

ナノサイエンスによる食品物性解析 - 食品の曳糸性と Computer Simulation -

一ノ瀬美春、一ノ瀬祥一、山崎由起

静岡県立大学食品栄養科学部

国際食品工業展 FOOMA JAPAN : Academic Plaza
於 東京ビッグサイト 2013年6月11日

Sec1. 食品の糸引き

糸引き現象がおもしろい ▶ 納豆

ソフトマター（食品、生体、化粧品、...）の特徴をよく引き出している簡単なモデル、leading は1次元 → 厳密解がある(1D Burgers Eq.)
散逸現象、非線形、非平衡、確率現象、開放系...

Sec2. ナノサイエンス (a) ソフトマター物理学

ソフトマター物理学： ナノの世界のメカニズムを追求する

様々な側面から特徴付けられている

- 複雑系 : 多体 (モル数のオーダー) による統計性、ゆらぎ
▶ ベシクルの揺らぎ
- メソスコピック : スケール 10 - 1000 nm
- 非線形 : 速度 v について、 v^2 , v^3 , ...
- 非平衡 : 時間的に不規則、空間的に不規則 ▶ 振動する水溜り
- 散逸系 : 摩擦 friction、熱放射 (電磁放射)
- カオス : 非決定論、不安定性 ▶ プラトー・レイリー不安定性
- ナノテク : ナノスケール

Sec2. (b) ソフトマター物理学

高度な数理解析が要求される

- 統計処理
- 境界条件
- コンピューター計算

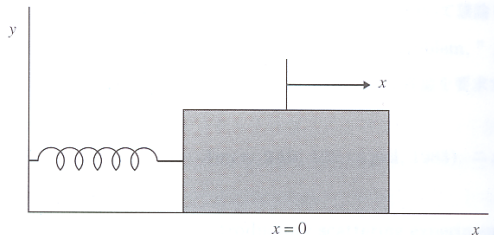
原理的に未知の部分が多い

cf. ニュートン力学、量子力学

▶ 水滴

Sec3. (a) ばね弾性運動

Figure: ばねの運動



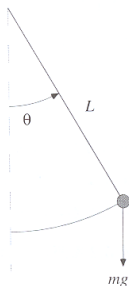
$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2x - \gamma \frac{dx}{dt}, \quad \omega^2 : \text{角振動数}, \quad \gamma : \text{摩擦係数}$$

加速度 復元力 摩擦力

(1)

Sec3. (b) 振り子の運動

Figure: 振り子の運動



$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\omega^2 \sin \theta$$

加速度 接線方向の力 (2)

Sec4. 粘性流体の方程式 (a) ナビアストークス方程式

Newton 流体に対し、連続な速度場（層流を仮定） $\vec{v}(t, \vec{r})$ は以下に従う。

ナビア-ストークス方程式

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} P + \frac{\eta}{\rho} \Delta \vec{v} + \vec{K}, \quad \Delta = \vec{\nabla}^2 = \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\right)^2$$

"相対論的" 加速度, 圧力項 粘性力 外力

$P(t, \vec{r})$: 圧力場, $\vec{K} = (0, 0, -g)$: 重力,

η : 粘性係数 (定数), ρ : 密度 (定数) (3)

Sec4. (b) 連続の式、質量保存

質量の保存を表す式（連続の式）は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (4)$$

Navier-Stokes 方程式 (3) のシュミレーション 津波

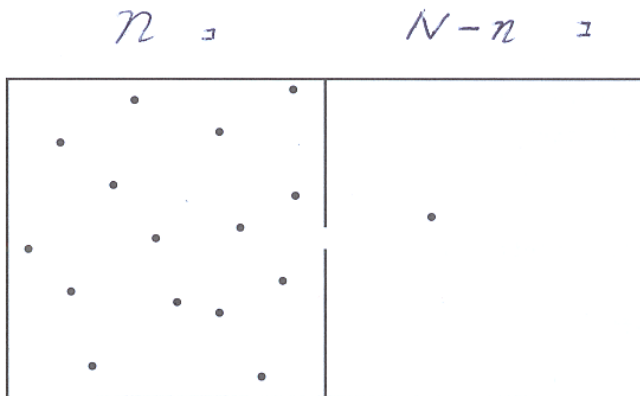
速度が緩やかな場合、主要部分は熱伝導方程式になる。

$$\text{一次元熱伝導方程式} : \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = (\text{熱伝導係数}) \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \quad (5)$$

