

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 29 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560185

研究課題名(和文) 気液マイクロ流の界面形状制御を支援する多重スケール解析

研究課題名(英文) Multiscale analysis for controlling interface shape of gas-liquid micro flow systems

研究代表者

杉山 和靖 (SUGIYAMA, KAZUYASU)

大阪大学・基礎工学研究科・教授

研究者番号：50466786

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,200,000円

研究成果の概要(和文)：気液マイクロ二相流の界面の変形、気泡の生成に至るまでを再現する計算手法を整備した。Hele-Shaw流れの近似が成り立つアスペクト比(流路幅/流路厚さ)の大きな薄厚チャネルを対象とし、液相流れの慣性影響を考慮した基礎方程式(Laplace則、二次元Euler-Darcy方程式)を境界要素法を用いて解き、気液界面分布の時間変化を捉える方法を開発した。気相・液相の2つの入口流路と、気液相が合流し下流へと流れていく出口流路からなるT字型マイクロチャネルにおいて、合流部で気液界面が分裂し、気泡生成へと至る既存の実験結果を概ね良く再現し、気泡生成における慣性影響の重要性を示唆する結果を得た。

研究成果の概要(英文)：Numerical methods for simulating an interface deformation and a bubble formation in a gas-liquid micro flow system has been equipped. In consideration of the liquid inertia, the basic equations, we employed, consist of the Laplace law and the two-dimensional Euler-Darcy equation under the assumption of Hele-Shaw's flow owing to a large width-to-thickness aspect ratio of the microchannel. The equations are numerically solved by means of a boundary element method, and the temporal change in the profile of the gas-liquid interface is captured. The simulated results in a T-shaped microchannel, which consists of two inlets for gas and liquid and a outlet for gas-liquid mixture, well reproduce the experimentally observed behaviors that the interface pinches off at the channel junction and then a bubble forms, and imply the relevance of the liquid inertia to the bubble formation.

研究分野：工学

キーワード：数値流体力学

1. 研究開始当初の背景

超音波診断・治療において、径が数 μm 程度の気泡 (マイクロバブル) の活用に関心が高まっている。気泡は体積変化しやすく、エコー源として作用するとともに、体積振動によって周囲液体の粘性散逸をもたらす、熱源としても作用する。超音波画像診断、集束超音波治療において、マイクロバブルを体内に投与すると、それぞれ、血流画像の線明化、患部の選択的な加熱凝固による低侵襲治療を実現する。従来のマイクロバブル生成法では、気泡径の分散が大きいため、気泡応答振動の位相がばらつき、エコー源/熱源作用が重ね合わさると、逆位相の影響が打ち消しあってしまう。超音波医療でマイクロバブルの機能性を発揮させるには、その音響特性は均一であることが望ましく、単分散径の気泡生成法が求められている。中でも、制御性に優れる MEMS 技術、特に、二つの流路から異なる流体を流入し、合流部で界面分裂を促し、気泡/液滴を生成する T 字型マイクロチャネルに注目が集まっている。目下の課題は、毛細血管を通過可能な $1\sim 5\mu\text{m}$ の気泡を指定した大きさで生成することであり、その実現には、気泡生成に至るまでの力学現象に関する流体力学的な知見が不可欠である。

