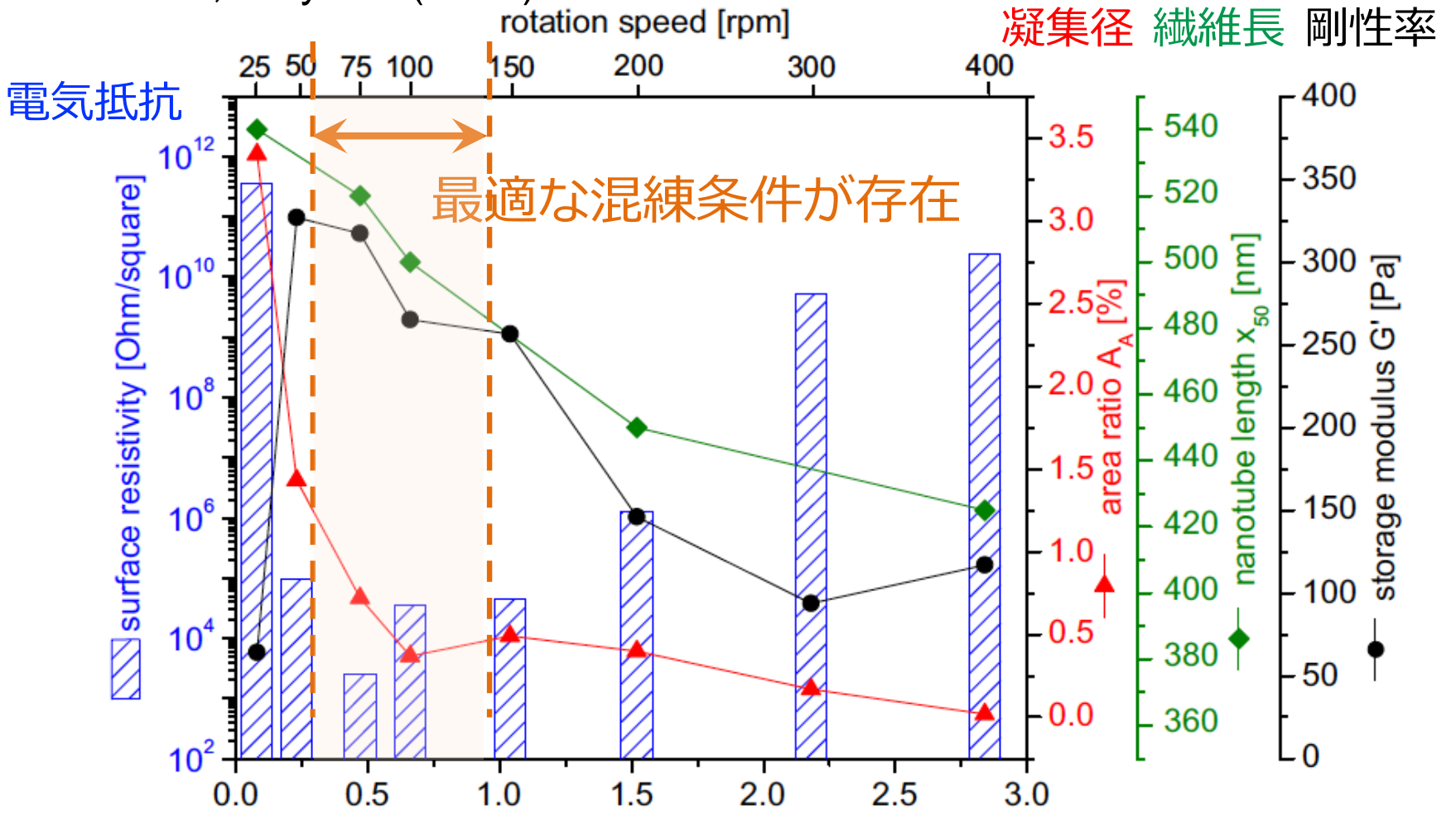


# 混練におけるナノファイバーの折損と 分散過程の直接数値解析

- 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

Öbtschke *et al.*, Polymer (2013)



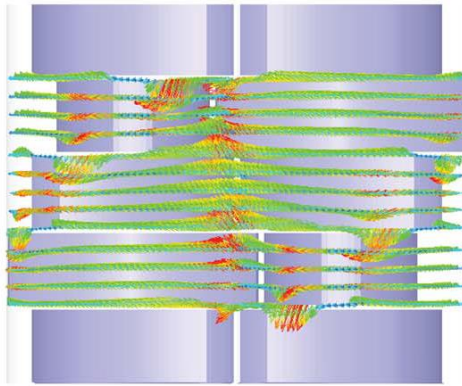
PCL + 0.5 wt% MWCNT

ファイバーの分散と折損のトレードオフ

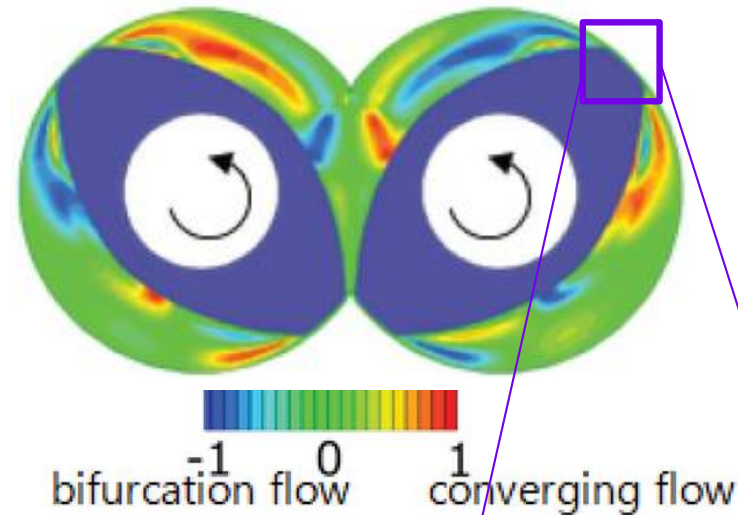
# 数値シミュレーション

## ・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）



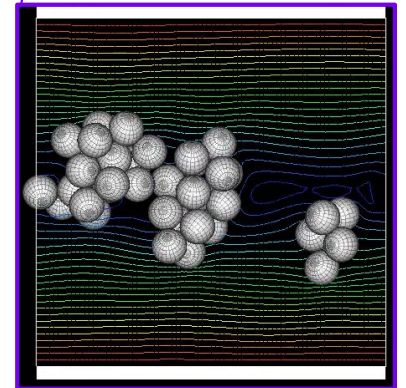
Nakayama *et al.*, AIChE J. (2018).



