# 粉体および粒子分散材料シミュレーション技術に関する調査研究

小林　泰則*　須貝　裕之**　岡田　英樹**

Feasibility Study on Simulation Technology for Powder and Particle Dispersed Materials

KOBAYASHI Yasunori*, SUGAI Hiroyuki** and OKADA Hideki**

## 1. 緒　　言

粉体や固体粒子を分散質として分散媒中に分散させた粒子分散材料は医薬品，化粧品をはじめ，潤滑剤（グリス），造形材（レジン），接着剤，電子材料（封止材，配線材）など各種産業分野において幅広く利用されている。一方，粉体や固体粒子を分散媒に分散させる工程においては経験的な要素が多くを占めているため，理論的な取り扱いやシミュレーション技術を活用することによって，業務の効率化や品質の安定化，より高性能な材料の開発が可能になると考えられる[1)]。

本調査研究では，対象とする材料について固液分散系にターゲットを絞り，それらの物性予測および攪拌混合プロセスに関するシミュレーション技術の導入および精度検証などを行った。

## 2. 調査研究結果

### 2.1　固液分散材料の物性予測シミュレーションに関する調査研究

予測する物性として分散系の相対粘度を対象とすることとし，シミュレーション手法として有限体積法による流体の数値解析(CFD)と離散要素法による粉体の数値解析(DEM)を連成させた CFD-DEM 連成法を用いた。流体 - 固体間の連成方法としては埋め込み境界法を採用した[2)]。

シミュレーションにはオープンソースプログラムである CFDEM Coupling[3)]を用いた。

なお，相対粘度は分散系の粘度と分散媒の粘度の比である。

精度検証を目的として，シミュレーションする系は水 - ポリスチレン粒子系を選択し，Krieger らによる実験結果[4)]および半理論粘度予測式[5)]による予測結果との比較を行った。ポリスチレン粒子径は 4μm の単分散とし，粒子の体積分率を 30，40，50%とした場合について計算した。せん断速度は $400s^{-1}$ とした。シミュレーション領域のサイズは 20×20×20μm とした。

シミュレーション結果および実験結果，粘度予測式による予測結果を図 1 に示す。シミュレーションは Krieger らによる粘度予測式や実験結果に近い値が得られていることがわかる。

また，埋め込み境界法に基づく CFD-DEM 連成解析による粘度予測については他のグループ

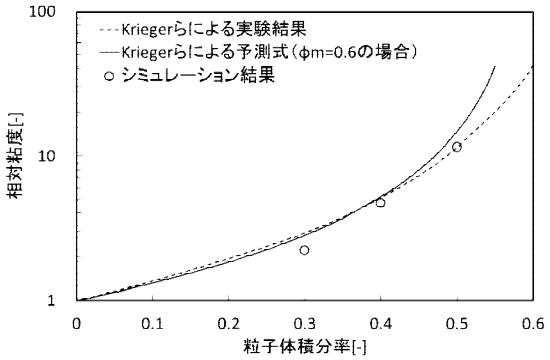


**図 1　シミュレーション結果と既報実験結果などとの比較**

*　研究開発センター
　　レーザー・ナノテク研究室
**　研究開発センター

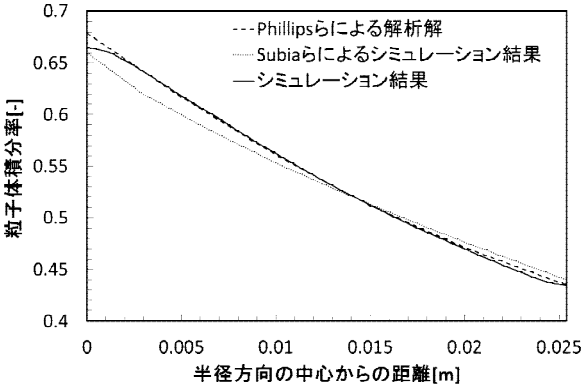


**図 2　シミュレーション結果と既報文献の結果との比較**

による研究においても Krieger らによる粘度予測式に近い結果が得られることが確認されている[6]。

### 2.2　固液分散材料の攪拌混合シミュレーションに関する調査研究

攪拌混合シミュレーションについて，30%以上の高い粒子体積分率の固体粒子分散液にせん断をかけた場合の粒子分布を再現するために開発された Phillips らによる粒子拡散モデル[7]を導入するためのプログラム改良を実施した。

