

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 9 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23560188

研究課題名(和文) 高分子鎖コイル-ストレッチ遷移における非アフィン性に着目した抵抗低減機構の解明

研究課題名(英文) Study on drag reduction mechanism with emphasis on non-affinity in polymer chain coil-stretch transition

研究代表者

堀内 潔 (Horiuti, Kiyosi)

東京工業大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：10173626

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,100,000円、(間接経費) 1,230,000円

研究成果の概要(和文)：高分子鎖を連結粒子系として近似するBDSとDNSとの結合法を用いて非アフィン粘弾性流体における抵抗低減機構の解明を行った。BDSでは、dumbbellの運動にslip velocityを付与して非affine性を導入したdumbbellモデルを用い、一様等方乱流を対象とした。非アフィン性が最小の場合、dumbbellが反変ベクトルとして運動して渦管の伸長を抑制するに対し、最大の場合は共変ベクトルとして運動して渦層に張力を及ぼすため、大きな低減が得られる事を明らかにした。共変性のdumbbellは溶媒からのせん断によりその長さが最大となる方向に配向するため、大きな伸長を受ける事を示した。

研究成果の概要(英文)：We carried out numerical study to reveal the mechanism of drag reduction (DR) in polymer-diluted flows. The polymer chains are modeled as elastic dumbbells. We elucidated the effect of non-affinity in the motion of dumbbells on DR, where their motions do not precisely correspond to macroscopically-imposed deformation. The DNS for the solvent is coupled to the mesoscopic description of dumbbells using BDS in forced homogeneous isotropic turbulence. Compared with the complete affine case ($a=0.0$), more drastic DR is achieved when non-affinity is maximum ($a=1.0$). When $a=0.0$, the dumbbell connector vector is convected as contravariant vector representing material line element and elasticity is caused on the tubular structures. When $a=1.0$, the connector is convected as covariant vector representing material surface element, and directs outward perpendicularly on the planar structures and exert an extra tension on vortex sheet, which leads to attenuation of energy cascade, causing larger DR.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：抵抗低減 高分子添加溶液 界面活性剤 粘弾性流体 Brownian dynamics Elastic dumbbell model 反変・共変ベクトル エネルギーカスケード

1. 研究開始当初の背景

乱流中に少量の高分子を添加することで摩擦抵抗が低減する現象は Toms 効果として知られており^[1], 省エネルギー技術に応用されている. さらに近年, DNA^[2]や界面活性剤^[3]といった高分子の添加溶液において顕著な抵抗低減が発生することが報告されており, 特に界面活性剤添加溶液では Virk の漸近線を超える結果が得られることが確認されている^[4]. こうした抵抗低減効果は溶媒の局所的な変形に対して高分子の追随性が失われる非 affine 性に起因する可能性が指摘されている^[5]. また, 剛直な高分子と柔軟な高分子を混合した溶液では, 各々を単独に添加した場合よりも大きな抵抗低減が発生することが実験的に確認されているが^[6], その機構は解明されていない.

2. 研究の目的

本研究課題は, 低減機構の解明を通じて Toms 効果の更なる有効活用を図るために, 高分子の基本的な挙動の検証を行い, さらに, 顕著な抵抗低減の発生が報告されている非 affine 性の高分子^[5]や異種高分子混合の効果を検証することを目標とした.

現在, 高分子添加溶液をはじめとする粘弾性流体を数値計算する手法として汎用されているのは, 変形と応力の関係を記述する構成方程式を用いる方法である. しかしながら, 構成方程式では macroscopic なスケールでの粗視化平均が施されていることから高分子鎖の挙動の検証が出来ず, また異種高分子混合を模擬することが出来ないといった欠点がある.

そこで本課題では, 高分子鎖を mesoscopic なスケールの dumbbell モデルで近似し, Lagrange 的に追跡する BDS(Brownian Dynamics Simulation)を行い, 算出される高分子応力を流体の運動量方程式に feedback する 2-way coupling による DNS との結合 (BDS-DNS) を行い, 高分子添加溶液における粘弾性効果のマルチスケール解析を行っ

た. この手法により, 個々の高分子の挙動の解析を可能とした. また, 高分子混合比のパラメータの調整により, 異種高分子混合添加溶液の挙動の解析を行った.