## ・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，折損，均一化）



# 直接数値シミュレーション Direct Numerical Simulation

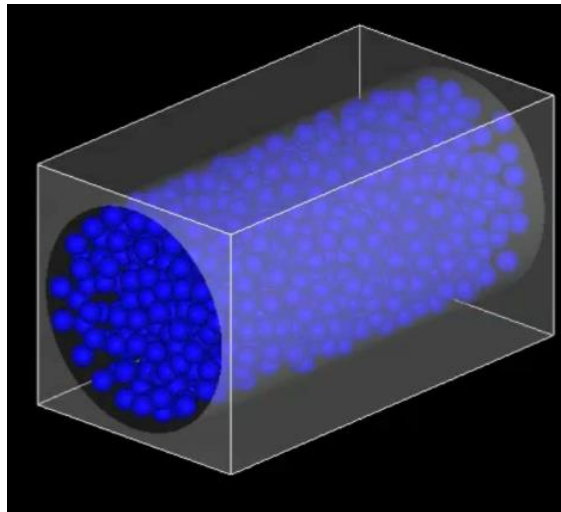
粒子：運動方程式（並進/回転）

流体力 ↑

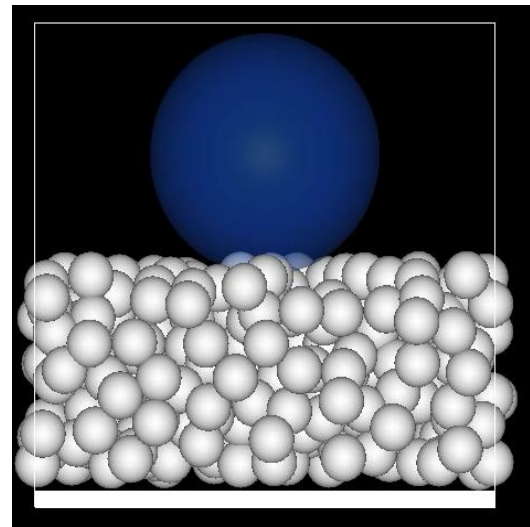
境界条件 ↓

← 連成：Immersed Boundary 法

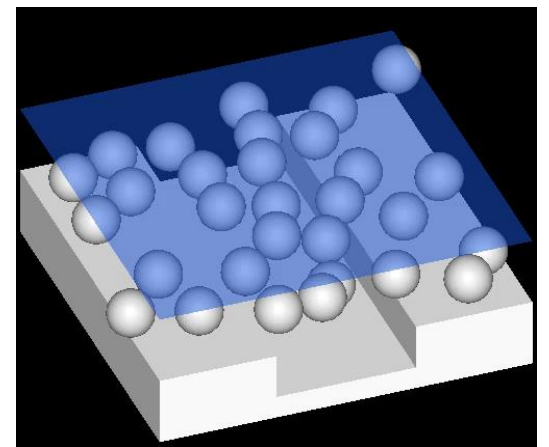
流動場：Navier-Stokes方程式



流動



浸潤



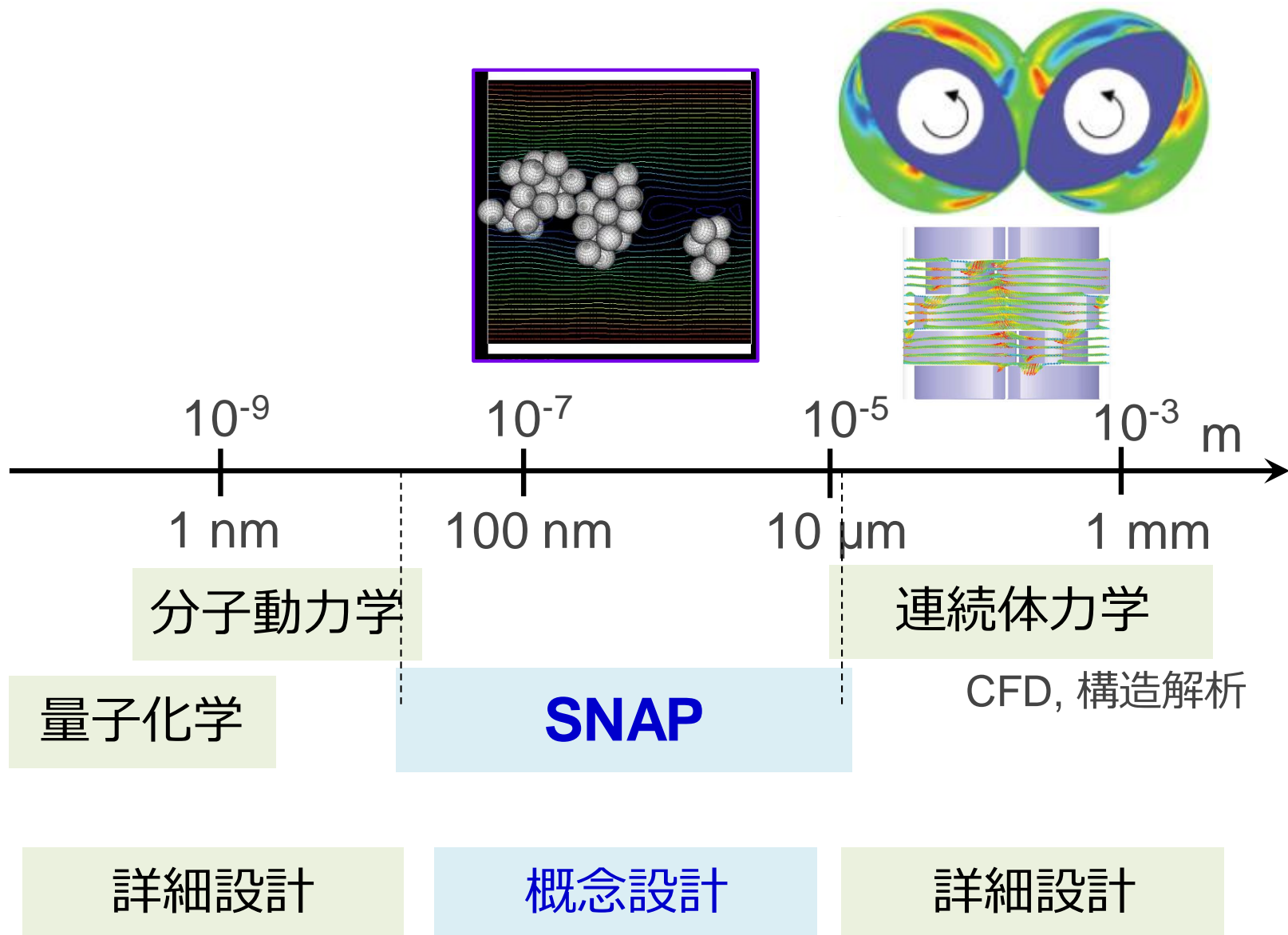
乾燥

SNAP研究会



Structure of NAno Particles  
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

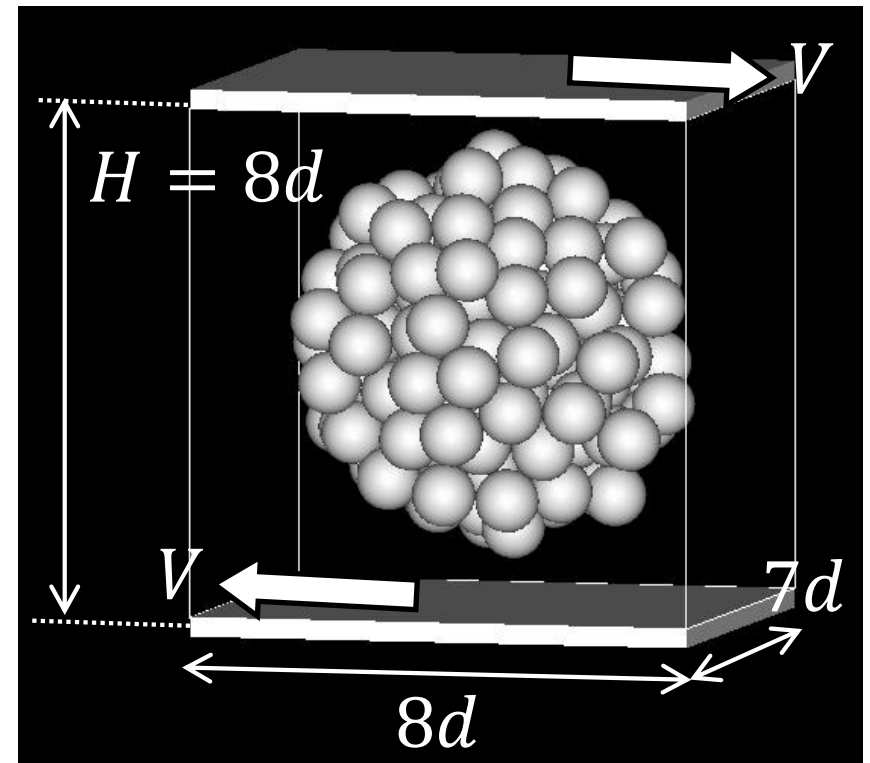
## 単純剪断流れにおける凝集体解砕

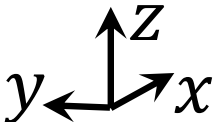
凝集体径  $6d$     一次粒子径  $d$   
 体積分率 18 vol%

