

# 複雑流体の流れの多階層レベルにおける 数値シミュレーション



研究ノート

山本剛宏\*

Numerical simulation of flows of complex fluids at multi analysis levels

Key Words : complex fluid, flow-induced structure, non-Newtonian fluid, rheology, numerical simulation

## 1. はじめに

複雑流体とは、流体内部に原子・分子レベルよりも大きなスケールの構造を有する流体のことをいう。その流体内部構造が、流動によって変化することにより、複雑流体は、水や空気などのニュートン流体（応力と変形速度の関係がニュートンの粘性則にしたがう流体）では見られない特異な流動挙動を示すことが知られている。

我々の研究室では、種々の複雑流体の流動メカニズムの解明を目指し、実験と数値シミュレーションの両面からの研究を進めている。本稿では数値シミュレーションによる解析について、現在進めている解析アプローチの概要を紹介する。

## 2. 複雑流体の流体内部構造と流動

ここで、複雑流体の流体内部構造について一例を紹介する。例えば、プラスチック成形品の原料である高分子流体は、流動によって高分子の形態が変化したり、高分子が絡み合って形成されるネットワーク構造が変形したりする(図1)。このような形態の変化に伴う力学応答が、高分子流体の示す粘弾性特性に関係している。

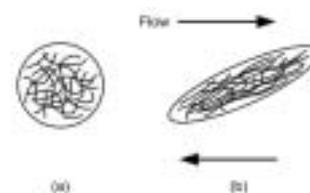


図1 高分子ネットワークのせん断流れによる変形(模式図): (a) 静止状態, (b) せん断流れ中

また、洗剤や乱流抵抗低減剤として使用される界面活性剤は、親水基と疎水基からなる両親媒性の物質で、ある濃度以上で水中に溶かすと、ミセルと呼ばれる分子集合体を形成する(図2)。さらに塩を添加することで、ミセルがネットワーク構造を形成し、高分子流体同様に強い粘弾性を示す。一方、ミセルは分子の集合体であるため、高分子の場合と異なり、変形によって破壊されても容易に再結成する。その結果、高分子流体とは異なる流動挙動が見られる。そのほかに、サスペンション(懸濁液)やエマルション、液晶なども複雑流体である。

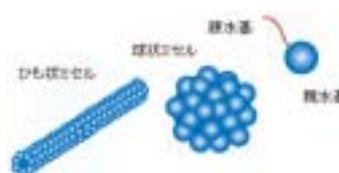


図2 種々のミセル(模式図)



\*Takehiro YAMAMOTO

1969年2月生  
大阪大学大学院工学研究科産業機械工学専攻 博士前期課程修了(1993年修了)  
現在、大阪大学・大学院工学研究科・機械工学専攻、准教授、博士(工学)、非ニュートン流体力学  
TEL: 06-6879-7308  
FAX: 06-6879-7308  
E-mail: take@mech.eng.osaka-u.ac.jp

複雑流体を原料とする製品の製造過程や複雑流体を利用した製品を使用する際には、それらの流れ現象が現れる。例えば、プラスチック成形品は、溶融した高分子材料を射出成形や押出成形などの成形加工法を用いて、金型に充填したり、ダイから押し出したりすることによって製造される。ペイント(サスペンション)や化粧品(エマルション, サスペンシ

ョン)はそれらを使用する際に塗るという作業を通じて流動現象(コーティング流れ)が現れる。液晶は流動配向現象を利用する機能性材料である。そして、流体内部構造の流動による変化が複雑流体の特異な流動挙動と関連し、さらに製品品質や機能性に影響する。したがって、複雑流体の流動解析において、流動誘起構造の解析が重要となることは容易に想像ができる。

### 3. 多階層レベルの数値流動シミュレーション

連続体力学に基づく流動解析においては、保存則と構成方程式を連立して、適当な初期条件、境界条件のもとで、それらの方程式系を解くことになる。複雑流体特有の力学挙動を表現する役割を果たす式が構成方程式である。