T 字型チャネル内での界面分裂に関して、これまで、絞り効果、噴流効果といった流路壁面により流れが狭められる影響によって引き起こされることが示されてきた (Christopher & Anna (2007) J. Phys. D). 絞り効果とは、気相が対面流路壁に近づくと、薄い液膜 (潤滑領域) と、その流れを駆動する高圧・低圧領域が形成し、その圧力差が界面を下流へと押し出す効果である。噴流効果とは、表面張力波やせん断層不安定によって界面が波打ち、界面分裂へと至る効果である。これまで、絞り/噴流効果により生成する気泡径のスケール則が提案されているが、このスケール則に従う生成気泡径は $100\mu\text{m}$ 程度であり、目標値に比べて随分大きい。絞り/噴流効果に当てはまらない現象として、薄層小型マイクロチャネルで、流路幅に比べて十分に小さな気泡が流路角部で生成することが観測されており、生成気泡径の最小値は $6\sim 7\mu\text{m}$ である (宮崎 (2011) 東京大学修士論文)。流路形状や作動条件を工夫することで、 $1\sim 5\mu\text{m}$ の気泡を均一に生成することが現実性を帯びてきている。実験では、出口圧力を固定し、液相流量を上げると、生成気泡径が小さくなるものの、ある流量を超えると気泡の生成が起きなくなる「気泡生成限界」が確認されている。さらに、低レイノルズ数流れであるにもかかわらず、気泡生成限界での気泡径は、粘性影響を指標するキャピラリ数 Ca ではなく、慣性影響を指標するウェーバー数 We で整理できるという、流体力学的に興味深い事実が明らかになっている。小さい気泡を生成するには、気泡生成限界に至る力学的機構を明らかにすることが重要である。

この課題をクリアするには、第一に、実験計測が必要であるが、系の寸法が小さく、流れが高速であるため、詳細なデータ取得に限りがある。また、実験では、物性値や対流の影響を調査しようとしても、パラメータを変えられる範囲には制約がある。従って、実験計測を補い、流路形状の設計の指針を合理的に与える数値流体力学への期待が高まっている。

2. 研究の目的

本研究では、生成気泡の寸法制御を見据え、(i) 気液マイクロ二相流の界面の分裂、気泡の生成に至るまでを再現する計算手法を開発すること、(ii) 数値解析により、気泡生成機構に関わる詳細な知見の獲得することを目的とする。(i) の二相流計算プログラムは、(1) 三次元 Navier-Stokes 方程式に基づくもの、(2) 二次元に次元縮約した計算モデルに基づくものに大別できる。(1) に関しては、Volume-Of-Fluid (VOF) 法に基づく二相流のシミュレーションを正確に、効率良く行うこと、(2) に関しては、Hele-Shaw 流れの仮定の下、基礎方程式を定式化し、それに合った計算法を開発することが課題である。

3. 研究の方法

(1) 高精度、高効率な VOF 法の開発

オイラー型 (空間に固定された矩形格子上で方程式を記述) の方法に基づき、VOF 法により非圧縮性二相流のシミュレーションを行う。VOF 法は、格子に占める各相の体積率を表す VOF 関数を用いて多相を識別する方法である。表面張力による垂直応力の跳躍の影響は、Continuum Surface Force (CSF) モデルを用いて、運動方程式における体積力として考慮する。VOF 関数の輸送式を安定・高精度に解くため、双曲線正接関数を用いて多次元界面の再構成を行う MTHINC 法を実装する。また、計算アルゴリズムについて、計算の効率化のため、圧力方程式を解く MAC 系の方法に変わる方法を検討する。

(2) 境界要素法による薄型マイクロチャネル内微細気泡生成シミュレーション

本研究では、薄型チャネルを用いた実験に対応する計算を行うため、手法の開発、実験結果との比較を行う。薄型チャネルは流路断面のアスペクト比 (流路幅/流路厚さ) が十分に大きいとして、Hele-Shaw 流れ (高さ方向の速度分布を放物分布で与える) で近似する。この近似により、流れ場を二次元とみなすことができ、次元が縮約される。さらに、二次元とみなした場合は、渦度の影響が壁面ごく近傍のみに制限されるため、ポテンシャル流れとみなす。ポテンシャル流れの速度分布は、ラプラス方程式の解として速度ポテンシャルを求めることで、表現可能である。本研究では、ラプラス方程式の数値解法として、境界要素法を用いる。境界要素法は、バルクに

おける計算格子が不要であり、計算領域境界上の離散化のみで近似解を得る方法である。二次元の問題を一次元に次元縮約できるため、広いパラメータ空間での計算を、試行錯誤的に行うことが容易となる。

