A Direct numerical simulation on detachment process of particle aggregate on plane surface - effect of cohesive interaction between solids -

O. Koike*, R. Tatsumi†, Y. Yamaguchi*

* PIA, † UTokyo

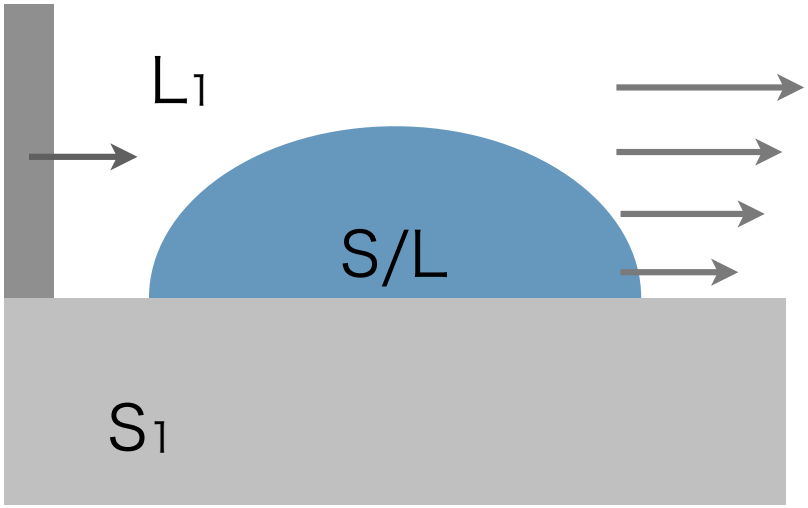
平板付着凝集体除去の直接的数値計算 - 固体間相互作用の影響 -

小池 修*・辰巳 怜†・山口 由岐夫*

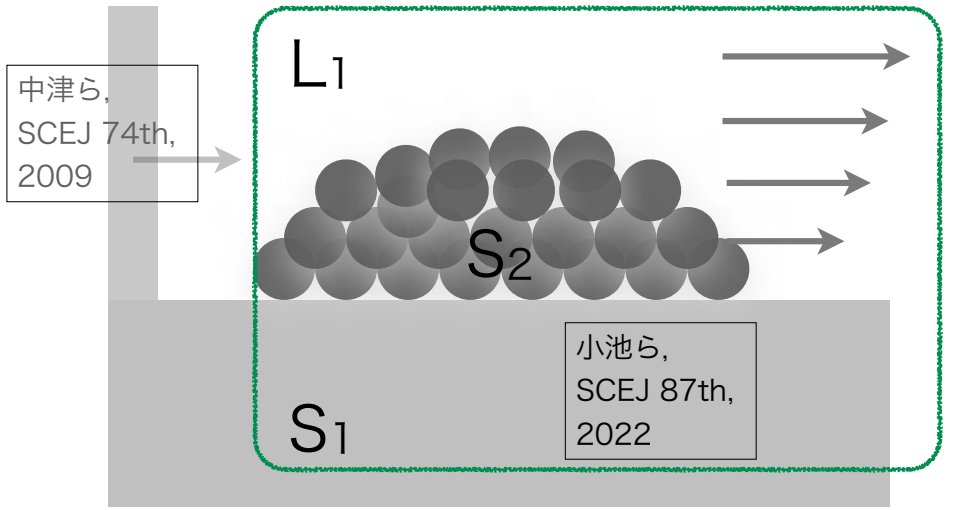
除去の仕方

・主な外場として：　固体壁移動・流体流動（今回）
・促進手段として：　溶質添加，温度調整，振動場・・・

一般な場合



粒子系

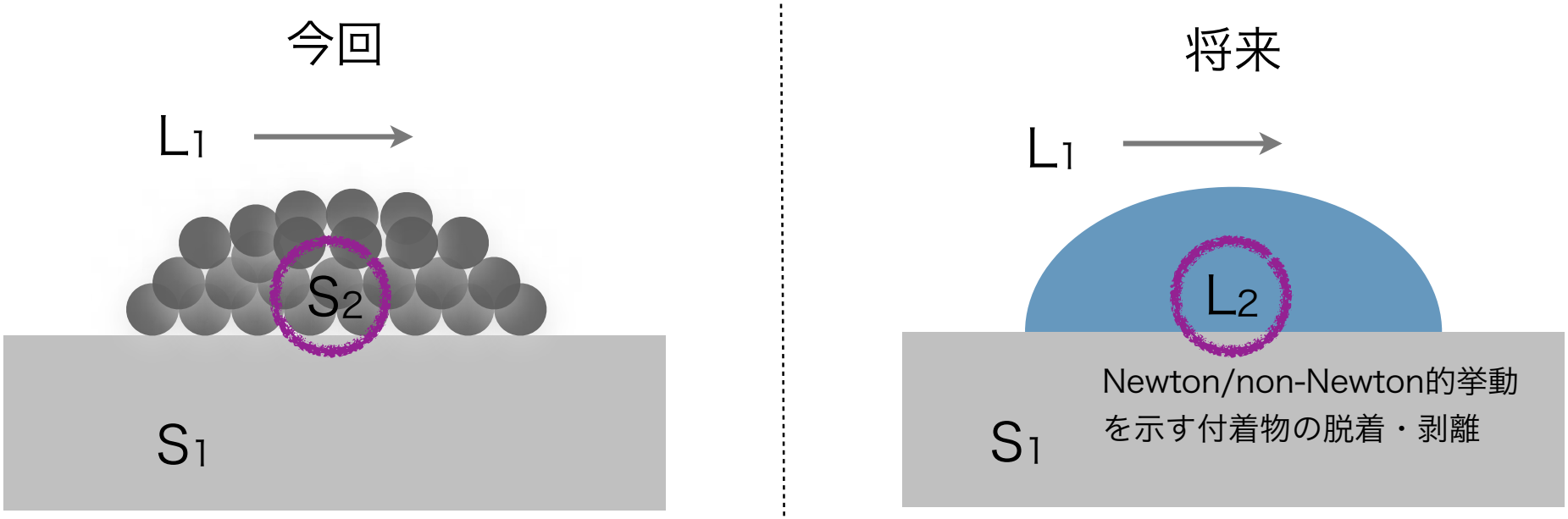


影響因子の候補

・界面自由エネルギー
・固体間摩擦，基板粗度
・付着物質のレオロジー特性：粘度・粘弾性

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．
・本対象から展開してより一般的に理解したい．



獲得知見の展開先：　付着物成長と洗浄，ろ過膜，研磨，集塵．．．

解析①：粒子系

-せん断流れ（基板に平行）-

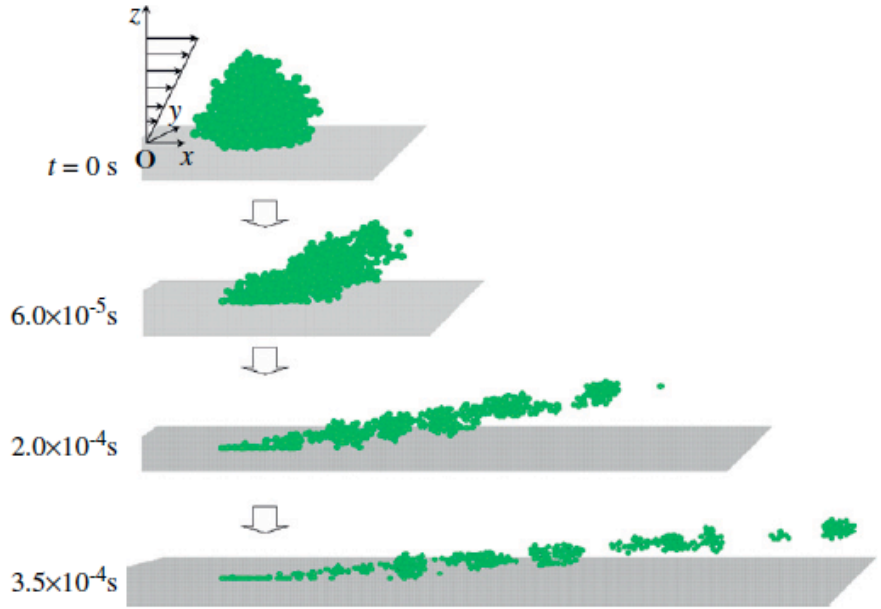


Fig. 8. Snapshots of entrainment process of Deposit-I from the plate surface of $A_s/A = 1.0$ under the shear stress of $\mu\gamma_s = 267$ Pa.

