

令和 4 年 6 月 7 日現在

機関番号：34412

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K04199

研究課題名(和文) ポピュレーションバランス方程式基盤のフロック形成流体の数値流動解析体系の構築

研究課題名(英文) Formulation of Numerical Flow Analysis System for Floc-Forming Fluids Based on Population Balance Equations

研究代表者

山本 剛宏 (Yamamoto, Takehiro)

大阪電気通信大学・工学部・教授

研究者番号：40252621

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：フロック形成流体の流動誘起構造を考慮した流動解析のために、フロックサイズ分布の時間変化をポピュレーションバランス方程式によって計算する解析モデルを開発した。フロックサイズ分布からフロック有効体積分率を求め、それを用いて、系の粘度と緩和時間をそれぞれ、Krieger-Doughertyモデルとべき乗則モデルで評価し、White-Metzner型の粘弾性構成モデルに取り込んだ。そして、本モデルはナノ繊維分散系のレオロジー特性を表現できることを示した。さらに、このモデルの複雑な流動場の解析への適用可能性を調べるために、有限要素法流動解析プログラムとの連成を行い、2次元合流流れの数値計算を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまで、フロック形成流体の流動誘起構造と粘弾性を考慮した数値解析モデルは存在しなかったが、本モデルの開発により、フロックサイズ分布を考慮した数値流動解析が可能となった。これにより、フロック形成流体を用いた成形過程における流動誘起構造の解析を行い、機能性への影響を考慮した製造過程のシミュレーションを行うなどの、より高度な流動解析の可能性が示された。

研究成果の概要(英文)：A computational model for the flow analysis considering the flow-induced structure of the floc-forming fluid was developed. In this model, temporal change in the floc size distribution was computed by the population balance equation of the floc size, and the effective volume fraction of flocs was obtained from the floc size distribution. The viscosity and relaxation time of the system were evaluated by the Krieger-Dougherty model and a power law model, respectively to introduce into the White-Metzner type viscoelastic constitutive model. The developed model successively expressed the rheological characteristics of the nanofiber suspension. Furthermore, in order to investigate the applicability of this model to the analysis of complex flow fields, numerical simulations of two-dimensional merging flows were performed using a flow analysis program in which the flow calculation with the finite element method and the present model were coupled.

研究分野：非ニュートン流体力学

キーワード：複雑流体 ポピュレーションバランス方程式 フロック 構成モデル 数値流体力学

1. 研究開始当初の背景

複雑流体の特異な流動現象・レオロジー特性の原因は、流動による流体内部構造の変化（流動誘起構造）にあり、流動メカニズムの解明には流動誘起構造の解析が本質的である。さらに、工学的応用のためには、流路内の複雑な流れ中の流動解析が必要である。したがって、流動誘起構造を考慮した流動解析に関する研究が進められてきた。高分子流体などについては、このような流動解析手法の研究が行われているが、ナノファイバー分散系のようなフロック形成流体の流動解析については、このようなアプローチのための体系が十分には研究されておらず、フロックサイズ分布の時間変化を考慮した流動解析のための構成モデルの開発が必要な状況であった。

2. 研究の目的

- (1) フロック形成流体の流動誘起構造として、フロックサイズ分布の時間変化を解析できる粘弾性モデルを開発する。
- (2) 開発したモデルのレオロジー特性に対するモデルパラメータの影響の検討を行い、モデルの適用可能性を示す。
- (3) 計算負荷を抑えた数値解析手法を提供することで、フロック形成流体を原料とする製品の開発において、従来は困難であったフロック挙動などの流動誘起構造を考慮した新規の製品デザイン手法やプロセス設計手法の創出へつなげる。

3. 研究の方法

複雑流体の流動誘起構造のモデリングには、個々の繊維や粒子の運動を考慮するマイクロなレベルから有効体積分率のみを考慮するマクロなレベルのものまで種々の解析レベルが存在するが、本研究では、流体内部構造に関する解析レベルを「フロックサイズ分布の解析」に設定し、フロックサイズ分布の時間変化を、物質収支を表すポピュレーションバランス方程 (PBE) によってシミュレーションする。そして、フロックサイズ分布から計算したフロック有効体積分率を用いて応力を計算し、それを介してマクロ流動計算とカップリングする。そして、計算負荷を抑えたフロック形成流体の数値流動解析の体系を構築する。

