

# 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

第二十八巻  
(2024年4月～2025年3月)

2025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

第二十八卷

(2024年4月～2025年3月)

2025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2024年8月に「次世代融合研究システム（AFI-NITY II）」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 HPE CRAY XD2000 / SuperdomeFlex 280 を利用して得られた2024年4月から2025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、2010年（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、2016年（平成28年）度および2022年（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。2022年（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。2021年（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。

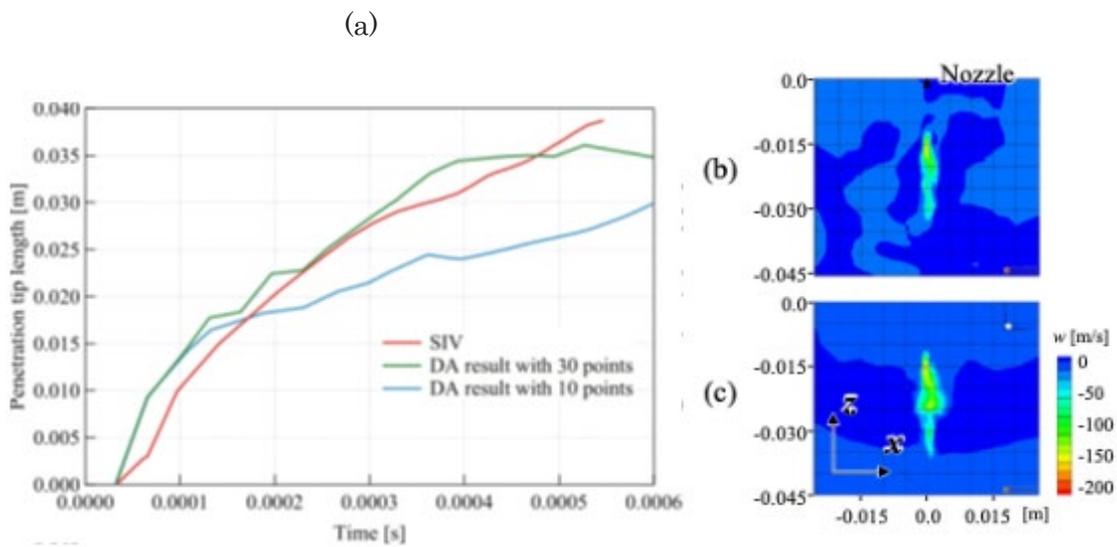
1990年（平成2年）、本研究所への初のスーパーコンピュータ導入以来、1999年（平成11年）の所内措置による未来流体情報創造センター設置を経て、2005年（平成17年）11月本センターに次世代融合研究システムが導入されました。さらに2011年（平成23年）5月、2018年（平成30年）8月更新を経て、さまざまな時空間スケールの複雑な未知の流動現象の解明、人類社会の持続的発展を実現するための革新的な設計法や制御法の開発を目指して、物質の流れに限らない幅広い「流れ」を対象とした大規模数値解析、実験と計算の融合研究、それらの高度可視化を対象とした流体情報研究が、本システムを利用して推進されております。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、2001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（東京）、第3回（ニューヨーク）、第4回（仙台）、第5回（仙台、JAXAと共催）、第6回（調布、JAXAと共催）と毎年継続され、2007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、2013年より単独シンポジウムとして、第13回 AFI-2013 から第24回 AFI-2024 まで仙台（2020～2022 はオンライン）で開催され、本年11月には、第25回 AFI-2025 が開催されます。

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

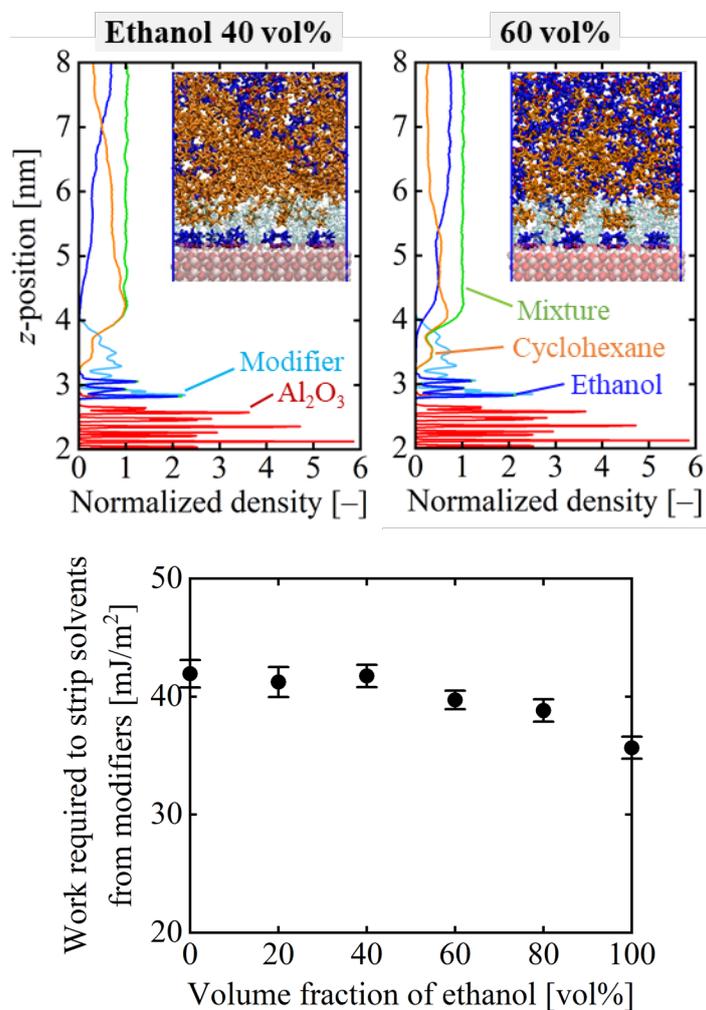
2025年10月

東北大学流体科学研究所  
未来流体情報創造センター  
センター長 丸田 薫



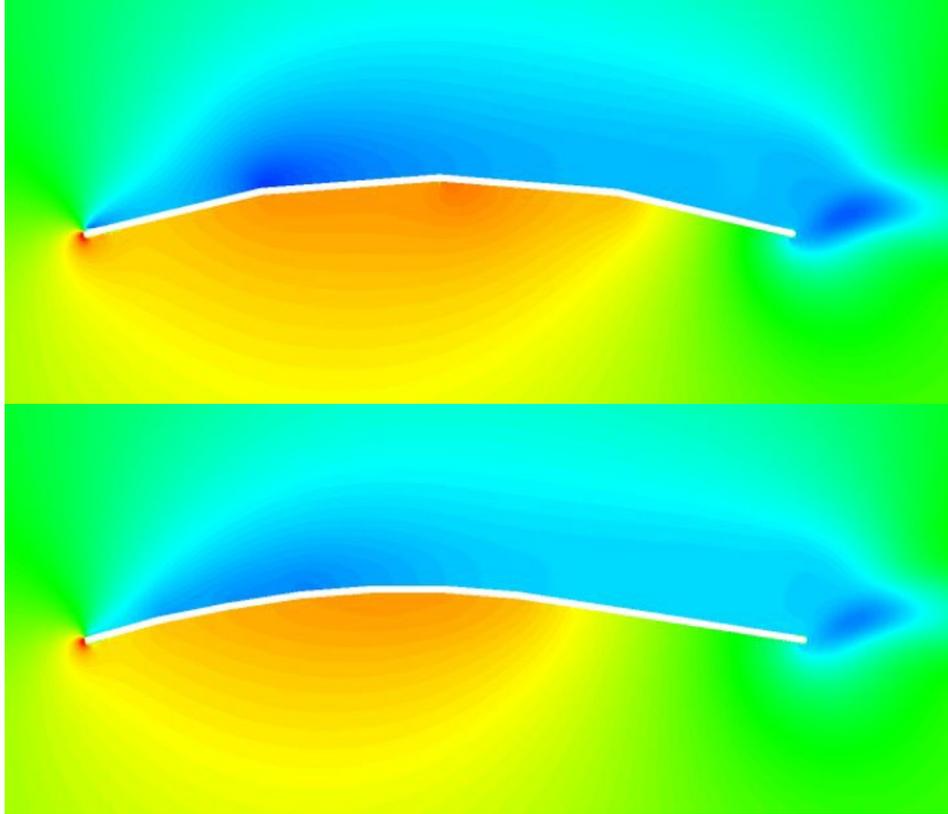
SIV によって得られた速度分布を用いたデータ同化の結果

SIV (Spray Image Velocimetry) から得られたデータを用いて、スプレーのデータ同化を行った結果を示します。(a)はスプレーの先端長さの比較で、実測値と 10 点および 30 点の観測点データを用いたシミュレーション結果を比較しています。(b)と(c)は、それぞれ 10 点および 30 点の観測点データから得られた、 $t = 0.0006$  秒時点でのスプレー方向成分の速度分布を示しています。



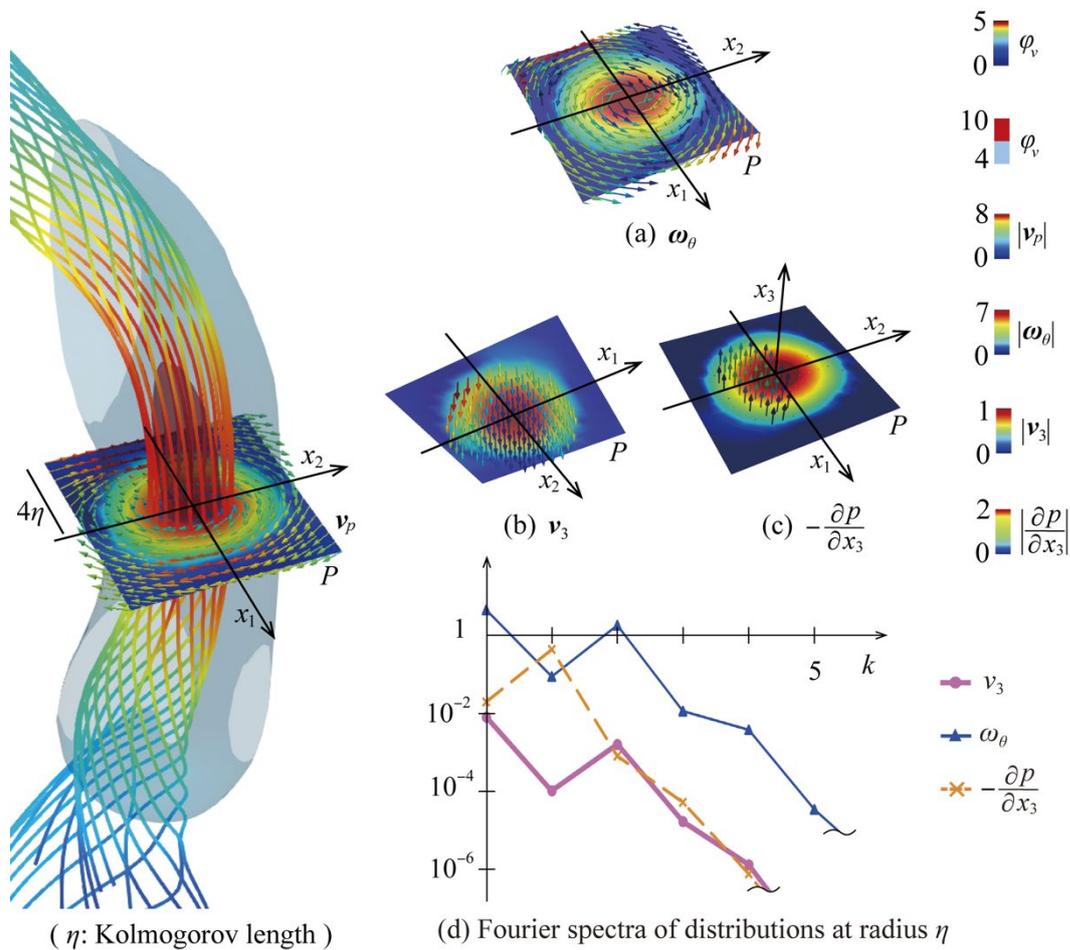
デカン酸修飾 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>／混合溶媒界面近傍側面図および密度分布と  
界面分離に必要な仕事

異なる溶媒体積分率における界面構造を可視化するとともに、修飾鎖と混合溶媒の分離に必要な仕事と溶媒体積分率との関係を解明した。



粒子数の多寡による平均圧力コンター図の相違

柔軟膜翼に対する空力構造連成解析を実施した。構造解析に使用する粒子数を増やす（下図）ことで、粒子数が少ない場合（上図）に比べて滑らかな変形及び流れ場が確認できる。

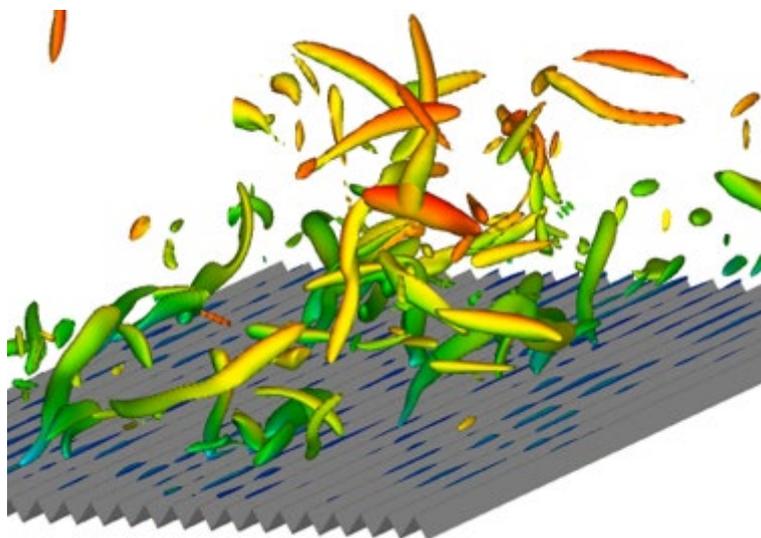


渦流と渦線バンドル束，並びに諸物理量の分布とスペクトル

swirlity  $\varphi_v$  のコンターで示された渦領域・旋回平面  $P$ ・渦線バンドル束と渦流  $v_p$  (左)，また  $P$  上の(a)渦流  $v_3$ ，(b)渦度ベクトルの周方向成分  $\omega_\theta$ ，(c)圧力勾配  $-\partial p/\partial x_3$  の分布，並びに(d)これらのスペクトル分布。

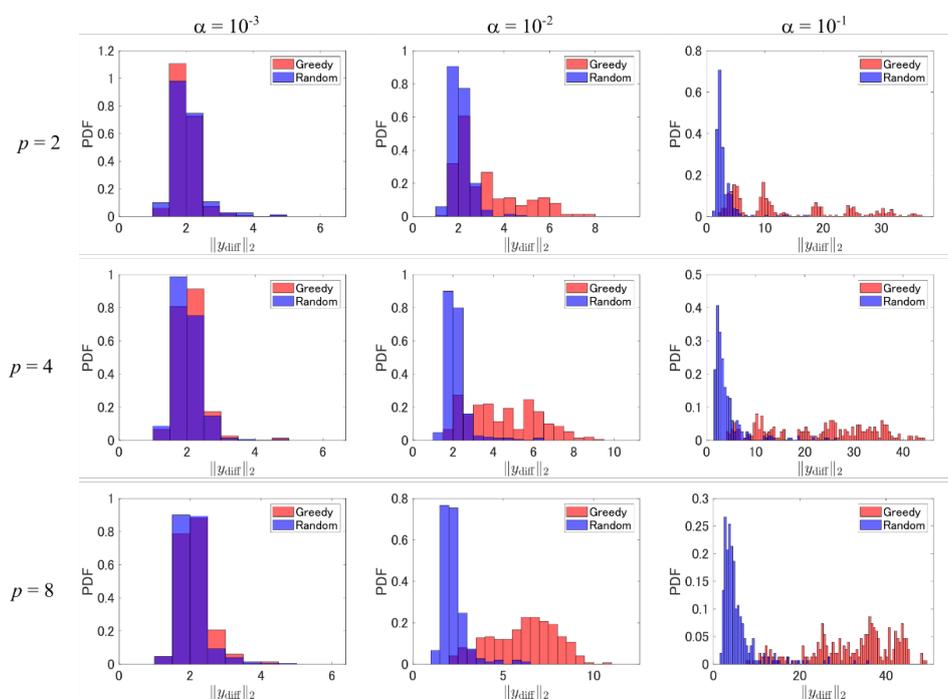
CP13APR24

マッハ数と圧力勾配がリブレットの性能に与える影響調査



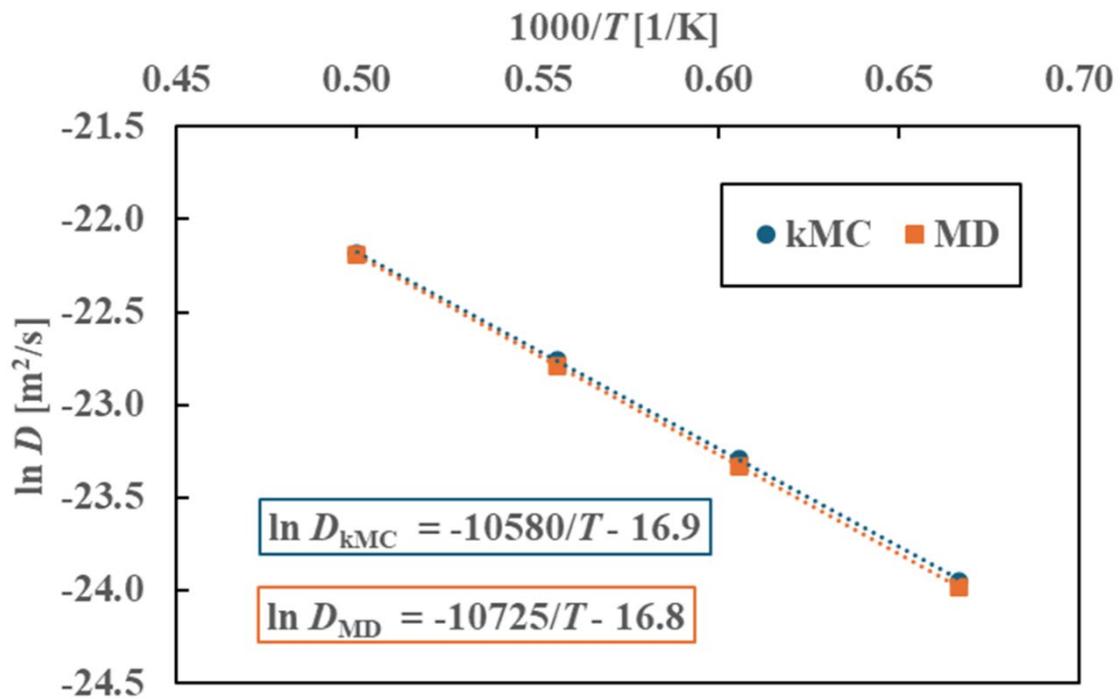
リブレット面上における  $Q$  値の等値面を流速で色付けした様子

リブレット面上における  $Q$  値の等値面を流速で色付けした様子を示している。圧縮性流れ条件下におけるリブレット周りの流れ場を詳細に解析した例は世界初である。



アクチュエータ位置で地表水蒸気量を除去した場合の終端状態の変動の L2 ノルムの確率密度分布 ( $p$  はアクチュエータ数,  $a$  は水蒸気量の減少倍率)

領域全体から乱択して介入を行った場合に比べて提案手法 (Greedy) で選択された場所で介入を行った場合の方が終端状態における状態が大きく変化する。

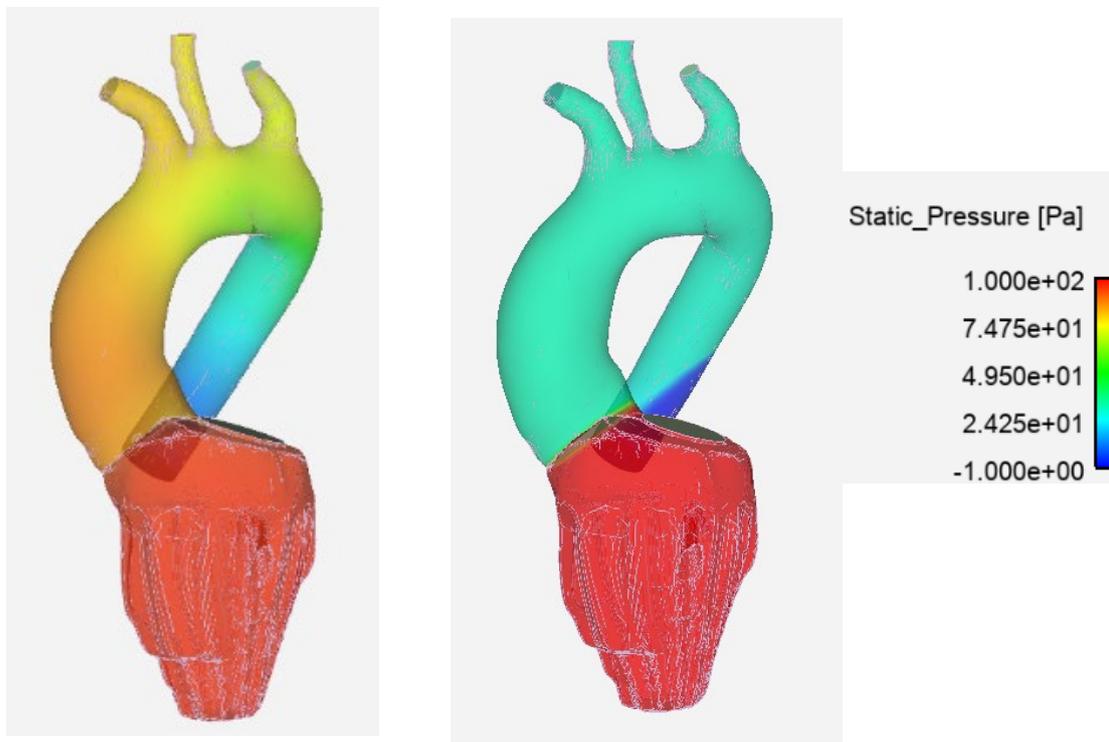


kMC 法及び MD 法により算出した拡散係数の温度依存性比較

開発した kMC 法と従来の MD 法で拡散係数の温度依存性がよく一致した。

CP24APR24

大動脈弁を考慮した大動脈・左心室系の血流解析

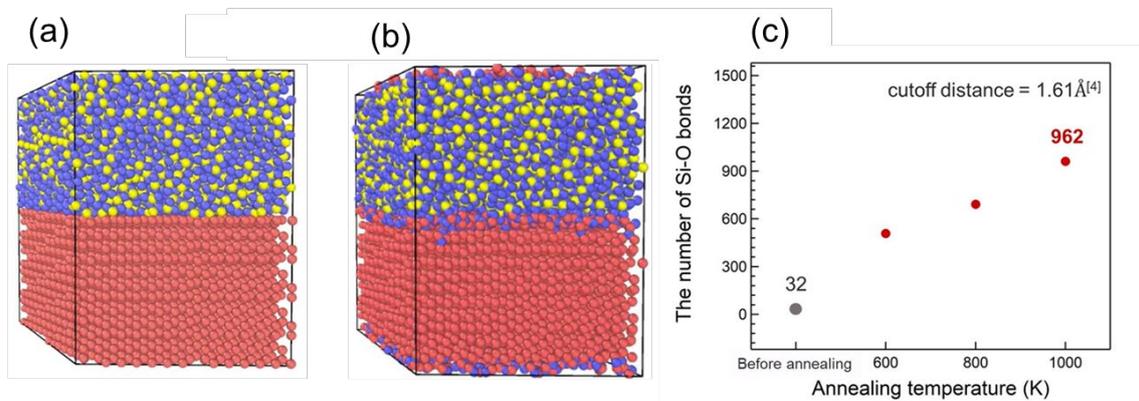


(a) without flow resistance model

(b) with flow resistance model

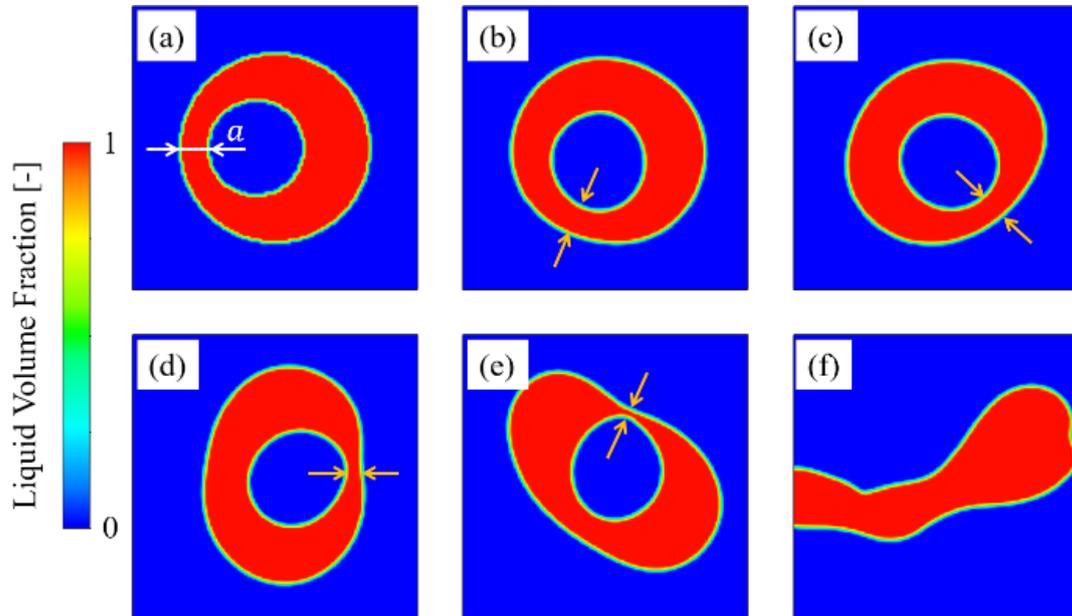
定常状態における大動脈・左心室系モデル内の圧力分布

流動抵抗モデルによる圧力分布への影響を示したものであり、流動抵抗モデルを適用することにより、大動脈弁付近の不連続な圧力が再現されている。



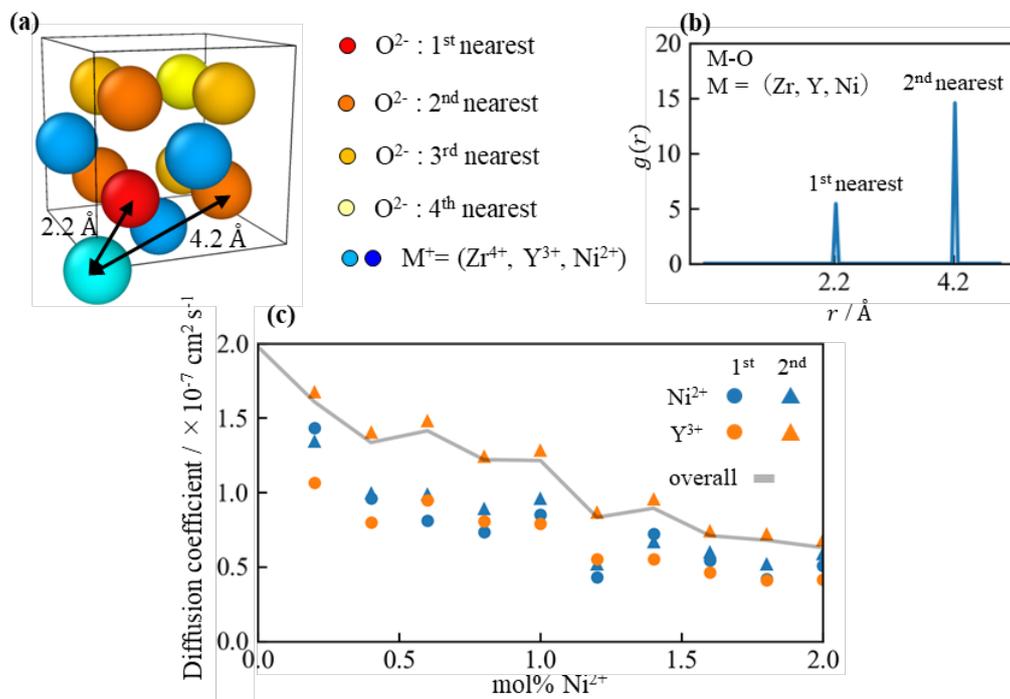
(a) 熱処理前, (b) 熱処理後における  $\text{TiO}_2/\text{Si}$  ヘテロ構造図と, 熱処理前, 600 K, 800 K, 1000 K で熱処理後における Si-O 結合数

熱処理温度に応じて  $\text{TiO}_2/\text{Si}$  界面での Si-O 結合が増え, 酸化シリコン膜の形成が確認された. この傾向は, 定性的に実験結果と一致する.



液滴の自転による気孔排出プロセスの一例

図(a)から(f)へと時間が経過するにつれ、液滴(赤)は扁平に変形する一方で、内部に存在する気孔(青)は円形を保つ。最終的に、最も液膜が薄い位置から気孔は排出される。

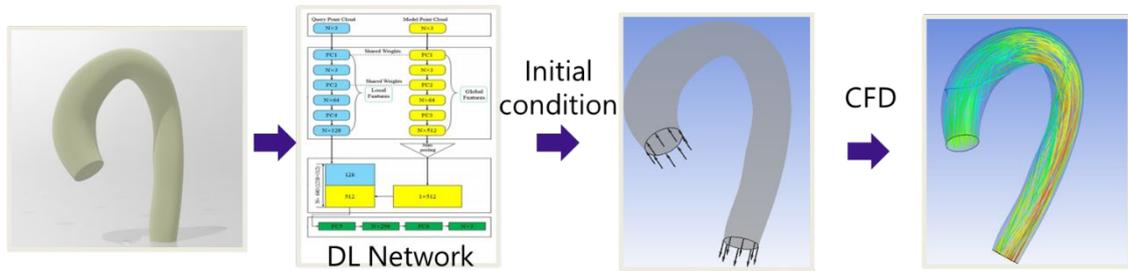


(a)初期状態における金属イオン  $M^+$ と最近接，第二近接に位置する  $O^{2-}$ の位置関係の模式図，(b)金属イオン  $M^+$ と  $O^{2-}$ 間の RDF，(c)初期状態で  $Ni^{2+}$ および  $Y^{3+}$ の最近接，第二近接に位置する  $O^{2-}$ の拡散係数と  $Ni^{2+}$ のモル分率

$Ni^{2+}$ の第二近接の位置は， $Y^{3+}$ の第二近接の位置と比べて酸素空孔が形成されづらく，その結果  $O^{2-}$ の拡散経路として機能しづらいと考えられる。 $Ni^{2+}$ が  $Y^{3+}$ よりもイオン伝導率の低下に大きく寄与するのは，この第二近接の  $O^{2-}$ の拡散特性の違いによるものと考えられる。

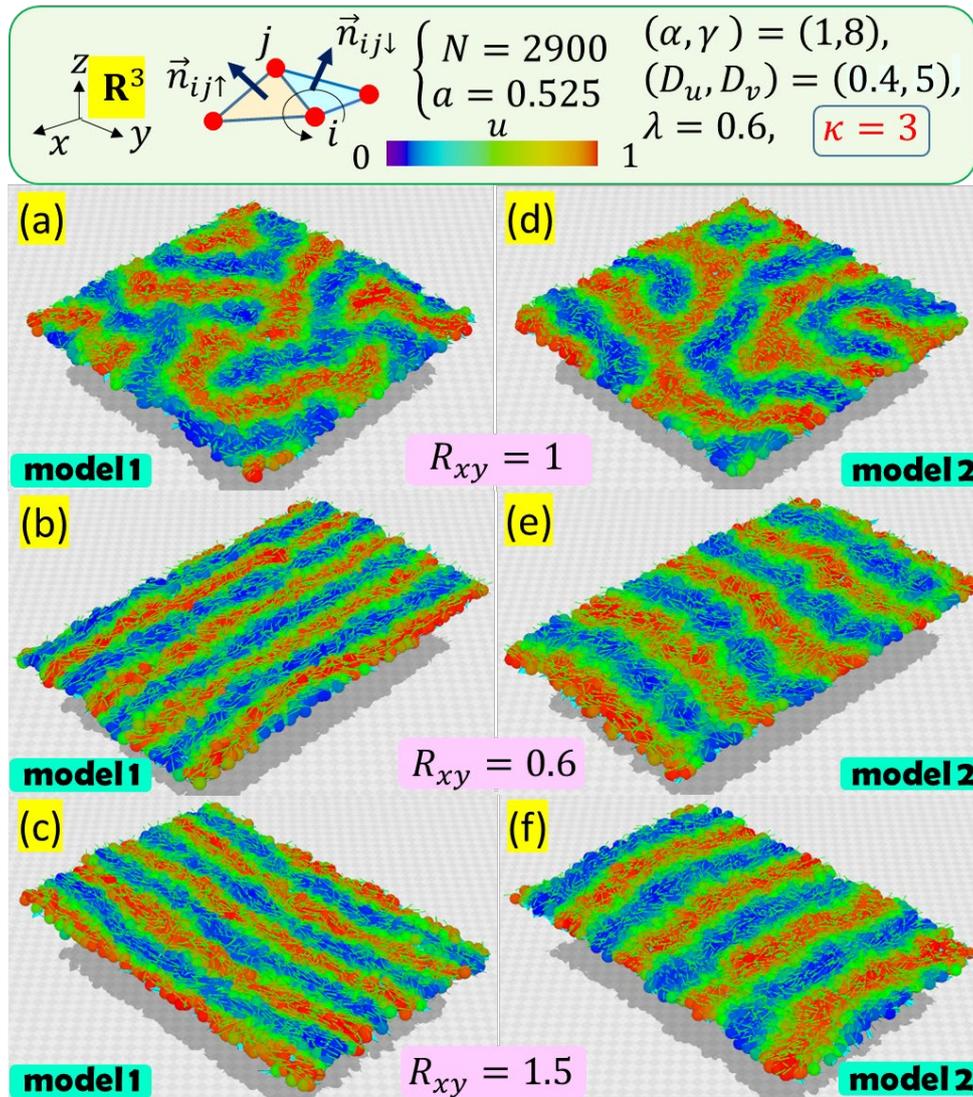
CL07APR24

血管内治療シミュレーションのためのさまざまな数値ソルバーの比較



深層学習と CFD を組み合わせた連成フレームワーク

深層学習ネットワークで予測された内部流れ場を，血流解析のための初期流れ場としてインプリメンティングすることで，収束に要する繰り返し回数の低減することが可能となった。

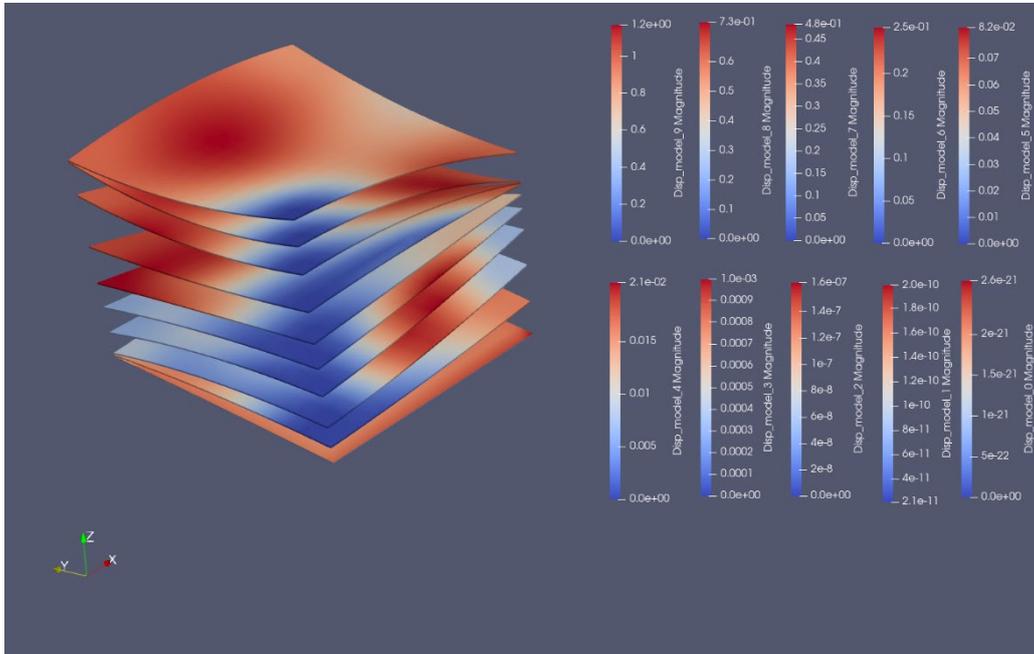


曲面状の膜に現れる Turing Pattern (TP)の膜引き延ばしに対する応答

3次元空間内の曲面状弾性膜を  $x$  方向または  $y$  方向に引き伸ばしたときの TP の異方性はポリマーの内部構造の異方性を反映している。

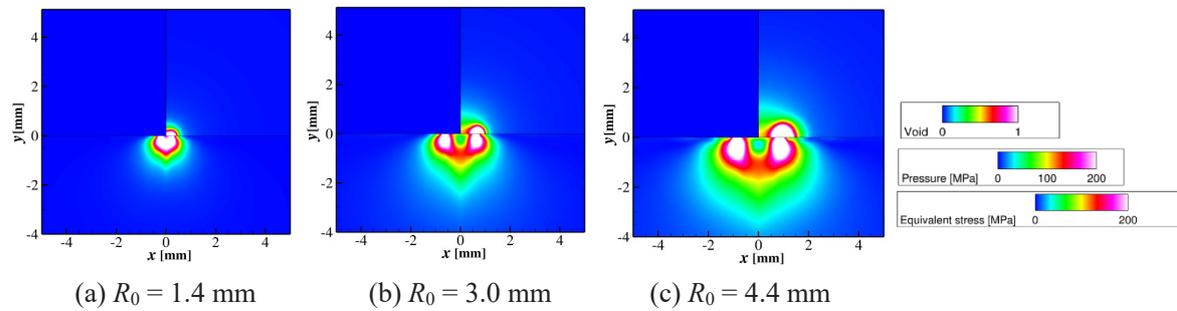
CL01AUG24

全固体電気化学デバイスの大規模電気化学 - 流体力学連成解析におけるマルチフィジクス・マルチスケール解析



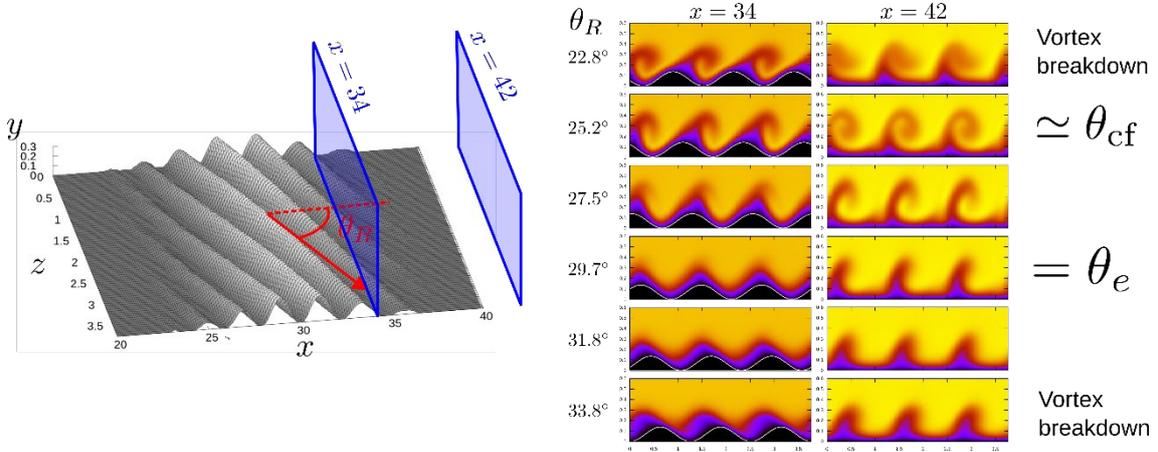
歪んだ 10 枚積層体の変位分布

sin 関数でランダムに作成した歪んだセルを積層し、上部から圧縮負荷を与えた際の変形度を示す。同時に電気化学計算を行うことで性能変化も可視化できる。



気泡圧潰時のボイド率，圧力および相当応力における気泡の寸法効果

初期気泡半径  $R_0$  を変化させて流体／材料連成数値解析を行い，相当応力が最大となるときのボイド率，圧力および相当応力のコンター図を示す．気泡の圧潰衝撃力による材料の影響領域が  $R_0$  の約 5 乗に比例することが判明した．

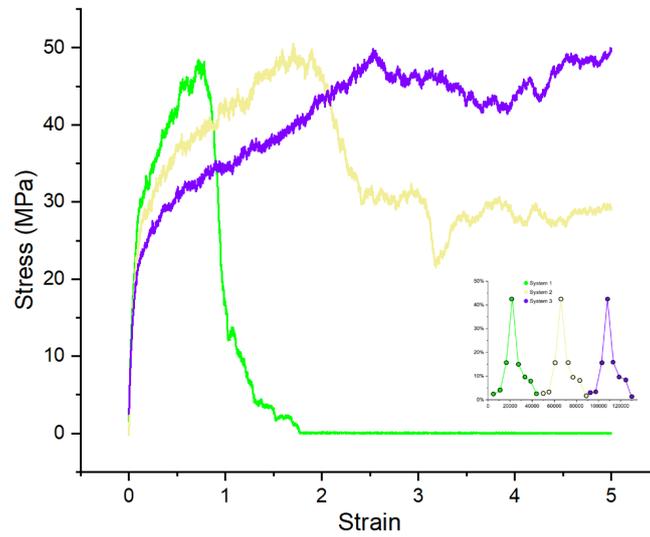


波型粗さ要素によって生成される横流れ渦列

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。

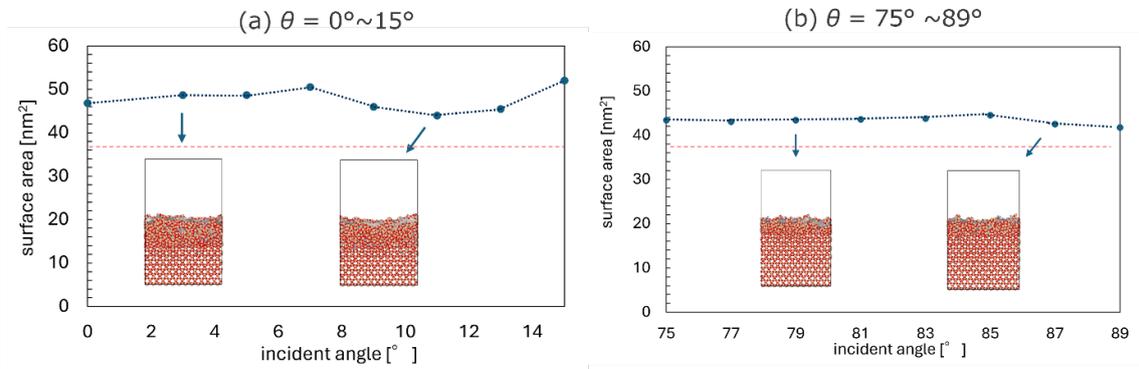
GR04APR23

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



高分子鎖長の異なるナフィオン膜における応力-ひずみ曲線の解析

異なる高分子鎖長における引張応力-ひずみ挙動の比較 (ひずみ範囲：0～5).

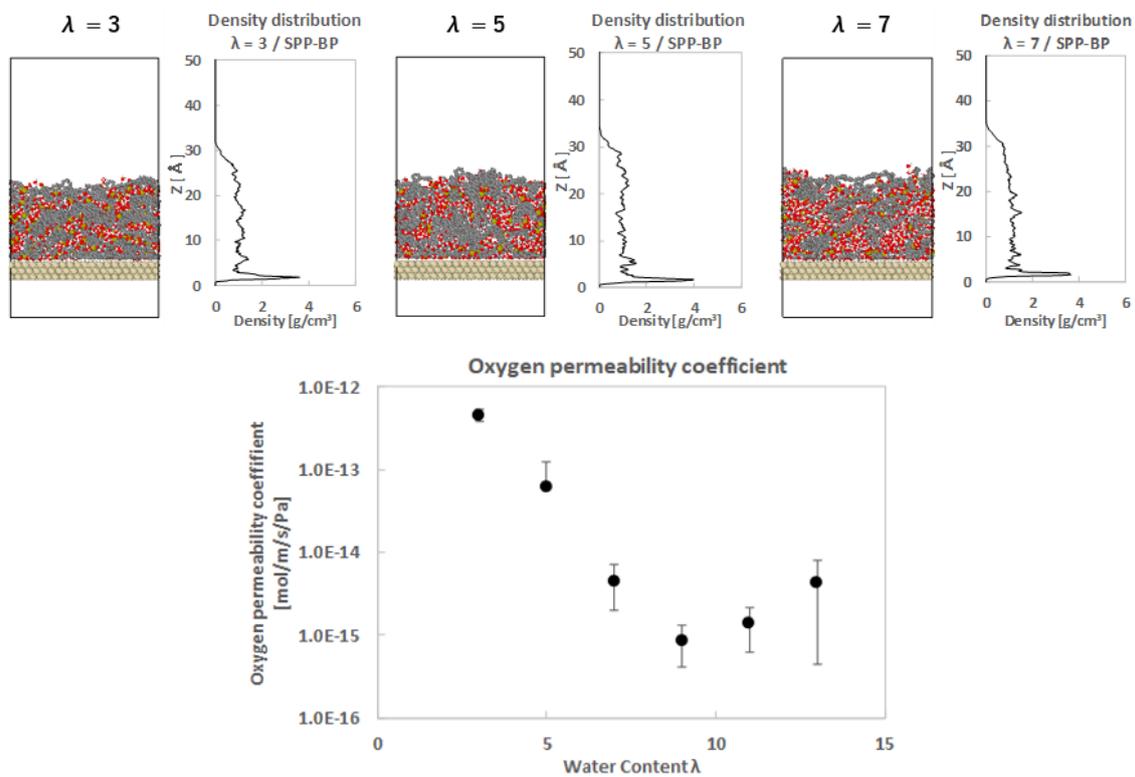


500 個 F 原子を入射した際の、F 原子の入射角度と基板表面積の関係

鉛直方向を  $0^\circ$  として、(a)、(b)の 2 つの範囲で入射角を変更した。赤い点線は初期構造の表面積を表す。加工後の表面積は平均して(a)の範囲でより大きくなることが確認された。これは高アスペクト比構造のエッチングにおいて、側面に比べ底面の面粗度が悪化しやすい傾向を示している。

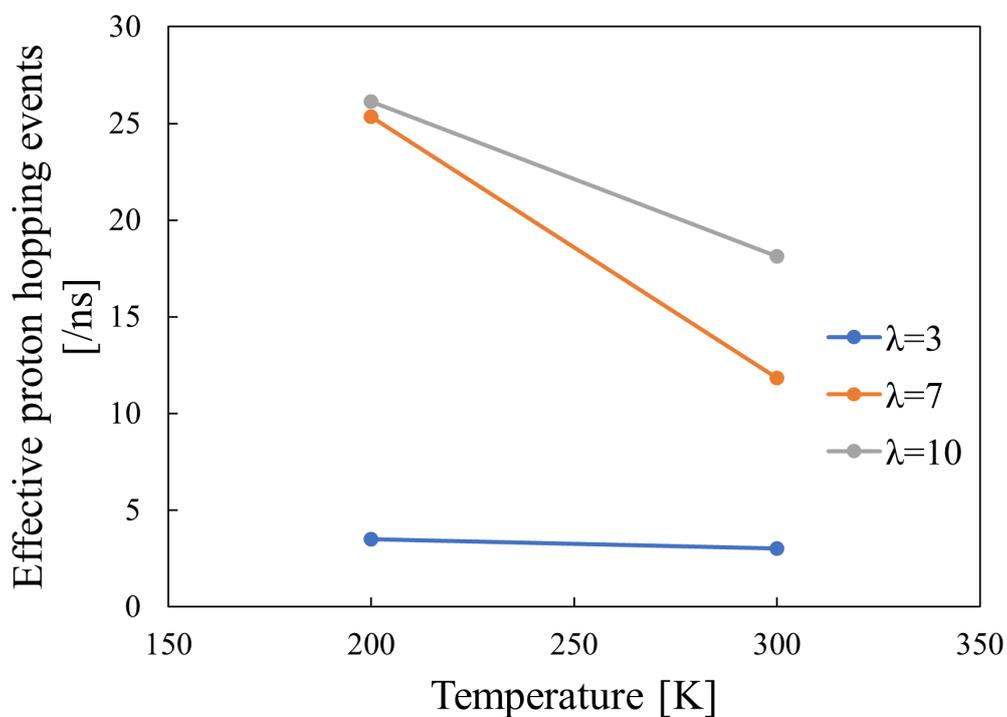
GR10APR23

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



アイオノマー薄膜構造と酸素透過係数の含水率依存性

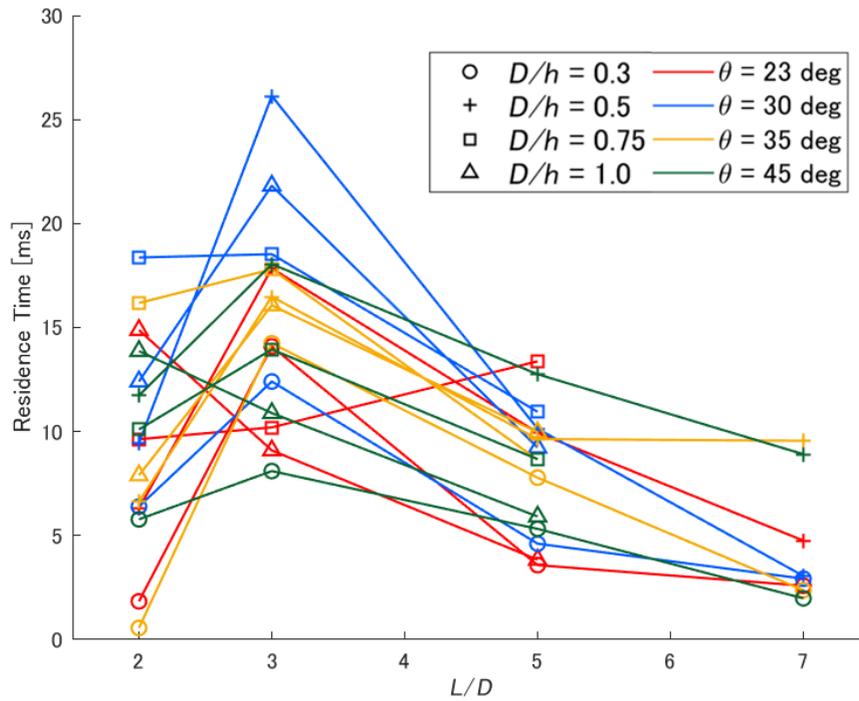
白金触媒近傍の炭化水素系アイオノマーの密度分布には大きな違いはないが、含水率の上昇に伴い酸素透過係数が急激に低下し、高含水率になるとほぼ横ばいとなっている。



有効プロトンホッピングの回数

本研究では、拡散に貢献するプロトンホッピングを有効プロトンホッピングとして、その回数を計算した。その結果、1 ns あたりの有効プロトンホッピング回数は 200 K において増加し、高含水率においてより顕著であった。

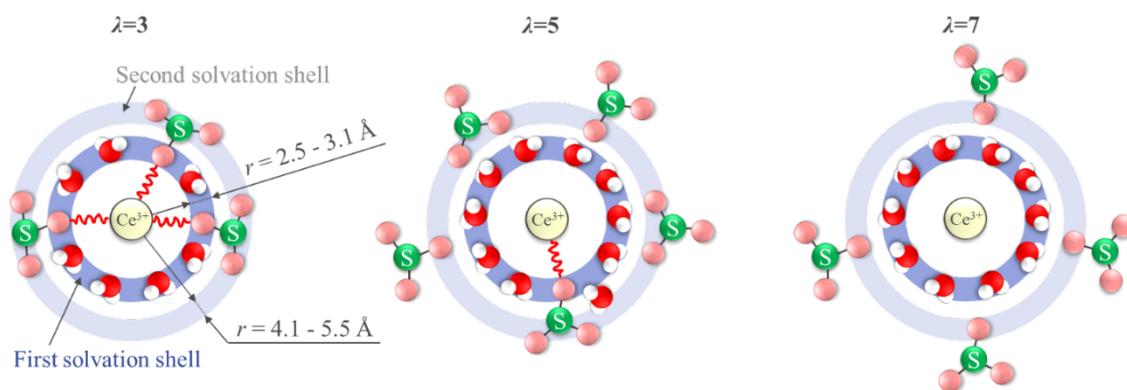
低飛行マッハ数条件下におけるスクラムジェット模擬燃焼器の火炎安定化手法の創成



滞在時間と L/D の関係

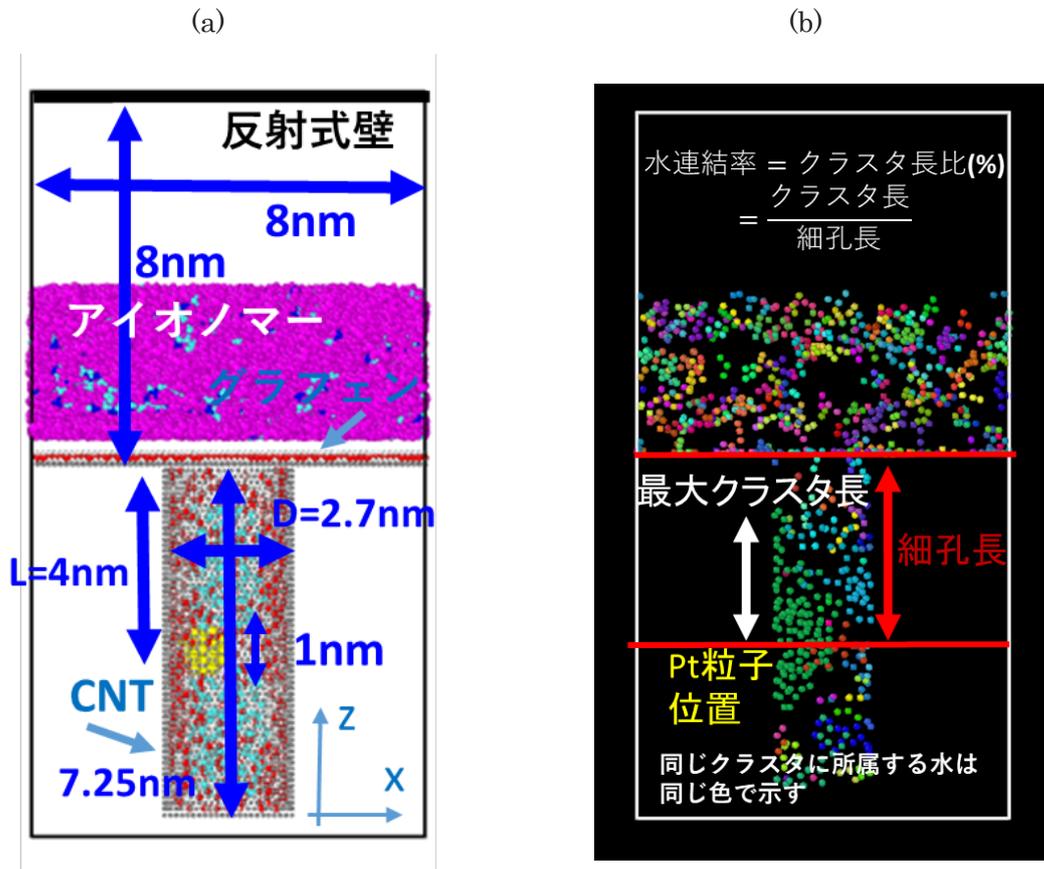
各形状に対する滞在時間を示している。L/D = 3 で最大値となっていることがわかる。

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



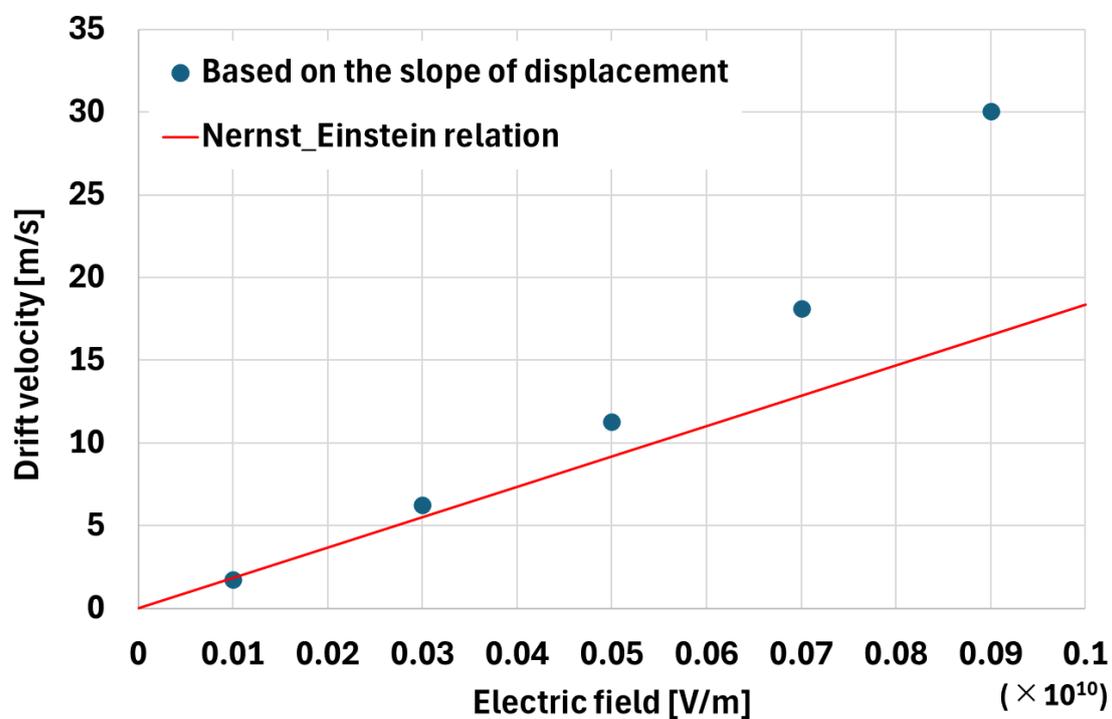
含水率の変化によるセリウムイオン周りの分子構造の変化

低含水時にはセリウムイオンは完全水和状態に比べて脱水しており、スルホ基の酸素原子と直接相互作用をする。含水率が上昇するにつれてセリウムイオンは完全水和に近づいていき、含水率 5 でスルホ基と水分子が入れ替わるように再配位を繰り返し、含水率が 7 で完全水和するというような分子構造の変化によって含水率によるセリウムイオンの輸送性変化の要因がわかった。



(a)一次細孔計算系と(b)細孔内水連結性の評価

(b)の結果より，一次細孔内には連結していない水クラスターが多数存在していることがわかる。

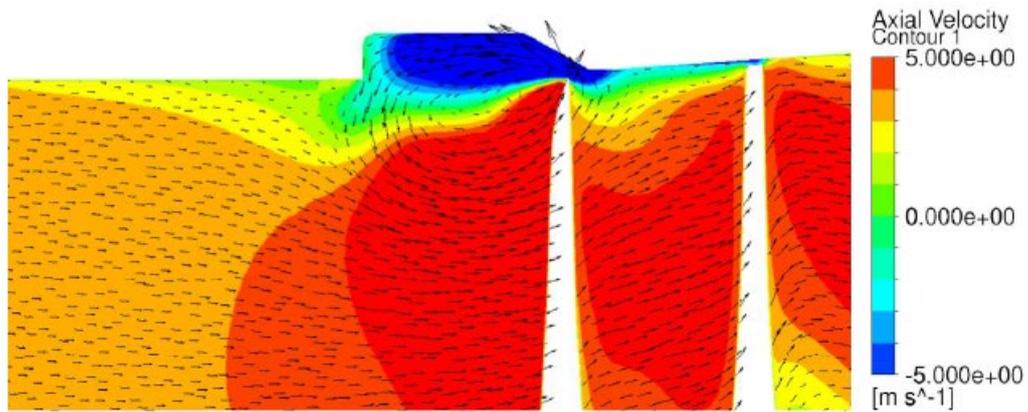


鉄鋼中の炭素原子のドリフト速度の電場依存性

分子動力学シミュレーションを使用して、炭素原子のドリフト速度を解析した。解析結果より、電場の増加に伴い炭素原子のドリフト速度は Nernst-Einstein 関係に従わなくなることを明らかにした。

GR06APR24

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新規抑制デバイスの開発と抑制メカニズムの解明

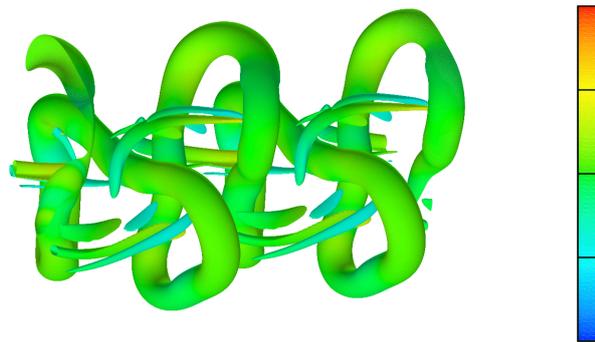


逆流返しライナ付きインデューサの流れ場

インデューサチップ部の前縁を通る子午面における速度ベクトルと軸流速度コンター分布.