▶ 津波

Sec5. 簡単な非平衡モデル (a) 仕切られた箱空間

Figure: 2rooms



Sec5. (b) 時刻 t での左部屋の粒子数 $n(t)$

図のように小さな穴のあいた壁で仕切られた箱空間を考える。中に N 個の自由粒子がランダムに運動している。単位時間あたり 1 個の粒子がその穴を通りぬけるとする。時刻 t 秒での左の部屋の粒子数：
 $n(t)$

$$n(t+1) - n(t) = \begin{cases} -1 & r \leq \frac{n}{N} \\ +1 & r > \frac{n}{N} \end{cases}$$

$$= -\frac{n - rN}{|N - n|}, \quad (6)$$

$$rN \rightarrow n^{eq} \quad \text{各ステップごとに異なる仮の平衡値}$$

(LBM で使われるアイデア、後ほど) (7)

$0 \leq r < 1$ は乱数、各ステップごとに異なる (random 変数)。

Sec5. (c) 非平衡、平衡、古典曲線、ゆらぎ

$t + \Delta t$ での粒子数を $n + \Delta n$ とすると

$$\Delta n = \left[\frac{-n(t)}{N} + \frac{N - n(t)}{N} \right] \Delta t \quad . \quad (8)$$

$\Delta t \rightarrow 0$

$$\frac{dn}{dt} = 1 - \frac{2n(t)}{N} \quad (9)$$

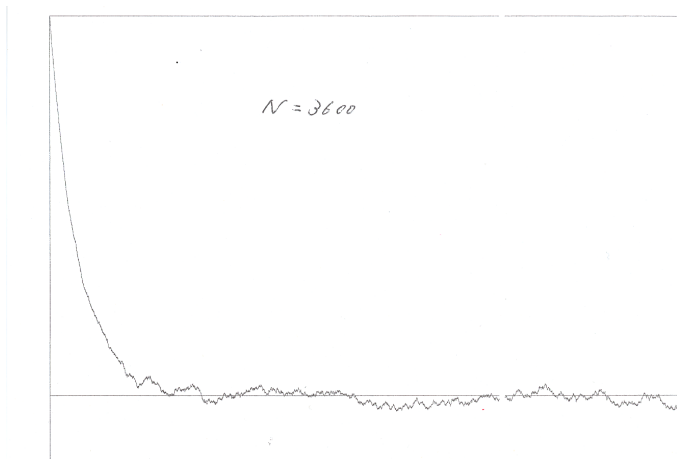
$$\text{故に } n(t) = \frac{N}{2}(1 + e^{-2t/N}) \rightarrow \frac{N}{2} \text{ 平衡値} \quad (10)$$

ステップごとのサイコロ振り (偶然) による差分方程式 (時間発展)
から Differential Eq. (決定論)

Note: No Use of Newton's law. cf Molecular Dynamics Method

Sec5. (d) シミュレーション数値実験

Figure: randomBox



Sec6. Lattice Boltzmann Method (a) 紹介

- Lattice Boltzmann Method 1988 McNamara and Zanetti
テキストブック S. Succi, 2001, A.A. Mohamad, 2011
- ボルツマン輸送方程式(後述) に基礎をおいた 散逸系 物理一般の
離散モデル (数値シュミレーション)
- 従来のシュミレーション :
Finite Element Method(FEM)
Finite Difference Method(FDM)
Molecular Dynamics Method(MDM)
e.t.c.