3. 研究の方法

本研究では高分子鎖を図 1 に示すような, 2 つの beads を有限伸長性非線形(Finitely Extensible Non-linear Elasticity)バネで繋いだ dumbbell モデルで近似する. ここで n は dumbbell の番号を, $x_1^{(n)}$, $x_2^{(n)}$ は beads の位置を表す. Beads の質量が十分小さく慣性力を無視出来ると仮定し, 溶媒から受ける抗力とバネによる弾性力の釣り合いを考えると, 高分子の端点同士を結ぶ dumbbell connector vector $R^{(n)}$ と beads の重心位置 r_g の発展方程式(3.1),(3.2)が導出される.

$$\frac{dR_i^{(n)}}{dt} = u_i(x_1^{(n)}) - u_i(x_2^{(n)}) - \frac{1}{2\tau_s} \frac{R_i^{(n)}}{1 - (R_k^{(n)} R_k^{(n)} / L_{MAX}^2)} + \frac{r_{eq}}{\sqrt{2}\tau_s} ((W_1^{(n)})_i - (W_2^{(n)})_i) \quad (3.1)$$

$$\frac{d(r_g^{(n)})_i}{dt} = \frac{1}{2} (u_i(x_1^{(n)}) + u_i(x_2^{(n)})) + \frac{r_{eq}}{\sqrt{8}\tau_s} ((W_1^{(n)})_i + (W_2^{(n)})_i) \quad (3.2)$$

ここで $u(x_i^{(n)})$ は溶媒の速度, τ_s は dumbbell の緩和時間, r_{eq} は平衡長, L_{max} は最大伸び切り長である. また, $W^{(n)}_i$ は beads が溶媒から受ける熱揺動力であり, White Gaussian の統計(式(3.3),(3.4))に従う.

$$\langle (W_a^{(n)}(t))_i \rangle = 0 \quad (3.3)$$

$$\langle (W_a^{(m)}(t))_i (W_b^{(n)}(s))_j \rangle = \delta_{ab} \delta_{ij} \delta_{mn} \delta(t-s) \quad (3.4)$$

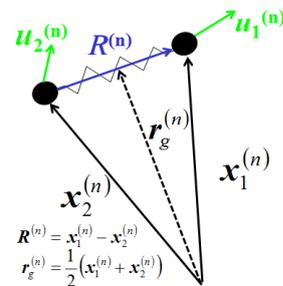


Fig 1 Schematic of elastic dumbbell model

式(3.1)では affine 性が仮定されているが, 本課題では, 非 affine 性を考慮するために, 右

辺第一項に式(3.5)のように速度場に対して slip velocity の導入を行った^[7].

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_g + (\nabla \mathbf{u}_g) \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_g) - 2\alpha \{ \mathbf{S} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_g) \} \quad (3.5)$$

ここで \mathbf{u}_g は beads の重心位置の速度ベクトル, \mathbf{S} はひずみ速度テンソルである. また α は非 affine 性強度を示す slip parameter ($0.0 < \alpha < 1.0$) で, $\alpha = 0.0$ の時には非 affine 性最小となり flexible な高分子に対応し, $\alpha = 1.0$ の場合は非 affine 性最大となり rigid な高分子に対応する. 式(3.1), (3.2) 及び(3.5)から, 高分子の運動を記述する事が出来る. 更に高分子が流体に及ぼす粘弾性効果を表現するために, dumbbell の及ぼす応力を式(3.6)に基づき算出した. この応力の発散を流体の運動量方程式に付加することで, 溶媒と高分子間の相互作用を取り入れた.

$$\tau_{ij} = \frac{3\pi a(1-2\alpha)}{2\tau_s \text{Re}} \sum_{n=1}^{N_d} \{ R_i^{(n)} R_j^{(n)} - r_{eq}^2 \delta_{ij} \} \quad (3.6)$$

Dumbbell の重心は必ずしも格子点と一致しないため, 数値計算で発展方程式(3.1), (3.2) を解く際には dumbbell の重心位置に直近の 8 格子点の速度を線形補間することで $u_i^{(n)}$ を求めた. 同様に, 式(3.6)で定義される dumbbell の及ぼす応力を流体の方程式に導入するには, 各々の dumbbell の応力を直近の格子に対して線形補間で分配し, 総和を取ることによって空間全体の応力を算出した.