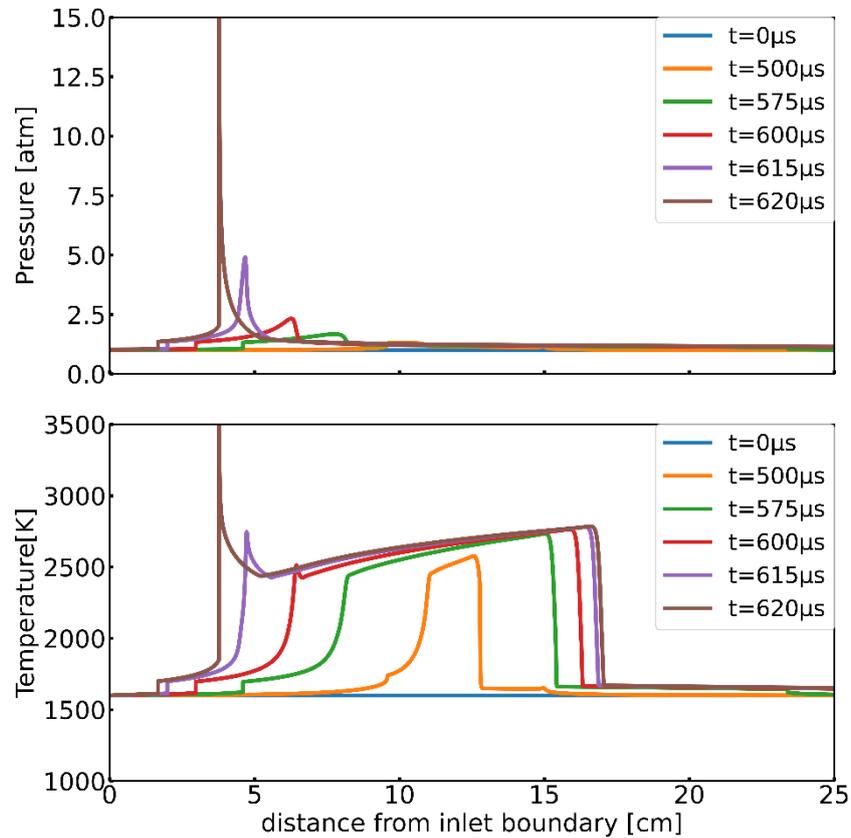
GR09APR24

らせん渦系の乱流遷移過程の直接数値シミュレーション研究



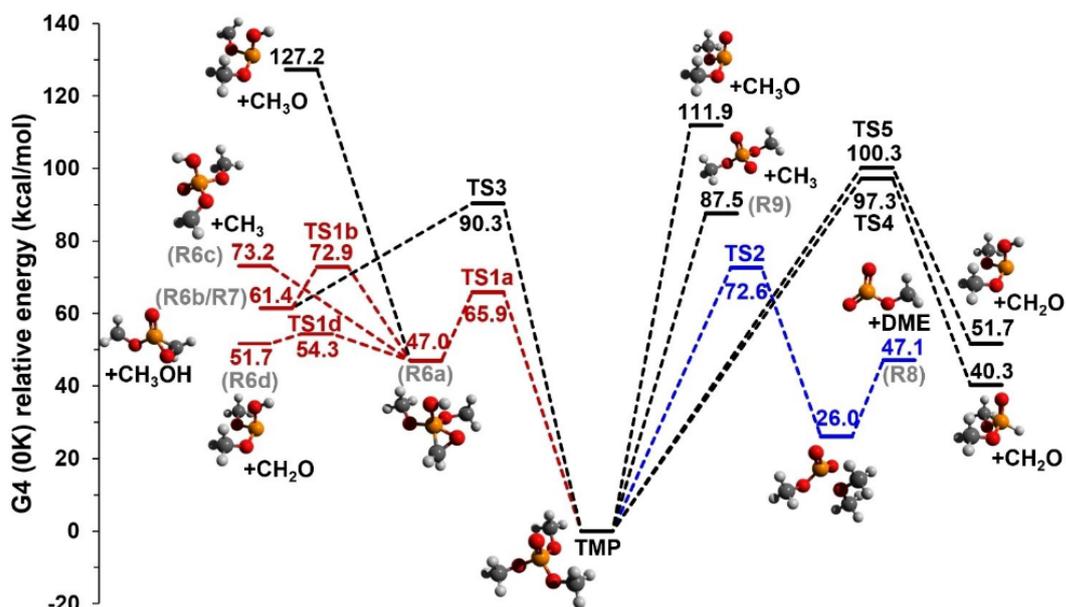
らせん渦の非線形発展

$kL=3/2$  の波長をもつ長波長不安定性モードを擾乱として与えたらせん渦の非線形発展の様子を渦度の大きさの等値面で示したものである.



#### Autoignitive reaction wave からの Deflagration to Detonation の発生

従来、Deflagration to Detonation を発生させるには長時間の多次元計算が必要とされていたが、1次元の Autoignitive Reaction Wave から Deflagration to Detonation を確認した。

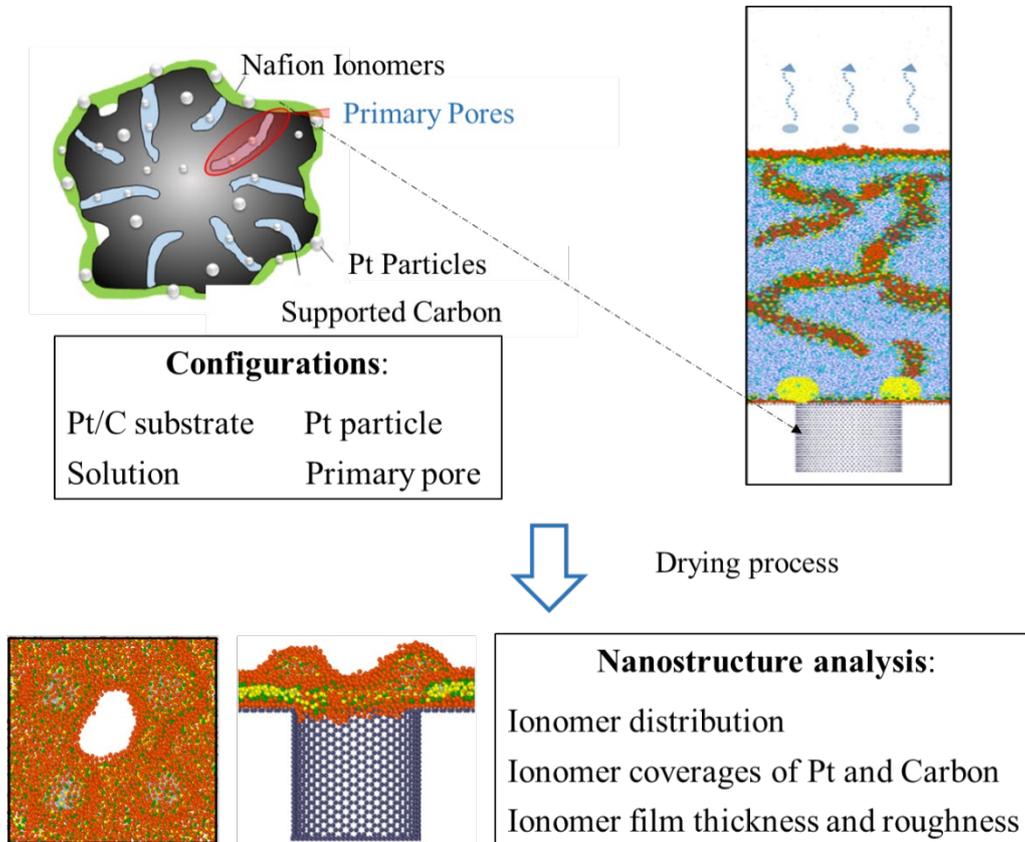


リン酸トリメチル (TMP) の単分子解離反応におけるエネルギー図

バッテリー難燃剤候補のリン酸トリメチル (TMP) の単分子解離反応について Gaussian を用いた量子化学計算により探究した. TMP から直接メチルラジカルを生成する反応より, 異性化を経て解離する反応がエネルギー的に優位であることが分かった.

GR02SEP24

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

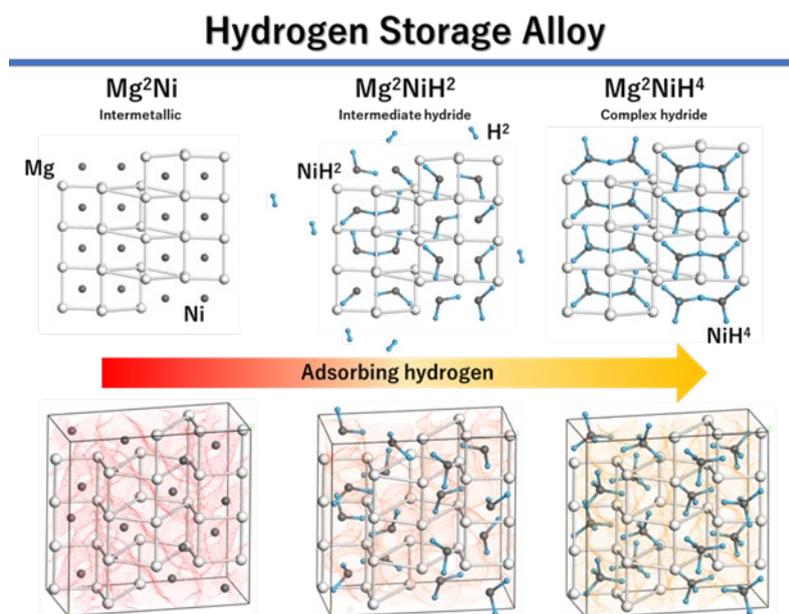


一次細孔を有する Pt/C 触媒層における Nafion アイオノマーの分布と構造変化

Nafion アイオノマー溶液は乾燥過程で Pt/C 基板上に膜を形成する。本研究では、CGMD シミュレーションを用いて、一次細孔の存在がアイオノマーの分布や構造変化に及ぼす影響を解析した。

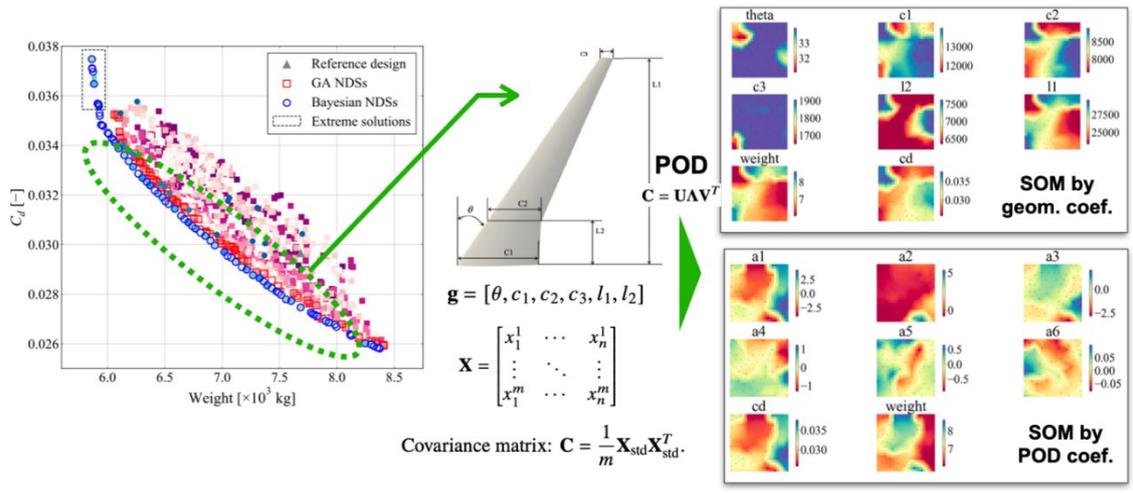
GR03SEP24

水素吸蔵合金内部の水素の挙動および金属の相変化に関する分子論的解析



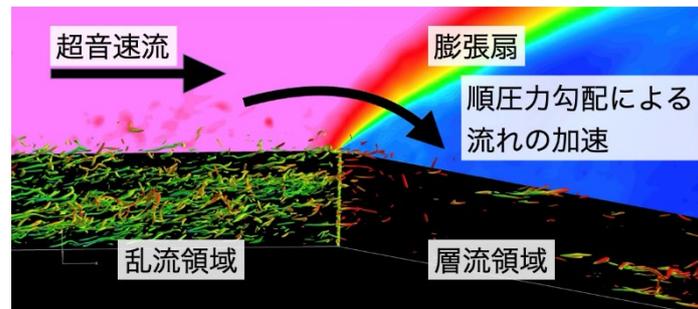
第一原理計算を用いた水素吸蔵合金の特性解明と安全性向上に関する研究

合金結晶構造内の水素を Fukui 関数によって定量的解析を行い可視化したもので、赤いほど反応性が高く、水素貯蔵能力の高さを示している。



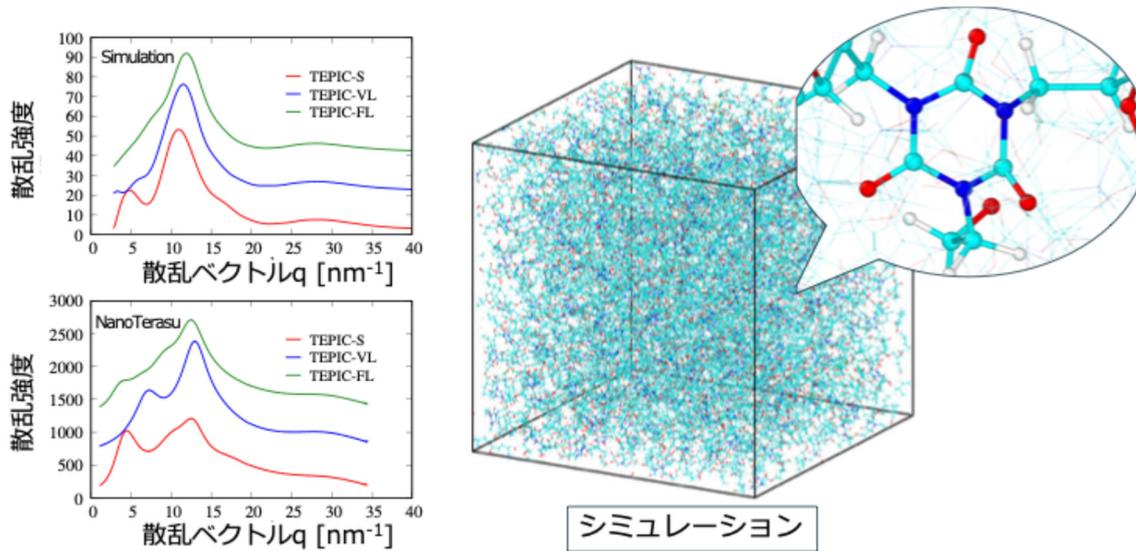
複合材航空機主翼の多目的最適化における主成分分析

複合材航空機主翼の多目的最適化における主成分分析を行い、パレート解群を構成する主要な主翼形状パラメータを同定することができた。



膨張コーナーにおける渦構造

膨張コーナー周り瞬時場のマッハ数によって色づけられた速度勾配テンソルの第二不変量  $Q$  の等値面を示しており，背景は圧力分布である．超音速で流入した乱流境界層が順圧力勾配による加速を経て再層流化するようすを示している．



分子シミュレーションと放射光の連携

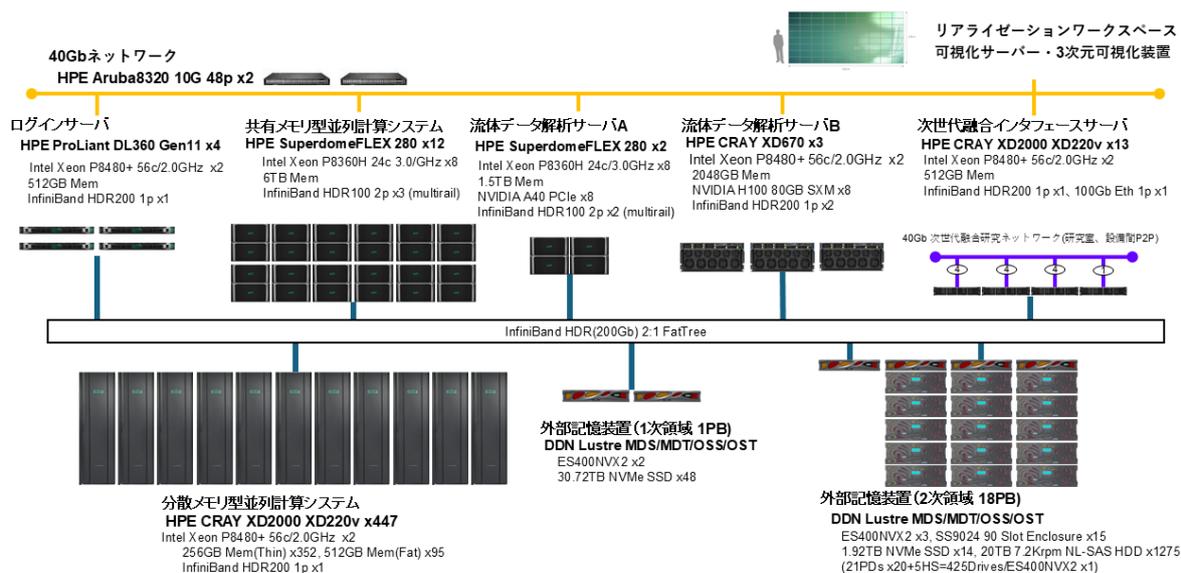
分子シミュレーションから得られた架橋構造の散乱スペクトルは放射光を用いて得られる広角散乱スペクトルとよく一致し、その妥当性の検証および構造の可視化を可能とした。

## 次世代融合研究システムの構成

2024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 II<sup>\*1</sup>)」は、スーパーコンピューティングを行う計算サーバ群、計算結果の画像解析のための3次元可視化サーバ、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。

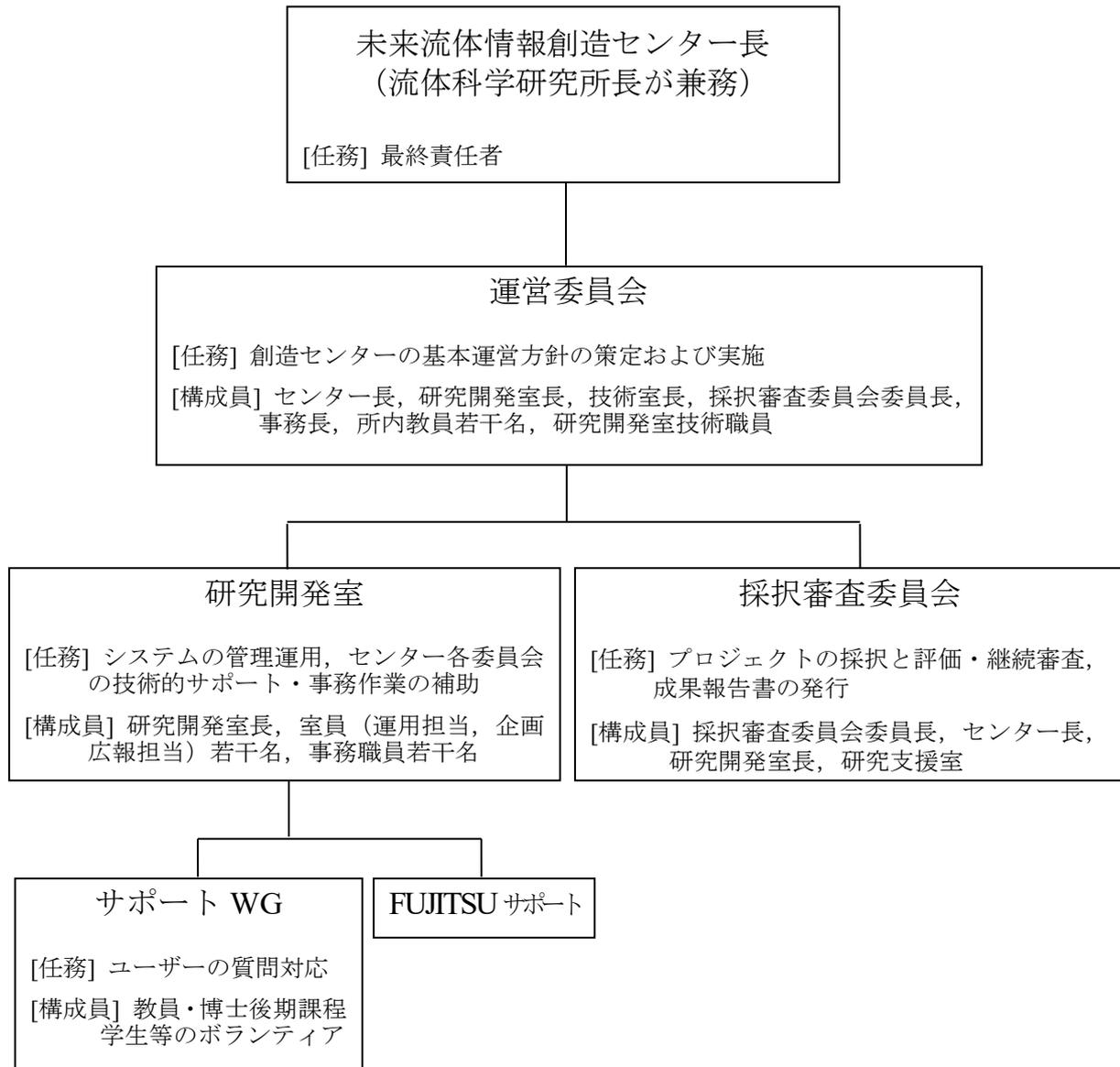
計算サーバ群は、HPE による分散メモリ型並列計算システムと共有メモリ型並列計算システムを主力として構成されており、システム総理論演算性能合計 4.4PFLOPS・最大共有メモリ 6TB・主記憶容量合計 223TB の計算機能を提供します。

サーバ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。

<b>計画研究</b>	重点的に推進するプロジェクト
<b>公募共同研究</b>	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
<b>共同研究</b>	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
<b>一般研究</b>	通常のプロジェクト
<b>若手研究</b>	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
<b>連携研究</b>	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
<b>特定研究</b>	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)  
第二十八巻  
(2024年4月～2025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 SP01APR24	航空宇宙流体の数理解物理学とその応用に関する研究	大林 茂 教授	.....1
-------------	--------------------------	---------	--------

<公募共同研究>

2 CP01APR24	Non-Boussinesq effects on the turbulent natural convection	小宮 敦樹 教授	.....6
3 CP02APR24	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	.....9
4 CP04APR24	那覇空港の滑走路運用に関する研究	焼野 藍子 准教授	.....13
5 CP05APR24	突起を持つロータブレード周りの低レイノルズ数における流れ構造の解明	伊神 翼 助教	.....17
6 CP06APR24	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	.....19
7 CP08APR24	火星飛行機実現に向けた柔軟膜翼の流体解析手法の研究	永井 大樹 教授	.....23

8	CP09APR24	ソニックブーム評価関数の気象モデルへの実証 大林 茂 教授	.....26
9	CP10APR24	非平衡的挙動を示す乱流場におけるエネルギー・スカラ輸送機構に関する 数値研究 服部 裕司 教授	.....30
10	CP12APR24	乱流渦中の渦線バンドル束のトポロジーによる軸流発生メカニズムの解析 服部 裕司 教授	.....35
11	CP13APR24	マッハ数と圧力勾配がリブレットの性能に与える影響調査 焼野 藍子 准教授	.....39
12	CP15APR24	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	.....43
13	CP16APR24	気象改変技術の構築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 教授	.....46
14	CP17APR24	動的架橋反応を伴う高分子材料のマルチスケール分子シミュレーション 菊川 豪太 准教授	.....51
15	CP18APR24	機械学習による特徴量重要度に基づく有機材料の構造/熱物性相関の解明 菊川 豪太 准教授	.....54
16	CP21APR24	Dual-Phase 固体酸化物電解質膜内の酸素イオン伝導特性のマルチスケール解析 徳増 崇 教授	.....56
17	CP22APR24	複発ロータ機の流れ干渉効果がロータ性能に及ぼす影響の解明 永井 大樹 教授	.....59
18	CP24APR24	大動脈弁を考慮した大動脈・左心室系の血流解析 船本 健一 准教授	.....62

19	CP25APR24	キャリア選択性パッシベーションコンタクト界面構造の分子動力学解析 徳増 崇 教授	.....64
20	CP26APR24	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	.....70
21	CP01MAY24	金属液滴内部気孔の排出に関する 3 次元シミュレーション 高奈 秀匡 教授	.....74
22	CP02MAY24	CO <sub>2</sub> permeability through (microalgae) lipid membrane using molecular dynamics simulation 馬淵 拓哉 准教授	.....77
23	CP01DEC24	YSZ 相転移とイオン伝導性メカニズム 小原 拓 教授	.....80
<共同研究>			
24	CL03APR24	自然対流に特化した境界層制御技術の創成 小宮 敦樹 教授	.....83
25	CL07APR24	血管内治療シミュレーションのためのさまざまな数値ソルバーの比較 安西 眸 准教授	.....86
26	CL14APR24	矢軸まわりの回転を伴うアーチェリー矢を過ぎる流れの数値解析 服部 裕司 教授	.....89
27	CL19APR24	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 准教授	.....91
28	CL20APR24	流体機械設計のためデータ駆動・データインフォームドアプローチの研究 阿部 圭晃 准教授	.....93
29	CL23APR24	Super-resolution reconstruction of turbulent flows using diffusion- based model 服部 裕司 教授	.....95

30	CL27APR24	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 .....	99
31	CL01JUN24	熱的に揺動する膜上のチューリングパターン：異方性の起源に関する数 値的および数理的な研究 内一 哲哉 教授 .....	101
32	CL01AUG24	全固体電気化学デバイスの大規模電気化学 - 流体力学連成解析におけ るマルチフィジクス・マルチスケール解析 伊賀 由佳 教授 .....	106
33	CL02AUG24	レーザー誘起気泡圧潰衝撃力の材料への影響に関する流体/材料連成数 値解析 伊賀 由佳 教授 .....	112
34	CL03AUG24	微小重力環境下におけるアンモニア球状火炎伝播の数値シミュレーシ ョン 中村 寿 教授 .....	115
＜一般研究＞			
35	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 .....	117
36	GR02APR23	液体・ソフトマター・界面の分子熱物性解析 小原 拓 教授 .....	121
37	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 .....	124
38	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 .....	129
39	GR05APR23	スーパーコンピューティングによる先端車輻基盤技術研究 石本 淳 教授 .....	133

40	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的解析 徳増 崇 教授 .....	135
41	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 .....	138
42	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 .....	142
43	GR01MAY23	CLCF の F-/H+輸送機構に関する分子論的研究 馬淵 拓哉 准教授 .....	145
44	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 .....	148
45	GR01APR24	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 .....	152
46	GR02APR24	低飛行マッハ数条件下におけるスクラムジェット模擬燃焼器の火炎安定 化手法の創成 早川 晃弘 准教授 .....	155
47	GR03APR24	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 .....	158
48	GR04APR24	燃料電池触媒担体細孔中の水の状態および物質輸送特性の解明 徳増 崇 教授 .....	161
49	GR05APR24	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研究 徳増 崇 教授 .....	164
50	GR06APR24	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新規 抑制デバイスの開発と抑制メカニズムの解明 伊賀 由佳 教授 .....	166

51	GR07APR24	機械学習技術の応用と数理解析による乱流の物理の解明 服部 裕司 教授 .....	170
52	GR08APR24	アジョイント法と流れの直接数値シミュレーションによる形状最適化研究 服部 裕司 教授 .....	175
53	GR09APR24	らせん渦系の乱流遷移過程の直接数値シミュレーション研究 服部 裕司 教授 .....	182
54	GR02AUG24	内部を機能化した人工 DNA チャンネルのイオン輸送特性に関する分子論 的解析 馬淵 拓哉 准教授 .....	186
55	GR03AUG24	着火と火炎を繋げる理論を用いた革新的燃焼器開発に向けた数値的研究 森井 雄飛 助教 .....	189
56	GR01SEP24	再生可能エネルギー時代の燃料および化学物質の燃焼特性に関する研究 中村 寿 教授 .....	193
57	GR02SEP24	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 .....	198
58	GR03SEP24	水素吸蔵合金内部の水素の挙動および金属の相変化に関する分子論的解析 徳増 崇 教授 .....	201
<若手研究>			
59	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 准教授 .....	204
60	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 .....	210
<連携研究>			
61	EF01APR24	表面形状、加飾による空力向上の検討 焼野 藍子 准教授 .....	213

<特定研究>

- 62 FS01APR24 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 .....216
- 63 FS02APR24 複数の分岐点を含む流れ場を記述する低次元モデリング手法の確立  
大西 直文 教授 .....221
- 64 FS03APR24 多様体構造を考慮した parametrized ROM の構築に向けた大規模数値解析  
大西 直文 教授 .....225
- 65 FS04APR24 相分離構造を有する複合材料の力学特性に関するマルチスケール数値解析  
岡部 朋永 教授 .....228
- 66 FS01DEC24 Energy efficiency gain of oil-lubricated hydrostatic bearings  
大西 直文 教授 .....232

# 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	SP01APR24
研究種別	計画研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025年9月3日提出

## 航空宇宙流体の数理物理学とその応用に関する研究

大林 茂, 焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 教授, 准教授

小川 拓人, 猪熊 建登, Achille Hippolyte Jacquemond

東北大学流体科学研究所 特任研究員

高見 光, 野本 京佑, 川端 敦仁, 宗 巨樹, 中村 勝海, Flavien Colusso

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

本研究室はこれまで、直接数値計算による詳細な流れ場解析と多様な風洞実験を組み合わせた融合計算技術を駆使し、航空機や車両などの輸送機器が実際に運行する際の流体力学的な諸問題の解決に取り組んできた。摩擦抵抗低減に関する研究では、後退翼での未解明な遷移機構を解明し、さらに「表面粗さは抵抗を増加する」という既存概念を覆す新知見を獲得するなど、世界最高水準の成果を上げてきた。

本研究プロジェクトは、大規模並列計算機を用いても実機レベルの数値計算が依然として困難であるという課題を背景に、これまでの成果をさらに発展させることを目的としている。高解像度大規模並列直接数値計算を主軸に、風洞実験、データ同化、およびデータ科学を融合させることで、航空宇宙流体の数理物理学的理解を促進し、その応用として、将来的な革新的な輸送機体設計手法や、抵抗低減デバイスの実用化指針を得るための提案を行うことを目指す。

## 1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内の最終目標は、以下の四つの研究テーマを推進し、将来的には輸送機本体の性能向上のための、基盤技術の構築を行うことである。

- ✓ 高解像度大規模並列化による直接数値計算の実施、特に境界層遷移やマイクロ粗さ上での流れ現象の解明
- ✓ 最適な実験データ取得によるデータ同化シミュレーション技術の向上
- ✓ 機械学習などのデータ科学に基づく乱流モデルの構築と機体設計への応用

- ✓ 数値解析を援用した風洞実験の計画と検証

## 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

本研究期間において、CFD（計算流体力学）とデータ科学を融合させた新しい解析手法の開発に取り組んだ。特に、機械学習を用いた乱流モデルを適用した非定常 RANS（レイノルズ平均ナビエーストックス）シミュレーションにより、カルマン渦の剥離現象をより高精度に再現する手法を確立した（Kawabata *et al.*, ICFD2024）。また、ジェット騒音の発生メカニズムを解明するため、モード分解手法を用いて内部フィードバックループの流体感度解析を実施し、その知見を Springer Proceedings に発表した（Morita *et al.*, 2024）。さらに、燃焼場の着火遅延時間シミュレーションにシュリーレン画像流速計測からのデータ同化を適用し、シミュレーション精度の向上に成功し、学術論文に成果を発表した（Yakeno *et al.*, Flow Measurement and Instrumentation, 2024）。

### 2.2 新しい現象の解明

本研究では、航空機や宇宙輸送機の性能向上に直結する、流体现象の新しい知見を数多く獲得した。第一に、分散型マイクロ粗さ（Distributed Micro Roughness: DMR）の抵抗低減メカニズムについて、DNS（直接数値シミュレーション）を用いて詳細に解明した。DMR 上での抵抗低減に寄与する流れの秩序構造を特定し、その物理的メカニズムを明らかにした（Ogawa *et al.*, IUTAM Transition, ICFD2024）。第二に、実機飛行条件下の後退翼境界層における乱流遷移について、DNS を用いて詳細な研究を行った。この研究により、既知の定在波だけでなく進行波の発生を観察し、遷移の主要因となる可能性を示唆した。この成果は、航空機的设计において極めて重要な知見である（Mori *et al.*, AIAA Aviation Forum and ASCEND, 2024）。この一連の研究は、従来の「表面粗さは抵抗を増加する」という概念を覆すものであり、特許「評価装置、粗面、評価方法及びプログラム」の登録にもつながった。

## 3. 研究目標の達成状況

本研究期間で、当初の研究計画をおよそ達成できた。高解像度大規模並列直接数値計算については、極超音速アポロ型カプセル周りの流れ場解析や、乱流遷移におけるコヒーレント構造の解明など、多岐にわたる研究を推進した。データ同化シミュレーション技術の向上については、燃焼場への適用に成功し論文を発表することができ、今後さらなる応用が期待される。データ科学に基づく機体設計については、機械学習を用いた乱流モデルの検討が進み、より高速で高精度な解析手法の構築に向けた基盤を築いた。数値解析を援用した風洞実験の計画と検証については、DMR の効果に関する知見が特許として認められるなど、具体的な成果に結びついた。

## 4. まとめと今後の課題

本研究期間における成果は、航空宇宙流体力学の新たな可能性を切り拓くものであり、国内外の学会で高く評価された。特に、境界層遷移の新たな物理的解明と、それを応用した抵抗低減技術に関する研究は、特許登録という形でその独創性が認められた。これらの成果は、航空機や宇宙輸送機の将来的な設計に大きなインパクトを与えるものである。今後の課題としては、

これらの基礎研究で得られた知見を、さらに実用的な技術へと昇華させていく必要がある。特に以下の課題に取り組んでいく。

- ✓ DMR の抵抗低減効果について、より複雑な実機形状での検証を行うための研究。
- ✓ 乱流モデルの機械学習適用をさらに進め、複雑な流れ場の予測精度を向上させること。
- ✓ データ同化を多様な流体现象に適用し、実験と計算の融合をさらに深化させること。

これらの研究を通じて、本研究が「流体力学の基礎理論の拡張」と「革新的な技術提案」を両立させるという目標を達成できるよう、今後も継続的に研究を推進していく所存である。

## 5. 研究成果リスト

### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

#### 学術雑誌（解説等を含む）

Aiko Yakeno, Rin Inamura, Naoki Watanabe, Ryoichi Yoshimura, Shigeru Obayashi, Naoki Kurimoto, Scott Skeen: Data assimilation for combustion ignition delay time simulation using schlieren image velocimetry, Flow Measurement and Instrumentation, Vol. 97 (2024), 102596. (査読有り)

Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Study of an Aeroacoustic Internal Feedback Loop in a High-Speed Jet Using Mode Decomposition Methods, Journal of Flow and Energy, Vol. 2 (2024), pp. 67-83. (査読有り)

Shota Morita, Aiko Yakeno, Christophe Bogey, Shigeru Obayashi: Flow Sensitivity Analysis for the Feedback Loop Phenomenon of Subsonic Jet Noise Generation, Springer Proceedings in Physics, (2024), pp. 281-286. (査読有り)

#### 著書

該当なし

#### 国際学会

Aiko Yakeno, Jens Fransson: Transition physics and turbulence modeling to reproduce it, International Conference of Fluid Dynamics (ICFD2024) (2024年11月18日).

Atsuhito Kawabata, Aiko Yakeno, Richard D. Sandberg: Unsteady RANS simulations of vortex-shedding using CFD-driven machine-learned turbulence closure, International Conference on Fluid Dynamics (ICFD2024) (2024年11月19日).

Takuto Ogawa, Aiko Yakeno: Coherent Structures over Distributed Micro Roughness Related to Drag Reduction, International Conference of Fluid Dynamics (ICFD2024) (2024年11月19日).

Takuto Ogawa, Aiko Yakeno: DNS study of Flow Mechanism Contributing to Drag Reduction over Distributed Micro Roughness, IUTAM Transition (2024年9月2日).

Yuji Mori, Aiko Yakeno, Takuto Ogawa, Shigeru Obayashi: Numerical Simulation of Transition over a Transonic Swept Wing with Distributed Roughness, IUTAM Transition (2024年9月2日).

Yuji Mori, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: DNS of Boundary-Layer Transition over a Transonic Swept Wing under Real Flight Condition, AIAA Aviation Forum and ASCEND, AIAA 2024-4486 (2024). (責任著者)

Yuji Mori, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: DNS of Boundary-Layer Transition over a Transonic Swept Wing under Real Flight Condition, AIAA Aviation FORUM (2024年8月2日).

Takuto Ogawa, Aiko Yakeno: Parametric Study of Distributed Roughness Effects for Transitional Flow, Twelfth International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD12) (2024年7月15日).

Yuji Mori, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi: Coherent Wave Generation in Swept-Wing Boundary Layer Transition at a Real Flight Condition, 13th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP13) (2024年6月28日).

Takuto Ogawa, Aiko Yakeno: Numerical investigation of distributed roughness effects for transient flow, 13th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP13) (2024年6月26日).

#### 国内学会・研究会等

猪熊建登, 焼野藍子, Flavien Colusso, 八柳秀門, 丹野英幸: 極超音速 Apollo 型カプセル周りの流れ場における表面 trip 敷設の影響に関する RANS 解析, 2024 年度 衝撃波シンポジウム (2025年3月13日).

焼野 藍子: 流体の支配方程式: 工学と理論の橋渡し JST CREST 決定論的支配方程式による非線形・散逸・偶然性の動力学, 第3回「ムーンショット目標8 高垣プロジェクト」ワークショップ (2025年3月11日). (招待有り)

金子 賢人, 大山 聖, 焼野 藍子: 宇宙輸送機への適用に向けたリブレットに関する研究, 令和6年度宇宙航行の力学シンポジウム (2024年12月16日).

金子 賢人, 大山 聖, 焼野 藍子: 遷音速旅客機の巡航速度におけるリブレットの粘性抵抗低

減効果, 第 56 回流体力学講演会／第 42 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム (2024 年 7 月 4 日).

焼野 藍子: 輸送機器の高性能化のための様々な研究の紹介, 東北大学流体科学研究所・本田技術研究所 技術交流会 (2024 年 6 月 21 日).

焼野 藍子: The need for advanced analysis of flow transition as a difficult fluid engineering problem, 京都大学応用数学セミナー (2024 年 5 月 21 日). (招待有り)

焼野 藍子: Superlayer fluid science near the surface of objects for more effective transportation, 第 12 回若手アンサンブルワークショップ (2024 年 5 月 20 日). (招待有り)

焼野 藍子: Aerodynamic challenges for more effective transportation: turbulence drag reduction, laminarization and flow separation controlling, Current Advances in Turbulence and Multiphase Flows at Okinawa Institute of Science and Technology (OIST) (2024 年 4 月 17 日). (招待有り)

## 5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

令和 6 年, 特許登録, 特許第 7609489 号, 「評価装置, 粗面, 評価方法及びプログラム」, 特許権者 国立大学法人東北大学, 発明者 焼野藍子, 出願番号 特願 2023-560283, 出願日 令和 5 年 5 月 31 日, 登録日 令和 6 年 12 月 23 日

# 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	CP01APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025年8月4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 Associate Professor, 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(例)

Using a massively parallelized 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 analyze turbulent mechanisms and structures, as well as to develop essential models for turbulent NCBL flows.

## 2.2 新しい現象の解明(例)

Our studies reveal that the turbulence of natural convection is developed independent of  $Pr$ , where the outer plume becomes turbulent prior to the near-wall until the shear is strong enough to sustain turbulence locally in the near-wall. Massive scale DNS of  $Pr=0.71$ , 4.16 and 6 confirmed the existence of the ultimate turbulent regime, with a shear-instability mechanism and a log-law type scaling for the skin friction. The laminar—turbulent transition, however, is found to be characterized by a buoyant-instability, so that the transitional flow is better characterized by the thermal boundary layer rather than the velocity boundary layer. In the ultimate regime, all  $Pr$  cases demonstrate a similar near-wall coherence structure with clear streaky behavior. However, the streak spacings are shown to be dependent on the Prandtl number due to the remnant buoyancy in the near-wall: with increasing  $Pr$  the spacing grows larger.

## 3. 研究目標の達成状況

So far, this series of massive scale fully resolved DNSs have successfully captured the turbulence development in both air ( $Pr=0.71$ ) and water ( $Pr=4.16$ ,  $Pr=6$ ). Using these high fidelity data, we established the world's first 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, as evidenced in the joint Journal of Fluid Mechanics publications. We have successfully extended the findings for air flow ( $Pr=0.71$ ) to the water flows at different ambient temperatures (25 and 42 degrees Celsius), while highlighted and modelled the Prandtl number effects for the heat transfer and statistics. In addition to the temporal framework, we have also got one MPhil student (J. Lu) working on the spatially developing flows for  $Pr=2$  and  $Pr=6$ , whose preliminary results show excellent agreement with the temporal flows, confirming the similar mechanisms in the spatial counterpart. These results and findings are communicated to the community via academic conferences and a Journal of Fluid Mechanics manuscript (see details listed in section 5 below).

## 4. まとめと今後の課題

We have confirmed the emergence of the ultimate regime in high-Prandtl-number flows and revealed the mechanistic differences in turbulent near-wall structures induced by variations in  $Pr$ , achieved by adjusting the ambient temperature of water. Our ongoing research aims to extend these insights, currently derived from temporally evolving frameworks, to canonical spatially developing configurations. In addition, we plan to investigate strongly non-Oberbeck–Boussinesq (non-OB) conditions, such as air flows with temperature differences of  $dT = 50, 100$  and  $200K$ , to explore the interplay between thermal stratification and flow dynamics. We believe that both non-OB effects and spatial development can be systematically analyzed with continued HPC support, offering valuable insights into turbulence control

strategies in real-world thermal-fluid systems.

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, A. Komiya, S. W. Armfield and N. Williamson, Unified thermal scaling and Prandtl number effects in vertical natural convection, Journal of Fluid Mechanics (Under review).
2. J. Ke, A. Komiya, S. W. Armfield and N. Williamson, Non-Oberbeck-Boussinesq effects on the turbulent natural convection, Journal of Fluid Mechanics (In prep).

著書

N/A

国際学会

1. J. Ke, A. Komiya, S.W. Armfield and N. Williamson, In 13<sup>th</sup> Australasian Natural Convection Workshop, Canberra, ACT Australia, 1-3 December 2025 (Accepted).
2. J. Ke, A. Komiya, S.W. Armfield and N. Williamson, In 13th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, Perth, WA Australia, 26-27 June 2025.
3. J. Lu, A. Komiya, S.W. Armfield and J. Ke, In 13th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, Perth, WA Australia, 26-27 June 2025.
4. J. Ke, A. Komiya, S.W. Armfield and N. Williamson, In 24th Australasian Fluid Mechanics Conference, Canberra, ACT Australia, 1-5 December 2024.
5. J. Lu, A. Komiya, S.W. Armfield and J. Ke, In 24th Australasian Fluid Mechanics Conference, Canberra, ACT Australia, 1-5 December 2024.

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）

N/A

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP02APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 4 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，助教

菊川豪太

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

ナノ粒子を溶媒中に分散したナノフルイドは、プリンテッドエレクトロニクス用ナノインクなどへの応用が期待される機能性流体材料である。また、ナノ粒子を高分子に内包させた高分子ナノコンポジット材料は、材料の機能を飛躍的に向上させることが可能であることから、機能性材料として様々な分野での応用が期待されている。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・抑制に加えてナノ粒子の空間構造の制御が不可欠である。その一手法として表面を有機分子で修飾したナノ粒子を利用する方法が注目されている。

表面修飾ナノ粒子を含む材料の製造プロセスにおいては、単独溶媒を用いる場合に比べて混合溶媒を用いる場合の方が多い。よって、混合溶媒中における表面修飾ナノ粒子の分散安定性を向上させることが望まれる。これを達成するためには、混合溶媒と表面修飾ナノ粒子との親和性を評価することが必要となる。

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解明することを目的とする。

## 1.2 研究期間内の最終目標

従来の研究では、単独溶媒あるいは単独高分子と表面修飾無機固体との界面親和性に関する研究が広く展開されてきた。実プロセスにおいては、単独成分を用いる場合は特殊なケースであり、ほとんどの系では混合物が使用される。本研究では、実プロセスで一般的に用いられる混合成分系への展開を志向し、表面修飾無機固体と混合溶媒との界面における現象を愛明することを目標としている。

## 2. 研究成果の内容

### 2.1 表面修飾無機固体と混合溶媒との界面現象

表面修飾ナノ粒子／混合溶媒界面の一部を模擬した界面モデルを構築して全原子分子動力学(MD)シミュレーションを実行した。無機固体は表面を水酸化した  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  (0001), 修飾鎖はデカン酸を対象とした。表面修飾率は最大修飾密度 4.9 分子/ $\text{nm}^2$  を 100%と定義し, 修飾鎖層への溶媒の浸透について調査するため, 修飾率は 50%とした。混合溶媒は良溶媒としてシクロヘキサン, 貧溶媒としてエタノールを対象とし, 混合溶媒中のエタノール体積分率を種々変更した。温度は 300 K, 圧力は 1 MPa とした。全ての計算には LAMMPS を用いた。シミュレーション結果を用いて, 界面近傍の構造を可視化評価するとともに, 界面垂直方向の質量密度分布を評価した。混合溶媒におけるエタノール体積分率は, 溶媒浸透前におけるエタノールの体積を全溶媒の体積で除した値として定義した。

平衡状態において, 固体表面における修飾鎖の構造は無秩序であり, 溶媒は修飾鎖層に浸透した。いずれの組成条件においても, エタノール分子が  $\text{Al}_2\text{O}_3$  表面に吸着する様子が観察された。修飾鎖の周囲に存在する溶媒に着目すると, エタノール体積分率が 40 vol%の場合では, 修飾鎖の周囲にはシクロヘキサンが多く存在した。エタノール体積分率が 60 vol%の場合, エタノールも修飾鎖の周囲に存在した。

質量密度分布から, エタノール体積分率が 40 vol%の場合では, 修飾鎖とシクロヘキサンの密度分布が重なっていることから, 修飾鎖層にシクロヘキサンが浸透しており, 一方で, エタノールは修飾鎖の密度分布とはほぼ重なっていなかった。エタノール体積分率が 60 vol%の場合では, 修飾鎖とエタノールの密度分布が重なっている領域があり, シクロヘキサンに加えてエタノールも修飾鎖層に浸透することが確認された。

### 2.2 界面親和性と溶媒組成との関係の解明

修飾鎖／混合溶媒間の相互作用を定量的に評価するため, 修飾鎖／混合溶媒間の分離に必要な仕事を付着仕事から抽出して評価した。エタノール体積分率が 0–40 vol%の範囲では, 仕事の値はほとんど変わらなかった。これは, このエタノール体積分率の範囲では, 修飾鎖層にはシクロヘキサンのみが浸透し, エタノールは浸透しなかったためと考える。エタノール体積分率が 40–100 vol%の範囲では, エタノール体積分率が大きいほど仕事は小さかった。これは, エタノール体積分率がある値を超えると, その存在量の多さゆえにエタノール分子が修飾鎖層へ浸透し, その結果として修飾鎖／溶媒間の相互作用が弱くなったためと考える。よって, 修飾鎖と混合溶媒との親和性には, 修飾鎖層に浸透した溶媒の組成が影響すること, そして修飾鎖層に存在する溶媒の組成はバルク液体中とは異なり, 修飾鎖分子と個々の溶媒分子との相互作用の強さに左右されることが示唆された。

## 3. 研究目標の達成状況

これまでの検討において, 単独溶媒を対象に, MD シミュレーションによる表面修飾ナノ粒子／溶媒間の親和性を評価するとともに, ナノフルイド液滴からのナノ粒子構造体の形成の実験的な観測に成功し, 表面修飾ナノ粒子の設計指針を確立することができた。本研究によって, MD シミュレーションによる手法を, 実プロセスで重要となる混合溶媒系へと展開, 発展させ,

ナノフルイドの界面現象に関する重要な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、単独溶媒のみならず実プロセスにおいて重要な混合溶媒に対して、表面修飾ナノ粒子を高濃度分散させたナノフルイドを設計する指針を示すことができた。

今後は、分子スケールで獲得される知見と粒子スケールでの知見を融合する方法論を確立し、表面修飾ナノ粒子を含有するナノフルイドを用いた材料製造プロセスにおいて、材料中におけるナノ粒子の空間構造とプロセス条件との関係を解明することが望まれる。

#### 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

###### 学術雑誌（解説等を含む）

1. Eita Shoji, Akira Hoshino, Tetsushi Biwa, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri : Superspreading Wetting of Nanofluid Droplet Laden with Highly Dispersed Nanoparticles, *Langmuir*, 40, (2024), 26509–26516.

###### 著書

2. 久保正樹, 斎藤高雅 : 表面修飾ナノ材料の分子スケール・粒子スケール可視化シミュレーション, *粉体工学会誌*, 61, (2024), 606-611.

###### 国際学会

3. Takamasa Saito, Yuto Sato, Masaki Kubo, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Atsuki Komiya : Molecular dynamics study for interfacial structure and affinity between surface-modified metal oxide and binary mixtures of organic solvents, *The 20th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2024)*, Sendai, (2024).

