流体中を沈降する非球形粒子群の運動の動力学シミュレーション*

三 神 史 彦^{*1}, 谷 下 一 夫^{*2}

Dynamic Simulation of Sedimenting Non-Spherical Particles in a Fluid

Fumihiko MIKAMI and Kazuo TANISHITA

The motion of non-spherical suspended particles is analyzed by the Stokesian dynamics method using a dumbbell model. The precise prediction of the motion and interaction of cells in biological flows is required to design devices for cellular technology. Stokesian dynamics is a method for the simulation of a suspension of rigid micro spheres, which accounts for multiple body hydrodynamic interparticle interactions based on the Stokes equation. Many cells, however, are non-spherical, and each cell differs both in shape and size. In this study, we developed the Stokesian dynamics method for the dumbbells suspended in a fluid. The dumbbell consists of two rigid spheres of the same size connected by an infinitesimally thin rigid rod. The sedimenting processes of the high concentration region of particles are computed by this method. The structures of the wake in the dumbbell cases are completely different from those in the sphere cases. The formation of clusters, which are larger in size for dumbbell-like particles than spherical ones, is observed.

Key Words: Bio-Fluid Mechanics, Numerical Analysis, Viscous Flow, Biological Engineering, Stokes Flow, Microhydrodynamics, Suspension, Biorheology, Sedimentation, Cluster, Sphere, Dumbbell

1. 緒 言

血液流れにおける血球の運動や、バイオリアクタの中の細胞や担体の運動など、生物流体現象には微小な粒子の運動が関係する流れが多い。このような流体中に懸濁している粒子の運動を取扱う手法として、近年 microhydrodynamics⁽¹⁾ という領域が開拓され、計算機の発達とともに進展している。

流体中の微小な粒子の運動を扱う研究には、血液流れにおける赤血球の運動および凝集⁽²⁾、また最近では、流体マイクロマシンを使って個々の細胞の運動を制御する試み⁽³⁾ などがあるが、これらの問題を調べるためには、粒子の運動の正確な把握または予測が不可欠である。

本研究ではこれらの背景をふまえ、実在の細胞の多くが非球形であることに着目し、非球形細胞をダンベルとしてモデル化して、浮遊細胞の運動を解析した。流れ場の中の粒子の運動として、もっとも基本的な問題の一つである、静止流体中を一定の外力のもとで運

動する複数の粒子の運動を調べた。これはまた、赤血球の沈降や、複数の細胞の運動を電気力によって制御するような問題と関連する。

Durlofsky らによる Stokesian dynamics の手法⁽⁴⁾⁽⁵⁾ は、Stokes 方程式に基づいて粒子間の相互作用を計算し、流体中に浮遊している複数の微小な剛体球の運動を計算機を用いて予測する手法であるが、取扱っているのは球形粒子のみである。そこで本研究では、Stokesian dynamics の手法をダンベルを扱うために拡張し、複数のダンベルが静止流体中を沈降するときの運動を計算することによって、その微視的構造を調べた。

おもな記号

a : 球の半径

E^∞ : あたえられた流れ場の変形速度

$$= \frac{1}{2}(\nabla U^\infty + U^\infty \nabla)$$

F : 球にはたらく力

l : ダンベルを構成する球の中心間距離

M : Mobility マトリックス

N_d : ダンベルの個数

N_p : 粒子の個数

* 原稿受付 平成6年3月18日。

^{*1} 正員、慶應義塾大学大学院 (〒223 横浜市港北区日吉3-14-1)。

^{*2} 正員、慶應義塾大学理工学部。

p : 圧力

$\mathbf{R}$: Resistance マトリックス

$\mathbf{S}$: 球にはたらく stresslet

$\mathbf{T}$: 球にはたらくトルク

$\mathbf{U}^\infty$: あたえられた流れ場

U_i : 単独球沈降終端速度

u : 流速

$\boldsymbol{\Omega}^\infty$: あたえられた流れ場の角速度 $= \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{U}^\infty$

2. Stokesian dynamics

2.1 力学モデル N_p 個の球形剛体粒子が無限に広い非圧縮 Newton 流体中に懸濁している系を考える。それぞれの粒子は十分小さく、粒子のレイノルズ数が 1 よりもずっと小さいとする。ただし、粒子はブラウン運動を無視できる程度の大きさをもつものとする。