剪断率  $\dot{\gamma} = 2V/H$

無次元応力

$$\tau^* = \frac{\text{流体応力}}{\text{凝集応力}} = \frac{\eta\dot{\gamma}}{\tau_p}$$

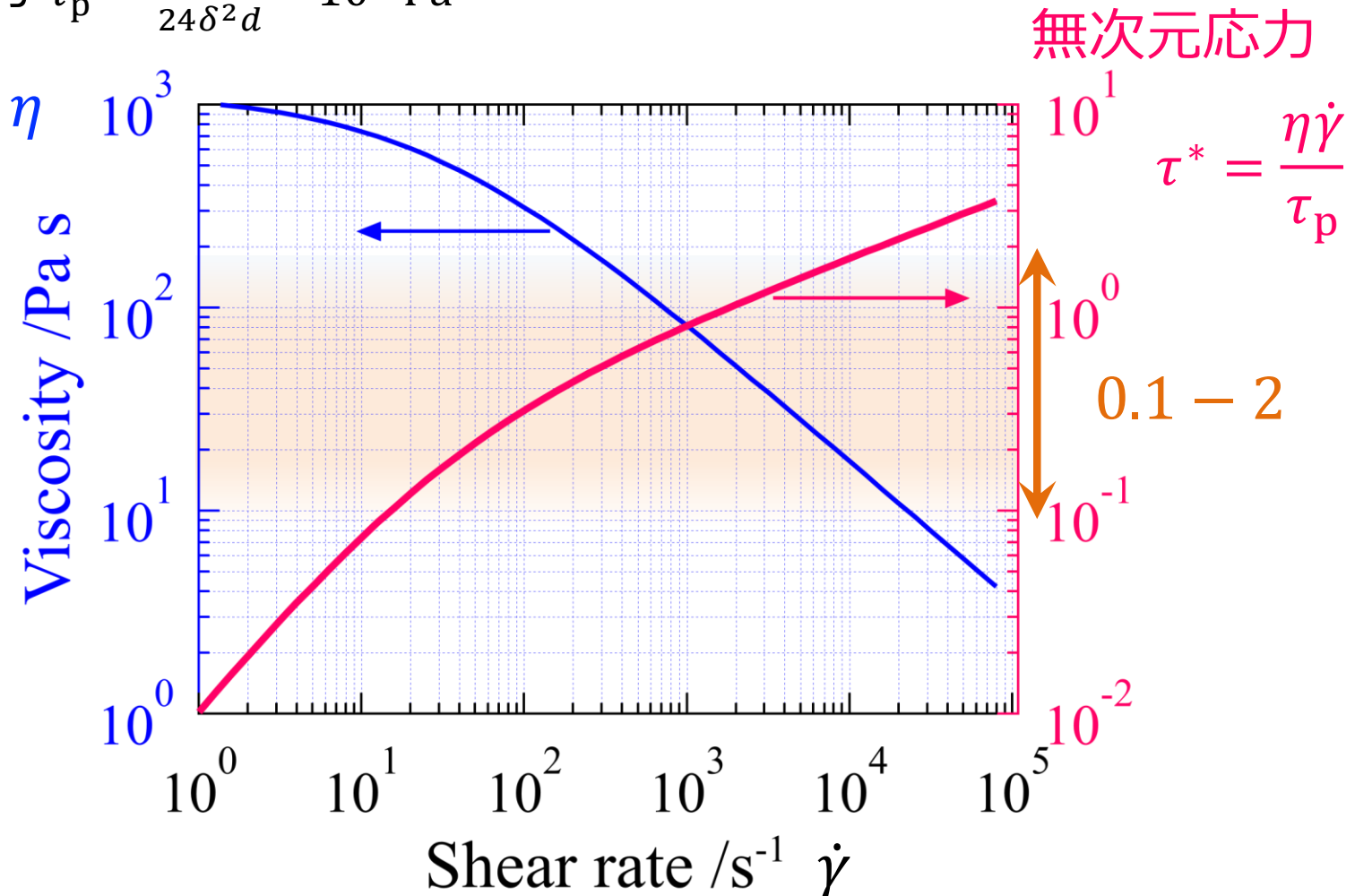


周期境界条件:  $x, y$  

# 無次元応力の見積もり

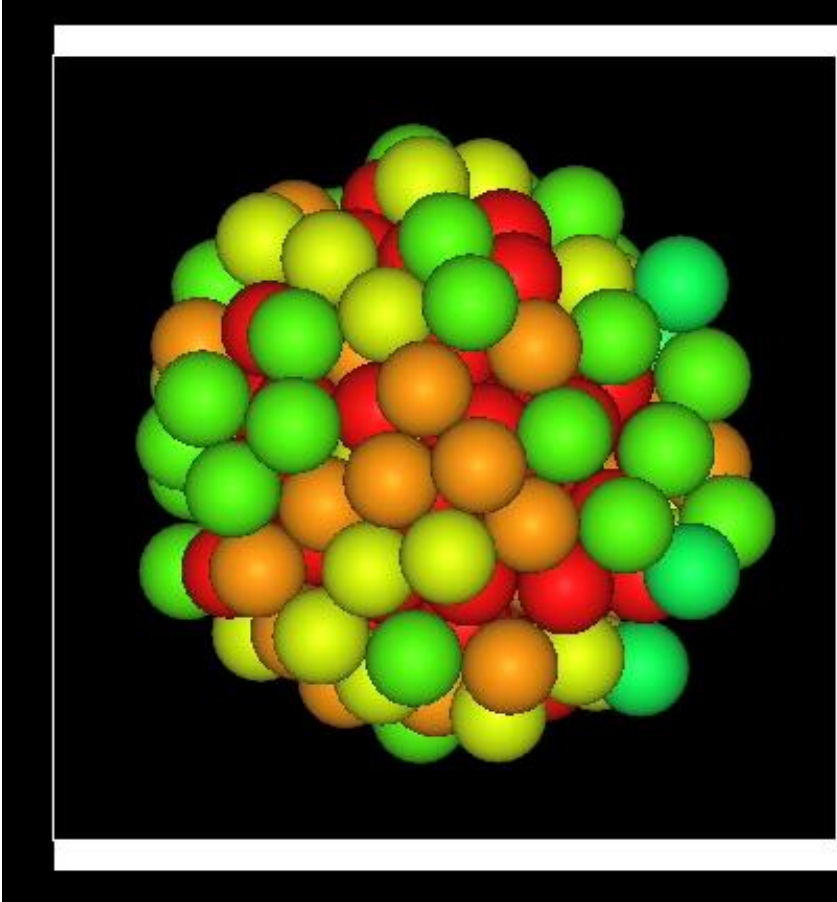
凝集エネルギー (Hamaker定数)  $A \sim 10^{-20}$  J      粒径  $d \sim 10^{-7}$  m

凝集応力  $\tau_p = \frac{A}{24\delta^2 d} \sim 10^5$  Pa

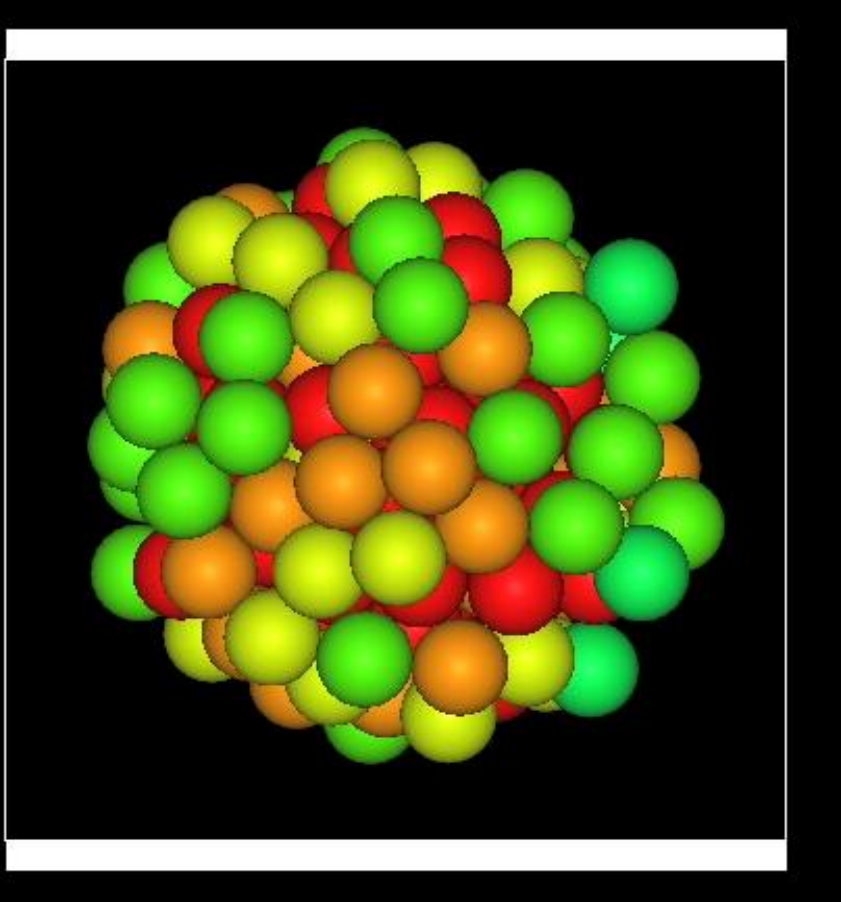


# 計算結果

0 接触数 6



$$\tau^* = 0.09$$



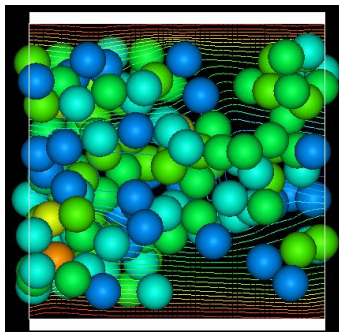
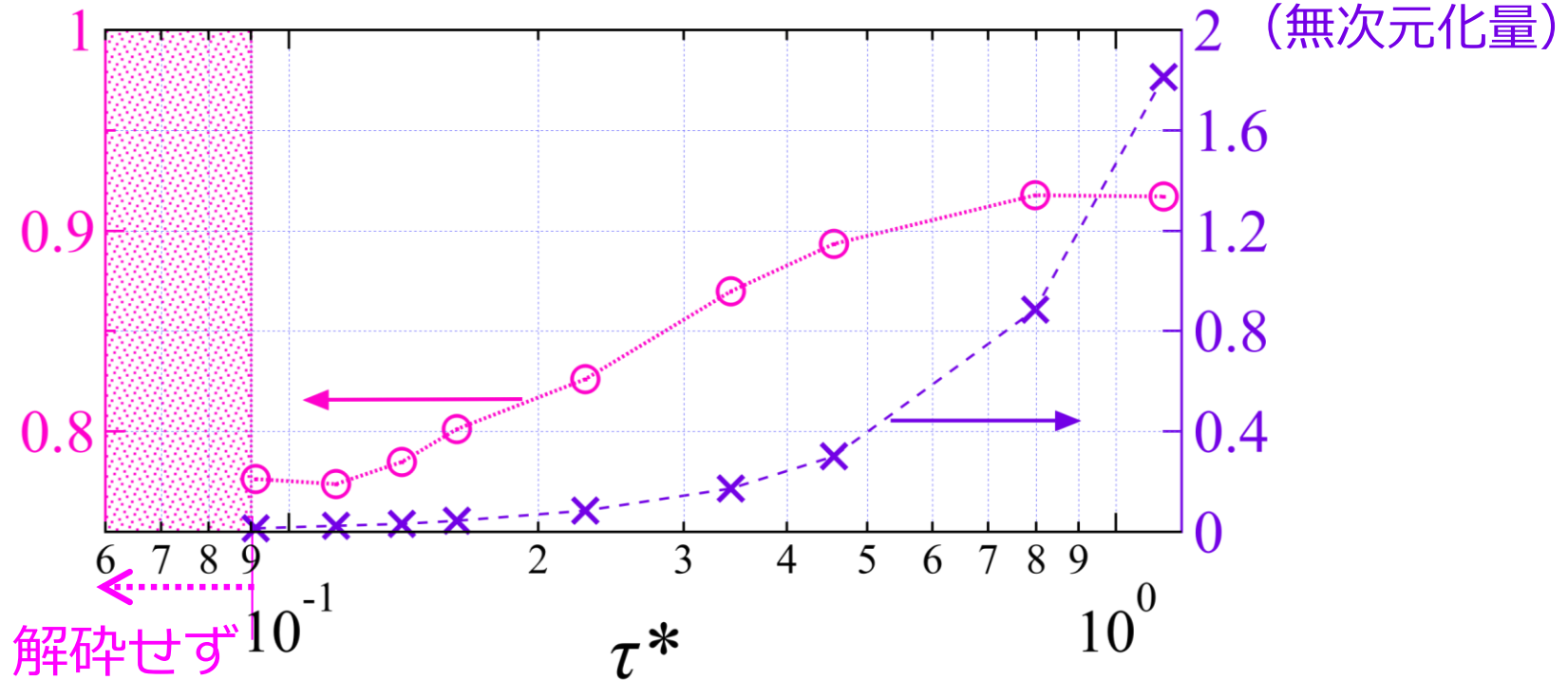
$$\tau^* = 0.46$$



