

# マイクロ流路内における液液二相流の数値解析

岡山理科大学 工学部 バイオ・応用化学科

平野博之・王 嫻

# 目次

---

- はじめに
- 基礎式
- 無次元化
- 計算方法
- 計算結果
- 実験結果
- 結言

# はじめに

- 分析化学, 有機合成, 創薬, ゲノム解析などの分野
  - $\mu$ -TAS, Lab-on-a-chip
    - 微小流動を利用し, 単一基板上で全行程を行う
- マイクロスケールの特徴
  - 粘性力や界面張力などの表面力(その力の大きさが表面積に比例するもの)  $\gg$  慣性力などの体積力(その力の大きさが体積に比例するもの)
  - $L^2 \gg L^3$ は無視小
  - 拡散距離が短い
  - 多相問題では, 試料体積に対し接触界面積の割合が大きくなる.

# $\mu$ -TAS

- Micro Total Analysis System: ポンプ, バルブ, センサなどを小型化・集積化した化学分析システム. 高感度であるので医療や環境などの分野において, とくに特定物質の測定に有利. 最近は大量生産にも対応できつつある.
  - サンプルが少量で済む
  - 反応時間の短縮が可能
  - 測定の自動化
  - 装置の小型化
  - 装置のディスポーザブル化
  - 手間を含む低コスト化

# Lab-on-a-Chip

## Laboratory on a Chip

$\mu$ -TASと同様にチップ上にポンプ, バルブ, リアクターなどさまざまな機能を微小化, 集積化させたシステム. 分析のみが主な目的ではなく, チップ上で**化学合成**などを行い, より高速, かつ高効率な合成システムの構築などをも目的としたもの. 基本的に $\mu$ -TASと同義.

# マイクロ化学チップ

## ■ ICチップの登場

- 計算機や各種通信機器などの小型化が実現

## ■ マイクロ化学チップ

- 化学コンビナートの小型化を目指す
- 基本となるモジュールを平面内で連結, あるいは立体的に積層することで量的問題も解決できる.
- 独立した基本モジュールにおいては, 扱う量が少ないので, 漏れ(毒性), 爆発などの危険性を大幅に軽減できる.

# エレクトロニクスとマイクロ化学チップ

回路	導線	マイクロチャンネル
素材	金属線	液体(流体)
キャリア	電子	分子, イオン
実現可能なこと, 応用分野	計算・情報処理 (演算)	化学分析, 有機合成, 化学工学など
社会・産業への寄与	科学技術計算によるシミュレーション技術の開発, 膨大な量の情報の処理・制御	複雑な工業装置の小型化 危険(毒性・爆発)の軽減

# 化学操作のマイクロ化

## ■ 微小空間の特性

- 短い拡散距離
- 大きな比界面積
- 小さな熱容量
- 低レイノルズ数

## ■ マイクロ単位操作

- 混合・反応, 相合流, 抽出, 相分離



# チャンネルの分類

conventional channels	: $D > 3 \text{ mm}$
mini channels	: $3 \text{ mm} > D > 200 \mu\text{m}$
<b>micro channels</b>	<b>: <math>200 \mu\text{m} &gt; D &gt; 10 \mu\text{m}</math></b>
transitional micro channels	: $10 \mu\text{m} > D > 1 \mu\text{m}$
transitional nano channel	: $1 \mu\text{m} > D > 0.1 \mu\text{m}$
nano channel	: $0.1 \mu\text{m} > D$

D: smallest channel dimension

# 必要となる技術

- マイクロ・ナノオーダーの加工技術
- 流体制御
- マイクロ化学の知識
- 定量分析技術
- 表面処理
- 実装技術
- システム間の制御

# 基礎式

## ■ 流体の取り扱い

- 非圧縮性ニュートン流体
- 相互溶解しない2種類の流体(片方は水を想定)  
がYあるいはT字流路で合流
- 標準状態(1 atm, 25°C)

