1 計算手法

1.1 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.

$$u^{s} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n(n+1)} B_{n} P'_{n}(\cos \theta) \sin \theta \hat{\theta}$$
 (1)

ここで、 \hat{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{r} と粒子の方向ベクトル \hat{e} とが成す角、 $\hat{\theta}$ は単位極角ベクトルである。また、 u^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 squirmer の泳動速度を、n=2 の項は squirmer の存在によって生じる応力を決めるが、 $n\geq 3$ 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

1.2 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.1.2 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

1.3 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.

1.3.1 Navier-Stokes 方程式

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

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

ここで、t は時間、 ρ_f は流体の質量密度、 σ は流体の応力テンソル、 ϕf_p は粒子の剛直性を保証する体積力、 f_{sq} は流体と粒子間の速度差を生じる力、 f_s はジグザグ流を生じる力である。ジグザグ流とは、Fig.1.3.1 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.

1.3.2 運動方程式

$$\dot{R}_i = V_i \tag{5}$$

$$M_{\mathbf{p}}\dot{\mathbf{V}}_{i} = \mathbf{F}_{i}^{\mathbf{H}} \tag{6}$$

$$I_{\mathbf{p}} \cdot \dot{\Omega}_{i} = N_{i}^{\mathbf{H}} + N_{i}^{\mathbf{b.h.}}$$
(7)

ここで, $F_i^{\rm H}$ は流体から受ける力, $N_i^{\rm H}$ は流体から受けるトルク, $N_i^{\rm b.h.}$ は bottom heavy 性によるトルクである. $M_{\rm p}$ は粒子の質量, I_i は慣性モーメント, \dot{R}_i は粒子の位置, V_i は粒子の速度, $\dot{\Omega}_i$ 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.

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

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、e は粒子の方向ベクトル、g は重力ベクトルである.

1.3.3 異方性の導入

本研究では、bottom heavy 性を squirmer に付加することで、squirmer の進行方向に異方性を与えた.その原理について述べる.周辺流体に流れを生じさせる、Pusher 型/Puller 型の squirmer の進行方向が鉛直上上向きからずれた場合、Fig.1.3.3 のように擬似的なせん断流を考えることができる.

Fig. 5 suirmer の存在による応力

粒子が存在することによって生じる応力は式(9)のように表される [].

$$\Sigma^{p} = \frac{1}{V} \sum S \tag{9}$$

ここで、V は系の体積、S は単体粒子による応力である。系に存在するのが単体の squirmer のみの場合、その応力は式 (10) により計算される \square .

$$S = \frac{4}{3}\pi a^2 (3ee - I)B_2 \tag{10}$$

ここで、a は squirmer の半径、e は squirmer の方向ベクトル、I は単位行列である。したがって、これらの 2 式から、squirmer 単体が存在することで生じる応力の xy 成分は、

$$\Sigma_{xy}^{p} = \frac{4\pi a^2 B_2}{V} e_x e_y \tag{11}$$

と表される. ここで, e_i は squirmer の方向ベクトルの i 成分である. この応力は, 粒子の進行方向 により, Fig.1.3.3 のように表される. グラフから, 粒子が定常的に回転している場合, この応力 の影響はプラスとマイナスで打ち消されると考えられる.

Fig. 6 Σ_{xy}^{p} と粒子の進行方向の関係

ここで、bottom heavy 性によるトルクの影響を考える。流体から受けるトルクと bottom heavy 性によるトルクの大小関係から、粒子の回転が制限され、粒子の進行方向がいずれかの進行方向に固定された結果、応力に影響を与えると考えられる。例えば、 B_2 の値が正である Puller 型の場合、その進行方向が $0\sim\pi/2$ の間に固定された場合、応力を大きくする方向に影響を与えると考えられる。

Fig. 7 粒子の進行方向が応力の大きさに与える影響

本研究では、xy平面上をx軸方向に流体の流れを生じさせ、y軸方向に重力をかけた.