

Title	分子動力学シミュレーションを用いた電界共役流体の物性値の決定と流動理論の構築
Sub Title	Development of flow theory of electro-conjugate fluid based on the calculation of physical properties using molecular dynamics simulation
Author	竹村, 研治郎 (Takemura, Kenjirō)
Publisher	
Publication year	2019
Jtitle	科学研究費補助金研究成果報告書 (2018.)
JaLC DOI	
Abstract	<p>電圧の印加によって流動するデカン二酸ジブチルを対象として流動理論の構築を目指した。Korteweg-Helmholtz式で計算される電気力をナビエ-ストークス方程式に導入し流動の支配方程式を決定し、式に現れるイオン移動度を分子動力学計算を用いて算出した。これにより、流動発生に有効な電極配置を求め、実験結果と比較した。すなわち、四角柱とスリットによって構成される電極対を用いた際に電極の配置が発生する流動に与える影響を計算機内で検証し、計算結果に基づいて製作した電極対を用いて流動を可視化した。この結果、四角柱とスリットの距離およびスリット間隔の適切な値を明らかにし、流動変化の要因を明確にした。</p> <p>This research aimed to construct a flow theory for dibutyl decanedioate which flows under the application of voltage. The electric force calculated by the Korteweg-Helmholtz equation was introduced to the Navier-Stokes equation to establish the governing equation of flow, and the ion mobility appearing in the equation was calculated using molecular dynamics simulation. Thus, the effective electrode arrangement for flow generation was estimated and compared with the experimental results. The influence of the arrangement of the electrodes on the flow generated when using the electrode pair constituted by the square pole and the slit was verified in a computer, and the flow was visualized using the electrode pair designed based on the calculation result. As a result, appropriate values of the distance between the square pole and the slit and the slit spacing were clarified, and the factors of the flow change were clarified.</p>
Notes	研究種目：挑戦的萌芽研究 研究期間：2016～2018 課題番号：16K14148 研究分野：機械工学
Genre	Research Paper
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KAKEN_16K14148seika

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

令和元年5月18日現在

機関番号：32612

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K14148

研究課題名（和文）分子動力学シミュレーションを用いた電界共役流体の物性値の決定と流動理論の構築

研究課題名（英文）Development of flow theory of electro-conjugate fluid based on the calculation of physical properties using molecular dynamics simulation

研究代表者

竹村 研治郎（Takemura, Kenjiro）

慶應義塾大学・理工学部（矢上）・教授

研究者番号：90348821

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,800,000円

研究成果の概要（和文）：電圧の印加によって流動するデカン二酸ジブチルを対象として流動理論の構築を目指した。Korteweg-Helmholtz式で計算される電気力をナビエ-ストークス方程式に導入し流動の支配方程式を決定し、式に現れるイオン移動度を分子動力学計算を用いて算出した。これにより、流動発生に有効な電極配置を求め、実験結果と比較した。すなわち、四角柱とスリットによって構成される電極対を用いた際に電極の配置が発生する流動に与える影響を計算機内で検証し、計算結果に基づいて製作した電極対を用いて流動を可視化した。この結果、四角柱とスリットの距離およびスリット間隔の適切な値を明らかにし、流動変化の要因を明確にした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電界共役流体（ECF）は微小な液圧源としての利用が期待されており、ECFマイクロモータやECFソフトアクチュエータ、ノートPC用CPU強制液冷システム、世界初の液体レートジャイロであるECF液体レートジャイロなど優れた応用例が具現化されている。ECFの流動理論に関する本研究の成果は、こうしたECFの優れた応用例の実用化を加速すると考えられる。すなわち、本研究は、ECFに関する学術的新規性だけでなく、我が国発の機能性流体であるECFのマイクロ液圧源としての可能性を拡大し、実用化を加速する成果として意義が大きい。

研究成果の概要（英文）：This research aimed to construct a flow theory for dibutyl decanedioate which flows under the application of voltage. The electric force calculated by the Korteweg-Helmholtz equation was introduced to the Navier-Stokes equation to establish the governing equation of flow, and the ion mobility appearing in the equation was calculated using molecular dynamics simulation. Thus, the effective electrode arrangement for flow generation was estimated and compared with the experimental results. The influence of the arrangement of the electrodes on the flow generated when using the electrode pair constituted by the square pole and the slit was verified in a computer, and the flow was visualized using the electrode pair designed based on the calculation result. As a result, appropriate values of the distance between the square pole and the slit and the slit spacing were clarified, and the factors of the flow change were clarified.

