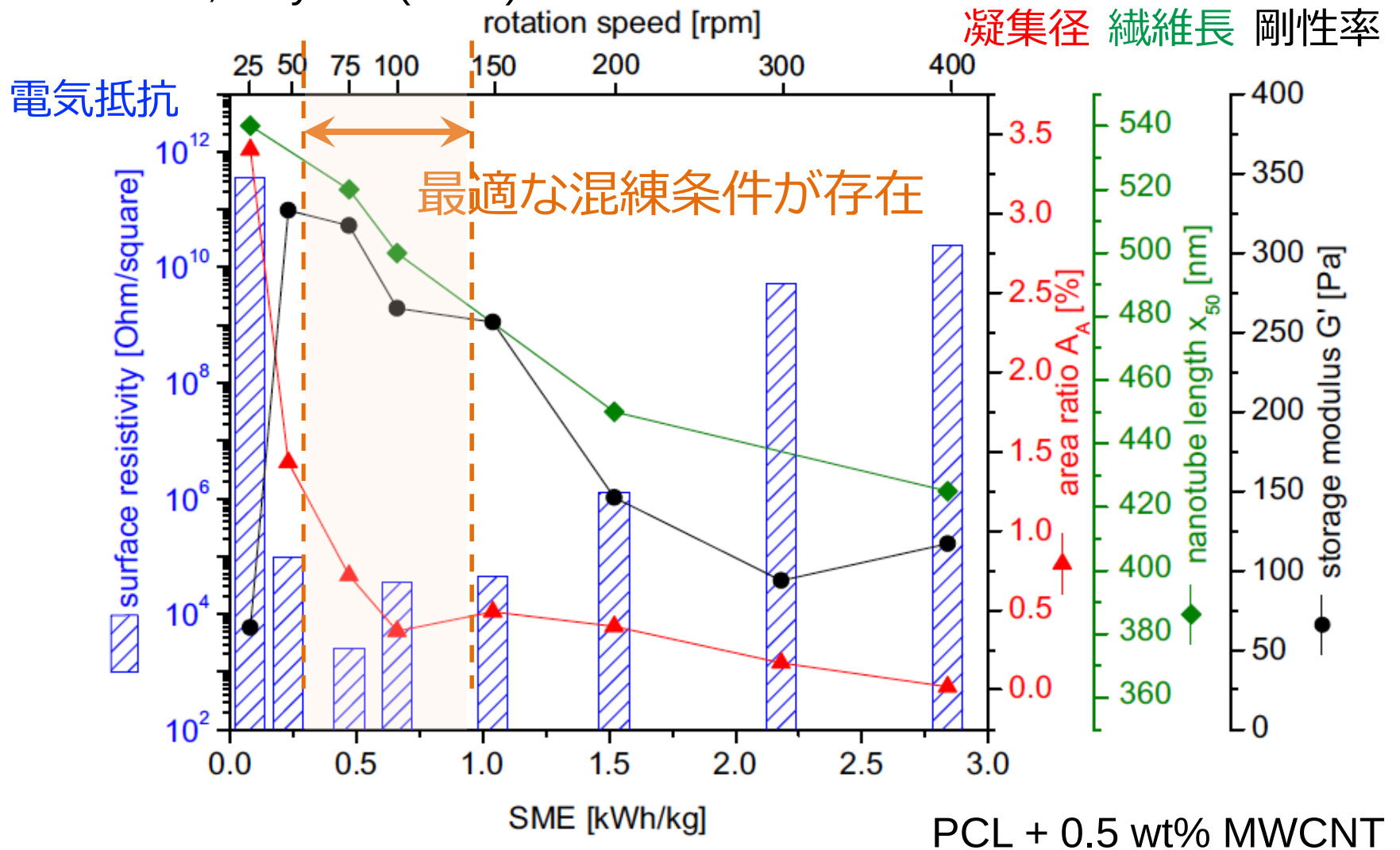


混練におけるナノファイバー分散過程の 微視的シミュレーション

- 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)

混練条件とファイバー分散

Pötschke *et al.*, Polymer (2013)

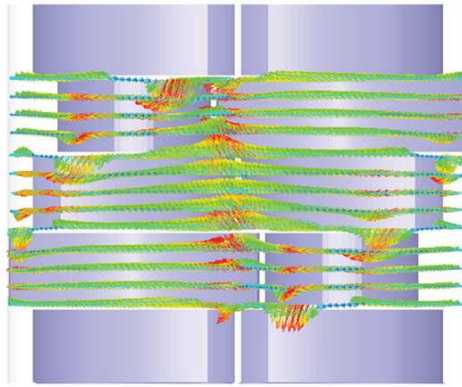


ファイバーの分散と破壊のトレードオフ

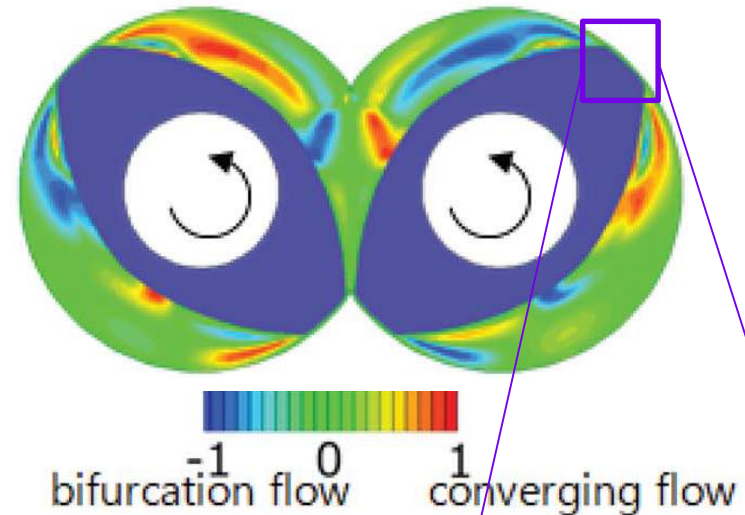
数値シミュレーション

- ・ **装置内流動解析**（巨視的スケール）

装置形状，操作条件 → 流動状態（剪断率，流動様式）



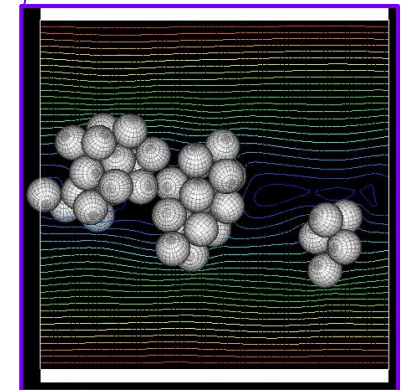
Nakayama et al., AIChE J. (2018).



