

A speculation on adsorption process of dispersant around them by fracture simulation of fine particle aggregates

O. Koike^{*}, R. Tatsumi[†], Y. Yamaguchi^{*}

* PIA, † UTokyo

微粒子凝集体の解砕シミュレーションを利用した
分散剤吸着過程の考察

小池 修^{*}・辰巳 怜[†]・山口 由岐夫^{*}

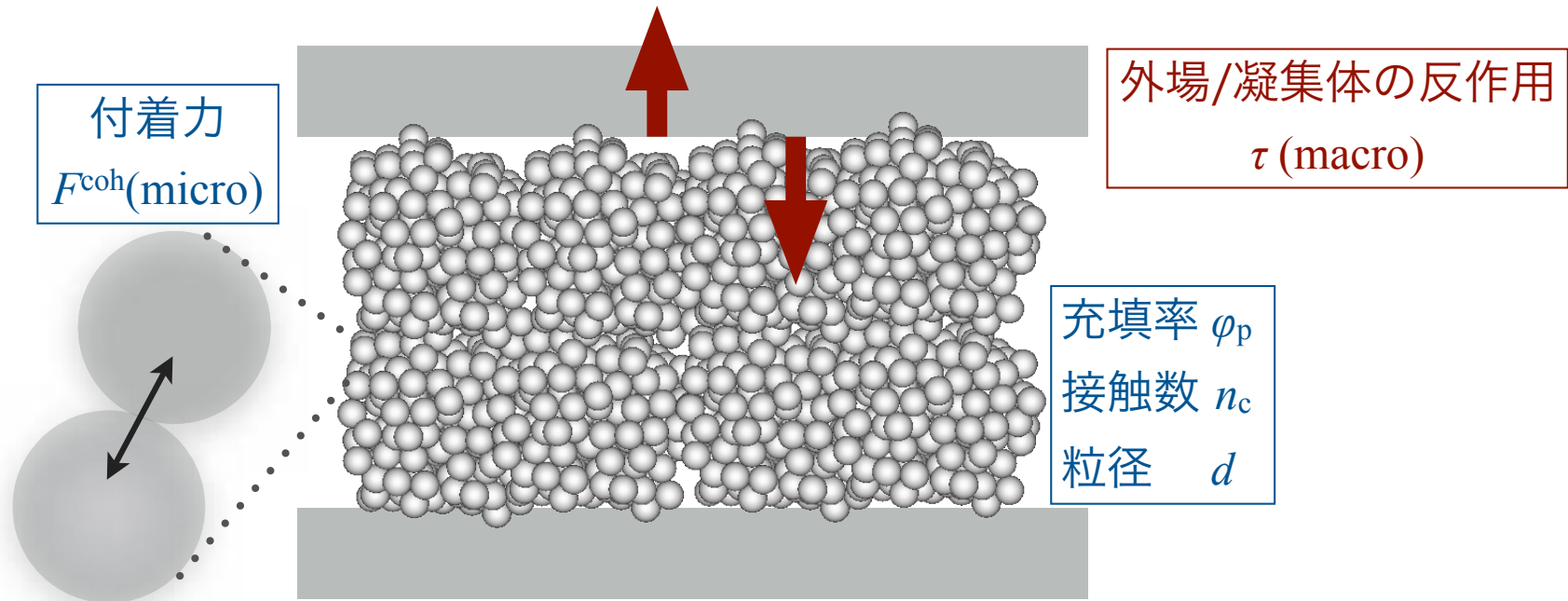
本日の概略

- ・材料機能の獲得には,
混練分散プロセスの重要性を認識している.
 - ・混練分散を理解するため,
低粘度～高粘度系まで意識している.
-
- ・単純剪断場での凝集体の解砕条件を導出, 及び混合過程を可視化
 - ・シミュレーション結果を利用し, 分散剤の吸着イメージを考察

＊分散剤の輸送挙動にはニーズがある
＊精緻な数理モデルを立てる前の試み

凝集体の強度

- 内外条件の関係 -



Rumpfの式

$$\tau = \frac{\varphi_p n_c F^{\text{coh}}}{\pi d^2}$$

式から推測される検討要素

- ・ 凝集体構造
- ・ 付着力
- ・ 剪断応力

準備①：剪断応力を無次元化

流体

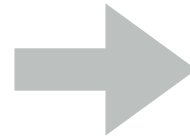
$$\tau_f = \mu \dot{\gamma}$$

粒子

$$\tau_p = \frac{F^{\text{coh}}}{d^2} = \frac{A}{24\delta^2} \cdot \frac{1}{d}$$

*付着力；
van der Waals力型を想定

$$\tau_p = 4.2 \times 10^5 \left(\frac{A_{-20}}{\delta_{-10}^2 d_{-7}} \right) \text{ [Pa]}$$



$$\tau^* = \frac{\tau_f}{\tau_p} = \frac{24\mu\dot{\gamma}\delta^2 d}{A}$$

無次元剪断応力 τ^* ：

印加する剪断応力を拮抗する力で相対的に捉える

準備②：分散度の評価指標

Nondimensional Boundary Area: NBA

定義

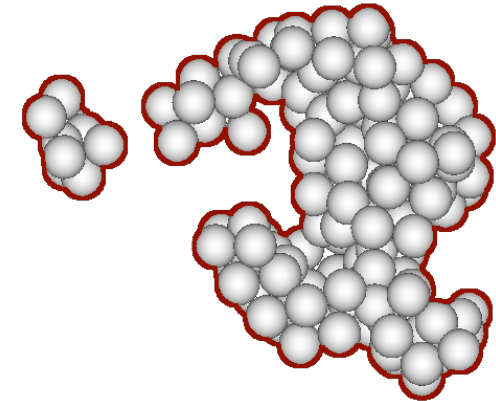
$$\text{NBA} = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{c_{\max}} \sum_{c=0}^{c_{\max}} (c_{\max} - c) n(c) \right]$$

c : 配位数 ($c_{\max} = 12$)