現在、高分子成形加工などの実際の工業プロセスにおいて現れる複雑な流れ場の解析に対しては、主として連続体力学に基づく数値シミュレーションが用いられており、ニュートン流体と異なる流動挙動の解析・予測に役立てられている。通常、連続体力学に基づく解析では、速度場や応力場に関する巨視的な量の情報が得られ、主に流体のレオロジー特性(粘度、法線応力差、動的粘弾性など)と流れ現象との関係を考慮して流動メカニズムの解析が行われる。多くの場合、流体内部構造に関する情報は陽的には得られないが、これは構成方程式の導出過程とも関係がある。

流体内部構造を構成する要素の動力学に基づく構成方程式の場合でも、最終的な構成方程式を導出するまでの過程において、流体内部構造に関する微視的情報は、平均化されたり、近似が導入されたりすることによって失われる。以下に、例として、分子運動論に基づく高分子流体の構成方程式の導出過程を見ていくことにする。

まず、高分子の力学特性を、その末端間ベクトル(end-to-end vector)  $R$  の方向を向いたビーズをバネで連結した要素(弾性ダンベル)でモデル化する(図3)。そして、ビーズに働く力(流体抵抗、バネ力、ブラウン力など)を考慮して運動方程式を作ることによって、 $R$  の発展方程式が導かれる。この式を解くことにより各モデル分子の運動を記述することができる。そして、系のマクロ特性は  $R$  の統計平均

$\langle R \rangle$  から求められる。

しかし、各モデル分子の運動を計算することは、非常に計算負荷の高い問題となるため、比較的簡単な流れ場の解析にしか適用できない。そこで、個々のモデル分子の運動を追跡するのではなく、ある時刻、位置における  $R$  の分布を表す確率密度関数を求めることを考える。そして、 $R$  空間における確率密度の連続の式から、 $R$  の確率密度関数の拡散方程式(Fokker-Planck 方程式)を導くことができる。この式を解くことによりある点におけるモデル分子の形態・配向の分布関数が分かる。

この段階でもまだ解析は容易ではない。ここでは詳細は省略するが、さらに、テンソル  $\langle RR \rangle$  を導入し、平均化、クロージャー近似を導入することによって、 $\langle RR \rangle$  の発展方程式を導き、それを、応力を用いた表現に直すことによって、構成方程式が得られる。一般的に構成方程式は非線形偏微分方程式になる。

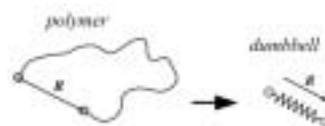


図3 高分子の弾性ダンベルによるモデリング

このように各階層レベルにおいて微視的情報が失われていく様子は他の複雑流体の構成方程式についても同様である。しかし、言い換えれば、導出過程の各階層レベルにおける解析を行えば、各レベルの微視的情報を保ちながら解析を行うことができるということである。一般に、より微視的なレベルの情報を含む解析ほど計算負荷が高く、複雑な流れ場に対して適用するのは経済的ではない。しかし、複雑流体の示す特異なレオロジー特性が流動による流体内部構造の変化に起因していることから、流動中の流体内部構造の変化を解析することが複雑流体の流動メカニズムの解明につながると考えられ、学術的に興味深い問題である。また、近年の製造技術の発展・高度化に伴い、微小スケールの構造をもつ製品の成形加工や高度な機能性の予測が必要となり、より微視的レベルにおける解析に対する要請も現れてきた。このような解析は、実験によるアプローチが難しい問題で、数値シミュレーションに対する期待が大きい。

図4に示すようなコーティングの問題の場合、通常、

自由表面形状，速度分布，応力分布などを解析して，所要のコーティング厚さを得るための流動条件や適切な流動条件を調べたり，複雑流体特有の現象との関係を調べたりする（図4a）．また，より高度な成形や機能性創生のために，より微視的レベルの解析の必要性もある．例えば，機能性付与のために加えた粒子の分布や配向状態に関する情報を得たいという要請が考えられる．そのためには，流動時の分子の配向分布関数を求めたり（図4b右），さらに詳細な情報を得る解析として，成形プロセス中の各粒子の運動を解析したりすることが考えられる（図4b左）．

