

溶質吸着層を膜表面に持つクロスフロー精密膜ろ過直接数値シミュレーション

日大生産工 (院) ○藤平 拓朗 日大生産工 安藤 努
PIA 小池 修, 東大環安セ 辰巳 玲, 神奈工大応バイオ 市村 重俊

1. 緒言

水の浄化などの水処理分野で膜ろ過技術が使用されている. この膜ろ過においては, 膜表面への粒子の堆積および膜細孔内に粒子が詰まるファウリングによる透過流束の低下は避けられない. この影響を知ることは, 膜ろ過を最適化するために必要である. 近年, 膜に表面修飾を施すことで膜表面および細孔内における粒子の吸着を抑制してファウリング対策に繋がる実験研究¹⁾を初め多くの研究が行われている.

本研究では, 溶液中に膜に吸着する溶質が共存するモデル²⁾を使用し, 膜表面に形成される吸着層と粒子の重なりに伴う相互作用を考慮したクロスフロー精密膜ろ過数値シミュレーションを実施する. この条件にせん断速度の変化を加えた場合のファウリング状況および透過流束に及ぼす効果や影響を調べた.

2. シミュレーションモデル

本研究では, 粒子および流体運動を同時に解くシミュレータ(SNAP-F)³⁾を用い, シミュレーションを行った. 微粒子分散液の溶媒はニュートン流体とし, 非圧縮性流体について, 熱揺動項, 圧力勾配項および粒子加速度項を追加したナビエ・ストークス方程式^{3,4)}に従う. 微粒子分散液中の粒子の並進運動はニュートンの運動方程式, 回転運動はオイラーの運動方程式に従う. 粒子に働く相互作用として接触力, DLVO力, 流体力を考慮している.

3. シミュレーション条件

計算条件を表1に, 計算領域を図1に示す. 粒子濃度, 圧力勾配は本研究では, せん断速度 $\dot{\gamma}$ および吸着エネルギー $\beta\epsilon$ を変化させた. せん断速度 $\dot{\gamma}$ は距離に対する速度勾配である. 本研究では, $\dot{\gamma}_0 = 0.83 \times 10^6 \text{ [s}^{-1}\text{]}$ とし, $2\dot{\gamma}_0, 4\dot{\gamma}_0$ の3パターンのせん断速度 $\dot{\gamma}$ を与えた.

吸着エネルギー $\beta\epsilon$ は正負と考慮しない場合の3つのパターンを試みた.

粒子間距離に対する粒子間力を図2に示す. 横軸は, 粒子 - 膜間の表面間距離を粒子の直径で除した値である. 縦軸は粒子間力を無次元化した値で, 0 以上では, 斥力が働き, 0 以下では, 引力が働く. そのため, 吸着エネルギー $\beta\epsilon$ が正の場合では, 粒子と膜表面にある吸着層との重なりにより常に斥力が働くことがわかる. このことから, 粒子は膜に吸着しにくい. しかし, 吸着エネルギー $\beta\epsilon$ が負の場合では常に引力が働くため粒子は膜に吸着しやすいことが予想される. また, 粒子に働く相互作用の静電力, van der Waals 力よりも溶質吸着による相互作用の力が大きい値を示していることから影響を受けやすい.

表1 計算条件

	名称	値
粒子・膜	粒子直径 [nm]	100
	ゼータ電位 [mV]	40
	粒子体積率 [%]	5
	ハマカー定数 [J]	4.7×10^{-20}
溶質	溶質拡散係数 [m^2/s]	1.0×10^{-7}
	溶質濃度 [mol/m^3]	1.0×10^{-2}
	吸着層厚さ [nm]	25
	吸着エネルギー [-]	$0, \pm 0.5$

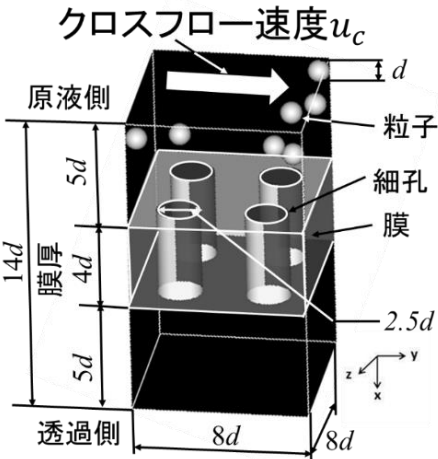


図1 計算領域

Direct numerical simulation of crossflow microfiltration with membrane surface layer of adsorbing solutes