###### 国内学会・研究会等

4. 斎藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川 豪太, Surblys Donatas: 表面修飾  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /ポリプロピレン間の界面熱抵抗に及ぼす表面修飾率の影響, 第61回日本伝熱シンポジウム, 神戸, (2024).
5. 佐藤悠都, 斎藤高雅, 久保正樹, 庄司衛太, 菊川 豪太, Surblys Donatas, 小宮敦樹: 分子動力学シミュレーションによる表面修飾  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /混合溶媒界面における親和性評価, 第61回日本伝熱シンポジウム, 神戸, (2024).
6. 斎藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, Surblys Donatas, 久保百司: 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及ぼすナノスケール構造の影響, 化学工学会第55回秋季大会, 札幌, (2024).
7. 佐藤悠都, 斎藤高雅, 久保正樹, 庄司衛太, 菊川 豪太, Surblys Donatas, 小宮敦樹: Molecular dynamics study of interfacial phenomena between surface-modified  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and solvent mixture, 令和6年度化学系学協会東北大会, 秋田, (2024).

8. 佐藤悠都, 斎藤高雅, 久保正樹, 庄司衛太, 菊川 豪太, Surblys Donatas, 小宮敦樹: 分子動力学シミュレーションによる表面修飾無機固体／混合溶媒間の界面親和性の評価, 化学工学会宇都宮大会 2024, 宇都宮, (2024).

## 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

### 受賞

9. 2024 年 9 月 15 日, 優秀ポスター賞, Molecular dynamics study of interfacial phenomena between surface-modified  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and solvent mixture, 佐藤悠都, 令和 6 年度化学系学協会東北大会.
10. 2024 年 11 月 7 日, 分子動力学シミュレーションによる表面修飾無機固体／混合溶媒間の界面親和性の評価, 佐藤悠都, 化学工学会宇都宮大会.

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP04APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 4 日提出

## 那覇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 准教授

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

## 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。沖縄県の主要空港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。そのため、那覇空港に離発着する航空機の運行状況を知ること、および空港周辺の風環境予測をすることは重要である。以上の背景より、本研究では、那覇空港の滑走路運用対する風環境が及ぼす影響有無について調査することを目的とする。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本年度は、年が異なる同一日において那覇空港に離発着する航空機の運行状況を調査する。さらには、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し、渦が移流する様子を調査する。

## 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）

本研究は公募共同研究であり、得た成果は航空機の実際の運行状況を可視化したものであるとともに、流体シミュレーションによる滑走路周辺の風環境を明らかにしたものである。そのため、これらの結果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る。特に、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・儀間の所属先は沖縄県内の航空会社との包括連携を結んでおり、運行状況に関する分析を進めてきた結果をヒアリングするなど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。

図 1 に那覇空港最近傍での 2015 年及び 2016 年の 9 月 17 日での風速値、及び風向の 3 時間刻みでの変化を示す。この結果、図 8 より 2016 年での風速は 21 時を除いて風速 8m/s 以上の風が生じ、その向きも南東から南方向を示している。それに対して、図 2、3 に那覇空港に離陸及び着陸する際の航空路を示す。その結果、着陸・離陸の両ケースにおいて進路が逆転している。これは、一般的に追い風成分が 8 m/s を超えた場合、離陸及び着陸が禁止となったことに関係していると考えられる。

次に、図 4 に初期条件として空港の建物に対して、斜め 70 度の一様流れ 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 4 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。

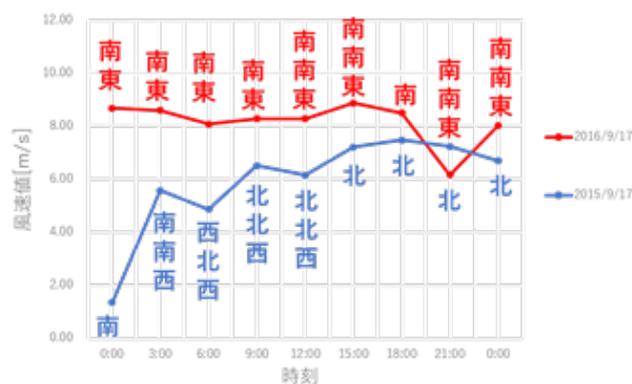
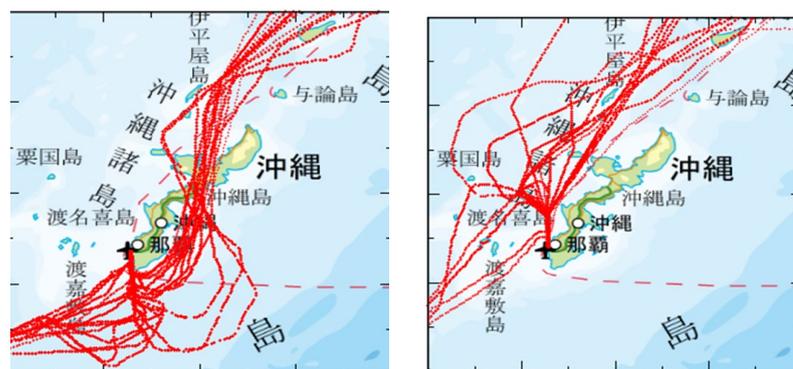


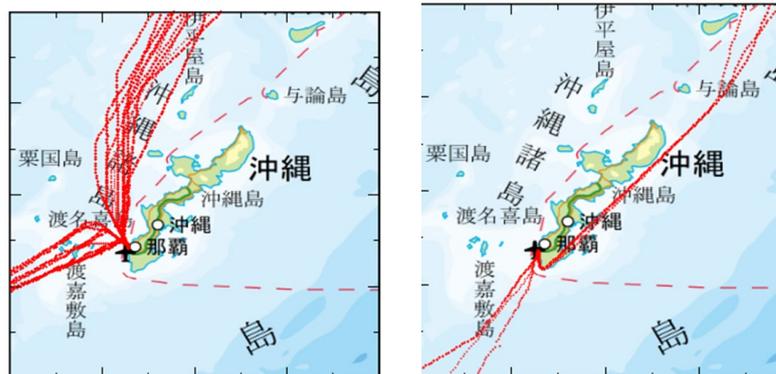
図 1 那覇空港付近での風速と風向



(a) 2015 年 9 月 17 日

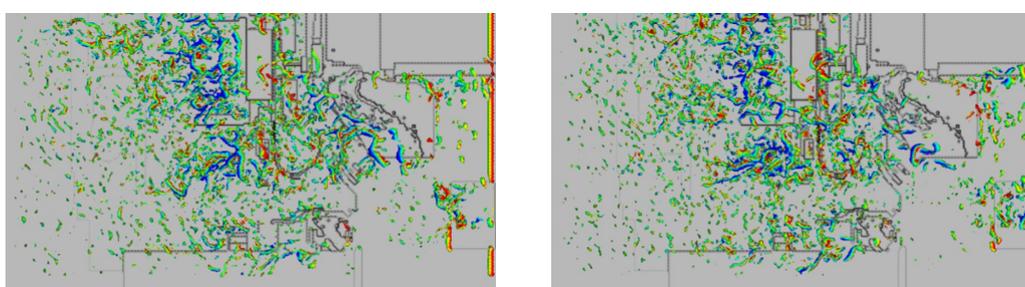
(b) 2016 年 9 月 17 日

図 2 那覇空港に着陸する場合の航空路



(a) 2015年9月17日 (b) 2016年9月17日

図3 那覇空港に離陸する場合の航空路



(a) 風速 4.1m/s のとき (b) 風速 8.2m/s のとき

図4 上空からみた那覇空港周辺での瞬間的な流れ場

### 3. 研究目標の達成状況

本年度は、那覇空港の滑走路運用対する風環境が及ぼす影響有無について調査するため、那覇空港に離発着する航空機の運行状況、および空港周辺の風環境予測を行った。その結果、着陸・離陸の両ケースにおいて進路が逆転している。これは、一般的に追い風成分が  $8 \text{ m/s}$  を超えた場合、離陸及び着陸が禁止となったことに関係を示唆することができた。さらに、風環境予測としては、異なる初期条件の風速によって滑走路に生じる渦の移流に関する違いを示すことができた。

### 4. まとめと今後の課題

本研究では、年が異なる同一日において那覇空港に離発着する航空機の運行状況を調査し、風向・風速といった風環境によって着陸・離陸の両ケースにおいて進路が逆転していることを示した。一方、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流体シミュレーションでは、初期条件に風速の初期条件が速いほど、渦の散逸が大きくなることを示した。今後は、調査した航空機の運航状況をもとに風環境の予測に向けた流体シミュレーションすることで、那覇空港の滑走路運用に対する渦散逸と離着陸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

S. Morizawa, N. Gima, and A. Yakeno, "Numerical investigation of the flow field on the railway at Naha Airport," Twenty-first International Conference on Flow Dynamics (ICFD2024), CFR-59, Sendai, Japan, November 18-20, 2024.

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	CP05APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 08 月 04 日提出

## 突起を持つロータブレード周りの 低レイノルズ数における流れ構造の解明

大塚光

金沢大学フロンティア工学系 助教

大崎歩乃花, 佐々木大輔

大阪公立大学大学院工学研究科 修士学生, 教授

川本 裕樹

東海大学工学部 研究員

伊神 翼

東北大学流体科学研究所 助教

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

#### 1.1 研究の背景と目的

低レイノルズ数領域において, 突起を付けたロータブレードまわり流れの 3 次元構造を明らかにし, 突起形状に対応したブレード表面での剥離状態を解明する. 本研究により, 低レイノルズ数ロータのブレード表面流れの制御手法の確立が期待される.

#### 1.2 研究期間内の最終目標

解析を 2 次元から 3 次元へ拡張し, 突起の形状と配置によって変化する剥離流れ構造の違いを明らかにする.

### 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 共同研究の意義

本研究プロジェクトは, 東北大学, 金沢大学, 大阪公立大学, 東海大学の 4 者から参加する研究者によって行われている. プロジェクト内では, 実験と数値解析によるアプローチで, ロータブレード周りの流れ構造の解明と, ロータ空力性能の評価を行っている. 本数値解析を実施することにより, 実験では捉えることが難しいブレード表面突起周囲の流れ構造を比較することができる. 実験と数値解析結果の比較により, 実験だけに頼るよりも短期間で, 空力性能が突起によって変化するメカニズムを明らかにすることが可能となる.

#### 2.2 平板状突起周り流れの 3 次元解析

平板上に, 半球と半円柱を配置して, 迎角を変えた際の剥離領域の大きさを比較した. 低

迎角の平板の場合、前縁から層流剥離が生じ、翼上面で流れが付着することで剥離泡が形成される。本解析では半球突起を付加することで、剥離泡が拡大することがわかった。一方で、突起が剥離泡の構造に左右する迎角は  $3^\circ$  以下であった。想定しているロータブレードの有効迎角は約  $6^\circ$  であるため、突起が剥離泡に入り流れ場に作用しないことが予想される。

半円柱突起についても同様で、迎角が大きい条件では突起の有無が剥離泡の状態に作用しなかった。また、更に半円柱の場合は、圧力抵抗の増加により揚抗比が悪化した。

### 3. 研究目標の達成状況

流れ場の3次元構造を解明するため、CFD解析により、突起周りの流れ場の特性把握を試みた。前縁剥離を生じる低レイノルズ数の薄い平板では、突起が剥離泡に埋没しない迎角が  $3^\circ$  以下となり、それ以上の迎角では突起が剥離泡の状態に影響しないことを確認した。

### 4. まとめと今後の課題

薄い翼型で低レイノルズ数では、翼型前縁から層流剥離泡が形成されることが一般的に知られている。そのため、今回行った平板翼上での流れの状態は、平板特有のものとは考えにくく、薄い翼型であれば、前縁剥離泡に突起が作用する迎角が限定されると考えられる。一方で、迎角  $3^\circ$  以上での剥離泡に対して、突起が作用する可能性が否定されたわけではない。今後、突起の形状や配置により、剥離泡の大きさに作用する迎角の条件を調べ、ロータブレード上面での剥離法の制御に有効な突起形状や配置の探索を行う。

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

#### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

##### 学術雑誌（解説等を含む）

なし

##### 著書

なし

##### 国際学会

なし

##### 国内学会・研究会等

[1] Hikaru Otsuka, Haruto Sasaki, Hiroshi Tokutake, Tsubasa Ikami, Hiroki Nagai, Honoka Osaki, Daisuke Sasaki, Yuki Kawamoto, "Plan to Study the Surface Flow of a Small Rotor Blade with a Vortex Generator," Twenty-fourth International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, Japan, 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	CP06APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 7 月 29 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, 松倉 真帆

東北大学大学院工学研究科 准教授, D3, M2, M2, 研究員

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

電気推進システムの発展によってペイロード輸送効率が高まり, 生命や宇宙の起源解明を目的とした深宇宙探査ミッション, 月や火星などの天体探査ミッションなどが実現できるようになった。一方で, 現行のイオンエンジンやホールスラスタなど静電加速型電気推進システムは, 高速で排気されるプラズマと電極とが接触するため, 電極損耗によって推進機寿命が制限されてしまい, 宇宙機が航行可能な範囲が制限されてしまう。この推進機寿命の問題を回避するため, プラズマと電極との直接的な接触を避けられる“無電極電気推進機”に注目が集まっている。無電極推進機では, 絶縁体チューブの外部に高周波 (RF) コイル, 静磁場印加用の磁石あるいはコイルを設置し, プラズマ中に誘導電流を駆動することで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。電極損耗が生じない点が利点だが, それに加え, 排気イオンは高温電子によって自動的に電氣的に中和されるため中和器の搭載が不要であり, 超寿命化と軽量化, システムの簡素化が実現出来る。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, 現在宇宙空間で使用され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, 実用化に向けて更なる性能改善が必要である。

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”が提案されている。変動磁場の電磁誘導効果によりプラズマ中に強い周方向電場を誘起し, 拡散磁気ノズルの径方向磁場と, 周方向電場とで発生するローレンツ力を電子に作用させ, 電子を軸方向に加速する。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, 高性能を達成し得ると予想されるが, 一方で現行の変動磁場型スラスタの性能はまだ十分に高いとは言えない。また, 放電チャンネル内でのプラズマ移流の物理過程も複雑さゆえ明らかになっておらず, 数値シミュレーションを用いた物理過程の理解と, それに基づく改善策の提案が

必要である。

## 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メカニズム解明を目的として、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 2 次元 3 速度成分 (2D3V) 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いため、Faraday の電磁誘導則を用いた簡易的電磁誘導モデルを新しく提案し、従来の静電的 PIC シミュレーションに組み込む。また、推進機下流のプルーム領域の振る舞いも重要だと考えられるため、荷電粒子流出を模擬できる Open boundary 条件を開発し、数値シミュレーションに組み込む。計算の結果を実験と比較することで数値計算の妥当性を検証した上で、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、推進性能を調べることで提案手法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

本研究は宇宙推進機デバイスの内部にて発生する磁化低温プラズマの流動現象を明らかにするものであり、宇宙機デバイスの非平衡プラズマ流に詳しく、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、複雑な流動現象への理解が深まり、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、パラメータの数も膨大であることから、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  $512 \times 128$  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。加えて、推進機下流のプルーム領域でのプラズマ流動現象を再現すべく、Open boundary 境界条件を開発した。ヘリコンプラズマ推進機では、磁気ノズルに沿ってカレントフリー条件が満たされていると考えられる一方、数値シミュレーションでは電子の移動度がイオンと比較するとはるかに大きく、計算境界に到達した荷電粒子を単

に消滅させて **Open boundary** を模擬すると、カレントフリー条件が満たされない。この問題を解消するために、**Open boundary** へと到達した電子とイオンの分布関数を監視し、分布関数を台形則にしたがって積分することでカレントフリーの破綻具合を把握した上で、カレントフリーが満たされるように反射エネルギー閾値を決定して境界にて電子を反射させた。

### 2.3 数値計算結果

開発した **Open boundary** にてカレントフリー条件が満たされることが明らかとなった。これにより、下流のプルーム領域を含めたヘリコンプラズマスラスタの数値シミュレーションが可能となり、プラズマ流動現象の理解が深まり得る。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**” の形成が確認された。この **Cross field** によって電子が半径方向へと加速される事が明らかとなった。続いて、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、先行して駆動された電子とイオンとで電荷分離が発生し、イオンが半径方向へと引っ張られることが明らかとなった。スラスタ中心部に高密度イオン領域が形成され、このイオンがボルツマン電場に従って軸方向へと加速されることで、高速のイオン流が生成されることが明らかとなり、推力生成メカニズムを説明することに成功した。

また、シミュレーションを通して従来スラスタの問題点を見出すことに成功した。即ち、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分かり、推進剤利用効率や推力性能に悪影響を与えている。そこで、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。PIC 計算の結果、 $E \times B$  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

**Open boundary** 条件の開発により、下流のプルームを含めた変動磁場印加型スラスタの数値計算が可能となった。PIC 計算により、**Cross-field** の形成と電子加速、およびボルツマン電場によるイオン加速過程が明らかとなった。また、バックフローおよび誘電体壁面でのプラズマ損失によって推進性能が低下している可能性を明らかにした。そこで、局所閉磁場を利用する “コイル内蔵型スラスタ” を提案し、その有効性を示した。以上より、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

**Open boundary** 条件の開発、およびスーパーコンピューターを用いた PIC シミュレーションにより、プルームを含めた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たに提案した。今後は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調査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, “Numerical Simulation for High-speed and Low-temperature Plasma Flows in a Space Transport System,” Proceedings of Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, CFR-5 (2024).（査読なし）

著書

なし

国際学会

[1] Masayuki Takahashi, Soichiro Suzuki, Hiroyuki Suzuki, Koki Ito, and Hiroki Nagai, “Numerical Simulation for High-speed and Low-temperature Plasma Flows in a Space Transport System,” Proceedings of Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, CFR-5, Sendai (2024).

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	CP08APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 4 日提出

## 火星飛行機実現に向けた柔軟膜翼の流体解析手法の研究

永井 大樹, 伊神 翼  
東北大学流体科学研究所 教授, 助教  
佐々木 大輔  
大阪公立大学大学院工学研究科 教授  
藤田 昂志  
金沢工業大学工学部 准教授  
川本 裕樹  
東海大学工学部 研究員  
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

超小型火星飛行機による火星探査の実現に、機体重量の削減が可能な柔軟膜翼を主翼に用いた火星飛行機が提案されている。先行研究では、柔軟膜翼を用いた翼では膜の変形を積極的に利用することで最大揚力、最大揚抗比が向上することが報告されている。しかし、柔軟膜翼では、翼面上の非定常流れ場に応じて形状（膜）が振動するため、翼周りの非定常流れ場を理解することが重要である。本研究では、流体構造連成解析により、柔軟膜翼の再現をすることで、柔軟膜翼周りの非定常流れ場の詳細を明らかにすることが目的である。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、火星飛行機に対する柔軟膜翼の有効性を明らかにするため、柔軟膜翼の動的空力特性の理解を流体構造連成解析を実施して行う。本年度は、開発している流体構造連成解析手法に関して、実験との比較を通して本手法の妥当性を検討すると共に、解析精度と解析時間を両立させる設定を明らかにする。

## 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。流体構造連成解析で得られた結果を議論することで、現在の手法の問題点や更なる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、柔軟膜翼の解析において、構造解析に使用する粒子数を変化させて、流体構造連成解析を実施した。解析条件は、レイノルズ数 10,000、迎角 4.5 度であり、粒子数を 3 点、9 点、15 点と変化させた解析を実施した。その結果、粒子数が 9 点の場合、柔軟膜翼が滑らかに表現されていることが分かるのに対し、粒子数が少ない場合には表面圧力の不連続が確認できた。そのため、9 点以上の粒子数を設定することで、実用的な柔軟膜翼の解析が可能であると結論づけた。

また、本解析手法を用いて、風洞実験と同様の解析条件を設定し、柔軟膜翼の解析を行った。実験では柔軟膜翼の振動が確認できるのに対し、解析では安定性を向上させるために振動が生じないような設定になっているため、実験の再現にはまだ至っていない。

## 3. 研究目標の達成状況

本研究では、柔軟膜翼周りの非定常流れ場を数値解析により解析し、粒子数を増やすことで滑らかな形状表現が可能であることを示した。当初計画では、解析手法を拡張した 3 次元化を予定していたが、粒子数の増加に伴う構造解析の計算量増加もあり、単純な 3 次元への拡張では計算量の増大が不可避であることから、未実施である。

更に、今回風洞実験の諸条件を再現した解析を実施した。風洞実験では、柔軟膜翼の振動が生じているが、数値解析では解析の安定性を高めた解析条件のために振動を再現することはできず、柔軟膜翼の動的空力特性を明らかにするには至っていない。

## 4. まとめと今後の課題

本研究では、直交格子法に基づく非定常流体構造連成解析手法を構築し、柔軟膜翼の滑らかな変形を解析することが可能となった。風洞実験との妥当性を検証し、柔軟膜翼に生じる流れ場の詳細を再現するためには、風洞実験において柔軟膜翼に生じる振動を再現できる設定が必要である。そのためには、計算量の著しい増加は防ぎつつ、現在の解析手法を拡張することが必要である。

## 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

Kosei Funada, Honoka Osaki, Yuma Chikamoto, Daisuke Sasaki, Yuki Kawamoto, Shun Takahashi, Koji Fujita, Haruka Kurahashi, Makoto Okawa, Tsubasa Ikami, Hiroki Nagai: Fluid-Structure Interaction Analysis of Flexible-membrane Wing at Low Reynolds Number, Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2024), OS23-29, pp. 1351-1353.

#### 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	CP09APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 07 月 23 日提出

## ソニックブーム評価関数の気象モデルへの実証

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

Hiroshi Yamashita, Bastian Kern

Institute of Atmospheric Physics, German Aerospace Center

鶴飼 孝博

大阪工業大学 准教授

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与える気象 (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 of の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

過去 10 年間の気象データを用いて実施したソニックブーム伝搬解析の統計データに基づき, 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おいて, 入力変数としての気象データの取り扱い方法を検討し, 予測結果を得る. また, より実用的なサロゲートモデル構築に向けて, 地上におけるソニックブーム騒音が大気乱流との干渉によって不規則に変化する状況に対応するため, ソニックブーム騒音を高精度に推定可能な近似手法の基盤を構築する.

## 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 ソニックブーム推定の精度向上

大気乱流と干渉したソニックブームを高精度に推定するには、音波の回折特性を的確に再現することが求められる。従来の KZK (Khokhlov-Zabolotskaya-Kuznetsov) 方程式に基づく伝播解析では、音響ビームの主軸近傍の現象を対象とした放物線近似が採用されており、音源から $\pm 15^\circ$ 程度の狭い角度範囲でしか高い解析精度が得られない。そこで本研究では、大振幅音波の伝播を扱う Lighthill-Westervelt 方程式に基づき、音源から $\pm 90^\circ$ までの圧力伝播を模擬可能な一方向近似による伝播解析法を構築する。この手法の解析精度を検証するため、KZK 法に用いられる放物線近似と比較し、厳密解が得られる線形かつ均質媒体中での伝播解析を行った。

音源には、基本波長  $\lambda$  の 4 倍の直径をもつ円形ピストンを用い、一次高調波のみを発生させた。伝播媒質は、音速および密度が空間的に一様な静止空気とした。計算領域は、音波の主たる伝播方向 ( $x$  軸) に  $15\lambda$ 、それに直交する横方向 ( $y$  軸) に  $60\lambda$  の二次元領域とし、 $y$  軸方向の両端には反射のない境界条件を設定した。また、線形伝播における近似精度を評価するため、音響マッハ数を 0.001 以下に設定し、非線形効果を見捨てる条件とした。波動方程式に台形積分を適応して厳密解を得た。一方、一方向近似および放物線近似には、高速フーリエ変換を介して常微分方程式を解いた。

その結果、従来法である放物線近似に比べて、一方向近似が解析精度に優れていることが確認できた。各手法によって得られた音圧分布を図 1 に示す。音源から発生した音圧は、減衰しつつ放射状に広がり、伝播の過程で音波同士の重なりによって干渉縞が形成される。放物線近似による音圧分布では (図 1 (b)),  $x$  軸近傍においては高い解析精度を維持しているが、 $x = 0$  から  $y$  軸方向に離れるにつれて厳密解 (図 1 (a)) との乖離が顕著となる。また、干渉縞の本数が過剰であり、波の干渉が正確に再現できていない。一方、一方向近似による音圧分布では (図 1 (c)), 音源から遠ざかった広角領域においても、波の広がり角や干渉縞の構造が厳密解と比較的良く一致している。よって、大気乱流とソニックブームの干渉を高精度に解析するには、従来の Lighthill-Westervelt 方程式に基づく放物線近似に比べて、一方向近似が有効であることが示された。

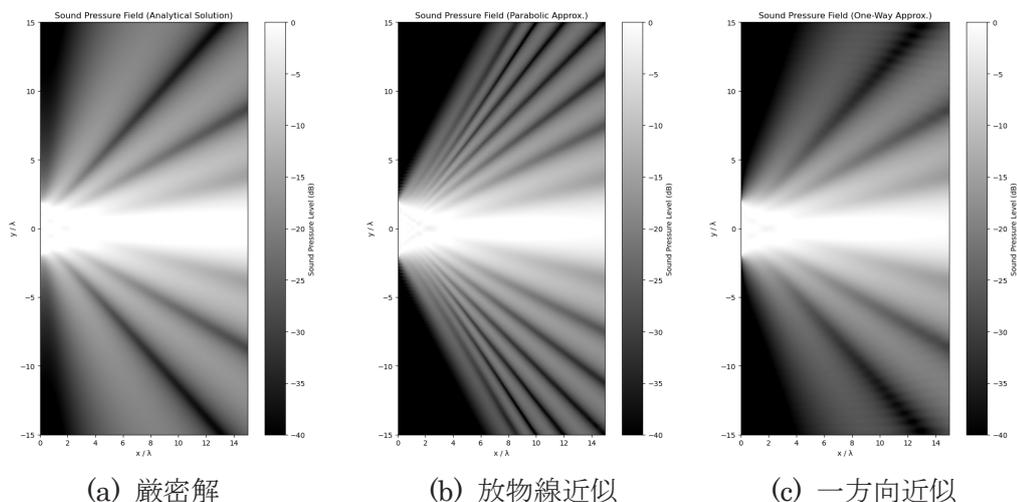


図 1 各手法によって得られた音圧分布の比較

## 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

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）を出力するようなサロゲートモデルを昨年度から引き続き検討している。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、固有直交分解（POD）による次元削減を行う。例として温度の鉛直プロファイルをモード分解した結果を図 2 に示す。最終的に **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、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ている。

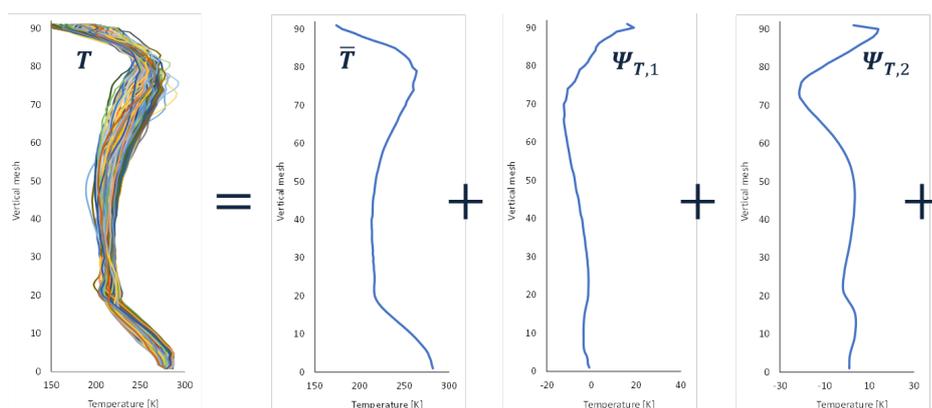


図 2 固有直交分解による温度鉛直プロファイルのモード分解例

## 3. 研究目標の達成状況

2022 年度に実施した、10 年間の気象データに基づくソニックブーム伝播解析データを用いて、**Kriging** 法によるサロゲートモデルを検討した。その結果、大気乱流を除く気象条件下においては、最大過剰圧を概ね予測できることが予備検討で分かっている。さらに、大気乱流を含む気象条件に対応したサロゲートモデルの構築に向けて、ソニックブームと大気乱流の干渉における音波の回折現象を高精度に解析可能な手法の基盤を整備した。したがって、本年度の目標は概ね達成されたと判断できる。

## 4. まとめと今後の課題

大気乱流干渉時におけるソニックブーム推算の精度向上のため、線形かつ均質な媒質中を伝播する音波に対し、2 つの近似手法を用いた伝播解析を実施し、波動方程式の厳密解と比較した。その結果、一方向近似は音響ビームの主軸から外れた広角回折領域においても厳密解と非常に良く一致し、高い解析精度が確認された。今後は、温度、湿度や風の気象条件の影響も考慮されたソニックブーム伝播解析へ本手法を実装し、大気乱流との干渉効果を正確に評価することで、より実用的なサロゲートモデルの構築を目指す。

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

### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

## 著書

なし

## 国際学会

- [1] Hiroshi Yamashita, Bastian Kern, Takahiro Ukai, Takashi Misaka, Shigeru Obayashi, Characterizing atmospheric conditions for sonic boom loudness, Twenty-fourth International Conference on Flow Dynamics, ICFD 2024, 18-20 November 2024, 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	CP10APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 7 日提出

## 非平衡的挙動を示す乱流場における エネルギー・スカラ輸送機構に関する数値研究

伊藤 靖仁

名古屋大学大学院工学研究科 教授

Muyang Wang

ハルビン工程大学, 助教

長田 孝二, 渡邊 智昭, 楠畑 天音

京都大学大学院工学研究科 教授 准教授, 博士課程学生

Yi Zhou, Muyang Wang

南京理工大学 教授 ハルビン工程大学 助教

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

近年, 完全発達乱流を基にした理論やスケーリング則が部分的にしか適用できない乱流場に関する研究が盛んにおこなわれている. この点に関して, 本研究グループにおけるこれまでの研究から, そのような結果をもたらす一部の物理的要因（例えばレイノルズ数や初期条件の依存性）の解明や乱流エネルギー減衰に関する新たなスケーリング則の提案をするに至った. しかしまだ未解明な点も多く, 明らかにされた内容は断片的であると言わざるを得ない. 特にいわゆる非平衡的挙動を示した場合, それが本当に非平衡乱流と呼べるのか, 別の要因でそれに類似する挙動を示したのかを明らかにすることは, 学術的に極めて重要である. そこで本研究では, 物体後流流れやせん断乱流, 圧縮性を考慮する必要がある乱流場等種々の流れ場に対する数値シミュレーションを実行し, 乱流統計解析などを通して, その特性と平衡性/非平衡性の関係性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

特に平衡性やエネルギーとスカラの相似性に着目した現象解明を行う. これにより, 乱流の普

遍的性質の有無やその原因を明らかにするとともに、非平衡的な性質を特徴づける物理構造を見出し、新たなスケーリング則の提案を目指す。

## 2. 研究成果の内容

本研究の目的を達成するためには、得られるデータに限界がある実験研究や乱流モデルを用いた数値シミュレーションではなく、モデルを使わない直接数値計算 (Direct numerical simulation: DNS) による流れ場の再現が必要不可欠である。しかしそのためには通常のワークステーションなどでは現実的ではない大規模かつ高速なコンピュータが必要とある。そこで本研究を東北大学流体科学研究所と共同で実施し、同研究所のスーパーコンピュータを利用して流体シミュレーションを実行した。本稿では衝撃波の干渉を受けた等方性乱流場に関する研究結果について述べる。なお本テーマの工学応用としては、超音速旅客機実現に向けたソニックブーム問題の解決を目指すものである。

### 2.1 乱流中を伝播する衝撃波の局所形状の振舞いの解明

#### 2.1.1 研究の意義と本研究の目的

既往研究[1]を通じて、乱流中を伝播する垂直衝撃波に生じる局所変形を平均曲率 $H$ 及びガウス曲率 $K$ を用いて定量評価した。加えて、流体の圧縮・膨張に関わる $-\gamma P \partial u_i / \partial x_i$  ( $\gamma$ : 比熱比、 $P$ : 圧力)の波面接線方向成分が乱流による衝撃波強度の変動に寄与することを明らかにした。本研究では乱流中を伝播する垂直衝撃波において、伝播流体の速度分布が衝撃波の局所形状に及ぼす影響を明らかにした。

#### 2.1.2 DNS データベース

Tanaka et al.[2]により行われた乱流中を伝播する垂直衝撃波の直接数値計算(DNS)のデータベースを使用した。計算領域の大きさは $(L_x, L_y, L_z) = (32L_0, 4L_0, 4L_0)$ (ただし $L_0$ は初期乱流の積分長さスケール)であり、計算格子数は $(N_x, N_y, N_z) = (2048, 256, 256)$ である。乱流領域は $2.5L_0 \leq x \leq 22.5L_0$ の範囲であり、衝撃波の初期位置は $x = 1.5L_0$ である。 $y, z$ 方向には周期境界条件を用い、 $x = 0$ には Dirichlet 境界条件、 $x = 32L_0$ には Neumann 境界条件を適用した。

干渉の初期条件は、初期衝撃波マッハ数 $M_{S0} = 1.3$ 、初期乱流マッハ数 $M_{t0} = 0.063$ 、初期乱流レイノルズ数 $Re_\lambda = 71$ である。支配方程式は理想気体の3次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式である。計算は内製の DNS コードで行った。このコードの空間離散化は非粘性項については5次精度 WENO 法、その他の項については6次精度中心差分法で行った。時間発展法は4段4次 Runge-Kutta 法である。

本研究では、乱流との干渉による衝撃波位置の変動が統計的定常となる、平均衝撃波位置が $10L_0 \leq x \leq 15L_0$ の領域[2]で解析を行った。

#### 2.1.3 衝撃波局所形状の評価

衝撃波の局所形状を平均曲率 $H$ 及びガウス曲率 $K$ で評価した。ある時刻の衝撃波面位置 $x_S(y, z)$ を $x$ 方向圧力勾配が最小となる点として定義した。Kobayashi の方法[3]を用いて衝撃波面位置 $x_S(y, z)$ における局所形状の最大曲率 $\kappa_1$ 、最小曲率 $\kappa_2$ 及び対応する波面接線方向 $t_1, t_2$ を求めた。平均曲率 $H$ 及びガウス曲率 $K$ はそれぞれ $H = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$ 及び $K = \kappa_1 \kappa_2$ で定義される。

衝撃波面の局所形状は $H$ と $K$ の符号によって 4 種類に分類され、 $H = 0$ かつ $K = 0$ の場合は平面である。 $H > 0, K > 0$ のときには楕円凹面、 $H < 0, K > 0$ のときには楕円凸面、 $K < 0$ のときには鞍状面となる。

#### 2.1.4 Helmholtz 分解

Helmholtz 分解を用いて速度場 $\mathbf{u}$ を dilatational 速度 $\mathbf{u}_d$ 及び solenoidal 速度 $\mathbf{u}_s$ に分解した。dilatational 速度は流体の圧縮・膨張に関わり、 $\nabla \times \mathbf{u}_d = \mathbf{0}$ を満たす。対して solenoidal 速度はせん断・伸長・回転といった流体の非圧縮運動に関わり、 $\nabla \cdot \mathbf{u}_s = \mathbf{0}$ を満たす。Helmholtz 分解は高速フーリエ変換(FFT)を併用した三重対角行列(TDMA)法[4]で実施した。

#### 2.1.5 結果と議論

Inokuma et al. [5]により乱流と干渉した衝撃波の shock ray が focusing・defocusing することで衝撃波強度が変動することを示す衝撃波変調モデルが提案されている。Focusing・defocusing は衝撃波局所接線方向の流体の圧縮・膨張と関わって衝撃波強度を変動させる。

本研究では、dilatational 速度接線方向成分の勾配と衝撃波局所形状の関係を調べた。 $(H, K)$  で条件付けた速度 dilatational 速度接線方向成分の接線方向勾配の条件つき平均を求めた。dilatational 速度の $t_1$ 方向成分 $u_{d1}$ の $t_1$ 方向勾配を $\theta_{t1} = \partial u_{d1} / \partial t_1$ 、 $t_2$ 方向成分 $u_{d2}$ の $t_2$ 方向勾配を $\theta_{t2} = \partial u_{d2} / \partial t_2$ とする。 $(H, K)$  で条件付けた $\theta_\alpha$  ( $\alpha = t_1, t_2$ )の条件つき平均を $\langle \theta_\alpha | H, K \rangle$ とあらわす。ここでは $\theta_\alpha$ は衝撃波面位置における値を用いている。別紙図は $\theta_\alpha$ の rms 値 $\theta_{\alpha, rms}$ と $\theta_\alpha$ の平均値 $\langle \theta_\alpha \rangle$ で標準化した $\langle \theta_\alpha | H, K \rangle$ の偏差 $(\langle \theta_\alpha | H, K \rangle - \langle \theta_\alpha \rangle) / \theta_{\alpha, rms}$ を $H - K$ 平面に描画したものである。 $H, K$ はそれぞれの rms 値 $H_{rms}, K_{rms}$ で標準化している。 $\langle \theta_{t1} | H, K \rangle$ の $\langle \theta_{t1} \rangle$ からの偏差は、衝撃波面局所形状が楕円凸面( $H < 0, K > 0$ )のときには正の値となり、楕円凹面( $H > 0, K > 0$ )のときには負の値、鞍状面( $K < 0$ )のときにはわずかに負の値をとる。 $\langle \theta_{t2} | H, K \rangle$ の $\langle \theta_{t2} \rangle$ からの偏差は、衝撃波面局所形状が楕円面のときには $t_1$ 方向と同様の結果を示し、凸面( $H < 0, K > 0$ )のときには正の値となり、楕円凹面( $H > 0, K > 0$ )のときには負の値をとる。反対に鞍状面( $K < 0$ )のときには $t_1$ 方向の結果とは異なりわずかに正の値をとる。

衝撃波面局所形状が楕円面のときには $\kappa_1$ と $\kappa_2$ は同じ符号を持ち、楕円凸面ではともに負、楕円凹面ではともに正である。対して鞍状面のときには $\kappa_1$ と $\kappa_2$ は異なる符号をもつ。したがってある接線方向 $\alpha$ への曲率が正であれば $\theta_\alpha$ は負の値をとり、反対に曲率が負であれば $\theta_\alpha$ は正の値をとる傾向があるといえる。このような局所形状に関連した dilatational 速度の勾配の変化が、局所形状が凹面のときの波面接線方向への流体圧縮及び凸面のときの流体膨張を生じさせ、shock ray の focusing・defocusing を引き起こすとわかった。この結果は既往研究で示された速度擾乱による衝撃波変調モデル[5]を支持するものである。

#### 参考文献

- [1] A. Kusuhatu, K. Tanaka, T. Watanabe, K. Nagata, and A. Sasoh, *Phys. Fluids*, 35, (2023), 086110.
- [2] K. Tanaka, T. Watanabe, and K. Nagata, *Phys. Fluids*, 32, (2020), 096107.
- [3] S. Kobayashi, "Differential geometry of curves and surfaces", *Springer*, (2019).
- [4] Y. Zhou, K. Nagata, Y. Sakai, H. Suzuki, Y. Ito, O. Terashima. And T. Hayase, *Phys. Fluids*, 26, (2014), 075105.
- [5] K. Inokuma, T. Watanabe, K. Nagata, and Y. Sakai, *Phys. Fluids*, 31, (2019), 085119.

### 3. 研究目標の達成状況

プロジェクト 1 年目である本年度は、上記の衝撃波と乱流の干渉に関する研究に加えて、物体後流流れ場、また新たな流れ場として、特殊境界条件下での流動構造に関する研究などについて調査してきた。おおむね順調に進捗したと考えている。

### 4. まとめと今後の課題

乱流の平衡・非平衡現象は本質的にエネルギー散逸に関するものであることから、様々な流れ場に対して研究を行い、その普遍的/非普遍的の性質を見出すことは重要である。次年度も本年度の研究を継続・発展させることで、研究目標の達成を目指す。

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

#### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

##### 学術雑誌（解説等を含む）

1. Y. Xie, X. Zhang, X. Xiong, Y. Zhou, Temporal evolution of the turbulence interface of a turbulent plane jet, *Journal of Fluid Mechanics*. 1001, A39 (2024)
2. S. C. Tao, Y. Xie, X. T. Shi, and Y. Zhou\*, Detection of the irrotational boundary using machine learning methods, *Physics of Fluids*. 36, 075101 (2024)
3. J. Xing, T. Watanabe, and K. Nagata, Hybrid large eddy simulation and Lagrangian simulation of a compressible turbulent planar jet with a chemical reaction, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 96, pp. 962-990, 2024.

##### 国際学会

1. Kusuhatana, K. Tanaka, T. Watanabe, K. Nagata, and A. Sasoh, Solenoidal and dilatational velocity statistics for a planar shock wave propagating in turbulence, *The 34th International Symposium on Transport Phenomena*, 4 pages, 2024, Taoyuan, Taiwan.
2. Y. Nishimoto, T. Watanabe, and K. Nagata, Local dissipation scaling in temporally developing grid turbulence, *The 34th International Symposium on Transport Phenomena*, 4 pages, 2024, Taoyuan, Taiwan.
3. Y. Xie, K. Nagata, and Y. Zhou, “Connecting the temporal evolution of the turbulence interface to the entrainment and detrainment in a turbulent plane jet”, *IUTAM bookseries (J. Wang and I. Marusic eds.)*, *Proc of the IUTAM Symposium on Turbulent/non-turbulent interface in turbulent shear flow*, 174-181, 2024, Beijing, China.
4. Muyang Wang, Yasumasa Ito, Yasuhiko Sakai, *The Modulating Effect of Coherent Structures on Inter-scale Energy Transfer in Turbulent Mixing Layer*, *Proc. 21st Int. Conference on Flow Dynamics*, pp.1012, 2024
5. Kusuhatana, K. Tanaka, T. Watanabe, K. Nagata, Y. Ito, Y. Hattori, *The Behavior of*

Local Geometries of Shock Wave Surfaces Propagating in Turbulent Flow, Proc. 21st  
Int. Conference on Flow Dynamics, CFR-8, 2024

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	CP12APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 4 日提出

## 乱流渦中の渦線バンドル束のトポロジーによる

## 軸流発生メカニズムの解析

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

乱流における渦がどのようなメカニズムでその速度構造が形成されるか、という渦の基盤的な特性を明らかにすることは、様々な乱流現象や渦のダイナミクスの解明において重要である。ローカルトポロジーにおける速度成分を分解した詳細なトポロジカル特性に着目した渦の幾何学的特性のアプローチは、旋回平面上の渦流の基本的な非対称的分布特性の条件を定めると共に、本平面や楕円的な渦流の主軸に基づくガリレイ不変の座標系の定義を可能とした。この渦空間と呼ばれる座標系における渦伸長等の作用の定式化は、渦流が渦線バンドル束を旋回させるメカニズムを明らかにした。その一方で、渦線バンドル束が旋回平面に垂直な流れである軸流の発生に大きく寄与することも示された。即ち、渦流と渦線バンドル束との相互作用により渦の速度構造が形成される、というメカニズムの存在が示唆された。この中で興味深いことは、渦領域に沿った圧力勾配の方向に反して軸流が発生する、という点である。軸流は、圧力勾配と渦線バンドル束の双方の作用によりその速度分布が定められると考えられるが、これらのバランスや分布特性を分析することにより、軸流発生メカニズムが明らかになり、渦構造の形成メカニズムの解明や現実的な渦の速度モデルの構築に繋げることができる。

本研究では、一様等方性乱流の乱流渦において、渦空間、また渦中心周りの速度成分や物理量をスペクトル分解する解析手法を用いてこれらの分布特性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

渦線バンドル束が軸流発生に関わるのは、旋回平面上の周方向成分の幾何学的特性であると考えられる。本研究では、一様等方性乱流中の渦の旋回平面上における軸流、渦線バンドル束・渦度ベクトルの周方向成分、また軸流方向の圧力勾配の渦中心周りの分布特性を比較・分析する。また、これらのスペクトル解析を行い、これらの分布の周期特性を明らかにし、軸流発生 of 支配的要因を明らかにする。

## 2. 研究成果

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渦流に基づくガリレイ不変の物理空間の座標系における渦流の幾何学的特性の理論、また各速度成分のスペクトル分布を解析する手法を応用し、軸流発生メカニズムとして考えられる渦線バンドル束、そして圧力勾配の幾何学特性の依存性を分析した。これにより、渦線バンドル束が軸流特性と非常に密接な関係があることが一様等方性乱流の渦を対象とした解析にて示された。これは、現実的な非軸対称の渦モデルの構築、また渦構造の形成メカニズムの解明において重要な成果であると考えられる。

### 2.1 渦中心周りの渦度ベクトル場・物理量のスペクトル解析

*swirlity* の極大値を渦中心とし、この点での渦空間を定義して渦中心周りの速度分布を求め、これをスペクトル解析することにより周波数特性を評価する解析は、これまでの共同研究等において開発、解析を行っている。本研究では、これを軸流並びに渦度ベクトル場、また圧力勾配場に適用する。渦度ベクトル場では、渦線バンドル束の旋回平面上における回転成分の幾何学特性を求めめるため、旋回平面上の本周方向成分を抽出し、この分布について解析を行う。また、旋回平面の法線方向の圧力勾配についても同様に解析を行い、軸流の周波数特性と比較することにより軸流に影響する要因の分析が可能となる。

### 2.2 軸流の分布特性を定めるメカニズム

擬スペクトル法により解析した一様等方性乱流中の渦において、前述した解析手法を用いて軸流、に渦線バンドル束、並びに圧力勾配の渦中心周りの分布特性とそのスペクトルを分析すると、軸流と渦線バンドル束の周方向成分は共に波数 2 の周期性を有しており、即ち、これらの分布特性は周期 2 の分布で代表されることが示された。また、これらの分布特性を定める軸流の旋回平面上のヘシアンと同平面上の渦線バンドル束のローカルトポロジーに関する周方向成分の二次形式の固有値、並びにこれらの固有ベクトルの方向が非常に高い相関で一致することが確認できた。これらのスペクトル解析では、半径が大きくなると共に増加する波数 0 の成分を除くと、渦中心では波数 2 の成分が支配的であった。一方、軸流方向の圧力勾配の分布は、軸流特性との相関が低いものではないが、フーリエ変換すると波数 2 の成分が主成分ではない異なる特性を有し、周期性の観点では相関は低いと考えられる。これより、軸流は、圧力勾配の作用によるものもあるが、主要な分布特性と周期性は渦線バンドル束の回転特性による作用が支配的であることが示された。

## 3. 研究目標の達成状況

旋回平面上の軸流の分布特性を定めるヘシアンとその固有ベクトルの方向、並びに軸流分布

のフーリエ解析の結果、軸流は渦線バンドル束・渦度ベクトルの固有値・固有ベクトルとの相関が非常に高く、またスペクトル特性も同様であった。圧力勾配との相関はあるものの、周期性のスペクトルは異なっており、圧力勾配の分布は軸流と異なっている。従って、渦線バンドル束の巡回特性が支配的要因となって軸流が形成されていると考えられる。これらの解析により、本研究の目標は達成された。

#### 4. まとめと今後の課題

一様等方性乱流の渦において、巡回平面上で軸流が発生するとき、渦線バンドル束の巡回特性が支配的要因となって軸流の形成がなされていることが示された。また、本解析において、渦中心周りの分布特性を分析するためには、スペクトルを用いた解析が有効であることが併せて示された。今後は渦線バンドル束の細かな変化における軸流特性の挙動を理論と解析から分析することにより、これらの関連をモデル化し、現実的な（非対称）渦モデルの構築に繋げることを検討する。

#### 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）

なし

###### 著書

なし

###### 国際学会

(1) K. Nakayama: Vortical Flow Structure Derived from Local Flow Geometry, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, (2024), TuFM1613.

(2) K. Nakayama, Uchima K. and Y. Hattori: An Analysis of Self-Organization of Three Dimensional Turbulent Vortical Structure Derived from Interaction between Vortical Flow and Bundle of Vorticity Lines, Proceedings of the Twenty-fourth International Symposium on Advanced Fluid Information, (2024), pp. 136-38.

(3) K. Nakayama: An Asymmetric Vortical Flow Structure Based on Local Flow Geometry and Galilei Invariant Vortex Space, Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, (2024), pp. 1076-1078.

(4) K. Uchima and K. Nakayama: Passage Characteristics of Bundle of Vortical Axis Lines in Homogeneous Isotropic Turbulence, Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, (2024), pp. 1398-1400.

###### 国内学会・研究会等

(1) 中山雄行：ローカルトポロジーから導かれる渦流の3次元構造の基本的特性, 第67回理論応用力学講演会, (2024), N-OS14-2-03.

(2) 内間海斗, 中山 雄行：一様等方性乱流における渦軸バンドル束と渦構造の形成に関する

解析, 第 67 回理論応用力学講演会, (2024), N-OS14-2-02.

(3) 内間海斗, 中山 雄行: 乱流渦における渦軸バンドル束の進行特性と渦構造に関する解析, 日本流体力学会年会 2024, (2024), 2M605-09-03.

(4) 内間海斗, 中山 雄行: 乱流渦における渦軸バンドル束の勾配テンソルを用いた曲率の可視化, 可視化情報学会第 52 回可視化情報シンポジウム, (2024), No. 154.

## 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	CP13APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025年8月8日提出

## マッハ数と圧力勾配がリブレットの性能に与える影響調査

大山 聖, 金子 賢人

宇宙航空研究開発機 教授, 東京大学大学院工学系研究科

焼野 藍子

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

航空機に対する需要は長期的に増加し続けることが見込まれている一方で, 持続可能な航空輸送を実現に向けて, 巡行時の CO<sub>2</sub> 排出量削減は喫緊の課題である. その有効な対策の一つとして, リブレットによる粘性抵抗低減が挙げられる.

リブレットは数十～百  $\mu\text{m}$  程度の微細な縦溝から構成される受動デバイスであり, 乱流域において最大で約 8~10%の粘性抵抗が低減可能であると多くの文献で報告されている. しかし, これまでの先行研究の多くは, 圧力勾配のない非圧縮完全発達乱流を対象としており, 実際の航空機周りの複雑な流れ場を十分に考慮されていなかった.

実際の航空機周りの流れ場は, 横流れの影響を受けるほか, 圧縮性や圧力勾配の影響も無視できず, これらの要因はリブレットの抵抗低減性能に大きく関与する可能性がある. したがって, リブレットを航空機に効果的に適用するためには, これらの流体力学的要因が性能に与える影響を定量的に把握することが不可欠である.

本研究では, 航空機周りの流れ場を模擬した条件におけるリブレットの抵抗低減効果を明らかにするとともに, その知見を基に航空機への実用化に向けた設計指針の構築を目指す.

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間内の最終目標は, 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およびその効果のメカニズムを明らかにすることである.

## 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）

空力設計の実問題に精通した大山教授との共同研究により, リブレットの航空機への実用化に向けた研究の促進を図った. 以下に本研究における主な成果について報告する.

まず、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、各マッハ数における滑面上の壁単位で無次元化した無次元溝幅 $s^+$ を 12, 15, 18, 21, 24, 30 となるように設定した。昨年度実施した乱流遷移流れを対象とした DNS で得た乱流流れ場データを流入に与えることで、計算領域全体で乱流場を再現した。

図 1 に、滑面に対するリブレットによる抵抗変化率分布を示す。図 1 において横軸はリブレットの無次元溝幅 $s^+$ 、縦軸は抵抗変化率を示しており、縦軸の値が負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。青のプロットはマッハ数 0.2 (非圧縮性流れ)、赤のプロットはマッハ数 0.85 (圧縮性流れ) の場合である。

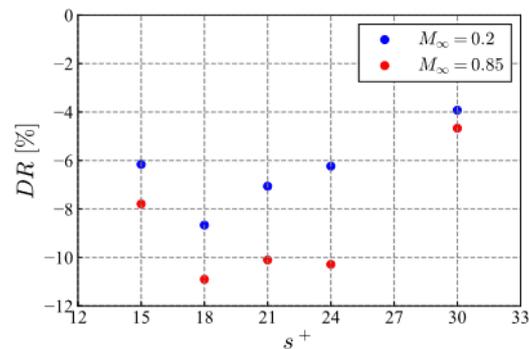


図 1. 非圧縮性流れと圧縮性流れにおけるリブレットによる抵抗変化率

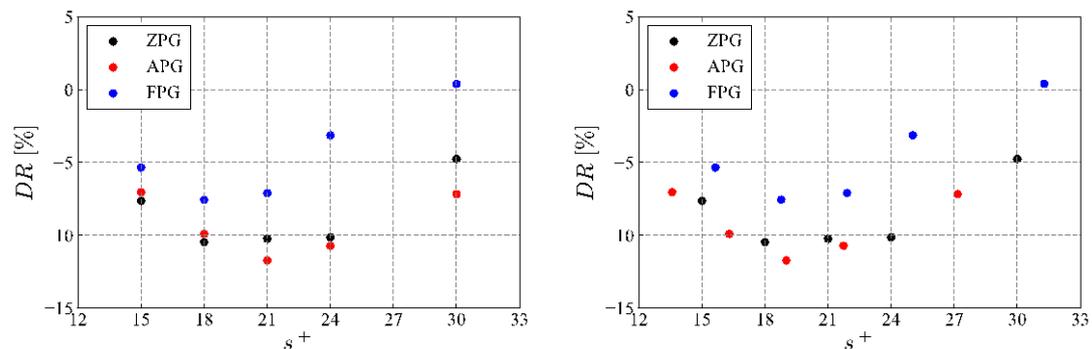
図 1 に示すように、マッハ 0.85 の条件下では、 $s^+ = 18 \sim 24$ において最大の抵抗低減効果が得られ、約 11%の抵抗低減が確認された。また、同一 $s^+$ で比較した際に、マッハ 0.85 における抵抗低減効果が、マッハ 0.2 の場合よりも大きいことが明らかになった。マッハ数の増加に伴い、縦渦の sweep および ejection 運動の強度が増加するが、この傾向が滑面に比べてリブレット面では抑制されるためであることが、レイノルズ応力の四象限解析より判明した。

本解析において、マッハ 0.2 の壁面単位を基に設定されたリブレットの無次元溝幅 $s^+ = 18$ は、マッハ 0.85 では $s^+ = 15.4$ に相当することが示された。この差異は、流れの特性および対応する壁面単位がマッハ数に依存するために生じたものであり、マッハ 0.2 における壁面単位で設計されたリブレットは、マッハ 0.85 の実際の飛行条件には直接適用できない可能性を示唆している。一方で、飛行速度条件 (圧縮性流れ条件) の壁面単位を用いて適切にリブレットを設計した場合、その抗力低減効果は、亜音速条件 (非圧縮性流れ条件) で設計した場合と比較して向上することは、先述の通りである。

次に、圧力勾配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、逆圧力勾配下と順圧力勾配下でのリブレットまわりの流れを DNS により調査した。壁面垂直方向の遠方境界に、流れ方向に一定の圧力勾配を与えることで圧力勾配流れを再現した。なお、主流マッハ数はいずれも 0.85 とした。

図 2 に各圧力勾配下におけるリブレットによる抵抗変化率分布を示す。図 2 において横軸はリブレットの無次元溝幅 $s^+$ 、縦軸は抵抗変化率を示しており、縦軸の値が負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。黒、赤、青のプロットはそれぞれ、ゼロ圧力勾配下、逆圧力勾配下、純圧力勾配下における結果である。また、図 2(a), (b)はそれぞれ、

ゼロ圧力勾配下の滑面上における壁単位で整理した場合と、各圧力勾配下の滑面上における壁単位で整理した場合における抵抗変化率分布を示している。



(a) ゼロ圧力勾配下の滑面上における壁単位で整理した場合 (b) 各圧力勾配下の滑面上における壁単位で整理した場合

図 2. 圧力勾配を伴う流れ場におけるリブレットによる抵抗変化率

図 2(a)に示すように、同一 $s^+$ で比較した際に、逆圧力勾配はリブレットの抵抗低減効果を増加させる場合がある。一方で、順圧力勾配下では $s^+ < 30$ においてリブレットによる抵抗低減効果はあるものの、その効果は小さくなることが確認された。逆圧力勾配によってリブレットの抵抗低減効果が増加する場合のその要因として、逆圧力勾配流れでは縦渦の sweep および ejection 運動の強度が増加するが、この傾向が滑面に比べてリブレット面では抑制されるためであることが観察された。対して、順圧力勾配流れでは縦渦の sweep および ejection 運動の強度は低下するが、その抑制の程度が滑面に比べてリブレット面の方が小さいためであることが明らかとなった。また、図 2(b)より、各圧力勾配下における壁単位で整理した場合には、圧力勾配の有無に関わらず $s^+ = 18, 19$ 程度のときにリブレットの抵抗低減効果が最大となることが確認された。つまり、圧力勾配が存在する場合にも、各圧力勾配下での滑面上の壁単位を基にリブレットを設計することによって、その性能を最大限引き出すことが可能であることが示された。

### 3. 研究目標の達成状況

本研究では、圧縮性と圧力勾配がリブレットの粘性抵抗低減効果に与える影響とそのメカニズムを明らかにすることを目的とし、2. に記したように達成した。

### 4. まとめと今後の課題

本研究成果により、圧縮性と圧力勾配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。また、これらの結果を踏まえて、航空機のような圧縮性や圧力勾配が存在する流れ場におけるリブレットの設計知見を獲得することができた。今後は実際に翼型ヘリブレットを適用した場合の性能評価に取り組んでいく予定である。

## 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）

金子賢人, 大山聖, 焼野藍子 : 遷移域におけるリブレットのはたらき, 日本航空宇宙学会論文集, 73 巻 (2025) , pp.33-41.

