

次世代融合研究システム (スーパーコンピュータ) 利用研究成果報告書

第二十五卷
(2021年4月～2022年3月)

2022年10月
東北大学流体科学研究所
未来流体情報創造センター



TOHOKU
UNIVERSITY

次世代融合研究システム
(スーパーコンピュータ)
利用研究成果報告書

第二十五卷

(2021年4月～2022年3月)

2022年10月

東北大学流体科学研究所

未来流体情報創造センター

はじめに

本報告書は、東北大学流体科学研究所未来流体情報創造センター（Advanced Fluid Information Research Center : AFI）に平成 30 年 8 月に「次世代融合研究システム（AFI-NITY）」として導入された分散/共有メモリ型並列計算機システム FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4 を利用して得られた令和 3 年 4 月から令和 4 年 3 月までの研究成果を取りまとめたものです。

流体科学研究所は、平成 22 年度に共同利用・共同研究拠点として文部科学省に認定され、平成 28 年度には同拠点「流体科学国際研究教育拠点」として認定更新を受け、国内外研究機関との共同研究を推進しております。令和 4 年 10 月、附属未到エネルギー研究センターを改組し、新たに附属統合流動科学国際研究教育センターが発足いたしました。その結果本所は、流動創成研究部門、複雑流動研究部門、ナノ流動研究部門の 3 研究部門と、附属統合流動科学国際研究教育センターと附属リヨンセンターの下に、31 の研究分野を持つ研究所となりました。流動創成研究部門は、新たな流動機能の創成に関する研究を、複雑流動研究部門は、複雑な流動現象の解明に関する研究を、ナノ流動研究部門は、ナノスケールの流動現象の解明に関する研究を推進して参ります。新しい附属統合流動科学国際研究教育センターでは、流体科学研究の確固たる学術基盤を元に、具体的な応用分野における社会課題解決にまでつなげる、流体・材料連携研究を実施して参ります。これまでリヨンセンターの活動を通じて築いた、フランス・リヨン大学群との流体・材料連携研究を系統的に拡大して参ります。令和 3 年の VISION2030 改訂にあわせて発足した、環境・エネルギー、ナノ・マイクロ、健康・福祉・医療、宇宙航空と、社会課題解決クラスターの 5 つと共に、研究成果の社会課題解決への適用を図って参ります。

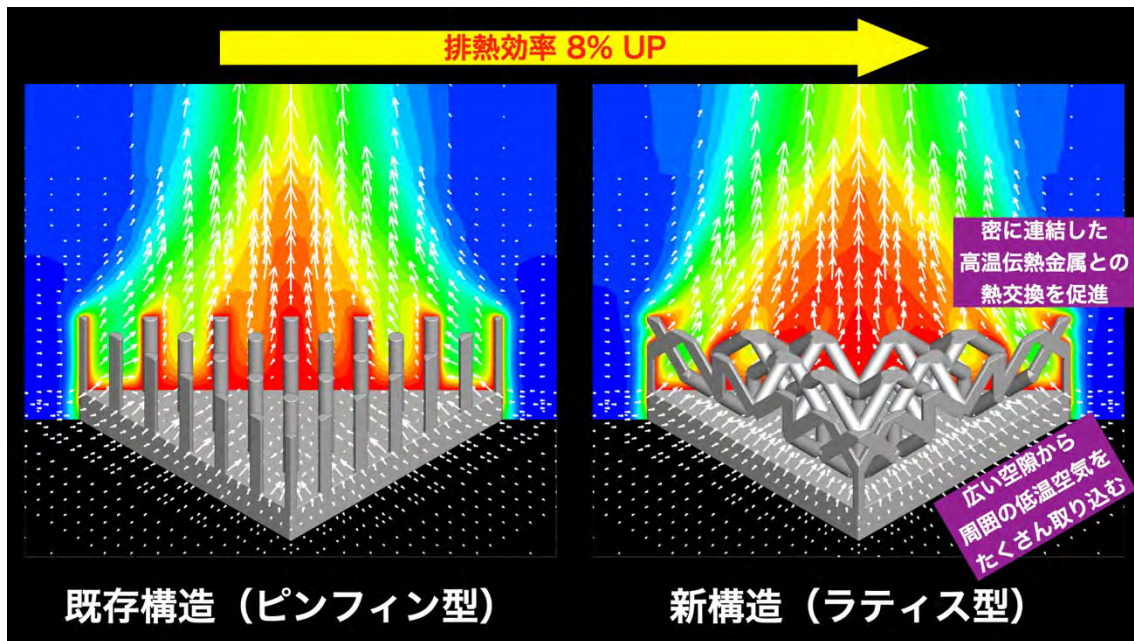
平成 2 年のスーパーコンピュータ導入以来、平成 11 年の所内措置による未来流体情報創造センター設置を経て、平成 17 年 11 月本センターに次世代融合研究システムが導入されました。さらに平成 23 年 5 月、平成 30 年 8 月の更新を経て、さまざまな時空間スケールの複雑な未知の流動現象の解明、人類社会の持続的発展を実現するための革新的な設計法や制御法の開発を目指して、物質の流れに限らない幅広い「流れ」を対象とした大規模数値解析、実験と計算の融合研究、それらの高度可視化を対象とした流体情報研究が、本システムを利用して推進されております。本センターでは、システムの管理を計画的かつ効率的に行い、各種所内プロジェクト研究、学内外との共同研究を、限られた資源を効率的に活用し推進しております。

本センターを利用して得られる膨大な流体情報を世界に発信すべく、平成 13 年には本研究所主催で第 1 回高度流体情報国際会議（International Symposium on Advanced Fluid Information : AFI）を蔵王にて開催しました。その後、第 2 回（平成 14 年：東京）、第 3 回（平成 15 年：ニューヨーク）、第 4 回（平成 16 年：仙台）、第 5 回（平成 17 年：仙台、JAXA と共催）、第 6 回（平成 18 年：調布、JAXA と共催）と継続され、平成 19 年からは流体融合研究センターが主催する TFI 国際シンポジウムとの共催シンポジウムとして第 7 回 AFI/TFI-2007 から第 12 回 AFI/TFI-2012 まで毎年仙台で開催、国際的に高い評価をいただいております。融合センターの活動終了に伴い、平成 25 年より単独シンポジウムとして、第 13 回 AFI-2013 から第 21 回 AFI-2021 まで仙台で開催され、本年 11 月には、第 22 回 AFI-2022 がオンラインで開催されます。

流体科学研究所は、今後も本センターの大規模数値計算資源を駆使した研究を強力に展開していく予定です。皆様の一層の御支援、御鞭撻をお願い申し上げます。

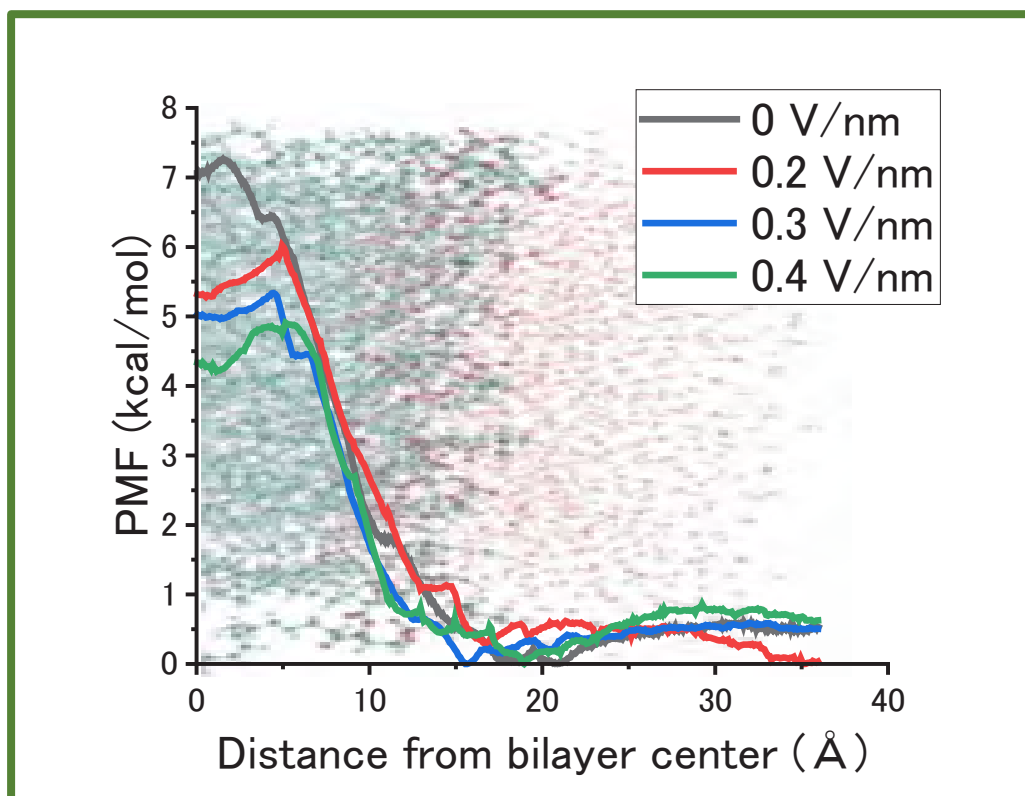
令和 4 年 10 月

東北大学流体科学研究所
未来流体情報創造センター
センター長 丸田 薫



ラティス型ヒートシンクのトポロジー設計最適化

既存のピンフィン型に比べて、高性能を実現できるラティス型ヒートシンク構造を創出することに成功した。



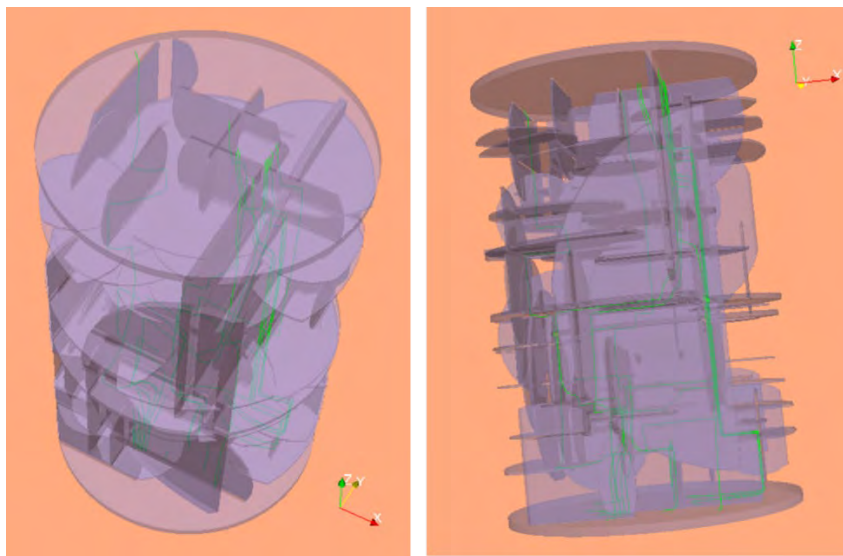
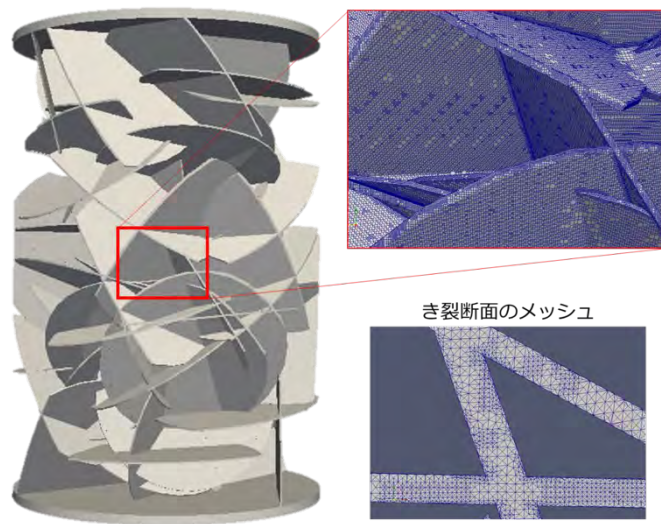
電界印加に対する細胞膜内の自由エネルギー変化

対象は過酸化水素である．電界が 0.3 V/nm では，膜中心のポテンシャル低下が大きく，膜透過係数は約 4 倍になる．

自然構造デザイン研究分野

CP08APR21

複雑地下構造内の流体流動シミュレーションによる地下構造の逆解析



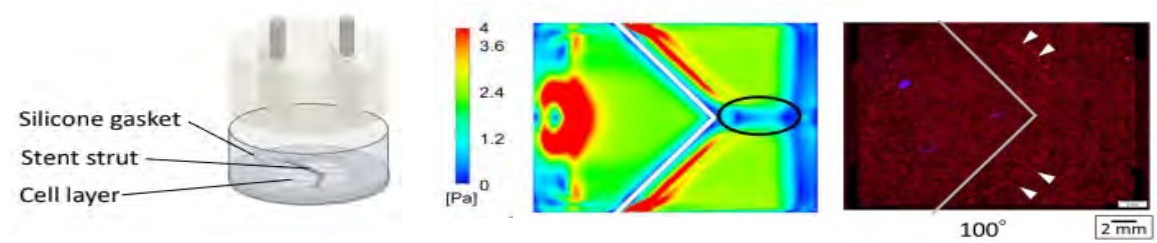
OpenFOAM によるき裂ネットワーク内の流動シミュレーション

岩石き裂を模擬した人工的なき裂ネットワーク内の流動シミュレーションを行い、優先的な流路があることを可視化できた。

生体流動ダイナミクス研究分野

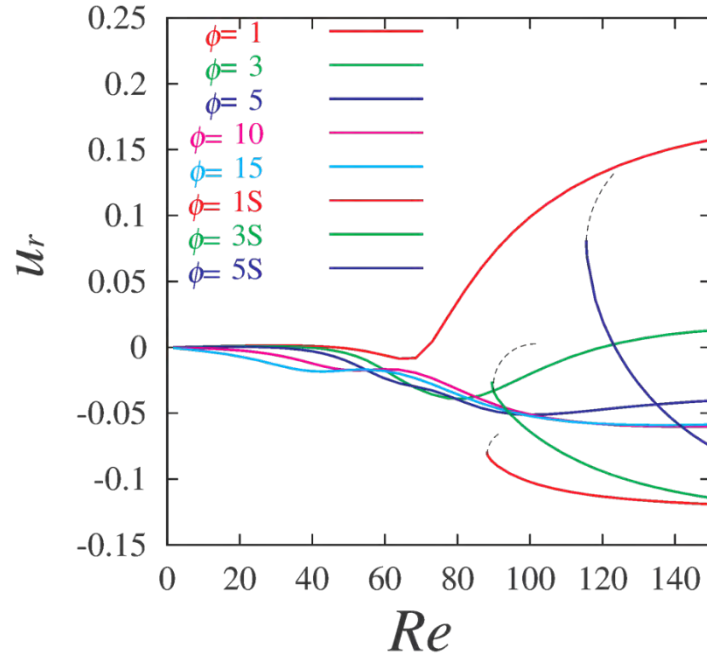
CP11APR21

チャンバー内の血流解析



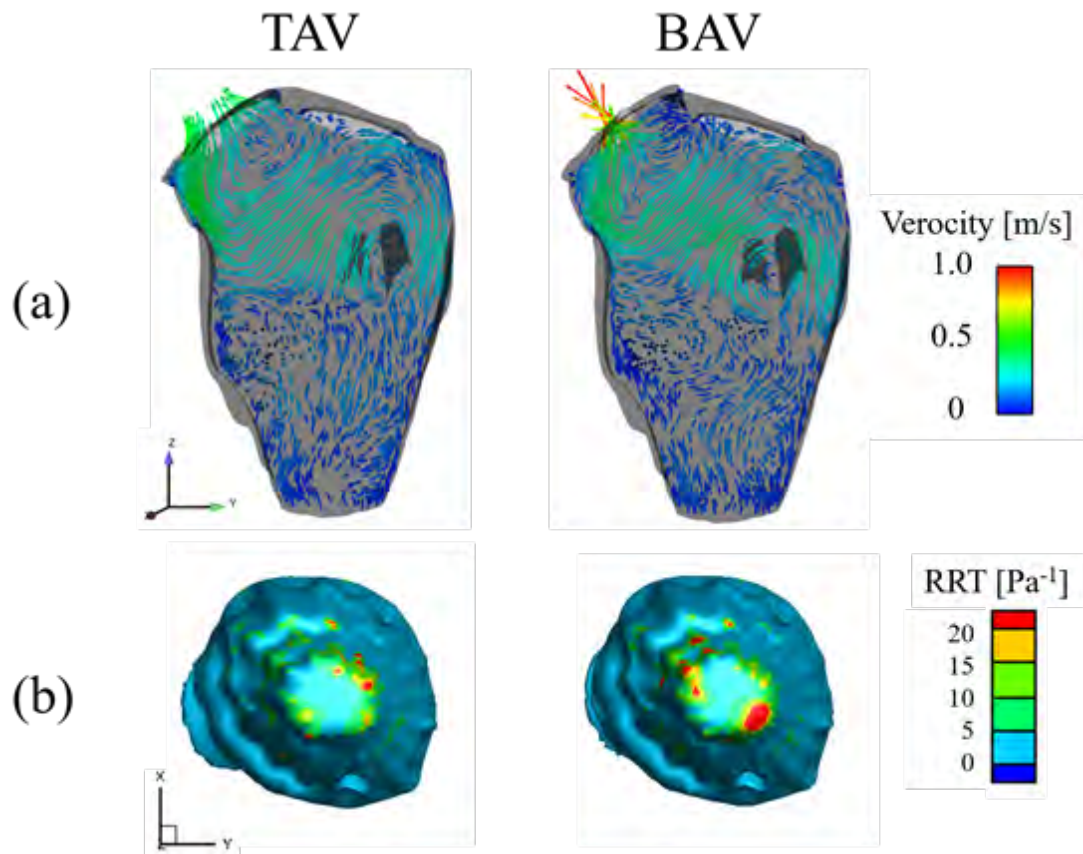
ステント周りの壁せん断応力分布と流れ刺激による内皮細胞分布変化

フローチャンバーを用いた血管内皮細胞に対する流れ負荷実験を行い，壁せん断応力分布と細胞分布を比較した結果，高壁せん断応力部で高い細胞密度が見られた。



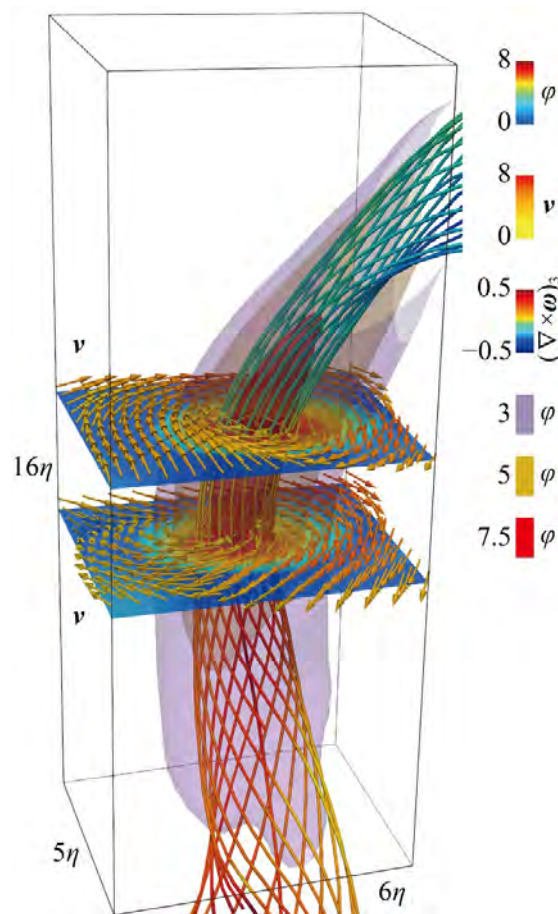
側壁が傾斜し，内外円筒半径比 $\Gamma=3.7$ の場合の分岐ダイアグラム

サドル・ノード分岐が生じる場合の分岐ダイアグラムを内外円筒半径比 Γ とレイノルズ数 Re を用いて示したものである．また，側壁の傾斜角度を ϕ としている． $\Gamma=3.7$ の場合には，側壁が傾斜した場合にも分岐の構造は維持されて，サドル・ノード分岐の構造が保たれる．



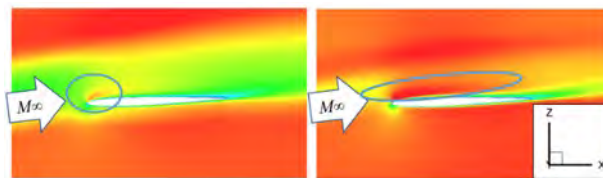
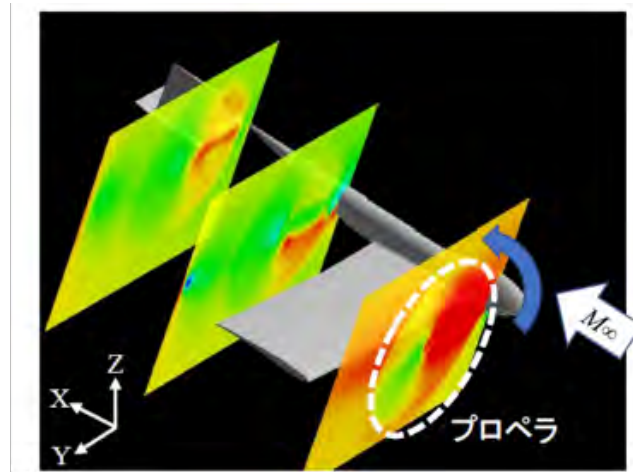
左心室内の血流解析結果. (a) 収縮期における速度分布, (b) RRT 分布.

三尖弁 (TAV) モデルと比較して二尖弁 (BAV) モデルの方が大動脈弁を通過する血流の流速が大きく, 心尖部では血流の停滞の度合いを表す指標の RRT の値が増加している.



一様等方性乱流中の渦領域における渦流構造と渦線バンドル束

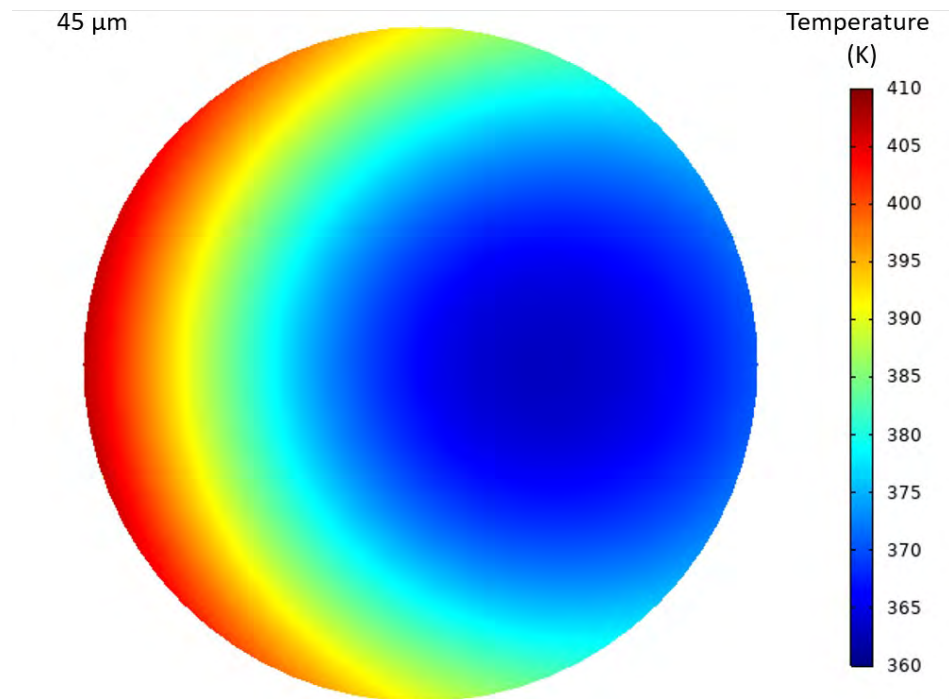
swirlity φ で示された渦領域における二つの旋回平面上 (φ のコンター) の渦流 \mathbf{v} と渦軸バンドル束 (渦度ベクトルの旋回平面の法線方向における回転成分 $(\nabla \times \boldsymbol{\omega})_3$ のコンター) (η : Kolmogorov 長さ)



(左) プロペラ前縁配置, (右) プロペラ後縁配置.

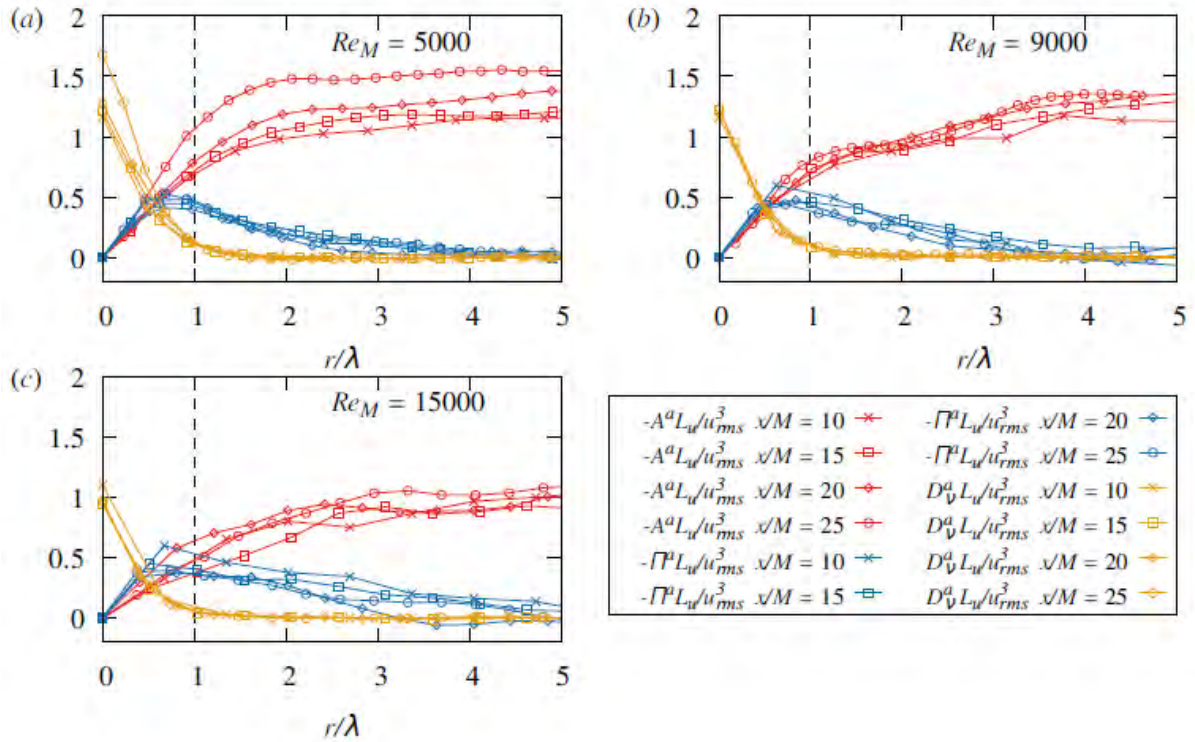
プロペラ後流模擬を含めた流れの数値計算例と, 水平尾翼ハーフスパン位置での空間速度分布

プロペラの前後縁配置の違いによる水平尾翼周りの流れ場を比較している. プロペラ前縁配置の場合は, 主翼によるプロペラ後流の干渉効果が尾翼に影響している.



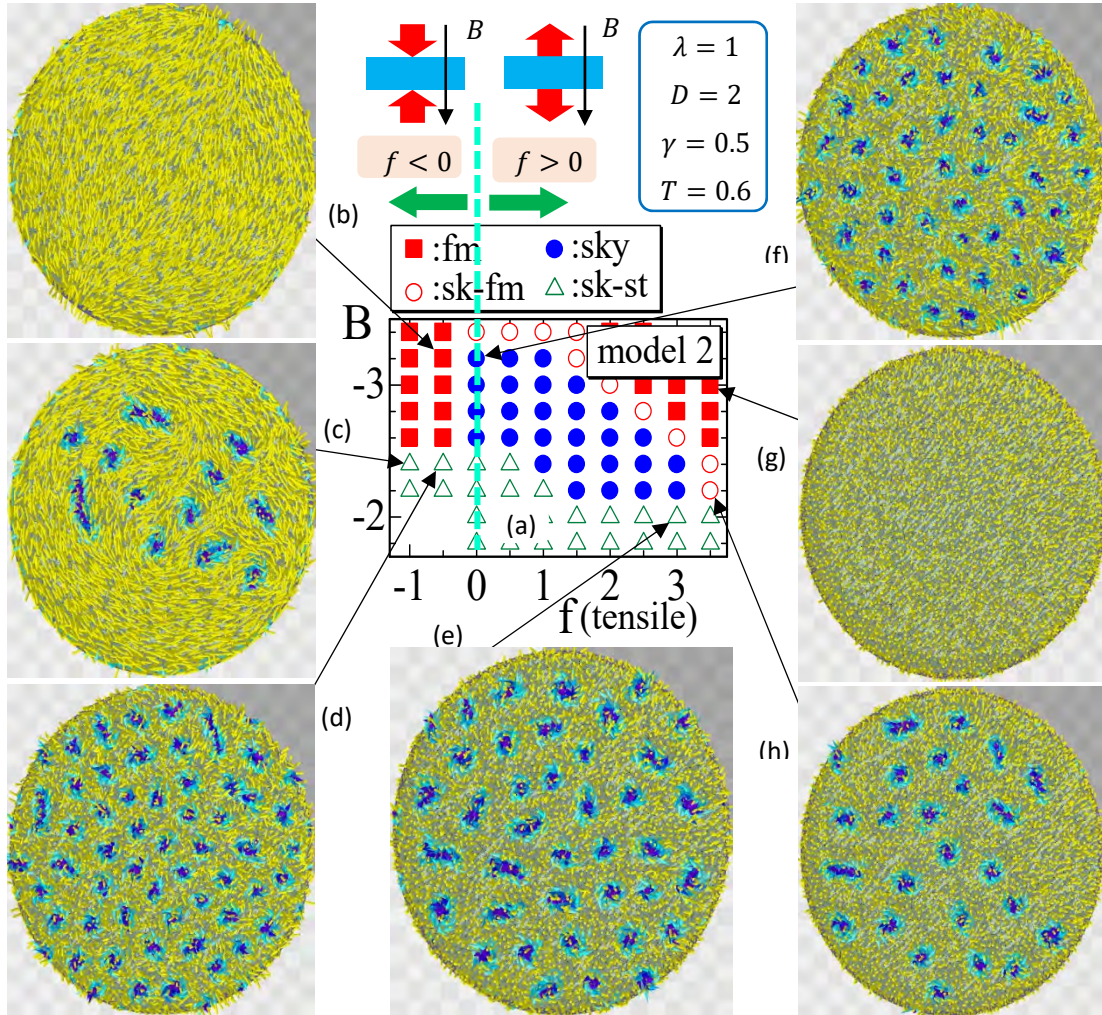
コールドスプレー皮膜形成法における基板衝突直前での直径 45 μm の高分子粒子内温度分布

コールドスプレー法による高分子皮膜創製においては，高速気体中において原料粒子が加速および加熱される．その際の高分子粒子内温度分布は一様にはならず，温度勾配が生じることが明らかとなった．



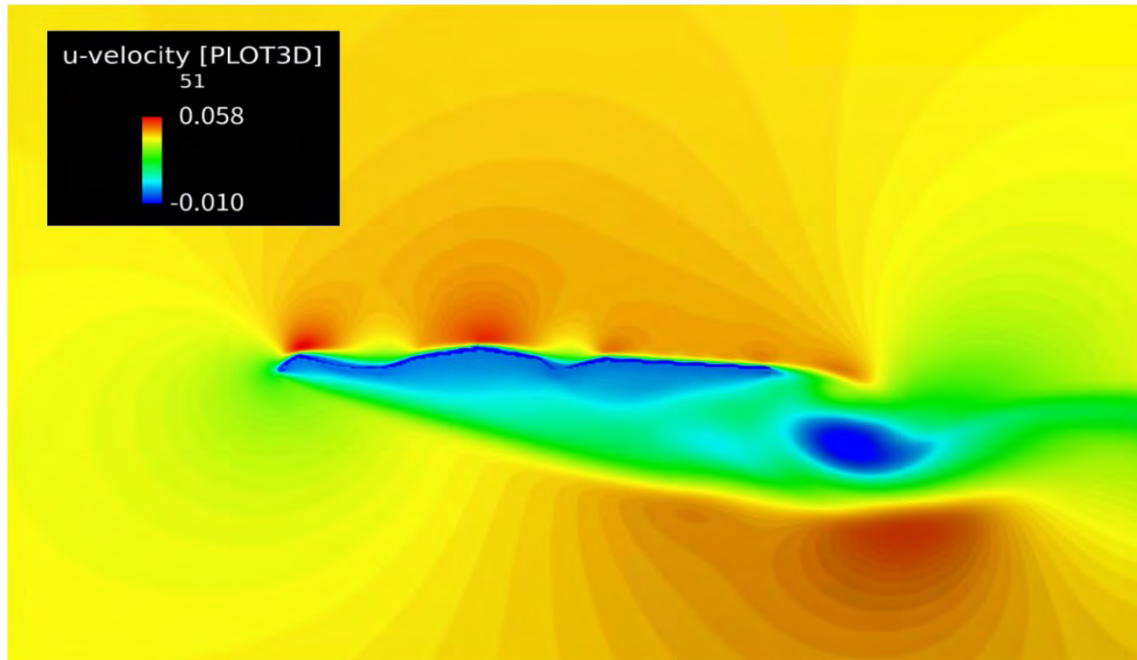
構造関数に現れる各項の距離に対する寄与 (L/u_{rms}^3 で無次元化された場合, ただし L は積分スケール, u_{rms} は主流方向速度変動の RMS 値).

二次の構造関数に現れる各項の寄与を異なる主流方向位置で調査した結果, 乱流エネルギーの減衰係数の主流方向に対する変化に寄与するのは非線形項ではなく移流項であることが明らかになった.



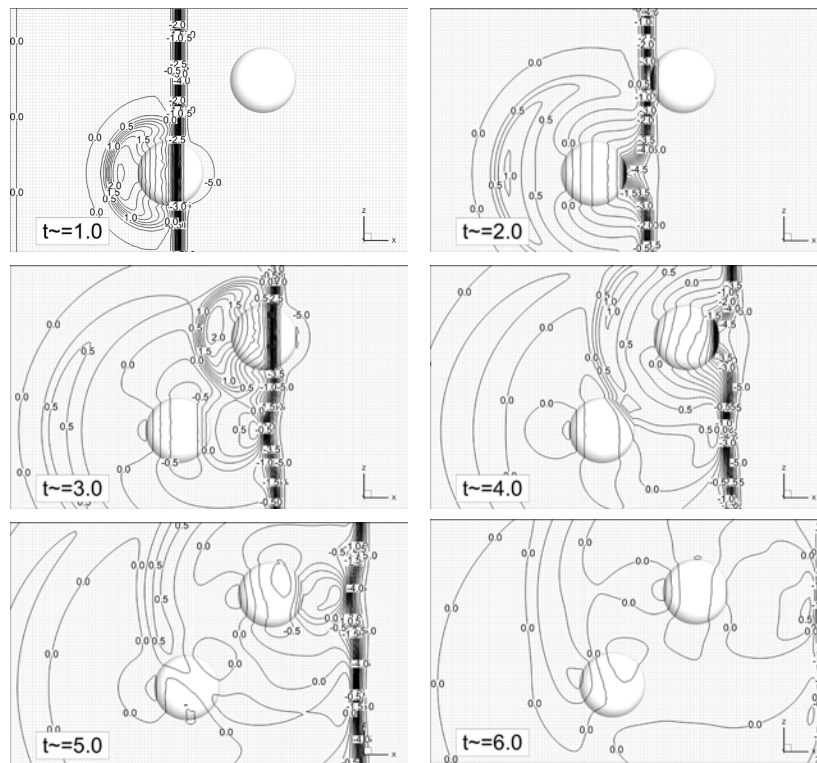
磁場 (B) - 応力 (f) の相図とスキルミオンのスナップショット

面と垂直な磁場と同じ方向に引張る ($f > 0$) とスキルミオンが現われ (●), 圧縮する ($f < 0$) とスキルミオンが消えて強磁性相 (■) が現われる. スナップショットの黄色い小さな棒はひずみの方向を表わす.



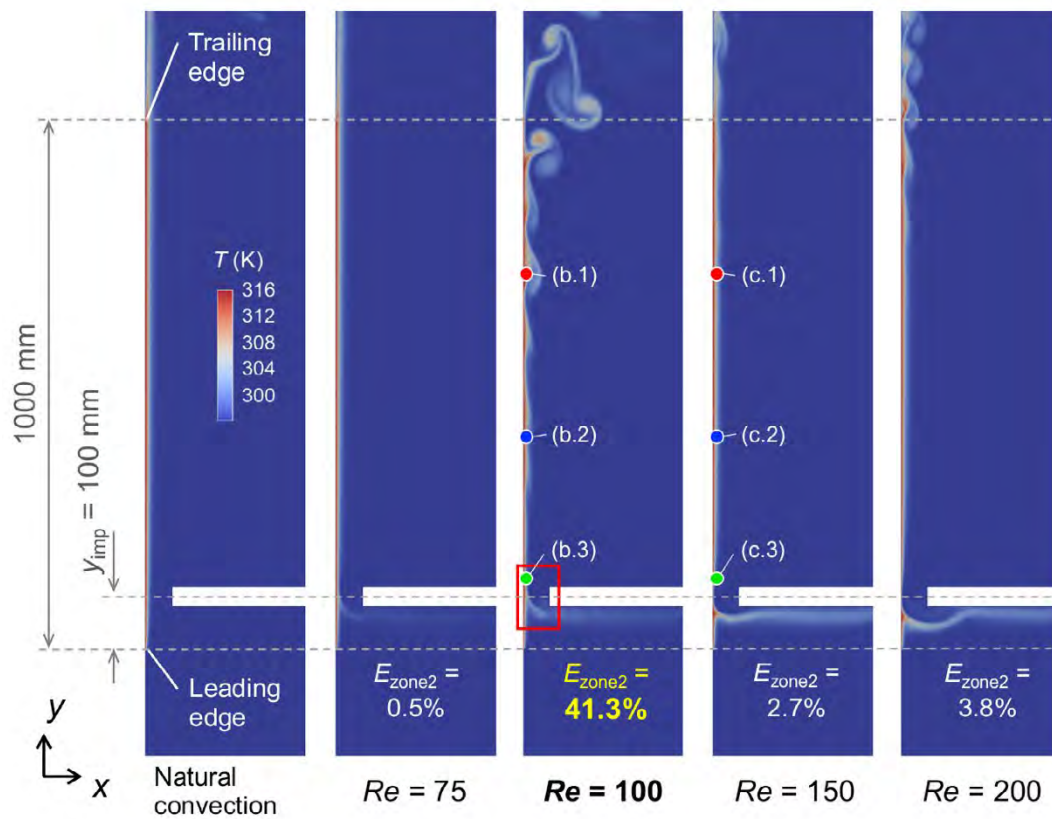
コルゲート翼上昇時の流れ場

コルゲート翼がヒービング運動により上昇する際に形成される流れ場を表す。下面の渦が後流に流れ去ることが確認できる。



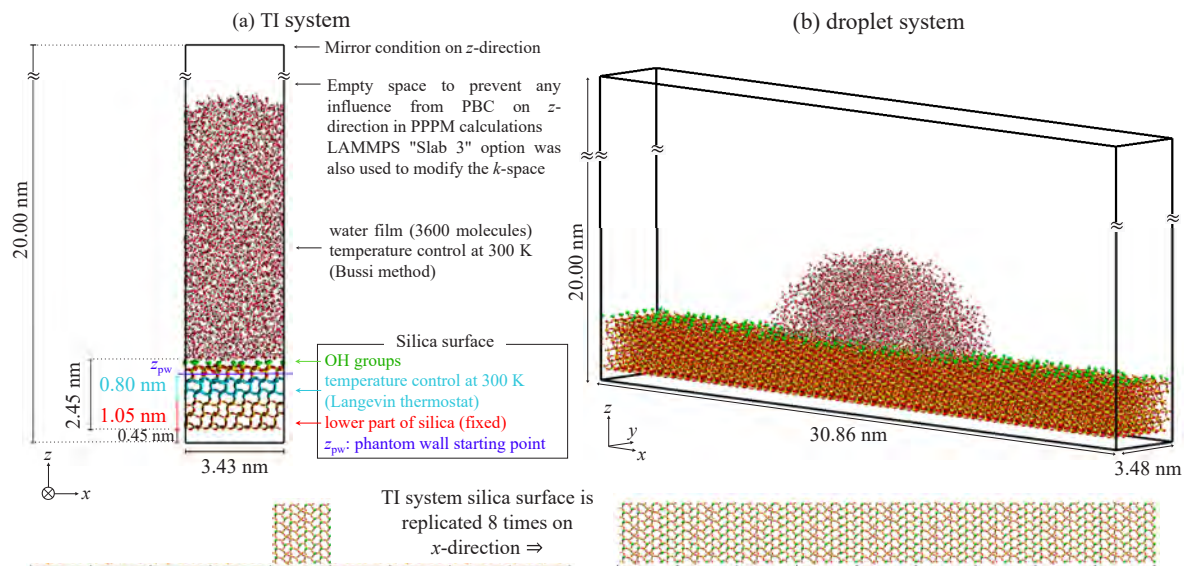
移動する2つの粒子に作用する平面衝撃波が誘起する圧力係数分布図

衝撃波 Mach 数 1.22, 粒子 Reynolds 数 49 の条件で2つの移動する粒子に平面衝撃波を作用させた場合に見られる圧力係数分布の変化を示した図である。衝撃波の回折, 反射と粒子の移動が確認できる。



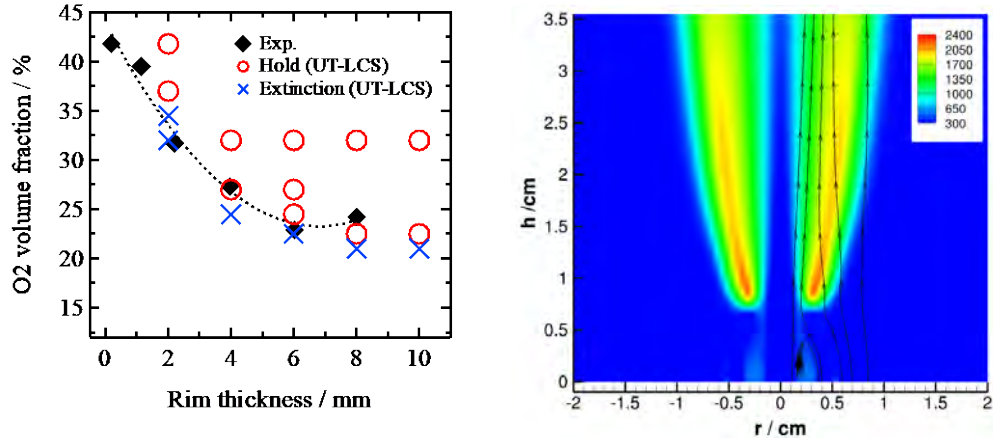
各レイノルズ数条件下における微弱噴流条件下における自然対流境界層の温度境界層の可視化結果

微弱噴流を自然対流境界層中の上流側に微小噴流を付与した時、境界層の不安定成長が促進することが明らかとなった。特に $Re=100$ である時、温度境界層の不安定性が促進伝熱量が 40%程促進することが明らかとなった。



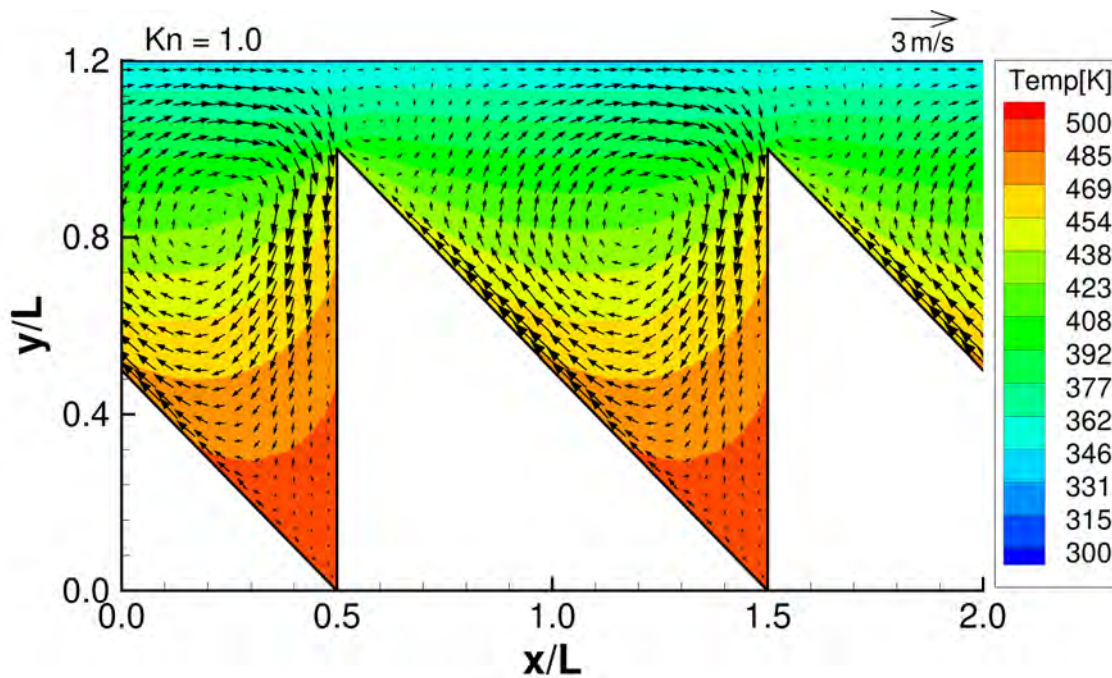
OH 修飾されたシリカ表面と水の計算系. 左: 熱力学積分系, 右: 液滴系

熱力学積分により求めた固液界面張力からヤングの式を介して得られる接触角と液滴がなす接触角を比較した結果, 広い OH の表面数密度の領域で一致した.



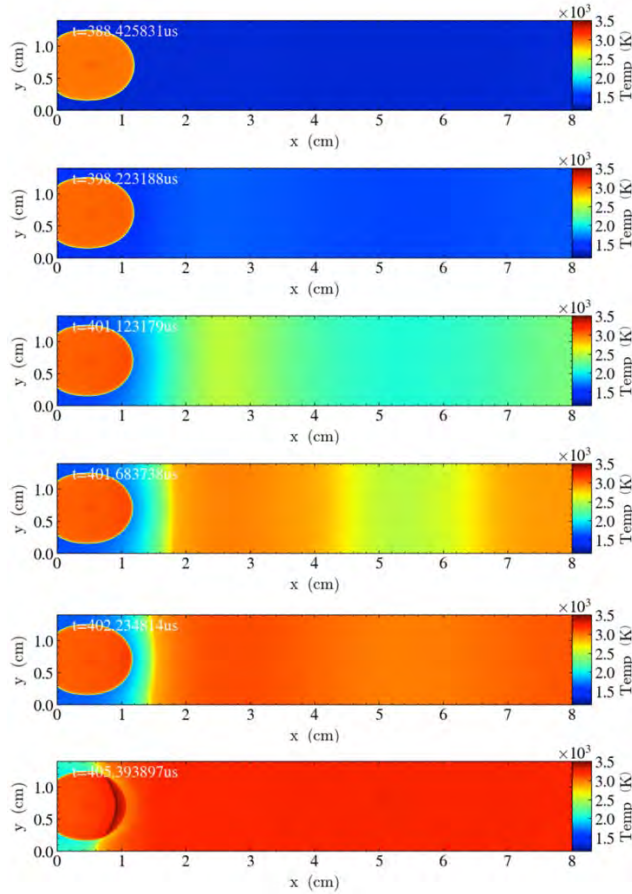
燃焼 CFD による工業バーナーアンモニア火炎の保炎消炎境界の予測

詳細反応機構を用いた燃焼 CFD によって実験で観測された保炎消炎境界を非常に良い精度で再現した。右図は消炎直前の火炎の様子で、CFD 結果より保炎消炎機構を明確にすることができた。



表面微細構造の周りで熱的に誘起される流れ

低温の気体の中に先端を持つ高温の微細構造を置くと気体と微細構造の温度差により、気体から微細構造の先端に向かって強い流れが誘起される。先端が鋭いほど流れが強くなる。

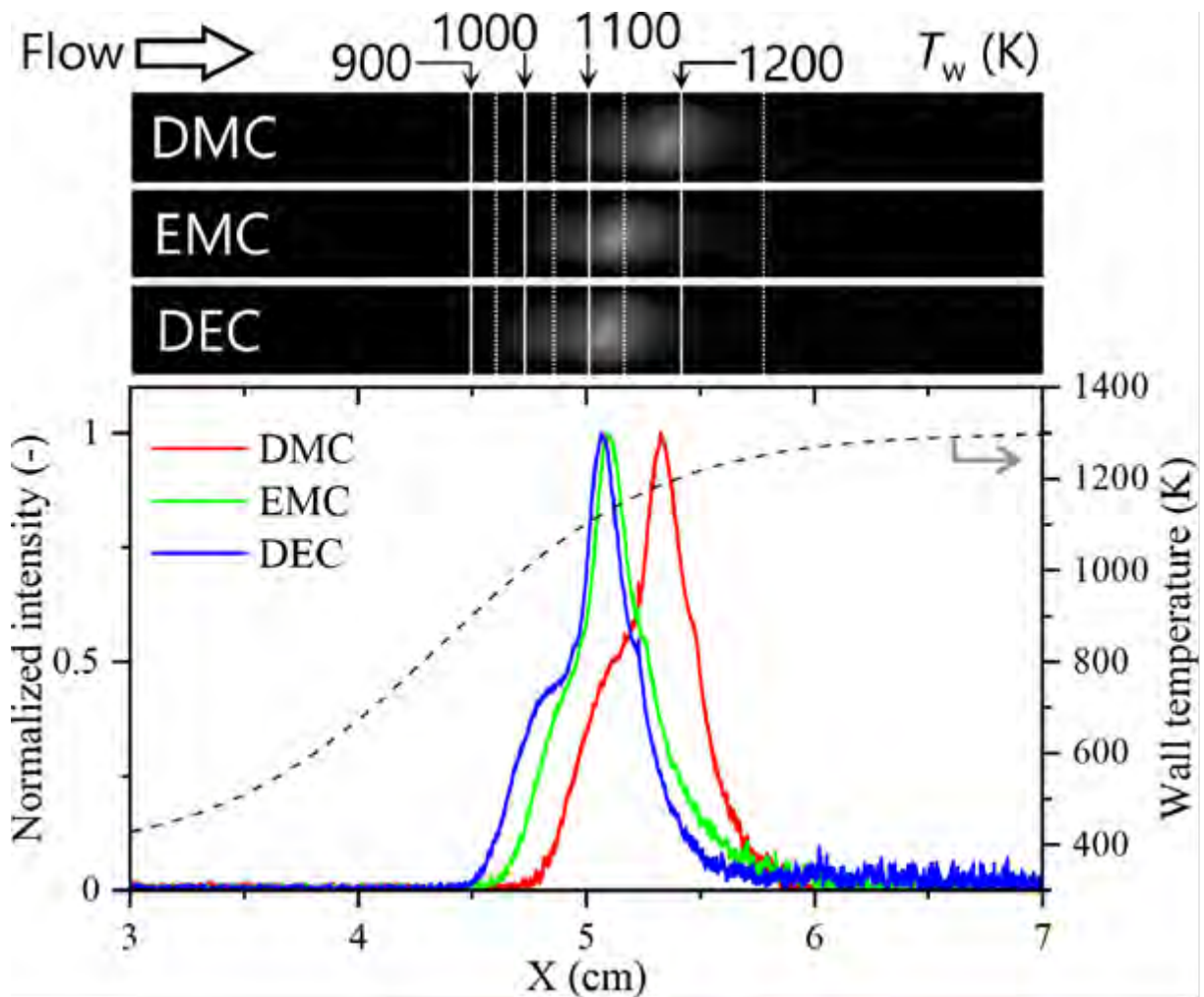


初期温度 1150 K の条件における自着火の様子

初期温度 1150K における自着火モード. 火炎伝播の各瞬間における温度分布.

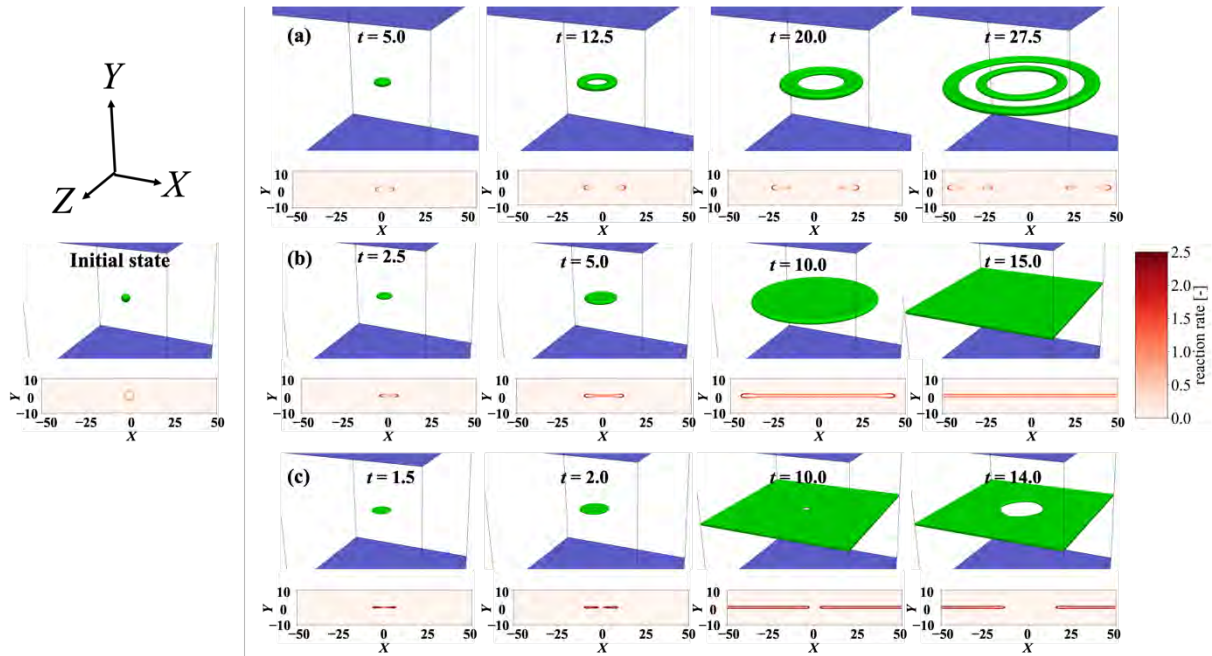
時間は μs で表記. 自着火は炎が側壁に触れる前に起こる. 火炎前方における自着火は, エンドガスの自着火よりも強い.

温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた各種燃料・電解液溶媒・冷媒の燃焼特性に関する研究



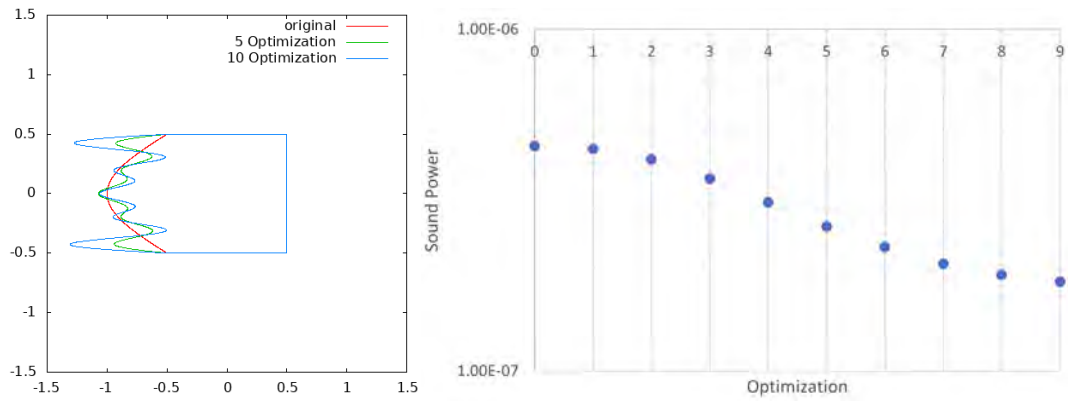
温度分布制御マイクロフローリアクタによる直鎖炭酸エステルの反応性評価

エチル基を有する EMC (炭酸エチルメチル) と DEC (炭酸ジエチル) は, エチル基を持たない DMC (炭酸ジメチル) より, 低温側に反応帯が位置する.



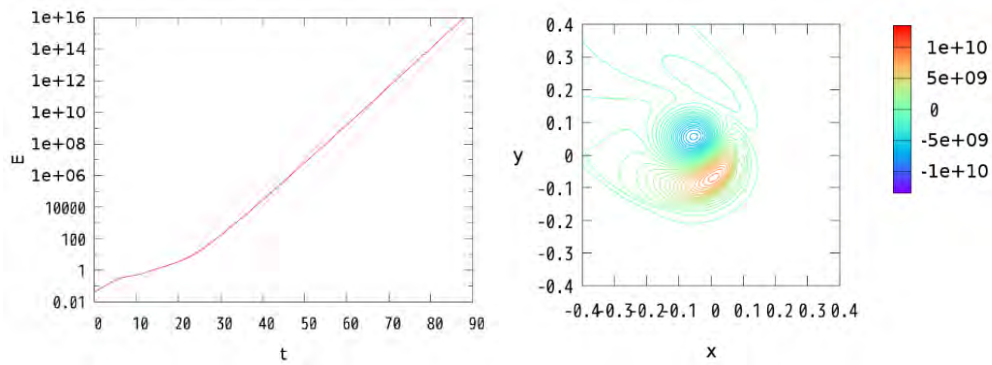
Flame ball を初期解 (Initial state) とした対向流場における火炎発展の様子
 (a) リング状火炎, (b) 平面火炎, (c) 中央に穴が空いた平面火炎

対向流平面火炎 (b) が存在可能な伸長率条件でも, 平面火炎に至らない2種類の消炎が確認された (a, c).



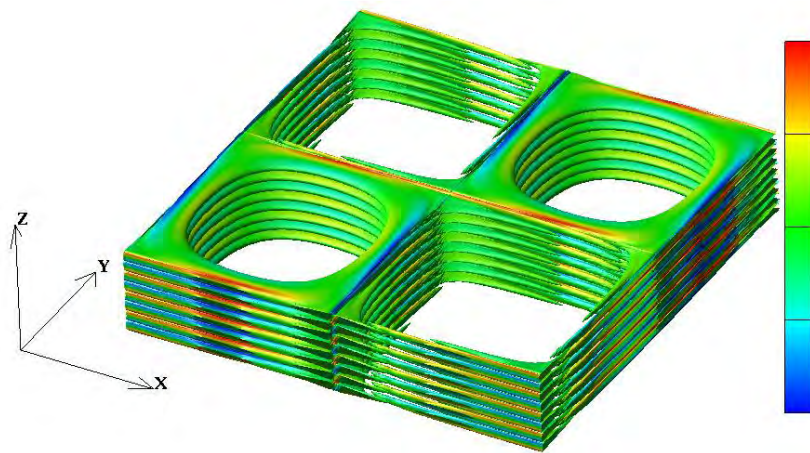
アジョイント法による空力騒音低減のための形状最適化

空力騒音低減のための物体形状最適化をアジョイント法により行った. (左図) フーリエ級数であらわされた形状の変化, (右図) 空力音のパワーと最適化回数関係.



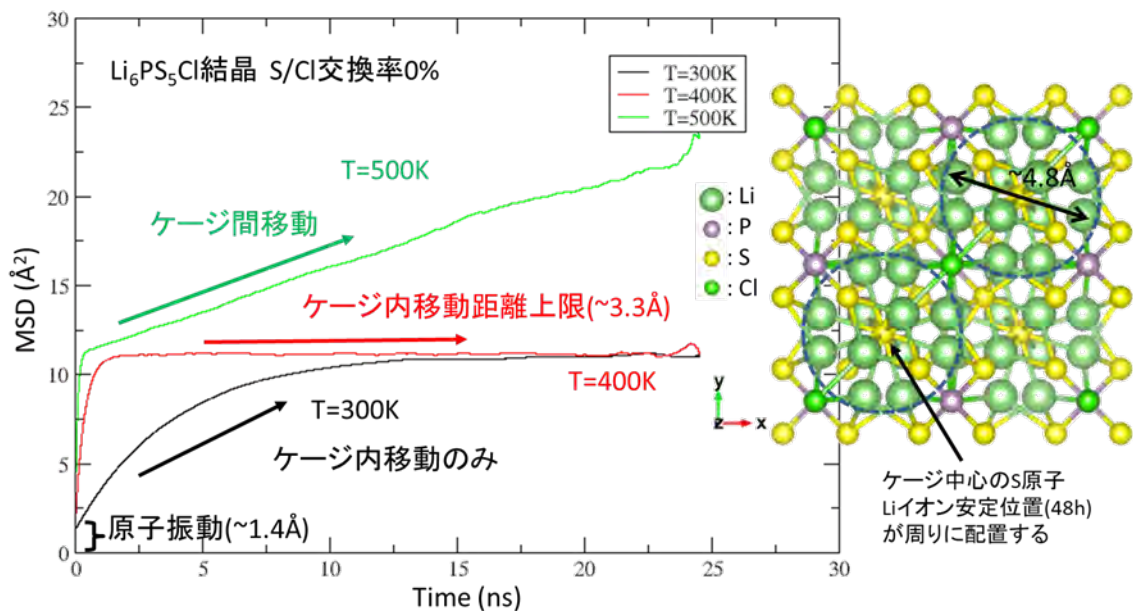
らせん渦の長波長不安定性

らせん渦の長波長不安定性を線形化 Navier-Stokes 方程式の直接数値シミュレーションにより求めた. 擾乱のエネルギーが指数関数的に成長すること (左図), 不安定モードの構造が屈曲波によるものであること (右図) を確認した.



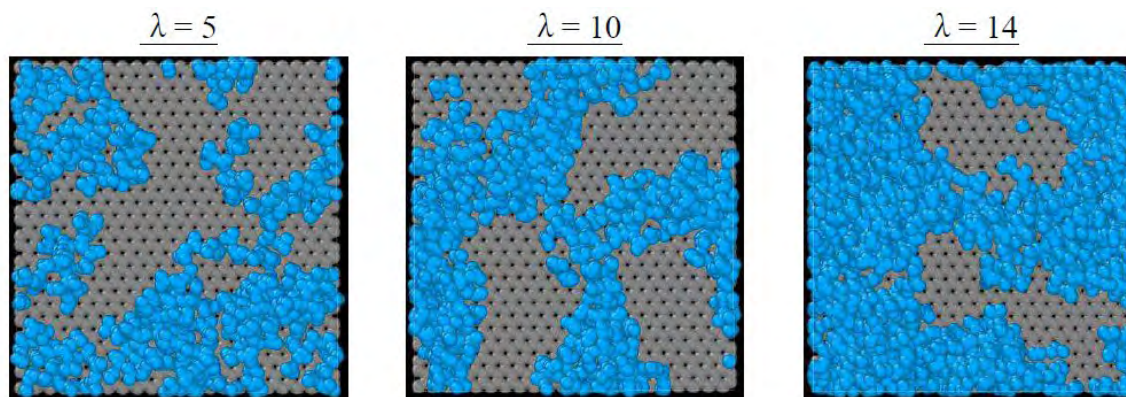
2次元テイラーグリーン渦の双曲型不安定性モードの構造

2次元テイラーグリーン渦に成層と回転が加わったときに発生する双曲型不安定性モードの構造の一例を擾乱渦度の大きさの等値面により可視化したものである。



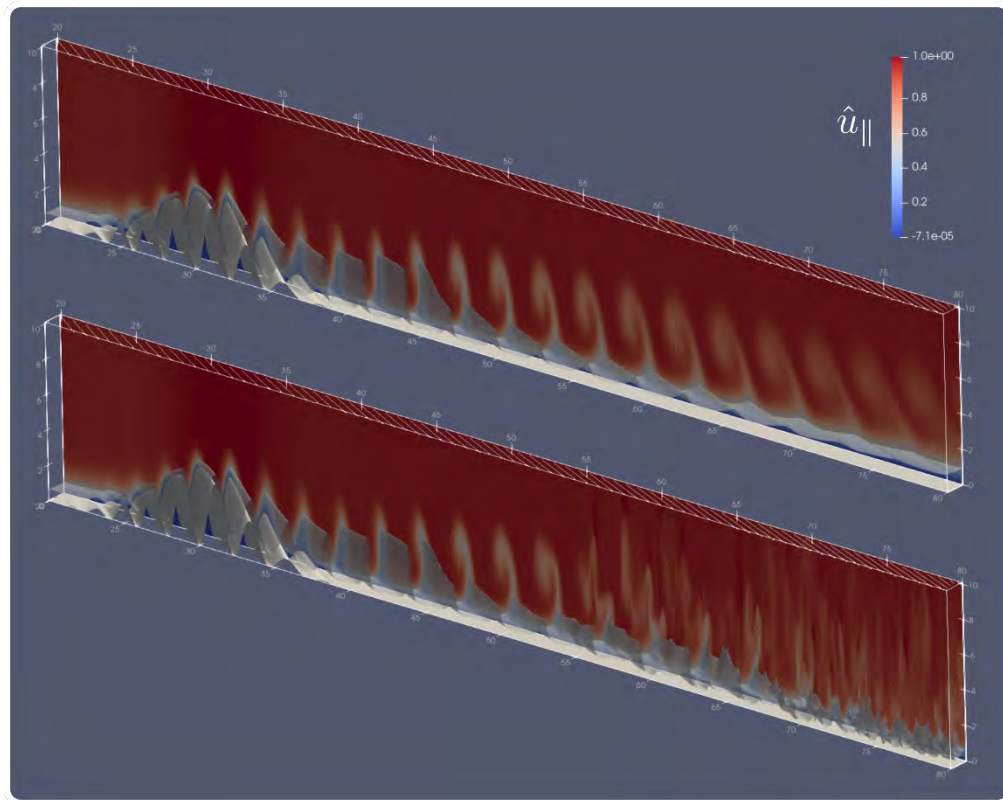
S/Cl 交換率 0%固体電解質内 Li イオン拡散特性

温度 400K 以下の場合 Li イオンがケージ内移動のみ。同ケージ内安定位置サイト最大間隔は約 4.8Å だが、MSD 解析結果より最大移動距離は約 3.3Å と判断した。温度が 500K 以上になると、ケージ間の Li イオン拡散も可能。



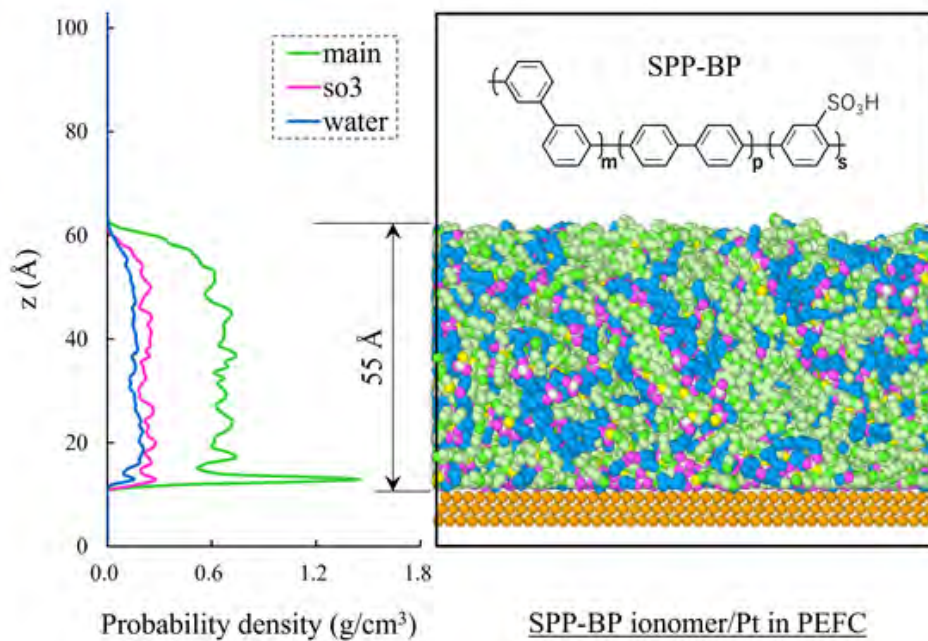
各含水率におけるグラフェンシート界面領域の水分子/ヒドロニウムイオンネットワーク

含水率が増加するにつれて、グラフェンシート界面上の水分子/ヒドロニウムイオンネットワークの連結性が増加している。このことがグラフェンシート界面領域のプロトン拡散係数の増加を引き起こしている。



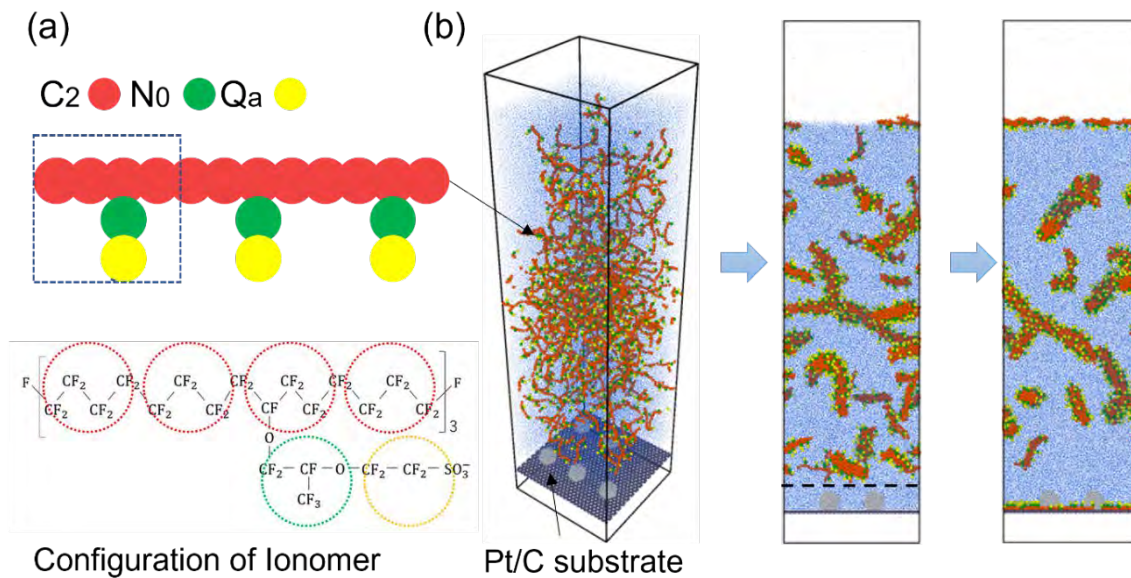
波型粗さ要素によって誘起される横流れ渦

波型粗さ要素が横流れ渦列を生成する様子. 非定常攪乱を与えると渦列が崩壊して乱流へと遷移する.



白金表面における炭化水素系高分子アイオノマーの分子動力学解析

白金（黄）表面において、高分子（緑，ピンク）と水分子（青）で構成されたアイオノマー薄膜の密度分布を解析した。

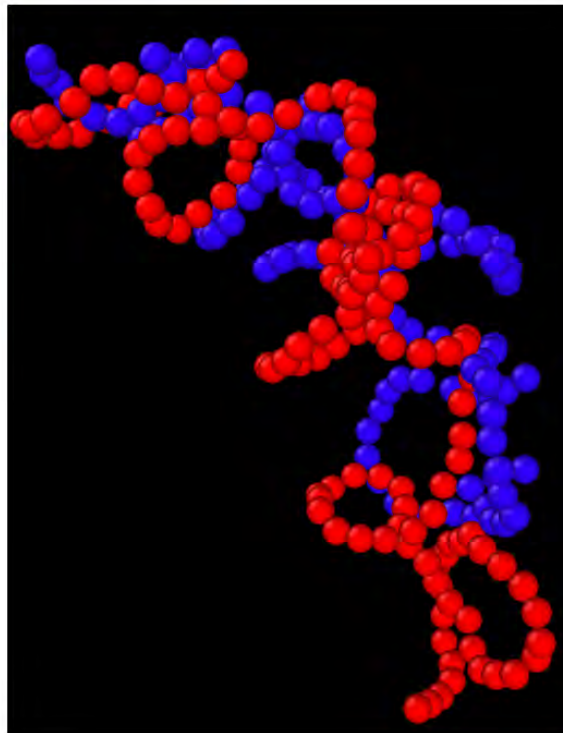


アイオノマー分散液内部のアイオノマーの Pt/C 基板への吸着挙動

(a) CG モデルでのアイオノマーの化学構造. (b) Pt/C 基板と接触している溶液に分散したアイオノマーの画像. アイオノマーは徐々に凝集体を形成し, Pt/C 表面に吸着している.

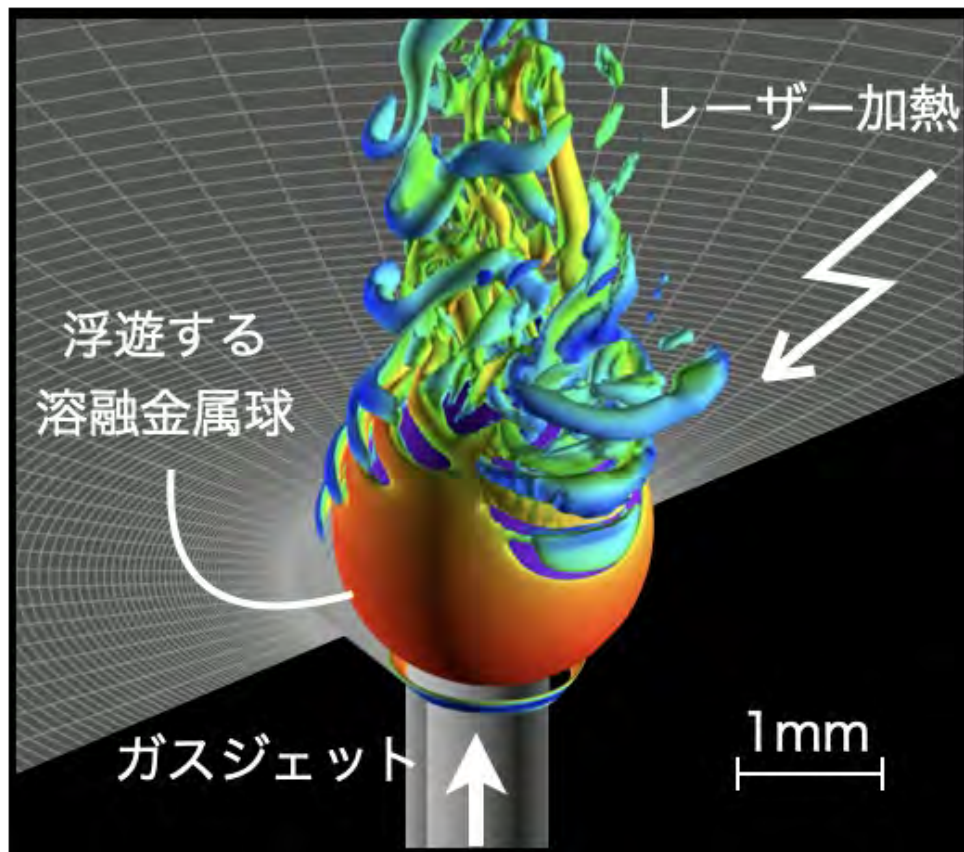
Molecule group ID Linking number

a	b		
	495	380	10.3979
	139	447	7.34106
	51	284	6.1882
	94	473	6.10862
	109	410	5.53259



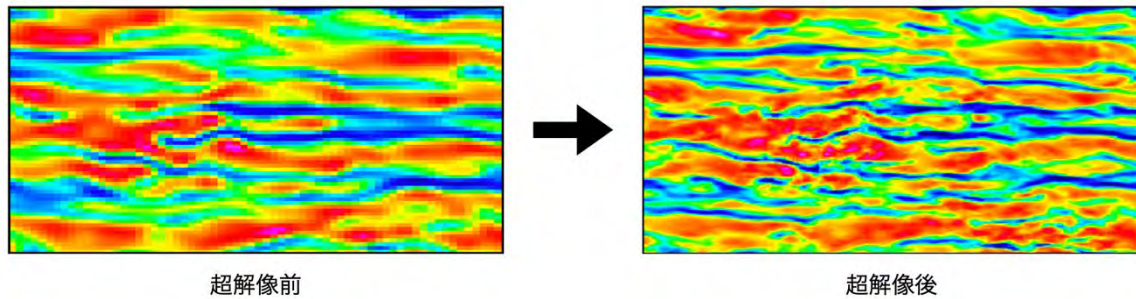
ポリマーの絡み具合の定量化と可視化

画像は2つの絡み合うポリマーの模式図であり、リンク数は、ガウスのリンク数より計算した二つのポリマーの絡み具合を表している。a, bはポリマーの番号を表す。



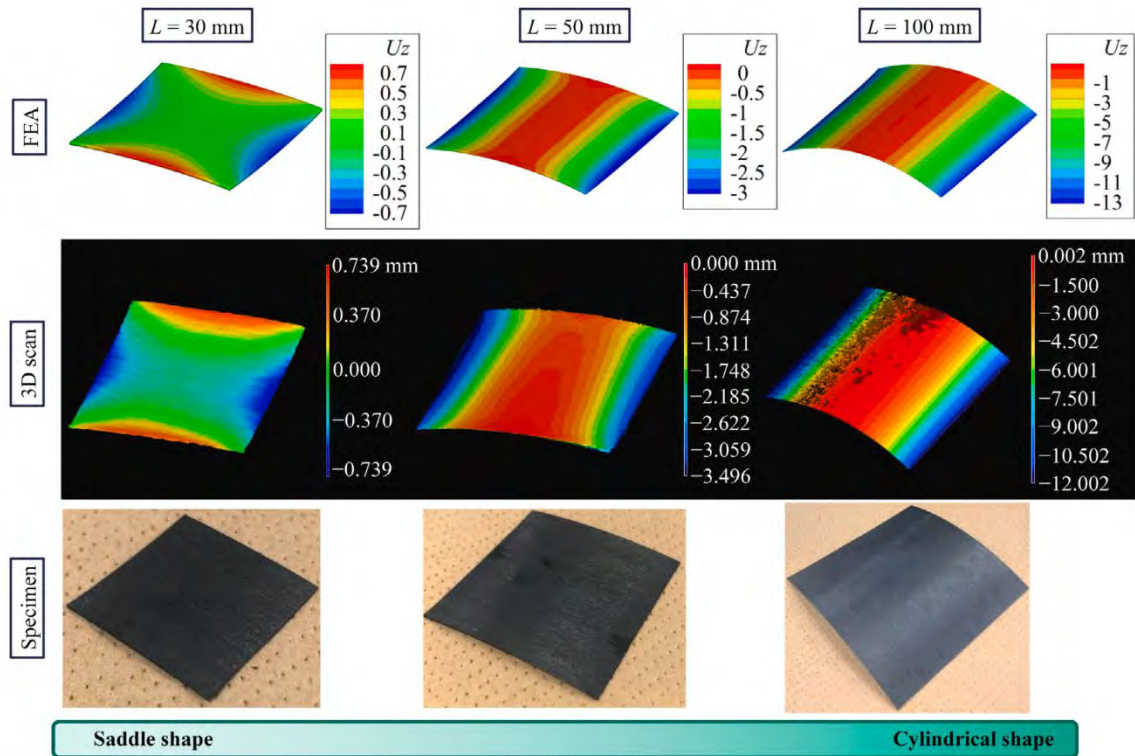
浮遊する溶融金属球

高温 (1391K) で溶融する金属の溶融体を剛体球としてモデル化し, 安定浮遊時の流れ場を可視化した.



