令和２年度卒業論文

MPS法を用いた剪断流動下における繊維懸濁液の繊維配向挙動の解析

物理工学科

増渕研究室

学生番号 081720073

氏名 榎本 圭吾

要旨

剪断流動下における繊維懸濁液内の繊維の配向挙動は繊維長と流動場、そして繊維の数密度によって決定される。希薄極限においては、Jeffery によって繊維運動の解析解が求められているが、数密度が上昇すると繊維間の流体を介した相互作用 (流体相互作用) や繊維同士の直接の接触により複雑な相関が生じるため理論的アプローチは難しい。したがって、シミュレーションを用いた研究が有効である。しかし、シミュレーションを用いた先行研究では、流動場は一様であると仮定し、繊維間の流体相互作用は二体の相互作用として近似しており、厳密ではない。そこで本研究では MPS 法を用いて、流体の基礎方程式である Navier-Stokes 方程式に基づいて繊維懸濁液のシミュレーションを作成し、繊維懸濁液中の繊維の配向挙動の数密度依存性を解析した。バルク領域の配向テンソルの解析結果から、繊維の数密度が上昇するにつれて繊維は流動方向に配向しづらくなることがわかった。また、繊維の配向分布関数は数密度が上昇するにつれてなだらかになり、ピーク位置の流動方向からの変化は大きくなった。ピーク位置の変化方向は、繊維の回転方向に依存し、ピーク位置の変化量は他繊維の相互作用の増加に伴って増加した。このピーク位置の変化は、他繊維から受ける相互作用によって、繊維が受けるトルクが増減することが原因であると考えられる。また、流体相互作用による寄与を無視して計算を行った先行研究と配向分布関数の比較を行ったが、定性的にはその形状に大きな変化は見られなかった。繊維懸濁液の剪断粘度は繊維の数密度が上昇するに伴って増加した。この増加は、繊維の占有体積による寄与、繊維の配向角が大きくなり繊維にかかる流体抵抗が大きくなることによる寄与、繊維同士の接触によって生じる抵抗による寄与の 3 つがあると考えられる。

目次

要旨 1

第 1 章 序論 4

1.1 はじめに 4

1.2 Navier-Stokes 方程式と理論解 4

1.2.1 Poiseuille 流 5

1.2.2 Couette 流 5

1.3 粒子法とは 6

1.4 粒子法における繊維の表現方法 6

1.5 流体中の繊維の運動 7

1.6 既存の繊維配向モデル 8

1.7 シミュレーションによるアプローチ 10

1.8 剪断変形下における繊維の配向挙動 10

1.9 本研究の目的 11

第 2 章 シミュレーション方法 12

2.1 支配方程式 12

2.2 無次元化 12

2.3 流体モデル (MPS 法) 13

2.3.1 粒子を用いた離散化 13

2.3.2 重み関数と粒子数密度 13

2.3.3 演算子の離散化 14

2.3.4 半陰的アルゴリズム 14

2.3.5 圧力の計算 16

2.3.6 境界条件 17

2.4 繊維モデル 18

2.4.1 stretching force 18

2.4.2 bending force 18

2.5 時間刻み幅 19

2.5.1 クーラン条件 19

2.5.2 拡散数条件 19

2.5.3 繊維間のバネによる制限 20

2.6 初期配置の生成 20

第 3 章　シミュレーションの妥当性検証 22
3.1　流体計算の妥当性検証 22
3.1.1　Poiseuille 流 23
3.1.2　Couette 流 24
3.2　繊維モデルの妥当性検証 25
3.2.1　Jeffery Orbit 25
3.2.2　パラメータ 27

第 4 章　結果 29
4.1　繊維配向に壁が与える影響 30
4.2　定常状態の決定 31
4.3　繊維配向の数密度依存性 32
4.4　繊維の配向分布関数 33
4.5　剪断粘度の数密度依存性 34

第 5 章　考察 36
5.1　流体相互作用による配向挙動への影響 36
5.2　配向分布関数のピーク位置の変化方向 37
5.3　繊維配向と粘度の関係 38

第 6 章　結論 39

謝辞 40

付録 A　研究に使用したプログラム 41

付録 B　計算に用いたアルゴリズム 42
B.1　近傍粒子探索のアルゴリズム 42
B.2　線分の交差判定アルゴリズム 42

参考文献 44

第 1 章

序論

1.1 はじめに

近年、炭素繊維複合材料はその軽量性と剛性、また耐腐食性から様々な用途に対して用いられている [1]。その中でも、短繊維複合材料は長繊維を用いた材料と比較して強度は劣るが、コストが安価であり、また長繊維を用いたものと比較して成形対象の自由度が高いことが特徴である [2]。このような短繊維複合材料の力学的強度は、複合材料の内部構造によって決定し、この構造は繊維の長さや樹脂の特性、繊維の数密度、そして成型時の流動場に依存する [3]。したがって、製品の物性を予測するには、成形過程における繊維懸濁液 (樹脂に繊維が分散された系) の内部構造を知ることが重要である。この内部構造の予測にシミュレーションは有効であり、いくつかの先行研究が存在する [4]。本研究においても、特定の流動下における繊維懸濁液の内部構造をシミュレーションを用いて解析する。

1.2 Navier-Stokes 方程式と理論解

非圧縮粘性流体の運動は以下の Navier-Stokes 方程式と連続の式から導出される非圧縮の条件式にしたがって運動することが知られている。[5]

$$\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \nu\nabla^2\boldsymbol{u} + \boldsymbol{f} \tag{1.1}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0 \tag{1.2}$$

この時、$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\nabla$ はラグランジュ微分または物質微分と呼ばれ、流体粒子の運動経路に沿った時間微分である。$\boldsymbol{u}$ は速度ベクトル、ρ は流体の質量密度、 P は流体にかかる圧力、$\nu = \mu/\rho$ は動粘性係数であり、粘性係数 μ を質量密度 ρ で割った値、$\boldsymbol{f}$ は外力 (体積力) である。
この Navier-Stokes 方程式は現時点においては、任意の初期境界条件において解析的に解を求める事はで

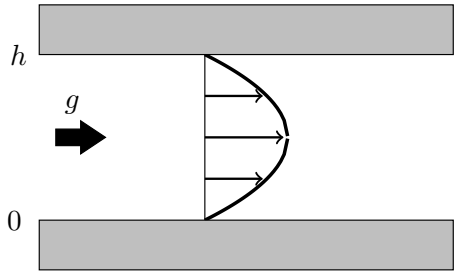

図 1.1 Poiseuille 流

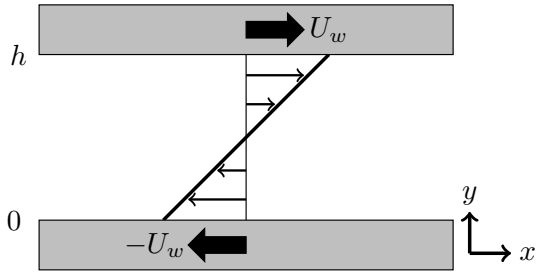

図 1.2 Couette 流

きていない。したがって、粘性流体の運動を予測するには数値計算を用いるのが一般的である。しかし、いくつかの定常流れについては理論解を計算することができ [5]、シミュレーションの妥当性検証に用いることができる。

以下の図 1.1 や図 1.2 のように二つの平板間の流れを考える。ここでは、平板に対して平行な流れを考える。つまり、粘性流体の速度 $\boldsymbol{u}$ が以下のように x 方向のみの成分を持つ場合を考える。

$$\boldsymbol{u} = (u(y), 0, 0) \tag{1.3}$$

ここで、定常状態を考えれば $\partial u/\partial t = 0$ であり、また対称性より z 依存性も持たない。x 軸方向には圧力が一定であることを仮定すると、式 (1.1) は以下のように書ける。

$$0 = \nu \frac{\partial^2}{\partial y^2} u + f_x \tag{1.4}$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial P}{\partial y} = 0 \tag{1.5}$$

以下では、今回の検証にも用いた定常平板間流れである Poiseuille 流と Couette 流について記述する。

1.2.1　Poiseuille 流

図 1.1 のように x 軸に沿って一定の体積力 g が働いている状況を考える。定常状態を考えると、速度 u は y だけの関数になり、式 (1.4) は以下のように書ける。

$$0 = \nu \frac{\partial^2}{\partial y^2} u(y) + g \tag{1.6}$$

この時、体積力は流体に対して一様に作用されるため、圧力勾配は生じない。また、壁面境界 ($y = 0,\, h$) では速度が 0 という境界条件を与えると外力下での 2 次元 Poiseuille 流の解析解は以下のように導ける。

$$u(y) = \frac{g}{2\nu} y\,(h - y) \qquad (0 \le y \le h) \tag{1.7}$$

また、$y^* = y/h$, $u^*(y) = u(y)/\left(gh^2/8\nu\right)$ で無次元化すると解析解は以下のように書ける。

$$u^*(y^*) = 4y^*(1 - y^*) \qquad (0 \le y^* \le 1) \tag{1.8}$$

1.2.2　Couette 流

外力がない状態における定常流を考えると、式 (1.4) は以下のように書き直せる。

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} u(y) = 0 \tag{1.9}$$

上下の壁がそれぞれ U_w, $-U_w$ の速度で移動している場合を考えると、境界条件は以下のように書ける。

$$u(h) = U_w, \quad u(0) = -U_w \tag{1.10}$$

したがって、Couette 流の解析解は以下の通りである。

$$u(y) = \frac{2U_w}{h}\left(y - \frac{h}{2}\right) \qquad (0 \le y \le h) \tag{1.11}$$

また、$y^* = y/h$、$u^*(y) = u(y)/U_w$ で無次元化すると解析解は以下のように書き直せる。

$$u^*(y^*) = 2\left(y^* - \frac{1}{2}\right) \qquad (0 \le y^* \le 1) \tag{1.12}$$

1.3　粒子法とは

流体シミュレーションは、格子法 (オイラー的記述) と粒子法 (ラグランジュ的視点) の二つに分けられる。格子法は一般に広く用いられているシミュレーション方法であり、膨大な先行研究が存在する。[6, 7] したがって、計算精度や数値解法に関する理論的なバックグラウンドやそれに付随する計算精度、OpenFOAM 等の無償で使用できるソフトウェアの多様性等は粒子法よりも優れている。しかし、格子法の場合、計算点が初期に設定した格子状に固定されており、本研究で目的とするような移動する固体との界面を追跡するのは容易ではない。

それに対し、粒子法では、流体を複数の「流体粒子」の集合体として空間の離散化を行う。各流体粒子は位置、速度等の物理量を持った計算点であり、周囲の流体粒子の影響を受けながら Navier-Stokes 方程式に従って運動する。粒子法では計算点が移動するので、格子法と比較して界面の取り扱いが容易であり、大変形を伴う計算や本研究の対象でもある固液混相流の計算が比較的容易になる。例えば、固体部分を「固体粒子」として離散化し流体との相互作用を計算すれば、固液界面の追跡は不要である。

現在、流体計算の分野で用いられる、Navier-Stokes 方程式を出発点とした粒子法は大きく分けて二つ存在する。一つは SPH(Smoothed Particle Hydrodynamics) 法 [8] である。SPH 法は元々は宇宙物理学の分野での応用を目的として開発された手法であり、圧縮性流体を陽解法で計算するものである。宇宙物理学では圧縮性流体を用いるが、現実の流体の多くは非圧縮である。従って、SPH 法でも圧縮性をわずかに許容する WCSPH 法や MPS 法と同様のアルゴリズムを採用した ISPH 法などの非圧縮流体用のスキームも開発されている。

もう一つの方法は MPS 法 (Moving Particle Simulation)[9] である。MPS 法では外力と粘性項を陽的に計算した後に、非圧縮条件を満たすように圧力を陰的に計算する。従って、体積保存則性にも優れており、短繊維複合材料の成形過程のシミュレーション [10] などコンポジットの流動については多くの計算がなされている。SPH 法と比較して実装が比較的容易であるということも含めて、本研究では MPS 法を採用する。

1.4　粒子法における繊維の表現方法

MPS 法では、固体は拘束をかけた流体粒子の集合として表現される。単純な剛体モデル [11] の場合、まずは剛体粒子は流体粒子と同様に位置と速度を更新する。しかし、このままでは元の剛体の形状とは配置が変化してしまうので、固体粒子の重心の座標変化と回転角が保たれるように剛体補正を行う。このような補正が固体から流体への作用を計算したことに相当する。例として、Yashiro ら [10, 12] はこの剛体スキームを使用して、繊維複合樹脂の整形シミュレーションを行っている。

しかし、一般に物理シミュレーションでは拘束条件が多いほど、安定的な計算を実現するためのコストが高くなるものである。繊維を粒子の集合として表現する方法の中で代表的な繊維モデルに、Yamamoto ら [13] によって開発された BCM(bead-chain model) が存在する。BCM では周囲の流体の Reynolds 数が十分低く Stokes 流で近似できる際に用いることができる。繊維を伸び、曲げ、ねじりの 3 種類のバネで繋がれた粒子の集合体として表現し、各粒子には Stokes 流の理論解に由来する粘性力とトルクが働く。BCM は、実装が比較的簡単で繊維の破断も表現することができるため、多くの研究で採用されている [14]。また、Sasayama ら [15] は、BCM モデルの回転の自由度を省略し、並進の運動方程式のみを用いることによって、計算効率の向上を図った。粒子法の流体計算においても、SPH 法では Yang ら [16] や

Meyer ら [17] が、同様に流体粒子間をバネで結合した拘束力によって繊維を表現している。
以上を踏まえ、本研究では Yang らと同様に、流体粒子を伸び、曲げの 2 種類のバネで拘束することによって繊維を表現する。

1.5　流体中の繊維の運動

繊維懸濁液は体積分率によって、以下のように領域分けされる [18, 19]

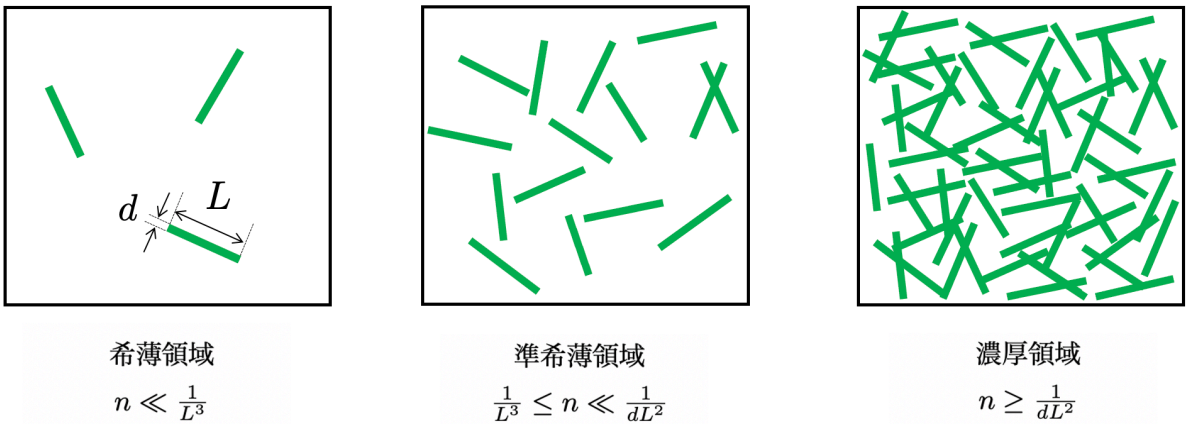

図 1.3　繊維懸濁液の体積分率による領域分け

ここで、L は繊維の長さ、d は繊維の太さ、n は繊維の数密度であり系内の繊維数を N_f、体積を V として $n = N_f/V$ と表される。

図 1.4 に示すような剪断流動中の繊維の運動を考える。この時、周囲流体の流動方向は x 軸方向、速度勾配方向は y 軸方向となる。希薄領域では、他の繊維との相互作用がないので、繊維の運動についての解析解が示されている。Jeffery[20] は流体の Reynolds 数が十分に小さく、周囲の他の物体の運動や壁の影響がない場合について、以下のような繊維 (正確には回転楕円体) の運動方程式を導いた。

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\dot{\gamma}}{r_p^2+1}\left(r_p^2 \sin^2\phi + \cos^2\phi\right) \tag{1.13}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \frac{\dot{\gamma}}{4}\left(\frac{r_p^2-1}{r_p^2+1}\right)\sin 2\phi \sin 2\theta \tag{1.14}$$

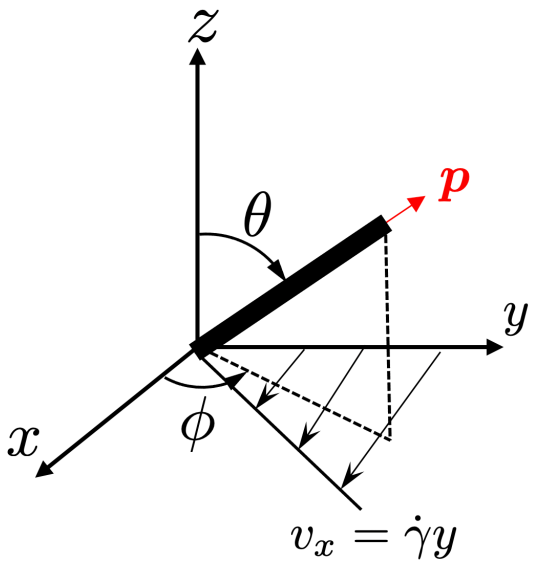

図 1.4　繊維の回転角 θ, ϕ と配向ベクトル $\boldsymbol{p}$ の定義

ここで、$\dot{}$ は時間微分を表し、$\dot{\gamma}$ は流動場のひずみ速度である。r_p はアスペクト比であり、$r_p = L/d$ として書かれる。また、ϕ、θ は図 1.4 に示す通りである。こ

れを解くと、以下の表式が得られる。

$$\tan\phi = \frac{1}{r_p}\tan\left[-\frac{\dot{\gamma}}{r_p + r_p^{-1}}t + \tan^{-1}\left(r_p\tan\phi_0\right)\right] \tag{1.15}$$

$$\tan\theta = \frac{C' r_p}{\left(r_p^2\sin^2\phi + \cos^2\phi\right)^{1/2}} \tag{1.16}$$