- ・ **フィラー分散過程の解析**（微視的スケール）

流動状態（剪断率，流動様式）

→ 分散過程（解砕，破壊，均一化）



直接数値シミュレーション

Direct Numerical Simulation

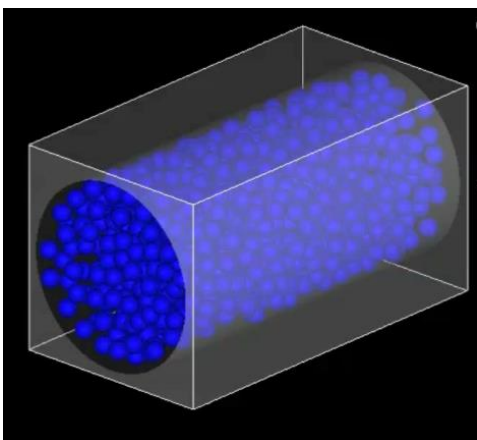
粒子：運動方程式

流体力

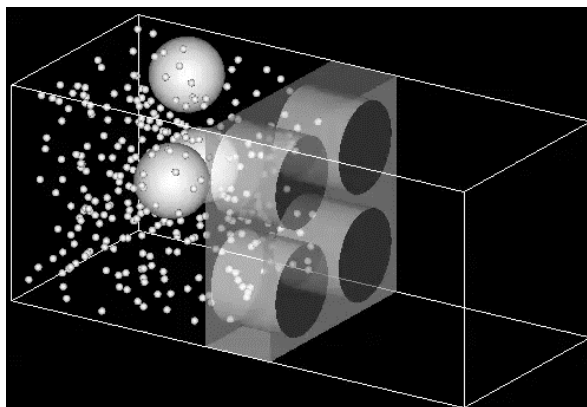
境界条件

← 連成：Immersed Boundary 法

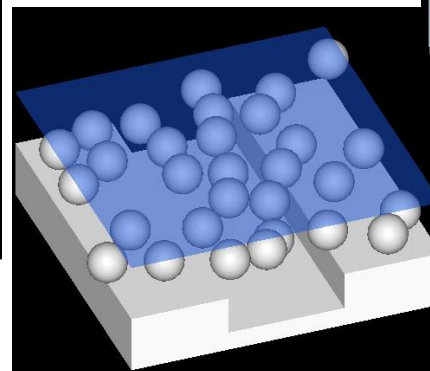
流動場：Navier-Stokes方程式



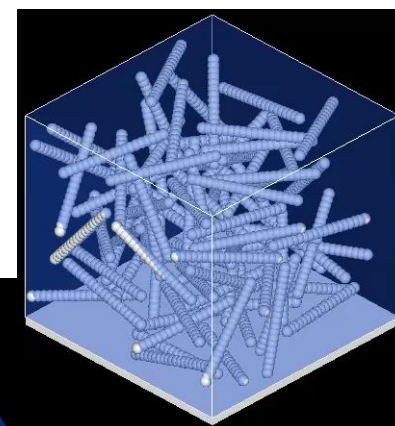
流動



濾過



乾燥

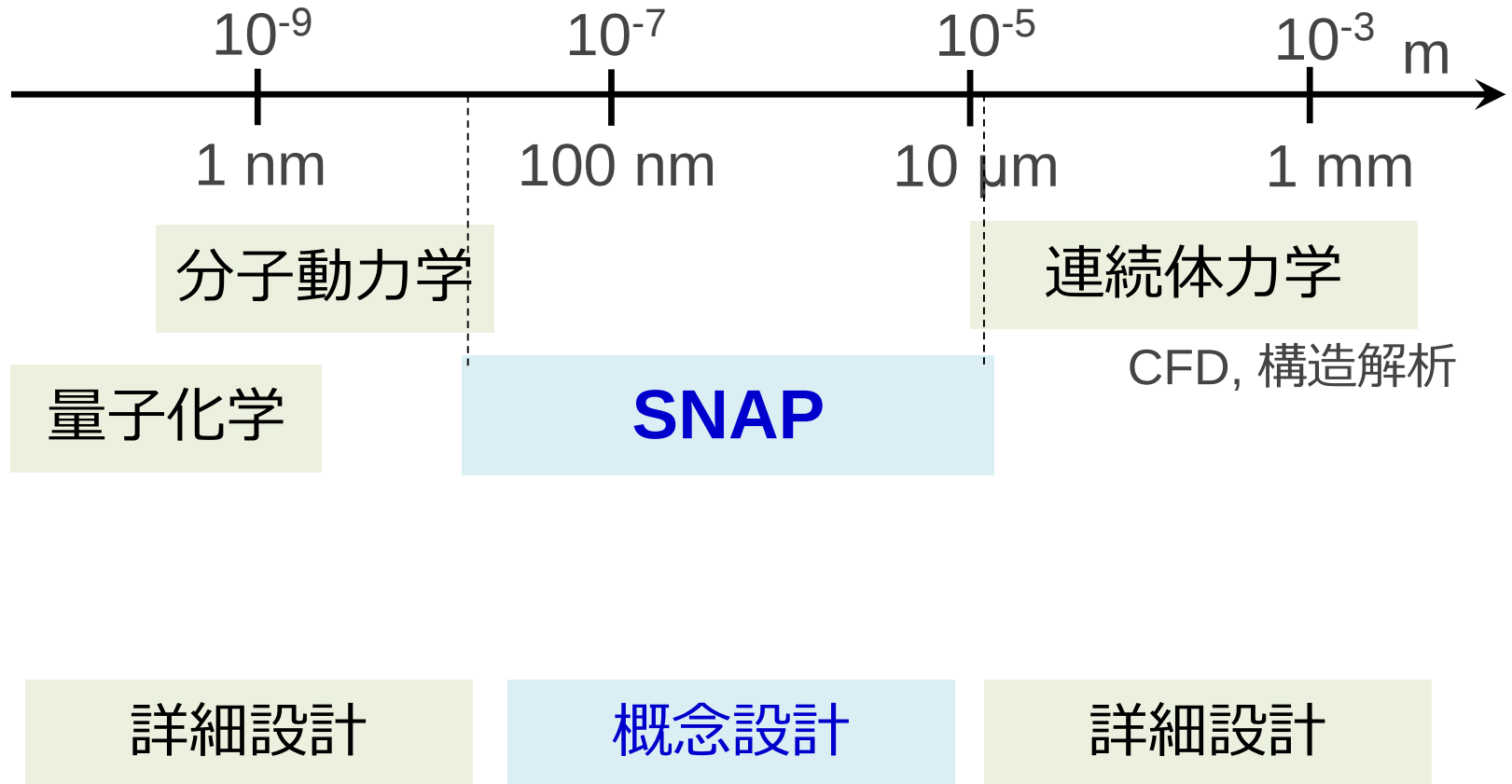


SNAP研究会



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

空間スケールとモデル



SNAP解析事例

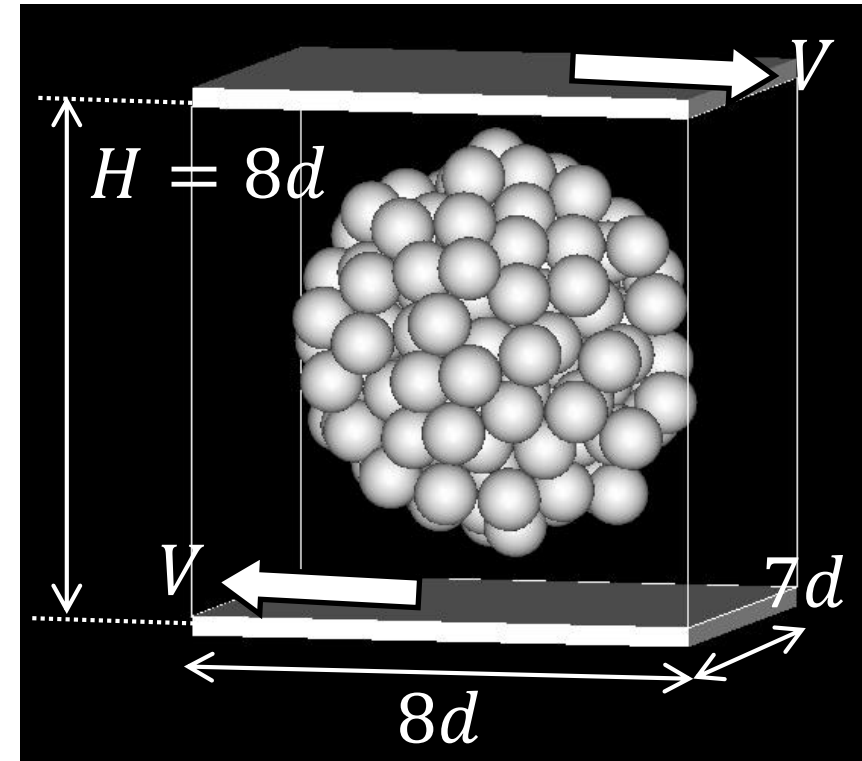
単純剪断流れにおける凝集体解砕

- 凝集体径 $6d$ 一次粒子径 d
体積分率 18 vol%

- 剪断率 $\dot{\gamma} = 2V/H$

- 無次元剪断率

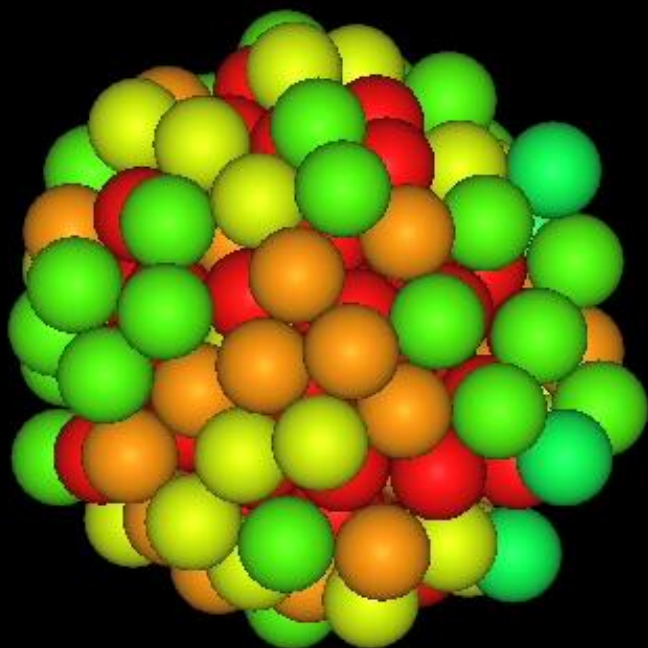
$$\Gamma = \frac{\eta \dot{\gamma} d^3}{E} = \frac{\text{剪断エネルギー}}{\text{凝集エネルギー}}$$



