Mesoscopic simulationについての提案

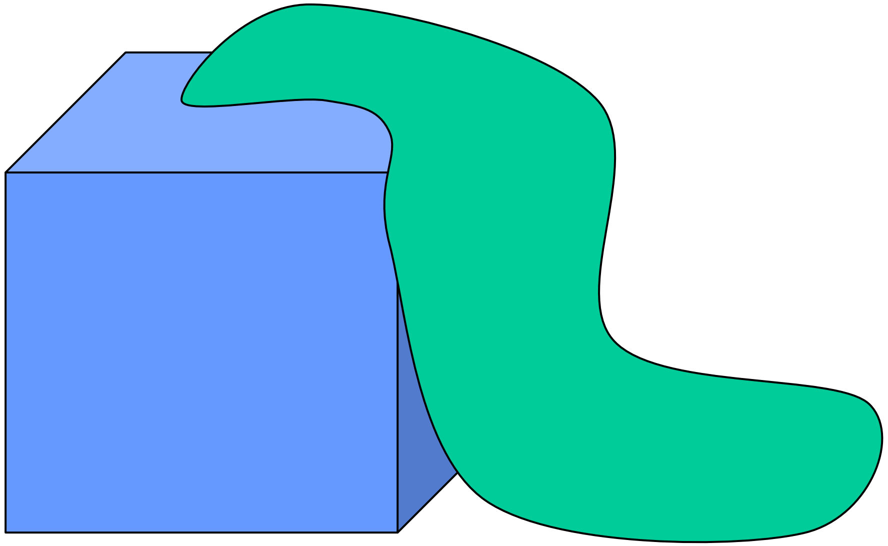
次段の製膜プロセスのSimulationに必要な
Colloidal suspension のレオロジー特性を
Stokesian dynamicsからもとめる。

AA&S presents

Advanced Algorithm & Systems

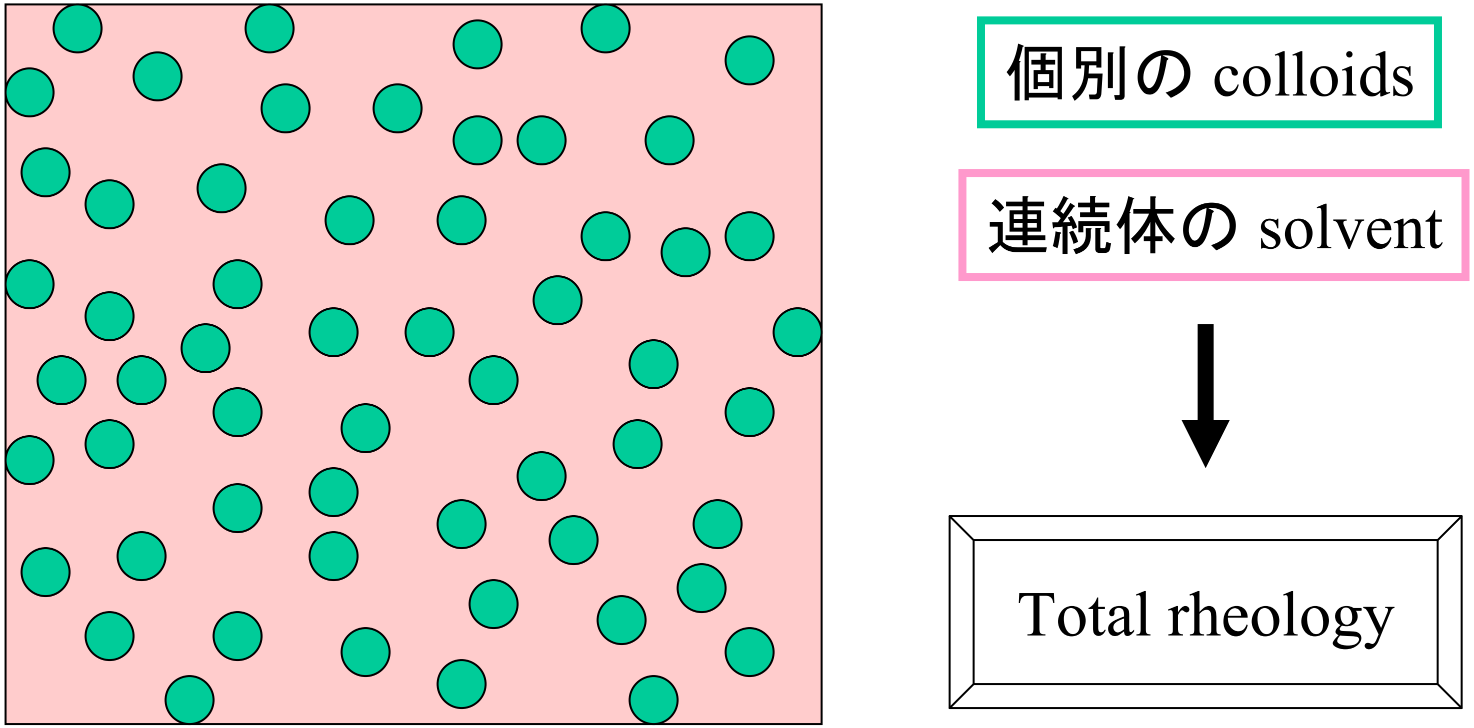
マクロな物性としての
レオロジー特性

Viscosity	η
Elasticity	$J_e^{(0)}$
Viscoelasticity	$G^*(\omega) = G'(\omega) + iG''(\omega)$