## ■ 計算条件

- 重力を無視(極めて薄い領域)
- 2次元数値計算

# 支配方程式 (有次元)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad \text{or} \quad \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{\partial(vC)}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\rho} f_{svx}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\rho} f_{svy}$$

$$\rho = \rho_2 + C(\rho_1 - \rho_2)$$

$$\mu = \mu_2 + C(\mu_1 - \mu_2)$$

$C$  : 1 for fluid 1, 0 for fluid 2

# 界面モデル

## CSF モデル

$$\vec{f}_{sv} = \sigma \kappa \frac{\rho}{(\rho_1 + \rho_2)/2} \nabla C$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$$

- $\vec{f}_{sv}$ : 体積力: 単位界面積あたりに働く界面張力を与える
- $\sigma$ : 界面張力 [N/m]
- $\kappa$ : 界面における局所的な曲率 [1/m]
- $\hat{\mathbf{n}}$ : 界面に対する単位法線ベクトル

# 次元解析

## ■ Hellums and Churchill の方法

- 無次元変数( $X$ ) = 有次元変数( $x$ ) / 参照値( $L$ )  
→  $x = X L$
- 支配方程式, 計算条件に $x=XL$ を代入して整理することで無次元数を導く
- 機械的な導出が可能

## ■ 現象の相似性

- 幾何学的形状が相似
- 現象を支配する無次元数が等しい

# 支配方程式 (無次元)

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \frac{\partial(UC)}{\partial X} + \frac{\partial(VC)}{\partial Y} = 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = -\frac{1}{\bar{\rho} + C(1 - \bar{\rho})} \frac{\partial P}{\partial X} + \frac{\bar{\mu} + C(1 - \bar{\mu})}{\bar{\rho} + C(1 - \bar{\rho})} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) + \frac{2\Gamma}{1 + \bar{\rho}} (-\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}) \frac{\partial C}{\partial X}$$

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} + U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} = -\frac{1}{\bar{\rho} + C(1 - \bar{\rho})} \frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{\bar{\mu} + C(1 - \bar{\mu})}{\bar{\rho} + C(1 - \bar{\rho})} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \right) + \frac{2\Gamma}{1 + \bar{\rho}} (-\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}) \frac{\partial C}{\partial Y}$$

$$X = \frac{x}{x_a}, Y = \frac{y}{x_a}, U = \frac{u}{u_a}, V = \frac{v}{u_a}, \tau = \frac{t}{t_a}, P = \frac{p}{p_a},$$

$$x_a = h, u_a = \frac{\mu_1}{\rho_1 x_a}, t_a = \frac{x_a}{u_a} = \frac{\rho_1 x_a^2}{\mu_1}, p_a = \frac{\mu_1^2}{\rho_1 x_a^2}, \bar{\rho} = \frac{\rho_2}{\rho_1}, \bar{\mu} = \frac{\mu_2}{\mu_1},$$

$$\Gamma = \frac{\sigma \rho_1 x_a}{\mu_1^2} = \frac{\sigma}{\mu_1 u_a} = \frac{1}{Ca}: \text{Capillary number}$$

$a$ : 参照値

# 計算方法

## ■ 流れ場

- 有限差分近似
- スタッカード格子
- HSMAC (SOLA) 法

## ■ 界面追跡

- Volume Of Fluid (VOF)
- Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC)
- Continuum Surface Force (CSF)



