

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

第二十七巻
(2023年4月～2024年3月)

2024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

第二十七卷

(2023年4月～2024年3月)

2024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 5 年 4 月から令和 6 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 年度および令和 4 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。

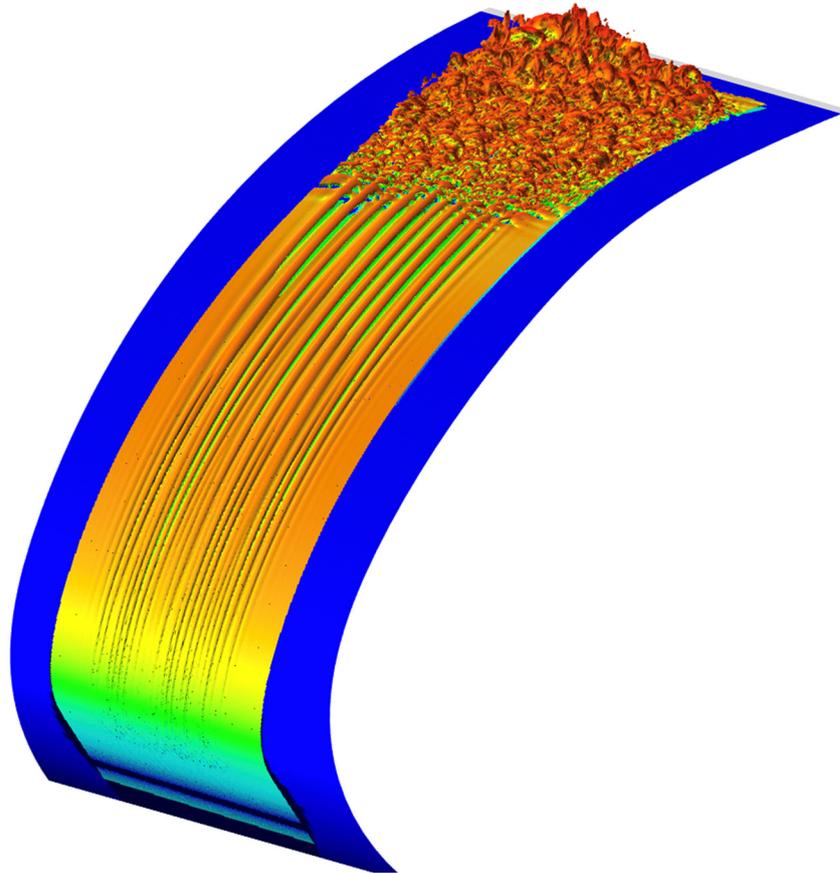
平成 2 年、本研究所への初のスーパーコンピュータ導入以来、平成 11 年の所内措置による未来流体情報創造センター設置を経て、平成 17 年 11 月本センターに次世代融合研究システムが導入されました。さらに平成 23 年 5 月、平成 30 年 8 月更新を経て、さまざまな時空間スケールの複雑な未知の流動現象の解明、人類社会の持続的発展を実現するための革新的な設計法や制御法の開発を目指して、物質の流れに限らない幅広い「流れ」を対象とした大規模数値解析、実験と計算の融合研究、それらの高度可視化を対象とした流体情報研究が、本システムを利用して推進されております。本センターでは、システムの管理を計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 23 回 AFI-2023 まで仙台（2020～2022 はオンライン）で開催され、本年 11 月には、第 24 回 AFI-2024 が開催されます。

なお令和 6 年 8 月には、新たに機種更新が行われ、次世代融合研究システム II（AFI-NITY II）が稼働開始しております。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。

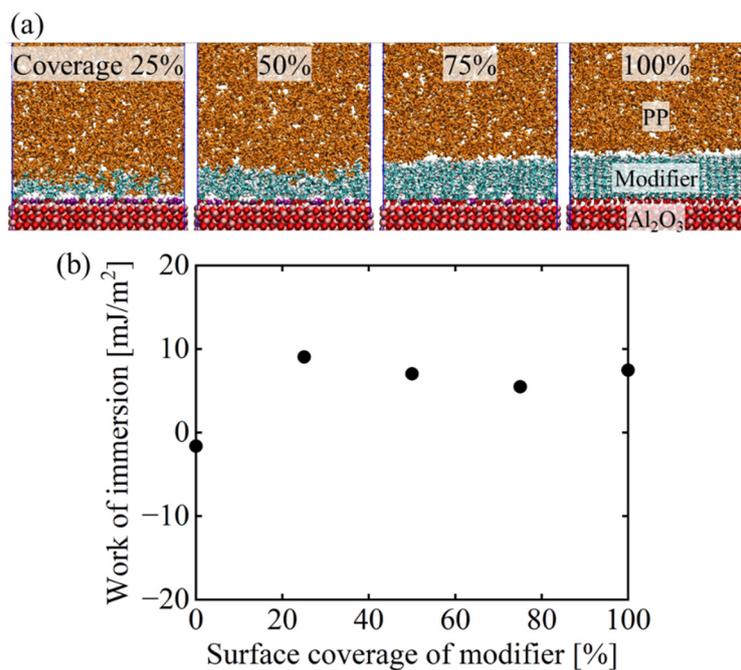
令和 6 年 9 月

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



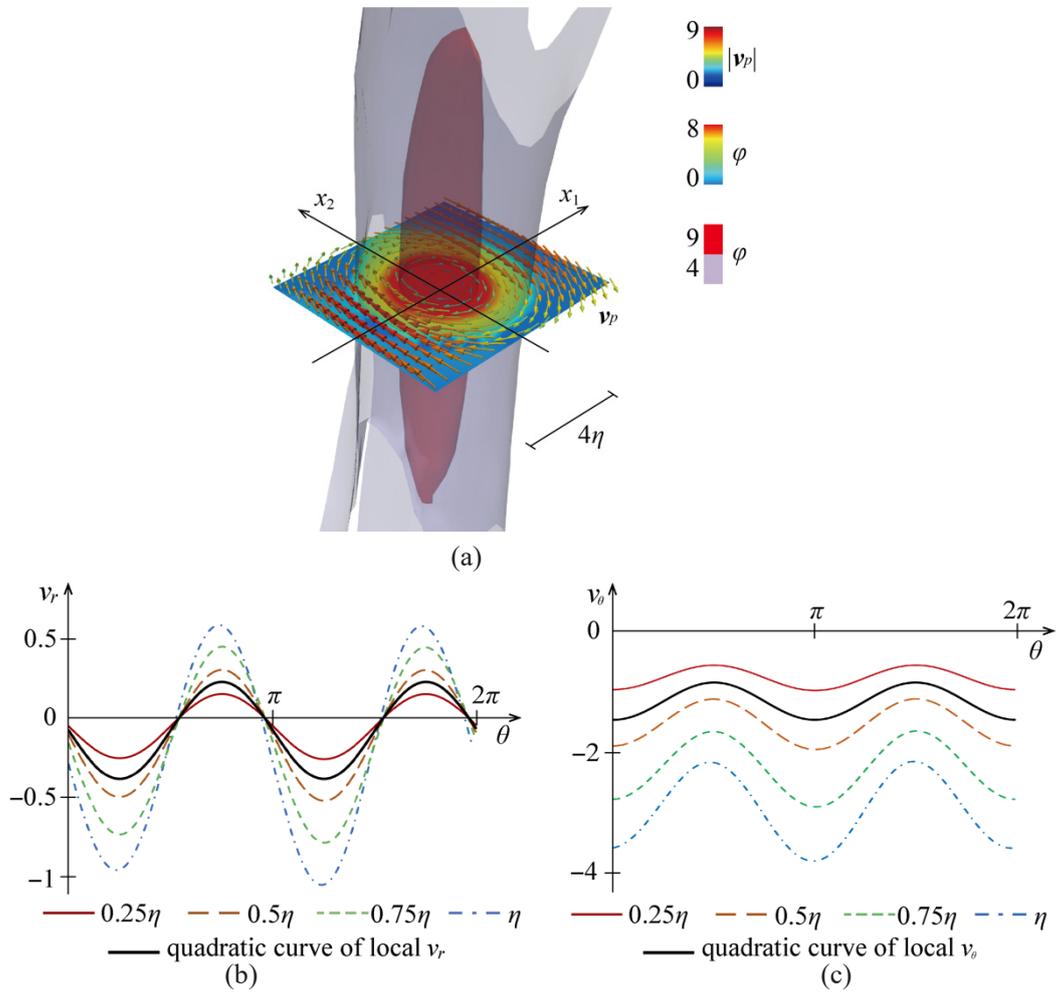
CRM+NLF 主翼，巡航時レイノルズ数マッハ数での直接数値計算により
再現された遷移現象の発生

実際の航空機モデル CRM+NLF 主翼形状に対し，巡航レイノルズ数，マッハ数 ($Re = 17,500,000$, $M = 0.86$, 迎角 1.5 [deg]) における直接数値計算により，遷移現象の詳細解析を可能にした。



種々の修飾率におけるデカン酸修飾 Al_2O_3 / PP 系の(a)側面図と(b)浸漬仕事

異なる修飾率における界面構造を可視化し、修飾鎖層への高分子の浸入の程度と表面修飾無機固体/高分子間の濡れ性との相関を解明した。

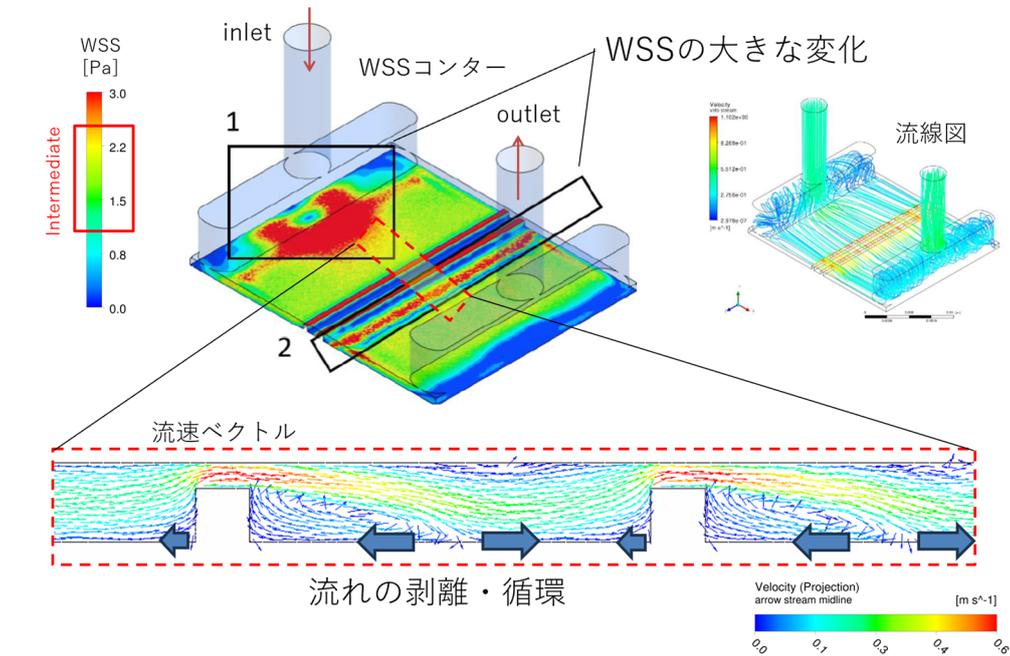


渦領域における渦空間座標系と旋回平面上の渦構造

(a) swirlity φ で示された渦領域並びに旋回平面と本平面上の渦流 \mathbf{v}_p , また渦流の(b)半径方向速度, (c)周方向速度の円周上の分布とローカルトポロジーにおける二次形式曲線. (η : Kolmogorov 長さ)

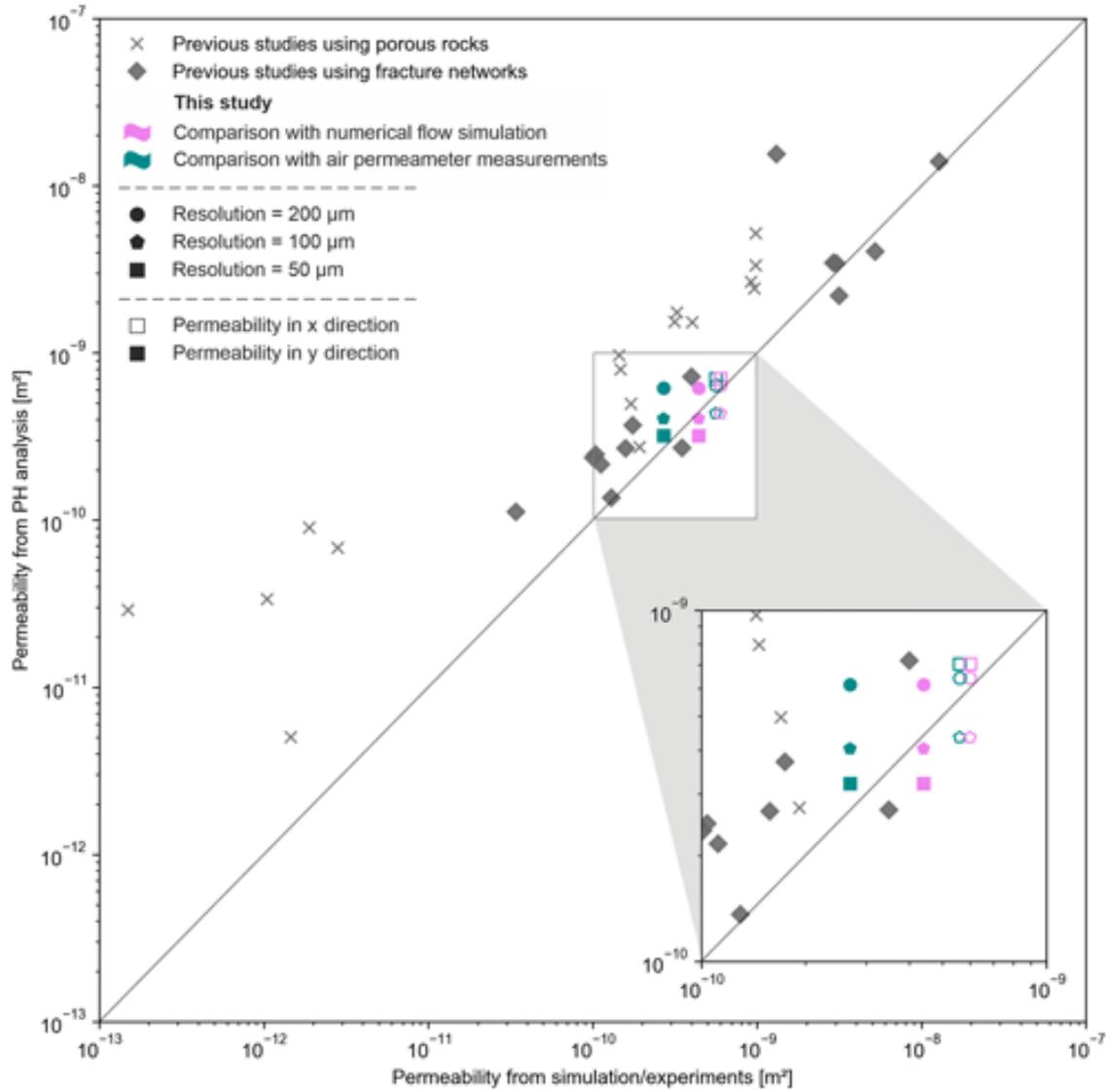
CP16APR23

ステントデザイン最適化のためのチャンバー内流れ解析



フローチャンバー底面に播種された内皮細胞に付加されるせん断応力

フローチャンバー底面のデザインを変化させることで、医療機器周りの内皮細胞に対し、複雑な流動状態を人為的に付加する。

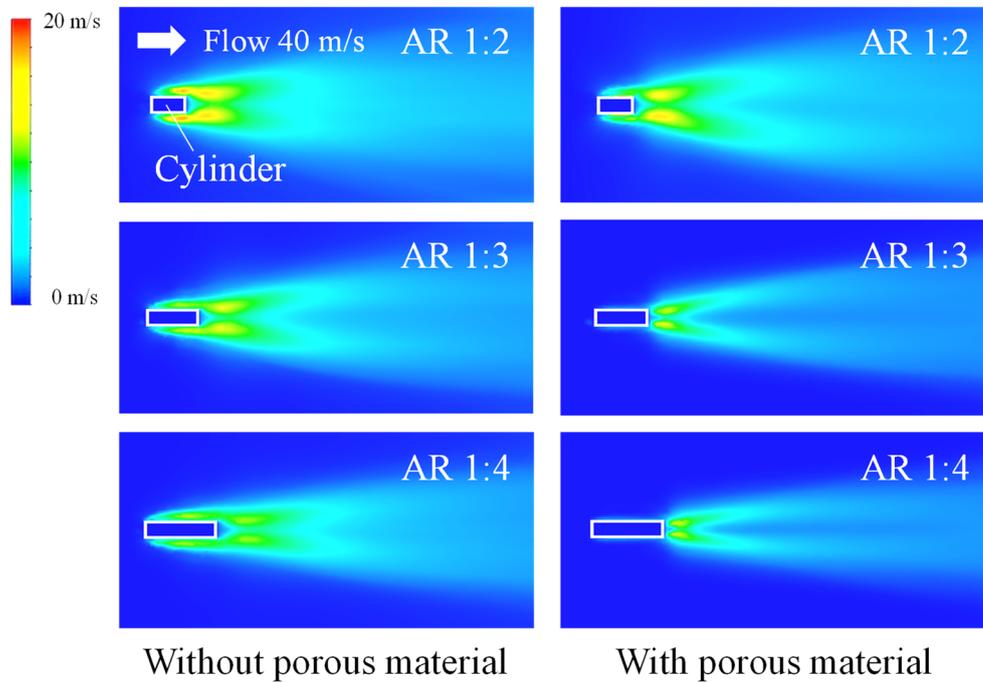


本研究と先行研究で推定した浸透率の比較

本研究は、パーシステントホモロジーを用いて画像データから浸透率を推定（縦軸）、他の研究はシミュレーションおよび実験から浸透率を算出（横軸）。本手法の妥当性を示せた。

CP26APR23

バイオミメティクスを活用した流体と音波の透過性に大きな差異をつけた多孔質材料による効果的な流動抵抗・空力騒音低減技術の開発

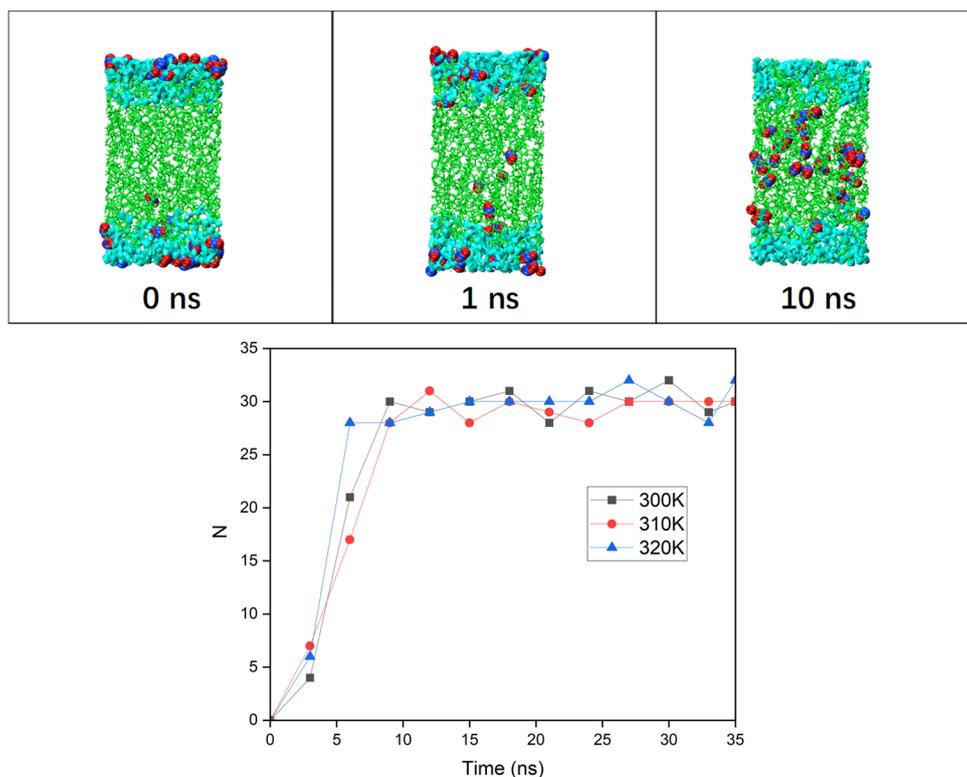


多孔質材を適用した角柱周りの流体の速度変動の分布

多孔質材を設けることで角柱周りの速度変動の分布が変化する様子が再現できた。

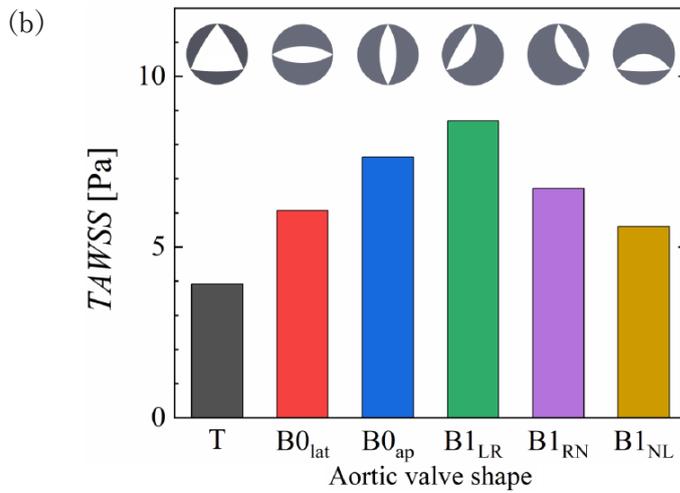
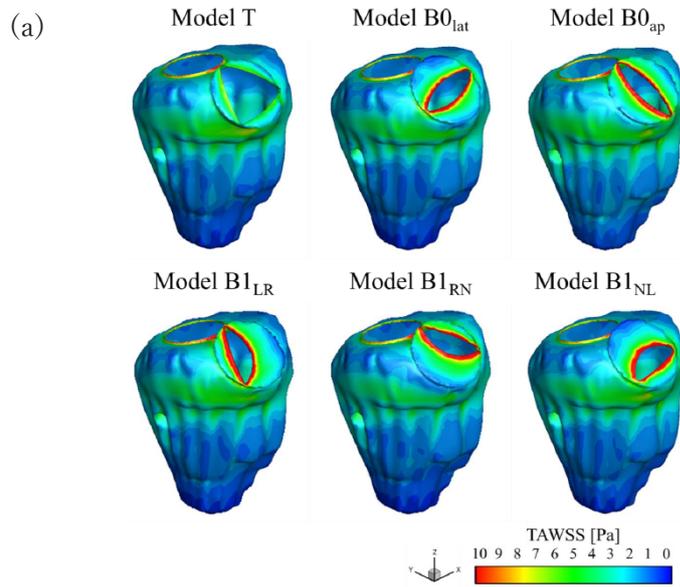
CP01AUG23

Molecular Simulation of CO₂ Permeation through Microalgae Lipid Membrane



Trajectory visualization and amount of CO₂ molecules inside DPPC lipid bilayer with time

As can be seen from the results in the image, after 1 ns, several CO₂ molecules begin to successfully permeate into the DPPC lipid bilayer (cell membrane). By 10 ns, the majority of CO₂ molecules are already inside the cell membrane. After entering the cell membrane, CO₂ molecules tend to remain in that area and permeating back from the cell membrane into the water area.



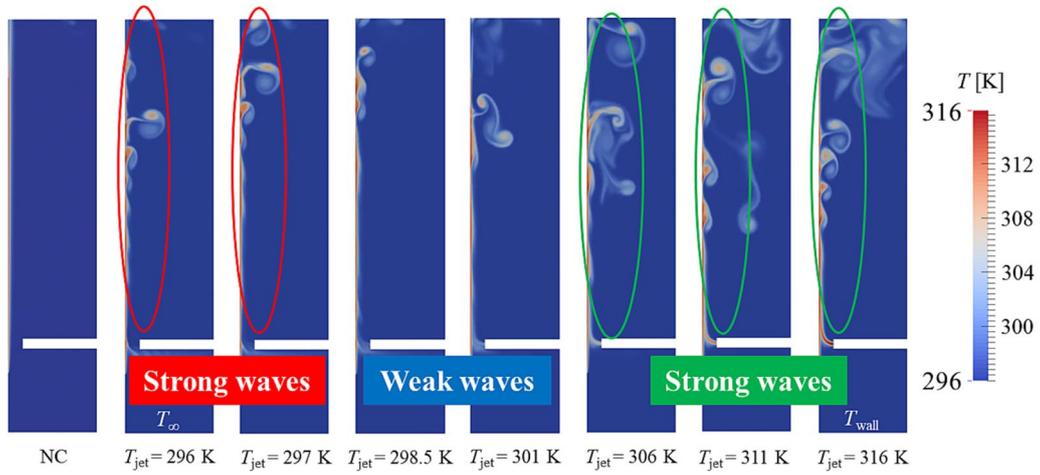
左心室壁面の時間平均壁せん断応力(TAWSS)

(a) TAWSS 分布, (b) 大動脈弁近の TAWSS の平均値

三尖弁モデルより二尖弁モデルの方が TAWSS は大きい. 二尖弁モデルにおいても開口方向や位置によって TAWSS は大きく異なる.

CL10APR23

大空間の自然対流境界層の制御手法の創成のためのメカニズム解明

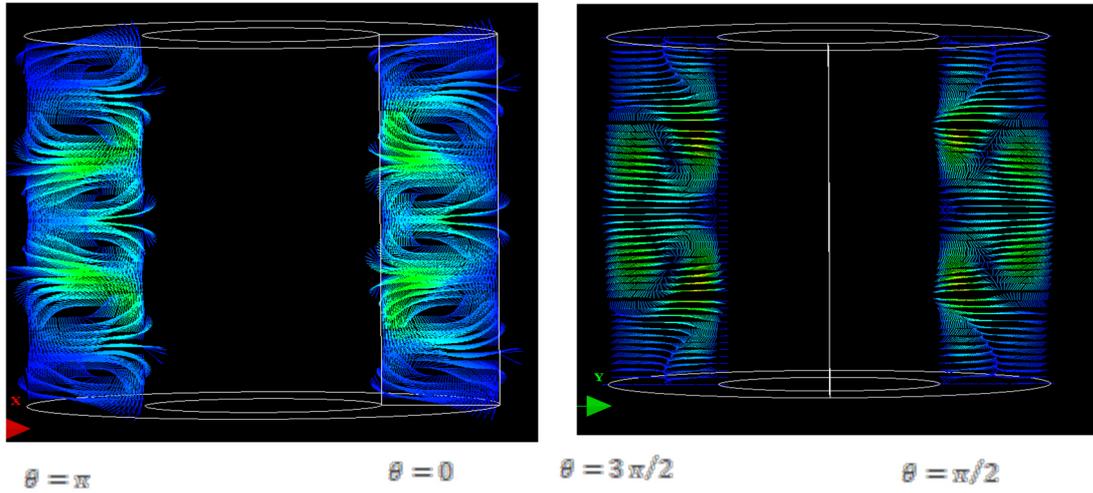


衝突噴流温度を調節したときの自然対流境界層の発達過程の違い

図に示されるように、衝突噴流温度を変更させる時、自然対流境界層が共鳴、乱流、対流不安定の3つに分類されることが明らかとなった。

CL13APR23

回転二重円筒/円すい間に発生するテイラー渦の非線形分岐挙動と動的モード分解

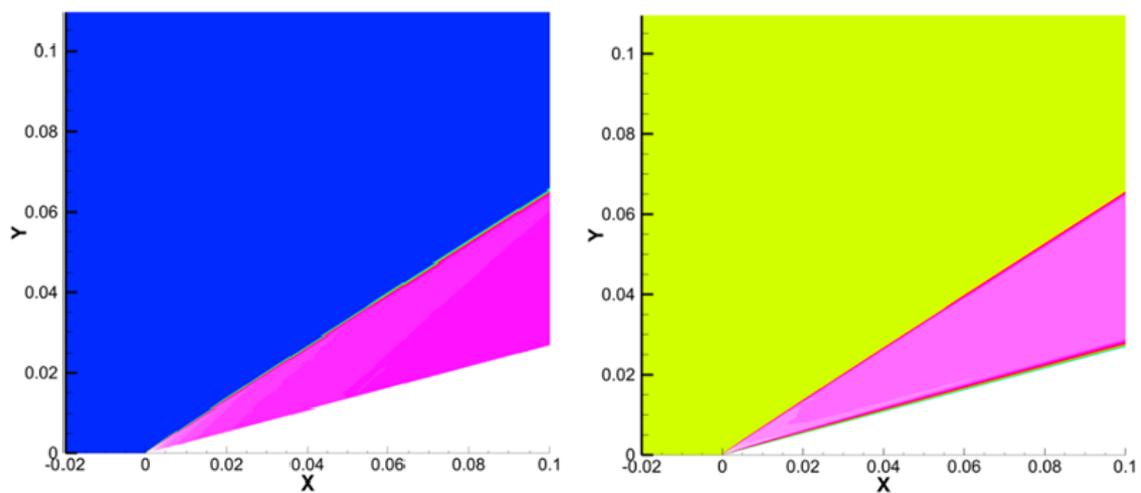


DMD 解析による $r-z$ 平面における速度場

回転二重円筒間に発生する非定常解の原因となるモードを DMD によって解析した結果、回転方向に 1 周期の変化を持つモードが特定された。図はこのモード $r-z$ 平面のベクトル場を示しており、2 対と 3 対の渦対をもつ流れが確認できる。

CL14APR23

直交格子による超音速／極超音速下における熱流束予測

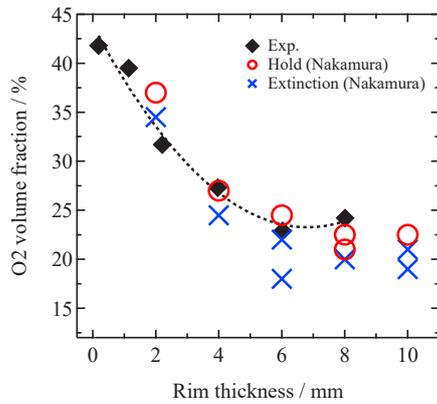


くさび型に対する超音速流れの解析結果

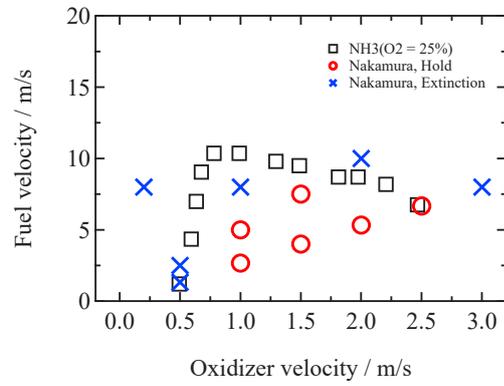
超音速流れ（マッハ数3）に置かれたくさび型に対して，境界埋め込み法を用いた直交格子の解析を行った．その解析の結果，くさび型周りの圧力コンター（左）及び温度コンター（右）が得られた．

CL19APR23

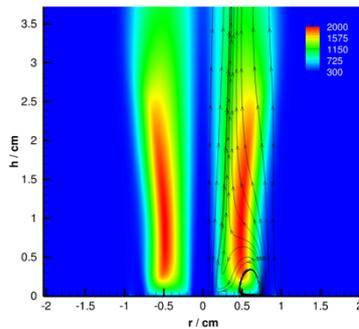
アンモニア非予混合バーナー保炎消炎機構の解明：再循環流領域における化学反応の役割について



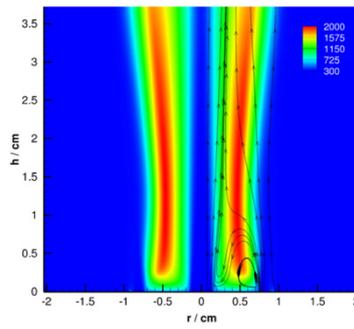
Effects of rim thickness and O2 volume fraction



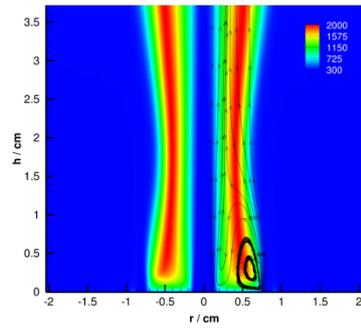
Effects of jet velocities



Low jet velocity case



Intermediate jet velocity case



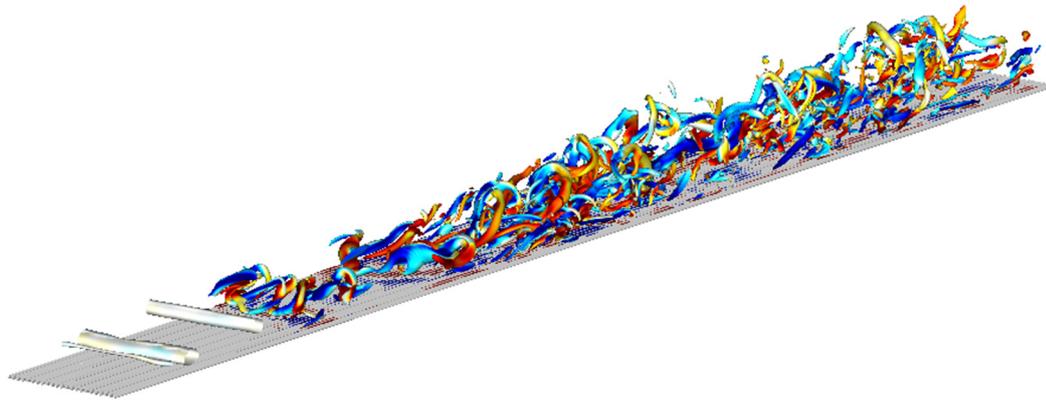
High jet velocity case

燃焼 CFD によるアンモニアバーナー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良い精度で再現した。本研究では、保炎消炎境界に対する燃料および酸化剤噴流流速の影響を明らかにした。

CL03MAY23

マイクロサイズの凹凸など表面性状による流れへの影響についての詳細解析

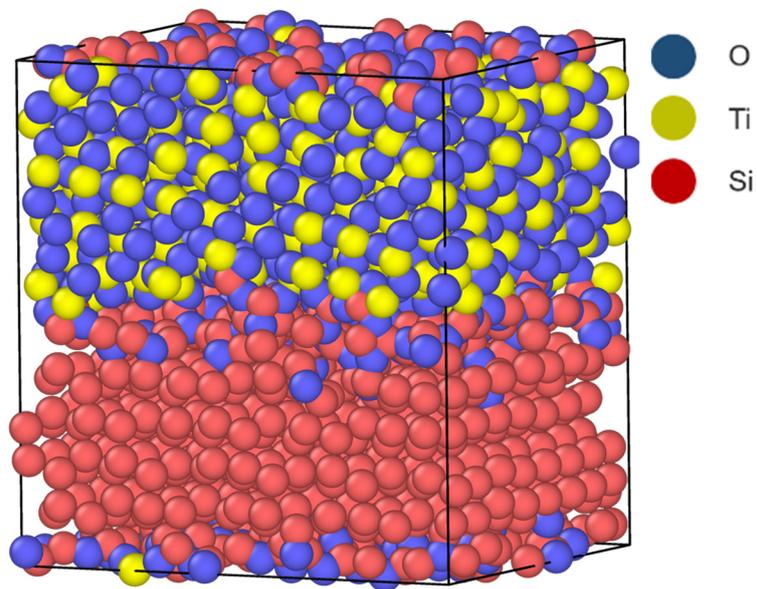


リブレット面上に発達する渦構造

リブレット面上における Q 値の等値面を流れ方向の渦度で色付けしている。まず、2次元横渦が発生し、下流に移流するにしたがいスパン方向に歪み、やがて3次元崩壊を起こして乱流遷移している様子が確認できる。

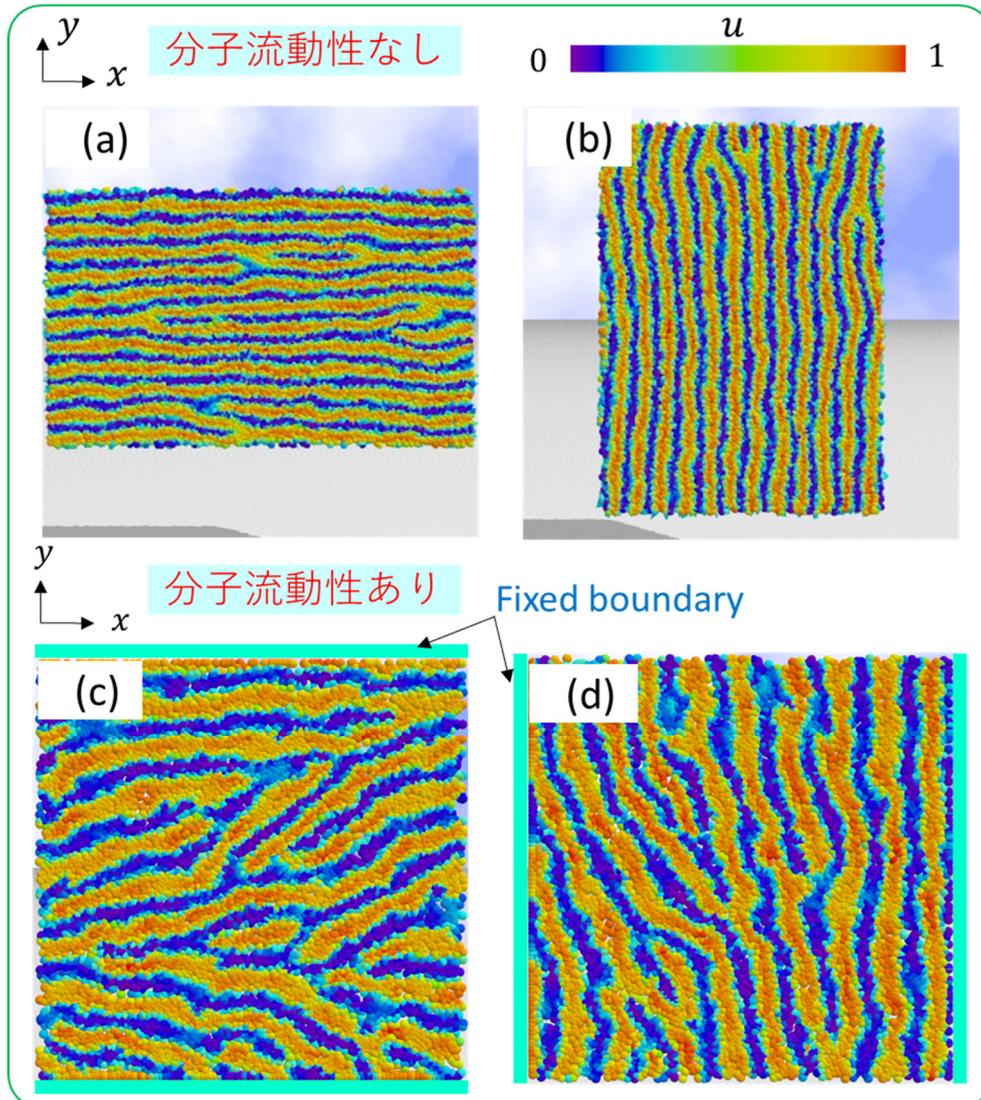
CL01JUN23

金属/酸化チタン界面構造の分子動力学解析



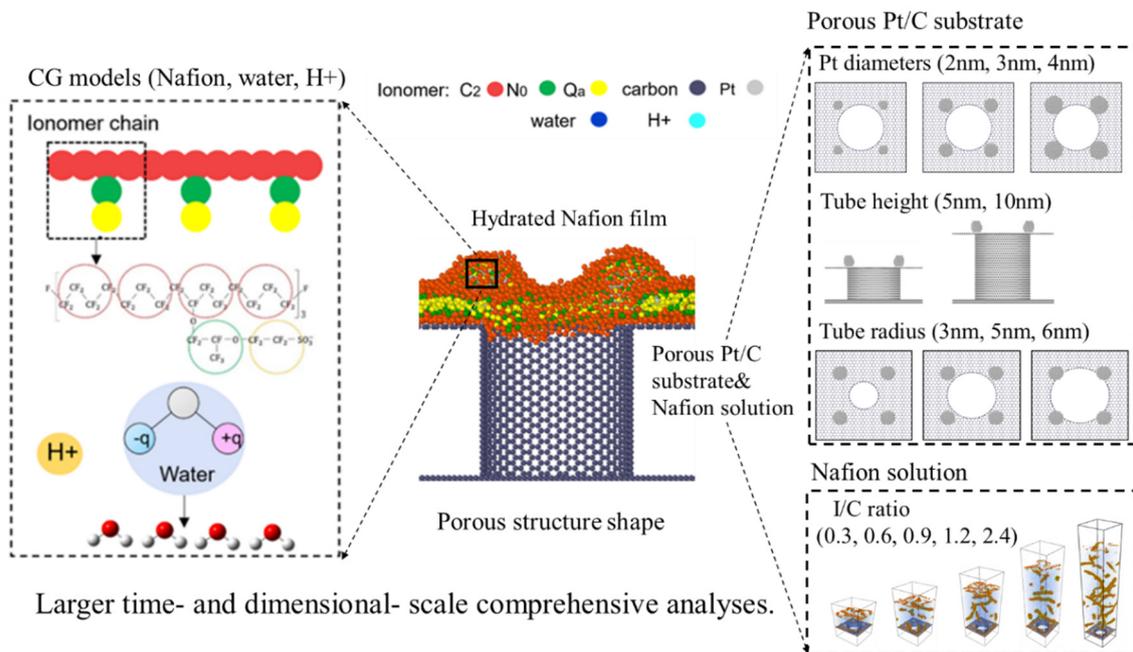
1000K, 1ns の熱処理後における a-TiO₂/c-Si ヘテロ構造

1000 K, 1 ns アニールした後の a-TiO₂/c-Si ヘテロ構造のシミュレーション結果. c-Si 表面および内部に O 原子が拡散し, Si-O 結合の形成が確認された. この結果は, 実験的な報告と一致する.



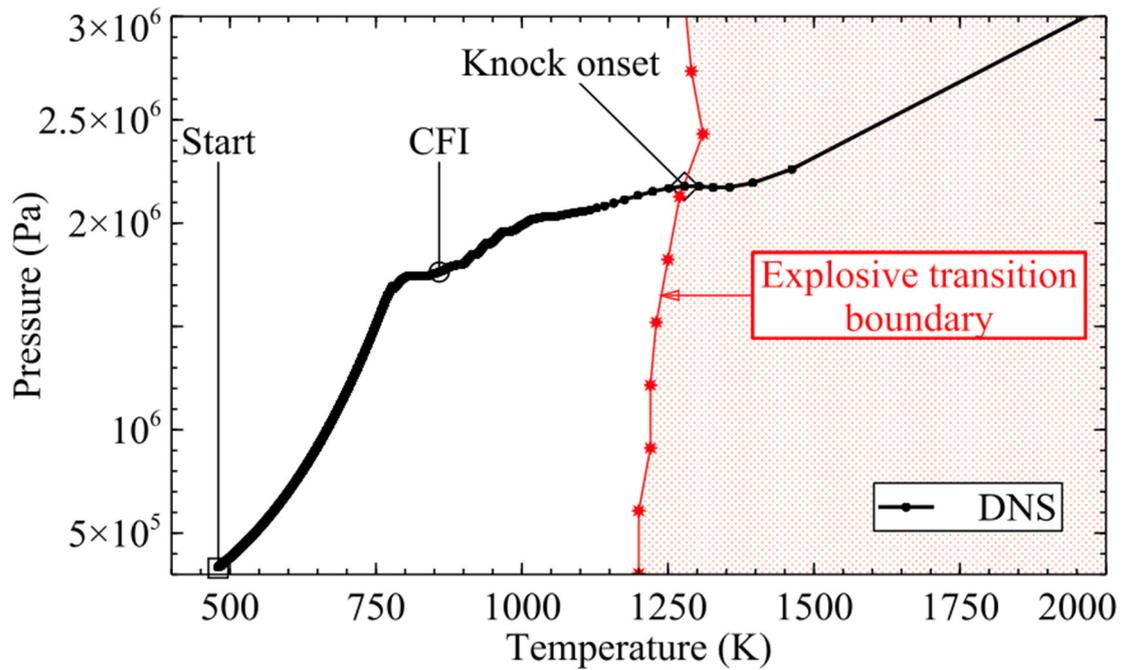
境界条件によって決まる Turing パターンの方向

(a), (b) 分子の流動性がない場合には、膜を引き伸ばすことでパターンの方向が決まる。
 (c), (d) 分子の流動性がある場合には、上下、左右の境界上で流動性を制限することで、パターンの向きが決まる。



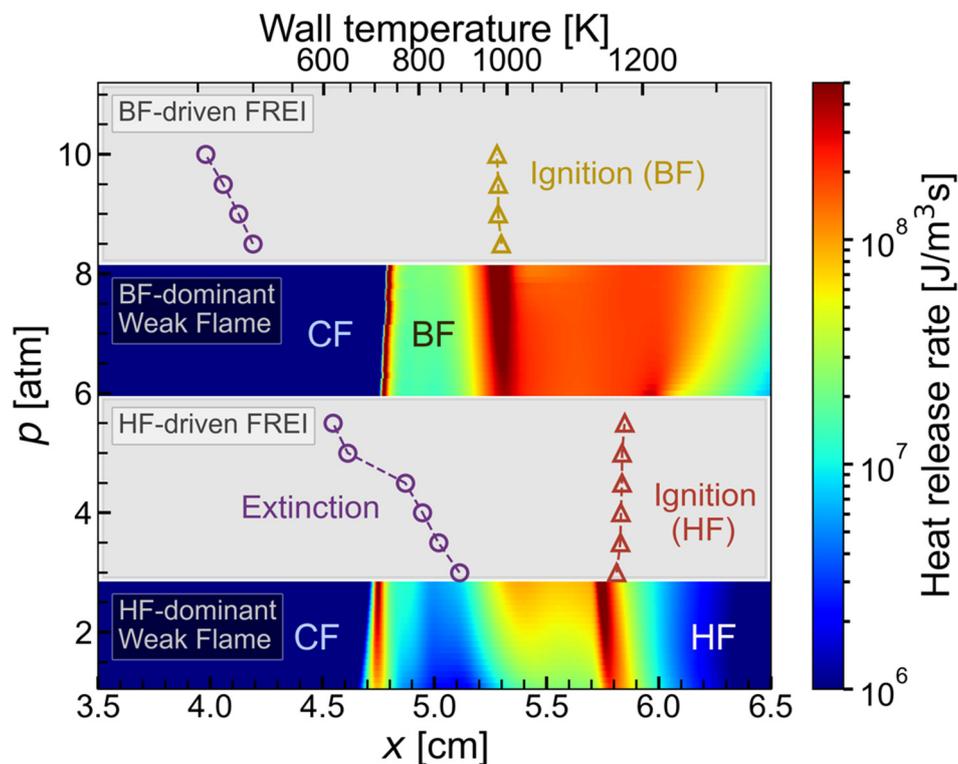
一次細孔を含む基板上的アイオノマー吸着状態の MD シミュレーション

この図は、一次細孔を模擬した Pt/C 基底におけるイオノマー膜の分布と構造を示している。さまざまなナノチューブのサイズ、管径、I/C 比についてシミュレーションを行った。



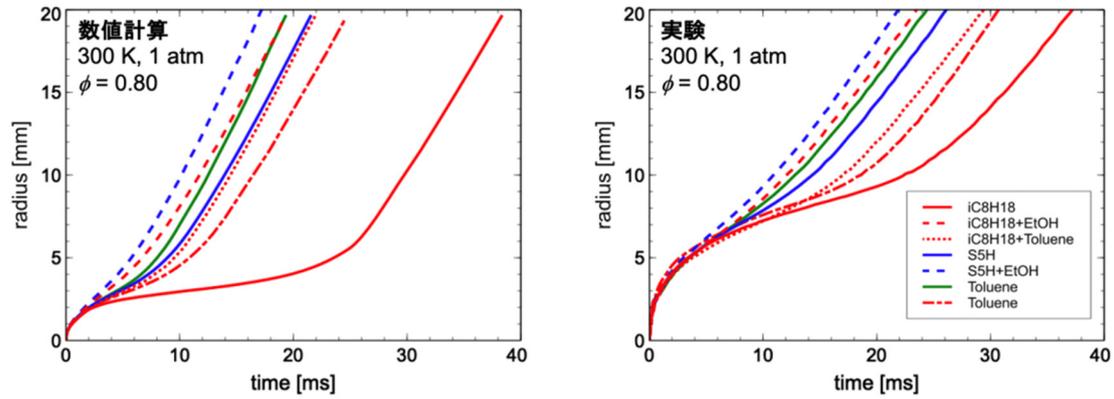
理論による火炎の存在領域とノッキングの発生との関係

Explosive transition boundary を超えると理論的に火炎が存在できない条件となる。この条件とノッキングの発生条件が一致していることがわかる。



ノルマルヘプタン/空気混合気を用いたマイクロフローリアクタ内での
火炎応答の圧力依存性

圧力に応じて、中温反応である Blue flame と高温反応である Hot flame の反応強度が強く変化する。その結果、1-3 気圧の低圧条件では定常の Hot flame-dominant weak flames, 3-6 気圧では Hot flame から自着火に至る非定常の HF-driven FREI, 6-8 気圧では Blue flame-dominant weak flames, 8 気圧以上では、Blue flame から自着火に至る Blue flame-driven FREI の 4 つの異なる火炎応答が観察された。

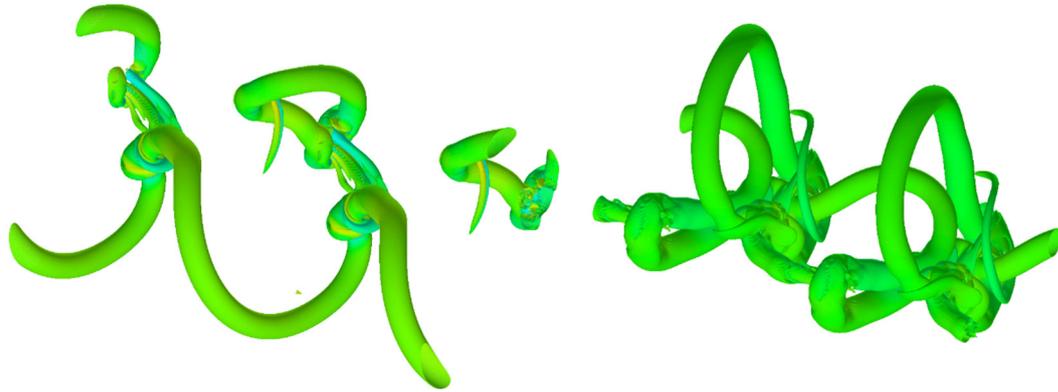


混合燃料を用いた火炎直径の時間履歴の数値計算及び実験結果

様々な混合燃料を用いた数値計算と実験から得られた着火・火炎伝播遷移過程を比較すると、燃料間での成長の順番が一致した。

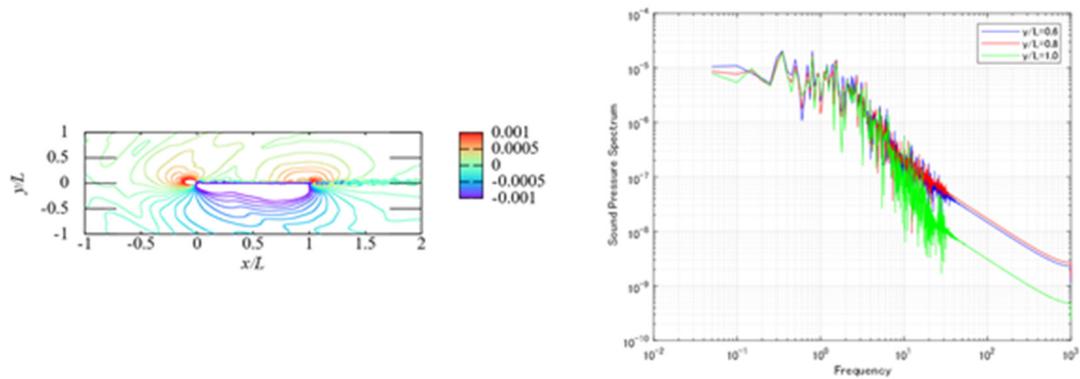
GR05APR22

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



切りつなぎ後のらせん渦の渦構造：(左) $L/R=0.3$, (右) $L/R=0.2$

長波長不安定モードを擾乱として加えたらせん渦には渦の切りつなぎが起こるが、 $L/R=0.3$ の場合は渦輪が分離するのに対し、 $L/R=0.2$ の場合は渦輪とらせん渦が絡み合う様子が示されている。

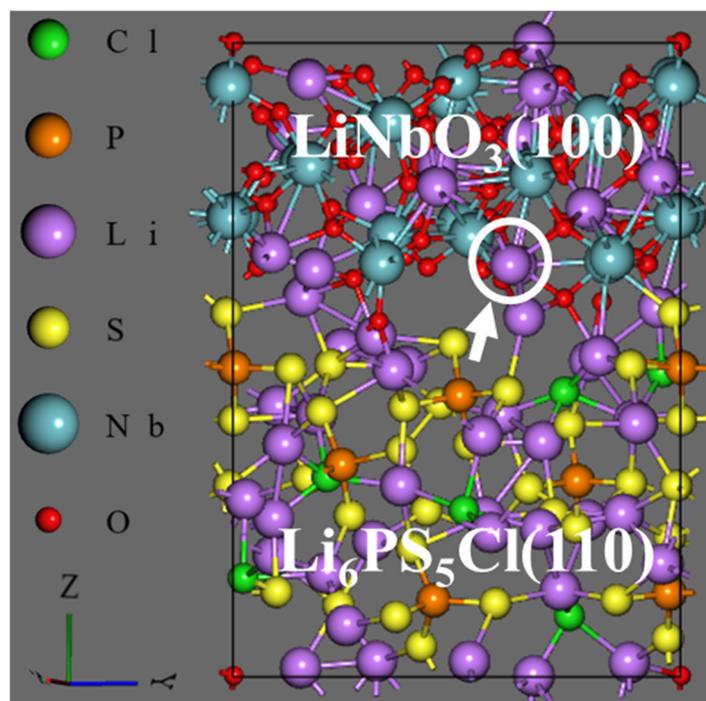


平板周りの圧力場と音圧変動のスペクトル

(左図) 平板をすぎる流れから発生する空力騒音の伝播の様子を圧力の等値線図で示したものの。(右図) 観測点における音圧変動のスペクトル。

GR08APR22

固体電解質／コート材界面の Li イオン輸送に関する分子論的解析

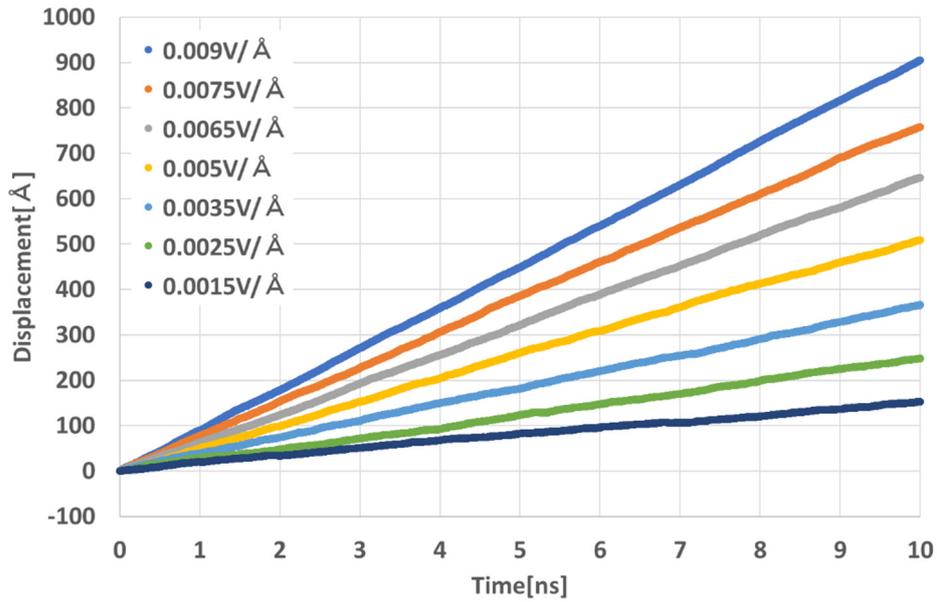


固体電解質／コート材界面構造モデル

固体電解質 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}(110)$ とコート材 $\text{LiNbO}_3(100)$ 表面の界面構造モデル. MD シミュレーション計算の結果より, Li イオンの移動現象が観測された(白い丸が一例).

GR01MAY22

相変態をともなう鉄内部の電場による炭素拡散に関する分子論的解析

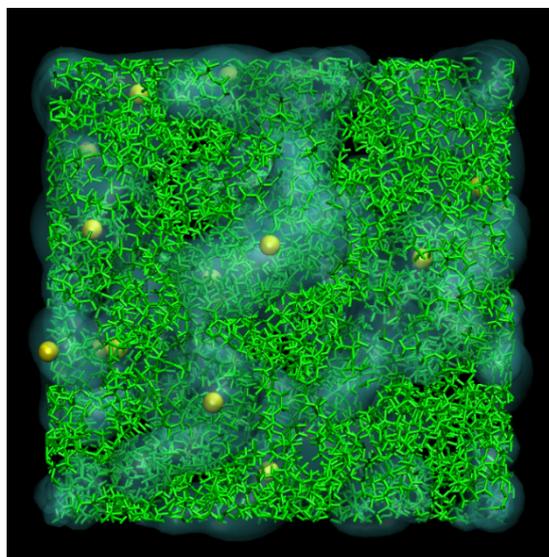


鉄鋼中の炭素原子の電場方向の変位

変位の傾きから求めた電場方向の炭素原子のドリフト速度について、Nernst-Einsteinの式から求められる値と異なる値を示した。

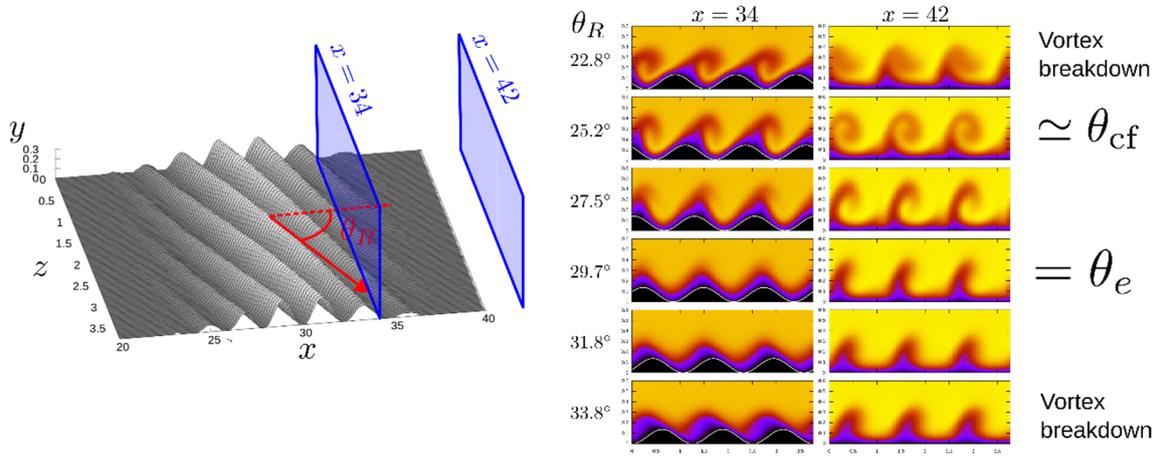
GR01JUN22

固体高分子形燃料電池長寿命化に向けたセリウムイオン輸送モデルの構築とセリウムイオン分布シミュレータの開発



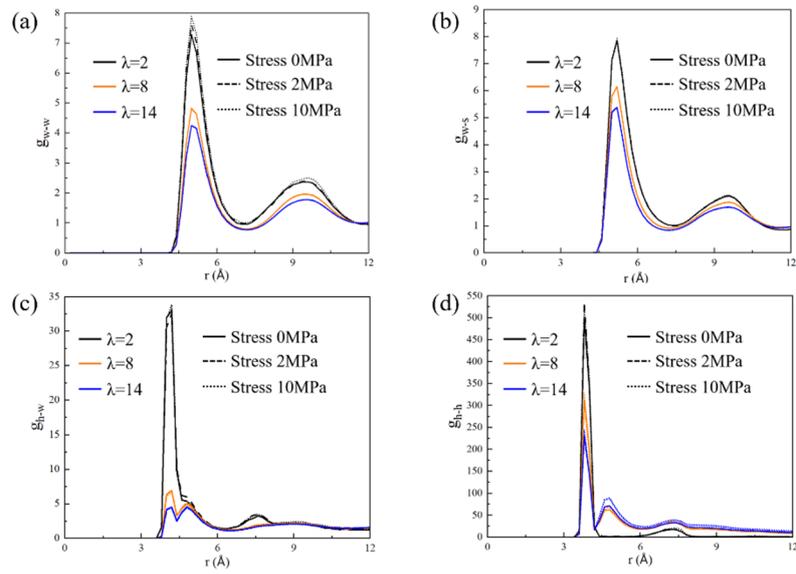
セリウムイオンを添加した高分子電解質膜のスナップショット

緑であらわされた分子が電解質膜を構成する高分子であり，透明の青い靄が水分子を表す．黄色の粒子がセリウムイオンであり，水分子中に存在していることがわかる．



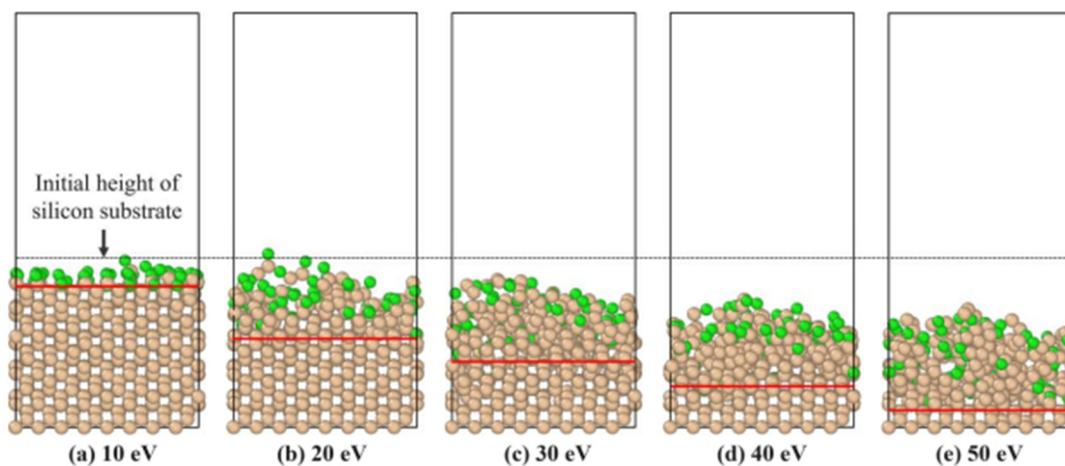
波型粗さ要素によって生成される横流れ渦列

波型粗さの角度の違いによって、生成される渦列の構造が異なる。渦崩壊が起こらないような角度の範囲が存在する。



異なる粒子間の動径分布関数の結果

異なる引張応力条件下における水分子間、過酸化水素分子間、およびナフィオン側鎖のサルホン酸塩間の動径分布関数.

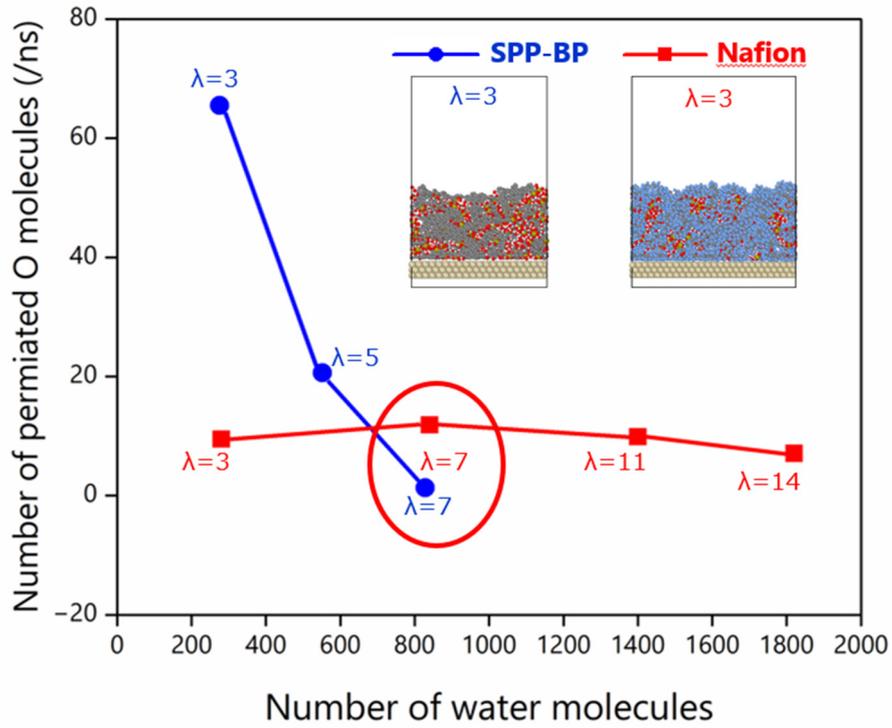


400 個 Cl 原子を入射し、エッチングが終了した後の Cl 原子の
運動エネルギー毎の基板最終構造

10 eV の入射エネルギーでレイヤーバイレイヤーエッチングが達成されたことを示している。入射エネルギーが 20 eV を超えると、Si 結晶表面に SiCl 化合物が形成されることが観測された。形成された SiCl 化合物の相対面積は、入射エネルギーの増加とともに増加する。50 eV の高い入射エネルギーでは、結晶 Si 表面のほとんどがアモルファス構造に変化した。

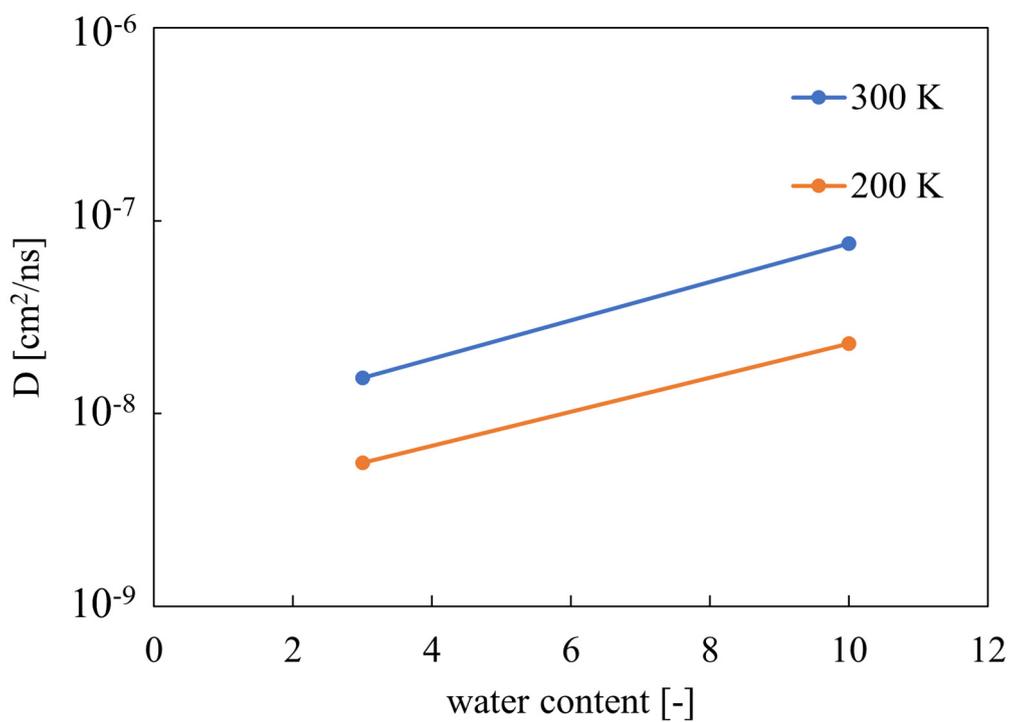
GR10APR23

炭化水素系アイオノマー薄膜における酸素透過特性の分子動力学解析



酸素透過数の含水率依存性比較

白金触媒上にフッ素系電解質膜を配置した場合と非フッ素系電解質膜を配置した場合の酸素透過数の比較を実施

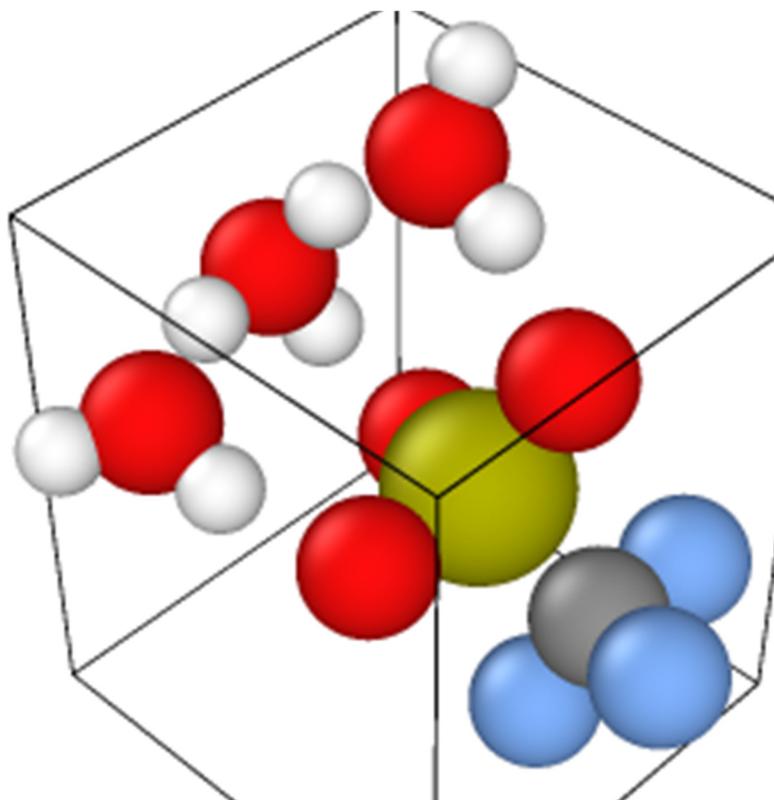


常温，低温における含水率依存のプロトンの拡散係数の傾向

常温と低温におけるプロトンの自己拡散係数を算出し，含水率に対する傾向について解析した．この結果から高含水率のほうが温度低下による拡散係数の低下が大きいことが分かった．

EF01JUL23

数値シミュレーション手法を用いた燃料電池材料特性予測

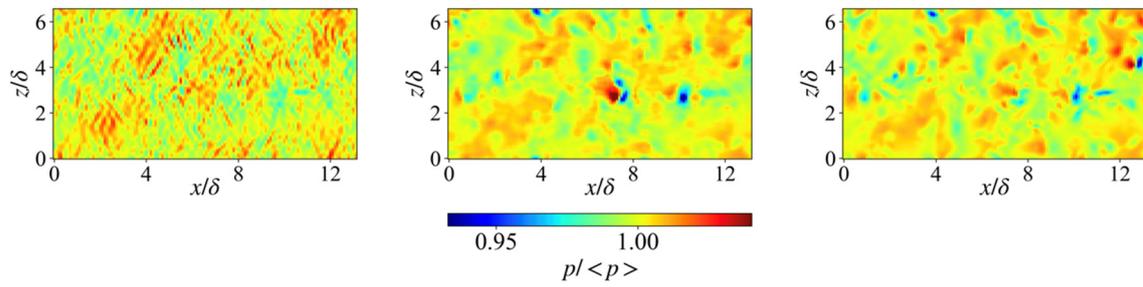


ReaxFF MD で用いるプロトンホッピングモデルを構築するためのスルホ基と水の相互作用の量子化学計算モデル

ReaxFF での力場を構築するために、スルホ基と水、オキソニウムイオンが相互作用している際のエネルギーを量子化学計算で求めた。

FS01APR22

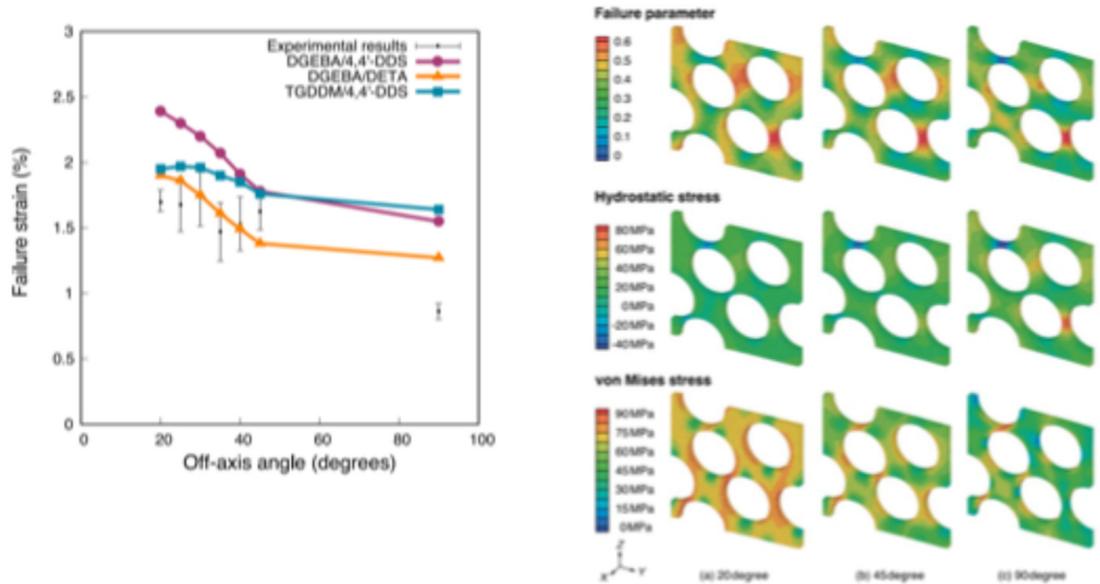
航空宇宙工学に関わる圧縮性流体の高精度数値シミュレーション研究



機械学習を用いた大きな時間積分エラーを含む LES 瞬時場の修正

($M \approx 1.5$, $Re_\tau \approx 205$ のチャンネル乱流)

粗い時間刻み幅 $\Delta t^+ \approx 2.0$ で陰解法により計算した $y/\delta = 1.0$ における圧力分布（左）と機械学習モデルにより修正した結果（中央）および参照解（右）を表している。

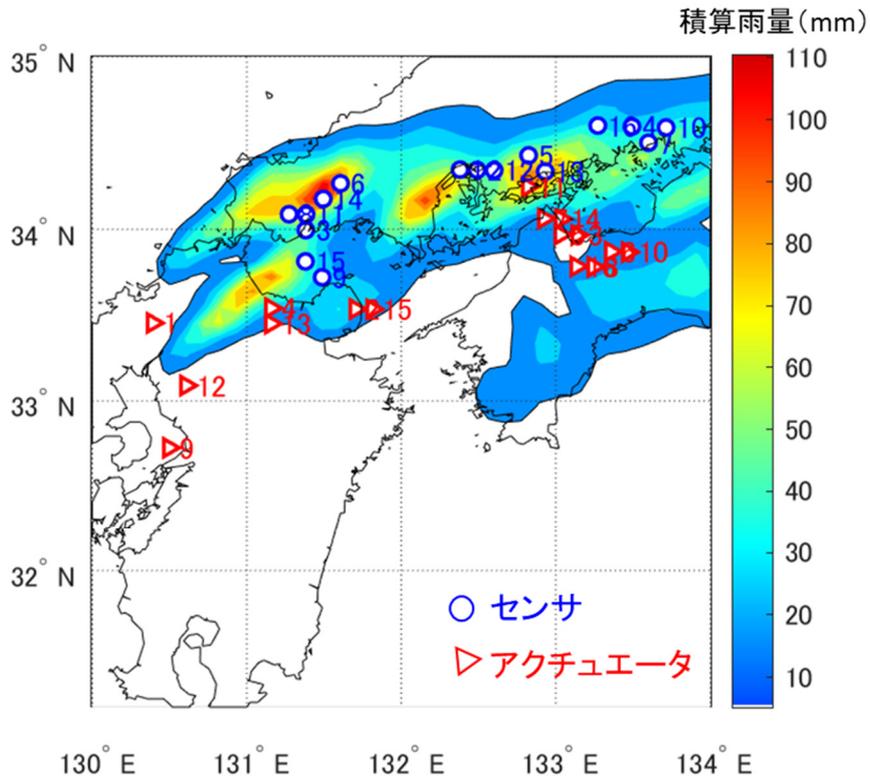


マルチスケール破壊解析で得られた 3 樹脂種積層板の off-axis 強度と破壊モードの比較

左図より 3 種の母材樹脂を想定した積層板の off-axis 強度は低角度と高角度でその大小関係は変化する。これは樹脂特性によって破壊特性が異なるためである。右図は DGEBA/DETA の破壊モードを可視化しており、低角度ではせん断変形由来、高角度では膨張変形由来で破壊している。