具体的な計算方法に関して、境界要素法により、ラプラス方程式 $\nabla^2 \phi = 0$ (ここで、 ϕ は速度ポテンシャル) を解く。境界条件として、チャンネル壁では Neumann 条件 $\mathbf{n} \cdot \nabla \phi = 0$ (ここで、 \mathbf{n} は単位法線ベクトル)、チャンネル入り口では $\mathbf{n} \cdot \nabla \phi = q_{in}$ (ここで、 q は速度ベクトルの境界線に垂直方向の成分、添字 in は入口を表す)、チャンネル出口では Dirichlet 条件 $\phi = \phi_{out}$ (ここで、添字 out は出口を表す) を課す。本研究では、気液界面の過渡的運動を扱う必要があり、さらなる境界条件として、境界要素法の基礎式と整合するように式を導出する。

気液界面の変形を扱うには、界面の移動と、界面上の力学的釣り合いを考える必要がある。界面では、表面張力による気液圧力の跳躍を考え、Laplace 則を適用する。気相圧力は、ある一定値を与えるのに対して、液相圧力は、場全体での液の運動方程式の解として与えられる。レイノルズ数が十分に小さく、ストークス流れとみなせる場合、運動方程式は、粘性項と圧力勾配項の釣り合いを表す Darcy 則に従うはずである。しかし、T 字型マイクロチャンネルを有した実験(宮崎 (2011))では、低いレイノルズ数(高々、10 程度)であるにもかかわらず、気泡が生成される過程において、慣性影響が関係することが示唆されている。この事実を踏まえ、本研究では、慣性影響を議論するため、Darcy 則に時間微分項と対流項を加えた Euler-Darcy の式 (Ruyer-Quil (2001) Acad. Sci. Paris IIb) によって運動方程式を記述する。

4. 研究成果

(1) 高精度、高効率な VOF 法の開発

MTHINC 法の実装を行い、エネルギー輸送収支や、格子解像度と解の収束性の影響に関する知見を得た。

計算アルゴリズムに関して、二相流への疑似圧縮性法の有用性について検討した。疑似圧縮性法は、圧力のポアソン方程式を解く代わりに、悪影響を及ぼさない程度の微弱な圧縮性を仮定し、擬似的な音速を導入することで、圧力波伝播の式を陽的に時間積分する方法である。そのため、演算性能を出しやすいという特徴がある。ただし、事前に設定するモデルパラメータの大きさには任意性があり、与え方によっては、計算の安定性や質量保存性が破綻する場合がある。本研究では、速度の発散を場全体で自乗平均した値が最小になるようにモデルパラメータを動的に決定する手続きを提案した。そして、この手続きを導入することによって、疑似マッハ数の上界がクーラン数と次元に応じた定数との積で与えられ、疑似圧縮性を制御できるこ

と、また、疑似圧縮性の影響は、運動エネルギー輸送の収支における、圧力・速度発散相関項として顕在化し、時間刻みの 2 乗に比例することを明らかにした。

(2) 境界要素法による薄型マイクロチャンネル内微細気泡生成シミュレーション

液の運動が Euler-Darcy の式に従う場合、気液界面上での Laplace 則を以下のように求めた。

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{5}{14}q^2 - \frac{9}{14}w^2 + \frac{9}{14}q_{out}^2 - \frac{5\mu}{2\rho h^2}(\phi - \phi_{out}) + \frac{5}{6}\left(-\frac{\Delta P}{\rho} + \frac{\pi\gamma\kappa}{4\rho}\right),$$

ここで、 $q = |\mathbf{n} \cdot \nabla \phi|^2$ 、 $w^2 = |\nabla \phi|^2 - q^2$ 、 μ は粘度、 ρ は液相密度、 h はチャンネル厚さ、 ΔP 駆動圧力差、 γ は表面張力、 κ は界面の曲率である。本研究では、慣性の影響を議論するため、時間微分項と対流項を除いた、Darcy 則(次式)に基づく計算も行った。

$$0 = -\frac{5\mu}{2\rho h^2}(\phi - \phi_{out}) + \frac{5}{6}\left(-\frac{\Delta P}{\rho} + \frac{\pi\gamma\kappa}{4\rho}\right).$$

