

高濃度微粒子分散液の 高ペクレ数レオロジー シミュレーション

小池修・藤田昌大・山口由岐夫

東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻

背景

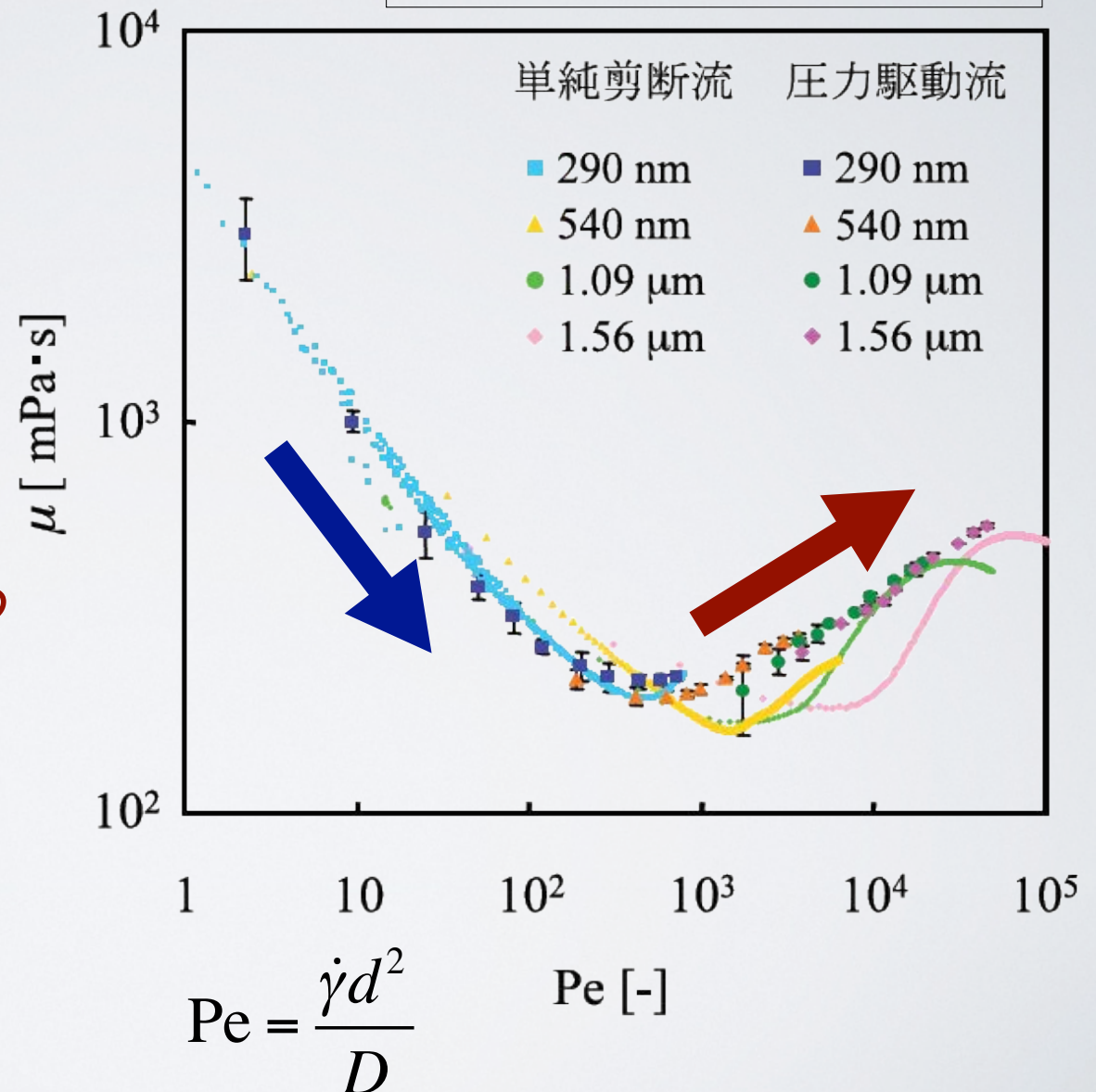
微粒子分散液＋流れ場
→非ニュートンの流れ

Shear-thinning

Shear-thickening

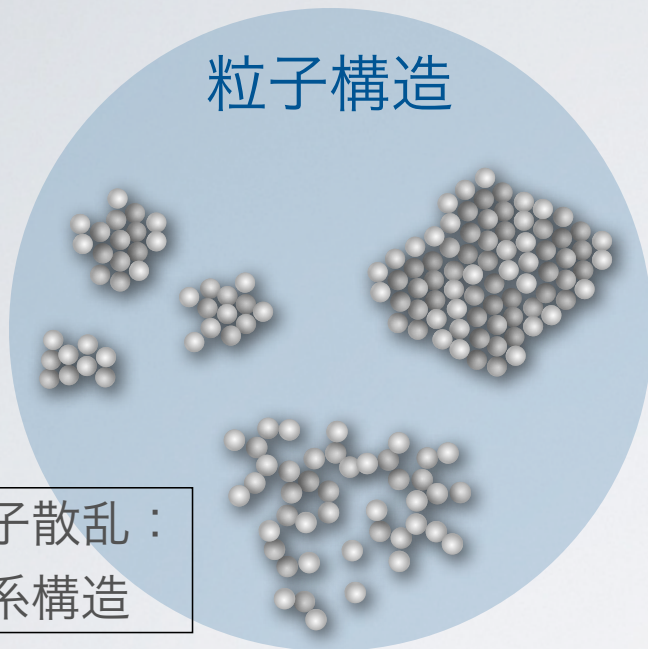
濃厚系を高速に取り扱う
際の効率や品質に影響

山口研, 真野涼平, 2008年度修論



背景

粒子構造



中性子散乱：
粒子系構造

実験

粘度挙動の要因：

粒子系構造 粒子間相互作用
と推定されている

目指すこと

粘度挙動のメカニズムの解明

→粒子系構造の形成過程の直接観察が必要

→直接的シミュレーションでアプローチ

目的

- 高ペクレ数・高濃度での粒子系構造-粘度の相関の獲得
- 粒子系構造の形成と粘度挙動のメカニズムを解明する

手段と条件

- SNAP-Fでの 固液連成 直接数値シミュレーション
- 円管内の微粒子分散液に圧力を印加

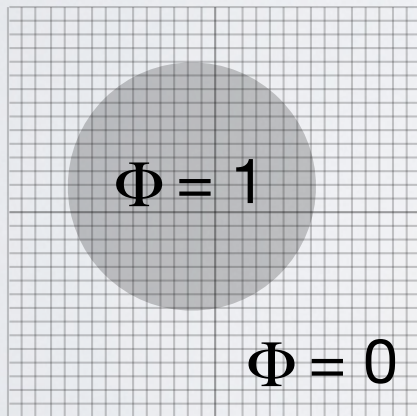
SNAP-Fのモデル方程式

Immersed boundary法 + DEM

質量保存（非圧縮） $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$

運動方程式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\rho_f} \nabla \cdot \mathbf{S} + \Phi \alpha$$