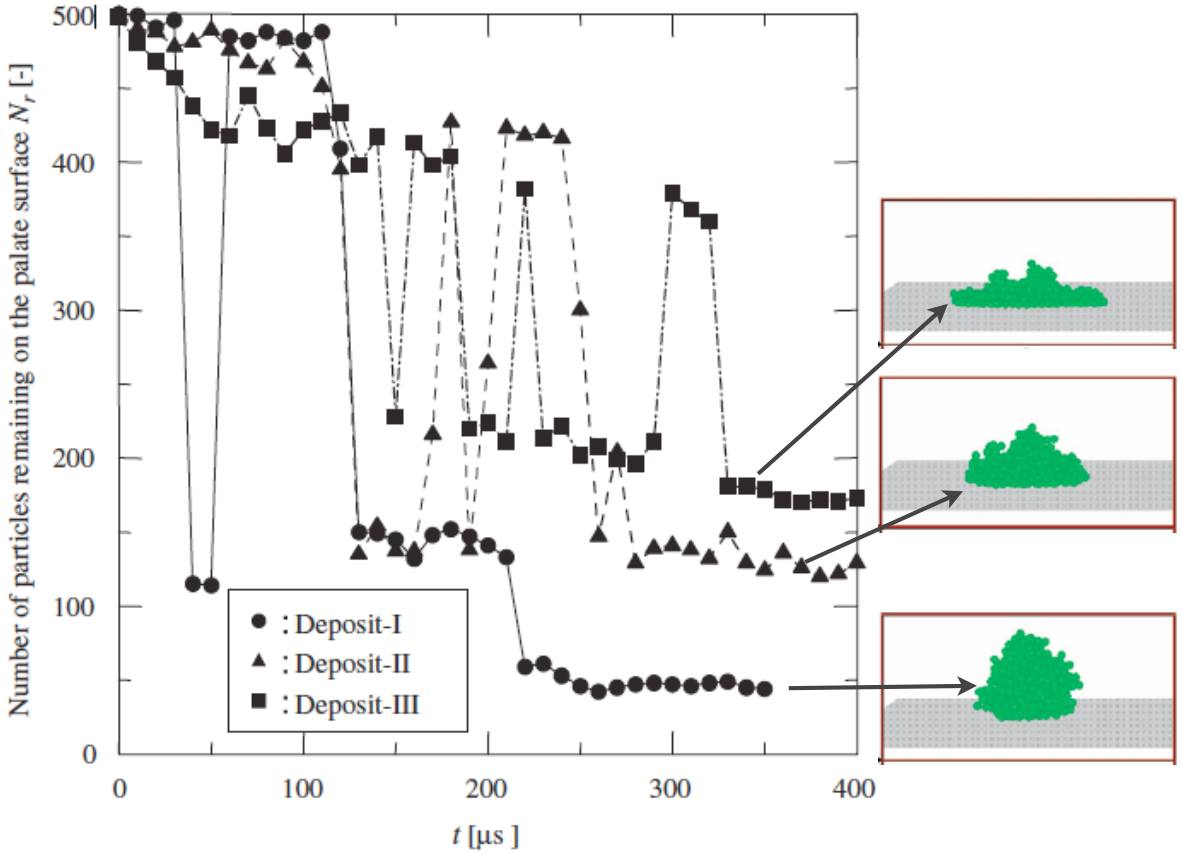


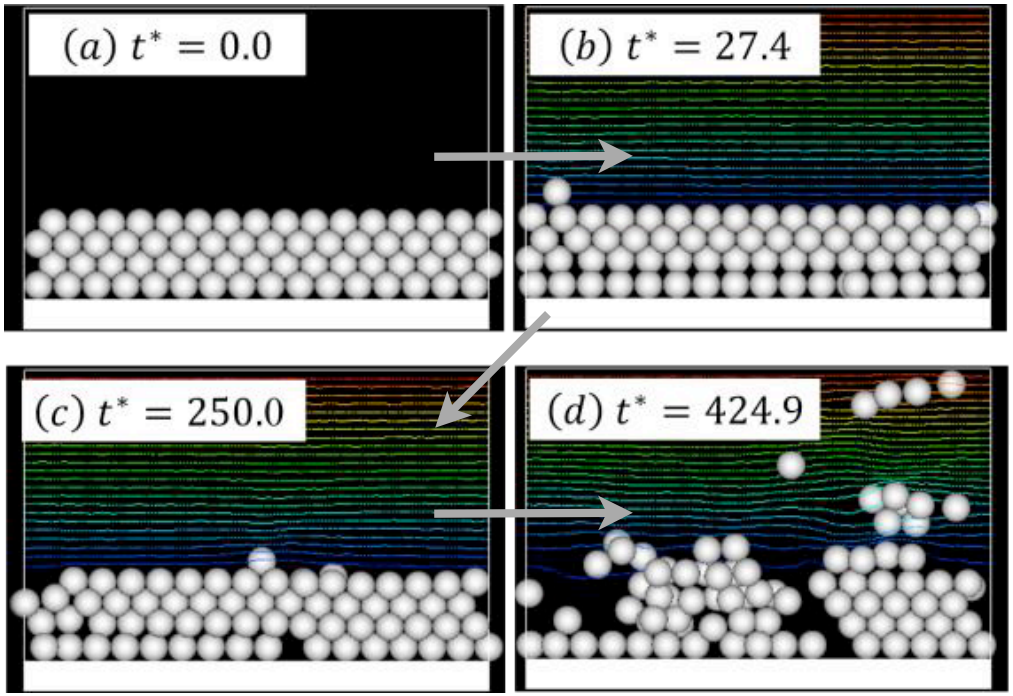
Fig. 10. The number of particles remaining on the plate surface of $A_s/A = 1.0$ as a function of elapsed time for (●) Deposit-I, (▲) II and (■) III under the shear stress of $\mu\gamma_s = 276$ Pa.

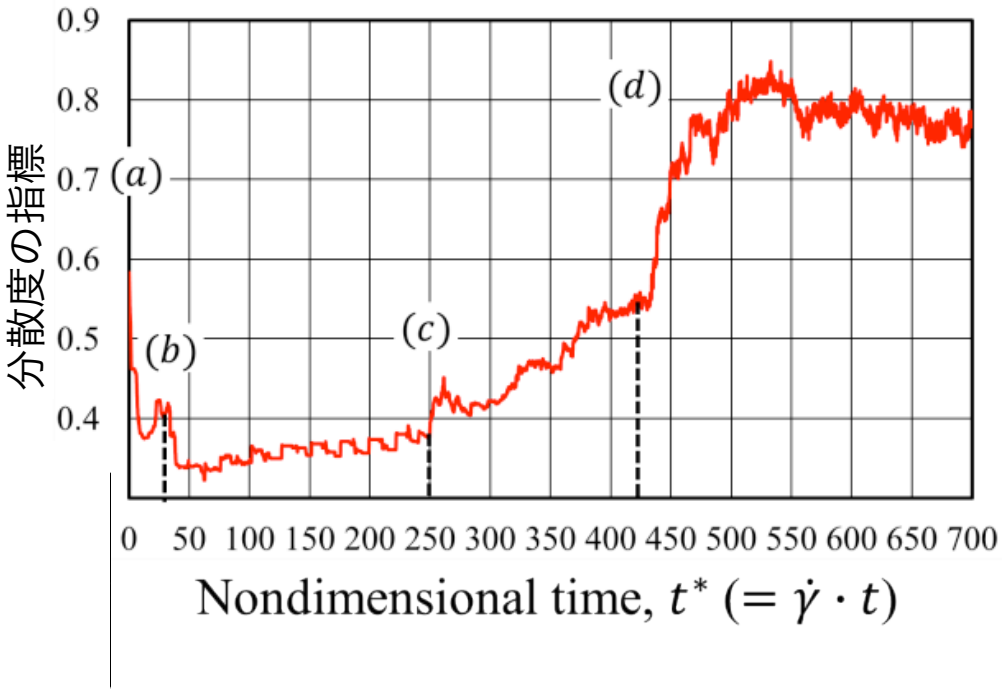
・粒子数500で固定
　初期付着面積（表面高さ）を変化
　付着力・せん断力を変化
・平板の他，球面での計算報告もあり