ここで、$\phi_0 = \phi(t=0)$、C' は定数である。また、この時の配向角 ϕ についての周期は以下の通りである。

$$T = \frac{2\pi}{\dot{\gamma}}\left(\frac{r_p^2+1}{r_p}\right) \tag{1.17}$$

このように、定常状態では繊維は回転運動を続けることが予想されており、多くの実験でその妥当性が証明されている [21, 22]。また、この解析解を繊維のような円柱状の粒子に対して用いる場合には、本来のアスペクト比 r_p とは少し異なる有効アスペクト比 $r_p{}'$ を用いる必要がある [23]。

準希薄領域では、他の繊維の運動が流体を介して伝搬する。従って、希薄領域と異なり、繊維の運動は互いに相関するので理論的な解析は非常に難しくなる。また、準希薄領域では後述する濃厚領域とは異なり繊維間の相互作用のほとんどが流体相互作用によるものであることがいくつかの理論的な予測や実験結果から示されている [24]。流体相互作用には潤滑相互作用と呼ばれる短距離での相互作用と、長距離の相互作用の 2 種類に分けられる。シミュレーションを用いた先行研究においてはこれらの二つの相互作用を用いているが、Yamane らによると長距離の流体力学相互作用の有無はあまり重要ではないことが示唆されている [25]。

また、濃厚領域では繊維同士の接触の影響が強くなり、内部の運動はさらに複雑になる。濃厚領域との密度の境界値として $1/dL^2$ という数密度が用いられる。ここで、dL^2 は繊維がある一平面上で回転した際の排除体積である。従って、$1/dL^2$ の数密度を超えると繊維の回転軌道中に他の繊維が存在することを意味し、この領域は濃厚領域と呼ばれる。この領域においては、繊維同士の接触による相互作用が支配的になり、流体相互作用はあまり重要視しないことが一般的である。また、濃厚領域では、剪断変形下において、粘度が低減するいわゆるシアシニングが強く生じることが知られている [19]。

本研究で対象とする 2 次元系では、重なり濃度 n^* が領域の境目になると考えられる。重なり濃度 n^* は繊維長 L を用いて以下のように計算される。

$$n^* = \frac{1}{\pi\left(L/2\right)^2} \tag{1.18}$$

つまり、繊維が回転した際の排除面積につき、繊維が 1 本存在するような濃度である。このような重なり濃度以降の領域では、繊維同士の接触が生じやすくなるため、繊維間の相互作用が懸濁液の内部構造に強く影響すると考えられる。

1.6　既存の繊維配向モデル

繊維の配向状態を示す物理量は、図 1.4 に示した繊維の配向ベクトル $\boldsymbol{p}$ が用いられており、以下のように定義される。

$$\boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi\sin\theta \\ \sin\phi\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

この配向ベクトルを用いると、式 (1.13) と式 (1.14) は以下のように一般化することができる。

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{W}\cdot\boldsymbol{p} + \xi\left[\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{p} - (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{p})\,\boldsymbol{p}\right] \tag{1.20}$$

ここで、$\boldsymbol{D}$ と $\boldsymbol{W}$ はそれぞれ速度勾配の対称または非対称な成分であり、剪断流下では以下のように書かれる。

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\dot{\gamma}}{2} & 0 \\ \frac{\dot{\gamma}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\dot{\gamma}}{2} & 0 \\ -\frac{\dot{\gamma}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.21}$$

また、$\xi = (r_p^2 - 1)/(r_p^2 + 1)$ である。式 (1.20) は前述の通り、他の繊維との相互作用が全くない場合について解かれたモデルであるため、準希薄領域においては式 (1.20) に対し、どのように流体相互作用による効果を取り入れるかが肝要となってくる。

繊維懸濁液中のある点における繊維の配向状態は配向分布関数 $\Psi(\phi,\theta)\,(=\Psi(\boldsymbol{p}))$ を用いて表現することができる。配向分布関数は、ϕ と θ についての確率密度分布であり、以下の規格化条件を満たす。

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\Psi(\phi,\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi = 1 \tag{1.22}$$

この配向分布関数を求めることができれば、系内の繊維配向を知ることができる。Folgar ら [26] は繊維間の流体相互作用を、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ に比例した回転拡散項とみなしてモデル化することで、以下のように式 (1.20) を拡張した。

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{W}\cdot\boldsymbol{p} + \xi\left[\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{p} - (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{p})\,\boldsymbol{p}\right] - C_I\dot{\gamma}\frac{1}{\Psi(\boldsymbol{p})}\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{p})}{\partial\boldsymbol{p}} \tag{1.23}$$

式 (1.23) の拡散項の係数 C_I をフィッティングパラメータとして計算すると、実験結果に良好に一致することを示した。また、繊維の配向分布関数 $\Psi(\phi)$ のピーク位置が $\phi > 0$ の方向に推移することも再現に成功している。しかし、この拡散項は現象論的な項であり、C_I は実験結果に対するフィッティングによってのみ得られるため、繊維間の相互作用の効果を正確に表現したとは言い難い。

また系内の繊維配向を表現する方法として配向ベクトルのテンソル積 $\boldsymbol{pp}$ も広く用いられている [27]。この配向ベクトルのテンソル積を配向テンソル $\boldsymbol{a}$ と呼び、以下のように定義される。

$$\boldsymbol{a} = \int_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{pp}\Psi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p} = a_{ij} \tag{1.24}$$

ここで、a_{ij} の添字の 1 は図 1.4 における x 軸、2 は y 軸、3 は z 軸を示す。また、これらの配向テンソルは系内の繊維の本数 N_f が与えられると、以下のように近似的に計算することができる [28]。

$$\langle a_{ij}\rangle = \frac{1}{N_f}\sum_{k=1}^{N_f} p_i^{(k)} p_j^{(k)} \tag{1.25}$$

ここで、$p_i^{(k)}$ は k 番目の繊維の配向ベクトルの i 成分を示す。以後、$\langle a_{ij}\rangle$ は式 (1.25) で示すようなある時間における系内の繊維に対する p_ip_j の平均値、$\overline{\langle a_{ij}\rangle}$ は定常状態とみなされる時間領域における $\langle a_{ij}\rangle$ の時間方向への平均値とする。Advani ら [27] は、式 (1.20) を配向ベクトル $\boldsymbol{p}$ から、配向テンソル $\boldsymbol{a}$ を用いた表式に拡張した。この時、Folgar らによって導入された拡散項も含まれており、4 階の配向テンソルに対しては、式 (1.24) の 2 階テンソルを用いて近似を行う closure approximation(閉包近似) が用いられた。この表式は幅広い流動に対して用いられている [19] が、上述の通り、拡散項の前係数の決定にはフィッティングを用いるため、繊維間の相互作用の正確な表現はできていない。

1.7　シミュレーションによるアプローチ

既存の繊維懸濁液に対するシミュレーションの多くは、流体の流れ自体は解いておらず、周囲の流体や繊維による寄与を定式化し、繊維の運動方程式に組み込むことで計算を行っている。この時に考慮される繊維への作用は大まかに分割すると以下の 3 つである。

一つ目は、流動場が与える繊維への作用である。つまり、一様な剪断流動中に独立な繊維が配置されている場合にかかる力とトルクを計算セル内の全ての繊維に対して与える方法である。この一様流動場から受ける力を表現する際には、Jeffery[20] によって計算された力やトルク、もしくは Batchelor[29] による slender body theory を用いるのが主流である。slender body theory では、希薄極限における太さが 0 の繊維が流動場中で運動する際のトルクと力が計算されており、Jeffery の場合とは異なり、繊維の運動によって繊維付近の流動場の変化も考慮されている。

二つ目は、繊維間の流体相互作用である。流体相互作用とは、繊維が運動することによって周囲の流動場が変化し、その結果周りの繊維の運動に影響を及ぼす効果である。この流体相互作用は、それぞれの繊維の動きによって誘起された流動場が系内の各繊維に作用しそれぞれの運動を変化させるため、厳密には N_f 体の相互作用になる。しかし、それらの相互作用をシミュレーションで計算するには計算コストが高すぎるため、一般には 2 体の相互作用で近似されることが多い。

流体相互作用には前述の通り、大きく分けて二つの寄与がある。一つは潤滑相互作用と呼ばれる短距離での相互作用で、繊維同士が非常に近くまで接近した際に、繊維間に存在する流体によって生じる強い抵抗力である。この潤滑相互作用のモデリングには主に Yamane[25] によって定式化されたものが使用される。もう一つは長距離の相互作用である。Fan ら [30] は Yamane らによる潤滑相互作用の表式と slender body theory を用いて長距離の相互作用をモデル化している。

三つ目は繊維間の接触による作用である。これは準希薄領域以降の比較的数密度が高い領域において繊維配向やレオロジー特性に対して寄与が大きいと考えられている作用である。代表的な先行研究としては、Sundararajakumar ら [3] によるものが挙げられる。繊維間の接触は上述の潤滑相互作用で代用されることもある。

しかし、従来の研究が仮定している流動場の一様性は繊維の存在によって成立しない。また、その流動場の乱れを表現した流体相互作用は多くの研究では 2 体の相互作用として近似されており、厳密ではない。したがって、準希薄領域のように流体相互作用が重要となる領域においては、Navier-Stokes 方程式を実際に解き、繊維による流動場への影響を考慮することが必要である。

1.8　剪断変形下における繊維の配向挙動

実験では、Folgar ら [26] が繊維の配向分布関数を測定したが、不透明な繊維を用いたため表面付近の繊維についてのみしか観測ができていなかった。Stover ら [24] は等屈折性の懸濁液を用意することによってこの問題を解決した。この実験においても繊維の配向分布関数を測定し、分布の平均が流動方向 ($\phi = 0$) とは一致せず、$\phi > 0$ の方向にピークの位置が変化することを示した。このピーク位置の変化は繊維長のバラつきによるものではないことも示しているが、その原因はわかっていない。また、Petrich ら [22] は、Stover らと同様の手法で繊維配向とレオロジー特性を測定し、準希薄領域から濃厚領域においては Jeffery[20] による希薄極限での理論と比較して $\langle \sin^2 \phi \rangle$ の値が大きくなることを示した。つまり希薄領域と比較して流動方向 (図 1.4 における x 方向) に対して配向しづらくなることを示した。

シミュレーションでは、Yamamoto らが BCM を用いて、剪断下での繊維懸濁液内部の繊維の配向状態を調べた [31, 32]。この時、準希薄領域では、剪断面に対して直交する方向への配向を表す a_{33} 成分が上昇することを示した。この結果から、繊維は剪断面における他繊維との接触を避けるような運動をしていることが示唆されている。Sundararajakumar ら [3] は、繊維間の流体相互作用を無視し、流動場から受ける力とトルクと繊維間の衝突による斥力とトルクのみを考慮してシミュレーションを行った。この計算は二次元と三次元のそれぞれについて行われ、Stover らの結果と同様に配向分布関数のピーク位置は流動方向とは一致しないことを示した。

これらの先行研究では配向分布関数のピーク位置が流動方向 ($\phi = 0$) とは一致しないという結果が得られている。またこれらのピーク位置の変位方向は全て $\phi > 0$ 方向である。ただ、このピークが $\phi > 0$ の方向へ変化するメカニズムについては先行研究では十分に理解されているとは言えない。

1.9　本研究の目的

本研究では MPS 法を用いて、剪断変形下における繊維懸濁液中の配向状態の数密度依存性を調べる。繊維懸濁液内の繊維の本数をパラメータとして振ることによって、系の繊維の数密度を変化させる。各数密度における繊維の配向分布関数を比較することによって繊維配向の数密度依存性を議論する。また、一様流動を仮定して計算を行った先行研究 [3] と比較することによって流動場の乱れが繊維の配向分布に与える影響を議論する。

第 2 章

シミュレーション方法

2.1 支配方程式

前章で述べたように、非圧縮粘性流体が従う方程式は以下の 2 式である。

$$\frac{D\hat{\boldsymbol{u}}}{D\hat{t}} = -\frac{1}{\hat{\rho}_\alpha}\hat{\nabla}\hat{P} + \nu_\alpha\hat{\nabla}^2\hat{\boldsymbol{u}} + \hat{\boldsymbol{f}}_\alpha \tag{2.1}$$

$$\hat{\nabla}\cdot\hat{\boldsymbol{u}} = 0 \tag{2.2}$$

ここで、下付きの添字 α は相を表し (今回の場合では流体相と固体相の 2 種類)、$\hat{\psi}$ は物理量 ψ が有次元量であることを表す。式 (2.1) は流体の運動方程式である Navier-Stokes 方程式であり、式 (2.2) は非圧縮条件である。
これらの 2 式を支配方程式としてシミュレーションを行う。

2.2 無次元化

コンピュータ上で物理シミュレーションを行う際には、計算の見通しをよくするため無次元化をする必要がある。したがって、式 (2.1)、式 (2.2) に登場する物理量を以下のように無次元化する。

$$\boldsymbol{x} = \frac{\hat{\boldsymbol{x}}}{l_0}, \quad \boldsymbol{u} = \frac{\hat{\boldsymbol{u}}}{l_0\dot{\gamma}}, \quad \rho_\alpha = \frac{\hat{\rho}_\alpha}{\rho_0}, \quad P = \frac{\hat{P}}{\rho_0 l_0^2\dot{\gamma}^2}, \quad t = \dot{\gamma}\hat{t} \tag{2.3}$$

ここで、l_0 は初期粒子間距離で後述の流体粒子のサイズに相当する長さ、ρ_0 は流体の質量密度、$\dot{\gamma}$ は剪断変形のひずみ速度である。式 (2.3) を用いて、式 (2.1) を無次元化すると以下の通りである。

$$\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho_\alpha}\nabla P + \frac{1}{\mathrm{Re}_\alpha}\nabla^2\boldsymbol{u} + \boldsymbol{f}_\alpha \tag{2.4}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0 \tag{2.5}$$

ここで、Re_α は Reynolds 数で

$$\mathrm{Re}_\alpha = \frac{l_0^2\dot{\gamma}}{\nu_\alpha} \tag{2.6}$$

と表される。

2.3　流体モデル (MPS 法)

2.3.1　粒子を用いた離散化

粒子法では、流体を粒子の集合として離散化を行う。例えば、$L' \times L' \times L'$ の質量 M の流体領域を N^3 個の粒子で離散化することを考える。この時、粒子一つの直径は $l_0 = L'/N$ となり、粒子一つあたりの質量は M/N^3 になる。実際の数値計算では、各流体粒子の受ける加速度 (式 (2.4) の右辺) を計算し、それに時間刻み幅 Δt をかけて速度や位置を計算していく。また、MPS 法は各流体粒子の軌跡を追うラグランジュ的記述のモデルであるので、左辺のラグランジュ微分は単純な時間微分として表現することができる。これより、粒子 i について式 (2.4) は以下のように離散化される。

$$\frac{d\boldsymbol{u}_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\rho_i}\nabla P_i(t) + \frac{1}{\mathrm{Re}_i}\nabla^2 \boldsymbol{u}_i(t) + \boldsymbol{f}_i \tag{2.7}$$

2.3.2　重み関数と粒子数密度

MPS 法では、重み関数を用いて周囲の流体粒子との粒子間相互作用を表現する。その重み関数は一般に以下の形式が採用される。

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

ここで、r_e は影響半径であり、粒子間相互作用の強さを粒子間距離に反比例させている。また、この影響半径は計算精度と計算量との観点から、初期粒子間距離 l_0 の 2 ~ 4 倍程度にとるのが一般的である [9]。そして、この重み関数を用いて、注目する流体粒子 i の周りの粒子数密度 n_i を以下のように定義する。

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

ここで、N は系の全粒子数である。このように、粒子数密度とは、影響半径内の粒子数にその重みを掛け合わせたものに対して和をとった量である。また、この粒子数密度 n_i は流体粒子 i の質量密度 ρ_i と以下のような比例関係にある [33]。

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

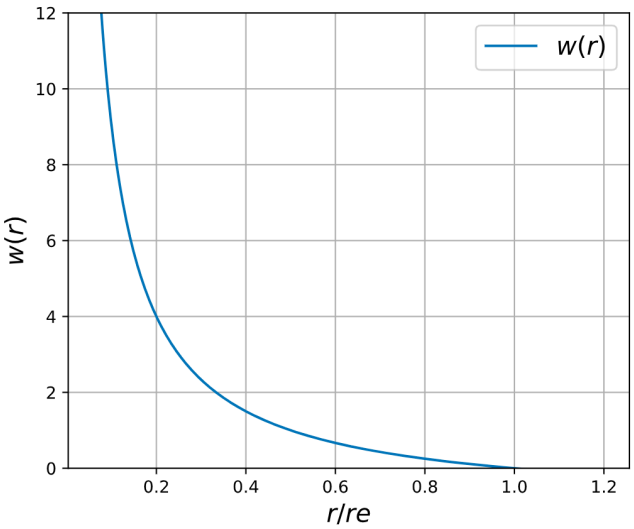

図 2.1　MPS の重み関数 $w(r)$: (式 (2.8))

ここで、V_e は影響半径内の体積で、2 次元計算の場合には $V_e = \pi r_e^2$、m は流体粒子一つの質量である。

2.3.3　演算子の離散化

MPS 法では、流体粒子 i の持つスカラー量 ψ_i に対する勾配とラプラシアン、ベクトル量 $\boldsymbol{s}_i$ に対する発散はそれぞれ以下のような演算子モデルで計算される。

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

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

$$\langle\langle\nabla^2\psi\rangle\rangle_i = \frac{2d}{\lambda_0 n_0}\sum_{j\neq i}^{N}\left[(\psi_j-\psi_i)w(|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i|)\right] \tag{2.13}$$

ここで、n_0 は初期状態における流体の粒子数密度、d は次元数であり、$\langle\langle\cdot\rangle\rangle_i$ は粒子 i のもつ物理量に対し、式 (2.11 - 2.13) の演算子モデルを適用することを示す。また、λ_0 は統計的な分散の増加を解析解と一致させるための係数であり、初期の粒子配置から次式によって計算される [11]。

$$\lambda_0 = \left(\sum_{j\neq i}^{N}(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i)^2\, w\left(|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i|\right)\right)\Bigg/\left(\sum_{j\neq i}^{N} w\left(|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i|\right)\right) \tag{2.14}$$