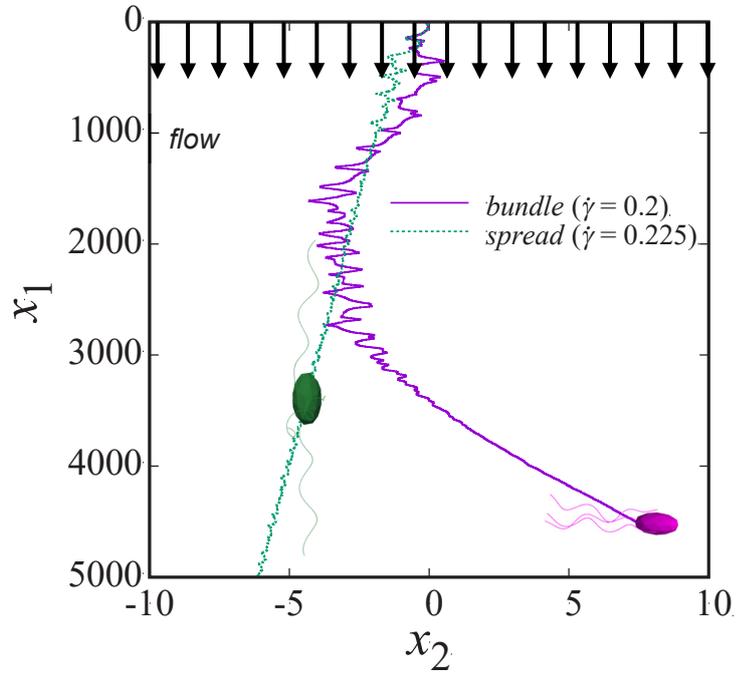
FS01OCT22

気象制御に向けた大規模自由度場の再現とアクチュエータ位置の最適化アルゴリズムの研究



2018年7月5日12時から18時の積算雨量分布と
選択されたセンサ/アクチュエータ位置

センサ位置に関しては雨量が多い地域が選択され、アクチュエータ位置に関してはその南西側(風上側)に集中して配置された。風上側で介入を行うことで効率的な介入ができることを示唆している。



せん断流れ中の大腸菌の挙動

弱いせん断流れ中では大腸菌の鞭毛が束化し、渦度方向へと遊泳する。一方、強いせん断流れ中では大腸菌の鞭毛が束化できず、遊泳できなくなる。

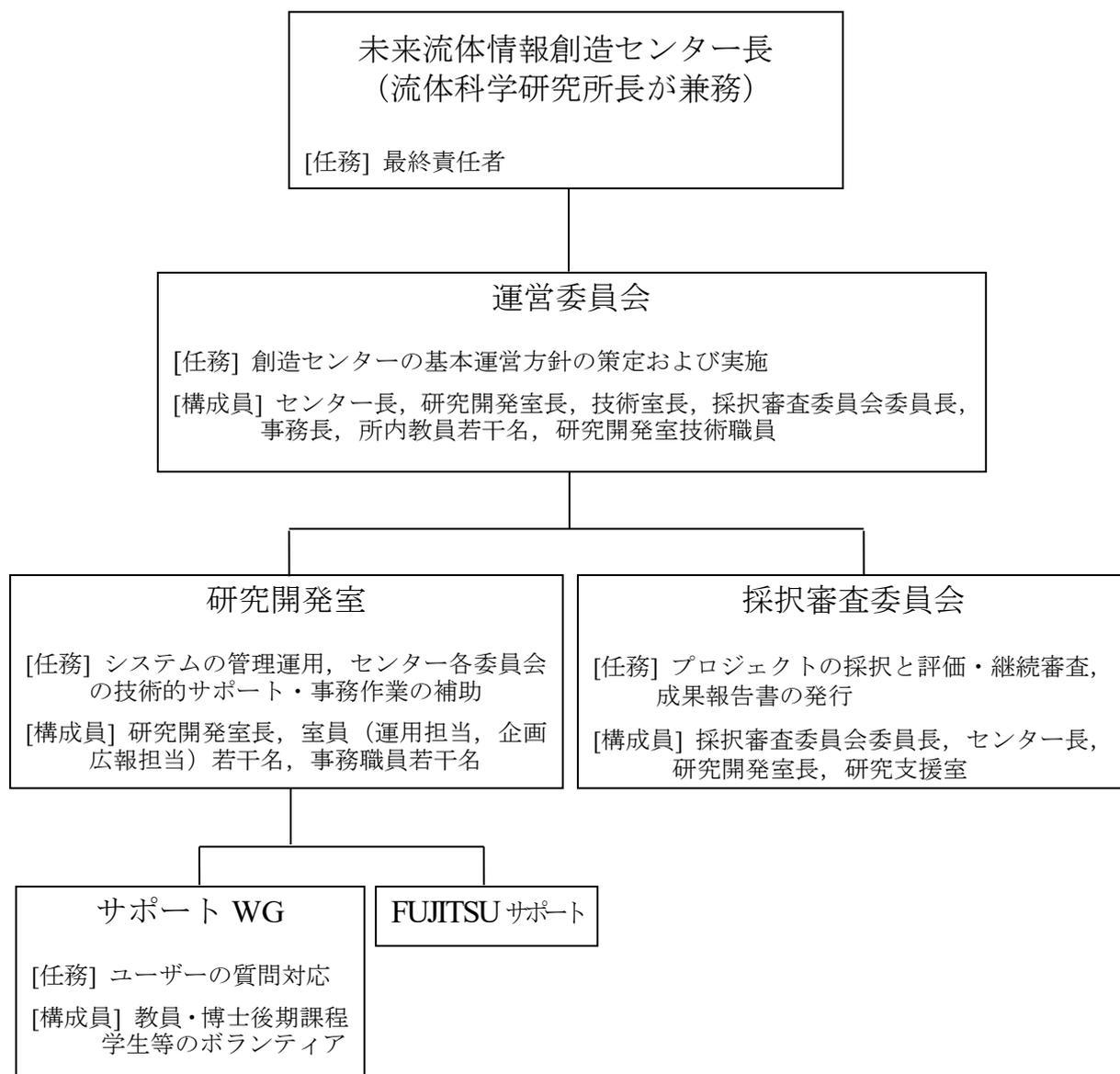
次世代融合研究システムの構成

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)
第二十七巻
(2023年4月～2024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
---	-----------	------------------------------	---------	--------

<公募共同研究>

2	CP06APR23	ふく射と対流の複合解析による熱中症ダイナミクスの解明	岡島 淳之介 准教授20
3	CP07APR23	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24
4	CP11APR23	Non-Boussinesq effects on the turbulent natural convection	小宮 敦樹 教授29
5	CP12APR23	表面修飾ナノ粒子／分散媒のナノスケール界面現象に関する研究	小宮 敦樹 教授32
6	CP15APR23	乱流渦の非対称性構造と周期特性に関する解析	服部 裕司 教授36

7	CP16APR23	ステントデザイン最適化のためのチャンバー内流れ解析 安西 眸 助教40
8	CP17APR23	脳血管画像に基づく流れ場推定手法の開発 安西 眸 助教44
9	CP22APR23	動的架橋反応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47
10	CP24APR23	複雑構造と流れに関する新たな記述子の開発 鈴木 杏奈 准教授50
11	CP26APR23	バイオミメティックスを活用した流体と音波の透過性に大きな差異をつけた多孔質材料による効果的な流動抵抗・空力騒音低減技術の開発 永井 大樹 教授53
12	CP04MAY23	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56
13	CP05MAY23	高速電離流を伴う宇宙航行システムの数値的研究 永井 大樹 教授59
14	CP07MAY23	ソニックブーム評価関数の気象モデルへの実装 大林 茂 教授63
15	CP01AUG23	Molecular Simulation of CO ₂ Permeation through Microalgae Lipid Membrane 馬淵 拓哉 助教67
<共同研究>			
16	CL02APR23	分子動力学法を用いた界面ナノバブルの応力解析 菊川 豪太 准教授70
17	CL03APR23	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72

18	CL04APR23	液体ロケットインデューサで生じるキャビテーション不安定現象の動特性に関する数値解析	伊賀 由佳 教授76
19	CL05APR23	Computational simulation on polymer coating by cold spray	高奈 秀匡 教授79
20	CL08APR23	飛行する回転中空円筒の実験と数値解析の発展	石本 淳 教授82
21	CL09APR23	ロータ配置の対称性に着目したマルチロータ機の地面効果の解明	永井 大樹 教授84
22	CL10APR23	大空間の自然対流境界層の制御手法の創成のためのメカニズム解明	小宮 敦樹 教授87
23	CL13APR23	回転二重円筒／円すい間に発生するテイラー渦の非線形分岐挙動と動的モード分解	小宮 敦樹 教授90
24	CL14APR23	直交格子による超音速／極超音速下における熱流束予測	大林 茂 教授97
25	CL18APR23	数値シミュレーションによるアンモニア球状火炎伝播特性の解明	中村 寿 准教授100
26	CL19APR23	アンモニア非予混合バーナー保炎消炎機構の解明：再循環流領域における化学反応の役割について	中村 寿 准教授102
27	CL23APR23	物理駆動機械学習を用いた有機材料の構造／熱物性相関の解明	菊川 豪太 准教授108
28	CL25APR23	実効粘度の非接触測定に向けた慣性移動を伴う懸濁液流れの数値シミュレーション	船本 健一 准教授110

29	CL27APR23	回転同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置内の 3 次元電磁流体解析 高奈 秀匡 教授	113
30	CL01MAY23	晴天乱気流の発生過程の理論的解析に関する研究 烧野 藍子 助教	117
31	CL02MAY23	空港の滑走路運用に関する研究 烧野 藍子 助教	119
32	CL03MAY23	マイクロサイズの凹凸など表面性状による流れへの影響についての詳細 解析 烧野 藍子 助教	122
33	CL01JUN23	金属/酸化チタン界面構造の分子動力学解析 徳増 崇 教授	125
34	CL01JUL23	Turing パターンの起源に関する分子の揺動と流動を取り入れたシミュレ ーション 内一 哲哉 教授	130
35	CL02JUL23	微小な迎角をつけたアーチェリー矢を過ぎる流れの数値解析 服部 裕司 教授	135
36	CL01SEP23	製造プロセスから触媒層構造を予測するシミュレーターの開発 徳増 崇 教授	138
37	CL02SEP23	火炎伝播限界条件近傍におけるノッキング挙動の調査 森井 雄飛 助教	140

<一般研究>

38	GR01APR22	デュアル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におけ る保炎性能の解明 早川 晃弘 准教授	143
----	-----------	---	-----

39	GR03APR22	温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いたガソリン代替合成燃料・電解液溶媒・アンモニアの着火・燃焼特性に関する研究 中村 寿 准教授	147
40	GR04APR22	SI エンジンの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	155
41	GR05APR22	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 服部 裕司 教授	163
42	GR06APR22	圧縮性流れ高精度数値解法による空力騒音低減の数値シミュレーション研究 服部 裕司 教授	167
43	GR07APR22	機械学習による乱流モデルの開発と乱流制御の数値シミュレーション研究 服部 裕司 教授	173
44	GR08APR22	固体電解質／コート材界面の Li イオン輸送に関する分子論的解析 徳増 崇 教授	177
45	GR01MAY22	相変態をともなう鉄内部の電場による炭素拡散に関する分子論的解析 徳増 崇 教授	180
46	GR01JUN22	固体高分子形燃料電池長寿命化に向けたセリウムイオン輸送モデルの構築とセリウムイオン分布シミュレータの開発 徳増 崇 教授	182
47	GR01APR23	高熱流束冷却にむけた加熱壁面上の微細蒸発熱伝達現象の解析 岡島 淳之介 准教授	185
48	GR02APR23	液体・ソフトマター・界面の分子熱物性解析 小原 拓 教授	188
49	GR03APR23	後退翼における境界層制御デバイスの設計と層流化効果の評価 廣田 真 准教授	190

50	GR04APR23	ナフィオン陽子交換膜の機械的特性に対する過酸化水素の影響メカニズム研究	徳増 崇 教授195
51	GR05APR23	スーパーコンピューティングによる先端車輛基盤技術研究	石本 淳 教授198
52	GR06APR23	有機分子修飾界面におけるナノスケール輸送現象の解明	菊川 豪太 准教授200
53	GR08APR23	高精度エッチング手法の確立に向けた入射粒子の分子動力学解析	徳増 崇 教授202
54	GR09APR23	気体アンモニアならびに液体アンモニアに対する拡散燃焼に関する研究	小林 秀昭 教授205
55	GR10APR23	炭化水素系アイオノマー薄膜における酸素透過特性の分子動力学解析	徳増 崇 教授209
56	GR01MAY23	膜タンパク質 CLCF の F-/H+輸送機構に関する分子論的研究	徳増 崇 教授212
57	GR01JUL23	氷点下における固体高分子形燃料電池高分子電解質膜の内部状態の分子論的解析	徳増 崇 教授215
<若手研究>				
58	YG01APR23	空力弾性学と破壊力学に基づく CFRP 航空機主翼の最適設計	阿部 圭晃 助教219
59	YG02APR23	機能性流体による水圧破碎のメカニズム解明	椋平 祐輔 助教224
<連携研究>				
60	EF01JUL23	数値シミュレーション手法を用いた燃料電池材料特性予測	徳増 崇 教授227

<特定研究>

61	FS01APR22	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	229
62	FS02APR22	複合材料の破壊に関するマルチスケール数値解析 岡部 朋永 教授	235
63	FS03APR22	高強度レーザー照射グラフェンにおける異常イオン加速機構の解明 大西 直文 教授	240
64	FS04APR22	多様体論的アプローチによる能動的流体制御手法に関する大規模数値解析 大西 直文 教授	243
65	FS01OCT22	気象制御に向けた大規模自由度場の再現とアクチュエータ位置の最適化 アルゴリズムの研究 野々村 拓 准教授	246
66	FS01APR23	複雑環境下の微生物挙動の予測と制御 石川 拓司 教授	249
67	FS02APR23	複数の流れ場からつくる低次元空間に基づく流体力学的特性の解明 大西 直文 教授	253
68	FS03APR23	大気圏再突入技術の確立に向けた極超音速・遷音速流の数値解析 大西 直文 教授	258

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	2021.4～2024.3
報告回数	第 3 回報告

2024年8月22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

東北大学流体力学研究所 教授, 助教

小川 拓人

東北大学流体力学研究所 特任研究員

森田 聖大, 野本 京佑, 森 悠二, 鈴木 彩日

明石 朱里, 飯島 啓伍, 飯島 諒, 木田 樹

Muhammad Alfiyandy Hariansyah

関西 一平, 西山 晶, 庭野 翔也, 藤本 雄登

川端 敦仁, 佐藤 寛人, 宗 巨樹, 中村 勝海, 和田 朋也

東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻

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。

今年度は最終年度として、数値計算において特に実用機体での適用を念頭にした解析を実施し、デジタルツインの実現による工学設計技術の革新へ着実に繋げていく。

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 Implicit 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 (焼野, 森)
 - 壁面粗さの遷移または乱流への影響に関する詳細解析 (小川)
- データ同化に関する研究
 - PSP, PIV 実験データの RANS, DES 同化 (野本, 川端)
 - 風洞実験支援のための計算 (木田)
- そのほかの研究
 - 亜音速ジェット騒音発生機構に関する研究 (森田)

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

今年度は、これまで実施してきた、基礎的な形状かつ低レイノルズ数、低マッハ数域での検討に基づき、実際の航空機の主翼形状を対象とし、巡航レイノルズ数、マッハ数 ($Re_c =$

17,500,000, $M = 0.86$, 迎角 1.5 [deg]) での直接数値計算により、遷移状態を観察、遷移遅延デバイスの性能評価を実施することに成功した (図 1, 2)。ここでは、気象計算で用いられる「ネスティング」と似ている手法で、外層に RANS, 内層に DNS を適用したハイブリッド的手法 (図 1) を構築した (Mori et al. AIAA Aviation 2024)。

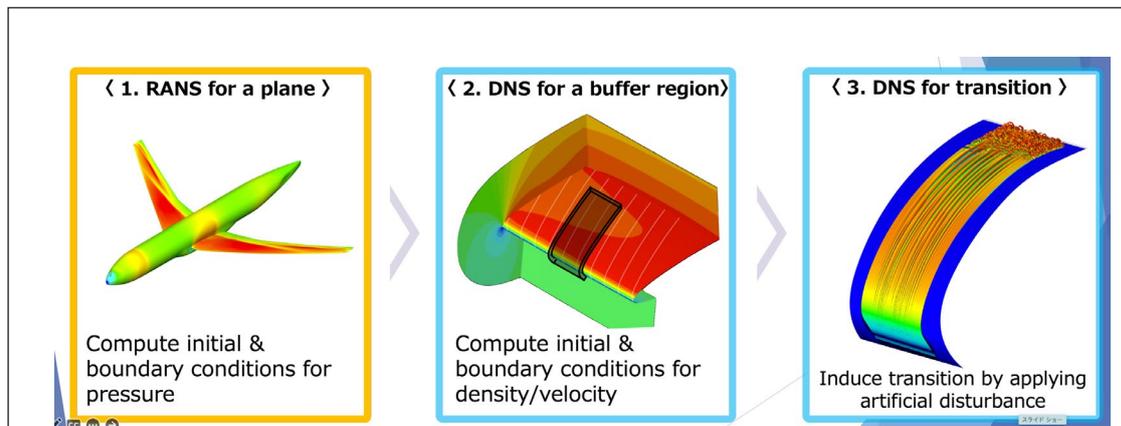


図 1 実際の航空機モデル CRM+NLF 主翼, 巡航レイノルズ数, マッハ数 ($Re_c = 17,500,000$, $M = 0.86$, 迎角 1.5 [deg]) での直接数値計算による遷移の評価を実施するため, 外層に RANS, 内層に DNS を適用したハイブリッド手法を構築した (M2 森).

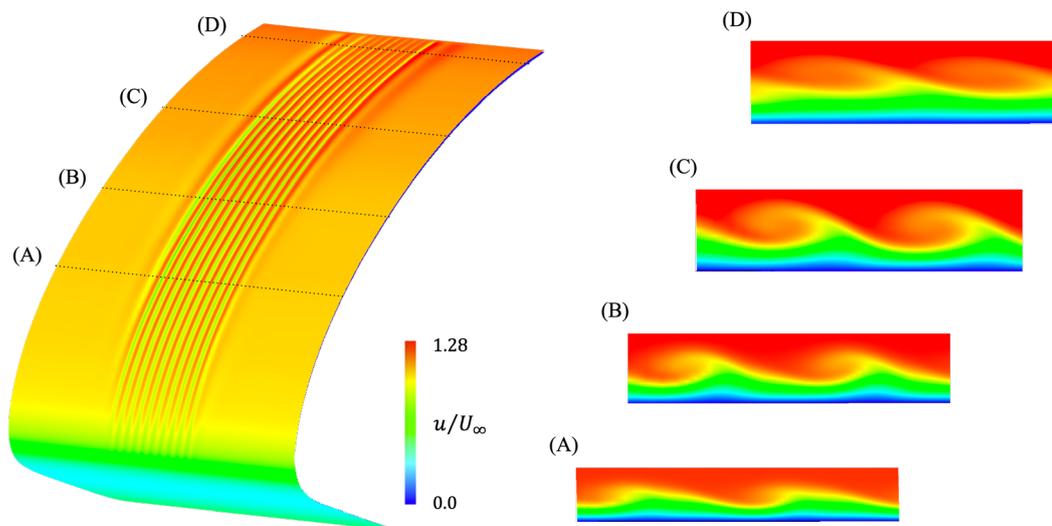


図 2 実際の航空機モデル CRM+NLF 主翼で, 横流れ不安定が支配的と考えられる領域について, 巡航レイノルズ数, マッハ数 ($Re_c = 17,500,000$, $M = 0.86$, 迎角 1.5 [deg]) における直接数値計算を実施, 横流れ不安定を発生させることに成功した (M2 森).

➤ 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

これまで 1 ケースの砂状粗面形状についての効果しか確認していなかったが, 今年度は粒子密度を変化させたパラメトリックスタディを実施し, 同じ粗さ高さに対し, 異なる粒子密度で低抵抗化効果の違いがあることを確認できた (Ogawa & Yakeno, ICCFD 2024)。現在, 前節で構築したツールを用いて, 実際の航空機表面に DMR を設置した場合の検証計算を進め

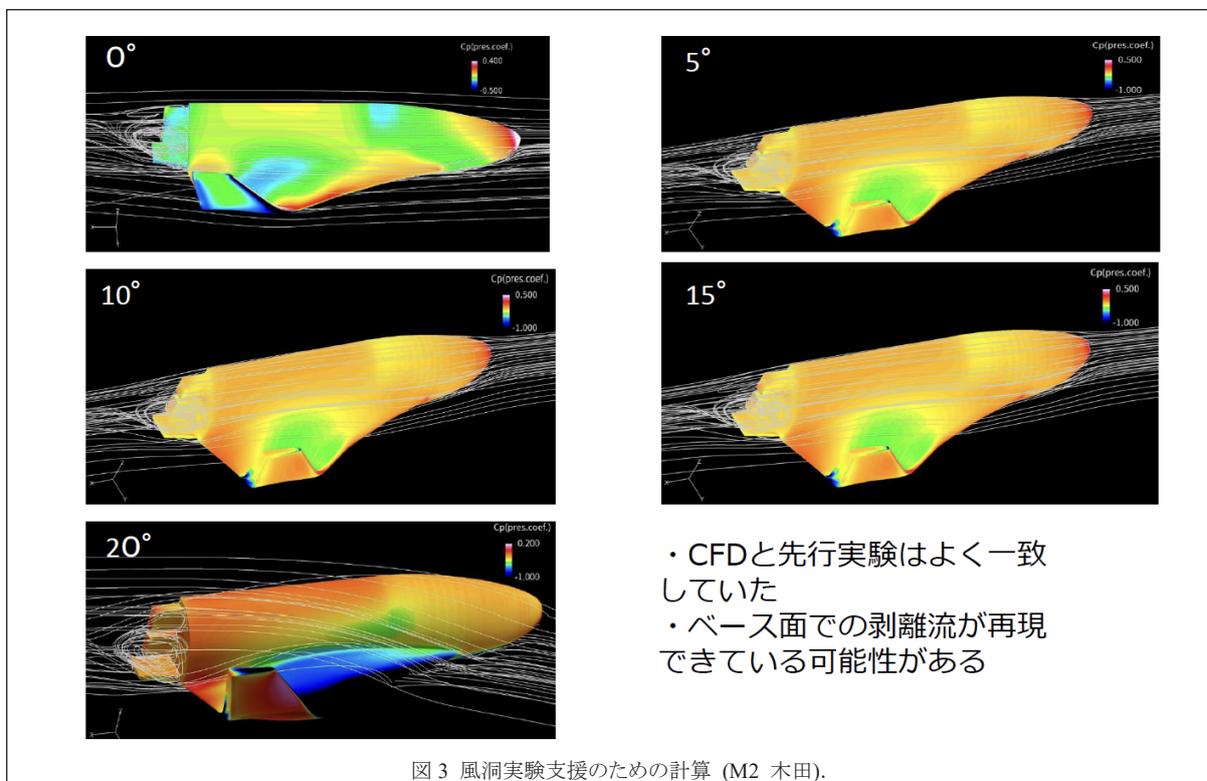
ている.

➤ データ同化に関する研究

- PSP, PIV 実験データの RANS, DES 同化 (野本, 川端)
- 風洞実験支援のための計算 (木田)

今年度は特に, Unsteady RANS に実験の PSP データを同化, RANS モデル係数をチューニングすることで, 非定常な流れを良好に再現することに成功 (Kawabata, Yakeno & Obayashi, THMT 2023), 乱流クロージャの機械学習による最適化も実施中である.

また, 磁力支持天秤装置を用いて ALFLEX 模型の空力の測定を実施するにあたり, 数値計算による予測を実施した(図 3).



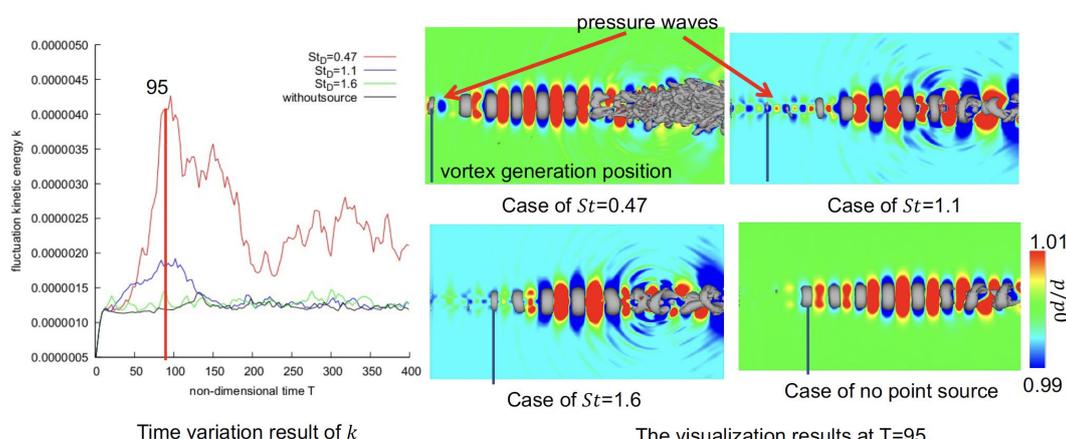
➤ そのほかの研究

- 亜音速ジェット騒音発生機構に関する研究 (森田)

従来, 超音速ジェットや衝突噴流の騒音発生ではフィードバック機構が存在することが知られていたが, 亜音速ジェットではあまり知られていなかった. 共同研究者であるリヨン大学の Christophe Bogey 博士は, 亜音速ジェット騒音の発生機構にフィードバック機構が存在する可能性を指摘していた. 我々はそのようなフィードバック機構の存在を証明するため, ポテンシャルコア終端に人工擾乱を設置し, 上流域での周波数応答を観察した. その結果, ポテンシャルコア終端の KH モードと一致する周波数が, 上流で最もエネルギーを増加させることを示し, フィードバック機構が存在することを示した (S. Morita et al. JFE 2024) .

Results(3/5)

NS solver: the case of the guided jet wave frequency



➡ **Vortex generation position moved to upstream with emerging the pressure waves**
The frequency case of $St=0.47$ is the most turbulent

図4 音速ジェット騒音発生機構に関する研究 (D3 森田).

3. 研究目標の達成状況

本研究プロジェクトにおける実施項目は多岐に渡り、それにより研究目標は予想以上の成果を上げることができた。安定性解析においては、線形化ナビエ・ストークス方程式の直接数値計算手法を構築し、時空間情報を排除しない大域的安定性解析を実施することができるようになった。線形化しないナビエ・ストークス方程式による結果との比較により、非線形作用も直接的に評価することができるようになった。乱流モデルを使用した計算手法に関しても、データ同化によるモデル係数のチューニング、逆ハイブリッド計算による実機巡航条件での遷移過程の再現に成功するなどの研究成果を得られた。そのほか、計算対象とする物体形状の自由度を高めるため、IBM法の一つであるVP法をこれまでのソルバーに実装できたことにより、空港周辺の風環境の解析、風洞の改修のための解析など、より実用的な流れのシミュレーションが可能になった。今後、より高速、高温などより高負荷環境での流の予測と制御について、学術的に大きく貢献できると考えている。

4. まとめと今後の課題

大規模データから描像を捉える内挿的技術は、デジタル化により機械により作業を代替できることから大きな可能性を秘めており、近年大きく注目を集めている。一方研究者は、決定論的支配方程式の性質を精緻に解明し用いる「外挿」的技術、つまり、データが少ないとしても、例えば極超音速域や地球外環境での振る舞いを、支配方程式から完璧に予測し制御することができるはずである。前者は統計モデル化により達成可能であり、従来概念の枠を出ない流体機器開発に非常に有効な手段となる一方、後者は力学モデル化として、航空宇宙流体工学の水準と学問としての価値を向上させる(機械よりも研究者の方が上と考える場合)と信じている。統計的かつ力学的モデル化の特性をよく理解し、使いこなすことが、研究者の今後の課題であるかもしれないと考えている。

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）

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, 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

2022年度

- Chiharu Inomata, Masahide Kuwata, Sho Yokota, Yoshiaki Abe, Hideo Sawada, Shigeru Obayashi, Keisuke Asai, Taku Nonomura: Model position sensing method for low fineness ratio models in a magnetic suspension and balance system, Review of Scientific Instruments 94(2) 025102-025102 2023年2月
- Chenguang Lai, Liangkui Tan, Shigeru Obayashi: Aeroacoustic control mechanism on near-wall-wing of Aero-train based on plasma jet, Physics of Fluids 35(2) 025122-025122 2023年2月
- Chenguang Lai, Shengji Zhu, Shuai Feng, Guangtao Zhai, Liangkui Tan, Shigeru Obayashi: Flow characteristics and wake topology of two-seat convertibles, Physics of Fluids 35(1) 015144-015144 2023年1月
- Kazuya Seo, Hiroyuki Okuizumi, Yasufumi Konishi, Takuto Kobayashi, Hiroaki Hasegawa, Shigeru Obayashi: Measurement of aerodynamic force and moment acting on a javelin using a magnetic suspension and balance system, Scientific reports 13(391) 1-11 2023

- Shun Takahashi, Takayuki Nagata, Yusuke Mizuno, Taku Nonomura, Shigeru Obayashi: Effect of particle arrangement and density on aerodynamic interference between twin particles interacting with a plane shock wave, *Physics of Fluids* 34(11) 113301-113301 2022 年 11 月
- 焼野 藍子, 流体工学におけるデジタルツイン, 日本機学会計算力学部門 CMD Newsletter 68(November) 2022 年 11 月
- Keiichi Shirasu, Masayoshi Mizutani, Naoki Takano, Hajime Yoshinaga, Tsuyoshi Oguri, Ken ichi Ogawa, Tomonaga Okabe, Shigeru Obayashi: Lap-shear strength and fracture behavior of CFRP/3D-printed titanium alloy adhesive joint prepared by hot-press-aided co-bonding, *International Journal of Adhesion and Adhesives* 117 2022 年 9 月
- Hikaru Takami, Shigeru Obayashi: A Formulation of the Industrial Conceptual Design Optimization Problem for Commercial Transport Airplanes, *Aerospace* 1-21 2022 年 6 月
- Chenguang Lai, Liangkui Tan, Yujie Zhu, Shengji Zhu, Shigeru Obayashi: Aeroacoustic characteristics of multi-directional wing under the wing-in-ground effect, *Physics of Fluids* 34(6) 067112-067112 2022 年 6 月
- 焼野 藍子, 竜門賞受賞記念解説 壁乱流準秩序構造に着目した摩擦抵抗低減制御に関する研究, 日本流体力学学会 ながれ 41 161-166 2022 年 6 月
- Ryoichi Yoshimura, Kento Suzuki, Junshi Ito, Ryota Kikuchi, Aiko Yakeno, and 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*, 61(5):503 – 519, 2022
- 三坂 孝志, 久保 世志, 浅海 典男, 出田 武臣, 大林 茂: フィルム冷却流れ解析を高度化するデータ同化, 日本ガスタービン学会誌 50(3) 163-169 2022 年 5 月

2023 年度

- Takashi Misaka, Ryoichi Yoshimura, Shigeru Obayashi, Ryota Kikuchi, Large-Eddy Simulation of Wake Vortices at Tokyo/Haneda International Airport, *Journal of Aircraft* 1-13 2023 年 4 月 18 日

- R. Yoshimura, J. Ito, P. A. Schittenhelm, K. Suzuki, A. Yakeno, S. Obayashi: Clear Air Turbulence Resolved by Numerical Weather Prediction Model Validated by Onboard and Virtual Flight Data, *Geophysical Research Letters* 50(12) 2023 年 6 月 21 日
- Shingo Hamada, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Drag reduction effect of distributed roughness on the transitional flow state using direct numerical simulation, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 104 109230 2023 年 12 月
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Progress in Turbulence X, accepted (published in 2024)
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: *Journal of Flow and Energy*, accepted (published in 2024)

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

2022 年度

- N. Takano, Masayoshi Mizutani, K. Shirasu, H. Yoshinaga, T. Oguri, K. Ogawa, T. Okabe, Shigeru Obayashi: Application of metal additive manufacturing to multi-material adhesion with CFRP through porosity control, The International Conference on Leading Edge Manufacturing/Materials & Processing (LEM&P 2023) 2023 年
- Hiroyuki Okuizumi, Rintaro Makino, Hideo Sawada, Yasufumi Konishi, Shigeru Obayashi, Taku Nonomurav: Measurement of Aerodynamic Characteristics of Square Cylinders with Low Fineness Ratio Using 1-m Magnetic Suspension and Balance System, AIAA SciTech Forum 2023 2023 年 1 月 26 日
- Ryoichi Yoshimura, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Global sensitivity explaining atmospheric shear layer transition, 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics 2022 年 11 月 21 日
- Shingo Hamada, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: DNS Study of Drag Reduction Effect on Ultra-Fine Rough Surfaces, 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics 2022 年 11 月 21 日

- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Flow Structure Extraction Related to the Noise Generation in A Subsonic Free Jet by Using Mode Decomposition Methods, ELYT WORKSHOP 2022 2022年11月16日
- Ryoichi Yoshimura, Aiko Yakeno, Benoit Pier, Frederic Alizard, Shigeru Obayashi: Sensitivity Analysis to Investigate the Secondary Structure from Atmospheric Shear Flow, ELYT WORKSHOP 2022 2022年11月16日
- Aiko Yakeno, Shingo Hamada, Sayaka Suzuki, Masanari Hattori, Masayoshi Mizutani, Yoshiaki Abe, Shigeru Obayashi: Transition Delay Effect of Ultra-Fine Surface Roughness by Aircraft Paint or Film Processing, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- D. Sasaki, K. Abe, H. Moriai, S. Takahashi, G. Yamada, S. Ogawa, K. Mori, Shigeru Obayashi, Koji Shimoyama: Study on Heat Flux Prediction Method for Cartesian-Mesh CFD Under Supersonic Flows, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- H. Yamashita, B. Kern, R. Iura, T. Ukai, T. Misaka, Shigeru Obayashi: Sonic Boom Variation of North Atlantic Supersonic Flight, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Y. Okada, T. Ishide, H. Izumi, A. Harada, Koji Shimoyama, Shigeru Obayashi: Numerical Analysis on the Flow Around a Flapping Wing, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Patrick Schittenhelm, Ryoichi Yoshimura, Junshi Ito, Shigeru Obayashi: Investigation on Aircraft Turbulence Using Large Eddy and Flight Simulations, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Shun Takahashi, Takayuki Nagata, Yusuke Mizuno, Taku Nonomura, Shigeru Obayashi: Influence of Particle Density and Relative Position on Aerodynamic Interference Between Two Moving Particles Driven by Shock-Induced Flows, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- S. Asakura, H. Hasegawa, Shigeru Obayashi, K. Nakagawa: Improvement of Aerodynamic Performance of Flying Object Clothed with Fabrics of Air Permeability Flows, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年

11月10日

- Ssiichiro Morizawa, R. Sakai, Ryota. Kikuchi, Shigeru Obayashi: Development Study on an Air Transportation System with a Roadable Aircraft Among Remote Islands and Major Cities Around Okinawa, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- K. Tanaka, M. Kudo, Shigeru Obayashi: Development of Reduced Order Models for Controlling Unsteady Thermocapillary Convection, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- U. Kagawa, T. Arai, M. Hirano, H. Izumi, T. Ishide, Koji Shimoyama, Shigeru Obayashi: Development of a Small Birdlike High-Performance Flying Robot, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Chenguang Lai, Liangkui Tan, Yujie Zhu, Shigeru Obayashi: Aeroacoustic Generation and Propagation Characteristics of Annular-Wing Under WIG Effect, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Kazuya Tajiri, Aiko Yakeno, Shahriar Alam, Shingo Hamada: Study of Shock Wave-Particles Interaction, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Ryoichi Yoshimura, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi, Benoit Pier, Frederic Alizard: Atmospheric aircraft turbulence investigated by sensitivity analysis Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Modal approach for extracting flow structure related to the subsonic jet noise generation, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Aiko Yakeno, Shingo Hamada, Masanari Hattori, Masayoshi Mizutani, Yoshiaki Abe, Shigeru Obayashi: Transition delay effect of ultra-fine surface roughness by aircraft paint or film processing, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Modal Approach for Extracting Flow Structure Related to the Subsonic Jet Noise Generation, Nineteenth

International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 9 日

- Ryuichi Ishiai, Kazuya Seo, Daiya Tsudou, Ryuya Sakaue, Hiroyuki Okuizumi, Yasufumi Konishi, Shigeru Obayashi, Shinichiro Ito, Masaki Hiratsuka: Measurement of Aerodynamic Forces Acting on a Vibrating Javelin, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 9 日
- K. Fuchigami, Hiroyuki Okuizumi, Sho Yokota, Shigeru Obayashi, Taku Nonomura: Effect of Reynolds Number on Critical Geometry of Magnetically Supported Cylinder Body, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 9 日
- Hajime Kosada, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Feasibility Study of Ammonia Fueled Supersonic Transportation, The Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022) 2022 年 10 月 13 日
- Hajime Kosada, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Feasibility study of ammonia fuel supersonic transportation, The 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT) 2022 年 10 月 11 日
- Aiko Yakeno: Challenges for delaying transition to reduce airplane drag, US-Japan workshop on bridging fluid mechanics and data science 2022 年 9 月 6 日
- Yoshiaki Abe, Shigeru Obayashi: Digital Transformation of Aircraft Design with Carbon Fiber Reinforced Plastics, 2nd US-Japan Workshop on Data-Driven Fluid Dynamics 2022 年 9 月 6 日
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Flow structure analysis related to the acoustic wave generation in subsonic free jet using dynamic mode decomposition, 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) and 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM-VIII) 2022 年 8 月 2 日
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Flow Structure Analysis Related to the Acoustic Wave Generation in Subsonic Free Jet Using Dynamic Mode Decomposition, WCCM-APCOM 2022(15th World Congress on Computation Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computation Mechanics) 2022 年 7 月 31 日
- Ryoichi Yoshimura, Aiko Yakeno, Junshi Ito, Shigeru Obayashi: Direct Global

Stability of Atmospheric Shear Flow That Causes Aircraft Turbulence, Twelfth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12) 2022年7月21日

- Ryoichi Yoshimura, Aiko Yakeno, Junshi Ito, Shigeru Obayashi, Direct global stability for atmospheric shear flow inducing aircraft turbulence, 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), 2022年7月19日
- Shingo Hamada, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi, Ultra-fine roughness effect on transition delay using direct numerical simulation, 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), 2022年7月19日
- Aiko Yakeno: Direct global sensitivity approach for atmospheric shear flow that causes aircraft turbulence, ELyT workshop, 2022年6月9日

2023年度

- Aiko Yakeno: Trials for friction drag reduction focusing on quasi-coherent flow structures around object surfaces, Mini-workshop of IFS_TU and PME_NTHU 2023年6月30日
- Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi, Flow Sensitivity Analysis for the Feedback Loop Phenomenon of Subsonic Jet Noise Generation, iTi conference on turbulence 2023 2023年7月22日
- Atsuhito Kawabata, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi, Reproduction of unsteady observation data by optimization of turbulence model parameters using data assimilation, Turbulence, Heat and Mass Transfer 10 2023年9月13日
- Aiko Yakeno, Challenges of flow control for drag reduction around high-speed vehicles (long ver.), UW-IFS Workshop 2023年9月20日
- Aiko Yakeno, Challenges of flow control for drag reduction around high-speed vehicles, AOS Workshop: Session-A @Smith Room in Suzzallo Library, UW 2023年9月21日
- Ryoichi Yoshimura, Junshi Ito, P. A. Schittenhelm, Kento Suzuki, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi, Clear Air Turbulence Resolved by Numerical Weather Prediction Model Validated by Onboard and Virtual Flight Data, Federal Aviation Administration (FAA), The Aerospace Human Factors Research Division (AHFRD), New and Emerging Aviation Technologies (NEAT) series 2023年10月31日 招待有り

- S. Morita, A. Yakeno, C. Bogey, S. Obayashi, Clarification of Flow Structures Related to Jet Noise Generation Using Mode Analysis and High-Precision Jet Flow Simulation, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023 年 11 月 8 日
- D. Sasaki, K. Miyata, S. Ogawa, K. Mori, K. Abe, S. Yoshinaga, H. Moriai, S. Takahashi, A. Yakeno, S. Obayashi, Study on Heat Flux Prediction Method for Cartesian-Mesh CFD under Supersonic Flows, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023 年 11 月 7 日
- K. Tajiri, S. G. Viyyapu, A. Yakeno, Study of Shock Wave-Particles Interaction, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023 年 11 月 7 日
- K. Kaneko, A. Oyama, A. Yakeno, Riblet Surface Effect on Viscous Drag in the Laminar, Transitional, and Turbulent Flow, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023 年 11 月 7 日
- Kento Kaneko, Akira Oyama, Aiko Yakeno, Shingo Hamada, Mach Number Effect on the Drag Reducing Performance of the Riblet in the Transition and Turbulent Flow, AIAA SCITECH 2024 Forum 2024 年 1 月 4 日
- Sayaka Suzuki, Aiko Yakeno, Yasufumi Konishi, N. Tokugawa, Makoto Hirota, Hikaru Takami, Shigeru Obayashi, Experimental Validation of the Suppression of Crossflow Instability by Sinusoidal Roughness Elements, AIAA SCITECH 2024 Forum 2024 年 1 月 4 日
- Yuji Mori, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi, Effects of Surface Roughness and Free-stream Turbulence on Transition in Swept-Wing Boundary Layer, AIAA SCITECH 2024 Forum 2024 年 1 月 4 日
- Takuto Ogawa, Kengo Asada, Aiko Yakeno, Kozo Fujii, Revisiting Burst Drive Conditions of DBD Plasma Actuator for Airfoil Flow Control, AIAA SCITECH 2024 Forum 2024 年 1 月 4 日
- Aiko Yakeno, Current wind tunnel activities in the Aerospace Fluid Engineering Lab, IFS Tohoku University, Magnetic Suspension Balance Systems Forum 2024 年 3 月 6 日 招待有り

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

2022年度

- 飯島 啓伍, 大林 茂, 小佐田 一: アンモニアハイブリッド航空機概念検討, 日本航空宇宙学会北部支部 2023年講演会 ならびに 第4回再使用型宇宙輸送系シンポジウム 2023年3月21日
- 大林 茂: 流体とインフォマティクス, 日本機械学会流体工学部門企画講習会 2023年2月1日
- 長橋 昌平, 焼野 藍子, 大林 茂, 筒井 裕貴, 横川 譲: 胴体後部形状の変化による BLI ファン搭載電動ハイブリッド航空機の空力性能評価, 第36回数値流体力学シンポジウム 2022年12月14日
- 大林 茂: 流動現象のデジタルツインを実現するデータ同化流体科学, アドバンス・シミュレーション・セミナー2022 2022年12月9日
- 大林 茂: フルードインフォマティクス 2.0, 日本機械学会関西支部第382回講習会(ネット配信 WebEX) 実務者のための流体解析技術の基礎と応用 2022年11月24日

- 焼野 藍子, 初鳥 匡成, 阿部 圭晃, 新屋ひかり: 帯電物体の 대기へのマルチスケール影響調査, 第 9 回東北大学若手研究者アンサンブルワークショップ 2022 年 11 月 22 日
- 大久保 祐汰, 焼野 藍子, 大林 茂, 湯原 達規, 吉田 憲司: 超音速水素旅客機の燃料タンク配置と空力性能検討, 第 60 回飛行機シンポジウム 2022 年 10 月 12 日
- 香川 詩花, 石出 忠輝, 新井 太一郎, 平野 政輝, 泉 源, 山崎 渉, 下山 幸治, 大林 茂, 劉浩: 小鳥型高性能飛行ロボットの開発, 第 60 回飛行機シンポジウム 2022 年 10 月 11 日
- 新井 太一郎, 石出 忠輝, 香川 詩花, 平野 政輝, 泉 源, 山崎 渉, 下山 幸治, 大林 茂, 劉浩: 2 自由度を有する羽ばたき翼モデルの開発, 第 60 回飛行機シンポジウム 2022 年 10 月 11 日
- 大林 茂, 野本 京佑, 焼野 藍子, 野々村 拓: データ同化による風洞実験デジタルツイン構築の試み, 第 60 回飛行機シンポジウム 2022 年 10 月 11 日
- 焼野 藍子: 壁乱流準秩序構造に着目した摩擦抵抗低減制御に関する研究, 日本流体力学会年会 年会 2022 竜門賞受賞記念講演 2022 年 9 月 27 日
- 大林 茂, 廣田 真, 阿部 圭晃: 飛行機のながれ ~航空産業のデジタルとグリーン~, 令和 4 年度みやぎ県民大学 大学開放講座 東北大学流体科学研究所 ながれの科学 2022 年 9 月 2 日
- 野本 京佑, 吉村 僚一, 焼野 藍子, 大林 茂: 円柱後流の PIV 計測データを用いたデータ同化による乱流モデルの高精度化, 第 54 回流体力学講演会/第 40 回航空数値シミュレーション技術シンポジウム 2022 年 7 月 1 日
- 井浦 玲伊, 鶴飼 孝博, Hiroshi Yamashita, Bastian 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 回航空数値シミュレーション技術シンポジウム 2022 年 6 月 30 日
- 川俣 柊介, 川本 裕樹, 奈良 祥太郎, 野原 徹雄, 高橋 俊, 大林 茂: 複雑な管形状による多数の個体粒子を含む非ニュートン流体の数値流体解析, 第 45 回日本バイオレオロジー学会年会 2022 年 6 月

2023 年度

- 吉村 僚一, 伊藤 純至, 焼野 藍子, 大林 茂: 晴天乱気流中フライトシミュレーションの 3 次元可視化, 第 98 回 CG・可視化研究会 (CAVE 研究会) 2023 年 7 月 19 日 招

待有り

- 焼野 藍子, 物体表面の流れの科学による次世代輸送機革新, 一般社団法人 みやぎ工業会 梵天会 令和5年度第一回研修会 2023年12月20日 招待有り
- 焼野 藍子, 次世代高速輸送機のための物体表面近傍の流れに関する研究, 一般社団法人 精密工学会 ナノ精度機械加工専門委員会 講演会 2024年1月 招待有り
- 焼野 藍子, 高速輸送機器高性能化のための流れ機構解明と制御の研究, 第7回東北大学 紫千代萩受賞講演 2024年3月19日 招待有り

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

特許

2022年度

- Aiko Yakeno, EVALUATION APPARATUS
出願番号 米国仮出願 63/389,369, 出願日 2022年7月15日

2023年度

- 焼野 藍子, 評価装置、粗面、評価方法及びプログラム
出願番号 特願 PCT/JP2023/020386, 出願日 2023年5月31日
公開番号 WO2024/014155, 公開日 2024年1月18日
- 焼野 藍子, 評価装置、粗面、評価方法及びプログラム
出願番号 特願 2023-560283, 出願日 2023年5月31日

受賞

2021年度

- 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にて, 「**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**」を受賞, (2022年3月28日)

2022年度

- 焼野 藍子, 2022年度日本機械学会流体工学部門「**フロンティア表彰**」受賞, 2022年11月13日

- Patrick Schittenhelm, The 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 「**Best Presentation Award**」を受賞 (2022年11月10日)
- 小佐田 一, 日本航空宇宙学会北部支部 2022 年講演会並びに第 3 回再使用型宇宙輸送系シンポジウムで「**Good Presentation Award**」を受賞 (2022年4月15日)

2023 年度

- 焼野 藍子, 令和 5 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰「**若手科学者賞**」を受賞 (2023年4月7日)
- 明石 朱里, 日本航空宇宙学会, 第 61 回飛行機シンポジウムにおいて「**学生優秀講演賞**」を受賞 (2023年11月17日)
- 焼野 藍子, 2023 年度 東北大学優秀女性研究者賞「**紫千代萩賞**」理学・工学 分野 (2024年2月9日)
- 森 悠二, 東北大学大学院工学研究科「**機械系専攻長賞**」を受賞 (2024年3月26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

2023 年度

- 2023 年 2023-06-28 吉村 僚一 博士 (令和 4 年度博士後期課程修了) らによる研究成果が Geophysical Research Letters に掲載予定となり, 東北大学と流体科学研究所より

プレスリリース，複数のインターネットメディア，河北新報に記事が掲載された。2024年度には晴天乱気流の事故が発生し，吉村博士，大林教授は，晴天乱気流の専門家の一人として，複数のテレビ局に出演した

- 「飛行機を揺らす見えざる脅威を可視化～東京湾上空で発生した晴天乱気流をスーパーコンピュータ「富岳」で再現～ | 東北大学」 Willing Inc. アンドラ 2023年7月5日 インターネットメディア
- 「東京湾上空・航空機の見えざる脅威「エアポケット」可視化」河北新報社 河北新報 朝刊 2023年7月1日 新聞・雑誌
- 「東北大・名大、「富岳」で晴天乱気流の再現に成功」航空新聞社 jwing.net WING 2023年6月29日 インターネットメディア
- 「東北大など、東京湾上空の晴天乱気流の超高解像シミュレーションに成功」マイナビニュース TECH+ 2023年6月29日 インターネットメディア
- 「東北大と名大、東京湾上空で発生した晴天乱気流をスーパーコンピュータ「富岳」で再現」日本経済新聞社 日経電子版 2023年6月28日 インターネットメディア

- 2024年 AIAA SciTech FORUM にて，10件に1件程度である AIAA Showcase に，焼野グループから発表した3件とも選出され，流体科学研究所よりプレスリリースした

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	CP06APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年7月23日提出

ふく射と対流の複合解析による熱中症ダイナミクスの解明

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 准教授

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

地球温暖化やヒートアイランド現象の影響からか、近年、熱中症の患者数・死亡者数は増加傾向にあり、有用な熱中症対策の確立は急務である。熱中症に関連があると考えられる要因として、個体要因（年齢、性差など）、社会的要因（活動場所、運動強度など）、熱的要因（熱環境、暑熱順化など）が挙げられる（環境省、平成22年度熱中症とヒートアイランド現象の関係解析調査業務報告書）。これらは統計学から導き出されたものであり、伝熱学的視点から実際に生体内でどのように熱が発生し、それが拡散していくのか、明らかになっていない。

江目は屋外における最も重要な熱源である太陽光ふく射を遮蔽することで、有効な熱中症対策を確立できると考え、研究を遂行してきた（Gonome, et al., *Appl. Therm. Eng.*, 2020.）。加えて、共同研究者である河野助教・山田教授（芝浦工大）と共に人体の皮膚のふく射特性を測定してきた。これまで熱源となる太陽光のみを考慮した設計を行ってきたが、皮膚のふく射特性には波長依存性がある（Kono, et al., *Int. J. Thermophys.*, 2019.）。また、日に当たることで生じるメラニン色素は光をより吸収するように作用する（Kono, Gonome, Yamada, et al., *Biomed. Opt. Express.*, 2019.）。暑熱順化とは逆に熱中症に弱くなる方向に身体が作用する、という矛盾が存在する。この矛盾を解き明かすには、生体細胞の大部分を占める水とその他の細胞（ヘモグロビン、メラニン色素など）との非平衡ダイナミクスを明らかにし、熱平衡化やエネルギー伝達を決定づける分子振動エネルギー緩和現象に斬り込む必要があると考えた。各細胞は各波長に対する熱応答が異なるため、超短時間では各系で異なる温度を持ち、時間が経つと熱緩和し、身体の温度上昇につながる。そこで、より有用な熱中症対策

の確立のため、各波長の光が人体の深部にどの程度浸透し、熱に変わり、それが拡散していくことで熱中症が発症するのか、などの熱中症のダイナミクス（原因や本質）に迫る必要があると考えた。そこで、細胞内でふく射により生まれた熱がどのように拡散し、熱中症に寄与するのか（散乱性媒体中におけるふく射伝熱と熱伝導・対流熱伝達の複合問題）を明らかにする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究は、熱中症発症プロセスの詳細な解明を目指し、生体細胞内におけるふく射伝熱の光と熱のエネルギー変換をサイズスケールとタイムスケールの両面からミクロ的に解明し、細胞内でふく射により生まれた熱がどのように拡散していくのかを明らかにすることを目的とする。熱中症の原因や本質を明らかにし、有用な熱中症対策の確立に貢献する。

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、生体伝熱現象に関する深い知識を持つ岡島、ふく射伝熱と対流熱伝達の複合解析に精通した古川、そして散乱性媒体のふく射伝熱に関する専門知識を持つ江目が協力し、複雑な物理現象が混在している都市のふく射伝熱現象に取り組む点に学術的な意義がある。

2.2 熱中症対策ミスト冷却装置の開発

熱中症における重要な熱源として、地表からのふく射がある。ふく射熱遮蔽に最適なミスト冷却装置の設計指針として、水粒子のふく射特性やウォーターミストのふく射遮蔽性能を定量的に評価することが重要である。本研究では、ふく射熱伝達解析を実施し、ふく射熱伝達を最小化するため、最適な水滴サイズを導出した。広範囲の水滴径と波長に対して、単一水滴のふく射特性を計算した。ミスト層を一次元平行平板系でモデル化し、ミスト層内のふく射伝達を解析した。

入射電磁波に対する単一球状粒子のふく射特性は、Maxwell 方程式から導かれる波動方程式を球座標系で解くことで厳密解（Mie 散乱理論）を得ることができる。これにより、水滴のふく射特性を計算した。

本研究ではミスト層を模擬した一次元平行平板モデル内でふく射輸送方程式を光線放射モデルによるふく射要素法（REM²）により解き、反射率を計算した。計算の簡易化のために、水滴の分散状態は単分散であると仮定している。実際は、液滴同士は衝突し、粒度分布が変化する。これは、粒子群のふく射特性に影響を与える。さらに、水滴の蒸発と周囲環境からの対流熱伝達も、本研究では考慮していない。水滴の最適粒径を特定するため、粒子径は安定していると仮定した。

解析結果と別に評価していた実験結果との比較を図 1 に示す。実験結果と解析結果の傾向は一致しており、理論解析が現象を表現できていることを示した。水滴径の減少に伴い、遮蔽率が増加している。ミスト層の水滴径がふく射遮蔽性能に影響を及ぼし、水滴径を小さくすることがふく射遮蔽により効果的であることを示した。

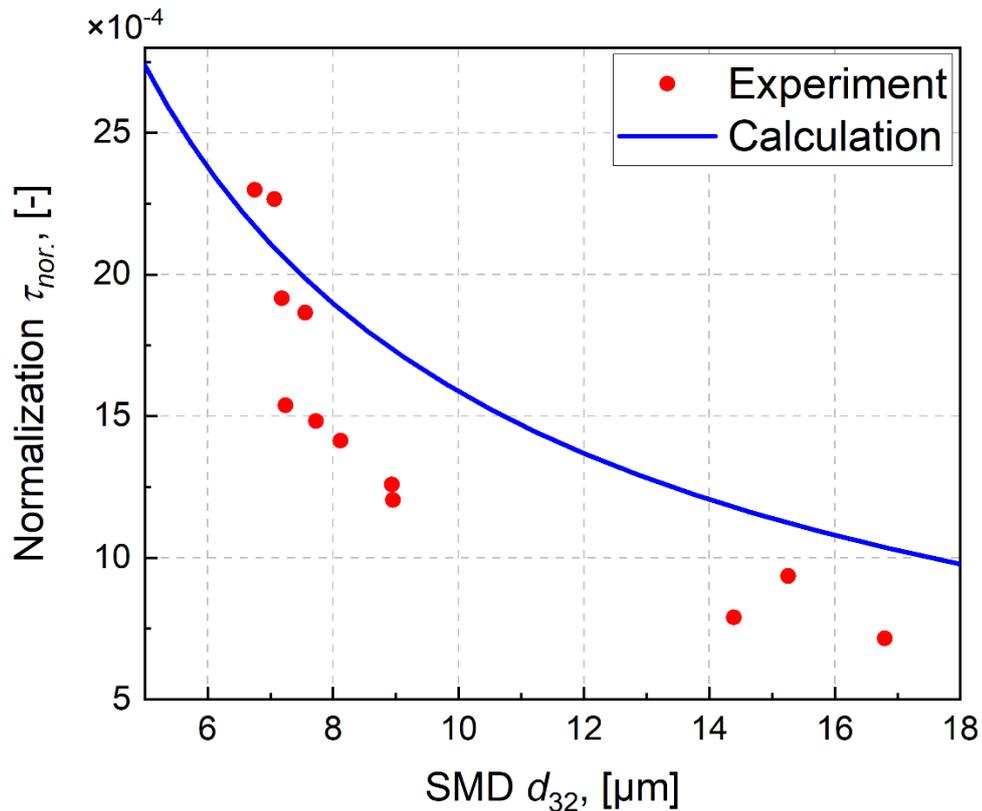


図1 ミストのふく射透過特性に関する実験結果と解析結果の比較

3. 研究目標の達成状況

本研究では、ふく射遮蔽機能を有したミスト層の実現を目標とし、ミスト層の理論解析を行った。ミスト層のふく射遮蔽率は水滴径の依存性を持ち、水滴径を小さくすることがより効果的であることを示した。これらの知見を活用して、熱中症対策ミスト冷却装置などの都市環境制御技術の開発に貢献することが期待される。

4. まとめと今後の課題

現状では水滴の蒸発の影響を無視している。そこで今後は、周囲環境からの伝熱のミスト層への影響を把握するため、水滴の経時変化に対するスペクトル応答評価を行う予定である。また、ミスト全体の蒸発モデルを実装する前に、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）

国際学会

Hiroki Gonome, Masato Jono, Kaito Suzuki, Shuichi Moriya, Junnosuke Okajima, and Takuma Kogawa: Spectral Shielding Evaluation of Mist for Heat Stroke Prevention against Thermal Radiation from the Ground Surface, Proceedings of the 23rd

International Symposium on Advanced Fluid Information, (2023), pp. 89-90.

国内学会・研究会等

城野 雅斗, 古川 琢磨, 川井 喜与人, 邢 文静, 守谷 修一, 岡島 淳之介, 江目 宏樹: ウォーターミストのふく射遮蔽に有効な水滴径に関する実験的評価, 日本伝熱学会東北支部第 24 回学生発表会講演論文集, (2024).

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

令和 6 年 6 月 27 日, NHK 総合, 「やままる」

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP07APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 22 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

名古屋大学大学院工学研究科 教授

長田 孝二, 渡邊 智昭

京都大学大学院工学研究科 教授 准教授

Yi Zhou, Muyang Wang

南京理工大学 教授, ハルビン工程大学 助教 (元名古屋大学)

服部 祐司

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

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, 格子乱流場や自由せん断乱流場, 圧縮性流体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. また減衰乱流におけ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. これにより乱流力学の深化および既存の乱流モデリングの修正および発展を目指す.

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。乱流混合層における研究結果について述べる。

2.1 計算および流れ場の概要

計算領域の大きさは主流方向，鉛直方向，スパン方向にそれぞれ $7L \times L \times 0.8L$ であり，格子点数は $5600 \times 800 \times 640$ とした。上層側初期流速は下層側初期流速の2倍とした。初期断面平均流速と鉛直方向長さに基づくレイノルズ数は12000とした。図1に(a)瞬間流速と(b)瞬間圧力のカラーコンターマップを示す。下流に進むにつれて混合層が発達していること，上流部では特に圧力場で組織的な構造が見られるが，下流に進むにしたがって乱流化し，よりランダムで微細な構造が現れることが確認される。

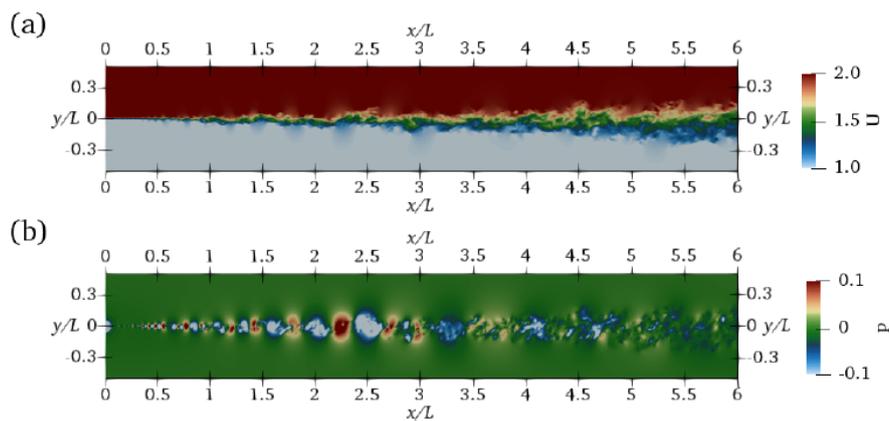


図1. (a)瞬間流速と(b)瞬間圧力のカラーコンターマップ

2.2 渦スケール間の輸送に関する解析

異なる渦スケール間における乱流エネルギーの輸送機構を明らかにするために，いわゆるKMHM式を解析した。主流方向位置が $x/L = 2$ および $x/L = 5$ におけるその結果を示す。なお図中の横軸は二点間の距離 r である。非線形輸送項 Π に着目すると，上流では逆カスケードが起きているのに対して下流ではその傾向が見られない。これは格子乱流場ではみられなかった現象である一方，後流流れである Poltela et al (J. Fluid Mech. 2020) では同様の傾向が見られた。このことから，平均せん断を伴う場合には，流れ場を問わず発達遷移領域においては逆カスケード現象が見られると言えることが明らかになった。

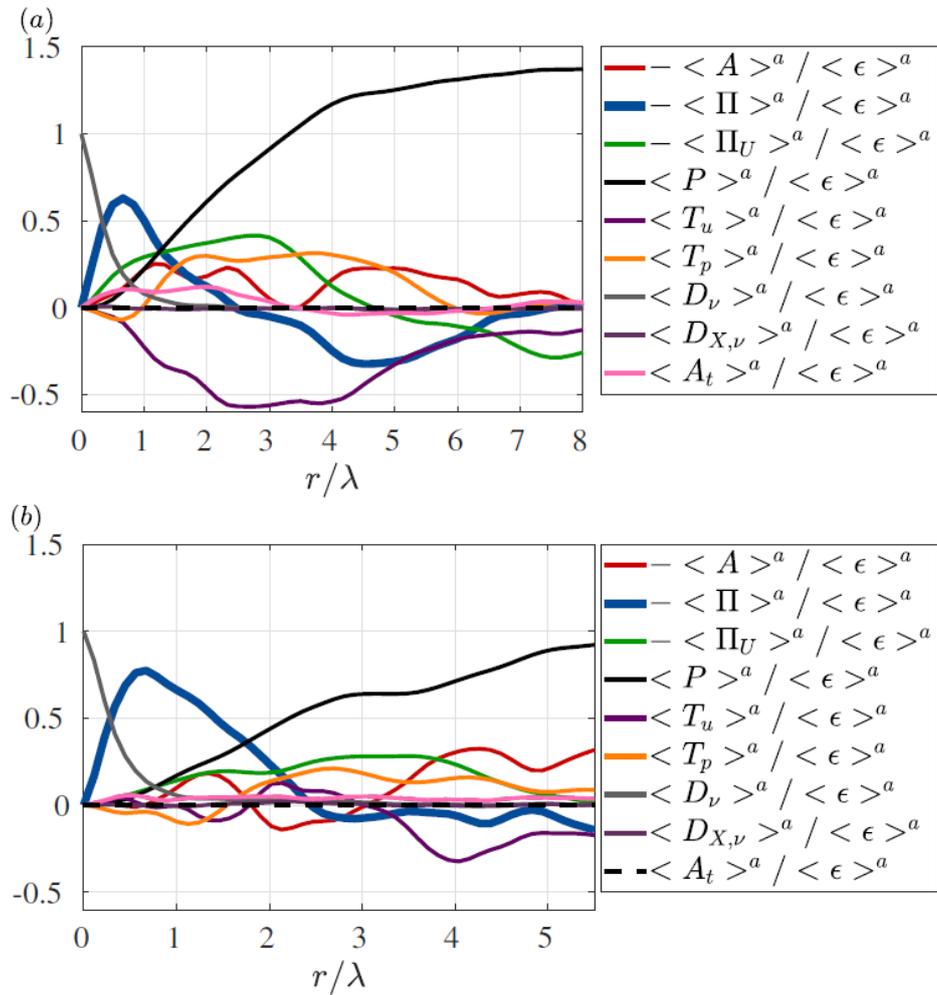


図 2. KMHH 式の各項の寄与. (a) $x/L=2$; (b) $x/L=5$.

3. 研究目標の達成状況

プロジェクトの 3 年目である本年度は、せん断乱流場や後流流れなど速度こう配を伴う流れ場における乱流エネルギーの輸送機構を明らかにするとともに、格子乱流場に代表される平均速度こう配を伴わない場との相違を明らかにした。結果は *Physics of Fluids* や *Phys. Rev. Fluids* といった雑誌に掲載された。このことから研究目標はおおむね達成できたと考えている。

4. まとめと今後の課題

本研究から、非普遍的な統計的性質を有する様々な流れ場の基礎特性の解明を行うことができた。残された課題としては、そのような流れ場における乱流モデルの高精度化があげられる。今後も本課題に取り組むことにより、乱流研究の深化および工学応用に取り組む所存である。

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. Wang, Y. Yurikusa, Y. Sakai, K. Iwano, Y. Ito, Y. Zhou, Y. Hattori, Interscale transport of turbulent energy in grid-generated turbulence with low Reynolds numbers, *Int. J. Heat Fluid Flow* 97 (2022), 109031.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2022.109031>
- [2] Muyang Wang, Takuya Yurikusa, Koji Iwano, Yasuhiko Sakai, Yasumasa Ito, Yi Zhou, Yuji Hattori, Scale-by-scale analysis of interscale scalar transfer in grid turbulence with mean scalar gradient, *Phys. Fluids* 35, 045153 (2023)
<https://doi.org/10.1063/5.0145314>
- [3] Zhou Yi, Nagata Koji, Ito Yasumasa, Sakai Yasuhiko, Hattori Yuji, Appearance of the $-5/3$ scaling law in spatially intermittent flows with strong vortex shedding, *Physics of Fluids* 35, 045116 (2023) <https://doi.org/10.1063/5.0141076>
- [4] Weijun Yin, Shancong Tao, Koji Nagata, Yasumasa Ito, Yasuhiko Sakai, Yi Zhou, Spatial distribution of coherent structures in a self-similar axisymmetric turbulent wake, *Phys. Rev. Fluids* 8, 084603 (2023)
<https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.8.084603>

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.
- [3] M. Wang, Y. Ito, Y. Zhou, K. Nagata, T. Watanabe, K. Iwano, Y. Sakai, Y. Hattori, Transport and dissipation mechanism of turbulent energy and scalar in wakes behind bars and grids, *Proc. of the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information*, (2022), pp. 161-162.
- [4] M. Wang, T. Yurikusa, Y. Sakai, K. Iwano, Y. Ito, Inter-scale transfer of passive scalar in grid turbulence, *Proc. of the 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (2022)*, No.201.
- [5] Y. Zhou, Multi-Scale Characteristics of Wake Growth and the corresponding Interaction Mechanisms, *Conference for the Major Research Program on the Creation, Evolution, and Mechanisms of Turbulent Structures (2022)*
- [6] Muyang Wang, Takumi Okawa, Koji Iwano, Yasuhiko Sakai, Yasumasa Ito, Inter-scale Transfer of Energy in Turbulent Mixing Layer, *The 20th International Conference on Fluid Dynamics (2023)*.
- [7] Wang Muyang, Yurikusa Takuya, Iwano Koji, Sakai Yasuhiko, Ito Yasumasa, Transfer Mechanism of a Passive Scalar in Grid Turbulence with Mean Scalar Gradient,” *Proc. of the Interdisciplinary Turbulence initiative X*, 4 pages, 2023
- [8] Yi Zhou, Yasumasa Ito, Koji Nagata, Tomoaki Watanabe, Koji Iwano, Yasuhiko Sakai,

Yuji Hattori, On the self-similarity behavior of coherent structures in a fully-developed axisymmetric turbulent wake, The 23rd International Symposium on Advanced Fluid Information, CRF-67 (2023)

国内学会・研究会等

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] 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] 汪 沐陽, 百合草 拓哉, 岩野 耕治, 酒井 康彦, 伊藤 靖仁, 平均スカラー勾配を伴う流れ場におけるスカラーカスケード機構, 第 36 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (2022), No.A10-2.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP11APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年7月20日提出

Non-Boussinesq effects on the turbulent natural convection

Atsuki Komiya

Institute of Fluid Science, Tohoku University Professor

Nicholas Williamson, Steven Armfield and Junhao Ke

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

Natural convection boundary layer is ubiquitous in a vast variety of industrial and geophysical applications. Existing studies show that the turbulence development of the natural convection boundary layer is different from the canonical forced flows. The near-wall streaks and the strong Reynolds shear that are commonly seen in the forced flows are not observed in the natural convection flows in the existing literature. Following our earlier investigations, in this study we use the direct numerical simulation to show that the near-wall shear grows with the Rayleigh number as the flow continue to develop, and the streaky structures are recovered at sufficiently large Rayleigh numbers. This indicates that the existing literature for turbulent natural convection boundary layers are just not turbulent enough in the sense of von Karman.

1.2 研究期間内の最終目標

The present study aims to determine the existence of the so-called ‘ultimate’ regime for turbulent natural convection flow, and, if it exists, to understand how the turbulent flow transitions to the ultimate turbulent regime as well as the turbulent structures in the ultimate regime. This information is crucial to accurately predict the heat transfer characteristics in large scale industrial and geophysical applications. We aim to examine the turbulence development in both air and water.

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

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 Rayleigh number 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

Our studies reveal that turbulence is sustained differently in the natural convection flow due to its unique structure and development. At relatively low Rayleigh number, the near-wall turbulence is mainly sustained by the turbulence generated in the outer free-shear layer (plume-like region). In this regime, the near-wall shear and turbulence are weak, and the flow is found to be driven by the outer free-shear plume. Most existing literature belongs to this weakly turbulent regime. At sufficiently high Rayleigh number, the near-wall turbulence is sustained by the near-wall shear, rather than the outer plume. In this regime, the flow has a scaling similar to the GL theory in which the heat transfer increases slowly towards its asymptotic value.

3. 研究目標の達成状況

Using the massive scale fully resolved DNS for air flow, we have established a buoyancy-modified model for the mean velocity profile, a turbulence structure model for high Rayleigh number convection in the ultimate turbulent regime, and the world's first direct evidence of the ultimate regime. These achievements are reflected by a series of 3 joint publications in the Journal of Fluid Mechanics (JFM), and one of these papers is selected to be featured in JFM Focus on Fluids for being 1 of the 12 most significant JFM articles in 2023. This project also resulted in two Int'l conference presentations in 2023 – one of which was an invited keynote.

4. まとめと今後の課題

Our studies show mechanistic evidence of the existence of a second turbulent regime using a temporally developing framework with Oberbeck—Boussinesq (OB) conditions for natural convection in air. In future study, we will continue to explore the turbulence development in water flows ($Pr=4\sim 7$) and the transition mechanism towards the ultimate turbulence regime. Additionally, many modern applications of natural convection flows operate in a regime at a large temperature difference where the fluid properties vary significantly and the classical assumption of Oberbeck—Boussinesq is not valid. Although the flow behavior is similar, the transition to ultimate regime is generally thought to be affected by multiple factors: e.g., spatial gradients in spatially developing flows, the background stratification, and non-Boussinesq effects. Our ongoing work aims to examine if the conclusions drawn from the temporal framework with OB condition can be applied to the spatially developing flow with NOB conditions. We believe the OB effects, as well as the spatial gradient effect, can be further analyzed to offer valuable insights into flow control strategies in real-world applications with continuing HPC support.

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, A. Komiya and S. E. Norris, The turbulence development of a vertical natural convection boundary layer, *Journal of Fluid Mechanics*, 964, A24.

著書

N/A

国際学会

1. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield and A. Komiya, APS DFD, Washington DC, USA, Nov. 2023.

国内学会・研究会等

N/A

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

(受賞) Featured in Focus on Fluids, A. Wells, From classical to ultimate heat fluxes for convection at a vertical wall, *Journal of Fluid Mechanics*, 970, F1. 08 Sept 2023.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP12APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.4～2024.4
報告回数	第 1 回報告

2024年7月21日提出

表面修飾ナノ粒子／分散媒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

久保正樹，庄司衛太，斎藤高雅

東北大学大学院工学研究科 教授，准教授，大学院生

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

ナノ粒子を溶媒中に分散したナノフルイド，あるいは高分子中に内包したナノコンポジット材料は，バルク体とは異なる性質を発現できることから，様々な分野への応用が期待される機能性材料である．いずれの材料も，工業的に利用するには，溶媒や高分子中でのナノ粒子の凝集制御・抑制ならびに構造制御が不可欠であり，その一手法として表面を有機分子で修飾したナノ粒子が注目されている．表面修飾ナノ粒子を含むナノフルイドあるいはナノコンポジット材料の応用においては，基板への塗布工程を伴う場合が多いため，ナノ粒子の分散安定性だけでなく，基板上での動的濡れ性の制御も重要である．

本研究では，表面修飾ナノ粒子を用いた各種材料の製造プロセスの設計・最適化に資するため，表面修飾ナノ粒子と分散媒とのナノスケール界面現象を実験と数値シミュレーションの両面から解明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，塗布乾燥ならびに熔融混練によるナノコンポジット材料製造プロセスへの展開を志向しており，ナノ粒子・高分子・溶媒からなる系において，異相界面における現象を解明することを目標としている．シミュレーションにおいては，分子動力学（MD）シミュレーションを用いて，表面修飾ナノ粒子と高分子との親和性と界面構造との関係を明らかにする．実験においては，位相シフトエリプソメータを用いて，基板上における表面修飾ナノ粒子含有ナノフルイドの塗布乾燥に伴うナノ粒子配列膜の形成機構を明らかにする．

2. 研究成果の内容

研究代表者の小宮は研究分担者の庄司らとともに、液滴のミクロスコピックな動的現象の評価を高精度な光学測定手法により進めてきた。研究分担者の久保らは、表面を有機分子で修飾したナノ粒子を対象として、分子動力学 (MD) シミュレーションを用いた媒体との親和性の評価、離散要素法 (DEM) シミュレーションを用いた表面修飾ナノ粒子の分散・凝集挙動の評価を行い、親和性/プロセス条件/材料構造の相関の解明に取り組んできた。そこで、本共同研究では、ナノ材料製造プロセスの基盤技術の構築を目指して、両者の知見を融合し、ナノ粒子/分散媒のナノスケールでの界面現象を数値シミュレーションと実験の両方を駆使して各種検討を進めている。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 表面修飾無機固体/高分子間の親和性および界面熱抵抗の評価

表面修飾ナノ粒子と高分子から構成される材料を対象に、ナノ粒子表面の一部を模擬した界面モデルを構築して全原子 MD シミュレーションを行った。無機固体は表面を水酸化した α - Al_2O_3 (0001), 修飾鎖はデカン酸, 高分子は重合度 20 のポリプロピレン (PP) とした。修飾鎖の最大修飾密度 4.9 分子/ nm^2 を 100% と定義し、修飾率を種々変更した。温度は熔融混練によるナノコンジット材料製造プロセスを想定して 450 K に制御した。親和性の指標として、媒体中に浸っている固体を媒体から取り出すのに必要なエネルギーである浸漬仕事を評価した。浸漬仕事は、熱力学的積分法の一つである phantom-wall 法により算出した表面修飾固体/高分子間の付着仕事と高分子の表面張力との差から求めた。さらに、界面垂直方向に定常熱流束を課した非平衡 MD シミュレーションを行い、異相界面における温度ジャンプを系内の熱流束で除することで表面修飾固体/高分子間の界面熱抵抗を求めた。全ての計算には LAMMPS を用いた。

種々の修飾率において表面修飾固体/高分子界面近傍の構造を可視化評価した。修飾率が低い場合では修飾鎖の構造は不規則であったが、高い場合では修飾鎖は界面垂直方向に配向した。また、修飾率が低いほど修飾鎖層への高分子の浸透が高かった。次に、種々の修飾率において表面修飾固体/高分子間の浸漬仕事を評価した。表面修飾した固体の場合の浸漬仕事は未修飾の場合に比べて大きくなった。また、浸漬仕事は修飾率 25% で最大であった。これは、修飾鎖層に対する高分子の浸透が大きく、表面修飾固体/高分子間の相互作用が最も強くなったためと考える。

界面垂直方向の温度分布および密度分布から、異相界面における温度ジャンプを評価した。修飾率 100% における温度ジャンプは修飾率 0% に比べて小さかった。界面熱抵抗の逆数である界面熱コンダクタンスを見積もると、修飾率 0% で 55 $\text{MW}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$, 修飾率 100% で 154 $\text{MW}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$ であった。よって、表面修飾による界面熱抵抗の低減を定量的に示すことができた。そして、界面構造および浸漬仕事と界面熱抵抗との相関を評価することができた。

2.2 表面修飾ナノ粒子含有ナノフルイド液滴のパターン形成

基板上ナノフルイドの動的挙動の解明を目的として、その動的濡れとナノ粒子配列膜のパターン形成に関する実験を行った。ナノフルイド試料の分散媒には各種 n -アルカンを用い、デカン酸修飾 CeO_2 ナノ粒子 (平均粒径 6 nm) を 0.5 wt% となるように分散させた。調製したナノフルイドは、インクジェット装置を用いて Si 基板上に滴下し、位相シフトエリプソメー

タによる液滴および溶媒蒸発後のナノ粒子層の形状測定を実施した。インクジェット装置で吐出された液滴は1滴あたりおよそ 300 pL であり、滴下数を 100 滴とし、観察を行った。

種々の有機溶媒を用いた場合の溶媒蒸発後ナノ粒子層の膜厚分布を評価した。*n*-ヘキサンを用いた液滴ではスポークパターンを、*n*-ヘプタン、*n*-オクタン、*n*-ノナンではコーヒーリングを示し、*n*-ヘプタンが最も粒子層の縁における堆積が大きかった。一方、*n*-デカンでは、コーヒーリングが多数形成されるマルチリングを示した。

これらのパターンは Bénard-Marangoni 対流、毛管流れ、接触線の Stick-slip 運動から誘起されると考え、無次元数 Marangoni 数 Ma 、Peclet 数 Pe 、緩和時間 τ_{re} と蒸発時間 τ_{ev} の比を算出した。これらの無次元数をもとに、パターンの分類を行うことができた。

3. 研究目標の達成状況

表面修飾ナノ粒子／媒体界面の親和性評価においては、従来の溶媒系から高分子系への拡張に成功し、ナノスケールの界面構造と親和性との相関を解明することができた。更に、界面構造と界面熱抵抗との相関を解明するに至った。また、ナノフルイド液滴の乾燥に伴い形成したナノ粒子配列膜のパターン評価により、ナノフルイドの濡れ現象に関する知見を獲得することができた。よって、当初の目的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、表面修飾ナノ粒子と分散媒との異相界面におけるナノスケールの現象を解明することができ、有機修飾ナノ粒子を用いたナノ材料の設計指針、材料製造プロセス最適化の方法論に関する有用な知見を獲得することができた。

今後は、ナノスケール界面現象とマクロスケールの材料製造プロセスを橋渡しするために、分子スケール、粒子スケール、プロセススケールの知見を有機的に結び付ける階層的相関の獲得が望まれる。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌（解説等を含む）

1. Takamasa Saito, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Momoji Kubo: Molecular dynamics simulations for interfacial structure and affinity between carboxylic acid-modified Al_2O_3 and polymer melts, *The Journal of Chemical Physics*, 159 (2023), 164708.