本研究では、フロックサイズ分布の時間変化を表現する PBE は次式のように表される。

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} k^{(a)}(i-j, j) n_{i-j} n_j - \sum_{j=1}^{\infty} k^{(a)}(i, j) n_i n_j - k^{(b)}(i) n_i + \sum_{j=i+1}^{\infty} \beta(i, j) k^{(b)}(j) n_j$$

ここで、 n_i は i 本のモノマーからなるフロックの単位体積あたりの個数である。右辺の第 1, 2 項はフロックの凝集を、第 3, 4 項は破壊を表す。フロックの凝集および破壊を表現するカーネル ($k^{(a)}, k^{(b)}$) には、ナノファイバー分散系に対して提案されたモデルを用いる。

フロックサイズ分布の計算結果からフロック有効体積分率を計算し、それを用いて、Krieger-Dougherty モデルから粘度を計算する。その粘度を White-Metzner モデルの粘度関数に取り入れ、さらに、White-Metzner モデルの弾性係数を有効体積分率の関数とすることで、緩和時間のフロック有効体積分率依存性を取り入れた。White-Metzner モデルから計算された応力テンソルを通じて、Cauchy の運動方程式とカップリングする。

本研究では、スタートアップせん断流れの計算を行い、レオロジー特性の評価を行った。さらに、流路内流れの解析への適用のために、有限要素法を用いた流動解析プログラムを作成し、流路内流れの計算を行った。ここでは、計算負荷の問題から、粘弾性モデルではなく、非ニュートン粘性モデルを用いて計算を行った。

4. 研究成果

(1) 一般化ニュートン流体モデルによる非ニュートン粘性の表現

粘度を Krieger-Dougherty モデルで表現し、PBE の計算結果から得られフロック有効体積分率を用いて粘度を計算することで、せん断粘度のシアニング性を表現できることを確認し、セルロースナノファイバー分散系のレオロジー特性を記述できることを示した (文献①参照)。

(2) 粘弾性モデルの提案

フロック形成流体のひとつであるセルロースナノファイバー分散系、フロックサイズ分布の効果を考慮した流動解析のための粘弾性構成モデルの開発を行った。フロックサイズ分布の時間変化を PBE で計算し、その結果を用いて、粘度のフロック有効体積分率依存性を Krieger-Dougherty モデルで表現し、この粘性モデルを White-Metzner 型の粘弾性構成方程式の粘度関数に取り込み、さらに、弾性係数関数にフロック有効体積分率の影響を取り入れることで、フロック形成流体の粘弾性モデルを構築した。

本モデルについて、スタートアップせん断流れの数値シミュレーションを行い、レオロジー特性の解析を行った。ここでは、弾性係数関数にフロック有効体積分率のべき乗則モデルを適用し、

弾性係数を通じて緩和時間のブロックサイズ分布依存性を取り入れたモデルと緩和時間を一定にしたモデルとで、せん断レオロジー特性を比較した。その結果、せん断速度一定のせん断スタートアップ流れの流動初期における第1法線応力差の成長挙動に違いが見られることが分かった（文献①・文献②参照）。

また、当初の研究計画では、configuration テンソルを用いた粘弾性モデルの開発を挙げていたが、これについては、モデル化方法を検討し、モデルの枠組みは概ね準備できた。しかし、計算負荷が非常に高く、複雑な流れ場の流動解析への適用は現時点では現実的でない判断し、更なる研究は行わなかった。

