京都大学	博士（　工　学　）	氏名	西山　卓哉
論文題目	二相系格子ボルツマン法を用いた流れ場中の微粒子分散化過程の研究		

（論文内容の要旨）

本論文は，新素材の製造過程で重要な微粒子分散技術向上に向けた分散化現象の解明を目的に，液液二相系格子ボルツマン法（以下，二相系 LBM）を適用した微粒子分散系の数値計算モデルを構築し，ブラウン運動する多数の微粒子からなる微粒子凝集体の分散化過程における基礎現象を数値計算により解明した結果をまとめたものであり，６章からなっている．

第１章は序論であり，新素材製造に際しての微粒子分散技術の重要性と，微粒子分散化の技術的課題について述べ，本論文の目的およびその重要性について述べている．

第２章は，微粒子凝集体の分散化の数値計算方法について述べている．Inamuro & Ii のモデルを基に，以下の改良した計算法が提示されている．二相系 LBM では，各微粒子に独立な“色付けした”識別関数を用いると，微粒子同士が衝突しても合一を防ぐことができるが，離れた位置の微粒子には同じ色を割り振り，同色の微粒子が近づいた場合には，自動的に色を付け替えるアルゴリズムが提案され，少ない識別関数で多数の微粒子を扱うことが可能になった．識別関数を異なる“色”同士で入れ替えることにより色の付け替えが実現し，計算負荷を抑えながら多数の微粒子の挙動を安定に計算することが可能になった．また，粒子間力として，DLVO 理論を基とし，粒子間の種々の斥力ポテンシャルを一般化する van der Waals ポテンシャルのカットオフモデルが実装された．さらに，ナノ粒子の分散挙動を明らかにするために，Langevin の揺動力モデルにより微粒子のブラウン運動が実装された．以上の方法により，粒子間に van der Waals 力および一般化された斥力を有し，ブラウン運動する多数の微粒子が Stokes 方程式に従って運動する微粒子分散系の挙動を固液の境界条件を設定することなく単純なアルゴリズムで計算することが可能になった．

第３章では，第２章で構築した数値計算法を用いて，同一粒子径の微粒子で構成された微粒子凝集体の，せん断流れ場における分散化について調べている．せん断流による流体力と粒子間引力との比である I, せん断流による流体力と粒子間最大引力との比である Y, ならびにせん断流による移動速度と自己拡散による移動速度の比である Péclet 数の３つの重要な無次元パラメータが導入され，種々の条件下での数値計算が行われている．その結果，無次元パラメータ Y が分散化の鍵となる因子であり，凝集体は Y が 0.001 より大きい場合に分散化することが示された．また，ブラウン運動は分散化を遅延し分散化に要するせん断流の作用時間を増大させることが明らかになり，Péclet 数が 10^5 より小さい場合にブラウン運動の効果は顕著であることが示された．

第４章では，粒径分布を有する多分散系を単純化した模型として，直径比 0.5 の大粒子および小粒子からなる微粒子凝集体が構成され，せん断流れ場における分散化挙動が，第３章で述べた単分散系の場合と比較されている．小粒子間，小粒子－大粒子間，大粒子間の I および Y を表す I^{11}，I^{12}，I^{22} および Y^{11}，Y^{12}，Y^{22}，ならびに小粒子，大粒子

京都大学	博士（ 工 学 ）	氏名	西山 卓哉

に対する Péclet 数を表わす Pe^1，Pe^2 の無次元パラメータが導入され，種々の条件下での数値計算が行われている．その結果，単分散系の場合と同様に，せん断流による流体力と粒子間最大引力との比（Y）が分散化の鍵となる因子であること，

Y^{11}，Y^{12}，Y^{22} の最大値を $Y^{\max}$，最小値を $Y^{\min}$ とすると，微粒子凝集体は $Y^{\max}$ が 0.002 より大きい場合に分散化し，$Y^{\min}$ も 0.002 より大きい場合には個々の粒子に至るまで分散化すること，および分散化に必要な Y の値は単分散系の場合とほぼ同じオーダーであることが示された．また，単分散系の場合と同様にブラウン運動は小粒子の分散化を遅延するが，大粒子に対しては逆に分散化を促進することが示され，ブラウン運動の効果が単分散系と異なることが見出された．また，ブラウン運動の効果は Péclet 数が 10^4 より小さい場合に顕著であることが示された．

