

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 8 日現在

機関番号：11501

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2016

課題番号：25800238

研究課題名(和文)シミュレーションによる流体力学的相互作用を含む任意形状をした粒子の解析

研究課題名(英文)Simulation of hydrodynamic interactions among particles

研究代表者

牧野 真人(Masato, Makino)

山形大学・大学院理工学研究科・助教

研究者番号：10649172

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,400,000円

研究成果の概要(和文)：流体力学的相互作用を含むシミュレーションを行った。主に2次元で流路内でキラリティを持つ粒子が相互作用する系を調べた。また、球状粒子の分散系が円柱の管の中を沈降していくシミュレーションも行った。管を傾けると沈降速度が増加するボイコット効果が確認できた。一般形状をした粒子の動力学に関しては、シミュレーションも大事であるが、十分に解析研究もされていない。そのため、フォッカープランク方程式に基づいて、回転電場におけるプロペラ状粒子の振る舞いを調べ、キラリティに応じて移動方向が異なり、キラリティに応じた分離の方法を考えた。

研究成果の概要(英文)：The dynamics of the particles with hydrodynamic interaction was simulated. We examined the interaction of the particles with chirality in two dimensional channel flow. We also examined the sedimentation of spherical particles in cylindrical tube. A speed up of the sedimentation, which is called Boycott effect, could be confirmed when the tube was tilted. In the dynamics of arbitrary shaped particle, the analytical calculation is important although the simulation is important. We discussed the dynamics of the propeller-like particles in rotating electric field using Fokker Planck equation. The results showed the direction of the migration of the particle depends on the chirality. The separation method was discussed due to the chirality.

研究分野：微小流体力学

キーワード：微小流動 任意形状粒子 ブラウン運動 キラリティ 分離 シミュレーション 解析解 プロペラ

1. 研究開始当初の背景

(1) 流体中に分散する粒子の研究は進んでいる。そのような粒子として、球状、棒状の粒子がほとんどである。それは、解析のしやすさ、および、今まで注目してきた効果が、棒状粒子への近似で、適当な精度の解析が可能で、あったことが考えられる。しかし、右手や左手のように、鏡像になっており、互いに重ね合わせることが出来ない性質、すなわちキラリティを持っている場合の粒子を考えるには、棒状粒子の近似では、不十分である。そこで、棒状粒子から発展した一般形状の粒子、特に、キラリティを持った粒子の研究を行う必要があった。

(2) 数値計算手法の一つである埋め込み境界法(Immersed Boundary Method)は、球状粒子の分散系において開発された計算手法であった。任意の形状で計算されるものではなかった。

(3) 任意形状をした粒子の希薄系の枠組みは、我々により、フォッカープランク方程式などを基礎として解析手法が作られていた。しかし、特定の系で理論計算された例はほとんどされていなかった。また、この解析手法は、任意形状をした粒子の多体相互作用を研究することは出来なかった。

2. 研究の目的

これまで、ほとんど研究されて来なかった螺旋やプラベラ状の粒子、鏡像を重ね合わせることが出来ないキラリティを持つ粒子のような任意形状の粒子が液体に高濃度で分散している場合を対象とし、外場(重力場、単純せん断流)における粒子の振る舞いと粒子間の流体相互作用を含んだシミュレータの計算プログラムの作成を第一の目的とする。そして、特にキラリティがある粒子についての解析を行う。

3. 研究の方法

アルゴリズムの確立およびシミュレータ作成を行う。流体は、差分法あるいは格子ボルツマン法で解く。一般形状をした剛体粒子は埋め込み境界法を用いて開発する。せん断流やポワズイユ流などの流れに、キラリティのある粒子を配置し、そのダイナミクスを調べる。

4. 研究成果

(1) 2次元の任意形状をした剛体粒子の流体相互作用を含むシミュレータ開発を行った。ソフトウェアは、流体を解く格子ボルツマン法と粒子の存在により流体を乱す効果を埋め込み境界法を使って作成した。このソフトウェアを用いて、2次元でのポワズイユ流内に流れる、円、楕円、L型、型粒子をシミュレーションすることが出来た。これらの粒子のうち2種類が混ざった分散系では、粒

