

メソスケール流体解析のための粒子法の開発

Development of a particle method for meso scale analysis

- 近藤雅裕, 東京大学大学院工学系研究科, 文京区本郷 7-3-1, E-mail : kondo@mps.q.t.u-tokyo.ac.jp
越塚誠一, 東京大学大学院工学系研究科, 文京区本郷 7-3-1, E-mail : koshizuka@sys.t.u-tokyo.ac.jp
酒井幹夫, 東京大学大学院工学系研究科, 文京区本郷 7-3-1, E-mail : mikio_sakai@sys.t.u-tokyo.ac.jp
Masahiro KONDO, School of Engineering, Tokyo University, 7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku
Seiichi KOSHIZUKA, School of Engineering, Tokyo University, 7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku
Mikio SAKAI, School of Engineering, Tokyo University, 7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku

To reveal the Mechanism of droplet transportation through MPL (Micro Polous Layer) in PEFC (Polymer Electrolyte Fuel Cell), meso-scale flow is to be analyzed. In meso-scale flow, surface tension and rarefaction effect play important roles. We develop a particle method which can express surface tension and rarefaction effect based on DPD (Dissipative Particle Dynamics). We also evaluate viscosity in DPD to compare the macroscopic behavior to continuum flow.

1. はじめに

燃料電池の膜電極複合体 (MEA:Membrane Electrode Assembly) では水素と酸素から水ができる反応がおこる。水素および酸素が流入する一方で水が流出するため逆方向の物質輸送が同時に生じており、MEA 内の物質輸送メカニズムを解明することで運転効率を高められると期待されている¹。流路およびガス拡散層についてはマイクロスケールの構造なので連続体解析が可能である。しかし、カーボン繊維でできたガス拡散層と触媒層との間にある多孔質体層 (MPL: Micro Polous Layer) はナノスケールの多孔質体構造を持つ撥水性の物質である。このようなナノスケールの撥水性の狭空間ではケルビン効果による飽和水蒸気圧の上昇の影響やブラウン運動による物質拡散の効果が大きくなっている可能性がある。具体的には、ケルビン効果によって水が気体となることで物質拡散が大きくなり、空気と水が逆方向に輸送されているという仮説がある²。さらに、気体が多孔質体のような狭い空間を流れる場合には、希薄流体であるため壁付近スリッブ³が生じて圧力損失が低下するとも言われている。これらの仮説を確かめるためには、物質拡散の効果、表面張力および濡れ性、気液の相変化、希薄効果などを表現できる計算モデルを開発する必要がある。

ブラウン運動によるランダム性を表現できる粒子法として、ランダムな粒子間相互作用力を与える散逸粒子動力学 (DPD:Dissipative Particle Dynamics) 法⁴がある。DPD 法は分子スケールと連続体スケールの中間的な空間スケールであるメソスケールの現象を解析できる可能性がある⁵と期待されている。Groot and Warren⁵は分子スケールとの関係から DPD 法のパラメータを決定する方法を示した。また、統計力学的な考察から DPD 法における流動がない場合の輸送係数が示されている^{6, 7, 8}。また、相分離の計算モデル⁹、表面張力モデル^{10, 11}、気液共存モデル¹²なども提案されている。

本研究では、DPD 法におけるマクロな流れの粘性係数を評価することで連続体力学における流体の振る舞いと比較するとともに、ランダム力による物質拡散効果を調べるために拡散係数を計算する。また、表面張力、気液相変化、希薄効果の解析のための計算モデルを開発する。

2. 散逸粒子動力学法

DPD 法では粒子間相互作用力として、

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{F}_{ij}^C + \sum_j \mathbf{F}_{ij}^D + \sum_j \mathbf{F}_{ij}^R \quad (1)$$

と運動量保存性のある力が与えられる。ここで、 \mathbf{F}_{ij}^C は粒子 ij 間に導入されたポテンシャルより導かれる保存力であり、 \mathbf{F}_{ij}^D はエネルギー散逸力であり、 \mathbf{F}_{ij}^R はランダム

力である。座標系によらない定式化を行うためには (ガリレイ不変性を満足するためには) 散逸力 \mathbf{F}_{ij}^D およびランダム力 \mathbf{F}_{ij}^R が 2 粒子間の相対位置ベクトル $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ および相対速度ベクトル $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i$ の組み合わせによって定式化される必要がある。ここで、 \mathbf{r}_i および \mathbf{v}_i はそれぞれ粒子 i の座標および速度である。散逸力およびランダム力は

