

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 15 日現在

機関番号：10103

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009～2011

課題番号：21560161

研究課題名（和文）Shear-thinning 性を有する粘弾性流体中における気泡運動の数値解析

研究課題名（英文）Numerical analysis of the dynamic motion of a bubble rising through shear-thinning viscoelastic fluids

研究代表者

太田 光浩 (OHTA MITSUHIRO)

室蘭工業大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：00281866

研究成果の概要（和文）：

粘弾性流体に対する Chilcott-Rallison (FENE-CR) モデルと Shear-thinning 性に対する Carreau モデルを融合したハイブリッド・モデルを構築し、非ニュートン流体気液二相流れに対する三次元数値解析コードを開発する。粘弾性流体系での気泡・液滴の上昇運動および粘弾性流体系剪断場における液滴の変形・分裂現象の解析を行った。解析結果より Shear-thinning 効果と弾性効果の両非ニュートン効果が気泡・液滴運動に及ぼす影響が明らかにされた。

研究成果の概要（英文）：

A numerical method with a new hybrid model which combines the Carreau model for treating shear-thinning properties with the FENE-CR model for treating elastic properties was established for computing non-Newtonian gas-liquid flows. The motion of a bubble or drop rising in shear-thinning viscoelastic fluids and drop deformation and breakup in shear-thinning viscoelastic shear flows were computed using the established method. Numerical results revealed that both elastic and shear-thinning properties had synergistic effects on the bubble or drop motion.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2010 年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2011 年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：流体工学，非ニュートン流体力学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：Shear-thinning 特性，粘弾性特性，数値解析，気泡運動

1. 研究開始当初の背景

複雑特性を有する高分子流体(非ニュートン流体)の気液/液々二相流れの評価は工学的に重要である。非ニュートン流体系では局所的な粘度・応力場の状態把握・評価が現象解明の鍵となるが、実験的評価が困難であり、数値解析による現象解明が有効とな

る。高分子流体を代表とする非ニュートン流体の複雑特性の本質は「Shear-thinning 性」と「粘弾性」に分類できる。Shear-thinning 性には Carreau モデルが優れた粘度構成モデルとして知られ、粘弾性モデルとしては FENE dumbbell モデルが広く使われてきた。しかし、Carreau モデルは粘度モデルであるために粘

弾性特性を評価できず、また FENE モデルは、粘度一定とした粘弾性モデルであるため Shear-thinning 特性を評価できない。多くの非ニュートン流体は、〈Shear-thinning 性〉と〈粘弾性〉の両特性を持ち合わせており、実在系に対して厳密評価をより正確に行うためには新しい方法論が必要となる。

2. 研究の目的

粘弾性流体モデルとして、FENE モデルの一つである Chilcott-Rallison (FENE-CR) モデルを採用し、FENE-CR モデルに粘度変化に対する Carreau モデルを組み込んだハイブリッド・モデルを構築する。粘度減少を考慮した粘弾性モデルも提案されているが、粘度現象に関しては、Carreau モデルを用いて議論される場合が多い。例えば Carreau (Cu) 数を用いて現象を整理するなどがあり、これらの実状を考慮してハイブリッド・モデルを検討する。ハイブリッド・モデルを用いて Shear-thinning 特性を有する粘弾性流体中での工学的に重要な気泡・液滴運動ダイナミクスを三次元数値解析により詳細説明を試みる。局所粘度効果と局所粘弾性効果の相乗効果が気泡・液滴運動ダイナミクスに及ぼす役割を明白する。運動過程として、上昇運動過程ならびに剪断場における変形・分裂挙動を対象とする。