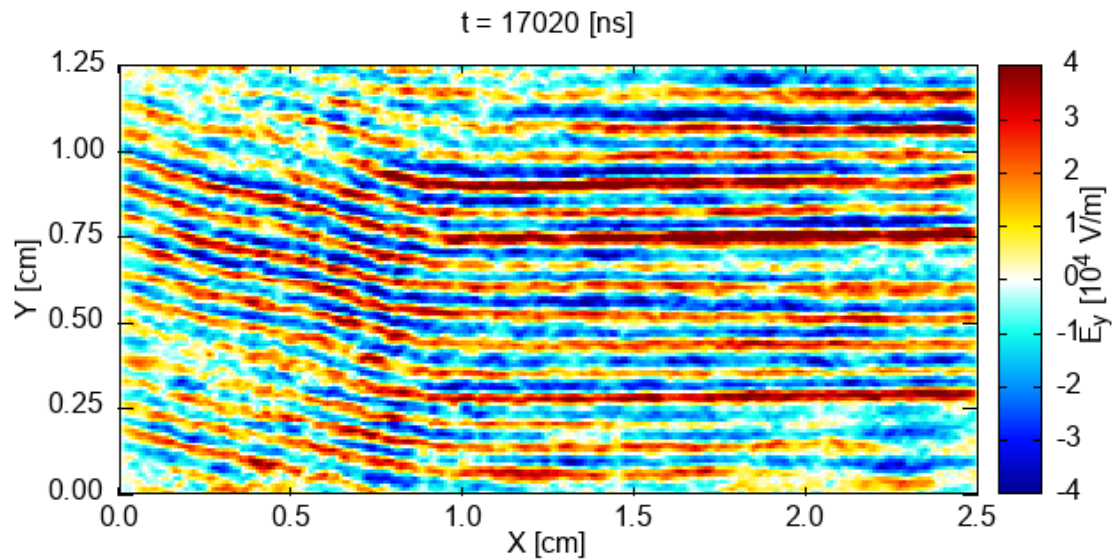
教師なし学習による LES 瞬時場の超解像

$y^+ = 15$ における粗格子 LES の主流速度瞬時場を超解像した結果を表している。超解像前の流れ場(左)と比較して、超解像された流れ場(右)はより細かな構造を含む。



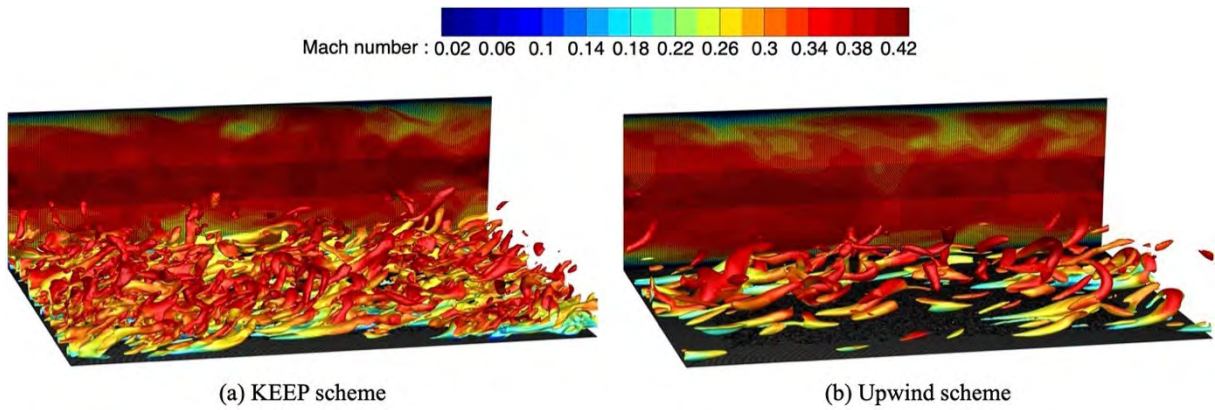
CFRP 積層板の成型時残留変形のマチスケールモデリング

量子化学計算，分子動力学法，2 スケールの有限要素法を用いて CFRP 積層板の成型時の変形を予測し，実験結果（変形量やサイズ依存の変形形状）をよく再現できた。



ホールスラストの放電管内に形成される波状のプラズマ構造

$E \times B$ ドリフトする磁化電子と非磁化イオンの間の相対速度に起因する不安定性が成長し、周方向（図内 Y 方向）に静電波が現れる．静電波によって電子の運動が乱され、移動度が増加することを示唆している．

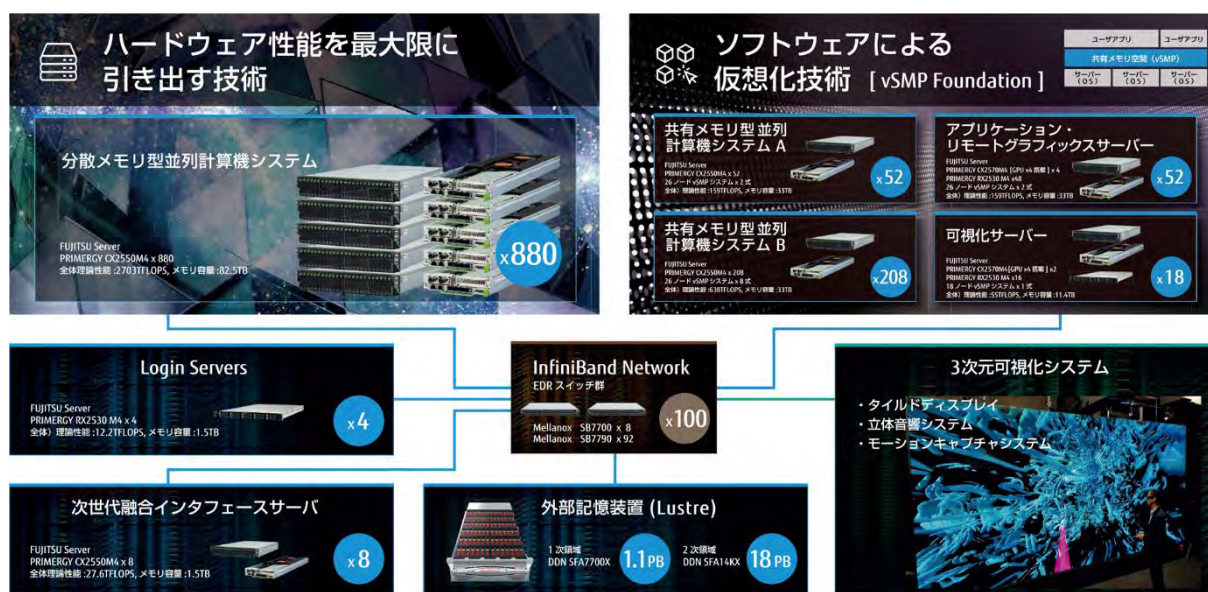


チャンネル乱流の Q 値による可視化（チャンネル下面側だけを可視化）

風上スキームを用いた場合には数値粘性の影響で渦が散逸している一方で、KEEP スキームは非散逸なスキームであるため、小さい渦構造まで高精度に計算が行えている。

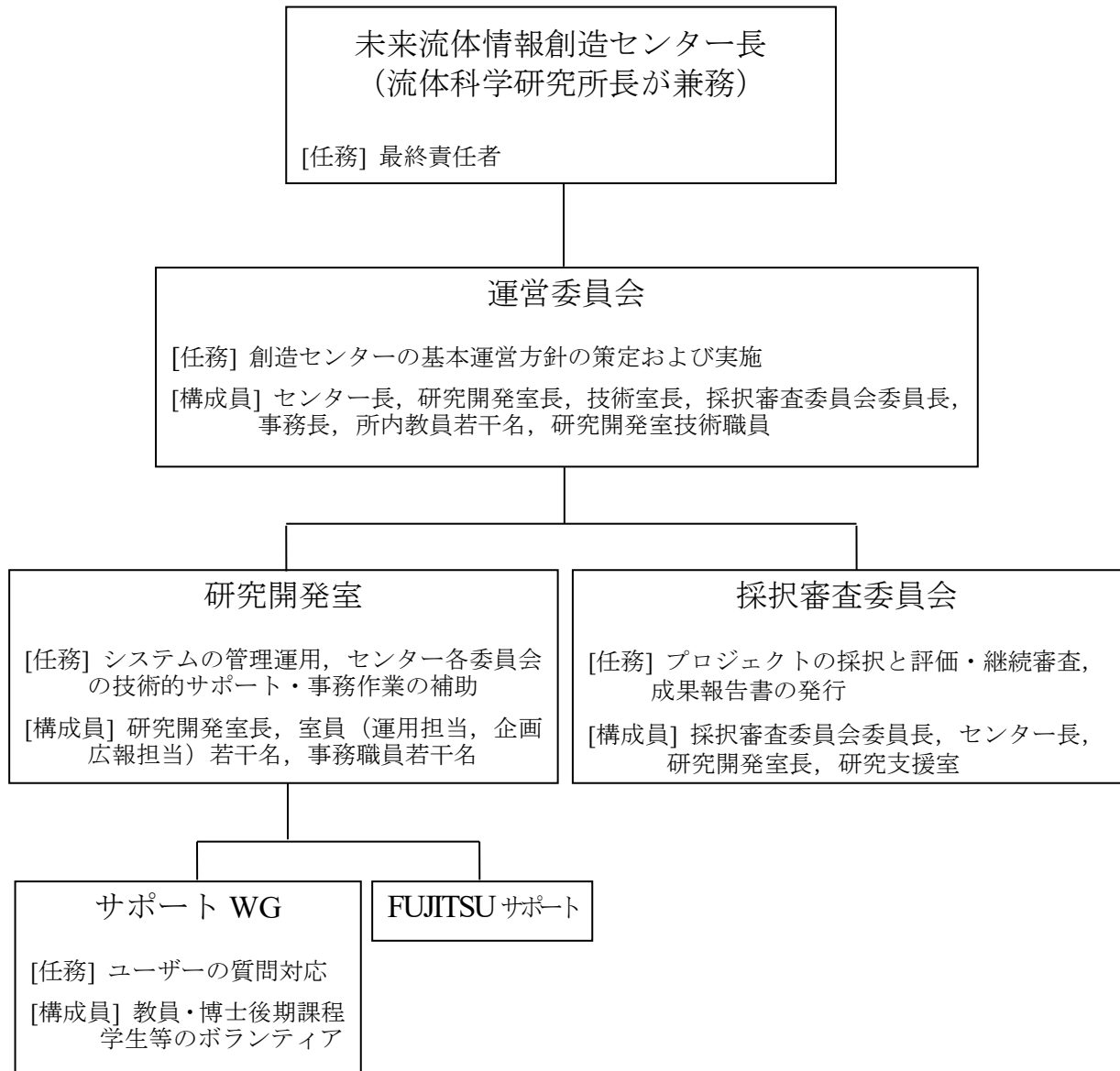
次世代融合研究システムの構成

2018年8月に稼働を開始した現在の「次世代融合研究システム (AFI-NITY^{*1})」は、スーパーコンピューティングを行う計算サーバー群、計算結果の画像解析のための3次元可視化サーバー、実験装置を接続して計算シミュレーションと実験解析をリンクする計測融合研究のための次世代融合インタフェースサーバーを中核として、PBクラスの容量をもつストレージシステム(磁気ディスク装置)を有し、3次元可視化出力装置を備えたリアライゼーションワークスペース (RWS) や周辺機器を備えています。計算サーバー群は、分散メモリ型並列計算システムとしてFUJITSU、共有メモリ型並列計算システムとしてvSMPによる、理論演算性能合計3.7PFLOPS・主記憶容量合計192TB(最大共有メモリ16TB)の計算機能を提供します。サーバー群と利用者をつなぐネットワークは40Gbit Ethernetをバックボーンとして整備され、研究所内において高速なデータ交換や画像処理を含むクライアント作業を可能にしています。



*1) 未来流体情報創造センター (AFI Research Center) では、次世代融合研究システムのニックネームを“AFI-NITY”としました。AFI-NITYはAFI Next-generation Integrated supercomputer for promoting fluid science and Technologyの略称であり、次世代の流動科学技術を押し上げるスーパーコンピューティングシステムであることを意図しています。また、AFI-NITYは親和・融和を意味する英単語“affinity”に由来しており、流体科学の基礎研究と先端学術領域との融合、学際融合的な流体科学研究の推進、社会的課題の解決を通じた社会との親和を目指しています。

未来流体情報創造センターの組織



次世代融合研究システムの利用形態

次世代融合研究システムは、以下に示す[プロジェクト研究]、[非プロジェクト研究]により運用されています。

[プロジェクト研究]

次世代融合研究システムの主要な利用形態であり、以下の種別により構成される。

計画研究	重点的に推進するプロジェクト
公募共同研究	流体科学研究所の公募共同研究に採択された課題に基づくプロジェクト
共同研究	民間企業等を含む流体科学研究所外の研究者との共同研究プロジェクト
一般研究	通常のプロジェクト
若手研究	流体科学研究所所属の准教授、講師、助教が代表者となる若手研究者奨励のためのプロジェクト
連携研究	受託研究または共同研究の契約に基づき、計算費用として外部資金を受け入れて成果を外部組織に提供するプロジェクト
特定研究	学内他部局の教員が代表者となって、流体科学に特化した研究を行うプロジェクト

[非プロジェクト研究]

将来、プロジェクト研究へ移行するための準備研究を行う。

次世代融合研究システム利用研究成果報告書
(スーパーコンピュータ利用研究成果報告書)
第二十五卷
(2021年4月～2022年3月)

目次

I. 研究成果概要

<プロジェクト種別>

#	課題番号	プロジェクト課題名	研究代表者氏名	頁
<計画研究>				
1	SP01APR21	統計的かつ力学的な計算モデルによる航空宇宙流体工学の研究	大林 茂 教授1
2	SP02APR21	データ駆動型流体解析・設計アプローチの研究	下山 幸治 准教授14
<公募共同研究>				
3	CP01APR21	プラズマ-生体界面における活性種挙動の大規模数値解析	佐藤 岳彦 教授19
4	CP03APR21	実気象条件下におけるソニックブーム評価関数の開発	大林 茂 教授22
5	CP07APR21	Direct numerical simulation of high Rayleigh number natural convection	小宮 敦樹 教授27

6	CP08APR21	複雑地下構造内の流体流動シミュレーションによる地下構造の逆解析 鈴木 杏奈 助教30
7	CP10APR21	表面修飾ナノ粒子サスペンションのナノスケール界面現象に関する研究 小宮 敦樹 教授36
8	CP11APR21	チャンバー内の血流解析 安西 眸 助教41
9	CP12APR21	Dual-Phase 固体酸化物電解質膜内の粒界と酸素イオン伝導特性の相関 関係の解明 徳増 崇 教授46
10	CP13APR21	回転二重円すい間に発生するテイラー渦の安定性と乱流遷移 小宮 敦樹 教授49
11	CP15APR21	機械学習と分子動力学シミュレーションを融合した有機材料の構造物性 相関の解明 菊川 豪太 准教授52
12	CP16APR21	既存空港を利用した那覇空港を拠点とした際の離島や都市部を結ぶ飛行 車両の実現性の検討 大林 茂 教授54
13	CP18APR21	数値流体力学解析と細胞実験による血管疾患の機序解明 船本 健一 准教授59
14	CP24APR21	スーパーコンピュータを用いた乱流渦のトポロジカル特性に関する解析 服部 裕司 教授61
15	CP30APR21	火星探査航空機の空力と動特性に対するプロペラ後流の影響調査 永井 大樹 教授65
16	CP31APR21	Numerical modelling of the particle temperature evolution during cold-spray process 高奈 秀匡 准教授70

17	CP32APR21	ふく射熱遮蔽機能を有する消防装置の開発 岡島 淳之介 准教授73
18	CP33APR21	非普遍的な乱流場における乱流エネルギー・スカラ輸送機構に関する基礎 研究 服部 裕司 教授78
19	CP01JUN21	同軸円筒 MHD エネルギー変換機内の 3 次元電磁流体解析 高奈 秀匡 准教授82
20	CP01SEP21	スキルミオン安定性の 3D シミュレーションと磁歪現象の機構 内一 哲哉 教授85
 <共同研究>			
21	CL02APR21	飛行する回転中空円筒の実験と数値解析 石本 淳 教授88
22	CL04APR21	超低レイノルズ数流れにおける数値的・実験的研究による非定常空力現象の 解明 下山 幸治 准教授90
23	CL05APR21	航空機体と稼働エンジンとの統合解析 大林 茂 教授93
24	CL09APR21	分子動力学シミュレーションによる固液界面における不凝縮ガスに関する 解析 菊川 豪太 准教授95
25	CL14APR21	実際の構造を反映させた多孔質材料内部の固気反応を伴う物質移動と構造 変化の大規模シミュレーション 小宮 敦樹 教授97
26	CL17APR21	混相流中における移動物体周りの流れの数値予測 大林 茂 教授100

27	CL19APR21	鏝を装着したベアーシャフト矢を過ぎる流れの数値シミュレーション 服部 裕司 教授	103
28	CL20APR21	自然対流境界層の不安定性成長の因子解明 小宮 敦樹 教授	106
29	CL21APR21	熱遷移流に対する大規模分子動力学解析 菊川 豪太 准教授	109
30	CL22APR21	液体及び界面における熱輸送特性の分子動力学的研究 小原 拓 教授	111
31	CL23APR21	分子動力学法による濡れ機構の解析と解明 Surblys Donatas 助教	113
32	CL25APR21	流体機械中の非定常キャビテーションの三次元数値解析 伊賀 由佳 教授	116
33	CL26APR21	相変態を伴う高分子材料のマルチスケール数値解析 菊川 豪太 准教授	119
34	CL27APR21	アンモニア非予混合バーナー火炎における保炎消炎機構の解明 中村 寿 准教授	122
35	CL28APR21	マイクロ・ナノスケールの表面構造を持つ物体に働く熱的駆動力に関する研究 小原 拓 教授	127
36	CL29APR21	ガスタービンおよび工業炉用バーナに対応した気液アンモニア噴流燃焼に関する研究 小林 秀昭 教授	132
37	CL01AUG21	雰囲気 X 線光電子分光装置用差動排気ノズル周辺の圧力分布計算 服部 裕司 教授	135

38	CL01NOV21	電場下の鉄内部における C 原子エレクトロマイグレーション現象の解析 徳増 崇 教授137
39	CL02NOV21	燃焼振動の解明に向けた直接数値計算による火炎と非線形音響の相互作用の調査 森井 雄飛 助教140
<p><一般研究></p>			
40	GR01APR20	大気圏再突入カプセルの動的不安定現象に関する研究 永井 大樹 教授142
41	GR02APR20	温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた各種燃料・電解液溶媒・冷媒の燃焼特性に関する研究 中村 寿 准教授145
42	GR03APR20	ガソリンエンジン高効率化に向けた異種燃料添加による燃焼促進効果の調査 森井 雄飛 助教151
43	GR04APR20	修正 Volume Penalization 法の応用研究 服部 裕司 教授155
44	GR05APR20	機械学習による乱流モデル開発のための基礎研究 服部 裕司 教授160
45	GR06APR20	渦構造の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究 服部 裕司 教授166
46	GR07APR20	分子シミュレーションを用いた固体電解質/活物質内 Li イオン輸送特性の解明 徳増 崇 教授170
47	GR03MAY20	次世代形燃料電池膜電極接合体内部の物質輸送に関する数値シミュレーション 徳増 崇 教授172

48	GR04MAY20	金属結晶内の炭素拡散に関する分子論的解析 徳増 崇 教授174
49	GR01AUG20	スクラムジェット模擬燃焼器内部流における気流境界層抽気時の水素/ 空気燃焼ガス噴射による燃焼特性に関する数値解析 小林 秀昭 教授177
50	GR01APR21	境界層遷移のモデル構築とそれに基づいた層流化デバイスの設計 廣田 真 准教授180
51	GR03APR21	有機分子修飾界面におけるナノスケール界面現象の解明 菊川 豪太 准教授184
52	GR04APR21	固気液接触線でのマルチスケール性を考慮した相変化熱流体解析 岡島 淳之介 准教授186
53	GR05APR21	化学気相堆積法および原子層堆積法における成長機構の量子論的/分子 動力学的解析 徳増 崇 教授188
54	GR06APR21	炭化水素系アイオノマー内部の物質輸送特性の解明 徳増 崇 教授191
55	GR01SEP21	スーパーコンピューティングによる先端車輻基盤技術研究 石本 淳 教授194
56	GR01OCT21	粗視化分子動力学法における触媒層構造生成プロセスの解析 徳増 崇 教授196
57	GR02OCT21	低レイノルズ数における柔軟膜翼の非定常流れ場解析 永井 大樹 教授198
58	GR01NOV21	ナフィオン膜における機械的特性の影響要因の解明 徳増 崇 教授201

<若手研究>

- 59 YG01APR21 ガスジェット浮遊法による溶融体の物性計測高度化に向けたマルチフィジックスデータ同化解析
阿部 圭晃 助教203

<特定研究>

- 60 FS01APR20 航空宇宙工学に関わる圧縮性流体の高精度数値シミュレーション研究
河合 宗司 教授209
- 61 FS02APR20 複合材料の熱・機械特性に関するマルチスケール数値解析
岡部 朋永 教授215
- 62 FS04APR20 低温弱衝突磁化プラズマ中の不安定輸送現象に関する数値的研究
大西 直文 教授219
- 63 FS05APR20 プラズマアクチュエータによる気流制御メカニズム解明に向けた放電・流体の連成数値解析
大西 直文 教授222
- 64 FS06APR20 無電極プラズマ推進システムの実用化に向けた数値的研究
大西 直文 教授225
- 65 FS01FEB21 大規模疎行列の通信隠蔽反復法の検討
水藤 寛 教授228
- 66 FS01APR21 流れ中の微生物挙動の予測と制御
石川 拓司 教授230
- 67 FS02APR21 高次精度非構造格子法の高度化と航空分野における活用
大西 直文 教授234

I. 研 究 成 果 概 要

計画研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	SP01APR21
研究種別	計画研究
利用期間	2021.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2022年3月1日提出

統計的かつ力学的な計算モデルによる航空宇宙流体力学の研究

大林 茂, 焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 教授, 助教

吉村 僚一, 高見 光, 森田 聖大

野本 京佑, 小関 洋佑, 和島 佑樹, 稲葉 裕太

館野 裕紀, 奥野 陽子, 小佐田 一, 長橋 昌平, 大久保 裕汰

濱田 真伍

東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻

Schitte Nhelm Patrick

Faculty of Energy Technology, Process Engineering and Biological Engineering,
University of Stuttgart

森 悠二

東北大学工学部 機械・知能航空学科

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

本研究は, 統計的かつ力学的な計算モデルによる航空宇宙流体力学の研究と題して, 最新のデータ科学に基づく統計モデルに, 剥離や乱流遷移など流体の非線形現象に関連する力学モデルを組み合わせることで, 従来の空力予測技術を精度と計算速度において飛躍的に向上させ, 航空宇宙流体力学のブレークスルーを目指すものである. 本研究室ではこれまで, 直接数値計算による詳細な流れ場の解析と, さらに多様な風洞実験も実施してきた. そして, いずれの長所も短所も熟知した上で, それらを駆使した新しい融合計算技術を提案, 航空機が実際に飛行する際に重要な流体力学の諸問題の解決に取り組んで来た.

これまでに, 航空機翼前縁部の直接数値計算を実施し, 世界最高レベルの高レイノルズ数域で実際に発生する不安定な波の発生を捉えることができおり, 航空機開発

において注目を集めつつある。風洞実験では、世界最大の磁力支持天秤装置を用いて低アスペクト比円柱の空力特性を得られており、さらに実験条件と同等のレイノルズ数域での高精度数値計算により、流体力学的な新発見も得られている。データ同化手法に関しては、企業との共同研究を行い、可観測性に基づく最適計測地点探索や、燃焼場への適用など、これまでにないデータ同化の可能性を広げる成果を出している。航空安全については、上空の晴天乱気流、そして離発着時に問題となる空港の風環境について、それぞれ気象モデルや implicit LES を用いた解析を進めている。

今後、数値計算において特に乱流の非線形作用など現象の詳細に着目しつつ、デジタルツインの実現による工学設計技術の革新を期待できると考えている。

1.2 研究期間内の最終目標

高解像度で計算領域を十分に確保した大規模並列化による複雑流れの直接数値計算を軸として、データ同化技術のさらなる高精度化を進める。特に流体の非線形性、散逸性に着目し、その物理的性質を明らかにするとともに、安定性解析、データ同化など、従来のさまざまな解析に取り入れ高度化する。それにより、革新的な航空機設計技術を獲得することを最終目標とする。

安定性解析においては、時空間情報を排除しない全体安定性解析(または大域的安定性解析、英語では Global stability analysis)を、より高精度な予測、流体现象の解明に用い、その有用性を確立する。データ同化では、本研究室で MSBS を用いて取得した実際の PIV データや、前年度に取得した implicit LES 計算結果をもとに、JAXA において開発中の新しい乱流モデルに適用し、非定常性などより複雑な現象への予測精度向上を達成する。そのほか、航空機の安全航行に資する研究では、晴天乱気流の高精度予測、回避方法の提案、さらに空港周辺の風環境の予測を可能とする LES 技術の構築を進める。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 研究項目について

本プロジェクトでは、多岐にわたる研究項目を実施している。今年度の成果として、以下の研究項目について報告する。

- 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究
 - 後退翼前縁部境界層の遷移に関する研究
 - 壁面粗さの遷移または乱流への影響に関する詳細解析
- 航空機の安全航行に関する研究
 - 晴天乱気流の発生機構に関する研究
 - 空港周辺風況予測のための LES 技術開発
- データ同化に関する研究
 - MSBS 実験取得 PIV へのデータ同化
- そのほかの研究

2.2 具体的な成果の説明

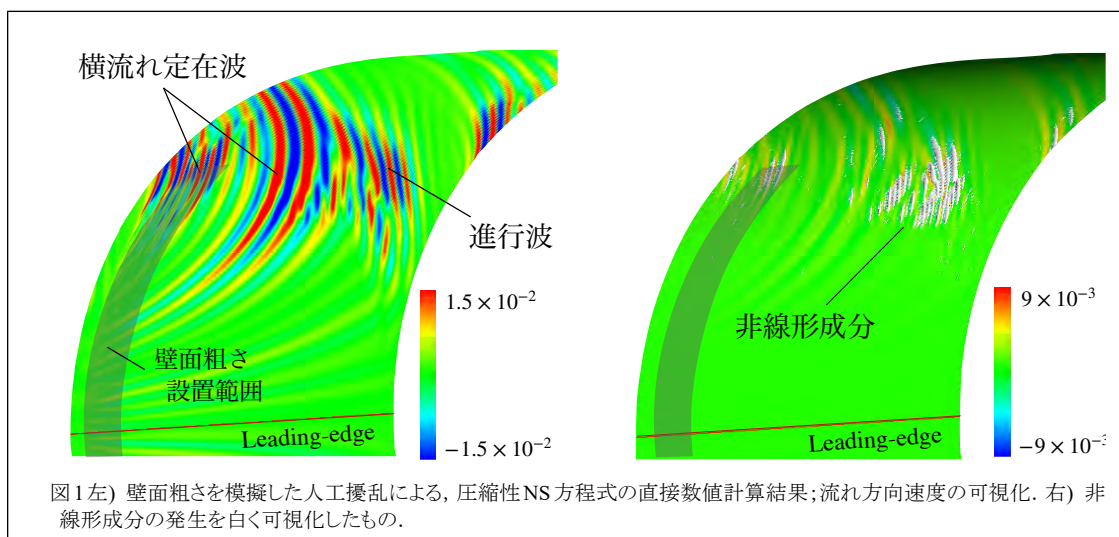
➤ 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究

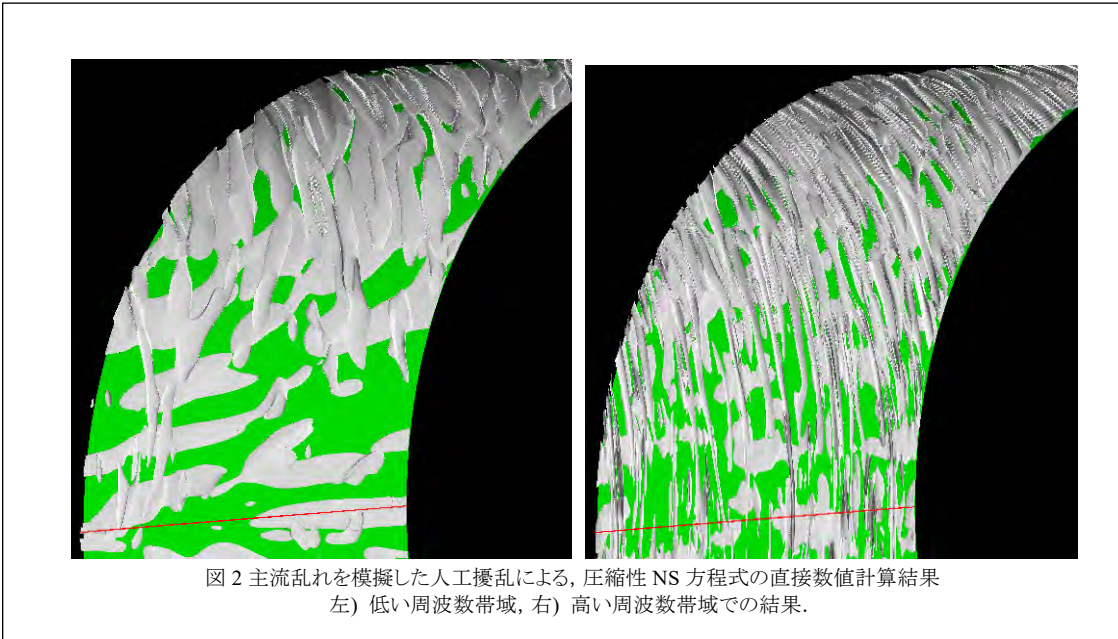
● 後退翼前縁部境界層の遷移に関する研究

航空機後退翼の、層流化技術の開発のため、後退翼面上で特に問題となる乱流遷移に関する大規模並列計算による直接数値計算を実施している。これまでに、壁面粗さを模擬した人工擾乱を前縁付近に付与することで、風洞実験では捉えることが難しかった、進行波の発生を再現することに成功し、さらにエネルギー過渡増幅との比較により、遷移機構は従来の漸近安定性ではなく、エネルギー過渡増幅により説明されるべきであることを示した (Yakeno and Obayashi, *Physics of Fluids* 2021)。

今年度は、前縁部境界層の受容性について検討を進めるため、壁面粗さに加えて、主流乱れの影響に関する検討も実施した。圧縮性 NS 方程式の計算ソルバーの線形化にも取り組み達成した。図 1 は流れ方向速度で色付けした前縁部周辺の流れの様子を示している。図 1 左は、壁面粗さを模擬した人工擾乱によって発生した横流れ定在波と、進行波の様子を表している。次に、線形化 NS 方程式(LNS 方程式)の計算結果について、図 1 右に示す。NS 方程式と LNS 方程式の差として、非線形成分を抽出し、それを可視化した。これより、遷移のもとになると考えられる非線形成分は、主に進行波周辺で発生していることが明らかになった。

次に、主流乱れを模擬した人工擾乱を付与した場合の結果を図 2 に示す。主流乱れは、周波数帯域の異なる二種類を用意した。図 2 の右と左にそれぞれ示すように、まず主流乱れによっては、発生する不安定波は、定在波よりも進行波の強度が強い傾向が観察された。次に周波数帯域の違いでは、低周波帯域のものに対しては、より低周波の進行波が、高周波帯域のものに対しては、より高周波の進行波がそれぞれ発生することがわかった。高周波の進行波は、前縁部から後流域にかけての大きな構造を形成する。人工擾乱として壁面粗さを与えた場合と比較しても、構造は前縁部から後流域にかけて大規模になる特徴があることが新たにわかった。従来、世界的には、安定性解析や直接数値計算は、計算コストの制限から一部の領域に対してのみの解析を実施するにとどまっている。しかしながら、本計算結果より、それでは全容を捉えきれていない可能性があることが判明した。今後、更なる解析を進め、層流翼開発において世界に先んじることを目指す。

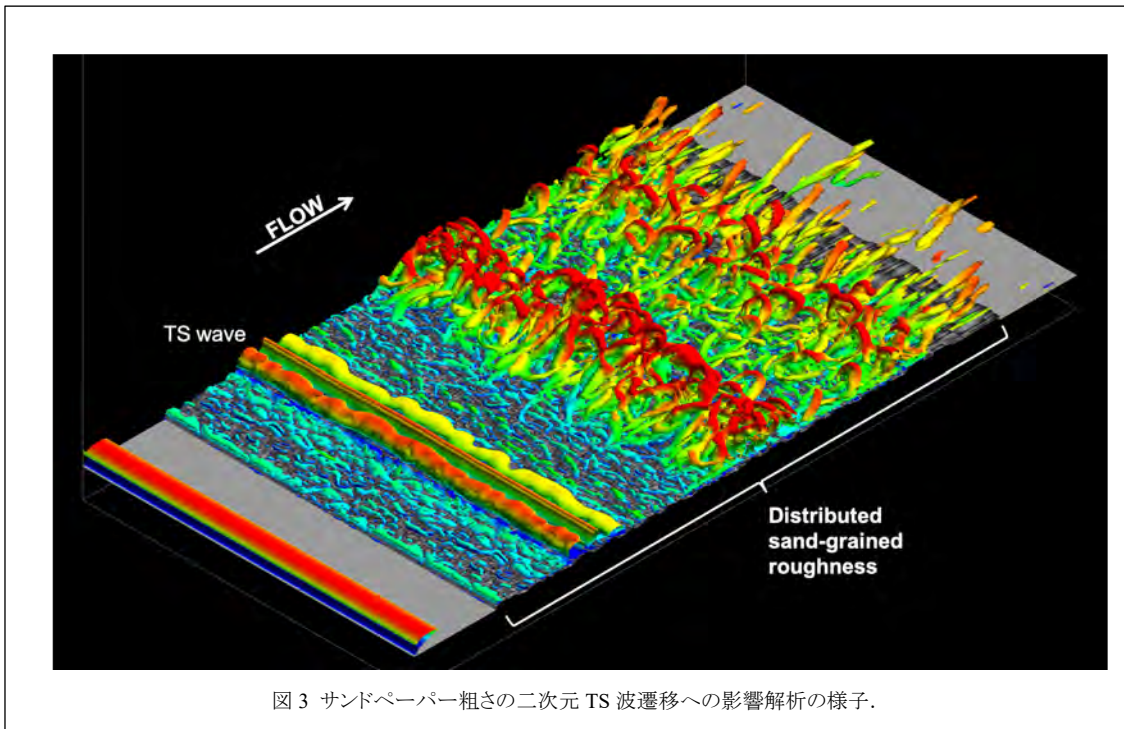




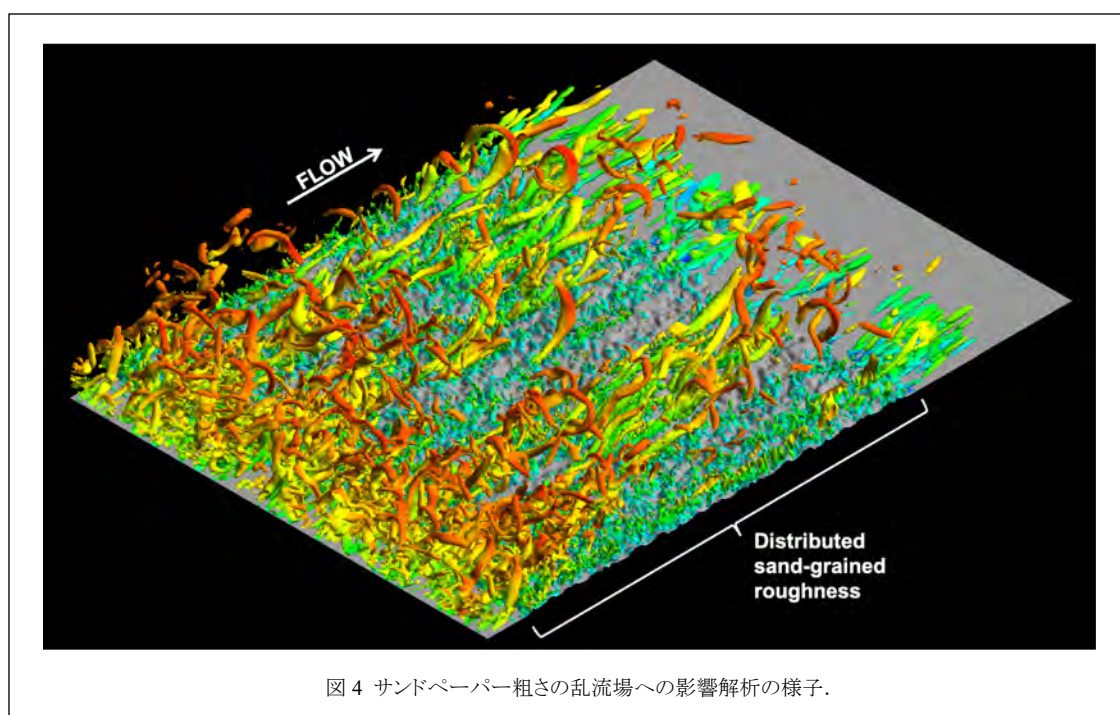
➤ 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究

- 壁面粗さの遷移または乱流への影響に関する詳細解析

従来、滑らかであるとされる粘性底層以下の粗さが、遷移もしくは乱流場へ影響を与える可能性を指摘されている。本研究プロジェクトでは、直接数値計算を用いて、境界層の4分の1程度の非常に小さな粗さでも、粗さの波長によっては遷移を遅延する効果を有することを示してきている (Tameike *et al.*, *Journal of Fluid Science and Technology* 2020)。前年度は、さらに三次元の直接数値計算でも、その効果を実証した (Hamada *et al.*, Proc. of twelfth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), 2022)。



本研究室では、小型風洞を用いた実験にも着手しており、粗さ $7[\mu\text{m}]$ 程度のサンドペーパー面では、流れの乱れ強度が低下することを確認した。そこで、これまでの直接数値計算ソルバーに対し、粗さ形状の自由度を許容し、精度を向上させ、さらに計算コストを抑えるために、Volume Penelization Method (VPM) と、重合格子法 (Zonal grid method) を使用するための実装をおこなった。それにより、サンドペーパー面のような複雑な三次元粗さの流れへの影響を、直接数値計算により解析することを可能にした。図3は二次元 TS 波への影響、図4は乱流場への影響について、それぞれ計算した結果を示す。今後、乱流統計量の取得など、粗さ効果に関する詳細解析を実施していく。

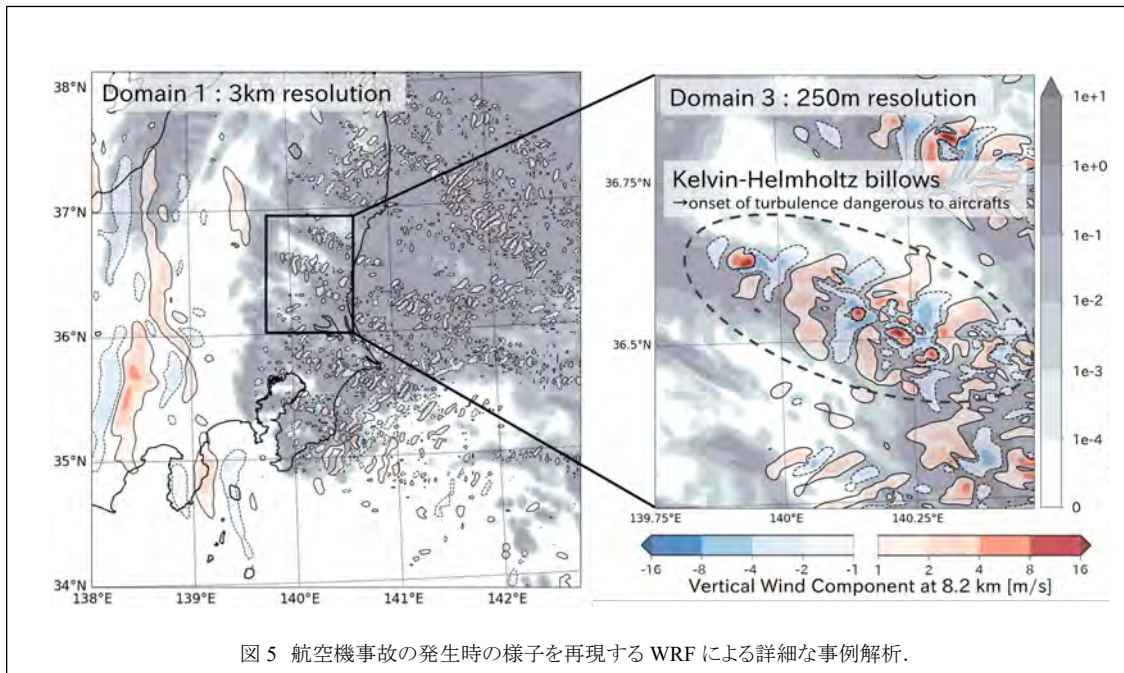


➤ 航空機の安全航行に関する研究

● 晴天乱気流の発生機構に関する研究

晴天乱気流に分類される乱気流は、従来のレーダーで感知することが出来ないため遭遇予測が難しく危険であることが知られている。しかし、従来気象分野では、航空機が航行する高度域での熱流体現象にはあまり注目されてきておらず、知見が少ない。そこで本研究では、実際に航空機事故の発生した過去の例を取り上げ、高解像の気象予測モデル WRF により再現する数値実験を実施した (図5)。それにより、気象条件によって Kelvin-Helmholtz (KH) 波を発生し、航空機の危険な揺動を引き起こされる機構を明らかにした (R. Yoshimura *et al.*, *Journal of Applied Meteorology and Climatology* 2022)。

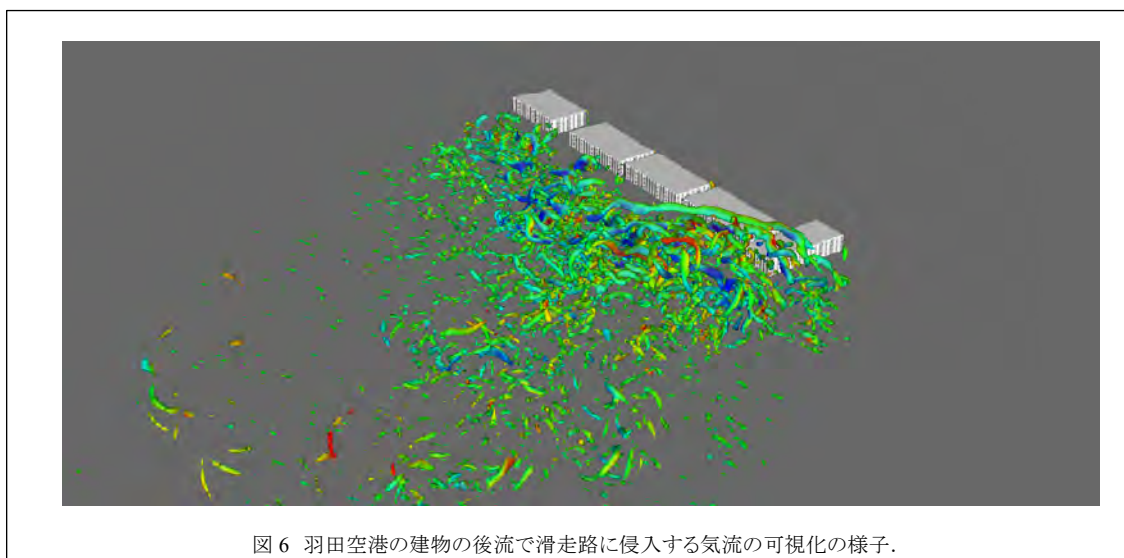
また、気象庁の気象モデル asuca を用いたさらに高解像の計算や、KH 波が崩壊して、航空機の揺動に直接的な影響を与える渦になるまでの過程について、全体安定性解析による理論計算も実施している。



➤ 航空機の安全航行に関する研究

● 空港周辺風況予測のための LES 技術開発

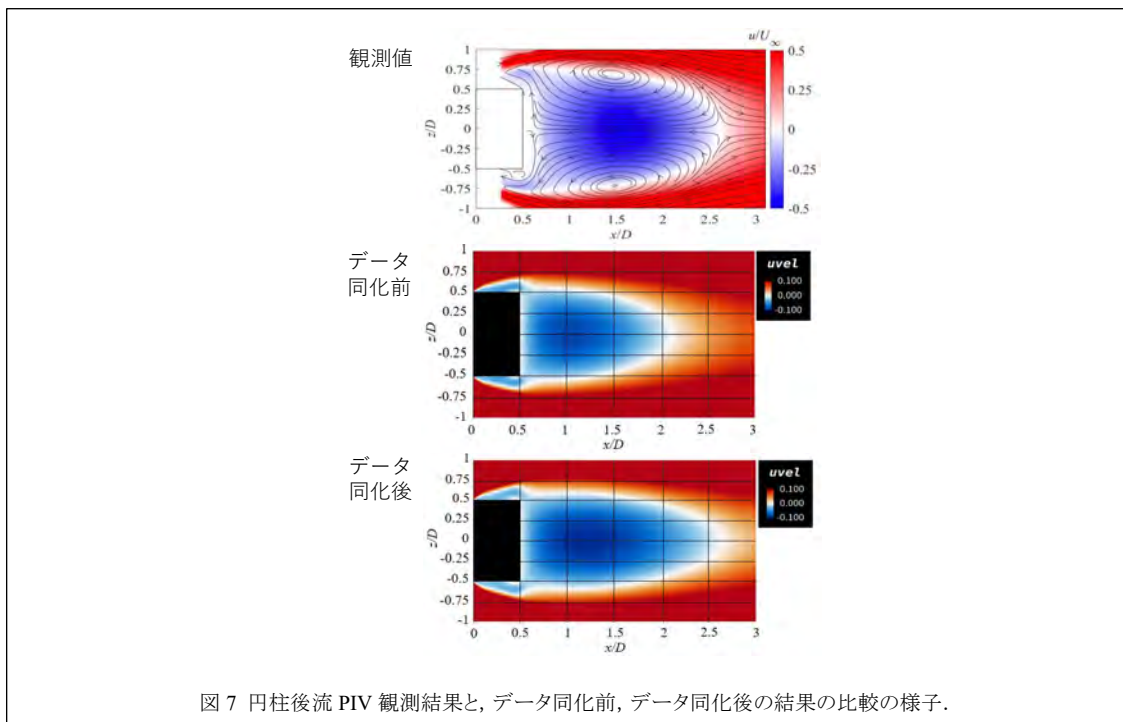
次に、航空機離着陸時に問題となる空港周辺の風況予測に関する研究の成果について報告する。これまで、階層型直交格子法（英語では Building Cube Method (BCM)）を用いた非圧縮 NS 方程式の Implicit LES による解析が実施されてきている。一方、本研究室では、圧縮性 NS 方程式ソルバーへの VP 法の実装により、複雑な建物周りの圧縮性 NS 方程式の Implicit LES 計算を、より簡便に実施できるようになった。本研究では、Google Earth から羽田空港滑走路周辺の建物配置の画像をキャプチャ取得し、それから、VP 法で必要となる体積力効果の分布を作成することで、既存の圧縮性 NS 方程式による Implicit LES ソルバーにより、空港周辺風況予測を可能にした。



➤ データ同化に関する研究

● MSBS 実験取得 PIV へのデータ同化

鈍頭物体の空力特性とその周囲に形成される流れ場の関係を理解することは工学的に重要である。これまで、気流に平行に支持された円柱周りの流れや空力特性について、MSBSを用いた実験により解析を実施してきている。前年度は実験に加えて、Implicit LESによる大規模数値計算も実施することで、流れの特徴的な周波数成分に関する詳細な知見を取得することができた (Kuwata *et al.*, *Physical Review Fluids* 2021)。本研究プロジェクトでは、風洞実験のデジタルツイン構築に向けた取り組みを進めており、特にデータ同化の高度化を試みている。今年度は、最もポピュラーな乱流モデルの一つである SA モデル係数の一つについて、時間平均化した PIV 可視化結果に近づけるための最適化をおこなった。その結果を図 7 に示す。データ同化を施した SA モデル係数を用いると、計算結果は PIV 観測結果により近づくことが確認された。今後、JAXA による最新の乱流モデルを用いて、非定常流れに対するデータ同化に挑戦する。



➤ そのほかの研究

本研究プロジェクトでは、そのほかにも、電動航空機の BLI 搭載の最適設計や、機械学習と遺伝的アルゴリズムによる航空機の機体構造の最適化に関する研究も進めている。図 8 と図 9 に、その一部の成果を示す。

図 8 は、BLI を搭載した旅客機モデル NASA-CRM 周り、FaSTAR-Move を用いた非定常計算結果を示している。今後さまざまな形状パラメータに対する最適化を実施する。図 9 上は、最適化対象とする主翼平面形の模式図を示している。本研究により、機械学習とニューラルネットワークを組み合わせた最適化ツールの有効性が確かめられた。

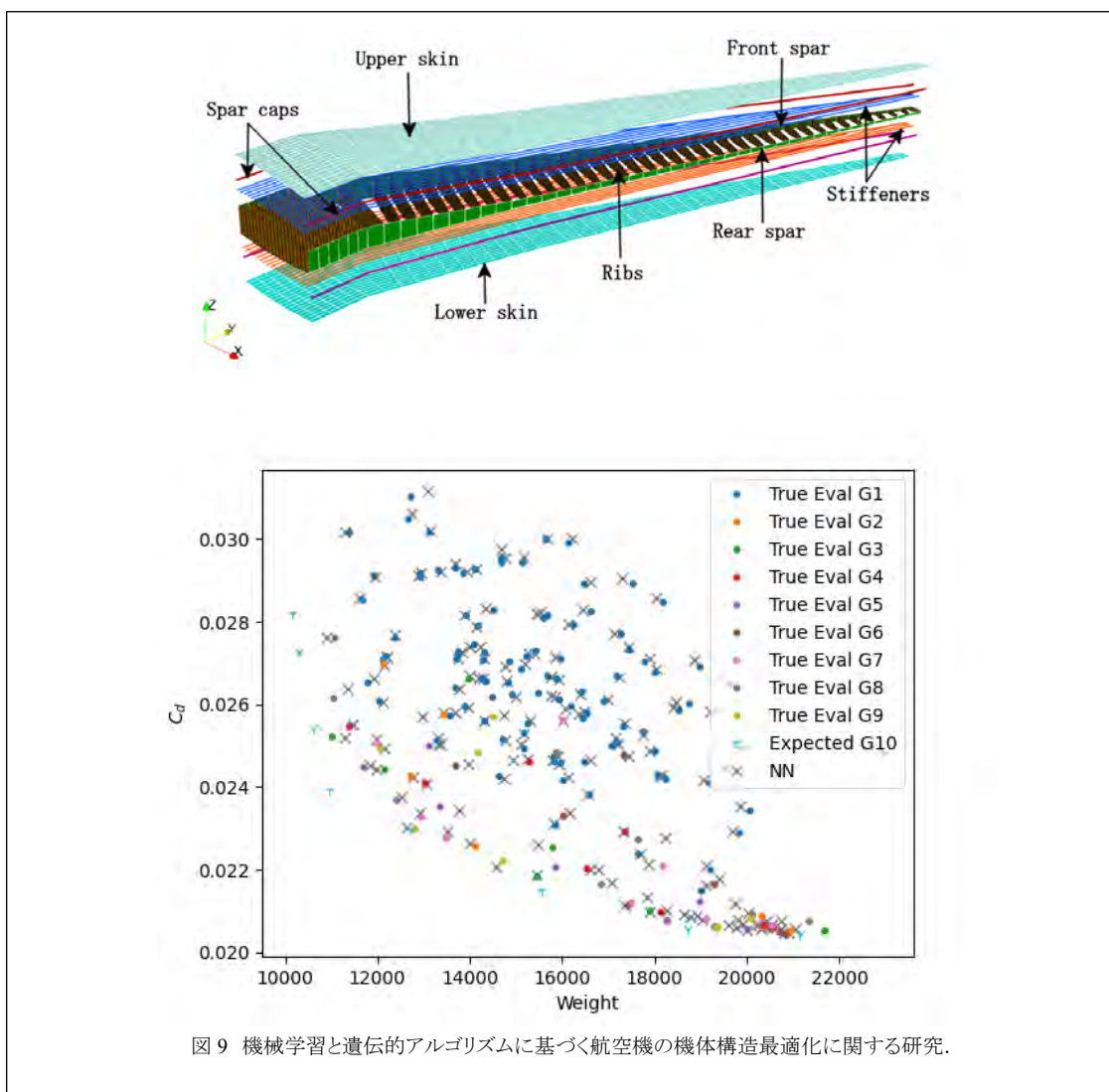
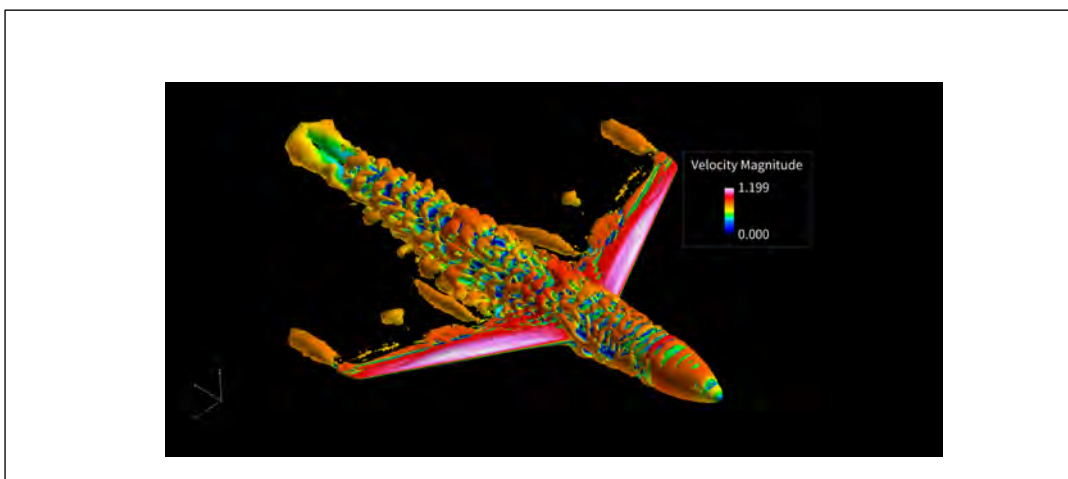


図9 機械学習と遺伝的アルゴリズムに基づく航空機の機体構造最適化に関する研究.

3. 研究目標の達成状況

➤ 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究

● 後退翼前縁部境界層の遷移に関する研究

前年度までに後退翼前縁部周辺 10%の計算を実施したが、今年度は 50%まで範囲を広げた、同様の計算条件での直接数値計算を実施することができた。前年度に検討した壁面粗さだけでなく、今年度はさらに、主流乱れを模擬した人工擾乱の受容性をも確かめることができた。高レイノルズ数となる運行時に胴体で発達する乱流境界層には、高周波数擾乱が含まれることが予想されるため、高周波擾乱を受容して成長する進行波に対する対策が必須であることが改めて確認された。今後は、マッハ数依存性、確認された不安定モードの成長を抑制する後退翼の形状最適設計、層流化デバイスの設置に関する検討を進めていく。

● 壁面粗さの遷移または乱流への影響に関する詳細解析

今年度は、境界層厚さの 4 分の 1 以下の小さな粗さを解像した直接数値計算を実施するために、当該計算ソルバーに、Volume Penalization Method (VPM) と、重合格子法 (Zonal grid method) の実装をおこなった。それにより、サンドペーパー面のような複雑な三次元粗さの流れへの影響を、直接数値計算により解析することが可能になった。今後は、既存のサンドペーパー面だけでなく、これまでの知見をもとに最適化した形状の、遷移や乱流への効果を確かめていきたいと考えている。

➤ 航空機の安全航行に関する研究

● 晴天乱気流の発生機構に関する研究

高解像の気象予測モデル WRF と、asuca により、実際の乱気流の発生を再現する数値実験を実施した。さらに、航空機の運動モデルを乱気流場に適用し、実際に航空機で観測した重力加速度との比較も行っている。今後は、KH 波が崩壊していく過程について、全体安定性解析による理論計算をさらに進めつつ、危険領域の事前予測を高精度に行うための知見の取得を行なっていく。

● 空港周辺風況予測のための LES 技術開発

空港周辺の風況予測のために、既存の圧縮性 NS 方程式の計算ソルバーを改変し、Implicit LES 計算を可能にした。今後は、必要に応じて建物周辺の解像度を上げたり、境界条件に実際の数値予報データを用いたりすることで、より現実に近づけていく。また、航路上の乱流統計量を取得することで、危険予測領域を明示するなどを検討する。

➤ データ同化に関する研究

● MSBS 実験取得 PIV へのデータ同化

最もポピュラーな乱流モデルの一つである SA モデル係数の一つを最適化し、実験で取得した PIV 観測値の速度分布へ近づけられることを確認した。今後は、JAXA による最新の乱流モデルを用いて、非定常流れに対するデータ同化に挑戦するなどする。

➤ そのほかの研究

今年度は、FaSTAR-MoveによりBLI搭載機の旅客機全機周りの計算を可能にした。今後は、さまざまな形状パラメータに対する多目的最適化を実施する。一方、胴体形状の最適化について、機械学習とニューラルネットワークを組み合わせた最適化ツールはさらに改善する要素がある。最終的には、従来機のデータに頼らない革新的な設計手法を確立していく。

4. まとめと今後の課題

本研究では、大規模並列非定常数値解析を軸に、これまでデータ同化や遷移の安定性解析あまり考慮されていなかった、流体の非定常現象の詳細に着目し取り入れることで、工学設計の革新を目指している。今年度は特に、後退翼前縁部の受容性に関して調査を実施し、新知見の取得に成功した。今後は、層流化デバイスの設置や、翼形状の工夫により、遷移遅延を達成するための検討をさらに進めていく。また、平板境界層遷移においては、非常に小さな複雑な三次元形状の粗さ面上での、直接数値計算を実施することができた。今後、粗さ形状の種類を増やし、影響についてさらに詳細を解析していく。また、航空機事故の発生した実際の事例について、気象計算により詳細解析を実施し、KH渦の発生機構を明らかにした。今後は、さらに高解像計算を実施、そして安定性理論に基づき、航空機揺動に直接的な影響をもたらす細かな渦の発生に関する研究により、深めていく。また、羽田空港周りの実スケール大規模計算についても、今後は航路上の統計量を取得していく。風洞実験デジタルツイン構築に関しては、今後JAXAの最新の乱流モデルのデータ同化により、非定常流れなどより複雑な流れ場の予測の高精度化に挑戦する。そのほか、電動航空機BLIや、機体構造の最適化もさらに進めていく。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

2021年度

- Ryoichi Yoshimura, Kento Suzuki, Junshi Ito, Ryota Kikuchi, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Large Eddy and Flight Simulations of a Clear Air Turbulence Event Over Tokyo on 16 December 2014, Journal of Applied Meteorology and Climatology, Vol. 61 (5), pp. 503-519, 2022
- Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Propagation of stationary and traveling waves in a leading-edge boundary layer of a swept wing, Physics of Fluids, Vol. 33 (9), pp. 094111, 2021
- Aiko Yakeno: Drag reduction and transient growth of a streak in a spanwise wall-oscillatory turbulent channel flow, Physics of Fluids, Vol. 33 (6), pp. 065122, 2021

- Masahide Kuwata, Yoshiaki Abe, Shota Yokota, Taku Nonomura, Hideo Sawada, Aiko Yakeno, Keisuke Asai, Shigeru Obayashi: Flow characteristics around extremely low fineness-ratio circular cylinders, Physical Review Fluids, Vol. 6 (5), pp. 054704, 2021

著書

2021年度

- 大林 茂, 三坂 孝志, 加藤 博司, 菊地 亮太 : データ同化流体科学—流動現象のデジタルツイン—, 共立出版, 2021年1月発行

国際学会

2021年度

- Shigeru Obayashi, Aiko Yakeno, Makoto Hirota, Yuki Ide, Naoko Tokugawa and Hikaru Takami: Computational Laminar Flow Technology, 2021 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT), **Plenary Speak**, November 15th, 2021
- Yuta Inaba, Shugo Date, Hariansyah Muhammad Alfiyandy, Yoshiaki Abe, Koji Shimoyama, Tomonaga Okabe, Shigeru Obayashi: Optimization of Structural Layout for Composite Aircraft Wings, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, OS20-37, October 27th, 2021
- Shingo Hamada, Aiko Yakeno, Sayaka Suzuki, Shigeru Obayashi, Bagus Nugroho: Transition delay and drag reduction mechanism by designed surface roughness, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, OS21-CRF-47, October 27th, 2021
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Mode Decomposition Method for Extracting Characteristic Structures Related to the Subsonic Jet Noise Generation, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, OS22-12, October 27th, 2021
- Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Traveling-wave propagation in the swept leading-edge boundary layer at high Reynolds number, August 22-27, 2021
- Shigeru Obayashi, Takashi Misaka, Aiko Yakeno, Ryota Kikuchi: Data Assimilation for Engineering Design and Operation, 14th International Conference on

Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control (EUROGEN2021), Semi-plenary Lecture, June 29th, 2021

- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Modal approach for extracting flow structure related to the subsonic jet noise generation, ELyT workshop 2021, June 25th, 2021
- Shigeru Obayashi, Takashi Misaka, Aiko Yakeno, Ryota Kikuchi: Digital-Twin Fluid Engineering, The biennial International Conference on Cybernetics (CYBCONF2021), Plenary Lecture, June 10th, 2021

国内学会・研究会等

2021年度

- 吉村 僚一, 伊藤純至, 鈴木 健斗, Patrick Antonio Schittenhelm, 焼野 藍子, 大林 茂: 冬季の南関東中下層で発生する晴天乱気流の大規模数値シミュレーション及び飛行機の揺動評価, 第16回航空気象研究会, 発表番号2, 2022年2月4日
- 吉村 僚一, 伊藤 純至, 鈴木 健斗, Patrick Antonio Schittenhelm, 焼野 藍子, 大林 茂: 2020年12月30日に発生した乱気流事例の asuca による LES 解析およびフライトシミュレーション, 第23回非静力学モデルに関するワークショップ, セッション3-2, 2021年10月28-29日
- 稲葉 裕太, 伊達 周吾, Hariansyah Muhammad Alfiyandy, 阿部 圭晃, 下山 幸治, 岡部 朋永, 大林 茂: 複合材航空機の主翼設計における構造部材配置最適化, 第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2A04, 2021年7月1日
- 焼野 藍子, 稲村 麟, 大林 茂, 渡辺 直樹, 栗本 直規, 燃料シミュレーション予測精度向上のためのシュリーレン画像を用いたデータ同化適用の研究, 統計数理研究所-東北大学流体科学研究所-材料科学高等研究所 合同ワークショップ, 2021年4月21日

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

特許

該当なし

受賞

2021年度

- 焼野 藍子, 日本機械学会流体工学部門 2022 年度「フロンティア表彰」受賞, 2022 年 3 月 15 日運営委員会で決定
- 焼野 藍子, 日本流体力学会 2021 年度「竜門賞」受賞, 2022 年 2 月 19 日総会で決定
- 大林 茂, 2021 年度日本機械学会流体工学部門「部門賞」受賞, 2021 年 11 月 9 日
- 濱田 真伍, 第 25 回データ同化夏の学校「優秀発表賞」を受賞, 2021 年 8 月 13 日
- 森 悠二, 東北大学工学部「総長賞」受賞, 2022 年 3 月 25 日
- 小佐田 一, 日本航空宇宙学会北部支部講演会「Good Presentation Award for Student」受賞, 2022 年 3 月 18 日

マスコミ発表

2021 年度

- 2021 年 雑誌『子供の科学』（発行部数 9 万部）2021 年 12 月号（11 月 10 日発売）で、旅客機主翼の層流化に関する研究が紹介された
- 2021 年 Physics of Fluids 掲載論文内容を東北大学プレスリリース, 日本経済新聞やその他の Web サイトに記事が掲載された
 - 「世界初！旅客機主翼の流れの遷移メカニズムを解明 -後退翼の層流化により空気抵抗の大幅減へ前進-」東北大学プレスリリース
 - 「東北大、旅客機主翼の流れの遷移メカニズムを解明」日本経済新聞
 - 「旅客機主翼の層流から乱流への遷移メカニズムを解明 - 将来の低計算コストでの航空機開発に寄与 東北大学」 エンジニアのためのキャリア応援マガジン「fabcross for エンジニア powered by MEITEC」
 - 「東北大、後退角主翼前縁部の乱流遷移メカニズム解明」航空新聞社 jwing.net
- 2021 年 Physical Review Fluids 掲載論文が Editor's suggestion に選出され, 東北大学プレスリリース, 日本経済新聞, 日刊工業新聞などに記事が掲載された
 - 「短い円柱の空気抵抗は円板に近づく -磁力浮遊させる風洞実験により超細長比円柱の空力特性を解明-」東北大学プレスリリース
 - 「東北大、磁力浮遊させる風洞実験により超低細長比円柱の空力特性を解明」日本経済新聞
 - 「東北大、風洞実験で超低細長比円柱の空力特性解明に成功」航空新聞社 jwing.net
 - 「東北大、磁力浮遊で空力計測 宇宙カプセル設計高度化」日刊工業新聞

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	SP02APR21
研究種別	計画研究
利用期間	2021.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2022年3月2日提出

データ駆動型流体解析・設計アプローチの研究

下山 幸治¹, Boonjaipetch Potsawat², Timothy Jim³, 鎌田 大³,
 Muhammad Hilmi Al Fatih³, 足立 匠海³, Muhammad Alfiyandy Hariansyah³,
 明石 朱里⁴, 関西 一平⁴

¹ 東北大学流体科学研究所 准教授, ² 学術研究員, ³ 大学院生, ⁴ 学部生

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

流体力学の数値解析（CFD）は発展の一步を辿ってきており, 昨今の計算機性能の向上と相まって精度的にもコスト的にも有益なツールとして認識されるようになった. 本プロジェクトでは, CFD 技術およびそれを用いた流体設計の更なる高度化を目指して, 既存の CFD 技術と最先端のデータ科学技術の融合により, 独自のデータ駆動型アプローチの開発し, 流体研スパコンシステムを駆使して様々な実問題への応用に役立てる. CFD 技術単体をモノづくりに応用した従来の研究は, 計算コストおよび精度の面で不十分であり, 実用的ではなかった. 一方本研究では, CFD 技術とモノづくり問題の間にデータ科学技術を仲介させることで, 流体問題の本質を学習・予測できるようにした上で, 流体力学に則したモノづくり支援を高効率かつ高信頼性で実現することを目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

本プロジェクトは, 「最適化」「不確かさ解析」「データ同化」に関連した課題に取り組む. それぞれの課題に共通して要求されるタスクは, 必要最小限の解析コスト（例えば, CFD 解析のケース数）をもって, 解析解・最適解を正しく取得することである. そのためには, 途中過程で解析モデル・最適化モデルを逐次評価し, 必要に応じてデータを取捨選択・有効活用し, 解析モデル・最適化モデルを進化的に改良していく, データ駆動型のアプローチを確立する. アプローチの枠組みはすべての課題でほぼ共通であるが, アプローチの細部については各課題の趣旨に個別対応させることで検証を進める. 最終的には, 流体力学の実問題に応用し, その有効性を実証する.

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 ラティス型ヒートシンクのトポロジー設計最適化

高温デバイスからの排熱のために使用されるヒートシンクは, 加工技術の限界から, 単純な

構造（ピンフィン型）に限られており，高性能化を十分に追求していなかった．そこで本研究では，最新の積層造形で成形できる複雑構造（ラティス型）に拡張して，ヒートシンク構造のトポロジーを最適化した．その結果，既存のピンフィン型に比べて，高性能を実現できる世界唯一のラティス型ヒートシンク構造を創出することに成功した（図1）．

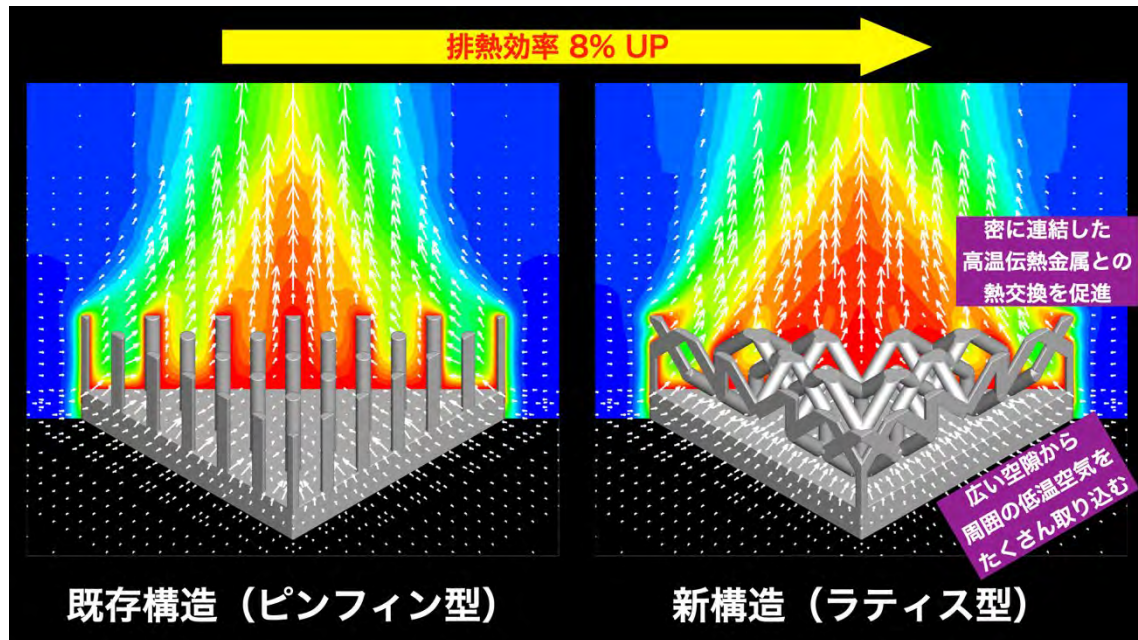


図1 ラティス型ヒートシンクのトポロジー設計最適化

2.2 機械学習による翼型形状の高速多目的最適化

航空機の翼型に求められる相反する設計目的（抵抗最小化，揚力最大化）を同時に実現する形状を高効率に探索するために，機械学習（ニューラルネットワーク）によるデータ駆動型の高速最適化手法を提案した．その結果，従来の最適化手法（遺伝的アルゴリズム）に比べて約70%の計算コストを削減しつつ，抵抗最小化と揚力最大化をバランスできる多様な設計候補の探索することに成功した（図2）．

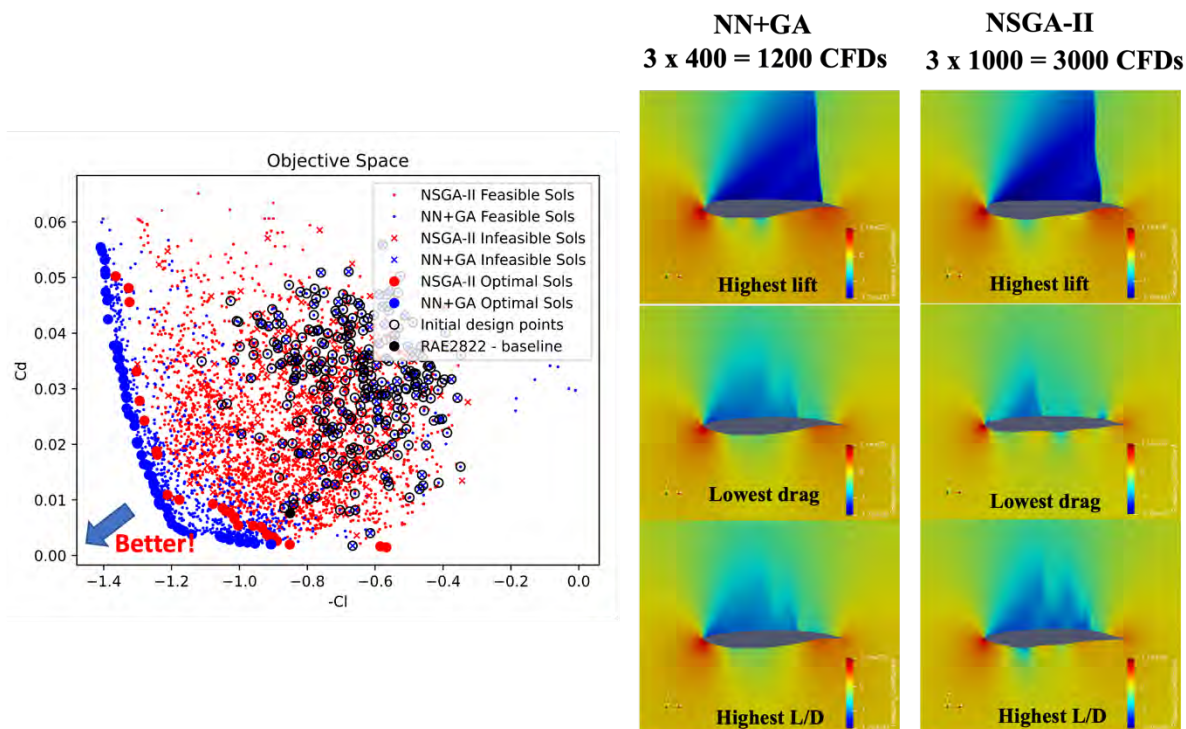


図 2 機械学習による翼型形状の高速多目的最適化

2.3 超音速旅客機の複合領域最適化

超音速旅客機の低ブーム化・低抵抗化・低荷重化の 3 つの目的を考慮した設計最適化のためのフレームワークを構築し、最適化計算を実施した。その結果、3 つの目的の間のトレードオフ関係を確認するとともに、各目的を達成するために重要となる設計指針と物理的根拠を明らかにした。さらに、トリム性能と姿勢安定性を加味することで、より現実的な設計への絞り込みを行うことができた (図 3)。

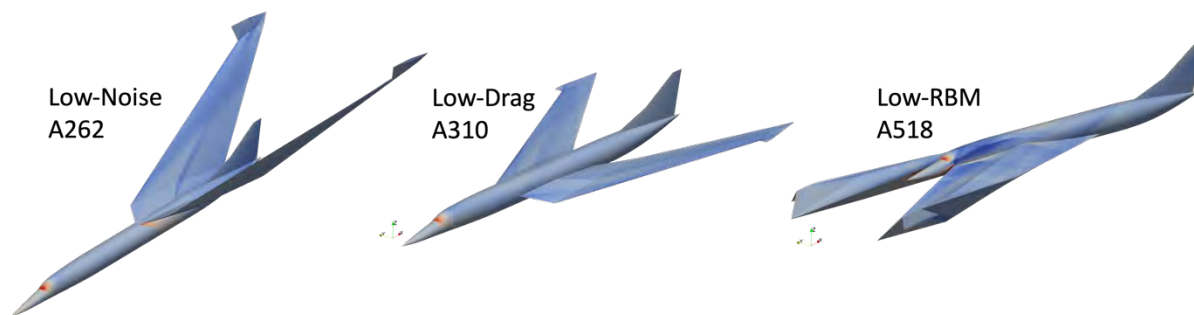


図 3 超音速旅客機の複合領域最適化

3. 研究目標の達成状況

「最適化」については、必要最小限の解析コストをもって最適設計に導くデータ駆動型最適化手法を開発し、種々の設計問題において開発手法の有効性を実証した。

4. まとめと今後の課題

データ駆動型の最適化手法を開発し、有効性を実証した。今後は、「不確かさ解析」や「データ同化」に関連する問題の解決にも取り組み、データ駆動型アプローチの更なる高度化を

目指す.

5. 研究成果リスト (※第2回以降の報告の場合は, 初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

1. Koji Shimoyama and Atsuki Komiya, “Multi-Objective Bayesian Topology Optimization of a Lattice-Structured Heat Sink in Natural Convection,” *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2022.
2. 大林茂, 千葉一永, 下山幸治, 三坂孝志, “機械工学とインフォマティクス (設計情報学, 代替モデリング, データ同化からの概観)”, *設計工学*, Vol. 56, No. 11, 2021年11月, pp. 539–545.
3. Potsawat Boonjaipetch, Koji Shimoyama, and Shigeru Obayashi, “Parametric Study on Waverider Configurations at Low-supersonic Speed for Low-boom Supersonic Transport,” *Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences*, Vol. 64, No. 6, November 2021, pp. 325–334.
4. Timothy M. S. Jim, Ghifari A. Faza, Pramudita S. Palar, and Koji Shimoyama, “Bayesian Optimization of a Low-Boom Supersonic Wing Planform,” *AIAA Journal*, Vol. 59, No. 11, November 2021, pp. 4514–4529.

著書

なし

国際学会

1. ○Muhammad Alfiyandy Hariansyah and Koji Shimoyama, “On the Use of a Multilayer Perceptron as an Aerodynamic Performance Approximator in Multi-Objective Transonic Airfoil Shape Optimization,” *18th International Conference on Flow Dynamics*, Sendai, Japan, 27–29 October 2021.
2. ○Muhammad Hilmi Al Fatih, Koji Shimoyama, and Kazumasa Kamisori, “An Optimization Study of Strake Implementation on a Spaceplane,” *2021 AIAA Aviation and Aeronautics Forum and Exposition (AIAA AVIATION Forum)*, online, 2–6 August 2021.
3. ○Yuki Sano, Yuji Akai, Takumi Takahashi, Keisuke Ishii, Kichinosuke Fukuhara, Takeo Kobayashi, and Koji Shimoyama, “Construction of New MBD Process for Valve Train That Realizes Multi-Functional and High-Performance Optimal Design in a Short Time,” *SAE World Congress Experience (WCX)*, online, 13–15 April 2021.

国内学会・研究会等

1. ○明石朱里, Timothy Jim, 下山幸治, “ソニックブーム伝播の異方性に着目した超音速旅客機形状のベイズ最適化”, 日本航空宇宙学会北部支部 2022 年講演会ならびに第 3 回再使用型宇宙輸送系シンポジウム, オンライン, 2022 年 3 月 17–18 日.
2. ○Muhammad Alfiyandy Hariansyah, 下山幸治, “On the Use of a Multilayer Perceptron Based Surrogate Model in Evolutionary Optimization”, 日本機械学会第 34 回計算力学講演会, オンライン, 2021 年 9 月 21–23 日.
3. ○東田憲太郎, 下山幸治, “オートマチックトランスミッションケーシングの多目的設計探査 (軽量化)”, 自動車技術会 2021 年度中部支部研究発表会, 名古屋, 2021 年 7 月 1 日.
4. ○Muhammad Alfiyandy Hariansyah, 下山幸治, “An Artificial Neural Network-Assisted Genetic Algorithm with Application to Multi-Objective Transonic Airfoil Shape Optimization”, 第 53 回流体力学講演会/第 39 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, オンライン, 2021 年 6 月 30 日–7 月 2 日.
5. ○門脇皓司, 劉軍, 小野寺淳, 米倉充, 下山幸治, “HVAC ユニット内温度場の実験式を用いた CFD 高精度予測”, 自動車技術会 2021 年春季大会, オンライン, 2021 年 5 月 26–28 日.
6. ○Jun Liu, Jun Onodera, Koji Kadowaki, Mitsuru Yonekura, Yasufumi Konishi, Koji Shimoyama, “An Experimental Study on Mixing Zone of Hot and Cold Air Flow in a Simple HVAC Model”, 自動車技術会 2021 年春季大会, オンライン, 2021 年 5 月 26–28 日.

