

講義ノート

「マイクロ分散相流れの基礎と応用」

(京都大学 集中講義 2006 年 7 月 25, 26, 27 日)

東京大学 工学系研究科 高木 周

(2007 年 2 月 19 日受理)

目次：

第 1 章 分散相流れと気泡流の多重スケール構造	2
1.1 はじめに	2
1.2 気泡の挙動が流動のマクロ構造に与える影響	3
1.3 界面活性剤が単一気泡の上昇速度に与える影響	5
1.4 気泡の抗力係数・揚力係数と界面活性剤の影響	10
1.5 分散相に働く種々の力について	12
1.6 ベンチュリ管を用いた微細気泡発生装置	15
第 2 章 マイクロ分散相のバイオ・医療応用	20
2.1 はじめに	20
2.2 マイクロバブルによる腫瘍焼灼	22
2.3 キャピテーション現象を利用した結石破碎	28
2.4 せん断流中における変形ベシクルの挙動	36
第 3 章 分散相流れの数値計算法	42
3.1 はじめに	42
3.2 自由表面流れの数値計算法の分類	42
3.3 気液界面に課される条件	44
3.4 固定矩形格子を用いた各種数値計算法	49
3.5 境界適合格子を用いた一般曲線座標系による方法	52
3.6 おわりに	57

付記： 本講義で紹介する研究内容の多くは、東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻 松本・高木研究室(<http://www.fel.t.u-tokyo.ac.jp/>)のメンバーとともに行われたものである。

1. 分散相流れと気泡流の多重スケール構造

1.1 はじめに

気相・液相・固相など異なる相が複雑に干渉し合いながら流動構造が決定される流れを混相流と呼ぶ。混相流では、層流の状態においても様々な時空間スケールの構造が流れの中に存在し、ミクロ・メゾ・マクロといった異なるスケール間の干渉が流動構造にとって重要となる多重スケール構造をなす。一口に混相流と呼んでも、様々なタイプの流れが存在し、それぞれの流れで多重スケール構造も異なるものとなるが、中でも、液体中に多数の気泡や液滴・粒子などの分散相を含む流れは分散系混相流と呼ばれ、多重スケール性が特に重要となる。分散系混相流は、流体機械を始め、化学反応器、熱交換器、エンジンの燃料噴射部、水処理のための曝気槽など、工学上重要となる様々な装置で見受けられる。特に最近では、マイクロ・ナノテクノロジーの進展に伴い、大きさがサブミリ以下のマイクロ分散相やナノ分散相に関連する事柄が増え、それらマイクロ分散相に対する基礎知識が重要となってきている。また、環境問題と関連して、水処理技術へのマイクロバブルの適用などが大きな注目を集めている。

水質浄化槽や化学反応器などにおいて特に重要となる微小上昇気泡群を含む流れにおいては、図 1.1 に示すように、個々の気泡の表面における界面活性剤の存在など分子スケールのミクロな現象から、流れ場全体のマクロな構造に到るまで、ミクロ・メゾ・マクロの様々なスケールの現象が複雑に干渉し合いながら流動構造が決定されている。例えば、微量の界面活性剤を含む水では、直径 1mm 以下の小さな気泡に働く抵抗は、球形気泡の値よりも剛体球の値にほぼ等しくなることが知られている。また、界面活性剤の存在する水中では気泡同士の合体が非常に起こりづらくなることも知られている。前者の現象は、気泡表面に吸着する界面活性剤分子により引き起こされるマランゴニ効果により説明できるが、これら微量の界面活性剤が上昇速度を大幅に減少させたり、気泡同士の合体を妨げたりすることにより、気泡流全体の挙動が大きく変わってくる。

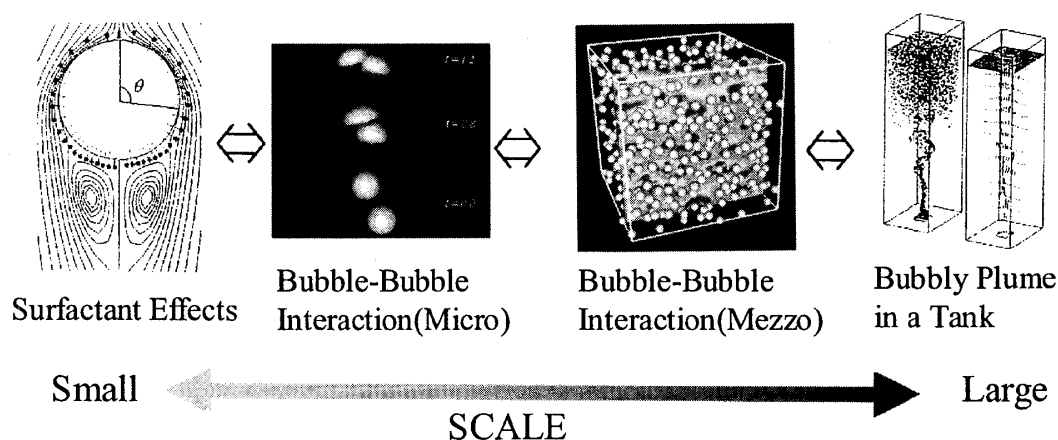


図 1.1 気泡流の多重スケール構造

これらの流れにおいては、個々の分散相の表面近傍における界面活性剤や電解質の存在など分子スケールのミクロな現象が、個々の気泡の挙動を大きく変化させ、結果として、水質浄化システムにおいて現れる気泡ブルームのようなマクロな流動構造にも大きな影響を与え、浄化性能を大きく変化させることになる。

赤血球の挙動に着目した血液の流れも典型的な分散系混相流であり、マイクロ分散相は医療分野でも種々の応用が考えられる。血液の流れを考えた場合、心臓や脳に関する研究では、血液全体を連続体とみなすのが一般的である。これに対し、毛細血管内を変形しながら移動する赤血球、血管造影剤用マイクロバブル、ドラッグデリバリーシステム (DDS) 用マイクロカプセルなどの輸送担体の挙動を予測するには、これら輸送担体を分散相とみなした分散系混相流としての扱いが重要となる。さらに、赤血球による酸素の輸送、DDS 用マイクロカプセルによる薬物の輸送に対しては、膜を介した分子レベルでの物質輸送まで考慮する必要がある。現象の全体像を捉えるには分子レベルのミクロ現象から連続体レベルのマクロ現象までを取り込んだマルチスケール解析を行う必要がある。

以上を踏まえて、次節以降では、気泡流のマルチスケール構造に関連した実験を紹介し、さらにこれらの現象に関連して重要となる因子の説明を行う。

1.2 気泡の挙動が流動のマクロ構造に与える影響

上記のように、微量の界面活性剤の存在が個々の気泡の運動を変化させ、結果として気泡流全体の挙動が大きく変化すると述べたが、ここではそのような例をチャンネル内上昇流中に関する実際の実験結果を用いて紹介し、現象を理解するために重要となる知識について説明する。

1.2.1 実験装置、実験条件

実験装置の概略図を図 1.2 に示す。チャンネルは高さが 2m、断面が 40mm (2H)×400mm (アスペクト比 10) の垂直矩形管である。主流方向を x 、壁面垂直方向を y 、スパン方向を z として座標系を設定し、単相時に完全発達乱流が得られる、導入部から 1600mm ($x/H=80$) 下流を測定領域とする。液相はポンプで駆動し、チャンネル内に上昇流を発生させる。また、コンプレッサーで加圧した空気を気泡発生装置から送り出すことで、気泡群をチャンネル内に一様に導入する。気泡発生装置は、内径 0.07mm、長さ 24mm のステンレス細管 474 本を用いて構成している。

液相には水道水、気相には空気を用いる。バルク流速 U_b とチャンネル幅 $2H$ で定義される液相バルクレイノルズ数 Re は、単相時に乱流の条件である 8200。平均ボイド率は気相流量を調節することにより変化させるが、すべての条件下で 1% 以下とする。ここでは、液相に添加する界面活性剤として、3-Pentanol と Triton X-100 を用いる。

1.2.2 実験結果

図 1.3 に気泡流の様子を示す。気相流量 Q_g を 1.4 l/min に保っている。平均ボイド率は約 0.6% であるが、マランゴニ効果や気泡径の違いにより気泡の上昇速度が変化するので各条件間で変動がある。(a) は界面活性剤を添加していない気泡流の画像である。このときの気泡径は 1mm から 4mm とばらつきが大きく、径の大きな気泡は変形を伴いながらジグザク運動や螺旋運動をしている様子がわかる。(b)(c) は界面活性剤としてそれぞれ 3-Pentanol と Triton X-100 を加えたときの様

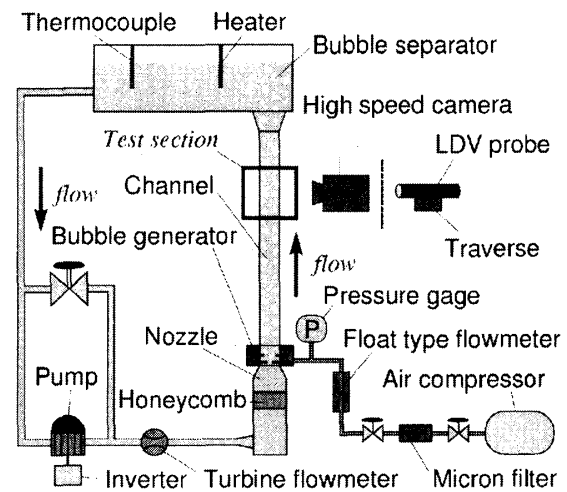


図 1.2 実験装置

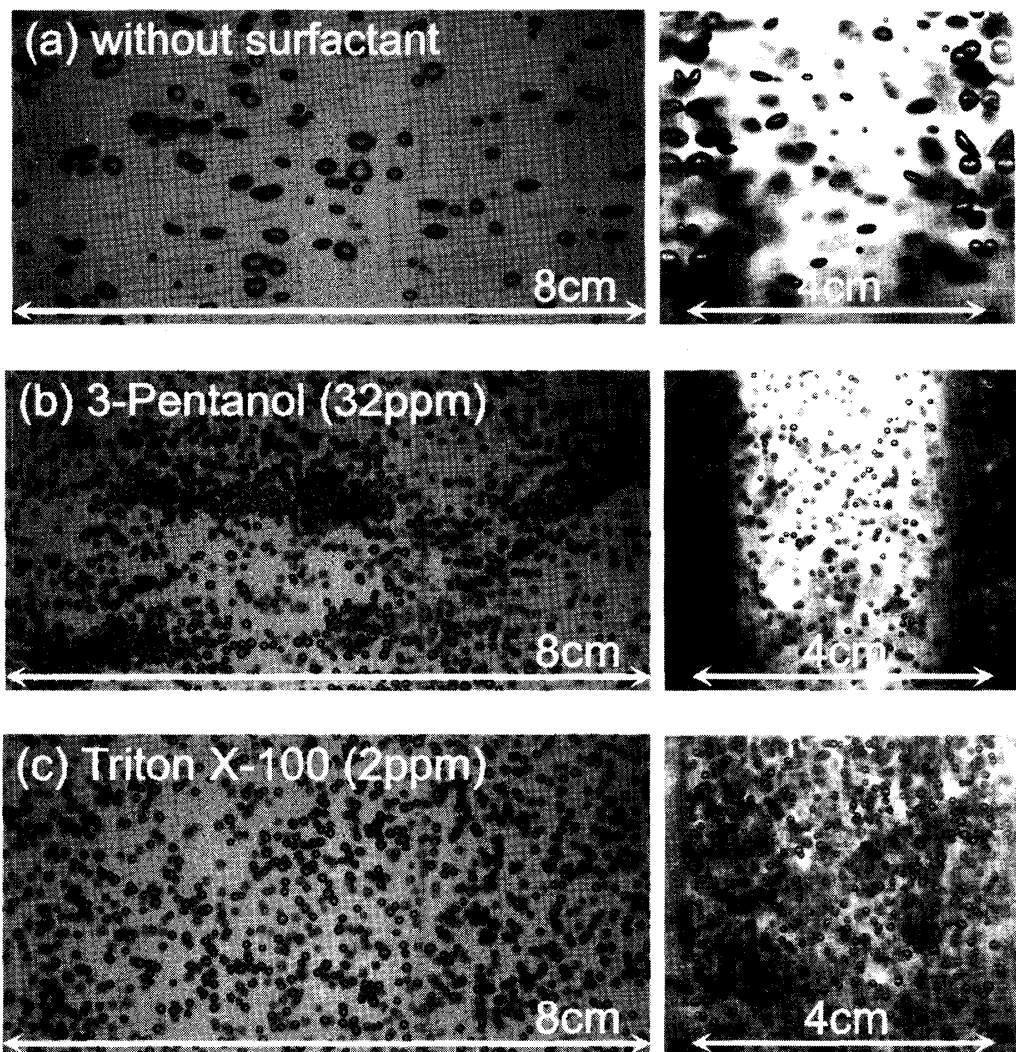


図 1.3 界面活性剤の種類(濃度)の違いが気泡流に与える影響

子である。界面活性剤溶液中では気泡同士の合体が抑制され、発生時の気泡径が保たれる。そのため、測定領域において平均気泡径が 1mm 程度の単分散の微小気泡群が観察される。ここで注目すべき点は、3-Pentanol を添加した際には正面から見ると((b) front view)、集積した気泡群が三日月型のクラスタを形成しているのに対して、Triton X-100 溶液中では壁面近傍における気泡群のクラスタ化現象が現れない((c) front view)。すなわち、気泡径分布がほぼ同じなのに、観測される大域的乱流構造が大きく異なる流れとなっている。さらに調べると、3-Pentanol の条件では、チャンネル側面から観察すると((b) side view)、気泡が壁面近傍に強く集積しているのがわかる。一方、Triton X-100 溶液中では気泡の壁面集積傾向は非常に弱く((c) side view)気泡がチャンネル断面でほぼ一様に分布しているのがわかる。気泡クラスタは、壁面から気泡半径程度離れた場所に拘束された気泡群が二次元的な配置の中で相互干渉しながら運動することで形成される。つまり気泡クラスタが形成される条件として、気泡が壁面の極近傍に存在し、かつ、壁面垂直方向の運動を制限される必要がある。Triton X-100 溶液中では気泡が壁面近傍に捕らえられないために、気泡クラスタを形成しないことになる。

では、なぜほとんど同じ気泡径の 2 つの条件で、3-pentanol 溶液では、気泡が壁面近傍に集積するのにに対して、Triton X-100 ではそのような傾向が現れないのか？ この現象を説明するには気泡運動に対するきちんとした知識が必要である。次節では、気泡運動に関する基礎知識の説明をする。

1.3 界面活性剤が単一気泡の上昇速度に与える影響

1.3.1 背景

水中の気泡は、水中に微量に存在する界面活性剤の影響によりその上昇速度が大きく減少することがよく知られている。この現象は、気泡表面に吸着した界面活性剤が、気泡の上昇運動にともない、気泡表面の上方部から下方に向かい掃き流されることにより、気泡表面に沿って界面活性剤の濃度分布が生じることによると考えられている。すなわち、界面活性剤の濃度が高くなる下方部では、表面張力が小さくなるため、表面張力の大きい上方に向かってせん断応力が発生することにより抗力が増加し、上昇速度の減少がもたらされる。界面活性剤の濃度差により表面張力の空間分布が生じ流れが誘起される効果は、濃度マランゴニ効果あるいは化学マランゴニ効果と呼ばれる。

界面活性剤による気泡の上昇速度低下のメカニズムを、このマランゴニ効果により最初に説明したのは、Frumkin & Levich⁽¹⁾である。その後、多くの理論解析や数値解析が行なわれてきた⁽²⁾が、その多くが、界面活性剤の濃度分布や液相内の速度分布をあらかじめ仮定して行なわれたものである。これに対し、Cuenot ら⁽³⁾は、気泡表面および液体中における活性剤の輸送方程式を運動方程式と連成させ、無次元数とマランゴニ効果および上昇速度の関係について、詳細に調べた。さらに Liao & McLaughlin⁽⁴⁾は、水中を変形しながら上昇していく気泡について数値計算を行い、界面での物質吸着の時間変化を詳細に調べている。

超純水を用いて気泡の挙動を詳細にしらべた研究としては、Duinveld らの一連の研究^{(5),(6)}がよく知られている。また、Zhang & Finch⁽⁷⁾は、実験的に終端速度に到達するまでの上昇距離について調べ、微量な界面活性剤を含む系では、界面への活性剤の吸着・脱離現象が非常にゆっくりしたプロセスで起きるため、気泡発生部から静かに離脱した気泡が終端速度に到達するまで数メートルの距離を要する場合もあることを示している。

ここでは、これらを背景に、界面活性剤として吸着・脱離の物性が異なる、ペンタノール(分子量小)と、TritonX-100 (分子量大)を含む水中を上昇する気泡に関して、著者らが行った実験および数値計算について説明する⁽⁸⁾。

1.3.2 実験手法

図 1.4 に実験装置の概略図を示す。水道水を 2 台の純水製造装置(ミリポア社製 Milli-RX 12 α , Milli-Q SP)で処理し、超純水(比抵抗 18.3 M Ω ·cm)を得た。この超純水を、ガラス製の円筒形の実験容器(直径 64.5 mm, 高さ 340 mm)に満たし、底部から窒素ガスの単一気泡を発生させて実験を行なった。発生させた気泡の挙動は、気泡発生部の上方約 250 mm にあるテストセクション側方から高速度カメラ(コダック社製 SR-500)を用いて撮影し、その画像をもとに気泡径と気泡上昇速度を評価した。

3 種類の界面活性剤 (1-ペンタノール, 3-ペンタノール, Triton X-100) のバルク濃度 C_0 を変化させ、上昇速度への影響を調べる。ペンタノールの濃度は、0.037~1.39 mol/m³(4~150 ppm)の範囲で変化させ、TritonX-100 は、 7.1×10^{-4} mol/m³(0.43 ppm)と 1.5×10^{-3} mol/m³(0.89 ppm) の 2 条件で実験を行なった。

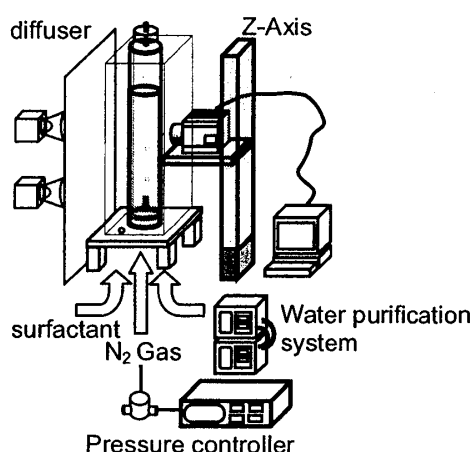


図 1.4 静止流体中を上昇する気泡の実験

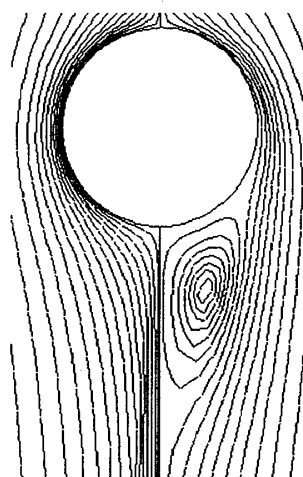


図 1.5 気泡周囲の流線
(左 : 活性剤なし, 右 : 活性剤あり)

1.3.3 数値計算手法

支配方程式は Cuenot ら⁽³⁾と同様のものを用いる。連続の式，運動量保存式(ナビエ・ストークス方程式)，界面活性剤のバルク濃度 C と表面濃度 Γ の2つの輸送方程式，界面活性剤の表面への吸着・脱離の関係式，表面張力と表面濃度の関係式などをすべて連立して数値的に解く。

気泡周囲の液相に関する支配方程式は，連続の式，運動量保存式，界面活性剤のバルク濃度 C の輸送方程式からなり，それぞれ以下のように与えられる。

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

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_l} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1-2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (1-3)$$

座標系には軸対称直交曲線座標系を用い，速度成分として，反変速度物理成分を用いる⁹⁾。また，計算アルゴリズムには SIMPLER 法を用いる。この際，空間微分は2次精度中心差分によってもとめる。

本研究では，気泡は球形を保つと仮定し，気泡表面に吸着した界面活性剤の影響は，表面に沿った活性剤の濃度分布よりもたらされるマランゴニ効果として取り入れる。すなわち，活性剤の濃度が濃くなる気泡後方部では表面張力が下がり，表面張力 σ の大きな前方部から界面接線方向 $\mathbf{t}$ に力が働く。このときの気泡表面に沿ったせん断応力 τ は表面張力から

$$\tau = \mathbf{t} \cdot \nabla_s \sigma \quad (1-4)$$

と求められ，これが液体側の接線方向粘性応力と釣り合うことになる。添え字 s は，気泡表面に沿う方向に微分することを表す。また σ は Frumkin の吸着式から， R_G : 気体定数， T : 温度， $\Gamma_{\max}$: 飽和表面濃度として，次式で与える。

$$\sigma = \sigma_0 + R_G T \Gamma_{\max} \ln \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_{\max}} \right) \quad (1-5)$$

界面活性剤の濃度についての境界条件は，対称軸上でバルク濃度 C および表面濃度 Γ の勾配が0，無限遠でバルク濃度が一定である。また，気泡表面上においては，表面濃度の輸送方程式として以下の式を解く。

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla_s \cdot (u_s \Gamma) = D_s \nabla_s^2 \Gamma - D \nabla C_s \cdot \mathbf{n} \quad (1-6)$$

ここで， u_s は気泡表面での速度， $\mathbf{n}$ は気泡表面における法線ベクトルを表す。さらに，右辺第2項については，界面における吸着・脱離とバルク濃度との物質輸送の関係を次式で与える。

$$-D \nabla C_s \cdot \mathbf{n} = k_a \{ C_s (\Gamma_{\max} - \Gamma) - \beta \Gamma \} \quad (1-7)$$

ここで， C_s は表面近傍のバルク濃度である。

計算条件として，球形気泡を仮定し，界面活性剤として，実験で用いた 1-ペンタノールと

Triton X-100 を考える．1-ペンタノール，Triton X-100 の物性値を表 1.1 に示す．計算には，高木ら⁹⁾と同様，半径方向に放射状に広がった球座標型の境界適合格子を用いる．計算領域は気泡径の 25 倍と十分大きくし，本計算を行った条件では，計算領域の大きさの違いによる誤差は 1 %以内に収まることを確認した．

表 1.1 1-ペンタノールと Triton X-100 の物性値

	k_a [m ³ /(mol·s)]	β [mol/m ³]	Γ_{max} [mol/m ²]
1-pentanol	5.08	21.7	5.9×10^{-6}
Triton X-100	50	6.6×10^{-4}	2.9×10^{-6}