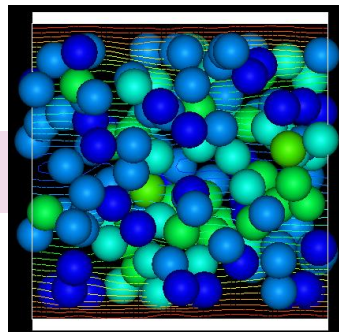
# 解砕特性

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

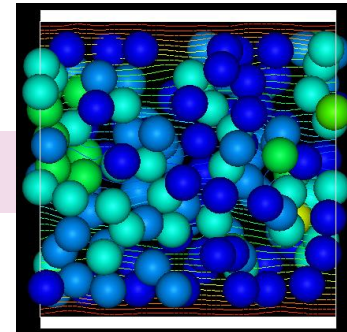
$$\text{仕事率} = \text{壁面応力} \times \text{剪断率}$$



$\tau^* = 0.09$



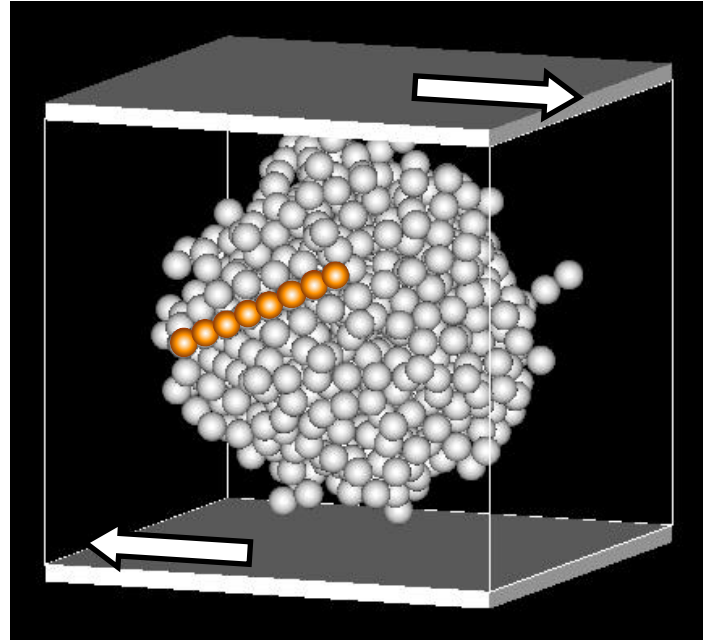
0.46



1.1

# 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**)
- 分散過程におけるファイバー粒子内応力の観点から折損の発生を考察



# 基礎方程式

## 粒子：運動方程式

並進  $M \frac{dV}{dt} = F^H + F^{PP}$

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

流体力    粒子間力

- 凝集力 (Van der Waals 引力)
- ポテンシャル
- 粒子間距離
- 接触力
- 摩擦力
- 粒子内力
- ファイバー形状の維持
- 破壊閾値の設定 → 折損

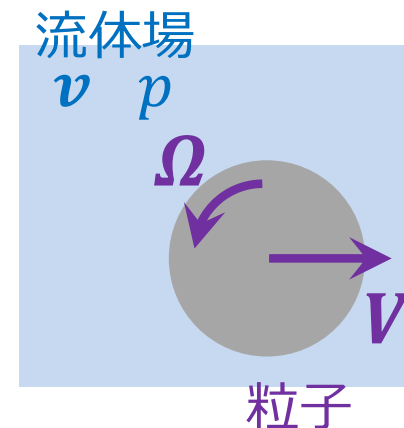
## 流体場：Navier-Stokes方程式

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) = \nabla \cdot \sigma + f_P$$

流体応力    粒子速度  
境界条件の強制

$$\nabla \cdot v = 0$$

$$\sigma = -pI + \eta[\nabla v + (\nabla v)^T]$$



# 計算条件

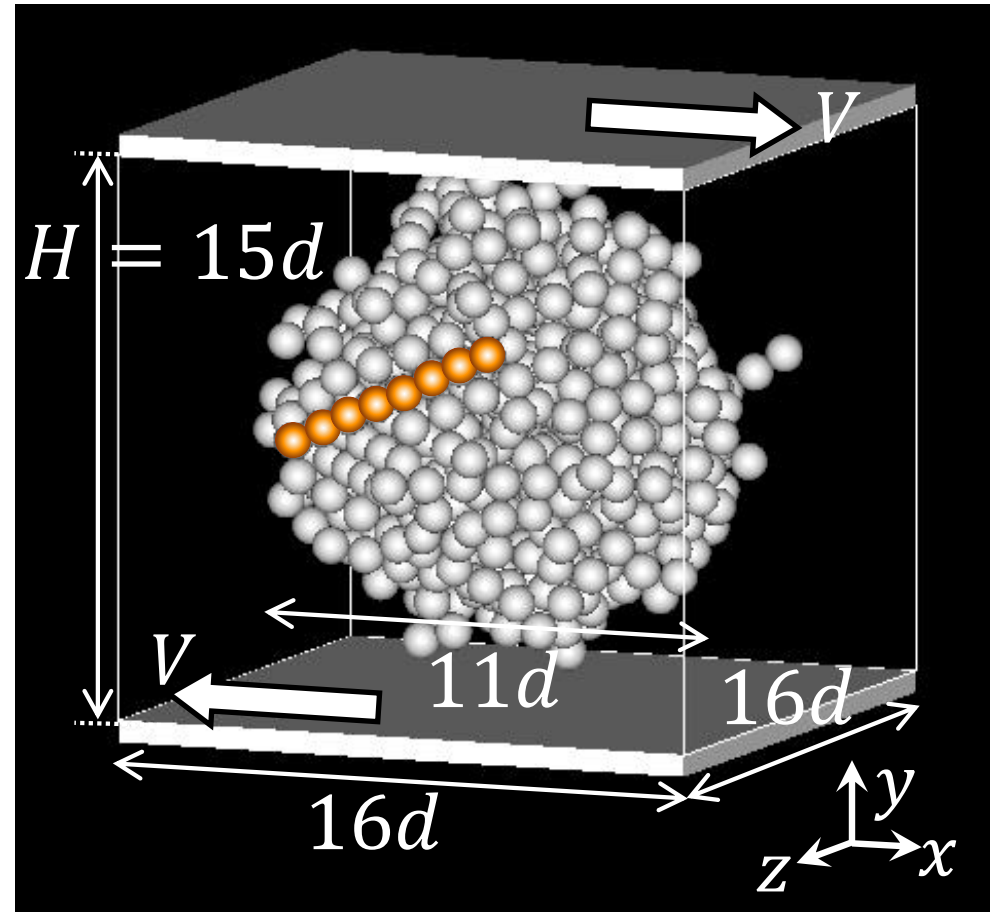
## 粒子

- 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  $\dot{\gamma} = 2V/H$

無次元応力

$$\tau^* = \frac{\text{流体応力}}{\text{凝集応力}} = \frac{\eta\dot{\gamma}}{\tau_p} = 0.02$$



初期接触要素間のみ凝集力が作用  
 → 離れたら凝集力は消失 (結合の消失)

# 評価量

## 分散度

$$1 - \frac{\text{平均結合数}}{\text{初期平均結合数}}$$

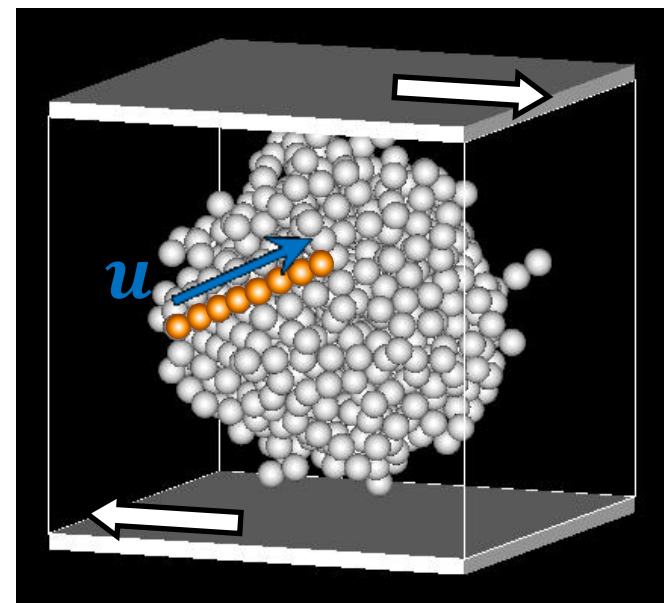
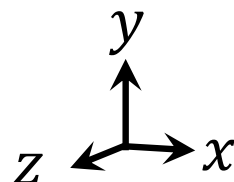
## 壁面応力

