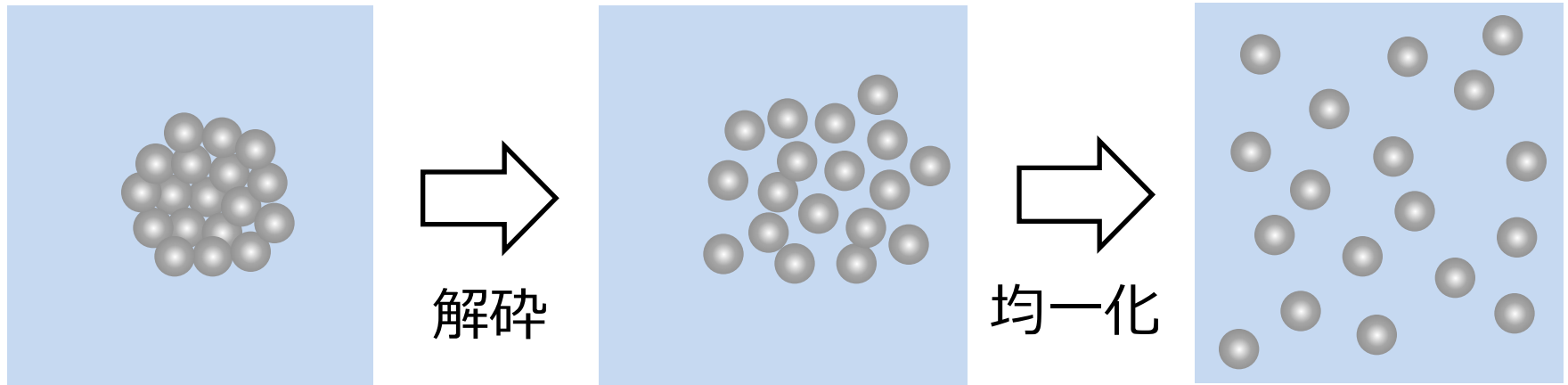


混練におけるフィラー微細化の 数値シミュレーション

- 辰巳 怜 (東大環安セ)
- 小池 修 (PIA)
- 山口由岐夫 (PIA)
- 辻 佳子 (東大環安セ/東大院工)

ポリマーコンポジットの混練

熔融ポリマー中でのフィラー混合



- ・ 界面エネルギーの低減： 分散剤，表面改質剤
- ・ 機械的エネルギーの投入： 流動場

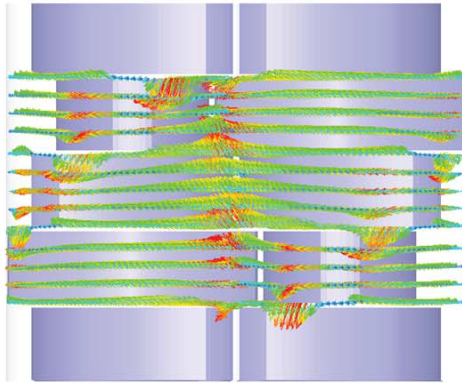
混練の課題 解砕不良，不均一化，熱劣化

CAE(**C**omputer **A**ided **E**ngineering)による課題解決

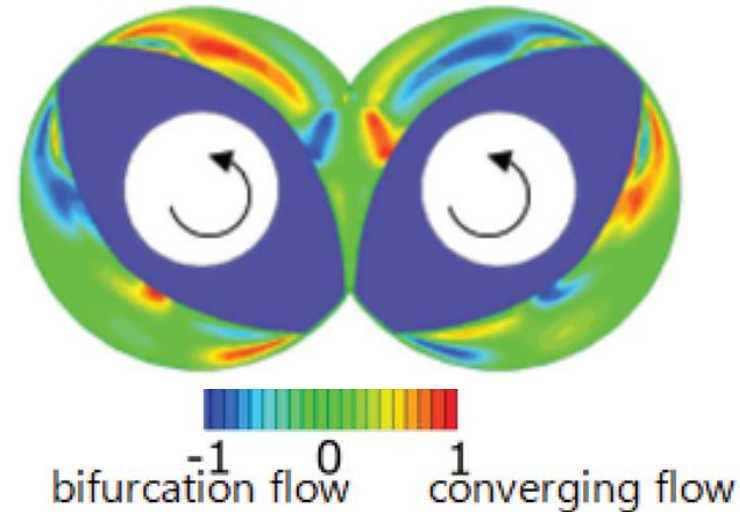
混練におけるCAE

- ・ **装置内流動解析**（装置スケール）

装置形状，操作条件 → 流動状態（剪断率，流動様式）



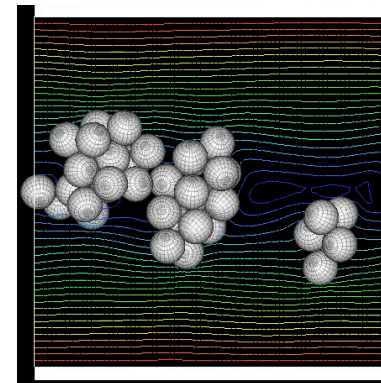
Nakayama *et al.*, AIChE J. (2018).