流体加速度 $\alpha = \frac{\mathbf{v}_p - \mathbf{v}}{\Delta t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nu \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{1}{\rho_f} \nabla \cdot \mathbf{S}$

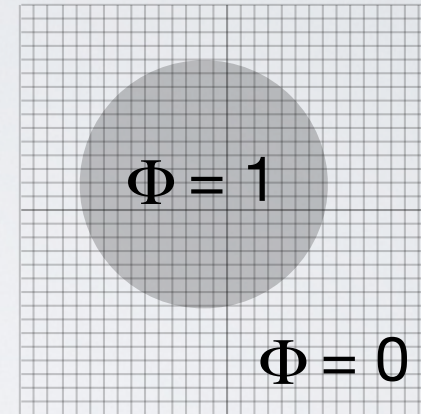
粒子運動と連成させる役割を持つ

粒子内部 $\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} = \frac{\mathbf{v}_p - \mathbf{v}^n}{\Delta t}$

流体力と流体トルク

粒子体積率

$$\phi_p(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left\{ \tanh \left(\frac{a - |\mathbf{x} - \mathbf{r}_p|}{\xi} \right) + 1 \right\}$$

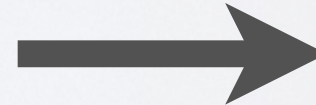


流体力と流体トルク

$$\mathbf{F}^h = - \int_V \rho_f \phi_p(\mathbf{x}) \alpha(\mathbf{x}) dV$$

$$\mathbf{T}^h = - \int_V \left\{ \mathbf{r}_p(\mathbf{x}) \times \rho_f \phi_p(\mathbf{x}) \alpha(\mathbf{x}) \right\} dV$$