粒子の運動と、それによって引き起こされる流体の運動は、粘性力が慣性力に比べて支配的なので、流れ場は、以下の連続の式と Stokes 方程式で表現できる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$\nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad \dots\dots\dots (2)$$

一方、粒子の運動は、

$$\mathbf{m} \cdot \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F}^H + \mathbf{F}^P + \mathbf{F}^{\text{ext}} \quad \dots\dots\dots (3)$$

の Newton の運動方程式で表される。ここで、 $\mathbf{m}$ は粒子の質量と慣性モーメントを合せた $6N_p \times 6N_p$ 行列、 $\mathbf{U}$ は粒子の並進速度と回転角速度を表す $6N_p$ 次元ベクトル、 $\mathbf{F}$ は粒子にはたらく力とトルクを合せた $6N_p$ 次元ベクトルで、 $\mathbf{F}^H$ は流体力学的な力、 $\mathbf{F}^P$ は非流体力学的な粒子間力、 $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ は外力を表す。

Stokes 方程式の線形性と境界条件が線形であることから、個々の粒子にはたらく流体力と、粒子の速度・角速度ならびに変形速度とのあいだに、次の線形の関係がなりたつ。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}^H \\ \mathbf{S} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{FU} & \mathbf{R}_{FE} \\ \mathbf{R}_{SU} & \mathbf{R}_{SE} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} - \mathbf{U}^\infty \\ -\mathbf{E}^\infty \end{pmatrix} \quad \dots\dots\dots (4)$$

ここで、 $\mathbf{S}$ は流体が粒子に及ぼす stresslet である (付録 1)。 $\mathbf{U}^\infty$ および $\mathbf{E}^\infty$ は、あたえられた流れ場の速度・角速度および変形速度テンソルの、粒子の中心の位置における値である。また $\mathbf{R}$ は、Resistance マトリックスとよばれる粒子の配置のみに依存する行列であって、粒子の運動速度にたいして受ける抵抗の関係を表す。逆に、粒子にはたらく力にたいする粒子の速度の関係を表す行列 $\mathbf{M}$ は、Mobility マトリックスとよばれ、 $\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{R}$ の関係がある。

粒子にはたらく流体力は、

$$\mathbf{F}^H = -\mathbf{R}_{FU} \cdot (\mathbf{U} - \mathbf{U}^\infty) + \mathbf{R}_{FE} : \mathbf{E}^\infty \quad \dots\dots\dots (5)$$

のように表される。

粒子のレイノルズ数が小さいことから、粒子の慣性力は無視できるので、式 (3) の左辺を省略する。これと式 (5) から、次の式が得られる。

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{U} = \mathbf{U}^\infty + \mathbf{R}_{FU}^{-1} \cdot (\mathbf{F}^{\text{ext}} + \mathbf{F}^P + \mathbf{R}_{FE} : \mathbf{E}^\infty) \quad \dots\dots\dots (6)$$

したがって、時間ステップ Δt のあいだの粒子の変位 $\Delta \mathbf{x}$ は、

$$\Delta \mathbf{x} = \{ \mathbf{U}^\infty + \mathbf{R}_{FU}^{-1} \cdot (\mathbf{F}^{\text{ext}} + \mathbf{F}^P + \mathbf{R}_{FE} : \mathbf{E}^\infty) \} \Delta t \quad \dots\dots\dots (7)$$

によって得られる。

粒子の運動の計算は、各時間ステップごとに、次の手順を繰返すことによって行う。

(1) 粒子の位置と速度・角速度がわかる (最初のステップでは、初期条件としてあたえる)。

(2) Resistance マトリックスを組み立て、粒子にはたらく流体力を計算する。

(3) 粒子の運動方程式を解いて、次の時刻における粒子の位置と速度・角速度を求める。

粒子運動の解析の中心課題は Resistance マトリックス $\mathbf{R}$ を求めるところにあるが、流体を媒介とする粒子間の相互作用を次のように考え、これを組み立てる。