気液界面上の各要素点 \mathbf{x}_s は次式に基づき、更新した。

$$\frac{d\mathbf{x}_s}{dt} = \mathbf{n}q.$$

基礎式を、一定要素を用いて離散化し、LAPACK ライブラリの dgesv を用いて、連立方程式を解いた。五点公式による界面分布の平滑化、三次スプライン法を用いた要素間隔の均一化の手続きを導入することで、数値安定性や解の精度を高めた。さらに、計算方法の妥当性の検証を進めた。

気相・液相の 2 つの入口流路と、気液相が合流し下流へと流れていく出口流路からなる T 字型マイクロチャンネルを対象として計算を行った。計算例を図 1 に示す。ここでは、出口圧力を固定し、図中の右側での幅 W の流路断面での液相流速 U をパラメータとしている。流速の低い ($U = 1\text{m/s}$) 結果を見ると、液相の流れによって、界面は、初期分布に対して、全体的に気相側に押し出されることがわかる。ただし、図において合流部の右上では、圧力が局所的に低下するため、界面が液相側に引っ張られ、流路の下流へと伸びていく。この押し出し・引っ張り効果の競合によって、合流部の右上で形成するネック部分が、チャンネル壁に接近し、最終的につぶれることにより、気泡生成へと至る。界面の押し出し・引っ張り効果の相対的な現れ方は、流速に応じて、異なってくる。流速を $U = 2\text{m/s}$ に上げた場合の結果を見ると、 $U = 1\text{m/s}$ の結果に比べて、気相側へ押し出しの効果がより顕著であることがわかる。引っ張り効果よりも、押し出しの効果が相対的に強くなるため、界面が下流へと十分に伸びていく前に気泡生成

に至るため、 $U = 1\text{m/s}$ の条件に比べて、 $U = 2\text{m/s}$ の条件での生成気泡径は小さくなる。さらに流速を $U = 3\text{m/s}$ に上げると、引っ張り効果が現れる前に、界面全体が気相側に押出されてしまい、気泡生成へと至らない。既存の実験（宮崎(2011)）によると、液相流量を上げると、生成気泡径が小さくなるものの、ある流量を超えると気泡の生成が起きなくなる「気泡生成限界」があることが示されている。本計算において、生成限界に至る様子を捉えることに成功した。

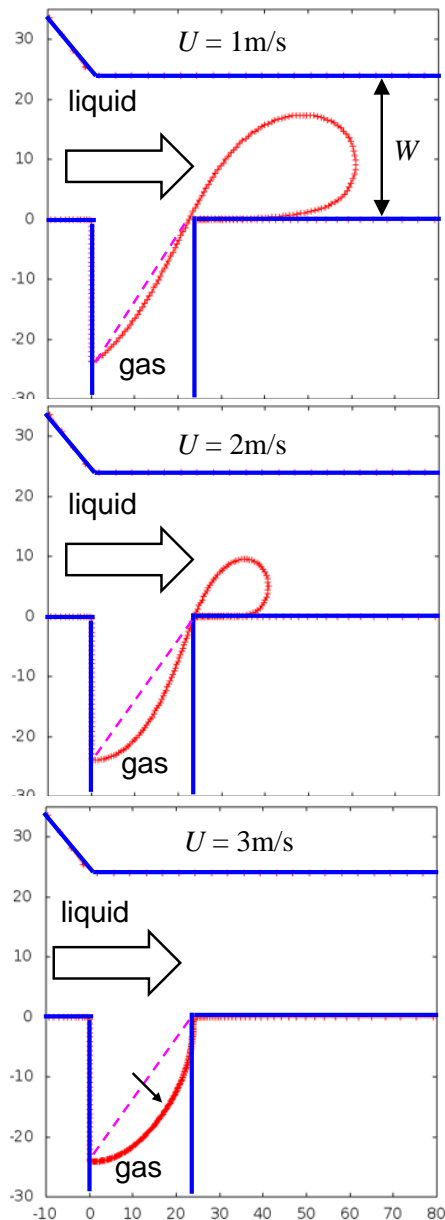
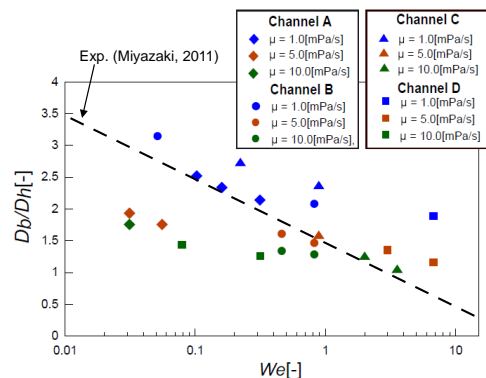