子の形状に応じてポワズイユ流の中心部や壁付近に粒子が移動していく傾向があるようだ(図1)。

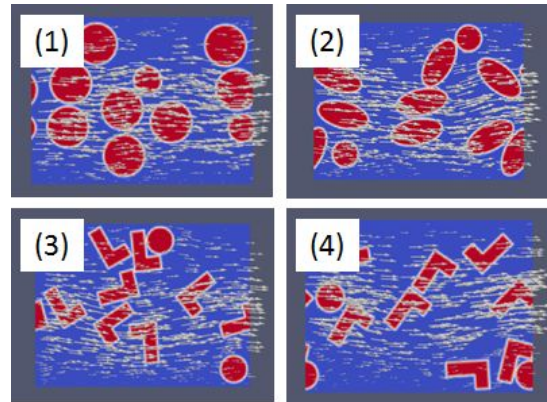


図1. 2次元系におけるポワズイユ流れにおける粒子。(1)大きさが異なる円状の粒子。(2)円と楕円粒子。(3)円とL型粒子。(4)円と型粒子。L型と型は、キラリティが異なるが、特に、その違いは見られなかった。

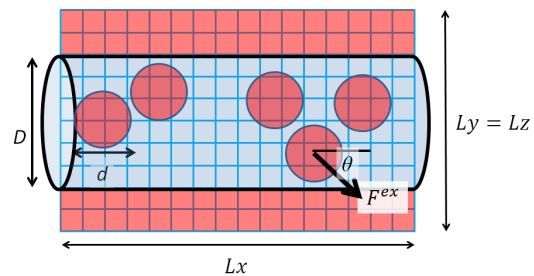


図2. シミュレーションシステム。長さ $L_x \times L_y \times L_z$ の領域に直径 D の管を置く。その管の中に直径 d の球状粒子を分散させ外力 F^{ex} を与えてシミュレーションする。

(2) 3次元系のシミュレーションに向けて、球状粒子に限定した3次元の剛体粒子の流体力学的相互作用を含むシミュレータ開発も行った。図2のような系で、円柱状の流路内を相互作用しながら沈降していく様子がシミュレーション出来た。実験結果では、粒子の半径と円柱状の流路の半径の比に応じて、粒子の平均速度が単調に変化しないことが報告されているが、今回のシミュレーションでは、二つの半径の比に単調に減少した。さらに、流路の軸と重力の方向が平行ではなく、ある一定の角度で流路を傾けた場合を調べた。これは、ボイコット効果と呼ばれ、流路を傾けることにより、沈降速度が上昇する現象である。この沈降速度が上昇する要因は、図3のように、流体が流れる領域と粒子が流れる領域が分かれ、別々に運動することによる。

(3) シミュレーションによる解析が当初の目的であったが、理論解析のほうが、独創的な研究が行えると判断し、理論解析も行った。流体中に任意形状をした永久ダイポールを

持つ粒子(図 4)を置き、回転電場を与えることで、粒子が回転し、ねじのように動いていく現象に関して理論解析を行った。方法としては、ブラウン運動を考えたフォッカープランク方程式をもとに、配向を算出し、粒子の移動速度を算出した。キラリティを持つ粒子に関しては、電場に垂直な進行方向が、キラリティに応じて逆になり、右と左が混じったラセミ体を分離できる結果を理論解析から明らかにすることが出来た。解析解は、ブラウン運動が大きい際に計算した。ブラウン運動が大きい場合は、電場の2乗の効果で、分離が可能であることが分かった。また、電場の効果が強い場合は、シミュレーションにより算出した。

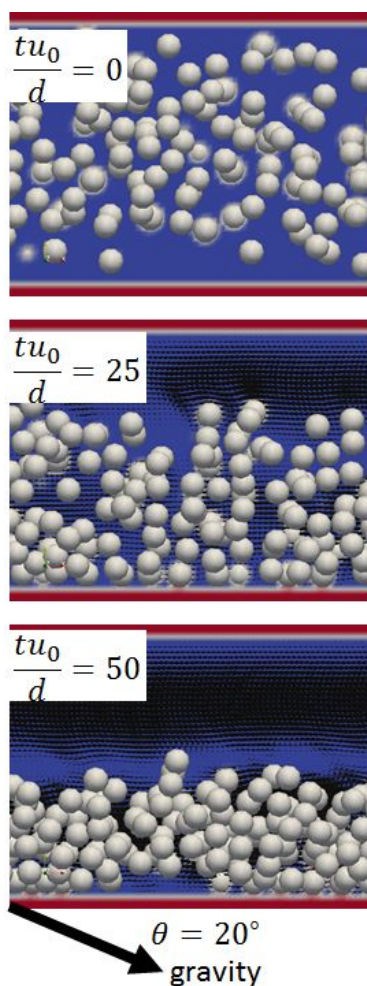


図 3. 流路を 20 度傾けた場合の $D/d=10$ の管内を沈降する粒子の無次元化時間 $tu_0/d=0,25,50$ における断面のスナップショット。一部のみを表示している。 D, d, u_0 は流路の半径、粒子の半径、ストークス速度を表す。