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

解析①’：粒子系

-せん断流れ（基板に平行）-





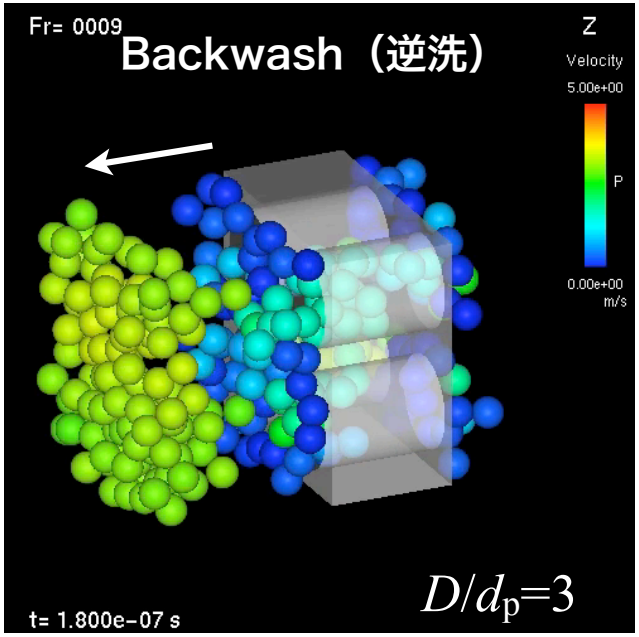
細孔なし基板のケース

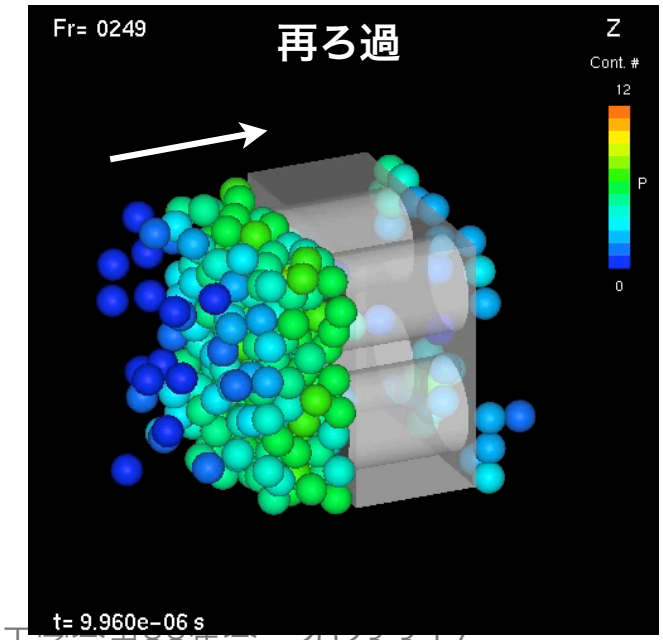
＊藤平ら，化学工学会第83年会，2018（細孔あり）
＊藤平ら，化学工学会第84年会，2019（細孔なし）