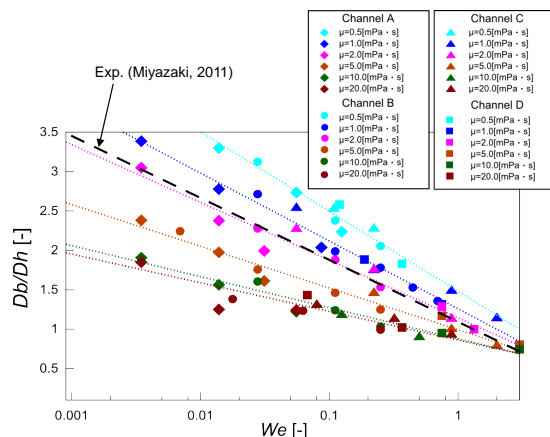
図1 T字型マイクロチャンネル内での気液界面変化の様子（破線は初期界面分布；赤い曲線は、気泡生成に至ったとき、もしくは、十分に時間が経過した後の界面分布）

図2に気泡生成限界時における無次元気泡径 (D_b/D_h) とウェーバー数 ($We (= \rho U^2 h / \gamma)$) との関係を示す。ここで、 D_b は、生成気泡体

積に等しい体積の球の直径、 $D_h (= 2Wh / (W + h))$ は、水力等価直径である。ここでは、相似形のチャンネルの寸法と、粘度 μ をパラメータとして計算を行なった。図の凡例中の Channel A, B, C, D は寸法の違いを表す。図2(a)の結果は、液相の慣性影響を無視した Darcy 則に基づいて界面での液相圧力を評価した結果である。この場合、生成気泡径とウェーバー数の間には、有意な相関が認められない。図2(b)の結果は、液相の慣性影響を考慮した Eule-Darcy 方程式に基づいて界面での液相圧力を評価した結果である。この図より、粘度 μ に応じて、生成気泡径はウェーバー数によって整理できることがわかる。図中の破線は宮崎(2011)の実験結果を整理して得られた曲線である。実験での粘度は $0.5\text{mPa/s} \leq \mu \leq 2\text{mPa/s}$ の範囲に限られる。実験の粘度範囲に近い計算結果は、実験結果を、概ねよく再現する。図2の結果より、慣性影響の重要性を確認するとともに、気泡生成におけるスケール則が粘性係数に大きく依存することが明らかになった。



(a) Darcy 則 (慣性影響無視)



(b) Eule-Darcy 方程式 (慣性影響考慮)

図2 気泡生成限界時における無次元気泡径とウェーバー数との関係

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 3 件)

- ①大久保 秀彦, 杉山 和靖, 薄型マイクロチャンネルにおける微細気泡生成の数値解析, 混相流シンポジウム 2015, 2015 年 8 月, 高知工科大学, 高知県香美市(発表確定).
- ②大久保 秀彦, 杉山 和靖, T字型マイクロチャンネルにおける微小気泡生成機構, 日本機械学会 関西学生会平成 26 年度学生員卒業研究発表講演会, 2015 年 3 月, 京都大学桂キャンパス, 京都府京都市.
- ③杉山 和靖, 適応パラメータを持つ擬似圧縮性解法, 第 28 回数値流体力学シンポジウム, 2014 年 12 月, タワーホール堀場, 東京都江戸川区.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

- 出願状況 (計 0 件)
- 取得状況 (計 0 件)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

杉山 和靖 (SUGIYAMA, Kazuyasu)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

研究者番号: 50466786