粒子の運動方程式へ：
Newtonの運動方程式



計算条件

粒子

粒径 d : 100 nm

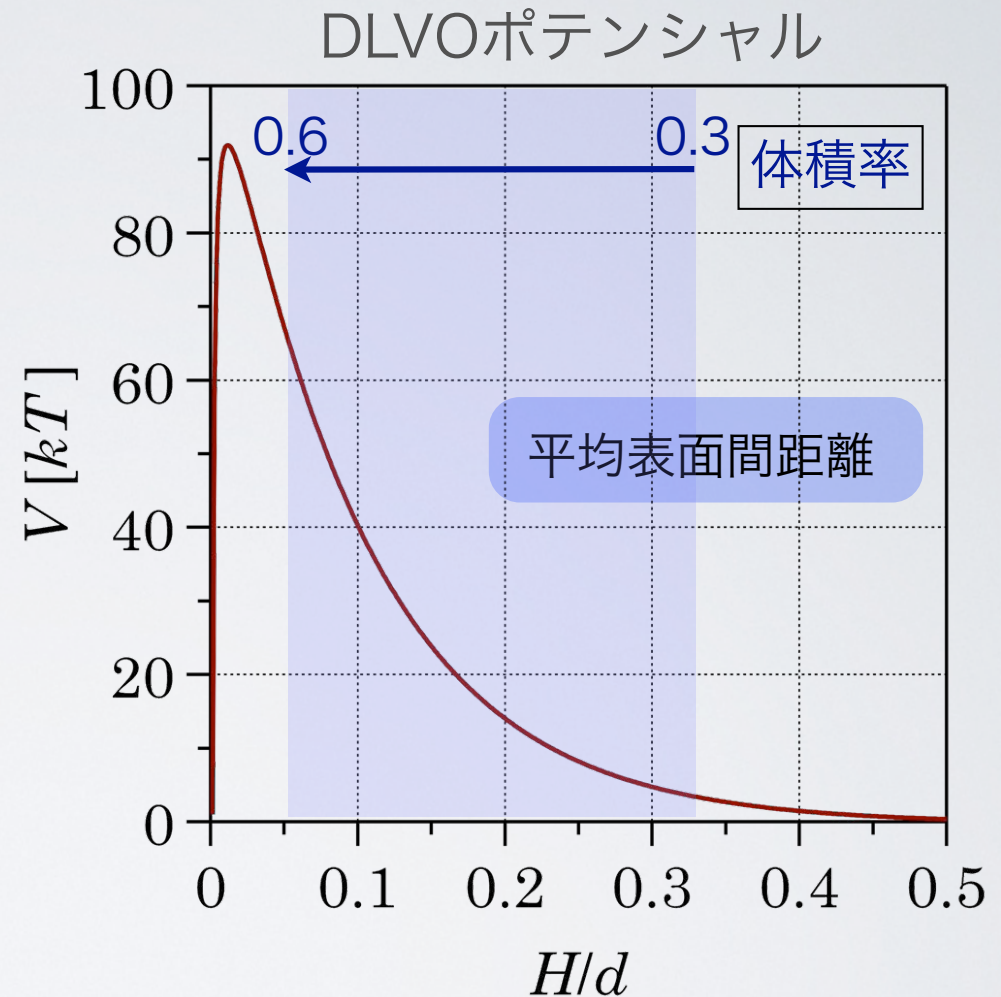
体積率 : 0.3 - 0.6

ζ 電位 : -50 mV

溶媒 (水)

温度 : 20 °C

電解質濃度 : 1 mM/l



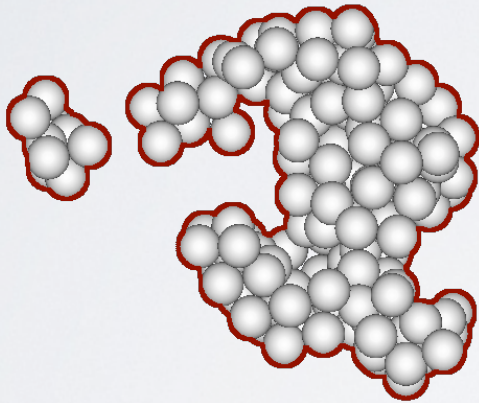
管径 : $10d$, 管長 : $20d$

Pe : $10^3 \sim 5 \times 10^4$ (流れ方向周期境界)

構造評価指標 NBA

Nondimensional Boundary Area

NBAの幾何学的意味



$$\text{NBA} = \frac{\text{凝集体の表面積}}{\text{粒子の表面積の和}}$$

実際は離散量で定義

$$\text{NBA} = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{12} \sum_{c=0}^{12} (12 - c)n(c) \right]$$