日大・安藤努研とのコラボ
対象：クロスフロー精密膜ろ過

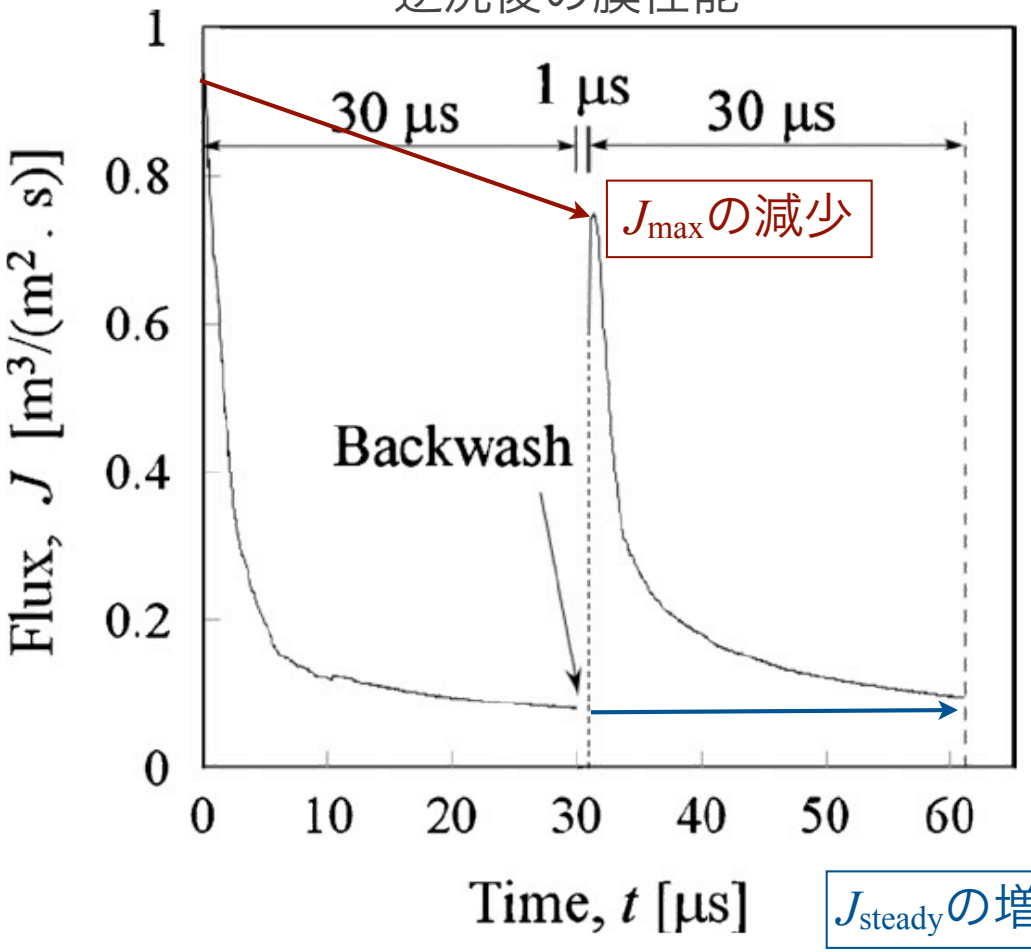
解析②：粒子系

-圧力駆動流れ（基板に垂直）-





逆洗後の膜性能



J_{steady}の増加

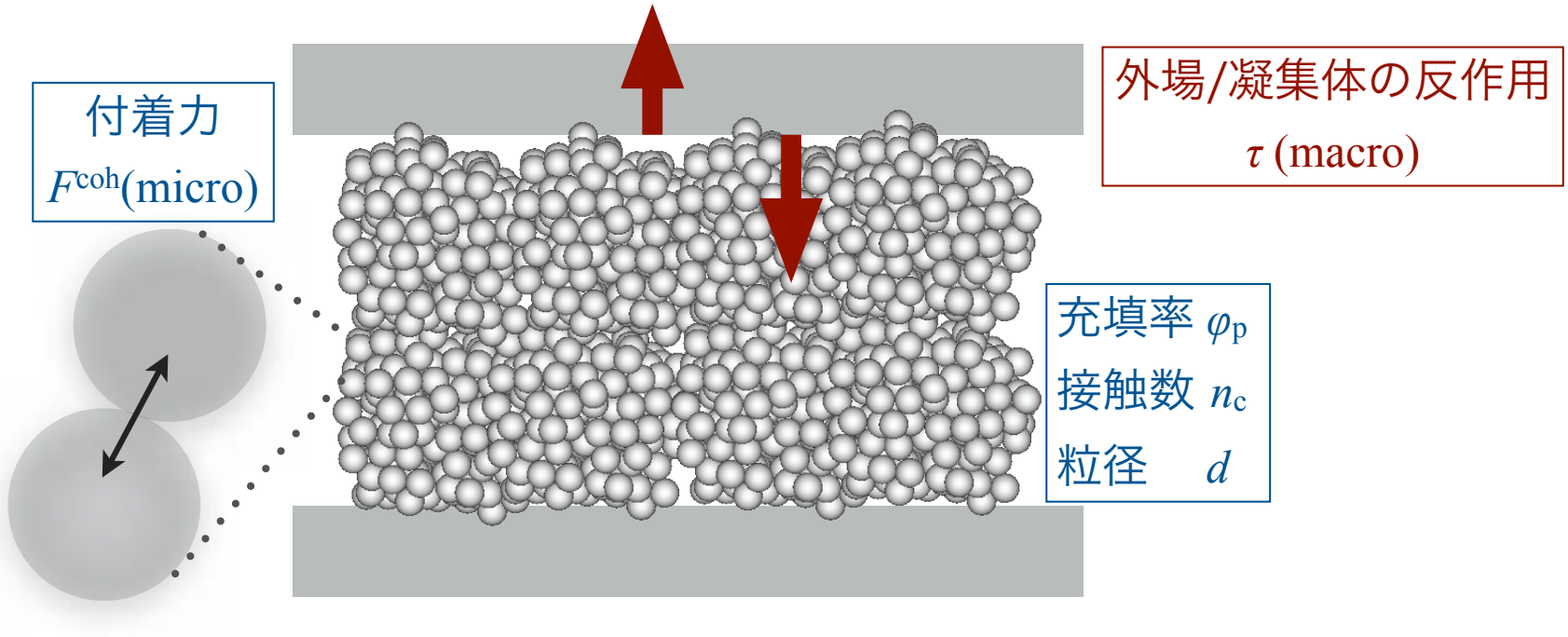
＊T. Ando, K. Akamatsu, S. Nakao et al.,
Journal of Membrane Science **392-393** (2012) 48

工学院大・中尾赤松研，日大・安藤努研とのコラボ

対象：デッドエンド精密膜ろ過

準備①：強度の支配因子

- 凝集体強度 Rumpfの式 -



Rumpfの式

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

式から推測される検討要素

平均構造
付着力

剪断応力

個

&

全体構造（形，分布）
追加付着力（壁）

集団・境界

準備②：流体剪断応力の無次元化

- 具体的な定義とその構成 -

流体 $\tau_f = \mu\dot{\gamma}$

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

＊付着力；
van der Waals力型を想定

$$\tau_p = 4.2\times10^5\left(\frac{A_{-20}}{\delta_{-10}^2 d_{-7}}\right)\ [\mathrm{Pa}]$$

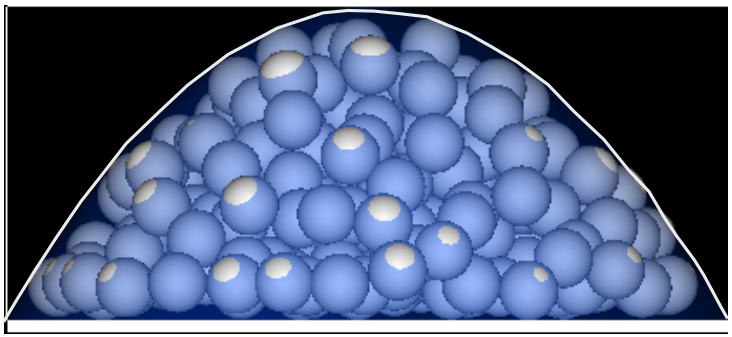
$$\tau^* = \frac{\tau_f}{\tau_p} = \frac{24\mu\dot{\gamma}\delta^2 d}{A}$$