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

1. “世界唯一の高性能ラティス型ヒートシンク構造を創出～積層造形・データ科学・電熱制御の融合による革新的設計～”, 東北大学流体科学研究所プレスリリース, 2022 年 2 月 9 日.
2. 下山幸治, 小宮敦樹, 杉原隆夫, 廣川啓, 石川一郎, 田内常夫, “ヒートシンクの製造方法、及び、ヒートシンク”, 特願 2021–66528, 2021 年 4 月 9 日出願.
3. 下山幸治, 杉原隆夫, 石川一郎, 田内常夫, “ヒートシンクの設計方法、及び、ヒートシンクの設計プログラム”, 特願 2021–66527, 2021 年 4 月 9 日出願.

I. 研 究 成 果 概 要

公募共同研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 10 日提出

プラズマ-生体界面における活性種挙動の大規模数値解析

内田 諭

東京都立大学大学院システムデザイン研究科 教授

佐藤 岳彦

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

この 10 年で，大気圧放電プラズマを用いた医学応用，すなわちプラズマ医療は大きく進展し，実用に資する学問体系の構築が急務となっている．特に細胞膜中における放電活性種の反応輸送工程は医療効果における重要な生体機構の一つであるが，プラズマ-生体相互作用を加味した理論的な定量解析は現時点においても極めて限定的である．

申請者らは平成 24-28 年度新学術領域研究「プラズマ医療科学の創成」の研究構成員（佐藤：計画班，内田：公募班）として，主にプラズマ-生体界面における放電活性種の挙動を分子動力学シミュレーションを用いて数値的に検証してきた．こうした研究アプローチはプラズマ医療科学の学問分野において，国内で他に行っている例が少なく，関連する海外研究者からも注目されている．

本研究の目的は，生体膜内における放電活性種の力学的挙動について，量子化学計算（QC）および分子動力学法（MD）により，反応輸送および構造変位を定量的にモデル化することである．本課題は，様々な膜組成に対する活性種の浸透性を分子レベルで解明しようとする意欲的研究である．なお，電荷形成や電界印加による相乗的効果も詳細に検証していく．

1.2 研究期間内の最終目標

上記に示した目的に基づいて，本研究期間内に行う目標課題を以下に示す．

- ① 放電活性種を内在する数値生体膜モデルを構築する．
- ② 膜構成分子と放電活性種との反応過程を定量化する．
- ③ 生体膜中における放電活性種の輸送パラメータを導出する．
- ④ 電荷電界に対する生体膜変位の特性を把握する．

2. 研究成果の内容

本研究では、流体モデル計算や分子動力学法による数値解析の実績を有する報告者が、センターの計算機に実装されている解析ソフトウェア（COMSOL および AMBER）を用いて、大容量並列高速計算によるマルチスケールの解析結果を統計的に精査している。本年度は、流体-回路統合モデルおよび生体膜モデルを用いて、膜電位変動と電界依存性を再評価した。

2.1 大気圧グロー放電下による細胞膜電位の変動

流体近似計算から得たプラズマインピーダンスを入力パラメータとして、生体細胞の等価回路モデルより、細胞各部位における電圧および電流の経時変化を導出した。一般的な大気圧グロー放電の照射においては、細胞間に 7 mA 程度の電流が生じた。これは他研究の検証結果と定性的な一致を示している。

2.2 活性種に対する膜内自由エネルギーと浸透係数の電界変化

酸素活性種の一つである過酸化水素を内在した数値生体膜モデルを用いて、電界重畳時のアンブレラサンプリングシミュレーションを行った。電界強度が 0.3 V/nm のとき、膜中心の自由エネルギーが大きく減少し、膜浸透係数は 4 倍近くに増加した（図参照）。

3. 研究目標の達成状況

今回の研究目標において、流体近似計算と等価回路を併用した統合的モデリングから、細胞膜間電流を定量的に導出した。また、印加電界に対する膜内自由エネルギーと膜浸透係数の関係を特定できたことから、所定の成果が得られたと言える。また、本計算センターに実装された解析ソフトウェア（COMSOL および AMBER）で、より実際の並列高速計算による大規模膜解析の検証も実施できた。本研究期間における目標はおおむね達成できたと思われる。

4. まとめと今後の課題

本研究では、生体膜内における放電活性種の力学的挙動について、放電プラズマと生体膜のモデル構築および高速並列計算による長時間の膜挙動解析の工程を確立し、詳細な細胞部位の電圧・電流や高精度な自由エネルギー・輸送係数を導出することができた。今後、これらの成果を早急に論文等にまとめて、幅広い公開を行っていく予定である。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

国際学会

1. Shota Yamauchi, Yuta Iwata, Ippei Yagi, Satoshi Uchida, "Analysis of Electrical Characteristics of Living Cells Exposed by Cold Atmospheric Plasma using the Equivalent Circuit Model," 74th Annual Gaseous Electronics Conference (GEC2021), Online (USA time), GT61.00026 (October 4-8, 2021)
2. Yuta Iwata, Shota Yamauchi, Yuya Oishi, Ippei Yagi, Satoshi Uchida, Takehiko Sato "Numerical Simulations of Membrane Deformation Induced by Cold Atmospheric

Plasma with Circuit Analysis and Molecular Dynamics," The Twenty-first International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2021), Sendai, Japan (Online Zoom), CRF-21 (October 27-29, 2021)

国内学会・研究会等

1. 山内 翔太, 岩田 優太, 八木 一平, 内田 諭, 「プラズマ照射による生体細胞への電氣的効果の等価回路解析」, 第82回応用物理学会秋季学術講演会, 13p-N107-7, オンライン (Zoom) (2021年9月10-13日)
2. 内田 諭, 「プラズマ-生体間の電荷・電界による膜機能制御の分子計算評価」, 第37回九州・山口プラズマ研究会, 佐世保, 長崎 (2021年11月6-7日) (招待講演)
3. 内田 諭, 八木 一平, 佐藤 岳彦, 「電界下におけるプラズマ誘起種の膜透過性の分子動力学解析」, 第31回日本MRS年次大会, 横浜, 神奈川+オンライン (Zoom), H-I14-002 (2021年12月13-15日) (招待講演)
4. 岩田 優太, 山内 翔太, 八木 一平, 立花 孝介, 小田 昭紀, 佐藤 岳彦, 内田 諭, 「電界と電荷による活性酸素種の生体膜透過特性の変化」, 第69回応用物理学会春季講演会講演予稿集, 25p-E105-1, 07-092, オンライン (Zoom) (2022年3月22-26日)
5. 山内 翔太, 岩田 優太, 八木 一平, 内田 諭, 「大気圧プラズマ照射によるがん細胞への電氣的作用の数値解析」, 第69回応用物理学会春季講演会講演予稿集, 25p-E105-1, 07-092, オンライン (Zoom) (2022年3月22-26日)
6. 佐々木 瞬, 藤田 諒, 山内 翔太, 内田 諭, 立花 孝介, 小田 昭紀, 「プラズマ照射が生体細胞へ及ぼす影響の解明に向けた大気圧He/N₂グロー放電のシミュレーション」, 第69回応用物理学会春季講演会講演予稿集, 26a-P03-14, 07-120, 相模原, 神奈川 (2022年3月22-26日)

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP03APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04~2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 8 日提出

実気象条件下におけるソニックブーム評価関数の開発

Development of sonic boom evaluation function under real meteorological conditions

鵜飼 孝博, 井浦 玲伊

大阪工業大学 講師, 修士 1 年

Hiroshi Yamashita, Bastian Kern

Institute of Atmospheric Physics, German Aerospace Center

三坂 孝志

産業技術総合研究所

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

ソニックブーム低減が必要不可欠である超音速旅客機開発において, ソニックブーム騒音に影響を及ぼす気象 (温度・湿度・風) を考慮したソニックブーム推定および機体設計が求められる。そこで, 気象に応じてソニックブーム低減が可能である, 飛行ルートの最適化を実現させるため, 本 SEIRA (Sonic-boom Evaluation In Realistic Atmospheres) project では, 気象に対するソニックブーム騒音変動をモデリングしたサロゲートモデルの開発を目指し, 過去 10 年間の気象データの生成およびソニックブームの伝搬解析を行う。

1.2 研究期間内の最終目標

サロゲートモデルを構築するためには, 気象データとソニックブーム騒音の関連性を調査する必要がある。そこで, 本研究では, 過去 10 年間の気象データを用いてソニックブーム伝搬解析を行い, 気象変動とソニックブーム騒音の関連性を明らかにする。また, サロゲートモデル構築に必要なデータを取得する。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 新しい解析手法の開発(例)

本研究では、東北大学流体科学研究所所有のスーパーコンピュータを用いて、過去 10 年間の気象データを基に約 51,000 回の衝撃波伝搬解析を行い、大規模なデータを取得する。気象生成には、DLR が開発した EMAC モデルを用いて全球の気象シミュレーションを行い、AirTraf モデルによりコンコルドの飛行経路直下の気象プロファイルを抽出する。そして、気象データを基に大阪工業大学が衝撃波伝搬解析（ソニックブーム騒音の推定）を行い、産業技術総合研究所がサロゲートモデル構築を担当する。このように複数の研究・教育機関が連携して研究を進めている。本報告書では、衝撃波伝搬解析結果について主に報告する。

本伝播解析に用いた気象プロファイルのサンプルを図 1 に示す。なお、本研究では 2009 年 3 月から 2019 年 2 月においてヒースロー空港 (LHR) からジョン・F・ケネディー空港 (JFK) 間のコンコルド飛行直下の気象プロファイルを使用した。また、KZK 方程式ベースの圧力波伝播解析ツールを用いて、大気中を長距離伝播する圧力波を模擬し、大気状態がソニックブーム波形に及ぼす影響を評価した。このツールでは熱粘性吸収、緩和吸収、幾何拡張成層化および非線形歪に加え、波の回折や大気乱流による影響も評価できる。なお、本解析では、回折効果と大気乱流の効果は評価しない。

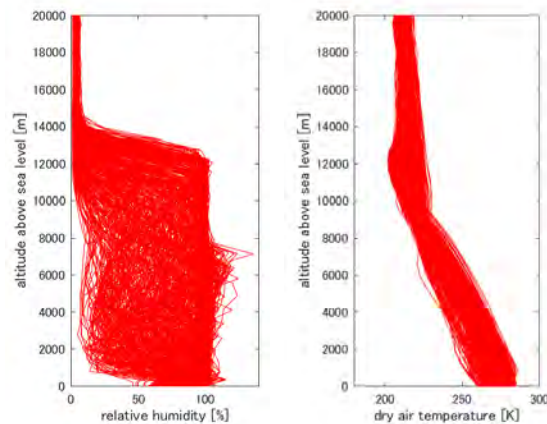


図 1 コンコルド飛行直下の気象プロファイルのサンプル，左図：相対湿度，右図：温度。

2.2 新しい現象の解明(例)

図 2 に 10 年間の気象データを基に飛行経路直下の地上で得られたソニックブーム波形を示す。先行研究の数値計算結果では、コンコルドの地上の最大過剰圧は 60~150 Pa であり、NASA の資料によると、コンコルドの最大過剰圧が 93 Pa である。一方、本解析結果では最大過剰圧の平均値が 101 Pa であり、先行研究と類似しているため、本ソニックブーム伝播解析が正しく行われていることが確認できた。

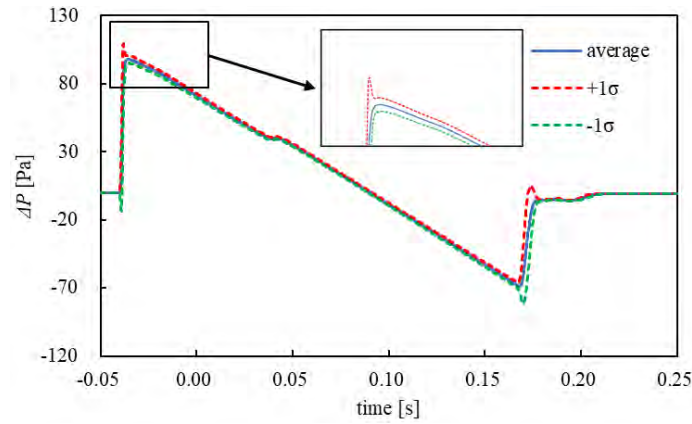


図2 10年間の気象データを基に算出した地上のソニックブーム波形

実フライト中では、高度毎に温度や湿度などの大気状態が変化するため、高度毎の大気状態がソニックブーム波形に影響を及ぼす。図3に各高度における大気状態と地上最大過剰圧の相関を示す。各高度の温度と地上最大過剰圧で相関は見られなかったが、高度10000~4000 mにおいて湿度と0.3程度の相関が現われた。先行研究によると、大気中の気体分子種によって異なる圧力減衰を引き起こし、圧力波形の周波数に応じて減衰率が変化する。特に、高/中周波数帯において分子緩和による減衰効果が強くなる。機体から衝撃波が伝播した直後（高度14000~10000 m）では、波形に高/中周波数成分が多く含まれるため（図4）、分子緩和効果の影響が大きくなると考えられるが、その影響は小さい。この理由は後述する。一方、高度10000~4000 m付近においても、圧力波形が高/中周波数帯で構成されるため、分子緩和効果により圧力減衰が強くなる。そして、（高度4000~0 m）では、波形の高/中周波数帯が若干弱くなるため、分子緩和による減衰の影響を受けにくいと推測する。

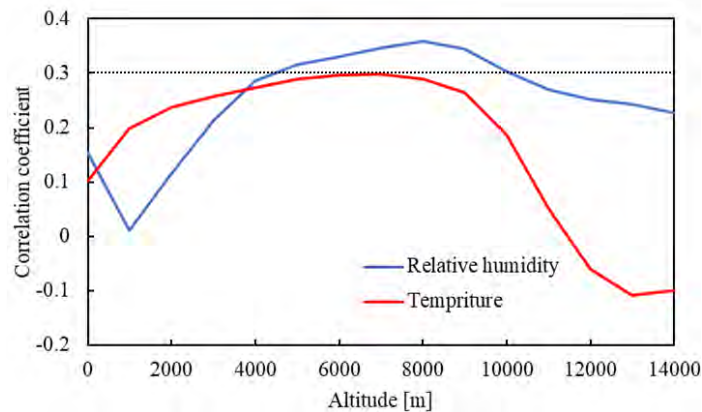


図3 各高度における大気状態と地上最大過剰圧の相関

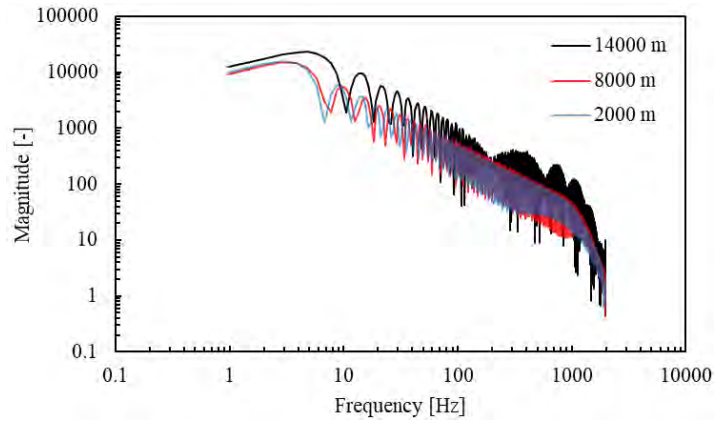


図 4 伝播過程中的ソニックブーム波形の周波数解析

高度 14000 ~ 10000 m において、分子緩和効果の影響が小さい原因は、最大過剰圧の非線形減衰が関係している。非線形効果と幾何拡張のみを考慮して伝播解析を行い、伝播距離 dz に対する最大過剰圧の減衰勾配 ($d(\Delta P)/dz$) を図 5 に示す。この最大過剰圧の減衰勾配は、 $(d(\Delta P)/dz)_j = (\Delta P_{j-1} - \Delta P_{j+1}) / 2dz$ として算出した。ここで、下付き j は、任意の高度の地点を示す。つまり、この $d(\Delta P)/dz$ は、波形の非線形/線形具合を意味する。高度 14000~8000 m では、非線形に最大過剰圧が減少し、波形の整理統合が行われる。そして、高度 8000~0 m では、最大過剰圧の減衰勾配が比較的一定であるため、非線形性が弱いと考えられる。つまり、非線形効果が強い高度 14000~8000 m においては、分子緩和効果の影響よりも非線形効果により最大過剰圧が減衰したと考えられる。

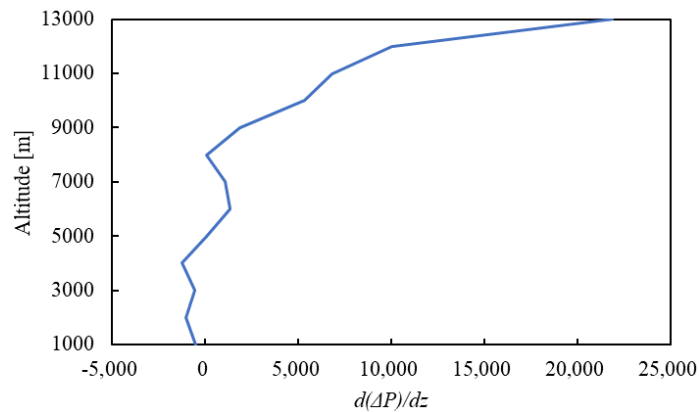


図 5 高度ごとの最大過剰圧の減衰勾配

3. 研究目標の達成状況

飛行ルート直下の 10 年間の気象データを用いて衝撃波伝播解析を実施し、約 51,000 個のソニックブーム波形を取得した。また、高度 10000 ~ 4000 m の相対湿度がソニックブーム波形に強く影響を及ぼすことが明らかとなり、サロゲートモデル構築に向けた知見と大規模データの準備が整った。よって、本年度の目標は達成できた。

4. まとめと今後の課題

本研究では、過去 10 年間の気象データを用いてソニックブーム伝播解析を行い、気象変動とソニックブーム騒音の関連性を調査した。その結果、高高度 (14000~8000 m) では、波形変化の

非線形性が強いいため気象変動の影響を受けにくいことが分かった。一方、中高度（10000～4000 m）においても、波形に高/中周波数成分が比較的多く含まれるため、分子緩和効果が強く影響することが分かった。つまり、中高度の相対湿度がソニックブーム波形に強く影響する。今後は、本研究で得られた知見および約 51,000 個のソニックブーム波形と気象データを用いてサロゲートモデルの開発を行う。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

国際学会

H. Yamashita, B. Kern, T. Ukai, R. Iura, T. Misaka, S. Obayashi, “Sonic-boom Calculation of a Realistic North Atlantic Flight,” 18th International Conference on Flow Dynamics, Sendai (online), 2021, CRF-60.

国内学会・研究会等

井浦玲伊, 鵜飼孝博, H. Yamashita, B. Kern, 三坂孝志, 大林茂, “10 年間の気象データを基にした実フライト上におけるソニックブームの伝播解析,” 第 54 回流体力学講演会/第 40 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2B10, 2022.

5.2 その他（特許, 受賞, マスコミ発表, 等）

井浦玲伊, 鵜飼孝博, “10 年間の気象データを用いた実フライトルート上におけるソニックブームの伝播解析,” 大阪工業大学 卒業論文, 2021.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP07APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04~2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022年7月15日提出

Direct numerical simulation of high Rayleigh number natural convection

Atsuki Komiya

Institute of Fluid Science, Tohoku University Professor

Nicholas Williamson, Steven Armfield and Ke Junhao

The University of Sydney Senior Lecturer, Professor, Research associate

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

The study focuses on a temporally evolving natural convection boundary layer (NCBL) adjacent to a vertical isothermal wall (Prandtl number: $Pr = 0.71$). This study aims to lay the foundations for future improvements in energy technology by improving our ability to predict and control the behavior of vertical NCBLs. We will for the first time examine this flow, using a large scale direct numerical simulation, in the transitional and fully turbulent flow at very high Rayleigh number regimes to obtain a detailed understanding of the flow structure of turbulent NCBLs. The study investigates not only in the limit of very high Rayleigh number flows but also the relatively weakly turbulent flows.

1.2 研究期間内の最終目標

The present study aims to understand how the turbulent flow behaves and the structure of the boundary layer at very high Rayleigh number NCBLs in asymptotic regime (ultimate turbulent regime), which helps in accurately predicting the heat transfer characteristics in large scale industrial and geophysical applications; as well as the weakly turbulent regime (classical turbulent regime), which is also investigated by most experimental studies.

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 新しい解析手法の開発(例)

Using a massively parallelised incompressible Navier—Stokes solver with Boussinesq approximation, we have employed our direct numerical simulation with over a billion structured finite volume grids in a rectangular computational domain. This is so-far the highest Grashof number (Gr) DNS dataset for natural convection boundary layers. With detailed statistics provided by DNS, we are able to analyse turbulent mechanisms and structures, as well as to develop essential models for turbulent NCBL flows.

2.2 新しい現象の解明(例)

The results show that the initial conditions (perturbations) persist until very high Gr which greatly affect the laminar—turbulent transition behaviour and turbulence statistics/characteristics at relatively weakly turbulent regime. In this regime Grashof number is relatively low (lies in the range of conventional experiment studies) and there exists a laminar-like region in the near-wall part of the boundary layer. In this classical weakly turbulent (or, laminar-like) regime, the length scale ratio of maximum velocity location to the molecular length scale is approximately a constant --- this further leads to a Re^{-1} scaling for the skin friction coefficient, similar to the laminar flow and Blasius boundary layers. By looking at the budget of the length scale ratio, we found the only term adjusting the ratio from the classical regime to the ultimate regime is the turbulent shear. As the flow continues to develop (higher Gr) the turbulent shear grows in magnitude and the skin friction starts to follow a log-law prediction.

3. 研究目標の達成状況

As mentioned above, in the weakly turbulent regime the statistics largely depends on the initial perturbation, while at sufficient high Gr these statistics collapse together and become initial condition independent. For the high Gr flow, we found that the bulk flow can be well approximated by a plume model with slowly varying pre-factors. In the relatively low Gr flow, the flow demonstrates similar near-wall behaviour to a laminar structure. We believe this turbulent (near-wall is laminar-like) subregime can be further analysed to reveal the turbulent mechanisms with continuing HPC support. At current stage, we have two published papers in the JFM, and another draft under preparation for JFM.

4. まとめと今後の課題

As mentioned above, we will continue the simulation to achieve a higher Gr with various initial perturbations/conditions so that a more detailed description of the turbulent boundary layer structure can be obtained. The ongoing analysis on the turbulence statistics aims to report second-order statistics as well as the turbulent kinetic energy budget for the flow. The study of the turbulence statistics will lead to a better understanding of multiple features of the turbulent boundary layer and establish a benchmark for the future studies.

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Law of the wall for a temporally evolving vertical natural convection boundary layer, *Journal of Fluid Mechanics*, 902, A31.
2. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, High Grashof number turbulent natural convection on an infinite vertical wall, *Journal of Fluid Mechanics*, 929, A15.
3. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, Turbulence statistics of a temporally developing natural convection boundary layer, *Journal of Fluid Mechanics*. (Draft in preparation)

著書

NA

国際学会

1. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Application of an Integral Model to an Unsteady Natural Convection Boundary Layer, The 11th Australasian Natural Convection Workshop, Sydney, NSW Australia, Dec. 2019.
2. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Integral modelling of an unsteady natural convection boundary layer, The 22nd Australasian Fluid Mechanics Conference, Brisbane, QLD Australia, 7-10 Dec. 2020.
3. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, Turbulence statistics in a temporally evolving turbulent natural convection boundary layer. In 12th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, Sydney, NSW Australia, 30 June - 1 July 2022.
4. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, Turbulent vertical natural convection boundary layers --- Insights gained from DNS up to $Gr = 1.8e8$. In 12th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, Sydney, NSW Australia, 30 June - 1 July 2022. (Keynote)
5. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Heat transfer and friction characteristics of a turbulent natural convection boundary layer, The 23rd Australasian Fluid Mechanics Conference, Sydney, NSW Australia, Dec. 2022. (upcoming)

国内学会・研究会等

NA

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

NA

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP08APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 16 日提出

複雑地下構造内の流体流動シミュレーションによる地下構造の逆解析

鈴木 杏奈, 後藤啓一朗

東北大学流体科学研究所 助教, M2

James Minto

University of Strathclyde, Research Associate

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

地下資源開発 (例えば地熱エネルギー) では、計測できるデータに基づいて、岩石き裂内 (き裂幅 nm-m スケール) を流れる流体流動を把握する必要がある。複雑な現象をモデル化する場合、既往研究では変数の次元 (自由度) を増やす要素還元論的アプローチをとる。大規模計算が可能となった近年では複雑な構造でも直接シミュレーションが可能となったものの、この直接シミュレーションでは、計算コストがかかり、構造を全て把握しないといけないので構成パラメータが膨大となり、フィールドスケールの数値計算はほぼ不可能である。資源開発分野では、き裂を1枚の平行平板と仮定し、流れやすさを表す等価なパラメータをグリッドに与えることによって貯留層内の流体流動をシミュレーションする等価モデルがよく用いられる。これは一つの「構造」から「流れ」を導く手法である。しかしながら、この等価モデルでも、得られた計測データから地下き裂分布を把握することは困難なため、モデル構成の不確実性が非常に高い。ここで、井戸で観測される物質移動応答・熱応答と、流動現象ならびに構造との関係性を、当該研究で目指すデータ駆動型のアプローチによって明らかにすれば、計測データから、地下構造を推定できる可能性を示すことができる。当該研究では、一つの井戸から還元冷水とともに注入され、他の井戸で計測される試薬の濃度変化ならびに温度応答とに着目し、不均質な多孔質体の複雑な流体流動・物質移動・熱移動を定式化することを目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

当該研究では、3D プリンタを活用した構造制御型流動実験と数値シミュレーションを実施する。複数のき裂ネットワークパターンを用意し、2 つのタイプの数値シミュレーションによって、その流動現象、物質移動現象、ならびに熱移動現象を計算する。一つは、直接シミュレーションを行う OpenFOAM、もう一つは多相多孔質体の流体・物質移動・熱移動シミュレータ TOUGH2 である。得られた数値計算結果を学習データとして、機械学習に基づいたデータ駆動型アプローチ

によって、複雑な構造と、流動現象との関係を定式化する。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

MICP は、放射性廃棄物処分場周辺の岩盤中の亀裂の封止 [1], 炭素回収貯留注入点周辺のセメント中の亀裂の封止 [2,3], 亀裂を有するインフラの修復 [4] など、多くの工学的用途に提案されている。しかし、これまで亀裂中の MICP に関する研究は、単一の平面亀裂に焦点を当てたものであり、複雑な亀裂ネットワークに焦点を当てたものではなかった。本研究は、このギャップを埋めるとともに、進展する亀裂ネットワークの流動モデリングを改善するための、より一般的なテストケースとなることを目的とする。東北大学では、鈴木が 3D プリントした 3 種類の複雑な亀裂ネットワークを設計・印刷し、University of Strathclyde の Minto に送り、X 線 CT と MICP 実験を実施しました。流れのモデリングは、IFS のスーパーコンピュータシステムで OpenFOAM v7 を用いて行った。破碎ネットワーク（図 1、2、3）はそれぞれ、均一な薄い破碎、均一な厚い破碎、薄い破碎と厚い破碎の範囲の異なる性質を持ち、以下、薄い、厚い、可変の破碎ネットワークと称する。

- 1) それぞれの亀裂ネットワークにおける流れの特性を実験的・数値的に把握する。
- 2) MICP を用いて亀裂ネットワーク内に炭酸カルシウムを沈殿させ、X 線 CT と流動モデリングにより流路の変化を評価する。
- 3) 複雑な亀裂ネットワークを封止するための現在の MICP 処理戦略（単一平面亀裂用に開発）の有効性と限界を明らかにする。
- 4) MICP 処理溶液間の重力と密度分離の影響を把握する（バクテリア溶液を最初に注入し、その後、かなり高密度の尿素/CaCl₂ 溶液を注入する）。
- 5) 複雑な亀裂ネットワークに対する新しい MICP 処理戦略を提案し、その有効性を評価する。
- 6) IFS のスーパーコンピューティングシステムを利用し、既存の亀裂流モデリング機能[5]を改善・更新する。

3. 研究目標の達成状況

すべての亀裂ネットワークは、60 μ m の解像度で X 線 CT スキャンされ、「印刷されたままの」形状（入口と出口ポートの配置を含む）が得られ、数値流体モデリングの基礎となるものである。Figure 1 は、可変型亀裂のトレーサー破過実験のシミュレーション結果である。

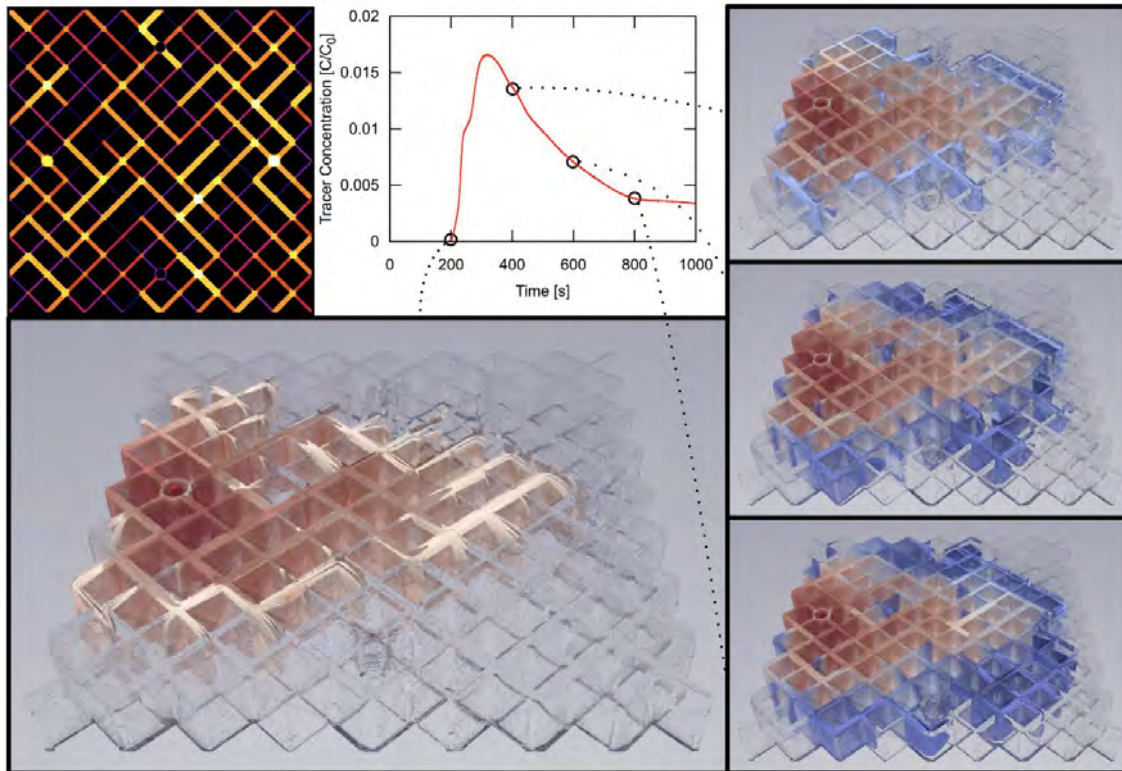


Figure 1: Variable aperture fracture. Top left: fracture aperture distribution, determined from X-ray CT scan. Top middle: tracer breakthrough profile (i.e. concentration of tracer at outlet) simulated with custom OpenFOAM solver. Bottom and right inserts: tracer time-to-arrival with short times (i.e. rapid transport) shown in red and long arrival times shown in blue. Areas of the fracture network where tracer does not arrive within 1000 seconds are rendered transparent.

この薄い亀裂ネットワークを用いて、1 間隙量の尿素分解活性細菌を注入し、無流動期間を設けて亀裂側面に付着させた後、高濃度の尿素/CaCl₂ 溶液を注入する標準的な MICP 処理サイクルを評価した。これを「処理サイクル」と呼び、1 サイクル後、7 サイクル後、9 サイクル後に X 線 CT スキャンを行い、9 サイクルの処理を実施した。その結果、MICP による透過率低下は、ほとんどが入口と出口ポートの閉塞に関連していることがわかった。亀裂ネットワーク全体に CaCO₃ の析出が見られたが、広い範囲では反応流体の密度分離と優先流路の形成により析出はごくわずかであった。このことから、標準的な処理方法を用いた場合、亀裂ネットワークに長期間の低透水性のシールを形成することに課題がある可能性があることが示唆された。

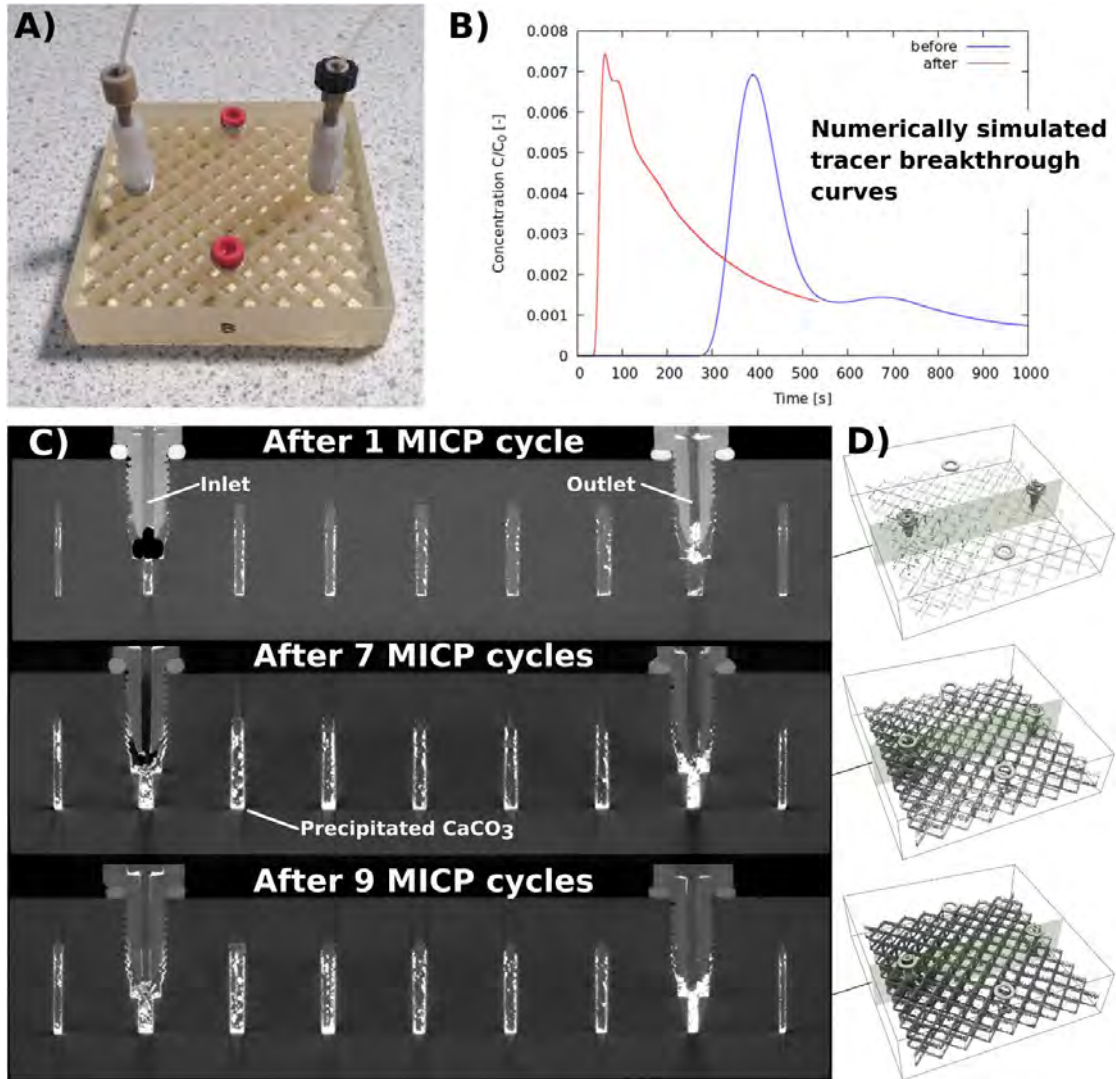


Figure 2: A) 3D printed Thin fracture network with inlet and outlet ports. B) Simulated tracer breakthrough curves before treatment and after 9 treatment cycles. C) Cross-sections through the X-CT data showing fracture geometry with low density materials (air) shown in black, high density materials (CaCO₃) shown as white, and mid-density materials (water, plastic) shown as grey. D) 3D renderings showing spatial distribution of microbially precipitated CaCO₃.

バクテリアと尿素および CaCl₂ をビーカー内で 24 時間混合し、生きたバクテリアと小さな CaCO₃ 結晶を含む粒子懸濁液を作製したのである。この粒子懸濁液を高流量で Thick フラクチャーネットワークに注入し、その後 1 週間かけて尿素/CaCl₂ をゆっくりと注入した。その目的は、割れ目の間隙の多くを未固結の CaCO₃ スラリーで素早く満たし、その後の微生物活動によって固化させることであった。この処理は X 線 CT スキャンの前に 2 回繰り返され、初期の結果は、密閉性を高め、試薬をより効率的に使用できることが期待される。

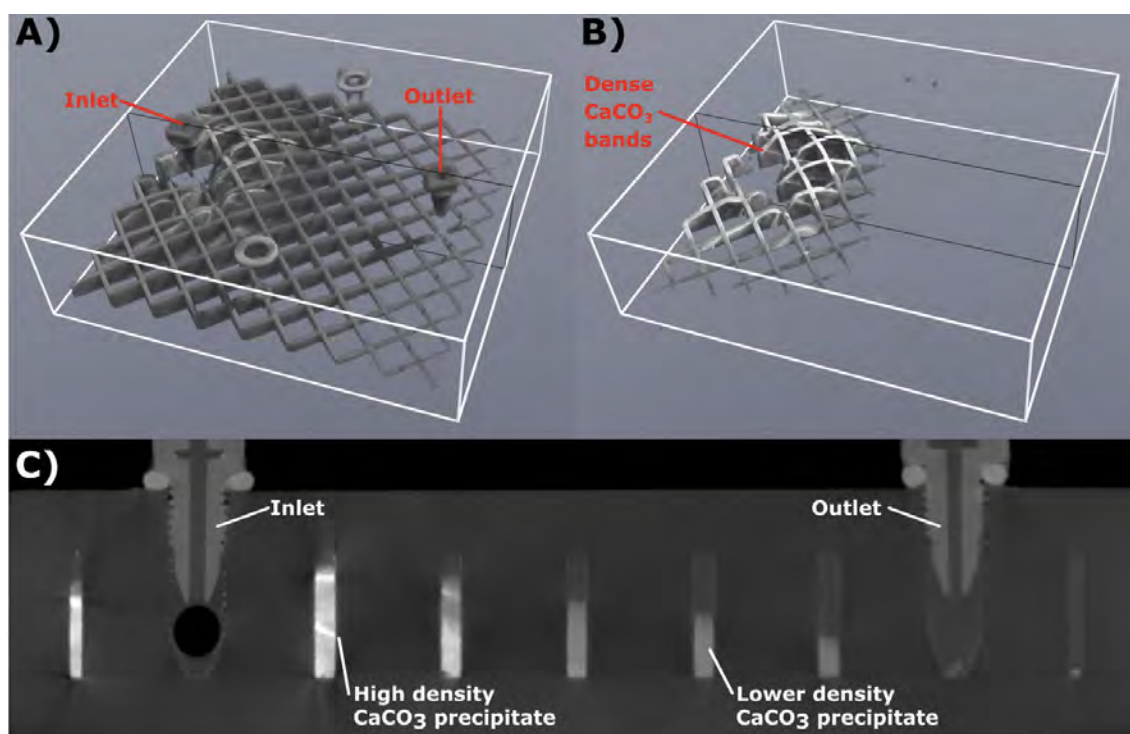


Figure 3: A) Distribution of CaCO_3 slurry after second injection. B) Distribution of high density CaCO_3 slurry. C) Cross-sections through the X-CT data showing bands of high density CaCO_3 that form during the 1 week static reaction period.

4. まとめと今後の課題

このパイロットデータは、現実的な亀裂ネットワークで機能する改良型 MICP 処理戦略への期待を示している。今後は、鈴木が実験とスーパーコンピュータによるモデリングによって広範な特性を明らかにした4番目の亀裂ネットワークで実験を繰り返す予定である。

次のステップでは、亀裂のトポロジーの変化が亀裂の流れにどのように影響するかを明らかにするために、流れのモデリングに持続的ホモロジーアプローチを使用し、MICP が亀裂ネットワークの熱特性にどのように影響するかを直接モデリングする予定である。

(1) 3D プリンターを用いた構造制御流動実験と数値シミュレーション

- 2次元破碎ネットワーク (Thin, Thick, Variable fracture network)。100 %

- 3次元破壊ネットワーク：2022年予定

(2) 持続的相似性による複雑な亀裂構造の定量化

- 3D プリントによる設計: 100 %

- CaCO_3 沈殿：2022年予定

5. 研究成果リスト (※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

- A. Suzuki, M. Miyazawa, J. M. Minto, T. Tsuji, I. Obayashi, Y. Hiraoka, and T. Ito, "Flow estimation solely from image data through persistent homology analysis", Scientific Reports, 11, 17948, DOI:

10.1038/s41598-021-97222-6 (2021).

- 鈴木杏奈, “地下資源開発における「かたち」と「ながれ」”, *ながれ*, 38(1), 21-25 (2019).

著書

国際学会

- A. Suzuki, “Topological data analysis for flow in porous media”, The 17th International Conference on Flow Dynamics, Online, October 28-30, 2020.
- A. Suzuki and J. Minto, “Data-driven modeling of flow in complex structures”, The 20th International Symposium on Advanced Fluid Information, Online, October 28-30, 2020.
- A. Suzuki, M. Miyazawa, T. Ito, and P. Kang, “Estimating flow characteristics of 3D fracture network based on persistent homology”, InterPore2020, Online, August 31-September 4, 2020.
- M. Miyazawa, A. Suzuki, and T. Ito, “Topological data analysis for estimating flow characteristics of 3D fracture network”, the 16th International Conference of Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 6-8, 2019.
- A. Suzuki, M. Miyazawa, M. Konno, and T. Ito, “Topological characterization of 3D printing fracture networks”, InterPore 11th Annual Meeting, Valencia, Spain, May 6-10, 2019.
- A. Suzuki and J. Minto: Data-driven modelling of flow in complex structures, *Proc. the 21st International Symposium on Advanced Fluid Information*, (2021).

国内学会・研究会等

- 鈴木杏奈, “パーシステントホモロジーを用いた地下き裂岩体内の流動・輸送挙動評価”, 研究集会「データ駆動型解析で推し進める変動帯ダイナミクス研究の深化」, 東京大学地震研究所共同研究 (2018-B-01), Online, February 22, 2021.
- 鈴木杏奈, 宮澤美幸, 大林一平, 平岡裕章, 伊藤高敏, “岩石内の流れを推定するパーシステントホモロジー”, 日本応用数理学会 2020 年度年会, Online, September 8-10, 2020.
- 招待講演, Anna Suzuki, “Characterization of Relationships between Flow and Fracture Structures by Persistent Homology”, I2CNER 国際ワークショップ CO2 貯留研究部門, 九州大学エネルギーウィーク 2020, Fukuoka, Japan, January 31, 2020.
- 宮澤美幸, 鈴木杏奈, 岡本敦, 大林一平, 平岡裕章, 伊藤高敏, “パーシステントホモロジーを用いた 3 次元き裂ネットワークの構造評価”, 日本地球惑星科学連合 2019 年大会 (JpGU2019), Makuhari, Japan, May 26-30, 2019.

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

- 東北大学プレスリリース・研究成果 HP, 複雑な構造の"かたち"から"ながれ"を直接予測 岩石内の流体流動をトポロジーによって読み解く, 2021.9.22, <https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2021/09/press20210922-01-flow.html>
- 子供の科学 2021 年 12 月号, “岩石内の水の流れがトポロジーで解ける!”, 2021. 11. 10
- 日刊工業新聞, 2021. 9. 24
- JSTnews, さきがける科学人, 2021. 9. 1

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP10APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022年7月15日提出

表面修飾ナノ粒子サスペンションのナノスケール界面現象に関する研究

小宮敦樹

東北大学流体科学研究所 教授

塚田隆夫, 久保正樹, 庄司衛太

東北大学大学院工学研究科 教授, 准教授, 助教

菊川豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

表面修飾ナノ粒子（有機分子を表面に修飾した無機ナノ粒子）を有機溶媒中に分散したナノフルイドは、バルク体とは異なるナノ粒子特有の性質を有することから、様々な分野への応用が期待されている。本研究では、有機溶媒（媒体）と表面修飾無機ナノ粒子からなるサスペンションの濡れ現象を、CFD-DEM 連成シミュレーションおよび位相シフトエリプソメータを用いて、ナノスケールの観点から解明する。また、分子動力学（MD）シミュレーションを利用して、表面修飾ナノ粒子と周囲流体との界面構造および親和性を分子レベルで検討し、サスペンション中のナノ粒子の分散性について考察する。

1.2 研究期間内の最終目標

CFD-DEM 連成シミュレーションにおいては、ナノ粒子表面の修飾有機分子による粒子間相互作用を考慮した CFD-DEM 連成シミュレータを用いて、表面修飾ナノ粒子サスペンション液滴の拡張挙動（濡れ挙動）を明らかにする。位相シフトエリプソメータにおいては、超臨界水熱法により合成した表面修飾ナノ粒子を含むサスペンション液滴の溶媒蒸発時の濡れ挙動を明らかにする。表面修飾ナノ粒子と流体との親和性評価については、ナノ粒子サスペンションの表面張力を測定し、MD シミュレーションによる固液間界面親和性の評価との関係を明らかにする。

2. 研究成果の内容

研究分担者の塚田らは、これまで表面を有機分子で修飾したナノ粒子を含むサスペンションを対象として、DEM あるいは CFD-DEM 連成シミュレーションを用いて、ナノ粒子の分散・

凝集挙動，流動状態，乾燥挙動に関する基礎的検討を行ってきた。そして，実プロセス，特に塗布乾燥プロセスへの展開を志向し，基板に対するサスペンションの濡れ性，すなわち固／気／液 3 相接触線近傍のサスペンションの流動特性の解明を目指している。研究代表者の小宮は，これまで単成分液滴のミクロスコピックな濡れ性評価を高精度な光学測定手法により進めてきた。そこで，両者のこれまでの実績を鑑み，高濃度ナノ粒子サスペンションのミクロスコピックな濡れ挙動を数値シミュレーションと実験の両方を駆使して解明し，プリンテッドエレクトロニクス用ナノインクなど，ナノ粒子サスペンションの塗布プロセスへの応用展開を目標として，共同研究に至った。研究期間において，以下の知見を獲得することができた。

2.1 表面修飾ナノ粒子サスペンション液滴の拡張挙動の CFD-DEM 連成シミュレーション

流体運動では連続式および熱揺動を考慮した Landau-Lifshitz Navier-Stokes 方程式を，粒子運動では各粒子の Newton の運動方程式を，液滴表面形状は level-set 関数の移流方程式を支配方程式とし，粒子と流体の運動と液滴界面形状の連成シミュレーションを行った。ここで，粒子間相互作用力として，van der Waals 力，粒子間接触力，毛管力，粒子表面に存在する有機修飾鎖に起因する相互作用力を考慮した。三次元直交座標系において， x 方向 2000 nm， y 方向 125 nm， z 方向 350 nm を計算領域とし，オレイン酸あるいはデカン酸修飾 Al_2O_3 ナノ粒子（粒径 25 nm）を含む半円筒形トルエン液滴（初期液滴半径 250 nm）の基板上での拡張挙動を解析した。

シミュレーションの結果，オレイン酸修飾ナノ粒子の場合は，粒子体積分率 0.30 までは，粒子の存在は液滴の拡張挙動に影響を及ぼさなかった。一方，デカン酸修飾ナノ粒子の場合，粒子体積分率が高いほど液滴の拡張距離は短かった。これは，デカン酸修飾ナノ粒子はトルエンとの親和性が低いため，液滴の拡張の過程でナノ粒子凝集体を形成することにより，液滴高さの低下が抑制され，結果として液滴の拡張が抑制されたためと考える。このように，ナノ粒子の分散凝集状態が液滴の拡張挙動に影響することを明らかにした。

2.2 表面修飾ナノ粒子サスペンション液滴の溶媒蒸発に伴う収縮挙動の可視化計測

Si 基板上に置かれたデカン酸修飾 CeO_2 ナノ粒子を含むサスペンション液滴を対象として，溶媒蒸発時の接触線近傍の液膜形状および溶媒蒸発に伴い基板上に形成されるナノ粒子層の膜厚分布を位相シフトエリプソメータにより計測した。デカン酸修飾 CeO_2 ナノ粒子（平均粒径 6 nm）は超臨界水熱法により合成し，有機溶媒には n -オクタン， n -ノナン， n -デカンを用いた。なお，有機溶媒の飽和蒸気圧は， n -オクタン $>$ n -ノナン $>$ n -デカンの順であり，蒸発速度は n -オクタンが最大である。

実験の結果，溶媒蒸発に伴い，接触角が一定の時は，液滴半径が減少，液滴半径が一定の時は，接触角が減少する，いわゆる Stick-Slip 現象が観察された。また，蒸発速度が高いほど Stick-Slip 現象が顕著であることがわかった。さらに，溶媒が完全に蒸発した際に基板上に形成されたナノ粒子層の膜厚分布を測定した。そして，ナノ粒子層の平坦度は蒸発速度の低い n -デカンの方が高いことがわかった。このように，蒸発速度が濡れ挙動およびナノ粒子層の構造に影響を及ぼすことを明らかにした。

2.3 表面修飾ナノ粒子サスペンションの表面張力測定および固液間界面親和性の評価

デカン酸修飾ナノ粒子を含むサスペンションを対象として、Pendant Drop 法を用いて表面張力を測定した。溶媒にはシクロヘキサン、トルエン、デカリンを用い、ナノ粒子濃度を種々変更して測定を行った。その結果、ナノ粒子濃度が高いほど表面張力は低下したが、ある濃度以上では一定となった。これは、気液界面にナノ粒子が吸着することで表面張力は低下するが、ある濃度以上では気液界面のナノ粒子数が飽和吸着量に達するためと考える。気液界面へのナノ粒子吸着による表面張力変化 $\Delta\sigma$ を求め、飽和状態の吸着粒子が気液界面に六方最密で配置すると仮定して界面吸着量を評価し、これらの値から粒子-溶媒間接触角を算出した。接触角の値から、固液間界面親和性はトルエンおよびデカリン系よりシクロヘキサン系の方が高いことがわかった。

以上の結果の理論的裏付けを目的に、全原子分子動力学 (MD) 計算を用いて有機修飾無機固体/有機溶媒界面の親和性、すなわち接触角を評価した。具体的には、MD 計算により固液界面の付着仕事と溶媒の表面張力を求め、それらの値から濡れ係数を算出し、接触角を求めた。MD による計算値は実験値と同様、固液間界面親和性はトルエンおよびデカリン系よりシクロヘキサン系の方が高い傾向を示した。このように、ナノ粒子と溶媒との親和性を実験、MD シミュレーションの両面から評価できることを示した。

3. 研究目標の達成状況

研究成果に示す通り、1) CFD-DEM 連成シミュレーションによる表面修飾ナノ粒子サスペンション液滴の拡張挙動 (濡れ挙動) とナノ粒子体積分率、さらにはナノ粒子の構造との相関の解明、2) 超臨界水熱法により合成した表面修飾ナノ粒子を含むサスペンション液滴の溶媒蒸発時の濡れ挙動およびナノ粒子層の形成過程の可視化、さらには 3) ナノ粒子サスペンションの表面張力に及ぼすナノ粒子濃度の影響、表面張力測定と MD シミュレーションによる固液間界面親和性の評価など、当初の目標を達成できたと判断する。

4. まとめと今後の課題

本研究により確立した実験および理論的評価技術を利用し、(ナノ粒子-溶媒間親和性) - (サスペンション中のナノ粒子の構造) - (サスペンションのマイクロ動的濡れ特性) の相関についてより詳細に明らかにするとともに、親和性だけでなく、溶媒蒸発速度などのプロセス条件とナノ粒子の構造、特に溶媒蒸発後のナノ粒子層の構造との相関について明らかにする必要がある。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌

1. Eita Shoji, Takahiro Kaneko, Tatsuya Yonemura, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Atsuki Komiya: Measurement of dynamic wetting using phase-shifting imaging ellipsometer: comparison of pure solvent and nanoparticle suspension on film thickness profile, apparent contact angle, and precursor film length, *Experiments in Fluids*, 62, 206 (2021)

国際学会

1. Eita Shoji, Taiga Saito, Tetsushi Biwa, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri: Measurement of dynamic wetting of a nanofluids droplet and nanoparticles deposition during evaporation, Droplets 2021, Darmstadt, Germany (2021).
2. Takamasa Saito, Masaki Kubo, Eita Shoji, Takao Tsukada, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Atsuki Komiyama: A Study on Nano-scale Interfacial Phenomena of Surface-modified Nanoparticle Suspensions, 18th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, (2021).
3. Takamasa Saito, Ryo Takebayashi, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys: Molecular Dynamics Analysis on the Interfacial Affinity between Organic-Modified Solid and Organic Solvent, 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Hawaii, USA (2021).

国内学会・研究会等

1. 竹林遼, 齋藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, Surblys Donatas: 分子動力学シミュレーションによる有機修飾 Al_2O_3 /溶媒間の親和性に及ぼす修飾鎖長および溶媒の影響, 第 58 回日本伝熱シンポジウム, オンライン (2021)
2. 庄司衛太, 金子峻大, 久保正樹, 塚田隆夫, 小宮敦樹: Si 基板上の SiO_2 ナノ粒子/PDMS 懸濁液の先行薄膜の膜厚分布測定, 第 58 回日本伝熱シンポジウム, オンライン (2021)
3. 庄司衛太, 齋藤大河, 琵琶哲志, 久保正樹, 塚田隆夫, 菅居高明, 阿尻雅文: ナノフルイドの動的濡れにおける接触線近傍のナノマイクロ膜厚分布計測, 混相流シンポジウム 2021, オンライン (2021)
4. 庄司衛太, 齋藤大河, 琵琶哲志, 久保正樹, 塚田隆夫, 菅居高明, 阿尻雅文: ナノフルイド液滴蒸発時の動的濡れと堆積ナノ粒子層の光学測定, 化学工学会第 52 回秋季大会, オンライン (2021)
5. 大塚俊輝, 久保正樹, 塚田隆夫, 小池修, 辰巳怜: 基板上を拡張する表面修飾ナノ粒子含有ナノフルイド液滴の数値シミュレーション, 化学工学会第 52 回秋季大会, オンライン (2021)
6. 久保正樹, 庄司衛太, 齋藤高雅, 塚田隆夫: ナノ材料の界面親和性評価と構造形成, 化学工学会第 52 回秋季大会, オンライン (2021)
7. 齋藤大河, 庄司衛太, 琵琶哲志, 久保正樹, 塚田隆夫, 菅居高明, 阿尻雅文: Si 基板上ナノ流体液滴の蒸発を伴う動的濡れと堆積ナノ粒子層の可視化計測, 第 42 回日本熱物性シンポジウム, オンライン (2021)
8. 齋藤高雅, 竹林遼, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, Surblys Donatas: 有機修飾固体/有機溶媒界面の親和性に及ぼす表面修飾鎖および溶媒の影響, 第 58 回日本伝熱シンポジウム, オンライン (2021)
9. 庄司衛太, 星野瑛, 齋藤大河, 琵琶哲志: 飽和条件下における Si 基板上アルカン液滴の先行薄膜の光学測定, 化学工学会第 87 年会, オンライン (2022)
10. 小西徹, 齋藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫: 有機修飾無機ナノ粒子を含む有機溶媒の表面張力測定及び固液間界面親和性の評価, 化学工学会第 87 年会, オンライン (2022)

11. 庄司衛太, 齋藤大河, 琵琶哲志, 久保正樹, 塚田隆夫, 菅居高明, 阿尻雅文: ナノフルイド液滴蒸発時の動的濡れと堆積ナノ粒子層の光学測定, 化学工学会第 87 年会, オンライン (2022)
12. 庄司衛太, 星野瑛, 齋藤大河, 琵琶哲志: 飽和条件下における Si 基板上アルカン液滴の先行薄膜の光学測定, 化学工学会第 87 年会, オンライン (2022)

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

受賞

1. 日本機械学会奨励賞 (研究), 位相シフト法を用いた熱物質輸送の光学可視化計測の研究, 庄司衛太, 2021.4.22, 日本機械学会.
2. 日本熱物性学会学生ベストプレゼンテーション賞, 有機修飾固体/有機溶媒界面の親和性に及ぼす表面修飾鎖および溶媒の影響, 齋藤高雅, 竹林遼, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, Surblys Donatas, 2021.10.27, 日本熱物性学会.
3. 青葉工学研究奨励賞, 位相シフト技術を導入した光学計測手法の開発と熱物質輸送現象への展開, 庄司衛太, 2021.12.8, 青葉工学振興会.
4. シンポジウム賞奨励賞, ナノフルイド液滴蒸発時の動的濡れと堆積ナノ粒子層の光学測定, 庄司衛太, 2022.3.16, 化学工学会粒子・流体プロセス部会.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP11APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 14 日提出

チャンバー内の血流解析

安西 眸

東北大学流体科学研究所 助教

進藤 有悟

東北大学工学研究科 博士課程前期

武田 和輝

東北大学医工学研究科 博士課程前期

Mingzi Zhang

マッコーリ大学 研究員

Nainggolan Bonfilio

バンドン工科大学 学部学生

Narendra Kurnia Putra

バンドン工科大学 講師

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

血流が組織/細胞に及ぼす影響を調べるには、人体の直接的測定の外、チャンバーと呼ばれる微小流路を容器内に作製し、その中に細胞を播種した後に流れを負荷し、細胞の応答調べることにより行う方法がある。チャンバー内に血管に存在する細胞（内皮細胞）を播種し血液を模した液体を流すことで、チャンバー内の内皮細胞への影響を調べることができ、血流の影響を調べる上で非常に有効な手段である。現在我々のところでは、世界で唯一ステント上の細胞挙動を定量化するチャンバーを開発している。本研究ではチャンバー内の流れ場を解析し、インビトロ細胞実験の結果と比較することで流れが血管内皮細胞に与える影響を調べ、血管に留置後、ステントが完全に内皮細胞に覆われる（内皮化）までの時間を最短にするステント形状を探索することを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究は最適化を行うインドネシアグループと細胞実験を行う東北大グループの共同研究である。細胞実験は非常に繊細で数をこなすことが難しいため、スーパーコンピュータシステムを用いた CFD により、実験結果の補間をし、流れ刺激に対する細胞応答の傾向

を見出すことを目的とする。本年度は特に、細胞実験用のフローチャンバー形状を変更した数値解析モデルを作成し流体解析を行うことで、細胞密度に対するステント形状の影響を明らかにする。

1.2.1 フローチャンバー内の流れ場解析

血管内皮細胞の壁せん断応力 (WSS) 刺激に対する応答を明らかにするため、フローチャンバー内にストラットを模した金属ワイヤーを留置し、その時のチャンバー底面の WSS 分布を算出する。細胞培養したディッシュに対しフローチャンバーで流れ負荷し、CFD より得られる WSS 分布と細胞分布と照らし合わせる。本年度はチャンバーを改良することで V 字型にストラットを留置することが可能となったので、様々なストラット角での CFD 解析を行った。

1.2.2 3次元血管形状を用いた流れ場解析

フローチャンバーは平面上に流れを形成するが、実際の血管は曲がりや分岐を伴う複雑な管形状をしている。したがって、体内で医療用デバイス周辺に発生する流れ場も複雑な挙動を示す。本年度は実形状動脈瘤に対しバーチャルでステントを留置し、不完全なステント拡張が起こった場合の血流挙動を評価した。

2. 研究目標の達成状況

2.1 フローチャンバー内の流れ場解析

チャンバー内流れの解析結果と細胞実験による細胞密度分布を照らし合わせた。その結果、ストラットによる剥離流れがチャンバー底面に再付着する領域において大きな壁せん断応力変化が見られ、細胞実験ではその領域において高い密度分布が見られた。本結果は直線ストラットを用いた際と同様の傾向であった。本年度は角度を持ったストラットを留置したことで、底面に発生する WSS がより複雑な分布を持っている。ストラットの曲がり部下流において、左右からの流れがぶつかり、よどみ点が発生したため、低 WSS 領域が生成された。この低 WSS 領域においては、細胞実験では高い細胞密度は観察されなかった。本結果は国内ワークショップで発表し、さらに論文としてまとめている。

2.2 3次元血管形状を用いた流れ場解析

in vivo で不完全なステント拡張 (IncSE) が確認された 2 例の患者を対象に、ステントの近位、中央、遠位セグメントでそれぞれ 2 つの重症度レベルの IncSE をモデル化し、合計 14 通りの血管モデルを作成した。動脈瘤の中心部または遠位部に IncSE が発生した場合、動脈瘤の流量減少性能はかなり低下し、流入速度 (IR) およびエネルギー損失 (EL) の最大上昇は 10% と 15% であった。動脈瘤の流入量のわずかな減少が近位部の IncSE と関連しており、IR と EL のさらなる減少の最大値は 5% と 8% であった。IncSE の効果は発生部位によって大きく異なるため、治療前に患者に応じた個別のリスク評価を行うことの重要性が明らかになった。本結果は原著論文として雑誌掲載された (別刷)。

3. まとめと今後の課題

今後は再現性を得るためストラット角度を変化させた細胞実験を進める。チャンバー底面において WSS 値に大きなばらつきが見られることから、領域ごとに WSS 値および細胞密度の評価を行う必要があると示唆される。したがって、CFD 結果に基づきチャンバー底面を分割し、

細胞染色画像から細胞密度を算出することで、より定量的な解析を進める。

4. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Tomoaki Yamazaki, Gaku Tanaka, Ryuhei Yamaguchi, Yodai Okazaki, Hitomi Anzai, Fujimaro Ishida, Makoto Ohta, “Numerical Simulation of Flow Behavior in Basilar Bifurcation Aneurysms Based on 4-Dimensional Computed Tomography Angiography”, World Journal of Mechanics, Vol. 11, 2021, doi: 10.4236/wjm.2021.114006

Zhang M, Li Y, Sugiyama S, Verrelli D I, Matsumoto Y, Tominaga T, Qian Y, TUPIN S, Anzai H, Ohta M., “Incomplete stent expansion in flow-diversion treatment affects aneurysmal haemodynamics: a quantitative comparison of treatments affected by different severities of malapposition occurring in different segments of the parent artery”, International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering, Vol. 37, 2021, p. e3465, doi: 10.1002/cnm.3465

Mingzi Zhang, Simon Tupin, Yujie Li, Makoto Ohta, “Association between aneurysmal haemodynamics and device microstructural characteristics after flow-diversion treatments with dual stents of different sizes: a numerical study”, Frontiers in Physiology, section Computational Physiology and Medicine, Vol. 25, 2021, p. 100966, doi: 10.3389/fphys.2021.663668

著書

該当なし

国際学会

Z. Wang, H. Anzai, Y. Kojima, N. K. Putra, J.-P. Rieu, N. Ohtsu, H. Taniho, M. Ohta
Endothelial cells distribution after the flow exposure experiment
[Lyon Saint Etienne & Nippon Scientific Network Engineering sciences Lyon Tohoku
LyonSE&N - ELyT Workshop 2021, 2021/06/21-25, オンライン]

Ryuhei Yamaguchi; Naoki Ikeya; Nadia Shafii; Kahar Osman; Atsushi Saito; Gaku
Tanaka; Makoto Ohta
Frequency Characteristics of Elastic Patient-Specific Aneurysm Model
[Summer Biomechanics, Bioengineering, and Biotransport Conference, 2021/06/14-18,
オンライン]

Kazuki Takeda, Hitomi Anzai, Mingzi Zhang, Wang Haoran, Ai Kajiyama, Makoto Ohta
Assessing of the Relationship between WSS and TAV for Disturbed Flow on the

Geometry of AVF for Hemodialysis

[Eighteenth International Conference on Flow Dynamics - ICFD 2021, October 27-29 2021, オンライン]

Zi Wang, Narendra Kurnia Putra, Hitomi Anzai, Naofumi Ohtsu, Yukiko Kojima, Hanif Saifurrahman, Makoto Ohta

Endothelial Cell Distribution within Gap between Two Stent Struts after Flow Exposure
[UTM-IFS 3rd International Biofluid Symposium 2021, 2021/11/18, オンライン]

Fangjia Pan, Naoko Mori, Shunji Mugikura, Hitomi Anzai, Makoto Ohta

Influences brought by different wall shear stress analysis on curved vessels
[UTM-IFS 3rd International Biofluid Symposium 2021, 2021/11/18, オンライン]

Fangjia PAN, Naoko MORI, Shunji MUGIKURA, Hitomi ANZAI, Makoto OHTA

Influence of flow rate estimation at vertebral arteries on basilar artery wall shear stress
[The 11th Asian-pacific conference on Biomechanics, 2021/12/02-04, オンライン]

Hitomi Anzai, Gaoyang Li, Keiichiro Shiraishi, Makoto Ohta

Deep leaning network for predicting cardiovascular hemodynamics
[Biofluids 2021 "Biofluid Symposium", 2021/06/21-24, 招待講演, オンライン]

Yujie Li, Mingzi Zhang, Makoto Ohta

Simulation of Aneurysmal Haemodynamics after Flow-Diversion Treatment: Modelling the Flow-Diverting Stent as a Porous Medium
[Eighteenth International Conference on Flow Dynamics - ICFD 2021, October 27-29 2021, 招待講演, オンライン]

Simon Tupin, Mingzi Zhang, Yujie Li, Makoto Ohta

Dual-Stent Microstructural Characteristics and their Impact on Intra-Aneurysmal Haemodynamics
[Eighteenth International Conference on Flow Dynamics - ICFD 2021, October 27-29 2021, 招待講演, オンライン]

Hitomi ANZAI, Gaoyang LI, Keiichiro SHIRAISHI, Makoto OHTA

Prediction of cardiovascular hemodynamics based on arterial geometries: deep learning application for fluid dynamics
[The 11th Asian-Pacific Conference on Biomechanics, 2021/12/02-04, 招待講演, オンライン]

国内学会・研究会等

小島有紀子, 王子, Narendra Kurnia Putra, 大津直史, 安西眸, 太田信
ステント表面内皮化に対する流れ負荷実験の有用性
[2021 年度 東北大学金属材料研究所共同研究ワークショップ・日本バイオマテリアル学会
東北ブロック講演会, 2021/09/29-30, オンライン]

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP12APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.4~2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 12 日提出

Dual-Phase 固体酸化物電解質膜内の粒界と酸素イオン伝導特性の相関関係の解明

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

Jeongmin Ahn

Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Syracuse University 准教授

永島 浩樹

琉球大学工学部 助教

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

固体酸化物電解質膜の特性で重要なのが, 様々な使用条件下での酸素イオンと電子の混合伝導性 (mixed ionic and electronic conductivity : MIEC) である. MIEC を高めるために, 近年膜のナノ薄膜化やナノ粒子化が進んでおり, さらに二つの異なる構造を有する酸化物を組み合わせた Dual-phase (DP) 酸化物が注目されている. DP 膜内には異なる構造間の粒界 (grain boundary : GB) が必ず存在し, ナノ化した DP 膜内では GB の影響が相対的に大きくなる. そのため, GB や各構造の結晶サイズがイオン伝導特性に与える影響を把握することは重要である. そこで本研究ではペロブスカイト構造を有する $\text{SrSc}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{O}_{3-\delta}$ (SSC)酸化物とフルオライト構造を有する $\text{Sm}_{0.2}\text{Ce}_{0.8}\text{O}_{2-\delta}$ (SDC)酸化物から成る DP 酸化物膜の特性とその膜内の GB 面における酸素イオン伝導メカニズムとの相関関係を明らかにすることを目的としている.

1.2 研究期間内の最終目標

期間内の最終目標は, 実験により薄膜の作成方法を構築し, DP 酸化物電解質膜のイオン伝導特性を把握することと, 分子動力学 (molecular dynamics : MD) 法により DP 酸化物内の各構造の結晶サイズが酸素イオン伝導特性に与える影響を明らかにすることで, DP 酸化物電解質膜内の酸素イオン伝導特性と結晶サイズとの関係について知見を得ることである.

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

本研究における共同研究の意義は, 実験とシミュレーションの両方から DP 酸化物型電解質膜内の酸素イオン伝導現象を解析できる点である. 実験結果はシミュレーションの妥当性を保証するだけでなく, 実験により特定した電解質膜の特性をもとにシミュレーションを行い, そのメカニズムを解明することができるという利点がある. 本研究では SSC 酸化物と SDC 酸

化物からなる DP 酸化物電解質膜を作成し実験と MD 法による解析を行なった。実験による解析では、様々な膜の配置において、より効率的に薄膜を形成する手法を構築した。この手法は fill-coat 法というもので、従来の dip-coat 法よりも様々な厚さの薄膜を形成することができる。この技術によりより様々な環境下で作動する薄膜を形成することができるようになった。

MD 法による解析では、SSC と SDC からなる DP 酸化物電解質膜のモデルを作成し、DP 膜内の酸素イオンの平均二乗変位から拡散係数を算出し、アレニウスの関係式に基づいて活性化エネルギーの解析を行なった。昨年度は、SSC と SDC の結晶サイズを変更させ幅広い温度条件下で解析を行った。解析の結果、拡散係数は SSC と SDC の結晶サイズによって変化し、SSC の結晶サイズが大きくなるほど拡散係数は高くなり、SDC の結晶サイズが大きくなるほど拡散係数は低くなることが分かった。一方、活性化エネルギーは、SSC と SDC の結晶サイズが大きくなるほど高くなることが分かった。

3. 研究目標の達成状況

実験により様々な環境下で作動する薄膜を形成する技術を構築した。また、MD 法による解析より、DP 酸化物電解質膜内の結晶サイズと酸素イオン伝導特性との関係を明らかにした。

4. まとめと今後の課題

本研究では、DP 酸化物膜の特性とその膜内の粒界サイズとの関係に関する知見を得るために、ペロブスカイト構造を有する SSC 酸化物とフルオライト構造を有する SDC 酸化物からなる DP 酸化物電解質膜内の酸素イオン伝導性について実験と MD シミュレーションにより解析を行った。昨年度は、実験により様々な環境下で作動する薄膜を形成する手法を構築し、酸素イオン伝導特性を測定した。また、MD 法による解析では、酸素イオン伝導特性は結晶サイズにより変化し、さらに酸素イオン拡散に必要な活性化エネルギーは、結晶サイズが大きくなるほど高くなることが分かった。今後の課題としては、DP 膜内の粒界の空間的分布により酸素イオン伝導特性がどのように変化するかを実験により特定し、MD 法により DP 膜の構造と酸素イオン伝導性の相関についての分子論的メカニズムを解明する必要がある。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし。

国際学会

1. H. Nagashima, T. Ijichi, J. Ahn, and T. Tokumasu “Correlation between oxygen ion conductivity and GBs in solid oxide electrolyte membrane”, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, CRF-23, 2021.

国内学会・研究会等

なし。

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）
なし.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP13APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022年7月15日提出

回転二重円すい間に発生するテイラー渦の安定性と乱流遷移

足立 高弘

秋田大学理工学研究科 教授

小宮 敦樹

東北大学大学院工学研究科 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

流体に回転運動を与えたときの不安定現象についての研究は、混合を考慮するような多くの産業用途にとって重要である。例えば、回転システムの研究はあらゆる同心駆動装置やタービンロータなどの回転機械設計に役立つだけでなく、小型の回転熱交換器やミキサーなど化学装置の最適化にも役立つ。これらの流れをより良く制御するためには、流れの不安定性が発生する臨界パラメータや、不安定性による流れのパターンの遷移メカニズムを解明する必要がある。本研究では、ミキサー等のモデルとして、同心同軸で回転する二重円すい間の流れを取り扱う。

本研究ではアスペクト比が有限で容器の上下に蓋のある系において、円筒の側壁が傾斜した同心二重円すいの場合を取り扱う。既往の研究で扱われた傾斜が無く無限に長いクラシカルな同心二重円筒内のテイラー流れの場合とは異なり、不安定現象の様相は傾斜の影響で不完全分岐となり複雑となることが予想される。また、回転による遠心力の斜面成分により、このシステムでは回転と同時にテイラー・クエット流と似た渦が生じることが先行研究より分かっているが、それらの渦の遷移条件等の詳細については不明なままである。そこで、本研究では二重円すい間内の渦形態が遷移する条件を解明するために、スペクトル・エレメント法を用いた固有値解析を用いて安定性解析を行い、流れが遷移する臨界点とその後の遷移現象を分岐理論を用いて明らかにする。さらに、OpenFOAM等の流体解析ソフトを用いて遷移後に流れを計算し、渦の時間的な挙動を追跡することで、混合、摩擦や伝熱などの工学的な応用量を計算し、高効率な回転機械の開発に繋げる。

1.2 研究期間内の最終目標

ニュートン流体と非ニュートン流体の両方について、回転数と粘度の変化に対して流れが

不安定になる臨界点を線形安定性解析により求める．さらに，トルクや熱伝達係数などの物理量を OpenFOAM 等の流体解析ソフトを用いて明らかにする．

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 共同研究の意義

本研究では二重円すい間内の渦形態が遷移する条件を解明するために，スペクトル・エレメント法を用いた固有値解析を用いて安定性解析を行い，流れが遷移する臨界点とその後の遷移現象を分岐理論を用いて明らかにする．これは複雑な非線形力学系の問題となっており，伝熱工学と流体力学を合わせた高度な総合工学の範疇に入る．そのため，流体科学研究所における熱流体に関する研究者と共同で研究を行うことには大変意義がある．

2.2 本研究の独創性

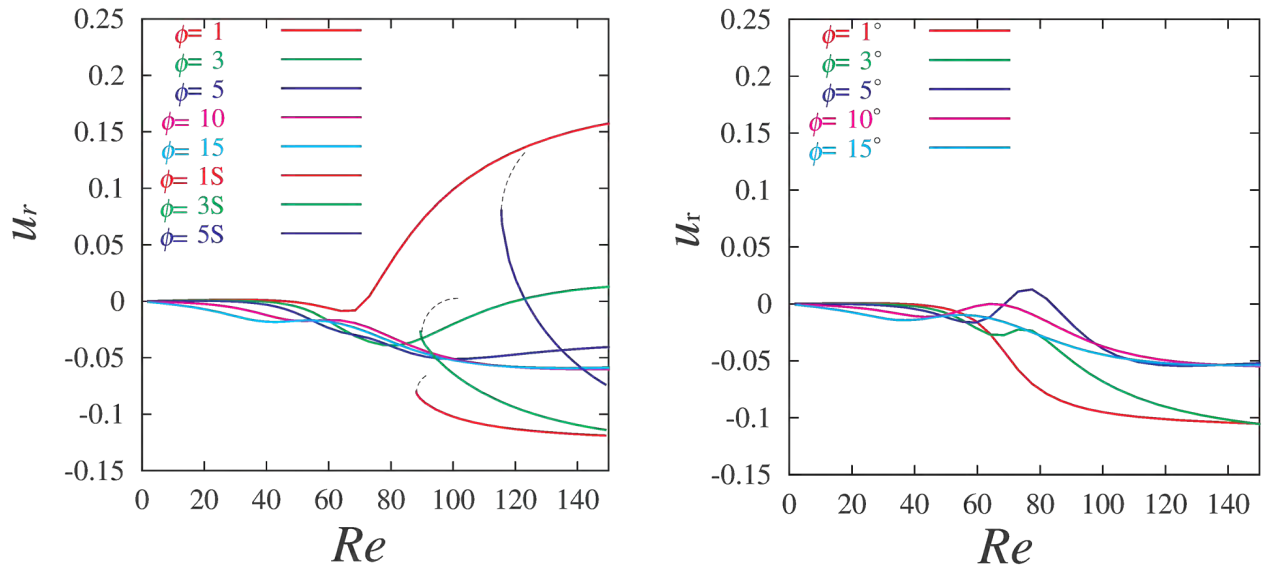
本研究で取り扱う回転二重円すい間に発生するテイラー渦流れは，シンプルな分離装置としての独創性を有している．円筒の斜面が傾斜しているため，遠心力の分力が斜面に沿っても作用することで，密度の異なる液体や微粒子の分離を円筒の内側と外側に促進するだけでなく，円すいの底部と上部へも分離することが可能となる．さらに，粘度や非ニュートン性の変化による影響を考慮して，高効率な分離機としての応用が期待できる．

わが国のものづくり企業は医療機器に活かすことができる高い技術を有しているにもかかわらず，現状の国内売上額（2.8 兆円）に占める輸入額の割合は 49%程度であり輸入超過で推移している．この現状を打破すべく海外との競争も視野に，医療分野での分離装置としての応用を念頭に研究を行う．例えば，赤血球や血中のアルブミン等の分離をすばやく適切に行うことで血液検査を円滑に行えるような装置の開発が本研究の位置付けとなる．

3. 研究目標の達成状況

側壁が傾斜した場合の同心二重円すい形状の場合について，スペクトル・エレメント法を用いた非線形平衡解の計算を行った．図 1 は，サドル・ノード分岐が生じる場合の分岐ダイアグラムを内外円筒半径比 Γ とレイノルズ数 Re を用いて示したものである．また，側壁の傾斜角度を ϕ としている． $\Gamma=3.7$ の場合には，側壁が傾斜した場合にも分岐の構造は維持されて，サドル・ノード分岐の構造が保たれる．一方， $\Gamma=4.0$ の場合には，側壁が傾斜することにより，分岐構造がくずれてサドル・ノード分岐が維持されないことが明らかとなった．

円筒形状流路から側壁が傾斜する円すい形状の流路を取り扱う段階へと移行した．内外円筒半径比の違いにより，分岐の構造が円筒の場合と比べ大きく変化することが明らかになった．これは，昨年度の段階では考え難い結果であり，研究目標の達成に向けさらに計算を進める必要があることを示唆している．



(a) $\Gamma=3.7$

(b) $\Gamma=4.0$

図 1 : 側壁が傾斜した場合の内外円筒半径比 Γ とレイノルズ数 Re による分岐ダイアグラム

4. まとめと今後の課題

側壁が傾斜を持つ同心二重円筒間に発生するテイラー渦の遷移について、非線形平衡解を求めることで、アスペクト比の異なるいくつかの流路形状の変更に対して大域的な分岐ダイアグラムを求めることができた。傾斜のある場合には、内外円筒半径比の違いにより、分岐の構造が大きく異なることから、最終的な分岐構造の解明という目標までの道程はかなり遠いものと思われる。

5. 研究成果リスト (※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

T. Adachi, W. Toshiharu, K. Akinaga, A. Komiya, D. Henry, V. Botton: Stability and Transition to Turbulence of Taylor Vortex in a Gap between Rotating Two Cones, Proceedings of the 21th International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2021)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP15APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.4~2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

機械学習と分子動力学シミュレーションを融合した

有機材料の構造物性相関の解明

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

Hari Krishna Chilukoti

National Institute of Technology (NIT) Warangal, India 助教

河本 祐樹

東北大学大学院工学研究科ファインメカニクス専攻 博士前期課程

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

有機材料や高分子材料などソフトマテリアルの熱流動特性, 機械特性の予測は広い科学・工学の領域で重要となっている. このような要望の高まりに合わせ, 実験を代替する **virtual testing** としての物理シミュレーション技術に加え, データ科学の技術を利用した材料特性の予測や材料開発, すなわちマテリアルズ・インフォマティクス (MI) が注目を集めている. これまでの先行研究の多くは, データ駆動的な側面が強く, 膨大なデータを集約して物性の予測精度を上げるという研究の方向性が主である. しかしながら, 扱う材料種や物性によっては, 簡単にデータを収集することが難しいものもあり, スモールデータのみ利用できる場合であっても予測精度の高い方法論の提案が求められる. そこで, 本研究では物理駆動的な機械学習 (**physics-guided machine learning**) による MI 技術の構築を目指している. 着目する物性と相関の高い分子スケール構造データや物性データを見出し特徴量選択に利用することで, これまでに無い機械学習手法を構築することを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

分子動力学 (MD) シミュレーションによる分子スケール構造や物性計算に基づき, 単純な物性のみを機械学習による物性予測精度を超える機械学習手法の提案を目指す. 本研究ではまず, SOM (自己組織化マップ) を用いて物性間の相関や分子スケール構造データと物性との相関性を見出す. また, 比較的小さなデータセットにおいても高い予測精度が見込める

ガウス過程法 (GPR) による機械学習予測手法を実装し, 入力した他の物性から着目する物性を予測する交差検証を行う. 最終的に, SOM 学習データを入力データとして利用することで, データ量の拡張を行い, GPR による予測精度への影響を評価する.