Mesoscopic simulation

Stokesian dynamics



Mesoscopic regionの特徴

連続Solvent部分の取り扱い

Macroscopic regionでは**Navier-Stokes equation**

$$\rho\left(\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}+(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})\vec{v}\right)=-\vec{\nabla}p+\mu\nabla^2\vec{v}+\rho\vec{f}$$

溶媒部分をグリッドに切って流体方程式を解く

Mesoscopic regionのStokesian dynamicsでは**Stokes equation**

$$0=-\vec{\nabla}p+\mu\nabla^2\vec{v}+\rho\vec{f}$$

Stokes flowを扱う

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{v}=0$$

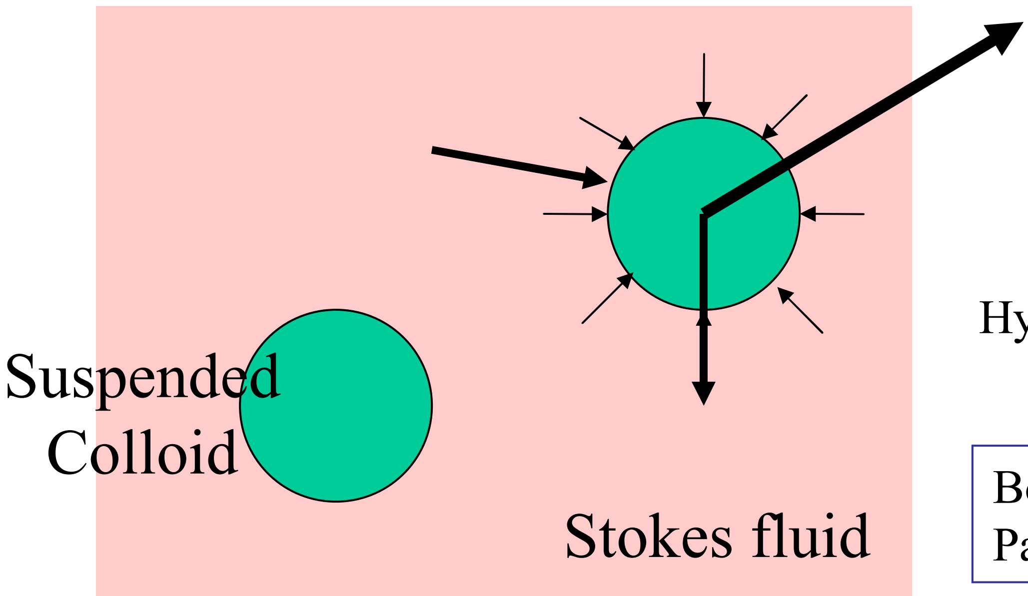
→ $\vec{v}$ について線形 → Hydrodynamic Interactionの取り扱いが違う

Descreteなcolloid粒子の取り扱い

個別のcolloid粒子についてNewtonの運動方程式を解く

相互作用

粒子間相互作用	DLVO、弾性力、摩擦力 etc
粒子-溶媒間相互作用	Hydrodinamic interacton Brownian interaction etc
外力	重力、壁との相互作用 etc



