

機関番号：13903

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2008 ～2010

課題番号：20760112

研究課題名（和文） 高分子鎖と乱流場の相互作用に関する基礎的研究

研究課題名（英文） Fundamental studies on the interaction between the polymer chain dynamics and turbulent flows

研究代表者

渡邊 威（WATANABE TAKESHI）

名古屋工業大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：30345946

研究成果の概要（和文）：乱流中に分散した高分子鎖の振る舞いとその統計性を調べるために、数値シミュレーション解析を行った。流れ場の強く乱れた揺らぎにより生じる、高分子鎖の伸縮運動の統計的性質を明らかにした。またこの性質は高分子鎖のモデルを構成する粒子数を変化させても定性的な違いはないことがわかった。さらに伸縮運動と乱流揺らぎの相関性について調べ、伸縮運動の特徴的な時間スケールと乱流揺らぎのそれとの関連性を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：We investigated the statistical and dynamical nature of long chain polymers dispersed in turbulent flows by using the large-scale numerical simulations. Statistics of coil-stretch transition of polymer extension fluctuations was clarified in the case for isotropic turbulence. We found that this nature was insensitive to the variation of number of beads consisting of the polymer model. We also discussed the relationship between the time scale of polymer extension dynamics and velocity gradient fluctuations.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2009年度	900,000	270,000	1,170,000
2010年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	2,900,000	870,000	3,770,000

研究分野：統計流体力学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：乱流、直接数値計算、並列計算、高分子鎖

1. 研究開始当初の背景

乱流中に高分子溶液を混ぜると、その乱れの特性は劇的に変化し、顕著な乱流抵抗低減が生じることが知られている。この現象は60年以上も前に観測されており、これまで国内外問わず多くの理論・実験的研究が行われてきた（J. L. Lumley, J. Polymer Sci. 7, 263, 1973）。しかしこの乱流抵抗低減を支配

する物理過程の詳細は未だに明らかにされていない。その1つの要因は、乱流中の高分子の物理過程が幅広いスケールに及ぶ動力学的階層構造によって支配されているからである。乱れを駆動する代表長さと、乱れが熱に変わるエネルギー散逸長さととの比は、実験室で得られる規模の乱流では数桁以上に及び、且つ大小様々なスケールの渦が階層構造を形成している。一方高分子鎖の特徴的な

長さは、エネルギー散逸長よりスケールが小さいことが知られている。しかし特性時間の比においては、高分子の緩和時間スケールは、乱流渦の最も小さな時間スケールより十分大きくなり得る(K. R. Sreenivasan & C. M. White, J. Fluid Mech. 409, 149, 2000)。この時、最大の疑問は「乱流の散逸スケールより小さな高分子鎖の集団が、どのようなメカニズムで乱流の巨視的スケールの運動に顕著な影響をもたらしているのか？」という事につける。

高分子溶液における乱流の数値解析には、主に構成方程式モデル (Oldroyd-B, FENE-P など) が用いられている。これは高分子鎖を粗視化して場の方程式を構成し、ストレス場として流体の方程式に組み込んだものである。過去の研究においては、構成方程式を流体の基礎方程式と結合させた数値解析が多く行われてきた。しかし構成方程式モデルは、数値的安定性や正值性の保証の問題など、数値計算を行う上で本質的に困難な問題があるため、人工的な粘性項を付加するなどの任意性を伴う。

一方で、高分子鎖に関する研究は、ソフトマター物理学の分野では重要な研究テーマの1つであり、その物性や動力学に関して多くの理論・数値的研究の蓄積がある。特に分子動力学シミュレーション (以下MDS) やブラウン動力学計算 (以下BDS) を基盤にした数値的研究を通して、その複雑な運動特性と統計性質が明らかにされつつある。高分子鎖のMDSやBDSにおいては、高分子をセグメントと呼ばれる分子の集合体を1つのユニットにして、セグメントがバネで結合した“バネ-ビーズモデル”が有力なモデルである。単純なモデルではあるが、実験で得られる様々な統計性質を矛盾なく再現することが知られている(“高分子物理の基礎”, 別冊数理科学, 川勝年洋 著)。