国際学会

2. Takamasa Saito, Ryo Takebayashi, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys: Relationship between Nanoscale Structure and Affinity for Organic-Modified Inorganic Solid/Organic Solvent Interface, 2023 AIChE Annual Meeting, Orlando, (2023).
3. Masaki Kubo, Toru Konishi, Takamasa Saito, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Atsuki Komiya: Evaluation of the Interfacial Affinity between Organic Solvents and Surface-modified Nanoparticles, The 20th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), Sendai, (2023).

- Akira Hoshino, Eita Shoji, Tetsushi Biwa, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri: Time-resolved Multi-scale Droplet Shape Measurement of Superspreading Wetting of Nanofluid, The 20th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), Sendai, (2023).

国内学会・研究会等

- 庄司衛太, 星野瑛, 齋藤大河, 琵琶哲志, 久保正樹, 塚田隆夫, 筈居高明, 阿尻雅文: 接触線近傍ナノ液膜の観測に基づくナノフルイド液滴の超拡張濡れのメカニズム検討, 第60回日本伝熱シンポジウム, 福岡, (2023).
- 庄司衛太: 動的濡れにおけるナノ液膜の計測と理解: ナノフルイドの超拡張からパターン形成まで, 相変化界面研究会, オンライン, (2023).
- 齋藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, SURBLYS Donatas: 表面修飾無機固体/高分子間の親和性および界面熱抵抗に関する分子動力学解析, 日本セラミックス協会第36回秋季シンポジウム, 京都, (2023).
- 久保正樹, 小西徹, 齋藤高雅: 有機修飾無機ナノ粒子と有機溶媒との界面親和性の評価, 化学工学会第54回秋季大会, 福岡, (2023).
- 久保正樹: 表面修飾ナノ材料の分子・粒子スケール可視化シミュレーション, 第60回粉体に関する討論会, 東京, (2023).
- 庄司衛太: メゾスケール光計測に基づくソフトマテリアルの動的濡れの研究, 日本伝熱学会北陸信越支部秋季セミナー, 新潟, (2023).
- 庄司衛太: ナノフルイド液滴のパターン形成と超拡張濡れ —メゾスケール光計測によるアプローチ—, 化学工学会熱工学部会セミナー, 兵庫, (2023).
- 庄司衛太, 齋藤大河, 琵琶哲志, 久保正樹, 塚田隆夫, 筈居高明, 阿尻雅文: 無次元数を用いた基板上インクジェットナノフルイド液滴のパターン形成の整理, 化学工学会第89年会, 大阪, (2024).
- 齋藤高雅, 庄司衛太, 久保正樹, 辰巳怜, 小池修, 塚田隆夫: マルチスケールシミュレーションによる高分子ナノコンポジット材料の有効熱伝導率解析, 化学工学会第89年会, 大阪, (2024).

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

特許

- 令和6年3月3日, 特許出願 2024-31763, 庄司衛太・久保正樹・塚田隆夫・阿尻雅文: 多層体及びその製造方法.

受賞

- MFD 大賞, 表面修飾無機固体/高分子間の親和性および界面熱抵抗に関する分子動力学解析, 齋藤高雅, 2023.9.7, 日本セラミックス協会マテリアル・ファブリケーション&プロダクション・デザイン研究会.
- コニカミノルタ画像科学奨励賞, 動的濡れにおけるソフトマテリアル特有の駆動力特定に向けた溶質の局在構造イメージング手法の開発, 庄司衛太, 2024.3.5, コニカミノルタ科学技術振興財団

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP15APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年 7月 10日提出

乱流渦の非対称性構造と周期特性に関する解析

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、気象や海洋等の自然現象だけでなく、風力・火力・原子力等の発電分野、航空、流体機械等の様々な工学分野に関わる。渦という特有の流れの幾何は、流れの混合等の特性に重要な影響を与えると共に、圧力極小や渦流自身の自己安定性の特性を有している。これらの性質は、渦の旋回平面における半径方向速度、周方向速度によって定められる。従って、渦流の分布・構造や条件を解明することは、渦力学だけでなく様々な分野に存在する渦の性質、影響分析や技術評価において重要である。多くの渦は非軸対称であると考えられるが、これまでの渦の代表的な速度構造のモデル、即ち渦モデルの殆どが軸対称渦であり、非軸対称的な渦のモデルは、ある仮定の下で幾つか提案されているのが現状である。

この渦の速度構造特性において、ローカルトポロジーの観点では、速度勾配テンソルの固有値・固有ベクトルがこれまで長年渦の定義や渦領域の同定に大きく貢献してきた。一方で、このローカルトポロジーの詳細な数理考察により、これらの固有値による吸込み渦・湧出し渦等の分類は不明瞭であることが示され、渦流対称性等の詳細な幾何学的特性を定める物理量が提案された。これらによると、ローカルトポロジーにおける半径方向速度、周方向速度成分は対象点からの距離で除した二次形式によって表され、また、渦中心周りの円周上におけるそれぞれの速度成分は波数 2 の周期性を有し、各成分の極大・極小点の角度は直交すること等が数学的に示されている。

そこで、本研究では、ローカルトポロジーにおける半径方向速度、周方向速度の特性を分析し、これらの速度分布が有するべき条件をまとめ、実際の渦の速度構造として一様等方性乱流の DNS(Direct Numerical Simulation)における乱流渦を分析する。更に、渦中心周りのこれらの分布に対してフーリエ解析を行うことにより、有限渦の速度構造におけるローカルトポロジーの性質の適合性を考察する。

1.2 研究期間内の最終目標

一様等方性乱流の DNS において、有限規模の乱流渦の速度構造、即ち半径方向速度、周方向速度の分布特性を解析し、これらの渦中心周りの円周上の周期特性とその配置を明らかにすることを目標とする。

2. 研究成果の内容

本研究では、これまでの共同研究における成果等から得られたベクトル勾配テンソルにおけるローカルトポロジーの詳細な理論化に基づいて進め、従来の研究でよく用いられてきた本勾配テンソル（速度勾配テンソル）の固有値・固有ベクトルではなく、半径方向・周方向速度成分に分解して得られる二次形式により各々の成分の詳細な分布特性をまとめ、実際の DNS における乱流渦の速度構造を解析して比較を行った。この結果、ローカルトポロジーの数学的に導かれる幾何学的特性が実際の乱流渦の速度特性を表し、また、本トポロジーの理論が示す波数 2 の周期性を有していることを速度分布のフーリエ解析より明らかとなった。これよりローカルトポロジーの理論の有効性が示されると共に、本研究の結果を基にして現実的な非軸対称の渦モデルの構築が期待できる成果を得た。

2.1 渦流速度分布の波動特性の解析

ローカルトポロジーにおける渦流の旋回強さを示す *swirlity* により乱流の速度場における渦領域を同定、また *swirlity* の一階導関数並びにヘシアンを用いて極大点を同定し、これを渦中心と定める。次に渦中心における渦空間を定義、即ち旋回平面と楕円軌道の渦の短軸・長軸を座標軸とするガリレイ不変の座標系を定め、渦中心からの幾つかの半径上で渦流の半径方向・周方向速度を計算し速度分布を求める。更に各半径上のこれらの速度成分のフーリエ変換を行い、これらの速度のスペクトル分解を行う。

2.2 半径・周方向速度の周期特性

ローカルトポロジーの理論によると、半径方向・周方向速度の二次形式の軸（固有ベクトル）が互いの軸の中間にあり、これは旋回や半径方向速度の強さに依らない。また、渦流対称性や渦の強さ(*swirlity*)に応じて半径方向速度の非軸対称性が強くなり、渦中心周りに吸込み・湧出し流れの双方を有し、その差が大きくなることが理論より示される。実際の乱流渦の速度構造として一様等方性乱流の DNS における渦を対象と、この渦構造を分析した結果、渦空間が定める旋回平面において、半径方向・周方向速度がそれぞれのローカルトポロジーに従った二次形式的な分布特性とそれらのレイアウト（二次曲線の軸）に従って渦中心から発達することを確認した。更に、渦中心から広がる各半径における半径方向・周方向速度の分布をフーリエ解析にて分析した結果、全周上で波数 0 と 2 の周期特性成分が支配的な成分であることが示された。ここで、波数 0 の成分は、全周上の角速度の平均を示し、波数 2 の成分は二次形式の固有値・固有ベクトルに従う周期成分である。

3. 研究目標の達成状況

一様等方性乱流の DNS において、有限規模の乱流渦の半径方向速度、周方向速度の各々のローカルトポロジーが示す非対称性を有し、本トポロジーが定める二次形式とその配置に従って

速度が渦中心の円周上に発達し、これらの分布が波数 2 の周期性を有しつつ円周上に発達することが確認された。これらの成果により、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 **Direct Numerical Simulation** において、渦流の半径方向速度、周方向速度分布の解析を行い、これらのローカルトポロジーの理論が示唆する二次形式が各々の速度の主要な特性を定め、波数 2 の周期特性を有することが確認できた。ローカルトポロジーの数学的な特性が実際の乱流渦の速度特性を表していることから、これらの特性を基にした有限規模の速度構造の渦モデルを検討することにより、非軸対称の現実的な渦の基盤的速度モデルの構築が期待できる。

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) Katsuyuki Nakayama, Kaito Uchima, and Yuji Hattori: An Analysis of Self-organization of Three Dimensional Vortical Structure Derived From Interaction between Vortical Flow and Bundle of Vorticity Lines, Proceedings of the Twenty-third International Symposium on Advanced Fluid Information, (2023), CRF-45, pp. 128-129.

(2) Katsuyuki Nakayama: Vortical Flow Derived from Local Flow Geometry and its Relationships to Flow Structure of Finite-scale Vortex in Homogeneous Isotropic Turbulence, Proceedings of Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023), pp. 1023-1024.

(3) Kaito Uchima and Katsuyuki Nakayama, “Bending of Bundle of Vorticity Lines in a Vortex and its Relationships to Vortical Flow Characteristics in Homogeneous Isotropic Turbulence”, Proceedings of Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023), pp. 1248-1249.

(4) Katsuyuki Nakayama, “Vortical Flow Characteristics Derived from Local Flow Geometry and Relationships to Bundle of Vorticity Lines in Organization of Vortical Structure”, Bulletin of the 76th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, (2023), L39.00005.

国内学会・研究会等

(1) 内間海斗, 中山 雄行: 一様等方性乱流における渦領域中の渦線バンドル束の曲り特性に関する解析, 日本流体力学会年会 2023, (2023), E3-01.

(2) 内間海斗, 中山 雄行: 一様等方性乱流における渦領域中を通る渦線バンドル束の進行特性, 第 21 回日本流体力学会中部支部講演会, (2023), 3A-5.

(3) 中山 雄行: ローカルトポロジーに基づく渦の速度構造と渦線バンドル束との相互作用, 第 37 回数値流体力学シンポジウム, (2023), 3010-13-04.

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	CP16APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年7月23日提出

ステントデザイン最適化のためのチャンバー内流れ解析

安西 眸

東北大学流体科学研究所 助教

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。

細胞実験ではチャンバーシステムに定常流を与え、ディッシュ平面上での細胞挙動を検討してきた。しかしながら近年の疾患治療においては、血管内に医療機器を留置する低侵襲医療の割合が増加していることから、複雑形状の医療機器周辺における細胞挙動を調べるのが重要である。

これまでに我々研究グループでは、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、実験を行ってきた。チャンバーの改良により、より複雑な形状を模したステントワイヤーをチャンバー内に留置することが可能となった。しかしながら実際の生体内では血流は心拍によって駆動され、血管内壁には非定常的な負荷がかかっている。したがって本年度は、振動的な流れ付加の状態を表す指標である振動せん断指数(oscillatory shear index, OSI)を変化させるフローチャンバーシステムの開発を行う。数値流体力学解析(CFD)によりフローチャンバー内部の流動状態を調べ、細胞実験により流れ場が細胞に与える影響を評価する。

1.2 研究期間内の最終目標

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。

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することで、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。本共同研究を基にして、国内のみならずハンガリーとの共同研究が始まったことから、学際的な国際共同研究として非常に発展性が高いと考えられる。

2.2 OSI を制御可能なフローチャンバーシステムの構築

これまで用いてきた平面型フローチャンバーシステムを改良し、シリコンガasketの組み合わせにより底面にキャビティフローを発生させた。キャビティフローの底面を関心領域 (Region of Interest, ROI) とし、関心領域におけるヒト頸動脈内皮細胞(HCtAEC)の配向を評価した。ROI 幅、流量を変化させることで任意の OSI を発生させることが可能となった。24 時間 OSI 曝露後の ROI 底面内皮細胞は、低 OSI (0-0.11)では剥離が少なく伸長が見られたが、高 OSI (0-0.45)では流れによる剥離が見られ、伸長は見られなかった。

3. 研究目標の達成状況

フローチャンバーの改良を行い、細胞に対して非定常流れ場を付加することが可能となった。開発したフローチャンバーを用い細胞実験により、振動流れが細胞挙動に影響を与えることを検証した。本チャンバーにより任意の範囲で OSI を変化可能であることから、より定量的に OSI に対する細胞応答の評価が可能となった。本年度は査読なし論文として雑誌掲載され（別刷）、さらに 2 件の国際会議発表および 1 件の招待講演につながった。1 件の国際会議発表は受賞につながったことから、国際的にも評価の高い研究であるといえる。

4. まとめと今後の課題

本年の実験で得られた傾向はこれまでの他の細胞実験や臨床研究、動物実験による傾向と一致していた。これまでの先行研究は定性的であったが、本研究で開発したフローチャンバーではさらに、任意の範囲で OSI を変化可能であることから、より定量的に OSI に対する細胞応答の評価が可能となる。今後は細胞形態のみならず、炎症性のたんぱく質発現など、生物学的評価を組み合わせて、ステント留置による流動状態変化が細胞に与える影響を評価する必要がある。

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）

Zi Wang, Narendra Kurnia Putra, Hitomi Anzai and Makoto Ohta: Endothelial Cell Distribution After Flow Exposure With Two Stent Struts Placed in Different Angles, *Frontiers in Physiology*, 12:733547 (2022), DOI: 10.3389/fphys.2021.733547

Makoto Ohta, Naoya Sakamoto, Kenichi Funamoto, Zi Wang, Yukiko Kojima, and Hitomi

Anzai: A Review of Functional Analysis of Endothelial Cells in Flow Chambers, Journal of Functional Biomaterials, 13(3):92 (2022), DOI: 10.3390/jfb13030092

王子, Hanif Saifurrahman, 小島有紀子, 安西眸, 大津真史, 太田信, ステント表面およびステント形状が流れ存在下の内皮細胞挙動に与える影響, バイオマテリアル-生体材料(査読なし), 41(3):196-201 (2023)

国際学会

M. Ohta, Z. Wang, Y. Kojima, N. K. Putra, N. Ohtsu, H. Saifurrahman, H. Anzai: Flow chamber for evaluation of Endothelial cell adhesion on stent struts, Chemistry Physics and Biology of Colloids and Interfaces, 2022/6/6-10, Hungary

Yukiko Kojima: The effect of stent angle on flow and endothelialization process, Mini workshop between IFS and Lyon, 2022/6/9, France

Yukiko Kojima, Zi Wang, Narendra Kurnia Putra, Naofumi Ohtsu, Hitomi Anzai, Makoto Ohta: The Effect of Stent Angle on Flow and Endothelialization Process in a Parallel Chamber, 9th World Congress of Biomechanics, 2022/7/10-14, Online

Narendra Kurnia Putra, Mikha Hilliard, Muhammad Rafi Sudrajat, Bonfilio Nainggolan, Makoto Ohta, Hitomi Anzai: Development of Open-Source Deployment Method for Simulation and Optimization of Balloon Angioplasty and Stent Geometry Design based on Numerical Simulation, 19th International Conference on Flow Dynamics, 2022/11/9-11, Japan

Hanif Saifurrahman, Zi Wang, Yukiko Kojima, Makoto Ohta, Hitomi Anzai: Observation of Endothelial Cell Response to Various Stenting Deployment in an In-Vitro Flow System, ELYT Workshop 2022, 2022/11/16-18, France

H. Saifurrahman, Z. Wang, H. Anzai, M. Ohta: The Effect of Oscillatory Shear Index (OSI) on Endothelial Cell Behavior Observed in a Flow Chamber, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023/11/06-08, Sendai

N. K. Putra, F. Z. Sarwono, I. Anshori, M. Ohta, H. Anzai: Numerical Simulation of Droplet Generation on the Sub-Microfluidic Channel, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, The 23rd International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2023), 2023/11/06-08, Sendai

国内学会・研究会等

Hanif SAIFURRAHMAN, Zi WANG, 小島有紀子, 安西眸, 太田信: Observation of

Endothelial Cell Migration and Morphology under different values of Oscillatory Shear Stress (OSI) in a flow chamber, 日本機械学会 第 33 回バイオフィロントニア講演会, 2022/12/17-18, 神戸

小島有紀子, 王子, Narendra Kurnia Putra, 大津直史, 安西眸, 太田信: ステント角度が細胞挙動に及ぼす影響, 2022 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, 2022/10/26, 仙台

安西眸, Zi Wang, Hanif Saifurrahman, 太田信: フローチャンバーシステムを用いた血管内皮細胞の流れ負荷応答の解明, 2023 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交流会, 2023/12/22, 仙台

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

Hanif Saifurrahman, Best Presentation Award for Young Researcher, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023/11/06-08, Sendai

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP17APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年7月23日提出

脳血管画像に基づく流れ場推定手法の開発

安西 眸

東北大学流体科学研究所 助教

杉山 慎一郎

仙台広南病院 部長

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

脳動脈瘤の有病率は約5%と高く，その病態には血流が大きく関与する．しかし，既存のCFD手法では前処理を含む計算過程に多大な時間を要し実臨床への応用は難しい．血管疾患に関する疫学的なエビデンスを得るためには数万例の症例を解析する必要がある．そのためにはCFDの手間暇と計算時間というボトルネックを解決する必要がある．そこで本研究では，血管形状を表す医療用画像とCFD解析結果のペアを学習した深層学習ネットワークを構築し，世界初となる深層学習による脳血流推定ネットワークの開発を目指す．提案するネットワークが開発されれば，これまで数時間～数日かけて作業者が行ってきたCFD解析が数秒で完了するようになり，上記ボトルネックを大幅に改善することになる．

一般的にDLはデータ集約的なアプローチであり，より高い予測精度とロバスト性を達成するためには大規模なデータセットを構築する必要があるという問題がある．しかし，医療画像からのCFDは，巨大動脈瘤のような複雑な形状において安定した収束が困難であることが多い．したがって，より安定的かつ高速に，学習用データセットを構築するためのCFDのためのパイプラインが必須である．

1.2 研究期間内の最終目標

上記の課題を解決するため，本研究では深層学習技術とCFDを連携させた学習データ構築のためのフレームワークを提案する．本年度は，予測された流れ場をCFDの初期条件として使用することの可能性を検討するため，スタンドアロンCFDとDLインプリントCFDの収束性能を，総反復回数と3次元流れ場の観点から比較する．

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

本研究では患者形状血管を用い、深層学習ネットワークを構築する。したがって、実際に臨床現場で取得された患者医療断層画像を用い、血管内腔形状を3次元に再構築する。医師との連携は不可欠な医工学研究である。

2.2 深層学習と CFD を連携した学習データ構築フレームワーク

先行研究で学習した深層学習ネットワークを用い、患者大動脈・冠動脈・頸動脈の流れ場の推定を行った。学習に用いていない全く新しいデータセットとして、公開医療画像データベースである Cancer Imaging Archive より5名の胸部 CT 画像を取得し、大動脈の平均形状を構築した。ネットワークにより推定された速度場・圧力場を CFD の初期条件として使用した際の繰り返し計算の収束、最終的に出力される流れ場を既存手法の CFD と比較した。

深層学習による流れ場推定を組み合わせた CFD では、既存の CFD と比較して計算開始時の残差が小さい傾向が見られ、また収束に至るまでの繰り返し計算回数も減少した。既存 CFD を Grand Truth としたときの平均二乗誤差 (MSE) を算出したところ、深層学習推定のみでは 0.166 であったものが、深層学習と CFD の組み合わせでは 8.76×10^{-8} まで低下した。

3. 研究目標の達成状況

深層学習と CFD を組み合わせることで、これまでのボトルネックである学習データセット作成を高速化できる可能性が示された。本研究結果は国際学会ならびに国内学会において発表され、さらに国内学会では研究奨励賞の受賞につながった。さらに深層学習による即時流れ場推定手法に関する特許の取得につながった。

4. まとめと今後の課題

これまでは離散化された支配方程式の逐次解析であった CFD を形状-内部流れ場のパターンマッチングとして代理するモデルにより、超高速で流れ場情報を出力する技術を開発した。本研究ではさらに代理モデル構築のための学習データ構築をするためのフレームワークを構築し、代理モデルによる流体解析を加速することが可能となった。今後は本技術を用い、東北メディカルメガバンクに保存されている 12,000 人の脳 MRI 画像について解析を進め、ワイドゲノム解析、形状解析と流れ場の比較を行う。

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)

該当なし

著書

該当なし

国際学会

H. Anzai, K. Shibata, G. Li, H. Wang, K. Yanagisawa, S. Sugiyama: Development of a Flow Field Estimation Method based on Cerebrovascular Images: Stabilization and Speedup of CFD Data Acquisition for Training Datasets, Twentieth International Conference on Flow

Dynamics, The 23rd International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2023), 2023/11/06-08, Sendai

Hitomi Anzai: Synthetic database of arterial network and its variability, 19th Interdisciplinary Cerebrovasucular Symposium, 2023/08/17-19, Switzerland

Keito Yanagisawa: Development of a pipeline for blood flow high-speed analysis using deep learning techniques, Tohoku University – Ecole Centrale Lyon – INSA Lyon , 2023/12/13-14, France

国内学会・研究会等

令和 4 年度卒業研究 ディープラーニングを用いた数値流体力学解析の初期条件設定に関する研究 (Study on Initial Condition Setting Using Deep Learning for Computational Fluid Dynamics), 柴田和樹

柴田和樹, 白石敬一郎, 太田信, 安西眸: 数値流体力学とディープラーニングの連成による血行動態解析の高速化手法の開発, 第 62 回日本生体医工学会大会 2023, 2023/05/18-20, 名古屋

安西眸, 神容慶, 白石敬一郎, 柴田和樹, 太田信: 3 次元血流場推定ネットワーク構築のためのバーチャルポピュレーション構築の試み, 東北大学・統計数理研究所合同ワークショッププログラム, 2023/05/10, 仙台

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

安西 眸, 渡邊 和浩, ガオヤン リー, 太田 信, 富永 悌二, 新妻 邦泰, 杉山 慎一郎: 血流場推定装置、学習装置、血流場推定方法及びプログラム, 特許第 7462925 号 (特願 2020-033293), 出願日 2020/2/28, 登録日 2024/3/29

柴田 和樹, 白石 敬一郎, 太田 信, 安西 眸: 日本生体医工学会 研究奨励賞・阿部賞 2023 年度「数値流体力学とディープラーニングの連成による血行動態解析の高速化手法の開発」

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP22APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

動的架橋反応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

岸本 直樹

東北大学理学研究科化学専攻 准教授

Zhao Yinbo

Tongji University, China 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・高生産性を有する産業用高分子材料を設計するためには、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みても 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の開発が急務である。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。このように、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、架橋高分子材料の架橋反応と材料内部の相分離挙動とは空間的・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、分子動力学計算や粗視化粒子スケールのシミュレーション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、架橋高分子および高分子ブレンド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。エポキシを構成するモノマー分子の構造を変化させ、熱機械特性との関連を明らかにする。

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、DPD における粗視化スケールおよび DPD 粒子間の相互作用パラメータの影響を評価する。

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)

MD シミュレーションによって、架橋高分子材料を構成するモノマー分子の長さを変化させ、熱伝導率および機械特性を解析した。その結果、モノマーの分子長さが熱伝導率に大きな影響がない一方で、機械特性についてはモノマーが長くなるにつれ剛性が大きく低下した。材料内部のリング構造を解析することによって、この要因を明確にした。

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。DPD 粒子の粗視化レベル、すなわちどの程度の原子群を DPD 粒子として粗視化するかを変えることで、硬化反応にどのような影響があるかを解析した。その結果、反応に与える官能基の粗視化が硬化曲線に大きく影響することを明らかにした。

3. 研究目標の達成状況

架橋高分子材料 (エポキシ樹脂) を構成するモノマー分子の構造を変化させ、熱伝導率および熱機械特性との関連を明らかにできた。また、DPD シミュレーションについては、精度への影響要因を明らかにした。このように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、エポキシ樹脂を構成するモノマー分子の長さを変化させ、熱輸送特性および機械特性への影響を明らかにした。DPD 法における粗視化レベルを解析し、架橋反応過程への影響を評価した。今後、動的に架橋構造を変化させる高分子材料を対象に本手法を適用し、輸送特性を明らかにしたい。

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, Keiichi Shirasu, Yoshiaki Kawagoe, and Tomonaga Okabe, Constructing and characterizing various multi-component crosslinked epoxy resins based on molecular dynamics simulations with a curing reaction model, *Polymer*, Vol. 297, 126817 (2024).

2. Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, Zhengming Huang, and Yan Li, Length effect of short

base resin on thermomechanical properties of crosslinked epoxy resin via molecular dynamics simulation, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 225, 125400 (2024).

国際学会

1. Gota Kikugawa, Integrated Molecular Simulation for Thermophysical Properties of Crosslinked Polymers, 10th US-Japan Joint Seminar on Nanoscale Transport Phenomena, San Diego, USA, (2023).
2. Kaiwen Li, Gota Kikugawa, Investigation of the structural and thermophysical properties of crosslinked polymers using DPD simulations at various levels of coarse-graining, The 33rd International Symposium on Transport Phenomena, Kumamoto, Japan, (2023).

国内学会

1. Li Kaiwen, 菊川 豪太, 架橋高分子材料の DPD シミュレーションにおける粗視化レベルの構造および熱物性への影響, 第 60 回日本伝熱シンポジウム, (2023), H1406.

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	CP24APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.04.01～2024.03.31
報告回数	第 1 回報告

2024年8月23日提出

複雑構造と流れに関する新たな記述子の開発

鈴木 杏奈

東北大学流体科学研究所 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

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、岩石き裂内を流れる流体流動を把握する必要がある。この「構造」と「流れ」との関係を定量化・定式化（記述）できれば、地下流体流動の評価、最適な開発デザインへとつなげることができる。本研究では、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的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

複数のき裂ネットワークパターンを用意し、直接流動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。また、トポロジカルデータ解析でき裂構造を評価する。計測データに基づく地下構造推定手法の妥当性を示す。

2. 研究成果の内容

2.1 熱トレーサー応答を用いた流路表面積の推定

本研究では、平行板形状の閉じた貯留層内での水の流れをモデル化し、流路内の熱伝達プロセスを解析した。熱トレーサー応答（温度低下観測）を用いることで、注入された水と岩石の熱交換に影響を与える岩石の表面積を推定することができた。さらに、表面積に加え、他のモデルパラメータの確率分布を考慮し、不確実性の評価を行った。このため、ランダム化最大尤度（RML）法を用いて、モデルパラメータの不確実性を推定した。

また、熱トレーサーテストの結果と過去の研究で用いられた溶質トレーサー応答の解析を組み合わせることで、各流路における流量、平均滞留時間、及び流路表面積に基づいて開口サイズを推定することができた。これにより、個々の流路構造が詳細に評価され、パーシステ

ント・ホモロジー (PH) 解析を用いて流路の数と最も狭い開口部を抽出することができた。これらの成果は、複数の流路を持つ貯留層システムにおける熱挙動の理解に大きく寄与した。

2.2 パーシステントホモロジーを用いた岩石構造の特徴づけ

本研究では、熱および溶質トレーサーテストデータから流路開口部を推定する方法を数値シミュレーションにより検証した。熱および溶質トレーサー応答を得るため、**OpenFOAM** を用いて数値シミュレーションを実施した。共役熱伝達をシミュレートするため、**GeoChemFoam** を用いて領域のメッシュを作成し、異なるレイノルズ数における水の流れを再現する一連のシミュレーションを行い、出口温度データを収集した。溶質トレーサーテストデータに関しては、**snappyHexMesh** を使用してメッシュを生成し、**SIMPLE** 法を用いて定常流を求めた。最終的に、スカラー輸送方程式ソルバーである **scalarTransportFoam** を用いて、対流拡散方程式に基づく溶質トレーサー応答を得た。これらのシミュレーションにより、熱および溶質トレーサーデータを用いた流路開口部の推定方法が数値的に検証され、精度を確認することができた。

3. 研究目標の達成状況

現時点で、**OpenFOAM** を用いてトレーサー応答を取得することに成功している。トレーサー応答は明確なピークは見られないが、長い側にテールが存在している。次のステップとして、熱伝達シミュレーションを実施する予定である。

4. まとめと今後の課題

本研究は、地下資源開発における岩石き裂内の流体流動を定量化し、複雑な流体流動・物質移動・熱移動を定式化することを目的としている。研究期間中に、複数のき裂ネットワークを用いた流動シミュレーションと、トポロジカルデータ解析によるき裂構造の評価を行った。熱トレーサー応答を用いて流路の表面積を推定し、モデルパラメータの不確実性も考慮した評価を実施した。数値シミュレーションにより、熱および溶質トレーサーデータから流路開口部を推定する方法の精度を確認した。現時点では、トレーサー応答の取得に成功している。次のステップでは、熱および溶質トレーサー応答データを解析し、流路の開口部を推定する予定である。その後、推定された値を PH 解析で得られた流路の開口部と比較する。期待される結果は以下の通りである。

1. 単純な断裂モデルにおいて、数値シミュレーションで熱トレーサーテストを実施することにより、断裂ネットワーク内の流路の表面積を推定するための貴重なデータが得られる。このデータを熱伝達方程式に適合させることで、流路の表面積を最適化でき、その値はモデルで定義された表面積と一致するはずである。次に、溶質トレーサー応答を解析することで、滞留時間と流量を推定し、流路の開口部を正確に推定することが可能となる。
2. 複雑な断裂ネットワークにおいては、熱および溶質トレーサーテストに基づいて推定された流路の開口部は、PH 解析によって得られた開口部と一致することが期待される。

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）

Marco Fuchs, Anna Suzuki, Togo Hasumi, Philipp Blum: Investigating rough single-fracture permeabilities with persistent homology, *Solid Earth*, 15(3), (2024) 353-365.

著書

該当なし

国際学会

Estimation of Fracture Network Structures Using Heat and Solute Tracers: M. Qiao, K. Goto, J. Maes, A. Patsoukis Dimou, J. Miyanaga, A. Suzuki, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023).

Topological Data Analysis for Estimation of Rock Fracture Structure: T. Hasumi, Y. Imoto, J. Miyanaga, T. Uda, A. Suzuki, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023).

Toward Estimation of Aperture of Complex Fracture Network from Tracer Responses: J. Miyanaga, K. Goto, A. Suzuki, A. Patsoukis Dimou, J. M. Minto: Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023).

3D Printed Fracture Networks for Investigation of Fracture Deformation under Stress [A. Patsoukis Dimou, Q. Lei, N. Watanabe, A. Suzuki: Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023).

Accuracy Considerations Concerning 3D Printed Fracture Models: M. Kröhn, A. Suzuki] Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023).

国内学会・研究会等

位相的データ解析を用いた地下の複雑なき裂の構造解析について: 宮永潤, 鈴木杏奈, 後藤啓一郎, Alexandros Patsoukis Dimou, James M. Minto, 第20回(2023年度)日本応用数理学会研究部会連合発表会 (2024).

トポロジカルデータ解析による岩石流路構造の新たな記述子の提案: 蓮見登冨, 後藤啓一郎, Marco Fuchs, Philipp Blum, 鈴木杏奈, JpGU Meeting 2023, (2023).

データ記述科学のエネルギー資源・地球科学分野における応用探索: 鈴木杏奈, 後藤啓一郎, 石塚師也, 辻健, 赤穂昭太郎, 平岡裕章, JpGU Meeting 2023 (2023).

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	CP26APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.4 – 2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年07月23日提出

バイオミメティクスを活用した流体と音波の透過性に大きな差異をつけた多孔質材料による効果的な流動抵抗・空力騒音低減技術の開発

寺島 修

富山県立大学 工学部 機械システム工学科 准教授

永井 大樹, 小西 康郁, 伊神 翼

東北大学 流体科学研究所 教授, 学術研究員, 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

鳥類の羽根の性質を再現して表面性状や内部構造を設計した多孔質材を用いた，熱流体の流動抵抗および流動に起因して発生する振動騒音の低減技術を開発する．これまでも多孔質材を用いた同様の試みは世界各国で行われていたが，バイオミメティクスに基づくものはなかった．このため，例えば流動抵抗は低減できたとしても，振動騒音は増加するケースや，逆に，振動騒音は低下するが，流動抵抗は増加してしまうケースがほとんどで，両者の低減を両立できるものはなかった．これに対し本研究で提案する多孔質材は，内部構造と表面性状の改変により，鳥類・生物の特性と同様に多孔質材の流体の透過性と音波の透過性に大きな差異をもたせ，これにより，流動抵抗と振動騒音の両者を大幅に低減することを目指す．

具体的な目標としては，はく離・再付着流れにより生じる流動抵抗の10%程度の低減，境界層流れにより生じる流動抵抗の5%程度の低減である．

1.2 研究期間内の最終目標

これまでの研究により，上記の数値目標は概ね達成できる見通しが得られているため，本研究では，この技術を実流体機械製品に適用するために必要となる，(a)抵抗低減原理の解明，(b)最適な多孔質材の選定方法・設計方法の確立，を目指す．

2. 研究成果の内容

2.1 共同研究の意義

東北大学流体科学研究所が所有する施設(スーパーコンピュータ・低乱熱伝達風洞・低騒音風洞)を活用して数値解析や実験を行うことで，より早い上記目標の達成を目指す．

2.2 はく離・再付着流れの数値シミュレーション結果に基づく抵抗低減原理の解明

流体解析は汎用熱流体解析ソフト ANSYS FLUENT を用いて行った。流体解析で用いた角柱の寸法は高さ 20 mm, 流れ方向長さ 40 mm, 幅 650 mm である。座標系の原点は角柱の上流側の面の中央位置とした。本研究では, (a)角柱の 4 面全てを厚さ 3 mm の剛体壁と模したものの, (b)長辺を有する面を厚さ 3 mm の多孔質材と模したものの, の 2 種類を想定した。メッシュは六面体形状とし, 最小メッシュサイズは 0.1 mm とした。乱流モデルは LES(Large Eddy Simulation)とし, ポスト処理として FW-H(Ffowcs Williams and Hawkings)モデルを用いて放射される音圧を求めた。タイムステップは 0.0002 s, 計算時間は 1 s とし, 音圧の評価位置は角柱後端中央に設けた原点に対して $(x, y, z) = (20 \text{ mm}, 200 \text{ mm}, 0)$ の位置とした。計算領域は x 方向に 600 mm, y 方向に 200 mm, z 方向に 200 mm とし, 流入部から 200 mm の位置に角柱を配置した。流入部には 20-40 m/s の一様流流入条件を与え, 流出部にはゲージ圧を 0 とする圧力境界条件を与えた。多孔質材は圧力波の透過のみを許すことで模擬した。その透過性能の再現には音響透過損失計測装置(Brüel & Kjær 社, Type 4206)で計測した多孔質材の音響透過損失の値を用いた。これにより, 多孔質材自体の微小変位による振動・発音特性までは再現できていないが, 多孔質材が流れ場に与える影響やそれによる発生音の変化については再現できているものと考えられる。

図 1 に音圧の周波数解析結果を示す。図 1 の横軸は周波数, 縦軸は音圧を表しており, 縦軸は dB 表記とした。図 1 より, 多孔質材を用いない剛体壁の場合, 135Hz の周期性の強い音が発生していることがわかる。一方, 角柱の一部を多孔質材と模した場合は音圧が小さくなり, 発生する周期性の強い音の周波数が 220 Hz 程度まで上昇することが確認でき, 過去の実験結果と矛盾しないことがわかった。これより, 多孔質材を模擬する際に与えた条件やそれにより得られた解析結果は妥当であると考えられる。

図 2 に流れ方向の速度変動の rms 値のコンター図を示す。(a)は角柱を全て剛体壁, (b)は一部を多孔質材と模した場合の結果を表している。図 2 より, 多孔質材を模した場合, 過去の実験結果と同様に角柱近傍における速度変動は小さく, 後流に強い速度変動を有する部分が存在するものとなった。一方, 全て剛体壁とした場合はこれまでの多くの研究で知られているものと同様に, はく離せん断層やはく離泡の発生により角柱近傍の速度変動が強くなっている。このような角柱近傍での速度変動の強さの違いにより, 発生する空力騒音の低下や抵抗の低減がもたらされてものと考えられる。

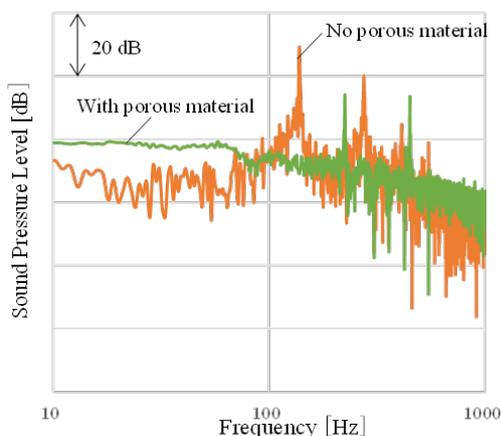


Fig. 1 Estimated sound pressure level.

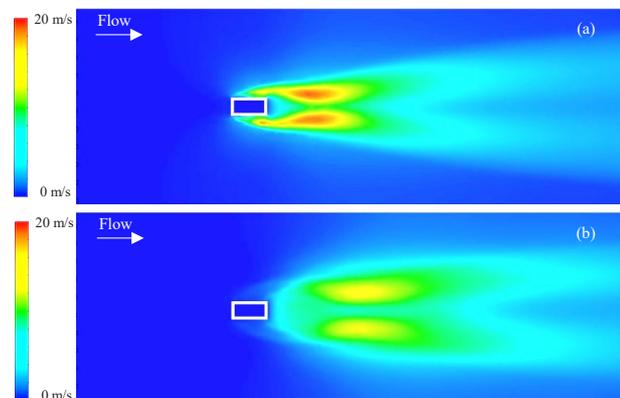


Fig. 2 Estimated streamwise velocity fluctuation.

3. 研究目標の達成状況

上記の数値解析結果から、この多孔質材を用いた場合、角部で生じるはく離渦の発生を抑制するとともに、その渦の維持も抑制する効果が見られた。これは、多孔質材を介した圧力波の伝播により、渦の形成・維持プロセスが変化し、安定的にはく離渦が形成できなくなったためであると考えられる。

4. まとめと今後の課題

今後は境界層流れについても同様に数値シミュレーションや必要に応じて実験を行い、原理の解明を図る。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌（解説等を含む）

寺島修: バイオミメティクスを活用した機械振動騒音低減技術の開発, 月刊 技術士, Vol. 2024, No. 1 (2024), pp. 14-17.

著書

武田尚恭, 小林将, 井上達哉, 草野大勢, 寺島修 (担当:分担執筆, 範囲:EV の振動、騒音対策と材料、部品の開発 (車両電動化で顕在化する異音・騒音問題とその対策)), 月刊 車載テクノロジー 2024年3月号, 技術情報協会 2024年3月

国際学会

N. Takeda, K. Shige, O. Terashima, Y. Konishi, T. Ikami, H. Nagai, T. Komatsuzaki: On the Reduction of the Flow-induced Noise Using Bio-inspired Porous Material with Low Acoustic Transmission Loss, Proceedings of the Twenty-third International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2023), CRF-44, pp. 126-127.

国内学会・研究会等

武田尚恭, 寺島修, 小西康郁, 伊神翼, 永井大樹, 小松崎俊彦, 山田周歩, GX への貢献を目指したエネルギーハーヴェスティングと流体抵抗低減技術の高度化・高付加価値化, 日本機械学会 2024年度年次大会, 発表予定

5.2 その他

ございません

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP04MAY23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.05~2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月23日提出

Dual-Phase 固体酸化物質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 教授

永島 浩樹

琉球大学工学部 准教授

Alexander Ryan Hartwell

Department of Mechanical Engineering, Western New England University 助教

伊地知 卓己

東北大学工学研究科 ファインメカニクス専攻

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

近年、CO₂ 排出量増加に伴い地球温暖化が深刻化している。発電過程において CO₂ を排出しない燃料電池は、クリーンなエネルギーデバイスとして注目されている。燃料電池の中でも固体酸化物質を用いた固体酸化物質形燃料電池は、高い作動温度により高効率での発電が可能である。一方で、高温による電極材料や電解質膜材料の劣化促進が懸念されている。

作動温度低減のために固体酸化物質膜の Dual-Phase 化及びナノ構造化による酸素イオン伝導特性向上に関する研究が行われている。異なる構造を組み合わせた Dual-Phase 固体酸化物質膜 (Dual Phase Solid Oxide Membrane: DPSOM) は、従来の Single-Phase 膜に比べて高い性能を示す。また、ナノ薄膜化やナノ結晶化のように膜内部の結晶構造をナノスケールまで小さくすることで、膜厚低下によるイオン伝導性向上や粒界に沿った粒界拡散経路の増加が予想される。しかしながら、格子拡散では粒界がイオン伝導特性を低下させる要因となっていることが報告されている。さらに、DPSOM のように複雑な構造である粒界が酸素イオン伝導特性に与える影響については明らかになっていない。そこで本研究では、密度汎関数理論(DFT)と分子動力学(MD)法、動的モンテカルロ法(kMC)法を組み合わせたマルチスケール解析により、ボトムアップ的に膜の構造とイオン伝導の情報を構築することで DPSOM 内の粒界における酸素イオン伝導特性の発現メカニズム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

研究期間内の最終目標は kMC 法をベースとしたマルチスケール解析手法の開発および DPSOM 内部の酸素イオン拡散現象の解明である。

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 共同研究の意義

本研究は東北大学、琉球大学におけるシミュレーションとシラキユース大学における実験の両方の観点から DPSOM 内の酸素イオン伝導性の解析を行うことができる点が共同研究の意義である。実験によりシミュレーションの妥当性を担保できるだけでなく、実験結果から得られた DPSOM の特性についてシミュレーションを行うことで、そのメカニズムの解明が可能である。

2.2 kMC 法をベースとしたマルチスケール解析手法の開発

はじめに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)内の酸素イオン伝導特性について MD 法による解析を行った。MD 法により求めた拡散係数からアレニウスの式に基づいて試行頻度と活性化エネルギーを算出し、kMC 法の遷移確率パラメータとして用いた。kMC 法により SSC 内の酸素イオン伝導特性について解析し、MD 法による解析結果と比較した。温度条件は 2000、1800、1650、1500 K とした。kMC 法による計算は各温度で異なる初期配置で 10 回ずつ行い、その平均値を用いた。その結果、拡散係数の温度依存性については MD 計算の結果とよい一致が見られた一方、拡散係数の大きさについては kMC 法による数値の方が MD 計算の結果に比べて小さくなった。

3. 研究目標の達成状況

kMC 法をベースとしたマルチスケール解析手法を開発した。開発した kMC 法を用いて SSC 内での酸素イオン伝導特性を解析した結果、MD 法と同様に拡散係数の温度依存性を再現することができた。しかしながら、MD 法と kMC 法の拡散係数は定量的に一致せず、拡散係数の pre-factor の計算方法についての課題が残っているため、70%の達成度と考えている。

4. まとめと今後の課題

MD 法により算出した遷移確率パラメータを用いて kMC 法による解析を実行した結果、MD 法で示された拡散係数の温度依存性を再現することができた。しかしながら、kMC 法で算出した拡散係数の値が MD 法と一致しなかった。今後の課題として、密度汎関数理論に基づいて試行頻度を算出することで拡散係数の計算手法の改善および精度向上に努める予定である。

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. Takumi Ijichi, Hiroki Nagashima, Alexander R. Hartwell, Jeongmin Ahn, Takashi Tokumasu, “Oxygen Ion Conduction Property of Solid Oxide Membrane Based on Multi-Scale Analysis”, ECS Transactions, 111 (6) 1597-1602 (2023).
2. Hiroki Nagashima, Ryan Falkenstein-Smith, Jeongmin Ahn, and Takashi Tokumasu, “Molecular

dynamic study of oxygen ion diffusion and grain boundary in $\text{SrSc}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{O}_{3-\delta}$ perovskite solid oxide membrane”, *Solid State Ionics* 399 (2023), 116291.

著書

なし.

国際学会

1. Takumi Ijichi, Hiroki Nagashima, Alexander R. Hartwell, Jeongmin Ahn, Takashi Tokumasu, “Oxygen Ion Conduction Property of Solid Oxide Membrane Based on Multi-Scale Analysis”, the 243rd ECS Meeting with SOFC-XVIII, SOFC-0247, May-June 2023, Boston, MA.
2. Takumi Ijichi, Hiroki Nagashima, Alexander R. Hartwell, Jeongmin Ahn, Takashi Tokumasu, “Experimental and Computational Analysis of Solid Oxide Fuel Cell Multilayer Ceramic Composites”, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, CRF-16, 2023.
3. Takumi Ijichi, Hiroki Nagashima, Alexander R. Hartwell, Jeongmin Ahn, Takashi Tokumasu, “Multi-scale Analysis of Oxygen Ion Conduction Property in Solid Oxide Electrolyte Membrane”, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, 2024.

国内学会・研究会等

1. 伊地知卓己, 永島浩樹, 徳増崇, 「Dual-Phase 固体酸化物膜解析のためのマルチスケールシミュレーション手法開発」, 日本流体力学会年会 2024

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	CP05MAY23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.5～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

高速電離流を伴う宇宙航行システムの数値的研究

高橋 聖幸, 鈴木 颯一郎, 伊藤 光毅, 鈴木 宏征

東北大学大学院工学研究科 准教授, D3, M2, M2

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

生命や宇宙の起源の解明を目的とした深宇宙探査や、火星など他天体の探索・移住ミッション実現に向け、従来の化学推進よりも燃費が良く輸送ペイロードの大質量化が見込まれる電気推進システムが近年注目され、性能の高い推進機確立を目指して研究開発が盛んに行われている。宇宙航行用の推進システムについて、現在ではイオンエンジンやホールスラスタなどの静電加速型電気推進システムが主流となっているが、これらのシステムではプラズマとの接触による電極や中和器の損耗が推進機寿命と直結しており、今後の宇宙ミッションで要求される長寿命・大電力稼働を満たすという点では不利と考えられる。この問題を回避するため、電極を有さない次世代無電極電気推進システムである“磁気ノズル型スラスタ”に注目が集まっている。磁気ノズル型スラスタでは絶縁体チューブの外部に高周波（RF）コイルを設置し、RF 電場によって高密度プラズマを生成、これを拡散磁場、即ち“磁気ノズル”を通して膨張させつつ高速排気することで推力を生成する。本システムの利点として、高速プラズマの排気流と直接的に接触する電極が存在しないため原理的に電極損耗問題が発生しないこと、排気イオンは高温電子によって自発的に電気的中和が成されるため中和器の搭載が不要であること等が挙げられ、超寿命化と軽量化、システムの簡素化が達成出来る。近年ではカusp磁場を磁気ノズル型スラスタに適用することで 30%程度の推進効率が達成されているが、現在普及しているイオンエンジンやホールスラスタの推進効率は 50%を超えており、実用化のためにはさらなる性能向上が必要である。

磁気ノズル型スラスタの改良案の一つとして、時間変動を伴う磁気ノズルを利用した“変動磁場印加型スラスタ”が新しく提案されている。本システムでは変動磁場の印加により周方向電流を誘起し、径方向磁場との相互作用によって発生するローレンツ力を電子に作用させることで排気速度の増大を図る。一般に電磁加速は静電加速と比較して大推力・高比推力を達成出来ると考えられており、変動磁場型スラスタは電磁誘導加速を能動的に誘起可能であるため、磁気ノズル

型スラスタの改良に革新を起し得ると予想される。しかし変動磁場型の推進性能はまだ十分に高いとは言えず発展途上であり、そのプラズマ移流の物理過程も複雑さゆえ未だ明らかになっていない部分が多い。従来の研究ではスラスタ下流のプルーム領域に注目した実験的アプローチが主であったが、推進性能向上のためにはスラスタ内部を含めた物理現象のより詳細な理解が必須である一方、スラスタ内部流の実験的計測は困難であり、数値計算的アプローチが現象理解のために有効と考えられる。しかしながら変動磁場型スラスタについて数値計算を行い、その現象を解明した事例はまだ無いのが実情である。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、変動磁場印加型スラスタのプラズマ輸送現象の解明を目的として、電子とイオンの運動論的振る舞いを記述することができる静電的 Full Particle-in-Cell (PIC) シミュレーションを実施する。ここで従来の静電的 PIC シミュレーションでは電磁誘導効果を導入できなかったため、Faraday の電磁誘導則を用いた簡易的電磁誘導モジュールを新しく提案し、従来の静電的 PIC シミュレーションに組み込んだ。計算の結果を実験と比較することで本提案モジュールの妥当性を検証する。また変動磁場効果をより推力に寄与させ得る磁場形状を新しく提案し、数値シミュレーションと推力計算モデルとを組み合わせた性能評価によりその有効性を議論する。

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

本研究は宇宙機デバイスにおいて発生する高速な低温プラズマの流動現象を明らかにするものであり、宇宙機周りの非平衡プラズマ流の現象に詳しく、且つ卓越した解析技術を有する永井教授と共同研究を行う事で、複雑な流動現象の理解が深まり、大変意義深い。また、本共同研究では流体科学研究所スーパーコンピュータシステムを用いるが、PIC シミュレーションにおいて使用する粒子数は数百万個を超え、研究室規模のワークステーションではシミュレーション実施が困難である。大規模計算を実施する上でも、本共同研究は意義深いと言える。

2.2 数値計算手法

本研究では、変動磁場型スラスタのプラズマ輸送現象を再現するために、軸方向-半径方向を想定した 2 次元静電的 Full PIC シミュレーションを行った。イオンと電子の運動方程式を Buneman-Boris 法を用いて積分して粒子軌道を求め、2 次元 Poisson 方程式を Mudpack ライブラリにより解く事で電場を算出した。粒子の位置情報から weighting 計算によって格子点上での電荷密度を求め、それを Poisson 方程式へとフィードバックする事で荷電粒子と場とをカップリングした。計算領域は $15 \times 4.5 \text{ cm}^2$ とし、実験で用いられたスラスタと同サイズとなるように誘電体壁面を設置した。ここで誘電体表面でのプラズマシースを考慮するために帯電プロセスをモデル化して数値計算に組み込んでいる。超粒子を用いて電子とイオンを計算空間内に配置し、数値ノイズを低減するためイオンと電子の超粒子をそれぞれ 600 万個程度用いた。またデバイ長程度の現象を解像するためにセル数を 512×128 とした。それに加えて weighting 計算に用いる補完を 5 次とし、数値ノイズを低減させた。また、電磁誘導効果を低コストで模擬するために Faraday の電磁誘導則を利用する簡易的電磁誘導モジュールを PIC シミュレーションに組み込み、計算領域内の変動磁場および周方向誘起電場を適宜更新する。

2.3 数値計算結果

PIC シミュレーションの結果、実験と定性的に一致する磁場垂直方向電場“Cross-field”の形成と、半径方向へのイオン静電加速が確認された。また上流位置における静電ポテンシャル・電子圧力の時間発展を調べたところ、実験と定性的に良く一致する結果が得られ、本シミュレーションの有効性が確認された。また、イオンに先行して駆動された ExB ドリフト電子によって荷電分離領域が機軸-半径面内に形成されていることがシミュレーションから明らかになり、Cross-field を形成する特徴的なポテンシャル構造が荷電分極に由来する可能性を初めて示した。加えて従来スラスタの問題点として、プラズマのバックフローと誘電体壁面へのプラズマ損失が発生していることが PIC シミュレーションから判明し、これらの現象が推進剤利用効率や推力性能に悪影響を与えていると考えられた。この問題を解決するため、プラズマ源内部に静磁場コイルを設置し、局所閉磁場を利用する“コイル内蔵型スラスタ”を新しく提案した。提案スラスタのコンセプトは、従来バックプレートに向いていた Cross-field 方向の向きを、局所閉磁場を印加することでプラズマ源中心部を向くように修正し、壁面でのプラズマ損失を低減させる点にある。その有効性を調査するため、先の再現計算と同様に提案スラスタについても PIC シミュレーションを実施した。計算の結果、ExB ドリフト電子の駆動を局所閉磁場によって制御することで、投入電力が同量であるにも関わらずプラズマ源内部のイオン粒子数が従来スラスタと比較して約 1.3 倍に向上した。また、数値シミュレーションを推力評価の物理モデルと組み合わせて推進性能を評価したところ、電子圧力推力、ローレンツ力による電磁推力がともに向上し、変動磁場 1 周期間での平均推力が約 1.5 倍に向上した。このように、共同研究とスーパーコンピュータシステムの利用によって大変有意義な研究結果を得た。

3. 研究目標の達成状況

変動磁場印加型スラスタの定性的な再現計算に成功し、提案した電磁誘導モジュールの妥当性、Cross-field の形成原理、従来スラスタが抱えるバックフローおよび誘電体壁面でのプラズマ損失問題を明らかにした。また、ExB ドリフト電子がポテンシャル構造とイオン輸送について重要な役割を担っていることから、局所閉磁場を利用する“コイル内蔵型スラスタ”を提案し、その推進性能改善における有効性を PIC シミュレーションから明らかにした。当初の研究目標は十分に達成できたと言える。

4. まとめと今後の課題

スーパーコンピュータを用いた PIC シミュレーションにより、変動磁場印加型スラスタのプラズマ輸送現象が明らかになり、得られた知見を活用してコイル内蔵型スラスタを新しく提案した。今後は PIC シミュレーションにおける変動磁場モジュールの改良、提案スラスタの最適設計、変動磁場印加時のプラズマデタッチメント現象などについての議論を進めていく予定である。

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）

学術雑誌（解説等を含む）

[1] [Masayuki Takahashi](#), Soichiro Suzuki, Hiroyuki Suzuki, Koki Ito, and Hiroki Nagai,

“High-speed Plasma Flow Simulation on Spacecraft and Propulsion Systems,”
Proceedings of Twentieth International Conference on Flow Dynamics, CFR-38 (2023).
(査読なし)

著書

なし

国際学会

[1] Masayuki Takahashi, Soichiro Suzuki, Hiroyuki Suzuki, Koki Ito, and Hiroki Nagai,
“High-speed Plasma Flow Simulation on Spacecraft and Propulsion Systems,” Twentieth
International Conference on Flow Dynamics, CFR-38, Sendai (2023).

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	CP07MAY23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.05～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年8月21日提出

ソニックブーム評価関数の気象モデルへの実装

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

鶴飼 孝博

大阪工業大学 准教授

Hiroshi Yamashita, Bastian Kern

Institute of Atmospheric Physics, German Aerospace Center

三坂 孝志

産業技術総合研究所

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，飛行ルート最適化を実現させるため，本 SEIRA (Sonic-boom Evaluation In Realistic Atmospheres) II プロジェクトでは，SEIRA プロジェクトで推進してきた過去 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結果に基づいて，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．特に，次世代超音速機である低騒音（低ソニックブーム）機体を調査対象とし，サロゲートモデル構築に必要なデータを取得する．これらのデータに基づき，サロゲートモデル構築に関する初期的な検討を行う．特に Kriging 法を用いたサロゲートモデリングに関して，入力変数としての気象データの取り扱いを検討して初期的な予測結果を得る．

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 過去 10 年間の気象データに基づくソニックブーム伝播解析

本研究では、東北大学流体科学研究所との共同研究によりスーパーコンピュータを用いた過去 10 年間の気象データを基に約 51,000 回の衝撃波伝播解析を行い、大規模なデータを取得した。ジョン・F・ケネディ空港からロンドン・ヒースロー空港までの 10 年間の超音速飛行を用いて、擬似コンコルドと LBC によって発生するソニックブームの知覚レベルに及ぼす大気条件の影響を調査した。ECMWF 再解析データを基に EMAC モデルを用いて、全球気象を得た。そして、AirTraf を用いて、飛行経路直下の大気プロファイルを抽出した。気象データを提供した隣接位置間の距離は、超音速飛行中の飛行経路に沿って約 490km とした。代表的な大気条件（相対湿度、温度および風）を通過するソニックブーム伝播は、KZK 方程式に基づくソニックブーム伝播ツールを用いて計算した。ソニックブームと乱流干渉の調査の場合、使用した気象データは、冬期と夏期の 1 地点とした。

乱流干渉を伴わないソニックブーム伝播の結果は、10 年間を通して N 波の最大過剰圧が季節によって大きく変動した。特に、冬期と夏期に最大過剰圧がそれぞれ減少および増加することが分かった。N 波の知覚レベルも同様な季節変動を示した。一方、LBC によって発生する LR 波は、10 年間の飛行で波形の立ち上がり時間の標準偏差が大きいため、知覚レベルの季節変動は大きくない。ソニックブームが地上に伝播する際の大気の状態による影響について調査した結果、高度 10 km における最大過剰圧の低減には、分子緩和効果が支配的であった。中高度以下では、分子緩和効果の代わりに熱粘性吸収効果が支配的であったが、圧力上昇時間の変化にのみ影響した。

ソニックブームと乱流干渉における気象の影響を明らかにするため、夏期と冬期において、ソニックブームは同じ乱流場を通過した。ソニックブームと乱流干渉による LR 波の最大過剰圧の低減には、低温と低相対湿度の両方が寄与していた。乱流場を伝播する前の低い最大過剰圧の波形が乱流干渉による圧力低下を促進する可能性がある。本研究では、一定の乱流特性から乱流場を生成したが、観測した気象データを基に乱流場を生成するのが理想的である。乱流場は場所や季節によって異なるため、今後は複数の場所や季節において、ソニックブームと乱流干渉の影響を調査する必要がある。

2.2 サロゲートモデルによる最大過剰圧の年間変動の予測

サロゲートモデルの初期検討として、気象モデルから得られる気象場の鉛直プロファイルを入力とし、ソニックブームの強度を示す指標（例えば、最大過剰圧）を出力するようなモデルを考える。サロゲートモデルとしては Kriging 法を用いるが、鉛直プロファイルをそのまま Kriging 法の入力変数とするには次元が大きすぎるため、固有直行分解 (POD) による次元削減を行う。したがって、Kriging モデルは POD 係数を入力とし、ブーム指標を出力するように構築される。また、ブーム指標は気象場や乱流場による日々の変動が比較的大きいため、20 日の移動平均を行い、年次の平均的な変動を予測するようなモデルを構築した。

図 1 に 2009 年 3 月から 2018 年 2 月までの気象データおよびブーム指標から構築し、2018 年 3 月からの一年間の最大過剰圧の予測を行った結果を示す。上記のようなモデリングにより、一年間の平均的な最大過剰圧の変動は予測できることが確かめられた。

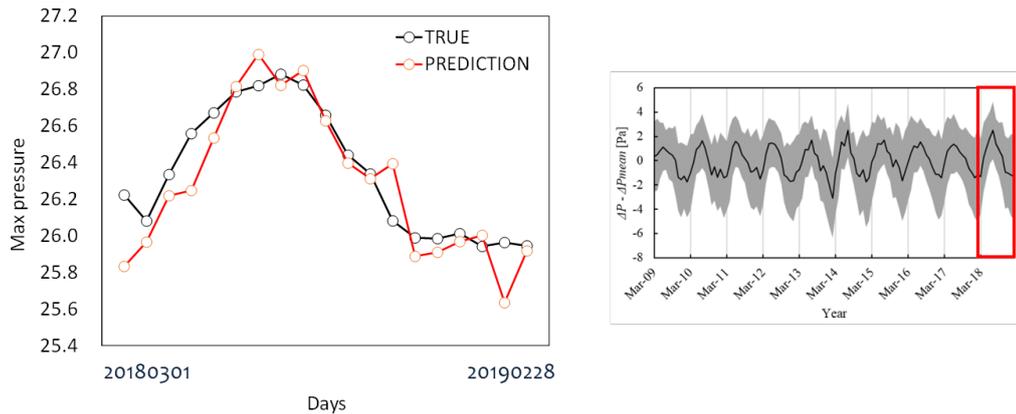


図1 サロゲートモデルによる最大過剰圧の年次変化の予測

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、コンコルドおよび低ブーム機体のソニックブーム波形を取得し、低ブーム機体に対する気象変動とソニックブーム騒音の関連性を明らかにした。また、低ブーム波形の大気乱流の影響も明らかにした。また、**Kriging** 法を用いたサロゲートモデルの初期検討を行い、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。したがって、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、高周波成分の強度が弱い低ブーム波形は、高周波成分の強い N 字型波形よりも気象変動の影響を受けにくいことが分かった。また、低ブーム波形は、大気乱流干渉の影響も受けにくいことが分かった。また、POD を用いた気象鉛直プロファイルの次元削減により、一年間の平均的な最大過剰圧の変動の予測が可能であることを確かめた。今後は、本研究で得られた知見および膨大なソニックブーム波形と気象データを基にサロゲートモデルの高精度化を行う。

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）

- [1] Rei Iura, Takahiro Ukai, Hiroshi Yamashita, Bastian Kern, Takashi Misaka, Shigeru Obayashi, Impact of atmospheric variations on sonic boom loudness over 10 years of simulated flights, *Journal of the Acoustical Society of America*, Accepted.

著書

なし

国際学会

- [1] Rei Iura, Takahiro Ukai, Hiroshi Yamashita, Bastian Kern, Takashi Misaka, Shigeru Obayashi, Acoustic propagation analysis of sonic boom at atmospheric variation

during 10-year flight, Inter-Noise 2023, 20-23 August 2023, Chiba.

- [2] Hiroshi Yamashita, Bastian Kern, Rei Iura, Takahiro Ukai, Takashi Misaka, Shigeru Obayashi, Sonic boom variation in realistic atmospheres, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, ICFD 2023, 6-8 November 2023, Sendai.

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	CP01AUG23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.08～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年7月16日提出

Molecular Simulation of CO₂ Permeation through Microalgae Lipid Membrane

馬淵 拓哉

東北大学流体科学研究所 助教

Fayza Yulia

Pertamina University Assistant Prof.

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

The research aims to employ molecular dynamic (MD) simulation methods to visually represent the permeation process of Carbon Dioxide (CO₂) molecules across microalgae's lipid membranes. This approach allows for a detailed exploration of the interaction dynamics between CO₂ and lipid membranes, offering insights that may not be readily achievable through experimental techniques

1.2 研究期間内の最終目標

The study seeks to achieve three main objectives:

a) Showcase Mechanism and Dynamics of CO₂ Permeation

It can provide a detailed temporal evolution of interactions between CO₂ molecules and lipid membranes. By tracking the trajectory of CO₂ molecules, it helps in understanding how changes in molecular orientation and configuration affect permeation.

b) Partially Quantitative Insights into Gas Penetration

By using the trajectory data to calculate the number of CO₂ molecules penetrating the membrane over time. Analyzing these data will help quantify the rate of penetration under different conditions.

c) Analysis of Properties Related to Gas Permeation

The properties evaluated include density, free energy profile, and structural changes in area of DPPC (Dipalmitoylphosphatidylcholine) lipids. RDF analysis is also carried out to examine the distribution of molecules around a reference CO₂ molecule, which provides insights into the local molecular environment and interaction potentials, and

finally, transport properties which include permeability and diffusion coefficient are also analyzed.

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 Significance of the Joint Research

The collaborative effort between Tohoku University and Pertamina University in simulating CO₂ permeation through microalgae lipid membranes brings together expertise from both institutions, leveraging molecular dynamics simulations as well as experimental knowledges to gain insights into the permeation mechanisms and dynamics of CO₂ at a molecular level. This collaboration allows for an exchange of knowledge and techniques, enhancing the overall quality and scope of the research.

2.2 Elucidation of new phenomena

Through our simulations, we have elucidated several new phenomena regarding CO₂ permeation:

- It was revealed that the primary energy barrier for CO₂ permeation is located at the interface between the water region and the lipid region, composed of large and charged atoms such as phosphate and nitrogen.
- We found that variations in temperature (300, 310, and 320 K) do not significantly affect the transport properties of CO₂ molecules through the DPPC lipid bilayer, indicating a stable permeation process under different thermal conditions.

These findings contribute to a deeper understanding of the molecular mechanisms governing CO₂ permeation through lipid membranes, which is crucial for designing efficient bio-based materials for CO₂ capture and utilization.

3. 研究目標の達成状況

In this project, an analysis of the permeation process of CO₂ molecules through the cell membrane of microalgae, modeled with DPPC (Dipalmitoylphosphatidylcholine) molecules, was conducted using molecular dynamics simulations. Currently, we have able to obtain following results :

1. CO₂ molecules are shown to be capable of permeating into the DPPC lipid bilayer. From the density profile and free energy profile, it is revealed that the primary energy barrier for CO₂ permeation is in the interface between the water region and the lipid region, which consists of large and charged atoms such as phosphate and Nitrogen. This result is in agreement with previous works related to the current project.
2. We measured the quantitative transport properties of the CO₂ molecules by calculating the diffusion coefficient and permeability. The molecular dynamics simulation results show that the diffusion coefficient of CO₂ molecules through the

DPPC lipid bilayer ranges from 1.81 to 2.69 x 10⁻⁵ cm²/s, with a permeability of 0.17 to 0.22. This result is within acceptable deviation compared to previous relevant experimental or numerical works conducted by other researchers.

3. We are interested in the effects of environmental factors on CO₂ permeation characteristics. So far, we have conducted simulations with temperature variations of 300, 310, and 320 K. Based on the diffusion coefficient and permeability results, there is no significant effect of temperature changes within the range of 300 to 320 K on the transport properties of CO₂ molecules through the DPPC lipid bilayer.

4. まとめと今後の課題

There is ample room for further development of this research. To obtain more accurate results, the author suggests using a longer duration for equilibration and data collection. To add novelty to this research, an analysis of CO₂ selectivity against other molecules commonly found in flue gases, such as O₂, SO_x, and NO_x, can be conducted.

The main challenge to this project so far is to gain access to an accessible and reliable high-performance computing cluster (supercomputer). So far, we are using a supercomputer facility at the Institute of Fluid Science, Tohoku University. Unfortunately, the high amount of users using the facility and system migration this year has hindered our progress. We are currently trying to obtain access to several HPC facilities within our reach, including installing our own HPC in the faculty of engineering, Universitas Indonesia. We are also considering incorporating machine learning technology into our work in order to obtain more data in a shorter amount of time.

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

- F. Yulia, F. P. Nasution, T. Mabuchi, Nasruddin, “Permeability of CO₂ Gases through DPPC Lipid Membranes using Molecular Dynamics Simulation”, 20th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), Sendai, Japan, November 6-8 (2023).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

I. 研 究 成 果 概 要

共同研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 07 月 23 日提出

分子動力学法を用いた界面ナノバブルの応力解析

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

固液界面上界面ナノバブルは，核沸騰の促進やナノ材料の製造などの様々な面で重要である。そのため，これまで多様な手法を用いて界面ナノバブルに関する研究が報告されているが，その中でも特に分子の運動を直接解析する手法である分子動力学(Molecular Dynamics, MD)法を用いて，微細な機序の解明を試みる研究が活発に行われてきている。具体的には，MD 法を用いた数値解析によって界面ナノバブルの安定性に関する研究がこれまで報告されている。その他にも，MD シミュレーションを用いることで，Lennard-Jones 流体の蒸気からなる擬二次元系の界面ナノバブルは，界面活性剤の導入により安定性を失うことが明らかとなっている。しかし，より現実に近い，水分子中の窒素気体からなる三次元系の界面ナノバブルへの界面活性剤の影響は明らかにされていない。

そこで本研究では，MD シミュレーションによって，水分子中に窒素からなる界面ナノバブルを作成したうえで，界面活性剤を導入した際のその内部の応力テンソルの空間分布の評価を行い，形状に与える影響についてその分子スケールのメカニズム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

窒素気体からなる界面ナノバブルの生成シミュレーションを行い，特に界面活性剤の役割に着目し，その応力分布がどのようなようになるかを定量的に明らかにする。

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）

本研究内容を共同研究によって進めることにより，分子動力学シミュレーションを用いた研究を速やかに実施できる。またシミュレーション負荷の都合上，大規模な処理が可能な計算機を使用する必要がある。

グラファイト基板-水-窒素気体に、界面活性剤としてペンタノール分子を混合した系において MD シミュレーションを行うことで、グラファイト基盤上に界面ナノバブルを生成した。この際に、図(a)に示すシミュレーション系の断面図のように、底面のグラファイト基板の一部を疎水性にすることによって、界面ナノバブルはその直上で形成した。また、ペンタノール分子の数によらず同様の結果となった。

生成した界面ナノバブルの形状を評価するため、図 1(b)に示すように水分子の数密度分布を評価した。これにより、界面活性剤の導入によって、界面ナノバブルの接触角は減少し、平坦な形状になることがわかった。また界面活性剤の分子は、固液気三相界面に集中的に分布することがわかった。

以上の結果についてのメカニズムを解明するために、窒素分子間に働く応力テンソルの空間分布を評価した。具体的には、気体分子の応力の運動エネルギー項およびビリアル項を求めた。さらに座標変換により、円筒座標成分の応力テンソルを取得した。図 1(c)に示す応力の半径方向成分の空間分布に示すように、界面活性剤の有無によって、それらに大きな差はみられなかった。一方で、応力分布から界面張力を求め、それらのバランスを表すヤングの式に代入することによって、界面活性剤が界面ナノバブルを平坦な形状にする結果と整合することが明らかとなった。

3. 研究目標の達成状況

界面活性剤の界面ナノバブルの形状への影響やその空間分布を評価した上で、その分子スケールのメカニズムを明らかにするために、ナノバブルを構成する窒素分子の応力テンソルを求めた。応力テンソルから界面張力を求めることによって、界面における力のバランスを考察した。それにより、界面活性剤を導入することによって現れる応力の変化が、界面ナノバブルを平坦な形状にする結果と整合することが明らかとなった。

4. まとめと今後の課題

これまでの MD シミュレーションを用いた研究から、界面ナノバブルの形状へ及ぼす界面活性剤の影響を、様々な面から明らかにした。特に、窒素分子の応力から界面における力のバランスを解析した結果、界面活性剤はナノバブルの形状を平坦な形状に変化させる方向に作用することがわかった。今後は、界面活性剤全般において同様の効果を有するかについての検証が必要である。

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] Takuma Hori, Gota Kikugawa, “Effect of Surfactant on Surface Energy of Nanobubble Composed of Nitrogen Gas”, 20th International Conference on Flow Dynamics, Sendai (2023).

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	CL03APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年7月22日提出

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，津田 晋吾

東北大学流体科学研究所 准教授，大学院生

宮内 優

宮崎大学工学部 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）

1.1 研究の背景と目的

高齢化や生活様式の変化によって血管疾患の患者数は年々増加しており，国内外において高い死亡率を占めている．これまでの研究において，血流動態と血管疾患の関連性が多く報告されているが，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となっていない．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と左心室内の血流動態を対象に，数値流体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

本研究期間の最終目標は次の2つである．(i)大動脈三尖弁と開口形状や位置が異なる5種類の大動脈二尖弁を設置した数値流体解析による大動脈弁の形状が左心室内の血流動態に及ぼす影響．(ii)血管透過係数を推定する提案手法における透過係数が過大評価される原因の解明．

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．

2.1 大動脈弁の形状が左心室内の血流場に及ぼす影響の解明

大動脈は動脈瘤などの循環器系疾患の好発部位であり、その発症・進展には上流に位置する左心室から流入する血流が大きな影響を及ぼしていると考えられる。大動脈弁は一般的には三つの弁尖からなる三尖弁であるが、全人口の約 0.5~2.0%は生まれつき弁尖が 2 つしかない二尖弁である。二尖弁である患者は、大動脈解離や大動脈瘤などを発症する割合が高いことが知られている。本研究では、三尖弁と開口方向の異なる 5 種類の二尖弁に対して数値流体解析を行い、それらを比較することで弁形状が左心室内の血行動態に与える影響を調べた。弁を除く左心室の形状は全てのモデルで同じで、開口部面積は Model T が 4.20 cm²、Model B0_{lat}、B0_{ap} が 1.84 cm²、Model B1_{LR}、B1_{RN}、B1_{NL} が 1.60 cm² である。数値流体解析には熱流体解析ソフトウェア (Fluent 17.2, ANSYS, USA) を用いて 7 心周期まで解析を行い、左心室内の血流の変化がほぼ周期的となる 4 週目以降の計算結果について考察を行った。

血行力学パラメータの一つである時間平均壁せん断応力 (TAWSS) の分布を図(a)に示す。三尖弁モデル Model T と比較して、二尖弁モデル Model B0 および B1 では、TAWSS が大動脈弁の辺縁部において上昇していることがわかる。これは大動脈弁の開口部面積が三尖弁モデルに比べて半分以下と小さく、拍出速度が大きくなっていることが原因と考えられる。定量的な比較を行うため、大動脈弁を取り付けた平面の各節点の TAWSS を抽出し、算術平均を計算した (図(b))。図より、大動脈弁以外は同じ左心室形状を有するモデル間でも、身体に対して前後方向に開口するモデル (Model B0_{lat} および B1_{NL}) では、大動脈弁縁部の TAWSS が低いことがわかる。また、身体に対して上下方向に開口するモデル間では開口部が左に位置するモデル (Model B1_{LR}) ほど TAWSS が高いことが分かった。

TAWSS が高かった二尖弁のモデル Model B1_{LR} および B0_{ap} では、直線状の速度ベクトルが大動脈弁開口部で衝突しているが、TAWSS が低い二尖弁のモデル Model T および B0_{lat}、B1_{NL} では渦様の速度ベクトル分布が観察された (図は省略)。三尖弁の Model T においても渦様の流れが観察されることから、これら渦様の拍出血流が正常な流れと考えられる。これに対し、身体に対して上下方向に開口するモデル (B1_{LR} および B0_{ap}) では、この渦様の流れが大動脈弁開口部で阻害されて直線状の速度分布に変化し、大動脈弁近傍で大きく加速するために血流の速度勾配が高く、結果としてせん断応力の上昇につながっていると考えられる。

2.2 血管透過係数を推定するデータ同化手法

血流と組織間の物質交換を制御する血管透過性は、生体内の恒常性維持のために血管壁が有する重要な性質であり、その異常は種々の血管疾患を誘発することが知られている。我々は血管壁上の透過係数分布を求める方法として、データ同化による血管透過性の推定手法を提案している。これまでの研究より、擬似的に作成した正規分布に従う計測ノイズを含んだ濃度計測データに対してはノイズが大きいほど推定された透過係数の平均値が過大評価されることがわかった。本研究では、透過係数が過大評価される原因を明らかにし、その補正方法を提案することを目的とした。

計測ノイズに関する SNR が大きいほど推定誤差が小さくなり、その変化の傾向から補正式の関数形を指数関数として次式で定義した (図は省略)。

$$\Delta P = \beta_1 + \beta_2 e^{-\beta_3 \cdot \text{SNR}} \quad (1)$$

ここで、 ΔP は推定値と真値の差、 β_1 , β_2 , β_3 はフィッティングによって定まる係数である。フィッティングに用いた各 SNR の値における ΔP に対し、補正式の結果は正確に一致し、また SNR の値が比較的高い SNR=80 の値に対しても概ね良好な一致していた。一方で、SNR=15 では近似曲線と実際の推定誤差 ΔP に差があった。このことから、式(1)により変化の傾向を表現できたが、 ΔP の変化の大きい低 SNR の領域に対してはフィッティングに使用する SNR の値を変えるなどの工夫が必要であることがわかった。

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、大動脈弁の位置に三尖弁または開口形状の異なる二尖弁を設置し、左心室内の血流動態および血行力学の変化を数値流体解析により調べた。解析結果より、大動脈弁形状のみならず開口方向や位置により、左心室内の大動脈弁近傍や心尖部付近における血行動態が大きく変化することが分かった。これらは、大動脈弁形状によって一意に合併症リスクが変化するとは言えないことや、特定の開口方向や位置によってリスクが急激に高くなる可能性があることを示唆している。本研究では、弁形状を除いた左心室の形状や左心室の運動は同じであり、今後は患者一人一人に応じた左心室モデルを作成し、血流の数値解析を行う必要がある。血管透過係数を推定するデータ同化手法に関する研究では、透過係数が過大評価される原因を明らかにし、その補正方法を提案した。今後は、補正方法の改良を行うとともに、提案手法の多次元化や実際の計測データに対する有効性を調べる。

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. S. Miyauchi, K. Hosoi, S. Tsuda, T. Hayase, and K. Funamoto: Numerical analysis of hemodynamic changes and blood stagnation in the left ventricle by internal structures and torsional motion. *AIP Advances*, 13, 045105, (2023).