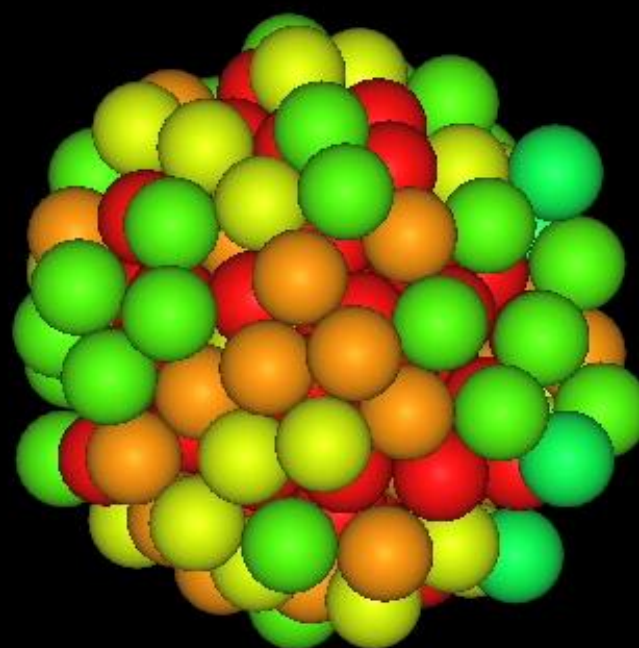
周期境界条件: x, y

計算結果

0 接触数 6



$\Gamma = 4$

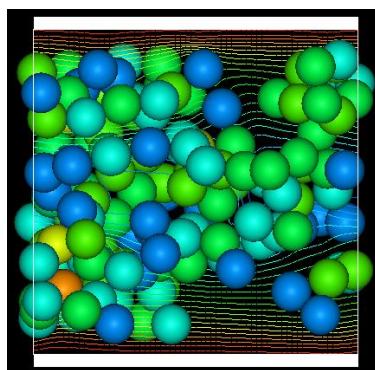
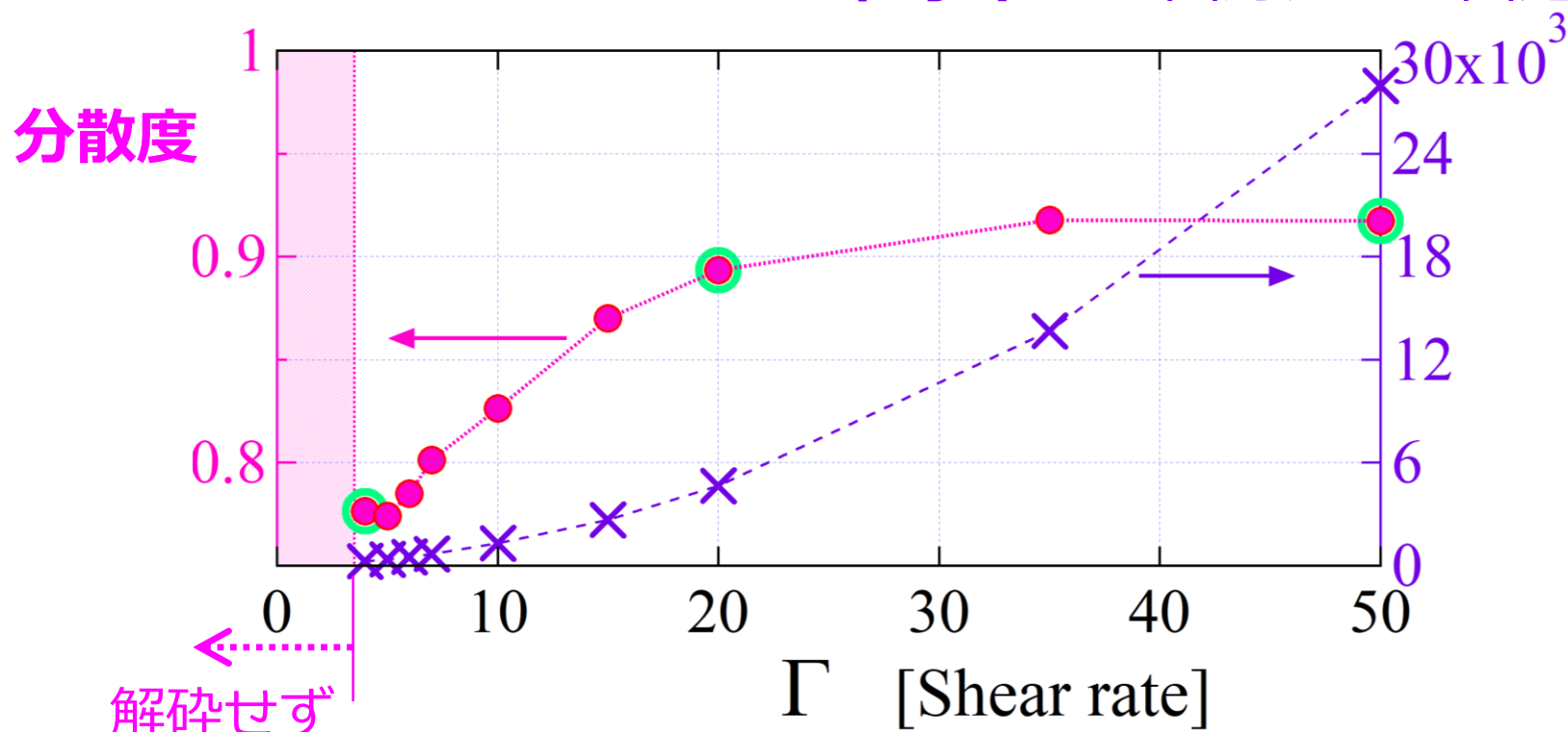