直接数値計算の概要は以下の通りである. 本研究では非圧縮強制一様等方乱流の数値計算を行った. 支配方程式は Navier-Stokes 方程式(3.7)及び連続の式(3.8)である.

Navier-Stokes 方程式:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i \partial u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + f_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.7)$$

連続の式:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.8)$$

x_i は空間座標 ($i=1,2,3$), u_i は速度ベクトル, Re はレイノルズ数, τ_{ij} は高分子応力テン

ソル f_i は定常状態を維持するために付加されたソレノイダルな外力項である. ここで f_i は, 式(3.9)のように, 時間に関してデルタ関数でガウス分布に従う外力とした^[8].

$$f(\mathbf{k}, t) = \sqrt{\frac{E_f(k)}{16\pi k^4 \Delta t}} \{ \mathbf{k} \times (\alpha(\mathbf{k}) + i\beta(\mathbf{k})) \}$$

$$E_f(k) = \begin{cases} c_f, & (0 \leq k \leq 1) \\ 0, & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3.9)$$

c_f は \mathbf{k} に依存しない定数であり, ここでは $c_f = 0.5$ とした. また, Δt は時間刻み, i は虚数単位, $\alpha(\mathbf{k}), \beta(\mathbf{k})$ は独立なガウシアン乱数ベクトルである. この乱数ベクトルはアンサンブル平均 $\langle \cdot \rangle$ に関して $\langle \alpha_i \rangle = \langle \beta_j \rangle = 0, \langle \alpha_i^2 \rangle = \langle \beta_j^2 \rangle = 1$ を満たすように設定し, 8 time step おきに値を更新した. 計算領域は一辺の長さが 2π の立方領域とし, 周期境界条件を適用した. 空間の離散化にはスペクトル法を用い, aliasing 誤差は 3/2 則により除去した. また, 時間前進には Wray による 3 次精度 Runge-Kutta 法を用いた^[8]. 格子点数は 128^3 , レイノルズ数は $\text{Re} = 30$, 時間刻み幅は $\Delta t = 0.001$ とした.

Dumbbell の最大伸長長さは Newton 性の場合の Kolmogorov 長 η (≈ 0.1) 程度とし, $L_{\max} = 0.1$ とした. 緩和時間 τ_s はコルモゴロフ時間スケール τ_η に対し $W_i = \tau_s / \tau_\eta$ で定義されるワイゼンベルグ数 W_i が coil-stretch 遷移が発生する $W_i = 5.0$ 程度になるように, $\tau_s = 1.4$ とした^[8]. また平衡長を $r_{eq} = L_{\max} / 50$, 粒子半径を $a = 0.000185$ とした. 高分子濃度は, 5 ppm を想定したが, この濃度を実現する dumbbell の総数は $Nt = 10^{13}$ となり計算機的能力を超えるため, $Nt = 10^9$ とし, 十分な強度の高分子応力を確保するため, τ_{ij} にファクター ($\sim 10^3$) を乗じ, 高分子の複製追加の操作を施した^[9]. 本研究では, $\alpha = 0.0$ と 1.0 を単独に添加した場合と, それらを 50 ずつ混合した場合の 3 ケースで計算を実行した.