Sec6. (b) 特徴

- 運動量（速度）一座標の空間（**phase space**）を離散化し、そこで多体系の 分布関数 $f_{\vec{p}}(\vec{x}, t)$ を調べる。
- 力学方程式（Advection, Diffusion, Navier-Stokes, etc）は時間空間の **スケール変換** に対応したパラメータ展開（Chapmann-Enskog Expansion）から出る
- 適応範囲が、従来の方法に比べ、格段に広い。**非ニュートン流体**、多層系、熱的非一様系、圧縮系などへの拡張ができる or できそう。
- プログラムが簡単。境界条件、初期条件

Sec6. (c) ボルツマンの輸送方程式

Boltzmann Transport Equation (L. Boltzmann 1872)

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f_v + \frac{F_i}{m} \frac{\partial f_v}{\partial v^i} = \Omega \quad , \quad f_v = f_v(\vec{x}, t), \quad \vec{v} = \vec{v}(\vec{x}, t) \quad ,$$

$f_v(\vec{x}, t)$: 分布関数 $\Omega = \Omega(f)$: 衝突項 (演算子) . (11)

BGKW 近似 (Bhatnagar, Gross and Krook 1954, Welander 1954)

$$\Omega = -\frac{1}{\tau}(f_v - f_v^{eq}) \quad , \quad \tau : \text{緩和時間} \quad ,$$

f_v^{eq} : Maxwell-Boltzmann distribution function . (12)

(Single-time relaxation, Diagonal form)

Sec6. (d) 速度空間の離散化

Discretization of \vec{v} ($\vec{F} = 0$)

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f_i = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) \quad , \quad \text{注意 } i : \text{ Not summed}$$

For 2 dimension $\{c_i\} = \{c_0; c_1, c_2, c_3, c_4; c_5, c_6, c_7, c_8\}$ See Fig.5 .(1)

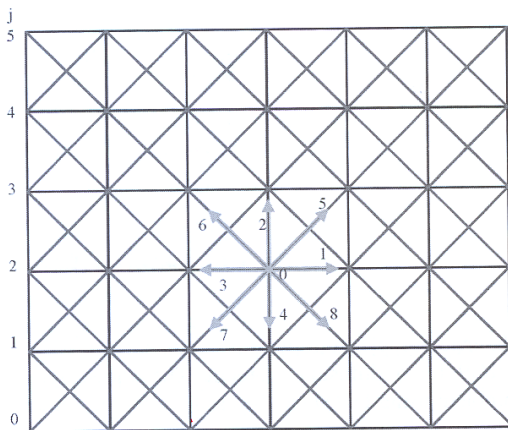
Discretization of t

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)) \quad . \quad (14)$$

(Direction-fixed form)

Sec6. (e) 2次元9速度成分格子

Figure: D2Q9lattice.eps



Sec6. (f) 力学方程式が内在する

1D diffusion Eq. for temperature $T(x, t)$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad , \quad (15)$$

has the global **scale** invariance.

$$t \rightarrow \frac{t}{\epsilon^2} \quad , \quad x \rightarrow \frac{x}{\epsilon} \quad . \quad (16)$$

ϵ : positive scale parameter

1次元の場合 $(c_i) = (c_1, c_2) = (1/2, -1/2)$
 仮定

$$f_i^{eq}(x, t) = w_i \Theta(x, t) \quad . \quad (17)$$

質量保存

$$\sum_{i=1}^2 f_i^{eq}(x, t) = \Theta(x, t) \quad . \quad (18)$$

Sec6. (g) "ゆっくり" と見える座標系の選択

運動量保存

$$\sum_{i=1}^2 c_i f_i^{eq}(x, t) = 0 \quad . \quad (19)$$

→ $w_1 = w_2 = 1/2$

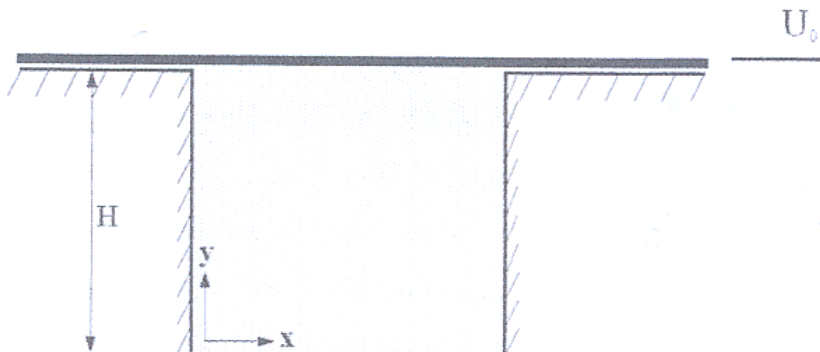
$\epsilon (\ll 1)$ 展開 (" ゆっくり" と見える座標で見る)

$$f_i(x, t) = f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2 + \dots \quad . \quad (20)$$

$$0 = \frac{\partial \Theta}{\partial t} - \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right) \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} \quad , \quad \alpha = \tau - \frac{\Delta t}{2} \quad . \quad (21)$$

