



Title	Development of Numerical Simulation of Micro Scale Polymer Flows
Author(s)	Sunarso
Citation	大阪大学, 2007, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/48422
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	スナルソ SUNARSO
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 2 1 1 7 2 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 19 年 3 月 23 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科機械物理工学専攻
学 位 論 文 名	Development of Numerical Simulation of Micro Scale Polymer Flows (高分子マイクロ流れの数値シミュレーションの開発)
論 文 審 査 委 員	(主査) 助教授 山本 剛宏 (副査) 教 授 稲葉 武彦 教 授 梶島 岳夫 教 授 田中 敏嗣

論 文 内 容 の 要 旨

Flows of polymeric fluids in complex micro channels can be found in many industrial processes such as production of components of micro electro mechanical systems (MEMS) and fabrication of polymer composite materials. The study of flow behaviors in such channels should contribute in the improvement of production processes, which in turn, improve the quality of end products. In the analysis of flow behaviors, it should be noted that the flow behavior in micro channels usually deviates from that in macro channels.

In this research, a numerical simulation for analysis of polymeric flows in complex micro channels was developed. The simulation was developed based on a decoupled method, in which kinematics (velocity and pressure) fields are computed using a finite element method (FEM), while polymeric stress is computed using backward tracking Lagrangian particle method (BLPM). This method has a relatively good stability and relatively low memory requirement. In addition, the method can be implemented easily for various constitutive models, and thus provides a framework for the future development, in which a new or a more sophisticated constitutive model can be implemented in the numerical simulation. To account for wall effect, which has been demonstrated experimentally to be significant as the channel size decreases, a slip boundary condition was introduced. Using the developed simulation, polymeric flow in macro and micro contraction channels was analyzed. The results show that the wall slip introduces channel size dependent phenomena such as the different vortex growths for the flows in macro and micro channels and the dependence of wall shear stress on the size of channel, which are qualitatively in agreement with those observed in the experiments.

To improve the performance of the simulation, a constitutive model based on network theory was developed. Using the network theory, a more sophisticated model for wall effect is potentially included in the constitutive model. The development of the constitutive model was started by developing a Brownian Dynamics (BD) simulation based on a reversible network model. Using the BD simulation, the capability of the reversible network model in predicting the rheological properties of polymeric fluids was investigated. It has been shown that by controlling the association/dissociation rates, the model was able to predict rheological properties of both

associative and non associative polymer. For realistic prediction of elongational properties, FENE connection force should be used instead of Hookean connection force. Based on the BD model, a constitutive model was derived. A new approach in the derivation of constitutive model has been proposed, that is by superimposing the effect of velocity field and association/dissociation processes on the evolution of configuration tensor. This results in a general form of constitutive model that can be used with various forms of association and dissociation functions. Therefore, the constitutive model is potentially be used for various polymeric fluids. It has been shown that predictions of the constitutive model are qualitatively in agreement with predictions of BD simulation.

論文審査の結果の要旨

本論文では、高分子流体のマイクロ流れの数値シミュレーション手法を開発しており、はじめに、高分子流体のマイクロ流路内流れにおける壁面すべり現象の解析を行い、さらに、壁面すべり現象をより高精度に解析に取り入れるために、壁面と高分子の相互作用を考慮することのできる分子モデルを提案している。そして、その分子モデルを用いたマイクロシミュレーションを行っている。また、複雑な流れ場における計算に適用を可能とするために、その分子モデルを基礎とした構成方程式を導出している。その主な成果は以下のようである。

- (1) 壁面すべり速度モデルを用いた高分子流体のマイクロ流路内流れ数値解析を行い、全体の流動に対する壁面すべりの影響がマクロ流路に比べてマイクロ流路において顕著に現れることを示している。また、壁面すべり特性を変化させた解析により、高分子マイクロ流れにおける壁面すべりとの流れ場の関係を解明している。
- (2) 壁面すべり速度モデルのような経験式を用いずに、より精緻で高度なシミュレーションを行うために、壁面に吸着した高分子とバルクの高分子の相互作用を取り入れることが可能な分子モデルを導入することを考え、可逆ネットワークモデルに基づく従来の分子モデルの改良を行っている。そして、改良モデルのレオロジー特性について、ブラウン動力学シミュレーションにより詳細な解析を行ない、ネットワークの生成・分離速度関数を検討し、現実の高分子流体の挙動をよりよく再現するモデルの開発に成功している。
- (3) 複雑な流れ場に対する解析を行なうことを考慮して、上記のモデルから構成方程式を導出している。そして、その導出に当たり、新規の導出過程を提案し、その結果、分子モデルを変化させた場合にも適用が可能な形式の構成方程式を導出することに成功している。
- (4) 分子モデルから導出した構成方程式の特性について、ブラウン動力学シミュレーションの結果との比較により、その妥当性を確認している。

以上のように、本論文は高分子流体のマイクロ流れにおける流動メカニズムに関する壁面すべり現象の効果に関する有用な知見を得るとともに、より高度な高分子マイクロ流れシミュレーションのための基礎となるモデルおよび構成方程式を提案しており、学術的な価値も高く、その成果は工学分野において有用である。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。