2 次元系での計算では、計算効率の観点から各演算子モデルごとに式 (2.8) における影響半径 r_e を設定することが一般的である [33]。本研究においてもそれに倣い、ラプラシアンモデルについては $r_e = 3.1l_0$、勾配、発散モデルについては $r_e = 2.1l_0$ を採用した。ここで、$2.0l_0, 3.0l_0$ ではなく $2.1l_0, 3.1l_0$ を採用した理由は、ちょうど $2.0l_0, 3.0l_0$ の位置にいる粒子からの寄与を確実に計算するためである。また、これらの演算子モデルは，粒子が格子状に配置されていることを前提としている。したがって，粒子の配置が格子よりもずれる場合については，これらの微分演算子モデルに由来する空間的な誤差が生じる。この粒子配置についての修正モデルとしては，修正行列を用いる方法 (GC(Gradient Correction) モデル)[34] が一般的である。

2.3.4　半陰的アルゴリズム

MPS 法は非圧縮粘性流体の計算で広く使用されている SMAC(Simplified Marker and Cell Method) 法の半陰的アルゴリズムを採用している。この半陰的アルゴリズムでは、圧力を陰的、粘性項と外力項を陽的に計算する。したがって、時刻 $k\Delta t$ から時刻 $(k+1)\Delta t$ への更新について、式 (2.7) は、以下のように離散化される。

$$\frac{\boldsymbol{u}_i^{k+1}-\boldsymbol{u}_i^k}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_\alpha}\langle\langle\nabla P\rangle\rangle_i^{k+1} + \frac{1}{\mathrm{Re}_\alpha}\langle\langle\nabla^2\boldsymbol{u}\rangle\rangle_i^k + \boldsymbol{f}_\alpha{}^k \tag{2.15}$$

ここで、$\langle\langle\nabla\psi\rangle\rangle_i^k$ は粒子 i の k ステップ目の物理量 ψ に対して、式 (2.11) の演算子を作用させることに相当する。ラプラシアンについても同様である。

まず、第一段階の陽的ステップとして、粘性項と外力項の計算を行う。この計算で、中間速度 $\boldsymbol{u}^*$ と中間位置 $\boldsymbol{r}^*$ を求める。

$$\boldsymbol{u}_i^* = \boldsymbol{u}_i^k + \Delta t\left[\frac{1}{\mathrm{Re}_\alpha}\langle\langle\nabla^2\boldsymbol{u}\rangle\rangle_i^k + \boldsymbol{f}_\alpha{}^k\right] \tag{2.16}$$

$$\boldsymbol{r}_i^* = \boldsymbol{r}_i^k + \Delta t\boldsymbol{u}_i^* \tag{2.17}$$

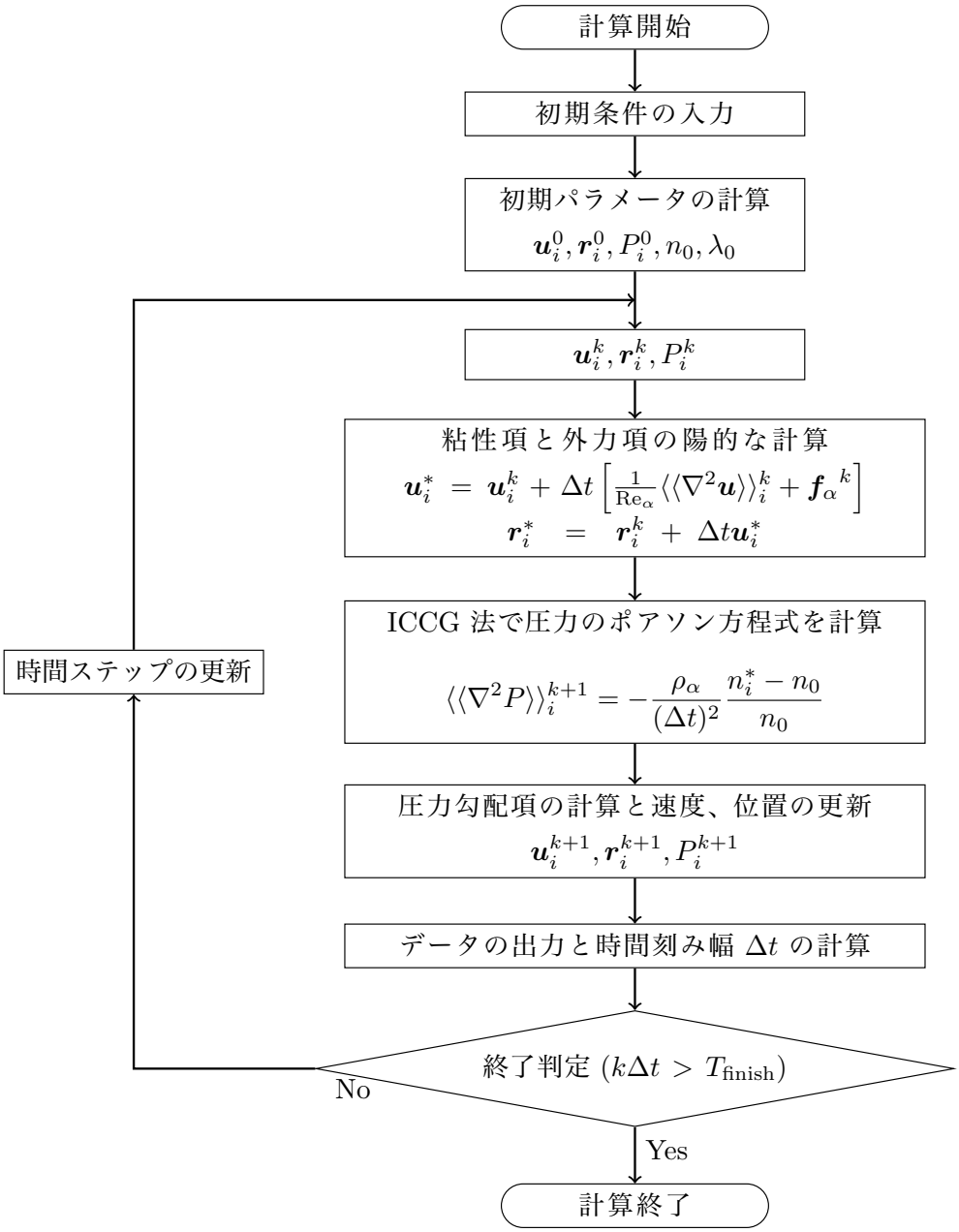

図 2.2　MPS 法のアルゴリズム

ここで計算された中間速度 $\boldsymbol{u}^*$ と中間位置 $\boldsymbol{r}^*$ を用いて、2.3.5 項で示す手順で $k+1$ ステップ目の圧力 P_i^{k+1} を計算し、以下のように速度と位置を更新する。

$$\boldsymbol{u}_i^{k+1} = \boldsymbol{u}_i^* - \Delta t \frac{1}{\rho_\alpha} \langle\langle \nabla P \rangle\rangle_i^{k+1} \tag{2.18}$$

$$\boldsymbol{r}_i^{k+1} = \boldsymbol{r}_i^* + \Delta t \boldsymbol{u}_i^* \tag{2.19}$$

この操作を終了時刻に達するまで繰り返し、計算を進める。
ただし、圧力勾配項については、計算の安定化のために以下のように変更する。[9]

$$\langle\langle\nabla P\rangle\rangle_i = \frac{d}{n_0}\sum_{j\neq i}^{N}\left[\frac{P_j-\tilde{P}_i}{|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i|^2}(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i)w(|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i|)\right] \tag{2.20}$$

$$\tilde{P}_i = \min_{j\in J_i}(P_i,P_j), \qquad J_i=\{j\,|\,w(|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i|)\neq 0\} \tag{2.21}$$

つまり、粒子 i の圧力勾配を計算する際には、粒子 i の圧力ではなく、影響範囲内での最小圧力を用いる。これによって、粒子間に働く圧力勾配は常に斥力となり、粒子の過剰接近が抑えられるため分散しやすくなる。また、計算のフローチャートを図 2.2 に示す。

2.3.5　圧力の計算

前項で述べた通り、Navier-Stokes 方程式は陽的パートと陰的パートの 2 段解で計算される。陰的パートである式 (2.18) について、両辺の発散をとると以下のように近似することができる。

$$\frac{\langle\langle\nabla\cdot\boldsymbol{u}\rangle\rangle_i^{k+1}-\langle\langle\nabla\cdot\boldsymbol{u}\rangle\rangle_i^{*}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_\alpha}\langle\langle\nabla^2 P\rangle\rangle_i^{k+1} \tag{2.22}$$

$k+1$ ステップ目では非圧縮条件が成立するには、式 (2.5) より $\langle\langle\nabla\cdot\boldsymbol{u}\rangle\rangle_i^{k+1}=0$ が成立する必要がある。よって、式 (2.22) は以下のように書ける。

$$\langle\langle\nabla^2 P\rangle\rangle_i^{k+1} = \rho_\alpha\frac{\langle\langle\nabla\cdot\boldsymbol{u}\rangle\rangle_i^{*}}{\Delta t} \tag{2.23}$$

連続の式 ($D\rho_\alpha/Dt+\rho_\alpha\nabla\cdot\boldsymbol{u}=0$)、また式 (2.10) を用いると以下の関係式が得られる。

$$\begin{aligned}\langle\langle\nabla\cdot\boldsymbol{u}\rangle\rangle_i^{*} &= -\frac{1}{\Delta t}\frac{{\rho_\alpha}_i^{*}-\rho_\alpha}{\rho_\alpha}\\ &= -\frac{1}{\Delta t}\frac{n_i^{*}-n_0}{n_0}\end{aligned} \tag{2.24}$$

ここで、${\rho_\alpha}_i^{*}$ は第一段階の陽的ステップ後の流体粒子 i の質量密度である。よって、式 (2.22), 式 (2.24) 式より、

$$\langle\langle\nabla^2 P\rangle\rangle_i^{k+1} = -\frac{\rho_\alpha}{(\Delta t)^2}\frac{n_i^{*}-n_0}{n_0} \tag{2.25}$$

式 (2.25) の左辺について、ラプラシアンモデルを適用すると、以下の通りである。

$$-\frac{1}{\rho_\alpha}\frac{2d}{\lambda_0 n_0}\sum_{j\neq i}(P_j^{k+1}-P_i^{k+1})w(|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i|) = \frac{1}{(\Delta t)^2}\frac{n_i^{*}-n_0}{n_0} \tag{2.26}$$

左辺について、係数を $B=-\frac{1}{\rho_\alpha}\frac{2d}{\lambda_0 n_0}$、粒子 i と粒子 j に対して計算する重み関数を $w_{ij}=w(|r_i^{*}-r_j^{*}|)$ として和の部分を以下のように整理する。

$$\begin{aligned}&B\left\{(P_1-P_i)w_{1i}+(P_2-P_i)w_{2i}+\cdots+(P_j-P_i)w_{ji}+\cdots+(P_N-P_i)w_{Ni}\right\}\\ &=B\left\{P_1w_{1i}+P_2w_{2i}+\cdots+(-w_{1i}-\cdots-w_{ij}\cdots)P_i+P_jw_{ji}+\cdots+P_Nw_{Ni}\right\}\end{aligned} \tag{2.27}$$

他の全ての粒子についても同様の関係式が成立するので、これらを合わせた連立方程式は以下のように行列表示をすることができる。

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1j} & \cdots & m_{1N} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2j} & \cdots & m_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ m_{i1} & m_{i2} & \cdots & m_{ij} & \cdots & m_{iN} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ m_{N1} & m_{N2} & \cdots & m_{Nj} & \cdots & m_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1^{k+1} \\ P_2^{k+1} \\ \vdots \\ P_i^{k+1} \\ \vdots \\ P_N^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_i \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} \tag{2.28}$$

ここで、m_{ij} は、

$$m_{ij} = \begin{cases} -\frac{1}{\rho_\alpha}\frac{2d}{\lambda_0 n_0} w(|\boldsymbol{r}_j^* - \boldsymbol{r}_i^*|) & (i \neq j) \\ \frac{1}{\rho_\alpha}\frac{2d}{\lambda_0 n_0} \sum_{i \neq j} w(|\boldsymbol{r}_j^* - \boldsymbol{r}_i^*|) & (i = j) \end{cases}, \qquad v_i = \frac{1}{(\Delta t)^2}\frac{n_i^* - n_0}{n_0} \tag{2.29}$$

と定義した。式 (2.29) より、$m_{ij} = m_{ji}$ となるので、左辺は正値対称行列となる。また、重み関数 $w(r)$ は式 (2.8) より、影響半径 r_e 以上離れると 0 になるので、係数行列内のほとんどの要素は 0 になり、このような行列 $\boldsymbol{M} = \{m_{ij}\}$ は疎行列と呼ばれる。
大規模対称疎行列の計算では ICCG 法 (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient method) を用いると高速に計算できることが知られており、今回のシミュレーションについても ICCG 法を用いた。行列計算の部分についてはフリー行列計算ライブラリである PETSc(Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) を用いた [35]。

2.3.6　境界条件

MPS 法では、固体壁粒子には、単に位置と速度を固定するのみで表現できる。流体粒子の壁内への侵入を防ぐために、壁粒子は流体粒子同様に圧力を計算する。また、壁粒子や壁付近の流体粒子の粒子数密度を一定に保つために、圧力を計算する壁粒子の外側に粒子数密度の計算のみに使用するゴースト粒子を配置する。今回の計算では最大の影響半径は $r_e = 3.1 l_0$ であるため、周期境界条件を考慮するとゴースト粒子は 2 層あれば十分である。

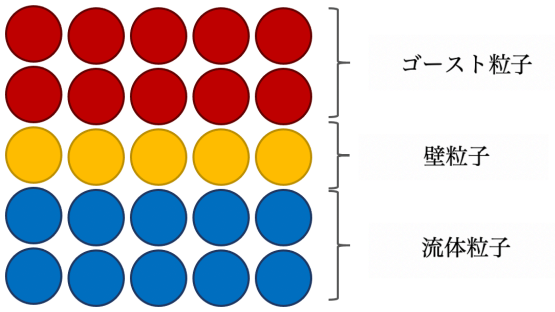

図 2.3　壁粒子とゴースト粒子

ここで導入されたゴースト粒子は数密度の計算のみに使用され、圧力の計算の際には除外される。したがって式 (2.29) の圧力のポアソン方程式の係数行列は以下のように表現できる。
[粒子 i が流体粒子、もしくは壁粒子]

$$a_{ij} = \begin{cases} -\frac{1}{\rho_\alpha}\frac{2d}{\lambda_0 n_0} w(|\boldsymbol{r}_j^* - \boldsymbol{r}_i^*|) & (i \neq j,\ \text{粒子 } j \text{ が流体粒子 もしくは 壁粒子}) \\ 0 & (i \neq j,\ \text{粒子 } j \text{ がゴースト粒子}) \\ \frac{1}{\rho_\alpha}\frac{2d}{\lambda_0 n_0} \sum_{i \neq j} w(|\boldsymbol{r}_j^* - \boldsymbol{r}_i^*|) & (i = j) \end{cases}, \quad b_i = \frac{1}{(\Delta t)^2}\frac{n_i^* - n_0}{n_0} \tag{2.30}$$

[粒子 i がゴースト粒子]

$$a_{ij} = \begin{cases} 0 & (j \neq i) \\ 1 & (i = j) \end{cases} \quad , \quad b_i = 0 \tag{2.31}$$

2.4　繊維モデル

本研究で用いる繊維モデルでは、固体粒子間の距離についての拘束力である stretching force と隣あう 3 つの固体粒子がなす角についての拘束力である bending force を適用し、直線状の繊維を表現する。わずかな曲がりは許容されることになるが、バネ定数を大きくすることによって、十分無視できる程度の曲がりに抑制することができる。以下にこれらの二つの拘束力について述べる。

2.4.1　stretching force

繊維を構成する隣り合う固体粒子 i と j の間に働く stretching force は以下の通りである。

$$\boldsymbol{f}_{ij}^{s} = k_s(r_{ij} - l_0)\frac{\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i}{r_{ij}} \tag{2.32}$$

ここで、k_s はバネ定数である。F_i^s は粒子 i が隣接粒子 j から受ける力で，2 粒子間距離 $r_{ij} = |\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|$ が粒子間距離 l_0 よりも大きければ $(r_{ij} - l_0 > 0)$ 粒子 i から隣接粒子 j への方向への復元力が働き、$r_{ij} - l_0 < 0$ であればその逆方向の復元力が働くことを示す。

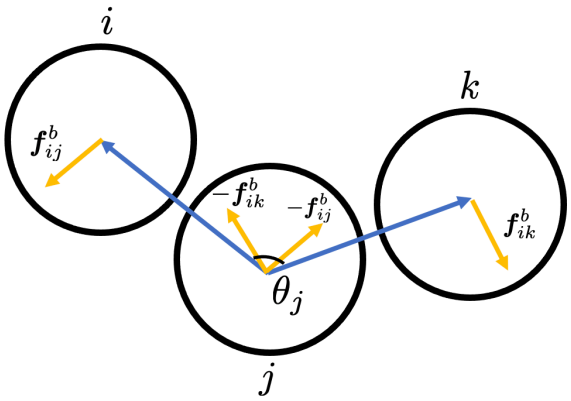

図 2.4　bending force

2.4.2　bending force

図 2.4 のように 3 つの隣り合う固体粒子 i, j, k を考える。このときに角度 θ_j によって粒子 i と粒子 k に働く復元力 $\boldsymbol{f}_{ij}^{b}, \boldsymbol{f}_{kj}^{b}$ を求める。この時、ポテンシャルは以下のように与えられ、使用する式は，以下の 3 つの式である。

$$U(\theta_j) = k_b\,(1 + \cos\theta_j) \tag{2.33}$$

$$(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)\cdot(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j) = |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|\,|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|\cos\theta_j \tag{2.34}$$

$$\boldsymbol{f}_{ij}^{b} = -\frac{\partial U(\theta_j)}{\partial \boldsymbol{r}_i} = -\frac{\partial U(\theta_j)}{\partial \theta_j}\frac{\partial \theta_j}{\partial \boldsymbol{r}_i} \tag{2.35}$$

式 (2.33) は $\theta = \pi$ の時に最安定となるベンディングポテンシャル、式 (2.34) は $\boldsymbol{r}_{ji} = \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j$ と $\boldsymbol{r}_{jk} = \boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j$ の内積、式 (2.35) は粒子 i に働くポテンシャル力である。
まずは，$\partial\theta_j/\partial\boldsymbol{r}_i$ を求める。式 (2.34) を $\boldsymbol{r}_i$ で微分すると以下のようになる。