Hydrodynamic interaction

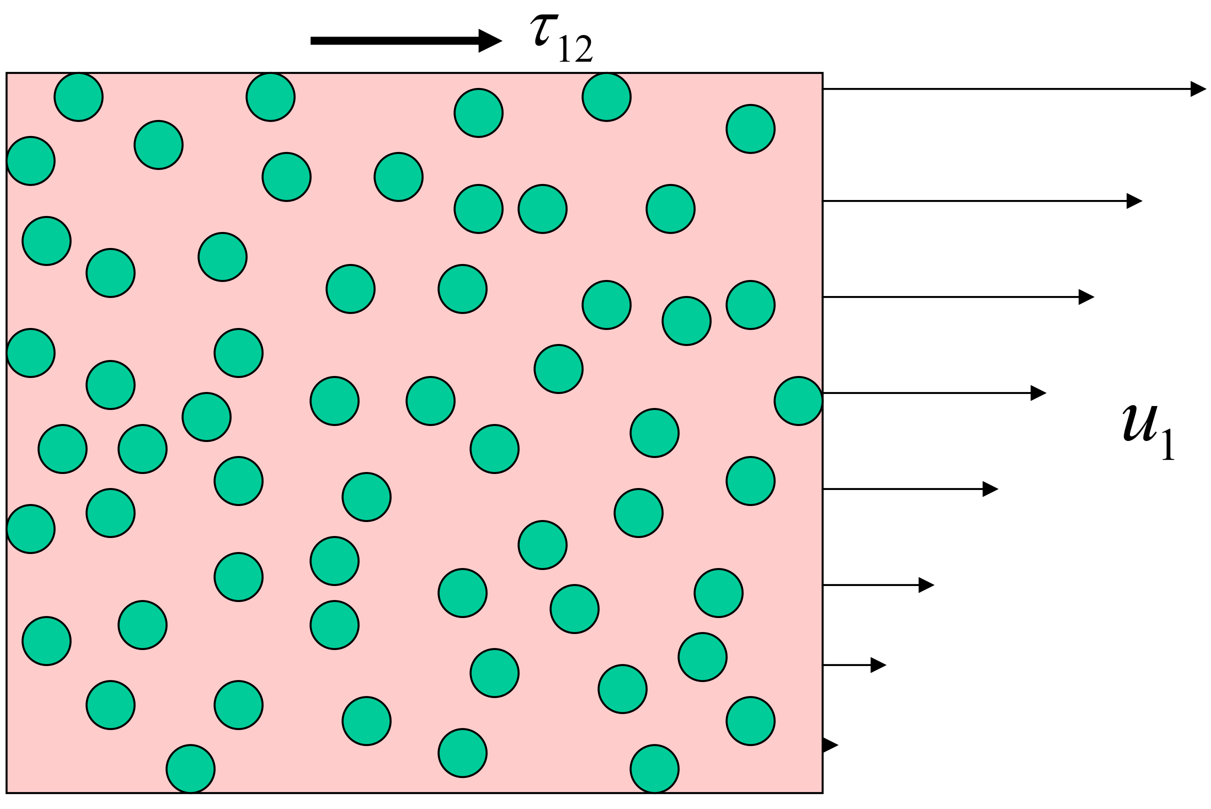
↑

Boundary integral method
Parallel computing

Shear FieldをSimulation

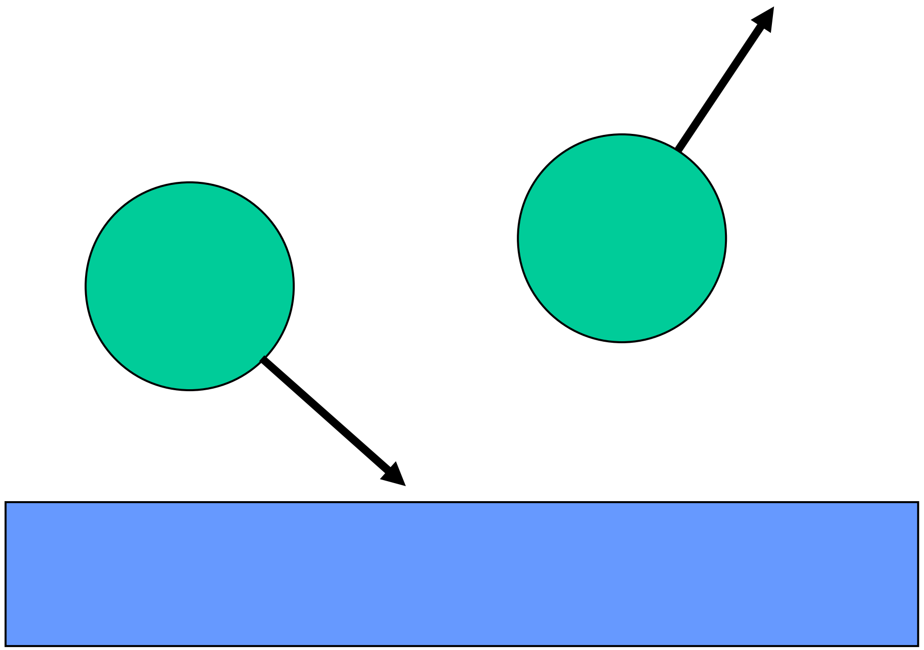
Shear stressとshear strain rateからShear viscosityをもとめる。

$$\tau_{12} = \eta \left\{ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right\}$$



Boundary condition

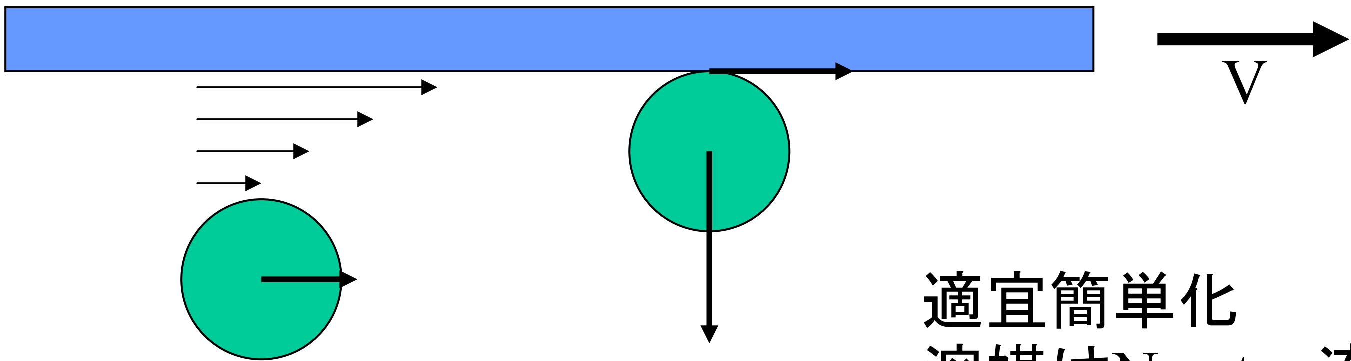
左右の壁	周期境界条件
下の壁	固定した壁
上の壁	一定速度あるいは周期的な速度で移動



