令和４年度修士学位論文

繊維の回転運動を再現できる
繊維懸濁液の micropolar-MPS 法の開発

名古屋大学　大学院工学研究科　物質科学専攻

ナノ解析物質設計学講座

レオロジー物理工学研究グループ

282122056 榎本 圭吾

繊維の回転運動を再現できる繊維懸濁液の micropolar-MPS 法の開発

レオロジー物理工学研究グループ　榎本圭吾

【緒言】　せん断流動下における流体中の孤立繊維の運動は Jeffery[1)]によって解析解が求められており、繊維が周期的に回転することが知られている。しかし、懸濁液中の繊維濃度が上昇すると、流体相互作用などの相互作用によって運動が複雑になり理論的な記述が難しいので、シミュレーションによる研究が盛んに行われている。その中でも、MPS (Moving Particle Simulation)法 [2)]などの Lagrange 描像に基づく流体粒子法は、Navier-Stokes 方程式に基づいて流体を計算でき、固体の実装が Euler 描像に基づく手法と比較して簡便であるため、繊維懸濁液のシミュレーション手法としても用いられる。この時、計算の簡便さから繊維は一列の固体粒子の集合として表現されることが多い。しかし、粒子は計算点であり中心力のみが働くため、せん断流動下において繊維が流動方向に配向した際に、周囲流体から受ける力が均衡し静止してしまう。そこで、本研究では MPS 法を拡張し上記の問題を解決する新手法の開発を目的とした。開発した新手法を用いてせん断流動中の孤立繊維の運動の三次元計算を行い、Jeffery 理論と比較して手法の妥当性の検証を行う。また、繊維濃度が高い領域での計算を行い、従来手法とのせん断粘度の比較を通じて本手法の優位性を示す。

【シミュレーションモデル】　一般に繊維状の物体を粒子の一列の集合として再現する場合は、固体粒子に回転自由度を導入し、周囲流体の並進運動に基づく粘性トルクを定式化する必要がある。しかし、従来の MPS 法の枠組みではそのようなモデル化はできない。そこで、本研究では回転自由度として角速度場を導入した連続体理論である micropolar fluid モデル [3)]を応用し、固体粒子への回転自由度の導入と並進運動とのカップリングを行った。本研究では計算コスト削減のため、陽解法型の MPS 法を使用し支配方程式を離散化し、固体粒子の並進および回転運動と流体粒子の並進運動を計算した。また、繊維は固体粒子に伸びと曲げのポテンシャルを付与して相互の位置関係を拘束することで表現した。

【結果および考察】　Fig.1 に繊維の回転角の時間発展を示す。ここで、ϕ は流動方向と繊維がなす角度である。Fig.1 より、本研究で開発した新手法では従来手法とは異なり、繊維が周期的な回転運動を行っていることが確認できる。また、有効アスペクト比 r_{ef} への換算を行うことで回転周期は実線で示す Jeffery 理論とよく一致している。これより、開発した新手法で正しい繊維の回転運動を再現できることを確認した。Fig.2 に本手法および従来手法によるせん断粘度 η の数密度 n 依存性を示す。ここで、η_0 は溶媒粘度である。本手法では、先行研究 [4)]と同様に繊維濃度の上昇に伴って粘度も上昇している。一方で、従来の MPS 法では粘度上昇がほとんど観測されない。これは、各繊維の回転運動が再現されていないため、ほぼ全ての繊維が流動-渦度面上に配向し、粘度上昇に寄与しないことが原因である。これより、繊維懸濁液のシミュレーションにおける繊維の回転運動の重要性が示された。

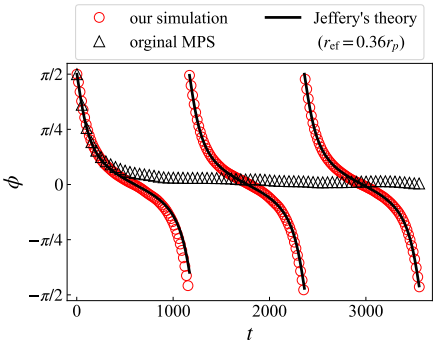


Fig. 1　繊維の回転角 ϕ の時間発展

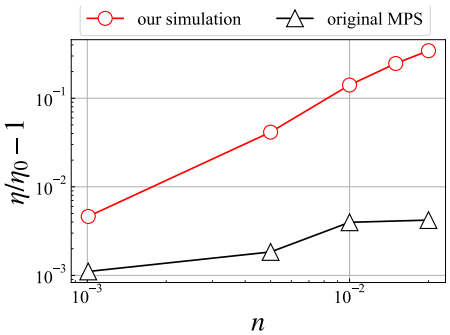


Fig. 2　せん断粘度の数密度依存性

【参考文献】

1) G. B. Jeffery, *Proc. R. Soc. A-Math. Phys. Eng. Sci.*, **102**, 161 (1922)
2) S. Koshizuka et. al., *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **26,** 751 (1998)
3) A. C. Eringen, *J. Math. Mech.*, **16,** 1 (1966)
4) J. E. Butler et. al., *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, **50**, 299 (2018)

目次

要旨 i

第 1 章　諸言 2

1.1　繊維懸濁液の概要 2

1.2　繊維懸濁液の実験的研究 3

1.3　流体中の繊維運動の理論記述 5

1.3.1　希薄極限における繊維の運動理論 5

1.3.2　繊維懸濁液の理論記述 7

1.4　繊維懸濁液のシミュレーション手法 8

1.5　流体粒子法とは 9

1.6　流体粒子法による繊維懸濁液のシミュレーション 11

1.7　本研究の目的 12

第 2 章　シミュレーションモデル 13

2.1　回転自由度の導入 13

2.2　**Micropolar fluid** モデル 14

2.3　**explicit MPS** 法 14

2.4　繊維モデル 16

2.5　数値計算アルゴリズム 17

2.6　時間刻み幅 19

2.7　境界条件 20

2.8　初期配置 21

第 3 章　シミュレーションの妥当性検証 24

3.1　流体計算 24

3.1.1　速度プロファイル 24

3.1.2　溶媒粘度 25

3.2　固体粒子の回転運動 27

第 4 章　希薄極限における繊維運動 29

4.1　シミュレーション設定 29

4.2　結果及び考察 29

4.2.1　孤立繊維の回転運動 29

4.2.2 繊維の角速度および配向分布関数 32
4.2.3 **Jeffery** 軌道 33
4.2.4 パラメータ依存性 34

第 5 章 濃厚系における繊維懸濁液の計算 36
5.1 諸言 36
5.2 シミュレーション設定 36
5.3 結果及び考察 38
5.3.1 繊維の配向の時間発展 38
5.3.2 壁による影響 40
5.3.3 繊維の回転運動の濃度依存性 43
5.3.4 配向分布関数の濃度依存性 46
5.3.5 定常粘度 48
5.3.6 回転自由度の導入による影響 50
5.3.7 初期状態依存性 53

第 6 章 考察 56
6.1 希薄系における繊維運動 56
6.2 濃厚系の計算 57
6.2.1 繊維配向の先行研究との比較 57
6.2.2 定常粘度の濃度依存性 58
6.2.3 濃厚領域の速度勾配 63
6.3 計算コストの比較 64
6.4 モデルの拡張 65

第 7 章 結論 66

謝辞 68

付録 A 関連する理論記述 70
A.1 ダイレクターの時間発展 70
A.2 式 (2.5) 第二項の安定条件 71

付録 B シミュレーションデータ (希薄系) 72
B.1 初期配向依存性 72
B.2 パラメータ依存性 73

付録 C シミュレーションデータ (濃厚系) 76
C.1 四階の配向テンソル A_{1122} および軌道定数 $\langle C_b \rangle (t)$ 76
C.2 パラメータ依存性 78
C.3 システムサイズ依存性 79
C.4 軌道定数 C_b の分布関数 $\Psi(C_b)$ 81

付録 D　初期配向依存性：渦度方向へ配向している場合 83

付録 E　シミュレーションの詳細 86

E.1　計算に要する時間 86

E.2　並列化効率 87

E.3　使用したソフトウェア及び参考にした邦書 88

参考文献 89

第 1 章

諸言

1.1 繊維懸濁液の概要

繊維懸濁液とは、流体中に繊維上の細長い固体が分散した系のことを指す。繊維懸濁液のレオロジー的性質の理解は、製紙産業やコンポジット材料の成形過程など幅広い分野に関連する重要な問題である [1, 2]。近年は電気自動車への移行に伴う車体の軽量化の要求から、熱可塑性樹脂に短い炭素繊維が分散したコンポジット材料 (CFRTP) に注目が集まっている [3]。CFRTP は鉄と比較して軽量かつ高強度であり、腐食性にも優れた材料である。飛行機の機材として利用される連続繊維のコンポジット材料と比較して、CFRTP は成形時の自由度が高いこと、コストが低いことが特徴である [4]。こういった CFRTP を用いて作られる製品の力学特性は繊維自体の長さや剛性、樹脂の特性、繊維の数密度と成形時の流動場によって変化する [5]。よって、この成形過程を制御するために懸濁液の粘度や内部構造 (繊維配向や配置) の予測するために多くの研究がなされてきた [2, 6]。本節では本研究で対象とする繊維懸濁液の概要、および重要な要素である繊維濃度について説明する。

本研究では簡単のために、アスペクト比 $r_p = L/d$ の剛直な繊維が分散した懸濁液を考える。ここで、L は繊維長、d は繊維の厚みである。繊維は Brown 運動による影響が無視できるほど大きく、繊維の運動は流体力が支配的な状況とする。また、周囲流体は Newtonian であり、粘度が十分に高く慣性の影響は無視できるものとする。周囲流体と繊維の密度比が 1 である状態を考え、繊維の沈降や浮力は考慮しない。

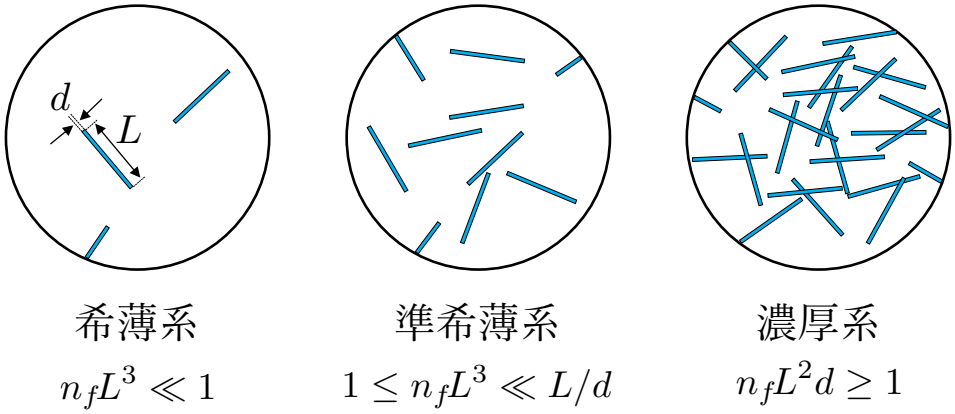
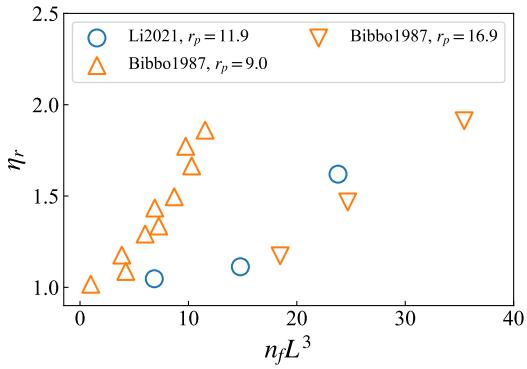


図 1.1: 繊維懸濁液の濃度領域

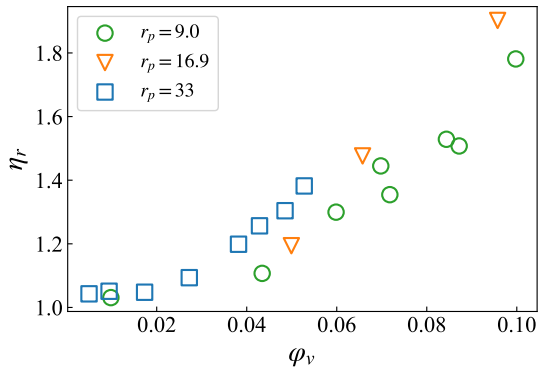
繊維懸濁液の挙動は上述の通り、繊維の数密度 $n_f = N_f/V$ の影響を強く受ける。ここで、N_f は注目するシステム中の繊維の数であり、V はシステムの体積である。図 1.1 に示すように、繊維懸濁液の濃度

領域は、n_f の値によって大きく三つ (希薄、準希薄、濃厚) に分割することができる [2, 7]。この時、繊維が回転運動をする際の排除体積のオーダーとの対比でおおよその濃度が評価できる。長さ L の繊維が自由に回転運動をする際に占める排除体積のオーダーはおおよそ L^3 である。この排除体積あたりに繊維が一本存在するような密度 ($\sim 1/L^3$) よりも十分に密度が低い領域、すなわち、$n_f L^3 \ll 1$ の密度領域が希薄領域である。希薄領域では、繊維間相互作用がほとんどなく各繊維の運動が独立とみなすことができる。繊維がある平面上で回転運動をする際に占める排除体積のオーダーは $L^2 d$ である。$1/L^3$ よりは密度が高いが、繊維間の接触はないような濃度帯、$1 \leq n_f L^3 \ll L/d$ の密度領域が準希薄領域である。準希薄領域では、繊維は周囲の繊維との相互作用によって自由に回転することはできない。この領域では、一般に繊維間相互作用は流体相互作用が支配的であるとされている [2]。これよりも濃度が高く、繊維間の接触が支配的になる領域、$n_f L^2 d \geq 1$ の密度領域が濃厚領域である。濃厚領域では、繊維同士の衝突が生じやすくなるため繊維の運動はより複雑になる。アスペクト比 $r_p = 10$ の spherocylinder 粒子の場合では $n_f L^2 d \simeq 4.7$、体積分率 $\varphi_v = 0.37$ を超えると、粒子はもはやランダムな配向が不可能となり、ある一方向に配向してしまう [8]。

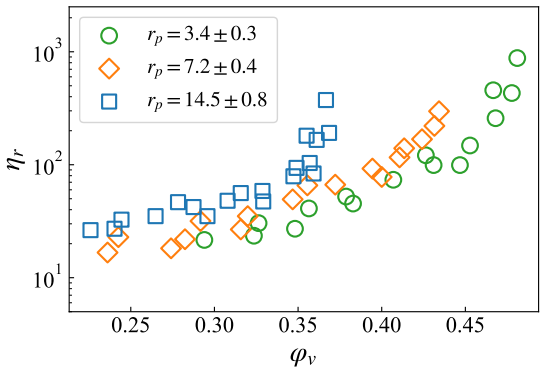
1.2　繊維懸濁液の実験的研究



(a) $n_f L^3$ 依存性。○: Li ら [9] ($r_p = 11.9$)、△ : Bibbo ら [10] ($r_p = 9.0$)、▽ : Bibbo ら [10] ($r_p = 16.9$)。



(b) Bibbo [11] による η_r の体積分率 φ_v 依存性。



(c) Tapia ら [12] による高濃度領域における η_r の体積分率 φ_v 依存性。

図 1.2: 先行研究の実験による相対粘度 η_r の繊維濃度依存性

Newton 流体をマトリックスとする繊維懸濁液のレオロジーに関する実験的研究では、繊維濃度やひずみ速度、アスペクト比等をパラメータとして粘度や配向にの測定が行われている。Powell ら [13] や Petrie ら [6] 、Shaikh ら [8] の review 論文によくまとめられており、本研究で扱う定常せん断流の結果に一部についてのみ記述する。本研究で対象とするアスペクト比 $r_p = 10$ に近い実験結果を図 1.2(a) に示す。これより実験結果は研究グループによって大きく変動していることが分かる。また、図 1.2(a) では繊維のアスペクト比が大きいほど同じ $n_f L^3$ における粘度の値が低くなっているが、Shaikh ら [8] の review でも言及されている通り $r_p = 33$ と 50 のデータで比較するとその逆の傾向を示している。このように、Brown 運動のない繊維懸濁液系では明確な定常状態の定義が難しく、実験グループ間でもデータのバラつきが確認されている。一方で、図 1.2(b) 体積分率 φ_v を横軸にとって濃度依存性を見ると $r_p = 9 \sim 51$ の範囲ではほとんどアスペクト比依存性が見られないことが確認されている [11]。また、準希薄領域ではいくつかの研究において、ひずみ速度の上昇とともに粘度の値が下がるシアシニングを示すことが知られている [8]。$r_p > 100$ を超えるような長繊維では顕著なシニングが確認されている [13] が、短繊維についてマトリックスの微弱な非ニュートン性に由来するものだという主張もあり議論は確定してはいない [8]。報告されている実験の多くが準希薄領域におけるものであり、濃厚領域での実験結果は多くない。これは、Brown 運動をしないサイズの繊維は一般的なレオメーターのギャップサイズとオーダーが同程度であり、繊維濃度が高いほど実験の難易度が上がることが原因である (ギャップサイズが 1mm 程度に対して繊維が 0.1mm 弱) [8]。これまでの多くの実験で測定された濃度は、体積分率で換算すると高くても $r_p = 17$ で約 $\varphi_v = 0.15$、$r_p = 9$ で約 $\varphi_v = 0.23$ である。Tapia ら [12] は図 1.2(c) に示す通り、$r_p = 3 \sim 15$ の繊維に対して $\varphi_v = 0.25 \sim 0.45$ の高濃度におけるせん断粘度の測定に成功した。これは最大収容密度に近い高濃度域であり、急激な粘度上昇まで観測されている。このような高密度での実験を可能にするために、穴あきの天板で懸濁液を抑え圧力調整を行った。結果的に、最大収容密度によって実験結果がうまく整理できることを見出した。

カメラを用いたせん断流れ中の繊維配向の観察も行われている。Stover ら [14] は渦度方向にカメラを配置し、せん断流れ中の二次元的な繊維配向を観測した。これにより、実験的に繊維の配向分布関数を得ることに成功した。Petrich ら [15] らも $r_p = 50, 72$ について、各濃度における繊維配向および繊維の回転周期を観測した。これより、繊維の回転周期は濃度上昇とともに若干長くなる傾向があることを示した。また、Stover ら [14]、Petrich ら [15] によって測定された後述する繊維の軌道定数は濃度上昇に伴って減少傾向を見せたが、多くのシミュレーションによる結果は逆の傾向を見せており、相違がある [2]。このような繊維配向は、粘度にも大きな影響を及ぼす。Bibbo ら [11] はシリコーンオイルとナイロン繊維を用いて $r_p = 9 \sim 51$ の幅広いアスペクト比に対してせん断粘度を観測した。この時、ランダムな繊維配向と、多くの繊維が流動方向に配向した初期配向を作成し、二つの粘度の濃度依存性を比較した。その結果、繊維がランダムな配向状態の方が流動方向への配向状態と比較して粘度の値が遥かに大きいことが示された ($r_p \sim 50, n_f L^3 = 60$ で約 2 倍程度の差) [11]。この結果からも繊維配向が粘度と密接に結びついていることが分かる。

また、せん断を印加する際の固体壁による影響も無視することはできない。Moses ら [16] は単一繊維の壁面付近の運動を実験的に測定した。壁面付近では、後述する Jeffery 理論 [17] よりも繊維の角速度自体は速く、流動方向に配向しやすい事を示した。また、Bibbo ら [10] は、ギャップサイズが繊維長の 1.2 倍以下である場合、ゼロせん断粘度の値が小さくなることを示した。Li ら [9] らは体積分率 $\varphi_v = 0.1 \sim 0.4$ の範囲で、レオメーターおよび CCD カメラを用いて、壁面が粘度および繊維配向に与える距離を調査した。これより、ギャップサイズの増加とともに定常粘度の値は大きくなり、その依存性は繊維の約 10 倍程度まで及ぶことを示した。また、繊維にかかる実行的なひずみ速度は壁面付近では小さくなっており、

繊維長の約 1.5 倍程度までその影響が及んでいることが示されている。現状、壁面付近の運動については流体を考慮した第一原理的な理論モデルも確認できておらず、各実験、計算ごとにその依存性を注意して確認する必要がある。

1.3　流体中の繊維運動の理論記述

1.3.1　希薄極限における繊維の運動理論

希薄極限における単一の繊維の運動については Jeffery [17] によって完全な解析解が与えられている。図 1.3 のような、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ のせん断変形下における Newton 流体中の単一の回転楕円体の運動を考える。この時、流動方向 (x 軸) となす角 $\phi(t)$ と渦度方向 (z 軸) となす角 $\theta(t)$ の時間微分は以下のように求められる。

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{\dot{\gamma}}{r_p^2+1}\left(r_p^2\sin^2\phi+\cos^2\phi\right) \tag{1.1}$$

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \frac{\dot{\gamma}}{4}\left(\frac{r_p^2-1}{r_p^2+1}\right)\sin 2\phi\sin 2\theta \tag{1.2}$$

これを解くと、以下の解が得られる。

$$\tan\phi(t) = \frac{1}{r_p}\tan\left[-\frac{\dot{\gamma}}{r_p+r_p^{-1}}t+\tan^{-1}\left(r_p\tan\phi_0\right)\right] \tag{1.3}$$

$$\tan\theta(t) = \frac{C_J r_p}{\left(r_p^2\sin^2\phi(t)+\cos^2\phi(t)\right)^{1/2}} \tag{1.4}$$

ここで、$\phi_0 = \phi(t=0)$、C_J は定数である。この理論解から、回転楕円体はある閉軌道上において周期的な回転運動を行うことが分かる。この閉軌道は Jeffery 軌道と呼称され，初期配置のみによって決定する無数の中立安定解のうちの一つである。また、繊維のような一軸対称な粒子については繊維のアスペクト比 r_p を有効アスペクト比 r_{ef} に置き換えることで Jeffery 理論を適用できることが理論 [18] や実験 [19] によって示されている。この有効アスペクト比を用いてせん断流動下における単一の繊維の回転周期 T は以下のように記述される。

$$T = \frac{2\pi}{\dot{\gamma}}\left(r_{\mathrm{ef}}+\frac{1}{r_{\mathrm{ef}}}\right). \tag{1.5}$$

また、式 (1.4) を変形し、有効アスペクト比を用いることで C_J は以下のように定義される。

$$C_J = \frac{1}{r_{\mathrm{ef}}}\tan\theta_0\left(r_{\mathrm{ef}}^2\sin^2\phi_0+\cos^2\phi_0\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{1.6}$$

この C_J によって各 Jeffery 軌道は特徴づけられる。C_J は実数であり、上限及び下限はない。これより、数値的な取り扱いを簡単にするために、以下のように定義される規格化された軌道定数 C_b を用いて Jeffry 軌道を特徴付けることが多い。

$$C_b = |C_J|/\left(1+|C_J|\right) \tag{1.7}$$

$C_b = 0$ の時、繊維が渦度方向 (z 軸) を向いていることを示し, $C_b = 1$ の時には繊維がせん断勾配面 (x-y 平面) 上で運動していることを表現する。以上より、溶液中の孤立繊維の運動は理想的には Jeffery 理論によって書き下すことができる。

一方で、実際の実験では慣性項やその他の摂動の効果を完全には無視することはできず、Jeffery 理論の設定と完全に一致することはほとんどない。よって、初期配置から決定する Jeffery 軌道からの遷移が

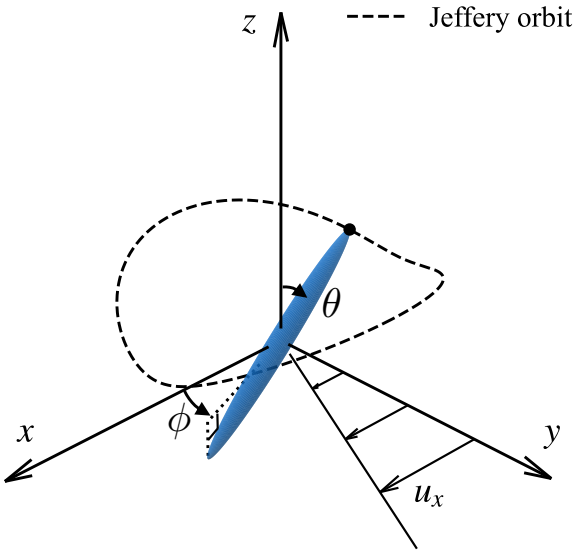


図 1.3: せん断流動中において配向角 ϕ と θ を向いた繊維 (回転楕円体) の概念図。破線は繊維端の回転軌道 (Jeffery 軌道) を示している。

生じることが実験的に報告されている [19]。こういった状況で最終的に繊維が向きやすい方向 (preferred orientation) についても議論が重ねられている。理想的な Jeffery 軌道では $C_b = 0$ の軌道を除いて繊維は周期的に回転運動を行うため非定常であり、preferred orientation は存在しない。せん断流動中における繊維の preferred orientation は対称性から $C_b = 0$、もしくは $C_b = 1$ のどちらかの軌道だと推測され、実際に理論的に有限 Re における摂動下ではこれらの二つの軌道に帰着することが示されている [20]。$C_b = 0$ の繊維が渦度方向を向いた時の運動は log-rolling 運動と呼ばれる [20]。log-rolling 運動はせん断流動中ではエネルギー散逸が最小であり、Jeffery はこの log-rolling 運動が preferred orientation となるという仮説を提案している [17]。Saffman [21] は理論的に長楕円体は渦度方向に配向しやすいことを示した。また、摂動の原因として流体の慣性や非ニュートン性を挙げたが、実際にはその効果は流体力と比較して非常に小さいので長時間の測定を行わないとそのような軌道の繊維は実験的に観測されないと結論づけた。実際には速度勾配のかかり方や壁の効果もあると考えられるが、それらは実験装置の設定に依存しやすく、厳密な議論を行うのは困難である。Saffman らの論文 [21] でも実験によってこの prefferred orientation はまちまちであるという報告がなされている。一方で、Einarsson ら [22] によると、lattice-Boltzmann 法を用いたいくつかの直接数値計算では安定な log-rolling 運動は報告されていない。Harper and Chang [23] は、繊維を Stokes 動力学の玉二つで表現されたダンベルとしてモデル化し、Saffman とは異なる結果を導いた。Subramanian and Koch [24] は Navier-Stokes 方程式の慣性項も取り入れて計算し、Harper and Chang らと同様の結論を導いた。一方で、ここで用いたものと同様の手法を用いて Saffman [21] と同様の計算を行うと、Saffman らと同様 log-rolling 運動が安定であるという結論を導いた [25]。このように、摂動下における安定な preferred orientation についての議論は紛糾している。$C_b = 0$ もしくは $C_b = 1$ のどちらの軌道に帰着するかは実験装置および計算手法に由来する摂動のかかり方に依存するものと考えられる。

1.3.2　繊維懸濁液の理論記述

系内に多数本の繊維が存在する場合には、以下に示すような繊維の方向ベクトル $\boldsymbol{p}$ のテンソル積を用いて計算される配向テンソル $\boldsymbol{A}$ が使用されることが多い。

$$\boldsymbol{A} = \int_{\boldsymbol{p}} \boldsymbol{p}\boldsymbol{p}\Psi\left(\boldsymbol{p}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{1.8}$$

ここで、$\Psi(\boldsymbol{p}) = \Psi(\theta, \phi)$ は繊維の配向分布関数と呼ばれる確率密度分布関数であり、以下の規格化条件を満たす。

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\Psi(\theta,\phi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi = 1 \tag{1.9}$$

また、これらの配向テンソルは、システムに含まれる N_f 本の繊維の平均として、以下のように近似的に計算することもできる [26]。

$$\langle A_{ij}\rangle = \frac{1}{N_f}\sum_{k=1}^{N_f} p_i^{(k)} p_j^{(k)} \tag{1.10}$$

ここで、$p_i^{(k)}$ は k 番目の繊維の方向テンソルの i 成分を示している。

繊維濃度が高くなると繊維間の流体相互作用や接触によってその運動を記述することが非常に難しくなるため、Jeffery 理論のような決定論的な理論は現状では存在しない。したがって、理論的には主に現象論的なアプローチが取られてきた。Folgar and Tucker [27] は周囲の繊維から受ける相互作用による項を付与し、Jeffery 理論を拡張した。この時、相互作用項の大きさはひずみ速度 $\dot{\gamma}$ に比例するものだと仮定し、その係数をフィッティングパラメータ C_I とすることで実験結果で得られた配向分布関数を概ね再現する結果を得た。また、Advani ら [28] は Folgar-Tucker モデルを繊維の配向テンソル $\boldsymbol{A}(t)$ の時間発展に適用できるように拡張を行なった。

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = \left(\boldsymbol{W}\cdot\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{W}\right) + \xi\left(\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{D} - 2\boldsymbol{A}_4 : \boldsymbol{D}\right) + 2C_I\left|\dot{\gamma}\right|\left(\boldsymbol{I} - 3\boldsymbol{A}\right) \tag{1.11}$$

ここで、速度場を $\boldsymbol{u}$ として $\boldsymbol{W} = (\nabla\boldsymbol{u} - \nabla\boldsymbol{u}^T)$、$\boldsymbol{D} = (\nabla\boldsymbol{u} + \nabla\boldsymbol{u}^T)$、$\xi = (r_p^2 - 1)/(r_p^2 + 1)$ である。$\boldsymbol{A}_4$ は四階の配向テンソルであり、以下のように定義される。

$$\boldsymbol{A}_4 = \int_{\boldsymbol{p}} \boldsymbol{p}\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}\Psi\left(\boldsymbol{p}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{p} \tag{1.12}$$

また、平均値は式 (1.10) と同様に以下のように計算する。

$$\langle A_{ijkl}\rangle = \frac{1}{N_f}\sum_{m=1}^{N_f} p_i^{(m)} p_j^{(m)} p_k^{(m)} p_l^{(m)} \tag{1.13}$$

このような Folgar らのアプローチでは、周囲の繊維との相互作用は平均値が 0 であるホワイトノイズで記述されている。これより、角速度の平均値は相互作用がない場合、Jeffery の式と全く同じ結果が得られることが想定される。一方で、実験において、Folgar らの予測よりも繊維配向の時間発展はより遅いものになっていることが知られている [29]。つまり、繊維の角速度の平均値は濃度濃度上昇に伴って遅くなるようにモデルを組む必要がある。Wang ら [30] はこれを再現するために繊維配向テンソルの時間発展が遅れるように $\boldsymbol{A}$ の固有値を使用した RSC (Reduced Strain Closure) モデルを構築した。他にも、周囲の繊維からの相互作用パラメータ C_I を相互作用テンソル $\boldsymbol{C}_I$ として、非等方的な相互作用を表現できるようにする [31, 32] などモデルの改良が試みられているが、基本的にはパラメータの数が増えてしま

い、第一原理的なモデルは構築されていないのが現状である。また、こういったマクロモデルは繊維の詳細な運動を追えないので、現実系で存在する繊維長分布の影響や壁が繊維配向に与える影響を取り込むことができないという欠点もある。

第一原理的なアプローチとしては、slender body theory [33] が有効である。Slender body theory では繊維のアスペクト比が $r_p \to \infty$ の極限を仮定することで Stokes 流体中における繊維の運動方程式を近似することができる。Batchelor はこの slender body theory を用いて、流体中で繊維が受ける力やトルクを定式化した [34]。Batchelor によって得られた表式を応用して繊維間の流体力学相互作用を推定することで希薄系における伸長粘度 [35] や準希薄系における繊維の角速度の変化 [36] が理論的に計算されている。準希薄系においても、Shaqfeh ら [37] が slender body theory を用いて多体相関を考慮することで以下に示す相対粘度 η_r の予測式を提案している。

$$\eta_r = \frac{\eta_{\mathrm{sus}}}{\eta_{\mathrm{sol}}} = 1 + \frac{\eta_f}{\eta_{\mathrm{sol}}} \langle A_{1122} \rangle, \quad \frac{\eta_f}{\eta_{\mathrm{sol}}} = \frac{\pi n_f L^3}{3\left[\ln(1/\varphi_v) + \ln\left(\ln\left(1/\varphi_v\right)\right) + B\right]} \tag{1.14}$$

ここで、η_{sus} は懸濁液のせん断粘度、η_{sol} は溶媒粘度、η_f は繊維による粘度の上昇分、B は繊維の平均的な配向によって決定する定数であり、繊維配向が等方的な場合は $B = -0.6634$、一方向に配向している場合は $B = 0.1585$ である。また、Mackaplow ら [38, 39] は slender body theory を用いて流体相互作用を任意の次数まで計算可能な手法を構築している。しかし、slender body theory が適用できるのはあくまでも繊維の長軸が短軸よりも十分に長いとみなせる範囲までであり、他の繊維との平均距離が繊維の短軸と同程度のオーダーになる場合、slender body theory の近似は正当化することができない。また、理論の適用範囲は繊維が全て同じ方向を向いている場合や繊維座標が固定されている場合等限られた範囲である。よって、繊維同士の衝突等が起きるような濃厚系においては slender body theory で得られる結果は適用することができない。

1.4　繊維懸濁液のシミュレーション手法

上述の通り、理論的に濃厚系における繊維運動を記述することは非常に難しいため、繊維運動を直接計算するシミュレーション手法が多数開発されてきた [2, 40]。繊維懸濁液のシミュレーション手法は大きく分けて 3 つの方法が存在する。一つ目が現象論的粗視化モデルである。この手法では、一様な流動場を仮定し、計算コストを下げるために繊維間の流体力学的相互作用は二体相互作用で近似されている。剛直な繊維の計算において、Yamane ら [41] は潤滑近似を用いて繊維間の短距離相互作用を定式化した。また、Fan ら [42] は Yamane らの計算を拡張し slender body theory を応用して長距離相互作用を取り入れて計算を行った。Sundararajakumar ら [5] は短距離相互作用と繊維間の衝突のみを考慮して計算を行い、流体相互作用のみでは繊維間の衝突は防ぐことができないことを報告している。これらの 3 つの研究では、実験と比較して概ね妥当な粘度の値を再現している一方で、繊維の軌道定数 C_b の分布関数は Stover ら [14] の実験値とは一致しなかった。また、柔軟な繊維の運動を計算するために粒子を繋げて繊維を表現する方法も多数開発されている。Yamamoto ら [43] は繊維を一列の球状粒子の集合体としてモデリングを行う Particle Simulation Model (PSM) モデルを開発した。この時、各粒子は流体や周囲の繊維から力とトルクを受けて運動し、伸びと曲げ、ねじりの 3 種類のバネによって繊維粒子間の相対位置が固定されている。PSM では粒子にかかる力やトルクを決定するために $6N \times 6N$ の行列を解く必要があり計算コストが高くなる。この計算コストの削減のために粒子間の結合方法 [44] やカットオフ長の設定 [45]、各粒子の支配方程式の削減 [46] 等の工夫がなされている。また、Schmid ら [47] は繊維の平衡状態の形状や柔軟性、摩擦が繊維の凝集状態に与える影響を系統的に調査している。これらの計算では、流体の運

動を解く必要がないという点で計算コストに優れるが、実際には繊維の存在によって流動場は乱され一様にはならない。また、流体相互作用には Oseen tensor が用いられることが多いが、これは長距離極限において正当化されるものであり、強い近似が行われている。実際に、Lindström ら [48] は、繊維の存在による流動場の乱れによって希薄系においても繊維の回転周期が変化することを示しており、より正確な繊維運動を得るためには流体の運動を適切に評価する必要がある。

二つ目のシミュレーション手法は格子法によって直接的に流れ場を計算するアプローチである。この手法では有限差分法 [48–51] や Lattice-Boltzmann 法 [52, 53] などの格子法を用いて流体の流れ場を Navier-Stokes 方程式に基づいて計算し、そこから得られる流体力を繊維の運動方程式に取り込んでいる。Lindström ら [48, 50, 51] は、流動場の計算によって長距離相互作用を考慮した上で、Yamane らと同様の表式の短距離相互作用や繊維間の斥力、摩擦を取り入れた計算を行った。彼らの計算では繊維の回転軌道定数の分布関数や粘度、第一法線応力について実験と比較して概ね妥当な結果を与えている。配向分布関数や C_b についての議論から、繊維配向に対する濃度についての寄与は小さく、それよりも繊維のアスペクト比が与える影響の方が顕著であるということを示唆している。興味深い結果として、体積分率が 1vol% 付近の非常に希薄な系において摩擦係数を大きくすると繊維の凝集が観測された点である。これは流体相互作用を考慮しなかった Schmid らの研究では観察されなかった結果であり、繊維間に存在する流体に対して十分にせん断がかかっていないことが原因だと推測され、流動場を解いたからこそ得られた結果である。このようにミクロ流体力学的なモデルと比較して実験を再現する結果が得られた一方で、自由表面と含む流れや複雑な流路への適用が難しいというデメリットが存在する。このような流れは、射出成形など繊維懸濁液の応用上重要であるコンポジット材料の成形プロセスに大きく関わる問題である。また、繊維懸濁液のように移動物体を含む流れを解く場合は、メッシュの再生成や固液境界の追跡が必要となるため計算コストが増大してしまう。

三つ目は、後述する Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法 [54] と Moving Particle Simulation (MPS) 法 [55] といった流体粒子法を用いたアプローチである。流体粒子法はその Lagrange 的性質によって流動場を解きつつも、格子法と比較して固体粒子のモデル化が簡便である点に強みを持つ [56]。最も簡単な手法では相対位置を固定して流体粒子の集合として固体を表現するため、固液境界の追跡が不要であり実装も比較的容易である。上述の通り自由表面を含む大変形問題を得意とするため、特にコンポジット材料のプロセスシミュレーションへの応用が盛んである。Yashiro ら [57, 58] は、短繊維の射出成形シミュレーションに対して初めて MPS 法を適用した。SPH 法に関しては、繊維を二粒子で表現した計算 [59] や、非ニュートン流体モデルを用いた射出整形シミュレーション [60, 61]、新しい繊維の配向手法の検証計算 [62] が提案されている。また、繊維を粉体解析でよく使用される離散要素法 (Discrete Element Method: DEM) [63] を用いて表現し、周囲流体を SPH 法で解く手法も提案されている [64, 65]。より学術的な計算としては、流路中の柔軟な繊維のダイナミクスを解析した計算 [66] や、濃厚系の計算 [67] も行われている。これらの計算では、複雑流路における繊維配向をおおよそ予測できているが、1.3.1 項で述べたような単一繊維のダイナミクスに関する検証計算が不十分であり、詳細な繊維運動解析に対する信頼性は不足しているものと考えられる。

1.5　流体粒子法とは

連続体解析では図 1.4 に示すように大きく分けて二種類の手法が用いられる [68]。格子法 (有限差分法や有限要素法) は広く用いられている解析手法であり、計算領域をメッシュで分割し、結節点上に物理量を定義する。そして、解くべき支配方程式を結節点間の相互関係を記述する代数方程式に離散化し、物理

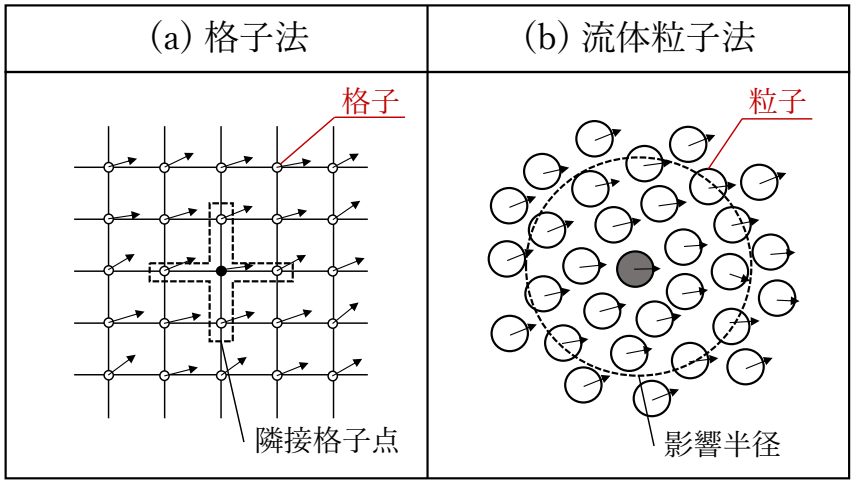


図 1.4: 格子法と粒子法の概念図

量の時間 · 空間変化を追う。一方、流体粒子法は連続体解析の手法の一つであり、系内の流体や固体を複数の粒子の集合として空間の離散化を行う。この時、各粒子は速度や圧力といった物理量を保持しており、影響半径内に存在する近傍粒子との相互作用を受けて支配方程式となる偏微分方程式を再現するように各粒子の運動が計算される。計算対象が Newton 流体の場合は支配方程式は以下に示す Navier-Stokes 方程式となる。

$$\frac{D\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P(\boldsymbol{r},t) + \nu\nabla^2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t) + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{r},t) \tag{1.15}$$

ここで、D/Dt は物質微分、$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)$ は速度場、ρ は質量密度、$P(\boldsymbol{r},t)$ は圧力、ν は動粘性係数であり、$\boldsymbol{f}$ は単位質量あたりの外力である。このような Lagrange 的な手法は格子法のような Euler 的な手法と比較して以下の二つのメリットが挙げられる。一つは数値的不安定性の原因となる移流項の計算が不要となることである。もう一つは、連続体を移動可能な計算点として離散化するため大変形の表現や境界面の取り扱いが容易であることである。このような背景から、自由表面のある流れや気液・固液混相流、船舶や津波の解析等幅広い用途に応用されている [69–71]。

流体粒子法の代表的な手法として SPH 法 [54] と MPS 法 [55] が挙げられる。SPH 法は元来は宇宙物理の分野で使用されていた圧縮性流体解析のための手法であり、Monaghan [72] によって初めて擬似非圧縮性流体に対しても適用された。一方で MPS 法は、非圧縮性流体の流れ場を計算するためのアルゴリズムである SMAC 法 [73] を用いて開発された手法である。両者の手法は互いの利点を相互に輸入し合いながら発展を続けており、流体計算という観点では現時点においてその違いは微分演算子の計算方法を除けばほとんどないと言ってよい。SPH 法では空間上のある点 $\boldsymbol{x}$ における物理量は $\boldsymbol{x}$ 近傍の粒子の積分補完として定義され、物理量の空間微分は同様に積分補完に使用した kernel 関数の微分として定義される。[69]。一方で、MPS 法では物理量は粒子上のみに存在すると定義され、物理量の空間微分に対して粒子間相互作用モデルを適用する。この時、空間の一階微分演算子と二階微分演算子がそれぞれモデル化されるため、微分演算子の数学的一貫性を欠く一方で SPH 法で必要となる非物理的な粘性の導入を避けることができる [68]。本研究では、固液混相流に対して流体粒子法を適用する。SPH の思想に忠実に従うならば物理量を積分補間する関係上、システム全体を単一の支配方程式で記述する必要がある。一方で固体と流体の運動方程式は一般のシミュレーションでは異なるものと認識されているため、粒子上にのみ物理量が定義される MPS 法に着目して論を進めていく。