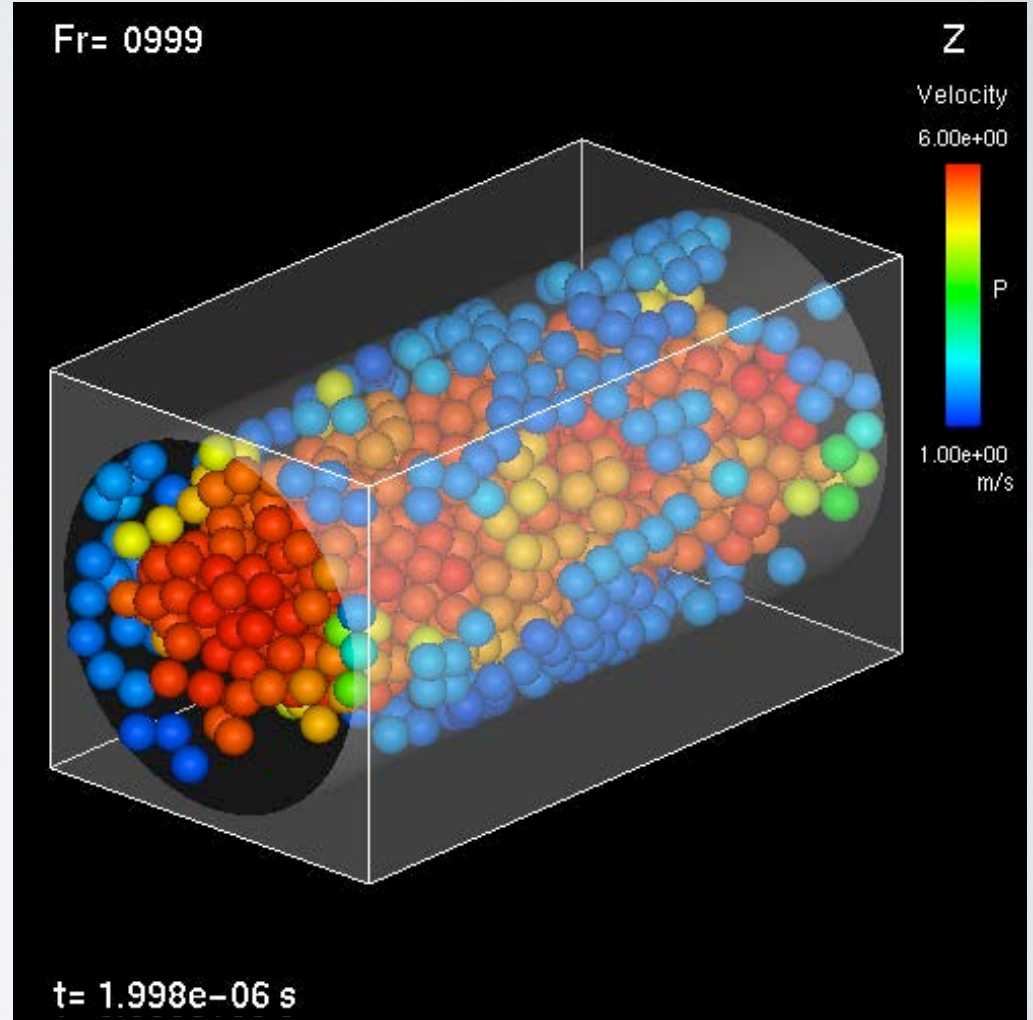
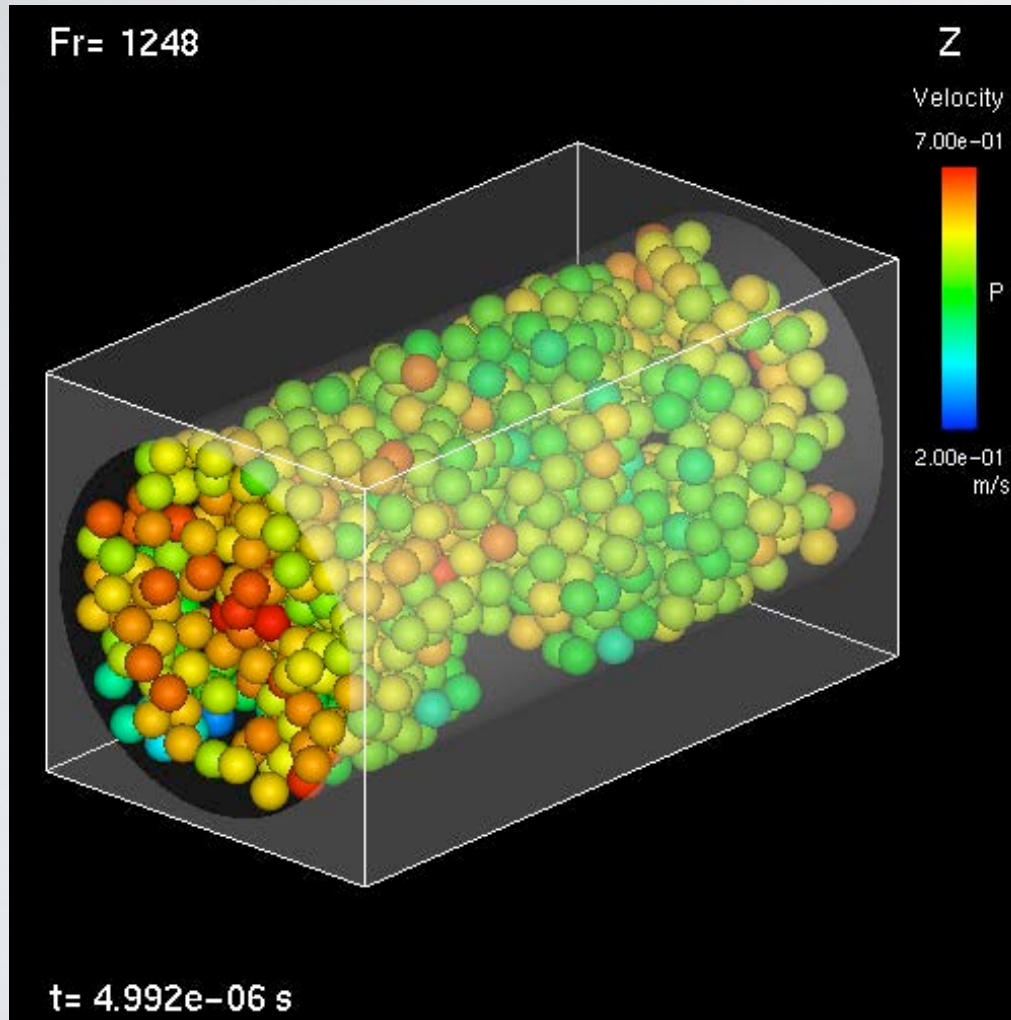
$n(c)$: 配位数 c の粒子数