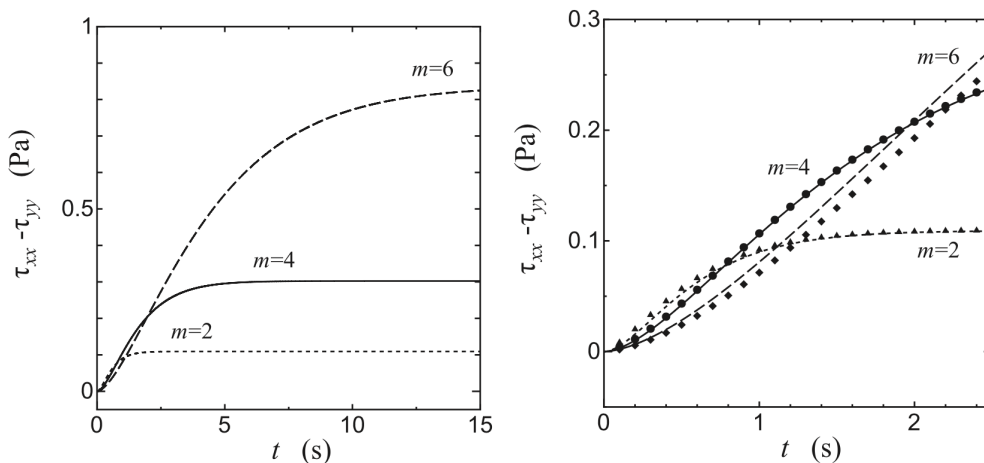


図 4.1 第1法線応力差の時間変化に対する弾性係数関数のべき指数 m の影響

(3) フラクタル次元の影響の解析

(2)のテーマで提案したモデルのパラメータであるフラクタル次元 d_f のレオロジー特性への影響を調べた。 d_f はブロック形状に関するパラメータで、ブロック質量とモノマー直径との間の関係を表すフラクタル次元である。スタートアップせん断流れの数値シミュレーションの結果から、 d_f が小さいほどブロックサイズは大きくなり、粘度のシアシニング性が強く現れ、第1法線応力差が大きくなることを明らかにした。そして、フラクタル次元を調整することでブロック成長現象を制御することが可能であることを示した（文献③参照）。

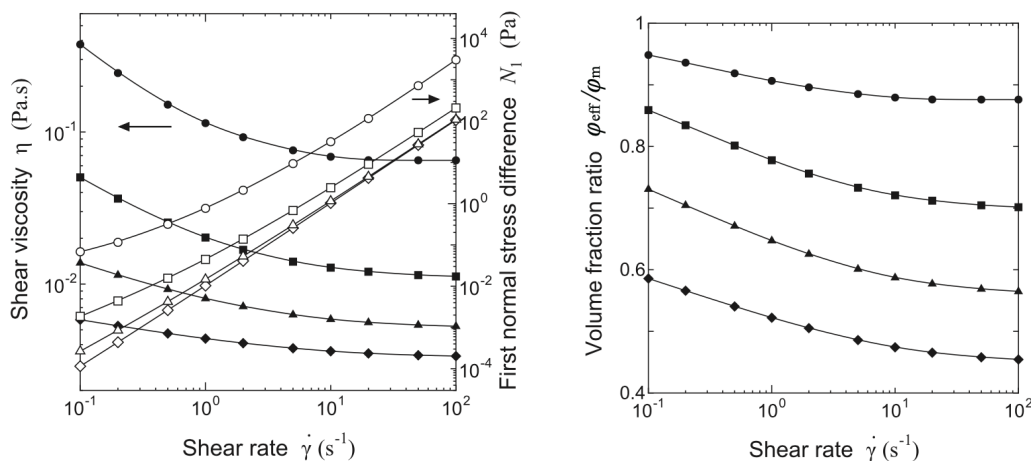


図 4.2 (左) せん断粘度と第1法線応力差のせん断速度依存性に対するフラクタル次元の影響、(右) 有効体積分率せん断速度依存性に対するフラクタル次元 d_f の影響： $d_f = 2.65$ (○●), 2.7 (□■), 2.75 (△▲), 2.8 (◇◆)

(4) 流路内流れへの適用

本研究では、ブロックサイズ分布の時間変化を考慮した流動解析を行うことを目的として実施された。そこで、PBE 基盤の構成モデルの流路内流れの解析への適用可能性を検討した。ここでは、有限要素法を用いた流動解析プログラムを作成し、2次元 T 字型合流流路内流れの計算を

行った。

流れ場の計算には、速度修正法を用いて、速度場と圧力場の分離解法を適用した。速度場と圧力場の近似のための有限要素には、三角形3節点線形要素を使用した。そして、計算負荷を考慮して、ブロック有効体積分率は要素内で一定とし、PBEを用いたブロックサイズ分布の計算は、各要素の重心位置で行った。また、応力場の計算には、粘弾性モデルではなく、非ニュートン粘性モデルを用いた。時間更新にはRunge-Kutta法を適用した。

図4.3に計算を行った流路の形状と境界条件を、図4.4に計算に使用した有限要素メッシュ分割を示す。流体は左右の入口から、それぞれ平均流速 U_1, U_2 で流入し、合流した後に下流側の出口より流出する。壁面ではすべりなしの条件を与え、出口では発達条件を与えた。構成モデルのパラメータとして、(1)~(3)のテーマで使用した、セルロースナノファイバー分散系を想定したモデルパラメータを使用した。