#### 国際学会

K. Kaneko, A. Oyama, A. Yakeno : Viscous Drag Reduction Effect of Riblet at Cruising Speed of Transonic Aircraft, *AIAA Aviation Forum*, (2024).

K. Kaneko, A. Oyama, A. Yakeno : Pressure Gradient Effect on the Riblet Performance at Cruising Speed of Transonic Aircraft, *EFDC1* , (2024).

K. Kaneko, A. Oyama, A. Yakeno : The Effect of Compressibility and Pressure Gradient on the Drag Reduction Performance of the Riblet, *ICFD*, (2024).

#### 国内学会・研究会等

金子賢人, 大山聖, 焼野藍子 : 遷音速旅客機の巡航速度におけるリブレットの粘性抵抗低減効果, 第 56 回流体力学講演会／第 42 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, (2024).

金子賢人, 大山聖, 焼野藍子 : 宇宙輸送機への適用に向けたリブレットに関する研究, 令和 6 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）

なし

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP15APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025年8月4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 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

地球温暖化や都市部でのヒートアイランド現象に伴い、熱中症の発症リスクが高まっている。本研究では、ふく射と対流の複合効果を考慮し、ミスト噴霧が持つ波長選択的ふく射遮蔽と冷却効果の高機能化を目指す。特に、ミスト粒径のスペクトル特性がふく射熱遮蔽および対流場に与える影響を、複合的に解析することを目的とする。

## 1.2 研究期間内の最終目標

- ・ 散乱性媒体を含むふく射-対流複合伝熱解析モデルの確立
- ・ 蒸発による粒径変化がスペクトル遮蔽と対流に与える影響の評価
- ・ ミスト冷却技術の高機能化に向けた最適粒径設計の提案

## 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

- ・ 波長依存性を考慮した複合伝熱解析において、異なる Band 数によるふく射解析精度の定量的検証を実施。
- ・ 散乱性媒体を含む DNS（直接数値シミュレーション）手法を世界で初めて適用し、乱流強度や乱流熱輸送特性への影響を評価。
- ・ 蒸発を伴う粒径変化をふく射性媒体の吸収係数変動としてモデル化し、対流場との相互作用を予測可能な手法を構築。

## 2.2 新しい現象の解明

- ・ ミストによるふく射遮蔽が、従来の水膜よりも有効である可能性を数値的に実証。
- ・ 境界層中の吸収係数変動によって、自然対流の遷移挙動（層流↔乱流）を制御できることを確認。
- ・ 散乱媒体中のふく射が人体に与える伝熱量に与える寄与を初めて定量評価。

## 3. 研究目標の達成状況

解析手法の開発と数値モデルの精度検証を順調に達成中。DNS における散乱特性の取り込み、Band 数依存性の検証、蒸発モデルの基礎構築など、当初の計画に沿って着実に進展している。

## 4. まとめと今後の課題

ミスト冷却の波長選択制御がふく射遮蔽と対流制御の両面で有効である可能性が見出された。今後は、単一水粒子の蒸発モデルの精緻化および人体モデルとの統合により、熱中症対策としての実効性をさらに検証し、社会実装に向けた基盤技術を確立する。

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

### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

#### 学術雑誌（解説等を含む）

江目宏樹, 城野雅斗, 古川琢磨, 川井喜与人, 岡島淳之介: ウォーターミストによる火災熱放射の遮蔽の高機能化, 第72回全国消防技術者会議資料, (2024), pp. 344- 353.

#### 国際学会

Hiroki Gonome, Masato Jono, Kiyoto Kawai, Wenjing Xing, Shuichi Moriya, Junnosuke Okajima, Takuma Kogawa: Effect of Atomization Characteristics of Two-Fluid Nozzle on Radiative Shielding of Mist for Heat Stroke Prevention against Thermal Radiation from the Ground Surface, Proceedings of the 24th International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI2024), (2024).

Masato Jono, Takuma Kogawa, Kiyoto Kawai, Wenjing Xing, Shuichi Moriya, Junnosuke Okajima, Hiroki Gonome: Effect of Atomization Characteristics of Two-fluid Nozzle on Radiative Heat Transfer in Fire Accident, Proceedings of the 21st International Conference on Flow Dynamics (ICFD2024), (2024).

Masato Jono, Takuma Kogawa, Kiyoto Kawai, Wenjing Xing, Shuichi Moriya, Junnosuke Okajima, Hiroki Gonome: Effect of Atomization Promotion by Mist Spray on Radiative Shielding Performance, Proceedings of the 12th International Conference on Smart System Engineering 2024, (2024).

Masato Jono, Takuma Kogawa, Kiyoto Kawai, Wenjing Xing, Shuichi Moriya, Junnosuke Okajima, Hiroki Gonome: Experimental Evaluation for Radiative Heat Transfer in Polydisperse Water Mist, Proceedings of the 5th International Workshop on Nano-Micro Thermal Radiation (NanoRad2024), (2024).

## 国内学会・研究会等

北村昂輝，古川琢磨，江目宏樹：生体温熱モデルを用いた熱中症評価のための数値解析手法の確立，日本機械学会東北支部第 60 期総会・講演会講演論文集，(2025).

江目宏樹，城野雅斗，古川琢磨，川井喜与人，岡島淳之介：ウォーターミストによる火災熱輻射の遮蔽の高機能化，第 72 回全国消防技術者会議講演論文集，(2024). [招待講演]

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：二流体ノズルの微粒化特性がミストのふく射遮蔽性能に与える影響，日本機械学会熱工学コンファレンス 2024 講演論文集，(2024).

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）

2024 年 11 月，令和 6 年度消防防災科学技術賞，総務省消防庁

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP16APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 4 日提出

## 気象改変技術の構築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

## 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)）を用いて再現した極端気象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

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 法などによるため繰り返し計算が必要である。そのため、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、一般的な特異ベクトル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。米国大気研究センターを中心に開発された気象モデルの WRF に接線系/随伴モデルを備えた 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。

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。また、ここで選択したアクチュエータ位置は場を大きく変化させるための位置であり、雨量を最小化するための入力を決める必要がある。本研究では、乱択特異ベクトル法で得た低次元モデルを用いて、各アクチュエータの on/off を変化させ、終端状態での最大降水量地点の雨量を最小化するアクチュエータの on/off の組み合わせを総当たりで探索する方法を実装した。

本研究では、2018年7月5日12時から18時を対象に西日本地域の解析を行った(図1)。この時間帯は集中豪雨の初期に相当する。図2,3に示すように応答モードと感度モードが得られた。なお、これらのモードは Lanczos 法により得られた特異ベクトルとおおよそ一致することを確認した。

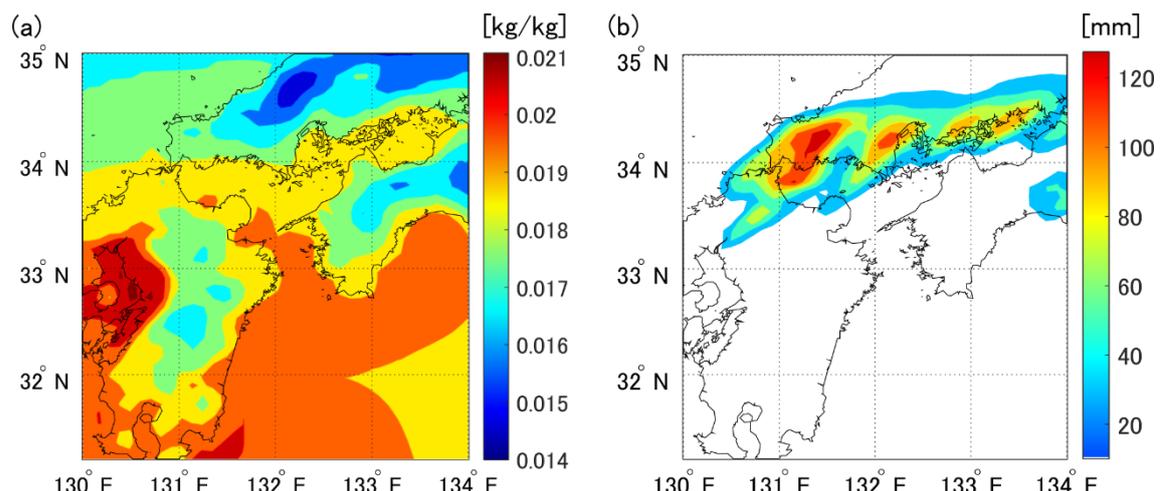


図1：ベースの状態量分布。(a) 地表水蒸気量(初期状態); (b) 積算雨量(終端状態)。

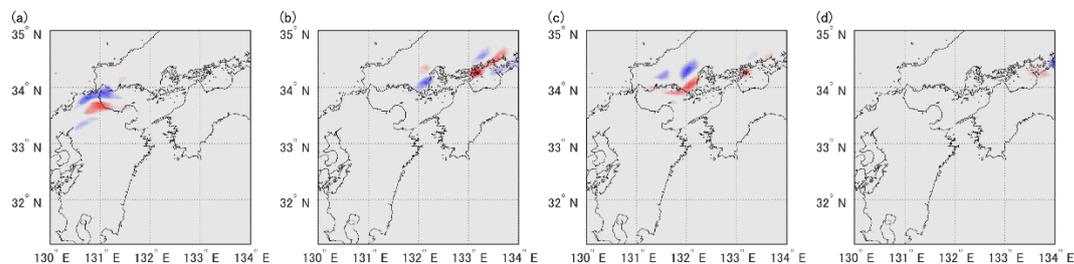


図2：得られた特異モード(左特異モード)。

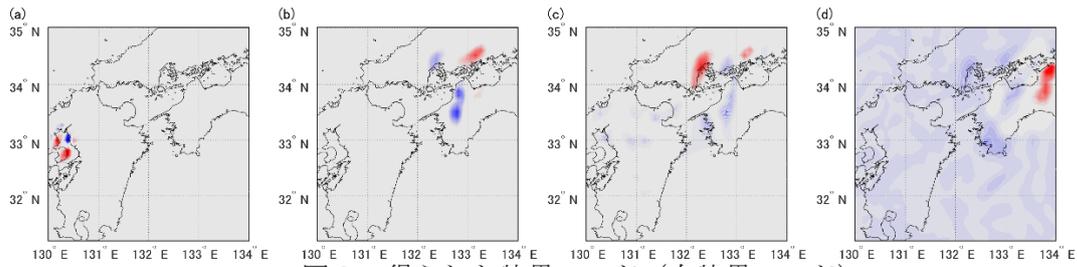


図3：得られた特異モード（右特異モード）.

図4に終端状態における積算雨量分布と提案手法により選択されたアクチュエータ位置を示す。図から、アクチュエータ位置は強雨域の南西側、つまり風上側が選択されたことがわかる。これは、地表での介入が上空のなど雲へ影響を与え、降雨量を変化させると考えれば妥当な配置と考えられる。図5は、地表水蒸気量に対する介入により終端状態がどれだけ変化したかを示す。“Greedy”は提案手法により選択した16点の候補の中から $p$ 点を乱択して介入を行った場合で、“Random”は関心領域全体から $p$ 点を乱択して介入を行った場合である。尚、入力は $3 \times 3$ セルのガウス分布で行い、300パターンのアクチュエータ位置を生成して解析した。介入は地表水蒸気量を $\alpha$ 倍することで行った（ $\alpha=0.1$ であれば初期場の地表水蒸気量を10%削減）。図から、領域全体から乱択して介入を行った場合に比べて提案手法で選択された場所で介入を行った場合の方が終端状態における状態が大きく変化する。

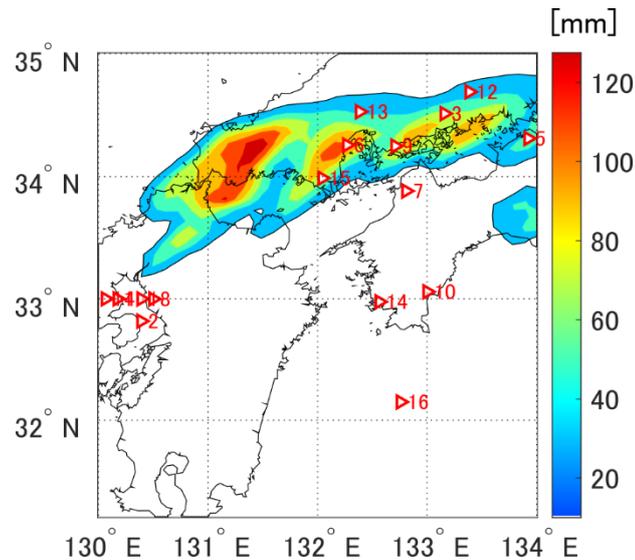


図4：積算雨量分布と選択されたアクチュエータ位置.

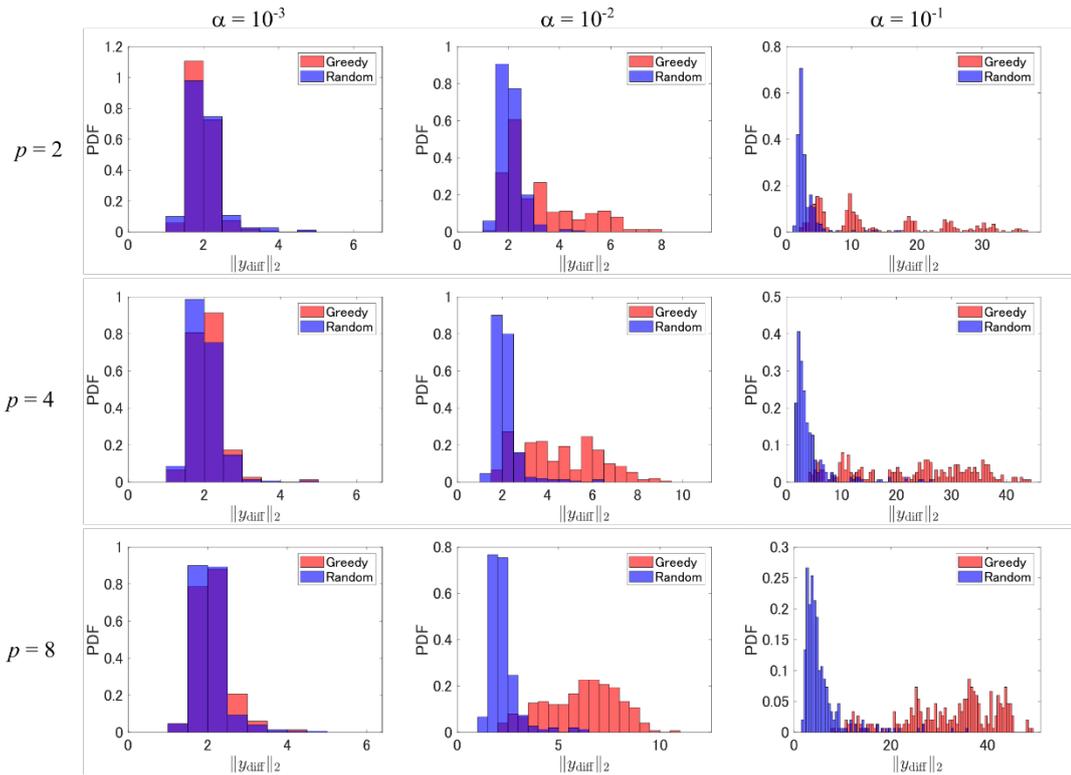


図5：アクチュエータ位置で地表水蒸気量を除去した場合の終端状態の変動のL2ノルムの確率密度分布 ( $\alpha$ は水蒸気量の減少倍率)。

### 3. 研究目標の達成状況

本研究により、気象場等の大規模自由度場においてアクチュエータ位置を最適化することが可能となった。実際に気象場に介入を行うには、介入に利用するアクチュエータの問題、シミュレータと現実の差異、倫理的・法的問題を含む社会的な合意形成などが必要となるが、限られた入力により効果的な介入を行うための手法が構築された。これにより、将来的には極端な気象現象の制御及び、激甚災害のリスク低減に繋がる技術が構築された。

### 4. まとめと今後の課題

乱択特異ベクトル法と WRFPLUS により集中豪雨の積算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。また、介入を行ったシミュレーションにより、提案手法で選択したアクチュエータ位置で介入することで乱択で決定したアクチュエータ位置で介入した場合よりも終端状態がより大きく変化することを確かめた。今後は、他の集中豪雨イベントへの適用や、時系列入力の最適化、非線形最適化への拡張を行っていきたい。また、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可能であると考えている。

## 5. 研究成果リスト

### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

#### 学術雑誌（解説等を含む）

[1] M. Watanabe, Y. Sasaki, T. Nagata, K. Yamada, D. Tsubakino, T. Nonomura: “Actuator Placement Optimization in a Linear Impulsive Control System by Determinant-based Greedy Algorithm,” IEEE Access (under revision).

#### 著書

なし

#### 国際学会

[2] H. Naruse, T. Nagata, Y. Sasaki, M. Watanabe, K. Yamada, J. Ito, J. A. I. Paski, D. Tsubakino, S. Obayashi, and T. Nonomura: “Actuator Placement Optimization Based on Randomized Singular Value Decomposition for Weather Control by Impulsive Input,” AOGS 22nd Annual Meeting, AS34-A013, Singapore, August, 2025 (to be presented).

[3] H. Naruse, T. Nagata, Y. Sasaki, M. Watanabe, K. Yamada, J. Ito, J. A. I. Paski, D. Tsubakino, S. Obayashi, and T. Nonomura: “Construction of Actuator Placement Optimization Framework Toward Realization of Efficient Weather Modification Technology,” Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, CRF-63, Japan, November, 2024.

#### 国内学会・研究会等

[4] 永田貴之, 佐々木康雄, 渡辺昌仁, 成瀬寛高, 山田圭吾, 伊藤純至, Jaka Anugrah Ivanda Paski, 椿野大輔, 大林茂, 野々村拓: 効率的な気象場への介入に向けたアクチュエータ位置最適化フレームワークの検討-WRFPLUS と乱択特異ベクトル法による感度解析-, 日本流体力学会年会 2024, 3FH110-14-05, 東京, 2024年9月.

[5] JIANG Shan, 永田貴之, 渡辺昌仁, 成瀬寛高, 佐々木康雄, 野々村拓: アジョイント法とランダム摂動を用いた感度推定: 豪雨制御への応用, 日本流体力学会年会 2025, 大阪, 2025年9月 (発表予定).

[6] 渡辺昌仁, 佐々木康雄, 永田貴之, Jiang Shan, 成瀬寛高, 野々村拓: 時系列入出力に着目した線形化 Ginzburg-Landau モデルに対するアクチュエータ位置最適化, 日本流体力学会年会 2025, 大阪, 2025年9月 (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	CP17APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.4~2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 5 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分子シミュレーション

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。この手法を、難燃性エポキシ樹脂材料に適用し計算結果の妥当性を実験データによって評価する。

## 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および側鎖の官能基を変化させ、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。側鎖については特に熱伝導率への影響が大きいことが明らかとなった。

これまでに構築した DPD シミュレーション手法を難燃性エポキシ樹脂に適用し、構造形成および熱機械特性の解析を行った。その結果、実験結果と整合する結果を得ることができ、手法の妥当性を確認できた。

## 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鎖長および側鎖を変化させ、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、難燃性エポキシ樹脂へ適用し、実験データと比較することで手法の妥当性を示した。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. Kaiwen Li, Gota Kikugawa, Exploring Structural and Thermophysical Properties of Crosslinked Polymers: DPD Simulations at Varied Coarse-Graining Expressions, The 3rd Asian Conference on Thermal Sciences, Shanghai, China, (2024), O-0374.

#### 国内学会

1. 李 楷文, 伊藤 明彦, 菊川 豪太, 反応 DPD/MD 連携シミュレーションによるリン含有難燃性エポキシ樹脂の熱機械特性の解明, 日本機械学会 2024 年度年次大会, (2024), J051-04.

#### 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	CP18APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 5 日提出

## 機械学習による特徴量重要度に基づく有機材料の構造/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

## 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

本研究では，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熱物性予測手法を探索するため，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を導入し，着目する各種熱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。

また、アルカン液体や冷媒の熱物性予測を実現する回帰モデルとして、決定木回帰 (DTR)、多重線形回帰 (MLR)、多項式回帰 (PR)、ランダムフォレスト回帰 (RFR)、フィードフォワードニューラルネットワーク (FNN)を採用した。また、分子構造に基づく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。その結果、ランダムフォレスト回帰が特に優れた回帰性能を示すことがわかった。

### 3. 研究目標の達成状況

化学構造に基づく分子記述子を生成し、それらの入力データとすることによって、各種熱物性の高精度予測モデルを構築すること成功した。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、各種予測学習モデルを比較することでロバストな学習モデルの選択が可能となることを示した。今後は、分子動力学シミュレーションを自動化したフレームワークによって、高速なデータ生成を行い、分子記述子の構築・設計によりさらなる予測精度の向上と構造物性相関の解明を計画している。

### 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).

#### 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	CP21APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 08 月 08 日提出

## Dual-Phase 固体酸化物電解質膜内の酸素イオン伝導特性のマルチスケール解析

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

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

Cole Wilhelm

Mechanical and Aerospace Engineering, Syracuse University

Aliza Willsey

Mechanical and Aerospace Engineering, Syracuse University

## 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

地球温暖化の主な原因は CO<sub>2</sub> 排出量の増加である。発電過程において CO<sub>2</sub> 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。燃料電池の中でも電解質材料や電極材料に固体酸化物を用いた固体酸化物形燃料電池は、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問題視されている。

作動温度低減のために固体酸化物膜の 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期待される。しかしながら、格子拡散において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、分子動力学(Molecular Dynamics: MD)法と動的モンテカルロ法(kinetic Monte Carlo: 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

初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のアレニウスプロットから拡散係数  $D_0$  と活性化エネルギー  $E_a$  を求めた。次に試行頻度  $\Gamma_0$  と拡散係数  $D_0$  の関係式を導出し、活性化エネルギー  $E_a$  と試行頻度  $\Gamma_0$  を遷移確率パラメータとする kMC 法を開発した。開発した kMC 法を用いて SSC 内の酸素イオン伝導特性について解析し、従来の MD 法による解析結果と比較した。温度条件は 1500 K、1650 K、1800 K、2000K とした。その結果、拡散係数の温度依存性について従来の MD 計算の結果とよく一致した。

さらに Nudged Elastic Band (NEB)法を用いて SSC 内における酸素イオンの遷移に必要な活性化エネルギーを計算し、MD 法の結果から算出した活性化エネルギーと比較した。その結果、NEB 法により得られた数値と MD 法の結果から算出した数値はよく一致した。

## 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、従来の MD 法と同様な拡散係数の温度依存性を再現することができた。

## 4. まとめと今後の課題

MD 法の結果を遷移確率パラメータとして用いた kMC 法の開発を行った。開発した kMC 法の検証のために、Single-Phase 膜内部における酸素イオン伝導特性解析を行い、従来の MD 法と比較した。その結果、開発した kMC 法により従来の 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。今後は Dual-Phase 膜モデル内部における酸素イオン拡散現象の解析に取り組む予定である。

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）

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, CRF-37, 2024.
4. Takumi Ijichi, Hiroki Nagashima, Jeongmin Ahn, Takashi Tokumasu, “Development of Multiscale Simulation Method for Oxygen Ion Conduction Analysis in Dual-Phase Solid Oxide Membrane”, 19th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells, SOFC-0312, 2025.

##### 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	CP22APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 07 月 29 日提出

## 複発ロータ機の流れ干渉効果がロータ性能に及ぼす影響の解明

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

赤羽 峻瑛

金沢大学自然科学研究科フロンティア工学専攻

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 研究背景

複数の回転翼を持つ小型マルチロータ機は, ロータが生じる空気力が, ロータ間の後流干渉によって変化する. 近年では Urban Air Mobility を代表とする, 大型で複数ロータを備える垂直離着陸機の商用運行が計画されており, ロータ間干渉の影響とそのメカニズムを解明することで, 機体性能の改善や設計指針を示すことが可能となる.

これまでに, 複数のロータ間で流れが干渉する場合の, ロータ性能について実験的, 数値的な解析が行われてきた. 一方で, 両手法の解析結果の比較によって, 数値解析結果の妥当性を担保した報告は限られる. 数値解析的なアプローチは, 流れ場の詳細を, 実験設備の制約に依存せずに解析できるが, 解析結果が現実の流れ場と乖離する場合があります, その妥当性を論じつつ解析結果を分析する必要がある. また, 機体開発のために行われる数値解析は, 個別機体の空力特性評価を目的としている. 回転翼空気学分野のさらなる発展には, 限られたロータ配置や飛行条件でなく, 流れ干渉のロータ性能への影響を広く議論できるよう, パラメトリックに, 各条件がロータ特性に与える影響を明らかにすることが望まれる.

## 1.2 研究目的

本研究の目的は, 小型マルチロータ機のロータ間流れ干渉時の推力変化の評価と, そのメカニズムの解明である. 具体的には, 数値解析的アプローチにより, 地面近傍でのホバリング中と水平飛行中のマルチロータ機周りの流れ場を把握し, 推力変化と流れ場の対応を明らかにする. 数値解析結果は, 並行して実施する実験での空気力や可視化結果と比較する.

### 1.3 研究期間内の最終目標

2024年度内の目標は、胴体を備えるクアッドロータ機の地面効果中における後流構造の解明と、複数ロータへの拡張を目指して気流条件を変えて一様流れ中でシングルロータに働く空気力を評価することである。

なお、2024年度5月以降秋にかけて、システム更新に伴って解析が一時的に実施できなくなるため、プロジェクトにおける数値解析作業は限定的になると見込まれていた。

## 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）

### [研究成果の意義]

一様空気流シングルロータに働く、空気力を評価し、表面での圧力分布を得た。本解析は前年度も実施していたものであるが、計算収束までのロータ回転数を増やし、計算ステップ数の違いによる解析結果への影響を排除することができた。

### [共同研究の意義]

金沢大学では実験的解析を行い、東北大学では数値解析を行っている。実験的アプローチでは、ロータ配置の影響を多数の条件でパラメトリックに解析でき、数値解析では実験では捉えることが難しい3次元的な流れ場を把握できる。両者のアプローチでマルチロータ機周りの解析を行うことで、流れ場の把握と実験パラメータの影響を速やかに分析することができる。

### [研究成果の内容]

#### a. 一様流れ中でシングルロータに働く空気力

研究期間の初期において、複数の風速に対して、一様流れ中に置かれたロータの表面圧力分布の解析を行った。

#### b. 胴体を有するクアッドロータ機の後流解析

実験的なアプローチで、流れ場の可視化実験と、胴体に加わる空気力およびロータ推力の分析を行った。システム更新に伴い、解析作業を中断している。

## 3. 研究目標の達成状況

一様流れ中のロータに加わる空気力の数値解析を実施した。ロータ推力とピッチングモーメントについて実験値との対応を比較し、解析結果が妥当であることを確認した。また、気流条件に対するロータブレードに表面圧力分布を得た。

解析を進めた一方で、2024年6月以降から現在まで解析作業を行っていない。ロータ周り流れの解析にはJAXAから提供を受けているrFlow3Dを用いているが、システム更新後に同ツールの計算システムへの導入が完了していないため、作業を中断している。

## 4. まとめと今後の課題

複数ロータ間で流れが干渉する場合を想定し、事前準備として一様流れ中のシングルロータに加わる空気力の解析を行った。今後、ロータを複数にして解析を実施する。また、胴体を備えた場合のクアッドロータ後流の流れ場解析を行ない、胴体位置がロータ空気力に与える影響を評価する。

システム更新後、JAXA解析ツール導入にかかる管理者側およびJAXA開発担当者の作業

量の負荷が大きいと見込まれ、利用再開の見通しは立っていない。今後のツール提供の再開を待ちつつ、実験的アプローチでの解析を進める。

## 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）

#### 学術雑誌（解説等を含む）

[1] H. Otsuka, S. Akaba, T. Hara, H. Nagai, H. Tokutake: Thrust variations in small rotors due to corner and vertex effects on the ground side, *The Aeronautical Journal*, Vol. 129, No. 1334, (2025) pp. 1077–1095, doi:10.1017/aer.2024.148.

#### 著書

無し

#### 国際学会

[1] Taisei Hara, Hikaru Otsuka, Hiroshi Tokutake, and Hiroki Nagai, “Preliminary Study on Quadrotor Wake in Ground Effect Using Symmetry Walls,” *Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information*, Sendai, Japan, 2022.

[2] Hikaru Otsuka, Taisei Hara, Hiroshi Tokutake, and Hiroki Nagai, “Simulation of Fountain Flow Development in Quadrotor Wake with Symmetry Boundary Condition,” *Twenty-third International Symposium on Advanced Fluid Information Japan*, 2023.

[3] Hikaru Otsuka, Yukitaka Kobayashi, Shunei Akaba, Hiroshi Tokutake, Masaki Okawa, Tsubasa Ikami, Hiroki Nagai, “Smoke-Visualized Wake of Quadrotor in Ground Effect,” *Twenty-fourth International Symposium on Advanced Fluid Information*, Sendai, Japan, 2024.

#### 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, 東京, 2023.

[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, 北九州市, 2023.

### 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

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）, 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, 大塚光, 加藤優紀, 森健登, 米田将吾, 砂田茂, 得竹浩, 2023. 11. 21 21, 日本航空宇宙学会.

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP24APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.4~2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 5 日提出

## 大動脈弁を考慮した大動脈・左心室系の血流解析

船本 健一

東北大学流体科学研究所 教授

宮内 優, 上田 晃蒼

宮崎大学工学部 准教授, 宮崎大学工学研究科 大学院生

## 1. 研究の目的と目標

## 1.1 研究の背景と目的

大動脈は大動脈解離や大動脈瘤などの致死率の高い疾患の好発部位であり, これらの疾患の機序解明や新たな診断法の提案のため, これまでに多くの数値流体力学解析が行われてきた. 大動脈の上流側には大動脈弁があり, シミュレーションにおいて正確な大動脈内の血流動態を再現することは困難な課題である. 本研究の目的は, 大動脈弁による流動抵抗を表す外力モデルを新規に提案し, 大動脈とその上流に位置する左心室を結合した大動脈・左心室系モデルに実装することで, 大動脈弁が大動脈内の血流動態に与える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

提案手法を大動脈・左心室系モデルに実装し, その妥当性を評価することが本研究期間における最終目標である.

## 2. 研究成果の内容

本研究では, 大動脈弁のない左心室・大動脈系モデルに対して数値流体解析を実施し, 提案する流動抵抗モデルの有効性を調べた.

左心室と大動脈が結合した血管モデルは, 先行研究 (Miyachi S. et al., *Proc. AFI2021*, pp.159-160, 2021) と同じものを用いた. 大動脈弁の流動抵抗を再現するために Navier - Stokes 方程式の外力項に, 以下の流動抵抗モデル  $\mathbf{f}$  を導入した.

$$\mathbf{f} = -K\mathbf{u}$$

ここで,  $K$  は流動抵抗の大きさを表すパラメータ,  $\mathbf{u}$  は流れの速度である. この流動抵抗モデルは左心室と大動脈の結合部から大動脈の方向へ, その中心軸に沿って 2 mm の範囲内に存在する流体セルにのみ与えた.

流体解析には、熱流体解析ソフトウェア（Fluent 2022 R1, ANSYS, USA）を用いた。簡単化のために、左心室と大動脈の変形は考慮していない。境界条件として、僧帽弁位置の境界面には圧力 100 Pa, 下降大動脈の境界面には圧力 0 Pa, 他の境界にはすべりなし条件を与えた。初期条件は解析領域全域で流速 0 m/s とし、定常状態になるまで解析を行った。血液の物性値を参考に、流体の密度は  $1,050 \text{ kg/m}^3$ , 粘度は  $3.5 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$  とした。パラメータ  $K$  には、 $0, 1 \times 10^5, 5 \times 10^5, 1 \times 10^6, 2 \times 10^6, 3 \times 10^6 \text{ kg/m}^3\text{s}$  の 6 通りの値を用いた。なお、 $K = 0$  は流動抵抗モデルを用いていない解析を意味する。本報告書では紙面の都合、 $K = 0, 3 \times 10^6 \text{ kg/m}^3\text{s}$  の結果のうち定常状態における圧力分布を図に示す。 $K = 0$  の場合は、解析領域全体において圧力が連続的に変化した。一方、 $K = 3 \times 10^6 \text{ kg/m}^3\text{s}$  の場合は、左心室と大動脈の境目で急激に圧力が低下した。大動脈弁が閉じる際、大動脈弁を境に圧力は急激に低下するため、定性的に妥当な結果が得られた。

### 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

本研究では、大動脈弁による流動抵抗を表す外力モデルを新規に提案した。このモデルでは Navier-Stokes 方程式における外力項により大動脈弁を表現するため、大動脈弁の動きに合わせて流体メッシュを動かす必要はない。そのため、大動脈弁を通過する血流解析で課題となっていたメッシュの過度な歪みによる計算不安定化は問題にならない。パラメータを大きくするほど流動抵抗は大きくなるが、今回計算できたパラメータの値では、流速が十分に小さくなったとはいえ、より大きなパラメータを適用できるように計算条件や計算アルゴリズムの変更を検討する必要がある。また、今後は左心室壁の変形を考慮した非定常計算での有効性を確認する予定である。

### 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）

##### 国際学会

1. Takumi Shimabuku, Suguru Miyauchi, Kenichi Funamoto: Two-dimensional Analysis of Flow through an Orifice Using Extended Finite Element Method, Proceedings of the Twenty-fourth International Symposium on Advanced Fluid Information, (2024), CFD-43

#### 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	CP25APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 7 日提出

## キャリア選択性パッシベーションコンタクト界面構造の分子動力学解析

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

宇佐美 徳隆

名古屋大学工学研究科 教授

後藤 和泰

新潟大学工学部 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

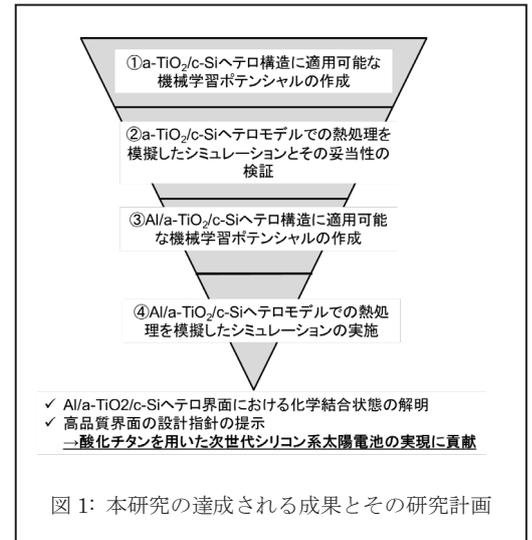
本研究の目的は、酸化チタンを用いた低コストかつ高効率なシリコン系太陽電池を実現するために、分子動力学（Molecular Dynamics: MD）計算を用いて金属/酸化チタン/結晶シリコン界面における構造変化や化学結合状態の変化の解明することである。

酸化チタンは、バンドギャップエネルギーがおよそ 3.3 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、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/アモルファス TiO<sub>2</sub>/結晶シリコン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。



[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-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造へのアニール処理における酸化シリコン膜の形成とその電気的影響

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-TiO<sub>2</sub>) /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。前年度での活動において、我々は a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造を適切に模擬する機械学習ポテンシャル (Machine Learning Potential: MLP) の作成を行った。2.1 項では、作成した MLP をもとに a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造への熱処理における構造変化とそれが及ぼす電気的影響への考察を行った。

図 2 に、(a) 1000 K, 1 ns, カノニカルアンサンブル (NVT) で熱処理前、(b)熱処理後の a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造と、(c) 熱処理前, 600 K, 800 K, 1000 K で熱処理後における Si-O 結合数を示す。ここで、熱処理シミュレーションには、前年度作成した MLP を用いており、シミュレーション対象のモデルは三次元での周期境界条件を用いた。図 2 (a), (b) より、熱処理により TiO<sub>2</sub>/c-Siヘテロ界面に酸化シリコン層が形成されていることが確認された。これは実際の実験結果と一致する[2-3]。この結果は、実際の実験結果とも整合しており[2-3]、シミュレーションの妥当性を支持するものである。さらに、図 2 (c) に示すように、熱処理前後で Si-O 結合数を比較したところ、熱処理温度の上昇に伴い Si-O 結合数が増加することが確認された。特に、1000 K での熱処理後には Si-O 結合数が 962 に達し、熱処理前の 32 に比べて大幅な増加が見られ、熱処理温度の上昇が Si-O 結合の形成を促進することが示された。これらの結果から、熱処理条件が Si-O 結合形成に重要であることが示唆された。

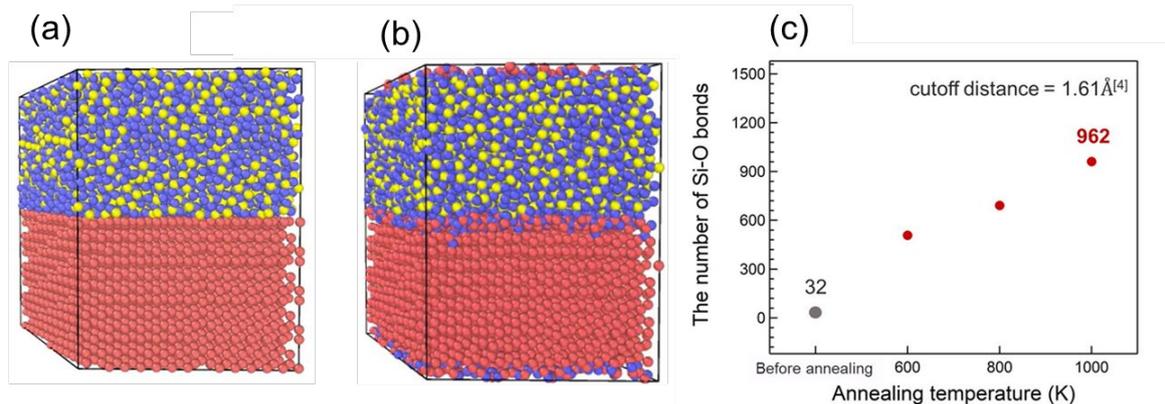


図 2 : (a)1000 K, 1 ns, NVT で熱処理前, (b)熱処理後の a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造と、(c)熱処理前, 600 K, 800 K, 1000 K で熱処理後における Si-O 結合数。熱処理シミュレーションには、前年度作成した MLP を用いた。結合半径の cutoff 半径は、1.61 Å とした。

## 2.2 MLP を用いた a-TiO<sub>2</sub>/c-Si, Ti/a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ界面での熱処理時の Si-O 結合の解析

これまで、a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造上に Al 成膜を行うことでパッシベーション性能が低下することが報告されている。本研究の最終的な目的は、Al 成膜によるパッシベーション性能の低下原因の解明である。しかしながら、Al 成膜を考慮した MLP の作成は、Al, Ti, O, Si の四元素を考慮した力場作成となるため計算コストが非常に高く、現状では MLP の作成は難しい。一方で、Ti 成膜時にもパッシベーション性能が大幅に低下することが知られており、まずは Ti 成膜に着目することが妥当と考えた。既に TiO<sub>2</sub>/c-Si 構造での Ti, O, Si の三元素を対象とした MLP は構築済みであるため、その力場を用いることで Ti 成膜時の影響を詳細に解析することが可能である。そこで 2.2 項では、Ti 成膜が Si-O 結合へ及ぼす影響を調査するために、a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造と Ti/a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造において、熱処理後の Si-O 結合の解析を行った。

図 3 (a) Ti/a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造における 1000 K, 1 ns の熱処理後のモデル、(b) 熱処理前後の Si-O 結合密度を示す。図 3 (b) から、熱処理後において a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造の Si-O 結合密度は約 80 nm<sup>-2</sup>に達しており、Ti/a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造の約 60 nm<sup>-2</sup>と比較して高い値を示している。これは、金属 Ti の成膜が界面における Si-O 結合の形成を抑制していることを示唆している。ここで、Si-O 結合密度が高いほど界面のパッシベーション性能が向上すると仮定すると、金属 Ti の存在が Si-O 結合の形成を抑制し、結果として界面パッシベーション性能を低下させている可能性がある。これらの結果から、金属 Ti の成膜が TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ界面における Si-O 結合の形成に負の影響を与えることが明らかとなり、金属電極形成時の a-TiO<sub>2</sub>/c-Si 界面制御がデバイス性能向上のために重要であることが示唆された。

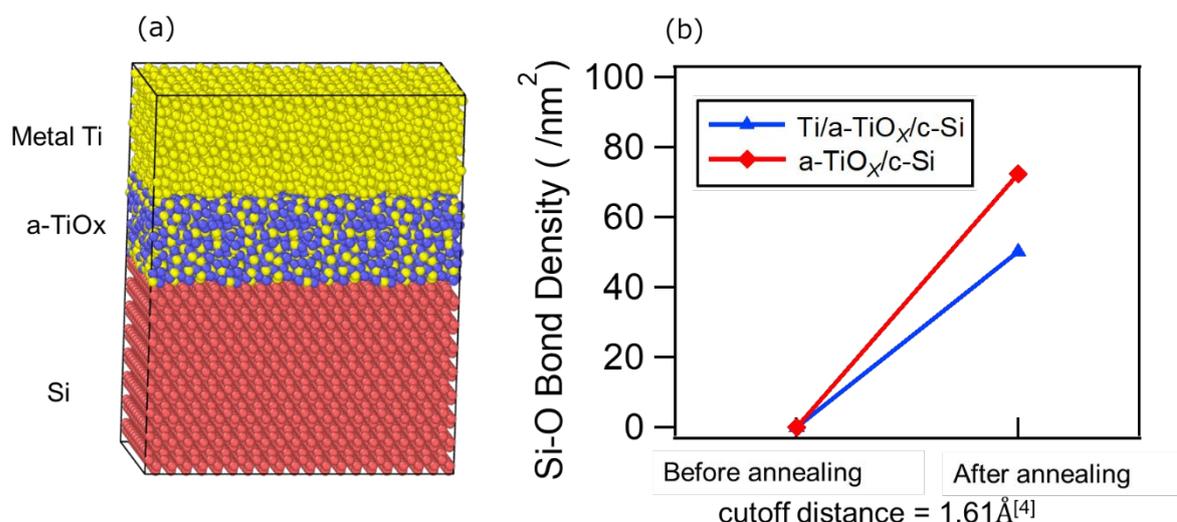


図 3: (a) Ti/a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造モデルと、(b) 1000 K, 1 ns の熱処理前後の Si-O 結合密度.

[4] T. A. Sidorov, *Russ. J. Inorg. Chem.*, **52**, 532–542 (2007).

[5] T. Matsui et al., *ACS Appl. Energy Mater.*, **5**, 12782 (2022).

### 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-TiO<sub>2</sub>/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-TiO<sub>2</sub>/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-TiO<sub>2</sub>/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-TiO<sub>2</sub>/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-TiO<sub>2</sub>/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。

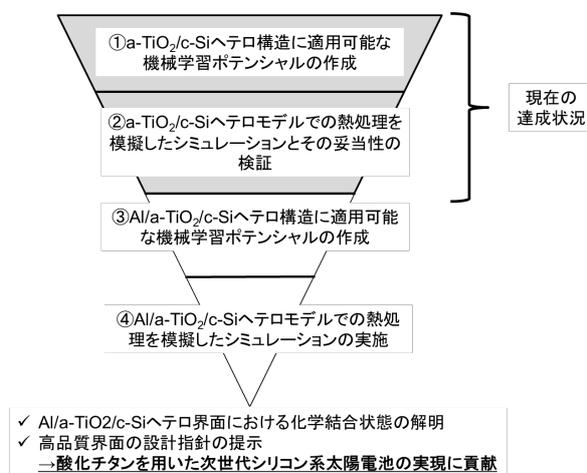


図 4: 本研究における進捗状況

### 4. まとめと今後の課題

本研究では、a-TiO<sub>2</sub>/c-Si および Ti/TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ界面における熱処理時の構造変化と Si-O 結合状態について、MD シミュレーションを用いて詳細に解析した。その結果、a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造において熱処理により界面で Si-O 結合が形成されることが確認され、実験的な結果と一致する結果が得られた。一方で、Ti/a-TiO<sub>2</sub>/c-Si ヘテロ構造では、金属 Ti の成膜が Si-O 結合形成を抑制し、界面におけるパッシベーション性能の低下を引き起こしている可能性が示された。これにより、酸化チタンを用いた次世代シリコン系太陽電池における界面制御の重要性が明らか

かとなった。

今後の課題として、金属 Ti 以外の他の金属電極との界面における Si-O 結合状態や界面特性への影響を解析し、酸化チタンを用いた太陽電池の界面制御に向けた最適化指針を明確にしていく必要がある。また、より精度の高い MD シミュレーションを実現するために、MLP の改良や、実験結果とのさらなる比較・検証を進めていくことが求められる。本研究で得られた知見を基に、酸化チタンを用いた高効率シリコン系太陽電池の開発に向けて、引き続き研究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）

なし。

#### 著書

なし。

#### 国際学会

S. Fukaya, Y. Michishita, N. uene, K. Gotoh, T. Tokumasu, and N. Usami, “Numerical analysis of TiO<sub>x</sub>/Si Heterostructure with Molecular Dynamics Simulation”, 35th International Photovoltaic Science and Engineering Conference, Numazu, Japan, November 10-15, 2024.

Y. Michishita, S. Fukaya, N. Uene, K. Gotoh, T. Tokumasu and N. Usami, “Investigation of the Passivation Mechanism of TiO<sub>x</sub>/Si Heterostructure by Molecular Dynamics Simulation”, 21st International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 18-20, 2024

G. Tamura, N. Uene, K. Gotoh, N. Usami, and T. Tokumasu, “Numerical simulation study for analysis of Si nanocrystal / SiO<sub>x</sub> compound layer by ReaxFF Molecular Dynamics”, 35th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-35), Numazu, Japan, November 10-15, 2024

G. Tamura, N. Uene, K. Gotoh, N. Usami, and T. Tokumasu, “Reactive Force-Field Molecular Dynamics Study for Analysis of Silicon Nanocrystal Formation Process in Silicon Oxide Film”, PRiME 2024 Joint International Meeting, Honolulu, HI, The USA, October 6-11, 2024

#### 国内学会・研究会等

道下悠登, 深谷昌平, 上根直也, 後藤和泰, 徳増崇, 宇佐美徳隆, “分子動力学シミュレーショ

ンによる  $\text{TiO}_x/\text{Si}$  ヘテロ構造のパッシベーション性能向上機構の解明”, 第 72 回応用物理学会 春季学術講演会, 東京理科大学野田キャンパス, 2025 年 3 月 14 日~17 日

田村玄汰、上根直也、後藤和泰、宇佐美徳隆、徳増崇、“シリコン酸化膜におけるシリコンナノ結晶の成長メカニズムの解明に向けた反応性力場分子動力学法による数値シミュレーション”、第 21 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム（第 4 回日本太陽光発電学会学術講演会）、広島、2024 年、7 月 11~12 日

田村玄汰、後藤和泰、宇佐美徳隆、徳増崇、“アモルファスシリコン酸化膜中のシリコンナノ結晶形成に関する分子動力学シミュレーション”、第 72 回応用物理学会 春季学術講演会、東京、2025 年、3 月 14~17 日

## 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし.

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP26APR24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 09 月 01 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

難波 喬大

筑波大学理工情報生命学術院 M2

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るスパイラル状の高速ストリークが形成されることがわかった。また、流路高さ中央では、テイラー渦に伴う内円筒から外円筒へ向かう流れが形成され、流路高さ中央の内円筒近傍でも高速ストリークが現れる。結果として、ある MHD 相互作用下では、内円筒壁近傍に三又状の高速ストリークが出現することがわかった。本研究期間では、このような三又状の高速ストリークが出現する条件に対する、半径比  $Ha$  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、流体科学研究所の最新鋭のスパコンを用いて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半径比依存性の解明

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スパイラル状の高速ストリークが発生することがわかった。

これらの結果から、スパイラル状の高速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、結果として、 $Hr=Ha/Re \times 10^4=125$

において、異なるレイノルズ数においても、スパイラル状の高速ストリークが再現されることがわかった。

一方で、半径比は流体に及ぼす遠心不安定性とも関係する。内円筒壁近傍の MHD 相互作用の強さを知ることができれば、内円筒の回転トルクへの影響も予見することが可能となる。そこで、レイノルズ数 8000 において、半径比  $\chi$  をこれまでの 0.5 に加えて、0.25 と 0.75 の場合について検討した。その結果、テイラー数の定義として、 $Ta = Re(1/\chi - 1)^{1/2}$  とすると、 $Hr = Ha/Ta \times 10^4 = 125$  となる条件で、スパイラル状の高速ストリークが得られることが、世界に先駆けて示された。

### 3. 研究目標の達成状況

3 次元 MHD 乱流において、ハルトマン数のみならず、半径比も、乱流生成と乱流抑制に影響を及ぼし、MHD 相互作用の強さに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。現在は、これまでの共同研究により得られた研究成果をまとめ、当該分野でのトップジャーナルに投稿すべく、準備を進めている。

### 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、風車起動時や制動時に通過する低レイノルズ数において発生する波動テイラー渦の影響について、外部負荷抵抗を変化させた際の電磁流体場や発電性能へ及ぼす影響について検討していく。

### 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）

Hiromichi Kobayashi, Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: Turbulent Taylor-Couette flow with magnetohydrodynamic interaction in axial magnetic field, *Physics of Fluids*, Volume 37 (2025), pp.1-11, 027165 (2025).  
<https://doi.org/10.1063/5.0255100>

##### 国際学会

Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana, Hiromichi Kobayashi: Effects of Channel Geometry on MHD Taylor-Couette flow with end walls, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics (ICFD2024), Sendai, Japan (2024).

Hiromichi Kobayashi, Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: Turbulent Taylor-Couette flow with MHD interaction in axial magnetic field, 26th International Conference of the Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM 2024), Daegu, South Korea (2024).

Hiromichi Kobayashi, Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: LES of

MHD Taylor-Couette flow for control of wind turbines, 9th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS), Lisboa, Portugal (2024).

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01MAY24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.05～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 7 月 30 日提出

## 金属液滴内部気孔の排出に関する 3 次元シミュレーション

吉川 穰, 伊藤 桂介

宮城県産業技術総合センター 研究員, 研究員

高奈 秀匡

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

本研究では, 粉末生成に広く利用されているガスアトマイズ法を対象とし, 金属付加製造の材料粉末に含まれる気孔の低減(気孔レス)のための最適条件を明らかにすることを目的とする. 気孔レスガスアトマイズ装置開発を目指した研究では, 熔融金属の微粒化過程における気孔の取込メカニズムの解明や, 気孔の取込抑制のための流れの制御方法の提案に焦点が当てられてきた一方で, 本研究では金属液滴に気孔が取り込まれることを許容して, その気孔が金属液滴の凝固前までに排出される条件を探ることで気孔レスの実現を目指している. そこで, 内部気孔を有する金属液滴の変形挙動を 3 次元気液二相流モデルとして取り扱い, そのシミュレーションを通じて内部気孔の排出条件を無次元数(レイノルズ数, ウェーバー数など)で整理することで, 金属種を限定しない汎用的な気孔の排出条件を見出す.

## 1.2 研究期間内の最終目標

過去の研究により, 自転液滴の角速度上昇に伴い気孔がより短い時間で排出されることがわかっている. 今年度は, その排出に要する時間がどのような条件に依存するのかを調べることを目標とする.

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

本共同研究では, 宮城県産業技術総合センターにて考案した気液二相流モデルを用いて数値計算を実施し, 流体科学研究所と共同で得られた結果について考察する. 液滴内部に含まれる気孔径と液滴中心位置からの気孔中心位置のオフセット量を変化させたパラメトリックスタディを行った. なお, 3 次元シミュレーションの事前検討として, 今年度は 2 次元シミュレーションにて解析を進めた. 数値計算には Ansys Fluent® 2024 R1 を用い, Volume of Fluid

法にて気液二相流をモデル化した。液滴直径 0.1 mm をとし、初期の速度場には液滴内部を剛体回転領域とする Rankine の渦モデルを採用した。溶融金属の粘性係数と表面張力係数には液相線温度の Ni 基合金のインコネル 718 の物性値を採用し、定数として扱った。図に液滴の自転による気孔排出プロセスの一例を示す。自転によって液滴が扁平に変形する一方で、気孔は円形を保ったまま排出される。ここで、液滴と気孔の中心位置にオフセットを設けたことで、初期の液相領域では「a」で示す位置の液膜厚さが最も薄く、その薄い液膜領域が自転によってさらに薄くなることで最終的に気孔の排出に至ることがわかった。そこで、気孔径とオフセット量をパラメータとし、初期状態で最も薄い液膜厚さ a に対して気孔が排出に至る時間を調べた。その結果、気孔の排出時間はほぼ気孔径には依らず、初期液膜厚さ a で整理できることがわかった。また、この排出時間は 1 ms を下回るオーダーであり、直径の液滴が凝固に至るまでの時間 10 ms に比べて十分に小さいことがわかった。なお、本計算を宮城県産業技術総合センターが有する計算環境(4 コア MP 並列)にて実施した場合に比べて、次世代融合研究システム(32 コア MPI 並列)を利用することで、およそ 1/3 倍の時間で 1 条件の計算を実施することができた。

### 3. 研究目標の達成状況

液滴の運動によって内部気孔が排出される否かを判断するためには、気孔排出に要する時間スケールを把握することが必要である。すなわち、その時間スケールが凝固時間よりも長い場合には、金属粉末中に気孔が残留すると判断できる。今年度の研究では、その判断基準となる時間スケールを明らかにすることができた。

### 4. まとめと今後の課題

今年度の研究では、自転液滴による内部気孔排出の時間スケールが明らかとなった。次年度は、この知見を元に気孔の残留/排出について無次元数を用いてマップ化する。さらに、液滴の並進運動による気孔排出のマップ化、3次元性の効果の調査も課題として残されている。

### 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

J. Yoshikawa, K. Itoh, H. Takana: Collapse Process of Gas Pore from a Rotating Metal Liquid Droplet, *Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics*, (2024), OS5-15, pp.506-508.

