MPS 法によるマイクロディスペンサーのシミュレーション*

鈴木 幸人^{*1}, 大野 浩 誠^{*2}, 越 塚 誠 一^{*1}Numerical Simulation of a Micro-dispenser
Using the MPS MethodYukihito SUZUKI^{*3}, Hiromasa OHNO and Seiichi KOSHIZUKA^{*3} Department of Quantum Engineering and Systems Science, The University of Tokyo,
7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, 113-8656 Japan

The MPS method is a particle method which approximates motion of continua by discrete dynamics of a finite number of particles. Thus it is relatively easy to simulate complicated phenomena in multiphase flows or fluid-structure interaction. In this study, a micro-dispenser reported in Lindemann et al. (2004) is simulated using the MPS method. This microfluidic device offers a challenging problem of fluid-structure interaction and multiphase flows, where deformation of the elastic tube interacts with fluid flow and droplets are ejected changing the topology of the surfaces. The results are compared with the experiment to investigate applicability of the MPS method to microfluidic devices.

Key Words: Numerical Simulation, Liquid Droplet, Moving Boundary Problem, Microfluidics, Free Surface Flow, Particle Method

1. 結 言

粒子法^{(1),(2)}は、流体・固体などの連続体の運動を離散粒子群の運動によって近似する計算手法である。したがって、粒子法は計算格子を一切構築する必要がないという利点をもつ。さらに、例えば有限体積法、有限要素法のような格子あるいは要素を用いる手法では計算することが難しい多相流における複雑な界面変化や流体構造連成問題などについても、粒子法によれば比較的容易に扱うことができる。MPS(Moving Particle Semi-implicit)法^{(1),(3)}はこのような特長をもつ粒子法の一つであり、実際、水柱の崩壊⁽³⁾、海岸における砕波⁽⁴⁾、液滴の分裂⁽⁵⁾、流体・構造連成問題⁽⁶⁾、固体の破壊⁽⁷⁾など非常に複雑な現象に対しても適用が試みられている。さらに、後述のマイクロ流体デバイスへの応用に関しては、デジタルミキサーにおける液滴生成過程の解析^{(8),(9)}、バイオリアクターにおける細胞付着流れの解析⁽¹⁰⁾の実績がある。

手のひらサイズの小型チップ上で化学反応、検出等を行うマイクロ生化学システムと呼ばれる技術が近年

注目を集めている^{(11),(12)}。このマイクロ生化学システムは、装置の微小化に伴い、試料、試薬、廃液量を少なくできること、および反応の高速化、並列化、低コスト化が可能であるなどの利点があり、次世代の主要な技術として広範な応用が期待されている。その要素技術の中で特に重要なものとしてマイクロ流体制御技術^{(11),(12)}が挙げられるが、そこでは液滴の生成・分裂・合体^{(13),(14)}、PDMS(Polydimethylsiloxane)等の変形する構造体と流れとの相互作用⁽¹⁵⁾など、複雑な界面変化を伴う多相流問題、流体構造連成問題がいたるところに見られる。特に、Lindemann et al.⁽¹⁶⁾により開発されたマイクロディスペンサー(PipeJetTM)は、マイクロスケールの弾性体のチューブをピストンで押し潰すことにより微小液滴を射出させるという単純な構造をもっているが、そこで起きている現象は、弾性チューブの変形と流れとの相互作用、液滴の射出における気液界面のトポロジー変化など非常に複雑なもので、数値シミュレーション上興味ある例題を提供している。

そこで、本研究では、MPS 法による3次元多相流体・構造連成手法を確立し、そのマイクロ流体制御デバイスへの適用性を検討することを目的として、マイクロディスペンサー:PipeJetTMの解析をMPS法により

* 原稿受付 2006年11月10日。

^{*1} 正員、東京大学大学院工学系研究科(〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1)。^{*2} 東京大学大学院工学系研究科。