$n(c)$: 配位数 c の粒子数

N : 全粒子数

幾何学的意味



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

➡ NBA = 1 : 完全分散
NBA = 0 : 最密充填

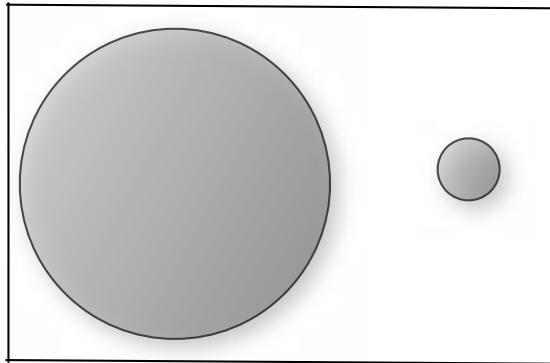
準備③：計算方法の選択

＊本目的には、こちらが最適だろう

直接計算法 (SNAP-F)

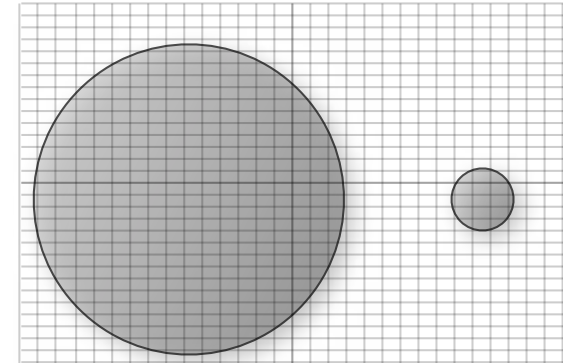
解像度

モデル法 (従来法)



流体力・流体トルク→
1格子中の粒子数と
流体・粒子速度の関数で与える

充填率の高い領域における
粒子運動の精度は粗いが大きな領
域を計算出来る：流動床など



流体力・流体トルク→
粒子周辺内部の流体情報をそのま
ま積分して得る

充填率の高い領域における
粒子に働く力・トルクを高精度に
計算できる

流体（連続描像）

質量保存（非圧縮）

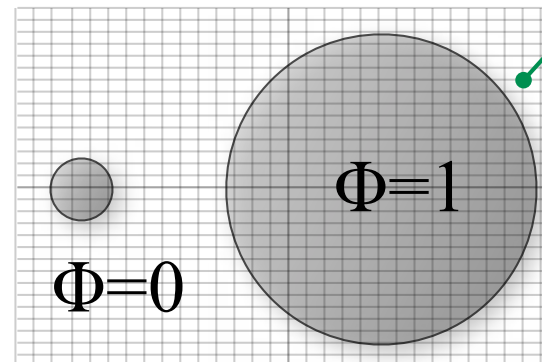
$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

＊高粘度系に対し，Stokes方程式でアプローチ
＊非Newton性は，考慮しない

運動方程式

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

対流項 熱揺動項 粒子-流体連成項



粒子（離散描像）

並進運動

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}^{\text{co}} + \mathbf{F}^{\text{D}} + \mathbf{F}^{\text{h}}$$

接触力
付着力
流体力

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

回転運動

$$I \frac{d\omega}{dt} = \mathbf{T}^{\text{co}} + \mathbf{T}^{\text{h}}$$

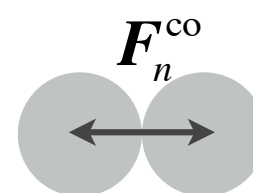
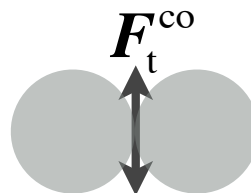
接触トルク
流体トルク