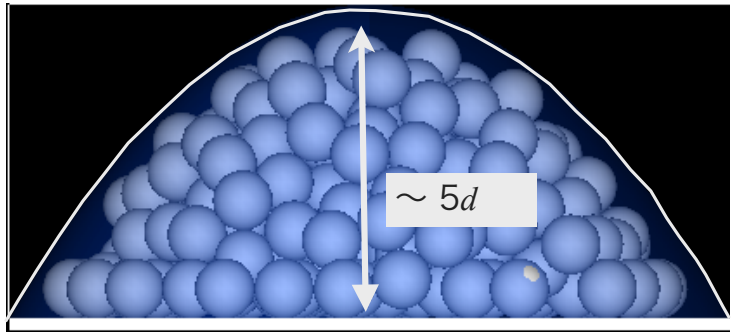
無次元剪断応力τ^*：拮抗する力で相対的に捉える

前計算

- 凸状初期凝集体の作成: SNAP-L -

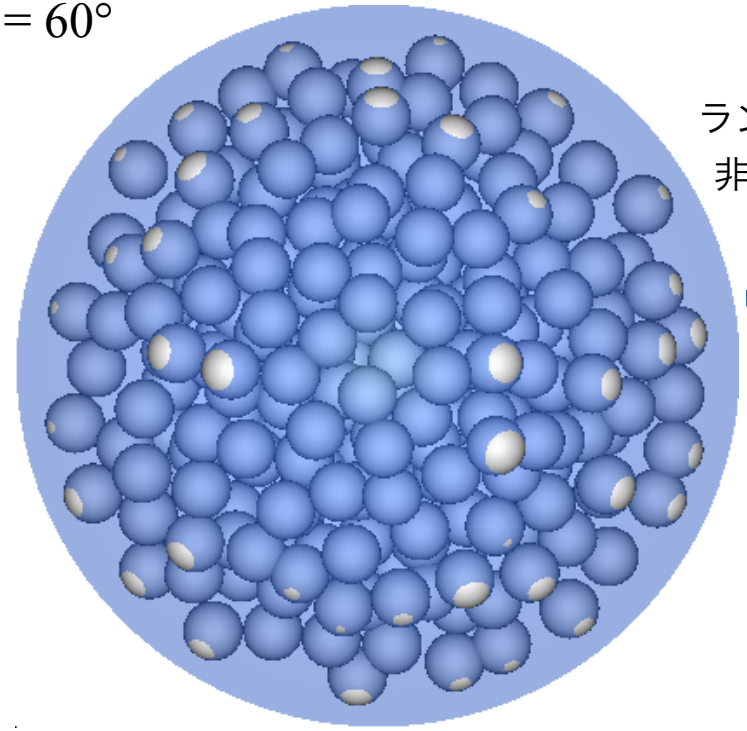
視点：横





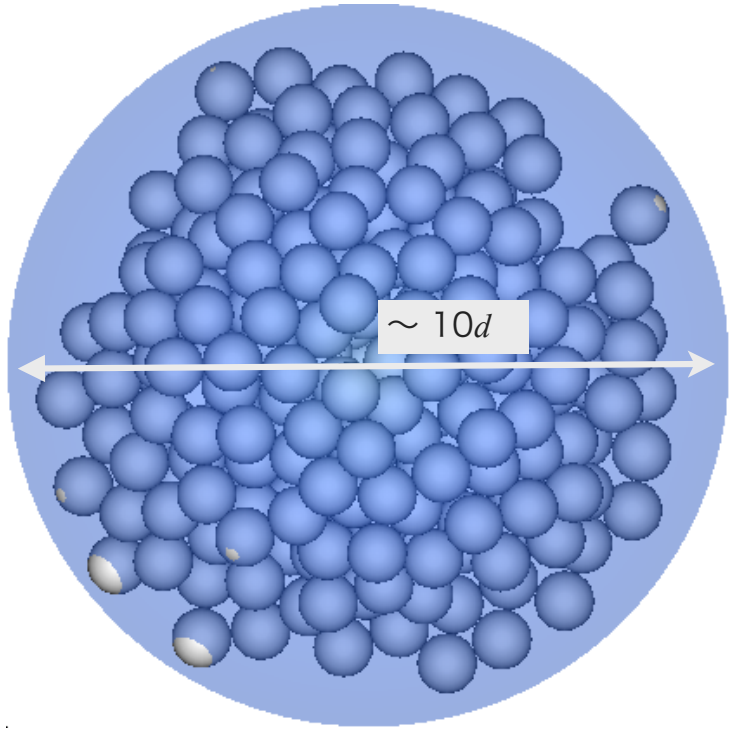
$\theta = 60°$

視点：上



ランダム
非接触

凝集
接触



・粒子の閉じ込め→放物面状の液滴
・ランダム配置

・引力系でブラウン運動
・引力のお陰で領域中心に凝集

モデル方程式①

-流体-粒子連成: Immersed Boundary法 -

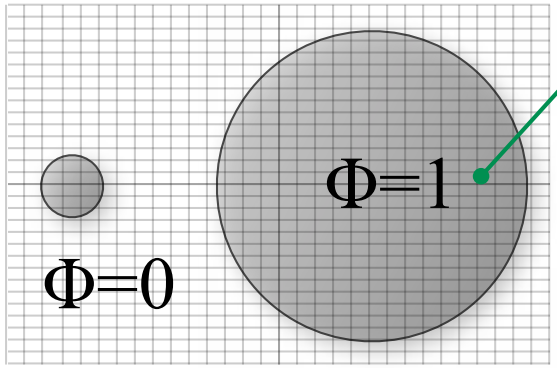
質量保存（非圧縮）　$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0$

運動方程式

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

対流項　　熱揺動項　　粒子-流体連成項

Re<<1



流体力

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

流体トルク

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

モデル方程式②

並進運動

接触力　付着力　流体力

$$m\frac{dv}{dt} = \boldsymbol{F}^{\mathrm{co}} + \boldsymbol{F}^{\mathrm{D}} + \boldsymbol{F}^{\mathrm{h}}$$

回転運動

接触トルク　流体トルク

$$I\frac{d\omega}{dt} = \boldsymbol{T}^{\mathrm{co}} + \boldsymbol{T}^{\mathrm{h}}$$

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）

$$\left|\boldsymbol{F}_{\mathrm{t}}^{\mathrm{co}}\right| = \min\left(\left|\boldsymbol{F}_{\mathrm{t}}^{\mathrm{co}}\right|, \mu\left|\boldsymbol{F}_{n}^{\mathrm{co}}\right|\right)$$

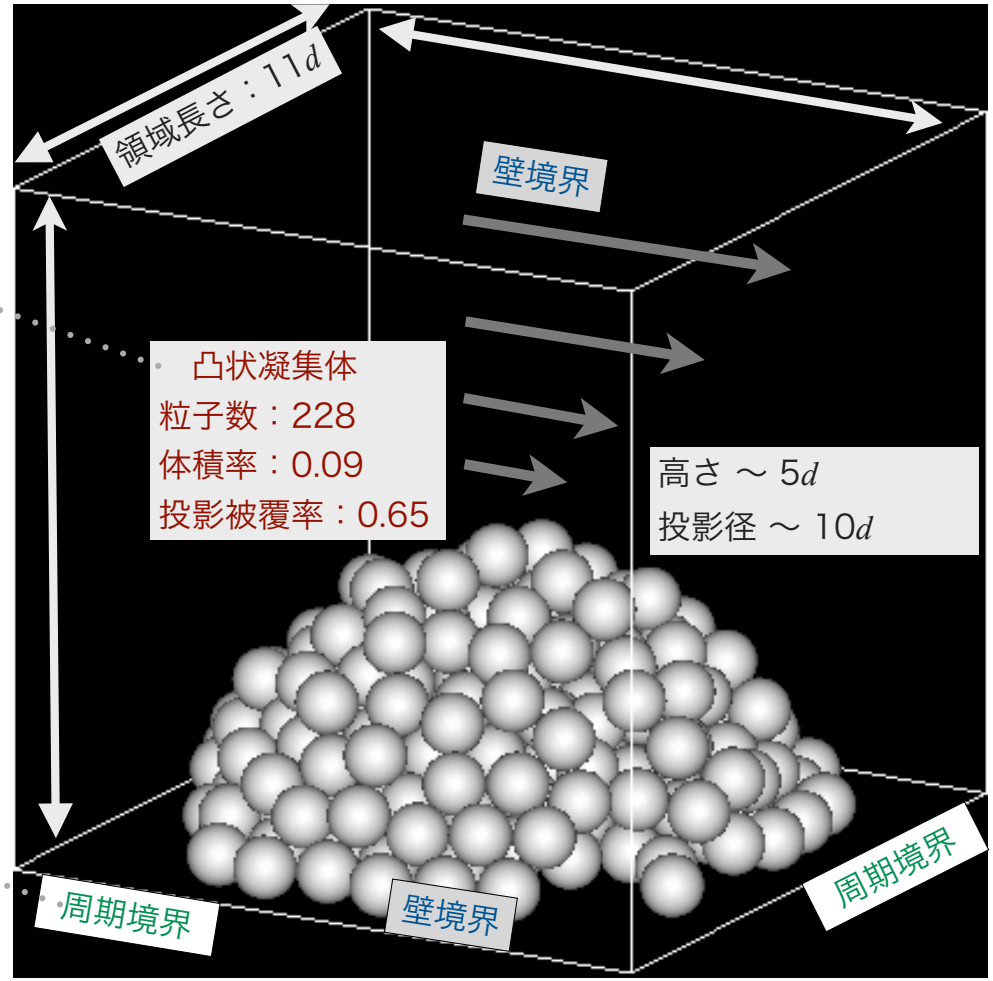
・オイラー・ラグランジュ描像（流体：連続，粒子：離散）
・粒径以下の流体解像度にして混合体の運動を捉える

本計算

- 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

周期境界によって
格子状配置の付着物になる



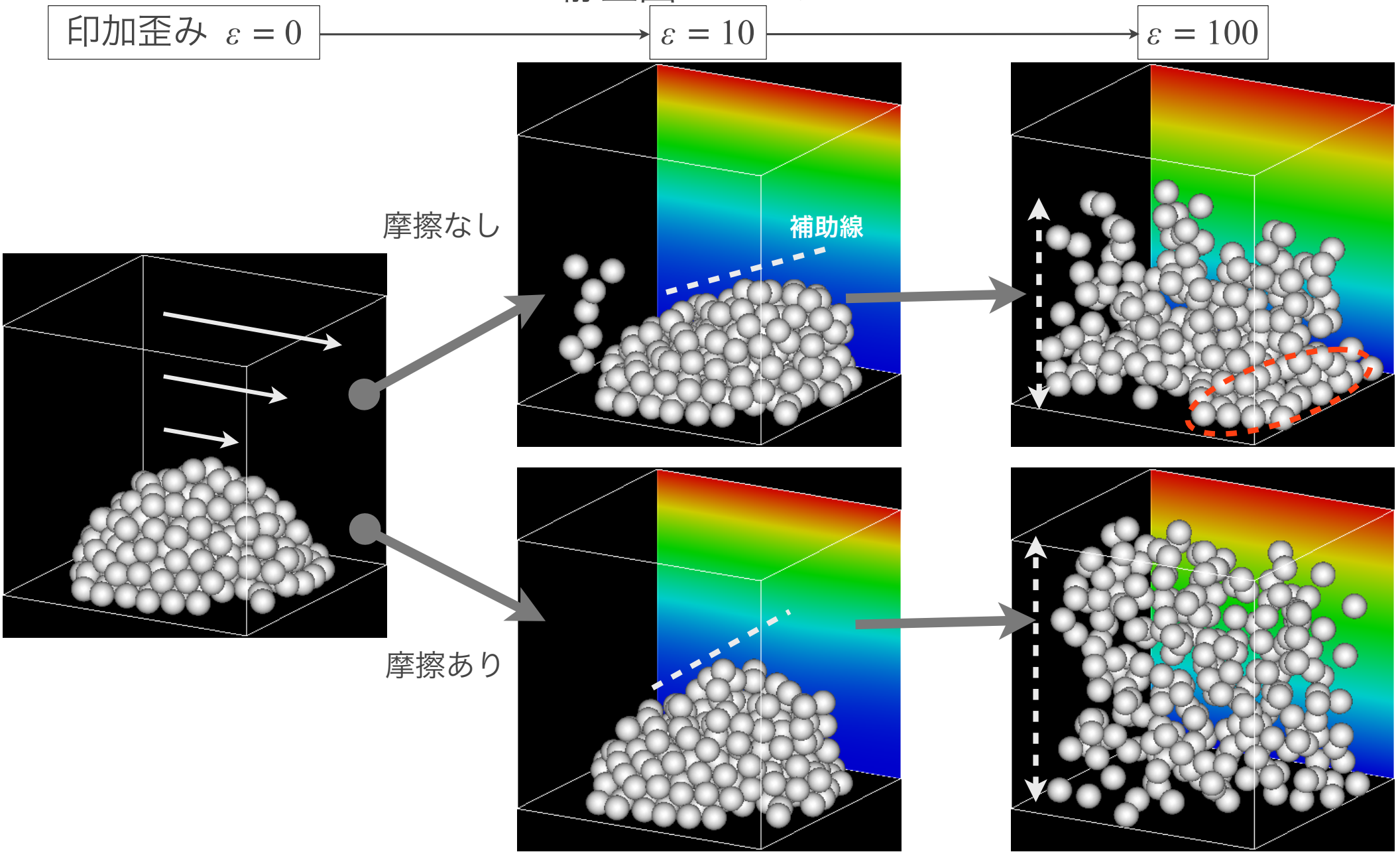
剪断応力 τ^* ： 0.01 - 5.0
印加ひずみ ε ： $\dot{\gamma}t = 100$