壁とコロイド粒子の相互作用

接触による相互作用
動摩擦係数、静止摩擦係数

Solventを介した相互作用
Relative velocity
Tangental
Normal
Boundary integral methodの利用



適宜簡単化
溶媒はNewton流体

システムの概要

従来通りWebを介してシステムにアクセスいたします。

モニタ用画面は3Dレンダリングで定評のあるOpenGLをJavaから利用するJavaGLで実装いたします。

メモリを動的に割付けでき、将来の並列計算も視野に入れてFortran90もしくはC++で実装いたします。

以上の議論は全体の構成が自己配列シミュレーションに
見られるもので妥当であると仮定していますがそれは正し
いでしょうか。特にhydrodynamicな相互作用の扱いが最も
重要であると考えています。並列計算も視野に入れた取り
組みが必要であると思います。

一軸伸張、せん断歪に対する応力緩和等にも対応します。

その他に必要な物性、さらにそれを求めるのに用いる
アルゴリズム等御座いましたらどんどんお申し付けください。
以上よろしくお願い申し上げます。

付記
hydrodynamic interactionのアルゴリズムについて

基礎方程式

$$v_l(\vec{r}) = -\frac{1}{8\pi\mu}\oint_S G_{li}(\vec{r}-\vec{\xi})\sigma_{ij}(\vec{\xi})\hat{n}_j(\vec{\xi})dS(\vec{\xi})$$

$$-\oint_S v_i(\vec{\xi})\sum_{ilj}(\vec{r}-\vec{\xi})\hat{n}_j(\vec{\xi})dS(\vec{\xi})$$

より

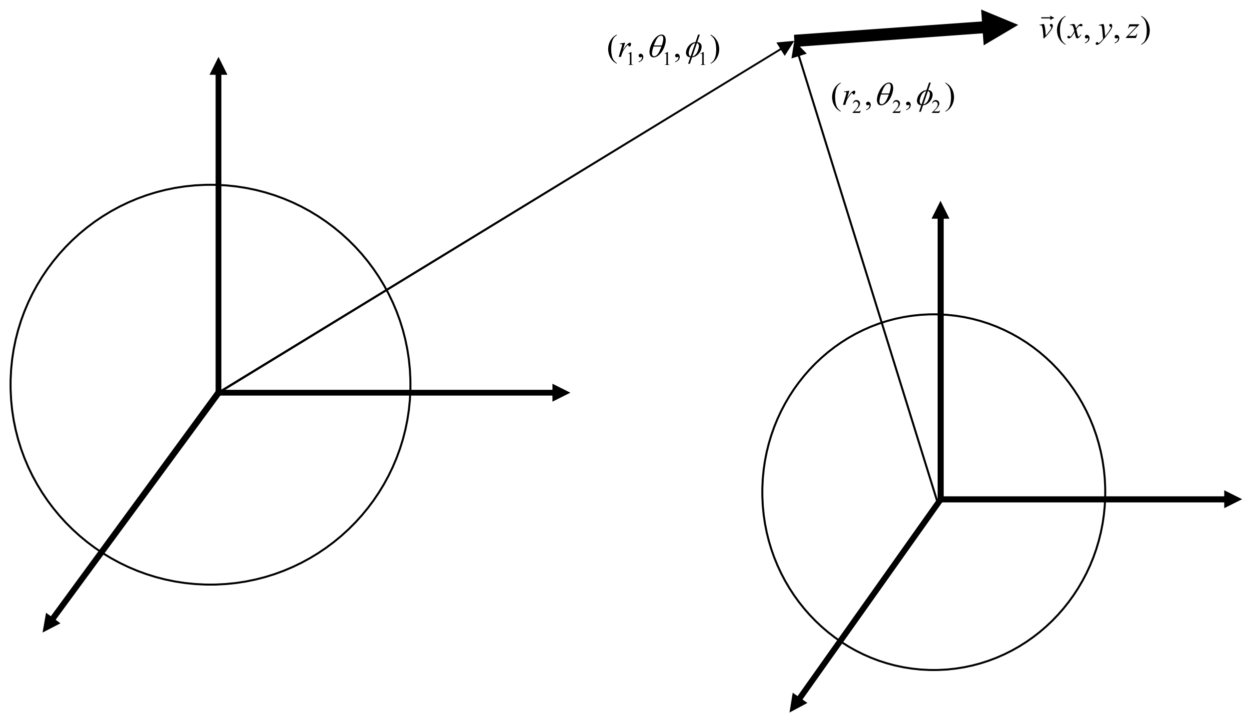
$$\begin{pmatrix} \vec{F}_1(\vec{r}) \\ \vec{T}_1(\vec{r}) \\ \vec{F}_2(\vec{r}) \\ \vec{T}_2(\vec{r}) \\ \cdots\cdots \\ \vec{F}_n(\vec{r}) \\ \vec{T}_n(\vec{r}) \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} \vec{V}_1(\vec{r}) \\ \vec{\Omega}_1(\vec{r}) \\ \vec{V}_2(\vec{r}) \\ \vec{\Omega}_2(\vec{r}) \\ \cdots\cdots \\ \vec{V}_n(\vec{r}) \\ \vec{\Omega}_n(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