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

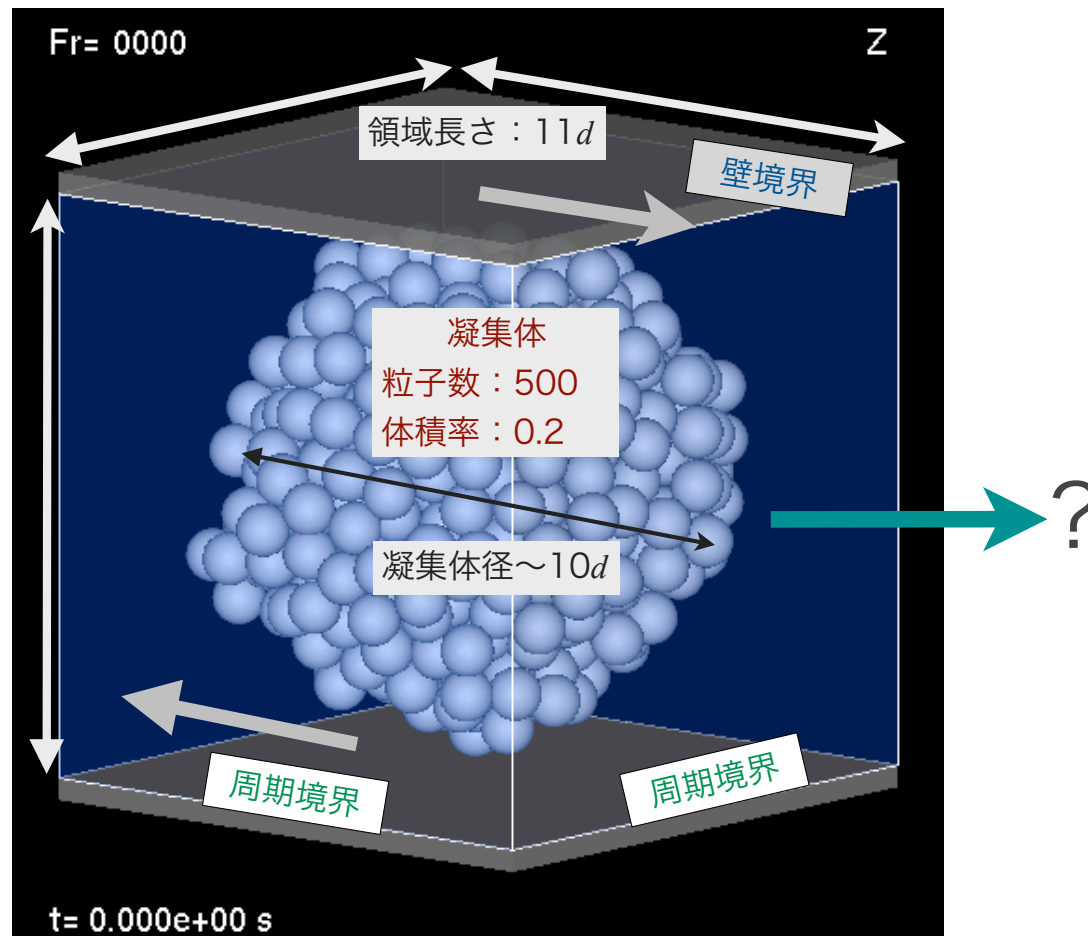
接触相互作用：離散要素法DEMのモデルを採用

- 接触力： 粘弾性
- 摩擦則： アモンソン-クーロン則

$$|\mathbf{F}_t^{\text{co}}| = \min(|\mathbf{F}_t^{\text{co}}|, \mu |\mathbf{F}_n^{\text{co}}|)$$