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j) &= \frac{(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}\,|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|\cos\theta_j - |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|\,|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|\sin\theta_j \cdot \frac{\partial\theta_j}{\partial\boldsymbol{r}_i} \\ \frac{\partial\theta_j}{\partial\boldsymbol{r}_i} &= \frac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|\sin\theta_j}\left\{-\frac{(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|} + \frac{(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}\cos\theta_j\right\} \end{aligned} \tag{2.36}$$

また、ポテンシャルの微分は以下の通りである。

$$\frac{\partial U(\theta_j)}{\partial \theta_j} = -k_b \sin\theta_j \tag{2.37}$$

以上より、式 (2.35) と式 (2.36) を用いて、bending force は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}_{ij}^b &= k_b \sin\theta_j \frac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j| \sin\theta_j} \left\{ -\frac{(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|} + \frac{(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} \cos\theta_j \right\} \\ &= -k_b \frac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} \left\{ \frac{(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|} + \frac{(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i)}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} \cos\theta_j \right\} \end{aligned} \tag{2.38}$$

同様に、粒子 k が受ける力は以下の通り

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}_{kj}^b &= k_b \sin\theta_j \frac{1}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j| \sin\theta_j} \left\{ -\frac{(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} + \frac{(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|} \cos\theta_j \right\} \\ &= k_b \frac{1}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|} \left\{ \frac{(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i)}{|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|} + \frac{(\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j)}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_j|} \cos\theta_j \right\} \end{aligned} \tag{2.39}$$

また、これらの反作用として $-\boldsymbol{f}_{ij}^b$ と $-\boldsymbol{f}_{kj}^b$ が粒子 j に働く。

以上より、式 (2.32) と式 (2.38) から、繊維を構成する固体粒子 i に働く拘束力は以下のようにまとめることができる。

$$\boldsymbol{f}_i = \boldsymbol{f}_{i(i-1)}^s + \boldsymbol{f}_{i(i+1)}^s + \boldsymbol{f}_{i(i-1)}^b + \boldsymbol{f}_{i(i+1)}^b - \boldsymbol{f}_{(i-1)i}^b - \boldsymbol{f}_{(i+1)i}^b \tag{2.40}$$

2.5　時間刻み幅

MPS 法の計算では、時間刻み幅 Δt について対流項 $((\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u})$ の安定性を確保するためのクーラン条件、粘性項の計算の安定性を確保するための拡散数条件の二種類の条件が存在する。また、繊維を導入すると繊維のバネ定数に対する時間刻みの制限が発生する。以下では、これら三つの条件について述べる。

2.5.1　クーラン条件

MPS 法では、粒子間距離 l_0 と、1 ステップでの粒子の移動距離の比をクーラン数と定義する。

$$C = \frac{u_i \Delta t}{l_0} \tag{2.41}$$

ここで、MPS 法においてはクーラン数がとりうる値は経験的に 0.2 以下である [33]。すなわち、1 ステップでの粒子の移動距離は必ず、初期粒子間距離 l_0 の 0.2 倍以内である必要がある。実際の計算では、全ての粒子がクーラン条件を満たすために、系の最大速度 u_{max} を用いて時間刻み幅の上限が決定する。また、上述の通りクーラン数は $C = 0.2$ と設定する。したがって、時間刻み幅が満たすべき条件は以下の通りである。

$$\Delta t \leq \frac{l_0 C}{u_{max}} = 0.2 \frac{l_0}{u_{max}} \tag{2.42}$$

2.5.2　拡散数条件

拡散数条件は、拡散方程式において拡散係数によって決定される条件である。MPS 法では粘性項がそれに該当し、式 (2.4) より今回解く方程式においては拡散係数は Reynolds 数の逆数になる。したがって、

拡散数は以下のように定義される。

$$D = \frac{1}{\mathrm{Re}_\alpha}\frac{\Delta t}{l_0^2} \tag{2.43}$$

MPS 法においては、拡散数がとりうる値についても経験的に 0.2 以下であり、本研究でも $D = 0.2$ と設定する。したがって、拡散数条件による時間刻み幅の条件は以下の通りである。

$$\Delta t \leq \frac{D\, l_0^2}{1/\mathrm{Re}_\alpha} = 0.2\, l_0^2\, \mathrm{Re}_\alpha \tag{2.44}$$

2.5.3　繊維間のバネによる制限

繊維を構成する粒子にかかる stretching force のバネ定数 k_s についても時間刻み幅について制限を与える必要がある。今回は、経験的にバネが単振動した際の周期の半分の時間刻み幅を特徴的な時間とする。つまり、時間刻み幅の制限は以下の通りである。

$$\Delta t \leq \pi\sqrt{\frac{m}{k_s}} \tag{2.45}$$

各ステップ毎に速度は更新されるので、逐次クーラン条件を満たしているかを計算し、上記の三つの条件の最小値を次のステップの時間刻み幅として採用する。したがって、本研究では $k+1$ 番目のステップの時間刻み幅を以下のように決定する。

$$\Delta t_{k+1} = \min\left(0.2\frac{l_0}{u_{max}^k},\, 0.2 l_0^2 \mathrm{Re}_\alpha,\, \pi\sqrt{\frac{m}{k_s}}\right) \tag{2.46}$$

2.6　初期配置の生成

繊維を複数本入れた場合の初期配置をモンテカルロ法 [36] を用いて生成した。この時の初期配置を作る際に満たすべき条件は 2 つある。一つは繊維配向がランダムかつ重なりがないということである。これは、観測対象が各繊維の配向であるので初期配置による影響を最小にすること、2 次元系では繊維の重なりは物理的に起こりえない現象であることに由来する。もう一つは系の粒子数密度が概ね一定であるということである。これは、各粒子の粒子数密度の偏りが大きいと、式 (2.25) のように圧力が非常に大きくなり計算が発散してしまうためである。これらの条件を満たすために、以下の手順で初期配置を生成した。

(1) 乱数を用いて繊維の端点の座標 $\boldsymbol{r}_s = (x_s, y_s)$ と繊維が x 軸となす角 θ_s　$(0 \leq \theta_s \leq 2\pi)$ を選び、以下のように n 番目の繊維粒子を配置する。

$$\boldsymbol{r}_n = \boldsymbol{r}_s + n\boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} \cos\theta_s \\ \sin\theta_s \end{pmatrix} \tag{2.47}$$

(2) 線分の交差判定アルゴリズム (付録 B.2 に記載) を用いて他の繊維との重なりをチェックする。同時に繊維が壁面内に進入していないかをチェックする。違反していた場合、この繊維配置を棄却し、次の繊維の配置を行う。

(3) 繊維の配置が終了した後、乱数を用いて座標を生成し、流体粒子を配置する。

(4) この状態 A における系全体のエネルギー U_A を、粒子を格子状に配置した時の粒子数密度 n_0 を用いて以下のように計算する。

$$U_A = \sum_{i=0}^{N}\frac{1}{2}(n_i - n_0)^2 \tag{2.48}$$

ここで、n_i は式 (2.9) と同様に計算する。U_A は、各粒子の粒子数密度が n_0 に近づくとエネルギーが下がるようなエネルギーになっている。

(5) ランダムに一つの流体粒子 α、もしくは繊維粒子 α を選び、以下のランダムな変位を与える。

$$\boldsymbol{r}'_\alpha = \boldsymbol{r}_\alpha + \begin{pmatrix} (\xi_1 - 0.5)\, l_0 \\ (\xi_2 - 0.5)\, l_0 \end{pmatrix} \tag{2.49}$$

ここで、ξ_1, ξ_2 は 0 から 1 までをとる乱数、l_0 は粒子間距離である。$U_A < N$ の時は、$\boldsymbol{r}'_\alpha$ の採択率を上げるためにランダムな変位を 10 分の 1 にする。

(6) この状態 i' における系全体のエネルギー U'_A を計算する。

(6-a) $U'_A \leq U_A$ の時、新しい状態 A' を次の状態 B として (4) に戻る。

(6-b) $U'_A > U_A$ の時、新しい状態 A' を棄却し、元の状態 A を次の状態 B として (4) に戻る。

(7) (4) から (6) の計算を $U_A < 0.1N$ となるまで繰り返す。

(8) MPS 法の圧力勾配と粘性項、繊維粒子間の拘束力のみを用いて一定時間、流体粒子と繊維の配置を緩和させる。

図 2.5 に手順 (7) までの工程で作成された初期配置、図 2.6 に (8) の手順によって緩和させた初期配置の例を示す。(7) までのモンテカルロ法のアルゴリズムではエネルギーがある一定以上小さくなるとエネルギーの減少率が著しく低下する。したがって MPS 法の圧力勾配を用いて、各粒子に対して粒子数密度が一定になる方向へ力を作用させることで、より効率的に粒子配置を緩和させることができる。

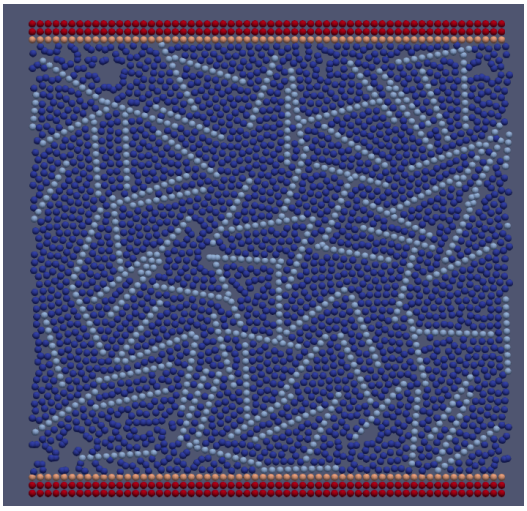

図 2.5　手順 (7) 終了後の粒子配置の例

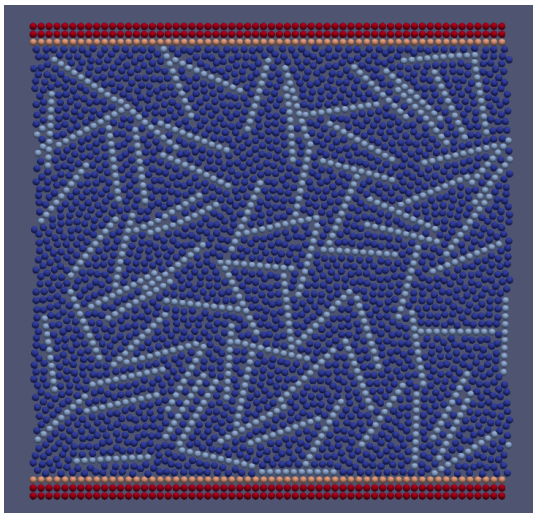

図 2.6　手順 (8) 終了後の粒子配置の例

第 3 章

シミュレーションの妥当性検証

3.1　流体計算の妥当性検証

1.2 節で述べた 2 つの流れの理論解を用いて、作成したシミュレーションの定常状態における妥当性を検証する。ここで、x 軸方向の粒子の数が $n_x = 40$、y 軸方向の粒子の数が $n_y = 40$ で合計 1600 粒子を用いた計算の初期配置を図 3.1 に示す。この時、赤色の粒子がゴースト粒子、黄色の粒子が壁粒子、青色の粒子が流体粒子である。下側の壁粒子の y 座標を 0 に固定すると、上側の壁粒子の y 座標は $h = n_y - 5$ となる。また、x 軸方向には周期境界条件を適用した。

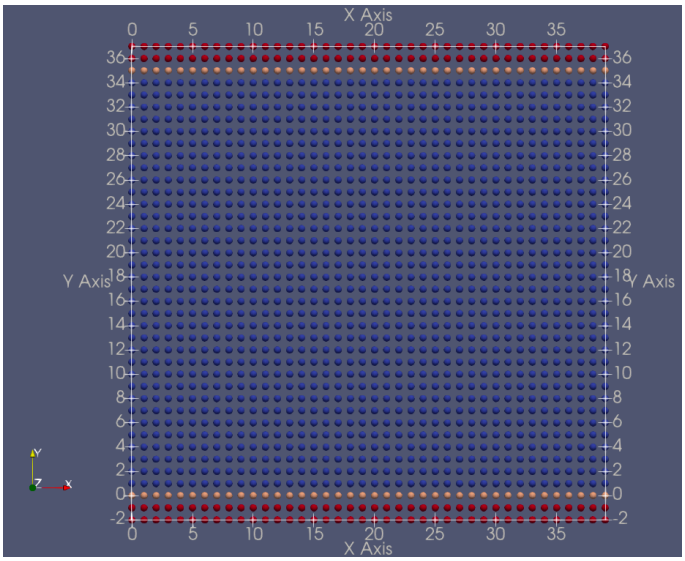

図 3.1　粒子の初期配置 ($n_x = 40, n_y = 40, N = 1600$)

Poiseuille 流の場合、流体粒子には図 1.1 のように、x 軸の正の方向に体積力 g がかかる。Couette 流の場合、図 1.2 のように上側の壁粒子とゴースト粒子は x 軸方向に速度 U_w、下側の壁粒子とゴースト粒子は速度 $-U_w$ で移動する。このとき、壁速度 U_w はひずみ速度 $\dot{\gamma}$ を用いて、以下のように計算される。

$$U_w = \frac{h}{2}\dot{\gamma} \tag{3.1}$$

また、3.1 項においては、流路幅を基準とした Reynolds 数を用いる。Poiseuille 流については系内の最大速度 $U_{\max}$ を用いて、Reynolds 数を以下のように定義する。

$$\mathrm{Re}_{\mathrm{Poi}} = \frac{hU_{\max}}{\nu} \tag{3.2}$$

Couette 流については壁速度 U_w を用いて、Reynolds 数を以下のように定義する。

$$\mathrm{Re}_{\mathrm{Cou}} = \frac{hU_w}{\nu} \tag{3.3}$$

3.1.1　Poiseuille 流

計算パラメータとして、動粘性係数は $\nu = 1.0, 1.0 \times 10^4$、重力 g は $\mathrm{Re}_{\mathrm{Poi}} = 1.0, 0.1$ となるように与えた。また、システムサイズは $n_x = n_y = 40 \quad (N = 1600)$ と $n_x = n_y = 60 \quad (N = 3600)$ の 2 種類で行った。図 3.2 に定常状態の速度分布を示す。縦軸は式 (1.7) における最大速度 $U_{\max} = gh^2/8\nu$ で規格

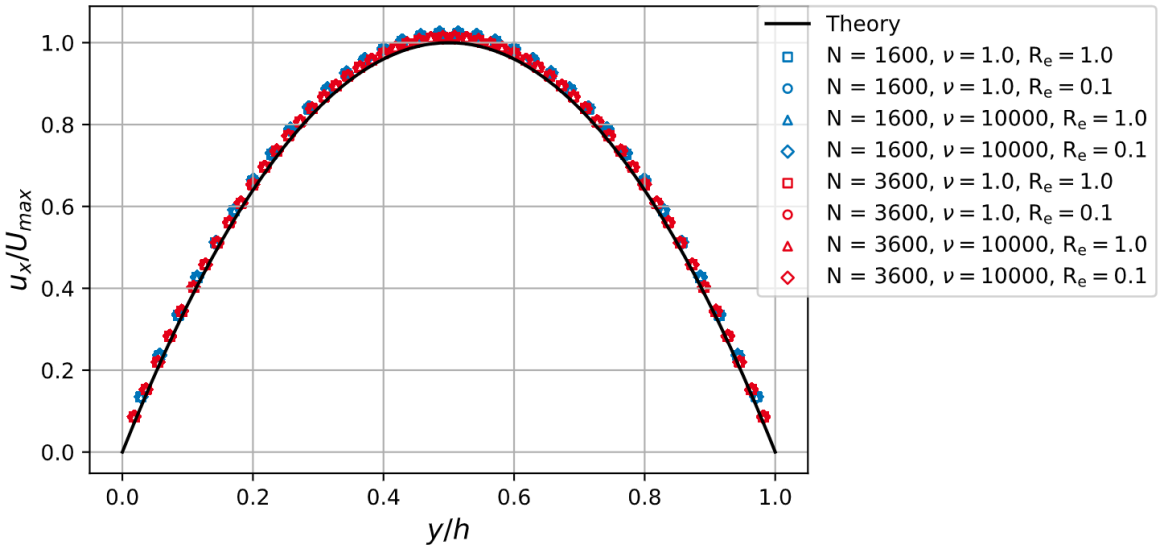

図 3.2　Poiseuille 流の速度プロファイル ($N = 1600, 3600$)

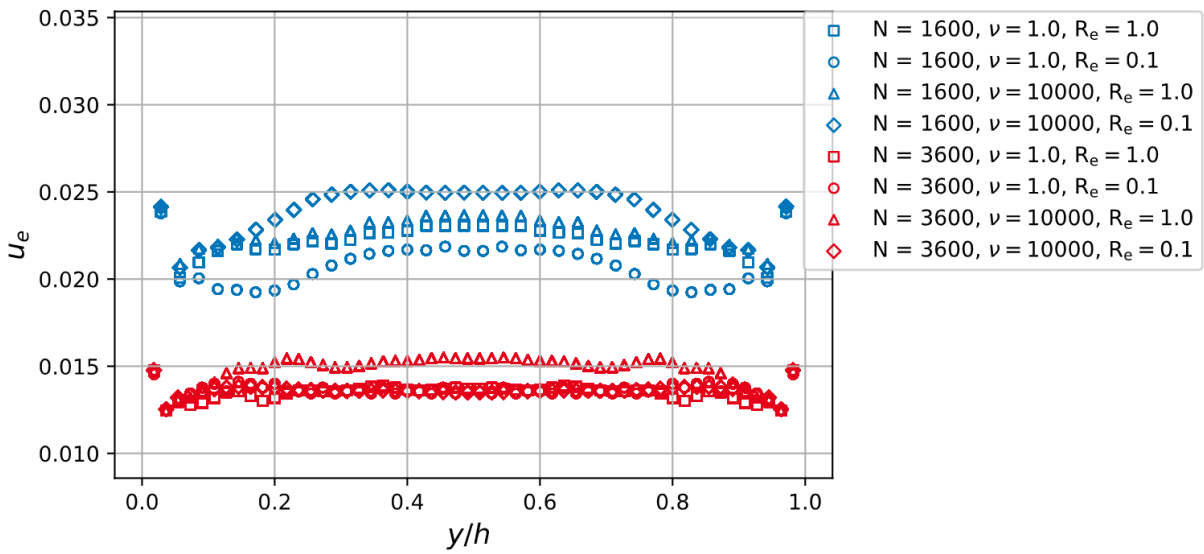

図 3.3　理論値 (式 (1.8)) からの規格化誤差 ($N = 1600, 3600$)