1.3.4 結果および説明

図 1.5 に，界面活性剤の影響のない場合の上昇気泡周りの速度場と，界面活性剤の影響を受け剛体球とほぼ等しい終端速度へ到達したときの速度場の比較(数値計算結果)を示す．両者でレイノルズ数が等しいが，右側は活性剤の影響により流動場が大幅に変化し，剥離渦が形成されているのがわかる．ちなみに，このときの抗力係数は剛体球とほぼ等しくなるが，剥離域の大きさは活性剤溶液中の気泡の方が大きくなる．これは，気泡の前方部ではマランゴニ効果の影響が少なく，気泡表面で滑り速度を有しているため，剥離点でも接線方向の速度をもって剥がれるためである．抗力がほとんど一致しているにも関わらず，剥離域の大きさが異なるのは興味深い．

1-ペンタノール溶液中を上昇する気泡に関して，3 種類の濃度に対して抗力係数を測定し，数値計算と比較した結果を図 1.6 に示す．気泡径の違いにより，同じ濃度でも異なるレイノルズ数になっている．数値計算の条件は，実験より見積もられた気泡径，終端速度および界面活性剤濃度を用いて与えている．各点は，実験値(凡例：□, ○, △)と，計算結果(凡例：*, ×, +)である．実験結果の誤差は抗力係数について約±5 %，レイノルズ数について約±3 %である．比較のため，球形のクリーンバブルのときの Mei の抗力係数式¹⁰⁾と，剛体球に対する Mei の抗力係数式¹¹⁾をそれぞれ実線と破線で示した．不純物中の気泡は，通常，表面ですべり速度なしの境界条件が課される剛体球と，ほぼ同じ抗力係数を持つことが知られているが，本実験ではクリーンバブルから剛体球への遷移域が精度良く計測されている．このようなクリーンバブルと剛体球の抗力の間領域においても実験結果と計算結果が良い一致を示しているのは非常に興味深い．これは，本研究で用いた吸着・脱離モデルおよび物性値が 1-ペンタノールに対して妥当であったためであると考えられる．図 1.7 は，3 種類の界面活性剤(1-, 3-ペンタノール, Triton X-100)について，それぞれ 2 種類の濃度で気泡の上昇速度を測定し，抗力係数とレイノルズ数の関係を調べたものである．ペンタノールの場合， 10^{-2} mol/m³ 程度では，上昇速度の減少はほとんど見られないが，Triton X-100 の場合には， 10^{-3} mol/m³ 程度の濃度で既に，活性剤の影響により剛体球の抗力状態に達している．

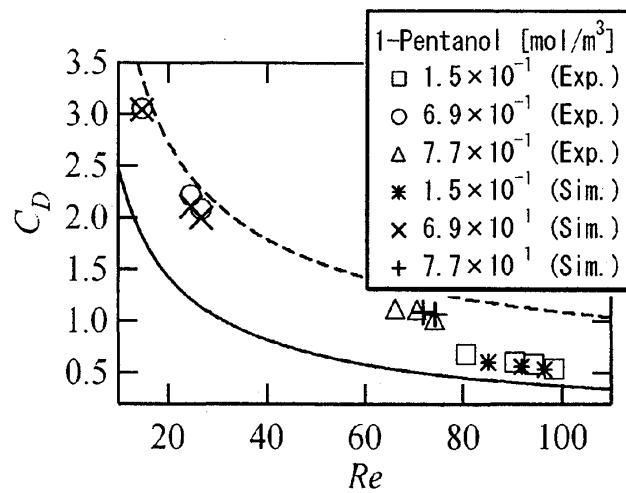


図 1.6 1-pentanol の実験と数値計算の比較 (抗力係数: $C_D \equiv \frac{F_{drag}}{\frac{1}{2}\rho U^2 \pi a^2}$)

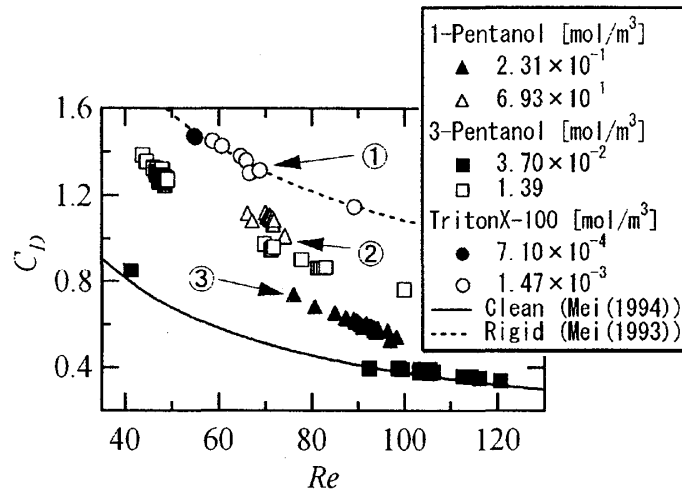


図 1.7 異なる種類・濃度の界面活性剤に対する抗力係数の比較
(1-pentanol について)

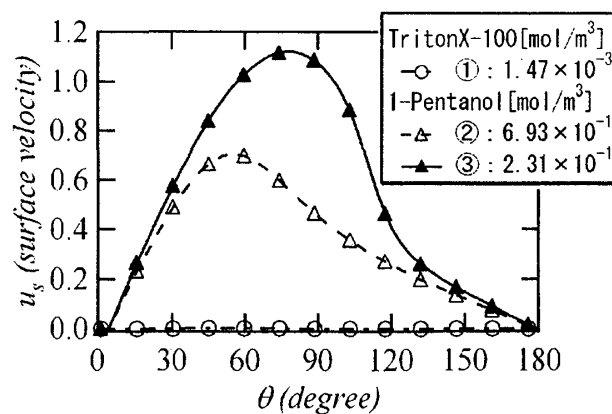


図 1.8 気泡表面の速度分布 (①, ②, ③は図 1.7 の条件に対応)

これはペンタノールと TritonX-100 の吸着・脱離の特性の違いによる。Triton X-100 は、1-ペンタノールに比べ吸着係数 k_a は約 10 倍大きい³⁾が、脱離係数 β は約 1/30000 と非常に小さな値をとる。すなわち、Triton X-100 の方が、吸着しやすく脱離しにくい特性をもち、気泡前面で吸着したものが、気泡後部で脱離しにくい⁴⁾ため、気泡表面にそって大きな濃度分布を持つことになる。そのため、バルク濃度の低い状態においても、Triton X-100 の場合には気泡の上昇速度を大幅に下げる効果をもつ。

図 1.8 は、図 1.7 のグラフ中、矢印で示した 3 つの条件①,②,③のもとで数値計算を行った結果である。図より、Triton X-100 は、わずか $1.47 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$ の濃度でも、界面が滑り速度なしの剛体球と同じような状態になっており、1-ペンタノールとは界面の速度分布が大きく異なっているのがわかる。この図より、図 1.7 において①の条件で抗力係数が剛体球と等しくなっているのが理解できる。1-ペンタノールに関しては、濃度の濃い②の条件の方が界面での滑り速度が減少しており、それに対応して抗力係数も、より剛体球寄りの値をとっており、数値計算結果が界面で起きている現象を再現していると考えられる。表面での速度分布を実験的に計測するのは著しく困難なため、このように上昇速度に関して実験と数値計算で良好な一致を確認した後に、界面の速度分布、濃度分布など界面で起きている現象について数値計算結果を用いて調べるのは、数値計算結果の大変有効な利用法である。

1.4 気泡の抗力係数・揚力係数と界面活性剤の影響

チャンネルの実験では水道水を使用しているため、マランゴニ効果に対する 3-Pentanol や Triton X-100 以外の影響を評価する必要がある。そこで、静止流体中における単一気泡の上昇実験を行い、水道水を基準とした溶液中での抗力係数を測定した。抗力係数は気泡の表面速度と相関があり、マランゴニ効果による気泡表面の境界条件の変化を定性的に表しているものと考えることができる。図 1.9 に結果を示す。水道水中での抗力係数(□)は、超純水中のもの(○)と比較して僅かに増加する。3-Pentanol 溶液中では、濃度を増加すると剛体球の抗力係数に近づいていき、Triton X-100 溶液中での気泡の抗力係数(□)は剛体球のものとはほぼ等しくなる。

抗力係数の測定から、水道水中においても 3-Pentanol と Triton X-100 ではマランゴニ効果の影響が異なり、気泡表面でのせん断応力に違いが生じる。すなわち、3-Pentanol 溶液(32ppm)中では気泡表面にいくらかのせん断力が生じるものの、表面速度は持つことになる。一方、Triton X-100 溶液(2ppm)中では気泡の表面速度はすべての領域でほぼ 0 になる。つまり、3-Pentanol 溶液(32ppm)中の気泡は free-slip と no-slip の間の中間的な境界条件を有しているのに対し、Triton X-100 溶液(2ppm)中では no-slip である剛体粒子とほぼ同様の境界条件になっていると考えられる。

では、この現象が壁面方向への移動に対してどのような影響を与えるのか。これに対しては、平均せん断により気泡に与えられる揚力により説明できる。球体が一様せん断場から受ける揚力につ

いての最近の研究^{(14)~(17)}から、クリーンバブル(free-slip 気泡)と剛体粒子(no-slip 気泡)とでは大きな違いがあることが示されている(図 1.10)。本実験での条件と一致する気泡レイノルズ数 Re_b が 100-250 程度するとき(1)の範囲)、クリーンバブルに働く揚力は剛体粒子のそれよりも 10 倍以上大きくなる。したがって、本実験の場合、3-Pentanol 溶液(32ppm)中の気泡と Triton X-100 溶液(2ppm)中の気泡では、前者の方が周囲のせん断から大きな揚力を受けており、その結果として壁面への集積傾向が顕著に現れていると考えることができる。ここで示した例では、表面活性剤はまず気泡同士の合体を抑制し、単分散の気泡径を持つ気泡流を作り出す。さらに表面活性剤の濃度と種類に依存して、マランゴニ効果により気泡表面の速度分布に違いが現れ、それにより気泡の壁面への集積挙動に大きな違いが現れる。結果として、壁面近傍の大規模な乱流構造が、表面活性剤の濃度と種類に依存して大きく異なるものとなる。

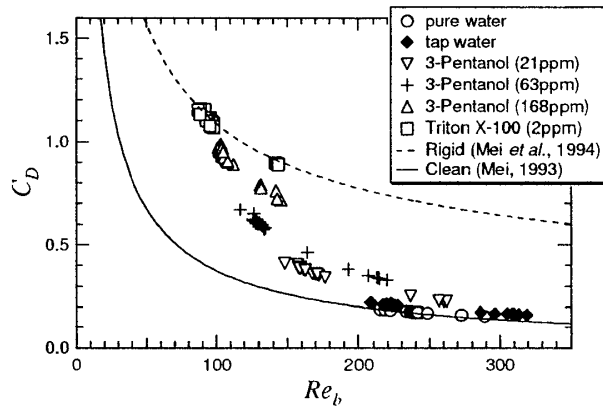


図 1.9 水道水に界面活性剤を加えた際の活性剤濃度と抗力係数 C_D の関係

$$\left(\text{抗力係数: } C_D \equiv \frac{F_{\text{drag}}}{\frac{1}{2} \rho U^2 \pi a^2} \right)$$

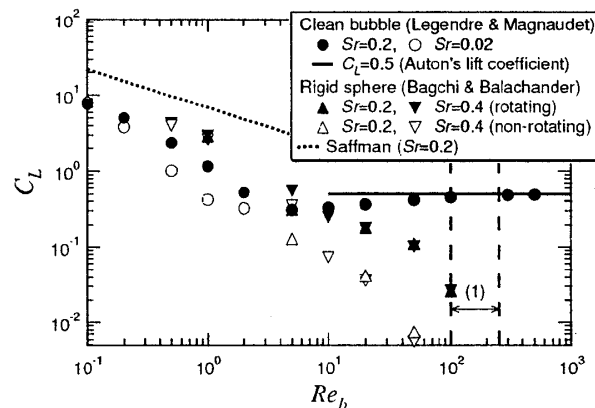


図 1.10 揚力係数 (C_L) の気泡レイノルズ数 (Re_b) 依存性 (揚力係数: $C_L \equiv \frac{F_{\text{Lift}}}{\frac{4}{3} \pi a^3 \rho |\mathbf{U} \times \boldsymbol{\Omega}|}$)

1.5 分散相に働く種々の力について

1.5.1 ストークス流れとマイクロ分散相

マイクロ分散相のサイズが十分小さく、またその並進速度が十分小さい場合について考える。このようなマイクロ流れでは、水中の不純物分子や電場の影響により流れ場が古典的な流体力学の知識だけではうまく予測できない場合もある。しかし、その一方で、粘性の影響がより支配的となり、流れ場が線形のストークス方程式で精度良く近似できる場合も多い。ここでは、ストークス流れの近似のもと、表面活性剤などの影響が無視できるきれいな水中における気泡の挙動について、粒子の場合との比較を行いながら簡単に説明する。

慣性の影響が無視できる定常ストークス方程式は、次式で表わされる

$$\nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1-8)$$

一様流中の球形気泡（粒子）のように軸対称の場合には、

$$v_r = \frac{-1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad v_\theta = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (1-9)$$

で与えられる Stokes の流れ関数 ψ を用いると、

$$E^4 \psi = 0 \quad \left(\text{ただし, } E^4 = \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right\}^2 \right) \quad (1-10)$$

を得る。この式は、Stokes の流れ関数に対する 4 階の線形微分方程式となっている。この式は球座標表記で与えられているため、球表面での境界条件を与えれば解を得ることができる。

ここでは、単純せん断流中の球形の粒子や気泡の問題のように 3 次元の場合にも有効な表現として、Lamb の一般解を示しておく。Lamb の一般解は、球座標系で示されたラプラス方程式の基本解である球面調和関数を用いて、以下の式で与えられる⁽⁷⁾。

$$\mathbf{u} = \sum_{n=1} \left\{ \frac{(n+3)r^2 \nabla p_{G_{nm}}}{2\mu(n+1)(2n+3)} - \frac{n \mathbf{x} p_{G_{nm}}}{\mu(n+1)(2n+3)} - \frac{(n-2)r^2 \nabla p_{D_{nm}}}{2\mu n(2n-1)} + \frac{(n+1) \mathbf{x} p_{D_{nm}}}{\mu n(2n-1)} + \nabla \Phi_{nm} + \nabla \times (\chi_{nm} \mathbf{x}) \right\} \quad (1-11)$$

$$\text{ここで, } p_{G_{nm}} = A_{nm}^* r^n y_{nm} + \tilde{A}_{nm}^* r^n \tilde{y}_{nm}, \quad p_{D_{nm}} = \frac{A_{nm}}{r^{n+1}} y_{nm} + \frac{\tilde{A}_{nm}}{r^{n+1}} \tilde{y}_{nm}$$

$$\Phi_{nm} = \left(\frac{B_{nm}}{r^{n+1}} + B_{nm}^* r^n \right) y_{nm} + \left(\frac{\tilde{B}_{nm}}{r^{n+1}} + \tilde{B}_{nm}^* r^n \right) \tilde{y}_{nm}, \quad \chi_{nm} = \left(\frac{C_{nm}}{r^{n+1}} + C_{nm}^* r^n \right) y_{nm} + \left(\frac{\tilde{C}_{nm}}{r^{n+1}} + \tilde{C}_{nm}^* r^n \right) \tilde{y}_{nm} \quad (1-12)$$

であり 球面調和関数 y_{nm} は、ルジャンドル多項式 $P_n(\cos \theta)$ を用いて、次式で与えられる。

$$y_{nm} = P_{nm}(\cos \theta) \cos m\phi, \quad \tilde{y}_{nm} = P_{nm}(\cos \theta) \sin m\phi \quad (1-13)$$

例えば、無限遠で {(一様流)+(単純せん断)} $U_\infty = U_0 + \alpha y$ の速度分布を持つ場合には、

$$B_{10}^* = U_0, \quad B_{21}^* = -\frac{1}{6}\alpha, \quad \tilde{C}_{11}^* = \frac{1}{2}\alpha \quad (\text{その他の係数は0}) \quad (1-14)$$

で与えられ、半径 a の気泡表面でせん断応力 0 の条件を満たすように解をもとめると、

$$A_{10} = -\mu a U_0, \quad A_{21} = \frac{2}{3} \mu a^3 \alpha, \quad , \quad (\text{その他の係数は0}) \quad (1-15)$$

となる。さらにこの係数で与えられる速度分布および圧力分布を用いて球形気泡に働く抗力を計算すると、

$$F_D = 4\pi\mu a U_0, \quad F_L = 0 \quad (1-16)$$

$$\text{すなわち, 抗力係数} \quad C_D = \frac{F_D}{\frac{1}{2} \rho U_0^2 \pi a^2} = \frac{16}{Re} \quad \left(Re = \frac{2a\rho U_0}{\mu} \right),$$

$$\text{揚力係数} \quad C_L = 0 \quad (1-17)$$

を得る。これに対して、表面でノンスリップの境界条件が与えられる剛体球では、

$$\text{抗力係数} \quad C_D = \frac{24}{Re}, \quad \text{揚力係数,} \quad C_L = 0 \quad (1-18)$$

となり、剛体球の方が気泡より抗力が 1.5 倍大きくなるのがわかる。また、気泡・粒子いずれの場合も、せん断による横方向の揚力が働かないのがわかる。より一般の液滴に対しても球形の仮定のもとでは、粘性のみで支配されたストークス流れではせん断流中で揚力が働かないという重要な性質を示す。すなわち、球形の物体がせん断により横方向に移動するためには低 Re 数においても慣性の影響を取り入れることが重要であり、Oseen タイプの近似を必要とする。

次に Stokes 流れの近似が妥当と考えられる条件について考えてみる。定常状態では、抗力と浮力が釣り合うため、終端速度を U とすると、

$$4\pi\mu a U = \frac{4}{3} \pi a^3 \rho g, \quad \text{すなわち,} \quad U = \frac{a^2 \rho g}{3\mu} \quad \text{となり,} \quad Re = \frac{2a\rho U}{\mu} = \frac{2a^3 \rho^2 g}{3\mu^2} \quad (1-19)$$

となる。水の物性 ($\mu = 10^{-3} (\text{Kg/ms}), \rho = 10^3 (\text{kg/m}^3)$) を用い、 $g = 9.8 (\text{m/s}^2)$ とし評価すると、気泡半径 $a = 100 \mu\text{m}$ のとき 気泡レイノルズ数 $Re \approx 6.5$, $a = 10 \mu\text{m}$ のとき $Re \approx 0.0065$ となる。細い針の先端などから気泡を出す場合には、微細加工により非常に細い針を作製しても、生成される気泡の径は通常、百ミクロン以上となるので、これらの場合には有限な Reynolds 数の効果を考慮する必要があるのがわかる。

ところで、静止流体中を上昇する気泡の変形に関しては、粘性のみで支配された液体中を上昇する気泡は、表面張力の有無によらず球形を保ち(Taylor & Acrivos⁽⁸⁾)、変形を引き起こすには慣性の効果が必要である。変形の程度を表す重要な指標である Weber 数(We)は、 $a = 100 \mu\text{m}$ のとき、

$$We = \frac{2a\rho U^2}{\sigma} = \frac{2a^5 \rho^3 g^2}{9\mu^2 \sigma} \approx 0.003 \quad \text{となり, 慣性に比べ表面張力の影響が大きくなり, 実験的な観察によ}$$

っても気泡がほとんど変形せず球形を保つのが確認できる。

1.5.2 分散相に働く力のまとめ

通常、直径 1 mm 以下の気泡はほぼ球形を保つとしてよい。また、不純物を含む多く場合に、水中を上昇する微細気泡は剛体球のような振る舞いを示す。そこで、ここではマイクロバブルに働く力と関連して、球形の気泡や粒子に働く種々の力について簡潔にまとめておく。液体中を移動する気泡・粒子には、浮力、抗力以外に、(1)揚力、(2)付加質量力、(3)履歴力、(4)周囲流体の加速による力などを受ける。以下、これらの力と関連して、重要となる参考文献を挙げて、簡単な説明をつける。

(1) 揚力： 単純せん断流中の球形物体に働く揚力に関しては以下の論文が参考になる。

理論解析：Saffman¹⁵⁾(粒子，低 Re 数，速度勾配大)，McLaughlin¹⁶⁾(粒子，低 Re 数)，

Legendre & Magnaudet¹⁷⁾(気泡，低 Re 数)，Auton¹⁸⁾(気泡，高 Re 数)

数値解析：Kurose & Komori¹²⁾(粒子，回転固定)，Bagchi & Balachandar¹³⁾(粒子，回転自由)，

Legendre & Magnaudet¹⁴⁾(気泡)，

前述のように、直径 1mm 程度の気泡は、きれいな水中では、Auton の揚力を感じるが、活性剤溶液中では活性剤濃度の増加につれ剛体球のようになり、文献(12),(13)および本稿 1.4 節に説明されているように、揚力を受けなくなる。

(2) 付加質量力： 付加質量係数 β は、ポテンシャル流れおよびストークス流れの理論から球体の物体では $1/2$ ともとまる。数値計算により中間 Re 数における付加質量係数を評価した研究として、Magnaudet et al.¹⁹⁾、高木・松本²⁰⁾などがある。いずれの研究も、中間 Re 数において付加質量係数が $1/2$ とみなせることを示している。

(3) 履歴力： 履歴力は、気泡（粒子）の表面で生成される渦度が、液体中に拡散していく過程で働く力であり、時間に関する積分形式で与えられる。積分核が $K(t-\tau)=(t-\tau)^{-1/2}$ の関数形を持つときが、低 Re 数で粒子に働く Basset 力²¹⁾に相当する。気泡の場合には、Yang-Leal 力²²⁾となる。なお、高木・松本²⁰⁾は、数値計算により中間 Re 数では履歴力の影響が無視できることを示している。

(4) 周囲流体の加速による力： この力は、圧力勾配による力とも呼ばれるが、粘性流体中においてはこの表現は厳密ではない。厳密には、液相側の実質微分により記述される力であり、周囲流体が加速度運動していることにより、気泡（粒子）に慣性力として見かけの力が作用することに対応している。

(5) その他の力： 基本的には以上の力で運動の記述が可能であるが、壁の近傍に気泡が存在していたり、他の気泡が近くにいる場合には、これらの影響を外力として評価することがある。気泡に関しては、Takemura et al.⁽²²⁾(実験，壁近傍，低 Re 数)，Magnaudet, Takagi & Legendre⁽²³⁾(理論，壁近傍，低 Re 数)，Legendre et al.⁽²⁴⁾(計算，2 気泡，中間 Re 数)などがある。