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

有機液体材料の MD シミュレーションを実施し, 動径分布関数 (RDF) 解析に基づく分子スケール構造データを取得した. 特に動径分布関数の第 1 ピークに関連する量を SOM の物性データに加えて学習した結果, 多くの材料の多くの物性と構造データが高い相関を持つことが明らかになった. このように, SOM は物性と相関の高い構造データを抽出するために有効であることが示唆される.

物性予測を実現するガウス過程法を実装し, ハイパーパラメータの最適化には MCMC (マルコフ鎖モンテカルロ) 法を採用した. ある着目する (予測する) 物性を欠損させ, その他の物性データを入力データとすることで教師データを作成し, 5 分割交差検証を用いて物性予測精度の検証を行った. その結果, 構築した予測手法は, 平均 10%以下の精度で欠損データを予測できることが明らかとなった. さらに, SOM 学習データを入力データとすることでデータの拡張を行ったが, GPR による予測精度向上はあまり見られなかった.

3. 研究目標の達成状況

ガウス過程法による物性予測手法の構築は完了したが, 今後物性と相関のある特徴量を学習データに加えた予測精度の検証を行う.

4. まとめと今後の課題

本研究によって, SOM が分子スケール構造データと物性との相関性をうまく抽出できる手法であることを示した. また, ガウス過程法は, 物性データを高い精度で予測可能であることを明らかにした. 今後は, 物性と相関のある特徴量を学習データに加え, GPR による予測精度の向上を狙う.

5. 研究成果リスト (※第 2 回以降の報告の場合は, 初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

国際学会

1. Gota Kikugawa, Yuki Kawamoto, Hari Krishna Chilukoti, Self-organizing map for clarifying relationship between the molecular structure and thermophysical properties, Proceedings of the 21st International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai (online), Japan, (2021), pp. 40-41, (available online).

国内学会

1. 河本 祐樹, 菊川 豪太, 機械学習を用いた有機液体の分子スケール構造と熱物性の相関性の解明, 第 35 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (available online).

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP16APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022年7月8日提出

既存空港を利用した那覇空港を拠点とした際の離島や都市部を結ぶ飛行

車両の実現性の検討

森澤 征一郎，兼久 勇人
 沖縄工業高等専門学校 講師，本科生
 坂井 玲太郎
 宇宙航空研究開発機構 研究員
 菊地 亮太
 京都大学 助教
 大林 茂
 東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

那覇空港は日本本土とアジア諸国の中間地点に位置し，日本含むアジア主要都市を迅速に結びつけるリージョナルハブとして期待されるとともに，沖縄県内の離島を結ぶ中継地点でもある．この離島間では，100席以下の小型航空機で2地点を結ぶコミューター航空会社が存在し，重要な移動手段となる．その際，台風などの悪天候で船舶が就航できないときには緊急輸送となる．しかし，離島間の航空路線は小規模かつ需要に限られるため，座席当たりの運航コストが高く，構造的に採算性が低く，路線の維持や確保を図ることが課題となっている．一方，近年では新たな移動手段として空飛ぶクルマなどの飛行車両に非常に多くの期待が集まり，離島間での移動手段としても検討が進められている．本研究では，航空機が那覇空港に離発着する際に悪天候の影響を調査し，今後の緊急輸送に役立てるとともに，飛行車両を投入した際の離島間輸送に対する利点・欠点を明らかにすることを目的とする．

1.2 研究期間内の最終目標

本年度は，台風の有無による那覇空港に着陸する航空機の航空路，及び飛行高度・対地速度の違いを調査するとともに，飛行車両の機体成立検討に向けた機体形状のサイジングを実施する．

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

「飛行車両」の実現には本研究で取り扱う機体形状、運航問題を含め多くの考慮すべきことが複合的に関連してくる。このような複合的な問題を取り扱うものを **Multidisciplinary Analysis** と呼ばれ、工学分野としても重要な位置付けをもつ。研究プロジェクト代表者である大林はこの分野の世界的な先駆者であり造形が深い。加えて、本研究の提案者である森澤は所属機関と地元のエアラインで包括連携協定を結んでおり、より実問題に近いところで活動をしている。他の研究者(坂井・菊地)らも航空分野の第一線で活躍する研究者である。そのため、本共同研究することは相互に相乗効果があり、今後の航空研究への大きな寄与が期待できる。

2.1 那覇空港に離発着する航空機の運航分析

初めに、台風の有無による那覇空港に航空機が着陸する際の航空路、及び飛行高度・対地速度の違いを分析する。なお、対象とした機種は沖縄県外や県内離島への航空路線が就航している Boeing 737-400 である。図 1 に 9 月 17 日 15 時時点での 2015 年（台風の発生なし）と 2016 年（台風の発生あり）の風速の等高線を示し、図 2 に 2015 年及び 2016 年に那覇空港を着陸する際の航空路を示す。その結果、台風が沖縄本島に接近した 2016 年では航空路が南西諸島側で大きくばらついている。また、那覇空港への着陸は南側から行っているが、2016 年では那覇空港に着陸する航空路は那覇空港への北側から進入している。さらに、石垣島へ着陸する航空路が存在せず、この結果は台風 16 号の中心が石垣島にあるため欠便になったと考えられる。

さらに、図 3 に 2015 年及び 2016 年に那覇空港を着陸した際の対地速度と飛行高度の時系列変化を示す。2016 年での対地速度は 2015 年に比べてばらつきが少なく勾配の変化が小さい。これらは、台風の強風による機体に及ぼす影響を軽減させるために高度を低くし、対地速度の変化を小さくして緩やかに着陸を行ったと考えられる。また図 2(b)より、180s 前後で離陸時での対地速度の勾配に変化が見られるといった特徴も確認することが出来た。

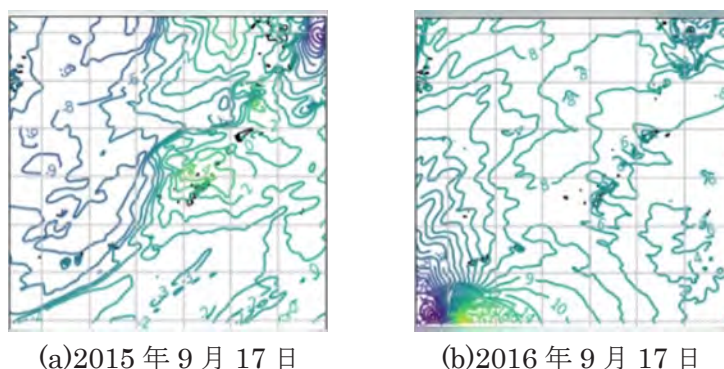
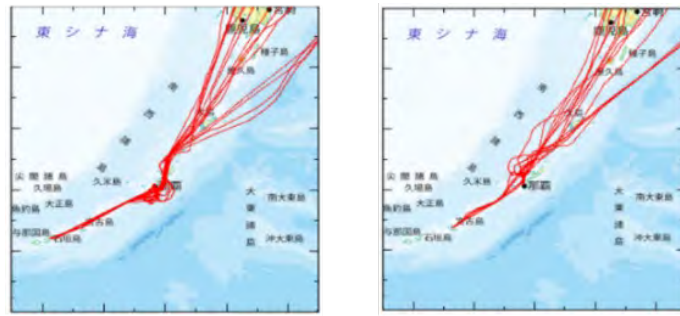
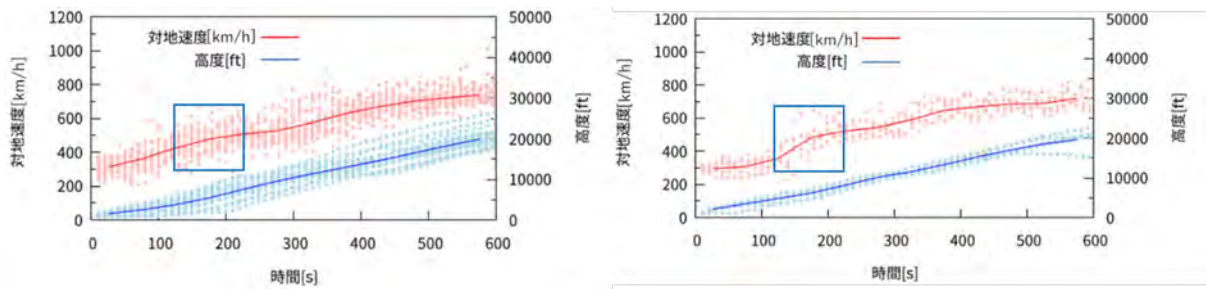


図 1 台風の有無による風速の等高線図



(a)2015年9月17日 (b)2016年9月17日

図2 着陸時の航空路の違い



(a)2015年9月17日 (b)2016年9月17日

図3 着陸時の対地速度と飛行高度の違い

2.2 飛行車両の形状サイジング

図4に機体形状のモデリングを行い、その性能評価を実施した手順を示す。過去にバージニア工科大学とラフバラー大学によって検討された飛行車両「Pegasus」の形状を基に性能評価を行った。さらに、この結果と搭載すべきエンジン性能の影響も考慮し、機体形状のサイジングを試みた。図5にPegasusに搭載された初期エンジン、既存の自動車用エンジン、軽航空用エンジンの全備乾燥質量[lb]に対する最高出力[hp]を示す。その結果、これらのエンジンの自動車用エンジンと軽航空エンジンで同じ傾向をもつことを示した。

また、図6にこのエンジンを初期エンジンと最高出力が1番大きい軽航空機エンジン（最高出力435hp、全備乾燥質量615lb）を採用した場合のサイジング結果を示す。その結果、エンジン性能変更前より翼面荷重(W/S)_{TO}、パワー荷重(W/P)_{TO}ともに大きくなったことがわかる。その際の航続距離をブレゲーの式より見積もり、結果825kmとなり沖縄県内の離島間を飛行する航続距離を十分にカバーできることがわかった。

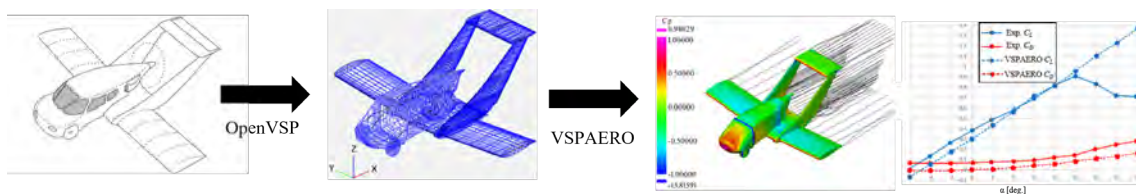


図4 OpenVSPによる機体形状モデリングと性能評価の手順

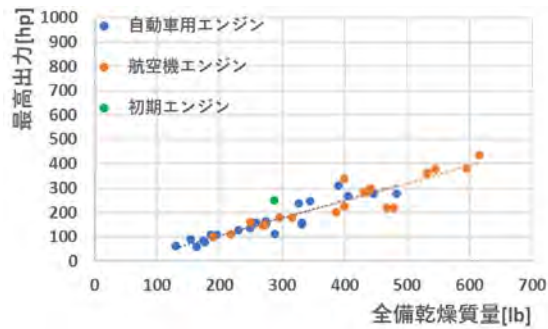


図5 エンジン性能の評価

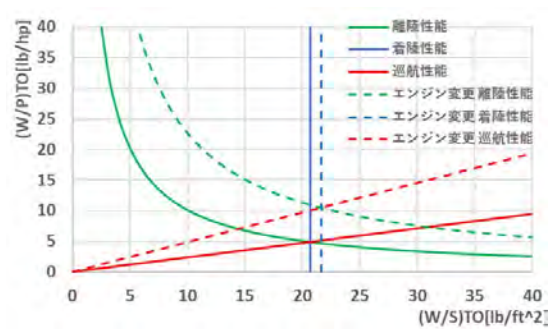


図6 機体性能のサイジング結果

3. 研究目標の達成状況

本年度は航空機が那覇空港に離発着する際に悪天候の影響を調査し、台風の有無による航空路、対地速度、及び高度の違いを導くとともに、飛行車両の機体成立検討に向けた機体形状のサイジングを実施した。加えて、本テーマを派生した内容で科研費（若手）を獲得するなど研究目的を達成する成果を得ている。しかし、昨年度に続き、本年度もコロナ禍による影響を受け、申請者の所属機関で連携している地元エアラインと議論や意見交換を十分行うことが出来なかった。この点は来年度以降も継続していく予定である。

4. まとめと今後の課題

本研究は、昨年度採択されたリーダーシップ共同研究を発展させ、台風の有無による那覇空港に航空機が着陸する際の航空路、及び飛行高度・対地速度の違いを分析とともに飛行車両の機体成立検討に向けた機体形状のサイジングを実施した。

その結果、航空機の運航状況の分析では、台風が沖縄本島に接近したときとそうでないとき的那覇空港へ着陸する航空路が顕著に異なるとともに、台風の強風による機体に及ぼす影響を軽減させるために高度を低くし、対地速度の変化を小さくして緩やかに着陸していることがわかった。一方で、気象要因による運航制約条件の精緻化するためにはこれらの特徴と運航状況遅延や欠便状況について検討が必要である。

また、機体形状のサイジングではエンジン性能変更前より翼面荷重(W/S)_{TO}、パワー荷重(WP)_{TO}ともに大きくなるとともに、離島間を飛行する航続距離を十分にカバーできることがわかった。一方で、空力設計を行う上で必要な有害抗力や最大揚力係数などの予測精度を詳細に議論する必要がある。今後は、ナビエ・ストークス方程式による高忠実な空力シミュレーションや風洞実験を通してより詳細な空力設計に取り組む。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

- [1] H. Kaneku, D. Yamabata and S. Morizawa, "Study on Sizing Method on a Roadable Aircraft using OpenVSP," Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), OS20-27, October 27-29, 2021.
- [2] S. Morizawa, R. Sakai, R. Kikuchi, H. Kanakeu, and S. Obayashi, "Realization of a roadable aircraft to connect Okinawa's remote islands," Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), CFR-57, October 27-29, 2021.

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP18APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 13 日提出

数値流体力学と細胞実験による血管疾患の機序解明

船本 健一，二階堂 正隆，菅原 竜志，津田 晋吾
 東北大学流体科学研究所 准教授，大学院生，大学院生，研究生
 宮内 優
 宮崎大学工学部 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

血流動態と血管疾患の関連性についてはこれまでの研究により多くのことが報告されているが、細胞動態、血流現象、疾患の発症・進展の間で時空間スケールが大きく異なるため、それらの相互作用の詳細は明らかになっていない。本研究では、血管疾患として微小血管網の虚血再灌流障害や大動脈の動脈瘤など様々なサイズの血管疾患を対象に、数値流体力学解析と細胞実験を実施する。また、それらを融合することで、血流動態と血管疾患の関連の詳細について明らかにすることを最終的な目標とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間では、(i) 左心室内の血流場に大動脈二尖弁が及ぼす影響の解明と、(ii) 血管壁の物質透過係数を推定するデータ同化法の提案を目標とした。

2. 研究成果の内容

本研究では、血管疾患の機序の解明と診断・治療・予防方法の確立を目的に、数値流体力学解析と細胞実験、およびそれらの融合による研究アプローチをとる。両研究機関の研究グループが有する数値解析技術と実験技術を組み合わせ、そのシナジー効果を利用する。以下に実施した研究内容について記す。

(i) 左心室内の血流場に大動脈二尖弁が及ぼす影響の解明

大動脈弁に三尖弁（TAV）または二尖弁（BAV）を有する 2 つの左心室モデルを構築し、血流解析を行った。得られた計算結果を比較することで、二尖弁が左心室内の血流場に与える影響について調べた。ここで、各大動脈弁形状は臨床における知見を参考に、三尖弁の弁口は面積 4.2 cm^2 の三角形に近い形状、二尖弁の弁口は面積 1.84 cm^2 の楕円形に近い形状とした。そ

れ以外の左心室の形状や左心室壁の動きは先行研究 (Yamada, et al., J. Biomech Sci Eng., 2018; Miyauchi, et al., AIP Adv., 2019) と同様に設定した。流体解析には熱流体解析ソフトウェア (Fluent 17.2, ANSYS, USA) を用いた。計算結果の一例として、収縮期における左心室内の速度分布と、血流停滞を表すパラメータである **Relative Residence Time (RRT)** の分布を図 1 に示す。図より、二尖弁モデルの方が三尖弁モデルより大動脈弁口を通過する拍出速度が大きい。この速度の違いは、両弁の弁口面積の違いに起因している。また、RRT は心尖部において、二尖弁モデルの方が三尖弁モデルより高い。このことは、二尖弁を有する左心室の方が心尖部において血流が停滞し易く、血栓形成のリスクを高めることを示唆している。

(ii) 血管壁の透過性を推定するデータ同化法の提案

液体中の物質の濃度分布を表す方程式を拘束条件に、計測データと計算結果の差が最小となるような物質透過係数の値を推定するデータ同化法を定式化し、実装した。拘束条件付きの最小化問題の解法として、Lagrange 未定乗数法を採用した。液体中の物質の濃度分布を表す方程式には、実装の容易さから定常拡散方程式を用いた。拡散方程式を弱形式化し、境界積分項に拡散によって血管壁を通過する物質透過条件式を組み込んだ。有限要素法で方程式を離散化し、その非線形代数方程式の解法には Newton-Raphson 法を適用した。既知の透過係数を与えた濃度分布の数値解を計測データとして用いた 1 次元の検証問題を通して、今回提案した血管壁の透過係数を推定するデータ同化法が妥当であることを確認した。

3. 研究目標の達成状況

当初の計画通り、研究は順調に進んでいる。

4. まとめと今後の課題

左心室内血流に関する研究では、大動脈弁に三尖弁または二尖弁を有する 2 つの左心室モデルを用いて得られた結果を比較し、二尖弁の場合に拍出速度が大きく、血流停滞の度合いが高くなることを明らかにした。今後は、異なる開口形状を有する二尖弁モデルを作成して解析を行い、二尖弁の形状による左心室内の血流場への影響を調べる。血管壁の物質透過性を推定するデータ同化法に関する研究では、定式化と 1 次元の検証問題による提案手法の妥当性の調査を行った。今後は、空間解像度や計測データの補間方法が物質透過性の推定精度に与える影響について詳しく調べる。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

国際学会

Suguru Miyauchi, Shuta Kosaka, Toshiyuki Hayase and Kenichi Funamoto: Numerical Analysis of a Blood Flow in the Left Ventricle-Aorta System, Proceedings of the Twenty-first International Symposium on Advanced Fluid Information, (2021), pp. 159-160.

国内学会・研究会等

津田晋吾, 宮内優, 船本健一: 大動脈二尖弁による左心室内血流場の変化に関する解析, 日本機械学会第 32 回バイオフロンティア講演会講演論文集, (2022), 2C12.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP24APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022年7月11日提出

スーパーコンピュータを用いた乱流渦のトポロジカル特性に関する解析

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

中山 雄行

愛知工業大学工学部機械学科 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

渦は、海洋や気象等をはじめとする自然現象、また発電・航空・内燃機関等の様々な工学分野に関わる。これらの流れの特性に影響を与える渦には、渦流中の吸い込み流れによる渦度の拡散抑制や渦伸長(vortex stretching)による自己安定性、また圧力極小等の性質があるが、これらは渦の速度構造から導かれる。渦領域は、この領域に沿った複数の旋回平面で構成されると考えることができ、また、渦線のバンドル束としてもみなすことができる。このバンドル束は、旋回平面上の渦流れによる渦伸長作用を受け、またそれが別の旋回平面の渦流のトポロジーに影響を与えると考えられる。この様に、渦流とその流れ構造における渦伸長の特性は、渦の渦線の相互作用的なトポロジカルダイナミクスの仲介的な役割を果たしており、渦の安定性や構造の変化の解明において重要である。

渦構造を定めるための旋回平面の同定また本平面に関連付けたガリレイ不変の座標系、並びに軸線のバンドル束の渦領域中のトポロジカル特性を定める Local axis geometry は、渦の速度構造とバンドル束のトポロジカル特性の関連に関わる解析を可能にしている(Nakayama, *Phys. Rev. Fluids*, 2017; *ICFD2019*, 2019)。そこで、本研究では、一様等方性乱流の渦の速度構造と渦伸長の詳細な特性、また渦線バンドル束のトポロジーへの作用について分析することを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、擬スペクトル法による一様等方性乱流の DNS(Direct Numerical Simulation)において、有限規模の乱流渦の旋回平面上における速度構造、並びにその構造が導く渦伸長の作用と渦線バンドル束のトポロジカル特性を明らかにすることを目的とする。

2. 研究成果の内容

本研究では、渦の速度構造を旋回平面上で解析すると共に、同平面を通る渦線のバンドル束を併せて同定し、更に渦伸長の作用を成分分解して分析することにより、渦流が導く渦線へのトポロジー作用、並びに渦伸長から渦流に与える作用について分析した。その結果、渦流の非軸対称性が渦伸長も非軸対称性に行っていること、旋回平面の上下の渦流に非軸対称的な発達・減衰の効果を与えていることが明らかになった。以下にその解析手法と結果について示す。

2.1 新しい解析手法の開発

本研究では、ローカルトポロジーに基づく旋回平面に関連づけた渦空間座標系（ガリレイ不変の座標系）を定め、トポロジーに関する **vortical flow symmetry** 等の物理量、渦流の周方向速度の固有ベクトルに基づいて渦流の非軸対称とその方向を同定できる独自の解析手法を用いている。渦線のバンドル束のベクトル場は、渦中心の渦度を 0 （基準）とすることにより、渦中に広がる渦度ベクトル場のトポロジーが明らかになる。また、渦伸長の渦空間座標系上の定式化を行い、旋回平面上の渦度ベクトル場の半径方向、法線方向の各々の成分に関する伸長作用の分解を可能とし、渦伸長の詳細な解析が可能となった。

2.2 新しい現象の解明

一様等方性乱流における有限規模の乱流渦は、旋回の強さに関わらず非軸対称性の構造であり、半径方向速度は吸い込み流れと湧き出し流れの双方が存在する。渦領域の各点におけるローカルトポロジー上の半径方向速度の強さは、旋回の強さに応じて小さくなることが示されているが、有限規模の渦中心では強い旋回であるにも関わらず半径方向速度の大きさは減衰しないことが明らかとなった。

この吸い込み流れと湧き出し流れの旋回平面上の各領域では、旋回平面上の渦度ベクトル成分をそれぞれ減衰或いは発達させている。この渦度ベクトル成分は、本旋回平面の上下の渦流における旋回の強さに作用するが、この作用も非軸対称となる。この様な作用が渦線バンドル束のトポロジーに関わり、渦伸長によるバンドル束の半径方向・周方向成分への作用を定めることが判った。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、渦度や **swirlity** のコンターでは軸対称的な様相を有する渦において、その速度構造は非軸対称であること、また、この構造により渦伸長では旋回平面に平行な渦度成分に複雑な作用を与えること、更に対象とする旋回平面の上下の旋回平面上の渦流に非軸対称的な作用を与えることが示された。これらと併せて渦伸長の渦線バンドル束への非軸対称的な作用が明らかとなり、本研究の目標は達成された。

4. まとめと今後の課題

一様等方性乱流の渦において、非軸対称的な速度構造がもたらす 3 次元的な渦伸長の作用が明らかになった。今後は、本研究にて開発した速度構造の同定技術を用いて 3 次元的な速度構造の解明が課題となる。また、渦の速度構造が渦伸長を通して作用する渦線のバンドル束において、逆にバンドル束が速度構造に作用を与える相互作用について理論と解析を進め、渦構造

の自己安定のメカニズム解明に繋ぐことを考える。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

- (1) K. Nakayama: A Theory and Analysis that a Vortex Makes the Vorticity Lines Vortical through Vortex Stretching, *The Seventy-fourth Annual Meeting of American Physical Society Division of Fluid Dynamics* (オンライン), (2021), A24.00009.
- (2) Y. Adachi and K. Nakayama: A Feature of Vortical Axis in Coalescence of Vortical region in a Homogeneous Isotropic Turbulence, *The Seventy-fourth Annual Meeting of American Physical Society Division of Fluid Dynamics* (オンライン), (2021), N01.3.
- (3) K. Hyoudou and K. Nakayama: The Analysis of the Topological Characteristics of Bundle of Axes Lines, *The Seventy-fourth Annual Meeting of American Physical Society Division of Fluid Dynamics* (オンライン), (2021), N01.12.
- (4) K. Kato, D. Aoyama and K. Nakayama: An Analysis of Three-Dimensional Vortical Flow Structure in a Homogeneous Isotropic Turbulence, *The Seventy-fourth Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics* (オンライン), (2021), N01.13.
- (5) K. Nakayama: A Study of Relationships between Vortex Dynamics and Topological Features of a Bundle of Vortical Axes, *Proceedings of Eighteenth International Conference on Flow Dynamics*, Sendai (オンライン), (2021), CRF-85, pp. 627-629.
- (6) Y. Adachi and K. Nakayama: Coalescence of Vortical Regions and Bifurcation of Vortical Axes in a Homogeneous Isotropic Turbulence, *Proceedings of Eighteenth International Conference on Flow Dynamics* (オンライン), (2021), pp. 743-744.
- (7) K. Hyoudou and K. Nakayama: Axis Bundle Relationships between Vorticity Lines and Eigen-vortical-axis Lines in Vortical Core Region, *Proceedings of Eighteenth International Conference on Flow Dynamics* (オンライン), (2021), pp. 736-738.
- (8) K. Kato, D. Aoyama and K. Nakayama: An Investigation of Three-Dimensional Vortical Flow Structure in Isotropic Homogeneous Turbulence, *Eighteenth International Conference on Flow Dynamics* (オンライン), (2021), pp.739-740.
- (9) Y. Sendo and K. Nakayama: A Hierarchical Flow Scale Analysis in Development of a Vortex in a Homogeneous Isotropic Turbulence, *Eighteenth International Conference on Flow Dynamics* (オンライン), (2021), pp.745-747.

国内学会・研究会等

- (1) 兵藤京香, 中山雄行: 渦コア領域における軸線バンドルの特性, 日本機械学会第 99 期流体工学部門講演会講演論文集 (オンライン), No.21-80, (2021).

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP30APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 6 月 29 日提出

火星探査航空機の空力と動特性に対するプロペラ後流の影響調査

金 崎 雅 博

東京都立大学大学院システムデザイン研究科 教授

永 井 大 樹

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

宇宙航空研究開発機構(Japan Aerospace Exploration Agency: JAXA)の宇宙科学研究所(Institute of Space and Astronautical Science: ISAS)に設置されている火星探査航空機リサーチグループでは，火星大気を利用した航空探査を目指した機体の研究開発を行っている．この RG はじめ，世界的にもその概念が検討されている火星探査航空機の多くではプロペラ推進が用いられることが想定されているが，プロペラが生み出す流れ（プロペラ後流）と翼など機体本体との干渉により，自身の翼性能や構造成立性に影響を与えることを考慮した設計を行う必要がある．特に，火星大気は低密度，低温であることから，地球大気を飛ぶ小型無人機に比べて低レイノルズ数，高マッハ数環境となり，風洞実験による現象追跡が難しいことから，数値計算の援用が有望である．そこで本研究では，プロペラ後流を伴う火星探査航空機周りの空力や舵効きに基づく動特性に関わる知見の獲得を目的とする．

1.2 研究期間内の最終目標

プロペラ後流を伴う火星探査航空機周りの空力や舵効きに基づく動特性に関わる知見の獲得を目的とする．この達成により，空力・推進・構造を統合した実機丸ごとシミュレーションによる設計検討技法を確立する．

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 プロペラ後流を模擬する計算手法

低レイノルズ数領域で火星飛行機にプロペラ後流が及ぼす影響について調査をするため，数値流体力学(Computational Fluid Dynamics: CFD)を用いた．プロペラ後流を直接プロペラの運動により模擬する計算は概念検討の段階では高コストであると判断されたため，本研

究では体積力モデリング (Body Force Modeling: BFM) によりプロペラ後流をモデル化した Actuator Disk Model(ADM)を適用した。

2.2 得られた結果

主翼前縁のプロペラ設置位置による、水平尾翼による縦安定性とエレベータ舵効きに関するパラメトリックスタディを実施した。調査対象の形状として、第1図に示す通り無推力の大気球試験機 MABE-2 に仮にプロペラを装用したものを仮定した。プロペラ設置位置は主翼スパン 50%位置の前縁側と後縁側である。主流速度は 61.7m/s で火星飛行機の巡航飛行を想定し、主翼コード長基準でレイノルズ数 30,000、マッハ数 0.2 とする。火星飛行機の機体重量を支える揚力係数 0.63 で空力評価を行った。推力は 1.71 N、トルクは 0.725Nm、回転数は 1 秒当たり 37.1 回転、プロペラ進行率は $J=2.12$ となり、プロペラ回転方向は翼端渦と逆向きである。

図2に各迎角におけるピッチングモーメント係数 C_M を示す。プロペラ後流がある方が頭下げ方向にピッチングモーメントが大きくなり、プロペラ後縁配置の場合に頭下げ方向のピッチングモーメントが最大となった。これは、前縁配置ではプロペラ後流が主翼に干渉してから尾翼に流れ込むが、後縁配置では直接尾翼に流れ込むことが原因と考えられる。これにより、図3に示すように後縁配置の方が水平尾翼上面で流れが加速され、上面と下面での圧力差が大きくなり、前縁配置よりも大きなピッチングモーメントが発生したものと考えられる。さらに、迎角減少に伴って頭下げ方向にピッチングモーメントが増加した。本検討では、巡航 CL で評価しているため、巡航飛行状態でトリムを取る方法のひとつとして、エレベータを頭上げ方向により大きく舵角を取ることや、設置角度を変更することが考えられる。図4に $\delta e=0^\circ$ のときの C_M との差分を取った ΔC_M を示す。プロペラ後流がある方がない場合に比べて ΔC_M が大きい。特に、プロペラ後縁配置のとき ΔC_M が最大であった。これはエレベータを切ったとき、図5に示すように後縁配置では前縁配置よりも水平尾翼上面の正圧領域の増加が大きくなることが原因だと考えられる。

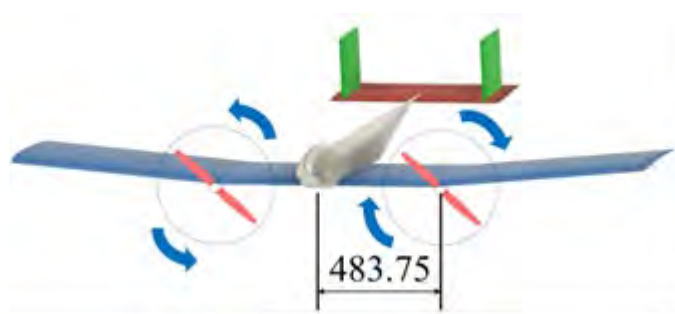


図1：推進系付火星探査航空機モデル

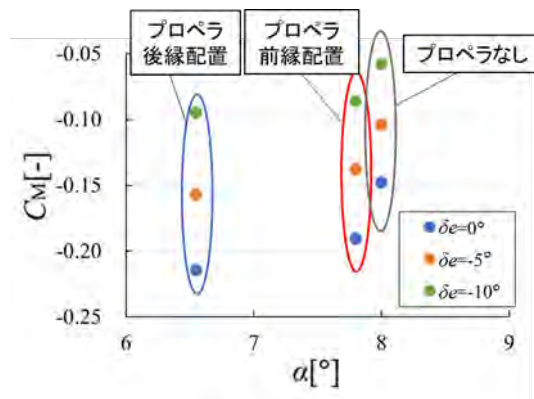


図 2 : プロペラ配置とエレベータ舵角ごとのピッチングモーメント係数の比較

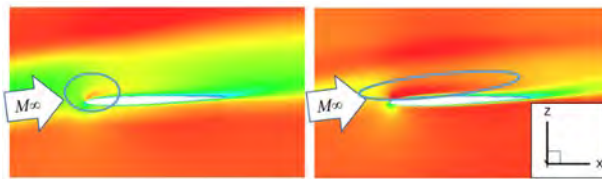


図 3 : 水平尾翼ハーフスパン位置での空間速度分布. (左) プロペラ前縁配置, (右) プロペラ後縁配置.

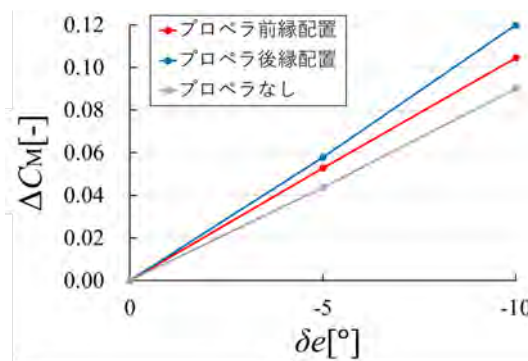


図 4 : エレベータ舵角 δe に対する, ピッチングモーメントの増分 ΔC_M .

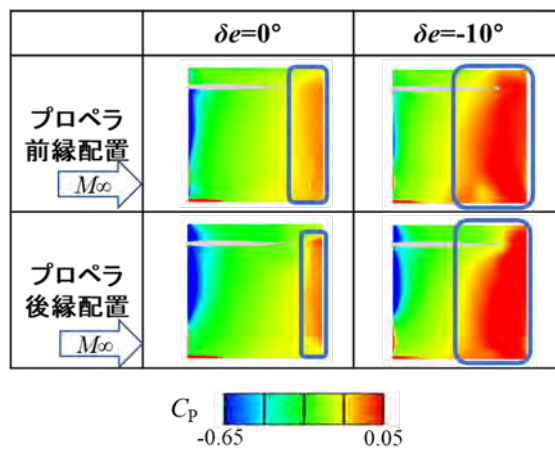


図 5 : $\delta e = 0^\circ$ のときの C_M との差分, 水平尾翼上面の表面 C_p 分布

3. 研究目標の達成状況

本申請研究において予想される成果を次の通りに挙げた。

- ① プロペラ後流を考慮した空力特性・データベースの取得
- ② エレベータ舵効きへのプロペラ後流への影響に関する知見
- ③ 運動特性に関する知見の獲得

項目①に関して、主翼や水平尾翼への影響性を中心に調査を行い、プロペラの統合位置の影響も含めて知識化することができた。運動計算に必要な空力データベースについては、さらに補完の余地があるが、適切な計算格子、計算モデルに関する知見は得ることができており、それらを活かして次年度課題の中で継続して実施する。②は無推力である MABE-2 に対して、新たな空力的な知見であり、MABE-2 による大気球試験後の、推力付き火星探査航空機概念を検討するための研究開発の進展に貢献できるものと期待している。③は、空力 - 飛行連成などの計算ツールは開発済みであることから、空力データベースの充足を図ったうえで、次年度課題の中で実施する。

4. まとめと今後の課題

申請研究では 2021 年度中、プロペラ後流の火星探査航空機のエレベータへの影響を調査した。その結果、プロペラを統合した際は頭下げ方向のピッチングモーメントが大きくなり、プロペラ後縁配置で最大となることが分かった。また、プロペラを後縁に統合した際に舵効きが大きくなることも分かった。今後は、他のエレベータ舵角についても同様の調査を行った後、空力データベースを充足し、飛行経路の最適設計を行う。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし。（投稿準備中 1 件）

著書

なし。

国際学会

[1] Nakamura, H., Horie, S., Kanazaki, M., Fujita., K., and Nagai, H., “Numerical Investigation: Influence of Propeller Wake on Mars Exploration Airplane’s Stability,” 18th International Conference on Flow Dynamics (ICFD 2021), CRF-40, Online, October 27, 2021.

国内学会・研究会等

- [1] 中村晴香, 堀江史郎, 金崎雅博, 藤田昂志, 永井大樹, 「火星探査航空機縦安定性へのプロペラ後流の影響」, 令和3年度 宇宙航行の力学シンポジウム, オンライン, 2021年12月.
- [2] 金崎 雅博, 谷口 翔太, 堀江 史郎, 安養寺 正之, 岡本 正人, 藤田 昂志, 永井 大樹, 大山 聖, 「MABE-2 の空力計測結果と飛行試験を支えた空力技術」, 4B04, 第65回宇宙科学技術連合講演会, virtual, 2021年11月.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP31APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022年07月26日提出

Numerical modelling of the particle temperature evolution during cold spray process

Chrystelle Bernard

東北大学学際科学フロンティア研究所 助教

Hidemasa Takana

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

The cold spray process emerges in the mid-1980s as a powerful additive manufacturing technology to bond together two (similar or dissimilar) metallic materials. Since then, the process investigates the bonding of other materials combination such as with ceramic, polymer, and composite.

The process involves the impact of micro-sized particles onto a substrate. The particles are accelerated in a de Laval nozzle by a pressurized heated gas. Thus, in addition to accelerate the particles, the gas will heat them. Although the particle velocity can be measured by a high-speed camera, it is more difficult to obtain an accurate evaluation of the particle temperature. A solution is to use numerical simulations, particularly Computational Fluid Dynamics (CFD). However, as particles are considered discrete objects, only an average estimation of the particle temperature is obtained (in addition to the particle velocity). If this value gives good insights of the metallic particle temperature, it is not the case for polymer due to their low thermal conductivity.

1.2 研究期間内の最終目標

The aim of this project is to identify the temperature distribution inside a polymer particle during its flight in the nozzle. The particle temperature is non-homogenous before its impact on the substrate. As polymers are strain rate and temperature sensitive materials, this will have considerable effect on their impact behavior.

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 新しい解析手法の開発(例)

Based on our previous research work, we evaluated the gas flow field (pressure, velocity, and temperature) and the particle velocity (and average temperature). To obtain the temperature distribution inside a polymer particle, a new simulation has been designed using COMSOL Multiphysics. This considers a particle of a given diameter isolated in the flow field. The time dependent gas temperature, pressure, and relative velocity are given as inlet boundary conditions obtained from our previous calculations using ANSYS/Fluent.

2.2 新しい現象の解明(例)

In this research, the particle temperature distribution has been elucidated for different particle sizes. As assumed, the temperature distribution in the polymer particle is not uniform (except for 10 μm) and a large temperature difference is observed inside the particle (around 50 K for 60 μm). This phenomenon will have considerable influence on the particle mechanical properties before its impact on the substrate. In addition, due to the presence of the particle, the flow field is disturbed with the apparition of vortexes in the particle bottom region. This will contribute to heat the back side of the particle.

3. 研究目標の達成状況

The temperature distribution inside one polymer particle has been elucidated for several diameters of Ultra-High Molecular Weight Polyethylene (UHMWPE) particles. The obtained results showed valuable insights of the particle temperature distribution and can be extrapolated to other kind of polymer materials. In addition, the developed models could be used for future calculations on the cold spray process (ANSYS/Fluent model) and the particle thermal gradient (COMSOL Multiphysics model).

4. まとめと今後の課題

The particle thermal gradient of a polymer particle has been identified assuming that the particle flow is sufficiently diluted in gas flow. However, does this assumption can stand ? In the case where the assumption of diluted phase is not valid anymore, then, particles will influence each other. It is the aim of future research to understand how particles will interact with each other in the nozzle.

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学 術 論 文 ・ 学 会 発 表 （ 発 表 予 定 含 む ） 学術雑誌（解説等を含む）

1. **C.A. Bernard**, H. Takana, G. Diguët, O. Lame, K. Ogawa, J.-Y. Cavallé, *Thermal gradient of polymeric particles during cold spray process*, Submitted to

Computational Particle Mechanics, July 2022

2. **C.A. Bernard**, H. Takana, O. Lame, K. Ogawa, J.-Y. Cavaillé, *Influence of the nozzle inner geometry on the particle history during cold spray process*, *Journal of Thermal Spray Technology*, Accepted April 2022, doi.org/10.1007/s11666-022-01407-y
3. **C.A. Bernard**, H. Takana, G. Diguët, K. Ravi, O. Lame, K. Ogawa, J.-Y. Cavaillé, *Thermal gradient of in-flight polymer particles during cold spraying*, *Journal of Materials Processing Technology*, 2020, **286**, 116805, doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2020.116805

著書

Not applicable

国際学会

1. **C.A. Bernard**, H. Takana, G. Diguët, O. Lame, J.-Y. Cavaillé, K. Ogawa, *In-flight thermal gradient of polymer particles during cold-spray process*, ICFD2021, Sendai, Japan, October 2021
2. **C. A. Bernard**, H. Takana, O. Lame, K. Ogawa, J.-Y. Cavaillé, *Nozzle design for polymer coating by cold spray process*, ELyT Workshop 2021, online, June 2021

国内学会・研究会等

Not applicable

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

Not applicable

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP32APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 13 日提出

ふく射熱遮蔽機能を有する消防装置の開発

岡島 淳之介

東北大学流体科学研究所 准教授

古川 琢磨

八戸工業高等専門学校産業システム工学科 助教

江目 宏樹

山形大学理工学研究科 准教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

本研究では，火災現場において火炎及び加熱壁面から放射され，延焼や火傷等の原因となっている熱ふく射を遮蔽できる消防装置の確立を目的とする．本研究の最適化水滴ミストによるふく射遮蔽を消防車両の自衛噴霧に応用することを検討し，噴霧による「水の節約」と「ふく射遮蔽」を同時に達成する技術の確立を目指す．将来的には，消防職員の可搬自衛噴霧装置など，広く消防職員の命・安全を守ることのできる技術への応用を目指す．

火災現場のような高温場において，「ふく射伝熱」は重要な伝熱要素となる．目に見える炎に加え，目に見えない熱ふく射も消火活動において多大な影響を持つ．この熱ふく射による延焼や火傷等を防ぐ消防設備の実現が望まれている．林野火災などの大規模火災ではふく射による延焼が支配的となり，本研究成果は特殊災害にも貢献可能である．

本研究では，これまで散水性能に特化し，設計されてきた消防設備において，ふく射遮蔽を議論するならば，水量の少ないミスト層のほうが，水量の多い水膜よりも，ふく射遮蔽性能が高いというパラダイムシフトを示している点に新規性及び革新性がある．現状の消防車両の自衛噴霧は，噴霧粒径が大きく，広範囲に水をかけ車両を冷却するには有用だが，ふく射遮蔽には寄与しない．ふく射遮蔽機能を有することで自衛噴霧の高機能化が可能になる．

ウォーターミストのようなふく射性媒体が高温場での対流-ふく射伝熱に及ぼす影響についてはこれまで報告されてきていない．その理由として，実際の火災場では火炎のスペクトル特性が時間的に変化する，物体の燃焼により発生するガス・煤の量やスペクトル特性の想定が困難である等，複雑な物理現象が混在していることから，ふく射性媒体が熱流動場に及ぼす影響のみを純粋に評価することが難しいためである．それでも，ふく射性伝熱が熱流動

場に及ぼす影響は無視できるものではないことから、解析の観点から主に様々な研究が行われている。

Kogawa らは正方形キャビティ内に非灰色吸収性ガスである常温空気を混入させた場合の自然対流に関する乱流解析を行い、壁面の放射率の違い・ガスによるふく射の吸収の有無が乱流渦構造を大きく変化させることを示している[Takuma Kogawa, Junnosuke Okajima, Astushi Sakurai, Atsuki Komiya, and Shigenao Maruyama, "Influence of radiation effect on turbulent natural convection in cubic cavity at normal temperature atmospheric gas", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 104, pp. 456-466, 2017.]. さらに Kogawa らは開放空間に吸収係数の異なるふく射性媒体を混入させた場合における鉛直加熱平板内の乱流解析を行い、吸収係数の違いにより境界層での渦発生が不規則に変化することを示している[Takuma Kogawa, Junnosuke Okajima, Atsuki Komiya, and Shigenao Maruyama, "Effect of gas radiation-depended natural convection on the transition of spatially developing boundary layers", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 177, 2021.].

上記のようにふく射性媒体は流動場を安定化・不安定化させる働きを持つ。これらを応用すれば非灰色吸収-散乱性媒体であるウォーターミストにより火災のような高温自然乱流場においてふく射熱の遮蔽のみならず、対流熱伝達を能動的に制御することが可能となり、スプリンクラーを始めとしたウォーターミストを用いた消火設備の高機能化が望める。

しかし、依然として多くの対流-ふく射の複合伝熱に関する研究では吸収性媒体・散乱性媒体のみを含む、灰色媒体として取り扱う、散乱は等方的であると仮定するなど、ふく射伝熱の観点からは限定的な状況での実験・数値シミュレーションが大半を占めていた。これらの仮定は、非灰色吸収-非等方散乱性媒体であるウォーターミストには適用できるとは言えない。

そのため、ウォーターミストによるふく射熱遮蔽や流動場の能動的制御の可能性を明らかにするためには、ふく射性媒体の吸収・散乱特性や、散乱の非等方性、非灰色性を考慮したふく射熱輸送解析コードを構築し、ウォーターミストを含んだ対流-ふく射の複合伝熱解析よりウォーターミストが熱流動特性に及ぼす影響を定量的に評価する必要がある。

1.2 研究期間内の最終目標

実際の火災場では火炎のスペクトル特性が時間的に変化する、物体の燃焼により発生するガス・煤の量やスペクトル特性の想定が困難である等、複雑な物理現象が混在している。そのために、数値シミュレーションの観点から問題を単純化し、ウォーターミストの混入が高温流動場に及ぼす影響のみを純粹に評価することを目指す。本研究の目的達成に向けて、非灰色吸収-散乱性媒体であるウォーターミストを混入させた場合の高温環境下での自然対流解析を行う。

本研究ではふく射伝熱が支配的な高温流動場を想定していることから、流動場内に混入するウォーターミストのふく射モデリング精度は解析結果に大きく影響を及ぼす。商用 CFD ソフトウェアにもふく射性媒体のモデリングや対流-ふく射の複合解析は可能であるが、ふく射性媒体の取り扱いが吸収のみ・等方散乱など限定的である、ふく射輸送解析には簡易的な近似モデルのみが導入されている等、ふく射輸送解析に優れたものは多くない。そこで本研究では、機能の拡張やカスタマイズが比較的容易である OpenFOAM をカスタマイズし、新た

に散乱性媒体，非等方散乱現象，ふく射性媒体の非灰色性を考慮できるふく射輸送解析ライブラリを実装する．始めに本研究で実装したふく射輸送解析コードの精度検証を複数実行し，高精度ふく射輸送解析が可能であるかどうかを詳細に調査する．続いて実装したふく射輸送解析ライブラリを用いて非灰色の吸収・非等方散乱性媒体であるミストを含んだ場合の対流-ふく射の複合解析を行う．そして，乱流場において非等方散乱性媒体がどのような影響を及ぼすかを厳密且つ詳細に明らかにするために乱流の直接数値シミュレーションを行う．

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 共同研究の意義

本研究では，ミストの熱流動及び蒸発現象に見識の深い岡島，ふく射伝熱と対流熱伝達の複合解析を扱える古川，散乱性媒体のふく射伝熱に強い江目で複雑な物理現象が混在している火災現象に取り組む点に学術的意義がある．

2.2 対流-ふく射の複合伝熱解析

本研究ではミストの水粒子直径は $2\ \mu\text{m}$ 又は $10\ \mu\text{m}$ で一定とし，対流-ふく射の複合伝熱解析を行った．解析モデルを図 1 に示す．解析領域のアスペクト比は $x:y:z = 4:1:4$ に設定されており， x 及び z 方向は周期境界条件が適用されている．下部の加熱壁温度 T_h は 1200K ，上部の冷却壁温度 T_c は 300K に一定に保たれている．解析領域内には吸収-散乱性媒体であるミストが一様分散しており，蒸発は考慮しない．また，計算コスト削減のため，Plank-mean approximation (PMA)により黒体エネルギーが均等になるように 4 バンドに分割されたウォーターミストのスペクトル特性を使用した．

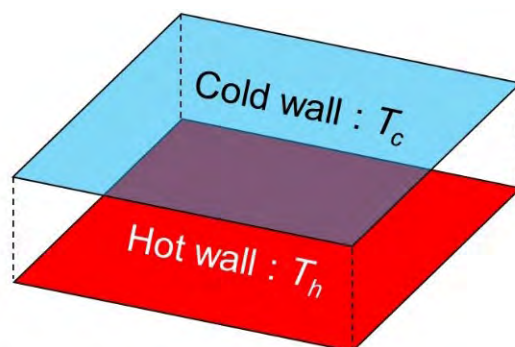


図 1：解析モデル

計算結果として，冷却壁近郊での Nusselt 数を Table 1 に示す．ふく射熱伝達特性は水粒子直径が $2\ \mu\text{m}$ であるミストの方が，ミストがない系と比べて約 27% 熱ふく射遮蔽に貢献している．ふく射熱抑制の要因の 1 つとして水粒子の異方性散乱特性が挙げられる．粒子の散乱特性は粒子が大きいほど前方散乱成分が支配的となり，ふく射熱遮蔽に寄与しない．一方，水粒子直径 $2\ \mu\text{m}$ のミストを用いた系の対流熱伝達特性はミストのない系と比べて 2 倍以上促進されている．ふく射 Nusselt 数は減衰係数と幾何学的距離の積で表される光学厚さの増加に伴い減少傾向を示すのに対し，対流 Nusselt 数は対流伝熱による影響が大きいレイリー数において光学厚さの増加に伴い増加傾向を示すことが知られている．ウォーターミストの

光学厚さを検証したところ、高温場で支配的となる近赤外線領域での光学厚さの違いが大きく、本研究ではミストのふく射熱吸収によって駆動される自然対流が対流熱伝達促進の要因であると考えられる。

Table 1 Nusselt number at the cold wall.

Condition	Nu_{conv}	Nu_{rad}	$Nu_{conv} + Nu_{rad}$
No mist	1.55×10^2 (100%)	2.02×10^4 (100%)	2.04×10^4 (100%)
Mist ($d_{p,w} = 2.0$)	3.65×10^2 (235%)	1.47×10^4 (73%)	1.51×10^4 (74%)
Mist ($d_{p,w} = 10$)	3.34×10^2 (215%)	1.69×10^4 (83%)	1.72×10^4 (84%)

3. 研究目標の達成状況

本研究は、対流-ふく射の複合伝熱解析を行い、ウォーターミストが火災乱流場に与える影響について評価した。ウォーターミストを用いた消防装置開発における実用環境下に近い場合のふく射伝熱現象に関する理解が深まった。これらの知見を用いて、可搬自衛噴霧装置や消火ホースなど、消防職員の命を守る技術の開発に貢献できる。

4. まとめと今後の課題

本研究では乱流自然対流の熱伝達特性におけるふく射熱伝達の役割を明らかにするために、OpenFOAMによる吸収-非等方散乱性媒体であるミストを含む対流-ふく射の複合解析を行った。解析結果より、ふく射物性の違いは高温乱流場における対流・ふく射熱伝達特性に影響を及ぼすことが示され、これらの要因が光学厚さ・前方散乱強度によるものである可能性を示した。

本研究では、現状、水滴の蒸発の影響を無視している。そこで今後、周囲環境からの伝熱のミスト層への影響の把握のため、水滴の経時変化に対するスペクトル応答評価を行う。また、ミスト全体の蒸発モデルの実装に先駆け、単一水粒子の蒸発過程と共に、蒸発過程における水粒子のふく射特性の変化を再現できるコードを実装する。ふく射伝熱を考慮した単一水粒子の蒸発過程に関する知見を得た後、ミスト全体の蒸発モデルの実装を目指す。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

H. Gonome, Y. Takagi, T. Nagao, and M. Ono: Effect of soot on thermal radiation shielding performance of water mist, *Fire Safety Journal*, Vol. 123, (2021), p. 103363 (8 pages), <https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2021.103363>.

江目宏樹, 鷹木勇人, 長尾太一, 小野泉帆, 古川琢磨, 守谷修一, 岡島淳之介: 火災現場におけるふく射熱伝達- ウォーターミストによるふく射熱遮蔽-, *エアロゾル研究*, Vol. 36, (2021), pp. 170-175, <https://doi.org/10.11203/jar.36.170>.

国際学会

H. Gonome, Y. Takagi, T. Kogawa, and J. Okajima: Radiation and convection coupling calculation for development of thermal barrier fire extinguishing devices, Proceedings of the 21st International Symposium on Advanced Fluid Information, Online, (2021), CRF-1, pp. 2-3.

Y. Takagi, T. Kogawa, and H. Gonome: Active Control of Thermal-Flow Field by Thermal Radiation in Participating Medium, Proceedings of the 18th International Conference on Flow Dynamics, Online, (2021), pp. 819-820.

国内学会・研究会等

江目宏樹: 散乱性媒体によるふく射制御, 山形化学工学懇話会講演会, 山形, (2021).

鷹木勇人, 古川琢磨, 江目宏樹: 火災流動場の能動的制御に向けた散乱性媒体の熱対流解析, 第 58 回日本伝熱シンポジウム, Online, (2021), BPA1401 (1 pages).

鷹木勇人, 古川琢磨, 岡島淳之介, 江目宏樹: ウォーターミストによる乱流場制御の検討, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2021, Online, (2021), (5 pages).

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP33APR21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 26 日提出

非普遍的な乱流場における乱流エネルギー・スカラ輸送機構

に関する基礎研究

伊藤 靖仁, 長田 孝二, 渡邊 智昭, 岩野 耕治
 名古屋大学大学院工学研究科 教授, 教授, 准教授, 助教

酒井 康彦

名古屋産業科学研究所 研究員

Yi Zhou

南京理工大学 研究員

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

近年, 完全発達乱流を基にした理論やスケーリング法則が適用できない非普遍的な乱流場に関する研究が盛んにおこなわれている. 本研究グループでは昨年度まで「乱流・非乱流共存流動場における流動構造とエネルギー・スカラ輸送機構」というテーマで研究を行ってきた. その結果, そのような流れ場では通常の乱流が有する普遍的性質を有さない乱流の存在を明らかにしてきた. しかし統計解析は行われたものの, その物理現象的解釈やスカラ輸送機構の詳細までは解明されていない. そこで本研究では, 様々な流れ場に対する数値シミュレーションを行い基礎特性を取得するとともにその特徴構造を見出すことを目的とする. また乱流エネルギー減衰と深く関連する平衡性やエネルギーとスカラの相似性にも着目し, 普遍的性質が見られる完全乱流との相違を明らかにする.

1.2 研究期間内の最終目標

非普遍的な乱流場における乱流エネルギー・スカラ輸送機構を明らかにする. 具体的にはレイノルズ数が低い格子乱流場や完結的な流れ場である物体後流流れや自由せん断乱流場, また圧縮性流体を対象とする. さらに得られた知見をもとに, 既存の乱流モデリングの修正および発展を目指す.

2. 研究成果の内容

本研究の目的を達成するためには、得られるデータに限界がある実験研究や乱流モデルを用いた数値シミュレーションではなく、モデルを使わない直接数値計算（Direct numerical simulation: DNS）による流れ場の再現が必要不可欠である。しかしそのためには通常のワークステーションなどでは現実的ではない大規模かつ高速なコンピュータが必要とある。そこで本研究を東北大学流体科学研究所と共同で実施し、同研究所のスーパーコンピュータを利用して流体シミュレーションを実行した。

本報告では格子乱流場(低レイノルズ数の場合)における研究結果について述べる。図1に計算領域の概略図を示す。格子間隔 M に対して、主流方向長さが $32M$ 、鉛直およびスパン方向長さが $6M$ であり、乱流格子が流入部から $2M$ の位置に設置されている。格子間隔と主流方向速度に基づくレイノルズ数 Re は 5000, 9000, 15,000 とした。

図2に乱流エネルギーの減衰係数 C_ε と乱流レイノルズ数 Re_λ の関係を示す。図より、 $Re=15000$ の場合にはほぼ全領域で C_ε が一定となるのに対して、 $Re=5000$ の場合には下流域でも一定とならず Re_λ に反比例する分布となることがわかる。そこでこの原因を明らかにするために、速度変動差に対する二次構造関数による解析を行った。図3および図4に、構造関数に現れる移流項 (A)、非線形項 (I)、および粘性項 (D) の分布を示す。なお横軸はマイクロスケール λ で無次元化されており、縦軸は、図3は粘性消散率で、図4は減衰係数に現れる L/u_{rms}^3 で無次元化されている。ここで L は積分スケール、 u_{rms} は主流方向速度変動の RMS 値である。図3において、非線形項も含めた全ての各項の寄与が主流方向位置に寄らないことから、乱流エネルギーの減衰係数 C_ε が一定とならない理由是非平衡性ではないことがわかる。一方図4においては、 $Re=5000$ の場合には、移流項の寄与が主流方向に対して変化することがわかった。つまり、レイノルズ数が低い場合に C_ε が一定とならない原因は、移流項の寄与が主流方向に対して変化するためであることが明らかになった。

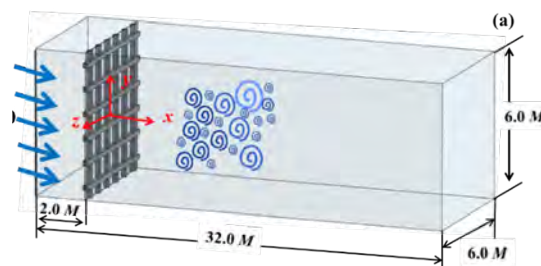


図1：計算領域の概略図

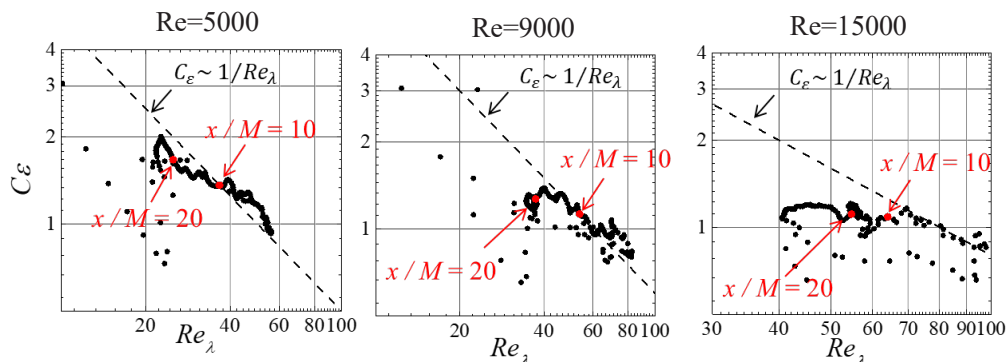


図2：乱流エネルギーの減衰係数 C_ε と乱流レイノルズ数 Re_λ の関係

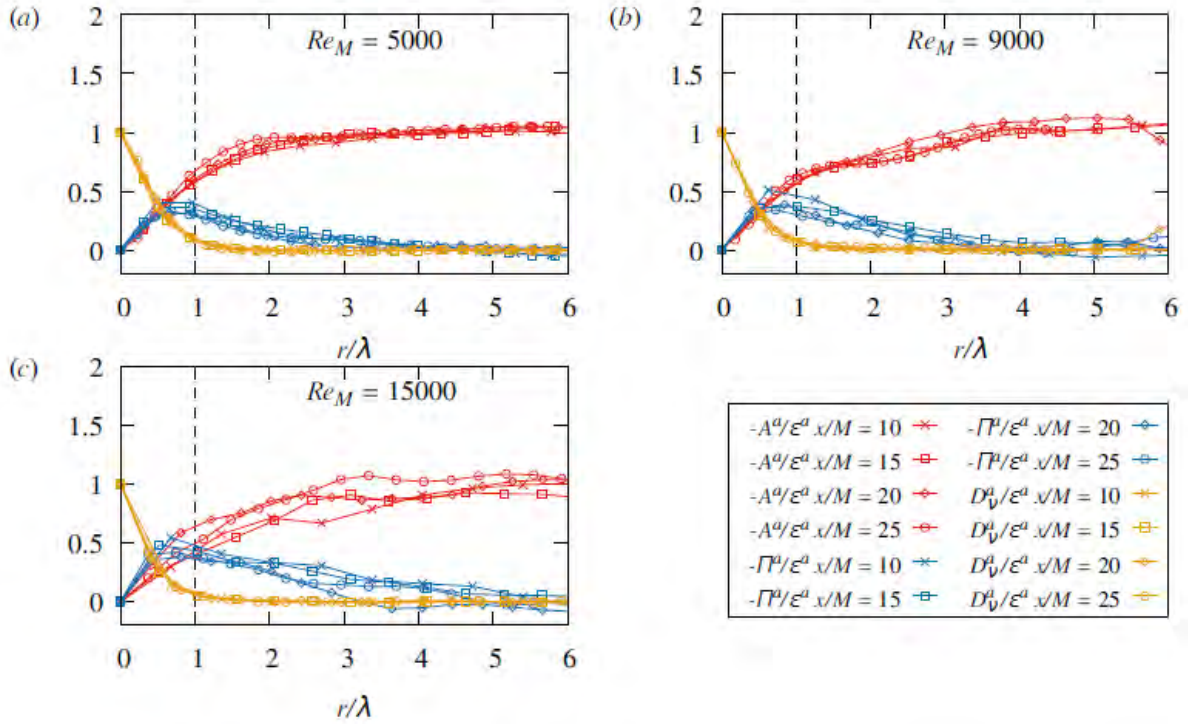


図 3：構造関数に現れる各項の距離に対する寄与（粘性消散率で無次元化された場合）

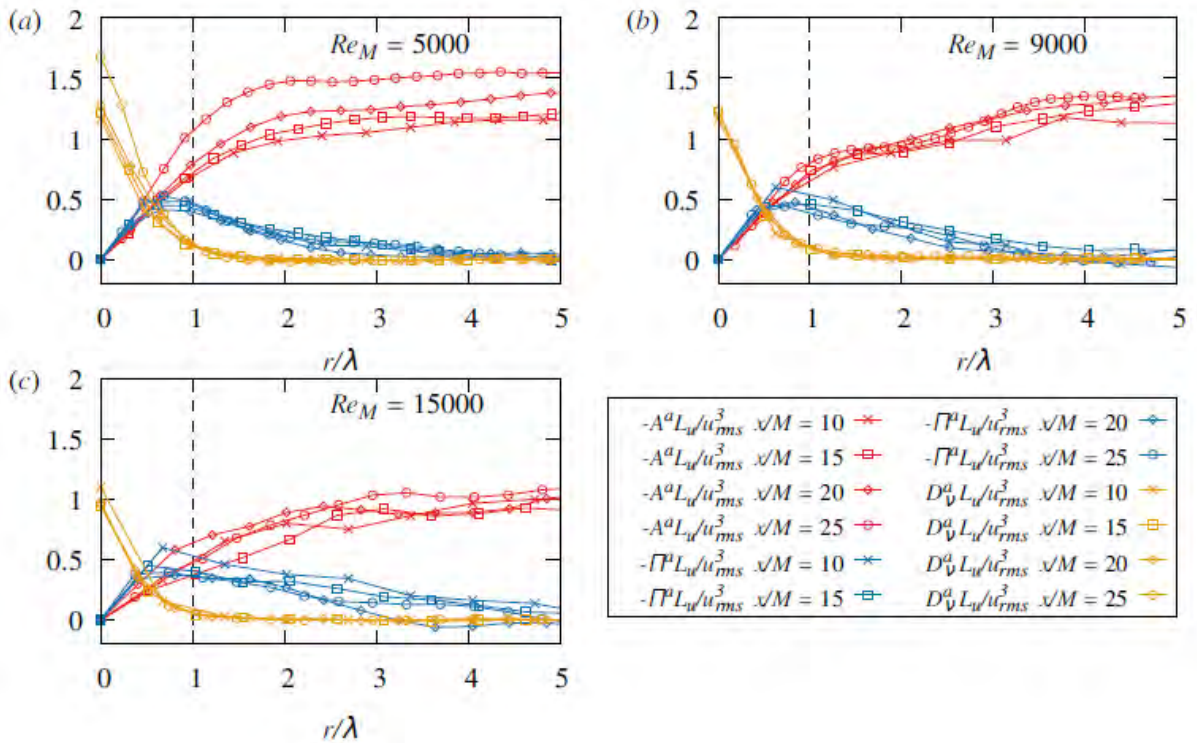


図 4：構造関数に現れる各項の距離に対する寄与（ L/u_{rms}^3 で無次元化された場合）。

3. 研究目標の達成状況

プロジェクトの1年目である本年度は、平行棒後流、格子乱流場や混合層流など様々な流れ場に対する数値シミュレーションプログラムを構築するとともに、構造関数を用いた解析を

実施するなど、おおむね研究は順調に進捗したと言える。

4. まとめと今後の課題

本年度の研究から、レイノルズ数が低い格子乱流場における乱流エネルギー減衰挙動と平衡性の関係をあきらかにした。また本報告には記載していないが、平行棒後流における速度変動パワースペクトルの挙動やその乱流モデリングに関する考察を行った。次年度は衝撃波を伴う場に対するプログラムの構築や、スカラ場の拡散減衰挙動に関する研究も実施する予定である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）、著書

なし

国際学会

[1] Y. Zhou, Y. Ito, K. Nagata, T. Watanabe, K. Iwano, T. Hattori, Y. Sakai, Turbulent energy transport in wakes behind bars and grids, *Proc. of the 21st International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2021)*, Sendai

[2] M. Wang, Y. Ito, T. Okawa, K. Iwano, Y. Sakai, Numerical Investigation about Inverse Cascade Phenomenon in Mixing Layer, *Proc. of the 18th International Conference on Flow Dynamics (ICFD-2021)*, オンライン, (2021), No. OS15-7/4 pages.

国内学会・研究会等

[3] M. Wang, Y. Ito, Y. Yurikusa, Y. Sakai, K. Iwano, The relation between dissipation and the scale-by-scale transport in grid-generated turbulence, 2021年度日本機械学会年次大会, オンライン, (2021), No. S055-22/4 pages.

[4] 汪 沐陽, 百合草 拓哉, 岩野 耕治, 酒井 康彦, 伊藤 靖仁, 格子乱流でのスカラの逆カスケード方向の輸送現象に関する研究, 日本流体力学会年会 2021, オンライン, (2021), No. 507/4 pages.

[5] 汪 沐陽, 大川 拓己, 岩野 耕治, 酒井 康彦, 伊藤 靖仁, 乱流混合層におけるエネルギーおよびスカラの渦スケール間輸送機構の解明, 第35回数値流体力学シンポジウム, オンライン, (2021), No. A09-3/4 pages.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01JUN21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.06～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 27 日提出

同軸円筒 MHD エネルギー変換機内の 3 次元電磁流体解析

高奈 秀匡

東北大学流体科学研究所 准教授

佐々木 亮

筑波大学理工情報生命学術院 M2

藤野 貴康

筑波大学システム情報系 准教授

小林 宏充

慶應義塾大学法学部物理学教室 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

持続可能なエネルギー社会の実現に向け、風力発電の更なる導入拡大が望まれている。それに応えるべく風力発電のコスト低減をもたらす風力エネルギーのより一層の高度利用技術の開発が期待されている。研究代表者は、風力発電機稼働時の余剰風力エネルギーの回収を可能とする回転同軸二重円筒型 magnetohydrodynamic (MHD) エネルギー変換装置の機構を提案している。この変換装置は風車軸に直結され、装置内部に充填した液体金属と外部磁場との相互作用 (MHD 相互作用) によって生じるローレンツ力により軸回転トルクを制御し、余剰風力時にも軸回転速度を定格速度に保つことを狙う。それと同時にファラデーの電磁誘導の法則に基づき電気出力を得ることを狙う、画期的な変換装置である。本変換装置は、風力発電のみならず、自動車の回生ブレーキなど、回転機器へのさらなる応用の可能性を秘めている。

本研究では、実風車での実証試験を想定した大型の同軸円筒 MHD エネルギー変換装置の設計指針を提示するために、回転同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置内の電磁流体现象の学理的理解を 3 次元電磁流体解析により深化することを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

磁場が印加されていない状況で、軸方向周期境界条件の direct numerical simulation (DNS) と軸方向に壁を有する large eddy simulation (LES) と比較して、上下壁の影響と解像度の

影響を調べ、必要最低限の軸方向距離と解像度を決定する。軸方向のセル構造に関する学理として、軸方向が長い場合についての検討も行うが、本研究の目的である風車や流体機器への応用という観点においては、アスペクト比が 1 程度の流れ場を主に検討する。これによりアスペクト比の影響も明らかにする。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 Taylor-Couette MHD 乱流現象の解明

本研究が対象とする流れ場は、Taylor-Couette 流と呼ばれる古典的な流れ場であり、不安定性解析をはじめ古くから多くの研究があるものの、3 次元電磁流体流れの数値シミュレーションによる研究は、研究代表者が知る限りこれまでほとんど例がない。

その一方、Taylor-Couette 流の研究は、最近特に注目されている。Singh と Prigent (JFM, 2021) は、突然回転させた場合や止めた場合の流れ場の様子を PIV 計測し、それぞれのエネルギー生成の違いを明らかにしている。粘弾性流における Taylor-Couette 流の研究は、Lacassagne ら (JFM, 2021) や Kang ら (JFM, 2021) による渦構造の変化に関する興味深い報告がなされている。

このような世界の研究者が再び注目をし始めているこの時期に Taylor-Couette MHD 流れという新しい領域を開拓することは非常に意義がある。また、その回転機器へ適用はこれまで例がなく、世界の流体工学研究に新し視点を与える。

本研究では、まず軸方向に長い、アスペクト比 10 での層流における検討を行った。磁場を印加しない場合、軸方向に 10 個の Taylor 渦が形成された。軸方向磁場を強くしていくと、流れと反対方向に作用するローレンツ力により、流れが減速され、Taylor 渦が 8、6、4、2 個へと減少した。興味深いことに、内円筒にかかるトルクは、磁場が印加され、Taylor 渦が少し抑制された場合に最小になることがわかった。

次に、内円筒速度、半径幅、動粘性係数で定義されるレイノルズ数 8000 の乱流条件において、軸方向に周期境界条件を用いた DNS の結果と比較し、LES の格子解像度の検討を行った。平均流速はアスペクト比 10 の場合、軸方向に平均することで、DNS の結果とよく一致し、乱流強度は、内円筒と外円筒付近にピークを持つ分布となるが、そこでの強度にわずかな差があるものの全体的には良い一致を示す格子解像度が確認できた。この解像度において、磁場強度を増加させることで、層流の場合と同様、Taylor 渦の減少を確認したが、乱流の場合の方が、減少しにくいことがわかった。これは乱流による速度乱れがローレンツ力に対抗し、Taylor 渦の抑制を阻むからである。

次に、実験装置を想定したアスペクト比 1 かつレイノルズ数 8000 の場合について検討を行った。その結果、2 つの Taylor 渦が存在し、磁場強度を増加させると渦電流がその Taylor 渦に沿って形成された。乱流中の渦管は磁場強度が弱い場合は円周方向に長く伸びた軸を持っているが、磁場強度が強くなると磁場方向に渦管の軸が揃う quasi-two-dimensional (Q2D) 構造が形成されることがわかった。さらに内円筒付近にできる円周方向に長く伸びたストリーク構造は、磁場強度が増加すると三又上の高速ストリークに変化することがわかった。

3. 研究目標の達成状況

3 次元 MHD 乱流計算の実装ができ、異なるアスペクト比や様々な磁場強度における計算が

可能となった。当初の研究目標は、かなり達成できている。

4. まとめと今後の課題

流体計算に適したスーパーコンピュータを利用することで、高速かつ多くの条件での結果が得られ、研究が大いに進展した。上記のような興味深い結果が多く得られている一方で、低磁場の計算において軸方向に非対称な定常分布が得られることがあり、その原因を究明中である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

佐々木亮，藤野貴康，高奈秀匡，小林宏充：層流条件下での同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置の発電特性に関する数値解析，電気学会論文誌 B，142 巻，5 号（2022），pp.268-274

国際学会

Ryo Sasaki, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana, Hiromichi Kobayashi: Large Eddy Simulation of Liquid Metal Flow in Co-axial MHD Energy Conversion Device, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, Japan (2021)

国内学会・研究会等

佐々木亮，藤野貴康，高奈秀匡，小林宏充：MHD 相互作用下における Taylor-Couette 流れの三次元数値シミュレーション，第 35 回数値流体力学シンポジウム，オンライン開催，(2021)

佐々木亮，藤野貴康，高奈秀匡，小林宏充、「層流条件下での同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置の発電特性に関する数値解析」，電気学会 新エネルギー・環境研究会，オンライン開催，(2021)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

令和3年，新エネルギー・環境技術委員会若手優良発表賞受賞，日本電気学会新エネルギー・環境技術委員会

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01SEP21
研究種別	公募共同研究
利用期間	2021.09～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 12 日提出

スキルミオン安定性の 3D シミュレーションと磁歪現象の機構

鯉淵 弘資

仙台高等専門学校 特命教授

内一 哲哉

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

スキルミオン(Sky) は将来のスピン트로ニクスデバイスの開発に向けて多くの注目を集めている。しかし, Sky を個別に自由に生成消滅させるような基本技術が確立されていないため, 多くの基礎及び応用研究がなされている。本研究では, 最近注目されている機械的応力による Sky の安定化または不安定化現象に対して Finsler 幾何(Finsler geometry:FG)モデルという申請者メンバーらが開発研究してきた新しい手法を適用し, 3次元の4面体格子を用いた Monte Carlo 計算によってその安定化メカニズムを解明する。更に, これをとおして, 磁歪現象の機構の解明を目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

日本とドイツのグループによって独立に同じ時期に発表された実験結果

(doi: 10.1038/ncomms9539, doi: 10.1103/PhysRevLett.115.267202)

を FG モデルで再現することを目標とした。なお, その実験結果の概要は、「MnSi というカイラル磁石に低温で磁場をかけると発生する Sky に対して、磁場と垂直(平行)に圧縮応力をかけると Sky が安定化(不安定化)する」というものであり、この安定化・不安定化の理解が Sky の生成と消滅の技術につながるという意味を持つ。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 本申請研究の意義

応力による安定化・不安定化は、一般の磁性材料における磁歪現象の Sky バージョンであり、これまでの多くの数値的な研究でも、従来の磁歪現象の理論をカイラル磁石に適用するという方法が用いられてきた。しかし、この方法は、実験結果と合うようにまたは実験結果から求めた多くのパラメータを仮定しなければならないため、万能ではあるが、なぜそのよ

うなパラメータの値になるのかというようなことは試行錯誤によるほかはなく、実験結果の予言、いわゆる逆問題、広く考えれば最適設計、なども論理的には望めない。

一方、これらの実験とは別に、FeGe というカイラル磁石の薄い膜に、引っ張り応力を与えると、その膜面に現れた Sky の形がその引っ張り応力方向に細長く伸びるという実験結果が報告された (doi: 10.1038/NNANO.2015.113)。この理由として、カイラル磁石特有のヘリカル秩序(図 1(a))

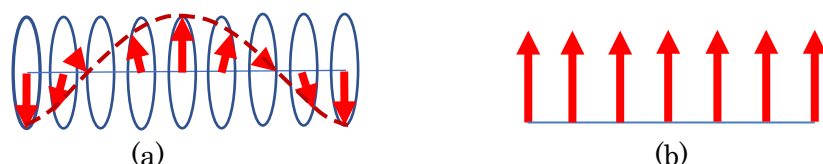


図 1 (a) ヘリカル秩序と(b)強磁性秩序. 矢印はスピン(あるいは分子レベルの磁化)

を記述するジャロシンスキー・守谷相互作用(DMI)の相互作用定数が異方的 (=方向依存) になるからという数値計算も同時になされた。更に、この研究とは別に、DMI の相互作用定数の異方性が原因とする研究結果も報告された(doi: 10.1038/srep13302)。

そこで、Sky はこの変形が大きくなるとストライプに変化することに着目すればこの変形現象は不安定化現象とみることができる。そうすると、この変形現象は上記の安定化・不安定化と同じ現象とみることができる。一方、この Sky の応力による変形現象は、FG モデルの方法によって、応力による DMI 相互作用定数の異方化という観点から既に研究されている (doi: 10.1103/PhysRevB.104.024402)。従って、もし、この FG モデルで Sky の安定化・不安定化現象がうまく説明できれば Sky の磁歪現象が DMI の異方性という観点から FG モデルで研究可能ということになるから、一般の磁歪現象も FG モデル化の方法で攻略可能というより大きな目標も見えてくる。これがこの研究の意義である。

2.2 得られた結果

FG モデルという微分幾何を含む広い意味の幾何学的なモデル化の方法で、「応力によって DMI 相互作用定数が異方的になり、その結果として Sky の応力による安定化・不安定化現象が説明できる」という内容で、上記 1.2 の文献で発表された実験結果と consistent な数値計算結果を示すことができた。論理的には、「応力によって DMI 相互作用定数が異方的になる」ことを幾何学的に示せたことに意味があるが、その結果を用いて実験結果を説明できないと意味がなくなってしまうので、「応力による Sky の安定化・不安定化現象が説明できる」ことが重要である。

3. 研究目標の達成状況

達成状況としては「おおむね良好」である。「おおむね」の意味は、タイトルに含まれる「磁歪現象の機構」の解明までは至らなかったことである。しかし、磁歪現象は広い範囲のテーマであるためそのすべてを含めての解明は難しいこと、更に、FG モデル化の方法でひずみ場という新しい自由度を導入して「応力によって DMI 相互作用定数が異方的になる」を示せたことで、この FG モデル化の方法は Sky の磁歪現象のモデルと考えられる。これらのことから、実際は「かなり良好」と考えている。

4. まとめと今後の課題

最後に、FG モデルの物理的側面と今後の課題を述べる。Sky は、強磁性相互作用(FMI)とDMIの強さが拮抗したところで発生する。ここで、FMIは図1(b)のようにスピンをある方向にそろえようとする力であり、DMIはすでに述べたようにスピンを図1(a)のようなヘリカル秩序にする力である。ここで、SkyのFGモデルでは、MnSiのような材料に応力を加えると、このDMIの力が応力の方向とそれと垂直な方向で違ってくるのはなぜかを説明する。それは、DMIエネルギーはDMI定数(示強変数) \times ヘリカル秩序エネルギー(示量変数)で表わせるが、このDMI定数(示強変数)の部分が応力によって方向依存に変化することで、ヘリカル秩序エネルギーの部分も間接的に影響を受けて、全体としてエネルギー的に減少するからである。このような物理的に自然なことが実現されるのがFGモデルである。

既に述べたようにSkyは応力による磁化の異方性に影響される。この場合、非常に弱い外部磁場または外部磁場ゼロでSkyが発生する。このような性質は、一般には等方的なFMI相互作用だけでは表わされない。z軸方向に磁化がそろうためには一般には複雑で現象論的(=実験結果からパラメータを決める)な磁気弾性相互作用が必要になる。しかし、FGモデルの考え方をFMIに適用すれば、応力下の材料において、外部磁場ゼロあるいは非常に弱い磁場でSkyが発生するような現象も、現象論的な磁気弾性相互作用なしで物理的に自然に説明できる可能性がある。また、その機構は磁歪現象とも共通になる。今後の課題は、これらの現象をFGモデルで研究することである。

5. 研究成果リスト (※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

[1] Sahbi El Hog, Fumitake Kato, Satoshi Hongo, Hiroshi Koibuchi,, Gildas Diguët, Tetsuya Uchimoto, Hung T. Diep: The stability of 3D skyrmions under mechanical stress studied via Monte Carlo calculations, Results in Physics 38, 105578 (2022) <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2022.105578> (open access).