計算条件



剪断応力 τ^* : 0.01 - 5.0

付着力 : van der Waals力型

印加ひずみ ε : $\dot{\gamma}t = 100$

計算結果

$d = 100$

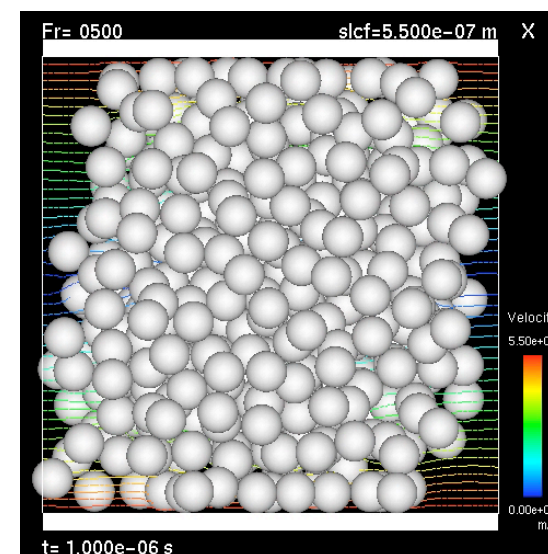
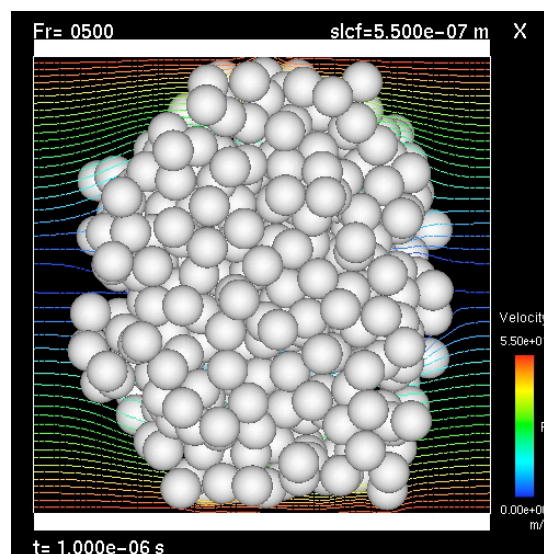
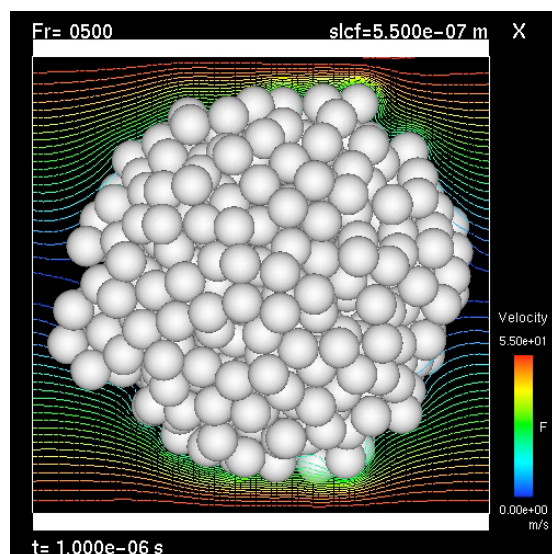
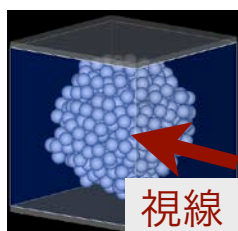
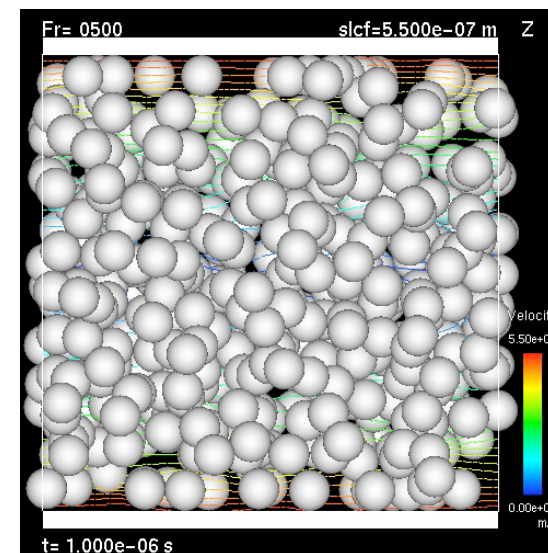
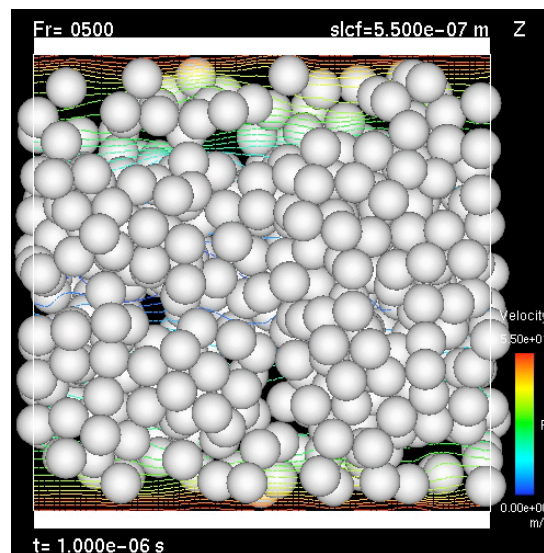
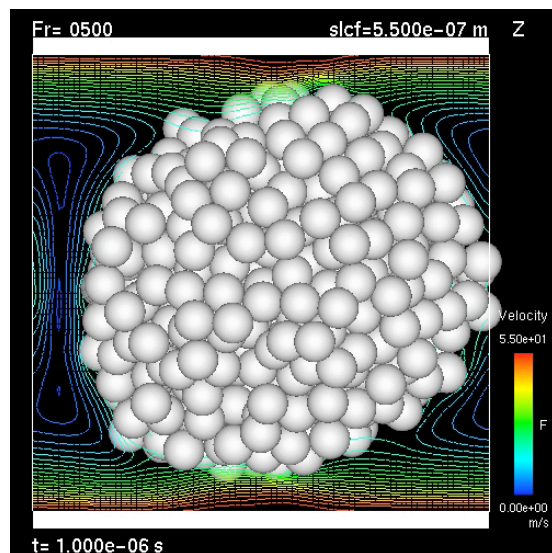
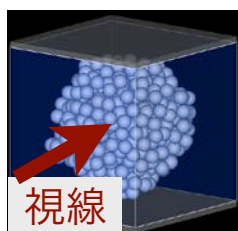
- 粒子分布 -