##### 国内学会・研究会等

吉川穰, 伊藤桂介, 高奈秀匡: 金属液滴の粘性と表面張力が自転による内部気孔排出に与える影響, 日本混相流学会混相流シンポジウム 2024, (2024), OS0106.

## 5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

(受賞) 2024年11月20日, Best Presentation Award for Young Researcher, The 21st International Conference on Flow Dynamics.

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP02MAY24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.05～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 08 月 07 日提出

## CO<sub>2</sub> permeability through (microalgae) lipid membrane using molecular dynamics simulation

Fakhri Putra Nasution, Fayza Yulia, Nasruddin

インドネシア大学 博士学生, 講師, 教授

馬淵 拓哉

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

The research aims to employ molecular dynamics (MD) simulation methods to visually represent and quantitatively analyze the permeation process of Carbon Dioxide (CO<sub>2</sub>) molecules across microalgae's lipid membranes. This approach allows for a detailed exploration of the interaction dynamics between CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> Permeation

It can provide a detailed temporal evolution of interactions between CO<sub>2</sub> molecules and lipid membranes. By tracking the trajectory of CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> 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 main properties that this research aims to evaluate is permeation coefficient, which refers to the rate of the CO<sub>2</sub> solutes passes through the microalgae's lipid membranes.

### 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）

Research collaboration related to Molecular Simulation of CO<sub>2</sub> Permeation on DPPC

lipid membranes is a series of research collaborations that have been carried out in previous years regarding investigations of carbon capture and storage using the adsorption method. In 2024, this collaborative project was part of the general collaborative research activities at the Institute of Fluid Science (IFS) Tohoku University, utilizing IFS's computing support facilities.

To ensure the project's objectives were met and to facilitate effective collaboration, the research team held a schedule of regular meetings, held at least twice a month. These meetings provided a platform for discussing ongoing research, sharing findings, and planning future activities. Additionally, an evaluation of the research progress was conducted during the International Conference on Fluid Dynamics (ICFD), held from November 18-20, 2024. This event was crucial for presenting initial results, receiving feedback from the scientific community, and refining research methodologies based on peer input.

### 3. 研究目標の達成状況

In this study, we investigated the permeation behavior of carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) through microalgae cell membranes, modeled using DPPC (Dipalmitoylphosphatidylcholine) lipid bilayers. The simulations were carried out using Non-Equilibrium Molecular Dynamics (NEMD) techniques to explore CO<sub>2</sub> interactions and dynamics at the molecular level.

The simulation system, with a box size of 3 x 3 x 6 nm, included 32 CO<sub>2</sub> molecules initially placed in the water phase and was run at 310 K under atmospheric pressure for 30 nanoseconds. During this period, the CO<sub>2</sub> molecules began to permeate the lipid bilayer within the first nanosecond, and by the end of the simulation, most had entered the membrane region. The number of CO<sub>2</sub> molecules inside the membrane was tracked every nanosecond to monitor permeation progress.

We also analyzed the mass density profile of CO<sub>2</sub> along the membrane normal (z-direction) to evaluate gas accumulation within the bilayer. At 3 ns, most CO<sub>2</sub> molecules remained in the aqueous region, whereas by 30 ns, the gas was more uniformly distributed within the membrane, indicating significant uptake.

To further understand the thermodynamic landscape of permeation, we calculated the free energy profile of CO<sub>2</sub> using umbrella sampling. This method applied harmonic restraints on the solute along the z-axis and was compared with results from equilibrium free sampling based on density-derived free energy estimates. Both approaches yielded consistent results, with the highest energy barrier (around 6.5 to 7.0 kJ/mol) located at the membrane–water interface.

Additionally, we explored the impact of cholesterol content—common in microalgae membranes—on CO<sub>2</sub> transport. Systems with 0%, 25%, 50%, and 75% cholesterol were simulated. Contrary to the common assumption that cholesterol enhances permeation by increasing membrane fluidity, the Mean Squared Displacement (MSD) analysis showed a decrease in CO<sub>2</sub> mobility with higher cholesterol levels. This may be due to cholesterol

aggregation creating asymmetry and local packing variations in the bilayer, which hinder CO<sub>2</sub> diffusion.

#### 4. まとめと今後の課題

This research aims to calculate the permeation coefficient (PC) of carbon dioxide across membranes. The PC is determined based on the local resistance to permeation, which depends on two key properties: the excess free energy and the local diffusion coefficient of the permeating molecule. We have already obtained the excess free energy profile using the umbrella sampling method.

Currently, we are working on calculating the local diffusion coefficient using the Force Autocorrelation Function (FACF) approach. This involves performing molecular dynamics simulations where the CO<sub>2</sub> molecule is fixed at specific positions along the membrane and analyzing fluctuations in the force acting on it.

After determining the permeation coefficient, we will investigate how environmental factors relevant to microalgae cultivation—such as temperature, pH, and salinity—influence molecular transport across membranes. Insights from this study could help optimize cultivation conditions and improve the efficiency of microalgae-based biotechnological applications, with potential for future scale-up.

#### 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

F.P. Nasution, F. Yulia, Nasruddin, and T. Mabuchi, “Molecular Simulation of CO<sub>2</sub> Permeation through Microalgae Lipid Membrane”, 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, Japan, November 10-13 (2025).

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01DEC24
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.12~2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 7 月 18 日提出

## YSZ 相転移とイオン伝導性メカニズム

小原 拓

東北大学流体科学研究所 教授

郭 玉婷

京都大学工学研究科 助教

## 1. 研究の目的と目標

## 1.1 研究の背景と目的

SOFC (固体酸化物形燃料電池) のアノード材料として広く用いられる Ni-YSZ 複合体では、高温・還元雰囲気下で Ni が YSZ に固溶し、結晶構造や酸化物イオンの移動性に大きな影響を及ぼすことが報告されているが、その詳細な原子レベルのメカニズムは未解明である。本研究の目的は、Ni の固溶がイットリア安定化ジルコニア (YSZ) の相転移およびイオン伝導性に及ぼす影響とそのメカニズムを、分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて明らかにすることである。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、Ni の固溶による局所構造の乱れ、酸素空孔の形成、ならびに  $O^{2-}$  の拡散経路の変化に注目し、イオン伝導率の低下や構造変化の起点となる因子を特定する。加えて、得られた知見を通じて、Ni-YSZ 系材料の耐久性向上や相変態抑制につながる材料設計指針を導くことを目指す。

## 2. 研究成果の内容

## 2.1 Ni が固溶した YSZ モデルの作成

本研究では、 $Ni^{2+}$  と  $Zr^{4+}$  が置換することで Ni が YSZ に固溶していると仮定し、以下の手法で Ni が固溶した YSZ モデルを作成した。まず、立方晶  $ZrO_2$  単位格子を各方向に 5 倍に拡張した。次に、SOFC の燃料極材料や電解質として広く用いられている、 $Y_2O_3$  を 8 mol% 添加した YSZ (8YSZ) を再現するため、相当量の  $Zr^{4+}$  をランダムに選択して  $Y^{3+}$  に置換した。そして、Ni の固溶を再現するために、結晶中の  $Zr^{4+}$  をランダムに選択して、任意の数だけ  $Ni^{2+}$  に置換した。最後に、得られた結晶が電氣的に中性となるよう、 $O^{2-}$  をランダムに選択して取り除き、Ni が固溶した YSZ モデルを作成した。境界条件として、全ての方向に周期境

界条件を適用した.

## 2.2 構造の変化の解析

固溶させた  $\text{Ni}^{2+}$  のモル分率が 0%, 1.4%, 4.0% の YSZ モデルにおける動径分布関数 (RDF) を計算した.  $\text{Ni}^{2+}$  のモル分率が増加しても, いずれのイオン間の RDF においてもピーク位置はほとんど変化しなかった. これは, 結晶の格子定数がほとんど変化せず, 実験で観察される Ni の固溶による YSZ の立方晶から正方晶への相変態が起こらなかったことを示している. これは, 本研究では等方的に圧力制御を行ったため, 特定の方向への変形が顕著に進行するような相変態が再現されなかったためであると考えられる.  $\text{Ni}^{2+}$  のモル分率が増加すると, RDF のピーク強度は減少することがわかる. これは,  $\text{Ni}^{2+}$  の固溶量の増加に伴い, YSZ 結晶のイオン配置が乱れ, 結晶性が低下するためだと考えられる. この結晶性の低下が,  $\text{O}^{2-}$  の移動経路の乱れを引き起こし, 実験で確認される相変態と同様にイオン伝導率の低下に寄与している可能性がある.

### 研究目標の達成状況

本研究では, Ni 固溶モデルの構築を完了し, YSZ モデルに対するイオン伝導率と構造特性の検証を行った. 作成したモデルは実験値および既存の MD 研究とよく一致し, モデルの妥当性が確認された. また,  $\text{Ni}^{2+}$  および  $\text{Y}^{3+}$  を固溶させた場合の  $\text{O}^{2-}$  拡散挙動や酸素空孔の関係性を定量的に評価し, Ni 固溶が第二近接  $\text{O}^{2-}$  の移動を強く阻害することを明らかにした. これにより, イオン伝導率の低下機構を分子論的に解明することに成功した. 進捗は当初計画に対して順調であり, 想定された成果をほぼ達成している. 今後は, YSZ の相変態挙動の再現に向け, 異方的な圧力制御の導入や, Ni 析出・再溶解を伴う界面モデルへの拡張を検討する. これにより, より実系に近いシミュレーション環境の構築と, 相変態メカニズムの精緻化を目指す.

### まとめと今後の課題

本研究では, Ni の固溶が YSZ のイオン伝導性や構造に及ぼす影響とそのメカニズムを解明することを目的として, Ni を固溶させた YSZ モデルに対して分子動力学 (MD) シミュレーションを行った. Ni が固溶した YSZ のイオン伝導率の変化および構造の変化を解析した. まず, イオン伝導率を解析することで, YSZ に固溶した  $\text{Ni}^{2+}$  は  $\text{Y}^{3+}$  に比べて  $\text{O}^{2-}$  の拡散をより強く阻害することがわかった. その要因として, それぞれの第二近接の位置における  $\text{O}^{2-}$  の拡散特性の違いに起因することが明らかになった. また, RDF を計算し構造の変化を解析し, Ni の固溶量が増加するにつれて周囲のイオンの配置が乱れ, 結晶性が低下することがわかった.

本研究には以下のような課題が残されている. 今回のシミュレーションでは等方的な圧力制御を用いたため, 実験で観測される YSZ の相変態を再現することができなかった. このため, 今後は異方的な圧力制御法の導入を含め, 相変態を忠実に再現可能な計算条件への見直しが必要である. 本研究で構築したモデルでは, すべての方向に周期境界条件を適用したため, Ni と YSZ の界面で起こる実際の固溶現象を模倣することができていない. 実際には,  $\text{Ni}^{2+}$  が YSZ と接する界面において固溶し, さらに還元されて析出するような現象が報告され

ている。これらの界面特有の現象を再現するためには、モデル構築手法の抜本的な見直しと、界面を含むより現実に即したシミュレーション条件の設定が求められる。

### 3. 研究成果リスト

#### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

##### 学術雑誌（解説等を含む）

なし

##### 著書

なし

##### 国際学会

[1] Yuting Guo, Taiyo Taniuchi, Jin Shiomi, Keisho Fukumoto, Taku Ohara, Masashi Kishimoto, Hiroshi Iwai, A Molecular Dynamics Investigation of Ionic Conductivity in YSZ Phase Transitions, Twenty-fourth International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2024), CRF-34, Poster (presented on November 20).

##### 国内学会・研究会等

[1] 塩見仁, 谷内 太陽, 郭 玉婷, 岸本 将史, 岩井 裕: Niの固溶によるYSZの相変態と劣化メカニズムの分子動力学解析, 日本機械学会 関西支部 2024年度関西学生会卒業研究発表講演会, 大阪公立大学 (2025).

#### 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

## 共同研究

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL03APR24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 4 日提出

## 自然対流に特化した境界層制御技術の創成

小宮 敦樹, 小泉 匠摩

東北大学流体科学研究所 教授, 博士学生

古川 琢磨

芝浦工業大学 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

**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。

**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）

### 微弱噴流による制御創成に関する研究

本研究期間中は、効率的な自然対流共鳴現象促進のための条件探索のため、自然対流境界層に噴出させる微弱噴流の条件を種々変更させた。具体的には、加熱平板からの噴流発生位置、噴流高さ位置、周囲温度にからの噴流温度差を変更してその共鳴現象への影響を数値解析的に評価した。解析の結果、ある一定の条件において最も共鳴が促進する条件が存在することが示唆された。

### 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 によるふく射ライブラリを用いて、放射率が異なる壁面を設置した矩形キャビティ内部の自然対流境界層の数値解析を行った。解析の結果、放射率が異なる壁面を設置したとき微弱ではあるが壁面での温度境界層を制御可能であることが明らかとなった。具体的には壁面近くで僅かな渦変動を生成されることが示唆された。また数値解析の比較のため、光干渉計を用いた境界層可視化実験との比較を行った。可視化では東北大学と八戸高専（古川の前職機関）間において、効果的な境界層可視化の議論を実施した。可視化の結果、数値解析で観察されたような放射率制御による境界層の変動は可視化されなかった。実験では対流伝熱の熱漏洩が顕著に影響するため定量的な可視化には断熱性能を向上する必要性があることが示唆された。

## 3. 研究目標の達成状況

### 微弱噴流による制御創成に関する研究

本研究期間で、噴流の熱流体的特性を変更することによって、共鳴現象自体が能動的に変化することが明らかとなった。噴流条件は出口温度、噴流の高さ、対面位置等様々な条件で変更して評価を行っており、境界層制御に関する多数の知見を取得することができた。以上の状況から本研究の目的は概ね達成できたと考える。

### 放射率制御による境界層制御に関する研究

本研究期間では数値解析、実験による比較まで実施することができた。境界層制御の可能性についての影響は小さいものの数値解析的に示すことができた。以上の結果から、数値解析・実験による比較を目標としていた本研究の目標は概ね達成できたと考える。

## 4. まとめと今後の課題

### 微弱噴流による制御創成に関する研究

微弱噴流の特性によって、自然対流境界層の共鳴に与える影響は大きくことなることが本研究期間によって明らかにすることができたが、その共鳴現象の促進の流体力学的考察は依然とし

て不十分である。今後は渦生成や噴流と自然対流境界層での運動量交換の観点から共鳴促進現象についての定量的な考察を行う予定である。

### **放射率制御による境界層制御に関する研究**

数値解析では、放射率制御による温度境界層の変動は示唆された。しかしながら、その温度変動は極めて小さかったため、解析対象、実験対象の系を変化させる必要があることが示唆された。本年度の研究では非対称加熱壁面からの常温のふく射による境界層制御を着目していた。本実験系では常温であるため、ふく射の影響は小さかったと考えられる。そこで今後はハロゲンランプ等の出力性能が高い加熱装置を使用して、ふく射による境界層の制御可能性について言及する予定である。

## 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）

#### 国際学会

- (1) Takuma Koizumi, Takuma Kogawa, Juan F. Torres, Steven Armfield, Atsuki Komiya, Oscillation Behaviour of a Moderate Laminar Jet Impinging on a Vertical Natural Convection Boundary Layer, Proceedings of 24<sup>th</sup> Australasian Fluid Mechanics Conference (2024), AFMC2024-219.

#### 国内学会・研究会等

- (1) 小泉匠摩, 古川琢磨, Torres Juan F., Armfield Steven, 小宮 敦樹垂直平板上における振動流生成に向けた噴流と自然対流間の運動量バランス, 日本機械学会熱工学コンファレンス2024講演論文集, No.24-19 (2024), F53.
- (2) Takuma Koizumi, Takuma Kogawa, Juan F. Torres, Steven Armfield, Atsuki Komiya, Investigation of configurations of low Reynolds number impinging jet for resonance oscillation control of natural convection, 第61回日本伝熱シンポジウム講演論文集, (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	CL07APR24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 3 日提出

## 血管内治療シミュレーションのためのさまざまな数値ソルバーの比較

安西 眸

東北大学流体科学研究所 准教授

Narendra Kurnia Putra

バンドゥン工科大学 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

数値流体力学解析(CFD)は血管内疾患の力学的応答や経過の理解, およびその治療の評価・開発研究に広く用いられてきた。当該研究室ではより高速な血流解析の実現に向けて, 世界初の大動脈・冠動脈血流予測ネットワークによる血流推定を行っている。本ネットワークに続き, 血流を予測する研究が複数行われているが, 学習データの作成に必要な膨大な計算時間のため, 機械学習ネットワークの構築は困難を伴う。そこで本プロジェクトでは機械学習技術と CFD 技術を連携し, より高速に学習データを構築するためのフレームワークを構築する。機械学習により CFD 解析の初期流れ場を設定することで繰り返し計算回数を低減する先行研究が存在する。しかしながら入出力形式が画一的であり, 工学部品より不定形な生体に対して適用することが困難であった。本研究は, これまでに開発してきた血管形状に対する機械学習技術を組み合わせることで幅広い形状の入出力に適用を可能とし, 安定した学習データの生成を可能とする。本プロジェクトの遂行はより幅広い学習データの構築に繋がるため非常に意義深い研究である。

## 1.2 研究期間内の最終目標

機械学習技術と CFD 技術を連携し, より高速に学習データを構築するためのフレームワークを構築する。

## 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

当該研究室ではより高速な血流解析の実現に向けて, 深層学習技術を用いた血流予測ネットワークの開発を行ってきた。深層学習の予測精度は学習に用いたデータに強く依存する

ため、十分なクオリティを担保した CFD 解析データが必要となる。共同研究先機関であるバンドゥン工科大では Ansys および Comsol の両ソルバーを用いて血管内流れの最適化を行ってきた経験を持つため、研究代表者（流体研）が機械学習部分を担当し、分担者（インドネシア）は CFD 解析を担当することで、効率的に開発が可能となる。

## 2.2 深層学習ネットワーク構築のための基盤技術の開発(例)

当該研究室ではより高速な血流解析の実現に向けて、世界初の大動脈・冠動脈血流予測ネットワークによる血流推定を行っているが、深層学習を構築するための学習データ生成に関しては、既存の解析を行いデータを蓄積するほかなかったため、深層学習のボトルネックとなっていた。本研究は CFD ベースの機械学習研究では負担で合った学習データ生成の負荷を低減することから、より幅広い学習データの構築に繋がる基盤研究であるため非常に意義深い。開発するフレームワークを用いることで、本邦にこれまで蓄積されてきた大量の医療画像に対して血流解析を行うことが可能となる独創的な研究である。

## 3. 研究目標の達成状況

公開ライブラリである **CancerImaging** より大動脈に異常を認めない医療画像を取得し、実血管形状の再構築を行った。深層学習ネットワークとはまったく異なるデータソースであり、直径や曲率は臨床報告の範囲内であることを確認した。深層学習ネットワークで予測された内部流れ場を、血流解析のための初期流れ場としてインプリメンティングすることで、連成フレームワークとして構築した。

連成フレームワークでは既存の CFD 解析と比較し約 10%程度の iteration 回数の低減が見られ、また CFD 繰り返し解析部分の収束も良好であった。

## 4. まとめと今後の課題

本研究では、機械学習と数値流体力学 (CFD) を連携させることで、血流解析における学習データ生成の高速化を図るフレームワークを構築した。特に、実医療画像から再構築された血管形状に対して深層学習により予測された流れ場を初期条件として用いることで、CFD 解析の反復計算回数を低減し、従来手法と比較して約 10%の高速化を実現した点は大きな成果である。また、ネットワークによる初期条件の付与により、安定的な収束性も確認されており、本手法の有効性が示された。

一方で、今後の課題として、多様な病変形状への対応、初期流れ場の精度向上、およびデータ拡張と汎化性能の評価と検証が必要である。以上の課題に取り組むことで、機械学習と CFD の融合による高速かつ高精度な血流解析の実現が期待され、今後の医療現場における診断支援や治療計画立案への貢献が見込まれる。

## 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）

該当なし

#### 国際学会

Hitomi Anzai, Keito Yanagisawa, Liao Jing, Kazuki Shibata, Kazuyoshi Jin, Makoto Ohta: Rapid Blood Flow Analysis and Blood Flow Database Creation Enabled by Deep Learning, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics (2024), pp. 650-651.

Kazuki Shibata, Haoran Wang, Gaoyang Li, Keito Yanagisawa, Makoto Ohta, Hitomi Anzai: Development of Flow Field Imprinting in CFD Analysis Using Deep Learning to the Steady State Flow in Aorta, 8th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering (CMBE24), (2024), pp.250-252.

#### 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	CL14APR24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 08 月 04 日提出

## 矢軸まわりの回転を伴う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

アーチェリー競技矢の抵抗係数(Cd)を測定した既往の実験研究によれば, 競技矢のレイノルズ数(Re)域で高低 2 値が計測されている. また, 競技矢は飛翔中に微小な迎角をもつことおよび, 矢軸まわりに回転していることが知られている. 迎角( $\alpha$ )に関しては, 矢表面の境界層の速度分布をもとに安定解析が行われ, 微小な迎角で不安定化することが示された. その一方, 矢軸まわりに回転についてはまだその影響が分からないために, 直接数値計算することによって回転のもたらす効果について調べることを本研究の目的とする.

## 1.2 研究期間内の最終目標

矢軸まわりの回転の大きさを表すスピンパラメータ(SP)の値を変化させて, 矢表面境界層の速度分布の受ける影響, とくに定常流が非定常化する SP の閾値を求めることを目標とした.

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

## 2.1 新しい現象の解明

競技中アーチャーが射出する矢で生じる矢軸まわりの回転は, スピンパラメータの値に直すと  $SP=0.03$  と推定されている. 代表的なレイノルズ数  $Re=1.5 \times 10^4$  において, ベアシャフト矢の鍔を椎型, 流線形の 2 種類に変化させて,  $SP=0.03$  の条件で数値計算した. 計算で得られた速度分布を  $SP=0$  の場合の速度分布と比較したが, 速度成分に明確な差異はみられなかった.

## 3. 研究目標の達成状況

当初最終目標とした SP 値の影響に関する解明は達成できていない. SP 値が小さい場合 (競技

矢における値と同程度)に境界層の速度分布が受ける影響は小さいことは確認できたが、SP 値が大きい場合について解析できていない。

#### 4. まとめと今後の課題

現在得られている計算結果は、新しい現象の解明をできていないが、スピンパラメータが流れにおよぼす影響は小さいという従来からの推定と一致する。今後の課題は以下の二つがある。

- 1) 計算に用いているプログラム(ルンゲクッタ陽解法)の安定性が低く、 $SP > 0.06$  に対して収束しないため、より安定性の高いプログラムを開発する。
- 2) 競技矢に対して推定されている SP 値では回転の影響がほとんどないことが分かったため、SP 値の大きい場合に対して矢軸まわりの回転の影響を調べる。

#### 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)

計画中

###### 著書

無

###### 国際学会

無

###### 国内学会・研究会等

西連地 純平, 高橋 直也, 岩津 玲磨, 宮寄 武, アーチェリー競技ベアシャフト矢の微小迎角における非定常流の発生, 日本機械学会 スポーツ工学・ヒューマンダイナミクス部門講演会 2024 (SHD2024), 2024/11/15.

##### 5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

無

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL19APR24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 8 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 准教授

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

風速の鉛直方向の大きな変化である、鉛直風速シアによって誘発されるケルビン・ヘルムホルツ（KH）不安定波の成長とその崩壊は、航空機の安全な運航を阻害する大気の流れの一因として広く知られている。単一方向の風速成分のみを有する理想的な鉛直シアで成長する KH 波や、それに伴う 2 次不安定の特性を解析した研究は数多く存在する。一方、実際の大気中で頻繁に観測される、2 方向の風速成分がシアを有するねじれた風速構造における検討はあまり進んでいない。本研究では、このねじれた鉛直風速シアにおける 2 次不安定の特性を明らかにすることを目的とする。このような研究は、気象学や流体力学の分野に新たな知見をもたらすものと考えられる。同時に、大気中での風速の鉛直変化が乱流をどのように引き起こし、成長するかを把握することは、将来的な航空乱気流の予測技術や、大気中の乱流を記述する新たなモデルの構築にも貢献すると期待される。

## 1.2 研究期間内の最終目標

現実の大気の流れの鉛直風速シアにおける 2 次不安定の性質を調べ、そこで成長する擾乱により流れ場全体が乱流に崩壊する過程を明らかにする。

## 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：本研究は大気の流れの鉛直シアにおける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。

本共同研究は、2023.5-2024.3 で実施した共同研究「晴天乱気流の発生過程の理論的解析に関する研究」の継続テーマである。

成果内容：昨年度共同研究で実施した KH 不安定波の計算及びブレイド域における 2 次不安定の特性調査において、解析のベースとなる大気風速プロファイルにおけるシアの方向と、KH 不安定波を誘発させるために付加した正弦波擾乱の方向がずれていた。その為、2 次不安定で成長する風速擾乱を正しく観察することができていない可能性があり、両者の方向のずれを修正して再計算を行った。修正の結果、前回共同研究で得られた成果を改変するほどの影響がないことを確かめた。

## 2. 研究目標の達成状況

本共同研究では、昨年度共同研究でベースとした不正確な計算条件を修正し、その結果、現状の研究成果が影響を受けないことを確認した。

## 3. まとめと今後の課題

昨年度報告書で課題として挙げた「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」に取り組む予定である。なお今後、本研究課題は焼野准教授のプロジェクトの実施項目の 1 つとして継続される予定である。

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

### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

**学術雑誌（解説等を含む）**

**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	CL20APR24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025年8月5日提出

## 流体機械設計のためデータ駆動・データインフォームドアプローチの研究

阿部 圭晃

東北大学流体科学研究所 准教授

下山 幸治, 林 晃生

九州大学工学研究院機械工学部門 教授, 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

流体力学の数値解析（CFD）は発展の一步を辿ってきており, 昨今の計算機性能の向上と相まって精度的にもコスト的にも有益なツールとして認識されるようになった. さらに, 近年の発展が目まぐるしいデータ科学技術との融合により, 設計・開発上必要と思われるケースで CFD を優先的に実施しながら, 蓄積された CFD データから所望の設計・開発に繋げる「データ駆動」アプローチの研究が進められてきた. しかし, 「データ駆動」アプローチは数値データに基づき, 設計作業を機械的に支援するだけであり, 設計者の本質的な理解を促すものではない. そこで本研究では, 「データインフォームド」アプローチを提案することで, 設計作業の効率向上だけでなく, 難解な流体力学に支配される機械を設計する者の物理的理解と意思決定を支援する世界初のフレームワークを構築する.

## 1.2 研究期間内の最終目標

機械学習により簡易化・低次元化あるいは特徴量化された物理代替モデルから, 流体機械の性能向上に欠かせない, 重要な流体现象を設計者に気付かせる「データインフォームド」アプローチを開発する. そして, 流体機械の実設計問題に応用し, その有効性を実証する.

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

## 2.1 次元縮約を併用した高次元ベイズ最適化手法の開発と流体機械設計への応用

複雑形状を詳細に設計するような高次元の最適化問題において, 代替モデルの精度が低下するためベイズ最適化の利用が望めないという問題点があった. そこで, 本研究では条件付き変分オートエンコーダ（CVAE）による次元縮約を併用したベイズ最適化を提案し, 従来の次元縮約なしのベイズ最適化手法との性能比較を行った. その結果, 高次元最適化のテスト問題においては, CVAE は平均的に優れた解探索性能を示した. さらに, 本手法をヒートシンクのトポロジー最適化にも応用し, 既存設計を凌駕する新設計を詳細に探索することが

できた (図 1).

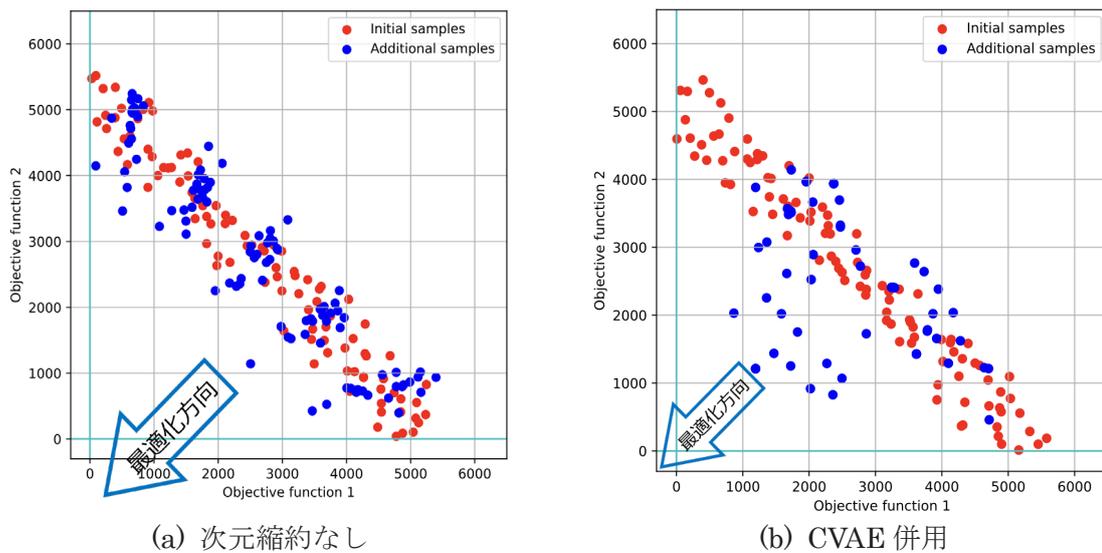


図 1 次元縮約を併用した高次元ベイズ最適化手法の開発

### 3. 研究目標の達成状況

次元縮約を併用した高次元ベイズ最適化手法を開発し、多変数最適化のテスト問題において検証した結果、最適解の探索性能の改善が確認された。さらに、開発手法は流体機械の詳細設計においても有効であることを実証した。

### 4. まとめと今後の課題

流体機械の性能改善に紐づく形状的特徴を読み取りながら、流体機械の詳細設計を効果的に進めるデータ駆動・データインフォームド型の最適化手法を開発し、有効性を実証した。将来的には、流体現象から設計上重要な特徴を直接読み解く、さらに高度なデータインフォームドアプローチの導入を目指す。

### 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)

齊藤陸人, 林晃生, 下山幸治, “変分オートエンコーダによる次元縮約を併用した流体機械設計のための高次元ベイズ最適化”, 日本機械学会九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 大分, 2025 年 3 月 5 日.

#### 5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL23APR24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.4~2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 4 日提出

## Super-resolution reconstruction of turbulent flows using diffusion-based model

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

Golsa Tabe Jamaat

東北大学大学院情報科学研究科 特任助教

### 1. 研究の目的と目標

#### 1.1 研究の背景と目的

In the recent years, there have been many studies on the super-resolution reconstruction of turbulent flows with the aim of reconstructing the DNS (direct numerical simulation) flow field using low-resolution inputs [1,2]. However, developing a model which is successful in predicting the flow field well especially for very low-resolution inputs is still challenging. Furthermore, the novel methods which are being proposed for the image super-resolution in the computer vision from time to time can make it more likely to improve the performance and generalizability of the previously established models for the super-resolution reconstruction of turbulent flows.

Golsa Tabe Jamaat has worked on turbulence modeling using CNN (convolutional neural network). She joined Prof. Okatani's laboratory which is one of the leading groups in computer vision. Combining the experience in turbulence modeling and the sophisticated techniques in computer vision should make a breakthrough in the study of turbulence.

[1] Xu, Q., Zhuang, Z., Pan, Y. and Wen, B., 2023. Super-resolution reconstruction of turbulent flows with a transformer-based deep learning framework. *Physics of Fluids*, 35(5).

[2] Kim, H., Kim, J., Won, S. and Lee, C., 2021. Unsupervised deep learning for super-resolution reconstruction of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 910, p.A29.

[3] Tabe Jamaat, G., Hattori, Y., 2023. A priori assessment of nonlocal data-driven wall modeling in large eddy simulation, *Physics of Fluids* 35 055117.

## 1.2 研究期間内の最終目標

Our aim is to develop a novel powerful method for super-resolution reconstruction of turbulent flows. At first, we work on improving the CNN model accuracy for the super-resolution reconstruction of turbulent flows by modifying the loss functions and utilizing the functions that work well for the super-resolution and style transfer tasks in the computer vision like the perceptual loss [4]. Then, we compare the results with that of the CNN with the commonly used loss functions like the mean-squared error (MSE). Next, considering the insight from the modifications of the loss function, we focus on the diffusion-based model for the same task with the aim of improvement in the super-resolution reconstruction of turbulent flows like better prediction of the vorticity especially when the inputs have very low-resolution. Diffusion models have already been used for various tasks in the computer vision including image super-resolution [5]. The performance of the model will be compared later with that of the CNN and bicubic interpolation. We begin with the homogeneous isotropic turbulence and to check the performance of the models for the wall-bounded turbulence later.

[4] Johnson, J., Alahi, A. and Fei-Fei, L., 2016. Perceptual losses for real-time style transfer and super-resolution. In *Computer Vision—ECCV 2016: 14th European Conference, Amsterdam, The Netherlands, October 11–14, 2016, Proceedings, Part II 14* (pp. 694–711). Springer International Publishing. (<https://arxiv.org/abs/1603.08155>)

[5] Saharia, C., Ho, J., Chan, W., Salimans, T., Fleet, D.J. and Norouzi, M., 2022. Image super-resolution via iterative refinement. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 45(4), pp.4713–4726.

## 2. 研究成果の内容

A residual-based diffusion model based on the ResShift approach (Yue et al., NeurIPS, 2023) is built for super-resolution (SR) reconstruction of turbulent flows in pixel space across various resolution ratios. The training dataset is provided by direct numerical simulation (DNS) of 3D homogeneous isotropic turbulence (HIT) at  $Re_\lambda = 94$  and 173, where  $Re_\lambda$  denotes the Reynolds number based on the Taylor microscale. The model is trained using single snapshots of velocity components at resolution ratios of 4, 8, and 16. The training dataset includes 25,600 snapshots, each of size  $256^2$ .

The diffusion model in this study employs a Markov chain to transfer between high-resolution (HR) and low-resolution (LR) data by shifting the residuals between them over 15 steps, which can improve transition efficiency. In the reverse process, the noisy sample is gradually denoised by reversing the forward diffusion process and estimating the posterior distribution. A schematic of the model is shown in Fig. 1.

The probability density function (PDF) of vorticity and the energy spectrum for the resolution ratio of 16 are presented in Fig. 2, which show that the diffusion model can predict the PDF and energy spectrum well, and effectively capture small-scale structures,

compared to bicubic interpolation and the convolutional neural network (CNN) model.

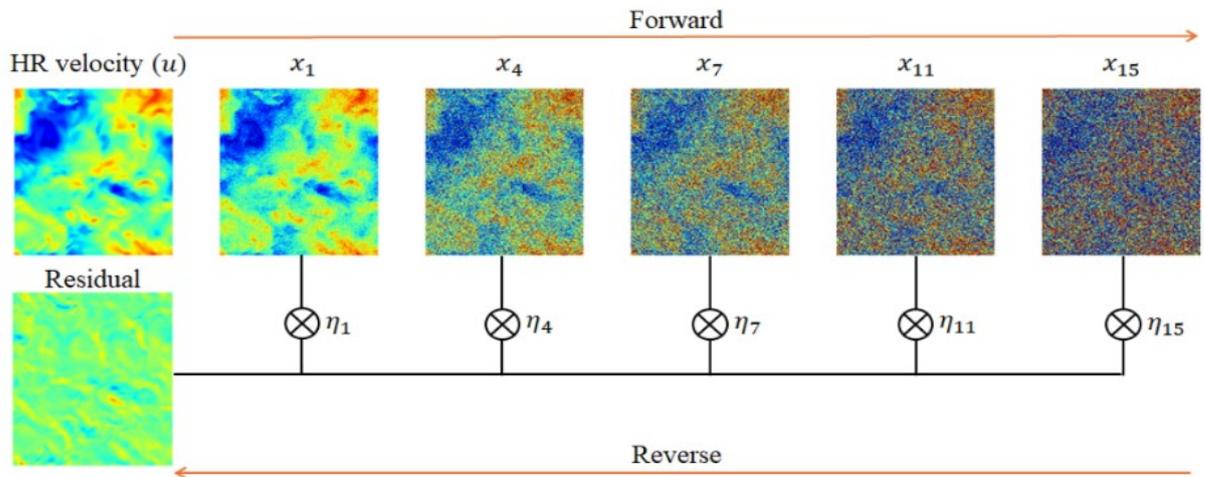


Fig. 1 Schematic of residual-based diffusion model

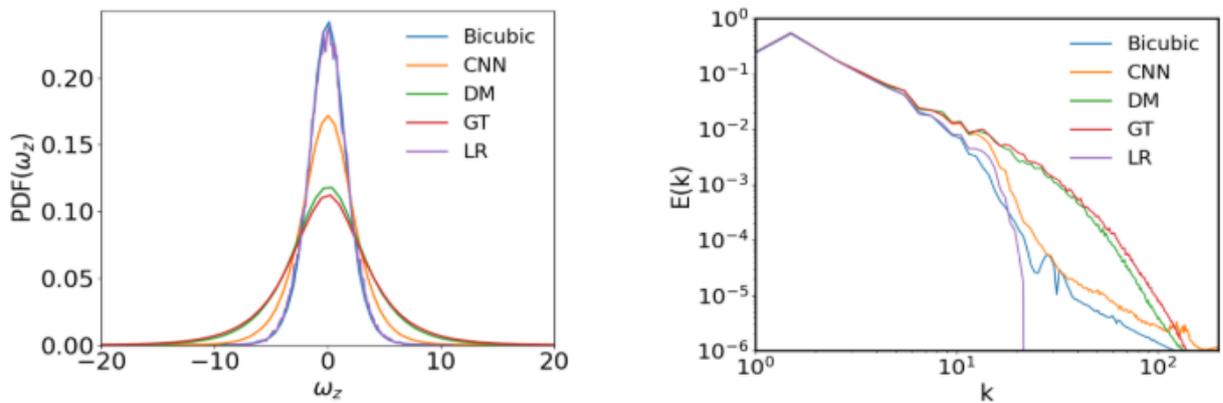


Fig. 2 PDF of vorticity (left) and energy spectrum (right)

### 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

乱流データの超解像に拡散モデルが有効であることを示した。従来手法 (CNN など) と比較して、エネルギースペクトルを忠実に再現できるのが著しい長所であることがわかった。

今後はその長所を活かして乱流モデルへの応用への展開を行う。

### 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)

Golsa Tabe Jamaat, Takayuki Okatani, Yuji Hattori, “High-fidelity turbulent flow field reconstruction using a low-inference-cost diffusion model,” submitted to Journal of Fluid

mechanics.

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	CL27APR24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.4～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025年8月5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

東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 助教

趙 子毅

東北大学大学院工学研究科ファインメカニクス専攻 博士後期課程

犬飼 春太, 高岡 勇佑

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の自動化による高効率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 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間を解析した結果、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。

## 2.2 SAM/溶媒界面の MD シミュレーションの自動化

多くの SAM 分子種や溶媒種の組み合わせにより界面親和性を明確にするためには、多数の組み合わせによる膨大な MD シミュレーションが必要となる。ここでは、分子構造を記述する文字列を与えることで、自動的に界面系を構成し、電荷の決定や分子力場のアサイン、MD シミュレーションの実行を行うフレームワークを構築することに成功した。

## 3. 研究目標の達成状況

種々の SAM 種を用いた不均一な SAM 表面上の液滴接触に対する目標および MD シミュレーションの自動化フレームワークの構築について、概ね目標を達成した。

## 4. まとめと今後の課題

今後、構築された自動化フレームワークを用いて、解析対象となる SAM や溶媒の種類を拡張し、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、接触線の動的な挙動に関して解析を進める。

## 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, 楠戸 宏城, 菊川 豪太, 第 61 回日本伝熱シンポジウム, (2024), BPA31.
2. 犬飼春太, 楠戸 宏城, 田川 義之, 菊川 豪太, 日本流体力学会 年会 2024, (2024), 1M1004-07-02.

#### 国際学会

1. Ziyi Zhao, Hiroki Kusudo, Gota Kikugawa, A Molecular Dynamics Study on Wetting Behavior of Water Droplets on Heterogeneous SAM-Modified Surfaces, 3rd Asian Conference of Thermal Sciences, Shanghai, China, (2024), P-0748.

### 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	CL01JUN24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.06～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 7 月 22 日提出

## 熱的に揺動する膜上のチューリングパターン：

## 異方性の起源に関する数値的および数理的研究

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

魚の表面などに現れるパターン(図1)は A.Turingが1952年に発表したTuring方程式によって明らかにされている。一方、このことが実験的に確認されたのは比較的最近のことである(S. Kondo and R. Asai,Nature 376, (1995)). 本研究は昨年引き続いて、このTuring Pattern (TP)の発生原因は何かという問題に取り組む。



図 1. 魚に現れる Turing パターン

昨年度は平面上のTPを取り扱ったため、そのときに今後の課題として残された問題：**曲面上のTPの発生原因は平面上の場合と同じく弾性力に起因するか？**を昨年度と同様にFinsler幾何(FG)モデルを用いて幾何学的に扱う。

研究目的は、曲面をある方向に引き伸ばすような外力は、平面上の場合と同じように、TPの発生原因となることを示すことである。

## 1.2 研究期間内の最終目標

FGモデルでは内部自由度(IDOF)が重要な役割を担う。TPのモデルでは、平面でも曲面でも弾性膜モデルを用いている。昨年度の研究では平面上のTPに対してはポリマー分子位置の揺らぎの向きをIDOFと仮定したが、曲面上ではこのIDOFは仮定できないため、曲面上ではポリマー分子の向きをIDOFとする。「ポリマー分子の向き」は、弾性膜モデルにおける新しい概念である。なお、このIDOFは、文献 Monte Carlo Study of Rubber Elasticity on the Basis of Finsler Geometry Modeling <https://doi.org/10.3390/sym11091124>において導入されたものと同じである。

本研究の目標は

- (i) 膜を一方向に引き伸ばすことで拡散係数が動的に異方性を帯びるという機構が、曲面上の反応拡散方程式においても成り立つことを、数値計算によって示すことである。

## 2. 研究成果の内容

### 2.1 新しい解析手法の開発

既に述べたとおりポリマーの向きという変数を IDOF として新しくモデルに組み込むことは、モデルを拡張することになる。この拡張が意味を持つためには、弾性エネルギーがこの新しい変数の導入によって予期しない影響を受けないことを確認する必要がある。このために具体的にチェックしたことは

- (i) IDOF がランダム(=等方的)なときに、TP も等方的になること、即ち、IDOF が無い場合に予想される結果と同じになること、
  - (ii) 平面上で現われる TP は、IDOF が等方的な場合も異方的な場合も、分子の揺らぎ方向を IDOF とした昨年度のモデルの結果と同じになること、
- 等であり、これらには問題ないことは確認した。

### 2.2 新しい現象の解明

細かく述べると次の3点に要約できる。

- (i) ポリマーの向きという新しい変数(IDOF)の導入によって拡張した弾性膜モデルが意味のあるモデルであることが分かったこと
- (ii) この拡張された弾性膜モデルを用いた FG モデルによって、曲面上の TP も平面上と同じように、面がある方向に引き伸ばされるとその方向に平行または垂直に TP が現われることが分かったこと
- (iii) 新しい変数を持った弾性膜モデルから、そのマクロな弾性的性質を反映する自由エネルギー $F$ を計算することで、エントロピー $S$ を $F=U-TS$ から計算した。ここで、 $U$ はミクロな力学的性質を反映する内部エネルギー、 $T$  ( $=1$ )は温度である。その結果、 $S$ は IDOF の状態に応じて変化すること、更に、エントロピー $S$ はある IDOF の状態で最大値を取ること、また $S$ が最大値を取るこの IDOF の状態は、膜を引き伸ばしたりするような膜の変形に大きな影響は受けないことなどが分かった。この(iii)は当初は予想していなかったことである。この(iii)の意味や、関連する今後の課題に関しては、4. で述べる。

## 2.3 数値計算結果

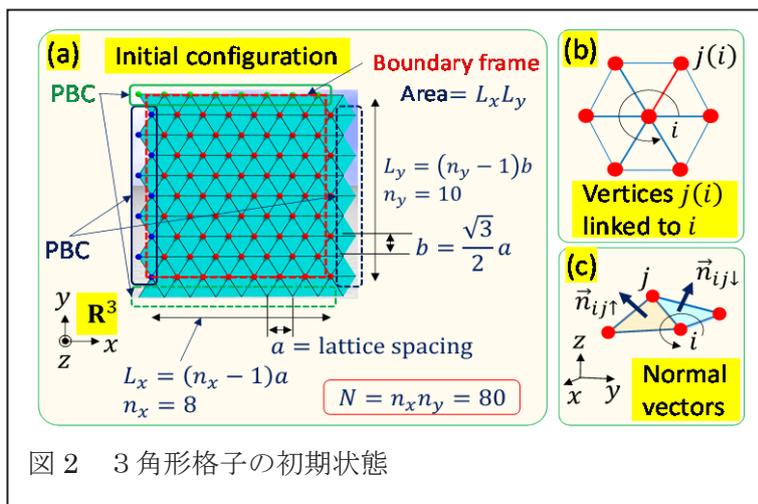


図2 3角形格子の初期状態

初めに、計算に用いる3角形格子を図2に示す。図は見やすさのために、頂点数 $N$ を計算に用いるものよりも小さくしている。縦と横の長さの比がほぼ1になるように、縦と横の頂点数を調整している。正3角形からなる格子なので縦横比は完全には1にはならない。計算では頂点の位置を動かすので、図は初期状態を表わしている。

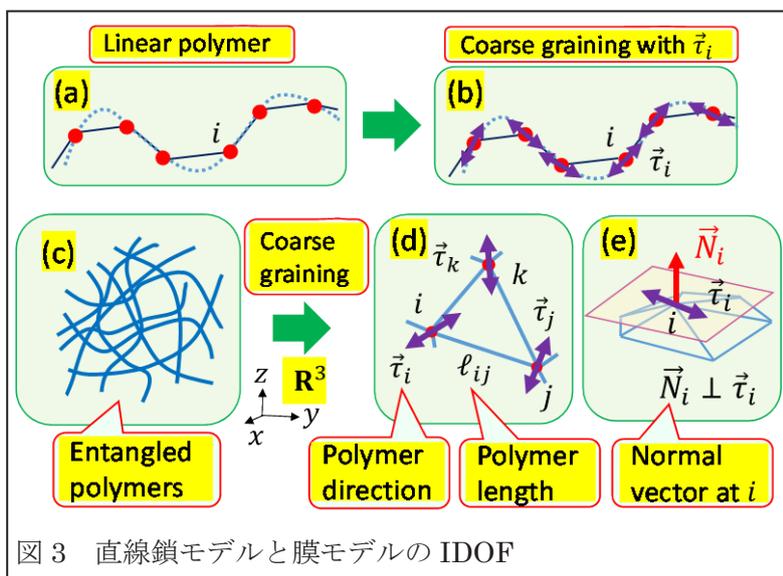


図3 直線鎖モデルと膜モデルのIDOF

図3に新しいIDOF： $\tau$ ，をイラストで説明する。図3(a),(b)は直線鎖(linear chain)モデルの場合の $\tau$ である。この直線鎖の場合の $\tau$ を2次元の膜モデルの場合に拡張したものが新しいIDOFとして導入するものである(図3(c),(d),(e))。膜モデルの場合の $\tau$ は接平面内に値を取ると仮定している。その接平面は各頂点で、その周りの3角形の法線ベクトルとその面積の重みづけ平均で求めている。

図4(a),(b)は、それぞれ等方的な外力をかける場合と $x$ 方向に外力をかける場合のイラストを示す。これらの外力によって膜が引き延ばされ、この外力のする仕事が自由エネルギー $F$ として計算できる。実際の計算では図4(b)のように $x$ 方向の外力 $\sigma^x$ に対応する自由エネルギーを計算した。

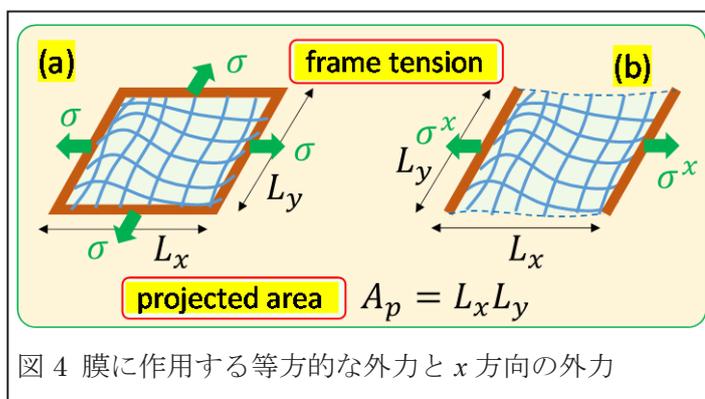


図4 膜に作用する等方的な外力と $x$ 方向の外力

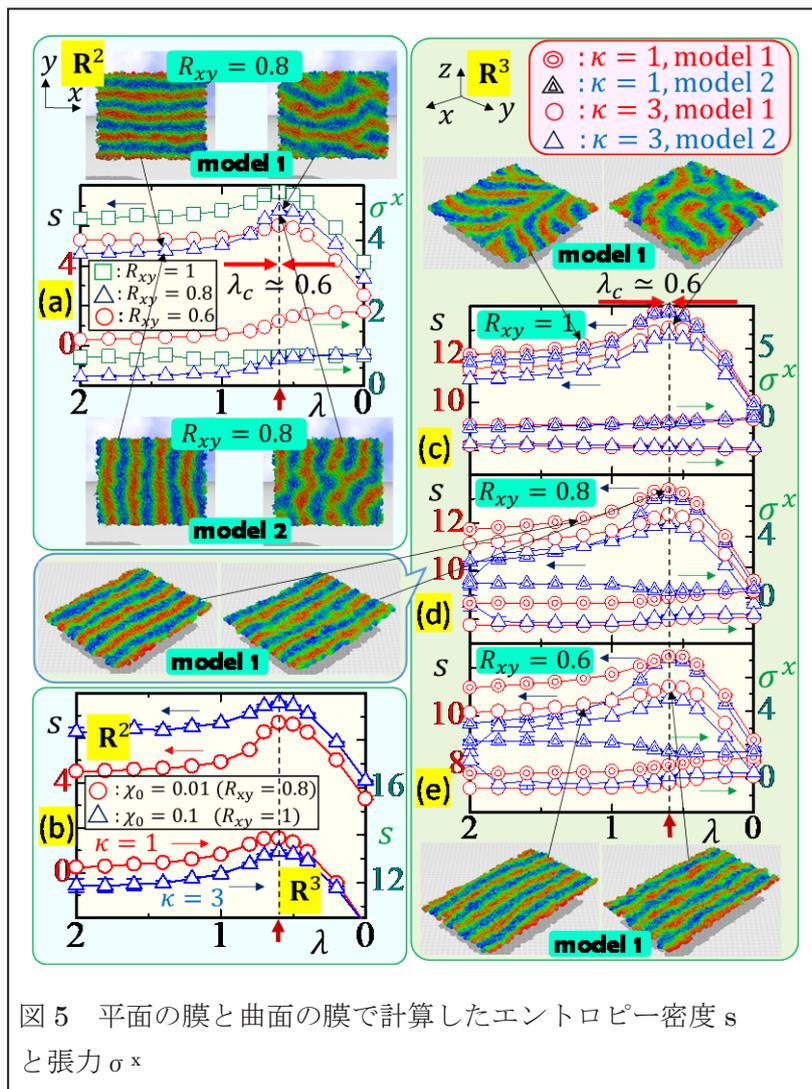


図5 平面の膜と曲面の膜で計算したエントロピー密度  $s$  と張力  $\sigma^x$

図5に、その自由エネルギーからミクロな情報である内部エネルギー  $U$  を用いて計算したエントロピー密度  $s(=S/A)$ 、即ち、単位面積当たりのエントロピー  $s$  とそのときに仮定したマクロな外力  $\sigma^x$  を示す。平面上のモデルの結果が図5(a)で、曲面の膜の結果がそれ以外の(b)–(e)である。グラフの横軸は、IDOF  $\tau$  に仮定した自己相関(=隣同士が同じ方向になる傾向)の強さを制御するパラメータ  $\lambda$  である。平面の膜でも曲面の膜でも  $\lambda=0.6$  でエントロピーが最大になることが分かる。興味深いことに、この値  $\lambda=0.6$  は、膜の形を表わす  $R_{xy}$  の値にもよらない。ここで、 $R_{xy}$  は膜の  $x$  方向と  $y$  方向の長さの比で  $R_{xy}=1$  が正方形を意味する。そのほか、 $\lambda=0.6$  は TP の方向を制御する model 1,2 の違いにもよらない

いし、曲面の膜においてはその曲げ剛性係数にもよらない。これらの結果は応用上も物理的にも重要な意味があるように思われる。このことに関しては4.今後の課題で考察する。

### 3. 研究目標の達成状況

1.2 で述べた期間内の最終目標は達成され、論文として発表することができた[文献 1,2]。

### 4. まとめと今後の課題

上記のとおり、曲面上の TP においても拡散係数が動的に異方性を帯びるという機構が働くことで TP が外力方向に異方性を帯びることを FG モデルの方法で示すことができた。

このほか、当初は予期していなかったが、弾性膜に対するマクロな自由エネルギーの計算からエントロピー密度を計算したところ、次のような興味深い結果が得られた：

(i) エントロピー最大の状態は IDOF の相関の強さを決める  $\lambda$  が  $\lambda=0.6$  で現われること

(ii) この  $\lambda=0.6$  はマクロな外力による膜の引き延ばし、その他の諸条件に影響されないこと  
 これらの結果からは、(1)一般に、エントロピー最大の状態(=安定)に向かって膜の内部構造(=IDOF)は変化していくこと (=構造緩和)、(2)  $\lambda=0.6$  の値はある程度大きいため、 $R=0$  でも

IDOF は完全に等方的ではないような自発秩序が期待されること, (3)TP の異方性は膜の内部構造を反映していること, を考慮すれば, 次のような考察ができる:

- (a) 膜を変形させて現われる TP の方向は,  $\lambda=0.6$  においては, 安定な状態である
- (b) その膜変形の外力による拘束条件を取り除けば, 異方的な TP から, ほぼ等方的である程度までの異方性を維持した TP へと状態変化する. この TP の状態変化は, 内部構造緩和, 即ち, 非平衡緩和過程を反映したものである

そこで, 問題は(b)の過程がシミュレートできるかどうかである. しかし, その初期状態(=引き伸ばしたときの TP)と終状態(=引き延ばしなしのときの TP)は計算できても, その途中の時間変化は, 一般に Monte Carlo 計算は時間的に変動しない平衡状態の計算なので, MC 計算でそれを直接に求めるのは難しい.