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma\omega_D(r_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij} \quad (2)$$

および

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \sigma\omega_R(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}\zeta_{ij} \quad (3)$$

と定式化する。ただし、 $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$ は 2 粒子間 ij の距離であり、 $\mathbf{e}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$ は粒子 i から粒子 j に向かう単位ベクトルである。また、 ζ_{ij} は $\zeta_{ij} = \zeta_{ji}$ を満たすホワイトノイズであり、

$$\langle \zeta_{ij}(t) \rangle = 0 \quad (4)$$

および

$$\langle \zeta_{ij}(t)\zeta_{i'j'}(t') \rangle = (\delta_{ii'}\delta_{jj'} + \delta_{ij'}\delta_{ji'})\delta(t-t') \quad (5)$$

の確率特性をもつ。 $\zeta_{ij} = \zeta_{ji}$ であるため運動量の保存性がある。また、 ω_D および ω_R は重み関数であり、散逸力およびランダム力の働く範囲を決める。 γ および σ はそれぞれの項の係数であり、系に対するエネルギー散逸の速さおよびランダム力によるエネルギー供給の速さをそれぞれ決めている。散逸力は粒子 i および粒子 j がお互いに近づこうとしている場合には斥力として働き、逆に粒子 i および粒子 j がお互いに離れようとしている場合には引力として働く。それゆえエネルギーを散逸するのである。一方、ランダム力は系の熱運動を維持するように粒子に力を与え続ける。

式 (2) および式 (3) をニュートンの運動方程式 (式 (1)) に代入することによって、ランジュバン方程式が

$$d\mathbf{x}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} dt \quad (6)$$

$$d\mathbf{p}_i = \left[\sum_j \mathbf{F}_{ij}^C + \sum_j \mathbf{F}_{ij}^D \right] dt + \sum_j \sigma\omega_R(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}dW_{ij} \quad (7)$$

と得られる。ただし、 m_i は粒子 i の質量である。また、 $dW_{ij} = dW_{ji}$ は独立なウィーナー過程である。ウィーナー過程というのはブラウン運動を確率で表現した確率過程のことであり、

$$dW_{ij}dW_{i'j'} = (\delta_{ii'}\delta_{jj'} + \delta_{ij'}\delta_{ji'})dt \quad (8)$$

を満たすことが知られている。

DPD 法ではランジュバン方程式を時間に関して

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \Delta t) = & \mathbf{v}_i(t) \\ & - \frac{\alpha}{m} \sum_j \omega_C(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}\Delta t \\ & - \frac{\gamma}{m} \sum_j \omega_D(r_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij}\Delta t \\ & + \frac{\sigma}{m} \sum_j \omega_R(r_{ij})\mathbf{e}_{ij}\theta_{ij}\sqrt{\Delta t} \end{aligned} \quad (10)$$

と離散化して計算を行う。ただし、 θ_{ij} は確率変数で

$$\langle \theta_{ij} \rangle = 0 \quad (11)$$

および

$$\langle \theta_{ij}\theta_{i'j'} \rangle = (\delta_{ii'}\delta_{jj'} + \delta_{ij'}\delta_{ji'}) \quad (12)$$

の確率特性を持つ。また、熱平衡状態において適切な速度分布となるためには、

$$\omega_R(r) = \omega_D^{1/2} \quad (13)$$

および

$$\sigma = (2k_B T \gamma)^{1/2} \quad (14)$$

を満たす必要がある。

本研究では、規格化された重み関数

$$\omega(r_{ij}) = \max\left(\frac{3(1-r_{ij})}{\pi r_c^3 n}, 0\right) \quad (15)$$

を用い、保存力項、散逸力項、ランダム力項のそれぞれの重み関数を

$$\omega_C(r_{ij}) = \omega_D(r_{ij}) = \omega_R(r_{ij})^2 = \omega_R(r_{ij})^2 \quad (16)$$

とする。

3. 壁境界モデル

分子動力学で主に用いられる境界条件は周期境界条件あるいは対称境界条件である。DPD 法も分子スケールの解析手法を粗視化した手法としての性格を持つため、連続体スケールの流体力学で用いられているような圧力境界や速度境界などの境界条件は確立されていない。流体力学では固体壁を表す境界としてスリップ境界およびノンスリップ境界が挙げられる。これらの壁境界についても DPD 法では確立された手法はない。そこで、DPD 法におけるノンスリップ境界モデルとして本研究では以下のようなものを用いる。

