様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成 22 年 5 月 31 日現在

研究種目：若手研究(B)
研究期間：2008～2009
課題番号：20760123
研究課題名（和文）複雑なマイクロ流路を過ぎる多流体に対する数値計算手法の開発
研究課題名（英文）Development of the computational method for the multiple fluid flows through the micro channel with a complex shape

研究代表者
沖田　浩平（Okita Kohei）
独立行政法人理化学研究所・機能情報シミュレーションチーム・上級研究員
研究者番号：20401135

研究成果の概要（和文）：マイクロ流路の流れのように壁面境界の近似精度が内部に及ぶ問題に対して，符号付き距離関数を直角直交格子系における形状表現に用いた計算法を提案し，解析精度の向上を確認した．また，多流体に対する自由エネルギーを提案し，表面張力の影響が大きいマイクロ流れにおいて，３重会合点のような３次元的な界面の接触状態が適切に表現できることを確認した．さらに，界面が複雑に変形する多流体の３次元運動の数値解析を行った．

研究成果の概要（英文）：The immersed boundary method with employing the signed distance function for the shape representation in Cartesian mesh is proposed. The accuracy of the Poiseuille flow, which is dominated by the representation accuracy of the wall boundary condition, is improved by the present method. On the other hand, the free energy model for multiple fluids is proposed based on the diffuse interface method. The three-dimensional contact interfaces at the triple junction is properly represented. Additionally, the gravity driven motion of multiple fluids with the complex deformation of interfaces is reproduced by the three-dimensional computation.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2008 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2009 年度	900,000	270,000	1,170,000
総　計	1,900,000	570,000	2,470,000

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：マイクロ流れ，混相流，数値流体力学，Diffuse Interface Model，Immersed Boundary Method，符号付き距離関数

１．研究開始当初の背景
　近年，DNA チップのような分析装置としてミクロンオーダの流路が集積されたμTAS などのマイクロ流路を使った装置の開発が国内外で盛んに進められている．また，マイクロスケールにおける流れでは，表面張力，壁面との分子間力の影響や，流れの駆動方法によっては電気二重層の影響などが顕著に現れてくる．
　バイオチップなどのμTAS 開発において，

マイクロ流路の集積化に伴う流路形状の複雑化，および，水・油・空気のような二流体以上の混相流を取り扱う問題が予想され，このような流れに対する解析アプリケーションが設計開発において必要とされている．

２．研究の目的

本研究の目的は，複雑形状を有するマイクロ流路の流れを対象に，表面張力を自由エネルギー的に考慮した二流体以上の多流体からなる流れに対する物理モデルの構築と数値計算法の開発である．

３．研究の方法

(1)　複雑形状を有するマイクロ流路の流れに対する数値計算法

直角直交格子系における任意形状の高精度な表現方法として界面からの距離や法線が得られる陰関数である符号付き距離関数$\phi(\mathbf{x})$（Signed Distance Function : 以下SDF）を用いる．SDFは，距離関数$\phi(\mathbf{x}) = \min\left(\left|\mathbf{x}-\mathbf{x}_I\right|\right)$としての性質に界面で区切られた領域の内外に対応して正負の符号が付けられたものである．このSDFのゼロ等値面として任意形状を陰関数表現し，符号によって領域の判別を可能とする．また，界面における法線ベクトルが$\mathbf{n} = \nabla\phi$で得られるという特徴があり，本研究ではこれを用いて計算精度の向上を試みた．

直角直交格子系における任意形状を過ぎる流れの数値計算手法として，本研究では，非圧縮粘性流れに対するImmersed Boundary Methodを用いるため，基礎方程式は次のようになる．

連続の式

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0$$

運動方程式

$$\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} = -\nabla P + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{f}_b$$

右辺最終項$\mathbf{f}_b$は矩形格子系において任意の界面における境界条件$\mathbf{u} = \mathbf{u}_b$を満足させるために導入された外力項である．　Mohd-Yosufの手法を基にして，本研究では界面最近傍の速度定義点において流体速度をSDFより得られる距離と法線方向の勾配を用いて次式のように見積り，

$$\mathbf{U} = \mathbf{u}_b + \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial n}\phi$$