- ・ **フィラー混合過程の解析**（フィラースケール）

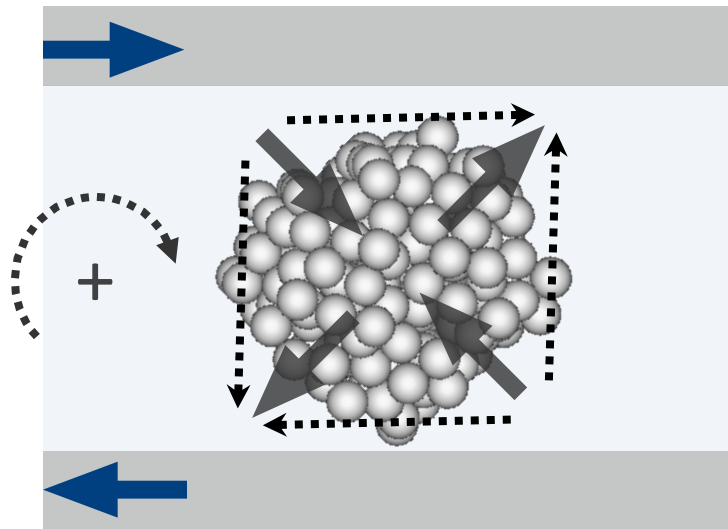
流動状態（剪断率，流動様式）

→ 混練性能（解砕，均一化）



目的

- 解砕特性の解析： 分散度 vs. 剪断率
← 直接数値シミュレーション (SNAP)
- 単純剪断流れにおける凝集体解砕



直接数値シミュレーション

Direct Numerical Simulation

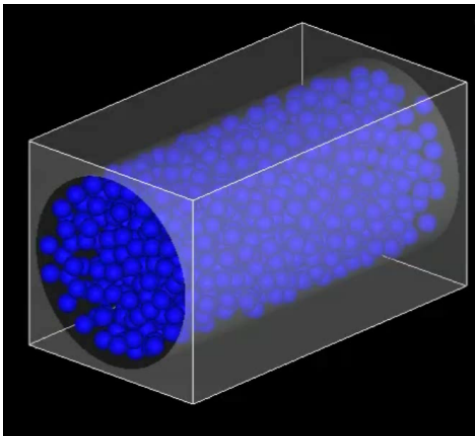
粒子：運動方程式

流体力

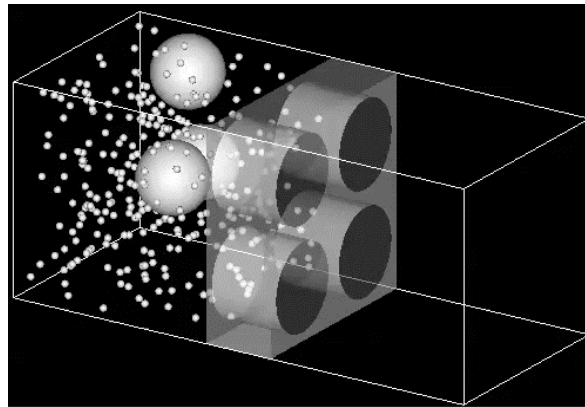
境界条件

← 連成：Immersed Boundary 法

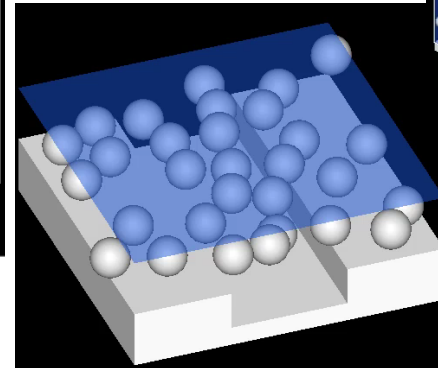
流動場：Navier-Stokes方程式



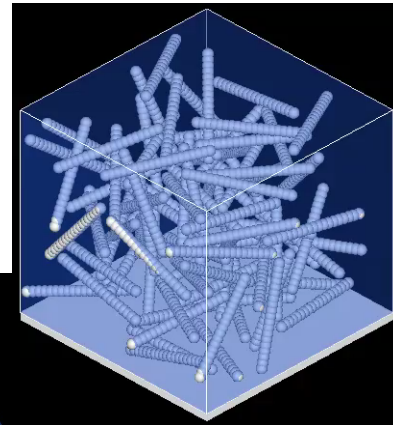
流動



濾過



乾燥



SNAP研究会



Structure of **N**Ano **P**articles
粒子分散系プロセスの課題解決

基礎方程式

粒子：運動方程式

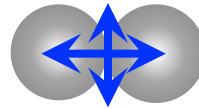
[並進] $M\dot{\mathbf{V}} = \mathbf{F}^H + \mathbf{F}^{PP}$

[回転] $I\dot{\boldsymbol{\Omega}} = \mathbf{N}^H + \mathbf{N}^{PP}$

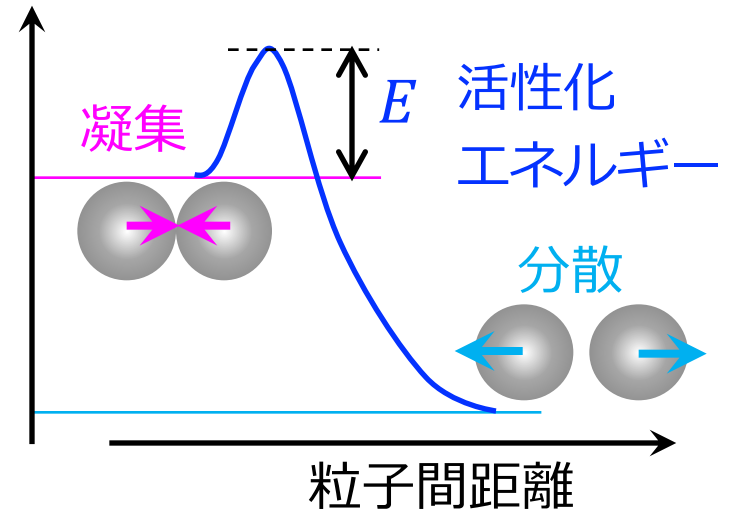
流体力

粒子間力

- ・ 接触力
- ・ 摩擦力



・ 相互作用ポテンシャル



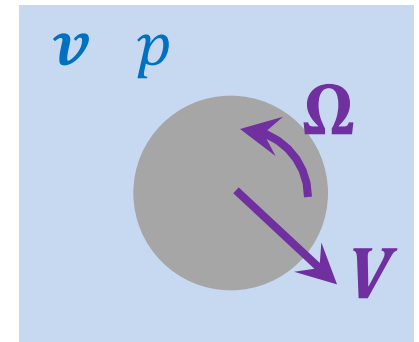
流動場：Navier-Stokes方程式

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_P$$

粒子速度
境界条件の強制

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

$$\text{応力} : \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \eta[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T]$$



