



Title	統計力学的手法を用いたディスク状粒子分散系の流動解析に関する研究
Author(s)	清水, 智大
Citation	大阪大学, 2015, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/52217">https://doi.org/10.18910/52217</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

## 論文内容の要旨

氏名 ( 清水 智 大 )

論文題名

統計力学的手法を用いたディスク状粒子分散系の流動解析に関する研究

## 論文内容の要旨

本研究では、機能性フィルムや塗料、化粧品などに使われている、ディスク状粒子分散系を対象として、様々な流れ場における数値計算を行った。本研究では、マクロ流動計算と粒子配向挙動のマイクロシミュレーションをカップリングした計算により、流体のマクロ流動挙動と粒子分散系の内部構造の関係を明らかにした。カップリングは、流体の運動方程式中の応力テンソルを介して行い、応力テンソルはマイクロシミュレーションから求めた多数の粒子配向の統計平均を用いて評価した。ディスク状粒子は、偏平回転楕円体で近似し、粒子間相互作用は平均場ポテンシャルを用いて表現した。さらに、Brownian Configuration Field (BCF) 法と呼ばれる、応力計算時のノイズを低減し流体計算を安定させる手法を用いた。このモデリングによって、比較的低コストのマクロ流動計算とマイクロシミュレーションのカップリング計算を実現できた。

第1章では、研究の背景と本研究の目的および論文構成について述べた。

第2章、第3章では、それぞれディスク状粒子希薄分散系と濃厚分散系を対象に、単純せん断流れと平行平板間流れについての基礎的なレオロジー特性と配向挙動、流動特性について述べた。そして、shear-thinning粘性や第一法線応力差の発生という非ニュートン性や、shear-thinning流体特有の平らな速度分布を予測し、本モデルによりディスク状粒子分散系の挙動を表現できることを確認した。

第4章では、高分子融液およびディスク状粒子希薄分散系の押出成形機内流れの計算について述べており、本計算手法が複雑な流れ場への適用が可能であることを示した。また、サンプリング点においてのみ、追加のマイクロシミュレーションを行うことで、全体の計算負荷を抑えて低計算コストで粒子配向分布を求める方法を提案した。

第5章では、スロットコーティング流れの計算について述べており、粒子配向による異方性が強くなることによって、自由表面形状に膨らみが生じる現象や、ダイ出口付近の粒子の流動配向が流れとともに緩和するが、溶媒の蒸発による粒子間相互作用の増大から液晶相が出現し、再配向が生じ、配向が固定化される現象を見出した。

第6章では、結言を述べた。

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 清水 智大 )		
論文審査担当者	(職)	氏 名
	主 査	(准教授) 山本 剛宏
	副 査	(教 授) 梶島 岳夫
	副 査	(教 授) 田中 敏嗣
	副 査	
	副 査	
	副 査	
	副 査	
<b>論文審査の結果の要旨</b>		
<p>本論文では、ディスク状粒子濃厚分散系の複雑な流れ場に適用可能なマイクロ・マクロ流動シミュレーション手法を開発するため、はじめに、希薄分散系を対象に、簡単な流れ場である単純せん断流れや平行平板間流れにおいて、ディスク状粒子を扁平回転楕円体でモデル化し、Brownian Configuration Field (BCF) 法を用いて粒子配向場を解く計算手法の妥当性を検討し、さらに、濃厚分散系の簡単な流れ場において、濃厚分散系で考慮する必要がある粒子間相互作用を平均場ポテンシャルで表現する手法の妥当性を検証している。そして、粒子分散系を用いた成形加工において見られるような複雑な流れ問題に対して、本計算モデルを適用した数値解析を行っている。その主な成果は以下のようである。</p>		
<p>(1) ディスク状粒子を扁平回転楕円体でモデル化し、その回転運動を BCF 法を用いて計算し、粒子配向場の統計平均を用いて評価した応力テンソルを介してマクロ流動計算をカップリングする比較的 low 計算負荷のマイクロ・マクロシミュレーション方法を提案している。特に、工学的に重要となる濃厚分散系に対しては、計算負荷の増大を抑え、粒子間相互作用を考慮する方法として、平均場ポテンシャルを導入することで、複雑な流れ場に対する濃厚分散系の数値シミュレーションを実現している。</p>		
<p>(2) 高分子融液およびディスク状粒子希薄分散系について、押出成形機内流れのマイクロ・マクロシミュレーションを行い、実験や連続体力学的手法により得られているものと同様の流動現象を予測できることを示すことにより、本シミュレーション手法の妥当性を確認している。また、配向分布を評価するサンプル点においてのみマイクロシミュレーションを行う粒子数を増加させることで、計算精度を維持したまま計算負荷を低減する方法を提案している。</p>		
<p>(3) ここで提案されたマイクロ・マクロシミュレーション手法を適用し、さらに溶媒の蒸発を考慮してディスク状粒子濃厚分散系のコーティング流れの数値解析を行い、一旦配向緩和が進んだ後に、溶媒蒸発による粒子間相互作用の増大により再配向が起きる現象を見出した。さらに、流れに沿った配向変化や配向度の膜厚方向分布を得ている。再配向がどの位置で起きるのか、あるいは、どの程度の配向角のばらつきが生じるのかを予測することは、機能性膜の機能性発現を予測した成形プロセスのデザインに有用であるが、これらを実験によって測定することは困難なものであり、本数値解析の有用性は高い。</p>		

以上のように、本論文は、比較的計算負荷の低いマイクロ・マクロシミュレーション手法を提案し、複雑な流れ場において、粒子の配向挙動や配向分布などの従来の連続体力学的手法では得られないマイクロ情報と流れ場との関係を説明することに成功しており、学術的価値も高く、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。