

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 5 日現在

機関番号：15301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13453

研究課題名(和文)分離困難な多重小スケールを有する系の数理モデリングと数値解析

研究課題名(英文) mathematical modelling of a multiple-scale system having a wide and continuous scale-range

研究代表者

小布施 祈織 (Obuse, Kiori)

岡山大学・環境生命科学研究所・特任助教

研究者番号：90633967

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：1. 流体内部N体問題および混相流仮定の2種の数値計算を基盤として研究を進めた。数値計算データが示す特徴と実験データが示す特徴の整合性を確認およびナノ粒子分散系のダイナミクスに対する2種の近似的評価の相違点はある程度明らかになったが、「離散と連続のちがいを十分に示唆するデータを入力する段階まで達することはできなかった。

2. 2次元空間内に孔のあいた壁と1つの円形ナノ粒子を考え、流れにシアが存在する場合について、ナノ粒子の挙動を記述する数理モデルの作成を試みた。ここでの設定は2次元であるが、解析的な問題の扱いであることにより流体内部ナノ粒子のダイナミクスに対するより明確な示唆を得る可能性がある。

研究成果の概要(英文)：1. It was found that although two major approximations based on both the N-body problem and the multi-phase fluid problem give somewhat consistent numerical results with those of experimental data of nano-fluid dynamics, the mechanisms of the appearance of characteristic aspects in numerical data are totally different.

2. Suggested a simple mathematical model for a nano-particle and a wall with a gap in a two-dimensional shear flow. The numerical calculation is now being carried out, and expected to give a simple and clear understandings for the complexed three-dimensional problem.

研究分野：数値解析・数理モデリング

キーワード：数理モデリング ナノフルイド

## 1. 研究開始当初の背景

単一スケールによる従来の系の数理的記述では不十分である多重スケールを持つ現象の数理解モデリングや数値解析は、応用数学の一分野として急速にその認知が広がりつつあり、例えば Society for Industrial and Applied Mathematics から Multiscale Modeling and Simulation なる雑誌が発刊されるなど、近年注目を集めている。これら多重スケールを持つ系は、惑星形成、微生物流体、微粒子分散流体などの多くの分野において、観測、実験、数値シミュレーションを通して報告され、活発な研究がなされている。しかしながら理論研究の多くは、仮想スケール極限もしくはスケール分離に基づくモデルを用いた数値計算による現象の再現にとどまっており、中間スケールに注目した研究も存在するものの、広いスケールにまたがる視点と階層間の相互作用を取込んだ系の数理的記述と理解につながる有力な理論は未だ存在しない。そこで本研究課題では対象として、物質のパッシブ性により系の持つ多重スケール性が前面に出る、有機溶媒中に多数の表面修飾ナノ粒子およびその凝集体が分散している系を考える。この系は多重スケールを有するだけでなく、溶媒分子のスケール ( $0(10^{-10})$  m) とナノ粒子およびその凝集体のスケール ( $0(10^{-9})$ - $0(10^{-6})$  m) が連続的に続くことより、系全体のダイナミクスを一つのモデルに取り込むにあたってスケール極限やスケール分離の観点に頼ることができないという特徴を持つ。溶媒を流体として取り扱い、その基礎方程式として例えば Navier-Stokes 方程式を用いることに関しては、多くの場合反論を受けない。しかし連続体として扱うほどには十分に小さくなく、流体中の分散固体として扱うほどには溶媒分子に比べて十分に大きくないナノ粒子およびその凝集体を、数理的にどう扱うかに対する明快な指針はこれまで知られていない。本研究課題では、分散・連続に続く新たな数理的概念の提案と、それに基づく、分散困難な多重スケールを持つ現象の数理的記述および理解を探求する。

## 2. 研究の目的

本研究課題では、分散困難な多重小スケールを持つ系に対する、数理科学的理解を目指す。この系は、そのダイナミクスを一つのモデル

に取り込むにあたって、スケール極限やスケール分離の視点に頼ることができないという困難性を持ち、それゆえその明快な数理的記述方法は知られていない。そこで本研究では、まず数値シミュレーションによる系全体のダイナミクスの評価を通して既存の数理モデルの不十分さを明らかにし、次いでそこから得られる知識および情報を基に分散・連続に続く新たな数理的概念を提案し、系のダイナミクスの定性的および定量的に優れた数理モデリングと系の数理的理解を目指す。

## 3. 研究の方法

1. 仮想的スケール極限とスケール分離の視点に基づく既存モデルの欠陥・長所の解明：ナノ粒子およびその凝集体が溶媒分子程度に小さいと仮定して連続体として取り扱うこと(仮想的スケール極限の視点)による系の評価と、ナノ粒子およびその凝集体が溶媒分子よりも十分に大きいと仮定して溶媒中の分散物質として取り扱うこと(仮想的スケール分離の視点)による系の評価を、同一の系に対して数値的に行う。その結果を連携研究者による実験データと比較することにより、各評価モデルの欠陥および長所を明らかにする。

