

ミクロ繊維束構造における有機物分解を考慮したマクロ浸透・拡散特性評価

○東北大学工学部 学生員 工藤 宏樹
東北大学大学院 正 員 加藤 準治
東北大学大学院 正 員 寺田 賢二郎
東北大学大学院 正 員 京谷 孝史

1. はじめに

ガラスは繊維状に加工することで破断強度が約100倍になる。繊維状に加工したガラスは、繊維強化プラスチック(FRP)や、地中の重金属を吸着・除去するツールとして利用されており、応用の幅が広がってきている。しかし、ガラスを加工する際には有機材料を使用するため、ガラス繊維表面に有機材料が残留し、一般にリサイクルの際の分別廃棄が困難となる。これを化学的に除去する技術が開発されつつあるが、実験的に反応速度を算出する研究や、物質の移流拡散数値解析などの研究はなされてきたものの、分解反応と流体、拡散を連成した数値解析やそのための特性評価はなされていない。そこで本研究では、繊維表面に付着した有機材料(でんぷん)の分解反応に酵素水溶液を用い、流れ・拡散を連成したミクロ数値解析において、繊維表面のでんぷんの形状変化を考慮することで、経時的に変化する均質化浸透係数、拡散係数、反応速度を評価する方法を提案する。

2. 有機物の分解反応を伴う現象のマクロスケールモデリング

本研究で対象とするガラス繊維束は、図-1に示すように直径0.08mmのガラス繊維を平たい束にして垂直に編んだものである。このガラスクロスに有機材料として使用されたでんぷんが付着しており、それを酵素水溶液を流すことによって分解する現象を対象とする。マクロスケールにおける流れ・反応拡散現象を精度よくシミュレートするために、ミクロ構造の非均質性を考慮したマクロ均質化特性をミクロ解析により評価する。そのために、ミクロ・マクロスケールでそれぞれの支配方程式を設定し、均質化法よりミクロ非均質性を平均化してミクロモデルとマクロモデルを関連付け、ミクロ解析を解くことでマクロ特性を算出できるようモデリングした。

解析の核となる支配方程式は、運動方程式、質量保存則および物質の反応・移流拡散方程式で表され、後者の2つは

$$\frac{-\partial m}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + f_w \quad (1)$$

$$\frac{-\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}c - d\nabla c) + f_g \quad (2)$$

である。ここに、 m : 流体の質量、 $\mathbf{q}$: 流束、 c : 物質濃度、 d : 拡散係数であり、 f_k : 生成・消滅項は各式に存在する。運動方程式については流速 $\mathbf{v}$ をミクロスケールでは層流とみなしてナビエーストックス式、マクロスケールでは浸透流

とみなしてダルシー則を適用する。これらの支配方程式を定常・非定常、移流なしなど条件や境界条件に応じて変化させ、均質化浸透係数・拡散係数・反応特性を評価する。

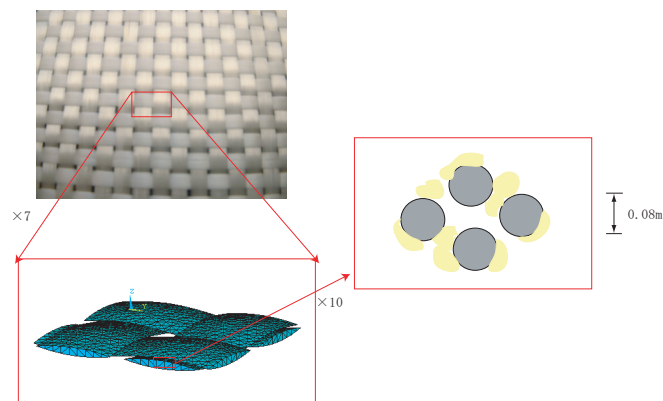


図-1 マクロガラスクロスとミクロ構造

3. 定常問題に対する均質化特性評価

本研究で使用した汎用ソフト COMSOL¹⁾での浸透流・拡散均質化解析結果を、既存の均質化解析ソフト Multi-scaleSim2.1²⁾の参照解とを比較し、妥当性を検証する。また、ミクロガラス繊維に付着したでんぷんの分解反応が正しくモデル化されているか検証する。今回モデルは図-2に示すような0.2mm直方体の中央にファイバーが存在するモデルである。

