

平成 21 年 6 月 17 日現在

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2007～2008

課題番号：19560155

研究課題名（和文）粘弾性流体中における気泡ダイナミクスの三次元数値解析

研究課題名（英文）Three-dimensional simulations of the dynamic motion of single bubbles in viscoelastic fluids

研究代表者

太田 光浩 (OHTA MITSUHIRO)

室蘭工業大学・工学部・准教授

研究者番号：00281866

研究成果の概要:本研究では,粘弾性流体中を上昇する気泡運動が攪拌を主たるターゲットとして,三次元数値解析から気泡運動が攪拌を考察した.FENE-CRモデルにより粘弾性流体をモデル化し,粘弾性特性(モデル・パラメータ)が気泡運動へ及ぼす影響を調べた.粘弾性流体中における気泡上昇運動の特徴である Cusp 形状を有する気泡を三次元解析により再現することに成功した.弾性特性として緩和係数 λ (Deborah 数)およびタンベル間の伸長パラメータ L が重要な因子であることを明確にした.変形が小さい気泡では, λ と L の値が比較的小さくても弾性効果が顕著に現れ,一方,変形が大きい気泡では, λ と L の値がある程度大きくないと弾性効果は現れなかった.また,密度比の影響を調べるために,液滴上昇運動と気泡上昇運動の相違を検討した.液滴の方が気泡に比べて弾性効果の影響をより大きく受けることを明らかにした.また,気泡・液滴の変形・分裂が攪拌の基本的なケースとして,粘弾性流体中で静止している液滴(密度比および粘度比が 1)の剪断変形・分裂が攪拌に対して三次元数値解析を行った.剪断方向に沿って液滴の先端付近で粘弾性応力が強く作用し,変形・分裂が攪拌に大きく影響を与えていることが分かった.

交付額

(金額単位:円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	700,000	210,000	910,000
2008 年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,500,000	450,000	1,950,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体力学

キーワード：非ニュートン流, 混相流

1. 研究開始当初の背景

化学工業プロセスでの気液・液々接触反応装置,高分子材料成形・加工プロセス,食品工業等では液相中における気泡・液滴運動の解明が重要となる.一般的にこれらのプロセスで扱う流体は,高分子溶液に代表される複雑な特性を有した非ニュートン流体である.非ニュートン流体系では局所的な粘度・応力場の状態を把握した評価が現

象解明の鍵となるが,局所非ニュートン流体特性を実験的に評価することは困難である.したがって,数値解析による現象解明が,非常に有効となる.近年,ニュートン流体系での気泡運動の数値解析は大きく進展しているが,非ニュートン流体系に対する試みは,まだ非常に少ない.特に,三次元数値解析による非ニュートン流体系での気泡・液滴が攪拌の評価は,ほとんど報告

されていない。

2. 研究の目的

本研究では粘弾性流体中における気泡運動を三次元数値解析により再現し、気泡運動を考察する。粘弾性流体中における気泡上昇運動および剪断場における気泡の変形・分裂現象を検討対象とする。粘弾性流体モデルとして Chilcott-Rallison (FENE-CR) モデルを採用する。FENE-CR モデルは、ダンベル・モデルの一つである。数値的に局所弾性効果を明白にすることで気泡運動がイテックスへの弾性効果の影響・役割を解明する。また、工学的に重要なパラメータにより気泡運動がイテックスを整理し考察する。

3. 研究の方法

本研究では、気液界面の時間的変化を数値的に追跡する手法として Coupled Level-Set/Volume-of-Fluid (CLSVOF) 法を用いる。また、気液界面の境界条件の扱いに Sharp Interface 法を適用する。これにより、本研究では気液界面での急激な密度および粘度変化を厳密に考慮して解析を行う。本研究の数値解析での支配方程式は、1 流体モデルに基づいた連続の式および運動方程式となる。