国際学会

1. S. Miyauchi, S. Kosaka, T. Hayase and K. 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.
2. S. Miyauchi, S. Takeuchi and K. Funamoto: Data assimilation method for estimating membrane permeability based on the Langrange multiplier method: formulation and fundamental examination, *15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM-VIII)*, Yokohama, (2022), 842.
3. S. Tsuda, S. Miyauchi and K. Funamoto: Comparison of hemodynamics in the left ventricle between tricuspid aortic valve and bicuspid aortic valves, *Proceedings of the*

13th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing, Tokyo, (2022), Paper 9.

4. R. Shigeru, S. Miyauchi, S. Takeuchi and K. Funamoto: Data Assimilation Method for Estimating Membrane Permeability Based on the Lagrange Multiplier Method: Effect of Signal-to-Noise Ratio on Estimation Accuracy, Proceedings of the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2022), pp. 80-81.
5. S. Tsuda, S. Miyauchi, K. Funamoto: Hemodynamic Changes in the Left Ventricle by Bicuspid Aortic Valve Geometries, Proceedings of the Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2023), CRF-40, pp. 80-81.

国内学会・研究会等

1. 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 回バイオフィロントニア講演会講演論文集, (2022), 2C12.
2. 茂零音, 宮内優, 竹内伸太郎, 船本健一: ラグランジュ未定乗数法に基づく血管透過性の推定のためのデータ同化法 (試行回数による誤差の収束性), 日本機械学会九州学生会第 54 回学生員卒業研究発表講演会, (2023), 218.
3. 茂零音, 宮内優, 竹内伸太郎, 船本健一: ラグランジュ未定乗数法に基づく血管透過性の推定のためのデータ同化法 (推定値の補正方法の提案), 日本機械学会 第 36 回計算力学講演会(CMD2023), (2023), OS-1812.

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	CL04APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年09月04日提出

液体ロケットインデューサで生じるキャビテーション不安定現象の 動特性に関する数値解析

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

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

本研究プロジェクトは, 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の抑制に着目し, 実機インデューサの製造元である IHI が過去に提案している抑制手法の逆流返しライナについて数値解析を行ったものである. 本逆流返しライナは JAXA 角田での水試験で抑制効果を確認していたが, その後, ロケット推進剤と同じ特性（極低温, 圧縮性, 熱力学的キャビテーション抑制効果）を有する液体窒素試験でキャビテーションサージが発生してしまった. そこで現在, JAXA 角田と共同で, その有効性の再検証を行っている.

本研究では ANSYS-CFX を用いて, 液体ロケットインデューサの数値解析を行い, 解析結果からキャビテーションの動特性パラメータを評価する. キャビテーションの動特性パラメータは本来, 入口に与えた圧力または流量の線形振動に伴いキャビテーションが振動するモデルに基づき, 振動が発散することで系の不安定性を判定するものである. 一方, 本プロジェクトで評価するのは, 圧力と流量の大規模な非線形振動を伴うキャビテーション不安定現象が発生した際のキャビテーションの振動や, 抑制手法を適用し不安定現象が抑制された状態のキャビテーションの振動から動特性パラメータを評価するものであり, これまで用いられてきた評価方法と逆方向からのアプローチとなる. これは, 線形理論解析で導かれた動特性パラメータ自体の, 実際の流れ場における有効性を検証することにもなる点で, 本研究は従来研究とは異なり独創的であると考えている.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究は, 数値解析を用いて逆流返しライナ付きインデューサの動特性パラメータを評価し, 本ライナの有効性, 不安定抑制メカニズム, 適用範囲, 更には形状の改良を検討する. また, 動特性パラメータの評価方法について, 定常解析を用いた準定常評価と非定常解析を用いた評価の比較を行い, 評価手法の有効性についても検討する. 以上から得られた結果を,

国内会議，国際会議で成果報告する．

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）

キャビテーション不安定現象の発生を数値解析で予測し，発生メカニズムを考察した例は多くあるが，本研究のように不安定現象の抑制メカニズムの解明や，新たな抑制手法の開発を数値解析を用いて行っている研究グループは国内外を通して多くない．これは本グループが，JAXA 角田宇宙センターでの実機試験データをもとに計算結果の有効性をある程度保証できているためにできる研究であると考えており，共同研究で実行することに意義がある．

本研究の成果としては，不安定現象が発生した際の個々のキャビテーションの二方向への振動に対する動特性パラメータを評価することで，振動の振幅の評価では得られない各不安定現象の振動特性や，抑制手法による抑制効果を評価できることが示された．キャビテーションサージ発生時には，流量変動に対して軸方向へ振動が増大するため，軸方向へのキャビテーションの成長を抑制する逆流返しライナが有効であることが示された．また，逆流返しライナでは，キャビテーションが軸方向に最も成長した際に高い抑制効果を示しており，逆流返し形状の軸方向長さの改良が有効であることが示唆された．

3. 研究目標の達成状況

本研究成果をとりまとめ，国際会議 2 件，国内会議 1 件で発表したため，研究目標は概ね達成したと考えている，

4. まとめと今後の課題

上記研究成果を受け，今後は，逆流返しライナの不安定抑制・適用範囲の向上を目的とし，数値解析を用いて形状の改良及び本研究グループで開発中のスリットインデューサと併用した際の有効性の検証を行う．スリットインデューサはインデューサ翼に切り込み加工を施した抑制手法であり，ケーシングの形状による抑制手法である逆流返しライナと組み合わせることにより更なる抑制効果が期待されている．また，それらについても動特性パラメータにより評価を行い，有効性を高め，試験結果への適用を検討する．

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）

該当なし

著書

該当なし

国際学会

1. Takuo Mino, Koki Tamura, Satoshi Kawasaki, Yuka Iga, "Numerical Analysis of Oscillation Characteristic of Cavitation in Liquid Rocket Inducer with Several Suppression Methods", The 8th International conference on Pumps and Fans (ICPF2024), Yangzhou, Jiangsu, China (2024), PaperID-162.
2. Takuo Mino, Koki Tamura, Satoshi Kawasaki, Yuka Iga, "Numerical Analysis of

Rocket Pump Inducer with Backflow Restriction Step", 11th AJCPP 2023, Ishikawa, Japan (2023)

国内学会・研究会等

1. 美濃拓生, 田村浩紀, 川崎聡, 伊賀由佳, 「液体ロケットインデューサの不安定抑制手法がキャビテーション動特性に与える影響」, ターボ機械協会第 89 回創立 50 周年記念学術講演会, 東京 (2023), pp.284-290.
- 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	CL05APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 8 月 21 日提出

Computational simulation on polymer coating by cold spray

高奈 秀匡

東北大学流体科学研究所 教授

Chrystelle Bernard

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

Since the emergence of polymer coating by cold spray, significant improvements have been made regarding the increase of the deposition efficiency as well as the improvement of the interfacial adhesion strength. However, these successes were achieved using “try and fail” experiments, and little is known about the deposition mechanisms or the state in which the polymer particle should be before spraying and/or impacting the substrate. This research aims to clarify the optimum spray conditions for successful coating for perfluoroalkoxy alkane (PFA) cold spray.

1.2 研究期間内の最終目標

In this study, computational Fluid Dynamics (CFD) were carried out using ANSYS/FLUENT 19.0. The setup was designed according to the experiments performed by Sulen et al. (2022) to elucidate the particle thermomechanical behavior during flight.

2. 研究成果の内容

This collaborative research enables the multiphysics approaches toward the understanding of the successful bonding in the cold spray. Results have been obtained under the spray conditions (0.5 MPa, 773 K) (see Figure 1). It appears that the polymer particles reach their melting temperature during their flight. Further investigation is needed to clarify whether the temperature increase influences the particle microstructure during the flight time of 0.4 ms.

Based on the obtained simulation results, a new system is designed for the understanding of polymer particle deposition mechanism. This new system allows

spraying UHMWPE particles under the two conditions: (i) keeping the particles under glassy state (temperature below 163 K) in the feed stock, and (ii) particle reaching its melting point upon the impact. Thus, low temperature nitrogen gas is used to cool the feedstock particles and accelerate the particles at the particle inlet, while air is used as the mainstream gas. In order to increase the particle temperature from 163 K to 403 K, several strategies are foreseen: (i) increasing the nozzle length, or (ii) decreasing the particle size. Based on the CFD simulations, the optimal particle size for UHMWPE particles was found to be around 25 μm instead of the 45-63 μm currently used (see Figure 2).

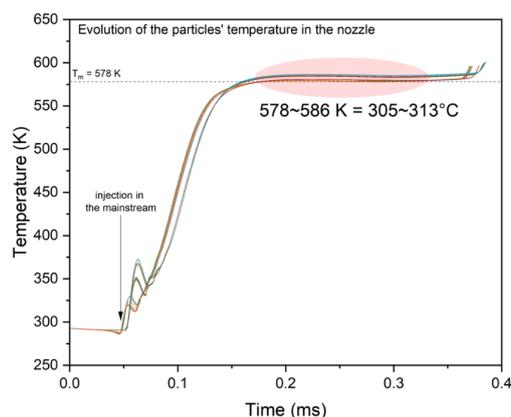


Figure 1: Evolution of the PFA particle temperature during its flight under the spray conditions (0.5 MPa, 773 K).

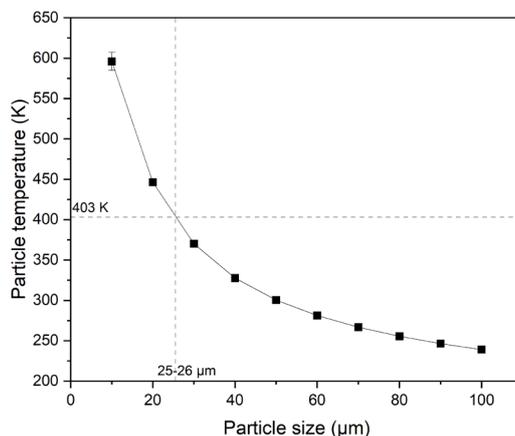


Figure 2: Evolution of the UHMWPE particle temperature as a function of the particle size under the spray conditions (0.4 MPa, 773 K) using a 240 mm long nozzle and low temperature nitrogen gas at the particle inlet.

3. 研究目標の達成状況

According to this research, several parameters have been identified as primordial for manufacturing polymer coating by cold spray process:

- Substrate Roughness should be in agreement with the particle size

- Powder should be below its glass transition temperature (glassy polymer) in the feedstock
- Particle temperature should be above its melting temperature before impact

4. まとめと今後の課題

Identification of the evolution of the microstructure of PFA powder during the cold spray process has been carried out. Based on the results, it has been established that the substrate roughness and addition of nano-alumina particles play an important role in the coating formation and adhesion. It appears that the thermal state of the powder in the feedstock and at the impact also plays an important role in the coating formation by minimizing the viscoelastic energy of the powder and maximizing the particle plastic deformation. Therefore, the polymer particles should be at their glass state, which is lower than the gas temperature and reach their melting point just before the impact.

According to these results, a new model was designed for spraying UHMWPE whose glass transition temperature is well below room temperature. Numerical results appear to be promising and further experiments will be conducted for the validation of the numerical model.

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] C.A. Bernard, H. Takana, O. Lame, K. Ogawa: Which mechanisms govern polymer deposition by cold spray process?, Proceedings of 20th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2023), OS23-11, pp. 1333-1335.
- [2] C.A. Bernard, H. Takana, O. Lame, K. Ogawa: Quels mécanismes gouvernent la déposition de poudre polymère au cours du procédé cold spray ?, Seminar INSA de Lyon, Lyon, (December 2023)

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	CL08APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	新規

2024年09月01日提出

飛行する回転中空円筒の実験と数値解析の発展

平田 勝哉*, 石本 淳**

中野 政身****, 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

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

航空機の翼には翼端が存在し、誘導抗力が発生する。リング翼には翼端がなく誘導抗力を減少することが期待されているが、実用化はされておらず不明な点も多い。そのため我々は回転しながら飛行する中空円筒に注目する。

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。その飛行中の様子をハイスピードカメラで撮影し、各種空力特性に関するデータを取得する。さらに様々なアスペクト比の円筒を飛行させ、形状による空力特性への影響を調査する。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取得することが出来た。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 形状による空力特性への影響の解明

アスペクト比の異なるリング翼を射出装置から発射し、そこから得られた各種空力特性に関するデータを比較し、アスペクト比が空力特性に与える影響についての関係性を解明した。

2.3 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実施のための予備調査を試みたが公表できる計算結果を得ることはできなかった。

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。運動解析方法についても再検討し、精度向上を図ることができた。またアスペクト比が空力特性に影響を及ぼすことを確認することができた。

数値計算に関しては将来の大規模計算実施時のための計算条件を具体的に検討することができた。

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。さらにはアスペクト比が空力特性に与える影響についても確認することができた。しかしながら、さらなる解明には実験精度の向上を図っていく必要がある。および数値解析を用いて解析を実現させる必要がある。来年度からは秋田大学の足立先生も研究に加わる予定であり、数値計算によるリング翼の特性の解明が期待できる。さらに風洞実験の実施も予定している。様々な角度からのアプローチによってリング翼の特性の解明に努めていく予定である

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)

学術雑誌 (解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

- [1] “Effects on the Aerodynamics of a Spinning Hollow Cylinder in Flight” D. Tanaka, T. Wada, Y. Naito, M. Nakano, J. Ishimoto, H. Tanigawa, K. Hirata, The twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023).

国内学会・研究会等

- [1] “回転しながら飛行する中空円筒の実験” 田中大貴, 中野政身, 石本淳, 谷川博哉, 野口尚史, 平田勝哉, 第87回ターボ機械協会講演会(2022).

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	CL09APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 07 月 23 日提出

ロータ配置の対称性に着目したマルチロータ機の地面効果の解明

大塚 光, 得竹 浩

金沢大学理工研究域フロンティア工学系 助教, 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

1.1 研究の背景と目的

複数の回転翼を持つ小型マルチロータ機は、ロータ推力が地面近傍で地面効果によって、地面からの高さに応じて変動する。これまでの実験から、1つの独立したロータと異なり、マルチロータ機のロータ推力は、地面との距離に対して単調に変化しないことが分かっている。推力が地面との距離に対して単調に変化しないことで、軽い機体は着陸時に機体の高さ位置が振動しやすく、着陸時に転倒するリスクが有る。そのため、離着陸時の推力制御や、地面効果を抑制する手法を検討するために、マルチロータ機の地面効果時の流れ場と推力変動メカニズムの解明が求められる。

一方、マルチロータ機の地面効果解析は、流れが発達しきるまでにかかる計算ステップ数が多く、複数ロータを解析対象とするために計算コストがかかる。そこで、計算コスト削減を狙って、ロータの対称性に基づいて計算領域を1/4にした解析を行う。全機での解析と1/4モデルの解析結果を比較することで、1/4モデル解析の妥当性を評価する。

本研究の最終目的は、地面効果を生じる条件でのクアッドロータ機後流の3次元流れ構造の解明である。

1.2 研究期間内の最終目標

2023年度の目標は、主に3つである。1,2を行うことで、クアッドロータ機周り流れの解析時間の短縮と、3次元流れ構造を明らかにする解析データを得る。なお、目標の3つ目は、暫定の解析結果を鑑み、課題を発展させるために行った。

1. 全機と1/4モデルでの地面効果中の推力と噴流の比較
2. 4ロータモデルの高さ変化による推力変化解析(4条件)
3. 一様流中のロータに働く空気力評価

2. 研究成果の内容

複数ロータかつ、地面効果を生じるロータ周りの流れ解析には、計算コストを必要とする。よって、研究を現実的な期間内で終えるためには、スーパーコンピュータを用いた計算を必要とした。

2.1 全機モデルと 1/4 モデルの比較

解析結果の収束が不十分であったものの 2022 年度の解析結果から、計算領域を対称として解析することで、全機モデルよりも噴流の速度が速まることが予想された。2023 年度前半は、本解析ケースの収束まで解析を行った。予想通り、解析結果からは、1/4 モデルにおいてロータ間を上昇する噴水流が加速することを確認した。クアッドロータ機まわりで噴水流が成長する領域では、流れが非対称性を持ち、混合しながら流れが上昇していくが、対称面を設けることで混合が弱まり、噴水流が加速したと思われる。

この状態を実際に模擬し、1 ロータを 2 つの壁で囲った状態と 4 ロータの状態で流れの可視化実験を行ったところ、2 辺の壁が接する辺に沿って、4 ロータ形態よりも早い噴水流が形成されることを確認した。これらの結果から、CFD 解析にあたっては、全機モデルの解析を要することを確認した。この効果については実験と、CFD 解析による追加解析を実施する予定である。

2.2 4 ロータモデルの解析

実験で観測が難しい微細な流れ構造を明らかにするため、ロータ間隔と高さを変えて 4 ロータモデルの解析を行った(4 条件)。プログラムの並列計算機能制約と計算コストの高さから、1 ケースの収束に約 2 ヶ月を要した。解析は期間内に完了したが、可視化や空気力解析を終える前にシステム更新期間を迎えたため、2024 年度の新システム更新後に解析結果の評価を行う予定である。

2.3 一様流中のロータに働く空気力評価

2.1, 2.2 により当初の設定目標に対して一定の検討結果を得たと判断し、次年度の研究内容の発展に向けて、流れ中のロータに働く空気力の解析に着手した。単独ロータの解析を行い、クアッドロータ機形態で解析を行うための比較用データを得た。

また、解析により、ロータブレードを下側に傾ける形態とする(負のプリコング角の付与)ことで、ロータに働く機首上げピッチングモーメントを低減できることを確認した。

3. 研究目標の達成状況

当初狙っていた対称性に着目した、計算コスト低減は実現できないことを確認した。一方で、最終目標であった CFD 解析による地面効果発生時のクアッドロータ機後流の解析結果を得ることができた。これらの解析により、2 辺の壁とロータの間で生じる噴水流の様子を把握し、推力変化への影響が示唆された。この結果に基づいて実験による推力変化解析を行っており、今後成果を取りまとめる予定である。

また、一様流れ中の単独ロータの解析においては、プリコング角とピッチングモーメントの関係を明らかにした。解析により、4 機モデルでの解析準備を進めるとともに、流れ中のロ

ータに働く空気力の特性を変化させる手法と，その効果を明らかにした．

4. まとめと今後の課題

対称解析モデルによるクアッドロータ機周り流れ場の計算コスト削減は難しいことを確認した．一方で，今年度の解析により，地面効果を受けるクアッドロータ機後流の解析データを得た．2024年度は本解析データの評価を行い，実験的手法では観測が難しかった，詳細な後流構造を分析する．また，研究課題を発展させるための一様流中のロータ周り流れの解析を行い，解析の習熟と，ロータのピッチングモーメント特性を変化させる手法を構築した．

今後は，既解析データの分析と，一様流中を飛行するクアッドロータ機周り流れの解析に取り組み，ロータ間流れ干渉とロータ推力の関係を明らかにする．

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）

該当なし．

著書

該当なし．

国際学会

[1] T. Hara, H. Otsuka, H. Tokutake, and H. Nagai: Preliminary Study on Quadrotor Wake in Ground Effect Using Symmetry Walls,” Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information(2022), CRF-41, Sendai, Japan.

[2] H. Otsuka, T. Hara, H. Tokutake, and H. Nagai: Simulation of Fountain Flow Development in Quadrotor Wake with Symmetry Boundary Condition, Twenty-third International Symposium on Advanced Fluid Information(2023), CRF-39, Sendai, Japan.

国内学会・研究会等

[1] 大塚光，加藤優紀，森健登，米田将吾，砂田茂，得竹浩：プリコニング角に対する横風中のロータピッチングモーメントの評価，第55回流体力学講演会および第41回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム(2023)，2C05，東京．

[2] 赤羽峻瑛，原大生，大塚光，得竹浩，伊神翼，永井大樹：頂点効果によるロータ推力変動の評価，第61回飛行機シンポジウム(2023)，1F12，北九州市．

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

[1] 大塚光，加藤優紀，森健登，米田将吾，砂田茂，得竹浩：プリコニング角に対する横風中のロータピッチングモーメントの評価，第55回流体力学講演会/第41回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム最優秀賞(流体力学部門)，(2023)．

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL10APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年7月20日提出

大空間の自然対流境界層の制御手法の創成のためのメカニズム解明

小宮敦樹，小泉匠摩

東北大学流体科学研究所 教授，博士後期過程二年

古川 琢磨

八戸工業高等専門学校 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

本研究では大空間で生じる自然対流境界層の制御手法を確立することを目的とする。具体的には、微弱噴流および壁面の放射率制御による境界層の能動制御手法を確立する。本目的を達成するために、研究グループで開発してきた OpenFOAM 解析ライブラリを用いた、Large Eddy Simulation (LES)、Direct Numerical Simulation (DNS) を実施する。さらに、位相シフト型光干渉計および Back Oriented Schlieren (BOS) 法による境界層可視化実験との定量比較を行う。既存の自然対流境界層の能動制御手法は、強制対流との共存対流として取り扱っており、自然対流境界層の性質が消失したものであった。その中で、自然対流境界層の性質を維持しつつ、自然対流境界層の能動制御を目的とする本研究の意義は大きく、本研究により省エネルギー、循環社会に対するマイルストーンとなる技術の創成が可能となる。

1.2 研究期間内の最終目標

A. 微弱噴流による制御創成に関する研究

本研究では目的に応じて DNS と LES の 2 つの数値シミュレーションを行う。通常自然対流では層流から乱流への遷移が生じるが、噴流を用いた共鳴の場合、層流—乱流遷移の間に共鳴が生じる。そこで DNS により、共鳴から乱流への遷移過程の解明を行う。一方 LES では、加熱平板を用いた実験における条件決定に向け、伝熱促進に有効な噴流条件（速度、温度、構成等）の探索を行う。

B. 放射率制御による境界層制御に関する研究

本研究では表面の放射率特性を制御することによって、自然対流境界層制御可能性について検討を行う。具体的には自然対流が発達する壁面に対して、放射率が異なる壁面を交互に設置し、その交互設置によって境界層の渦生成が促進する可能性について言及する。本評価には、多数の光線を放出可能なふく射ライブラリを使用して DNS による解析を行う。そして、光干渉計との比較による定量的な検証も行う。

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）

A. 微弱な衝突噴流における自然対流境界層の共鳴現象と伝熱促進

本研究では、浮力を有する微弱な衝突噴流を自然対流の上流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、特に噴流構成が不安定性に与える影響について数値解析を用いて議論した。共同研究者の古川分担者は自然対流境界層の乱流場に関して知見を有しており、共同研究を推進することで境界層の数値解析の妥当な方法論を構築することができた。数値解析の結果、噴流出口と壁との距離、噴流設置高さ、ノズル幅が噴流衝突領域での不安定性の発現に影響を与えることが明らかとなった。また、比較的大きな不安定性が生じている場合、噴流下部（自然対流上流側）に渦が存在していることも新たな発見であった。この渦は上述の噴流構成によって形状が変化することから、本結果は噴流構成と不安定性の関係の解明、それに続く不安定発現メカニズムの解明に繋がる可能性がある。本研究は微弱な衝突噴流による自然対流境界層の共鳴現象の一般化に向けた一歩となったことから、本研究の意義は大きいと考える。

B. 放射率制御による境界層制御に関する研究

本研究期間中は OpenFOAM のふく射ライブラリを使用して、放射率制御時の自然対流境界層の数値解析を行った。計算対象として非対称加熱・冷却壁面を有する自然対流境界層に着目した。共同研究者の古川分担者はふく射伝熱に関して造詣が深く、連成解析プログラムの修正に貢献した。数値解析では上下の断熱壁の放射率を変更させ断熱壁周囲の温度境界層に対する影響を評価した。解析の結果、断熱壁周辺において交互に放射率が異なる壁面を設置した時、上部、下部において流体温度が低下、上昇することが明らかとなった。今回の解析では放射率が異なる壁面は 5 分割としていたが、今後はその分割数を増やしてその分割数の影響を評価する予定である。また本研究期間中では上記計算条件を模擬する矩形キャビティを作成した。今後は作成した実験装置を使用して光干渉計、BOS 法で取得した温度境界層分布との比較を行っていく予定である。

3. 研究目標の達成状況

A. 微弱な衝突噴流における自然対流境界層の共鳴現象と伝熱促進

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について、不安定性の強度の観点から議論を行った。衝突噴流の構成が変化すると、噴流衝突領域における不安定性強度が変化し、従う境界層の挙動が共鳴または層流と変化することが明らかとなった。本研究では噴流衝突による不安定生成と境界層の不安定成長の因子解明を目的としており、ノズル幅等の噴流構成によって不安定の発現が変化することを示唆した点において本研究の主目的はおおむね達成できたと考える。

B. 放射率制御による境界層制御に関する研究

本研究期間中では実験との比較を行うことはできなかったが、異なる放射率の壁面を交互に設置することで、断熱壁周囲の温度境界層を制御できる可能性が示唆された。本研究の主目的である放射率制御による境界層制御に関する知見は創出できたと考えており、本研究目的はおおむね達成することができたと考える。

4. まとめと今後の課題

A. 微弱な衝突噴流における自然対流境界層の共鳴現象と伝熱促進

本研究期間によって、微小噴流の構成変化による自然対流境界層の不安定生成について論じた。計算結果では、不安定性の強度の観点から噴流構成が不安定性生成に与える影響について議論した。今後は共鳴現象生成に向けた噴流構成の一般化を行う。また、不安定生成に対する臨界レイリー数の評価を加えることで、不安定生成のメカニズム解明及び不安定成長にかかる浮力・慣性力の支配性に関する評価を行う予定である。

B. 放射率制御による境界層制御に関する研究

本研究期間で構築した矩形キャビティの実験装置を使用して、今後は実験で可視化計測した温度境界層との比較を行っていく予定である。また放射率が異なる壁面の分割数を増やしてその境界層制御の可能性について言及していく予定である。

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）

学術雑誌（解説等を含む）

- T. Koizumi, T. Kogawa, J. F. Torres, Y. Kanda, A. Komiya, “Controlling instability waves on vertical natural convection using a buoyant impinging jet”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 148, (2023), 107033.

国際学会

- Takuma Koizumi, Takuma Kogawa, Juan F. Torres, Steven Armfield, and Atsuki Komiya: Evaluation of the effect of distance from the jet outlet on periodic flow generation on a heated wall, 12th Australasian Natural Convection Workshop, (2023), pp.45-46.

国内学会・研究会等

- 小泉匠摩, 小宮敦樹: 低レイノルズ数浮力衝突噴流による共鳴現象を用いた伝熱促進, 第10回東北大学若手研究者アンサンブルワークショップ, P-11., (2023).
- 小泉匠摩, 古川琢磨, Juan F. Torres, 神田雄貴, 小宮敦樹: 低レイノルズ数浮力衝突噴流が自然対流温度境界層に与える影響評価, 第60回日本伝熱シンポジウム講演論文集, H1444., (2023).
- 高木松誠, 小泉匠摩, 古川琢磨, 小宮敦樹: 矩形キャビティ内部の壁面放射率特性が自然対流温度境界層に及ぼす影響の評価, 第60回日本伝熱シンポジウム講演論文集, J224, (2023).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

- 令和5年, 優秀講演賞, 東北大学アンサンブルワークショップ
- 令和5年, 優秀プレゼンテーション賞, 日本伝熱シンポジウム

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL13APR23
研究種別	公募共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年7月30日提出

回転二重円筒/円すい間に発生するテイラー渦の非線形分岐挙動と

動的モード分解

足立 高弘, 秋永 加奈, 谷田 開

秋田大学理工学研究科 教授, 技術職員, 大学院 D1

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.

先行研究として, 二重円筒間のテイラー・クエット流に関する研究は数多くなされている. その中でも, 内側の円筒のみを軸中心に回転させて円筒間の流れ挙動を調べた研究では, 内円筒の回転速度に応じたある臨界点で周方向の回転流が不安定となり円筒間にはテイラー渦が発生する. この遷移の形態は, 円筒長さ l と円筒の幅 b の比で表されるアスペクト A を無限大($l/b \rightarrow \infty$, 円筒が無限長)としたときに, 完全なピッチ・フォーク分岐となることがわかっている. しかし, アスペクト比が有限の大きさ(上下に蓋のある系)の場合には, 渦の発生形態は不完全分岐となり, さらに回転数を大きくすることで複雑な分岐現象を示す. アスペクト比の変化に対して, 豊富な遷移現象が現われるため分岐理論を用いた観点から多くの研究が行われている. 一方で, 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. 上述のように分岐の様相は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については不明な点が多い.

本研究では同心二重円筒/円すい間内の渦形態が遷移する条件を解明するために, 線形安定性

および非線形分岐理論を用いた安定解析を行う。さらに、分岐が生じた後の流れを基礎方程式の時間発展をスペクトル・エレメント法あるいは OpenFOAM を用いてシミュレーションすることで明らかにする。さらに、得られた数値シミュレーションの結果を用いて動的モード解析を行う。動的モード解析では、多数のモードが出力され、対象とする現象を説明する支配的なモードがどのモードであるかを動的モード解析の結果のみから特定することは一般に難しく、その手法の確立には新規性がある。本研究では、線形安定解析から得られた不安定モードの固有関数と動的不安定解析で得られたモードの比較を行い、現象を支配するモードを抽出する方法の確立を目指す試みを実施する。動的モード解析は、データ駆動型サイエンスにおける比較的新しい手法であり、本解析手法の活用法を研究することで熱流体力学における非線形挙動の解明に新しい切り口で迫ることが可能となる。

1.2 研究の背景と目的

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自作 Fortran のスペクトル・エレメント法、OpenFOAM 等の流体解析ソフトを用いて明らかにし、さらにそれらの時系列空間データを用いて DMD 解析手法を確立することが目的である。

本研究で取り扱う回転二重円筒/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。円すいの場合には特に、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。一方、学術的な特色としては、データ駆動型サイエンスに基づく方法を導入し、既存のナビエ・ストークス方程式に基づく決定論的な方法とデータを元にした特徴抽出による手法との比較を行うことを目的とする。

1.3 研究期間内の最終目標

本研究で取り扱う回転二重円筒/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。円すいの場合には特に、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。一方、学術的な特色としては、データ駆動型サイエンスに基づく方法を導入し、既存のナビエ・ストークス方程式に基づく決定論的な方法とデータを元にした特徴抽出による手法との比較を行い、DMD 解析手法を確立するが最終的な目標である。

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 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。本研究課題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

2022年度は、側壁が傾斜しない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時間発展方程式の数値計算を実施した。図1(a)は有次元系における物理モデルであり、図1(b)は無次元系における物理モデルである。

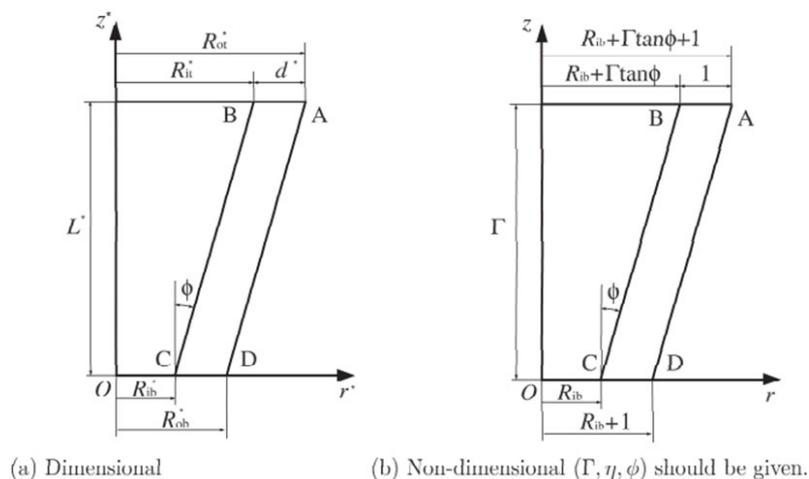


図1 物理モデル

Lopez and Francisco(2005, Physica D) の先行研究によると、 $\Gamma = 3.75, \eta = 0.5$ モデルでは、レイノルズ数を上げていくと $Re = 120$ 付近で Hopf 分岐を迎え、 $Re = 120 \sim 150$ では非定常解が発生するとされている。したがって本研究では、 $\Gamma = 3.75, \eta = 0.5, Re = 130$ に注目し

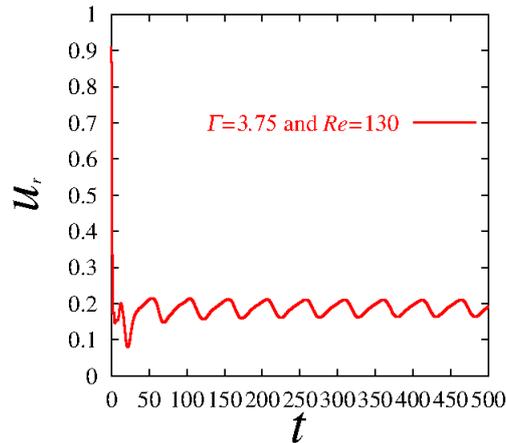


図2 $\Gamma = 3.75, \eta = 0.5, Re = 130$ の時間発展

て研究を進めている。Fortran のスペクトル・エレメント法で時間発展を求めた。その時の様子を図2に示す。先行研究に示されていた通り、非定常解が発生していることが確認できる。十分に時間が経過した安定状態の非定常解の波の山と次の山との間隔から角周波数を求めると、周波数は $\omega_p = 0.1280$ と求められる。この非定常解の揺れの原因を究明するために、ある時刻の速度と1周期の平均速度との差の絶対値を商用可視化ソフトAVSを用いてマッピングした結果を図3に示す。

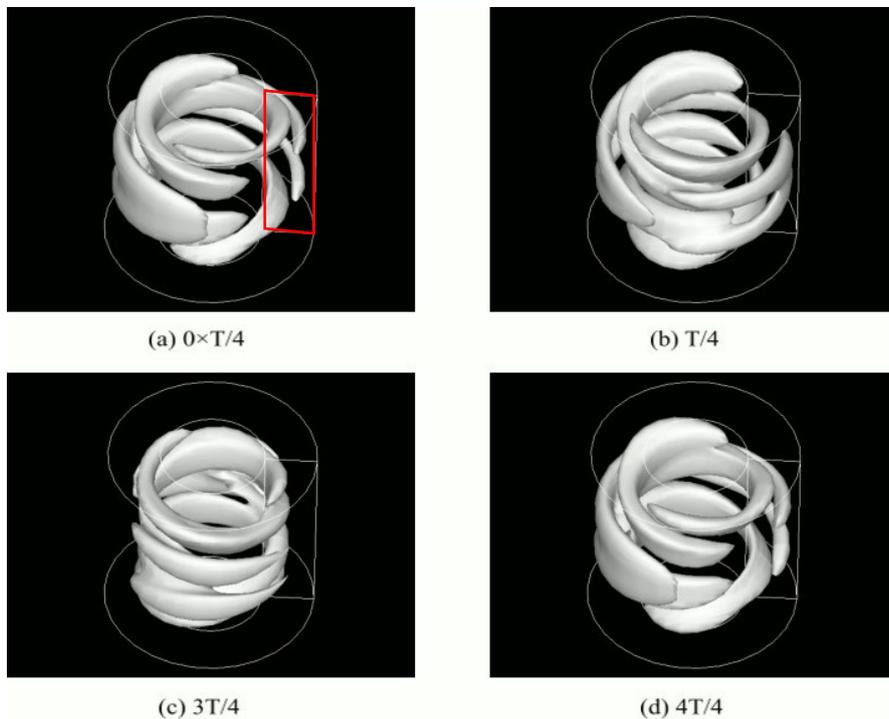


図3 揺れの原因の3次元マッピング

この図で、赤線で示した平面は $\theta = 0$ の $r-z$ 平面である。この平面を貫く指形状のフィンガ一の数に着目すると4本の時と6本の時があり、この解の揺れの原因になっていると考えられる。続いて、このモデルの1周期分の時間発展の解について線形安定性解析とDMDを実

行した結果について述べる。まず線形安定性解析の結果について示す。解析の結果、不安定な定常解として、図4に描くようなベクトル場を持つ解を観察できた。図の中央部には1対の渦対が存在し、この流れはHopf分岐前のベクトル場に似ていることがわかる。

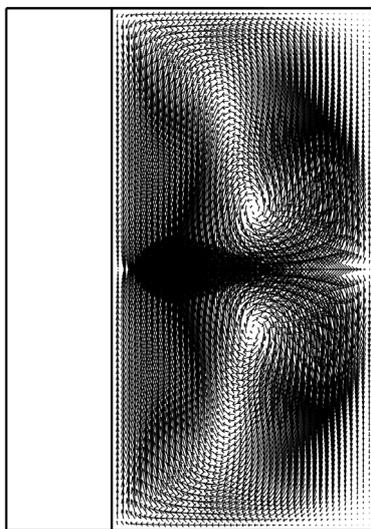
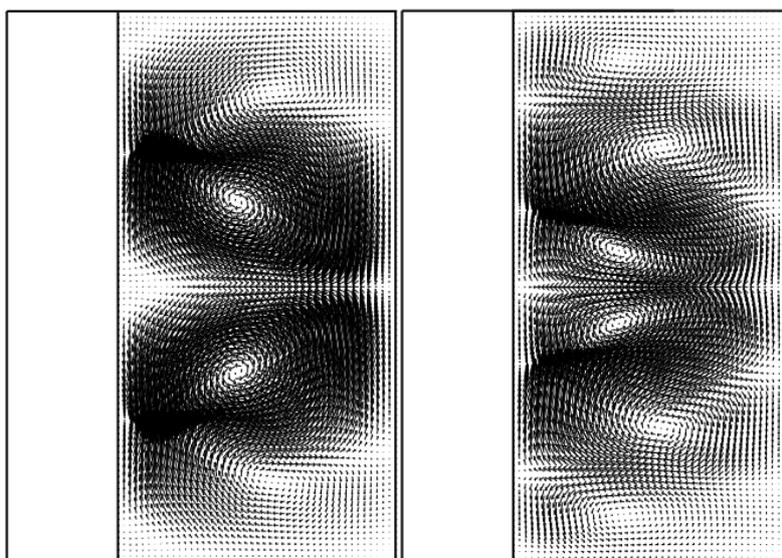


図4 不安定な定常解が示すベクトル場

さらに、最大不安定モードを観察すると、このモードの実部と虚部が示すベクトル場はそれぞれ、図5である。実部では2対の渦対が発生している一方で、虚部では3対の渦対を観察できた。さらに、この実部と虚部は $2/\pi$ 位相がずれて現れることがわかった。また、このモードの角周波数は、 $\omega_c = 0.1255$ ということもわかった。以上の結果から、図4で示した不安定な定常解（1対の渦対をもつベクトル場）と最大不安定モード（2, 3対の渦対をもつベクトル場）が重なり合わさり非定常解が発生していることが分かった。



(a) 実部

(b) 虚部

図5 最大不安定モードが示すベクトル場

続いて、DMD の結果を示す。スペクトル・エレメント法によって求めた計 N 個のすべてのノードにおける速度と圧力 $u_{\theta}, v_{\theta}, w_{\theta}, p_{\theta}$ の値 1 周期分をスナップショットデータとして DMD を行う。DMD は物理現象をいくつかのモードに分解する手法だが、本研究では 3 つのモードに着目し解析を進める。それは、線形安定性解析の結果から、本現象に影響するモードの数は 3 つ程度だという予測ができたためである。この時 Mode1 で特徴的な流れを観測することができた。Mode1 の角周波数は $\omega_{dmd} = 0.1279$ とスペクトル・エレメント法と線形安定性解析の結果を一致するものである。Mode1 のベクトル場を図 6 に示す。 $\theta = 0, \pi$ の $r-z$ 平面には 3 対の渦対が観測された一方で、 $\theta = \pi/2, 3/2\pi$ では 2 対の渦対が観測できる。この結果は線形安定性解析の結果とも辻褄が合う。したがって、本モデルの非定常解の原因は Mode1 に示すような流れであることが分かる。

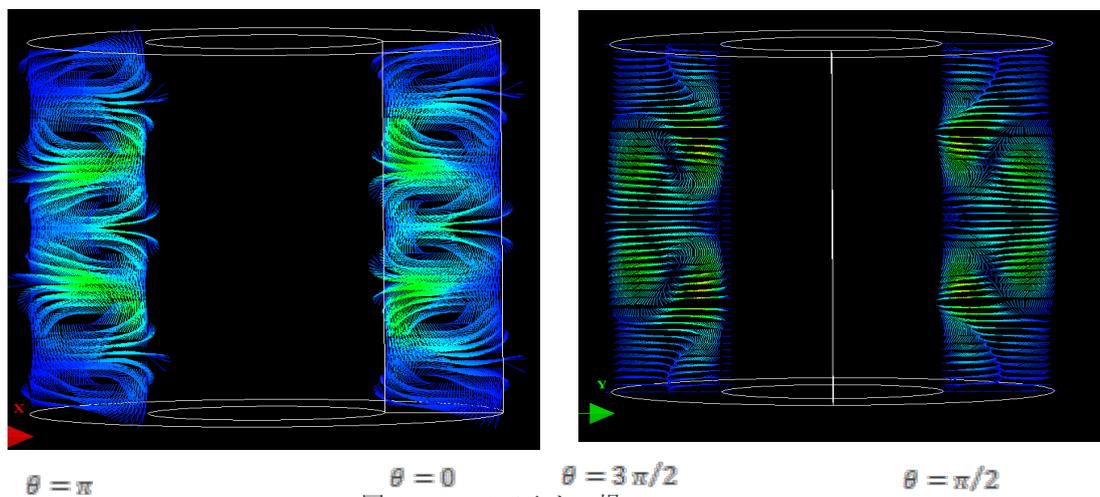


図.6 Mode1 のベクトル場

4. まとめと今後の課題

本研究では同心二重円筒間内の渦形態が遷移する条件を解明するために、線形安定性および非線形分岐理論を用いた安定解析を行った。さらに、分岐が生じた後の流れを基礎方程式の時間発展をシミュレーションすることで明らかにすることを試みた。時間発展のシミュレーションの結果から、その周期を求め、1 周期分の解から DMD を実行した。その結果線形安定性解析の結果と似た非定常解の原因となるモードを特定することができた。しかし、今回の DMD には、線形安定性解析から得た知見を用いており、本来の目的である、DMD の結果のみから支配的なモードの特定には至っていない。したがって、今後はさらなる安定性解析の結果との比較と、多分野に知見を広げ統計学等の知見を参考にした現象を支配するモードを抽出する方法の確立を目指す。

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）

国際学会

- 1) 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)

- 2) Hiraku Yata, Kana Akinaga, Valery Botton, Atsuki Komiya, Takahiro Adachi, Nonlinear Bifurcation and Dynamic Mode decomposition for Taylor Vortex in Gap between Rotating Two Cylinders/Cones, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2023)
- 3) Hiraku Yata, Kana Akinaga, Atsuki Komoya, Takahiro Adachi, Identification of dominant modes of flow between rotational conical cones by linear stability and DMD analyses, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2024) 予定

国内学会

- 1) 谷田開, 足立高弘: 回転2重円筒間におけるテイラー渦の非線形分岐解析と動的モード分解の関係, 日本機械学会東北支部第59期秋季後援会, 2023

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL14APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年8月24日提出

直交格子による超音速／極超音速下における熱流束予測

大林 茂, 焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 教授, 助教

佐々木 大輔, 森 浩一, 小川 泰一郎

大阪公立大学大学院工学研究科 教授, 教授, 助教

森合 秀樹

金沢工業大学工学部 教授

高橋 俊

宇宙航空研究開発機構 主任研究開発員

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

近年, 民間の宇宙船による宇宙飛行が成功する等, 宇宙ビジネスに注目が集まっている. 宇宙旅行をより身近にすることが期待される宇宙往還機では, 主に先端部周辺で生じる高い熱流束の高精度かつ高効率の予測が不可欠であり, CFDにおける精度良い推算が求められている. これまで開発してきた直交格子法は, 実機等の複雑形状に対して容易に解析を実施することが可能であるが, 熱流束の予測精度は実用レベルに達しているとは言い難い. そこで, 本研究では, 超音速／極超音速流れ下における熱流束予測精度の向上を目的として, 埋め込み境界法の改良を図る.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では, 超音速／極超音速流れ下における熱流束予測精度の向上を目的として, 埋め込み境界法の改良を図る. 具体的な解析対象として, くさび型から生じる衝撃波背後の熱流束を推算し, 構造格子による解析結果との比較を通して妥当性を明らかにする. 埋め込み境界法の取り扱いやイメージポイントの距離を変え, 圧力係数や表面熱流束の変化を明らかにする.

2. 研究成果の内容

本研究は, 複数機関の研究者から構成される共同研究により実施された. その結果, 流体

解析で得られた結果を議論することで、問題点や改善点について明らかにすることができたため、非常に意義のある共同研究であった。

本研究では、直交格子法における超音速流れ場の熱流束の予測精度を実証すると共に向上させるため、埋め込み境界法の開発と改良を行ってきた。くさび型を対象として、くさび型より生じる斜め衝撃波を対象として直交格子上での熱流束予測を行った。流入マッハ数 3、レイノルズ数 10^5 の条件において、得られた解析結果より、比較対象とした構造格子の解析 (BFC) に比べて、衝撃波距離の若干のずれが確認できる。また、温度分布を比較すると、直交格子では、格子密度によらず BFC に比べて物体近傍の温度勾配が低く予測されていることが確認できる。本解析結果より、直交格子法と埋め込み境界法を用いた解析により、超音速流れにおいて表面熱流束予測が可能であることは示されたが、精度に関しては格子細分化や埋め込み境界法の修正により、更なる改善の必要がある。

3. 研究目標の達成状況

本研究で開発した直交格子法 CFD により、くさび型形状の表面温度・熱流束分布予測が可能であることを示した。直交格子 CFD ワークショップにおける参照値 (BFC) との比較により、同様の分布が得られている一方、物体近傍における予測精度には更なる改善の余地があることが明らかとなった。今後、超音速飛行体の空力設計・熱設計に活用するには、更なる予測精度の向上が必要である。

4. まとめと今後の課題

本研究では、超音速／極超音速で飛行する機体から生じる衝撃波に伴う表面熱流束予測可能な直交格子法の研究を行っている。今年度の結果より、くさび型形状の表面熱流束分布を予測することが可能となったが、実用性の向上には解析精度の改善が不可欠である。今後、物体近傍の格子密度の細分化や埋め込み境界法の改善を図り、予測精度の向上を目指す。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌 (解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

Daisuke Sasaki, Kentaro Miyata, Shinichiro Ogawa, Koichi Mori, Kumpei Abe, Shoya Yoshinaga, Hideaki Moriai, Shun Takahashi, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Study on Heat Flux Prediction Method for Cartesian-Mesh CFD under Supersonic Flows, Proceedings of the Twenty-third International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2023), CRF-42, pp. 122-123.

Kumpei Abe, Keishiro Yoshida, Daisuke Sasaki, Shun Takahashi, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Estimating Heat Flux on a Wedge in Supersonic Flow Using Building-Cube Method, Proceedings of the 14th Asian Computational Fluid Dynamics, Bengaluru, (2023), Paper ID 17.

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	CL18APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.4~2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年7月23日提出

数値シミュレーションによるアンモニア球状火炎伝播特性の解明

中村 寿

東北大学流体科学研究所 准教授

武藤 昌也

名城大学理工学部 准教授

橋本 望

北海道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

通常重力下における球状火炎伝播実験はこれまでに国内外で多数実施されているが、微小重力環境下においてアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝播を対象とした研究例はこれまでにほとんど報告されていない。本研究では、三次元直接数値シミュレーションを実施できる流体計算用コードを用いて、微小重力下および通常重力下でのアンモニアの球状火炎伝播計算を実施し、これまで国内外で取得されてきた微小重力下および通常重力下でのアンモニア/空気予混合気の燃焼速度計測実験に対して、浮力の影響がどのようなメカニズムで作用しているのかを明らかにすることを試みる。このことにより、これまで取得されてきた世界中の実験データに補正を加える必要性を議論することができるようになり、今後のアンモニアを燃料として利用する様々な機器の設計に必要な燃焼速度に関して、精度の高いデータを提供することが可能となると期待される。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間内では、数値シミュレーションによりアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝播特性を明らかにする。過去に北海道大学において実施された、微小重力環境下におけるアンモニア/空気予混合気の火炎伝播実験と地上の通常重力下で実施した火炎伝播実験を再現するような数値シミュレーションを行い、実験結果との差異を再現することを試みる。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

本研究では、数値シミュレーションによりアンモニアの球状火炎伝播特性を明らかにするため、UCバークレーのGRI-Mech 3.0 (Smith *et al.*, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/), および東北大学流体科学研究所・中村寿准教授が構築したアンモニア詳細化学反応機

構 (Tamaoki *et al.*, 2023) を、三次元直接数値シミュレーションを実施できる流体計算コードに実装し、微小重力下および通常重力下での火炎伝播計算を試みた。

2.2 解析手法の妥当性の検証

2.1 節で開発した解析手法により、通常重力下においては、いずれの当量比下においても数値シミュレーションの結果は実験計測値と概ね一致し、本シミュレーション手法の妥当性が確認された。

3. 研究目標の達成状況

本研究期間内において、数値シミュレーションにより、実験計測で得られたアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝播特性を明らかにすることを試みた。その結果、本数値シミュレーション手法の妥当性を確認することはできたが、実験計測における微小重力下および通常重力下での火炎伝播速度の差異を再現するまでには至らず、達成状況としてはやや不十分と考えられる。

4. まとめと今後の課題

本研究では、数値シミュレーションによりアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝播特性を明らかにすることを試みた。その結果、通常重力下においては、実験計測値と概ね一致するような数値シミュレーション結果を得たが、微小重力下では実験計測値による火炎伝播速度を過小評価し、実験計測で得られた火炎伝播速度の差異を再現するまでには至らなかった。今後は、用いる詳細化学反応モデルや化学種毎の拡散係数の差異の適用など、さらなる計算手法の検討や計算精度の向上が課題である。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌 (解説等を含む)

該当せず

著書

該当せず

国際学会

M. Muto, Y. Xia, N. Hashimoto, H. Nakamura and R. Kurose: Numerical simulation of laminar flame propagation of NH_3/air premixture under microgravity condition, *19th International Conference on Numerical Combustion*, (2024), pp. 53.

M. Muto, Y. Xia, N. Hashimoto, H. Nakamura and R. Kurose: Study of laminar flame propagation of ammonia/air premixture under microgravity conditions using numerical simulation. *CI's 40th International Symposium*, (2024), poster.

国内学会・研究会等

該当せず

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

該当せず

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL19APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月22日提出

アンモニア非予混合バーナー保炎消炎機構の解明：再循環流領域における化学反応の役割について

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（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

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、また、その燃焼技術の開発が推進されている。本研究で対象とするアンモニアは、代替燃料の有力候補である水素の高密度キャリアであるだけでなく、アンモニア自体が直接燃焼可能な代替燃料の候補として考えられている。しかし、従来から広く用いられてきたメタンやプロパンなどの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（NOx）発生といった欠点を克服する燃焼技術の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詳細反応機構を用いた燃焼 CFD（Computational fluid dynamics）解析を行う。特に、バーナー火炎の保炎および消炎現象の解明を目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

これまでに、バーナー火炎の保炎消炎現象に対するリム厚と酸素富化率の影響を解析してきた。本研究では、それらの結果を踏まえ、新たなパラメータとなる燃料および酸化剤噴流速度の影響を明らかにすることを目的とした。

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 解析手法

アンモニアに限らず、消炎現象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重要となる。本研究の特色は、燃焼 CFD 解析において、詳細

反応機構を適用するである。これにより、化学反応現象の高度予測を可能となる。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 Otomo モデル (30 化学種, 212 反応), Nakamura ら [Nakamura et al., Combust. Flame, 2017] が提案した Nakamura モデル (28 化学種, 229 反応), また Konnov モデル [Konnov and Ruyck, Combust. Sci. Technol., 2001] (30 化学種, 240 反応) を比較解析として用いた。解析では、軸対称条件を仮定した (3 点軸対称解析: 格子点 $268 \times 3 \times 254$)。軸対称バーナー中心からアンモニアが、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 [武石ら, 機論, 2017] を参照いただきたい。

2.2 保炎現象の予測

図 1 に、反応機構 Otomo モデルで得られた保炎消炎境界に関する燃焼 CFD 解析結果と実験の比較、リム厚 6 mm および酸素富化率 24.5% の場合の温度分布と流線を示す。アンモニア噴流流速が 4.0 m/s, 酸化剤噴流流速が 1.5 m/s の場合である。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。Otomo モデルを用いた燃焼 CFD 解析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ることが示されている。ここには示さないが、Nakamura モデルも同じように実験結果を再現し、Konnov モデルの場合には保炎領域を過大に予測する (保炎消炎境界位置が下へ移動する)。流線からリム背後には再循環領域が形成されることが確認できる。その領域内に火炎基部が位置することから、保炎消炎現象に対する再循環領域の重要性が示唆される。リム厚が薄くなれば、再循環領域が小さくなるため、保炎に必要な酸素富化率が高くなることを説明できる (図 1 の保炎消炎境界の傾向)。

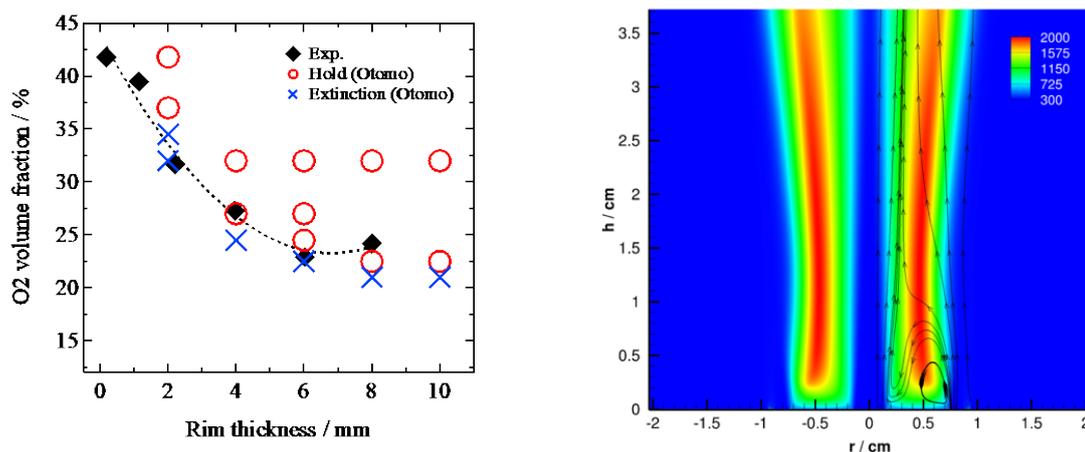


Fig. 1 Prediction of flame-holding boundary and combustion flow fields with Otomo model

2.3 再循環領域における化学反応進行

図 2 に、再循環領域内 ($h = 0.2$ cm) における半径方向の化学種質量分率と温度分布を示す。ここでは各反応機構の結果を比較しており、再循環領域内の NH_3 の質量分率は、Konnov モデ

ルが最も小さく 10^{-3} 程度で、Otomo および Nakamura モデルが 10^{-2} 程度と大きくなる。また、再循環領域内の最高温度も Konnov モデルが最も高く、Nakamura モデル、Otomo モデルと続くことがわかる。この結果から、Konnov モデルでは、再循環領域内において反応が最も速く進行し、 NH_3 の消費、またその結果として熱発生を促進していると考えられる。最高温度が高いことは、火炎基部への熱供給が大きいことを示唆し、その結果、保炎の可能性を高める。これらの結果は、再循環領域における化学反応進行の重要性を具体的に示すものであり、再循環領域内の反応進行の予測精度がバーナー保炎消炎境界の予測精度を決定する重要な要素といえる [寺島ら, 熱工学コンファレンス, 2023].

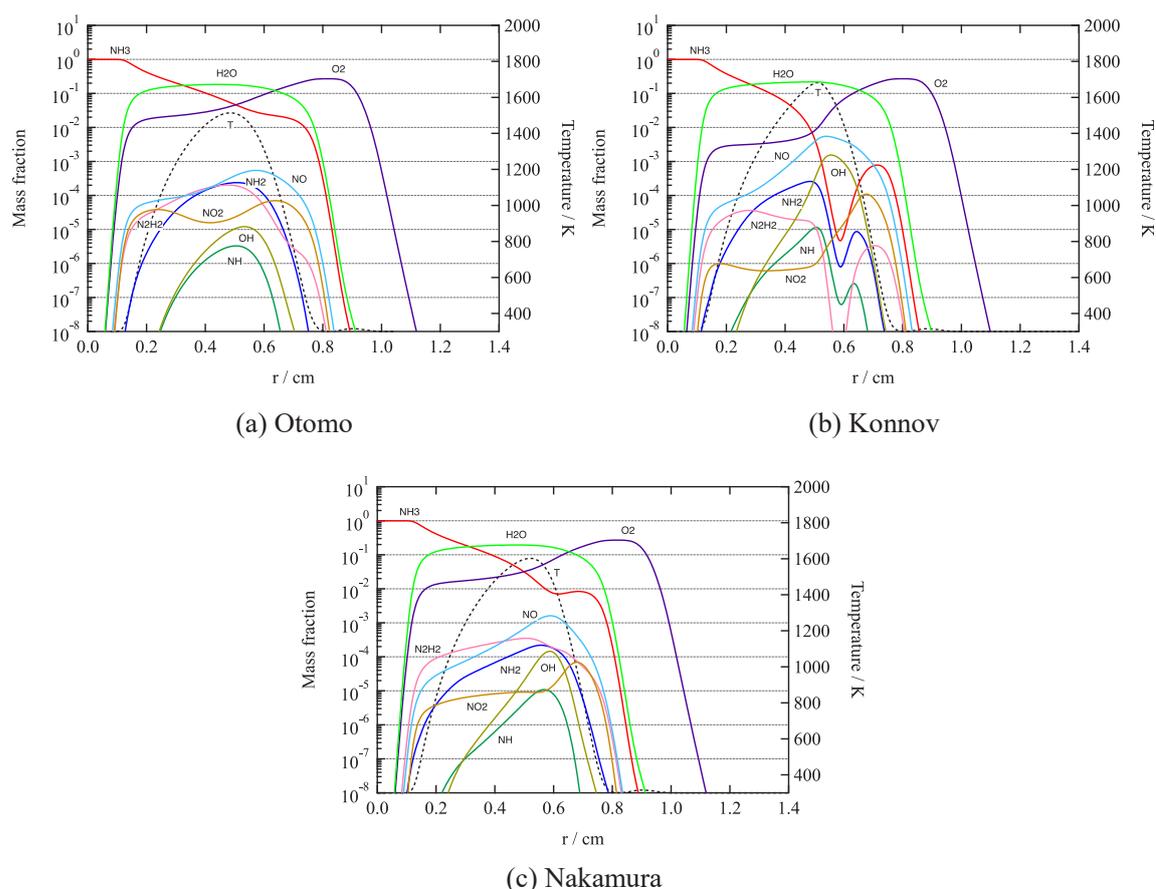


Fig. 2 Profiles of mass fraction of species and temperature in the recirculation region ($h = 0.2$ cm)

2.4 噴流速の影響

図 3 に、リム厚 6 mm, 酸素富化率 25% において、アンモニア噴流流速と酸化剤噴流流速を変化させて得られた保炎消炎境界を示す。実験データは暫定的なものである。境界を特定する十分な数の結果が得られているわけではないが、Otomo および Nakamura モデルの結果を見ると、酸化剤流速が大きな領域では、実験の保炎消炎境界を予測できている一方で、酸化剤流速 1.0 m/s の条件では、保炎領域を過小に見積もっていることがわかる。しかし、この酸化剤流速条件は酸化剤流速 0.5 m/s 付近に位置する実験の保炎消炎境界に近く、正確な予測が難しい条件といえる。一方、Konnov モデルでは、先述したように他のモデルに対して反応進行が早いことがわかっており、全般的に保炎領域を過大に見積もる傾向がある。

図4に、同じ運動量流束比(4.0)である3条件での温度分布と流線の比較を示す。大まかな燃焼流れ場構造は同じであるが、火炎長さや火炎幅が噴流流速に依存していることがわかる。非燃焼流れ場では、再循環領域には双子渦が形成され、その大きさが運動量流束比の関数とされている[水谷, 矢野, 機械学会論文, 1976]。得られた燃焼流れ場を見ると、燃料側の渦は火炎の形成によって明確でなくなるが、酸化剤側の渦(再循環領域)は維持されていることが確認できる。よって、リム背後に形成される流れ場構造は、燃焼の有無によって大きく異なることには注意が必要である。燃焼流れ場における再循環領域の大きさは条件によって異なっており、運動量流束比のみの関数とした非燃焼流れ場での知見[水谷, 矢野, 機械学会論文, 1976]とは異なる。燃料および酸化剤流速が小さくなれば、再循環領域は小さくなり、最終的には燃料および酸化剤の供給が十分なため、消炎に至ると考えられる。一方、燃料および酸化剤流速が大きい条件では、再循環領域を上方に引き伸ばされ、最終的に吹き飛びによって消炎に至ると考えられる。

定常的な燃焼場では、燃焼に至るまでの流れ場構造を把握するのは困難なため、今回得られた燃焼場と非燃焼場との対応を調べていくことで、より詳細に噴流流速条件と保炎消炎現象の関係が明らかにできると考えている。

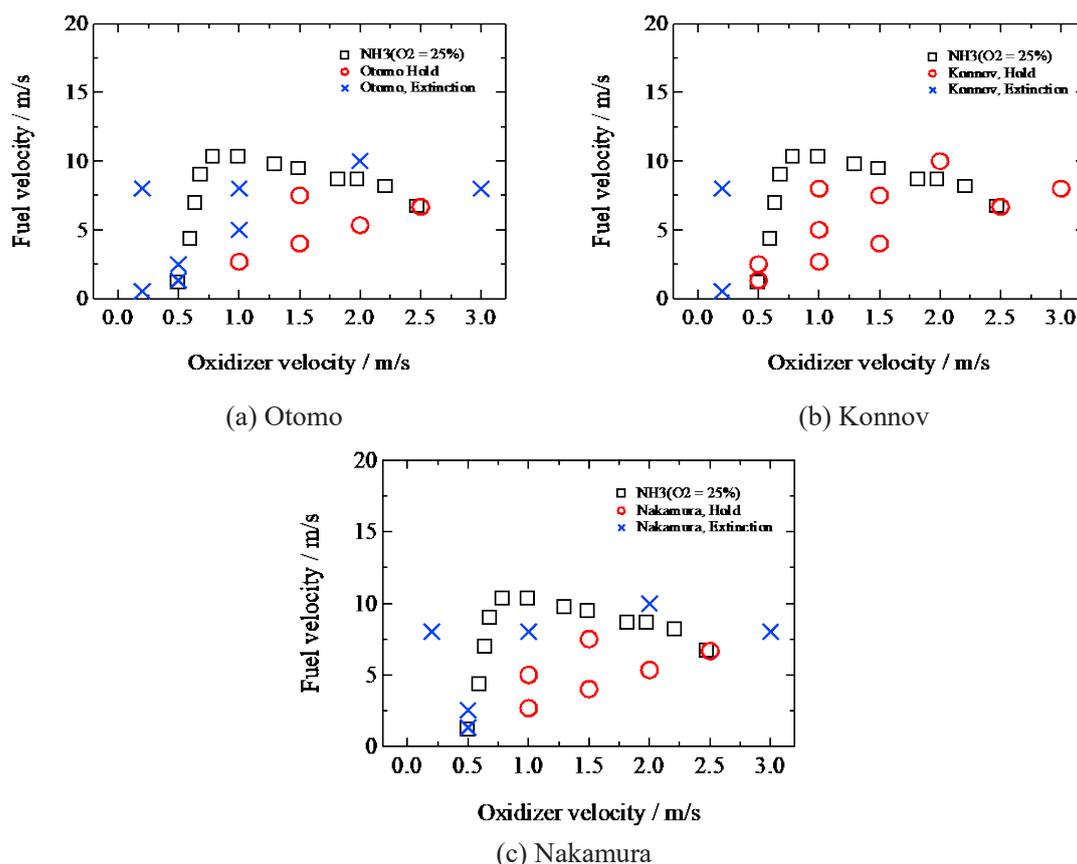


Fig. 3 Comparisons of flame-holding boundary with effects of fuel and oxidizer jet velocities

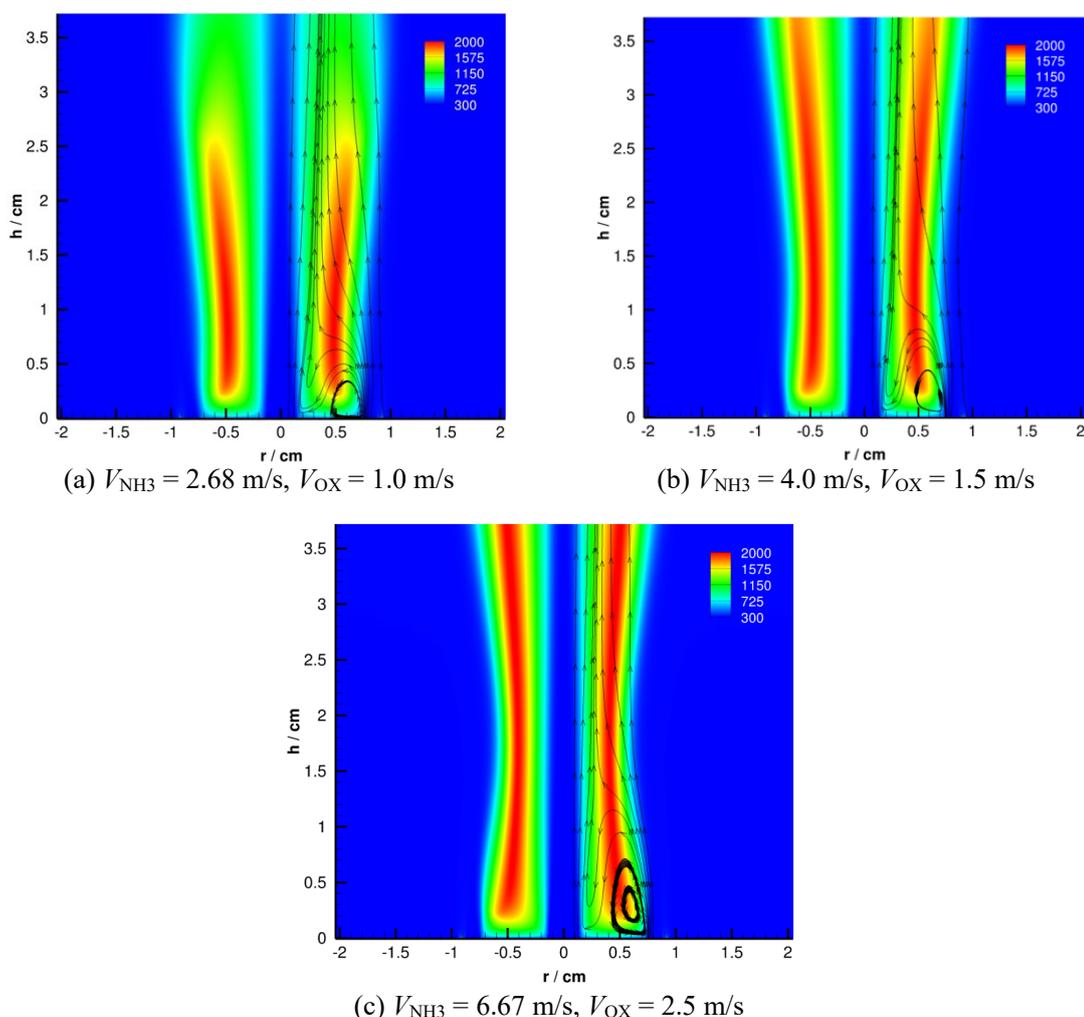


Fig. 4 Comparisons of combustion flow fields under the momentum flux ratio of 4.0

3. 研究目標の達成状況

アンモニア非予混合バーナー火炎に対して、燃料および酸化剤噴流流速を変化させた解析を行い、各反応機構による保炎消炎境界を得ることができた。実験結果との比較では、酸化剤流速が低い領域において若干の違いは見られるが、本数値解析結果が妥当であることを示した。

4. まとめと今後の課題

アンモニア非予混合バーナー火炎の保炎消炎機構を明らかにするため、詳細反応機構を用いた燃焼 CFD 解析を実施した。本燃焼 CFD によって得られた温度や化学種分布から、リム壁背後に形成される再循環領域内の反応進行がバーナー保炎消炎現象の支配要因となることを示した。噴流流速を変化させた解析を行い、燃料および酸化剤流速が小さい条件では、再循環領域への燃料および酸化剤の供給が十分ではなくなり消炎に至ること、大きい条件では、再循環領域は上方に引き伸ばされ、吹き飛びにより消炎に至ることが示唆された。バーナーリム背後の流れ場構造は燃焼の有無で大きく異なるため、非燃焼解析結果を得ることが重要と考えている。燃焼と非燃焼流れ場の比較により、定常燃焼に至るまでの流れ場構造が明らかになり、保炎消炎機構の支配要因を特定できることを期待している。

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

寺島洋史，中村寿，林潤：アンモニア非予混合バーナー保炎消炎機構における再循環領域の重要性について，日本機械学会熱工学コンファレンス (2023).

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	CL23APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

物理駆動機械学習を用いた有機材料の構造/熱物性相関の解明

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

鈴木 創太

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構築・提案が求められる．そこで，本研究では物理的な背景知識を援用する機械学習（**physics knowledge-oriented 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予測手法を探索するため，ガウス過程法（GPR）のような各種回帰学習モデルを比較しながら，

分子スケール構造を反映した記述子から着目する物性を予測する交差検証を行う。最終的に、特徴量重要度を利用することでどの記述子が予測精度向上に寄与するかを評価する。

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）

有機液体材料について、分子スケール構造や化学特性を反映した各種分子記述子を生成し、SOM を用いて物性との相関性を明らかにした。SOM は物性と相関の高い記述子や構造データを抽出するために有効であることがわかった。

物性予測を実現するガウス過程法を回帰モデルとして、分子記述子を入力データとすることで物性予測精度の検証を行った。数 100 種類に及ぶ記述子を前処理し、その中から PFI (permutation feature importance) を用いて特徴量重要度を解析した。この結果を基に、特徴量選択を行った結果、分子記述子をベースにした予測手法は、決定係数 0.75 程度の予測精度を実現した。また、重要度の高い特徴量と物性との相関が物理的にも自然であることがわかった。

3. 研究目標の達成状況

化学構造から多数の分子記述子を生成し、それらの特徴量選択によってガウス過程法による物性予測手法の高精度化に成功した。したがって、当初の研究計画を概ね達成したといえる。

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や分子記述子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、分子記述子の特徴量選択を行い、それらを入力データとしたガウス過程法は、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、分子記述子の探索空間を広げ（例えば 3 次元記述子の生成）、回帰モデルによるさらなる予測精度の向上を計画している。

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）

学術論文

1. Kiran Rathod, Sai Charan Ravula, Prasanna Sai Chandra Kommireddi, Rahul Thangeda, Gota Kikugawa, Hari Krishna Chilukoti, Predicting thermophysical properties of alkanes and refrigerants using machine learning algorithms, Fluid Phase Equilibria, Vol. 578, 114016 (2024).

国内学会

1. 菊川 豪太, 鈴木創太, クラスタリングとベイズ予測機械学習を用いた有機・高分子材料の高効率探索, 航空機フォーラム in 大阪, (2023).

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	CL25APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月23日提出

実効粘度の非接触測定に向けた慣性移動を伴う

懸濁液流れの数値シミュレーション

船本 健一

東北大学 流体科学研究所 准教授

福井 智宏

京都工芸繊維大学 機械工学系 准教授

川口 美沙

東京農工大学 工学研究院 特任助教

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

慣性を伴う流路内流れにおいて，懸濁粒子は流れと直交する方向に移動し，速度勾配に起因する揚力と壁面からの反発力が釣り合う平衡位置に集約する(Segre-Silberberg 効果)．懸濁液レオロジーは，懸濁粒子の挙動（分散状態，配向，運動）により変化する．慣性力による受動的粒子挙動操作のみならず，光，電磁場，音響場による能動的な非接触粒子操作技術（Lim et al., *Nature Physics*, 2019）が急速に発達している潮流において，今後の工学応用に重要な流路内懸濁液流れのレオロジー制御の実現には，ミクロな粒子挙動とマクロな懸濁液レオロジーの関係を見出すことが必要不可欠である．

本研究では，Segre-Silberberg 効果を顕微鏡下での実験観察および数値シミュレーションによって再現し，圧力駆動される懸濁液流れにおける粒子分散状態および粒子挙動と実効粘度の関係を明らかにする．慣性力による粒子の位置情報から，局所分布も含む実効粘度の予測モデルを構築することを最終目標とする．

1.2 研究期間内の最終目標

先行研究（Doyeux et al., *Phys. Rev. Fluids*, 2016; Okamura et al., *JFST*, 2021）から着想を得て，単一粒子の実効粘度への寄与を重ね合わせることで，慣性移動を伴う懸濁液流れのマクロな実効粘度を予測する方法を提案した（Kawaguchi et al., *Proc. 22th AFI-2022*, 2022）．しかしながら，単一粒子の寄与から予測される粘度分布は，懸濁液流れの数値解析結果と異なる部

分があり，流体力学的な相互作用の影響が考えられた．そこで本研究では，数値計算により粒子の能動運動を加味した数値解析結果と実験結果の比較を行い，懸濁粒子の挙動（空間分散状態，並進速度）および溶媒厚さと局所的な実効粘度分布との関係の詳細を明らかにし，懸濁液流れにおける流体力学的相互作用が実効粘度に与える影響について考察する．

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 研究成果の意義

メゾスケールの粒子構造とレオロジー特性の関係は，経験則的な理解（実験結果に対する近似モデルなど）に留まり，物理的な理解に至っていない．本研究の意義は，固体粒子と流体の相互作用を考慮した **two-way coupling** による数値シミュレーションを行い，マイクロチャンネル内流れの実験的知見とも合わせて，多角的に複雑流動の理解を深める点にある．

2.2 新しい評価方法の検討

本研究では，正規化格子ボルツマン法および仮想流束法 (Kawaguchi et al., *Compt. Fluids*, 2022) を用いて，圧力駆動される平行平板間懸濁液流れの数値解析を行った．Doyeux ら (*Phys. Rev. Fluids*, 2016) が提案した粘度推定法に着想を得て，平行平板間で流動する懸濁液の実効粘度を推定した．計算モデルは，初期に一樣に分散したモデル (**model HS**)，単一粒子のみを含むモデル (**model S**)，初期に流れに対して垂直方向に 1 列に配置したモデル (**model V**) を用いた．初期に粒子-壁面間距離が異なる **model S** を用いて，粒子 1 個当たりの粘度への寄与を元に実効粘度を推定した（以下，推定粘度とする）．懸濁液流れの数値計算結果から得られる実効粘度に対し，推定粘度は高濃度ほど数値解析結果よりも高い値となった．一方，**model V** の粒子 1 個当たりの寄与を元に重ね合わせによって推定される実効粘度は，対象とした濃度の範囲では数値解析結果に近い値となった．以上から，一樣分散懸濁液流れでは，流れに直行方向に位置する粒子間の流体力学的相互作用が有効粘度への寄与を小さくしていることが推察される．

3. 研究目標の達成状況

当初予定していた懸濁粒子の挙動（空間分散状態，並進速度）および溶媒厚さと局所的な実効粘度分布との関係を明らかにすることと，実験結果と数値計算結果の直接比較までは達成できなかった．しかし，流体力学を受けて並進・回転運動をする粒子の運動を能動的に制御することで，粒子の運動が，懸濁液の実効粘度に与える影響について調査した結果，粒子挙動および流体力学的相互作用に関する新たな示唆を得た．

4. まとめと今後の課題

本研究では，慣性力による粒子の位置情報から，局所分布も含む実効粘度の予測モデルを構築することを最終目標として，懸濁液流れにおける流体力学的相互作用が実効粘度に与える影響を調査した．複数の解析モデルを用いた実効粘度の推定値と数値計算結果を比較した．その結果，一樣分散状態における懸濁液の実効粘度には，垂直方向の粒子間相互作用が実効粘度を下げる方向に影響することが示唆された．今後は，局所実効粘度分布の推定および粒

子の回転運動および流体力学的相互作用の影響を定量的に評価し、高粘度領域も含めた大規模計算を行い、これらの結果をまとめて論文投稿を目指す。

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）

該当なし

著書

該当なし

国際学会

該当なし

国内学会・研究会等

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	CL27APR23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 08 月 22 日提出

回転同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置内の 3 次元電磁流体解析

高奈 秀匡

東北大学流体科学研究所 教授

長谷部 喬大

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

本研究で対象とする回転同軸二重円筒内の流れは, 流体力学分野では, テイラーケット流れと呼ばれている. 制御パラメータが, 内円筒と外円筒の回転角速度のみであることから, 普遍性があり, 乱流遷移や乱流混合の分野で, 今なお活発に研究が続いている. 内円筒と外円筒の間に水などの流体を入れ, 外円筒を固定した状態で, 内円筒を回転させる場合が, もっとも古典的な条件である. 内円筒の回転角速度が増加していくと, まずは内円筒に沿って流体全体が回転するケット流れができるが, ある臨界値を超えると内円筒壁近傍において遠心力不安定性が現れ, 円周方向に回転軸をもつテイラー渦が発生する. さらに次の臨界値を超えるとその渦が円周方向に波打つテイラー渦となり, 最終的には乱流状態へと遷移をしていく.

