

機関番号：53101

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2011～2012

課題番号：23760149

研究課題名（和文） マイクロ空間 2 流体流れにおける界面不安定因子特定手法の構築

研究課題名（英文） Determination Method of Interface Instability Factor for Two Phase Flow in Micro Space

研究代表者

倉橋 貴彦（KURAHASHI TAKAHIKO）

長岡工業高等専門学校・機械工学科・准教授

研究者番号：00467945

研究成果の概要（和文）：

界面張力を考慮した CSF モデルによる非圧縮性流れ場の方程式に対して、安定化気泡関数有限要素法に基づく二流体の流れ場解析に関するプログラム構築を行い、マイクロチップを用いた実験による界面観察結果と解析結果の比較から、解析プログラムの妥当性を確認することができた。また、圧力を変数とするヘルムホルツ方程式に対する有限要素方程式について安定性解析プログラムの構築を行った。マイクロチャンネル内の固有角周波数（共振角周波数）に関する検討結果より、送液波形の角周波数と安定性解析により得られた固有角周波数の値の比較に基づき、共振現象を誘発する可能性の有無を判断できると考えられる。

研究成果の概要（英文）：

Computational program for analysis of two phase flow in micro channel based on stabilized bubble function element finite element method was constructed. In this program code, effect of interface tension is included by the CSF model, and validity of program code could be confirmed by comparing results between experiment and numerical analysis. In addition, stability analysis based on the Helmholtz equation was carried out. Consequently, it appears that cause of resonance can be judged by comparison of angular frequency for time history of pumped liquid volume and result of eigen angular frequency by stability analysis.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	3,700,000	1,110,000	4,810,000

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：計算物理, シミュレーション工学, マイクロ・ナノデバイス, マイクロマシン, 流体工学

1. 研究開始当初の背景

小スペースにおける短時間の反応や、マイクロスケールの粒子を対象とする液体に混入させる等の目的で、図1に示すマイクロ化学チップが近年着目されている。現在マイクロ化学チップは、研究段階にあり、様々な利用法について模索されているが、①ダイオキシンをはじめとする環境分析に対する利用、②アレルギーなどの医用分析、③抗ガン剤の製造など薬品合成等の医療分野に対する適用、④エネルギーの分野では「小型の燃料電池（携帯電話のバッテリー等）」の作成、⑤化粧品の分野ではエマルジョン化粧品の作成、⑥文具の分野ではエマルジョンインクの作成等、幅広い分野における利用が期待されている。

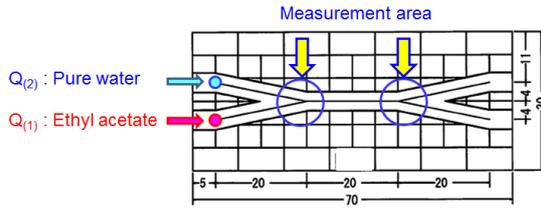


Fig. 1 Micro-chemical chip

マイクロ化学チップの利用の際の問題点の一つとして、マイクロ流路における多層流の形成が困難であることが挙げられる。そこで、研究開始にあたり、このようなマイクロスケール流路内において、平行二相流を形成するための流量条件の組み合わせを事前に予測できるツールの開発として、有限要素解析による検討を行うことにした。当初は三次元モデル(図2)も視野に入れ検討を行ったが、計算に要する時間が膨大になるため、検討数の関係も踏まえ、本研究では2次元モデルを採用することとした。また、平行流区間を取り除いたモデルに対して解析が行える様な計算法に関する提案を行った。