4. 研究成果

BDS-DNS の実行により得られたエネルギー散逸率の時間発展を図 2 に示す. 図より, 高

分子の feedback が存在すると、いずれのケースにおいても Newton 性(黒色)の場合より散逸率が減少しており、構成方程式による DNS^[5]と同様な乱流生成の抑制が見て取れる。また、散逸率の減少は $\alpha=1.0$ 単独の場合が最も大きく、混合、 $\alpha=0.0$ 単独の順に小さくなっており、非 affine 性強度によって抵抗低減効果が異なることがわかる。

図 3 に dumbbell 伸長率 R/r_{eq} の時間発展を示した。単独の $\alpha=0.0$ と 1.0 を比較すると、 $\alpha=1.0$ がより伸長が大きく、粘弾性効果が卓越していることがわかる。また、混合の場合と単独の場合の dumbbell 伸長率を比較すると、 $\alpha=0.0$ の dumbbell は単独よりも伸長が小さいのに対して、 $\alpha=1.0$ の dumbbell は単独よりも伸長が大きいことがわかる。

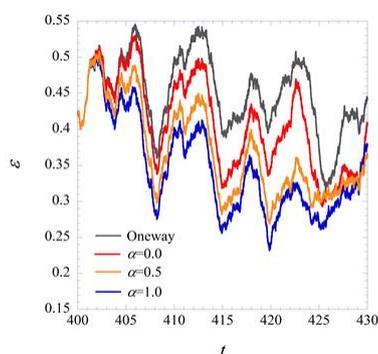


Fig 2 Temporal evolutions of dissipation rate

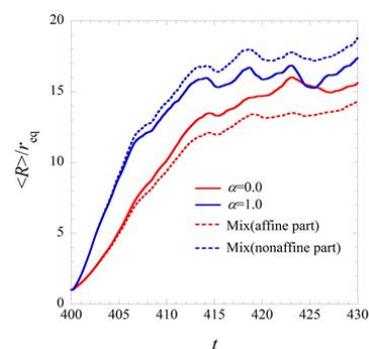


Fig 3 Temporal evolutions of the mean polymer extension

以上の結果から、非 affine 性の強度により粘弾性効果の発生する機構が異なることが推察された。このため、この機構の検証のために、高分子の渦構造に対する配向を解析した。

本研究では渦構造の同定に、式(4.1)で定義されるテンソル A_{ij} の固有ベクトルを用いた^[10]。

$$A_{ij} = (S_{ik} \Omega_{kj} + S_{jk} \Omega_{ki}) \quad (4.1)$$

A_{ij} の固有値はバーガース渦層に相似な、渦度とひずみが均衡する領域で大きな値をとるため、渦層の抽出に用いた。ここでは、固有値のクロスオーバーを避けるために固有ベクトルと渦度ベクトルの配向に基づく並び替えを行い、固有ベクトルが渦度に最も平行なものを s 成分、残りの2つの固有値の値が大きい方を $+$ 成分、小さい方向を $-$ 成分とした。上記の方法で求めた A_{ij} の3固有ベクトルのうち \mathbf{a}_s は渦層に垂直に配向しており、 \mathbf{a}_+ 及び \mathbf{a}_- は渦層に平行に分布し、これらの固有ベクトルは渦層の方向を与える。本研究では、この A_{ij} の3固有ベクトルを用いた高分子配向の同定を行った。

高分子の配向を検証するために、dumbbellの運動方程式の解析を行った。式(3.1)の右辺第一項に対して Taylor 展開を施し、熱揺動力の項を無視すると、 $\alpha=0.0$ の dumbbell connector vector \mathbf{R} の発展方程式は次の式(4.2)のように近似される。

$$\frac{dR_i}{dt} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} R_j - \frac{1}{\tau_s} R_i \quad (4.2)$$

これは、式(3.3)に示す非圧縮性流体中の微小線要素の発展方程式に類似しており、 \mathbf{R} は反変ベクトルとなる。また、式(4.3)で \mathbf{l} を $\boldsymbol{\omega}$ に置き換えると非粘性の渦度方程式と同一になることから、affine 性の高分子は渦線と同様な線要素として運動するものと予測した。

$$\frac{dl_i}{dt} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} l_j \quad (4.3)$$

次に、以上の予測と実際の dumbbell と渦構造の配向との相関を検証した。図 4 は、dumbbell connector vector と A_{ij} の固有ベクトルが成す角度の確率密度関数を示したものである。グラフでは赤色が s 成分、青色が $+$ 成分、緑色が $-$ 成分を示す。図より、 $\alpha=0.0$ の dumbbell は渦度ベクトルに平行で渦層に沿