&

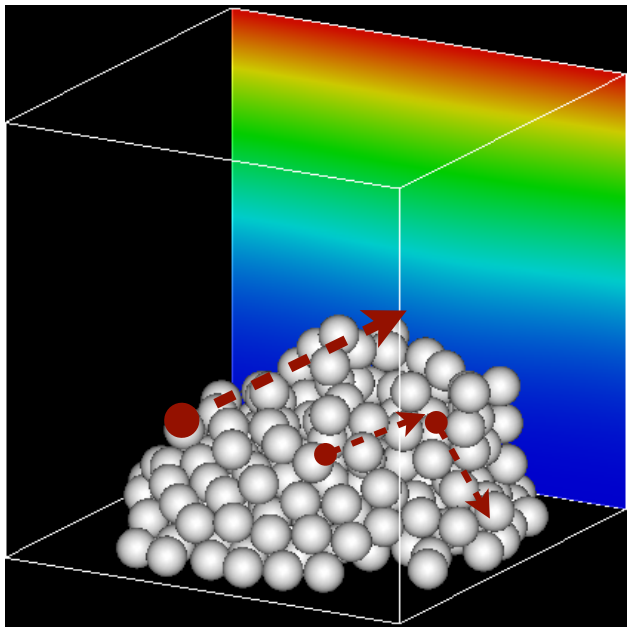
摩擦係数 μ ： 0, 1
周期長 ： $11d$

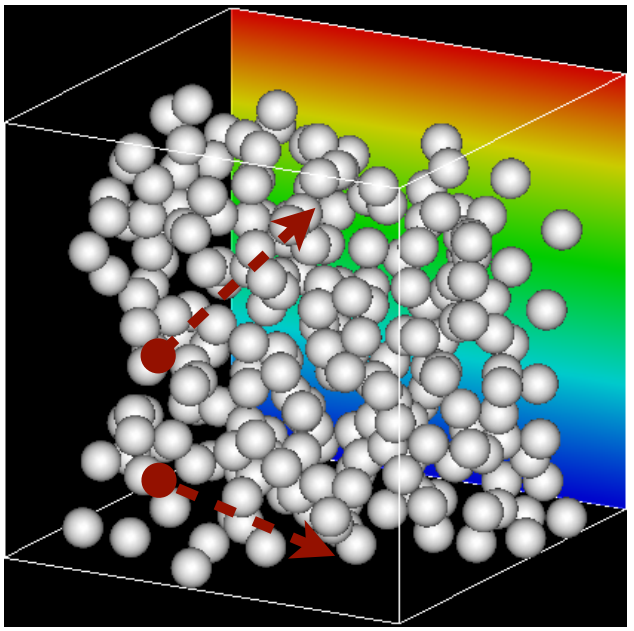
結果（SCEJ87）

- 静止画 $\tau^* = 1.0$ -



凝集体の振る舞い（SCEJ87）



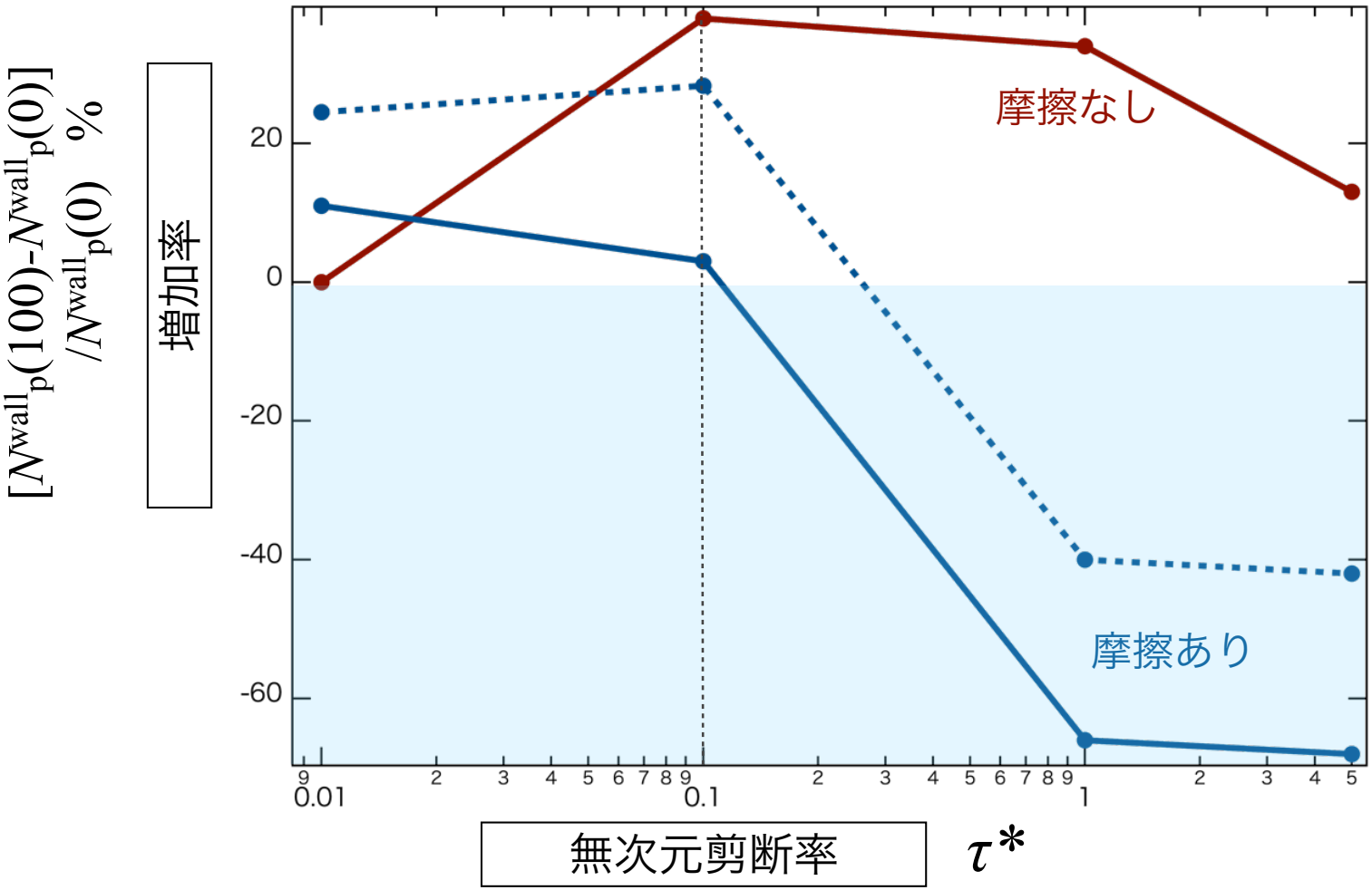


・凝集体上部から解れる
・摩擦ありの場合,
　回り込みが誘起される

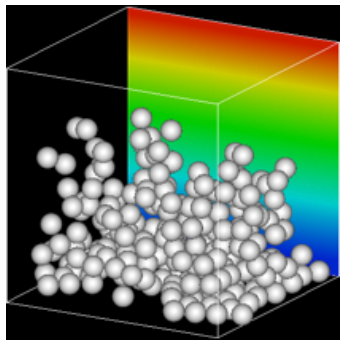
・基板側・溶媒側にそれぞれに移動
・基板への再付着がおこる
・基板上粒子は剥離しにくい