$\Gamma = 20$

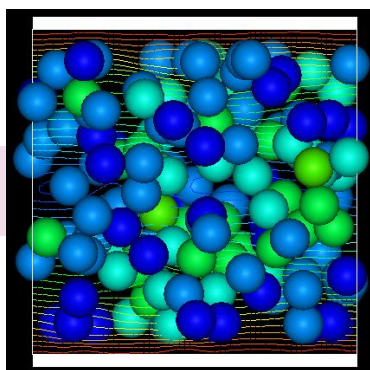
分散度 vs. 剪断率

単位: $E^2/\eta d^3$

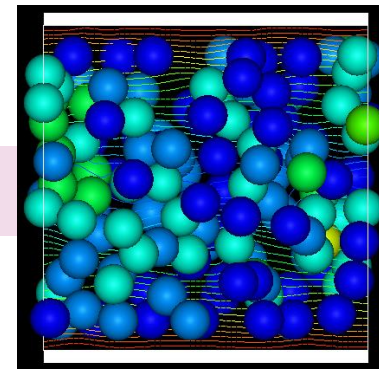
仕事率 = 壁面応力 $\times$ 壁面速度



$\Gamma = 4$



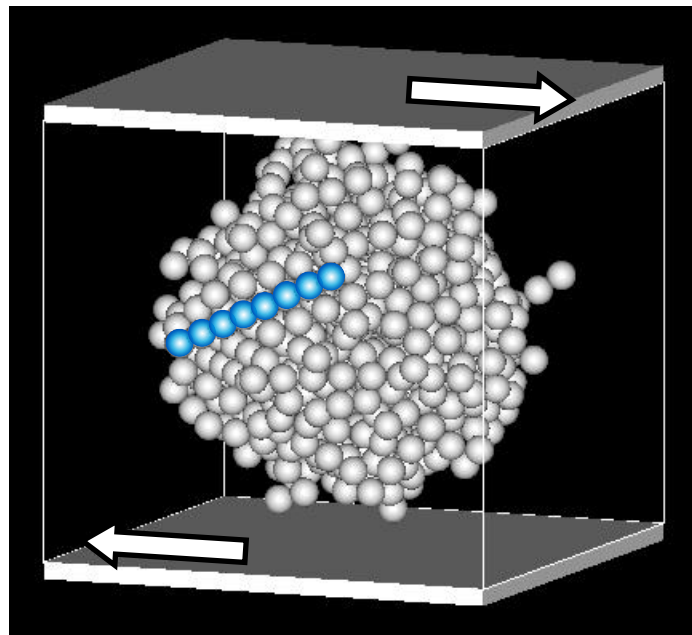
20



50

目的

- ファイバー凝集体の分散過程の解析
← 直接数値シミュレーション (SNAP)
- トレードオフ解決のための混練条件の考察
ファイバーの分散 vs. 破壊



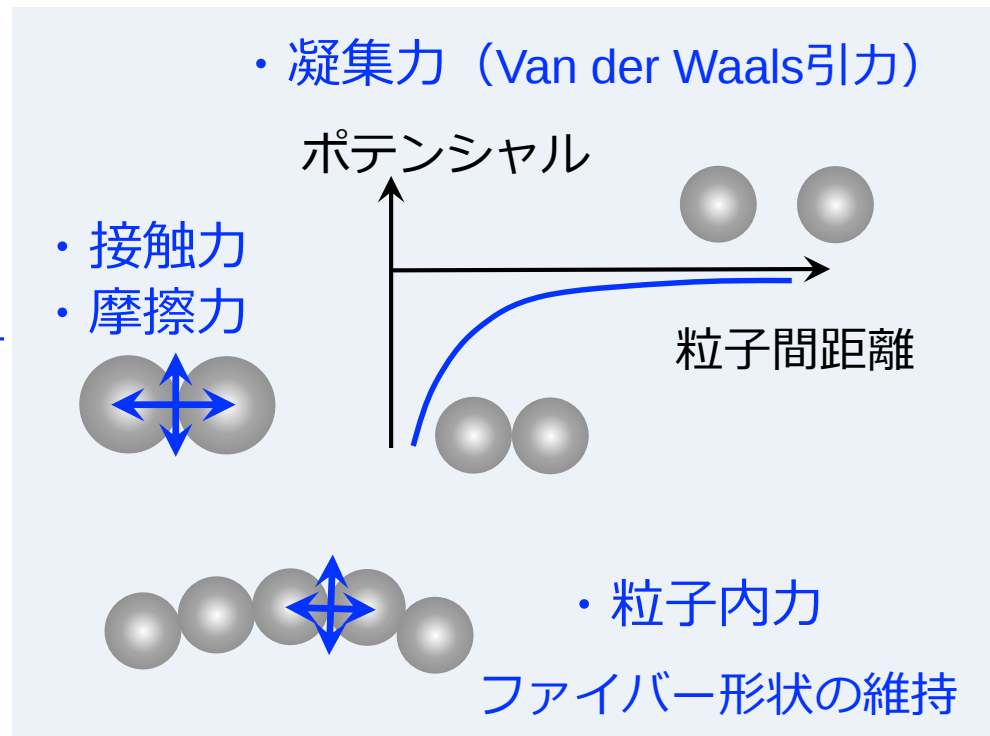
基礎方程式

粒子：運動方程式

並進 $M \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F}^H + \mathbf{F}^{PP}$

回転 $I \frac{d\mathbf{\Omega}}{dt} = \mathbf{N}^H + \mathbf{N}^{PP}$

流体力 粒子間力



流体場：Navier-Stokes方程式

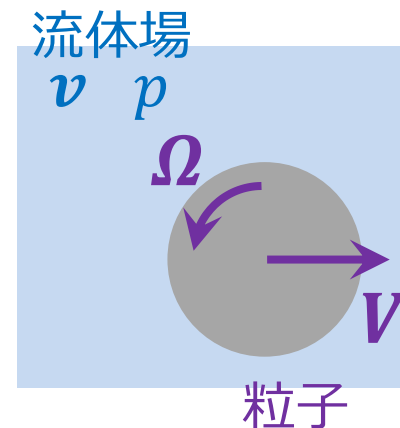
$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_P$$