う方向に配向していることがわかる。これは、 \mathbf{R} が渦線に追従し、反変ベクトルとして振る舞うという上記の予測と整合する事が示された。また、以上の結果から $\alpha=0.0$ のケースの抵抗低減は高分子が渦線の伸長を抑制する事により発生したと考えられる。

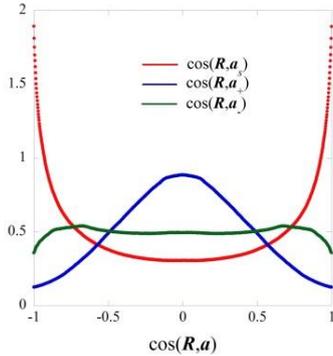


Fig 4 Probability density function (PDF) of $\cos(\mathbf{R},\mathbf{a}_k), (k=\{s,+,-\})$

次に、 $\alpha=1.0$ の dumbbell について同様な解析を行った。非 affine 性が最大の場合、式 (3.5) による slip velocity を導入した connector vector の発展方程式に対して Taylor 展開を施して次の近似式(4.4)を得た。

$$\frac{dR_i}{dt} = -\frac{\partial u_j}{\partial x_i} R_j - \frac{1}{\tau_s} R_i \quad (4.4)$$

これは式(4.5)に示す流体の微小面要素に外向き垂直な面積ベクトル \mathbf{S} の発展方程式と類似し、 \mathbf{R} は共変ベクトルとなる。

$$\frac{dS_i}{dt} = -\frac{\partial u_j}{\partial x_i} S_j \quad (4.5)$$

図 5 に、 $\alpha=1.0$ の dumbbell と A_{ij} の固有ベクトルの成す角度の確率密度関数を示した。図から、高分子は渦層に垂直な \mathbf{a}_+ ベクトルと平行で、渦度ベクトルに垂直な配向を取る事が見て取れる。これは、 $\alpha=1.0$ の dumbbell が反変ベクトル同士の外積によって構成される面積ベクトル、すなわち共変ベクトルとして振る舞うという上述の予測と整合する。この配向により、 $\alpha=1.0$ では高分子が渦層に対して張力を及ぼし、渦層の伸長によるエネルギー散逸の生成を抑制し、抵抗低減が発生したと考えられる。

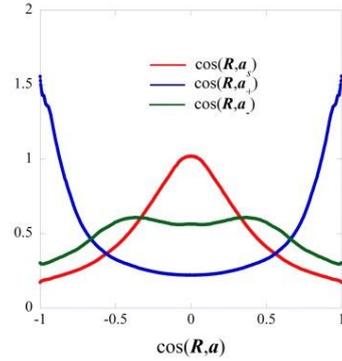


Fig 5 PDF of $\cos(\mathbf{R},\mathbf{a}_k), (k=\{s,+,-\})$

BDS-DNS による強制一様等方乱流の数値計算を行い、非アフィン性高分子の導入による抵抗低減機構を明らかにした。 $\alpha=1.0$, 混合、 $\alpha=0.0$ の 3 ケースの BDS-DNS を行い、抵抗低減の強度が、この順で減少する事を示した。Dumbbell の運動方程式の解析から、 $\alpha=0.0$ の dumbbell は反変ベクトルとして、 $\alpha=1.0$ の dumbbell は共変ベクトルとして振る舞う事を示し、特に、 $\alpha=1.0$ の場合、高分子が渦層に張力を及ぼすため顕著な低減が得られる事を明らかにした。