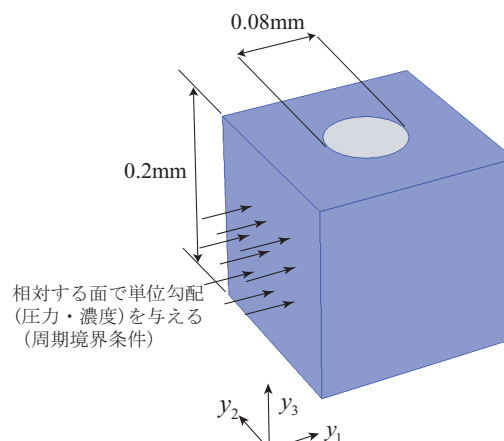


図-2 ミクロ解析モデルと解析条件

でんぷんの分解反応は、酵素がでんぷんと結びついて加水分解が起こり、グルコースとなった後に酵素が分離する。よってでんぷんの分解反応の速度式は次のミカエリスメン

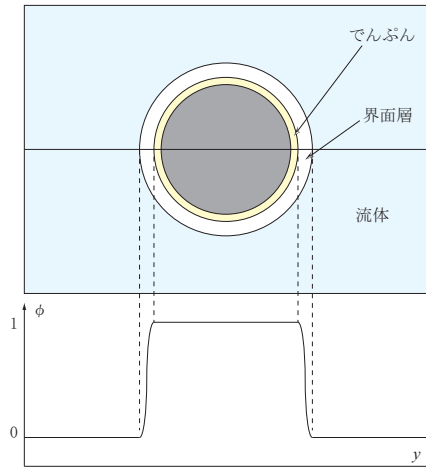


図-3 密度関数に用いるヘビサイド関数

テン式により記述できるとされている³⁾。

$$V(t) = \frac{[S]V_{max}}{[S] + K_m} \quad (3)$$

ここに、 S ：でんぷん濃度、 V_{max} ：最大反応速度、 K_m ：ミカエリスメンテン定数である。

一方、物質の移流拡散方程式 (2) におけるマクロ生成・消滅項 F_g は均質化法より次式で表される。

$$F_g = \frac{1}{Y} \int_{\partial Y} r_g ds \quad (4)$$

ここに、 Y ：ミクロ領域体積、 r_g ：でんぷんと水の反応面での反応速度である。今回のモデルは、でんぷんと流体の間の反応面を反応層として近似し、分解反応がその領域でのみ起こるものとする。この反応層は、1と0の間を滑らかにつないだ密度関数

$$\phi = 1([S] > C_e), \quad 0([S] < C_e) \quad (5)$$

の、 $0 < \phi < 1$ における微分値が $\dot{\phi} \neq 0$ となる領域として定義した。ここに、 C_e は固体・液体間の濃度の閾値である。このとき、 F_g と反応層におけるミクロ生成・消滅項 f_g の関係は次式のように近似できる。

$$F_g \approx \frac{1}{Y} \int_{Y_g} f_g dY \quad (6)$$

このモデルを表-1に示す条件で解析し、実現現象を再現できているか検証したところ、図-4に示すように、ある値でグルコース濃度の増加が停滞した。生成したグルコースが滞留し、でんぷんと酵素水溶液の接触が妨げられ反応が滞る現象が再現されており、これはミカエリスメンテン式 (3) と同様の挙動である。

次に、表-2に均質化拡散係数の評価結果を示す。要素

表-1 均質化浸透係数

パラメータ	単位	値
グルコース拡散係数 D_g	m^2/s	5.2×10^{-8}
でんぷん拡散係数 D_s	m^2/s	5.2×10^{-10}
でんぷん初期濃度 C_{s0}	mol/m^3	0.305
固液平衡濃度 C_e	mol/m^3	0.01

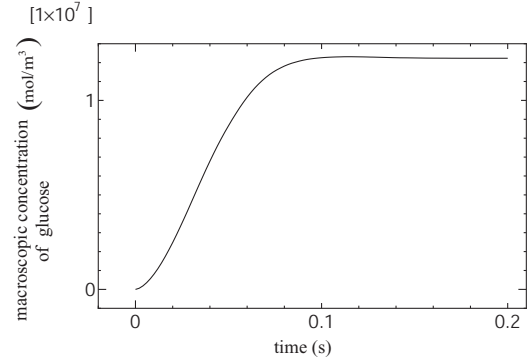


図-4 ガラス繊維周りに生成したグルコースのマクロ濃度変化

数・サイズを変えた解析も行ったが、参照解と比較しておおむね妥当な値が得られた。

表-3に均質化浸透係数の評価結果を示す。ミクロモデルのサイズを変化させた解析を行い、ガラス繊維材料の格子の目の粗さで浸透係数が変化することを確認した。また、参照解とも概ね一致した。

表-2 均質化拡散係数

	拡散係数 ($\text{m}^2/\text{s} \cdot 10^{-6}$)
参照解 $\bar{K} =$	$\begin{pmatrix} 4.039 & 0 \\ 0 & 4.039 \end{pmatrix}$
本解析 $\bar{K} =$	$\begin{pmatrix} 4.0427 & 0 \\ 0 & 4.0386 \end{pmatrix}$

表-3 均質化浸透係数

	浸透係数 ($\text{m}/\text{s} \cdot 10^{-6}$)
参照解 $\bar{K} =$	$\begin{pmatrix} 1.348 & 0 \\ 0 & 1.347 \end{pmatrix}$
本解析 $\bar{K} =$	$\begin{pmatrix} 1.2718 & 0 \\ 0 & 1.2703 \end{pmatrix}$

4. 終わりに

本研究では、ミクロモデルの分解反応解析を行うことにより、でんぷんのマクロ均質化分解反応挙動の評価法を提案し、その妥当性を検証した。また、ミクロ構造の非均質性を考慮したマクロ均質化特性をミクロ解析により評価し、精度検証を行った。今回のモデルはガラス繊維一本に対して均質化を行ったが、この方法で様々な形状の材料の非均質性を考慮したマクロ特性を算出することができる。

参考文献

- 1) <http://www.kesco.co.jp/products/software/comsol/>
- 2) <http://www.cybernet.co.jp/ansys/multiscale/multiscale.im/>
- 3) 安達修二, 橋本健治, 植山正基: グルコアミラーゼによるでんぷんの糖化反応に対する速度式, 1985.
- 4) 寺田賢二郎, 菊池昇: 均質化法入門, 丸善, 2003.