実験では, 二重円筒の軸方向に存在する上下壁の影響を極力なくすために, 円筒間のギャップ幅と軸方向長さの比であるアスペクト比が大きくなるよう, 軸方向に長くしている. 数値計算では, 上下壁の影響をなくすために, 軸方向に周期境界条件を用いて, 実験における上下壁がない理想的な状況を検討している. 数値計算におけるこの状況は, 円周方向にも周期境界条件が利用できるため, 2 方向に高速フーリエ変換 (FFT) を利用し, 半径方向のみ壁ありの滑りなし条件と簡便化できる. 結果として, 計算の高速化にも寄与しており, 直接数値計算 (DNS) による大規模な数値計算を容易にしている.

一方, 本研究で対象とする電磁流体 (MHD) エネルギー変換装置では, 風力発電のシャフ

トが内円筒に接続され、固定された外円筒との間に、液体金属のような電気伝導性を有する流体を用いる。装置の軸方向に磁場を印加すると、ファラデーの電磁誘導の法則より、円筒間に起電力が発生する。内円筒と外円筒を金属とし、その間に外部負荷抵抗を接続すると、外部に電力を取り出すことが可能となる。これが MHD エネルギー変換装置の概略である。

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

液体金属を用いたテイラーケット流れに対して、軸方向に磁場を印加し、磁場に比例するハルトマン数 (Ha) を増加させていくと、内円筒壁で生成される高速・低速ストリークのうち、低速ストリークが選択的に抑制され、また上下壁近傍のストリークが抑制されていく。上下壁の内円筒近くでは、せん断が強くなるので、渦対が生成され、テイラー渦と周方向流れに沿って移流されていくことがわかった。本研究期間では、このような二種類の乱流構造に対する Ha 依存性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（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、代表者が実験によって機構解明を行った MHD エネルギー変換装置内の電磁流体现象を 3 次元数値解析によって明らかにする。当該分野の数値計算を専門とする教員との共同研究を実施し、研究を進展させている。また、大学院生も参画することで研究教育の両面からも本事業を推進している。

2.2 内円筒壁近傍の乱流構造のハルトマン数依存性の解明

外円筒と上下壁が停止し、内円筒のみが回転する液体金属を用いたテイラーケット流れを検討する。内円筒と外円筒との間のギャップ幅と内円筒の回転速度、動粘性係数で定義されるレイノルズ数 (Re) を 8000 と設定した場合、流れは乱流となり、内円筒壁近傍には流れ方向に引き延ばされた高速・低速ストリークが生成される。軸方向に定常磁場を印加し、その磁場に比例するハルトマン数を増加させていくと、内円筒壁近傍の低速ストリークが抑制され、上下壁近傍のストリークが抑制されていく。上下壁の内円筒近くでは、せん断が強くなるので、渦対が生成され、テイラー渦と周方向流れに沿って移流される楔形の高速ストリークが発生することがわかった。

これらの現象から、 $Ha=0$ の状況において二種類のストリークが存在することが予見できる。一つは、内円筒壁面でのせん断応力に起因する流れ方向に引き延ばされるストリークであり、もう一つは、内円筒と上下壁のせん断による渦対が作る上下壁から内円筒中央に斜めに伸びる楔形のストリークである。これらが混在した乱流構造が内円筒壁近傍に生成されている。この状況に、軸方向磁場を印加することで、ローレンツ力によって、まず流れ方向に引き延ばされるストリークが抑制される。さらにハルトマン数を増加させると、上下壁と内円筒で形成される、より強いせん断によって生成される楔形のストリークのみが現れ、さらにハルトマン数を増加させると、この楔形のストリークも抑制される。

これらの結果から、楔形のストリークが出現するのは、乱れの生成とローレンツ力による乱れの抑制の関係で決まることが予想される。そこで、レイノルズ数を変化させた状況で、楔形ストリークが発生するかを検証した。すると、 $Hr=Ha/Rex10^4=12.5$ において、楔形ストリークが再現されることがわかった。

3. 研究目標の達成状況

3次元 MHD 乱流において、乱流生成と乱流抑制の閾値が存在することが解明できた。これによって、大型風力発電への導入を検討する同軸円筒 MHD エネルギー変換装置の設計指針において、このような楔形ストリークによる低周期の変動と風車の共振を避ける指針を提示できたと考えられる。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。今後は、内円筒と外円筒の半径比や流路断面アスペクト比が流れ場や電磁流体場への影響を検討していく。

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）

- [1] 長谷部喬大, 佐々木亮, 藤野貴康, 高奈秀匡, 小林宏充: 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実験と理論解析, 電気学会論文誌 B, 143 巻 ¥(2023), pp.454-460.
- [2] Takahiro Hasebe, Ryo Sasaki, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana, Hiromichi Kobayashi: Experimental and theoretical analyses on power generation characteristics of co-axial MHD energy conversion device, Electrical Engineering in Japan, Volume 216 (2023), pp.1-8, e23446. <https://doi.org/10.1002/eej.23446>

国際学会

- [1] Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana, Hiromichi Kobayashi: MHD Coupled Simulation of Taylor-Couette Flow of Liquid Metal, The X International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering (COUPLED 2023), Creta, Greek (2023).
- [2] Hiromichi Kobayashi, Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: MHD turbulent Taylor-Couette flow with end walls in axial magnetic field, The 22nd edition of the International Couette Taylor Workshop (ICTW23), Barcelona, Spain (2023).
- [3] Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana, Hiromichi Kobayashi: Study on Streaky Structure in the Vicinity of Rotating Inner Cylinder in Co-axial MHD Energy Conversion Device, Twentieth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), Sendai, Japan (2023).

国内学会・研究会等

- [1] 長谷部喬大, 藤野貴康, 高奈秀匡, 小林宏充: 同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置における発電効率の負荷抵抗依存性に関する 3 次元数値解析, 電気学会 新エネルギー・環境研究会, 浜松 (2023).
- [2] 長谷部喬大, 藤野貴康, 高奈秀匡, 小林宏充: MHD 相互作用下の Taylor-Couette 乱流におけるストリーク構造に及ぼす内円筒回転速度と外部印加磁場の影響, 複雑流動ダイナミクス研究会, 京都 (2023).

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01MAY23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.5～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 8 月 26 日提出

晴天乱気流の発生過程の理論的解析に関する研究

焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 助教

吉村 僚一

名古屋大学宇宙地球環境研究所 特任助教

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

風速が鉛直方向に大きく変化する鉛直風速シアで誘起されるケルビン・ヘルムホルツ（KH）不安定波の成長とその崩壊は、飛行機の安全な運行を阻害する大気の流れの原因として知られている。1つの風速成分のみを持つ理想的な鉛直シアに起因するKH波やその崩壊に資する2次不安定の性質を調べた例は多数存在する。しかし現実の大気でしばしば発生する、2つの風速成分がシアを持つねじれた風速プロファイルについて調べられた例は少ない。本研究では、現実の大気の鉛直シアにおける2次不安定の性質を明らかにする。このような研究は気象学と流体力学の研究に新たな知見をもたらすと考えられる。同時に、大気中の風速変動がどのように乱流を生み出し、どのように発展するかをよく理解することは、将来的に航空乱流の予測や大気中の乱流効果の新しいモデル開発にも役立つと考えられる。

1.2 研究期間内の最終目標

現実の大気の鉛直シアにおける2次不安定の性質を調べ、その崩壊の過程を理想的な鉛直シアの崩壊過程で説明できるかを明らかにする。

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）

共同研究の意義：本研究は大気中の鉛直シア中の乱流遷移現象を取り扱っており、流体力学・乱流遷移に造詣の深い流体科学研究所の焼野藍子助教および、大気力学の知見がある宇宙地球環境研究所の吉村特任助教が共同で研究することが不可欠である。

2.1 KH渦に関する初期解析

圧縮性NS方程式を数値的に解いて大気プロファイルからKH波を再現し、等間隔に並ぶKH渦列を再現した。その後KH渦列に渦様風速擾乱を付加したところ、隣り合うKH渦の間の

高歪み領域であるブレードによって伸張されることにより擾乱が成長すると分かった。

2.2 2次不安定による成長モードの調査

2.1 で渦様風速擾乱がブレード域で成長すると分かったが、2.2 ではランダム風速擾乱を加え、より自然に成長する変動モードの性質を調べた。風速擾乱の空間波数により成長率は異なり、過去の理論値である波数に近いほど成長率は高く、ブレードで成長する最適な波数であると示唆された。

3. 研究目標の達成状況

2次不安定による成長モードがブレード域で成長すること、最適な空間波数が過去の理想的なシアの2次不安定でわかっている事実と良く相関しており、「現実の大気鉛直シアにおける2次不安定の性質を調べ、その崩壊の過程を理想的な鉛直シアの崩壊過程で説明できるか」という目的達成に向けて順調に進んでいる。

4. まとめと今後の課題

圧縮性 NS 方程式を用いてねじれた大気鉛直シアから KH 渦を計算し、ブレード域に対する乱数擾乱の感度を調べた。擾乱の波数を変えながら成長率を計算したところ、ねじれていない理想的なシアの2次不安定の最適波数に近いほど成長率が高いと分かった。2次不安定で生じる渦の詳細な構造については、その再現性に格子解像度が寄与していることがわかっており、スーパーコンピュータを用いて解像度をさらに高めた解析を行う必要がある。

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

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

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02MAY23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.5～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年8月27日提出

空港の滑走路運用に関する研究

焼野 藍子

東北大学大学院工学研究科 助教

森澤 征一郎，儀間 南軌

沖縄工業高等専門学校 准教授，専攻科生

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

沖縄県は日本南西端に位置し，海に囲まれた島々から成るため，航空機は非常に重要な移動手段である．那覇空港は県内外の航空交通の拠点空港であるとともに，東南アジアを中心とした地域に対する我が国の南玄関として重要な役割を果たしている．事実，コロナ禍を除き，那覇空港への航空機の離発着数も増加傾向にある．そして，第2滑走路が建設され年間発着容量が約1.8倍に拡大されるとともに，羽田に次ぐ2番目の高さを有する管制塔が配備され視認障害範囲を改善されるなど那覇空港の機能拡充も進めている．一方，沖縄県は台風やゲリラ豪雨が生じるなど気象変化が多い場所でもある．さらに，那覇空港の格納庫以外にも中心都市那覇市付近のため空港以外の建物も存在する．そのため，そこで乱れた風が滑走路に流れ込むと航空機の離発着に影響を与え，滑走路周辺の風環境予測を行うことは重要である．以上の背景のもと，本研究の目的は那覇空港周辺の建物が滑走路に及ぼす風環境を明らかにし，離発着する航空機の影響を明らかにすることである．

1.2 研究期間内の最終目標

本年度は，那覇空港周辺の建物が滑走路に及ぼす風環境の予測に向けた高精度な流体シミュレーションを実施する．具体的には，空港の建物に対して，斜め70度の異なる風速の1様流れを与えたときに建物後方で生じる流れ場の様子を調査する．そして，滑走路付近の建物から剥がれた流れ気流が生み出す流れについての滑走路上で移流や拡散の様子を調査する．

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）

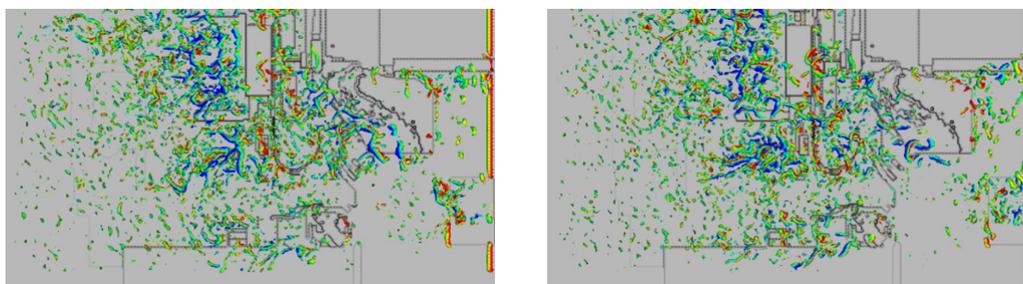
本研究で得た成果は，滑走路周辺の高精度な風環境を明らかにすることは航空機の安全かつ効率的な運用を維持で不可欠なものであり，本シミュレーションを実施することで詳細な流れ場

の情報を得るとともに、風環境の様子と航空機の着陸する際の関係を定性的かつ定量的に示すことができる。そのために、研究プロジェクト代表者である焼野の所属先では乱気流など航空気象に関わる大規模な計算経験を有している。一方、森澤・儀間の所属先は県内・外のエアライン会社との包括連携を結んでおり、企業との結びつきも強い。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。

本稿では空港の建物に対して、斜め 70 度の一様流れを与えたときの建物後方での流れ場の様子を検討する。初めに、図 1 に初期条件として 4.1m/s と 8.2m/s の一様流れを空港の建物に与えたとき、建物上面から見た際の瞬間的な流れ場を示す。なお、流れ場は Q 値の等値面と鉛直方向の速度の色（青：吹き下ろし、赤：吹き上げ）で可視化している。図 1 において、両ケースとも流れは空港の建物に衝突し、建物後方に多くの渦が観察される。このとき、速度差による流れのパターンに大きな違いは見られないが、8.2m/s の流れの方が 4.1m/s の場合よりもわずかに建物からの後流による移流が多く残っているように思われる。

次に、図 2 に滑走路 18L 付近での異なる速度の発生頻度を示す。このとき、初期条件として与えた一様流の風速についても記載している。その結果、両ケースとも初期状態からの減衰しており、8.2m/s のケースの方が 4.1m/s のケースよりも若干減衰が長いといった図 1 と同様の傾向を示した。

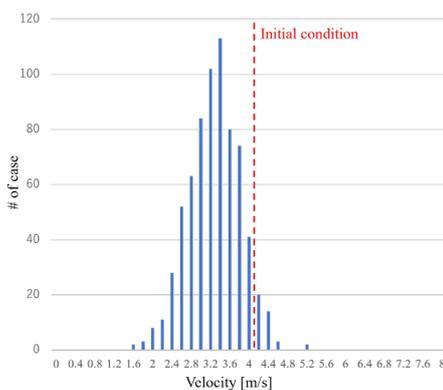
最後に、図 3 に滑走路 18L 付近での高さ方向に対する加速された流れの発生頻度を示す。図 3 より、4.1m/s での周波数は下側に集中し、加速度が大きくなるにつれて単調減少する。それに対して、8.2m/s での周波数は低い方に集中し、加速度が大きくなるとこれらの周波数は減少するとともに、時折増加も見られた。したがって、風速の初期条件が速いほど、流れの散逸が大きく不規則になることを示唆している。



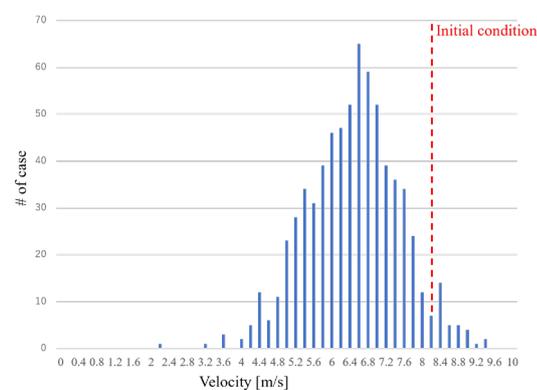
(a) 風速 4.1m/s のとき

(b) 風速 8.2m/s のとき

図 1 上空からみた空港後方から生じる周辺での瞬間的な流れ場



(a) 風速 4.1m/s のとき



(b) 風速 8.2m/s のとき

図2 滑走路18L付近での異なる速度の発生頻度

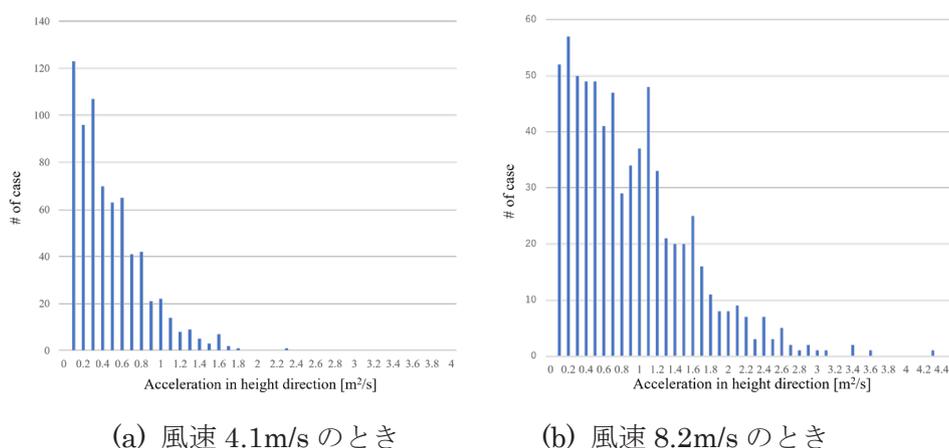


図3 滑走路18L付近での高さ方向に対する加速された流れの発生頻度

3. 研究目標の達成状況

本年度は、本研究の目的は那覇空港周辺の建物が滑走路に及ぼす風環境を明らかにするため、高精度な流体シミュレーションを実施した。その結果、異なる初期条件の風速によって滑走路付近の建物から剥がれた流れ場の様子を示した。そして、滑走路付近の建物から剥がれた流れの違いを抽出することができた。

4. まとめと今後の課題

本研究は、那覇空港の建物や中心都市那覇市付近によって乱れた風が滑走路に流れ込むと航空機の離発着に影響を与える。そのため、その際の建物周辺の流れ場および建物周辺の流れ場および滑走路周辺の風環境予測を流体シミュレーションによって行った。その結果、滑走路18Lでの流れの散逸が大きく不規則になるといったことを示唆する結果を得た。今後は、航空機の離陸する際の小型機および大型機の違いによって生じる後方乱気流が滑走路に発生した際の風環境との関係を明らかにする。

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

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

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL03MAY23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.05～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 08 月 21 日提出

マイクロサイズの凹凸など表面性状による流れへの影響についての詳細解析

焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 助教

大山 聖

宇宙航空研究開発機構 教授

金子 賢人

東京大学大学院

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

航空機に対する需要は長期的に増加を維持すると考えられている一方で、環境負荷を低減し、持続可能な航空輸送を実現するために、CO₂ 排出量削減の要求も高まっている。この解決策の一つとして、空気抵抗を低減し、燃費を向上させることが挙げられ、特に近年では、粘性抵抗低減技術であるリブレットが注目されている。航空機まわりの流れにおいてリブレットが流れ場に与える影響を明らかにすることと、リブレットを航空機に効率的に活用するための設計知見を得ることが、本研究の目的である。

1.2 研究期間内の最終目標

圧縮性流れおよび圧力勾配流れにおけるリブレットの抵抗低減効果を明らかにすることが、研究期間内における目標である。

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 共同研究の意義

自動車やロケット、火星飛行機などの実問題における空力設計を専門とする大山教授と共同研究を実施することで、リブレットの航空機などへの実用化を視野に入れた研究が促進される。

2.2 研究成果

圧縮性がリブレットの抵抗低減性能に与える影響を調査するために、主流マッハ数 0.2 と 0.85 の場合において、リブレットまわりの流れを DNS により調査した。リブレット断面は正三角形とし、流れ方向に一様な 2 次元リブレットを採用した。また、リブレットの溝幅については、乱流域において、マッハ数 0.2 における壁座標基準で 15 程度となるように設定した。本研究では流入条件として、ブラジウス層流解に壁面垂直方向に周期的な擾乱を与えることで乱流遷移

流れを再現した。

図 1 に滑面に対するリブレットによる抵抗低減率分布を示す。図 1 において横軸は流れ方向座標、縦軸は抵抗低減率を示しており、縦軸の値が正であればリブレットにより抵抗が減少したことを表している。横軸の $x/\delta_{in} = 140$ が流入に相当し、横軸下に記載している矢印は乱流域を示している。実線はリブレット面、破線は滑面における乱流域をそれぞれ示しており、青線はマッハ数 0.2、赤線はマッハ数 0.85 の場合である。図 1 に示すようにマッハ数が増加すると乱流域におけるリブレットの抵抗低減性能が減少することが分かった。図 2 は、横軸に流れ方向座標、縦軸にリブレットの溝幅を各マッハ数における滑面上の壁座標で整理した値を示している。図 2 より、マッハ数が増加するにつれ、乱流域ではその値が理想値（15 から 25 程度）よりも低くなることが分かる。つまりマッハ数が変化することで、縦渦のサイズとリブレットの溝幅の関係が変化し、抵抗低減性能が変化することが明らかとなった。

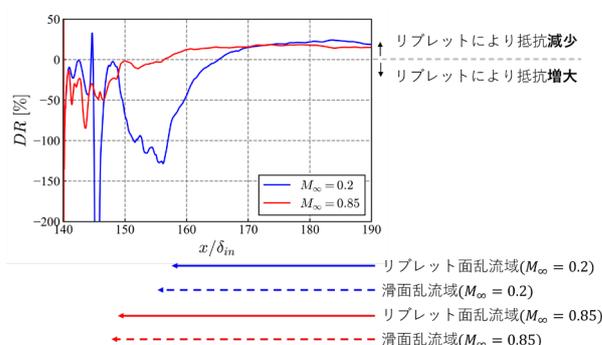


図 1：非圧縮流れと圧縮性流れにおけるリブレットの抵抗変化率の比較

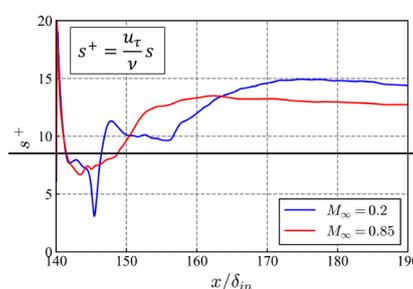


図 2：無次元溝幅分布

3. 研究目標の達成状況

本研究では、まず、圧力勾配のない圧縮性流れにおけるリブレットの粘性抵抗低減効果およびそのメカニズムを明らかにすることを目的とし、2. に記したように概ね達成した。一方で、圧力勾配がリブレットの性能に与える影響調査については未達成であり、2024 年度に実施する。

4. まとめと今後の課題

本研究成果により、圧縮性がリブレットの抵抗低減性能に影響を及ぼすことが明らかになった。今後は遷音速旅客機へリブレットをより効率的に適用することを目指し、圧縮性乱流境界層におけるリブレットの最適な溝幅を明らかにする。また、圧力勾配がリブレットの抵抗低減効果に与える影響を明らかにしていく予定である。

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）

学術雑誌（解説等を含む）

著書

国際学会

K. Kaneko, A. Oyama, A. Yakeno, S. Hamada: Riblet surface effect on laminar to turbulent transition by Direct numerical simulation, *Aerospace Europe Conference*, (2023).

K. Kaneko, A. Oyama, A. Yakeno, S. Hamada: Mach Number Effect on the Drag Reducing Performance of the Riblet in the Transition and Turbulent Flow, *AIAA SCITECH Forum*, (2024).

国内学会・研究会等

金子賢人, 大山聖, 焼野藍子: 層流域におけるリブレット粗さ効果に関する数値研究, 日本航空宇宙学会第54期定時社員総会および年会講演会, (2023).

金子賢人, 大山聖, 焼野藍子: 圧縮性境界層の層流・遷移・乱流におけるリブレットの効果, 令和5年度宇宙航行の力学シンポジウム, (2024).

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	CL01JUN23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.6~2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

金属/酸化チタン界面構造の分子動力学解析

徳増 崇, 上根 直也

東北大学流体科学研究所 教授, 特任助教

後藤 和泰

新潟大学工学部 准教授

深谷 昌平, 宇佐美 徳隆

名古屋大学工学研究科 博士後期課程学生, 教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

本研究の目的は、酸化チタンを用いた低コストかつ高効率なシリコン系太陽電池を実現するために、分子動力学 (MD) 計算を用いて金属/酸化チタン/結晶シリコン界面における構造変化や化学結合状態の変化の解明することである。

酸化チタンは、バンドギャップエネルギーがおよそ 3 eV と大きく、結晶シリコンと接合した際に電子輸送に有利なバンドラインナップを示すことから、次世代の太陽電池における電子選択層として期待されている。これまで、酸化チタンを太陽電池の電子選択層として応用する研究が活発に行われてきたが[1-3]、電極として用いる金属が酸化チタンと接触し、熱処理を課すことで酸化チタンの結晶シリコンに対する表面保護性能が低下することが報告されてきた。酸化チタンの電子選択層としての応用を考えた場合、金属/酸化チタン界面を制御するための指針と技術が必要である。

そこで本研究では、金属/酸化チタン界面における構造変化に着目する。酸化チタンの場合、接触する金属と熱処理条件に依存して酸化チタンの還元反応や酸化チタン/結晶シリコン界面への拡散が起こることが予想され、それらが金属電極形成後の表面保護性能の低下を引き起こしている可能性がある。しかしながら、調査領域が界面近傍のため、実験的に信号を取ることが困難といった問題があり、その界面の構造的な変化は明らかにされていない。本研究では、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) シミュレーション法を用いて金属と酸化チタンとの界面近傍の化学結合状態や金属原子の挙動を明らかにすることで高品質界面の設計指針を提示し、酸化チタンを用いた次世代シリコン系太陽電池の実現に資することを目標とする。

1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内の最終目標としては、Al/a-TiO₂/c-Si ヘテロ界面での原子挙動、化学結合状態の解明、および高品質界面の設計指針の提示である。図1に、本研究の達成される成果とその研究計画を示す。本研究では大きく3つの進捗状況に分けることができ、以下の①から④を順次達成することで、最終的な研究目標の達成を目指す。

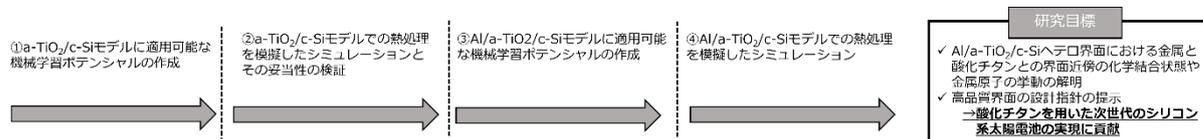


図1: 本研究の達成される成果とその研究計画

[1] B. Liao, B. Hoex, A. G. Aberle, D. Chi, S. Bhatia, *Appl. Phys. Lett.*, **104**, (2014), 253903.

[2] X. Yang, Q. Bi, H. Ali, K. Davis, W. V. Schoenfeld, Wever, *Adv. Mater.*, **28**, (2016), 5891.

[3] T. Mochizuki, K. Gotoh, A. Ohta, S. Ogura, Y. Kurokawa, S. Miyazaki, K. Fukutani, N. Usami, *Appl. Phys. Express*, **11**, (2018), 102301.

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 a-TiO₂/c-Si ヘテロ構造へ適用できる機械学習ポテンシャルの開発

本項目の共同研究における意義は、既に実験的に得られているアモルファス酸化チタン（a-TiO₂）/結晶シリコン（c-Si）ヘテロ構造を再現する計算系を構築する点である。MDシミュレーションでは、原子の挙動記述する力場によって計算が進められるため、本項目では、まず初めにa-TiO₂/c-Siヘテロ構造を適切に再現する力場の構築から行った。

図2に、(a) 作成したバルクのc-Siモデルの力場を用いてc-Siを500 Kで熱処理した前後における動径分布関数を示す。ここで、青色塗りつぶしの三角のマーカー(▲)は本研究で作成した力場を用いたMD計算で得られたc-Si、白抜き丸(O)のマーカーはc-Siの経験的力場(tersoffモデル)を用いて得られた動径分布関数である。図2(a)より、経験的に得られている力場と本研究で作成した力場により計算されたc-Siの動径分布関数が精度よく一致していることが分かる。また、(b) 作成したa-TiO₂モデルの力場を用いてTiO₂を2500 Kで加熱後、500 Kで急冷した後における動径分布関数を示す。ここで、赤色塗りつぶしの三角のマーカー(▲)は本研究で作成した力場を用いたMD計算で得られたa-TiO₂の動径分布関数、緑色塗りつぶしの丸(●)のマーカーは実験で報告されているa-TiO₂の動径分布関数である[4]。図2(b)では、a-TiO₂における各結合のピーク位置において、各信号の立ち上がり位置は比較的良好に一致しており、さらに二つのピークの凹部が文献値の単峰性のピーク位置と大まかに一致することから、酸化チタンの系として非常に近いことが考えられる。以上より、本研究で作成した力場が、従来よく知られている力場や実験結果をよく反映していることを確認した。

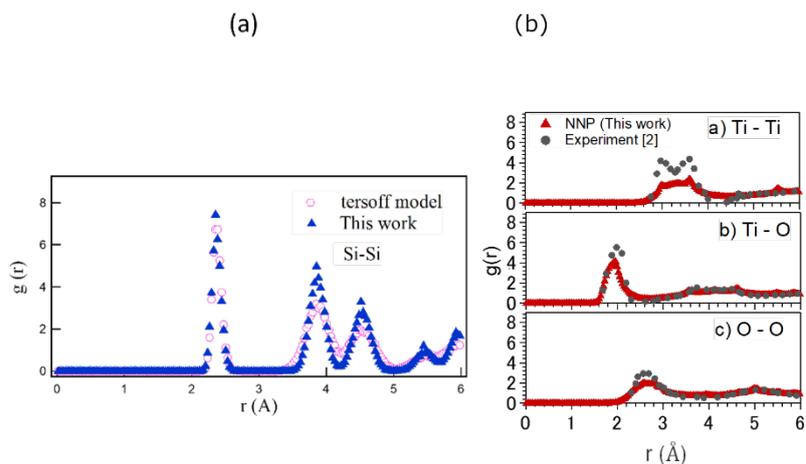


図 2 : (a) 作成したバルクの c -Si モデルの力場を用いて c -Si を 500 K で熱処理した前後における動径分布関数. 青色塗りつぶしの三角のマーカー (▲) は本研究で作成した力場を用いた MD 計算で得られた c -Si, 白抜き丸 (○) のマーカーは c -Si の経験的力場 (tersoff モデル) を用いて得られた動径分布関数. (b) 作成した a -TiO₂ モデルの力場を用いて TiO₂ を 2500 K で加熱後, 500 K で急冷した後における動径分布関数. ここで, 赤色塗りつぶしの三角のマーカー (▲) は本研究で作成した力場を用いた MD 計算で得られた a -TiO₂ の動径分布関数, 緑色塗りつぶしの丸 (●) のマーカーは実験で報告されている a -TiO₂ の動径分布関数を示す.

2.2 機械学習ポテンシャルを用いた a -TiO₂/ c -Si ヘテロ界面での熱処理時の原子挙動の再現

次に, 2.1 で作成した力場を用いて a -TiO₂/ c -Si ヘテロ構造での熱処理を行った際の原子の挙動を調査した.

図 3 に, 1000 K, 1 ns の熱処理後における a -TiO₂/ c -Si ヘテロ構造を示す. ここで, 本シミュレーションは周期境界条件下で行われたため, 上層と下層の両方に Si 原子と O 原子が存在している. 図 3 より, アニール後では c -Si 表面からその内部に向けて Si-O 結合が形成されてることが分かる. これは, アニール後に a -TiO₂/ c -Si 界面に Si-O 結合が形成されるという実験結果と一致する[3]. a -TiO₂ 中の酸素原子が Si-O 結合を形成したことは, a -TiO₂ 中に酸素空孔が生成したことを示している. 既に, 酸素空孔は a -TiO₂ 中でドナーとして働くことが実験的に知られており[5, 6], 本シミュレーション結果は, 酸素空孔の増加が c -Si のパッシベーション性能の向上に寄与することを示唆するものである.

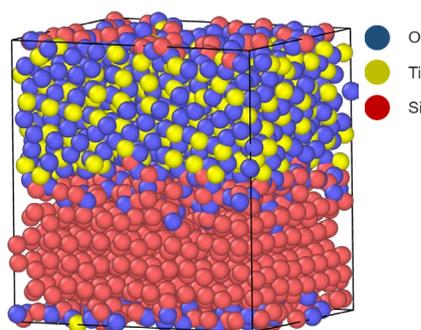


図 3: 1000K, 1ns の熱処理後における a -TiO₂/ c -Si ヘテロ構造

- [4] Hieu H. Pham and Lin-Wang Wang, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, (2015), 541.
 [5] T. Bak, J. Nowotny, and M. K. Nowotny, *J. Phys. Chem. B.*, **24**, (2006), 21560.
 [6] V. Gurylev, C. Su, T. Perng, *J. Catal.*, **330**, (2015), 177- 186.

3. 研究目標の達成状況

本研究を遂行していく段階として、大きく四つのステップがある：①a-TiO₂/c-Si モデルに適用可能な機械学習ポテンシャルの作成，②a-TiO₂/c-Si モデルにおいて熱処理を模擬したシミュレーションとその妥当性の検証，③Al/ a-TiO₂/c-Si モデルに適用可能な機械学習ポテンシャルの作成，④Al/ a-TiO₂/c-Si モデルの熱処理を模擬したシミュレーションである．この場合において、現在は、②a-TiO₂/c-Si モデルにおいて熱処理を模擬したシミュレーションとその妥当性が終了した段階である．よって、全体の 50 %程度を達成したといえる．

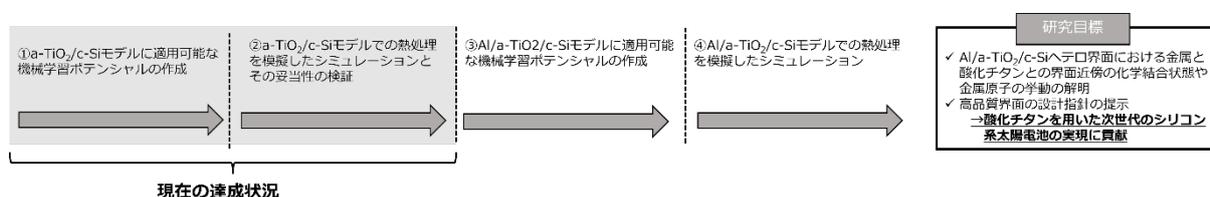


図 4: 本研究における進捗状況

4. まとめと今後の課題

現在の段階で、結晶シリコン、酸化チタンを適切に記述する力場の作成、さらに a-TiO₂/c-Si 界面の再現を行った．その結果、結晶シリコンでは従来用いられた力場と非常に近い力場が作成でき、酸化チタンでは実験的に得られた結果とよく似た結果を示す力場を作成できた．a-TiO₂/c-Si 界面モデルでは、熱処理を模擬したシミュレーション結果において Si-O 結合の生成が示され、実験的な報告と整合する結果が得られた．したがって、本研究で作成された力場を用いることで、a-TiO₂/c-Si ヘテロ界面を適切に記述できることが分かった．

今後の課題では、Al/a-TiO₂ ヘテロ界面を有する構造を記述する力場の作成に取り組んでいく．MD シミュレーションは使用する力場で想定される条件以外においては適切な物理を表現することが出来ないため、力場の作成が本研究において最も根幹で重要な部分であり、研究の完成度を大きく左右するステップといっても過言ではない．よって、今後も丁寧に進めていきたいと考えている．

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）

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.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01JUL23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第1回報告

2024年7月2日提出

Turing パターンの起源に関する分子の揺動と流動を取り入れた

シミュレーション

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

1.1 研究の背景と目的

この研究はシマウマや魚などに現れる”異方的”なパターンの起源に関するものである。このパターンの研究は数学者の A.Turing が、Turing 方程式または反応拡散方程式と呼ばれる2つの変数に関する偏微分方程式でこのパターンが記述できることを示したことで創始された(1952年)。それ以来、反



図1. シマウマと魚に現れる Turing パターン

応拡散方程式をもとに多くの研究がなされてきた。最近では、Turing パターンは生物ばかりでなくミクロな世界にも現れることから、ナノテクノロジーへの応用も期待されている(DOI: 10.1126/science.aar6308)。一方、魚のパターンが Turing パターンであることが実験的に確認されたのは最近のことである(S. Kondo and R. Asai, Nature 376, (1995))。このように、Turing パターンにはまだ多くの謎と発展の可能性が残されているといっても過言ではない。本研究の目的は、異方的な現象を取り扱う Finsler 幾何(FG)モデルの方法を、異方的な拡散現象である Turing パターンを記述する Turing 方程式に適用可能なことを示すことである[1]。これまで FG モデルは Hamiltonian を用いて定義される統計力学的モデルに適用されてきたため、偏微分方程式モデルには適用例がない。

1.2 研究期間内の最終目標

細胞やそれを構成する分子は熱的な影響で乱雑に動く。その等方的な運動は random walk などのモデルで記述できる。一方、何かの外的な制限でその等方性が破れると異方的な熱揺らぎ運動がおけると期待できる。本研究の目標は、

- (i) 分子の揺らぎの効果を取り入れた反応拡散方程式に外的な要因で異方的な拡散運動が現われ、これによって拡散係数が動的に異方性を帯びることで異方的な Turing パターンが現われる、
- (ii) その異方的な拡散運動がおこる外的要因として、膜を1方向に引き延ばすような1軸応力、ある方向の拡散が抑制されるような境界条件、が挙げられるを示すことである。

2. 研究成果の内容

2.1 本申請研究の意義

1.2 節に示した目標(i)の内容は、拡散係数の異方性がある力学的な機構で現われるとするものであるから、Turing パターンがこれまでの研究による異方的な拡散係数を仮定した結果と同じであれば、その発現機構を説明しているという意義を持つ。更に、目標(ii)の内容は、(i)で分かった Turing パターン発現機構からの自然な発想として、どうすればそのパターンを制御できるかという問題に対する答えを与えるものであり、応用的な研究の可能性を示すという意義がある。

2.2 得られた結果

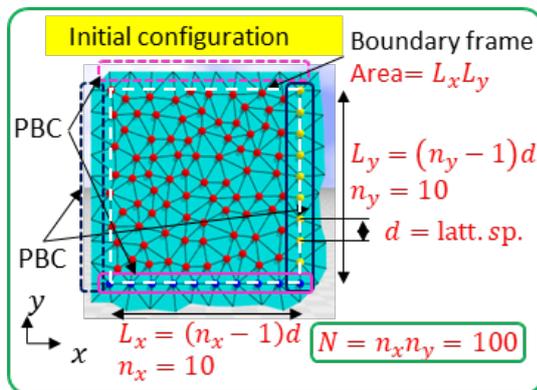


図 2. 3 角形分割された 2 次元格子. 計算では $N=100 \times 100$ の格子を用いる。

初めに、計算に用いる 3 角形分割された 2 次元格子を図 2 に示す。図 3 には、境界間の距離を縦横比 R_{xy} で固定した格子の形を示す。頂点の位置は変数として Monte Carlo 法で更新する(図 4(a),(b))。このとき、3 角形が折りたたまれないような条件を課す(図 4(c))。頂点の移動方向を内部自由度 τ として(図 4(d))、Turing 方程式の変数 u, v の拡散に対応する Laplace 作用素に、FG モデル化の方法で拡散異方性を導入する。頂点と u, v には周期的境界条件を課す(図 2(a))。

図 4 (e)には内部自由度が等方的な場合と異方的な場合の τ の模式図を示す。

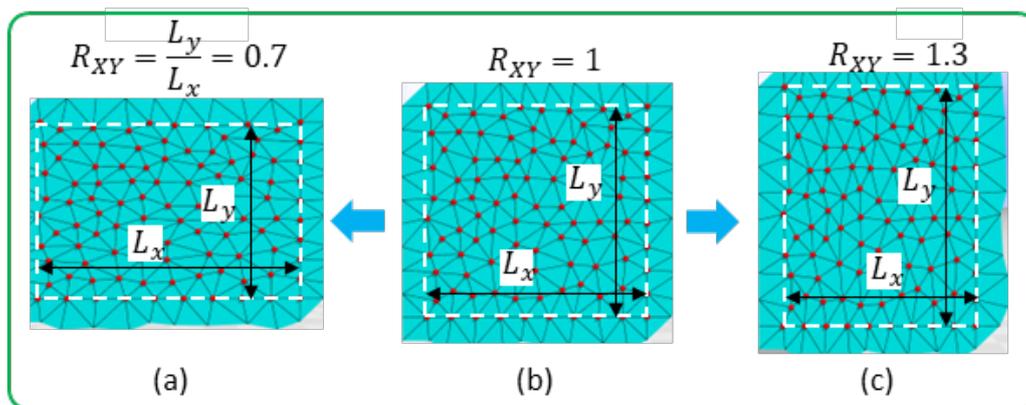


図 3. 縦横比 R_{xy} ; (a) $R_{xy}=0.7$, (b) $R_{xy}=1$, (c) $R_{xy}=1.3$, で固定した格子. 面積が変わらない条件で引き伸ばしている。

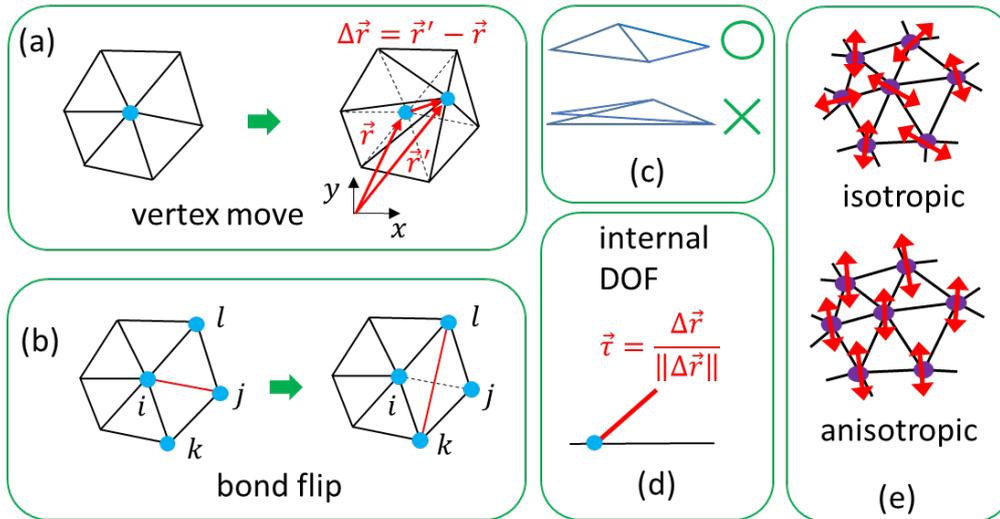


図 4. MC 法による頂点の位置更新と内部自由度 τ .

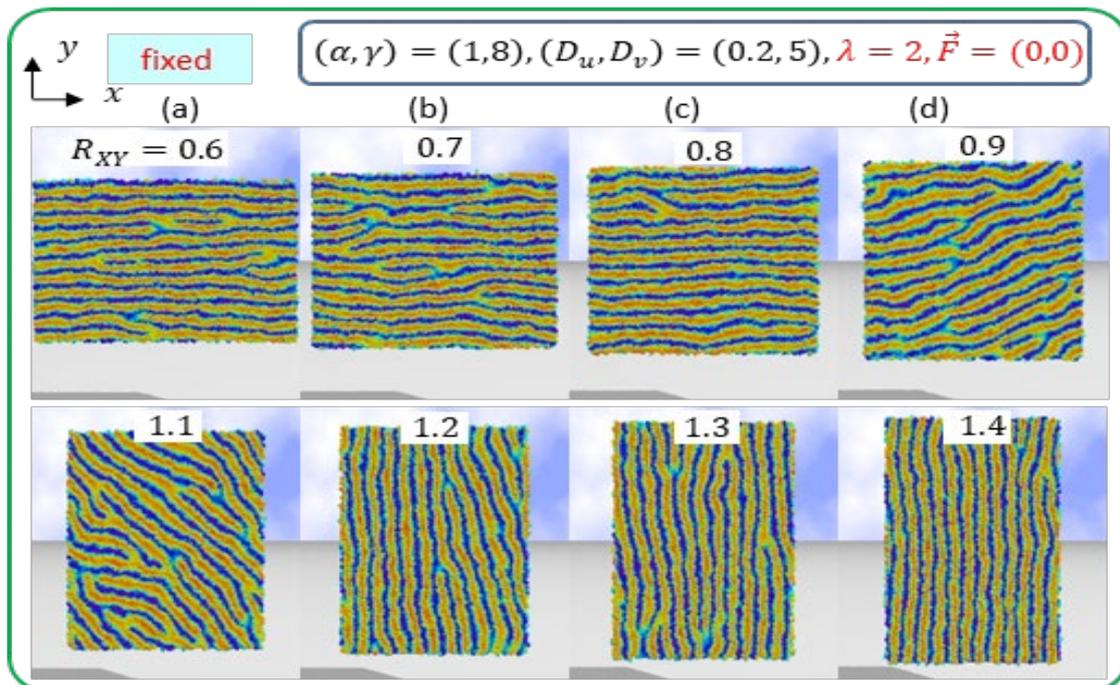


図 5. 頂点の流動性がない場合の計算結果.

図 5 には、 R_{xy} のいくつかの値に対する Turing パターンの計算結果を示す。これらは頂点の位置変数に対して流動性(図 4(b))を仮定しない場合の結果である。引き伸ばされた方向にパターンが形成されていることが分かる。 $R_{xy}=1$ の場合もパターンは形成されるがその方向は自発的に、即ち、頂点の位置や u, v の初期条件によって、定まる。

図 6 は頂点の流動性を仮定した場合の計算結果である。流動性があると、境界に等方的な流動性を許した場合、パターンは等方的になってしまう。しかし、図に示すように、上下の境界、左右の境界で頂点の流動性を制限すると、内部の頂点の移動が左右方向、上下方向に偏るという流動の異方性が起こり、その結果、パターンに異方性が現われる。

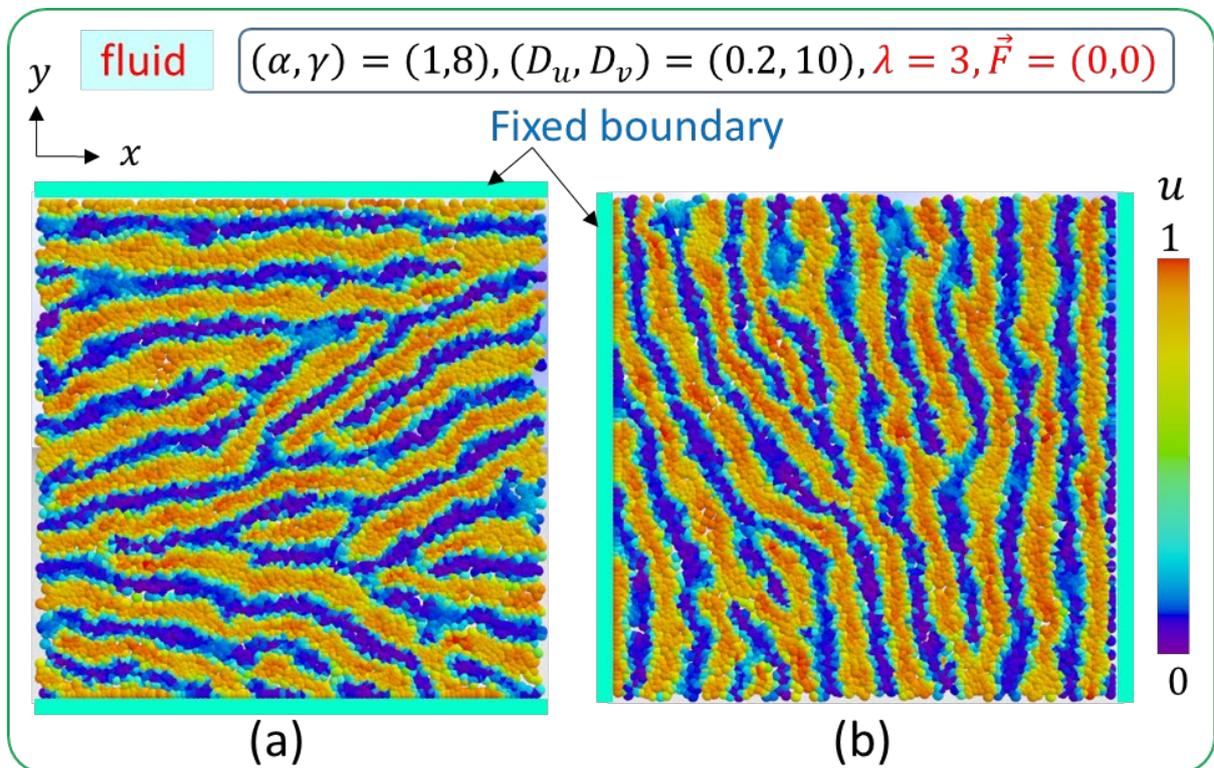


図 5. 頂点の流動性ありの場合の計算結果. (a)では上下境界, (b)では左右の境界, を越えての流動を禁止している.

3. 研究目標の達成状況

達成状況としてはおおむね良好と考えている。当初の目的であった異方的なパターンが現われる機構として、(i)分子の揺らぎの効果を取り入れた反応拡散方程式に外的な要因で現われる異方的な拡散運動、(ii)その異方的な拡散運動がおこる外的要因として、分子の流動性がない場合には膜を1方向に引き延ばすような1軸応力、分子の流動性がある場合にはある方向の流動が抑制されるような境界条件、などが考えられる。

4. まとめと今後の課題

本研究では、シマウマや魚に現れる異方的な Turing パターンの発生機構として知られている「異方的な拡散現象」を対象に、「異方的な拡散はどういう条件で起こるのか」を研究した。その結果、その可能性の一つとして、熱揺らぎで起こる「分子運動の異方性」が異方的な拡散の起源ではないかという結論が得られた。更に、この結果に基づけば、分子運動に流動性がない場合には膜を引き伸ばすことで、また、分子運動に流動性がある場合にはその流動を膜の境界上で制限することによって、その内部の異方的なパターンが制御できることがわかった。

今後の課題としては、膜が3次元空間内の曲面の場合である。本研究では、パターンが現われる膜として、折りたたまれていない平坦な2次元格子を仮定した。この場合、分子流動性が無い場合には、例えばx方向に引き延ばすとy方向に分子同士が近づく。すると、排除体積効果によりy方向に強い斥力が発生し、分子の熱揺らぎ方向がx方向に偏る。これが、異方的拡散の直感的な意味であり、これは2次元格子の平坦性から来る。しかし、動植物の表面は一般には曲面であり、この完全な平坦性は仮定できない。このため、曲面上では、本研究において内部自由度として仮定した分子の移動方向の自由度も含めて、モデルを一般化する必要がある。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- [1] G. Diguët, M. Nakayama, S. Tasaki, F. Kato, H. Koibuchi, and T. Uchimoto: Numerical study of anisotropic diffusion in Turing patterns based on Finsler geometry modeling, *Physical Review E* 109, 014213, 2024, <https://doi.org/10.11/physreve.109.014213>.

著書

国際学会

国内学会・研究会等

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	CL02JUL23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.07～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月22日提出

微小な迎角をつけたアーチェリー矢を過ぎる流れの数値解析

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

岩津 玲磨, 高橋 直也

東京電機大学 教授, 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

スポーツ工学の一分野としての競技用アーチェリーに関しては, 射出の力学, シャフトの変形等が比較的良好に調べられている (Flohrich, 2011). 流体力学的な側面に関しては, 水槽実験を用いた境界層の乱流遷移の可視化研究があり (Park et al., 2011), シャフト直径ベースのレイノルズ数が 3.4×10^4 のときに, 乱流遷移点の位置は平板境界層の場合とほぼ同程度であると報告されている. 一方, 矢の射出実験 (Ortiz et al., 2019) では競技矢のレイノルズ数を含むレイノルズ数範囲で, 同じレイノルズ数に対して高低 2 値の抵抗値が測定され, 矢表面の境界層が層流と乱流の場合に対応していると推定されている. しかし, 鏃の形状を取り入れた線形安定解析の結果 (Hasegawa et al., 2018) では不安定モードが計算されたものの, 境界層の乱流化を引き起こすほど大きくなかった. スパコンで計算された, 微小な迎角をつけた基本流をもとにおこなった安定解析では (Ito et al., 2020), 流線形鏃に対して下流域で不安定性が出現した. 椎型鏃に対しては, 微小な迎角においては上流側で基本流がかえって安定化される計算結果となった. 安定解析では逆流の効果が評価されていないため, ここでは, 迎角が境界層にもたらす影響を調べることを目的として 2 種類の鏃形状を装着したベアシャフト矢を過ぎる流れの直接計算を行い, 定常流が不安定化する条件を探ることを目標とする.

1.2 研究期間内の最終目標

流線形鏃と椎型鏃それぞれに対して, レイノルズ数と迎角をパラメータにとり, 競技矢のレイノルズ数範囲 ($Re \leq 20,000$), 飛翔中の迎角 ($\alpha < 1.4^\circ$) の条件で境界層の状態を調べ, 迎角の影響を明らかにする.

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 新しい解析手法の開発(例)

特になし

2.2 新しい現象の解明(例)

計算の結果以下のことがわかった。

1. 流線形鏝と椎型鏝いずれの場合も迎角の増加が境界層の非定常流化をもたらす。
2. 流線形鏝では、境界層が非定常となる迎角はレイノルズ数によらずほぼ一定値($\Theta \sim 0.8^\circ$)であった。境界層は、矢後端付近の背側から非定常となり、非定常流の範囲は矢後端付近に限定され、上流側に遡ることはなかった。可視化では、非定常流となる矢後端付近において波束が生成消滅する様子が観察された。
3. 椎型鏝では、境界層が非定常となる迎角は、低レイノルズ数域では流線形とほぼ同じ値をとり、高レイノルズ数域では流線形よりも低く、レイノルズ数の増加とともに減少した。また、 $Re \geq 1.80 \times 10^4$ では迎角 0° において非定常流となった。低レイノルズ数 ($Re < 1.20 \times 10^4$) においては、矢後端近くの背側から非定常化が始まった。非定常流の領域は上流に遡らず、矢後端付近に限定された。高レイノルズ数 ($Re \geq 1.30 \times 10^4$) のときには、鏝の付け根付近から非定常化が始まった。鏝の付け根付近には剥離泡があり、再付着点近辺から波状の運動が始まり、それが下流へ伝わり、最終的には表面境界層全体が非定常となった。
4. 椎型鏝で中間的なレイノルズ数 ($Re = 1.20 \times 10^4$)、高迎角 ($\alpha = 1.1^\circ$) の場合には、矢後端付近の背側と、矢先端の鏝付け根付近の 2 か所から非定常運動が始まり、矢先端から下流へ非定常流が伝わるとともに、矢後端からも上流側へ非定常流が遡って伝わる現象が観察された。

3. 研究目標の達成状況

1. 直接計算によって、非定常化に二つの道筋があることが分かり、レイノルズ数 Re と迎角 α をパラメータとするパラメータ平面上の状態図を作成することができた。
2. しかし、非定常運動開始時の波長、周波数などの定量的解析、不安定化の説明はまだこれから行わなければならない状態課題である。

4. まとめと今後の課題

1. 直接計算によって、定常流が非定常化するやり方に二通りあることがわかった。
2. 直接計算は、定常流が非定常化するはじめの過程を捉えることを目的としているので、非定常流の乱流化を捉えるためには分解能不足である。解像度を増加させることが今後の課題である。
3. 矢軸まわりの回転を表すスピンパラメータの影響は小さいと推測されているが、その影響を直接計算によって評価することも今後の課題である。

1. 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) Norikazu Shodo, Reima Iwatsu, Naoya Takahashi and Takeshi Miyazaki : Onset of unsteady motion in the boundary layer on an archery arrow with small angle of attack: direct numerical simulation and visualization study, *Journal of Fluids and Structures* (予定), 執筆中.

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

(1) 岩津 玲磨, 正藤 範一, 高橋 直也, 宮寄 武,
微小な迎角をつけた矢羽根なしのアーチェリー矢表面における定常/非定常流の数値シミュレーション, *Numerical simulation of flows around an archery bare-shaft arrow with a small angle of attack*, 日本流体力学会 年会 2023, *スポーツ流体*, 9/20-22, 2023. (9/21)

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	CL01SEP23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年07月01日提出

製造プロセスから触媒層構造を予測するシミュレーターの開発

徳増 崇

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

固体高分子形燃料電池（Polymer Electrolyte Fuel Cell: PEFC）の触媒層において、アイオノマーの分布（被覆率、厚さ）はプロトン伝導率と酸素透過性に影響を与える。しかし、担持カーボンの一次細孔がアイオノマーの分布に与える影響については十分に研究されていない。特に高電流密度条件下での効率向上のためには、担持カーボンの一次細孔の形状、管径、深度がアイオノマー膜の分布に与える影響を調査する必要がある。本研究では、分子動力学（Molecular Dynamics: MD）計算を通じて、担持カーボンの一次細孔がアイオノマーの分布および触媒層の性能にどのように影響するかを明らかにし、PEFC の設計と効率を最適化することを目的としている。

1.2 研究期間内の最終目標

(1) PEFC 触媒層において、一次細孔が存在する Pt/C の MD シミュレーションモデルの構築を行う。これにより、一次細孔の形状、管径、および深度がアイオノマーの吸着および分布に与える影響を評価する基盤を確立する。

(2) シミュレーション条件（I/C 比、Nafion 溶液の特性など）を変更し、一次細孔が存在する場合のアイオノマーの吸着および分布に及ぼす影響を包括的に解析する。これにより、異なる条件下での原生孔の影響を明らかにし、最適な触媒層設計の指針を提供する。

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 一次細孔を含む触媒層の MD シミュレーション手法の開発

本研究では、一次細孔が存在する Pt/C の MD シミュレーションモデルを開発した。このモデルを構築することで、担持カーボンの一次細孔構造（形状、管径、深度）がアイオノマーの吸着および分布に与える影響を詳細に解析することができた。計算条件としては、さまざまな I/C 比や Nafion 溶液の特性を考慮し、これらの条件下でのアイオノマーの微細構造およ

び最終的な膜形成についても包括的に分析した。この手法の開発により、触媒層の微細構造特性をより精密なスケールで研究することが可能となった。

2.2 一次細孔がアイオノマーの分布に与える影響の包括的評価

シミュレーション条件（例：I/C 比、Nafion 溶液の特性）を変更することにより、一次細孔が存在する場合のアイオノマーの吸着および分布に及ぼす影響を包括的に解析した。その結果、一次細孔の形状、管径、深度がアイオノマー膜の担持カーボン表面および Pt 粒子への分布に大きな影響を与えることが明らかになった。本研究は、MD シミュレーションを通じて原生孔構造がアイオノマーの分布および触媒層の性能にどのように影響するかを解明した。

3. 研究目標の達成状況

触媒層の Pt/C を模擬した基板にカーボンナノチューブ（CNT）を付加して一次細孔を模擬し、一次細孔の深度と管径、Pt のサイズと分布、Nafion 溶液の組成を変えた異なる MD 計算モデルを構築した。各モデルに対して平衡状態の触媒インク計算と非平衡状態の触媒インク蒸発計算を行い、蒸発過程中のイオン分布と凝集、蒸発終了後のイオン膜の Pt/C 基底上での被覆状況を解析し、一次細孔の影響を解析した。現在、データの補充と関連論文の執筆を進めている。

4. まとめと今後の課題

本研究では、一次細孔の形状、管径、深度がアイオノマーの分布に与える影響を明らかにした。今後の課題としては、溶液組成のさらなる調査や V 型基底モデルのシミュレーションが挙げられる。具体的には、分散剤としてのアルコールの添加量を変化させ、Nafion 溶液の組成が蒸発中のイオン膜の動的特性と最終的な膜構造に及ぼす影響を詳細に調査する。また、一次細孔を模擬した円筒形 CNT のモデルに加え、担持カーボンのメニスカスを模擬した V 型基底モデルのシミュレーションも進めていく予定である。

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）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

国際学会

Sirui Wang, Yuting Guo, Ruoyu Liu, Sheng-Feng Huang, Takashi Tokumasu. Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation on the Impact of the Primary Pores on the Distribution and Morphology of Ionomers within Catalyst Layers during the Drying Process. PRiME 2024, October 6-11, Honolulu, HI.（発表予定）

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	CL02SEP23
研究種別	共同研究
利用期間	2023.09～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年7月23日提出

火炎伝播限界条件近傍におけるノッキング挙動の調査

森井 雄飛

東北大学流体科学研究所 助教

Ajit K. 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の開発において，高圧縮比で発生しやすいノッキングが大きな障害となっている．ノッキングは，流体力学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がノック発生に強く影響を与える．同様に，ロケットエンジンの開発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，開発を大きく阻害する要因となっている．これらの現象は圧力と燃焼の連成問題であり，実験のみではその詳細なメカニズムを解明することが困難であるため，現象の本質的な理解には至っていない．

研究目的

本研究の目的は，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詳細に調べることである．この目的を達成するために，実験では困難な現象の解明を，実現象を忠実に再現できる直接数値計算（DNS）を用いて行う．具体的には，以下の二段階のアプローチを取る：

1. 実験結果が公開されているノッキング現象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詳細に調査する．
2. 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し，燃焼振動のメカニズムを解明する．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の最終目標は以下の通りである：

1. 圧縮性 CFD 解析を用いて，従来の非圧縮性流体を仮定した解析では捉えられなかった音響と燃焼の連成現象を解明する．

2. 得られた結果を詳細に分析することで、ノッキングや燃焼振動の発生メカニズムを理論的に説明する.
3. 上記の知見を基に、燃焼振動の発生を予測・抑制可能な理論を構築し、エンジン設計に応用可能な指針を提示する.

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）

主な研究成果は以下の通りである：

1. ノッキング現象の直接数値計算と詳細分析
 - 層流火炎と着火現象の間に強い相関があることを発見した.
 - 着火と火炎の構造が時空間変換によって等価であることを理論的に示した.
 - この理論を用いて、ノッキングが発生するタイミングを高精度で予測することに成功した.
2. 音響理論との融合
 - **Dubey** 先生の音響理論をベースに研究を進め、ノッキングの発生位置と音波の相関を明らかにした.
 - この知見は、エンジン設計においてノッキングの制御に新たな指針を与える可能性がある.
3. 着火と火炎を結ぶ統一理論の構築
 - 従来は別個の現象と考えられていた着火と火炎伝播を、統一的な理論で説明することに成功した.
 - この理論は、広範囲の燃焼現象の理解と予測に応用できる可能性がある.

3. 研究目標の達成状況

研究目標に対する現在の達成状況は以下の通りである：

1. ノッキング現象の直接数値計算
 - 公開されている実験結果に対して直接数値計算を実施し、初期温度の変化がノック強度や発生位置に与える影響を定量的に評価した.
 - 計算結果は実験結果と良好な一致を示し、モデルの妥当性を確認した.
2. 着火と火炎を結ぶ理論の構築
 - 着火と火炎伝播を統一的に説明する理論を構築し、この理論を用いてノッキングの発生時刻を高精度で予測することに成功した.
3. 音響理論との連成
 - 着火と火炎の理論と音響理論を連成させ、ノッキングの発生位置を予測する方法の構築を進めている.
 - 現時点では予備的な結果が得られているが、さらなる検証と改良が必要である.

4. まとめと今後の課題

本研究では、直接数値計算と理論的アプローチを組み合わせることで、ノッキング現象の理解を大きく進展させることができた。特に、着火と火炎を結ぶ統一理論の構築は、燃焼科学分野において重要な成果といえる。

今後の課題と研究の方向性は以下の通りである：

1. 簡易予測手法の開発

- 構築した理論を基に、直接数値計算を実施せずにノッキングの発生位置や時期を予測する簡易手法を開発する。
- この手法の精度検証と適用範囲の明確化を行う。

2. 非線形音響と火炎の相互作用の解明

- 閉じた系における火炎と非線形音響の相互作用をより詳細に調査する。
- ノッキングの強度や発生メカニズムに音波が与える影響を定量的に評価する。

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）

Y Morii, A Tsunoda, AK Dubey, K Maruta: Analysis of knock onset based on two-dimensional direct numerical simulation and theory of explosive transition of deflagration, *Physics of Fluids* 35 (8)

著書

なし

国際学会

Youhi Morii, Akira Tsunoda and Kaoru Maruta: Lewis Number Effect on Explosive Transition of Stretch-Free Flat Flame, *Proceedings of the 29th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, Paper 172, 2023.

国内学会・研究会等

森井雄飛, 角田陽, Ajit K. Dubey, 丸田薫：着火と火炎（基調公演），日本燃焼学会講演論文集（2023）

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	GR01APR22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.04～2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024年07月12日提出

デュアル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に

おける保炎性能の解明

早川 晃弘

東北大学流体科学研究所 准教授

乗松 慧生, 西浦 聡志, 山下 裕史, 吉川 涼真

東北大学大学院工学研究科

勝村 紀子

東北大学工学部

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

近年では航空宇宙輸送のさらなる高速化が要求されている。特に，スクラムジェットエンジンはマッハ 5 以上の極超音速飛行が達成可能な唯一のエンジンであり，注目されている。スクラムジェットエンジンは，他の推進器に比べて軽量かつ高比推力であるという特長がある。しかしながら，エンジン内の気流が超音速流れであり，燃焼の継続（保炎）や燃料と気流の混合が課題である。また，気流を衝撃波により圧縮するため，超音速域まで加速するのに別の推進器が必要となる。旅客機への適用を想定した場合，現行の航空機エンジンであるターボジェットエンジンとの併用が現実的である。しかし，ターボジェットエンジンは熱負荷により飛行マッハ数 3 が限界であり，スクラムジェットエンジンは飛行マッハ数 5 以上での運用が想定されている。そのため，スクラムジェットエンジンの安定作動範囲を飛行マッハ数 3 まで拡大する必要がある。マッハ 3 のような低飛行マッハ数条件では，気流のエンタールピーが低く，燃料が自着火しない。そのため，保炎はより一層困難になる。したがって，低飛行マッハ数条件に主眼を置いた場合の課題は，① 気流滞在時間が短いことによる保炎と混合，② 燃料が自着火しないことである。

そこで本研究では，滞在時間の増加を目的にキャビティ保炎器を 2 つ設置したデュアルキャビティ保炎器，燃料を強制着火させるために予燃焼ガス噴射に着目する。そして，これらに有するスクラムジェット模擬燃焼器における保炎性能を流れ場，燃焼場の観点から実験・数値計算により解明する。なお，予燃焼ガス噴射方式とデュアルキャビティを組み合わせた

燃焼器の研究例はない。したがって、本研究の目的はデュアルキャビティ保炎器と予燃焼ガス噴射方式を有するスクラムジェット模擬燃焼器について、保炎性能へ与える影響を流れ場や基礎燃焼特性の観点から明らかにすることである。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の目的は、デュアルキャビティと予燃焼ガス噴射を有するスクラムジェット模擬燃焼器の保炎性能を、基礎燃焼特性と流れ場の観点で解明することである。したがって、研究期間内の最終目標は、燃焼器内の流れ場や燃料・温度の分布を数値計算によって可視化し、実験結果と比較することで、デュアルキャビティによる保炎への効果を詳細に解明することである。

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）

スクラムジェット模擬燃焼器においてデュアルキャビティ保炎器周囲の燃焼特性を解明するために、三次元数値計算を行った。数値計算のソフトウェアには、Ansys社のFluentを使用した。計算における基礎方程式は、レイノルズ平均ナビエーストクス方程式 (RANS)、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、Conaireらの H_2/O_2 詳細反応機構を利用した。なお、予燃焼ガス組成の算出には、Chemkin-Proを用いた。また、反応計算時のソルバーはCHEMKIN-CFDソルバーとした。

本年度の研究は、下流側のキャビティにも燃料（以降、追加燃料と記載）を供給し、主燃料と追加燃料とを燃焼器へ噴射する二段噴射に主眼をおいた。二段噴射はより高い発熱が得られることが期待されるため、実機への適用を見据えた実用的な研究対象である。図1および図2に本プロジェクトにて得られた数値計算結果の一例を示す。図1は二段噴射におけるOHモル分率分布である。OHは燃焼の中間生成物で、燃焼ガス領域のマーカーとなる化学種である。OHモル分率分布を可視化することで、燃焼が盛んな領域を特定することが可能となる。本プロジェクトでは、風洞試験で取得したOH自発光の撮影結果と図1とを比較することで、数値計算の妥当性と燃焼領域を解明した。また、図2に示すような燃焼完了度を計算した。燃焼完了度は、投入した燃料がすべて燃焼した場合の水の生成量と特定の燃焼器断面における水の質量との比を取ることで、投入した燃料の何割が反応を完結したかを示す指標である。図1と図2から、主たる燃焼領域は1つ目のキャビティより上流のはく離領域であること、予燃焼ガスを噴射した直後 ($x = 45 \text{ mm}$) に燃焼完了度が高まること、燃料のほとんどすべてが反応を完了していることが明らかになった。

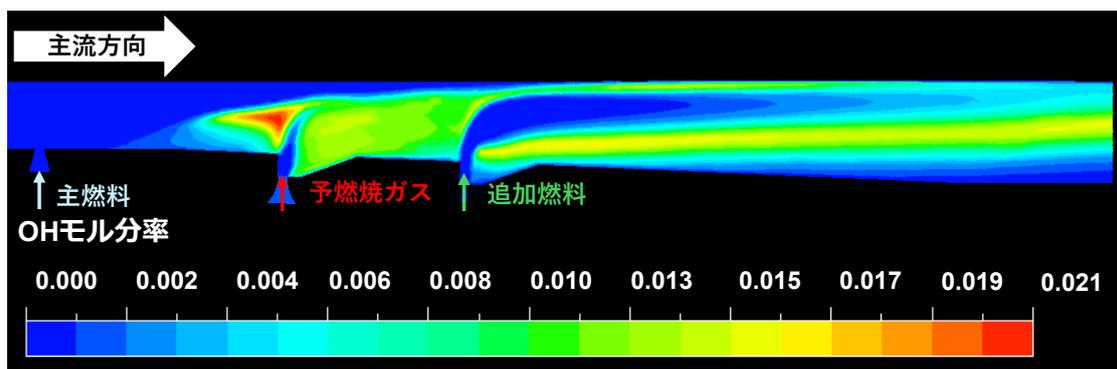


図1 燃料二段噴射時におけるOHモル分率分布

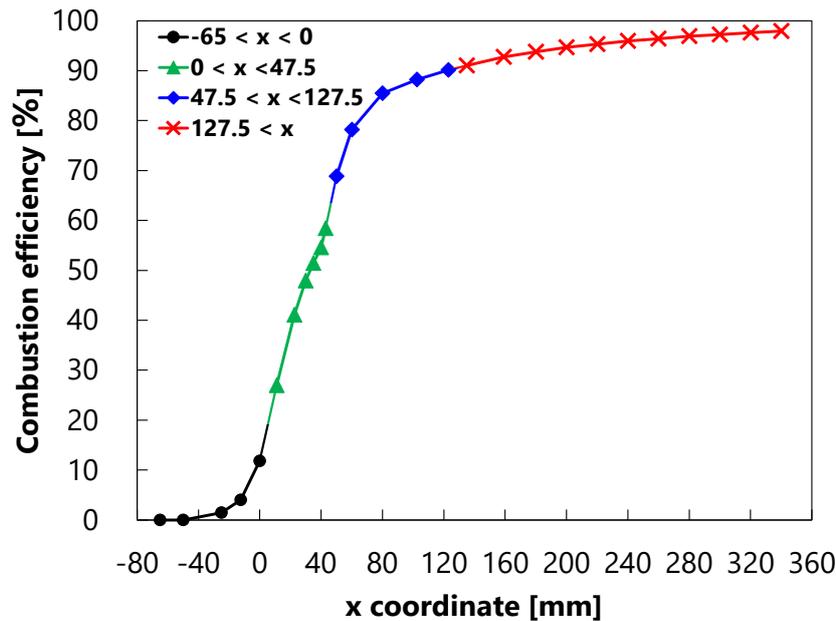


図 2 燃焼完了度

3. 研究目標の達成状況

第 1 回の報告時点で、デュアルキャビティが保炎性能を向上するメカニズムに対する要因を明らかにしていた。本報告では、実機を見据えた燃料二段噴射を対象に燃焼現象の解明を行うことができた。したがって、本プロジェクトの最終目標であるデュアルキャビティによる流れ場と保炎性能に与える影響の解明に加え、二段噴射に関する知見を獲得できたことから、研究目標は達成できたと判断できる。

4. まとめと今後の課題

2 年度に渡る本プロジェクトにより、再循環領域による滞在時間の増加および高温領域の形成といった、デュアルキャビティが保炎範囲を拡大する要因を明らかにした。また、実機への適用を見据えた燃料二段噴射に関して、燃焼完了度をはじめとする定量的な検討を行い、その有効性を解明することができた。

一方で課題としては、二段噴射した場合における燃焼器内の圧力分布が一致しない部分が確認された。そこで、次年度以降では燃焼器壁面条件の改善や境界層を考慮したより高解像度な計算格子による計算などに挑戦し、実験と数値計算とのバリデーションを高めていく。

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）

- ① 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吸込みが流れ場および保炎性能へ与える影響, 日本航空宇宙学会論文集, 71, 2, (2023), pp.94-103.

著書

なし.

国際学会

ポスター発表

- ② K. Norimatsu, S. Nishiura, Y. Wakita, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, effects of Boundary Layer Bleeding and Dual-cavity Flameholder on Flame Stabilizing in Supersonic Flows, 39th International Symposium on Combustion, 2022/07/26.
- ③ K. Norimatsu, S. Nishiura, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Effects of Dual-cavity Flameholder on Flow Field and Flame Structure in Supersonic Flows, 19th International Conference on Flow Dynamics, 2022/11/09.
- ④ K. Norimatsu, S. Nishiura, T. Kudo, Akihiro Hayakawa, Study on Pressure Profile for Various Fuel Flow Rates in a Scramjet Combustor with Dual-cavity Flameholder, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023/11/6 – 2023/11/8.