E-mail: y_suzuki@mps.q.t.u-tokyo.ac.jp

行い, その結果を Lindemann et al. ⁽¹⁶⁾ の実験結果と比較・検討した。

2. 計算手法

流体構造連成手法としては, 弱連成を採用した。すなわち, 各時間ステップにおいて流体と構造体の運動を計算するときに, 互いに他の運動を既知のものとして扱う。そのとき, 流体計算では弾性構造体を剛体として扱い, その境界面で速度固定の境界条件を与える。弾性計算では, 弾性体境界面に働く流体力を外力として与える。以下, 流体計算と弾性計算のそれぞれの計算手法について概説する。

2・1 流体計算手法^{(1),(3)} 表面をもつ非圧縮粘性流の支配方程式は, 表面張力項をもつ Navier-Stokes の方程式と連続の式:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{u} + \frac{1}{\rho}\sigma\kappa\mathbf{n} \quad (1)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (2)$$

である。ただし $\mathbf{u}$, p , ρ はそれぞれ流体の速度, 圧力密度で, t は時間, D/Dt は物質微分作用素, ∇ は空間微分作用素, ν は動粘性係数, σ は表面張力係数, κ は表面の曲率, $\mathbf{n}$ は表面の単位法線ベクトル, δ は表面の δ 関数である。Navier-Stokes の方程式を MPS 法により離散化すると

$$\frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_0}\langle\nabla p\rangle_i + \nu\langle\nabla^2\mathbf{u}\rangle_i + \frac{1}{\rho_0}\sigma\kappa_i\left(\frac{l_0}{d^{st}}\right)\mathbf{n}_i \quad (3)$$

と表される。ただし $i=1, \dots, n_p$ は粒子番号を表しており, $\mathbf{u}_i$ および $\mathbf{r}_i$ はそれぞれ i 番粒子の速度および座標, ρ_0 は流体の密度 (一定), κ_i と $\mathbf{n}_i$ はそれぞれ i 番粒子における表面曲率と表面の単位法線ベクトル, l_0 は初期粒子間隔, d^{st} は表面の厚さである。なお, (3) 式の右辺第 1 項と第 2 項はそれぞれ MPS 法の勾配モデルとラプラスアンモデルにより離散化された圧力項と粘性項である (これらの具体的な表現に関しては文献(1)を参照)。第 3 項は表面張力項で, κ_i および $\mathbf{n}_i$ の計算手法は, Nomura et al. ⁽⁵⁾ で用いられたものを単純に 3 次元に拡張したものを用いた⁽⁹⁾。すなわち図 1 に示すような円錐頂点の角度を θ_i とするとき

$$1 - \cos\theta_i = n_i^{st2}/n_0^{st} \quad (4)$$

$$\kappa_i = 2\cos\theta_i/r_e^{st} \quad (5)$$

により表面曲率 κ_i を求める。ここで n_i^{st} は i 番粒子における粒子数密度, n_0^{st} は表面が平面のときの粒子数密度, r_e^{st} は上記の粒子数密度を求めるときに用いる影響半径である¹。また表面の単位法線ベクトルは

$$\mathbf{n}_i = \mathbf{a}_i/|\mathbf{a}_i| \quad (6)$$

ただし

$$\mathbf{a}_i = \frac{n_i^{+x} - n_i^{-x}}{2l_0}\mathbf{n}_x + \frac{n_i^{+y} - n_i^{-y}}{2l_0}\mathbf{n}_y + \frac{n_i^{+z} - n_i^{-z}}{2l_0}\mathbf{n}_z \quad (7)$$

とする。ここで l_0 は初期粒子間隔, n_i^{+x} は i 番粒子位置から x 方向へ l_0 進んだ位置における粒子数密度, n_i^{-x} は i 番粒子位置から x 方向へ l_0 後退した位置における粒子数密度, $\mathbf{n}_x$ は x 方向単位ベクトル (y と z に関しても同様) である。