壁境界は対称境界を用いてモデリングする。すなわち、粒子 i が壁付近にある場合を境界を挟んで線対称となる位置に仮想粒子 i' を置く。このとき、粒子 i' には粒子 i の速度と反対向き

$$\mathbf{v}_{i'} = -\mathbf{v}_i \quad (17)$$

を与える (図 1(a))。分子動力学法では、保存力のみで定式化されるため粒子速度に応じて働く力がないので、こ

のように壁境界の外側の粒子に仮想的な速度を与えることは計算結果と無関係だが、DPD 法の散逸力は粒子速度に応じて働く力なので、このようなモデリングを行うことで壁と粒子との相互作用が生まれる。壁が移動壁の場合にも同様に壁の速度 \mathbf{v}_{wall} に応じて

$$\mathbf{v}_{i'} = 2\mathbf{v}_{\text{wall}} - \mathbf{v}_i \quad (18)$$

と仮想粒子に速度を与える (図 1(b))。

また、粒子が壁と衝突した場合には

$$\mathbf{v}_i^{\text{after}} = -\mathbf{v}_i^{\text{before}} \quad (19)$$

と壁との衝突後に衝突前と反対向きの速度を持つようにする (図 2(a))。これは、流体と壁との間の力の要因となっている壁の細かい凹凸を粗視化したものである。壁に細かい凹凸がある場合にはマクロ的に見た壁の法線と実際に分子が衝突した場所の法線は必ずしも一致しない。ミクロ的に見た法線方向がランダムに存在するならば、粒子が壁と衝突する際には粒子の速度ベクトルに垂直な面に衝突する可能性が高い。本モデルは、粒子と壁の衝突ではすべて速度ベクトルに対して垂直な面に衝突すると仮定して粗視化したモデルである。壁が移動壁の場合も同様に衝突後の速度が、

$$\mathbf{v}_i^{\text{after}} = 2\mathbf{v}_{\text{wall}} - \mathbf{v}_i^{\text{before}} \quad (20)$$

となるようにする (図 2(b))。

本モデルは、連続体スケールの流体力学において用いられているような壁境界上で流速がなくなるような完全なノンスリップ境界条件ではないが、壁との相対速度によって壁付近の粒子が抵抗力を受けることを表現できる計算モデルである。

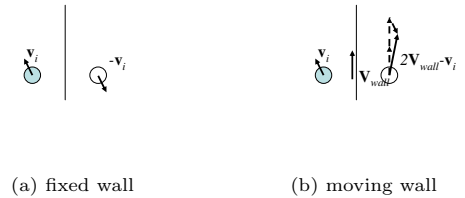


Fig. 1: Virtual velocity out of wall boundary

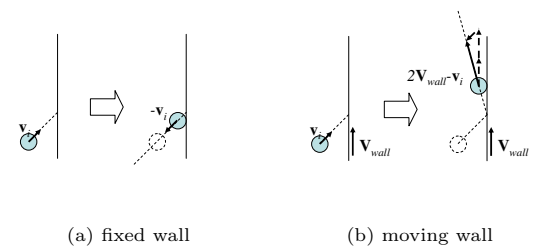


Fig. 2: Collision to wall boundary

4. DPD 法の粘性について

DPD 法のアルゴリズムに従う粒子群を流体とみなした場合の粘性係数を計算する。熱平衡状態に近い場合の粘性については、Marsh et al.⁷によって理論的な考察が行われている。本研究では、単純せん断流および平行平板間に重力を加えた流れの解析を用いてマクロな流動が大きい場合の粘性を計算する。

4.1 単純せん断流の解析

x 軸方向 10[nm]、y 軸方向 100[nm] の計算体系において、x 軸正方向の境界を速度 100[m/s] で y 軸方向に移動する壁とし、x 軸負方向の境界を固定壁とし、y 軸方向の境界を周期境界とする。表 1 の計算条件を用いて計算を行う。