離散式において，$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{U}$を満足するように$\mathbf{f}_b$を与えた．

基礎方程式の離散化は，有限差分法により空間微分を2次精度の中心差分で近似し，非圧縮流れに対するFractional Step法に準じた時間積分を行った．

(2)　多流体流れのモデリングと数値計算法

マイクロスケールにおける流れでは，表面張力，壁面との分子間力の影響や，流れの駆動方法によっては電気二重層の影響などが顕著に現れてくる．このようなミクロスケールの現象をモデリングする方法として，Diffuse Interface Model もしくは Phase Field Model と呼ばれる手法がある．これらは主に，凝固，溶解および結晶成長といった材料系分野で，マルチスケール解析手法の一つとして発展してきたが，近年，混相流分野においてもこれらを用いた解析が盛んになってきており，国内外で様々な二相流の解析が行われている．

本研究では， Diffuse Interface Model を基に非混和な多流体に対する自由エネルギーをモデリングし，次のような基礎方程式を提案した．

連続の式

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0$$

運動方程式

$$\frac{Du}{Dt} = -\nabla p + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla\cdot\left(\nabla\mathbf{u} + {}^t\nabla\mathbf{u}\right) + \frac{\ell\Psi}{\mathrm{We}}\sum_n^N \alpha_n\mu_n\nabla\phi_n$$

ここで，右辺最終項は表面張力に相当するもので，Ψおよびα_nは表面張力σ_{mk}と界面厚さγ_{mk}によって，次式で定義される．

$$\Psi = \frac{1}{2(N-1)}\left(\sum_m^N\sum_{k\neq m}^N \frac{\sigma_{mk}}{\gamma_{mk}}\right)$$

$$\alpha_n = \frac{1}{\Psi}\left(\frac{\sigma_{nm}}{\gamma_{nm}} + \frac{\sigma_{kn}}{\gamma_{kn}} - \frac{\sigma_{mk}}{\gamma_{mk}}\right) \text{for } n \neq m \neq k$$

ϕ_nは流体を区別するための秩序変数であり，保存量の秩序変数に対する時間発展式には，次の Chan-Hilliard 式で表現される．

$$\frac{D\phi_n}{Dt} = \frac{1}{\ell\mathrm{Pe}_n}\nabla^2\mu_n$$

ただし，μ_nは媒質 n の化学ポテンシャルであり，本研究では次のように与えた．

$$\mu_n = -\phi_n + \phi_n^3 - \frac{1}{\ell^2}\sum_m^N \beta_{nm}K_{nm}\nabla^2\phi_m + \frac{c_{im}}{\alpha_n}\left[\sum_m^N(\phi_m+1) - 2\right]$$

ここで，右辺第 3 項が表面エネルギーを表わしており，最終項が非混和性を表現するポテンシャルである．

基礎方程式の離散化は，有限差分法によって空間微分を 4 次精度の中心差分で近似し，

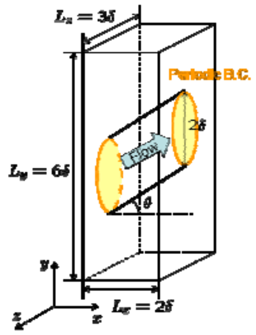
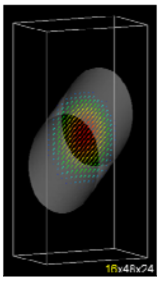
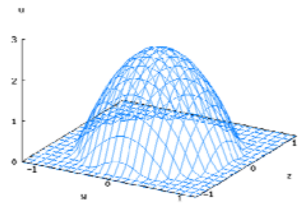


Fig. 1. Schematic diagram of the arrangement of cylinder in the computational domain





(a) Velocity vector

(b) Profile of the axial direction velocity

Fig. 2. Velocity vectors and profile on a cross section for the steady state flow of Re_τ=5 in the case of the angle of 36.9 degrees and the grid resolution of 16x48x24