Sec6. (h) 等速上蓋移動流体空間のシミュレーション

Figure: LidDrivCav.eps



7. Non-Newtonian Flow の場合

例 Lid Driven Cavity

M.M. Hedayat, M.H. Borghel, A. Fakhari and K. Sadeghy, 2010

2 dim square cavity, lid-driven cavity flow

Pinho model (F.T. Pinho, 2003)

$$\eta^{eff} = (K_v |\dot{\gamma}|^{n-1}) \cdot (K_e |\dot{\epsilon}|^{p-1})$$

η^{eff} : effective viscosity K_v, K_e, n, p : constants

$\dot{\gamma}$: rate of shear $\dot{\epsilon}$: rate of extension . (22)

See [Movies](#): [VelDist1.0](#), [V1.5](#), [vVel](#) [▶ ShockTube](#) [▶ VelDist1.5](#)

Sec8. 1次元粘弾性方程式 (a) 密度 ρ と速度 u

▶ 1dDensDistR500Vis01

▶ 1dDensDistR500Vis01

厳密に解ける場合

B.M, Boghosian, P. Love and J. Yopez, 2004

1D2Q $\{c_1, c_2\}$

$$\text{密度 } \rho(x, t) = f_1(x, t)[N_+(x, t)] + f_2(x, t)[N_-(x, t)]$$

$$\text{速度 } u(x, t) = f_1(x, t)[N_+(x, t)] - f_2(x, t)[N_-(x, t)]$$

逆に

$$\text{右向き分布関数 } N_+ = \frac{1}{2}(\rho + u)$$

$$\text{左向き分布関数 } N_- = \frac{1}{2}(\rho - u) \quad (23)$$

H 関数

$$\text{仮定 } H = \frac{1 + \alpha}{2} h(N_+) + \frac{1 - \alpha}{2} h(N_-)$$

Sec8. (b) 厳密解 u^{eq} , Burgers 方程式

平衡分布関数

$$0 = \left. \frac{\partial H}{\partial u} \right|_{\rho} \rightarrow \text{厳密解 } u^{eq} = \frac{2}{\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha}} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\rho^2}{4} \left\{ \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \right\}^2} \right] \quad (25)$$

緩和時間 τ を「LB 変換の際、H 関数があまり変化しない」という条件の τ^* とパラメータ κ で定義する。 $0 \leq \kappa \leq 1$

下記の形のスケール変換 (parabolic ordering) を導入し、摂動計算を行う。時間は ε^2 倍し、空間は ε 倍する。

$$\begin{aligned} \Delta t &\rightarrow \varepsilon^2 \Delta t \\ c \Delta t = \Delta x &\rightarrow \varepsilon c \Delta t = \varepsilon \Delta x \end{aligned} \quad (26)$$

最終的に ε^2 計算のところから、Burgers 方程式が導かれる。

$$\frac{\partial w}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \quad w \equiv -\frac{c\alpha}{\Delta t} \rho, \quad \nu \equiv \frac{\kappa c^2}{2\Delta t} \quad (27)$$

Sec8. (c) $h(z)$ の決定

また摂動の高次が ρ に寄与しないという条件より

$$\begin{aligned}
 h(z) &= z \exp(-1/z) + \text{Ei}(-1/z), \\
 \text{Ei}(-z) &= - \int_z^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt \quad (\text{積分指数関数})
 \end{aligned} \tag{28}$$

Sec9. 結語とコメント (a) 粘弾性流体の幾何学的見方

幾何学（一般相対性理論）が粘弾性流体の解析に非常に大切であることが最近わかってきている。

I. Bredberg, C. Keeler, V. Lysov and A. Strominger, arXiv:1101.2451
"From Navier-Stokes to Einstein"

V. Lysov and A. Strominger, arXiv:1104.5502
"From Petrov-Einstein to Navier-Stokes"

Sec9. (b) 銀河の営み

Figure: Andromeda



Sec9. (c) ブラックストリング

Figure: ブラックストリング