流体応力

粒子速度
境界条件の強制

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

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



計算条件

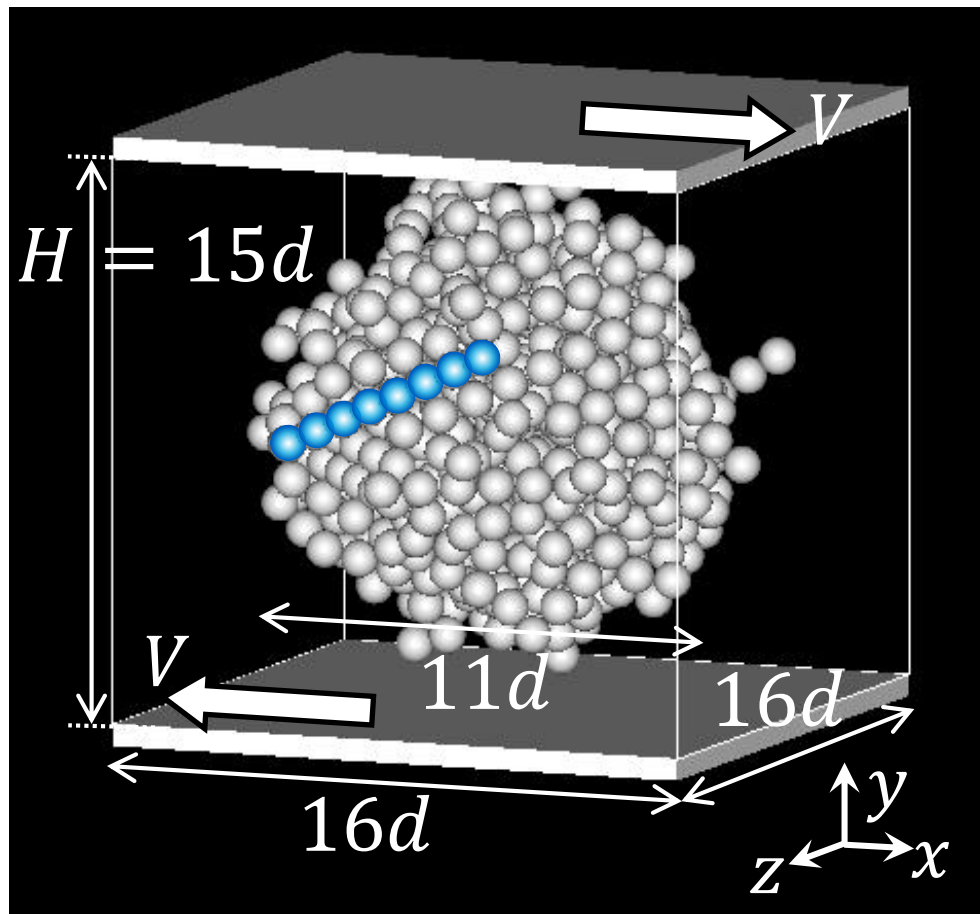
粒子

- ・ 直径 $d = 11 \text{ nm}$
(バンドル径)
- ・ アスペクト比 8
- ・ 体積分率 11 vol%

剪断率 $\dot{\gamma} = 2V/H$

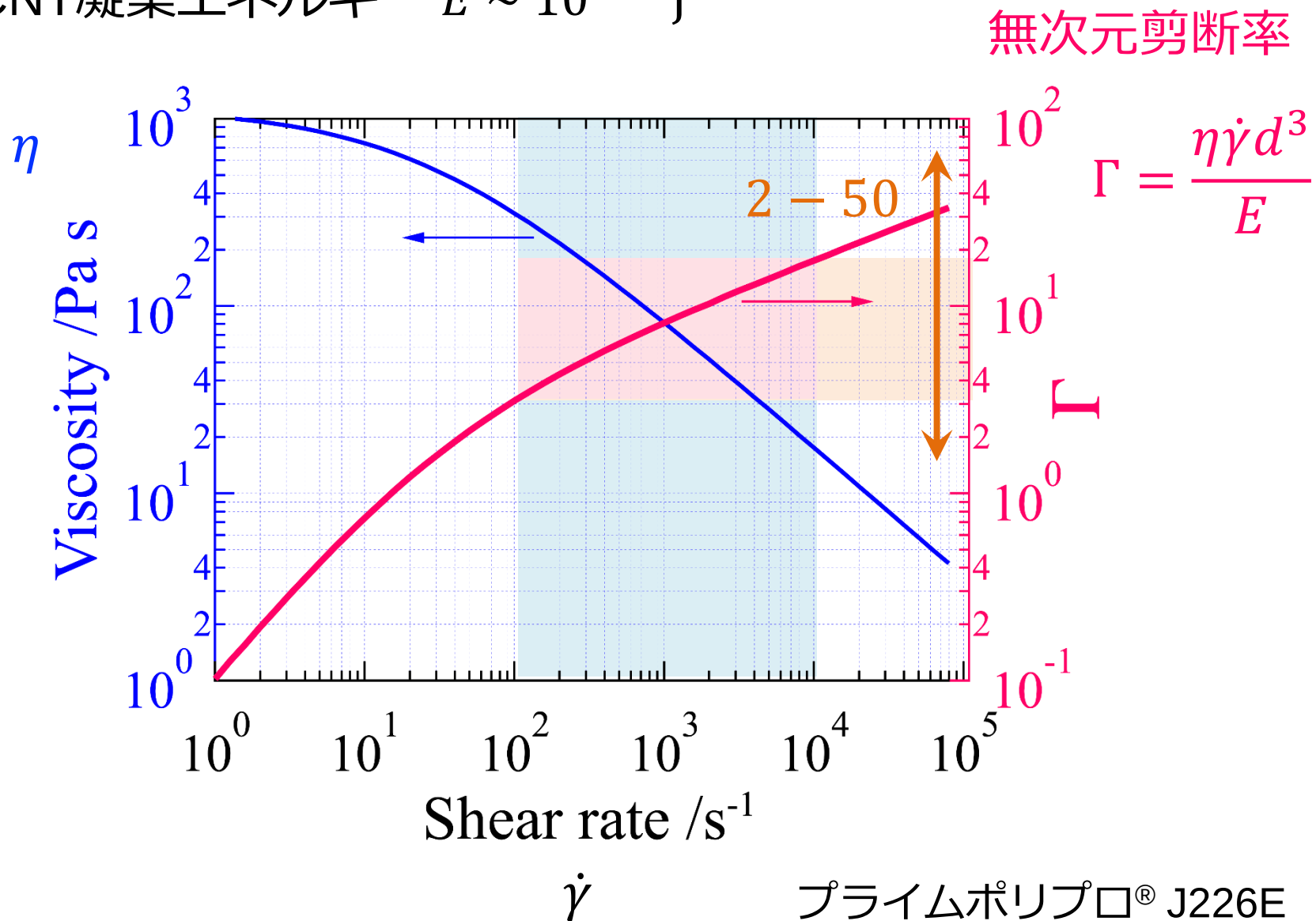
無次元剪断率

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

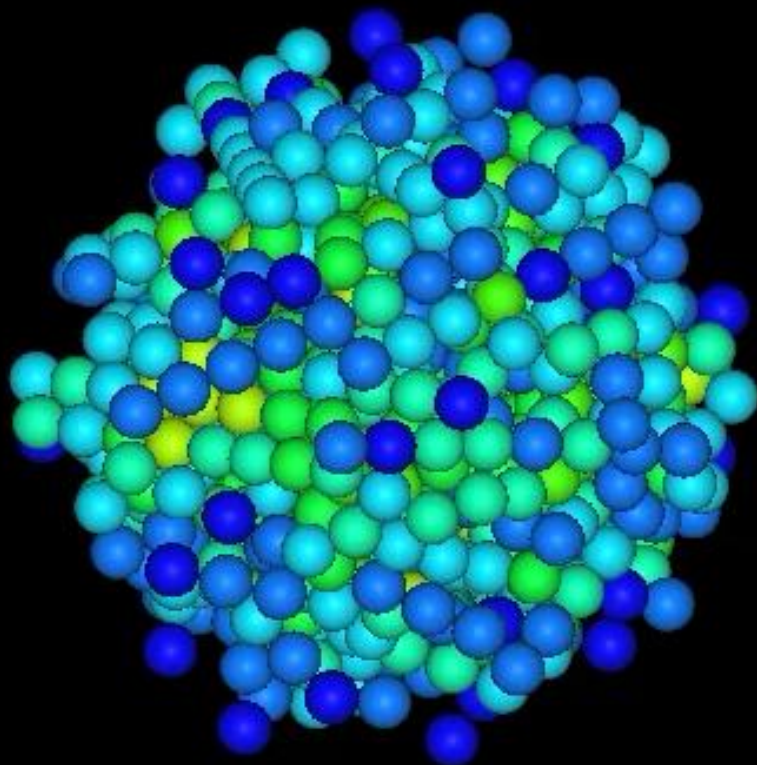
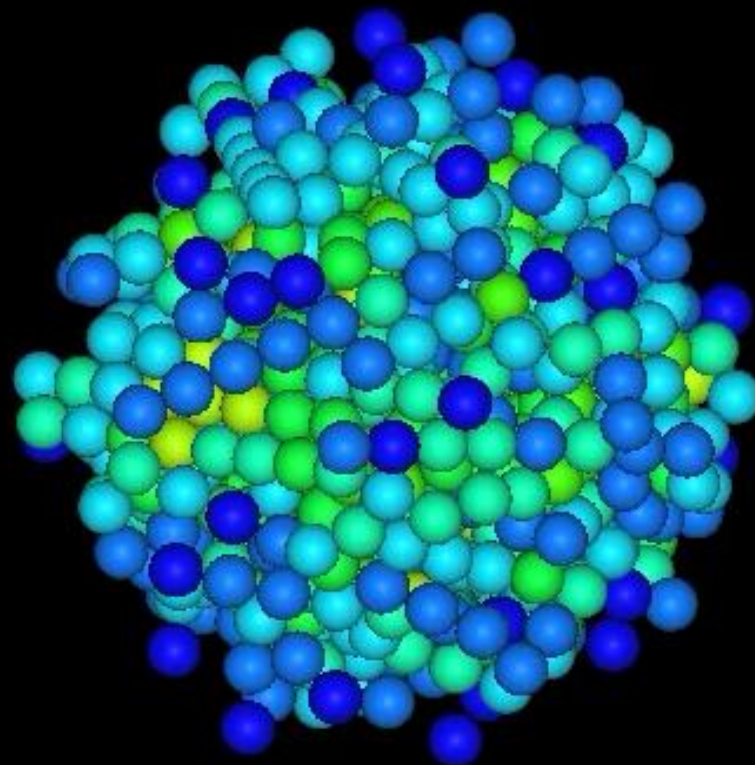


計算条件

CNT凝集エネルギー $E \sim 10^{-20}$ J



計算結果

 $\Gamma = 2$  $\Gamma = 6$

評価量

分散度

$$1 - \frac{\text{平均接触数}}{\text{初期平均接触数}}$$

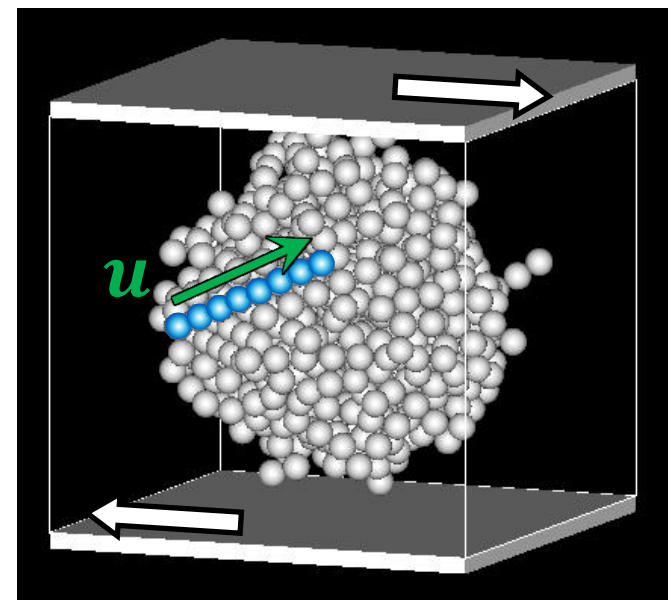
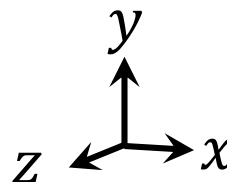
壁面応力