国際学会

Hiroshi Koibuchi, Satoshi Hongo, Fumitake Kato, Sahbi El Hog, Gildas Diguët, Tetsuya Uchimoto, Monte Carlo Studies on 3D Skyrmion Stability and Shape Deformation under Uniaxial Stress, Proceedings of Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, Sendai, October 28, 2021

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

特になし

I. 研 究 成 果 概 要

共同研究

課題番号	CL02APR21
区分	共同研究
研究期間	2021/04/01 ~2022/03/31
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 26 日提出

飛行する回転中空円筒の実験と数値解析
Experiment and Simulation of a Rotating Hollow Cylinder in Flight

平田 勝哉*†, 石本 淳**††
中野 政身***, 野口 尚史*, 田中 大貴*
*同志社大学理工学部, **東北大学流体科学研究所
***東北大学未来科学技術共同研究センター
†申請者, ††所内対応教員または所外対応研究者

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

一般に, 高レイノルズ数における三次元物体を過ぎる流れは航空力学や機械工学, スポーツなどのさまざまな分野で重要であるが, 二次元物体と比較すると研究も少なく, 不明な点も多い. 3次元物体の基本構造としては球や円板などの軸対称物体が挙げられる. ここではパイプを取り上げ, さらに回転している状態を考える.

目的としては, 回転しながら飛行するパイプの飛行メカニズムを空気力学的な観点から明らかにすることを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

射出装置による精密な投擲を行い, より詳細なモデルの軌道・姿勢を得る. 数値解析では実験と同様の条件で3次元シミュレーションを行い, モデル周囲の詳細な流れを得る.

2. 研究成果の内容

2.1 モデルに作用する空力特性の解明

射出装置を完成させた. この装置を用いて実験を行うことで, 広い迎角範囲での多数の実験データを得ることが出来た. そしてそれらのデータを運動解析することで, モデルに作用する揚力, 抗力, 空力モーメントと迎角, 角速度との関係性を解明した.

2.2 数値解析によるモデル周囲の詳細な流れの解析

数値解析では実験と異なる条件で3次元シミュレーションを行い, 結果より得られたプログラムの問題点についての改善を行った.

3. 研究目標の達成状況

射出装置を使用することで、広い迎角範囲での多くの飛行データをとることが出来た。これらのデータを運動解析することで、モデルに作用する流体力(揚力/抗力)、モーメントを算出し、流体力やモーメントがモデルの軌道にどう影響しているかを確認できた。数値解析においてはプログラムコードのミスを発見し、改善を行った。

4. まとめと今後の課題

本年度の活動で、広い迎角の範囲で、より精密、詳細な飛行パイプに働く流体力やモーメントを得ることが出来、それらがパイプの軌道にどう影響しているかを確認できた。数値解析においては観測実験とパラメータを合わせたシミュレーションを行い、いくつかコードにミスを見つけて改善を行った。現在結果が出ているのは一例のみであるため、今後さまざまなパラメータで数値解析を行い、計算することが望まれる。今後、異なる形状のパイプを作成し、形状効果における空力特性について調査する予定である。

5. 研究成果 (*は別刷あり)

1) 学術雑誌 (査読つき国際会議, 解説等を含む)

なし

2) 国際会議・国内学会・研究会・口頭発表等

*[1] Yusuke Naito, Hirochika Tanigawa, Jun Ishimoto, Masami Nakano, Takashi Noguchi, Katsuya Hirata: “Experiment and Numerical Analysis of a Rotating Hollow Cylinder in Free Flight”, SimHydro 2019 [2019.6.12-14, Nice], paper 65(2019).

[2] Yusuke Naito, Hirochika Tanigawa, Jun Ishimoto, Masami Nakano, Takashi Noguchi, Katsuya Hirata: “Experiment and Simulation of a Rotating Pipe in Flight”, Sixteenth International Conference on Flow Dynamics, Proceedings of the Fifteenth International Symposium on Advanced Fluid Information[2019.11.6-8, Sendai], pp.174-175.

[3] Yusuke Naito, Hirochika Tanigawa, Jun Ishimoto, Masami Nakano, Takashi Noguchi, Katsuya Hirata: “On a Rotating Hollow Cylinder in Flight”, The 19th International Symposium on Advanced Fluid Information, CRF-74(2019) [2019.11.6-8, Sendai], pp.174-175.

[4] 内藤 悠介, 谷川 博哉, 中野 政身, 平田 勝哉: “回転飛行パイプの屋外観測と数値解析”, 日本機械学会 2018 年度年次大会, 日本機械学会 2018 年度年次大会講演論文集 [2018.9.9-12, 吹田], S0510101, pp.1-5.

3) その他 (特許, 受賞, マスコミ発表等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL04APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 26 日提出

超低レイノルズ数流れにおける数值的・実験的研究による

非定常空力現象の解明

下山 幸治, 大林 茂
 東北大学流体科学研究所 准教授, 教授
 佐々木 大輔, 岡本 正人, 赤坂 剛史
 金沢工業大学工学部 教授, 教授, 准教授
 高橋 俊
 東海大学工学部 准教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください）

近年注目を集めているドローンを初めとして, 超小型航空機のような用途での使用が注目されている. その一方, 運用時間の制限や安定性の問題等が明らかになっており, 超低レイノルズ数域における非定常空力特性を理解することで解決することが期待されている. 超低レイノルズ数の流れ場においては, 流れ場が複雑であり, レイノルズ数や形状の相違によって空力特性が大きく変化することが知られている. そこで, 小型ドローンの性能向上・安定性向上を実現するために, び数値解析を用いて超低レイノルズ数域における非定常空気力学特性, 特に動的特性について明らかにすることが目的である.

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 風洞実験との比較

物体がヒービング運動した時の流れ場が実際の現象として正しく再現できているかを確認するために, レイノルズ数 2800 の流れ場において, ヒービング運動する平板を対象に直交格子上で流体解析を実施した. その解析結果を, ヒービング風洞による可視化結果と比較した. ヒービング風洞では, 翼がヒービング運動するのではなく, 撮影機器と共に風洞自体が動くため, 流体解析との比較に適した画像を取得することが可能である. 実験による可視化と解析による可視化の比較の結果, 流れが平板に沿って流れることや剥離渦が見られること等, 大きな現象を実験と同じく捉えられているから, 解析結果は実際の流れ場に近いたことが示された. そのため, 本解析手法はヒービング運動時の物体周りの解析に妥当である.

2.2 コルゲート翼の動的空力特性

本解析手法を用いて、平板とコルゲート翼の垂直力係数の比較を行った。比較に用いた平板はコード長に対し厚さ 1.5% であり、無次元周波数 0.5 の条件下でのコルゲート翼の凹凸が空力係数に及ぼす影響を調べた。コルゲート翼と平板の垂直力係数の比較を行い、平板では、垂直力係数が 0 になるところを中央値としてヒステリシスループになっていることが確認できた。そのため、平板では一周分分の羽ばたきで上下方向の力は相殺され、力が発生していないことがわかる。一方、コルゲート翼ではキャンバ効果により垂直力係数の平均値が正になっていると共に、同じ迎角変化に対する垂直力係数の振幅が大きくなっている。このことは、変形やピッチングを起こさずに、コルゲート翼を上下に動かすだけでより大きな上向きの力が発生することを示している。さらに、可視化図より、コルゲート翼では、凹凸の影響により上面に負圧領域が生じており、この効果により垂直力係数がより大きくなると考えられる。

3. 研究目標の達成状況

本研究において実施した実験的・数値的研究により、本解析で使用した流体解析手法が妥当であることを示した。その手法を羽ばたき翼に適用し、平板とコルゲート翼を対象に非定常空力特性を調べた。その結果、凹凸を持つコルゲート翼は、変形やピッチングを起こさずに、翼を上下に動かすだけで上向きの力が発生することを明らかにした。また、無次元周波数による空力係数や流れ場の変化を明らかにしたことから、今後のドローンの開発にとって役立つ知見を得られたと考えられることから、当初の研究目標を達成できたと考える。一方、フェザリング運動の解析へと解析手法の拡張を行うには至っておらず、フェザリング運動の効果は調べられていない。

4. まとめと今後の課題

本研究では、コルゲート翼と平板周りのヒービング運動を実施し、その動的特性の相違を調べた。また、無次元周波数によりヒービング運動するコルゲート翼の動的特性の変化を明らかにすることができた。今後、フェザリング運動の解析へと解析手法の拡張を行うことで、より現実の羽ばたき運動に近い解析をすることが可能となり、コルゲート翼の動的空力特性を調べることが可能となる。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

D. Sasaki, R. Naganuma, K. Mizumoto, T. Akasaka, M. Okamoto, S. Takahashi, S. Obayashi and K. Shimoyama: Experimental and Computational Study on Unsteady Aerodynamic Characteristics of Heaving Corrugated Wings, *Proceedings of the Twenty-first International Symposium on Advanced Fluid Information*, Sendai, (2021), CRF-45, pp. 99-100.

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL05APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 06 月 21 日提出

航空機体と稼働エンジンとの統合解析

千葉 一永

電気通信大学大学院情報理工学研究科 教授

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

メーカーがエンジン単体で設計している航空機エンジンは、機体の影響を少なからず受けるが、現在はモデル化で対処しており、今後の高性能エンジン設計には変革がなければ世界に後れを取る。本研究では、稼働状態のエンジンを含む航空機全機の大規模な統合解析を世界で初めて行い、今後の環境適合型航空機の設計に先鞭を付ける。

1.2 研究期間内の最終目標

高密度格子を用いて稼働状態のエンジンと機体との大規模統合解析を実施し、格子依存性を調査するとともに、収束判定条件検討のための知見を獲得する。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

非構造格子による計算空間離散化により必要となる 1 TB 強のメモリを確保することで、3 億点近い格子による重合移動格子解析を実施した。上記計算環境を独自に用意することなく実施できたのは本共同研究の御蔭である。また、機体全体、エンジン各パーツの空力性能の時系列データを取得することで、収束判定条件にかかる知見を蓄積した。

3. 研究目標の達成状況

解析を安定的に実施することができるようになったが、AFI-NITY の仕様で 1 つの解析の連続時間が 100 時間に制限されるため、都度継続計算を再投入することになった。継続計算の優先度が都度下がることで、job の投入後、実行までに数週間を要し、結局 3 回目の継続計算が回ることなく期間が終了したため、収束判定を考える十分な回転計算には至らなかった。

4. まとめと今後の課題

稼働エンジンと機体との統合解析を安定的に実施するに至ったが、約 20 min/iteration の時間を要する本計算では、数ヶ月単位での連続計算の実施が可能な環境が必要不可欠であった。よって、物理現象を議論するまで安定的な解析を継続実施するため、非構造重合移動格子法による数億点規模解析が可能となる数 TB のメモリ容量を確保した計算環境構築が必須である。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

- [1] Chiba, K. and Oba, Y. Integrated analysis of operating engine and airframe for high-fidelity wing load estimation, 15th World Congress on Computational Mechanics, Yokohama, Japan, 31 July-5 August, 2022.

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL09APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 06 月 20 日提出

分子動力学シミュレーションによる固液界面における

不凝縮ガスに関する解析

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

堀 琢磨

東京農工大学大学院工学研究院先端機械システム部門 准教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

固液界面上の不凝縮ガスからなるナノバブルは, 腐食の要因になることが知られているため, 工学的に重要である. これまで, ナノバブルの生成や安定性に焦点を当てた実験的な研究が行われているほか, 分子シミュレーションを用いた研究も数多く報告されている. 一方で, これまでに行われてきた分子シミュレーションでは, 現実の水の特性を再現しないモデルを用いるなどしている. そのため, より精緻に減少を理解するためには, 現実的な振る舞いを解析する必要がある. 特に, 実際の界面ナノバブルにおいてコンタミネーションが意図せず混入することが起こりうるため, そのナノバブルへの影響の理解が不可欠である.

本研究では, 水および窒素気体からなる現実的な系を模擬した分子動力学(Molecular Dynamics, MD)シミュレーションを行い, 界面ナノバブルの生成をする. 特に, 生成した界面ナノバブルの形状へ界面活性剤が与える影響に焦点を当てる.

1.2 研究期間内の最終目標

界面活性剤の導入が界面ナノバブルの形状へ与える影響を MD シミュレーションによって明らかにする. これにより, 現実の現象を想定した場合のナノバブルの挙動の解明に貢献することを目標とする.

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

グラファイト基板-水-窒素気体からなる系において, 分子動力学法を用いて窒素の不凝縮ガスからなる界面ナノバブルの生成シミュレーションを行った. グラファイト基板を底面に, 圧力制御のためのグラフェンを天面に配置し, 両者の間を水分子と窒素分子で満たした. ここで, 底面のグラファイト基板の中央部分と水分子の間に働くポテンシャルを弱めることで疎水性

サイトを設けた。MD シミュレーションの最初の段階では、天面のグラフェンに圧縮方向へ力を加えたうえで系を緩和した。続いて、界面ナノバブル生成のために圧力を解放した。この結果、図(a)に示すように、グラファイト基板の疎水性サイト上に窒素ガスからなる界面ナノバブルが形成した。

生成した界面ナノバブルに対して、界面活性剤を加えることにより、その体積や形状へどのような影響があるかを評価した。界面活性剤には、1-ペンタノールを用いた。界面活性剤の有無ごとの水分子の数密度分布を求めることで、界面ナノバブルの形状を評価した。具体的には、図(b)に示すように、円筒座標系での数密度分布を得た。この図から、界面活性剤の存在により、界面ナノバブルの体積は減少することが明らかになった。この結果は、事前に行った窒素を含まない蒸気泡における結果と同様であった。

さらに、求めた水分子の円筒座標系での数密度分布の気液界面を円近似することにより、界面ナノバブルの曲率を求めた。この結果、図(c)のように、曲率半径は界面活性剤の分子数の増大に従い増加することが定量的に明らかになった。この結果も蒸気泡と同様であり、界面活性剤によって界面ナノバブルの体積や曲率半径が制御可能であることが分かった。

3. 研究目標の達成状況

MD シミュレーションを行うことで、界面ナノバブルの体積や曲率半径が界面活性剤によって制御可能であることが明らかになった。また、これらの結果は事前に行った蒸気泡の傾向と同様であることもわかった。一方で、多様な表面状態でのバブルの形成や、応力に基づく変形現象の解明など、より重要な知見を得るための研究が今後も必要であると考ええる。

4. まとめと今後の課題

本研究では、固体壁面上に形成した不凝縮ガスからなるナノバブルの形状や体積が、界面活性剤によってどのように変化するかを明らかにした。今後は、これまでのシミュレーションに比べて、より多様な基板表面状態ごとの解析を行う。さらに、界面活性剤がナノバブル形状に及ぼす影響の機構を明らかにするため、応力分布の解析を行う。以上により、界面ナノバブルの形状の決定因子の解明へ繋げる。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

国際学会

1. T. Hori, G. Kikugawa, I. Ueno, and Y. Matsumoto, “Molecular Dynamics Study on Effect of Surfactant on Surface Nanobubble”, 21th International Symposium on Advanced Fluid Information, online, (2021).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL14APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04~2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022年7月15日提出

実際の構造を反映させた多孔質材料内部の固気反応を伴う物質移動と

構造変化の大規模シミュレーション

松下 洋介, 沼澤 結, 小野 祐耶, 青木 秀之

弘前大学大学院理工学研究科 教授,

東北大学大学院工学研究科 博士課程後期学生, 博士課程後期学生, 教授

小宮 敦樹

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標

コークスの不均質な構造を直接反映させた有意性を検討するため、比較対象として均質なモデルに対しても同様の解析を行う。これにより、反応工学で用いられる迷路度などのパラメータでは表現することができない現象を再現する。

2. 研究成果の内容

円柱状のコークスのマイクロ X 線 CT 像を撮像した。本研究では、コークスが気孔および炭素基質から構成されると仮定したうえで、Otsu の手法に基づいて 2 値化し、コークスの X 線 CT 像におけるボクセルを気孔と炭素基質に分類した。2 値化した画像を積層させることで、コークスモデルを作成した(Case N)。また、比較対象として均質な解析対象も作成した(Case U)。図 1 にコークス全体の反応率および見かけの反応速度の経時変化を示す。いずれの Case においてもみかけの反応率は、全体の傾向として時間の経過とともに単調に増加し、Case N の 1573 K では反応時間 200 min 以降において傾きが減少する非線形な挙動が見られた。これは図 1 (b)に示す見かけの反応速度からもわかり、反応後期において反応表面積が減少したためである。また、いずれの温度においても Case N の全体の反応率および見かけの反応速度は Case U よりも大きい値を示した。反応温度 1373 K では、Case N の見かけの反応速度が Case U よりもおおよそ 2 倍大きかった。一方、反応温度 1573 K では、Case N の見かけの反応速度は全体の反応率が 0 から 0.5 の範囲では Case U の 2 倍程度大きかった。この差は 2 つの Case で表面積と CO₂ の拡散性が異なるためである。また、全体の反応率が 0.5 以上の範囲では両者の差が小さくなる傾向が見られた。これは両者の全体の表面積が同程度となったためである。

3. 研究目標の達成状況

実際の構造を反映させた多孔質材料内部の固気反応を伴う物質移動と構造変化の大規模シミュレーションとして、コークスが本来有する複雑な構造を考慮することで実際に観察される反応挙動を表現することができた。これは、反応工学で用いられる迷宮度などのパラメータでは表現することはできないと考える。

4. まとめと今後の課題

X線CT像を直接反映させることで、コークスが本来有する構造を再現し、また、反応に伴う構造の変化も表現可能であることを示した。今後X線CTの技術が発展し、解像度が増加することで、さらに微細な構造も考慮可能であると考えられる。

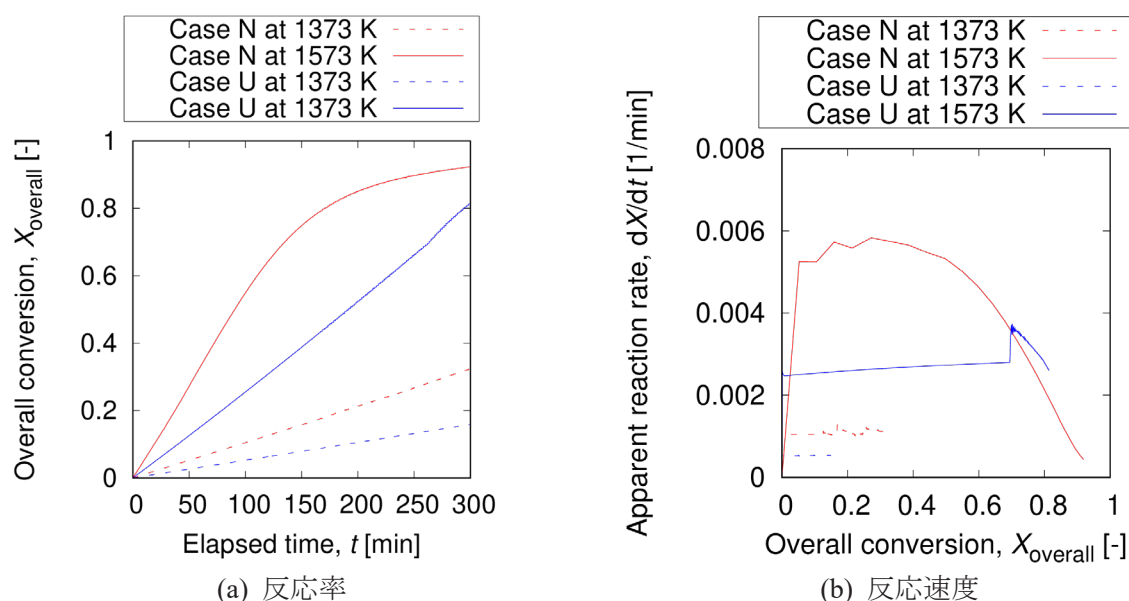


図1：反応率の経時変化と反応率に対する反応速度

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. Yui Numazawa, Yohsuke Matsushita, Hideyuki Aoki, Atsuki Komiya, Numerical Investigation for the Temperature Dependency of Coke Degradation by CO₂ Gasification Reaction in a Blast Furnace, ISIJ International, 60(12), 2686–2694 (2020)

国際学会

1. Y. Numazawa, Y. Matsushita, H. Aoki, A. Komiya, Large-Scale Simulation of Mass Transfer and Structural Change with Solid-Gas Reaction in Porous Media: Investigation of Diffusion Term, 16th International Conference on Flow Dynamics, OS18-14, Sendai, Japan, November 6-8 (2019)
2. Y. Numazawa, Y. Matsushita, H. Aoki, A. Komiya, Numerical simulation of mass transfer and structural change with solid-gas reaction in a full-scale porous model, 17th International Conference on Flow Dynamics, Online, November 28–30 (2020)

3. Yui Numazawa, Yoshiya Matsukawa, Yohsuke Matsushita, Hideyuki Aoki, Atsuki Komiya, Large-Scale Simulation of Gasification Reaction with Mass Transfer for a Full-Scale Porous Model: Temperature Dependency, International Conference on Flow Dynamics, October 27-29 (2021)

国内学会・研究会等

1. 沼澤結, 赤尾津翔大, 松下洋介, 青木秀之, 小宮敦樹, 三成分系の拡散における Stefan-Maxwell 式と Correction velocity を用いた近似式の比較, 化学工学会第 51 回秋季大会, オンライン, 9 月 24-26 日 (2020)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL17APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 27 日提出

混相流中における移動物体周りの流れの数値予測

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

高橋 俊

東海大学大学院工学研究科 准教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

伝搬する衝撃波が物体と干渉する現象は，爆発や衝撃による物体の破壊から体内の結石の破砕など，様々な研究が行われてきた．衝撃波通過時に物体に生じる瞬間的な非定常抗力は，衝撃波と物体の干渉現象における特徴的な現象の一つである．これまでは主に単一の粒子に衝撃波を負荷した時に生じるこの非定常抗力について実験と数値計算によって計測，調査がなされ，非定常抗力係数は定常抗力係数の数倍に達することが明らかにされてきた．また非定常抗力が生じる際の衝撃波の可視化から，衝撃波が粒子の後流側よどみ点で収束した際に抗力が大きく低下する現象や， Re 数によっては瞬間的に抵抗が負になる現象を示した．現在までこの非定常抗力は世界中で研究され続けている．近年，非定常抵抗の研究では 2 次元と 3 次元の CFD 研究の増加が見られる．これは埋め込み境界法を応用した CFD が一定の成熟を見せたことと，計算機性能が向上したことが背景にある．そこで本研究では流体科学研究所が有するスーパーコンピュータの大規模な計算資源を活かして他に類を見ない CFD による粒子周りの詳細な解析とデータベースの作成を行う．

1.2 研究期間内の最終目標

いまだ粒子の運動の影響を議論した研究は多くないが，実際に非定常抗力や定常抗力を受けた微粒子は流れの中で加速度運動して流れ場も同時に変化する．また微粒子の運動は粒子の質量によっても変化するが，その観点からも詳細な CFD による調査は少ないのが現状である．そこで本研究では 1 つもしくは 2 つの粒子が非定常抵抗を受けて運動した際の流れ場との相互干渉効果に着目し，比重と配置を変更して埋め込み境界法を応用した CFD により調査を行なう．

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

支配方程式には無次元化された 3 次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式, 非粘性流束計算には著者らが提案したハイブリッドスキームにて求め, 時間積分は 3 次精度の TVD Runge-Kutta 法を用いて行う. 物体境界はこれまでに開発した埋め込み境界法を用いて表現し, 本研究では粒子の運動方程式との連成解析を行う. 運動方程式には 3 自由度の平行移動の運動方程式を用いた.

2.2 新しい現象の解明

粒子 Re 数 49, 衝撃波マッハ数 1.22 の条件で, 直径を 40 分割した解析で格子収束を確認した. 粒子の移動を考慮した解析では相対密度 50 以上では固定の解析と同様の結果を示し, 相対密度の増加に伴って移動量が変化する傾向を示した. 2 粒子の初期状態での中心間距離を固定して, 直列配置, 並列配置, 斜め配置で 2 粒子の連成解析を実施した場合, 並列配置のみで僅かに 2 粒子が離れたが, それ以外では全て 2 粒子が近づく傾向を示した.

3. 研究目標の達成状況

当初の目標通りに進んでいるが論文執筆が遅れており急ぐ必要がある. 今後はこの現象の M 数依存性について取り組む予定である.

4. まとめと今後の課題

衝撃波通過時に物体に生じる瞬間的な非定常抗力に着目して, 本研究では流体科学研究所が有するスーパーコンピュータの大規模な計算資源を活かして他に類を見ない CFD による粒子周りの詳細な解析とデータベースの作成を行った. 支配方程式には無次元化された 3 次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式を用い, 物体境界は埋め込み境界法を用いて表現し, 運動方程式との連成解析を行った.

粒子 Re 数 49, 衝撃波マッハ数 1.22 の条件で, 直径を 40 分割した解析で格子収束を確認した. 粒子の移動を考慮した解析では比重 100 以上ではほぼ固定の解析と同様の結果を示し, 比重 10, 100, 1000 ではそれぞれ 10 倍程度に移動量が変化する傾向を示した. 2 粒子の初期状態での中心間距離を 2D と固定して, 直列配置, 並列配置, 斜め配置で 2 粒子の流体一運動連成解析を実施した場合, 並列配置はごく僅かに 2 粒子が離れたが, それ以外では全て 2 粒子が近づく傾向を示した.

当初の目標通りに進んでいるが論文執筆が遅れており急ぐ必要がある. 今後はこの現象の M 数依存性について取り組む予定である.

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌

Takahashi, S., Nagata, T., Mizuno, Y., Nonomura, T., Obayashi, S., “Effect of particle arrangement and density on aerodynamic interference between two particles in a shocked flow”, Physics of Fluids, under review

国内学会・研究会等

高橋俊，永田貴之，水野裕介，野々村拓，大林茂：衝撃波負荷により移動する 2 球体に生じる非定常抵抗低減効果，第 35 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (2021), D09-5

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

無し

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL19APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04~2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 07 月 13 日提出

鏃を装着したベアーシャフト矢を過ぎる流れの数値シミュレーション

岩津 玲磨, 高橋 直也
 東京電機大学工学研究科 教授
 服部 裕司
 東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

競技弓矢に関する流体力学的研究はまだ数が少ない。澤田らによる風洞実験, 宮寄らによる飛翔実験では, 競技矢のレイノルズ数域において抵抗値の 2 値化が報告された。長谷川らは軸対称計算された迎角 0° のシャフト表面速度分布をもとに線形安定解析を行ったが, 境界層の乱流化を引き起こすほど大きい局所増幅率を得ることができなかった。

1.2 研究期間内の最終目標

迎角の影響を調べるために, 迎角 1° までの範囲で 3 次元計算を行い, 得られた表面速度分布をもとに安定解析を実施する。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

迎角の影響を調べるにあたり, 迎角 0° において軸対称計算と 3 次元計算によって同じ速度分布が求まっているのかどうかを確認する必要性が生じたため, それぞれの計算で格子依存性を調査し, 軸対称計算と 3 次元計算の誤差を調べた。また, 安定解析では計算格子における速度値から補間した速度分布を用いているため, スプライン補間とトリ (パイ) キュービック補間による速度値の差を計算することで, 補間の影響を評価した。これら予備計算の結果によれば, 軸対称計算と 3 次元計算の差とそれぞれの格子依存性, 補間法の違いが安定解析結果に与える影響は十分に小さいことが確認できた。

軸対称計算と 3 次元計算双方の妥当性が検証できたために, 本計算では, 迎角をつけた 3 次元計算を行い, シャフト表面において定常流が得られるレイノルズ数, 迎角範囲をおおよそ特定した。本計算で得られた表面速度分布をもとに線形安定解析を行った結果によれば, 予想に反して, 微小な迎角の場合に基本流が安定化の方向に変化することが分かった。

3.

3.1 新しい解析手法の開発(例)

今回、新規の解析手法は特に開発していない。

3.2 新しい現象の解明(例)

迎角の増加に応じて基本流が変化するが、微小な迎角の場合には基本流が安定化することがわかった。

4. 研究目標の達成状況

表面境界層の不安定化の原因の特定に向けて、迎角 0° の場合についてレイノルズ数の効果、微小な迎角の影響が分かってきた。

5. まとめと今後の課題

不安定化の要因としては、迎角の増加による境界層速度分布の変化が考えられるが、それ以外にも 1) 鋸付け根に発生する剥離せん断層の振動、2) 飛行中の迎角の周期的変化が考えられる。今後の課題としては、3次元計算によって、上記 1) および 2) の影響を解明することを目標とする。

6. 研究成果リスト (※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

伊藤一希, 守裕也, 宮寄武, 董紫旭, 正藤範一, 岩津玲磨, 高橋直也: 迎角のついたアーチェリー一矢側面の境界層流れの安定性解析, ながれ, (2022, 投稿中・掲載可).

著書

なし.

国際学会

なし.

国内学会・研究会等

董紫旭, 正藤範一, 岩津玲磨, 高橋直也, 宮寄武, 迎角 0 度のベアシャフト矢を過ぎる流れの数値計算, Numerical simulation of flow past a bare shaft arrow with attack angle 0 degree,

第34回計算力学講演会 (CMD2021), 講演番号 245, 9/21-23, 2021.

伊藤一希, 小野口貴仁, 守裕也, 宮寄武, 岩津玲磨, 高橋直也, 迎角のついたアーチェリー矢側面の境界層流れの安定性解析, Stability analysis of boundary layer flow along an archery arrow with angle of attack, 日本流体力学会年会 2021, スポーツ流体-5, 9/21-23, 2021.

董紫旭, 正藤範一, 岩津玲磨, 伊藤一希, 高橋直也, 宮寄武, 守裕也, アーチェリー矢のシャフト表面速度分布に及ぼす迎角の影響, The effect of attack angle on the base flow velocity distribution of an archery arrow, 日本機械学会第 99 期流体力学部門講演会, OS07-01, 11/8-10, 2021.

ドンズシュ, 正藤範一, 伊藤一希, 岩津玲磨, 高橋直也, 宮寄武, 守裕也, アーチェリーのベアシャフト矢表面定常流の計算, Numerical simulation of the steady boundary layer flow along an archery bare shaft arrow, 第 35 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, B02-1, 8pages, 12/14-16, 2021.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL20APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2021年7月15日提出

自然対流境界層の不安定性成長の因子解明

小宮敦樹

東北大学流体科学研究所 教授

古川琢磨

八戸工業高等専門学校 助教

小泉匠摩

東北大学大学院工学研究科

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

自然対流伝熱は強制対流伝熱と異なり、外部動力を必要とせず浮力のみによって流動する流れ場である。そのため、乱流境界層の形成も強制対流伝熱とは全く異なる。しかしながら、乱流場を形成するために大規模な空間を要すること、有効な数値解析手法が確立されていなかったことから、自然対流の乱流形成メカニズムは依然として十分には明らかとなっていない。本研究では自然対流乱流場の中でも空間発達型の自然対流境界層の乱流場に着目する。空間的に発達する強制対流乱流場では、境界層中の粘性不安定性が境界層の乱流成長を促進することが明らかとなっている。一方で、自然対流境界層では粘性不安定起因ではなく、変曲点不安定起因によって乱流場が発達する可能性も指摘されている。

このような状況下で本研究ではどのような流れ場条件下で、空間発達型の自然対流境界層が不安定化するかを特定することを目的とする。本目的を達成するために、乱流発生因子を付与した状況での境界層発達過程を評価する。乱流発生因子として、低駆動の衝突噴流、ガスふく射効果による体積的発熱に着目する。これら発生因子を境界層中に付与することにより、境界層の発達過程が過去の研究によって変動することが示唆されている。これら過程において、変曲点近傍の速度勾配分布の評価、発達過程における特定周波数の抽出を実施する。そして、境界層が不安定となる条件を調査する。乱流初生因子である衝突噴流とガスふく射効果は能動的に制御することが可能であり、自然対流の乱流場の不安定メカニズムが明らかになれば、間接的に境界層を制御することに繋がる。自然対流境界層の乱流場によって伝熱量が促進することから、自然対流の境界層制御によって伝熱促進、抑制技術の創出に貢献することができる。これまで、機器形状の変更によって自然対流伝熱の伝熱量の促進、抑

制が実施されてきた。本研究は乱流成長因子をコントロールすることによって、自然対流境界層そのものの伝熱機構自体を制御することに注目しており、その意義は大きい。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間中は具体的にどのようにして自然対流境界層が不安定化するかの現象把握のために、弱い衝突噴流下における自然対流境界層の発達過程を実験および数値解析の観点から評価を行うことを目的とする。さらにふく射影響中での矩形キャビティ内部での自然対流境界層の可視化実験を行い、表面ふく射と温度境界層との相互作用を評価してふく射効果の高精度な解析表現方法を構築することを目的とする。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 微弱な衝突噴流における自然対流境界層の共振現象と伝熱量の増加

本研究では、微弱な衝突噴流を自然対流境界層中の上流中に付与することにより自然対流境界層の不安定性がどのように成長するかを実験、数値解析の観点から議論した。解析の結果から特定の衝突噴流の Re 条件下では不安定成長が促進されそれに伴い、伝熱量も増大することが明らかとなった。不安定成長が促進する Re の閾値は局地的に存在することが明らかとなっており、低エネルギーで自然対流境界層の放熱性を制御可能であることを示唆している。これまで強制対流と自然対流境界層の制御については数多くの研究によって検討されてきたが、ほとんどが慣性力支配となる共存対流のみを対象としており、本研究のような微弱な噴流制御に関する知見はなかった。このなかで本研究では浮力支配での共存対流現象着目による自然対流境界層制御の全く新しい知見を創出しており、本研究の意義は大きいと考える。

2.2 ふく射効果と自然対流境界層の相互作用

本研究ではふく射効果の定量的な議論を行うためには、壁面でのふく射伝熱量を高精度に予測する必要がある。常温環境ではふく射熱伝達率は自然対流とほぼ同一のオーダーであるため固体内部での熱伝導効果を考慮しなければふく射根痛流束の影響は無視できない。そこで本研究ではふく射熱影響下の自然対流境界層可視化実験を行い、固体熱伝導を加味した解析モデルとの比較を行い、ふく射熱流束が境界層の温度成層成長に影響する度合いを評価した。比較の結果 **OpenFOAM** での固体、ふく射モデルのカップリング手法ではふく射熱流束効果による伝熱量上昇を定量的に評価できないことが明らかとなった。調査の結果、固体面での熱抵抗について精緻に条件を与えることが必要であることが明らかとなった。

3. 研究目標の達成状況

本研究期間中では主に微小な衝突噴流付与時の自然対流境界層の不安定成長について議論した。また境界層の不安定成長について、周波数特性の観点から議論を行った。自然対流境界層の不安定成長には外力を加えた場合でも共振現象が重要であることが明らかとなった。本研究では境界層の不安定成長の因子解明を目的としており、共鳴現象が主な要因であることを示唆した点においては本研究の主目的はおおむね達成できたと考える。

4. まとめと今後の課題

本研究期間によって、微小噴流のレイノルズ数変化による自然対流境界層の不安定成長性について論じた。計算結果では、周波数の共振周波数と境界層成長について議論した。今後は自然対流境界層での運動量保存、エネルギー保存の観点から不安定成長が浮力もしくは慣性力起因どちらで発生しているかの区別を行う予定である。また本研究期間ではふく射伝熱と自然対流境界層の相互作用について固体複合伝熱の観点から評価を行った。解析の結果から気体、固体界面でのふく射熱流束のモデリングに問題点が発見された今後は界面の熱流束モデルを再調査して、モデルの改善を図る予定である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- N. Ogasawara, J. F. Torres, Y. Kanda, T. Kogawa, A. Komiya, “Resonance-driven heat transfer enhancement in a natural convection boundary layer perturbed by a moderate impinging jet”, *Physical Review Fluids*, vol. 6, 2021.
- T. Kogawa, J. Okajima, A. Komiya, S. Maruyama, “Effect of gas radiation-depended natural convection on the transition of spatially developing boundary layers”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 177, 2021.

国内学会・研究会等

- 小泉匠摩, 高木松誠, 石澤輝, 小宮敦樹, 古川琢磨, “自然対流場における固体表面でのふく射効果の実験・数値的評価”, 日本伝熱学会東北支部第60期春季講演会講演論文集, 2021年5月
- 小笠原直人, Juan Felipe Torres, 神田雄貴, 古川琢磨, 小宮敦樹, “衝突噴流による自然対流温度境界層の共鳴効果を用いた伝熱促進”, 第58回日本伝熱シンポジウム講演論文集, 2021年5月
- 高木松誠, 小泉匠摩, 古川琢磨, “ふく射影響下の自然対流境界層中の壁面放射率特性が及ぼす影響の可視化測定”, 熱工学コンファレンス2021講演論文集, 2021年10月

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

令和3年7月6日, 日本経済新聞, 「東北大、自然対流の固有周波数の存在を実験的に捉えることに成功」

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL21APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 06 月 28 日提出

熱遷移流に対する大規模分子動力学解析

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

山口 浩樹

名古屋大学大学院工学研究科 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

マイクロ・ナノテクノロジーの発展とともに熱流動場の微小化が進んでいる。それに伴い、流れの希薄度を表す無次元数であるクヌッセン数が重要なパラメータとなってきている。クヌッセン数は、流体を構成する分子が他の分子と衝突するまでに移動する平均的な距離である平均自由行程と系の代表長さの比で定義される。熱流動場の微小化は、系の代表長さが小さくなるためにクヌッセン数の大きい「高クヌッセン数流れ」をもたらす。その結果、希薄気体流れと同様の効果が生じることが知られている。このような流れに特異な現象の一つとして、流路壁面の温度勾配によって低温側から高温側へと誘起される熱遷移流がある。熱のみで流れが生み出されるため、マイクロデバイスでの流れへの影響が危惧される一方で、ポンプなどへの応用が期待されている。この熱遷移流に関しては、様々な解析や実験が行われてきているが、熱遷移流場そのものの内部における詳細な流動構造については十分に明らかになっているとは言い難い。特に数値解析で広く用いられている直接シミュレーションモンテカルロ (DSMC) 法などでは分子の衝突過程がモデル化されており、平均自由行程以下の解像度でもって流動構造の解析を行うことはできないため、結果として分子動力学 (MD) 解析が要求される。

そこで本研究では、MD 解析を用いて大規模数値シミュレーションを行うことにより直接的に熱遷移流の流動構造を解析し、その特性を明らかにすることを試みる。具体的には、微細流路を構成する壁面分子に温度勾配を課し、流路内部での流動を、特に壁面近傍に着目しながら解析する。

1.2 研究期間内の最終目標

本計算においては、流路壁面を構成する固体分子の熱運動の影響を明らかにするために、

流路壁面の固体分子を全て陽に扱う。そのため、非常に大規模な数値解析が必要となる。さらに、熱流動場の流速や温度などの物理量は気体分子の熱運動に対する平均量から導出しなければならない。計算条件としては高クヌッセン数流れとなる希薄な条件であるため、流速ベクトルを十分な空間分解能で取得して精度良く流動構造を明らかにするには十分な統計量を確保することが求められる。これまで **dense gas** の条件で詳しく解析することに成功した。そこで、統計量を確保するのがより厳しくなることに注意しながら、この条件を参考にさらに希薄となる **dilute gas** となる条件を目指して条件を段階的に変化させて数値解析を実施し、比較検証を行う。

2. 研究成果の内容

本研究では熱遷移流の流動構造について、これまで壁面近傍まで十分に解像して解析することに成功していた **dense gas** の条件を基に、**dilute gas** の条件を目指して流路の代表長さである流路壁面間距離を段階的に変更して解析を実施した。なお **dilute gas** の条件になるにつれて空間解像度を確保することがより困難になるため、同一の空間セルに対してサンプリング数、つまり計算時間を変化させることで対応した。その結果、**dense gas** から **dilute gas** の条件に至るまで熱遷移流の構造は大きく変化せず、**dilute gas** の条件においても熱遷移流において吸着層が重要な役割を果たしていることが確認でき、数密度に対する熱遷移流の基礎的な流動構造についての知見を新たに得ることができた。特に、流路壁面からの距離に応じた分子の層構造において内部の残存確率を求めることで、壁面近傍の吸着層の存在を明らかにし、その吸着層と熱遷移流の流動の関係を解析した。

3. 研究目標の達成状況

当初の目標であった **dilute gas** の条件で、流路内断面の速度分布を取得するほど十分な統計量は確保できなかったものの、吸着層と熱遷移流の流動の関係を議論できるだけの統計量を確保した大規模な数値解析を実施することができた。特に **dense gas** から **dilute gas** の条件へ段階的に変化させて比較検証を実施することに成功した。

4. まとめと今後の課題

微細流路の壁面において流れ方向に対して温度勾配を課した系を構築し、MD 法による大規模数値解析を行うことによって、**dilute gas** の条件下で直接的に熱遷移流を再現することを目指した。流路断面内の流速分布を得ることは叶わなかったが、壁面近傍における熱遷移流を捉えることには成功した。今後、熱遷移流と吸着層との関係について詳細な解析を行う必要がある。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

国内学会・研究会等

山口浩樹, 菊川豪太: 熱遷移流における流動構造の分子動力学解析, 日本機械学会 2022 年度年次大会講演論文集, (2022).

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL22APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 6 月 24 日提出

液体及び界面における熱輸送特性の分子動力的研究

小原 拓, Donatas Surblys, 松原 裕樹
 東北大学流体科学研究所 教授, 助教, 特任助教
 川越 吉晃
 東北大学大学院工学研究科 助教

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

熱伝導率などバルク液体の輸送物性や固液界面の熱コンダクタンスなど界面の輸送物性は、デバイス内の熱輸送や発熱体からの放熱などに直結する工学的に重要な特性である。特に近年では、電気自動車のインバータなど高密度の発熱を伴うパワーモジュールから速やかに熱エネルギーを除去するなど、高度な要求に応える技術が求められており、大きな課題となっている。一般に液体の輸送特性は、分子間・分子内の複雑な力学的干渉の結果として発現するが、分子スケールの輸送メカニズムに介入して上述の技術課題を解決しようとする工学的なアプローチは確立されていない。本研究は、単純な分子系を用いた基礎的検討から出発して複雑な実用的化学物質の適用による応用に至るまで、大規模かつ系統的な分子動力学シミュレーションにより、基礎現象のメカニズム解明と技術的課題の解決を図ろうとするもので、対応する実験も含めた大規模なプロジェクトの基幹部分となるものである。

1.2 研究期間内の最終目標

(1)液体・ソフトマターの熱伝導率の決定メカニズム、(2)固液界面熱抵抗の発現メカニズム、(3)固体表面微細構造の影響、(4)界面活性物質吸着の影響、(5)ソフトマターTIM (熱界面材料)の効果、などを解析の対象として、これらの特性を解明し、界面熱現象を所望の特性に設計するための方策を確立する。

2. 研究成果の内容

2.1 界面活性剤分子による固液間振動モードマッチングが固液界面熱抵抗低減に及ぼす影響

固液界面において固体－液体間の熱輸送特性が劣化する（固液界面熱抵抗）本質的な原因の一つは、界面において接する固液分子の振動数が異なることである。界面活性剤を固液分子の間の界面に吸着させると、固液の両者に適合的な振動が生じて熱抵抗を低減させる可能性がある。この効果を、固体結晶－界面活性剤吸着層－液体の分子系に対する非平衡分子動力学シミュレーションにより解析した。界面活性剤および液体を単原子分子で表現した簡潔

なモデルを対象に、界面活性剤分子の質量、界面活性剤の液体中濃度、固体原子と界面活性剤分子の相互作用の強さなどを系統的に変化させることにより、界面活性剤分子の振動状態を変化させた。この結果、固液間の熱抵抗が極小となる界面活性剤分子の質量が特定の値で存在することや、従来から解析に用いられてきた振動状態密度 (vDOS) 分布の重なりでは説明できない固液熱輸送特性のふるまいがあることが明らかとなった。この結果に基づいて、界面活性剤分子の振動モードを調整することにより固液界面熱抵抗を最小にすることが可能となった。

2.2 拘束力を適用した分子動力学系における熱抵抗の算出法

例えば液体水の分子動力学シミュレーションにおいては、水分子の O-H 間距離の振動や H-O-H の変角振動を無視して、水分子が剛体であるものとして計算されることが多い。このとき、これらの距離や角度を固定するために、拘束力学を用いた分子動力学シミュレーションが行われる。このとき、分子間で発生する物理的に意味がある原子間力だけでなく、距離や角度を拘束するための力が適用される。このような系における熱流束がどのように算出されるか、それは真のマクロ熱流束を表しているのか、については、これまで明確にされていなかった。ここでは、我々がかつて多原子分子系に初めて適用して熱流束を計算することに成功したセントロイド原子応力形式を拘束力学系に適用することに成功し、熱流束に対する拘束力の寄与は小さいが無視できないことや、これまで分子動力学パッケージ LAMMPS に実装され世界で広く用いられてきた原子団定式化が誤った熱流束値を算出することなどを明らかにした。ここで提案したセントロイド原子応力形式は現在では LAMMPS に実装され、広く提供されている。

3. 研究目標の達成状況

研究目標を達成し、物理化学・熱科学分野の主要誌に研究成果を発表した。

4. まとめと今後の課題

上述の他、界面活性剤分子の振動モードマッチングの調和振動子解析、Tripod SAM による界面修飾が固液界面熱抵抗に与える影響、単鎖ポリエチレンの熱伝導特性に分子間ポテンシャルが与える影響、グラフェン懸濁パラフィンの熱輸送特性などに成果を得て、順次ジャーナル論文として公表する予定である。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, Gota Kikugawa and Taku Ohara: Methodology and meaning of computing heat flux via atomic stress in systems with constraint dynamics, *J. Appl. Phys.*, Vol. 130 (2021), 215104, DOI: 10.1063/5.0070930.

Hiroki Matsubara, Donatas Surblys, Yunhao Bao and Taku Ohara: Molecular dynamics study on vibration-mode matching in surfactant-mediated thermal transport at solid-liquid interfaces, *J. Mol. Liq.*, Vol. 347 (2022), 118363, DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118363.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL23APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 13 日提出

分子動力学法による濡れ機構の解析と解明

SURBLYS Donatas

東北大学流体科学研究所 助教

山口 康隆

大阪大学大学院工学研究科 准教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

生産や加工技術の向上によってナノ・マクロスケールに於ける濡れ挙動は重要性を増してきた。具体的に印刷技術の解像度がマイクロスケールまで達しており、印刷時のインクの挙動の制御が課題となっている。更に半導体生産においては、構造がナノスケール領域までに到達しており、半導体を洗浄する際に、毛細管現象による構造へのダメージが度々問題となっている。どの業界も常に改善を試みてはいるものの、経験的な法則による部分が大きい。本研究では分子メカニズムを解明することにより、ナノ・マイクロスケールにおける濡れ現象に多大な影響を持つ固液界面性質を明らかにするのが目的である。濡れ挙動を分子の動きとして解釈し、分子統計力学などによって、マイクロスケールの分子の揺らぎとマクロスケールの濡れ現象を結び付け、要因の解明を進めていくやりかたは他ではまだほとんど確立されていない。本研究は、特に基礎現象の理解と解明に努めているものであり、濡れ現象にまつわるすべての研究の底上げを目指している。

1.2 研究期間内の最終目標

分子動力学法によって実現象に近い OH 基が表面を修飾するシリカ壁面上に数ナノメートル程度の水滴を配置した系を作成し、OH 基の表面数密度に応じた濡れ挙動を観察する。また、各界面の自由エネルギーを抽出し、要因の検討とマクロ濡れ理論との整合性を検証する。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 共同研究の意義

分子動力学シミュレーションによってナノ・マイクロスケールにおける濡れ性の研究が多くの観点から盛んに行われてきた。壁面上の微小な液滴の挙動、固体界面の幾何学的や化学的な変化による影響や動的な現象の観察などが代表的に行われてきた研究である。濡れ挙動は固液界面の性質を色濃く反映しているため、液滴に限らず、工業的にも重要な界面性質全般に関する重要な知見も得られる。ただし、多くの場合、現象解明は界面形状の観察などの簡易な解析にとどまり、

分子動力学法によって得られる系を構成する全分子についての情報が必ずしも活かされていない。本申請者および共同研究者は、液相を有する界面に関して新たな解析法の開発及び世界的にみても有数の高度な解析と解明の実績をもっており、濡れ機構を決定づける新たな要因及び制御方法のコンセプトを確立できると考えられる。さらに本プロジェクトの根幹である申請者らの学術論文 (J. Chem. Phys. 150, 044701 (2019)) が Editor's Choice に選ばれるなど高く評価されている。

2.2 長距離クーロン相互作用のある複雑な界面の自由エネルギーの算出

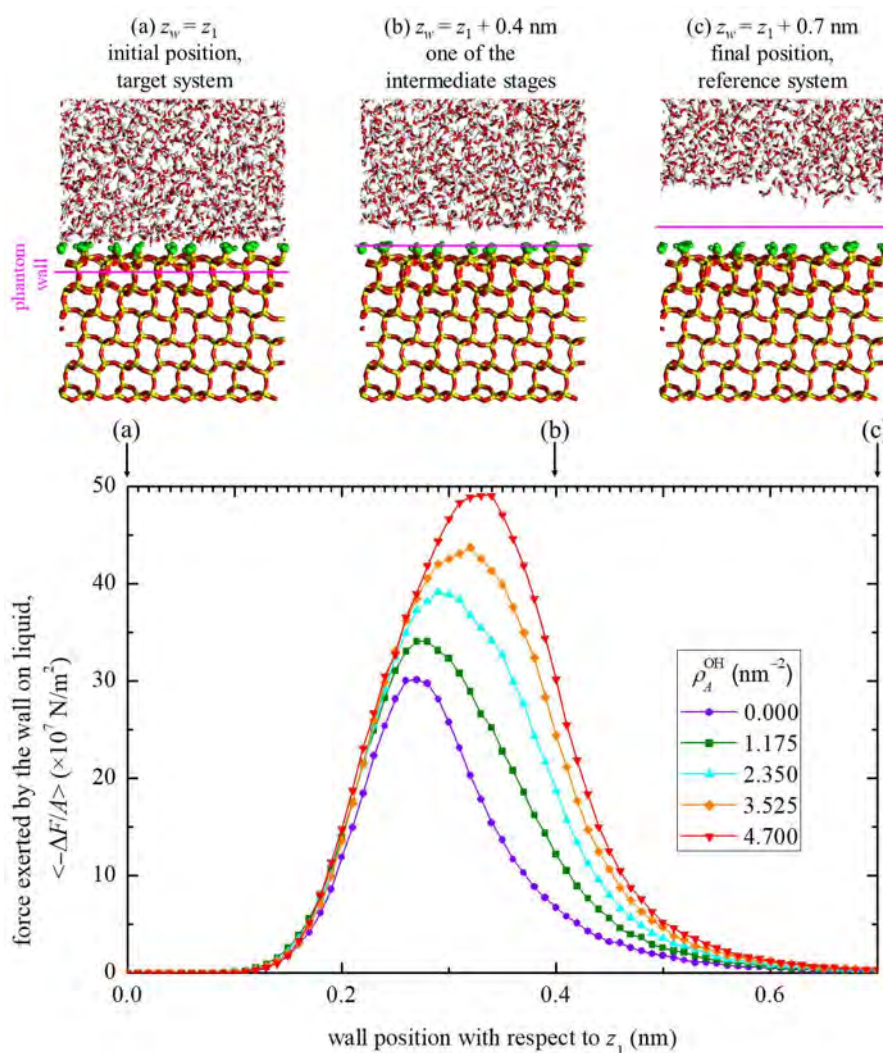


図1 熱力学積分法によるシリカと水の間の固液界面エネルギーの抽出

クーロン相互作用のある固液界面の自由エネルギーを算出する熱力学積分手法として、過去に固液間作用強さをパラメータとして変化させる Dry-Surface 法が確立されているが、今回用いた OH 基が存在するシリカでは表面形状が複雑なため、この手法を用いることができなかった。そこで、もう一つの熱力学積分手法である Phantom Wall 法をクーロン作用のある界面に適用し、その妥当性を検証した。具体的には、図1のように水のみを力及ぼす仮想的な壁面 (phantom wall) を介して固液界面を等温準静的に引き剥がす操作を行うことで、シリカと水という複雑な系の固液界面エネルギーを、自由エネルギーの形で求めることができた。

2.3 ヤング式から得られる理論的接触角と見かけの接触角の整合性

液滴の各界面の自由エネルギーと接触角の関係を示すヤングの式はマクロスケールの濡れのモデルとして広く用いられている。これまでの研究から、単純な Lennard-Jones 分子で構成される流体が平滑な固体表面上にある場合、ナノスケールでもヤングの式から算出される接触角とシミュレーションで測定される接触角がよく一致することが知られているが、水などの実在分子を用いた場合に、それが適用できるかについては不明確であった。今回用いた水と OH 終端されたシリカの固体表面の系において、実際に液滴を配置して接触角を見積もったところ、広い OH 密度の範囲でふたつの接触角がよく一致しており、ヤングの式がナノスケールでも成立する可能性を示した。また、これらに差異がみられるものについては、接触線がピンングされていることも明らかになった。

3. 研究目標の達成状況

実現象に近い OH 基が存在するシリカ壁面上に水滴を配置した系の分子動力学法によるシミュレーションを行い、各界面の自由エネルギーを求めた。また同じ壁面における液滴の見かけの接触角を見積もったところ、ピンング力までを含めた力学的なバランスとして Young の式が概ね成り立つことが分かり、本年度の研究目的を達成することができた。この結果を *The Journal of Chemical Physics* に発表した。

4. まとめと今後の課題

今回用いた OH 終端されたシリカは、物理的、化学的な粗さを有する壁面の代表的な存在であるが、これと対照的な壁面であるグラフェンと水の界面エネルギー、および液滴の挙動を解析していく。また、同様な平衡系を用いた固液間の熱抵抗の解析にも着手していく。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- Carlos Bistafa, Donatas Surblys, Hiroki Kusudo, Yasutaka Yamaguchi: Water on hydroxylated silica surfaces: Work of adhesion, interfacial entropy, and droplet wetting, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 155 (2021), 064703.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL25APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 08 月 01 日提出

流体機械中の非定常キャビテーションの三次元数値解析

伊賀由佳，岡島淳之介
 東北大学流体科学研究所 教授，准教授
 近藤創太，横井貴志，木幡明日花，
 東北大学大学院工学研究科機械系
 佐々木裕章
 日本原子力発電株式会社

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

本プロジェクトは，旋回キャビテーションやキャビテーションサージといった液体を作動流体とするターボ機械中に発生するキャビテーション不安定現象の発生メカニズム解明と抑制手法の確立を，数値解析を通じで目指すものである。これら現象解明や抑制手法検討に，計算負荷が非常に高い三次元非定常解析を適用することが学術・産業の両面から求められている。しかしながら，幅広い流動条件下で流体機械の性能を予測可能なキャビテーションモデルは確立しておらず，計算モデルの妥当性検証も並行して行う必要がある。本研究では，JAXA 角田宇宙センターでの実機試験結果と数値解析結果を補完し合うことにより計算の妥当性検証や実験での現象理解を試みる。

1.2 研究期間内の最終目標

本プロジェクトでは，特に液体ロケットインデューサでのキャビテーション不安定現象に着目し，①ブレードへのスリットの付与による不安定現象抑制手法と②超同期旋回キャビテーション発生限界条件の解明を目指す。①では，インデューサに設けるスリットの寸法及び形状が流れ場に与える影響を解明し，キャビテーション不安定現象を大幅に抑制する最適な形状を見出すことを目指す。②では，インデューサや遠心ポンプの回転数を変化させ，超同期旋回キャビテーションの発生条件と回転数の関係を明らかにする。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 液体ロケットインデューサのスリット形状が性能及び不安定現象に及ぼす影響の数値解析

本研究では，スリットの幅や深さを変化させたインデューサの数値解析を行い，スリット形状が性能及び不安定現象に及ぼす影響を検討した。その結果，次の結果が得られた。まず，スリット位置 333 では，スリット幅を変化させることでキャビティの対称性が大きく変化する

ることが確認できた。また、スリット幅 10 mm, 20 mm では非対称性キャビティは発生せず、不安定現象の抑制に対して効果が高いことが示唆された。スリット前縁から発生する翼端渦によって、キャビティの成長が妨げられていることが確認できた。これは、翼端渦により、スリット上流の流れがせき止められることによって、圧力が上昇し、スリット上流の翼端もれ渦キャビティの成長を妨げている為であると考えられる。キャビティの非対称性の抑制は、スリット幅で変化するスリット前縁の翼端渦の大きさや傾きと関係があることが示唆された。非対称キャビティが完全に抑制されたスリット幅 10 mm, 20 mm では、翼端渦は他と比べ、大きく、傾きも大きかった。スリット深さによって不安定性の抑制効果にあまり差が見られず、一方、ポンプ性能は深さに対して低下したことから、浅いスリットの方が性能低下を低減できてよいと言える。

2.2 液体ロケットインデューサ広範囲作動時における巡回キャビテーションの振動特性

巡回キャビテーションの振動特性を考察するため、複数の回転数で三次元非定常数値解析を行った。実験では得られなかったキャビティ長さを予測し、キャビティ長さをを用いたストローハル数について考察した。数値解析の結果、super-S RC 発生時の非定常キャビテーションの周波数がインデューサ回転数の低下に伴い減少し、伝播速度比が回転数に関わらず傾きがほぼ等しくなるという実験で得られた傾向と同様の傾向が確認でき、定量的には異なるものの、本解析手法の定性的な妥当性が確認された。また、 f_{cav} の比較から、キャビテーション不安定現象でない EC と伝播現象を伴う super-S RC 発生時の f_{cav} は、連続的に単調減少である一方で、伝播現象を伴わない sync RC と CS では、この単調減少の傾向にないことが分かった。最大キャビティ長さ $L_{(cav,max)}$ の比較から、 f_{cav} において連続して単調減少に見えた EC と super-S RC 発生時における $L_{(cav,max)}$ は、連続的に単調増加しているが、super-S RC の最後では、各翼で発生する $L_{(cav,max)}$ に差異が生じることが分かった。また sync RC においても、各翼で $L_{(cav,max)}$ が大きく異なることが分かった。また CS での $L_{(cav,max)}$ は、super-S RC の最後と同程度であることが分かった。さらに、キャビテーション不安定現象でない EC でのキャビテーションは自然な振動特性で振動していると考えられるので、EC の S_{tl} を自然な振動特性であると仮定すると、 f_{cav} 、 $L_{(cav,max)}$ において連続的に見えた super-S RC では、同程度の S_{tl} を示しており、super-S RC 発生中のキャビテーションは自然な振動特性で振動していると考えられる。しかし、super-S RC の最後では S_{tl} が小さくなっており、super-S RC は自然な振動特性から外れて終了することが分かった。また sync RC では、 S_{tl} がキャビティごとに大きく異なっており、自然な振動特性でないことが分かった。また CS においては、自然な振動特性の領域からは大きく外れて振動していることが分かった。

3. 研究目標の達成状況

得られた研究成果をまとめ、プロジェクト期間中に国際会議 1 件、国内会議 2 件で成果発表を行い、①に関しては特許を 1 件申請、②に関しては現在さらに国際会議 1 件に申し込み、国際誌に投稿準備中であり、研究目標は十分に達成されたと考えている。

4. まとめと今後の課題

①のスリットインデューサでは、数値解析で得られた、浅いスリットの方が性能低下を低減しつつ不安定を抑制できるという傾向を、JAXA 角田宇宙センターでのインデューサ実機試験を

通じて実証予定である。②については、その後の動特性評価を含め、学術誌に投稿準備中である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

- ・ Asuka Kowata, Satoshi Kawasaki, Yuka Iga, "Numerical analysis of effect of slit shape on the performance and cavitation instability of liquid rocket inducer", 3rd IAHR-Asia Symposium on Hydraulic Machinery and Systems, Web (2021.11.22-23(23)), CT006.

国内学会・研究会等

- ・ 近藤創太, 田村浩紀, 川崎聡, 伊賀由佳, 「ロケットインデューサに発生する超同期旋回キャビテーションの振動特性に関する数値解析」, 日本機械学会第99期流体工学部門講演会, web (2021.11.8-10(8,9)), OS11-09.
- ・ 田村浩紀, 近藤創太, 川崎聡, 伊賀由佳, 「広範囲作動時の液体ロケットインデューサにおけるキャビテーション不安定現象の発生特性」, ターボ機械協会第86回総会講演会, 早稲田大学 (2022.5.13), No.A07.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL26APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

相変態を伴う高分子材料のマルチスケール数値解析

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

岡部 朋永

東北大学工学研究科 教授

大矢 豊大

東北大学理学研究科 学術研究員

Zhao Yinbo

東北大学工学研究科 特任助教

李 楷文

東北大学大学院工学研究科ファインメカニクス専攻 博士前期課程

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

高機能・高生産性を有する高分子材料を選別するためには、大きく 2 つの困難が伴う。第一に、高分子材料の多種多様性から最適材料の候補が無数に存在することである。航空機用複合材料のマトリクス樹脂の代表であるエポキシ樹脂は主剤と硬化剤との架橋反応により、高い熱・機械物性を発現するがこれらの組み合わせに限っていても 1000 種類以上の材料が販売されている。したがって、実験を代替する数値計算ベースの材料選択技術が急務である。第二に、分子量の大きく異なる高分子材料では現象の空間的・時間的スケールが大きく異なり、複合した際の現象理解が非常に困難であることである。例えば、上記のエポキシ樹脂はその比強度・比剛性の高さに対して、靱性が低いという欠点がある。この欠点を克服するために、少量の熱可塑性樹脂を添加し破壊の進展を分散させるという方法がとられているが、その構造形成と破壊進展のメカニズムはいまだ推測の域を出ていない。今後の実験の指針となる数値計算技術の開発が必要不可欠であるが、熱硬化性樹脂の架橋反応と熱硬化性樹脂の相分離挙動とでは空間的・時間的スケールが大きく隔たっており、これまで単一の数値計算手法による再現は困難であった。本研究では、分子動力学計算や自己無撞着場理論といったスケールの異なる数値計算手法を有機的に接続し、熱硬化性樹脂/熱可塑性樹脂複合系の物性を分子レベルからメソスケールに渡って再現できる「マルチスケールシミュレーター」を開発するとともに、機械

学習等の情報科学技術と組み合わせた高分子材料の多目的材料探索を行うことを目的としている。

1.2 研究期間内の最終目標

原子スケール・粒子ベースの数値計算として、正確な第一原理計算と GRRM (Global Reaction Route Mapping method) アルゴリズムを組み合わせることにより、熱硬化性樹脂の正確な反応エネルギーを取得する手続きを確立する。反応エネルギーは MD 計算における反応判定で用いられ、精緻な化学反応を架橋高分子材料において再現することが可能となる。本手法を分子量の比較的大きなエポキシ系に適用する。エポキシ樹脂の主剤として TGDDM と DGEBA を、硬化剤として 4,4'-DDS や DETA を考慮し、これらの分量や組成比 (多成分系の場合) を変化させ、熱伝導率やヤング率、密度、ガラス転移温度の変化と、これらの変化に影響を及ぼす架橋構造の分子論的なメカニズムを考察する。

メゾスケールの数値計算として、MD 法および散逸粒子動力学 (DPD) 法を連携したシミュレーション手法の高精度化を実施する。ここでは、MD 法からボトムアップで DPD 法における相互作用パラメータを構築する手法を確立する。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 エポキシ樹脂の化学反応計算

GRRM により反応エネルギーを正確に求める手法を探索し、DFT 法 (B3LYP 汎関数) とある程度大きなガウス関数基底 (6-31G*) が必要となることを明らかにした。これによって得られた反応エネルギーを分子動力学シミュレーションの反応モデルに組み合わせ、硬化過程および硬化状態における各種物性を測定した。その結果、実験で求めた熱伝導率、ヤング率、ガラス転移温度を定量的に再現することがわかった。また、密度については力場モデルの影響もありやや過小評価するものの、異なる材料種間の傾向を再現することに成功した。

2.2 DPD 法における相互作用パラメータのボトムアップ構築

MD シミュレーションにおける全原子モデルをグループに分割し、DPD 粒子として粗視化を行った。各 DPD 粒子に対応する全原子モデルを用いて MD シミュレーションを実施し、DPD 粒子の溶解度パラメータを計算する。この溶解度パラメータを計算することで、DPD 粒子間の相互作用を Flory-Huggins 理論に基づいて決定した。さらに、高分子鎖を構成する DPD 粒子間の共有結合相互作用についても MD シミュレーションから決定した。以上の相互作用パラメータを用いて架橋反応を含む DPD 計算を実施したところ、MD シミュレーションと整合する結果を得ることができた。

3. 研究目標の達成状況

当初の計画通りに進行している。

4. まとめと今後の課題

反応モデルを組み込んだ MD 法と DPD 法を連携し、原子スケールからメゾスケールに渡る複合材料用高分子の特性を計算する手法を高速化・高精度化した。分子動力学法においては、

多種・多成分系を含むエポキシ樹脂にてその正確性を確認した。DPD 法における相互作用パラメータのボトムアップ探索については、MD シミュレーションにおける架橋反応過程をうまく再現する手法の構築に成功した。今後、原子からメソスケールまでをブリッジする数値計算手法を用いて、メソスケールの相分離を伴う高分子材料の構造・物性計算を実現したい。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, Naoki Kishimoto, Yingxiao Xi and Tomonaga Okabe, Uncovering the mechanism of size effect on thermomechanical properties of highly crosslinked epoxy resin, *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 126 (2022), pp. 2593-2607.

国際学会

1. Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, Naoki Kishimoto, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, and Tomonaga Okabe, Relation between the internal molecular structure and thermomechanical properties of multi-component epoxy resin, *Proceedings of the 2nd Asian Conference on Thermal Science*, Fukuoka (online), Japan, (2021), 20311, (available online).
2. Gota Kikugawa, Multiscale modeling for thermomechanical properties of crosslinked polymers: from quantum chemistry to mesoscale simulation, *The 32nd International Symposium on Transport Phenomena*, Tianjin (online), China, (2022).

国内学会

1. Li Kaiwen, 菊川 豪太, 川越 吉晃, 岡部 朋永, 熱硬化性高分子材料の反応 DPD シミュレーションにおける相互作用パラメータの探索, 第 35 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (available online).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL27APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022年07月11日提出

アンモニア非予混合バーナー火炎における保炎消炎機構の解明

中村 寿

東北大学流体科学研究所 准教授

寺島 洋史

北海道大学工学研究院 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

脱・低炭素社会の早期実現に向けて、二酸化炭素を排出しないクリーンな代替燃料の導入、その燃焼技術の開発は喫緊の課題となっている。本研究で対象とするアンモニア(NH_3)は、代替燃料の有力候補として期待されている水素(H_2)の高密度輸送キャリアであるだけでなく、直接燃焼が可能な代替燃料としても考えられている。しかし、従来から広く採用されてきた炭化水素燃料に比べると、アンモニア燃焼特性の知見は少ないという課題があり、その難燃性や燃料由来の窒素酸化物(NO_x)発生といった欠点を克服する燃焼技術の早期確立が必要不可欠である。本研究では、アンモニア燃焼特性の詳細理解を深めるため、基礎的なバーナー非予混合火炎を対象に燃焼流体 CFD 解析(以下、燃焼 CFD: computational fluid dynamics)を行う。特に、保炎および消炎機構の予測技術の確立と現象解明を目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

先行実験で観察された保炎消炎境界の燃焼 CFD 予測、解析結果を用いた保炎消炎機構の解明を目標とした。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

アンモニアに限らず、保炎消炎境界のような限界的燃焼条件の数値予測には、流体现象だけでなく化学反応現象のモデリングが非常に重要となる。本研究の特色は、燃焼 CFD において、化学反応現象の高度予測を可能とする詳細反応機構を適用することにある。燃焼 CFD における詳細反応機構の適用は、流体と化学反応現象の特性時間スケールの違いから困難とされてきたが、共同研究者らが開発してきた解析技術によって大幅な高速化が可能となった。本研究は、この詳細反応機構/燃焼 CFD 技術を援用したものである。

支配方程式は、各化学種質量保存式を考慮した圧縮性 Navier-Stokes 方程式で、熱的完全気体を仮定した。方程式の解法については、文献[Terashima and Koshi, Combust. Flame, 2015]を参照いただきたい。アンモニアの詳細反応機構には、Otomo ら[Otomo et al., Int. J. Hydrogen Energy, 2018]が提案した UT-LCS モデル(30 化学種, 212 反応)を採用した。解析では、軸対称条件を仮定した。軸対称バーナー中心から燃料アンモニアが、その周りから酸化剤が噴射される。バーナー形状や流入条件の詳細は文献[武石, 機論, 2017]を参照いただきたい。解析において保炎消炎の判断は次のように行った。まず、リム壁温度を 2000 K として強制的に定常火炎を形成させる。その後、リム壁を想定される壁温度 500 K に下げ、火炎の保炎消炎を観察した。

2.1 保炎消炎現象の予測

図 1 に、保炎消炎境界に関する実験と燃焼 CFD 結果の比較を示す。バーナーリム厚さ(横軸)や酸化剤の酸素富化率(縦軸)が増加すると、保炎領域が拡大していく傾向を確認できるが、我々が実施した燃焼 CFD によって実験結果の保炎消炎境界を非常に良く予測できていることがわかる。リム壁温度の設定に任意性は残るが、詳細反応機構を適用した本燃焼 CFD の妥当性および有効性が示された大きな研究成果といえる。

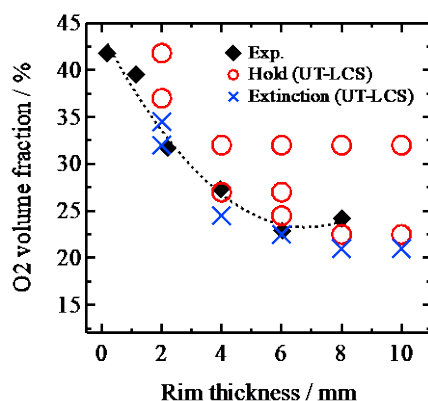


Fig. 1 Comparison of flame hold/extinction boundary between the experiment and CFD results

2.2 保炎消炎機構

解析結果から、まず保炎機構については、リム壁背後に形成される再循環領域が重要な役割を担うことがわかった。図 2 は、リム厚さ 6 mm, 酸素富化率 24.5% の場合の温度分布と流線を示しているが、リム壁背後に再循環領域が形成されていることを確認できる。再循環流れによって、①未燃燃料および酸化剤が供給、②燃焼ガス(未燃ガスの着火を促進する高温源)が下流から供給、そして③供給される燃料および酸化剤の滞留時間が確保、といった火炎を維持しやすい要素がもたらされる。再循環領域の大きさは、リム厚さに比例するため、①から③の要素によって、リム厚さ(図 1 横軸)の増加にしたがい保炎領域は拡大していく。しかし、リム厚さが 8 mm 以上の条件では、保炎領域の拡大は見られなくなる。これは、リム壁背後の再循環領域は大きくなるが、未燃燃料と酸化剤噴流間の距離も大きくなり、火炎形成がそもそも難しくなるためである。そのため、リム厚さ 10 mm より厚い条件の解析は実施していないが、リム厚さの増加とともに保炎領域は縮小していき、保炎消炎曲線は下に凸の形状になると考えられる。

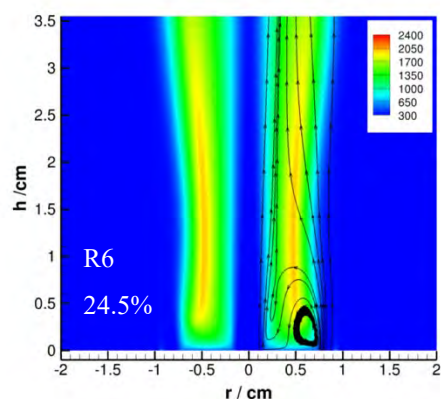


Fig. 2 Temperature distributions and streamlines for the rim thickness of 6 mm and O_2 volume fraction of 24.5%

消炎機構については、リム厚に依存してその機構も異なる。リム厚さが小さい場合、再循環領域の形成が無くなるため、基本的に消炎しやすく、図 1 から消炎領域が広いことを確認できる。また、リム壁からの熱損失も小さいため、その消炎機構は、燃料および酸化剤噴流の速度差に起因する火炎伸張効果が支配的となると考えられる。図 3 左に示すように、リム厚さが小さく、火炎伸張が強い場合、リム壁背後で火炎を維持することができず、浮き上がり火炎の形態を取りながら消炎していく。一方で、リム厚さが増加すると、再循環領域の形成で火炎は維持されやすくなるが、リム壁への熱損失とのバランスで保炎消炎が決定される。図 3 右より、浮き上がり火炎とは異なり、リム壁背後の燃焼ガス領域が最後まで残り、リム壁熱損失による消炎(熱消炎)の発生を確認できる。このように、実験に比して詳細な燃焼流れ場を観察・解析できることは本燃焼 CFD の利点といえる。

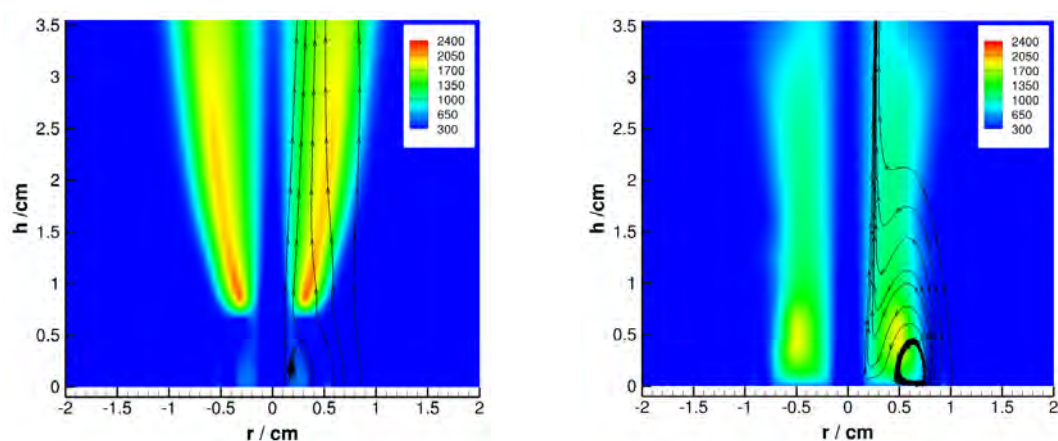


Fig. 3 Temperature distributions at the moment just before the extinction occurs (left: rim thickness of 2 mm and O_2 fraction of 35%, right: rim thickness of 6 mm and O_2 fraction of 22.5%)

2.3 保炎消炎を支配するパラメータ探求

図 4 に、数値実験として行った UT-LCS モデルとは異なる反応機構である Konnov モデル [Konnov, Combust. Sci. Technol., 2002] で得られた保炎消炎境界の結果を示す。Konnov モデルもアンモニア燃焼に適用される反応機構であるが、保炎消炎境界を再現できないことが示さ

れた。解析結果では、全てのリム厚さ条件において、保炎領域は拡大し(低酸素富化率で保炎)、保炎消炎境界がその形状を維持しながら下方へ移動する。UT-LCS と Konnov モデル間で保炎消炎境界は異なるが、温度をはじめとした燃焼流れ場には大きな差は見られなかった。

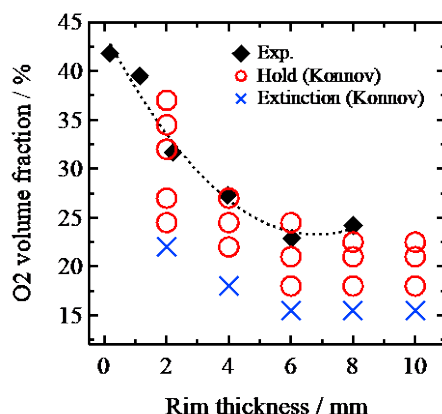


Fig. 4 Comparison of flame hold/extinction boundary between the experiment and CFD results using Konnov model

UT-LCS と Konnov モデル間で大きく異なる燃焼特性は層流燃焼速度であり、Konnov モデルは層流燃焼速度を大きく見積もる傾向がある。今回対象としている同軸バーナー火炎では典型的な非予混合火炎が形成されるが、リム壁背後の再循環領域には部分的に予混合領域が形成されている。よって、上流側の火炎先端位置は予混合的燃焼特性に支配され、これが保炎消炎条件に影響を及ぼしている可能性がある。そこで、酸素富化率の代わりに層流燃焼速度を用いて書き直した保炎消炎境界を図 5 に示す。リム厚さ 4 mm 以上の条件では、両モデルで得られた保炎消炎境界はほぼ一致することが示され、層流燃焼速度が適切な支配パラメータとなることを示唆する。これは、予混合領域の形成が保炎消炎機構に重要であることも意味する。

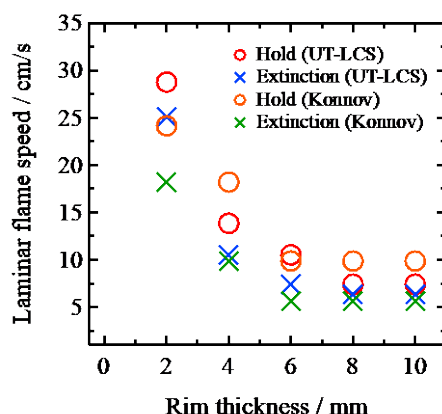


Fig. 5 Flame hold/extinction boundary using laminar flame speed

一方、リム厚さが小さい条件では、再循環領域が形成されにくく、予混合領域の形成も明確ではないため、層流燃焼速度による保炎消炎境界の決定は困難と予想される。実際、図 5 においても、リム厚さ 2 mm の場合には、両モデルの保炎消炎境界が一致しないため、別の異

なるパラメータの探求が必要といえる。また、層流燃焼速度は、大気圧、温度 300 K、そして当量比 1.0 を仮定して求めたもので、バーナー火炎における予混合領域の条件を正確に反映していない点は今後考慮が必要である。

3. 研究目標の達成状況

本燃焼 CFD によって、実験で観察されたアンモニアバーナー火炎の保炎消炎境界を良く再現できたことは大きな研究成果である。また、実験では取得が困難な燃焼流れ場の観察から、特にリム厚さに依存する保炎消炎機構を明確にした。

4. まとめと今後の課題

アンモニア燃焼特性の詳細理解を深めるため、基礎的なバーナー非予混合火炎を対象に燃焼流体 CFD 解析を実施した。本燃焼 CFD によって、実験で観察された保炎消炎境界を、非常に良い精度で予測できることを示した。保炎機構はリム厚さ背後の再循環領域、消炎機構は火炎伸長とリム壁熱損失が支配的要因であることを明らかにした。引き続き、異なる反応機構や異なる燃料を用いた比較解析によって、保炎消炎の鍵となる化学反応素過程の特定、保炎消炎機構に重要となる燃焼特性(火炎伸長率、層流燃焼速度、着火遅れ時間など)を抽出し、保炎消炎境界を分類可能な統一的パラメータの提案を行いたい。

5. 研究成果リスト (※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

無し。

著書

無し。

国際学会

無し。

国内学会・研究会等

本瀬俊太郎, 寺島洋史: アンモニア非予混合噴流火炎の保炎・消炎解析: 噴流流速の影響, 日本機械学会北海道学生会第 51 回卒業研究発表会講演会, 2022 年 3 月, オンライン。

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

無し。

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL28APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.4～2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022年7月15日提出

マイクロ・ナノスケールの表面構造を持つ物体に働く

熱的駆動力に関する研究

小原 拓, オティック・クリントジョン

東北大学流体科学研究所 教授, D3

米村 茂

中部大学工学部機械工学科 教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

静止している気体中に、気体とは異なる温度の物体を静かに置いた状況を考える。物体の温度が高い場合には、物体まわりの気体は温められて膨張し軽くなるため上に流れ、下から冷たい気体を吸い上げ、定常的に対流が生じることになる。この対流は、軽くなった気体に働く浮力により駆動されているため、重力が働かない状況下では、生じ得ない。連続体的なナビエ・ストークス方程式やエネルギー方程式によると、重力がない場合には、定常状態においては、物体から周囲の気体に向かって定常的な温度の空間変化が現れるが、気体の圧力は一樣になるため、気体の各要素に働く力はつり合っており、流れは生じない。ナビエ・ストークス方程式が成り立つ通常のサイズの流れ場であればこのようになるはずである。