2. 対象が微小スケールであることの寄与の理解と数理的記述方法の提案：

系の全ての長さスケールは我々の日常におけるスケールに比べると非常に小さい。このことがどのような非直感的特徴を生み、数理的にどう記述されるのかを解明する。

3. スケール極限やスケール分離に代わる新たな数学的視点に基づく、系の数理モデル構築：

上記の1および2で得た知識を基に、スケールの多重性と分散困難性がナノ粒子凝集体再分散の主要メカニズムにどのような影響を及ぼし、どのような数学的枠組みの中でどう記述されるべきかを明らかにする。その際、分散・連続に続く新たな数理的概念を提案し、この概念を用いて、分散困難な多重小スケールを有する系に対する数理モデルの構築を目指す。

## 4. 研究成果

### 1. 数値実験

混相流問題およびN体問題の2種の近似に基づく数理モデルを用い、様々なパラメータ値と初期条件のもとで数値計算を行った。下流における凝集体のサイズの期待値を、流れの速度についてグラフ化したところ、両方の数理モデルに基づく数値実験において、連携研究者から提供された実験データと概ね整合

的な結果が得られた。またナノ粒子クラスタ分散のメカニズムについて、再分散能力の高いナノ粒子の設計につながる可能性のある、下記の特徴が示唆された。

・混相流問題に基づく数値モデルでの数値実験：ナノ粒子クラスタに対応する流体部分の分散は主にシアストレスによって引き起こされる。分散の程度は流れの速度差および混相流間の粘性差に大きく依存する。

・N 体問題近似に基づく数値モデルでの数値実験：

流れが早い場合には、ナノ粒子凝集体の内部に流体がほとんど入り込めず、ナノ粒子の再分散は主に凝集体同士の衝突または流れのシアによって起きる。

一方、流れが遅い場合には、流体が凝集体の隙間に入り込み、凝集体を校正するナノ粒子同士の引力を内側からゆるめ、ナノ粒子を再分散させる。後者の傾向は特に、ナノ粒子の表面修飾による隙間の存在が重要であり、再分散能力の高いナノ粒子の設計につながる可能性がある。

上記の数値実験結果は、混相流仮定においてもN体問題仮定においてもナノ粒子再分散は実験データと同様の傾向を示すが、そのメカニズムは異なっていることを示しており、「離散と連続の中間的な概念」を考える上で、有用なヒントとなり得る。しかしながら、当該研究課題期間内には「離散と連続のちがいを十分に示唆するデータを入手する段階まで達することはできなかった。

## 2. 2次元数値モデル

よりシンプルなモデルを用いて流体内部ナノ粒子の基本的な数理的な理解を深めるため、2次元空間内に孔のあいた壁と1つの円形ナノ粒子を考え、流れにシアが存在する場合について、ナノ粒子の挙動を記述する数値モデルの作成を試みた。現在、数値モデルを検証する数値実験のための数値計算プログラム作成および数値実験データの作成途中である。ここでの設定は2次元であり、現実の系や行っている数値シミュレーションの設定とは異なるが、解析的な問題の扱いであることにより流体内部ナノ粒子のダイナミクスに対するより明確かつシンプルな示唆を得る可能性がある。またこの数値モデルはナノフルイド問題のみならず、微生物やナノマシンなどが流体内部に分散する多くの応用的問題に適用が可能である。

5. 主な発表論文等  
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 0件)

[学会発表](計 7件)

1. Kiori Obuse and Jean-Luc Thiffeault  
“2次元Stokes流体内境界付近における微生物のダイナミクス”(招待講演・特別講演)  
流体力学学会四国中国支部講演会, 岡山大学,  
26-27 Nov., 2016

2. 小布施祈織  
“2次元 Stokes 流体内における微生物の挙動”(招待講演)  
現象と数値モデル, 姫路キャッスルグラン  
ヴィリオホテル, 7-9March, 2016

3. Kiori Obuse and Jean-Luc Thiffeault  
“Behaviour of treadmilling swimmers in 2D Stokes flow”(招待講演)  
ACCA meeting, Imperial College London,  
London, 17 February 2016

4. Kiori Obuse and Jean-Luc Thiffeault,  
“Behaviour of a treadmilling microorganism near a semi-infinite wall”(招待講演),  
Second International ACCA-JP\_UK Workshop,  
Kyoto University, 18-19Jan2016

5. 小布施祈織  
Stokes 流体内における微生物の N 体問題  
(招待講演),  
Perspectives in Mathematical Sciences, 岡  
山大学, 6-8Jan2016

6. Kiori Obuse, Jean-Luc Thiffeault,  
“微生物の挙動と複素空間内特異点モデル  
(招待講演),  
数値モデルとシミュレーション, 伊良湖,  
2015年10月31日-11月2日

7. Kiori Obuse and Jean-Luc Thiffeault,  
“A low-Reynolds-number treadmilling swimmer near a semi-infinite wall”(招待講演),

The 21th Kyoto Univ. Appl. Math. Seminar  
ACCA-JP, Kyoto University, 14 July, 2015

〔図書〕(計 0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

取得状況(計 0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

小布施 祈織 (OBUSE, Kiori)  
岡山大学・大学院環境生命科学研究科・特  
任助教  
研究者番号：90633967

##### (2) 研究分担者

( )

研究者番号：

##### (3) 連携研究者

水藤 寛 (SUITO, Hiroshi)  
東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・  
教授  
研究者番号：10302530

青木 宣明 (AOKI, Nobuaki)  
東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・  
助教  
研究者番号：90437244

##### (4) 研究協力者

( )