化した流体粒子の x 軸方向の速度、横軸は流路幅 h で規格化した各流体粒子の y 座標 $y^* = y/h$ である。実線は式 (1.8) で示した規格化された Poiseuille 流の理論値である。各システムサイズについて、それぞれ粘性係数と重力を振った 4 つの計算条件について同時にプロットした。この時、図 3.2 より ν, g が異なっていてもほぼ理論曲線に重なっていることがわかる。ただ、流速はパラメータに関わらず、理論値よりもやや高くなっていることがわかる。つまり、壁近傍において滑りが生じていると言える。先行研究

[37] においても、同様の結果が報告されていることから、壁近傍における流体の滑りは、壁面境界を固定された流体粒子で表現した際のアーティファクトによるものであると考えられる。

また、図 3.3 に図 3.2 に示したデータの理論値からの誤差 u_e を示す。この時、誤差 u_e は式 (1.8) における理論値を $u^{(theory)}(y^*)$ として、以下のように計算する。

$$u_e = \frac{\left| u_x(y^*) - u_x^{(theory)}(y^*) \right|}{U_{max}} \tag{3.4}$$

図 3.3 より、速度プロファイルが $y^* = y/h = 0.5$ を中心とした二次関数になっていることを考慮すると壁近傍での誤差が最も大きいことが分かる。また、粒子数が大きい方が理論値からの誤差が小さいことが分かる。これは粒子数を増やすことで空間離散誤差が小さくなることに相当する。理論値からの平均の誤差は $N = 1600$ では約 4.7%、$N = 3600$ では約 3.2% である。先行研究 [10] においては約 8% の誤差となることが報告されており、同様のオーダーとなった。

3.1.2　Couette 流

計算パラメータとして、動粘性係数 $\nu = 1 \times 10^4$、ひずみ速度 $\dot{\gamma} = 1.0, 10, 100$ を選び計算を行った。また、システムサイズは $n_x = n_y = 40, 60, 80, 100$ の 4 種類で行った。本項では、後の計算で用いる $\dot{\gamma} = 10$ における結果を示す。定常状態に達してから十分に時間の経過した時刻 $t = 2.0$、ひずみ $\gamma = 20$ におけるデータを以下に示す。また、この計算は時間刻み幅が $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ で 10000 ステップを要した。図 3.4

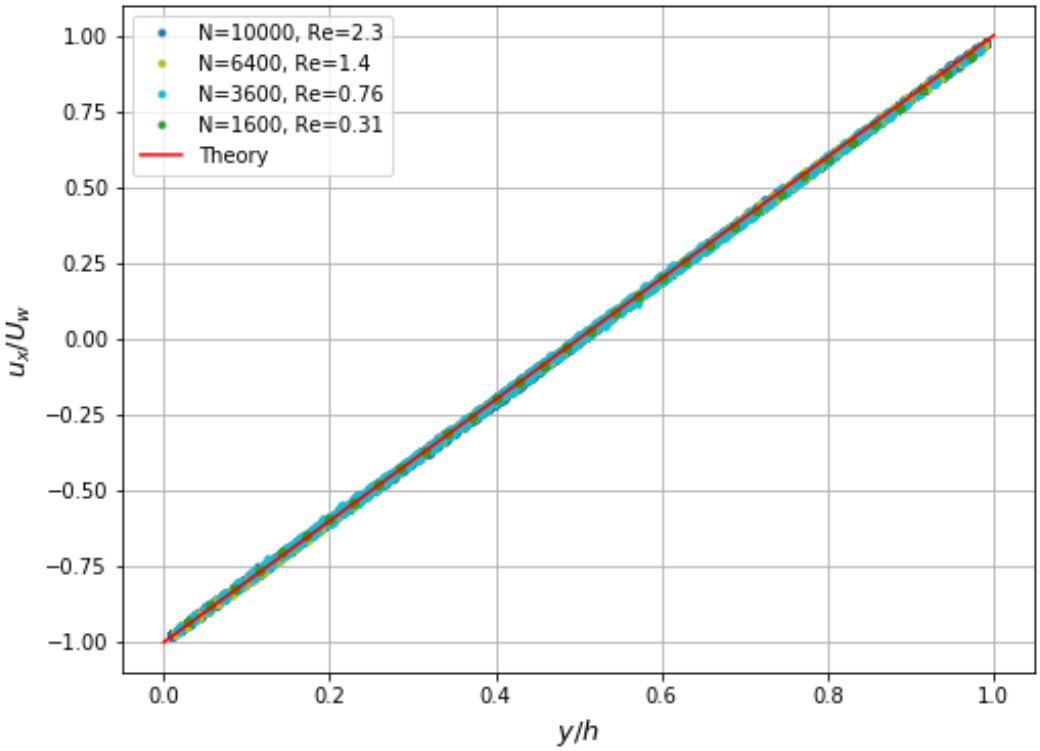

図 3.4　Couette 流の速度プロファイル ($\dot{\gamma} = 10, \gamma = 20$)

に速度プロファイルを示す。縦軸は壁速度 U_w で規格化した各流体粒子の x 軸方向の速度、横軸は流路幅 h で規格化した各流体粒子の y 座標 $y^* = y/h$ である。実線は式 (1.12) の定常状態の Couette 流の理論解である。図 3.4 より、システムサイズに関わらず概ね理論解に沿った速度分布が実現していることがわかる。また、各システムサイズについて最小二乗法を用いて一次関数でフィッティングを行うと、その傾きが $\partial u_x/\partial y$ に相当する。実際に得られた値を図 3.5 に示す。これより、理論値の $\dot{\gamma} = 10$ とは概ね一致していることがわかる。また、傾きの値から、$N = 6400$ 以降では壁による影響が少ないと考えられる。

図 3.4 で得られたデータの理論解からの誤差 u_e を図 3.6 に示す。ここで、u_e は式 (1.12) で示す理論値を $u_x^{(theory)}(y^*)$ とすると以下のように書ける。

$$u_e = \frac{\left| u_x(y^*) - u_x^{(theory)}(y^*) \right|}{U_w} \tag{3.5}$$

図 3.6 より、多くの流体粒子速度の誤差は約 0.01 以下、つまり壁速度の 1 %未満のオーダーの誤差となっており、ほぼ Couette 流が実現されていると考える。相対誤差の大きさを考えると、Couette 流の方が Poiseuille 流よりも高精度に再現されていると言える。

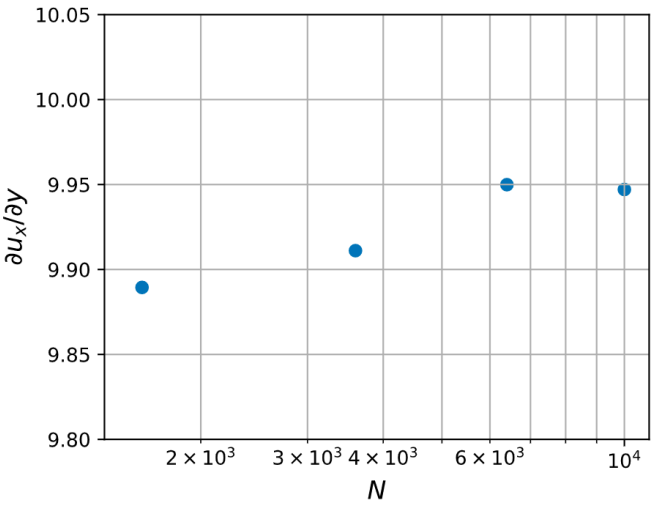

図 3.5　各システムサイズの $\partial u_x/\partial y$

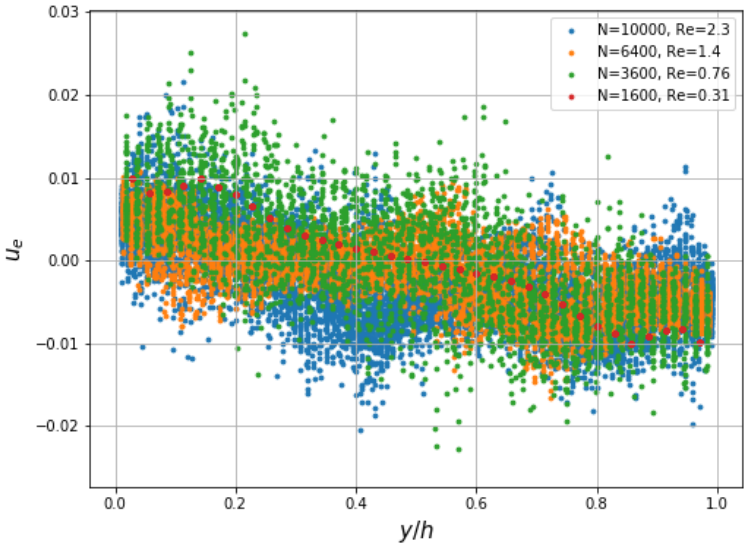

図 3.6　規格化された速度と理論値との絶対誤差 ($\dot{\gamma} = 10, \gamma = 20$)

3.2　繊維モデルの妥当性検証

3.2.1　Jeffery Orbit

ここでは、繊維モデルの妥当性を検証するために、式 (1.15) に示した Jeffery による理論式との比較を行う。図 3.1 と同様に粒子を配置し、この系の中心にアスペクト比 $r_p = 10$、つまり 10 個の粒子によって構成される繊維を配向角 $\phi = \frac{\pi}{2}$ として、1 本配置する。その後ひずみ速度 $\dot{\gamma} = 10$ で上下の壁を移動させ、剪断流をかける。この時、流体の動粘性係数は $\nu = 1.0 \times 10^4$ とし、システムサイズは $n_x = n_y = 40, 60$ の二つについて $t = 20$ まで計算を行った。繊維を拘束するバネ定数は $k_s = 1 \times 10^9$, $k_b = 5 \times 10^8$ とし、

繊維の平均の伸びは 1% 以内、曲がりは 0.03% 以内であった。また、配向角 ϕ は繊維はほぼ曲がっていないと考え、繊維の両端を結ぶ直線が x 軸となす角を ϕ とした。図 3.7 に繊維の配向角 ϕ の時間発展、図 3.8 に図 3.7 のデータにおいて、2 回目以降の回転で $\phi = \frac{\pi}{2}$ に到達した時間を $t = 0.0$ として抽出したデータと Jeffery による解析解との比較を示す。

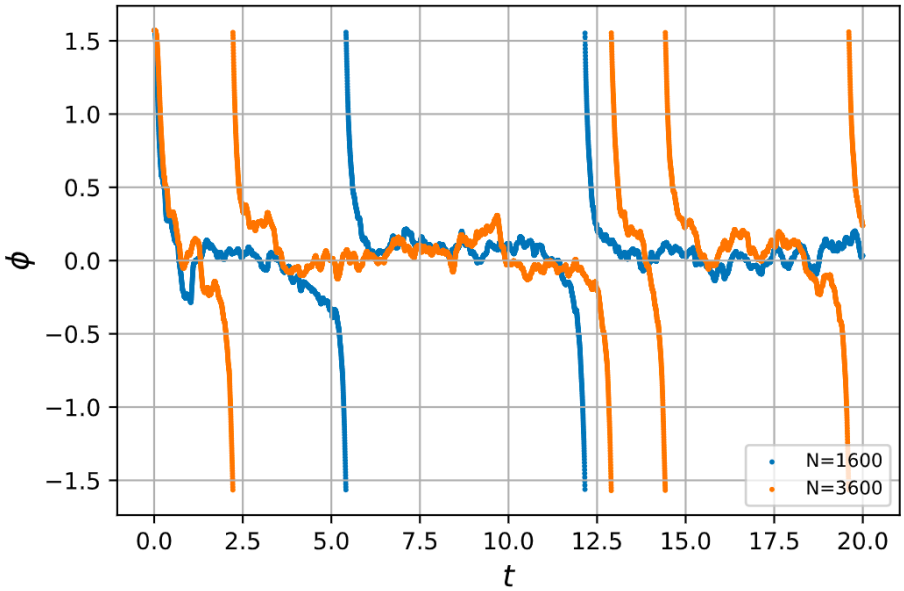

図 3.7　繊維の断続的な回転 ($N_f = 1$, $N = 1600, 3600$)

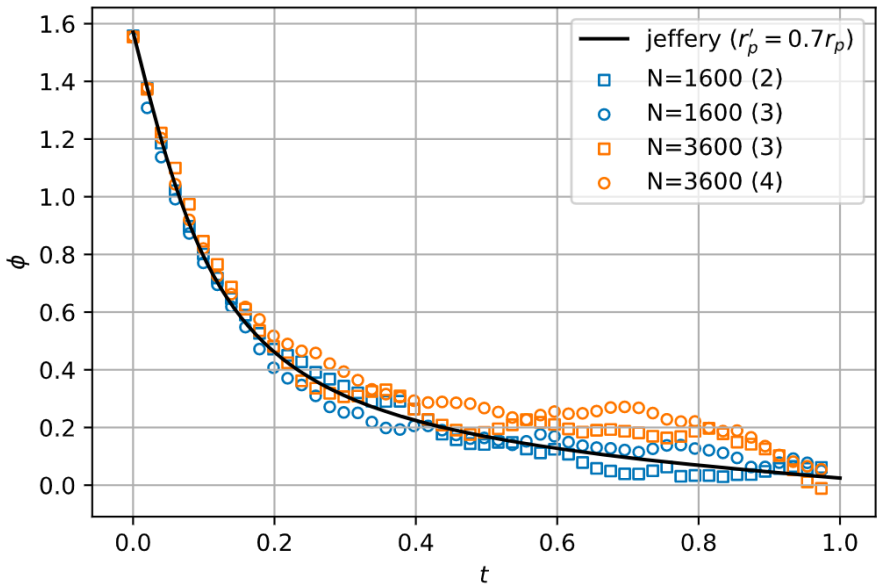

図 3.8　Jeffery[20] による理論式 (式 (1.15)) とシミュレーション結果との比較

図 3.7 において、配向角 ϕ の値が $-\frac{\pi}{2}$ から $\frac{\pi}{2}$ へ遷移している時間帯が繊維が回転をしている領域に対応する。図 3.8 では図 3.7 において、$N = 1600$ では 2 回目と 3 回目の回転を、$N = 3600$ については 3 回目と 4 回目の回転を Jeffery による解析解と比較したものである。これより、システムサイズに関わらず概ね解析解に沿った傾向を示していることがわかる。配向角が解析解の付近で揺らいでいるような角度

変化が見られるが、これは回転中に繊維粒子間の距離が大きくなり、バネによる復元力が働くことが原因であると考えられる。また、これらのデータから $t = 0.4 \sim 0.8$ の領域で、システムサイズが大きい方が配向角 ϕ が大きくなっていることが分かる。これは、壁からの影響がシステムサイズによって異なることが原因であると考えられる。

図 3.7 より、この繊維の回転頻度に周期性はなく、理論 [20] で予測されている繊維の周期的な回転は観測されなかった。これは、MPS 法では連続的な流体を粒子で離散化しているため、それによって生じるランダムな動きによるものと考えられる。さらに、実際の繊維では、図 3.9 のように、剪断流中で繊維が x 軸に並行に配向した際、上面と下面の繊維表面に生じる粘性応力 σ を受けて、トルクが生じる。しかし、繊維を一列の粒子対として表現する場合、周囲の流動場が理想的な Couette 流である状況においては、上下の対称性から各粒子に働く粘性応力は 0 になる。山本ら [31] は流体力学的には厳密ではないが、繊維粒子に回転の自由度を与え、常に Stokes 流にしたがったトルクと、繊維粒子間に摩擦を働かせることによって、繊維の定常的な回転を表現している。ただ、MPS 法における流体粒子は回転の自由度を持たないため、本研究にはそのまま適用することはできない。以上より、本研究では希薄状態での繊維の定常的な回転は表現できていないことに注意する必要がある。

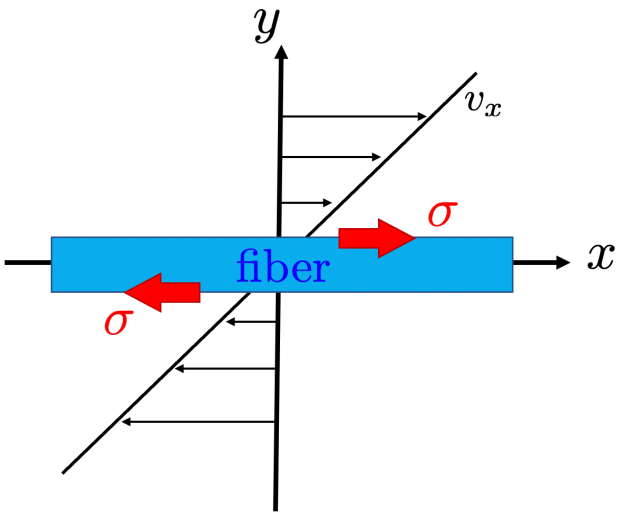

図 3.9　剪断流中で繊維が x 軸に平行に配向した場合

3.2.2　パラメータ

Yamamoto ら [31] は繊維のバネ定数は粘性応力 $\eta\dot{\gamma}$ と比較して十分に大きい値を選び、バネの伸びが約 0.1% 以内となるように設定をしている。十分にバネを強くすることは繊維の形状を保つと同時に、繊維同士のすり抜けを防ぐ役割を果たしている。図 3.10 に、実際に繊維間のバネがやや弱く、繊維の数密度が高い場合に繊維同士がすり抜けてしまった例を示す。また、この計算における繊維を構成する粒子の平均の粒子間距離と平均角度の時間発展を以下の図 3.11 に示す。

図 3.11 の左の縦軸は、式 (2.32) で示されている隣り合う繊維粒子間の距離 r_{ij} を初期粒子間距離 l_0 で規格化したもので、繊維の伸びがない場合には $r_{ij}/l_0 = 1$ となる。また、右の縦軸は式 (2.33) で示されている 3 つの繊維粒子がなす角度 θ_j を π で規格化したもので、曲がっていない時は $\theta_j/\pi = 1$ となる。横軸は時間 t である。図 3.11 より、青線で示された繊維粒子間の平均の伸びは $t < 2.5$ の流動のかかり

