

京都大学	博士 (工学)	氏名	辰巳 怜
論文題目	Direct Numerical Simulation Studies on the Dynamics of Dispersed Particles in a Compressible Fluid (直接数値シミュレーションによる圧縮性流体中の分散粒子の動的挙動に関する研究)		
<p>(論文内容の要旨)</p> <p>本論文では、分散粒子の運動に対する溶媒の圧縮性の影響を理解するために直接数値シミュレーションの方法を開発し、それを用いて圧縮流体中に分散する粒子の動的性質を理論的立場から検討した。序論 (第1章) と結論 (第5章) を含め、全5章で構成されている。</p> <p>第1章は序論であり、既存の研究を概観するとともに、本研究で取り扱う検討内容を明確にしている。通常微粒子分散系のシミュレーションでは、溶媒流体の密度変化を無視する非圧縮性の仮定が用いられる。これは、流体中の運動量伝達方式である粘性拡散と音波伝播について、多くの場合に後者は前者に比して極めて短い時間スケールで起こるので頭には考慮しないという立場であり、音速無限大の極限を考えることに相当する。しかし、分散系の音波物性のように高周波数 (短時間スケール) の特性に注目する際や、粘性拡散と音波伝播の時間スケールが拮抗する油やシロップなどの高粘性流体の場合には、圧縮性の考慮が必要となる。しかし、分散系での流体圧縮性の影響に関する知見は乏しく、特に理論的な視点からの研究が大きく立ち後れているのが実情である。</p> <p>第2章では、溶媒流体の圧縮性を考慮した分散系のシミュレーション手法の開発を行った。微粒子分散系の動的挙動を扱うための数値解析手法には、流体の基礎方程式に対するモデル化・数値解法により様々な種類が提案されているが、本研究では、直接数値シミュレーション法を用いている。この方法は、流体の基礎方程式である連続の式、ナビエ・ストークス方程式と、分散粒子の運動を記述するニュートン方程式を、分散粒子表面での境界条件を満たすように同時に解くもので、流体と粒子の連成運動を正確に計算することが可能である。この手法の主な困難は、流体の運動を計算機で解くために導入した離散空間 (計算格子点) 上での流体-粒子境界の取り扱いにあり、計算の効率と精度に大きく関係する。その取り扱いについては複数の手法が考案されているが、その中の1つに、名嘉山と山本により開発された SP (Smoothed Profile) 法がある [Phys. Rev. E 71, 036707 (2005)]。この手法は計算効率と計算精度の両立する画期的なものであるが、本研究では SP 法をさらに発展させ、圧縮性流体への拡張を行った。すなわち、流体密度変化を考慮した連続の式とナビエ・ストークス方程式に対して SP 法を構築し直した。この手法を1粒子の動的挙動の解析に適用し、計算精度の確認を行うと共に、粒子周囲の流体流速場と密度場 (圧力場) に着目して、流体圧縮性が粒子運動に与える影響を調べた。更に流体に熱揺らぎを導入することで、分散粒子のブラウン運動が揺動散逸定理を満足することを確認した。</p>			

第3章では、溶媒流体中の2粒子間に流体力学的相互作用が伝搬する際の圧縮性の影響を調べた。分散系の動的挙動には、流体を介した分散粒子間の運動量交換、つまり流体力学的相互作用が大きく影響している。流体力学的相互作用は長距離に及ぶ多体相互作用であるため、微粒子分散系においてその実態を理論的に厳密に扱うのは極めて困難である。そのため、粒子対に対する理論的取り扱いを拡張し、多体の問題を粒子対の流体力学的相互作用 (RPY (Rotne-Pragar-Yamakawa) 易動度テンソルなど) の重ね合わせとして近似する取り扱いがよく用いられる。しかし、RPY 易動度テンソルを含めた流体力学的相互作用に関する理論的研究の多くは、粒子の運動に対して流体の運動は瞬時に追従するという擬定常流れ (ストークス流れ) の仮定に立脚しており、流体力学的相互作用は音波伝播による成分も粘性拡散による成分もどちらも瞬間的に伝達するものと仮定している。本研究ではそのような仮定を用いることなく2粒子間の流体力学的相互作用の伝達過程を詳細に取り扱い、流体圧縮性の影響を系統的に調べた。その結果、粘性拡散と音波伝播の各々が担う流体力学的相互作用の性質の違いを粒子周囲の流速場と関連づけて理解することに成功し、低圧縮性流体では流体力学的相互作用が音波として伝播した後で粘性拡散による効果が現れ始めるが、高圧縮性流体ではそれとは異質な流体力学的相互作用の伝達挙動が発現することを見出した。