非圧縮流れに対する Fractional Step 法に準じた時間積分を行った．

４．研究の成果

(1)　符号付き距離関数を形状表現に用いた数値計算法の精度検証

形状に曲面を含み，形状の近似精度が流れ場の精度を決める流れとして，解析解が存在する Poiseuille 流れを対象に, 本研究で提案する数値計算法の精度検証を行った. Fig.1 に示すように，矩形の計算領域に円管を任意の角度θで配置し，円管の両端に周期条件を課して平均圧力勾配によって駆動する流れを考えた．Re_τ=5 で平均圧力勾配一定の条件における定常状態の流れ場の様子として，ある断面における速度ベクトルと軸方向速度の分布をそれぞれ Fig.3(a)および(b)に示す．円管の配置角度はθ=36.9degree=atan(3/4)で，計算領域に対する直交等間隔格子の解像度は 16x48x24 である．Fig.2(a)より，円管の軸方向に沿った流れが形成されている様子が見られる．また，Fig.2(b)より，軸方向速度分布が放物型をしており，円管外部の速度がゼロになっていることがわかる．

計算で得られた軸方向速度分布と解析解の誤差の RMS 値を解析解の最大流速で無次元化したものを数値誤差の指標として，計算格子の解像度による数値誤差の変化を調べた結果を Fig.3 に示す．図には，形状を流体

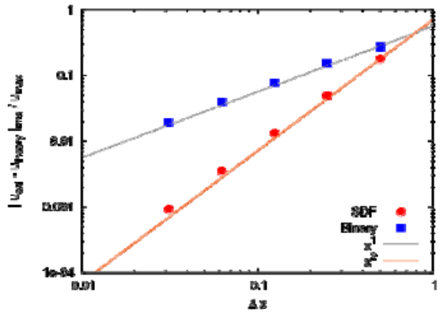


Fig. 3. Numerical error as function of the grid resolution for the steady state Poiseuille flow of Re_τ=5 in the case of the angle of 36.9 degrees. The result of the SDF representation is compared to the result of the binary representation.

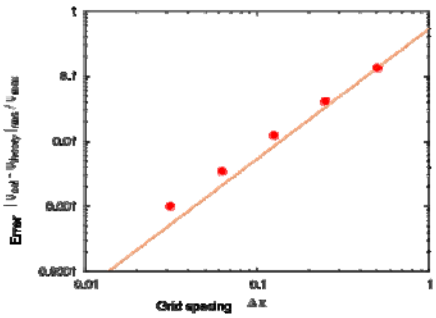


Fig. 4. Numerical error as function of the grid resolution for the unsteady oscillating Poiseuille flow of Re_τ=5 in the case of the angle of 36.9 degrees.

領域か否かのバイナリで表現した場合の結果を比較として載せている．図より，バイナリによる形状表現では，格子幅が小さくなるにつれて 1 次のオーダーで数値誤差が減少していることがわかる．これは，流れの計算スキームとして空間微分の離散化が 2 次精度中心差分であるのに，形状表現の近似が 1 次精度で影響するためである．一方，本研究で提案する SDF による形状表現を用いた場合には，数値誤差が 2 次のオーダーで減少しており，計算スキームとして空間微分の離散化が円管のような曲面形状を含んでいる場合でも 2 次精度が得られていることがわかる．このことは，仮に 1%程度の数値誤差の範囲内で結果を得ようとすれば，SDF では Binary に比べて 10 倍の格子幅，つまり 3 次元では 1000 分の 1 の総格子点数で同等の結果が得られるとことになり，形状の近似精度を向上することの利点がいかに大きいかがわかる．

次に，非定常な振動流に対して数値計算法の検証を行った．解像度による数値誤差の変化を調べた結果を Fig.4 に示す．図より，格子幅が小さくなるにつれて，ほぼ 2 次のオーダーで数値誤差が減少することがわかる．

以上，Immersed Boundary Method を基に符号付き距離関数を形状表現に用いた計

算手法を開発した．本手法を３次元直角直交格子において格子線と物体境界が一致しない形状である円管の内部流れに適用し，低レイノルズ数の定常流および振動流に対する解析解との比較を行った．その結果，本手法により空間２次精度が得られることを確認した．