一方, 外力を周期的に変化させたときの応答は, "動的 MC 法"と呼ばれる方法で, 定常的な時間変化は計算可能であることが分かっている.  $\lambda=0.6$  において現われる IDOF の静的状態は, 周期無限大という意味の動的外力に対する上記の安定な状態と考えられる. しかし, 応用的な観点からは, 単発的な外力に対する時間応答よりも変化する外力に対する応答の方が興味深い. どちらも構造緩和現象は起こる. 更に非平衡現象における時間変化そのものより構造変化がどのように残るかが問題になる. 特に, 変化する外力に対してはその内部構造緩和の影響を受けて現われるヒステリシスは実験データも多い. FG モデルと動的 MC 法の組み合わせで得られるヒステリシスは, IDOF の状態変化を反映して現われたものであるから, 実験的に得られるヒステリシスと類似のものと考えられる. 従って, 今後の課題としては

#### FG モデル + 動的 MC 法

の組み合わせによって, TP に関連したヒステリシスを計算することである. この組み合わせは TP 現象に限らず, 他の現象に対しても適用可能な, 時間依存の非平衡緩和現象を研究できる新しい方法と期待できる. FG モデルは動的 MC 法と組み合わせて非平衡現象が計算でき, また動的 MC 法は FG モデルに適用することでその威力を発揮できる. これがこの研究で得られた示唆であり, また今後の課題でもある.

## 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] F.Kato, H.Koibuchi, E.Bretin, C.Carvalho, R.Denis, S.Masnou, M.Nakayama, S.Tasaki and T.Uchimoto, Turing patterns on polymerized membranes: a coarse-grained lattice modelling with an internal degree of freedom for polymer direction, *Soft Matter*, 21, pp.2317-2338 (2025), <https://doi.org/10.1039/D4SM01309C>

#### 国際学会

- [2] E.Bretin, C.Carvalho, R.Denis, F.Kato, H.Koibuchi, S.Masnou, M.Nakayama, S.Tasaki, T.Uchimoto, Coarse-grained Lattice Simulations for Turing Patterns on Membranes, conference paper, ICFD2024 CDROM.

### 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	CL01AUG24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.08～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 08 月 27 日提出

## 全固体電気化学デバイスの大規模電気化学 - 流体力学連成解析における

## マルチフィジクス・マルチスケール解析

伊賀 由佳

東北大学流体科学研究所 教授

佐藤 一永

東北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

燃料電池・電気化学水素製造・全固体電池をはじめ全固体電気化学デバイスは、大容量化するために大面積薄膜積層体を多数スタックした構造を有する。これまで研究では、経時変化から算出した還元ひずみと、温度の経時変化から算出される熱ひずみを構造解析に用いることで、電気化学デバイスの機械的劣化予測のためのプログラムを開発してきた。しかし、これまでは物性値が変数に依存するため、陽解法による非定常計算を行う際に時間刻みを細かく取らなければ精度の良い結果が得られない。また、平板型電気化学デバイスに対してガス流路部分を正確にモデル化すると要素数が膨大になるため、特に大規模モデルや長時間運転では電気化学ポテンシャル解析だけではなく構造解析においても、計算コストが増大するという問題がある。

そこで本研究では、遂行する大規模実機スケール（ $100 \times 200 \text{ mm} \times 200 \mu \text{ m}$ （5 層、最薄層は  $10 \mu \text{ m}$ ）の積層複合体（10 層以上）の電気化学状態（発電、電解、充電・放電）における電気化学スタックの応力と電気化学的挙動を可視化する。実験との比較により、力学と電気化学の連成現象を世界に先駆けて明らかにする。これでは、電気化学デバイスに限らず、航空機・半導体・タービン等の分野への応用が可能である。

## 1.2 研究期間内の最終目標

大規模実機スケール（ $100 \times 200 \text{ mm} \times 200 \mu \text{ m}$ （5 層、最薄層は  $10 \mu \text{ m}$ ）の積層複合体（10 層以上）の電気化学状態（発電、電解、充電・放電）における電気化学スタックの応力と電気化学的挙動を可視化する。力学と電気化学の連成現象を世界に先駆けて明らかにする。

## 2. 研究成果の内容

## 2.1 新しい解析手法の開発

大面積かつ複雑形状かつ薄膜積層体かつ多段積層構造体における各種シミュレーションを行うと計算コストが極めて高くなる。そのため、通常の解析もしくはモデルとは異なる手段で解析できる手法を提案する必要がある。そこで、本研究では、実験で得られた特徴量などのゆらぎデータを計算に組み込むことで計算コストが格段に下がるシステム開発を目指した。

本研究では、解析コードに FEniCS を用いた。ANSYS や COMSOL でも検証を行ったが、自由度が低いため、Python ベース、計算式が自分で入力できる、詳細・複雑な条件を設定できるという特徴を有するため、FEniCS を用いた。図 1 に 10 枚の反ったセルの計算モデルを示す。

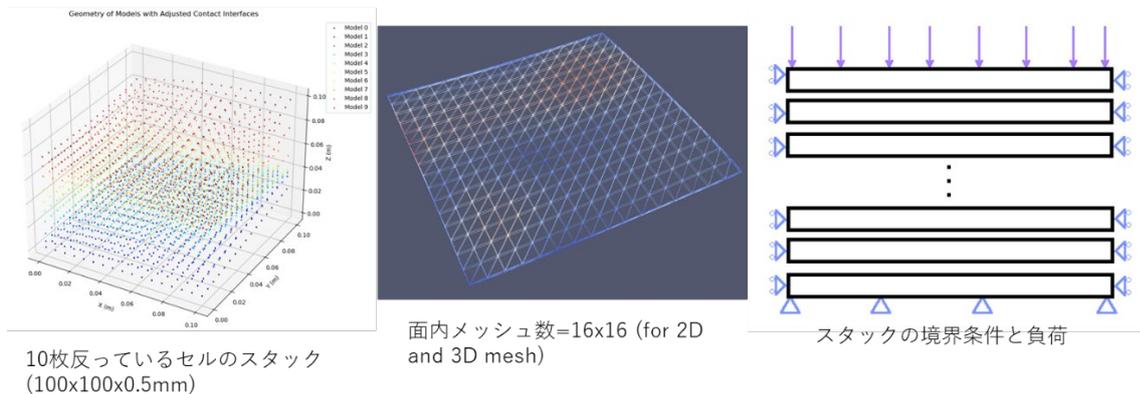


図 1 計算モデル

反りに関しては疑似的に  $\sin$  関数を用いて、異なる反りのあるセルを作った。これは実験に基づいたランダム関数である 100 枚まで異なる反り方のセルモデルが作成できるようになった。今後は、実験データで得られる特徴量を元に反りモデルを構築していきたい。本研究では、接触問題をシミュレートできるように、各層のセルの隙間計算を行い、できるだけ小さくした。計算コストを下げるために、面内メッシュ数を段階的に減らし、100mm×100mm のセルを 16x16 で行うことができた。応力分布も確認できた（所要時間が従来の 1/8 に低減）。一番上のセルから力が伝達できるように、するために境界条件でセルの四隅のエッジを  $xy$  方向に拘束した。シミュレーションへの影響を小さくするために、一番下以外のセルに、下部の面に 1 点を  $z$  方向も拘束することで力が下まで伝わった。収束性の観点から、Penalty 法から Augmented Lagrangian 法を接触問題に適用した。結果的に、分布荷重の 0.1%~1% の誤差まで収束できた。解析については、最終的に 300 枚以上の積層構造を解析するために様々な手法やソフトを試行している。この部分をブレイクスルーできれば多くの歪んだ積層構造体の構造解析が短時間に可能になると考えている。

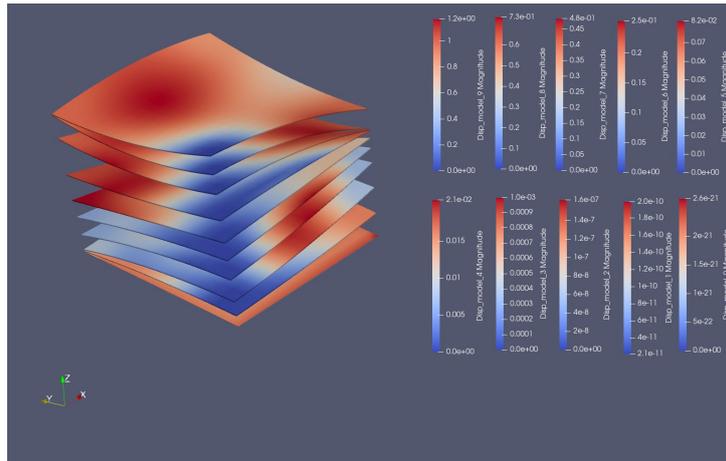


図 2 歪んだ 10 枚積層体の変位分布

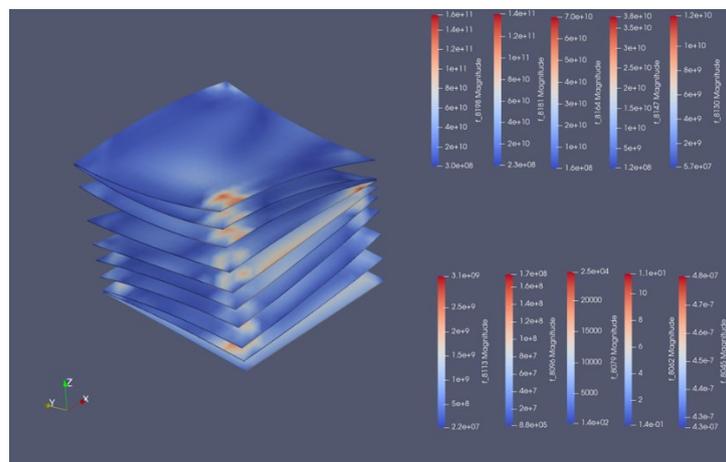


図 3 歪んだ 10 枚積層体の von mises 応力

## 2.2 新しい現象の解明

前述した最適化設計手法を特徴量解析によるアプローチについて説明する．主に 5 つの特徴量が考えられる．

- A (高さ統計) – 面全体の平均ギャップ
- B (斜率) – 加工ストローク／摩擦・接触角，流路の影響も含まれる
- C (二次曲面) – 低次の反り・鞍形・傾き → スタック順番で重要
- D (DCT) – 二次以上でも表せない長波歪み
- E (Shape Index) – 微視的な凸凹タイプ分布

現在，表 1 に示すように考えられるパラメータを元に特徴量を算出している．13 枚のセル（おもて面，裏面）を以下の式に基づいて主成分解析を行った．主成分解析によりそれぞれの割合を算出したものを表 2 に示す．

表 1 5つの特徴量ならびに解析に用いた式

グループ	変数名	表記	数式	主な意味と使いどころ
A (高さ統計 ISO 25178)	Sa	算術平均高さ/粗さ	$Sa = \frac{1}{A} \iint_A  z - \bar{z}  dx dy$	面全体の平均的な浮き沈み量
	Sq	二乗平均平方根高さ	$Sq = \sqrt{\frac{1}{A} \iint_A (z - \bar{z})^2 dx dy}$	Saと同義だが大振幅を強調
	Sz	最大高さ	$Sz = z_{\max} - z_{\min}$	山と谷の間の全振幅
	Ssk	歪度	$Ssk = \frac{1}{Sq^3} \frac{1}{A} \iint_A (z - \bar{z})^3 dx dy$	分布の左右非対称 +なら山優勢, -なら谷優勢
	Sku	尖度	$Sku = \frac{1}{Sq^4} \frac{1}{A} \iint_A (z - \bar{z})^4 dx dy$	分布の尖り具合
B (傾斜)	Sdq	二乗平均平方根傾斜	$Sdq = \sqrt{\frac{1}{A} \iint_A ((\theta_x)^2 + (\theta_y)^2) dx dy}$	加工ストローク痕や滑り摩擦
C (二次曲線係数)	a0	高さオフセット	a0 (定数項)	平面外れ量 基準面補正後は0に近い
	a1, a2	一次傾斜係数	a1 = $\partial_x z$ , a2 = $\partial_y z$	全体の傾き(ねじれでなく単純傾斜)
	a3, a5	軸方向二次曲率	a3 = $\frac{1}{2} \partial_{xx} z$ , a5 = $\frac{1}{2} \partial_{yy} z$	X/Y 軸に沿った凸凹量。 +凸, -凹
	a4	交差二次曲率	a4 = $\partial_{xy} z$	“鞍形”度合い(対角方向反り)
D (低周波数)	DCT0 – DCT14	離散コサイン変換係数	$C_{pq} = \sum_{i,j} Z_{ij} \cos \frac{\pi p(2i+1)}{2N} \cos \frac{\pi q(2j+1)}{2N}$	画像の2D-FFTの低域版。p,qが小さいほど全体形状を支配する。0: 長手方向膨らむ, 1: 短手方向膨らむ
E (形状指数ヒストグラム)	ShapeBin0 – ShapeBin9	形状指数(Shape Index)分布	形状指数 $S = \frac{2}{3} \arctan \frac{\partial_{xx} z}{\partial_{yy} z}$ を[-1, 1]空間で10bin/面積正規化	各画素の局所主曲率 $k_1 > k_2$ から求める。-1: 凹杯 / -0.5: 鞍 / 0: 円筒 / +1: 凸頂。ヒストで“凹優勢 or 鞍優勢”を定量化。

表 2 5つの特徴量全体寄与度

主成分	割合 (%)	主に寄与する特徴量	各グループの分散	主な寄与(累積値)
PC-1	57.5	DCT低周波 & 二次曲率a3, a5	D=1.10, E=0.90, C=0.78, A=0.70, B=0.35	凸(+)/凹(-)の量とスケール(どれだけ反っているか)
PC-2	14.8	交差曲率a4 & DCT01	D=0.59, E=0.48, C=0.42, A=0.37, B=0.19	形状タイプ(+:鞍形 / -:楕円状膨らむ)
PC-3	11.8	一次傾斜a1, a2 & DCT11	D=0.82, E=0.68, C=0.56, A=0.52, B=0.26	面全体の傾き・ねじり
PC-4	0.08	DCT02 & 局所尖度(ShapeBin8-9)	-	
PC-5	0.04	ShapeBin0-2 & Sku(尖度)	-	

A=高さ統計, B=傾斜, C=2次曲面, D=低周波DCT, E=Shape Index

これにより, PC-1, PC-2, PC-3 の主成分がセル変形情報に重要であることがわかる. PC-1 は凹凸度合いを示し, PC-2 は鞍形とバルジ形の度合いを示す. また, PC-3 はねじり方向を示している. PC-1 と PC-2 の関係を表したものを図 4 に示す. また, ねじり度合いを示したものを図 5 に示す. これに基づいてセル積層の組み合わせを計算すれば最適な積層方法が見つかる可能性がある.

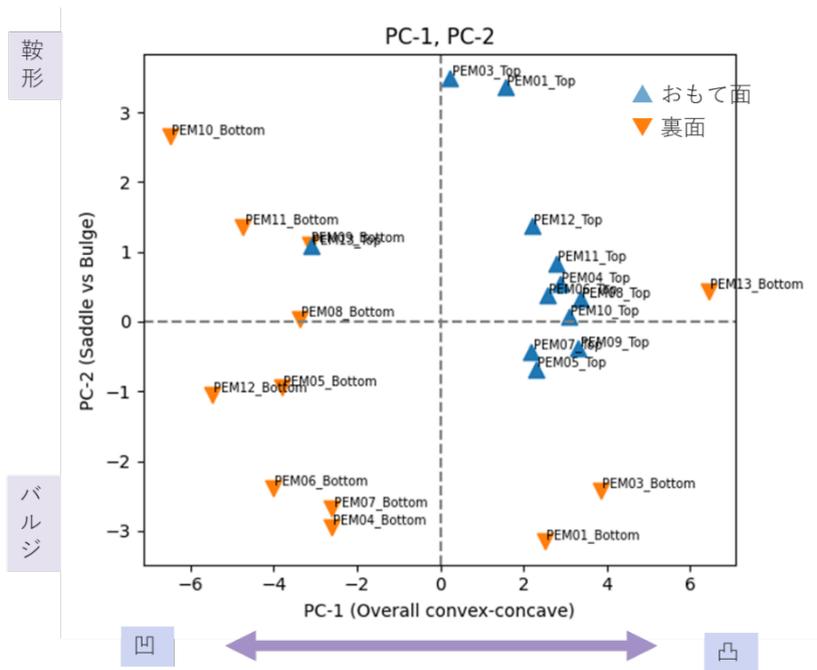


図4 PC-1 と PC-2 の関係

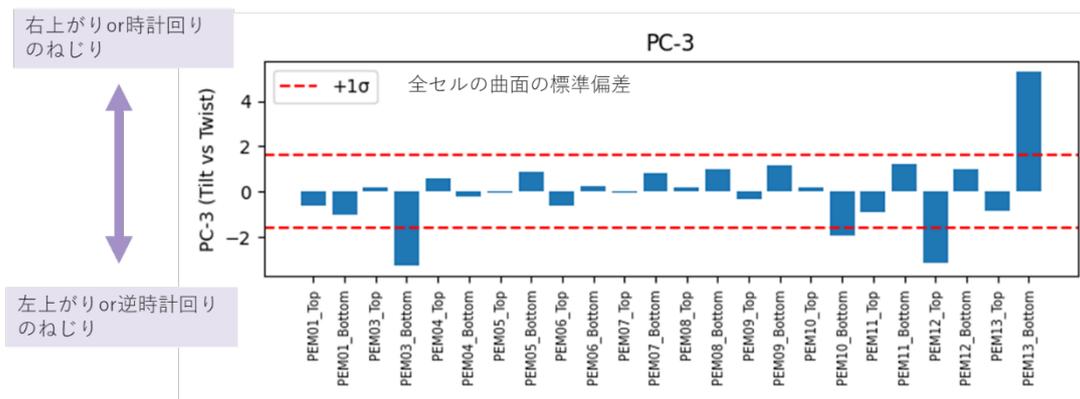


図5 PC-3 と各セルの曲面の標準偏差

### 3. 研究目標の達成状況

当初計画に掲げた目標と同等程度の成果を見出すことができた。今後、実験と比較を行うことで本手法の優位性を示すことができると思っている。

### 4. まとめと今後の課題

全固体エネルギー変換デバイスの高性能化と低コスト化を実現するには、高エネルギー密度化が不可欠である。これを達成するには、個々のセルを薄くして積層数を増やす必要がある。しかし、セルを薄くすることで製造時に反りが生じやすくなり、この反りを無視して積層すると、性能低下や劣化につながる可能性がある。そのため、製造誤差を考慮した最適な設計とモデル化が求められる。本研究では、積層構造体のモデル化を行うことで特徴量のゆらぎデータを用いた新しい解析手法を提案した。様々な計算方法を用いて積層問題に最適な計算方法を見出していきたい。

## 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）

Junya Tanaka, Shinichi Sugihara, Kazuhisa Sato, Keiji Yashiro, Tatsuya Kawada, Toshiyuki Hashida : In-Situ Monitoring of Cell Deformation during Operation in Solid Oxide Fuel Cells, *Journal of hydrogen energy* (2025)

#### 国際学会

K. Kojima, Y. Liao, Y. Huang, K. Akiyama, Y. Ozawa, K. Sato: Investigation of Flow and Mechanical Properties in Solid Oxide Electrolysis Cell Interconnects with Different Rib structure, *Proceedings of SOFC19 th Symposium*, (2025)

#### 国内学会・研究会等

小嶋健生, 黄怡暉, 秋山邦洋, 小沢喜仁, 佐藤 一永 : 固体酸化物電解セルのスタック内流路設計と機械的安定性に関する研究, *日本機械学会 2025 年度年次大会講演論文集*, (2025)

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02AUG24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.8~2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025年8月20日提出

## レーザ誘起気泡圧潰衝撃力の材料への影響に関する

## 流体／材料連成数値解析

伊賀 由佳

東北大学流体科学研究所 教授

佐々木 裕章

日本原子力発電株式会社 研究員

嘉 博鑫

東北大学大学院工学研究科ファインメカニクス専攻 大学院学生 (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

本研究プロジェクトは、レーザ誘起気泡の圧潰衝撃力を金属材料の機械的表面改質に活用するレーザキャビテーションピーニングについて、流体／材料連成数値解析により、気泡の圧潰衝撃力の材料への影響を明らかにするものである。レーザキャビテーションピーニングにおいて、レーザ焦点距離と被加工材表面のスタンドオフ距離 ( $L$ ) は重要な加工因子であるが、実験ではトライ&エラー的な試行錯誤により決定しており、レーザパルスエネルギーや材料ごとに最適なスタンドオフ距離が存在するのかさえも不明である。本研究では、気泡半径  $R_0$  と気泡中心と固体壁面間の距離  $L$  で定義される  $\gamma = L/R_0$  について、実験上、好適とされている  $\gamma < 0$  の領域や  $\gamma \approx 0$  の領域について、系統的に流体／材料連成数値解析を行い、最適スタンドオフ距離におけるレーザパルスエネルギーや材料の影響を明らかにする。

## 1.2 研究期間内の最終目標

$R_0$ 、 $\gamma$ 、材料定数 (ポアソン比、ヤング率、密度) を変えて、気泡圧潰衝撃力による材料への影響領域を評価し、最適な  $\gamma$  を明らかにする。また、材料定数の最適な  $\gamma$  への影響を明らかにする。さらに、気泡圧潰衝撃力による材料への影響領域における  $R_0$  の効果 (気泡の寸法効果) 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 気泡の圧潰衝撃力による材料への影響領域における最適な  $\gamma$  の解明

水中に被加工物を設置してパルスレーザを照射して被加工物の疲労強度などを向上させるレーザキャビテーションピーニングでは、パルスレーザ照射によりレーザアブレーションが発生し、レーザアブレーションの後に、キャビテーション気泡的挙動を示す気泡が発生して圧潰し、この気泡の圧潰衝撃力を用いて機械的表面改質を行っている。このレーザキャビテーションピーニングの実験では、 $\gamma < 0$  の領域において最適な $\gamma$ が存在するが、その機構は不明である。

本研究では、詳細に $\gamma$ を変化させて、系統的に流体／材料連成数値解析を行い、気泡の圧潰衝撃力による材料への影響領域を評価した結果、 $\gamma \approx 0$  において最大となることが判明し、これは材料定数に依存しないことが明らかになった。

## 2.2 気泡の圧潰衝撃力による材料への影響領域における気泡の寸法効果の解明

気泡の圧潰衝撃力による材料への影響領域について、マイクロジェット型圧潰と衝撃波が支配的な半球型圧潰 ( $\gamma \approx 0$ ) のそれぞれの場合において、 $R_0$  のべき乗則をそれぞれ仮定した場合、マイクロジェット型圧潰ではべき指数が約 1 であり、半球型圧潰ではべき指数が約 5 であることが判明した。これは、実験ではマイクロジェット型圧潰と衝撃波が支配的な圧潰を区別して実験できない（実験では両者が混在して生じた結果しか評価できない）ため、有用な知見である。また、これはキャビテーション壊食における寸法効果のべき指数が 0~12 程度にばらつく一因を示唆しているとも考えられる。

## 3. 研究目標の達成状況

種々の材料、 $R_0$  において気泡圧潰衝撃力による材料への影響領域が $\gamma \approx 0$  において最大となり、これは材料に依存しないことと、材料の影響領域の気泡の寸法効果が明らかになり、研究目標を達成できた。

## 4. まとめと今後の課題

本研究により、気泡の圧潰衝撃力により材料への影響領域が最大となる $\gamma$ が判明し、その初期半径の寸法効果も明らかになった。なお、本研究により明らかになった、寸法効果において、気泡の周囲圧力や温度、液体の音響インピーダンス（音速や密度）などが影響している可能性がある。今後、寸法効果におけるこれらの諸因子の影響を明らかにする必要がある。

本研究の流体／材料連成数値解析により、 $\gamma \approx 0$  において気泡の圧潰衝撃力による材料の影響領域が極大となることが判明した。実験では、パルスレーザのアブレーションによって気泡が誘起されて発達するので、パルスレーザの焦点位置から定義する $\gamma$ とは異なる可能性がある。そのため、 $\gamma$ を変化させた際の気泡最大径ならびに気泡形状を実験により詳細に計測して  $R_0$  の寸法効果を勘案して、実験上の最適な $\gamma$ を考察する必要がある。

## 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）

下記の論文を Experimental Thermal and Fluid Science, Special Issue “Cavitation and Bubble Dynamics” (Guest editors: Shuhong Liu and Claus-Dieter Ohl)に投稿予定。

Tentative title: Scaling effect on stress induced by a bubble collapse near elastic solid wall obtained by fluid/material coupled numerical simulation

Authors: Jia Boxin, Hirotohi Sasaki, Yuka Iga and Hitoshi Soyama

**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	CL03AUG24
研究種別	共同研究
利用期間	2024.8～2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 8 月 8 日提出

## 微小重力環境下におけるアンモニア球状火炎伝播の数値シミュレーション

中村 寿

東北大学流体科学研究所 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 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。特に、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 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/](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、微小重力下では通常重力下に対して火炎伝播速度がやや増加する傾向を示したが、その差はわずかであり、実験計測値のばらつきを考慮すると十分に有意とは言えない値となった。そのため、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。また、微小重力下では通常重力下に対して火炎伝播速度がわずかに増加する傾向を示したが、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火炎面の空間解像度など、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  $\text{NH}_3/\text{air}$  premixture under microgravity condition, *19th International Conference on Numerical Combustion*, (2024), pp. 53.

#### 国内学会・研究会等

B.M. Thuong, M. Muto, N. Hashimoto, Y. Xia, R. Kurose, H. Nakamura, Y. Konno, O. Fujita: DNS study on laminar flame propagation of ammonia-air mixture in microgravity, *第62回 燃焼シンポジウム*, (2024).

### 5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

該当せず

# 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	GR01APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 2 回報告

2025 年 8 月 4 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がある。ベイパーチャンバ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现象の直接計測は未だ困難である。そこで本研究では、ベイパーチャンバ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し、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 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。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。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。

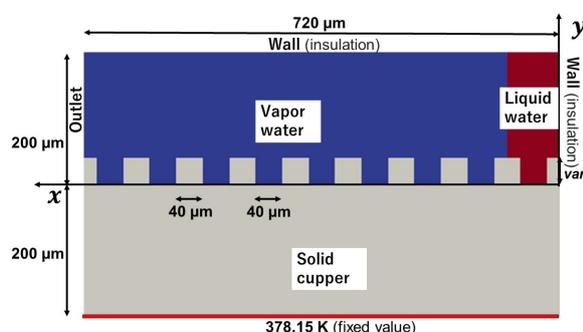


図 1. 解析モデル

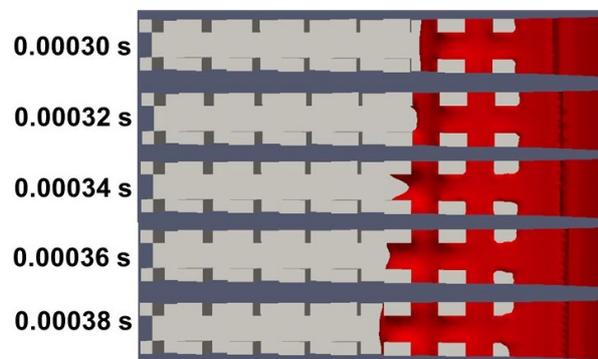
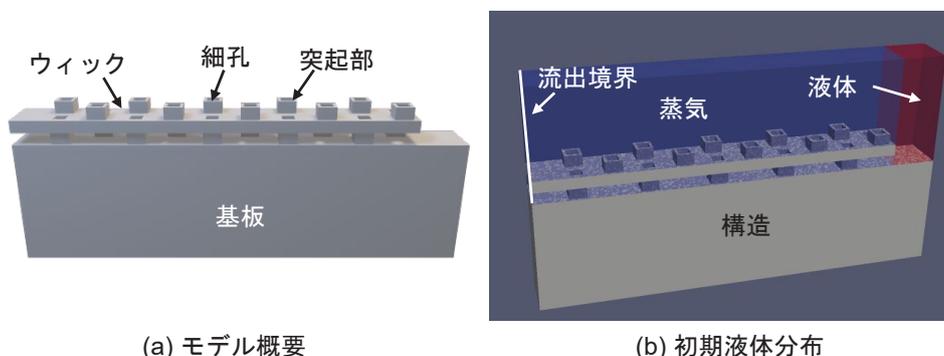


図 2. メニスカス進展の様子

## 2.1 複雑構造体における濡れ-蒸発現象

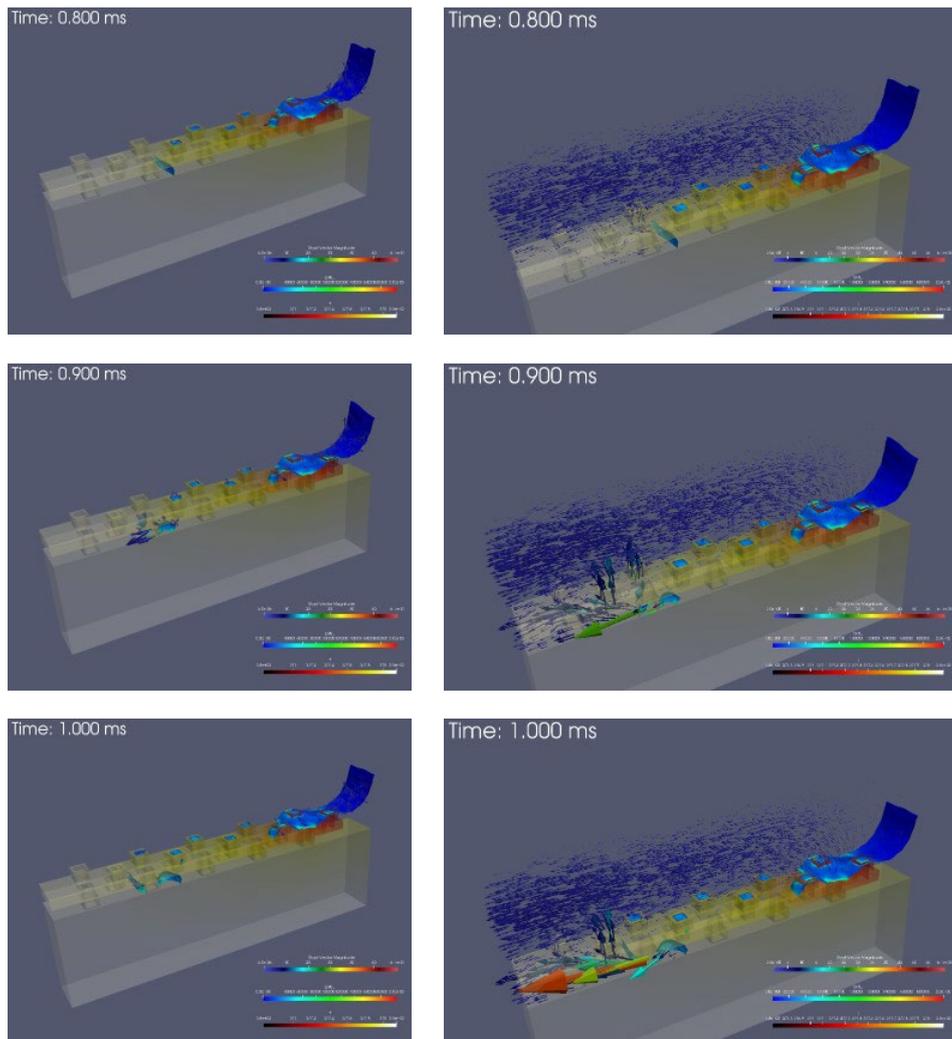
図 3 は本研究で用いた複雑構造体である。流体（気体と水）は  $100^{\circ}\text{C}$ ，構造の初期過熱度および構造底面の過熱度は  $5\text{K}$  とし，接触角は  $20^{\circ}$  とした。計算領域の手前と奥の面は周期境界条件とした。初期条件として図 3(b)ように初期の液体を配置した。固体は銅，流体は水とした。以上の条件で構造内部への液体の流入・蒸発を計算した。図 4 にウィック内への液体の充填挙動を示す。液体は主にウィック下部を流動し，かつウィックを冷却しながら進行する。一部の液体はウィック上面も移動した。ウィックの細孔による液体の吸い上げが可視化され，ウィック上面から細孔内への液体の充填挙動も確認された。またウィック下部の中でも相対的に狭い空間があるところで速度が増加している様子が示された。また図 4(b)は流体の流速ベクトルを表しており，主に発生した蒸気の流れが表されている。ウィック細孔への充填直前に細孔から大きな速度ベクトルが示されており，ウィック下部の空間からの蒸気の抜けが表されている。ウィック下部の空間内で界面の下流で蒸気の移動により速度ベクトルが大きくなっている。



(a) モデル概要

(b) 初期液体分布

図 3 複雑構造体の解析モデル(ウィック  $640\ \mu\text{m} \times 80\ \mu\text{m} \times 80\ \mu\text{m}$ ，ウィックの中心板厚  $20\ \mu\text{m}$ ，突起部  $30\ \mu\text{m} \times 30\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$ ，細孔  $20\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$ )



(a) 気液界面・固体内温度

(b) 流速ベクトル

図4 解析結果

### 3. 研究目標の達成状況

構造体内における液体の輸送および蒸発現象を取り扱い、複雑形状内での濡れ広がりおよび蒸発現象の解析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。

### 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

J. Okajima, Y. Naka, H. Sontheimer, T. Gambaryan-Roisman, and P. Stephan, Study on Micro-scale Evaporation for Heat Transfer Enhancement, Proceedings of the Twenty-fourth International Symposium on Advanced Fluid Information, pp. 101–102. (2024)

Y. Lyu, and J. Okajima, Numerical Simulation on Bubble Growth and Wall Heat Transfer During Saturated Flow Boiling of Water in Microchannel, Proceedings of Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, pp. 1435–1438. (2024)

## 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.

石橋輝, 大田光希, P. Stephan, 岡島淳之介, 数値シミュレーションによるプール核沸騰におけるマイクロ液膜形成過程の評価, 第61回日本伝熱シンポジウム講演論文集, E312. (2024)

三浦凌, 常岡大修, 岡島淳之介, サブクールプール沸騰における単一気泡の挙動および熱伝達の数値シミュレーション, 日本機械学会東北支部第60期総会・講演会予稿集, pp. 18–19. (2025)

## 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 2 回報告

2025 年 7 月 24 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, 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

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。現在は、異方性熱伝導率など特異な熱輸送特性やその分子配向との関係についての研究に発展している。

## (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。さらに、一对の固体壁間に溶液を満たした系において、溶液にイオン性の有機添加剤を加えた系に解析を進めた。この場合、溶液に電場を印加することによって、有機添加剤が固体壁に押し付けられ、界面活性剤の効果をオン・オフすることができるナノスケールデバイスとして有望である。その界面熱輸送特性とメカニズムを詳細に解明した。

## 3. 研究目標の達成状況

研究目標を達成し、物理化学・熱科学分野の主要誌に研究成果を発表した。

## 4. まとめと今後の課題

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）

Haiyi Sun, Donatas Surblys and Taku Ohara: Enhancement of thermal transport via electrostatic surface modification by ionic organic additives under electric fields: A molecular dynamics study, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 274 (2025), 126803, DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2025.126803.

Shukai Cheng, Donatas Surblys and Taku Ohara: Molecular dynamics study on phase change properties and their nano-mechanism of sugar alcohols: Melting and latent heat, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 234 (2024), 126104, DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126104.

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 2 回報告

2025 年 8 月 4 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, 藤井 陽向

東北大学情報科学研究科 M2, B4

## 1. 研究の目的と目標

## 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 CO<sub>2</sub> 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

### 2.1 後退翼まわりの境界層に対する層流化デバイスの効果検証

前年までは翼面上における境界層遷移を忠実に再現できる DNS コードを開発し、Volume Penalization 法を用いて任意の形状の人工粗さ(層流化デバイス)を配置できるようになった。解析対象として、JAXA の技術参照機体である TRA2012A の翼型(図 1 左)を採用し、全機まわりの RANS 解析によって得られた速度分布と圧力分布を翼近傍領域の DNS で再現した。実際の飛行環境では翼面上の自然粗さや付着物、気流の乱れなどが擾乱源として存在し、それらの大きさやスペクトル、空間分布は未知であるが、乱流遷移を引き起こす原因となる。本研究の DNS では、ホワイトノイズに近いランダムな擾乱を一定の振幅で全領域に与え続けることで、あらゆる擾乱を想定した試験環境とした。実際に擾乱が乱流遷移を引き起こすことが確認でき、このような擾乱環境下で層流化を試みた。具体的には境界層の線形安定性解析に基づいて本研究が提案する波型粗さ要素(SRE)の最適な形状を設計し、これを翼の前縁部に配置した(図 1 右)。この SRE を配置すると、横流れ不安定性が大幅に抑制され、乱流遷移の発生を完全に抑制することができた(図 2)。これまでの平板上の DNS では、SRE によって乱流遷移を遅延することまでしかできなかったが、曲率をもつ翼面上においてはさらに効果的に層流化ができることが示された。

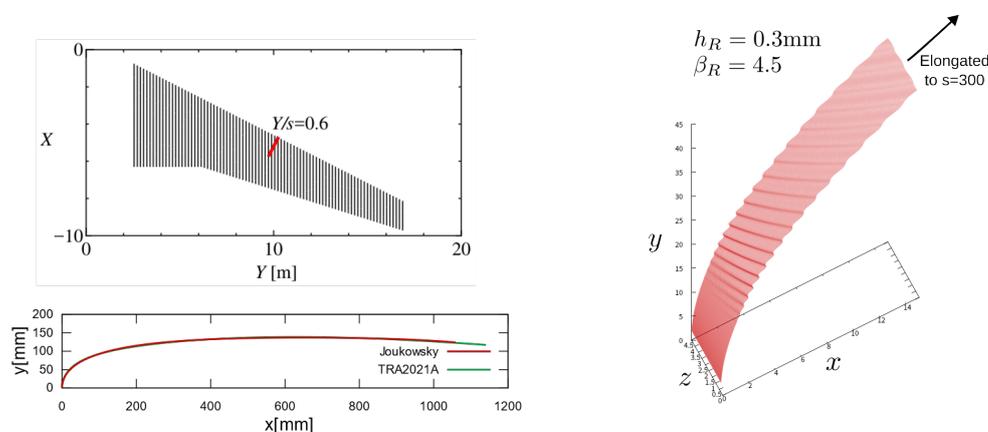


図 1 (左上) TRA2012A の主翼、(左下) スパン位置  $Y/s=0.6$  における翼形状、(右) 前縁近傍の人工粗さ SRE

### 2.2 超音速境界層の層流化

超音速旅客機の商用化のためには低騒音化と低燃費化が重要課題とされており、本研究の提案する層流化デバイスによって摩擦抵抗が低減できれば、低燃費化への貢献ができる。ただし、超音速機では後退角が 45 度以上の翼が採用されるため、横流れ不安定性の成長率は大きくなり、抑制するのが難しくなる。本研究は飛行高度を 5 万 ft、飛行速度をマッハ 1.5 と想定し、平板上の超音速境界層において、層流化が行えるかどうかを検証した。遷音速機に比べると飛行高度が高いのでレイノルズ数は大きくなり、圧縮性の影響が大きくなるという違いがある。まず、後退角を 65 度と大きくした場合、流線方向がよりスパン方向に傾くため、擾乱が前縁部に

長く滞在し、横流れ不安定性の成長が非常に大きくなった。数値誤差レベルの擾乱でも即座に前縁部で乱流遷移が起きてしまい、これを SRE によって抑制することはできなかった。一方で、後退角が 46 度の場合では、不安定性の増幅はそこまで大きくなく、SRE の形状を十分に最適化すれば乱流遷移を抑制することができた。このことから、境界層が超音速であることはあまり問題にはならず、後退角が大きいほど層流化が急激に難しくなるという傾向がみられた。とはいえ、前縁超音速となる後退角 45 度くらいであれば、本研究の層流化デバイスが一定の効果を発揮できることがわかった。

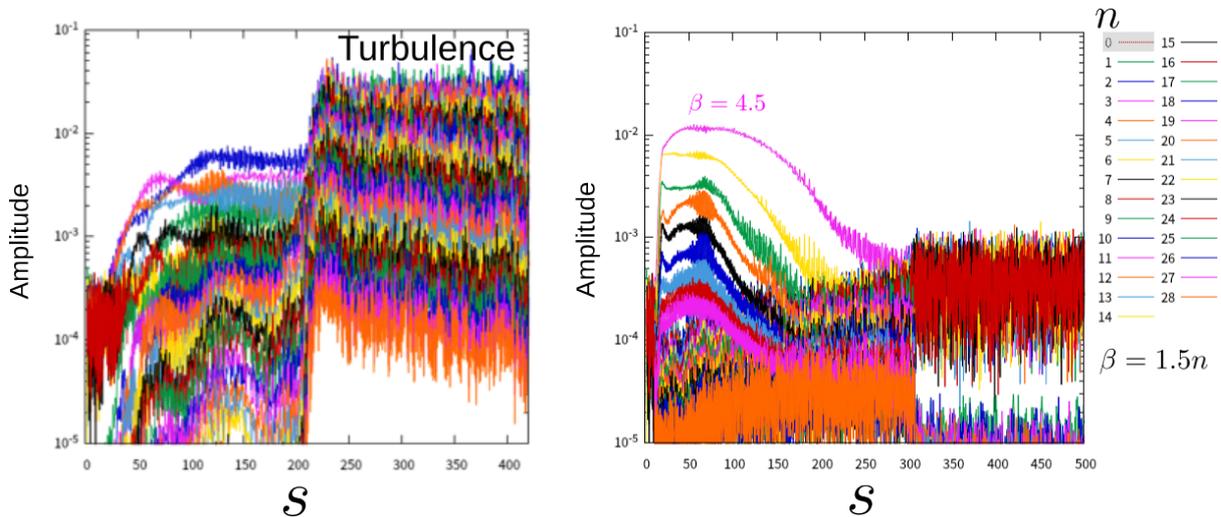


図2 翼弦方向(s)に沿ったスパン方向波数( $\beta$ )成分の振幅。(左) SRE なし (右) SRE あり

### 2.3 二次元テラー・グリーン渦の線形安定性解析と崩壊過程

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性と崩壊過程を調べた。Krylov 部分空間法を用いて渦列の線形不安定モードを同定し、それが非線形発展して渦崩壊に至る過程を DNS で調べた。渦列の間には双曲型の淀み点が存在し、そこで増幅する双曲型不安定性によって渦列は崩壊する。ただし、コリオリ力が働く回転系では、回転の効果によって渦崩壊が抑制されて完全な乱流状態にはならず、部分的に渦構造とエネルギーは生き残ることがわかった。このような渦列の全体安定性解析は、境界層における横流れ渦列の崩壊による乱流遷移過程にも応用できる。そこで、Volume Penalization 法と組み合わせて、人工粗さまわりの流れの全体安定性解析を行うコードの開発を進めた。

## 3. 研究目標の達成状況

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 解析が行えるようになった。翼型前縁まわりの曲率をもった翼面上に層流化デバイス（人工粗さ）を配置することにより、境界層の制御を数値的に試みた。形状を最適化した層流化デバイスは平板上よりも大きな効果を発揮し、横流れ不安定性による乱流遷移を完全に回避できることがわかった。これは主翼の大部分を層流化し、大幅な摩擦抵抗の低減に寄与することが期待される結果である。超音速機の主翼への応用も検討した結果、境界層が超音速となることより、後退角が大きくなることによって、層流化が困難になる傾向がみられた。ただし、前縁超音速となる後退角 45 度くらいならば、層流化できるケースを確認することができた。

#### 4. まとめと今後の課題

提案する層流化デバイス SRE は特許を取得し、低乱風洞実験施設での検証も行った。数値シミュレーションでは三次元の主翼全体まわりの解析へとさらに進むことが考えられるが、それを DNS で行うには計算機の性能に限界があり、境界層の遷移と制御は局所的な物理法則に従うので、計算コストに見合う有意義な結果は得にくくなる。今後の SRE の実用化という観点では、実際に翼面上に加工する方法を検討し、飛行試験を行うといった、数値計算以外のプロジェクトが必要であろう。

数値解析では境界層の不安定性や乱流遷移をより正確に予測するための理論モデルや解析手法をさらに発展させるべきである。DNS は現象を忠実に再現できるが、計算コストが高く、流れの不安定は擾乱の与え方によって結果が変わる。飛行環境の擾乱はよくわからないため、DNS の予想通りの結果が飛行試験で得られるとは限らない。局所平行流近似に基づく様々な安定性解析手法が用いられているが、翼面の凹凸や粗さなどに対しては近似が悪く、忠実な結果が得られない。計算コストは DNS と同程度に抑えつつ、忠実性の高い安定性解析を行う手法の開発が必要と思われる。

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

##### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

###### 学術雑誌（解説等を含む）

M. Hirota, Y. Ide, and Y. Hattori: Streamwise-elongated Sinusoidal Roughness Elements with Enhanced Laminarizing Effect on Three-dimensional Boundary Layer, AIAA Journal, Vol. 62, No. 10 (2024), pp. 3672-3685.

Y. Ide, M. Hirota: Non-modal secondary growth in a boundary layer modulated by primary crossflow vortices, Physics of Fluids, Vol. 37, 054103 (2025).

###### 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.

M. Hirota, S. Niwano, Y. Ide, Y. Hattori, S. Obayashi: Laminarization of Supersonic Three-dimensional Boundary Layer by Sinusoidal Roughness Elements, 9th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering 2024, Lisbon

M. Hirota, Y. Ide, Y. Hattori: Suppression of crossflow-induced boundary layer transition on a swept wing by sinusoidal roughness elements, 77th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics 2024, Salt Lake City.

N. Ueno, M. Hirota, Y. Hattori: Deformation and breakdown of vortex structure due to rotational-hyperbolic instability of 2D Taylor-Green vortices in rotating fluids, 77th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics 2024, Salt Lake City

#### 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

廣田真, 井手優紀, 服部裕司: 粗さ要素を用いた境界層の乱流遷移制御のメカニズムと課題, 数理解析研究所共同研究「非平衡な乱流」, 2024, 京都大学数理解析研究所

上野直哉, 廣田真, 服部裕司: 回転流体中の2次元 Taylor-Green 渦における巨視的不安定性に起因した渦構造の変化, 日本流体力学会年会 2024, 仙台

廣田真, 庭野翔也, 井手優紀, 服部裕司, 大林茂: 超音速三次元境界層の乱流遷移抑制効果をもつ最適な粗さ要素の探索, 第62回飛行機シンポジウム, 2024, 福井

井手優紀, 廣田真: 横流れ定在渦を重ねた三次元境界層における乱れの線形 non-modal 成長について, 第38回数値流体力学シンポジウム, 2024, 東京大学生産技術研究所.

#### 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

令和5年10月18日, 特許登録(日本), 特許第7369386号

令和6年4月3日, 特許登録(日本), 特許第7465483号

令和6年8月22-23日, JST主催 大学見本市に出展「表面をデコボコにして流れをきれいに保つデバイス」

令和7年1月14日, 特許登録(米国), U.S. Patent No. 12,195,169

## 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 2 回報告

2025 年 8 月 7 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（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

新たな低炭素排出エネルギー源の開発は、現在、世界が直面している重要な課題である。高効率なエネルギー変換装置である固体高分子形燃料電池（PEFC）は、反応による化学エネルギーを電気エネルギーへと直接変換することが可能である。その高いエネルギー変換効率と汚染物質の排出ゼロという特性から、PEFCはクリーンエネルギーの中核要件を満たし、重要な研究対象となっている。PEFCの中核構成要素であるプロトン交換膜（PEM）は、酸化剤から燃料を効果的に分離するだけでなく、高いプロトン伝導性を有する必要がある。この膜は高温・高圧といった過酷な条件下で作動することが多いため、その機械的特性や安定性は、PEFCの全体的な作動安定性および安全性を確保するうえで極めて重要である。本研究では、広く用いられている PEM 材料であるナフィオンを対象として、分子動力学（MD）シミュレーションを用いたモデル化を行った。シミュレーションを通じて、反応性中間体である過酸化水素（ $H_2O_2$ ）の存在下における膜の動的応力負荷応答、およびこれらの応答を推進する根本的な微視的メカニズムの解明を目的とする。さらに本研究では、温度変化が以下の点に及ぼす影響を系統的に調査している：(1)  $H_2O_2$ の分布、(2)  $H_2O_2$ 分布に対する応力応答の感度、(3) 温度変化に伴う微細構造進展の可能性。分子動力学シミュレーションは、これらの重要なプロセスを微視的スケールで理解するための強力な手法となる。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究は、過酸化水素、温度および応力条件がナフィオン膜の微細構造進展特性に及ぼす影響の解明に焦点を当てている。特に、引張応力および圧縮応力下において含水率が異なるナフィオン膜の応答を検討する。本研究では、ナフィオン系の主要構成要素（高分子主鎖、親

水性ドメイン、イオン性クラスター、水分子および  $\text{H}_2\text{O}_2$ ) における温度変化、引張応力および圧縮応力に対する応答特性とその差異を系統的に解析している。さらに、破断後の微細構造の進展メカニズムを明らかにし、破断後におけるナフィオン膜の機械的特性の変化に関わる微視的メカニズムおよび動的進展過程についても詳細に検討する。

## 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 新しい解析手法の開発

本研究の主な革新性は、以下の点に集約される。すなわち、過酸化水素に対する粗視化極性モデルを開発する先駆けとなった点である。本研究は、既存文献の調査によると、 $\text{H}_2\text{O}_2$  に特化した三部位粗視化 (CG) 極性モデルを初めて開発・適用した研究であり、現行の研究における不足を補うものである。このモデルの構築は、既に広く確立されている三部位粗視化極性水モデルの枠組みに基づき、それを拡張するものである。その設計理念の核心は、「極性特性の保持と制御」にある。計算効率の向上を目的として、本モデルでは水および  $\text{H}_2\text{O}_2$  分子の実際の空間構造を合理的に簡略化 (粗視化) している。最も重要な物理的制約は、対象分子の極性 (双極子モーメント) を正確に再現することである。モデルの極性と実際の分子の物理的特性との整合性を達成するために、本研究ではモデル内における荷電粒子対の電荷分布を系統的に調整し、それによってその全体的な極性特性を精密に調整し、最終的に決定している。

### 2.2 鎖長が材料の機械的特性に与える影響

MD シミュレーションの結果、ナフィオン高分子鎖のヤング率は、劣化による鎖長短縮後も大きく変化しないことが示された。しかしながら、鎖長の変化は材料の破断挙動を顕著に変える。長鎖系は延性挙動を示し、より大きな変形能力と破断抵抗性を有する。一方、短鎖系では、材料は脆性挙動へと遷移し、破断強度が増加する可能性があるものの、破断ひずみは著しく低下し、脆性破断がより生じやすくなる。長鎖系では、分子鎖間の絡み合いネットワークが広範囲に形成されており、これらの絡み合い点が変形中のエネルギーを効果的に散逸させるとともに、分子鎖の急速なすべりや解離を効果的に抑制する。これにより、破断に至るまでの塑性変形をより多く許容することが可能となる (延性挙動)。対照的に、鎖長の短縮は系内の絡み合い密度を著しく低下させる。その結果、応力下において分子鎖では十分な絡み合い拘束が不足し、すべりや解離に対する抵抗が低下する。このため、材料はより小さな変形で破断に至る (脆性挙動)。

## 3. 研究目標の達成状況

本研究は、応力下において含水率の異なるナフィオン膜中における過酸化水素の材料特性および微細構造進展を系統的に解析し、 $\text{H}_2\text{O}_2$  を含有するナフィオン膜系の応力応答に関わる微視的メカニズムの解明を目的としている。さらに、 $\text{H}_2\text{O}_2$  による劣化に起因する鎖長の違いを有するナフィオン膜系に対して、応力下における材料特性および微細構造変化を詳細に検討している。

その結果、 $H_2O_2$ の存在はナフィオン膜のヤング率の低下を引き起こすことが明らかとなった。引張応力の印加はナフィオン膜内における  $H_2O_2$  の拡散を促進する。その潜在的なメカニズムの一つとして、応力により相分離がより顕著に進行することが挙げられる。 $H_2O_2$ による劣化によりナフィオン膜中の高分子鎖が短縮された場合、膜のヤング率には大きな影響は見られない。しかし、鎖の短縮は材料の破断抵抗性および引張性能（延性）に顕著な影響を及ぼし、脆性の増加および破断傾向の強まりが観察された。マイクロボイド解析の結果、短鎖系ではより小さな空隙が形成されるか、大きな空隙が複数の小さな空隙へと分裂する傾向があることが示された。空隙サイズの縮小により高分子鎖間の分子間相互作用が強化され、それにより材料の脆性が増加する。

#### 4. まとめと今後の課題

既存の解析技術に基づき、ナフィオンのような非晶性高分子材料の構造特性評価は限定的に実施可能である。本研究では、高分子の劣化による材料特性の短鎖構造への変化を調査するとともに、それに伴う微視的メカニズムを予備的に解明した。構造解析の観点からは、材料内部に存在する可能性のある空隙構造の解明に焦点を当てた。しかしながら、現時点での解析は静的な特性評価に限られており、特定の空隙の動的進展を対象とした追跡解析や時間分解解析には至っておらず、これは今後の研究における重要な課題である。また、既存の数式を用いて分子鎖の絡み合い構造を推定することは可能であるものの、計算の定量的精度にはなお改善の余地があり、計算手法のさらなる最適化が求められる。

#### 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）

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）

Haoran Wang, Sheng-feng Huang, Takashi Tokumasu, A Molecular Dynamics Study on the Effect of Polymer Chain Entanglement on the Mechanical Properties of Nafion under Tensile Loading. （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	2023.4～2025.3
報告回数	第 2 回報告

2025 年 8 月 5 日提出

## スーパーコンピューティングによる先端車輻基盤技術研究 z

西村 祐輔, 佐々木 秀, 平井 直人, 鈴木 祥弘

ASTEMO 株式会社 主任研究員

石本 淳

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

車載製品製造においては、はんだのぬれ性をいかに制御するかが重要な課題となっており、ぬれ現象の十分な理解と予測が求められている。この背景を踏まえ、本研究では「はんだぬれ性に関する混相流体解析法の開発」を行う。

## 1.2 研究期間内の最終目標

はんだのぬれ角を予測可能とする混相流体解析法の構築を目指す。

## 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 新しい解析手法の開発

粒子法を用いた DualSPHysics を活用し、混相流体解析プログラムを開発した。

## 2.2 新しい現象の解明

実際の製造工程で用いられる物性値を反映し、はんだがぬれる様相を再現することで、ぬれ角を予測できるようになった。

## 3. 研究目標の達成状況

解析手法の調査を行った結果、「粒子法を用いた DualSPHysics による混相流体解析」が有望であることが明らかになった。数値計算により、実際のぬれ現象に近い挙動を再現できたほか、実験的にも異なる環境条件下でのはんだぬれ性のデータを取得することができた。

## 4. まとめと今後の課題

数値計算および実験の両面から、ぬれ現象の挙動を確認することができた。ただし、数値計算ではいくつかの前提条件が必要であり、実験結果についても影響因子との関係性をさらに明らかにすべき複数の追加要因が存在している。今後は、これらの課題を整理・明確化する必要がある。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

**学術雑誌（解説等を含む）**

なし

**著書**

なし

**国際学会**

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	GR08APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 2 回報告

2025年8月7日提出

## 高精度エッチング手法の確立に向けた

## 入射粒子の分子動学的解析

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

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、半導体構造の複雑化に伴い、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 法によるエッチ

ングプロセスを分子動力学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 基板上に電気的に中性な Cl および F 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。また中性ハロゲン粒子の入射角度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入射角度依存性を検証した。

### 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。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、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