国内学会・研究会等

- ⑤ 乗松慧生, 西浦聡志, 工藤琢, 早川晃弘, 小林秀昭, デュアル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における流れ場および火炎安定化に関する研究, 日本航空宇宙学会北部支部 2023 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, 2023 年 3 月
- ⑥ 乗松 慧生, 勝村 紀子, 西浦 聡志, 工藤 琢, 早川 晃弘, 超音速流におけるデュアルキャビティ保炎器を有する燃焼器の燃料流量に対する圧力分布への影響, 第 63 回航空原動機・宇宙推進講演会/北部支部 2024 年講演会ならびに第 5 回再使用型宇宙輸送系シンポジウム, 2024/03/13–15, 北海道立道民活動センター かでの 2・7 (発表受理, 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	GR03APR22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.04～2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024年07月22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
ガソリン代替合成燃料・電解液溶媒・アンモニアの着火・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

東北大学流体科学研究所 博士研究員

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、カーボンニュートラルなガソリン代替合成燃料及びカーボンフリー燃料であるアンモニアの実機への適用や可燃性を有する電解液の発火防止を目的とし、各種ガソリン代替合成燃料、電解液溶媒、アンモニアの着火・燃焼特性の調査を行う。研究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は、消炎直径以下の内径を有する石英管と外部熱源により構成され、火炎が自発的な着火・消炎を繰り返す非正常火炎や、微弱な発熱を有する定在火炎といった特異な性質を有す

る火炎を観察可能な実験装置である。この実験手法を用いることにより、従来の燃料解析手法では困難であ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。またリアクタ内の気相温度を外部熱源により強く拘束するため、反応性の低い燃料に対しても燃焼特性の調査が可能である。数値計算においても管内流れが1次元とみなせること、温度分布が拘束されていること、解析領域のスケールが小さいことなどから、従来の手法に比べ詳細な反応過程の調査が可能である。以上の特徴を活かし、各種燃料の着火特性の調査及び着火に寄与する反応経路の特定を行い、反応モデルの検証および修正を行うとともに、修正反応モデルを用いて実機燃焼器における最適な燃焼条件の探索を行う。

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を模擬した数値シミュレーションを実施し、各種ガソリン燃料、電解液溶媒、アンモニアの着火・燃焼特性に関するデータの取得や、低温化学反応と動的火炎伝播の相互干渉に関する未発見の燃焼現象の解明を行う。さらに、化学種計測結果との比較により既存の反応モデルを修正し、高精度なモデルを構築する。修正された反応モデルはCFDに導入し、安全性の高い電解液溶媒の開発、ガソリンエンジンやアンモニアガスタービン燃焼における燃焼条件設計に利用される。

2. 研究成果の内容

2.1 炭酸エチルメチルの反応モデル構築と検証

バッテリー電解液の主成分のひとつである炭酸エチルメチルについて、反応モデルを構築し、マイクロフローリアクタの計測結果と比較検証した。昨年度の研究成果から、メチル基とエチル基で反応特性の差異を見出したことから、炭酸エチルメチルのメチル基側は炭酸ジメチルから、エチル基側は炭酸ジエチルから、グループ測により反応モデルを構築した。燃料ラジカル熱物性はTHERMを用いて計算した。図1に構築したモデルによる炭酸エチルメチル反応過程における中間体の予測結果と計測結果の比較を示す。構築したモデルは炭酸エチルメチルの燃焼過程を良く再現することを確認した。

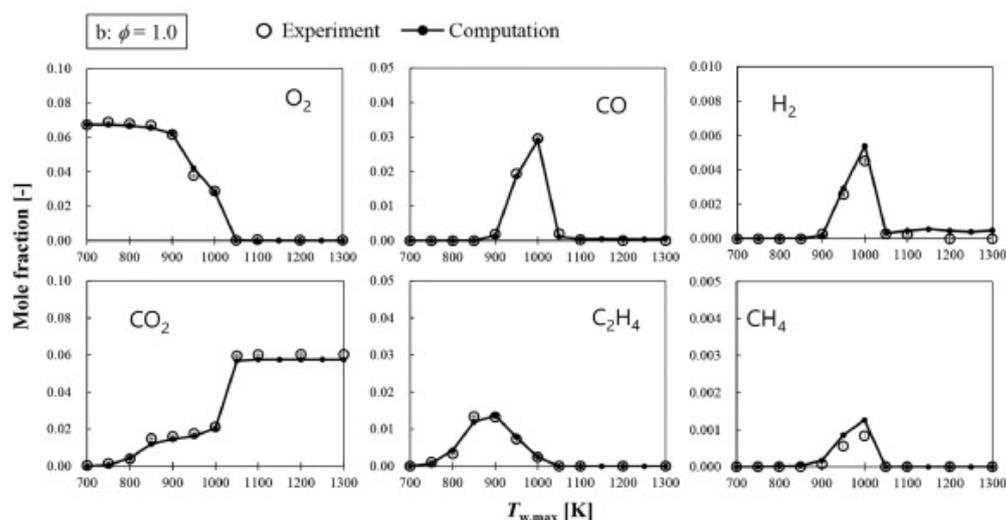


図1 炭酸エチルメチルの反応モデル検証

2.2 亜酸化窒素 (N₂O) の分解, 反応特性の調査

亜酸化窒素 (N₂O) はアンモニアを燃焼させた際に排出が懸念されている窒素酸化物の一種である。N₂O は CO₂ の約 300 倍の温室効果を持つ物質であるため、アンモニア燃焼の実用化にあたって N₂O の排出制御が求められている。N₂O は通常の燃焼方法であれば熱により分解されほとんど排出されない。しかし工業炉などで高効率な燃焼方法として用いられている高温空気燃焼と呼ばれる燃焼方法では局所温度が高い領域が存在しないため、熱による分解が進まずに N₂O が排出されてしまう可能性がある。本研究では N₂O を対象とし、1400K 以下での Ar, CO₂, H₂O 存在下での熱分解特性および N₂O を酸化剤として用いた際の燃料との反応特性について調査した。熱分解特性に関しては、実験より H₂O 存在下で N₂O の分解が最も促進されることが分かり、数値計算によって CO₂, H₂O の三体係数を新たに定義した。新たに定義した三体係数を用いた数値計算結果と実験結果を比較した図を図 2 に示す。新たに定義した三体係数を用いると数値計算において実験結果を精度よく再現可能であることが確認できる。燃料との反応特性に関しては、実験よりメタンよりもエタンとアンモニアの方が N₂O の消費を促進することが分かった。この理由について数値解析を行い、エタンの場合は N₂O の消費に重要な H ラジカルがより低温で生成されやすいこと、アンモニアの場合はアンモニア酸化過程で最初に生成される燃料ラジカル (NH₂) が直接的に N₂O を消費することが分かった。

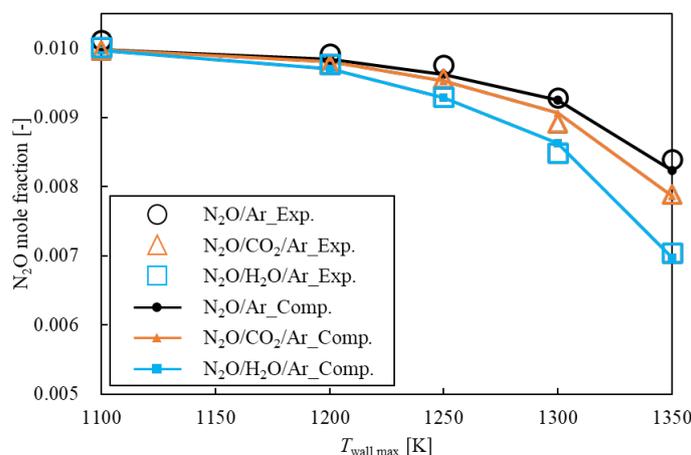


図 2 N₂O 熱分解における実験と数値計算の比較

2.3 反応性流体用 CFD コードの構築とノルマルヘプタンの火炎応答の調査

ガソリン燃料の主成分であるノルマルヘプタンを対象に、温度分布制御型マイクロフローリアクタ内で観察される動的な着火、火炎伝播を調査した。数値計算のために、詳細化学反応を考慮した反応性流体用の CFD コードの構築を行なった。ノルマルヘプタンは多段的な酸化反応経路を持つことから、低温から中温域で生じる部分的な着火反応の進行により先進の高圧縮エンジン内では火炎伝播特性に影響を及ぼすことが想定される。そこで、圧力や滞在時間を容易に制御可能なマイクロフローリアクタを用いることで、部分的な着火反応が火炎伝播に及ぼす影響を調査した。常圧条件では、高流入流速条件において、流れの滞在時間が短くなることで、Cool flame 等の低温化学反応の強度が小さくなり、結果、低温反応による

伝播速度の促進効果が弱くなることがわかった。一方、高圧条件では、低温化学反応が強くなることから、図3に示すように、Cool flameの定在位置において強い火炎伝播速度の促進効果が現れることを明らかにした。

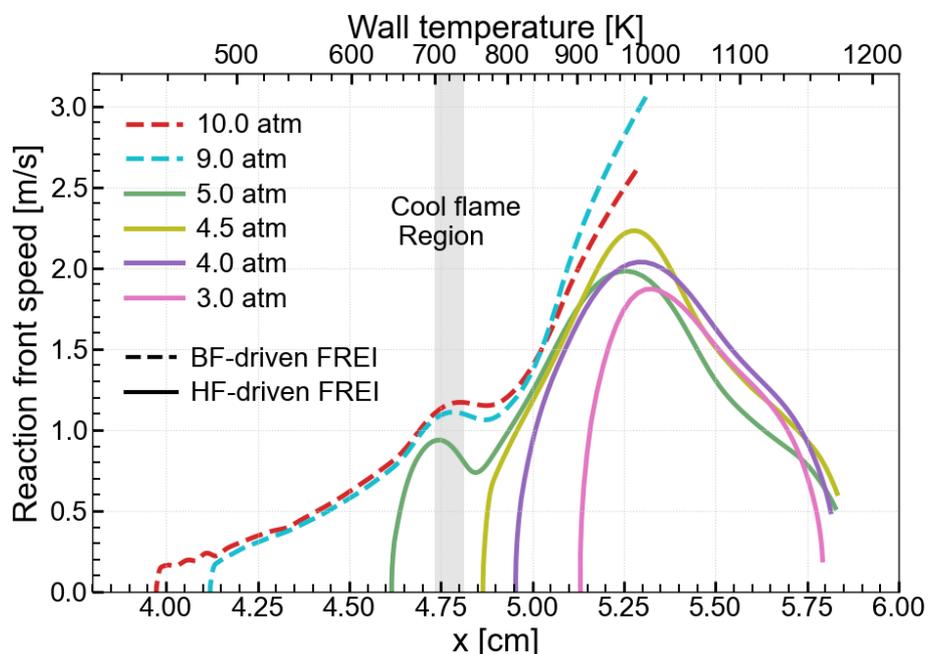


図3 マイクロフローリアクタ内を伝播する火炎速度の圧力依存性

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出来た。

4. まとめと今後の課題

温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた実験と数値計算の比較により、炭酸エチルメチルのモデル検証を行い、 N_2O の熱分解特性、燃料と反応させた際の反応特性について調査することが出来た。ノルマルヘプタンの数値計算では、低温及び中温反応の強い圧力依存性により、高圧条件では部分酸化反応による強い火炎伝播の促進効果があることを明らかにした、引き続き、各種燃料の実機燃焼器適用に向け、様々な混合気に対して着火・反応特性の調査を行う予定である。

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）

Shintaro Takahashi, Keisuke Kanayama, 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 II: Chemical Kinetic Modeling of Ethyl Methyl Carbonate, Combustion and Flame, Vol.238, (2022), 111878.

Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kenji Hiraoka, Kaoru Maruta:

Effects of mixture composition on oxidation and reactivity of DME/NH₃/air mixtures examined by a micro flow reactor with a controlled temperature profile, *Combustion and Flame*, Vol. 238, (2022), 111911.

Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Experimental and Modeling Study on Pyrolysis of Ethylene Carbonate/Dimethyl Carbonate Mixture, *Combustion and Flame*, Vol. 245, (2022), 112359.

Keisuke Akita, Youhi Morii, Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Dynamics of FREI with/without cool flame interaction, *Proceedings of The Combustion Institute*, Vol. 39, (2023), 1957-1965.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Masahiko Izumi, Hisashi Nakamura: Roles of NH₂ reactions in ammonia oxidation at intermediate temperatures: Experiments and chemical kinetic modeling, *Combustion and Flame*, Vol. 259, (2024), 113177.

Takumi Harada, Yuki Murakami, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Masahiko Izumi, Hisashi Nakamura: N₂O consumption by thermal decomposition and reduction with CH₄, C₂H₆ and NH₃, *Combustion Science and Technology*, In Press, (2024).

著書

該当なし

国際学会

Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Thermal Decomposition-induced Multi-stage Reaction of Diethyl Carbonate Examined by a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 28th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS 2022), (2022.6.20) *Proceedings of the 28th ICDERS*, #167.

Keisuke Akita, Youhi Morii, Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Dynamics of FREI with/without cool flame interaction, 39th International Symposium on Combustion, (2022.7.29), *PROCI-D-22-01380*.

Takumi Harada, Yuki Murakami, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Hisashi Nakamura: Study on rate constant of N₂O consumption using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, 39th International Symposium on Combustion,

(2022.7.28), 3P015.

Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Theoretical calculations for decomposition of gas-phase ethylene carbonate and species measurements for pyrolysis of ethylene carbonate doped with dimethyl carbonate, 39th International Symposium on Combustion, (2022.7.28), 3P020.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Role and impacts of N_2H_2 reactions on ammonia oxidation with H_2O addition, 39th International Symposium on Combustion, (2022.7.28), 3P044.

Yuki Murakami, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Investigations on extinction limits of CH_4/NH_3 nonpremixed counterflow flames with high-temperature air, 1st Symposium on Ammonia Energy, (2022.9.1), CF04.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Experimental and kinetic modeling studies of NH_3 oxidation using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, KAUST-Tohoku University-Orléans core-to-core workshop, (2022.9.26).

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Kinetic study on ammonia oxidation with H_2O addition using a micro flow reactor controlled with a controlled temperature profile, 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022.11.10), OS2-5.

Takumi Harada, Yuki Murakami, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Study on N_2O reactions with H_2 and CH_4 using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022.11.10), OS2-6.

Yuki Murakami, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Extinction limits of $CH_4/NH_3/N_2$ versus high-temperature air nonpremixed counterflow flames, 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022.11.10), OS2-9.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Kinetic Study on Ammonia Oxidation at Fuel-Rich Conditions with H_2O Addition Using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 14th Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC 2023), (2023.5.18), 126.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Masahiko Izumi,

Hisashi Nakamura: Experimental and Chemical Kinetic Studies on Ammonia Oxidation Using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 2nd Symposium on Ammonia Energy, (2023.7.11), 487694.

Keisuke Kanayama, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Toward Model Prediction for Combustion Properties of Lithium-Ion Battery Electrolyte Solvents, 29th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS 2023), (2023.7.25), 187.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Investigation on ammonia oxidation at elevated pressures examined by a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Workshop on Ammonia Combustion Chemistry, (2023.9.6).

Keisuke Kanayama, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Andras Bodi, Patrick Hemberger: Short-Lived Intermediates Detection in Trimethyl Phosphate Pyrolysis using Vacuum Ultraviolet Synchrotron Radiation, 20th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), (2023.11.6), OS2-4.

Kenta Tamaoki, Takuya Takuya, Masahiko Izumi, Hisashi Nakamura: Investigation on Ammonia Oxidation at Elevated Pressures Using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 20th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), (2023.11.6), OS2-5.

国内学会・研究会等

原田拓実, 村上雄紀, 金山佳督, 玉置健太, 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 N₂O 熱分解に関する研究, 日本伝熱学会, (2022.5.20), A344.

玉置健太, 村上雄紀, 金山佳督, 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 H₂O 添加がアンモニア酸化に及ぼす影響に関する研究, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2022, (2022.10.9), H212.

玉置健太, 村上雄紀, 金山佳督, 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アンモニア改質反応に関する研究, 日本燃焼学会第 60 回燃焼シンポジウム, (2022.11.22), B211.

原田拓実, 村上雄紀, 玉置健太, 金山佳督, 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 N₂O と H₂ 及び低級炭化水素の反応に関する研究, 日本燃焼学会第 60 回燃焼シンポジウム, (2022.11.22), B232.

玉置 健太, 泉 正彦, 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昇圧条件下におけるアンモニア酸化反応に関する研究, 第 61 回燃焼シンポジウム, (2023.11.17), A315.

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	GR04APR22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.04～2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024 年 07 月 24 日提出

SI エンジンの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, 丸田 薫

東北大学流体科学研究所 助教, 教授

秋田 佳祐, 角田 陽, 廣瀬 海音, 柿澤 昂志, 岡田 晏, 宮崎 将吾, 森山 陽太

東北大学流体科学研究所 D3, D2, M2, M1, M1, M1, B4

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て, 希薄運転限界を拡大することで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. 希薄運転限界を拡大するには, 希薄化により困難となる着火核から火炎伝播への遷移を理解する必要がある. また, ノッキング (未燃予混合気中での意図しない着火等の異常燃焼) の理解は, 高効率なガソリンエンジンの開発において重要であるが, まだ十分に理解されていない.

ガソリンサロゲート燃料における Explosive transition of deflagration

ノッキングはエンジンの燃焼室内で高温・高圧となった未燃混合気の自着火に起因すると考えられている. しかし, 火炎伝播と自着火の双方が作用する現象であることからノッキングの発生メカニズムは完全には明らかにされておらず, 高温・高圧環境下における火炎伝播及び自着火現象に関する調査が必要である. 森井らは, 燃料のルイス数が 1 より大きい混合気では, ある初期温度以上では予熱帯における自着火反応の進行を無視できなくなることで 1 次元平面火炎が存在できなくなる "Explosive transition of deflagration" (ETD) が発生することを示した. また, 2 次元直接数値計算 (2D DNS) によるノッキング発生実験の再現結果より, ノッキング発生時の温度・圧力条件と ETD 発生時の温度・圧力条件が一致したことから, ETD とノッキングは密接な関係を持つことが示唆されている. そこで, 5 つの燃料成分でガソリンの燃焼特性を再現したガソリンサロゲート燃料を用いた数値計算により, ノッキングの発生予測等への ETD の適用可能性について調査する.

ガソリンサロゲート燃料における着火・火炎伝播遷移過程とリーン着火限界特性の燃料影響予測

燃料希薄条件においては量論比に比べ燃焼速度が低下することから、実機エンジンではサイクル中に燃焼を完了させるため、高強度乱流燃焼が用いられる。しかし、燃料希薄条件では着火が困難となり、希薄着火限界が存在することが知られている。燃焼場における乱流強度の増大に伴う着火の困難化については、最小着火エネルギー (Minimum Ignition Energy, 以下 MIE) と乱流強度の関係が調査されている。乱流強度の増大に伴って MIE は徐々に増加するが、ある乱流強度を境に急激に MIE の値が増加する MIE transition 現象が発生することが示された。複数の研究グループによる結果を総合すると、希薄着火限界近傍でのエンジン内の着火・伝播遷移過程では、エンジン筒内が MIE transition に満たない弱い乱れでの燃焼となっていること、その振る舞いは静止予混合気を用いた球状伝播火炎の着火・火炎伝播遷移過程によって代表できることが示唆された。

エンジン実機を用いた研究において、ベース燃料に対して各種の添加燃料を加えた際に燃料種によっては希薄限界が顕著に拡大すること、さらに希薄限界と層流燃焼速度に強い相関があることが示されている。一方で層流燃焼速度は伸長の影響を考慮しておらず、実際のエンジン燃焼場のような乱流場における層流着火特性と希薄限界との関係をより正確に調査するためには、火炎伸長の影響を考慮した層流燃焼特性を評価する必要があると考えられる。

以上より、希薄着火限界近傍のエンジン燃焼動態は層流での着火・火炎伝播遷移過程によって説明可能であると仮定し、希薄着火限界と層流での着火・火炎伝播遷移との関係について調査した。また、火炎伸長の影響を考慮した燃料の層流燃焼性質を定量的に示す指標を考案し、燃料間での希薄着火限界の予測手法の構築を試みた。

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、燃焼限界近傍の火炎挙動とノッキング現象を明らかにする。更に、数値計算に基づく希薄着火限界及びノッキング発生の予測を目指す。

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)

ガソリンサロゲート燃料における Explosive transition of deflagration

エンジン燃焼室内部を想定した高温・高圧条件下で 1 次元平面予混合火炎の定常計算 (Cantera 3.0 を使用) を実施した。ETD の検討において自着火と火炎の関係性が重要となることから、計算領域中の未燃領域の長さを変更しながら計算を行った。燃料にはレギュラーガソリンの燃焼特性を再現した 5 成分ガソリンサロゲート燃料をベースとし、2 つのオクタン価 (RON90, 100) の燃料を用いた。加えて、同一のオクタン価で 25vol% のエタノールを添加した燃料を使用した。これは実エンジンにおいてエタノール添加によるノッキング抑制効果が確認されているためである。

同一の初期温度条件で未燃領域の長さを変更しながら火炎の計算を行うと、未燃領域長がある値よりも長くなると、燃焼速度が上昇した。これは、未燃領域において自着火反応が進行することに起因する。初期温度を上昇させて同様の計算を行うと、燃焼速度が上昇し始

める未燃領域長さが短くなるとともに、火炎の収束回が得られない点が存在した。これらの条件下では、自着火反応の進行の影響による非定常現象が生じている可能性がある。また、1次元平面火炎の解が得られないことから、火炎が存在せず ETD が発生していると考えられる。各初期温度条件で収束解を得られる点数をもとに ETD の発生条件を求めたところ、オクタン価の増加に伴って ETD の発生は高温になる傾向が得られた。同一のオクタン価を保ったまま 25vol%のエタノールを添加した燃料を用いた結果においては、エタノールの添加によって ETD の発生が高温になるような効果は見られなかった。

ガソリンサロゲート燃料における着火・火炎伝播遷移過程とリーン着火限界特性の燃料影響予測

研究室内製の計算コードを使用し、1次元球座標系で球状伝播火炎の着火・火炎伝播特性を模擬した非定常計算を実施した。エンジン試験結果と比較するため、既往研究にて調査が行われた混合燃料を中心に、イソオクタンと SIP 事業にて策定されたハイオクガソリンサロゲート燃料 (S5H) をベース燃料とし、エンジン試験より特に希薄運転限界拡大が期待される燃料種を添加した混合燃料を設定した。数値計算と同一の条件において、定容燃焼容器を用いて着火・火炎伝播遷移過程を調査する実験も行った。

数値計算結果及び実験から得られた火炎半径の時間履歴より、全ての燃料群において、熱と物質の拡散の比を示すルイス数が 1 よりも大きい場合の着火・火炎伝播遷移における典型的な振る舞いが確認された。さらに、着火・火炎伝播遷移過程を燃料間で比較すると、その成長の順番は数値計算と実験の結果で一致していた。今回用いた数値計算手法と化学反応機構の妥当性が示されたと考えられる。燃料ごとの層流着火特性と希薄限界をより定量的に結びつけるため、初期火炎核の成長速度に着目した評価手法を考案した。着火過程の影響が十分に小さく、火炎半径の成長が伸長率に対して線形になるまでの時間を、着火直後の火炎成長の速さを示す特性時間 τ として定義した。燃料間の比較を行った結果、エンジンの種類によらず τ が短いほど希薄限界が広がる傾向が得られた。燃料間での希薄燃焼への適合性は、エンジンによらない燃料性質をもとにした比較検討が実施できると考えられる。

3. 研究目標の達成状況

ガソリンサロゲート燃料を用いた 1次元平面予混合火炎の定常計算により、高温条件下においては自着火反応の進行による燃焼速度上昇効果や、火炎が存在し得なくなる Explosive transition of deflagration(ETD)が発生することが示された。ETD の発生温度条件は燃料のオクタン価と相関を持つことが明らかとなった。

球状伝播火炎の数値計算及び実験結果の比較により、着火・火炎伝播遷移過程の燃料間の成長の順番が一致したことから、数値計算手法及び化学反応機構の妥当性が示された。また、着火直後の火炎成長の速さを示す特性時間 τ を定義すると、エンジンの種類によらず τ が短いほど希薄限界が広がる傾向が得られた。

4. まとめと今後の課題

ガソリンサロゲート燃料において、Explosive transition of deflagration(ETD)が発生すること、および ETD 発生条件とオクタン価に相関関係を持つことが示された。ETD が発生す

る条件下において非定常計算を実施し、詳細な現象の理解とノッキング現象との関係性の解明を目指す。

球状伝播火炎の数値計算及び実験結果より、着火直後の火炎成長の速さによって層流燃焼特性を整理することに成功した。今後、着火条件や EGR が着火・火炎伝播遷移過程へ与える影響の評価と、その一般化を進めていく予定である。

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）

学術雑誌（解説等を含む）

Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Youhi Morii, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Computational study on lean and rich combustion of flame ball, counterflow flame and planar flame: Their limits and stoichiometries, Proceedings of The Combustion Institute, Vol. 39, Issue 2:1937-1944(2023).

Keisuke Akita, Peng Zhao, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Derek Splitter, Flavio Dal Forno Chuahy, Effects of unburnt reaction progress on stretch flame dynamics under elevated temperatures, Combustion and Flame, Vol. 259, 113193(2024).

著書

特に無し

国際学会

Youhi Morii, Ajit Kumar Dubey, Hisashi Nakamura Kaoru Maruta, DNS study on knocking initiation induced by acoustic waves interacting with tulip-like flame, The 18th International Conference on Numerical Combustion, 2022.

Kaito Hirose, Koji Shimoyama, Hisashi Nakamura: Generating a compact model for methane and natural gas using genetic algorithm and abbreviated reaction pathways, WIP Poster, 39th International Symposium on Combustion, (2022).

Kaito Hirose, Yuki Murakami, Koji Shimoyama, Hisashi Nakamura: Generating Compact Reaction Models for Methane and Natural Gas Using Genetic Algorithms, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, (2022).

Kazutaka Sagawa, Takaki Akiba, Akira Tsunoda, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Numerical analysis of flame behavior initiated from flame ball in weakly-stretched counterflow field, 39th International Symposium on Combustion, WIP Poster, Vancouver, Canada, 25 July 2022.

Youhi Morii, Ajit Kumar Dubey, Hisashi Nakamura Kaoru Maruta, Detail analysis of

experimentally verified 2D-DNS for knocking in a constant volume vessel with n-heptane fuel, 39th International Symposium on Combustion, WIP Poster, Vancouver, Canada, 25 July 2022.

Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Youhi Morii, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Computational study on lean and rich combustion of flame ball, counterflow flame and planar flame: Their limits and stoichiometries, 39th International Symposium on Combustion, 1B10, Vancouver, Canada, 25 July 2022.

Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Youhi Morii, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Near Lean/Rich Limits Behaviors and Local Stoichiometries of Flame Balls, Counterflow Flames, and Planar Flames in a CH₄/O₂/Xe Mixture, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 9 November 2022.

Ayaka Hashimoto, Keisuke Akita, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Numerical Study on the Effect of Initial Ignition Condition on Flame Propagation of Dimethyl Ether (DME)/Air Mixture, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 9 November 2022.

Youhi Morii, Ajit Kumar Dubey, Hisashi Nakamura Kaoru Maruta, Numerical Study for Reproducing Knocking Experiment in a Constant Vessel with a Single Spark Igniter, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 9 November 2022.

Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Masao Kikuchi, Kaoru Maruta, Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Masao Kikuchi, Kaoru Maruta, 34th International Symposium on Space Technology and Science, Fukuoka, 8 June 2023.

Kaito Hirose, Juwei Zhang, Hisashi Nakamura, Koji Shimoyama, Takamasa Ito, Tralin Kanaumi, Generating a simplified reaction model for NH₃ using a genetic algorithm and its integration into boiler CFD, 2nd Symposium on Ammonia Energy, France, 12 June 2023.

Takashi Kakizawa, Yoshiki Hirano, Taichi Mukoyama, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Effects of Repetitive Spark Discharges with Milliseconds Intervals on the Ignition-to-Flame Propagation Transition for Lean n-Heptane/Air and iso-Octane/Air Mixtures, 29th International Colloquium of the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Seoul, Korea, 25 July 2023.

Youhi Morii, Akira Tsunoda, Kaoru Maruta, Lewis Number Effect of Explosive

Transition of Stretch-Free Flat Flame, 29th International Colloquium of the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Seoul, Korea, 26 July 2023.

Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Counterflow Flame Behavior at Large Lewis Number around Explosive Transition of Deflagration, 29th International Colloquium of the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Seoul, Korea, 28 July 2023.

Daiki Nakao, Youhi Morii, Takuya Tezuka Kaoru Maruta, Explosive Transition of Deflagration in PRF/air Mixtures, 29th International Colloquium of the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, WIP Poster, Seoul, Korea, 26 July 2023.

Takashi Kakizawa, Keisuke Akita, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Study on the Ignition-to-Flame Propagation Transition of Spherically Propagating Flame Initiated by Spark Discharge and Low-Temperature Heat Source, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 6 November 2023.

Youhi Morii, Kaoru Maruta, Stabilities of Reaction Wave Structures in Low- to High-speed Reactive Inflow Conditions, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 6 November 2023.

Kaito Hirose, Youhi Morii, Koji Shimoyama, Hisashi Nakamura, Stiffness suppression in generating a simplified reaction model for methane using generic algorithms, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 7 November 2023.

Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta, An Updated Simplified Reaction Rate Model to Consider Chemical Reaction in Preheat Zone, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 8 November 2023.

Keisuke Akita, Peng Zhao, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Unburnt Reaction Progress Effects on Spherical Flame Dynamics under Elevated Temperature Conditions, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 8 November 2023.

Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Explosive transition of deflagration” and spontaneous ignition in $Le > 1$ stretched flame, 4th International Discussion Meeting on Chemistry and Technology of Combustion Application, Beijing, 17 December 2023.

国内学会・研究会等

廣瀬海音, 村上雄紀, 下山幸治, 中村 寿: 遺伝的アルゴリズムを用いたメタン/水素混焼用簡易化学反応モデルの構築”, 第 59 回伝熱シンポジウム (2022), A325 .

角田陽, 秋葉貴輝, 中村寿, 手塚卓也, 菊池政雄, 丸田薫, L3-FLAME: Flame ball・対向流火炎・非伸長平面火炎の燃料希薄・過濃限界に関する数値的研究, 日本マイクログラフィティ応用学会 第34回学術講演会, 愛知県, 2022年9月14日.

角田陽, 秋葉貴輝, 中村寿, 森井雄飛, 手塚卓也, 丸田薫, Flame ball・対向流火炎・非伸長平面火炎の希薄・過濃燃焼特性: 燃焼限界と"essential stoichiometry", 第60回日本燃焼シンポジウム, 東京, 2022年11月21日.

佐川和孝, 秋葉貴輝, 角田陽, 森井雄飛, 中村寿, 丸田薫, Flame ball および球状熱源を初期解に用いた対向流場中の火炎挙動の数値解析, 第60回日本燃焼シンポジウム, 東京, 2022年11月21日

橋本彩夏, 村上雄紀, 森井雄飛, 秋田佳祐, 中村寿, 丸田薫, DME 空気予混合気における初期着火条件と着火火炎伝播遷移家庭に関する数値的研究, 第60回日本燃焼シンポジウム, 東京, 2022年11月21日.

橋本彩夏, 秋田佳祐, 森井雄飛, 中村寿, 丸田薫, 各種ガソリンサロゲート燃料のリーン着火限界特性に関する数値的研究, 第60回日本伝熱シンポジウム, 福岡, 2023年5月26日.

森井雄飛, 角田陽, 丸田薫, 非伸長平面火炎の Explosive transition に及ぼすレイノルズ数の影響, 日本流体力学会年会, 東京, 2023年9月20日.

森井雄飛, 角田陽, Ajit Kumar Dubey, 丸田薫, 着火と火炎, 第61回日本燃焼シンポジウム, 秋田, 2023年11月15日.

角田陽, 森井雄飛, 丸田薫, $Le > 1$ 混合気における Explosive transition of deflagration に対する火炎伸長の影響, 第61回日本燃焼シンポジウム, 秋田, 2023年11月15日.

中尾太樹, 森井雄飛, 手塚卓也, 丸田薫, PRF におけるオクタン価とノック発生条件に関する基礎的研究, 第61回日本燃焼シンポジウム, 秋田, 2023年11月15日.

柿澤昂志, 橋本彩夏, 岡田晏, 秋田佳祐, 手塚卓也, 森井雄飛, 中村寿, 丸田薫, ガソリンサロゲート燃料組成が着火・火炎伝播遷移過程に与える影響, 第61回日本燃焼シンポジウム, 秋田, 2023年11月15日.

廣瀬海音, 森井雄飛, 下山幸治, 中村寿, 遺伝的アルゴリズムを用いたメタン対象の低ステイフ簡易反応モデルの構築, 第61回日本燃焼シンポジウム, 秋田, 2023年11月15日.

岡田 晏, 森井雄飛, 角田陽, 秋田佳祐, 丸田薫, **transonic autoignitive wave** の爆轟遷移メカニズムの調査, 第 37 回数値流体力学シンポジウム, 名古屋, 2023 年 12 月 17 日.

森井 雄飛, 丸田 薫, 数値流体解析を用いた超音速領域における着火と爆轟の遷移に関する研究, 衝撃波シンポジウム, 福岡, 2024 年 3 月 7 日.

柿澤昂志, 平野芳樹, 向山秦地, 橋本彩夏, 秋田佳祐, 手塚卓也, 森井雄飛, 中村寿, 丸田薫, スーパーリーンバーン SI 機関のリーン着火限界メカニズムとその燃料影響予測—ガソリンサロゲート燃料を用いた基礎燃焼学的検討—, 自動車技術会 2024 年春季大会, 学生ポスターセッション, 神奈川, 2024 年 5 月 22 日.

宮崎将吾, 中尾太樹, 手塚卓也, 森井雄飛, 中村寿, 丸田薫, 定容容器内でのノッキングの可視化観察—n ヘプタンと iso オクタンの比較—, 自動車技術会 2024 年春季大会, 学生ポスターセッション, 神奈川, 2024 年 5 月 22 日.

森山陽太, 中尾太樹, 角田陽, 森井雄飛, 丸田薫, ガソリンサロゲート燃料の **Explosive transition of deflagration** とオクタン化に関する数値的研究, 第 61 回日本伝熱シンポジウム, 兵庫, 2024 年 5 月 29 日.

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	GR05APR22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.4～2024.3
報告回数	第 2 回報告

2024 年 7 月 29 日提出

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

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

風車ロータなどの回転翼から発生するらせん渦は、長波長不安定性・短波長不安定性・相互作用型不安定性などにより不安定化し、最終的には乱流遷移する。研究代表者は、らせん渦のような曲りをもつ渦について、曲りに起因する曲率不安定性（短波長不安定性）が存在することを発見し、そのメカニズムを解明し、実証してきた。本研究は、物理的素過程としての不安定性に基づいて、らせん渦が乱流遷移する過程と遷移後の乱流の性質の体系的な理解を確立するものである。遷移過程と遷移後の乱流の性質が、らせん渦を特徴づける複数のパラメータ（太さ・振り・軸流・本数・レイノルズ数）と擾乱の性質によってどのように決まるかを解明する。

1.2 研究期間内の最終目標

(1) らせん渦が不安定化し乱流遷移する過程と、遷移後の流れの性質を、物理的素過程としての不安定性に基づいて体系的に解明するのが本研究の目的である。らせん渦を特徴づける複数のパラメータに対する依存性の全貌を明らかにする。3 種類の不安定性が直接的に乱流遷移を引き起こすのか、それとも 2 次不安定性や遷移成長によるバイパス遷移が原因となるのかを突き止め、遷移過程とヘリシティが遷移後の平均流や乱流ゆらぎの統計的性質に与える影響を明らかにする。遷移後にらせん渦が崩壊して発達した乱流となるのか、それとも構造が残存する弱い乱流状態となるのかを決める相図を作るのが最終目標である。

(2) らせん渦によって作られる風車ロータの後流を任意の条件下で予測できれば、風力発電量の正確な予測ができる。これは、欧州のように風力発電のシェアが大きい国において重要なだけでなく、風況が悪い（＝一定の強い風が吹く地域が限られている）我が国においても重要である。なぜならば、発電量が不安定で予測しがたいために電力グリッドに組み込むのが難しいことが、風力発電普及を妨げる一因となっているからである。また、乱流ゆらぎは風車ロータの振動を引き起こし、性能劣化や疲労故障の原因となる。乱流ゆらぎの性質を

明らかにすることで、ロータ寿命の予測や制振機構の開発による長寿命化、さらには運転範囲の拡大につなげる。

(3) らせん渦の研究は、風力発電の普及とともに広がりつつある。しかし、その多くは応用を目的とした平均流れに関するものである。基礎研究としては、らせん対称性を仮定した運動学の研究や線形安定性解析が行われてきた。しかし、基礎研究の立場から乱流遷移過程と遷移後の流れまでを体系的に理解しようという研究は世界的にもほとんどない。らせん渦の複数のパラメータに対する依存性を網羅的に調べることは困難である。本研究により、乱流遷移過程の物理的メカニズムに基づく理解を可能とすることで、風力発電量の予測や風車ロータの設計などの応用への道を切り拓く。

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 らせん渦の長波長不安定性による乱流遷移過程の研究

Helical vortices appear in a number of devices which possess rotating wings such as helicopter rotors, wind rotors, ship propellers and turbine impellers. The nonlinear evolution of a helical vortex disturbed by a long-wave instability mode is studied by direct numerical simulation. The three-dimensional Navier-Stokes equations for an incompressible flow are solved using highly accurate numerical techniques assuming that the helical vortex extends periodically. Two values of the pitch are considered: $L/R=0.2$ and 0.3 . The wavenumber of the long-wave instability mode is set to $k = 1/2$ and $3/2$ at which the growth rate is maximal. The Reynolds number based on the circulation of the helical vortex is $Re = 3925$.

It is found that the evolution and the topology of the resulting vortices depend crucially on the pitch L/R at the nonlinear stage. In both cases, the helical vortex deforms significantly, which is followed by vortex reconnection. When $L/R = 0.3$, a vortex ring is detached from the helical vortex after the vortex reconnection (figure 1, left). As a result, the pitch of the helical vortex is doubled. A vortex ring is also created after the vortex reconnection when $L/R = 0.2$; however, it is linked with the remaining helical vortex after the first reconnection (figure 1, right). This linkage imposes a topological constraint on the vortex motion forcing strong interaction between vortex tubes. As a result, many thin vortex tubes emerge around the vortex rings and the deformed vortex; finally, the flow becomes turbulent as it is dominated by small-scale structures.

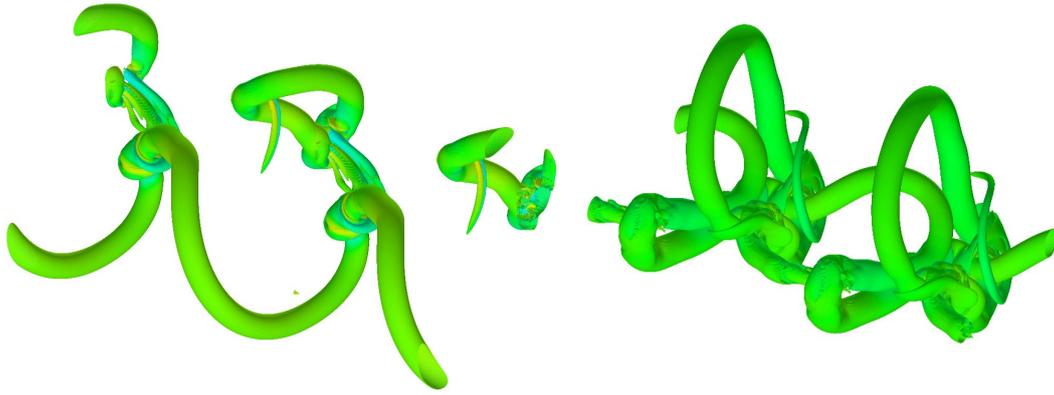


Fig. 1 Vortical structures after vortex reconnection. (Left) $L/R = 0.3$, (right) $L/R = 0.2$.

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

らせん渦の長波長不安定性による乱流遷移過程の研究においては、非線形発展過程がらせんのピッチに強く依存することを明らかにした。 $L/R=0.3$ の場合には、渦の切りつなぎの後に渦輪が分離するのに対し、 $L/R=0.2$ の場合には切りつなぎ後に渦輪が元のらせん渦と絡み合う渦系となる。後者の場合、トポロジ的な制約により渦どうしの非線形相互作用が強くなり、乱流遷移することがわかった。

今後は風車に発生するらせん渦により近いパラメータ領域、すなわちピッチと渦核半径が小さく、レイノルズ数が大きい場合の現象解明が課題である。

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）

Yuji Hattori and Makoto Hirota, “Stability of two-dimensional Taylor-Green vortices in rotating stratified fluids,” *J. Fluid Mech.* 967 (2023) A32.

Yuji Hattori, Makoto Hirota, “Stability of Stuart vortices in rotating stratified fluids,” *J. Fluid Mech.* 987 (2024) A12.

著書

国際学会

Y. Hattori, I. Delbende, M. Rossi, “Study of Turbulent Transition and Statistical Properties of Turbulence of Destabilized Helical Vortex,” 22th International Symposium on Advanced Fluid Information, 2022.

Yuji Hattori, “Turbulent transition of helical vortices destabilized by short-wave instability,” 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2022.

Yuji Hattori, “Instability of Curved Vortices,” International Workshop on Turbulence,

Vorticity Dynamics and Wind Energy, 2022.

Yuji Hattori, “Nonlinear Dynamics of Helical Vortex Disturbed by Long-Wave Instability,” IASM-BIRS Workshop on Vortex Dynamics: the Crossroads of Mathematics, Physics and Applications, 2023, Invited.

Yuji Hattori, Akihiro Hirano, Ivan Delbende, Maurice Rossi, “Nonlinear Evolution of Helical Vortex Disturbed by Long-Wave Instability,” 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2023.

Yuji Hattori, Ivan Delbende, Maurice Rossi, “Turbulent transition of helical vortices,” European Turbulence Conference (ETC18), 2023.

Yuji Hattori, Ivan Delbende, Maurice Rossi, “Study of Turbulent Transition and Statistical Properties of Turbulence of Destabilized Helical Vortex,” 23rd International Symposium on Advanced Fluid Information, 2023.

国内学会・研究会等

服部裕司, Ivan Delbende, Maurice Rossi, らせん渦の線形不安定性における軸流の向きの効果, 日本流体力学会年会 2022.

服部裕司, 短波長不安定性による渦輪の乱流化過程, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, 2022.

服部 裕司, 平野 晃大, 長波長不安定性によるらせん渦の崩壊過程, 日本流体力学会年会 2023.

服部裕司, らせん渦の不安定化過程: 渦核の乱流遷移の条件, 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023.

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	GR06APR22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.4～2024.3
報告回数	第 2 回報告

2024 年 7 月 29 日提出

圧縮性流れ高精度数値解法による空力騒音低減の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

山本 泰平, Liangkui Tan, 平尾 菜津美, 河野 海

東北大学大学院情報科学研究科 D2, D1, M1, 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

従来の空力騒音低減対策は、技術者・研究者のノウハウと試行錯誤に基づいて、対症療法的に行われることが多かった。これに対し、自動的な最適化を実現する本開発手法は人間のアイデアの限界を超えた革新的な形状を生み出すことができる。しかも、応用上のさまざまな制約下で、騒音低減と同時に維持したい性能も考慮できる。このため、本研究により開発手法の有効性が示されれば、幅広い産業応用において騒音低減法の革命を起こすことが期待される。これは機器の高速化・高度化を進める原動力となり得る。例えば、新幹線は騒音レベルで最高速度が制限されているが、騒音を 5dB 低減できれば、時速を 300km/h から 375 km/h に増加させることが可能である。

1.2 研究期間内の最終目標

(1) 流れと物体の相互作用により発生する空力騒音を低減するために、革新的な物体形状最適化法を開発するのが本研究の目的である。

機器の高速化により、主な騒音が空力騒音である場合が増加している。例えば、自動車の場合、エンジンの静音化に伴い、車内騒音はサイドミラーなど車外で発生する空力騒音が支配するようになってきている。新幹線の場合、パンタグラフなどから発生する空力騒音が走行速度を制限している。このため、空力騒音の低減が重要な課題の一つとなっている。

本研究では、埋め込み境界法とアジョイント法の融合により、空力騒音低減のための形状最適化法を開発する。埋め込み境界法により任意の物体形状の表現が可能である。また、アジョイント法により最急降下法による効率的な最適化ができると同時に、形状に対する制約条

件も取り入れることができる。騒音低減と同時に抵抗の増加を抑えたい場合などの多目的最適化問題への応用も容易である。さらに、数値シミュレーションによるため、低コストである。これにより、今までに人間が考えつかなかったような形状を生み出し、空力騒音を格段に低減する革新的な最適化法を開発する。

(2) 応募者は空力音の直接数値シミュレーション (DNS) に数多くの実績を持つ。空力音の DNS は音圧を支配方程式 (圧縮性ナビエ-ストークス方程式) の解として直接得るものである。音圧は大気圧に比べて小さいため (120dB の騒音で音圧/大気圧=0.04%)、普通の数値解法では数値誤差にまぎれて捉えることができない。そのため高精度解法と高品質の格子を必要とする。応募者は 1990 年代に国内でいち早く空力音の DNS に取り組み、現在まで実績を重ねてきた。

2016 年に応募者らが開発した修正 Volume Penalization (VP) 法は、埋め込み境界法と高精度解法を両立させたものである。これにより、流れの中に複雑な形状の物体や、運動・変形する物体が存在する場合に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。

本研究で扱う流れは一般に複雑な形状の物体を含む。この系で音を高い精度で直接捉えられる方法は極めて少ない。また、実験では物体形状の最適化がコストの面で難しいのに対し、DNS では容易である。修正 VP 法を開発した応募者が取り組むべき挑戦的な課題である。

(3) 最適化のために導入するアジョイント法は、これまで時間変化がない定常問題を中心に適用されてきたが、近年計算機性能の向上により非定常問題への適用が進みつつある。しかし、音波を直接捉える高精度解法にアジョイント法を導入して物体形状最適化を行うのは、本研究が世界初である。

2. 研究成果の内容

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解明

Ranque-Hilsch ボルテックスチューブ (RHVT) は、高圧に圧縮された気体が円管内に高速な旋回流場を形成することで高いエネルギーと低いエネルギーの流れに分離する装置である (図 1)。RHVT のエネルギー分離現象は Ranque-Hilsch 効果 (RH 効果) と呼ばれている。RH 効果の発見から現在までの約 90 年間に数多くの研究が実施されたが、エネルギー分離メカニズムの解明には至っていない。過去の研究では、乱流や音響現象等の円管内の高速旋回流に発生する非定常性と RH 効果の関連性が示唆されている。しかし、実験的研究及び乱流モデルによる数値的研究では物理的な信頼性が十分に保証できる非定常流れ場の時間発展データの取得が難しいため、非定常流れの特性は明らかにされていない。

本研究では、RHVT 円筒渦室内の高速な非定常旋回流について直接数値シミュレーションを実施し、流れの非定常成分に対する物理的信頼性が高い時間発展的データを高精度且つ高解像度で取得し、時間平均流及び乱流の特徴と RH 効果のエネルギー分離過程の関連性について考察を行った。

支配方程式は 3 次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式として、有限差分法による直接数値シミュレーションを実施した。計算格子は直交格子とし、境界形状の表現には VP (Volume Penalization) 法を利用した。修正 VP 項を用いて滑りなし境界条件を Character-Based VP 項を用いて断熱境界条件を設定した。実際の RHVT 内部の高速旋回流を直接数値シミュレ

ーションする場合は計算コストが膨大であるため、本論文では作動流体の粘性係数を実際の空気と比較して 100 倍以上に設定し、直接数値シミュレーションが実現可能な範囲で乱流場を計算する。

円管内の高速旋回流に生じる乱流強度は軸対称性を有する。また、圧縮空気流入側(旋回流上流側)で強度の高い乱流が発生し、温風出口側に向かうと共に減衰する。

作動流体の粘性係数 $\alpha_{\mu} (= \mu / \mu_{\text{air}})$ と吐出空気(温風/冷風)の全温度の関係(図 2)からは、乱流強度の増加に伴いエネルギー分離効果(温風と冷風の全温度差)が増加することから、乱流はエネルギー分離効果と関連性を持つと考えられる。また、層流($\alpha_{\mu}=250$)の流れ構造にもエネルギー分離機構が存在し、乱流場($\alpha_{\mu}=100$)と比較して約 50 % 程度のエネルギー分離効果が発生することが分かった。

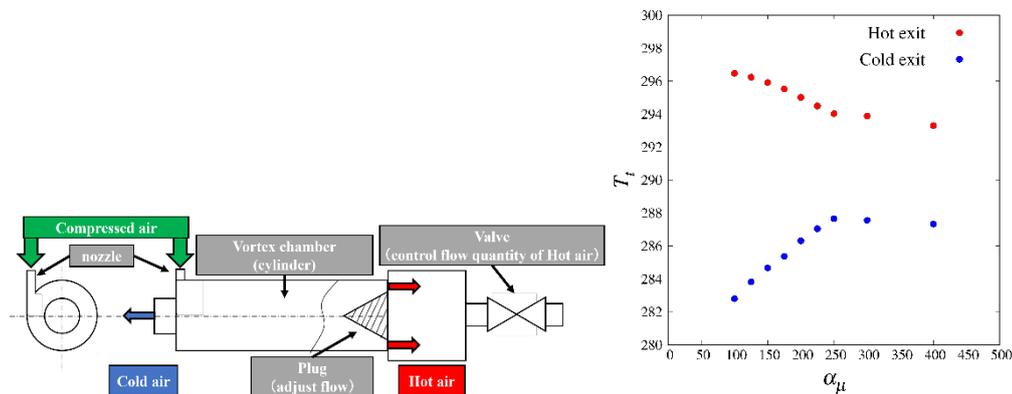


Fig. 1 装置の仕組みの概略図，作動流体の粘性係数と吐出空気(温風/冷風)の全温度の関係

2.2 翼のエッジ音の低減に向けた直接数値シミュレーション研究

航空機から発生する騒音は、航空輸送量が増加した近年において重要な課題である。その中でも、航空機のエンジンに起因する騒音は性能の向上などに伴い低減しているのに対し、機体の形状に起因する空力的な機体騒音については対策がほとんどなされていない。そのため、さらなる航空機騒音の低減のためには、この機体騒音の低減が必要不可欠である。

本研究では機体騒音の中でも翼周りで発生するエッジ音に着目し、エッジ音および先行研究で議論されている finlet による低騒音化効果の評価を行うことを目標とした。先行研究では finlet の効果について風洞実験で評価されているがこれを DNS で行うことで、より詳細なメカニズムの解明などが期待される。具体的には一様流中にエッジを持った平板を設置し、平板周りの流れ場の様子や平板から離れた点での音圧の変動を観測した。

Fig. 2 に平板周りの圧力場の様子と平板後縁真上の 3 点における音圧変動のスペクトラムを示す。平板周りの圧力場では平板後縁に高圧力領域が見られ、ここから遠方場に向かって圧力が伝播している様子が見られた。音圧変動スペクトラムでは低周波数が支配的であることが判明した。一方で一般に音源から離れるほど音圧変動は小さくなるのに対し、本結果ではそのような傾向が見られなかった。このことから、本計算で設定した音圧変動の観測点では、平板周りの流れ場など音波の伝播以外の影響を受けることが示唆される。

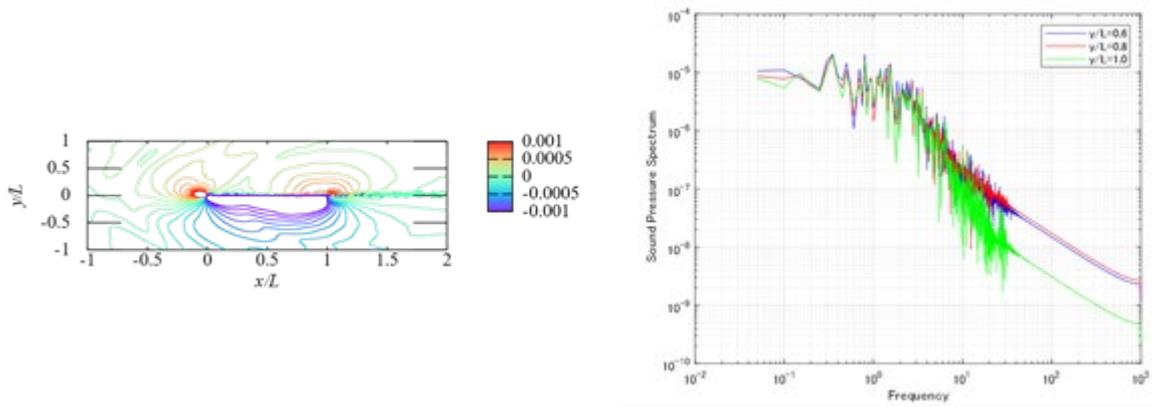


Fig. 2 平板周りの圧力場(左図)と音圧変動のスペクトラム(右図)

2.3 Aeroacoustic Noise Generation in Jet-Wing Interaction under the Wing-in-Ground Effect

To focus on the Jet-wing interaction aeroacoustics noise, the three dimensions compressible flow with clean wing of NACA4412 and engine jet is considered. We first conducted mesh independence study with four cases with different mesh scheme, where the case1 is the one calculated by the strategy proposed in this paper. Additionally, we validated this mesh scheme with different Reynolds number cases. The results indicate that this mesh scheme can accurately predict sound pressure.

Table 1 Mesh independence study with different mesh scheme

	Case1	Case2	Case3	Case4
Gridnumber (million)	159	96	48	35
RMS of pressure	2.3×10^{-4} (Baseline)	2.4×10^{-4} (4%)	2.5×10^{-4} (8%)	2.9×10^{-4} (26%)
Frequency	0.652	0.642	0.642	0.53

The monitoring points are arranged on the semi-circle with radius of $R=8C$ centered at the trailing edge to record the sound pressure with little effect of hydrodynamic pressure. The data indicate that the tonal components of the noise in the far field are primarily composed of frequencies 0.64 and 0.44. The far-field noise exhibits significant directivity, with the sound pressure in the 120° direction being much greater than in other directions.

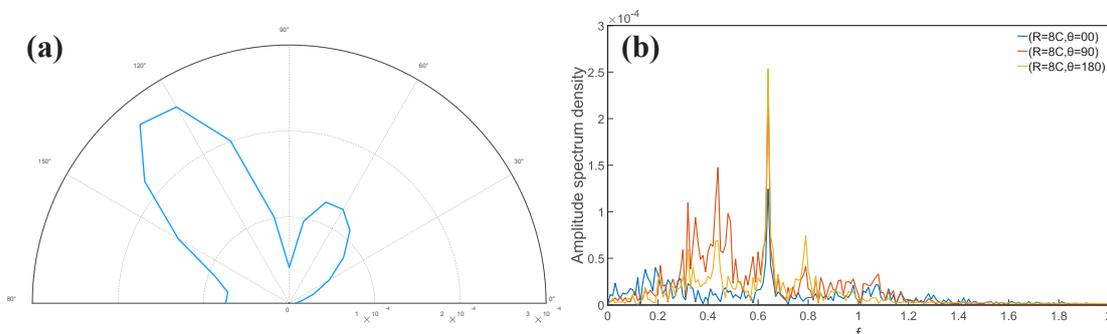


Fig. 3 (a) directivity of sound pressure (frequency is 0.64); (b) Frequency spectrum of sound pressure in far field.

To figure out why the tonal components propagating upstream are more pronounced than those

propagating downstream, the wavelet transform on a 100*30 measurement points array in the near field are performed. By this way we successfully identify the sound source spatially and temporally. It was also found that the main sound sources are distributed in the separation vortex region above the wing and at the exit of the ground effect channel. The detailed mechanisms of noise generation and propagation are currently under study

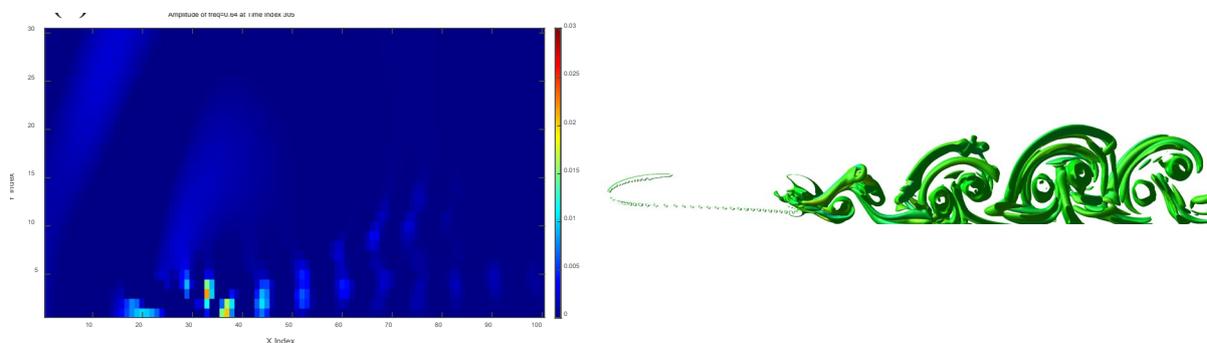


Fig. 4 (a) Wavelet coefficient amplitude of pressure with frequency 0.64; (b) vortex structure with $Q=1$.

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解明においては、エネルギー分離効果が層流状態でも存在することを示し、分離効果が乱流によって大きくなることを発見した。今後はエネルギー分離メカニズムの詳細を解明し、他の系におけるエネルギー分離メカニズムとの関係を明らかにする。

翼のエッジ音の低減に向けた直接数値シミュレーション研究においては、エッジから発生する空力騒音の基礎特性を明らかにすることができた。今後はフィンレットの設置などの方法により空力騒音を低減すること、さらにその詳細なメカニズムを解明することが課題である。

地面効果翼と噴流の相互作用により発生する空力騒音の直接数値シミュレーション研究においては、翼後流の乱流渦構造および発生する空力騒音の基礎特性を明らかにすることができた。今後は空力騒音発生メカニズムの解明とその低減が課題である。

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）

著書

国際学会

Natsumi Hirao, Makoto Hirota, Yuji Hattori, "Evaluation of Noise Generated from

Turbulent Boundary Layer on a Flat Plate Using Direct Numerical Simulation,” 20th International Conference on Flow Dynamics, 2023.

Taihei Yamamoto, Yuji Hattori, “Relation between Turbulence in Swirling Flow in a Cylindrical Pipe and The Ranque-Hilsch Effect,” 20th International Conference on Flow Dynamics, 2023.

国内学会・研究会等

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とエネルギー分離現象の関連性, 日本流体力学会年会 2022.

嶋崎 渉, 服部裕司, アジョイント法による空力騒音低減を目的とする形状最適化：形状表現の改良の効果, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, 2022.

平尾 菜津美, 廣田 真, 服部 裕司, 平板周り流れから発生する騒音の直接数値シミュレーションによる解析手法の検討, 日本流体力学会年会 2023.

山本泰平, 服部裕司, 円筒管内旋回流れに生じるゆらぎと Ranque-Hilsch 効果の関連性, 日本物理学会第 78 回年次大会, 2023.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

2023 年 1 月 12 日, 第 36 回数値流体力学シンポジウム若手優秀講演表彰、嶋崎渉「アジョイント法による空力騒音低減を目的とする形状最適化：形状表現の改良の効果」（日本流体力学会）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR07APR22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.4~2024.3
報告回数	第 2 回報告

2024 年 7 月 29 日提出

機械学習による乱流モデルの開発と乱流制御の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

Golsa Tabe Jamaat, Ayapilla Aditya Sai Pranith, 西山 大裕

東北大学大学院情報科学研究科 D3, D1, 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

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 6.67 (2022 年 2 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、強化学習などの機械学習法による乱流制御法の開発は、革新的な抵抗低減法などへの道を拓く。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 (ディープラーニングを含む) などの機械学習により乱流モデルの開発を行う。壁乱流の LES 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回転成層乱流の LES 解析のための乱流モデルを開発する。さらに凹面上の壁乱流の抵抗低減のため、強化学習やアジョイント法に基づく制御法を開発を行う。

(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) 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少なく、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し、さらに制御への応用を実現するものである。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とともに、革新的な乱流制御技術を提案することができる。

2. 研究成果の内容

2.1 成層乱流の機械学習による乱流モデリング

本研究では、成層流と呼ばれる密度成層効果の影響をうける流体の数値シミュレーションを行い、その基礎的なふるまいと機械学習の適用可能性について調査した。成層流の例として大気や海洋などの流れが挙げられ、成層流の理解は多くの気象現象や大気・海洋の循環現象の理解につながる。しかし、成層流の数値シミュレーションにおける大きな課題として、計算コストが非常に高くなる場合があることが挙げられる。大気や海洋の流れは一般に乱流の状態にあり、これを直接数値シミュレーションにより再現するためには非常に小さいスケールの流れまで解像する必要がある。このような密度成層効果を受ける乱流は成層乱流と呼ばれ多くの数値シミュレーションが行われてきたが、大気や海洋の流れに近い条件を直接数値シミュレーションにより再現することはできておらず、今後の計算機性能の向上が待たれている状況にある。計算コストを削減するため、乱流の数値シミュレーションでは小スケールの流れにモデルを与えて計算を行うラージエディシミュレーション (LES) が広く行われてきた。LES で用いられるモデルの性能は様々で、精度と計算の安定性を両立することは大きな課題となっている。そこで、本研究では機械学習を用いて成層乱流における LES のためのモデル開発を行った。機械学習モデルを与える際に、入力に格子上の物理量をとり直接小スケールの流れの影響を予測させることによって従来のモデルより性能の良いモデルが作成できることを示した。また、学習の過程で用いる損失関数に、LES の数値計算を不安定化させるような予測に対してペナルティを与える項を加えることにより計算が安定化できることを示した。これにより数値計算の安定化のために与える制限を最小限に抑えることができ、モデルの精度向上につながると考えられる。これらの成果は成層乱流の LES の計算精度向上、及び成層流の基礎的なふるまいの理解につながると考えている。

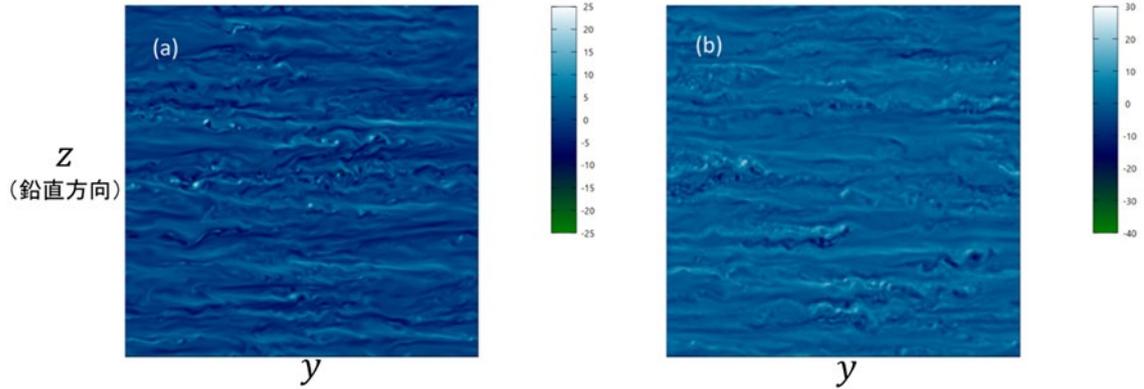


図 1：鉛直平面における渦度 ω_x (a)フィルタ DNS, (b)機械学習モデルを用いた LES

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

成層乱流の機械学習による乱流モデリングにおいては、直接数値シミュレーションのデータに基づいて構築した LES の SGS 応力モデルが、アプリオリテストでよい性能を示すことを確認した。実際にこのモデルによる LES では、エネルギー輸送を正確に表現するためにペナルティ項を追加して学習させたモデルがよい精度を示すことを明らかにした。これらの成果は成層乱流の LES の計算精度向上、及び成層流の基礎的なふるまいの理解につながるものである。

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）

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, “A data-driven approach to model enstrophy transfers in large eddy simulation of forced two-dimensional turbulence,” *Physics of Fluids*, 35 (2023) 75116.

Golsa Tabe Jamaat, Yuji Hattori, “A priori assessment of nonlocal data-driven wall modeling in large eddy simulation,” *Physics of Fluids* 35 (2023) 55117.

D. Nishiyama, Y. Hattori, “Turbulence modeling of stratified turbulence using a constrained artificial neural network,” *Phys. Fluids* 36 (2024) 055131.

著書

国際学会

G. Tabe Jamaat, Y. Hattori, “Searching for a Wall Model in LES using a Data-Driven Approach,” Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, 2022.

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, “Stable a posteriori LES of forced two-dimensional turbulence using shallow artificial neural networks,” 75th Annual

Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2022.

Golsa Tabe Jamaat, Yuji Hattori, “A data-driven approach using CNN for wall modeling in Large Eddy Simulation,” 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2022.

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, “Quasi-Steady State of a Hub Vortex Under Multi-Polar Strain Induced by Satellite Vortices,” 20th International Conference on Flow Dynamics, 2023.

Golsa Tabe Jamaat, Yuji Hattori, “Investigating a Non-local Data-Driven Approach for Wall Modeling in Large Eddy Simulation,” 20th International Conference on Flow Dynamics, 2023.

Golsa Tabe Jamaat, Yuji Hattori, “Numerical investigation of wall modeling for LES using convolutional neural network,” 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2023.

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, “Quasi-steady state of hub vortex under multi-polar strain caused by three satellite vortices,” 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2023.

国内学会・研究会等

Golsa Tabe Jamaat, 服部裕司, LES におけるチャンネル乱流のデータ駆動壁面モデル, 日本流体力学会年会 2022.

Aditya Sai Pranith Ayapilla, 服部裕司, 人工ニューラルネットワークを使用した強制2次元乱流における LES のアプリアリ分析とアポステリオリ分析, 日本流体力学会年会 2022.

小澤郁真, 服部裕司, 平面/凹面上における圧縮性乱流境界層の直接数値シミュレーション, 日本流体力学会年会 2022.

平野 晃大, 服部裕司, らせん渦の長波長不安定性の DNS による線形・非線形解析, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, 2022.

小澤 郁真, 服部裕司, 平面/凹面上における圧縮性乱流境界層の壁面温度による制御, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, 2022

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, Quasi-Steady State of a Hub Vortex Under Multi-Polar Strain, 日本流体力学会年会, 2023

Golsa Tabe Jamaat, 服部裕司, Assessment of a nonlocal data-driven approach for wall modeling in LES, 2023 年度 AIMR-IFS-ISM 合同研究会, 2023

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	GR08APR22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.04~2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

固体電解質／コート材界面の Li イオン輸送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

1.1 研究の背景と目的

次世代全固体 Li イオン電池セルの開発において、固体電解質、活物質、及びその界面での Li イオン輸送特性は非常に重要な研究テーマである。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の解明は重要な課題である。全固体電池特有な、かつ実験的に計測することが困難な物性値を推定するため、分子シミュレーションを活用し、その特性を理解することにより、高 Li イオン伝導性を有する固体電解質の選定指針を得ることができる。

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、固体電解質内部及び界面での Li イオン伝導特性を評価する。

2. 研究成果の内容

2.1 固体電解質内 Li イオン拡散特性の評価

改良した固体電解質 Neural Network Potential (NNP) モデルを用いて、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) シミュレーションにおける固体電解質内 Li イオン拡散係数を計算した。固体電解質としては $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ を用いた。また温度や結晶内 S と Cl 位置交換が Li イオン拡散係数に与える影響を解析した。また、S と Cl 位置交換より Li イオンの拡散経路の形成を検討した。

2.2 固体電解質・コート材界面の Li イオン輸送特性の評価

固体電解質、コート材の結晶構造と格子係数からマッチングする表面ミラー指数を選定し、構築した固体電解質、コート材界面構造で NNP モデルを作成した。また MD シミュレーションを用いて Li イオンの拡散状況を観測した。

3. 研究目標の達成状況

固体電解質 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ 結晶内の輸送特性に関しては、S と Cl 交換パターンや原子間電荷相互作用を考慮し、機械学習手法で NNP モデルを作成した。当ポテンシャルモデルを用いて、MD シミュレーション計算では結晶構造の維持を確認した。結晶内 S/Cl 交換と温度が固体電解質内部 Li イオンの拡散係数について影響を検証した。MSD 解析結果より、固体電解質内 Li イオン「ケージ」の存在を証明し、S/Cl 交換により Li イオン拡散係数が大幅に増加する現象を確認した。なお S/Cl 交換率が理論上 50%が最大になり、Li イオン拡散が最も拡散しやすいと予想したが、実際には 20%付近で「ケージ」の連結より Li イオン拡散経路が最も多くなり、それ以上 S/Cl 交換を行っても Li イオン拡散係数は増加しないことを確認した。

固体電解質/コート材界面の Li 輸送特性の解析では、結晶構造と格子係数のマッチングから固体電解質 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}(110)$ とコート材 $\text{LiNbO}_3(100)$ 表面構造を選定し、界面構造の NNP モデルを作成した。温度 300K での MD シミュレーションでは、結晶構造は維持でき、界面構造の再構築と Li イオンの拡散現象が観測された。

これらの内容から、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

固体電解質結晶内の Li イオン拡散係数について検証を行い、計算結果は先行研究の実験結果や量子化学 MD 計算の結果とよく一致した。更に S/Cl 交換率と Li イオン拡散の関係をより細かく検証し、拡散経路の形成について新たな影響を確認した。今後は結晶構造の欠陥の影響について検討する予定である。また固体電解質/コート材界面については、作成した NNP モデルを用いて、界面構造安定性や Li イオン輸送現象の検証を行い、外部電場の影響を検証する予定である。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

- [1] T. Wang, S.-F. Huang and T. Tokumasu, “Molecular Dynamics Study of Li-ion Transport Properties in Solid Electrolyte $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ ”, the Twentieth International Conference on Flow Dynamics, (2023), OS21-16.
- [2] Z. Zhang, N. Uene, S. F. Huang, T. Mabuchi, T. Tokumasu, “Molecular Dynamics Analysis of Lithium-Ion Transport Properties in Positive Active Material of All-Solid-State Lithium-Ion Battery”, 244th ECS Meeting, (2023), A02-0322.

国内学会・研究会等

- [3] 黄 聖峰, 馬淵 拓哉, 安田 博文, 幸 琢寛, 徳増 崇, “固体電解質 Li₆PS₅Cl 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&M2022 材料力学カンファレンス, (2023), OS0205.

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	GR01MAY22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.5～2024.3
報告回数	第 2 回報告

2024年7月13日提出

相変態をともなう鉄内部の電場による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

近年、二酸化炭素をはじめとする温室効果ガスの増加により、地球温暖化が世界的な問題となっている。ジュール熱を利用して金属の焼結や熱処理を行う手法は、再生可能エネルギーで作られた電気を使用すれば温室効果ガスを排出せず処理を行うことが可能であるため近年注目を集めており、積極的に研究が行われている。ジュール熱を利用した手法は、短い時間での処理が可能であるため、温室効果ガスの抑制だけでなく結晶粒粗大化を防ぎ、より強固な製品が製造できると考えられている。しかしながら、処理中に生じる現象が非常に複雑であり、シミュレーションベースの知見がまだまだ乏しく、現象メカニズムの解明やプロセスの最適化が十分でないことが当該分野の課題となっている。これらの知見が充実すれば焼結・熱処理分野にブレイクスルーをもたらすことができると考えられる。熱処理中の鉄鋼の構造変化のメカニズムを明らかにするためにはナノスケールで炭素拡散を解析することが非常に重要であるが、管見の限り、電場下の鉄鋼中の炭素拡散についてナノスケールから解析された例はほとんど見当たらない。そこで本研究プロジェクトでは、分子動力学シミュレーションを使用して電場下の炭素原子のドリフト速度や拡散係数を解析することを目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究テーマでは、鉄鋼中のエレクトロマイグレーションと相変化のメカニズムを包括的に解析することを最終的な目標としている。そのためには、マルチスケール解析が必要である。本研究期間内では、マルチスケール解析の中でも確率論的な解析を行う際に重要になってくる拡散係数について、その電場依存性を求めることに注力した。

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）

本研究プロジェクトでは、分子動力学シミュレーションにて電場下の鉄鋼中の炭素拡散について解析を実施した。具体的には、電場下の炭素原子のドリフト速度や拡散係数を解析した。その結果、電場方向の炭素原子のドリフト速度について、Nernst-Einstein の式から求められる値と異なる値を示すことが分かった。加えて、ドリフト速度の傾きに関しても Nernst-

Einstein の式から得られる値と異なる値が示されたため、電場が炭素の拡散係数を変化させている可能性が示唆された。

3. 研究目標の達成状況

電場下の鉄鋼中の炭素原子の運動をシミュレーションすることで、前述の目標である電場下の炭素原子の拡散係数やドリフト速度に関する電場依存性の解析が実施できた。

4. まとめと今後の課題

本研究プロジェクトでは、電場下の炭素原子のドリフト速度や拡散係数に関して解析を行った。今後は、上記の電場依存性が生じるメカニズムや温度依存性について明らかにする。その後、鉄鋼の相変態を模擬できるシミュレーション手法を構築し、結晶粒界等の界面を含む系の炭素拡散に関して解析を行う予定である。

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] R. Onozuka, T. Mabuchi, P. Chantrenne, T. Tokumasu, “Atomic Scale Investigation of the Electric Field Dependence of Carbon Diffusion in Fe”, Proceedings of International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), pp. 1344-1345.

著書

特になし。

国際学会

R. Onozuka, T. Mabuchi, P. Chantrenne, T. Tokumasu, “CarboEDiffSim :Molecular Theory Analysis of Carbon Diffusion in Iron which is Happened Phase Transformation under Electric Field”, ELyT workshop 2022, France, 16-18 November 2022.

R. Onozuka, T. Mabuchi, P. Chantrenne, T. Tokumasu, “Atomic Scale Investigation of the Electric Field Dependence of Carbon Diffusion in Fe”, International Conference on Flow Dynamics (ICFD2023), Sendai, Japan, 6-8 November 2023.

国内学会・研究会等

小野塚 隆太、馬淵 拓哉、Patrice Chantrenne、徳増 崇「鉄鋼中の炭素原子のエレクトロマイグレーションに関する分子論的解析」第60回日本伝熱シンポジウム、福岡、5月・2023年。

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	GR01JUN22
研究種別	一般研究
利用期間	2022.06～2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024年7月23日提出

固体高分子形燃料電池長寿命化に向けたセリウムイオン輸送モデルの 構築とセリウムイオン分布シミュレータの開発

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（Polymer Electrolyte Fuel Cell：PEFC）の高分子電解質膜がラジカルによって分解され耐久性が低下することが問題視されている。劣化を防ぐために膜内にラジカル捕捉材であるセリウムイオンを添加する手法が提案されているが、セリウムイオンが膜内を移動し濃度が薄い場所で劣化が進行してしまうため膜内部のセリウムイオン輸送メカニズムの解明が求められている。電解質膜内での物質輸送はナノスケールの膜構造に大きく依存するとされ、実験ではセリウムの濃度分布を時間連続的に解析することや、どのような膜構造がセリウムイオンの輸送を支配しているのかなどを解析することは非常に困難である。そこで本研究では、分子動力学法を用いてセリウムイオン添加時の高分子電解質膜をモデル化し、膜内部におけるセリウムイオン分布と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

セリウムイオンは水の対流、濃度勾配、電位勾配によって輸送されると考えられている。濃度勾配、電位勾配による輸送はセリウムイオンの膜内部での拡散係数を測ることによって評価する。また、水の対流については計算中で水に一方向の流速をつくり、セリウムイオンがどの程度引っ張られるかを流速の比として評価する。また、それぞれ温度と含水率（計算系内に存在する親水基の数に対する水分子の数）、セリウムイオンの濃度について条件を振り、最終的に得られた拡散係数と水の流束に対するセリウムイオンの流束を温度、含水率、セリウムイオン濃度の関数として関数化することを最終目標とする。

2. 研究成果の内容

2.1 拡散係数

セリウムイオンの拡散係数は温度の上昇、含水率の増加に伴い増加することがわかった。また、セリウムイオン濃度による影響はほとんどないことがわかった。温度による拡散性の上昇は膜の揺らぎが大きくなり上昇したと考えられる。一般的に高分子電解質膜内のイオンの輸送経路としては、水のチャンネルが挙げられる。水チャンネルの定量的な解析には、水のクラスター数や最大クラスターのサイズで評価を行った。その結果、含水率が上昇すると、クラスター数は減少する一方で、最大クラスターのサイズは著しく成長をする結果が得られた。以上から水のクラスターが成長することによってセリウムイオンの拡散性が上昇したと考察できる。

2.2 対流イオン輸送係数

水の対流によるセリウムイオンの輸送と流速の比として評価した。以後、対流イオン輸送係数と呼ぶ。対流イオン輸送係数は含水率の増加に伴い増加するが、含水率が一定以上を越えると収束する傾向が確認できた。

3. 研究目標の達成状況

物質移動が活発になる高含水率の条件では拡散係数、水に対するセリウムイオンの流束の比ともに値を得ることができた。しかし、実際の稼働条件の範囲内で最も含水率が低い条件では、拡散と流束の値を得ることが難しかった。これは、低含水率ではセリウムイオンをトラップするスルホン酸基が凝集したり、輸送経路と考えられる水チャンネルが消失したりすることによってセリウムイオンの拡散が時間に対して平均二乗変位が線形にスケールする通常の拡散から、時間の α 乗($0 < \alpha < 1$)にスケールする異常拡散にシフトしたためと考えられる。このため、達成状況としては70%程度と考えている。

4. まとめと今後の課題

高い含水率ではセリウムイオンの拡散係数と水に対するセリウムイオンの流束の比を評価することができた。しかし含水率が最も低い条件ではそれらの値を得ることが難しかった。そこで、セリウムイオンの挙動をより詳しく解析することによって通常の拡散、および異常拡散のどちらが起きているかを明確にし、輸送特性の評価方法を再検討する。

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）

Hiroto Suzuki, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Molecular Dynamics Simulations of Cerium Ion Transport Phenomena in Polymer Electrolyte Membranes of Polymer Electrolyte Fuel Cells, ECS Transactions, Vol. 109 (2022), pp. 295-302.

著書

なし

国際学会

○H. Suzuki, T. Mabuchi, T. Tokumasu, “Molecular Dynamics Simulations of Cerium Ion Transport Phenomena in Polymer Electrolyte Membranes of Polymer Electrolyte Fuel Cells”, 242th Electrochemical Society, Atlanta, USA. (October, 2022).

○H. Suzuki, T. Mabuchi, T. Tokumasu, “Analysis of cerium ion transport in anode side catalyst layer for improving polymer electrolyte membrane durability of polymer electrolyte fuel cells”, 244th Electrochemical Society, Gothenburg, Sweden. (October, 2023).