粒子がまばらなところでは、すべての粒子とのあいだの相互作用が支配的となる。ここでは粒子が誘起する速度を粒子間距離が大きいときの近似 (以後、遠方における近似とよぶ) として計算し、速度の重ね合わせによって、いったん Mobility マトリックス $\mathbf{M}^\infty$ を組み立てる。次にこれを反転することによって、すべての粒子の相互作用を含んだ Resistance マトリックス $(\mathbf{M}^\infty)^{-1}$ が求まる (付録 1)。

一方、粒子が密になっているところでは、流体の薄い層をとおして粒子どうしの重なり合いをさまたげる力 (近接相互作用) がはたらくが、これは、遠方における近似を使って計算することができない。このとき二体間のあいだでの作用が支配的になるので、二つの球のあいだにはたらく力の厳密解を使って計算した力を重ね合わせることによって、Resistance マトリックス $\mathbf{R}_{2B}$ を組み立てる (付録 2)。

なお、 $\mathbf{R}_{2B}$ を計算するときには、すでに遠方での近似のときに計算されている部分 $\mathbf{R}_{2B}$ が含まれているため、最終的な Resistance マトリックス $\mathbf{R}$ は、これを差引き、

$$\mathbf{R} = (\mathbf{M}^\infty)^{-1} + \mathbf{R}_{2B} - \mathbf{R}_{2B}^\infty \dots\dots\dots (8)$$

のようになる。ここで、 $\mathbf{R}_{2B}^\infty$ は、遠方における近似を用いた二体間の Mobility マトリックスを反転することによって計算する。

2・2 計算方法 Mobility マトリックスの反転には、LU 分解を用いた。

時間積分は、式(7)の一次の Euler 法では十分な精度が得られず、二次精度の Adams-Bashforth 法と四次精度の Runge-Kutta 法では、ともに良好な結果を得ることができた。ここでは、計算時間的に有利な二次精度の Adams-Bashforth 法を用いた。

近接相互作用の計算は、付録 2 に示すような Kim-Mifflin⁽⁶⁾, Kim-Karrila⁽¹⁾ による方法に基づいて計算した。球の中心間距離 r に応じて、8 個($r \geq 30a$ のとき)から 152 個($r = 2.01a$ のとき)の collocation point を用いた。粒子間距離がさらに小さくなると、collocation point の数の増加によって計算が困難になるため、 $r < 2.01a$ のときには、二球がほとんど接するくらいに近づいたときの解析解⁽¹⁾⁽⁷⁾⁽⁸⁾ を用いて相互作用を計算した。

3. ダンベルの取扱い

3・1 ダンベルモデル 完全な対称性をもつ球にたいして、方向によって受ける流体力が異なるダンベルの挙動を調べることによって、非球形細胞の運動を解析する。また、実在の細胞では重心の位置が偏っている場合もあるが⁽⁹⁾、ダンベルの重心の位置をずらすことによって、このような細胞の運動を表現する。本研究では、Stokesian dynamics の手法を以下に述べるように拡張し、ダンベルを取扱えるようにした。

図 1 に、本研究で用いたダンベルのモデルを示す。半径の等しい二つの剛体球が、無限に細い、すなわち抵抗の無視できる、剛体の棒(connecting rod)によって接続されている。ダンベルの球の半径を a 、球の中心間距離を l とする。ダンベルの中心 O にたいする重心 G の偏りを $\epsilon(l/2)$ とする。このとき、球 α と球 β の質量はそれぞれ、 $(1+\epsilon)m$ および $(1-\epsilon)m$ のように表せる。ダンベルの個数は、 N_d 個とする。

ダンベルの問題は、運動が拘束されている二つの球の問題として取扱うことができる。問題の特徴は、

- (1) 球の位置が、拘束条件によって関係づけられる、
 - (2) 拘束の力(ダンベルの connecting rod から球にはたらく力)が未知数である、
- という点である。

3・2 複数のダンベルの運動 Fair-Anderson⁽¹⁰⁾

図 1 ダンベルモデル

は、単独のダンベルの流体中での運動を取扱っているが、本研究ではこれを、複数のダンベルの運動へ応用する。

支配方程式(Stokes 方程式)が線形なことから、ダンベルの二つの球の運動を、(1)流体中での球の自由な運動(free problem)、(2)剛体の棒によって接続されていることによる運動(connector problem)、の二つの問題に分ける。(1)の問題は、Stokesian dynamics によって解くことができるので、(2)を考える場合には、(1)の解はすでに得られているものとする。