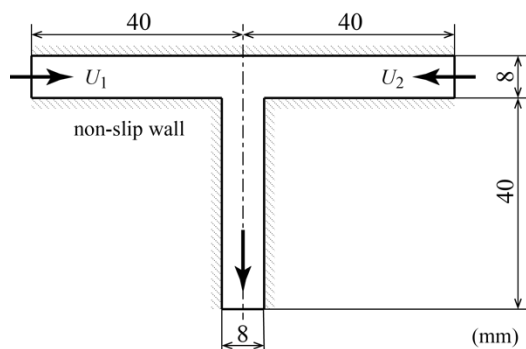


図 4.3 T型合流流路の概略図と境界条件

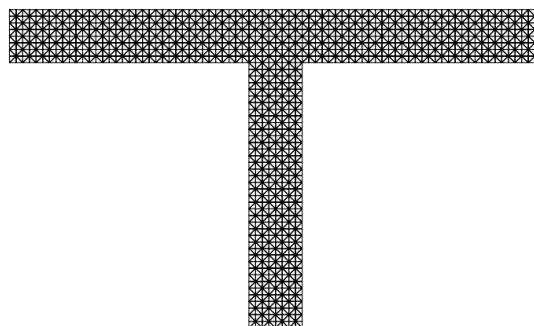


図 4.4 T型合流流路の有限要素メッシュ分割

図4.5に計算例として、 $U_1=1.0$ mm/s, $U_2=2.0$ mm/s のときのブロック有効体積分率分布を示す。合流部付近で体積分率が大きく変化している様子が見られる。これは、合流部で変形速度が大きくなり、ブロックの破壊が生じているためであると考えられる。

詳細な流動解析は今後の課題であるが、本研究で提案した構成モデルが、複雑な流れ場の解析に適用可能であることが示された。しかし、より高度な粘弾性モデルの適用のためには、さらに数値計算時間の短縮のための計算スキーム改良が必要である。

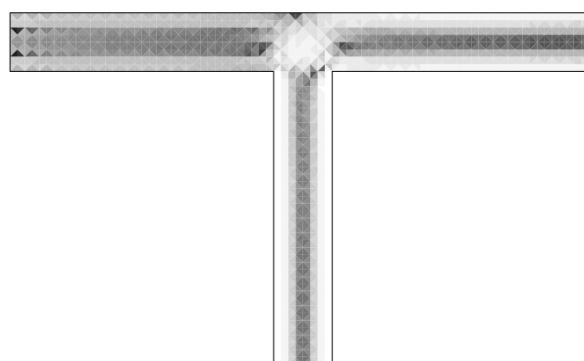


図 4.5 T型合流流路内流れのブロック有効体積分率分布の計算例（黒は体積分率が高く、白は低いことを表す。）

<引用文献>

- ① Takehiro Yamamoto, White-Metzner Type Viscoelastic Model for Cellulose Nanofiber Suspensions Based on Population Balance Equations for Fiber Floc Aggregation-Breakage, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Vol.264, 2019, pp.98-106.
- ② Takehiro Yamamoto, Modeling of Floc Forming Suspensions Coupling Population Balance Equation for Floc Aggregation-Breakage and White-Metzner Model, Nihon Reorogi Gakkaishi (Journal of the Society of Rheology, Japan), Vol.48, 2020, pp.121-128.
- ③ Takehiro Yamamoto, Effect of Fractal Dimension of Floc Size in a Constitutive Model Based on a Population Balance Equation for Floc-Forming Suspensions on Shear Rheology, Nihon Reorogi Gakkaishi (Journal of the Society of Rheology, Japan), Vol.49, 2021, pp.207-213.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Takehiro Yamamoto	4. 巻 49
2. 論文標題 Effect of Fractal Dimension of Floc Size in a Constitutive Model Based on a Population Balance Equation for Floc-Forming Suspensions on Shear Rheology	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 日本レオロジー学会誌	6. 最初と最後の頁 207-213
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1678/rheology.49.207	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takehiro Yamamoto	4. 巻 48
2. 論文標題 Modeling of Floc Forming Suspensions Coupling Population Balance Equation for Floc Aggregation-Breakage and White-Metzner Model	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本レオロジー学会誌	6. 最初と最後の頁 121-128
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1678/rheology.48.121	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 1件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 山本剛宏
2. 発表標題 フロック形成流体の数値流動解析モデル
3. 学会等名 2021年度 磁性流体連合講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

6. 研究組織

氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------