ここでは、単一上昇気泡に働く種々の力および界面活性剤がもたらす影響を中心に説明を行った。これらの知識を十分に活用することにより、気泡の壁面への集積傾向などについて、つじつまの合う説明が可能となる。しかし、界面活性剤が合体を抑制するメカニズムや、壁面近傍に集積した気泡群により構成される気泡クラスターの大きさや流れ場への影響などについては未知な点が多い。今後は、現象の多重スケール性にさらに踏み込んだ議論が必要になると考えられる。

1.6 ベンチュリ管を用いた微細気泡発生装置

微細な気泡群は、水槽内での停留時間が長く、また比表面積が大きいことから、ガスの溶解や気泡表面への物質の吸着などに優れ、水質浄化槽や化学反応器などの性能向上において重要な役割を果たす。そのため、微細な気泡(マイクロバブル)を大量かつ安価に作り出す技術の開発が昨今、盛んに行なわれている。マイクロバブルの発生法には、細い針や多孔質体を用いる方法が考えられるが、これらの手法により 1mm 以下の微小気泡を発生しようとした際には、内径(孔径)が 100 μm 以下のノズルを用いなくてはならず、実用上、液体中の微粒子による目詰まりなどが深刻な問題となる。また、これらの手法では、発生気泡のボイド率を上げることが極めて困難となり、水質浄化システムへの適用を考えた際には微細気泡の発生方法として優れた手法とは言いがたい。一方、加圧した状態でガスを水に溶解させ、大気圧への減圧時において 10 μm 程度の微細な気泡を析出させる手法がある。この手法はできる限り小さな気泡を生成させるという用途には大変優れた手法である。しかし、加圧溶解の際にエネルギー消費が大きい、溶解させるための装置が比較的大きいなどの問題点を持っている。これらのことを踏まえ、著者らは比較的安易な方法で高ボイド率下においても微細な気泡を生成でき、かつメンテナンスの点からも優れたベンチュリ管を用いたマイクロバブル発生装置を用いて様々な実験を行っている。ここでは、この装置の説明と、生成されるマイクロバブルに対する界面活性剤の影響について説明する。

1.6.1 マイクロバブル発生装置とその生成メカニズムの解明

著者らが実験に用いているベンチュリ管を用いたマイクロバブル発生装置の形状および寸法を図 1.11 に示す。ベンチュリ管は内部観察が可能のようにアクリル製でできており、縮流部と拡大部から成る。のど部および流入・流出部の径は 3mm および 8mm となっており面積比は約 7.1 である。この装置の特徴は、流入部において液体とともに気体を流すところにある。ここでは、作動流体である水道水はポンプにより、空気はコンプレッサより絞り部直前に設置したステンレス細管を介して気泡の状態で流路に注入している。

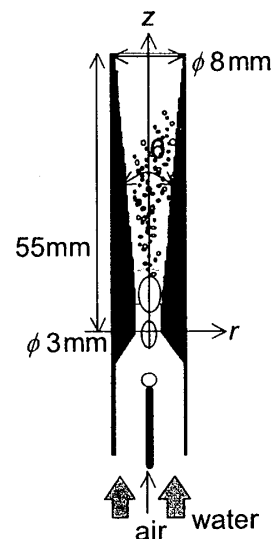


図 1.11 ベンチュリ管型
マイクロバブル発生装置

表 1.2 に実験条件を示す。液相流量の異なる 4 条件に対してそれぞれ、気体の体積流量比(ここではこの値をボイド率とする)が異なる 4%, 8%, 20% の 3 条件で実験を行った。

ノズル流出部より 50mm 下流 ($z \approx 105\text{mm}$) における気泡径の計測結果を図 1.12(a)に示す。図は、液相流量 $Q_w = 5.3 \text{ [l/min]}$ の条件でのボイド率と気泡径の確率密度関数 (pdf) の関係を示している。発生した気泡にストロボを照射し、投影像を光源の対面に設置した CCD カメラにより撮影した。輝度による二値化処理を行った後、面積等価直径 D を見積もった。また数千個の気泡径から Sauter 平均径 D_s を求めた。なお、気泡径計測の際、微細化直後の気泡径を得るため、合体を妨げる効果のある 3-Pentanol を約 50ppm 加えている。ボイド率を変化させても Sauter 平均及び pdf はほとんど変わらず、気泡径約 $100\mu\text{m}$ のものが最も多く生成されており、非常に小さな気泡が大量に生成されているのがわかる。さらにここで重要な点は、20%という高ボイド率においても気泡の微細化性能が落ちていないことである。

図 1.12(b)にボイド率 $\alpha=4\%$ における液相流量と気泡径の pdf の関係を示す。気泡径分布を比較するといずれの条件においても 100 から $200\mu\text{m}$ 径の気泡の出現頻度が最大となり、特に $Q_w \geq 5.3 \text{ l/min}$ の条件では $350\mu\text{m}$ 以下の径を有す気泡が全体の 90%以上を占める。これに対して液相流量 4.2 l/min の低流量条件ではザウター平均径も他の条件より $100 \sim 150\mu\text{m}$ 程度増加し $430\mu\text{m}$ となり、気泡径分布がなだらかとなる。これらの結果は低流量条件においては気泡微細化のメカニズムが異なり、効率よく微細化を起こすためには、ある流量を越えることが重要となることを示唆している。

表 1.2 実験条件

液相流量 $Q_w \text{ [l/min]}$	4.2,	5.3,	5.8,	6.7
(喉部の見かけ流速 $[\text{m/s}]$)	(9.9,	12.5,	13.7,	15.8)
ボイド率 $\alpha \text{ [%]}$	4, 8, 20			

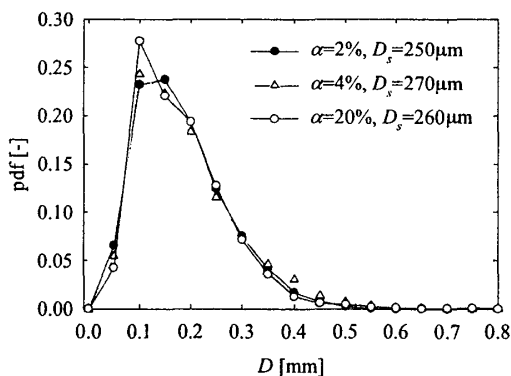
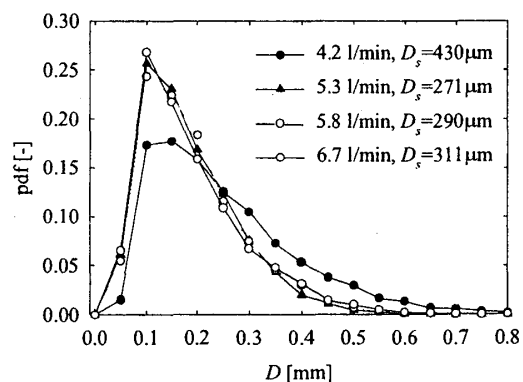
(a) ボイド率依存性 ($Q_w = 5.3 \text{ [l/min]}$)(b) 液相流量(流速)依存性 ($\alpha = 4\%$)

図 1.12 生成気泡径のパラメータ依存性

では、液相流量の違いが気泡の微細化にどのような影響を与えるのであろうか。

効率良く微細化が起きている条件下で、ベンチュリ管内部の気泡微細化の様子を高速カメラで撮影した様子を図 1.13 の右側に示す。のど部近傍(図中A領域)における減圧により気泡が膨張し、その後、気体の塊がノズル内を移動するにつれてB領域の部分で急激に崩壊して、一挙に気泡の微細化が起きている様子を表している。出口のC部では、すでに微細化した気泡がノズル出口から流出している様子がわかる。すなわち、この微細気泡の発生装置では、キャビテーション気泡の崩壊現象のように、気泡が崩壊するときの界面

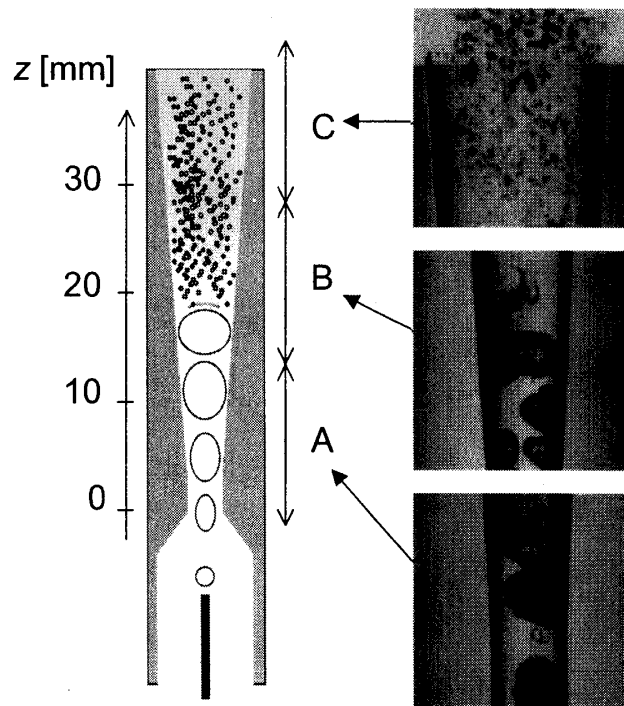
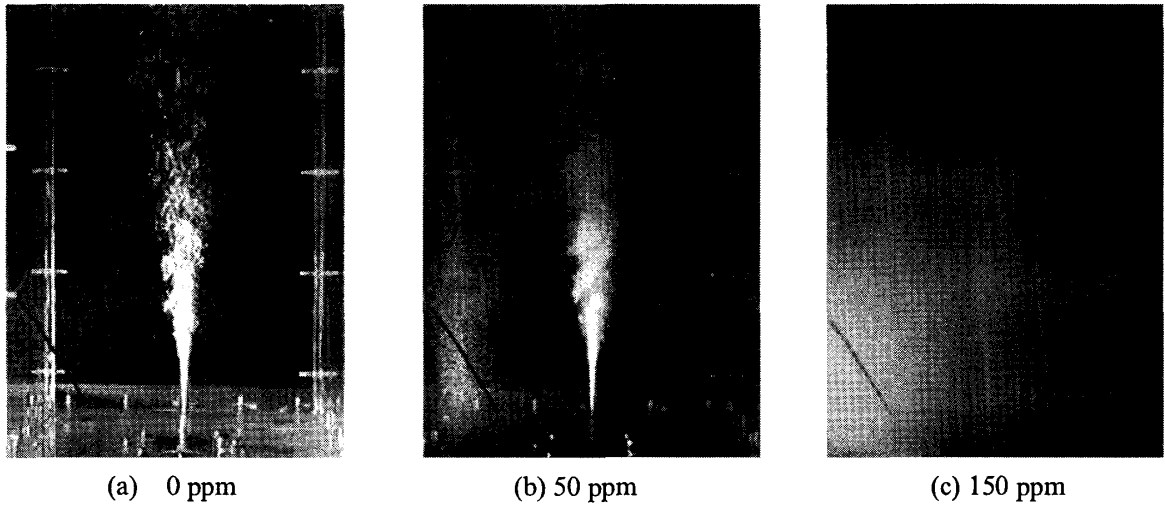


図 1.13 ベンチュリ管内の流動構造
(領域A: のど部近傍, B: 気泡崩壊部, C: 出口部)

不安定を利用して微細化を行っている。気泡の微細化性能を発揮するにはベンチュリ管ののど部での十分な圧力減少に伴う気泡の膨張と、その後激しい崩壊を導く急激な圧力回復が必要であり、そのためには入り口部で流速が十分速いことが要求されることになる。気泡流の音速は、数十 m/s にまで低下することが可能となるため、絞り部における平均流速が十分大きい場合には、基本的な流れ場の構造は、気泡流としての超音速流れ(ラバールノズル流れ)として解釈することができる。

最後に気泡の微細化に対する界面活性剤の影響について示す。図 1.14 に界面活性剤(3-pentanol)の濃度の違いにより生成される気泡の様子の違いを写真で示す。前述の気泡径分布などの結果は、(b)の pentanol 濃度が 50ppm の条件に対応し、このとき気泡径のピークは 100 μ m 程度である。これに対し、(c)の 150ppm のときには、気泡の微細化がさらに進み数十ミクロン程度の微細な気泡でタンクが満たされ、ミルク状の気泡流となる。このようにマイクロバブル発生装置においても、気泡の微細化に対して界面活性剤は大きな影響を及ぼすことがわかる。現状の知識からは、界面活性剤が入ることにより気泡の合体が抑制され、高濃度の条件ほどベンチュリ管内で気泡が生成された状態の気泡径分布に近いと考えているが、これについても確かな証拠はない。



(a) 0 ppm (b) 50 ppm (c) 150 ppm
図 1.14 濃度の異なる 3-ペンタノール水溶液中で生成されるマイクロバブル
($Q=7.5$ l/min, $\alpha=8\%$)

1 章の参考文献

- (1) A.Frumkin, and V.Levich, *Zhur. Fiz. Khim*, **21** (1947), 1183.
- (2) J.Magnaudet, and I.Eames, *Annual Review of Fluid Mechanics*, **32**(2000), 659.
- (3) B.Cuenot., Magnaudet, J. and Spennato, B., *J. Fluid Mech.*, **339** (1997), 25..
- (4) Y.Liao and J.B.McLaughlin, *J.Colloid Interface Sci.*, **224**(2000), 297.
- (5) P.C. Duineveld, *J. Fluid Mech.*, **292** (1995), 325.
- (6) R.B. Fdhila and P.C.Duineveld, *Phys. Fluids*, **8** (1996), 310.
- (7) Y. Zhang, and J. A. Finch, *J. Fluid Mech.*, **429** (2001), 63.
- (8) 高木周, 宇田東樹, 渡邊祐二, 松本洋一郎, 日本機械学会論文集 B 編, **69-686**(2003), 2192.
- (9) R. Mei, J. F. Klausner, and C. J. Lawrence, *Phys. Fluids*, **6**(1994), 418.
- (10) R. Mei, *Int. J. Multiphase Flow*, **19** (1993), 509.
- (11) P. G.. Saffman, *J. Fluid Mech.*, **22** (1965), 285.
- (12) J. McLaughlin, *J. Fluid Mech.*, **224** (1991), 261.
- (13) D.Legendre and J. Magnaudet, *Phys. Fluids*, **9** (1997), 3572.
- (14) T.R. Auton, *J. Fluid Mech.*, **183**(1987), 199.
- (15) R. Kurose and S. Komori, *J. Fluid Mech.*, **384** (1999), 183.
- (16) Legendre, D. and Magnaudet, J., *J. Fluid Mech.*, **368** (1998), 81.
- (17) P. Bagchi and S. Balachandar, *Phys. Fluids*, **14**(2002), 2719.
- (18) Magnaudet, J., Rivelo, R. and Fabre, J., *J. Fluid Mech.*, **284** (1995), 97.
- (19) 高木周, 松本洋一郎, 日本混相流学会誌, **10**(1996), 264.

- (20) A.B. Basset, "A Treatise on Hydrodynamics," Dover Pub.(1888)
- (21) S.M. Yang and L.G. Leal, *Phys. Fluids A* 3(1991), 1822.
- (22) F. Takemura, S. Takagi, J. Magnaudet and Y. Matsumoto, *J. Fluid Mech.*, **461**(2002), pp.277-300.
- (23) J. Magnaudet, S. Takagi, and D. Legendre, *J. Fluid Mech.*, **476** (2003), pp.115-157.
- (24) Legendre, D., Magnaudet, J. and Mougin, G., *J. Fluid Mech.*, **497** (2003), pp.133-166.

2. マイクロ分散相のバイオ・医療応用

2.1 はじめに

直径数ミクロン程度のマイクロバブルは、医療応用方面で大きな期待をされており、すでに医療現場で活用されている。血管内に直径5ミクロン以下のマイクロバブルを注入することにより、血管を見るための造影剤として使うことができる。すなわち、体外からあてられた超音波により、血管内にある気泡が血管中で振動して大きく超音波を反射する。気泡から返ってくるこの反射音を処理することにより、血管の位置を知ることができることになる。ところで、肝臓癌のような癌細胞の周りには毛細血管が非常に発達し、またその様相も通常のものと大きく異なることが知られている。そのため、癌細胞の近傍ではマイクロバブルが集積しやすく、反射音が正常な細胞とは異なるため、癌細胞の部位を検出することも可能となる。さらにこの癌細胞の部位に強力集束超音波を照射することにより癌細胞を焼灼し、癌の治療を行うことも可能である。すなわち、超音波との併用により、マイクロバブルを人体内部でエネルギー変換器として用いることも可能である。体外から与えられる集束超音波による音響エネルギーをマイクロバブルを介して熱エネルギーや力学的エネルギーに変換することにより、悪性腫瘍の焼灼や、結石の破碎を行い、人体を切開することなく非侵襲的な治療が可能となる⁽¹⁾。

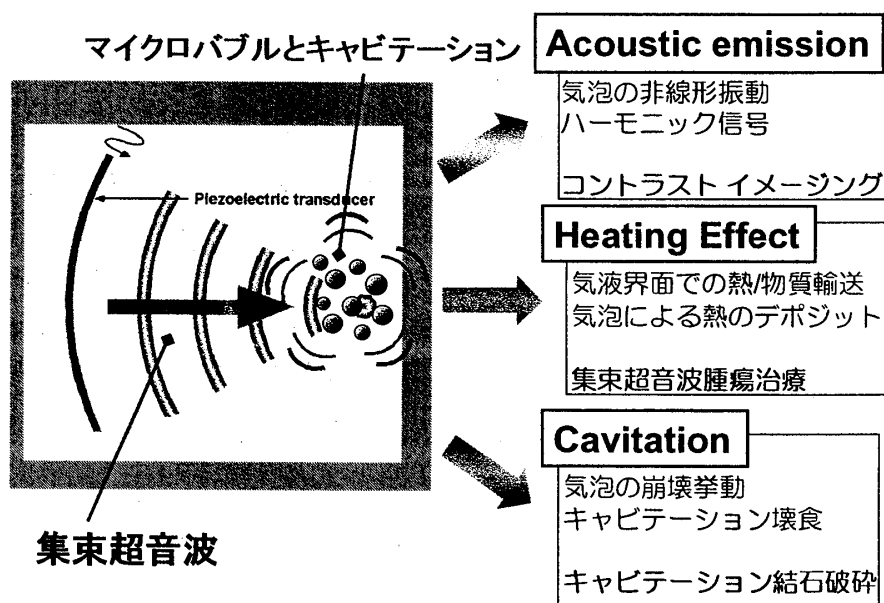


図 2.1 超音波とマイクロバブルの医療応用

図 2.1 に超音波とマイクロバブルを併用した医療応用技術について、簡単にまとめた図を示しておく。超音波を照射された気泡が体内で振動することにより、血管造影用のエコーを返す (Acoustic emission)、振動エネルギーが吸収されて熱に変わりその部位の温度を上昇させる

(Heating effect), 結石の表面でキャビテーション気泡を生成し結石を削る(Cavitation), などの効果が期待される. 2.2 節では, これらのうち Heating effect を利用して腫瘍を焼灼する技術について, 2.3 節では, 結石の表面でキャビテーション気泡を生成し結石を削る技術について説明する. また, 2.4 節では, 生体膜の基本要素である脂質二分子膜により構成されたベシクル(リポソーム)に関してせん断流中での変形挙動について説明する. リポソームは, 血液中にカプセルを注入し, 患部に直接薬剤を作用させる薬剤搬送システム(Drug Delivery System)における, 薬剤の輸送担体として大きな注目を集めている物質である.

