

(第 18 回) 2022 年度・研究助成報告

研究題名	混錬プロセスにおける粒子の濡れ・分散挙動解析手法の開発
研究期間	2022 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日
研究機関・所属 研究者名	東北大学・多元物質科学研究所 久志本 築

1. 2022 年度研究成果の概要

本研究では、混錬プロセスにおける粒子の濡れと分散挙動の解析を実現する新規シミュレーション手法を開発するだけでなく、実験と比較することでその妥当性も確認した。混錬は、母材中に粒子を投入し混合しながら練り混ぜることにより、粒子が母材に対して濡れた状態にするとともに、母材中に粒子を分散させることを目的としたプロセスである。しかしながら、粒子が母材中に濡れ分散していく過程を実験により解析することは難しいため、いまだ不明な点が多い。そこで、本研究では、シミュレーションによりこれら粒子の濡れ・分散挙動を解析する手法を新規に開発した。また、本シミュレーション手法の妥当性は、液液界面上の粒子挙動を直接観察し、その観察結果を比較することで確認した。これにより、これまで実現できなかった混錬プロセス中の粒子の濡れと分散挙動をシミュレーションにより解析可能とした。

2. 助成期間内での研究成果の概要

本研究では、混錬プロセスにおける粒子の濡れと分散挙動を解析可能なシミュレーション手法を開発することを目的とした。粒子が濡れる現象は、粒子が存在する流体中から他の流体中へと移動する現象である。こうした現象をシミュレーションで表現するためには、次の 6 つの事象をモデル化する必要がある。(1) 粒子の運動、(2) 流体の運動、(3) 2 つの流体が成す界面の運動、(4) 粒子と流体の相互作用、(5) 界面と粒子の相互作用、(6) 界面と流体の相互作用。(1)は離散要素法 (DEM)により追跡した。(2)の流体の運動は粒子の局所体積で平均化された流体の支配方程式を有限差分法で近似的に解くことで表現した。(3)の界面の運動についてはレベルセット法をベースとし、数値的な合一を防ぎつつ物理的な合一は起こるようにモデル化した新たな手法を開発し用いた。(4)は DEM-CFD カップリングモデルに基づき計算した。(5)には空間的な力のつり合いを考慮した新たなモデルを開発し考慮した。(6)は通常のレベルセット法同様にレベルセット関数から界面の曲率を求めることで計算した。上記のようにそれぞれモデル化することで、ある流体中から他の流体へと濡れ、その後分散する挙動を表現するモデルを新規に構築した。さらに、本モデルの妥当性はプローブ式の顕微鏡による直接観察結果と比較することで確認した。これにより、これまで困難とされた混錬プロセス中の粒子の濡れ・分散挙動の解析を可能にした。

### 3. 研究発表

本研究成果は下記の 2 件の発表会にて報告した。

1. 粉体工学会 2023 年度秋期研究発表会、○久志本築、George Franks、加納純也 「液液界面近傍での粒子挙動を表現するシミュレーション手法の開発」、口頭発表(一般) 2023 年 10 月 11 日
2. Tohoku-Melbourne Joint Workshop in Materials Science, Kizuku Kushimoto\* 「Development of the simulation for particle behavior in oil-water system」, 口頭発表(招待) 2023 年 11 月 1 日