既存の Cl 原子に関する研究の比較対象として、F 原子を用いたエッチングプロセスのシミュレーションを行い、入射時の運動エネルギーと脱離した Si 原子数の関係を検証し、エッチング収率の入射エネルギー依存性を確認した。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入射角度を変更し、エッチングプロセスに及ぼす影響について理解した。

## 4 まとめと今後の課題

Si 基板にハロゲン中性粒子を入射する場合において、粒子の入射時の運動エネルギーおよび入射角度、原子種を変更した際のエッチングプロセスへの影響が解明された。本シミュレーションを基軸として、今後は基板原子種の変更、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。また今回のシミュレーションにおいて加工後の基板原子の配列の変化が確認されたため、今後は加工条件を変更した際の結晶性への影響を検証する予定である。

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, 11 月 2023 年
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, 3 月 2024 年
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, 3 月 2024 年
4. ○後藤星南, 徳増崇, 「熱 ALD 法における BN 成膜機構解析に向けた反応性分子動力学法力場の構築」『第 72 回応用物理学会春季学術講演会』, 講演番号 16p-P13-2, 東京理科大学野田キャンパス, 東京, 3 月 2025 年
5. ○関口賢太, 大堀大介, 遠藤和彦, 徳増崇, 「反応性分子動力学による IV 族半導体基板の酸化機構の解析」『第 72 回応用物理学会春季学術講演会』, 講演番号 15a-K509-6, 東京理科大学野田キャンパス, 東京, 3 月 2025 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	GR09APR23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.04～2025.03
報告回数	第 2 回報告

2025 年 4 月 25 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 特任准教授

### 1. 研究の目的と目標

#### 1.1 研究の背景と目的

近年の気体アンモニア（GNH<sub>3</sub>）／空気燃焼研究の進展により、NH<sub>3</sub> が 2050 年のカーボンニュートラルに向けた有望なエネルギーベクトルであることが示されている。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 GNH<sub>3</sub>/空気燃焼および GNH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub>/空気燃焼に関する広範な研究を行い、GNH<sub>3</sub>/空気燃焼における NO<sub>x</sub> 低減のための世界初のリッチ・リーン 2 段燃焼技術を開発した。この技術により排ガス中の NO<sub>x</sub> 排出量は、O<sub>2</sub> 濃度 16% 換算で 100 ppm 未満（数値解析に基づく。後の実験では 42 ppm 未満を実証）に低減され、未燃 NH<sub>3</sub> 排出量もゼロになった。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 50 kW GNH<sub>3</sub> ガスタービンシステムにより発電実証が行われた。しかし、NH<sub>3</sub> は常温の高圧ポンペ（約 0.9 MPa）に液体として貯蔵・供給されるため、NH<sub>3</sub> を気化させて燃焼させる GNH<sub>3</sub>/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(LNH<sub>3</sub>)を気化させ、燃料ガスを再圧縮するためのエネルギーと、関連する設備コストが追加される。このエネルギーは、気化潜熱が NH<sub>3</sub> の低位発熱量の 7～8% 近くを占めることによる。さらに、アンモニア気化装置の応答が遅いため、発電量を急速に変化させることが難しく、ガスタービン発電のメリットを生かしにくい。これらの弱点を解決する方法として、液体アンモニア (LNH<sub>3</sub>) の噴霧による直接燃焼が考えられる。当研究室は産総研 FREA と共同で、2019 年から 2021 年にかけて、ガスタービン燃焼器に LNH<sub>3</sub> を噴射し、圧力 0.25 MPa の 2 段燃焼器により発熱量ベースで 50～100% の LNH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 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された（500 K 以上）旋回気流を使用した。一方、数値解析では、H<sub>2</sub> を混焼した LNH<sub>3</sub> 噴霧燃焼の数値解析により、LNH<sub>3</sub> の発熱量比 49% で安定した低 NO<sub>x</sub> 燃焼が確認された。これは、LNH<sub>3</sub> フラッシュ噴霧の連続燃焼に関する世界初の数値的研究である。さらに、2021

年4月から2023年3月にかけて、LNH<sub>3</sub>発熱量比を50%から100%に増加させたLNH<sub>3</sub>フラッシュ噴霧燃焼の研究に進展した。本研究では、GNH<sub>3</sub>/空気燃焼のような低NO<sub>x</sub>燃焼をLNH<sub>3</sub>/空気燃焼で実現し、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、工業炉技術にも適用することを目標としている。ホロコーン噴射弁を使用し、高い周囲圧力（より低い過熱レベル）での液体アンモニア噴霧の研究は、ガスタービンの運転においても非常に重要である。更に、単孔噴射ノズルを使用したLNH<sub>3</sub>噴霧のバックライト画像から、過熱レベルが十分大きい場合（40～50 K）、完全なLNH<sub>3</sub>フラッシュ噴霧形成が達成できることが示されている。しかし、ノズル内部でのフラッシュ沸騰とノズル出口直後の一次微粒化（フラッシュブレイクアップ現象）の両方を考慮したフラッシュ噴霧形成については、まだ十分に解明されておらず、特にフラッシュブレイクアップ現象の基礎研究が不可欠である。さらに、最近の実験的研究により、LNH<sub>3</sub>燃焼におけるNO<sub>x</sub>放出は、単孔噴射ノズルよりも多孔噴射ノズルの方が大幅に低減できることが示されている。従って、単孔噴射ノズルと多孔噴射ノズルによる噴霧形成の違いに関する研究も重要である。

## 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した。ノズル出口直後の噴霧角を仮定し、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LNH<sub>3</sub>噴霧の数値的予測、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LNH<sub>3</sub>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形成される。LNH<sub>3</sub>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LNH<sub>3</sub>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

フラッシュ噴霧の特性、例えば噴霧角（噴流形成）、初期の液滴サイズ、液滴到達距離などは、過熱度、ノズルの形状、ノズル内部の表面粗さにも依存する。そこで本研究では、LNH<sub>3</sub>の噴射

温度を 20°C で一定に保ちながら、燃焼器側の圧力を変化させることで過熱度を変化させた。ノズル出口での核生成密度、気泡剥離頻度、蒸気体積分率は、ノズル内の核生成理論を用いて数值的に計算した。様々な過熱度でのノズル出口での LNH<sub>3</sub> 液滴直径減少係数も数值的に取得され、アルコールおよびアルカン液体燃料と比較された。液体アンモニアのノズル出口における液滴直径減少係数は、過熱によって大きく変化する。過熱度 54 K では、液体アンモニアの有効初期液滴径はノズル径の約 7% まで減少することが分かった。

高速バックライト撮影による実験では、圧力旋回ノズル（ホロコーンノズルと基本的に同じ構造）から燃焼器圧力 0.9 MPa の雰囲気中に噴射された液体アンモニア噴霧では、非常に低い過熱度では液体アンモニアの中空噴霧構造が鮮明に観察された。さらに、燃焼器の周囲圧力の上昇とともに液体アンモニア噴霧の噴霧角度が増加することも観測された。そこで本数値的解析では、噴射温度を約 293 K に保ちながら、燃焼器の周囲圧力を 0.12 MPa から 0.9 MPa まで変化させることにより、さまざまな過熱度での液体アンモニア噴霧を計算した。ザウター平均直径 (SMD) で表した液滴サイズと温度分布を実験測定値と比較し、噴霧角度の変化を調べた（添付図参照）。本数値解析結果は、非常に低い過熱度条件を含む圧力旋回ノズルの噴霧現象を理解する上で、重要な知見を提供している。

### 3. 研究目標の達成状況

ノズル内の LNH<sub>3</sub> フラッシュ現象について、核生成理論に基づく過熱度に対する液滴径減少係数の理論曲線を得た。このモデルをノズル出口における初期液滴径の決定に適用し、ノズル出口直後の噴出角度を 90° と仮定したホロコーン噴射弁に対する LNH<sub>3</sub> 噴霧の気液二層流 LES 数値解析結果を得ることに成功した。

0.12 MPa から 0.9 MPa において様々な過熱度に対するザウター平均径 (SMD) と温度分布を数值的に求めた。過熱度が低下した条件下で、ホロコーン噴射弁を使用した完全な噴霧が形成された。これは、フラッシュ沸騰に加えて、通常の液体噴霧に対する空気力学的微粒化が一次微粒化プロセス（フラッシュブレイクアップ現象）において重要な役割を果たしていることを意味し、さらなる研究が必要である。

### 4. まとめと今後の課題

本研究では、LNH<sub>3</sub> の噴霧形成を数值的に研究し、過熱レベルに対するノズル内部の液滴径減少係数の理論曲線を得た。また、ホロコーン噴射弁に対して、0.12 MPa~0.9 MPa の LNH<sub>3</sub> 噴霧の SMD と温度分布を数值的に求めた。

今後の研究では、ノズル出口直後の一次微粒化（フラッシュブレイクアップ現象）のモデル開発が不可欠である。また、フラッシュ噴霧を実燃焼器に適用するため、単孔噴射ノズルと多孔噴射ノズルを用いた高過熱度での LNH<sub>3</sub>/空気燃焼と、NO<sub>x</sub> 生成特性ならびに燃料と空気の混合特性の数値的検討も重要である。

## 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）

#### 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

該当無し

#### 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 2<sup>nd</sup> 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, H. Kobayashi, The Temperature Characteristics of Liquid Ammonia Spray at High Pressures, The 20<sup>th</sup> International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan (2023), Paper No. OS2-43.
- [4] K. D. K. A. Somarathne, H. Yamashita, K. Oku, K. Honda, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Numerical investigation of flash-boiling atomization characteristics of liquid-ammonia fuel at various superheat degrees, The 19<sup>th</sup> International Conference on Numerical Combustion, Kyoto, Japan (2024), Paper No. ICNC2024-1025.
- [5] K.D.K.A. Somarathne, YR Chen, K. Honda, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Numerical modeling of liquid ammonia flashing sprays at various superheat degrees, The 40<sup>th</sup> International Symposium on Combustion, Milan, Italy (2024), Poster No. 145.
- [6] K.D.K.A. Somarathne, YR Chen, K. Honda, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Droplet Size and Temperature Distributions of Liquid Ammonia Sprays at Various Superheat Levels using a Hollow Cone Nozzle, The 3<sup>rd</sup> Symposium on ammonia Energy, Shanghai, China (2024), Paper No. A0356.

#### 国内学会・研究会等

- [1] K.D.K.A. Somarathne, YR Chen, K. Honda, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Numerical Modelling of Liquid-Ammonia Sprays at Various Superheat Degrees using a Hollow-Cone Nozzle, The 62<sup>nd</sup> Symposium on Combustion (Japanese), Osaka, Japan (2024).

#### 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当無し

## 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 2 回報告

2025 年 8 月 7 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

## 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

## 2.1 炭化水素系電解質膜 (SPP-BP) に対する酸素透過計算

本研究課題では、昨年度は白金触媒と炭化水素系電解質膜 (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、含水率 3, 5, 7 の 3 条件で酸素透過計算を実施した。本年度は今までよりも高含水率である 9, 11, 13 の 3 条件を追加し、計 6 条件の酸素透過計算を実施した。また、昨年度までは酸素透過性を評価する際にアイオノマー薄膜を透過し、白金表面に到達した酸素分子数で評価していたが、本年度は酸素透過係数に換算し、含水率による膜厚の違いなどの影響を排除し、定量的に酸素透過特性を評価できるようにした。

## 2.2 酸素透過係数の解析

SPP-BP アイオノマー薄膜の酸素透過特性には含水率が大きく影響していることが分かった。低含水率時の酸素透過係数は大きく、代表的な高分子であるナフィオンの酸素透過係数よりも 1~2 桁大きい。しかし、含水率が高くなるに伴い酸素透過係数が急激に低下し、含水率 9 以上になるとほぼ横ばいになることが明らかとなった。含水率の上昇に伴う酸素透過係数の急激な低下は、白金触媒とアイオノマー薄膜との界面部分の酸素輸送経路が消失することにより酸素透過性が低下したためだと考えられる。また、膜厚方向の密度分布を解析したところ、白金触媒とアイオノマー薄膜との界面部分の密度がアイオノマー薄膜内部の密度よりも大きくなっており、白金触媒とアイオノマー薄膜との界面部分の構造が酸素透過性に大きく寄与す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薄膜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。また、含水率に依存して白金表面近傍の高分子と水分子の割合が変化していく現象も確認できた。

## 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。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。しかしながら、高含水率になると急激に酸素透過性が低下してしまう。今後は、炭化水素系アイオノマーの構造に着目し、より酸素を透過させやすい構造を模索していく予定である。

## 5. 研究成果リスト

### 5.1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

#### 学術雑誌 (解説等を含む)

- [1] Kengo Hikida, Hiroto Suzuki, Takashi Tokumasu: Effects of Ionomer Film Thickness and Water Content on Oxygen Permeation Properties of PEFC Cathode Catalyst, ECS

Transactions, Vol. 114, (2024), pp.127-132

- [2] Hiroto Suzuki, Jin Yanwei, Yukie Ishizawa, Naoya Uene, Jiayuan Ji, Sheng-Feng Huang, Takuya Mabuchi, Takashi Tokumasu, “Molecular analysis of oxygen permeability of aromatic hydrocarbon-based ionomers”, 発表予定

#### 著書

なし

#### 国際学会

- [3] K. Hikida, H. Suzuki, T. Tokumasu, “Effects of Ionomer Film Thickness and Water Content on Oxygen Permeation Properties of PEFC Cathode Catalyst”, 246<sup>th</sup> Electrochemical Society Meeting, Honolulu, HI, U.S, (October, 2024)

#### 国内学会・研究会等

- [4] 疋田憲吾, 鈴木寛人, 上根直也, 馬淵拓哉, 徳増崇, ”PEFC カソード側触媒層アイオノマーの酸素透過特性に及ぼす膜厚と含水率の影響”, 第 31 回燃料電池シンポジウム, 東京都, 2024 年 5 月 23-24 日
- [5] 田憲吾, 鈴木寛人, 徳増崇, ”化学ポテンシャルに基づいた PEFC 白金表面上アイオノマー内部の酸素輸送特性の分子論的解析”, 日本機械学会東北支部 第 60 期総会・講演会, 宮城県, 2025 年 3 月 17 日

#### 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01MAY23
研究種別	一般研究
利用期間	2023.05~2025.03
報告回数	第 2 回報告

2025 年 8 月 4 日提出

CLCF の F<sup>-</sup>/H<sup>+</sup>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

## 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<sup>-</sup>)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<sup>-</sup>/H<sup>+</sup> antiporter (CLCF)を用いて、細胞内の F<sup>-</sup>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<sup>-</sup>を細胞外へ排出するにあたり、プロトン(H<sup>+</sup>)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<sup>-</sup>と H<sup>+</sup>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<sup>-</sup>と H<sup>+</sup>のイオン交換に至る以前に、F<sup>-</sup>のみを水溶液中のその他のイオン(Cl<sup>-</sup>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<sup>-</sup>輸送機構の解明にあたり、F<sup>-</sup>の輸送に寄与する領域の特定および、F<sup>-</sup>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<sup>-</sup>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<sup>-</sup>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<sup>-</sup>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<sup>-</sup>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<sup>-</sup>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（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)

該当なし

### 2.2 新しい現象の解明(例)

本研究では、**CLCF**  $F^-/H^+$  アンチポーターにおける  $F^-$  の輸送選択性および輸送機構について、分子動力学 (MD) シミュレーションを通じて詳細な解析を行い、複数の新規知見を得た。特に注目すべきは、外向きグルタミン酸残基 **E118 (Gluex)** のプロトン化状態が、 $F^-$  輸送のエネルギー障壁およびポア構造に大きな影響を及ぼす点である。**E118** がプロトン化された場合、輸送経路における自由エネルギー障壁が有意に低下し、ポア径が広がることで、 $F^-$  が円滑に輸送されることが明らかになった。一方で、**E118** が脱プロトン化された状態ではポアが狭まり、 $F^-$  の出口付近 (**Sext**) での通過が困難になる様子が定量的に示された。また、同様の経路に  $Cl^-$  を導入して比較したところ、 $Cl^-$  は  $F^-$  に比べて輸送経路中でより強い相互作用をタンパク質側と形成し、特に **ZCOM**  $< -7.5 \text{ \AA}$  の領域で高い自由エネルギー障壁を示した。これは、 $Cl^-$  が脱水しながらタンパク質内部に進入し、内部残基との相互作用が強まることによって、経路中でトラップされやすくなることを示している。実際、 $Cl^-$  は  $F^-$  と比べてタンパク質との相互作用エネルギーが約 **30 kcal/mol** 強く、特に非保存性アミノ酸である **M79** を含むヘリックス (**73–87** 残基) との相互作用が顕著であった。このヘリックス領域は  $Cl^-$  との結合により構造的に不安定化し、ループ構造へと変化することで  $Cl^-$  を閉じ込める“構造的トラップ”として機能していることが、**RMSF** 解析および構造可視化により明示された。これに対し、 $F^-$  は水和構造を保持したままタンパク質内を通過することができるため、脱水に伴うエネルギー損失が少なく、**M79** 付近での構造変化を引き起こすこともない。これにより、 $F^-$  は構造的障害を受けることなく、効率的に輸送経路を通過できることがわかった。これらの結果は、**CLCF** が  $F^-$  を選択的に輸送するための分子機構、すなわち「水和構造の保持」「**E118** のプロトン化依存性」「 $Cl^-$  特異的な構造的トラップ」という 3 つの因子に基づいた新たなモデルを提示するものであり、イオン選択性に関する既存知見を大きく更新する重要な発見である。

## 3. 研究目標の達成状況

本研究では、細菌が **CLCF** タンパク質を介して  $F^-$  を選択的に排出し、 $H^+$  と交換する輸送機構の解明を目的とし、特に  $F^-$  と類似イオンである  $Cl^-$  との比較を通じて、その選択性の分子基盤を明らかにすることを目指した。研究期間内においては、**CLCF** の結晶構造をもとに複数のプロトン化状態 (**E118** および **E318** 残基の状態) を設定し、それぞれの条件下で数百ナノ秒スケールの平衡分子動力学 (MD) シミュレーションを実施した。そのうえで、**Steered MD** 法を用いて  $F^-$  を強制的に輸送させた経路 (反応座標) を取得し、さらに **Umbrella Sampling** 法により自由エネルギー分布を算出することで、**Gluex** 残基のプロトン化状態が  $F^-$  輸送に与

える影響を定量的に評価することに成功した。また、Cl<sup>-</sup>を用いた同様の解析も実施し、エネルギー障壁、ポア径、残基との相互作用エネルギー、水和構造などの観点から F<sup>-</sup>との違いを明示的に比較することができた。その結果、F<sup>-</sup>は水和構造を保持しつつ低エネルギー障壁で輸送されるのに対し、Cl<sup>-</sup>は脱水や残基との強い相互作用により輸送経路でトラップされることが示された。これにより、F<sup>-</sup>に特異的な輸送経路と選択性については分子レベルで可視化・定量化するという目標は概ね達成されたと評価できる。

#### 4. まとめと今後の課題

本研究では、CLCF F<sup>-</sup>/H<sup>+</sup>アンチポーターにおける F<sup>-</sup>と Cl<sup>-</sup>の選択的輸送機構の違いを、詳細な分子動力学シミュレーションを通じて可視化・解析した。特に、輸送経路上に存在する E118 および E318 のプロトン化状態がポア径や自由エネルギー障壁に影響を与えること、また M79 を含む構造ユニットの変化がイオントラップの要因となることを明確に示した点は、構造・機能相関に関する新たな知見である。これらの結果は、イオンチャネル・トランスポーターの機能設計に資するだけでなく、ナノスケールでの分子輸送設計や人工チャネル構築にも応用可能性がある。一方で、H<sup>+</sup>の反応性輸送経路に関して、今回は Gluex のプロトン化状態の観点から見出すことはできたが、化学反応を考慮した解析は実行中の課題であり、ReaxFF による長時間スケールでの安定なシミュレーション実行、並びに水素結合ネットワークを介したプロトン移動の定量的解析が必要である。さらに、ンパク質変異体を用いた輸送性能の予測精度の向上など、多角的アプローチを組み合わせる研究が求められる。将来的には、他の CLC ファミリーや異種イオン輸送体への応用展開も視野に入れた展開が期待される。

#### 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)

A. Y. Nakamura, T. Mabuchi, "Molecular Insights into Fluoride Ion Uptake and Selectivity in the CLCF Fluoride/Proton Antiporter", *J. Phys. Chem. B* 2025, 129, 16, 4005– 4011. (April 14, 2025)

###### 国際学会

Akihiro Nakamura, Takashi Tokumasu, Takuya Mabuchi, "F<sup>-</sup> 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

A. Nakamura, T. Mabuchi, "Molecular analysis of ion transport inside nanopores toward a biomimic proton channel" The Nanopore Meeting 2025, 15<sup>th</sup> March 2025, Tokyo Japan.

###### 国内学会・研究会等

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

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<sup>-</sup>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

仲村陽宏, 馬淵拓哉 "分子動力学計算による CLCF における F<sup>-</sup>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. 2023 年 12 月, 福井.

##### 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 2 回報告

2025年 8月 7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 東北大学大学院工学研究科

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

燃料電池はカーボンニュートラル社会に向けた選択肢の一つとして大きな注目を集めている。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、小型軽量化が容易であることから家庭用定置電源や自動車などの用途で実用化が進められている。PEFC のさらなる普及に向けた課題として、耐久性の向上、物質輸送効率の向上、厳しい作動環境への対応などがあげられる。これらの課題の中でも氷点下条件での作動に関する問題は、寒冷地への展開を妨げる要因となっており、重要な課題の一つである。氷点下条件では、高分子電解質膜(Polymer Electrolyte Membrane: PEM)と触媒層の界面における水の凍結、生成水の凍結による輸送障害、PEM 中の物質輸送効率の著しい低下などが課題となっている。中でも、プロトンの輸送性の低下は発電効率に直接影響を及ぼすため、重要な課題の一つである。

PEM 中のプロトン輸送機構には Vehicle mechanism と Grotthuss mechanism の二種類がある。前者はヒドロニウムイオンの物理的移動によって拡散が発生する一方、後者では水分子とヒドロニウムイオン間の共有結合と水素結合が入れ替わることによって拡散が発生する。Grotthuss mechanism では水分子やヒドロニウムイオンの重心位置が変化しないため、Vehicle mechanism よりも高い拡散性を示す。氷点下条件中では、分子の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ることから、Vehicle mechanism による拡散が大きく低下する可能性が高い。一方で氷中では Grotthuss mechanism によって、常温以上にプロトン拡散が促進される現象も報告されている。これらのことから、本研究においても Grotthuss mechanism を考慮する必要がある。

本研究では、氷点下条件における PEM の内部構造、輸送特性の変化、両者の相関を分子論的に解析し、氷点下条件下でも性能を維持できる新規 PEM 材料の設計指針となる知見を提供することを目的とした。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、ナノスケールの現象解析のために分子動力学(Molecular Dynamics: MD)法による数値計算を行う。そのために、MD 法において正確な再現性を有する力場を構築し、その力場を用いた解析を行う。これにより、PEM 内部でのプロトン輸送特性の変化、内部構造の変化を分子レベルで解析し、得られた知見を基に新規 PEM 材料の設計開発に資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 反応性力場分子動力学法(Reactive Force Field MD: ReaxFF MD)の力場開発

反応性力場分子動力学法(Reactive Force Field MD: ReaxFF MD)は、化学反応と動力学を同時に扱うことができる数値計算手法である。この手法は、密度汎関数法や第一原理計算と比べて計算コストが小さく、PEM のような大規模計算系に対しても応用可能である。ReaxFF では多くの経験的な係数を用いており、それらは **parameter set** によって定義される。適切なシミュレーションを行うためには、対象とする原子、分子系に対してこの **parameter set** が妥当かを検証し、必要に応じて調整する必要がある。

本研究では、先行研究で用いられている **parameter set** を改良し、PEM の代表的材料である Nafion に対するシミュレーションが正確に行えるようにした。具体的には、Nafion の電離度、異常な結合の発生、系全体の密度に関して修正を行った。従来の **parameter set** では、含水率に関わらず Nafion の電離度が 0 %となっており、これがプロトン拡散の解析にも大きく影響を及ぼしていた。本研究ではこの点を改善し、含水率 3 以上の条件において電離度が 100 %となるように修正した。また、従来の **parameter set** では、Nafion 内の酸素原子とプロトンの間に本来存在しない異常な結合が生じる問題が確認された。この点についても同様に **parameter set** の修正を行い、異常な結合が発生しないように改善された。さらに、系全体の密度に関しては、Nafion 内の主鎖骨格や側鎖骨格の構造に関する修正を行った。その結果、修正前の値が 1.2 g/cm<sup>3</sup>であるのに対し、修正後は 1.7 g/cm<sup>3</sup>となり、実験値(1.8~1.9 g/cm<sup>3</sup>)との誤差が 10 %以下に収まる結果が得られた。

### 2.2 氷点下条件での輸送特性と内部構造の相関

氷点下条件での輸送特性の解析として、自己拡散係数の計算および Grotthuss mechanism によるプロトン拡散の評価を行った。自己拡散係数の結果から、氷点下条件においては水分子の輸送特性が大きく変化し、とりわけ高含水率条件において拡散性が顕著に低下することが明らかとなった。一方で、ヒドロニウムイオンの拡散係数は高含水率においても比較的低下しにくい傾向を示した。この現象について、Grotthuss mechanism による拡散の解析を行った。その結果、氷点下条件では、常温と比べて Grotthuss mechanism による拡散が増加していることが分かった。特にこの傾向は高含水率において顕著であり、Grotthuss mechanism による拡散の増加がヒドロニウムイオンの拡散性低下を抑制している原因であ

ることが示唆された。

これらの輸送性の変化について、水クラスター解析および水素結合ネットワークの解析を実施した。水クラスター解析からは、氷点下条件では常温に比べてより水クラスターが形成されており、高含水率においてその傾向が特に顕著であることが分かった。さらに、水素結合ネットワークの解析では、氷点下条件では常温と比べて水素結合の持続時間が長くなっていることが分かった。これは水素結合ネットワークが強固となっていることを示している。

以上の結果より、氷点下条件においては、強固な水素結合ネットワークの形成により大規模な水クラスターが形成され、それが **Grotthuss mechanism** による輸送経路を増加させる要因となっていることが明らかとなった。これにより、高含水率条件においてもヒドロニウムイオンの拡散性が大きく低下しないことが示された。

### 3. 研究目標の達成状況

これまでに、**ReaxFF** の **parameter set** の修正を行い、氷点下条件における **Nafion** 内部の輸送特性と構造特性の変化、両者の相関について詳細な解析を実施した。その結果、水素結合ネットワークによって形成される水クラスターが、**Grotthuss mechanism** によるプロトン拡散を促進する可能性が示された。これは新たな **PEM** 材料の開発に向けた有用な知見である。今後は、内部構造に関するさらなる詳細な解析を進めるとともに、他の **PEM** 材料との比較を通じて、構造と輸送特性の相関、氷点下条件においても性能が起りにくい高分子膜について包括的に解明する予定である。

### 4. まとめと今後の課題

本研究では、氷点下条件における **PEM** 内部の物質輸送性と内部構造の相関について解析し、新しい **PEM** 材料の開発に資する知見を得ることを目的として、**ReaxFF MD** による数値計算を用いて詳細な解析を行った。

まず、**Nafion** を対象とした **ReaxFF** の力場について、電離度、異常な結合、系全体の密度に関する修正を行い、より正確なモデルを構築した。次に、構築した力場を用いて、氷点下条件における **Nafion** 内部の輸送特性と構造特性を詳細に解析した。その結果、氷点下条件では常温に比べて水素結合ネットワークが強固となり、それに伴って水クラスターのサイズが増大することが解明された。この傾向は特に高含水率条件下で顕著であり、このような構造変化によって **Grotthuss mechanism** によるプロトン輸送経路が増加し、ヒドロニウムイオンの拡散性が低下しにくくなっていることが示された。

これらの成果は、氷点下条件でも性能が低下しにくい **PEM** 材料の設計に向けた有用な指針である。今後は、内部構造に関するさらなる詳細な解析を進めるとともに、他の材料との比較を通じて、より包括的な理解を深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）

#### 国際学会

Hiroki Nishizawa, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu, Analysis of Transport Characteristics of Protons in Polymer Electrolyte Membranes in PEFC below Freezing Temperatures, I01C-2899, 246<sup>th</sup> ECS meeting, October 2024.

Hiroki Nishizawa, Takuya Mabuchi, Takashi Tokumasu, Molecular Analysis of the Relationship between Water Clusters and Proton Diffusion Properties inside a Polymer Electrolyte Membrane in PEFC under Subzero Conditions, A1110, EFCF 2025, July 2025.

#### 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 年 5 月

(発表予定) 西澤裕紀、馬淵拓哉、徳増崇、氷点下条件における高分子電解質膜中の物質輸送性と内部状態の相関に関する分子論的解析、日本機械学会 2025 年度年次大会 J081-16、2025 年 9 月

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.4～2026.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 3 月 18 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, 蓮見 登冨, Qiao Mufan, 酒井 太郎  
 東北大学流体科学研究所 准教授, M1, M2, M2

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

## 1.1 研究の背景と目的

地下資源開発（例：地熱エネルギー）では、計測可能なデータを基に、岩石の亀裂内部（亀裂幅 nm～m スケール）を流れる流体の挙動を把握することが不可欠である。この「構造」と「流れ」の関係を定量化・定式化することで、地下流体流動の正確な評価や最適な開発デザインの構築が可能となる。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および温度応答に着目する。これらのデータを基に、不均質な多孔質体における流体流動、物質移動、熱移動の特性を明らかにし、統合的なモデル化を目指す。

## 1.2 研究期間内の最終目標

複数の亀裂ネットワークパターンを構築し、直接流動シミュレーションを行い、流動・物質移動・熱移動の特性を解析する。これまでに亀裂ネットワークモデルを用いた流体流動の数値シミュレーションを実施し、物質移動の濃度変化を取得することに成功したが、熱移動については実測データとの間に差異があり、計算手法の再検討が必要である。また、トポロジカルデータ解析（TDA）による亀裂構造の推定結果の妥当性を検証するため、数値シミュレーションを併用し、計測データに基づく地下構造推定手法の有効性を評価する。

## 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）

## 2.1 熱・溶質トレーサー統合と確率的最適化による地下流動解析の高精度化

本研究では、熱・溶質トレーサーを統合した新しい流動解析手法を提案し、確率的最適化（RML 法）を用いてパラメータ推定の信頼性を向上させた。まず、単一流動経路において熱トレーサー試験を実施し、熱交換特性から流動経路の表面積を推定した。元々はスーパーコンピュータで直接流動シミュレーションを実施する予定だったが、スーパーコンピュータの整備で利用ができない期間だったため、3D プリントモデルを用いた流動実験を実施した。また、溶質トレーサー試験を用いて平均滞留時間と分散係数を測定し、トレーサーの輸送特性を詳細に解析した。その結果、推定された表面積や開口幅は 3D プリントモデルの実際の寸法と誤差 1%未満で一致し、提案手法の精度と有効性が確認された。

単一流動経路の解析に成功した後、多経路シナリオに拡張し、開口幅の異なる流動経路が混在する環境下での評価を実施した。異なる開口幅を持つ 3 つの並列流路モデルを用いた実験

では、溶質トレーサーのピーク検出分析により、各流動経路を識別できることが示された。さらに、初期流量比を立方則 (Cubic Law) に基づいて設定し、RML 法によって最適化を行った結果、多経路システムにおいても流量比、滞留時間、表面積の変動を適切に捉えることが可能であることが確認された。RML の適用にスーパーコンピュータを利用した。RML 法を適用することで、実験データと事前情報を統合しながら、不確実性を考慮した高精度なパラメータ推定を実現した。ただし、多経路環境下での計算コストが課題となり、多数のパラメータ推定には膨大な計算資源を要することが判明した。このため、最適化プロセスを一部簡素化し、推定パラメータの数を削減することで計算負荷を軽減したが、その結果、表面積推定において若干の過大評価が生じることが分かった。このトレードオフの解決には、より効率的な最適化アルゴリズムの導入が求められる。

## 2.2 岩石構造評価へのトポロジカルデータ解析の適用

岩石の間隙構造を 2 次元のマッパーグラフとしてモデル化することにより、流路となる空隙構造を検出し浸透率を推定する新しい手法を提案した。本手法における Mapper グラフは、グラフ内の各ノードの開口幅情報から算出される各辺の重みと、初期条件として与えられる流体の流れ方向に従って重み付き有向グラフとして表現される。この Mapper グラフを用いて岩石の間隙構造から最小開口幅を抽出し透水係数を算出する。Mapper グラフは、岩石画像データを分割して生成される各セグメントが細くなるほど空隙構造をより正確に反映し、原理的には透水係数をより高い精度で推定することができる。2 次元の岩石データではこの傾向が見られ、セグメント数を増やすことで、流体シミュレーションから得られる浸透率と同じオーダーで透水係数を推定することに成功した。3 次元岩石データではこの傾向は必ずしも観察されなかったが、すべての種類のデータにおいて、流体シミュレーションから得られた透水係数と同じオーダーで透水係数を推定することに成功した。また、Mapper グラフより検出された流路の可視化も行い、先行研究のトレーサーシミュレーションで検出された流路との部分的な一致が確認された。

## 3. 研究目標の達成状況

本研究では、3D プリントモデルを用いた制御実験により、流動経路の特性評価手法を確立し、実験データと確率的最適化技術を統合することで、高精度なパラメータ推定が可能であることを示した。単一流動経路から多経路環境へと適用範囲を拡張し、トレーサー試験データの統合解析により、熱輸送と溶質拡散の同時解析を実現した。しかし、多経路システムでは計算コストの増大が課題となり、推定精度とのバランスを取るためのさらなる手法改良が必要であることが判明した。

## 4. まとめと今後の課題

本研究では、熱・溶質トレーサー試験と確率的最適化手法 (RML 法) を統合し、地下流動解析の高精度化を目指した。3D プリントモデルを用いた制御実験により、流動経路の特性評価手法を確立し、単一流動経路から多経路環境へと適用範囲を拡張することで、熱輸送と溶質拡散の同時解析を実現した。また、岩石の間隙構造をトポロジカルデータ解析 (TDA) を用いてモデル化し、透水係数の高精度推定手法を提案した。Mapper グラフを用いた解析により、流路構造の特定と透水係数の推定が可能であることを示し、従来の手法と比較して高い精度を達成した。

一方で、多経路システムへの適用時における計算コストの増大が課題として浮上し、推定精度と計算効率のバランスを考慮した最適化手法の改良が必要であることが判明した。また、Mapper グラフを用いた透水係数推定手法においては、画像データのセグメント数の選定が結果に大きな影響を及ぼすことが明らかとなり、適切なセグメント数を自動的に決定する手法の開発が今後の重要な課題となる。

今後は、離散亀裂ネットワーク (DFN) モデルを導入し、より実際の地熱貯留層の異質性を反映した解析を行うとともに、RML 法のフィールドスケールへの適用可能性を検討する。さらに、提案手法を用いた流動経路の可視化を進め、トレーサー試験データとの統合解析を強化することで、実フィールドデータとの比較検証を行う。これにより、地熱システムの動的変化を考慮した現実的な流動評価手法の確立を目指し、地熱エネルギーの効率的な利用と持続可能な開発に貢献することを目標とする。

## 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

Togo Hasumi, Yusuke Imoto, Jun Miyanaga, Tomoki Uda, Anna Suzuki, Evaluation of Flow Phenomena in Rock Fractures by Topological Data Analysis, CouFrac2024 Program and Abstracts, (2024).

Mufan Qiao, Anna Suzuki, Jun Miyanaga, Characterizing fracture structures via thermal and solute tracer test, CouFrac2024 Program and Abstracts, (2024).

・著者/発表者 (共著者も全て)

#### 国内学会・研究会等

Mufan Qiao, Anna Suzuki, Jun Miyanaga, Characterization of Fracture Networks Through Integrated Thermal and Solute Tracer Tests, 日本地熱学会令和 6 年学術講演会講演要旨集, (2024).

### 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	GR02APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.04～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 02 月 27 日提出

## 低飛行マッハ数条件下におけるスクラムジェット模擬燃焼器の

## 火炎安定化手法の創成

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, 勝村 紀子, 近藤 広海, 吉川 涼真

## 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・宇宙輸送のさらなる高速化に向けて，マッハ 5 以上で飛行する極超音速旅客機や宇宙往還機が期待されている．現在，航空機用エンジンとして主流のターボジェットエンジンは圧縮機への熱負荷のため運用速度はマッハ 3 程度が限界であるが，衝撃波により空気を圧縮し，超音速流中で燃焼するスクラムジェットエンジンはマッハ 5 以上での飛行が可能である．ターボジェットエンジンとの併用を考えると，スクラムジェットエンジンはマッハ 5 に達するまでの低飛行速度（マッハ 3 - 4）での安定作動が不可欠である．これまでの研究対象であるデュアルキャビティはマッハ 4 - 8，全温度 800 - 1500 K の高飛行速度で安定燃焼（保炎）することが解明されている．一方で，低飛行速度では気流の全温度が 700 K 未満と低く，燃料の自着火ができず保炎が一層困難になるため，本研究のほかに検討例はなく世界初である．以上より本研究の目的は，当研究グループでこれまでに着目・研究してきた燃焼ガス噴射をデュアルキャビティへ適用し，低飛行速度条件での火炎安定化手法の確立を目指すことである．

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究はデュアルキャビティと燃焼ガス噴射を有する燃焼器に対し，マッハ 3 程度の低飛行速度条件における①着火過程の観点からの保炎の解明，②火炎安定化手法の確立を目的とする．最終的には，幅広い燃焼条件においても保炎可能な保炎器を得ることが目的である．

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

低飛行マッハ数条件下でのスクラムジェットエンジン模擬燃焼器に設けられたキャビティ保炎器形状を変化させた際の影響を明らかに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ックス方程式 (RANS)、全エネルギー保存の式、質量保存の式とした。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。

本年度の研究では、保炎性能を向上させるために必要なキャビティ保炎器の形状を解明することに取組んだ。解析では、燃焼器を計算領域とし、燃焼器入口よりマッハ数 1.5 の流れを流入させた。キャビティ保炎器の形状パラメータには、キャビティ長さ ( $L$ ) と深さ ( $D$ ) の比である  $L/D$ 、キャビティ深さ  $D$ 、キャビティ後縁部角度 ( $\theta$ ) を独立に変化させ、計算を行った。図 1 および図 2 に数値計算結果の一例を示す。図 1 は流線を示している。なお、流線はキャビティ前縁部より 0.1 mm 下方、流路幅方向の線上を開始点とした。本研究では、可視化した流線をもとに、キャビティ内で再循環した流線を特定し、それらの滞在時間で各形状の評価を行った。図 2 に算出した滞在時間と  $L/D$  との関係を示す。図 2 から、ほとんど全ての条件において、 $L/D=3$  で滞在時間が最大となることを明らかにした。

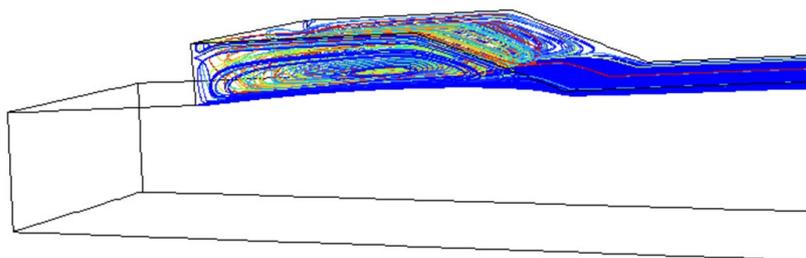


図 1 流線を用いたキャビティ保炎器付近の流れ場の可視化

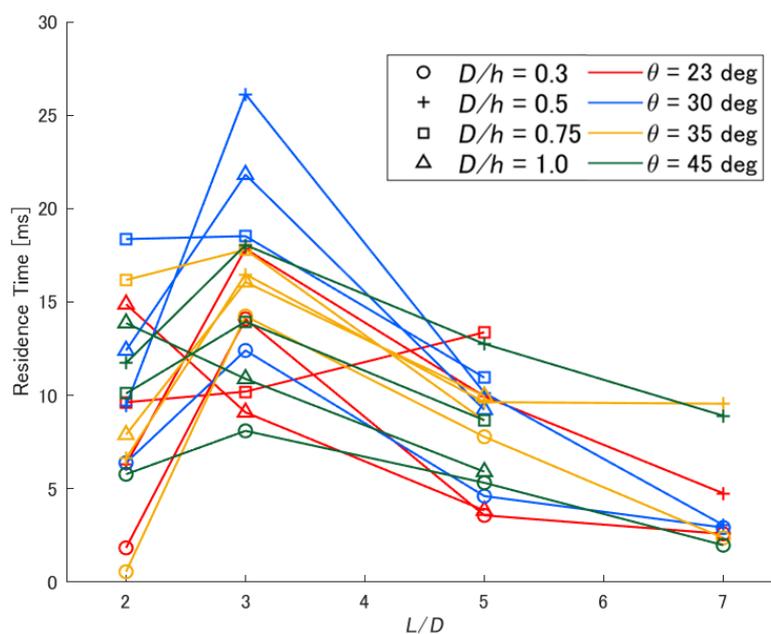


図 2 滞在時間を  $L/D$  について整理した結果

### 3. 研究目標の達成状況

本報告では、研究目標②火炎安定化手法の確立に対して、有効なキャビティ保炎器の形状の数値解析的な検討を行った。その結果、滞在時間に対するキャビティ長さとの比の影響を明らかにすることができた。その一方で、各パラメータが現象へ与える影響については、十分に解明できていない。したがって、研究目標②についてはおおむね達成できたものの、次年度も引き続き取り組む必要がある。研究目標①については、次年度も引き続き取り組む。

### 4. まとめと今後の課題

本プロジェクトにより、キャビティ保炎器の長さとの比を変化させた場合に、滞在時間へ与える効果を数値解析的に示すことができた。その一方で、バリデーションや詳細な現象については考察をより深める必要がある点が課題である。

### 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）

なし

##### 著書

なし

##### 国際学会

口頭発表（2025年 発表予定，受理済み）

- ① Kei Norimatsu, Noriko Katsumura, Satoshi Nishiura, Taku Kudo, Akihiro Hayakawa: Effects of Two-stage Injection on Flameholding and Pressure Profile for a Scramjet Model Combustor with Tandem Dual-cavity Flameholder, 15th Asia-Pacific Conference on Combustion (2025).

##### 国内学会・研究会等

- ② 乗松 慧生, 西浦 聡志, 勝村 紀子, 工藤 琢, 早川 晃弘, 小林 秀昭: デュアルキャビティと予燃焼ガス噴射方式を用いたスクラムジェット模擬燃焼器における着火過程と保炎性能の解明, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2024 講演論文集, M54 (2024).
- ③ 勝村 紀子, 乗松 慧生, 西浦 聡志, 工藤 琢, 早川 晃弘: 燃料二段噴射を用いた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, 第62回燃焼シンポジウム, C212 (2024).  
(発表予定)

- ④ 西浦聡志, 乗松慧生, 勝村紀子, 工藤琢, 早川晃弘, 低飛行マッハ数条件でのスクラムジェット模擬燃焼器におけるキャビティ保炎器形状に関する研究, 日本航空宇宙学会北部支部 2025年講演会 (2025)

#### 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	GR03APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.04～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025年2月24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

鈴木 寛人

東北大学大学院工学研究科 博士課程後期1年

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

本研究では自動車や家庭用燃料電池に使われる固体高分子形燃料電池（Polymer Electrolyte Fuel Cell：PEFC）について取り扱う。現在PEFCの実用化のためには、主として耐久性および低コスト化の2つの課題がある。このうち耐久性の目標値として定置用では50,000h以上の稼働、商用車では15年以上の耐久性が要求されている。しかし、現在の耐久性は定置用で10,000h程度であるため、劣化の原因究明とその対策が急務となっている。劣化の原因の1つとして高分子膜の化学的劣化が挙げられている。副生された過酸化水素が鉄イオンなどの不純物と接触すると、ヒドロキシラジカルが発生し、高分子膜を攻撃し分解するという一連のメカニズムが報告されている。この分解を抑制するためにヒドロキシラジカルを不活性にする物質（ラジカル捕捉材）を高分子膜内に添加する研究が進められ、実用化されている。ラジカル捕捉材として最も有用な物質の一つがセリウムイオン（Ceイオン）である。しかし、電解質膜中でセリウムイオンは移動し分布が不均一になる現象が報告されており、濃度が薄い場所ではラジカル捕捉材としての効果が薄くなり劣化が進行してしまう。また、ラジカル捕捉材の加えすぎにより電解質膜のプロトン輸送が妨げられ、PEFCの出力能力が低下するという問題もある。そのため、電解質膜内部でのCeイオン輸送メカニズムを理解することは燃料電池としての性能を維持しつつ、Ceイオンの移動を制御し電解質膜の耐久性を向上させるために重要である。しかし、実際に50,000hにもわたる稼働実験のコストは膨大であり、また、ナノ構造を有した電解質膜内部で生じる現象について実験による解析は難しいことからシミュレーションによる解析が求められている。

## 1.2 研究期間内の最終目標

電解質膜中での Ce イオンの流束は Nernst-Planck の式と水の対流による影響を考慮して次式のように定義できる。

$$J_{ce} = K_c W_m C_{ce} - D_{ce} \nabla C_{ce} - u_{ce} z_{ce} C_{ce} F \nabla \phi$$

ここで、第一項は水の対流による Ce イオンの流束を示す。  $K_c$  は水の流束に対する Ce イオンの流束、  $w_m$  は水の流束、  $C_{ce}$  は Ce イオンの濃度である。 また、第二項は Ce イオンの自己拡散を示す。  $D_{ce}$  は Ce イオンの拡散係数である。 第三項は電気泳動を示す。  $u_{ce}$  は Ce イオンの移動度、  $z_{ce}$  は Ce イオンの電荷、  $F$  はファラデー定数、  $\phi$  は電位である。 しかし、これらの値は解明されていない。 そこで本研究では PEFC の電解質膜内に Ce イオンを添加した系を考え、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) 法を用いて CFD シミュレーションへの応用を目標とした Ce イオンの輸送特性を明らかにする。

## 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 新しい現象の解明

先行研究(実験)などで、セリウムイオンの輸送性には含水率の影響が大きいことが分かっていたが、その原因については未解明であった。 本研究の遂行により、セリウムイオン周りの分子構造から含水率による構造変化の影響を解析した。 低含水時にはセリウムイオンは完全水和状態に比べて脱水しており、3つのスルホ基の酸素原子と直接相互作用をするため、拡散性は無視できるほど小さいことがわかった。 含水率が上昇するにつれてセリウムイオンは完全水和に近づいていき、含水率5でスルホ基と水分子が入れ替わるように再配位し、含水率が7ではセリウムイオンが完全水和することで、スルホ基による捕捉が弱くなるということがわかった。 このような分子構造の変化によって含水率によるセリウムイオンの輸送性変化の要因がわかった。

## 3. 研究目標の達成状況

拡散係数および電場下における移動度については既に値を得ることができた。 現在は、対流による影響を計算中である。

## 4. まとめと今後の課題

本研究では、高分子電解質膜内部におけるセリウムイオン輸送現象について解析を行った。 今後の課題として、マクロスケールのセリウムイオン分布シミュレータに本研究で得られたセリウムイオン輸送特性を適用することでセリウムイオンの電解質膜中での分布をより正確に得ることが可能になると考える。 さらに、電解質膜内部だけでなく触媒層中での輸送特性も解明することによって産業的にも利用が可能な設計指針を立てられると考えている。

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

### 5. 1 学術論文・学会発表 (発表予定含む)

#### 学術雑誌 (解説等を含む)

Hiroto Suzuki and Takashi Tokumasu, Evaluating Effects of Cerium Concentration and

Water Content on Diffusivity of Cerium Ions in PEFC Using Molecular Dynamics Simulations, *ECS Trans.* 114 191

**著書**

なし

**国際学会**

**Hiroto Suzuki**, Takuya Mabuchi, Takashi Tokumasu, Evaluating Effects of Cerium Concentration and Water Content on Diffusivity of Cerium Ions in PEFC Using Molecular Dynamics Simulations, PRiME 2024, 2024. 10. 12-16, Honolulu, HI, United state of America.

**国内学会・研究会等**

鈴木寛人, 馬淵拓哉, 徳増崇, 固体高分子形燃料電池電解質膜におけるセリウムイオン輸送特性の含水率依存性, 日本機械学会東北支部第 60 期総会・講演会, 2025 年 3 月 17 日, 仙台, 日本

**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	GR04APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.04~2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 24 日提出

## 燃料電池触媒担体細孔中の水の状態および物質輸送特性の解明

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

## 1. 研究の目的と目標

## 1.1 研究の背景と目的

燃料電池触媒層の担体カーボンには一次細孔と呼ばれる幅数 nm の穴が空いており、内部にはイオノマーは入ることができないが、触媒となる白金粒子は存在する。この白金粒子が触媒として機能するためには、一次細孔内部の水がプロトン輸送経路になると考えられるため、一次細孔内部の水の構造特性がプロトン輸送性能に大きく影響する。また、酸素輸送に関しては、その輸送経路が一次細孔内部の水中であるか、それとも一次細孔内にも空間が存在し、その空間が輸送経路になるかによって輸送特性が大きく異なってくる。よってこの一次細孔内部の白金触媒性能を評価するためには、白金粒子へのプロトンと酸素の輸送特性を解明する必要がある。この構造は実測が困難のため、本研究では分子動力学(MD)シミュレーションより一次細孔内部に存在する水の状態を再現し、水の構造特性解明を行う。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究の目的として、燃料電池触媒層の一次細孔モデルを構築し、分子動力学法で水分布特性、及び酸素分子の輸送特性を解析する。もしこれらの輸送特性が解明されれば、触媒層として有効に機能する担体カーボンの構造設計を行うことができ、今後の燃料電池の性能向上に大きく貢献できる。

## 2. 研究成果の内容

## 2.1 一次細孔シミュレーション計算系構築

本研究はカーボンナノチューブ(CNT)及びグラフェン分子構造を用いて、片側を閉じた細孔構造を模擬した。C-C 間結合長 1.42 Å、CNT の軸垂直方向(xy 方向)に周期境界条件を課し、軸方向(z 方向)の上部には反射壁ポテンシャルを設置した。CNT の直径 D は 4.0 nm と 2.7 nm の 2 種類を採用した。グラフェン構造の面積及び xy 方向計算領域は約 8 nm×8 nm、CNT の長さは約 7.25 nm、グラフェン表面以上の計算領域は約 8 nm とした。ポテンシャル

モデルは Dreiding 力場をベースにし、原子間相互作用は電荷のクーロンポテンシャルと Lennard Jones(LJ)ポテンシャルを採用した。CNT とグラフェン構造の C 原子に被覆率が 30 ~50%になるように、ランダムで-OH と-H 官能基を追加した。計算中は CNT、グラフェン構造及び被覆した官能基の各原子は固定した。

一次細孔の上部に厚さ約 4nm、含水率 3 と 7 のアイオノマー薄膜を設置した。計算中にアイオノマーの含水率を維持するように、細孔内の初期水分子数を調整した。白金の FCC 結晶構造から直径約 1.0 nm のクラスタ構造を構築し、親水性触媒物質の白金粒子モデルを作成した。また白金粒子を細孔開口部から深さ L が 4.0 nm と 6.0 nm の二通りで CNT 壁面に配置した。計算系の温度は 300 K および 350 K とした。計算系の平衡状態を確立するため、それぞれ初期状態より NVT アンサンブル計算を 20 ns まで実行し、アイオノマー薄膜の含水率が比較的維持する初期状態を選定した。その後、各計算条件の初期状態より 40 ns まで NVT アンサンブルの MD 計算を実行し、平衡状態の細孔内水分分布状態解析を行った。

## 2.2 一次細孔内水分分布解析と連結性評価

細孔内の水分子密度分布を解析計算結果より、水分子が細孔の内壁及び白金粒子に吸着し、ほぼ細孔の中心部に滞在しないことが確認された。CNT 壁面は疎水性であるが、強い親水性を示す-OH と-H 官能基及び白金粒子が CNT 表面に吸着しているためと思われる。

細孔内部に水が壁面に付着する前提で、水分子のクラスタ解析を行い、細孔内の水連結性を検証した。クラスタ解析は細孔構造の開口部から白金粒子位置までの領域範囲に限定され、その解析結果より細孔内の水連結性を評価した。細孔内の水連結率は以下のクラスタ長と細孔長の比で行った：

$$\text{クラスタ長比(\%)} = \frac{\text{最大クラスタ長}}{\text{細孔長}}$$

最大クラスタ長は白金粒子位置から細孔開口部までの領域内最大水クラスタの z 方向長さ、細孔長は白金粒子位置からアイオノマー薄膜までの距離で定義した。

評価結果より、細孔内部の水連結性へ影響が最も大きいのはアイオノマー薄膜の含水率であることがわかった。高含水率の湿潤状態のアイオノマーでは内部の水が全て連結するパーコレーションが発生し、平衡状態では一次細孔内の水は常に連結していると考えられる。次に細孔の大きさの影響について、直径が大きい CNT では薄膜が低含水率でも細孔内の水は高い連結率を示した。また、白金粒子位置が深いほど連結性が下がる傾向が見られ、その原因は白金粒子の位置が深いほど連結させるのに大きなクラスタが必要ため、連結する確率が下がるためと考えられる。なお計算系の温度、及び官能基被覆率の影響は比較的小さいと考えられる。

## 3. 研究目標の達成状況

プロジェクト当初の予定通り「一次細孔計算系構築、アイオノマー薄膜安定化検証」、及び「一

次細孔計算系安定化検証、水分布や連結性解析」の研究目標を達成した。

現行モデルでは直接プロトン輸送のシミュレーション計算は困難だが、引き続きアイオノマー薄膜及び一次細孔計算系構造の改良、酸素透過シミュレーションの導入など、細孔内分子輸送特性評価に関する研究を遂行する予定である。

#### 4. まとめと今後の課題

CNT とグラフェン構造を用いて、触媒層の担体カーボンの一次細孔シミュレーションモデルを構築し、内部の水の構造解析を行った。MD シミュレーションにて計算系の平衡状態を作成し、細孔内水クラスタ解析より水の連結性評価を行った。その結果、細孔に付着するアイオノマー薄膜の含水率と細孔の直径が細孔内部の水連結性に与える影響が最も大きく、高含水率で大きな細孔の場合には細孔内部で水が常に連結すると考えられる。白金粒子の位置、温度や官能基被覆率の影響も確認したが、比較的小さいことがわかった。

今後は一次細孔計算系に酸素透過シミュレーションを導入する予定だが、その前にアイオノマー薄膜の構築方法を改良し、一次細孔開口部がアイオノマーによって塞がれていない構造や、薄膜内の白金粒子の位置による影響を解析する。さらに酸素分子の拡散や透過率、白金粒子までの到達率などの解析方法選定も今後の課題である。

#### 5. 研究成果リスト

##### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

###### 学術雑誌（解説等を含む）

なし。

###### 著書

なし。

###### 国際学会

なし。

###### 国内学会・研究会等

黄 聖峰、徳増 崇：「固体高分子形燃料電池触媒担体の一次細孔内部の水構造特性に関する分子動力学解析」、日本機械学会 2024 年度年次大会、2024 年 9 月 8～11 日。

##### 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし。

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR05APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.4～2026.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 26 日提出

## 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（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

金属の熱処理手法の中でもジュール熱を利用した熱処理手法は、プロセス中に生じる温室効果ガスの排出量を抑制できる可能性があるため近年注目を集めている。しかしながら、このプロセス中に生じる物理現象が非常に複雑であるため、熱処理条件の最適化が十分ではないのが当該プロセス分野の課題である。当該プロセス中に生じる物理現象のシミュレーションでは、炭素原子のナノスケールの運動（エレクトロマイグレーション）と鉄鋼の相変化の両方を考慮する必要がある。電場下の鉄鋼内部では、炭素原子が電場によって運動するため、電場を用いた熱処理と電場を用いない従来の熱処理では、熱処理後の鉄鋼の構造が異なる可能性がある。これらの構造変化の物理的メカニズムが解明できれば、当該プロセスの処理条件の最適化を行うことができ、所望の構造をもつ鉄鋼材料を効率よく温室効果ガスの排出なしに製造することができると考える。本プロジェクトでは、分子動力学シミュレーション等のコンピューターシミュレーションと実験手法の両方を用いて、鉄鋼中で生じる炭素のエレクトロマイグレーションと鉄鋼の構造変化の関係を明らかにすることを目的とする。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本プロジェクトでは、電場下の炭素のエレクトロマイグレーションと鉄鋼の構造変化の関係を明らかにする。さらにそこで得られた知見を用いて、ジュール熱を利用した熱処理後の鉄鋼の構造を再現することができるシミュレーターを構築することを最終的な目標とする。

## 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）

電場下の炭素のドリフト速度を解析し、電場強度や温度の増加に伴い炭素原子のドリフト速度が **Nernst-Einstein** 関係に従わなくなることを明らかにした。シミュレーション中に炭素原子周りの鉄結晶の構造変化は生じておらず、炭素原子が近接安定サイトへジャンプするのに必要となるエネルギーバリアは電場の影響を受けていないことが明らかになった。そのため炭素

原子の試行頻度等の他のパラメータが Nernst-Einstein 関係からの逸脱のメカニズムに関係している可能性があるが、このメカニズムの解明には至っておらず現在調査中である。

### 3. 研究目標の達成状況

上記の最終目標で述べたようなシミュレーターを構築するためには、まず炭素原子のエレクトロマイグレーションのメカニズムを解明する必要があり、現状では電場強度や温度の増加に伴い、ドリフト速度が Nernst-Einstein 関係から逸脱することを明らかにした。

### 4. まとめと今後の課題

分子動力学シミュレーションを用いて、炭素原子のエレクトロマイグレーションに関してナノスケールの解析を行った。電場下の炭素原子のドリフト速度が電場依存性ならびに温度依存性を持つことを明らかにした。今後は、分子動力学シミュレーションを用いてさらなる解析を行い、これら依存性が生じるメカニズムを明らかにする。

### 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）

特になし。

##### 著書

特になし。

##### 国際学会

Ryuta Onozuka, Patrice Chantrenne, Takashi Tokumasu: Analysis of the Drift Velocity Variation of Carbon in Steel under Electric Field, Proceedings of Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, (2024).