N : 全粒子数

➡ NBA = 1 : 完全分散
NBA = 0 : 最密充填

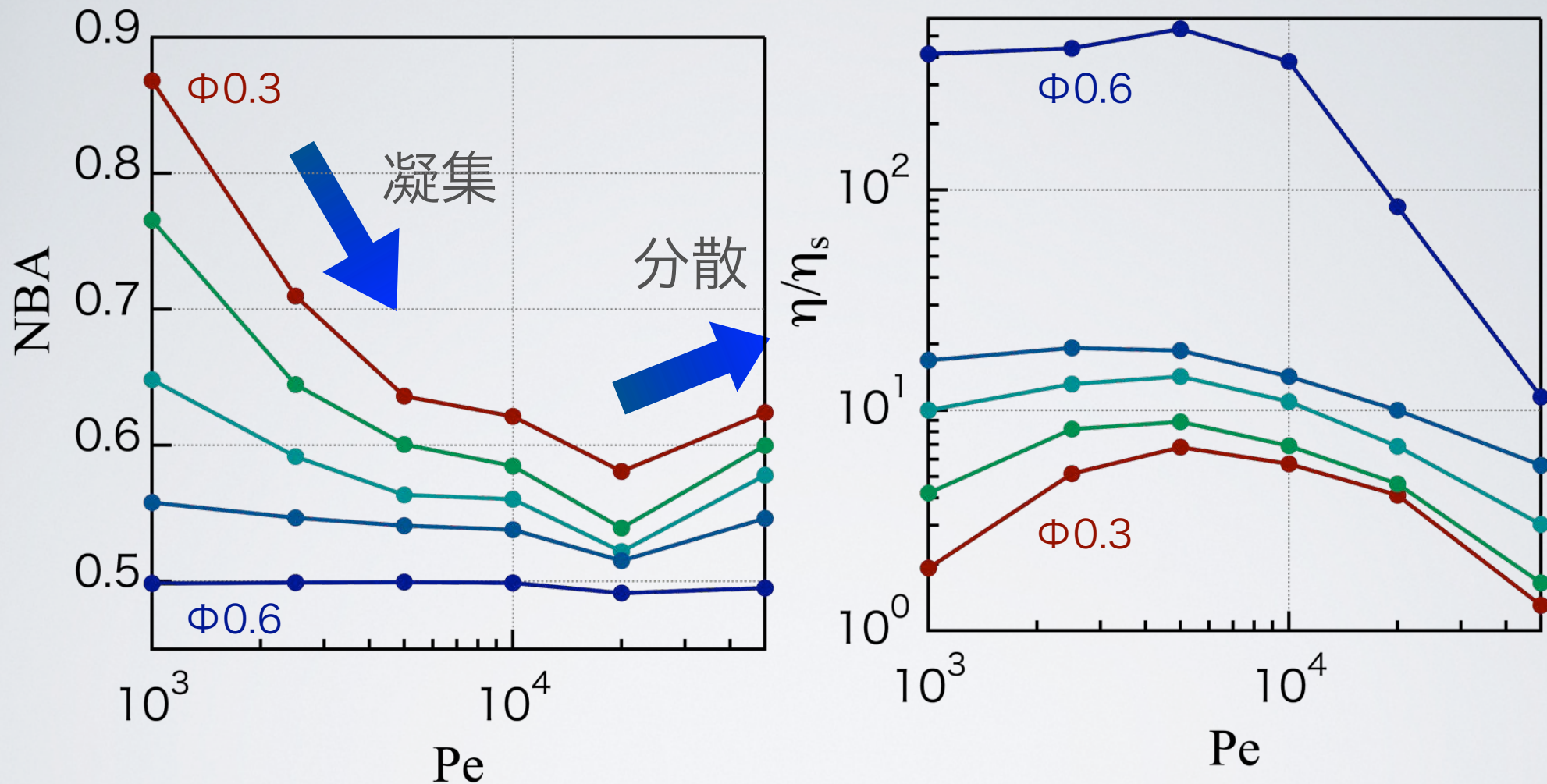
計算結果

$Pe = 2 \times 10^4$ 体積率 0.3 $Pe = 5 \times 10^4$



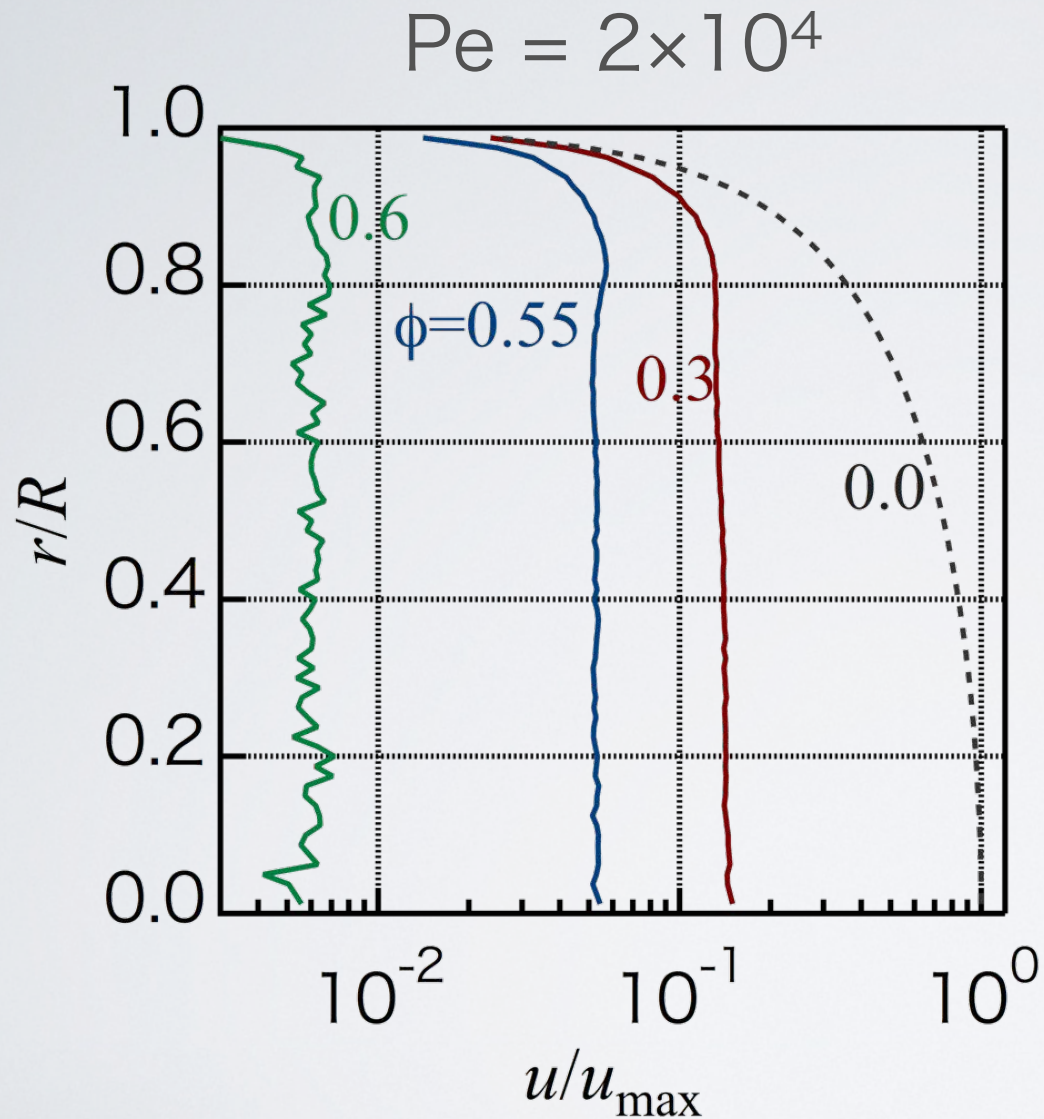