2.2 マイクロバブルによる腫瘍焼灼

近年、強力集束超音波（HIFU：High Intensity Focused Ultrasound）による治療が注目を集めている。HIFU とは、強力超音波を体外から照射し、体内で焦点を結ぶことによって、焦点で熱を発生させて体組織を加熱凝固させる手法である。この手法は、腹部を切開するなど外科的手術の必要がないこと、超音波そのものは人体に無害であることなど、患部以外の部分への影響の少ない低侵襲な治療法として知られており、国外では前立腺癌や乳癌を中心に数多くの臨床例が報告されている⁽²⁾。

このように HIFU による治療には、低侵襲性の観点から大きなメリットがある一方で、例えば脳腫瘍のように頭蓋骨に覆われているものや、肝腫瘍のように体内深部に存在するものについては、超音波の反射・屈折・減衰といった影響が大きくなるため、HIFU を用いても、患部に対する出力不足・加熱位置の不正確さなどといった問題もある。頭蓋骨などの存在による加熱位置の不正確さは現状において多くの問題を伴っているが、加熱効率の向上に関しては、血管造影用のマイクロバブルを有効に用いることにより、大きな改善が可能となる。以下、血管造影用マイクロバブルと強力集束超音波を併用した腫瘍焼灼技術に関する説明をおこなう。

図 2.2 に超音波を照射された単一気泡が放出するエネルギーについて説明した図を示す。超音波の照射下で気泡は振動することにより音を放出し、この音が遠方場でエコーとして捕らえられた場合には血管造影に用いられる。一方、振動する気泡は、体積が小さくなった状態で気泡内部の温度上昇を伴い、熱伝導を介して周囲の組織へ熱を逃がす。また、振動する気泡表面には、法線方向に粘性応力が働き、この粘性応力が流体中にエネルギー散逸を引き起こし、最終的には熱へと変換される。これらの熱へと変換される成分は、その部位の温度を上昇させるため、腫瘍の焼灼へと利用することができる。

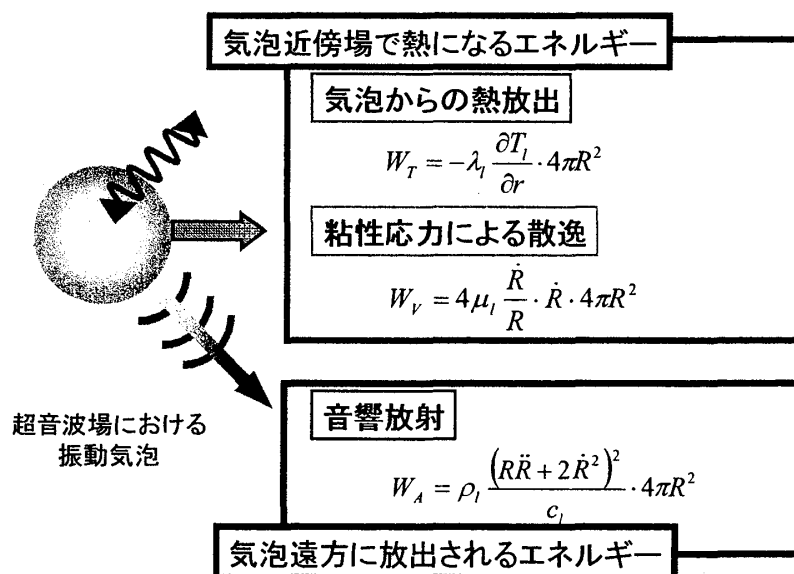


図 2.2 振動する単一気泡が放出するエネルギーの形態

以上の考察より、マイクロバブルの存在下で超音波を照射すると、超音波の音響エネルギーが熱エネルギーに変換され、温度上昇を引き起こす効果があるのが推測されるが、実際にどの程度の効果があるのか検討した結果について以下に示す。

図 2.3 にマイクロバブル存在下における集束超音波の照射実験に関する実験装置の概略図を示す。この装置において、波形生成機構で生成された正弦波形を PZT 素子で作られたピエゾトランスデューサに送信し、超音波を発信する。この PZT 素子が形成する超音波の伝播領域に、体組織と音響特性の近いポリアクリルアミドゲルを置く。さらに、超音波の焦点領域においては、ゲル内に空間を設け、その中にマイクロバブル造影剤 (Levovist®: 平均直径: $1.3\ \mu\text{m}$, 内部気体: 空気) を含んだ水を注入して、超音波を照射する。このように構成された装置において、超音波の照射の際の気泡からの発熱作用を確認するために、熱電対による焦点での温度の測定、および感温液晶シートによる温度分布の可視化を行った。以下、実験結果を示す。

図 2.4 は、造影剤の量を変えながら、超音波を 60 秒間照射した際における焦点領域の水の温度を、熱電対により測定したものである。周波数は $2.2\ \text{MHz}$, 焦点における出力は $800\ \text{W/cm}^2$ である。グラフより、気泡数密度が大きくなるにつれ温度上昇が大きくなることが確認できる。図 2.5 は、超音波照射時における温度分布の様子を感温液晶シートを用いて可視化したものである。周波数は $2.2\ \text{MHz}$, 焦点における出力は $200\ \text{W/cm}^2$ である。この図は上方のカメラから撮影されたものであり、シートの下に気泡の入った円筒空間がある。気泡が存在しない場合は、超音波の形成する直径数 mm 程度の焦点領域のみで温度が上昇している。それに対し気泡を注入した場合は、気泡が存在する領域の温度が徐々に上昇していることがわかる。これは、気泡が超音波エネルギーを吸収して振動することにより、そのエネルギーを熱エネルギーに変換して、周囲媒体の温度を上昇させていることを示している。

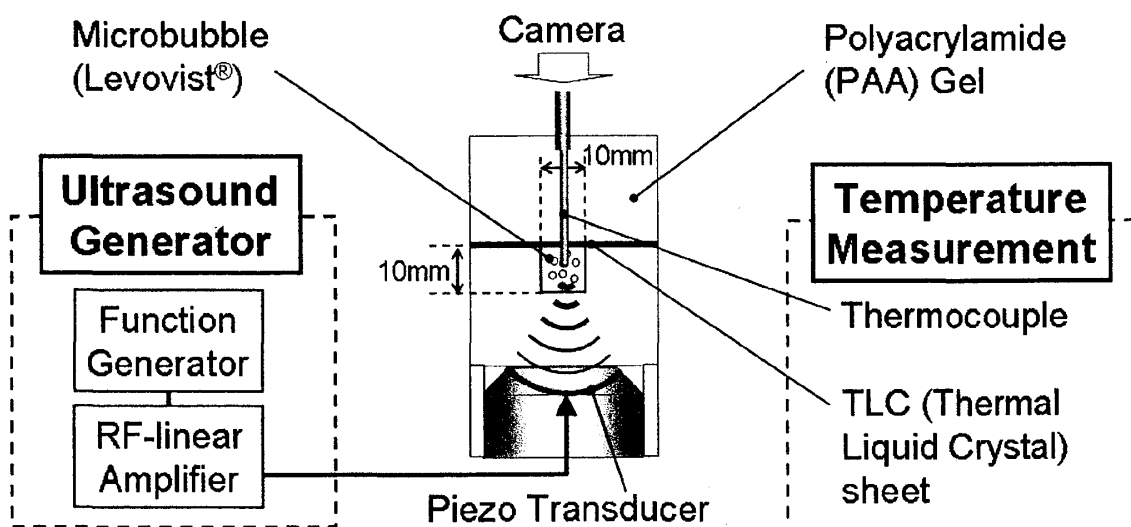


図 2.3 温度測定実験装置の概略図

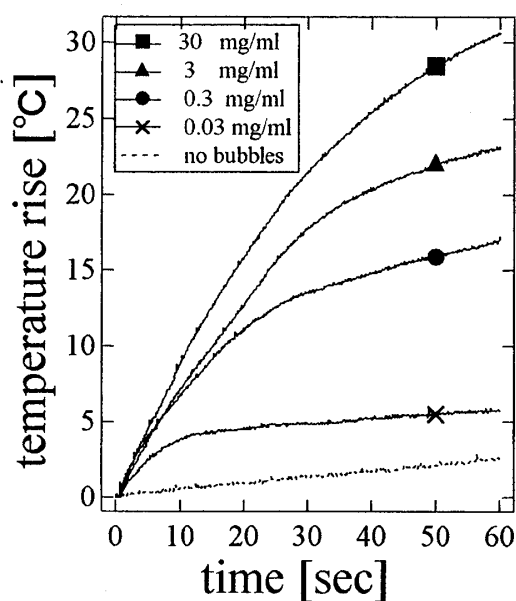


図 2.4 焦点における温度上昇

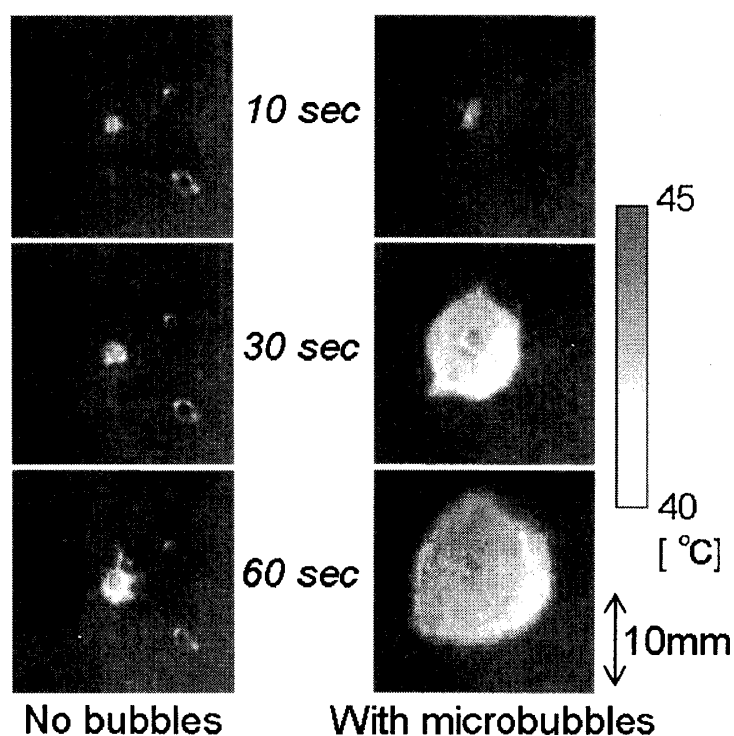


図 2.5 感温液晶による可視化結果

次に、内部気体の性質の違いが発熱作用にどのような影響を及ぼすのかについて、数値計算および実験による検討をした結果について示す。気泡が体積振動をする際に周囲に放出するエネルギーとして、前述のように、(1)気液各相内での熱伝導によるエネルギー拡散、(2)気液界面での粘

性減衰によるエネルギー散逸，(3)界面の振動に伴う音響エネルギー放射，の3つが挙げられる。以上の3つの放出エネルギーを考慮し数値計算を行った結果の一つが図2.6である。アルゴン(Ar)および六フッ化硫黄(SF₆)気泡に対して超音波（周波数1 MHz，圧力振幅100 kPa）を照射した際のエネルギー放出量である。計算モデルについては，文献(1)を参照のこと。(a)(b)ともに，共振気泡径あたりで各エネルギー放出量が大きくなっている。Arの場合は比熱比が1.67であり，気泡内部温度がより高くなるため，気液界面における熱伝導の効果が粘性散逸・音響放出の効果よりも大きくなる。一方，SF₆の場合では比熱比が1.09であり，気泡収縮時における気泡内部の上昇温度はArに比べて小さくなるが，半径変化がより激しくなる。その結果，粘性減衰および音響放射の効果が，熱伝導の効果よりも大きくなる。以上に示すとおり，内部気体の種類によって，気泡から放出されるエネルギーのバランスが変化することがわかる。

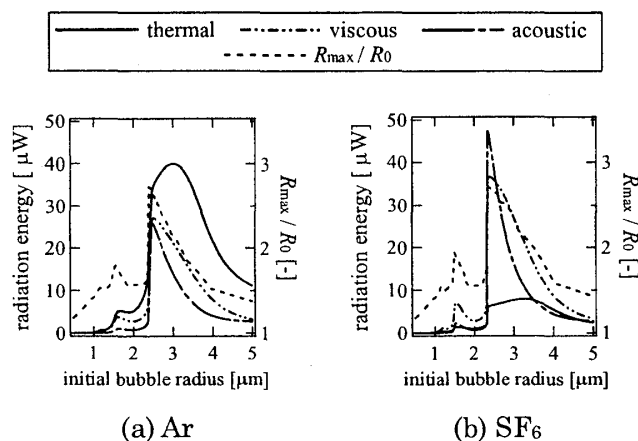


図 2.6 単一気泡からのエネルギー放出

次に，内部気体の異なる微小気泡の発熱作用についての実験結果について説明する。実験には前述の図2.3で示した実験装置を用いた。超音波は周波数3.3 MHz，焦点における出力は1200 W/cm²とした。微小気泡として，超音波造影剤Levovist®を使用し，さらに内部気体を他の4種類（アルゴン(Ar)，キセノン(Xe)，六フッ化硫黄(SF₆)，フッ化炭素(C₃F₈)）に置換した気泡を用いた。気泡を含む水のボイド率は約0.01%である。図2.7は，内部気体の異なる微小気泡を含んだ水の温度上昇の時間履歴である。まず，気泡の有無が温度上昇に与える影響に着目すると，気泡が存在する溶液の方が，温度上昇がより大きくなっている。これは，気泡が超音波エネルギーを吸収して，焦点領域において熱エネルギーとして変換していると考えられる。次に，内部気体の違いに着目すると，温度上昇の大きさは，Xe, Ar > air > SF₆, C₃F₈となっている。このような傾向を示す要因の一つとして，気体の比熱比の違いが挙げられる。前述のとおり，比熱比が大きい方が，気泡が膨張収縮を繰り返す際における気泡内部の温度変化がより大きくなり，気泡振動の熱的減衰の影響が大きくなることがわかっている。各気体の比熱比は，Ar: 1.67, Xe: 1.67, air: 1.40, SF₆: 1.09, C₃F₈: 1.07となっており，そのためArやXe気泡を含む水ではより大きな温

度上昇となっていると考えられる。

腫瘍焼灼に対するマイクロバブルの応用例の終わりとして、実際に、ラビットを用いた *in vivo* 実験について示す。図 2.8 に、実験の様子を概略図で示す。固定されたラビットの腹部より集束超音波を肝臓めがけて照射する。図 2.9 に、超音波照射後のラビット肝臓の焼灼領域の様子を示す。焼灼された領域が白っぽく変色している。(a)は生理食塩水、(b)は Levovist®を含む生理食塩水を門脈から注入した場合に対応しており、(b)のマイクロバブル注入時の方が約 3 倍ほど焼灼領域の体積が大きくなっているのがわかる。また、焦点領域の温度上昇に関しても、Levovist®の存在により大きくなることがわかった。

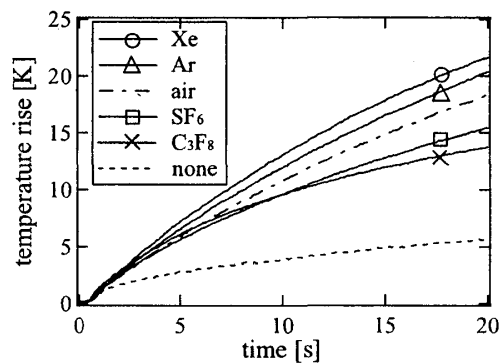


図 2.7 異なる種類の内部ガスを有する気泡に対する焦点領域の温度上昇履歴

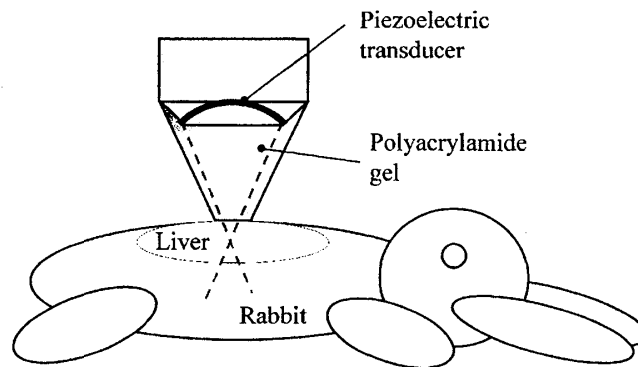


図 2.8 ラビット肝臓焼灼実験の概略図

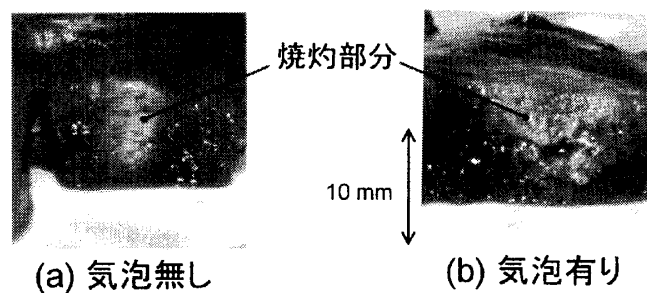


図 2.9 ラビット肝臓の焼灼領域の比較

以上の結果より、生体内においてもマイクロバブルの存在によって、発熱効果に有意な差をもたらすことが確認され、マイクロバブルによる腫瘍焼灼技術の大きな可能性が示された。

最後に、図 2.10 にマイクロバブルと超音波を組み合わせた低侵襲治療のプロセスについて概念図を示す。前節で示したとおり、注入されたマイクロバブルを血管造影剤として用いることにより、毛細血管が異常な発達を示す悪性腫瘍を発見することが可能となる。さらに、その腫瘍に対して、本節で説明した様に強力集束超音波を照射することにより、血管造影用マイクロバブルの体積振動を有効に活用し、腫瘍部分を焼灼することができる。これに加え、超音波を用いて、腫瘍の焼灼が済んだ部位の確認までできるようになると、診断から治療までのすべてのプロセスを、体を切開することなしに、体外から超音波を照射することで済ませることができるようになる。このように超音波治療法は、低侵襲の治療法として大きな期待が寄せられている。

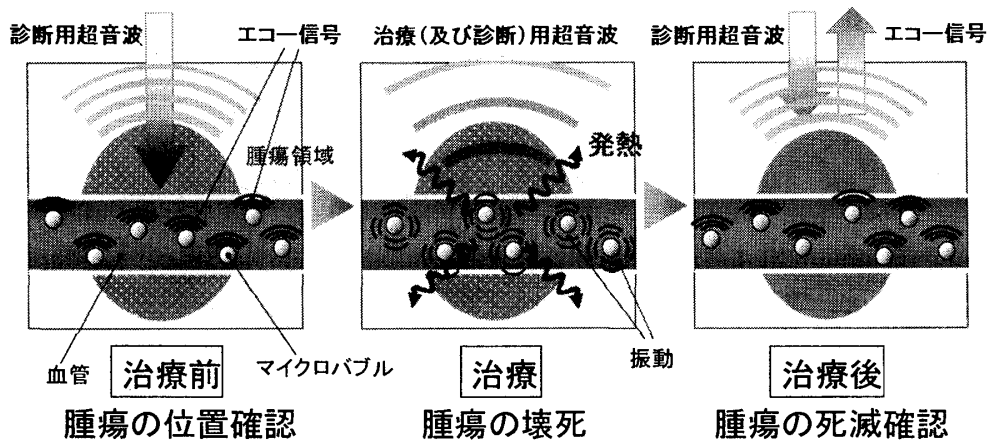


図 2.10 マイクロバブルと超音波を用いた低侵襲治療のプロセス

2.3 キャビテーション現象を利用した結石破碎

本節では、キャビテーション現象を利用した結石の破碎法について説明する。ここで扱う気泡は、前節で説明した血管造影剤としてのマイクロバブルではなく、体内に超音波を照射することにより生成されるキャビテーション気泡である。

腎臓にできた結石は直径 2 mm 程度までの大きさの場合には尿道を通過して尿とともに体外へ排出するが、それ以上の大きさのものは自然にはなかなか排出されない。そのような状況下では、手術など何らかの手段で結石を処理する必要があるが、現在の医療現場において結石破碎の第一選択は ESWL (Extracorporeal Shock Wave Lithotripsy : 体外衝撃波結石破碎術) と呼ばれる方法である。ESWL は、数 μ 秒の短い立ち上がり時間と、最高 1000 気圧に及ぶピーク圧力を持つ衝撃波を、体外から体内の腎臓結石に集束させることによって、結石を粉々に砕く治療法である。ESWL は超音波技術の治療応用として、非侵襲治療の先駆けという点と、臨床現場への導入台数という点において、大きな特徴を持つ。

しかし、超音波を用いた非侵襲治療の先駆けと言われる ESWL においても、実際には、

(1) 結石破砕片が比較的大きく、自然排出に十分なサイズにならない場合がある。

(2) 破砕時に体内の正常組織に損傷を与える

などの問題を有している。これらの問題は、図 2.11(a)⁴⁾に示すような破碎をもたらす衝撃波が、センチメートルオーダーの波長 (1 周期が約 10 μ 秒) を持つことによる。この波長は結石の代表長さと同じ程度であり、結石全体を包み込むように、度重なる張力と圧縮力を働かせることになる。結果として図 2.11(b)⁵⁾に示すように、結石は、大きなハンマーで石全体を砕いたときのようになり、その破砕片は大きくなる。

また、衝撃波の波長オーダーの範囲をもつ焦点領域に、衝撃波背面の負圧によって、キャビテーション気泡が発生する⁶⁾(図 2.11(c))。キャビテーション気泡は、負圧によって膨張させられ、その後圧力の回復により、急激に収縮し体積を最小にし、崩壊する。このとき気泡内部の圧力はきわめて高くなり、隣接する生体組織に対し、狭い範囲に針でつつくような力を及ぼす。そのため体組織が損傷され、血尿などの合併症を引き起こすことが報告されている。

ESWL によるキャビテーション気泡の崩壊現象は早い段階でその影響が報告され^{7), 8)}, ESWL の研究において最も重要な課題となってきた。ESWL 機器におけるキャビテーション現象は、体組織損傷因子としての解析⁹⁾がなされる一方で、局所的に発生する大きな崩壊圧が、結石破砕片の微細化に役立つとの観点からも研究⁴⁾が続けられている。近年では、キャビテーション崩壊現象を能動的にコントロールし結石破砕片の微細化をはかる、幾つかの手法も提案されている^{10), 11)}。しかしながらこれらの技術においても、破碎をもたらす圧力波は基本的には現存 ESWL 機器と変わらず、図 2.11(a)と同様の、波長の長い衝撃波である。したがって、広い焦点領域に発生するキャビテーションが体組織の損傷をもたらし得る、という点においては依然問題が残っている。

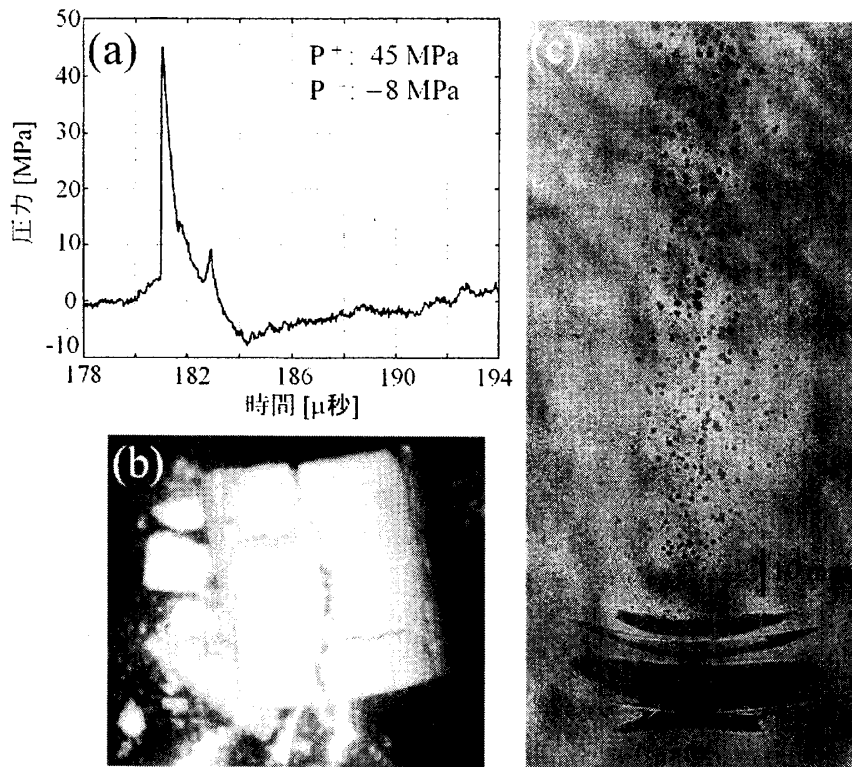


図 2.11 ESWL 機器による結石破碎

- (a) ESWL 機器 (Dornier HM-3) による典型的な衝撃波(Zhu et al.)⁴⁾,
- (b) ESWL 機器による破砕片(Eisenmenger et al.)⁵⁾.
- (c) 衝撃波背後の負圧により生じるキャビテーション気泡(Carnell et al.)⁶⁾.