接触角のモデルについても, Xie et al. ⁽¹⁷⁾ で用いられたものを単純に 3 次元に拡張したものを用いた。具体的には, 接触角を θ_c とするとき, 壁近傍の表面に働く表面張力の方向を, 壁面の法線ベクトル $\mathbf{n}_w$ と表面の法線ベクトル $\mathbf{n}$ が張る面内の, 壁面の法線ベクトル (壁方向が正) と角度 θ_c をなす方向とする (図 2)。

Fig. 1 Three dimensional surface tension model

Fig. 2 Three dimensional contact angle model

¹ 上添字の st および $st2$ の意味およびその他詳細については文献(5)または(1)を参照。

2・2 構造計算手法^{(1),(7)} 線型弾性構造体の運動方程式は

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (8)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda (\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} \quad (9)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (10)$$

と表される。ただし $\mathbf{u}$ は変位, ρ は密度, t は時間, ∇ は空間微分作用素, $\boldsymbol{\sigma}$ は応力, $\boldsymbol{\varepsilon}$ はひずみ, $\mathbf{I}$ は単位テンソル, λ および μ は Lamé の定数である。これを MPS 法により離散化すると

$$d\mathbf{r}_i / dt = \mathbf{v}_i \quad (11)$$

$$\rho_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \rho_i \left[\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right]_n + \rho_i \left[\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right]_s + \rho_i \left[\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right]_p \quad (12)$$

$$+ \mathbf{F}_{pi} + \mathbf{F}_{vi}$$

と表される。ただし $i = 1, \dots, n_p$ は粒子番号を表しており, $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{v}_i$ および ρ_i はそれぞれ i 番粒子の座標, 速度および密度である。(12)式の右辺の各項は, それぞれ垂直応力項, せん断応力項および圧力項を表している(これらの項の具体的な表現については文献(1)を参照)。

弾性体境界面に働く流体圧力については, 境界に属する弾性体粒子 (i 番粒子とする) に働く体積力として

$$\mathbf{F}_{pi} = -\frac{\rho_i}{m_i} \frac{\sum_{j \in I_{fluid}} P_j w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|)}{\sum_{k \in I_{fluid}} w(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i|)} \Delta A_i \mathbf{n}_{wi} \quad (13)$$

と与える。ただし P_j は j 番粒子の圧力, m_i は i 番粒子の質量, ΔA_i は i 番粒子が担当する境界面の面積, $\mathbf{n}_{wi}$ は i 番粒子における壁面法線ベクトル(流体方向为正), w は MPS 法の重み関数, I_{fluid} は流体粒子の番号の集合である。すなわち, (13)式で表される力は, 周りの流体の圧力を重み付け平均し, それに i 番粒子に属する部分境界面の面素を掛けたものに相当する(図3)。

弾性体境界面に働く粘性力についても, 境界に属する弾性体粒子 (i 番粒子とする) に働く体積力として

$$\mathbf{F}_{vi} = \mu \frac{2d}{n^0 \lambda} \sum_{j \in I_{fluid}} (\mathbf{u}_j - \mathbf{v}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad (14)$$

と与える。ただし $\mathbf{u}_j$ は j 番粒子(流体粒子)の速度, $\mathbf{v}_i$ は i 番粒子(構造粒子)の速度, μ は粘性係数, n^0 は流体粒子の初期粒子数密度, d は空間次元数で, λ は MPS 法の Laplacian モデルのパラメータ

$$\lambda = \left[\sum_{j \neq i} |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2 w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \right] / \sum_{j \neq i} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad (15)$$