MPS 法の開発当初からの問題としてあげられるのは数値的な不安定性である。特に圧力項は粒子数密度を一定にするための拘束力という役割を果たすため、システム中の粒子配置が乱れると圧力擾乱が生じてしまうことが報告されている [68]。また、MPS 法の演算子は近傍粒子が格子状に配置されていることを前提としており、乱雑な粒子配置においては空間の一次精度すら保証されない [74]。こういった計算の安定性や空間微分の精度向上を目指して高精度粒子法と呼ばれる改善手法が数多く提案されている。前者の安定性については Xu らの Particle Shifting 法 [75] など粒子の非等方的な粒子配置を修正する手法が提案されている。また、Matsunaga ら手法のように圧力の評価方法を工夫する方法 [76] や弱圧縮性を許容することで陽解法型の MPS 法の開発 [77, 78] が行われている。また、後者の微分演算子については、修正行列を用いて非等方的な粒子配置に対しても一次精度を保証する手法も開発されている [79]。同様に Tamai ら [80] によって開発された Least Squares MPS (LSMPS) 法では非等方的な粒子配置に対応し、なおかつ粒子数の増加に伴う計算精度の向上が保証されており、現状最も計算精度の高い流体粒子法だと考えられる。このように計算精度や安定性において進歩が見られる一方で、数値誤差の定量的な解析ができない点 [81, 82] や可変解像度への対応は現状でも課題である [83]。また、固液混相流に限ると異なる相間における運動量保存性や、膜や本研究で取り扱う繊維といったアスペクト比の大きな固体の取り扱い方法に関しても更なる改善が必要である。

1.6　流体粒子法による繊維懸濁液のシミュレーション

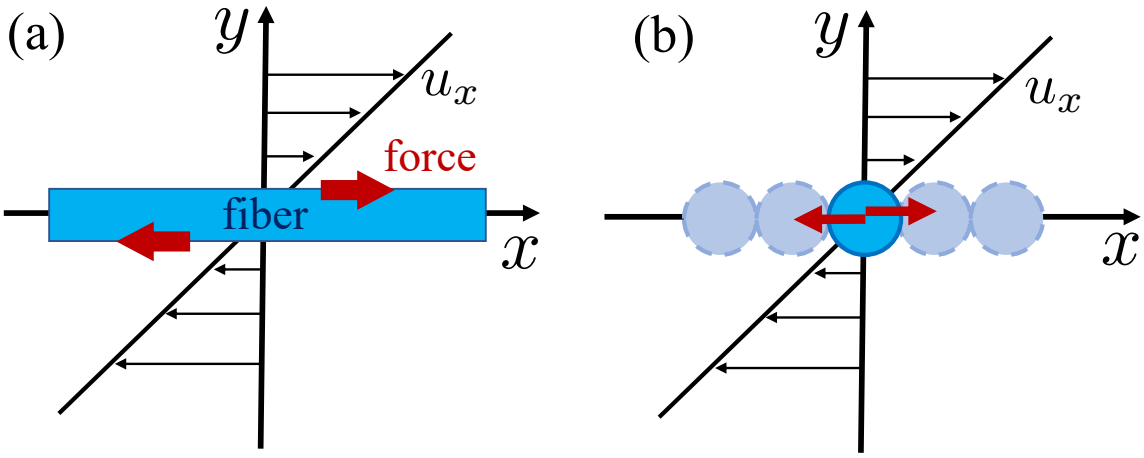


図 1.5: (a) 現実系において繊維が流動方向 (x 軸) を向いた際の概念図。v_x は流動方向の速度を示す。(b) 流体粒子法において繊維が流動方向に配向した際の概念図。繊維は流体粒子の一列の集合として表現され、各粒子には中心力のみが働く。

前節で述べた流体粒子法のシミュレーションでは、計算コストの削減のために繊維は一列の流体粒子の集合として表現されることが多い。しかし、この繊維モデルは大きな問題を孕んでいる。図 1.5 のようにせん断流動下において、繊維が流動方向 (x 軸方向) に配向した場合を考える。現実系では繊維には厚みが存在するので図 1.5 (a) において繊維の上下の面に逆向きの力がかかり、繊維全体のモーメントがかかる。よって、繊維はせん断流動下において第 1.3.1 項項で記述したような周期的な回転運動を行う。一方で、流体粒子法で取り扱う粒子は計算点であり中心力のみが働くため、上下の面にかかるはずの力が相殺される。つまり、繊維の「厚み」を表現することができないため繊維は流動方向に配向したまま静止して

しまう。この問題の解決のために Meyer ら [67] は SPH 法において、繊維表面における粘性摩擦由来のトルクを固体粒子の運動に取り入れる手法を提案した。しかし，粒子法では導出の際に仮定した固体表面における粘着条件は満たされない他、流体粒子への反作用が考慮されていない。その結果、繊維が流動方向に配向した際に静止してしまうアーティファクトは解消されたが、Jeffery の解と比較して繊維の角速度を過剰に評価している。また，多数の粒子を用いて直接的に繊維の厚みを表現する手法でも問題を解決可能だが、繊維濃度が高い系において計算コストが増大するため高度な並列化等の多大な労力を要する。以上より，計算コストの観点から繊維を一列の粒子の集合として表現することが望ましいが、その上で正しい繊維運動を再現できている手法はまだ存在しない。

1.7　本研究の目的

本研究では、MPS 法を用いた繊維懸濁液の新規シミュレーション手法の構築を行う。本手法では、繊維を一列の粒子の集合のままモデル化するために、構成粒子に対して回転自由度を導入するというアイデアを採用する。この時、固体–流体間の作用・反作用を満たすために、後述する micropolar fluid モデル [84] を用いて回転自由度を導入する。このようなモデル化によって、物理的に妥当でかつ最小の粒子数で計算可能な繊維モデルを構築することが目的である。

本論文は以下のように構成される。第 2 章では、本研究で開発した micropolar-MPS 法 [85] の概要について述べる。第 3 章では、構築したシミュレーションコードの妥当性を検証するために、Couette 流れとせん断流動中の単一の固体粒子の回転流れについて理論解との整合性を議論する。第 4 章では、単一の繊維の回転運動を計算し、その結果を Jeffery 理論 [17] と比較することで本モデルの妥当性や特性を検証する。第 5 章では、濃厚系における繊維配向や粘度を計算し、回転自由度の有無や繊維の初期配向が結果にどのような影響を与えるかを調査する。第 6 章では、本モデルで得られる繊維配向や粘度、計算コストを先行研究と比較し、本モデルの立ち位置を確認する。また、本モデルの展望についても述べる。

第 2 章

シミュレーションモデル

2.1 回転自由度の導入

MPS 法において、繊維を一列の粒子の集合としてモデル化することを考える。この表現方法で繊維の回転運動を再現するためには、Yamamoto らが開発した PSM [43] のように繊維を構成する粒子に回転自由度を導入する方法が有効である。繊維を構成する固体粒子が回転自由度を持つということは、 (1) 周囲の流体粒子の並進運動によって生じる固体粒子のトルク、 (2) 固体粒子の回転が及ぼす周囲の流体粒子の力、の二つを定式化する必要がある。これらは現実系の繊維であれば固体表面における流体力を面積分することで得られるが、粒子法では明確な固液境界が定義できないため、このような操作は行えない。同様に構造体の「厚み」が問題となる薄肉弾性体の分野では、シェルモデル [86] が応用されている。シェルモデルでは弾性体を構成する固体粒子の中間位置に角速度の自由度を持つ master point を配置して計算を行う。しかし、今回考える繊維モデルのように一次元的なモデルでは精度が下がる他、結局のところ固体粒子が受けるトルクは定式化されていない。また、回転自由度を含む固体粒子の表現方法として考えられるのは DEM を使用する方法である。固体粒子のサイズが流体粒子よりも大きい場合についてはそれぞれの運動を別の離散化空間上で解き、固相粒子と液相粒子が重なった部分について運動量を投影することでトルクを定式化できる [68]。しかし、この方法は流体粒子の解像度を上げる操作に相当し、全体の粒子数が増加するため計算コストが増大する他、本研究で考えるような固相粒子と液相粒子のサイズが同じ場合については適用できない。よって、我々の知識が及ぶ範囲では、流体粒子法においてこのような固体粒子の回転と流体粒子の並進運動のカップリングを実現した手法は存在しない。

粒子法は場を粒子の集合として離散化する偏微分方程式の解法であるという原点に立ち返ると、仮に回転自由度を導入した連続体モデルが存在しそれを流体粒子法で離散化を行えば原理的には MPS 法に回転自由度を導入することが可能である。本研究では、そのようなモデルとして、局所構造を持つ流体の理論である micropolar fluid モデル [84] に着目した。micropolar fluid モデルは回転の自由度として角速度場 $\mathbf{\Omega}$ を導入した流体力学の拡張理論である。例えば、血管中の血液のように流路幅と流体を構成する粒子や分子サイズのオーダーが近くなると、連続体近似の精度が下がり Navier-Stokes 方程式では再現できないような現象が生じる。こういった場合に micropolar fluid モデルは有効である [87]。また、micropolar fluid モデルを応用し、繊維懸濁液自体を連続体としてみなすモデル [88, 89] も提案されている。粒子法では、流体粒子の渦を再現するために主に Computer Graphics (CG) の分野で応用されている他 [90, 91]、SPH 法を用いて micropolar fluid の数値計算を行った研究も存在する [92]。micropolar fluid モデルでは角速度と並進速度のカップリング項が存在し、その項によって固体の回転運動と流体の並進運動を結びつけることができる。

2.2 Micropolar fluid モデル

micropolar fluid モデルでは回転自由度として角速度場 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{r},t)$ が定義され、以下のように Navier-Stokes 方程式を拡張した形で支配方程式が定義される [84]。

$$\frac{D\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P(\boldsymbol{r},t) + \nu\nabla^2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t) + \nu_r\nabla\times\boldsymbol{\Upsilon}(\boldsymbol{r},t) + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{r},t), \tag{2.1}$$

$$\mathcal{I}\frac{D\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{r},t)}{Dt} = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{r},t) - \nu_r\boldsymbol{\Upsilon}(\boldsymbol{r},t). \tag{2.2}$$

ここで、ν_r は回転動粘性係数、$\boldsymbol{\Upsilon}(\boldsymbol{r},t) = 2\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{r},t) - \nabla\times\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)$、$\mathcal{I}$ はマイクロ慣性係数であり $\boldsymbol{G}$ は外場によるトルク密度である。micropolar fluid モデルには一般に角速度の拡散を記述する輸送係数が表れるが、本研究では簡単のためにそれらは 0 としている。熱力学第二法則より、ν_r は以下の範囲で定義されるモデルパラメータである [92]。

$$0 \le \nu_r \le \left(1 + \frac{2}{d}\right)\nu. \tag{2.3}$$

ここで、d は空間次元である。micropolar fluid モデルは、Onsager の相反定理や作用 · 反作用の法則、また散逸性も満たしており、最低限流体に必要な条件は揃っている。ただし、相反定理の際の行列の非対角項は 0 であるので並進と回転の自由度は真にカップルしているわけではない。

回転自由度のない通常流体の角速度場は $\boldsymbol{\Omega} = (\nabla\times\boldsymbol{u})/2$ と計算される [92]。これを式 (2.1) に代入すると通常の Navier-Stokes 方程式に帰着することが分かる。よって、本研究では、液相領域の角速度場は $\boldsymbol{\Omega} = (\nabla\times\boldsymbol{u})/2$ と設定し、固相領域については式 (2.2) に従って時間発展を計算することとする。

2.3 explicit MPS 法

本研究では計算コストや圧力擾乱を防ぐために explicit MPS (EMPS) を採用する [77, 78]。MPS 法では、計算領域を N 個の粒子の集合体として離散化を行い、物理量は各粒子上に定義される。MPS 法は Lagrange 描像に基づく手法であるため、式 (2.1) と式 (2.2) 左辺の物質微分は単純な時間微分になる。これより、構成粒子 i の支配方程式は以下のように書ける。

$$\frac{d\boldsymbol{u}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i}\langle\!\langle\nabla P\rangle\!\rangle_i + \frac{1}{\mathrm{Re}}\langle\!\langle\nabla^2\boldsymbol{u}\rangle\!\rangle_i + \frac{1}{\mathrm{Re}_r}\langle\!\langle\nabla\times\boldsymbol{\Upsilon}\rangle\!\rangle_i + \boldsymbol{f}_i, \tag{2.4}$$

$$\frac{d\boldsymbol{\Omega}_i}{dt} = \alpha\boldsymbol{G}_i - \frac{2\alpha}{\mathrm{Re}_r}\boldsymbol{\Upsilon}_i, \tag{2.5}$$

$$\boldsymbol{\Upsilon}_i = 2\boldsymbol{\Omega}_i - \langle\!\langle\nabla\times\boldsymbol{u}\rangle\!\rangle_i. \tag{2.6}$$

ここで、$\langle\!\langle\rangle\!\rangle$ は後述する MPS 法における演算子モデルを適用して得られる量を示している。式 (2.4) と式 (2.5) は、流体の質量密度 ρ_0、基準動粘性係数 ν_0 と流体粒子のサイズ l_0 の三つの物理量によって無次元されている。ここで、ν_0 は動粘性係数の任意の参照値であり、l_0 はシステムを離散化する際の特徴的な長さであり、有限差分法におけるメッシュサイズに相当する。この三つの物理量によって長さ、時間、エネルギーの単位が定義され、これ以降に示す物理量は全て上記の三つの物理量によって無次元されている。$\mathrm{Re} = \nu_0/\nu$ は Reynolds 数であり、$\mathrm{Re}_r = \nu_0/\nu_r$ は回転 Reynolds 数で α は $\alpha = l_0^2/\mathcal{I}$ と定義される定数である。SPH 法における micropolar fluid モデル [92] と同様に、本モデルにおいても並進速度 $\boldsymbol{u}_i$ 及び角速度 $\boldsymbol{\Omega}_i$ は構成粒子 i 上で定義される。

本モデルでは、固体粒子は角速度 $\boldsymbol{\Omega}_i$ を持つ micropolar fluid 粒子であり、式 (2.4) と式 (2.5) に従って運動を計算する。流体粒子の運動は、以下に示す通常の Navier-Stokes 方程式 (式 (1.15)) を離散化した式に周囲の固体粒子から受ける式 (2.4) の右辺第三項の反作用を加えた式によって駆動される。

$$\frac{d\boldsymbol{u}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i}\left\langle\!\left\langle \nabla P \right\rangle\!\right\rangle_i + \frac{1}{\mathrm{Re}}\left\langle\!\left\langle \nabla^2 \boldsymbol{u} \right\rangle\!\right\rangle_i + \boldsymbol{f}_i. \tag{2.7}$$

式 (2.4) の右辺第一項と第二項はそれぞれ圧力勾配項と粘性項であり、通常の Navier-Stokes 方程式と共通の項である。本モデルにおいては、式 (2.4)、 (2.5) における角速度 $\boldsymbol{\Omega}$ と渦度 $\nabla \times \boldsymbol{u}$ の差分項 $\boldsymbol{\Upsilon}_i$ が重要な役割を果たす。式 (2.4) の右辺第三項は、固体粒子の回転運動によって生じる周囲流体への寄与を示し、式 (2.2) の右辺第二項は、流れ場によって生じる固体粒子の粘性トルクを示す。これらの項によって、固体粒子の回転と流体粒子の並進運動を作用 · 反作用を満たす形で実現することができる。

MPS 法において、粒子 i における物理量やその空間微分を計算するためには重み関数が必要である。MPS 法では一般に、以下の重み関数 $w(r)$ が使用される [93]。

$$w(r) = \begin{cases} l_c/r - 1 & (0 < r < l_c) \\ 0 & (r \geq l_c) \end{cases}. \tag{2.8}$$

ここで、 l_c は影響半径と呼ばれ、影響半径内に存在する粒子と相互作用を計算する。流体の局所的な密度は、上述の重み関数を用いて計算される粒子数密度 n_i で評価する。

$$n_i = \sum_{j \neq i}^{N} w\left(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|\right). \tag{2.9}$$

この粒子数密度 n_i と質量密度 ρ_i は、流体粒子の質量 m と影響半径内の体積 V_e を用いて以下のように書ける。

$$\rho_i = \frac{m n_i}{V_e}. \tag{2.10}$$

EMPS 法では粒子 i 上におけるスカラー量 ψ の勾配、ベクトル量 $\boldsymbol{b}$ の回転、Laplacian を以下のように定義する [68,77]。

$$\left\langle\!\left\langle \nabla \psi \right\rangle\!\right\rangle_i = \frac{d}{n_0}\sum_{j \neq i}\left[\frac{\psi_i + \psi_j}{|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|^2}(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) w\left(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|\right)\right], \tag{2.11}$$

$$\left\langle\!\left\langle \nabla \times \boldsymbol{b} \right\rangle\!\right\rangle_i = \frac{d}{n_0}\sum_{j \neq i}\left[\frac{(\boldsymbol{b}_j - \boldsymbol{b}_i) \times (\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i)}{|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|^2}(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) w\left(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|\right)\right], \tag{2.12}$$

$$\left\langle\!\left\langle \nabla^2 \boldsymbol{b} \right\rangle\!\right\rangle_i = \frac{2d}{\lambda n_0}\sum_{j \neq i}\left[(\boldsymbol{b}_j - \boldsymbol{b}_i) w\left(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|\right)\right], \tag{2.13}$$

$$\lambda = \frac{\sum_{j \neq i}(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i)^2 w\left(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|\right)}{\sum_{j \neq i} w_2\left(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|\right)}. \tag{2.14}$$

また、n_0 は初期配置における粒子数密度、λ は Laplacian モデルの統計的な分散を解析解と一致させるためのパラメータである [94]。式 (2.11) では、運動量保存性を改善するために一般的な MPS 法で使用される $\psi_j - \psi_i$ ではなく、$\psi_i + \psi_j$ を使用する [77]。第 1.5 節で述べたように、上記の演算子モデルは周囲の粒子が格子状に配置していることを前提としているため、実際の計算では離散化由来の誤差が乗ることに注意が必要である。非等方的な粒子配置に対しても一次精度を保つためには修正行列を用いる方法 [79] や LSMPS [80] が有効である。

式 (2.9) の粒子数密度の計算および式 (2.11) ~ (2.13) の勾配演算子の計算の際には着目する粒子 i の影響半径内に存在する近傍粒子 j を探索する必要がある。単純には粒子 i について N 回、各回のループに

おいてその他の $N-1$ 個の粒子との距離を計算し 2 粒子間の距離を計算することで近傍粒子を探索する。しかし、この時の計算コストは N^2 に比例し、三次元計算のように数万以上の粒子を使う場合は計算コストが激増してしまう。そこで、MPS 法では一般にセルリストを用いることで計算コストを $N^{1.5}$ のオーダーに下げている [94]。本研究でもセルリストを用いて計算の効率化を図った。実装は越塚ら [93] の著書および Allen らの著書 [95] を参考に行った。

2.4　繊維モデル

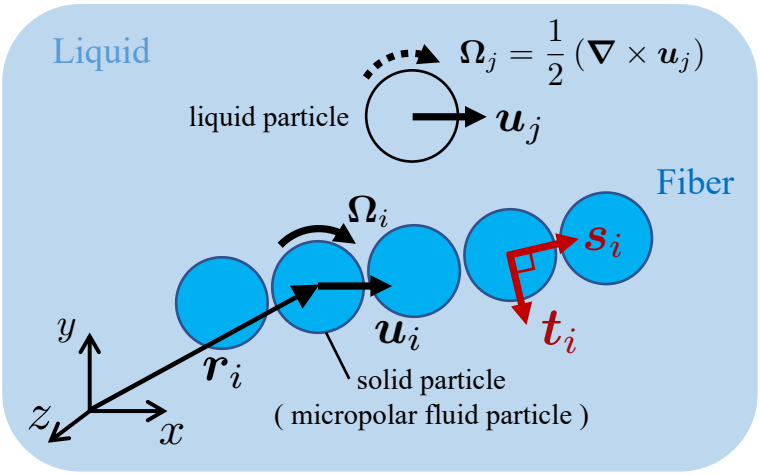


図 2.1: 本手法の概念図。繊維は速度 $\boldsymbol{u}_i$ と角速度 $\boldsymbol{\Omega}_i$ を持つ micropolar fluid 粒子によって構成される。液体粒子は角速度が $\boldsymbol{\Omega}_j = (\nabla \times \boldsymbol{u}_j)/2$ と固定された micropolar fluid 粒子として表現される。

本モデルにおいて、繊維は図 2.1 に示すように固体粒子の一列の集合として表現される。繊維を表現するために、Yamamoto らの PSM [43] と同様に固体粒子を伸び、曲げ、捻りのポテンシャルを用いて結合する。これらのポテンシャル力は、隣接粒子とのボンドベクトル $\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i$ 及び各固体粒子の方向を示す量の関数である必要がある [96]。固体粒子の方向を定義するために、本研究では各固体粒子上に二つのダイレクター $\boldsymbol{s}_i$ と $\boldsymbol{t}_i$ を定義する。このように、二本のダイレクターを定義することによって、粒子の三軸周りの回転を表現することが可能になる。図 2.1 に示す通り、$\boldsymbol{s}_i$ はボンドベクトルに並行な方向を向き、$\boldsymbol{t}_i$ はボンドベクトルに対して垂直な方向を向く単位ベクトルである。二つのダイレクターの時間微分は角速度とそれぞれ以下のような関係にある。

$$\frac{d\boldsymbol{s}_i(t)}{dt} = (\mathbf{1} - \boldsymbol{s}_i\boldsymbol{s}_i)\cdot(\boldsymbol{\Omega}_i \times \boldsymbol{s}_i)\,, \quad \frac{d\boldsymbol{t}_i(t)}{dt} = (\mathbf{1} - \boldsymbol{t}_i\boldsymbol{t}_i)\cdot(\boldsymbol{\Omega}_i \times \boldsymbol{t}_i)\,. \tag{2.15}$$

ここで、射影行列 $(\mathbf{1} - \boldsymbol{s}_i\boldsymbol{s}_i)$, $(\mathbf{1} - \boldsymbol{t}_i\boldsymbol{t}_i)$ は、数値誤差によって角速度ベクトル $\boldsymbol{\Omega}_i$ とダイレクターの直交関係が崩れることを防ぐ役割を担っている。式 (2.15) の具体的な導出については、付録 第 A.1 節に示している。

本研究では、結合ポテンシャル U_s、曲げポテンシャル U_b、捻りポテンシャル U_t を以下のように定義

する。

$$U_s\left(\{\boldsymbol{r}_i\}\right) = \sum_{\langle i,j\rangle} \frac{k_s}{2}\left(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i| - 1\right)^2, \tag{2.16}$$

$$U_b\left(\{\boldsymbol{r}_i\},\{\boldsymbol{s}_i\}\right) = \sum_{\langle i,j\rangle} \left[\frac{k_b}{2}\left(\boldsymbol{s}_j - \boldsymbol{s}_i\right)^2 - \frac{k_r}{2}\left\{\left(\boldsymbol{s}_i\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right)^2 + \left(\boldsymbol{s}_j\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_{ji}\right)^2\right\}\right], \tag{2.17}$$

$$U_t\left(\{\boldsymbol{t}_i\}\right) = \sum_{\langle i,j\rangle} \frac{k_t}{2}\left(\boldsymbol{t}_j - \boldsymbol{t}_i\right)^2. \tag{2.18}$$

ここで、k_s, k_b, k_r, k_t はバネ定数、$\hat{\boldsymbol{r}}_{ij} = \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right)/|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|$、$\langle i,j\rangle$ は二つの隣接する粒子の組を示す。上記のポテンシャルは図 2.1 のように、繊維の変形がなければ全固体粒子のダイレクター $\boldsymbol{s}_i$ が繊維の方向ベクトル $\boldsymbol{p}$ と一致するように設計されている。上式のポテンシャルは、Kuzkin ら [96] によって定式化された vector-based モデルに従った形式となっている。vector-based モデルでは、隣接粒子とのボンドベクトル $\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i$ や固体粒子上に定義されたダイレクターを用いて結合ポテンシャルを定義し粒子を結合することで、全ての変形を考慮した任意形状の固体を表現できることが保証されている。

ポテンシャル力 $\boldsymbol{f}_i$ とトルク $\boldsymbol{G}_i$ は以下のように計算される。

$$\boldsymbol{f}_i = -\frac{\partial\left(U_s + U_b\right)}{\partial \boldsymbol{r}_i}, \quad \boldsymbol{G}_i = \boldsymbol{s}_i \times \left(-\frac{\partial U_b}{\partial \boldsymbol{s}_i}\right) + \boldsymbol{t}_i \times \left(-\frac{\partial U_t}{\partial \boldsymbol{t}_i}\right). \tag{2.19}$$

実際に、得られる拘束力と拘束トルクの具体形は以下の通りである。

$$\boldsymbol{f}_i = k_s(r_{ij} - l_0)\hat{\boldsymbol{r}}_{ij} + \frac{k_r\left(\boldsymbol{s}_i\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right)}{|\boldsymbol{r}_{ij}|}\left[-\boldsymbol{s}_i + \left(\boldsymbol{s}_i\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right)\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right] + \frac{k_r\left(\boldsymbol{s}_j\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right)}{|\boldsymbol{r}_{ij}|}\left[-\boldsymbol{s}_j + \left(\boldsymbol{s}_j\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right)\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right], \tag{2.20}$$

$$\boldsymbol{G}_i = \boldsymbol{s}_i \times \left[k_b(\boldsymbol{s}_j - \boldsymbol{s}_i) + k_r(\boldsymbol{s}_i\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_{ij})\hat{\boldsymbol{r}}_{ij}\right] + \boldsymbol{t}_i \times k_t(\boldsymbol{t}_j - \boldsymbol{t}_i). \tag{2.21}$$

式 (2.16) より、バネ定数 k_s の値が十分に大きければ繊維長 L は一本の繊維を構成する固体粒子の数に一致する。また、系の単位長さが流体粒子のサイズと一致しているので、繊維のアスペクト比 r_p は L と一致する。

本手法では繊維間の相互作用として、直接の接触や排除体積効果を露には考慮していない。仮に 2 本の繊維が互いに隣接する場合を考える。この時、隣接する繊維を構成する固体粒子間に働く相互作用は式 (2.4) における圧力勾配項と粘性項、そして角速度 $\boldsymbol{\Omega}$ と渦度の差分項である。粘性項と圧力勾配項に基づく流体力ははそれぞれ接触摩擦や排除体積効果と同様の役割を果たし、角速度と渦度の差分項は回転摩擦と同様の寄与を与える。一方で、これらの項は micropolar fluid モデルの支配方程式が由来である「流体相互作用」であり、実際の固体間に働く接触力とは全く異なるものであることに注意したい。粒子法で繊維同士の接触をモデル化する場合は Meyer ら [67] の研究を参照いただきたい。

本研究では比較のために回転自由度のない従来の MPS 法を用いた繊維の計算も行う。この場合の支配方程式は、液体・固体粒子ともに式 (1.15) を式 (2.11) ~ (2.13) の演算子モデルを用いて離散化したものである。固体粒子間に働くポテンシャルは、式 (2.16) に示した結合ポテンシャル U_s と曲げポテンシャルとして $U_b = \sum_{\langle i,j\rangle} k_b(1+\cos\Phi)$ を使用する。ここで、 Φ は隣り合う三つの固体粒子がなす角度である。

2.5　数値計算アルゴリズム

EMPS 法では、通常の半陰解型の MPS と同様に fractional step アルゴリズムを用いて 2 段階に分けて時間発展を計算する。第一段階では、式 (2.4) の圧力勾配項以外の項を用いて中間速度 $\boldsymbol{u}_i^*$ を計算し、

固体粒子の角速度場式 (2.5) に従って以下のように時間発展を計算する。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_i^* &= \boldsymbol{u}_i^k + \Delta t\left[\frac{1}{\mathrm{Re}}\left\langle\!\left\langle\nabla^2\boldsymbol{u}\right\rangle\!\right\rangle_i^k + \frac{1}{\mathrm{Re}_r}\left\langle\!\left\langle\nabla\times\boldsymbol{\Upsilon}\right\rangle\!\right\rangle_i^k + \boldsymbol{f}_i^k\right],\\
\boldsymbol{\Omega}_i^{k+1} &= \boldsymbol{\Omega}_i^k + \Delta t\alpha\left[\boldsymbol{G}_i^k - \frac{2}{\mathrm{Re}_r}\boldsymbol{\Upsilon}_i^k\right],\\
\boldsymbol{\Upsilon}_i^k &= 2\boldsymbol{\Omega}_i^k - \left\langle\!\left\langle\nabla\times\boldsymbol{u}\right\rangle\!\right\rangle_i^k.
\end{aligned}
\tag{2.22}
$$

ここで、Δt は時間刻み幅を示し、右上部のインデックス k は $\psi_i^k = \psi_i(t = k\Delta t)$ のように k 番目のタイムステップを示す。$\boldsymbol{u}_i^*$ と $\boldsymbol{\Omega}_i^{k+1}$ を用いて中間位置 $\boldsymbol{r}_i^*$ と二つのダイレクターを以下のように時間発展させる。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}_i^* &= \boldsymbol{r}_i^k + \Delta t\boldsymbol{u}_i^*,\\
\boldsymbol{s}_i^{k+1} &= \boldsymbol{s}_i^k + \Delta t\left(\boldsymbol{1} - \boldsymbol{s}_i^k\boldsymbol{s}_i^k\right)\cdot\left(\boldsymbol{\Omega}_i^{k+1}\times\boldsymbol{s}_i^k\right),\\
\boldsymbol{t}_i^* &= \boldsymbol{t}_i^k + \Delta t\left(\boldsymbol{1} - \boldsymbol{t}_i^k\boldsymbol{t}_i^k\right)\cdot\left(\boldsymbol{\Omega}_i^{k+1}\times\boldsymbol{t}_i^k\right).
\end{aligned}
\tag{2.23}
$$

第 2.4 節で示した通り、$\boldsymbol{s}_i$ と $\boldsymbol{t}_i$ は常に直交関係を満たす必要があるが、実際には数値計算上の誤差によって位置関係がずれることがある。よって、数ステップに一度、計算した中間位置 $\boldsymbol{t}^*$ に対して射影をとることで、以下のように修正を行う。

$$
\boldsymbol{t}_i^{k+1} = \left(\boldsymbol{1} - \boldsymbol{s}_i^{k+1}\boldsymbol{s}_i^{k+1}\right)\cdot\boldsymbol{t}_i^*. \tag{2.24}
$$

第二段階では、$\boldsymbol{u}_i^*$ と $\boldsymbol{r}_i^*$ を用いて、位置と速度を以下のように更新する。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_i^{k+1} &= \boldsymbol{u}_i^* - \frac{\Delta t}{\rho_i}\left\langle\!\left\langle\nabla P\right\rangle\!\right\rangle_i^{k+1},\\
\boldsymbol{r}_i^{k+1} &= \boldsymbol{r}_i^* + \left(\boldsymbol{u}_i^{k+1} - \boldsymbol{u}_i^*\right)\Delta t.
\end{aligned}
\tag{2.25}
$$

通常の半陰解法型の MPS 法では P_i^{k+1} を得るために、Poisson 方程式を解く必要があり、この圧力計算が計算負荷の大部分を占めていた [93]。一方で、本研究で採用する EMPS 法では以下のように圧力を陽的に計算する [77]。

$$
P_i^{k+1} = \frac{\rho_i c_s}{n_0}\left(n_i^* - n_0\right). \tag{2.26}
$$

ここで、c_s は音速、n_i^* は中間位置 $\boldsymbol{r}^*$ における粒子数密度である。この音速 c_s は媒質中の密度波の伝播速度に相当する。現実の非圧縮性流体は密度変化による圧力が瞬時に場全体へと伝播するため、音速は理想的には ∞ となる。しかし、数値計算上でそのような大きな値を使用すると、わずかな密度変化に対して非常に大きな圧力が発生し、計算が安定しない。よって、c_s は実際の物性値よりも小さな仮想的な値が使用され、この値によってシステムの圧縮性の大小が決定する。システムの圧縮性の大小を測る無次元量として以下に示す Mach 数が存在する。

$$
\mathrm{Ma} = \frac{u_{\mathrm{rep}}}{c_s} \tag{2.27}
$$

ここで、u_{rep} は代表的な流体の流速であり、粒子法の計算では系の最大速度を採用することが多い [93]。Oochi ら [77] の研究では、Mach 数と体積圧縮について調査されている。矩形の水槽に重力下で流体を静置すると、上部の自由表面から水槽の底部に向けて線形に圧力が分布することが知られている。この計算を EMPS 法を用いて計算したところ Ma = 0.2 で底部での密度増加が約 1%、Ma = 0.1 で密度増加が 0.25% という結果を得ている。このように、Mach 数を上げることで流体が圧縮しやすくなり多少の誤差が生じてしまうので、計算の安定性とのバランスで適正な Mach 数を選ぶ必要がある。本研究の設定では自由表面や重力による影響を考慮しないので、もう少し小さな Mach 数が望ましいと考えられる。ただ、

現状では系統的に音速を変化させ、その影響を調べることでしか適正な Mach 数は決定できないものと思われる。

通常、自由表面のある計算においては、自由表面上に存在する粒子の圧力の値を $P_i = 0$ とする境界条件を付与する。したがって、式 (2.26) の計算において、$n_i < n_0$ で $P_i = 0$ とすることが多い [93]。しかし、本研究では自由表面を考慮しない内部流れであるため負圧を考慮しても何ら問題はない [97]。本研究における圧力はあくまでも粒子数密度 n_i を n_0 と比較した際の大小を示す相対値であり、負圧が存在しないと低い密度領域に穴が開く等の不利益が生じてしまう。よって、本研究の計算については負圧を考慮する。ただし、自由表面のある計算に拡張する際には、負圧を導入してはならない。

2.6　時間刻み幅

通常、EMPS 法において時間刻み幅は Courant 条件、音速に関する Courant 条件、拡散項 (粘性項) に関する条件の大きく三つの条件を考慮する [93]。一つ目の Courant 条件は、本来は Navier-Stokes 方程式における移流項 ($(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}$) の数値安定性を担保するための条件である [68]。MPS 法においては、粒子間距離 ($l_0 = 1$) と一ステップにおける最大移動距離 $u_{\max}\Delta t$ の比 $C = u_{\max}\Delta t$ を Courant 数として定義する。ここで、$u_{\max}$ はシステム中流体粒子の最大速度である。Courant 数 C が取りうる値の範囲は経験的に 0.2 以下となっている [93]。すなわち、一ステップあたりの各流体粒子の移動量は粒子サイズの 0.2 倍以下に制限されている。今回のシステムでは壁速度 u_{wall} がシステムの最大速度と期待されるため、Courant 条件に基づく時間刻み幅の制限は以下の通りである。

$$\Delta t \leq \frac{0.2}{u_{\mathrm{wall}}} \tag{2.28}$$

二つ目の条件は音速 c_s を用いて定義される Courant 条件であり、Courant 数が 1.0 以下となるように時間刻み幅を決定することが推奨されている [77]。具体的には以下のように書かれる。

$$\Delta t \leq \frac{1}{c_s} = \frac{\mathrm{Ma}}{u_{\mathrm{wall}}} \tag{2.29}$$

ここで、式 (2.27) の関係式を使用して変形を行った。三つ目の拡散数条件は式 (2.4) における粘性項 (右辺第二項) に関する条件である。本モデルにおいては拡散数は $\Delta t/\mathrm{Re}$ として定義され、経験的にこの拡散数が 0.2 以下となるように Δt を設定することが多い [93]。これより、拡散数条件は以下のように定式化される。

$$\Delta t \leq 0.2\mathrm{Re} \tag{2.30}$$

本研究では液体粒子だけでなく、回転自由度を持つ固体粒子を導入しているため、さらに追加で以下の二つの制限を考慮する。一つはポテンシャルのバネ定数に関する制限である。ここでは最も係数の値が大きくてかつポテンシャル形状が単純な伸びポテンシャル U_s に関する制限を考える。本研究では経験的にバネが単振動した際の周期の 1/10 の値として基準値を取り、具体形は以下に示す通りである。

$$\Delta t \leq \frac{\pi}{5}\sqrt{\frac{m}{k_s}} \tag{2.31}$$

もう一つの条件は式 (2.5) 第二項の安定性に関する条件であり、以下のように書ける。

$$\Delta t \leq \frac{\mathcal{I}}{2l_0^2/\mathrm{Re}_r} \tag{2.32}$$

詳細な導出は、付録 A.2 に記載している。以上の五つの制限を考慮し、本研究では時間刻み幅の最大値 $\Delta t_{\max}$ を以下のように決定する。

$$\Delta t_{\max} = \min\left(\frac{0.2}{u_{\mathrm{wall}}},\quad \frac{\mathrm{Ma}}{u_{\mathrm{wall}}},\quad 0.2\mathrm{Re},\quad \frac{\pi}{5}\sqrt{\frac{m}{k_s}},\quad \frac{\mathcal{I}}{2/\mathrm{Re}_r}\right) \tag{2.33}$$

実際のシミュレーションでは $\Delta t_{\max}$ 以下となるように時間刻み幅を決定する必要がある。

2.7　境界条件

MPS 法では流体粒子の位置や速度を固定することによって、壁を表現する。本研究においてもそれに倣い、図 2.2 に示す通り 3 層の速度を固定した流体粒子を用いて移動壁を表現する。壁粒子は直交格子状に配置する。一般に、流体に接している内側の一層を圧力を計算する壁粒子とし、その他の二層は粒子数密度の計算の際に参照するのみのゴースト粒子として実装されることが多い [93]。半陰解法型の MPS 法において壁面近傍に存在し、近傍粒子にゴースト粒子 j が存在する流体粒子 i を考える。この時ゴースト粒子の相互作用を計算しないということは圧力勾配項が 0 のノイマン境界条件を近似的に付与していることに相当する [93]。半陰解法型の MPS 法では式 (2.11) の $\psi_i + \psi_j$ の部分が $\psi_j - \psi_i$ であることを思い出すと、圧力勾配項が 0 であるということは仮想的に $P_i = P_j$ と置くことに相当する。一方で、本研究のように式 (2.11) の勾配モデルを用いてゴースト粒子を使用する操作は、$P_j = -P_i$ とする操作に相当し非物理的である。また、結果的に壁側から受ける圧力値が小さくなるため繊維が壁を貫通してしまい計算が発散する現象がしばしば観測される場合がある。以上の状況を踏まえて、本研究では三層全てを圧力を計算する壁粒子として実装した。

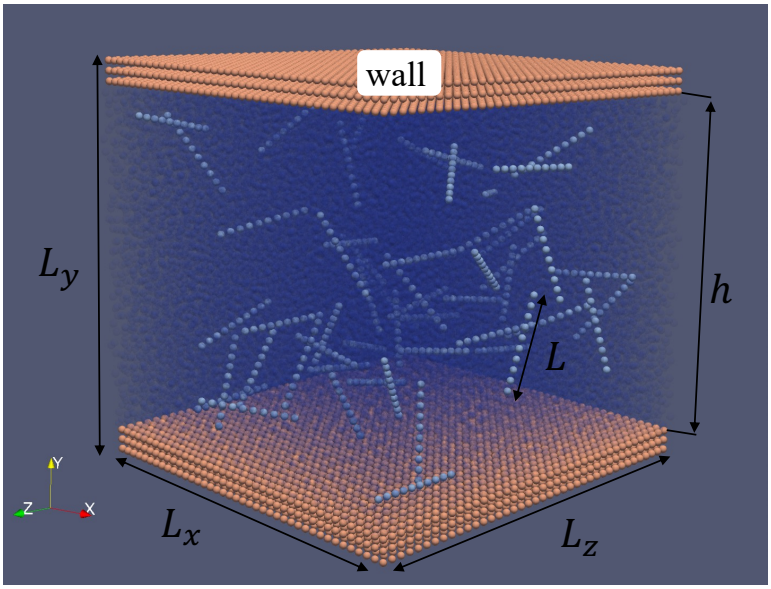


図 2.2: $n_f L^3 = 1.0$ における初期配置の一例。オレンジ色の粒子は壁粒子、水色の粒子は固体粒子、周囲の青色の粒子は流体粒子を示す。

三次元計算では壁粒子の隙間の面積が増えてしまうので、繊維端が壁粒子の隙間に入り込み、壁面領域に侵入してしまう現象が多数観測される。このような貫通を防ぐために、本研究では壁面から 0.5 以内の

距離の粒子に対して以下に示す壁ポテンシャル U_w を適用する。

$$U_w(r_w) = \begin{cases} \epsilon\,(r_w - 0.5) & (0 < r_w < 0.5)\,, \\ 0 & (r_w \geq 0.5)\,. \end{cases} \tag{2.34}$$

ここで、 r_w は粒子と最近接の壁との距離であり、ϵ 経験的な係数である。図 2.3 に壁ポテンシャル導入時と非導入時の計算結果を重ねて表示したスナップショットを示す。どちらも全く同じ初期配置から壁ポテンシャルの有無以外は同じ条件で計算を行った。図 2.3 より、水色の枠線で囲んだ壁ポテンシャルを導入していない場合の繊維は壁面を貫通しているのに対して、赤色の枠線で囲んだ壁ポテンシャル導入時の繊維は壁面からの反発力によって貫通を防止できていることが分かる。また、通常の壁面最近傍の流体粒子と壁面との距離は圧力勾配項由来の斥力によっておおよそ 1 となる。よって、この U_w が流体粒子の運動に与える影響小さく、繊維の壁面への貫通を防ぐ役割を果たす。

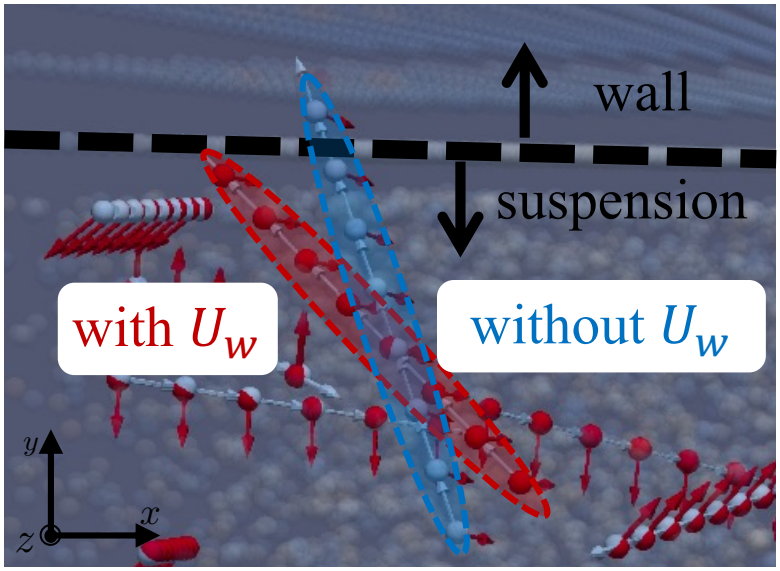


図 2.3: 壁ポテンシャル U_w の有無による壁面近傍の繊維運動の変化。水色の粒子で構成される繊維は $U_w = 0$ の計算結果であり、赤色の粒子で構成される繊維は U_w を導入した計算結果。各粒子の水色の矢印はダイレクター $\boldsymbol{s}$ を示し、赤色の矢印はダイレクター $\boldsymbol{t}$ を示す。