第 5 章では，同一粒子径の微粒子で構成された凝集体の，伸長流れ場における分散化の数値計算が行われ，第 3 章で述べたせん断流れ場の分散化挙動と比較されている．流路中にオリフィスを配置することで伸長流れ場が生成されている．せん断流の場合と同様に，伸長流による流体力と粒子間引力との比である I^{ext}，伸長流による流体力と粒子間最大引力との比である Y^{ext}，および伸長流による移動速度と自己拡散による移動速度の比である $\mathrm{Pe}^{\mathrm{ext}}$（Péclet 数）の無次元パラメータが導入され，種々の条件下での数値計算が行われた．その結果，せん断流れ場の場合と同様に，無次元パラメータ Y^{ext} が分散化の鍵となる因子であることが明らかになり，凝集体は Y^{ext} が 0.0002 より大きい場合に分散化することが示された．この値は，せん断流れ場において定義された分散化に対する Y の閾値の 5 分の 1 であり，伸長流はせん断流より分散化に効果的であることが明らかになった．また，伸長流れ場においても，ブラウン運動は分散化を遅延すること，およびブラウン運動の効果は $\mathrm{Pe}^{\mathrm{ext}}$ が 2700 より小さい場合に顕著であることが示された．Péclet 数に対する閾値の比較から，ブラウン運動の分散化遅延効果はせん断流中より弱く，ブラウン運動の影響の観点からも伸長流が分散化に効果的であることが示された．

第 6 章は結論であり，本論文で得られた成果について要約するとともに，今後の進展が期待される研究課題について言及している．

氏　名	西山　卓哉

（論文審査の結果の要旨）

本論文は、新素材の製造過程で重要な微粒子分散現象の解明に向けて，液液二相系格子ボルツマン法（以下，二相系 LBM）を適用した微粒子分散系の数値計算モデルを構築し，ブラウン運動する多数の微粒子からなる微粒子凝集体の分散化過程における基礎現象を数値計算により解明した成果についてまとめたものであり，得られた主な成果は次のとおりである．

1．微粒子分散系に対する Inamuro & Ii の二相系 LBM モデルに，少ない識別関数（色）で多数の微粒子を計算するために，微粒子の“色付け替え”アルゴリズムを実装し，計算負荷を抑えながら多数粒子の挙動の安定した計算を可能にした．さらに，ナノ粒子の分散挙動を明らかにするために，Langevin の揺動力モデルにより微粒子のブラウン運動を実装した．また，粒子間力として，van der Waals ポテンシャルのカットオフモデルを用いた．

2．構築した数値計算法を用いて，同一粒子径の微粒子で構成された凝集体のせん断流れ場における挙動を調べた．重要な無次元パラメータとして，せん断流による流体力と粒子間最大引力との比である Y，ならびにせん断流による移動速度と自己拡散による移動速度の比である Pe を導入し，凝集体は $Y > 0.001$ で分散化すること，および $\mathrm{Pe} < 10^5$ でブラウン運動により分散化が遅延されることを明らかにした．

3．直径比 0.5 の大・小粒子からなる凝集体を構成し，せん断流れ場における挙動を調べた．小粒子間，小－大粒子間，大粒子間の Y を表す Y^{11}，Y^{12}，Y^{22}，ならびに小粒子，大粒子に対する Pe を表わす Pe^1，Pe^2 の無次元パラメータを導入し，凝集体は Y^{11}，Y^{12}，Y^{22} の最大値が 0.002 より大きい場合に分散化し，Y^{11}，Y^{12}，Y^{22} の最小値が 0.002 より大きい場合には個々の粒子に至るまで分散化することを明らかにした．分散化に必要な Y の閾値は単分散系と同じオーダーである．一方，$\mathrm{Pe}^1 < 10^4$ で小粒子の分散化は遅延されるが，$\mathrm{Pe}^2 < 10^4$ で大粒子の分散化が促進され，ブラウン運動の効果が単分散系と異なることを見出した．

4．オリフィスを用いて，同一粒子径の微粒子で構成された凝集体の伸長流れ場における挙動を調べた．伸長流による流体力と粒子間最大引力との比である Y^{ext}，ならびに伸長流による移動速度と自己拡散による移動速度の比である $\mathrm{Pe}^{\mathrm{ext}}$ の無次元パラメータを導入し，凝集体は $Y^{\mathrm{ext}} > 0.0002$ で分散化すること，および $\mathrm{Pe}^{\mathrm{ext}} < 2700$ でブラウン運動により分散化が遅延されることを明らかにした．

以上の内容により，本論文は，学術上，実際上寄与するところが少なくない．よって，本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める．また，平成 24 年 12 月 17 日，論文内容とそれに関連した事項について試問を行って，申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し，合格と認めた．