始めでは 4% 以上、その後の定常状態においても 1% 以上となっている。このように、伸びのバネが弱く繊維粒子間の距離が大きくなると、その付近の粒子数密度が低くなるため圧力によって他の流体粒子や繊維のすり抜けが生じうる。逆に、繊維間のバネが強いと当該の繊維粒子の粒子数密度が周囲よりも下がらないため、仮に別の繊維が近づいてきた際は圧力勾配に起因する斥力が生じるので、繊維のすり抜けは生じない。しかし、繊維粒子間のバネ定数を大きくしすぎると、時間刻み幅がクーラン数上限や拡散数上限によって生じるものよりも小さくなり、計算コストが非常に高くなってしまうため、適切な値を選ぶ必要がある。

いくつかの計算結果から、平均のバネの伸びが 1% 以内であれば繊維のすり抜けは生じないという経験則を得たため、本研究ではその条件を満たすようなバネ定数を使用する。

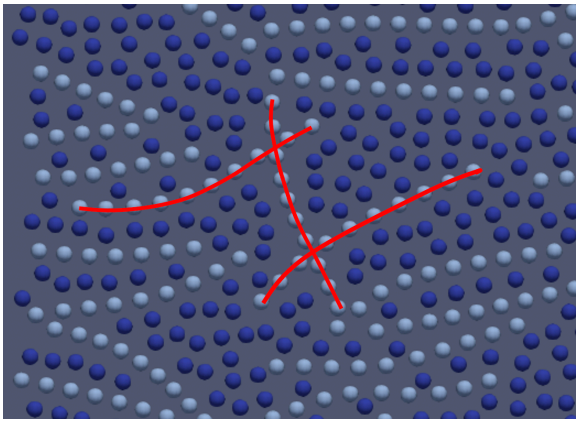

図 3.10　繊維のすり抜けの一例 ($N = 3600, N_f = 120, k_s = 1.0 \times 10^8, k_b = 1.0 \times 10^8$) 実線はすり抜けが生じた繊維を表す

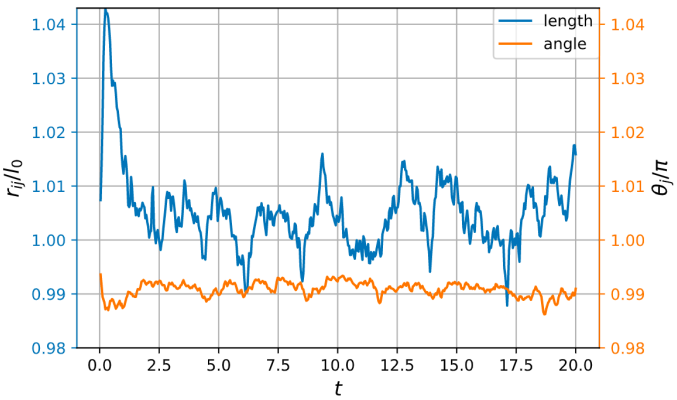

図 3.11　繊維粒子間の平均距離と平均角度 ($N = 3600, N_f = 120 k_s = 1.0 \times 10^8, k_b = 1.0 \times 10^8$)

第 4 章

結果

本論文では、粒子数 $N = 3600$, ひずみ速度 $\dot{\gamma} = 10.0$, 動粘性係数 $\nu = 1.0 \times 10^4$ の条件での結果を示す。また、繊維長は $L = 10$ とし、繊維の質量密度は流体粒子と同様である。このようにパラメータを決定すると、繊維基準の Reynolds 数は $\mathrm{Re}_f = L\dot{\gamma}^2/\nu = 0.1$ となり、先行研究と同様に粘性が支配的な領域となる [13]。繊維粒子間のバネ定数は $k_x = 1.0 \times 10^9$, $k_b = 5.0 \times 10^8$ を用いた。系内の繊維の本数は $N_f = 1, 5, 10, 20, 30, 40, 45, 55, 80, 120$ について計算した。本研究では、式 (1.18) に示した重なり濃度は $n^* = 0.013$ であり、それぞれの N_f の重なり濃度に対する相対濃度は $n/n^* = 0.02, 0.12, 0.24, 0.48, 0.73, 0.97, 1.33, 1.94, 2.91$ に相当する。ここで、繊維の数密度 n は流体粒子一つ当たりの長さは無次元化によって 1.0 になっていることと、壁粒子は上下合わせて 6 層存在していることから以下のように計算される。

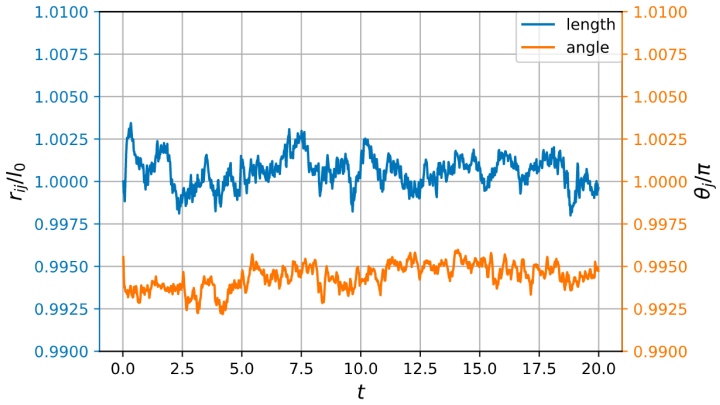

図 4.1　繊維粒子間の平均距離と平均角度 ($N = 3600, N_f = 120, k_s = 1.0 \times 10^9, k_b = 5.0 \times 10^8$)

$$n = \frac{N_f}{n_x(n_y - 6)} \tag{4.1}$$

図 4.1 に、繊維の変形が最も大きかった $N_f = 120$ の計算の繊維を構成する粒子の平均の粒子間距離 r_{ij} と平均角度 θ_j の時間発展を示す。これらはそれぞれ初期粒子間距離 $l_0 = 1$ と角度 π で規格化されている。図 4.1 より、繊維粒子間の平均の伸びは 0.5% 以内、曲がりは 1.0% 以内であり繊維同士の重なりが起きないようなバネ定数になっている。他の初期状態での計算についても同様ある。また、繊維の初期配置の数 N_s は $N_f = 1$ では 14 個、$N_f = 5, 10, 45, 55$ については 6 個、その他の N_f に対してはそれぞれ 9 個ずつ作成し、それらを平均した。本研究の計算は全て 2 次元であるため $\theta = \pi/2$ に相当し、式 (1.19) に示した配向ベクトルは z 成分を省略して以下のように書き直せる。

$$\boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi \\ \sin\phi \end{pmatrix} \tag{4.2}$$

以上より、各物理量 ψ に対する平均 $\overline{\langle\psi\rangle}$ は特に断りがない限り、各 N_f に対して以下のように計算する。

$$\overline{\langle\psi\rangle} = \sum_{s=1}^{N_s}\left[\sum_t \psi^{(s)}(t)\right] \tag{4.3}$$

ここで、$\psi^{(s)}$ は初期配置の異なるシミュレーションから得られた物理量であることを示し、時間については定常状態以降について平均をとる。また、定常状態の決定方法は後述する。各初期配置についてアンサンブル平均をとった場合については以下のように表す。

$$\langle\psi(t)\rangle = \sum_{s=1}^{N_s}\psi^{(s)}(t) \tag{4.4}$$

4.1　繊維配向に壁が与える影響

まず初めに、繊維配向に対して、壁が与える影響について述べる。ここで用いた「壁が与える影響」には繊維配向への影響と流体への影響の二つが存在するが、今回の計算においては、繊維配向に対して壁が与える影響の方がより顕著であると考えられるためそちらについてのみ考慮する。図 4.2 に壁からの距離 l_{wall} とバルク領域の概念図を示す。つまり、壁側領域とバルク領域を以下のように定義する。

$$0 < y \leq l_{wall}, \quad h - l_{wall} \leq y < h \qquad \text{(壁側領域)} \tag{4.5}$$

$$l_{wall} < y < h - l_{wall}, \qquad \text{(バルク領域)} \tag{4.6}$$

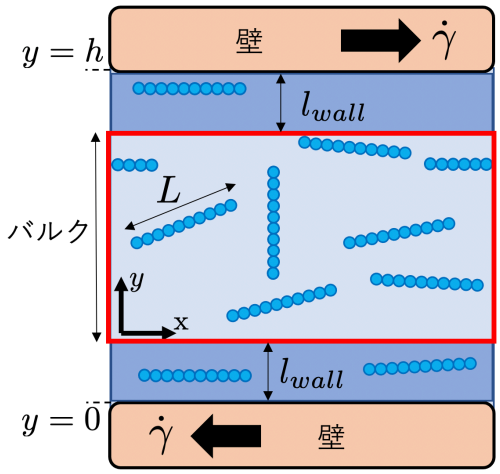

図 4.2　l_{wall} とバルク領域の定義

図 4.3 に、各 l_{wall} に対してのバルク領域の配向分布関数を $N_f = 30, 55, 80, 120$ に対して示す。(a)∼(d) のそれぞれにおいて、$l_{wall} = 1, 2$ では $\phi = 0$ に鋭いピークが見られ、壁付近の強く配向した繊維が配向分布に強く影響を及ぼしていることが分かる。また、$l_{wall} = 3$ 以降では、壁からの距離が離れるにつれて分布関数がブロードになり、かつピーク位置が $\phi > 0$ の方向に変化していることが分かる。ただ、$l_{wall} = 15$ 以降については、分布関数の変化率は小さくほぼ同一の分布関数とみなせる。従って、本研究では、$l_{wall} = 15$ 以上の領域をバルクとして定義し、バルク領域内の繊維についてのみ解析を行う。

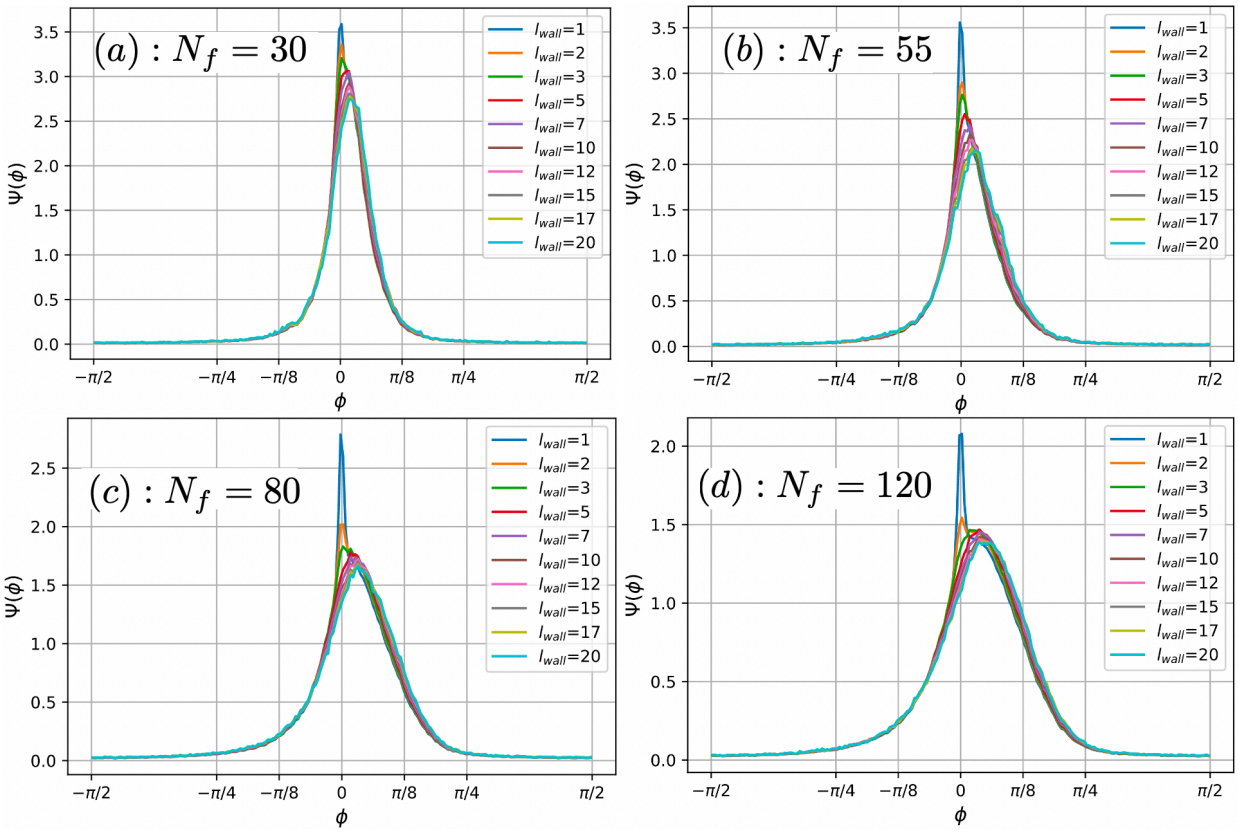

図 4.3　バルク領域の配向分布関数の l_{wall} 依存性。(a)$N_f = 30$、(b)$N_f = 55$、(c)$N_f = 80$、(d)$N_f = 120$

また、図 4.4 に壁側領域とバルク領域における配向分布関数 $\Psi(\phi)$ を示す。このように、壁側領域では繊維の回転が壁によって妨げられるため、$\phi = 0$ の方向に非常に強く配向する。したがって、壁による影響がある程度低減され、かつ平均をとるのに必要なサンプル数が十分に保たれるような l_{wall} を決定する必要がある。ただし、本計算のように粘性が支配的な領域においては壁による影響が及ぼされる範囲は非常に長くなるため、このような切り分けを行ったとしても壁による影響は存在しているということを予め断っておく。

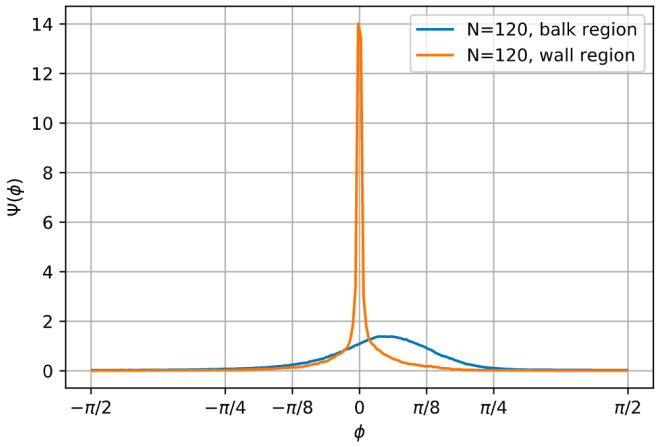

図 4.4　壁側領域とバルク領域における配向分布関数 ($l_{wall} = 15$)

4.2　定常状態の決定

定常状態を決定するために、各 N_f における異なる初期配置に対して平均をとった $\langle a_{11}(t)\rangle$ の時間発展を図 4.5 に示す。図 4.5 より、$T = 2.0$ 付近で $\langle a_{11}(t)\rangle$ の値の上昇が落ち着き、ある一定値付近で揺らぎ始めていることがわかる。したがって、もう少し時間が経過した $T > 2.5$ 以降を定常状態とし、これ以降のデータについて式 (4.3) の平均をとって解析する

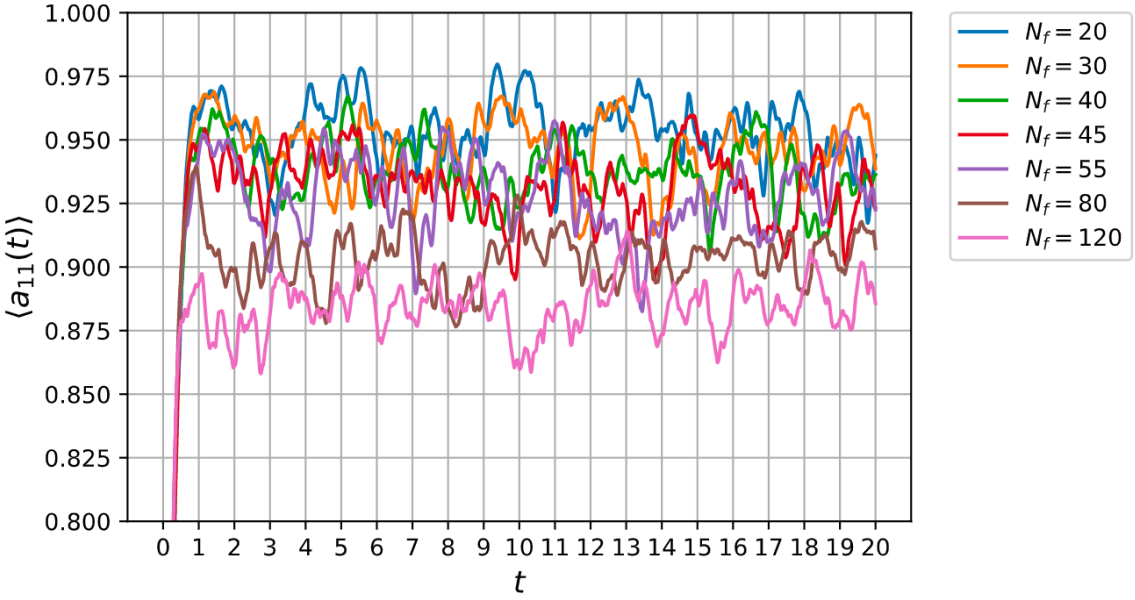

図 4.5　各 N_f における a_{11} の時間発展

4.3　繊維配向の数密度依存性

系内の繊維の配向状態を調べるために式 (1.25) で示した配向テンソルを計算した。ここで、二次元系では式 (4.2) の配向ベクトルを用いることから、ただちに $a_{12} = a_{21}$, $a_{22} = 1 - a_{11}$ であることがわかる。したがって、系内の平均的な配向を捉えるには a_{11} と a_{12} の二つについて考慮するのみで十分である。系の平均的な配向状態を示すため、各数密度における a_{11} と a_{12} を示す。