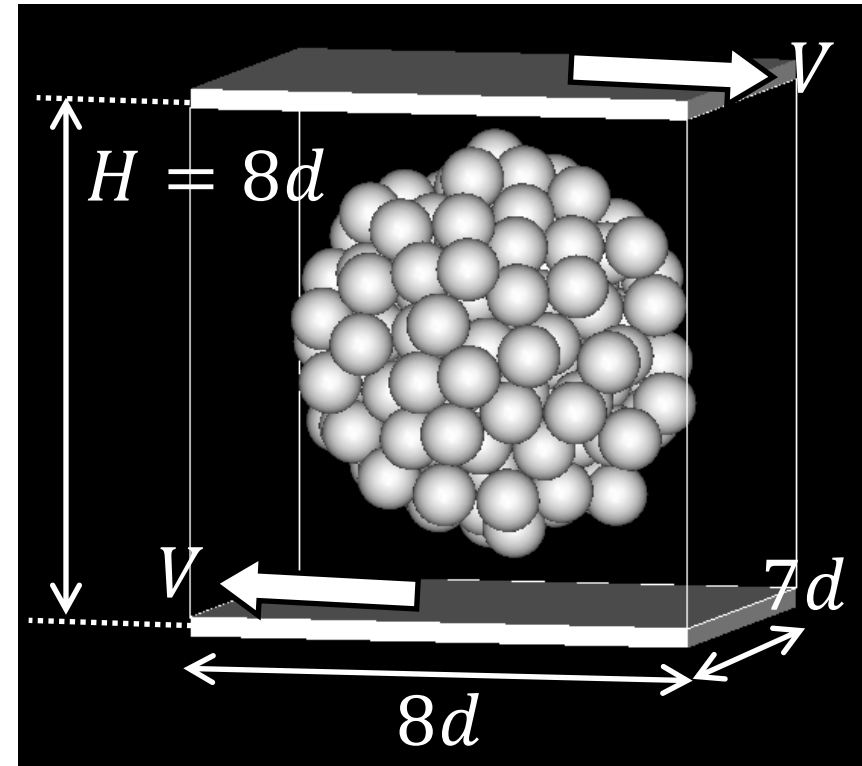
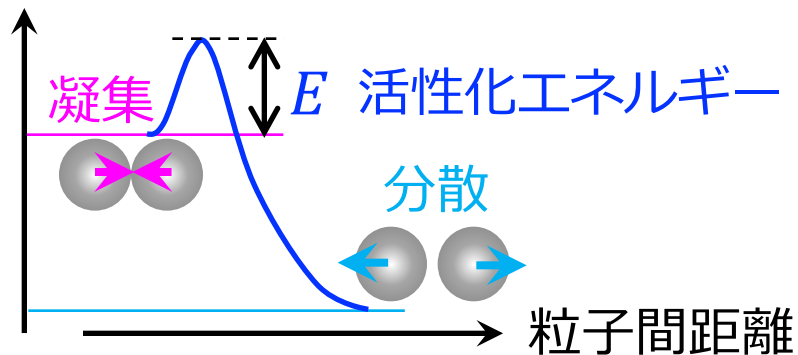
計算条件

単純剪断流れにおける凝集体解砕

- 凝集体径 $6d$ 一次粒子径 d
体積分率 0.18
- 剪断率 $\dot{\gamma} = 2V/H$

- 無次元剪断率

$$\Gamma = \frac{\eta \dot{\gamma} d^3}{E} = \frac{\text{剪断エネルギー}}{\text{活性化エネルギー}}$$