の線形関係を導くことが
アルゴリズム上の要になる

そこそこの計算コストで
精度の高いアルゴリズム
はないか。
J.F.Brady et al,Ganatos et al

剛体周りのStokes Flow

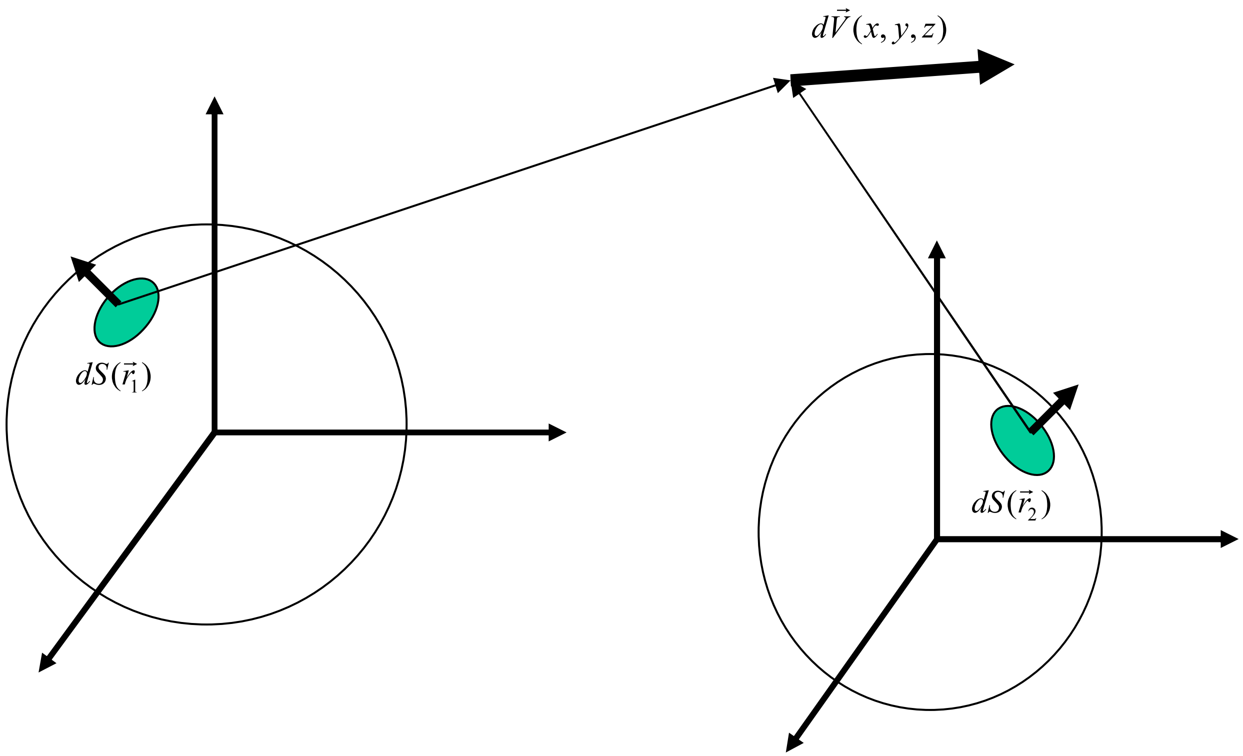
1. 剛体によりフィットした座標による一般解を各剛体ごとに配置する
   例　Ganatosによる球に対するLambのgeneral solutionの適用



Collocationに利用、高い精度、低い柔軟性、収束性の問題

剛体周りのStokes Flow

2. Boundary Integration MethodによるGreen関数の利用



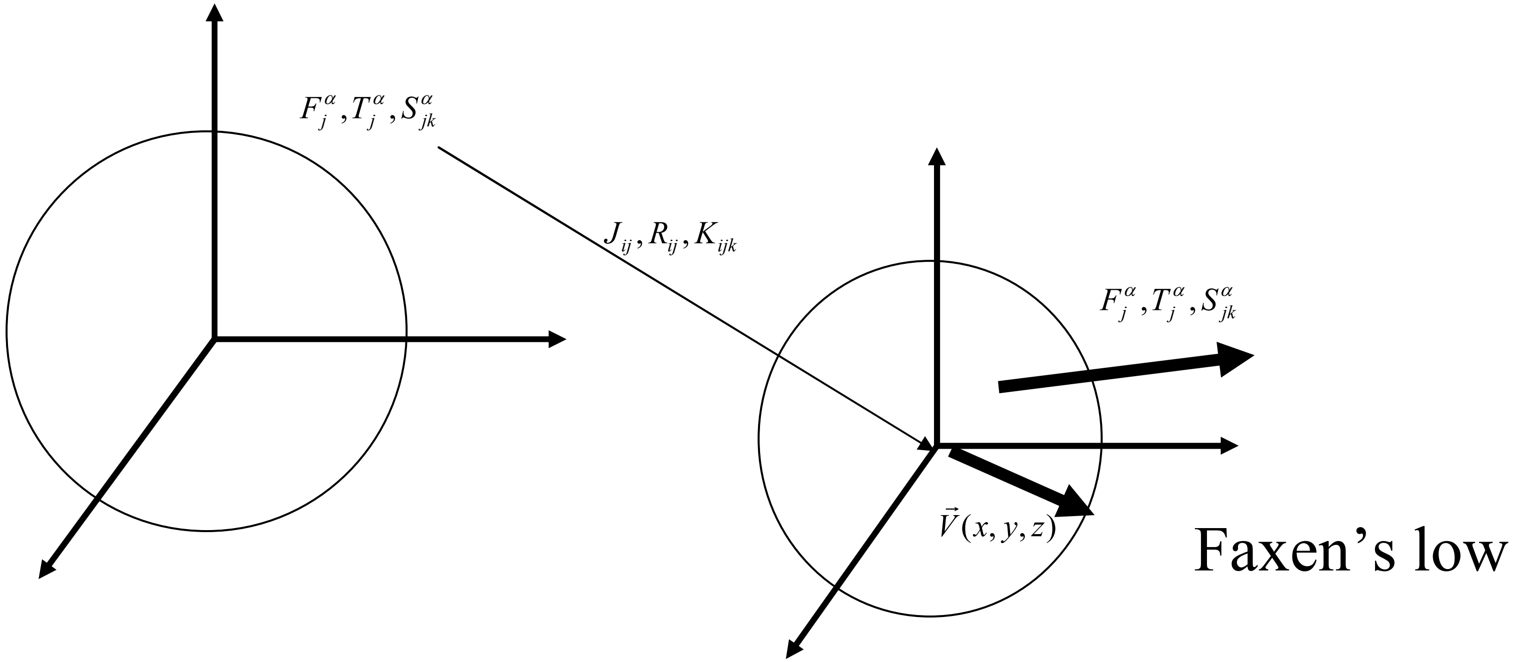
Boundary Integration法に利用、高い柔軟性、比較的低い精度
メモリの負担が大きい