0.01

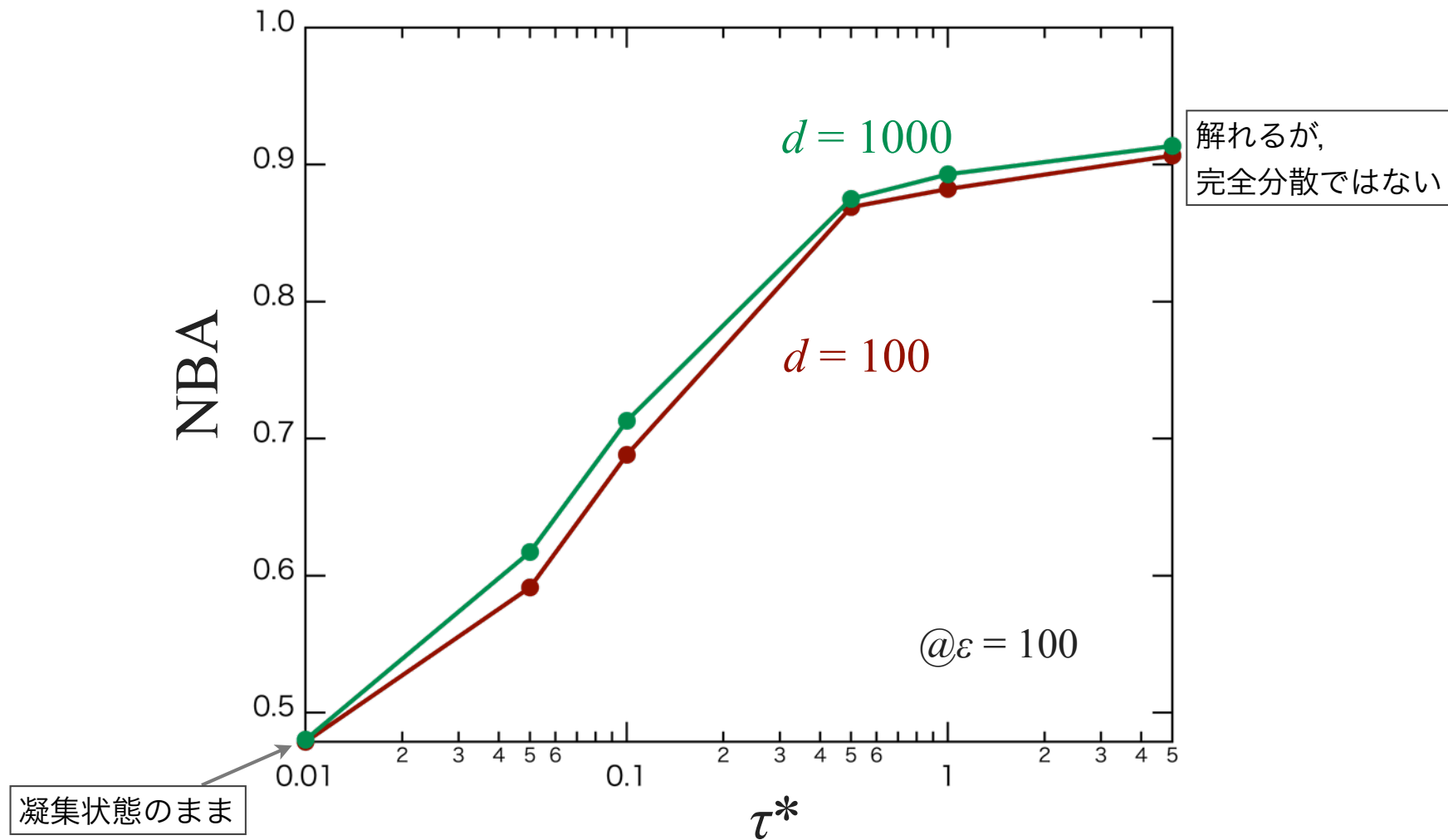
0.1

1.0

τ^*

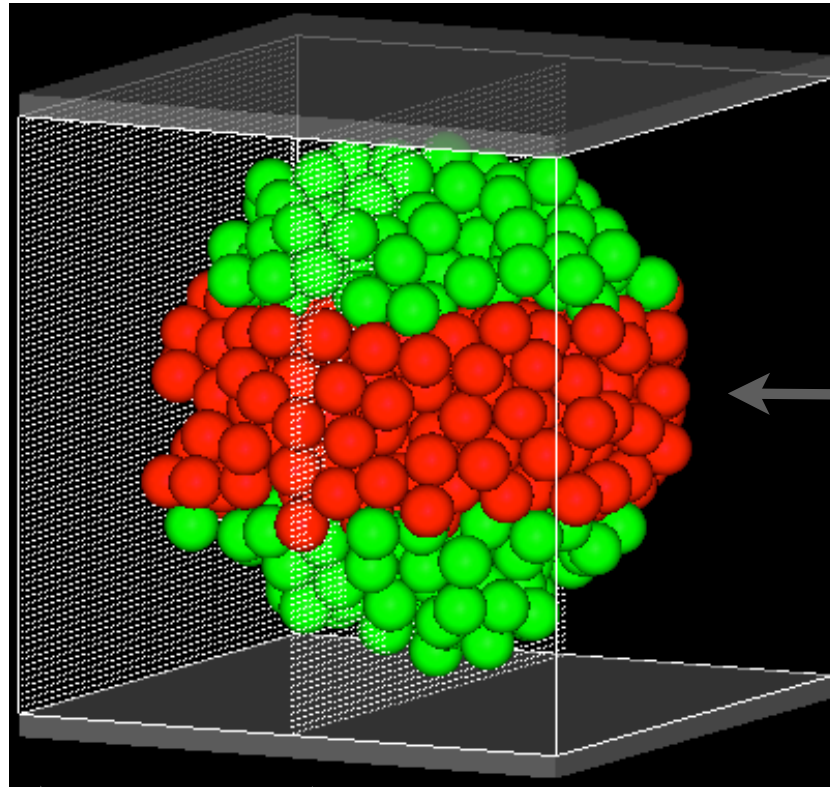


無次元剪断応力とNBA



τ^* の対数に対して、NBAがS字状に変化
 τ^* の導入によって、解砕条件を議論可能

微視的な混合過程の可視化



粒子に色付けして
流動場中の混合度を観察

