卒業論文 (2020 年)

せん断流下における
マイクロスイマー希薄分散系の動的挙動

京都大学工学部工業化学科
化学プロセス工学コース
移動現象論分野

荊尾 太雅

目 次

1 緒言 **2**
1.1 研究背景 2
1.2 研究目的 2

2 計算手法 **3**
2.1 Suirmer モデル 3
2.2 Smoothed Profile Method 3
2.3 支配方程式 4
2.3.1 Navier-Stokes 方程式 4
2.3.2 運動方程式 4

3 結果と考察 **5**

4 結言 **6**

謝辞 **7**

参考文献 **8**

Appendix **9**
A パラメーター一覧 9

1　緒言

1.1　研究背景

マイクロスイマーとは，水中の微生物に代表される，周辺流体との流体力学的相互作用により，粘性流体中を自己推進する微小な物体の総称である．マイクロスイマーが分散した流体は，自己泳動しないコロイド粒子が分散した流体とは，大きく性質が異なることが知られている．

1.2　研究目的

クラミドモナスのような鞭毛を持つ藻類の多くは，重心が体の中心からずれている bottom heavy 性を有する．本研究では，bottom heavy 性をシミュレーション上で再現し，マイクロスイマーがどのような動的挙動を見せるのかを

2　計算手法

jpgejge

2.1　Suirmer モデル

マイクロスイマーのモデルとして，Squirmer モデル[] を採用した．このモデルでは，球形の粒子表面において，粒子と流体の速度差が式 (1) で表される様な sliding 境界条件を用いる．

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{s}} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n(n+1)} B_n P_n'(\cos\theta) \sin\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} \tag{1}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{r}}$ は粒子の中心からその表面上の点に向かう単位ベクトルであり，θ は $\hat{\boldsymbol{r}}$ と粒子の方向ベクトル $\hat{\boldsymbol{e}}$ とが成す角，$\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は単位極角ベクトルである．また，$\boldsymbol{u}^{\mathrm{s}}$ はマイクロスイマー表面の重心に対する slide 速度，B_n は係数，P_n' は n 次 Legendre 多項式の導関数である．しかし，$n = 1$ の項は泳動速度を，$n = 2$ の項は応力を決めるが，$n \geq 3$ の項は，泳動速度，および応力に影響を与えないので，式 (1) は，式 (2) の様に簡略化できる．

$$\boldsymbol{u}^{s} = B_1 \left(\sin\theta + \frac{\alpha}{2} \sin 2\theta \right) \hat{\boldsymbol{\theta}} \tag{2}$$

ここで，B_1 はマイクロスイマーの進行速度の大きさ ($U = 2/3B_1$) を与え，$\alpha = B_2/B_1$ はその符号によりスイマーの種類を表す定数となる．$\alpha > 0$ を Puller 型，$\alpha = 0$ を Neutral 型，$\alpha < 0$ を Pusher 型と呼ぶ．Puller 型は，周辺流体に収縮流を生成し，Pusher 型は伸長流を生成する．

Fig. 1 Squirmer モデルにおける Pusher 型，Neutral 型，Puller 型の概略図

2.2　Smoothed Profile Method

固液二相シミュレーションにおいて，固体-液体の移動境界の取り扱いは非常に重要である．今回のシミュレーションでは，物理量とは異なる識別関数を導入し，仮想流体領域を考える Smoothed Profile Method(SPM)[] を用いた．SPM では，流体と粒子の界面に Fig.2.2 のような界面関数 ϕ を導入する．この界面関数は，流体領域で $\phi = 0$，粒子領域で $\phi = 1$ をとり，幅 ξ の界面領域では滑らかに変化する連続関数である．界面関数の導入により，境界条件を解く必要がなくなり，以下で説明する Navier-Stokes 方程式，および運動方程式を直接数値計算によって解くことが可能となる．

Fig. 2 SPM の界面関数

2.3　支配方程式

本研究では，流体の運動を非圧縮条件の Navier-Stokes 方程式，マイクロスイマーの運動を Newton 方程式，および Euler 方程式を用いて解いた．

2.3.1　Navier-Stokes 方程式

$$\rho_{\mathrm{f}}(\partial_t + \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\sigma} + \rho_{\mathrm{f}}(\phi\boldsymbol{f}_{\mathrm{p}} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{sq}} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{s}}) \tag{3}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u} = 0 \tag{4}$$

ここで，t は時間，ρ_{f} は流体の質量密度，$\boldsymbol{\sigma}$ は流体の応力テンソル，$\phi\boldsymbol{f}_{\mathrm{p}}$ は粒子の剛直性を保証する体積力，$\boldsymbol{f}_{\mathrm{sq}}$ は流体と粒子間の速度差を生じる力，$\boldsymbol{f}_{\mathrm{s}}$ はジグザグ流を生じる力である．ジグザグ流とは，Fig.2.3.1 のような速度プロファイルで表される流体の流れである．