# 界面計算の精度

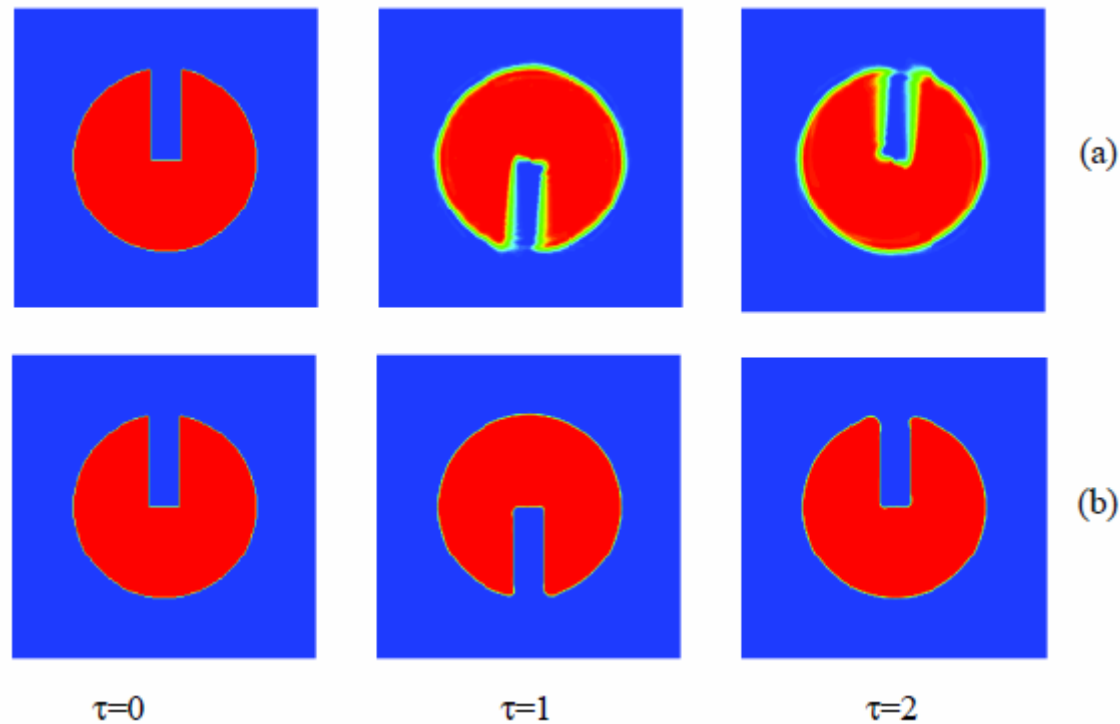