流れの強さに応じた凝集パターン

NBAとみかけ粘度



凝集に伴ってみかけ粘度が上昇
体積率と共にみかけ粘度が上昇

管径方向速度分布

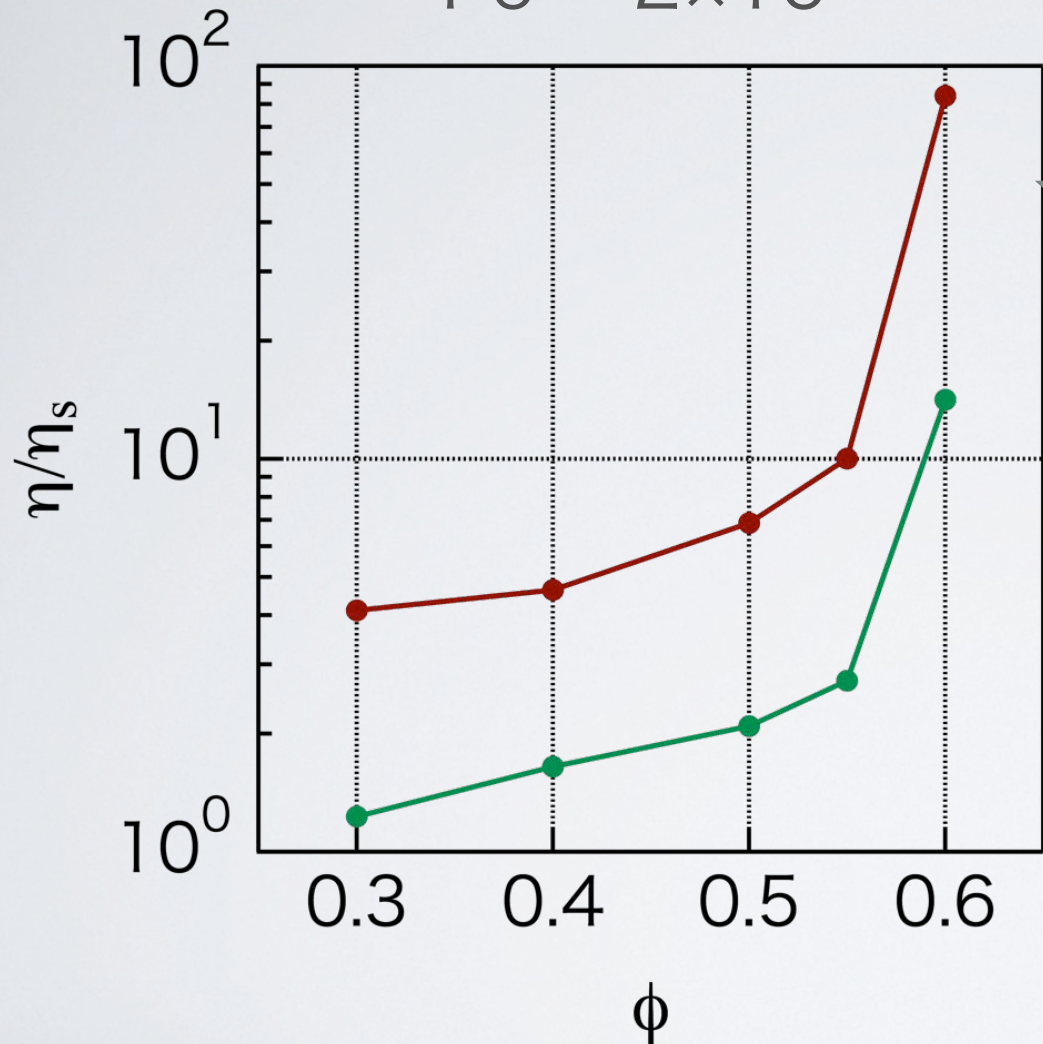


スラグ流れに似た
平坦な速度プロフ
ァイルの発生

凝集体が剛体のよ
うに振る舞う

粒子体積率とみかけ粘度

$$Pe = 2 \times 10^4$$

