

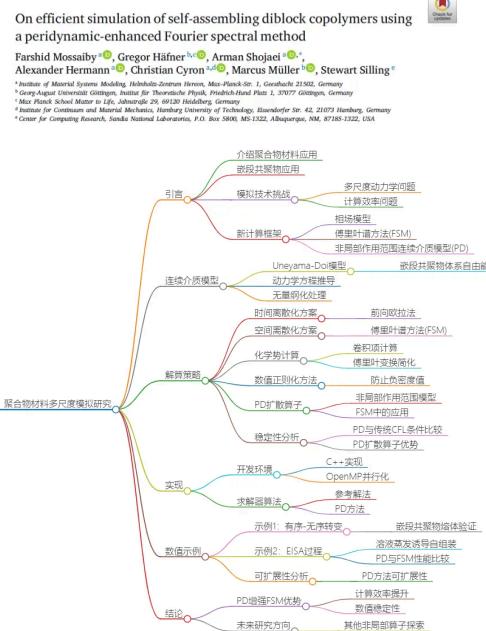
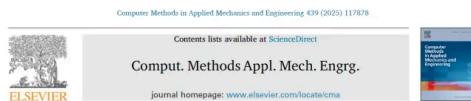
德美提出基于近场动力学增强傅里叶谱方法的自组装共聚物高效模拟方法

原创 夏小可 复合材料力学 2025年11月29日 09:03 陕西



二嵌段共聚物自组装过程的计算机模拟面临着严峻的多尺度动力学挑战与极高的计算成本。当前技术难以有效捕捉从分子到宏观尺度的结构演化，其中关键瓶颈在于：控制方程高度非线性，包含计算昂贵的空间卷积项，而常用的显式时间推进格式（如向前欧拉法）受制于严格的库朗-弗里德里希斯-卢伊稳定性条件（Courant-Friedrichs-Lowy; CFL），必须采用极小的计算步长。这导致模拟实验时间尺度的进程需要耗费高得令人望而却步的计算资源，严重阻碍了对蒸发诱导自组装（Evaporation-Induced Self-Assembly; EISA）等复杂工艺的深入研究和优化。

为解决以上问题，德国汉堡工业大学、马克斯-普朗克研究所、哥廷根大学、美国桑迪亚国家实验室等研究团队在 *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 期刊发表了相关研究成果，该研究通过引入近场动力学非局部扩散算子，成功将二嵌段共聚物自组装模拟的稳定时间步长提升一个数量级，使计算效率提高6倍以上。论文标题为“On efficient simulation of self-assembling diblock copolymers using a peridynamic-enhanced Fourier spectral method”。



该研究提出了一种结合近场动力学（Peridynamics; PD）与傅里叶谱方法（Fourier Spectral Method; FSM）的新型计算框架。该方法通过引入PD非局部扩散算子替代传统拉普拉斯算子，有效放宽了数值稳定性限制，允许使用更大的时间步长。研究中采用相场模型描述系统自由能，并利用FSM进行空间离散化，卷积项则通过傅里叶变换高效计算。此外，文章还设计了数值正则化算法处理负密度问题，确保模拟的物理合理性。

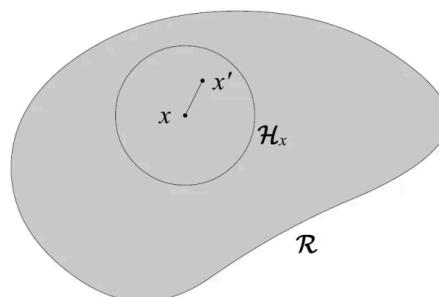


图1 域 R 和视界 H_x 的表示

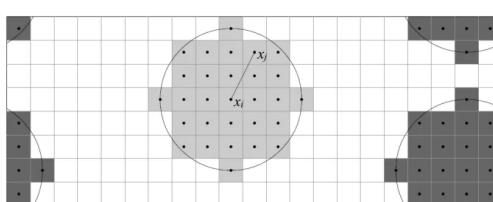


图2 PD模型中离散化的示意图图，包含邻域构建中的周期性

在数值验证方面，文章通过两个典型例子展示了方法的有效性与优越性。数值实验充分验证了该方法的准确性和卓越效率。在示例1中，模拟成功复现了二嵌段共聚物熔体的经典相图，其有序-无序转变边界与理论预测高度一致，并清晰地展示了从层状、柱状到球状形态的演变。性能提升

尤为显著：在示例2的EISA模拟中，**最大稳定时间步长**从FSM的 $10^{-6}\lambda^{-1}$ 提升至PD-FSM的 $10^{-5}\lambda^{-1}$ （提升900%），从而使得计算效率提升了6.41倍。稳定性分析从理论上证实，PD算子的稳定性条件远优于传统CFL条件，且随视界增大而更加宽松。