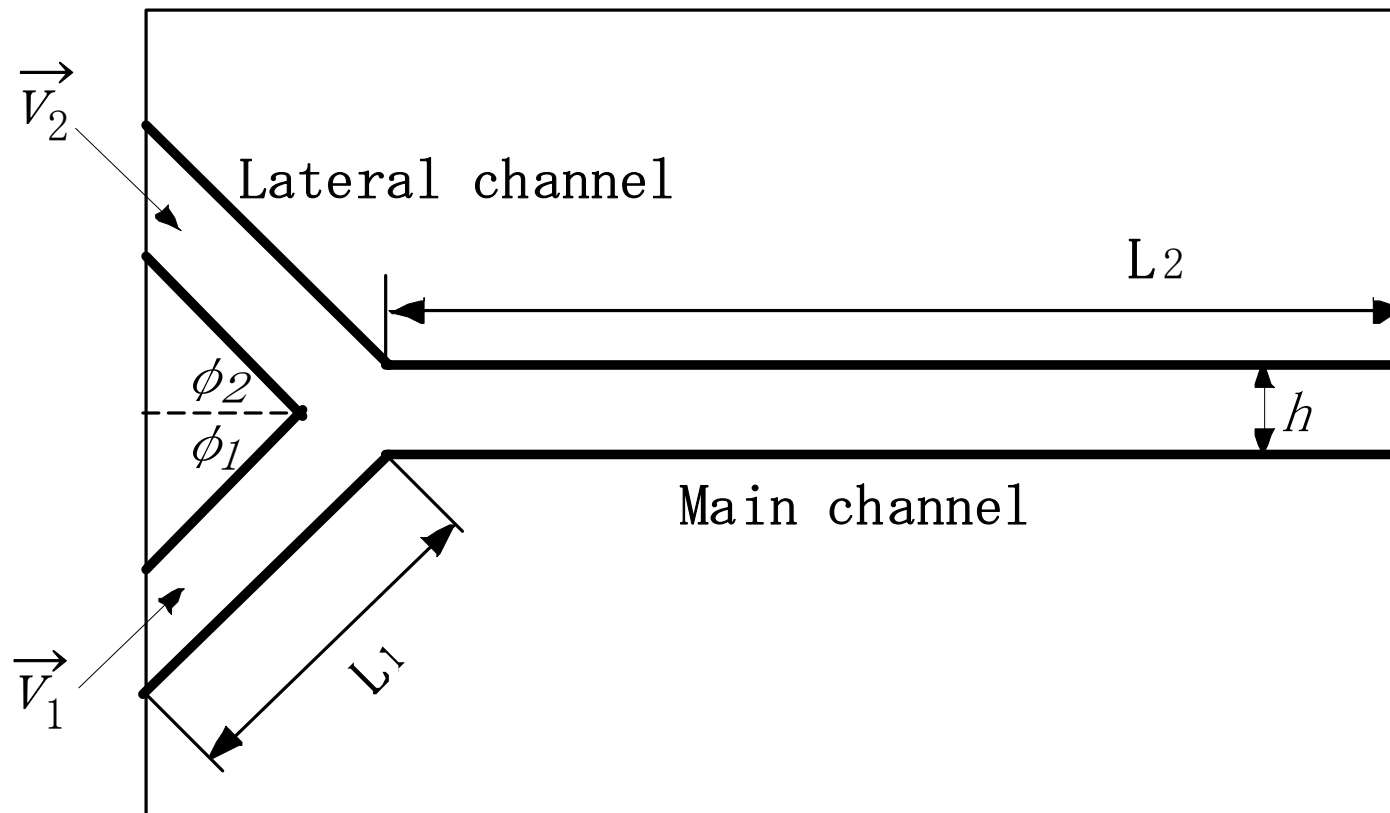