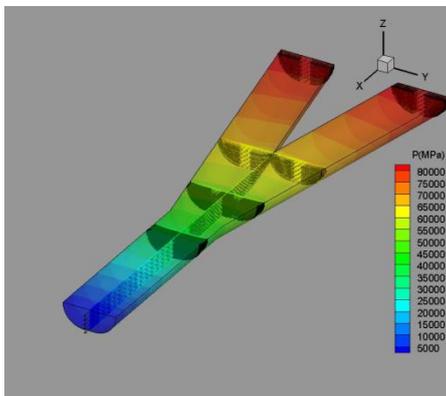


Fig. 2 Example of 3D flow analysis for micro-chemical chip shown in Fig.1

2. 研究の目的

本研究は、マイクロスケールにおける2流体流れにおいて、平行二相流を形成するための流量条件の組み合わせを事前に予測できるツールの開発を目的とした。また、安定性解析では、チャンネルの幅と長さの比が固有角周波数にどのような影響を与えるか調査することを目的とした。

3. 研究の方法

支配方程式としては、非圧縮粘性流体に対するナビエ・ストークスの運動方程式と連続式を導入し、また、二流体の識別に対しては、指標関数を変数とする輸送方程式を導入する。マイクロスケール流路内における二流体の界面張力を表すために、CSFモデルを適用する。また、離散化手法としては、安定化気泡関数要素を用いた有限要素法を適用し、流れ場の方程式に対しては、流速に安定化気泡関数要素、圧力に三角形一次要素、また指標関数に対しては安定化気泡関数要素を適用する。時間方向の離散化に対してはθ法を適用する。本論文では、平行流区間を除いて、下流側の分岐部のみでの二流体の解析を行うために、平行流区間の界面位置の推定式を誘導し、実験による界面観察の結果と数値解析結果の比較を行う。また、マイクロチャンネル内の固有角周波数を有限要素法に基づく固有値解析により求めることで、シリッジポンプから送液時に共振を生じさせないか検証を行うことにする。

3. 1 流体解析の定式化

本検討では、流れ場を表現するために、式(1)に示す運動方程式と式(2)に示す連続式、また、界面位置を表す輸送方程式を用いる。

$$\dot{V}_i + V_j V_{i,j} + \frac{1}{\rho} P_{,i} - \nu (V_{i,j} + V_{j,i})_{,j} = f_i^V \quad (1)$$

$$V_{,i} = 0 \quad (2)$$

$$\dot{\phi} + V_i \phi_{,i} = 0 \quad (3)$$

ここに、 V_i は流速、 P は圧力である。また、 ν は動粘性係数、 ρ は密度、 f_i^V は外力（チップを水平に置いているため、重力項は無視し、本検討では体積力のみを外力として考慮する。）、 ϕ は界面形状を表す指標関数（以後、指標関数）を示す。また表面（界面）張力を表すCSFモデルでは、体積力 f_i^V は式(4)の様に表される。式(4)における $\sigma \kappa(x)$ は表面(界面)曲率を表しており、式(5)により与えられる。

$$f_i^V(x) = \sigma \kappa(x) \frac{\rho_i(x)}{[\rho]} \frac{\rho(x)}{\langle \rho \rangle} \quad (4)$$

$$\kappa(x) = \frac{1}{|\mathbf{n}|} \left[\frac{n_i}{|\mathbf{n}|} |n_{i,j} - n_{i,j}| \right] \quad (5)$$

ここに σ は表面 (界面) 張力係数であり, $\langle \rho \rangle$, $[\rho]$ および界面上における法線ベクトル \mathbf{n}_i は, $\langle \rho \rangle = 0.5 \times (\rho_1 + \rho_2)$, $[\rho] = \rho_2 - \rho_1$ ($\rho_1 < \rho_2$), $n_i = \varphi_i$ と与えられる. ここに θ は $0 \leq \varphi \leq 1$ で設定される値であり, 指標関数 φ の値が, $0.5 \leq \varphi$ あるいは $\varphi < 0.5$ により流体の種別を分けることができる.

式(1)~(3)を有限要素法により離散化するため, 流速に対しては気泡関数要素, 圧力に対しては三角形一次要素, 指標関数に対しては気泡関数要素を適用する(図3). また, 式(1),(3)については, SUPG法と等価となる数値粘性を要素重心点のみに付与する安定化パラメータを導入する.