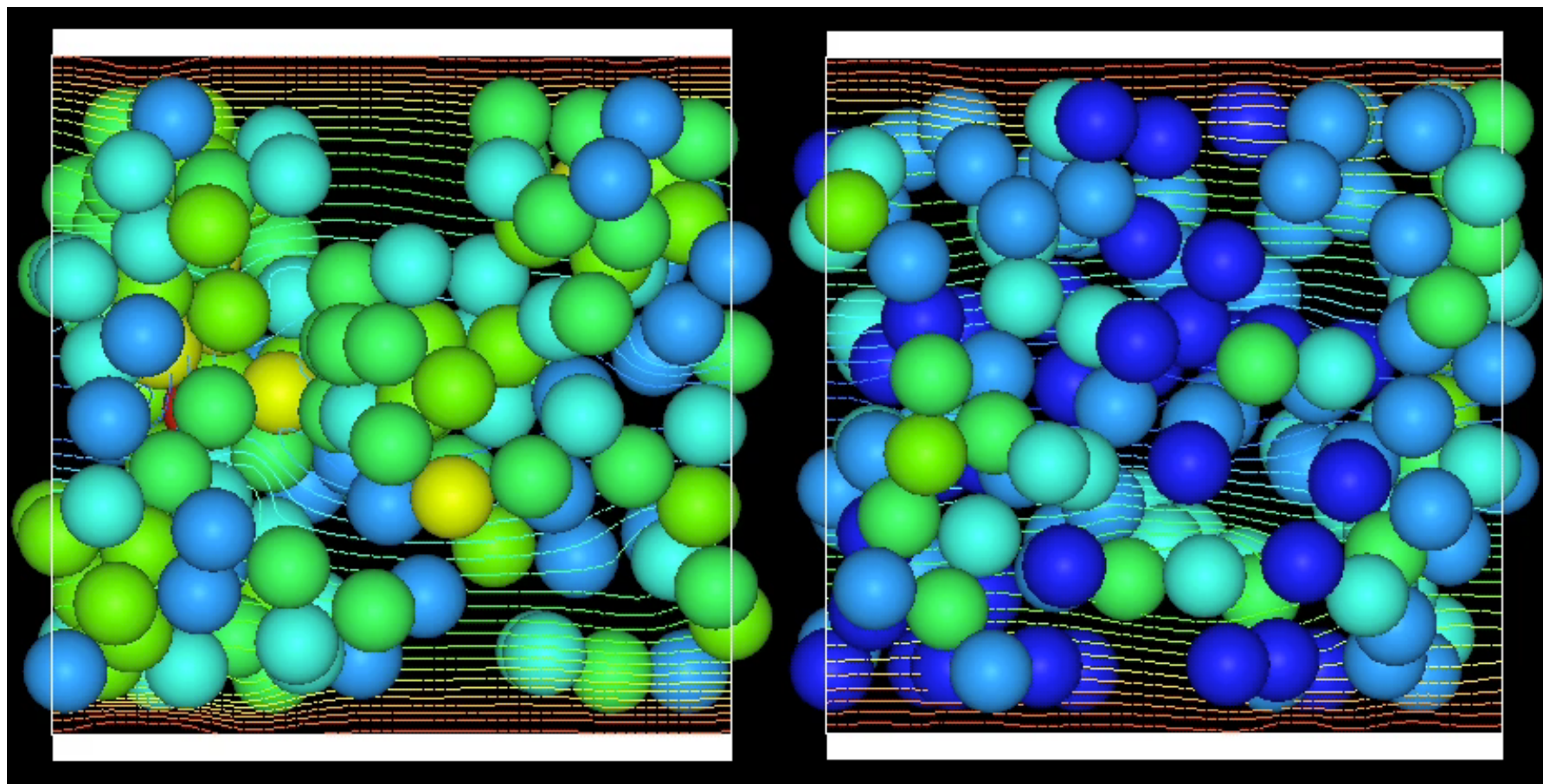
周期境界条件: x, y

A small 3D coordinate system diagram showing the x , y , and z axes.

→ 解砕特性：分散度 vs. 剪断率

計算結果

0 接触数 6

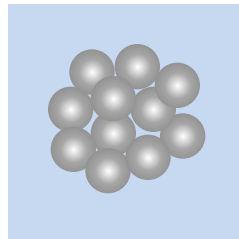
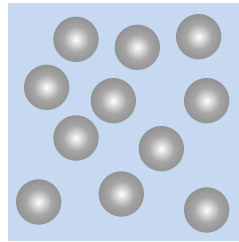