図 : VOF-PLIC による界面計算  
(Zalesak's slotted cylinder test problem:  $200 \times 200$  grids.)  
(a) conventional (b) PLIC

# 計算モデル



## 代表的な系についてのY字型流路の過渡応答の例



(a)  $\tau = 0$



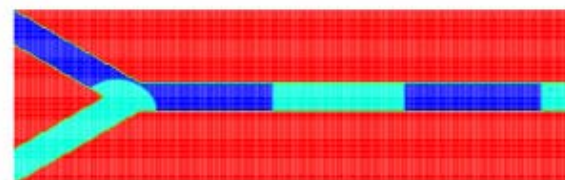
(b)  $\tau = 20$  (2.36 ms)



(c)  $\tau = 40$  (4.72 ms)



(d)  $\tau = 60$  (7.08 ms)



(e)  $\tau = 80$  (9.44 ms)



(f)  $\tau = 100$  (11.8 ms)

Figure 3: Instantaneous flow modes until  $\tau = 100$  at  $\Gamma = 250$ ,  $\Theta_{ca} = 90^\circ$  and  $\varphi_1 = \varphi_2 = 30^\circ$ .

# 実験方法

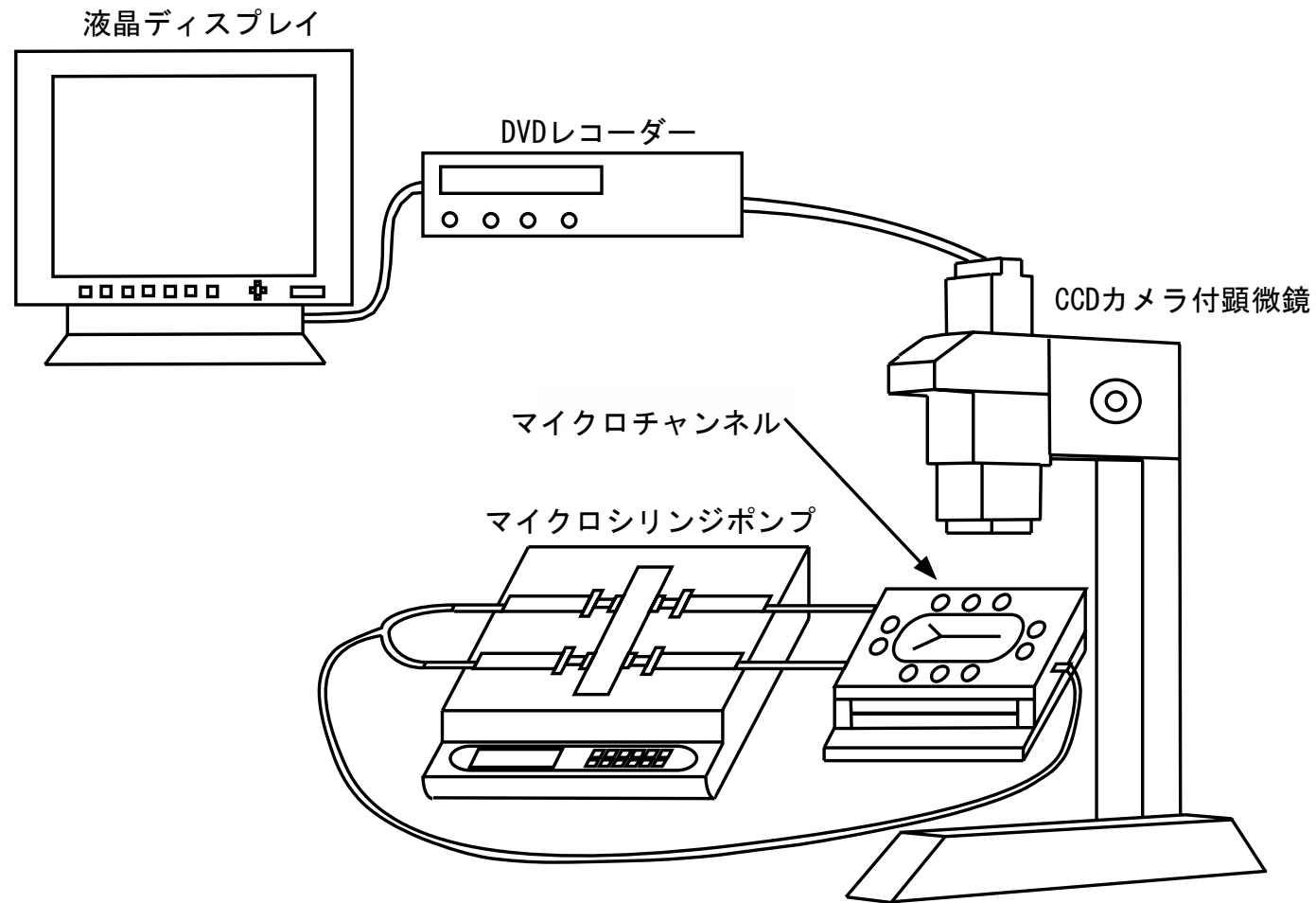


Fig. 実験装置図

