

論文内容の要旨

Thesis Summary

マイクロスケールの固体-流体問題の直接数値シミュレーションに関する研究

Numerical studies on micro-scale solid-fluid dynamics using the direct numerical simulation

氏名 鵜殿 寛岳

1. はじめに

本研究は、マイクロスケールの流体における固体粒子の挙動を扱う。いずれの問題も、高解像度の直接観察が困難である等の事情から、数値解析による観察、測定、定量評価が不可欠であるという特徴がある。もっとも、微細なスケールで周りの粒子、障害物が関与する3次元的な複雑な流れ場に置かれた微粒子の運動に対して、限定された仮定を置く解析モデルを適用することは現実的ではない。そこで、本研究は、マイクロスケールの流体中における粒子の挙動を得るために、粒子と流体の相互作用を解くことで粒子挙動を計算する直接計算法 (Direct Numerical Simulation, “DNS”) をベースにした数値計算法を用いた。

2. 数値計算法

本研究は、粒子の衝突力を評価する離散要素法(The Discrete Element Method, “DEM”)に DNS をカップリングさせた手法である DEM-DNS 法を用いた。DNS には、埋込み境界法(Immersed Boundary Method, “IBM”)を用いた。

まず計算空間を細かく等分割し、粒子径よりも小さいセルを準備する。各セル内部の体積分率 α を用いて次の合成速度を各セル内部で定義する:

$$\mathbf{U} = (1 - \alpha)\mathbf{u}_f + \alpha\mathbf{u}_s, \quad (1)$$

ただし、 \mathbf{u}_f 及び \mathbf{u}_s は、それぞれ流体相及び固体相の速度である。この合成速度をもとに、次の支配方程式を立てる:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (2)$$

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U}\mathbf{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu_f [\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T] + \rho_f \mathbf{f}. \quad (3)$$

式(2)は連続の式、式(3)はナビエ・ストークス方程式である。ただし、 ρ_f は流体密度、 p は圧力、 μ_f は流体粘度、 \mathbf{f} は固体・流体相間の相互作用項で、

$$\mathbf{f} = \frac{\alpha(\mathbf{u}_s - \hat{\mathbf{U}})}{\Delta t}. \quad (4)$$

で定義される ($\hat{\mathbf{U}}$ は各ステップで得られる仮の値である)。その結果、同一の式から各相に応じた流速を得ることができる。すなわち、

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{n+1} &= \hat{\mathbf{U}} + \Delta t \mathbf{f} \\ &= \begin{cases} \mathbf{u}_f^{n+1} & (\alpha = 0) \\ \mathbf{u}_s^{n+1} & (\alpha = 1) \end{cases}. \end{aligned} \quad (5)$$

粒子の運動は、並進 \mathbf{u}_p 及び回転 $\boldsymbol{\omega}_p$ に関してそれぞれ次の式で得られる:

$$\frac{d(m_p \mathbf{u}_p)}{dt} = - \int_{V_p} \rho_f \mathbf{f} dV + \sum F_c \left(+ \sum F_a \right), \quad (6)$$

$$\frac{d(I_p \omega_p)}{dt} = - \int_{V_p} \mathbf{r} \times \rho_f \mathbf{f} dV + \sum \mathbf{T}_c. \quad (7)$$

ただし、 m_p は粒子質量、 V_p は積分領域としての粒子内部、 I_p は粒子の慣性テンソルを表している。 $\sum \mathbf{F}_c$ 及び $\sum \mathbf{T}_c$ は、それぞれ DEM で評価された接触粒子に作用する接触力及び回転トルクである。 \mathbf{F}_c は、バネ-ダッシュポットでモデリングされる。 $\sum \mathbf{F}_a$ は粒子間の付着力で、 $F_a = -Aa/24h^2$ (A : Hamaker 定数, h : 粒子の表面間距離)で計算される。

3. マイクロ流路内を流れる粒子の慣性集約挙動に関する数値シミュレーション

3.1 序論

マイクロ流路内に高いスループットで粒子が分散した懸濁液を流すと、粒子は流れ方向とは直角方向をなす径方向に移動し、断面上離散的な領域に集約し、壁面中心線に沿ってストリームラインを形成する。