Tab. 1: Calculation of simple shear flow

影響半径 r_c	2.5[nm]
時間刻み幅 Δt	1.0×10^{-13} [sec]
粒子質量 m	1.0×10^{-24} [kg]
単位堆積あたりの粒子数 n	1.0×10^{27} [個]
散逸力の係数 γ	1.0×10^8
ランダム力の係数 σ	1.0×10^{-6}
保存力の係数 α	1.0×10^{-6}

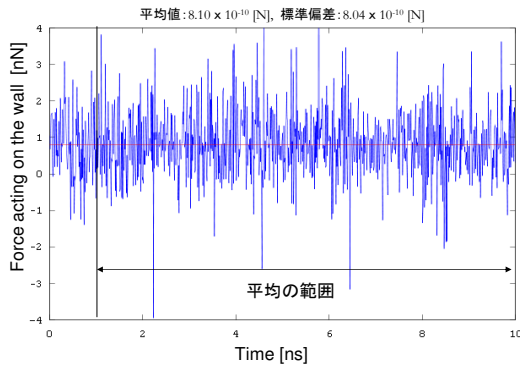


Fig. 3: Time history of F_{wall} in the simple shear flow

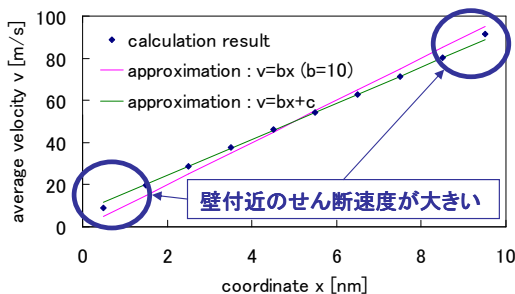


Fig. 4: Average velocity distribution in the simple shear flow

壁にかかる力 F_{wall} の履歴を図 3 に示す。壁にかかる

力 F_{wall} はランダム力によって振動しているので十分に長い時間平均を行う。 F_{wall} の平均値よりせん断粘性係数を計算すると

$$\mu = \frac{F_{wall} W_x}{V_{wall} S_y} = 8.10 \times 10^{-4} [Pa \cdot sec] \quad (21)$$

となる。また、平均速度分布は図 4 のようになる。壁付近は境界の影響を受けてせん断速度が大きくなっている。このため、直線形 velocity 分布を仮定していた式 (21) による粘性計算では、壁境界の影響を受けてしまっているといえる。粘性係数を計算する際に境界の影響を受けないようにするためには、流路の中央付近のせん断速度を評価する必要がある。壁付近のデータを取り除いた速度分布から粘性係数を計算すると

$$\mu = \frac{F_{wall}}{b S_y} = 9.45 \times 10^{-4} [Pa \cdot sec] \quad (22)$$

となる。

4.2 重力を加えた流れの解析

x 軸方向 10[nm]、y 軸方向 100[nm] の計算体系において、x 軸方向の境界を固定壁、y 軸方向の境界を周期境界とする。DPD 粒子に $g = 1.0 \times 10^{12} [m/s^2]$ の重力を作用させる。単純せん断流の解析と同じパラメータ (表 1) を用いて計算を行う。

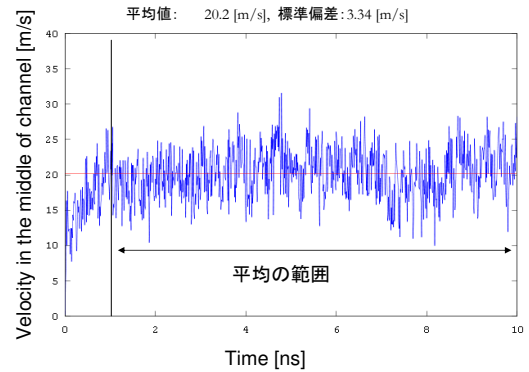


Fig. 5: Time history of maximum velocity V_{max} in the flow between parallel walls

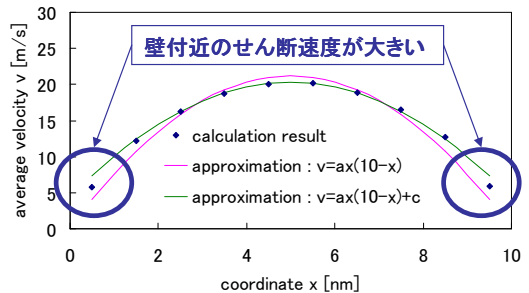


Fig. 6: Average velocity distribution in the flow between parallel walls

放物線形の平均速度分布を仮定し平板間中心の速度 V_{max} から粘性係数を計算すると、

$$\mu = \frac{1}{8} \frac{\rho g W_x^2}{V_{max}} = 6.19 \times 10^{-4} [Pa \cdot sec] \quad (23)$$