粒子外部にトレーサー配置：
分散剤の代表点とみなす

*分散剤の移動は、
移流支配とみなしている

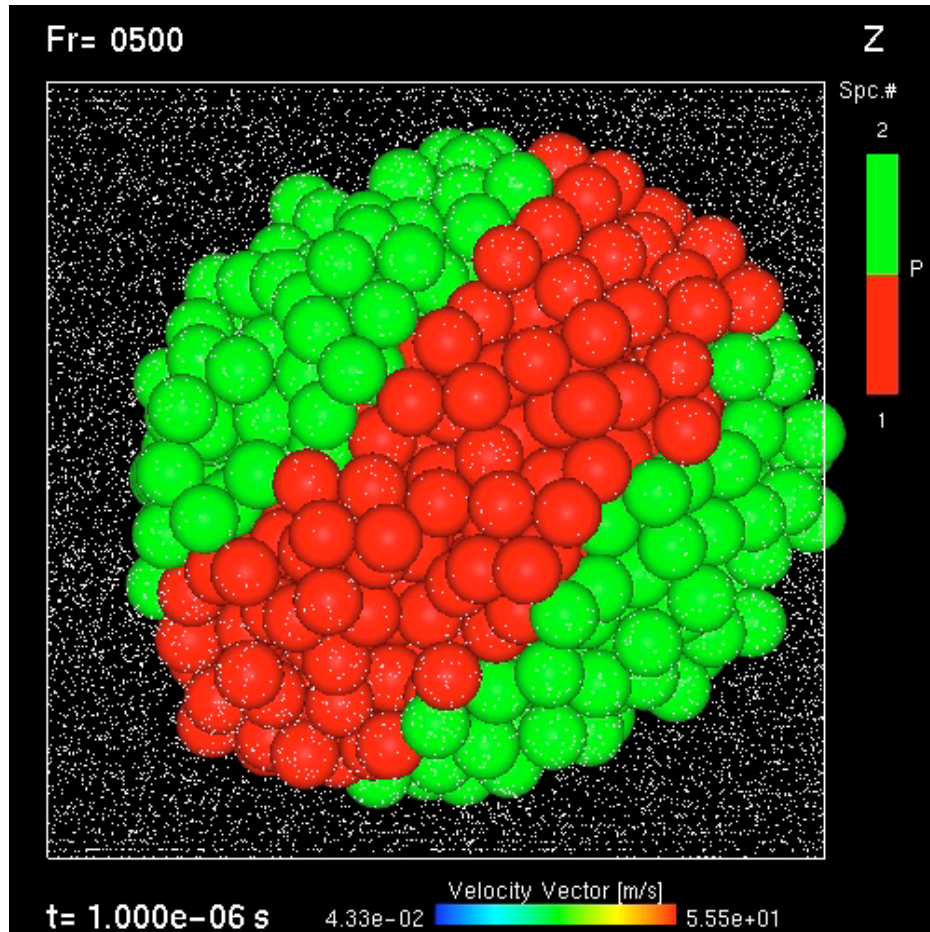
$$\text{Pe}^{-1} = D/ud \rightarrow 0$$

*トレーサー・粒子個数比

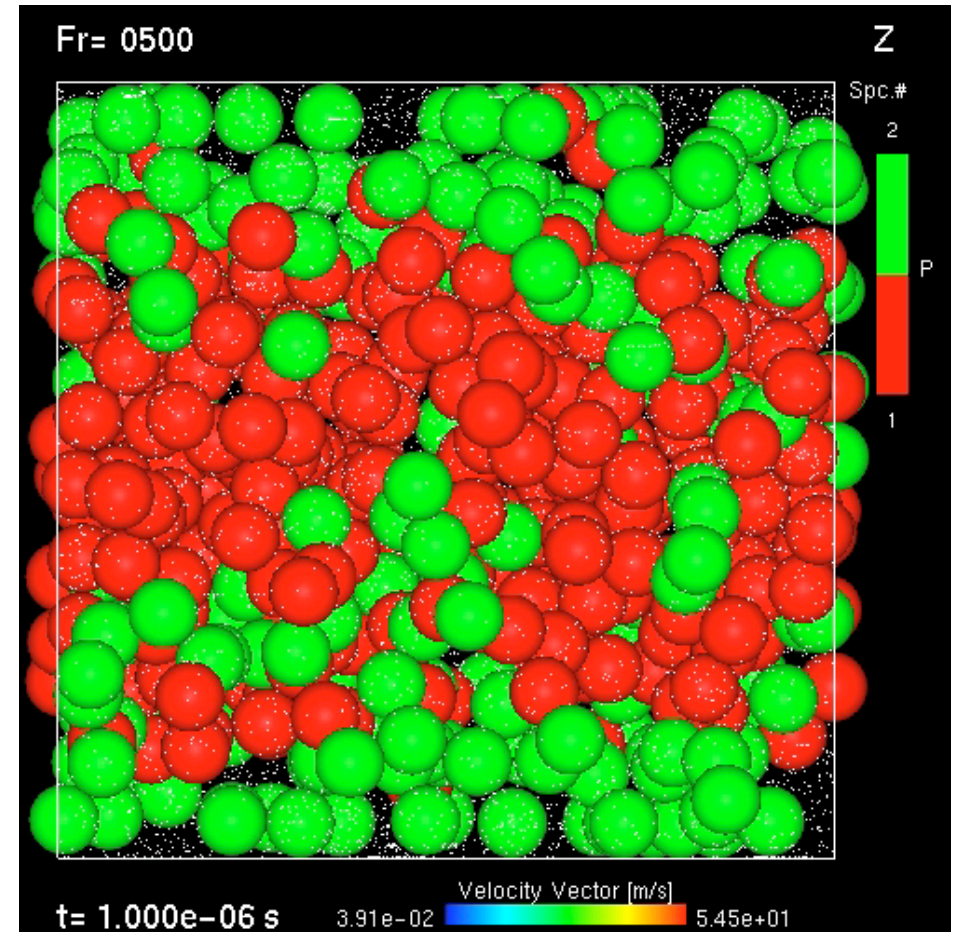
$$N_{\text{trc}}/N_p \sim 25$$