流体応力（媒質粘度×剪断率）  
で無次元化

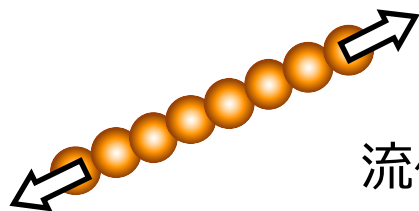
配向度： $\langle u_x^2 \rangle, \langle u_y^2 \rangle, \langle u_z^2 \rangle$

粒子長軸方向の単位ベクトル

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



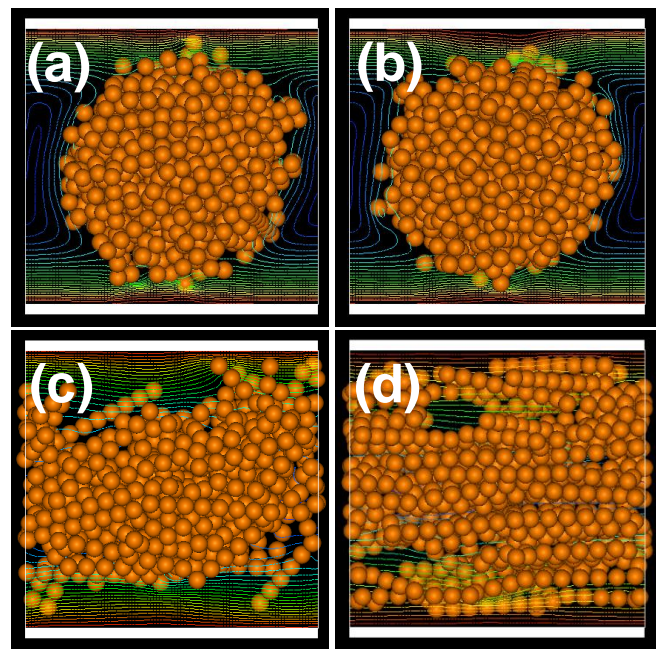
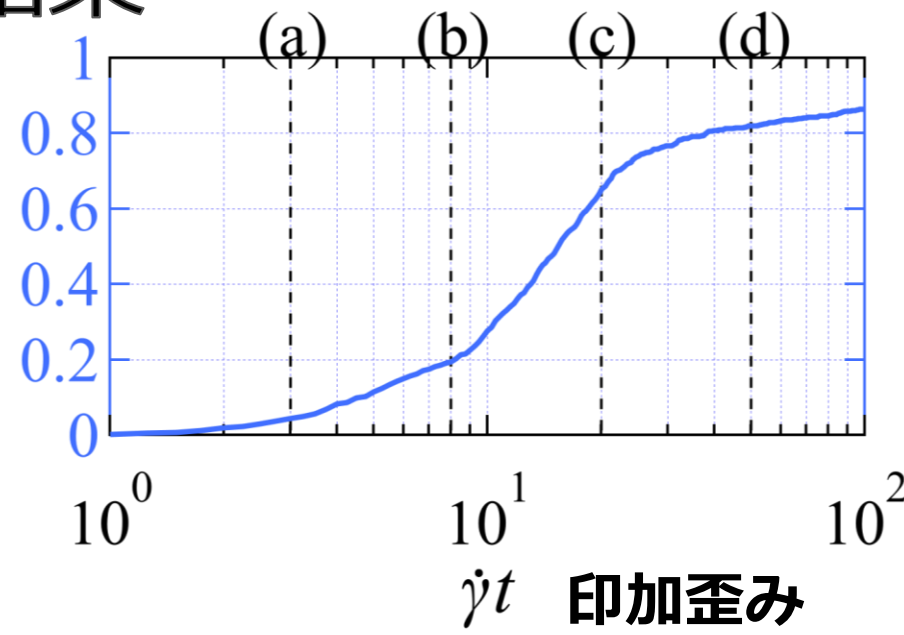
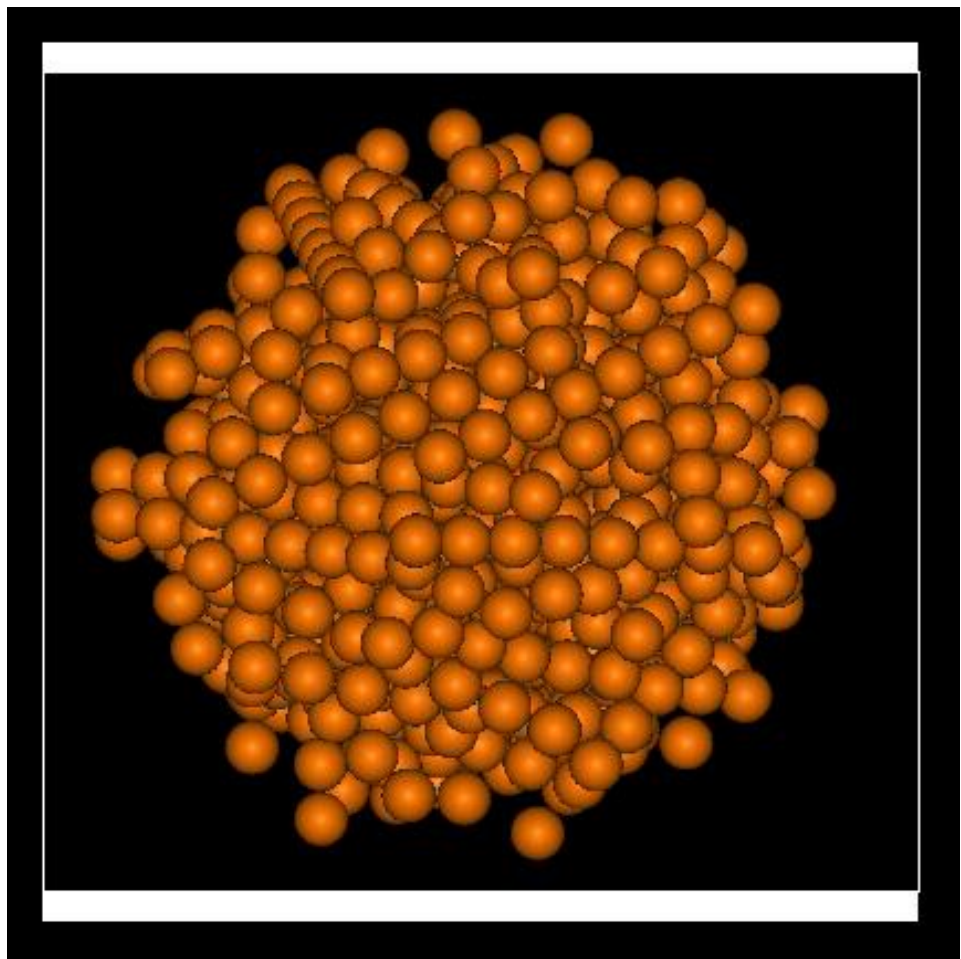
粒子内応力（引張応力）