となる。このとき、平板間中心の速度は図 5 に示すようにゆらぎを持っているので十分に長い時間平均を行う必要がある。また、平均速度分布は図 6 のようになり、放物線形の分布と比較して壁付近におけるせん断速度が大きくなっている。このため、壁付近のデータを取り除いた放物線近似の x に関する 2 次項の係数 a から粘性係数を計算すると

$$\mu = \frac{\rho g}{2a} = 7.84 \times 10^{-4} [Pa \cdot sec] \quad (24)$$

となる。

大気圧下での水の粘性係数は 20 で $10.0 \times 10^{-4} [Pa \cdot sec]$ なので、単純せん断流の解析で求めた粘性係数と重力を加えた流れの解析で得られた粘性係数はだいたい実際の水と同程度である。しかし、同じ相互作用の係数 $(\alpha, \gamma, \sigma) = (1.0 \times 10^{-6}, 1.0 \times 10^8, 1.0 \times 10^{-6})$ を用いたにも関わらず異なっている。これは、DPD 法の粒子群を流体とみなした場合の粘性係数には温度依存性があるためと考えている。DPD 法では散逸力の係数とランダム力の係数を決めると式 (14) により熱平衡状態の温度が決まる。しかし、単純せん断流および重力を加えた流れの解析では、系の外部からのエネルギー供給があるため定常状態ではあるが熱平衡状態ではない。単純せん断流の場合には移動壁から、重力を加えた流れの解析では重力からそれぞれエネルギーが供給されている。2つの解析ではエネルギーの供給が異なるので、粒子の平均運動エネルギーすなわち温度も異なっている。粒子の運動が激しい場合には運動量の輸送速度も大きくなるので粘性係数は大きくなる。単純せん断流の平均速度分布 (図 4) および重力を加えた流れの平均速度分布 (図 6) とを比較して単純せん断流の方がせん断速度は大きく、粒子の運動が激しい。このため、単純せん断流の方が粘性係数が大きく計算されたと考えられる。

5. DPD 法の拡散について

DPD 粒子は粒子間に与えられた散逸力およびランダム力によってブラウン運動のようなランダムな運動をする。このランダムな運動による物質輸送を評価するためには、DPD 法における拡散の程度を知る必要がある。そこで、熱平衡状態における粒子の拡散係数を計算する。 x 軸方向 $10 [nm]$ 、 y 軸方向 $100 [nm]$ の計算体系において、 x 軸方向の境界を固定壁、 y 軸方向の境界を周期境界とする。単純せん断流および重力を加えた流れの解析と同じ表 1 に示した計算条件を用いて解析を行う。

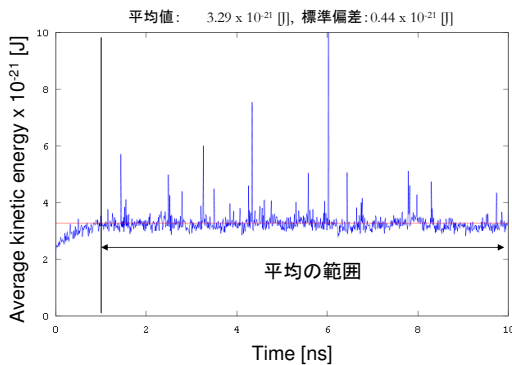


Fig. 7: Average kinetic energy of particles

図 7 は粒子の平均運動エネルギーの履歴である。熱平衡状態に達しているのは $t = 1.0 [ns]$ 付近であることがわかる。粒子の平均運動エネルギーは $3.29 \times 10^{-21} [J]$ であるから、系の温度は

$$T = \frac{K}{k_B} = \frac{3.29 \times 10^{-21}}{1.38 \times 10^{-23}} = 238 [K] \quad (25)$$