である。この(14)式で表される力は, 流体計算において速度固定境界条件により流体側に働く粘性応力の反力に相当する。

Fig. 3 Fluid pressure exerted to structures

2・3 流体構造連成計算手法の検査

前節に示した流体構造連成計算手法の妥当性を確認するため, 図4に示す体系について計算を行った。これは, 矩形容器に流体を入れたとき(図4(a)), その重さによって弾性体の容器底面が変形する様子を計算するものである。流体の重さによる荷重が弾性力と釣り合った状態を, 空の容器の底面に流体の重さに相当する荷重を境界条件として課した場合(図4(b))の結果と比較した。容器の寸法等は図に示した通りである。固体・流体ともに密度は 1000 kg/m^3 とし, 弾性体の Young 率は $1.0 \times 10^7 \text{ Pa}$, Poisson 比は 0.3 とした。流体の動粘性係数は $0.1 \text{ m}^2/\text{s}$ とし, さらに弾性体に適当な粘性を導入することにより定常解を得た(この粘性は最終的な定常状態に影響しない)。粒子は 1 cm 間隔で立方格子上に配置し構造粒子は 1803 個, 流体粒子は 250 個である。

図5に容器底面の最大変位(底面中心における変位)の変化を示す。実線は底面の圧力を境界条件として与えた構造計算の結果で, 破線が流体構造連成計算の結果である。両者とも計算開始直後は振動するが, 弾性計算に導入した粘性効果により急速に定常に近づいていく。定常に達した後は両者の結果はほぼ一致している。図6に定常に達した時点の底面変位の分布を示す。構造計算と流体構造連成計算の結果はほぼ一致している。図7にはその相対誤差を示す。以上の結果から, 前節に示した流体構造連成計算手法により, 十分精度

よく流体構造相互作用を計算できることが確認された。

Fig. 4 Test for fluid-structure interaction

Fig. 5 Largest displacement of the bottom

Fig. 6 Distribution of the displacement of the bottom

Fig. 7 Relative error of the displacement of the bottom

3. マイクロディスペンサーの概要

Lindemann et al.⁽¹⁶⁾により開発されたマイクロディスペンサー (PipeJetTM) は、内径 $200\mu\text{m}$ 、肉厚 $25\mu\text{m}$ の弾性体のチューブを、幅 $5000\mu\text{m}$ のピストンにより $90\mu\text{m/ms}$ の速度で押しつぶすことにより内部の液体を搾り出すもので、搾り出された液体は表面張力によって液滴となって射出される。チューブの流入側 (inlet channel) はリザーバタンクに接続されており、流出側 (outlet channel) との管長の比 (すなわち圧力損失の比) によって流体は流出側に押し出される。実験では、その比は流入側 : 流出側 = $100 : 1$ としている。

なお、ピストンストロークが $40\mu\text{m}$ の場合には、ピストンの運動は開始後 $445\mu\text{s}$ で停止し、その後ゆっくりと元の位置まで戻る。そのとき、ピストン運動開始から $525\mu\text{s}$ 後に液体表面がノズル出口から張り出し始め、 $1025\mu\text{s}$ 後には張り出した液体のノズル出口近辺がくびれて雨粒形になる。約 $1525\mu\text{s}$ 後にそのくびれ部分が分離して、一つの液滴が射出される。

4. マイクロディスペンサーの計算

4.1 計算条件 図 8 に計算体系を示す。寸法、動作条件等は基本的に Lindemann et al.⁽¹⁶⁾に基づいている。ただし、データ作成を容易にするため直径 $200\mu\text{m}$ の円管を 1 辺 $87.5\mu\text{m}$ の八角形断面の管で模擬した (図 9)。また、流入側と流出側の管長の比は実験では $100 : 1$ であるが、実質的に流入側の管長は無限大であるとみなし、流入側の出口は閉じている²。出口側の管長は Lindemann et al.⁽¹⁶⁾には明記されていないが、計算では $2500 \sim 6500\mu\text{m}$ の範囲で変化させ、それが結果に与える影響を調べた。なお、作動流体は常温常圧の水 (密度 $\rho = 1000\text{kg/m}^3$ 、動粘性係数 $\nu = 1.138 \times 10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$ 、表面張力係数 $\sigma = 7.348 \times 10^{-2}\text{N/m}$) である。実験で用いられた弾性チューブの物性は不明であるが、計算では疎水性 (接触角 $\theta = 3/4\pi$) とし、Young 率 E は 1.5MPa および 3.0MPa の二通りを試して結果を比較した。Poisson 比は 0.46 とした。ピストンのストロークは $40\mu\text{m}$ で押下速度は $90\mu\text{m/ms}$ である。これは弾性計算の境界条件として設定した。粒子は $l_0 = 12.5\mu\text{m}$ 間隔で立方格子状に配置した。総粒子数は最大で 303360 である。時間刻み幅