本研究では移動壁を用いてせん断流を印加する。図 1.3 に示すように、x, y, z 方向をそれぞれ流動方向、せん断勾配方向、渦度方向と定義する。また、図 2.2 に示す通り、各軸のシステムサイズを L_x, L_y, L_z とする。この時、x と z 軸方向には周期境界条件を適用し、$y = 0$、$y = h$ の位置に壁を設置する。Yashiro ら [58] の研究と同様に上下の壁をそれぞれ $u_{\mathrm{wall}} = \dot{\gamma}h/2$ の速度で逆向きに移動させる。ここで、$\dot{\gamma}$ はひずみ速度である。

2.8　初期配置

MPS 法の初期配置は、粒子を格子状に配置することが多い。格子状配置の利点は簡単に「平衡」な初期配置を生成できることにある。ここで言う「平衡」とは静的状態において、粒子の再配置が生じない状態、すなわち粒子数密度がほぼ一定となっている状態を指す。一方で、曲線を含む形状や、本研究のように多数のランダムな方向を向いた繊維が流体中に存在するシステムを格子状配置で表現するのは難しく、

表現の幅も制限されてしまう。よって、ランダムな粒子配置でなおかつ粒子数密度が概ね一定となるような初期配置生成アルゴリズムが必要となる。Colagrossi ら [98] は SPH 法において、平衡な初期配置を生成する手法を提案した。彼らのアルゴリズムでは、まず、境界粒子の位置を固定した後、内部の流体粒子の位置を以下の支配方程式に基づいて計算する。

$$\frac{d\boldsymbol{u}_i}{dt} = -\frac{2P_0}{\rho_0}\nabla\Gamma_i - \zeta\boldsymbol{u}_i \tag{2.35}$$

$$\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} = \boldsymbol{u}_i \tag{2.36}$$

ここで、P_0 は定常値における流体の圧力、ζ は減衰定数、Γ_i は SPH 法の kernel 関数 $W(r)$ と SPH 粒子の体積 V を用いて $\Gamma_i = \sum_j W(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|)V$ と書ける。Γ_i は MPS 法における粒子数密度 n_i に相当する量である。式 (2.35) 右辺第一項は平衡配置では値が 0 となる項であり、それに右辺第二項に散逸項を加えることで平衡に近い初期配置を得ることができる。

本研究では Colagrossi らの研究を参考に、図 2.2 に示した濃厚系におけるアスペクト比 r_p の N_f 本のランダムな繊維の初期配置を以下のようなアルゴリズムを用いて生成する。

(1) i 番目の繊維の端点の座標 $\boldsymbol{r}_s^{(i)}$ と繊維の配向角 θ_s, ϕ_s $(0 \le \theta_s \le \pi,\ 0 \le \phi_s \le 2\pi)$ をそれぞれ乱数を用いて選び、繊維を構成する j 番目の固体粒子を以下のように配置する。

$$\boldsymbol{r}_j^{(i)} = \boldsymbol{r}_s^{(i)} + j\boldsymbol{p}', \quad \boldsymbol{p}' = \begin{pmatrix} \sin\theta_s\cos\phi_s \\ \sin\theta_s\sin\phi_s \\ \cos\theta_s \end{pmatrix} \tag{2.37}$$

この操作を $j = r_p$ となるまで繰り返す。

(2) r_p 番目の固体粒子がシミュレーション領域内に存在し、壁面領域から距離が 0.5 以上であることを確認する。違反していれば (1) の操作をやり直す。

(3) (1) と (2) を繰り返し、r_p 個の固体粒子で構成される N_f 本の繊維の位置座標を確定させる。

(4) 繊維の凝集を防ぐために、以下のようにモンテカルロ法を用いて繊維間の距離を平均化させる。

(4-a) ある状態 A における系全体のエネルギー E_A を以下のように計算する。

$$E_A = \sum_{j,k>j} U_{jk}, \quad U_{jk} = \begin{cases} 0 & (r_{jk} \ge 1) \\ \frac{1}{2}(r_{jk}-1)^2 & (r_{jk} < 1) \end{cases} \tag{2.38}$$

ここで、$r_{jk} = |\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|$ であり、$\boldsymbol{r}_j, \boldsymbol{r}_k$ は各固体粒子の位置座標である。

(4-b) ランダムに一つの繊維 i を選び、繊維 i を構成する各固体粒子 j の位置座標 $\boldsymbol{r}_j$ に対して以下のように共通の変位を与え $\boldsymbol{r}'_j$ に更新する。

$$\boldsymbol{r}'_j = \boldsymbol{r}_j + \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix} \tag{2.39}$$

ここで、ξ_1, ξ_2, ξ_3 は $-0.5 \le \xi_1, \xi_2, \xi_3 \le 0.5$ を満たす乱数である。

(4-c) 位置を更新した繊維の端点が壁面領域に侵入しているか否かを判定し、違反していれば (4–b) の操作をやり直す。違反していなければこの状態を A' とする。

(4-d) 状態 A' におけるエネルギー E'_A を計算し、$E'_A \le E_A$ であれば状態 A' を採用し、そうでなければ状態 A を採用する。

(4-e) (4–a) から (4–d) までの操作を $E'_A \leq \beta r_p N_f$ となるまで繰り返した。ここで β は経験的な係数であり、本研究では繊維の体積分率 $\varphi_v = r_p N_f / N_{sl}$ (N_{sl} : 固体粒子と流体粒子の総数) に応じて以下のように設定した。

$$\beta = \begin{cases} 0.0001 & (\varphi_v \leq 0.025) \\ 0.001 & (0.025 < \varphi_v \leq 0.05) \\ 0.01 & (0.05 < \varphi_v \leq 0.1) \\ 0.1 & (0.1 < \varphi_v) \end{cases} \tag{2.40}$$

体積分率が高くなるほど、平均的な繊維間距離が近くなりシステムのエネルギー E_A が下がりにくくなるため、β の値が大きくして基準を緩和している。

(5) N_l $(= N_{sl} - r_p N_f)$ 個の流体粒子をシステム中にランダムに配置する。

(6) 繊維を位置を固定し、流体粒子について (4–a) ~ (4–e) と同様の手順でモンテカルロ計算を行い、適度に配置を緩和させる。この時系全体のエネルギー E_A は各流体粒子 i に対して以下のように計算する。

$$E_A = \sum_j^{N_l} \frac{1}{2} (n_i - n_0)^2 \tag{2.41}$$

また、終了条件は経験的に $E_A \leq 100 N_{sl}$ とした。

(7) 壁粒子を上下に 3 層ずつ配置する。その後、繊維の位置を固定し、流体粒子について以下の支配方程式を用いて一定時間位置を緩和させる。

$$\frac{d\boldsymbol{u}_i}{dt} = -\nabla P_i - \zeta' \boldsymbol{u}_i \tag{2.42}$$

$$\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} = \boldsymbol{u}_i \tag{2.43}$$

ここで、$\zeta' = \varepsilon c_s$ であり、ε は 0.001 から 0.005 の値を取る経験的な係数である。

式 (2.26) より圧力は粒子数密度に比例した値となるので、式 (2.35) の右辺第一項と式 (2.42) の右辺第一項は同様の役割を担う。手順 (4) の操作を省き、繊維に対しても式 (2.42) を用いて配置を緩和させることも可能だが、繊維の変形を防ぐためにはバネ定数を大きく取る必要があり、時間刻み幅 Δt を小さくする必要がある。よって、本研究では手順 (4) で簡易的に繊維の位置を緩和することで計算コストの短縮を行う。

第 3 章

シミュレーションの妥当性検証

3.1 流体計算

本研究で作成したシミュレーションコードの妥当性を検証するため、単純せん断流のシミュレーションを行った。y 方向のシステムサイズ L_y を変えて流路幅 h を 25 ~ 75 まで変化させた。動粘性係数は $\nu = 10$ とし、ひずみ速度は $\dot{\gamma} = 0.01$ とした。この時、流路幅基準の Reynolds 数は $\mathrm{Re}_h = 0.5h^2\dot{\gamma}/\nu = 0.3 \sim 2.8$ となる。音速 c_s は、特に言及がない限り Mach 数が $\mathrm{Ma} = 0.5h\dot{\gamma}/c_s = 0.03$ となるように決定した。時間刻み幅は第 2.6 節に示す条件を満たすように $\Delta t = 0.01$ とした。重み関数の影響半径は経験的に $l_c = 3.1$ とした。流体粒子の初期配置は第 2.8 節で述べた通りにランダムに配置した。提示するデータは 3 つ以上の初期配置について平均をとった。

3.1.1 速度プロファイル

本項では、流体の速度プロファイルを示し、Couette 流れの理論解と比較することで、妥当性の検証を行う。x, z 方向のシステムサイズは $L_x = L_z = 40$ である。図 3.1 に定常状態における流動場の一例を示す。ここで、$u_x^* = u_x/u_{\mathrm{wall}}$ は壁速度 u_{wall} で規格化した流動方向 (x 軸方向) の速度であり、$y^* = y/h$ は流路幅 h で規格化した y 座標である。これより、得られた結果は Couette 流れの理論解 $u_x^* = 2(y^* - 0.5)$ [99] とよく一致していることが分かる。

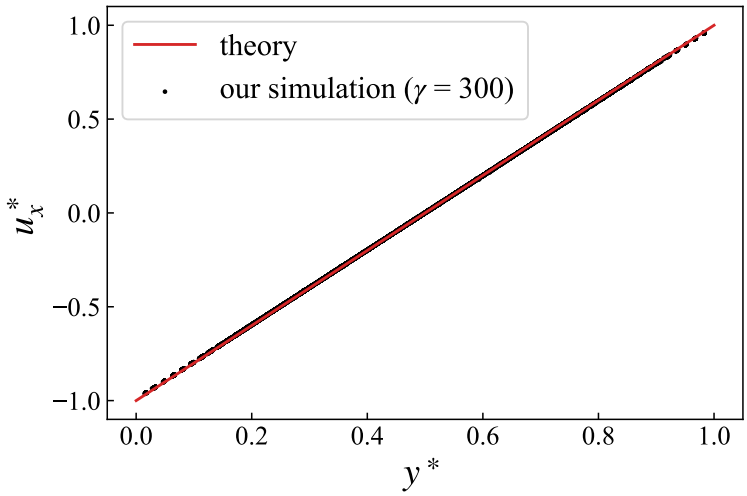


図 3.1: Couette 流の速度プロファイル ($\mathrm{Re}_h = hu_{\mathrm{wall}}/\nu = 1.5$、$h = 55$)。赤線は Couette 流の理論解。

速度プロファイルから計算によって求められたせん断速度の流路幅 h 依存性を図 3.2 に示す。ここで、$\dot{\gamma}^*$ は速度プロファイルから最小二乗法を用いて得られた速度勾配の平均値 $\langle \partial u_x^*/\partial y^* \rangle$ を Couette 流れの理論値 $(\partial u_x^*/\partial y^*)_{\mathrm{ideal}} = 2$ で規格化したひずみ速度である。これより、$h > 40$ であれば計算値 $\dot{\gamma}^*$ の理論値との誤差は 1% 以内となることが分かる。先行研究 [58, 100] と比較しても、本研究で作成したシミュレーションコードは十分にせん断流を再現できているものと考えられる。

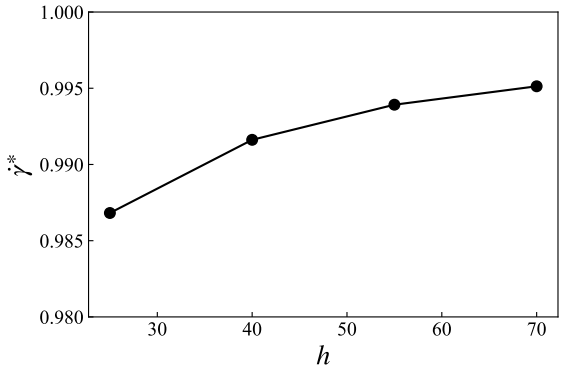


図 3.2: ひずみ速度の流路幅 h 依存性

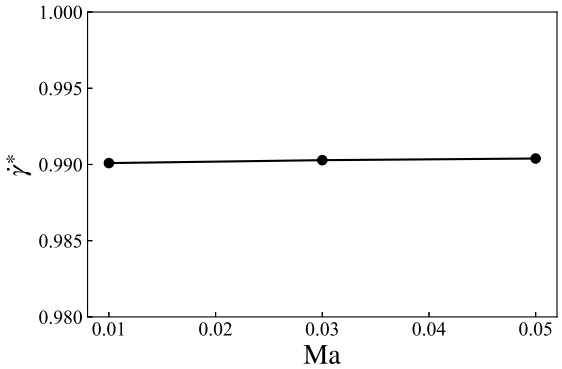


図 3.3: ひずみ速度の Ma 依存性

また図 3.3 に、$\gamma = 200 \sim 300$ で平均を取った速度勾配 $\langle \partial u_x/\partial y \rangle$ の Ma 依存性を示す。計算範囲内では Ma に関わらず、速度勾配の値は入力値 $\dot{\gamma}_{\mathrm{in}} = 0.01$ に対して約 1 % 以下の誤差に留まっていることが分かる。

3.1.2　溶媒粘度

粒子法においても、せん断を印加する壁粒子に働く応力を合算することによって、流体が与える応力の値を見積もることが可能である [101]。また、Couette 流れのせん断応力は $\sigma_{21} = \eta(\partial u_x/\partial y)$ と書ける [102]。図 3.1 に示すような速度プロファイルから得られる速度勾配 $\partial u_x/\partial y$ と、壁粒子全体が受けるせん断応力 σ_{21} を得ることができれば粘度 η を算出することが可能である。別の方法として、分子動力学計算ので用いられるような粒子間に働く力と相対位置によってミクロな応力の定義も存在する [103]。式 (2.7) より、流体粒子間に働く相互作用力は粘性力と圧力の二種類であり、これらの相互作用に由来する応力をそれぞれ $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{viscous}}$, $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{pressure}}$ と定義する。これらに加えて運動量に由来する応力 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{kinetic}}$ も存在し、各応力は以下のように定義される。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{pressure}} &= \frac{1}{V_{\mathrm{system}}} \sum_{i,j>i} (\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) \otimes \boldsymbol{f}_{ij}^{\mathrm{pressure}} \\
\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{viscous}} &= \frac{1}{V_{\mathrm{system}}} \sum_{i,j>i} (\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) \otimes \boldsymbol{f}_{ij}^{\mathrm{viscous}} \\
\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{kinetic}} &= \frac{1}{V_{\mathrm{system}}} \sum_{i} m_i \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{rel}} \otimes \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{rel}}
\end{aligned}
\tag{3.1}
$$

ここで、V_{system} は流体領域の体積、$\boldsymbol{f}_{ij}^{\mathrm{pressure}}$ は式 (2.7) の右辺第一項、$\boldsymbol{f}_{ij}^{\mathrm{viscous}}$ は式 (2.7) の右辺第二項、$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{rel}}$ は定常流と比較した相対速度であり、単純せん断の場合は $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{rel}} = \boldsymbol{u}_i - \dot{\gamma} y \hat{\boldsymbol{x}}$ である。 ($\hat{\boldsymbol{x}} = (1, 0, 0)^T$ は x 軸方向の単位ベクトル。) 今回は、各時刻における速度プロファイルから最小二乗法を用いて $\dot{\gamma}$ を推定し、$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{kinetic}}$ を計算した。これらを合算してミクロ応力 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{sum}} = \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{pressure}} + \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{viscous}} + \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{kinetic}}$ を算出する。

図 3.4 にせん断応力 σ_{21} の時間発展を示す。ここで、x, z 方向のシステムサイズは $L_x = L_z = 30$ である。図 3.4 より、実線で示す壁応力よりも破線で示すミクロ応力の値の方が大きくなっていることが分かる。今回の計算のインプットパラメータは、粘性係数 $\eta_{\mathrm{in}} = 10$, ひずみ速度 $\dot{\gamma}_{\mathrm{in}} = 0.01$ であるため、理想的なせん断応力は $\eta_{\mathrm{in}}\dot{\gamma}_{\mathrm{in}} = 0.1$ となる。つまり、壁応力の方が理想値に近い値となっている。最終状態における応力値は壁応力は 0.1011、ミクロ応力は 0.1067 であり、図 3.2 で得られたひずみ速度を用いて粘度を算出すると、それぞれ 10.2、10.8 となる。これより、本計算においては壁応力の方が約 6% ほど精度が高いため、本研究では壁応力を用いてせん断粘度を計算する。なお、繊維を含む系でミクロ応力を計算する際には固体粒子の回転由来の応力を評価する必要があるが、その形は自明ではない。

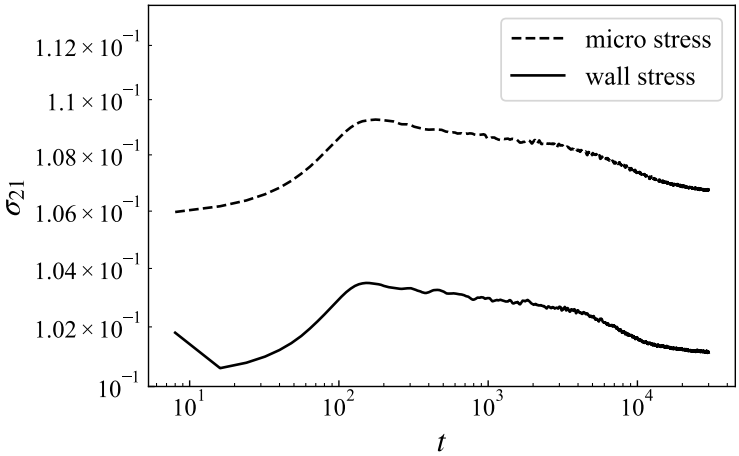


図 3.4: せん断応力 σ_{21} の時間発展。実線は壁応力、破線は式 (3.1) で定義されるミクロ応力である。

図 3.5 に、定常状態における溶媒粘度の流路幅依存性を示す。図 3.5 より、計算パラメータとして与えた溶媒粘度は $\eta_{\mathrm{in}} = 10$ であるため、概ね 2.5% 以内の誤差で推移していることが分かる。また、流路幅 h の値が大きくなるにつれて η_{in} の値に近づいていることが分かる。この h 依存性は、主には図 3.2 に示すように粒子数の増加に伴う速度勾配 $\partial u_x/\partial y$ の精度向上に起因するものと考えられる。

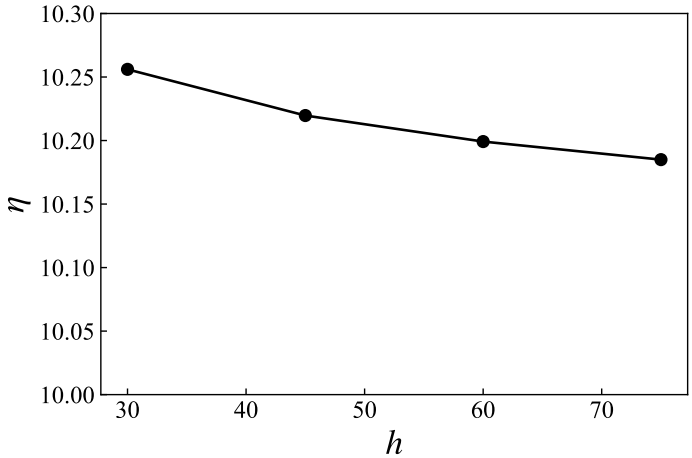
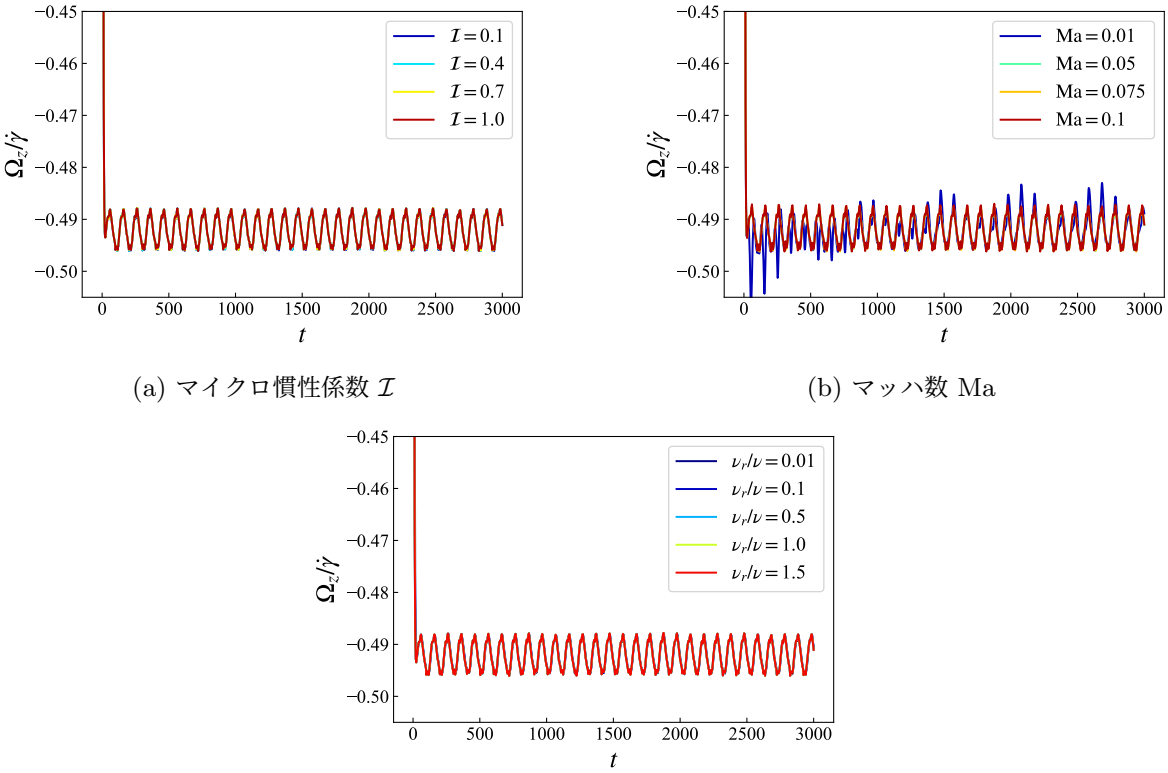


図 3.5: 溶媒粘度の流路幅 h 依存性

3.2　固体粒子の回転運動

固体粒子の運動を検証するためにせん断流中の単一の固体粒子のシミュレーションを行った。システムサイズは $L_x = L_y = L_z = 41$ とし、その他の流体に関するパラメータは上述の単純せん断流の計算と同様である。固体粒子の質量密度 ρ は流体粒子と同じ値を用いた。micropolar fluid モデル由来のパラメータは断りがない限りは $\nu_r = 1.5\nu$, $\mathcal{I} = 0.8$ とした。また、空間対称な初期配置を実現するために固体粒子はシステムの中心に配置し、周囲の流体粒子は格子配置とした。



(a) マイクロ慣性係数 $\mathcal{I}$　　(b) マッハ数 Ma

(c) 回転動粘性係数 ν_r

図 3.6: せん断流動下における単一の固体粒子の角速度 Ω_z の時間発展。縦軸はひずみ速度 $\dot{\gamma}$ で規格化されている。

図 3.6 にひずみ速度 $\dot{\gamma}$ で規格化した固体粒子の角速度 Ω_z の時間発展を示す。図 3.6(a) にマイクロ慣性係数 $\mathcal{I}$、図 3.6(b) にマッハ数 Ma、図 3.6(c) に回転動粘性係数 ν_r を変えた計算を示す。図 3.6(a) 及び図 3.6(c) より、全てのパラメータにおいてグラフが重なっており、定常状態においては固体粒子単体の角速度は $\mathcal{I}, \nu_r$ によらないことが分かる。一方で、図 3.6(b) においては Ma = 0.01 のデータについてのみ時折他のデータとは外れるような挙動が見られる。Ma が低くなるということは、計算上の音速 c_s の値が大きくなることを意味している。式 (2.26) より、c_s の値が大きくなると同じ密度揺らぎに対して働く圧力の絶対値が大きくなる。従って、図 3.6(b) は Ma を小さくしすぎると、密度揺らぎに対して過剰に圧力がかかり計算が不安定になりやすくなることを示している。よって、以降の計算については 0.01 よりも大きな Ma 数を使用する。MPS 法では、現状として Ma 数は経験的に決めざるを得ないことを補足しておく [68]。また、各グラフにおいてデータが振動しているのは、格子配置によって固体粒子の粒子数

密度が周期的に変化していることに由来する。よって、この振動幅は影響半径 l_c を小さくすると大きくなってしまう。また、図 3.6 の各グラフにおいて角速度は 0.49 付近で振動している。ここで、せん断流動中の球状の固体粒子の角速度は、理論的には式 (1.3) において $r_p = 1$ とし時間微分を行うことで得られる。計算すると $\dot{\phi} = \dot{\gamma}/2$ となり、図 3.6 において規格化された角速度の理論値は 0.5 となる。この値は、当然ながら Stokes 極限におけるせん断流動中の固体球の理論解と一致する [104]。よって、$l_c = 3.1$ においては理論解とのズレはおおよそ 1% となり、十分に妥当な結果が得られていることが確認された。

第 4 章

希薄極限における繊維運動

本章では、構築した micropolar-MPS 法の妥当性を検証するために、せん断流動中の単一の繊維運動を理論解 (Jeffery 理論 [17]) と比較を行う。せん断流動中の繊維の回転運動を (1) 回転周期 (2) 一周期における角度の分布 (3) 回転軌道 の三つ要素に分けて解析を行う。また、本手法ではいくつかのモデルパラメータが存在するため、それらに対する結果の依存性を調べることで適切なパラメータ設定のヒントとする。これらの解析によって、本手法の妥当性や精度、適用範囲について議論する。

4.1 シミュレーション設定

本手法における繊維運動の妥当性を検証するため、せん断流動中における単一繊維のシミュレーションを行った。システムサイズは $L_x = L_y = L_z = 40$ であり、合計 $N = 64000$ 粒子を用いて三次元計算を行った。この時、流路幅は $h = 35$ となる。比較対象の Jeffery 理論は $\mathrm{Re} \to 0$ の極限での理論解であるため、できるだけ Re を小さくし、粘性が支配的な領域で計算する必要がある。そこで本研究では動粘性係数は $\nu = 10$ とし、$\mathrm{Re}_f = L^2\dot{\gamma}/\nu$ が 0.1 以下になるようにひずみ速度 $\dot{\gamma}$ を決定した。音速 c_s は Mach 数が $\mathrm{Ma} = 0.5h\dot{\gamma}/c_s = 0.03$ となるように決定した。時間刻み幅は第 2.6 節に示す条件を満たすように $\Delta t = 0.01$ とした。その他のモデルパラメータは断りがない限りは $\nu_r = 1.5\nu$, $\mathcal{I} = 0.8$ とした。固体粒子の質量密度 ρ は流体粒子と同じ値を用いた。繊維のアスペクト比 r_p は 2 から 20 まで変更した。繊維の拘束ポテンシャルのバネ定数は $k_s = 1000$, $k_b = k_t = k_r = 200$ とし、繊維の変形が 0.1% 以下となるように設定した。初期配置は、繊維の重心がシステムの中心と一致するように設定した。繊維の初期配向として、流動方向との配向角は $\phi(t = 0) = \phi_0 = \pi/2$ として固定し、渦度方向との配向角 $\theta(t = 0) = \theta_0$ は 0 から $\pi/2$ までの範囲で変化させた。また、周囲の流体粒子は第 2.8 節で述べた通りにランダムに配置した。

本研究の計算は静置状態から始めるため、最初の回転中に繊維が感じるひずみ速度 $\dot{\gamma}$ が大きく変わりうる。これは Jeffery 理論で想定されている状況とは異なるので、比較を行う際にはシステムの設定由来の誤差が生じうる。よって、繊維の回転運動について平均値を取る場合は二回転目以降のデータを用いる。

4.2 結果及び考察

4.2.1 孤立繊維の回転運動

図 4.1 にせん断流動下における繊維のスナップショットを示す。図 4.1 (a) は $\theta_0 = \pi/3$ の計算を渦度方向視点で見たスナップショットである。繊維は速度勾配によって回転運動を開始し、流動方向に配向する。従来手法ではここでトルクが消失して繊維は静止してしまうが、本手法では流動方向に配向してから

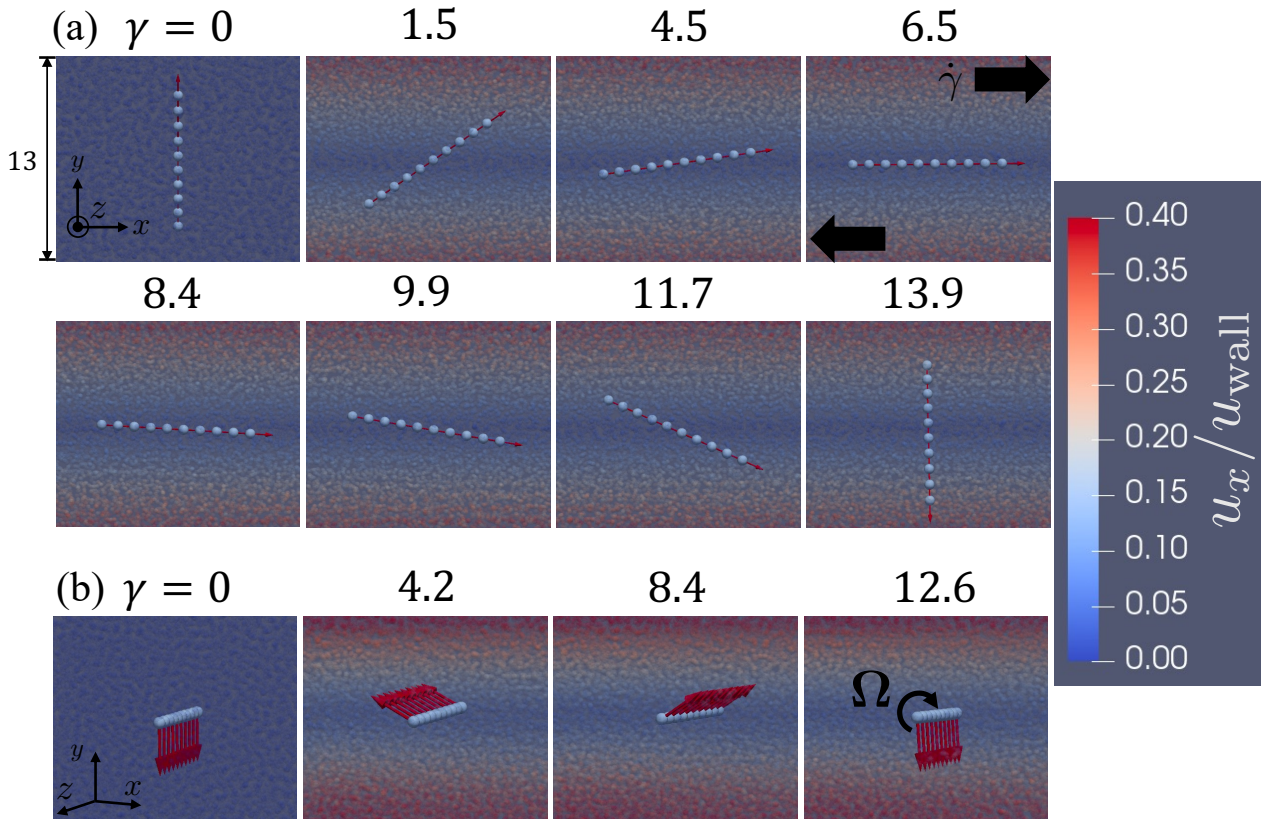


図 4.1: (a) せん断流動下における単一繊維のスナップショット ($r_p = 10$, $\dot{\gamma} = 0.001$ $\phi_0 = \pi/2$, $\theta_0 = 2\pi/3$)。水色の粒子の集合が繊維で、赤色の矢印が各固体粒子のダイレクター $\boldsymbol{s}$ である。周囲の流体粒子の色は流速を示す。(b) 渦度方向に配向した繊維のスナップショット ($r_p = 10$, $\dot{\gamma} = 0.01$ $\phi_0 = \pi/2$, $\theta_0 = 0$)。赤色の矢印が各固体粒子のダイレクター $\boldsymbol{t}$ である。

も繊維が回転運動を続けていることが分かる。また、図 4.1 (b) に $\theta_0 = 0$ の渦度方向に配向した場合のスナップショットも示す。赤い矢印で表示されたダイレクター $\boldsymbol{t}$ の運動から、速度勾配により繊維の軸に沿った回転運動も再現されていることが分かる。これらの結果から、本手法における固体粒子への回転自由度の導入によって、二軸周りの繊維の回転運動が実現されていることが確認できた。

続いて、図 4.2 に繊維の配向角 ϕ の時間発展を示す。黒色のシンボルで示した回転自由度のない従来の MPS 法による結果では流動方向 ($\phi = 0$) 付近で繊維がほぼ静止しており、実線で示す Jeffery 理論の結果と整合しない。一方で、赤色のシンボルで示した本手法による結果では、周期的な回転運動が再現できていることが確認できる。この結果は、繊維運動に対する本モデルで導入した回転自由度の重要性を示している。また、実線は Jeffery 理論の結果を示している。Jeffery 理論によると、繊維の回転軌道はアスペクト比 r_p に依存する。アスペクト比は、繊維の流体力学的に等価な楕円体の 2 軸の比として定義することができる [18]。本モデルの繊維は厳密には剛体でないため、アスペクト比が正確に定義されないという懸念があるかもしれない。しかし、我々が採用したシミュレーションパラメータにおいては、繊維は流動下でほぼその長さと形状を保つことができるので、近似的に剛体として扱うことができる。実際に、有効アスペクト比 $r_{\mathrm{ef}} = 0.36 r_p$ を用いて Jeffery 理論をプロットすると本モデルの結果とよく一致していることが分かる。この配向角 ϕ の時間発展は式 (1.3) より θ に依存しない。図 B.1 に示す通り、本モデルにおいても Jeffery 理論と同様に配向角 ϕ の時間発展は θ に依存しないことを確認している。

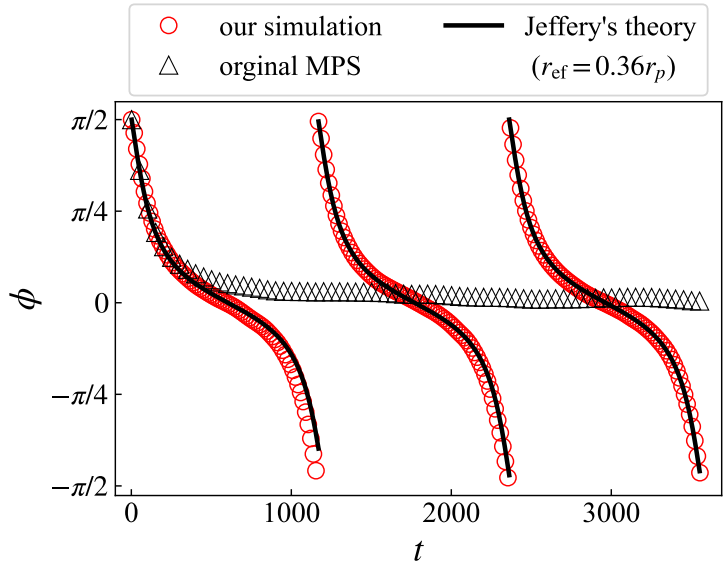


図 4.2: 希薄形における繊維の配向角 ϕ の時間発展 ($r_p = 10, \phi_0 = \pi/2, \theta_0 = \pi/2$)。○：本手法、△：回転自由度のない従来の MPS、—：Jeffery 理論の結果 ($r_{\mathrm{ef}} = 0.36r_p$)

Jeffery 理論と比較した解析を進めていくためには、本手法における繊維の有効アスペクト比 r_{ef} を推定することが必要となる。本研究では、r_{ef} を式 (1.5) にフィッティングすることで推定する。図 4.3 にひずみ速度 $\dot{\gamma}$ で規格化した繊維の回転周期 $T\dot{\gamma}$ のアスペクト比 r_p 依存性の結果を示す。破線は式 (1.5) を r_{ef} を用いてシミュレーション結果にフィッティングした結果である。この時、r_{ef} は r_p に比例するとしてフィッティングを行った。図 4.3 より、繊維の回転周期は r_p の上昇とともに長くなっており、Jeffery 理論ともよく一致していることが分かる。フィッティングによって求められた r_{ef} は $r_{\mathrm{ef}} = 0.36r_p$ である。この値は $\nu_r = 1.5\nu$ における結果であり、第 4.2.4 項で議論する通り、繊維の回転周期は ν_r に依存していることに注意していただきたい。また、今回の解析で得られた r_{ef}/r_p の値は、実験的に得られている結果 ($r_{\mathrm{ef}}/r_p \simeq 0.7$) の約半分の値となっている [19]。この結果の一つの解釈は、本手法の繊維の厚さが約 2 粒子分であるということである。繊維の周囲には流体粒子がおおよそ粒子 1 つ分の距離に存在しており、その周囲の流体粒子の中心点が本手法の繊維の固液境界だと見なすことができる。

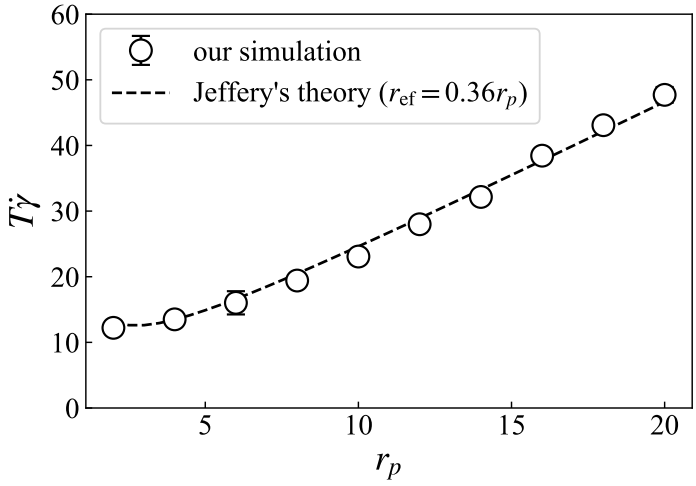


図 4.3: 希薄領域におけるひずみ速度で規格化した繊維の回転周期 $T\dot{\gamma}$。破線は式 (1.5) に示す Jeffery 理論とのフィッティング結果である。

4.2.2　繊維の角速度および配向分布関数

本節では、繊維の詳細な回転運動の統計を取るために、繊維の角速度の平均値、及び配向角 ϕ の確率密度分布である配向分布関数 $\Psi(\phi)$ について解析を行う。また、本節では代表して $r_p = 10$ について解析を行う。まずは、図 4.4 に各角度 ϕ における繊維の角速度の平均値 $\langle\dot{\phi}\rangle(\phi)$ を示す。$r_p = 10$ の 5 つの異なる初期配置の計算に対して、角度領域を 100 個に分割し、それぞれの角度領域に対して平均を計算した。破線は式 (1.1) に示す Jeffery 理論によって得られる繊維の角速度である。図 4.4 より、本研究の結果は Jeffery 理論と同様に対称な形状をしており、角速度の値についても Jeffery 理論とほぼ一致していることが分かる。ただ、$\phi \simeq \pi/2, -\pi/2$ 付近では他の角度と比較して Jeffery 理論と比較して角速度がやや遅くなっている。この角度は繊維がせん断勾配方向 (y 軸) を向いているときの角度であり、わずかではあるが繊維の伸びが最大となる角度である。0.1% 以内であってもわずかな伸びによって実効的な有効アスペクト比が大きくなり、角速度が下がっている可能性が考えられる。いずれにせよ、一周期における $\phi \simeq \pi/2, -\pi/2$ 付近に繊維が滞在する時間の割合は図 4.2 から分かるようにわずかであり、概ね Jeffery 理論を再現していることには変わりはない。

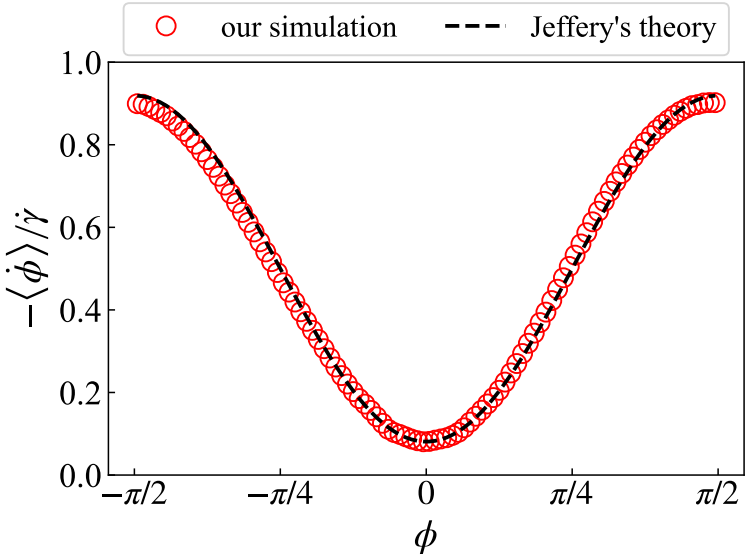


図 4.4: 各角度 ϕ における繊維の角速度の平均値 $\langle\dot{\phi}\rangle(\phi)$ ($r_p = 10$)。破線は式 (1.1) に示す Jeffery 理論の結果 ($r_{\mathrm{ef}} = 0.34 r_p$)。縦軸はひずみ速度 $\dot{\gamma}$ で規格化されており、視認性のために符号を反転させている。

続いて、図 4.5 に配向分布関数 $\Psi(\phi)$ を示す。シンボルは本研究の結果であり、破線は以下に示す Jeffery 理論から導かれる分布関数である [105]。

$$\Psi(\phi) = \frac{r_{\mathrm{ef}}}{\pi\left(r_{\mathrm{ef}}^2 \sin^2\phi + \cos^2\phi\right)} \tag{4.1}$$

これより、本モデルの $\Psi(\phi)$ は Jeffery 理論と同様にほぼ対称な形状をしており、ピーク値以外についてはほとんど一致していることが分かる。図 4.4 で議論した通り、$\phi \simeq \pi/2, -\pi/2$ の高角側では平均の角速度が小さくなっているため、その領域における確率密度も Jeffery 理論と比較してやや高くなっていることが分かる。これによって、分布形状がややブロードになり、中心のピーク位置の高さが低くなっている。