研究分野：機械工学

キーワード：電気流体力学現象 分子動力学 イオン移動度 電界共役流体

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

電界共役流体（Electro-conjugate fluid, ECF）は、直流高電圧の印加によって活発な流動を発生する機能性流体である。この流動現象を工学的に利用すれば、油空圧システムのように大規模なポンプやコンプレッサを必要とせずに極微小な液圧源を構成できる。このため、ECF マイクロモータや ECF レートジャイロ、CPU 液冷システムなどが開発され、工学的な有効性が明らかにされている。一方、電界共役流体に生じる流動のメカニズムは未だ明らかではなく、理論体系の確立が実用化に向けた最大の課題となっている。研究代表者も、本研究の開始以前から ECF を利用した液滴駆動システムやソフトロボットハンドの研究に取り組み、開発したシステムの新規性に加えて理論体系の確立を望む声に多く触れてきた。

2. 研究の目的

上述のように、電界共役流体はマイクロ液圧源としての応用研究が進んでいるが、流動理論の構築が実用化に向けた最大の課題として指摘されてきた。これまで、この流動現象をマクロにモデル化し、数値計算によって解析した例はあるものの、電界分布の検討が不十分である、物性値の決定が試行錯誤的であるなどの問題から流速分布の計算結果と実験結果の定量的な一致には至っていなかった。このため、本研究では液体中の電界分布をモデル化するとともに、分子動力学シミュレーションを用いて未知な物性値を見積もることによって、電界共役流体の流動理論を確立することを目的とした。

3. 研究の方法

(1) ECF 流動の支配方程式の決定

電界共役流体は誘電性の液体である。このため、誘電液体中の電位分布を測定し、これを考慮した ECF 流動の支配方程式を決定した。すなわち、電界の印加によって流動する ECF の流動を、

- ・ Korteweg-Helmholtz 式で計算される電気力を導入したナビエストークス方程式
 - ・ 電荷の移流方程式
- によってモデル化した。

(2) 分子動力学シミュレーションを用いたイオン移動度の決定

(1) で決定した ECF に発生する流動現象の支配方程式に基づいて、数値シミュレーションを実行するために、パラメータの具体的な値を決定した。粘度や密度など ECF の基本的な物性値は Material Safety Data Sheet に記載されている値を参考とした。一方、支配方程式中に現れるイオン移動度に計測値がないため、分子動力学シミュレーションを用いて ECF のイオン移動度を決定した。すなわち、計算機内で強制的にイオン化された ECF 分子が電界によって如何なる速度で移動するかを分子動力学シミュレーションで求めた。なお、本研究では作動流体として ECF の一種であるデカン二酸ジブチルを対象とし、分子動力学シミュレーションに必要な結合ポテンシャルは文献に記載のブチルと酢酸のポテンシャルを参考に決定した。

(3) ECF 流動モデルの数値シミュレーションと実験結果との比較

(1)(2) の結果に基づいて、ECF の流動モデルを用いた数値シミュレーションを行った。また、数値シミュレーションと同等の寸法の電極を用いて、ECF に流動を発生させた際の流動の可視化実験も行い、数値シミュレーションの結果と実験結果を比較した。

4. 研究成果

電圧の印加により発生する ECF の流動の原因となる支配的な力は電気力であると考えられる。このため、Korteweg-Helmholtz 式で計算される電気力を流体のナビエストークス方程式に導入して、ECF の流動に関する支配方程式を決定した。

つぎに、ECF の流動に関係する電氣的物理量を実験および計算から理論的に決定した。まず、数元効果の測定により、本研究で対象としたデカン二酸ジブチルの優勢イオンは正電荷であることを明らかにした。つぎに、静電探針法により電荷注入係数が $2.9 \times 10^{-11} \text{ C}/(\text{Vm}^2)$ であることがわかった。さらに、分子動力学計算によりデカン二酸ジブチルのイオン移動度が $2.3 \times 10^{-9} \text{ m}^2/(\text{Vs})$ であることを明らかにした。これらの電氣的物理量と上記の ECF 流動の支配方程式を用いて、計算機内でデカン二酸ジブチルに発生する流動を再現した。

さらに、粒子画像流速測定法によりデカン二酸ジブチルに発生した流動の特性を実験的に明らかにし、数値流体力学計算により計算機ないに再現した流動特性と比較することで、ECF の流動理論を評価した。この結果、実験と数値計算で得られた流動特性は概ね一致したことから、本研究で構築した ECF 流動の支配方程式および電氣的物理量は妥当であることがわかった。

最後に、本研究で構築した ECF の流動モデルを用いて、四角柱-スリット電極における電極配置が流動に与える影響を考察し、電極配置の最適化に向けた知見を得た。四角柱-スリット電極においても実験と数値計算によって得られた流動特性は概ね一致した（表 1, 図 1）。また、発生する ECF 流動の強さは流動状態に依存し、流動状態は電極配置に依存することを明らかにした。