媒質粘度×剪断率
で無次元化

配向度： $\langle u_x^2 \rangle, \langle u_y^2 \rangle, \langle u_z^2 \rangle$

粒子長軸方向の単位ベクトル

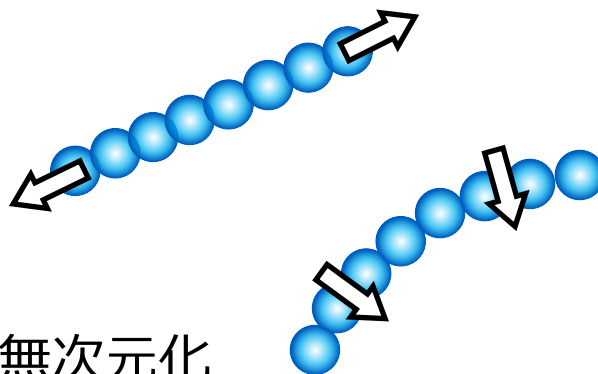
$$\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$$



粒子内応力

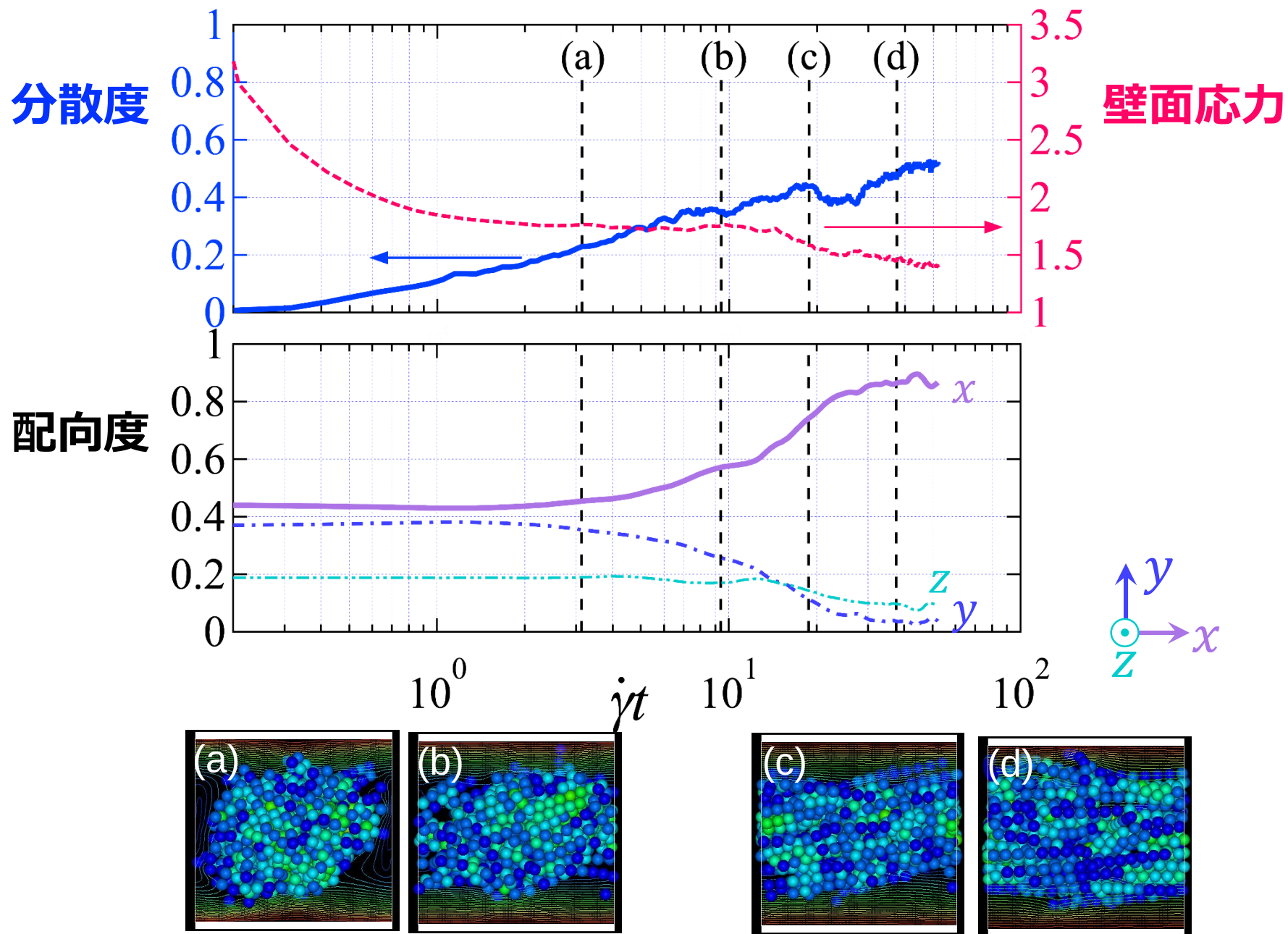
- ・ 引張応力
- ・ 曲げ応力

Young率で無次元化



$\Gamma = 6$

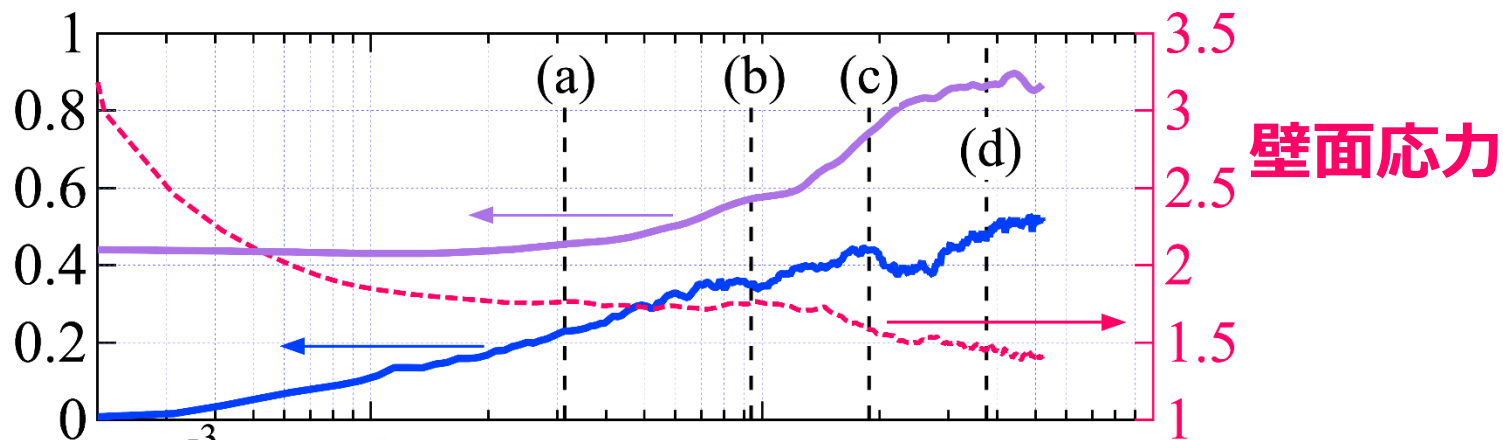
解砕の進展



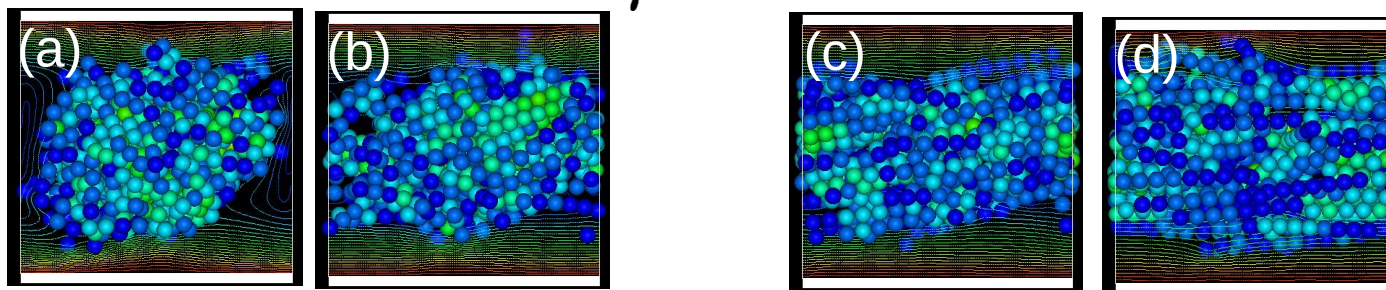
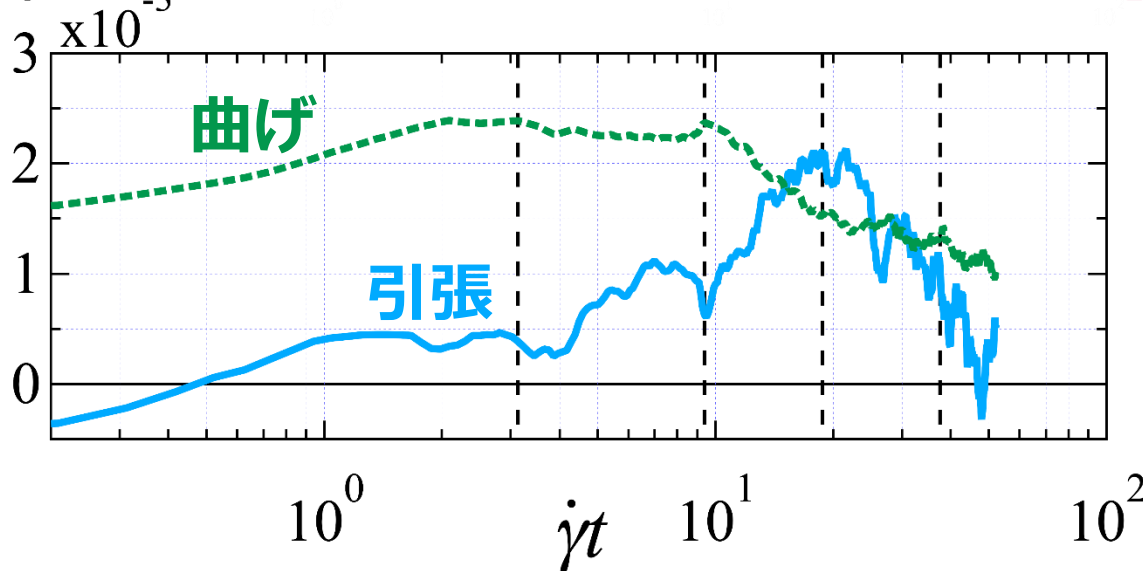
解砕の進展