粒子濃度が一定の限界値を超えると、慣性集約挙動はブレイクダウンする。このため、既存研究は、粒子濃度が 1%を下回る十分に希釈された流体を扱ってきた。この混雑効果は、微粒子分離プロセスの精度と効率性の合理的妥協点を左右する問題であるにも関わらず、一致しない結果が報告されており、混乱を招く恐れがあった。

本研究は、DEM-DNS 法を用いて、慣性集約挙動に対する粒子濃度の影響を調べることで、集約挙動がブレイクダウンする混雑効果を調べる。適切な流路長を決めるために、周期境界条件が付された流路の長さ集約挙動の関係について明らかにする。

3.2 計算条件

粒子はポリスチレンビーズ、流体は水を想定した。それぞれの物性値は表 1 及び表 2 の通りである。時間刻みは、 1.0×10^{-9} s とした。

表 1 流体の物性値

item	symbol	value	unit
density	ρ_f	0.998	g cm^{-3}
viscosity	μ_f	1.002	mPa s

表 2 粒子の物性値

item	symbol	value	unit
diameter	a	4.0	μm
density	ρ_p	1.05	g cm^{-3}

3.3 結果及び考察

3.3.1 流路長の影響

正しい集約挙動が得られる適切な流路長を決めるために、流路長が集約挙動に与える影響を調べた。流路断面は、高さ H 及び幅 W それぞれ $40 \mu\text{m}$ とし、各辺が 80 分割されるように計算空間を等分割した (1 粒子径あたり 8 セル相当)。境界条件は、流れ方向に周期境界条件、それ以外の壁面はすべりなし条件とした (図 1 左)。また、図 1 右は、断面内の粒子位置の変数を図解している。一つは、流路軸中心からの壁面法線方向の距離 δ_L 、もう一つは、面心線からのオフセット距離 δ_{CL} である。

3 種類の異なる長さを持つ流路を用いて、レイノルズ数($Re = \rho_f U_{\max} H / \mu_f$, U_{\max} は最大流速)250 での粒子の挙動を調べた。流路長 L は粒子径 a に対して 20 倍, 10 倍, 5 倍のものを用いた。

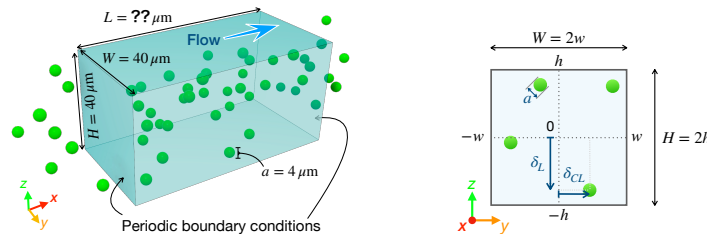


図 1 (左) 計算領域の寸法及び境界条件。(右) 断面内での粒子位置。

$L = 20a$ の流路では、各辺面心線に沿って集約粒子のストリームラインが形成され (図 2 左)、既存の実験結果と一致した正しい粒子分布が得られた。

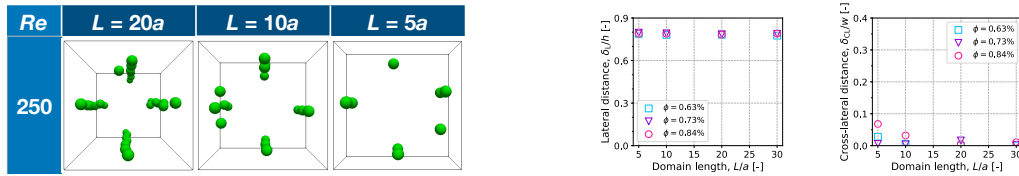


図 2 (左)正面から見た粒子の分布 ($\phi = 0.8\%$)。 (右) 流路長に対する(a) δ_L 及び(b) δ_{CL} への影響。

しかし、流路長を短くすると、軸中心からの距離 δ_L は流路長の影響がほとんど見られなかったのに対して、面心線からのオフセット距離 δ_{CL} はゼロから乖離し(図 2 右)、分布の対称性が崩れた。この傾向は、粒子濃度が高いとより顕著になった。以上の結果から、粒子径 20 倍相当の流路長が最適であると判断した。