表 1 ECF 流動の実験結果と計算結果の比較

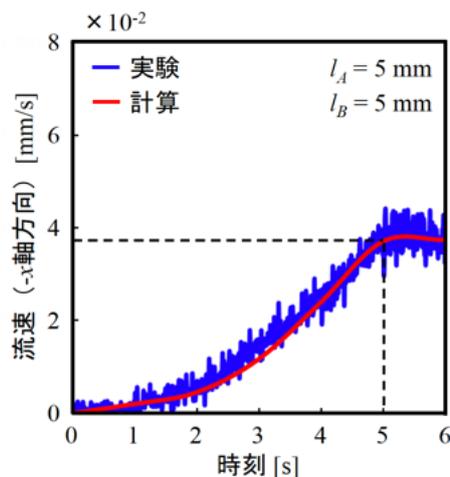
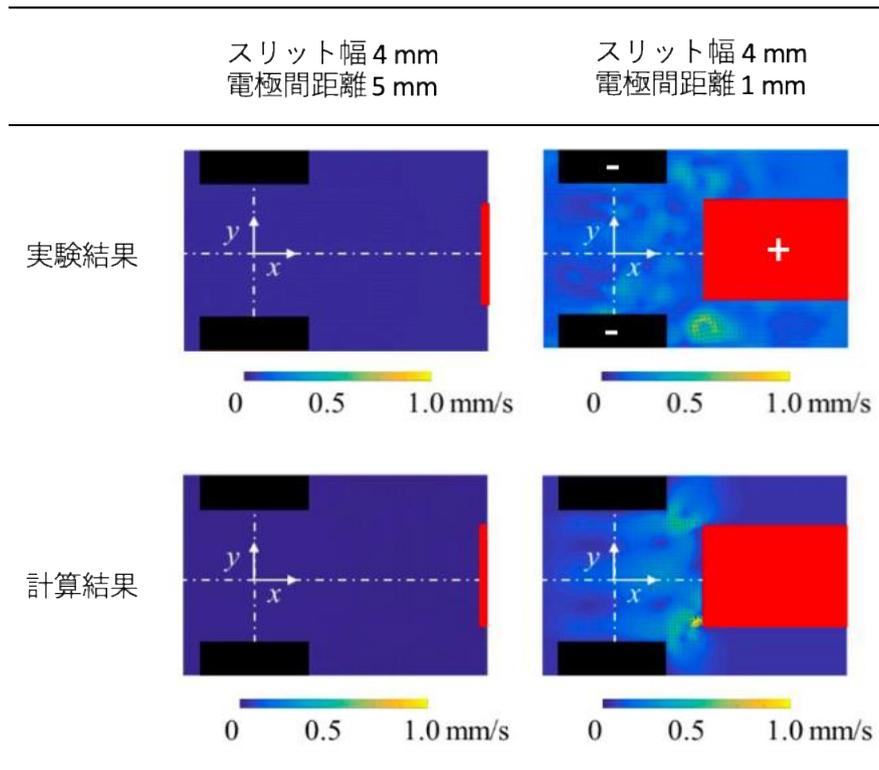


図 1 ECF 流動の過渡応答の比較

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 3 件)

- ① Y. Kuroboshi, K. Takemura, K. Edamura, Efficient electrode configuration for electro-conjugate fluid flow generation with dibutyl decanedioate: Experimental and theoretical investigation, *Sensors & Actuators A*, 279, pp. 223-228, 2018.
- ② Y. Kuroboshi, K. Takemura, K. Edamura, Understanding of electro-conjugate fluid flow with dibutyl decanedioate using numerical simulation - Calculating ion mobility using molecular dynamics simulation, *Sensors & Actuators B*, 255, pp. 448-453, 2018.
- ③ Y. Kuroboshi, K. Takemura, Coarse grained model for calculating the ion mobility of hydrocarbons, *AIP Advances*, 6, 125307, 2016.

[学会発表] (計 3 件)

- ① Yuichiro Kuroboshi, Kenjiro Takemura, Kazuya Edamura, Effective Arrangement of Electrodes for Electro-conjugate Fluid Flow Generation, *JFPS International Symposium on Fluid Power System*, 2017.

- ② Yuichiro Kuroboshi, Kenjiro Takemura, The Experimental and Theoretical Understandings of Electro-conjugate Fluid Flow Generation, The 15th International Conference on Electrorheological Fluids and Magnetorheological Suspensions, A-41, 2016.
- ③ 黒星雄一郎, 竹村研治郎, 枝村一弥, 数値計算を用いた電界共役流体における流動現象の理解と考察, 平成 28 年秋季フルードパワーシステム講演会, 2016.

〔図書〕 (計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.takemura.mech.keio.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

なし

(2) 研究協力者

なし

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。