これらの背景を踏まえ、研究代表者は高分子鎖の動力学が乱流に与える影響を、よりミクロな視点から解明することは出来ないだろうか? と考えるに至った。研究代表者はこの数年、発達した乱流及びスカラー場の直接数値計算 (以下DNS) を通して、その統計性質や間欠性の起源を解明する研究を行ってきた。乱流の素過程は非常に複雑であり、その詳細を理解する上で数値シミュレーションが十分な威力を発揮する事を経験してきた。そこで本研究では、乱流物理学、及びDNSの知識と経験を土台にして、DNSと高分子鎖のMDS、BDSが連結した“**マルチスケールシミュレーション**”を実行する計算手法を開発し、乱流中の高分子鎖の運動と流れ場との相互作用、乱流の素過程へ与える影響をメソスケールのレベルから理解することを目指す。

2. 研究の目的

次の3点の課題に集中的に取り組み、問題点の解明を目指す。

- (1) 乱流-高分子系の連結数値シミュレーションを実行するための計算コードを作成する。
- (2) 高分子鎖と乱流場との相互作用の詳細を明らかにし、乱流中の高分子鎖の特性を理解する。
- (3) 多数の高分子鎖の集団運動が、乱流の素過程に及ぼす影響を定量的に評価する。

3. 研究の方法

乱流場の数値計算にはスペクトル法を用い、ナビエ・ストークス方程式と連続の方程式を数値積分する。高分子鎖の数値計算にはバネ-ビーズモデルを基盤にして、流体との相互作用を取り込んだモデルを用いる。DNS-BDS連結計算プログラムを新たに開発し、乱流中の高分子の振る舞いと相互作用、その乱流運動への影響を様々な統計解析を通して調べる。

(1) 乱流-高分子系の連結数値シミュレーション法の開発

初年度は、申請者がこれまで行ってきた乱流DNSのプログラムを基盤にして、DNSとBDSを連結させる新しいコードの開発を行う。高分子鎖を構成するセグメントに働く力は流体から高分子鎖に働くストークス抵抗力、ランダムな熱揺動力、そして弾性力を考える。ストークス抵抗力と熱揺動力は流体への反作用力として、ナビエ・ストークス方程式には新たにストレス場による項が付け加えられる。高分子鎖のBDS用プログラムを乱流DNSコードに新たに追加し、流体-高分子系の連結シミュレーションを行う。この計算における最大の難問は、乱流運動におけるエネルギー散逸の時間スケールに比べ、高分子鎖が周囲の流体運動へ応答する時間スケールが極端に短い事である。このため通常の方法で数値積分する場合、両者では時間刻み幅が2桁ほど異なる事になり、高分子鎖の時間積分により多くの計算コストを要することになる。この困難を克服するために、高分子系と流体系では異なる時間刻みを持つ時間積分の方法を採用する。高分子系の時間発展の際には、流体場は局所的に定常と見做して時間積分を行う。

(2) 乱流中の単一高分子鎖の振る舞いとその基本性質の理解・把握

初年度に開発したプログラムを用いて、乱流中の単一高分子鎖の振る舞いについて、その運動の様子と統計的性質について検証を行う。高分子鎖の運動の様子を動画にして可視化し、流れ場の構造と高分子鎖の伸長・折り畳みのダイナミクスの関連性を調べる。特にコイル-ストレッチ転移の性質について詳細に解析を行う。またストークス数やワイゼンベルグ数といった、系を特徴づけるパラメータを変化させて同様の計算を行い、数値的安定性、計算精度と結果の妥当性、計算コストの削減の可能性等、を吟味する。