○H. Suzuki, T. Mabuchi, T. Tokumasu, “Evaluation of factors affecting the migration of cerium ions in PEFC using molecular dynamics simulations”, PRiME2024 The Electrochemical Society, Hawaii, USA. (2024 発表予定)

国内学会・研究会等

鈴木寛人, 馬渕拓哉, 徳増崇, 「分子動力学シミュレーションを用いた固体高分子形燃料電池触媒層中のセリウムイオン輸送現象の解析」, 第 60 回 日本伝熱シンポジウム, (2023)

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	GR01APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

高熱流束冷却にむけた加熱壁面上の微細蒸発熱伝達現象の解析

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

熱拡散デバイスの一つにベイパーチャンバーがある。ベイパーチャンバーはヒートパイプに比べ薄型化や小型化が容易であることや熱輸送の力が高いことが知られている。ベイパーチャンバーはデバイス内部に液体を封入し、蒸発を伴う流体の移動を利用して熱を拡散している。ベイパーチャンバーの性能向上にはウィックの微細構造を工夫することが有効であるが、微細構造内での熱流体現象の直接計測は未だ困難であることから、数値シミュレーションの適用が有効である。そこで本研究では、ベイパーチャンバー内の流体の熱流動挙動を明らかにすることを目指し、微細構造面上での蒸発を伴った流体の濡れ広がり挙動を数値シミュレーションにより評価する。

1.2 研究期間内の最終目標

ベイパーチャンバーのウィック構造に代表される微細複雑構造が作るメニスカスの熱流動と相変化過程を評価する数値シミュレーションを構築するとともに、液膜や三相接触線の蒸発のモデルを取り入れ、マルチスケール性を考慮した蒸発伝熱シミュレーションの実現を目指す。

2. 研究成果の内容

2.1 微細構造体での蒸発と気液界面進展の数値シミュレーション

本研究では OpenFOAM v2112 に沸騰解析のモデルである TwoPhaseFlow ライブラリを適用して解析を行った。支配方程式は連続の式、Navier-Stokes 方程式、エネルギー保存の式、VOF 関数の移流方程式、固体の熱伝導方程式である。

計算領域は流体領域と固体領域からなる三次元空間であり、その正面図を図 1 に示す。固体部分は平面の上に直方体のブロックを規則正しく並べた形状である。図 1 に示すように、流体部の左端、上端は断熱かつ滑りなしの壁であり、右端は等温の流入境界、手前と奥行

きは対称面である。初期条件として液体を右側に配置した。本計算では重力は無視し、この液体は構造が有する毛細管力で左側へ移動する。流体の初期温度は飽和温度の 373.15 K であり、固体底面の温度は飽和温度より 5 K 高い 378.15 K の等温壁である。計算格子の大きさは気液界面が進展する領域で計算格子が小さくなるようにした。固気液接触線での接触角は一定の値を与えた。

図 2 は計算領域上面から見たタイムステップごとの気液界面の様相である。時間の経過とともに以下の挙動が観察された。① ブロック間でメニスカスが形成、水平方向へ進展、② ブロック間の高さ方向へ気液界面が進展、③ ブロックの前面でメニスカスが形成、水平方向へ進展した。①の段階では気液界面が比較的速く進展し、③でメニスカスが形成されてからは進行方向への移動が遅くなった。また、液体はブロックの高さ近くまで充填された。

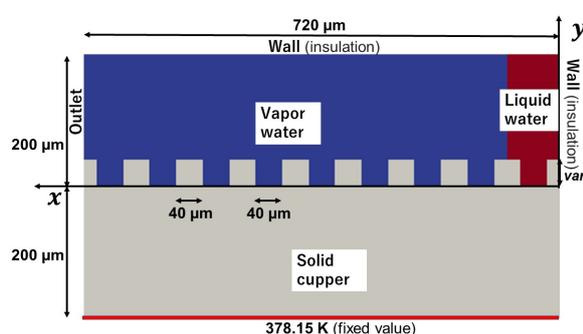


図 1. 解析モデル

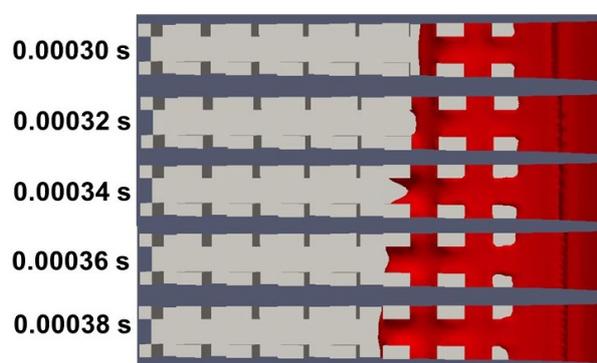


図 2. メニスカス進展の様子

3. 研究目標の達成状況

比較的複雑な形状における液体の輸送および蒸発現象を取り扱うに成功したことから、本研究における重要なマイルストーンは達成した。また、微細構造内の濡れ広がりにおいて、濡れ広がり速度は構造体の高さによって変化し、界面の進行方向への進展を促進する要素と阻害する要素が存在することを明らかにし、構造の影響を評価することができた。

4. まとめと今後の課題

熱流体デバイスの構造が作り出す相変化熱流動現象の特性の評価が可能になりつつある。今後は、より複雑な構造体における毛細管力の発現およびそれに伴う液体の輸送現象の解析を通じて、熱流体デバイスの冷却性能を評価するシミュレーションの実現を目指す。

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）

該当なし

著書

該当なし

国際学会

Junnosuke Okajima, Yutaro Naka, Henrik Sontheimer, Tatiana Gambaryan-Roisman, Peter Stephan: Study on Micro-scale Evaporation for Heat Transfer Enhancement, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, submitted.

国内学会・研究会等

中裕太郎, Henrik Sontheimer, Tatiana Gambaryan-Roisman, Peter Stephan, 岡島淳之介: 微細構造体での蒸発と気液界面進展の数値シミュレーション, 日本伝熱学会東北支部第24回学生発表会講演論文集, (2024), 講演 1.

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	GR02APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04~2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024年7月9日提出

液体・ソフトマター・界面の分子熱物性解析

小原 拓, Donatas Surblys
東北大学流体科学研究所 教授, 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

熱伝導率などバルク液体・ソフトマター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・ソフトマターの輸送特性は、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ある。

1.2 研究期間内の最終目標

(a)相変化蓄熱材 (PCM) をはじめとする複雑な液体・ソフトマターの熱物性の決定メカニズム、(b)固液界面熱抵抗の発現メカニズムと、固体表面微細構造や界面活性物質吸着の影響、(c)界面近傍の物質輸送特性、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

(1) 相変化蓄熱材 (PCM) の熱物性

太陽光など不安定なエネルギー源から得た熱を必要な使用の時機まで損失を抑えて蓄えるために、相変化の潜熱を利用した蓄熱材 (Phase Change Material) の探索と開発が活発に行われている。適切な固液相変化の融点、高い熱伝導率、大きな相変化潜熱などが求める特性であるが、これらの条件を満足する材料を分子の選択や混合で設計するのは容易ではない。

エリスリトールなどいくつかの多糖類に対する分子動力学シミュレーションにより、それぞれの融解現象を解析した。融解面や融解が進む結晶格子の方向により、融解温度が異なることなどを明らかにした。様々な結晶面が露出する実際の結晶融解プロセスでは、これらのうち融解温度がもっとも高い結晶面で融解が発現していることが考えられる。

(2) 固液界面熱抵抗の決定メカニズム

半導体モジュールの材料として重要なシリカ表面をイオン化した修飾界面や、凹凸などヘテロな構造が存在する固体表面について、固液界面熱輸送特性を解析した。イオン化したシリカ表面と水との固液界面では、イオン化の程度に依存して界面をまたぐ水素結合が生じることから、固液界面熱抵抗の低下に大きな効果があること、凹凸をもつ固体表面に長鎖ポリマー分子が接する固液界面では、固液分子の親和性や固体表面の凹凸のサイズと長鎖分子の長さスケールとのバランスにより固液界面熱抵抗が複雑な応答を示すことなどが明らかとなった。

3. 研究目標の達成状況

初年度研究目標を達成し、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

この他、カーボンナノ材料の懸濁による有機液体の有効熱伝導率向上などの研究を進めている。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文

学術雑誌（解説等を含む）

Qing-Yao Luo, Donatas Surblys, Hiroki Matsubara and Taku Ohara: A molecular dynamics study on the solid–liquid polymer interface: insight into the effect of surface roughness scale and polymer chain length on interfacial thermal resistance, *Molecular Physics*, 2024, DOI: 10.1080/00268976.2024.2321311.

Haiyi Sun, Donatas Surblys, Shukai Cheng and Taku Ohara: Molecular dynamics study on the effect of surface ionization on the interfacial heat transfer between silica and water, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 244 (2024), 122762, DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2024.122762.

Qing-Yao Luo, Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, and Taku Ohara: Chemical heterogeneity size effects at nanoscale on interface thermal resistance of solid–liquid polymer interface via molecular dynamics simulations, *AIP Advances*, 14 (2024), 075305, DOI: 10.1063/5.0218506.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR03APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 26 日提出

後退翼における境界層制御デバイスの設計と層流化効果の評価

廣田 真

東北大学流体科学研究所 准教授

上野 直哉

東北大学情報科学研究科 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

カーボンニュートラルな社会実現に向けて、航空産業分野では航空機の低 CO₂ 化や低燃費化が課題となっている。それに対する流体力学的アプローチとして、主翼の摩擦抵抗を低減することは大きな貢献となる。これまでに本研究は、NEDO プロジェクトの一環で JAXA・三菱重工と共同研究を進めてきており、翼面に境界層厚さと同程度のマイクロな粗さ要素を配置することで境界層流れの不安定性を抑制し、乱流遷移位置を下流にシフトさせる手法(層流化デバイス)を研究している。特に、従来よりも層流化効果が飛躍的に高いデバイス(SRE)を CFD 解析によって考案し、2022 年に日本と米国で特許を出願した。2022 年春には平板上にこのデバイスを加工して低乱風洞施設で試験を行い、CFD 解析の予測と同程度に不安定性が抑制されることを確認できた。ただし、デバイスを適切に設計し、効果を発揮させるには、流速分布や圧力分布を正しく把握した上で境界層の安定性解析をする必要があり、乱れの強度もある程度仮定しなければならない。間違った速度分布や仮定に基づいてデバイスを設計してしまうと、それは乱流を引き起こして逆効果になる可能性もある。風洞実験に比べると、飛行環境の翼まわりの流れは直接計測が困難であるため、CFD 解析によって流れ場の情報を正しく予測しなければならない。さらに、翼面は曲率をもっているため、平板上の境界層とは安定性が大きく異なることも予想される。よって、実際の翼形状と流速分布を忠実に再現した境界層の CFD 解析によって適切なデバイスを設計し、摩擦抵抗の低減効果を定量的に予測することが本研究の目的であり、それが実用化へ進む鍵となっている。

1.2 研究期間内の最終目標

実機の翼面と同様な曲率と圧力分布をもつ境界層において直接数値シミュレーションを行い、層流化効果の高い人工粗さ要素の設計を行う。特に、粗さ形状の最適化により、横流れ

不安定性による乱流遷移を抑制して回避することを目指す。さらに、超音速航空機のような、高マッハ数や大きな後退角の場合についても同様な試みを行う。

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 後退翼まわりの境界層の DNS 解析コードの開発

これまでの DNS 解析では平板上の理論解である Falkner-Skan-Cooke 境界層を対象として層流化の研究を行ってきており、直交格子を用いていた。これを実際の主翼の前縁まわりの問題に一般化しつつ、これまでと同様なコンパクト差分法による高精度な DNS 解析を行うため、まずはジューコフスキー変換を用いた構造格子を採用してコードを再構築した。JAXA の技術参照機体である TRA2012A では、全機の RANS 解析によって主翼まわりの速度分布や圧力分布が計算されているため、その中から図 1 (左上) の赤線部を境界層遷移の解析対象とした。この位置での翼形状をジューコフスキー翼で最小二乗近似すると、図 1 (左下) のように非常によく適合した。よって、このジューコフスキー変換を用いて翼面近傍の計算格子を生成した。境界層厚さは 1mm にも満たないため、計算領域は図 1 (右) のように非常に薄く、格子点は壁近傍に集中させた。速度分布と圧力分布を境界層外縁における境界条件として与え、境界層そのものを二次元 DNS で得られる定常状態として計算した。圧力勾配と後退角の存在により、横流れをもつ三次元境界層の形成が再現できた。

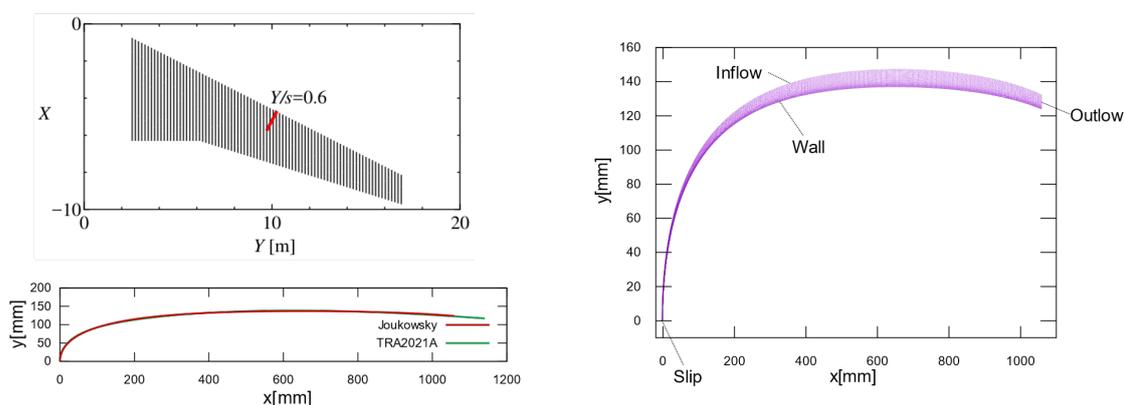


図 1 (左上) TRA2012A の主翼、(左下) スパン位置 $Y/s=0.6$ における翼形状、(右) 計算領域と格子

2.2 後退翼まわりの境界層の線形安定性解析

三次元境界層の横流れ不安定性は、スパン方向波数 β によって空間的な成長率が異なり、本研究では局所平行流近似を用いた固有値解析(LST 解析)、放物化安定性方程式を解いた解析(PSE 解析)、DNS 解析の 3 通りで成長率を計算した(図 2)。LST 解析は成長率を過大評価してしまい、定量的な遷移の予測には使えないことが改めてわかった。PSE 解析は翼面の曲率や境界層の非平行性を考慮したものであり、DNS 解析で引き起こしたいくつかの不安定モードの成長率とよく一致した。これは開発した DNS コードが横流れ不安定性を正しく再現していることの裏付けにもなる。

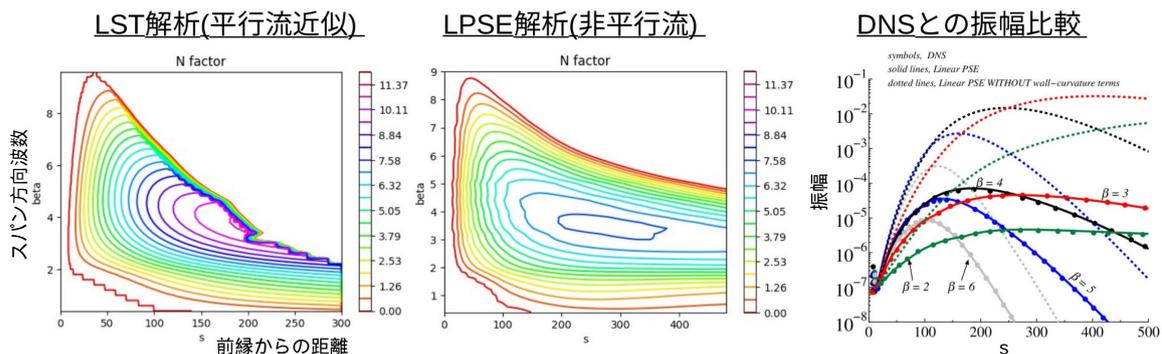


図2 各スパン方向波数(beta)に対する不安定性増幅率 $\exp(N)$ の計算結果

2.3 前縁部における粗さ要素の配置

安定性解析によって乱流遷移を起こさない波長 β が予測することができ、それによって制御デバイスである人工粗さ要素(SRE)の形状パラメータを設計した。埋め込み境界法の一つである Volume Penalization 法を用いて、図3のような形状の粗さを配置して DNS を行った。以前の平板(直交格子)の場合に比べると計算コストは二倍程度になるが、問題なく計算できることまで確認した。次年度に新スパコンが稼働したら、本格的な層流化のシミュレーションを行う。

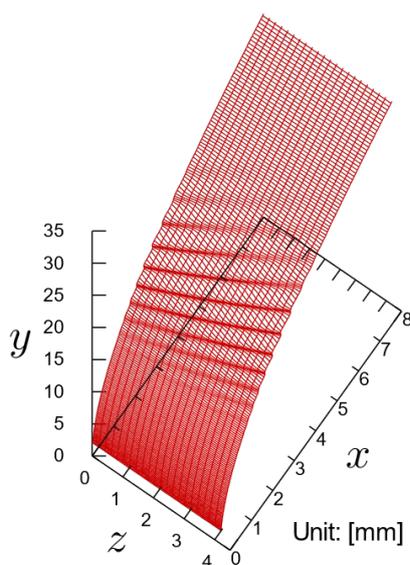


図3 前縁付着線($x=y=0$)の近くに配置した SRE

2.4 二次元テラー・グリーン渦の線形安定性解析と DNS 解析

修士学生の研究テーマとして、周期的な渦列の厳密解である二次元テラー・グリーン渦の不安定安定性と崩壊過程を調べた。ここで用いた Krylov 部分空間法は横流れ渦列の崩壊による乱流遷移過程や、人工粗さ周辺の流れの全体安定性解析にも応用できる手法であり、次年度の学生のテーマにする予定である。

3. 研究目標の達成状況

実際の遷音速航空機の主翼まわりに生じる三次元境界層を再現し、その安定性解析や DNS

解析を行えるようになった。人工粗さによって境界層を制御した場合の計算も一つのケースで実施し、乱流遷移の抑制が期待できる結果は得られている。

4. まとめと今後の課題

実際の翼面ではランダムな微細粗さが存在し、それが横流れ不安定性の主な引き金になっていると考えられている。それを模擬するような擾乱源を翼面上で与える予定である。しかし、擾乱のレベルやスペクトルについては未知であるので、大きな擾乱源が存在していたとしても層流を維持できるようなロバスト性まで評価することが今後重要と思われる。

また、超音速や後退角が大きい場合は、層流化が難しくなる傾向にあるが、そのような場合でもデバイスの効果が得られるかどうか調べる。

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）

M. Hirota, Y. Ide, and Y. Hattori: Streamwise-elongated Sinusoidal Roughness Elements with Enhanced Laminarizing Effect on Three-dimensional Boundary Layer, AIAA Journal 2024 (掲載確定)

著書

なし

国際学会

N. Ueno, M. Hirota, Y. Hattori: Nonlinear Development of Instability of Two-Dimensional Taylor-Green Vortices in Rotating Fluid, 20th International Conference on Flow Dynamics 2023

M. Hirota, Y. Ide, and Y. Hattori: Design Basis of Sinusoidal Roughness Elements for Enhanced Laminarizing Effect on Three-dimensional Boundary Layer, AIAA SciTech Forum 2024, AIAA 2024-0889.

S. Suzuki, A. Yakeno, Y. Konishi, N. Tokugawa, M. Hirota, H. Takami, and S. Obayashi: Experimental validation of suppression effect on crossflow instability by Sinusoidal Roughness Element, AIAA SciTech Forum 2024, AIAA 2024-0891.

国内学会・研究会等

上野直哉, 廣田真, 服部裕司: 回転流中における2次元テイラー・グリーン渦の不安定性の非線形発展, 日本流体力学会 年会 2023, 東京農工大学

廣田真, 井手優紀, 服部裕司: 波形粗さ要素の適用による後退翼面上の境界層遷移の安定化, 日本物理学会 2024年春季大会, 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5年9月22日 上野直哉, 日本流体力学会年会 2023 若手優秀講演表彰

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR04APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月23日提出

ナフィオン陽子交換膜の機械的特性に対する 過酸化水素の影響メカニズム研究

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

低炭素排出量の新たなエネルギー源の開発は、目下の重要な課題である。化学反応による化学エネルギーを電気エネルギーに変換する装置である固体高分子形燃料電池（Polymer Electrolyte Fuel Cell: PEFC）は、エネルギー変換率が高く汚染物質を排出しないことから新しいエネルギー源としての要件を満たしており、重要なトピックになっている。陽子交換膜は、酸化剤と還元剤を隔離し陽子が通過できるようにするため、PEFCの重要な構成要素である。陽子交換膜は通常、高温や高圧などの比較的過酷な環境で機能し、その機械的性質の安定化はPEFCの安定性と安全性にとって重要である。本研究では、分子動力学（Molecular Dynamics: MD）シミュレーションを用いてナフィオンと呼ばれるイオン交換膜をモデル化した。このシミュレーションにより、化学反応過程の中間生成物である過酸化水素の分布や応力分布およびそれに対応する微視的機構を理解することができる。さらに、過酸化水素の分布と応力反応や対応する微視的機構に対する温度変化の影響も、シミュレーションにより理解することができる。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の最終目標は、異なる温度かつ過酸化水素が存在する様々な応力条件下でのナフィオンの微細構造の変化に関する特徴を調べることである。異なる含水率のナフィオン膜に引張応力と圧縮応力を印加し、温度、引張応力、圧縮応力に対するナフィオン系の過酸化水素の分布や応力分布について解析した。

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 新しい解析手法の開発

本研究では新たに粗視化分子動力学法における過酸化水素のモデリングを行った。構築した粗視化モデリングは三次元球面極性モデルとした。この手法は過酸化水素の極性を考慮している。過酸化水素の極性モデルは、極性水分子の粗視化モデルに基づき構築した。極性水分子の粗視化モデルの極性を特徴付けるために用いる荷電粒子対の電荷を変えることで、過酸化水素分子の極性に適合するように水分子モデルの極性を修正した。

2.2 引張応力が物質輸送特性に与える影響

MDのシミュレーション結果は、引張応力がナフィオン膜における過酸化水素、陽子の輸送特性を促進することを示している。応力が高くなると、この変化はより大きなものになる。異なる粒子間のRDFを計算し解析を行った結果、引張応力が極性分子間での水クラスターの形成を促進することが明らかとなった。また、応力が大きくなると、この現象はより顕著になる。水クラスターは、引張応力により相分離がより大きなものになり得ることを示している。過酸化水素分子は局所的により集中して分布し、狭い水ネットワーク内を移動していることがわかった。これは、引張応力によって生じる過酸化水素の拡散率増加の理由となり得ることを示唆している。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、異なる含水率の過酸化水素含有ナフィオン膜の材料特性と微細構造について応力下での変化を解析し、過酸化水素含有ナフィオン膜系の応力発生メカニズムについて解析した。その結果、過酸化水素が存在するとナフィオン膜の強度（ヤング率）が低下する傾向にあることを示している。さらに、引張応力にはナフィオン膜における過酸化水素の拡散促進効果がある。考えられる理由の一つとして、応力がより大きな相分離を引き起こすことがある。粒子間の動径分布関数（RDF）の結果から、引張応力は水分子間と過酸化水素分子間のRDFのピークを増大させるが、RDFのピーク半径には影響を及ぼさないことが分かる。これは、極性分子はクラスターを形成する可能性が高いため、引張応力がより大きな相分離を促進することを示唆している。クラスターにより粒子は局所的により集中して分布し、粒子の移動範囲は局所的に拡大する。これは、応力がナフィオン膜における過酸化水素の拡散率を促進する理由となり得ることを示唆している。以上の内容が明らかになったことにより、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

本研究では異なる状態における高分子膜の微細構造を解析し、様々な温度と応力に対する過酸化水素の輸送メカニズムを解明した。一部のメカニズムについては説明できているが、高分子の絡み具合を表すパラメータの導入とそのメカニズムについてはまだ解析が完了していない。また、過酸化水素による高分子の開裂の影響についてもまだ解析できていない。今後の研究では、絡み合い構造の評価に関する新たな解析手法を試み、絡み合い構造が高分子の機械的強度に与える影響を解析する。また高分子の開裂が発生した系についても解析する予定である。

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）

- [1] Haoran Wang, Sheng-feng Huang, Takashi Tokumasu, “A Molecular Dynamics Simulation Study on the Hydrogen Peroxide Mechanism and Distribution Features Response to the Stress in Nafion Membrane at Different Water Contents”, 発表予定

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

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR05APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024年7月11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

金 裕純, 西村 祐輔, 小野寺 哲

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

FY22 共同研究で得られたヒートシンクにおける最適化知見を適用する

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 製品設計への適用

- ・ベイズ最適化により得られたヒートシンクのフィン形状の適用

2.2 新しい現象の解明

- ・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深化
- ・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

3. 研究目標の達成状況

- ① 製造課題の解決手法が機能へ及ぼす影響を明確にし、最終仕様として製品設計に適用
- ② OpenFOAMによるレーザー溶接数値解析モデルの理実一致を確認し、有用性を示した

4. まとめと今後の課題

- ① 共同研究で得られたヒートシンクにおける最適化知見の製品適用を完了した
- ② 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した

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

5.2 その他（特許,受賞,マスコミ発表,等）

特許

発明の名称：冷却器及び半導体装置

特許出願番号：PCT/JP2023/019536

出願者：Astemo、東北大学（共同出願）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR06APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

有機分子修飾界面におけるナノスケール輸送現象の解明

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

楠戸 宏城

日本学術振興会特別研究員（PD）

趙 子毅, 犬飼 春太

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，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、OH基末端よりCOOH基末端を有するPEG基SAMでは界面の熱輸送特性が大きく向上することが明らかとなった。これはOH基末端と比較し、COOH基末端では、OH官能基が溶媒側に配向するが、OH基末端ではOH基がSAM内部へ配向していることが要因である。この構造の違いはPEG分子鎖の柔らかさに起因すると考えられる。

2.2 複合SAM修飾膜による液滴濡れの解析

金固体間上を異なる親水性末端を持つアルカンチオールSAMによって不均一に修飾した表面の計算系を構成し、表面上に水液滴の接触状態を構成するMDシミュレーションを行った。液滴の接触界線の動的挙動と液滴サイズの関係解析の結果、不均一性のサイズによって液滴の三相界線がピンニングおよびデピンニングを生じることが明らかとなった。

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不均一なSAM表面上の液滴接触に対する目標について、概ね目標を達成した。

4. まとめと今後の課題

今後、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解析について、SAMの種類を拡張し、有機分子設計に繋がる知見を集積する。また、物理的・化学的不均一性を有するSAM表面における液体の親和性について、接触線の静的・動的な挙動に関してさらに解析を進める。

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）

国内学会・研究会等

1. 趙 子毅, 菊川 豪太, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, (2023), D123.
2. 楠戸 宏城, 大賀 春輝, 山口 康隆, 菊川 豪太, 第37回数値流体力学シンポジウム, (2023), 3306-10-05.

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	GR08APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 07 月 23 日提出

高精度エッチング手法の確立に向けた

入射粒子の分子動力的解析

徳増 崇, 上根 直也

東北大学流体科学研究所 教授, 特任助教

1 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

集積化に向けて微細化が進む半導体素子は、短チャネル効果や量子トンネル効果といった量子力学的な損失を回避するため、構造の複雑化が図られている。しかし、複雑化の促進に伴い、製造工程の 1 つであるエッチングプロセスでは、従来手法では対応できないような複雑かつ高精度な加工を行う必要がある。中性粒子ビームエッチング（**Neutral Beam Etching : NBE**）法は、従来の誘導結合プラズマを中性化することで粒子の運動エネルギーやガス状原料の化学反応を制御し、任意の形状に薄膜を加工する手法であり、次世代の半導体産業の基幹足り得る技術である。しかし、エッチングプロセスは物質移動および化学反応を含むため非常に複雑であり、高効率かつ高精度なエッチング条件の解明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、計算系にハロゲン系中性粒子を導入し、薄膜を加工する NBE 法に着目し、入射する原子の種類や基板温度がエッチングプロセスへ与える影響の解明を第一の目的とする。第二に、気体分子入射時の運動エネルギーをパラメータに設定し、エッチングプロセスへの影響を明らかにする。その後、数値計算から明らかとなった知見をもとに実証実験を行い、高アスペクト比構造を実現可能なエッチングプロセスの指針を提案する。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 10 nm 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 NBE 法によるエッ

エッチングプロセス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、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。

1.2 研究期間内の最終目標

NBE法を用いたエッチングプロセスにおける微視的な表面反応機構の理解、および入射する原子種や入射時の運動エネルギー、基板温度等の加工条件がエッチングプロセスに及ぼす影響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）

2.1 中性ハロゲン粒子による Si 基板エッチング

Si 基板上に電氣的に中性な Cl 原子を入射し、NBE 法を用いたエッチングプロセスを模擬するシミュレーションを実施した。入射時の運動エネルギーを変化させた際に計算系から脱離した基板 Si 原子数を算出することでエッチング収率の変化を確認した。また Si 原子と Cl 原子の相互作用を物理スパッタリングと化学反応に分類し、その比率を算出することでエッチング機構を明らかにした。

2.2 Si 基板の酸化機構の解明

半導体製造プロセスを包括的に理解するため、Si 基板上に生成する酸化膜の成長過程もシミュレーションした。基板の初期構造はエッチングプロセスの一つのパラメータとして捉えられるため、本研究のさらなる理解に有用であると考えられる。熱酸化プロセスを再現し、基板材料や面方位を変化させた際に基板表面での酸素分子の解離率や酸化膜の構造解析を行った。基板材料を Si から Ge に変更することで表面反応が変化し、酸化膜の性質に差が生じた。また、構造解析の結果と照らし合わせることで基板材料ごとの酸素原子の挙動を確認し、酸化機構を明らかにした。

3 研究目標の達成状況

入射エネルギーと脱離した Si 原子数の相関関係について、本計算による結果と先行研究による実験値を比較し傾向の一致を確認した。これによって本計算の妥当性が示された。また、加工条件の内、エッチング収率に大きな影響を与える入射原子の運動エネルギーを変更し、エッチングプロセスに及ぼす影響について理解した。これらのことから、本研究課題の目標は概ね達成されたと考えている。

4 まとめと今後の課題

Si 基板に Cl 中性粒子を入射する場合において、気体分子の運動エネルギーをパラメータとした際のエッチングプロセスへの影響が解明された。妥当性が確認された本シミュレーションを基軸として、今後は入射する原子種の変更や基板原子種の変更、基板温度の変更など、異なる加工パラメータの変化に伴うエッチングプロセスへの影響の解明へと拡張する予定である。また、エッチングプロセスへの影響を判断する基準として基板の物性に関わる結晶性についても考察を行う予定である。

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

1. K. Sekiguchi, N. Uene, D. Ohori, K. Endo, T. Tokumasu, 「ReaxFF MD Analysis of Substrate Material Properties into Oxide Films during Thermal Oxidation Process of Group IV Semiconductor Materials.」, 『PRiME2024 The Electrochemical Society』, Abstract# 196413, Hawaii, U.S. (October, 2024).

国内学会・研究会等

1. 関口賢太, 上根直也, 大堀大介, 遠藤和彦, 徳増崇, 「反応性力場分子動力学法を用いたIV族半導体材料の酸化膜形成における温度依存性解析」『第14回マイクロ・ナノ工学シンポジウム』, 講演番号 6P5-PN-8, 熊本城ホール, 熊本, 2023.
2. 関口賢太, 上根直也, 大堀大介, 遠藤和彦, 徳増崇, 「IV族半導体材料の熱酸化プロセスにおける酸化膜厚の温度依存性への反応性力場分子動力学解析」『第71回応用物理学会春季学術講演会』, 講演番号 24p-P11-2, 東京都市大学世田谷キャンパス, 東京, 2024.
3. 後藤星南, 上根直也, 徳増崇, 「フッ化物イオンによる二酸化ケイ素エッチングの反応性分子動力学解析」『第71回応用物理学会春季学術講演会』, 講演番号 25a-12J-2, 東京都市大学世田谷キャンパス, 東京, 2024.

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	GR09APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024年9月5日提出

気体アンモニアならびに液体アンモニアに対する拡散燃焼に関する研究

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

Yu, Xia

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

気体アンモニア（GNH₃）/空気燃焼に関する近年の研究の進展により、2050年カーボンニュートラルに向けたエネルギーベクトルとしてNH₃が有望であることが明らかになっている。当研究室では、2014年から2019年にかけてSIPプロジェクトにおいて、GNH₃/空気燃焼およびGNH₃/CH₄/空気燃焼に関する広範な研究を実施し、GNH₃/空気燃焼におけるNO_x低減のためのリッチ・リーン二段燃焼技術を世界で初めて開発した。この技術により、O₂濃度16%で排出ガス中のNO_x排出量を100ppm以下（数値解析によるものであり、後に実験で42ppm以下を実証）に低減し、未燃NH₃排出量もゼロに抑えることができた。これらの研究と並行して、産総研福島再生可能エネルギー研究所(FREA)において、世界初の50kW GNH₃ガスタービンシステムが構築され、発電実証が行われた。しかし、NH₃は常温で高圧ポンプ（約0.9MPa）内に液体として貯蔵され供給されるため、これを気化させて燃焼させるGNH₃/空気燃焼では、ガスタービン設備に新たなコストが発生する。すなわち、液体アンモニア（LNH₃）を気化させて燃料ガスを再圧縮するためのエネルギーとそれに伴う設備コストが加わる。このエネルギーは、NH₃の低位発熱量の7～8%近くを気化潜熱が占めることに起因する。さらに、アンモニア気化装置の応答性は遅く、発電量を速やかに変化させることが難しく、ガスタービン発電の利点を生かすことが難しい。これらの弱点の解決策として、液体アンモニア（LNH₃）を噴霧して直接燃焼させることが考えられる。当研究室は、2019年から2021年にかけて、産総研FREAと共同で、ガスタービン燃焼器にLNH₃を噴霧することで、圧力0.25MPaの二段燃焼器を用いて、発熱量基準でLNH₃が50～100%

の LNH₃/CH₄ 混焼試験に成功した。同研究では、火炎安定化のために予熱 (500 K 以上) した旋回空気流を用いた。また、数値解析では、H₂ と混焼する LNH₃ 噴霧燃焼の数値解析を実施し、LNH₃ 発熱量比 49% で安定した低 NO_x 燃焼を確認した。これは、連続 LNH₃ フラッシュ噴霧燃焼に関する世界初の数値解析的研究である。さらに、2021 年 4 月から 2022 年 3 月にかけて、LNH₃ の発熱量比を 50% から 100% に高めた LNH₃ フラッシュ噴霧燃焼の研究に進展させた。本研究では、GNH₃/空気燃焼のような低 NO_x 燃焼を LNH₃/空気燃焼で実現すること、この新しいアンモニア燃焼技術をガスタービン燃焼だけでなく工業炉にも適用することを目標とする。LNH₃ フラッシュ噴霧形成過程はまだ十分に解明されておらず、今後の燃焼技術開発のために基礎研究が不可欠である。

1.2 研究期間内の最終目標

フラッシュ噴霧形成過程は、周囲圧力が気液飽和圧力より低い環境に液体が放出されたときに発生する現象である。本計算では、はじめに核生成理論を用いてノズル内部におけるフラッシュ沸騰による核生成モデルを実装した。その粒径をノズル出口の噴霧境界条件とした。並行して噴霧液滴の過熱蒸発モデルを作成する。初期噴霧の噴霧角 (円錐角) を仮定し、フラッシュ噴霧におけるノズル近傍の高密度噴霧領域の特性を明らかにする。これらを統合して、雰囲気圧力ならびに過熱度に対する LNH₃ 噴霧の数値予測、さらに燃焼予測を行うことを最終目標とする。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

高圧の LNH₃ をノズルから飽和圧力以下の低圧環境に噴射すると、激しいフラッシュ沸騰によりフラッシュ噴霧となり二相流が発生する。LNH₃ フラッシュ噴霧の数値解析では、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。そのため、気相にはオイラーアプローチを、液相にはラグランジュアプローチを採用している。噴霧中の液滴は、分裂、抗力発生、フラッシュ沸騰、蒸発、伝熱など多くの物理現象が関与しているため、これらの相互作用については、ラグランジュ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双方向結合が重要な開発項目である。気相には、連続方程式、運動量、化学種保存則に基づく圧縮性ナビエ・ストークス方程式を空間フィルタリングとともに使用している。高圧の LNH₃ が低圧環境に噴射されると急速に加熱されるため、本研究では平衡蒸発モデルに加えて非平衡フラッシュ沸騰モデルを採用している。数値解析は、オープンソースコード OpenFOAM-7 のスプレーフォームソルバーを使用している。本研究では、3 次元計算領域で Large Eddy Simulation を実行した。

2.2 新しい現象の解明

噴射角 (プルーム形成)、初期液滴サイズ、液滴到達距離などのフラッシュ噴霧特性は、過熱度、ノズル形状、ノズル内部の表面粗さ等に依存する。そのため、本研究では、噴霧角を 90° とした噴射ノズル仮定し、LNH₃ の噴射温度を 20 °C 一定に保ちながら、燃焼器側の圧力を変更することで過熱度を変化させた。ノズル出口の核形成密度、気泡離脱頻度、および蒸気体積分率は、ノズル内の核形成理論を使用して数値的に計算した。さまざまな過熱度で

のノズル出口の LNH₃ の液滴直径の減少係数を数値的に取得し、アルコールおよびアルカン液体燃料との比較も行った。

液体アンモニアのノズル出口における液滴直径の減少係数は、過熱度によって大きく異なる。過熱度 54 K では、液体アンモニアの有効初期液滴直径はノズル直径の約 7% まで減少することが分かった。ノズルから噴射された LNH₃ 噴霧の軸方向のザウター平均直径 SMD 分布は、一旦増加した後減少し、その後一定の SMD を維持することがわかった（添付図参照）。周囲圧力 0.12 MPa の条件では、噴霧の中心軸温度は 210 K まで低下し、0.12 MPa での飽和温度よりはるかに低くなる。これは、周囲空気との混合による GNH₃ の分圧低下や、フラッシュ沸騰の非平衡過程が影響しているためと考えられる。数値解析と概ね同条件で実験計測を行った結果、LNH₃ フラッシュ噴霧の温度ならびに液滴の SMD 分布は数値解析結果と良好な一致を示し（添付図参照）、本数値解析の妥当性が検証された。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、ノズル内部の LNH₃ のフラッシュ現象に対して、核形成理論に基づき過熱に対する液滴径の減少係数に関する理論曲線を得た。そのモデルを実装してノズル出口での初期液滴直径を決定し、噴射角 90° を仮定してノズル下流の気液二層流の LES に成功した。数値解析では、ノズル先端に非常に近いところでは大きなブルーム角度があるにもかかわらず、中心軸に沿って急激に減少することが分かった。さらに、半径方向と軸方向の液滴の SMD 分布と温度分布は、実験測定とよく一致していることが示され、本数値解析は LNH₃ フラッシュ噴霧の特性を再現する目標を達成しつつある。

4. まとめと今後の課題

本研究では、雰囲気圧力 0.12 MPa において数値解析を行い、実験計測による SMD および温度分布と比較して良好な一致を得た。本数値解析では噴射角を仮定しているが、今後の研究においては、より低い過熱度でのノズル出口直後の LNH₃ ブレークアップ現象によるブルーム発達角度を予測するモデル開発を進める予定である。

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] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, K. Oku, K. Honda, E.C. Okafor, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Towards the development of liquid ammonia/air spray combustion in a gas turbine-like combustor at moderately high pressure, Applications in Energy and Combustion Science, Vol. 16 (2023), 100215.

著書

無し

国際学会

- [1] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Towards the development of liquid ammonia/air spray combustion in a Gas turbine-like combustor, the 14th Asia-Pacific Conference on Combustion, Kaohsiung, Taiwan (2023), Paper No. 184.
- [2] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, The Characteristics of liquid ammonia sprays at various ambient pressures, The 2nd Symposium on ammonia Energy, Orleans, France (2023), Paper No.64
- [3] K. D. K. A. Somarathne, H. Yamashita, K. Oku, K. Honda, T. Kudo, A. Hayakawa, Hideaki Kobayashi, The Temperature Characteristics of Liquid Ammonia Spray at High Pressures, The 20th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan (2023), Paper No. OS2-43.

国内学会・研究会等

無し

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	GR10APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 13 日提出

炭化水素系アイオノマー薄膜における酸素透過特性の分子動力学解析

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

石澤 由紀江

東北大学流体科学研究所 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

現在，自動車や家庭用燃料電池に使われている固体高分子形燃料電池（Polymer Electrolyte Fuel Cell：PEFC）にはフッ素系電解質膜が広く用いられているが，環境負荷・高コスト・高温低加湿環境での出力低下などの点で問題があった．近年，それらの問題の改善が見込める構成元素にフッ素を含まない非フッ素系（炭化水素系）電解質膜が次世代膜として強く期待されている．しかし，これまで開発されてきた非フッ素系電解質膜には 1 つ 1 つの物性においてはフッ素系電解質膜以上の物性を示す材料は存在するものの，性能と耐久性を同時に両立する非フッ素系電解質膜はこれまで存在しなかった．近年，高性能と高耐久性の相反する特性を両立する革新的な非フッ素系電解質膜の設計指針が見いだされた．本研究では，スルホ酸化ポリフェニレン(SPP-BP)という高いプロトン伝導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当て，アイオノマー内部の解析を行い，白金表面における吸着状態や酸素輸送特性およびプロトン伝導性の解明を目指す．

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し，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・プロトン伝導性との比較を行うことで，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 フッ素系電解質膜 (Nafion) に対する酸素透過計算

白金触媒とフッ素系電解質膜 (Nafion 高分子モデル, 水モデル, ヒドロニウムイオン) とで構成された計算系を作成し, 酸素透過計算を実施した. 含水率は 3, 7, 11, 14 の 4 条件とした. 計算の結果, 各含水率で膜厚は 3.0~3.5nm となり, 含水率の上昇に伴い酸素透過数がわずかに減少する傾向が見られたが, 含水率依存性は低かった.

2.2 非フッ素系電解質膜 (SPP-BP) に対する酸素透過計算

白金触媒と非フッ素系電解質膜 (SPP-BP 高分子モデル, 水モデル, ヒドロニウムイオン) とで構成された計算系を作成し, 酸素透過計算を実施した. 含水率は 3, 5, 7 の 3 条件とした. 計算の結果, 各含水率で膜厚は 3.0~3.5nm となり, 含水率の上昇に伴い酸素透過数が大きく減少する傾向が見られ, 低含水率時はフッ素系電解質膜よりも高い酸素透過性を示したが, 高含水率時はフッ素系電解質膜と同程度の酸素透過性を示した. これは含水率の増加に伴い, 界面部分の酸素輸送経路が消失し, 酸素透過性が急激に低下したためだと考えられる. また, 膜厚方向における密度分布を解析したところ, 白金触媒と電解質膜との界面部分の密度が電解質膜内部の密度よりも大きくなっており, 酸素透過性には白金触媒と電解質膜との界面部分の構造が大きくかわることが示唆された.

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 高分子が含まれた非フッ素系電解質膜 (炭化水素系アイオノマー) の分子動力学計算と, 比較用に従来のフッ素系電解質膜の分子動力学計算を実施した. 計算の結果, 白金表面における炭化水素系アイオノマー内部の酸素透過性が低含水率時に従来のフッ素系電解質膜 (Nafion) よりも大幅に増加する現象を確認出来た.

4. まとめと今後の課題

白金表面上に高分子アイオノマーを配置した計算において, 炭化水素系アイオノマーの構造特性と酸素分子の透過特性を明らかにした. さらに, 従来の Nafion 材料を用いた電解質膜の計算結果との比較を行った. 解析の結果, SPP-BP という炭化水素系高分子を含むアイオノマーでは, 従来の Nafion を含むアイオノマーより酸素透過性が高くなることが分かった. 今後は, 酸素透過係数に換算することで酸素透過性を定量的に評価し, より精度良く従来のフッ素系電解質膜と新規材料の非フッ素系電解質膜の酸素透過特性を比較していく. また, 酸素透過特性の律速となり得る原因の解明にも取り組んでいく.

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

Takashi Tokumasu : Large Scale Molecular Simulations for the Transport and Structure Characteristics of Polymer Electrolyte Fuel Cell, International Conference on Polygeneration 2023, Bali, Indonesia, 2023.

国内学会・研究会等

徳増崇 : 固体高分子形燃料電池高分子材料内部の物質輸送特性の分子論的解析, 第 72 回高分子討論会, 愛媛, 日本, 2023.

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	GR01MAY23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.05～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2024年7月23日提出

膜タンパク質 CLCF の F-/H+輸送機構に関する分子論的研究

馬淵 拓哉

東北大学流体科学研究所 准教授

徳増 崇

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

細菌細胞は、細胞内のフッ化物イオン(F⁻)の濃度が上昇することで、細菌増殖の際に重要な酵素の働きが低下し、増殖を抑制すること知られている。そこで、細菌細胞は膜タンパク質である CLCF F-/H+ antiporter (CLCF)を用いて、細胞内の F⁻を適切に排出し増殖機能の維持を図っている。CLCF は実験によって、F⁻を細胞外へ排出するにあたり、プロトン(H⁺)を細胞内に取り込み交換することが明らかとなっている。また、静的な結晶構造も明らかとなっており、グルタミン酸(Gluex)が細胞内外の水溶液にアクセスできる点から、交換における重要因子であると考えられている。しかしながら、F⁻と H⁺が交換される機構については明らかとなっておらず、Gluex の直接的な働きも明らかとなっていない。加えて、CLCF が F⁻と H⁺のイオン交換に至る以前に、F⁻のみを水溶液中のその他のイオン(Cl⁻など)と差別化を図り、選択する機構についても明らかとなっていない。これらの機構は動的な現象であることから、結晶構造解析等の実験において解明することは困難である。そこで本研究では、分子動力学 (Molecular Dynamics : MD) シミュレーションを用いて機構の可視化及び解析を行う。

本研究を行うにあたり、計算系は数十万原子かつ、サブマイクロ秒での実施が必要である。これはMDシミュレーションにおいて空間的にも時間的にも非常に大規模な系となる。よって、通常の計算機での研究遂行は困難であり、本研究が大規模計算機により成されることで、生物工学を初めとして創薬等の医工学において大変価値のある研究ができると考えている。

1.2 研究期間内の最終目標

CLCF における F⁻輸送機構の解明にあたり、F⁻の輸送に寄与する領域の特定および、F⁻の輸送に対する CLCF 中に存在する各アミノ酸効果を理解することは、F⁻輸送機構について巨視的にも局所的にも理解が図れる。F⁻の輸送に寄与する領域の調査には反応座標における自

由エネルギー解析が有効であり、F⁻の輸送に対する CLCF 中に存在する各アミノ酸効果の調査については F⁻と各アミノ酸間の相互作用エネルギーの解析が有効とされている。しかしながら、本来の F⁻の輸送現象は数マイクロ秒で行われるため、一般的な MD シミュレーションでは輸送現象の再現が困難となる。そこで、非平衡計算である Steered MD 法を用いて人工的に F⁻を輸送させることで反応座標を行う。そして、反応座標に対してバイアスポテンシャルを付与し、F⁻の存在確率密度分布から自由エネルギーを取得および F⁻と各アミノ酸間の相互作用エネルギー取得を Umbrella sampling 法を用いて行う。その際に F⁻が選択的に輸送される要因を探るため、塩化物イオン(Cl⁻)でも同様に行い比較を行う。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

該当なし

2.2 新しい現象の解明

本研究を通じて、CLCF の F⁻輸送における排出機構及び選択機構について新たな提案が可能となった。CLCF 内に侵入した F⁻は結合サイトにトラップされた後、F⁻輸送経路に存在する 2 つのグルタミン酸 (Gluin, Gluex) について、Gluin のプロトン化/脱プロトン化状態に関わらず、Gluex が脱プロトン化状態に F⁻は結合サイトに保持され、プロトン化状態に F⁻は排出されることが明らかとなった。また、Gluex が脱プロトン化状態および Gluin がプロトン化状態の場合に、F⁻に対する選択性が示された。これは、Gluin がプロトン化状態であることで負に帯電するアニオンを反発しない状態になったうえで、周辺の一部のループ構造が変性して Cl⁻のみをキャッチして通さず、F⁻はそのまま通過する機構が提案された。

3. 研究目標の達成状況

概ね計画通りに進行していると考える。

4. まとめと今後の課題

本研究を通じて、これまで明らかとされていなかった CLCF における F⁻イオンの排出から選択機構について新たに提案する形となった。しかしながら、選択機構の中で一部のループ構造がなぜ Cl⁻では変性せずに F⁻の場合のみ変性するのかについて明らかとなっていない。そこで今後は、イオンと各アミノ酸残基レベルでの相互作用力に着目して、影響因子の特定を分子レベルで行う予定である。

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)

該当なし

国際学会

1. Akihiro Nakamura, Takashi Tokumasu, Takuya Mabuchi, "F⁻ ion transport mechanism in CLCF

analyzed by molecular dynamics simulation”, EBSA CONGRESS 2023, Stockholm (Sweden),
2023年7月31日-8月3日

国内学会・研究会等

2. 仲村陽宏, 徳増崇, 馬淵拓哉, “CNTの内部官能基修飾によるイオン輸送特性への影響調査”, 第37回数値流体力学シンポジウム, 愛知県, 2023年12月15-17日
3. 仲村陽宏, 徳増崇, 馬淵拓哉, “分子動力学計算によるCLCFにおけるF-イオン選択機構の解析”, 第37回分子シミュレーション討論会, 福井県, 2023年12月4-6日

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	GR01JUL23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.07～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024年 7月 13日提出

氷点下における固体高分子形燃料電池高分子電解質膜の

内部状態の分子論的解析

西澤 裕紀

東北大学流体科学研究所

徳増 崇

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

近年、クリーンエネルギーの一つとして燃料電池が注目されている。燃料電池の中でも固体高分子形燃料電池(Polymer Electrolyte Fuel Cells: PEFC)は常温での起動が可能であり、小型化が容易である特徴から家庭用定置電源、燃料電池自動車などの製品に応用されている。PEFC が普及拡大に向けて抱えている課題として、耐久性、物質輸送効率、作動環境に関する問題などがあげられる。この中でも氷点下環境での作動に関する問題は今後の世界的な普及に向けた大きな課題となっている。氷点下環境においては、高分子電解質膜(Polymer Electrolyte Membrane: PEM)と触媒層の界面において水の特性の変化、排水の凍結に関する問題、物質輸送効率の大きな低下などがあげられている。その中でも、プロトン輸送性の低下は発電効率に直接影響を及ぼすため、重要な課題となる。

PEM 内部のプロトン輸送には Vehicle mechanism と Grotthuss mechanism の二種類がある。Vehicle mechanism はヒドロニウムイオンが直接移動することによって起こる拡散である。Grotthuss mechanism は水分子がプロトン伝導を媒介し、水分子、ヒドロニウムイオンの重心位置が移動せずにプロトンのみが拡散する輸送機構である。氷点下環境では運動エネルギーの著しい低下、PEM 内部の水が相変化する可能性があり、Vehicle mechanism による拡散が大きく低下する可能性が高い。一方、Grotthuss mechanism は分子の運動を必要としないため、氷点下環境においても拡散に貢献する可能性が高い。したがって、Grotthuss mechanism についても考慮した解析が必要となる。

本研究では、氷点下環境における PEM 内部の状態について構造、輸送の観点から分子論的に解析し、氷点下環境での作動に関する知見を提供することを目的としている。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、分子論的な解析を通して、氷点下環境での作動に関する知見を得ることを目的として、分子動力学(Molecular Dynamics: MD)法を用いた数値計算を行う。そのため、MD 法による正しいシミュレーションが可能な力場について作成し、それらを用いた解析を行う。これにより、高分子膜内部でのプロトン輸送特性、氷点下環境に特有の構造の変化などについて解析し、それらを用いて氷点下環境での作動に関して具体的な改善方法、解決策を提言することを目標としている。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい力場の開発

本研究では、MD 法を用いた数値計算を行う。前節で示したように氷点下における PEM の内部状態に調査する際には、Grotthuss mechanism による拡散を考慮することが重要である。古典的な MD 法では、結合の切り替わりなどの化学反応を定義することはできないため、この手法では Grotthuss mechanism を考慮することはできない。そのため、本研究では、反応性力場分子動力学法(ReaxFF MD)を用いたシミュレーションを行った。このシミュレーションでは parameter set と呼ばれる経験的に設定された変数を多数使用するため、それらが使用したい計算系に対して適切かを検証する必要がある。本研究では、先行研究で用いられている parameter set を基礎としてそれらを PEM の計算系に対して適切になるように修正を加えた。本研究では PEM の代表的な材料として Nafion を用いた。

本研究では電離度、異常な結合、系全体の密度に関して修正を加えた。Nafion の電離度は、含水率ごとに異なり、膜の含水率が 3 以上になると電離度は 100%となる。修正前の parameter set を用いた計算では、3 以上の含水率においても電離が確認されなかった。そのため修正を行い、電離度が 100%となるように修正した。また、従来の parameter set を用いた計算では、Nafion 内の酸素原子に対してプロトンが付着する異常な結合の発生が確認された。この点についても異常な結合が発生しないように修正した。密度に関しても、修正前の値が 1.2 g/cm^3 であるのに対し、改善後は 1.5 g/cm^3 となった。ただし、実験値は $1.8\sim 1.9 \text{ g/cm}^3$ であり、さらなる修正が必要であると考えられる。以上の修正によって電離度、異常な結合の防止を行った。密度に関しても修正したが、実験値と離れた値となっていることからさらなる改善が必要であると考えられる。

2.2 氷点下環境での輸送特性の解析

氷点下環境での輸送特性に関する解析として、自己拡散係数の測定と動径分布関数による構造特性の解析、Grotthuss mechanism による拡散の解析が行われた。

構造特性解析では、高含水率条件のほうが、PEM 内部の水の構造変化が大きいことが分かった。この変化は水による水素結合ネットワークが強固になったことを示唆しており、これは高含水率において、Vehicle mechanism による輸送の低下がおこることを示唆している。一方、低含水率では大きな構造変化はみられておらず、低含水率では Vehicle mechanism による輸送の低下が小さいことが分かった。

Grotthuss mechanism による拡散の解析では、高含水率において温度の低下に伴って

Grotthuss mechanism による拡散が増加する傾向が見られた。一方、低含水率では、温度の低下に伴う Grotthuss mechanism による拡散はほとんど変わらなかった。以上の結果から、氷点下環境では高含水率であるほど Grotthuss mechanism による拡散が増加する傾向が強いことが分かった。

以上の結果から、氷点下環境では、高含水率であるほど、Vehicle mechanism による拡散は低下、Grotthuss mechanism による拡散は増加する傾向があることが分かった。拡散係数の測定結果では、高含水率において温度の低下に伴う拡散係数の低下が大きい傾向が確認された。これは Grotthuss mechanism による拡散の増加を上回る Vehicle mechanism による拡散の低下が起こったことを示している。

3. 研究目標の達成状況

現在までに、parameter set の修正を行い、氷点下環境における PEM 内部のプロトン拡散について検証した。この結果から、氷点下環境における PEM 内部のプロトン拡散現象の特性が分かった。これは最終目標の一つである氷点下環境での PEM 内部のプロトン輸送特性について解析したものである。今後は、構造の変化、具体的な解決策に関する提案を行っていく予定である。

4. まとめと今後の課題

本研究では、近年クリーンエネルギーとして注目されている PEFC が抱える氷点下環境での作動に関して PEM 内部の物質輸送効率について分子論的な観点から解析を行った。この結果から氷点下環境においては、含水率の増加に伴って Grotthuss mechanism による拡散は増加、Vehicle mechanism による拡散は低下する傾向があることが分かった。この二つの拡散機構の傾向はトレードオフであると考えられる。PEM 中のプロトンの自己拡散係数の傾向は高含水率のほうが温度低下による拡散係数の低下が大きいことが分かった。これは、含水率が 10 の場合は Vehicle mechanism による拡散の低下の影響が大きいことが原因であると考えられる。

今後の展望として、密度に関する parameter set の改善、計算条件の拡大に取り組んでいく予定である。また、構造特性などの詳細な解析なども行い、氷点下における PEM の内部状態について包括的に解析し、氷点下環境での性能向上に向けた具体的な提言を行いたいと考えている。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術論文

Hiroki Nishizawa, Naoya Uene, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Molecular analysis of hydrogen-bond structures in polymer electrolyte membrane in polymer electrolyte fuel cells below freezing temperatures, ECS transaction, 2023, Vol.112, pp.285-290.

国際学会

Hiroki Nishizawa, Naoya Uene, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Molecular analysis of hydrogen-bond structures in polymer electrolyte membrane in polymer electrolyte fuel cells below freezing temperatures, I01C-1886, 244th ECS meeting, October 2023.

Hiroki Nishizawa, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Analysis of Transport Characteristics of Protons in Polymer Electrolyte Membranes in PEFC below Freezing Temperatures, I01C-2899, 246th ECS meeting, October 2024.

国内学会・研究会等

西澤裕紀、馬淵拓哉、上根直也、徳増崇：氷点下環境における固体高分子形燃料電池高分子電解質膜内部のプロトン輸送特性の分子論的解析、第61回日本伝熱シンポジウム A325, 2024

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	YG01APR23
研究種別	若手研究
利用期間	2023.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

空力弾性学と破壊力学に基づく CFRP 航空機主翼の最適設計

阿部 圭晃

東北大学流体科学研究所 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

環境負荷の低い次世代航空機には、比強度・比剛性に優れた CFRP を主要構造に用いることが期待される。近年、難燃性 CFRP や熱可塑性 CFRP といった機能性を高めた先進材料の研究も行われ、航空機グレードの材料としてクーポン・部分構造レベルでの試験が進められている。次世代航空機の開発においては、このような新しい材料の特性を活かした設計が求められるが、**実機スケールの試験を繰り返し行うことは困難であり、設計の初期段階で材料特性を反映させた空力構造設計を行い、設計の後戻りを減らすことが重要である。**

航空機の主翼設計では、定められた揚力を保つように、巡航時の変形状態にある翼形状を空力設計で求めた後、その変形状態を実現するよう非破壊かつ軽量の構造を設計する。実機試験の困難さから、航空機的设计開発には比較的早くから数値解析が取り入れられてきた。しかし現状では、空力・構造設計では別々に数値解析が導入され、それらを相互に作用させた設計開発は殆ど行われていない。実際には、**部材寸法によって翼の変形状態が変わり、また翼形状は空気力分布に影響することから、空気力と構造変形の平衡状態を予測可能な流体構造連成解析が望ましい。**本研究では、時間的に変化しない巡航時の平衡状態を予測する静的空力弾性(静空弾)解析に着目し、研究例の少ない CFRP 主翼について上述の課題を解決するための基礎技術構築を狙う。

申請者らのグループは近年、**繊維と樹脂の物性を基に、空気力・構造変形の平衡状態で Boeing 777 クラスの CFRP 主翼構造サイジングを行うマルチスケール解析を世界で初めて成功させ、炭素繊維種の違いが CFRP 主翼の設計に及ぼす影響を明らかにした。**本手法は繊維と樹脂の物性から CFRP の積層板の機械特性を予測するため、実験値のない新しい CFRP 材料に対しても静空弾状態の主翼設計を数値的に行える画期的なフレームワークと言える。しかし、現状では非粘性圧縮性流体解析を用いており、**大変形する CFRP 主翼の空気力予測には十分な精度を持った解析となっていない。**また、Boeing 777 を模した単一の翼形状に対する解析に留まっており、**繊維種を変化させた新しい CFRP 材料に対し、最適な主翼設計解がどのように変化するかは未解明である。**

本研究では、炭素繊維強化プラスチック (Carbon Fiber Reinforced Plastic: CFRP) を用いた航空機主翼を対象に、**炭素繊維と母材樹脂の物性にに基づき、巡航時の空力弾性変形解析と、破壊を生じない内部構造サイジングを含めた翼空力形状・内部構造の多目的大域的最適化を目的とする。**これまで多く研究されてきた金属製主翼と異なり、CFRP 構造では**繊維と樹脂の複雑な破壊現象を予測可能な破壊則を取り入れた構造サイジングが求められ、また翼が大**

大きく変形することから空気力予測には定常乱流モデル以上の高度な流体解析を必要とする。申請者らは近年、繊維と樹脂の物性を基に、空気力・構造変形の平衡状態で Boeing 777 クラスの CFRP 主翼構造サイジングを行うマルチスケール解析に世界で初めて成功し、空気力予測は非粘性流解析に基づくものの、炭素繊維種の違いが CFRP 主翼の設計に及ぼす影響を明らかにした。CFRP の実験データベースに基づく主翼構造設計はミシガン大学による研究例が複数あるものの、繊維と樹脂の物性を入力とするマルチスケール解析に基づく構造設計を実現可能な研究グループは我々以外に存在しないと考えている。本研究では、非粘性流解析を乱流モデル解析に高度化し、かつ翼形状の大域的最適化を行うことでシミュレーションツールを空力構造設計へと拡張し、航空機グレードの炭素繊維種の違いが CFRP 主翼の最適な空力構造設計解に及ぼす効果を世界で初めて明らかにする。

1.2 研究期間内の最終目標

本課題では遷音速旅客機を対象として、上述のマルチスケール解析[2]を発展させ、流体解析に圧縮性乱流モデルを適用し、翼形状の変化も考慮した大域的多目的最適化を行うことで、以下の2つを明らかにする。

【項目 A】 巡航時の空気力と構造変形の平衡状態における、内部構造サイジングを考慮した CFRP 主翼形状の大域的多目的最適化(抗力・重量最小化)を実施し、航空機グレードの CFRP における繊維種の違い (T700S, T800S, T1100G. 樹脂は#3900-2B) が最適解の性能に及ぼす影響を明らかにする。

【項目 B】 大域的最適化により得られるパレート解のデータベースを構築し、翼形状に対する主成分分析を通じて主翼性能の影響因子となる翼形状特性を特定する。

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 項目 A に関する多目的最適化設計手法の検討

当初計画では遺伝的アルゴリズム (NSGAI) による最適化を検討していたが、計算リソー

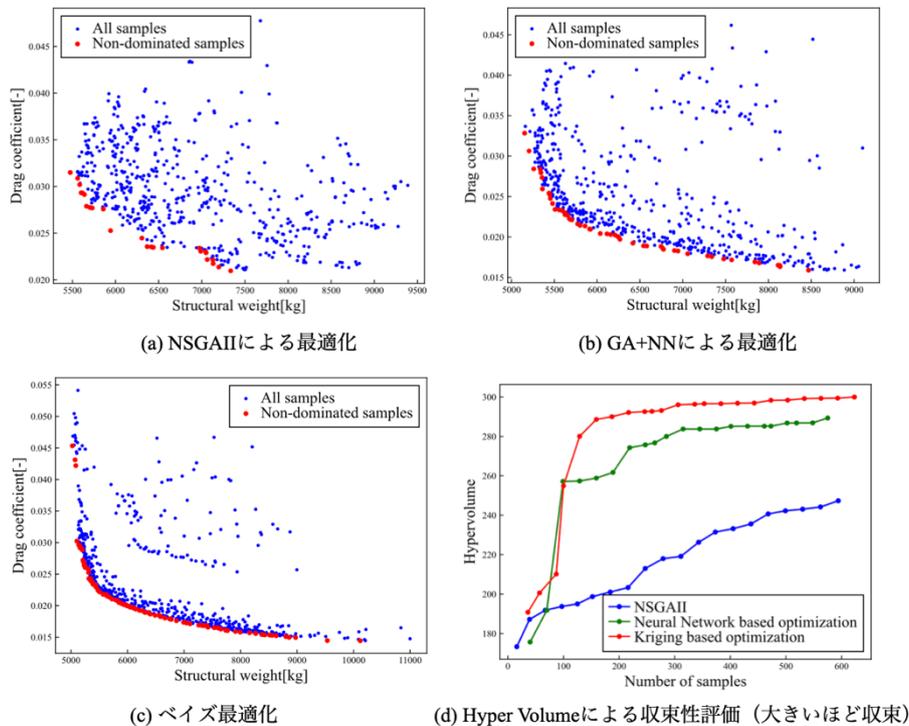


図 1：ベイズ最適化および GA+NN モデルによる多目的最適化 (T800S)

スに制限があることを踏まえ、より効率の良い最適化手法の検証を進めた。その結果、ベイズ最適化による最適化と、機械学習 (Neural Network) と NSGAIII を併用した GA+NN モデルによる最適化を新たに比較することが出来た (図 1)。これまでの過去研究では、いずれの手法も簡易なベンチマーク問題や流体解析による最適化のみに適用されてきており、マルチフィジクス性を含む実用的な工学問題で検証したことは初めてと考えられる。図 1 では、いずれの手法もトレードオフとなる解群を示すパレート面を得られるとわかった。しかし、GA+NN やベイズ最適化 (Kriging モデル) による最適化が明らかにより収束性が高く、また綺麗なパレート面を得られている。ここまでの内容は、一部を 2023 年度の日本航空宇宙学会北部支部講演会にて発表済み、また 2024 年 10 月に行われる飛行機シンポジウムにおいて発表予定である。

2.2 項目 A に関する幾何学的非線形解析の適用

大変形する翼においては構造解析において幾何学的非線形性を考慮した解析を行うことが求められる。本項目では、従来線形解析で行っていたソルバーを非線形解析に切り替え、主翼平面形に対する多目的最適化を行なった 3 つの個体に対して、線形解析との比較を行なった。その結果、翼の変形量と構造重量の双方で、アスペクト比の異なるいずれの平面形でも幾何学的非線形性の影響は小さく、多目的最適化を行う際の構造解析としては線形解析を基本としても問題がないことが示唆された。本内容は以下のように国際学術誌への投稿準備中である: Multi-objective design optimization of CFRP aircraft wings considering fluid-structure interaction and geometric nonlinearity, Yajun Liu, et al.

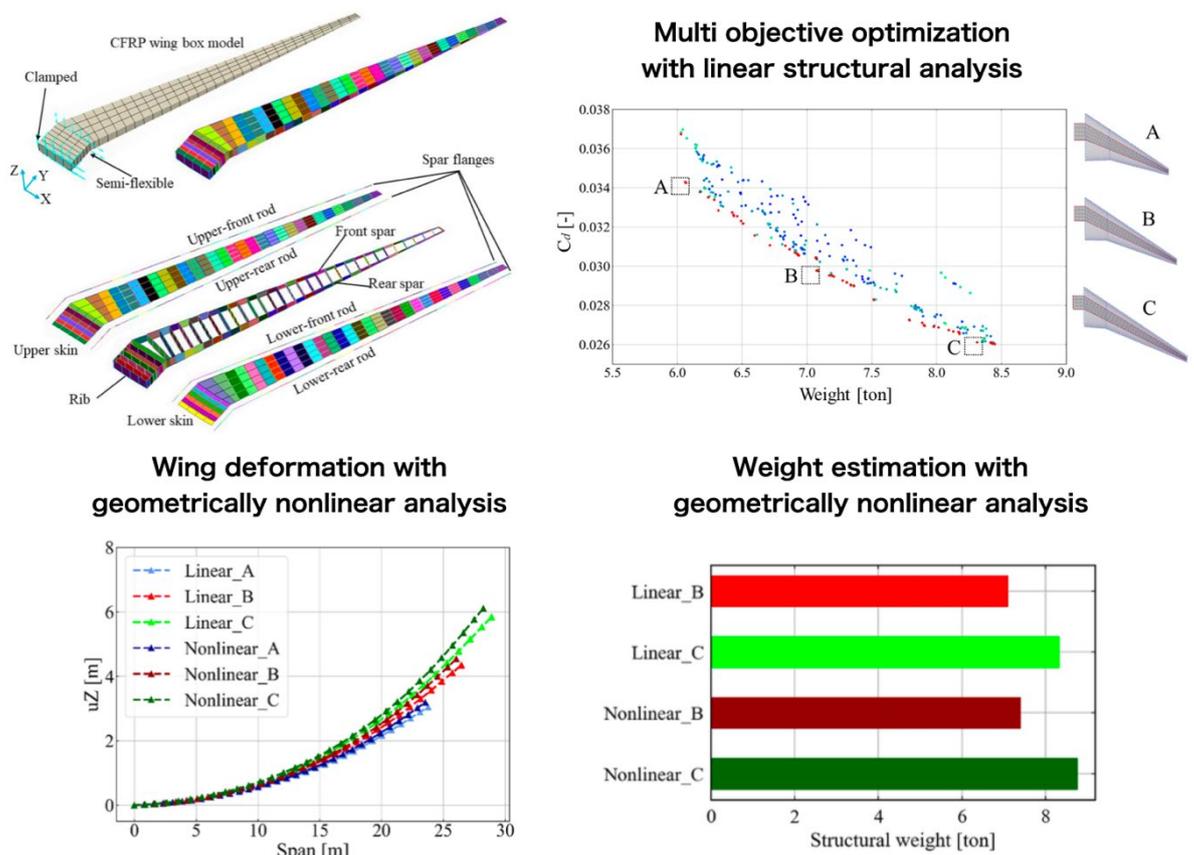


図 2 : 幾何学的非線形解析を導入した主翼静空弾解析とサイジング結果 (T800S)

3. 研究目標の達成状況

静空弾と構造サイジングを取り入れた複合材航空機主翼の多目的最適化について、より効率の良い最適化手法を検証し、また大変形する主翼における幾何学的非線形解析の効果を確認することができた。特にベイズ最適化による計算コストの削減効果は大きく、各個体の計算モデルをより高度なものに変更する道筋を立てることができたと考えている。現状では基準となる複合材材料の T800S/3900-2B による最適化を主に進めてきたため、他材料種での解析を引き続き進めていき、項目 A を早期に終了させることを考えたい。

4. まとめと今後の課題

繊維と樹脂の物性を基に、空気力・構造変形の平衡状態で Boeing 777 クラスの CFRP 主翼構造サイジングを行う静空弾解析ツールを用いた多目的最適化を行なった。今年度は効率の良い最適化手法を検証し、当初予定していた NSGAI による最適化のみならず、ベイズ最適化と機械学習を用いた高効率手法を確立することができた。これを用いて、異なる材料種の多目的最適化や各個体の計算モデルの高度化を進める計画である。また、項目 B に関しては翼平面形だけでなく材料パラメータも含めた不確実性評価(図3に試行的な例を示す)という観点も含め、多目的最適化結果のデータ解析を進めていきたい。

PCE(多項式カオス展開)による実装を検討。まず、主翼上面の破壊形態(表面座屈・材料破壊)の変化を見るため、圧縮強度C11に対する挙動を確認中。

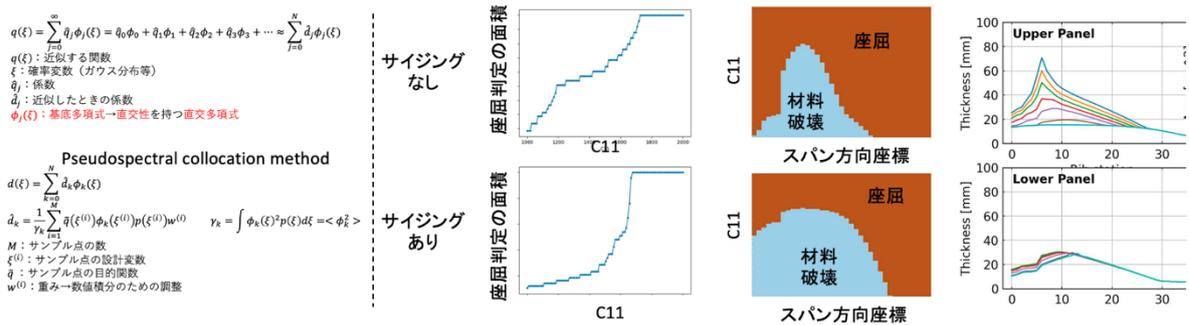


図 3 : 最適化結果に対する材料パラメータの不確実性評価

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)

(解説記事) 阿部 圭晃: 航空機の設計とながれ, 日本流体学会誌ながれ, 43 巻 (2024), pp. 9-14.

国際学会

Y. Liu, T. Yamazaki, S. Date, T. Nagashima, Y. Abe: Multi-objective design of CFRP composite aircraft wing with next generation fibers and resins, ECCOMAS 2024

国内学会・研究会等

西山 晶, 稲葉 裕太, 阿部 圭晃, Hariansyah Muhammad Alfiandy, 兼田 陽可, 大林 茂 :
ニューラルネットワークを援用した進化計算による複合材航空機の空力構造最適化, 日本航
空宇宙学会 北部支部講演会 (2024)

Yajun Liu, Tomoki Yamazaki, Shugo Date, Toshio Nagashima, Yoshiaki Abe: Effect of
geometrically nonlinearity on aerodynamic performance and structural sizing of CFRP
aircraft wings, 日本航空宇宙学会第 55 期年会講演会 (2024)

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	YG02APR23
研究種別	若手研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月23日提出

機能性流体による水圧破碎のメカニズム解明

椋平 祐輔, 和田 琉

東北大学流体科学研究所 助教, 修士1年

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

水圧破碎は、坑井内に流体を圧入し、坑井近傍の岩盤にき裂を造成する技術である。従来の水圧破碎法では、一般的に地殻応力状態に応じて、最大主応力方向にのみき裂が造成され、この方向の浸透性の改善が期待される。この水圧破碎の特徴に対し、せん断増粘流体（Shear Thickening Fluid: STF）を破碎流体として用いることが提案され、従来の水圧破碎とは異なるき裂造成が実現された（Mukuhira et al., ARMA, submitted）。この先行研究では、STFによる岩石破碎の室内実験で、複数回の流体圧の急降下と、顕著な AE 活動、多方向への破碎き裂造成を確認している。STF は非ニュートン流体の一種で、ずり速度に応じて粘度が非線形的に上昇する。この粘度の上昇によって、最初に生じたき裂が閉塞することで、破碎流体の流出が抑制され、再度坑井の流体圧が上昇し、別の方向にき裂が造成されたと考えられている。しかし、室内実験だけでは検証が十分ではないため、数値シミュレーションによって、STF を用いた際の多方向へのき裂造成メカニズムを解明する必要がある。

本研究では当研究室で所有している個別要素法（Discrete Element Method: DEM）プログラムを用いて数値シミュレーションを行うが、現時点では STF の粘度変化を取り扱う機能を有していないため、まずはこの実装から取り組む。粘度変化を取り扱えるよう改良した後、先行研究の実験結果をシミュレーション上で再現することを目指し、再現後に結果を解析してメカニズムを解明する。

1.2 研究期間内の最終目標

STF を取り扱えるように改良した DEM プログラムを用いて、先行研究の実験結果である複数回の流体圧降下と多方向への破碎き裂造成をシミュレーション上で再現し、その結果を解析して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）

2.1 新しいモデル化手法の開発

本研究では、水圧破碎のシミュレーションに実績のある DEM プログラムを基に、STF の流動を計算する機能を追加実装することで、複数回の流体圧の急降下と多方向へのき裂造成の再現を目指した。基となる DEM プログラムでは、モデル内でのニュートン流体の流動を計算することができるが、STF は非ニュートン流体であるため、その流動の計算方法を新たに考案する必要があった。本研究では、まずは可能な限り簡便に実装するために、ずり速度に応じた STF の粘度変化を計算し、他の流動計算はニュートン流体の場合から大きく変更せず実装を行った。その後、実際に STF を用いた岩石破碎のシミュレーションを行い、最初のき裂造成を確認してからもしばらく圧入を継続する計算を行った。計算中の破碎流体の粘度変化を出力し、考案した粘度変化の計算方法が想定通りに動作していることを確認できた。

2.2 実装内容の有効性の確認

実装した粘度変化の計算によって、造成されたき裂内での流体の流動が一部抑制されることが確認された。モデルに生じた破碎き裂の内部で、粘度計算によって粘度が高くなっている部分を境界として、破碎流体の流量が減少していることが確認された。したがって、実装した粘度計算によって、STF の高粘度化によるき裂閉塞という仮説を再現できる可能性があることが示された。

3. 研究目標の達成状況

本研究は STF の粘度計算の実装、先行研究の実験結果の再現、メカニズムの解明という 3 段階から成る。このうち、STF の粘度計算の実装を完了し、計算が発散せず、また本研究の目的に対して有効であることが確認できた。現時点で、DEM プログラム全体の処理の理解と、STF の最も重要な特性である粘度変化の実装について一定の成果を得られているため、以降は加速度的に研究が進行するものと考えている。

4. まとめと今後の課題

本研究は、STF を用いた水圧破碎によって多方向へのき裂造成が実現したという新しい現象について、数値シミュレーションによってそのメカニズムを解明することを目的としている。現時点では 3 段階ある目標のうちの 1 つ目である、STF の粘度変化を DEM プログラム内に実装することを完了し、その有効性も確認できた。今後の課題は、実験結果の再現に向けて、STF の粘度計算をより実際の挙動に近づけることである。例えば、粘度の緩和にかかる時間を実装することで、き裂を閉塞させる時間を調整するなどである。今後は様々な計算パラメータを調整することで実験結果をシミュレーション上で再現し、メカニズムを解明することを目指す。

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）

該当なし

著書

該当なし

国際学会

該当なし

国内学会・研究会等

該当なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

I. 研 究 成 果 概 要

連携研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	EF01JUL23
研究種別	連携研究
利用期間	2023.07～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月23日提出

数値シミュレーション手法を用いた燃料電池材料特性予測

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は温室効果ガスを排出しないクリーンなエネルギー源として燃料電池自動車の電源や家庭用燃料電池などの需要が見込まれている。この燃料電池の性能向上のためには燃料電池内部の反応物質の輸送メカニズムを把握する必要があるが、この輸送メカニズムはナノスケールの現象であり、通常の実験的な解析や連続体計算では情報を得ることが難しい。そこで本研究では、(株)デンソーとの共同研究により燃料電池内部の物質輸送特性の解析を行い、その知見を元に物質輸送特性に優れた新規材料の開発を行った。

1.2 研究期間内の最終目標

本課題では、燃料電池用電解質膜材料の高性能化に向けた材料特性の立案を最終目標とする。今年度は電解質アイオノマーと補強材の複合系でのプロトン特性を解析し、高性能を発現させる電解質膜の特性を立案する。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

ヒドロニウムイオンは、膜中を直接移動する **Vehicle** 機構と、プロトンが水素結合を介してホッピングを行うことにより移動する **Grotthuss** 機構が挙げられる。一般的な数値シミュレーション技術では、**Vehicle** 機構のみを考慮した解析となるが、高分子電解質膜のような分子が密に接している領域では **Grotthuss** 機構の寄与が支配的である。以前は研究室で自作のモデルを作成して **Grotthuss** 機構を考慮していたが、並列化が難しく、計算時間がかかっていた。本研究では、LAMMPS で取り扱える ReaxFF をベースとして、**Grotthuss** 機構を考慮できるモデルを構築し、計算時間の短縮を試みた。

2.2 新しい現象の解明

フッ素系の高分子電解質膜のプログラムを拡張して、補強材が混入しているフッ素系高分子膜の構造特性の解析を行った。補強材としてはフッ素系高分子の主鎖骨格(Teflon)を用いた。この中の水クラスターの構造を確認したところ、通常の補強材のないフッ素系高分子膜と比べて水クラスターの連結性が悪化していた。これは高分子の親水基であるスルホ基の割合が低くなったためと考えられ、補強材の導入により高分子膜のプロトン伝導性が悪くなることが示唆された。

高分子膜の内部に特異な水クラスター構造を有する高分子電解質膜の解析を行うための計算モデルを作成した。今年度はラメラ構造を有する膜の解析を検討し、分子の初期配置などを工夫することにより、安定にラメラ構造を有する計算モデルの構築に成功した。

3. 研究目標の達成状況

今年度は研究の初年度であったため、計算モデルの構築に時間がかかり、目標としている材料開発の課題までは到達できなかった。しかしながら、**ReaxFF MD**を用いたプロトン輸送特性の計算プログラムや、ラメラ構造を有する高分子膜モデル、補強材を導入した高分子膜モデルなど、いくつかの計算系の構築には成功したため、50%程度の達成度であると考えている。

4. まとめと今後の課題

今年度は計算プログラムや対象となる計算系の構築には成功したものの、それを用いた計算による解析や、その結果を踏まえた新規材料開発の課題までは達成できなかった。今後はまず分子動力学計算を行って対象となる系でのプロトン拡散メカニズム、酸素透過メカニズムを解析し、材料開発に繋げていきたいと考えている。

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）

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

特定研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01APR22
研究種別	特定研究
利用期間	2022.04~2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024年5月11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 (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. 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流れにおける乱流境界層現象に関しては, 実験による計測が困難だけでなく, 乱流のモデル化なしに高忠実な数値流体解析 (LES/DNS) を実施することは, 今後数十年のスパコンの発達を考えても困難となる. そのため高レイノルズ数の乱流境界層現象に関する物理現象の理解およびそこから導かれる物理モデリングは十分に進んでいない. したがって本課題では, 高レイノルズ数圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減するための数値計算手法の構築を以下の 2 つのサブ課題の観点から行う.