以上の知見をもとにすると、体組織の損傷を避けるためには現在 ESWL で用いられているような破壊力の大きな圧力波は用いずに、小さなエネルギー投入でキャビテーションを結石表面のごく近傍のみで発生させ崩壊させるのが、効果的であると考えられる。このような考えのもと、池田ら¹²⁾は、超音波キャビテーションの崩壊現象によるエロージョンで、結石のみを破碎する手法の開発を行っている。ここではこの手法について紹介する。

この手法では、キャビテーションを生成させる圧力波としては、ESWL による衝撃波と比べ、1 オーダーほど波長が短い集束超音波を用い、結石表面の局在化された領域にクラウドキャビテーションを生成させる。次に、結石表面に発生させたクラウドキャビテーションの崩壊を引き起こすことにより、結石表面のみでの高圧力・高エネルギーの集中を導く。

キャビテーション気泡の崩壊圧力は一個一個が崩壊する時よりも、多数の気泡が集まった気泡群 (クラウドキャビテーション) が崩壊する際の方がはるかに大きくなり得る。クラウド中心付近では、10000 気圧以上の大きな崩壊圧が発生することが実験¹³⁾及び数値計算¹⁴⁾で示されているが、ここではこの特性を利用して結石の破碎を行う。

図 2.12 に、開発された結石破碎法におけるキャビテーション制御手法の概念図と、キャビテーション制御に用いられた二種類の周波数をもつ集束超音波のパルス波形の概略図を示す。まず、狭い領域にキャビテーションを発生させるために、高周波（1～4 MHz 程度）の超音波を結石表面に集束させる(図 2.12,2)。高周波超音波は焦点領域に、多数のキャビテーション気泡で構成されるクラウドキャビテーションを発生させる。もう片方の超音波は、クラウド気泡群としての共振周波数近辺の周波数を持つ、低周波の超音波（400～1 MHz 程度）であり、前記の高周波の超音波周波数より 1 オーダー程度低い。低周波超音波は、図 2.12 下に示されるように、高周波の超音波がストップした後、直ちに印加される。この低周波の超音波は、高周波で生成されたクラウドを強制振動させ崩壊を導く(図 2.12-3,4)。振動圧力場中におかれたクラウドの内部には衝撃波が集束し、中心部では、気泡は激しく崩壊する(図 2.12-5,6)。この一連のプロセスの結果、空間的に制御された位置にキャビテーション気泡群が生成し、さらに、その崩壊を誘導することにより、破砕片の微細化を達成することが可能となる。

実際に高低 2 種類の超音波を固体壁面上に集束させ、クラウドキャビテーションを強制振動させた結果について以下に紹介する。高速度カメラによって固体壁近傍で撮影されたキャビテーションの様子を図 2.13 に示す。写真は 2.75 MHz の高周波超音波によって作られる安定なクラウドキャビテーションが、545 kHz の低周波超音波によって崩壊に導かれる様子である。撮影のフレーム間隔は 2.75 μ s、露光時間は 50 ns である。2.75 MHz の超音波によって形成された長半径約 225 μ m、短半径約 100 μ m の半楕円体状の気泡クラウドが、クラウドを構成する一つ一つの気泡の体積を減少させる形で、545 kHz の超音波によって強制振動させられ、4、8 フレーム目において激しく崩壊している様子が確認できる。2 回の崩壊時刻の間隔は約 2 μ s であり、ほぼ低周波超音波周期と一致する。このとき、気泡クラウド中心部においては多数の気泡が激しく崩壊し、固体表面に対して非常に高い圧力を及ぼしていると考えられる。また、この崩壊挙動は毎回ほぼ同一番号のフレームに撮影されており、時間的に再現性よく崩壊が誘導されていることが確認されている。

図 2.14 は高周波として 3.82 MHz の超音波を 50 μ s 印加した後に、545 kHz の低周波超音波を直ちに印加したときに引き起こされる気泡クラウド崩壊に起因して発生した、衝撃波のシャドウグラフ撮影画像である。撮影の露光時間は 5 ns、フレーム感覚は 100ns である。周波数は異なるが、現象としては、図 2.13 の 4 フレーム目で気泡クラウド中の個々の気泡が爆縮して崩壊し、気泡クラウド中心に衝撃圧が発生したあとの、リバウンドの圧力波が、気泡クラウド外に向かって伝播してゆく様子を捉えたものであると考えられる。2 波目の低周波超音波が気泡クラウドに到達した直後に、非常に陰影の濃い圧力波が、気泡クラウドから外に向かって、球面上に伝播してゆく様子が観測された。この現象の再現性は図 2.13 の強制振動の撮影と同様非常に高く、ほとんどのケースにおいて同一のフレームで同様の現象が撮影された。

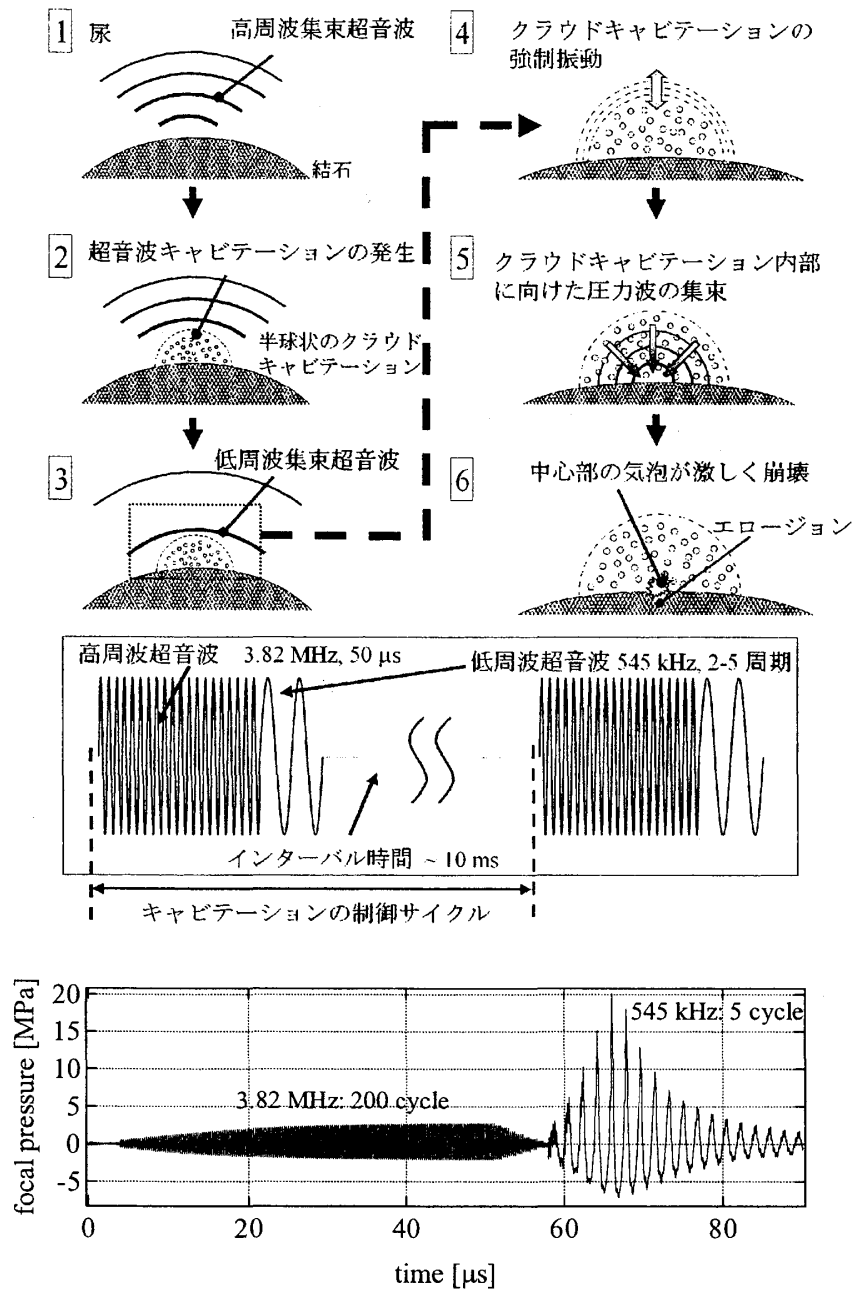


図 2.12 二種類の超音波を用いたキャビテーション制御.

上図：超音波キャビテーションの制御手法概念図

中図：キャビテーションコントロール波形の概略図

下図：焦点における超音波波形の例（実測）

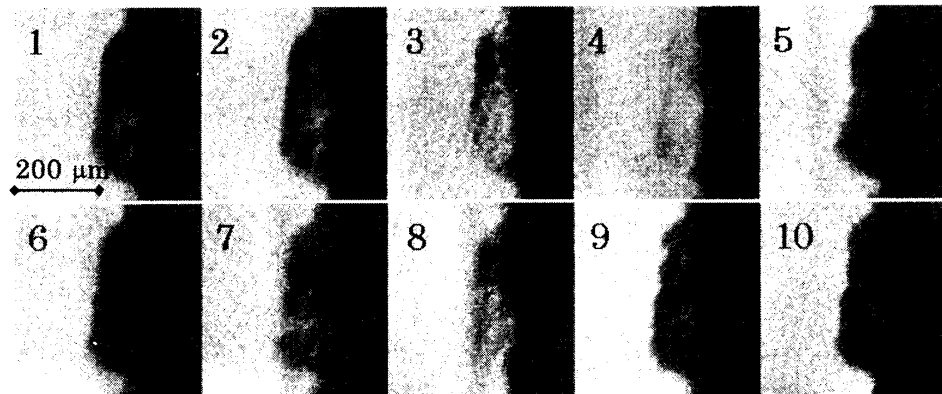


図 2.13 高低 2 周波の超音波による気泡クラウドの強制振動
高周波 2.75 MHz, 低周波 545 kHz, フレーム間隔 275 ns,

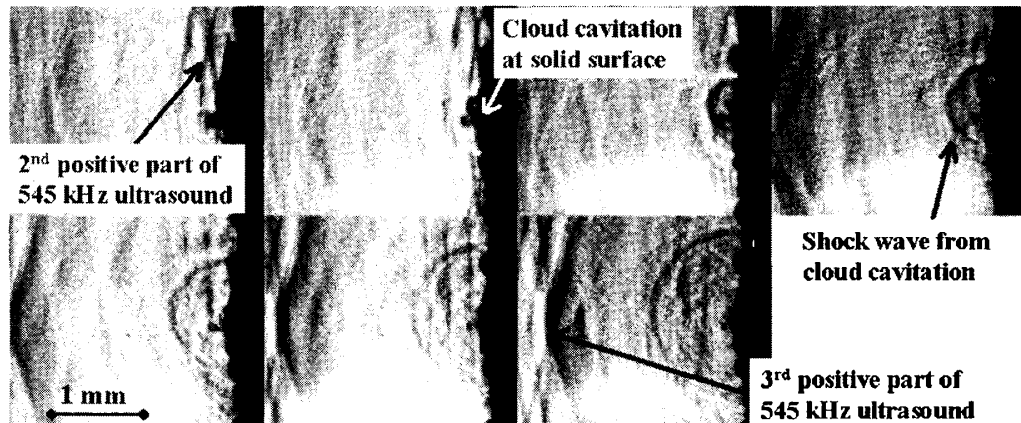


図 2.14 クラウド崩壊に伴う衝撃波の放出：
高周波 3.82 MHz, 低周波 545 kHz, フレーム間隔 100 ns

図 2.15 は、ハイドロフォンを用いて、衝撃波撮影と同期して測定された音圧信号である。測定は集束超音波の焦点から 1.6 mm 遠方で行われた。実線が高低 2 周波を用いた場合の現象に対応し、クラウドキャビテーションの崩壊を起こしたときの音圧信号である。また、破線は、545 kHz の低周波超音波のみによって引き起こされたキャビテーション崩壊による音圧信号となっている。また、同一条件下で取得した、異なる音圧信号 15 ケースの中に見られた、気泡崩壊によるものと考えられる衝撃圧のピーク値を取り出した。それらは、図 2.15 中に、その値をとった時刻に対して○、▲の記号でプロットしてある。

545 kHz の超音波では、キャビテーションが広い範囲に起こり、それぞれが 545 kHz の超音波振動と同期しながらも、一個一個の気泡として崩壊するため衝撃圧は時間的に広く分布し、またそのピーク圧力も分散が大きく、最大値も低く 2 MPa 程度である。一方、高周波と低周波を

組み合わせ、クラウドの崩壊を導いたときは、低周波 2 波目の時刻 ($3.3 \mu\text{s}$ 付近)において、 3 MPa に達する大きな衝撃圧が 1 回のみ、観測される。また、その衝撃圧が発生する時刻は、ほぼ毎回同時刻に起こっており、その標準偏差は 65 ns であった。これにより、気泡クラウドの崩壊は、その位相においてもよく制御されて引き起こすことができることが確認された。

以上の解析により、高周波の超音波で生成したクラウドキャビテーションを、低周波の超音波で崩壊に導くことにより、時間的、空間的に制御性よく、固体壁面上に大きな圧力を集束させることが可能であることが示された。次に、実際の結石破碎への効果を、モデル結石によって確認を行った結果について示す。

図 2.16 にモデル結石（円柱形、直径 10 mm 、高さ 10 mm ）に対して、3 ケースの集束超音波を印加した後の、キャビテーションエロージョンによる破碎痕の写真および断面形状を示す。それぞれ (a) 高周波 3.82 MHz , $50 \mu\text{s}$, (b) 低周波 545 kHz , 2 周期, (c) 高周波 3.82 MHz , $50 \mu\text{s}$ の後、直ちに低周波 545 kHz , 2 周期を印加したものの、となっており、(c) のケースが気泡クラウドの崩壊を引き起こしたときの結果となっている。なお、3 ケースとも、上記の超音波波形を 1 パルスとし、パルス繰り返し周波数 20 Hz で 3 分間、超音波を照射した。

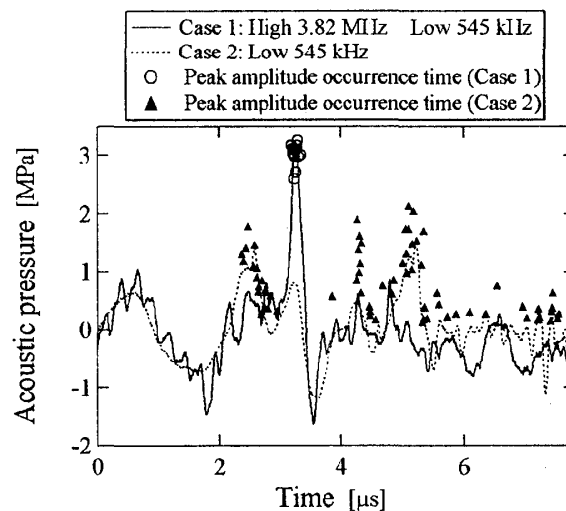


図 2.15 クラウド崩壊に伴う音圧信号の時間履歴

図 2.16(a), (b)では、単一周波数の超音波での、キャビテーションエロージョンによる破碎痕が確認できる。キャビテーション発生領域は超音波の波長に依存し、(a) 3.82 MHz では直径約 1 mm , (b) 545 kHz では直径約 6 mm の範囲が削り取られていることがわかる。また、その深さはそれぞれ約 1 mm , 3 mm であった。しかしながら、図 2.16(c)の気泡クラウドの崩壊を引き起こしたケースにおいては、結石はクラウド崩壊によるエロージョンによって、鋭くえぐり取られるように破碎された。その断面形状は図 2.16(a)および(b)の線形和で得られる形状よりはるか

に大きく、その破砕痕の深さは 6 mm に達した。

また、同様にして、2 周波で集束超音波を照射すると、腎臓結石を微細な破砕片として削り取ることができる。図 2.17 にその破砕片の写真および破砕片の粒径分布を示す。临床上、尿道を無痛で通るに十分な破砕片の大きさは 2 mm とされているが、本手法によれば、キャビテーションエロージョンを利用することによって腎臓結石は 2 mm 以下の細かい破砕片に削り取られている¹⁵⁾。さらに、胆石など、音響インピーダンスが水に近いため ESWL では破砕することのできないものも、本手法を用いて破砕することが可能となる。

以上より、クラウドキャビテーションの崩壊を利用することにより、結石表面の局在的な領域を強い力で破砕することが可能であることが示された。また本手法は、キャビテーションの生成領域を現存 ESWL 機器と比べてはるかに狭く、局在化した上で、結石をエロージョンにより、削り取るように破砕するため、より低侵襲な結石破砕が期待できる。

以上、ここでは、キャビテーションを積極的に利用し、その位置を制御することにより低侵襲の治療が可能であることを結石破砕を例に取り示したが、これ以外にも DDS(Drug Delivery System: 薬剤搬送システム)、遺伝子導入などでも、マイクロバブル(キャビテーション)と超音波を組み合わせた治療応用の進展が期待されている。

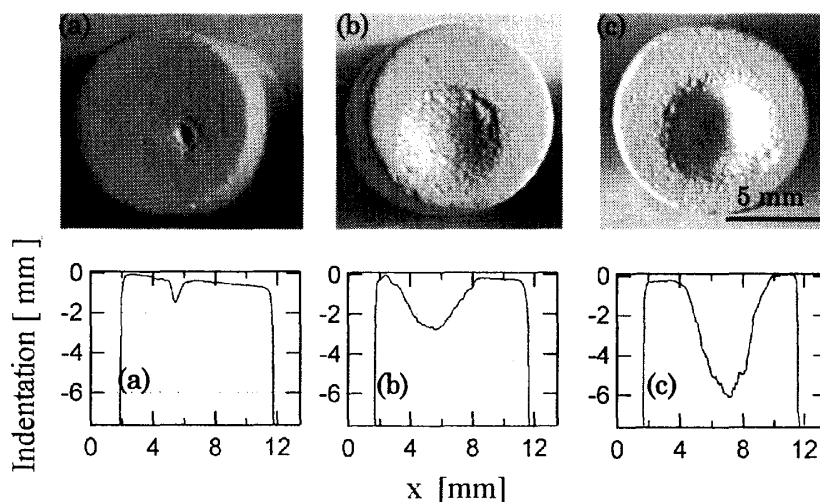


図 2.16 モデル結石を用いた実験:

- (a) 3.82 MHz, 50 μ s, (b) 545 kHz, 2 cycle,
(c) 3.82 MHz, 50 μ s + 545 kHz, 2 cycle

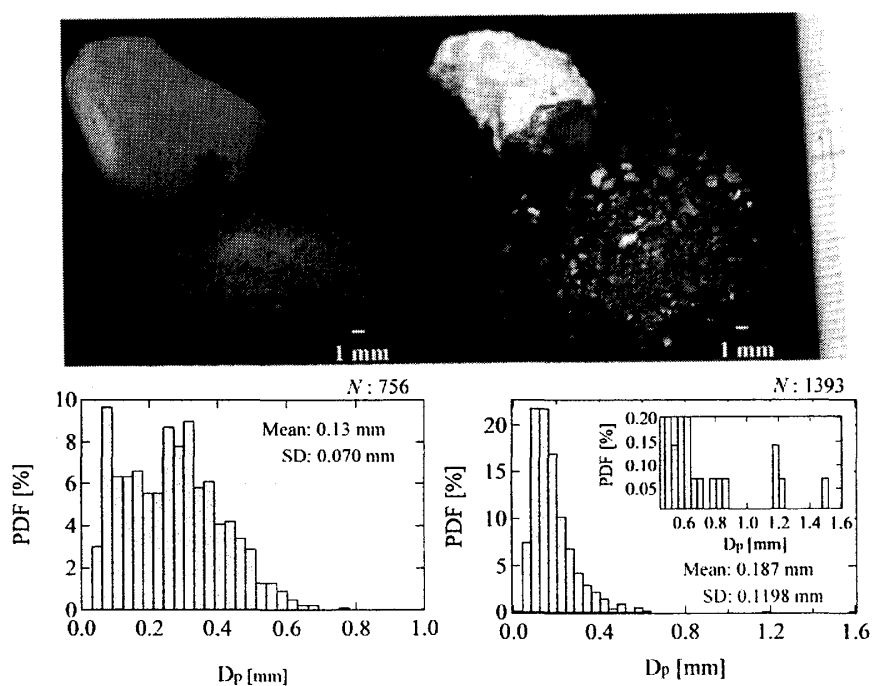


図 2.17 腎臓結石破碎試験：結果と破砕片粒径分布
(左図：シスチン結石，右図：サンゴ状結石)

2.4 せん断流中における変形ベシクルの挙動

2.4.1 はじめに

脂質二分子膜を有するベシクル（リポソーム）は、人口酸素運搬体や Drug Delivery System(DDS)用の薬剤カプセルとして、近年注目を集めている。DDS の実用化や高効率化のために、血管内におけるベシクルの挙動を精度よく予測するためのシミュレーション技術の開発が期待されている。しかし、せん断流中でのベシクルの挙動に関しては、計算結果と比較できる実験結果が乏しいため、得られた結果の妥当性の検証や、計算と実験との比較を通してベシクルモデルを構築することが容易でない。そこで本研究では、単純せん断流中におけるジャイアントベシクル（GV、直径 $1\mu\text{m}$ 以上のベシクル）の挙動に関して、数値計算および実験を遂行し、両者の比較を通して膨潤率の影響を定量的に評価する。

単純せん断流中でのベシクルは、楕円体状に変形し、主軸の方向を保ったまま膜が回転する“Tank-Treading 運動”と、楕円体全体が回転する“Tumbling 運動”と呼ばれる運動を呈する。ベシクル内外の液体の粘性がほぼ同じ場合には、Tank-Treading 運動が起きるが、本研究ではこの Tank-Treading 運動に注目し解析する。

2.4.2 数値計算手法

本研究では、計算手法として Peskin らの Immersed-Boundary 法を用いた⁽¹⁶⁾。膜モデルは、脂質二分子膜のモデルとしてよく用いられる、2次元流動膜モデルを仮定し、膜の微小要素 ds に生じる力を以下の式で表現した。

$$\mathbf{F} = \sigma \int H \mathbf{n} ds - \frac{\delta W}{\delta \mathbf{x}} \quad (2.1)$$

$$\text{ここで, } \sigma = \frac{1}{2} k_c \left(\frac{S}{S_0} - 1 \right), \quad W = \frac{1}{2} k_b \int (2H)^2 ds \quad (2.2)$$

H は平均曲率、 $\mathbf{x}$, $\mathbf{n}$ は膜上の位置ベクトル及び単位法線ベクトルである。また S は全表面積、 S_0 は歪みのない状態での全表面積、 k_c , k_b はそれぞれ面膨張係数、曲げ剛性係数である。右辺第一項は膜の面膨張による力を表す。ここで実際の面膨張係数 k_c は非常に大きく、膜は伸びずに膜面内で局所非圧縮と考えることができるが、本計算では数値的不安定を避けるため、局所非圧縮ではなく、GV の全表面積を初期面積に戻すような復元力をかけている。右辺第二項は膜の曲げによる力で Helfrich⁽¹⁷⁾の曲げエネルギー W の変分により表現した。また脂質二分子膜の内外での流体の出入りは本計算の対象とするジャイアントベシクルでは無視できるため GV 内部の体積 V は一定とした。

2.4.2 実験手法

ここでは、位相差顕微鏡観察下で単純せん断流を生成できる装置を製作し、単純せん断流中の GV の挙動を解析した。以下、その手法について概要を説明する。

本研究では DOPC (Phosphocholine,1,2-Dioleoyl-sn-Glycero-3-<L- α -Lecithin Dioctanoyl>) を用いて、静置水和法によって GV 作成を行った。DOPC のメタノール溶液 (5mg/ml) をガラス瓶に30 μ l 滴下し、窒素ガスで乾燥後、真空デシケータ内で2時間乾燥させる。その後、スクロース水溶液 (100mM) を3ml 入れ、常温で48時間静置してGVを作成した。作成されたGVを位相差顕微鏡で観察した様子を図 2.18 に示す。