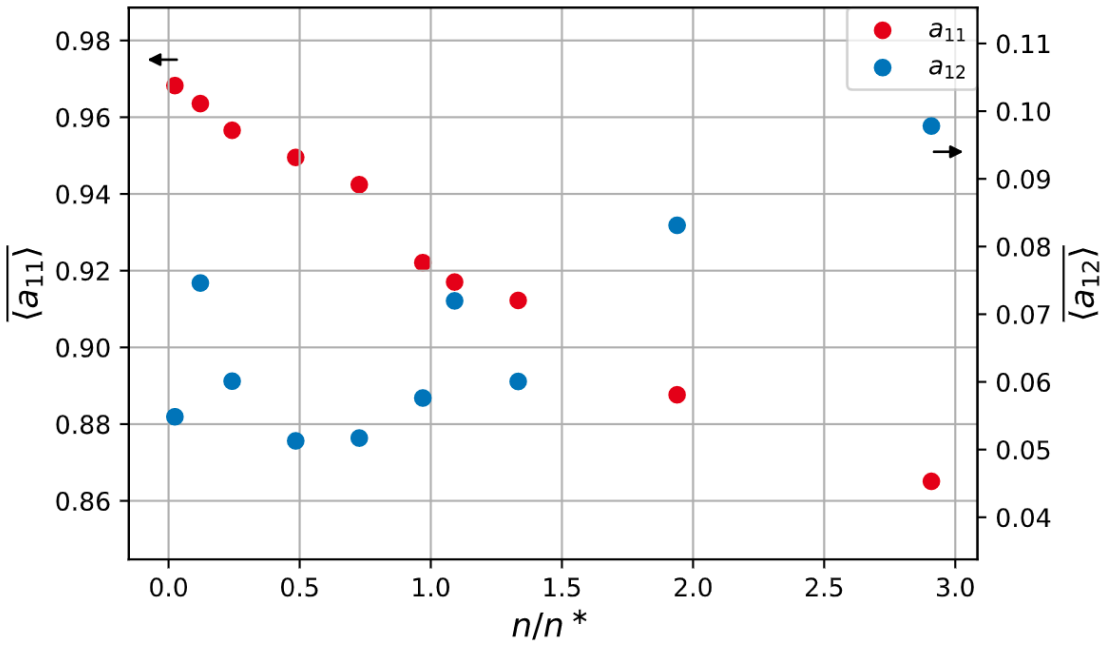

図 4.6　a_{11} と a_{12} の数密度依存性

横軸の n/n^* は重なり濃度 n^* で規格化された繊維の数密度である。a_{11} は全ての繊維が流動方向 $\phi = 0$

に配向すると 1.0、ランダムに配向すると 0.5 をとる指標である。図 4.6 より、繊維の数密度が上昇するにつれて a_{11} の値が減少していく傾向が見られる。これは、繊維の数密度が上昇するにつれて、繊維が接触する確率が上昇すること、また流体相互作用を受ける他繊維の数が増えることが影響していると考えられる。ただし、最も数密度が高い系においても $\langle a_{11}\rangle|_{N_f=120} \simeq 0.865$ であり、多くの繊維は流動方向に配向していることがわかる。また、a_{12} は繊維が平均的に $\phi > 0$ の方向に向いていれば正、$\phi < 0$ の方向に向いていれば負になる値であり、繊維が完全に $\phi = 0$ の方向に配向すると 0 になる指標である。図 4.6 より a_{12} は全て正の値をとっており、繊維が平均的に $\phi > 0$ の方向に向いていることがわかる。$n/n^* = 0.5$ 以上の数密度では、概ね a_{12} の値が上昇していることがわかる。$n/n^* = 0.5$ 未満では、$\langle a_{12}\rangle$ の値は大きな変化は見られていない。これは、$n/n^* \leq 1$ の流体相互作用が支配的な領域においては、$n/n^* \geq 1$ の領域とは $\langle a_{12}\rangle$ の数密度依存性が異なっていることを示唆している。以上より、繊維の数密度が上昇するにつれて、繊維は流動方向 $\phi = 0$ の方向には配向しづらくなることがわかる。また、繊維が配向する向きは平均的には $\phi > 0$ の方向である。

4.4　繊維の配向分布関数

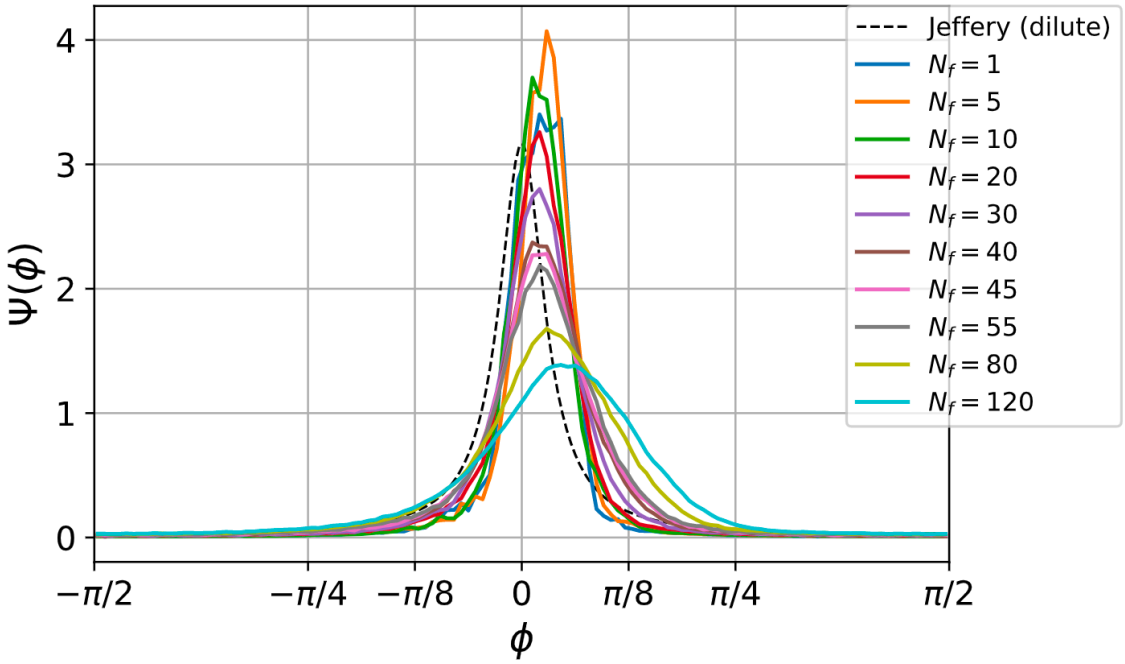

図 4.7　各 N_f の配向分布関数 $\Psi(\phi)$ と Jeffery による理論値 [20] との比較

バルク領域で得られた繊維の配向分布関数を図 4.7 に示す。縦軸は配向分布関数 $\Psi(\phi)$、横軸は xy 平面における角度 ϕ であり、流動方向は $\phi = 0$ である。また、Jeffery による解析解に基づく配向分布関数を点線で示しており、その具体形は以下のように書ける [22]。

$$\Psi(\phi) = \frac{r_p}{\pi\left(r_p^2 \sin^2\phi + \cos^2\phi\right)} \tag{4.7}$$

図 4.7 より、$N_f = 1$ を除いて、系内の繊維数が増えるほど、すなわち繊維の数密度が上がるほど分布の形状がなだらかになっていることがわかる。$N_f = 1$ では Jeffery による解とは異なり、配向分布関数のピーク位置は元々 $\phi > 0$ の方向に変化している。さらに、$N_f = 1, 5, 10, 20$ では、Jeffery の解よりもピークの値が大きくなっている。これらは 3.2.1 項で述べた本研究のアーティファクトによるものである

と考えられる。また、ピーク位置が $\phi > 0$ となることは、条件によらず本研究で行ったシミュレーションでは全て共通して観測された。これは先行研究の実験 [26, 24] やシミュレーション [3] と同様の結果である。この変化方向の理由については、次章で考察する。

4.5　剪断粘度の数密度依存性

この系のレオロジー的な特性を測定するために、系の粘度を解析する。剪断流においては、剪断粘度 μ は以下の構成方程式から算出される。

$$\hat{\sigma}_x = \mu \frac{d\hat{u}(\hat{y})}{d\hat{y}} \tag{4.8}$$

また、シミュレーションで得られる物理量は無次元化された応力 σ_x と速度勾配 $du(y)/dy$ である。ここで、応力は $\hat{\sigma}_x = \rho l_0^2 \dot{\gamma}^2 \sigma_x$ として無次元化されているので、シミュレーションによって得られる応力は以下のように書ける。

$$\sigma_x = \hat{\sigma}_x / (\rho l_0^2 \dot{\gamma}^2) = \frac{\mu}{\rho l_0^2 \dot{\gamma}} \frac{du(y)}{dy} \tag{4.9}$$

式 (4.9) より、系の粘度 μ を求める。本研究においては、壁にかかる応力 σ_x は流体粒子や繊維粒子が壁粒子から感じる粘性力、または圧力勾配による力の反作用として計算した。速度勾配 $du(y)/dy$ は図 3.5 で計算した $N = 3600$ についての速度勾配を用いた。

繊維がない状態の定常状態における剪断粘度 (媒質粘度) を μ_0 と設定する。流動開始直後は一般に粘度は一定ではない。そこで剪断流動を $t = 0$ でかけた際の粘度の変化を見るため粘度成長関数 $\mu_0(t)$ を求めた。この粘度成長関数を図 4.8 に示す。図 4.8 より、$t = 0.5$ 以降では定常状態であるとみなし、これ以降について平均をとることで $\mu_0 = 8.4 \times 10^3$ を得た。得られた粘度は、パラメータとして設定した動粘度から計算される粘度 $\nu/\rho = 1 \times 10^4$ よりもやや小さい値になっている。これは、粒子を用いたことによる離散化誤差や、流動中の粒子配置によって生じる誤差であると考えられる。以降では媒質粘度 μ_0 はこの値を用いる。

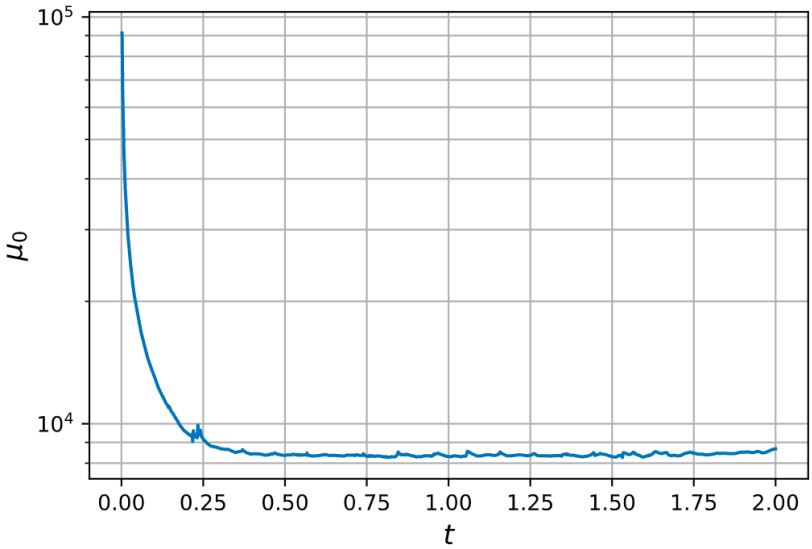

図 4.8　溶媒粘度 μ_0 の時間発展 ($\nu = 1.0 \times 10^4$, $\dot{\gamma} = 10$, $n_x = n_y = 60$)

次に、媒質の粘度 μ_0 で規格化した各 N_f についての相対粘度 μ/μ_0 を図 4.9 に示す。縦軸は対数軸をとっており、横軸は式 (4.1) で示した繊維の数密度 n である。これより、繊維の数密度が上昇するにつれ

て、粘度は上昇していることがわかる。ここで、$n = 0$ では系に繊維は存在しないので $\mu/\mu_0 = 1$ となるはずであるが、前述の通り μ_0 の値が小さくなっているため図 4.9 において、$n = 0$ 付近では $\mu/\mu_0 \simeq 1.2$ になっている。

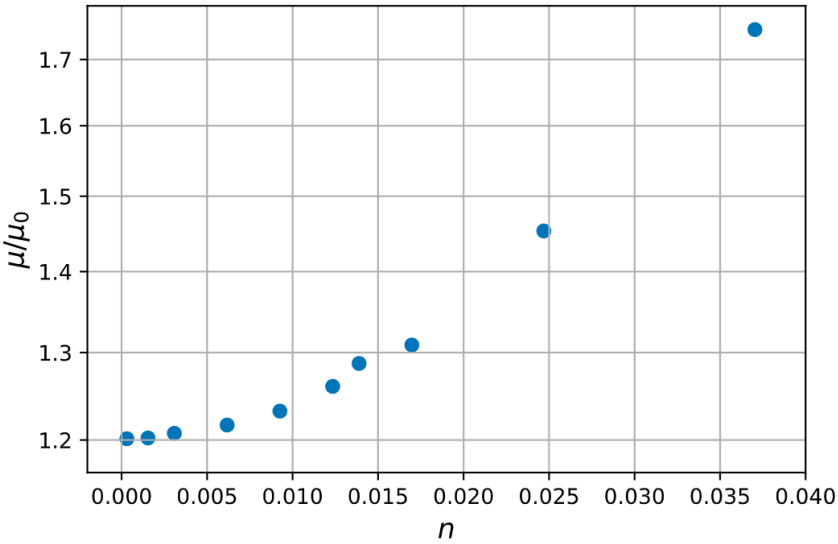

図 4.9　相対粘度 μ/μ_0 の数密度依存性

第 5 章

考察

5.1 流体相互作用による配向挙動への影響

流体相互作用が繊維の配向状態に与える影響を調べるため、流体相互作用による寄与を無視した先行研究 [3] との比較を行う。二次元でのシミュレーションによって得られて配向分布関数との比較を図 5.1 に示す。

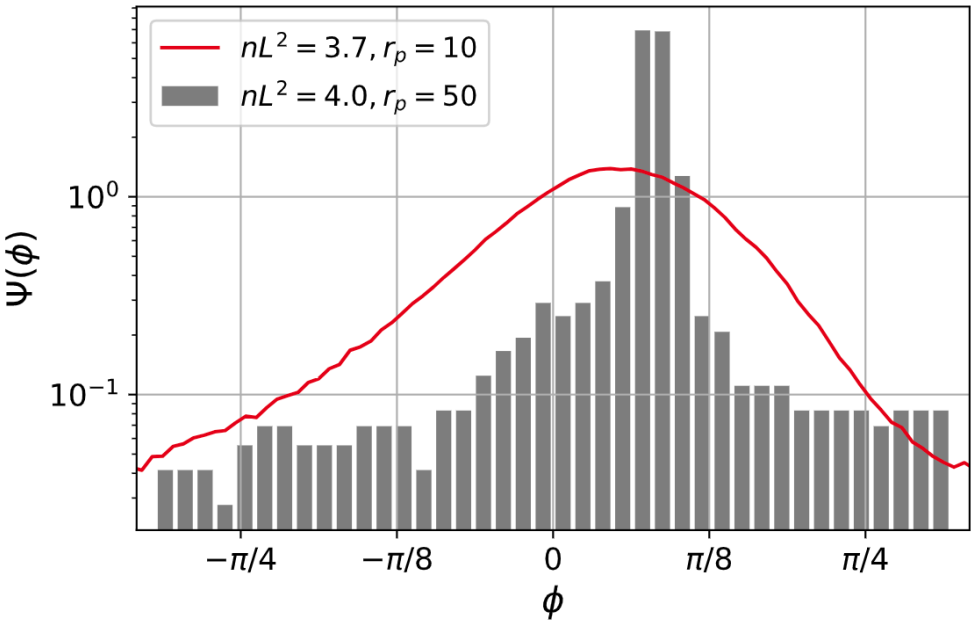

図 5.1　配向分布関数と Sundararajakumar らによる結果 [3] との比較

縦軸は対数をとった配向分布関数 $\log \Psi(\phi)$、横軸は xy 平面における角度 ϕ である。実線は図 4.7 での $N_{fiber} = 120$ における結果、ヒストグラムは先行研究 [3] で得られた配向分布関数である。この時、流動方向は $\phi = 0$ である。二つのデータはどちらも繊維長を考慮した数密度 nL^2 はほぼ同じでアスペクト比が異なるデータである。先行研究の分布関数のアスペクト比 r_p は本研究のアスペクト比の 5 倍であるため、分布関数の形状は本研究でのデータと比較して急峻になる。したがって、ピークの変化の絶対値や分布の幅などの定量的な比較はできないため、ここでは定性的な議論のみに留める。図 5.1 より、ピーク位置の変化の方向はどちらも $\phi > 0$ であることがわかる。つまり、ピークの変化の方向は他繊維から受ける相互作用の種類にはよらないことがわかる。また、分布の形状はどちらもピーク位置に対して非対称であ

る。以上より、現時点では流体相互作用の有無が繊維配向に与える定性的な影響は特定することができなかった。今後、この流体相互作用の有無による影響を評価するためには、繊維のアスペクト比や繊維の剛直性などを揃え、定量的な比較を行うことが必要となる。

5.2　配向分布関数のピーク位置の変化方向

図 4.7 より、各分布のピーク位置は $\phi > 0$ の方向に変化していることがわかる。これらは先行研究においても確認されているが、その原因について言及している研究は少ない。Stover ら [24] はこのピーク位置の変化がアスペクト比のばらつきによるものではないかと考え、繊維のアスペクト比がガウス分布にしたがって分布していると仮定して配向分布関数の再計算を行ったが、同様の結果が得られた。従って、繊維長のアスペクト比の分布は分布関数のピーク位置の変化に影響していないことが分かる。

図 4.7 より、繊維の数密度の上昇に伴ってピーク位置の変化量が増加していることがわかる。また、Jeffery による希薄極限での理論と $N_f = 1$ の時の配向分布関数を実験により計測した Petrich ら [22] の結果から 1 本の繊維が剪断流中に存在する時にはこのような変化は起こらないことがわかっている。以上を踏まえると、このピーク位置の変化は他の繊維から受ける相互作用によって起きている現象であるということが分かる。

