

## 審査の結果の要旨

氏名 近藤 雅裕

本論文は粒子法の数値安定性とマイクロスケール流体解析に関する研究で、6章より構成されている。

第1章は緒言で、研究の背景と目的が述べられている。複雑な工学システムを支配している現象は、気体・液体・固体の運動、表面張力などの複数の物理現象の相互作用の結果である場合が多い。また、分子スケールから連続体スケールまで異なる空間スケールの複合現象となっている場合も多い。その例として固体高分子形燃料電池における空気と水の輸送メカニズムの問題を挙げている。従って、マルチフィジクスおよびマルチスケールな現象を統一的に扱うことができる手法の開発が望まれているとしている。

第2章ではハミルトン力学に基づく粒子法の開発についてまとめられている。厚肉弾性体のためのMPS(Moving Particle Semi-implicit)法による3次元シンプレクティックスキームが開発され、検証計算により大変形を伴う場合においても力学的エネルギーの保存性に優れていることが示された。最小自乗法を用いる粒子法では、シンプレクティックスキームを維持しつつ人工的なポテンシャルを新たに導入し、局所的な振動の抑制に成功している。その有効性は、片持ち梁の釣り合いの解析、梁を伝わる弾性波の解析、複雑に振動する梁の解析によって示された。さらに、薄肉弾性体に対するハミルトン力学に基づく粒子法が提案され、薄板の自由振動の解析によって計算手法が適切であることが確認された。

第3章では粒子法による非圧縮性流体解析の安定性の改善が述べられている。これまでのMPS法による非圧縮性自由表面流れの解析では、圧力の不自然な数値振動や粒子の運動の不安定性が問題となっていた。そこで、圧力の計算に密度の時間に関する1階微分および2階微分を用いることにより振動抑制が試みられた。静水圧解析、ダム崩壊解析、液滴の伸長解析において、本手法が圧力の数値的な振動を効果的に抑制することが示された。

第4章では粒子法による表面張力モデルの開発についてまとめられている。これまで粒子法に用いられた表面張力の計算方法には、CSF(Continuum Surface Force)モデルと粒子間にポテンシャルを導入するモデルがあった。CSFモデルでは粒子配置から表面法線および表面曲率の評価を行うために複雑な定式化が必要なのに対して、粒子間ポテンシャル

を用いるモデルでは定式化が単純である。また、固体壁との間にも同様なポテンシャルを導入することで濡れ性も統一的に表現できる。本研究では、粒子間ポテンシャルから表面エネルギーを見積もることで表面張力係数および接触角と粒子間ポテンシャルの大きさとの関係を示した。これによって表面張力と濡れ性の物性値からポテンシャルを定量的に決定できるようになった。本研究で開発した粒子間ポテンシャルによる表面張力モデルは、燃料電池の流路およびガス拡散層の解析に適用された。

第5章では粒子法による物質拡散モデルの開発について述べられている。燃料電池のMPL(Micro Porous Layer)に存在する間隙はマイクロスケール以下であり、物質拡散が支配的になっていると考えられる。また、撥水性の狭空間ではケルビン効果により気体になりやすくなるので水は気体として存在していて、物質拡散によって空気(酸素)と水(水蒸気)が逆方向に輸送されていると予測される。これらの仮説を確かめるためには、マイクロスケール以下での物質拡散の効果を含んだ計算手法が求められている。マイクロスケール以下の物質拡散の効果を含んだ粒子法としてDPD(Dissipative Particle Dynamics)法がある。流動による物質輸送も同時に考慮できるためには、DPD法のアルゴリズムに従った粒子運動を流体とみなしたときの粘性が、実際の空気または水と同程度になる必要がある。そこで、DPD法を用いて単純せん断流および体積力を与えた並行平板流れの計算を行い、得られた平均速度分布から粘性係数を算出したところ、妥当な値であることが示された。さらに、表面張力、気液の相変化、希薄効果による壁スリップについても評価できる計算手法が開発された。

第6章は結言で、本研究のまとめが述べられている。

以上を要するに、本研究ではハミルトン力学に基づく弾性解析手法の開発、非圧縮性流体解析の安定性の改善、粒子間ポテンシャルを用いた表面張力モデルの開発、DPD法におけるマイクロスケール以下の現象に適用できる計算モデルの開発が行われた。これらの成果は粒子法によるマルチフィジクス・マルチスケール解析を大きく進展させるものであり、システム量子工学の進歩に貢献するところが少なくない。よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。