計算プログラムにはオープンソースである OpenFOAM[8]を用い，プログラム改良は OpenFOAM に標準で付属している pimpleFoam ソルバーに Phillips らによる粒子拡散モデルに基づく計算ルーチンなどを追加する形で実施した。

プログラム改良結果の検証のため，Phillips らによる粒子拡散モデルに基づく粒子分布の解析解を求めることが可能な円筒管内流れを対象とした計算結果[9]との比較を行うこととした。

具体的には，1,1,2,2 テトラブロモエチレンとポリアルキレングリコールおよびアルキルアリルポリエーテルアルコールを重量比で，14.07:35.66:50.27 の割合になるように混合した分散媒に平均粒子径 3178μm の PMMA 粒子を体積分率が 50%になるように分散させた液を内径 0.0508m の円管内に平均流速が 1m/s となる条件で流した場合の半径方向の粒子分布の計算結果の比較を行った。

改良したプログラムによって求められた結果と Phillips らによる解析解および Subia らによるシミュレーション結果[9]を図 2 に示す。本研究による計算結果は解析解とよく一致しており，プログラム改良には大きな間違いはないものと思われる。

## 3. 結　　言

(1) 粉体および粒子分散材料シミュレーション技術に関する調査研究について，対象とする材料として固液分散系にターゲットを絞り，それらの物性予測および攪拌混合に関するシミュレーション技術の調査研究を行った。

(2) 固液分散材料の物性予測シミュレーションについては，埋め込み境界法による CFD-DEM 連成解析による粘度予測の検討を行った。その結果，Krieger らによる粘度予測式や実験結果に近い値が得られることが確認された。

(3) 固液分散材料の攪拌混合シミュレーションについては，OpenFOAM プログラムへの Phillips らによる粒子拡散モデルの導入について検討した。既報論文との結果の比較を行ったところ，同様の結果が得られることを確認した。

## 参考文献

1) http://nanotech.t.u-tokyo.ac.jp/whats_snap.html , 2020 年 3 月 5 日.
2) D. Fantin, “CFD-DEM Coupling for Systems of Fluid and Non-Spherical Particles,” Master’s Thesis, Delft University of Technology (2018).
3) https://www.cfdem.com/about-cfdemrproject, 2020 年 1 月 16 日.
4) W. B. Russel, "*Colloidal Dispersions*," Cambridge University Press, (1989), pp. 466-471.
5) I. M. Krieger, T. J. Dougherty, "A Mechanism

for Non-Newtonian Flow in Suspensions of Rigid Spheres," *Transactions of the Society of Rheology*, vol. 3 (1959), pp. 137-152.

6) 境正俊 , 酒井幹夫, “数値シミュレーションを用いたスラリー粘度評価手法”, ホソカワ粉体工学振興財団年報, No. 23, 2015, pp. 199-202.

7) R. J. Phillips, R. C. Armstrong, R. A. Brown, A. Graham and J. R. Abbott, "A constitutive model for concentrated suspensions that accounts for shear-induced particle migration," *Physics of Fluids A*, vol. 4 (1992), pp. 30-40.

8) https://openfoam.org/, 2020 年 1 月 14 日.

9) S. R. Subia, M. S. Ingber, L. A. Mondy, S. A. Altobelli and A. L. Graham, ‘‘Modelling of concentrated suspensions using a continuum constitutive equation,’’ *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 373 (1998), pp. 193–219.