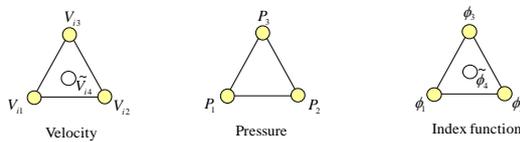


Fig. 3 Element type

3. 2 安定性解析の定式化

安定性解析に関する基礎的検討として, 移流項および粘性項を除いた圧縮性流体の方程式を導入する (式(6)).

$$\begin{cases} \dot{V}_x + \frac{1}{\rho} P_{,x} = 0 \\ \dot{V}_y + \frac{1}{\rho} P_{,y} = 0 \\ \dot{P} + \rho c^2 (V_{,x,x} + V_{,y,y}) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

運動方程式に対して空間微分を行い, 連続式に対して時間微分を行うと式(7)が得られる.

$$\begin{cases} \dot{V}_{x,x} = -\frac{1}{\rho} P_{,xx} \\ \dot{V}_{y,y} = -\frac{1}{\rho} P_{,yy} \\ \dot{P} + \rho c^2 (\dot{V}_{x,x} + \dot{V}_{y,y}) = 0 \end{cases} \quad (7)$$

ここで, 式(7)において運動方程式を連続式を代入する事で, 圧力に関する波動方程式が式(8)の様 to 得られる. ここに P は圧力, c は音速を示している.

$$\ddot{P} - c^2 (P_{,xx} + P_{,yy}) = 0 \quad (8)$$

また, 式(8)の解を ω を角振動数として, 式(9)の様に仮定する.

$$P = \psi(x, y) e^{-i\omega t} \quad (9)$$

式(9)を式(8)に代入すると, 各項は式(10)の様になる.

$$\begin{cases} \ddot{P} = \psi(x, y) \frac{\partial^2 e^{-i\omega t}}{\partial t^2} = -\omega^2 e^{-i\omega t} \psi(x, y) \\ c^2 (P_{,xx} + P_{,yy}) = c^2 \left(e^{-i\omega t} \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} + e^{-i\omega t} \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} \right) \end{cases} \quad (10)$$

式(10)を式(8)に代入し整理すると式(11)の様になる.

$$\begin{aligned} & -\omega^2 e^{-i\omega t} \psi(x, y) \\ & -c^2 \left(e^{-i\omega t} \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} + e^{-i\omega t} \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

ここで, 式(11)の指数関数部を両辺に対して除して, 微分をカンマ表示すると式(12)の様 to 書くことができる.

$$-\omega^2 \psi - c^2 (\psi_{,xx} + \psi_{,yy}) = 0 \quad (12)$$

式(12)を移項し整理すると式(13)の様になり, 式(13)の右辺の Ψ に対する係数を λ と置くことで, ヘルムホルツ方程式が得られる.

$$c^2 \psi_{,xx} + c^2 \psi_{,yy} = -\omega^2 \psi \quad (13)$$

$$c^2 \psi_{,xx} + c^2 \psi_{,yy} = \lambda \psi \quad (\lambda = -\omega^2) \quad (14)$$

式(14)を有限要素法により離散化し, 固有値解析を行うことで, マイクロチャネルの幅と長さに対する固有角振動数 ω の関係を整理する.

4. 研究成果

4. 1 Y字合流部における実験・解析結果の比較

まず, 図4に示すようなクエット・ポアズイユ流のモデルを考える. まず, 式(15)に示す軸方向の定常流れ場に対する運動方程式を各流体に対して考える. 図4に示すモデルより, 各流体に対する境界条件は式(16)のよ

うに与えられる．ここで，各流体の流速に対する厳密解を誘導し，各流体の幅により積分すると，各流体に対する単位幅流量は式(17)のように与えられる．ここで，界面上におけるせん断応力の釣り合いより，式(18)を考え，厳密解を式(18)に代入し，また，各流体に対する圧力勾配が等しいとすると，式(19)に示す圧力勾配の式が得られる．式(19)を式(17)に代入し，界面流速の値でまとめることで，式(20)を得ることができる．この式は流体(1)に対する界面幅 $b_{(1)}$ に対する 4 次方程式となっており，各流体に対する単位幅流量と，粘性係数と流路の幅を与えることで，平行流区間における流体(1)に対する界面幅 $b_{(1)}$ を得ることができる．