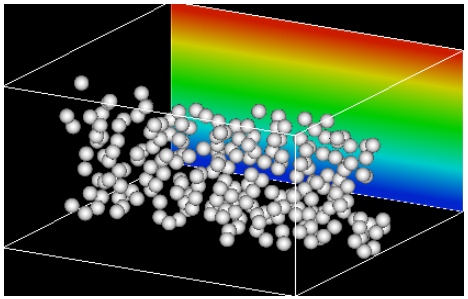
結果（SCEJ87）

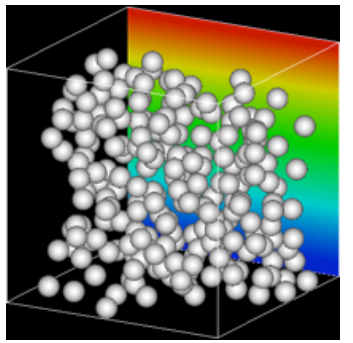
- 基板上粒子数 @ $\varepsilon = 100$ -



画像@τ^*=1.0



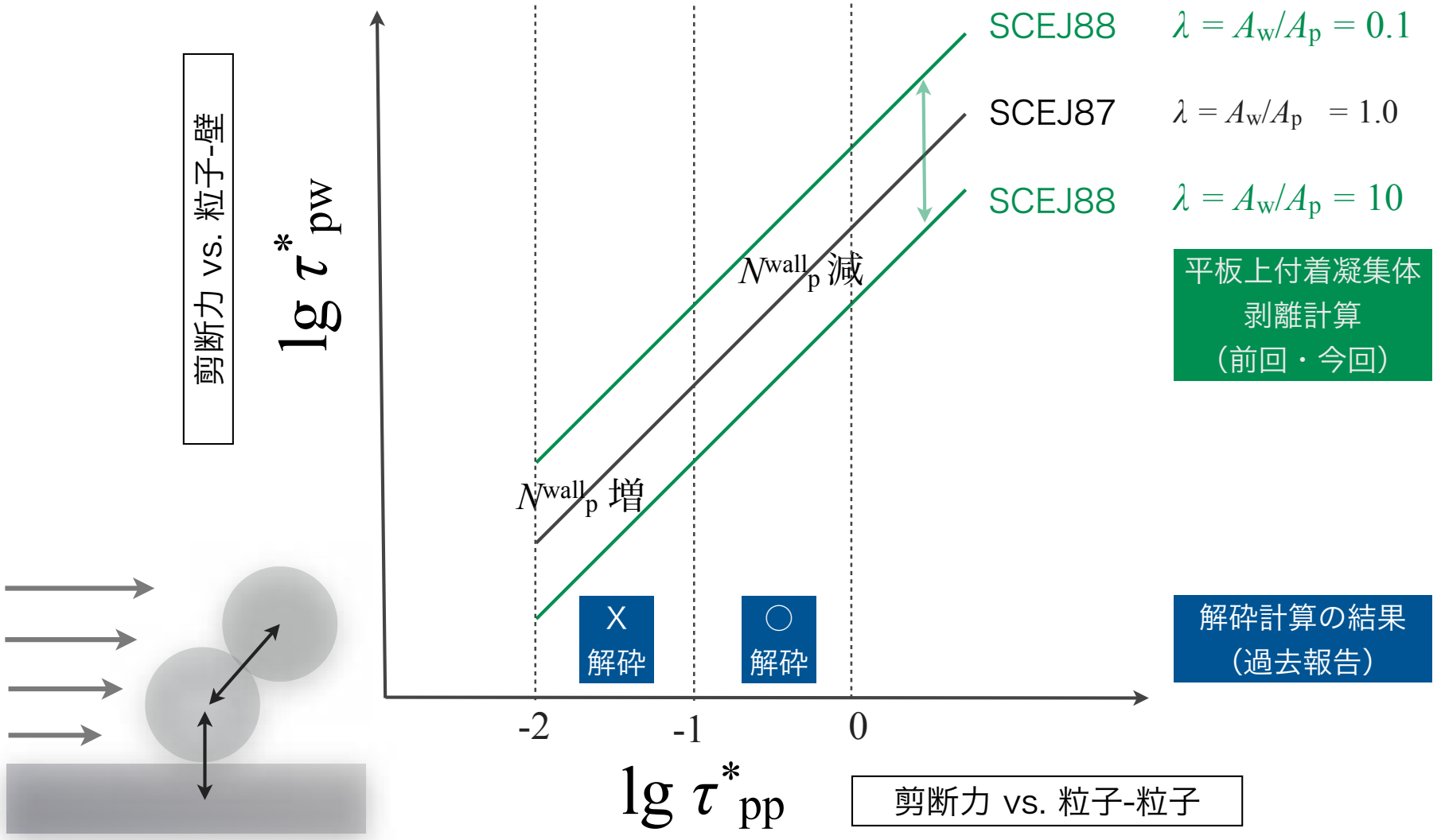




基板上の粒子：全て取れる訳ではない

設定量の俯瞰

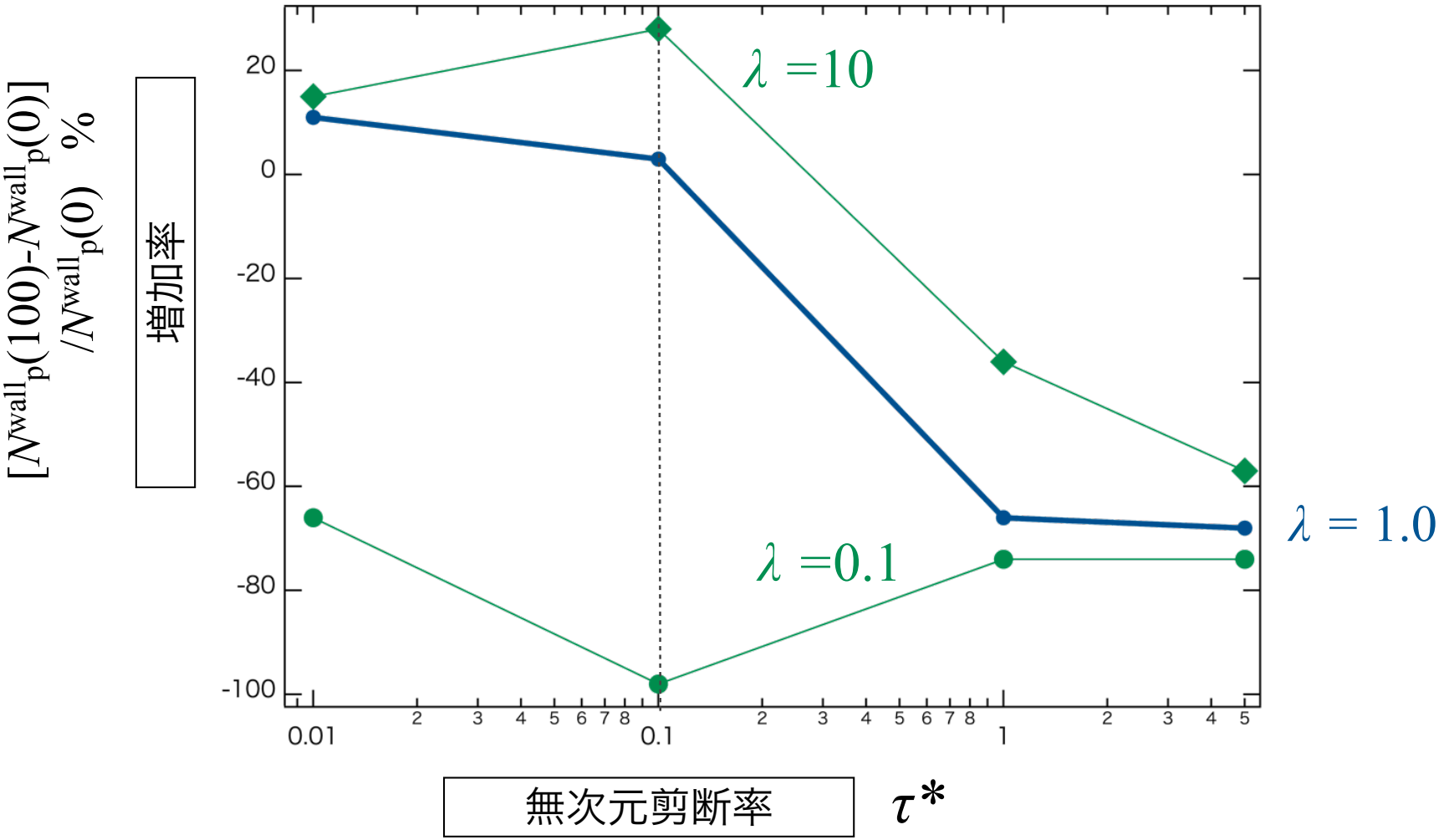
- 調べる範囲 -



基板-粒子間の付着力を調節してみる

結果（SCEJ88）

- 基板上粒子数 @ $\varepsilon = 100$ -