しかし、流れ場が気体分子の平均自由行程程度まで小さい構造を持つ場合には状況は異なる。低温の気体の中に尖った先端を持つ高温で等温の物体がおかれ、その先端から平均自由行程程度の空間スケールの領域にある気体を考える。この物体は等温であるので、物体の先端近傍では物体の先端を取り囲むように気体の等温面が現れる。その場合、先端付近の気体の温度は比較的低温で、先端から離れた物体表面近くの気体の温度は高くなる。つまり、先端から物体の表面に沿って気体の温度が低温から高温に変化する。このような場合、高温側から物体表面に入射する分子は低温側から物体表面に入射する分子より大きな運動量を持ち込むため、物体は高温側から低温側に向かって力を受け、気体はその反作用として反対向きの力を受け低温側から高温側に向かう流れが生じる。このような流れを熱先端流という。

前述したように、このような流れと力は連続流領域では現れず、クヌッセン数が高い場合にのみ現れる。このようにクヌッセン数が高い場合には連続流では考えられないような状況

で物体に力が発生することが原子間力顕微鏡などの実験で確かめられており、その発生メカニズムは状況によって様々で、良く分かっておらず、総じてクヌッセン力と呼ばれている。

我々の研究グループでは図1のようなノコギリ歯状のマイクロ・ナノスケールの表面構造をもつ静止基板を高温に加熱し、その近くに低温の物体を配置して分子の平均自由行程程度の距離まで近づけた場合に、低温物体と静止基板の表面に平行方向の相対運動を誘起する接線方向クヌッセン力が両物体に働くことを数値計算により確認している。この力を利用すれば物体を基板に平行方向に推進することが可能となる。本研究課題ではこの接線方向クヌッセン力のメカニズムを調べることを目的とする。メカニズムを理解することで、物体駆動により有利な方法の提案が可能となる。

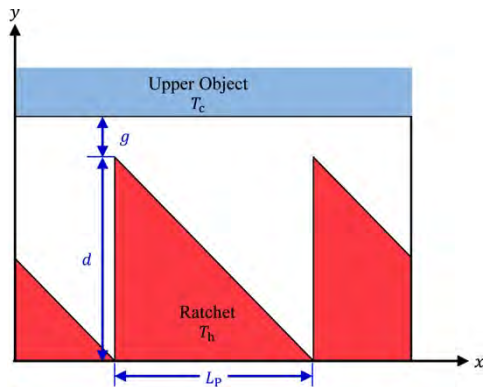


図 1

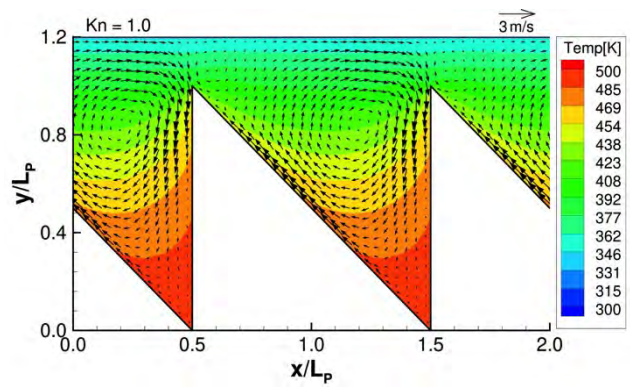


図 2

1.2 研究期間内の最終目標

ノコギリ歯状の表面構造で現れる接線方向クヌッセン力の生成メカニズムを明らかにする。

2. 研究成果の内容

2.1 理論解析

これまでの従来研究により、ノコギリ歯状の表面構造を用いた場合に図2のように流れが生じて、上側の物体に右方向の接線方向クヌッセン力が働くことは確認されていたが、そのメカニズムは良くわかっていなかった。従来研究では、図2で生じている右回りの渦の流れにより、上側物体に右向き力がかけると定性的に説明されていた。しかし、クヌッセン数 Kn が1程度まで大きくなる場合、両面間の距離が平均自由行程程度であるため、両面間の流れを構成している分子と全く干渉せずに上側物体表面に入射する分子が多数存在するため、流れの寄与だけによる説明では不十分である。

原子・分子のミクロな視点に立てば、上側物体表面にもたらされる運動量は全て気体分子の衝突によってもたらされているはずである。流れの粘性の寄与も、分子の衝突によってもたらされる運動量に含まれる。そこで、本研究では図3のように、上側物体表面に入射する分子を二つのグループに分けて考えることにした。一つは図3(a)のように、ノコギリ歯の高温表面で拡散反射して、その後、分子間衝突を起こすことなく、そのまま上側の低温表面に入射する分子のグループであり、もう一つは図3(b)のように、気体中で他の分子と分子間衝突を起こした後、上側の低温表面に入射する分子のグループである。

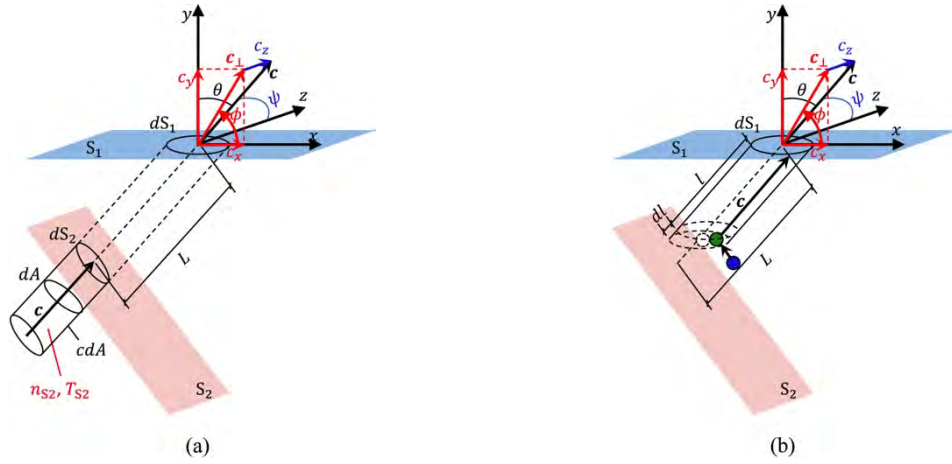


図 3

速度 c の分子の自由行程の平均値 λ_c を考慮すると、これら2つのグループによって物体表面にもたらされる接線方向応力はそれぞれ

$$J_{M,x}^{(\text{wall})} = \int_{\phi_1}^{\phi_2} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \exp(-L/\lambda_c) mn_{S_2} \sin^3 \psi \sin \phi \cos \phi c^4 \left(\frac{m}{2\pi k_B T_{S_2}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2k_B T_{S_2}} c^2\right) dcd\psi d\phi. \quad (1)$$

$$J_{M,x}^{(\text{gas})} = \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \{1 - \exp(-L/\lambda_c)\} mn_g \sin^3 \psi \sin \phi \cos \phi c^4 \left(\frac{m}{2\pi k_B T_g} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2k_B T_g} c^2\right) dcd\psi d\phi. \quad (2)$$

と導かれ、これらの和があらゆる分子の入射によって物体表面にもたらされる接線方向応力を表すので、これを接線方向クヌッセン力の理論式とする。ここで、上付き添字の(wall)は高温表面で反射されてから直接物体表面に入射する分子グループの寄与を意味し、(gas)は気体中で衝突してから物体表面に入射する分子グループの寄与を意味している。

この理論式と DSMC 法による数値実験によって得られる物体表面の接線応力分布を図 4 に示す。図 4 の下部に示されている線図は、本研究で取り扱ったラケット構造の配置を示している。ただし、縦方向に縮尺を縮めて表示していることに注意されたい。この図から、理論による接線応力分布の予測は数値実験の結果と同様の特徴を示すものの、 $0.7L_p < x < 1.4L_p$ の領域ではある程度大きな差異が生じている。図 2 を見ると、この差異が生じている領域 $0.7L_p < x < 1.4L_p$ では物体表面近くで右向きの流れがあることに注意されたい。本研究で導いた理論式においては、気体は静止しているものと仮定した。つまり、流れの寄与は考慮されていない。そこで、物体表面から平均自由行程離れたところの流速を調べ、その場所にある分子が、その位置での分子の平均運動量を持って、壁に入射してくると考え、それを流れが作る粘性応力として考慮して理論式に合算すると図 5 に示されるように数値実験の結果と非常に良く一致する。さらに物体表面近傍の温度場による熱応力の寄与も加えると連続流領域から $\text{Kn}=1$ の遷移流領域まで接線方向クヌッセン力を記述できることを確認している。

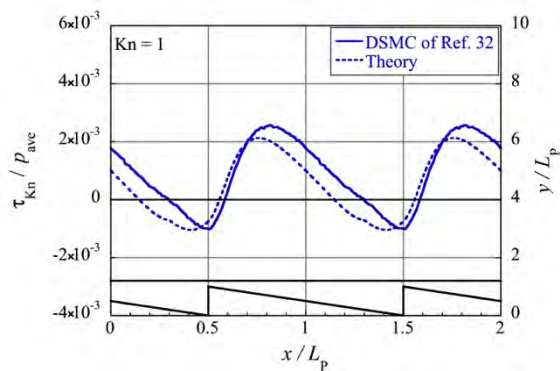


図 4

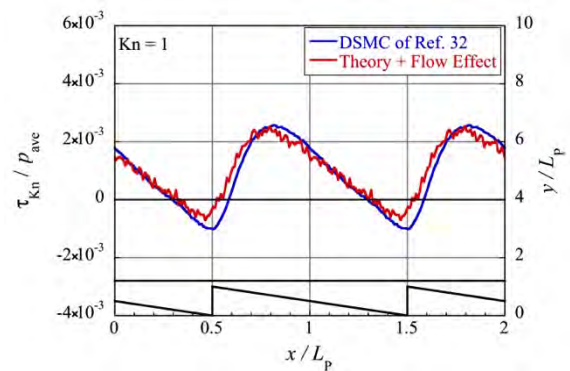


図 5

2.2 本現象のメカニズム

理論式で接線方向クヌッセン力を記述できているので、分子運動の観点からどのようにして接線方向運動量が伝わっているかが理解できる。接線方向クヌッセン力を伝えるのに最も重要な役割を果たすのは、高温のラチェット表面で散乱され、分子間衝突を起こさずそのまま入射する分子である。これらは、気体中で衝突して入射する分子よりも高い運動エネルギーと運動量を持っている。ラチェットがない場合には、物体表面の近くには気体分子は存在するものの、それらに決まった方向性はなく、接線方向の力は現れない。しかし、物体表面近くに高温のラチェット表面がある場合には、ラチェットに入射する分子を高温に加熱して反射することになる。ラチェットがない場合にも、上述の反射分子と同じ数の分子が、ラチェットが存在する領域からラチェットが無い領域に入射するのであるが、ラチェットがある場合には、あたかもこれらの分子を加熱して、運動量を高めて撃ち出すような効果がある。その分子の数流束は、ラチェット表面に対して垂直方向が最も強くなるので、この分子流が物体表面に届けば、ラチェット表面の方向に応じた力が物体表面に伝わるのである。図 1 のラチェットのように右斜め上を向いている面がある場合には、そこから飛び出した分子は物体表面に強い右向き運動量をもたらすことになる。この効果はクヌッセン数が 1 程度まで大きくなると顕著になる。一方で、クヌッセン数が 0.3 程度まで小さくなると急激に減衰し消滅してしまう。連続流に近い小さなクヌッセン数では、物体とラチェットの表面間距離 L が平均自由行程 λ_c の数倍程度以上になるため、ラチェット表面での反射分子が物体表面に無衝突で到達できる確率 $\exp(-L/\lambda_c)$ が非常に小さくなり、全く到達できなくなるためにその寄与が消滅するのである。これがこの接線方向クヌッセン力が連続流領域で現れず、クヌッセン数が 1 程度まで大きくなった時に現れる理由である。連続流に近いクヌッセン数では、反射分子の寄与は消滅してしまうが、熱的に誘起された流れによる粘性応力と熱応力の和で説明することができる。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、表面微細構造の形状を変えて、ノコギリ歯のラチェット構造よりも、斜め方向に尖った突起があるような表面構造の方が接線方向クヌッセン力生成により良いということ进行を明らかにした上で、接線方向クヌッセン力生成メカニズムを理論解析により明らかにした。研究目標は達成されたと言える。

4. まとめと今後の課題

本研究により、ラチェット構造の場合の接線方向クヌッセン力のメカニズムは解明できたが、クヌッセン力が起こる状況は一通りではなく、状況に応じて異なるメカニズムでクヌッセン力が生成されているものと考えられる。そのため、今後も想定された状況ごとにクヌッセン力の生成メカニズムを研究して行く必要がある。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌

1. C.J.C. Otic and S. Yonemura, “Effect of different surface microstructures in the thermally induced self-propulsion phenomenon,” *Micromachines*, Vol.13, 871 (2022).
2. C.J.C. Otic and S. Yonemura, “Mechanism of tangential Knudsen force at different Knudsen numbers,” *Physics of Fluids*, Vol. 34, 072010 (2022).

国際学会

1. S. Yonemura and C.J.C Otic, “On the mechanism of the thermally induced tangential Knudsen force,” 32nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (2022).
2. C.J.C. Otic, T. Ohara, and S. Yonemura, “On the tangential Knudsen force induced by a heated substrate with surface microstructure,” *Proceedings of the Eighteenth International Conference on Flow Dynamics*, 491–492 (2021).
3. C.J.C. Otic, X. Li, and S. Yonemura, “A study on the microscale gas flow in the noncoalescence phenomenon between droplet and liquid pool,” *Proceedings of the Eighteenth International Conference on Flow Dynamics*, 748–749 (2021).

国内学会・研究会等

1. オティック・クリントジョン, 小原 拓, 米村 茂: 表面微細構造をもつ加熱基板近傍に置かれた物体に誘起される接線方向クヌッセン力の源, 日本機械学会 2021 年度年次大会, J052-11 (2021).
2. オティック・クリントジョン, 小原 拓, 米村 茂: 表面微細構造によって誘起される接線方向クヌッセン力のメカニズムに関する一考察, 日本流体力学会年会 2021, 202 (2021).

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

1. *Micromachines* で出版された学術雑誌論文 1 が “Feature Paper”, “Editor’s Choice” に選ばれた。
2. *Physics of Fluids* で出版された学術雑誌論文 2 が選ばれ、米国物理学教会の American Institute of Physics (AIP) Showcase で特集記事が組まれた。

<https://www.growkudos.com/publications/10.1063%25252F5.0096324/reader>

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL29APR21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.04~2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 02 月 28 日提出

ガスタービンおよび工業炉用バーナに対応した気液アンモニア 噴流燃焼に関する研究

小林 秀昭

東北大学 流体科学研究所 教授

Somarathne, K.D. Kunkuma A.

東北大学 流体科学研究所 特任研究員

Colson, Sophie

東北大学 流体科学研究所 特任助教

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

最近の気体アンモニア (GNH₃) / 空気燃焼に関する先進的な研究により、2050 年までに NH₃ がカーボンニュートラル社会の有力なエネルギー源となることが示された。当研究室は、2014 年から 2019 年の SIP プロジェクトにおいて、GNH₃/空気燃焼および GNH₃/CH₄/空気燃焼を広範囲に研究した。その結果、GNH₃/空気燃焼では、2 段リッチ-リーン燃焼技術により、当量比が約 1.1 の場合、未燃 NH₃ 排出をゼロとしながら、O₂ 濃度 16% での排ガス中の NO_x 排出を 100 ppm 程度まで低減することができた。しかし、NH₃ は常温では高圧シリンダ (0.9 MPa) で液体として市販されているため、GNH₃/空気燃焼ではガスタービン設備に追加コストが発生する。すなわち、液体アンモニア (LNH₃) の気化と燃料蒸気の再圧縮のためのエネルギーコストと、それに関わる設備コストによるものである。このエネルギーコストは、NH₃ の低位発熱量の 7~8% 近くを蒸発潜熱が占めることに起因する。この弱点を克服するための解決策の 1 つは、液体アンモニア (LNH₃) 噴霧の直接燃焼である。2019 年から 2021 年にかけて、当研究室は FREA とともに、メタン (CH₄) と混焼するガスタービン燃焼器への LNH₃ 噴霧の採用に成功している。0.25MPa の中程度の高圧で、2 段燃焼器を用いた研究では、CH₄ に対する LNH₃ の混合比 (発熱量ベースの熱量比) は 50% から 100% まで変化させたこの研究では、火炎安定化のために予熱された (500 K 以上) 接線方向の旋回流を使用した。熱量比 100% では許容できないほど高い NO 排出を示したが、50%~70% の LNH₃ 火炎では、NO と未燃 NH₃ 排出が非常に低くなった。同時に、2019~2021 年の期間、H₂/空気混焼による LNH₃ 噴霧燃焼の数値シミュレーションを行い、LNH₃ 熱量

比 49%で安定した低 NO_x 燃焼を達成した。これは、LNH₃ 噴霧燃焼に関する世界初の数値研究である。本研究では、LNH₃ 熱量比を 50%から 100%まで増加させることで先行研究を拡張するとともに、GNH₃ 燃焼においても、低エミッション燃焼を実現し、工業炉などへの新たなアンモニア燃焼の適用を目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、産総研 FREA マイクロガスタービンを想定し、0.3MPa までの高圧力下のガスタービンモデル燃焼器における液体アンモニア／空気乱流非予混合燃焼の燃焼現象及びエミッション特性を数値シミュレーションにより再現する。具体的には、低位発熱量に基づく燃料中のアンモニア発熱比 (ENH₃) を 50%から 100%に維持して、気体水素 (GH₂) と混焼する LNH₃ 噴霧火炎の燃焼・エミッション特性を数値的に検討する。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

高圧の LNH₃ がノズルから飽和圧力以下の低圧環境に噴射されると激しいフラッシュボイルリングによりフラッシングスプレーとなり二相混合流が発生する。LNH₃ のフラッシングスプレーに関する数値解析では、気相 (連続相)、液相 (離散相)、および二相間の相互作用を考慮する必要がある。気相ではオイラー的なアプローチを採用し、液相ではラグランジュ的なアプローチを採用した。噴霧中の液滴は分裂、抗力生成、フラッシュボイルリング、蒸発、熱伝達など多くの物理現象を生じる。これらの相互作用については、ラグランジアンアプローチを用いたサブモデルで計算された生成項をオイラーアプローチの気相方程式に導入するという、双方向の結合を数値研究に導入した。気相では連続性、運動量および化学種の保存に基づく圧縮性 Navier-Stokes 方程式を空間的にフィルタリングして用いた。高圧の LNH₃ が低圧環境に噴射され急速に加熱されるため、本研究では平衡蒸発モデルとは別に非平衡フラッシュ沸騰モデルを採用した。数値シミュレーションは、OpenFOAM-7 オープンソースコードのスプレーフォームソルバーを用いて実施した。本研究では3次元の計算領域で Large Eddy Simulation (LES) を実施した。

2.2 新しい現象の解明

アンモニア熱量比 (ENH₃) 50%から 100%までの LNH₃ / GH₂ / 空気火炎のアンモニア噴霧燃焼の数値解析に成功した (添付図参照)。LNH₃ 噴霧火炎がこのように安定した火炎構造となるのは、予熱空気供給に加えて大きな再循環量流領域を持つ燃焼器構造によるものだと考えられる。さらに、LNH₃ 噴霧の特異な現象を調べるため、大気圧および高圧での非反応性 LNH₃ 噴霧特性を数値的に調べ、実験結果との比較を行った。その結果、噴霧はそれぞれの圧力に対応する飽和温度よりもはるかに低い温度に達することがわかった。これは実験的にも確認され、フラッシュボイルリング現象が関係していると考えられる。しかし、周囲圧力が大気圧より高い場合には、最終的な火炎温度は高くなった。また、LNH₃ 噴霧に中空円錐ノズルを用いたにもかかわらず、噴射直後の NH₃ 蒸気および噴霧は非常に早く中心軸方向に収束することが数値的にも実験的にも明らかになった。これは、連続的な温度低下による比体積の減少が、燃焼場に影響を及ぼしていると考えられる。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、燃料中のアンモニア熱量比を 50%から 100%まで変化させながら、液体アンモニア噴霧火炎とガス状水素を混焼させた単段燃焼器の燃焼およびエミッション特性を調べた。アンモニア蒸気領域温度が 273 K (0 °C) と低いにもかかわらず、当量比 0.9 ~ 1.4 の広い範囲で火炎を安定化させることに成功し、アンモニア蒸気領域温度と当量比の関係を明らかにした。600 K の予熱空気と、内部循環をもたらす非常に強い旋回流が火炎の安定化に重要な役割を果たした。計算条件下で、未燃 NH₃ および NO 排出量が最小となる最適な当量比は、ENH₃ が 50%、60%、70%、100%の場合、それぞれ 1.37、1.32、1.28、および 1.15 であることが確認された。最適な当量比では、ENH₃ が 50% ~ 70% の場合、NO および未燃 NH₃ エミッションは約 500 ppm であった。しかし、ENH₃ が 100% の場合、排出量は 200 ppm であった。2 段燃焼を適用することで、未燃 NH₃ と NO を共に減少させることができる。

4. まとめと今後の課題

新たに提案した燃焼器構成と断熱壁条件を用い、さらに予熱空気により LNH₃ 噴霧燃焼の数値解析に成功した。今後は、低エミッション、特に N₂O エミッションを抑制しながら、等温壁条件での LNH₃ 火炎特性を調べることが重要と考えられる。

5. 研究成果リスト (※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

[1] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Flashing spray characteristics of LNH₃ fuel at various ambient pressures, Fuel, (2022) (投稿予定).

[2] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Combustion and emission characteristics of LNH₃/air and GNH₃/air flames co-fired with GH₂ in a gas turbine combustor at high pressures, Combustion and Flame (2022) (投稿予定).

著書

無し

国際学会

無し

国内学会・研究会等

[1] K.D.K.A. Somarathne, S. Colson, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Numerical study on effects of ammonia fuel fraction in liquid ammonia/hydrogen/air co-combustion at high pressure, 第 59 回燃焼シンポジウム (2021).

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

無し

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01AUG21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.8~2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

雰囲気 X 線光電子分光装置用差動排気ノズル周辺の圧力分布計算

森山 航太

東北大学工学部 電気情報理工学科応用物理学コース B4

山本 達

東北大学国際放射光イノベーションスマート研究センター 准教授

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

触媒・光触媒、燃料電池、リチウムイオン電池を初めとした物質・エネルギー変換材料は、反応条件下で材料表面の構造・組成が変化するため、その反応メカニズムの本質的な理解のためには反応条件下での直接観測が不可欠である。実動作下の材料やデバイスを直接観測し、測定対象の構造と機能の相関を見出すことを目的とした計測手法を「オペランド計測」と呼び、現在多くの研究分野で重要テーマとなっている。

最近急速な進展を見せているオペランド計測法の一つとして、雰囲気 X 線光電子分光法 (Ambient pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy; AP-XPS) が挙げられる。従来の XPS 測定は真空中に限られていたが、AP-XPS では高輝度放射光 X 線と多段差動排気型電子レンズを利用した新規電子分光器によりガス雰囲気下での XPS 測定が可能になった。我々 (山本) は大型放射光施設 SPring-8 の高輝度軟 X 線ビームライン BL07LSU において AP-XPS システムを開発し、触媒材料のオペランド計測研究を推進してきた。同システムにおける測定可能ガス圧は軟 X 線では世界最高レベルの 100 mbar であるが、現在東北大学青葉山新キャンパスに建設中の次世代放射光施設 (ナノテラス) では大気圧 (1 atm, 1013 mbar) での測定を目指している。

AP-XPS では差動排気された小開口サイズのノズルを試料表面に近づけることで光電子のガス中での散乱を抑えている (図 1)。しかし、差動排気ノズルを試料に近づけすぎると、試料表面の圧力が低下してしまう。そのため、最適な試料・差動排気ノズル間距離を決定するためには、差動排気ノズル周辺のガス圧力分布を知る必要がある。本研究では、数値流体力学 CFD 計算により差動排気ノズル周辺のガス圧力分布をシミュレーションすることを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、AP-XPS の最重要コンポーネントである差動排気ノズル周辺のガス圧力分布計算を行い、その計算結果を元にノズル形状を最適化し、世界で初めて大気圧下での軟 X 線 AP-XPS 計測を実現することを最終目標にしている。

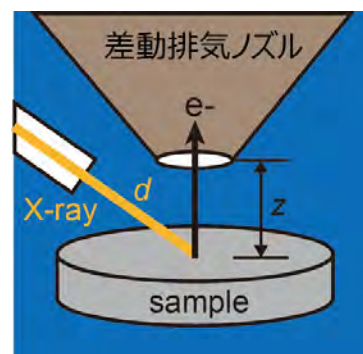


図 1 雰囲気 X 線光電子分光法における実験配置図

2. 研究成果の内容

今年度は CFD 計算に習熟することを目的として、先行研究(J. M. Kahk *et al.*, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **205**, 57 (2015).)における差動排気ノズル周辺のガス圧力分布計算結果の再現シミュレーションを行い、同様の結果を得ることに成功した。CFD シミュレーションは ANSYS Fluent を用い、層流と仮定し、ノズル開口サイズ 300 μm 、試料・ノズル間距離 300 μm 、ガス圧 30 mbar の条件に対し行った。

3. 研究目標の達成状況

今年度は計画していた先行研究のシミュレーション結果を再現することに成功し、ANSYS Fluent を用いたシミュレーションに習熟することができた。

4. まとめと今後の課題

今年度 ANSYS Fluent を用いたシミュレーションに習熟することができたため、今後は現在 SPring-8 で使用している開口サイズ 50 μm の差動排気ノズル周辺の圧力分布を計算する。更には最終目標である大気圧下での軟 X 線 AP-XPS 計測を可能にするノズルの設計及びシミュレーションを行っていく予定である。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

該当なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01NOV21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.11～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 07 月 14 日提出

電場下の鉄内部における C 原子エレクトロマイグレーション現象の解析

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

拡散現象は液体や気体のような流体に限らず, 金属などの固体の内部でも生じる. 特に, 鉄内部の炭素拡散は鉄鋼材料の特性を決定する上で極めて重要である. 一般に, 鉄内部の炭素拡散は分子レベルの熱運動に依存することが知られている (温度依存性). その一方で, 近年, 低温かつ短時間での処理が可能な手法として注目されている放電プラズマ焼結 (Spark Plasma Sintering : SPS) 法では電場による炭素拡散も大きな要因を占めると考えられている (電場依存性). 炭素原子の格子間拡散は鉄鋼の相変態の反応速度制御に関わるために重要である. そこで本研究では, 分子一つひとつの運動を数値計算できる分子動力学シミュレーションを用い, 鉄内部における炭素拡散の温度依存性と電場依存性について解析を行う. SPS 法による次世代の材料開発は世界最高水準の学術的に価値ある取り組みが多く, 本研究はそれらの基礎として位置づけられる.

本研究では, 分子動力学シミュレーションを用いて, 炭素原子の拡散について電場依存性と温度依存性を定量的に明らかにするとともに, 炭素拡散にともなう局所的な炭素濃度の変化が鉄の相状態にどのような影響を与えるかという点について, 熱力学的積分法を用いて各構造の自由エネルギーを比較することで明らかにすることを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

鉄結晶の相変化を考慮したポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションを行い, 温度や電場, 炭素濃度等のパラメータを変更して計算を行い, 鉄内部における炭素拡散の電場依存性と温度依存性, 炭素拡散にともなう鉄の相状態のメカニズムを解明することを最終目標とする。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

先行研究にて, 固体状態の鉄における炭素拡散の温度依存性と電場依存性について報告され

ているが、シミュレーション時間内に現象を再現するために極端に大きな電場を作用させている点に問題がある。そこで、固体状態での解析を行う前段階として、液体状態の鉄に対して、先行研究と比べて十分に弱い電場を作用させた場合の炭素拡散の電場依存性と温度依存性について調べる。さらに、その知見をもとに、複雑な固体状態の鉄を対象とした炭素拡散の検討を共同研究者とともに行う。固体状態と液体状態の解析を分担して行い、効率よく研究を推し進められる点に共同研究の意義がある。

系の温度変化に対する鉄の密度変化の不連続変化から融点を明らかにし、液体状態と固体状態それぞれの鉄内部における炭素拡散のシミュレーションを行った。分子動力学シミュレーションを用いて、液体状態と固体状態の鉄内部における炭素の拡散現象について、炭素原子の平均二乗変位や拡散係数を定量的に求めることで、温度依存性と電場依存性を定量的に評価する。

3. 研究目標の達成状況

温度依存性に関して、系の温度上昇とともに炭素原子の拡散係数が上昇することを確認し、固体状態の拡散係数が液体状態よりも大きく低下することを確認した。電場依存性に関しては、電場の強度と方向に依存して炭素原子の平均二乗変位が大きくなることを確認した。

4. まとめと今後の課題

分子動力学シミュレーションを用いて、液体状態と固体状態の鉄内部における炭素の拡散現象について、炭素原子の平均二乗変位や拡散係数を定量的に求めることで、温度依存性と電場依存性を定量的に評価した。さらに、電場の強度と方向に依存して炭素原子の平均二乗変位が大きくなることから、SPS法を用いた場合には炭素分布の偏りが電場方向に生じることが示唆された。今後は、電場に応じた炭素分布の偏りによる鉄の相変態について検討を進め、今回の取り組みで得られた固体状態と液体状態の結果を合わせることで、SPS法の初期段階から中期段階に関する鉄中の炭素拡散の温度依存性と電場依存性の詳細を明らかにする予定である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

特になし

著書

特になし

国際学会

特になし

国内学会・研究会等

特になし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

特になし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02NOV21
研究種別	共同研究
利用期間	2021.11~2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

燃焼振動の解明に向けた直接数値計算による

火炎と非線形音響の相互作用の調査

丸田 薫, 中村 寿, 森井 雄飛,
 東北大学流体科学研究所 教授, 准教授, 助教,

Ajit Kumar Dubey

Indian Institute of Technology Roorkee Assistant professor

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

研究背景

熱効率の高いガソリンエンジンを開発する上で問題となるのは, 高圧縮比で発生しやすいノッキングである. ノッキングは, 流体と化学反応が複雑に絡み合った結果発生する現象であり, エンジン内を伝播する圧力波はノック発生に強く影響を与える. また, ロケットエンジンの開発の初期段階で問題となる燃焼振動は, エンジンを破壊する可能性があり, 開発を阻害する. ノッキングや燃焼振動は圧力と燃焼の連成問題であり, 実験ではその詳細が得られず, 現象の詳細な理解には至っていない. 本研究では, 燃焼と圧力の干渉を忠実に再現できる直接数値計算を適用する. この直接数値計算ソフトウェアには当研究室で開発した超高速な化学反応の時間進行法である MACKS を組み込んでおり, 流体研のスパコンを用いることで世界最大スケールの数値計算を実施可能である.

研究目的

火炎面において, 圧力が化学反応と流れ場に及ぼす影響を調べることは, 実験で困難であるため, 実現象を忠実に再現できる直接数値計算を実施する. まず, 実験結果が公開されているノッキングを対象に直接数値計算を実施し, 圧力変動が燃焼波に与える影響を調査する. その後, 研究分担者が実施した管内を予混合気で満たし, 片方から着火させて自励振動を起こす実験に対して直接数値計算を実施する. _

1.2 研究期間内の最終目標

層流燃焼は燃焼速度が音速よりもはるかに遅いため, 一般に非圧縮性流体を仮定して解かれる. 本研究では音響との連成を調査するため, 圧縮性 CFD 解析を実施することで, 現

象を解明する。また、得られた結果を分析することで、燃焼振動の発生を抑制可能な理論を構築することを最終目標としている。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

実験を再現可能なノッキングの直接数値計算は本共同研究で得られた結果を除いて存在しない。また、Dubey 先生は音響理論の構築に長けている。共同研究の成果として、ノッキング現象に関して、初期温度を変化させることにより、ノッキングの強度や発生位置が大きく異なる結果を得ることができた。

3. 研究目標の達成状況

実験結果が公開されているノッキング現象に対して、直接数値計算を実施し、初期温度を変化させることで、ノック強度やノックの発生位置が異なることを確認できた。伝播している火炎の振動が強くなる位置は Dubey 先生の理論式で得られた結果とよく一致していることも確認できた。

4. まとめと今後の課題

初期温度の影響によって、自着火発生のメカニズムの違いを明らかにすることができたが、初期の着火エネルギーによる影響も結果に大きく影響する可能性がある。今後は、初期温度だけでなく、着火エネルギーの違いについても調査し、閉じた系における火炎と非線形音響の相互作用を明らかにする。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

Ajit Kumar Dubey, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, and Kaoru Maruta: 2-D DNS study of Autoignition Modes in n-Heptane Combustion, 13th Asia-Pacific Conference on Combustion, 2021

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

I. 研 究 成 果 概 要

一般研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01APR20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.04～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022 年 05 月 02 日提出

大気圏再突入カプセルの動的不安定現象に関する研究

永井 大樹, 藤田 昂志

東北大学流体科学研究所 教授, 助教

野村 将之, 吉實 優子

東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 博士 4 年, 修士 2 年

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

これまでの宇宙探査では, 宇宙から地球の大気圏へ再突入し地上へ確実に帰還するため, 様々な形状の大気圏再突入カプセルについての研究開発が行われ用いられてきた. この再突入カプセルは遷音速や亜音速域での飛行時に, 動的に不安定となることが知られている. この現象は, 主としてカプセルのピッチ方向への大きな自励振動が起こるというもので, 減速・着陸のためのパラシュート開傘を難しくするなど大きな影響を及ぼしている. このため, 自励振動現象の解明やカプセルの空力特性・動特性を把握することが求められている. 過去の研究では, カプセル後胴部での圧力変動や圧力変動の位相遅れ, カプセル肩部での流れのはく離と後胴部での再付着のヒステリシスといったものが現象に関わっているものと考えられてきた. しかしながら, 未だ解明されていない点も多く残されている.

カプセル後胴部形状の違いによる動特性の変化を比較した先行研究では, 後胴部形状を半球状に変化させたときピッチ振動が収束し動的に安定となり, カプセルの動特性が著しく改善されたことが示されている. しかしながら, 半球の後胴部形状は空力加熱の影響を受けやすく, 現実的な形状とは言い難い. 一方で, 後胴部形状がカプセルの動特性に大きな影響を及ぼしていることは明らかであることから, 後胴部形状の違いによる動特性の変化を比較し検討することにより, 大気圏再突入カプセル全般の動的不安定現象の解明や, 将来の宇宙探査におけるカプセル設計に役立てられるものと考えられる.

本研究ではそのような背景のもと, 大気圏再突入カプセルの後胴部形状を変化させることで動特性が改善された形状を見出すことと, その形状でのカプセルまわりの流れ場を解析することにより, 自励振動現象を解明することを目的とした.

1.2 研究期間内の最終目標

最終目標は、動特性が改善される大気圏再突入カプセル形状の提案およびカプセルの自励振動現象の解明である。目標を達成するために、本プロジェクトでの数値流体計算により空力特性や動特性、カプセルまわりの流れ場解析を行い、遷音速風洞試験による実験計測との比較検証を行う。

2021年度は、カプセルまわりの流れ場やカプセル表面に加わる圧力などをより詳細に調査し、カプセル形状の違いによって自励振動が抑制された要因や自励振動が生じやすくなった要因について考察を行った。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 再突入カプセル肩部から後方の形状の違いによる流れ場の変化

大気圏再突入カプセル HTV Return Vehicle (HRV) の肩部から後方の形状が異なる 3 つのモデルでの 3 次元非定常数値計算を行った。計算条件は、JAXA 宇宙科学研究所の設備にて実施した遷音速風洞試験時と同じ条件とした。一様流マッハ数を 0.7 とし、総圧を 150 kPa とした。また、モデルの代表直径は 105 mm で、このときのレイノルズ数を 1.93×10^6 とした。トリム迎角での迎角固定および、移動格子を用いたピッチ方向への強制振動法によりカプセルを一定振幅・振動数でピッチ振動させた状態での非定常計算を行った。ピッチ振動の振幅および振動数は、風洞試験でモデルがピッチ振動し始めた際の値を用いた。数値計算は、JAXA により開発された非構造格子圧縮性流体解析ソルバー FaSTAR (FaST Aerodynamic Routines) により行った。支配方程式は 3 次元圧縮性ナビエ・ストークス方程式とし、乱流モデルは壁面近傍で Spalart-Allmaras model with rotation correction (SA-R)、遠方では Wall-Modeled LES (WMLES) とする IDDES を用いた。また、計算格子生成は JAXA により開発された自動格子生成ソフトウェア HexaGrid を用いて行い、格子のセル数は約 4800 万とした。

数値流体解析を行いその結果から、カプセル形状の違いによって自励振動が抑制された要因や自励振動が生じやすくなった要因について考察を行った。形状は、HRV カプセルの相似形状とした基準形状と、肩部を延長した Model 1、後胴部の角度を浅くした 10°形状の 3 つを用いた。

$Y = 0$ 平面上のマッハ数および表面 C_p コンター図からは、基準形状では迎角が変化しても流れ場に大きな変化は無く、表面 C_p の大きな変動も無いことが分かった。一方で Model 1 では、肩部を延長した部分の上面の表面 C_p が低くなり、低圧領域が形成されていた。10°形状では、後胴部の後方から背面の上部にかけて圧力が変動している領域があった。

表面 C_p プロットから算出した重心まわりのモーメントからは、基準形状では重心まわりのモーメントについても、迎角の変化によってモーメントが変動している領域は見受けられなかった。一方で Model 1 および 10°形状には迎角の変化によってモーメントが変動する領域が存在したために、Model 1 では自励振動が抑制され、10°形状では自励振動しやすくなったものと考えられる。

DMD 解析の結果からは、基準形状と 10°形状ではカプセルの上下面で位相が反対となる C_p 変動が見受けられ、この変動がカプセルをピッチ振動させた要因の一つである可能性が示された。

3. 研究目標の達成状況

2021年度に掲げた目標は概ね達成できた。現状では迎角固定とピッチ振動時のそれぞれ1種類ずつの試験条件についてのみしかDMD解析をしていない。今後は複数ケースに亘って解析を行い、自励振動現象に関わる流れ場構造を把握することが必要であるものと考えられる。

4. まとめと今後の課題

本プロジェクトは、大気圏再突入カプセルの後胴部形状を変化させたモデルでの数値流体計算を行い、動特性が改善されたカプセル形状を見出すこと、また、カプセルの自励振動現象の解明を目的および最終目標としている。2021年度は、カプセルまわりの流れ場やカプセル表面に加わる圧力などをより詳細に調査し、カプセル形状の違いによって自励振動が抑制された要因や自励振動が生じやすくなった要因について考察を行い、当初の目的を概ね達成できた。

現状では迎角固定とピッチ振動時のそれぞれ1種類ずつの試験条件についてのみ計算を行っている状況である。最終目標を達成するためにより多くの試験条件での計算を行う必要があり、これらは今後の課題となっている。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

無し

著書

無し

国際学会

Masayuki Nomura, Koji Fujita, Hiroki Nagai, Consideration of Suppression of Self-excited Oscillation by Different Re-entry Capsule Shapes, 18th International Conference on Flow Dynamics, 2021.

国内学会・研究会等

野村 将之, 藤田 昂志, 永井 大樹: 再突入カプセルの形状の違いによる自励振動抑制の一考察, 第65回宇宙科学技術連合講演会, (2021).

野村 将之, 藤田 昂志, 永井 大樹: 遷音速での自励振動を軽減する再突入カプセルの実験的評価, 第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, (2021).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

無し

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR02APR20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.04～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022年7月15日提出

温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた 各種燃料・電解液溶媒・冷媒の燃焼特性に関する研究

中村 寿

東北大学流体科学研究所 准教授

村上 雄紀, 高橋 伸太郎, 秋田 佳祐, 金山 佳督, 秋葉 貴輝, 阿部 一幾,
東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 博士学生

玉置 健太, 原田 拓実

東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 修士学生

丸田 薫

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

本研究では、内燃機関の熱効率向上や、可燃性を有するバッテリーの電解液溶媒や冷媒の防災を目的として、ガソリン燃料、電解液溶媒、冷媒の燃焼特性の調査を行う。燃焼特性の分析には、当該研究室の独自手法である温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いる。マイクロフローリアクタでは、リアクタ温度を外部熱で拘束することで、火炎が自発的な着火・消炎を繰り返す非定常火炎や、微弱な発熱を有する定在火炎という特異な性質を有する火炎を観察できる。これら火炎を観察することで、従来の燃焼解析手法では見ることが難しかった燃料固有の反応温度や反応過程について調べることができる。また、燃焼熱ではなく外部熱により対象燃料の温度が上昇させるという装置の特徴から、燃焼性の低い燃料に対しても安定な火炎を形成し、燃焼特性を調査することができる。本研究ではまず、着火・消炎を繰り返す非定常火炎の実験及び、実験を再現する数値解析コードの構築とそれを用いた数値解析を行う。実験との比較により、流体モデル及び燃焼化学反応モデルの検証とエンジン燃焼場において重要となる温度勾配下における着火と火炎伝播の燃焼現象を調査する。さら

に、定在微弱火炎を対象とした実験及び数値計算並びに数値計算を行い、燃焼反応機構の検証及び構築を行う。

1.2 研究期間内の最終目標

温度分布制御型マイクロフローリアクタの動的火炎を対象とした流体 CFD と化学反応計算を連成させた数値シミュレーションの構築し、ガソリン燃料に対する着火・火炎伝播・消炎特性等の火炎動態に関する知見の取得と、流体モデルを含めた数値モデルの検証を行う。さらに、燃焼器の効率化のためのガソリン基準燃料である PRF や、防災のための電池の電解液溶媒やフッ化物冷媒、エネルギーキャリアとしても着目されるアンモニアなどを対象として、実験と数値計算の比較することで、燃焼化学反応モデルの検証及び修正を実施する。

2. 研究成果の内容

2.1 マイクロフローリアクタにおけるノルマルヘプタンの火炎動態の数値解析

ガソリン燃料の主成分であり、強い着火特性を有するノルマルヘプタンを対象燃料とする。マイクロフローリアクタに燃料を特定の流速条件で供給することで着火と火炎伝播、消炎を繰り返す特異な非定常火炎が観察される。この特異火炎は、強い乱流と圧力変動を有する複雑なエンジン場から、シンプルな層流場に本質的な燃焼現象のみを抽出した現象と言える。よって本研究では、燃焼反応を考慮した流体数値シミュレーションにより特異非定常火炎を再現し、その燃焼過程を調査した。数値計算結果の解析から、燃料がマイクロフローリアクタの高温領域に到達し、高温着火するまでに、低温側から段階的に 3 つの熱発生速度ピークが現れることがわかった。実験では、高温着火した強い発光を伴う火炎が周期的に伝播するため、これら低温の熱発生速度ピークに相当する火炎を観察することが難しく、本数値計算結果を分析することで初めて捕らえることができた。これらピーク位置での化学種分布を分析することにより、過去の定常火炎で観察されていた冷炎、青炎、熱炎に相当する火炎であることがわかった。また、熱炎の着火後、火炎は定在する冷炎及び青炎を通過しながら伝播した。そこで、定在冷炎が火炎の伝播速度に与える影響を調査した結果、定在冷炎による温度上昇や化学種組成の変化によって、熱炎の伝播速度が上昇することが明らかとなった。

2.2 炭酸エステルの反応モデル検証

炭酸エステルは、再生可能エネルギーとバイオマスから合成されるカーボンフリー燃料として注目されている。また、リチウムイオンバッテリーの電解液の主成分として用いられている。したがって、高効率な燃焼器開発とリチウムイオンバッテリーの発火防止の双方の観点から、炭酸エステルの反応過程解明は重要な課題である。本研究では直鎖炭酸エステルとして分子量の小さいものから順に、炭酸ジメチル、炭酸エチルメチル、炭酸ジエチルの三種類を取り上げ、それぞれの分子構造と反応性の関係を調べた。また、直鎖炭酸エステル 3 種を含む化学反応モデルを開発した。実験の結果、エチル基を有する炭酸エチルメチルと炭酸ジエチルの方が炭酸ジメチルより、マイクロリアクタ内に形成される微弱火炎が低温側に位置した。開発したモデルは微弱火炎の位置を精度良く再現した。また、反応経路解析の結果、エチル基を有する場合、C-O 結合の解離による熱分解が酸化反応に先立って進行することが分かった。

3. 研究目標の達成状況

当初の研究目標をおおむね達成することができた。

4. まとめと今後の課題

非定常火炎を再現する空間 1 次元及び 2 次元数値モデルの構築が完了し、大気圧場におけるノルマルヘプタンの数値シミュレーションを実施した。シミュレーション結果より、ノルマルヘプタンの有する多段的な酸化過程や、低温酸化反応が火炎伝播に対し与える効果を調査することができた。また、直鎖炭酸エステルの包括的反応モデル構築および検証を実施することができた。引き続き、多様化する燃料の高効率化やエネルギー物質の発火防止のために、様々な試料の反応特性を調べる予定である。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. Keisuke Akita, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, 2D computations of FREI with cool flames for *n*-heptane/air mixture, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 38 (2021), pp. 2247-2255.
2. Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Effects of blending ratios on the reactivities of CH₂F₂/C₂H₅F refrigerant blends, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 38 (2021), pp. 2487-2495.
3. Keisuke Kanayama, Ajit K. Dubey, Takuya Tezuka, Susumu Hasegawa, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Study on products from fuel-rich methane combustion near sooting limit temperature region and importance of methyl radicals for the formation of first aromatic rings, Combust. Sci. Tech., Vol.194 (2022), pp. 832-849.
4. Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Go Asai, Kaoru Maruta, Reactivity of CO/H₂/CH₄/air Mixtures derived from In-cylinder Fuel Reformation Examined by a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, Combust. Sci. Tech., Vol.193 (2021), pp.266-279.
5. 金山 佳督, 高橋 伸太郎, 森倉 渉太, 中村 寿, 手塚 卓也, 丸田 薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた直鎖炭酸エステルの酸化及び熱分解に関する研究, 日本燃焼学会誌, Vol.63 (2021), pp.285-293.
6. Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Study on Oxidation and Pyrolysis of Carbonate Esters using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile. Part I: Reactivities of Dimethyl Carbonate, Ethyl Methyl Carbonate and Diethyl Carbonate, Combustion and Flame, Vol.237, 111810 (2022).

著書

該当なし

国際学会

7. Keisuke Akita, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, CFD Analysis on FREI with Low-Temperature Oxidation in a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile for *n*-Heptane/air Mixture, 17th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2020), Sendai, (2020.10.28), OS2-5, pp.122, 123.
8. Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Study on Effects of F/H Ratios on the Reactivities of CH₂F₂/C₂HF₅ Refrigerant Blends using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 17th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2020), Sendai, (2020.10.29), OS2-17, pp.151-152.
9. Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Keisuke Kanayama, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Takayuki Shirane, Kensuke Nakura, On the reactivity of carbonate esters examined by weak flames in a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Low-Carbon Combustion, Lille (2020.11.6), Session5, pp.57-58.
10. Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Gas-phase Reactivity Difference between Dimethyl Carbonate and Diethyl Carbonate in a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 17th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2020), Sendai, (2020.10.29), OS2-16, pp.149-150.
11. Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Oxidation of Dimethyl Carbonate and Diethyl Carbonate in a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 38th International Symposium on Combustion, Adelaide, Australia, (2021.1), GPR-13.
12. Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Effect of blending ratios on the reactivity of CH₂F₂/C₂HF₅ refrigerant blends, 38th International Symposium on Combustion, Adelaide, Australia, (2021.1.25), 1B05.
13. Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kenji Hiraoka, Kaoru Maruta, Composition and equivalence ratio effects on oxidation of DME/NH₃ mixtures examined by a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Cardiff-KAUST-Tohoku Early Career Researchers Ammonia Energy Workshop, (2021.2.24)
14. Hisashi Nakamura, Shintaro Takahashi, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Ajit Kumar Dubey, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Reaction zone separation by a micro flow reactor with a controlled temperature profile for mechanism validation of hydrocarbons, ammonia, refrigerants, and electrolytes, 3rd International Discussion Meeting on Chemistry and Technology of Combustion Application, Beijing, China

(2021.6.5).

15. Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura, Effects of H₂O diluents on ammonia oxidation examined by a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, (2021.10.27), OS2-5.
16. Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kenji Hiraoka, Kaoru Maruta, Investigations of Oxidation and Reactivity of Dimethyl Ether/Ammonia Mixtures by a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, (2021.10.27), OS2-4.
17. Shintaro Takahashi, Keisuke Kanayama, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Experiments and Kinetics for Oxidation and Pyrolysis of Ethyl Methyl Carbonate examined by a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, (2021.10.28), OS2-11.
18. Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, "Species Measurement for Studying Oxidation and Pyrolysis of Dimethyl Carbonate and Diethyl Carbonate using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile", Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, (2021.10.28), OS2-10.
19. Olivier Mathieu, Keisuke Kanayama, Claire Gregoire, Shintaro Takahashi, Takuya Tezuka, Sulaiman Alturaifi, Hisashi Nakamura, Eric L. Petersen, Kaoru Maruta, An Experimental study of ethyl-methyl-carbonate (EMC) combustion, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, (2021.10.29), CRF-66.
20. Artem Dmitriev, Keisuke Kanayama, Ksenia Osipova, Shintaro Takahashi, Andrey Shmakov, Takuya Tezuka, Denis Knyazkov, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Isomer-specific influence on kinetics of oxidation and combustion of n-heptane/toluene/propanal and n-heptane/toluene/acetone mixture, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, (2021.10.29), CRF-68.
21. Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Experimental and Modeling Study on Oxidation of Three Linear Carbonate Esters using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 13th Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC 2021), Abu Dhabi, United Arab Emirates, (2021.12.8), W1-10.
22. Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura, Investigation on Ammonia Oxidation under H₂O Diluents Condition Using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 13th Asia-Pacific

Conference on Combustion (ASPACC 2021), Abu Dhabi, United Arab Emirates, (2021.12.8), W1-11.

国内学会・研究会等

23. 秋田佳祐, 森井雄飛, 中村寿, 手塚卓也, 丸田薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタにおける冷炎反応を含む FREI に関する数値的研究, 第 58 回燃焼シンポジウム, (2020.12.3), B213.
24. 高橋伸太郎, 中田涼太, 中村寿, 手塚卓也, 丸田薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた neoC₅H₁₂ の低温酸化反応のモデル間差異に関する研究, 第 58 回燃焼シンポジウム, (2020.12.2), C112.
25. 金山 佳督, 高橋 伸太郎, 森倉 渉太, 中村 寿, 手塚 卓也, 丸田 薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた気相の炭酸ジメチルと炭酸ジエチルの反応性の差異に関する研究, 第 58 回燃焼シンポジウム, (2020.12.2), C111.
26. Kenta Tamaoki, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Investigation on ammonia combustion under Ar, N₂ and CO₂ dilution conditions using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Young Researchers Workshop on Ammonia Energy, (2021, 2,24),
27. 金山佳督, 高橋伸太郎, 森倉渉太, 中村 寿, 手塚卓也, 丸田 薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた炭酸ジメチル,炭酸エチルメチル,炭酸ジエチルの反応性評価及び反応解析, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2021, (2021.10.9), A132.
28. 高橋伸太郎, 中村 寿, 手塚卓也, 丸田 薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた冷媒 R1234yf(C₃H₂F₄)の酸化反応特性に関する研究, 日本燃焼学会第 59 回燃焼シンポジウム, (2021.11.22), A112.
29. 玉置健太, 村上雄紀, 金山佳督, 中村 寿, 手塚卓也, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた H₂O 希釈がアンモニア燃焼に及ぼす影響, 日本燃焼学会第 59 回燃焼シンポジウム, (2021.11.24), E312.
30. 村上雄紀, 手塚卓也, 中村 寿, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた NH₃/CH₄ 混合気の酸化および反応性に関する研究, 日本燃焼学会第 59 回燃焼シンポジウム, (2021.11.24), E333.
31. 金山佳督, 高橋伸太郎, 森倉渉太, 中村 寿, 手塚卓也, 丸田 薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた直鎖炭酸エステルの燃焼特性に関する研究, 日本燃焼学会第 59 回燃焼シンポジウム, (2021.11.24), E313.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR03APR20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.4～2022.3
報告回数	第 2 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

ガソリンエンジン高効率化に向けた

異種燃料添加による燃焼促進効果の調査

丸田 薫, 中村 寿, 森井 雄飛, 村上 雄紀, 手塚 卓也,
 東北大学流体科学研究所 教授, 准教授, 助教, 特任研究員, 技術職員,
 秋田 佳祐, 秋葉 貴輝, 角田 陽, 佐川 和孝, 橋本 彩夏, 廣瀬 海音
 東北大学流体科学研究所 D3, D3, D1, M2, M2, M1

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

ガソリンエンジンの高効率化に向け, 希薄運転限界を拡大し熱効率を大幅に向上させる大規模共同研究が進められている (SIP→AICE). SIP では火花点火エンジンの熱効率が, 世界最高の 51.5% を達成するなど, 希薄燃焼を利用した実用燃焼技術の持つ潜在能力が示されている. 一方で希薄燃焼限界付近においては, 火炎が有する不安定性が顕在化し, 予期せぬ燃焼現象やそれに起因した消炎に至るなどの課題を有する. また, 脱炭素社会実現に向けて, 炭化水素燃料にアンモニア (NH_3) を混合した燃料の利用が検討されている. これまで炭化水素燃料や NH_3 の単体での基礎燃焼特性については, 様々な研究が進められてきているが, 混合燃料の研究例は依然として限定的である.

希薄限界近傍での火炎挙動理解

希薄運転限界拡大のためには, 燃焼限界近傍での火炎挙動を正確に理解することが非常に重要である. これまで対向流予混合火炎に代表される伝播火炎と, 伝播性の無い特異燃焼である Flame ball に関して, これらを統一した燃焼限界に関する理解は未だ得られていない. Flame ball は伝播火炎の燃焼限界よりも燃料濃度が低い条件で存在が確認されており, Flame ball の応用利用により, 大幅な希薄運転限界の拡大が見込まれる. 本研究グループではこれまで, 対向流場の流速を拡散流速と競合する極低流入流速条件まで減少させることで, 流れ場中に定在する伝播火炎と静止予混合気中に定在する Flame ball との存在領域が漸近するとの仮定の元, 微小重力実験と数値計算を実施してきた. なお本研究課題は, 国際宇宙ステーション“きぼう”実験棟での宇宙実験を 2023 年度に実施予定である. これまで対向流平面火炎と Flame ball とを橋渡しするような球状の火炎群 (Sporadic flames) が微小重力

実験や数値計算で発見されており、伝播火炎と Flame ball の関係性が徐々に明らかになってきている。素反応を考慮した数値計算と、燃焼現象の核心を抽出した非定常大規模計算モデルによる解析を複合して、実機開発に資する燃焼限界近傍の火炎挙動解明を目指す。

CH₄/NH₃ 混合気の着火特性

脱炭素社会の実現に向けて、環境負荷の小さい天然ガスと NH₃ の混合燃料の利用が期待されている。実燃焼器における新燃料の利用に際して、混合気の着火特性が、燃焼効率を左右する重要なパラメータの一つとなる。炭化水素/NH₃ 混合燃料の着火性に関するこれまでの研究で、ジメチルエーテル (DME) と NH₃ の混合燃料において、DME の多段反応と、NH₃ の酸化反応から生成する窒素酸化物 (NO_x) の相互作用によって、本来反応性の低い NH₃ が炭化水素の着火性を向上させることが分かっている。しかし、天然ガスの主成分であるメタン (CH₄) は DME と異なり、多段的に反応が進行せず、CH₄ に対して NH₃ を添加した場合の影響については、依然として調査が必要である。そこで、CH₄ と NH₃ の混合燃料について、混合気組成の変化によって、着火性を支配する化学反応がどのように変化し、燃料の着火特性にどのように影響を与えるかを調べる。

1.2 研究期間内の最終目標

希薄燃焼技術によるガソリンエンジンの高効率化に向け、伝播火炎と Flame ball を統一する燃焼限界近傍の火炎挙動を明らかにする。

更に、脱炭素社会実現に向けて、CH₄/NH₃ 混合気の組成変化が着火特性に及ぼす影響を調査し、着火特性を支配する化学反応を明らかにする。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

燃焼限界近傍での火炎挙動理解

研究室内製の 3 次元非定常計算コードを用い、対向流場中の淀み点上に Flame ball を配置し、対向流場流速を変化させ、着火・火炎伝播過程解析を実施した。淀み面に向かって Flame ball が押しつぶされた後、平面火炎に至る条件に加え、2 種類の消炎形態が確認された。一つは、リング状の火炎が淀み面と並行に進展し、消炎に至った。もう一つは一度平面火炎が形成されるものの、バーナ軸に近い位置で反応速度が減少し、形成された穴が進展して消炎に至った。これらの消炎は一般的な対向流平面火炎が存在し得る流速条件であっても確認され、希薄運転時の着火・火炎伝播過程を解明する上で更なる解析の必要性が示された。

CH₄/NH₃ 混合気の着火特性

温度分布制御型マイクロフローリアクタ (MFR) による実験を模擬した一次元の定常計算 (ANSYS Chemkin-Pro の PREMIX パッケージを使用) を実施し、MFR 内に観察される微弱火炎 (Weak flame) の火炎位置の比較を行った。DME/NH₃ 混合気と同様に、CH₄/NH₃ 混合気においても、少量の NH₃ を混合した条件では、わずかに反応性が向上する傾向が実験および数値計算において確認された。反応解析の結果、CH₄ の反応が開始する温度と NH₃ の反応が開始する温度の差が、DME と NH₃ の場合よりも小さいことから、NH₃ の反応の進行度

が小さく、NO_xによる反応性向上効果が小さくなることが分かった。また、DME/NH₃混合気と比べて、CH₄/NH₃混合気の方が化学反応モデルによる火炎位置の予測値のばらつきが大きく、反応モデルの予測精度向上には、個々の反応パラメータに関する更なる調査が必要であると考えられる。

3. 研究目標の達成状況

Flame ball を初期解とした対向流場中の着火・火炎伝播形成過程は、対向流場流速に依存して、大きく変化することが示された。宇宙実験に先立ち、淀み点状に形成された理想的な Flame ball が流速の影響を受けてどのように変化するかについて、明らかになった。

炭化水素/NH₃ 混合燃料の着火特性については、DME/NH₃ 混合気の結果と同様に、CH₄/NH₃ 混合気でも NH₃ 由来の NO_x による着火性促進効果が確認できた。着火性促進効果の度合いは、炭化水素燃料の酸化プロセスに強く影響を受けることが分かった。

4. まとめと今後の課題

対向流場における着火・火炎伝播遷移過程は、初期の着火核などへの強い依存性を有することが明らかになった。本研究で得られた計算結果を、宇宙実験にて実際に確認し燃焼限界近傍における火炎動態を明らかにする。

また、炭化水素/NH₃ 混合燃料の着火特性については、ベースとなる炭化水素燃料の酸化プロセスが、NH₃ の酸化反応から生成する NO_x との相互作用において本質的に重要であることが分かった。今後は、異なる炭化水素燃料と NH₃ の混合燃料についても調査を行い、混合燃料の着火特性に関する、より一般的な理解を得たいと考えている。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. Effects of mixture composition on oxidation and reactivity of DME/NH₃/air mixtures examined by a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kenji Hiraoka, Kaoru Maruta, Combustion and Flame, Vol. 238 (2022), 111911.

国際学会

1. Investigations of Oxidation and Reactivity of Dimethyl Ether/Ammonia Mixtures by a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kenji Hiraoka, Kaoru Maruta, The 18th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, Japan, October 2021.
2. Computational Study on Flame Balls at Fuel Lean and Rich Conditions, Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, The 18th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, Japan, October 2021.
3. Numerical analysis of flame behavior initiated from flame ball in counter flow field,

Kazutaka Sagawa, Takaki Akiba, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, The 18th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, Japan, October 2021.

4. Effects of Turbulence and Lewis Number on the MIE Transition Phenomena, Yoshiki Hirano, Taichi Mukoyama, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, The 18th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2021), Sendai, Japan, October 2021.
5. Investigation of MIE transition and the effects of Lewis number on ignition-to-propagation processes under various turbulent intensities, Yoshiki Hirano, Taichi Mukoyama, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, 2nd Asian Conference on Thermal Science, Fukuoka, Japan, October 2021.
6. Experimental observation of overdriven spherical propagation flame, Yoshiki Hirano, Taichi Mukoyama, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, 13th Asia-Pacific Conference on Combustion 2021, Abu Dhabi, United Arab Emirates, December 2021.

国内学会・研究会等

1. 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた NH_3/CH_4 混合気の酸化および反応性に関する研究, 村上雄紀, 手塚卓也, 中村寿, 第 59 回燃焼シンポジウム 2021 年 11 月.
2. メタン及びプロパンを燃料とする Flame ball の燃焼特性に関する数値的研究, 角田陽, 秋葉貴輝, 中村寿, 手塚卓也, 丸田薫, 第 58 回伝熱シンポジウム 2021 年 5 月.
3. イソオクタンにおける最小着火エネルギー遷移と着火・火炎伝播遷移過程, 平野芳樹, 手塚卓也, 森井雄飛, 中村寿, 丸田薫, 第 58 回伝熱シンポジウム 2021 年 5 月.
4. 燃料過濃条件における Flame ball の存在可能性に関する数値的検討, 角田陽, 秋葉貴輝, 中村寿, 手塚卓也, 丸田薫, 第 33 回日本マイクログラビティ応用学会学術講演会 2021 年 10 月.
5. Flame ball を初期解に持つ対向流場中での火炎挙動の数値解析, 佐川和孝, 秋葉貴輝, 森井雄飛, 中村寿, 丸田薫, 第 59 回燃焼シンポジウム 2021 年 11 月.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR04APR20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.4~2022.3
報告回数	第 2 回報告

2022 年 7 月 19 日提出

修正 Volume Penalization 法の応用研究

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

中田 圭亮、山本 泰平、嶋崎 渉

東北大学大学院情報科学研究科 M2, M1

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

応募者らが 2016 年に発表した修正 VP 法は、埋め込み境界法と高精度解法の両立を可能にした。これにより、流れの中に複雑な形状の物体や、運動・変形する物体が複数含まれている場合においても空力音を直接捉えることが可能となり、主として基礎研究にとどまっていた空力音の DNS の適用範囲を工学応用に拡大した。本研究はこの優れた方法を応用することにより、騒音低減法の高度化と可視化技術開発に取り組むものである。特に 3 次元可視化システムの利便性を飛躍的に向上させることにより、3 次元非定常流動現象の理解増進につながる。

1.2 研究期間内の最終目標

- (1) 本研究では、本研究分野で開発された複雑な幾何における圧縮性流れの高精度直接数値解法の応用により、次の二つのテーマに取り組む：(i) 多孔質材料利用による空力騒音低減メカニズムの解明と低減効果の最適化、(ii) 物体周り流れのオンデマンド型 3 次元動的可視化システムの開発。(i)においては、パンタグラフ騒音のモデルである円柱周り流れを対象とする。これまで 2 次元低レイノルズ数流れで得られた知見をふまえて、3 次元流れの場合について、直接数値シミュレーション研究により騒音低減メカニズムの解明と低減効果の最適化を行う。(ii)においては、一般に複雑な形状の物体周りの流れを、その場でただちに可視化するシステムを開発する。
- (2) 埋め込み境界法は計算機の発達とともに利用が拡大しつつあるが、高い精度を必要とする空力音直接解析においては、これまで有効な手段がなかった。われわれは、これまでに Liu and Vasilyev (2007) の方法を改良することにより、埋め込み境界法による圧縮性流れの高精度直接数値解析法 (修正 VP 法) を開発し、その精度を実証した (Komatsu et al., 2016)。

実機を用いる実験では、形状を変更するたびに実機を作り直す必要があるなどコスト・労力・時間が膨大となるが、数値シミュレーションはこれを容易に行うことができる。また実験ではしばしば背景雑音を除去することが困難であるが、数値シミュレーションでは雑音のない理想的な計算ができるため、騒音発生機構の解明の上で極めて有利である。渦運動の3次元性が騒音発生機構に及ぼす影響や、不明な点が多い多孔質材の騒音低減効果とそのメカニズムを解明できれば、低騒音社会の実現に貢献することができる。さらに、修正VP法は、原理的には任意の形状をもつ物体周りの流れを格子生成の過程をスキップして適用することができる。これを利用して物体周り流れをただちに可視化できるシステムを開発する。本研究所の3次元可視化スペース(RWS)に展開することも視野に入れている。

(3) 空力騒音の直接数値シミュレーション法は1990年代以降に技術が発達し、基礎研究を中心に普及が進んだ。申請者はいち早くこの分野で研究を開始し、数多くの研究業績を挙げている。コンピュータ性能が向上し埋め込み境界法に関する数値計算技術が充実しつつある現在、騒音低減技術および可視化技術に寄与するべく本研究を行う。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 Ranque-Hilsch ボルテックスチューブのエネルギー分離メカニズムの研究

Ranque-Hilsch ボルテックスチューブ(以下 RHVT)とは、空気を円筒渦室内の旋回を伴う自身の運動の効果のみで温風と冷風に分離する装置である (Fig. 1 左)。冷媒が不要であり小型で単純構造という利点を持ち、工作物へのスポットクーラーや防護服・作業用ベスト内の冷却システム等に利用されている。

円筒容器内に高圧で高速な旋回流を形成することで半径方向にエネルギー分離が生じるといふ現象は1934年にRanqueによって発見された。しかし、その物理的メカニズムは未だ完全解明に至っておらず、物理的メカニズムの理解が及んでいない現象の1つである。本研究の目標は、RHVT円筒渦室内の流れに生じるエネルギー分離メカニズムを古典物理学の基礎法則のみで解明することである。

エネルギー分離現象を考察するために、本研究では乱流をモデル化しない数値計算方法である直接数値計算を利用して、円筒容器内の高速旋回空気流中に生じる乱流現象に関する物理的信頼性の高いデータを得る。直接数値計算には埋め込み境界法の1つである修正VP法を適用した有限差分法を用いる。

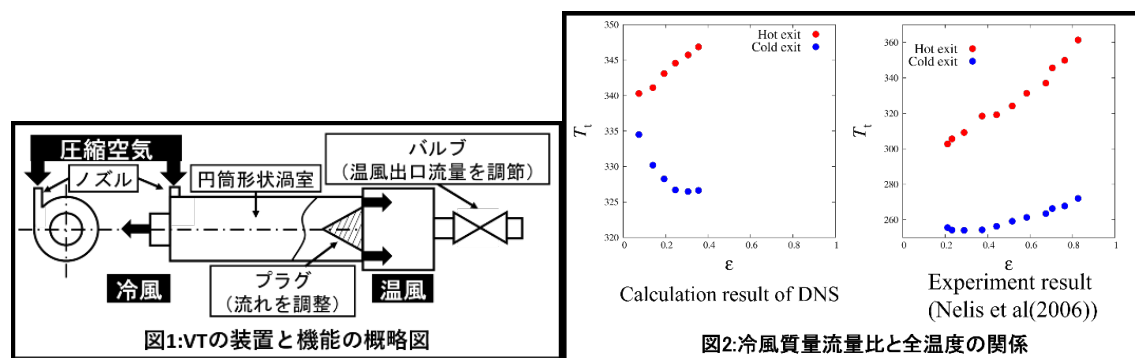


Fig. 1 (左) Ranque-Hilsch ボルテックスチューブの概略図、(右) 冷風質量流量比と全温度の関係

今年度は、計算結果の妥当性についての検討と流れの特性の考察を行った。Fig. 1 右に RHVT のエネルギー分離性能を評価する方法として頻繁に用いられる冷風質量流量比と吐出空気的全温度の関係を示す。冷風質量流量比は、流入空気の質量流量に対する冷風質量流量の比率として定義される無次元量であり、RHVT の運転条件を表すパラメータの1つである。先行研究による実験結果と比較すると全温度の値に定量的な違いはみられるが、低い冷風質量流量比の範囲では定性的に傾向が合うことが確認できた。

円筒容器内の流れ場については時間平均場と擾乱場で各々考察を行った。時間平均場は軸対称分布で、円筒壁面に沿って温風出口へ流れる旋回流と、円筒中心部を冷風出口へ流れる低圧渦の2つの旋回を伴う流れで主に構成されることが分かった。また、擾乱強度の分布は、平均場と同様に軸対称分布であり、その強度は圧縮空気流入側で強く、温風出口側に向かうにつれて弱くなることが分かった。

エネルギー分離性能と渦室に生じる流れの特性が他研究の主張と部分的に一致するため、RHVT 渦室内流れに対する直接数値計算の実現可能性を示せたと考えている。

2.2 アジョイント法による空力騒音低減のための形状最適化

本研究では自動車のサイドミラーを模したモデルを二次元の一樣流に置いたときに発生する空力騒音の低減を目標として、アジョイント法による形状最適化を行った。モデルは最適化の中で形状を更新することを考慮して埋め込み境界法的一种である修正 VP 法によって表現した。モデルの流れに対して上流側の面を正弦波の重ね合わせで表現し、各周波数モードの重みを変形のための変数とした。

Fig. 2 左図に最適化5回毎のサイドミラーモデルの形状を示す。また Fig. 2 右図に形状と音響パワーの関係を示す。Fig. 2 左図から形状を更新するごとにモデルの形状は流れの方向に長くなり、波打った形状が現れたことが確認できる。またこの形状変化によって音響パワーが低減されたことが Fig. 2 右図から確認される。このことから空力騒音の低減のための形状変化として本手法が正しく機能したことが確認された。Fig. 3 に初期形状と更新を10回行った後の形状の周りの渦度場の等高線を示す。これにより、形状の変化によって渦の発生点がより後方に移っていることが確認された。このことから形状の変化によってモデルに対する流れの干渉が低減し、結果空力騒音の低減につながったといえる。

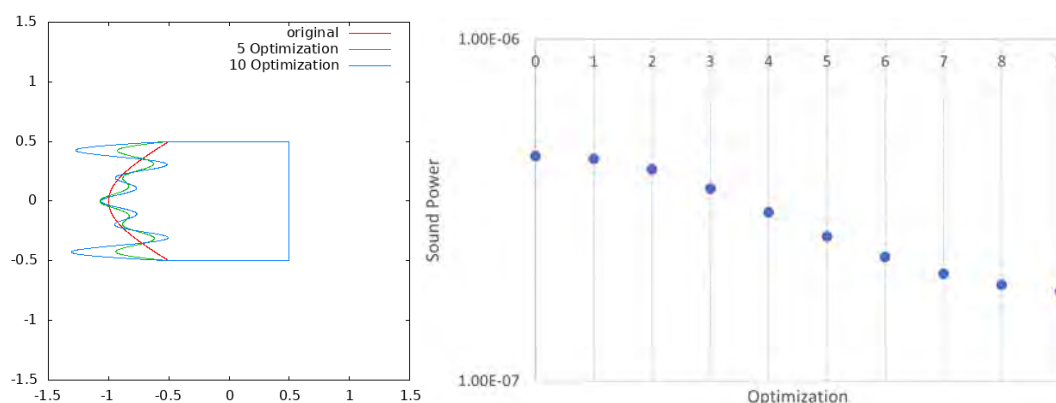


Fig. 2 (左) サイドミラーモデルの形状の履歴、(右) 音響パワーの形状依存性

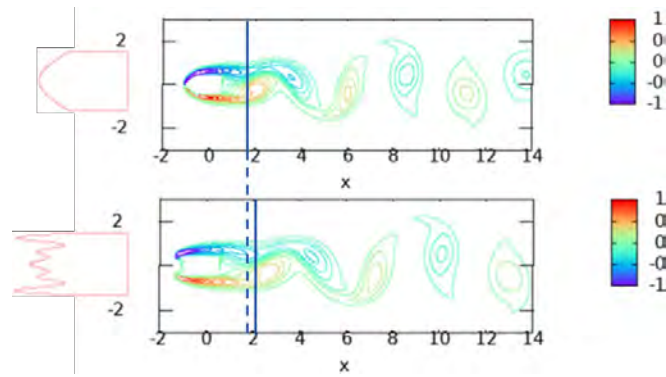


Fig. 3 渦度場

3. 研究目標の達成状況

進捗状況は順調であり、予定の計画にしたがって成果を挙げた。

4. まとめと今後の課題

Ranque-Hilsch ボルテックスチューブのエネルギー分離メカニズムの研究においては、世界初の直接数値シミュレーションにより、エネルギー分離を再現することに成功した。流量比依存性が実験と少なくとも定性的に一致することも確認できた。今後はエネルギー分離メカニズムの物理的な解明を目指す。これにより、エネルギー分離の最適化への道が開かれる。

アジョイント法による空力騒音低減のための形状最適化においては、アジョイント法により実際に空力騒音低減が可能であることを示すことに成功した。今後は形状表現方法の改良と最適形状の評価、さらに3次元物体への応用が課題である。これにより、空力騒音低減のための形状最適化法として確立する。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Kosei Nishikawa, Kodai Konno and Yuji Hattori, “Assessment of immersed boundary method as a tool for direct numerical simulation of aeroacoustic sound,” J. Fluid Sci. Tech. 15 (2020), JFST0004.

Sho Iwagami, Ryoya Tabata, Taizo Kobayashi, Yuji Hattori and Kin'ya Takahashi, “Numerical Study on Edge Tone with Compressible Direct Numerical Simulation: Sound Intensity and Jet Motion”, to appear in Int. J. Aeroacoust. **20** (2021) 283-316.

Yasunori Sato and Yuji Hattori, “Mechanism of reduction of aeroacoustic sound by porous material: comparative study of microscopic and macroscopic models,” J. Fluid Mech. **929** (2021) A34.

著書

国際学会

Y. Hattori, Y. Sato, “Reduction of Aeroacoustic Sound using Porous Materials:

Comparison between Macroscopic and Microscopic Models,” Proceedings of the Seventeenth International Conference on Flow Dynamics, 2020, pp. 474-475.

Y. Hattori, Y. Sato, “Comparison between Microscopic and Macroscopic Models of Porous Materials in Aerodynamic Sound Generated from a Flow past a Cylinder,” 73rd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, 22-24 November 2020, online, USA.

R. Tabata, S. Iwagami, T. Kobayashi, K. Takahashi, Y. Hattori, “Numerical Analysis of Air-Jet Instrument’s Sound Sources by Compressible Direct Numerical Simulation,” Proceedings of the Seventeenth International Conference on Flow Dynamics, 2020, pp. 472-473.

R. Sumita, R. Tabata, T. Kobayashi, K. Takahashi, Y. Hattori, “Numerical Study of a French Horn Mouthpiece with Compressible Direct Numerical Simulation,” Proceedings of the 20th International Symposium on Advanced Fluid Information (2020), pp. 169-170.

国内学会・研究会等

嶋崎 渉, 服部裕司「アジョイント法を用いた空力騒音低減のための形状最適化の数値シミュレーション」第35回数値流体力学シンポジウム（2021年12月、オンライン）

山本 泰平, 服部裕司「Ranque-Hilsch ボルテックスチューブに生じる流れの直接数値シミュレーション」第35回数値流体力学シンポジウム（2021年12月、オンライン）

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR05APR20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.4～2022.3
報告回数	第 2 回報告

2022 年 7 月 19 日提出

機械学習による乱流モデル開発のための基礎研究

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

Golsa Tabe Jamaat, 阿部 哲弥, Ayapilla Aditya Sai Pranith, 平野 晃大

東北大学大学院情報科学研究科 D2, M2, M1

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

統計的機械学習を乱流モデルの開発に応用するアイデアはこれまでもあったが、その多くは統計的機械学習を補助的に用いるものであった。乱流モデルの関数形そのものを求めようという本格的なモデリングはわれわれの研究(Gamahara and Hattori, Phys. Rev. Fluids, 2017) が世界初である。この論文の FWCI (Field Weighted Citation Impact) は 4.70 (2019 年 10 月現在) であり、先駆けとなったこの研究に対する注目度の高さを示している。

本研究はこの成果をきっかけとして、実用可能な高精度乱流モデルを開発するものである。これにより、数値流体力学の利用範囲を拡大することができる。工業製品の設計開発に利用できるようになれば、開発のコストを削減し、期間を短縮できるため、生産性の大幅向上に貢献できる。さらに、本研究で用いる手法は、乱流を含む現象一般に展開できる。工業的に重要な混相流、燃焼などの化学反応を含む乱流や、宇宙・惑星規模の流れへの応用が期待される。機械学習の技術が発展し、計算機性能が充実した今こそ行うべき研究である。

1.2 研究期間内の最終目標

(1) ニューラルネットワークやサポートベクトルマシンなどの機械学習により乱流モデルの開発を行う。自動車の室内気流解析を目的とし、RANS 解析のための乱流モデルを開発する。また、宇宙・惑星規模の乱流への応用のための基礎研究として木星の大赤斑モデルの直接数値シミュレーション研究を行う。

(2) 流体解析の多くは数値計算コスト上の問題により格子以下の現象を乱流モデルとして表現することにより行われる。しかしながら、乱流モデルの精度はモデルの選択や流れの種類に依存しており、万能な乱流モデルは存在しない。われわれは、よりよい乱流モデルの開発に機械学習を用いる研究を行っており、これまでに学習およびモデルの開発が原理的には可

能であることを示した (Gamahara, Hattori, 2017)。本研究はこれを発展させ、機械学習の結果に基づいて物理モデルをして定式化すると同時に、機械学習モデルを数値シミュレーションに実装する方法を確立する。

(3) 統計的機械学習の応用範囲の拡大により、最近になって乱流研究への応用は増えてきたが、乱流モデルの開発への応用は世界的にもほとんどなく、ユニークな研究である。本研究は、これまで人間の考えの及ぶ範囲に限られていた乱流モデルを超える (=人智を超える) 革新的なモデルを提案するものである。これまでにない発想のモデルにより精度を格段に向上させ、乱流数値解析の飛躍的な進化につながる。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 Development of subgrid-scale model for LES of Burgers turbulence with large filter size

Neural network (NN) with one hidden layer is used to find a subgrid-scale (SGS) model for large eddy simulation (LES) of the Burgers equation. Five sets of input and output are considered for the neural network as shown in Table 1. The training datasets are obtained by filtering the direct numerical simulation (DNS) data of the forced Burgers equation with 65536 grid points. In the a priori test, a correlation coefficient over 0.93 is achieved for the SGS stress and as shown in Figure 1, the NN models outperform the gradient model (GM), Smagorinsky model (SM), and dynamic Smagorinsky model (DSM). The results of the a posteriori test reveal that all NN models are stable without applying any stabilization techniques. Figure 2 shows the results of the energy spectrum which can confirm the reasonable performance and applicability of the NN models to the LES code. However, not all the NN models have the generalizability and are successful for the LES under different conditions. It is shown that the most reliable NN model (NN5) can be applied to a set of parameters which are different from those used in training. On the whole, this model outperforms SM and GM, and is comparable to the DSM. However, it has an advantage over DSM in the numerical cost.

Table 1: Input(s) and output for different NN models

model	NN1	NN2	NN3	NN4	NN5
input	$d\bar{u}/dx$	$\bar{\Delta}^{1/3}d\bar{u}/dx$	$\bar{\Delta} d\bar{u}/dx, \bar{\Delta}$	$\bar{\Delta}^2 d\bar{u}/dx d\bar{u}/dx $	$\bar{\Delta}d\bar{u}/dx d\bar{u}/dx $
output	$\tau/\bar{\Delta}^2$	$\tau/\bar{\Delta}$	τ	τ	$\tau/\bar{\Delta}$

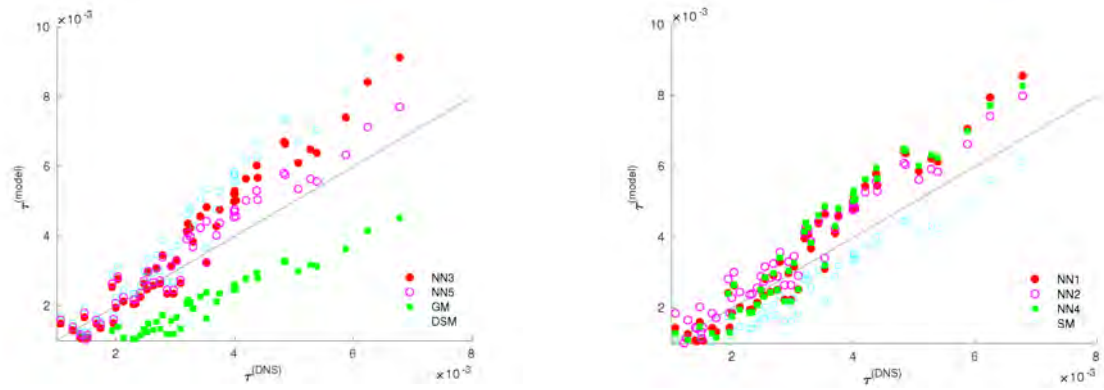


Figure 1: SGS stress predicted in the *a priori* test for $\bar{\Delta}/\Delta_{DNS}=128$.