$\Gamma = 4$

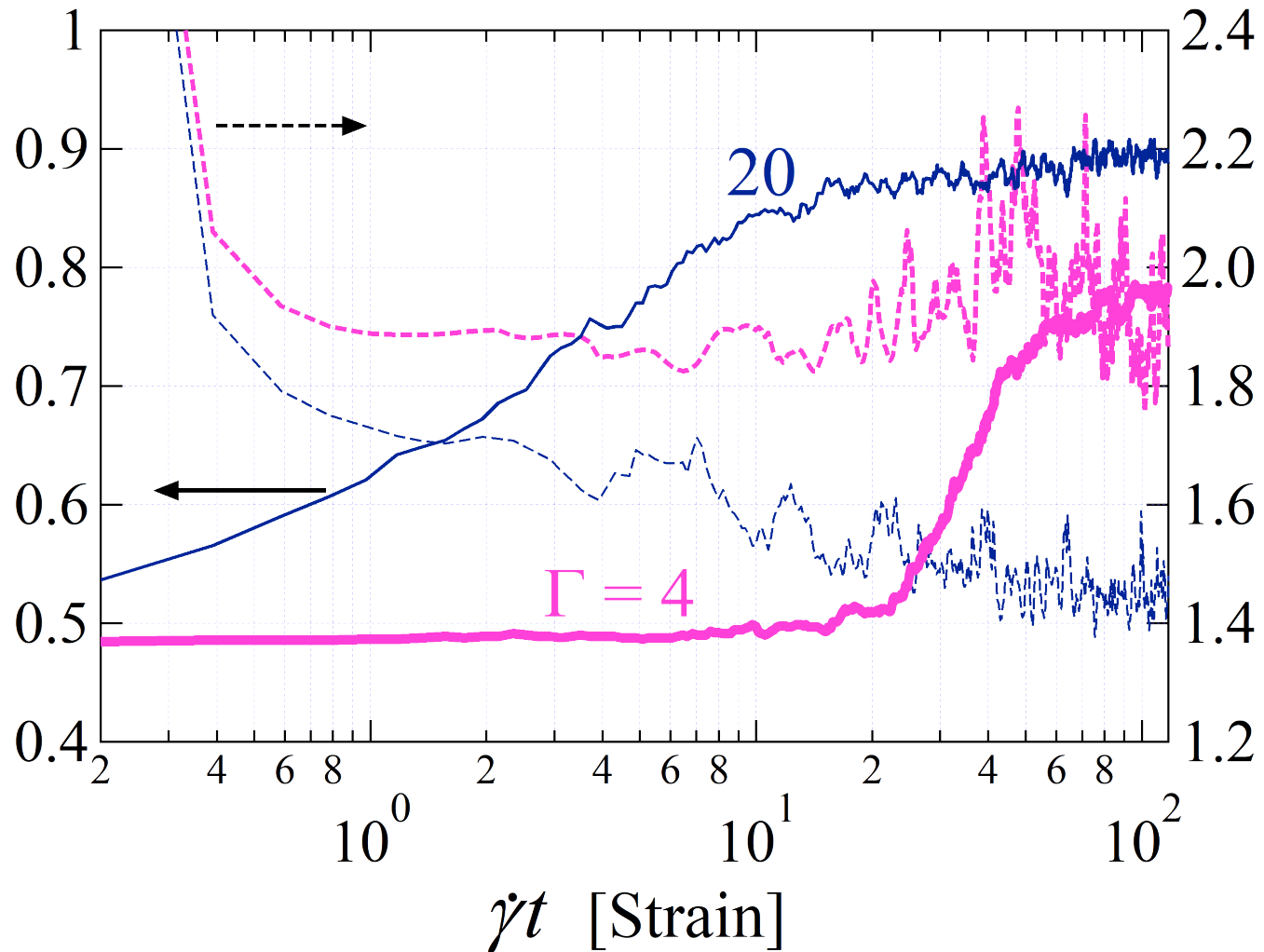
$\Gamma = 20$

解砕の進展

$$\text{分散度 (Dispersibility)} = 1 - \frac{\text{平均接触数}}{\text{最大接触数}}$$



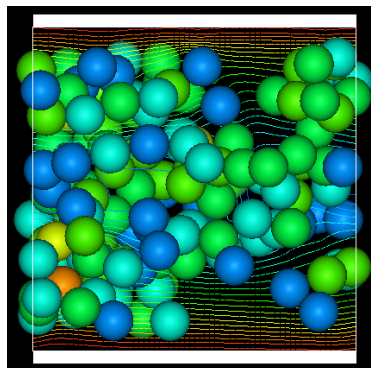
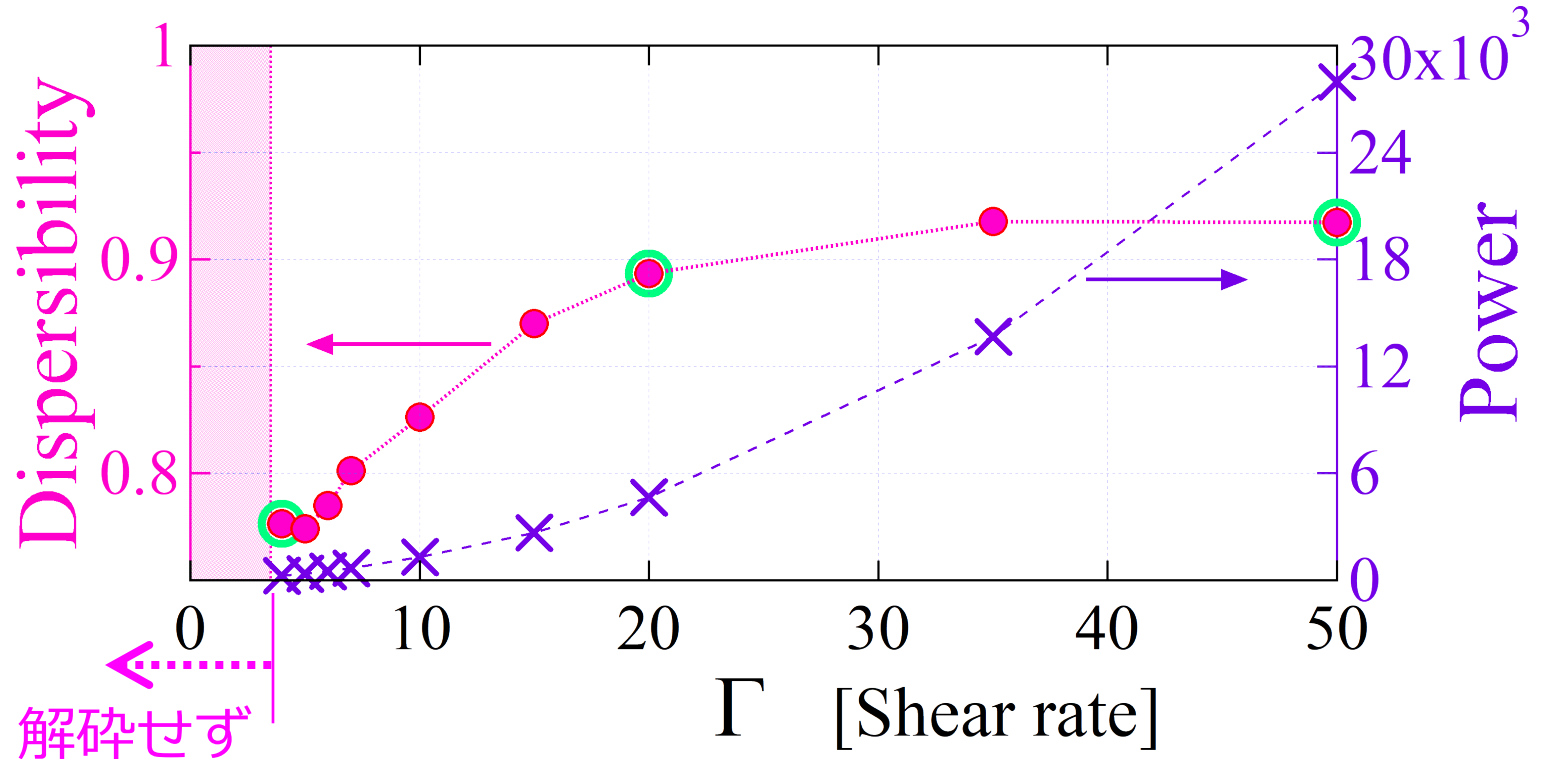
Dispersibility



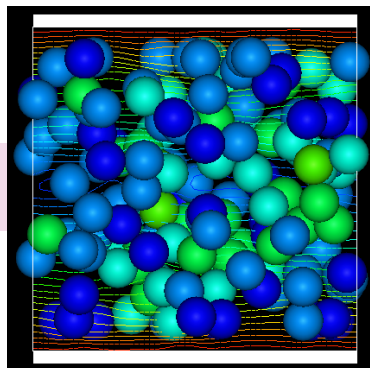
Viscosity

分散度 vs. 剪断率

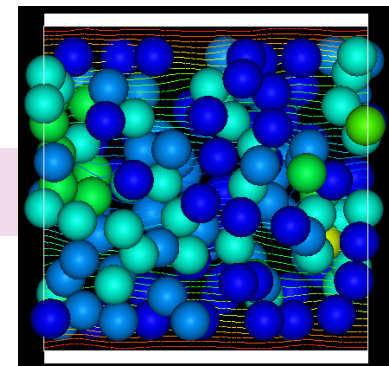
仕事率 (Power) = 壁面応力 $\times$ 壁面速度 [unit: $E^2/\eta d^3$]