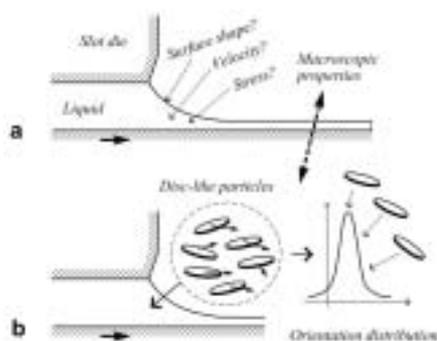


図4 複雑流体のコーティング流れにおける各階層レベルにおける解析のイメージ

我々は，種々の複雑流体を対象に，これらの要請に対応できるように，各レベルにおける数値シミュレーション・プログラムを作成し，複雑流体の流動誘起構造の解析を行っている．その一例を図5，6に示す．図5は液晶高分子の平行平板間流れ中のダイレクタ（分子の平均的な向きを表す単位ベクトル）の配向角分布を示しており，これに対応するような模様（テクスチャ）が実験によっても観察されている．図6はディスク状粒子分散系のせん断流れについて，ブラウン動力学シミュレーションにより粒子挙動のシミュレーションを行った例（図6a）と Fokker-Planck 方程式を用いて求めた粒子配向分布の例（図6b）である．さらに，異なる階層のシミュレーションのカップリング手法の検討や構成方程式の検討を行っている．

必要な計算量を想像してもらえれば分かるように，複雑な流れの解析を，すべてブラウン動力学シミュレーションで計算することは，ほぼ不可能である．そのため，連続体力学的な手法とのカップリング，

あるいは，各階層レベルのシミュレーションによる情報の複合的な利用により，複雑な流れ場における複雑流体の流動メカニズムを解明することを検討している．また，複雑流体の流動解析を，流体内部構造に関するマイクロシミュレーションとマクロ流動シミュレーションのカップリングという形で捉えることで，種々の複雑流体に対する数値シミュレーション手法の開発が可能になってくるのではないかと考えている．

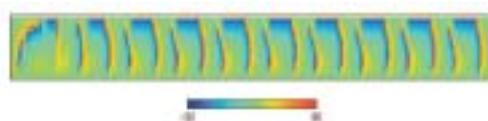


図5 液晶高分子の平板間流れにおけるダイレクタ配向角分布（流れは左から右）

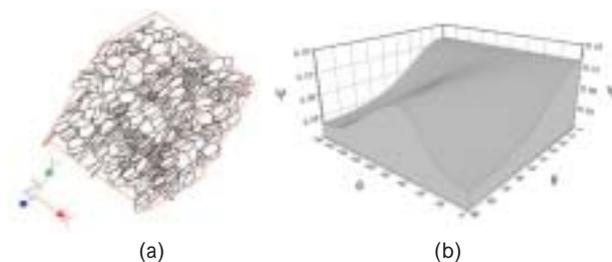


図6 ディスク状粒子分散系のせん断流れのシミュレーションの例：  
(a) ブラウン動力学シミュレーションによる粒子運動の計算（スナップショット）  
(b) Fokker-Planck 方程式を用いて求めた粒子配向分布

#### 4. おわりに

本稿では，我々の研究室で取り組んでいる複雑流体の流動解析について，数値シミュレーションによるアプローチの概要を紹介した．我々の研究室では，複雑流体の流動メカニズムの解明の本質は，流体内部構造とマクロ流動挙動との関係の解明にあると考え，様々な階層レベルにおける流動誘起構造の解析を行い，複雑流体の特異な流動メカニズムの解明を目指している．また，工学的問題への応用を考える場合，現実に現れる複雑な流れ場における解析に対して，現実的な計算コストの中で，マクロ流動解析とマイクロシミュレーションのカップリングを実現するための手法を開発することも，今後の課題である．