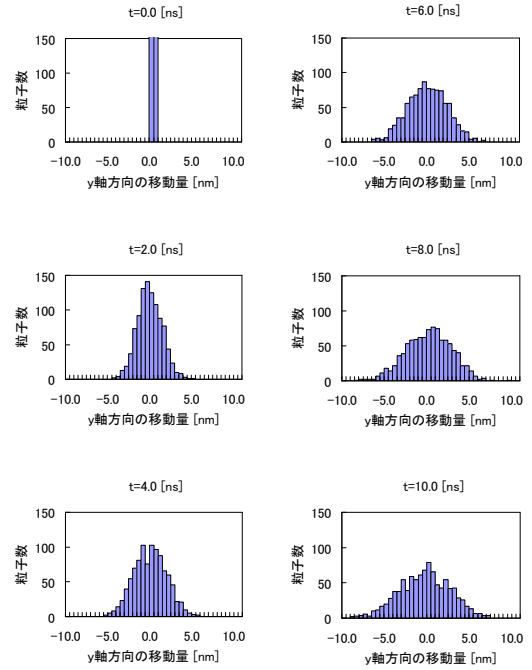


Fig. 8: Diffusion of DPD particles (histogram)

と計算できる。

図 8 は初期状態からの流路方向 (y 軸方向) への変位をヒストグラムで示したものである。ガウス分布に近い分布となっていることがわかる。拡散方程式

$$\frac{\partial \rho(t, x)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(t, x)}{\partial x^2} \quad (26)$$

の解

$$\rho(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{x^2}{4Dt} \right] \quad (27)$$

とガウス分布

$$\rho(t, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi s^2}} \exp \left[-\frac{x^2}{2s^2} \right] \quad (28)$$

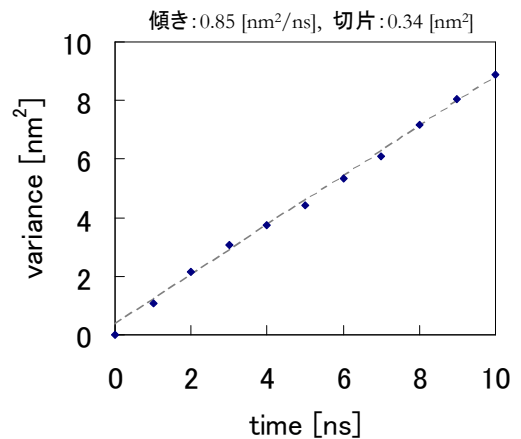


Fig. 9: Proportionality of time and variance

を比較すると、

$$2Dt = s^2 \quad (29)$$

が得られる。ただし、 D は拡散係数で、 s^2 はガウス分布の分散である。粒子の y 軸方向変位の分散と時間の関係を図 9 に示す。通常の拡散と同様に分散と時間に比例関係があることがわかる。また、図 9 の勾配より、拡散係数 D は、

$$D = \frac{s^2}{2t} = \frac{0.85}{2} = 0.38[\text{nm}^2/\text{ns}] \quad (30)$$

と計算される。このとき、系が平衡状態に達していない $t = 0.0[\text{ns}]$ の分散は無視して、 $t = 1.0[\text{ns}]$ から $t = 10.0[\text{ns}]$ までの時間と分散の関係から、勾配を計算した。

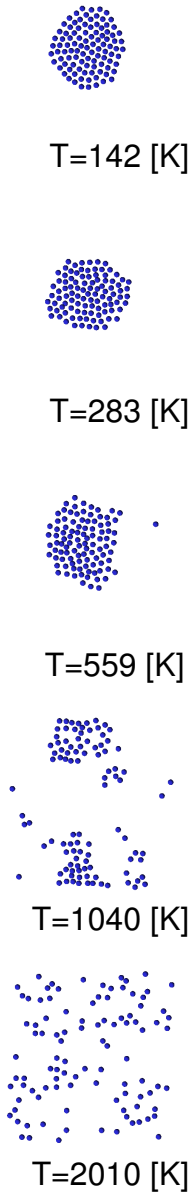


Fig. 10: Surface tension and phase change

6. 表面張力および相変化の計算

DPD 法における粒子間隔に比例した斥力を生じる 2 粒子間ポテンシャル力の代わりに、分子間力に似た近距離で斥力、長距離で引力となるポテンシャル力

$$\mathbf{F}_i^P = - \sum_j \left[C_{repulsive} \frac{(1 - r_{ij}/r_c)^4}{\pi r_c^2 n} \mathbf{e}_{ij} + C_{attractive} \frac{(r_{ij}/r_c)(r_{ij}/r_c - 1)}{\pi r_c^2 n} \mathbf{e}_{ij} \right] \quad (31)$$