$\Gamma = 4$



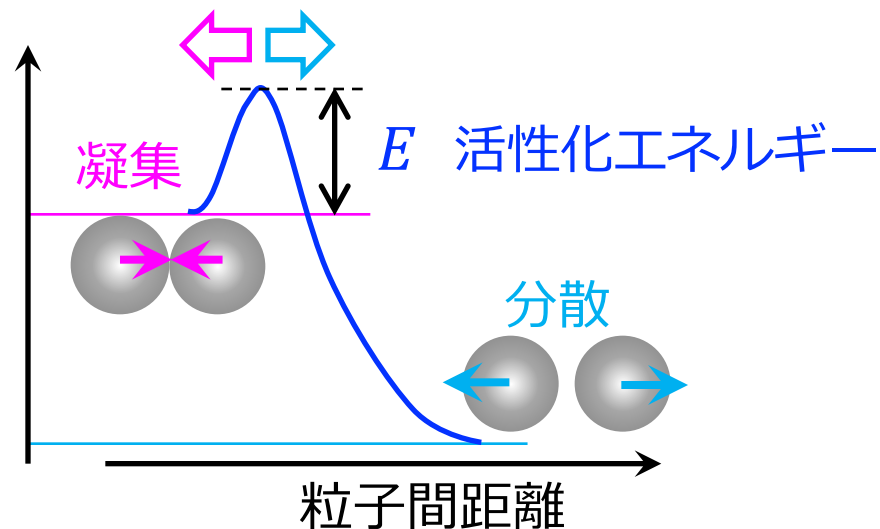
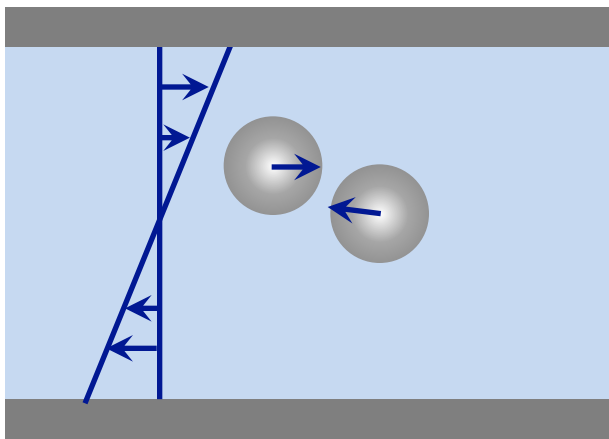
20