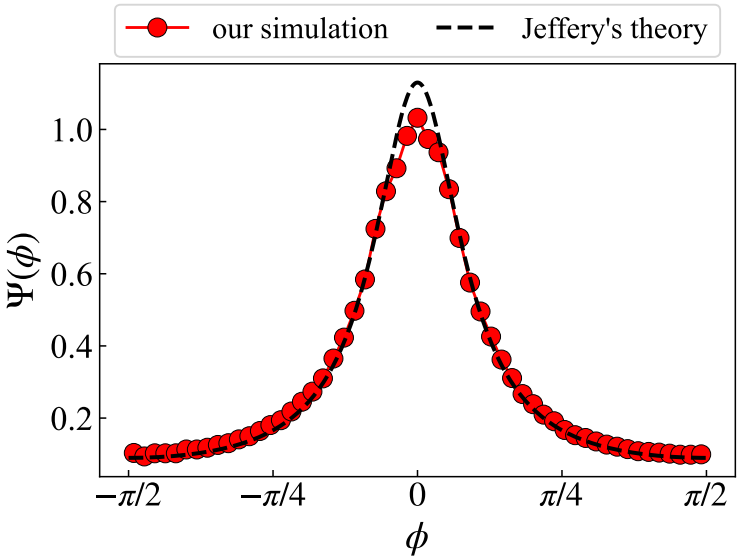


図 4.5: 配向分布関数 $\Psi(\phi)$ (r_p = 10)。破線は式 (4.1) に示した Jeffery 理論による配向分布関数 ($r_{\mathrm{ef}} = 0.36 r_p$)。

4.2.3 Jeffery 軌道

第 4.2.1 項では繊維のせん断勾配面 ($x-y$ 面) に射影した配向角 ϕ の時間発展や周期を調べた。本項では、せん断勾配面からの角度 θ 傾いている場合の繊維の回転周期を調べる。図 4.6 に本モデルを用いて計算した Re = 0.01 における繊維の回転軌道と Jeffery 軌道との比較を示す。軌道 (a) は $\theta_0 = \pi/6$ でひずみ $\gamma = 12 \sim 50$ の結果、軌道 (b) は $\theta_0 = \pi/3$ でひずみ $\gamma = 0 \sim 50$ の結果である。破線は図 4.3 で計算された有効アスペクト比 r_{ef} を用いて計算した Jeffery 軌道である。数値誤差による多少の揺らぎはあるが、繊維は概ね一定の軌道に沿って運動しており、Jeffery 理論の結果とも一致していることが分かる。以上より、本手法は単一繊維の回転運動を繊維の回転軌道まで再現できることが確認された。

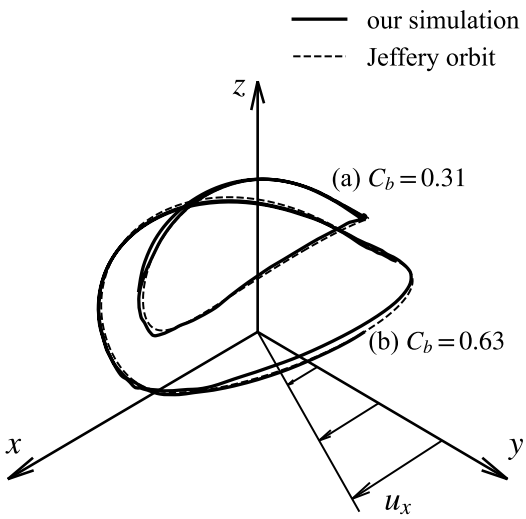


図 4.6: 希薄領域における繊維の回転軌道 (r_p = 10)。破線は $r_{\mathrm{ef}} = 0.36 r_p$ を用いて計算された軌道であり、軌道 (a) は $C_b = 0.31$、軌道 (b) は $C_b = 0.63$ である。

4.2.4　パラメータ依存性

本モデルでは主に回転動粘性係数 ν_r、音速 c_s、マイクロ慣性係数 $\mathcal{I}$ の 3 つのモデルパラメータがある。ν_r と $\mathcal{I}$ は、micropolar fluid モデル特有のモデルパラメータであり、物性値から決定することはできない。よって、モデルパラメータが繊維の回転運動に与える影響を調査する必要がある。

図 4.7 に有効アスペクト比 r_{ef} の ν_r 依存性を示す。ν_r の値が大きくなるにつれて回転周期 T が短くなり、r_{ef}/r_p の値は単調に小さくなっていることが分かる。これより、ν_r の値をチューニングすることによって特定の実験系に対応する r_{ef}/r_p の値を 0.3 ~ 0.65 の範囲で得られることが示唆される。

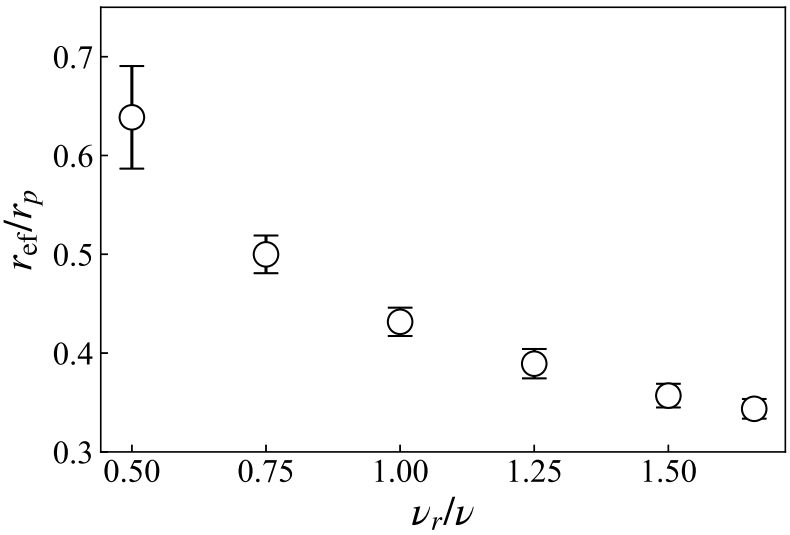


図 4.7: 本手法における回転動粘性係数 ν_r の有効アスペクト比 r_{ef} 依存性。r_{ef} と ν_r はそれぞれアスペクト比 r_p と動粘性係数 ν によって規格化されている。

また、本モデルを用いて繊維を表現する場合、ν_r には下限値がある。図 4.8 に各 ν_r における繊維が半回転するまでの $\phi(t)$ の時間発展を示す。図 4.7 の結果から分かる通り、ν_r が大きくなるにつれて繊維が回転するまでの時間が短くなっている。一方で、$\nu_r/\nu = 0.1$ とした計算では、本研究の計算範囲 $(0 \leq t \leq 20000)$ において繊維の回転は観測されなかった。つまり、ν_r の値が小さすぎると繊維が回転しないことが分かる。これは、ν_r の値を小さくすることによって、繊維を構成する各固体粒子にかかるトルクが MPS 法由来の計算誤差の大きさと同程度になり十分に繊維の回転運動に結びつかないことが原因であると考えられる。また、図 4.7 において、ν_r の値が小さくなるにつれて誤差が r_{ef} の分布が広くなっていることもこのことが原因であると考えられる。よって、本モデルでは実験値で示される $r_{\mathrm{ef}}/r_p \sim 0.7$ の繊維の運動は表現できないことに注意する必要がある。

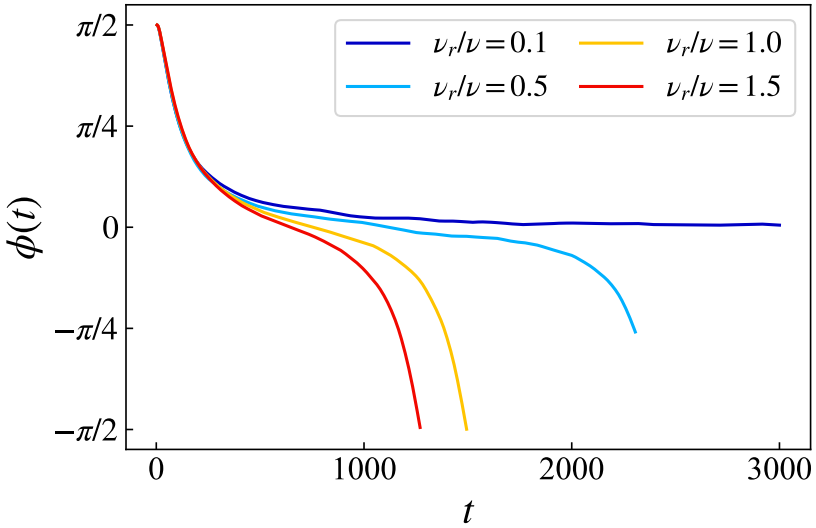


図 4.8: 各回転動粘性係数 ν_r における繊維の配向角 $\phi(t)$ の時間発展。$\nu_r/\nu = 0.1$ 以外は繊維が半回転するまでの $\phi(t)$ を示している。

最後にマイクロ慣性係数 $\mathcal{I}$ を変化させた際の繊維の配向角 $\phi(t)$ を図 4.9 に示す。これより、計算した範囲においては、マイクロ慣性係数 $\mathcal{I}$ は孤立繊維の回転運動にほとんど影響を及ぼさないことが分かる。式 (2.5) を見るとマイクロ慣性係数が関係する係数 α は右辺全体にかかっているため、右辺第一項の固体粒子間の拘束力と周囲の流体粒子から受けるトルクである右辺第二項の大きさの割合は $\mathcal{I}$ に依らない。したがって、$\mathcal{I}$ は繊維の回転運動にも影響を及ぼさないものと考えられる。その他のパラメータ依存性については付録 第 B.2 節に示している。

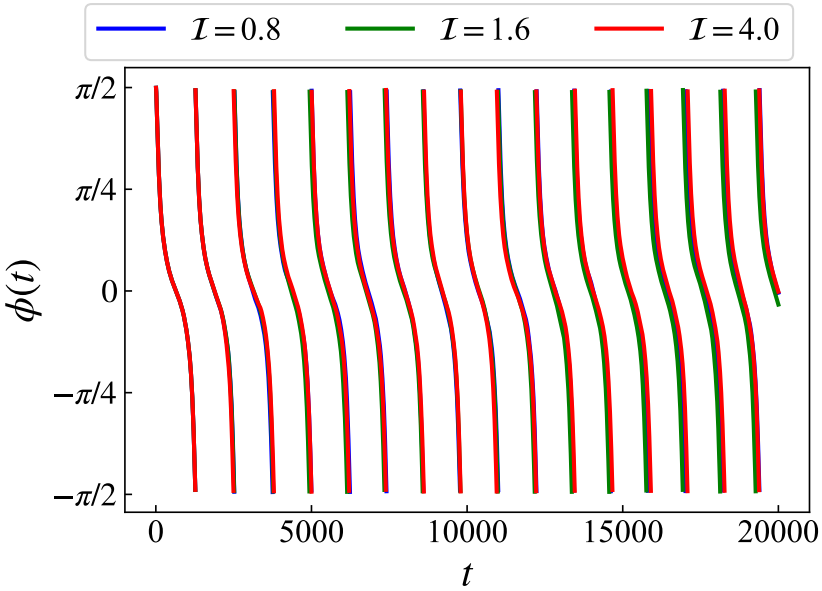


図 4.9: $\mathcal{I} = 0.8, 1.6, 4.0$ における孤立繊維の配向角 $\phi(t)$ の時間発展。

第 5 章

濃厚系における繊維懸濁液の計算

5.1 諸言

せん断流動中の繊維の運動は主に繊維の回転軌道と回転周期によって特徴づけられる。希薄領域においては、第 4.2 節に示した通り軌道定数 C_b と繊維の回転周期はほとんど一定の値を取る。一方で、濃厚系においては繊維間の相互作用によって、繊維は異なる回転軌道に遷移し [2, 50]、回転周期は長くなる [15, 50, 106]。本章では、これらの濃厚系で期待される挙動が再現されるかを確認するため、また濃度依存性を調査するために定常状態における回転軌道 C_b と規格化された回転周期 $T\dot{\gamma}$ の定常状態における分布関数を計算する。また、繊維懸濁液の性質を特徴付けるものの一つとして粘度の濃度依存性を調査する。本研究では壁を用いてせん断流れを印加するが、この移動壁は繊維運動に影響を与えうる。よって、本モデルにおいて壁が繊維運動に与える距離を調査し、データを取る内部領域を決定する。本モデルが導入した回転自由度の有無によって、繊維配向および粘度がどのように変化するのかについても調査する。

5.2 シミュレーション設定

開発した micropolar-MPS 法を用いて繊維懸濁液の三次元せん断シミュレーションを行った。計算パラメータは特に言及のない限り以下のパラメータで行った。システムサイズは $L_x = L_z = 30$、$L_y = 60$ の合計 $N = 54000$ 粒子を用いた。この時、流路幅は $h = 55$ であり、付録 C.3 節で示す通り、$r_p = 10$ であればシステムサイズ依存性は見られない設定である。動粘性係数は $\nu = 10$ とし、$\mathrm{Re}_f = L^2\dot{\gamma}/\nu$ が 0.1 以下になるようにひずみ速度 $\dot{\gamma}$ を決定した。音速 c_s は Mach 数が $\mathrm{Ma} = 0.5h\dot{\gamma}/c_s = 0.03$ となるように決定した。時間刻み幅は第 2.6 節に示す条件を満たすように $\Delta t = 0.01$ とした。その他のモデルパラメータは $\nu_r = 1.5\nu$, $\mathcal{I} = 0.8$, $\epsilon = 0.12c_s^2/(0.5)^2$ とした。繊維のアスペクト比 r_p は 10 とした。システム中の繊維の本数を変化させることによって、繊維長 L で規格化された数密度 $n_f L^3$ が $n_f L^3 = 1.0 \sim 25$ の範囲で計算を行った。繊維の拘束ポテンシャルのバネ定数は $k_s = 1000$, $k_b = k_t = k_r = 250$ とし、繊維の変形が 0.1% 以下となるように設定した。初期配置は、第 2.8 節で述べた通り、繊維の配向と位置、流体粒子の位置がランダムになるように配置した。

繊維配向は式 (1.6), (1.7) に示す軌道定数を用いて評価する。本来、Jeffery 理論では C_J, C_b は軌道「定数」であり、繊維が摂動を受けない限り変化しない物理量である。一方で、繊維濃度が上昇すると周囲の繊維との相互作用によって軌道定数は時間変化する。よって、本章では以下に示す $C_J(t), C_b(t)$ を用いて繊維配向を評価する。

$$C_J(t) = \frac{1}{r_{\mathrm{ef}}} \tan\theta(t)\left(r_{\mathrm{ef}}^2 \sin^2\phi(t) + \cos^2\phi(t)\right)^{\frac{1}{2}} \tag{5.1}$$

$$C_b(t) = |C_J(t)| / (1 + |C_J(t)|) \tag{5.2}$$

便宜上、これらの呼称は軌道定数のままとするが、本章で示す「C_b」は全て時間に依存することに注意していただきたい。また、物理量 x の確率密度分布関数 $\Psi(x)$ は以下のように計算する。

$$\Psi(x) = \frac{\sum_i \mathcal{N}(i\Delta x \le x < (i+1)\Delta x)}{\sum_i \Delta x \mathcal{N}(i\Delta x \le x < (i+1)\Delta x)} \tag{5.3}$$

ここで、Δx は分布の刻み幅であり、$\mathcal{N}(i\Delta x \le x < (i+1)\Delta x)$ は $i\Delta x \le x < (i+1)\Delta x$ の範囲に分布する x のサンプル数を示す。本章で示す物理量 x の平均値 $\langle x \rangle$ は定常状態における時間平均であり、なおかつ N_{sample} 個の計算のアンサンブル平均である。つまり、以下のように定義される。

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N_{\mathrm{sample}}(j_e - j_s)} \sum_i^{N_{\mathrm{sample}}} \sum_{j_s \le j \le j_e} x_{(i)}\,(t = j\Delta t) \tag{5.4}$$

ここで、$x_{(i)}$ は i 番目のサンプルにおける物理量であり、j_s, j_e はそれぞれ定常状態とみなす時間領域の最初と最後のインデックスである。また、粘度は第 3.1.2 項で議論した通り、壁が受ける応力を用いて計算する。

5.3　結果及び考察

5.3.1　繊維の配向の時間発展

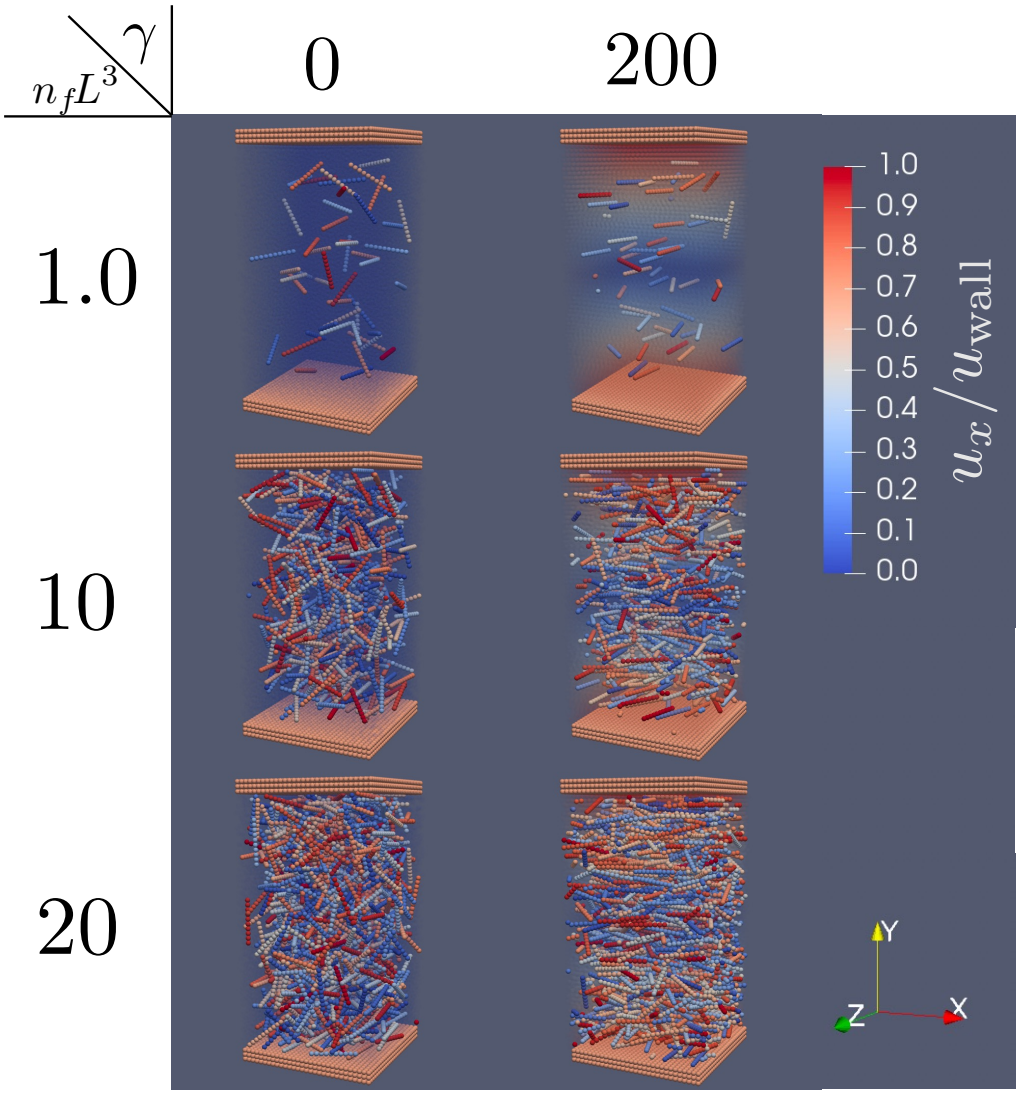
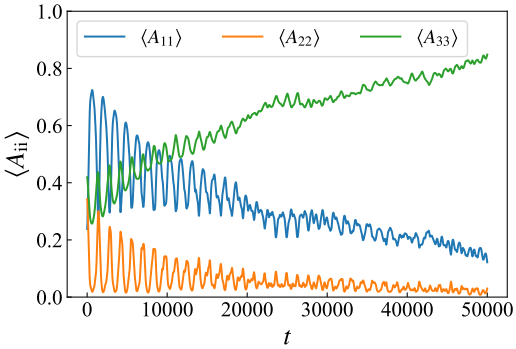


図 5.1: 各濃度における初期状態 ($\gamma = 0$) と定常状態 ($\gamma = 200$) におけるスナップショット。上下の壁によってせん断を印加しており、粒子の一列の集合として表現される繊維は識別のために色をつけている。また、周囲の流体は右上部のカラーバーに示す壁速度で規格化した速度を表示している。

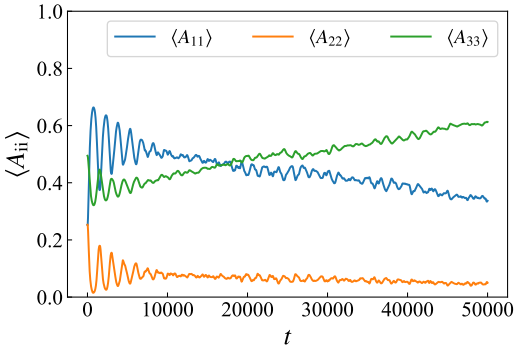
図 5.1 に三つの濃度 $n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ における $\gamma = 0, 200$ のスナップショットを示す。左列に示す初期状態では各濃度において、概ねランダムな配向が実現されている。せん断をかけてある程度時間が経つと、どの濃度においても初期状態と比較して多くの繊維が xz 平面まわりに配向していることが分かる。これはせん断流動下における Jeffery 理論の性質からも自明な結果であり、実験的な観察とも定性的には一致している [27]。また、濃度依存性に注目すると、図 5.1 上段に示す準希薄領域 $n_f L^3 = 1$ では、z 方向 (渦度方向) への配向が顕著であることが確認できる。濃厚系 ($n_f L^3 = 10, 20$) では、壁面近傍の繊維は z 方向に配向している繊維が多い一方で、内部領域では xz 平面内における特定方向への配向は確認されていない。このように壁面近傍で繊維が渦度方向へと配向するのは、繊維の回転が物理的に阻害された結果

であると考えられる。これは、$C_b = 0$ 付近の軌道が、最も y 方向成分が小さく、壁との衝突によるエネルギーロスを減らせることが原因であると推測される。

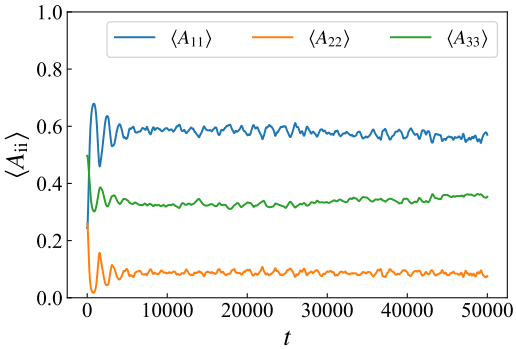
続いて、繊維配向の時間変化を定量的に観察するために、式 (1.10) に示す 2 階の配向テンソルの対角項の時間発展を図 5.2 に示す。各繊維の運動が周期的であることから、$\langle A_{\mathrm{ii}} \rangle$ の値においても初期段階ではデータの振動が見られる。せん断がかかるにつれて各繊維の位相がずれていき、振動は減衰する。この時、濃度が高くなるにつれて振幅は小さく、減衰は早くなる。これは、平均を取る繊維の本数が多いことや繊維間相互作用が強くなることによって繊維の周期が乱されやすいことが原因だと考えられる。また、A_{33} の値に注目すると、濃度が低いほど早い段階で A_{11} を上回っており、$n_f L^3 = 1.0, 10$ では今回の計算範囲では定常状態に落ちていない。繊維濃度が十分に高くなると $n_f L^3 = 20$ のように $\langle A_{\mathrm{ii}} \rangle$ は一定の値に落ち着き、定常状態が観測される。結果として、本研究の観測範囲 ($\gamma \leq 400$) では $n_f L^3 < 20$ の領域については十分に定常状態まで達することを確認することができなかった。今後の分布関数等では便宜上 $300 \leq t \leq 400$ のデータを定常状態の計算に用いるが、必ずしも十分に定常状態に落ちているわけではないことに注意していただきたい。



(a) $n_f L^3 = 1.0$



(b) $n_f L^3 = 10$



(c) $n_f L^3 = 20$

図 5.2: $n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ における 2 階の配向テンソル $\langle A_{\mathrm{ii}} \rangle$ の時間発展。

5.3.2 壁による影響

図 5.1 に示した通り、濃厚系の繊維懸濁液中の繊維配向は壁による影響を受ける。これは、物理量の平均値や分布関数に対しても影響を及ぼしうる。多くの先行研究では周期境界条件で計算している他 [5, 41, 42, 107]、実験で観測する繊維も基本的にはシステムの中心付近のものである [14, 15]。従って、先行研究と対比する場合については壁による影響を取り除いてデータを解析する必要があり、そのためには壁が影響を及ぼす範囲を調査する必要がある。また、この壁の影響の決定は理論的にも難しく、1 本の繊維運動ですら流動場の変調を考慮した厳密な理論解は得られていない [9]。よって、壁面による影響を定量化すること自体も物理的にも実用的にも重要である。これらを観測するために、本項では、いくつかの物理量について繊維の中心と壁との距離 r_w 依存性を調べる。r_w に応じてシステムをいくつかの領域に分割し、各領域においてアンサンブル平均と時間平均を取る。このようにして得られた物理量 b の平均値を $\langle b \rangle_w$ と表記する。

まず最初に、図 5.3 に繊維の数密度 n_f の壁面からの距離 r_w 依存性を示す。縦軸は第 1.1 節で定義を行ったシステム全体の平均としての数密度 n_f で規格化しており、横軸は繊維長 L で規格化している。図 5.3 より、準希薄領域 ($n_f L^3 = 1.0, 5.0$) については平均量が十分ではないが、概ね全ての濃度で $r_w/L > 0.5$ については $\langle n_f \rangle_w / n_f \simeq 1$ となっている。その一方で、$r_w/L < 0.5$ では $\langle n_f \rangle_w / n_f$ が 1 を下回っている。これは、繊維と壁との物理的な接触が起こる $r_w/L \leq 0.5$ の領域では斥力が働くことが原因であると考えられる。同様の現象は、Yamane ら [106] のシミュレーションでも確認されている。これより、直接の接触がない領域 ($r_w/L > 0.5$) については概ね一様に繊維が分布していることが分かる。

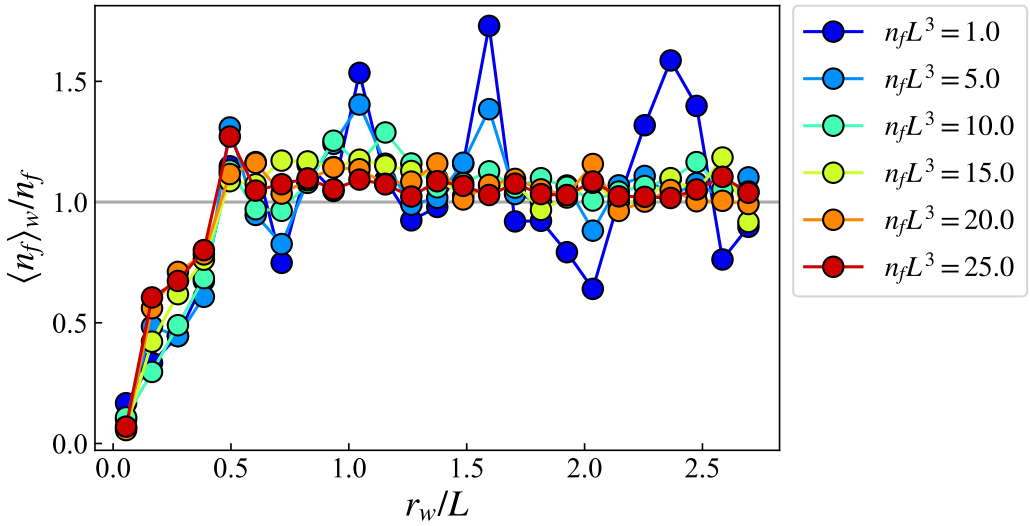


図 5.3: 各濃度における、繊維の数密度 $\langle n_f \rangle$ の壁面距離 r_w 依存性。縦軸はシステム全体の平均的な数密度 n_f、横軸は繊維長 L で規格化している。

続いて、図 5.4 に繊維の軌道定数 $C_b(t)$ の壁面距離依存性を示す。どの濃度においても、$r_w/L < 0.2$ の領域については $\langle C_b \rangle_w \simeq 0.1$ であり、壁面近傍では繊維は極端に渦度方向に配向していることが分かる。これは、壁面最近傍の繊維については繊維濃度に関わらず、固体壁という物理的な障害によって渦度方向に強く配向することを意味している。r_w/L が大きくなるにつれてどの濃度においてもデータは一定値に近づき、その一定値は濃度の上昇とともに大きくなっている。ここから、$n_f L^3 < 25$ の範囲にお

いて、本研究の測定範囲内では濃度上昇によって繊維が平均的にはせん断勾配面 (xy 面) の方に配向することを示している。また、$n_f L^3 > 20$ では $r_w/L > 0.5$ 以降では明確に定常値に至っているのに対し、$n_f L^3 = 10, 15$ では $0.5 < r_w/L < 1$ の範囲で徐々に定常値まで推移している。つまり、本研究の観測範囲では、壁が $\langle C_b \rangle_w$ に与える影響を与える距離は濃度上昇とともに短くなっているものと予想される。以上の結果から、本研究では $r_w/L > 1$ の領域を内部領域として C_b の平均値を計算することとする。

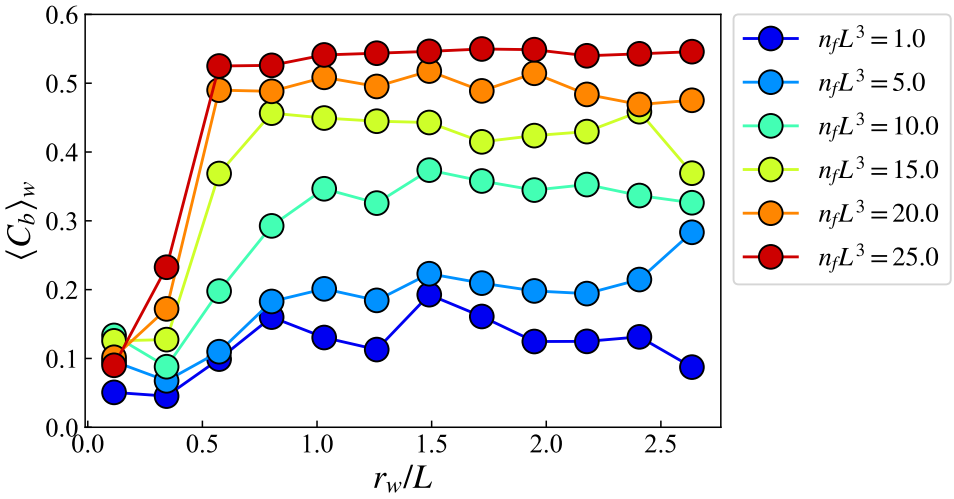
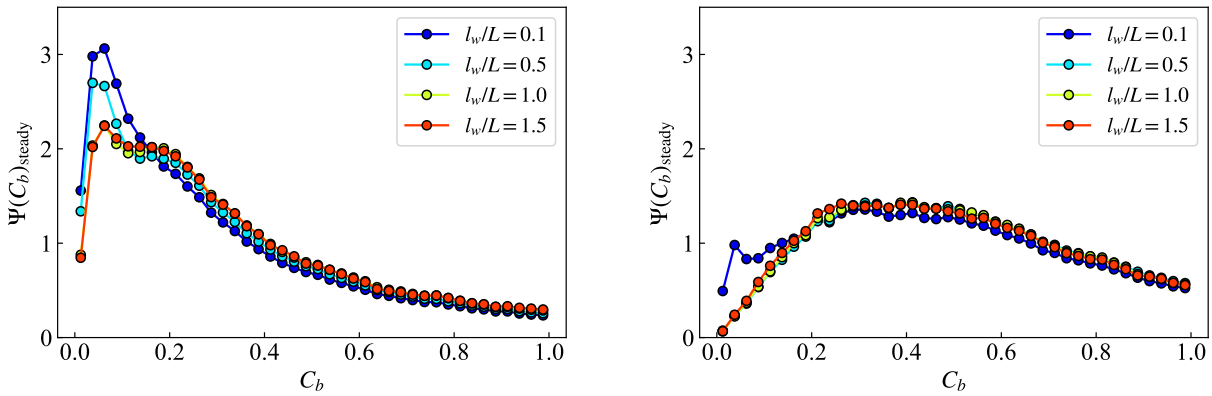


図 5.4: 各濃度における、繊維の軌道定数 $\langle C_b \rangle_w$ の壁面距離 r_w 依存性。

図 5.4 における、定常値に至るまでの距離の濃度依存性については二つの考察が考えられる。一つは C_b の緩和の仕方に r_w 依存性があるということだ。これは前項で述べた通り、$n_f L^3 < 20$ のデータは完全な定常状態を得られていないことに由来する。つまり、壁による影響が最も少ないシステムの中心部から配向の緩和が進んでいくという描像が予想される。これを確認するためには、十分なアンサンブル平均を取り、図 5.4 の結果の時間依存性を見ることが必要だと考えられるが、計算コストの関係から十分な平均量が取れるとは限らない。

もう一つは、濃度上昇に伴っていわゆる screening length [37] が短くなることである。screening とは、ある繊維の運動の基づく流体相互作用が周囲の繊維の存在によって徐々に減衰し、ある距離で文字通り遮断されてしまうという考え方であり、その距離が screening length である。Shaqfeh ら [37] らの slender body theory を用いた理論によると、この screening length は準希薄領域については高次項を省くとおおよそ $d\left[\left(\hat{B}/\varphi_v\right)\ln(1/\varphi_v)\right]$ だと推定されており、Mackaplow [39] らのシミュレーションでもこの形での減衰が確認されている。ここで、$\hat{B}$ は繊維形状や配向分布に依存する定数である。Shaqfeh らの screening length は繊維間の相互作用でなおかつ繊維の厚みが 0 と近似できるような準希薄領域における推定であるため、壁による screening length が全く同じオーダーになる保証はない。ただ、流体相互作用が減衰すると言う意味では、Shaqfeh らの表式と同様に濃度の上昇とともに screening length が短くなるという考察は図 5.4 を踏まえても概ね妥当なものと考えられる。

実際に、境界領域と内部領域それぞれにおける C_b の分布関数 $\Psi(C_b)$ を図 5.5 に示す。代表として $n_f L^3 = 10, 20$ のデータを示し、他の濃度については付録 C.4 節に示す。ここで、l_w は境界領域と内部領域の境界となる r_w の値であり、境界領域は $r_w \leq l_w$ となる領域、内部領域は $r_w > l_w$ となる領域と定義する。図 5.5 より、$l_w/L \geq 1.0$ の二つのデータはほとんど重なっており、$l_w/L > 1.0$ 以降であれば壁が C_b の定常分布に与える影響を十分に取り除けているものと考えられる。



(a) $n_f L^3$ = 10.0　　(b) $n_f L^3$ = 20.0

図 5.5: 各 l_w における軌道定数 C_b の分布関数 $\Psi(C_b)$。

最後に、繊維の規格化した回転周期 $T\dot{\gamma}$ の壁面距離依存性を図 5.6 に示す。次節に示す分布関数の形状から平均を取る値は $15 < T\dot{\gamma} < 80$ とした。これは、渦度方向に配向した繊維によって与えられる外れ値によって平均値が大きく変わることを防ぐためである。これより、どの濃度においても概ね $r_w/L > 1.0$ については一定値を示している。また、図 5.4 と同様に、$r_w/L < 0.5$ では壁によって物理的に回転を阻害されるため、どの濃度においても繊維の回転周期が長くなっている。以上より、回転周期についても $l_w/L = 1.0$ として分布関数を計算する。

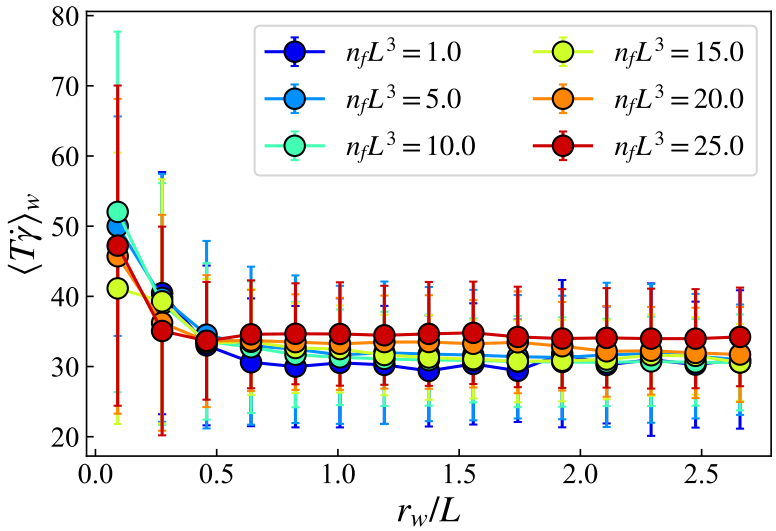


図 5.6: 各濃度における繊維の規格化回転周期 $T\dot{\gamma}$ の壁面距離 r_w 依存性。エラーバーは標準偏差を示している。

5.3.3　繊維の回転運動の濃度依存性

多数本の繊維を含む系における繊維端の回転軌道の一例を図 5.7 に示す。図 5.7 (a) は準希薄系 ($n_f L^3$ = 8.2) における回転軌道の一例、図 5.7 (b) は濃厚系 ($n_f L^3$ = 10.0) における回転軌道の一例を示す。図 4.6 で示した通り、希薄系では Jeffery 軌道に沿った繊維の回転運動が観測されたのに対し、準希薄及び濃厚系における繊維の回転軌道は Jeffery 軌道から大きく逸れ、別の回転軌道への遷移を続けていることが分かる。これは、Jeffery 理論では考慮されていない繊維間の流体相互作用や濃度上昇に伴う速度場の乱れが原因であるものと考えられる。

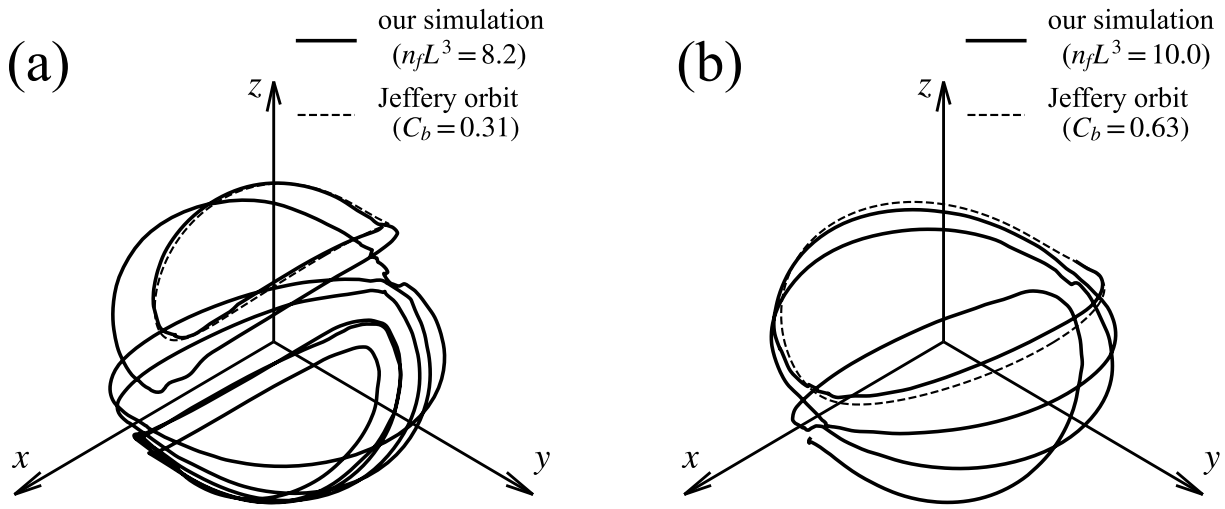


図 5.7: 準希薄 · 濃厚系における繊維端の回転軌道 (r_p = 10, γ = 0 ~ 100)。実線は本計算におけるシステム中のの繊維端の回転軌道の一例、破線は r_{ef} = 0.36r_p を用いて計算した Jeffery 軌道。(a) 準希薄系: ($n_f L^3$ = 8.2)。 破線は C_b = 0.31 の Jeffery 軌道。(b) 濃厚系: ($n_f L^3$ = 10)。 破線は C_b = 0.63 の Jeffery 軌道。

続いて、$C_b(t)$ の定常分布の繊維濃度依存性を図 5.8 に示す。破線は $n_f L^3$ = 20 における初期状態の分布関数を示している。ここで、初期状態の C_b の分布は濃度によらずおおよそ一定であることを付録 C.4 節において確認している。準希薄領域 ($1 \leq n_f L^3 \leq 10$) では、初期状態の配向と比較して、低 C_b 側の確率分布の値が上昇していることが分かる。この結果は、流体相互作用によって繊維が粘性散逸を最小にするように渦度方向に配向していることが原因だと考えられる。一方で、濃厚領域 ($n_f L^3 > 10$) においては、低 C_b 側の確率密度が低下したのに対して、高 C_b 側の確率密度が上昇していることが分かる。これは、繊維の排除体積効果によって渦度方向への配向が阻害され、せん断勾配面の方向に配向しているものと考えられる。

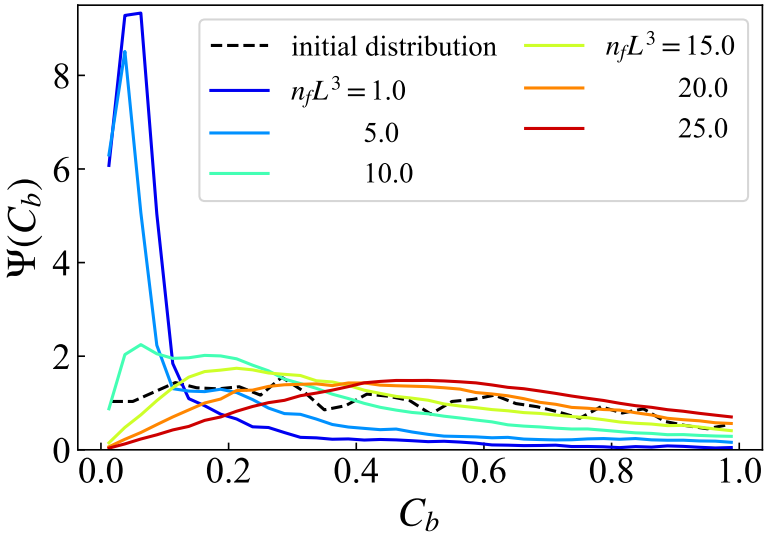


図 5.8: $C_b(t)$ の定常状態における分布関数 $\Psi(C_b)$ の濃度依存性。実線は各 $n_f L^3$ における分布関数を示し、破線は $n_f L^3$ = 20.0 における初期状態の分布関数 $\Psi(C_b(0))$ を示している。

また分布の平均値 $\langle C_b \rangle$ を図 5.9 に示す。これより、$\langle C_b \rangle$ は計算した濃度範囲においては、濃度上昇ともに単調に増加していることが分かる。このような傾向は、先行研究のシミュレーションによる結果と同様である [2]。