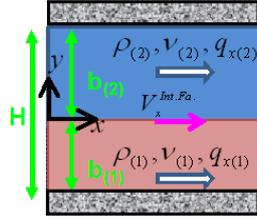


Fig. 4 Model of two phase parallel flow

$$v_{(i)} \frac{d^2 V_{x(i)}}{dy^2} = \frac{1}{\rho_{(i)}} \frac{dP_{(i)}}{dx} \quad i=1,2 \quad (15)$$

$$\begin{cases} V_{x(1)} = 0 & \text{on } y = -b_{(1)} \\ V_{x(1)} = V_x^{Int.Fa.} & \text{on } y = 0 \end{cases} \quad (16)$$

$$\begin{cases} V_{x(2)} = V_x^{Int.Fa.} & \text{on } y = 0 \\ V_{x(2)} = 0 & \text{on } y = b_{(2)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} q_{(1)} = \int_{-b_{(1)}}^0 V_{x(1)} dy \\ = -\frac{1}{12\mu_{(1)}} \frac{dP_{(1)}}{dx} b_{(1)}^3 + \frac{b_{(1)}}{2} \bar{V}_x^{Int.Fa.} \\ q_{(2)} = \int_0^{b_{(2)}} V_{x(2)} dy \\ = -\frac{1}{12\mu_{(2)}} \frac{dP_{(2)}}{dx} (H - b_{(1)})^3 + \frac{(H - b_{(1)})}{2} \bar{V}_x^{Int.Fa.} \end{cases} \quad (17)$$

$$\mu_{(1)} \frac{dV_{x(1)}}{dy} = \mu_{(2)} \frac{dV_{x(2)}}{dy} \quad (18)$$

$$\frac{dP}{dx} = -\frac{2}{H} \left(\frac{\mu_{(1)}}{b_{(1)}} + \frac{\mu_{(2)}}{b_{(2)}} \right) \bar{V}_x^{Int.Fa.} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} & (\mu_{(1)} - \mu_{(2)}) (\mu_{(1)} q_{(1)} + \mu_{(2)} q_{(2)}) b_{(1)}^4 \\ & + 2\mu_{(1)} H \left\{ \mu_{(2)} (3q_{(1)} + q_{(2)}) - 2\mu_{(1)} q_{(1)} \right\} b_{(1)}^3 \\ & + 3\mu_{(1)} H^2 \left\{ 2\mu_{(1)} q_{(1)} - \mu_{(2)} (3q_{(1)} + q_{(2)}) \right\} b_{(1)}^2 \\ & + 4\mu_{(1)} q_{(1)} H^3 (\mu_{(2)} - \mu_{(1)}) b_{(1)} + \mu_{(1)}^2 q_{(1)} H^4 = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

ここで，式(20)の適用可能性を調べるために，上流側の Y 字合流部における有限要素解析を行い，解析結果より得られる流体(1)に対する界面幅と，界面観察結果と式(20)によって得られる結果の比較を行う．図 5 に示す有限要素解析メッシュを用い，流体(1)を酢酸エチル，流体(2)を純水として検討を行った．各流体の流量は， $Q_{(1)}=10\mu\text{l}/\text{min}$ ， $Q_{(2)}=50\mu\text{l}/\text{min}$ とし，各流体に対する物性値およびその他計算条件は表 1 のように与えた．流量は断面積により割ることで平均流速を算出し，流路軸方向に一樣に与え，また， θ 法における θ は 1.0 とし，完全陰解法を適用した．