混合度：粒子・分散剤

$$\tau^*=0.01$$



$$\tau^*=1.0$$

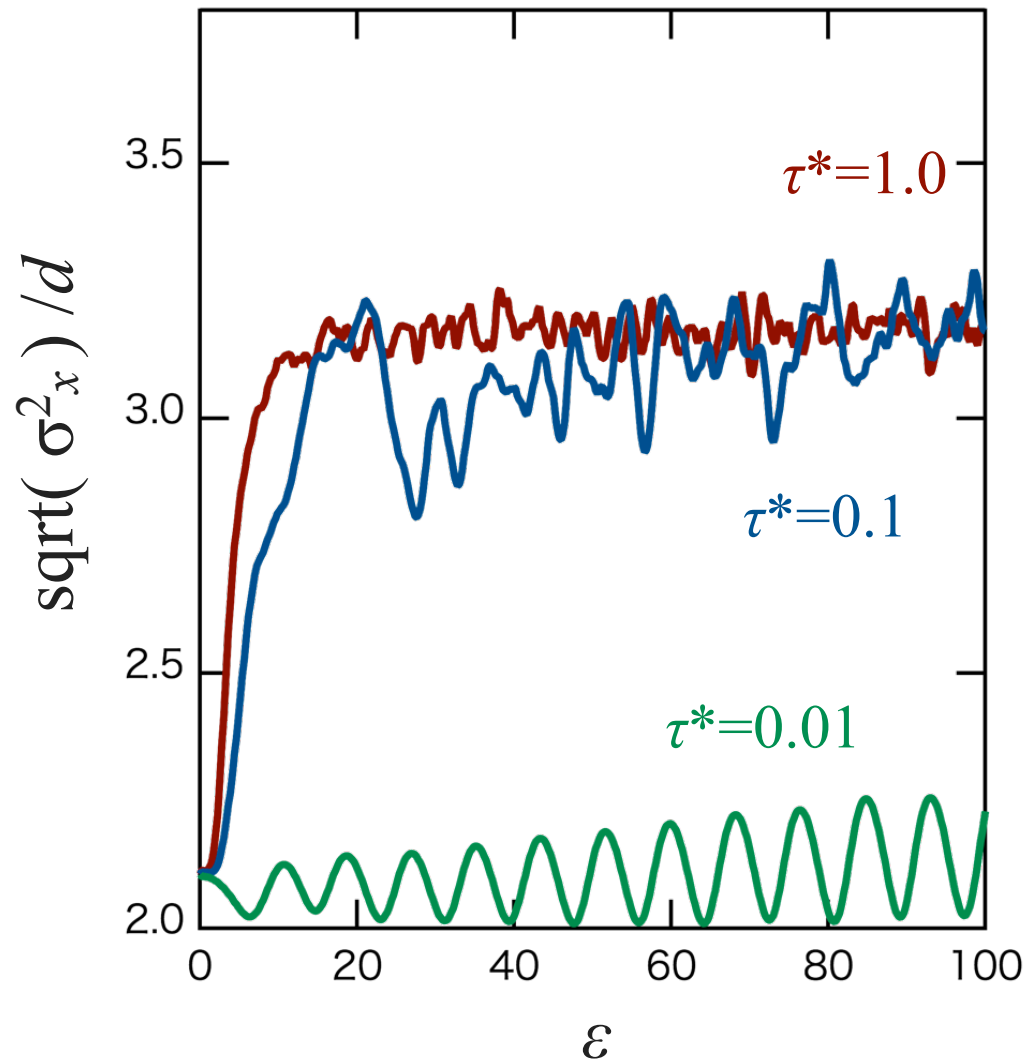


粒子：緩やかに混合，層状化する
分散剤：解砕すれば速やかに混合

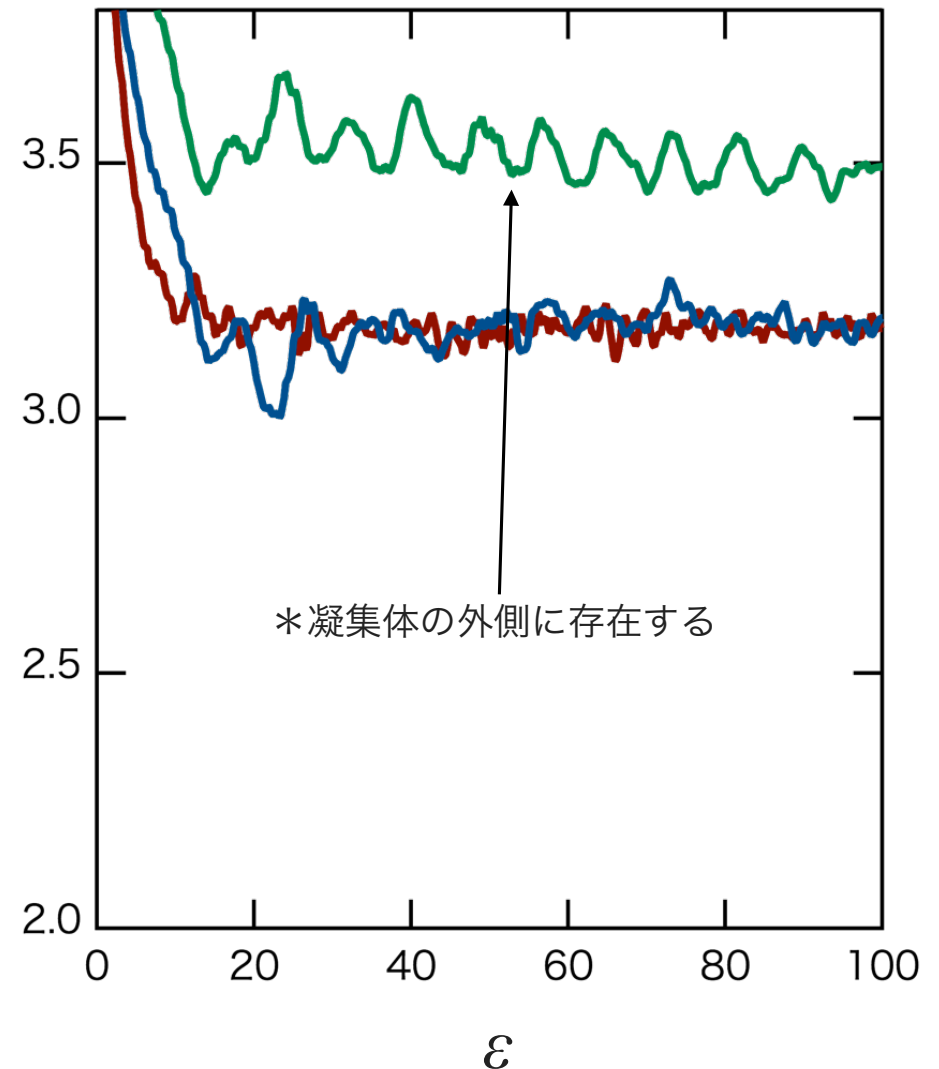
印加ひずみと位置RMS

- 流れ方向の広がり -

粒子