流体応力で無次元化

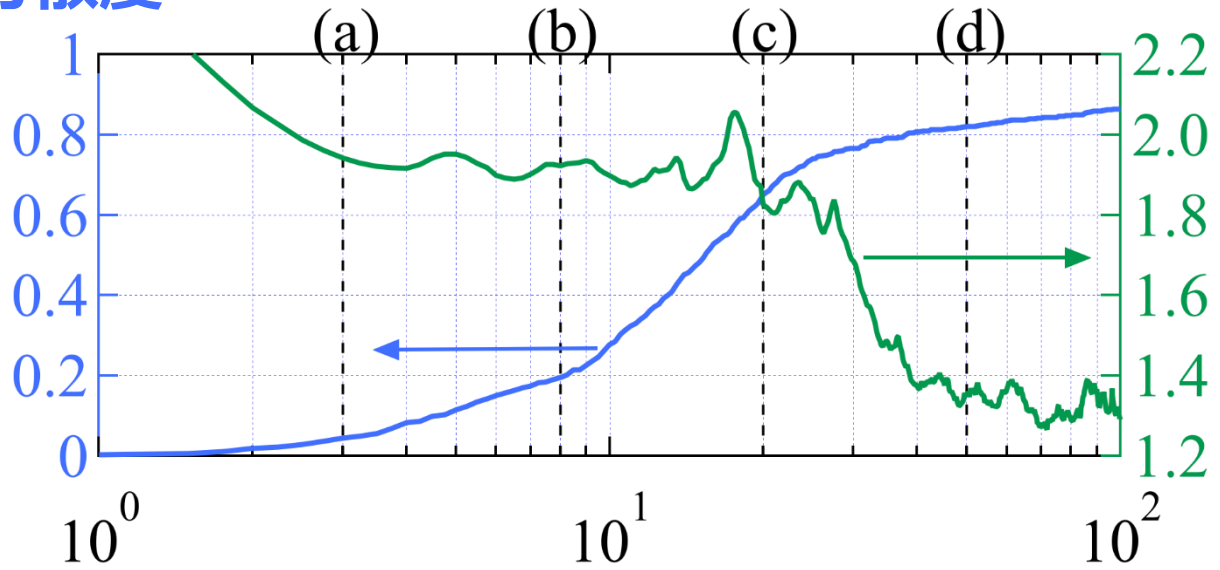
# 計算結果

$$\text{分散度} = 1 - \frac{\text{平均結合数}}{\text{初期平均結合数}}$$

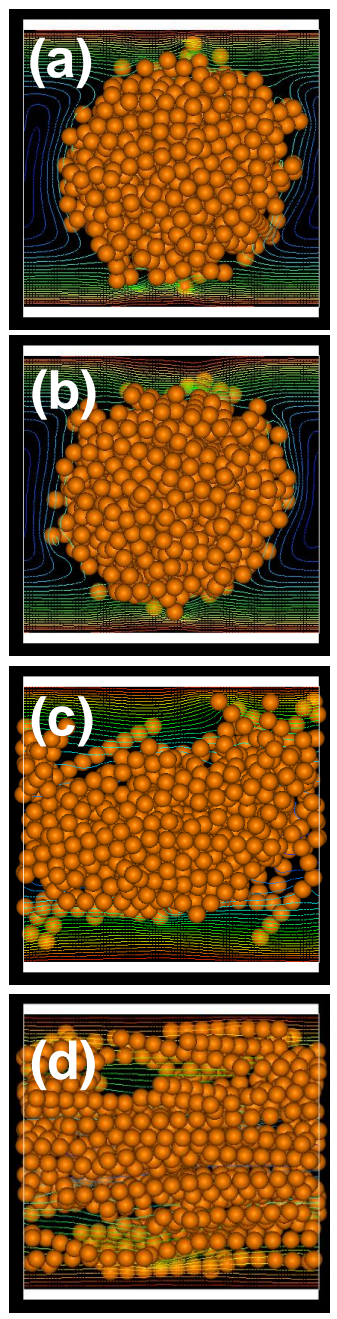
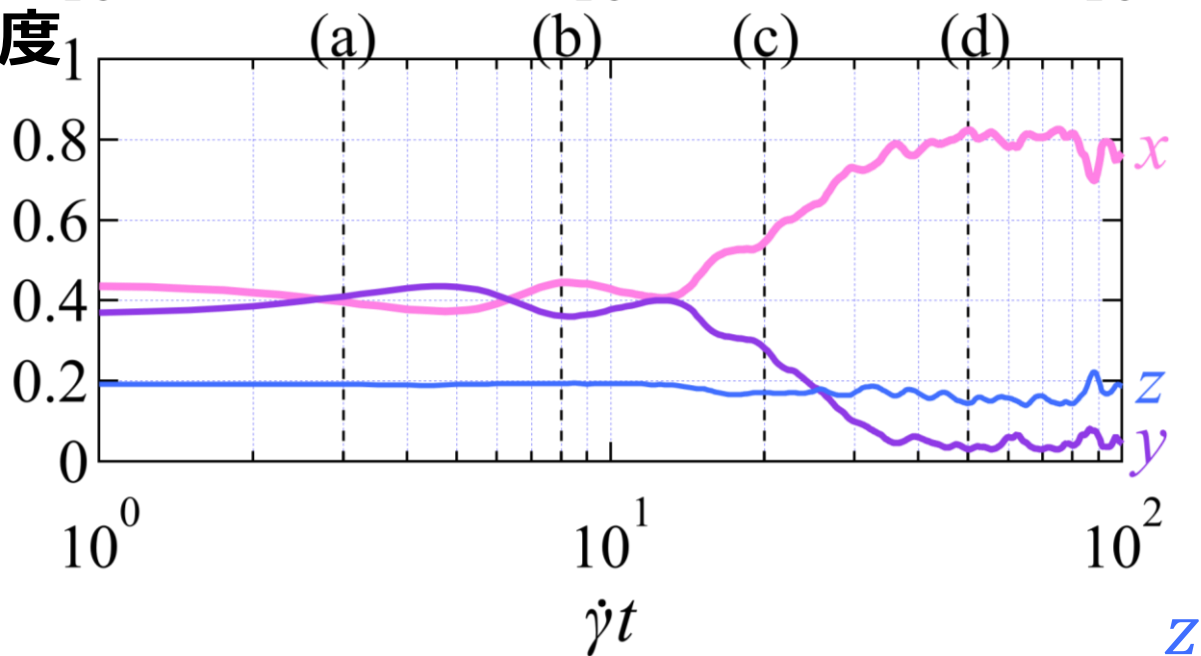


# 解砕の進展

分散度 壁面応力



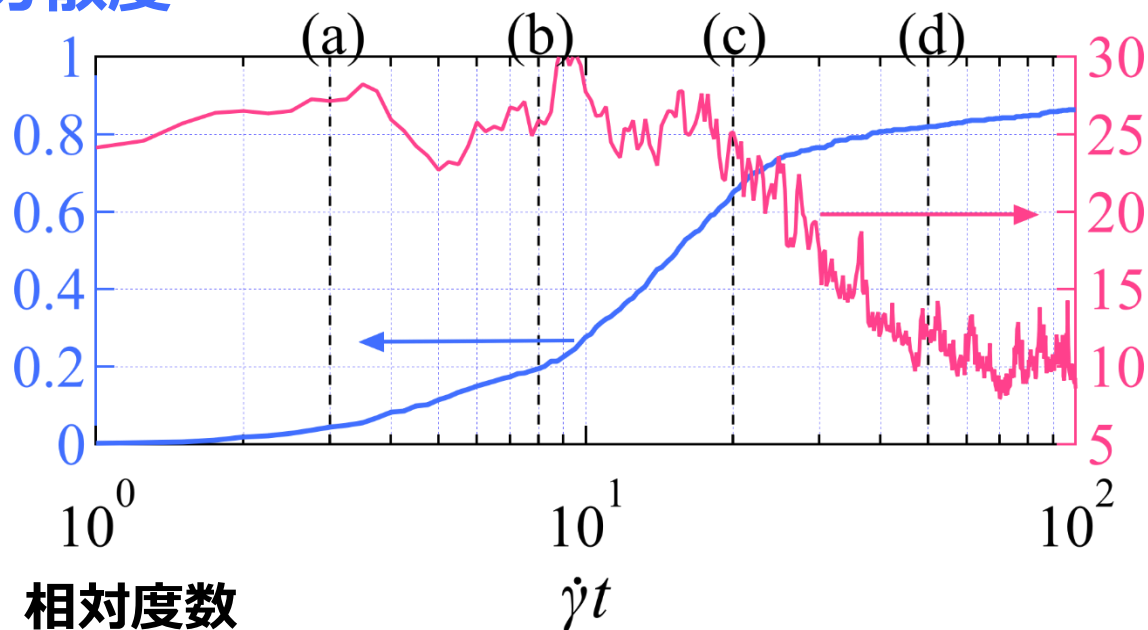
配向度



# 粒子内応力

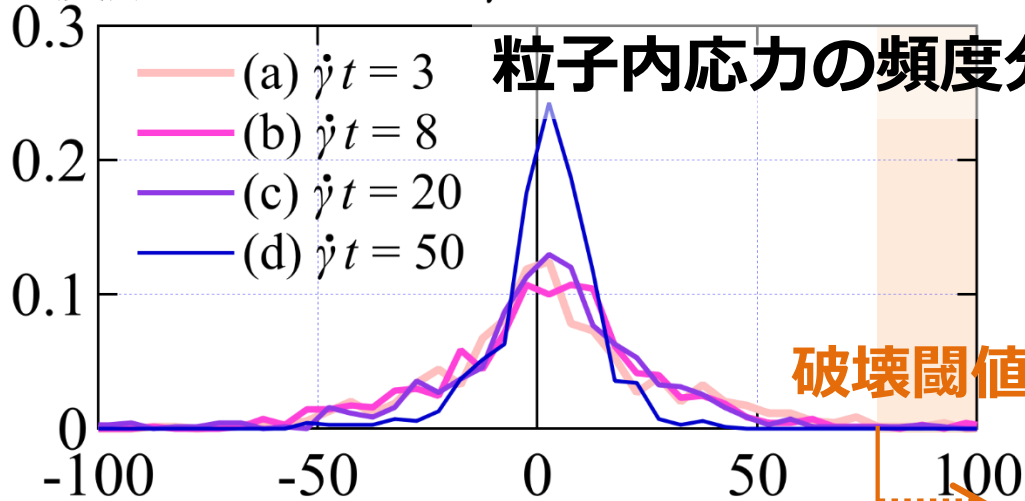
分散度

粒子内応力 (標準偏差)