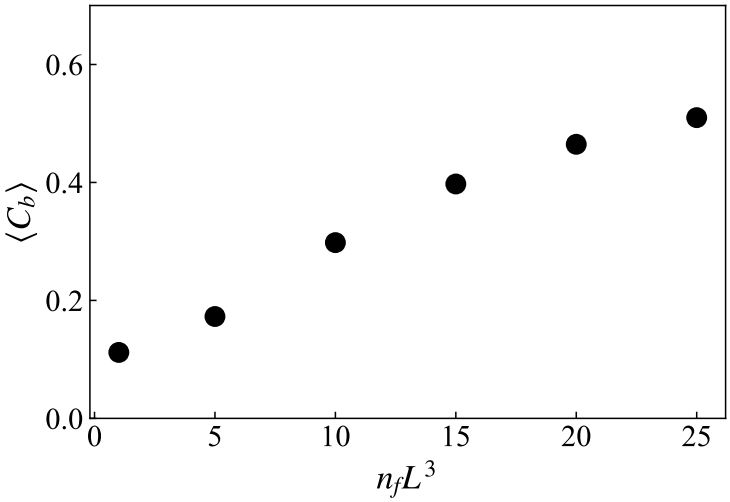


図 5.9: 定常状態における軌道定数 C_b の平均値の濃度依存性

規格化した繊維の回転周期 $T\dot{\gamma}$ の定常状態における分布関数 $\Psi\left(T\dot{\gamma}/(T\dot{\gamma})_{\mathrm{dilute}}\right)$ を図 5.10 に示す。ここで、$(T\dot{\gamma})_{\mathrm{dilute}}$ は、図 4.3 に示した希薄極限 $(N_f = 1)$ における無次元化された回転周期である。図 5.10 より、繊維濃度の上昇と主に分布関数はブロードになり、$T\dot{\gamma}$ の平均値が増加していることが分かる。また、分布関数の形状は非対称であり、高 $T\dot{\gamma}$ 側の確率密度は、低 $T\dot{\gamma}$ 側の確率密度と比較してブロードになっていることが分かる。これらの結果は繊維間の相互作用が強くなるにつれて、先行研究と同様に繊維の回転運動は遅くなっていることを示す [15, 50, 106]。ここで注目すべき点が分布関数の非対称性である。この非対称性は、繊維間の相互作用はどちらかというと繊維の回転運動を阻害するように働いていることを意味している。

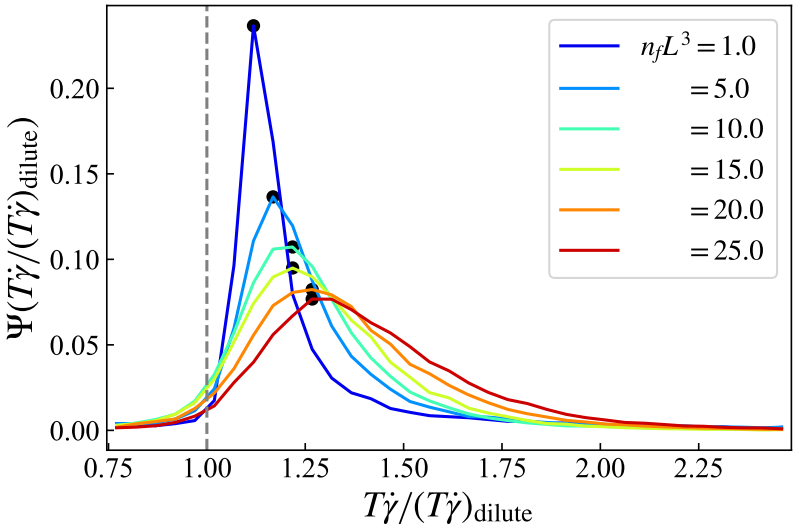


図 5.10: 各繊維濃度 $n_f L^3$ における規格化された繊維の回転周期 $T\dot{\gamma}$ の確率密度分布。黒丸の点は分布関数の頂点を示している。破線で示す通り、希薄極限では分布関数はデルタ関数となる。

5.3.4　配向分布関数の濃度依存性

各濃度における繊維の配向分布関数 $\Psi(\phi)$ を図 5.11 に示す。この時、各繊維の配向角 θ が $\theta_{\mathrm{th}} = \tan^{-1}(1/r_p)$ を下回る場合は、繊維の方向ベクトル $\boldsymbol{p}$ の x, y 成分が粒子の解像度を下回るので計算から除外している。図 5.11 より、準希薄領域では分布関数のピーク位置 $\bar{\phi}$ が $\bar{\phi} < 0$ となっているのに対して、その他の濃度はほぼ全て $\bar{\phi} \simeq 0$ となっている。また、分布形状については準希薄領域の二つの結果と比較して、$n_f L^3 \geq 10$ の濃厚領域はブロードになっている。$n_f L^3 \geq 10$ 以降のデータについてはほとんど濃度依存性が観測されていない。この傾向は計算から除外する配向角の閾値を $\theta_{\mathrm{th}}\pi/6$ のように大きくしても変化しなかった。また、準希薄系、濃厚系ともに破線で示した $N_f = 1$ の結果と比較するとピーク位置が高くなり、分布が狭くなっている。これは、多数本の繊維を含む系では、希薄極限の時よりも繊維が流動-渦度平面 ($x - z$ 平面) 付近に配向している確率が高いことを示している。図 5.10 で言及した通り、繊維間の相互作用が平均的には繊維の回転運動を阻害するように働いていることが原因だと考えられる。同様の傾向は Lindström ら [50] のシミュレーションでも示されている。

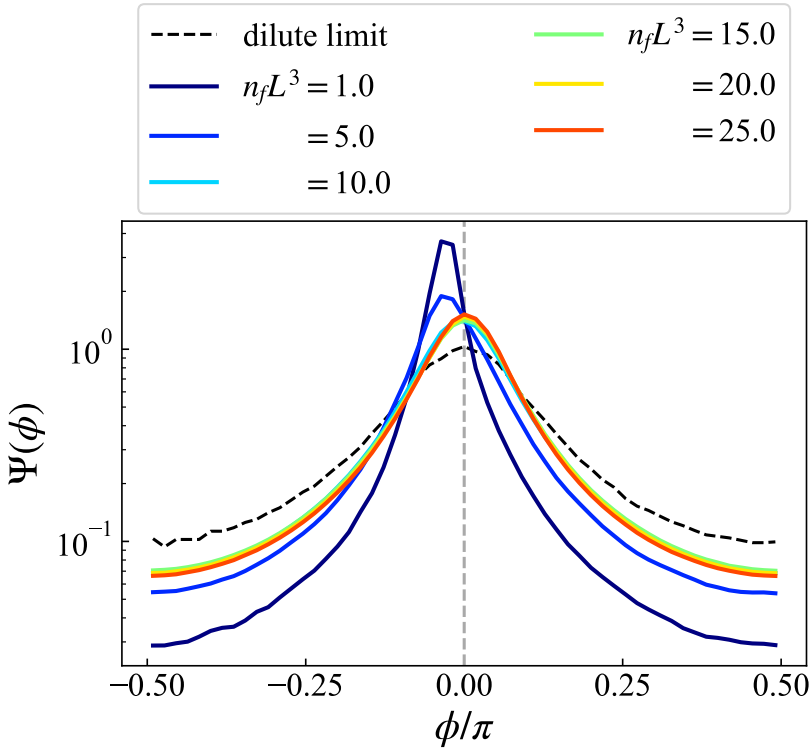
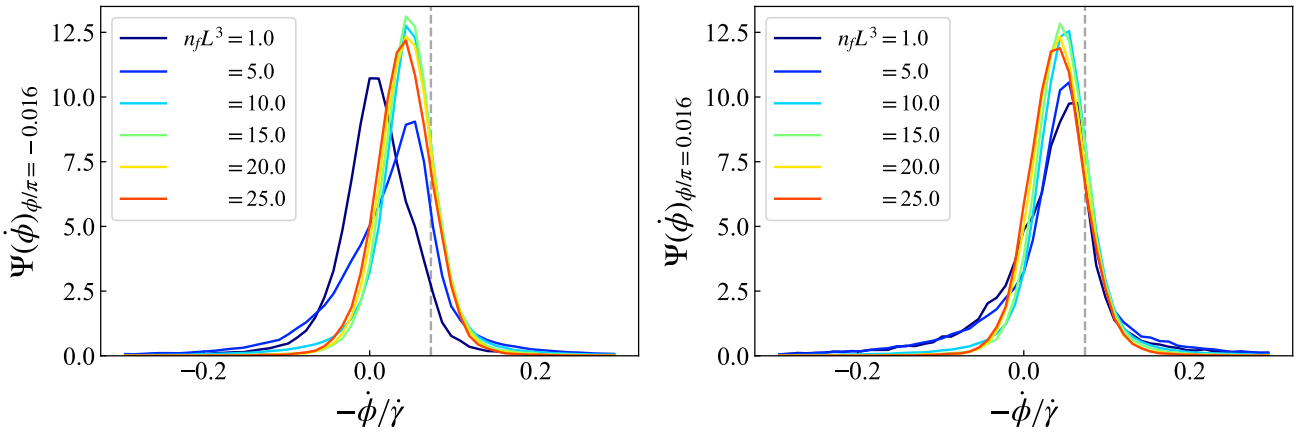


図 5.11: 各濃度における繊維の配向分布関数 $\Psi(\phi)$。波線は図 4.5 に示した希薄極限 ($N_f = 1$) における分布関数である。

Stover ら [14] による実験や Lindström ら [50] によるシミュレーションでは、ピーク位置の濃度依存性はごく僅かであった。これより、$n_f L^3 \geq 10$ については先行研究と同様の結果を示していることがわかる。準希薄領域の二つの計算においては他の濃度とは異なり、分布関数のピーク位置は $\bar{\phi} < 0$ となった。実際に、Stover ら [14] の実験においても、わずかではあるが $n_f L^3 \leq 5$ で同様の方向へのピーク位置の遷移が確認されており、本研究のアーティファクトではないものと考えられる。ただ、$\bar{\phi} < 0$ となるのは自明な結果ではない。繊維濃度の上昇に伴って周囲の繊維から流体相互作用を受けると、現象論的には角速度の揺らぎのような効果を示すと期待される。この時、繊維が等方的に分布していれば、このゆらぎは平

均が 0 のホワイトノイズのようなものだと考えられる。これは図 5.3 の結果からも内部領域であれば概ね妥当な仮定だと考えられる。一方で、せん断によって誘起される繊維の回転方向は常に同じ方向である。このようなせん断による回転方向の非対称性によって、等方的なゆらぎを受けた場合でも $\bar{\phi} > 0$ の方向にピークが推移すると考えられる。この結果は、同様のモデル化を行った Folgar and Tucker ら [27] による数値計算の結果でも示されている。準希薄系における結果はこれらの結果に反するものである。この結果を説明する一つの仮説としては、準希薄領域では角速度のゆらぎを等方的だとはみなせないということが挙げられる。

実際に、準希薄領域のピーク位置 $\phi \simeq -0.016$ とその対称な位置 $\phi \simeq -0.016$ における角速度の分布関数 $\Psi(\dot{\phi})$ を図 5.12 に示す。ここで、データの確保のために注目する角度 $(\phi \simeq -0.016, 0.016)$ の $\pm\pi/500$ の範囲内のデータについて解析を行った。また、本研究のシステム設定では図 1.3 に示す通り角速度が負の値の時に順方向に回転するため、横軸は符号を反転させている。よって、図 5.12 においては $-\dot{\phi}/\dot{\gamma} > 0$ の方が角速度が「大きい」という表現をする。希薄極限であれば式 (1.1)、もしくは図 4.4 の破線で示す通り、角速度は流動方向 $\phi = 0$ に対して対称である。図 5.12 では $n_f L^3 \geq 5$ についてはどちらの角度においてもほとんど同じ位置にピークを持っており、概ね対称だと言える。一方で、$n_f L^3 = 1.0$ については図 5.12(a) の分布関数のピーク値の方が小さい。つまり、図 5.11 でピーク値を持つ角度の角速度は対称な位置と比較して明らかに小さくなっている。また、$n_f L^3 \leq 5$ の準希薄領域では低 $-\dot{\phi}/\dot{\gamma}$ 側の確率密度が高 $-\dot{\phi}/\dot{\gamma}$ と比較してブロードになっており、非対称な形状になっている。$n_f L^3 \geq 10$ の濃厚領域では概ね対称な分布関数となっている。よって、前述の仮説の通り、図 5.11 で準希薄領域のピーク位置が $\phi < 0$ 側にあるのは角速度のゆらぎが非対称であり、大きく減速されていることが原因だと考えられる。



(a) $\phi/\pi \simeq -0.016$　　(b) $\phi/\pi \simeq 0.016$

図 5.12: 各濃度における繊維の角速度 $\dot{\phi}$ の確率密度分布関数。破線は式 (1.1) に示した希薄極限における理論解。

5.3.5　定常粘度

第 3.1.2 項より、繊維懸濁液の定常粘度は壁が受ける応力 σ_{21} と速度勾配の平均値 $\langle \partial u_x/\partial y \rangle$ によって計算される。まず、定常状態における速度勾配の平均値の濃度依存性を図 5.13 に示す。これより、濃度上昇とともに速度勾配の値は単調に減少していることが分かる。よって、インプットパラメータとしてのひずみ速度 $\dot{\gamma}_{\mathrm{in}} = 0.01$ を使用すると、せん断粘度を低く見積もってしまう可能性がある。速度勾配に関する詳細な議論は第 6.2.3 項にて行う。

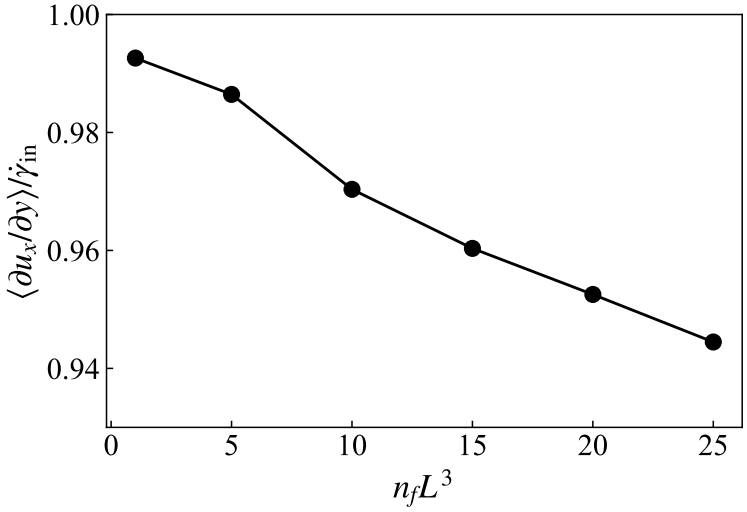


図 5.13: 定常状態における速度勾配の平均値 $\langle \partial u_x/\partial y \rangle$ の濃度依存性。縦軸はインプットパラメータとしてのひずみ速度 $\dot{\gamma}_{\mathrm{in}}$ で規格化されている。

図 5.14 に各濃度の粘度成長曲線を示す。各濃度のグラフはそれぞれ短時間側で最も粘度が高く、そこから徐々に粘度が振動しつつ緩和していく過程が観察される。この粘度の振動は繊維の回転運動を反映したものである。また、短時間側のグラフ形状は実験によって得られる粘度成長曲線の形状とは異なっている [11]。実験では短時間側において粘度の値は 0 から徐々に上昇していき、定常値付近に落ち着くが、本研究では短時間側から逆に粘度が下がっていっている。これは、せん断のかかり方及び音速による影響だと考えられる。本研究の場合、シミュレーションの 1 ステップ目から壁速度は u_{wall} であり、真にステップ的なせん断がかかっている。また、本研究で指定している音速の値は現実系と比較すると遥かに小さい値になっているため、流体の密度変化は即座に追随するわけではない。従って、壁と流体の間に大きな速度差が生じ、式 (2.4) の右辺第二項に基づく大きなせん断応力がかかる。計算を続けることによって運動量が伝播し、理想的な速度勾配に近づくにつれて応力が緩和していくものと考えられる。粘度成長曲線まで実験を再現する場合には、短時間側の時間刻み幅やせん断の掛け方に工夫が必要だと考えられる。

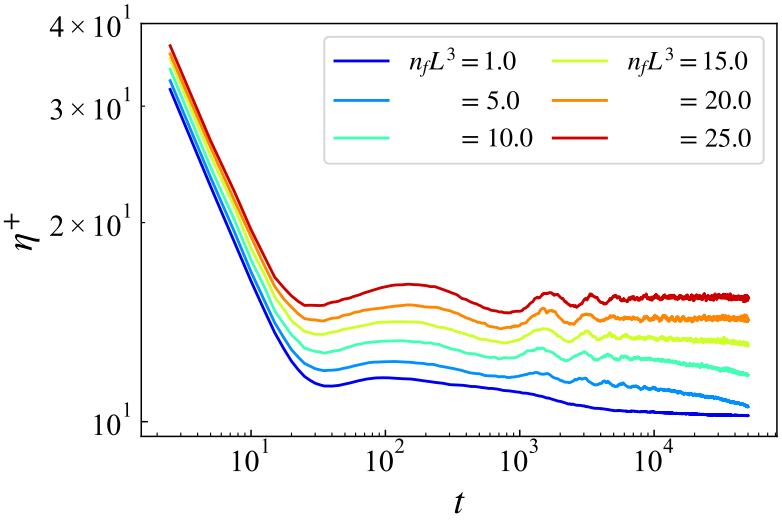


図 5.14: 各濃度における粘度成長曲線 η^+。溶媒粘度は $\eta_{\mathrm{sol}} = 10$ であり、ひずみ速度は定常状態の速度勾配の平均値を用いた。

続いて、図 5.15 に定常せん断粘度の濃度依存性を示す。図 5.15 より、本計算で得られたせん断粘度は濃度上昇とともに増加していることが分かる。また、$n_fL^3 < 5$ の二点については破線で示す準希薄領域の理論と概ね一致しており、濃度上昇に伴って理論では考慮されないような排除体積効果やより近接的な流体相互作用によりさらに濃度が上昇している。$n_fL^3 = 10, 15$ の二点については、十分には定常状態に達していないので、さらに長時間の計算を行うと配向が緩和して粘度が下がると考えられる。これより、配向状態から算出した Shaqfeh らの理論と比較すると、概ね妥当な粘度の値が得られているものと考えられる。先行研究の実験や計算との比較は第 6.2.2 項で行う。

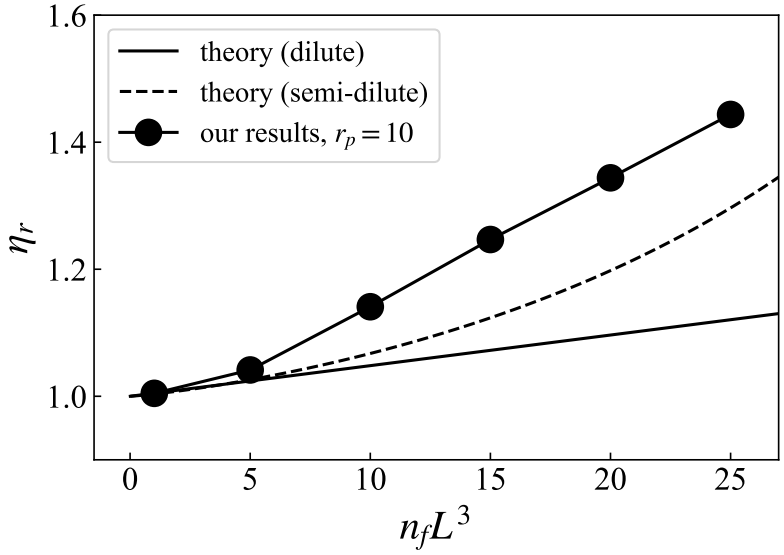


図 5.15: 定常状態における比粘度の濃度依存性。シンボルは本研究による結果、実線は Batchelor [34] による希薄領域における粘度予測式であり、破線は式 (1.14) に示した Shaqfeh ら [37] による準希薄領域の粘度予測式である。各理論式の計算には $\langle A_{1122}\rangle = 0.021$ を用いた。実際に本計算で得られた $\langle A_{1122}\rangle$ の濃度依存性は付録 C.1 節の図 C.3 に示している。

5.3.6　回転自由度の導入による影響

図 4.2 の結果や第 1.6 節における記述より、希薄領域において回転自由度のない MPS 法では繊維の回転運動を再現できないことは自明である。しかし、このような繊維の回転運動を再現しないモデルでせん断流れの計算を行った場合の結果は流体相互作用の存在によって自明ではない。そこで、回転自由度のない通常の MPS を用いて多体の繊維を含む計算を行い、その結果を本モデルと比較する。

まずは、図 5.16 に三つの濃度 $n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ における $\gamma = 0, 150$ のスナップショットを示す。左列に示す初期状態は図 5.1 と同様にランダムな配向のものを使用した。図 5.16 の右列より、せん断をかけるとどの濃度領域においてもほぼ全ての繊維が xz 平面上に位置していることが分かる。また、渦度方向を向く繊維も少なく、特に x 方向 (流動方向) への配向が顕著であることが見てとれる。

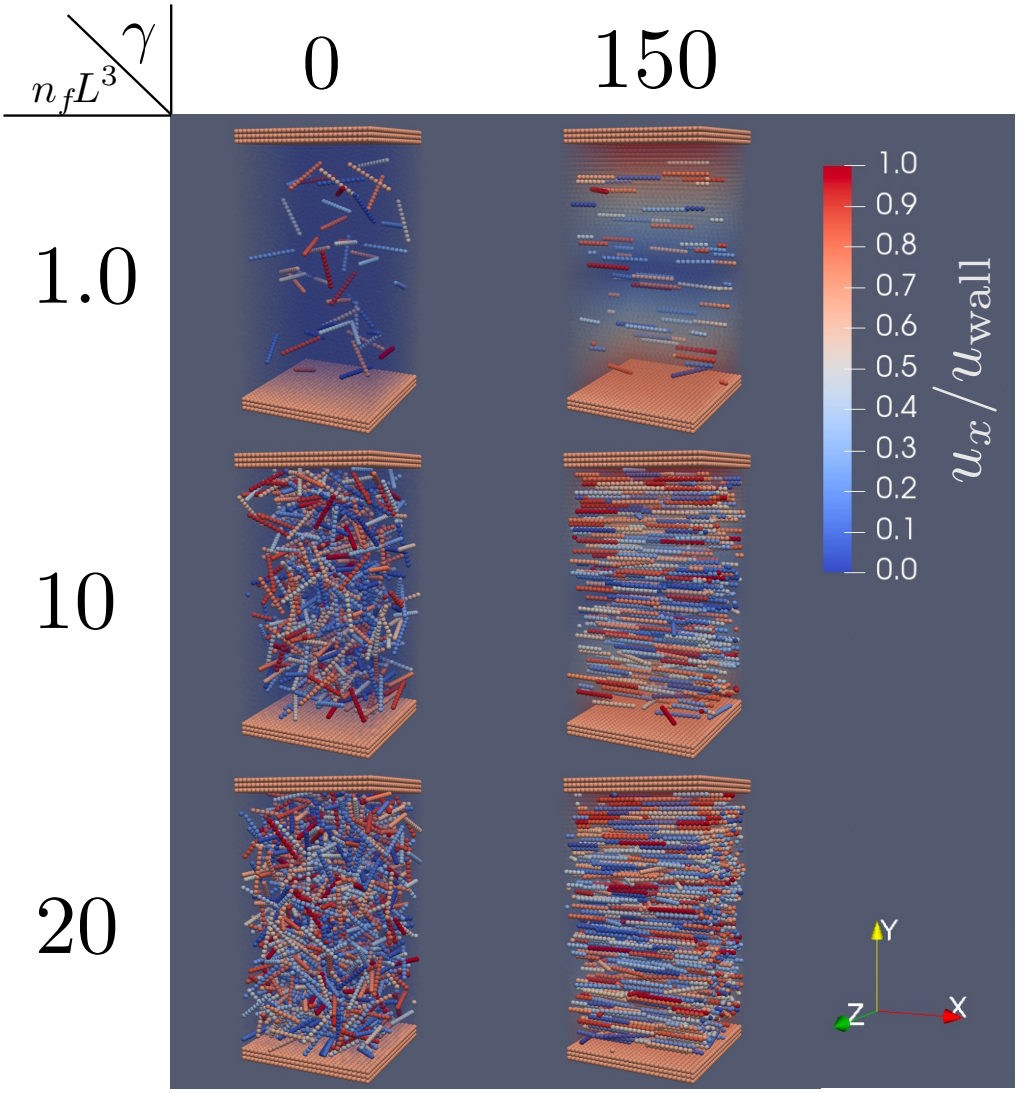
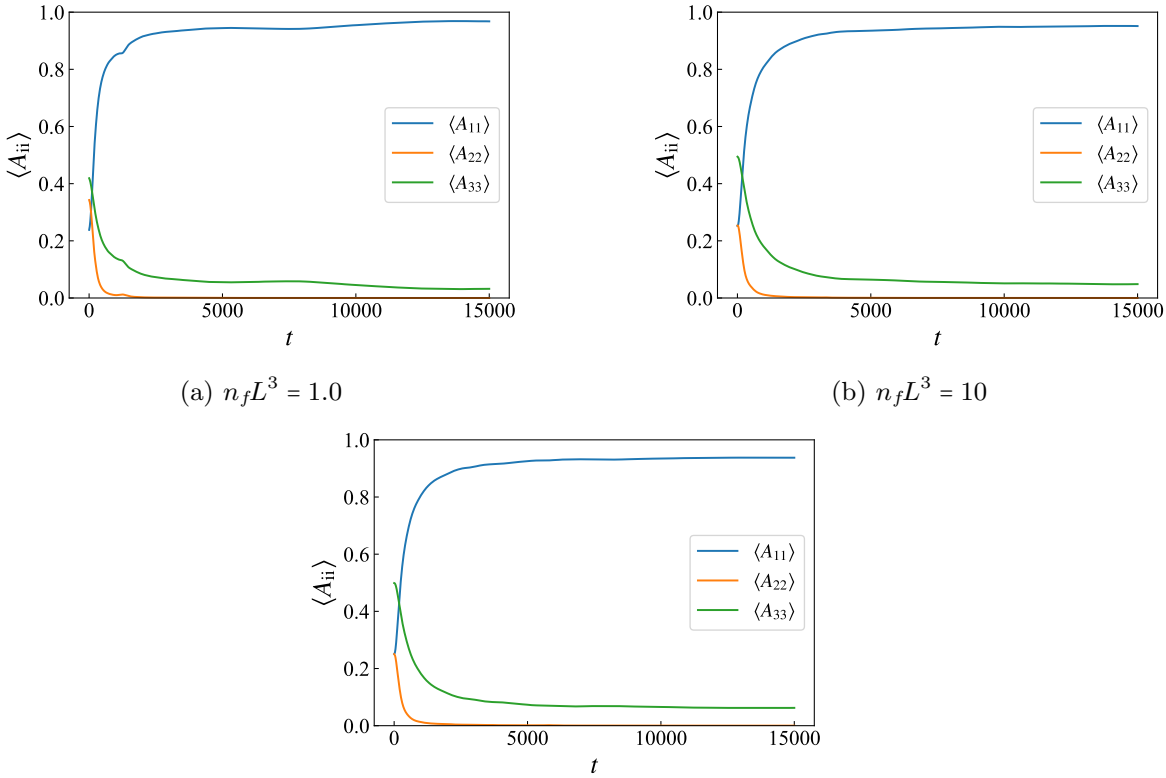


図 5.16: 通常の MPS を用いたシミュレーションのスナップショット。各濃度における初期状態 ($\gamma = 0$) と定常状態 ($\gamma = 150$) を示している

続いて、三つの濃度について二階の配向テンソルの平均値 $\langle A_{\mathrm{ii}} \rangle$ の時間発展を図 5.17 に示す。図 5.2 と比較すると、どの濃度においても繊維が回転していないためグラフの振動が観測されず、流動方向の成分 $\langle A_{11} \rangle$ の値が非常に大きいことが分かる。また、特に顕著なのが $\langle A_{22} \rangle$ 成分がどの濃度においても即座に

0 になっていることである。これは、xz 平面上に繊維が配向した際にトルクがかからないため、そこにトラップされていることを示している。それ以降は繊維の回転が生じ得ないので、流動場の乱れがなく、繊維が xz 平面から抜け出すことはない。結果として、ほぼ全ての繊維が xz 平面上に配向していることが分かる。



(a) $n_f L^3 = 1.0$　　(b) $n_f L^3 = 10$

(c) $n_f L^3 = 20$

図 5.17: 通常の MPS 法を用いて計算した $n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ における 2 階の配向テンソル $\langle A_{ii} \rangle$ の時間発展。

繊維の回転軌道 C_b の分布についても図 5.18 に示す。図より、ほとんど濃度依存性がなく、$C_b \simeq 1.0$ 付近に分布が集中しているため、多くの繊維が流動方向に配向していることが分かる。また、$C_b \simeq 0.7$ 付近に小さなピークがあるが、その原因は不明である。図 5.8 の結果と比較すると違いは明らかである。また、多くの先行研究における実験結果 [14, 15] や計算結果 [41, 42, 50] では $0.3 \leq C_b \leq 0.6$ 付近にピークを持つ分布になっており、図 5.18 の結果は全く異なっている。ここからも、繊維懸濁液のシミュレーションを行うにあたって繊維の回転運動を正しく再現することの重要性が分かる。

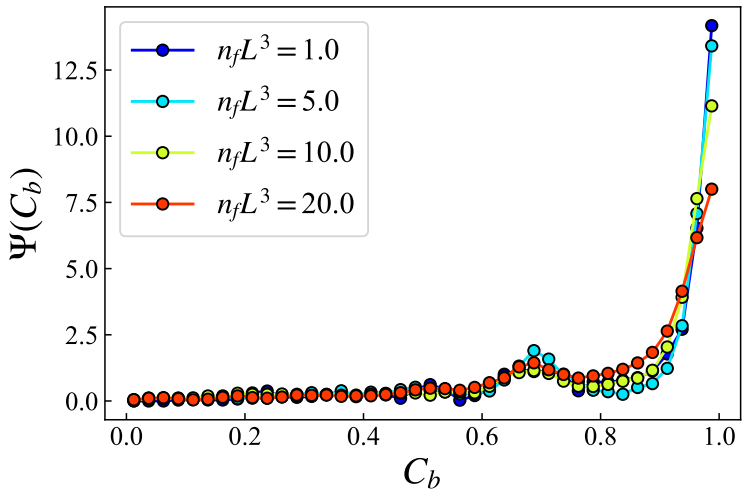


図 5.18: 回転自由度を導入していない場合の軌道定数 C_b の分布関数

最後に、本モデルを用いた比粘度 $\eta/\eta_0 - 1$ と、通常の MPS 法を用いて計算した比粘度との比較を図 5.19 に示す。違いは明らかであり、本モデルでは濃度上昇に伴って粘度上昇が観測される一方で、通常の MPS 法では粘度上昇はわずかである。これは、図 5.17 や図 5.18 で示した通り、ほぼ全ての繊維が流動方向に配向するため、繊維の存在が粘度上昇に寄与しないためである。繊維の回転がないため、固体粒子間のポテンシャルに由来する拘束力が働かず、単なる液体粒子が流れている状態と変化がほとんどない状況になっている。従って、繊維濃度の増加に伴った粘度上昇はごくわずかとなる。この結果からも繊維懸濁液の粘度予測をする上で、繊維運動を理解することやシミュレーションで繊維の回転運動を再現することの重要性が強調される。

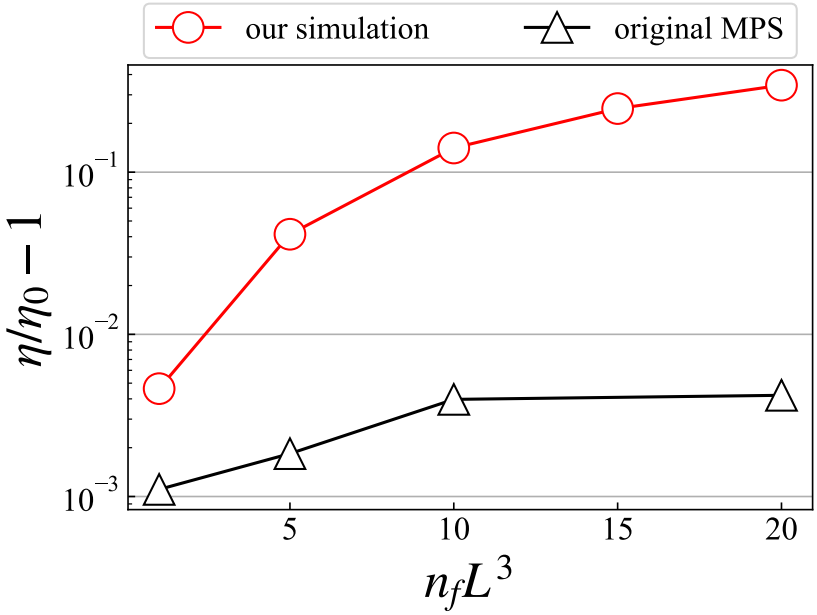


図 5.19: 従来手法 (回転自由度なし) と本手法の比粘度との比較

5.3.7　初期状態依存性

本研究で対象とする繊維懸濁液はコンポジット材料のように粘性が支配的で Reynolds 数が低い流体である。このような懸濁液では、これまでに受けたひずみ速度の履歴や静置時間等、測定の初期状態によって例えば粘度成長曲線の結果に違いが見られることが知られている [108]。そこで、本研究においても極端な初期状態の例として全ての繊維が x 方向に配向した状態からの計算を行う。初期状態の違いによって、最終的な定常状態や粘度、配向の時間発展の仕方の違いについて調べる。また、システム設定は初期状態で全ての繊維が x 方向に配向している、つまり $\phi_0 = 0, \theta_0 = \pi/2$ であること以外は本章の他の計算と同様である。

まずは、シミュレーションのスナップショットを図 5.20 に示す。左列に示す通り、初期状態においては繊維は全て x 方向に配向しているが、せん断がかかるにつれて徐々にランダムな配向に推移している。$n_f L^3 = 1.0$, $\gamma = 200$ のスナップショットに注目すると、図 5.1 に示したものと比較して渦度方向への配向が弱いことが分かる。一方で、$\gamma = 400$ では渦度方向への配向が進んでおり、初期配向の影響によって繊維の配向変化が遅れていることが予測される。

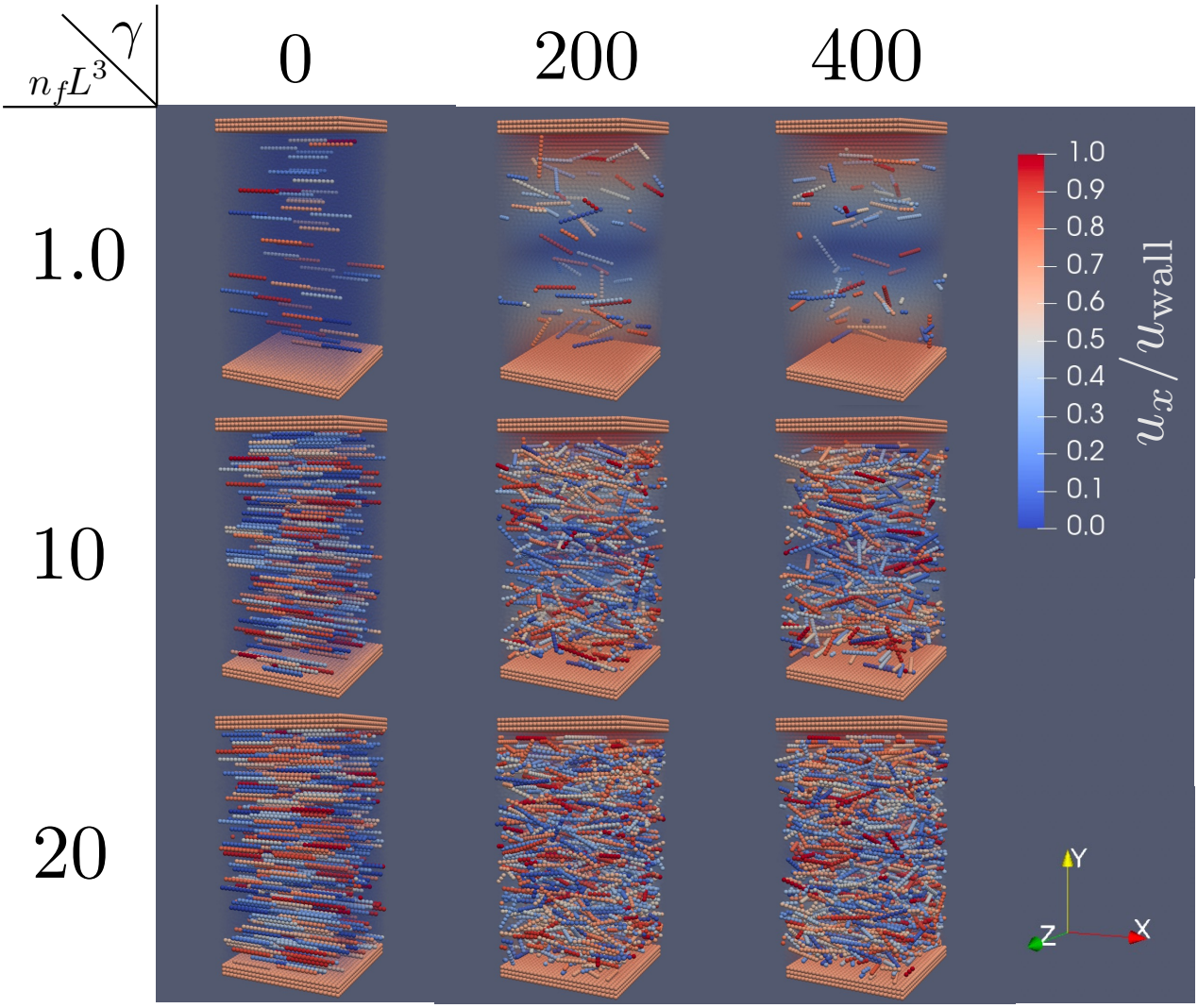
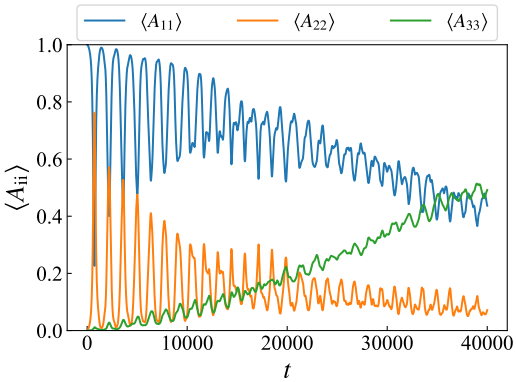
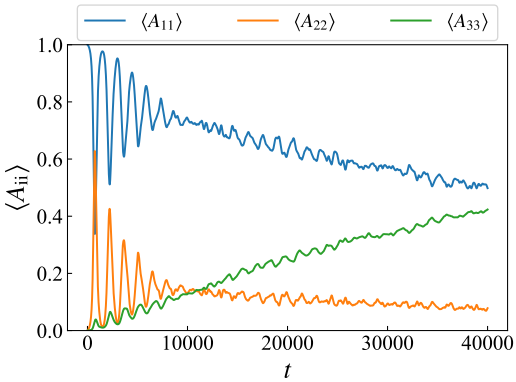


図 5.20: 各濃度における初期状態 ($\gamma = 0$) と定常状態 ($\gamma = 200$) におけるスナップショット。

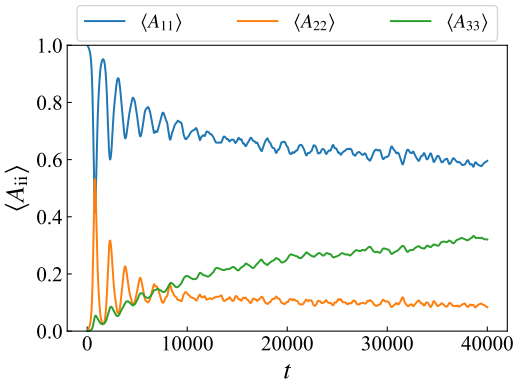
続いて、三つの濃度について二階の配向テンソルの平均値の時間発展を図 5.21 に示す。A_{11}, A_{22} は、初期状態で全ての繊維の配向が揃っているので各繊維の周期が同調し大きく振動している。その後計算が進むにつれて濃度が高いほど早く各繊維の周期がズレていくことでグラフが減衰していく。また A_{33} 成分はどの濃度においても時間発展とともに値が大きくなっている。図 5.21(a) において $A_{11} \leq A_{33}$ となるのはおおよそ $t = 38000$ である。同じ濃度でランダム配向の初期配置で行った図 5.2(a) ではおおよそ $t = 10000$ あたりで値の逆転が起きており、初期配置によって繊維配向の発展の仕方に遅れが生じていると解釈できる。



(a) $n_f L^3 = 1.0$



(b) $n_f L^3 = 10$



(c) $n_f L^3 = 20$

図 5.21: $n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ における 2 階の配向テンソル $\langle A_{\mathrm{ii}} \rangle$ の時間発展。

初期配向の依存性を調査する上で実験的に最も気になることは、最終的な定常状態の違いである。定常状態の行き着く先が初期配向に依存するのであれば、実験の再現性にも関わるためこの問題は重要である。図 5.22 に、図 5.20 のように初期配向が流動方向に向いている計算 (align) と図 5.1 のように初期配向がランダムである計算 (random) における軌道定数 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展を示す。グラフは、本研究の計算範囲で完全な定常状態が得られた $n_f L^3 = 25$ の結果である。図 5.22 より、本モデルの計算では初期配向が異なっていても、十分にせん断をかければ同じ定常状態が得られるということが分かる。この結果から、得られる定常状態は初期配向には依存しないことが示唆された。ただ、今回の結果は流体相互作用のみによって与えられていることに注意し、接触摩擦等の相互作用がある場合は含まないことに注意していただきたい。

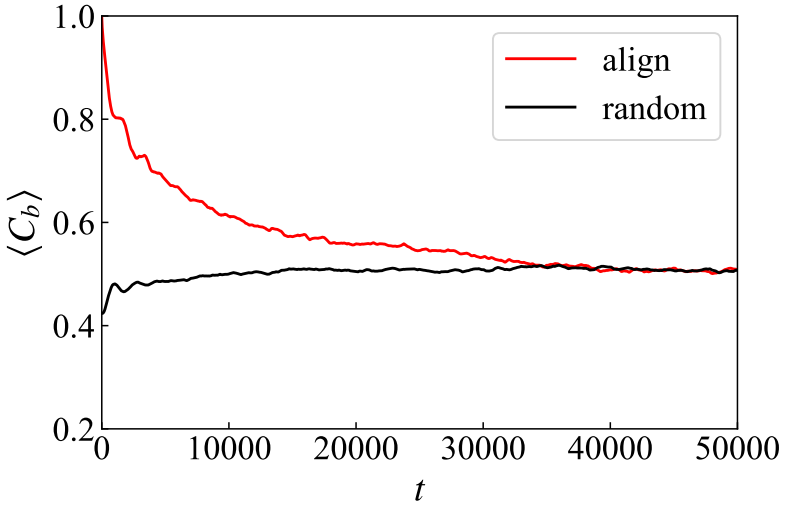


図 5.22: 異なる初期配向による平均の軌道定数 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展の比較 ($n_f L^3 = 25$)。