3. 研究の方法

ハイブリッド・モデルの構築のためのアイデアとして、まず FENE モデルを考える。FENE モデルでは、ニュートン流体溶媒中にバネで結ばれた高分子が分散していると考えられる。溶液の粘度 η_L は、溶媒の粘度 η_S と高分子の粘度寄与 η_P との和 ($\eta_L = \eta_S + \eta_P$) で表現される。なお、 $\eta_P = c\eta_S$ の関係があり、 c は高分子濃度に関するパラメータである。Shear-thinning 性は高分子の寄与に起因するので、本研究では $\eta_P (= c\eta_S)$ に Carreau モデル特性を持たせる。つまり、パラメータ c が剪断速度に応じて変化するとする。この考えにより Shear-thinning 性に関しての Carreau モデルと粘弾性特性に対する FENE モデルを組み合わせた方法論、すなわち Shear-thinning 性を考慮した粘弾性応力項を持った運動方程式 (Navier-Stokes 式) を構築する。なお、本研究では、FENE モデルとして、非線形バネ特性を持った FENE-CR モデルを用いた。気液/液々界面の数値的追跡法には、Sharp Interface Coupled Level Set/Volume of Fluid (Sharp Interface CLSVOF) 法を用いる。これらをベースとして Shear-thinning 特性を有する粘弾性流体中での気泡・液滴運動ダイナミクスの数値解析評価を行う。具体的には、以下の支配方程式を解く。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\eta_P f(\mathbf{A})}{\lambda} \mathbf{A} \right) + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (2\eta \mathbf{D}) - \frac{\sigma \kappa}{\rho} \nabla H + \mathbf{g} \quad (2)$$

(1) 式は連続の式、(2) 式は運動方程式である。なお、式中の変数は、 \mathbf{u} : 速度場、 t : 時間、 p : 圧力、 \mathbf{D} : 変形速度テンソル、 ρ : 密度、 η : 粘度、 η_P : ポリマーの粘度への寄与、 σ : 界面張力、 κ : 曲率、 \mathbf{g} : 重力加速度、 λ : 緩和時間である。密度 (ρ) と粘度 (η) は、 $\rho = \rho_L H + \rho_G (1-H)$ 、 $\eta = \eta_S H + \eta_G (1-H)$ 、 $\eta_P = c\eta_S H$ で定義される。添え字の "G", "L", "S" と "P" は、それぞれ「気相」、「液相」、「溶媒」、「ポリマー」。 H は、Heaviside 関数であり、 ϕ (Level-set 関数) ≥ 0 で $H = 1$ 、 $\phi < 0$ で $H = 0$ である。 \mathbf{A} はポリマー配位テンソルで、 \mathbf{A} の時間発展方程式は次式となる。

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} - \frac{f(\mathbf{A})}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \quad (3)$$

上式で、 $f(\mathbf{A}) (= L^2 / (L^2 - \text{tr}(\mathbf{A})))$ は、バネモデルであり、 L はバネの伸長パラメータである。先に述べたように η_P に Carreau モデルの粘度減少の寄与を導入する。すなわち、 η_P は次式となる。

$$\eta_P = \eta_{P0} \left[1 + (\alpha \cdot \dot{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2} \quad (4)$$

ここで、 α と n は Carreau モデル・パラメータ、 $\dot{\gamma}$ は剪断速度である。 $\eta_{P0} + \eta_S$ がゼロ剪断速度粘度 (η_0) に対応する。

界面の数値的追跡法に関して、CLSVOF 法 (VOF (F) 関数および LS (ϕ) 関数) の時間発展方程式は次式となる。

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} F) = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = 0 \quad (5)$$

これらを二次精度の解析スキームで解く。

4. 研究成果

(1) 気泡の上昇運動ダイナミクス

ハイブリッド・モデルを組み入れた三次元数値解析コードを用いて、粘弾性流体系での気泡上昇運動を広範囲の物理条件下で調べた。小気泡 (低 Eötvös 数条件) から大気泡 (高 Eu 数条件) までを対象とした。解析では、 $4d$ (x 方向) $\times 4d$ (y 方向) $\times 24d$ (z 方向) (d : 気泡径) の計算領域を設定し、 $t = 0$ において解析領域下部に静止球形気泡を設定した。 $t > 0$ で自由上昇運動を追跡した。物性値は、 $\eta_{P0} = 0.999$ Pa·s、 $\eta_S = 0.001$ Pa·s、 $\rho_L/\rho_G = 833$ 、 $\eta_L/\eta_G = 55000$ として解析を行った。Morton 数 ($= g\eta_0^4(\rho_L - \rho_G)/\rho_L^2\sigma^3$) の点からは、 $M = 78$ である。

図 1 および図 2 に解析結果を示す。図 1 は、 Eu (Eötvös 数、 $= gd^2(\rho_L - \rho_G)/\sigma = 19.6$ 、図 2