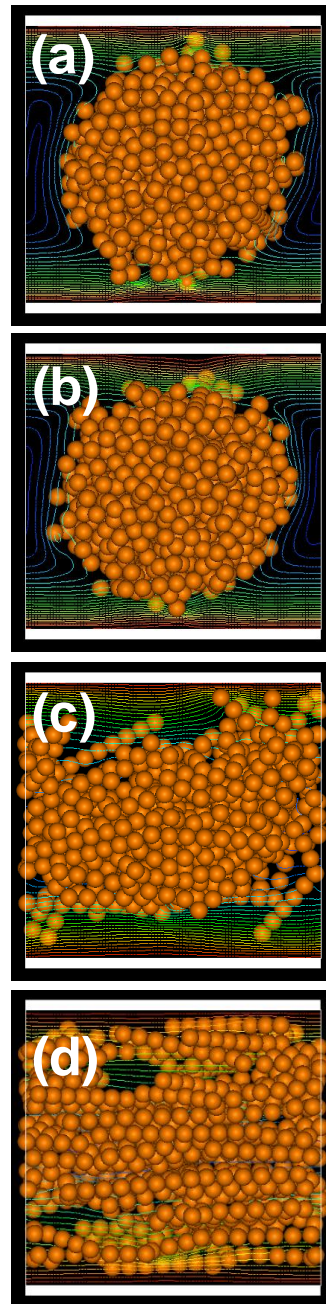


相対度数

粒子内応力の頻度分布



粒子内応力

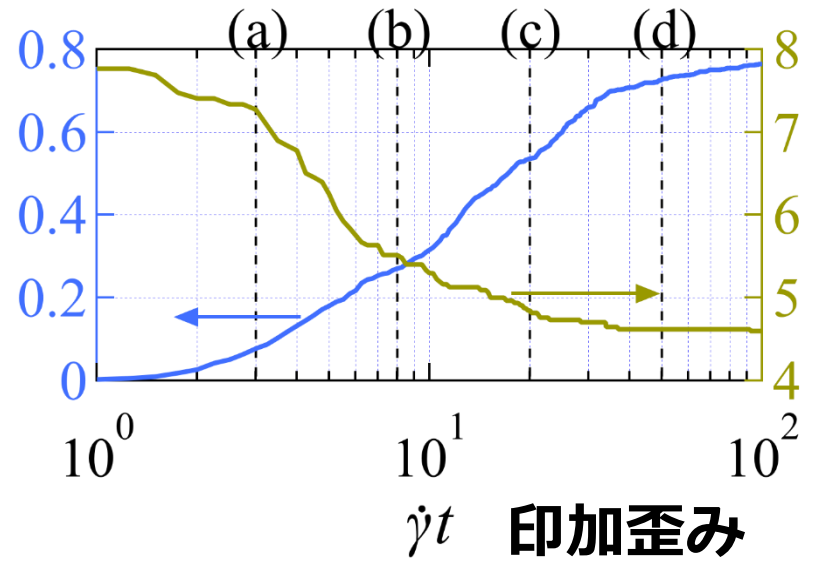
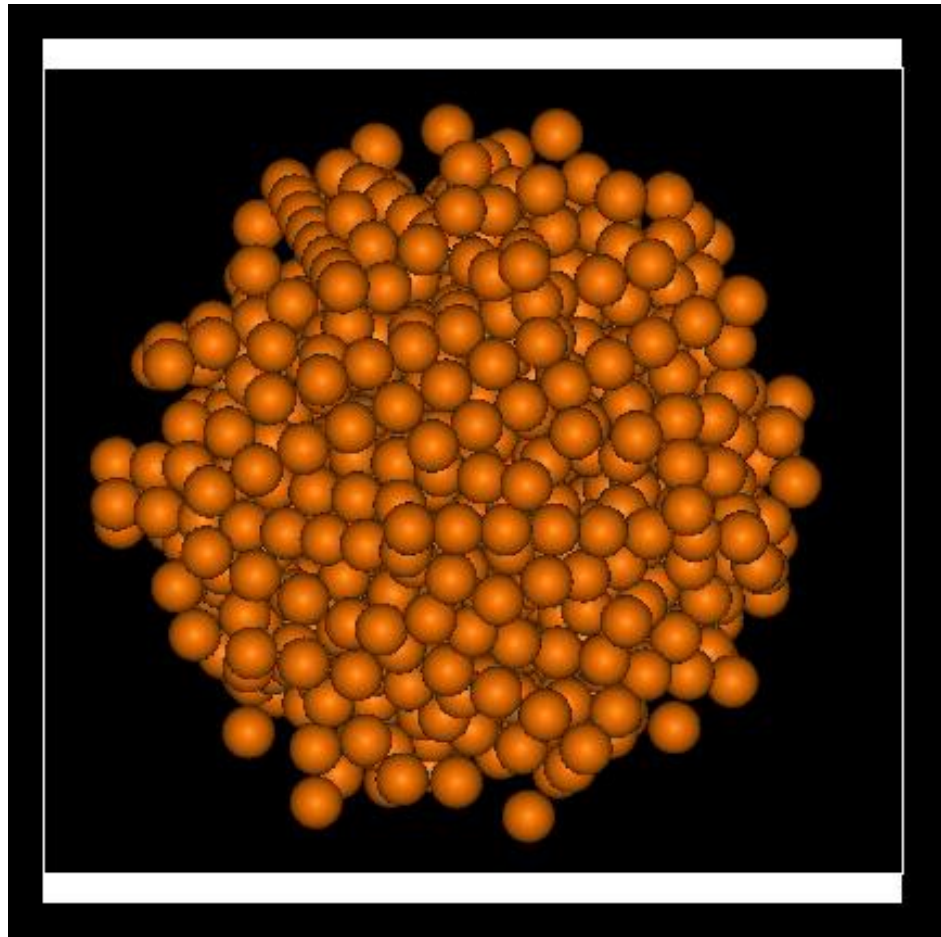