マイクロ流路の流れは低レイノルズ数の流れであり，壁面境界の近似精度の影響が内部にまで及ぶ．このため，高精度な形状表現は必要不可欠であり，符号付き距離関数を形状表現に開発された本計算手法の意義は大きい．また，空間精度の向上は，解析において目的とする精度の結果を得る際に大幅な計算コストの削減をもたらすため，複雑形状を有するマイクロ流路の３次元解析および設計において特に重要である．

(2) 多流体の自由エネルギーによる３重会合点の再現精度

非混和な多流体に対する自由エネルギーモデルの妥当性を検討するため，Fig.5 に示すような３流体が接触する３重会合点の様子を調べた．３重会合点では，各界面に働く表面張力によって，界面の成す接触角が次式で表わされる．

$$\cos\theta = \frac{\sigma_{RG}^2 - \sigma_{GB}^2 - \sigma_{BR}^2}{2\sigma_{GB}\sigma_{BR}}$$

理論的な接触角θが得られるように表面張力を設定した計算によって得られた角度を Fig.6 に示す．計算結果は妥当に３重会合点における接触角の変化を再現できていることがわかる．角度が小さくなるにつれて，点線で示された理論解から僅かに離れるものの，界面の格子解像度を上げることで理論解に近づく結果が得られている．このように，本研究で提案した非混和な多流体に対する自由エネルギーモデルによって，３流体が接触する３重会合点が定量的にも妥当に再現できることを確認した．

次に，３次元問題への応用として，２流体の界面に液滴が存在する場合の液滴の平衡形状に関して各流体間の表面張力をパラメータとした３次元計算を行った．Fig.7 に，球形を初期形状として平衡形状に至るまでの時間発展の様子を示す．液滴は他よりも大きな表面張力σ_{RG}に引っ張られて，球形から凸レンズ型に形状が変化していく．平衡形状における界面の断面形状を Fig.8 に示す．水平断面は円形をしており，垂直断面は$\sigma_{GB} > \sigma_{BR}$のためにやや上に凸なレンズ形状となる．３重会合点では，２次元とは異なって，レンズの周方向の曲率の影響があるために，３流体はより複雑な接触状態になるが，このような場合においても，本研究で提案する手法によって妥当に再現できることが確認できた．

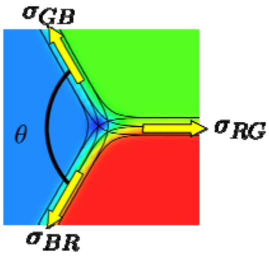


Fig. 5. Triple junction. Contour lines indicate the interface of each fluid. The contact angle of blue fluid is θ.

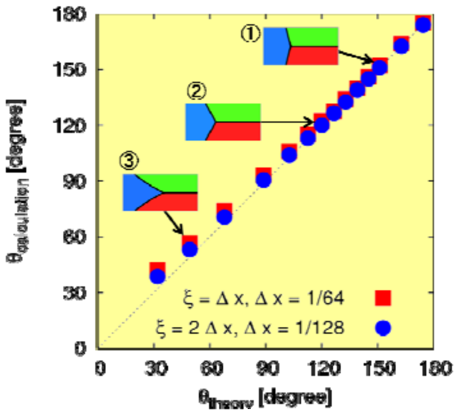


Fig.6 The represented contact angle of blue fluid at triple junction as function of the theoretical contact angle. Symbols are compared for the resolution of the diffuse interface.

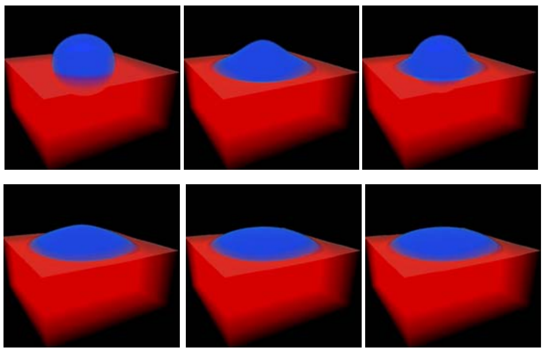


Fig.7 Time evolution of the shape of the droplet (blue) in two different fluid interfaces (red and invisible green).
（$\sigma_{RG} = 1.0, \sigma_{GB} = 0.35, \sigma_{BR} = 0.75$）

