

流体粒子ダイナミクス法を用いた 複雑流体中のコロイドシミュレーション

東京大学 生産技術研究所 荒木 武昭, 田中 肇

コロイド分散系を扱う際、コロイド粒子に働く力として、直接的な粒子間相互作用の他に、分散媒を介した長距離に及ぶ流体力学的相互作用を考慮しなければならない。この流体相互作用は本質的に動的な多体的効果であるため、理論的取り扱いが極めて難しく、数値シミュレーションを用いた研究が広くなされてきた。しかしながら、計算機の著しい発達に加え、多くの研究者により様々な計算モデルや近似補正が提案されてはきたものの、コロイド系の動的挙動、特に流体力学的効果に関して未解明の問題が多く残されているのが現状である。従来の計算手法における最も大きな困難の一つは、粒子界面における固体—液体境界条件の扱いである。そこで、我々は固体であるコロイド粒子を高い粘性を持つ変形しない液体粒子として扱い、分散媒との粘性率比が無限大になった極限がコロイド分散系に対応するという考えにたち、「流体粒子ダイナミクス法—fluid particle dynamics (FPD) method—」を考案した。この手法は、流れ場は正方格子（またはスタックカート格子）上で計算し、粒子の運動は連続空間上で計算するという hybrid 方式をとっている。ある時刻のコロイド粒子の配置から、コロイドを有限の厚さの界面を持つ濃度場分布で記述することで、系全体を連続的な流体とみなす。非一様な粘性率を持つこの流体について、Navier-Stokes 方程式を解き流れ場をもとめ、個々の粒子に対し平均した速度場から、新たな粒子配置を計算することで系を時間発展させる。[1]

シミュレーション法としての拡張性の高さは、FPD 法の大きな特徴であると考えている。例えば、この手法では、粒子の重心運動だけでなく、回転運動も自動的に計算されるため、コロイド系のレオロジーや沈降現象などに関する数値シミュレーションを容易に行うことができる。また、FPD 法において連続体として表現した分散媒にイオン濃度や液晶配向場の自由度を新たに導入することによって、様々な複雑流体中のコロイド分散系のダイナミクスを調べることができる。本研究では、濃度を秩序変数として与えることにより、相分離する混合二成分流体の分散媒を考え、固体粒子を含む流体混合系における相分離とぬれの競合ダイナミクスを調べた。

図 1 は、固体粒子を含む流体混合系における相分離の時間発展の様子である。図 1(a) は粒子が動ける場合、(b) は動けない場合である。図において、白い球は粒子を表し、また分散媒の濃淡は濃度を表しており、濃淡の薄い相が粒子にぬれやすい。また、 t は相分離の特徴的な時間で規格化した時刻である。この結果は、実験で得られている相分離パターンを非常によく再現している。[2] 相分離が始まると粒子をぬれやすい相が覆い、それがつながりあっていくことで時間発展する。粒子が動く場合には (図 1(a))、構造の粗大化は粒子がない場合に比べ遅くはなるものの界面エネルギー

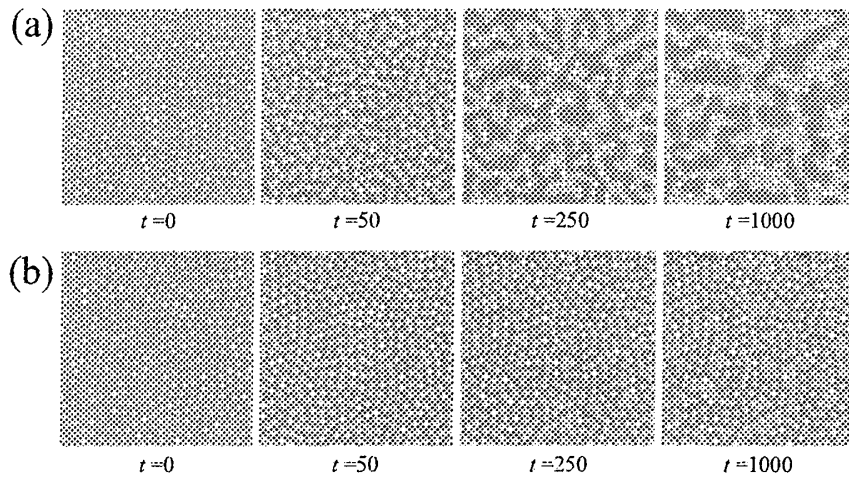


図 1: 固体粒子を含む流体混合系における相分離の時間発展の様子。(a) 粒子が動く場合 ($\zeta^{-1} = 0.2$), (b) 動かない場合 ($\zeta^{-1} = 0$)。 t は相分離の特徴的な時間で規格化した時刻。

ギーを減らすべく粗大化は起こり続ける。一方、動かない場合には (図 1(b)), 相分離構造は粒子に pinning され, 通常の流体相分離としては粗大化しなくなる。

図 2(a) は, 時刻 $t = 1000$ における相分離構造の特徴的長さ \bar{R} の粒子の易動度 ζ^{-1} 依存性であり, 粒子が動きやすいほど特徴的長さが大きくなることを示している。図 2(b) は, 同じ時刻 $t = 1000$ の相分離構造のオイラー標数 χ_E の ζ^{-1} 依存性である。動きにくい場合には, ぬれやすい相は不連結構造 (この場合 $\chi_E > 0$) となり, 反対に動きやすい場合には連結相 ($\chi_E < 0$) になる傾向があることが分かった。

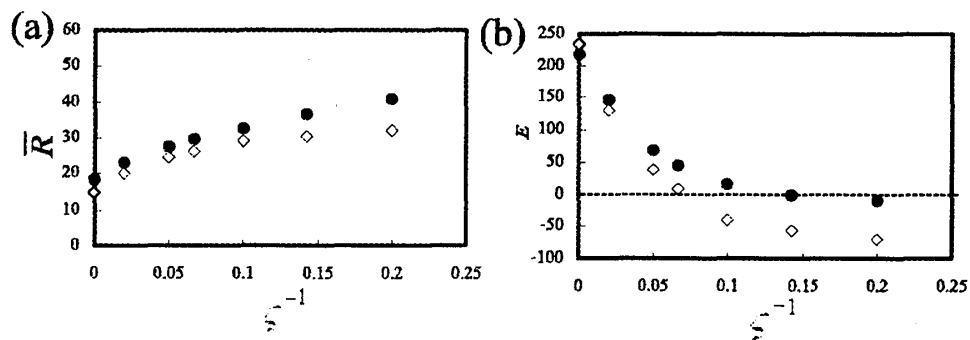


図 2: 時刻 $t = 1000$ における相分離構造の (a) 特徴的長さ \bar{R} と (b) オイラー標数 χ_E の易動度 ζ^{-1} 依存性。粒子の体積分率は, 9.6%(●), 21.7%(◇)

参考文献

- [1] H. Tanaka and T. Araki, Phys. Rev. Lett. **85** (2000), 85.
- [2] H. Tanaka, J. Phys.: Condens. Matter **13** (2001), 4637.