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

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

上式において \mathbf{u} は速度、 p は圧力、 ρ は密度、 η は粘度、 η_p はポリマーの粘度への寄与、 λ は緩和時間、 \mathbf{A} はポリマー配位テンソル、 \mathbf{D} は変形速度テンソル、 $f(\mathbf{A})$ はダンベル間のスプリング・モデル σ は界面張力、 κ は曲率、 H は、Heaviside 関数、 \mathbf{g} は重力加速度である。 ρ と η は次式で定義される。

$$\rho = \rho_G(1-H) + \rho_L H \quad (3)$$

$$\eta = \eta_G(1-H) + \eta_S H, \quad \eta_p = c\eta_S H \quad (4)$$

添え字の G, L, S, P は、気相、液相、溶媒、ポリマーを表す。 c は、ポリマー(ダンベル)濃度に関連したパラメータであり、ポリマーの粘性への寄与は、 $\eta_p = c\eta_S$ と表現される。したがって、溶液の粘度は $\eta_L = \eta_S + \eta_p = \eta_S + c\eta_S = (1+c)\eta_S$ となる。また、Heaviside 関数は、次式で定義される。

$$H = \begin{cases} 1 & \phi \geq 0 \\ 0 & \phi < 0 \end{cases} \quad (5)$$

\mathbf{A} の時間発展方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} - \frac{f(\mathbf{A})}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \quad (6)$$

ダンベル間のスプリング・モデルである $f(\mathbf{A})$ は、次

式で与えられる。

$$f(\mathbf{A}) = \frac{1}{1 - \text{tr}(\mathbf{A})/L^2} \quad (7)$$

ここで、 L はダンベルの伸長パラメータで、平衡ダンベル長さと最大ダンベル長さの比を表す。

CLSVOF 法の移流方程式は、次式となる。

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) F = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \phi = 0 \quad (8)$$

F は VOF 関数、 ϕ は Level set 関数である。これらの支配方程式を有限差分法による二次精度の計算システムで解析を行う。本研究での気液物性条件は、 $\rho_L/\rho_G = 845$, $\eta_L/\eta_G = 28000$, Morton (M) 数 ($= g(\rho_L - \rho_G)\eta_L^4/\rho_L^2\sigma^3$) = 78, Eötvös (Eu) 数 ($= g(\rho_L - \rho_G)d^2/\sigma$, d : 気泡径) = 20 および 176 である。

4. 研究成果

図 1 および 2 に数値解析結果を示す。図 1 は $Eu = 20$, $M = 78$ の条件、図 2 は $Eu = 176$, $M = 78$ の条件に対する結果である。FENE-CR モデル・パラメータに関しては $c = 1.0$ として λ と L の影響を調べた。 λ の影響は Deborah (De) 数 ($= \lambda V/d$, V : 気泡上昇速度) に換算されている。図には、ニュートン流体系の結果 ($De = 0$) も比較のために示した。また、側面(左)および下方(右)から見た結果が 1 つのセットとなっている。 $Eu = 20$ の場合(図 1)、ニュートン流体系では気泡は底部がフラットな形状をしているが、粘弾性流体系では全条件に対して気泡底部で Cusp が形成されていることが分かる。すなわち、モデル・パラメータの値が $L = 2.5$, $De = 1.1$ 程度で気泡運動に影響を与える弾性効果が発現することが分かる。また、モデル・パラメータ条件の違いによる大きな差は見られず、 $Eu = 20$ の条件では、 $L = 2.5$, $De = 1.1$ 程度で弾性効果は、飽和していると言える。

$Eu = 176$ の場合(図 2)、ニュートン流体条件では、気泡底部が大きく凹んだ形状を有した変形気泡となる。一方で、粘弾性流体系では、Cusp 形状とならない気泡と Cusp 形状となる気泡が存在することが分かる。 $L = 2.5$ の条件では、 De 数が大きくなっても気泡形状は、ほぼ同じである。また、ニュートン流体系での気泡径状とも大きく変わらない。しかし、 $L = 10.0$ の条件では、 $De = 1.0$ でも気泡底部の凹みがかかなり浅くなり、 $De = 5.2$ では、気泡底部に Cusp 形状が発現する。つまり、ニュートン流体系で大きな変形形状を有する気泡の場合、弾性パラメータの L と De 数の両方がある程度の大きさを有しない限り、顕著な弾性特性は出現しないと言える。