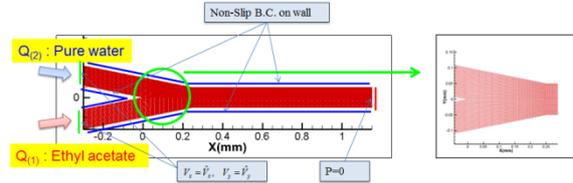


Fig. 5 Finite element mesh and definition of boundary condition

Table 1 Computational conditions

Total number of nodes	11,991
Total number of elements	23,200
Time increment (sec.)	10^{-7}
Time steps	150,000
$\rho_{(1)}$ (kg/mm ³)	9.982×10^{-7}
$v_{(1)}$ (mm ² /sec)	0.557
$\rho_{(2)}$ (kg/mm ³)	8.984×10^{-7}
$v_{(2)}$ (mm ² /sec)	1.004

解析結果と界面観察結果の比較を図 6 に示す．流路幅を H とし，平行流区間において流体(1) (酢酸エチル)の境界面から界面までの幅 $b_{(1)}$ の比を計算すると，解析結果は， $b_{(1)}/H=0.243$ となり，実験結果からは， $b_{(1)}/H=0.296$ となる．両者は概ね一致しており適切に解析が行われているものと考えられる．また，同条件に対して，式(20)に示す幅 $b_{(1)}$ の推定式を計算すると，根として， -0.480 ， 0.0231 ， $0.032 - 0.037i$ ， $0.032 + 0.037i$ と求まる．今回流路幅 H は 0.1mm であるため，その中に収まる

0.0231 が答えとなる。ここで、流路幅 H と平行流区間において流体(1) (酢酸エチル) の境界面から界面までの幅 $b_{(1)}$ の比の値は $b_{(1)}/H=0.231$ となり、解析結果と実験結果と概ね一致した値が得られていると考えられる。ここで、各流量比 $Q_{(2)}/Q_{(1)}$ に対して、 $b_{(1)}/H$ の値を整理すると、図 7 のようになり、概ね平行流区間における界面位置を表すことが出来ていると考えられる。ここで、次節に示す下流側の Y 字分岐部における解析を行うにあたり、指標関数の設定幅の決定の際に式 (20) により得られる結果を使用することにする。

4. 2 下流側 Y 字分岐部の解析

本節では、下流側 Y 字分岐部の解析結果を示す。流量設定は、 $Q_{(1)}$ (酢酸エチル) を $10\mu\text{l}/\text{min}$ 、 $Q_{(2)}$ (純水) を $10\mu\text{l}/\text{min}$ とし、式(11)に基づき得られた $b_{(1)}$ の値に基づき、境界条件として与える指標関数 ϕ の値の境目 ($\phi=0$ あるいは $\phi=1$) を決定する。前節と同様の節点・要素数とし、最少メッシュ幅を変え検討を行った。分岐点周りの結果を図 8 に示す。流路拡大部に着目し、軸方向における最小メッシュ幅を $5\mu\text{m}$ 、 $1.69\mu\text{m}$ としたところ、 $1.69\mu\text{m}$ の方が数値不安定性を抑えられる結果が得られた。上流側の Y 字合流部においては、このような数値不安定性は見受けられなかったが、下流側において流路が拡大する付近においては、メッシュ分割について留意する必要があると考えられる。また、この結果に対して、実験による界面観察結果と比較を行った (図 9)。結果として、界面位置は概ね適切に表されていると考えられるが、流路分岐部近傍において、両結果が若干一致していない箇所があることが分かる。これについては、下流側の分岐部において断面形状が三次元的に変化しており、この形状変化を考慮した解析になっていないため、各結果の間に差が生じているものと考えられる。

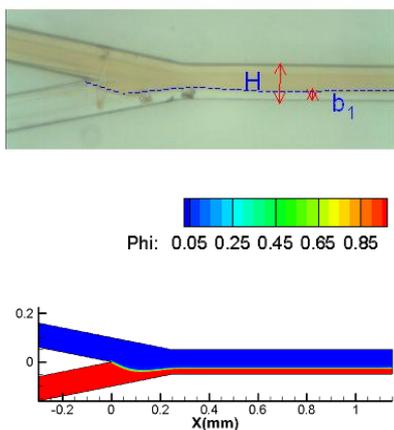


Fig. 6 Comparison of numerical and experimental results ($Q_{(1)}=10\mu\text{l}/\text{min}$, $Q_{(2)}=50\mu\text{l}/\text{min}$)