(4)キラリティを持つ粒子の回転電場の振る舞いの解析計算は、永久ダイポールだけでなく、電場によりダイポールが誘起される場合にもこの場合は、ブラウン運動が強い場合、電場の4乗の効果で電場に垂直な方向にキラリティに応じて移動するようである。これに

関しては、まだ研究途中であり、十分な考察が必要と考えられる。

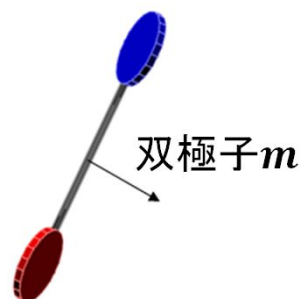


図 4. 双極子とプロペラ状粒子

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 4 件)

Masao Doi and Masato Makino, Separation of chiral particles in a rotating electric field, *Physics of Fluids*, 査読有, Vol. 28, 093302 (2016), DOI: 10.1063/1.4962411

Masato Makino and Masako Sugihara-Seki, Simulation of binary dispersion system of droplets with size and surface tension difference under Couette flow, *Journal of Biorheology*, 査読有, Vol. 28, (2014), pp.7-10, DOI: 10.17106/jbr.28.7

Masato Makino and Masako Sugihara-Seki, Segregation of large and small droplets suspended in Poiseuille flow, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, 査読有, Vol. 62, 2014, pp.69-78, DOI: 10.11345/nctam.62.69

Masato Makino and Masako Sugihara-Seki, Segregation by size difference in binary suspensions of fluid droplets in channel flow, *Biorheology*, 査読有, Vol. 50, 2013, pp.149-163, DOI: 10.3233/BIR-130638

[学会発表](計 8 件)

牧野真人, 回転電場におけるダイポール及びキラリティを持つプロペラ粒子, 第5回ソフトマター研究会, 2015年12月18日, 東北大学理学研究科(宮城県・仙台市)

牧野真人, 回転電場におけるキラリティを持つ粒子分散系の分離に関する理論, 日本流体力学会年会 2015, 2015年9月27日 東京工業大学 大岡山キャンパス(東京都・目黒区)

(4)研究協力者
なし

牧野真人, 回転電場を用いたキラリティを持つ粒子の分離の理論, 第 63 回レオロジー討論会, 2015 年 9 月 24 日 神戸大学工学部(兵庫県・神戸市)

Masato Makino, Simulation of the dispersion of two kinds of droplets under Couette flow, 15th International Congress of Biorheology and 8th International Conference on Clinical Hemorheology, 2015 年 5 月 27 日, Seoul(Korea)

牧野真人, 円管内の球状粒子の沈降, 第 28 回分子シミュレーション討論会, 2014 年 11 月 13 日 仙台市民会館(宮城県・仙台市)

Masato Makino, Simulation of Particle Dispersion in Tube under Gravity Field, 2014 International Conference on Materials and Processing, 2014 年 6 月 9 日, Detroit(USA)

Masato Makino, Lateral migration of particles in the Newtonian fluid, 2014 Smart Structures/NDE, 2014 年 3 月 11 日 San Diego(USA)

牧野真人, 格子ボルツマン-フロントラッキング法による粒子分散系のシミュレータ, 第 61 回レオロジー討論会, 2013 年 9 月 25 日, 山形大学 米沢キャンパス(山形県・米沢市)

〔図書〕(計 0 件)
なし

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)
なし

取得状況(計 0 件)
なし

〔その他〕
ホームページ等
<http://mstmkn67.sakura.ne.jp/wp/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

牧野 真人(MAKINO, Masato)
山形大学・大学院理学研究科・助教
研究者番号: 10649172

(2)研究分担者
なし

(3)連携研究者
なし