$$\Gamma = 6$$

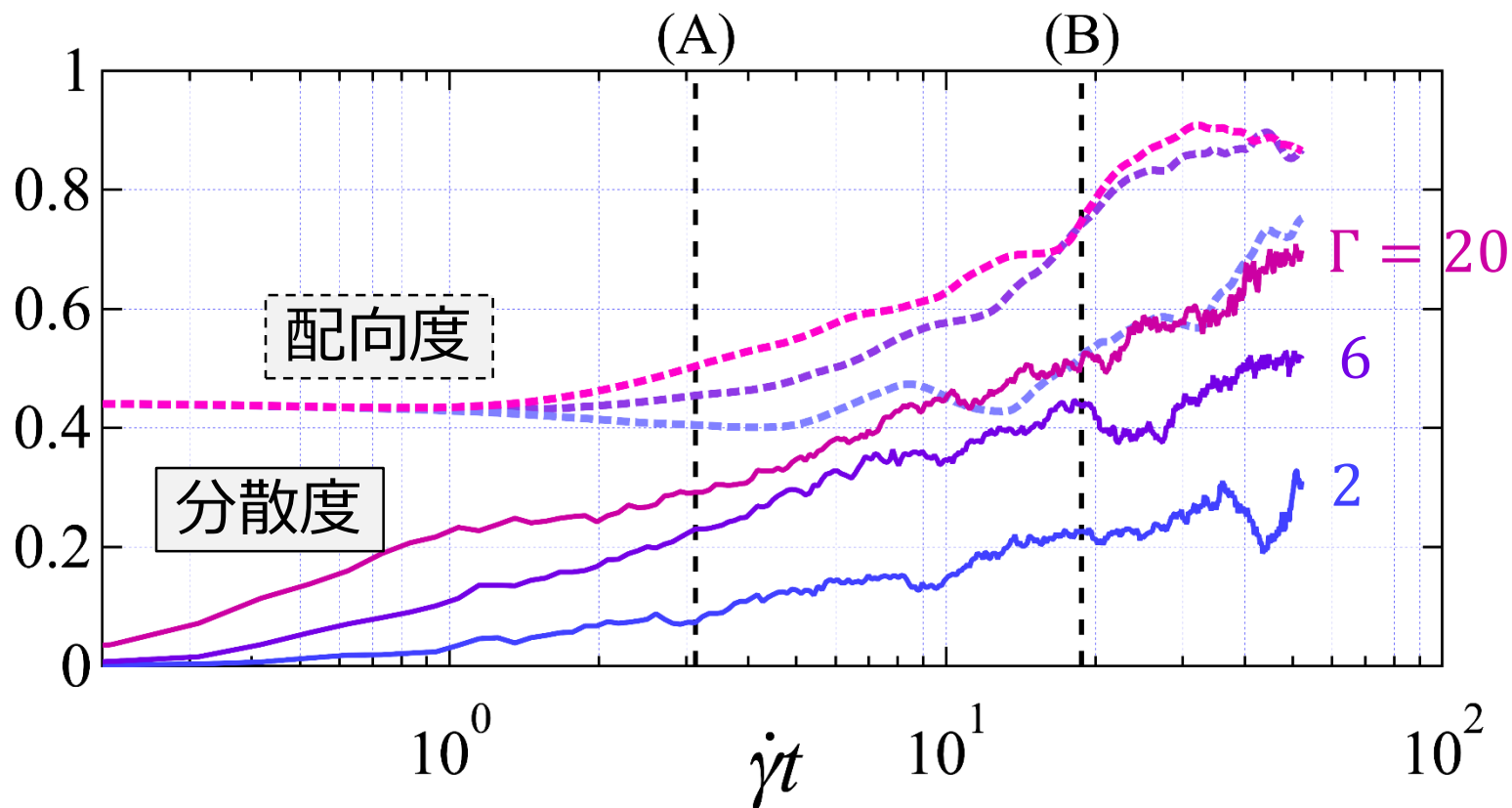
配向度
分散度



粒子内応力

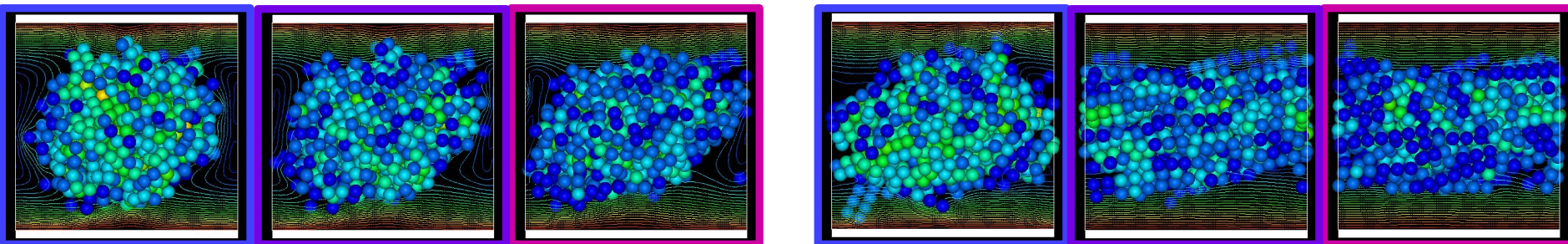


分散度 配向度

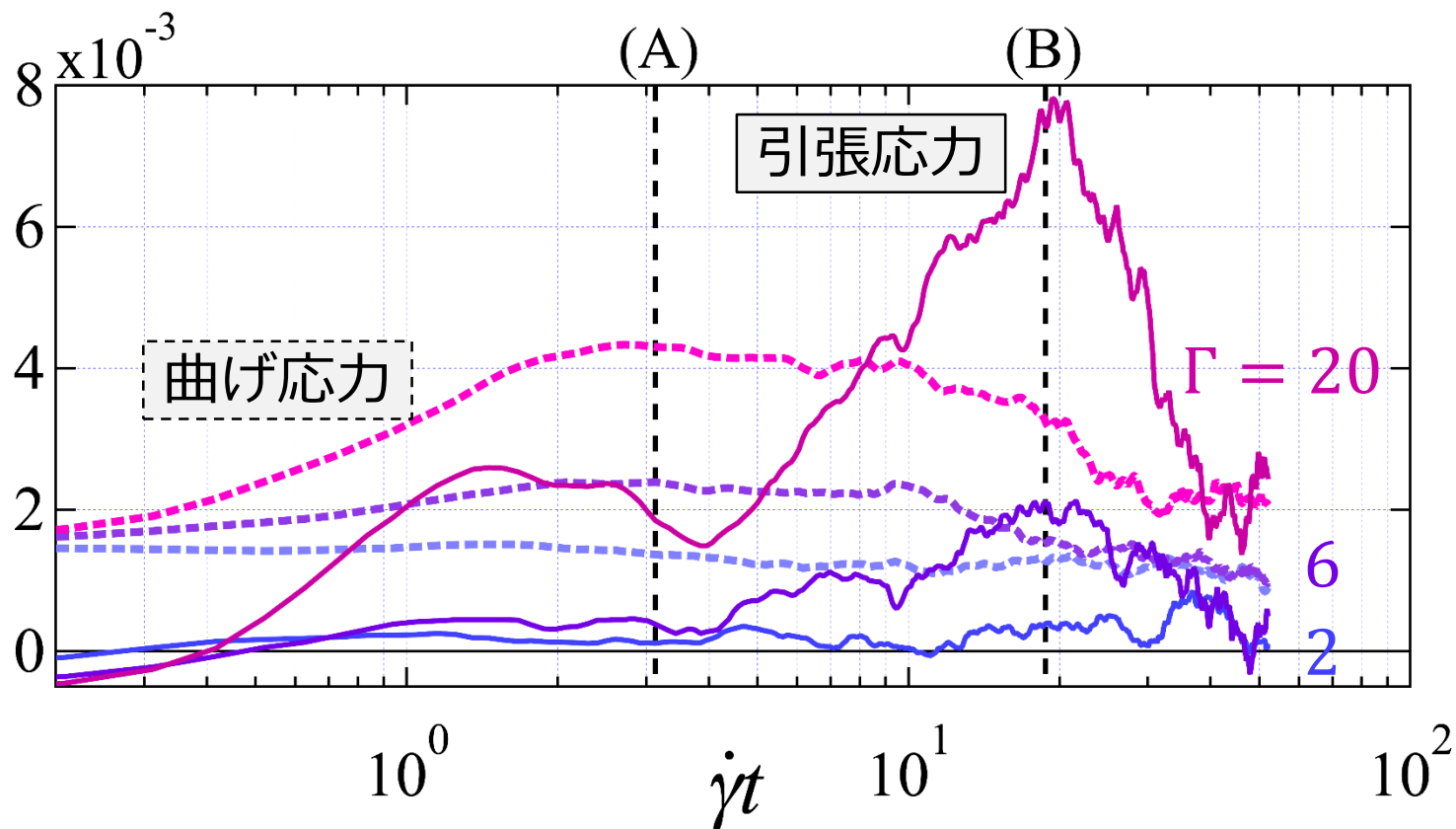


(A)

(B)

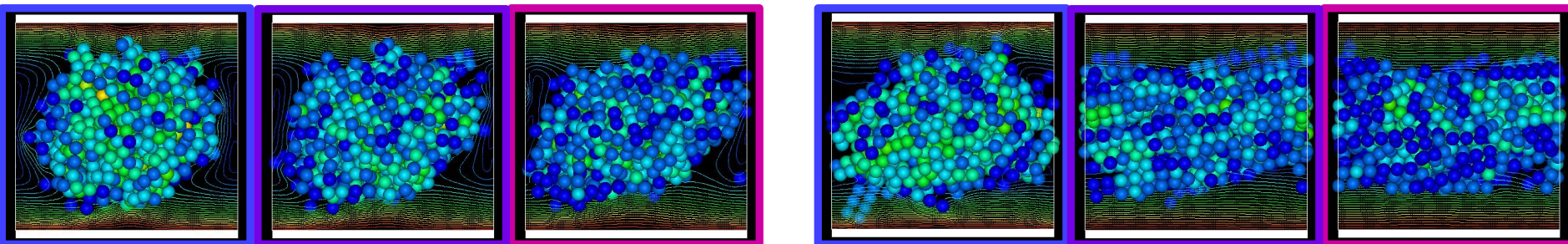


粒子内応力