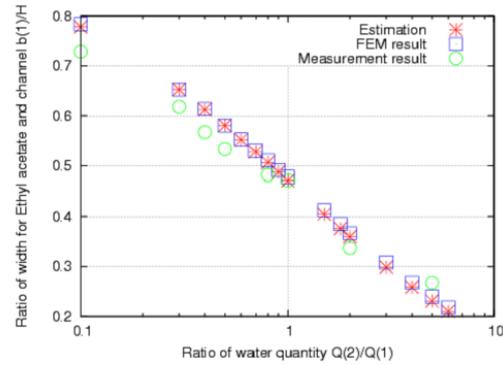


Fig. 7 Relationship between $Q_{(2)}/Q_{(1)}$ and $b_{(1)}/H$

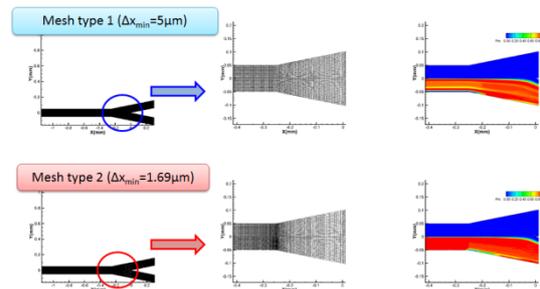


Fig. 8 Difference of computational results by minimum mesh size

4. 3 マイクロチャネルの幅と長さの比に対する固有角振動数の変化に対する考察

幅 L_y 、長さ L_x とした矩形領域のモデルに対して波速 c を 1 とし、式(14)から得られる有限要素方程式に対して固有値解析を行った。幅 L_y 、長さ L_x を変え、幅 L_y 、長さ L_x の比 L_y/L_x に対する固有値 λ の結果を整理した図を図 9 に示す。青い点が最小固有値、赤い点が最大固有値の値を示す。Y 軸を対数目盛にして表示した結果、最大固有値と最小固有値の間隔は概ね一定となり、幅 L_y 、長さ L_x の比 L_y/L_x が大きくなるに従い収束する傾向を示していることがわかる。

また、図 9 の固有値 λ の値から固有角周波数 ω を計算し整理した図を図 10 に示す。マイクロチャネルの幅と長さを考えると、 L_y/L_x は限りなく小さな値となるため、図 10 の結果を踏まえても固有角周波数は 1kHz 以上と考えられる。実際のシリッジポンプの角周波数は送液量が $10\mu\text{l}/\text{min}$ の場合に 60 秒間に 1 周期の波であるため、角周波数は $\omega=2\pi/T \approx 0.10\text{Hz}$ 程度となる。この結果からは、マイクロ化学チップ内においては、シリッジポンプの送液特性から界面不安定を誘起している原因とは想定し難いと考えられる。本検討では、運動方程式より移流項、粘性項を除いた形で検討を行っているため、詳細の検討は今後の課題とする。