ダンベルを構成する二つの球 α および β の速度と角速度を $\mathbf{U}_\alpha, \mathbf{U}_\beta, \boldsymbol{\Omega}_\alpha, \boldsymbol{\Omega}_\beta$ 、それぞれの球にはたらく力を $\mathbf{F}_\alpha, \mathbf{F}_\beta, \mathbf{T}_\alpha, \mathbf{T}_\beta$ とする。また、球 α の中心から球 β の中心へ向かう単位ベクトルを $\mathbf{e}$ とする。

free problem に関係する量に f , connector problem に関係する量に c , をつけて表すことにすると、

$$\mathbf{U}_\nu = \mathbf{U}_\nu^f + \mathbf{U}_\nu^c \dots\dots\dots (9)$$

$$\boldsymbol{\Omega}_\nu = \boldsymbol{\Omega}_\nu^f + \boldsymbol{\Omega}_\nu^c \dots\dots\dots (10)$$

$$\mathbf{F}_\nu = \mathbf{F}_\nu^f + \mathbf{F}_\nu^c \dots\dots\dots (11)$$

$$\mathbf{T}_\nu = \mathbf{T}_\nu^f + \mathbf{T}_\nu^c \dots\dots\dots (12)$$

の関係がある。なお、ここで、 $\nu = \alpha, \beta$ である。

connector problem における拘束条件は、 ν 番めのダンベルについて、二つの球の角速度が等しいことから、

$$\boldsymbol{\Omega}_\beta^c - \boldsymbol{\Omega}_\alpha^c = \boldsymbol{\Omega}_\alpha^f - \boldsymbol{\Omega}_\beta^f \dots\dots\dots (13)$$

二つの球の中心間距離が一定なことから、

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_\beta^c - \mathbf{U}_\alpha^c - \boldsymbol{\Omega}_\alpha^c \times \mathbf{le} \\ = \mathbf{U}_\alpha^f - \mathbf{U}_\beta^f + \boldsymbol{\Omega}_\alpha^f \times \mathbf{le} + \mathbf{U}^\epsilon \dots\dots\dots (14) \end{aligned}$$

のようになる。式(14)は、球 α と球 β の相対運動は回転運動のみであることを表しているが、計算を続けていく過程で誤差が累積し、 l の長さが無視できないくらい変化することがある。式(14)の右辺の $\mathbf{U}^\epsilon$ は、 l が一定になるように加えた伸縮速度を表す補正項で、

$$\mathbf{U}^\epsilon = \frac{l - l_0}{\Delta t} (-\mathbf{e})$$

で表される。ここで、 l_0 は、時刻 $t=0$ における l の値、 Δt は、計算を進める時間ステップである。この補正によって、 l の変化は l_0 の 0.04% 以下に抑えられた。

一方、力およびモーメントの釣り合いによって、

$$\mathbf{F}_a^c + \mathbf{F}_\beta^c = \mathbf{0} \dots\dots\dots (15)$$

$$\mathbf{T}_a^c + \mathbf{T}_\beta^c + l\mathbf{e} \times \mathbf{F}_\beta^c = \mathbf{0} \dots\dots\dots (16)$$

が成り立つ。

ここで、 f のつく量は、free problem を解くことによってすでに知られており、未知数は、一つのダンベルについて、 $\mathbf{F}_a^c$, $\mathbf{F}_\beta^c$, $\mathbf{T}_a^c$, $\mathbf{T}_\beta^c$, U_a^c , U_β^c , Ω_a^c , Ω_β^c の 8 個、合計 $8N_d$ 個である。

さて、connecting rod による力とそれによって引き起こされる粒子の運動の速度の関係は、すべての粒子についての相互作用を考えなければならないから、式 (13)~(16) の $4N_d$ 個の式に、Stokes 方程式から求まる流体力の関係、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}_1^c \\ \mathbf{F}_2^c \\ \vdots \\ \mathbf{T}_1^c \\ \mathbf{T}_2^c \\ \vdots \end{pmatrix} = -\mathbf{R}_{FU} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1^c \\ \mathbf{U}_2^c \\ \vdots \\ \Omega_1^c \\ \Omega_2^c \\ \vdots \end{pmatrix} \dots\dots\dots (17)$$