参考文献

- [1] B. A. Toms, *Proc. 1st Intl Congr. Rheol.* 2, (1949), 135-141
- [2] H. J. Choi, S. T. Lim, P. Y. Lai, and C.K. Chan, *Phys. Rev. Lett.* 89, (2002)
- [3] J. L. Zakin, J. Myska, and Z. Chara, *AIChE J.* 42 (1966), 3544
- [4] P. S. Virk, *AIChE J.* 21 (1975), 625-656
- [5] K. Horiuti, K. Matsumoto, and K. Fujiwara, *Phys. Fluids*, 25 (2013), 015106
- [6] W. Lee, R. Vaseleski, and A. Metzner, *AIChE J.*, 20, 128-133 (1974)
- [7] R. G. Gordon, and Schowalter, *J. Rheology* 16, 79-97 (1972)
- [8] T. Gotoh, D. Fukayama, T. Nakano, *Phys. Fluids*. 14 (2002), 1065-1081
- [9] T. Watanabe, and T. Gotoh, *Phys. Rev. E* 8, 066301 (2010)
- [10] K. Horiuti, and Y. Takagi, *Phys. Fluids*, 17 (2005), 121703

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 3 件)

- ① K. Horiuti, K. Matsumoto, and K. Fujiwara, "Remarkable Drag Reduction in Non-affine Viscoelastic Turbulent Flows", Phys. Fluids, 査読有, 25, 015106 (2013)
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4774239>.
- ② K. Horiuti and T. Ozawa, Multi-mode Stretched Spiral Vortex and Nonequilibrium Energy Spectrum in Homogeneous Shear Flow Turbulence, Phys. Fluids, 査読有 23, 035107 (2011) doi:10.1063/1.3567252.
- ③ K. Horiuti, K. Matsumoto and M. Adachi, Marked Drag Reduction in Non-affine Viscoelastic Turbulence in Homogeneous Isotropic and Pipe Flows. J. Phys.: Conf. Ser., 査読有, 318, 092016 (2011)
doi:10.1088/1742-6596/318/9/092016.

[学会発表] (計 6 件)

- ① 竹生 昇平, 堀内 潔, "Reconnection 過程における非アファイン粘弾性効果," 第 27 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 12 月 17-19 日, 名古屋大学, 日本流体力学会 (2013).
- ② K. Horiuti and S. Takeu, Contravariant and covariant dumbbells in polymer-diluted viscoelastic turbulence, 66th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Nov. 24-26, Pittsburgh, U.S.A., Bulletin of the American Physical Society 58 No.18, p. 334 (2013).
- ③ K. Horiuti and S. Takeu, Contravariant and covariant polymer dumbbells in non-affine viscoelastic turbulence, 14th European turbulence conference, ENS Lyon, Sep. 1-4, 査読有
<http://etc14.ens-lyon.fr/etc-14-program/TD.4 NNF2> (2013).
- ④ 堀内 潔, "流体乱流における反変・共変ベクトルと散逸構造", 「平成 23 年度 文部科学省 数学・数理科学と諸数学・産業との連携研究ワーク

ショップ, 乱流と流体方程式の解の特異性」, (招待講演) 1 月 27 日, 名古屋大学 理学南館 (2012).

- ⑤ 竹生 昇平, 堀内 潔, "Reconnection 過程における非アファイン粘弾性効果," 日本流体力学会年会 2012, 9 月 16-18 日, 高知大学, 日本流体力学会 (2012).
- ⑥ K. Horiuti, Multi-mode stretched spiral vortex and non-equilibrium energy spectrum in homogeneous isotropic and shear flow turbulence, International colloquium on Fundamental Problems of Turbulence, , Sep. 26- Sep. 30, Centre International de Rencontres Mathematiques, University of Marseille, France (2011).

[図書] (計 1 件)

- ① J. Schumacher, R. M. Kerr and K. Horiuti, "Structure and Dynamics of Vorticity in Turbulence", Chapter 2 in "Ten Chapters in Turbulence", Ed. by P. A. Davidson, Y. Kaneda and K. R. Sreenivasan, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., December, pp.43-86 (2012)
ISBN: 9780521769440.

[その他]

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

堀内 潔 (HORIUTI Kiyosi)

東京工業大学・理工学研究科・准教授
研究者番号: 10173626

(2) 海外共同研究者

J. Schumacher, Technische Universität Ilmenau, Department of Mechanical Engineering (Germany), Professor