(1) 物理モデル: 教師なし機械学習における粗格子 LES における SGS モデリング

エネルギー保有渦を適切に解像しない粗格子 LES においては, 乱流の解像成分が非物理的な構造になってしまうため, 従来の SGS モデルでは適切な乱流物理を再現できないことが知られている. そこで本サブ課題では, 機械学習によって乱流のスケール間相関の本質的な性質を学習することで, 従来の手法では困難な粗格子に対しても, 適切な SGS スケールの乱流モデリングを行うことができる SGS モデルの構築を行う.

(2) 時間積分法: 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正

高レイノルズ数流れでは, 物体代表長スケールと最小渦の時間的および空間的スケールの差が非常に大きくなる. このとき, 小さい時間スケールの物理に合わせて数値計算の時間刻み幅を小さくすると, 大きな時間スケールの物理に対する解析を行うのに必要なデータを得るまでに膨大な計算時間を要する. 一方で, 時間刻み幅を大きくとることができる陰解法を用いた場合には, 過度に時間刻み幅を大きくすると, 乱流渦などの時間発展を正しく追うことができない. そこで本サブ課題では, 異なる時間刻み幅を用いて得られた流れ場の相関を

機械学習によって学習することで、粗い時間刻み幅であっても流れ場を正しく時間発展させることができるデータ駆動型の流れ場修正手法の構築を行う。

1.2 研究期間内の最終目標

本課題では、高レイノルズ数圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減するための数値計算手法の構築を行う。上記 2 つのサブ課題に対するそれぞれの最終目標は以下の通りである。

(1) 教師なし学習による粗格子 LES における SGS モデリング

粗格子を用いた場合でも流体物理を正しく再現することができる SGS モデルおよびそのモデリング手法を提案する。構築した SGS モデルのアプリオリ・アポステリオリテストを行い、粗格子 LES の SGS モデリングに関する知見を得ることを目指す。

(2) 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正

機械学習による時間刻み幅拡大に向けた流れ場修正法の構築を行う。具体的には、時間刻み幅の粗い陰解法で計算した流れ場と正しく時間発展させた流れ場を学習モデルに与えることで、時間積分エラーを修正できる機械学習モデルの構築を目指す。また本機械学習モデルを用いて、粗い時間刻み幅で計算されたエラーを含む流れ場の修正を行いながら数値計算を行い、流体計算の高速化を試みる。

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 教師なし学習による粗格子 LES における SGS モデリング

昨年度のアプリオリテストに続き、今年度は教師なし機械学習 SGS モデルのアポステリオリテストを実施した。対象とする流れ場は摩擦レイノルズ数 $Re_\tau = 1000$ のチャンネル乱流である。LES の格子解像度は $(\Delta x^+, \Delta z^+) \approx (72, 36)$ であり、一般的な LES よりも粗く設定している。

図 1 に、各 SGS モデルにより得られた主流方向平均速度プロファイルとせん断応力プロファイルを示す。一般的な SMS モデルや従来の教師あり学習手法では、主流方向速度を過大評価している一方、提案教師なし学習手法は参照解と良い一致を示している。主流方向速度と深い関係にあるせん断応力プロファイルでは、提案手法が壁面付近のバッファ層 ($5 \leq y^+ \leq 30$) でせん断応力の立ち上がりを参照解の良い一致を示す一方、従来手法ではせん断応力を過小評価している。この差が、平均速度分布の予測精度の成否に関わっていることが明らかになっている。

図 2 に、提案手法と SMS モデルそれぞれにおける乱流運動エネルギーバジェットを示す。シアンで示す SGS 散逸項に着目すると、 $y^+ \geq 20$ において一般的な SMS モデルは負の寄与を予測しているのに対し、提案手法は $5 \leq y^+ \leq 100$ の広い領域で正の寄与を示している。SGS 散逸項の正の寄与は、小スケールの渦から大スケールの渦にエネルギーが輸送される SGS 逆拡散現象を表しており、これは多くの SGS モデルでは正確に予測できない現象である。提案 SGS モデルでは、予測された SGS 逆拡散により壁面付近の乱流変動が増加し、解像レイノルズせん断応力が壁面付近で増加するという物理メカニズムを通して適切なせん断応力の予測を可能にしていると言える。ここには示さないが、実際壁面付近の瞬時速度分布に、SGS 逆拡散により

生成されたと考えられる細かな渦構造が確認されている。一方、従来の SGS モデルでは SGS 逆拡散が十分に予測されないため、壁面付近の乱流変動が非物理的に小さくなり、せん断応力の過小評価・主流方向速度の過大評価が起きていると考えられる。

また、学習時のレイノルズ数 $Re_\tau = 1000$ に加え、 $Re_\tau = 2000$ におけるアポステリオリテストも行った結果、同様の傾向を示す結果が得られた。以上の結果より、粗格子 LES の SGS モデルにおいては、本研究が提案する教師なし学習手法が有効であることがアポステリオリテストにより確認された。

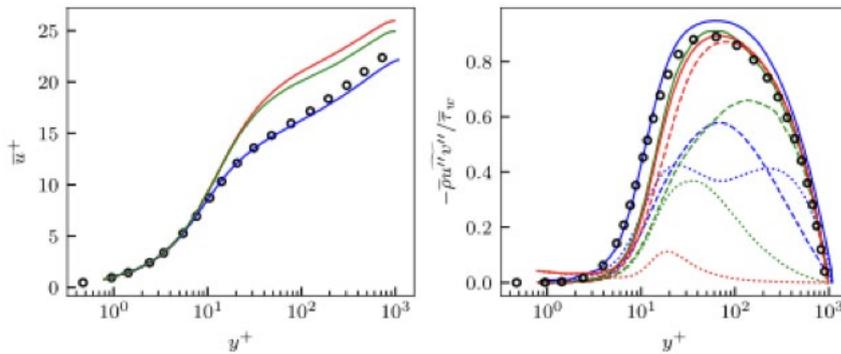


図 1: アポステリオリテストで得られた平均主流方向速度 (左) とレイノルズせん断応力 (右). (青, 提案教師なし学習手法; 緑, 従来教師あり学習手法; 赤, SMS モデル; 丸, 参照解. 右図: 鎖線, 解像レイノルズ数応力; 点線, SGS 応力; 実線, 合計せん断応力.)

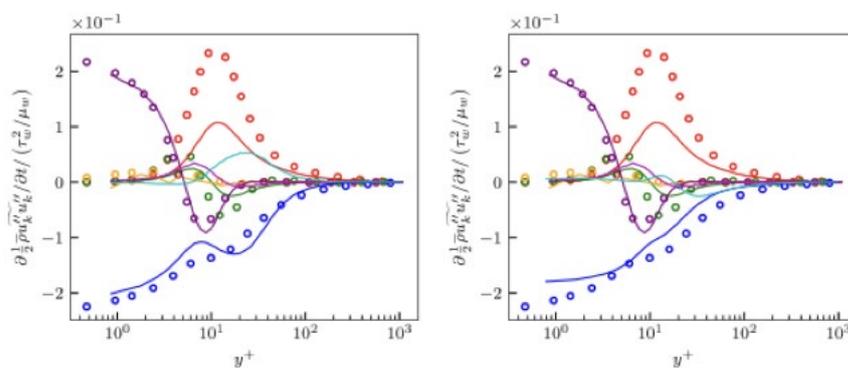


図 2: 提案教師なし学習手法 (左) と SMS モデル (右) の乱流運動エネルギーバジェット. (赤, 生成項; 青, 散逸項; 橙, 圧力輸送項; 紫, 粘性輸送項; 緑, 乱流輸送項; マゼンタ, SGS 輸送項; シアン, SGS 散逸項.)

2.2 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正

本サブ課題では、昨年度に実施した非常に粗い時間刻み幅を用いて得られた流れ場を正しく物理発展している流れ場へ修正する機械学習モデルの構築に続き、モデルを流体計算に組み込むアポステリオリテストを実施した。マッハ数 $M \approx 1.5$, 摩擦レイノルズ数 $Re_\tau \approx 205$ のチャンネル乱流を学習・修正対象とし、時間積分には陰解法である ADI-SGS を用いた。時間刻み幅を

$\Delta t^+ \approx 2.0$ とし、10ステップ進めた流れ場を修正対象とした。機械学習モデルは「粗い時間刻み幅を用いた陰解法で解かれた流れ場」から「同じ初期場から十分小さな時間刻み幅で進めた同時刻の参照解」への変換を学習する。予測時には粗い時間刻み幅を用いて計算された流れ場を入力とし、修正された流れ場を出力する。

図3は時間刻み幅を $\Delta t^+ \approx 2.0$ とした場合の、 $y/\delta = 1.0$ における修正前後と参照解の圧力分布である。陰解法で計算した流れ場では圧力振動が生じていたが、この振動が機械学習モデルを用いることにより参照解に近い流れ場へと修正されている。また、ここには示さないが、壁面平行断面の主流・スパン方向スペクトルなど、時間発展エラーを含んだ修正前の流れ場をより物理的に正しい流れ場へと修正できていることを定量的に確認している。

次に機械学習モデルで流れ場の修正を行いながら流体計算を行うアポステリオリテストでは、まずは時間刻み幅 $\Delta t^+ \approx 2.0$ で1ステップ進めた流れ場を修正するモデルを構築し、このモデルを用いて1ステップずつ修正をしながら流れ場を時間発展させることを試みた。修正間隔以外の計算条件はアプリオリテストと同じである。今回のアポステリオリテストでは6ステップ程度で流れ場が振動し計算が破綻したため、この振動原因について調査を実施した。図4に初期場から1ステップ進めた流れ場と計算破綻直前の修正前後の $y/\delta \approx 0.87$ 断面のスパン方向スペクトルを示す。1ステップ進めた流れ場の修正後のスペクトルでは、どの成分でも概ね参照解と一致しているが、高周波成分が参照解より大きくなっている。計算破綻直前の流れ場ではさらに高周波成分が増幅、すなわち流れ場が振動していることがわかる。これらの結果から、流れ場でエネルギーをあまり保持しない高周波成分であっても正確に修正し、時間発展させることが重要であることや、長時間計算可能なアポステリオリテストを行うにはモデルの高周波成分の修正精度をさらに向上させる必要があると言える。

このように、現在のモデルでは長期的に不安定な流体計算になることがわかったため、今後はモデル精度を向上させ、アポステリオリテストでの計算を安定して行える手法の構築を目指す予定である。

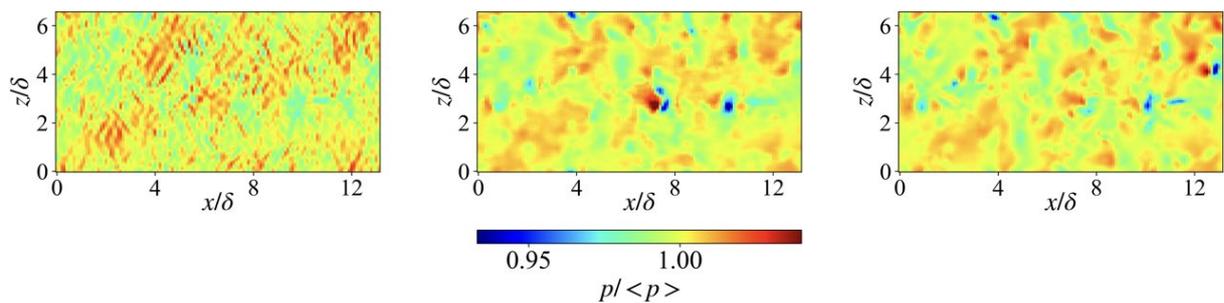


図3：機械学習モデルによる修正前後と参照解の圧力分布比較。圧力 p は各断面でのアンサンブル平均 $\langle p \rangle$ で規格化されている。(左、陰解法・修正前；中央、予測結果・修正後；右、参照解.)

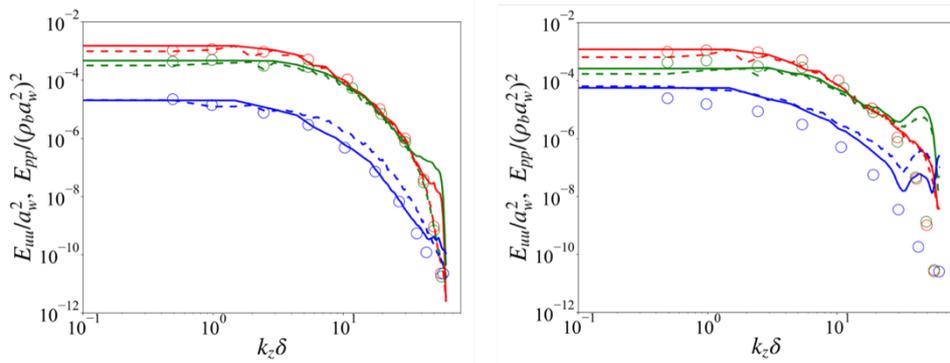


図 4：主流方向速度，壁面垂直方向速度，圧力のスパン方向スペクトル。（左，1 ステップ後；右，計算破綻直前。シンボル，参照解；破線，修正前；実線，予測結果・修正後。赤，圧力；青，主流方向速度；緑，壁面垂直方向速度。）

3. 研究目標の達成状況

本課題では高レイノルズ圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減することを目標に，機械学習モデルの構築を行ってきた。今後これまでに構築された機械学習モデルのさらなる改善や検証を行う必要はあるが，本年度の研究目標として掲げた機械学習モデルの構築やアポステリオリテストの実施など概ね達成できている。

4. まとめと今後の課題

本課題では，高レイノルズ数圧縮性流れに対する高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減するための機械学習を用いた数値計算手法の構築を以下の 2 つのサブ課題の観点から実施した。

(1) 教師なし学習による粗格子 LES における SGS モデリング

(2) 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正

1 つ目のサブ課題について，既存の機械学習手法では困難な粗格子 LES において SGS モデリングを可能とする新たな教師なし機械学習ベースの手法を提案した。昨年度のアプリオリテストに続き，今年度を実施したアポステリオリテストにおいても機械学習によって得られた SGS モデルが粗格子を用いた LES において有効であることが確認された。2 つ目のサブ課題では，粗い時間刻み幅による時間積分エラーを含んだ流れ場を正しい時間発展解に修正する学習モデルの構築を実施した。その結果，提案する学習モデルが時間積分エラーに起因する圧力振動などを含む流れ場を修正できることを確認した。一方で，本サブ課題のアポステリオリテストにおいては計算が長期的に不安定化することがわかったため，今後は安定に計算可能なモデルの構築を目指す予定である。

上記 2 つのサブ課題で構築された機械学習モデルは，高レイノルズ数圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減するのに有用な可能性があり，今後はそれぞれの手法の実用化に向けた検証，必要に応じての手法の改善を行う予定である。

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）

- Soju Maejima, Kazuki Tanino, and Soshi Kawai, “Unsupervised and supervised machine learning pipeline for sub-grid scale modeling in coarse-grid LES” (in preparation).
- 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*, 494 (2023), 112521.

著書

該当なし

国際学会

- Soju Maejima and Soshi Kawai: “Machine-Learned Sub-Grid Scale Backscatter in Coarse-Grid LES,” TSFP13 (2024).（採択済）
- Soju Maejima and Soshi Kawai: Coarse-Grid Large-Eddy Simulation by Unsupervised-Learning-Based Sub-Grid Scale Modeling, AIAA SciTech Forum 2024 (2024).
- Soju Maejima and Soshi Kawai: Machine-Learning-Based Sub-Grid Scale Modeling for Coarse-Grid Large-Eddy Simulation, ICFD2023 (2023).
- Soju Maejima and Soshi Kawai: Unsupervised machine-learning-based sub-grid scale modeling for coarse-grid LES, 75th Annual Meeting of the APS Division of Fluid (2022).

国内学会・研究会等

- 松本康平, 前島颯樹, 河合宗司: 大きな時間積分エラーを含む流れの機械学習再構成による高速乱流解析, 第 37 回数値流体力学シンポジウム, 2023 年 12 月.
- 前島颯樹, 河合宗司: 粗格子 LES の実現へ向けた機械学習による SGS モデリング, 日本流体力学会年会 2023, 2023 年 9 月.
- 松本康平, 前島颯樹, 河合宗司: 粗い時間刻みを用いた非定常乱流解析に向けた機械学習モデルの構築, 第 55 回流体力学講演会/第 41 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2023 年 7 月.
- 前島颯樹, 河合宗司: 教師なし学習 CycleGAN による粗格子 LES の SGS モデリング, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, 2022 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	FS02APR22
研究種別	特定研究
利用期間	2022.4~2024.3
報告回数	第 2 回報告

2024 年 9 月 13 日提出

複合材料の破壊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
東北大学大学院工学研究科 教授, 准教授, 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

航空機用構造材料である炭素繊維強化複合材料 (CFRP) は炭素繊維と熱硬化性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. 一方で, 材料選択から部材スケールの変形・破壊メカニズムまでの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, CFRP が分子から部材スケールまでの幅広い時空間スケールにおいてそれぞれに固有な現象を有しており, それらを正確に捉える必要があるためである. そこで, 本研究では量子化学計算 (QM), 分子動力学法 (MD), 有限要素法 (FEM) を接続することにより, 熱硬化性樹脂を構成するモノマー同士の化学反応から, 複合材料の熱機械特性および変形・破壊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破壊解析手法の開発を行う. 化学反応スケールからマクロな変形・破壊までを統一的に扱った研究は, 世界的に見ても成功といえる例は見当たらない. さらに本研究では各スケールでの計算手法を成熟させ, 精緻かつ大規模に行うことで, 従来手法では再現できていなかった高分子材料のメゾ構造や CFRP・炭素材料系の材料特性同定, マルチスケール性を考慮した変形・破壊特性の解明などの成果が期待される.

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によって, CFRP の破壊挙動を原子・分子スケールからマクロな積層板スケールまでを一貫して捉えることが可能になり, 複雑かつマルチスケール性を有する CFRP の破壊メカニズムの解明に大きく寄与することが期待される. 本手法で得られた樹脂および CFRP の破壊特性は実験的に検証され, 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 CFRP マルチスケール破壊解析手法の構築

複合材料の非繊維方向の破壊は樹脂物性によって決定される．そこで QM, MD, 2 スケール FEM の 4 スケールの解析を連携することで、マルチスケール破壊解析手法を構築した．まず、QM で反応特性を取得し、反応 MD によって硬化樹脂モデルを作成する．次に、MD によって力学特性を取得するが、一般に MD では計算時間の制限から、変形に対する樹脂応答を取得する際に実験に比べてはるかに大きなひずみ速度が加わっている．多くの樹脂は粘弾性的な特性を持つため、ひずみ速度依存性を有しており、MD における高速変形は特に強度の過大評価を引き起こす．本研究では 1 軸圧縮シミュレーション、3 軸引張シミュレーション、準静的 1 軸引張シミュレーションと Argon の理論式、Christensen の破壊則を連携することで、ひずみ速度依存性を除いた樹脂強度推定手法を構築した．得られた樹脂強度を FEM に接続し、複合材料の off-axis 強度を推定した．具体的には、積層板スケールのマクロスケール FEM をあらかじめ実施し、破壊点のひずみ履歴を取得する．このひずみ履歴を繊維/樹脂不均一構造を模したユニットセルを用いたミクロスケール FEM に負荷し、樹脂部に等方材 Christensen 破壊則による破壊判定を導入した．ここで、破壊則の、パラメータは MD から取得可能な 1 軸引張/圧縮強度である．本解析では off-axis 角度に応じた強度傾向が実験とよく一致し、樹脂種違いによる破壊モードの変化が詳細に解析可能となった．

さらに本手法を拡張し、横等方性材料である CFRP 積層板の強度解析に必要な 5 つの強度（繊維方向引張/圧縮強度、直交方向引張/圧縮強度、繊維方向せん断強度）を推定する手法を構築した．これにより計算空間上での分子設計から積層板の破壊までを一貫してモデリング可能となった

2.2 大規模反応誘起相分離シミュレーションの構築

CFRP では破壊靱性を向上させるために、母材となる熱硬化性樹脂に少量の熱可塑性樹脂を添加する．熱可塑性樹脂/熱硬化性樹脂混合系では硬化反応に伴う反応誘起相分離が起こる．本研究では粗視化手法である反応硬化散逸粒子動力学法（DPD）を用いて、反応誘起相分離を再現できる大規模シミュレーションを構築した．熱可塑分子量や添加量、昇温速度が相分離構造形成に及ぼす影響を評価し、実験観察との一致を示した．さらに、得られた相分離モルフォロジーを FEM メッシュにマッピングし、連続体ベースの解析へ接続可能とした．本成果は 2.1 と連携し、相分離樹脂を母材とする CFRP の強度解析へと展開が期待される．

2.3 Corrected SPH 法と MD を連携した局所構成関係の推定

MD では計算セルに変形を加えることで、力学応答を取得できるが、系全体の平均値のみが得られる．固体/樹脂系のような複合系の場合、特に樹脂は固体壁の影響を受けて不均一な構造を形成し、その局所的な力学応答は変化することが予想される．本研究では連続体力学的手法である Corrected SPH 法を MD のトラジェクトリーに適用し、分子の運動から連続体幾何量（ひずみや伸長比）を推定した．得られたひずみ場と局所応力の関係から、局所的な構成関係を取得し、壁面近傍に高剛性な樹脂層が存在することを定量的に明らかにした．

3. 研究目標の達成状況

当初の計画通りに達成できた。

4. まとめと今後の課題

本プロジェクトにおいて基本的な樹脂を母材とした CFRP のマルチスケール破壊解析手法 (QM から FEM まで) の構築は完了した。本手法を相分離樹脂系やフィラー添加系などに拡張し、高機能性樹脂複合材料開発の指針となる提案を行なっていきたい。

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)

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

Go Yamamoto, Kazuma Matsui, Shuma Yuki, Ji Won Suk, "Determination of transverse isotropic elastic constants of nacre and constituent tablets based on genetic-algorithm-assisted resonant ultrasound spectroscopy", *Results in Materials*, **15** (2022), 100312

Tadashi Watanabe, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, Tomonaga Okabe, "Multiscale model for failure prediction of carbon-fiber-reinforced composites under off-axis load", *International Journal of Solids and Structures*, **283** (2023) 112489

Yoshiaki Kawagoe, Gota Kikugawa, Keiichi Shirasu, Yuuki Kinugawa, Tomonaga Okabe, "Dissipative Particle Dynamics Simulation for Reaction-Induced Phase Separation of Thermoset/Thermoplastic Blends", *The Journal of Physical Chemistry B*, **128** (2024) 2018-2027

Yuuki Kinugawa, Yoshiaki Kawagoe, Kota Oine, Kazuki Ryuzono, Yamato Hoshikawa, Tomonaga Okabe, "Experiment-free multiscale simulation of residual deformation in non-crimp fabric composites", *Advanced Composite Materials*, (2024) in press

Redha A. Ramadhan, Chen Yu, Akira Kunitomo, Nozomu Shigemitsu, Tatsunori Shindo, Go Yamamoto, "Structure-Mechanical Property Relationships in Carbon Nanotube Yarns", *Materials Science Forum* (in press)

著書

該当なし

国際学会

Yoshiaki Kawagoe, Kenji Kawai, Yuta Kumagai, Keiichi Shirasu, Gota Kikugawa, Tomonaga Okabe, “Multiscale analysis for prediction of process-induced warpage on asymmetric CFRP laminate”, 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics, (2022), 7/31–8/5

Shuma Yuki, Yuto Sakuda, Masayoshi Mizutani, Go Yamamoto, “Determination of anisotropic elastic constants of additively manufactured Ti-6Al-4V alloys based on genetic-algorithm-assisted resonant ultrasound spectroscopy”, International Conference on Materials & Processing 2022, (2022), 11/6–10

Yoshiaki Kawagoe, Gota Kikugawa, Tomonaga Okabe, "Mesoscopic modeling of crosslinked thermoset resin using dissipative particle dynamics", Twenty-Third International Conference on Composite Materials (ICCM23), (2023), 7/20–8/4

Go Yamamoto, Yi Xiang, Koji Shimoyama, Keiichi Shirasu, “Design of high mechanical performance carbon nanotube structure: machine-learning assisted high-throughput molecular dynamics simulation approach”, International conference on composite materials (ICCM23), (2023), 7/20–8/4

Redha A. Ramadhan, Chen Yu, Akira Kunitomo, Nozomu Shigemitsu, Tatsunori Shindo, Go Yamamoto, “Structure-mechanical property relationships in carbon nanotube yarns”, 8th International Conference on Materials Engineering and Nano Sciences (ICMENS 2024), (2024), 3/22–25

国内学会・研究会等

結城秀麻, 作田祐人, 高野直輝, 水谷正義, 山本剛, 「共振超音波スペクトロスコピー法を用いた金属 3D 積層造形製チタン合金の弾性定数評価」, 日本機械学会 M&M2022 材料力学カンファレンス, 2022 年 9 月 26 日~28 日

Chen Yu, 國友晃, 山本剛, 「空孔欠陥を有するカーボンナノチューブの機械的特性に及ぼす層間架橋結合の影響評価」, 日本機械学会 M&M2022 材料力学カンファレンス, 2022 年 9 月 26 日~28 日

川越吉晃, 岡部朋永, 「分子動力学法と Corrected SPH 法を用いたエポキシ/固体系の局所変形場評価」, 第 48 回複合材料シンポジウム, 2023 年 9 月 12 日~13 日

衣川裕貴, 白須圭一, 川越吉晃, 岡部朋永, 「硬化条件を変化させた熱硬化性/熱可塑性ブレンド樹脂の反応誘起相分離構造形成および機械的特性評価」, 第 15 回日本複合材料会議, 2024

年 3 月 13 日～15 日

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	FS03APR22
研究種別	特定研究
利用期間	2022.04～2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024 年 08 月 22 日提出

高強度レーザー照射グラフェンにおける異常イオン加速機構の解明

ハリハラ スダン クマール, 大西 直文
東北大学大学院工学研究科 博士研究員, 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

超薄膜グラフェンターゲットからの炭素イオンが, 超高強度レーザーとの相互作用により極めて高いエネルギー (750 MeV 以上) まで加速されることが実験で確認されている。しかし, 従来の particle-in-cell (PIC) シミュレーションでは, この異常加速のメカニズムを説明することができていない。そこで本研究では, 分子動力学 (MD) と PIC シミュレーションを組み合わせたハイブリッド手法で異常加速のメカニズムを解明することを主目的とする。レーザープリパルスのシミュレーションは MD で行い, プリパルスで変化したターゲットを初期条件としてメインパルス照射下の PIC シミュレーションを行う。このハイブリッド手法の妥当性を検証しながら, いくつかの実験条件に適用し異常加速の様子について調査する。

1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内に, MD-PIC ハイブリッド手法を開発し, その検証を行い, 超薄膜グラフェンターゲットからの炭素イオンの異常加速のメカニズム解明に応用することが最終目標となる。

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）

本研究は, 共同研究の一環として行われている。実験はフランスのレーザー施設 VULCAN や量子科学技術研究開発機構のレーザー施設 JKAREN などで行われ, 報告者らが実験をサポートするシミュレーションを行っている。陽子線治療, 粒子加速器, 重イオン核融合などの応用には, 安定した単色の高エネルギーイオンビームの発生が不可欠である。これは世界中で活発に研究されている分野であり, 高エネルギー密度物理学のコミュニティで解決すべき重要な課題である。

2.1 新しい解析手法の開発

前年度に開発した MD-PIC ハイブリッドシミュレーション手法をもとに, いくつかの計算条件において検証を行い, その妥当性を確認した。またそれらの結果から, イオンが加速される機構が輻射圧加速 (Radiation Pressure Acceleration: RPA) とターゲット垂直シース加速

(Target Normal Sheath Acceleration: TNSA) のハイブリッド加速であることが示唆されたため、それを記述する理論モデルを構築した。

2.2 新しい現象の解明

当初、グラフェンターゲットで効率的にイオン加速が達成できる理由は、比較的強度の高いプリパルス照射したとしても、透過性が高く、かつグラフェンの構造を維持できていることにあると考えていたが、実際に MD-PIC ハイブリッドシミュレーションを実施したところ、プリパルスによるターゲットの変形は小さく、初期に光圧によって複数層のグラフェンが圧縮され、ある程度密度を保ったままメインパルスを迎えることが高エネルギーイオン生成に寄与していることがわかった。また、実験的には不純物がターゲットに混入しており、特に水素原子が表面を覆っていると考えられているが、このようなサンドイッチターゲットを仮定することで、より実験で得られる結果に近づけることができた。これらの結果から新しい RPA-TNSA ハイブリッド加速理論を提案し、これまでの様々な実験に矛盾しないハイブリッド加速の分類を行うことができた。それによると、従来提案されていた理論に比べて、より高いエネルギーのイオン生成が期待できる RPA が支配的な領域が狭いことが結論づけられ、ターゲットおよびレーザー照射条件に対する重要な指針を得ることができた。

3. 研究目標の達成状況

高強度レーザー照射によるグラフェンターゲットからの高エネルギーイオン生成の再現に適した MD-PIC ハイブリッドシミュレーション手法を提案し、その妥当性を検証した。またそれを用いて、高エネルギーイオン加速のメカニズムを明らかにし、新しい理論モデルを構築することで、今後の実験の指針を得ることができた。これら一連の成果は、概ね当初の研究目標通りである。

4. まとめと今後の課題

MD-PIC ハイブリッドシミュレーションによりグラフェンから生成される高エネルギーイオンをある程度予測することが可能になった。しかし、MD と PIC においてその時間・空間スケールにはまだオーダーの隔りがあり、直接的に MD-PIC が連携できているわけではないため、今後も検証を続ける必要があるだけでなく、より定量的な評価のためには同じ時間・空間スケールで繋げるための手法が必要になると考えられる。

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)

Y. Kuramitsu, T. Minami, T. Hihara, K. Sakai, T. Nishimoto, S. Isayama, Y. T. Liao, K. T. Wu, W. Y. Woon, S. H. Chen, Y. L. Liu, S. M. He, C. Y. Su, M. Ota, S. Egashira, A. Morace, Y. Sakawa, Y. Abe, H. Habara, R. Kodama, L. N. K. Dohl, N. Woolsey, M. Koenig, H. S. Kumar, N. Ohnishi, M. Kanasaki, T. Asai, T. Yamauchi, K. Oda, Ko. Kondo, H. Kiriya, and Y. Fukuda, Robustness of Large-Area Suspended Graphene Under Interaction with Intense Laser, *Sci. Rep.*, 12, 2346 (2022).

H. S. Kumar, M. Takahashi, Y. Kuramitsu, T. Minami, H. Kiriyaama, Y. Fukuda, and N. Ohnishi, A Hybrid Simulation Integrating Molecular Dynamics and Particle-in-Cell Methods for Improved Laser-Target Interaction, High Energy Density Physics (under review).

H. S. Kumar, M. Takahashi, Y. Kuramitsu, and N. Ohnishi, Integrating sheath and radiation-based acceleration using scaling coefficients for tailoring radiation dominant hybrid acceleration, Sci. Rep. (under review).

著書

なし

国際学会

Harihara Sudhan Kumar, Masayuki Takahashi, Yasuhiro Kuramitsu, Takumi Minami, and Naofumi Ohnishi: A Coupling Simulation Integrating Molecular Dynamics and Particle-in-Cell Methods for Accurate Intense Laser-Target Simulations, 13th International Conference on High Energy Density Laboratory Astrophysics, Lisbon Portugal, May 2022.

Harihara Sudhan Kumar, Yasuhiro Kuramitsu, Takumi Minami, Hiromitsu Kiriyaama, Yuji Fukuda, Masayuki Takahashi, and Naofumi Ohnishi: Energetic Ion Generation through Hybrid Acceleration from Ultra-Thin Graphene Targets for Good Contrast Linearly Polarized Laser Pulses, International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications 2023, Denver, CO, USA, September 2023.

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	FS04APR22
研究種別	特定研究
利用期間	2022.04～2024.03
報告回数	第 2 回報告

2024 年 7 月 23 日提出

多様体論的アプローチによる能動的流体制御手法に関する

大規模数値解析

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

乱流を伴う流れ場に対するリアルタイムフィードバック制御手法を確立することは、流体機器の性能を飛躍的に向上させるだけでなく、流体力学の進歩という学術的な観点から見ても意義深いものである。ところが、理論的・演繹的手法のみでは乱流を伴う流体機器周りの流れ場を正確に推定することは現代においても難しい。従って、実験・数値流体力学を利用することが必要不可欠である。特に、近年の数値流体力学の発展により乱流構造を伴う流れを精緻に再現できるようになってきた。しかし、計算コストが膨大になるため、これらの知見をリアルタイムフィードバック制御に活かすことは世界的に見ても未だに挑戦的な課題である。この課題に対して、本研究ではモード分解を利用した流れ場の低次元モデリングを用いた革新的な流体制御手法の確立を目指す。これまでの研究は、特定の1つ数値計算結果に対して得られる構造の議論に特化していたことに対し、本研究では多様体論的な観点を導入することで、大域的な特徴抽出を可能にすることを目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

これまでの、特定の1つの条件における数値計算結果もしくは実験結果に対してモード解析を行い、低次元モデルを構築するのが一般的であったが、このように構築した低次元モデルでは条件の変化に対するロバスト性に乏しいことが大きな欠点であった。そこで、本研究では、複数の条件に対しても適切な解を与える低次元モデルを提案することでこの課題を解決する。そして、その構築した低次元空間上での流体制御則を構築し、リアルタイムフィードバック制御を可能にする流れ場の高速推定技術の確立およびそれに基づく制御則の提案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 Grassmann 多様体に基づく部分空間の推定

本年度は、円柱周りの流れ場を対象として、流れのパラメータが変化した場合でも適切に流れ場の時間発展を記述できる parametrized reduced-order-model の構築に取り組んだ。低次元モデルとしてよく用いられる手法の一つに、POD (proper orthogonal decomposition) モードを用いた Galerkin projection 法が挙げられる。しかし、POD モードは一般に流れのパラメータに依存し、POD モードを抽出した流れ場のパラメータから外れたパラメータに対する流れ場に対して低次元モデルを用いると、非物理的な解が得られることが良く知られている。

そこで、本研究では流れのパラメータに応じて適切な POD モードが張る部分空間を推定する手法を確立し、推定された部分空間に Galerkin projection 法を適用する手法を確立した。ある定められた次元の部分空間の集合は Grassmann 多様体として表現することができ、部分空間の推定はこの Grassmann 多様体上での補間もしくは回帰の問題として定式化することができる。さらに、Grassmann 多様体上の接空間を考えることで、Euclid 空間で用いられてきた補間・回帰の手法を適用することが可能である。

本研究では、考案した手法を用いることで幅広いレイノルズ数の範囲において適切に流れ場を表現できることを実証した。加えて、データセットに含まれていないレイノルズ数の流れ場も適切に表現することができることの実証にも成功している。

2.2 Spectral POD 法を用いた乱流場の特徴構造の抽出

また、提案手法の適用範囲を高レイノルズ数に拡張することを目指し、円柱周りの流れ場を対象として、 $Re = 3900$ までの範囲における Large Eddy Simulation 解析を実施し、得られた流れ場データに対して、spectral POD 解析を実施した。従来の POD 解析では、乱流等の複雑な流れ場のデータに対して特徴的な構造を抽出することは困難であったことに対し、spectral POD 法を適用することで、流れ場が複雑になる $Re > 1000$ の領域においても、秩序的な流れ場の特徴構造を抽出できることがわかった。また、層流場と同様にレイノルズ数の変化に対して spectral POD モードは滑らかに変化する様子が確認できた。このことから、乱流構造を伴う複雑な流れ場であっても、比較的大きな時空間スケールのみに着目すれば、本研究の手法を適用し、低次元モデルを構築できる可能性があることが分かった。

3. 研究目標の達成状況

円柱周り流れを対象として、本研究の目標であったロバスト性に優れた低次元モデルの構築を達成することができた。提案手法はデータセットに含まれていないパラメータの流れ場の推定だけでなく、流れ場の制御にも適用することが可能である。例えば、目標とする流れ場を特徴づける部分空間と現在の流れ場を特徴づける部分空間の間の距離を指標とした新しい流体制御技術の確立が大いに期待される。

4. まとめと今後の課題

円柱周り流れを対象として、幅広い条件下でも適切に流れ場を推定できる低次元モデルを構築するために、Grassmann 多様体の構造に着目した部分空間の推定手法に関する研究を実

施した。これまでの研究は特定の1つ数値計算結果に対して得られる構造の議論に特化していたことに対し、本研究では多様な観点を導入することで、複数の数値計算結果を反映させた、大域的な流れ場の特徴構造に関する議論が可能となった。本研究の遂行によって、幅広いパラメータ範囲に渡って実行された流れ場の大規模数値計算のデータベースを構築することで、これまで困難とされてきた乱流場を含む複雑流れに対する **parametrized ROM** の実現が多いに期待される。本研究課題では特に円柱周りの流れ場に注目したため、今後は翼周りの流れ場なども対象とした研究にも取り組み、本手法の適用範囲を明らかにしていく必要がある。

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）

著書

国際学会

国内学会・研究会等

佐藤慎太郎, “流れ場のパラメータ依存性を考慮した低次元モデリングの検討,” 日本流体力学会 年会 2023.

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	FS01OCT22
研究種別	特定研究
利用期間	2022.10～2023.10
報告回数	第2回報告

2024年7月23日提出

気象制御に向けた大規模自由度場の再現とアクチュエータ位置の最適化

アルゴリズムの研究

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

野々村 拓

東北大学大学院工学研究科 准教授

(現 名古屋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

本研究は近年の激甚災害のリスク低減に向けて, 気象制御のための大規模自由度場に対するアクチュエータ位置の最適化アルゴリズムの構築に取り組む。

1.2 研究期間内の最終目標

これまでに開発された領域気象モデル (Weather Research and Forecasting (WRF), Scalable Computing for Advanced Library and Environment (SCALE)など) を用いた大規模自由度場の再現に取り組み, 解法による差異やその特徴について検討する。その後, 得られた場に対して効果的な制御を実現するためのアクチュエータ位置の最適化アルゴリズムについて検討する。

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 気象モデルの選定

気象モデルの候補として WRF と SCALE を検討したが, アクチュエータ位置最適化において入力に対する感度を計算するために随伴モデルを利用する方法を主に検討することとなったため, 接線形モデルと随伴モデルを備えた WRF モデルの採用に至った。介入対象として検討した 2018年7月5日から7日に発生した西日本豪雨の事例に対し, WRF モデルによるデータ同化を行い, 対象事例が WRF モデルにより 10 km メッシュでも一定程度再現できることを確認した。大林教授のグループはデータ同化に対する造詣が深く, WRF による気象

計算も同一の計算機システムで実施していたため、共同研究として実施することで研究がよりスムーズに進行したと考えている。

2.2 アクチュエータ位置最適化アルゴリズムの検討

アクチュエータの位置を最適化するためには、入力に対する感度を計算する必要がある。一般に利用される特異ベクトル法は Lanczos による繰り返し計算が必要なため、気象場の計算など計算コストが大きい問題では反復計算に時間を要する。そこで、乱択特異ベクトル法を提案し、大規模自由度場での効率的な感度解析を実現した。この手法は、通常の Lanczos 法と同様に接線形モデルと随伴モデルの時間積分を必要とするが、従来手法が接線形モデルと随伴モデルを交互に繰り返して時間積分をする代わりに、提案手法は多数の独立した計算を行いその結果を用いて上位の特異ベクトルを近似するため並列化効率が非常に高く、実実行時間で大幅に計算時間を短縮できる。WRFPLUS を組み合わせることで、対象事例における積算降雨量に対する地表水蒸気量の感度モードおよび積算降雨量の応答モードを算出した。すなわち、検討対象の時間区間の初期状態に入力を行い、それによる終端状態の変動を調べる。

アクチュエータ位置の最適化においては、乱択特異ベクトル法で算出した感度モードを用いて終端状態の出力を最大化する初期場に対する入力位置を求める線形逆問題のフィッシャー情報行列の行列式最大化を目的関数とした。この目的関数を用いて貪欲法でアクチュエータ位置を選択する方法を研究グループでこれまでに開発してきたセンサ位置最適化アルゴリズムを応用して構築した。

3. 研究目標の達成状況

WRFPLUS により対象事例に対して感度解析を実行できるツールを構築し、当研究グループで開発した乱択特異ベクトル法により降水量に対する地表水蒸気量変動の感度のモードを算出が可能となった。実際の豪雨事例に対してこれを適用し、得られた感度モードに対して研究グループで提案した行列式ベースのアクチュエータ最適化手法を適用することで対象事例においてアクチュエータ位置の選択まで実施しており、気象制御のための大規模自由度場に対するアクチュエータ位置の最適化アルゴリズムの構築が概ね達成できたと考えている。

4. まとめと今後の課題

現在までに、乱択特異ベクトル法と WRFPLUS により集中豪雨の積算降雨量に対する地表水蒸気量の感度解析を行い、効率的な介入が実施できると期待されるアクチュエータ位置の最適化が行えた。今後は、得られたアクチュエータ位置で水蒸気量に対して介入を行い、アクチュエータ位置をランダムに選択した場合や気象学的知見に基づいて選択した場合と比較してより効率的に介入できることを示す。また、他の事例に対しても同様の実験を行い、提案手法が様々なケースに対して有効であることを確認する。さらに、介入する状態量や介入における制約条件を変えた実験により、より効率的な介入方法の探索および介入による気象場への影響の物理的洞察を得ることもできると考えている。

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

Watanabe, M., Sasaki, Y., Yamada, K., Nagata, T., and Nonomura, T.: Actuator selection based on singular vector method in linearized Ginzburg-Landau model, 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, G31.00003, Washington, DC, USA, November 2023.

国内学会・研究会等

渡辺昌仁，佐々木康雄，山田圭吾，永田貴之，野々村拓：線形化 Ginzburg-Landau 方程式における特異ベクトル法に基づくアクチュエータ選択，流体力学会年会，C6-05，東京，2023年9月。

永田貴之，山田圭吾，佐々木康雄，渡辺昌仁，野々村拓：大規模自由度場の効率的な制御に向けた乱択特異ベクトル法に基づくアクチュエータ位置最適化，日本流体力学会年会 2023，E7-5，東京，2023年9月。

佐々木康雄，山田圭吾，永田貴之，渡辺昌仁，野々村拓，伊藤純至，椿野大輔：大規模な線形時変システムに対する特異値分解を利用した最適アクチュエータ選択—Lorenz 96 モデルへの適用—，第66回自動制御連合講演会，2H2-2，宮城，2023年10月。

佐々木康雄，永田貴之，渡辺昌仁，野々村拓，伊藤純至，椿野大輔：大規模な線形時変システムの可到達集合最大化のためのアクチュエータ選択—Lorenz 96 モデルへの適用—，広島，2024年3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	FS01APR23
研究種別	特定研究
利用期間	2023.4~2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024 年 7 月 1 日提出

複雑環境下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

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、複雑環境下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

研究期間内においては、主に複雑環境下の大腸菌の挙動を解析する。高せん断中の大腸菌の鞭毛には強い流体力が作用するため、複数の鞭毛が束化できず、一方向への遊泳運動を行えないことが予想される。我々が行った予備実験においては、この現象を示唆する結果が得られている。本研究では、高せん断中の大腸菌の挙動を数値シミュレーションで調べることで、我々の仮説を検証し、大腸菌が遊泳できる限界のずり速度を定量的に解明することを目的とする。

2. 研究成果の内容

2.1 実験結果

バクテリアが走化性を示す際には、大腸菌が鞭毛を束ねたり解いたりすることで **run and tumble** 運動を行い、濃度勾配をさかのぼって推進する。しかし、高せん断流環境におけるバクテリアの挙動は、まだ十分に理解されていない。本研究では、図 1a に示す実験装置を用い、マイクロ流路内を遊泳する大腸菌の挙動を観察した。ずり速度が弱い場合には、大腸菌は渦度方向にも遊泳する様子が見られたが (図 1b)、ずり速度が高くなるとほとんど流線と

同じ方向に流された (図 1 c)。渦度方向に遊泳するドリフト速度に着目して結果を整理したところ、図 1 d に示すように、大腸菌の渦度方向遊泳が高せん速度下で著しく阻害されることが明らかとなった。

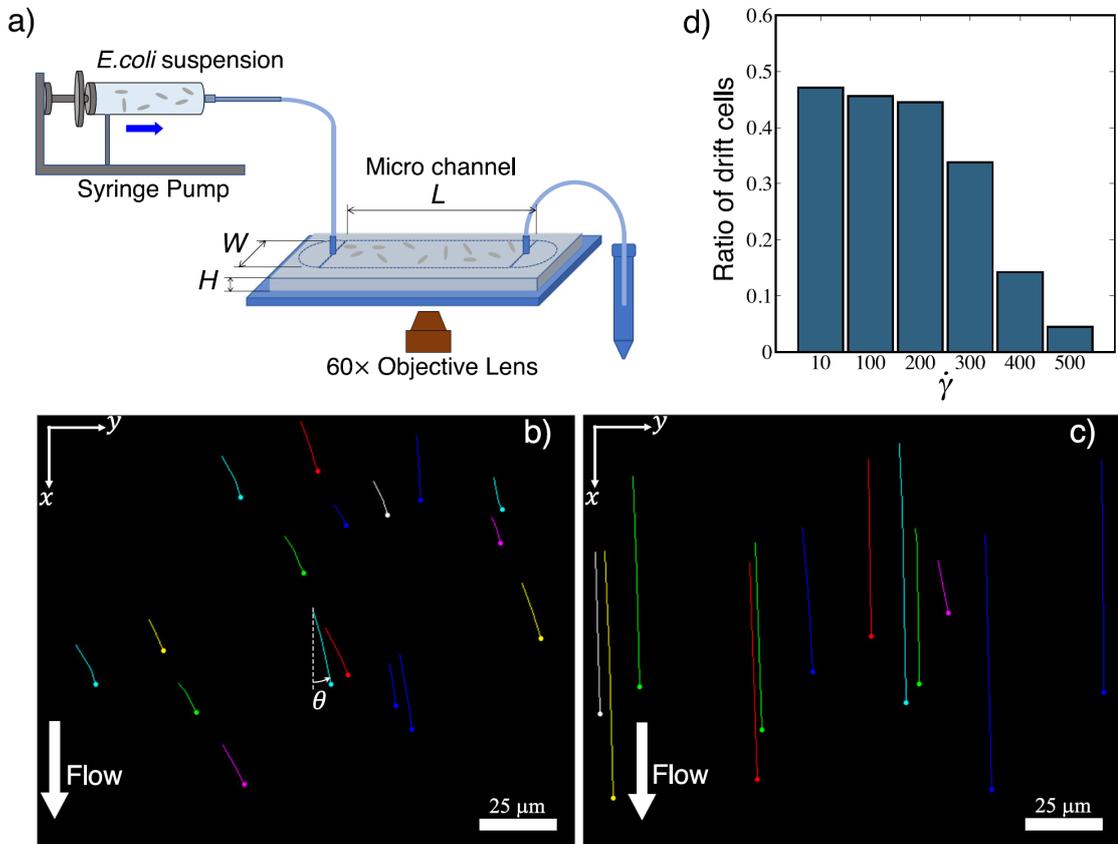


図 1 実験結果 a) 実験装置の概要, b) 低せん断流れ中の大腸菌の遊泳軌跡, c) 高せん断流れ中の大腸菌の遊泳軌跡, d) 渦度方向遊泳速度に及ぼすせん断強さの影響

2.2 シミュレーション結果

実験で得られた高せん断中の大腸菌の遊泳阻害メカニズムを解明するため、境界要素法を用いた数値シミュレーションを行った。図 2a に示すように、大腸菌の菌体を楕円体でモデル化し、3本のらせん鞭毛を持つ形状とした。鞭毛は剛体で変形しないとし、根元に分子モーターによる一定のトルクを作用させた。このトルクにより、鞭毛は反時計回りに回転し、お互いが作り出す水流によって束化する。束化した繊毛はワインのコルク抜きのように波を伝播させ、菌体は粘性流体中を推進する。

壁面近傍における大腸菌モデルの遊泳を調べたところ、低いせん断流れ中では鞭毛が束化し、下流に流されながらも渦度方向に一定速度でドリフトする様子が観察された (図 2b)。このとき、大腸菌の方向ベクトルは渦度方向に向いて定常となる (図 2c)。一方、高いせん断流れ中では鞭毛が束化できず、遊泳ができないため、下流に流されるだけの運動軌跡となった (図 2b)。このとき、大腸菌の方向ベクトルはせん断面内で大きく回転してしまう (図 2c)。こうした遊泳軌跡は、実験結果と定性的な一致をみている。

高いせん断流れにおいて鞭毛が束化できなくなるメカニズムを詳細に調べたところ、鞭毛

が引き寄せあうように作り出す水流に対して、背景のせん断流れが大きくなることが原因であることが明らかとなった。シミュレーションにより、鞭毛が束化できなくなるすり速度は数百[1/s]と見積もられ、これは実験で得られた閾値のすり速度 300-400[1/s]と定量的な一致を見た。さらに、強いせん断を受けた大腸菌は、やわらかく変形可能な物体のように振る舞い、壁から離れる方向へとドリフトすることも明らかとなった。これらの結果は、壁際の強いせん断により鞭毛を束ねることができないバクテリアは、壁から受動的に逃れるために運動戦略を変えることを示唆している。

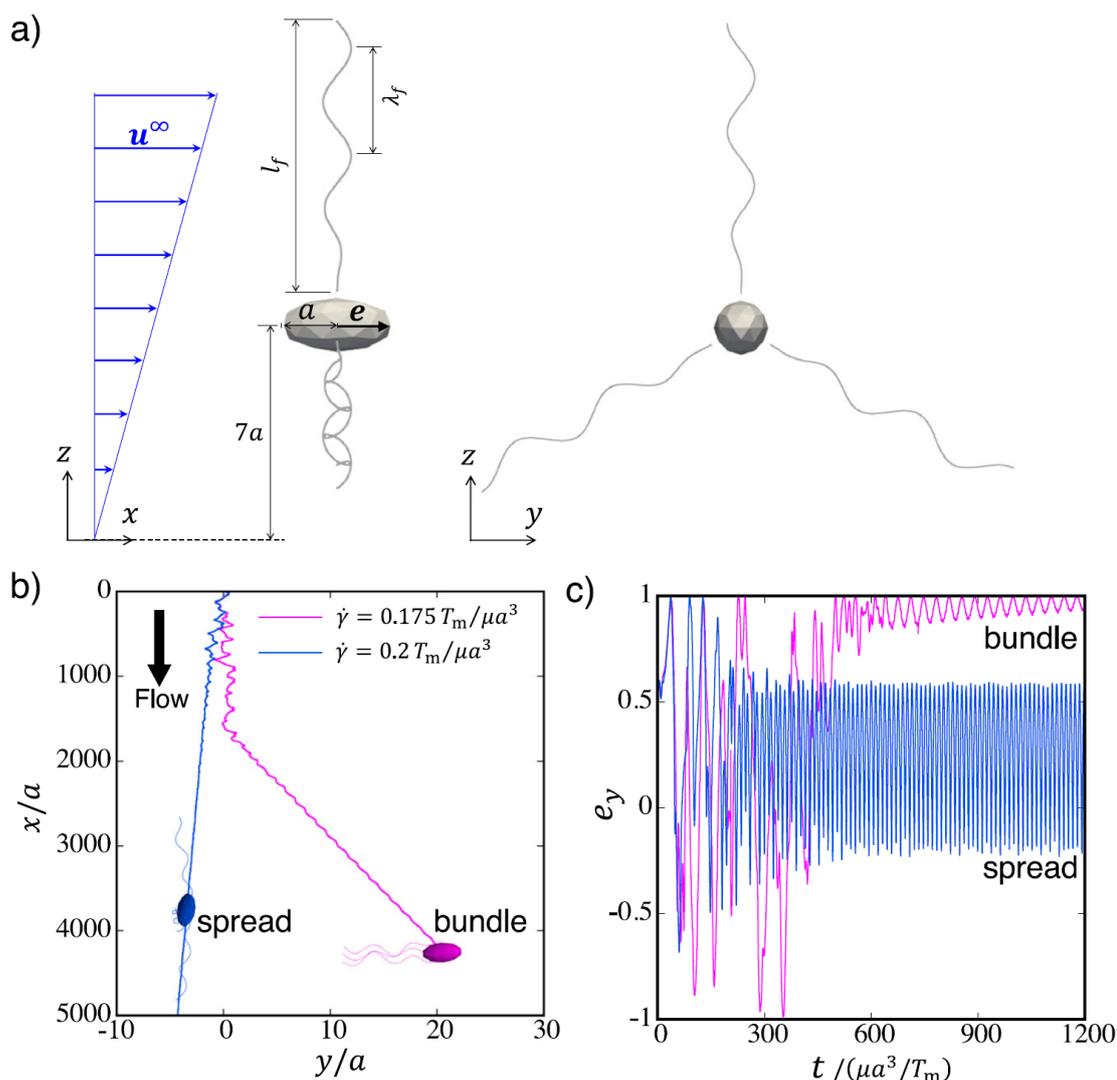


図2 シミュレーション結果 a) 大腸菌モデルの幾何学形状、およびシミュレーションの問題設定, b) 低すり速度と高すり速度における大腸菌の遊泳軌跡と遊泳形態, c) 大腸菌の遊泳方向の時間変化

3. 研究目標の達成状況

高せん断すり中の大腸菌の鞭毛には強い流体力が作用するため、鞭毛が束化できず、遊泳運動を行えないことが予想されたが、我々が行った実験において、この予想を裏付ける結果を得ることができた。さらに、高せん断すり中の大腸菌の挙動を数値シミュレーションで調べるこ

とで、我々の仮説を検証し、大腸菌が遊泳できる限界のずり速度を定量的に解明することができた。この成果は、物理学分野で定評のある *Communications Physics* 誌に掲載された。当初の研究目標を達成できたと考えている。

4. まとめと今後の課題

本研究では、せん断流れ中の大腸菌の挙動を実験と数値シミュレーションで調べ、大腸菌の遊泳が数百以上のずり速度で著しく阻害されることを示した。これは、背景のせん断流が鞭毛束形成に必要な鞭毛生成流よりも強くなったためと考えられる。強いせん断を受けた細菌は、やわらかく変形可能な物体のように振る舞い、壁から離れる方向へと移動した。これらの結果は、壁際の強いせん断で鞭毛を束ねることができないバクテリアは、壁から受動的に逃れるために運動戦略を変えることを示唆している。

今後は、大腸菌の鞭毛挙動を直接可視化計測する技術を開発し、流れ中の鞭毛挙動をより詳細に解明する必要がある。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌

Jinyou Yang, Kenji Kikuchi, Takuji Ishikawa: High shear flow prevents bundling of bacterial flagella and induces lateral migration away from a wall, *Communications Physics*, Vol. 6, (2023) p. 354.

国際学会

J. Yang, T. Isaka, K. Kikuchi, K. Numayama-Tsuruta, T. Ishikawa: Intestinal folds accumulate bacteria through physical and biological factors. 76th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, (2023), G14.05

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS02APR23
研究種別	特定研究
利用期間	2023.04～2024.03
報告回数	第 1 回報告

2024年07月23日提出

複数の流れ場からつくる低次元空間に基づく流体力学的特性の解明

大西 直文

東北大学工学研究科 教授

中村 悠斗

東北大学大学院工学研究科 博士後期課程1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

ポテンシャル流と等角写像の理論に着目して，渦放出を伴う流れ場の物体形状依存性を調査する．2次元の円柱周り流れとジュコフスキー翼型周りの流れの数値計算を実施し，固有直交分解により低次元空間を構築する．この際，必要に応じてデータに重み付けや正規化を行い構築される低次元空間を変える．空間同士の距離の比較やジュコフスキー変換を施すことで円柱と翼型の流れを繋ぎ新たな知見を得ることを目的とする．また，必要に応じて3次元計算を行い，円柱におけるレイノルズ数や翼型における迎え角などが変化した流れ場を低次元空間に加えることで流れの遷移と物体形状の依存性を解き明かすことを目指す．データサイエンス的知見と流体力学的知見を組み合わせ流れ場を解析し，革新的な低次元モデルを提案することを目指す．

1.2 研究期間内の最終目標

流れの計算のための低次元モデルではなく，解析のための低次元モデリングに焦点を当てる．期間内では，低レイノルズ数の物体周り流れを対象にPOD手法の開発と低次元モデリングを行う．低次元モデルの特性を調べることで，物体周り流れの流体力学特性を明らかにできることを示し，PODをもとにした低次元モデリングの利用可能性を示す．また，より高いレイノルズ数への拡張を見据え，単一の物体形状における低次元モデルを構築し，複雑な流れにおいても流体力学的特性を明らかにできることを示す．

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 異なる物体周り流れを表現する低次元空間の構築

本研究では，形状の異なる物体周り流れ同士をPODによって得られる低次元空間を介して

互いに結びつける．このようなアプローチを行うためには，形状の異なる流れ場のデータが同一の多次元空間内に存在する必要がある．物体の形状に沿った計算格子を用いて数値計算を実施する場合，形状毎に異なる計算格子となる．データが存在する多次元空間は計算格子に依存するため，格子が異なると同一の多次元空間に存在しているとみなすことができない．そこで本研究ではそれぞれの形状の周りの流れ場を座標変換により1つの空間に集めるアプローチを行った．この際，変換先の空間はどのような空間でも可能であるが，一般座標系の数値計算で利用される計算空間に変換するとして定式化した．これにより，形状毎に異なる空間に存在していたデータが，1つの多次元空間に変換される．変換されたスナップショットにPODを実施する場合，計算空間は物理的な空間と異なるため，流れ場の物理的な特徴を捉えるためには格子間隔と変換による格子の変形を考慮した重みをつける必要がある．本研究ではこの重みを数理的に導出した．計算空間の物理量に導出した重みを付与しPODを行って得られた基底を物理空間に変換すると，物理空間の変数に対しPODを実施して得られるPOD modeと同じ分布となる．そのため計算空間で分解を行った場合でも，物理空間での流れ場の特徴を的確に捉えることができる．

2.2 固有直交分解を用いた低次元モデルによる異なる物体周り流れの予測

計算空間におけるPODで得られたmodeを用いて，様々な形状の物体周り流れを予測できることを確かめた．検証では，円柱周りの計算格子にジュコフスキー変換を施し，楕円や翼周りの計算格子を生成した．

PODを用いた最もシンプルな低次元モデルの構築方法の1つはデータセットに複数の条件の流れ場を与えPODを行い，得られたモードに対応する結合係数を予測し，流れ場を再構築する手法である．そこで本研究では2つの楕円と1つの翼周りの流れ場の時系列データを各形状につき501枚用意し，それら全て1503枚のスナップショットを含んだデータセットを低次元モデルの構築に用いた．なお，各データは主流の条件を固定し，物体形状のみを等角写像で変化させた．物体の大きさによって規定されるレイノルズ数は主流方向の長さを基準にすると約200程度であり，迎角は25degとした．

スナップショットに含まれている形状及び，含まれていない形状の物体周りの流れ場を低次元モデルで予測したところ，PODを行った形状とは異なる流れ場の空間構造を持っている場合，用いている特徴量では流れ場を表現できず，誤差が減少しなかった．すなわち，周波数の変化が激しい形状変化では，空間的特徴の変化も激しいことが考えられる．一方で，周波数がほとんど変化しない形状においてはモード数の増加とともに誤差が減少するため，提案するPOD手法によって形状が異なる流れ場も表現することができ，その有効性が示された．

2.3 複雑流動への拡張に向けた遷移現象のデータ駆動型モデリング

より複雑な流れ場をPODを用いた低次元モデルで表現することを目指し，円柱周りのレイノルズ数200の流れ場の低次元モデリングを行った．レイノルズ数200の円柱周り流れではレイノルズ数が低いときに安定であった二次元の流れ場から三次元的な構造を持つ流れ場へと変化する遷移が起こる．二次元流れから始まった流れ場は，二次元的な流れ場の構造を維持しつつ，スパン方向に速度の攪乱を生じる．その攪乱は時間発展とともに成長

し、十分に成長を終えると二次元的な流れ場は崩壊する。本研究ではこの遷移過程を完全に二次元の流れ場 (2D state), 二次元流れにスパン方向の攪乱が生じている流れ場 (Transition state), スパン方向の攪乱が十分に発達した流れ場 (3D state) の3つに区別し、各過程における時系列データに POD を適用する。

これらの POD mode を用いて2つの低次元モデルを構築した。1つ目の低次元モデル (ROM1) は、2D state から得られた POD mode と 3D state から得られた POD mode を用いる。2つ目の低次元モデル (ROM2) は、1つ目の mode に加え Transition state から得られた POD mode を用いて構築する。ROM1 と ROM2 において 2D state の流れ場から低次元モデルの計算を始め、時間発展を計算した。いずれの ROM においても 2d state の 1st mode の係数は周期的な振動を起こしたが、ROM1 では 3D state の 1st mode は長時間の計算のちにも振動を起こさなかった。一方、Transition state から得られた POD mode も用いている ROM2 では、3D state の 1st mode も振動を起こし、一定の振幅に収束した。通常の CFD では、2D state から 3D state に遷移するため、ROM1 は遷移過程を適切にモデリングできていない。したがって、遷移過程を ROM でモデリングするには、遷移前後の流れ場だけでなく、その過程の流れ場の特徴も重要であることが示唆された。

2.4 低次元モデルを利用した三次元流れにおける流体力学特性の解明

レイノルズ数 200 の円柱周り流れでは、スパン方向の領域境界の大きさに応じて流れ場の特性が変化することが指摘されている。この特性の変化をモード分解と低次元モデルを利用して調査した結果、スパン方向の境界の大きさが円柱直径 D の 4 倍より大きい時、 $4D$ の大きさで周期的な構造を持つが、 $L_z = 3.5D$ のとき、スパン方向の波長も $3.5D$ で形成された。抗力係数の時間変化においては、スパン方向の領域境界が小さい時、完全に周期的であるが、領域幅が広がるにつれて非周期的な構造を有していた。また、主たる振動だけでなく、非常に低周波の振動が含まれていた。

これら 3 つの流れ場に POD を行い、低次元モデルを構築した。POD mode の数 r を変えて計算を行い、流れ場の振動特性を調査した。まず、 $L_z=3.5D$ について、上位のモードの振動によって形成されるリミットサイクルについて、ポアンカレ写像を行ったところ、十分な数の mode を用いるとリミットサイクルは、完全な閉軌道を形成した。これは、元の流れ場が完全に周期的であることを反映している。

次に、 $L_z=4D$ の場合にモード数を変えたところ、モード数が 4 以上 14 以下のとき、リミットサイクルは完全な閉軌道となった。一方、モード数が増えるとポアンカレ断面の通過位置が一定でないことから、この断面の範囲では、閉軌道を形成しなかった。これは、元の流れ場が非周期的な構造を持っていることを反映していると考えられる。また、元の流れ場が、非周期的な流れであっても高次の POD mode がいない場合、ROM では周期的な流れが形成される。このことから、非周期的な構造を作る要因は、高次のモードに含まれていることがわかる。今後、非周期性を作り出すモードが流体力学的にどのような特性を持っており、どのように上位モードを関連しているのかを調査していく予定である。

3. 研究目標の達成状況

異なる物体形状間においても、周囲の流れ場の予測が可能な POD 手法を開発し、低レイノルズ

数域において、実証を行った。実証の結果、低次元モデルの精度の流れ場の渦放出周波数に密接な関連があることが明らかになった。より高いレイノルズ数での検証に向けて、まず、円柱周り流れで低次元モデルの検証を行った。検証の結果、高次のモードを含めた低次元モデルで、数値計算の流れ場を再現できることがわかった。遷移過程に対する低次元モデルを確立し、三次元流れにおいても POD を用いた低次元モデリングが可能であることが示された。これらのモデリングの過程で、流れ場の寄与が小さいモードが非周期性を作り出すことや、遷移途中の流れ場が、遷移を促すなど、流れ場の種々の特性を明らかにした。

4. まとめと今後の課題

本研究の結果によりデータ駆動科学を用いることで、高次元の流れから得た低次元の構造を抽出し、それらを用いた低次元モデルで、様々な流体力学特性を見ることができた。本研究で開発した POD 手法を用いてより高レイノルズ数の物体周り流れから主要な特徴量を抽出し、低次元化することで、これまで困難であった流れ場の力学系の解析が可能になる可能性がある。一方、レイノルズ数 200 の円柱周り流れのモデリングにおいても、10 個以上のモードが必要になるなど、高レイノルズ数になるほど次元が増加し、解析が困難になる可能性が考えられる。今後、開発した POD 手法を拡張していく上で、次元の増加に対処していく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）

Yuto Nakamura, Shintaro Sato, Naofumi Ohnishi, “Application of proper orthogonal decomposition to flow fields around various geometries,” Under Review.

著書

該当なし

国際学会

・ Yuto Nakamura, Shintaro Sato, Naofumi Ohnishi, “Application of Proper Orthogonal

Decomposition to Variable in Computational Space for Reduced Order Modeling,” 76th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics Meeting, J28.02, 2023/11/19-21 (Washington, DC, USA).

・ Yuto Nakamura, Shintaro Sato, Naofumi Ohnishi, “Multiple flow fields gathering in a reduced order model,” Twentieth International Conference on Flow Dynamics, 2023/11/6-8 (Sendai, Japan).

国内学会・研究会等

・ 中村悠斗, 佐藤慎太郎, 大西直文, “流れの特徴量を用いた低次元モデルにおける準定常流の安定性”, 計算工学講演会, A-07-04, 2024 (口頭発表, 神戸).

- ・中村悠斗, 佐藤慎太郎, 大西直文, “低レイノルズ数流れにおける不安定現象を捉える低次元モデル”, 航空宇宙学会年会, 1C07, 2024 (口頭発表, 東京).
- ・中村悠斗, 佐藤慎太郎, 大西直文, “異なる翼周りの流れ場に内在する特徴量を用いた低次元化モデル”, 第61回飛行機シンポジウム, 3E06, 2023 (口頭発表, 北九州).
- ・中村悠斗, 佐藤慎太郎, 大西直文, “流体力学的不安定性の発生を予測するデータ駆動型アプローチの検討,” 流体力学学会年会, E8-02, 2023 (口頭発表, 東京).
- ・中村悠斗, 佐藤慎太郎, 大西直文, ”固有直交分解を用いた多岐にわたる物体周り流れの統一的表現手法の確立,” 第51回可視化情報シンポジウム, 0S4-10, 2023 (口頭発表, 小樽).

5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

- ・“変形する物体背後の渦構造のアーティスティックビジュアライズ,” 第51回可視化情報シンポジウム アートコンテスト 金賞, 2023 (小樽)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS03APR23
研究種別	特定研究
利用期間	2023.4～2024.3
報告回数	第 1 回報告

2024年7月23日提出

大気圏再突入技術の確立に向けた極超音速・遷音速流の数値解析

坂本 広樹, 岡野 泰人
東北大学大学院工学研究科 博士課程学生
大西 直文
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

大気圏再突入機を設計する上での重要な課題として, 高 Mach 数の極超音速流での乱流遷移と遷音速域での動的不安定性の予測が挙げられる. 高 Mach 数の極超音速飛行では, 壁面の強い冷却が伴う不安定な境界層での乱流遷移による空力加熱の増大が発生する. また遷音速飛行では, 機体側面あるいは機体背面側の流れによって自励振動が発生する. 前者は高レイノルズ数によって, 後者は機体運動の時間スケールと流体の時間スケールの違いによって, 計算負荷が高い. したがって, それらのモデリングが必要であるが, 物理現象のメカニズムは明らかではない. そこで, 本研究では, スーパーコンピュータを用いた大規模数値シミュレーションを実施し, 物理現象のモデリングに向けて, そのメカニズムの解明することを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

目標としては, 高 Mach 数の極超音速境界層の乱流遷移における壁面冷却効果の影響を明らかにする. また, 遷音速域での動的不安定性のメカニズムを解明する. 乱流遷移に関する研究では, 本研究で進めるような高い Mach 数 (Mach 数 20 以上) となる伝播する衝撃波背後の極超音速境界層の安定性に着目した研究は他に例が少ない. また, このような流れは火星をはじめとする惑星間軌道からの大気圏再突入に相当するため, 次世代の大気圏再突入技術の確立の観点から工学的な意義が深い. 一方, 動的不安定性に関する研究では, 対象とするカプセルの自励振動発達過程を数値計算で再現した先行研究は存在しない. 極超音速域と遷音速域の二つの側面から次世代の大気圏再突入技術の確立への貢献を目指す.

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 高 Mach 数の極超音速境界層の乱流遷移における壁面冷却効果

今年度は主に乱流遷移に着目した研究を行ったため、その研究において得られた成果について述べる。具体的な数値シミュレーションの対象は、衝撃風洞である膨張波管内を伝播する衝撃波の背後の境界層である。その境界層に人工的な擾乱を付加し、その擾乱の発展の様子を数値的に調査した。なお、壁面温度が擾乱の発展の様子に与える影響を調査するため、気流が壁近傍において境界層外よりも高温となる断熱壁条件と壁近傍で室温まで急激に冷却される等温壁条件において数値シミュレーションを行い、比較を行った。数値シミュレーションの際には、膨張波管内を伝播する衝撃波を衝撃波が静止して見えるような慣性系である衝撃波静止系で計算を行うことで、計算コストを大きく低減する工夫を行った。また、人工擾乱として壁面上のランダムな吸引・吹出擾乱を付加した。数値シミュレーションの結果、断熱壁条件において擾乱を付加した位置の後方では特定の波長の波が発達することはなかったが、等温壁条件において特定の波長の波が発達することがわかった。これは付加した擾乱の特定の波長の波が流体力学的な不安定性により発達したことを示唆しており、伝播する衝撃波背後の境界層は、衝撃波背後の高温の気流が壁面で急激に冷却される壁面冷却効果によって不安定化している可能性が考えられる。したがって、伝播する衝撃波背後の境界層では壁面冷却効果に起因する不安定性により乱流遷移が引き起こされる可能性があることがわかった。

3. 研究目標の達成状況

高 Mach 数となる膨張波管内を伝播する衝撃波の背後に発達する極超音速境界層の乱流遷移の擾乱発達過程における壁面冷却効果の影響が明らかになった。本研究により伝播する衝撃波背後の境界層において冷却効果に起因する流れの不安定性が存在することが示唆されるとともに、その不安定性によって伝播する衝撃波背後の境界層における乱流遷移が引き起こされる可能性が示された。

4. まとめと今後の課題

今年度の研究成果としては、伝播する衝撃波背後の極超音速境界層流において衝撃波背後の高温の気流が壁面で室温まで急激に冷却されるとき、特定の波長の波が発達することがわかった。しかしながら、限定的な数値シミュレーションに留まっており、今後は実在気体効果や三次元性の影響に着目した数値シミュレーションを行うことが今後の課題として挙げられる。

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

Hiroki Sakamoto, Shintaro Sato, and Naofumi Ohnishi, “Flow Instability in a Hypersonic Boundary Layer Behind a Propagating Shock Wave,” 76th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, ZC06-5, November 2023.

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

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

次世代融合研究システム CPU利用状況

集計対象期間：2023年4月～2024年3月

	分散メモリ型並列計算システム				共有メモリ型並列計算システム			
	2023/4 - 2023/9		2023/10 - 2024/03		2023/4 - 2023/9		2023/10 - 2024/03	
	ノード時間[h]	専有率[%]	ノード時間[h]	専有率[%]	ノード時間[h]	専有率[%]	ノード時間[h]	専有率[%]
電磁機能流動研究分野	600.0	0.0%	279.5	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
融合計算医学研究分野	159.6	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
生体流動ダイナミクス研究分野	54.0	0.0%	81.8	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
航空宇宙流体工学研究分野	562151.0	18.7%	677539.9	19.7%	2475.0	0.8%	1461.5	0.5%
宇宙熱流体システム研究分野	22600.4	0.8%	22342.7	0.7%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
自然構造デザイン研究分野	182.5	0.0%	2719.8	0.1%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
流動データ科学研究分野	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
高速反応流研究分野	7780.0	0.3%	32702.0	1.0%	0.0	0.0%	838.2	0.3%
伝熱制御研究分野	75942.2	2.5%	86475.6	2.5%	0.0	0.0%	1999.3	0.7%
先進流体機械システム研究分野	25193.1	0.8%	22623.3	0.7%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
複雑衝撃波研究分野	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
計算流体力学研究分野	505194.8	16.8%	571509.6	16.8%	263908.2	81.1%	223631.0	75.0%
非平衡分子気体流研究分野	127104.0	4.2%	158998.1	4.6%	152.3	0.0%	3021.6	1.0%
分子熱流動研究分野	252264.3	8.4%	296729.0	8.6%	2.6	0.0%	0.3	0.0%
量子ナノ流動システム研究分野	917855.5	30.5%	1022202.0	29.7%	55745.0	17.1%	58328.0	19.6%
生体ナノ反応流研究分野	2191.9	0.1%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
分子複合系流動研究分野	196333.6	6.5%	312162.4	9.1%	19.6	0.0%	0.0	0.0%
先端車輪基盤技術研究(日立Astemo)Ⅲ	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
グリーンナノテクノロジー研究分野	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
地殻環境エネルギー研究分野	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	559.6	0.2%
エネルギー動態研究分野	303972.4	10.1%	218564.4	6.4%	2560.5	0.8%	7760.4	2.6%
システムエネルギー保全研究分野	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
混相流動エネルギー研究分野	3883.4	0.1%	3963.8	0.1%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
流動システム評価研究分野	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
流動・材料システム評価研究分野	462.9	0.0%	396.9	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
マルチフィジックスデザイン研究分野	3748.8	0.1%	797.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
その他	4043.9	0.1%	6004.6	0.2%	528.4	0.2%	383.1	0.1%
合計	3011718.3	100.0%	3436092.4	100.0%	325391.6	100.0%	297983.0	100.0%

2018年8月 システム更新, サービス提供開始

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
第二十七巻
2024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

製作：プリントコープ KOPAS