# 実験対象

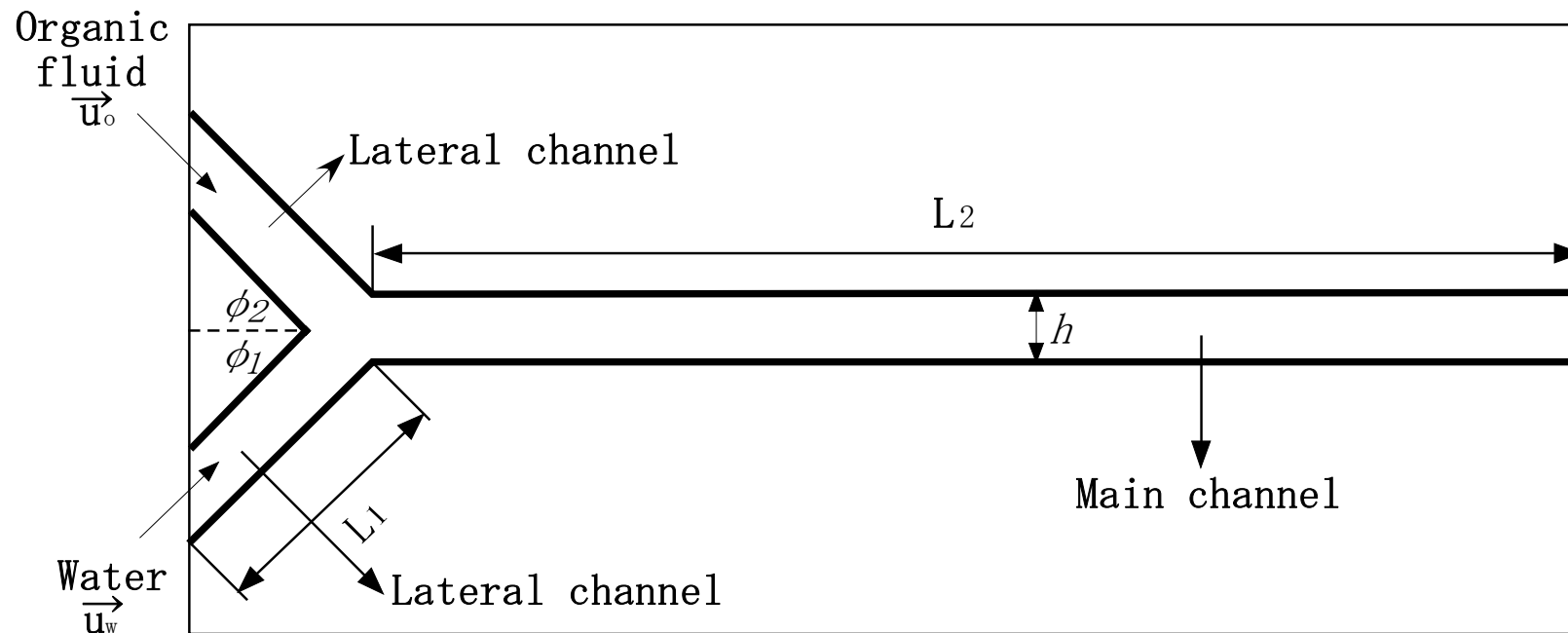


Fig. 流路内の対象モデル



図 実験結果  
(上側の赤い液体がcyclohexane, 下側の  
青い液体が水. 流路の幅と深さは $200 \mu\text{m}$ ,  
流入速度は $2.5 \text{ cm/s}$ .  $\text{Ca}=8.2 \times 10^{-4}$  )

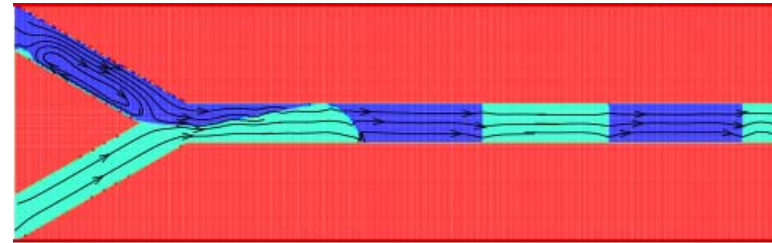


図 計算結果  
(青色がcyclohexane, 緑色が水.  
流路幅 $100 \mu\text{m}$ , 流入速度 $4.2 \text{ cm/s}$ .  
 $\text{Ca}=8.0 \times 10^{-4}$  )

# 結言

- Y字型マイクロ流路内で生じる2相のslug流に関する数値計算結果を行い、実験結果と比較検討したところ、slugが生成する場所、長さ、単位時間あたりの生成個数などに関して比較的良く一致した。

## 参考文献

北森武彦, 「早わかりマイクロ化学チップ」, 丸善株式会社, 2006

# 謝 辞

本研究は、文部科学省「都市エリア産学官連携促進事業(発展型)」の研究助成に与った。記して謝意を表す。