の $2N_p (=4N_d)$ 個の式を合せた合計 $8N_d$ 個の式を同時に解くことによって、 c のつく量を求める。最終的な球の速度は、式 (9)~(12) によって、free problem の解と connector problem の解を重ね合わせることによって求める。ここで、式 (17) の $\mathbf{R}_{FU}$ は、Stokesian dynamics の計算で求められた Resistance マトリックスそのものである。

なお、ダンベルの球の中心間距離 l は、ダンベルごとに異なってもよいが、球の半径 a は、すべて等しくなければならない。また、剛体棒には反発力がはたらかないため、一つのダンベルがもう一つのダンベルをすりぬけてしまうという事態が発生する可能性がある。そこで、 $l < 2\sqrt{2}a$ の制限が必要になる。

4. 計算結果と検討

4.1 無次元化 代表長さを球の半径 a 、代表速度を単独球の沈降終端速度 U_t にとる。このとき、 $6\pi\mu a U_t = F^{\text{ext}}$ の関係がある。ここで、 F^{ext} は、たんに時間スケールを設定しているにすぎない。位置 x_i 、時間 t および球の速度 U_i 、角速度 Ω_i は、以下のように無次元化される。

$$x_i^* = \frac{x_i}{a} \dots\dots\dots (18)$$

$$t^* = \frac{U_t t}{a} \dots\dots\dots (19)$$

$$U_i^* = \frac{U_i}{U_t} = \frac{dx_i^*}{dt^*} \dots\dots\dots (20)$$

$$\Omega_i^* = \frac{\Omega_i a}{U_t} = \frac{d\theta_i}{dt^*} \dots\dots\dots (21)$$

ここで、 θ_i は、回転角である。

4.2 計算モデル 本研究では、無限に広い流体中を $-z$ 方向の外力 $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ のもとで沈降する有限個の粒子群の運動を調べた。ただし、粒子間にはたらく非流体力学的な力 $\mathbf{F}^p$ は除外して考える。粒子は、はじめ $x-z$ 平面内に、高密度で集合した微小領域として、静止して置かれているものとする。流体力の対称性から、以後の運動はこの平面内に限られる。ただし、粒子の相互作用は三次元の球にたいするものである。

$x-z$ 平面の円内に正方形のセルを図 2 に示す要領で必要な数だけ配置し、各セルの中央に球またはダンベルを一つずつ置き、初期条件とした。球の場合にはさらに、一様乱数を用いて x 方向と z 方向に、最大でセルの一边の長さの 10% だけ、球の中心の位置をずらした。ダンベルの場合には、配向角を一様乱数を用いて決めた。粒子のセルに占める面積分率は、球とダンベルの両者の場合とも、0.2 とした。球の個数は、 $N_p = 32$ 、ダンベルの個数は、 $N_d = 16$ とした。

なお、ダンベルはすべて $l = 2.1a$ であり、ダンベルを構成する二つの球にはたらく外力は、 $(1+\epsilon)\mathbf{F}^{\text{ext}}$ および $(1-\epsilon)\mathbf{F}^{\text{ext}}$ で表される。

また、計算を進める時間ステップは、すべての場合について、 $\Delta t^* = 0.1$ とした。

4.3 初期配置の影響 $\Theta = 0^\circ$ と $\Theta = 45^\circ$ の初期配置では、その後の粒子の運動に大きな違いがみられた。図 3 にみられるように、 $\Theta = 0^\circ$ の場合には、初期の段階で粒子の連なりが生じるため、粒子群は中央から左右に分裂する運動パターンをとる。これは、初期配置において、中心線上に粒子が存在するか否かの影響が大きい。

図 2 粒子の初期配置

本研究のねらいは、各粒子が相互作用をしながら沈降するときのようすをみることにあるので、粒子群がひとかたまりになって沈降する $\theta=45^\circ$ の場合を重点的に調べた。