50

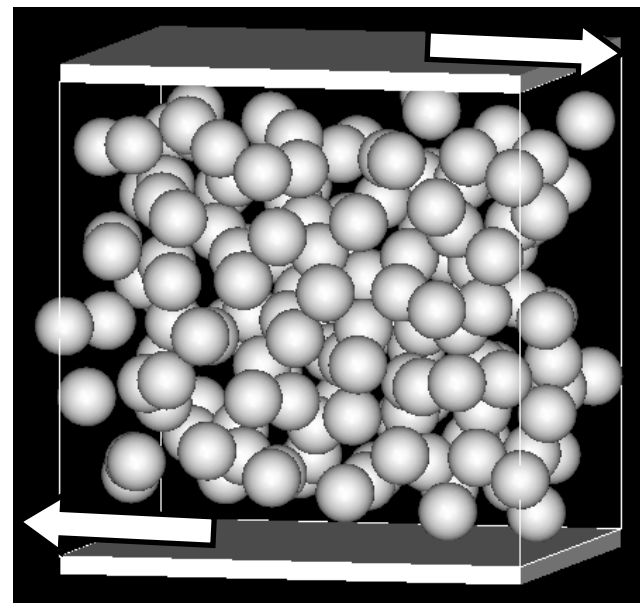
流動場中の分散・凝集

流動場による粒子の接近 → 剪断エネルギー vs. 粒子間ポテンシャル



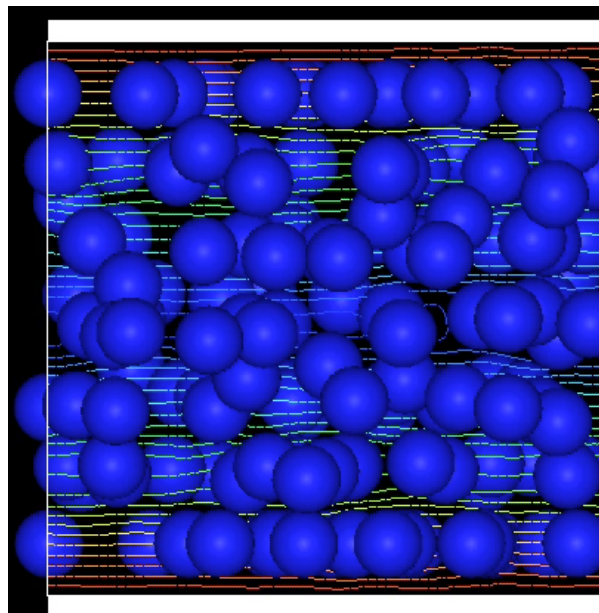
剪断流れにおける分散性の解析

→ 分散状態が維持される剪断率

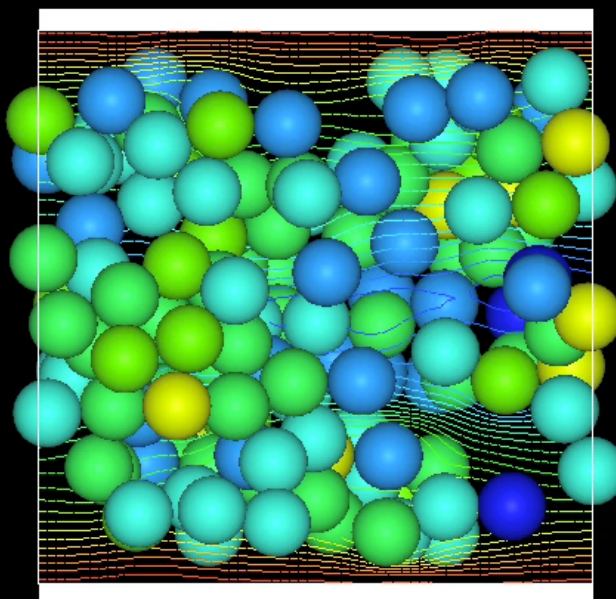


計算結果

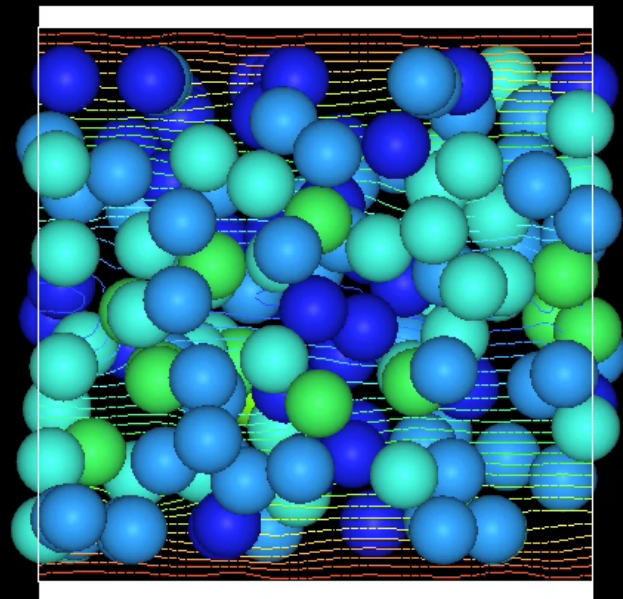
0 接触数 6



$\Gamma = 3$

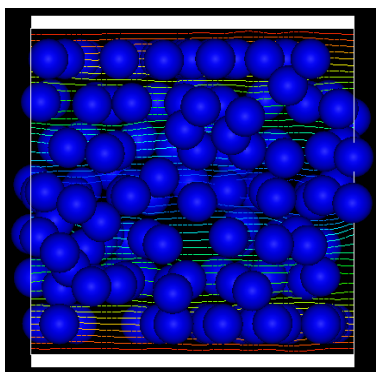
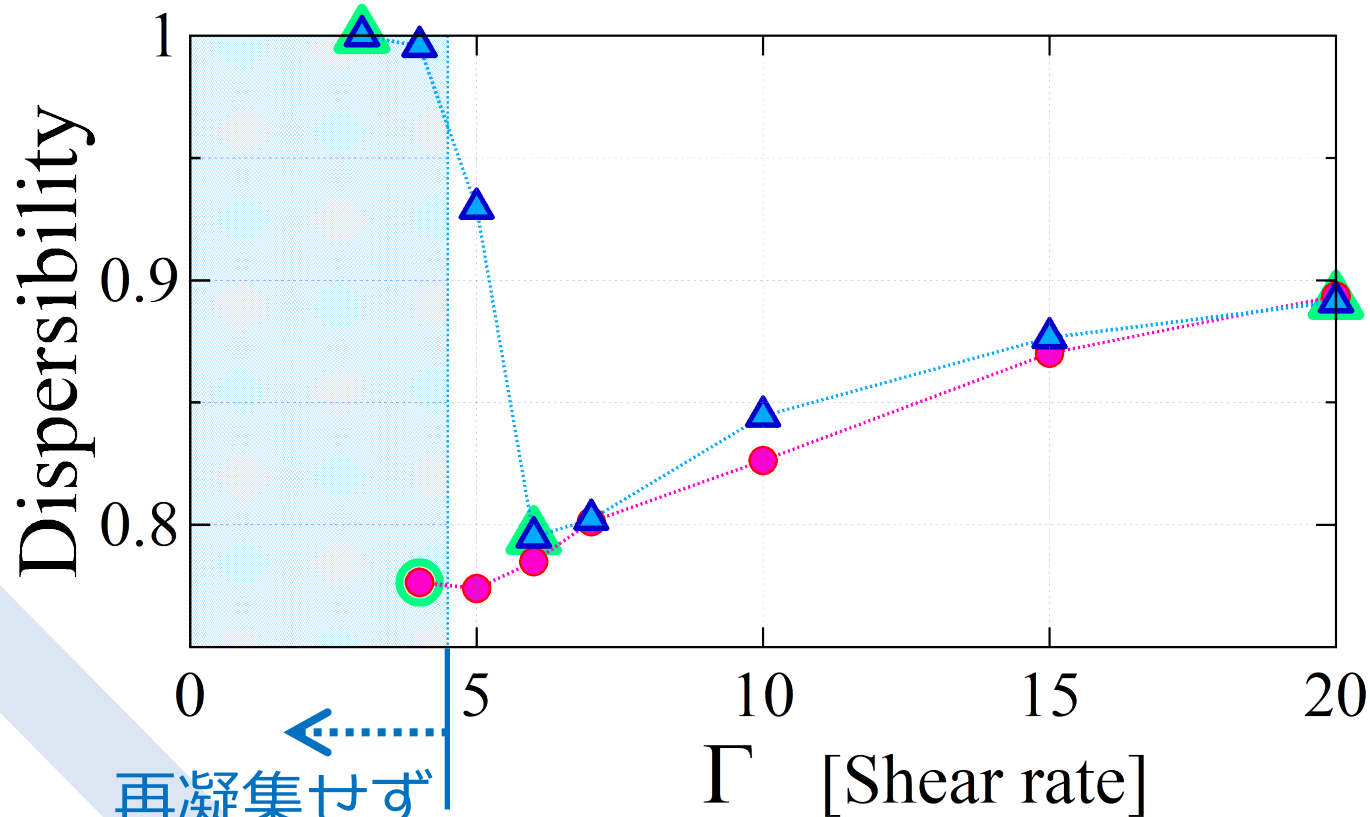