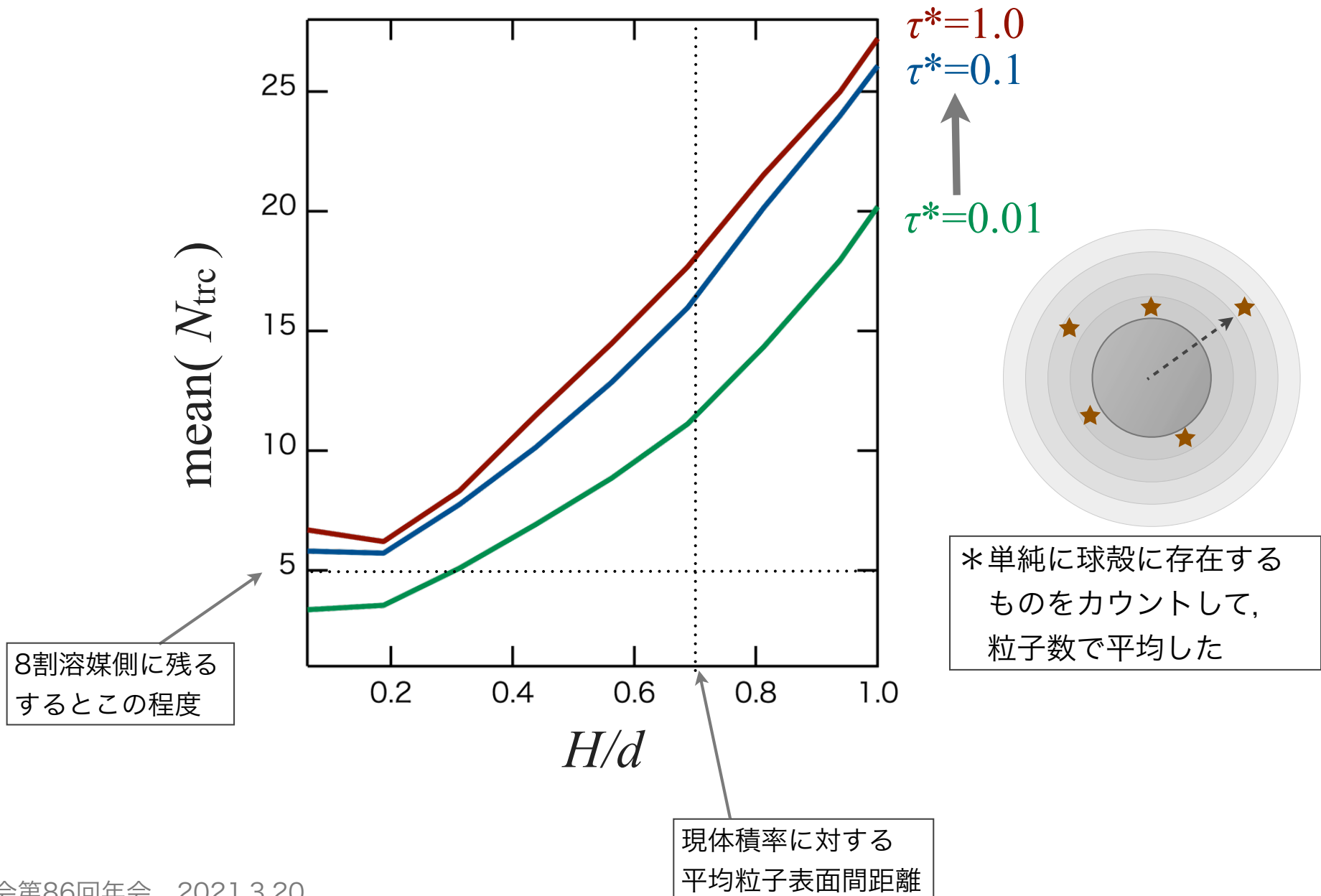
分散剤



*領域全体への混合を考慮して,
計算領域中心から測る座標で計算

粒子動径方向の分散剤分布

- 印加ひずみ100 における比較 -



まとめ

粒子・トレーサー軌道の可視化手法で、
高粘度溶媒系の分散剤移動のイメージの把握を試みた。

分散剤吸着の最適化における、機械的手法のアプローチとして、
凝集体解砕条件の把握が重要だと考えられる。