を用いて計算を行う。ただし、 $C_{repulsive}$ は近距離の斥力の大きさを決める係数で、 $C_{attractive}$ は遠距離の引力を決める係数である。計算領域は x 軸方向 $30[\text{nm}]$ 、 y 軸方向 $30[\text{nm}]$ の正方形領域とし、全方向周期境界条件を用いて計算を行う。計算条件を表 2 に示す。ただし、ランダム力の係数は 5 種類の値を用いることで、平衡状態での温度の異なる解析をそれぞれ行う。

Tab. 2: Calculation of surface tension and phase change

影響半径 r_c	$2.5[\text{nm}]$
時間刻み幅 Δt	$1.0 \times 10^{-13}[\text{sec}]$
粒子質量 m	$1.0 \times 10^{-24}[\text{kg}]$
単位堆積あたりの粒子数 n	$1.0 \times 10^{27}[\text{個}]$
散逸力の係数 γ	1.0×10^8
ランダム力の係数 σ	1.00×10^{-6}
	1.41×10^{-6}
	2.00×10^{-6}
	2.82×10^{-6}
	4.00×10^{-6}
斥力の係数 $C_{repulsive}$	15.0
引力の係数 $C_{attractive}$	2.0

計算結果を図 10 に示す。ランダム力が小さく温度が低い場合には表面張力によって液滴が丸くなる一方で、温度が高くなるに従って粒子配置が散逸的になる様子がわかる。液体状態と気体状態を分子スケールで見ると、分子同士の引力によってバラバラに飛び回らず塊として存在している状態が液体であって、分子の運動エネルギーが大きくなって分子同士の引力に打ち勝ってバラバラに飛び回っている状態が気体である。散逸力とランダム力を用いる粒子法においても、近距離で斥力、長距離で引力となるポテンシャル力を用いることでこの様子を表現できる。

7. 希薄効果のある流れ

流路幅に対して平均自由行程が大きい場合、すなわち、クヌーセン数が非常に大きい場合には、壁付近でスリップが起こることによりせん断速度が大きくなり圧力損失が連続体近似を行って計算した場合よりも低下することが知られている³。散逸力とランダム力を用いる粒子法においても、粒子数を少なくすることで、このような壁付近のスリップの効果があらわれるか検討する。

平行平板間における単純せん断流の計算体系を用いて、粒子数を少なくして解析を行う。 x 軸方向 $10[\text{nm}]$ 、 y 軸方向 $100[\text{nm}]$ の計算体系において、 x 軸正方向の境界を速度 $100[\text{m/s}]$ で y 軸方向に移動する壁とし、 x 軸負方向の境界を固定壁とし、 y 軸方向の境界を周期境界とし、表 3 の計算条件を用いる。粒子数を 1000 個、250 個、160 個、90 個とする場合のそれぞれについて解析を行う。

Tab. 3: Calculation of rarefaction effect

影響半径 r_c	$2.5[\text{nm}]$
時間刻み幅 Δt	$1.0 \times 10^{-13}[\text{sec}]$
粒子質量 m	$1.0 \times 10^{-24}[\text{kg}]$
単位堆積あたりの粒子数 n	$1.0 \times 10^{27}[\text{count}]$
散逸力の係数 γ	1.0×10^8
ランダム力の係数 σ	1.0×10^{-6}
保存力の係数 α	1.0×10^{-6}

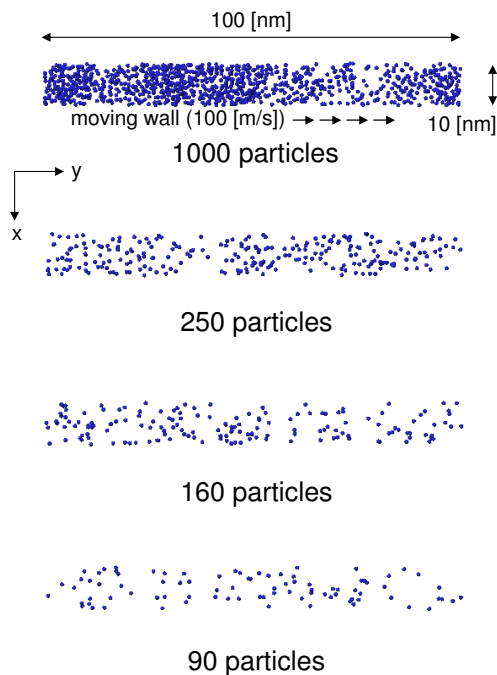


Fig. 11: Calculation of rarefaction effect

図 11 にそれぞれの解析の定常状態における粒子分布の様子を示す。また、平均速度分布の履歴を図 12 に示す。粒子数が少なくなるにつれて、流路内部と壁付近のせん断速度の差が大きくなっている。これは、粒子数を小さくすることで希薄効果による壁スリップを表現している。