剛体周りのStokes Flow

3. Green関数のモーメント展開

例　Durlofsky et alによるStokesian dynamics(1987)

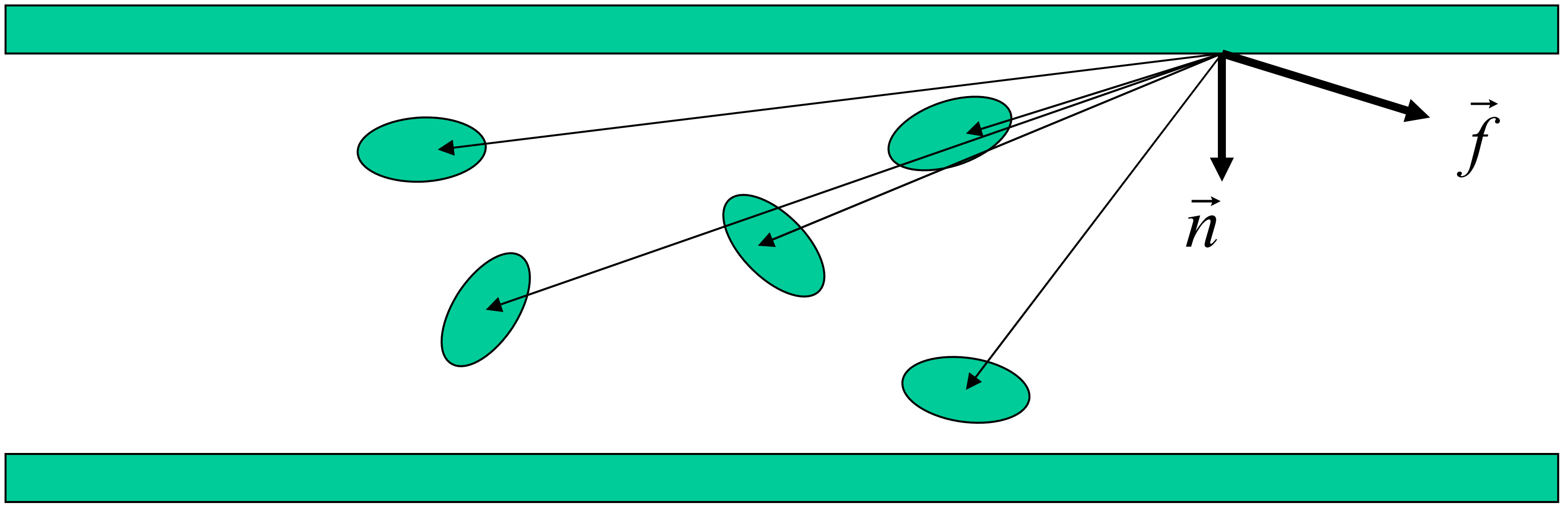
Faxen’s lawとLubricationの取り扱いも重要



Stokesian dynamics、高い効率性、Faxen’s lowは近似

Bounding wall の取り扱い（2無限平面に対して）

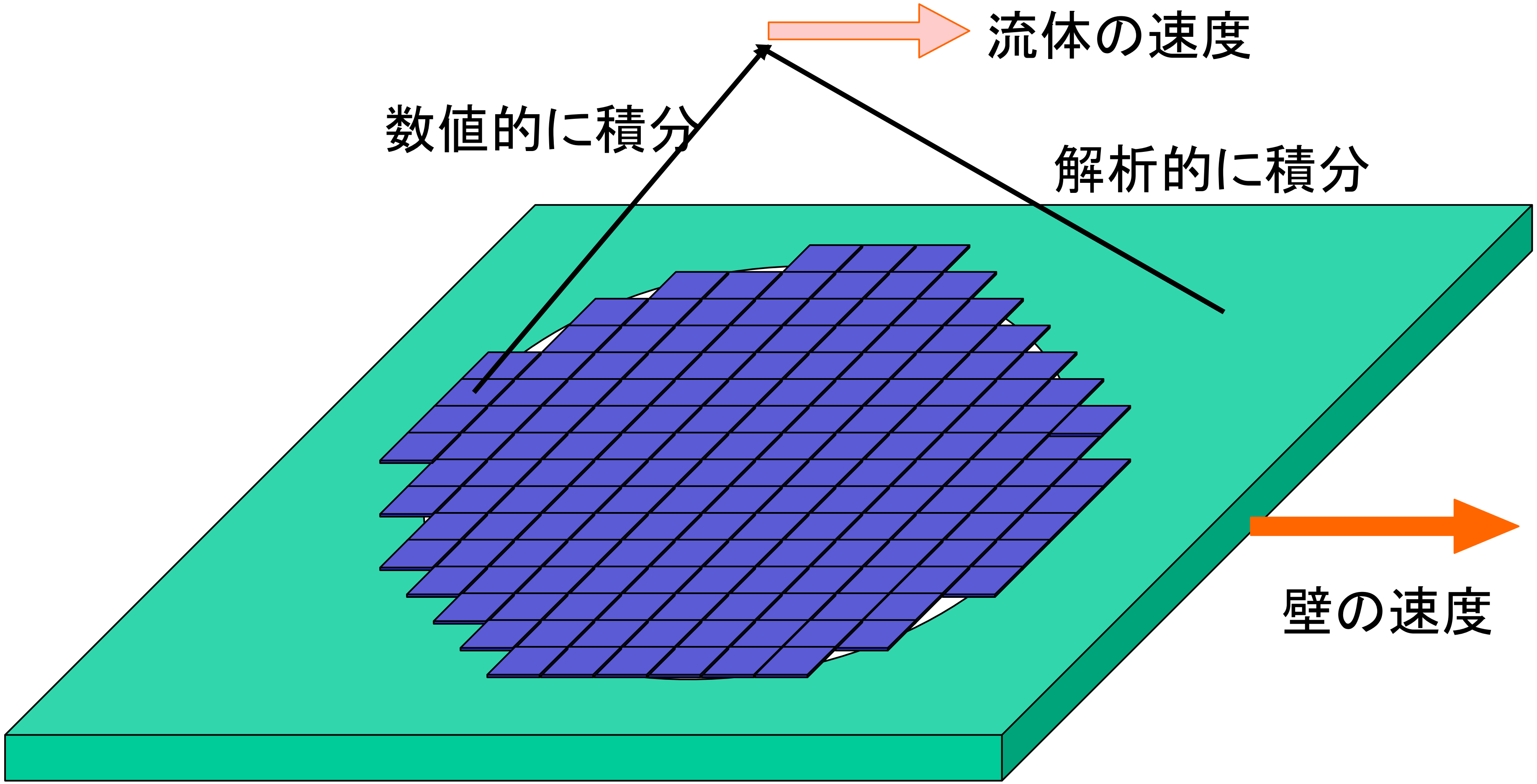
1. Boundary Integration method　におけるFree Space Green関数を数値的に利用（Durlofsky et al in 1989)
2. Collocationの文脈で、Wallによる速度擾乱をFourier変換を用いて解析的に表現(Ganatos et al in 1980)
3. その他、１無限平面に対してBlake kernalの利用etc。



詳細は現在調査中であるが1.のDurlofskyはMulti sphereへの実装であるが、2.のGanatosはone sphereの実装になっている。

Durlofsky and Bradyのwallの取り扱い

1. 十分遠方のWallの寄与は平均的な効果として扱う
2. 近傍のWallは離散化し、数値積分をおこなう
3. 近接作用としてLubricationも考慮



O’Brien’s method(参考)