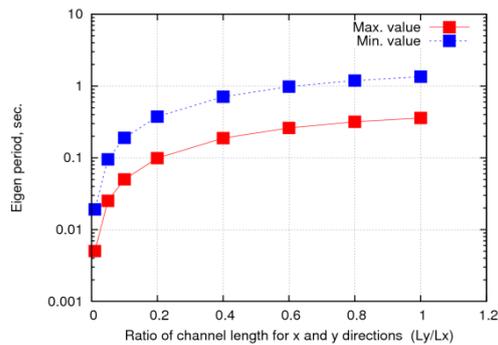


Fig. 9 Relationship between λ and L_y/L_x

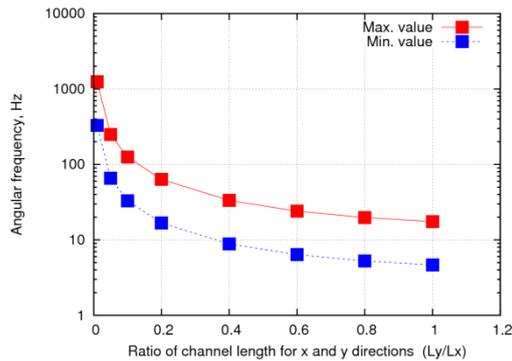


Fig. 10 Relationship between ω and L_y/L_x

4. 4 研究により得られた知見の整理

本研究では、CSFモデルを考慮した非圧縮年生流体に対するナビエ・ストークス方程式に対して安定化気泡関数有限要素法を適用し、マイクロ化学チップ内流路における二相流解析を行った。デジタルマイクロスコープによる界面観察を行い、Y字合流・分岐部における解析結果と実験結果の比較を行った。また、ヘルムホルツ方程式に対する有限要素方程式に対して固有値解析を行うことで、流路の幅と長さの比に対して、固有角振動数がどのように変化するか考察を行った。本研究により得られた知見を以下に整理する。

<流体解析による知見>

- ・下流側のY字分岐点では、流路拡大部においては流路軸方向にメッシュを細かくとる必要があるということが分かった。
- ・また、平行流区間において界面位置を適切に推定しておくことにより、下流側のみの解析を行う際の境界条件の設定に有効であることが分かった。

<安定性解析による知見>

- ・同種の液体の計算条件として、流路の幅と長手方向の長さの比に対する最大・最小固有角周波数を整理したところ、幅の広い流路からマイクロスケールの幅を持つ流路になるに従い、最大・最小固有角周波数の値は非線形的に上昇する結果が得られ、また、最大・

最小固有角周波数の値の差が大きくなる傾向が得られた。

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1件)

- (1) 倉橋貴彦, 曳地玲香, 古口日出男, 安定化気泡関数有限要素法によるダブルY型マイクロチャンネル内二相流における合流・分岐点の流況解析 (界面位置の観察結果との比較に基づく再現計算), 日本機械学会論文集 B 編, 78 巻, 790 号, pp. 1194-1181, 2012.

[学会発表] (計4件)

- (1) 倉橋貴彦, 曳地玲香, 古口日出男, マイクロチャンネル内二相流に対する有限要素解析, 日本機械学会第24回計算力学講演会 CD-ROM 論文集, 10月8日-10日, 2011, pp. 522-523.
- (2) 曳地玲香, 倉橋貴彦, 古口日出男, マイクロチャンネルY字合流・分岐部における液液二相流の有限要素解析, 日本機械学会北陸信越支部 第49期総会・講演会講演論文集, 3月10日, 2012, OS040417.
- (3) Takahiko Kurahashi, Reika Hikichi and Hideo Koguchi, Study on two phase flow in micro channel based on experiments and numerical examinations, 10th WORLD CONGRESS ON COMPUTATIONAL MECHANICS (WCCM 2012), Proceedings, 7月8日-13日, ID-18266, 2012, pp. 1-13.
- (4) 倉橋貴彦, 曳地玲香, 古口日出男, 安定化気泡関数有限要素法によるマイクロ化学チップ内Y字合流・分岐部における液液二相流解析, 日本機械学会 2012年度年次大会 CD-ROM, J053043, pp. 1-6, 2012年9月9日-12日.

[図書] (計0件)

[その他]

ホームページ等

<http://mcweb.nagaokaut.ac.jp/~kurahashi/freeweb/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

倉橋貴彦 (KURAHASHI TAKAHIKO)

長岡工業高等専門学校・機械工学科

・准教授

研究者番号: 00467945

(2) 連携研究者

古口日出男 (HIDEO KOGUCHI)

長岡技術科学大学・機械系・教授

研究者番号: 90143693