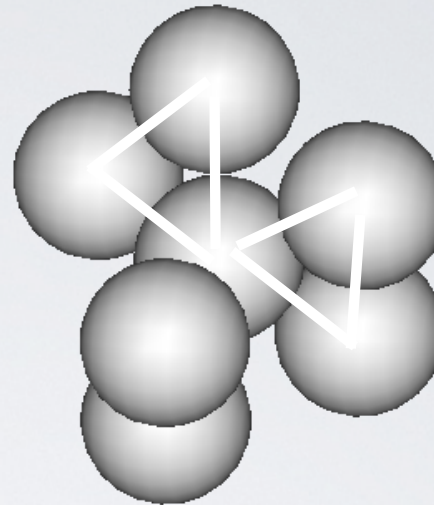
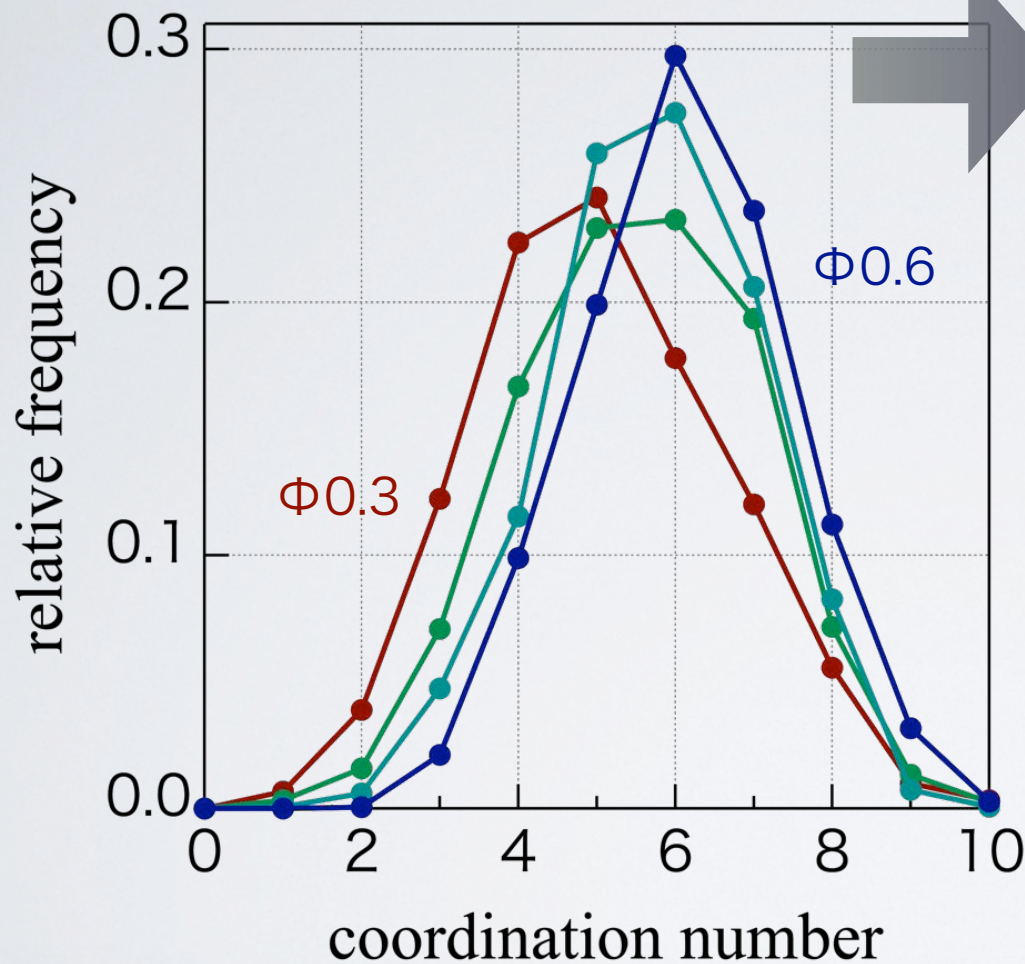


粒子-壁間の引力
を無くすと粘度が
下がる

濃度に対する挙動
は同じ傾向

粒子体積率と配位数分布

$$Pe = 2 \times 10^4$$



格子	配位数	充填率
FCC	12	0.74
BCC	8	0.68
SC	6	0.52

体積率の上昇で配位数6にピーク
配位数10以上の構造形成は難しい

まとめ

- 高濃度微粒子分散液のレオロジーシミュレーションを高ペクレ数領域で行った.
- 体積率 ~ 0.55 で、みかけ粘度の急な上昇がみられた.
- 粒子-壁の結合を弱くすると、みかけ粘度の絶対値が抑えられる.
- 粒子凝集体の結合を阻止すると、粘度上昇を抑制できることが考えられる.