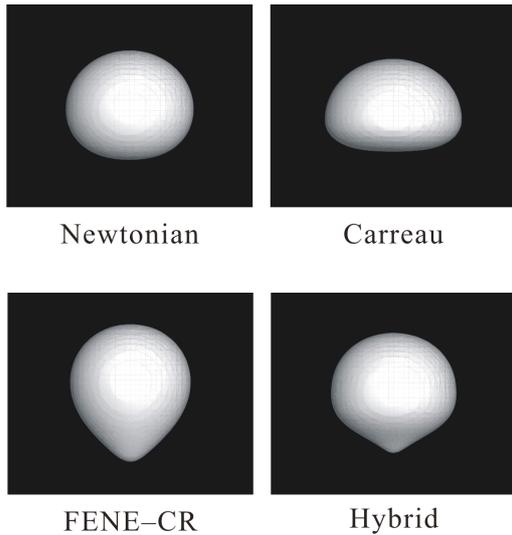


図1 気泡運動の解析結果
($M = 78, Eo = 19.6$)

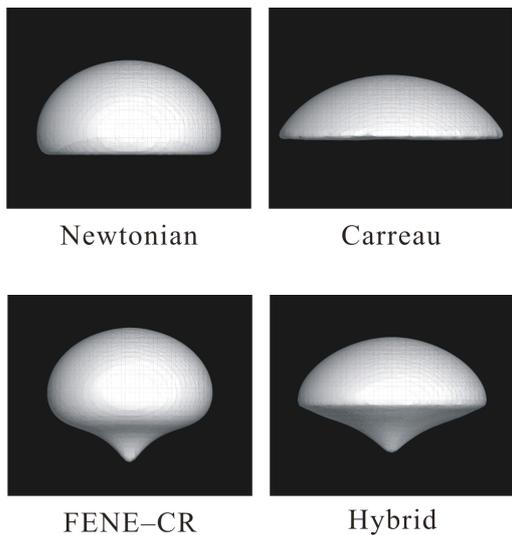


図2 気泡運動の解析結果
($M = 78, Eo = 176$)

は、 $Eo = 176$ の条件下での解析結果である。Carreau モデル・パラメータとして、 $\alpha = 1$ s, $n = 0.5$ あるいは 1.0 , FENE-CR モデル・パラメータとして、 $L = 10.0$, Deborah 数の点から $De (= \lambda V/d, V: \text{気泡上昇速度}) = 0.0$ あるいは 5.0 を設定した。図には、それぞれ 4 種類の解析結果を示した。すなわち、(1) ニュートン流体 ($n = 1.0, De = 0.0$), (2) Carreau モデル流体 ($n = 0.5, De = 0.0$), (3) FENE-CR モデル流体 ($n = 1.0, De = 5.0$), (4) ハイブリッド・モデル流体 ($n = 0.5, De = 0.0$) である。結果から明らかな様に、気泡形状はモデル・パラメータに非常に敏感に変化することが

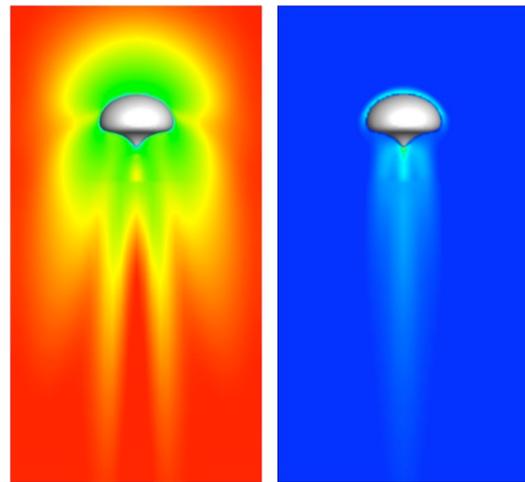
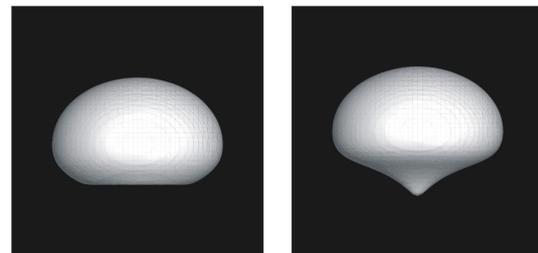
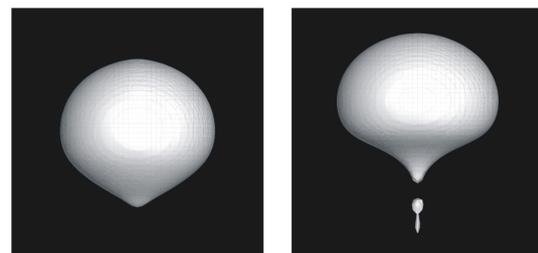