次に、単純せん断流生成装置について説明する。装置の模式図を図 2.19 に示す。水槽の中に投入した2つのステンレス円筒 (直径 50mm, 厚さ 4mm) を、1つの DC サーボモータで同方向に回転させ、円筒間の隙間 (幅 0.5mm) に単純せん断流を発生させる。本装置を倒立顕微鏡のステージ上に置き、下方から観察を行う。校正実験として、平均粒子径 1.6 μ m のポリスチレン粒子を用いて流れの可視化を行い、汎用 PIV ソフト DippFlow を用いて流速分布を計測した (図 2.20)。解析の結果、曲率の影響は両端で $\pm 0.7^\circ$ 以下、深さ方向のせん断率の変化は円筒下端から 100-2500 μ m の範囲で $\pm 3\%$ 以下、流れの時間変動は $\pm 10\%$ 以下という結果を得た。

対物レンズは CFI Plan Fluor ELWD ADL 20 $\times$ C (NIKON 製, N.A. 0.45) を用いた。この場合、500nm の粒子に対する被写界深度は約 10 μ m である。カメラと光源は、実験 1 では C4880-80 (浜松ホトニクス) とハロゲンランプを、実験 2 では X-Stream XS-3 (IDT) と水銀ランプを用いた。装置はグルコース水溶液 (100mM) で満たされており、観察はすべて位相差観察により行なった。

流動実験では、まず 1)2.1 で作成した GV 溶液からマイクロピペットで 100 μ l 採り、2)装置の側面に開けてある穴から注入し、3) 5 秒程度待ってから撮影を行った。すべての観察は、円筒下端から 500-1000 μ m の高さで行った。Tank-Treading 運動をしているベシクルの様子を図 2.21 に示す。

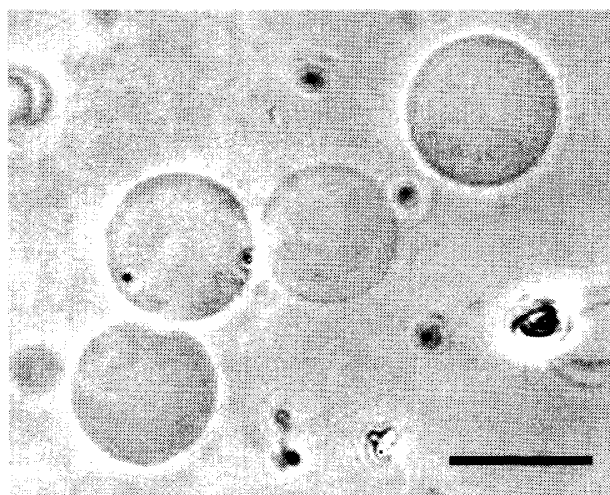


図 2.18 GV の位相差顕微鏡による像 (bar: 30 μ m)

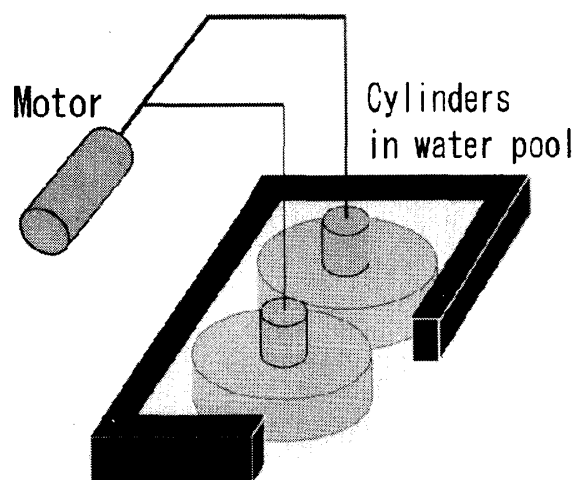


図 2.19 単純せん断流生成装置の模式図

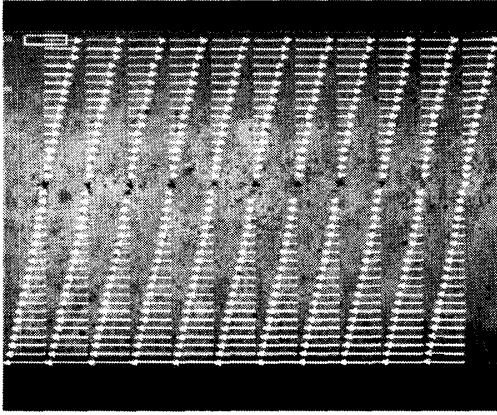


図 2.19 PIV により得られた円筒間の瞬時速度分布

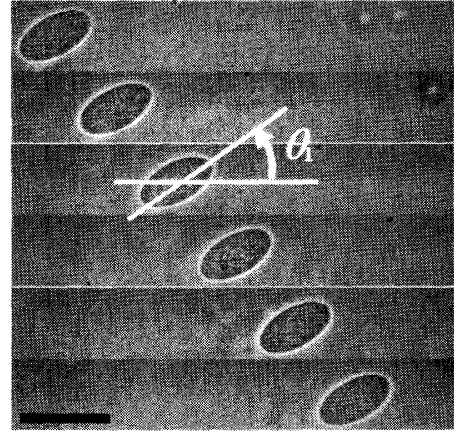


図 2.21 タンクトレディング運動する GV の様子 direction. (bar: 50μm).

2.4.3 結果および考察

ここでは、計算結果について主に説明し、Tank-Treading 運動の角度に関する実験結果との比較を示す。パラメータとして GV 内外の粘性比 $r = \mu_{in}/\mu_{out}$ と、以下の式で定義される膨潤率 τ を用いた。

$$S_w = V / \left\{ \frac{4}{3} \pi \left(\frac{S}{4\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \right\} \quad (2-3)$$

単純せん断流の計算を行う前に、静止流体中で十分な時間計算を行い、異なる膨潤率における GV の平衡形状を計算した。図 2.22 の $t=0.0$ の形状は $\tau=0.8$ の場合の GV の平衡形状である。図のように棒状の形状が、平衡形状として得られた。また膨潤率を 0.7 から 1 付近まで変化させて計算を行ったところ同様に棒状形状の GV が得られた。これらの棒状形状を初期形状として単純せん断流中での計算を行った。長さスケール $R = (3V/4\pi)^{1/3}$ 、時間スケール $t = 1/\gamma$ とし、 $8R \times 8R \times 8R$ の計算領域内の中心に GV の長軸を x 軸と一致するように配置し、単純せん断流 $(\gamma y, 0, 0)$ を与えて計算を行った。 γ はせん断率である。流れをストークス流れとし、以下の式で与えられる無次元パラメータ C_l, C_b をそれぞれ 1×10^{-3} , 10.0 とした。

$$C_l = \frac{\mu_{out} \gamma R}{k_c}, \quad C_b = \frac{\mu_{out} \gamma R^3}{k_b} \quad (2-4)$$

ここでは粘性比 r を 1 に固定して計算を行った。図 2.22 に $\tau=0.8$ の結果を示す。計算を開始すると膜が z 軸を中心に、図上時計回りに回転を始める。一方 GV の形状に着目すると、GV は長軸が反時計回りに回転しながら最終的に長軸が x 軸となす角度 θ で定常形状に落ち着いた。膨潤率と角度 θ の関係について、上記の実験による結果および他者の理論や実験と比較した結果を図 2.23 に示す。図のように膨潤率が大きくなるにつれ角度 θ は増加する傾向が見られる。また、本数値

計算結果 (□) (Yamada et al.) を, 本実験 (Experiment), Keller-Skalak 理論 (K-S 理論)⁽¹⁹⁾ (実線), Abkarian ら⁽²⁰⁾ の壁面近傍せん断流における実験結果 (△) と比較したところ, 良好な一致が得られているのがわかる. 数値計算および理論で仮定されている膜モデルでは膨潤率が一定ではあるが, 膜面内の局所的伸びを許したものである. にもかかわらず, 実際の実験と良好な一致を示している点は興味深い. すなわち, 膨潤率が角度 θ_i に対して大きく影響するのに対し, θ_i に対する膜面内速度分布の影響は小さいと考えられる.

次に図 2.24 に粘性比と角度 θ の関係を示す. 粘性比がある閾値を超えるまでは Tank-treading が見られ, この領域では図のように粘性比が大きくなるにつれ角度 θ が減少する結果が得られた. 減少傾向に着目すると, 粘性比がある領域までは角度 θ は粘性比に対して線形に減少するが, 角度 θ が 0 に近くなると減少量が急になっている様子が見られる. そして $\tau=0.8$, 0.9 について粘性比がそれぞれ約 5, 6 になると GV は閾値を越え, Tank-treading ではなく Tambling への遷移である非定常挙動を示した.

2.4.4 おわりに

本節では単純せん断流中で Tank-Treading 運動をするベシクルに関して, Immersed Boundary 法による数値計算を行った例について紹介した. また, 数値計算条件に対応する実験装置を作成し, 両者の結果の比較を行い, Tank-Treading 運動における安定角度 θ_i と膨潤率 S_w の関係について調べた結果についても紹介した. そして, 膜モデルの違いにもよらず, これらの結果は, 他者による従来の理論や実験と良好な一致を示すことがわかった. すなわち, 脂質二分子膜ベシクルの Tank-Treading 運動に関しては, 膜モデルよりも膨潤率が重要なパラメータとなっているのを確認できた. また, 膜内外の粘性比の影響についても調べ, 粘性比の増加とともに Tambling 運動へと遷移する様子を示すことができた.

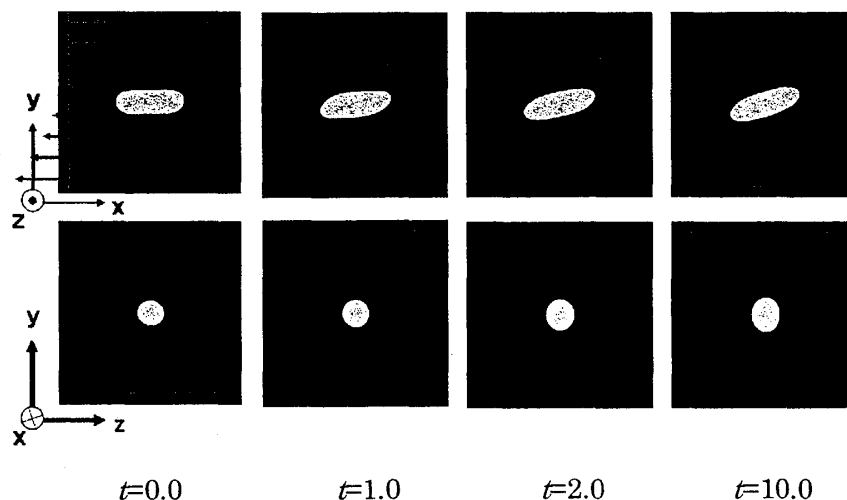


図 2.22 単純せん断流中における GV の Tank-Treading 運動 ($r=1, \tau=0.8$)

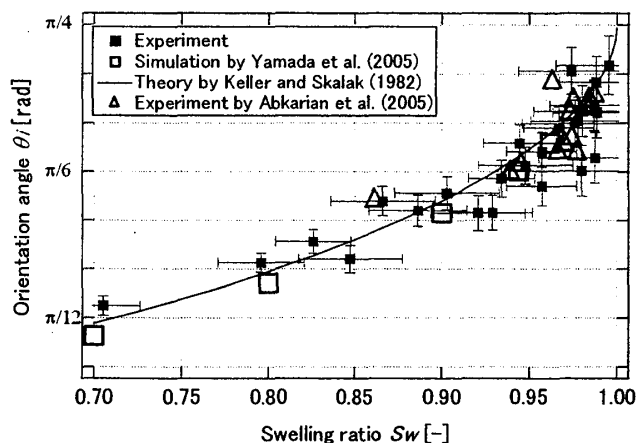


図 2.23 傾き角 θ_i と膨潤率 S_w の関係

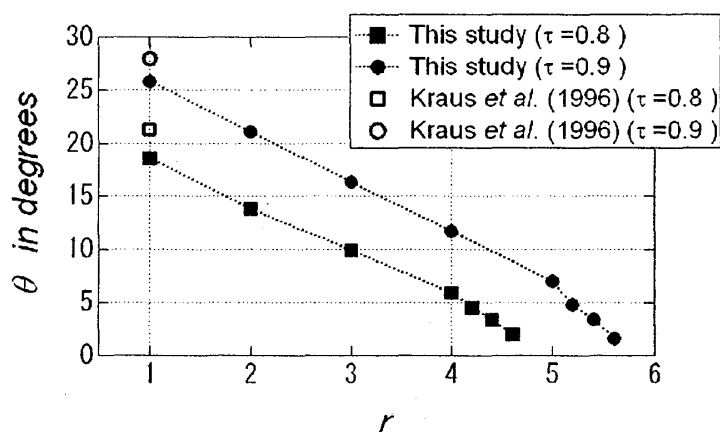


図 2.24 傾き角 θ と粘性比 r の関係 (膨潤率 $\tau=0.8, 0.9$)

2 章の参考文献：

- (1) Y. Matsumoto, et.al., 2005, “Medical ultrasound with microbubbles,” Experimental Thermal and Fluid Science, Vol.29, pp.255-265.
- (2) G. R. ter Haar, “Acoustic Surgery,” Physics Today, vol. 54, No. 16, pp. 29-34, 2002.
- (3) Y. Kaneko et al., “Use of a microbubble agent to increase the effects of high intensity focusedultrasound on liver tissue,” European Radiology, Vol.15, pp.1415-1420, 2005.
- (4) Zhu S, Cocks FH, Zhong P and Preminger GM, *The Role of Stress Waves and Cavitation in Stone Comminution in Shock Wave Lithotripsy*, Ultrasound Med. Biol., **28**(5), pp. 661-671, 2002.

- (5) Eisenmenger W, *The Mechanisms of Stone Fragmentation in ESWL*, *Ultrasound Med. Biol.*, **27**(5), pp 683-693, 2001.
- (6) Carnell MT, Alcock RD and Emmony D, *Optical Imaging of Shock Waves Produced by a High-energy Electromagnetic Transducer*, *Phys. Med. Biol.* **38**(11), pp 1575-1588, 1993.
- (7) Coleman AJ, Saunders JE and Crum LA, *Acoustic cavitation generated by an extracorporeal shockwave lithotripter*, *Ultrasound Med. Biol.*, **13**(2), pp. 69-76, 1987.
- (8) Crum LA, *Cavitation Microjets as a Contributory Mechanism for Renal Calculi Disintegration in ESWL*, *J. Urol.*, **140**, pp. 1587-1590, 1988.
- (9) Evan PA et al., *Kidney Damage and Renal Functional Changes are Minimized by Waveform Control that Suppresses Cavitation in Shock Wave Lithotripsy*, *J. Urol.*, **168**, pp 1556-1562, 2002.
- (10) Sokolov DL, Bailey MR and Crum LA, *Use of a Dual-pulse Lithotripter to Generate a Localized and Intensified Cavitation Field*, *J Acoust. Soc. Am.*, **110**(3), pp 1685-1695, 2001.
- (11) Xi X, and Zhong, P, *Improvement of Stone Fragmentation During Shock-Wave Lithotripsy Using a Combined EH/PEAA Shock-Wave Generator – In Vivo Experiments*, *Ultrasound Med. Biol.*, **26**(3), pp. 457-467, 2000.
- (12) 池田, 吉澤, 戸崎, 金子, 高木, 松本 2004, “クラウドキャビテーションの崩壊現象を利用した結石破砕法(第一報, クラウドキャビテーションの制御手法の開発),” *機論 B 編*, **70** (692), pp. 904-911, 2004.
- (13) Kato H, Konno A, Maeda M, Yamaguchi H, *Possibility of Quantitative Prediction of Cavitation Erosion Without Model Test*, *Trans ASME J. Fluids Eng.*, **118**(3), pp.582-588, 1996.
- (14) 島田, 松本, 小林, “クラウドキャビテーションの動力学とキャビテーションエロージョン,” *機論 B 編*, **65**(634), pp. 1934-1941, 1999.
- (15) Ikeda T., Yoshizawa S., Tosaki M., Allen J. S., Takagi S., Ohta N., Kitamura T., Matsumoto Y., *Cloud Cavitation Control for Lithotripsy Using High Intensity Focused Ultrasound*, *Ultrasound Med. Biol.*, Vol.32(9), 1383-1397, 2006.
- (16) Peskin C. S., “Numerical analysis of blood flow in the heart” *J. Comput. Phys.*, **25**, pp.220-252, 1977.
- (17) Kantsler, V. and Steinberg, V., “Orientation and Dynamics of a Vesicle in Tank-Treading Motion in Shear Flow”, *Phys. Rev. Lett.*, **PRL 95**, 258101, 2005 .
- (18) de Haas, K. H., et al., “Deformation of giant lipid bilayer vesicles in shear flow”, *Phys. Rev. E*, **56**, 7132(1997).
- (19) Keller S. and Skalak R., “Motion of a tank-treading ellipsoidal particle in a shear flow” *J. Fluid Mech.*, **120**, pp.27-47, 1982
- (20) Abkarian M. and Viallat A., “Dynamics of Vesicles in a Wall-Bounded Shear Flow”, *Biophys. J.*, **89**, pp.1055-1066, 2005

3. 分散相流れの数値計算法

3.1 はじめに

気液界面の変形などを伴う自由表面流れは、現在、数値流体力学の分野において主要なテーマの1つとなっている。本稿では、自由表面流れについて、最近開発が盛んに行なわれている有限差分法を用いて固定格子上を移動する界面を取り扱う手法を幾つか紹介し、それぞれの手法に適した数学的定式化を示す。簡単のため、ここでは混じり合わない非圧縮の2流体に関して説明を行なう。

3.2 自由表面流れの数値計算手法の分類

ここでは、連続体の視点に立ち、自由表面（相界面）を扱う数値計算手法について説明する。流れを支配する方程式を場の方程式としてとらえるオイラー的視点に立ち、相界面を持つ流れを考える。この場合、典型的な数値解析手法として、次のものが挙げられる。

- ・ 境界要素法
- ・ 有限差分(体積)法
 - 1) 固定矩形格子型
 - 2) 境界適合格子型
- ・ 有限要素法

これらの手法のうち、自由界面流れ、特に気液界面の大変形の問題に対しては、境界要素法が以前より多くの成功を収めてきた。しかし、境界要素法は、流れ場が線形の場合に有効な手法であるため、非線形性の強いナビエ・ストークス(N.S.)方程式で記述される流れ場には適用できず、解析の対象となる系は限られるものとなる。

一方、最近のコンピュータの計算能力の向上に伴い、有限差分法、さらには有限要素法による計算が増加してきており、種々の新しいアルゴリズムが開発されている。有限差分（体積）法を用いて N.S.方程式を解く手法は、1) 固定矩形格子内を通過する自由界面を何らかの手法で追跡する固定矩形格子型、2) 界面の形状にあわせて格子を切る境界適合格子型の2種類に分類することができる。1) 固定格子を用いた手法は、相界面での境界条件の精度はやや劣るが、多数の界面や複雑な境界を持つ流れに対して適した計算手法、2) 境界適合格子を用いた手法は、境界条件の精度に関しては優れているが、多数の液滴や粒子などを含む複雑な界面を持つ流れに対しては、適用困難な手法となる。これに対し、有限要素法では、相界面の境界条件を高精度で維持したまま、複雑な界面形状を持つ系に適用することが比較的容易である。有限要素法は、非構造格子を用いるため、境界適合格子による普通の差分法に比べ、格子形成の自由度が大きい。そのため、多数の液滴・気泡を含む流れの様に、液体中に多くの気液界面を持つような複雑な流れに対しても、分散した気液界面に適合した格子を切りながら流れを精度良く解くことが可能となる。従って、差分法における固定矩形格子型と境界適合格子型のそれぞれの利点を併せ持っており将来性が高い。しかし、現状においては、計算負荷の大きな手法であるため、2次元や軸対称流れ、ま

たは比較的滑らかな自由界面の変形を伴う流れの解析などには用いられているが、複数の自由界面形状を持つ3次元流れ(層流)への適用例は少なく、さらに乱流場への適用例となると極めて少ない。

したがって、相界面のシミュレーション手法として、乱流場への適用までを考えた際には、現段階においては、有限差分法による計算手法が有力な手法と考えられ、中でも固定矩形格子を用いた手法は様々な問題への適用が可能である。以下、固定矩形格子を用いた手法についてさらに説明を行う。境界適合格子を用いた手法については、本章の最後で詳細に説明する。

・固定矩形格子を用いた手法について

相界面のシミュレーションは、最近では相分離や結晶成長などのシミュレーションが話題になることも多いが、流れのシミュレーションと関連した問題としては、気液界面流れをいかに解くかが始まりであった。最初に気液の自由界面流れを解く手法として開発されたものは、Harlow & Welch⁽¹⁾のMAC(Marker And Cell)法である。この手法は、その名の由来にもなっている通り、固定された矩形格子内において自由表面を表す Marker を配置し、その動きを追跡することにより自由界面流れを解こうとするものである。その後、Hirt & Nichols⁽²⁾によりVOF法が開発され、この手法の改良版が現在盛んに用いられている。これらの手法は、固定矩形格子内を通過する界面を何らかの手法で追跡する方法であり、最近、この発想の延長上にあるいくつかの新しい手法が開発されている。その代表的なものは、密度関数法と呼ばれるものである。この手法では、例えば、気相で1、液相で0という値をとる密度関数と呼ばれるものの移流によって界面を追跡する。VOF法もこれらの手法の1つと考えることもでき、VOF法の場合には、セル内での気相の体積比率(ボイド率)を密度関数と考えることに相当する。従って、VOF法の場合には密度関数が体積比率という物理量を表すため、数値計算上、質量保存の精度がよい。一般の密度関数法では、質量の保存は保証されておらず、界面追跡の精度は、密度関数の移流方程式を解く精度で決まる。従って、密度関数の移流方程式を解く際に、安定かつ精度の良い手法の適用が重要となり、数値拡散が小さくかつ安定した手法の使用が望まれる。移流方程式に対するCIP法⁽³⁾やTVD法の適用はこのような要請から来ている。

密度関数法に類似した手法として、Level Set 法^{(4)~(6)}がある。通常密度関数法が界面を急峻な関数で表現するのに対し、この手法では、界面からの距離を Level Set 関数として所有することにより、密度関数の移流に伴う数値拡散の影響を小さくしている。Level Set 法は、UCLAのOsherらを中心としたアメリカの応用数学者たちにより開発されてきた手法であり、自由界面追跡の精度評価などが数学的に正確になされており、移動境界流れを扱っている研究者の間で特に話題になっている。この手法は、単なる自由界面流れだけでなく、複雑な界面形状を持つ凝固などの相変化問題や画像処理などの分野にも適用されている。