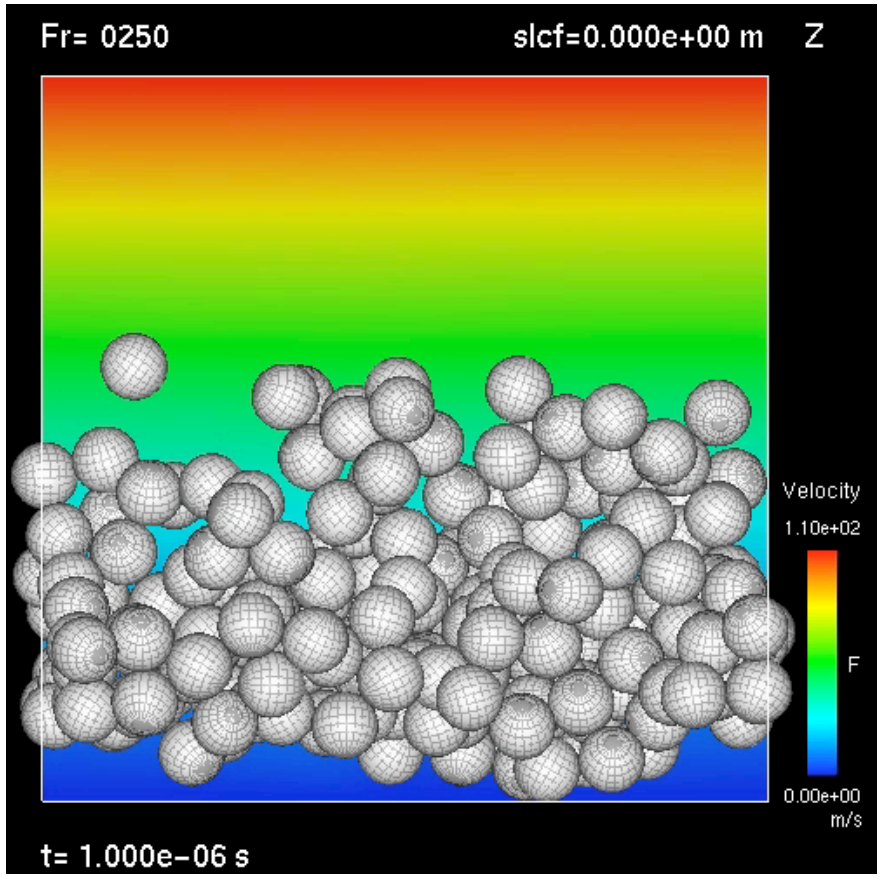


弱い基板-粒子付着力→除去へ進む

除去の様子

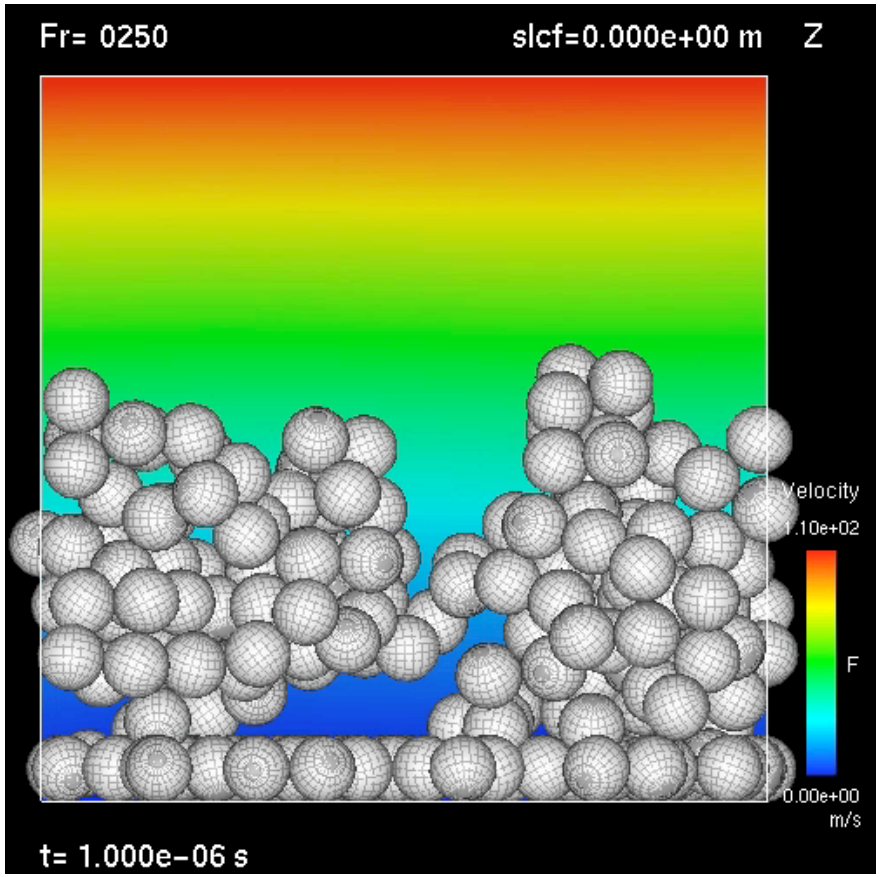
- 動画 $\tau^* = 0.1$ -

$\lambda = 0.1$



基板-粒子付着力:　弱

$\lambda = 10$



基板-粒子付着力:　強

提案と将来

[提案] 効率的な除去の考案につながる

[将来] 除去効率を付着量と投入仕事で計算

効率的な剥離シナリオの案

- 凝集体を軟らかい凝集塊として維持
  - 摩擦を付与，解砕せん断応力辺りで凝集塊を維持
  - 流体力で凝集塊を移動させる
- 基板-粒子間の付着力を下げる
  - 粒子の基板再付着を防ぐ