

多重スケール解析を用いた 反変・共変遷移型新規高分子モデルの創出

東京工業大学 工学院機械系 氏名 堀内 潔

目的 流体中を流動する高分子の運動においては、通常、溶媒の変形にたいする高分子の追従性が仮定されており、高分子は反変型となるが、de Gennesは非追従性の可能性を指摘した。この場合、高分子は共変型となる。本研究は、非追従性の導入が高分子の伸長に与える効果を示し、反変共変間の遷移を行う新規高分子モデルの創出を図る。

内容 高分子をdumbbellモデルで近似し、そのBrownian dynamics simulation と溶媒のDNSを結合する多重スケール数値計算を行った。

結果 図は提案したモデルにより得られた高分子の非追従性強度の時間発展を示す。 $\alpha = 0$ は反変型、 $\alpha = 1$ は共変型を示すが、伸長が大きくなると反変型から共変型に遷移しその過程が概周期的に反復される事が見て取れる。

利用した計算機	SX-ACE
ノード時間	27,000 時間
使用メモリ	2TB
ベクトル化率	95%
並列化	128並列

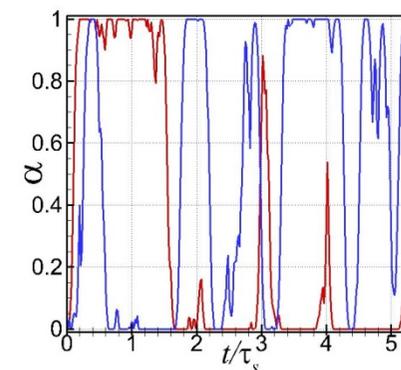


図 非追従性強度の時間発展
(赤線と青線は2つの高分子の結果を示す)