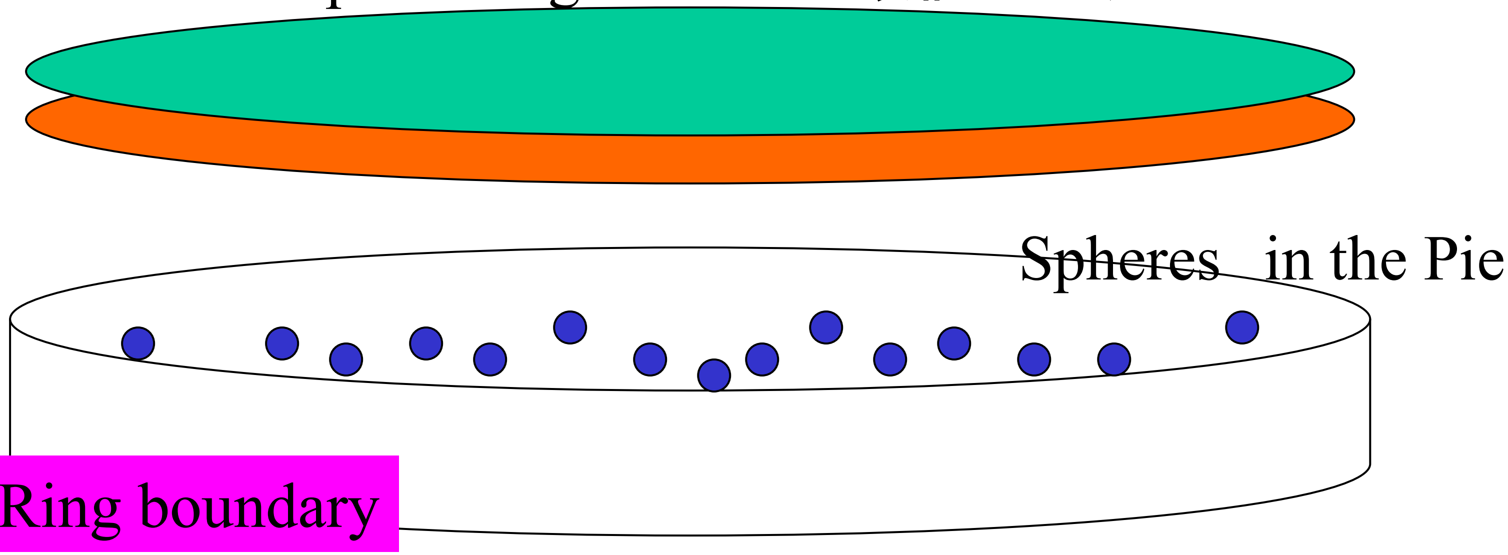
Convergent hydrodynamic interactionのために

Pie shaped boundary regionへの適用(AA&S案)

Circle boundary

Dipole integral -> 解析的に処理

Monopole integral -> 数値的に処理



物理量にBradyのいうsuspension avarageを用いる。

$$< u_i >, < e_{ij} >, < S_{ij} >, < L_{ij} >, < Q'_{ijk} >$$

(Brady et al 1988)

積分(quadrupoleが入る)は解析的に処理

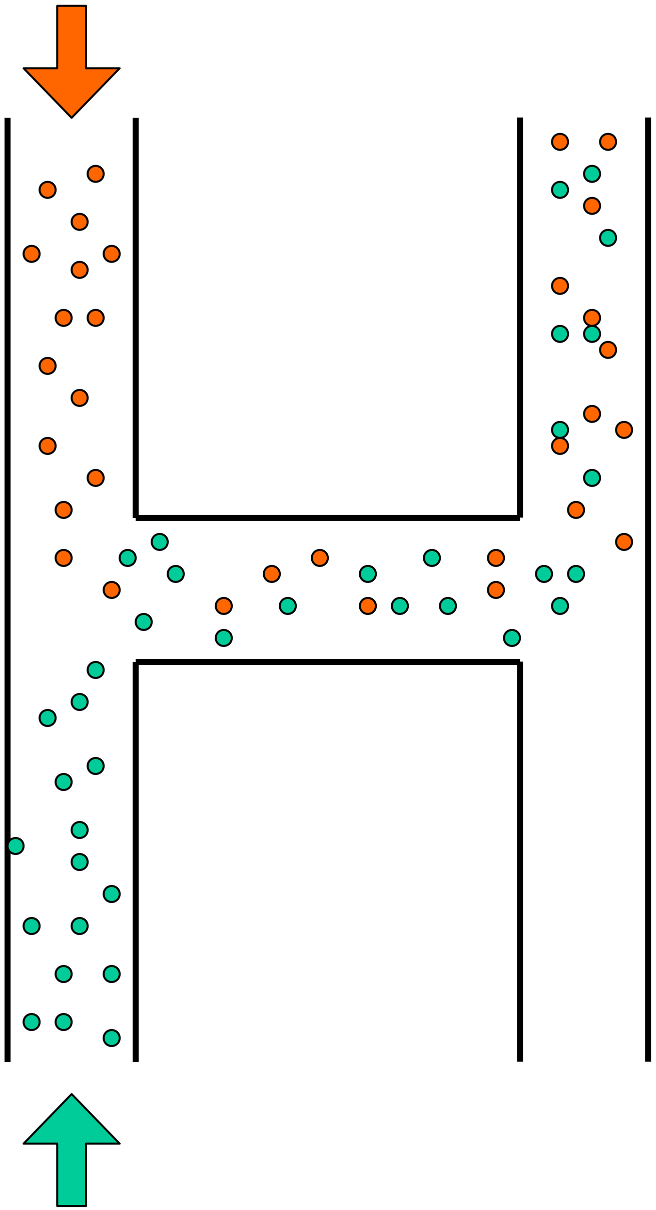
Bradyは全ての遠方のboundary上の（彼が想定していたのは球）面積積分をsuspension averageを用いて定式化しdivergence theoremを用いて積分を面積積分から体積積分に直している。(そのほうが有利？）

<u>,<e>はshear flowとしてあらかじめ与える。

半径 $R->\infty$ で諸物理量の収束(convergence)。

Durlofskyは以上のBoundaryIntegrationの中からある半径のsub regionを切り抜きそこのmonopole積分のみを数値的に処理しようと試みている。（wallのdipole積分はconstant)
彼は boundaryのcontributionは総じて(sphere以外という意味) non-particle shear flowを与えると仮定している。
この仮定のもとに定式化をおこなった。（検討も進める）
上記O’Brien の定式化もあわせて進める。

任意の境界条件へ容易に拡張



容易な拡張

粒子の形状
電解質溶液、電気泳動
触媒反応のSimulation

AA&Sの実装についての提案

剛体周りのStoke flow

精度　-> Ganatos et alのcollocation(対象による）
効率　->Brady et alのStokesian dynamical method
柔軟性->Boundary Integral Method

Wallに関するStokes flow

Durlofskyの方法（Boundary integral method)