

審査の結果の要旨

論文提出者氏名： 吉本 勇太

本論文は、ナノスケールにおける物質・運動量拡散のダイナミクスに焦点を置き、メソスコピックなレベルでダイナミクスを追跡できる粗視化モデルの構築手法を開発することを目的としている。

ナノ多孔質を用いた分離膜や燃料電池においては、ナノ空間における熱物質輸送が性能に大きな影響を与える。連続体近似に基づいた Navier-Stokes 方程式による解析だけでは、表面効果の顕在化による内壁へのぬれの不均一化や物質輸送の促進等の現象を捉えることができない。一方、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) 法は輸送の素過程を解析する方法として非常に有効であるが、扱える時空間スケールの制限により、燃料電池内のマイクロポーラス層のような直径 10-100 nm 程度の細孔が連結した系における輸送を直接計算することは難しい。粗視化計算法のひとつである散逸粒子動力学 (Dissipative Particle Dynamics: DPD) 法では、1 個の粗視化粒子で複数の原子・分子を表現することで、MD 法よりも時空間スケールの大きな計算が可能である。ただし、従来の DPD 法では質量、エネルギー、長さが無次元化されており、実現象と対応づけるためには系の等温圧縮率や拡散係数に基づいたスケージングが必要であるため、定量的に精緻な議論を展開することは難しい。そこで本論文では、DPD 法をミクロスコピックな観点から再構築し、物質・運動量輸送を再現可能な粗視化モデルをボトムアップ方式で構築する手法を検討している。その際、粒子運動の履歴性を考慮した non-Markovian DPD (NMDPD) モデルを提案している。

本論文は、「粒子運動の非マルコフ性を考慮した粗視化動力学」と題し、全 5 章から構成されている。

第 1 章は「序論」であり、研究の背景及び DPD に関する従来の研究を示した上で、本論文の位置づけ及び目的を述べている。

第 2 章は「粗視化粒子の運動方程式」であり、原子・分子群 (クラスタ) の重心を粗視化粒子とみなし、クラスタの重心運動を規定する一般化 Langevin 方程式に基づいて粗視化粒子の運動方程式を導出している。その際、Markov 近似に基づいた DPD 法を拡張し、粒子運動の履歴性を考慮した NMDPD 法を提案している。NMDPD の粒子間力 (平均力、摩擦力、揺動力) は下層における微視的粒子の運動及び相互作用によって記述されており、ミクロスコピックな解析からボトムアップ方式でモデリングが可能である。なお、摩擦力・揺動力は履歴性を持つ力として定式化されている。

第3章は「分子動力学法による粗視化モデルの構築」であり、Lennard-Jones (LJ) 流体の NMDPD モデルを MD 計算によりボトムアップ方式で構築している。LJ 粒子群で構成されるクラスタ間に作用する力に基づいて NMDPD における平均力、摩擦力、揺動力をモデリングする方法を述べている。また、揺動力の時間相関関数とクラスタ重心の速度相関関数を比較し、液体等の高密度な系においては Markov 近似に基づいた DPD が適用できないことを示している。その上で、揺動力の時間相関関数に基づいて履歴性を持った摩擦力・揺動力をモデリングする方法を詳説している。

第4章は「粗視化モデルの評価」であり、MD 計算によるサンプリング結果に基づき、平衡及び非平衡状態における DPD 及び NMDPD シミュレーションを行い、DPD 及び NMDPD 系の静的・動的特性を MD 系のものと比較している。Markov 近似に基づいた DPD モデルは、平衡状態における温度・拡散係数を過小評価、粘性係数を過大評価しており、揺動散逸関係が不適切であることが指摘されている。それに対して、NMDPD モデルは MD 系の温度、拡散係数、粘性係数を DPD よりも正確に再現できており、物質・運動量拡散のダイナミクスを解析する方法としての NMDPD の可能性が示唆されている。また、従来の DPD では考慮されていなかった粒子間を結ぶ動径方向に垂直な面内の摩擦力・揺動力が、NMDPD でダイナミクスを再現する上では重要な役割を果たすことが示されている。

第5章は「結論」であり、以上の考察から得られた知見をまとめている。

以上述べたように、本論文ではダイナミクスを再現可能な粗視化モデルを恣意的なスケールリング等の手順を踏むことなくボトムアップ方式で構築する手法を提案しており、DPD のミクロスコピックな基礎づけに資する重要な知見を示している。特に、履歴性を持った摩擦力・揺動力をミクロスコピックな解析から精緻に構築する手法を示した点は本論文の大きな特徴であり、評価に値する。本論文で示された知見は、燃料電池内のマイクロポーラス層のようにナノ空間における熱物質輸送が装置の性能に大きな影響を与える系の解析に必要となる、ゆらぎと散逸の影響を考慮した粗視化シミュレーション法を開発する上でも有用であり、その工学的意義は大きい。

よって本論文は博士（工学）学位請求論文として合格と認められる。