² 実際、流入側と流出側では慣性質量比としても摩擦圧損比としても 100 倍違うので、流れはほとんど流出側に向かうものと考えられる。

は Young 率が 1.5MPa のときには 2×10^{-7} s, 3.0MPa のときには 1.5×10^{-7} s で 2×10^{-3} s 前後まで計算を行った。なお、表面現象を含む多相流体構造連成計算では、表面張力が卓越するマイクロスケールの場合、流体計算と構造計算の時間刻み幅は、それぞれ表面張力波の速度と弾性波の速度：

$$c_{\text{surf}} \approx \sqrt{2\pi\sigma/(\rho l_0)} \approx 6\text{m/s} \quad (16)$$

$$c_{\text{elastic}} \approx \sqrt{\frac{E}{\rho}} \approx \begin{cases} 39\text{m/s} & (E = 1.5\text{MPa}) \\ 55\text{m/s} & (E = 3.0\text{MPa}) \end{cases} \quad (17)$$

によって制限されていると評価することができる

³ 全体では弾性波の速度で制限されており

$$\Delta t_{\text{max}} \approx l_0 / c_{\text{elastic}} \approx \begin{cases} 0.3\mu\text{s} & (E = 1.5\text{MPa}) \\ 0.2\mu\text{s} & (E = 3.0\text{MPa}) \end{cases} \quad (18)$$

であるから、上記の時間刻み幅は、Young 率が 1.5MPa のときは Δt_{max} の 2/3, 3.0MPa のときは Δt_{max} の 3/4 の値を用いていることになる。また、表面張力波の速度による流体計算の時間刻み幅の制限は、弾性波の速度による構造計算の時間刻み幅の制限の 6 倍～10 倍程度であるので、サブタイムステップ^{(9),(10)}等の工夫は施さなかった。

Fig. 8 Configuration for the simulation of the dispenser

Fig. 9 Cross section of the dispenser modeled by particles

4・2 計算結果

³ 粘性力による時間刻み幅の制限は $l_0^2 / 2\nu \approx 69\mu\text{s}$ であるから、これは表面張力による制限に比べて無視できる。

(1) 出口側の管長の影響

出口側の管長： l_0 を 2500, 4500, 5500, 6500 μm とした場合の結果を図 10～13 にそれぞれ示す。図の右側に記した数字は、ピストン駆動開始からの時刻を示している。なお Young 率は 1.5MPa とした。

出口側の管長が 2500 μm の場合は、液滴の後方に液体の帯が続き、その後それが小さな液滴に分裂するような結果が得られた。この挙動は単一の液滴が射出される実験結果と明らかに異なっている。管長を 4500 μm とすると、2500 μm の場合より射出速度が若干遅くなるが、それでも単一の液滴が射出するような結果は得られない。さらに管長を長くして 5500 μm とすると、ディスペンサー出口に残留する流体があるものの、単一の液滴が射出する結果が得られた。出口側管長が 6500 μm の場合も単一の液滴が射出される。この場合、ディスペンサー出口に残留する流体は 5500 μm の場合よりも少なくなり、射出速度がさらに遅くなっている。