(3) 乱流中の高分子鎖の集団運動と乱流場との相互作用に関する解析

前年度の解析結果を踏まえ、乱流中の多数の高分子鎖の集団運動とその乱流への影響を調べる。流れ場と高分子の状態を可視化し、乱流中の高分子の変形とその統計性質の変化を解析していく。また、乱流状態を特徴付ける基本的統計量（エネルギースペクトル、相関関数、圧力勾配の確率分布など）が、高分子溶液の物性パラメータ（ストークス数、ワイゼンベルグ数）にどう依存するか、を定量的に特徴づける。さらに高分子集団の運動の影響を取り込んだ乱流DNSを実行して高分子溶液流れの乱流状態を実現し、高分子鎖の運動が乱流の素過程（エネルギー伝達・散逸過程）にどのような影響を及ぼすのか、レイノルズ数依存性と間欠性への影響を明らかにする。

4. 研究成果

(1) 乱流-高分子系の連結数値シミュレーション法の開発

乱流のDNSプログラムを基盤にして、乱流場における流体粒子の速度および速度勾配テンソルのラグランジュ的な時間発展を得るためのプログラムを作成した。次にこれらを用いた高分子鎖のブラウン動力学シミュレーションを実行するためのプログラムを開発し、一様乱流中の高分子鎖の挙動とその基本的な統計性質に関する解析を行った。高分子鎖運動のアニメーションを作成して観察し、速度勾配のトポロジーと高分子鎖の伸長過程との関連性について、スカラー勾配場の伸長構造の解析結果と比較して議論した。また高分子鎖の伸長を特徴づけるワイゼンベルグ数を変化させると、コイル-ストレ

ッチ転移が生じることが確認され、過去の研究結果で良く知られる諸性質が再現できることが確認できた。得られた主な成果は、日本物理学会 2008 秋季大会（岩手大学）、及び 2009 年会（立教大学）等で発表された。

(2) 乱流中の単一高分子鎖の振る舞いとその基本性質の理解・把握

前年度に開発したコードを用いて、実際に一様乱流中の高分子集団の挙動に関する統計性質の解明を試みた。系の振る舞いを特徴づけるパラメータであるワイゼンベルグ数を変化させると、高分子鎖の集団はコイル-ストレッチ転移を生じる事が確認された。この時、高分子鎖の特徴的な緩和時間が乱流場のラグランジュ的な時間相関と密接に関連していることが明らかになった。また高分子鎖の末端間距離の大きさと速度勾配テンソルの普遍量との関連性を解析し、高分子鎖の強い引き伸ばしと速度場のトポロジーの関係を議論した。さらに高分子鎖モデルを構成するセグメント数に対する様々な統計量の依存性を調べた。結果、モデルに含まれるパラメータのセグメント数依存性を適切に選ぶことで、末端間距離の統計性質はセグメント数にはあまり敏感に依存しないことが示された。これはより単純な高分子モデルでも流れ場への影響を調べる目的においては十分良いモデルになり得ることを示唆している。得られた主な成果は、日本物理学会 2009 秋季大会（熊本大学）、九大応力研研究会（九州大学）等の学会、研究会で発表した。また得られた成果の一部を論文としてまとめ、Physical Review E 誌に投稿し受理された。

(3) 乱流中の高分子鎖の集団運動と乱流場との相互作用に関する解析

(1)、(2) で得られた研究成果を踏まえて、多数の高分子鎖モデルが乱流中に分散した際の、高分子鎖集団の流れ場への影響の解析に取り組んだ。最初に高分子鎖集団から弾性ストレス場を計算し、乱流の直接数値計算に組み込むための計算コードの開発を行った。この数値計算を高精度で実現するためには、非常にコストの高い計算を要する。そこでこの大規模数値計算を実現するための高効率な並列計算コードを開発した。計算コードの検証と結果の妥当性を検証するために、高分子鎖集団が一様等方減衰乱流に及ぼす影響を解析した。その結果、高分子の影響によるエネルギー散逸率の低減現象や、渦構造生成の抑制現象など、過去に構成方程式を用いて行われた数値計算の結果と定性的に一致していることが確認できた。これらは本研