図3 気泡周りの粘度分布と弾性応力分布
($M = 78, Eo = 176, n = 0.8, De = 5.0$)
左：粘度分布 右：弾性応力



$L = 2.5$ $L = 10.0$

(a) 気泡運動



$L = 2.5$ $L = 10.0$

(b) 液滴運動

図4 気泡運動と液滴運動の比較
($M = 78, Eo = 176, n = 0.8, De = 1.0$)

分かる。Carreau モデル流体の場合、粘度減少効果によって、ニュートン流体系気泡より大きく変形しているのが分かる。この特徴は、 $Eo = 176$ の場合により顕著に見られる。弾性効果が出現する場合 ($De = 5.0$)、気泡下部に Cusp 形状が形成されるのが分かる。これは、

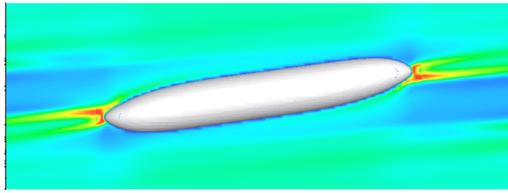


図5 剪断場における液滴変形の解析結果
($Ca = 0.15$, $Re = 12.0$, $\lambda = 1.0$ s)

気泡下部に弾性応力が働くためである。FENE-CR モデル流体は、ニュートン流体系気泡をベースとして Cusp 形状が形成されているが、ハイブリッド・モデル流体では、Carreau モデル流体をベースとして Cusp 形状が形成されている。すなわち、ハイブリッド・モデル流体は、Shear-thinning 効果と弾性効果の相乗効果を上手く再現している。

図3に気泡周りの粘度分布および弾性応力分布を示す。左が粘度分布、右が弾性応力分布である。粘度分布では、赤領域が高粘性域(ゼロ剪断速度粘度)、緑領域が粘度減少域に対応している。弾性応力分布は、赤領域が高弾性域、青領域は弾性応力がない領域に対応している。粘度分布は、気泡周りで大きく減少し、下流方向に広がっているのが分かる。弾性応力分布に関しては、図からは見にくいですが、Cusp 先端のみに高弾性応力が掛かっている。したがって、粘度減少効果により気泡形状は変更し、弾性応力によって Cusp 形成していることがこれらの結果より裏付けられる。また、ハイブリッド・モデルは、両非ニュートン効果を適切に表現できることを確認できる。

(2) 液滴の上昇運動ダイナミクス

図4にハイブリッド・モデル流体中での気泡運動と液滴運動を比較した結果を示す。液滴運動の場合は、密度比を 0.90 と設定し、他の物性条件は、図1および2で示した気泡運動解析と同じ条件で行い、非ニュートン流体パラメータは、 $n = 0.8$ および $De = 1.0$ とした。各々、 $L = 2.5$ および 10.0 の解析結果を示した。バネの伸長パラメータが大きいと弾性効果が大きく作用することが明らかであるが、気泡と液滴を比べた場合、液滴の方が弾性効果の影響を大きく受けることが分かる。これは、密度差が小さい液体間での運動であるので、ある程度、予測できる結果ではあるが、本解析結果により具体的に示された。液滴の方が、気泡より弾性効果の影響をより強く受ける。