図 14 に液滴先端位置の時刻歴を示す。液滴先端位置はノズル出口からの距離で表しており、Lindemann et al.⁽¹⁶⁾に示されている実験写真から読み取った値も同時に示している。先述した通り、出口側管長を長くするとほど射出速度が遅くなる傾向がみられる。このように射出速度が遅くなるのは、ピストンの押下げで駆動された流れが弾性管の膨張により緩和されることによるものであり、出口側管長を長くするとほどその効果は大きくなる。また、射出のタイミングについても、出口側の管長を長くするにつれて遅れる傾向がある。これも、射出速度の減速と同様に、弾性管が膨張することによって起こる現象である。実際、ピストンの降下は 445 μs で終了しており、ピストン可動部が押しつぶされたことによる体積減少は一旦他の部分が膨張することにより補われ、その後その膨張が復元することにより内部の液体が射出される。実験との比較では、液滴先端位置は液滴形状等の影響も受けるため単純な比較は難しいが、図 14 によると出口側管長を 2500 μm としたケース以外は総じて実験よりも小さい値が得られている。射出の挙動に大きく影響すると考えられる 1000 μs ～1500 μs における射出速度に関しては、出口側管長を 5500 μm としたケースが最も近い値を与えているように見える。射出の挙動やそのタイミングについても、このケースが最も実験に近い結果を与えている。実際、図 12 を見ると、ピストン運動開始から 1025 μs 後にノズル出口付近でくびれが生じて雨粒形になり、1525 μs 後にそのくびれ部分が分離して液滴が射出されるといった実験で観測される射出挙動を良く再現していることが確認できる。

Fig. 10 Simulation results of the ejection process ($l_0 = 2500$) Fig. 11 Simulation results of the ejection process ($l_0 = 4500$) Fig. 12 Simulation results of the ejection process ($l_0 = 5500$)

なお、液体噴流が液滴に分裂する際の不安定性については、Weber 数 (We) と Reynolds 数 (Re) の組合せにより対流不安定と絶対不安定の二つの場合が存在することが知られている^{(18),(19)}。両者の代表的な挙動は

Fig. 13 Simulation results of the ejection process ($l_0 = 6500$)

Fig. 14 Top of the ejected liquid

低重力環境下の実験⁽²⁰⁾等で観測されており、対流不安定の場合にはノズル出口から徐々に攪乱が成長し、ノズル出口から離れたところで液滴への分裂が生じるのに対し、絶対不安定の場合にはノズル出口直後から不連続的に液滴が射出するような挙動を示すことが知られている。対流不安定と絶対不安定を区分する臨界 Weber 数は、線型安定性理論により図 15 に示す通りに得られている⁽¹⁹⁾。なお、上記の計算結果から、出口側の管長が $2500\ \mu\text{m}$ のケースで $We \approx 3.4$, $Re \approx 140$, $4500\ \mu\text{m}$ のケースで $We \approx 1.4$, $Re \approx 88$, $5500\ \mu\text{m}$ のケースで $We \approx 0.9$, $Re \approx 70$ とおおよそ見積もることができる⁴。図 15 にはそれらの点も同時に示している (白丸は単一の液滴が射出されないことを表し、黒丸は単一の液滴が射出されることを表している)。これによると、計算ではその臨界 We 数が理論値よりも小さく予測されるものの、単一の液滴が射出されるかされないかの射出挙動の差は絶対不安定・対流不安定による液体噴

⁴ ここで代表速度は射出速度であり、図 14 の平均的な勾配を読み取って与えた。代表長さは管の半径である。

流の分裂挙動を再現しているものとみることができる。

Fig. 15 Critical Weber number versus Reynolds number⁽¹⁹⁾:
○ and ● are points obtained by the simulation, where ○ indicates the jet-like ejection and ● indicates the single droplet ejection

(2) Young 率の影響

図 18 に Young 率を $E = 3.0 \text{ MPa}$ とした結果を示す。出口側の管長は $6500 \mu\text{m}$ とした。図 13 の Young 率が 1.5 MPa の場合と比較すると、射出のタイミングが早くなり、実験で見られる液滴射出挙動を良く再現する結果が得られている。また、Young 率を 1.5 MPa とした中では最も実験と近かった出口側管長 $5500 \mu\text{m}$ のケース (図 12) の結果と比較しても、ディスペンサー出口に残留する流体量が少ないという点で、より実験に近いと判断することができる。図 17 に液滴先端位置の時刻歴を示すが、これを見ても他のケースより実験に近い結果が得られていることを確認することができる。なお、実験における出口側管長と弾性管の Young 率は不明であり、現状ではこれらのパラメータを変化させた感度解析により比較することしかできない。