$\Gamma = 6$

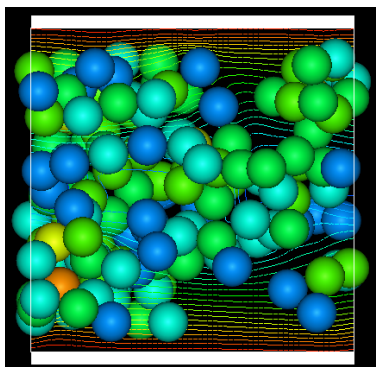


$\Gamma = 20$

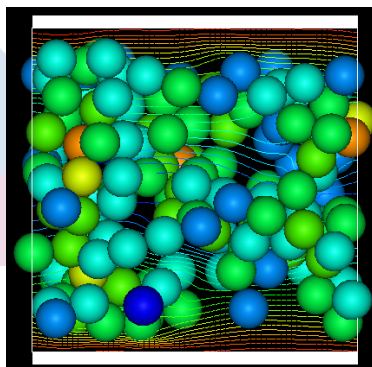
分散度 vs. 剪断率



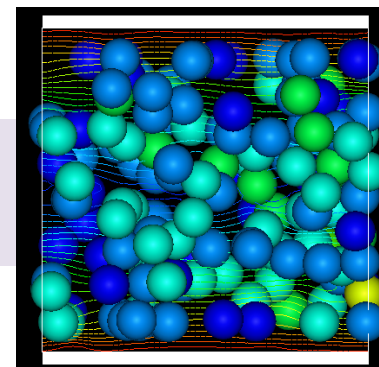
$\Gamma = 3$



4

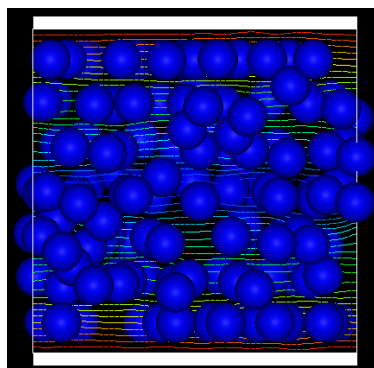
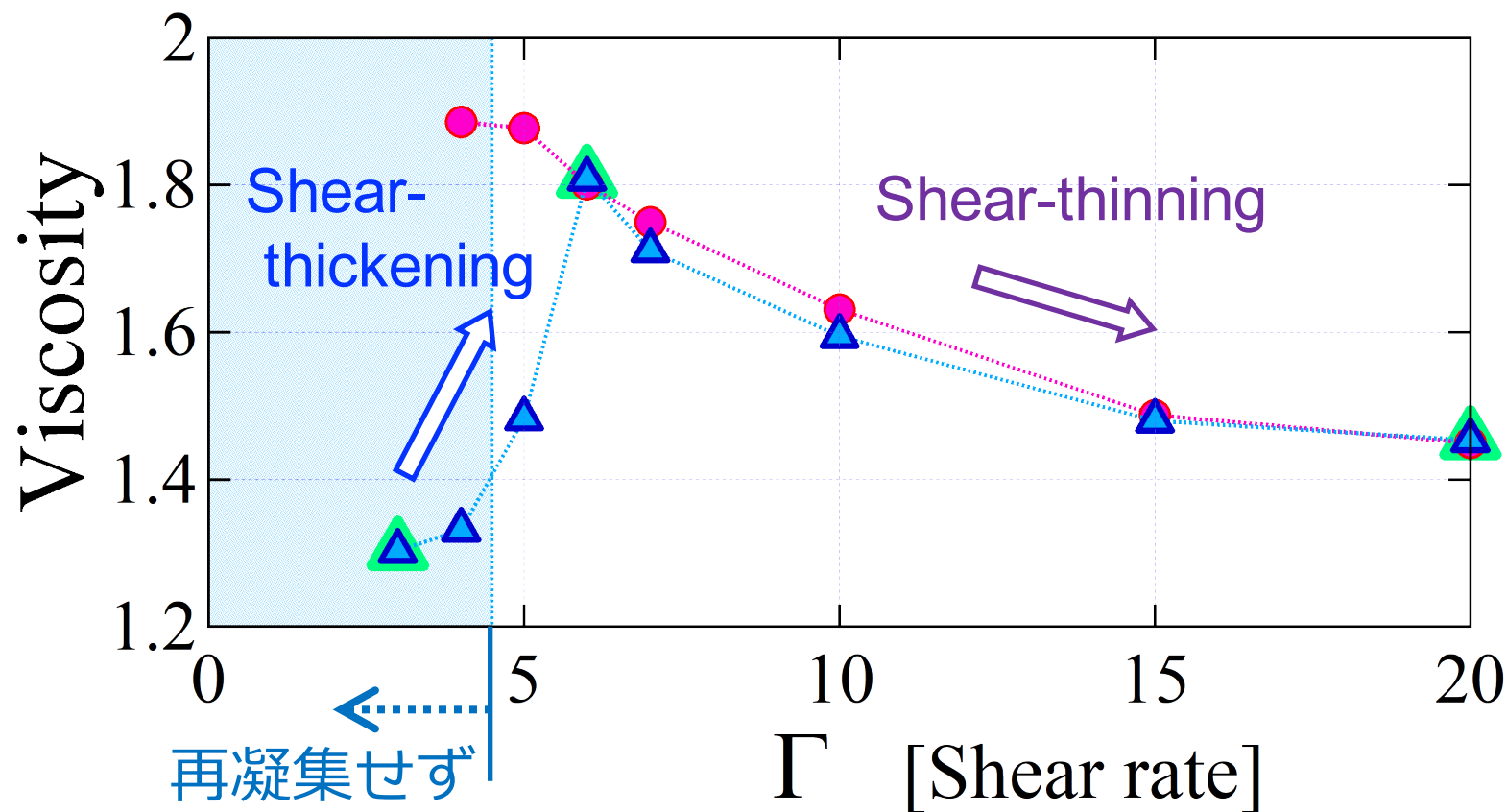
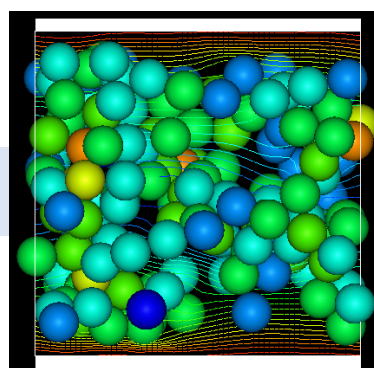


6

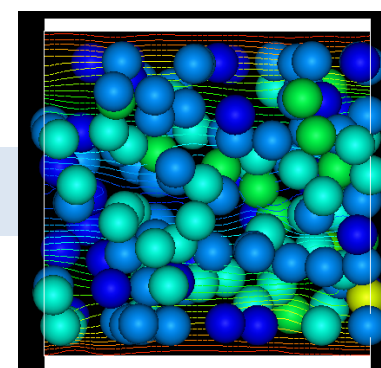


20

粘度 vs. 剪断率

 $\Gamma = 3$ 

6



20

- 数値シミュレーション**SNAP**による解砕特性の解析：
分散度 vs. 剪断率
- 高剪断率の注意点：
分散度の上限（解砕効率低下），発熱（品質劣化）
- 再凝集が起こる剪断率領域に注意
← shear-thickeningの把握