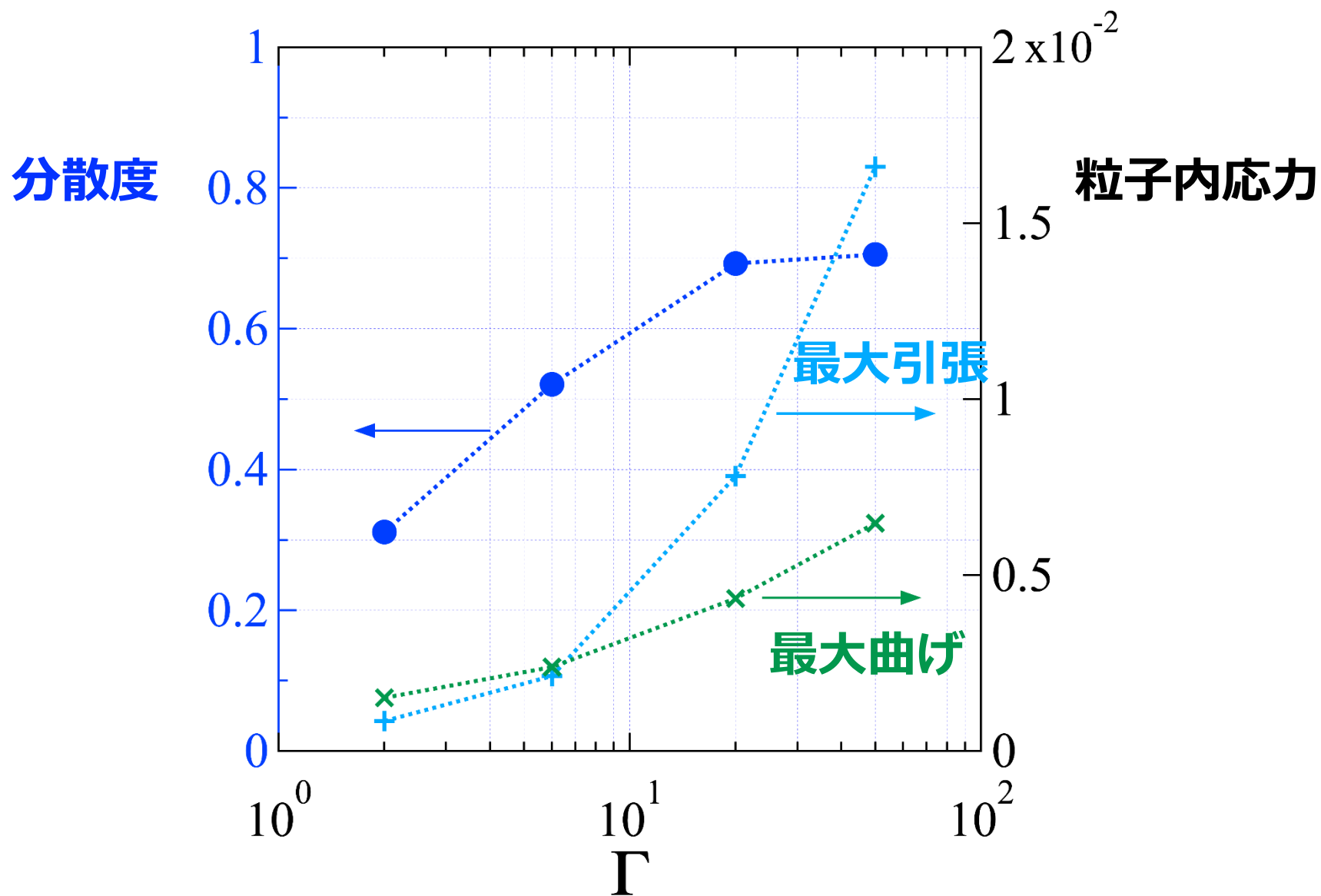
(A)

(B)



計算結果

19



総括

- **SNAP**による分散過程の可視化
凝集体解砕 → 配向の順で進行； 壁面応力の減少と対応
- 主要な粒子内応力（破壊モード）が変化
曲げ（解砕段階） → 引張（配向段階）
（低剪断率） （高剪断率）
- 剪断率増加に対する上昇率：
分散度：小 粒子内応力：大 → 最適な剪断率が存在
- 今後：ファイバー破壊を考慮した解析