Fig. 16 Simulation results of the ejection process ($E = 3 \text{ MPa}$)

Fig. 17 Top of the ejected liquid

(3) 射出量の比較

以上に示した計算で得られた射出量と実験結果との比較を表 1 に示す。計算では実験よりも 1 割程度小さい値が得られている。また、その変化は僅かであるものの、出口側管長を短くするほど、また硬い (Young 率が高い) 材料を用いるほど、射出体積が大きくなる傾向が見られる。

Table 1 Dosage volume

Length of the outlet channel [μm]	Young's ratio of the elastic tube [MPa]	Dosage volume [nl]
5500	1.5	20.43
6500	1.5	19.98
6500	3.0	20.46
Experiment		22.5

(4) まとめ

以上に示した結果から、特に出口側の管長を $6500 \mu\text{m}$ とし、Young 率を 3.0 MPa とすると、実験で観測される液滴射出挙動を良く再現できることが示された。Lindemann et al.⁽¹⁶⁾ は VOF 法と移動境界によるシミュレーションを行っているが、液滴が離脱するタイミングが約 $700 \mu\text{s}$ と大幅に早く、また後方に長く尾を引いた液滴形状が得られている。これと比較しても、本研究で得られた結果は実験結果を良く模擬していると言える⁵。

ただし、本研究でもディスペンサー出口に残留する流体が見られること、液滴先端位置が各時刻で実験よりも手前にあることおよび射出量に 1 割程度の差が見られることが問題点として挙げられる。これらは、Lindemann et al.⁽¹⁶⁾ に示されている実験条件で確定でき

⁵ これは主に本研究では流体構造連成挙動を正しくシミュレートしていることの帰結である。

Lindemann et al. の計算では、管の弾性変形は考慮していない。

ないパラメータ, すなわち出口側の管長, 弾性管の Young 率さらには管面と流体の接触角等の違いが原因となっている可能性がある。その一方で, Lindemann et al.⁽¹⁶⁾において, ノズル出口の形状を完全な円に加工したことによって安定した液滴射出が可能になったとの記述があり, 計算上円形断面を八角形で近似したことが影響していることも考えられる。断面形状を正確な円とするためには, 現在よりも大幅に粒子数を増加する必要がある。より多くの粒子を用いて詳細な解析を行うことは将来の課題としたい。

5. 結 論

MPS 法によりマイクロディスペンサーのシミュレーションを行い, 実験で観測される液滴射出挙動を良く再現する結果を得た。本例題は複雑な表面変化を伴う流れと弾性構造体の運動との連成問題であり, MPS 法がこのような解析に有効であることが示された。

ただし, ディスペンサー出口に残留する流体が見られること, 液滴先端位置が各時刻で実験よりも手前にあることおよび射出量に 1 割程度の差が見られることが問題点として挙げられる。これらを検討するためには, 例えば管の断面形状を正しく円形にすることが必要になると考えられるが, そのためにはさらに粒子数を増加して計算を行う必要がある。プログラムの並列化等により計算能力を向上し, より多くの粒子を用いて詳細な解析を行うことは将来の課題である。

謝 辞

本研究は科学技術振興機構 (JST) の戦略的創造研究推進事業 (CREST) の支援により行われたもので, ここに感謝の意を表します。

文 献

- (1) Koshizuka, S., *Particle Methods : The Series of Lectures on Computational Mechanics 5*, Maruzen (2005) (in Japanese).
- (2) Li, S. and Liu, W. K., *Meshfree Particle Methods*, Springer (2004).
- (3) Koshizuka, S. and Oka, Y., Moving-Particle Semi-implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid, *Nuclear Science and Engineering*, Vol.123 (1996), pp.421-434.
- (4) Koshizuka, S., Nobe, A. and Oka, Y., Numerical Analysis of Breaking Waves Using the Moving Particle Semi-implicit Method, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* Vol.26 (1998), pp.751-769.