究で扱った計算手法の有効性を強く示唆するものである。またこのような計算手法は、構成方程式の直接数値計算では扱うことが困難な物理現象を解析するのに適しており、今後の大きな発展が期待できる。これまでの研究成果を基盤にして、今後更なる研究を進めていきたいと考えている。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

1) Takeshi Watanabe, Toshiyuki Gotoh, "Coil-stretch transition in an ensemble of polymers in isotropic turbulence," *Physical Review E* (査読有), 81 (2010), 066301

2) Takahiro Iwayama, Takeshi Watanabe, "Green's function for a generalized two-dimensional fluid," *Physical Review E* (査読有), 82 (2010), 036307

3) 後藤俊幸、渡邊威, "Scalar flux in homogeneous turbulence," 九州大学応用力学研究所研究集会報告 (査読無), 19ME-S 7 (2009) pp. 29-36

[学会発表] (計 12 件)

1) 杉本大輝, 渡邊威, 金相佑, 後藤俊幸, "高分子モデルと乱流の相互作用に関する数値シミュレーション," 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011 年 3 月 25 日, 学会 Web 上でスライドを公表 (発表会は震災で中止)

2) 金相佑, 後藤俊幸, 杉本大輝, 渡邊威, "テイラー・クエット流における鎖状高分子の影響," 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011 年 3 月 25 日, 学会 Web 上でスライドを公表 (発表会は震災で中止)

3) 渡邊威, 後藤俊幸, "大規模並列計算による乱流中の高分子モデルの挙動解析," 京都大学数理解析研究所共同研究集会「乱流研究 次の 10 年: 乱流の動的構造の理解へ向けて」, 2011 年 1 月 12 日, 京都大学数理解析研究所

4) 渡邊威, 後藤俊幸, "乱流中のダンベルモデルの運動とその乱流への影響," 九州大学応用力学研究所研究集会「乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性」, 2010 年 11 月 12 日, 九州大学応用力学研究所

5) 渡邊威, 宇野聡志, 後藤俊幸, "高分子モデルの集団と乱流場の相互作用に関する数値シミュレーション," 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 25 日, 大阪府立大学

6) 渡邊威, 宇野聡志, 後藤俊幸, "等方乱流中に分散したダンベルモデルの数値シミュレーション," 日本流体力学会年会 2010, 2010 年 9 月 10 日, 北海道大学

7) 渡邊威, 後藤俊幸, "乱流中の高分子鎖モデルの数値シミュレーション," 九州大学応用力学研究所研究集会「乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性」, 2009 年 11 月 12 日, 九州大学応用力学研究所

8) 渡邊威, 後藤俊幸, "乱流中の単一高分子鎖の挙動とその統計性," 日本機械学会 第 22 回計算力学講演会 CMD2009, 2009 年 10 月 11 日, 金沢大学角間キャンパス

9) 渡邊威, 後藤俊幸, "一様乱流中の単一高分子鎖の挙動とモデリング," 日本物理学会 2009 年秋季大会, 2009 年 9 月 28 日, 熊本大学黒髪キャンパス

10) T. Watanabe, "Single Polymer Dynamics in Isotropic Turbulence," RIMS Workshop "Mathematics and Physics across the Diversity of Turbulence Phenomena", 2009 年 7 月 11 日, Kobe Institute

11) 渡邊威, 後藤俊幸, "一様乱流中の高分子鎖の振る舞いとその統計性," 日本物理学会第 64 回年次大会, 2009 年 3 月 27 日, 立教大学池袋キャンパス

12) 渡邊威, 後藤俊幸, "乱流中の単一高分子鎖の挙動の数値シミュレーション," 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 20 日, 岩手大学

6. 研究組織

(1) 研究代表者

渡邊威 (WATANABE TAEKSHI)

名古屋工業大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 30345946

(2) 研究分担者

()

研究者番号:

(3) 連携研究者

()

研究者番号: