

# A Detachment simulation of particle aggregate on a plane substrate by DNS approach

O. Koike<sup>\*</sup>, R. Tatsumi<sup>†</sup>, Y. Yamaguchi<sup>\*</sup>

\* PIA, † UTokyo

基板付着凝集体除去の直接数値シミュレーション

小池 修<sup>\*</sup>・辰巳 怜<sup>†</sup>・山口 由岐夫<sup>\*</sup>

# 剥離の解析①

-せん断流れ（基板に平行）-

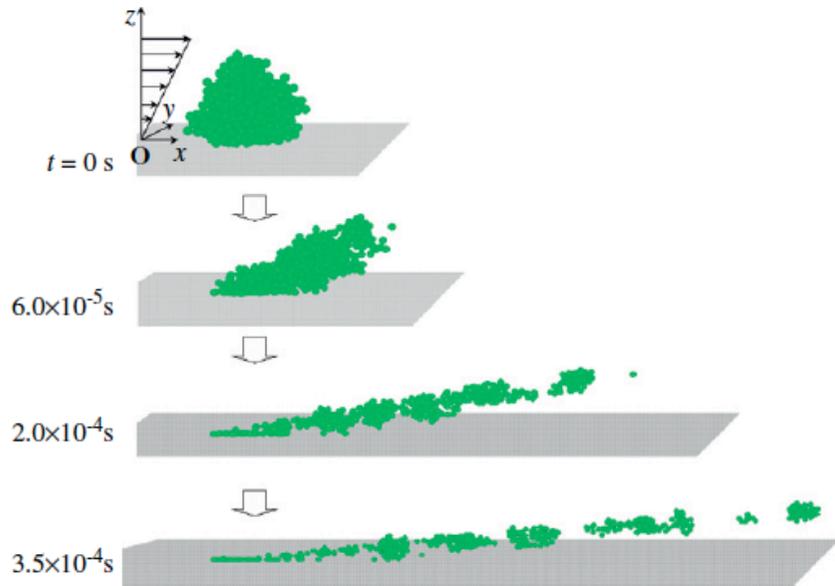


Fig. 8. Snapshots of entrainment process of Deposit-I from the plate surface of  $A_s/A = 1.0$  under the shear stress of  $\mu\gamma_s = 267$  Pa.

- ・ 粒子数500で固定
- 初期付着面積（表面高さ）を変化
- 付着力・せん断力を変化

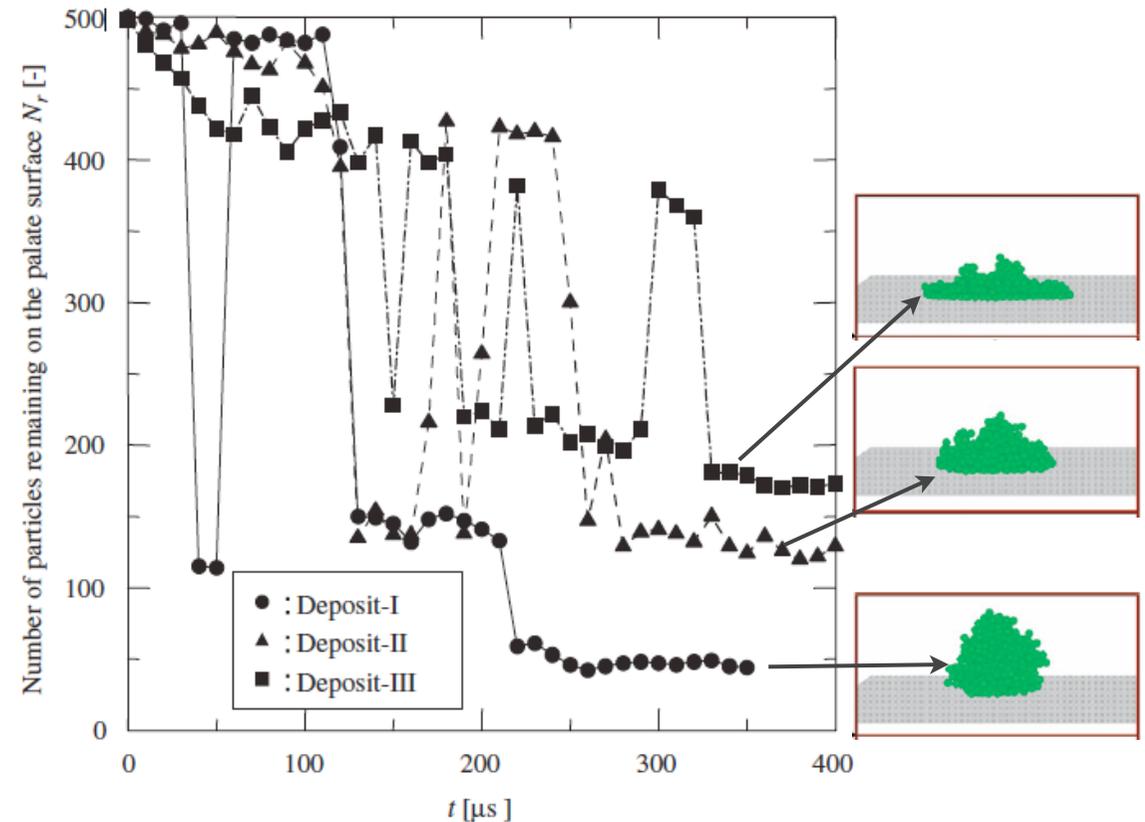
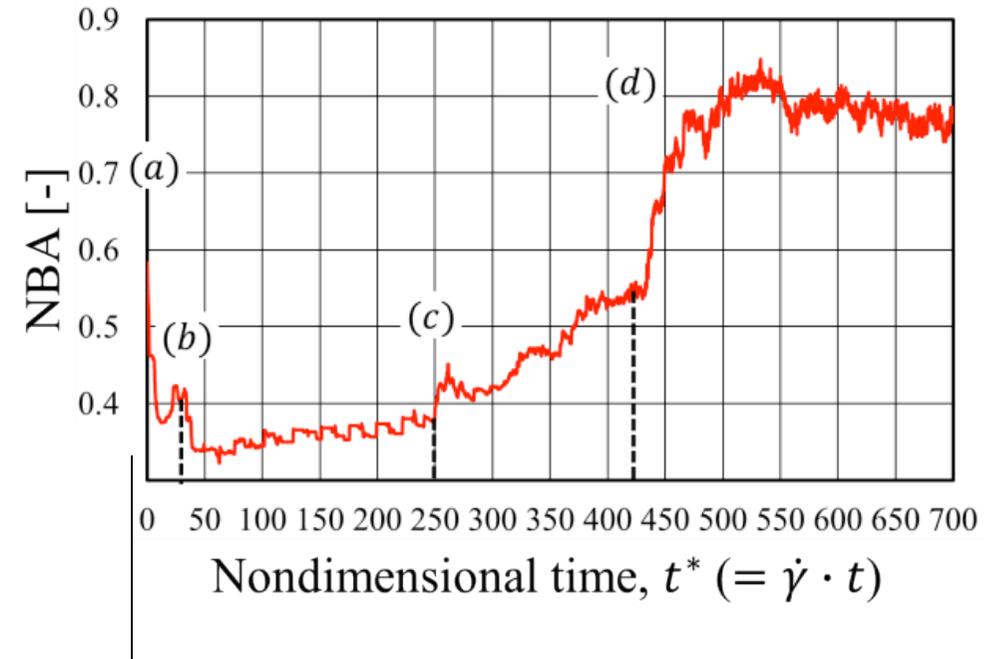
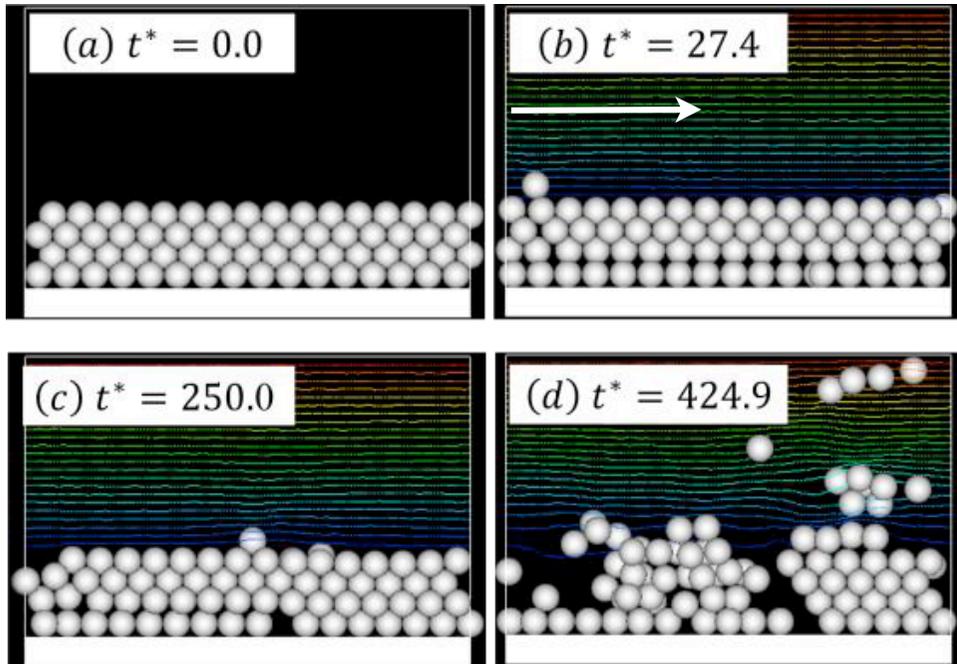


Fig. 10. The number of particles remaining on the plate surface of  $A_s/A = 1.0$  as a function of elapsed time for (•) Deposit-I, (▲) II and (■) III under the shear stress of  $\mu\gamma_s = 276$  Pa.

\*K. Imura, S. Watanabe, M. Suzuki et al.,  
Chemical Engineering Science **64** (2009) 1455

# 剥離の解析①'

-せん断流れ（基板に平行）-



細孔なし基板のケース

\*藤平ら, 化学工学会第83年会, 2018 (細孔あり)

\*藤平ら, 化学工学会第84年会, 2019 (細孔なし)

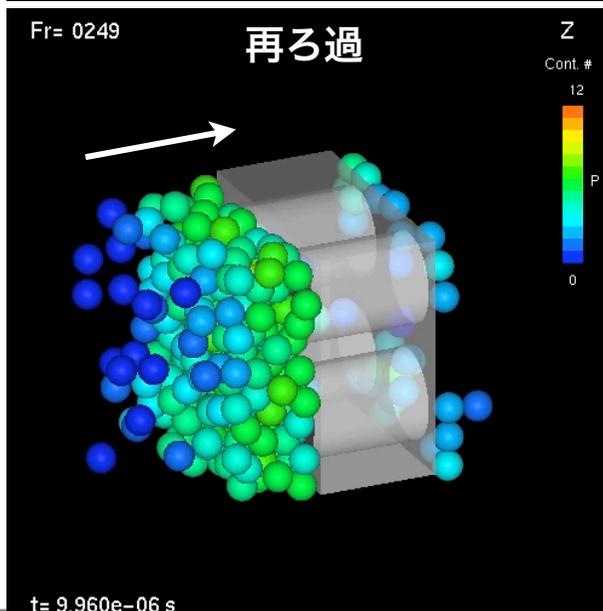
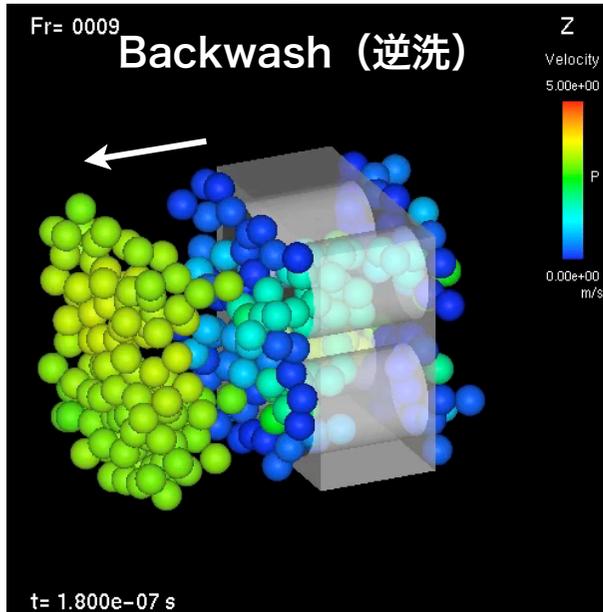
SNAP研究会 協力研究室:

日大生産工学部・安藤努研とのコラボ

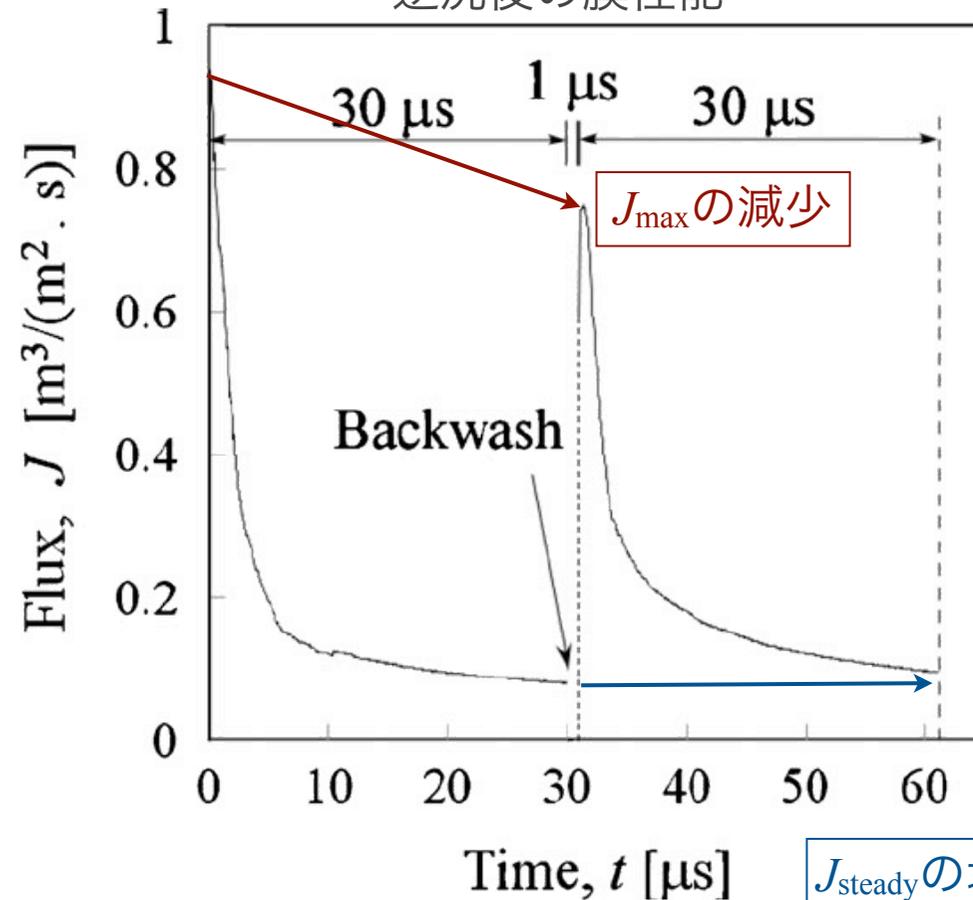
# 剥離の解析②

-圧力駆動流れ（基板に垂直）-

$$D/d_p=3.0$$



逆洗後の膜性能

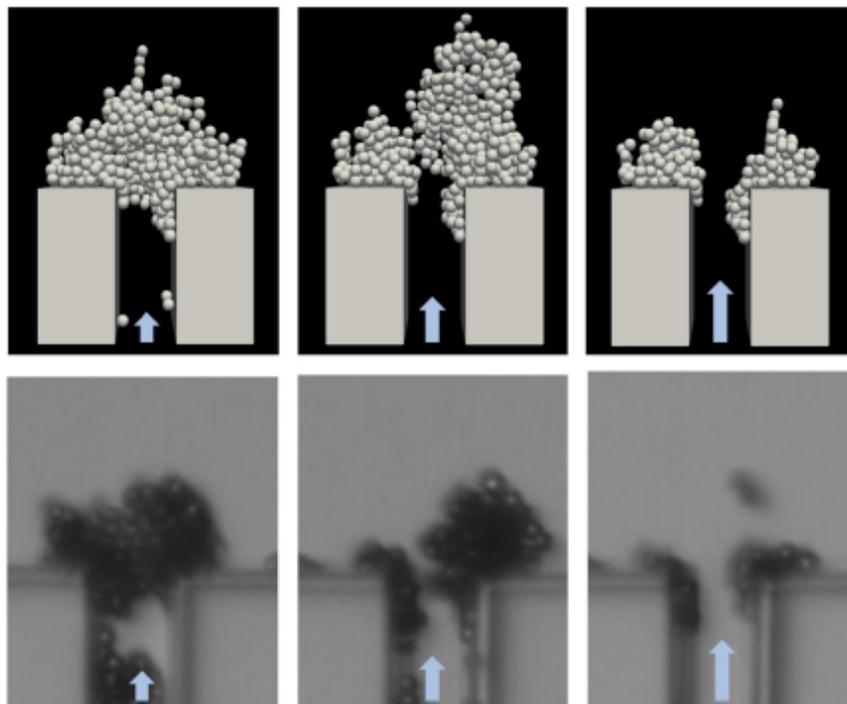


\*T. Ando, K. Akamatsu, S. Nakao et al.,  
Journal of Membrane Science **392-393** (2012) 48

SNAPによる計算

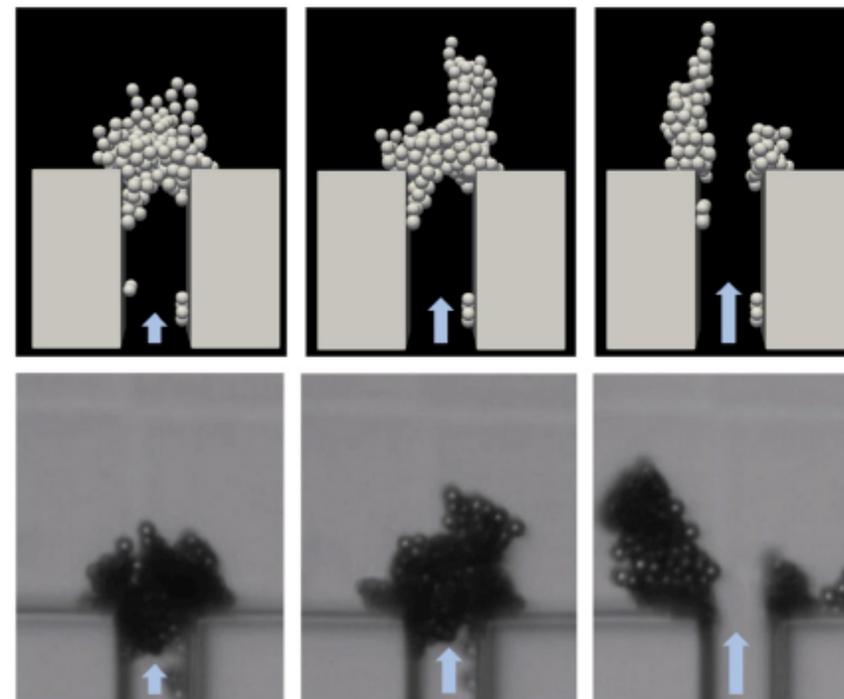
# 剥離の解析②'

a) Breakage of cluster



b) Attached particle movement

計算



実験

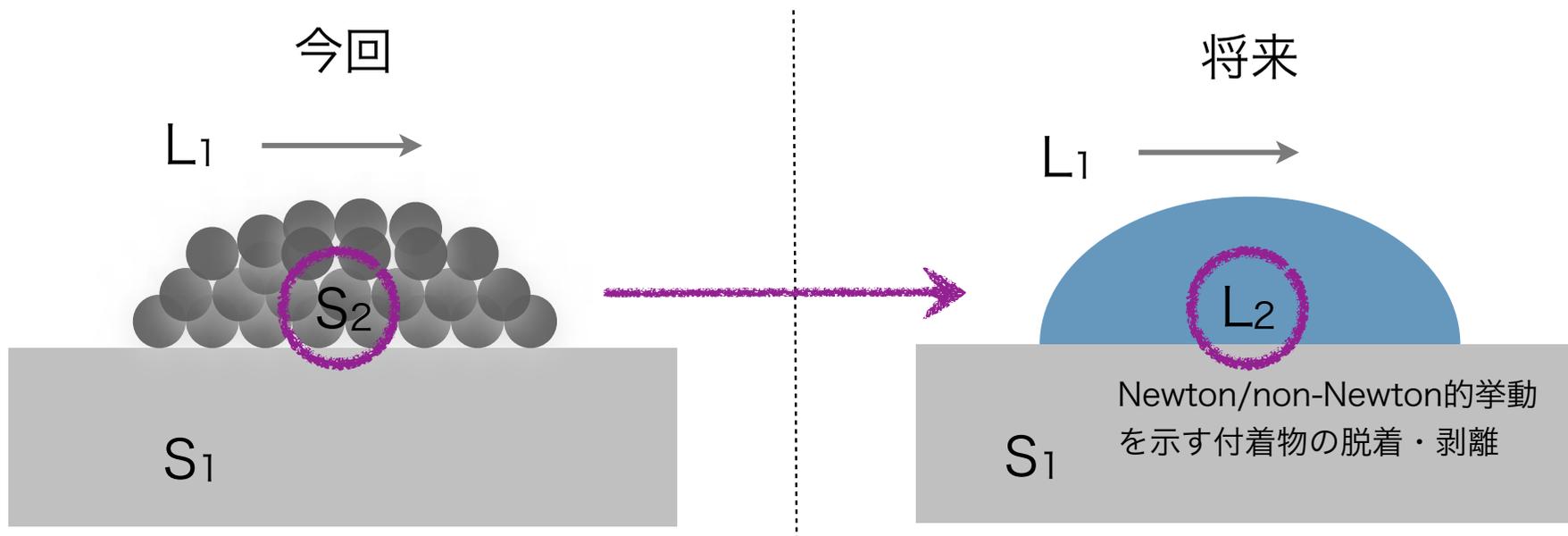
- ・ 実験観察：研究動機は T. Ando (2012)
- ・ 計算方法：CFD-DEM  
但し[計算の直接性] < [SNAPの直接性]
- ・ ソフト粒子の剥離にも興味あり

\*J. Lohaus, F. Stockmeier, P. Surray et al.,  
Journal of Membrane Science **602** (2020)117886

- ・ 過去10年以上に亘り研究対象となっている。
- ・ 計算手法の系列：Stokes Dynamics, CFD-DEM, 格子ボルツマン, DNS
- ・ 付着の問題は様々なプロセスに遍在していることが想像出来る。

# 獲得した知見の展開

展開先： 付着物成長と洗浄, る過膜, 研磨, 集塵. . .

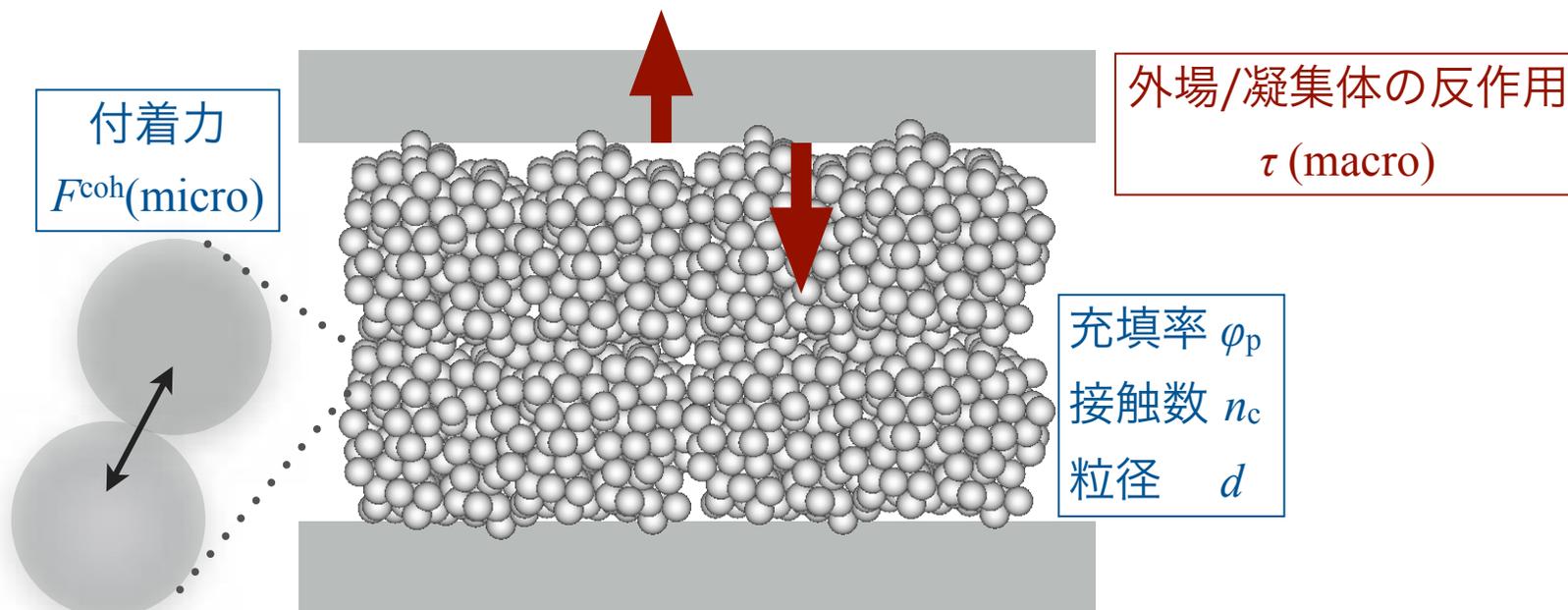


## 研究目的

- ・ 遍在する問題の内, 粒子-流体系をSNAP-Fで再理解したい.
- ・ 本対象から将来の対象へ展開して, より一般的に理解したい.

# 考えられる支配因子

- 凝集体強度 Rumpfの式を参考に -



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

平均構造  
付着力

剪断応力

&

全体構造 (形, 分布)  
追加付着力 (壁)

個

集団・境界

# 無次元剪断応力

- 具体的な定義とその構成 -

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

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

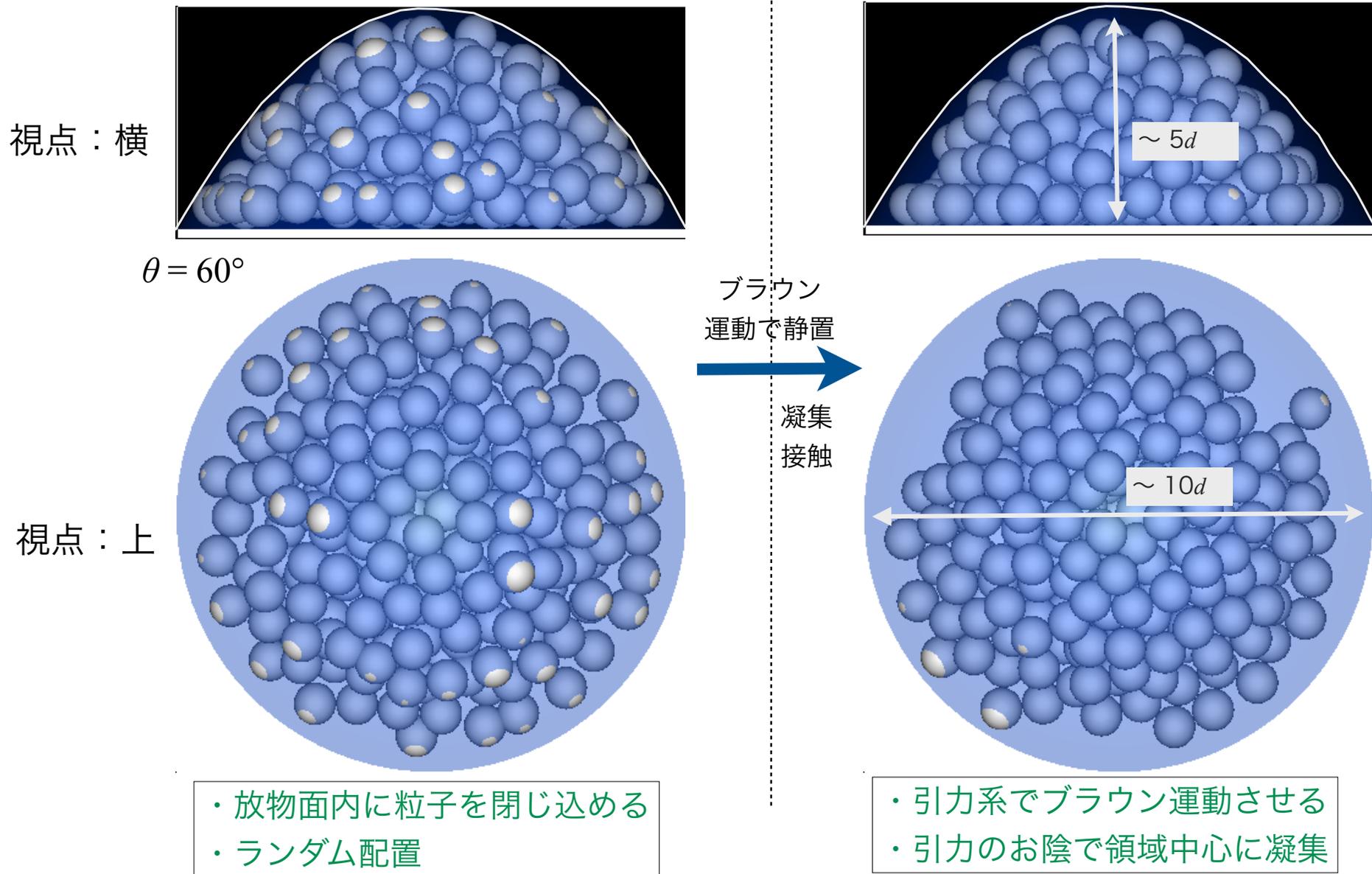
$$\tau^* = \frac{\tau_f}{\tau_p} = \frac{24\mu\dot{\gamma}\delta^2 d}{A}$$

無次元剪断応力 $\tau^*$ ：

印加する剪断応力を拮抗する力で相対的に捉える

# 計算

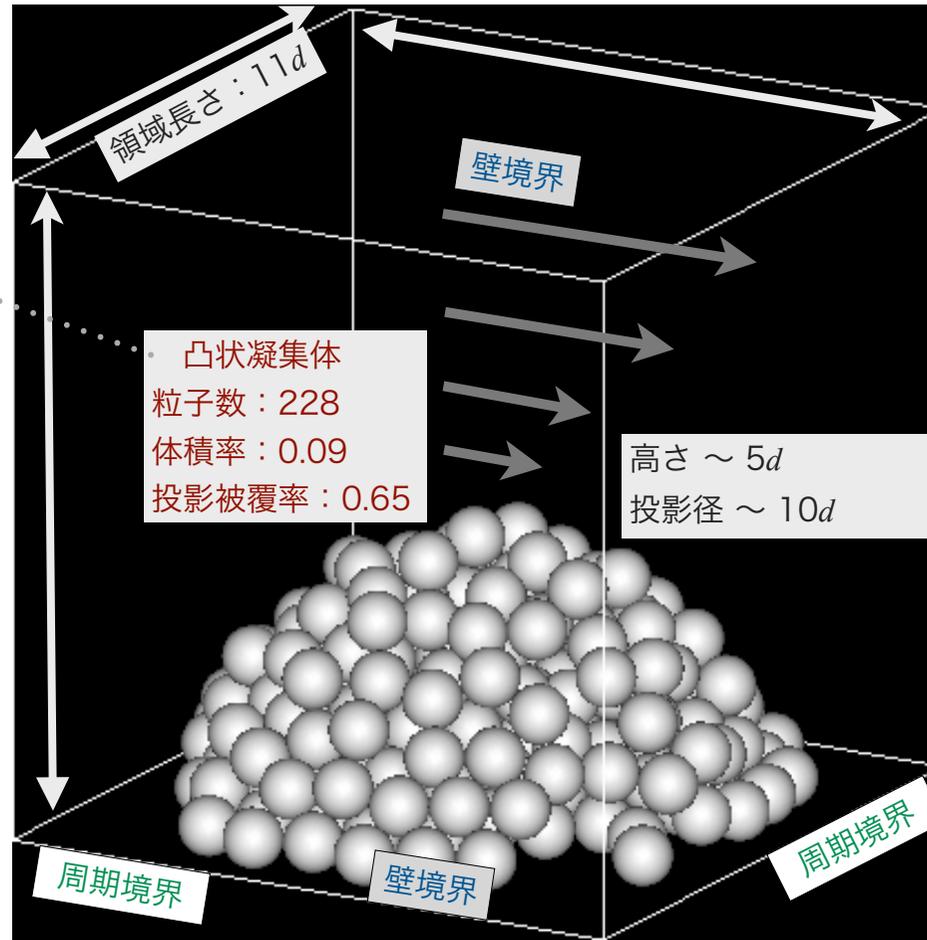
- 凸状初期凝集体の作成: SNAP-L -



# 計算

- 単純せん断場の印加: SNAP-F -

形状調整は  
閉じ込める曲面, 引力で調整可能  
だろうが, 今回はこれで調べる  
粒子・壁の物性値は同一にする



剪断応力  $\tau^*$  : 0.01 - 5.0

付着力 : van der Waals力型

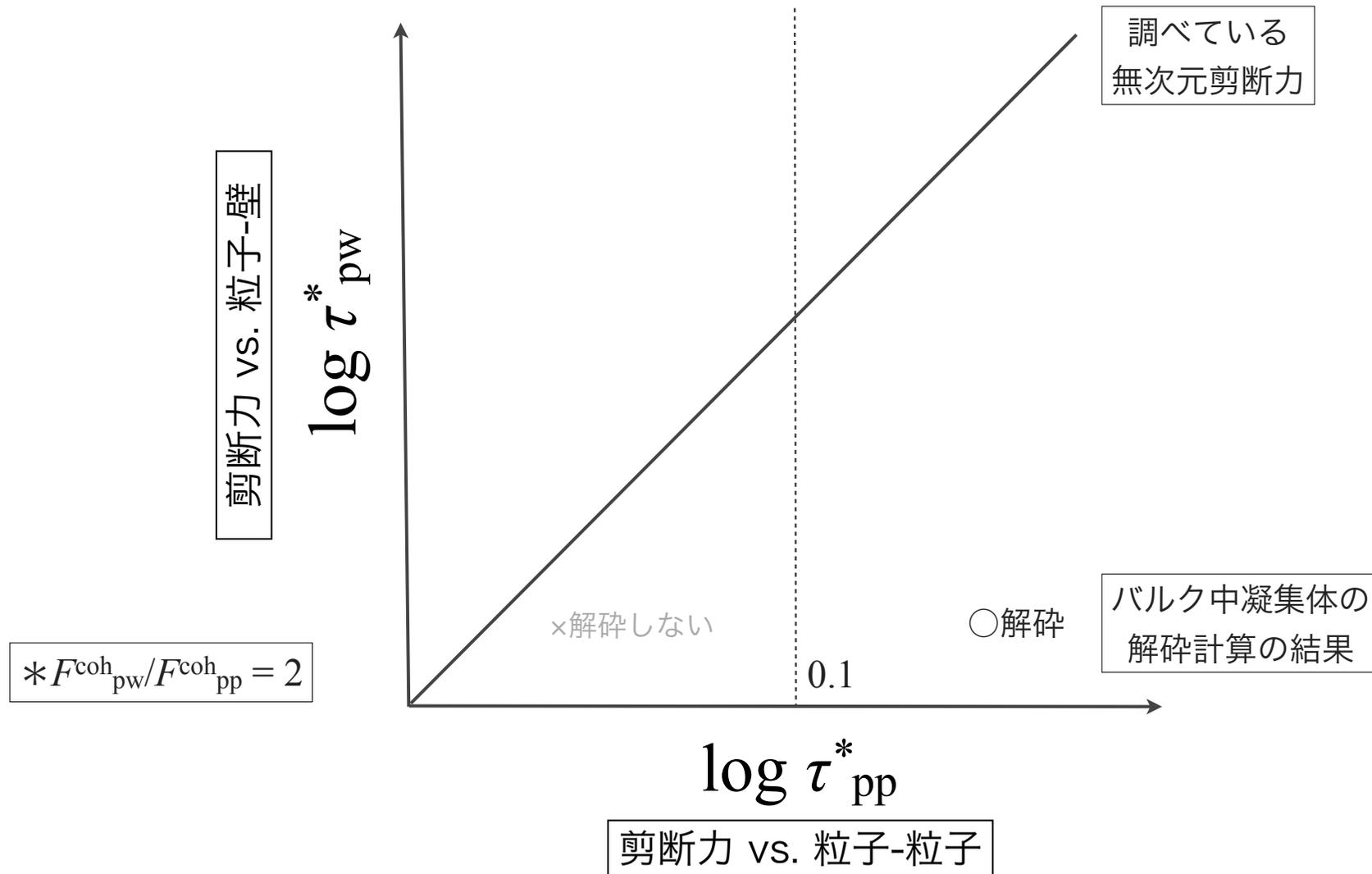
印加ひずみ  $\epsilon$  :  $\dot{\gamma}t = 100$

摩擦係数  $\mu$  : 0, 1

& 周期長 :  $11d, 22d$

# 設定量の俯瞰

- 調べている範囲 -



# モデル方程式①

-流体-粒子連成: Immersed Boundary法 -

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

運動方程式

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

対流項

熱揺動項

粒子-流体連成項

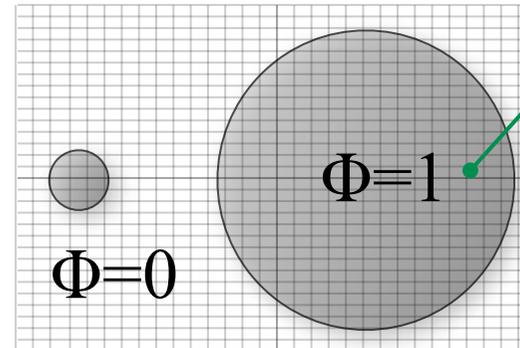
$Re \ll 1$

流体力

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

流体トルク

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



# モデル方程式②

並進運動

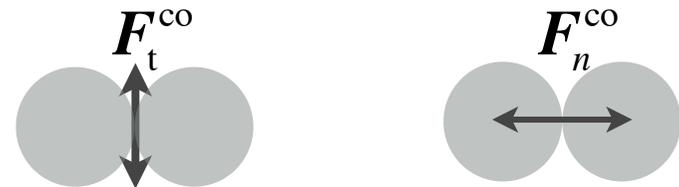
$$m \frac{dv}{dt} = \overset{\text{接触力}}{\mathbf{F}^{\text{co}}} + \overset{\text{付着力}}{\mathbf{F}^{\text{D}}} + \overset{\text{流体力}}{\mathbf{F}^{\text{h}}}$$

回転運動

$$I \frac{d\omega}{dt} = \overset{\text{接触トルク}}{\mathbf{T}^{\text{co}}} + \overset{\text{流体トルク}}{\mathbf{T}^{\text{h}}}$$

接触相互作用：離散要素法DEMのモデル

- 接触力：粘弾性
  - 摩擦則：アモン トン クー ロン 則 (すべり)
- $$|\mathbf{F}_t^{\text{co}}| = \min\left(|\mathbf{F}_t^{\text{co}}|, \mu |\mathbf{F}_n^{\text{co}}|\right)$$



- ・オイラー・ラグランジュ描像（流体：連続，粒子：離散）
- ・粒径以下の流体解像度にして混相流の運動を捉える

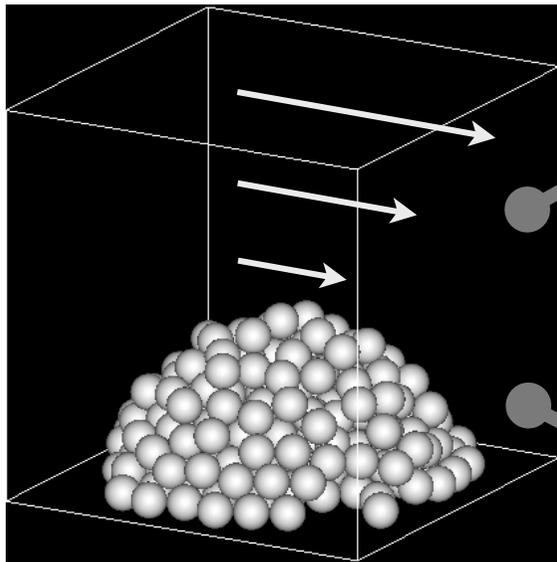
# 結果

- 静止画  $\tau^* = 1.0$  -

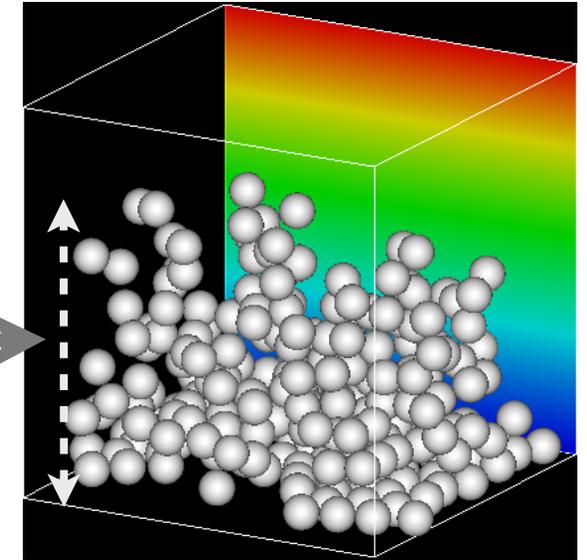
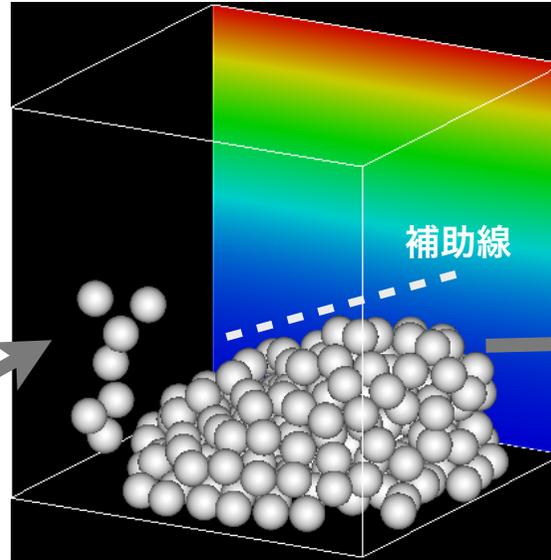
印加歪み  $\varepsilon = 0$

$\varepsilon = 10$

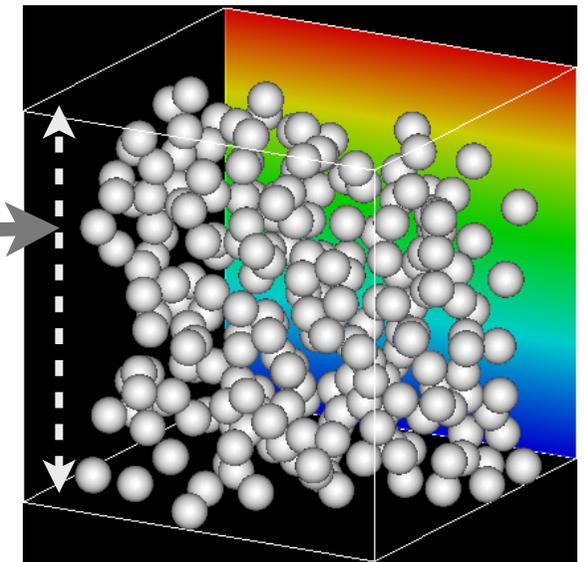
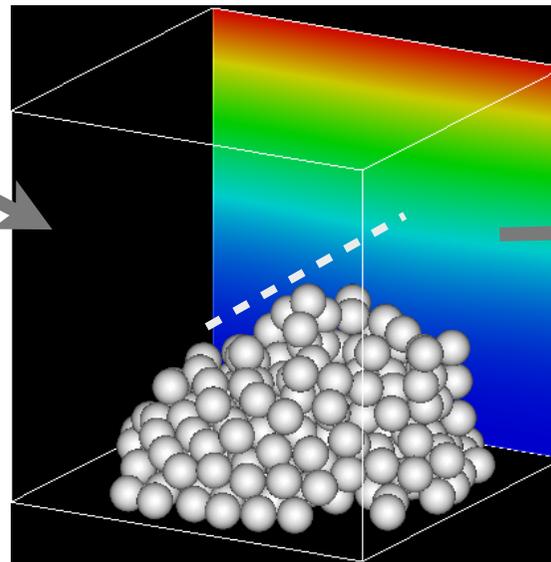
$\varepsilon = 100$



摩擦なし



摩擦あり

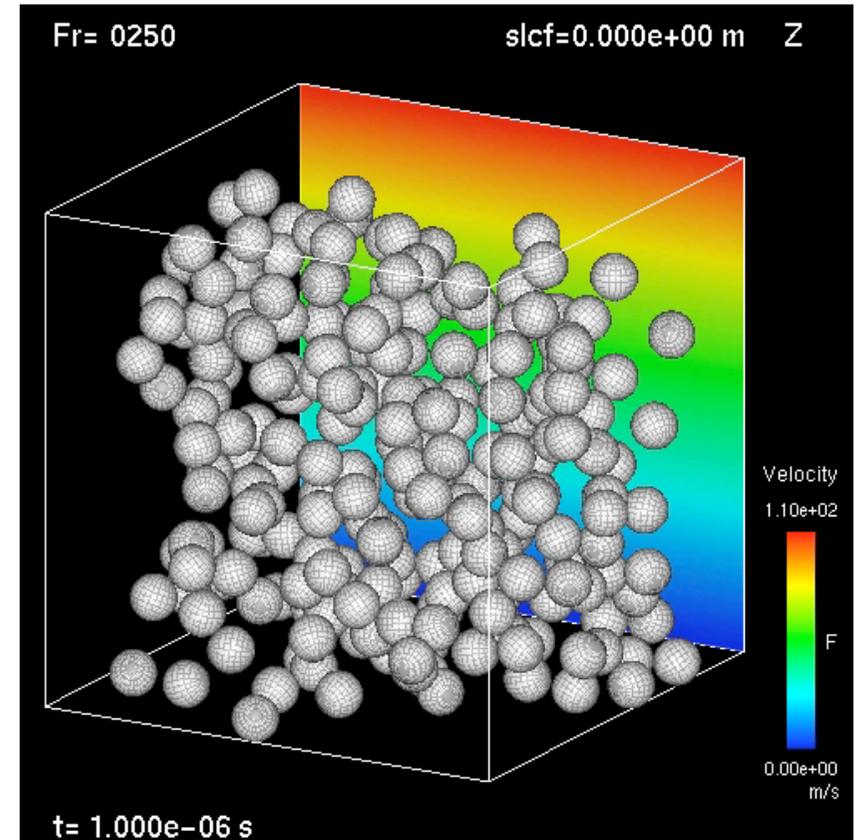
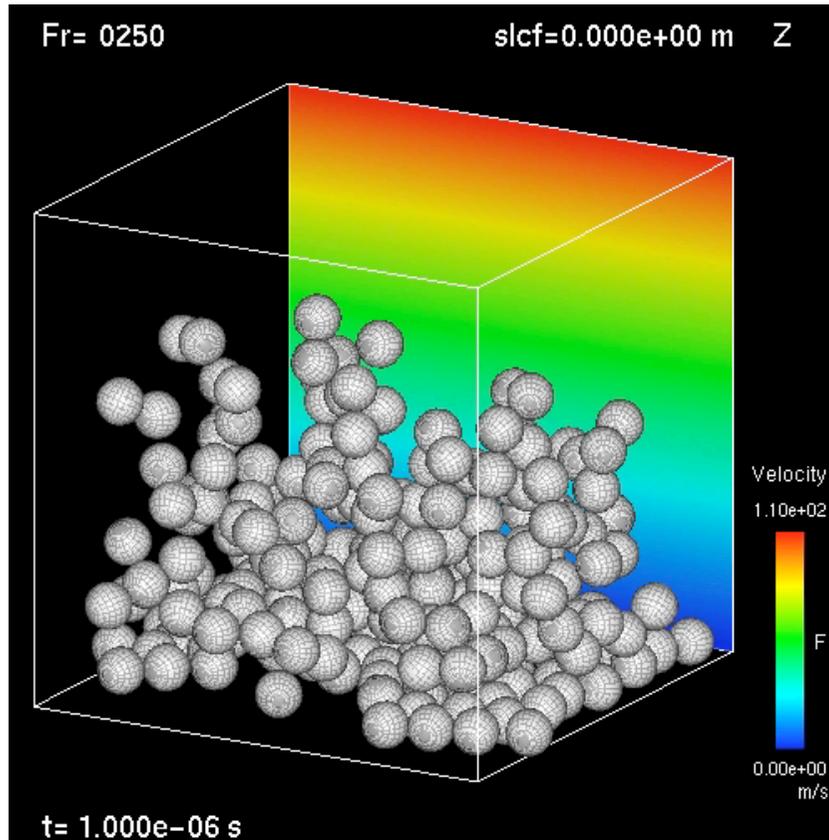


# 結果

- 動画  $\tau^* = 1.0$  -

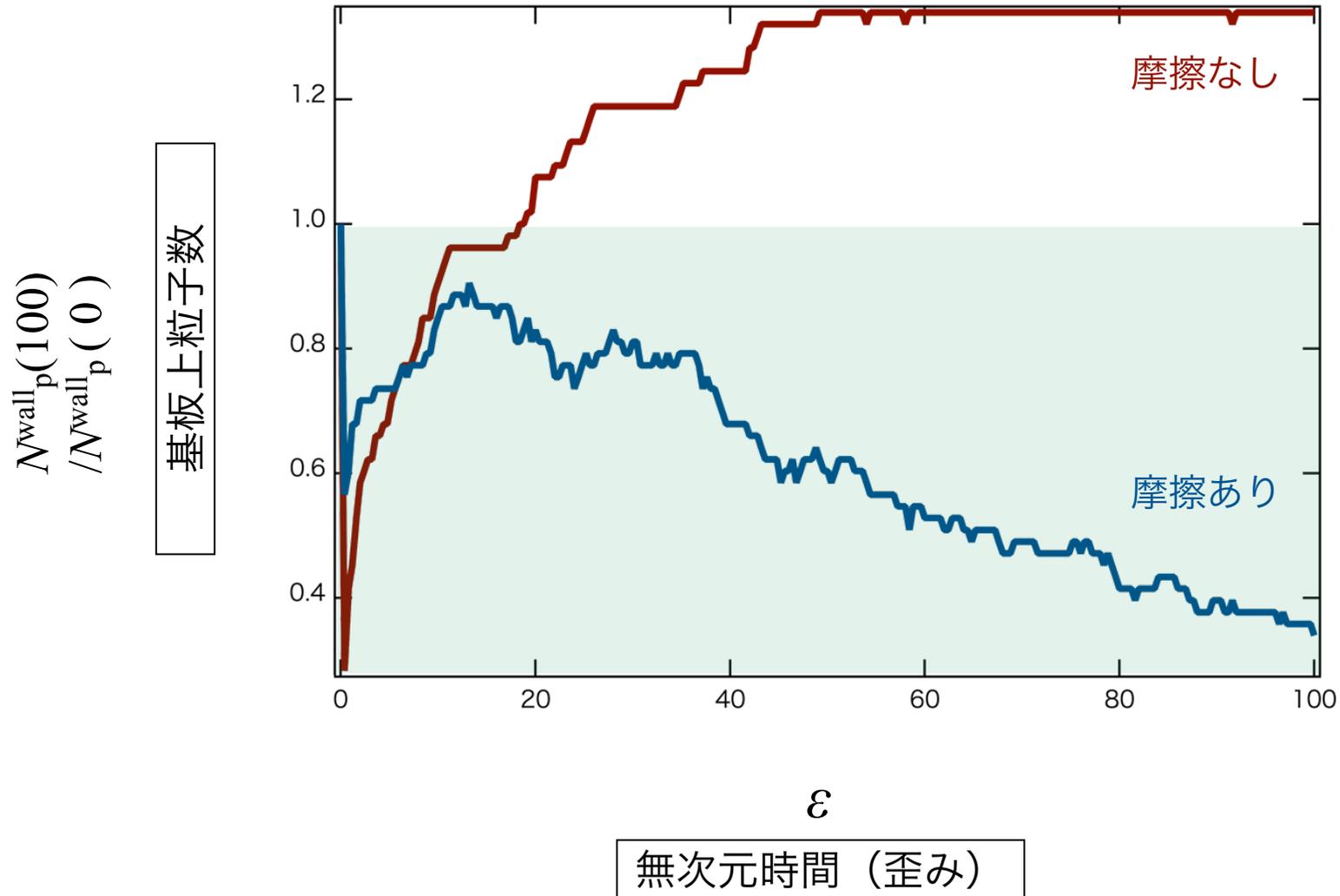
摩擦なし

摩擦あり



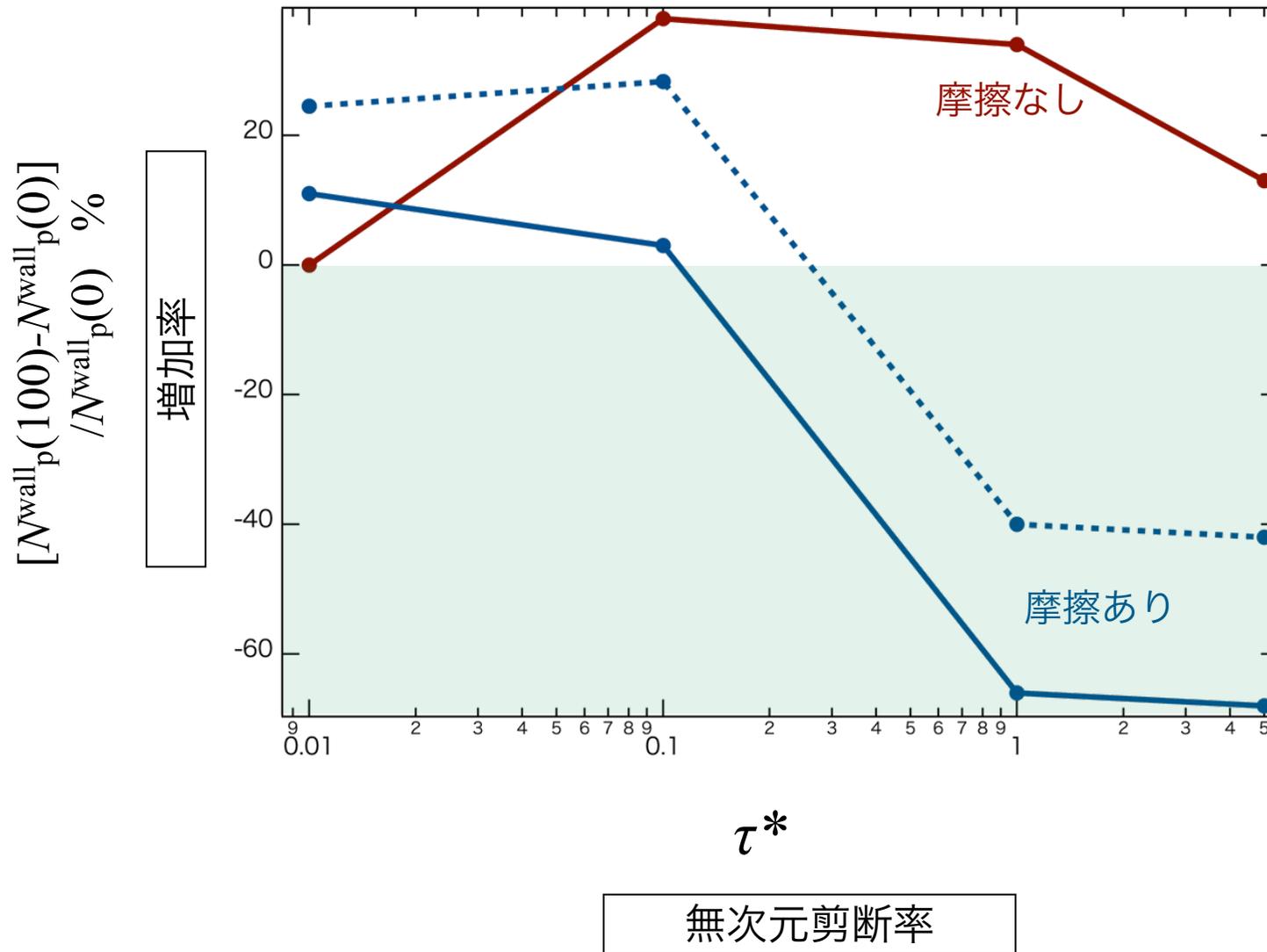
# 結果

- 基板上粒子の時間変化  $\tau^* = 1.0$  -

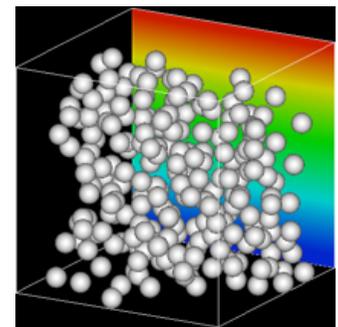
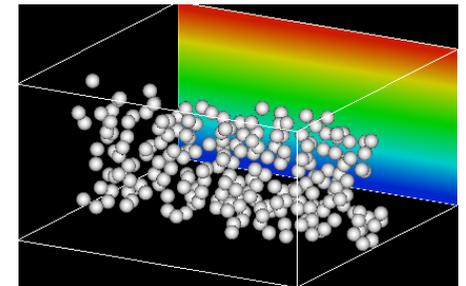
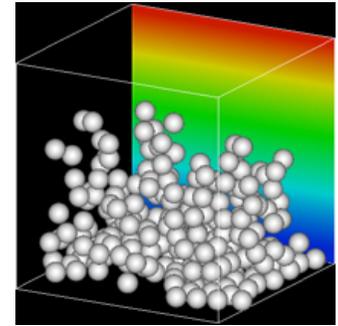


# 結果

- 基板上粒子の増加率 -



画像@ $\tau^*=1.0$



# まとめ

- メソスケールモデルによる計算を実施した.
- 凝集体上部から壊れていく. 摩擦が大きい時は回り込みがある.
- 一部壊れて, 基板/溶媒側に移動していく.
- 基板上粒子は剥離しにくい. 摩擦が小さい時は付着が進行.
- 被覆率が低いときも付着が進行する傾向あり.
- バルク中での凝集体解砕計算の知見は有効に働くだらう.