4・4 粒子の沈降過程 球およびダンベルの両者の場合とも、各粒子は、回転運動を伴い、複雑な軌跡を描きながら沈降する。図4は、粒子が沈降するときの軌跡を、 $\theta=45^\circ$ の場合について、粒子群の図心の位置からみたものである。異なる乱数を用いた三とおりの初期条件についての結果を重ね合わせて描くことによって、初期条件によるものではない、粒子の違いそのものによる運動パターンの抽出を試みた。図4(a1), (a2)は、ともに球の場合であるが、図4(a2)は、ダンベルと同じ初期配置を用いたものである。この結果、球形粒子とダンベルの場合とで、個々の粒子の運動に明らかな違いがみられた。

図5は、球およびダンベル ($\varepsilon=0.0$ および 0.5) の沈降する過程を、図心の位置からみたものである。基本的には、図2の円内にある、周囲の流体よりも密度の高い流体からなる液滴の沈降と崩壊の過程と考えることができるが、球の場合とダンベルの場合とでは、後流の構造に著しい違いがみられる。

(a) $\theta=45^\circ$ (b) $\theta=0^\circ$

図3 初期配置の影響
(時刻 $t^*=5$ における球の瞬間的な配置)

球の場合には、図6(a)に示すように、液滴の後端部が鋭くとがった形をしており、かつ、粒子の運動は、先端部分の二対の渦運動と、後端へ収束する運動で特徴づけられる。これは、図4(a1), (a2)でも確かめられる。

一方、ダンベルの場合には、図6(b), (c)に示すように、後端が先端と同程度の幅であり、かつ尾の長さも球の場合に比べて短い。 $\varepsilon=0.0$ の場合には、初期には先端部分に二対の渦運動がみられるが、やがて先端部分に粒子の小集団(クラスタ)が形成される[図6(c)]。このクラスタも二対の回転運動を続けながら、沈降する。 $\varepsilon=0.5$ の重心が偏ったダンベルの場合には、重力のモーメントによって配向する運動が支配的で、先端部分の渦対は観察されなかったが、この場合にも先端部分にクラスタの形成が起こった。

後端へ移動する粒子の運動は、図4(b), (c)からわかるように、球形粒子の場合のような後端に収束する軌跡を描かないため、幅の広い後流域を形成する。これは、ダンベルの場合には粒子が配向するために回転運動が抑制され、さらに z 方向に比べて x 方向の流体抵抗が大きくなり、 x 方向の運動が制限されるためと考えられる。配向は、重心の偏っている $\varepsilon=0.5$ の場合にはより早い段階であられるため、図5(c)においては図5(b)に比較して配向している粒子が多くなっているが、後流の構造に大きな差はみられなかった。

4・5 クラスタの形成 計算結果から、球およびダンベルの両者とも、クラスタの形成が観察された。球の場合には二つの球の対が数個形成されるにとどまるが、ダンベルの場合には、クラスタは3個から4個のダンベルから構成され、球の場合に比べてそのサイズが大きくなっている。これは、ダンベルのからみ合いの効果によるものと考えられる。本研究の計算では、

(a1) 球: $N_p=32$ (a2) 球: $N_p=32$, ダンベルの場合と同じ初期配置(b) ダンベル: $\varepsilon=0.0$, $N_d=16$ (c) ダンベル: $\varepsilon=0.5$, $N_d=16$

図4 粒子の軌跡 [図心の位置 (x^*_0, z^*_0) からみた球の中心の軌跡 ($0 \leq t^* \leq 100$)。点の間隔は $t^*=1$ 。異なる乱数もちいた三とおりの初期条件についての結果を重ね合わせて表示]

非流体力学的な粒子間力は除外しているから、純粋に流体力学的な力のみによってクラスタができるというてよい。

なお、赤血球の凝集を起こす要因として、赤血球表面の電荷、赤血球表面の粘着性物質、仲介となる分子の諸説⁽²⁾があげられているが、その前段階として細胞

どうしが接近するのに、流体力が大きく関与していることが、この計算結果から推察される。

5. 結 論

Stokesian dynamics の手法を、ダンベルを取扱えるように拡張した。

図 5 粒子の沈降過程 [時刻 $t^*=0, 5, 30, 60$ における粒子の瞬間的な配置を示す。
初期配置におけるセルの傾き $\theta=45^\circ$ 。矢印は、図心の運動にたいする相対速度を表す]