8. 結論

本研究では、DPD 法におけるマクロな流れの粘性係数を単純せん断流および平行平板間に重力を作用させた流れより評価し、常温における水と同程度の粘性係数を計算することができた。また、壁境界の影響を除けば、連続体力学における速度分布と同様な分布が得られた。

また、ランダム力による物質拡散において分散と時間の比例関係を確認するとともに拡散係数を計算した。

また、分子間力に似たポテンシャル力を用いることで表面張力および気液相変化を表現した。

また、粒子数を少なくした場合の解析において希薄効果（壁スリップ）があらわれることを示した。

謝辞

本研究は(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発事業の支援を受けたここに感謝の意を表す。

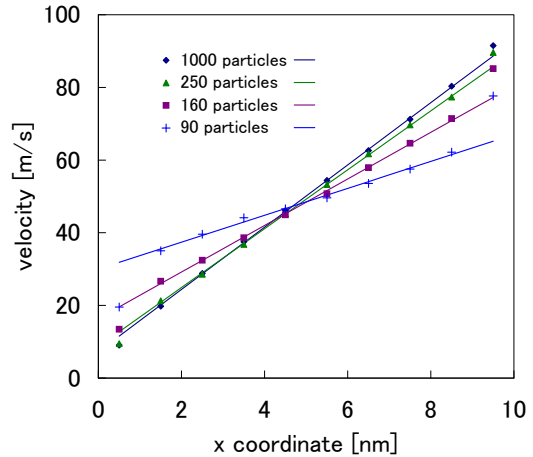


Fig. 12: Slippage near the walls

参考文献

1. 米田雅一, 滝本正人: “固体高分子形燃料電池シミュレータの開発”, みずほ情報総研技法, 1, pp. 1-8 (2007).
2. みずほ情報総研株式会社: “粒子法を用いた直接シミュレーションによる流路・拡散層内のガス・水滴輸送挙動の研究”, NEDO: 固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発・次世代技術開発、平成 19 年度分中間報告, 100011740 (2008).
3. G. Karniadakis and A. Beskok: “Micro flows : fundamentals and simulation”, Springer-Verlag (2002).
4. P. Hoogerbrugge and J. Koelman: “Simulationg microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics”, Europhysics Letters, **19**, pp. 155-160 (1992).
5. R. Groot and P. Warren: “Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation”, Journal of Chemical Physics, **107**, pp. 4423-4435 (1997).
6. P. Espanol and P. Warren: “Statistical mechanics of dissipative particle dynamics”, Europhysics Letters, **30**, 4, pp. 192-196 (1995).
7. C. Marsh, G. Backx and M. Ernst: “Static and dynamic properties of dissipative particle dynamics”, Physical Review E, **56**, 2, pp. 1676-1688 (1997).
8. 佐藤明, 間島保: “散逸粒子動力学法における輸送係数の理論値とシミュレーション値との比較検討”, 日本機械学会論文集 B 編, **70**, 695, pp. 87-93 (2004).
9. 大橋弘忠, 横井俊昭, 陳ゴ: “散逸粒子動力学法による内部構造をもつ流体の流れ解析”, ながれ, **18**, pp. 5-10 (1999).
10. A. Clark, M. Lal, J. Ruddock and P. Warren: “Mesoscopic simulation of drops in gravitational shear fields”, Langmuir, **16**, pp. 6342-6350 (2000).
11. M. Liu, P. Measkin and H. Huang: “Dissipative particle dynamics simulation of fluid motion through an unsaturated fracture and fracture junction”, Journal of Computational Physics, **222**, pp. 110-130 (2007).
12. P. Warren: “Vapor-liquid coexistence in many-body dissipative particle dynamics”, Physical Review E, **68**, 066702 (2003).