気泡運動と液滴運動の相違を調べるために、密度比だけを変化させた解析を行った。図 3 は、図 2 での気泡解析と同条件 ($Eu = 176$, $M = 78$, $c = 1$) で、密度比(連続相/分散相)のみを 1.1 とした場合の解析結果である。気泡の場合と同様に、ニュートン流体条件では、底部が大

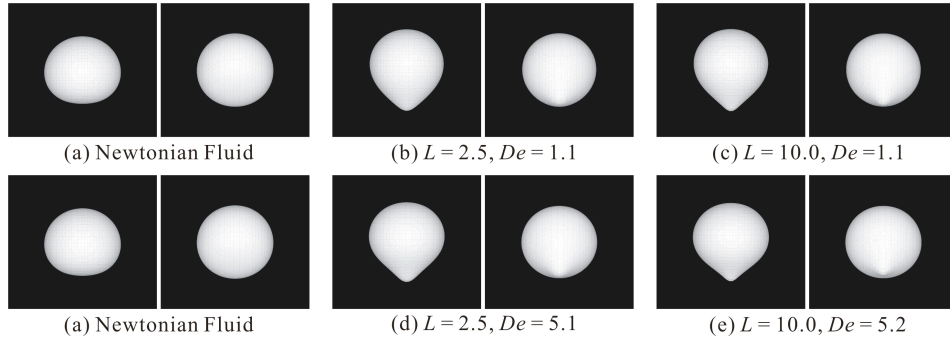


図1 $Eo = 20$, $M = 78$ の条件における数値解析結果.

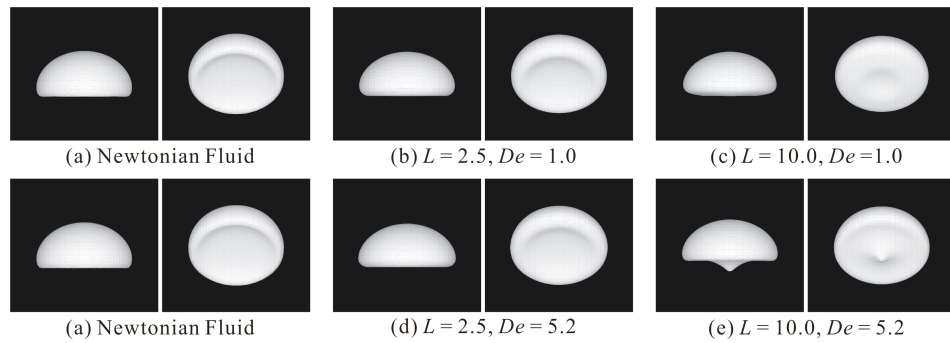


図2 $Eo = 176$, $M = 78$ の条件における気泡運動.

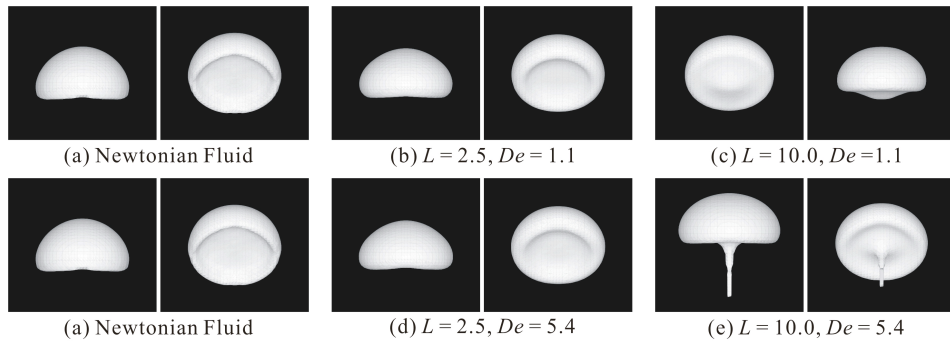


図3 $Eo = 176$, $M = 78$ の条件における液滴運動.

