K3-16

コロイド分散系シミュレーターKAPSELを用いたペーストの流れの記憶の数値実験

Numerical simulation for memory of flow in paste using colloidal suspension simulator KAPSEL

○石川諒馬 [1]，高橋秀典 [2]，松尾洋介 [3]，村松旦典 [4]，中原明生 [5]

*Ryoma Ishikawa[1], Hidenori Takahashi[2], Yousuke Matsuo[3], Akinori Muramatsu[4], Akio Nakahara[5]

It is found that a paste remembers the direction of the applied external force by its plasticity. For example, a paste remembers the direction of flow motion and, when it is dried, the desiccation cracks propagate parallel to the flow direction. However the mechanism of memory of flow is still unknown. In this study, we intend to reproduce the memory effect of flow by the simulator for dynamics of colloidal dispersions called KAPSEL. As a result, we understand that spatial distribution of velocity of particles becomes like sinusoidal waves in the span direction of the flow. At the same time, it is shown that an anisotropic network of particles is formed along the flow direction.

1. 緒言

干上がった沼地などでは等方的でランダムな乾燥亀裂パターンを見ることができる．近年の報告では，この亀裂を自在に制御し，異方的なパターンに変えることができるとされている [1]．この発見は科学として大変興味深く，工学への応用も期待されている．泥のような高濃度の固液混合液（ペースト）は塑性という性質を有することで，乾燥前に加えられた外力の方向を記憶することができる．まさに，これこそが亀裂パターンを制御する一つの重要な要素である．例えば，炭酸水酸化マグネシウムと純水から成るペーストの場合，乾燥前に１分だけ水平加振をしておくだけで，加振中につくられた流れの流線の方向を記憶し，流線に平行に亀裂が走る（流れの記憶）．

ペーストが流れを記憶できるメカニズムは確立されていない．顕微鏡で覗いても濁りで何が起こっているのか観察できない．そこで今回我々は，異方的な亀裂の種となるのは粒子配置の疎密構造であろうと仮定し，シミュレーションで液体と相互作用する粉粒子の動きを追跡することで，メカニズム解明を試みた [2]．

シミュレーションには，KAPSEL というコロイド・微粒子分散系の動的現象を計算するために開発されたものを利用した [3]．KAPSEL は，OCTA（ソフトマテリアルからなる機能材料の設計を目的に開発されたシミュレーションシステム）のインターフェースを一部利用している [4]．

2. ＫＡＰＳＥＬの基礎方程式

KAPSEL は，粉粒子と溶媒の運動を連動させるモデルとして，粒子表面に近接する格子点状上に表面からの距離に応じた補助変数を置いて界面位置を指定する方法で粗視化し計算の効率化を図っている（補助関数 $\phi = \sum_{i=1}^{N} \phi_i$（粒子領域で$\phi = 1$，溶媒領域で$\phi = 0$））．

粘性率η，密度ρのニュートン流体中に分散した，N個の半径aの球状粒子の運動を考える．溶媒は非圧縮としてNS方程式に従って流速ベクトル$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \mathrm{t})$の時間変化を追跡し，微粒子は Langevin 方程式 [5] に従うものとして並進座標$\boldsymbol{R}_i(t)$，並進速度$\boldsymbol{V}_i(t)$，回転座標$\boldsymbol{Q}_i(t)$，角速度$\boldsymbol{\Omega}_i(t)$の時間変化を追跡する（粒子番号$i = 1, \cdots, N$）．

溶媒の運動方程式

$$\rho(\partial_t + \boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} = -\nabla P + \eta \nabla^2 \boldsymbol{u} + \rho \phi \boldsymbol{f}_{\mathrm{p}} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \quad (2)$$

ここで，$P(\boldsymbol{x}, t)$ は溶媒の圧力であり，$\phi \boldsymbol{f}_p$は分散粒子表面での境界条件を満たすための拘束力である．

微粒子の運動方程式

$$M_p \dot{\boldsymbol{V}}_i = \boldsymbol{F}_i^H + \boldsymbol{F}_i^{other} + \boldsymbol{G}_i^V \quad (3)$$

$$\boldsymbol{I}_p \cdot \dot{\boldsymbol{\Omega}}_i = \boldsymbol{N}_i^H + \boldsymbol{N}_i^{other} + \boldsymbol{G}_i^\Omega \quad (4)$$

i番目の粒子の運動が，粒子の質量M_p，慣性モーメント$\boldsymbol{I}_p$として上式に従い，$\boldsymbol{F}_i^H, \boldsymbol{N}_i^H$は微粒子が流体から受ける力とトルクであり，流体・微粒子間で運動量が保存するように$\phi \boldsymbol{f}_p$と関連づけられている．$\boldsymbol{F}_i^{other}, \boldsymbol{N}_i^{other}$は流体以外からの力とトルクを表し，$\boldsymbol{G}_i^V, \boldsymbol{G}_i^\Omega$は熱揺らぎにより粒子に働くランダム力とトルクである．

日大理工・院（前）・航空 [1]，日大理工・非常勤講師 [2]，日大理工・研究員 [3]，日大理工・教員・航空 [4]，
日大理工・教員・一般物理 [5]

3. シミュレーション結果

実験による亀裂の観察は真上から二次元的な状態を観る．同様にシミュレーションでも粒子配置の観察は Fig. 1 のように行う．なお，境界条件としては Lees-Edwards 周期境界条件 [6] を用いている．