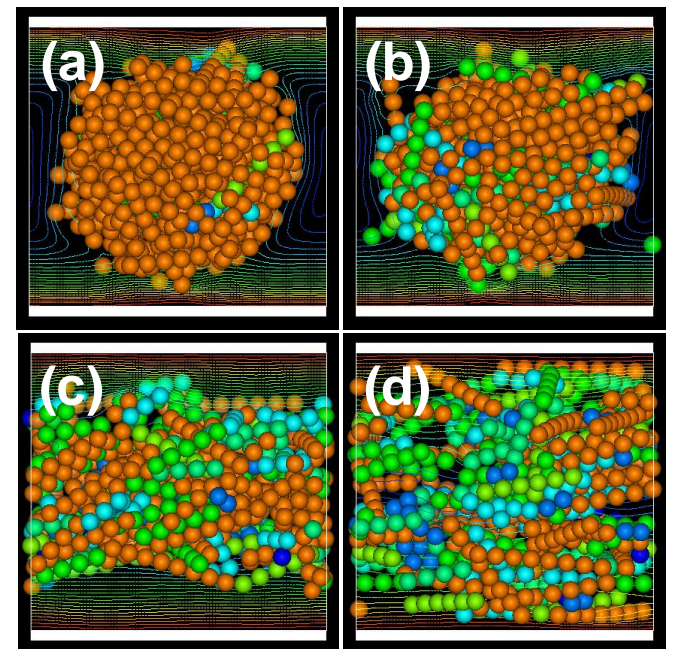
# 計算結果

$$\text{分散度} = 1 - \frac{\text{平均結合数}}{\text{初期平均結合数}}$$

平均ファイバー長



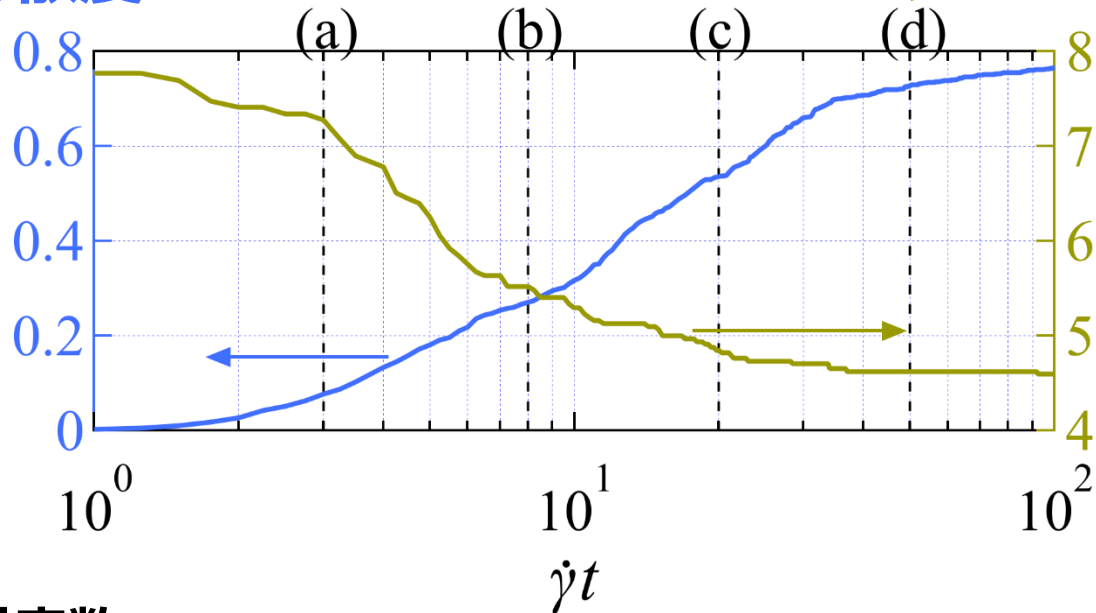
ファイバー長



# 解砕の進展

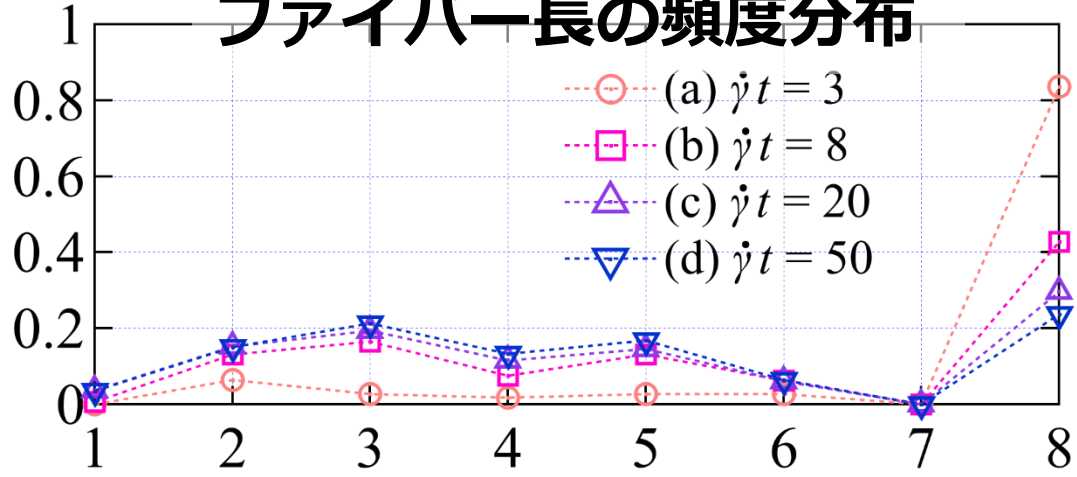
分散度

平均ファイバー長

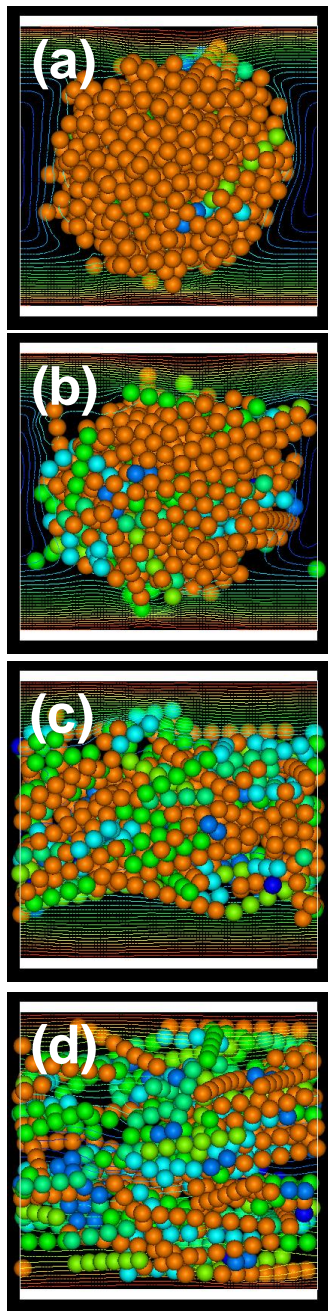


相対度数

## ファイバー長の頻度分布



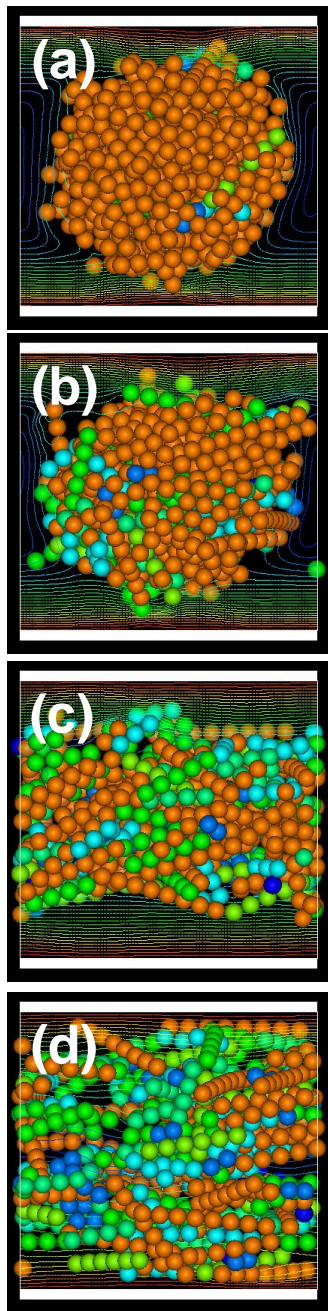
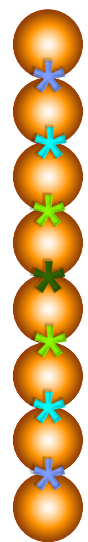
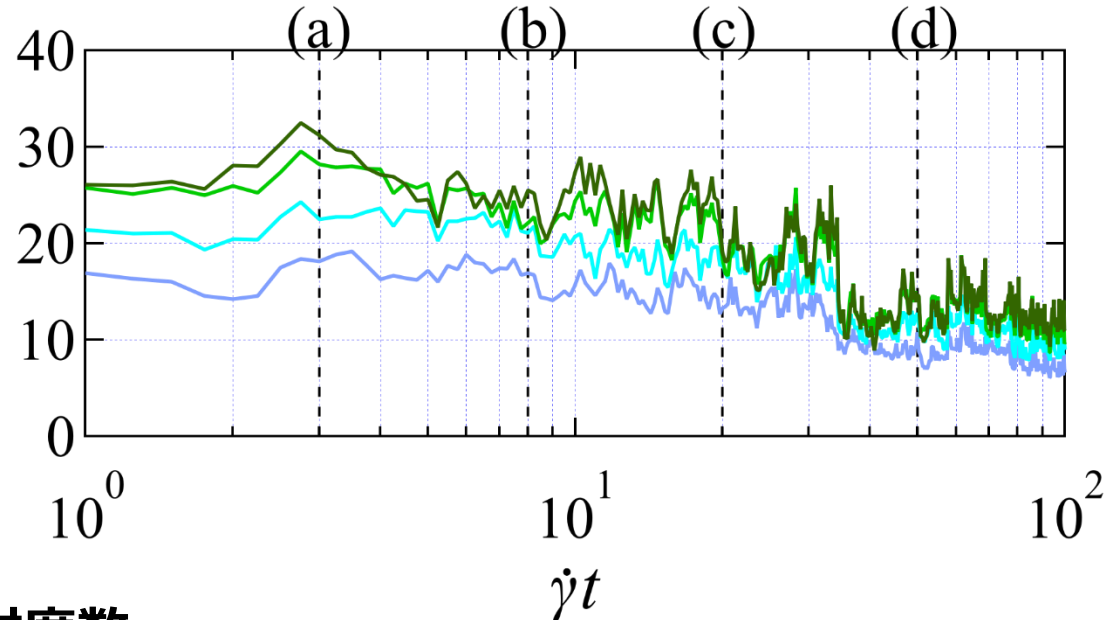
ファイバー長



# 解砕の進展

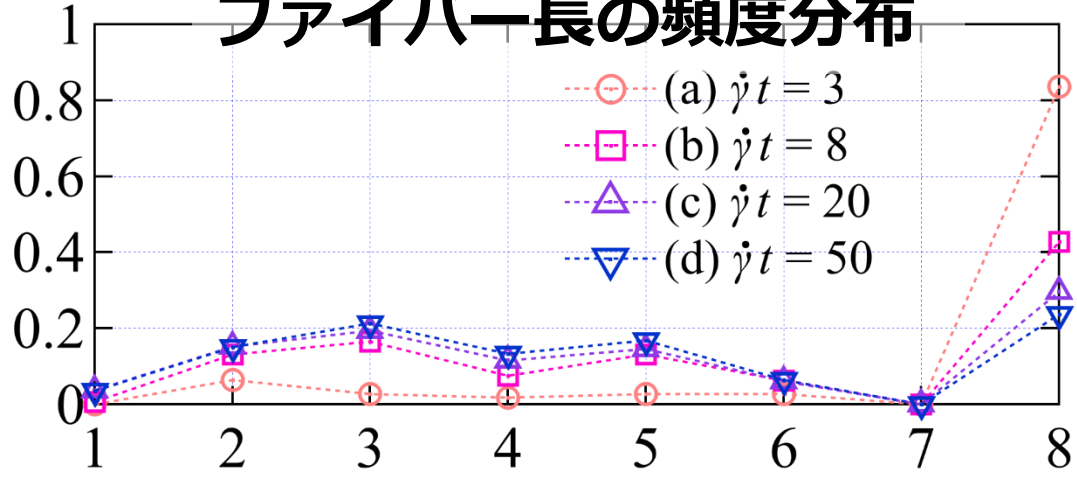
節点ごとの粒子内応力 (標準偏差)

節点の分類



相対度数

ファイバー長の頻度分布



ファイバー長

# 総括

- **SNAP**によるナノファイバーの折損と分散過程の可視化
- 凝集体解砕 → 配向の順で進行；壁面応力の減少と対応
- 粒子内応力：引張だけでなく圧縮も発生  
ただし，引張の発生頻度の方が多い
- 凝集体解砕段階で粒子内応力が大きく，折損が多く発生  
→ 折損低減にはこの段階での混練条件に注意
- ファイバー長分布の考察には，多段階での折損の考慮が必要  
(粒子内応力はファイバー中央で最大だが，  
その位置での折損で生じるファイバー長が最大ではない)