また、図 5.23 に random と align における粘度成長関数を示す。黒線で示す random の結果は、振動が減衰した後はほぼ一定の粘度値を示している。一方で、赤線で示す align の結果は全ての繊維の初期配向が揃っていたため、random の結果よりも短時間側の振動が大きい。振動が減衰した後も粘度の値は緩やかに減衰していき、最終的には random の定常値と一致する。よって、得られる定常粘度についても本研究で計算した範囲では初期配向にはほとんど依存しないことが示唆された。

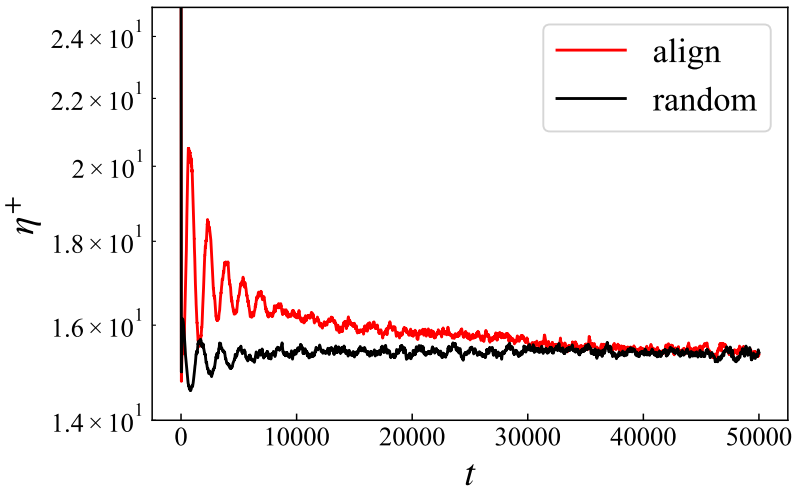


図 5.23: 異なる初期配向における粘度成長関数の比較。

第 6 章

考察

6.1 希薄系における繊維運動

実際には、本モデルを用いて長時間のシミュレーションを続けると、最終的には繊維が Jeffery 軌道から逸脱する。こういった挙動は、Jeffery 軌道の解の性質、及び本モデルの特性に起因するものである。Jeffery 軌道はどの C_b に対しても中立安定 (neutrally stable) な解であり [20]、摂動を受けた際も $C_b = 0, 1$ 以外の軌道は安定ではない [21]。従って、繊維の運動や周囲流体の流れ場が摂動を受けると、軌道は他の Jeffery 軌道に遷移する。我々の MPS を用いたモデルでは、粒子を用いて離散化するため、繊維の運動や流れ場にも離散化誤差に起因する揺らぎが含まれる。こういった揺らぎによって、繊維は初期状態における Jeffery 軌道から逸脱する。本研究においては、最終的には Jeffery 仮説の通りにエネルギー散逸を最小にするように渦度方向に配向するものと予想される。実際に長時間の計算を行うと、図 6.1 に示す通り、どの θ_0 からも $C_b = 0$、つまり渦度方向に配向することを確認している。また、本研究における固体壁の存在や流体の慣性も、ある程度の影響を及ぼす可能性がある。いずれにしろ、図 4.6 に示すように、本手法は他の先行研究 [42, 44, 109] と同様に、あるひずみ量までは Jeffery 軌道を合理的に再現している。

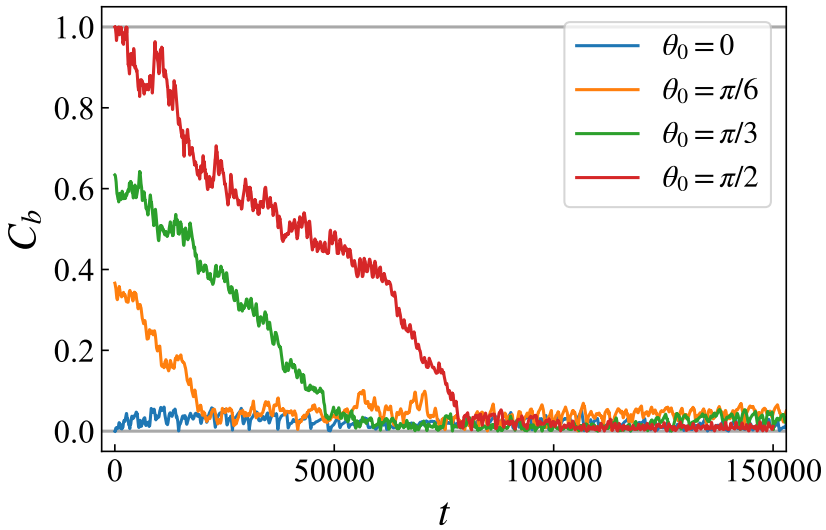


図 6.1: 異なる θ_0 における $C_b(t)$ の時間発展 ($\mathrm{Re}_f = 0.1$)。

6.2　濃厚系の計算

6.2.1　繊維配向の先行研究との比較

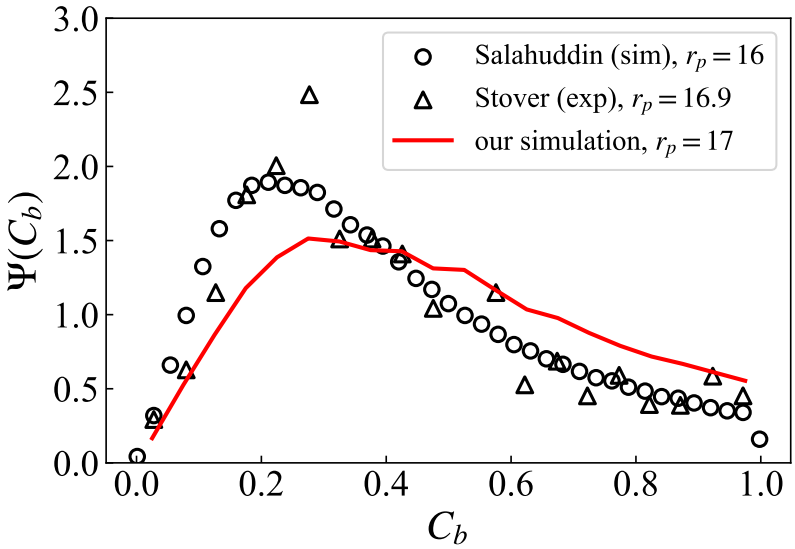


図 6.2: 各計算における軌道定数の分布関数 $\Psi(C_b)$。○: Salahuddin ら [53] によう Lattice-Boltzmann 法を用いてシミュレーション ($n_f L^3 = 20, r_p = 16$)、△: Stover ら [14] による実験 ($n_f L^3 = 20, r_p = 16.9$)、— : micropolar-MPS 法 ($n_f L^3 = 20, r_p = 17$)。

本モデルによって得られる繊維配向分布を評価するために Stover ら [14] による実験結果、および Salahuddin ら [53] によるシミュレーション結果との比較を行う。Salahuddin らのシミュレーションは Lattice-Boltzmann 法を用いて流体と繊維の運動を連成した計算である。これらの先行研究と比較を行うために、$L_x = L_z = 50, L_y = 75$ の合計 $N = 187500$ 粒子を用いたシミュレーションを行った。アスペクト比および繊維濃度は先行研究と同様に $r_p = 17$、$n_f L^3 = 20$ とした。

図 6.2 に、Salahuddin らの計算、Stover らの実験および本研究による軌道定数 C_b の分布関数を示す。どの結果においても分布のピークは 0.2 ~ 0.3 付近に位置しており、その点では先行研究と一致していると言える。一方で、本研究の結果はピークの高さがやや低く、その分 $C_b \sim 0.6$ 付近の密度分布が大きくなっていることが分かる。この原因については以下の二つの事象が考えられる。一つは有効アスペクト比の違いである。本研究の有効アスペクト比は第 4.2.1 項で言及した通り、一般的な繊維の有効アスペクト比の約半分となっている。これによって、繊維の回転周期が短くなるために繊維間相互作用が生じる頻度、密度が変わりうる。この影響を受けて配向分布の形状が変わりうる。もう一つは計算時間の長さである。Butler ら [2] による Review では $\langle C_b \rangle (t)$ の値が十分に定常状態になるには長時間の計算が必要であることが指摘されている。図 6.2 に示した計算はひずみ $\gamma = 210$ までの計算である。この時の軌道定数 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間変化を図 6.3 に示す。これより、わずかではあるが減少傾向が見られ、さらに長時間の計算によって図 6.2 の低軌道側の確率密度が上昇する可能性がある。今回比較した Salahuddin らのシミュレーションでは、$\gamma = 300 \sim 2000$ のようなさらに長時間の計算を行って分布を求めており、より正確な比較をするためには更なる長時間の計算を行う必要がある。

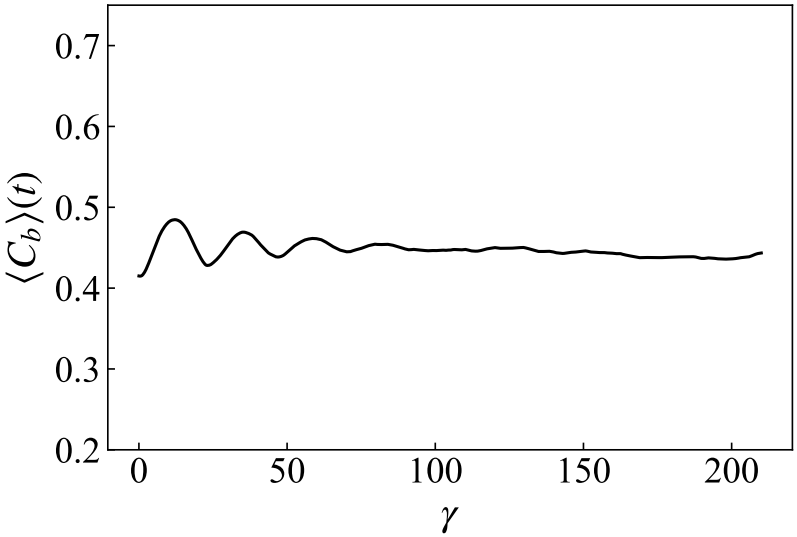


図 6.3: 軌道定数 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展 ($n_f L^3 = 20, r_p = 17$)。

6.2.2　定常粘度の濃度依存性

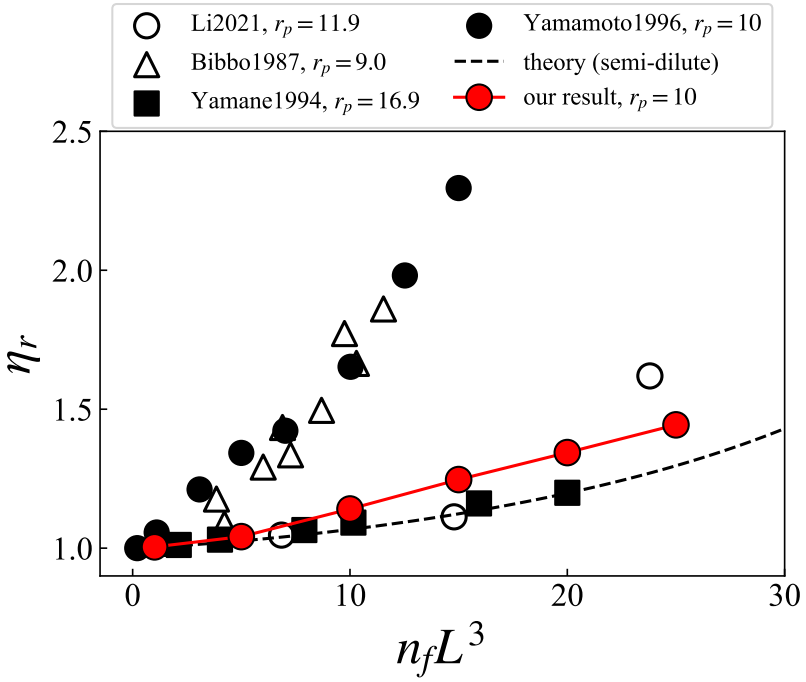


図 6.4: 相対粘度 η_r の濃度依存性。○: Li ら [9] (実験)、△: Bibbo [11] (実験)、■: Yamane ら [41] (計算)、• : Yamamoto ら [107] (計算)、破線: Shaqfeh ら [37] による準希薄領域の粘度予測式 (式 (1.14), $\langle A_{1122} \rangle = 0.023$)

参考のために本研究で得られた定常粘度の濃度依存性を先行研究の結果と比較する。図 6.4 に先行研究及び本モデルによる定常粘度の濃度依存性を示す。Yamane ら [41]、Yamamoto ら [107] によるシミュレーションはどちらもバックグラウンドフローを仮定しており、Yamane らは短距離相互作用のみ、Yamamoto らは Oseen テンソルに基づく長距離相互作用も含有している。また、Li ら [9] 及び Bibbo

ら [11] の結果は実験による結果である。図 1.2(a) でも示した通り、先行研究間においてもデータの一様性は得られていないことが分かる。これはシミュレーションモデルの違いやそもそもの実験においても再現性のあるデータを得ることが難しい [12] ことが原因である。前項で議論した通り、繊維配向は長時間の緩和があるものと推測され、繊維は Brown 運動を行わないため真の定常状態が得られる保証は全くない。従って、実験、計算ともにどれくらい長くせん断を印加したかによって得られる定常粘度の値が変動するものと考えられる。厳密にいうと、本研究の繊維は有効アスペクト比が通常の約半分となっているので r_p が一致したからといってデータが一致する保証はない。前項で議論した通り、本モデルにおいて何を基準として先行研究のデータとの比較を行うかについては、今後更なる検討が必要だと考えられる。また、グラフ形状に着目すると繊維の濃度の上昇とともに、せん断粘度の非線形的な上昇が多くの先行研究で観測されている [2, 12, 37]。しかし、我々の計算の濃度依存性は概ね線形になっており定性的にも一致しない。基本的には繊維は Jeffery 仮説によると粘性散逸を最小にするように軌道を遷移していくものと考えられ、高濃度領域のデータについては粘度成長曲線の結果を踏まえてもシミュレーション時間の不足が原因ではない。この結果が本計算のアーティファクトであるとするならば、その原因の候補は、 (1) 強いシアシニングを示す領域で計算を行っていること、 (2) せん断が十分にかからず速度滑りが発生していること、 (3) 定常状態に達していないデータ $n_f L^3 \leq 15$ の影響の以上 3 点が挙げられる。以下でこれらを検証する。

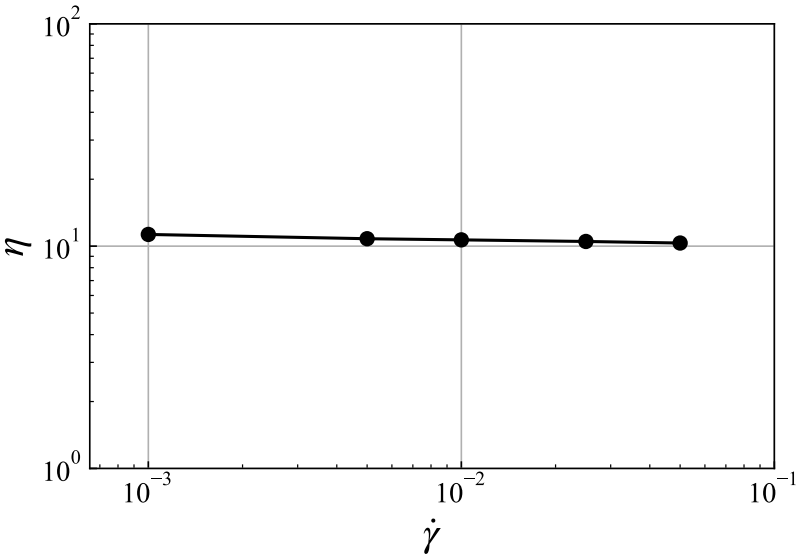


図 6.5: 定常せん断粘度のひずみ速度依存性 ($L_x = L_y = L_z = 30, \eta_0 = 10, r_p = 10, n_f L^3 = 5.0$)。

まず、図 6.5 に定常せん断粘度のひずみ速度依存性を示す。ひずみ速度を小さくすると定常状態を得るために長時間計算が必要となり、計算コストが高くなるので、$L_x = L_y = L_z = 30$ の比較的小さなシステムで計算を行った。図 6.5 よりほとんどシアシニングが観測されず、極端な非平衡状態では無いことが分かる。図 6.4 のデータは $\dot{\gamma} = 0.01$ の計算によって得られたものであり、本研究の測定範囲内ではひずみ速度の設定値の影響によってせん断粘度が著しく下がった訳では無いと考えられる。シアシニングを示す代表的な流体である高分子流体では、一般にシアシニングしきった後に定常値を示す領域が存在し、その粘度は第二 Newton 粘度と呼称される [102]。得られたせん断粘度が溶媒粘度 $\eta_{\mathrm{sol}} = 10$ とほとんど同じ値であることを考慮すると計算した領域が第二 Newton 粘度の領域である可能性も考えられる。ただし、この領域は流体の特性時間と比較してひずみ速度が十分に速い領域である。繊維の特性的な時間として回転

周期があり、本研究の設定では $\dot{\gamma} = 0.01$ でおおよそ $T \simeq 2200$ である。ひずみ速度から得られる特性時間は $1/\dot{\gamma} = 100$ であり、オーダー 1 つ程度の差に留まる。よって、第二 Newton 粘度の領域である可能性が低いと考えられる。これを確実に検証するためにはさらに低いせん断粘度での計算が必要だが、計算コストの観点から現実的ではないため議論はここまでに留めておく。

次に、速度すべりについて考える。図 5.13 より、濃度上昇とともに速度勾配の値が小さくなっている。その減少幅は本研究で計算した範囲では最大で約 7% 程度である。この速度勾配の違いによるせん断粘度の変化を見るために、図 6.6 に $\dot{\gamma}_{\mathrm{in}}$ および $\langle \partial u_x/\partial y \rangle$ を用いて計算したせん断粘度の濃度依存性を示す。図 6.6 より、速度勾配の修正によってせん断粘度が高くなっていることが分かる。しかし、その上昇幅はそれほど大きくは無く、せん断粘度の濃度依存性のグラフも概ね線形の上昇を見せている。よって、速度勾配の減少に伴うせん断粘度の値への影響は無視はできないが、本モデルについてはそれほど大きな影響を及ぼしているわけではないことが分かる。

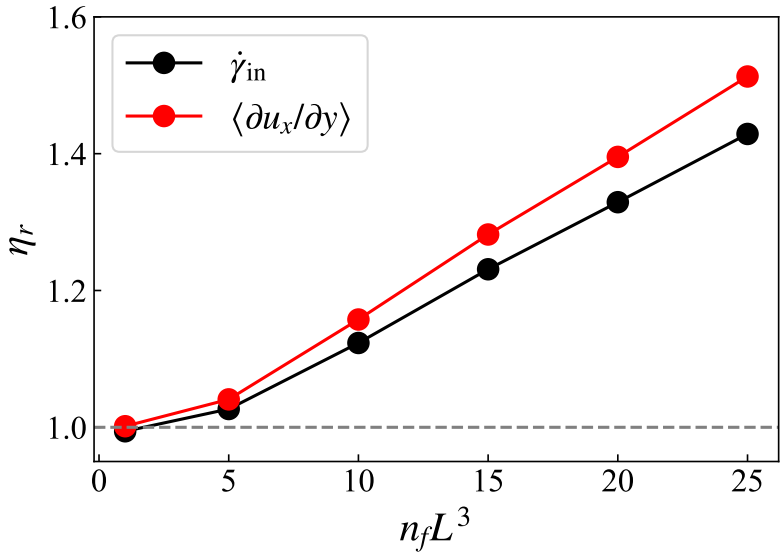


図 6.6: $\dot{\gamma}_{\mathrm{in}}$ および $\langle \partial u_x/\partial y \rangle$ を用いて計算したせん断粘度の濃度依存性。

三つ目の定常状態を得られていないことの影響が最もあり得る原因である。図 5.14 で示す $n_f L^3 = 10, 15$ の粘度成長曲線より、せん断粘度はさらに長時間の計算を行うと減少することが予測される。これは、式 (1.14) より、図 C.2 に示すとおり、繊維が時間経過とともに流動-渦度平面 ($x - z$ 平面) に配向することが原因である。この付近の濃度の粘度の値が減少することにより、先行研究のような非線形な形状のグラフが得られるのではないかと考えられる。

最後に、Bibbo [11] の実験結果との比較を示す。Bibbo [11] の実験結果ではアスペクト比によらず概ね同様の粘度が得られている。一方で、本研究で得られた粘度値はそれと比較すると明らかに低くなっている。実際には繊維長分布やせん断の印加方法 (実験では主に回転型のレオメータを使用するが、計算では平行にせん断を印加している)、せん断の印加時間によって粘度はバラつくものだと考えられるが、図 6.4、図 6.7 の結果を考慮すると本研究で得られた粘度は先行研究と比較すると低いと考えられる。

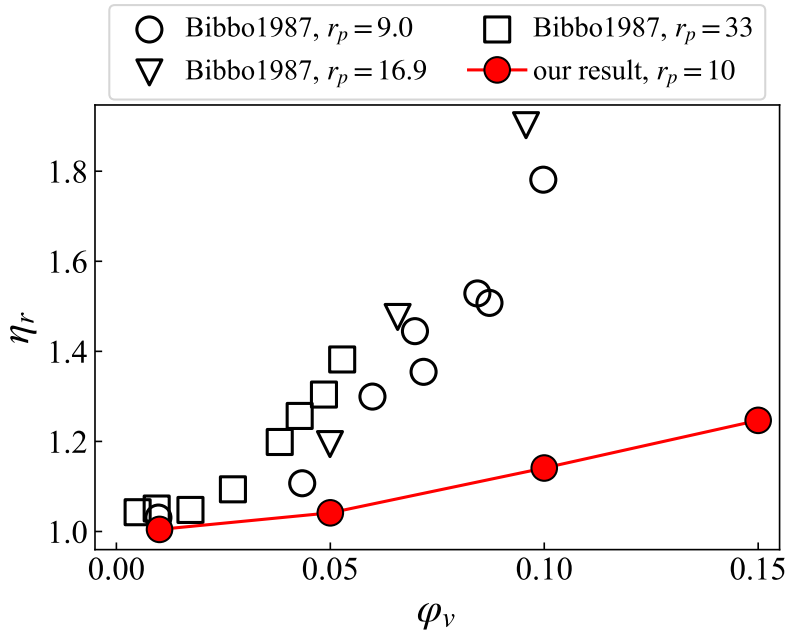


図 6.7: 相対粘度 η_r の体積分率 φ_v 依存性。赤色のグラフは本研究による結果を示し、黒色のシンボルは Bibbo [11] の実験結果を示す。

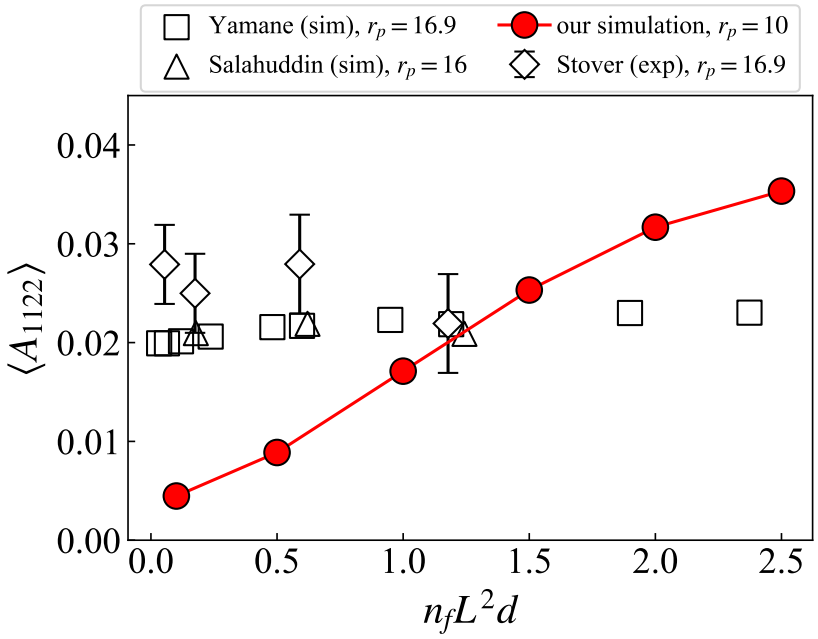


図 6.8: 4 階の配向テンソル $\langle A_{1122} \rangle$ の濃度 $n_f L^2 d$ 依存性。□: Yamane ら [41] (計算)、△: Salahuddin ら [110] (計算)、◇ : Stover ら [14] (実験)、● : 本研究の結果 (計算)。

この粘度低下の原因の候補としては、上述の (1) 第二 Newton 粘度の領域であること、 (2) 速度すべりがあることに加えて (4) 繊維の配向状態が先行研究と異なっていること、 (5) 有効アスペクト比による影響、そして (6) 力学的接触を考慮していないことが原因として考えられる。(1) と (2) については上述の通り粘度低下の主たる原因としては考えづらい。そこで、まずは (4) の繊維の配向状態について考える。式 (1.14) の構成方程式より、せん断粘度に関係する繊維配向は 4 階の配向テンソルの 1122 成分の平均値

$\langle A_{1122} \rangle$ で与えられる。図 6.8 に $\langle A_{1122} \rangle$ の規格化濃度 $n_f L^2 d$ 依存性の先行研究との比較結果を示す。アスペクト比が異なるので、単純には比較はできないが、濃度依存性が異なっていることが分かる。しかし、粘度を考える際には式 (1.14) より、$\langle A_{1122} \rangle$ の絶対値自体が重要となる。その観点に基づけば、本研究の結果は計算した濃度領域での平均値を考えると先行研究とおおよそ一致する。また、$n_f L^2 d \geq 2.0$ 以降については明らかに本研究の値の方が大きい。（$n_f L^2 d = n_f L^3 / r_p$ であるため $n_f L^2 d > 2.0$ は本研究のデータでは $n_f L^3 \geq 20$ に該当する。）したがって、本研究で得られた繊維の配向状態は先行研究と著しい違いはないと考えられ、粘度の値が小さい主たる原因とは考えにくい。

続いて、 有効アスペクト比による影響を考える。本研究では $\nu_r = 1.5\nu$ であれば第 4.2.1 項で議論した通り先行研究と比較して約半分程度の有効アスペクト比となる。したがって、本モデルにおけるシミュレーション上の繊維の体積分率についても補正が必要な可能性がある。第 4.2.1 項で考察した通り、繊維の厚みが 2 倍程度であると考えるのであれば体積分率は 2 倍する必要がある。一方で、繊維長自体が半分だと解釈するのであれば体積分率は半分となる。これらの修正を行った結果を図 6.9 に示す。これより、青色で示した繊維長が半分だと解釈した結果の方が先行研究に近い結果となった。ただ、粘度の値自体はまだ Bibbo ら [11] の実験結果と比較してもやや低い値となっている。緑色のシンボルで示した第 4.2.1 項の解釈に基づく修正では、実験結果とさらに違いが大きくなる結果となった。これより、粘度を計算する上では有効アスペクト比 r_{ef} に関連した「有効」繊維濃度を用いて議論しなければならない可能性がある。

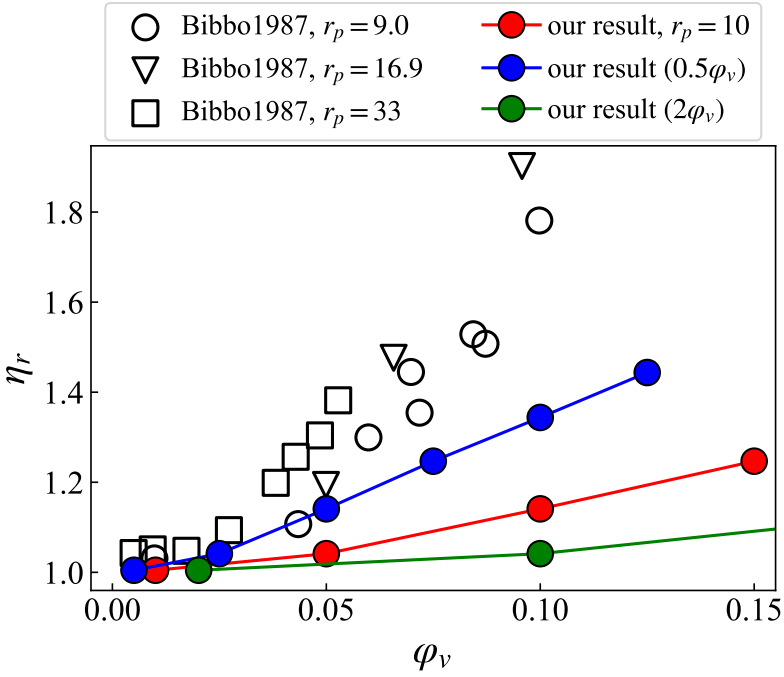


図 6.9: 相対粘度 η_r の体積分率 φ_v 依存性。青色のシンボルは繊維長が半分だと解釈した結果で、緑色のシンボルは厚みが 2 倍になったと解釈した結果である。

最後に力学的な接触の影響について考える。本研究では繊維間の接触による相互作用を導入していない。計算を行っていないので断定はできないが、Shaqfeh らによる準希薄領域での理論 [37] と一致していること、そして特に高濃度領域において粘度の差が大きいことを考慮するとこの力学的接触が粘度上昇に大きく寄与している可能性が高い。実際に、Lindström ら [51] のシミュレーションでは、繊維間の摩擦係数の変化に応じてせん断粘度が上昇していることが示されている。また、接触による効果のみを考

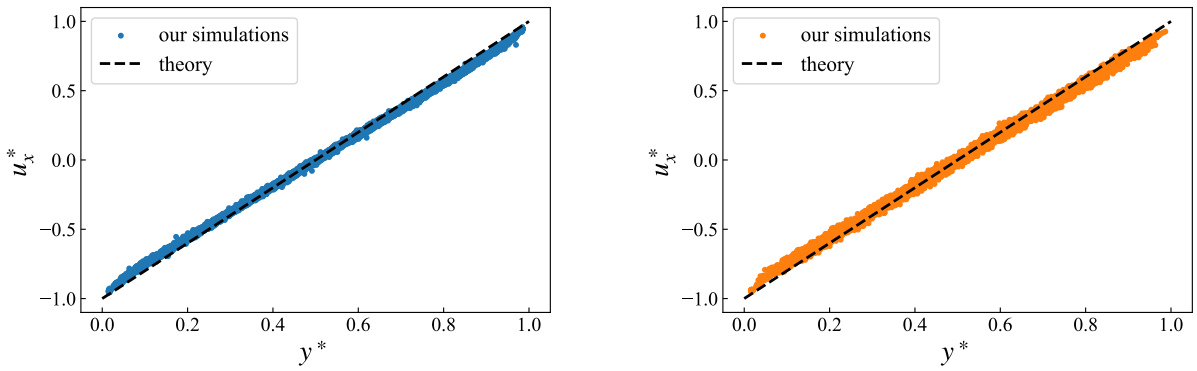
えた Sundararajakumar ら [5] のシミュレーションは、$r_p \simeq 50$ の計算において、$n_f L^2 d \geq 1.5$ の領域で Petrich ら [15] 及び Bibbo ら [10] の実験結果とおおよそ同等の濃度依存性を示している。したがって、高濃度領域については、力学的接触による相互作用を導入すると改善する可能性がある。ただし、本研究における固体粒子は「micropolar fluid 粒子」であり、あくまでも流体であるので、接触による相互作用をどのように導入すればモデルとして矛盾が生じないかについては自明ではない。

本項で、考えた「粘度」というスカラー値は懸濁液中の流動プロファイルや繊維間の相互作用、配向、配置または壁面との位置関係など様々な要因が絡み合った結果として得られる物理量である。したがって、本項で考えたいくつかの原因が複合的に絡み合った結果として粘度が上昇しづらくなっている可能性もあるが、それを裏付けるデータは得られていない。結果として、粘度の値が先行研究と比較して低い理由は現時点では分かっていない。

6.2.3　濃厚領域の速度勾配

図 6.10 に定常状態における濃厚系 ($n_f L^3 = 25$) の速度プロファイルの例を示す。縦軸は流動方向の速度、横軸は y 座標であり、それぞれ壁速度 U_w と流路長 h で規格化されている。図 6.10 (a) に示す流体粒子、及び (b) に示す固体粒子の速度プロファイルは、どちらも破線で示す理論解と比較して速度勾配が小さいことが分かる。図 6.10 (a) のプロファイル形状を見ると、壁付近 ($y^* = 0, 1$) は比較的理論値に近く、境界条件によるすべりが勾配低下の原因ではないと考えられる。システムの中心 ($y^* = 0.5$) が概ね理論値上に位置しているのは、上下の逆方向に移動させていることの対称性によるものである。このシステム中心と壁付近との間の領域において理論値と比較した速度低下が見られる。固体粒子の速度プロファイルは流体粒子の速度プロファイルと比較して大きく変化しているわけではないので、固液界面におけるすべりの影響は少ないと考えられる。

図 6.10 (a) に示すような速度プロファイルは Newton 流体に静置状態からせん断をかけた際の定常状態に至る直前のものと酷似している。つまり、十分な速度勾配を与えるためには懸濁液に対してさらに運動量を与える必要がある。そのような状況下では、図 6.6 に赤線で示した程度の応力が検出されるものと考えられる。速度勾配の低下を防ぐための改善策の候補としては、壁境界条件を変更する [100] ことや、突起のある壁を使用すること、またシステムの解像度を高くすることが挙げられる。



(a) 流体粒子　　(b) 固体粒子

図 6.10: 濃厚系 ($n_f L^3 = 25$) における (a) 流体粒子、 (b) 固体粒子の速度プロファイル。

6.3　計算コストの比較

本研究では、一列の粒子の集合として繊維を表現した上で繊維の正しい回転運動を再現したという点が先行研究では達成されていなかった部分である。背景で述べた通り、回転自由度のない従来の MPS 法で繊維の回転運動を実現するのであれは、多数の粒子を用いて繊維の厚みをモデリングすることが必要である。つまり、本モデルは MPS 法において最小の粒子数で繊維運動を再現できるモデルとなっている。本節では、多数の粒子を用いて繊維を表現する場合と比較して具体的にどれくらいの計算負荷が生じるのかについて概算する。

システムを N 個の MPS 粒子で離散化し EMPS 法で計算する場合を考える。この時の計算負荷のほとんどは近傍粒子探索を行う部分である。この近傍粒子探索には、一般にセルリスト [94] というアルゴリズムを利用して行われ、その計算時間は $N^{1.5}$ のオーダーになる。今回は通常の EMPS における計算時間 $t_{\mathrm{EMPS}} \sim N^{1.5}$ をベースに考える。

まずは、micropolar fluid モデルを導入した場合の計算負荷の増加分を評価する。テスト系として $L_x = L_y = L_z = 20$ の $N = 8000$ の系に対してプロファイリングをかけることで近傍粒子探索が必要な関数の計算負荷を調査した。プロファイリングは、単一スレッド計算の結果に対して gprof を適用した。$n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ の計算に対してプロファイリングをかけた結果を図 6.11 に示す。ここで、「① 粒子数密度」は式 (2.26) を計算するために各粒子の粒子数密度 n_i を計算する過程を示し、「④ 衝突処理」は粒子同士の距離が 0.5 以下になった場合に行われる剛体衝突処理である [93]。また、表において赤文字で示した列は全粒子に対する演算であり、通常の EMPS 計算と共通の項である。青文字で示した列は角速度 $\boldsymbol{\Omega}_i$ に関する演算であり本モデル特有の演算である。図 6.11 を見ると青文字の本モデル特有の演算が全計算に占める割合は各濃度に対してそれぞれ 0.59 %、4.03%、7.82% となった。これより、回転自由度の導入に伴う計算時間の増加割合はそれぞれ 1.006 倍、1.042 倍、1.085 倍となり、増加分はわずかである。

$$\frac{d\boldsymbol{u}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i}\overset{②}{\boxed{\langle\!\langle \nabla P \rangle\!\rangle_i}} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\overset{③}{\boxed{\langle\!\langle \nabla^2 \boldsymbol{u} \rangle\!\rangle_i}} + \frac{1}{\mathrm{Re}_r}\overset{⑥}{\boxed{\langle\!\langle \nabla \times \boldsymbol{\Upsilon} \rangle\!\rangle_i}} + \boldsymbol{f}_i,$$

$$\frac{d\boldsymbol{\Omega}_i}{dt} = \alpha \boldsymbol{G}_i - \frac{2\alpha}{\mathrm{Re}_r}\boldsymbol{\Upsilon}_i,$$

$$\boldsymbol{\Upsilon}_i = 2\boldsymbol{\Omega}_i - \overset{⑤}{\boxed{\langle\!\langle \nabla \times \boldsymbol{u} \rangle\!\rangle_i}},$$

	全粒子に対する演算				固体粒子のみの演算	
$n_f L^3$	① 粒子数密度	②圧力勾配	③粘性項	④衝突処理	⑤渦度	⑥回転項
1.4	26.4 %	27.3 %	24.1 %	14.2 %	0.28 %	0.31 %
10	25.5 %	26.4 %	23.2 %	13.8 %	1.93 %	2.1 %
20	24.6 %	25.4 %	22.2 %	13.2 %	3.7 %	4.12 %

図 6.11: 単一スレッドでの計算における式 (2.4) ~ (2.6) の各項の計算負荷割合。

一方で、繊維の厚みを実際にモデル化する場合については繊維を直方体状の物体としてモデル化するこ

とを考える。この時、短軸は少なくともそれぞれ 2 粒子ずつ配置することになる。短軸を 2 倍にするのみだとアスペクト比が半分になるので、長軸も 2 倍する。つまり、繊維 1 本あたり本モデルの 8 倍の粒子数が必要となる。図 6.11 の計算と同様の繊維本数で同様の濃度の計算を行うには結果としてシステムの各軸を 2 倍ずつ増やす必要がある。よって、この時の計算時間は $(8N)^{1.5} \simeq 23N^{1.5}$ となる。つまり計算量は我々のモデルと比較して約 20 倍程度となる。近年の粒子法の計算では数万から多いものだと 100 万粒子の計算も存在する [101] 中、オーダーが一桁分の差は大きなものになると考える。よって、計算コストの観点から考えても本手法は繊維懸濁液の計算に対して従来手法よりも優れていると言える。

6.4　モデルの拡張

本研究は流体粒子法において繊維を表現する上での最小モデルとなっており、その上で繊維の周期的な回転運動を再現することが可能となった。繊維は固体粒子をポテンシャルを用いて拘束しているため、バネ定数の値を調整することで柔軟な繊維を表現することも可能である。Yamamoto ら [43] のように繊維の回転自由度をダイレクターではなくオイラー角を用いて実装することで、材料特性に応じた繊維の伸縮・屈曲運動を計算することも可能である。また、接触摩擦などの力学的接触の影響を取り入れることで、特に濃厚系における繊維配向および粘度の予測精度が向上すると考えられる。ただし、流体粒子法では粒子が明確に定義された境界を持つことができないため、摩擦をどのように導入するかは慎重に検討する必要がある。

高分子溶液中に充填された繊維の運動は、He ら [61] のように非ニュートン流体モデルを用いて計算することも可能である。繊維長分布の設定や応力の閾値を設定することによって繊維の破壊も実装可能である。Yashiro ら [58] のような自由表面を含む複雑流路系の計算への適用に流体粒子法を採用した強みが発揮されると考えられる。これらの要素を適切に組み合わせることによって、繊維懸濁液のより複雑な現象の解明につながると期待される。本論文で解決した問題は、SPH による繊維懸濁液のシミュレーション [59–62, 64–66] に共通するものである。本手法は MPS に限らず、微分演算子と重み関数を変えるだけで SPH でも実装可能である。

本モデルの開発によって、物理的に自然な形で単一の固体粒子の回転運動を取り扱うことができるようになった。この結果により、流体粒子法における懸濁液のモデリングの自由度が大きく広がったものと考えられる。また、板状粒子の計算 [111, 112] についても同様に固体粒子を平面状に並べることでモデル化が可能である。SPH 法の分野では第 2 節で言及した通り shell model [86] を用いて板状粒子を表現することが多い。本研究のように回転自由度のある固体粒子を用いることによって、master point が不要となり計算コストの低減が期待できる。

第 7 章

結論

本研究では、MPS（Moving Particle Simulation）法 [94] において、せん断流中の繊維の回転運動を正確に再現するための新しいシミュレーション手法、micropolar-MPS 法 (mp-MPS 法) [85] の開発を行った。従来の MPS 法では、繊維は流体粒子の一列の集合として表現されることが多い。しかし、粒子は計算点であり中心力のみが働くため、せん断流動下において流動方向に繊維が配向した際に周囲流体から受ける力が均衡し静止してしまう。この問題を解決するために、本研究では micropolar fluid モデル [84] を MPS 法に応用し繊維を構成する粒子に回転の自由度を導入した。この方法を用いることによって固体粒子の回転運動と流体粒子の並進運動は運動量保存則を満たす形で連成される。本モデルでは繊維は伸びと曲げのポテンシャルによって結合された一列の micropolar fluid 粒子として表現される。支配方程式は微小な圧縮性を許容するが安定性と計算コストに優れる陽解法型の MPS 法 [77] を用いて離散化した。固体壁は 3 層の速度を固定した流体粒子によってモデル化され、上下に配置した固体壁を逆向きに動かすことによってシステムにせん断流れを印加した。

mp-MPS 法の妥当性を確認するために、せん断流動中の孤立繊維のシミュレーションを行った。本研究で行った回転自由度の導入によって、繊維は Jeffry 理論 [17] で予測される周期的な回転運動を行うことを確認した。また、繊維の回転周期や角速度、配向分布関数、回転軌道の計算結果は、有効アスペクト比を等価にした Jeffery の理論による計算結果とよく一致することが示された。

繊維濃度を上げ、濃厚領域における繊維懸濁液のシミュレーションも行い、以下の結果を得た。

- 壁が繊維配向に与える影響距離はおおよそ繊維の半分の長さである。
- 希薄および準希薄系 ($n_f L^3 \ll L/d$) では、初期配向と比較して渦度方向への配向が誘起された。
- 濃厚系 ($n_f L^3 \geq L/d$) では、せん断勾配面への配向が誘起された。
- 繊維の回転周期は濃度上昇とともに長くなった。分布形状は非対称であり、繊維間相互作用によって繊維の回転運動が遅延されやすいことが分かった。
- 配向分布関数の結果より、繊維間相互作用によって繊維の回転運動が阻害され、xz 平面上に繊維が配向しやすいことが分かった。これは Lindström ら [50] の計算結果を支持する結果である。
- 繊維濃度の上昇とともに速度勾配の値は小さくなった。せん断粘度を計算する際にはこの速度勾配の減少分を考慮する必要がある。
- 繊維濃度の上昇とともにせん断粘度は上昇した。また準希薄系においては Shaqfeh らの理論予測 [37] とおおよそ一致する結果を得た。