3.3.2 混雑効果

濃度限界付近で粒子濃度が慣性集約挙動に与える影響を、 $Re = 250$ の流れで調べた。 $\phi = 0.84\% - 1.68\%$ の間で、粒子列がブレイクダウンし、断面内円環状領域に粒子が広がった。次に、粒子濃度増加による粒子回転の影響を調べた。

図 3(左)は、各流れ領域において、流路を流れる粒子の数に対する粒子回転の変化を示している。粒子濃度の増加とともに、粒子回転が減少した。図 3(右)は、粒子回転と粒子分布の広がり度合い $2\delta_{CL}$ の関係を示している。粒子回転が高いほど、壁面方向の分布がより狭くなった。これは、粒子数が増加することで、同じ回転ベクトルを持つ近接粒子同士の流体力学的な相互干渉が生じていたことを示唆している。

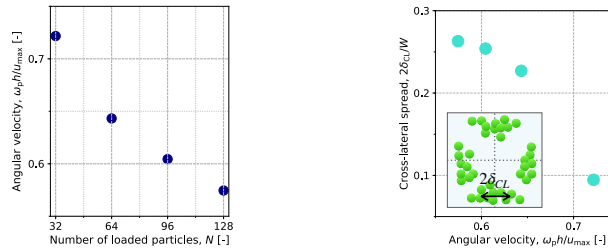


図 3 (左)粒子数の増加による粒子回転 ω_p の変化。 (右) 粒子回転と分布の広がり度合い $2\delta_{CL}$ の関係。

3.4 結論

DEM-DNS 法を用いて、適切な流路長を決め、濃度限界付近での集約挙動に対する濃度効果を調べた。混雑効果を引き起こす要因を明らかにし、粒子の空間分布を示すことができた。

4. Shear thinning 流体に含まれる凝集体のせん断変形とせん断粘度の関係に関する数値シミュレーション研究

4.1 序論

粒子間の相互作用が無視できる完全分散状態の懸濁液にせん断を加えると、測定粘度 μ_m は体積分率 ϕ にのみ依存する関数 (Krieger-Dougherty 式, 以下「KD 式」とする)

$$\mu_m/\mu_f = (1 - \phi/\phi_{\max})^{-[\eta]\phi_{\max}} \quad (8)$$

(μ_f : 流体の粘度, ϕ_{\max} : 最大充填率, $[\eta]$: 粒子の固有粘度) で記述される。一方、粘度が減少する shear thinning 挙動は、凝集体のせん断の作用による変形、解砕の反映である。平衡状態での凝集体は、凝集の強さ、作用するせん断の強さ等で決まるサイズに落ち着く。一部の流体は凝集体の中に閉じ込められて粒子と一体的に振る舞うため、懸濁液のせん断粘度は、流体と一体的に振る舞う凝集体の間で生じる粘性散逸により決定される。したがって、凝集体懸濁液の粘度評価では、流体から見える凝集体の見かけの体積を反映した実効体積分率(effective volume fraction, ϕ_{eff})が考慮され、名目体積分率 ϕ を実効体積分率 ϕ_{eff} で置き換えた修正 KD 式が提案されていた。本研究では、凝集体のミクロな構造が懸濁液のレオロジー特性に与える影響を、DEM-DNS 法により調べる。

4.2 数値計算手法

凝集体の変形は、粒子・流体間の相互作用と粒子・粒子間の相互作用(付着力及び接触力)がマイクロスケールで複雑に関与するプロセスであるため、DEM-DNS 法を採用した。

4.3 計算条件

流体及び粒子の物性値はそれぞれ表 3 及び表 4 の通りである。時間刻みは 1.0×10^{-10} s とした。凝集体構造が懸濁液のレオロジー特性に与える影響を調べるため、2 種類の構造を準備した(図 4)。一