以上、VOF法、密度関数法、Level Set 法など、固定矩形格子内を通過する界面の移動を、界面と関連づけて定義される関数の値の変化から追跡する手法を界面捕獲法と呼ぶ。

密度関数法と、MAC 法的な考えを両方取り込んでいる手法として、Tryggvason の界面追跡法^{(7)~(9)}がある。この手法では、気液界面を境界要素法での界面の様に、陽に表現する(2次元ではセグメント、3次元では3角形要素の集まり)。そのため、気液界面をラグランジェ的に追跡することができ、密度関数の移流による数値拡散を伴わない利点がある。さらに、界面を Indicator 関数で記述するという密度関数法的な概念をあわせ持っており、界面における密度や粘性及び表面張力のとびを、格子スケールで平滑化されたステップ関数やデルタ関数を用いて記述することにより、数値的安定性を達成している。

以上、固定矩形格子を用いた手法では、表面張力など気液界面に働く力は、N.S.方程式において界面における生成項として付加される。この際、VOF 法や界面を急峻な関数として表現する密度関数法では、界面の曲率を精度良くもとめるのが困難なため、界面形状の決定法や曲率の計算法については多くの研究がなされている^{(10)~(12)}。

3.3 気液界面に課される条件

連続体としての数学的定式化の際には、通常、界面は無限小の厚みを持つと見なされ、界面において様々な物理量のとびを考える。ここでは、混ざり合わない2流体において、界面での相変化が無い場合に関して、界面の移動方法および課される境界条件(運動学的条件と動力学的条件)について説明する。

3.3.1 界面追跡の方法について

有限差分(体積)法を用いた場合には、流れの支配方程式(連続の式、運動量保存式等)は、オイラー的に記述された偏微分方程式を用い、空間に配置された格子点上で支配方程式を離散化する。この場合においても、移動する界面を追跡する方法は、オイラー的視点に立つ必要はない。自由界面流れにおいては、界面の移動や変形を扱う手法は、大きく a)オイラー法、b)ラグランジェ法、c)ALE(Arbitrary Lagrangian-Eulerian)法の3つに分類できる。a) オイラー法とは、支配方程式の離散化同様、オイラー的視点に基づき界面の移動を追跡する。すなわち、前述の界面捕獲法の場合に対応し、空間に固定された格子内を移動する界面に関して、界面を表す関数(VOF 関数、Level Set 関数など)を移流することにより界面の移動を表現する方法である。b) ラグランジェ法は、界面上の流体粒子は常に界面上にとどまるという条件より、界面が要素によって陽に表現されているときに、その要素の移動速度に従って界面を移動させる方法である。c) ALE 法は、ラグランジェ法とオイラー法を組み合わせた方法であり、基本的なアイデアはラグランジェ法に近い。ラグランジェ法では、時間進行とともに、界面を表す格子点の密度に空間的な粗密が発生する問題点を持つが、ALE 法では、それを避けるのに、界面上の格子点を動かす方向を流体粒子の移動方向ではなく、数値計算上、より適した方向に移動させようとする方法である。

3.3.2 運動学的条件 (Kinematic Condition)

運動学的条件とは、移動する界面における質量保存の関係を記述したものであり、混ざり合わない2流体の界面においては、界面上の流体粒子は常に界面上にとどまるという重要な関係を与

える。運動学的条件は、流体 1 と流体 2 の界面において、流体 1 側の速度を $\mathbf{u}_1$ 、流体 2 側の速度を $\mathbf{u}_2$ とすると、

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n} \quad (3-1)$$

と表される。この関係は図 3.1 より明らかなように、界面に垂直な方向における流速が、流体 1 側と流体 2 側で一致することを表している。また、界面における流体 1, 2 とは別に界面そのものの速度を $\mathbf{u}_s$ と仮に定義すると、以下の関係が成り立つ。

$$(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_s) \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_s) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3-2)$$

この式は、界面の移動速度に対する流体 1,2 の相対速度の法線方向成分が 0 になることを意味し、このことより、混ざり合わない流体 1,2 に関して、界面の接線方向の滑りを許した場合でも、界面上の流体粒子は、常に界面上にとどまることがわかる。

さて、以上の運動学的条件を用いて、界面の移動を行うわけであるが、界面の移動を a) オイラー的、b) ラグランジェ的、c) ALE 的に扱うかで、この運動学的条件の記述が異なってくる。

a) オイラー的(陰関数による表記)

界面の移動をオイラー的に扱う手法、すなわち界面捕獲法を用いた場合には、自由界面の形状を陰関数で表現する方法が適している。この場合、自由界面上の流体粒子群により形成される平面の方程式を、時間(t)と空間($\mathbf{x}$)の関数として、

$$F(t, \mathbf{x}) = \text{const.} \quad (3-3)$$

と与える。自由界面上の流体粒子は、移動後も自由界面上に存在することより、この式は時刻によらず界面上で常に成り立ち、これより、

$$\frac{DF}{Dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F = 0 \quad (3-4)$$

の関係が成り立つ。この式は、界面を表す関数 F の移流を表す方程式であるが、 F を ρ と読み変えれば、非圧縮性流体の質量保存の式に対応することがわかる。

b) ラグランジェ的

界面の移動をラグランジェ的扱う手法は、界面捕獲法とは異なり、界面を要素として陽に表記している界面追跡法に適した手法である。この場合、界面を構成している要素上の点をラグランジェ的に追跡し、界面上の流体粒子は常に界面上にあるという条件より、移動後の位置を新しい時刻での界面位置とする。すなわち、

$$\frac{dx_s}{dt} = \mathbf{u}_s \quad (3-5)$$

ここで、添え字 s は、界面上の値であることを示す。

この関係を用いて、界面上の点を移動させる。界面追跡法と言った場合、境界適合格子を用いて界面を追跡する方法と、固定格子内で形成された界面要素を移動する方法の2種類が考えられるが、境界適合格子を用いた場合は、上式の $\mathbf{x}_s$ 、 $\mathbf{u}_s$ は、界面を表す座標線上の格子点の位置と速度をそれぞれ表す。

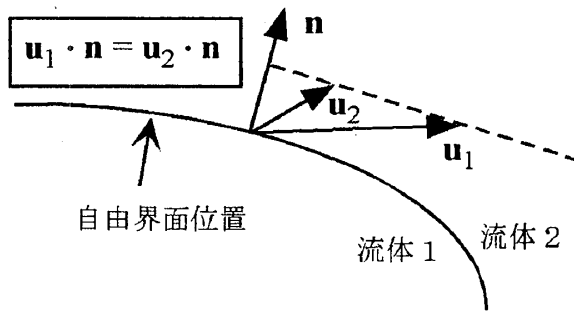


図 3.1 界面における運動学的条件

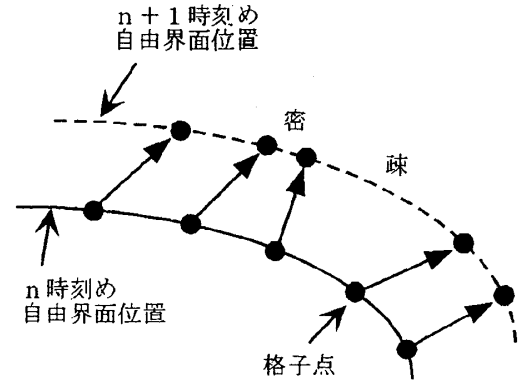


図 3.2 界面のラグランジュ的追跡

界面の追跡をラグランジュ的に行った場合、移動後の界面要素の形状が大きく歪んできたり、要素の空間的分布に粗密が生じ始め(図 3.2 参照)、数値的安定性や計算精度に問題を生じることがある。この場合には、界面要素の切り直しが必要となるが、境界適合格子を用いる場合には、通常、各タイムステップごとに界面格子の再配置を行う。この場合、ラグランジュ的に移動した格子点について、各点を結ぶ3次スプラインを形成し、その3次スプライン上で格子点を適切な位置に移動することにより再配置するのが、精度、安定性ともに優れた手法である。一般には、この様に格子の再配置をする場合も、次項で説明する ALE 法として分類される。

c) ALE 的(陽関数による表記)

この場合も、界面追跡法に適した表記である。この場合には、例えば、自由界面の形状をある基準位置からの高さとして、

$$z = h(t, x, y) \quad (3-6)$$

のように表す。この場合、 $F(t, x, y, z) = z - h(t, x, y)$ と置いて、a)陰関数表記のところで得られた関係を用いると、

$$\frac{DF}{Dt} = \frac{dz}{dt} - \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{dx}{dt} \frac{\partial h}{\partial x} - \frac{dy}{dt} \frac{\partial h}{\partial y} = w - \frac{\partial h}{\partial t} - u \frac{\partial h}{\partial x} - v \frac{\partial h}{\partial y} = 0 \quad (3-7)$$

すなわち,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = w - u \frac{\partial h}{\partial x} - v \frac{\partial h}{\partial y} \quad (3-8)$$

を得る。この式は、時間とともに界面の高さがどのように変化していくのかを表している。例えば、流下液膜の問題を境界適合格子を用いて解く場合に、界面の変形がさほど大きくなく、界面の高さが、位置の一価関数として与えられるときなどに、この表記による扱いが適したものとなる。また、界面の位置を記述する際に、その高さを物理空間の位置の関数として与えるのではなく、曲線座標系内すなわち計算空間内での位置 (ξ, η, ζ) の関数として記述することも可能である。この場合には、高さ h は

$$\zeta = h(t, \xi, \eta) \quad (3-9)$$

と記述され、また、界面位置の追跡は、次式によって行われる。

$$\frac{\partial h}{\partial t} = U_\zeta - U_\xi \frac{\partial h}{\partial \xi} - U_\eta \frac{\partial h}{\partial \eta} \quad (3-10)$$

ここで、 U_ζ, U_η, U_ξ は速度の反変成分と呼ばれ、座標線に直交する方向の速度成分である。

これらの手法では、界面の移動が、界面に交差する方向の座標線に沿って行われるため、ラグランジェ法で問題となる界面近傍の格子の歪みや、格子密度の粗密などの問題が生じにくい。

3.3.2 動力学的条件 (Dynamic Condition)

界面における動力学的条件とは、界面での運動量保存に関連して課される応力に関する条件である。表面張力の無視できない自由界面における応力の条件は、界面の法線方向に関して、

$$-p_1 + \mu_1 \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u}_1 + {}^t \nabla \mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{n} = -p_2 + \mu_2 \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u}_2 + {}^t \nabla \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{n} + \sigma \kappa \quad (3-11)$$

接線方向に関して、

$$\mu_1 \mathbf{t} \cdot (\nabla \mathbf{u}_1 + {}^t \nabla \mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{n} = \mu_2 \mathbf{t} \cdot (\nabla \mathbf{u}_2 + {}^t \nabla \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{n} + \mathbf{t} \cdot \nabla_s \sigma \quad (3-12)$$

となる。ここで、添え字 1,2 はそれぞれ、流体 1,2 側の値であることを示し、また、 σ は表面張力係数、 κ は界面の平均曲率を表す。この式における、 $\nabla_s \sigma$ の項は、表面張力係数が界面上で変化する場合に働く応力を表しており、この項の影響により与えられる効果は、Marangoni 効果と呼ばれる。さらに、気液自由界面の場合、気相の密度、粘性は、液相に対して十分小さいとされ、界面での気相側の粘性応力を無視し、気相側圧力 (p_{gas}) を一定と仮定し、次式が用いられる場合が多い。

法線方向：

$$-p_1 + \mu_1 \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u}_1 + {}^t \nabla \mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{n} = -p_{gas} + \sigma \kappa \quad (3-13)$$

接線方向：

$$\mu_1 \mathbf{t} \cdot (\nabla \mathbf{u}_1 + {}^t \nabla \mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \cdot \nabla_s \sigma \quad (3-14)$$

3.3.3 界面の曲率の計算法

気液界面において働く表面張力による応力は、表面張力係数と気液界面の平均曲率の積で与えられる。従って、界面における応力の釣り合い式において、表面張力による力が無視できない場合には、気液界面の平均曲率を精度良く計算することが重要となる。界面の平均曲率は、数学的には、

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad (3-15)$$

で与えられるが、この式の扱い方は、界面追跡の手法により異なってくる。以下にそれぞれの手法に適した界面の平均曲率の計算手法について述べる。

a) 固定格子を用いた場合

a)-1 界面捕獲法を用いた場合.

この場合には、界面は、密度関数などを用いて、 $\phi(x, y, z) = \text{const}$ と表現される。従って、界面における法線ベクトル $\mathbf{n}$ は、 $\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$ で与えられ、界面における平均曲率は、次式で与えられる。

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (3-16)$$

2次元の場合にその計算式を示すと次のようになる。

$$\kappa_{2D} = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) = \frac{\left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}}{\left(\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \right)^{3/2}} \quad (3-17)$$

a)-2 界面追跡法を用いた場合.

界面捕獲法と同様の固定格子を用いた場合でも、界面追跡法の場合には、気液界面を、固定格子上をまたがる界面要素として陽に有しているため、その情報を用いて界面の曲率の計算が可能となる。また、Tryggvason の界面追跡法などでは、気相と液相の判別をするため Indicator 関数を用いられており、これらを用いて、界面捕獲法と同様の計算式で界面の曲率を計算することも可能である。界面追跡法では、界面に接する方向に働く表面張力の合力として界面に垂直な方向の表面張力による応力を計算するのが、数値誤差が少ないと言われている。この場合には、界面の曲率を計算する必要はなく、界面要素の境界における接線(接平面)の方向を精度よく計算するの

が重要となる。

b) 境界適合格子を用いた場合.

この場合には、一般曲線座標系で、格子点群が $\mathbf{x}_s(\xi, \eta, \zeta)$ で与えられおり、界面は、ある座標面に沿って、例えば $\xi_s = \text{const}$ といった曲面上の離散的な点で、

$$\mathbf{x}_s = (x_s(\eta, \zeta), y_s(\eta, \zeta), z_s(\eta, \zeta)), \quad (3-18)$$

と与えられる。この場合、界面での法線ベクトル $\mathbf{n} = \mathbf{e}_\eta \times \mathbf{e}_\zeta$ を用いて、界面の平均曲率は、次式で与えられる。

$$\kappa = \frac{G \cdot L + E \cdot N - 2F \cdot M}{E \cdot G - F^2} \quad (3-19)$$

ここで、 $E = \frac{\partial \mathbf{x}_s}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_s}{\partial \eta}$, $F = \frac{\partial \mathbf{x}_s}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_s}{\partial \zeta}$, $G = \frac{\partial \mathbf{x}_s}{\partial \zeta} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_s}{\partial \zeta}$, $L = \frac{\partial^2 \mathbf{x}_s}{\partial \eta^2} \cdot \mathbf{n}$, $M = \frac{\partial^2 \mathbf{x}_s}{\partial \eta \partial \zeta} \cdot \mathbf{n}$, $N = \frac{\partial^2 \mathbf{x}_s}{\partial \zeta^2} \cdot \mathbf{n}$ である。

3.4 固定矩形格子を用いた各種数値計算手法

相界面のシミュレーションに関して、固定された矩形格子を用いて有限差分（体積）法により数値計算を行う場合について、a) 界面捕獲法と、b) 界面追跡法とに分けて、より細かな説明を行う。

a) 界面捕獲法.

まず、Level Set 法、密度関数法、VOF 法などを用いた場合に有効な基礎方程式の表記を行う。これらの手法では、ある関数(ϕ)を導入し、界面の位置を $\phi = c$ (一定)の曲線によって与える。また、基礎方程式は固定格子上で離散化され、方程式中に界面の位置は陽に現れてこない。界面での応力の飛びを表す表面張力の項は、運動量保存式中に付加項として取り込まれる。混ざり合わない2種の流体において、非圧縮の条件のもと、表面張力係数(σ)を一定とすると基礎方程式は、次式で表される。

$$\text{連続の式:} \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3-20)$$

$$\text{運動量保存式:} \quad \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u}) + \sigma \kappa \delta(\phi - c) \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (3-21)$$

また、密度や粘度の移流と関連して、次式で示される関数 ϕ の移流方程式が解かれる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = 0 \quad (3-22)$$

ここでは、種々の界面捕獲法のうち、比較的最近開発された手法であり、多くの研究者に利用されている Level Set 法^{(4)~(6)}についてさらに説明を行う。

Level Set 法:

Level Set 法では、界面を記述する指標として、界面からの距離を表す距離関数を用いる。多くの界面捕獲法では、界面を急峻な関数で表現するのに対し、この手法では、距離関数を用いることにより、関数の移流に伴う数値拡散の影響を小さくしている。ただし、Level Set 関数の距離関数としての特性は、時間進行とともに失われてしまう。従って、Level Set 関数の距離関数としての特性を維持するために、各時間ステップごとに再初期化と呼ばれる過程を行う必要がある(図 3.3 参照)。この過程は、他の界面捕獲法に比べ、計算手順を増やすこととなるが、密度関数の移流に伴う数値拡散の影響を小さくしたり、界面の曲率の計算精度を向上させるなど利点も多い。

Level Set 関数 ϕ の再初期化は、以下の過程で行われる。

$$\phi \text{ の再初期化 : } \quad \frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \frac{\phi_0}{\sqrt{\phi_0^2 + \varepsilon^2}} (1 - |\nabla \phi|) \quad (3-23)$$

再初期化⁽⁴⁾は、この式の定常解を各時間ステップごとに求めることによって行われる。この式の時間変数 τ は、物理的な時間ではなく、式(3-23)の定常解を計算するために導入された疑似時間である。式(3-23)の定常解が得られれば、 $|\nabla \phi| = 1$ 、すなわち ϕ が距離関数となっていることがわかる。

以上の再初期化により、Level Set 関数が距離関数であるという特性は保たれるが、時間進行とともに、数値誤差の蓄積から質量保存に対する誤差が無視できなくなる場合がある。この問題に対し、Chang ら⁽⁶⁾は、上記の再初期化の過程に加え、新たに初期面積（体積）への初期化を行なうことにより質量保存の精度を上げている。また、Sussman ら⁽⁶⁾は、再初期化の過程で界面の微小な移動が起きないための改良を行っている。

以上の再初期化により計算された、Level Set 関数 ϕ は、界面からの距離関数としての特徴を持つ。この ϕ を用いて、各格子点での密度や粘度、および運動量保存式中の表面張力による応力の項などを計算する。この際、 δ 関数やステップ関数を格子スケールで鈍らせた次に示す近似超関数を用いて、各物理量の計算を行う。

$$\delta_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} \frac{1}{2} (1 + \cos(\pi\phi/\varepsilon)) / \varepsilon & |\phi| < \varepsilon \text{ のとき} \\ 0 & \text{それ以外のとき} \end{cases} \quad (3-24)$$

$$H_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \phi < -\varepsilon \text{ のとき} \\ (\phi + \varepsilon)/(2\varepsilon) + \sin(\pi\phi/\varepsilon)/(2\pi) & |\phi| \leq \varepsilon \text{ のとき} \\ 1 & \phi > \varepsilon \text{ のとき} \end{cases} \quad (3-25)$$

これらを用いて、密度および粘性は次のようになる。

$$\rho(\phi) = \rho_0(\phi) + (\rho_1 - \rho_0)H_\varepsilon(\phi) \quad , \quad \mu(\phi) = \mu_0(\phi) + (\mu_1 - \mu_0)H_\varepsilon(\phi) \quad (3-26)$$

また、式(21)の δ 関数の代わりに上に示した $\delta_\varepsilon(\phi)$ が用いられ、運動量方程式が離散化される。

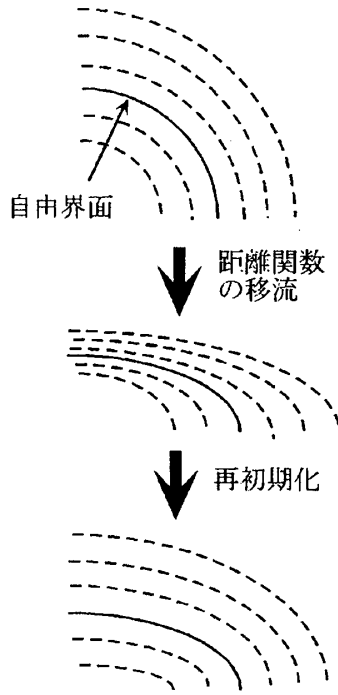
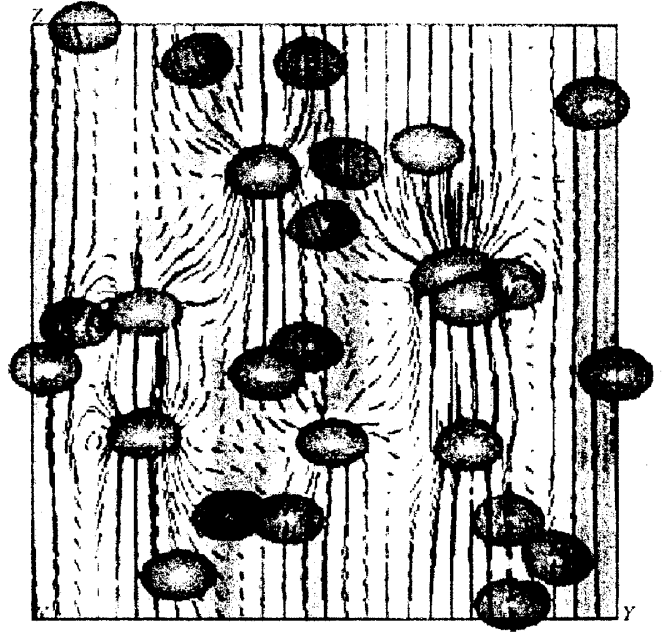


図 3.3 距離関数と再初期化

図 3.4 Tryggvason の界面追跡法による多数の上昇気泡群の直接数値シミュレーション⁽¹³⁾

b) 界面追跡法.

ここでは, Tryggvason の界面追跡法について説明を行う. 界面追跡法では, 界面を要素の張り合わせとして陽な形で有しているが, Tryggvason の界面追跡法の特徴は, さらに Indicator 関数と呼ばれる密度関数を利用して, 界面における物性値や物理量を周囲の格子点に分配し, 数値的安定を達成している点である. この手法においては Indicator 関数の値と界面の位置の関係は, 以下のようになっている.

Indicator 関数は, 通常の密度関数法と同様, 2種類の流体でそれぞれ, 0, 1の値をとるステップ関数である. この手法では, Indicator 関数($I(x)$)の勾配ベクトル $\mathbf{G}(x)$ を次式により計算する.