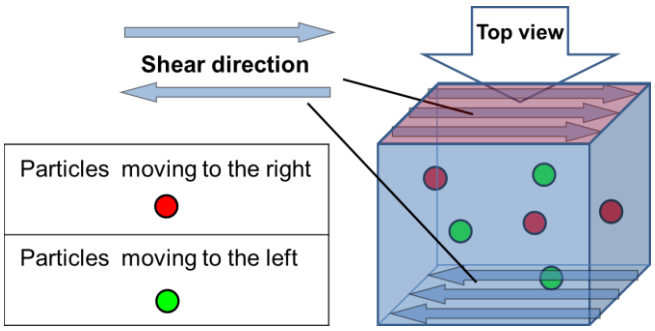

Fig.1 Numerical setup

今回はシステムサイズ$2^6 \times 2^6 \times 2^6$に対して一つの粒子の直径は 3 としている．システム全体に対する粒子の体積比率ρ，粒子間のポテンシャルエネルギーε，剪断速度$\dot{\gamma}$をパラメータとした相図を Fig. 2 に示す．

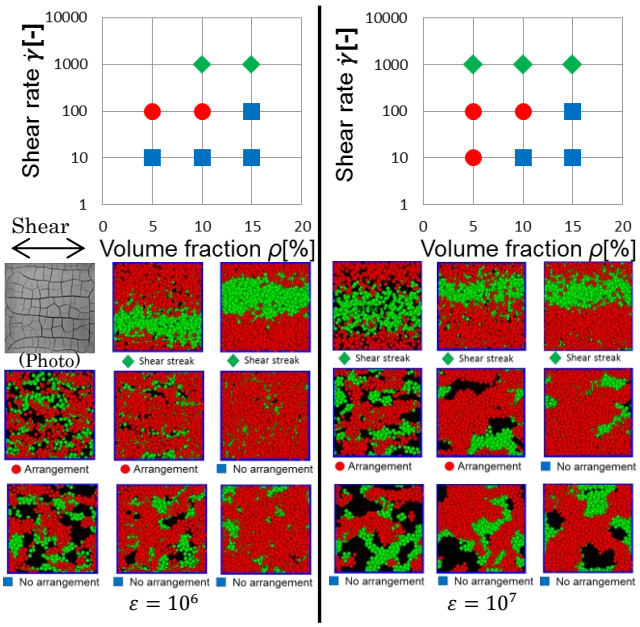

Fig.2 Morphological phase diagrams as functions of volume fraction of colloidal particles and shear rate at potential energy of $\varepsilon = 10^6$ and 10^7 . Each snapshot is taken as a top view. (Photo) Crack pattern of memory of flow obtained by experiment, ●Elongated clusters along span direction, ◆Shear streak, ■ No arrangement.

Fig. 2 からポテンシャルエネルギーによりクラスターを作る領域が確認できる(●)．ただし，いずれにおいても剪断速度が大きいとクラスターは保てていない(◆)．そして注目すべきなのは、対向流を作っていることである．我々は特に(◆)に着目し，スパン方向に長いシステム($2^8 \times 2^6 \times 2^6$)では対向流の縞の増加を確認した．また，粒子速度$v_y$の空間分布は正弦波状になり，粒子密度(density)の空間分布に異方的なネットワークが作られていることもわかった(Fig. 3)．

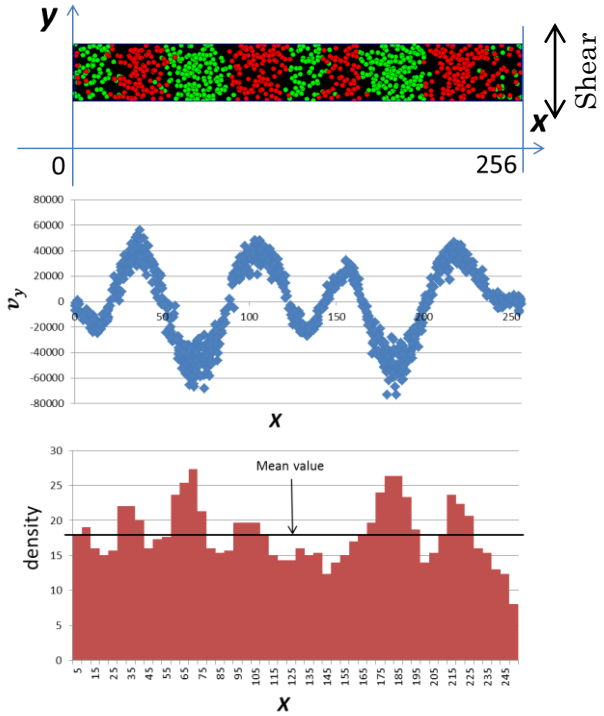

Fig.3 Snapshot of particle configuration taken as a top view and spatial distributions of velocity of particles and density.

4. まとめ

今回のシミュレーション結果と流れの記憶の亀裂パターンの比較により，流れの記憶の亀裂は対向流が作る疎密構造の疎の部分に入ると予想される．今後実験で検証することでメカニズムの解明に近づきたい．

参考文献

[1] 中原明生，松尾洋介，大信田丈志，「ペーストの記憶効果と破壊の制御への応用」日本物理学会誌 第 **70** 巻（2015 年）第 3 号 179-187.

[2] 石川諒馬，高橋秀典，松尾洋介，大竹智久，村松旦典，中原明生 「コロイド分散系シミュレーターＫＡＰＳＥＬを用いたペーストのメモリー効果の数値実験」第 58 回日本大学理工学部学術講演会（2014 年）．

[3] http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp

[4] http://octa.jp

[5] 岩波講座 現代物理学の基礎 6 第 5 章(久保亮五)．

[6] A. W. Lees and S. F. Edwards, J. Phys. C: Solid State Phys. **5**, 1921-1929 (1972).