図 6 高密度領域の沈降の模式図

無限に広い静止流体中を沈降する、有限個の球およびダンベルの運動を調べた結果、粒子群は周囲の流体よりも密度の高い液滴の運動と類似した運動をするが、粒子が球の場合とダンベルの場合とでは、後流の構造に著しい違いがみられた。

また、純粋に流体力学的な力のみによって粒子の小集団(クラスタ)ができ、ダンベルの場合には、からみ合いによる効果によって、クラスタのサイズが球の場合よりも数倍大きくなることがわかった。

本研究の一部は、平成5年度文部省科学研究費総合(A)No. 04305008の補助を受けて行った。

[付録1 多粒子の相互作用]

Durlafsky ら⁽⁴⁾⁽⁵⁾ による多粒子の相互作用の計算は、以下の多重極展開に基づいている。

粒子 α によって誘起される速度は、次式のように表現できる。

$$u_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_\alpha} J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f_j(\mathbf{y}) dS_y \quad \dots\dots\dots (22)$$

ここで、 S_α は粒子 α の表面、 $\mathbf{f}$ は粒子の表面上の応力分布を表す。 $J_{ij}(\mathbf{r})$ はStokes方程式の基本解⁽¹¹⁾であり、

$$J_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{r_i r_j}{r^3} \quad \dots\dots\dots (23)$$

のように表される。

式(22)を、次式のように、粒子の中心 $\mathbf{x}^\alpha$ のまわりで多重極展開する。

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{x}) &= \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_\alpha} J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f_j(\mathbf{y}) dS_y \\ &= \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_\alpha} \left[J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + (\mathbf{y}' \cdot \nabla_y) J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2!} (\mathbf{y}' \cdot \nabla_y)^2 J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \dots \right]_{\mathbf{y}=\mathbf{x}^\alpha} f_j(\mathbf{y}) dS_y \end{aligned}$$

図 7 近接相互作用の計算

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{8\pi\mu} J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^\alpha) \underbrace{\int_{S_\alpha} f_j(\mathbf{y}) dS_y}_{\text{ゼロ次モーメント: } F_j} \\ &+ \frac{1}{8\pi\mu} \frac{\partial}{\partial y_k} J_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Big|_{\mathbf{y}=\mathbf{x}^\alpha} \underbrace{\int_{S_\alpha} y'_k f_j(\mathbf{y}) dS_y}_{\text{一次モーメント: } D_{jk}} \\ &+ \dots\dots\dots (24) \end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{y}' = \mathbf{y} - \mathbf{x}^\alpha$ である。

ゼロ次モーメント F_j は粒子全体にはたらく力である。一次モーメント D_{jk} は、対称部分と反対称部分に分けられ、反対称部分

$$T_{jk} = \frac{1}{2} (D_{jk} - D_{kj}) \quad \dots\dots\dots (25)$$

は粒子全体にはたらくトルクであり、対称部分

$$S_{jk} = \frac{1}{2} (D_{jk} + D_{kj}) - \frac{1}{3} D_{ii} \delta_{jk} \quad \dots\dots\dots (26)$$

はstressletとして知られている。

Stokesian dynamicsでは、一次のモーメントの項で打ち切って考える。なお、球が接するくらいまで近づいたときには、無限項まで必要になるため、近接相互作用については付録2で述べる方法で計算し、2・1節で述べたように後で補正を加える。

[付録2 近接相互作用の計算]

図7に示すような球1, 2によって誘起される速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ は、Lamb⁽¹²⁾の一般解によって次式のようにあたえられる⁽¹³⁾。

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{U}^\infty(\mathbf{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \nabla \Phi_{n-1}^{(1)} + \nabla \times (\mathbf{r}_1 \chi_{n-1}^{(1)}) \right. \\ &\quad + \frac{(n+1)}{n(2n-1)} \mathbf{r}_1 p_{n-1}^{(1)} - \frac{(n-2)}{2n(2n-1)} r_1^2 \nabla p_{n-1}^{(1)} \\ &\quad + \nabla \Phi_{n-1}^{(2)} + \nabla \times (\mathbf{r}_2 \chi_{n-1}^{(2)}) \\ &\quad + \frac{(n+1)}{n(2n-1)} \mathbf{r}_2 p_{n-1}^{(2)} \\ &\quad \left. - \frac{(n-2)}{2n(2n-1)} r_2^2 \nabla p_{n-1}^{(2)} \right\} \quad \dots\dots\dots (27) \end{aligned}$$

