14503

数値シミュレーションを用いたスラリー粘度評価手法 A Numerical Simulation Method for Analysis of Slurry Viscosity

援助対象者 Scholarship Student: 境 正俊 Masatoshi SAKAI

東京大学大学院工学系研究科 博士課程後期 1 年
Graduate School of Engineering, The University of Tokyo,
PhD Student (D1)
E-mail: masatoshi_sakai@dem.t.u-tokyo.ac.jp

境 正俊

研究指導者 Academic Leader: 酒井 幹夫 Mikio SAKAI

准教授, Associate professor
E-mail: mikio_sakai@n.t.u-tokyo.ac.jp

成果の概要

棒状・繊維状粒子を含む懸濁液は、複雑なレオロジー特性を示すことが知られている (S. Yamamoto, and M. Takaaki, 1995)。粒子間ネットワークの形成などにより、シェアシンニングやチキソトロピーといった非ニュートン流体としての挙動を示すことが知られている。しかし粒子の運動の直接観察は困難であり、実験的アプローチによるレオロジー特性の推測は容易ではない。

我々は、直接計算 (Direct Numerical Simulation : DNS) と離散要素法 (Discrete Element Method : DEM) を連成した手法 (DEM-DNS 法) を開発し、高濃度棒状粒子を含むせん断流れ場の計算を行い、内部流動構造を観察した。棒状粒子のアスペクト比、個相の体積分率、および懸濁液に負荷したせん断速度が、棒状粒子の配向挙動や懸濁液の粘度に与える影響を評価した。棒状粒子は、ねじれも曲がりも生じないよう球状粒子を連結することによって形成し、回転運動の

記述にクォータニオンを使用することで剛体の姿勢更新を適切に行なった。

本数値解析によって、棒状粒子の体系と、球状粒子の体系を比較することで、粒子の形状がスラリーのレオロジー特性に影響を与えていることを明らかにした。せん断速度の大きな体系において、より棒状粒子が流れ方向へ配向する様子を観察し、粒子の配向によって粘度が小さくなる傾向を確認した。

数値解析手法

流体および固体粒子の運動を解析するにあたり、埋込境界法を用いた直接計算と、離散要素法を連成した手法を用いた、個体粒子間相互作用力である接触力の評価には DEM (P. A. Cundall, and O. D. L. Strack, 1979) を使用し、弾性力、粘性減衰力および摩擦力を計算した。流体の運動方程式には連続の式およびナビエ・ストークス方程式を使用した。固体粒子周りの流れ場を適切に計算するために、梶島らの提案した手法 (T. Kajishima, et al., 2001) を用いた

埋込境界法を使用した。流体の計算セルは、固体粒子の直径に比べ充分細かく分割し、スタガード格子を用いて離散化した。

棒状粒子に作用する全ての力およびトルクを計算した後に、粒子の姿勢の更新を行った。本数値解析では、棒状粒子の姿勢が大きく変化する運動を評価するため、すなわちジンバルロック現象を回避するために、式（1）で示されるようなクォータニオン（四元数）を使用した。本手法では式（2）に示すように、回転行列 $\mathbf{R}$ をクォータニオン $\mathbf{q}$ に変換することができる。

$$\mathbf{q} = [s, \mathbf{q}] = [s, (q_x, q_y, q_z)] = \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), (v_x \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), v_y \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), v_z \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)) \right] \quad (1)$$

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 - 2q_y^2 - 2q_z^2 & 2q_x q_y - 2s q_z & 2q_x q_z + 2s q_y \\ 2q_x q_y + 2s q_z & 1 - 2q_z^2 - 2q_x^2 & 2q_y q_z - 2s q_x \\ 2q_x q_z - 2s q_y & 2q_y q_z + 2s q_x & 1 - 2q_x^2 - q_y^2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

ここで、 θ および $\mathbf{v}$ はそれぞれ、回転角度および回転軸を示す。

数値解析

1. 解析条件・体系

水の内部に、棒状アルミナ粒子をランダムに分散させた体系を対象とした。粒子の形状による影響を評価するために、棒状粒子は球状粒子を連結することで形成しており、球形粒子は直径 $10 \mu\text{m}$ とした。計算領域を $100 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ とし、上面にシアを負荷し、スラリーのずり粘度を評価した。シアの大きさによる影響を考察するために、せん断速度を 10 s^{-1} , 100 s^{-1} , 1000 s^{-1} に設定した。せん断流れに対する棒状粒子の配向を評価するために、棒状粒子の長軸方向ベクトルの変化を評価した。

本研究では、棒状粒子の体積分率を 4.7% から 23.5% に変化させるとともに、アスペクト比を 1, 3 および 5 へ変化させることで、それ

Table 1 Simulation conditions

	Volume fraction of solid phase				
	4.7%	9.4%	14.1%	18.8%	23.5%
Aspect ratio 1	Case 1-1	Case 2-1	Case 3-1	Case 4-1	Case 5-1
Aspect ratio 3	Case 1-2	Case 2-2	Case 3-2	Case 4-2	Case 5-2
Aspect ratio 5	Case 1-3	Case 2-3	Case 3-3	Case 4-3	Case 5-3

Fig. 1 Initial conditions of needle-like particles.