つは、ランダムに粒子がパッキングされた球状の密充填凝集体で、もう一つは、密充填凝集体から中心部分をくり抜いた中空凝集体である。計算領域の上下境界面は滑りなし条件とし、等しい速度を与えてせん断を作用させた。それ以外の壁面は、周期境界条件とした。

表 3 流体の物性値

item	symbol	value	unit
density	ρ_f	0.996	g cm^{-3}
viscosity	μ_f	8.5	mPa s

表 4 粒子の物性値

item	symbol	value	unit
diameter	a	1.0	μm
density	ρ_p	2.5	g cm^{-3}
Hamaker const.	A	0.1	zJ
spring const.	k_n, k_t	1.0	Nm^{-1}
coef. of friction	μ	0.9	-

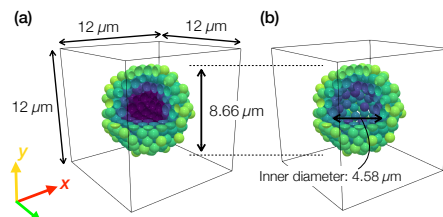


図 4 凝集体の初期配置。(a) 密充填, (b) 中空。

4.4 結果及び考察

凝集体構造体が懸濁液のレオロジー応答に与える影響を調べるために、密充填凝集体及び中空凝集体の懸濁液にせん断 $\dot{\gamma}$ (10 及び 2500 s^{-1})を作用させ、凝集体の変形をシミュレーションした。

$\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$ の最も弱いせん断では、どちらの凝集体も剛体回転を行い、構造体の変化は生じなかった。せん断粘度は、どちらの構造体でも等しい値が得られた (図 5 左)。これは、凝集体の変形がなかったことで、流体に見える実効体積分率が等しかったことによる。

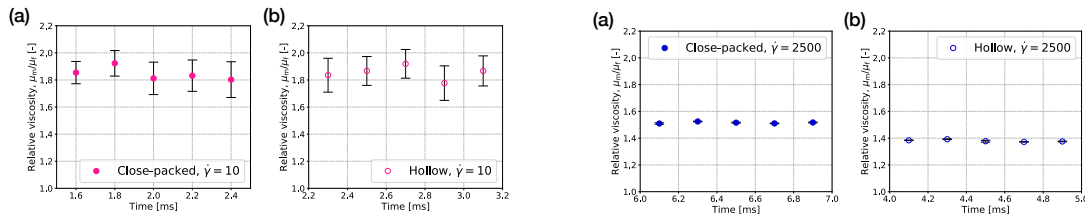


図 5 (左) $\dot{\gamma} = 10$, (右) $\dot{\gamma} = 2500$ でのせん断粘度の時間変化。(a) 密充填, (b) 中空。

一方、十分に強いせん断速度では、どちらの凝集体も変形、解砕し、散り散りになった粒子がせん断方向に流れた。せん断粘度はどちらも、 $\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$ に比べると減少し、**shear thinning**が見られただけでなく、密充填凝集体よりも中空凝集体の方でより大きな減少が観察された (図 5 右, 密充填: 20%減少, 中空: 26%減少)。

中空凝集体の方でより大きな **shear thinning** が見られたのは、せん断が強くなるにつれて中空構造体の方で大きな変形、解砕が起り、実効体積分率の減少がより顕著になったためである。**Shear thinning**の原因は、凝集体の中に閉じ込められた流体の解放にともなう実効体積分率の減少であることを数値シミュレーションで実証することができた。

4.5 結論

凝集体のせん断変形を模擬するとともに、密充填凝集体よりも中空凝集体の方でより大きな **shear thinning**が生じることを示すことができ、**shear thinning**のメカニズムを数値的に示すことができた。

5. おわりに

DNS をベースにすることで、周囲の粒子との相互作用が複雑に関与する微細な流れ場での粒子挙動を正確に模擬するとともに、粒子回転の測定、粘度評価等の実験では困難な定量的解析も可能であることを示すことができた。