ここで、

図 8 collocation point の配置

$$\begin{aligned}
 p_{-n-1}^{(a)} &= \sum_{m=0}^n r_a^{-n-1} P_n^m(\cos \theta_a) \\
 &\quad \times (a_{0n}^{(a)} \delta_{0m} + a_{mn}^{(a)} \sin m\phi), \\
 \phi_{-n-1}^{(a)} &= \sum_{m=0}^n r_a^{-n-1} P_n^m(\cos \theta_a) \\
 &\quad \times (b_{0n}^{(a)} \delta_{0m} + b_{mn}^{(a)} \sin m\phi), \\
 \chi_{-n-1}^{(a)} &= \sum_{m=0}^n r_a^{-n-1} P_n^m(\cos \theta_a) c_{mn}^{(a)} \cos m\phi, \\
 \alpha &= 1, 2,
 \end{aligned}$$

である。式(27)は、Legendre 陪関数で展開された形をしており、その係数 a_{mn} , b_{mn} , c_{mn} が未知数になっている。

一方、表面上の速度 $\mathbf{u}_s$ は、

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_s &= \sum_{l=1}^2 \sum_{m=0}^l [\nabla \{r_l^l P_l^m(\cos \theta) \\
 &\quad \times (A_{l0} \delta_{0m} + A_{lm} \sin m\phi)\} \\
 &\quad + \nabla \times \{r_l^l P_l^m(\cos \theta) B_{lm} \cos m\phi\}] \cdots \cdots (28)
 \end{aligned}$$

のように書くことができ⁽¹⁾⁽⁶⁾、 A_{lm} , B_{lm} を適当に選ぶことによって、球の並進、回転などを表現する。

式(27)の係数 a_{mn} , b_{mn} , c_{mn} を、図 8 の ○ の位置 (collocation point) で式(28)の境界条件を満たすように決定する。このとき、粒子が近づくほど、collocation point の数を多くする必要がある。得られた解から、粒子にはたらく力、トルクおよび stresslet が求まるので、境界条件を適当に選びながら、Resistance マトリックス $\mathbf{R}_{2B}$ を組み立てる。

文 献

- (1) Kim, S. T. and Karrila, S. J., *Microhydrodynamics : Principles and Selected Applications*, (1991), Butterworth-Heinemann.
- (2) 岡, バイオレオロジー, (1984), 例えば, § 20, 裳華房.
- (3) 増田・鷲津, 応用物理, **58**-3 (1989), 383.
- (4) Durlafsky, L., Brady, J. F. and Bossis, G., *J. Fluid Mech.*, **180** (1987), 21.
- (5) Brady, J. F. and Bossis, G., *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **20** (1988), 111.
- (6) Kim, S. and Mifflin, R. T., *Phys. Fluids*, **28**-7 (1985), 2033.
- (7) Jeffrey, D. J. and Onishi, Y., *J. Fluid Mech.*, **139** (1984), 261.
- (8) Jeffrey, D. J., *Phys. Fluids*, **A 4** (1992), 16.
- (9) Kessler, J. O., *J. Fluid Mech.*, **173** (1986), 191.
- (10) Fair, M. C. and Anderson, J. L., *Int. J. Multiphase Flow*, **16**-4 (1990), 663.
- (11) Ladyzhenskaya, O. A., 非圧縮粘性流の数学的理論, (1979), 第 3 章, 産業図書.
- (12) Lamb, H., *Hydrodynamics*, 6th ed., (1932), 594, Cambridge Univ. Press.
- (13) Happel, J. and Brenner, H., *Low Reynolds Number Hydrodynamics*, (1965), 65, Prentice Hall.
- (14) Weinbaum, S., Ganatos, P. and Yan, Z., *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **22** (1990), 275.