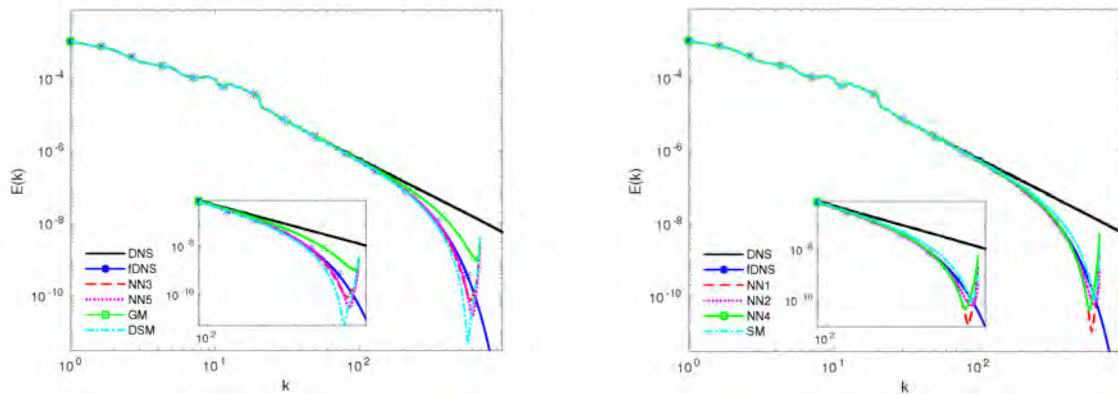


Figure 2: Energy spectrum in the *a posteriori* test; $N_{LES} = 2048, \bar{\Delta}/\Delta_{LES} = 4$.

2.2 らせん渦の長波長不安定性の直接数値シミュレーション研究

線形化非圧縮性 Navier-Stokes 方程式の直接数値シミュレーションによりらせん渦の長波長不安定性を調べた。擾乱のエネルギー変化を Fig.1 に示す。t=50 以降、擾乱のエネルギーが指数関数的に成長していることがわかる。t=87.5 での擾乱の渦度分布を Fig.2 に示す。長波長不安定性として知られている屈曲波に対応する構造が確認できる。

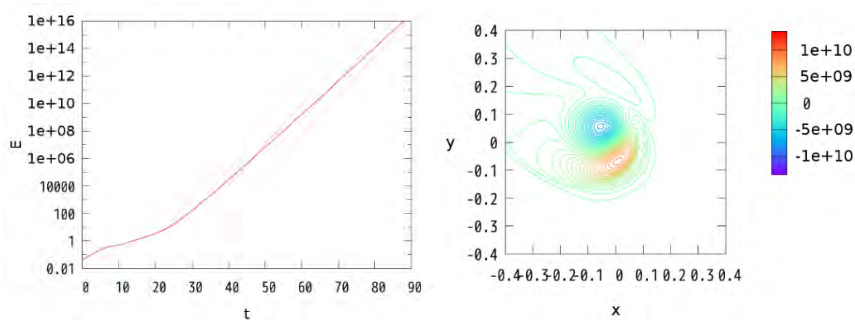


Fig.3 (左) 擾乱エネルギーの時間発展、(右) 断面渦度分布(t=87.5)

2.3 軸対称渦上の非線形慣性波の特性の研究

楕円型不安定性や曲率不安定性のような渦の短波長不安定性を研究する上で基本となるものが、軸対称渦上の慣性波である。線形不安定性が成長すると非線形性効果が強くなり、渦の挙動に影響を及ぼす。本研究の目的は、軸対称渦上の有限振幅の慣性波の特性を理論的及び数値的に明らかにすることである。

最初に基本流周りにおいて線形化した線形ナビエーストークス方程式に基づいて、固有値問題を解く (Fig. 4). 適当な慣性波を選定し有限振幅を与えた慣性波を非線形ナビエーストークス方程式に代入し、速度場の時間発展を求めた. 周期的な非線形慣性波を探索するために、初期条件との L2 ノルムの差が 0 に近づくような解(周期解)を探索する. 計算の結果、近似的に周期解を求めることに成功した(Table.1). また、非線形成分の比較を行い、弱非線形解析の結果と整合性があることを確認した(Fig.5).

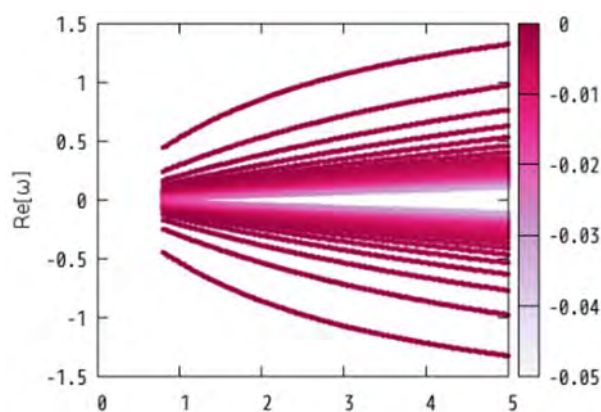


Fig 4. 分散関係

Table1. 1 周期後の L2 ノルムの比較

	Wave 1	Wave 2
ω_1	4.99076×10^{-06}	7.646902×10^{-7}
Linear	9.75283×10^{-07}	9.64227×10^{-7}
Suc 1	1.39892×10^{-07}	6.43637×10^{-7}
Suc 2	1.96577×10^{-07}	4.38958×10^{-7}

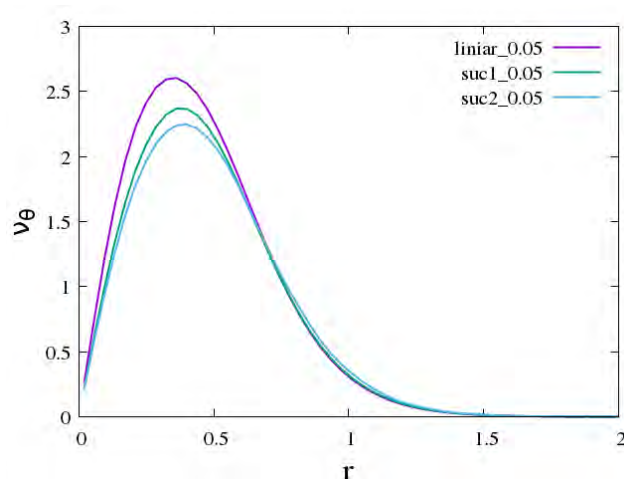


Fig.5 3つの初期条件における周方向速度分布の比較

3. 研究目標の達成状況

進捗状況は順調であり、予定の計画にしたがって成果を挙げた。

4. まとめと今後の課題

ニューラルネットワークによる Burgers 乱流の LES のための SGS 応力モデル開発においては、入力変数を工夫することで、フィルタ幅が大きい場合にも対応可能な SGS 応力モデルの開発に成功した。数値的な安定化をすることなく、実際の LES に用いることができるモデルを得ることができた。今後は、本研究で得られた知見を 3 次元乱流、特に壁乱流への適用し、新しい高精度モデルの開発を目指す。

らせん渦の長波長不安定性の直接数値シミュレーション研究においては、線形化 Navier-Stokes 方程式の直接数値シミュレーションにより、長波長不安定性モードをとらえることに成功した。擾乱のエネルギーが指数関数的に成長すること、モードの構造が予想される屈曲波によるものであることを確認した。今後は擾乱の非線形成長とらせん渦の乱流化について調べるのが課題である。

軸対称渦上の非線形慣性波の特性の研究においては、有限振幅の非線形慣性波を Navier-Stokes 方程式の近似的な周期解として得る方法を確立した。今後は解の数値的な探索方法の改良と、それにより大振幅の非線形慣性波を得ることが課題である。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Satoshi Miyazaki and Yuji Hattori, “Improving accuracy of turbulence models by neural network,” arXiv:2012.01723 (2020).

A. Golsa Tabe Jamaat and Yuji Hattori, “Development of Subgrid-Scale Model for LES of Burgers Turbulence with Large Filter Size,” Phys. Fluids **34** (2022) 045120.

著書

国際学会

G. T. Jamaat, Y. Hattori, “Investigation of the Effect of the Forcing Function on the Burgers Equation,” Proceedings of the Seventeenth International Conference on Flow Dynamics, 2020, pp. 579-580.

Golsa Tabe Jamaat, Yuji Hattori, “Searching for Subgrid-Scale Model for Burgers Equation Using Neural Network,” Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, 2021.

Tetsuya Abe, Yuji Hattori, “Characteristics of Inertial Waves on Axisymmetric Vortex,” Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, 2021.

国内学会・研究会等

阿部 哲弥, 服部裕司「渦上の非線形慣性波の特性の研究」日本流体力学会年会 2021（2021 年 9 月、オンライン）

Golsa Tabe Jamaat, Yuji Hattori 「データ駆動型アプローチを使用したサブグリッドスケール

ルモデリング」日本流体力学会年会 2021 (2021 年 9 月、オンライン)

アヤピラ アディチャ サイ プラニス, 服部裕司「二次元乱流における人工ニューラルネットワークを使用したサブグリッドスケール応力モデリング」第 35 回数値流体力学シンポジウム (2021 年 12 月、オンライン)

平野 晃大, 服部裕司「らせん渦の長波長不安定性の数値シミュレーション研究」第 35 回数値流体力学シンポジウム (2021 年 12 月、オンライン)

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR06APR20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.4～2022.3
報告回数	第 2 回報告

2022年 7月 20日提出

渦構造の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

申請者らは、密度成層流中の渦列について発見した不安定性が、双曲型不安定性に内部重力波の位相シフトが加わることで発現する新しい型の不安定性であることを突き止めた（Suzuki et al., *J. Fluid Mech.*, 2018）。これは、双曲型不安定性と波動による複合的な効果という点で意義深いものである。その後、この成層双曲型不安定性に対する回転の効果や、同様の効果による磁気双曲型不安定性の存在も発見された。これらの不安定性が非線形領域において果たす役割を解明し、流れの不安定性における一つの普遍的な物理メカニズムを明らかにするのが目的である。

また、申請者らは最近渦輪の曲率不安定性を直接数値シミュレーションにより実証した（Hattori et al., *J. Fluid Mech.*, 2019）。この曲率不安定性はらせん渦にも存在する。曲率不安定性によるらせん渦の不安定化過程を明らかにし、風車ロータで発生する回転翼端渦による後流の形成過程の解明につなげることがもう一つの目的である。

1.2 研究期間内の最終目標

2個のサブテーマに分けて進める：(i) 成層流中の渦構造の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究、(ii) らせん渦の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究。(i) については、以前の研究で明らかになった線形不安定性の非線形段階の時間発展の解析を行う。これにより、不安定性の発生条件、不安定成長率のパラメタ依存性（密度成層・回転・磁場の強さ、波数など）、乱流遷移の条件を求め、気象現象や惑星大気、宇宙流体现象にあらわれる強い渦のダイナミクスの解明に資する。(ii) については、まず渦輪の場合と同様に線形安定性に関する理論を数値解析により検証し、その後非線形段階の解析を行う。

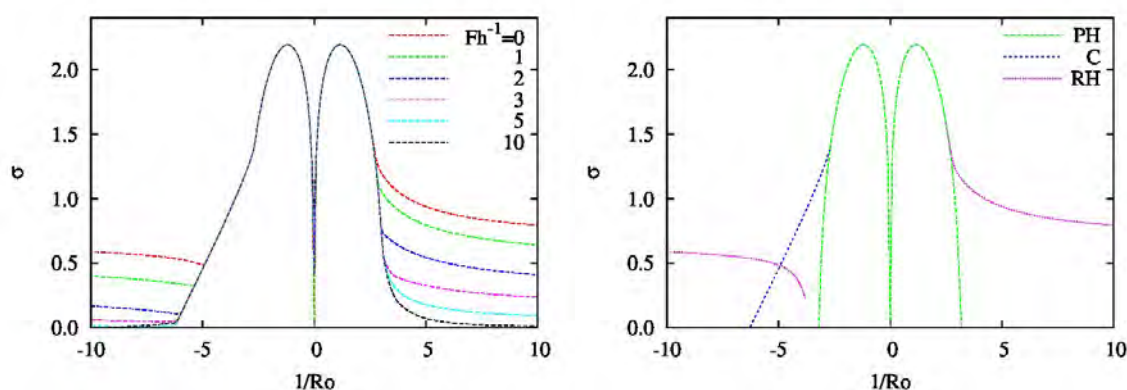
2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 成層流中の渦構造の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究

地球などの惑星における気象現象や降着円盤などの宇宙流体现象において、しばしば渦列が発生することが知られている。渦列は地形的な原因や Kelvin- Helmholtz 不安定性などにより形成される。気象現象や宇宙流体现象においては流れは一般に成層と回転の効果を受ける。最近われわれは渦列のように双曲型よみ点をもつ渦流れに成層の効果が加わった場合、これまでに知られていなかった不安定性が発生することを明らかにした。この不安定性は双曲型不安定性と内部重力波による位相シフトによって生み出される。この「成層双曲型不安定性」は、局所安定性解析によれば双曲型よみ点をつなぐ流線付近で大きい成長率をもち、モード安定性解析により得られる固有モードは対応する場所で大きい振幅をもつ。

本研究は成層流体中の渦列の線形不安定性に対する回転の効果を明らかにすることを目的とする。回転成層流体中の渦列には、成層双曲型不安定性のほかにも楕円型不安定性、双曲型不安定性、中心力不安定性などの不安定性が発生する。これらの不安定性の成層と回転の強さに対する依存性を解明し、気象現象や宇宙流体现象におけるその役割を明らかにする。

Fig. 1 に最大成長率のロスビー数依存性を示す。 $Fh^{-1} = 0$ の場合、双曲型不安定性(PH)、中心力不安定性(C) と回転効果による共鳴により発生する不安定性(回転双曲型不安定性, RH)があらわれる。双曲型不安定性は回転なし($Ro^{-1} = 0$) のときは発現しないが、弱い回転により発現し、 $Ro^{-1} = \pm 1.5$ 付近で成長率が最大となり、強い回転により安定化する。中心力不安定性は渦と回転の向きが異なる場合($Ro^{-1} < 0$) に、双曲型不安定性から分岐してあらわれ、 $Ro^{-1} = -6.5$ 付近で安定化する。回転双曲型不安定性は $Ro^{-1} > 0$ 側では双曲型不安定性から分岐してあらわれるが、 $Ro^{-1} < 0$ 側では単独であらわれる。双曲型不安定性と中心力不安定性の最大成長率は、成層効果の影響をほとんど受けない。これは成長率が、成層の影響を受けない波数ベクトルの角度で最大となるためである。不安定領域は成層効果を受けるため、モード構造には成層による変化があると予想される。回転双曲型不安定性は成層が強くなると弱くなる。成層双曲型不安定性は $Ro^{-1} = 0$ 付近で最大成長率を与える。



3. 研究目標の達成状況

進捗状況は順調であり、予定の計画にしたがって成果を挙げた。

4. まとめと今後の課題

成層流中の渦構造の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究においては、回転の効果が不安定性に及ぼす影響を詳細に明らかにすることに成功した。成層の強さをあらわすフルード

数と回転の強さをあらかすロスビー数に対する依存性を、局所安定性解析とモード安定性解析により明らかにし、5種類の不安定性の発現条件と成長率が渦度分布によってどう変化するかを解明した。非線形時間発展の研究は中途であり、今後の課題である。

らせん渦の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究においては、楕円型不安定性の基本モードを擾乱として与えたらせん渦の直接数値シミュレーションを行い、不安定化過程を調べた。レイノルズ数によって渦構造の崩壊に至る過程が異なることを明らかにした。他の不安定モードを擾乱として与える場合の時間発展と、らせん渦の複数パラメータ（ピッチ、太さ、軸流の強さ、本数）に対する依存性を明らかにすることが今後の課題である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Yuji Hattori, Shota Suzuki, Makoto Hirota and Manish Khandelwal, “Modal stability analysis of arrays of stably stratified vortices,” *J. Fluid Mech.* 909 (2021) A4.

Yuji Hattori, Makoto Hirota, “Stability of array of vortices in rotating stratified fluids”, submitted to *J. Fluid Mech.*

著書

国際学会

Y. Hattori, I. Delbende, M. Rossi, “Instability and Wave Interactions in Helical Vortices,” *Proceedings of the 20th International Symposium on Advanced Fluid Information (2020)*, pp. 173-174.

Yuji Hattori, Ivan Delbende, Maurice Rossi, “Instability and Wave Interactions in Helical Vortices,” *21th International Symposium on Advanced Fluid Information (2021)*.

国内学会・研究会等

服部裕司, 廣田真「双曲型不安定性による成層流中の渦列の不安定化過程」日本物理学会第75回年次大会（2020年3月、名古屋、現地開催中止、講演成立）

服部裕司, Ivan Delbende, Maurice Rossi「らせん渦の不安定性の数値解析」日本物理学会2020年秋季大会（2020年9月、オンライン）

服部裕司, Ivan Delbende, Maurice Rossi「軸流をもつらせん渦の線形不安定性の数値解析」日本流体力学会年会2020（2020年9月、オンライン）

服部裕司「らせん渦の不安定化過程の直接数値シミュレーション」第34回数値流体力学シンポジウム（2020年12月、オンライン）

服部裕司, Ivan Delbence, Maurice Rossi「らせん渦の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究」日本物理学会第76回年次大会（2021年3月、オンライン）

服部裕司, 廣田真「回転成層流体中の渦列の不安定性」日本物理学会2021年秋季大会（2021年9月、オンライン）

服部裕司, 廣田真「成層流中の渦列の安定性に対する回転の効果」日本流体力学会年会2021

(2021年9月、オンライン)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR07APR20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.04～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022 年 4 月 1 日提出

分子シミュレーションを用いた固体電解質／活物質内

Li イオン輸送特性の解明

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

固体電解質／活物質内 Li イオン輸送特性の研究は次世代 Li イオン電池セルの開発において非常に重要な研究の 1 つである。更なるエネルギー密度、入出力、耐久性など性能向上に向け、Li イオン電池セル内部抵抗についての解明は重要な課題である。この現象を解明するには固体電解質内部の Li イオンの輸送特性を明らかにする必要があるが、この現象は実験的に計測が困難なため、計算科学の活用が必要である。

1.2 研究期間内の最終目標

全固体 Li イオン電池の特徴を反映したシミュレーションモデルを構築し、固体電解質や活物質内、及びその界面での Li イオン伝導特性を評価する。

2. 研究成果の内容

2.1 固体電解質／活物質の結晶構造及びエネルギー状態について量子化学計算

量子化学計算を行い、固体電解質／活物質の結晶構造及びエネルギー状態を解析し、結晶内の Li イオン輸送経路やエネルギーバリアを特定する。

2.2 固体電解質／活物質内 Li イオン伝導シミュレータ構築及び妥当性検証

量子化学計算の結果を参照し、結晶内部 Li イオン拡散係数を評価できるシミュレーションモデルを構築する。またこのモデルを用いて分子動力学シミュレーション計算を行い、計算系の安定性や Li イオン伝導性を検証し、モデルの修正にフィードバックする。

3. 研究目標の達成状況

先行研究の結果を参考し、正極活物質 NCM333 結晶の古典 MD シミュレーションモデルを作成した。エネルギーが発散する問題を回避するためのポテンシャル修正や、電荷中性を維持するための調整などを行い、Li イオン充填率と拡散特性の関係を検証した。しかし Li 充填率より正極活物質結晶の格子係数変化が実験値と乖離し、計算モデルと手法はさらなる検証と修正が必要と判断した。

固体電解質 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ のポテンシャルモデルの作成が困難なため、機械学習手法で作成した Neural Network Potential (NNP) を利用し、MD シミュレーション計算を行った。しかし現行 NNP は長時間の MD 計算で固体電解質結晶構造が崩れる問題が生じたため、Li イオン以外の原子を固定し、単純化されたモデルで MD 計算を行った。計算結果により、固体電解質結晶内 Li イオン位置分布中心の S と Cl の交換より Li イオンの拡散係数が顕著に増大する現象を確認し、実験結果や量子化学 MD 計算の結果と一致する傾向が示された。

4. まとめと今後の課題

固体電解質、正極活物質それぞれのモデルを作成し、Li イオンの拡散現象を検証できたが、計算系が不安定になるなどの問題はまた残されており、原因の特定やモデルの修正と再作成を検討している。目標の固体電解質と正極活物質界面のシミュレーションについて、複雑計算系の構築、計算モデルを統合する手法などは今後の課題である。なおポテンシャルモデルや MD 計算結果を検証するため、第一原理 MD (AIMD) 計算手法の利用も考えられる。

5. 研究成果リスト (※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

黄聖峰, 馬淵拓哉, 安田博文, 幸琢寛, 徳増崇: 「固体電解質 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ 内部の Li イオン輸送特性に関する分子動力学解析」, 日本機械学会 M&M 2022 材料力学カンファレンス, 2022 年 9 月 26 日~28 日 (発表予定)

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR03MAY20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.05～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022 年 7 月 17 日提出

次世代形燃料電池膜電極接合体内部の物質輸送に関する

数値シミュレーション

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

固体高分子形燃料電池 (Polymer Electrolyte Fuel Cell : PEFC) の高分子電解質膜は高温低湿度条件下においてプロトン輸送性が大きく低下するという課題を抱えている。プロトン輸送性を効率的に行うために高分子膜内にカーボンナノチューブを添加する手法が提案されている。そこで本研究では、分子動力学法を用いてカーボンナノチューブ添加時の高分子膜をモデル化し、膜内部におけるプロトン輸送特性の解析を行うことを目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、高分子/カーボンナノチューブ複合膜内部のプロトン輸送現象に関して、膜の温度依存性と含水率依存性に着目して解析を進める。異なる温度や含水率の複合膜におけるプロトン輸送に対するカーボンナノチューブ界面における分子構造の影響を解析することで、プロトン輸送現象のメカニズム解明を目標とする。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

カーボンナノチューブ界面を炭素壁でモデル化することで、炭素壁と高分子の界面におけるプロトン輸送現象を解析するための計算系を作成した。そして、界面領域におけるプロトンの平均二乗変位を算出し、プロトンの界面における自己拡散係数を求めた。その結果、グラフェン壁面近傍(グラフェン界面)の自己拡散係数は、高分子のみのバルク状態の自己拡散係数に比べて大きくなることが確認された。

3. 研究目標の達成状況

炭素壁と高分子の界面におけるプロトン輸送現象を解析し、グラフェン近傍では輸送速度がバルク状態に対して向上すること、またこのメカニズムとして、グラフェン近傍に水分子が集まることによって良好なプロトンの通り道となる水分子ネットワークが形成されることが示された。これらの知見が得られたことにより、本研究の目標は達成されたと考えている。

4. まとめと今後の課題

今回、グラフェン界面においてプロトン輸送性能が向上することが分子動力学計算の結果として得られたが、カーボンナノチューブを含有する膜全体の輸送特性を解析するには、このグラフェン界面やバルク領域がどの程度存在するかを評価して解析しなければならない。それにはさらに上位の解析手法に今回の知見を組み込んだ解析を行わなければならない。その計算手法の構築が今後の課題であると考えている。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Rikki Tanaka, Takuya Mabuchi, Yushi Zhang, Bruce Hinds and Takashi Tokumasu: Molecular Dynamics Study of Proton Conductivity at an Interface between Nafion and Graphene Sheet, ECS Transactions, Vol. 104, No. 8 309-316, (2021)

著書

なし

国際学会

Rikki Tanaka, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Molecular Dynamics Study of Proton Transport in Water Filled Carbon Nanotubes, The seventeenth International Conference on Flow Dynamics, (2020)

国内学会・研究会等

田中陸機、馬淵拓哉、Yushi Zang, Bruce Hinds, 徳増崇: ナフィオン/カーボンナノチューブ複合膜中におけるプロトン輸送性に関する分子論的解析, 第34回数値流体力学シンポジウム (2020)

田中陸機、馬淵拓哉、Yushi Zang, Bruce Hinds, 徳増崇: 高分子/グラフェンシート界面におけるプロトン輸送性に与える濡れ性の効果, 第11回マイクロ・ナノ工学シンポジウム (2021)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

受賞

田中陸機, "Molecular Dynamics Study of Proton Conductivity at an Interface between Nafion and Graphene Sheet", PEFC&E 21 Symposium Student Poster Session Third Place Award, 2021年10月13日

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR04MAY20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.05～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022 年 07 月 14 日提出

金属結晶内の炭素拡散に関する分子論的解析

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

航空宇宙, 自動車など幅広い分野で鉄は利用されているが, これらの分野で材料として使用する前に, 強化をする必要がある. 鉄内部の炭素拡散は固溶強化の一種であり, 鋼の製造に特に関連していることから, 広く研究されている. 実験から, 格子欠陥と炭素原子間の相互作用が, フェライト鋼の機械的特性 (硬さ, 靱性, 強度など) に大きく影響することが分かっている. 格子欠陥は脆化, ひずみ老化, 鋼の侵食などの問題を引き起こす可能性がある. また, 不均一触媒反応や腐食などの分子表面の相互作用には, 炭素原子の地下層への拡散, さらにはバルクへの拡散も含まれる. そのため, 鉄中の炭素拡散プロセスを理解することは, 過酷な環境にさらされている鉄鋼の挙動を理解するのに役立つと考えられている. 鉄内部の炭素の拡散のプロセスとして熱による拡散がよく知られているが, 近年, 放電プラズマ焼結 (Spark Plasma Sintering : SPS) 法では, 電場による炭素の拡散が大きな注目を集めている. しかし, 熱拡散による鉄内部の炭素拡散は広く研究をされているが, 電界による鉄中の炭素拡散のメカニズムは実験だけで研究されており, 特に電界による鉄中の炭素拡散を分子動力学 (MD) 法でシミュレーションした報告はほとんど見当たらない. そこで本研究では, 分子動力学法を用いて, BCC 及び FCC 構造における電界下の炭素拡散現象の解析を行うことを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では, 放電プラズマ焼結の電場による炭素拡散の影響を解明するために分子動力学法を用いて, 電場下の鉄内部の炭素拡散の解析を行う. 加えて, 双晶系における炭素拡散現象の解析を行い, 炭素拡散と相変態の相関関係を解明することを最終目標とする.

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

初めにポテンシャルの妥当性の検証をし, 電場下における炭素輸送特性を解析する. 今回用

いるポテンシャルの鉄の相変態温度を解明するため、各構造の自由エネルギーを計算し比較する。またそこで得た相変態温度において実際に相変態が起こることを確認するため、BCC 構造、FCC 構造を隣接させ、計算を行う。最後に BCC 構造、FCC 構造の各構造や界面における炭素の輸送を解析する。

3. 研究目標の達成状況

電場をかけていない状態における鉄結晶内部の炭素原子の各温度の自己拡散係数から活性化エネルギーを算出し、実験値と比較を行い、この結果からポテンシャルの妥当性が検証された。さらに、電場下における炭素輸送特性の解析のため炭素の電場方向の変位、速度を算出し、解析した。今回用いるポテンシャルの鉄の相変態温度を算出した。また算出した相変態温度において実際に相変態が起こることを確認するため、BCC 構造、FCC 構造を隣接させ計算を行い、シミュレーションにて相変態を再現できることを確認した。

4. まとめと今後の課題

本研究では、放電プラズマ焼結法の焼結プロセス中の電場による炭素輸送及び鉄の構造を分子動力学シミュレーションにより解析した。鉄内部の炭素輸送特性の解明のため、鉄の結晶構造として BCC 構造、FCC 構造を使用し、それぞれの構造における炭素の自己拡散係数からポテンシャルの妥当性を検証し、電場下の炭素原子の変位、速度を調査した。構造特性を解析するため、鉄の格子定数からポテンシャルの妥当性を検証し、鉄結晶の相変態温度を解明するため、各構造の自由エネルギーを比較した。またそこで得た相変態温度において相変態を起こすのかを確認するため双晶系において計算を行った。今後の課題としては、今回採用した計算系では炭素原子が一つした導入できておらず、統計データとして、精度が低くなっている点が挙げられる。そのため、複数の炭素原子が導入できるポテンシャルを導入し、解析を行うことが当面の課題である。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

特になし

著書

特になし

国際学会

特になし

国内学会・研究会等

北快理, 馬淵拓哉, CHANTRENNE Patrice, 徳増崇: 電場下における鉄内部の炭素拡散に関する分子論的解析, 日本機械学会 2021 年度年次大会 (2021).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）
特になし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01AUG20
研究種別	一般研究
利用期間	2020.08～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022 年 2 月 21 日提出

スクラムジェット模擬燃焼器内部流における気流境界層抽気時の 水素/空気燃焼ガス噴射による燃焼特性に関する数値解析

小林 秀昭, 早川 晃弘

東北大学流体科学研究所 教授, 准教授

樋口 靖浩, 脇田 陽平, 乗松 慧生

東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻

西浦 聡志

東北大学工学部 機械知能・航空工学科

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

次世代の極超音速輸送機のエンジンとして、超音速飛行から極超音速飛行時に他の航空推進システムに比べて高い比推力性能を誇るスクラムジェットエンジンが期待されている。申請者らはこれまで、同エンジンを対象として超音速流中における水素/空気過濃燃焼ガス噴射による燃焼現象、およびラムジェットモードとなる疑似衝撃波発生や熱閉塞限界に近いマッハ数領域からの燃焼特性の解明に取り組んできた。その過程で燃焼器内に発達する気流の速度境界層がキャビティ保炎器内部の保炎に影響を及ぼすことが明らかになった。そこで、本研究ではキャビティ保炎器の上流で気流境界層を抽気した場合において燃焼特性および保炎性能に与える影響を明らかにすることを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、キャビティ保炎器を有するスクラムジェット模擬燃焼器内部流における速度境界層抽気の影響を明らかにするため、キャビティ保炎器の上流に空気エジェクタを設置し速度境界層抽気を行う条件において、エジェクタの性能が保炎に与える影響を明らかにすることを最終目標とする。

2. 研究成果の内容

スクラムジェット模擬燃焼器において気流境界層抽気を行った際の燃焼特性に関して数値解析を行うため、Ansys社の熱流体解析ソフトウェアであるFluentを使用し、三次元数値計算を行った。基礎方程式は、レイノルズ平均ナビエーストークス方程式、全エネルギー保存の式、質量保存の式および化学種の輸送方程式とした。また、レイノルズ応力を予測するための乱流モデルにはMenterのSST $k-\omega$ モデルを用いた。燃焼計算においては、Mullerらによって提唱されている H_2/O_2 詳細反応機構である9化学種19素反応機構を利用し、予燃焼ガス組成の算出にはChemkin-Proによる平衡計算を用いた。また、反応計算時のソルバーにはCHEMKIN-CFDソルバーを使用した。この結果、実験では取得することのできない図1(a)に示すような燃焼領域を示すOHモル分率分布および(b)に示す燃焼領域の形成と密接な関係にある運動量流束を得ることができた。なお、図には境界層抽気実施、非実施それぞれの結果を併せて示しており、境界層抽気による諸量の変化を明確に得ることができた。

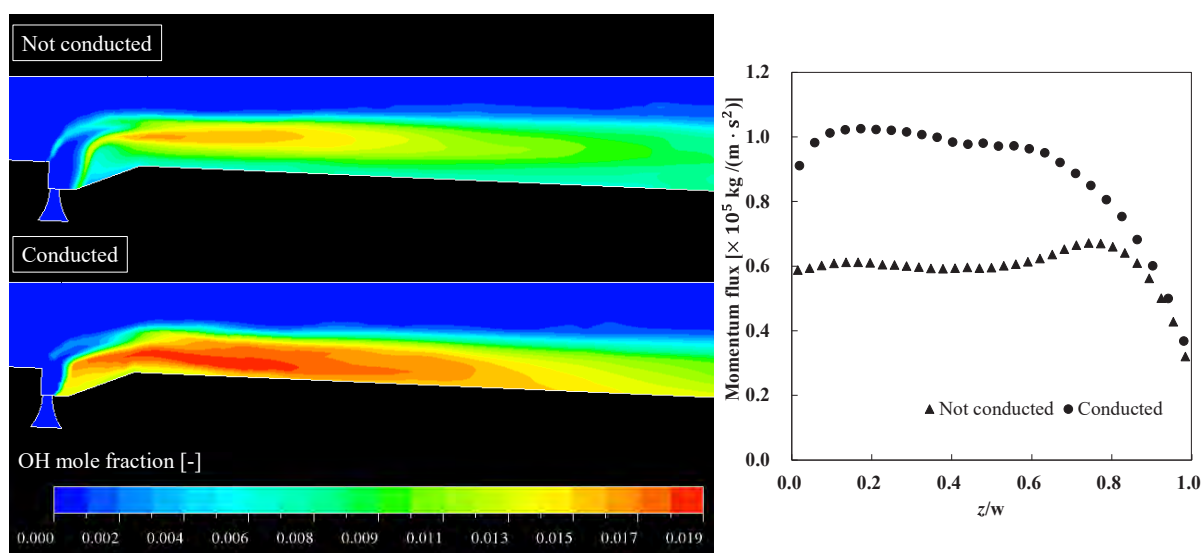


図 1. 三次元数値計算結果

本プロジェクトによって新たに得られた知見は次の通りである。

- (1) 気流境界層抽気により壁面付近および主流中心の流速が増加する。
- (2) 流速の増加により主流の持つ運動量が増加し、噴射ガスとの相互作用が変化する。
- (3) 相互作用が変化的ることによってキャビティ内部の混合過程に変化が生じ、保炎に有利な燃焼形態へと遷移する。

これらのことから、気流境界層抽気により保炎性能を向上させ、保炎可能な条件を拡大させることが可能と明らかにした。

3. 研究目標の達成状況

本プロジェクトでは、スクラムジェット模擬燃焼器内部流において気流境界層抽気を行った際の保炎性能の変化を調査することが目的である。これに対して、三次元数値計算によって境界層抽気によって保炎性能が向上することおよびそのメカニズムを明らかにすることができた。

そのため、研究目標については達成できたといえる。

4. まとめと今後の課題

スクラムジェット模擬燃焼器において気流境界層抽気を実施した際の保炎性能に関する数値的再現および調査、現象の解明については成功し、本プロジェクトの目標は達成できた。しかし、計算領域が大きく、計算負荷が高いため、今後は計算モデルの単純化や計算領域の削減などをさらに試みる必要があり、今後の課題といえる。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌

日本航空宇宙学会論文集(2022年発表予定)

著書

なし。

国際学会

1. Yohei Wakita, Tatsuya Yamaguchi, Mariko Hasegawa, Yasuto Yugami, Taku Kudo, Akihiro Hayakawa and Hideaki Kobayashi: Effects of Airflow Boundary Layer Control on Flameholding Performance in Supersonic Flow, Seventeenth International Conference on Flow Dynamics (2020). (口頭発表)
2. K. Norimatsu, S. Nishiura, Y. Wakita, T. Kudo, A. Hayakawa, and H. Kobayashi: Effects of Boundary Layer Bleeding and Dual-cavity Flameholder on Flame Stabilizing in Supersonic Flows, 39th International Symposium on Combustion Work in Progress Poster (2022). (ポスター発表)

国内学会・研究会等

1. 脇田陽平, 乗松慧生, 長谷万里子, 工藤琢, 早川晃弘, 小林秀昭: 超音速流中における気流境界層制御が燃焼場に与える影響に関する研究, 日本航空宇宙学会北部支部 2021年講演会ならびに第2回再使用型宇宙輸送系シンポジウム.
2. 乗松慧生, 脇田陽平, 工藤琢, 早川晃弘, 小林秀昭: 超音速流における気流境界層制御が流れ場および燃焼形態へ与える影響に関する研究, 日本航空宇宙学会北部支部 2022年講演会ならびに第3回再使用型宇宙輸送系シンポジウム.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし。

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01APR21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.4～2023.3
報告回数	第 1 回報告

2022年3月1日提出

境界層遷移のモデル構築とそれに基づいた層流化デバイスの設計

廣田 真

東北大学流体科学研究所 准教授

城崎 孝之

東北大学大学院情報科学研究科 M1

杉山 浩之

東北大学流体科学研究所 派遣職員

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

航空機の低燃費・低 CO₂ 化のために摩擦抵抗の小さい層流翼の研究が盛んに行われており、翼周りの境界層流れをできる限り層流化する様々な試みが行われている。特に、民間機で広く用いられている後退翼では、前縁近傍で生じる横流れ不安定性を抑制することができれば、境界層の乱流遷移位置が下流側へ移動し、層流領域を拡大できると期待される。このような層流化をもたらすデバイスとして、翼面にマイクロな突起物を周期的に配置して遷移を遅らす DRE(Discrete Roughness Elements)法がある。しかし、2019年にテキサス A&M 大学のグループが飛行試験まで行ったが、再現性のある層流化効果は確認できず、詳細な遷移プロセスの理解に基づいたデバイスの性能向上が課題とされている。実機の飛行環境において境界層内部の様子を観察することは不可能なため、CFD 解析によるデバイスの性能評価と予測が重要な役割をもつ。

本研究は DRE よりも層流化効果の高いデバイス(SRE)をこれまでに提案しており、その層流化効果を流体科学研究所の低乱風洞施設で実証する計画が NEDO プロジェクトの一環で現在進められている。本研究はそのためのデバイスの最適設計とロバスト性の評価を行い、単に CFD 解析で予測するだけでなく、それが実験結果を再現できるような予測になっているかを検証する。さらにはこうした CFD 解析を用いずとも最適なデバイスが提案できるような理論モデルの構築を目指している。

1.2 研究期間内の最終目標

風洞環境は飛行環境よりもレイノルズ数やマッハ数が低く、さらに SRE は流線の方向や境

境界層厚さ、気流乱れなどの様々な条件に合わせて最適設計する必要がある。しかし、これらの条件は前もって正確にわからないものもあり、このような条件を与えた CFD 解析によって最適なデバイスを設計しても、実験でその通りになるとは限らない。本研究では実際に風洞環境で計測された流れ場に合わせてデバイスを設計し、その実験結果をフィードバックしてさらなるデバイスの改善と最適化を目指す。そして、風洞実験と CFD 解析の知見を踏まえて理論モデルを構築し、飛行環境においても層流化が見込まれる最適なデバイスの指針を得ることを目標とする。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 CFD 解析に基づく風洞実験計画提案および SRE デバイスの設計

JAXA において後退平板を用いた類似の風洞実験の実績があり、まずはその模型を借りて 8 月および 10 月に予備実験が実施された。本研究はそれに先立ち、低乱風洞実験において想定される境界層の流速分布とその安定性、さらには SRE デバイスを設置した際の層流化効果を CFD 解析によって検討し、層流化が期待できる実験条件を示した。10 月にはディスク型ラフネスによって複数の波長の人工擾乱を励起し、最も不安定な波長は CFD 解析によって予想された横流れ不安定性の波長とおおむね一致することが確認された(図 1)。

次にこの不安定性を抑制するような SRE デバイスを設計し、層流化が見込まれる領域を予測した。このデバイスを実際に後退平板に設置した実験が 2 月末の現在行われている。この結果が期待通りであれば、さらに層流化効果の高いデバイスの検証を来年度に実施する計画であり、これについては東北大学・三菱重工・JAXA の共同で特許申請の手続きを進めている。

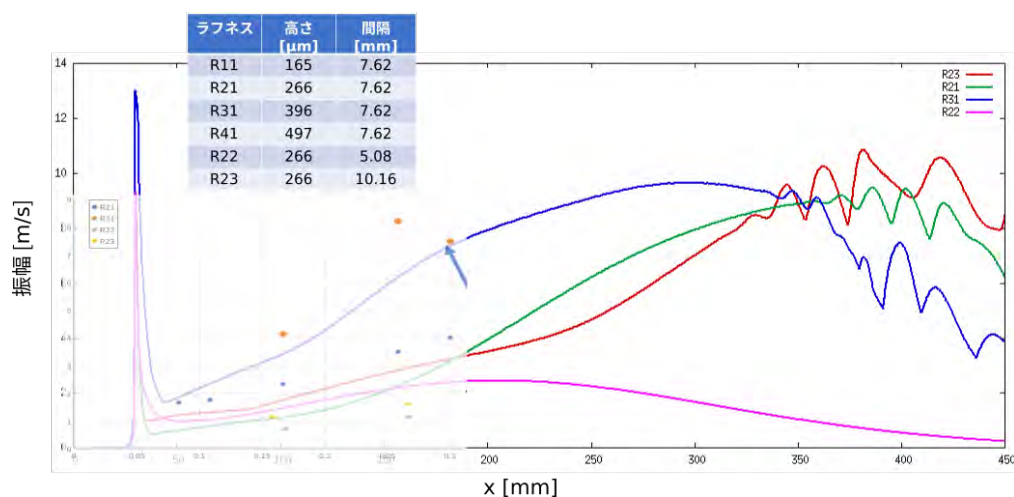


図 1. コード位置 $x=30\text{mm}$ に置かれたラフネスによって励起される横流れ不安定モードの振幅

2.2 平行流近似とスケール相似則に基づいた乱流遷移予測モデル

横流れ不安定性は境界層内部で主流方向に垂直な横流れ成分が存在する場合に発生し、そこだけを見ればケルビン・ヘルムホルツ不安定性と呼ばれる現象に等しい。つまり、翼面上のどの位置でも局所的には平行せん断流とみなすことができ、近似的に相似則をあてはめることができる。本研究ではこのような仮説の下で現象を単純化し、一次不安定性(横流れ不安

定性)の線形成長率と非線形飽和レベルのモデル、さらには二次不安定性の線形成長率のモデルを構築した。そこまで理論的に予測することができれば、おおよその乱流遷移位置を予測することができる。これらの簡易モデルは大規模並列計算を必要とする DNS の結果とある程度近い結果が予測できることを示した(図 3)。ただし、一次不安定性の飽和レベルに大きな差異が存在するため、DNS 解析の代替となるほどの定量的な予測としてはまだ不十分であった。オーダー評価としてはそれなりに正しいため、まだ改善の余地がある。

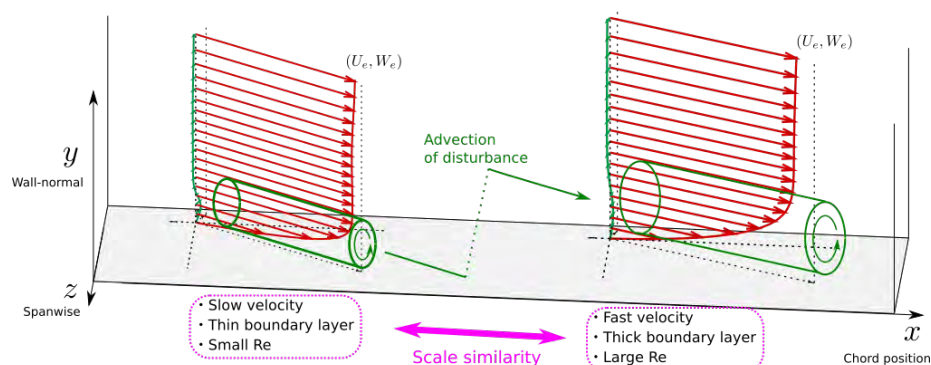


図 2. 各コード位置における境界層流れとそれらの間の相似則のイメージ

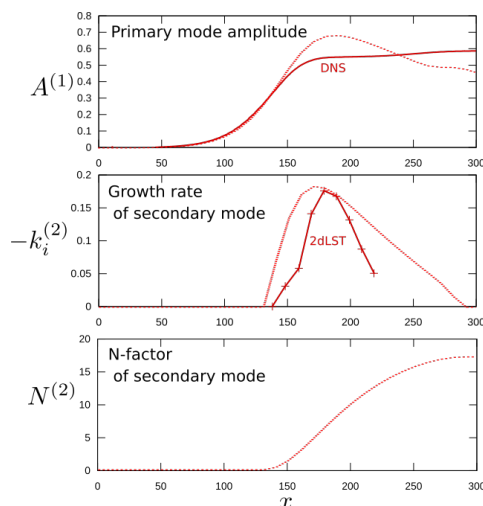


図 3. 一次不安定性の振幅 (上) 二次不安定性の線形成長率 (中) 二次不安定性の N 値 (下) ただし、点線はモデルによる予測

2.3 デバイスの準静的な形状変化を用いた最適形状探索

なんらかのデバイスを翼面に設置し、その層流化効果を評価するためには、デバイスによって乱流遷移位置がどの程度後方へ下がるのかを調べなければならない。しかし、乱流遷移位置はデバイスよりもかなり下流位置にあるため、デバイスの影響が下流に反映されるまでには時間がかかり、スパコンでも多くの計算領域と計算時間を必要とする。一方で、横流れ不安定性が移流不安定性 (≠絶対不安定性) ならば、デバイスによって励起された不安定波は流れによって移流されるだけであり、デバイスの形状パラメータを十分にゆっくりと変化させると、各形状の効果は時間遅れで次々と下流位置に現れる。デバイス形状は埋め込み境界法によって表現しているため、このように形状を準静的に変化させることが容易であり、効率的に層流化効果の高いデバイスを探索することができる。ただし、形状を動かすことで非定常な擾乱がわずかながら発生するため、形状を固定した場合に比べると乱流が発生しや

すくなる問題がある。擾乱の大きさは形状の変化速度に比例して大きくなるが、埋め込み境界法のパラメータを適切に選ぶことで相対的に小さくできることがわかった。

3. 研究目標の達成状況

本研究で設計した層流化デバイスの効果を検証するための実験が今現在行われており、計画通りに進んでいる。

理論モデルは現象を大幅に単純化したモデルによって乱流遷移位置の簡易的な予測まで行ったが、定量的予測としてはもう少し改善が必要と思われる。

4. まとめと今後の課題

現在行われている実験の結果が CFD 解析の予想とうまく整合すれば、来年度はさらに層流化効果の高いデバイスの設計と実験を行う計画である。予想と合わない結果になった場合はその原因をつきとめ、設計を見直して再挑戦することになる。

理論モデルは現象を単純化しすぎているために予測が合わない所があり、横流れ不安定性の非線形飽和レベルをより正確にモデル化する必要があると考えられる。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

M. Hirota, Y. Ide and Y. Hattori: Numerical Study on Local Scale Similarity of Primary and Secondary Crossflow Instability, 18th International Conference on Flow Dynamics (2021.10) Online

T. Shirotsaki, M. Hirota, Y. Hattori: Optimization of Turbulent Transition Delay Effect Using Dynamically Transforming Roughness Elements, 18th International Conference on Flow Dynamics (2021.10) Online

M. Hirota, Y. Ide and Y. Hattori: Modeling of Crossflow-Induced Boundary Layer Transition, 2021 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (2021.11) Ramada Plaza Jeju Hotel, South Korea

国内学会・研究会等

城崎 孝之, 廣田 真, 服部 裕司: 動的変化する壁面粗さ形状を用いた乱流遷移抑制効果の最適化, 第 35 回数値流体力学シンポジウム (2021.12.15) オンライン開催

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR03APR21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.4～2023.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 3 月 1 日提出

有機分子修飾界面におけるナノスケール界面現象の解明

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

熊谷 晴

東北大学大学院工学研究科ファインメカニクス専攻 博士前期課程

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

ナノテクノロジーやバイオ技術の進展に伴い，固体表面の表面処理技術が高度化しているが，その中でも有機分子の自己組織化能を利用し，“ボトムアップ”的な手法で，原子・分子オーダーの表面修飾を実現する自己組織化単分子膜（self-assembled monolayer, SAM）は，その広範かつ柔軟な特性から既に広く応用が進んでいる．このような有機分子を利用した表面修飾技術は，次世代の半導体デバイスの冷却技術への適用が期待されるため，本研究では，分子修飾膜界面における熱エネルギー輸送や濡れ特性に着目し研究を行う．特に，分子動力学（MD）シミュレーションを用い，固体表面に SAM を修飾した界面での熱輸送特性や液滴濡れを詳細に明らかにすることをねらいとしている．SAM 界面の界面熱抵抗を大幅に低減する新規修飾膜の模索を目指す．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では，種々の SAM 修飾界面の熱輸送解析を行い，種々の SAM 修飾界面における界面特性の解析を行い，界面熱抵抗の低減や界面親和性の向上を実現する修飾技術を模索する．特に SAM 界面における界面熱輸送を支配する分子論的メカニズムを明確にする．また，熱輸送特性や界面親和性に関して，分子動力学シミュレーションによる新たな解析技術の構築を目指している．

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 PEG 系 SAM/水界面における界面熱輸送特性

OH 末端や COOH 末端官能基を有する polyethylene glycol (PEG)鎖とアルカン鎖からなる SAM 分子を用いて SAM を構成し，水溶媒との界面熱コンダクタンスへの影響を明らかにし

た。その結果、COOH 基を有する PEG 基 SAM では界面熱コンダクタンスが著しく大きいことを明らかにした。

2.2 SAM 上液滴接触系を用いた濡れ性の解析

金基盤に修飾したアルカンチオール SAM の表面上に水液滴を配置した系を構成し、MD シミュレーションを行った。ここでは、2 次元の数密度分布を用いて接触角を算出し、実験で得られているデータと矛盾無い結果を得た。また、水分子間の相互作用に起因する局所応力解析を行い、接触線付近に設けた検査体積表面の応力を積分することで、界面接線方向の力学的バランスからピンング力の評価を行った。その結果、系統的な誤差範囲内でピンング力がほぼ無視できることが明らかになった。

3. 研究目標の達成状況

種々の SAM 種を用いた界面熱輸送解析および SAM 表面上における液滴の濡れ性を解析するという目標について、概ね目標を達成した。今後は固体間分子接合の系など解析対象をさらに拡張して研究を行っていく。

4. まとめと今後の課題

今後、SAM 界面での熱輸送特性について、溶媒や SAM の種類をさらに拡張して、実デバイスで想定される界面モデルを用いた解析を実施したい。固体間を直接有機分子で接続する分子接合系に関する熱輸送描像の確立を目指す。また、物理的・化学的不均一性を有する SAM 表面上における液体の親和性を明らかにする。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

国際学会

1. Gota Kikugawa, Leton Chandra Saha, Takashi Yagi, Yuichiro Yamashita, Masahide Sato, Taku Ohara, Thermal Conduction over PEG-Terminated SAM/Water Interface with Different SAM Chain Lengths, 2nd ACTS, Online, Japan, (2021).

国内学会・研究会等

1. 菊川豪太, 新田則佳, Surblys Donatas, 小原拓, 自己組織化単分子膜表面上の液滴接触状態に関する分子動力的研究, 第 58 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, J223, (2021), (in CD-ROM).

2. 菊川豪太, 新田則佳, Surblys Donatas, 小原拓, 疎水性の異なる SAM 表面上の液滴濡れ状態に関する分子動力的研究, 日本流体力学会年会 2021, (2021), (available online).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR04APR21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.04～2023.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 3 月 1 日提出

固気液接触線でのマルチスケール性を考慮した相変化熱流体解析

岡島 淳之介

東北大学流体科学研究所 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

気液二相流の数値シミュレーションはこれまでに数多くの研究のもと発展しており、汎用の熱流体解析ソフトウェアにも標準的なモデルを利用できる状態にあるが、沸騰現象の数値シミュレーションは十分に発展していない状態にある。特に固気液三相接触線近傍の取り扱いが現在でも発展途上であり、熱輸送に大きな寄与がある固体壁面上での蒸発現象を適切に表現できていないことが原因である。

そこで本研究では、沸騰・蒸発現象における固気液三相接触領域での微視的な濡れ現象及び蒸発現象がマクロスケールの気液二相熱流動挙動に与える影響を明らかにし、沸騰伝熱の素過程を十分に再現できるシミュレーションの実現を目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

沸騰・蒸発現象において、固体壁から流体にどのような経路で熱が輸送されるかというのは、現象理解および工業的に重要な熱輸送促進を達成するために必要な知見である。しかしながら、蒸発が強く生じる接触線のスケールと、気泡・液滴の熱流体挙動のスケールは大きく乖離しているため、マルチスケールの解析が必要となる。本研究は、このマルチスケール性を適切に表現し、核沸騰熱伝達、対流沸騰熱伝達、加熱面への液滴衝突などの相変化伝熱を伴う混相流現象におけるマルチスケール性を評価する。

2. 研究成果の内容

2.1 核沸騰熱伝達におけるマイクロ液膜形成

水の核沸騰熱伝達において重要となるマイクロ液膜の直接数値シミュレーションを行った。マイクロ液膜は加熱壁面上に付着した蒸気気泡が膨張・成長する過程で、加熱壁面上に形成される薄い液膜のことであり、高い熱輸送性能を有することが知られている。現象が高速かつ小さなスケールで生じるため、これまでは実験・数値シミュレーションともに評価が難しい

現象であったが、近年、その直接数値シミュレーションがいくつか報告されるようになってきた。本研究では、直接数値シミュレーションで考慮されていなかった①気泡の離脱および②固体壁面内の熱伝導の両面を取り入れた世界初のシミュレーションを実施した。既知の実験データをベンチマークとして計算結果を比較し、壁面温度の時間変化を定量的に一致させるためには、マイクロメートルオーダーの固体の多層構造を考慮する必要があることがわかった。また、同様の初期条件であっても、固体の熱伝導率が形成される液膜の厚さや乾くまでの形状変化に大きな影響を及ぼすことを明らかにした。

3. 研究目標の達成状況

沸騰伝熱の重要な課題であるマイクロ液膜の形成の直接数値シミュレーションに取り組んだことは、本研究目標の中で重要な一歩である。また、並行して蒸発を伴う動的接触角のモデルの構築に取り込んでおり、十分な進捗があった。

4. まとめと今後の課題

核沸騰熱伝達におけるマイクロ液膜の直接数値シミュレーションを行い、実験データとの比較により、定量的な一致のためには固体壁の多層構造での熱伝導の再現が必要であることが示された。一方で、気泡の形状・運動については再現が不十分であり、蒸発を伴う動的接触角モデルの導入が今後の課題である。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

国際学会

J. Okajima, P. Stephan: Analysis on Characteristics of Dynamic Contact Angle Derived from Evaporative Moving Contact Line Model, Surface Wettability Effects on Phase Change Phenomena (SWEP) Workshop 2021, (2021), No. 13.

国内学会・研究会等

岡島淳之介：蒸発を伴う動的接触線の熱流動解析による動的接触角の特性評価，第 58 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, (2021) A322.

大田光希, 岡島淳之介：マイクロ液膜形成を考慮した核沸騰熱伝達の数値シミュレーション，第 59 回日本伝熱シンポジウム, (2022) 発表予定.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR05APR21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.04~2023.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 03 月 01 日提出

化学気相堆積法および原子層堆積法における

成長機構の量子論的/分子動力的解析

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

化学気相堆積 (Chemical Vapor Deposition : CVD) 法および原子層堆積 (Atomic Layer Deposition : ALD) 法はガス状原料の供給とその化学反応を制御して所望の薄膜を形成する手法であり、半導体産業における基幹技術である。しかし、成膜に至るプロセスは物質移動、熱移動および化学反応を含むため非常に複雑であり、新規膜種の開発は試行錯誤的に行われるばかりで多大な経済的および人的資源を消費している。そのため我々は、化学反応と動力学を考慮した高精度なシミュレーションを行い、開発プロセスを大幅に改善することを最終目標としている。ここでは、Si 基板上に SiH_x 種および GeH_x 種 ($x = 0, 1, 2, 3$) を導入し、SiGe 薄膜を成長させる PECVD 法に着目し、その成長機構を解明することを第一の目的とする。その後、これらの知見を活かしてより複雑な BCl_3 などに代表されるホウ素前駆体を用いた窒化ホウ素 (Boron Nitride: BN) の ALD 堆積成長解明を第二の目的とする。手法に関して、化学反応を再現するためには第一原理計算に基づいた量子化学的手法を用いることが一般的である。ただし、そのような手法では多数の原子を取り扱うことは計算負荷の観点から現実的に難しく、最終的に数 10nm スケールの比較的大規模な形成膜の組成を解析することは困難である。そこで本研究では、主として反応性力場 (Reactive Force-Field : ReaxFF) を用いた分子動力学 (Molecular Dynamics : MD) 法によって解析を行う。比較的大規模な系において成長機構を分子動力的に解析した研究は国内外でも例が少ないため学術的にも非常に意義深く、加えて工学的にも応用先が広いことから大変価値のある研究であると考えている。

1.2 研究期間内の最終目標

化学気相堆積法および原子層堆積法における微視的な表面反応機構の理解，また実際の成膜によって得られる薄膜の構造特性（結晶性等）・成膜特性（成膜速度等）と成膜パラメーター（基板温度等）の相関関係について理解することを本研究の最終目的とする。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

Si 基板上に SiH_x 種および GeH_x 種 ($x=0, 1, 2, 3$) を導入し、SiGe 薄膜を成長させる PECVD プロセスシミュレーションを実施し、その成長機構を解明する。また気体分子種が成長薄膜の組成や結晶性に及ぼす影響を解明した。現在は、これらの CVD の知見を活かしてより複雑な BCl_3 および NH_3 から BN を成長させる ALD プロセスのポテンシャルの構築を実施している。

3. 研究目標の達成状況

各種気体分子 (SiH_3 , SiH_2 , GeH_3 , GeH_2) から構成される気体分子比率が、成長薄膜の組成や結晶性に及ぼす影響を定量的に算出し、その成長機構について明らかにした。また ReaxFF を開発した Prof. Adri van Duin のグループに滞在することで BCl_3 および NH_3 から BN を成長させる ALD プロセスにおいて、 BCl_3 の OH 終端 Si 表面における反応を記述するポテンシャルを構築した。

4. まとめと今後の課題

第一の目的である、Si 基板上に SiH_x 種および GeH_x 種 ($x=0, 1, 2, 3$) を導入し、SiGe 薄膜を成長させる PECVD 法における成長機構を解明が達成された。第二の目的である、 BCl_3 および NH_3 から BN を成長させる ALD プロセスにおけるポテンシャル構築も Prof. Adri van Duin のグループに滞在することで順調に進行中である。このポテンシャルに NH_3 の表面反応を組み込むことで ALD プロセスシミュレーションを完成させることが当面の課題である。

5. 研究成果リスト（※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitzu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Reactive force-field molecular dynamics simulation for the surface reaction of SiH_x ($x=2-4$) species on $\text{Si}(100)-(2\times 1)\text{:H}$ surfaces in chemical vapor deposition processes」, 『Computational Materials Science』, Elsevier, Vol.204, 111193, (2022)
2. N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitzu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Reactive Force-Field Molecular Dynamics Study of the Effect of Gaseous Species on Silicon-Germanium Alloy Growth by PECVD Techniques」, 『Proceedings of the 2021 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices』, IEEE, (2021)

著書

特になし

国際学会

1. **N. Uene**, T. Mabuchi, M. Zaitso, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Reactive Force-Field Molecular Dynamics Study of the Effect of Gaseous Species on Silicon-Germanium Alloy Growth by PECVD Techniques」, 『2021 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices』, Dallas, USA, September 2021
2. **N. Uene**, T. Mabuchi, Y. Jin, M. Zaitso, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Density Functional Study on ALD Precursors for Hexagonal Boron Nitride Deposition」, 『21st International Conference on Atomic Layer Deposition』, Florida (all-virtual), USA, June 2021

国内学会・研究会等

1. **N. Uene**, T. Mabuchi, M. Zaitso, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Numerical Simulation Study for Optimization of Material/Process and Composition/Structure in CVD/ALD thin film growth by Reactive Molecular Dynamics Method and Density Functional Theory」, 『応用物理学会分科会 229 回研究会』, all-virtual, Japan, July 2021 (*Invited*)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

特になし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR06APR21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.04~2023.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 3 月 1 日提出

炭化水素系アイオノマー内部の物質輸送特性の解明

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

固体高分子形燃料電池(PEFC)の触媒層では, 高分子を含むアイオノマー薄膜で白金触媒が覆われている. アイオノマーが厚いほどプロトン伝導性は上昇するが, アイオノマーが薄いほど酸素透過性は上昇する. PEFC の発電効率向上のためには, これらの相反する特性を両立する触媒層の設計が不可欠である. 今回の研究には, スルホ酸化ポリフェニレン(SPP-BP)という高いプロトン導電性と化学的安定性を併せ持つ炭化水素系高分子膜に焦点をあてて, アイオノマー内部に対する輸送特性の解析を適用して, 白金表面の吸着現象や酸素輸送特性およびプロトン伝導性を解明することである.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では, PEFC 触媒層において, SPP-BP 高分子を用いた炭化水素系アイオノマーの構造特性を解明する. そして, ナノスケール構造に基づく酸素透過メカニズムとプロトン伝導性を明らかにする. また, 従来のパーフルオロスルホン酸高分子のアイオノマーの酸素透過性・プロトン伝導性と比較することを行う. これにより, 低コスト・高性能を持つ高分子構造の設計に貢献できると考えられる.

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 計算系の構築と開発

従来のフッ素系の電解質膜材料は Nafion (EW=1144)を使用する. 新素材の SPP-BP のポリマー構成については, モノマーのランダム性を考慮して, シーケンス(v 型)とランダム(r 型)の二つのタイプを考えた. 白金のモデルは白金原子を面心立方格子構造として三つの層構造とした. ポテンシャルについて, 分子モデルの相互作用は DREIDING forcefield を使用した. 白金と水分子の相互作用は Spohr ポテンシャルを使用し, その以外は DREIDING forcefield のパラメータは Lennard Jones ポテンシャルで表した. また, Spohr ポテンシャルには, lammps に含まれないため, プラグインの形で lammps のソースコードに追加した. Spohr

モジュールを正しく動作することについて、確認を行った。

2.2 アイオノマーにおける白金表面の吸着現象の解明

分子動力学シミュレーションを行って、新たな SPP-BP (v 型と r 型) と従来の Nafion 材料を用いたアイオノマーの構造特性と水の拡散特性を解析した。計算結果より、炭化水素系アイオノマーにおいて、水と親水性のスルホ基の密度分布が一致し、白金表面に高分子が良く吸着していることを確認した。膜表面-真空の界面には、高分子主鎖が表面に、水とスルホ基は少し内部に分布し、Nafion の結果と同じであることが確認された。水のクラスターに関する特徴は、v 型のサイズが大きく、プロトン輸送性が高いと考えられる。水の拡散特性には、v 型と r 型の SPP-BP アイオノマーについて同程度の値を示し、その値は Nafion と比較して、低いことが示された。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、高いプロトン導電性と化学的安定性を併せ持つ新たな SPP-BP 高分子を用いた炭化水素系アイオノマーの分子動力学シミュレーションに着目して、計算系の構築ができた。この計算系を使用して、白金表面における炭化水素系アイオノマーの構造特性と水の拡散特性の解析に関しては目標を達成した。

4. まとめと今後の課題

白金表面における高分子アイオノマーに対するシミュレーションの結果について、炭化水素系アイオノマーの構造特性と水の拡散特性を明らかにした。さらに、従来の Nafion 材料との比較を行った。今後の課題として、炭化水素系高分子の構造による薄膜構造及び酸素透過性への影響についての解析を進行する予定である。また、プロトン伝導性に関するメカニズムを解明することに努める。これらの特性を明らかにすることで、より優れたアイオノマー薄膜の設計に繋げていく方針である。

5. 研究成果リスト (※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

紀佳淵, 黄聖峰, 馬淵拓哉, 徳増崇: 固体高分子形燃料電池触媒層における芳香族高分子膜のアイオノマーの吸着現象に関する分子動力学解析, 第 35 回数値流体力学シンポジウム, オン

ライン, B06-2, 2021.12.14-12.16.

紀佳淵, 黄聖峰, 馬渕拓哉, 徳増崇: 分子動力学法による白金表面における芳香族高分子電解質膜アイオノマーの吸着状態の解析, 第 35 回分子シミュレーション討論会, 岡山, 112P, 2021.11.29-12.1.

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01SEP21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.09～2023.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 2 月 22 日提出

スーパーコンピューティングによる先端車両基盤技術研究

石本 淳

東北大学流体科学研究所 教授

鈴木 祥弘, 多田 卓哉, 佐々木 秀, 平井 直人

日立 Astemo 株式会社

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

次世代超小型高エネルギー密度型 INV に適用する技術として,電動化における要素技術の構築が求められる。要素技術の物理モデルの構築と熱制御を踏まえ,高効率・小型化・高信頼性獲得に貢献する技術及び生産性の飛躍的向上に向けた技術の確立を目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では,以下 2 テーマを推進する

① 次世代 PCU 向け新冷却システム構築と要素技術研究

潜熱を活用した新冷却システムと最適化技術を用いて高性能/小型/低コストを実現する。

② レーザー溶融接合技術の数値解明

理論に基づく解析モデルを構築し,レーザー溶接で生じる実事象を再現することで製品設計技術の構築につなげる

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

<研究の意義>

製品設計およびモノづくりにおける製造条件の設定には高度な調整は不可欠である。しかし,求められる機能やモノづくりで生じる現象はいまだ解明されていないものが多く,従来の経験に基づく設計手法では機能や製造条件を決定する因子の調整に時間がかかり,また十分な検証ができなくなることが予測されている。そのため,自動車部品の高効率,小型,高信頼性を獲得するうえで,物理現象の把握およびデータサイエンスに基づく事象の再現を行うことは産業上および学術的な進歩に貢献する。

2.1 新しい解析手法の開発

- ・ベイズ最適化によるヒートシンクのフィン形状の最適化
- ・数値解析によりレーザー溶接過程を再現とメカニズムの解明

2.2 新しい現象の解明

- ・ヒートシンク形状をベイズ最適化を用いることで、冷却効率と圧力損失の背反性を両立するフィン仕様の導出（下記計算結果の図を参照）
- ・キーホール内のレーザー特性を考慮したレーザー溶接解析モデルの構築

3. 研究目標の達成状況

- ① ベイズ最適化を用いて探索範囲の操作することで冷却器フィンの最適形状の探索が出来た。
- ② OpenFOAMによるレーザー溶接数値解析ベースモデルの解析

4. まとめと今後の課題

- ① ベイズ最適化による冷却器フィン仕様の最適化完了
潜熱を利用したループヒートパイプの冷却システム最適化を行う予定
- ② レーザー溶接の実事象と数値解析結果の理実証明および解析モデルの精度向上

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

共同研究部門：「先端車輛基盤技術研究(日立 Astemo)Ⅲ」 通期報告会 報告予定

5.2 その他（特許,受賞,マスコミ発表,等）

予定なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01OCT21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.10~2023.03
報告回数	第 1 回報告

2022年3月1日提出

粗視化分子動力学法における触媒層構造生成プロセスの解析

徳増 崇, 郭 玉婷

東北大学流体科学研究所 教授, 学術研究員

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

固体高分子形燃料電池 (PEFC) の触媒層では、高分子を含む厚さ数 nm のアイオノマー薄膜で白金触媒が覆われている。アイオノマーは白金表面へプロトンを送るため、アイオノマーが厚いほどプロトン伝導性は上昇する。一方で、酸素はアイオノマーを透過して白金表面に到達するため、アイオノマーが薄いほど酸素透過性は上昇する。従って、PEFC の発電効率向上のためには、これらの相反する特性を両立する触媒層の設計が不可欠であり、特に高電流密度条件では、酸素供給不足が問題となっている。この触媒層のマイクロ構造(空隙率、屈曲度など)が触媒層のプロトン伝導性、酸素透過性の性能を決定する。

1.2 研究期間内の最終目標

触媒層の最終構造は、この触媒インクの組成のみならず、触媒層の作成条件(塗工方法や乾燥時間、温度など)によっても大きく左右される。そのため、最終的に決定される触媒層構造と触媒インクの組成や乾燥条件との関係性を理解し、触媒層構造形成現象を解明することが研究期間内の最終目標となる。

2. 研究成果の内容 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 アイオノマー凝集体の吸着現象の解明

本研究では、CGMD 法により PEFC 触媒層のアイオノマーの Pt 粒子が担持されているカーボン担体への吸着現象について、溶媒種類や混合比によりアイオノマー凝集体構造の変化及び Pt 粒子のサイズと分布に関わるアイオノマー凝集体の吸着メカニズムを明らかにする。

3. 研究目標の達成状況

触媒層の最終構造と触媒インクの組成との関係を調べた。触媒インクの構造を決定するパラメーターを決定するために、希釈したアルコール/水混合溶液中のアイオノマーと白金粒子が覆われているカーボン担体へアイオノマーの吸着構造と現象を解析した。

4. まとめと今後の課題

今後は触媒層を形成する条件（コーティング方法、乾燥時間、温度など）の影響を調べる。白金触媒並びにその表面のアイオノマー構造と蒸発・拡散・沈降を再現するために、溶液の蒸発速度を正確に制御する方法を探索する。蒸発過程でアルコール/水混合溶液の成分・Pt/C表面を基板表面に形成されたアイオノマー最終的な構造に与える影響を解析する。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

[1] Guo, Y.; Mabuchi, T.; Li, G.; Tokumasu, T. Morphology Evolution and Adsorption Behavior of Ionomers from Solution to Pt/C Substrates. *Macromolecules*, Vol. 55, pp. 4245-4255, 2022.

国内学会・研究会等

[1] 郭 玉婷, 馬淵 拓哉, 李 高陽, 徳増 崇, 「触媒層における Pt/C 表面がアイオノマーの吸着と形態変化に及ぼす影響に関する分子論的解析」, 『第 58 回日本伝熱シンポジウム』, 2022 年 5 月

[2] 徳増 崇, 馬淵 拓哉, 郭 玉婷 「固体高分子形燃料電池触媒層作成における塗布・乾燥工程の分子シミュレーション」, 『化学工学会第 52 回秋季大会 材料・界面部会シンポジウム』, 2021 年 9 月

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR02OCT21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.10～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 05 月 02 日提出

低レイノルズ数における柔軟膜翼の非定常流れ場解析

永井 大樹, 藤田 昂志

東北大学流体科学研究所 教授, 助教

山本 健太郎

東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 修士 2 年

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

火星の新たな探査手法として火星飛行機が提案されている。火星飛行機は、広範囲での探査ができ、溪谷や山などの高低差のある場所においても制約を受けることなく探索ができる。しかし、大気密度の小さな火星では飛行機の翼は大きな面積を必要とするため、飛行機を火星まで輸送する手段や機会が限られている。このような状況の中、10 cm × 10 cm × 10 cm 四方 (1U) を基本サイズとする超小型人工衛星 CubeSat が注目を集めている。CubeSat は相乗り打ち上げを基本としているため打ち上げ機会が多く、費用が低く抑えられる利点がある。

そこで本研究室では飛行機を火星へ輸送する機会を増やすべく、CubeSat と火星飛行機を組み合わせた超小型火星飛行機による火星探査を提案してきた。その中で薄い火星大気でも十分な揚力を得るために、柔軟膜翼を主翼に用いた火星飛行機を提案している。柔軟膜を利用することで大面積を有する主翼を 1U サイズに納めることができ、機体重量を大幅に削減することが可能となる。先行研究では、柔軟膜翼を用いた翼では膜の変形を積極的に利用することで最大揚力、最大揚抗比が向上することが報告されている。また、低レイノルズ数における柔軟膜翼の定常流れ場の研究も行われており、柔軟膜が翼上面方向に変形することで剥離が抑制されたことを報告している。しかし、柔軟膜翼では翼面上の非定常流れ場に応じて膜が振動するため、翼周りの非定常の流れ場を併せて理解する必要がある。

柔軟膜翼の非定常流れ場の研究は行われているもの柔軟膜が流れ場に応じて変位してしまうため膜近傍の流れ場を計測できていない。したがって、膜の変位が流れ場の変化を計測することができない。そこで、本研究では PIV 解析で得られた非定常流れ場の時系列データを新たな手法で解析することで膜の変位と流れ場の関係を理解することでこれからの研究・開発に貢献していくことを目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

最終目標は柔軟膜翼の柔軟膜の振動が空力特性に与える影響を解明することである。目標を達成するために、本プロジェクトでは風洞試験で取得した剛体平板翼、柔軟膜翼模型それぞれの非定常流れ場の比較を行った。

2021年度の目標は、PIVで解析した非定常流れ場にDMDを施し、再構築を行うことでノイズを除去した剛体翼、柔軟膜翼それぞれの流れ場を比較し、柔軟膜の振動と流れ場の速度変動周波数の相関について解明することとした。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 柔軟膜翼の速度変動周波数と膜の振動周波数

使用した翼模型には剛体翼と柔軟膜翼の2種類の翼模型を使用した。両翼模型のコード長は50mm、スパン長200mmでアスペクト比が4の平板翼である。また、柔軟膜翼はコード長方向に41.5mm、スパン長方向に190mm平板が切り抜かれており、切り抜かれた部分を覆うように柔軟膜が接着剤で張り付けられている。実験に用いた風洞は東北大学流体科学研究所所有の小型低乱風洞で実験をおこなった。実験条件は2次元翼で計測を行い、風速は9m/sとした。このときのレイノルズ数は30,000とした。高速カメラを用いて翼模型周りの流れ場を撮影した。このときの、サンプリング周波数は5,000 Hzとした。

柔軟膜の前縁、翼上、後縁の速度変動スペクトル、柔軟膜の振動スペクトルを取得したところ柔軟膜のスペクトルピーク周波数と速度変動スペクトルピーク周波数が非常に近い値となった。このことから柔軟膜の振動と流れ場の振動周波数には相関があると考えられる。また、特定の迎角以上では剛体翼の前縁の速度変動スペクトルピーク周波数と近い値になることから流れの速度変動の影響を受けて柔軟膜が振動しているのではないかと考えられる。

3. 研究目標の達成状況

2021年度の目標は達成できた。一方で、柔軟膜の振動が空力特性に与える効果については解明することができなかった。今後は柔軟膜翼の平均キャンバー翼と柔軟膜の空力特性、非定常流れ場の比較が必要だと考えられる。

4. まとめと今後の課題

本プロジェクトは、剛体翼と柔軟膜翼模型周りの非定常流れ場を比較することで柔軟膜翼の空力特性に柔軟膜の振動が与える効果を解明することを目的および最終目標としている。2021年度の目標は、翼模型周りの速度変動、柔軟膜の変位を取得し比較することで柔軟膜の振動と流れ場の速度変動周波数の相関について解明することとし、これを達成した。

柔軟膜翼が形成する平均キャンバーと柔軟膜翼の空力特性、流れ場の比較を行うことが最終目標を達成するために必要であり、今後の課題になっている。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は，初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

無し

著書

無し

国際学会

Kentaro Yamamoto, Tsubasa Ikami, Koichi Takahashi, Koji Fujita, Hiroki Nagai :
Unsteady Flow Field around Flexible-membrane Wing at low Reynolds Number, 18th
International Conference on Flow Dynamics, 2021.

国内学会・研究会等

山本健太郎，伊神翼，高橋幸一，藤田昂志，永井大樹：低レイノルズ数における柔軟膜翼の
非定常流れ場の PIV 解析，第 53 回流体力学講演会／第 39 回航空宇宙数値シミュレーショ
ン技術シンポジウム，(2021).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

無し

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01NOV21
研究種別	一般研究
利用期間	2021.11～2023.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 03 月 17 日提出

ナフィオン膜における機械的特性の影響要因の解明

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

固体高分子形燃料電池（PEFC）は、化学反応により、化学エネルギーを直接電気エネルギーに変換する装置である。PEFC のプロトン交換膜には酸化剤と還元剤を分離し、プロトン輸送の役割を果たすため、化学反応において重要な存在である。そのため、プロトン交換膜の構造的・機械的特性には、PEFC の安定性と安全性にとって非常に重要である。本研究の目的は、ナノスケールの解析に適用可能な分子動力学シミュレーション手法に基づいて、PEFC に広く使われているナフィオン膜に対して、ポリマーの特性および変形メカニズムを解明することである。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、ナフィオンの構造的・機械的特性に注目している。異なる含水率のナフィオンに圧縮・引張を加えて、機械的特性の変化を解析することで、ナフィオンポリマーの変形過程に影響を与える要因を特定し、その変形過程特にメカニズムを明らかにする。

2. 研究成果の内容

2.1 機械的特性と変形メカニズムの解明

ナフィオン膜材料は、圧縮や引張などの外力を受けるときに、その内部の構造が変化する。本研究には、分子動力学シミュレーションの結果により、水のクラスター、水の拡散特性、ポリマーの絡み具合などの解析を通して、ナフィオンの内部構造の変化を解析した。さらに、ポリマーの変形過程に係る要因や変形のメカニズムを解析した。

2.2 含水率よりヤング率への影響の解析

分子動力学シミュレーションの結果によると、含水率を増加することで、ポリマーの側鎖間の平均距離が長くなることが示された。この距離が長くなると、分子間の相互作用が減少する。これにより、材料の変形に抵抗する能力を低下させ、材料の強度を反映するヤング率が低下する重要な原因となる可能性があると考えられる。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、異なる含水率でのナフィオン膜に外力を加えたことにより、材料の構造に関する微視的な変化を解析した。その結果により、含水率が増加するとともにヤング率が低下することを示した。また、計算結果によると、引張と圧縮のヤング率には、同じ傾向であることが分かった。しかし、引張と圧縮に対する計算では、得られたヤング率は同じとはならなかった。その原因について、まず一つは含水率の増加に伴うポリマーの側鎖間の距離が長くなること、もう一つには、ポリマーの絡み具合の影響であると考えられる。この点については、メカニズムの解明・説明がまだできていない状態である。

4. まとめと今後の課題

ポリマーの変形過程に影響を与える要因を分析し、ナフィオン高分子の材料について、変形メカニズムを解明した。これらのメカニズムには、一部はすでに明らかにしたが、ポリマーの絡み具合に係る内容にはまだ合理的な説明ができていない。今後の課題として、ポリマーの絡み具合をさらに解析することで、ポリマーの変形過程とその要因や変形メカニズムがより明確に解明されると考えている。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

I. 研 究 成 果 概 要

若手研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	YG01APR21
研究種別	若手研究
利用期間	2021.04～2023.03
報告回数	第 1 回報告

2022年03月01日提出

ガスジェット浮遊法による溶融体の物性計測高度化に向けた

マルチフィジックスデータ同化解析

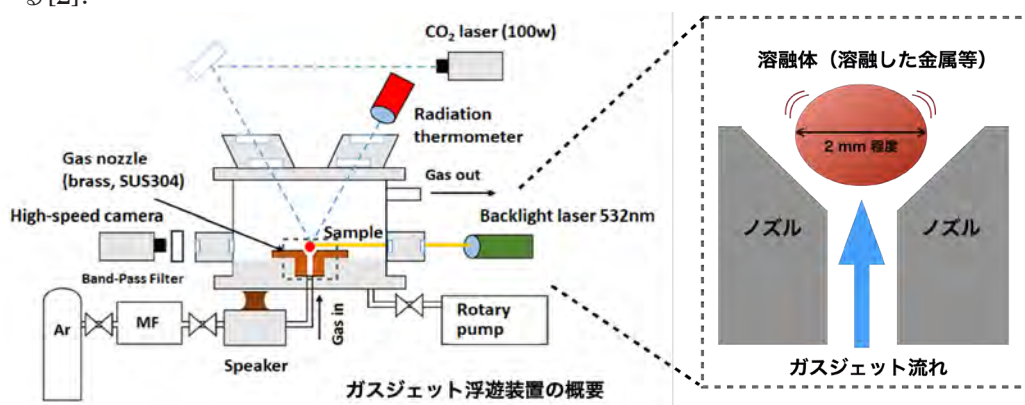
阿部 圭晃

東北大学流体科学研究所 助教

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

溶融体 (1000℃以上の溶融した金属やセラミック等) の熱物性 (粘性, 表面張力等) は, 鋳造・結晶成長・溶接・3D プリンティング等の様々な高温プロセスの支配因子であり, 航空宇宙分野の機能性材料開発への適用も含め, 高精度な測定技術が求められる. しかし, 溶融体は高温かつ高反応性を有するため容器に格納した状態での測定が難しく, 銅等の基礎材料ですら熱物性データは正確に整備されていない. そこで希ガスの噴流 (以下ガスジェットと呼ぶ) により溶融体を浮遊させ, その振動特性から熱物性を算出するガスジェット浮遊法 (下図に概要を示す) が提案されている[1]. 近年では特に, 大型放射光施設 (SPring8) において溶融金属ガラスの回折特性計測に用いられる等, 無容器測定法としての有用性が注目を集めている[2].