また、回転自由度のない従来の MPS 法による濃厚系の計算を行った。従来法では繊維は濃厚系であっても全て x-z 面状に配向し、繊維濃度の上昇に伴う粘度上昇は全く観測されなかった。この結果から、繊

維の回転運動の再現が繊維懸濁液の計算を行う上で非常に重要な要素であることが示唆された。初期配向を変えた計算を行ったが、十分に長時間の計算を行えば異なる初期配向からも同様の定常状態を得た。

粘度および繊維配向として軌道定数 C_b の分布関数の結果を先行研究の実験やシミュレーション結果との比較を行った。粘度の濃度依存性は先行研究で見られるような非線形的な上昇が観測されなかった。これらの原因として (1) 第二 Newton 粘度の領域であること、 (2) 壁や固液界面で速度すべりが生じていること、 (3) 低濃度領域が十分に定常状態に至っていないことの三つの原因が挙げられ、 (3) がもっともらしい原因であると考えられる。また、粘度の値自体も先行研究の実験結果と比較するとやや低い値となった。この原因としては上記の (1)、 (2) に加えて (4) 繊維の配向状態 ($\langle A_{1122} \rangle$) の値が異なっていることが挙げられたが、どれも粘度が低いことを説明することはできなかった。その他の候補としては力学的接触による相互作用の導入によって、高濃度領域における粘度上昇を再現できる可能性がある。繊維配向の比較として軌道定数の分布関数を計算した所、実験 [14] およびシミュレーション [53] の先行研究と同様のピーク位置を示した。ただし、計算時間の不足によってピーク高さは先行研究と比較して低くなっている。

本研究で開発した mp-MPS 法は流体粒子法で繊維懸濁液を再現する際の最小モデルとなっている。繊維の厚みを多数の粒子で表現する場合と比較すると、最低でも 20 倍以上の高速化が可能である。流体と固体の運動を同時に計算する上に、MPS 法をベースとしているため幅広い流路に対して応用可能である。今後の課題としては、LSMPS 法 [80] 等の高精度化手法の導入による計算精度の向上、回転動粘性係数等のモデルパラメータの物理的な解釈、接触摩擦等の相互作用の導入、壁面や固液界面の境界条件の高精度化が挙げられる。

謝辞

本論文の作成および3年間の研究室生活を過ごす上で、たくさんの方々にお世話になりました。本章で皆様に感謝の言葉を述べさせていただきます。

まず、増渕雄一教授には研究自体への多くの有用なコメントに限らず、挑戦する機会を多くいただきました。国際会議や学外の先生方とのディスカッション、論文執筆等、私が多くの貴重な経験をできたのは、増渕教授の幅広い人脈と背中を押していただいた言葉のおかげです。畝山多加志准教授には、本研究の根幹となるモデルの構築から研究の方向性、コーディングまで幅広い助言をいただきました。研究者としての初期の段階で畝山准教授からご指導いただけたことは、非常に幸運だったと思います。土井侑也助教授には、本研究に対して実験家視点から多くの有用なコメントをいただきました。また、日頃の雑談やTA業務、毎月の日程管理等、研究室における生活が円滑に進むようなサポートをいただきました。石田崇人研究員には、研究全体のデザインや論文執筆に関わる細かい部分まで、多方面から助言をいただきました。また、コーヒー文化の浸透によって研究室を居心地の良い空間にしていただいたり、サウナ等のプライベート面でも大変お世話になりました。先生方のお力添えがなければ本研究は成立しませんでした。厚く御礼を申し上げます。

九州大学の山本智教授にはレオロジー学会の度に研究のディスカッションをさせていただきました。繊維の回転運動自体を改善するという本研究の根本となるアイデアは2021年のレオロジー年会における山本教授とのディスカッションがきっかけでした。また、Jeffery軌道の再現方法やその精度に関しても山本教授の経験に基づく助言をいただき、本研究に多大な貢献をいただきました。この場を借りて改めて御礼を申し上げます。

芳松克則准教授には、各発表毎に本研究に対して流体力学の専門家としての貴重なご意見を多くいただきました。また、副査もご担当いただき、流体シミュレーション手法全般についての知識からプレゼンテーション自体についてのアドバイスを多数いただきました。芳松准教授との議論により、より客観的な観点から自らの研究を見つめ直し、修士学位論文審査会における発表をより良いものにできたと思います。改めて感謝申し上げます。

増渕研究室の皆様方にはそれぞれ研究内容が異なるにも関わらず、多くのご意見やアドバイスをいただきました。仲井文明さんには席が隣ということもあり、研究に関して多く議論していただきました。私が多くの学会発表や論文執筆等の挑戦をできたのは、仲井さんが学生のトップランナーとして走り続けているおかげです。後輩の皆様には研究だけでなく、日頃の雑談や一緒に野球をするなど私の研究室生活を彩っていただきました。同期の磯田君、大石君、北村君、白石君、安井君は皆優秀な上に負けず嫌いで、お互いに切磋琢磨して高め合っていくことができました。皆様のおかげで、苦しい事やたくさんの壁を乗り越えることができました。本当にありがとうございました。

最後に名古屋での6年間の生活を、様々な形で支えていただいた祖父母と親戚の皆様方、定期的に連絡をくださり多くのご支援をいただいた太宰府の祖父母、そしてこれまでの人生を支えていただいた両親と

兄弟に感謝の意を表します。本当にありがとうございました。

付録 A

関連する理論記述

A.1　ダイレクターの時間発展

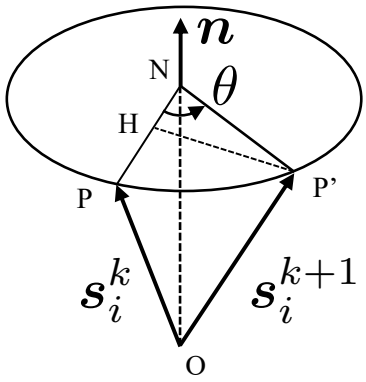


図 A.1: ダイレクターの時間発展の幾何的描像

式 (2.23) の時間発展アルゴリズムについて、幾何的な導出を行う。図 A.1 のように、あるタイムステップ k における固体粒子のダイレクター $\boldsymbol{s}_i^k$ が角度 θ 回転し、$\boldsymbol{s}_i^{k+1}$ と変位する過程を考える。この時の角速度ベクトル $\boldsymbol{\Omega}_i^{k+1}$ が既知であれば、回転量 θ は時間幅を Δt として $\theta = \Omega_i^{k+1}\Delta t$ となる。ただし、Δt は十分に短いものとする。また、角速度ベクトルに平行な単位ベクトルを $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\Omega}_i^{k+1}/\Omega_i^{k+1}$ とする。この時、$\boldsymbol{s}_i^{k+1}$ は $\boldsymbol{n}, \boldsymbol{s}_i^k, \theta$ を用いて以下のように書ける。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{s}_i^{k+1} &= \overrightarrow{\mathrm{ON}} + \overrightarrow{\mathrm{NH}} + \overrightarrow{\mathrm{HP'}} \\
&= \left(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{s}_i^k\right)\boldsymbol{n} + \left(\boldsymbol{1} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}\right)\boldsymbol{s}_i^k\cos\theta + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{s}_i^k\sin\theta \\
&= \left(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{s}_i^k\right)\boldsymbol{n}\left(1-\cos\theta\right) + \boldsymbol{s}_i^k\cos\theta + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{s}_i^k\sin\theta
\end{aligned}
\tag{A.1}
$$

ここで、$\overrightarrow{\mathrm{ON}}$ は点 O から点 N に向かうベクトルを表す。微小時間幅 Δt の時、$\theta \ll 1$ なので、$\cos\theta \simeq 1, \sin\theta \simeq \theta = \Omega_i\ k+1\Delta t$ となる。これより式 (A.1) は以下のように変形できる。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{s}_i^{k+1} &\simeq \boldsymbol{s}_i^k + \left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{s}_i^k\right)\Omega_i^{k+1}\Delta t \\
&= \boldsymbol{s}_i^k + \left(\boldsymbol{\Omega}_i^{k+1}\times\boldsymbol{s}_i^k\right)\Delta t
\end{aligned}
\tag{A.2}
$$

上式は式 (2.23) の射影行列を除いた形と全く同じである。つまり、時間刻み幅 Δt が十分に小さければ式 (2.23) は正当化される。実際に、本研究の典型的な値として $\dot{\gamma} = 0.01$ における $\Omega \simeq 0.05, \Delta t = 0.01$ を

考える。この時、プログラミング言語 python の数値計算ライブラリ NumPy [113] を用いて $\cos(\Omega\Delta t)$ の値を計算すると、0.99999999875 となり、ほぼ 1 である。つまり、本研究の設定では一ステップにおける回転角 $\theta = \Omega\Delta t$ は十分に微小であり、式 (2.23) の離散化による誤差は小さいものと考えられる。

A.2　式 (2.5) 第二項の安定条件

式 (2.5) 第二項の安定性に関する時間刻み幅の制限を考える。本モデルは単純な Euler 法を用いて時間微分を計算しており、この時の安定性に関する計算を行う。簡単のために外力項と渦度の項を 0 として、以下のように方程式を離散化する。

$$\frac{\boldsymbol{\Omega}(t+\Delta t)-\boldsymbol{\Omega}(t)}{\Delta t} = -A\boldsymbol{\Omega}(t), \qquad A = \frac{l_0^2}{\mathcal{I}}\frac{4}{\mathrm{Re}_r} \tag{B.1}$$

これを式変形すると以下の関係が得られる。

$$\boldsymbol{\Omega}(t+\Delta t) = (1-A\Delta t)\,\boldsymbol{\Omega}(t) \tag{B.2}$$

ここで、$t = n\Delta t$ の時を考えると

$$\boldsymbol{\Omega}(n\Delta t) = (1-A\Delta t)\boldsymbol{\Omega}((n-1)\Delta t) = (1-A\Delta t)^n\boldsymbol{\Omega}_0 \tag{B.3}$$

初期値 $\boldsymbol{\Omega}+\delta\boldsymbol{\Omega}$ が加わった場合に同様に陽解法で解を求めると、$\tilde{\boldsymbol{\Omega}}(n\Delta t) = (1-A\Delta t)^n\,(\boldsymbol{\Omega}_0+\delta\boldsymbol{\Omega})$ よって、その差は

$$\tilde{\boldsymbol{\Omega}}(n\Delta t) - \boldsymbol{\Omega}(n\Delta t) = (1-A\Delta t)^n\delta\boldsymbol{\Omega} \tag{B.4}$$

となる。これが、$t\to\infty$ で収束すれば良いので、時間刻み幅の条件は $|1-A\Delta t| \le 1$ となり以下の条件式が得られる。

$$0 \le \Delta t \le \frac{\mathcal{I}}{2l_0^2/\mathrm{Re}_r} \tag{B.5}$$

付録 B

シミュレーションデータ (希薄系)

B.1　初期配向依存性

式 (1.3) より、Jeffery 理論では繊維の流動方向に対する配向角 $\phi(t)$ は渦度方向に対する配向角 $\theta(t)$ によらないはずである。これを確かめるために、異なる初期配向 θ_0 における孤立繊維の回転運動を計算した。システムは $L_x = L_y = L_z = 40$、 $(h = 35)$ で繊維のアスペクト比は $r_p = 8$、$\mathrm{Re}_f = 6.4 \times 10^{-3}$、$\mathrm{Ma} = 0.05$ で計算を行った。図 B.1 に各 θ_0 における繊維の配向角 ϕ の時間発展を示す。これより、どの初期配向から初めても繊維の回転周期はほとんど変化しておらず、Jeffery 理論をおおよそ再現していることが分かる。ただ、長時間計算を続けると、各計算によって異なる離散化誤差が載ってくるため、配向角も若干ずれていく。また、$\theta = 0$ 付近では繊維の方向ベクトルの x, y 成分が流体粒子の解像度以下となり十分な精度が出ないため、配向角 ϕ は離散化誤差が大きく影響してしまうことに注意していただきたい。

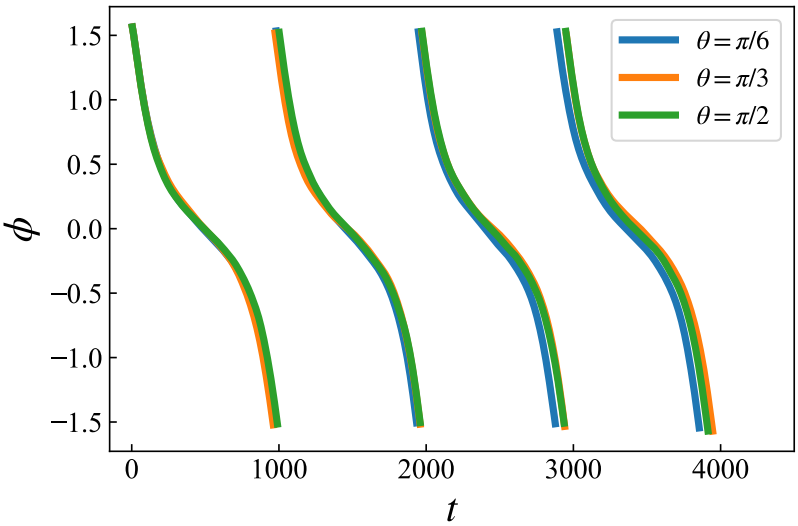
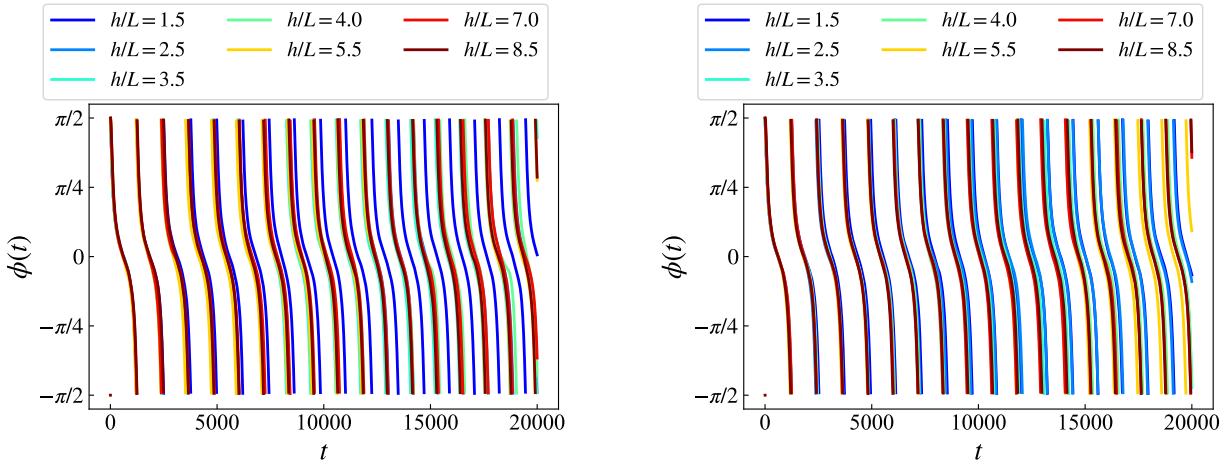


図 B.1: 異なる初期配向 θ_0 からの繊維の配向角 ϕ の時間発展。$(\phi_0 = \pi/2, \theta_0 = \pi/6, \pi/3, \pi/2)$

B.2　パラメータ依存性

孤立繊維の運動に与えるパラメータの影響を調べるために、いくつか計算を行った。システムは $L_x = L_y = L_z = 30$ ($h = 25$)、アスペクト比は $r_p = 10$、$\mathrm{Re}_f = 0.01$ の系をベースとして計算を行った。繊維の初期配向は $\phi_0 = \pi/2, \theta_0 = \pi/6, 2\pi/3, \pi/2$ とした。

まずは、y 方向のシステムサイズ依存性を調べるために、$L_y = 20,30,40,45,60,75,90$ ($h = 15,25,35,40,55,70,85$) と変化させて計算を行った。また、系の音速 c_s の値を固定したため、Mach 数は各 h に対して $\mathrm{Ma} = 0.01, 0.03, 0.042, 0.048, 0.066, 0.084, 0.102$ のように変化している。図 B.2 に繊維の配向角 $\phi(t)$ の時間発展を示す。時間経過とともに図 B.2 (a) では流路幅 $h/L = 1.5$、 (b) では $h/L = 2.5$ の計算の周期がやや遅れている。一方、それ以外の計算についてはほぼ一致している。



(a) $\theta_0 = 2\pi/3$　　(b) $\theta_0 = \pi/2$

図 B.2: 各 h における孤立繊維の配向角 $\phi(t)$ の時間発展。

図 B.3 に、孤立繊維の回転周期の平均値 $\langle T\dot{\gamma}\rangle$ の流路幅 h 依存性を示す。$h < 3$ 付近では周期がやや長くなる傾向が見られるが、いずれにせよほぼ誤差の範囲内である。よって、孤立繊維の運動については $1.5 \leq h/L$ の範囲については、明確なシステムサイズ依存性は観測されなかった。ただ、$h/L \geq 3.5$ が望ましいと考えられる。

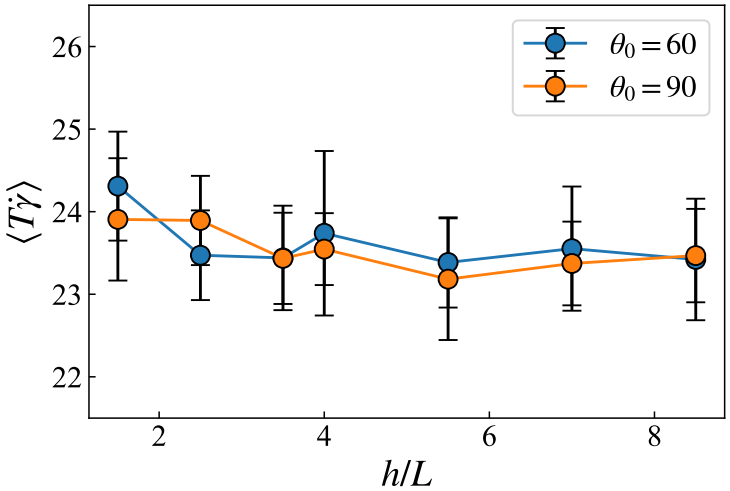
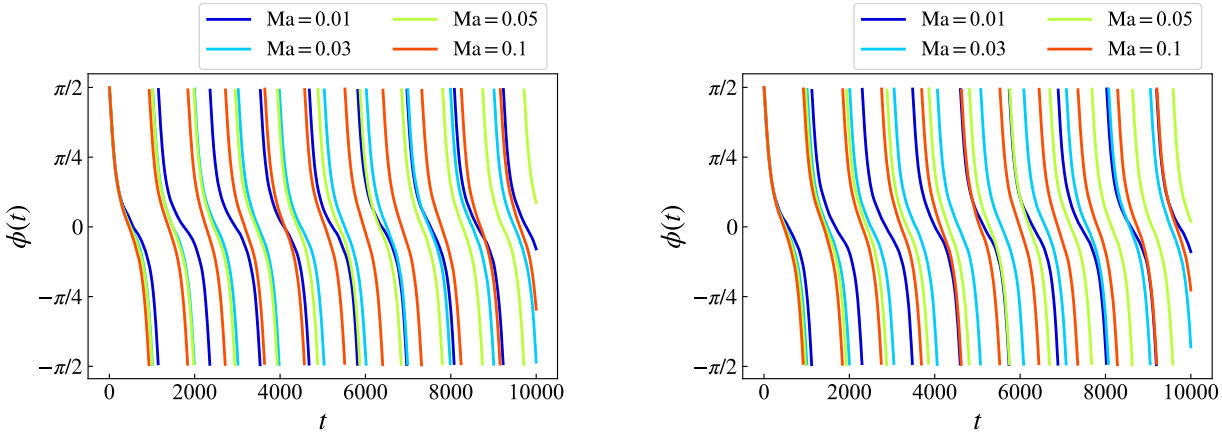


図 B.3: 各 h における孤立繊維の回転周期。

続いて、Mach 数が孤立繊維の運動に与える影響を調査した。Mach 数はその値が小さいほどシステムの代表的な流速と比較して音速が大きく、非圧縮性流体に近づくような指標である。システムサイズを固定し、音速を変化させることで Ma = 0.01, 0.03, 0.05, 0.1 と Mach 数を変化させた。図 B.4 に各 Ma における繊維の配向角 $\phi(t)$ を示す。これより、Mach 数が Ma = 0.01, 0.03 の計算については他の二つの計算と比較して繊維の回転周期が伸びていることが分かる。



(a) $\theta_0 = 2\pi/3$　　(b) $\theta_0 = \pi/2$

図 B.4: 各 Ma における孤立繊維の配向角 $\phi(t)$ の時間発展。

図 B.5 に、各初期配向 θ_0 における孤立繊維の回転周期の平均値 $\langle T\dot{\gamma}\rangle$ の Mach 数 Ma 依存性を示す。これより、どの θ_0 についても Ma の減少とともに繊維の回転周期が長くなっていることが分かる。今回は音速 c_s の値を変化させているため、式 (2.26) より同じ密度揺らぎに対する圧力値の値は Ma の値が小さいほど大きくなる。それに伴って圧力擾乱も発生しやすくなるが、図 B.4 より、比較的安定的に繊維が回転しているので、ランダム力による影響とは考えにくい。したがって、音速の上昇に伴う繊維が受ける平均的な圧力値の上昇に伴って繊維の回転周期が長くなる方向へ推移しているものと考えられる。

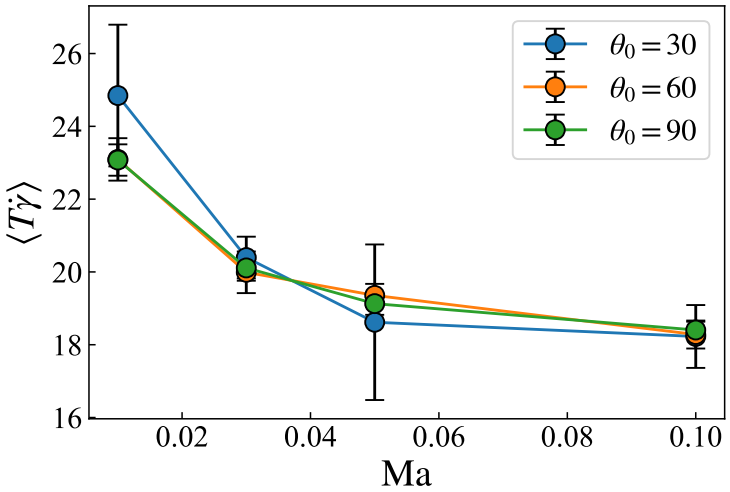


図 B.5: 各 Ma における孤立繊維の回転周期。

付録 C

シミュレーションデータ (濃厚系)

C.1　四階の配向テンソル A_{1122} および軌道定数 $\langle C_b \rangle (t)$

図 5.9 には各濃度における軌道定数 C_b の平均値を示した。しかし、実際には低い濃度域については図 5.2 で示した通り、十分に定常状態に達しているわけではない。図 C.1 に各濃度における繊維の軌道定数の平均値 $\langle C_b \rangle$ の時間発展を示す。図 C.1 については、繊維および複数の初期配置のアンサンブル平均を示す。これより $n_f L^3 \geq 15$ の計算については、今後繊維の軌道定数が低軌道側に遷移する、つまり繊維が渦度方向へ配向する可能性があることが分かる。

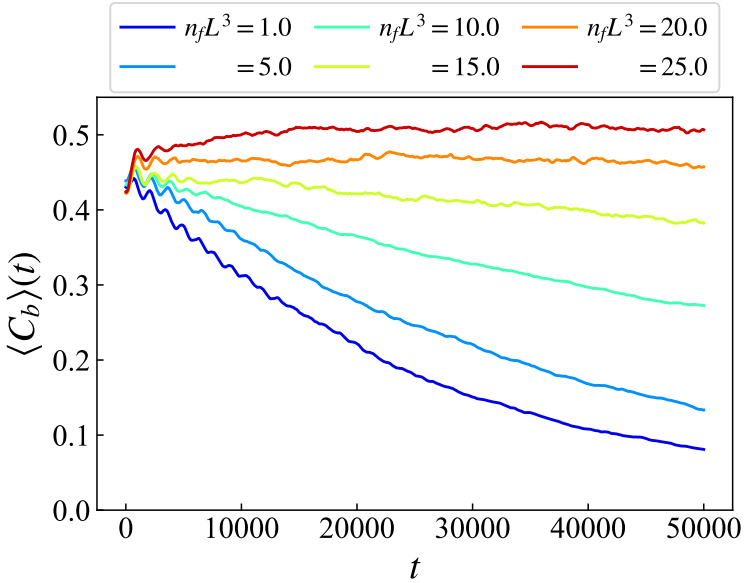


図 C.1: 各濃度における繊維の軌道定数のアンサンブル平均 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展。

式 (1.14) に示す構成方程式より、繊維の粘度は四階の配向テンソル A_{1122} の値に依存する。従って、本研究においてもその配向テンソルの値を調査することが重要となる。図 C.2 に、各濃度における四階の配向テンソルのアンサンブル平均 $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展を示す。これより、図 C.1 と同様に $n_f L^3 \leq 15$ の計算については、今後平均値がさらに小さくなる可能性がある。これは、式 (1.14) よりさらに長時間の計算を行うと、繊維が流動-渦度平面 ($x - z$ 平面) に配向し、せん断粘度が下がるということを示している。

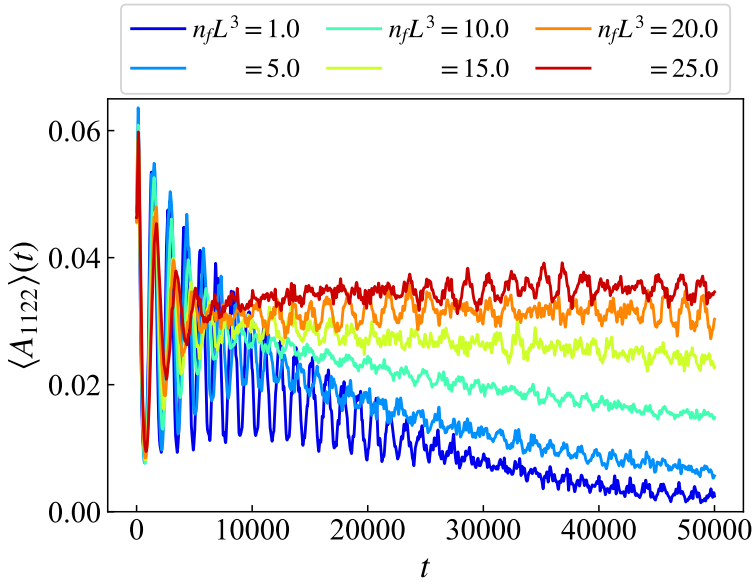


図 C.2: 各濃度における、四階の配向テンソルのアンサンブル平均 $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展。

最後に、図 C.3 に A_{1122} の平均値の濃度依存性を示す。これより、濃度上昇に伴って $\langle A_{1122} \rangle$ の値が上昇していることが分かる。これは、濃度が低いと渦度方向を向く繊維の数が多い、すなわち p_3 成分の値が大きくなっていることに由来するものと考えられる。図 5.15 や図 6.4 で式 (1.14) をプロットする際にはこれらの平均値として $\langle A_{1122} \rangle \simeq 0.021$ を使用する。

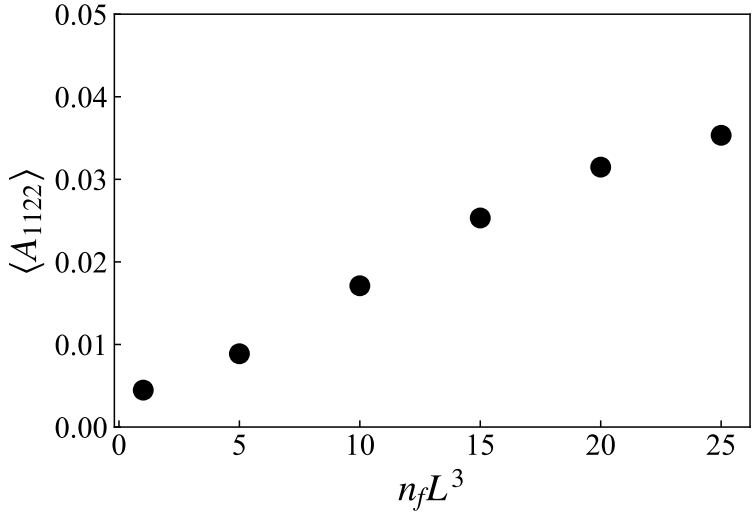
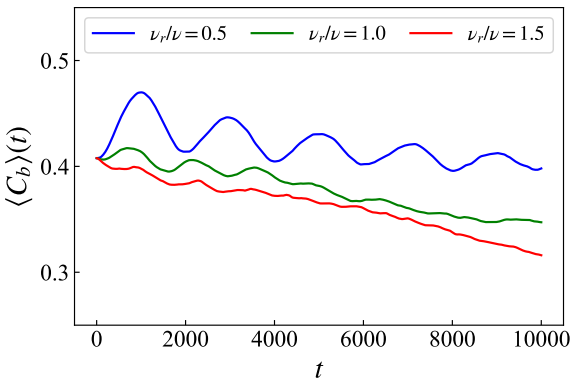


図 C.3: 四階の配向テンソルの平均値 $\langle A_{1122} \rangle$ の濃度依存性

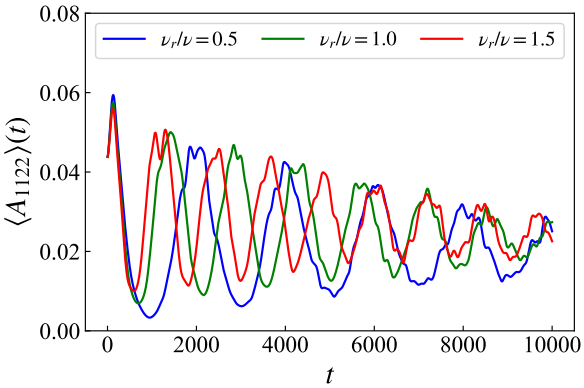
C.2　パラメータ依存性

本章では、いくつかのパラメータ依存性について調査した結果を報告する。システムサイズは、計算コスト削減のために $L_x = L_y = L_z = 30$ とし、$r_p = 10, n_f L^3 = 8.2$ とした。

図 C.4 に異なる ν_r における (a) $\langle C_b \rangle (t)$、 (b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展を示す。図 C.4 (a) に示す通り ν_r/ν の値が大きくなるにつれて低軌道側にシフトしていることが分かる。第 4.2.4 項に示した通り、各繊維の回転周期は ν_r/ν の上昇とともに短くなる。つまり、ν_r/ν が大きいほど単位時間あたりの繊維の平均回転数が多くなるため、相互作用の影響を強く受け低軌道側に推移しているものと考えられる。また、図 C.4 (b) より、$\langle A_{1122} \rangle (t)$ の値自体は ν_r/ν の影響を受けていないが、振動の周期が異なっていることが分かる。ν_r/ν の値に応じて孤立繊維の周期が短くなるため、$\langle A_{1122} \rangle (t)$ の周期も同様に短くなっている。



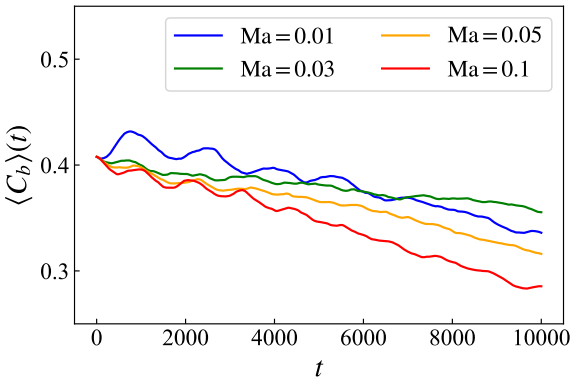
(a) $\langle C_b \rangle (t)$



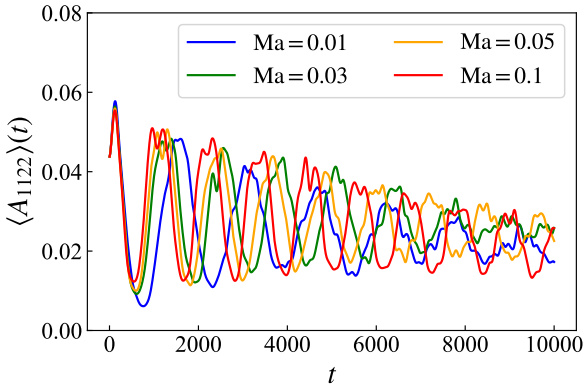
(b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$

図 C.4: 各 ν_r における (a) $\langle C_b \rangle (t)$、 (b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展

続いて、図 C.5 に異なる Ma における (a) $\langle C_b \rangle (t)$、 (b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展を示す。図 C.5 (a) より Ma の値が大きくなるにつれて低軌道側にシフトしていることが分かる。図 B.5 より、孤立繊維の運動に対しては Ma の低下とともに、繊維の回転周期が伸びている。これより、多数本の場合でも Mach 数によって繊維の回転周期が変化しており、周期が短い Mach 数の高い計算では繊維間相互作用を受ける頻度が増加し、より早く渦度方向へ配向している可能性が考えられる。また、Ma の違い、つまり音速 c_s の違いによって、繊維間に働く流体相互作用の応答が変化している可能性が考えられる。これは、圧力勾配項の強さに起因する違いであると考えられる。図 C.5 (b) より、$\langle A_{1122} \rangle (t)$ の値自体は Ma の影響を受けていないが、振動の周期が異なっていることが分かる。Ma の値が小さいほど、平均的に受ける圧力の値が大きくなるので、繊維が受ける流体抵抗が増加し周期が伸びていることが分かる。以上より、Ma のチューニングによっても計算結果が変化する可能性があることが分かった。



(a) $\langle C_b \rangle (t)$



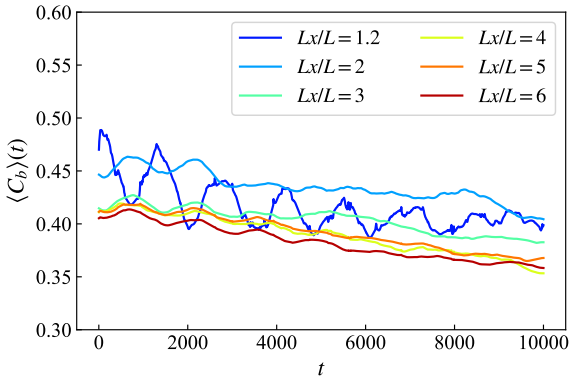
(b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$

図 C.5: 各 Ma における (a) $\langle C_b \rangle (t)$、 (b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展

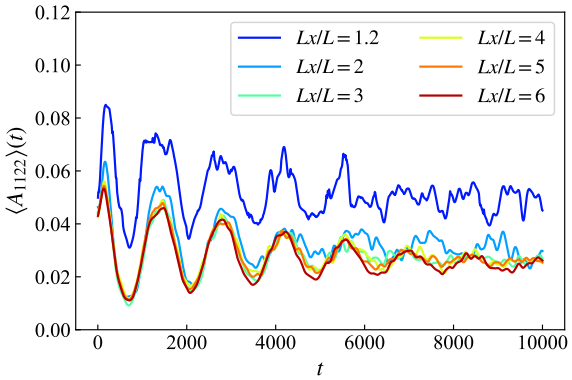
C.3　システムサイズ依存性

本章では、システムサイズ依存性について調査する。シミュレーション条件は L_x, L_y, L_z 以外のパラメータについては第 5 章と同様である。

まずは、$n_f L^3 = 10$ について、x, z 方向のシステムサイズ依存性を調査する。この二方向の長さ L_x, L_z が繊維長と比較して十分に長くなければ、自分の運動の相関が周期境界を通じて自分の運動に反映することになり不正確である。一方で、システムサイズの拡張は計算コストにダイレクトに影響するため、計算結果に影響を及ぼさない範囲でできるだけ小さなシステムを見つけることが重要となる。図 C.6 に 各システムサイズにおける (a) $\langle C_b \rangle (t)$、 (b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展を示す。$L_x/L, L_z/L = 1.2, 2, 3, 4, 5, 6$ と変化させた。図 C.6 (a) ではシステムサイズを大きくするにつれて $\langle C_b \rangle$ の値は低軌道側に推移しており、比較的システムサイズに対して敏感であることが分かる。特に $L_x/L, L_z/L = 1.2, 2$ のデータは他のデータよりも大きな値を示している。図 C.6 (b) については $L_x/L, L_z/L = 1.2, 2$ のデータが他のシステムサイズと比較して大きな値を返している。一方で、$L_x/L, L_z/L \leq 3$ のデータについては同様の値を返している。これより、本研究では $L_x, L_z \leq 3L$ のシステムで計算を行うこととする。



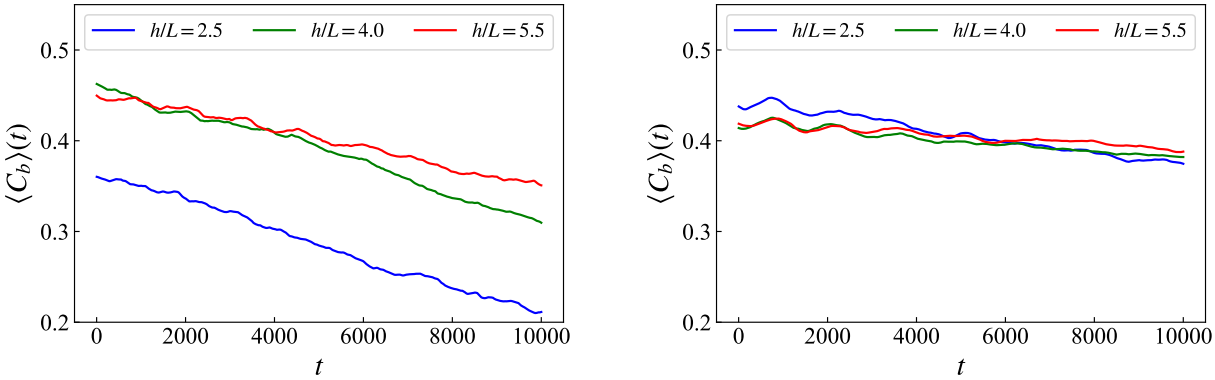
(a) $\langle C_b \rangle (t)$



(b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$

図 C.6: 各システムサイズにおける (a) $\langle C_b \rangle (t)$、 (b) $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展

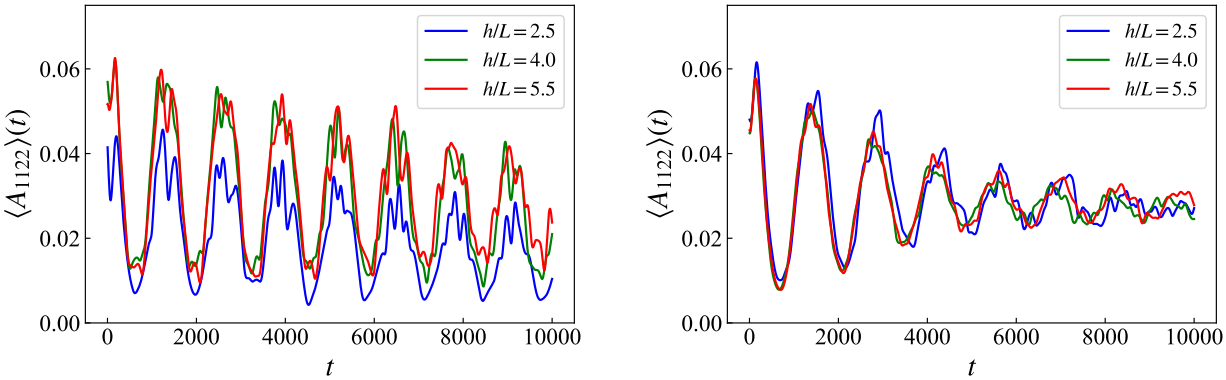
続いて、$n_f L^3 = 1.0, 10$ について y 方向のシステムサイズ依存性を調査する。本研究は壁を用いてせん断流を印加しており、この壁の影響は Reynolds 数が低い領域だと非常に長くなると予測される。よって、壁の影響を十分には除けないがそれでも影響の小さいシステムサイズを選ぶ必要がある。今回は $L_y/L = 2.5, 4.0, 5.5$ の領域について調査を行った。まずは、図 C.7 に各濃度における軌道定数の平均値 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展を示す。$n_f L^3 = 1.0$ では繊維の本数が少ないこともあり、顕著にシステムサイズの影響が出ている。h が小さくなるにつれて、繊維は低軌道側、つまり壁の影響によって渦度方向へと配向しやすいことがわかる。$n_f L^3 = 10$ では $n_f L^3 = 1.0$ の計算と比較するとシステムサイズの影響は小さいが、$h/L = 2.5$ の計算については他の二つとは異なる時間発展を示している。



(a) $n_f L^3 = 1.0$　　(b) $n_f L^3 = 10$

図 C.7: 各濃度における軌道定数の平均値 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展。

続いて、図 C.8 に各濃度における軌道定数の平均値 $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展を示す。$n_f L^3 = 1.0$ では $h/L = 2.5$ の計算の振幅が他の二つと比較して小さくなっている。また $n_f L^3 = 10$ では三つのデータがほとんど一致しており、明確なシステムサイズ依存性は確認されない。以上の結果を踏まえて、本研究では $h/L \geq 4.0$ のシステムで計算を行うこととする。