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \nabla I = \sum_i \delta_\epsilon^p(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(i)}) \mathbf{n}^{(i)} \Delta s^{(i)} \quad (3-27)$$

ここで, $\delta_\epsilon^p(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(i)})$ は, 式(24)で与えた近似超関数を多次元にしたものである. すなわち, 式(24)で与えられる $\delta_\epsilon(\phi)$ を用いると, 3次元の場合の $\delta_\epsilon^{3D}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(i)})$ は, 次式で与えられる

$$\delta_\epsilon^{3D}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(i)}) = \delta_\epsilon(x - x^{(i)}) \cdot \delta_\epsilon(y - y^{(i)}) \cdot \delta_\epsilon(z - z^{(i)}) \quad (3-28)$$

この時点で, 本来不連続な界面の条件が格子スケールで鈍らされたことになっており, 数値的安定をもたらしている. さらに, 式(27)の発散をとると, 次式が得られる.

$$\nabla^2 I = \nabla \cdot \mathbf{G} \quad (3-29)$$

このポアソン方程式を数値的に解き, 各格子点での $I(x)$ の値を求めることになる. さらにこの $I(x)$ の値を用いて, 各格子点における密度及び粘性は次式により決定する.

$$\rho(x) = \rho_0(x) + (\rho_1 - \rho_0)I(x) \quad , \quad \mu(x) = \mu_0(x) + (\mu_1 - \mu_0)I(x) \quad (3-30)$$

この様に密度や粘性の決定方法は、密度関数法と同様となる。しかし、界面追跡法では界面を陽に有しているため、格子点で求められた速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ を用いて、界面セグメントの速度 $\mathbf{U}(\mathbf{x}^{(i)})$ を次式により計算し、界面の移流をラグランジェ的に行うことができる

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}^{(i)}) = \int \mathbf{u}(\mathbf{x}) \delta_\varepsilon^\beta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(i)}) dV \quad (3-31)$$

これにより数値粘性の導入が必要となる密度関数の移流方程式を解く必要がなくなる。また、Front Tracking 法では、多次元のデルタ関数により界面での表面張力の影響を表現するため、式(21)とは異なり、次式のようにデルタ関数を積分した形式で表面張力による応力のとびが与えられる。

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u}) + \int \sigma \kappa \delta_\varepsilon^\beta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(i)}) \mathbf{n} ds \quad (3-32)$$

以下にアルゴリズムの概要を示す。

アルゴリズム

- (1) Indicator 関数に関するポアソン方程式を解き、密度場、粘度場を決定する。
- (2) 固定格子上で、N.S.方程式を離散化し、解く。(表面張力の項は、N.S.方程式中に含まれる)
- (3) 界面要素をラグランジェ的に移動させ、その後、要素の再構成を行う。
- (4) 以上、(1)～(3)の過程を時間進行させながら繰り返す。

100 個以上の変形気泡に関する直接数値計算はこの手法によるものが主である。計算例を図 3.4 に示しておく。

3.5 境界適合格子を用いた一般曲線座標系による方法

個々の分散相に働く抗力、揚力、付加質量力、履歴力などの種々の力を定量的に見積もるのに適した手法は、境界適合格子を用いた手法である。境界適合格子を用いた場合には、界面上で正確に速度や応力の条件が与えられるため、界面追跡の精度は、固定矩形格子を用いたものより良くなる。特に、粒子や気泡などの分散相に働く揚力や履歴力など、抗力に比較すると小さな値となる物理量の高精度計算は、境界適合格子によるものが主流となっている。

境界適合格子を用い、速度と圧力を基礎変数として一般曲線座標系による数値計算をする場合、用いる速度成分としては、カーテシアン成分と反変・共変系の成分が考えられる。カーテシアン成分による表記とは、曲線座標系による解析においても、曲線座標系に関係ないカーテシアン基底($\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$)に対する成分を用いるもので、この場合には基底ベクトルが空間的に変化せず、速度ベクトルの曲線座標系における空間微分の成分表記が、スカラー量の場合と同じ表記になる。

一方、反変・共変系の成分とは、曲線座標の座標線に沿って定義される共変基底ベクトル

と関連付けて定義される成分である。そのため、座標線が曲率を持つとそれに伴って基底ベクトルの方向も変化し、基底ベクトルの空間微分を考える必要が出てくる。さらに時間とともに格子の形状が変化する場合には、基底の時間方向変化も考慮する必要がある、反変・共変系の成分を用いた場合には、基礎方程式の成分表記が煩雑になるという欠点を持つ。

境界適合格子を用いた曲線座標系による数値解析は航空機・自動車などを始めとする物体回りの流れの解析を中心に発展してきた。これらの系では、固体壁表面で速度滑りなしのディレクレ条件が与えられ、カーテシアン成分と反変・共変系の成分を用いたときの境界条件に大きな差が生じないため、基礎方程式の表記が簡潔であるカーテシアン成分による解析が主流となっている。しかし、自由界面流れに関しては、界面における境界条件が界面の接線方向と法線方向、それぞれの方向の応力の釣り合い式で記述されるため、その方向に関連付けて定義される反変・共変系の成分を用いた方が、より簡潔な境界条件の表記となる。また、反変成分は界面を横切る流束とも関連付けられるため、コントロールボリュームによる定式化にも適している。従って、自由界面流れでは、反変・共変系の成分を用いる利点が多い。ただし、曲線座標系で数学的に定義される共変基底ベクトルは、カーテシアン基底と座標変換行列で関連づけられ、必ずしも単位ベクトルとなっていない。そのため、形成された境界適合格子の格子密度に粗密があると、それにともない基底ベクトル自身の大きさが変化してしまうことになる。格子の粗密による基底ベクトルの大きさの変化は、速度一定の一様流を一定の大きさとして認識しないため、数値誤差の要因となりうる。このような誤差をさけるため、共変基底ベクトルを単位ベクトルに規格化し、物理量として速度の次元を持つように定義された成分を反変速度物理成分と呼ぶ。反変速度物理成分による表記は、普通の反変速度成分（数学成分）による表記よりさらに、基礎方程式の成分表記を煩雑なものにする^[9]が、格子の粗密に対する数値計算の安定性に優れており、変形気泡など自由界面を持つ問題に対して高精度かつ安定なスキームを構築するのに適した手法となる。

3.5.1 変形上昇気泡のシミュレーション

前節で説明した通り、境界適合格子を用いた計算は、単一気泡に働く力を精度良く計算するのに優れている。しかし、数値計算を行う際、界面での境界条件を正確にかつ適切に与えないと数値的不安定を招きやすい。著者らは、気液界面での法線方向応力の取り扱いに独自の緩和法を適用することにより、それまで困難とされてきた境界適合格子による上昇気泡の非定常運動の数値計算に成功した。（文献(17)参照）。また、開発された手法を用いて気泡のジグザグ・らせん運動やせん断流中の変形上昇気泡に働く揚力⁽¹⁶⁾、体積変化を伴う気泡の上昇運動⁽¹⁸⁾などの解析を行ってきた。これらの中には、非直交格子を用いた3次元数値計算⁽¹⁶⁾も含まれるが、ここでは、直交曲線座標系による変形上昇気泡の軸対称計算について計算手法と計算結果について簡単に紹介する。

3.5.2 数値計算手法

数値計算を行う際に、気相と液相に対して以下のことを仮定した。

仮定：

- (1) 気液界面の表面張力係数は一定とする。
- (2) 液相は非圧縮ニュートン流体とする。
- (3) 液相の密度および粘性は、気相と比べ十分大きいとする。
- (4) 上昇する気泡の体積は一定とする。

計算アルゴリズム：

- (1) 気泡に関して適当な初期条件を設定する。ここでは、球形気泡が速度 0 で無限流体中に放置されている状態を初期条件とした。
- (2) 気泡界面が、計算格子の一境界に一致するように直交曲線格子を形成する。直交曲線格子の形成には、Duraismami ら⁽¹⁹⁾により開発された共変ラプラス方程式による手法を用いる。この手法では、通常のラプラス方程式を用いた手法と異なり、局所的に格子密度を高くするような格子密度の調節が可能である。
- (3) 与えられた境界条件、形成された格子のもとで、直交曲線座標系で表記された Navier-Stokes 方程式を SIMPLER 法を用いて解く。この際、界面の法線方向の応力条件に慣性緩和の概念を用いた反復法を導入し、精度を落とさず界面の法線方向速度の計算を行う。詳細は文献[4]参照。
- (4) (3)で求めた界面の移動速度に従い、気液界面上の格子点をラグランジェ的に移動させる。
- (5) 以上(2)～(4)の操作を時間進行させながら繰り返す。

基礎方程式：

流れ場の計算は、直交曲線座標系において、基礎変数として反変速度の物理成分を用い、空間微分項は 2 次精度中心差分で評価し、SIMPLER 法を適用する。 u_ξ, u_η ：反変速度物理成分， h_ξ, h_η ：スケール因数， r ：軸からの距離として， (ξ, η) の直交曲線座標系で記述された基礎方程式を以下に示す。

(1) 質量保存式:

$$\frac{1}{h_\xi h_\eta r} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta r u_\xi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi r u_\eta) \right] = 0 \quad (3-33)$$

(2) 運動量保存式： ξ 方向成分

$$\frac{\partial u_\xi}{\partial t} + \frac{1}{h_\xi h_\eta r} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (h_\eta r u_\xi^2) + \frac{\partial}{\partial \eta} (h_\xi r u_\eta u_\xi) \right]$$

$$= -\frac{1}{\rho} \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial p}{\partial \xi} + \nu \frac{1}{h_\xi h_\eta r} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{h_\eta r}{h_\xi} \frac{\partial u_\xi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{h_\xi r}{h_\eta} \frac{\partial u_\xi}{\partial \eta} \right) \right] + S_{\xi \text{ conv}} + \nu \frac{S_{\xi \text{ vis}}}{h_\xi h_\eta r} \quad (3-34)$$

$$\text{ここで, } S_{\xi \text{ conv}} = \frac{u_\eta^2}{h_\xi h_\eta} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} - \frac{u_\xi u_\eta}{h_\xi h_\eta} \frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} \quad (3-35)$$

$$S_{\xi \text{ vis}} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(u_\eta \frac{r}{h_\xi} \frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(u_\eta \frac{r}{h_\eta} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} \right) + \frac{r}{h_\xi} \frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} \frac{\partial u_\eta}{\partial \xi} - \frac{r}{h_\eta} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} \frac{\partial u_\eta}{\partial \eta} - \frac{u_\eta}{r} \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial r}{\partial \eta} - \frac{u_\xi}{h_\xi} \left[\frac{r}{h_\eta} \left\{ \left(\frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} \right)^2 \right\} + \frac{h_\eta}{r} \left(\frac{\partial r}{\partial \xi} \right)^2 \right] \quad (3-36)$$

と与えられる。これら2つの項は、反変速度物理成分を用いたことにより、空間的に変化する基底の影響として現れた追加項である。

η 方向の運動量保存式には、上式において ξ と η を入れ替えた式を用いる。

・時間微分項

本計算では、格子の移動を伴うために、物理空間での時間微分項は計算空間での時間微分項と格子の移動に伴う項とに分離される。 ξ 方向の速度 u_ξ について、計算式を示すと次式のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_\xi}{\partial t} &= \frac{\partial u_\xi}{\partial \tau} + u_\eta \left(\frac{h_\xi}{r_\xi} \right) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{x_\xi}{h_\xi} \right) \\ &- \frac{\partial x}{\partial \tau} \left[\frac{1}{h_\xi h_\eta} \left(r_\eta \frac{\partial u_\xi}{\partial \xi} - r_\xi \frac{\partial u_\xi}{\partial \eta} \right) \right] - \frac{\partial r}{\partial \tau} \left[\frac{1}{h_\xi h_\eta} \left(-x_\eta \frac{\partial u_\xi}{\partial \xi} + x_\xi \frac{\partial u_\xi}{\partial \eta} \right) \right] \\ &- \frac{\partial x}{\partial \tau} \left[\frac{u_\eta}{h_\xi h_\eta} \left(\frac{r_\eta}{h_\eta} \frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} + \frac{r_\xi}{h_\xi} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} \right) \right] - \frac{\partial r}{\partial \tau} \left[\frac{u_\eta}{h_\xi h_\eta} \left(\frac{x_\eta}{h_\eta} \frac{\partial h_\xi}{\partial \eta} + \frac{x_\xi}{h_\xi} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} \right) \right] \end{aligned} \quad (3-37)$$

ここで, $x_\xi = \frac{\partial x}{\partial \xi}$, $x_\eta = \frac{\partial x}{\partial \eta}$, $r_\xi = \frac{\partial r}{\partial \xi}$, $r_\eta = \frac{\partial r}{\partial \eta}$ である。

この式において、右辺、第3,4項は、格子移動に伴う成分の変化量を表し、速度のカーチアン成分を用いた場合にも現れる項である。右辺第2項は、基底の時間的变化を、第5,6項は格子移動に伴う基底の空間的变化を表し、これらの項は反変・共変系のベクトルを用いているために現れてくる項である。

境界条件：

気泡表面では、以下の境界条件が課される。(ξ方向が気泡表面に沿った方向、η方向が気泡表面に垂直な方向である。)

・接線方向応力条件：ここでは気液界面は、不純物の影響のない自由表面としているので、界面でせん断応力なしの条件として次式が与えられる。

$$\frac{h_\xi}{h_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{u_\xi}{h_\xi} \right) + \frac{h_\eta}{h_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{u_\eta}{h_\eta} \right) = 0 \quad (3-38)$$

・法線方向応力条件：気液界面での法線方向の応力の釣り合い式は、気液界面での液相側の圧力と気泡内部の圧力、方線方向粘性応力、表面張力によって次式のように表される。

$$-p + 2\mu e_{\eta\eta} = -p_0 + \sigma(\kappa_\xi + \kappa_\phi), \quad \left(\text{ここで, } e_{\eta\eta} = \left(\frac{1}{h_\eta} \frac{\partial u_\eta}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi h_\eta} \frac{\partial h_\eta}{\partial \xi} \right) \right) \quad (3-39)$$

主曲率 κ_ξ, κ_ϕ は、Ryskin & Leal⁽²⁰⁾に従い、界面に接する方向に離散化を行い、以下のように計算する。

$$\kappa_\xi = \frac{1}{h_\eta^3} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial^2 r}{\partial \xi^2} - \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} \frac{\partial r}{\partial \xi} \right), \quad \kappa_\phi = -\frac{1}{rh_\xi} \frac{\partial x}{\partial \xi} \quad (3-40)$$

3.5.3 計算結果

計算結果の検証のため、Reynolds(Re)数=2~200, Weber(We)数=2~15の広い範囲にわたり、Bhaga&Weber⁽²¹⁾(B&W), Hnat&Buckmaster⁽²²⁾(H&B)による実験およびRyskin & Leal⁽²⁰⁾(R&L), Takagi et.al⁽²³⁾(TP&M)による定常解の数値計算との比較を行った。なお、計算領域は、気泡径の25~40倍を遠方境界としてとり、Re=5以下の低Re数のときに40倍の広い領域を確保した。比較の例を図3.5に示すが、図に示されている通り、気泡形状に対して非常に良い一致が得られたおり、終端速度の比較も誤差が5%以内と良好な一致が得られている。

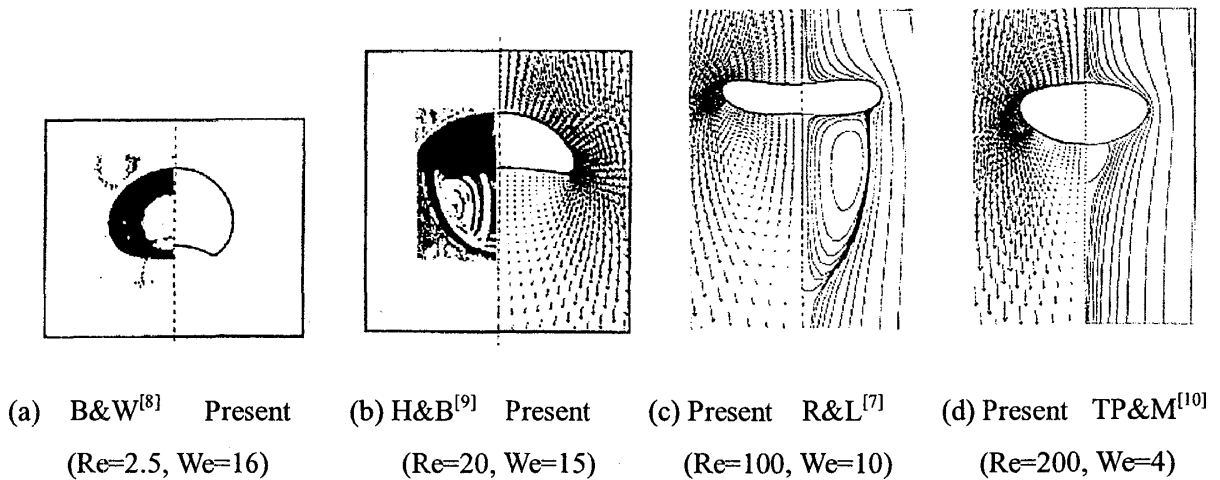


図 3.5 実験や他の数値計算結果との比較

この計算条件のもと、パラメータを振ると異なったタイプの気泡の挙動が得られる。1つめのタイプは、変形しながら軸対象な定常解へと達する気泡の場合にもっともよく見受けられるタイプである。気泡の変形がゆっくりと進行し、形状振動なしに定常解へと到達する。2つめのタイプは、気泡の形状振動が初期に成長するが、液体の粘性により形状振動は減衰し定常解へと到達する。これに対し3つめのタイプは、2つめのタイプよりやや Reynolds 数が高く、Weber 数が低い条件で起こり、気泡が上昇するにつれ形状振動が成長していき、やがて計算が不安定になるタイプである。この計算結果からのみだと3つめの系は数値計算上の不安定なのか物理現象として不安定なのかはわからない。ところで、静止流体中を上昇する気泡は、そのサイズが小さい場合には、一直線の上昇運動を行うが、あるサイズを超えるとジグザグ・らせん運動をすることが知られている。この現象は、Re 数の増加とともに現れる気泡からの渦の放出により引き起こされると説明できる。しかし、表面でせん断応力なしの条件が課される気泡では、球形を保つ限り剛体球に現れるような剥離渦が存在せず、現象は剛体球の場合より複雑である。上記の3つ目のタイプは、実験においてジグザグ運動が現れる条件であり、は直線運動からジグザグ運動への遷移点近傍の条件における数値計算である。これらの計算結果は、計算で現れる軸対称な気泡形状の不安定(形状振動)が、気泡のジグザグ運動と関係している可能性を示唆している。実際、同条件で3次元計算を行うと、初期に気泡形状の不安定が成長し、やがて3次元運動へと遷移していくのがわかる。すなわち、この条件において発生する気泡のジグザグ運動は、気泡形状の軸対称な不安定性がトリガーとなって引き起こされると考えられる。

3.6 おわりに

本稿では、固定格子を用いて移動する界面を扱う手法を中心に説明を行った。固定格子を用いた場合には、界面捕獲法の Level Set 法においても、界面追跡法の Tryggvason の方法においても、平滑化デルタ関数を用いて格子スケールで鈍らされた界面を扱うことにより計算の安定性を保っている。最近、これらの手法の延長上にある手法として、格子スケールで鈍らされた界面を求める際に界面における自由エネルギーの概念を導入した Phase Field 法⁽¹⁴⁾が話題となっている。また、Level Set 法の延長上にある手法としては、鈍らされた界面により計算精度が下がるのを避けるため、界面法線方向と接線方向に境界条件を分離し、境界条件の精度を向上させるために仮想的な流れ場を解く Ghost 流体法⁽¹⁵⁾と呼ばれる手法も話題を集めている。このように様々な手法の開発が行われているが、現時点では、液体中を上昇する気泡に働く力のうち抗力係数は、どのような手法を用いても精度良く計算ができるようになってきた。しかし、球形気泡に働く揚力係数など微弱な量になると境界適合格子による結果のみが信頼できる値を与えている。一方で、境界適合格子による計算では、多数の気泡を含む系の計算には多くの困難を伴うため、結局のところ、混相流の基礎知識を十分に取得し、解析の対象とする現象や流れ場に合わせて、適切な数値計算手法を選定することが大切なこととなる。

3 章の参考文献

- (1) Harlow & Welch, *Physics of Fluids*, 8(1965), 2182.
- (2) Hirt & Nichols, *J. Comput. Phys.*, 39(1981), 201.
- (3) Xiao & Yabe, *Proc. Int. Symp. Comp. Fluid Dyn.*, (1993) 337.
- (4) Sussman, Smereka & Osher, *J. Comput. Phys.*, 114(1994), 146.
- (5) Chang, Hou, Merriman, & Osher, *J. Comput. Phys.*, 124(1996), 449.
- (6) Sussman & Smereka, *J. Fluid Mech* 341(1997), 269.
- (7) Unverdi & Tryggvason, *J. Comput. Phys.*, 100(1992), 25.
- (8) Esmaeeli & Tryggvason, *J. Fluid Mech*, 314(1996), 315.
- (9) Yu, Ceccio & Tryggvason, *Phys. Fluids*, 7(1995), 2608.
- (10) Brackbill, Kothe & Zemach, *J. Comput. Phys.*, 100(1992), 335.
- (11) Ashgriz & Poo, *J. Comput. Phys.*, 93(1991), 449.
- (12) Lafaurie et al., *J. Comput. Phys.*, 113(1994), 134.
- (13) Tryggvason et al., *J. Comput. Phys.*, 169(2001), 708.
- (14) Jacqumin, *J. Comput. Phys.*, 155(1999), 96.
- (15) Osher & Fedkiw, Springer-Verlag New York Inc., (2003), 175.
- (16) Takagi, S. and Matsumoto, Y., Proc. of the 2nd International Conference on Multiphase Flow, Kyoto, (1995), PD2: 9-16.
- (17) 高木周, 松本洋一郎, 黄華雄, 日本機械学会論文集 B 編, 61-586 (1996), 1976-1983.
- (18) Binze, Y., Prosperetti, A. and Takagi, S., *Phys. Fluids*, 15 (2003), 2640-2648.
- (19) Duraiswami, R. and Prosperetti, A., "Orthogonal mapping in two dimensions," *J. Comput. Phys.* 98 (1992), 254-268.
- (20) Ryskin, G. and Leal, L.G., *J. Fluid Mech.* 148(1984), 19-35.
- (21) Bhaga, D. and Weber, M.E., *J. Fluid Mech*, 105 (1981), 61-85.
- (22) Hnat, J.G. and Buckmaster, J.D., *Phys. Fluids*, 19 (1976) 182-
- (23) Takagi, S., Prosperetti, A. and Matsumoto, Y., *Phys. Fluids*, 6 (1994), 3186-3188.