Fig. 3　ジグザグ流

ここで，$\dot{\gamma}$ はせん断速度，y は y 座標の値，L_y は y 軸方向の系の大きさである．この流れは，$L_y \to \infty$ のとき，厳密に Couette 流とみなすことができる．

2.3.2　運動方程式

$$\dot{\boldsymbol{R}}_i = \boldsymbol{V}_i \tag{5}$$

$$M_{\mathrm{p}}\dot{\boldsymbol{V}}_i = \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{H}} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{I}_{\mathrm{p}}\cdot\dot{\boldsymbol{\Omega}}_i = \boldsymbol{N}_i^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{N}_i^{\mathrm{b.h.}} \tag{7}$$

ここで，$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{H}}$ は流体から受ける力，$\boldsymbol{N}_i^{\mathrm{H}}$ は流体から受けるトルク，$\boldsymbol{N}_i^{\mathrm{b.h.}}$ は bottom heavy 性によるトルクである．M_{p} は粒子の質量，$\boldsymbol{I}_i$ は慣性モーメント，$\dot{\boldsymbol{R}}_i$ は粒子の位置，$\boldsymbol{V}_i$ は粒子の速度，$\dot{\boldsymbol{\Omega}}_i$ は粒子の角速度である．

Fig. 4　bottom heavy 性を有する squirmer

Fig.**??**のように表される squirmer について，bottom heavy 性によるトルクは式 (8) で計算される．

$$\boldsymbol{N}^{\mathrm{b.h.}} = \frac{4}{3}\pi a^3\rho h\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{g} \tag{8}$$

ここで，a は粒子の半径，ρ は粒子の密度，h は球の中心と粒子の重心との距離，$\boldsymbol{e}$ は粒子の方向ベクトル，$\boldsymbol{g}$ は重力ベクトルである．

3　結果と考察

4　結言

謝辞

本研究をご指導いただいた山本量一教授にまず心より御礼申し上げます．コロイド粒子分散系について基礎的な知識もなかった私に何度も丁寧にご指導いただき，多くのことを学べました．先生のご指導なしでは，私の拙い研究が卒業論文という形にまとまらなかったと思います．ゼミや普段の研究生活でご助言いただいた谷口貴志准教授，John Molina 助教に心よりお礼申し上げます．鋭い考察で研究について指導してくださった D2 の佐藤さん，M2 の小栗さん，笹倉さん，馬場さん，松田さん，土岸さん，スライドの体裁や発表について丁寧に指導してくださった M1 の瀬領さん，玉造さん，濱田さん，山口さん，養田さん，張さんに心よりお礼申し上げます．最後に，同輩たちはとても優秀で刺激を受ける機会が多く，充実した研究生活が送れました．1 講座の皆様，本当にありがとうございました．

参考文献

[1] D. Helbing, *et al.*, *Transport. Sci.*, **39**, 1(2005)

[2] Teun Vissers, *et al.*, *Soft Matter*, **7**, 2352(2011)

[3] Yasuya Nakayama and Ryoichi Yamamoto, *Phys. Rev. E*, **71**, 036707(2005)

[4] Hiroyuki Ohshima, *J. Colloid Interface Sci.*, **180**, 299(1996)

Appendix

A　パラメーター一覧

記号	パラメーター
Δ	格子幅
a	粒子半径
d	粒子径
λ_B	ビエルム長
e	電気素量
k_{B}	ボルツマン定数
T	絶対温度
E	電場強度
ϵ	誘電率
η	溶媒の粘度
ρ	溶媒の密度
D_α	拡散係数
z_α	α 種のイオン価数
Ψ	静電ポテンシャル
κ^{-1}	デバイ長さ
ϕ	界面関数
ξ	界面幅
$\boldsymbol{f}_{\mathrm{p}}$	粒子の剛体性を保証する力
$\boldsymbol{n}$	単位ベクトル
$\boldsymbol{I}$	単位テンソル
C_α	イオン密度
C_α^*	補助イオン密度
μ_α	化学ポテンシャル
M_{p}	粒子質量
$\boldsymbol{V}_i$	粒子 i の速度
$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{H}}$	粒子 i に働く流体からの力
$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{C}}$	粒子 i に働く相互作用力
$\boldsymbol{R}_i$	粒子 i の位置
$\boldsymbol{I}_{\mathrm{p}}$	粒子の慣性モーメント
$\boldsymbol{\Omega}_i$	粒子 i の角速度
$\boldsymbol{N}_i^{\mathrm{H}}$	粒子 i のトルク