Takuro FUJIIHIRA, Tsutomu ANDO, Osamu KOIKE, Rei TATSUMI and Sigetosi ICHIMURA

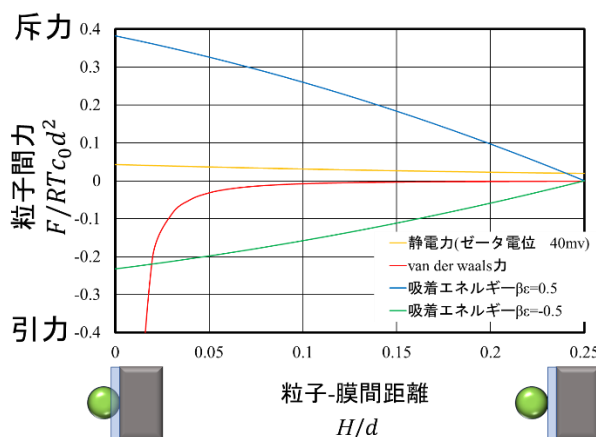


図2 粒子膜間距離に対する粒子間力

4. シミュレーション結果

本研究では、せん断速度 $\dot{\gamma}$ および吸着エネルギー $\beta\epsilon$ を変化させたシミュレーションを行った。せん断速度 $\dot{\gamma}$ を変化させた時の $30\mu\text{s}$ 後の $\dot{\gamma}_0$ および $4\dot{\gamma}_0$ の膜近傍のファウリング状況を図3に示す。 $4\dot{\gamma}_0$ の場合の透過時間と透過流束の関係を図5に示す。図3より、せん断速度 $\dot{\gamma}_0$ で吸着エネルギー $\beta\epsilon=0.5$ の場合では膜細孔内の粒子の閉塞は顕著に見られた。またこの時、透過流束は小さくなった。しかし、図5よりせん断速度 $4\dot{\gamma}_0$ に上昇したことにより、膜細孔内の閉塞が減少し、透過流束も大きくなった。また、吸着エネルギー $\beta\epsilon=-0.5$ の場合でも同様にせん断速度 $\dot{\gamma}$ 上昇により膜細孔内の閉塞が減少し、透過流束が大きくなった。吸着エネルギー $\beta\epsilon=0$ の場合は溶質吸着を考慮している他の2条件よりも膜細孔内の粒子の閉塞は顕著にでており、せん断速度上昇による影響も受けにくいことが確認できた。

せん断速度 $\dot{\gamma}$ [s^{-1}]	吸着エネルギー $\beta\epsilon$ [-]		
	$\beta\epsilon=0.5$	$\beta\epsilon=0$	$\beta\epsilon=-0.5$
$\dot{\gamma}_0$			
$4\dot{\gamma}_0$			

図3 $30\mu\text{s}$ の粒子ファウリング状況

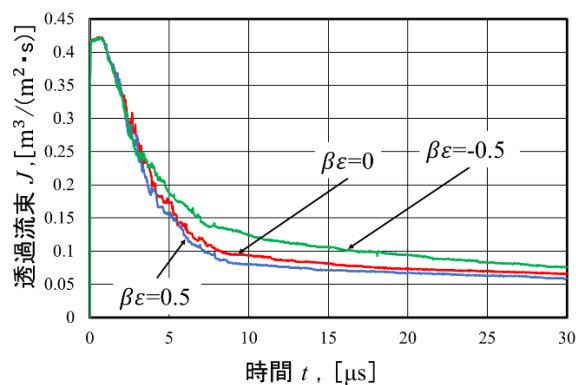


図4 $\dot{\gamma}_0$ の透過流束の時間推移

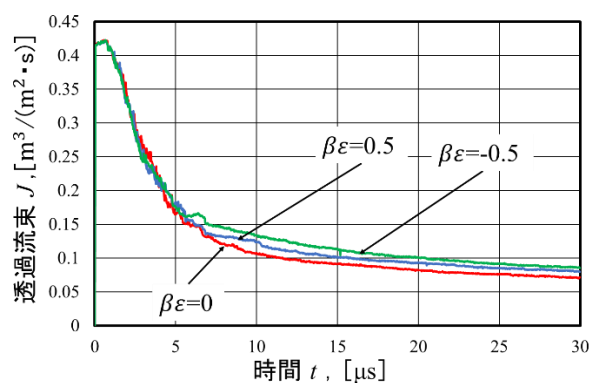


図5 $4\dot{\gamma}_0$ の透過流束の時間推移

5. 結言

吸着エネルギー $\beta\epsilon$ の変化により膜表面でのファウリング状況に変化が確認された。せん断速度 $\dot{\gamma}$ の上昇により、膜細孔内の粒子の閉塞は減少し透過流束も大きくなる結果が確認された。またこの結果より、引力系よりも斥力系の方がせん断速度 $\dot{\gamma}$ の上昇による効果は期待できる。これについては、考察を要する。

参考文献

- 1) 市村重俊ら, 日本海水学会誌, 第 68 巻, 第 6 号, 2014, pp. 316-322.
- 2) Rei Tatsumi, *et al.*, Mesoscale modeling of colloidal suspensions with adsorbing solutes, Phys. Rev. E, 91, 2015, 063301.
- 3) M. Fujita, Y. Yamaguchi, Simulation model of concentrated colloidal nanoparticulate, Phys. Rev. E, 77, 2008, 026706.
- 4) T. Ando, *et al.*, Simulation of fouling and backwash dynamics in dead-end microfiltration :Effect of pore size, J. Membr. Sci., 48, 2012, pp. 392-393