ぞれの影響を評価した。数値解析条件を Table 1 に、固体粒子の初期状態を Fig. 1 に示す。

2. 結果・考察

本研究における数値シミュレーションの結果を以下に示す。

Case1 すなわち、球形粒子の体系における比粘度の値の比較を、Fig. 2 (a) に示す。懸濁液はニュートン流体としての性質を示した。また比粘度の値は、スラリー粘度の体積分率に対する経験式である Krieger-Dougherty の式 (I. M. Krieger and T. J. Dougherty, 1959) とよく一致した。これにより、本数値解析手法がスラリーの粘性を精度よく評価できることが示された。

Case3 および Case5 における比粘度の比較を、それぞれ Fig. 2 (b) および Fig. 2 (c) に示す。棒状粒子のみを含む体系においては、球形粒子の体系と比べて高い粘度が観察された。アスペクト比の大きな体系において特に高い比粘度が観

Fig. 2 Relative viscosity dependence on shear rate and aspect ratio of rod-like particles.

Fig. 3 Rod-like particle orientation vector for Case 3-3 (Shear rate : 100 s^{-1}). Fig. 4 Typical snapshot for Case 3-3 ($t = 0.05 \text{ s}$).

察された。またせん断速度を増加させることによって比粘度の値が減少する、シアニング挙動が観察された。

以上の原因を考察するために、スラリー内部のミクロ構造の観察を行った。今回は、Case 3-3において、せん断速度 100 s^{-1} および 1000 s^{-1} のシアを負荷した際の棒状粒子の配向状態を評価した。棒状粒子における長軸方向ベクトルの単位ベクトルを V とし、せん断流れ場の中での変化の様子を調べた。

Fig. 3 に、せん断速度 100 s^{-1} の流れ場の中での、単位ベクトル V の変化の様子を示す。せん断流れ場を与えて間もなく、せん断方向 (x 方向) 成分が大きくなり、高さ方向 (y 方向) 成分は小さくなった。このことから、棒状粒子がせん断流れ方向へ配向していることが示さ

れた。 $t = 0.05 \text{ s}$ における、全ての棒状粒子の様子を Fig. 4 に示す。棒状粒子が全体にせん断流れ方向へ強く配向している様子が観察された。しかし時折 z 軸方向へ回転を行う様子も見られ、流れと並行に配向した定常状態にはならなかった。

また Fig. 5 に、せん断速度 1000 s^{-1} における単位ベクトル V の変化の様子を示す。せん断速度 100 s^{-1} の結果と比べて、高さ方向 (y 方向) 成分が特に小さくなった。このことから、せん断速度の大きな体系において、流れ方向への配向がより強く見られることが確認された。

以上の結果から、棒状粒子の体系においてアスペクト比が大きいほど粘度が高く、またシアニング挙動が観察された原因について考察を行う。高い粘度が観察されたのは、棒状粒子

Fig. 5 Rod-like particle orientation vector for Case 3-3 (Shear rate : 1000 s⁻¹).

が流れ方向へ強く配向しながらも、流れと並行に配向した定常状態にはならず、アスペクト比が大きいほど流体抗力が大きかったためと考察される。またシアニング挙動が観察された

のは、高いシアを負荷することで棒状粒子が流れ方向へより強く配向し、流体抗力が小さくなったためと考察される。

まとめ

我々は、DEM-DNS法を用いた数値シミュレーションによって、棒状粒子を含む懸濁液のレオロジー特性を評価した。

棒状粒子の配向状態がスラリー粘度に影響を与えていることを確認した。せん断速度の増大によって棒状粒子が流れ方向へ強く配向し、粘度が減少していることが観察された。

参考文献

- [1] S. Yamamoto, and M. Takaaki., The Journal of chemical physics 102.5 (1995) 2254-2260.
- [2] P. A. Cundall, and O. D. L. Strack., Géotechnique. 29 (1979) 47-65.
- [3] T. Kajishima., S. Takiguchi, and Y. Miyake., JSME Int. J. Series B, 44 (2001) 526-535.
- [4] I. M. Krieger, and T. J. Dougherty., Trans. Soc. Rheol., 3 (1959) 137-152.

外部発表成果

口頭・ポスター発表

1. 境 正俊, 酒井 幹夫, “非球形固体粒子で構成されたスラリーのレオロジー特性に関する数値解析”, 2015年度粉体工学会秋期研

究発表会 (大阪, 2015年10月13～14日).

2. 境 正俊, 酒井 幹夫, “数値シミュレーションによる棒状粒子を含む懸濁液のレオロジー特性評価”, 第21回流動化・粒子プロセスシンポジウム (福岡, 2015年12月10～11日).