しかし, 溶融体をガスジェットで安定に浮遊させるためガス流量を試行錯誤的に調整する必要があり, また溶融体の変形が物性測定の精度に及ぼす影響が検証されていないという問題点から, 実験測定の確実性・信頼性は未だ十分でない. これには, ガスジェット浮遊法を適

用して実際に物性を測定することに重きが置かれ、浮遊法そのものの物理現象が十分に議論されてこなかったという背景がある。そこで本研究では、実験観測が困難な 1000°C 超の熔融体周りのガスジェット流れや熔融体内部流動を数値解析により再現し、実験計測で取得可能な熔融体の振動特性（減衰率）に基づく実験と計測のデータ同化を試みる。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、1000°C 以上に加熱された熔融体をガスジェットにより浮遊させることで熱物性計測を行うガスジェット浮遊法の高度化（浮遊安定化による計測確実性の向上・熔融体変形評価による測定誤差の低減）を最終目的とし、そのためにマルチフィジックス数値解析（熔融体の浮遊運動・熔融体周りのガスジェット流れ・熔融体内部流動の連成数値解析）と実験のデータ同化を試みる。本研究では、ガスジェット浮遊法の高度化に向けて、以下の2つを明らかにする。

【A：熔融体のガスジェット浮遊が安定化する流体力学的機構】

実験では熔融体の温度により浮遊の安定性に影響があることが指摘されているものの、どのような条件で安定化するのか、またその物理的なメカニズムは明らかになっていない。本研究ではまず熔融体の位置を固定した準定常解析からスタートし、ノズル直上を中心に位置を変化させたパラメトリック解析を行う（A-1：剛体球を仮定した熔融体の静安定性解析）。これにより、熔融体に働く流体力が復元方向（ノズル直上に戻す力）かどうかを求めて静安定性の温度依存性を調べることで、安定浮遊の条件を見出す。また加熱を有する圧縮性流れの理論（Rayleigh 流れ）に基づき、復元力が生み出される流体力学的機構を明らかにする。以上の静安定性の議論に続いて、熔融体の運動方程式と流体解析を連成させた運動連成解析を実施し、動的な安定性が実現される条件を見出す。先の静安定解析で得られた安定化機構が動安定時においても適用されるかを検証することで、熔融体の浮遊安定化機構の解明を試みる。なおこの段階では、剛体球を仮定した非変形の熔融体に対して浮遊運動連成解析を行う（A-2：剛体球を仮定した熔融体の動安定性解析）。

【B：熔融体の形状変形による物性値の測定精度への影響】

実験では熔融体は変形しながら浮遊し、物性値の計測はその変形が球面調和関数に従うものと仮定して表面張力や粘性係数が算出される。しかし、ガスジェットから受ける流体力により実際には非球状となることが予想され、球面調和関数では近似出来ず物性値算出の精度低下に繋がるのが近年指摘されている。本項目では、先の剛体球運動モデルにより得られた流体力を元に、熔融体の変形解析を行うことで物性値を算出し、球面調和関数を仮定した場合に算出される物性値との差を明らかにする（B-1：熔融体の変形を予測する粒子法解析の試行計算）。これにより、熔融体の変形がどの程度物性値の推定誤差に影響するかを評価することが出来る。また、最終的には熔融体の変形解析と、項目 A の浮遊体運動解析を連成（B-2：完全分離解法を用いた連成解析手法の検証、B-3：熔融体変形と熔融体浮遊運動の連成解析）させたマルチフィジックス連成解析の枠組みを構築し、実験に近い状態で物性値の算出が行えるようにすることで、実験と解析のデータ同化実施へと繋げる（B-4：熔融体の変形運動連

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 剛体球を仮定した溶融体の安定性解析

まず、項目 A に関連し、圧縮性 Navier-Stokes 方程式を物体適合・構造格子を用いて離散化し、2次元層流計算、3次元 LES による浮遊安定性解析を行なった。計算ソルバーは宇宙科学研究所・宇宙研究開発機構にて申請者も開発に携わった LANS3D を用いた。対称保存型メトリックによる保存量保存性を担保した格子の移動変形と、領域分割による MPI 並列による解析を行なった。始めに、項目 A-1 として溶融体は変形しない剛体円柱と仮定し、またノズル直上付近で位置を変化させたパラメトリック解析を行った。流体解析は2次元解析とし、準定常状態における流体力を算出することで、溶融体の位置変化に対する静的流体力の変化をマップ化した。これにより、高温溶融時には壁面付近で反発力が生じる一方で、常温時には反発力が発生せず、不安定となりうることを示した。

次に、項目 A-2 として A-1 で得た知見を元に、常温・高温球の2次元、3次元浮遊安定解析を行なった。ここでは流体場と球の運動連成解析を行い、A-1 で判明した高温時の反発力が実際の浮遊安定化にも寄与することを示した。このことは実験で観測される常温時の不安定性・高温時の安定性と一致する傾向であり、定性的ではあるが数値解析によって実験現象が再現されたと言える。ここまでの成果を発表し、第 54 回流体力学講演会において流体力学部門最優秀賞を受賞した。

2.2 溶融体の変形を予測する粒子法解析

次に、項目 A-1,2 で得られた溶融体にはたらく流体力を用いて、B-1 として溶融体の変形解析を行なった。手法としては、弱圧縮性の SPH (WSPH) を用いた粒子法に基づく変形解析であり、共同研究者の石原真吾助教の協力により、浮遊時の変形形状の予測とそれに伴う表面張力係数の推定（従来は球面調和関数のみを仮定）を補正する式が導出された。本成果を元に、「浮遊液滴の表面張力推定方法および浮遊液滴の表面張力推定装置」として特許出願を行なった。

以上の内容は、研究概要の図 1 の各欄に対応している。

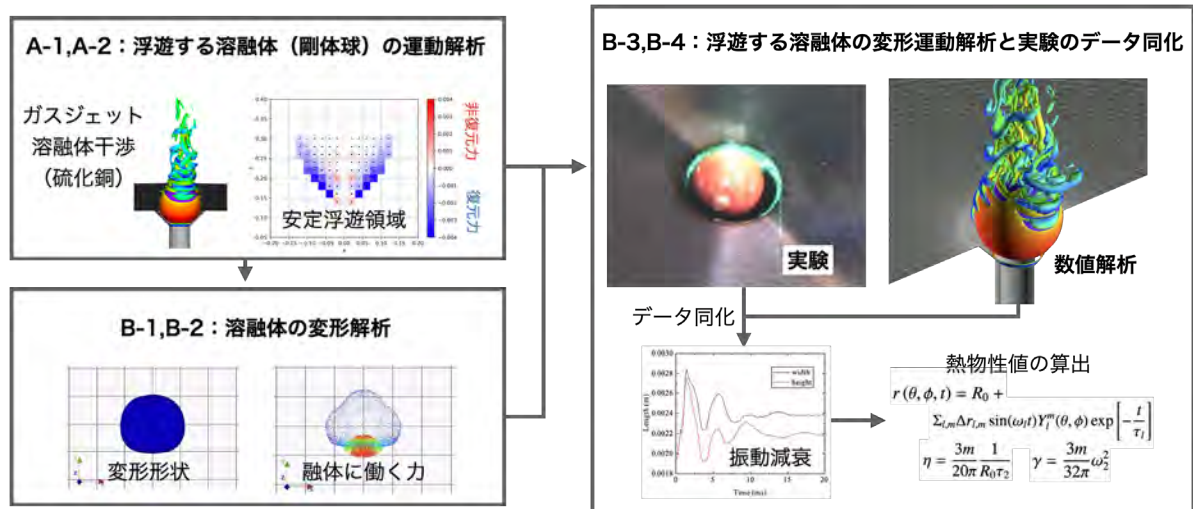


図 1 : 研究概要

3. 研究目標の達成状況

本研究において、A-1 と A-2 の剛体球解析はおおむね目標を達成し、B-1 の変形解析も着手出来た。いずれも学会講演賞や特許出願に繋がる成果となり、現在関連論文を執筆中であることから、順調な進捗と考えている。また、B-3 の溶融体変形を考慮した浮遊変形解析に向けて、物体非適合格子を用いた流体解析も検討を開始している。

4. まとめと今後の課題

これまでに剛体球による 2 次元・3 次元浮遊解析を達成し、実際の実験で確認される現象（常温時には不安定だが、高温熔融時には安定化する）を数値計算においても再現することが出来た。このことから、未だ変形の効果等、考慮出来ていない物理現象はあるものの、溶融体の浮遊に関する基礎的な現象理解、数値解析コードの構築に至った。次年度は、現在は後処理解析の形でなっている溶融体の変形解析を浮遊解析とカップリングし、変形に伴うガス流れの変化も考慮した浮遊変形解析へと進みたい。そのために、物体非適合格子による複雑形状に対応可能な流体解析ソルバーの実用化と、粒子法による変形解析の連成を進める。また、それらが完成次第、実験による計測データとのデータ同化解析を試み、ガスジェット浮遊による熱物性計測技術の高度化へと繋げたい。具体的には以下の項目を実施する。

・ B-2 : 完全分離解法を用いた連成解析手法の検証 (2021 年度実施予定であったが、後ろ倒しして 2022 年度に実施するよう計画を見直した)

次年度以降に行う溶融体の変形と流れの連成解析に向け、高効率の連成解析手法 (連成状態の予測に制御則を用いた分離解法[5]) の実証を行う。SPH 法による変形解析と流体解析の連成における解析手法の高効率化が期待出来るため、この期間に様々な流体構造連成ベンチマーク問題 (フラッター解析等) に適用して手法の評価を行う。特に次年度は、連成問題として航空機主翼の遷音速フラッター問題に着目し、流体系の非線形性により生じる遷音速ディップを捉えることができるかどうかを検証する。そのため、マッハ数・動圧をスイープさせフラッター境界を特定する大規模なパラメトリックスタディを必要とする。

・ B-3 : 溶融体変形と溶融体浮遊運動の連成解析

前年度までに A-1,A-2,B-1,B-2 で構築した剛体球モデルの溶融体浮遊運動解析と、溶融体の変形量解析を連成させた変形運動解析を行う。具体的には SPH と圧縮性流体解析コード LANS3D の連成であり、まずは弱連成解析から始め、その後 B-2 で検証した完全分離解法の導入を試みる。完全分離解法の本研究への適用が困難であると思われる場合は、通常分離反復解法を用いる形へと切り替える。

・ B-4 : 溶融体の変形運動連成解析と実験データの融合解析

ここまで構築した数値解析モデルにより、溶融体の浮遊時の変形量及び振動減衰率の予測が可能となっている。並行して共同研究者が行うガスジェット浮遊の実験(図3)により、溶融体の振動減衰率の時系列データが得られているため、これを元に実験と数値解析のデータ同化を試みる。具体的には、振動減衰率を観測量として実験と数値解析の同化が行われるようアンサンブルカルマンフィルターに基づく解析を行う予定である。これにより、実験では計測できない溶融体形状を数値解析結果から得ることが可能となり、変形が球面調和関数であると仮定して算出した場合の物性値(粘性係数・表面張力)がどの程度の誤差を含むかを定量的に評価可能となる。

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

阿部 圭晃, 小西 貴之, 安達 正芳, 石原 真吾, 岡部 朋永: ガスジェット浮遊法における高温球の浮遊安定性, 第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2021年6月30日~7月2日, オンライン開催.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

令和4年, 特願 2022-027953, 2022年2月25日出願(発明者: 石原真吾・阿部圭晃・安達正芳・加納純也)

令和4年8月3日, 流体力学部門最優秀賞, 「ガスジェット浮遊法における高温球の浮遊安定性」, 第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム(一般社団法人 日本航空宇宙学会 / 国立研究開発法人 宇宙航空研究開発機構)

令和 4 年 11 月 17 日，若手アンサンブルワークショップ・ポスター賞，「ガスジェット浮遊法による熱物性測定技術の高度化」阿部圭晃・安達正芳・石原真吾

I. 研 究 成 果 概 要

特定研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01APR20
研究種別	特定研究
利用期間	2020.04～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022 年 2 月 25 日提出

航空宇宙工学に関わる圧縮性流体の高精度数値シミュレーション研究

河合 宗司

東北大学大学院工学研究科 教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

航空宇宙工学分野における未解決の流体力学的問題の多くは、高レイノルズ数の圧縮性乱流現象と深く関わっている。しかし特に本課題でターゲットとしている高レイノルズ数の乱流境界層現象は、実験計測や高忠実 LES/DNS 解析の困難さ、現象の複雑さから物理現象の理解や物理モデリングが十分に進んでいない研究分野でもある。また特に航空機やロケットエンジン等の実機スケール・高レイノルズ数乱流の高忠実 LES 解析では、向こう数十年のスパコンの発達を考えても、乱流のモデル化無しには計算コストの観点で実機スケールの LES/DNS 解析は不可能であるのも事実である。したがって本課題では、LES/DNS 解析の計算コストを抜本的に削減する手法の構築を目指す。

その一つとして、壁面ごく近傍の境界層内層をモデル化する壁面モデル LES が挙げられる。我々のグループでは高レイノルズ数乱流境界層の LES を可能とする独自の壁面モデル LES で成果[Kawai & Larsson, *Phys. Fluids*, 2012 など]を上げ、当該学術分野で世界をリードしている。また近年ではスパコンを駆使した高忠実な LES 解析から流体物理現象を解明し、理解に基づくモデル化でも学術成果を上げてきている。その中で乱流境界層の剥離・再付着現象および壁面加熱・冷却の強い流れ場では、従来の壁面モデル LES では改良が必要であることが明らかになってきている[Tamaki *et al.*, 2020, Hirai *et al.*, 2020 など]。また、航空機エンジン内流れの予測に重要な燃焼計算は、非常に薄い火炎面とそれよりも大きい流れ場の渦を同時に捉える必要があり、計算コストが大きい。そこで、火炎面を拡大することで流れ場の渦とのスケール差を縮めるモデルがこれまでに提案されている。しかし、従来の火炎面拡大モデルでは火炎と渦が干渉した際に燃焼速度が不正確になることが知られている。

さらに、LES 解析のコスト低減にはサブグリッドスケール(SGS)乱流モデルも重要な役割を果たす。適切な SGS モデルを用いることで、低い解像度の格子でも高精度な乱流解析が可能となる可能性がある。しかし、壁面近傍のストリーク構造等モデル化の難しい複雑な乱流現

象もあり，従来の SGS モデルでは流れ場が十分に予測できないことが知られてきている．このような複雑な乱流現象のモデル化に対しては，機械学習（ML）によるデータ駆動型のアプローチが有効であると考えられる．ML によるアプローチでは，従来の統計的なアプローチと異なり，乱流の詳細構造を直接反映したモデルの構築が可能になると期待される．なお，我々のグループでは過去に ML を用いた壁面モデルの改良等の研究を積み重ねてきており，ML を流体现象のモデリングに用いるための知見を得つつある．

したがって本課題では壁面モデル，火炎面モデル，SGS 乱流モデルの 3 つの方向性で LES/DNS の計算コスト削減・予測精度向上に向けた研究を実施する．本年度は上記課題のうち，ML を用いたデータ駆動型アプローチからの LES における SGS 乱流モデルの構築を実施した．本課題で対象としているような大規模データを用いるモデリングは，航空宇宙分野においては未だ未成熟の分野であり，本課題において先駆的に実施することにより，当該分野をリードし得る可能性があると考えている．

1.2 研究期間内の最終目標

本課題では，高レイノルズ数の圧縮性乱流現象の LES/DNS を用いた高精度数値シミュレーションに関して，(i) より多様な条件における高レイノルズ数流れを高精度に予測する壁面モデル LES の開発，(ii) 燃焼速度が正しく予測できる火炎面拡大モデルの構築，および (iii) ML を用いる乱流詳細構造を反映した SGS 乱流モデルの構築が挙げられる．(i) では衝撃波や緩やかな圧力勾配による剥離・再付着現象，壁面の加熱冷却を伴う乱流境界層に対して，これまで構築した高レイノルズ数 LES データベースを活用・発展させ，非平衡効果を含む詳細な流体现象を考慮した新しい壁面モデルの提案を行う．具体的には，圧力勾配や熱の影響によるせん断応力および渦粘性への影響を物理・データに基づいてコンシステントにモデル化することで，モデルを改善する(第 1 回報告参照)．(ii) では乱流・火炎面干渉現象に関する詳細な DNS 解析を実施し，乱流燃焼モデルの構築のための高精度な DNS データベースを構築する．加えて DNS データベースを元にした物理的考察により，燃焼速度が正しく予測できるモデルを構築する(第 1 回報告参照)．また，(iii) では，LES と DNS の双方を教師なし学習に入力することで，LES と DNS の間の本質的な乱流構造の違いを明らかにする．さらに，その違いを SGS モデルとして LES に加えることで，粗い格子での高精度な LES の実現を目指す．

2. 研究成果の内容

2.1 (a) 深層学習を利用した LES 瞬時場の DNS 品質への超解像

近年乱流に関する研究分野では機械学習を用いた瞬時場の超解像が盛んに行われている．この研究は例えば実験などで得られた離散的な計測データを補間したり，粗い格子で計算された流れ場の解像度をあげたりする目的で行われる．これまでの多くの研究では，一つの高さの瞬時場断面のみを対象とした超解像や，粗視化 DNS を元の DNS に再構成する超解像が行われていた．本研究では 2.2 (b) に示す SGS モデルとしての応用を実現するために，一つの学習モデルから粗い格子の LES の計算領域全領域を DNS 品質に超解像できる学習モデルの構築を試みた．なお，瞬時場の流れ構造は壁からの距離に大きく依存するが，超解像モデルがこの流れ構造の変化に対応できるか検証するために，チャンネル乱流を本研究

の計算対象としている。

提案する学習モデルは「LES 瞬時場の DNS 品質への超解像」と「計算領域全領域での超解像」の2つを両立できることが特徴である。前者には、CycleGAN と呼ばれる教師なし学習を用いることで、一般的な超解像手法では困難であった LES 瞬時場を直接学習に使用し、高品質な DNS 品質での変換を実現している。また、後者に対しては粘性底層、対数層、チャンネル半分高さなどといった、物理的に特徴の異なる幾つかの瞬時場を選定し、それらを学習に用いることで実現を試みている。これにより、壁面近傍のストリーク構造とその外側の比較的等方的な構造の双方の学習が行われる。

このモデルの学習データは $Re_\tau = 180$ のチャンネル乱流であり、格子解像度が $\Delta x^+ = 9, \Delta z^+ = 4.5$ である DNS と、これより格子解像度が 2, 4, 8 倍粗い LES の 2 種類のケースを学習データとして収集している。図 1 に $y^+ = 15$ における本提案モデルにより超解像を施した 4 倍粗い LES 瞬時場を示す。超解像前の粗い格子で捉えた流れ構造を壊すことなく、細かい構造を新たに付加していることが確認できる。より定量的な比較を行うため、図 2 にこの瞬時場から得られるエネルギースペクトルを示す。この結果では、他の超解像手法では困難だった DNS 品質のエネルギースペクトルを、提案手法(CycleGAN を用いた超解像)では実現できていることが示された。これは、CycleGAN は単なる補間ではなく、LES と DNS の流れ場の間に存在する本質的な構造の違いを学習するというを示している。

なお、特筆すべき点として、 $y^+ = 15$ を含む計算領域内の全ての高さの超解像を一つの超解像モデルで実現していることが挙げられる。これは単一の高さのみを対象としてきた他の超解像手法では実現不可能な新規な点である。

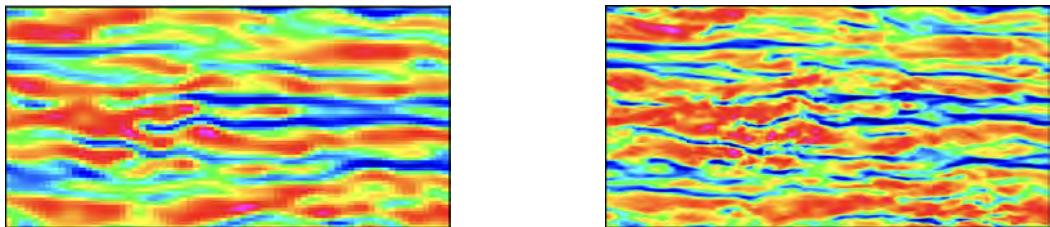


図 1 超解像前後の主流方向速度瞬時場の比較 (左 : 粗い格子の LES ; 右 : 超解像後)

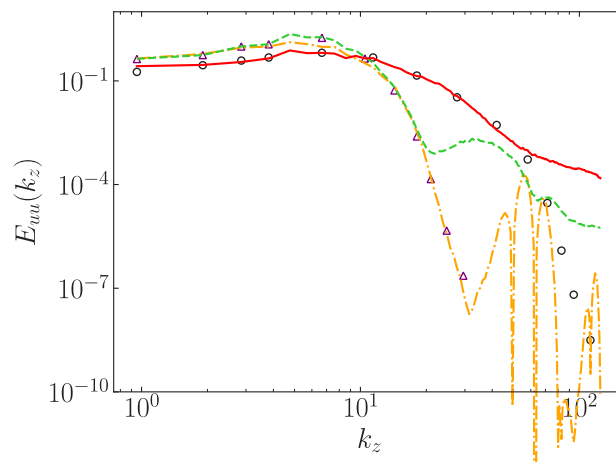


図 2 $y^+ = 15$ における主流方向速度のエネルギースペクトル
(丸 : DNS ; 三角 : 粗い格子の LES ; 赤 : CycleGAN を用いた超解像結果 ;
橙, 黄緑 : 他の手法による超解像結果)

2.2 (b)超解像を応用した SGS モデルの構築

LES では、格子より小さな流れ構造をモデル化するために SGS モデルを使用する。これにより、本来なら非常に細かな格子が必要な渦構造を解像しなくても正確な計算を行うことができる。しかし、SGS モデルは格子で解像できている GS 成分をもとに SGS 成分を計算するため、主要な渦構造が解像できないような粗い格子の場合は、GS 成分の信頼性が低いので SGS 成分が適切に計算されないという問題がある。この SGS モデルの問題を解決することで、粗い格子を用いても正確な LES 解析を行うことが可能になると考えられる。本研究では、2.1 (a)で構築した超解像モデルを応用した SGS モデルを構築することで、粗い格子で計算された瞬時場からも適切な SGS 成分を計算し、LES の計算にフィードバックする手法を構築する。具体的な手法としては、粗い格子の LES を 2.1 (a)に記載した手法を用いて DNS 品質に超解像し、そこから空間フィルタリングにより GS 成分と SGS 成分に分離することで SGS 応力を計算する。計算対象は $Re_\tau = 1000$ のチャンネル流れであり、格子解像度は(a)で用いた DNS の 4 倍 ($\Delta x^+ = 36, \Delta z^+ = 18$) である。

図 3 に提案モデルによって得られる SGS 成分と DNS の瞬時場から抽出した SGS 応力テンソルの成分を比較する。参考として示した従来の統計的モデリングに基づく SGS モデル (Smagorinsky モデル) に比べ、提案モデルは SGS 応力テンソルの各成分の傾向をよく捉えている。この結果は、壁面近くに存在するストリーク構造のような特徴的な乱流構造が提案モデルによって精度良く捉えられていることを示している。

さらに、この提案モデルを実際にソルバーに組み込んで計算を行なった場合の速度分布及びレイノルズせん断応力を図 4 に示す。现阶段では計算過渡段階の予備的な結果であるが、ML を用いた本提案 SGS モデルを用いない計算結果と比べ、外層側の速度分布が若干改善する傾向が見られる。さらに、図 4(b)のように、得られたレイノルズせん断応力分布は DNS と良い一致を示している。よって、計算の収束により、さらに速度分布がさらに改善することが期待される。

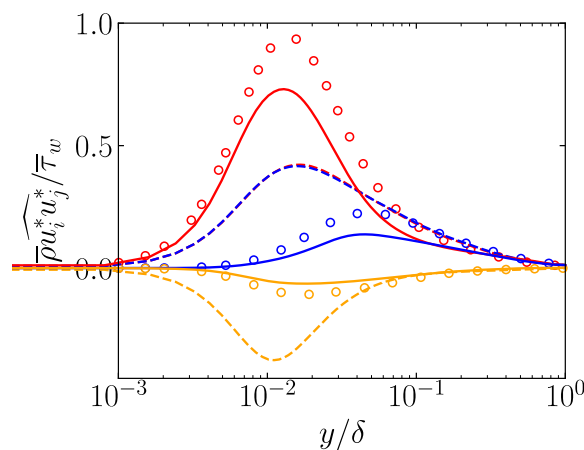
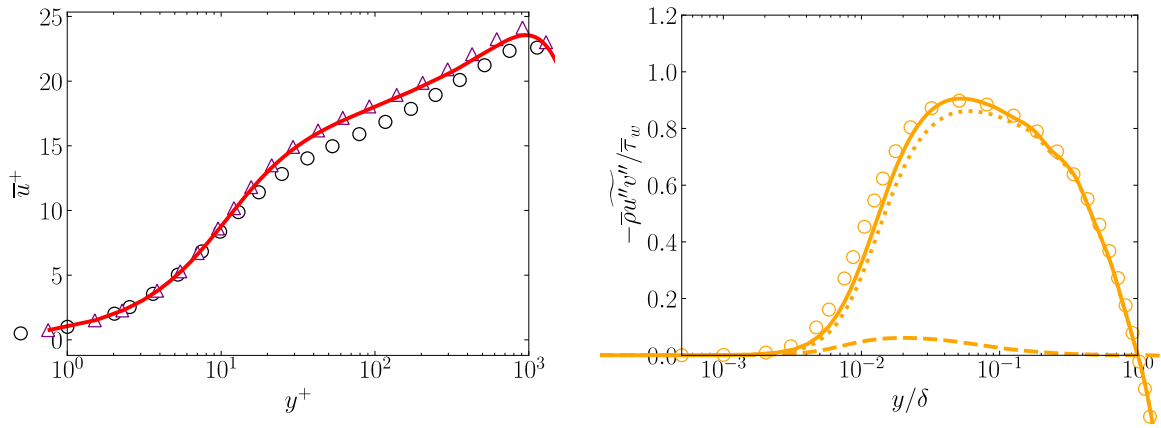


図 3 超解像モデルによって得られた SGS 応力成分 (丸 : DNS ; 実線 : 提案 SGS モデル ; 破線 : Smagorinsky model ; 赤 : x (主流)方向垂直応力 ; 青 : y (壁面垂直) 方向垂直応力 ; 黄 : xy 平面内せん断応力)



(a) 主流方向平均速度

(b) レイノルズせん断応力

(丸 : DNS ; 実線 : 提案 SGS モデルの LES ; (丸 : DNS ; 破線 : SGS 成分 ; 点線 : GS 成分 ; 実線 : GS+SGS)
 三角 : SGS モデルを使用しない LES)

図 4 提案モデルを組み込んだ LES によるチャンネル流れ計算結果

3. 研究目標の達成状況

本課題では、航空宇宙分野で重要となる高レイノルズ数 LES/DNS における計算コストを抜本的に低減するために、(i)壁面モデル、(ii)火炎面モデル、(iii)SGS モデルの改良を目指して研究を実施している。(i)では、圧力勾配および壁面熱流束の効果を反映した壁面モデルを構築し、それぞれで従来モデルに対して壁面せん断応力等の改善が得られることを示した(第1回報告)。(ii)では、火炎面曲率に基づいて燃焼速度をコントロールする新たなモデルの提案を行った(第1回報告)。また本年度取り組んだ(iii)では、粗い格子でも高精度な計算が可能な LES の開発に向けて、粗格子 LES により得られた瞬時場を超解像するための学習モデルの構築を行い、チャンネル乱流の計算全領域の超解像を一つの学習モデルで実現した。また、構築した学習モデルを用いて得られた瞬時場から SGS 成分を抽出することで超解像を応用した SGS モデルを構築した。このモデルを用いることで、粗い格子における LES でレイノルズせん断応力が良く予測できることを示した。以上より、概ね研究目標は達成されたと考えている。

4. まとめと今後の課題

航空宇宙分野で重要となる高レイノルズ数 LES/DNS における計算コストの抜本的低減を目指し、(i) 壁面モデル、(ii) 火炎面モデル、(iii) SGS モデルの3つのモデルの改良を行なった。それぞれのモデルについて、DNS で得られるデータを活用してモデリングを行うことにより、より詳細な物理を反映したモデルを構築することができた。今後は、さらなる計算コストの低減と流れ場予測精度の向上を目指したモデル改善を実施する。具体的には、壁面モデル LES における壁面近傍の瞬時流れ場の挙動を解析し、その構造に基づくモデルの改善を目指す。また、さらに粗い格子に対する LES の瞬時場を用いた超解像を可能とするための SGS モデルの改良を目指す。併せて、より広い範囲(異なるレイノルズ数や圧力勾配、圧縮性の効果のある流れ場)での学習や物理モデリングを行い、高レイノルズ数の乱流に普遍的に存在する物理現象を正しく反映できる汎用的モデル(壁面モデル・SGS 乱流モデル)の構築を目指す。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- ・ R. Hirai, R. Pecnik and S. Kawai, “Semi-local Reynolds number's effects in scaling turbulent statistics for wall heated/cooled supersonic turbulent boundary layers,” *Physical Review Fluids*, 6, 124603, (2021).
- ・ H. Terashima, Y. Hanada and S. Kawai, “A localized thickened flame model for simulations of flame propagation and autoignition under elevated pressure conditions,” *Proceedings of the Combustion Institute*, 38, 2119-2126, (2021).
- ・ R. Hirai and S. Kawai, “Analysis and robust method for source-term modeling of vortex generator,” *Journal of Aircraft*, 58, 958-970, (2021).

著書

- ・ 該当なし

国際学会

- ・ 該当なし

国内学会・研究会等

- ・ 谷野一樹, 前島颯樹, 河合宗司 : CycleGAN による超解像を応用した粗格子 LES 手法の構築に向けて, 第 35 回数値流体力学シンポジウム, 2021 年 12 月
- ・ 前島颯樹, 谷野一樹, 河合宗司 : LES から DNS 相当の全領域流れ場を超解像可能とする教師なし学習モデルの構築, 第 35 回数値流体力学シンポジウム, 2021 年 12 月
- ・ 平井遼, 河合宗司 : 加熱/冷却壁を伴う乱流境界層現象における無次元支配パラメータ, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, 2020 年 12 月
- ・ 加茂川諒, 河合宗司 : 剥離乱流境界層 LES における常微分方程式型非平衡壁面モデルの提案, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, 2020 年 12 月
- ・ 花田豊, 寺島洋史, 河合宗司 : 詳細反応機構を用いた LES 燃焼解析に向けた SGS 火炎面シワモデルの検討, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, 2020 年 12 月
- ・ 谷野一樹, 河合宗司 : 機械学習を用いたマッハ数・レイノルズ数変化にロバストなデータ駆動型 LES 壁面モデリング, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, 2020 年 12 月

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

- ・ 該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS02APR20
研究種別	特定研究
利用期間	2020.4~2022.3
報告回数	第 2 回報告

2022 年 7 月 14 日提出

複合材料の熱・機械特性に関するマルチスケール数値解析

岡部 朋永, 山本 剛, 川越 吉晃, 河合 健志
 東北大学大学院工学研究科 教授, 准教授, 助教, M2

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

航空機用構造材料である CFRP は炭素繊維と母材樹脂からなる複合材料であり, 比強度・比剛性の高さからその需要は増加の一途にある. その一方, 熱・機械特性発現のメカニズムに対して統一的な見解が得られているとは言い難い. その大きな理由の一つは, 分子から部材といった幅広い時空間スケールそれぞれに固有な現象を正確に捉える必要があるためであり, そのための重要な概念がマルチスケールモデリングである. 先行研究では, 金属やセラミック材料においてマルチスケール計算技術の例は多々あるものの, 高分子材料において成功例がほとんど存在しない. 金属材料と異なり, 高分子材料は多くの内部自由度を持つため, より解像度の高い時空間スケールの解析が求められるためである. そこで本研究では母材樹脂を構成するモノマー同士の化学反応から, 複合材料の機械特性評価までを統一的に再現する時空間階層を横断したマルチスケール解析手法の開発と, それを用いた高機能性複合材料の探索を行うことを目的としている.

1.2 研究期間内の最終目標

本マルチスケール解析手法の開発は, 多目的材料開発のデータ取得に供するだけでなく, 新しい計算科学の展開にも繋がる. 本研究では, 量子化学計算 (QM), 分子動力学法 (MD), 散逸粒子動力学法 (DPD), 有限要素法 (FEM) を接続することにより, 複合材料に特化したマルチスケール数値解析技術を開発する. 具体的にはこれまで構築してきた QM と MD を組み合わせた反応硬化 MD シミュレーションに触媒効果を組み込むことで, 多種多様な硬化反応を扱える様にする. または QM と DPD を組み合わせることで, 硬化シミュレーションの高速化・大規模化を実現し, 従来の反応硬化 MD では再現できなかった構造不均一性の評価を行う. これら分子スケールシミュレーションで得られた知見を FEM によるマイクロメカニクス/メゾメカニクス解析へ接続することで, 部材スケールの変形解析や損傷・破壊解析を可能とする. 具体的なベンチマーク試験として複合材料プリプレグの成型時反り変形を本

マルチスケール数値解析手法で予測し、実験と比較して誤差 10%以内の高精度予測を実現させる。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 反応硬化 DPD シミュレーションおよびリバースマッピング手法の構築

QM と粗視化手法である DPD を組み合わせた、反応硬化 DPD シミュレーションの開発し、硬化シミュレーションを高速に実施可能になった。さらに粗視化系を全原子系へと還元するリバースマッピング手法を開発し、得られた全原子系から高精度な物性評価を行った。シミュレーション結果は実験値に対し誤差 10%以内で物性値を再現できており、熱硬化性樹脂の高速かつ高精度な物性予測が可能となった。

2.2 CFRP 積層板の成形時残留変形のマルチスケールモデリング

QM, 反応 MD, ミクロ FEM, マクロ FEM を連携し、CFRP 積層板の残留変形を予測する手法を構築した。QM と反応 MD から樹脂の硬化収縮量と物性を取得し、ミクロ FEM によって複合材料の等価物性を取得する。最後にマクロ FEM によって成形時の非対称積層板の残留変形を予測した。成形実験と比較して、本マルチスケールモデリングは変形量およびサイズ・積層構成に応じた変形形状遷移を高精度に再現できた。また、樹脂種に応じた変形特性の違いをマルチスケールモデリングによって系統的に評価した。

2.3 反応誘起相分離シミュレーションの構築

前述の反応 DPD を用いて熱可塑性樹脂／熱硬化性樹脂混合系における反応誘起相分離を再現できるシミュレーションを構築した。反応速度や拡散性、熱可塑性樹脂の分子量や重量比が相分離構造に与える影響を系統的に評価した。

2.4 力学的特性に着目した多層カーボンナノチューブ紡績糸の構造最適化

機械学習支援分子動力学シミュレーション手法を用いることで多層カーボンナノチューブ紡績糸(MWCNT 紡績糸)の潜在引張強度の解明と実験手法で目指すべき構造パラメータ(本数、層数、カイラリティ、中空空間寸法、層間架橋結合、ねじり角)の調査を行った。無秩序な構造パラメータの組合せを紡績糸構造に持つシミュレーションモデルから得られた強度と構造に関する学習データを基礎データに用いた構造最適を行うことにより、最も高い引張強度が得られる MWCNT 紡績糸の構造パラメータの組合せが明らかとなった。

3. 研究目標の達成状況

当初の計画通りに進行している。

4. まとめと今後の課題

本プロジェクトにおいて炭素系材料およびその複合材料の数値解析ツールが確立された。特に分子スケールの解析手法をマクロスケールの FEM に接続し、部材スケールの変形解析を行うマルチスケールモデリングの構築に成功した。従って、本プロジェクトの最終目標を達成できたと考えている。本手法は分子構造レベルから高機能性複合材料を設計する指針の提案が可

能であり，社会的にも大きな成果である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は，初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Nobuyuki Odagiri, Keiichi Shirasu, Yoshiaki Kawagoe, Gota Kikugawa, Yutaka Oya, Naoki Kishimoto, Fumio S. Ohuchi and Tomonaga Okabe, “Amine/Epoxy Stoichiometric Ratio Dependence of Crosslinked Structure and Ductility in Amine-Cured Epoxy Thermosetting Resins”, *Journal of Applied Polymer Science*, **138**(23) (2021) 50542.

Yi Xiang, Koji Shimoyama, Keiichi Shirasu and Go Yamamoto, “Machine learning-assisted high-throughput molecular dynamics simulation of high-mechanical performance carbon nanotube structure”, *Nanomaterials* **10**(12), (2020), 2459.

Nobuyuki Odagiri, Keiichi Shirasu, Yoshiaki Kawagoe, Tomonaga Okabe, "Cure Path Dependency in Crosslinked Structure of DGEBA / DICY / DCMU Thermosetting Resin", *Materials System*, **38**, (2021), 21-30

Yoshiaki Kawagoe, Gota Kikugawa, Keiichi Shirasu, Tomonaga Okabe, "Thermoset resin curing simulation using quantum-chemical reaction path calculation and dissipative particle dynamics", *Soft Matter*, **17**(28), (2021), 6707-6717

Yi Xiang and Go Yamamoto, “A Data Mining Approach to Investigate the Carbon Nanotubes Mechanical Properties via High-Throughput Molecular Simulation”, *Materials Science Forum*, **1023**, (2021), 29-36

Yoshiaki Kawagoe, Kenji Kawai, Yuta Kumagai, Keiichi Shirasu, Gota Kikugawa, Tomonaga Okabe, "Multiscale modeling of process-induced residual deformation on carbon-fiber-reinforced plastic laminate from quantum calculation to laminate scale finite-element analysis", *Mechanics of Materials*, **170**, (2022), 104332-104332

国際学会

Yi Xiang and Go Yamamoto, “A Data Mining Approach to Investigate the Carbon Nanotubes Mechanical Properties via High-throughput Molecular Simulation”, The 9th International Conference on Nanostructures, Nanomaterials and Nanoengineering 2020 (ICNN2020), October 09-12, 2020, Online.

国内学会・研究会等

小森翔平, 白須圭一, 川越吉晃, インボ ツァオ, 菊川豪太, 岡部朋永, “航空機用難燃性エポキシ樹脂における熱機械特性ならびに熱劣化特性に関する分子動力学シミュレーション”, 第

12 回日本複合材料会議, 2021 年 3 月 2 日～4 日, オンライン開催.

川越吉晃, 菊川豪太, 岡部朋永, “量子化学反応経路計算と散逸粒子動力学法を用いた熱硬化性樹脂の架橋形成モデリング”, 第 12 回日本複合材料会議, 2021 年 3 月 2 日～4 日, オンライン開催.

河合健志, 川越吉晃, 岡部朋永, “マルチスケールモデリングを用いた CFRP 構造部材の成形時残留変形予測”, 第 12 回 日本複合材料会議, 2021 年 3 月 4 日, オンライン開催.

河合健志, 川越吉晃, 白須圭一, 岡部朋永, “幾何学的非線形を考慮した CFRP 構造部材のマルチスケールそり解析”, 第 29 回機械材料・材料加工技術講演会, 2021 年 11 月 18 日, オンライン開催.

川越 吉晃, 河合 健 志, 熊谷 裕太, 白須 圭一, 菊川 豪太, 岡部 朋永, “CFRP 積層板の成型時残留変形のマルチスケールモデリングと母材樹脂種の影響評価”, 第 13 回 日本複合材料会議, 2022 年 3 月 8 日, オンライン開催

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

- ・ 日本機械学会 機械材料・材料加工部門 部門一般表彰（奨励講演論文部門）
河合健志, 川越吉晃, 白須圭一, 岡部朋永
「幾何学的非線形を考慮した CFRP 構造部材のマルチスケールそり解析」

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS04APR20
研究種別	特定研究
利用期間	2020.04～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

低温弱衝突磁化プラズマ中の不安定輸送現象に関する数値的研究

大西 直文, 高橋 聖幸, 坂本 広樹
 東北大学大学院工学研究科 教授, 准教授, D1

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

マグネトロンやプラズマ推進などで用いられる弱衝突磁化プラズマにおいては, 磁場中での古典拡散, $E \times B$ ドリフトや反磁性ドリフトなどのドリフト運動に加えて, 弾性衝突・非弾性衝突が発生することからプラズマ輸送現象が大変複雑となる. 特に $E \times B$ Electron Drift 不安定や Rotating Spoke 不安定モードなどマイクロ・マクロスケール不安定性が発生した場合, 磁場閉じ込めが甘くなることで電子数密度が低下する, 電極損耗や電源系への負荷が増加して放電維持が困難となるなど, 放電デバイスとしての性能が低下することが知られている. 中でもマクロスケール不安定性である Rotating Spoke モードはプラズマの粗密が周方向へと伝播していく不安定性であるが, その発生過程が明らかとなっておらず, 対症的に安定作動パラメータを模索し, 極めて狭い動作範囲でのオペレーションを行わざるを得ない. また過去の放電実験では, 印加電圧上昇に伴って Rotating Spoke 現象の振動周波数が増大するとの報告がなされているが, パラメータの変化に伴ってなぜ振動周波数が増大するのかは明らかとなっていない. このように Spoke 現象は, そのパラメータ依存性も含めて物理過程が明らかとなっておらず, 動作範囲を拡張出来る可能性があるのか否か, 或いは振動抑制のための設計指針は何か不明瞭であり, 産業界における積極的な利用が妨げられている.

Rotating Spoke 構造の発生原因とそれがパラメータによってどのように変化するかが分かれば, 不安定性発生を抑制可能な設計指針を確立出来る可能性があるため, 本研究では, 磁化プラズマデバイス中の Rotating Spoke 構造を数値的に再現し, 発生原因とパラメータ依存性を調査することを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では Particle-in-cell (PIC) シミュレーションを実施し, 磁化プラズマデバイスにおける Rotating Spoke 現象を再現し, その発生メカニズムとパラメータ依存性を調査するこ

とを最終目標とする．衝突反応を考慮するため，PIC モデルに Monte Carlo Collision (MCC) モデルを組み合わせる．

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

本研究はフランス University of Toulouse III の Boeuf 教授との共同研究である．Boeuf 教授は磁化プラズマの大家であり，プラズマの物理現象理解や数値計算において優れた知見を有していることから，本研究の進展を促し得る．

本研究においては，周方向へ旋回運動する Rotating Spoke 現象を数値的に再現するべく，周方向を θ ，軸方向を z とする θz 平面での 2 次元 PIC-MCC シミュレーションを実施した．電子とイオンとを超粒子を用いて記述し，Bunemann-Boris 法を用いてそれらの運動方程式を解く．また誘導磁場の影響は小さいとして無視し，静電ポテンシャルを Poisson 方程式を用いて求め，電場を計算して運動方程式モジュールへとフィードバックすることで，場と粒子の相互作用を記述する．場は格子点上で定義される一方，粒子運動はラグランジュ的に記述されることから，オイラー量とラグランジュ量との補間のために 5 次のスプライン関数を用いて weighting による重み分配計算を実施した．背景気体はアルゴンとし，MCC モデルを利用して電子-重粒子間の弾性衝突，電子衝突電離，電子衝突励起反応を組み込む．またイオン-重粒子間の電荷交換反応も考慮する．パラメータ依存性を調査すべく，背景圧力，印加電圧，カソード表面での 2 次電子放出係数を変化させ，Spoke 構造や伝搬速度を調べた．

PIC-MCC シミュレーションの結果，磁場勾配とプラズマ密度勾配ベクトルとが平行であることから Simon-Hoh 不安定性が発生し，プラズマ分布が強く歪められることが分かった．この歪みによって局所的に電荷分離層（ダブルレイヤー）が形成され，ダブルレイヤー内部で電子が強い $E \times B$ ドリフトを受けて加速されてせん断流が発生し，ケルビンヘルムホルツ不安定性によって渦が放出される．ダブルレイヤー内部での加熱によって電子衝突電離が発生し，これがプラズマ拡散と組み合わせることで Rotating Spoke が伝搬することが示された．また背景圧力が低くなると電子温度が増大し，電子衝突電離周波数が上昇することから Spoke の伝搬速度が大きくなることが分かった．印加電圧やカソード表面での 2 次電子放出係数を増加させた場合，放電領域の電子数密度が高くなることからデバイ長が短くなり，ダブルレイヤーの領域が狭くなる事で局所的に電場が強くなる．この強い電場によって電子がより加熱され，背景圧力が低い場合と同様に電子衝突電離周波数が上がり，Spoke 伝搬速度が大きくなることが示された．これらの伝搬速度増加傾向は実験の傾向と一致していることから，妥当な数値計算結果であると言える．

3. 研究目標の達成状況

PIC-MCC シミュレーションを行うことで Rotating Spoke 現象が数値的に再現され，その発生メカニズムが明らかとされた．また背景圧力や印加電圧，カソードにおける 2 次電子放出係数を変化させると電子衝突電離周波数が変化し，それに伴って Spoke の伝搬速度が変化することが示された．Spoke 現象のパラメータ依存性も明らかとなったため，本研究の目標は概ね達成出来たとと言える．

4. まとめと今後の課題

本研究では，Rotating Spoke 現象が再現され，その駆動メカニズムとパラメータが構造に与え

る影響を示す事が出来た。今後はミクروسケールの不安定性も再現し、マクروسケールとミクروسケール構造がどのように相互作用するのかを調べる予定である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- (1) M. Takahashi: Plasma and Shock Wave Propagations on Microwave-driven In-tube Accelerator, Proceedings of International Electric Propulsion Conference 2022, IEPC-2022-419, 2022.
- (2) J. P. Boeuf and M. Takahashi: Rotating Spokes, Ionization Instability, and Electron Vortices in Partially Magnetized $E \times B$ Plasmas, Physical Review Letters, Vol. 124, No. 18, 185005, 2020.
- (3) J. P. Boeuf and M. Takahashi: New Insights into the Physics of Rotating Spokes in Partially Magnetized $E \times B$ Plasmas, Physics of Plasmas, Vol. 27, 084520, 2020.

著書

なし

国際学会

- (1) M. Takahashi and J. P. Boeuf: Numerical Simulation of Rotating Spokes on Partially Magnetized $E \times B$ Magnetron Sputtering Device: 62nd Annual Meeting of the APD Division of Plasma Physics, Nov., 2020, online.
- (2) M. Takahashi: Plasma and Shock Wave Propagations on Microwave-driven In-tube Accelerator: International Electric Propulsion Conference 2022, June, 2022, online.

国内学会・研究会等

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS05APR20
研究種別	特定研究
利用期間	2020.04～2022.03
報告回数	第 2 回報告

2022年7月15日提出

プラズマアクチュエータによる気流制御メカニズム解明に向けた放電・

流体の連成数値解析

大西 直文

東北大学大学院工学研究科 教授

佐藤 慎太郎

東北大学大学院工学研究科 助教

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

Dielectric-Barrier-Discharge Plasma Actuator (DBD-PA) は大気圧放電を利用した革新的な能動的流体制御デバイスとして注目を集めている。DBD-PA による翼周り流れの剥離制御効果は既に数多くの研究で報告されているが、高速気流中では制御効果が大幅に低下することが課題であり、DBD-PA の性能向上が求められている。近年、ナノ秒パルス放電を利用した新しい DBD-PA が提案されており、高速気流中においても気流制御効果が得られることが期待されている。しかし、その詳細な制御メカニズムについては明らかにされていないのが現状である。制御メカニズムの解明には放電のスケールから流れのスケールまでを統一的に解析する必要があるが、世界的に見ても報告されていない。さらに、放電現象は3次元構造を持つことが知られているが、現在の放電計算はほとんどが2次元計算に限られている。本研究では、世界初の3次元放電・流体の数値計算を行い、ナノ秒パルス駆動 DBD-PA による剥離制御メカニズムの解明に挑戦する。

1.2 研究期間内の最終目標

放電構造の違いが流体場に与える影響を明らかにするために、DBD-PA の放電過程に関する3次元数値計算を実施し、さらに3次元翼周り流れの流体計算との連成数値解析を実施することで大気圧放電を利用した能動的気流制御デバイスの詳細な制御メカニズムを放電のスケールから流れのスケールまで統一的に解析できる数値計算技術を確立することが本研究の最終目標である。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 DBD-PA における放電過程の3次元計算

本年度は、プラズマ流体モデルを用いた DBD-PA における放電過程の3次元数値解析を実施した。昨年度に比べ、格子点数を増やすことで高解像度での放電過程の数値計算を実施した。その結果、放電構造の大きな特徴は変化しないものの、ストリーマ放電進展時にみられる分岐構造が大きく変化し、表面誘電体バリア放電における放電構造を正確に議論するためには、高解像度の数値計算が必要不可欠であることがわかった。放電の分岐構造は、誘電体表面への帯電分布形成に大きな影響を与え、その分布は次のパルス放電の構造形成に寄与することが知られている。この影響を考慮した放電計算を実施し、3次元流体数値計算との連成計算を行うことで、ナノ秒パルス駆動 DBD-PA による剥離制御メカニズムの解明に向けて大きく前進することが期待できる。

3. 研究目標の達成状況

DBD-PA における3次元放電過程の数値計算および NACA0015 翼周りの剥離流れ制御に関する LES を実施することに成功し、どちらも実験結果をよく再現できることを確認した。これらの連成数値解析の実施については、静止気体中での平板上に設置された DBD-PA が誘起する流れ場の数値計算の実施が完了しているため、翼表面上に DBD-PA を設置した時の放電数値計算を実施することにより、DBD-PA を用いた翼周り流れの制御に関する統合的数値解析を実施することが可能になる。

4. まとめと今後の課題

DBD-PA を利用した気流制御の詳細なメカニズム解明に向けて、放電過程の3次元数値計算およびナノ秒パルス放電が流れに及ぼす影響を模擬した翼周り流れの数値計算を実施した。放電過程の3次元計算によって、3次元的なフィラメント構造を再現した。さらに、このフィラメント構造は電極の凹凸構造および誘電体表面電荷の分布に依存することを明らかにした。これに加え、放電の分岐構造を正確に捉えるためには高解像度の数値計算を実施することが必要不可欠であることがわかった。さらに、ナノ秒パルス駆動の DBD-PA の効果を模擬した簡易モデルを用いた LES によって空気加熱によって剥離流れを抑制できることを示した。今後は、翼の表面上に DBD-PA を設置した時の放電過程の数値計算を実施し、流れの数値計算と連成させることにより、放電現象から流れの制御過程までを統一的に扱う数値計算を実施する予定である。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

H. Tamura, S. Sato, and N. Ohnishi, “Three-dimensional numerical simulation of branching structure in surface dielectric-barrier-discharge”, APS Annual Gaseous Electronics Meeting Oct. 2021.

国内学会・研究会等

田村秀人, 佐藤慎太郎, 大西直文, “表面誘電体バリア放電における枝分かれ構造の数値的研究”, 第45回 静電気学会全国大会

田村秀人, 佐藤慎太郎, 大西直文, “曲面誘電体バリア放電の数値的研究”, プラズマアクチュエータ研究会 第8回シンポジウム

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS06APR20
研究種別	特定研究
利用期間	2020.4～2022.3
報告回数	第 2 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

無電極プラズマ推進システムの実用化に向けた数値的研究

大西直文, 山川雄大, 経沢尚輝
 東北大学大学院工学研究科 教授, D2, M2

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

生命や宇宙の起源の解明を目的とした深宇宙探査の実現に向け、電気エネルギーを用いて推進剤を加速させる電気推進が近年利用されている。電気推進は、従来の化学推進よりも高比推力で運用可能であり、探査機の長寿命化やペイロード比の向上に大きく寄与する。現在主流となっている静電加速型の電気推進システムは、プラズマに効率よく電気エネルギーを与えることができるため高推力が得られるものの、露出電極がプラズマと接触することにより損耗し、電極の寿命によって探査機の航続可能距離が制限されているという問題がある。そこで放電室から露出電極を排した無電極のプラズマ推進システムが提案されているが、電磁誘導による加速では電気エネルギーの伝達効率が悪いという問題がある。ホールスラストは多くの場合静電加速型に分類される電気推進システムであるが、磁場によって電子のみを閉じ込めることで電荷分離させているため、加速電場はプラズマの内部に維持されている。そのため放電室に電極を露出させずとも電場を維持できる可能性がある。そこで本研究では、無電極かつ静電的に加速する推進システムとして、無電極ホールスラストを提案する。このシステムが成立するかどうかを検証するためにはプラズマの輸送現象を正確に捉え、無電極でも電荷分離が形成されるかを調べる必要があるが、ホールスラストのプラズマには異常電子輸送と呼ばれる現象があり、予測が困難である。そのためまずは従来のホールスラストの詳細な数値計算を行い、異常輸送現象を解明することを目指した。

1.2 研究期間内の最終目標

無電極ホールスラストのシステム成立可能性を探るため、従来型ホールスラストの異常輸送現象に関して知見を得ることを目標とした。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

ホールスラストのプラズマには、時間的、空間的に様々なスケールの不安定性が現れることが知られており、電子異常輸送を引き起こす原因と考えられている。その中でも電子サイクロトロンドリフト不安定性 (ECDI) と呼ばれる不安定性は、 $E \times B$ ドリフトを利用する限りは発生することが避けられない現象として近年盛んに研究されている。そこで本研究では、ECDI による電子輸送を再現するために、ホールスラストの軸方向-周方向を想定した 2 次元 Full Particle-in-Cell (PIC) シミュレーションを行なった。

支配方程式はイオンと電子の運動方程式と Poisson 方程式で、電荷密度を介してカップリングさせた。現段階では簡単のため計算領域の両端に電極が存在することを想定しており、電位の軸方向(X)の境界には Dirichlet 境界条件 ($X=0\text{cm}$ で 200 V, $X=2.4\text{ cm}$ で 0V) を適用した。実機のホールスラストのプラズマでは周方向 (Y) に 数 10 cm の長さを持っているが、計算コストの削減のために周方向の計算領域は 1.25 cm とし、電位、粒子ともに周方向には周期境界条件を適用した。粒子の軸方向の境界条件は流出境界で、イオン化による粒子生成とホローカソードによる電子注入は先行研究 (Boeuf, 2018) に基づいてモデル化した。

計算の結果、先行研究に特徴が一致する波状のプラズマ不安定構造が現れた。電子の軌道を観察すると確かに静電波によって運動が乱されていることが確認され、電子の軸方向輸送が強められていることが示唆された。電子の移動度の増加量を定量化するため密度と電場の揺らぎの共分散 (密度波と静電波のカップリングの強さを表し、運動量保存則の摩擦項として考えられる) を計算したところ、加速領域及び下流領域で高い値を示した。これはホールスラストの電子異常輸送の傾向と一致しており、静電波によって電子輸送が強められていることが示唆された。

3. 研究目標の達成状況

ホールスラストにおいて、プラズマ不安定性に起因して発生する静電波によって電子輸送が強められることを確認できた。そのため電子異常輸送の知見を得ると言う面からは研究目標を達成できたと言える。

4. まとめと今後の課題

本研究では、無電極ホールスラストという新たなコンセプトを提案し、その実現可能性を探るためにホールスラストの限界で知られる電子異常輸送現象について数値的研究を行った。2 次元 Full PIC シミュレーションの結果プラズマ不安定性に起因する静電波が放電管内に現れ、電子の輸送が強められていることが確認された。現在の理論では静電波による異常輸送は予測することができないため、定式化を目指して理論的研究を行う予定である。

5. 研究成果リスト (※第 2 回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

学術雑誌 (解説等を含む)

- (1) A. Wada, C. Kato, M. Takahashi, and N. Ohnishi: Two-dimensional Full Particle-in-Cell Simulation of Magnetic Sails in Formation Flight, Proceedings of Space Propulsion Conference 2020+1, SP2020_108, 2021.
- (2) N. Tsunetzawa, M. Takahashi and N. Ohnishi: Numerical Study of Plasma Transport

Driven by the Wavy-microstructure in a Hall-effect Thruster, Proceedings of 37th International Electric Propulsion Conference, IEPC-2022-355, 2022.

著書

なし

国際学会

- (1) A. Wada, C. Kato, M. Takahashi, and N. Ohnishi: Two-dimensional Full Particle-in-Cell Simulation of Magnetic Sails in Formation Flight: 7th Edition of the Space Propulsion Conference, Mar. 17-19, 2021, Online.
- (2) N. Tsunetzawa, M. Takahashi and N. Ohnishi: Study of the Micro-turbulence Plasma Structure on a Hall-effect Thruster Using 2D Kinetic Simulation, 33rd International Symposium on Space Technology and Science, Fri. 26- Mar. 4, 2022, Online.
- (3) N. Tsunetzawa, M. Takahashi and N. Ohnishi: Numerical Study of Plasma Transport Driven by the Wavy-microstructure in a Hall-effect Thruster, Proceedings of 37th International Electric Propulsion Conference, Jun. 19-23, 2022, Boston.

国内学会・研究会等

- (1) 和田朱音, 加藤ちなみ, 高橋聖幸, 大西直文: 電磁プラズマ粒子シミュレーションによる磁気セイルの編隊飛行における推力特性評価, 令和 2 年度宇宙輸送シンポジウム, 1 月 14-15 日, 2021, オンライン.
- (2) 経沢尚輝, 高橋聖幸, 大西直文: ホールスラスタ内の微細乱流構造に関するプラズマ粒子シミュレーション, 第 65 回宇宙科学技術連合講演会, 11 月 9-12 日, 2021, オンライン
- (3) 経沢尚輝, 高橋聖幸, 大西直文: ホールスラスタにおける微細波状構造の 2 次元 Particle-in-Cell シミュレーション, 令和 3 年度宇宙輸送シンポジウム, 1 月 13-14 日, 2022, オンライン.
- (4) 経沢尚輝, 高橋聖幸, 大西直文: ホールスラスタにおける電子サイクロトロン不安定性による電子輸送に関する数値的研究, 日本航空宇宙学会北部支部 2022 年講演会, 3 月 17-18 日, 2022, オンライン

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01FEB21
研究種別	特定研究
利用期間	2021.2~2022.3
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

大規模疎行列に対する通信隠蔽反復法の検討

水藤 寛, Huynh Q.H. Viet

東北大学材料科学高等研究所 教授, 助教

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

大規模線形方程式の解法のひとつとして、BiCGStab 法は広く知られたアルゴリズムである。近年、そのアルゴリズムのバリエーションとして、Pipelined BiCGStab 法が提案された。これは、内積計算を行列ベクトル計算とオーバーラップさせることによって通信時間を最小化する方法で、並列計算機において標準的に実装されている BiCGStab 法よりも計算速度が速く、注目されている方法である。一般化された BiCGStab 法アルゴリズムとしては GPBiCG 法、BiCGSafe 法、BiCGStar-plus 法など多数あるが、その中でも BiCGSafe 法は収束性の優れたアルゴリズムとされている。Viet Huynh 助教は、BiCGSafe 法のバリエーションとして通信オーバーヘッドが最小化された Pipelined BiCGSafe 法を提案した。この手法は計算速度、収束性、計算機資源の有効活用の 3 点において、既存の手法を大きく改善することが期待できるものになっている。これらの成果に基づく本研究は、スーパーコンピュータ上で大規模線形システムを解くための新しいアルゴリズムを開発することを目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内にスーパーコンピュータ上に Pipelined BiCGSafe 法を実装し、Pipelined BiCGStab 法と比較して収束性がどのように優れているかを明らかにし、その検証を実行することを目指した。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

内積計算と行列ベクトル計算を同時に計算できる Pipelined BiCGSafe 法 (p-BiCGSafe) を実装した。図 1 に従来法との違いを示す。内積計算と行列ベクトル計算を 1 回だけ同時に計算することが、提案手法の特徴であり、これにより他の方法よりも高いパフォーマンスを期待できる。

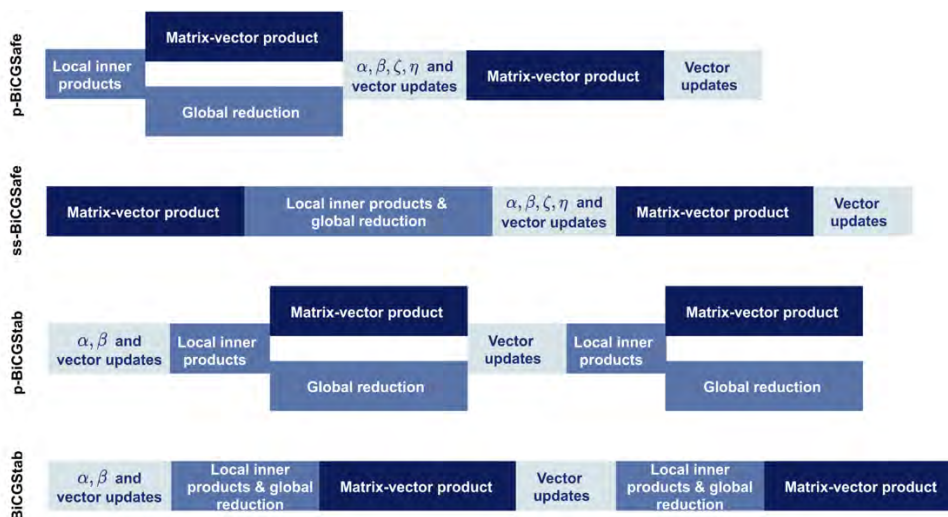


図 1 Pipelined BiCGSafe (p-BiCGSafe) 法と従来方法の比較図

3. 研究目標の達成状況

提案している Pipelined BiCGSafe 法は、通常のコンピュータだけでなく、分散メモリ並列コンピュータにも実装可能であり、従来法 BiCGStab 法や Pipelined BiCGStab 法に比べて収束性に優れていることを確認することができた。

4. まとめと今後の課題

内積計算と行列ベクトル計算を 1 回だけ同時に計算する Pipelined BiCGSafe 法を提案・実装し、その収束性を従来法と比較して検証することができた。分散メモリ型並列コンピュータ上での従来法との間でパフォーマンスを比較することは、今後の課題である。また、構造解析や流体解析における様々な問題を高速化するための応用研究も今後の重要な課題と考えている。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- [1] Communication-hiding pipelined BiCGsafe methos for solving large linear systems, Applied Mathematics and Computation, Viet Q. H. HUYNH, Hiroshi SUITO (投稿中).
- [2] Communication-hiding pipelined BiCGSafe methods for solving large linear systems, Viet Q. H. Huynh, Hiroshi Suito, <https://arxiv.org/abs/2108.10591> (2021).

国内学会・研究会等

特になし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

特になし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01APR21
研究種別	特定研究
利用期間	2021.4～2023.3
報告回数	第 1 回報告

2022年2月14日提出

流れ中の微生物挙動の予測と制御

石川 拓司

東北大学大学院医工学研究科 教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的、具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

微生物は、周囲流体の流れや重力、浸透圧といった力学環境によって、個々の細胞および集団として発現する生体機能に変化することが近年明らかになりつつある。例えば海洋中では、海水の流れと微生物の遊泳が干渉することで、水面下数メートルの深さに微生物が高密度に濃縮され、赤潮などを引き起こす。こうした流れ中の微生物の分布や機能を正確に予測し、効率的に制御する技術は、微生物研究の要であるが、従来経験則に基づく手法では限界があった。本研究では、物理法則に裏打ちされた数理モデルを丹念に積み上げ、高度な数値解析手法を用いることで、流れ中の微生物挙動を予測し制御することを目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

まず始めに、微生物の流体力学的な干渉現象を正確に記述できる新規の数値解析手法を開発する。ストークス流れの数値解析手法である境界要素法と、潤滑流れの解析に用いられる潤滑理論を融合させることで、任意物体の近距離相互作用を正確に、かつ効率的に扱う数値解析手法を提案する。次に、微生物集団をアクティブ流体と見なし、その流体力学的性質を世界に先駆けて解明する。物理刺激によって微生物集団がジョット流となる系を考え、ジェット的不安定性からアクティブ流体の表面張力などを明らかにする。さらに、腸内環境における大腸菌の挙動を数値シミュレーションで解析する。大腸菌の走性を数理モデル化することで、腸内細菌挙動の予測と制御を試みる。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 LTBEM の開発

微生物懸濁液のレオロジーおよび拡散特性は、粒子間の近距離相互作用に強く影響される。潤滑理論（LT）は、潤滑領域に作用する力とトルクの漸近解を求めるために用いられる古典的な解析手法である。一方、境界要素法（BEM）は、粒子周りのストークス流を正確に計算するための計算手法である。本研究では、BEM の近距離相互作用の計算精度を飛躍的に向上

させるため、LT と BEM を組み合わせた新しいハイブリッド法 (LTBEM) を提案する。この手法では、潤滑領域内の流れを LT で、外部の流れを BEM で求める。

粒子を剛体球とし、2 球体のせん断運動、回転運動、衝突運動の解析を行い、LTBEM の妥当性を確認した。その結果の一例を図 1 に示す。この結果から、2 つの近接球体に働く潤滑力とトルクの漸近的な性質は、LTBEM によって効率的に捉えられることがわかった。特に、衝突力に対する BEM の計算精度は LTBEM の導入によって劇的に改善された。これは、粒子の衝突を防ぐために重要なことである。さらに、得られた結果は、一般性を損なうことなく多数の球の任意運動に拡張できる。また、LTBEM は任意形状の粒子に対応できる利点も持ち合わせている。

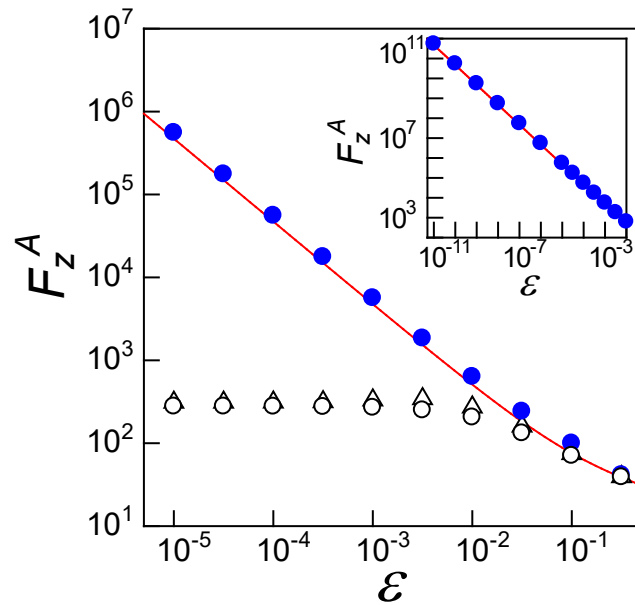


図 1 隙間距離 ε で衝突運動する 2 球に発生する潤滑力 F_z^A 。青丸は LTBEM (320 mesh), 白丸は BEM (320 mesh), 白三角は BEM (不等間隔 590 mesh), 赤線は潤滑理論による解析解。

2.2 微生物の 2 体干渉解析

開発した LTBEM の有効性を確認するため、微生物をモデル化した表面速度を持つ squirmer (図 2(a)) の 2 体干渉を解析した。図 2(b) に示すように、2 体の微生物が徐々に近付いて近接し、しばらく対となって泳いだ後、最終的に互いに離れていく過程を計算した。この条件下では、2 体の微生物は非常に近い距離まで近付くため、通常の BEM では潤滑力を正確に計算できず、衝突を回避できない。つまり、通常の BEM では 2 体は衝突し、重なり合ってしまう問題が生じる。こうした困難を避けるため、通常は近距離斥力を人工的に作用させる。この人工的な斥力の強さを制御するパラメータ λ を導入し、 $\lambda=0.1$ と 100 として解析を行った。斥力を導入することで、通常の BEM においても安定的にシミュレーションを実行できたが、微生物の遊泳軌跡は斥力の強さによって大きく異なる結果となった。

一方、LTBEM では潤滑力の解析に潤滑理論を用いているため、2 体の微生物が非常に近い距離まで近付いても、潤滑力を正確に求めることができる。これにより、人工的な斥力を導入しなくても流体力学的な作用のみで 2 体の衝突を防ぐことができ、正確な遊泳軌跡の導出が可能となった。

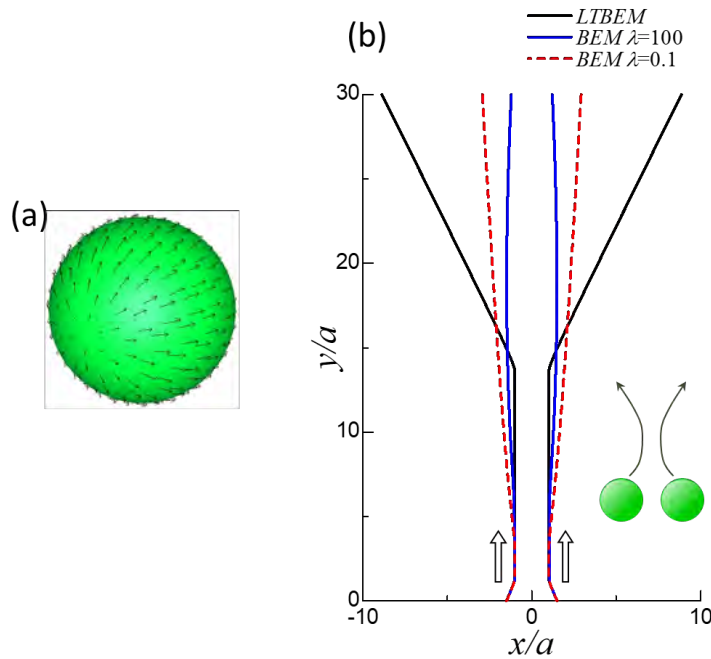


図2 2体の遊泳微生物モデルの衝突シミュレーション. (a) 表面速度を持つ squirmer モデル (b) LTBEM と BEM (人工的な斥力を導入) で計算した遊泳軌跡の違い

3. 研究目標の達成状況

ストークス流れの数値解析手法である境界要素法と、潤滑流れの解析に用いられる潤滑理論を融合させることで、任意物体の近距離相互作用を正確に、かつ効率的に扱う数値解析手法の開発に成功した。開発した手法を微生物の2体干渉問題に適用し、その有効性を確かめた。この成果は、数値解析分野で最高峰の *Journal of Computational Physics* 誌に掲載された。

4. まとめと今後の課題

今年度は、LTBEM の開発に成功した。次年度は、微生物集団をアクティブ流体と見なし、その流体力学的性質を世界に先駆けて解明する。物理刺激によって微生物集団がジェット流となる系を考え、ジェットの不安定性からアクティブ流体の表面張力などを明らかにする。さらに、腸内環境における大腸菌の挙動を数値シミュレーションで解析する。大腸菌の走性を数理モデル化することで、腸内細菌挙動の予測と制御を試みる。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌

Takuji Ishikawa: Lubrication theory and boundary element hybrid method for calculating hydrodynamic forces between particles in near contact. *Journal of Computational Physics*, (2022), Vol. 452, 110913.

国際学会

T. J. Pedley, Takuji Ishikawa, D. R. Brumley: RHEOLOGY OF A CONCENTRATED MONOLAYER

OF SPHERICAL SQUIRMERS, Thematic Session on Low-Re-number flows and Suspensions at the ICTAM 2020+1 conference, (2021), FM11.O01, 107770.

Takuji Ishikawa: Hydrodynamics of ciliary swimming, Invited Talk, Biofluid Symposium in Biofluids 2021, (2021).

国内学会・研究会等

Takuji Ishikawa: Functions and Efficiency of Ciliary Swimming, Keynote Talk, JSME・KSME ジョイントシンポジウム, 日本機械学会 2021 年度年次大会 (2021).

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS02APR21
研究種別	特定研究
利用期間	2021.04～2022.03
報告回数	第 1 回報告

2022 年 7 月 15 日提出

高次精度非構造格子法の高度化と航空分野における活用

大西 直文, 久谷 雄一, 有木 健人, 岡野 泰人, 村上 弘樹, 中島 茂, 奥村 済
 東北大学大学院工学研究科 教授, 助教, 助教, D1, M2, M2, M2

1. 研究の目的と目標 (研究の背景と目的, 具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

航空機やガスタービンなどの流体機械の設計現場においては, 非構造格子有限体積法 (UFVM) に RANS を組み合わせた手法が長年広く用いられている. これは, UFVM は複雑形状に対する適応能力が高く, RANS は計算時間と予測精度のバランスが良くとれた乱流モデルとなっているためである. 一方で, 剥離を伴う非定常流れや三次元乱流に対する RANS の解析精度は芳しくなく, 未だ課題は残されている. そのため, 産業界においてより良い流体機械設計および流体解析を実現するため, 長年多くの研究者が以下のようなアプローチに取り組んできている.

1) LES の産業利用の実現に向けた高速化 (必要格子点数の削減)

2) RANS モデルの予測精度の向上

産業界において複雑形状周りの LES を実現させるための必須要件の一つとして, 非散逸, 安定かつ複雑形状に適応可能な数値計算スキームの利用が挙げられる. UFVM は複雑形状に対する適応能力は高いが, 一般に数値計算スキームには数値粘性を多く含んだ風上スキームが用いられている. そのため, 風上スキームを用いて高精度な LES を行うには, 数値粘性の影響を低減する必要がある, 結果的に計算格子点数が膨大に増えることになる. そこで本研究では, 非散逸かつ安定な KEEP スキームを UFVM に展開し, 既存手法と比較してより少ない格子点数で複雑形状周りの高精度 LES の実現を目指す. KEEP スキームは近年我々が有限差分法に対して構築したもので, 数値粘性の付加なく数値安定性を大幅に向上させた非散逸スキームとなっている.

一方で LES よりも遥かに少ない計算時間で解が得られる RANS の予測精度の向上も重要である. そこで本研究では三次元乱流に対するモデル性能が高い Reynolds stress transport model (RSM) と, 層流-乱流遷移モデルの一つである γ 遷移モデルを組み合わせることで, 既存の RANS モデルのベンチマークとなり得る高度な RANS 手法を構築する.

1.2 研究期間内の最終目標

非構造格子を用いた LES を実施し、本研究で構築した UFVM KEEP スキームと非構造格子の計算に幅広く用いられている風上スキームとを比較することで、提案手法である UFVM KEEP スキームの優位性、および有用性を示す。また RSM の遷移モデリングに関しては、遷移モデリングの研究で幅広く行われているベンチマークテスト計算を行い、流れ場の予測精度、特に三次元流れ場に対する予測精度を既存の RANS 手法と比較しながら提案モデルの検証を行う。

2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

2.1 新しい解析手法の開発(例)

(1) UFVM KEEP スキーム

有限体積法はセル中心有限体積法とセル節点有限体積法に大別されるが、本研究では KEEP スキームの特徴をより反映出来るセル節点有限体積法を選択した。実際にセル中心有限体積法に対する KEEP スキームも構築したが、当初の解析通り、提案手法であるセル節点有限体積法に対する KEEP スキームのほうが遥かに数値安定性が高いことも示された。また非構造格子を用いた channel flow の計算を行い、FVM で幅広く用いられている風上スキームと比較することで、本研究で構築された UFVM KEEP スキームの優位性も示された。

(2) RSM の遷移モデルの構築

本研究では RSM に SSG/LRR-RSM を使い、遷移モデリングには γ 遷移モデルを用いた。SSG/LRR-RSM では方程式を閉じるのに ω の式も解かれる。このとき、既存の ω の生成項を用いると遷移点の予測が遅れることが示唆されたため、 ω の生成項に対する修正を行うことで遷移予測精度を向上させている。三次元流れ場を含むいくつかのベンチマークテストを行い、既存の遷移モデルに対する優位性も示された。

2.2 新しい現象の解明(例)

該当なし

3. 研究目標の達成状況

両研究テーマにおいて、提案計算スキームおよび遷移モデルの既存手法に対する明らかな優位性がすでに示されている。またそれぞれの研究テーマに対する学術論文の投稿も完了させている（論文は査読中）。

4. まとめと今後の課題

本研究では複雑形状周りの LES を既存手法と比較してより少ない格子点数で実現することを目指し、非散逸かつ安定な KEEP スキームを UFVM に展開させた。本研究で構築された UFVM KEEP スキームは既存の風上スキームと比較して数値粘性の影響がないため、より少ない格子点数で高精度な計算が行えることを示した。今後は提案手法を実際に複雑形状に適用することで、提案手法が実問題に対しても有用であることを示す必要がある。

また RSM 遷移モデルに関しては、提案手法はすぐにでも産業界で使えるモデルとなってい

る一方で、横流れ遷移に対するモデル化まではまだ行われていないため、後退翼などの遷移予測を考慮すると、今後は横流れ遷移に対するモデル化も必要となる。

5. 研究成果リスト（※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい）

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- Yuichi KUYA, Wataru OKUMURA, and Keisuke SAWADA: A kinetic energy and entropy preserving (KEEP) finite volume scheme on unstructured grids for compressible flows, *Journal of Computational Physics*, 2022 (under review).
- Yuichi KUYA, Taketo ARIKI, Shunya ENDO, Thanakorn SUJISAKULVONG, and Keisuke SAWADA: Blending of Reynolds stress transport model and γ transition model, *AIAA Journal*, 2022 (under review).

著書

該当なし

国際学会

該当なし

国内学会・研究会等

- 奥村 済, 久谷 雄一, 澤田 恵介: 非構造格子法に対する運動エネルギー・エントロピー保存 (KEEP) スキームの構築, 第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2021.
- 奥村 済, 久谷 雄一, 澤田 恵介: 運動エネルギー・エントロピー保存 (KEEP) スキームの非構造格子有限体積法への展開, 第35回数値流体力学シンポジウム, 2021.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

Ⅱ. システム利用状況

本項では未来流体情報創造センターが運用する次世代融合研究システム「AFI-NITY」の利用状況を示す。本システムは2018年8月から運用を開始しており、その性能は以下のとおりである。

共有メモリ型並列計算システム A (FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4)

コア数 : 2080 コア
演算性能 : 159 TFLOPS
メモリ : 33.1 TB

共有メモリ型並列計算システム B (FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4)

コア数 : 8320 コア
演算性能 : 638 TFLOPS
メモリ : 33.1 TB

分散メモリ型並列計算システム (FUJITSU Server RIMERGY CX2550M4)

コア数 : 35200 コア
演算性能 : 2703 TFLOPS
メモリ : 82.5 TB

アプリケーション・リモートグラフィックスサーバー (FUJITSU Server PRIMERGY RX2530M4 及び PRIMERGY CX2570M4)

コア数 : 2080 コア
演算性能 : 159 TFLOPS
メモリ : 33.1 TB

次世代融合インターフェースサーバー (FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4)

コア数 : 288 コア
演算性能 : 27.6 TFLOPS
メモリ : 1.5 TB

可視化サーバー (FUJITSU Server PRIMERGY RX2530M4 及び PRIMERGY CX2570M4)

コア数 : 720 コア
演算性能 : 55 TFLOPS
メモリ : 11.4 TB

外部記憶装置

一次領域 : 1.1 PB
二次領域 : 18 PB

東北大学流体科学研究所
次世代融合研究システム利用研究成果報告書
第二十五卷
令和4年10月発行

編集・発行 東北大学流体科学研究所
未来流体情報創造センター
センター長 丸田 薫

〒980-8577 仙台市青葉区片平2丁目1番1号
電話 022 (217) 5302 番
(総務係・ダイヤルイン)
FAX 022 (217) 5311 番

印刷：プリントコープ KOPAS