第4章では、平行壁面間に拘束された流体中の1粒子の運動に対する流体の圧縮性の影響を調べた。流体力学的相互作用の1つの重要な事例として、壁面近傍における粒子挙動への影響がある。例えば、コロイドの土壤中輸送や膜分離、そして近年ではマイクロ流体工学など、狭隘な流路中での分散粒子の動的挙動を扱う際には特に重要となる。そのため、壁面近傍での分散粒子の動的挙動について古くから理論的研究が行われてきた。しかし、この場合にも前述の擬定常流れを仮定することが多く、粒子と壁面の間で流体力学的相互作用が伝達する過程に関する知見は十分に得られていない。そこで本研究では、平行壁面間に拘束された圧縮性流体中における1粒子の動的挙動に関する直接数値シミュレーションを行うべく、SP法を応用することで流体に対して粘着境界条件を持つ剛体壁面の導入を行った。この問題で特筆すべき点は、壁面の存在により、粘性拡散の消失と音波の過減衰が起こる点である。この現象は、音波は無限遠方に伝播してその影響力が消失し粘性拡散が持続するバルク中とは対照的な状況を作り出すものである。本研究ではその様子を流速場の時間変化から確認すると共に、それに惹起される粒子挙動を調べた。初めは粘性拡散に支配されていた粒子運動が次第に音波支配に移行することが認められ、この過程における流体圧縮性の影響が明らかになった。

最後の第5章は結論であり、第2章から第4章で得られた結果を総括するとともに、本論文全体の結論を記した。

## (論文審査の結果の要旨)

本論文は、分散粒子の運動に対する溶媒の圧縮性の影響を理解するために、直接数値シミュレーションを用いて行った研究をまとめたものである。固体微粒子が流体中に懸濁した分散系は、多くの工業プロセスや製品に応用されている身近な存在であるが、過去の理論的研究では溶媒の密度変化を無視して非圧縮性を仮定することが多かった。しかし、分散系の音波物性や、粘性拡散と音波伝播の時間スケールが拮抗する高粘性溶媒の場合には、圧縮性の考慮が必要となる。以下に本研究の概要を記す。

- 1) 溶媒流体の圧縮性を考慮した分散系のシミュレーション手法の開発を行った。すなわち、密度変化を考慮した連続の式とナビエ・ストークス方程式で溶媒流体の運動を、ニュートン方程式で分散粒子の運動をそれぞれ記述し、高速フーリエ変換を用いて高速かつ高精度に解く手法を構築した。本手法を1粒子の運動に適用し、計算精度の確認を行うと共に、粒子周囲の流体流速場と密度場(圧力場)に着目して、圧縮性が粒子運動に与える影響を調べた。更に、流体に熱揺らぎを導入し、分散粒子のブラウン運動に対する揺動散逸定理の成立を確認した。
- 2) 溶媒流体中の2粒子間に流体力学的相互作用が伝搬する際の圧縮性の影響を調べ、粘性拡散と音波伝播の各々が担う流体力学的相互作用の性質の違いを粒子周囲の流速場と関連づけて理解した。低圧縮性流体では、流体力学的相互作用が音波として伝播した後で粘性拡散による効果が現れ始めるが、高圧縮性流体では、それとは質的に異なる流体力学的相互作用の伝搬挙動が発現することを見出した。
- 3) 平行壁面間に拘束された流体中の1粒子の運動に対する流体の圧縮性の影響を調べた。この状況を直接数値シミュレーションで実現するため、流体に対して粘着境界条件を持つ剛体壁面を導入し、壁面による粘性拡散の消失と音波の過減衰が発生する様子を流速場の時間変化から確認した。この現象はバルク中とは質的に異なる粒子挙動を惹起し、短時間領域では粘性拡散支配であったものが、時間の経過とともに音波支配に移行する。このような非定常現象に対する流体の圧縮性の影響を明らかにした。

以上、本論文は、新しいシミュレーション手法の構築に加えて、圧縮性溶媒中の微粒子の挙動に関する有用な知見を多く含んでおり、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25年2月27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。