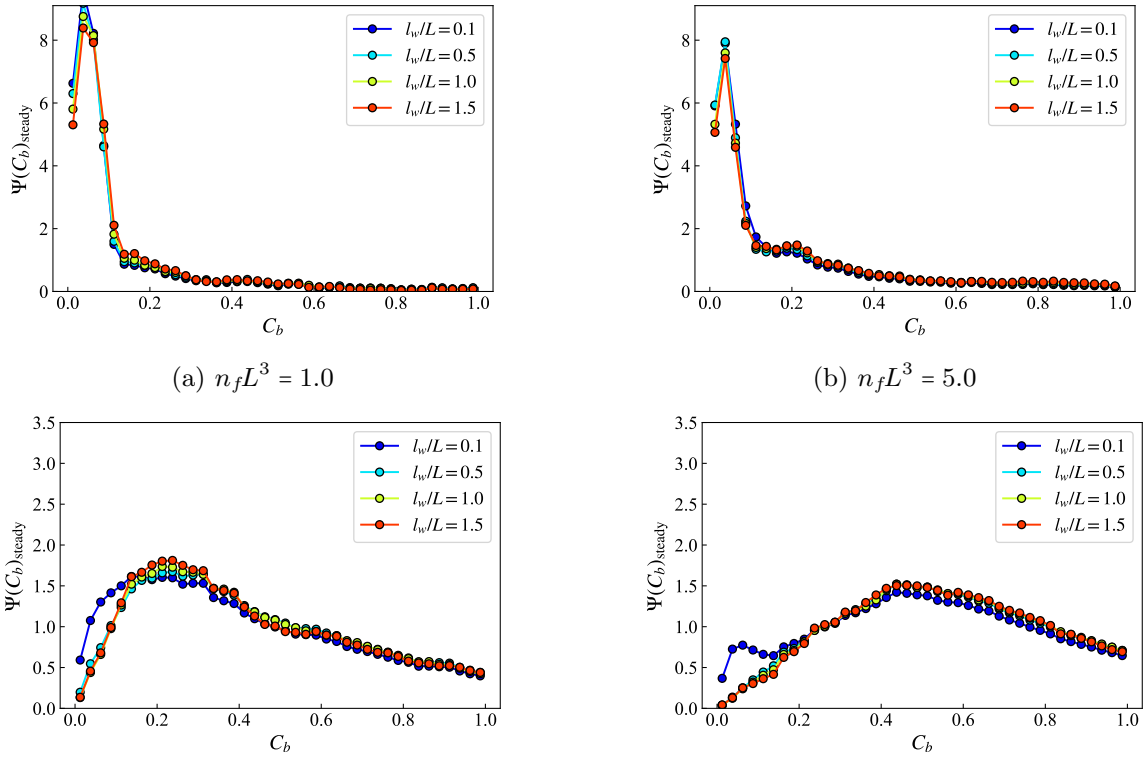


(a) $n_f L^3 = 1.0$　　(b) $n_f L^3 = 10$

図 C.8: 各濃度における軌道定数の平均値 $\langle A_{1122} \rangle (t)$ の時間発展。

C.4　軌道定数 C_b の分布関数 $\Psi(C_b)$

図 5.5 では示さなかった $n_f L^3 = 1, 5, 15, 25$ の濃度について、各 l_w における内部領域の C_b の分布関数を図 C.9 に示す。これより、主に $0 < C_b < 0.2$ の渦度方向周りの成分について l_w 依存性が強く出ている。よって、元々渦度方向の分布が大きい $n_f L^3 = 1, 5$ については壁依存性はあまり観測されない。また、$n_f L^3 = 15, 20$ については $l_w/L > 0.5$ のデータは概ね一致しており、壁の影響を受ける領域はおおよそ $r_w/L < 0.5$ だと考えられる。



(a) $n_f L^3 = 1.0$　(b) $n_f L^3 = 5.0$

(c) $n_f L^3 = 15.0$　(d) $n_f L^3 = 25.0$

図 C.9: 各 l_w における軌道定数 C_b の分布関数 $\Psi(C_b)$。

また、図 5.8 では $n_f L^3 = 20$ の初期分布についてのみ示した。図 C.10 に各濃度における初期分布を示す。平均に使用される繊維の本数が異なるため分布の計算精度の違いはあるが、概ね濃度によらない分布関数になっていることが分かる。

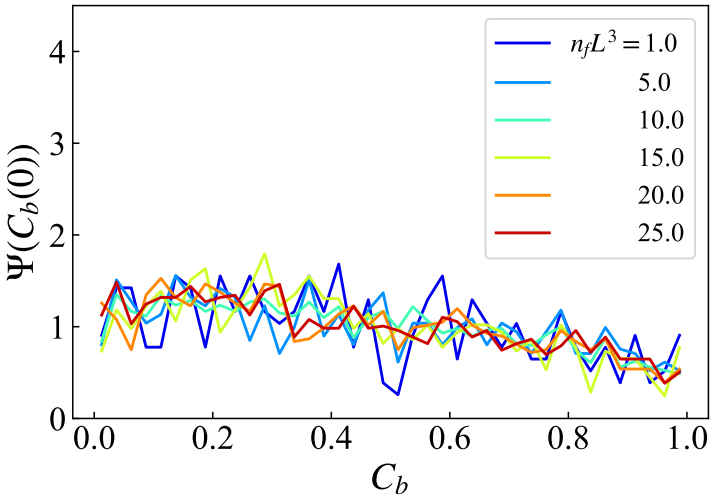
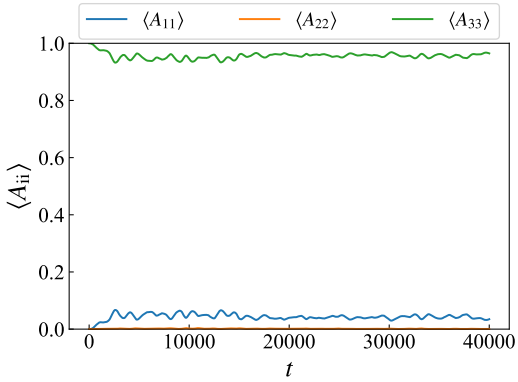


図 C.10: 各濃度における軌道定数 C_b の定常分布関数

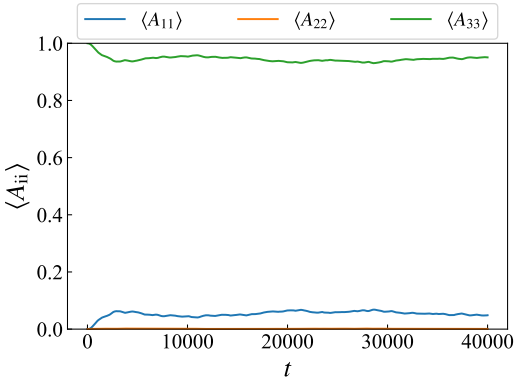
付録 D

初期配向依存性：渦度方向へ配向している場合

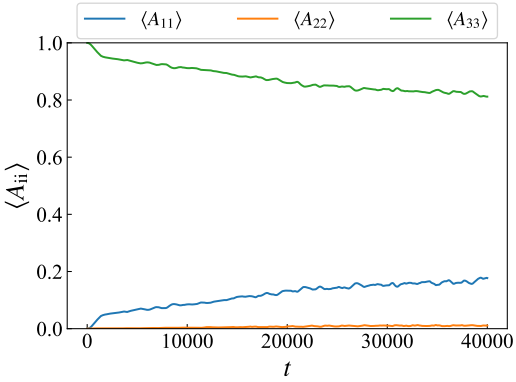
繊維配向やせん断粘度の初期配向依存性を調べるために、第 5.3.7 項では全ての繊維が流動方向に配向している場合の計算を行った。結果的には、濃厚領域 ($n_f L^3 = 25$) においては初期配向依存性はほとんど見られないという結果を得た。一方、希薄・準希薄領域についてはそれらの検証は行えていない。図 5.2 より、低濃度域ではランダムな初期配向の計算でも定常状態は得られていないが、最終的には多くの繊維が渦度方向へ強く配向するものと予測される。従って、本章では全ての繊維が渦度方向へと配向している初期状態 ($\phi_0 = 0, \theta_0 = 0$) からの計算を行い、特に低濃度域の懸濁液の繊維配向や粘度がどのように推移するかを観測する。シミュレーション条件は、初期配向以外は第 5.3.7 項と同様である。



(a) $n_f L^3 = 1.0$



(b) $n_f L^3 = 10$



(c) $n_f L^3 = 20$

図 D.1: $n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ における 2 階の配向テンソル $\langle A_{ii} \rangle$ の時間発展。

三つの濃度 $n_f L^3 = 1.0, 10, 20$ について二階の配向テンソルの平均値の時間発展を図 D.1 に示す。$n_f L^3 = 1.0, 10$ では、繊維配向がほとんど変化しておらず、A_{33} の値が 1.0 に近いまま推移している。この結果は、低濃度域では初期配向からほとんど変化せず繊維が渦度方向に強く配向していることを示している。一方で、$n_f L^3 = 25$ の濃厚領域では、A_{33} の値は減少し、A_{11}, A_{22} が単調に増加している。本計算の計算時間では定常状態は観測されていないが、計算を続けるとおそらく図 5.2 (c) と同様の値に落ち着くものと推測される。

次に、繊維の軌道定数のアンサンブル平均 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展を図 D.2 に示す。これより、$n_f L^3 \geq 10$ の計算については、繊維配向がおおよそ定常であることが分かる。$n_f L^3 \geq 10$ では、軌道定数の値は 0.1 以下であり、図 C.1 に示すランダムな初期配向の結果と比較すると非常に小さい値となっている。濃厚領域の計算から得た定常状態の繊維配向が初期配向に依存しないという結果が全ての濃度域で有効であれば、ランダムな初期配向からでも十分に長時間計算を行えば渦度方向に強く配向する可能性を示唆している。ただ、実際の検証には現状の数倍程度の時間の計算が必要だと考えられる。一方で、$n_f L^3 \leq 20$ の計算では $\langle C_b \rangle$ の値は単調に上昇しており、より長時間の計算を行うと図 5.22 と同等の定常配向に落ち着くと考えられる。濃厚領域では繊維間相互作用が十分に働くので、定常状態における繊維配向は一定のひずみ速度の下では繊維濃度によって決定すると考えられる。

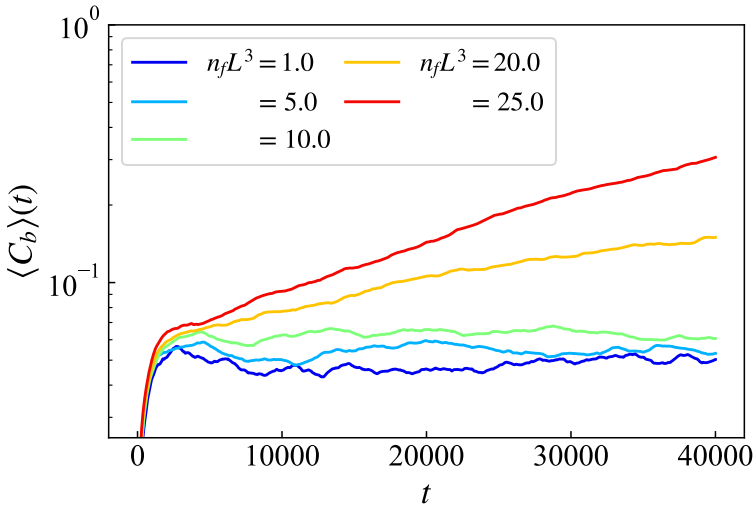


図 D.2: 各濃度における繊維の軌道定数のアンサンブル平均 $\langle C_b \rangle (t)$ の時間発展。

最後に、図 D.3 に各濃度の粘度成長曲線を示す。図 5.14 に示したランダムな初期配向における結果と比較すると、$t \simeq 10^4$ 付近まで濃度間の粘度値の差が小さい。これは、どの濃度においても初期配向の影響により渦度方向付近に強く配向しているので濃度によらず粘度が低いものと考えられる。$t > 10^4$ の領域では $n_f L^3 = 20, 25$ の濃厚領域において粘度上昇が見られた。これは図 D.2 より、時間発展に伴い平均的に繊維がせん断勾配面方向へと配向していくことで流体抵抗が上昇したことが原因だと考えられる。

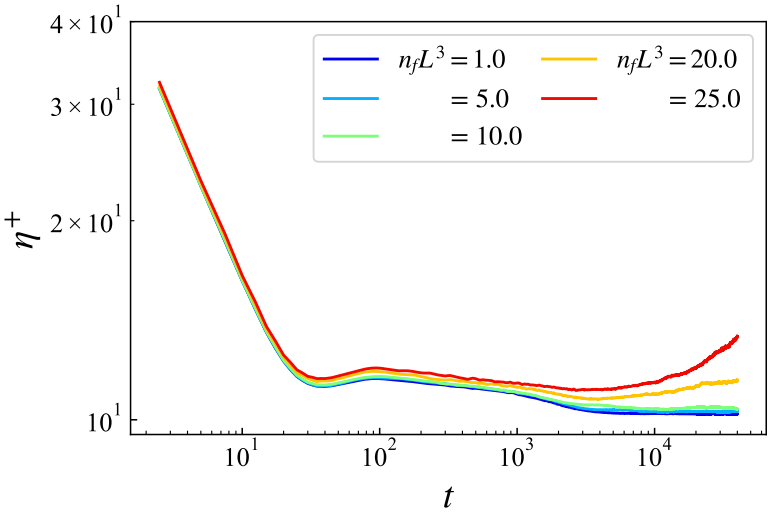


図 D.3: 各濃度における粘度成長曲線 η^+。溶媒粘度は $\eta_{\mathrm{sol}} = 10$ であり、ひずみ速度は定常状態の速度勾配の平均値を用いた。

付録 E

シミュレーションの詳細

本研究で用いたシミュレーションのソースコードは C 言語及び OpenMP を用いて作成した自作プログラムである。シミュレーションのソースコードは GitHub (https://github.com/keigo-enomoto) にて公開する予定である。また、本研究で作成したシミュレーション動画は、YouTube (https://www.youtube.com/channel/UCODDMaUqUC7EcQTZeouAGuA) にて公開している。

E.1 計算に要する時間

本研究のシミュレーションは、研究室内にあるリアルコンピューティング社製の計算機クラスター「liquid」及び名古屋大学保有のスーパーコンピュータ「不老」のクラウドシステムを用いて計算を行った。liquid に搭載されている CPU は Intel Xeon Gold 6230R (2.1GHz) である。不老クラウドシステムの CPU は Intel Xeon Gold 6230 (2.1 ~ 3.9 GHz) である。表 E.1 に liquid で行う典型的な計算に要する時間を示す。システムは $L_x = L_z = 30$、$L_y = 60$ の $N = 54000$ の計算であり、$r_p = 10$ である。また、並列数は 20 で、計算ステップは 200 万回ある。表 E.1 より、繊維濃度が高くなり固体粒子の数が増加するに伴って計算負荷が上がっていることが分かる。これは、式 (2.4) の右辺第三項に由来する計算負荷が高くなることが原因である。

表 E.1: 各繊維濃度 $n_f L^3$、繊維の本数 N_f に対する計算時間 (200 万ステップ、20 並列)。

$n_f L^3$	N_f	計算時間 (日)
1.0	49	4.4
10	486	6.0
20	972	7.6

E.2　並列化効率

本研究では OpenMP を用いてスレッド内並列計算を行った。このような並列計算の性能を評価する場合は、一般に台数効果を調べることが多い [114]。N_p 台のスレッドを用いた並列計算を行うことを考える。この時、N_p 並列時の計算時間 t_p が逐次計算の場合の計算時間 t_s と比較してどれくらい高速化されたか、つまり $S_p = t_s/t_p$ を台数効果と呼ぶ。並列化効率が 100% の理想的な状況下では $S_p = N_p$ となる。このような線形の関係が成立するのは、計算の全てが並列化できることが前提条件であり、そのようなプログラムはほとんど存在しない。プログラムにおける並列化できる割合が β である時、アムダールの法則より最大でも台数効果は $1/(1-\beta)$ となる [114]。よって、並列計算を行う際には台数効果を測定しながら、実装のチューニングを行うことが重要となる。

図 E.1 に $n_f L^3 = 1.0, 10$ における台数効果を示す。システムサイズは表 E.1 と同様である。図 E.1 より、どちらの濃度においても概ね 20 並列前後までは十分な並列効率で計算ができていることが分かる。これは陽解法型の MPS を採用し、並列化が容易なシンプルなアルゴリズムになっていることが要因である。半陰解法型のアルゴリズムを採用する場合については、行列計算の部分の並列化効率が肝となるため PETSc [115] 等の実績ある数値ライブラリを使用することが望ましい。ただし、PETSc を含む並列プログラムを実装する際には MPI の使用が必要である。また、濃度上昇に伴って並列化効率が下がるのは、式 (2.4) の右辺第三項の並列化ができていないことが原因である。この項の計算では、注目する固体粒子が受ける力を計算する際に相互作用を行う相手が流体粒子である場合は、反作用を返す必要がある。実際の実装では固体粒子に対してループを回しているため、異なるスレッドにおいて同じ流体粒子との相互作用を計算している場合に、同時に同じ配列要素へアクセスする可能性が生じうる。このアクセス競合を防ぐためには排他制御が必要となるが、一般にそのような操作を行うと並列効率が著しく下がるため、該当部については今回は並列化を行っていない。以上より、作成したプログラムでは $N = 54000$ で 16 並列程度を指定すると効率的に計算ができる。

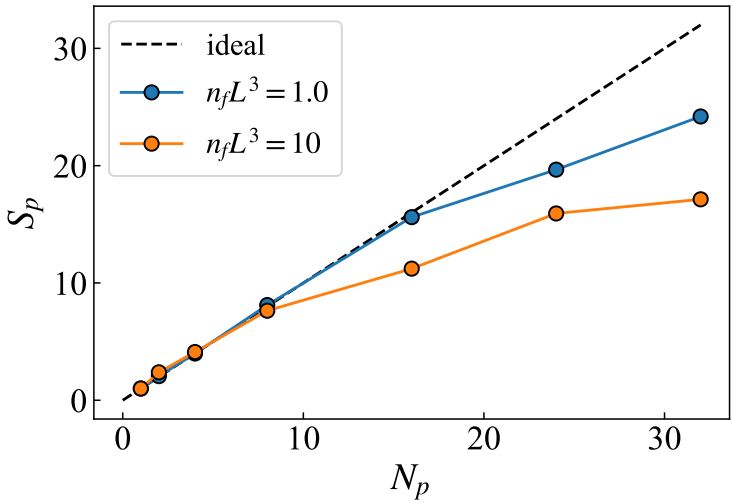


図 E.1: 本研究における台数効果 ($n_f L^3 - 1.0, 10$)。縦軸は台数効果 $S_p = T_s/T_p$、横軸は並列数 N_p。破線は並列化効率が 100% の理想的な状況における台数効果を示す。

E.3　使用したソフトウェア及び参考にした邦書

本研究では、C 言語および OpenMP を用いて並列計算プログラムを作成した。MPS 法のように近傍粒子探索が必要で、なおかつ数万以上の粒子を用いる三次元計算となると C 言語や Fortan といったコンパイラ型言語の使用が望ましい。Meyer ら [67] のように数千粒子程度の比較的小さなシステムであれば python をベースとした実装も可能である。本研究では OpenMP を用いた簡単なノード内並列に留めたが、さらに大きなシステム (数十万以上) で十分に効率を保って並列化を行うためには、MPI の利用は必要不可欠である。前節で述べた排他制御等の複雑な制御は MPI の利用が推奨され、OpenMP を利用する場合は基本的には単純な並列化のみに機能を制限する方が望ましい。

本研究のデータ解析にはインタプリタ型の言語である python を使用した。python は Jupyter notebook [116] などの環境を用いて対話的な実行処理が可能であり、データ解析の際には非常に便利である。また、どのプログラミング言語にも共通する内容ではあるが、よく使用する関数をモジュール化したり、notebook の内容をスクリプトに落とし込むことで解析の自動化も容易である。データ解析における python のもう一つの強みは豊富なライブラリである。現在、さまざまな業界で python の人気が高い要因は、高機能で豊富なライブラリを簡便に扱えることだと考えられる。本研究でも科学計算用ライブラリ NumPy [113] を用いて数百万程度の大量のデータの一括処理を行っている他、代表的なグラフ描画ライブラリである matplotlib [117] を用いて全てのグラフを描画している。

本研究で用いた MPS 法は東京大学の越塚ら [55] のグループによって開発された経緯もあり、邦書が充実している。入門書としては 2014 年発行の越塚らによる「粒子法入門 -流体シミュレーションの基礎から並列計算と可視化まで C/C++ ソースコード付-」[93] が最適である。初学者にも分かりやすく平易に MPS 法の基礎的な概念やアルゴリズムが紹介されている他、具体的なシミュレーションコードも解説付きで掲載されている。本研究においても、こちらの書籍に記載のシミュレーションコードを参考にプログラムを作成した。また、OpenMP, CUDA, MPI を用いた並列計算プログラムについても解説付きで公開されており、並列計算の初学者にも一読を薦める。SPH 法を含む流体粒子法の基礎理論については後藤らの「粒子法 -連続体・混相流・粒状体のための計算科学-」[68] が最も詳しい。第 1.5 節でも言及した高精度化粒子法や気液・固液連成などさらに実用的な応用面についても詳細に紹介されており、流体粒子法を研究する上では欠かせない書籍となっている。

参考文献

[1] J. Hämäläinen, S. B. Lindström, T. Hämäläinen, and H. Niskanen. Papermaking fibre-suspension flow simulations at multiple scales. *J. Eng. Math.*, 71(1):55–79, nov 2011.

[2] Jason E. Butler and Braden Snook. Microstructural Dynamics and Rheology of Suspensions of Rigid Fibers. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 50(1):299–318, jan 2018.

[3] Takashi Ishikawa, Kazuaki Amaoka, Yuichi Masubuchi, Tetsuya Yamamoto, Atsuhiko Yamanaka, Masahiro Arai, and Jun Takahashi. Overview of automotive structural composites technology developments in Japan. *Compos. Sci. Technol.*, 155:221–246, 2018.

[4] 松谷 浩明, 武田 一朗, 橋本 雅弘, 平野 啓之, and 岡部 朋永. 粒子法を用いた熱可塑性スタンパブルシートの流動シミュレーション. **日本複合材料学会誌**, 40(5):227–237, 2014.

[5] R. R. Sundararajakumar and Donald L. Koch. Structure and properties of sheared fiber suspensions with mechanical contacts. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 73(3):205–239, dec 1997.

[6] Christopher J.S. Petrie. The rheology of fibre suspensions. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 87(2-3):369–402, 1999.

[7] M. Doi and S. F. Edwards. Dynamics of rod-like macromolecules in concentrated solution. Part 1. *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2 Mol. Chem. Phys.*, 74:560–570, 1978.

[8] Saif Shaikh, Scott Strednak, and Jason E. Butler. Advances in the Rheological Characterization of Slurries of Elongated Particles. *KONA Powder Part. J.*, 39:84–99, jan 2022.

[9] Benke Li, Ying Guo, Paul Steeman, Markus Bulters, and Wei Yu. Wall effect on the rheology of short-fiber suspensions under shear. *J. Rheol. (N. Y. N. Y).*, 65(6):1169–1185, sep 2021.

[10] Miguel A. Bibbo, Steven M. Dinh, and Robert C. Armstrong. Shear Flow Properties of Semiconcentrated Fiber Suspensions. *J. Rheol. (N. Y. N. Y).*, 29(6):905–929, jul 1985.

[11] M. A. Bibbo. *Rheology of semiconcentrated fiber suspensions.* PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1987.

[12] Franco Tapia, Saif Shaikh, Jason E. Butler, Olivier Pouliquen, and Élisabeth Guazzelli. Rheology of concentrated suspensions of non-colloidal rigid fibres. *J. Fluid Mech.*, 827:R5, sep 2017.

[13] Robert L. Powell. Rheology of suspensions of rodlike particles. *J. Stat. Phys.*, 62(5-6):1073–1094, 1991.

[14] Carl A. Stover, Donald L. Koch, and Claude Cohen. Observations of fibre orientation in simple shear flow of semi-dilute suspensions. *J. Fluid Mech.*, 238(277):277–296, 1992.

[15] Michael P. Petrich, Donald L. Koch, and Claude Cohen. Experimental determination of the stress-microstructure relationship in semi-concentrated fiber suspensions. *J. Nonnewton. Fluid*

Mech., 95(2-3):101–133, dec 2000.

[16] Kelli B. Moses, Suresh G. Advani, and Andreas Reinhardt. Investigation of fiber motion near solid boundaries in simple shear flow. *Rheol. Acta*, 40(3):296–306, 2001.

[17] G. B. Jeffery. The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proc. R. Soc. London. Ser. A, Contain. Pap. a Math. Phys. Character*, 102(715):161–179, nov 1922.

[18] F. P. Bretherton. The motion of rigid particles in a shear flow at low Reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 14(2):284–304, 1962.

[19] B. J. Trevelyan and S. G. Mason. Particle motions in sheared suspensions. I. Rotations. *J. Colloid Sci.*, 6(4):354–367, aug 1951.

[20] J. Einarsson, F. Candelier, F. Lundell, J. R. Angilella, and B. Mehlig. Rotation of a spheroid in a simple shear at small Reynolds number. *Phys. Fluids*, 27(6):063301, jun 2015.

[21] P. G. Saffman. On the motion of small spheroidal particles in a viscous liquid. *J. Fluid Mech.*, 1(5):540–553, 1956.

[22] J. Einarsson, F. Candelier, F. Lundell, J. R. Angilella, and B. Mehlig. Effect of weak fluid inertia upon Jeffery orbits. *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, 91(4):041002, apr 2015.

[23] E. Y. Harper and i. Dee Chang. Maximum dissipation resulting from lift in a slow viscous shear flow. *J. Fluid Mech.*, 33(2):209–225, aug 1968.

[24] G. Subramanian and Donald L. Koch. Inertial effects on fibre motion in simple shear flow. *J. Fluid Mech.*, 535:383–414, jul 2005.

[25] G. Subramanian and D. L. Koch. Inertial effects on the orientation of nearly spherical particles in simple shear flow. *J. Fluid Mech.*, 557:257–296, jun 2006.

[26] Mikio Yamanoi and João M. Maia. Stokesian dynamics simulation of the role of hydrodynamic interactions on the behavior of a single particle suspending in a Newtonian fluid. Part 1. 1D flexible and rigid fibers. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 166(9-10):457–468, may 2011.

[27] Fransisco Folgar and Charles L. Tucker. ORIENTATION BEHAVIOR OF FIBERS IN CONCENTRATED SUSPENSIONS. *J. Reinf. Plast. Compos.*, 3(2):98–119, apr 1984.

[28] Suresh G. Advani and Charles L. Tucker. The Use of Tensors to Describe and Predict Fiber Orientation in Short Fiber Composites. *J. Rheol. (N. Y. N. Y).*, 31(8):751–784, 1987.

[29] M. Sepehr, G. Ausias, and Pierre J. Carreau. Rheological properties of short fiber filled polypropylene in transient shear flow. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 123(1):19–32, oct 2004.

[30] Jin Wang, John F. O'Gara, and Charles L. Tucker. An objective model for slow orientation kinetics in concentrated fiber suspensions: Theory and rheological evidence. *J. Rheol. (N. Y. N. Y).*, 52(5):1179–1200, sep 2008.

[31] Donald L. Koch. A model for orientational diffusion in fiber suspensions. *Phys. Fluids*, 7(8):2086–2088, 1995.

[32] Jay H. Phelps and Charles L. Tucker. An anisotropic rotary diffusion model for fiber orientation in short- and long-fiber thermoplastics. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 156(3):165–176, feb 2009.

[33] J. M. Burgers. Second report on viscosity and plasticity. *Kon. Ned. Akad. Wet. Verhand(Eerste Secite)*, 16:113, 1938.

[34] G. K. Batchelor. Slender-body theory for particles of arbitrary cross-section in Stokes flow. *J.*

Fluid Mech., 44(3):419–440, nov 1970.

[35] G. K. Batchelor. The stress generated in a non-dilute suspension of elongated particles by pure straining motion. *J. Fluid Mech.*, 46(4):813–829, apr 1971.

[36] Donald L. Koch and Eric S.G. Shaqfeh. The average rotation rate of a fiber in the linear flow of a semidilute suspension. *Phys. Fluids A*, 2(12):2093–2102, dec 1990.

[37] Eric S.G. Shaqfeh and Glenn H. Fredrickson. The hydrodynamic stress in a suspension of rods. *Phys. Fluids A*, 2(1):7–24, 1990.

[38] Michael B. Mackaplow, Eric S.G. Shaqfeh, and Richard L. Schiek. Numerical study of heat and mass transport in fibre suspensions. *Proc. R. Soc. London, Ser. A Math. Phys. Sci.*, 447(1929):77–110, 1994.

[39] Michael B. Mackaplow and Eric S.G. Shaqfeh. A numerical study of the rheological properties of suspensions of rigid, non-Brownian fibres. *J. Fluid Mech.*, 329:155–186, dec 1996.

[40] Susanne K. Kugler, Armin Kech, Camilo Cruz, and Tim Osswald. Fiber Orientation Predictions—A Review of Existing Models. *J. Compos. Sci.*, 4(2):69, jun 2020.

[41] Yuichi Yamane, Yukio Kaneda, and Masao Dio. Numerical simulation of semi-dilute suspensions of rodlike particles in shear flow. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 54(C):405–421, 1994.

[42] Xijun Fan, N. Phan-Thien, and Rong Zheng. A direct simulation of fibre suspensions. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 74(1-3):113–135, jan 1998.

[43] Satoru Yamamoto and Takaaki Matsuoka. A method for dynamic simulation of rigid and flexible fibers in a flow field. *J. Chem. Phys.*, 98(1):644–650, 1993.

[44] Paal Skjetne, Russell F. Ross, and Daniel J. Klingenberg. Simulation of single fiber dynamics. *J. Chem. Phys.*, 107(6):2108–2121, aug 1997.

[45] Mikio Yamanoi, C. Leer, F. W.J. van Hattum, O. S. Carneiro, and J. M. Maia. Direct fibre simulation of carbon nanofibres suspensions in a Newtonian fluid under simple shear. *J. Colloid Interface Sci.*, 347(2):183–191, jul 2010.

[46] Toshiki Sasayama and Masahide Inagaki. Simplified bead-chain model for direct fiber simulation in viscous flow. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 250:52–58, dec 2017.

[47] C. F. Schmid, Leonard H. Switzer, and Daniel J. Klingenberg. Simulations of fiber flocculation: Effects of fiber properties and interfiber friction. *J. Rheol. (N. Y. N. Y).*, 44(4):781–809, jul 2000.

[48] Stefan B. Lindström and Tetsu Uesaka. Simulation of the motion of flexible fibers in viscous fluid flow. *Phys. Fluids*, 19(11):113307, nov 2007.

[49] John M. Stockie and Sheldon I. Green. Simulating the Motion of Flexible Pulp Fibres Using the Immersed Boundary Method. *J. Comput. Phys.*, 147(1):147–165, nov 1998.

[50] Stefan B. Lindström and Tetsu Uesaka. Simulation of semidilute suspensions of non-Brownian fibers in shear flow. *J. Chem. Phys.*, 128(2):024901, jan 2008.

[51] Stefan B. Lindström and Tetsu Uesaka. A numerical investigation of the rheology of sheared fiber suspensions. *Phys. Fluids*, 21(8):083301, aug 2009.

[52] Jingshu Wu and Cyrus K. Aidun. A method for direct simulation of flexible fiber suspensions using lattice Boltzmann equation with external boundary force. *Int. J. Multiph. Flow*, 36(3):202–209, mar 2010.

[53] Asif Salahuddin, Jingshu Wu, and C. K. Aidun. Numerical study of rotational diffusion in sheared semidilute fibre suspension. *J. Fluid Mech.*, 692:153–182, feb 2012.

[54] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 181(3):375–389, dec 1977.

[55] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nucl. Sci. Eng.*, 123(3):421–434, 1996.

[56] Shigeki Yashiro. Application of particle simulation methods to composite materials: a review. *Adv. Compos. Mater.*, 26(1):1–22, jan 2017.

[57] S. Yashiro, T. Okabe, and K. Matsushima. A numerical approach for injection molding of short-fiber-reinforced plastics using a particle method. *Adv. Compos. Mater.*, 20(6):503–517, 2011.

[58] S. Yashiro, Hideaki Sasaki, and Yoshihisa Sakaida. Particle simulation for predicting fiber motion in injection molding of short-fiber-reinforced composites. *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, 43(10):1754–1764, oct 2012.

[59] R. Deeb, S. Kulasegaram, and B. L. Karihaloo. 3D modelling of the flow of self-compacting concrete with or without steel fibres. Part II: L-box test and the assessment of fibre reorientation during the flow. *Comput. Part. Mech.*, 1(4):391–408, dec 2014.

[60] Liping He, Gang Lu, Dachuan Chen, Wenjun Li, Liangpeng Chen, Jianmin Yuan, and Chunsheng Lu. Smoothed particle hydrodynamics simulation for injection molding flow of short fiber-reinforced polymer composites. *J. Compos. Mater.*, 52(11):1531–1539, aug 2018.

[61] Liping He, Gang Lu, Dachuan Chen, Wenjun Li, and Chunsheng Lu. Three-dimensional smoothed particle hydrodynamics simulation for injection molding flow of short fiber-reinforced polymer composites. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 25(5):055007, may 2017.

[62] S. Huntley, T. Rendall, M. Longana, T. Pozegic, K. Potter, and I. Hamerton. Validation of a smoothed particle hydrodynamics model for a highly aligned discontinuous fibre composites manufacturing process. *Compos. Sci. Technol.*, 196:108152, aug 2020.

[63] P. A. Cundall and O. D.L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1):47–65, mar 1979.

[64] Dongmin Yang, Ke Wu, Lei Wan, and Yong Sheng. A particle element approach for modelling the 3d printing process of fibre reinforced polymer composites. *J. Manuf. Mater. Process.*, 1(1):10, sep 2017.

[65] Ke Wu, Lei Wan, Hao Zhang, and Dongmin Yang. Numerical simulation of the injection molding process of short fiber composites by an integrated particle approach. *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, 97(9-12):3479–3491, aug 2018.

[66] Xiufeng Yang, Moubin Liu, and Shiliu Peng. Smoothed particle hydrodynamics and element bending group modeling of flexible fibers interacting with viscous fluids. *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, 90(6):063011, dec 2014.

[67] Nils Meyer, Oleg Saburow, Martin Hohberg, Andrew N. Hrymak, Frank Henning, and Luise Kärger. Parameter Identification of Fiber Orientation Models Based on Direct Fiber Simulation with Smoothed Particle Hydrodynamics. *J. Compos. Sci.*, 4(2):77, jun 2020.

[68] 後藤仁志. **粒子法 -連続体・混相流・粒状体のための計算科学-**. 森北出版, 2018.

[69] M. B. Liu and G. R. Liu. Smoothed particle hydrodynamics (SPH): An overview and recent developments. *Arch. Comput. Methods Eng.*, 17(1):25–76, mar 2010.

[70] Hitoshi Gotoh and Abbas Khayyer. Current achievements and future perspectives for projection-based particle methods with applications in ocean engineering. *J. Ocean Eng. Mar. Energy*, 2(3):251–278, apr 2016.

[71] Hitoshi Gotoh, Abbas Khayyer, and Yuma Shimizu. Entirely Lagrangian meshfree computational methods for hydroelastic fluid-structure interactions in ocean engineering—Reliability, adaptivity and generality. *Appl. Ocean Res.*, 115:102822, oct 2021.

[72] J. J. Monaghan. Simulating free surface flows with SPH. *J. Comput. Phys.*, 110(2):399–406, feb 1994.

[73] Anthony A. Amsden and Francis H. Harlow. A simplified MAC technique for incompressible fluid flow calculations. *J. Comput. Phys.*, 6(2):322–325, oct 1970.

[74] 越塚誠一. **粒子法**. 丸善, 2005.

[75] Rui Xu, Peter Stansby, and Dominique Laurence. Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach. *J. Comput. Phys.*, 228(18):6703–6725, oct 2009.

[76] Masayuki Tanaka and Takayuki Masunaga. Stabilization and smoothing of pressure in MPS method by Quasi-Compressibility. *J. Comput. Phys.*, 229(11):4279–4290, jun 2010.

[77] M Oochi, S. Koshizuka, and M. Sakai. Explicit MPS Algorithm for Free Surface Flow Analysis. *Trans. Japan Soc. Comput. Eng. Sci.*, 2010:20100013–20100013, 2010.

[78] Ahmad Shakibaeinia and Yee Chung Jin. A weakly compressible MPS method for modeling of open-boundary free-surface flow. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 63(10):1208–1232, aug 2010.

[79] Abbas Khayyer and Hitoshi Gotoh. Enhancement of stability and accuracy of the moving particle semi-implicit method. *J. Comput. Phys.*, 230(8):3093–3118, apr 2011.

[80] Tasuku Tamai and Seiichi Koshizuka. Least squares moving particle semi-implicit method: An arbitrary high order accurate meshfree Lagrangian approach for incompressible flow with free surfaces. *Comput. Part. Mech.*, 1(3):277–305, sep 2014.

[81] Antonio Souto-Iglesias, Fabricio MacIà, Leo M. González, and Jose L. Cercos-Pita. On the consistency of MPS. *Comput. Phys. Commun.*, 184(3):732–745, mar 2013.

[82] Guangtao Duan, Akifumi Yamaji, Seiichi Koshizuka, and Bin Chen. The truncation and stabilization error in multiphase moving particle semi-implicit method based on corrective matrix: Which is dominant? *Comput. Fluids*, 190:254–273, aug 2019.

[83] Gen Li, Jinchen Gao, Panpan Wen, Quanbin Zhao, Jinshi Wang, Junjie Yan, and Akifumi Yamaji. A review on MPS method developments and applications in nuclear engineering. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 367:113166, aug 2020.

[84] A. Eringen. Theory of Micropolar Fluids. *Indiana Univ. Math. J.*, 16(1):1–18, 1966.

[85] Keigo Enomoto, Takato Ishida, Yuya Doi, Takashi Uneyama, and Yuichi Masubuchi. Extension of Moving Particle Simulation including rotational degrees of freedom for dilute fiber suspension, jan 2023. available at arXiv: https://arxiv.org/abs/2301.03818v1.

[86] B. Maurel and Alain Combescure. An SPH shell formulation for plasticity and fracture analysis in explicit dynamics. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 76(7):949–971, nov 2008.

[87] J Chen, C Liang, and J D Lee. Theory and simulation of micronolar fluid dynamics. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part N J. Nanoeng. Nanosyst.*, 224(1-2):31–39, 2010.

[88] A. C. Eringen. Continuum theory of dense rigid suspensions. *Rheol. Acta*, 30(1):23–32, jan 1991.

[89] Christina Papenfuss and Joe Verhás. Constitutive Theory of fiber suspensions. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 253:27–35, mar 2018.

[90] Jan Bender, Tassilo Kugelstadt, Dan Koschier, and Marcel Weiler. A micropolar material model for turbulent SPH fluids. *Proc. - SCA 2017 ACM SIGGRAPH / Eurographics Symp. Comput. Animat.*, 2017.

[91] Chengwei Zhu, Chong Peng, and Wei Wu. Applications of micropolar SPH in geomechanics. *Acta Geotech.*, 2021.

[92] A. Souto-Iglesias, J. Bonet Avalos, M. Antuono, and A. Colagrossi. General isotropic micropolar fluid model in smoothed particle hydrodynamics. *Phys. Rev. E*, 104(1):015315, jul 2021.

[93] 越塚誠一, 柴田和也, and 室谷浩平. **粒子法入門 -流体シミュレーションの基礎から並列計算と可視化まで *C/C++* ソースコード付-**. 丸善, 2014.

[94] Seiichi Koshizuka, Atsushi Nobe, and Yoshiaki Oka. Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi ‐ implicit method. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 26(7):751–769, apr 1998.

[95] M.P. Allen and D.J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. OXFORD, 1987.

[96] Vitaly A. Kuzkin and Igor E. Asonov. Vector-based model of elastic bonds for simulation of granular solids. *Phys. Rev. E*, 86(5):051301, nov 2012.

[97] 田中 正幸 and 越塚 誠一. 粒子法を用いた赤血球の変形シミュレーション. **日本流体力学会誌「ながれ」**, 26(1):49–55, 2007.

[98] Andrea Colagrossi, B. Bouscasse, M. Antuono, and S. Marrone. Particle packing algorithm for SPH schemes. *Comput. Phys. Commun.*, 183(8):1641–1653, aug 2012.

[99] 神部 勉 and 石井克哉. **流体力学**. 裳華房, 1995.

[100] Naoto Mitsume, Shinobu Yoshimura, Kohei Murotani, and Tomonori Yamada. Explicitly represented polygon wall boundary model for the explicit MPS method. *Comput. Part. Mech.*, 2(1):73–89, 2015.

[101] Adolfo Vázquez-Quesada and Marco Ellero. Rheology and microstructure of non-colloidal suspensions under shear studied with Smoothed Particle Hydrodynamics. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 233:37–47, oct 2016.

[102] 日本レオロジー学会. **講座・レオロジー**. 高分子刊行会, 1992.

[103] Bastien Dietemann, Torsten Kraft, Harald Kruggel-Emden, and Claas Bierwisch. A Smoothed Particle Hydrodynamics scheme for arbitrarily shaped rigid bodies within highly viscous fluids. *J. Comput. Phys. X*, 8:100068, sep 2020.

[104] 森岡茂樹. **混相流体の力学**. 日本流体力学会, 1991.

[105] E. Anczurowski and S. G. Mason. The kinetics of flowing dispersions. III. Equilibrium orientations of rods and discs (experimental). *J. Colloid Interface Sci.*, 23(4):533–546, apr 1967.

[106] Yuichi Yamane, Yukio Kaneda, and Masao Doi. The Effect of Interaction of Rodlike Particles

in Semi-Dilute Suspensions under Shear Flow. *J. Phys. Soc. Japan*, 64(9):3265–3274, nov 1995.

[107] Satoru Yamamoto and Takaaki Matsuoka. Dynamic simulation of microstructure and rheology of fiber suspensions. *Polym. Eng. Sci.*, 36(19):2396–2403, 1996.

[108] Jun Wang, Wei Yu, Chixing Zhou, Ying Guo, Wim Zoetelief, and Paul Steeman. Elongational rheology of glass fiber-filled polymer composites. *Rheol. Acta*, 55(10):833–845, 2016.

[109] Satoru Yamamoto and Takaaki Matsuoka. Viscosity of dilute suspensions of rodlike particles: A numerical simulation method. *J. Chem. Phys.*, 100(4):3317–3324, 1994.

[110] Asif Salahuddin, Jingshu Wu, and C. K. Aidun. Study of semidilute fibre suspension rheology with lattice-Boltzmann method. *Rheol. Acta*, 52(10-12):891–902, nov 2013.

[111] Satoru Yamamoto and Takaaki Matsuoka. Dynamic simulation of a platelike particle dispersed system. *J. Chem. Phys.*, 107(8):3300–3308, jun 1997.

[112] Toshiki Sasayama, Hirotaka Okamoto, Norikazu Sato, and Jumpei Kawada. Numerical simulation of plate-like particle orientation in injection molding. *Powder Technol.*, 404:117481, may 2022.

[113] Charles R. Harris, K. Jarrod Millman, Stéfan J. van der Walt, Ralf Gommers, Pauli Virtanen, David Cournapeau, Eric Wieser, Julian Taylor, Sebastian Berg, Nathaniel J. Smith, Robert Kern, Matti Picus, Stephan Hoyer, Marten H. van Kerkwijk, Matthew Brett, Allan Haldane, Jaime Fernández del Río, Mark Wiebe, Pearu Peterson, Pierre Gérard-Marchant, Kevin Sheppard, Tyler Reddy, Warren Weckesser, Hameer Abbasi, Christoph Gohlke, and Travis E. Oliphant. Array programming with NumPy. *Nature*, 585(7825):357–362, September 2020.

[114] 片桐孝洋. **並列プログラミング入門 サンプルプログラムで学ぶ** *OpenMP* **と** *OpneACC*. 東京大学出版会, 2015.

[115] PETSc (Portable Extensible Tooklit for Scientific Computation Tooklit for Advanced Optimization). https://www.mcs.anl.gov/petsc/index.html.

[116] Project Jupyter. https://jupyter.org/.

[117] J. D. Hunter. Matplotlib: A 2d graphics environment. *Computing In Science & Engineering*, 9(3):90–95, 2007.