大きく凹んだ形状となった変形液滴となっている。ただし、ニュートン流体系での気泡とはよく似た形状ではあるが、完全に一致しておらず、同 Eo 数および M 数条件でも密度比の影響があることが分かる。全体としては、気泡条件での解析と同じ傾向が観察できる。 $L = 2.5$ の条件では、 De 数が大きくなっても液滴形状は、同じであり、また、ニュートン流体条件での液滴径状とも大きく変わらない。 $L = 10.0$ の条件では、弾性効果が顕著に現れ、 $De = 1.1$ でも液滴底部は若干出っ張った形状となっている。また、 $De = 5.4$ では、液滴底部に Cusp 形状が

出現するが、大きく伸びて分裂に至っている。気泡条件での解析と同じ傾向にはあるが、同じ弾性パラメータであるならば密度比が小さい液滴の方がより弾性効果を受けやすいと言える。

Cusp 形成時の弾性効果を検討するために $Eo = 176$, $M = 78$, $L = 10.0$, $De = 5.2$ の条件下での $\text{tr}(\mathbf{A})$ 分布を図4に示す。 $\text{tr}(\mathbf{A})$ 分布は、弾性応力の指標となる。 $L = 10.0$ の場合、理論的に取り得る $\text{tr}(\mathbf{A})$ の最大値は 100.0 となる。図4は、単位テンソル ($\text{tr}(\mathbf{A}) = 3.0$) から理論的最大値の $\text{tr}(\mathbf{A}) = 100.0$ の範囲で描かれている。この条件での $\text{tr}(\mathbf{A})$ の最大値は $\text{tr}(\mathbf{A}) = 89.4$ で

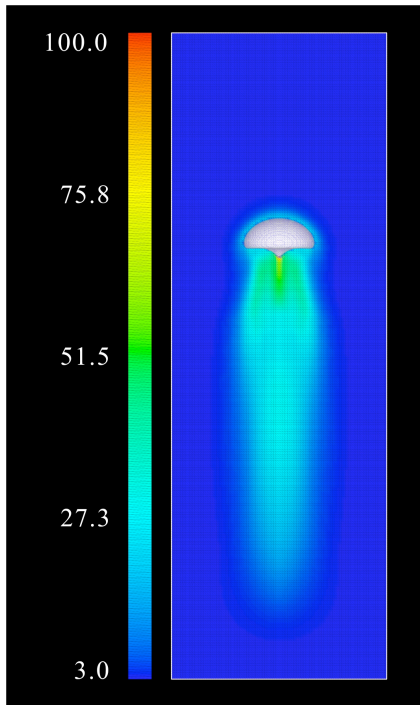


図4 気泡上昇運動時の $\text{tr}(\mathbf{A})$ 分布.
($Eo = 176$, $M = 78$, $L = 10.0$, $De = 5.2$)

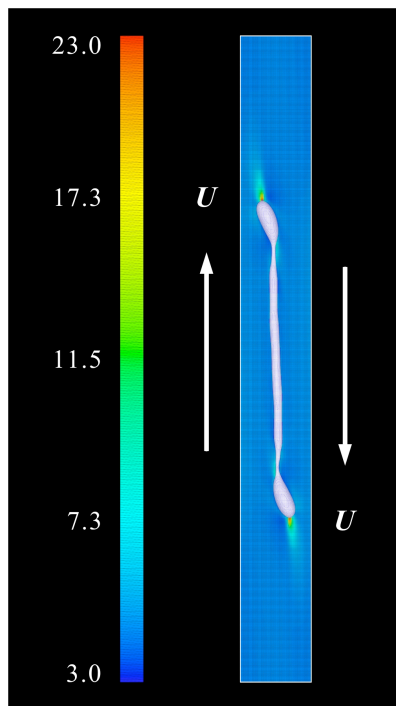


図5 液滴の変形・分裂運動時の $\text{tr}(\mathbf{A})$ 分布.
($Re = 20$, $Ca = 0.3$, $L = \infty$, $De = 1.0$)