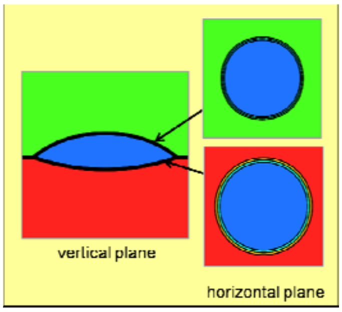


Fig.8 Steady state shape of the droplet (blue) in two different fluid interfaces (red and green). Contour lines on the cross sections indicate diffuse interface region.
（$\sigma_{RG}=1.0, \sigma_{GB}=0.35, \sigma_{BR}=0.75$）

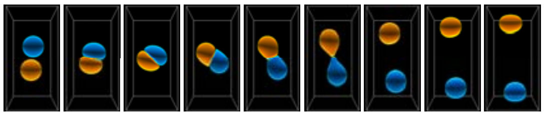
(3) 微小重力下における多流体の運動

よりダイナミックな問題として，微小重力下における２つの液滴の運動に対象に，本研究で開発した非混和な多流体に対する計算法を適用した．この際，微小重力の影響は運動方程式に Boussinesq 近似により導入した．

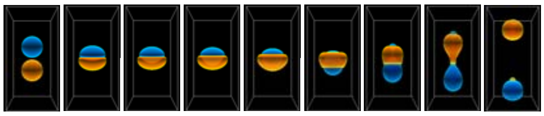
液体中に非混和な２つの液滴，周囲の流体より軽い流体からなる赤い液滴と周囲の流体より重い流体からなる青い液滴をずらした状態で初期配置した際の微小重力下での運動に対する３次元計算の結果を Fig.9 (a)に示す．２つの液滴は接触するものの，混ざることはなく，中心軸が少しずれているために接触したまま剛体回転する．その後，表面張力よりも重力の影響が大きいために，液滴は引っ張られるように接触面から引き離され，上下壁面に接して楕円形状となる．

次に，赤い流体の表面張力が青い流体の表面張力よりも弱い条件で同様の計算を行った結果を Fig.9 (b)に示す．ただし，中心軸にずれがないように初期配置している．２つの液滴は接触するものの混ざることなく，赤い液滴が青い液滴を覆いはじめる．完全に覆う前に，重力の影響で青い液滴が赤い流体の膜を下から破って現れた後，引っ張られるように分離して，それぞれ上下壁面に接して楕円形状となる．

このように，非混和な多流体に対して，液滴の合体，回転，分離といった運動を３次元計算によって再現した．また，液体中で表面張力の弱い液滴が表面張力の強い液滴を包むように合体する様子が再現することできた．本研究で開発された多流体に対する自由エネルギーによって，表面張力が重要となるマイクロ流れにおいて，微小重力下ではあるが非混和な多流体の３次元運動に対する数値解析が可能となった．



(a) Rotating motion
（$\sigma_{RG}=1.0, \sigma_{GB}=1.0, \sigma_{BR}=1.0$）



(b) Covering motion
（$\sigma_{RG}=0.7, \sigma_{GB}=1.0, \sigma_{BR}=0.7$）

Fig.9 Gravity driven motion of the two immiscible droplets in the other immiscible fluid. The red and blue fluids are respectively lighter and heavier than the surrounding fluid.

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）

〔学会発表〕（計２件）

① 沖田浩平, 小野謙二, “符号付き距離関数による形状表現を用いた流体ソルバーの精度”, 理研シンポジウムVCADシステム研究 2008, 平成 20 年 11 月 6~7 日, 埼玉県, 和光市.

② Okita, K., Tawara, T., Ono, K., “Shape Representation by Signed Distance Function for Immersed Boundary Method”, WCCM8 and ECCOMAS2008, June 31-July 5, 2008, Venice, Italy.

〔その他〕

ホームページ等

http://vcad-hpsv.riken.jp/

６．研究組織

(1) 研究代表者

沖田　浩平（Okita Kohei）

独立行政法人理化学研究所・機能情報シミュレーションチーム・上級研究員

研究者番号：20401135