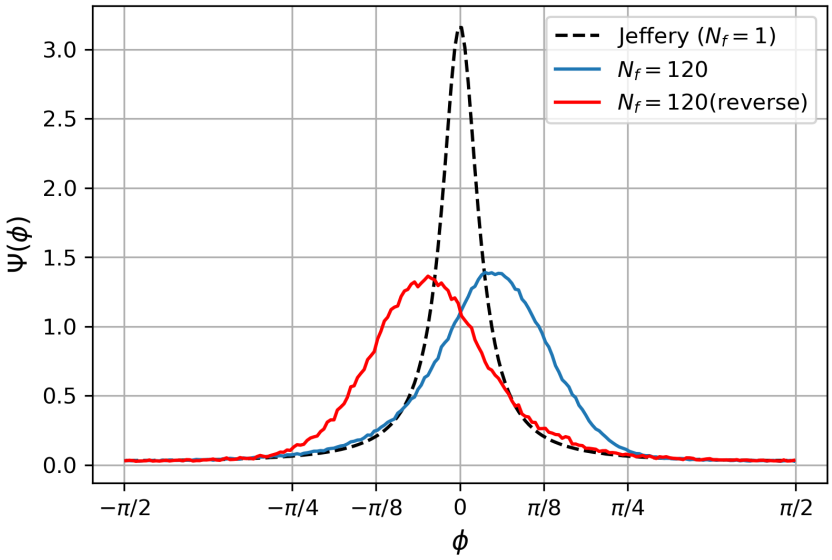

図 5.2　配向分布関数の流動方向依存性

次に、このピーク位置の変化方向とひずみ速度を与える方向との関係性を調べるため、ひずみ速度を与える方向を逆向きにして配向分布関数を計算した。計算は三つの初期配置について行い、ひずみ速度を与える方向が反対である以外は図 4.7 と同様の条件で計算を行った。グラフを図 5.2 に示す。青線が図 4.7 の $N_f = 120$ での結果、赤線がひずみ速度を与える方向を逆向きにして計算した配向分布関数、そして点線が Jeffery による解析解である。この結果から、配向分布関数のピーク位置の変化方向はひずみ速度を与える方向に依存していることが分かる。言い換えると、繊維は剪断流中では一方向に回転するため、配向分布関数のピーク位置の変化方向は繊維の回転方向によって決定されていると言える。ただし、これは x 軸を反転させたことに相当し、対称性から自明な結果であると考えられる。また、同様の結果は Folgar

ら [26] によっても報告されている。

以上をまとめると、配向分布関数のピーク位置の変化の絶対値は他の繊維からの相互作用が強いほど大きく、変化の方向は繊維の回転方向に依存していることが分かる。また、5.1 項より、配向分布関数のピーク位置の変化への寄与は、流体相互作用と繊維同士の衝突の両方であり、相互作用の種類に依存しないと言える。これらを踏まえて考えると、配向分布関数のピーク位置の変化は、繊維の角速度 $\dot{\phi}$ が他繊維から受ける相互作用によって Jeffery による希薄状態での理論 [20] と比べて増減することが原因であると考えられる。希薄極限では式 (1.13) より、剪断流下における繊維の角速度は角度 ϕ によって一意に決定するが、他繊維の流体相互作用や衝突が存在すると、その影響を受けて $\dot{\phi}$ の増減が生じる。このような $\dot{\phi}$ の揺らぎが存在すると、剪断流下における繊維の回転が必ず一方向であるという非対称性から配向分布関数のピーク位置は必ず $\phi > 0$ の方向に変化する。また、他繊維から受ける相互作用の強さは繊維の数密度が高いほど大きくなるため、繊維の数密度が高いほど配向分布関数のピーク位置の変化幅は大きくなっていると考えられる。このような希薄極限における繊維の回転運動からのズレは、Folgar ら [26] によって導入された回転拡散項に相当するものと考えられる。この考察を確かめるためには、各 ϕ に対して角速度 $\dot{\phi}$ を計算し、その分布を式 (1.13) による結果と比較する必要があると考えられる。

5.3　繊維配向と粘度の関係

図 4.6 より、繊維の数密度が上昇するにつれて、繊維は流動方向に配向しなくなるという結果が得られた。また、図 4.9 から、繊維の数密度が上昇するにつれて懸濁液の剪断粘度が上昇するという結果が得られた。以上の 2 点を踏まえると、繊維懸濁液の剪断粘度には、繊維の平均的な配向角 ϕ が寄与していることが予測される。つまり、繊維の流動方向に対する角度 ϕ が大きいほど、繊維が感じる流体抵抗が大きくなることで剪断粘度が高くなることが示唆される。また、図 4.9 より、$n \simeq 0.015$ を境に、剪断粘度 μ の増加率が変化していることが分かる。この結果は、繊維間による剪断粘度への寄与の構造が変化していることが示唆している。具体的には、繊維間の流体相互作用による寄与よりも、繊維同士の接触抵抗による寄与が大きくなっていることが予想される。この予想を確かめるためには、実際に繊維のコンタクト数と粘度を比較する必要があると考えられる。

第 6 章

結論

本研究では、MPS 法を用いて Navie-Stokes 方程式に基づいて繊維懸濁液のシミュレーションを作成し、剪断流動下における繊維の配向挙動を計算した。バルク領域の配向テンソル a_{11} の結果から、繊維の数密度が上昇するにつれて繊維は流動方向に配向しづらくなることがわかった。また、繊維の配向分布関数は数密度が上昇するにつれてなだらかになり、ピーク位置の流動方向からの遷移は大きくなった。ピーク位置の遷移方向は、繊維の回転方向に依存し、ピーク位置の遷移幅は他繊維の相互作用の増加に伴って増加した。このピーク位置の遷移は、他繊維から受ける相互作用によって、繊維が受けるトルクが増減することが原因であると考えられる。また、流体相互作用による寄与を無視して計算を行った先行研究 [3] と配向分布関数の比較を行ったが、定性的には、その形状に大きな変化は見られなかった。繊維懸濁液の剪断粘度は繊維の数密度が上昇するに伴って増加した。この増加は、繊維の占有体積による寄与、繊維の配向角 ϕ が大きくなり繊維にかかる流体抵抗が大きくなることによる寄与、繊維同士の接触によって生じる抵抗による寄与の 3 つがあると考えられる。

謝辞

本論文を作成するにあたっては、多くの方々にお世話になりました。ここで感謝の言葉を述べさせていただきます。まず、増渕雄一教授には多くの叱咤激励をいただき、目標を定めていただくことによって研究のペースを作り出していただきました。畝山多加志准教授には、プログラムの書き方や論文の読み方などの細かいところから、研究の方向性などの大きな部分まで幅広く面倒を見ていただきました。土肥侑也助教は、B4 輪講から日頃の雑談など、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。木田拓充特任助教は、短い期間とはなりましたが、席が隣であるということもあり様々な相談に乗っていただきました。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。

増渕研究室の先輩方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。また、日頃の食事での会話やボードゲームなどのおかげで楽しい 1 年を過ごすことができました。同期の 4 人は皆優秀で、常に負けないようにと切磋琢磨をすることでお互いに成長することができました。また、研究室外の友人もそれぞれのフィールドで奮闘する姿を見て大変刺激を受けました。皆様のおかげで、充実した一年を過ごすことができました。ありがとうございました。

増渕研究室に配属された 2020 年という一年はコロナウイルスによって我々の生活が一変した一年でした。その中でもこうして 1 年間健康に研究を行うことができたのは大学関係者や自治体関係者、医療従事者など様々な人々のおかげです。厚く御礼を申し上げます。

最後に名古屋での 4 年間の生活を支えていただいた祖父母と親戚の皆様方、頻繁に連絡をくださり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

研究に使用したプログラム

本研究で作成したプログラムは GitHub (https://github.com/keigo-enomoto/FiberSuspension) 上に掲載している。詳細は README.txt を参照いただきたい。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) にアップロードしている。興味があればこちらもご参照いただきたい。

MPS 法を用いたフリーウェアは、著者の知る限りでは有志で開発されている OpenMps[38] のみである。また、MPS 法の実装は比較的容易であり、実際のソースコードの作成方法については MPS 法の考案者である越塚らの著書が詳しい [33]。こちらの書籍では、具体的なソースコードが示してあり、並列化の方法についても具体例を用いて記述されているため、MPS 法のコーディングをする際には一読を薦める。

本研究では OpenMP を用いて 2 スレッドを用いた並列化を行った。OpenMP は既存のコードに指示文を追加することで、ノード内並列化を実装することができる。環境構築も、コンパイラに gcc を用いるのみであるので、比較的容易である。OpenMP の使用方法については、片桐ら [39] による著書が詳しい。

また、本研究では圧力の計算の際の行列計算は、フリー行列計算ライブラリである PETSc[35] を用いた。今回用いた ICCG 法のみならず、様々な逆行列の解法が実装されておりアルゴリズムのベンチマークとしても用いられる信頼性の高いライブラリである。ただし、OpenMP を用いた行列計算の並列化には今後も対応しないことが明言されているため、並列化によって性能を求めるためには MPI(Message Passing Interface) を用いた並列化が必要となる。

本研究のシミュレーションコードは C 言語を用いて作成した。C 言語の歴史は古く、長年数値計算の一線上で活躍してきたため、上述の PETSc のような先人が残した様々なライブラリを用いることができることが利点である。また、本研究のように多数の粒子間の相互作用を計算する場合には、C/C++ や Fortran などのコンパイラ言語を用いなければ、現実的な計算時間には収束しないと思われる。

本研究の解析には Python を用いた。Python は近年、科学技術分野でも人気を博しており、特に Jupyter Notebook[40] を用いると対話的な処理実行が可能であるため、データ解析の際には非常に重宝する。また、numpy[41] など科学技術計算に役立つライブラリが豊富であることも利点である。

付録 B

計算に用いたアルゴリズム

B.1　近傍粒子探索のアルゴリズム

MPS 法では、影響半径内の近傍粒子との相互作用を計算する。この近傍粒子との計算は粘性項と圧力勾配項の計算を行う際に生じ、その計算時間は N^2 に比例する。したがって、系の粒子数が増えるにつれて、その計算時間は爆発的に増大してしまうので、MPS 法では分子動力学法で用いられるようなセル-リンクリストを用いることで予め近傍粒子数を限定することで計算時間を $N^{1.5}$ のオーダーに落とすことが可能である [42]。したがって、本研究においてもセル–リンクリストを用いた。実際のアルゴリズムは Allen らによる著書 [43]、MPS 法での実装方法は越塚らによる著書 [33] を参照していただきたい。

B.2　線分の交差判定アルゴリズム

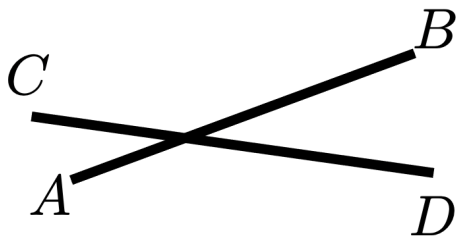

図 B.1　二つの線分の概念図

2 次元平面上において、二つの線分の交差判定は、外積を用いることで可能である。図 B.1 のように、二つの線分 AB と CD を考える。ただし、$\vec{AB}$ は点 A から B に向かうベクトルを表現することとする。このような二線分の交差を判定するには、「線分が交差している」という事象を定義する必要がある。今回は、この事象を以下のように定義する。

- 点 A と点 B が線分 CD を挟んで向かい側に位置している。
- 点 C と点 D が線分 AB を挟んで向かい側に位置している。

これは、外積を用いると、以下のように読み替えることができる。

- $\vec{CA} \times \vec{CD}$ と $\vec{CB} \times \vec{CD}$ の符号が逆である。
- $\vec{AC} \times \vec{AB}$ と $\vec{AD} \times \vec{AB}$ の符号が逆である。

つまり、$\left(\vec{CA} \times \vec{CD}\right)\left(\vec{CB} \times \vec{CD}\right)$ と $\left(\vec{CA} \times \vec{CD}\right)\left(\vec{CB} \times \vec{CD}\right)$ の符号がどちらも負であれば線分が交差しているというように判定することができる。したがって、点 A の x 座標を x_A、y 座標を y_A のようにすると、線分が交差する条件は以下の二つが同時に満たされる時である。

$$\begin{aligned}
&[(x_A - x_C)(y_D - y_C) - (y_A - y_C)(x_D - x_C)]\,[(x_B - x_C)(y_D - y_C) - (y_B - y_C)(x_D - x_C)] < 0 \\
&[(x_C - x_A)(y_B - y_A) - (y_C - y_A)(x_B - x_A)]\,[(x_D - x_A)(y_B - y_A) - (y_D - y_A)(x_B - x_A)] < 0
\end{aligned} \tag{B.1}$$

参考文献

[1] Takashi Ishikawa, Kazuaki Amaoka, Yuichi Masubuchi, Tetsuya Yamamoto, Atsuhiko Yamanaka, Masahiro Arai, and Jun Takahashi. Overview of automotive structural composites technology developments in Japan, 2018.

[2] 松谷浩明, 武田一朗, 橋本雅弘, 平野啓之, 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, Vol. 40, No. 5, pp. 227–237, 2014.

[3] R. R. Sundararajakumar and Donald L. Koch. Structure and properties of sheared fiber suspensions with mechanical contacts. *J. Non-newton. Fluid Mech.*, Vol. 73, No. 3, pp. 205–239, dec 1997.

[4] Shigeki Yashiro. Application of particle simulation methods to composite materials: a review. *Adv. Compos. Mater.*, Vol. 26, No. 1, pp. 1–22, jan 2017.

[5] 神部勉, 石井克哉. 流体力学. 裳華房, 1995.

[6] D. Liu, E. E. Keaveny, M. R. Maxey, and G. E. Karniadakis. Force-coupling method for flows with ellipsoidal particles. *J. Comput. Phys.*, Vol. 228, No. 10, pp. 3559–3581, jun 2009.

[7] Jingshu Wu and Cyrus K. Aidun. A numerical study of the effect of fibre stiffness on the rheology of sheared flexible fibre suspensions. *J. Fluid Mech.*, Vol. 662, pp. 123–133, nov 2010.

[8] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Vol. 181, No. 3, pp. 375–389, dec 1977.

[9] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nucl. Sci. Eng.*, Vol. 123, No. 3, pp. 421–434, 1996.

[10] Shigeki Yashiro, Hideaki Sasaki, and Yoshihisa Sakaida. Particle simulation for predicting fiber motion in injection molding of short-fiber-reinforced composites. In *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, Vol. 43, pp. 1754–1764. Elsevier, oct 2012.

[11] 越塚誠一. 粒子法. 丸善, 2005.

[12] 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.*, Vol. 20, No. 6, pp. 503–517, 2011.

[13] Satoru Yamamoto and Takaaki Matsuoka. A method for dynamic simulation of rigid and flexible fibers in a flow field. *J. Chem. Phys.*, Vol. 98, p. 2254, 1993.

[14] Mikio Yamanoi and João M. Maia. Analysis of rheological properties of fibre suspensions in a Newtonian fluid by direct fibre simulation. Part1: Rigid fibre suspensions. *J. Non-newton. Fluid Mech.*, Vol. 165, No. 19-20, pp. 1055–1063, oct 2010.

[15] Toshiki Sasayama and Masahide Inagaki. Simplified bead-chain model for direct fiber simulation

in viscous flow. *J. Non-newton. Fluid Mech.*, Vol. 250, pp. 52–58, dec 2017.

[16] 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*, Vol. 90, No. 6, p. 063011, dec 2014.

[17] 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.*, Vol. 4, No. 2, p. 77, jun 2020.

[18] 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.*, Vol. 74, pp. 560–570, 1978.

[19] Jason E. Butler and Braden Snook. Microstructural Dynamics and Rheology of Suspensions of Rigid Fibers, jan 2018.

[20] 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*, Vol. 102, No. 715, pp. 161–179, nov 1922.

[21] B. J. Trevelyan and S. G. Mason. Particle motions in sheared suspensions. I. Rotations. *J. Colloid Sci.*, Vol. 6, No. 4, pp. 354–367, aug 1951.

[22] Michael P. Petrich, Donald L. Koch, and Claude Cohen. Experimental determination of the stress-microstructure relationship in semi-concentrated fiber suspensions. *J. Non-newton. Fluid Mech.*, Vol. 95, No. 2-3, pp. 101–133, dec 2000.

[23] F. P. Bretherton. The motion of rigid particles in a shear flow at low Reynolds number. *J. Fluid Mech.*, Vol. 14, No. 2, pp. 284–304, 1962.

[24] Carl A. Stover, Donald L. Koch, and Claude Cohen. Observations of fibre orientation in simple shear flow of semi-dilute suspensions. *J. Fluid Mech.*, Vol. 238, No. 277, pp. 277–296, 1992.

[25] Yuichi Yamane, Yukio Kaneda, and Masao Dio. Numerical simulation of semi-dilute suspensions of rodlike particles in shear flow. *J. Non-newton. Fluid Mech.*, Vol. 54, No. C, pp. 405–421, 1994.

[26] Fransisco Folgar and Charles L. Tucker. ORIENTATION BEHAVIOR OF FIBERS IN CONCENTRATED SUSPENSIONS. *J. Reinf. Plast. Compos.*, Vol. 3, No. 2, pp. 98–119, apr 1984.

[27] 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).*, Vol. 31, No. 8, pp. 751–784, 1987.

[28] 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. Non-newton. Fluid Mech.*, Vol. 166, No. 9-10, pp. 457–468, may 2011.

[29] G. K. Batchelor. Slender-body theory for particles of arbitrary cross-section in Stokes flow. *J. Fluid Mech.*, Vol. 44, No. 3, pp. 419–440, nov 1970.

[30] Xijun Fan, N. Phan-Thien, and Rong Zheng. A direct simulation of fibre suspensions. *J. Non-newton. Fluid Mech.*, Vol. 74, No. 1-3, pp. 113–135, jan 1998.

[31] Satoru Yamamoto and Takaaki Matsuoka. Dynamic simulation of fiber suspensions in shear flow. *J. Chem. Phys.*, Vol. 102, No. 5, pp. 2254–2260, 1995.

[32] Satoru Yamamoto and Takaaki Matsuoka. Dynamic simulation of microstructure and rheology of fiber suspensions. *Polym. Eng. Sci.*, Vol. 36, No. 19, pp. 2396–2403, 1996.

[33] 越塚誠一, 柴田和也, 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.

[34] Abbas Khayyer and Hitoshi Gotoh. Enhancement of stability and accuracy of the moving particle semi-implicit method. *J. Comput. Phys.*, Vol. 230, No. 8, pp. 3093–3118, apr 2011.

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

[36] 佐藤明. HOW TO 分子シミュレーション -分子動力学法, モンテカルロ法, ブラウン動力学法, 散逸粒子動力学法-. 共立出版, 2004.

[37] Takuya Matsunaga, Nobuhiro Yuhashi, Kazuya Shibata, and Seiichi Koshizuka. A wall boundary treatment using analytical volume integrations in a particle method. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Vol. 121, No. 18, pp. 4101–4133, sep 2020.

[38] OpenMps. https://github.com/openmps/openmps.

[39] 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.

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

[41] 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, sep 2020.

[42] Seiichi Koshizuka, Atsushi Nobe, and Yoshiaki Oka. Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi ‐ implicit method. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Vol. 26, No. 7, pp. 751–769, 1998.

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