あった。図からは少し分かり難いが、この最大値は、Cusp 先端の僅かな領域のみに分布している。つまりこれは、Cusp 先端のみに非常

に大きな弾性応力が作用していることを意味し、これが気泡底部での Cusp 形状を形成させる要因となる。図4よりそのことが明白に分かる。

「変形・分裂がイミクス」の最も基礎的な問題として、まず粘弾性流体中におかれた静止ニュートン流体液滴(密度比および粘度比が1)の剪断変形・分裂過程の三次元数値解析を行った。解析では、高さ H で一辺が W の正方断面を有する三次元直方体の中央に初期条件として球形液滴を置き、時間 $t = 0$ から左右の壁を速度 U で互いに逆方向に動かした(図5参照)。液滴に作用する剪断速度 $\dot{\gamma}$ は、 $\dot{\gamma} = 2U/W$ となる。図5は、液滴の変形・分裂過程の解析結果(側面図)で $\text{tr}(\mathbf{A})$ 分布と併せて示した。 $\text{tr}(\mathbf{A})$ 分布は、単位テンソル($\text{tr}(\mathbf{A}) = 3.0$)から解析での最大値の $\text{tr}(\mathbf{A}) = 23.0$ の範囲で描かれている。解析条件は、 $Re = 20$, Ca (Capillary 数) $= 0.3$ であり、モデル・パラメータは、 $L = \infty$, $De = 1.0$, $c = 1.0$ である。ここで、剪断流中での Re 数、 Ca 数、 De 数は、 $Re = \rho_L \dot{\gamma} d^2 / \eta_L$, $Ca = \eta_L \dot{\gamma} d / \sigma$, $De = \lambda \dot{\gamma}$ で定義される。また、 $L = \infty$ の設定により、FENE-CR モデルは、Oldroyd-B モデルと等価となる。図から明らかのように液滴は剪断流れにより大きく引き伸ばされた状態に変形しているのが分かる。両端は膨らみを持った液滴状となっており、時間が進むと両端の液滴が分裂し、残りの部分は小さく分断してテライト液滴となった。 $\text{tr}(\mathbf{A})$ 分布に着目すると、液滴両端部分が $\text{tr}(\mathbf{A})$ の最大値となっている。ニュートン流体系では剪断流が変形・分裂現象に大きく影響を与えているが、粘弾性流体系ではそれに加え弾性応力も変形・分裂現象に大きく関与していることが分かる。

本研究では、粘弾性 FENE-CR モデル流体中を上昇する気泡・液滴運動がイミクスおよび粘弾性流体系での剪断流中における液滴変形・分裂がイミクスを三次元数値解析により検討した。粘弾性流体系では、弾性効果を明白にした上で現象を考察する必要があり、実際に数値解析が有効な手段となることを示した。また、粘弾性流体中での気泡・液滴がイミクスに弾性効果が非常に重要な役割を果たすことを明白に示した。モデル・パラメータが気泡・液滴運動へ影響を及ぼす大きさについても具体的に示すことができた。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計2件)

- ① M. Ohta, K. Onodera, Y. Yoshida, M. Sussman, Three-Dimensional Numerical Simulations of a Rising Bubble in a Viscoelastic FENE-CR Model Fluids, AIP Conference Proceedings: Materials Physics and Applications, **1027**, 896-898 (2008). 査読有り
- ② M. Ohta, K. Onodera, Y. Yoshida, M.

Sussman, Three-Dimensional Simulations of the Dynamic Motion of Single Drops Rising in Viscoelastic FENE-CR Model Fluids, J. Chem. Eng. Japan, to be accepted. 査読有り

[学会発表] (計 2 件)

- ① M. Ohta, K. Onodera, Y. Yoshida, M. Sussman, Three-Dimensional Numerical Simulations of a Rising Bubble in a Viscoelastic FENE-CR Model Fluids, The 15th International Congress on Rheology, Monterey, USA, August 3-8, (2008).
- ② M. Ohta, K. Onodera, Y. Yoshida, M. Sussman, Numerical Analysis of the Motion of a Drop Rising in a Viscoelastic FENE-CR Model Fluid, International Workshop on Process Intensification 2008, Tokyo, Japan, October 15-18, (2008).

6. 研究組織

(1) 研究代表者

太田 光浩 (OHTA MITSUHIRO)

室蘭工業大学・工学部・准教授

研究者番号：00281866