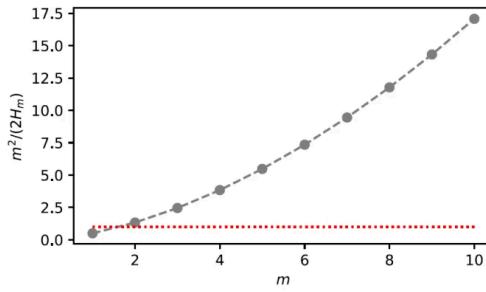


图3 项 $\frac{m^2}{2H_m}$ 对于 $1 \leq m \leq 10$ 的增长率。水平线表示 $\frac{m^2}{2H_m} = 1$ ，对于 $m > 1$ ，非局部算子展现出比CFL条件更宽松的稳定性准则。

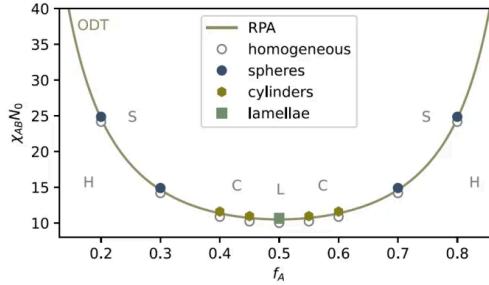


图4 示例1中二嵌段共聚物熔体的相图：该图显示了不同形态的稳定性 — 均匀 (H), bcc球体 (S), 六方柱状 (C) 和层状 (L)

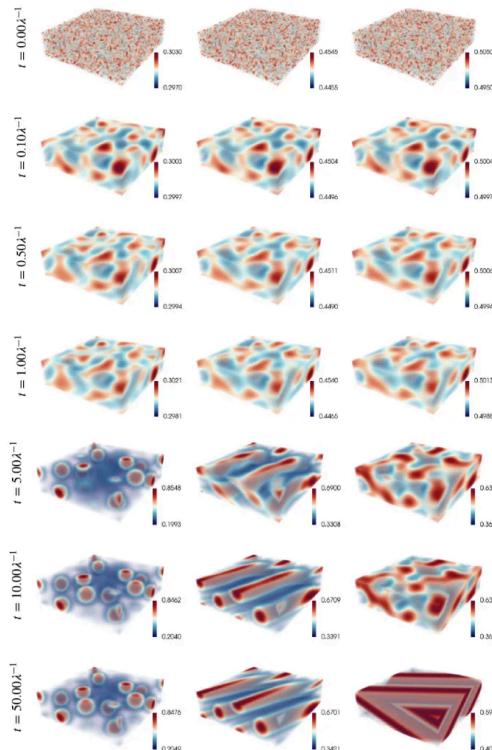


图5 示例1中少数嵌段密度 ϕ_A 的时间演化：(左) $f_A=0.3$, $X_{AB}N_0=14.19$, (中) $f_A=0.45$, $X_{AB}N_0=10.22$, (右) $f_A=0.5$, $X_{AB}N_0=10.01$

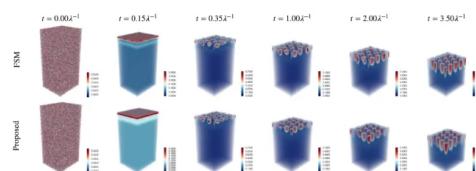


图6 示例2中少数嵌段密度 ϕ_A 的时间演化：(上) FSM, (下) 提出方法

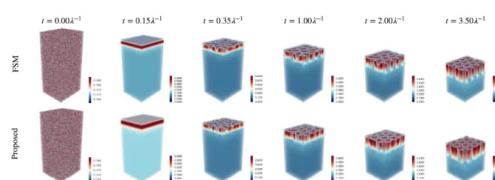


图7示例2中多段嵌段密度 ϕ_B 的时间演化：（上）FSM，（下）提出方法

该方法在功能高分子材料设计中具有广泛应用前景，特别是用于优化积分不对称滤膜的制备工艺。通过模拟EISA过程，可精确控制表面孔隙结构与机械性能，为水净化、催化等领域的膜材料开发提供理论指导。

原始文献：

Mossabiy, F., Hafner, G., Shojaei, A., Hermann, A., Cyron, C., Müller, M., & Silling, S. (2025). On efficient simulation of self-assembling diblock copolymers using a peridynamic-enhanced Fourier spectral method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 439, 117878.

原文链接：

<https://doi.org/10.1016/j.cma.2025.117878>

责任编辑：夏小可

↑ 点击文字“阅读原文”查看原始文献

↑ 文章已开启快捷转载

↑ 文献求助及技术交流群：640676531, 540731372



近场动力学 - 目录

[上一篇 · 上海交大：一种降阶近场动力学模型加速复合材料断裂模拟](#)

[阅读原文](#)