(3) 液滴の剪断変形ダイナミクス

最後に粘弾性流体の剪断場におけるニュートン流体液滴の変形挙動の解析結果を示

す。この解析では、まず静止液滴を考え、密度比を 1.0 と設定した。本系は、予想以上に解析時間が掛かること、また最終的な液滴の変形・分裂挙動が予測つかないために解析領域の大きさを試行錯誤で設定をする必要があったために、最終目標までの結果を得られなかった。しかし、今後、時間を掛ければ十分な結果を得られる手応えは得た。図5は、 Ca (Capillary 数, $= \eta_0 \Gamma d / \sigma$) = 0.15, Re ($= \rho_l \Gamma d^2 / \eta_0$) = 12.0, $\lambda = 1.0$ s の条件で解析を行った FENE-CR モデル中での液滴変形の様子である。図において、上壁が右方向に速度 V で動き、下壁は逆に左方向に速度 V で動いている。図5は、図3と同様に液滴周りの弾性応力分布を示している。液滴先端に弾性応力が集中して作用し、弾性応力の集中部分は少し尖った液滴形状になっているのが分かる。さらに時間が経つとより変形した液滴となった。しかし、図から分かるように、図5の解析系は、液滴変形を追跡するには小さく、より大きな解析系を再設定した上での解析が必要となる。ハイブリッド・モデルを含めた解析は継続して行っており、今後、十分な成果が得られる見通しである。

5. 主な発表論文等

[学会発表] (計 10 件)

- ① Tomohiro Furukawa, Mitsuhiro Ohta, Yutaka Yoshida, Mark Sussman, Three-dimensional Simulations of a Drop Rising in Immiscible Polymeric Liquids, Proceedings of the 1st International Symposium on Multiscale Multiphase Process Engineering (MMPE), Kanazawa, Japan, October 2011.
- ② Mitsuhiro Ohta, Tomohiro Furukawa, Yutaka Yoshida, Mark Sussman, Three-dimensional Numerical Simulations of a Bubble Rising in Polymeric Fluids, The 8th European Congress of Chemical Engineering, Berlin, Germany, September 2011.
- ③ 古川智浩, 木村幸香, 太田光浩, 吉田 豊, Mark Sussman, Carreau モデル流体中を上昇する気泡運動に対する有効 Reynolds 数の考察, 化学工学会第 43 回秋季大会, 2011 年 9 月.
- ④ 古川智浩, 太田光浩, 吉田 豊, 粘度変化を伴う粘弾性流体中を上昇する気泡運動の三次元数値解析, 資源・素材学会北海道支部 平成 23 年度春季講演会, 2011 年 6 月.
- ⑤ Tomohiro Furukawa, Mitsuhiro Ohta, Yutaka Yoshida, Mark Sussman, Numerical Simulations of the Motion of a Bubble Rising in Polymeric Liquids, Joint Seminar on Environmental Science and Disaster Mitigation Research 2011, Muroran, Japan, March 2011.

- ⑥古川智浩, 太田光浩, 吉田 豊, FENE-CRモデル流体中を上昇する気泡運動の三次元数値解析, 第20回化学工学・粉体工学研究発表会, 2011年2月.
- ⑦Tomohiro Furukawa, Mitsuhiro Ohta, Yutaka Yoshida, Mark Sussman, Three-dimensional Simulations of a Bubble Rising in Shear-thinning Viscoelastic Fluids, International Workshop on Process Intensification 2010, Fukuoka, Japan, December 2010.
- ⑧Mitsuhiro Ohta, Tomohiro Furukawa, Yutaka Yoshida, Mark Sussman, Three-dimensional Simulations of a Bubble Rising Through Shear-thinning Viscoelastic Fluids, The 13th Asia Pacific Confederation of Chemical Engineering (APCCHE) Congress, Taipei, Taiwan, October 2010.
- ⑨古川智浩, 太田光浩, 吉田 豊, Mark Sussman, FENE-Carreau 結合モデルによる粘弾性流体中を上昇する気泡運動の数値解析, 化学工学会第42回秋季大会, 2010年9月.
- ⑩Tomohiro Furukawa, Mitsuhiro Ohta, Yutaka Yoshida, Mark Sussman, Three-dimensional Computation of a Bubble Rising in a Shear-thinning Viscoelastic Fluid, The 5th Pacific Rim Conference on Rheology, Sapporo, Japan, August 2010.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

太田 光浩 (OHTA MITSUHIRO)

室蘭工業大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 00281866