- (5) Nomura, K., Koshizuka, S., Oka, Y. and Obata, H., Numerical Analysis of Droplet Breakup Behavior Using Particle Method, *Journal of Nuclear Science and Technology* Vol.38, No.12 (2001), pp.1057-1064.
- (6) Chikazawa, Y., Koshizuka, S. and Oka, Y., Numerical Analysis of Three-dimensional Sloshing in an Elastic Cylindrical Tank Using Moving Particle Semi-implicit Method, *Computational Fluid Dynamics Journal*, Vol.9, No.4 (2001), pp.376-383.
- (7) Song, M. S., Koshizuka, S. and Oka, Y., Dynamic Analysis of Elastic Solids by MPS Method, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.71, No.701 (2005), pp.16-22.
- (8) Harada, T., Suzuki, Y., Koshizuka, S., Arakawa, T. and Shoji, S., Simulation of Droplet Generation in Micro Flow using MPS Method, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.71, No.711 (2005), pp.2637-2641.
- (9) Harada, T., Suzuki, Y., Koshizuka, S., Arakawa, T. and Shoji, S., Three-dimensional Numerical Analysis of Micro Multiphase Flow Using MPS Method, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.73, No.726 (2007).
- (10) Suzuki, Y., Koishikawa, M., Koshizuka, S., Okamoto, T., Kaneko, N., Takamatsu, A. and Fujii, T., Numerical Simulation of Adhesion of Cells in Micro Channels using the MPS Method, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.72, No.721 (2006), pp.2109-2116.
- (11) Kitamori, T. et al. (eds.), *Technology and Application of Microchemical Chips*, Maruzen (2004) (in Japanese).
- (12) Whitesides, G. M., The Origins and the Future of Microfluidics, *Nature*, Vol.442 (2006), pp.368-373.
- (13) Hosokawa, K., Fujii, T., and Endo, I., Handling of Pico-liter Liquid Samples in a Polydimethylsiloxane (PDMS) -based Microfluidic Device, *Analytical Chemistry*, Vol.71 (1999), pp.4781-4785.
- (14) Go, J. S. and Shoji, S., Digital Sorting of Flow-through Droplet Phase Microfluid, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol.42 (2003), pp.L448-L450.
- (15) Go, J. S. and Shoji, S., A Disposable, Dead Volume-free and Leak-free In-plane PDMS Microvalve, *Sensors and Actuators A*, Vol.114 (2004), pp.438-444.
- (16) Lindemann, T., Streule, W., Birkle, G., Zengerle, R. and Koltay, P., PipeJetTM - A Simple Disposable Dispenser for the Nanoliter Range, *ACTUATOR 2004, 9th International Conference on New Actuators, 14-16 June 2004, Bremen, Germany*, pp.224-227.
- (17) Xie, H., Koshizuka, S. and Oka, Y., Modeling of Wetting Effects on the Liquid Droplet Impingement using Particle Method, *The 53rd Nat. Cong. of Theoretical and Applied Mechanics 2004 (NCTAM2004)*, 27-29 January 2004, Tokyo, Japan, pp.367-368.
- (18) Leib, S. J. and Goldstein, M. E., The Generation of Instabilities on a Liquid Jet, *J. Fluid Mech.*, Vol.168 (1986), pp.479-500.
- (19) Leib, S. J. and Goldstein, M. E., Convective and Absolute Instability of a Viscous Liquid Jet, *Phys. Fluids*, Vol.29, No.4 (1986), pp.952-954.
- (20) Edwards, A. P. R., Osborne, B. P., Stoltzfus, J. M., Howes, T. and Steinberg, T. A., Instabilities and Drop Formation in Cylindrical Liquid Jets in Reduced Gravity, *Phys. Fluids*, Vol.14, No.10 (2002), pp.3432-3438.