Ryuta Onozuka, Patrice Chantrenne, Takashi Tokumasu: MOLECULAR ANALYSIS ON ELECTRIC FIELD AND TEMPERATURE DEPENDENCE OF ELECTROMIGRATION IN Fe-C ALLOYS, Extended Abstracts of The Third Pacific Rim Thermal Engineering Conference, (2024).

##### 国内学会・研究会等

特になし。

#### 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

Ryuta Onozuka, Patrice Chantrenne, Takashi Tokumasu: Electric Field Dependence of Parameters Related to the C Diffusivity in Steel and Improvement of Previous Analytical Model, Abstracts book of ELyT workshop 2025, (2025).

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR06APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.04～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 02 月 28 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

## 新規抑制デバイスの開発と抑制メカニズムの解明

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

液体ロケットエンジンのターボポンプで発生するキャビテーション不安定現象はターボポンプに深刻な悪影響を与え, 過去にロケット打上失敗の原因ともなったため, 様々な抑制デバイスが提案されてきた. ロケットへの実用例としては, ポンプの上流側で脈動を吸収するアキュムレータ方式の POGO 抑制装置や, インデューサ翼端前縁付近のケーシング径を拡大する段差付きケーシングなどが挙げられる. 抑制デバイスの開発は段差付きケーシングに代表されるようなケーシングに加工を施す抑制デバイスであるケーシングトリートメントが主流である. ケーシングトリートメントでは壁面に溝を設ける手法が多く開発されており, 壁面に軸方向に伸びる複数の溝を設けた J-groove, 周方向の溝を設ける手法, 周方向溝の上端に放射線状に整流板を取り付けた Swirl Braker, 段差付きケーシングの上流側の入口径を絞った逆流返し(Backflow Restriction Step, BRS)付きケーシングなどが提案されている. 他にもインデューサ上流部に障害板を設ける手法や圧力面からインデューサ上流にバイパスする流路を設ける逆流再循環装置など様々である. 一方, 当研究グループでは, ケーシングトリートメントの抑制効果を向上させることを目的とし, ケーシングトリートメントと組み合わせることができるインデューサにおける抑制デバイスとしてスリットインデューサを開発してきた. スリットインデューサはインデューサの 3 枚の翼の翼端部分に切り欠きを付ける抑制デバイスである. これまで当研究グループでは, スリット付き三枚周期平板翼列の二次元数値解析に始まり, スリットインデューサの三次元数値解析や, ロケットインデューサを用いた実証試験など, 様々な研究を通じ, その有効性を検討してきた.

## 1.2 研究期間内の最終目標

本プロジェクトは, 液体ロケットエンジンのターボポンプで発生するキャビテーション不安定現象に対する各種の抑制デバイスの有効性やメカニズムを, 数値解析を用いて評価するものである. さらに, 各種抑制デバイスとの組み合わせることにより抑制範囲の拡大も試みる.

対象とする抑制デバイスは、具体的には、当研究グループで提案しているスリットインデューサ (Slit) およびノッチインデューサ (Notch)、既存のケーシングトリートメントである段差ケーシング (Step) と逆流返しライナ (BRS) である。それぞれ単独および、インデューサデバイスとケーシングデバイスの組み合わせに対して三次元定常・非定常解析を行う。定常解析では、発生したキャビティの非対称性から旋回キャビテーションの発生を予測し、旋回キャビテーションが抑制されるメカニズムをそれぞれの流れ場や圧力場から考察する。非定常解析ではキャビティの長さや厚さの振動特性を表すパラメータを求め、各デバイスの抑制効果を定量的に評価する。本プロジェクトの最後には、数値解析を通じて最も有効であると予測された抑制デバイスの組み合わせについて、液体ロケットエンジンの国内の研究開発施設である JAXA 角田宇宙センターでの実機を用いた実証試験を行う。

## 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）

本研究プロジェクトでは、得られた結果を以下にまとめる。

1 定常解析結果から、流量比  $Q/Q_d = 1.00$  のキャビテーション未発生下の揚程は、計算格子数の増加に伴って安定化し、一定の値をとることが分かった。揚程が収束した計算格子をキャビティが十分に発達するまで減圧させた場合、揚程低下点まで揚程の誤差は 1% 以内であり、本解析で用いた計算格子が妥当であることが示された。また、キャビテーションが発生する状態の解析と過去の実験結果の比較から、揚程低下直前の低キャビテーション数領域では揚程を過小評価したものの、揚程低下点一致しており、揚程低下後のキャビテーションの成長は数値解析によって再現できていると考えられる。また、キャビテーション未発生条件下では流量比  $Q/Q_d = 0.80 \sim 1.20$  の広い範囲で揚程性能が一致し、流量比に関わらず本解析が妥当であることが示された。

2 定常解析のキャビティの様相と性能の比較から、Slit や Notch において、低キャビテーション数領域ではスリット後段負圧面に発生するシートキャビティがスロート間に伸長するため、性能が早くなだらかに低下することが分かった。この性能低下はケーシングトリートメントと組み合わせた場合でも同様であり、組み合わせによって向上させることができないことが示唆された。

3 キャビティの非対称の評価から、ケーシングトリートメントである Step, BRS いずれもキャビティの非対称性の抑制効果が確認された。BRS では特に逆流返しが高い形状で最も抑制効果を示した。一方で、Step は Slit, Notch いずれと組み合わせた場合でもキャビティの非対称性の発生範囲が拡大し、R.C. に抑制効果を示す抑制デバイス同士でも干渉し抑制効果が弱まる組み合わせがあることが示された。Notch 単体および Notch と BRS の組み合わせにおいて、キャビティの非対称性が広い流量条件で完全に抑制され、Notch の高い非対称キャビティの抑制効果が示された。

4 非定常解析結果の各変動量の比較から、R.C. 発生時の流れ場の振動特性としてキャビティ長さだけでなくキャビティ厚さや上流側の局所のキャビテーション数、各翼の相対速度による各翼の迎角も位相差を持って変動していることが分かった。一方で、等長キャビテーション (E.C.) ではそれらの変動量は同位相で変動し、その振幅はわずかであった。

5 抑制デバイス単体における振動特性パラメータ  $k_L, k_W$  の比較から、低キャビテーション数領域では、R.C. の高い抑制効果を持つ Notch や Step で  $k_L$  の値が大きくなっており、キャビテ

ィが長さ方向に固くなっているため、キャビティが長さ方向に固くなっているとき R.C.がより抑制されることが分かった。また、 $k_w$ はBRS で減圧に対し増大しており、逆流返しが短いほどキャビティが厚さ方向に固くなっていることが分かった。先行研究で実験において短い逆流返しで C.S.の高い抑制効果が示されたことから、キャビティが厚さ方向に固くなっているとき C.S.がより抑制されることが分かった。

6 Non-Cavity 条件の定常解析結果から、BRS では逆流が逆流返しによって押し返されることで翼端漏れ渦を逆流返し内に固定する流れ場が形成されていることが分かった。このように渦が逆流返し内に固定されることで、流量変動に対するキャビティの厚さ方向への変動を抑制したと考えられる。

7 組み合わせ抑制デバイスでの $k_L$ の比較から、BRS と Notch の組み合わせで Notch 単体と $k_L$ の値が等しく、Notch のキャビティ長さ方向への抑制効果が BRS との組み合わせによって阻害されていないことが確かめられた。これは、Non-Cavity 条件の定常解析結果から、Notch では切り欠き部からの流れが隣接翼の圧力面を増速させ、圧力面の圧力が低下し、切り欠き部の前段前縁の流れが小さくなったことで翼端漏れ渦が成長しにくい流れ場が形成されたため、キャビティが長さ方向に固くなったと考えられる。

### 3. 研究目標の達成状況

研究成果としては国際会議での発表が 1 件のみであったが、本プロジェクトはシステム入れ替えに伴い 2024 年 8 月から計算が開始したため、短い期間としては十分な結果が得られていると考えている。継続の 2025 年度にさらに解析を進め、研究成果を発表していきたい。

### 4. まとめと今後の課題

先のプロジェクト終了時の 2025 年 3 月に、最も有効であると予測された短い BRS と Notch の組み合わせデバイスを実機インデューサに適用し、JAXA 角田宇宙センターで実証試験を行う予定であり、その実験結果を 2025 年度の継続プロジェクトにおいて考察する。

### 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

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.

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	GR07APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.4~2026.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 25 日提出

## 機械学習技術の応用と数理解析による乱流の物理の解明

服部裕司

東北大学流体科学研究所 教授

山本泰平, Aditya Sai Pranith Ayapilla, 西山大裕

東北大学大学院情報科学研究科 D3, D2, 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

本研究は機械学習技術の応用による乱流モデリングと数理解析による乱流の物理の解明を目的とする。

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 6.68 (2024 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。

本研究はこの成果とその後の研究成果を踏まえて、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、高まる実用上のニーズに応じて独自の発展を遂げている音声情報処理技術を、乱流データの解析に応用することにより、乱流ゆらぎの新たな統計法則を発見し理解する。

## 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。宇宙・惑星規模の乱流への応用のため、回転成層乱流の LES (large eddy simulation) 解析のための乱流モデルを開発する。さらに音声情報処理技術を応用した乱流データの解析により、乱流の物理の解明を行う。

(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)。また、壁乱流の壁面モデル LES で必要となる壁面モデルを畳み込みニューラルネットワーク (CNN) により構築することにも成功した (Tabe Jamaat, Hattori, 2023)。本研究はこれを発展させ、非等方的な乱流である回転成層乱流の乱流モデリングを機械学習により開発するものである。さらに、音声情報処理技術の利点を乱流解析に最大限に生かすことで、乱流研究の新局面を切り開く。

(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、革新的な乱流解析技術を提案することができる。

## 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 Tripolar Instability of Strained Lamb-Oseen and Batchelor Vortices

Our objectives of this study are to investigate the linear stability of Lamb-Oseen and Batchelor vortices under tripolar straining. Such a scenario can occur in systems where the formation of a central hub vortex, surrounded by three satellite vortices occur, such as wakes behind propellers with three blades. It is crucial to understand the flow dynamics of such wakes and determine the dominant modes and potential instabilities of the flow, in order to facilitate optimization and control of such flows, especially regarding their transition to turbulence. As an initial step in addressing this broader problem, we perform theoretical linear stability analysis to get determine potential unstable modes and obtain simplified expression that links their growth rates to flow parameters like the Reynolds number, radius of the central (hub) vortex and its distance to the satellite vortices. To support the theoretical analysis, we perform direct numerical simulations (DNS) by solving linearized Navies Stokes equations around a quasi-steady basic state to find the most unstable mode and compare it to the theoretical results. In the first part, we demonstrated the existence of the tripolar instability for a Lamb-Oseen vortex (no axial flow). The work was submitted to the Journal of Fluid mechanics and is currently under review (A. S. P. Ayapilla, Y. Hattori, and S. Le Dizès. Tripolar instability of a strained Lamb-Oseen vortex. *J. Fluid Mech.* (under review)). In the second part, we are investigating the effects of axial flow on the instability. The primary mechanism of this instability is similar to the elliptic instability and is that of parametric resonance between two Kelvin modes of the unperturbed vortex and the external strain, acting as the third mode. The following are the two-dimensional structures of the perturbation vorticity in z-direction of some of the unstable modes found, obtained using DNS performed for Reynolds number of 10000, on a non-uniform grid in cylindrical coordinates, with 695 points in r (grid spacing of 0.0475 in the region of the hip and

satellite vortices), and 512 points in  $\theta$ .

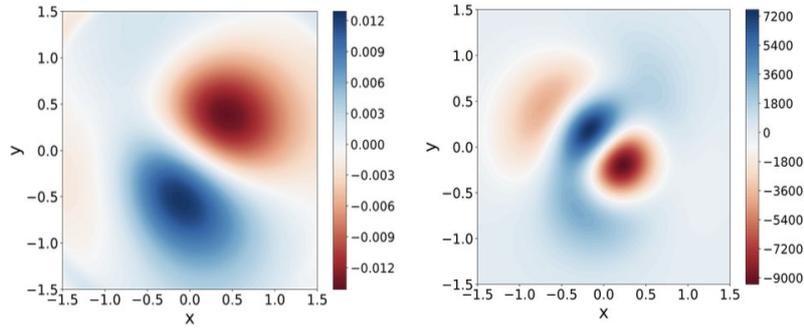


Fig. 1: z-vorticity structures of the unstable modes with the resonant azimuthal wavenumber combination (-1,2) of the Lamb-Oseen vortex.

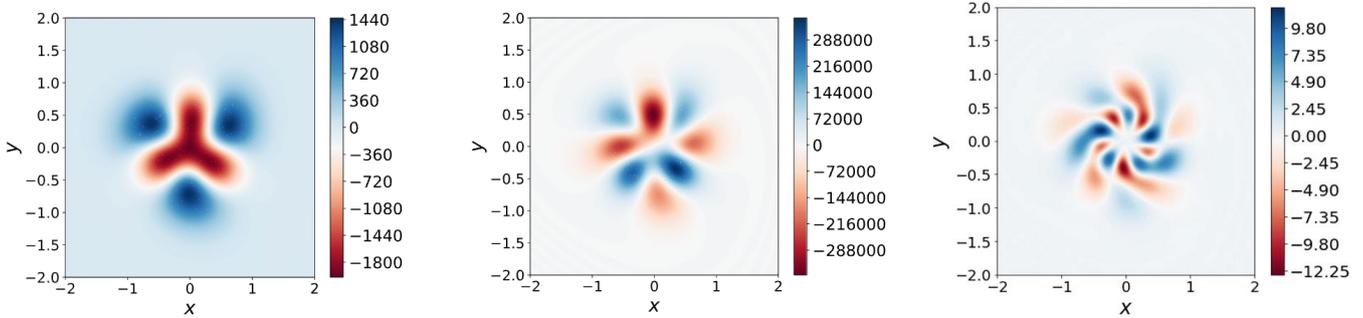


Fig. 2: z-vorticity structures of the unstable modes with axial flow ( $w = 0.2$ ); Left:  $w = -0.1$ , resonant azimuthal wavenumbers (3,0); center: (4,1), right: (5,2)

## 2.2 らせん渦の短波長不安定性と非線形発展

らせん渦は回転翼機から発生し、その後流の性質を特徴づける。回転翼機の例として風力タービンが挙げられ、大規模な風力発電では風力タービンが連続的に配置されることからその後流の性質は発電効率に直接影響を与える。実際に、密集する風力タービンでは最前列に比べて後列の風力タービンの発電効率が数十パーセント低下することが知られている。従って、回転翼機の支配的な構造であるらせん渦についてその基礎的な性質を理解することが重要となる。

本研究では主に数値計算によりらせん渦に現れる不安定性を調査し、さらにその非線形発展を調べることによりらせん渦の乱流遷移過程の詳細な理解を試みてきた。Fig. 3 にこれまでに数値計算で得られた代表的な不安定性を示す。これらは先行研究において渦輪で得られた不安定モードと概ね同様であることが分かった。また、Fig. 4 に楕円型不安定性の非線形過程の様子を示す。一部の楕円型不安定性について、線形に発展した後飽和して乱流遷移に至らないケースが見られた。このような傾向は曲率不安定性でもみられることが知られており、非線形効果が影響していると考えられる。

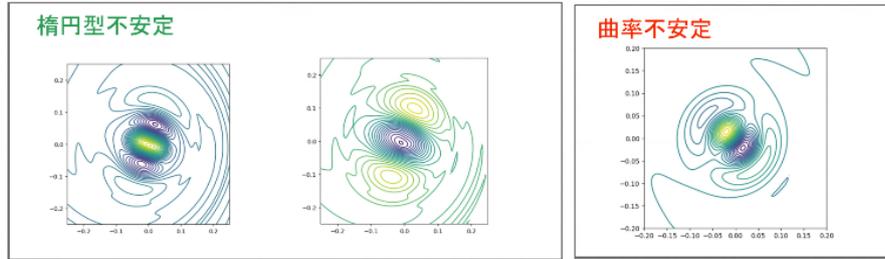


Fig. 3 らせん渦に現れる代表的な短波長不安定モード

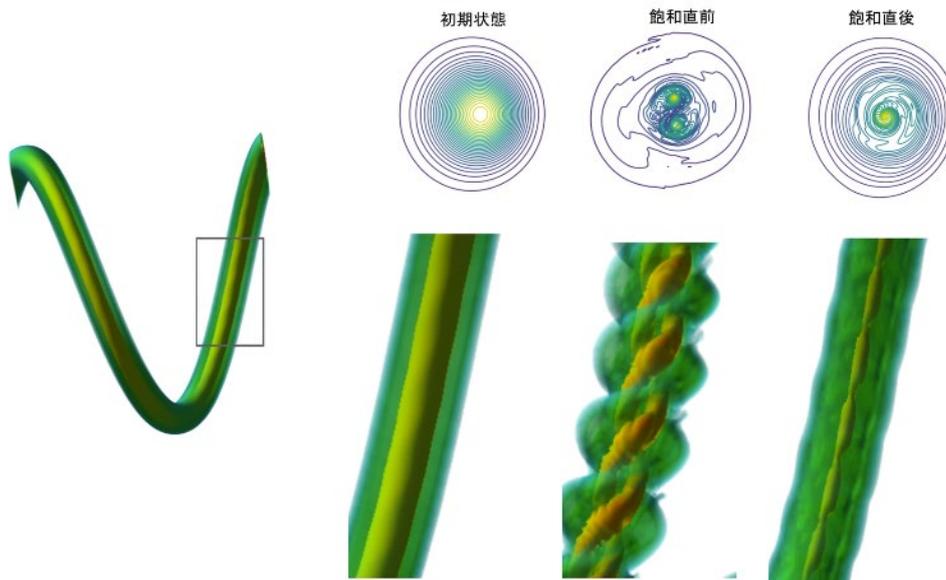


Fig. 4 楕円型不安定性の非線形発展過程

### 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ている。

### 4. まとめと今後の課題

三角形状ひずみを受ける渦の不安定性においては、軸流がない場合・ある場合の両方において、三角不安定性が起こることを理論的に示し、これが実際に発生することを直接数値シミュレーションにより示した。非線形の場合の時間発展プロセスを解明することが今後の課題である。

らせん渦の短波長不安定性と非線形発展においては、さまざまな不安定性モードによる非線形発展を直接数値シミュレーションにより捉えることに成功した。不安定性による非線形過程の違いを理論的に解明し、数値シミュレーションにより実証することが今後の課題である。

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

#### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

##### 学術雑誌（解説等を含む）

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, Stéphane Le Dizès, Tripolar Instability of a

strained Lamb-Oseen vortex, to appear in J. Fluid Mech.

## 著書

該当なし

## 国際学会

Daisuke Nishiyama, Yuji Hattori, Subgrid-scale modeling of stratified turbulence using a constrained artificial neural network, 1st European Fluid Dynamics Conference, 16 - 20 September 2024, Aachen, Germany

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, Stability of a Lamb-Oseen Vortex in a Tripolar Straining Field, Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, pp. 1088-1090, November 18 - 20, 2024, Sendai, Miyagi, Japan

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, Stephane Le Dizes

Tripolar Instability of a Strained Lamb-Oseen Vortex

77th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, November 24–26, 2024, Salt Lake City, USA

## 国内学会・研究会等

西山大裕, 服部裕司, 成層乱流の機械学習による乱流モデリング, 日本物理学会 2024 年春季大会, 2024 年 3 月 18 日~21 日, オンライン

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, Stability of a Lamb-Oseen Vortex in a Tripolar Strain Field, 日本流体力学会 年会 2024, 2024 年 9 月 25 日~27 日, 仙台

西山大裕, 服部裕司, 成層乱流の LES と機械学習による乱流モデリング, 京大 数理解析研究所 RIMS 共同研究, 「非平衡な乱流」, 2024 年 7 月 22 日--7 月 24 日, 京都

## 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	GR08APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.4～2026.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 25 日提出

# アジョイント法と流れの直接数値シミュレーションによる形状最適化研究

服部裕司

東北大学流体科学研究所 教授

山本泰平, Liangkui Tan, 河野海, 平尾菜津美, 立原陽太

東北大学大学院情報科学研究科 D3, D1, M2, M2, 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

従来の空力騒音低減対策や物体形状最適化は、技術者・研究者のノウハウと試行錯誤に基づいて、対症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、騒音低減や翼性能向上と同時に、他に維持したい性能も考慮することができる。このため、本研究により本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と物体形状最適化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。

### 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の低減、また揚抗比などの翼性能向上のために、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、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。また、航空機では離着時に翼後縁で発生する空力騒音が一定の大きな割合を占める。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。また、火星大気中を飛行する航空機や、昆虫の飛翔において、低レイノルズ数流れにおける翼性能に関心が集まっている。

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、空力騒音低減や翼性能の向上を目的とする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す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 (共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

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

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気体自身の形成する円管内の高速な旋回流れ場のみ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。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 効果の発見から約 90 年経過した現在も、そのエネルギー分離メカニズムは未解明である。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 円筒渦室内の非定常な高速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た。直接数値シミュレーションの 3 次元計算の結果から、円管子午断面における 2 次元平面上の時間平均流線に沿った全温度及び全温度変化率の分布を求め、全温度の変化が顕著な領域を特定した。また、時間平均流線に沿った全温度変化率の内訳を分析することで、全温度の顕著な変化を発生させる物理的な要因について考察した。直接数値シミュレーションの結果から、円管子午断面における 2 次元平面上の時間平均流線に沿った全温度及び全温度変化率を求め、流入ノズル部から冷風出口に向かう時間平均流線において、円筒中心部の逆流領域で全温度が顕著に減少することを特定した(図 1)。

全温度の顕著な減少領域における時間平均流線に沿った全温度変化率の内訳も調べた。最も高い乱流強度が高い条件 ( $\alpha_{\mu} = \mu_{\text{air}} = 100$ ) は、分析方法 1 より静温度変化率が全温度変化率の内訳を支配し、分析方法 2 より非線形効果項 (全エンタルピの変動成分が変動流により対流輸送される効果が時間平均的に残留する項) が全温度変化率の内訳に関して支配的であると分かった (図 2)。非定常な乱流渦運動が支配的な場合、分析方法 2 の非線形効果項が円筒中心の逆流領域における静温度分布を形成することが示唆された。

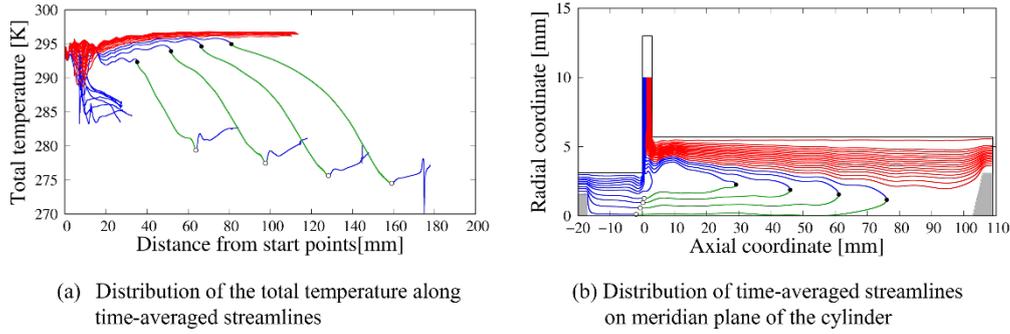


Fig. 1 : The region where the total temperature decreases significantly in the time-averaged streamlines. (The green line indicates the region which total temperature decrease significantly. The solid and hollow circle represent the starting and ending points of this region, respectively.)

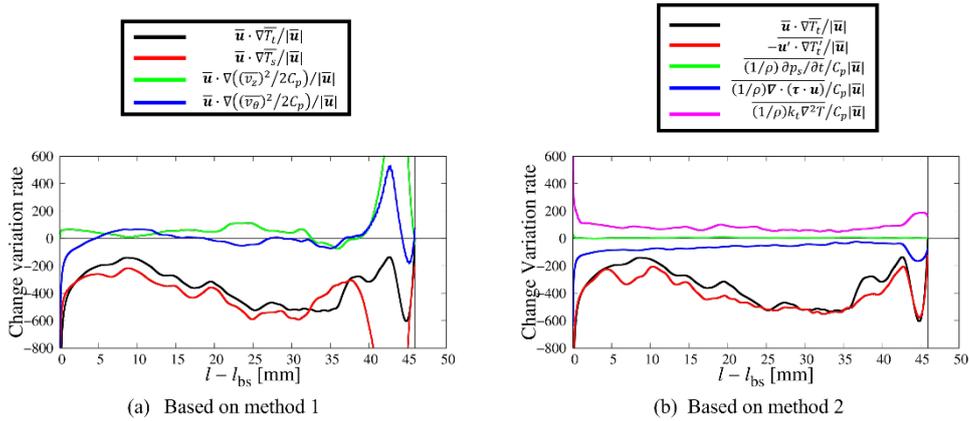


Fig. 2 : Distribution of each component of total temperature variation rate along time-averaged streamline. Initial points of streamline is  $x_s = 1.0 \times 10^{-3} \text{m}$  ( $\alpha_{\mu} = 100, \varepsilon = 0.408$ )

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

This study provides an in-depth investigation into the aeroacoustic noise mechanisms of a NACA 4412 wing operating under Wing-in-Ground (WIG) and jet coeffect conditions. Utilizing Direct Numerical Simulation (DNS), the research captures the complex interactions among vortex dynamics, WIG effects, and noise radiation. Key findings are following:

i) Influence of Ground Effect on Noise Characteristics: The strength of the ground effect, characterized by the ground clearance (H/C), significantly impacts both vortex evolution and the resulting noise characteristics, including frequency and intensity. As the

clearance is reduced to  $H/C = 0.1$ , the strong adverse pressure gradient near the trailing edge induces vortex breakdown (Fig.3 c), leading to a marked reduction in radiated noise. Additionally, the peak noise frequency shifts to second harmonic frequency of the acoustic feedback loop. This phenomenon arises from the intermittent behavior (Fig.4) which caused by combined influence of the WIG effect and a feedback mechanism.

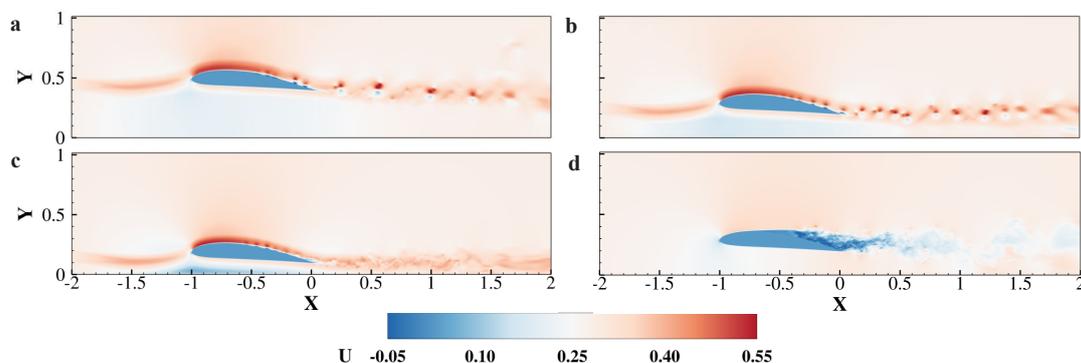


Fig. 3 Contour of velocity field (x component) with varying operating conditions of (a) C40\_J1; (b) C20\_J1; (c) C10\_J1; (d) C20\_J0.

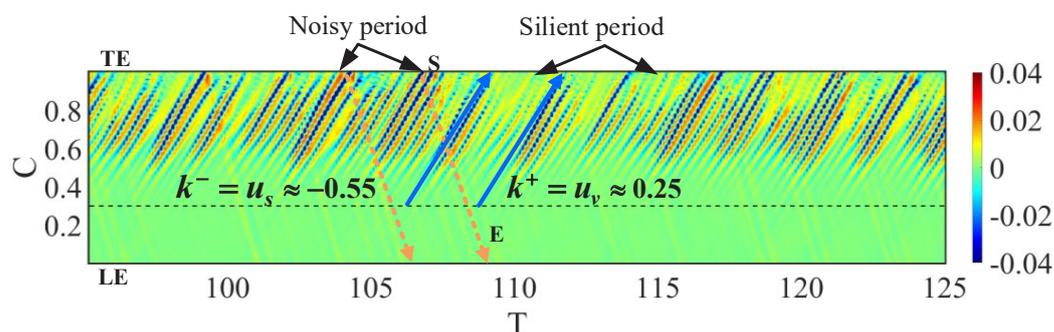


Fig. 4 Space-time pressure footprint of vortex and sound wave in C10.

ii) Effect of Jet Flow on Noise Generation Mechanisms: The introduction of a jet alters the flow instability characteristics, hence modifying the noise generation mechanism. In the absence of a jet, noise is primarily dominated by separation-stall noise driven by Kelvin–Helmholtz instability. However, with the presence of a jet, the dominant instability shifts to Tollmien–Schlichting instability, leading to the emergence of Laminar Boundary Layer–Vortex Shedding (LBL–VS) noise. This study confirms that the tonal frequency of LBL–VS noise corresponds precisely to the vortex shedding frequency, with its intensity governed by the vorticity transport process induced by the shedding vortices at the trailing edge. The introduction of jet will largely enhance the noise radiation, especially at relatively high clearance.

### 2.3 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に伴い低減しているが、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。

Fig. 5 に通常の平板と finlet を取り付けた平板での遠方観測点における圧力パワースペクトル密度(PSD) の比較を示す。finlet を取り付けたことで低周波数での圧力 PSD が見られた一方で、周波数  $f=7$  以上での圧力 PSD の増加と  $f=44$  でのピークが見られた。このうち  $f=44$  でのピークは初期の圧力変動に依存し finlet の影響ではないことが確認された。また Fig. 6 に平板周りの乱流運動エネルギー (TKE) の比較を示す。finlet を設置したことで、エッジ付近の TKE は減少した一方で、finlet の後縁付近や Tollmien-Schlichting 波を導入した前縁付近では TKE が増加したことが確認された。このことから、本研究における条件ではエッジ音は低減されるが、TKE の増加による新たな騒音源が生じている可能性が示唆された。

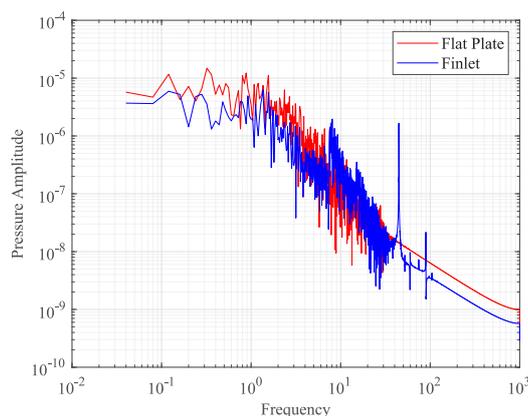


Fig. 5  $x = 1.0, y = 1.0$  の観測点における圧力パワースペクトル密度

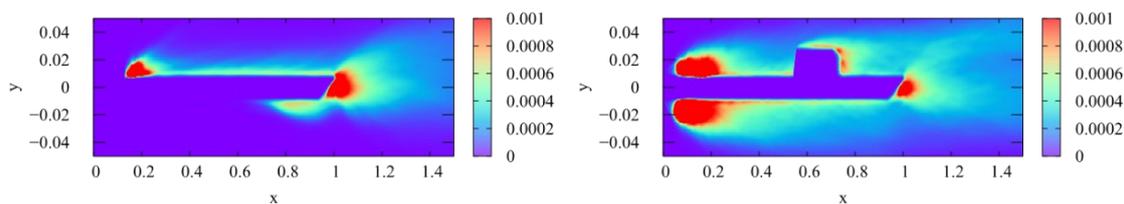


Fig. 6 通常の平板 (左図) と finlet 設置平板 (右図) の平板周りの乱流運動エネルギー

### 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ている。

### 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、エネルギー分離が起こっている領域を特定し、これを速度ゆらぎと温度勾配ゆらぎの相関が担っていることを明らかにした。このメカニズムのレイノルズ数依存性を定量的に明らかにすることが今後の課題である。

地面効果を受ける翼回り流れとジェットの影響による騒音の直接数値シミュレーション研究においては、ジェットの有無および地面からの距離によって渦運動と騒音の性質が変化することを明らかにし、騒音発生メカニズムを明らかにした。今後は多孔質材の利用などによる騒音低減を行うことが課題である。

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、平板のエッジ音を精度よく捉え、フィンレット設置による騒音低減効果を確認した。フィンレットの形状を最適化することにより低減効果を大きくすることが今後の課題である。

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

#### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

##### 学術雑誌（解説等を含む）

山本 泰平, 服部裕司, 直接数値シミュレーションによる Ranque-Hilsch 効果と円筒渦室内の高速旋回流に生じる乱流の関連性の検討, 日本機械学会論文集 Vol.91, No.941, 2025

Taihei Yamamoto, Yuji Hattori, Mechanism of Ranque–Hilsch effect at low Reynolds numbers, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 252 (2025) 127382.

##### 著書

##### 国際学会

Natsumi Hirao, Makoto Hirota, Yuji Hattori, Analysis of Trailing Edge Noise from a Flat Plate and Effect of Finlets on the Noise using Direct Numerical Simulation, Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, pp. 1057-1059, November 18 - 20, 2024, Sendai, Miyagi, Japan

Liangkui Tan, Yuji Hattori, The Mechanism of Aeroacoustic Noise Generation in Jet-Wing Interaction under the Wing-in-Ground Effect, Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, pp. 1060-1062, November 18 - 20, 2024, Sendai, Miyagi, Japan

Natsumi Hirao, Makoto Hirota, Yuji Hattori, Direct Numerical Simulation of the Trailing Edge Noise on a Flat Plate and the Effect of Finlets, 77th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, November 24–26, 2024, Salt Lake City, USA

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	GR09APR24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.4～2026.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 26 日提出

## らせん渦系の乱流遷移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

本研究は風車ロータ後流に形成される複数の渦からなる系における乱流遷移過程をかいめいすることを目的とする。

研究代表者は 20 年以上にわたって渦運動の基礎研究を行ってきた。特に渦輪の曲率不安定性の発見 (Hattori, Fukumoto, *Phys. Fluids*, 2003 他) は、渦の「曲り」が不安定性を生むことを世界で初めて示した画期的なものである。以来、曲率不安定性の普遍性を追究し、細い渦輪だけでなく太い渦輪やらせん渦にも存在することを理論的に示した。また大規模数値シミュレーションによる研究も数多く、最近では曲率不安定性の存在を直接数値シミュレーションにより実証した (Hattori et al., *J. Fluid Mech.*, 2019)。

らせん渦の乱流遷移過程の渦力学に基づく基礎研究はほとんど行われていなかった。不安定性を中心としてらせん渦の基礎研究が進む中で、らせん渦が乱流遷移する過程を、不安定モードの発展に基づいて解明しようと考えたのが本研究の着想である。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。これまでの研究で 1 個のらせん渦の場合については、長波長不安定性・短波長不安定性による不安定化過程と乱流遷移のメカニズムを明らかにすることができた。本研究はその成果を踏まえて、応用上重要な複数のらせん渦、特にハブ渦を含む場合の研究を行うものである。

## 1.2 研究期間内の最終目標

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) 複数のらせん渦からなる系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:  $L/R=0.2$ ,  $0.3$  and  $0.4$ . 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  $L/R$  and the wavenumber at the nonlinear stage. In all cases, the helical vortex deforms significantly, which is followed by vortex reconnection for  $k=1/2$ . When  $k$

$= 3/2$ , however, clear reconnection is not observed since the three-fold symmetry is preserved. The helical vortex expands as time proceeds (Fig. 1, left), while thin vortical structures emerge (Fig. 1, right). Eventually the flow becomes turbulent, although the fluctuations are weaker than  $k=1/2$ .

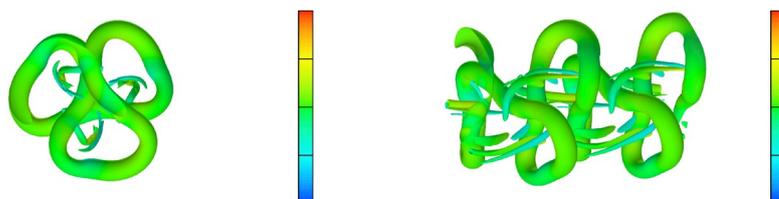


Fig. 1 Structures of helical vortex shown by iso-surface of enstrophy.

### 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ている。

### 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と擾乱の波長に強く依存することを明らかにした。 $k=3/2$  の場合には、対称性のために渦の切りつなぎが明瞭な形では起こらず、らせん渦自体が半径方向に広がることがわかった。最終的に流れは乱流遷移するが、乱流強度は小さいこともわかった。

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, Akihiro Hirano, Effect of pitch on nonlinear dynamics of helical vortex disturbed by long-wave instability, *J. Fluid Mech.* 991 (2024) R2.

Yonghui Xu, Ivan Delbende, Yuji Hattori, Maurice Rossi, A numerical procedure to study the stability of helical vortices, *Theor. Comput. Fluid Dyn.* 39 (2025), No. 15

##### 著書

##### 国際学会

Yuji Hattori, Akihiro Hirano, Ivan Delbende, Maurice Rossi, Topological change of helical

vortex disturbed by long-wave instability, 1st European Fluid Dynamics Conference, 16 - 20 September 2024, Aachen, Germany

Yuji Hattori, Ivan Delbende, Maurice Rossi, Nonlinear Dynamics of Helical Vortex Disturbed by Long-Wave Instability, Proceedings of the Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, pp. 1091-1092, November 18 - 20, 2024, Sendai, Miyagi, Japan

Yuji Hattori, Makoto Hirota, Rotational-hyperbolic instability and ring-type elliptic instability: new unstable modes of rotating stratified fluids, 77th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, November 24-26, 2024, Salt Lake City, USA

#### 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	GR02AUG24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.08～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 08 月 01 日提出

## 内部を機能化した人工 DNA チャンネルの イオン輸送特性に関する分子論的解析

馬淵 拓哉

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

分子レベルの部品から構成された，自律的な動作を可能とする分子ロボットは，医学・工学の幅広い分野での応用が期待されている．分子ロボットの実現には，特定の分子・イオンを膜で隔てられた特定領域へ選択的に輸送することでシグナル伝達を行う必要がある．そこで，分子・イオンの輸送制御に向け，分子・イオンの通路となる人工膜貫通チャンネルの開発が期待されている．特に，nm オーダーで任意の構造を高精度に設計・作製できる DNA オリガミを活用した人工 DNA チャンネルが注目されており，チャンネル内径を制御し，物質のサイズに依存して分子の輸送を制御する人工 DNA チャンネルを構築する試みが行われてきた．イオンは分子と比べて直径が極めて小さく，各イオンのサイズに大きな差異がないことから，チャンネル内径によるサイズ依存のイオン輸送の制御は困難である．人工 DNA チャンネルにおけるイオン輸送機構の確立には，チャンネルの内部を機能化する必要がある．チャンネル内部の機能化には，イオン輸送メカニズムを理解することが重要であるが，イオン輸送現象はナノスケールの現象であるため，その詳細を実験的手法により調査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輸送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となる．これは，MDシミュレーションにおいて，時間・空間スケールの非常に大規模な系である．そのため，通常の計算機での研究遂行は困難である．大規模計算機を利用することにより本研究が遂行されることで，分子ロボット工学をはじめとして，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

人工 DNA チャンネル内部に修飾する官能基には、疎水性、親水性、電荷の有無など様々なものが考えられる。イオンは通常、溶液中で水和した状態で存在し、イオン輸送と水の輸送は深く関係していることから、チャンネル内部の疎水化により輸送経路が制限され、イオンの輸送量が変化することが予想される。したがって、まずは疎水性官能基に注目し、官能基の種類とイオン輸送特性の相関について調査する。チャンネル内部に修飾する疎水性官能基として、エチル基、ヘキシル基を採用し、官能基未修飾の基本構造と官能基修飾モデルの比較により内部の疎水化の影響を調査し、エチル基とヘキシル基の比較により、官能基の長さの影響を調査する。

## 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）

### 2.1 新しい解析手法の開発(例)

該当なし

### 2.2 新しい現象の解明(例)

分子動力学シミュレーションによる解析の結果、疎水性官能基修飾が人工 DNA チャンネルのイオン輸送特性に顕著な影響を与えることを明らかにした。官能基未修飾の基本構造と比較して、エチル基およびヘキシル基修飾モデルではイオン輸送に起因する電流値が大幅に減少した。DNA の負電荷との静電相互作用により陽イオンが選択的に輸送され、輸送される陽イオンの大部分が DNA のリン酸基から  $4.5\text{\AA}$  以内の近傍領域を通過することが判明した。また、エチル基とヘキシル基では同程度の電流値を示し、ヘキシル基の物理的長さの優位性は  $4.5\text{\AA}$  以外の領域でのみ発現するため、イオン輸送の支配的領域では官能基の物理的長さがほとんど影響しないという新しい現象を解明した。

## 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える。

## 4. まとめと今後の課題

本研究により、DNA の負電荷特性に起因する陽イオン選択性およびイオン輸送経路の詳細が解明された。疎水性官能基修飾によるイオン輸送特性の制御機構も明らかとなった。一方、シミュレーション結果は実験値との相対的傾向は一致するものの、絶対値に大きな乖離が認められる。今後は水モデル挿入時の構造変化等、実験条件との差異を詳細に検討し、この乖離の影響因子を特定することが重要な課題である

## 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）

該当なし

## 著書

該当なし

## 国際学会

Taichi Hirano, Hiromu Akai, Yusuke Sato, Kan Shoji, and Takuya Mabuchi, “Analysis of Ion Transport Properties in Artificial DNA Channels Modified with Internal Functional Groups by Molecular Dynamics Simulations”, The 30th International Conference on DNA Computing and Molecular Programming (DNA30), Maryland, USA, September 16-20, 2024.

## 国内学会・研究会等

平野太一，赤井大夢，佐藤佑介，庄司観，馬淵拓哉，“人工 DNA チャンネル内部の疎水性修飾がイオン輸送に及ぼす影響に関する分子論的解析”，第 38 回数値流体力学シンポジウム，東京都，2024 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	GR03AUG24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.08～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 28 日提出

## 着火と火炎を繋げる理論を用いた革新的燃焼器開発に向けた数値的研究

森井 雄飛 ， 丸田 薫  
 東北大学流体科学研究所 助教， 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

ガソリンエンジンの高効率化に向けて，希薄燃焼の運転限界を拡大することで熱効率を飛躍的に向上させる大規模な共同研究（SIP→AICE）が進められている．SIPにおいては，火花点火エンジンの熱効率として世界最高の 51.5%を達成し，AICE ではさらなる高効率化に向けた研究が継続されている．我々は，ノッキング（未燃予混合気中での意図しない着火などの異常燃焼）現象の理解を深め，その発生条件を明らかにすることで，高効率なガソリンエンジンの開発に貢献することを目指す．加えて，カーボンニュートラル実現に向けた合成燃料の重要性が高まる中，我々独自の温度分布制御型マイクロフローリアクタを活用し，燃焼反応を時間的進行から空間的に分離することで，化学反応過程を精密に模擬し，高精度な一次元定常解析を用いて最適な合成燃料を探索する．さらに，我々が提案した着火と火炎伝播を関連付ける理論に基づき，新たな超音速燃焼器の可能性を検討し，爆轟現象への遷移条件を特定することで，安全な運転条件の確立を目指す．

## (1) ノッキング現象の理解

n-heptane(PRF0)と iso-octane(PRF100)を混合した燃料である PRF（Primary Reference Fuel）をベースとしてノッキング実験を実施し，その実験に対して再現性が担保された直接数値計算を実施することで，ノッキング現象の理解と我々の理論の検証を進める．さらに，直接数値計算は計算負荷が高いため，実機開発に資する簡易計算でノッキングを予測できる手法を確立する．

## (2) 次世代合成燃料の探索

0次元着火計算や1次元定常計算を多数の条件で実施することで最適な合成燃料を探索する．0次元着火計算や1次元定常計算の結果から絞り込んだ合成燃料に対して，温度分布制御型マイクロフローリアクタによる実験やノッキング実験を実施し，それらを再現する数値計算により，最適なカーボンニュートラル燃料を探索する．

### (3) 新しい超音速燃焼器の実現

着火と火炎が関わる現象として爆轟遷移 (Deflagration to Detonation Transition: DDT) は燃焼器開発や安全工学上重要であるため、古くから研究されている。特に近年では爆轟を利用した革新的な燃焼器が注目されている。我々はさらに高速な燃焼器が実現できる可能性を理論によって示した。この理論で予測された革新的で高効率な燃焼条件を数値計算によって実施し、最適な運転条件を調査する。

#### 1.2 研究期間内の最終目標

実験だけでは調査が困難な着火と火炎の関係に対し、数値計算も実施することで現象理解を進める。ノッキングに関しては、0次元着火計算や1次元定常計算などの簡易計算で予測できる方法を検討する。また、次世代合成燃料として最適な燃料を選択し、実験と数値計算により検証を進める。さらに、新しい超音速燃焼器の実現に向けた実機開発に資する現象理解を進める。

## 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)

### (1) ノッキング現象の理解

n-heptane(PRF0)と iso-octane(PRF100)を混合した燃料である PRF をベースとしてノッキング実験を実施している。実験条件を最適化するため、1次元の直接数値計算を実施し、結果的に得られた最適な形状で実験装置を設計中である。ノッキングの簡易計算による予測も進めており、基礎実験だけでなく、実機による結果との比較も進めている。

### (2) 次世代合成燃料の探索

従来のガソリン燃料に含まれることの多い炭素数6-8の21種を燃料として数値計算を用いて検討した。ガソリン燃料の主成分の1つであり、耐ノック性が高いことが知られている iso-octane との比較から耐ノック特性が良い燃料であった(a) 2,3-dimethylbutane, (b) 2,2,3-trimethylbutane, (c) 2,2,3,3-tetramethylbutane を選定することができた。これらの燃料に対する温度分布制御型マイクロフローリアクタによる実験・数値計算やノッキングの数値計算を実施し、結果を精査している。

### (3) 新しい超音速燃焼器の実現

着火と火炎が関わる現象として爆轟遷移は燃焼器開発や安全工学上重要である。特に近年では爆轟を利用した革新的な燃焼器が注目されている。我々は爆轟を利用した燃焼器よりもさらに安定で高速な燃焼器を理論によって予測した。この理論で予測された革新的で高効率な燃焼条件を数値計算を実施することで、実際に燃焼器として利用可能な条件が存在することを確認した。また、非定常性を持つ爆轟が発生する条件についても調査を進めており、その過程で Deflagration to Detonation が発生する条件を明確にすることに成功した。

## 3. 研究目標の達成状況

### 3. 研究目標の達成状況

(1) ノッキング現象の理解および抑制については、実機のデータとの比較も進めており、新たな視点による予測手法の改良が順調に進んでいる。

(2) 合成燃料に関しても、従来の燃料に比べて高性能化を達成可能な燃料種の選別ができつつ

あり、今後の実験や数値計算に進むために十分な進捗を達成している。

(3) 新しい超音速燃焼器の開発については、非定常性を生むデトネーションの発生を1次元計算によって予測できる手法が確立されつつあり、十分な進捗がある。

#### 4. まとめと今後の課題

ノッキング現象の予測に関しては、ノッキングを起こしにくい燃料種において実験的にノッキングを確認できておらず、さらなる検証が必要である。合成燃料に関しても、比較実験に必要な燃料の取得が難しいため、さらなる燃料種の選別が必要である。超音速燃焼器については、実験が危険であるため、数値計算や理論構築は順調に進んでいるが、検証が難しい点が課題である。

#### 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）

1. Keisuke Akita, Peng Zhao, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Double flame dynamics in hotspot ignition, *Combustion and Flame*, (2024), 269, 113660.

###### 著書

無し

###### 国際学会

1. Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Novel Analysis of Fuel-Lean Premixed Stretched Cool and Hot Flames in n-Heptane/Air Mixture, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics OS2-3, (2024).
2. Youhi Morii, Akira Tsunoda, Kaoru Maruta, Critical Role of Local State Quantities in Determining Burning Velocity: Insights from Fuel Mass Fraction and Temperature Profiles, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics OS2-10, (2024), *Invited*.
3. Shogo Miyazaki, Hinata Moriyama, Daiki Nakao, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Model Experiment on Knocking for PRF Using a Constant Volume Chamber, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics OS2-14, (2024).
4. Hinata Moriyama, Daiki Nakao, Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Numerical Study on Relationship Between the Research Octane Number and "Explosive Transition of Deflagration" of Primary Reference Fuels, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics OS2-15, (2024).
5. Haru Okada, Youhi Morii, Akira Tsunoda, Keisuke Akita, Kaoru Maruta: Analysis of Constant Thermodynamic Assumptions on Detonation Transition: New Perspective of Zel'dovich's Spontaneous Ignition Front, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, OS2-17, (2024).
6. Maryam Khan-Ghauri, Claire M. Grégoire, Keisuke Kanayama, Pascal Diévert,

Shintaro Takahashi, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura, Laurent Catoire, Kaoru Maruta, Eric L. Petersen, Olivier Mathieu: Experimental and Detailed Kinetics Modeling Study of Bis(2,2,2-trifluoroethyl) Carbonate, a Fire Suppressant for Lithium-Ion Batteries, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics OS2-20, (2024).

7. Smauel Manzello, Sayaka Suzuki, Kaoru Maruta: Characterization of Particulate Morphology Generated from Lithium-Ion Battery Combustion Processes, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics OS24-CRF-18, (2024).
8. Hinata, Moriyama, Youhi Morii, Akira Tsunoda, Kaoru Maruta: “Explosive Transition of Deflagration” of PRF at Different Research Octane Number, 15<sup>th</sup> Asia-Pacific Conference on Combustion, Paper ID: 658, (2025), *Accepted*.
9. Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Effect of flame stretch on “explosive transition of deflagration”, 15<sup>th</sup> Asia-Pacific Conference on Combustion, Paper ID: 699, (2025), *Accepted*.
10. Youhi Morii, Kaoru Maruta, “2D SIMULATIONS ON REACTION WAVE AND AUTOIGNITIVE REACTION WAVE IN SUPERSONIC CONDITIONS”, 13<sup>th</sup> Mediterranean Combustion Symposium, (2025), *Accepted*.

#### 国内学会・研究会等

1. 宮崎将吾, 中尾大樹, 森山陽太, 手塚卓也, 森井雄飛, 丸田薫: 定容容器を用いたノッキング現象の燃料依存性に関する研究, 第 62 回燃焼シンポジウム, B121, (2024).
2. 森山陽太, 森井雄飛, 角田陽, 丸田薫: PRF の Explosive Transition of Deflagration に関する数値的研究 - 高温高圧条件下における検討 -, 第 62 回燃焼シンポジウム, B122, (2024).
3. 岡田晏, 森井雄飛, 角田陽, 秋田佳佑, 丸田薫, Zel'dovich's Ignition Front からデトネーションへの遷移における熱力学仮定の役割, 第 62 回燃焼シンポジウム, C125, (2024).
4. 角田陽, 森井雄飛, 丸田薫: 顕著に予熱された燃料希薄 n-heptane/air 伸長火炎の動態に関する数値研究: ”自着火反応波面” と ”火炎構造” とを分類する新規分析, 第 62 回燃焼シンポジウム, C311, (2024).
5. 秋葉貴輝, 森井雄飛, 李敏赫, 丸田薫, 鈴木雄二, 量子コンピュータ利用に向けたカーレマン線形化を用いた非線形反応性流体解析手法の提案, 第 62 回燃焼シンポジウム, C334, (2024).
6. 森井雄飛, 角田陽, 丸田薫, 着火解析から層流燃焼速度を導出する方法について, 第 62 回燃焼シンポジウム, C335, (2024).
7. 宮崎将吾, 中尾大樹, 森山陽太, 手塚卓也, 森井雄飛, 丸田薫: 定容容器を用いた PRF におけるノッキングに関する基礎研究, 日本機械学会 熱工学コンファレンス 2024, OS-11, M22, (2024).

#### 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	GR01SEP24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.09～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 25 日提出

## 再生可能エネルギー時代の燃料および化学物質の燃焼特性に関する研究

中村 寿

東北大学流体科学研究所 教授

金山 佳督

東北大学流体科学研究所 特任研究員

玉置 健太

東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 博士学生

松本 凌太郎, 石田 誉人, 井草 光遥

東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 修士学生

## 1. 研究の目的と目標

## 1.1 研究の背景と目的

再生可能エネルギーの活用において、エネルギーの貯蔵や輸送が課題のひとつとして挙げられる。アンモニアや水素はエネルギーキャリアとして期待されるだけでなく、直接燃焼利用が可能なことから燃料としても注目されている。他にも、エネルギー貯蔵や製品の電化においてリチウムイオン電池をはじめとしたバッテリーや、植物由来のバイオ燃料などもカーボンニュートラル社会実現に向けて貢献が期待されている。したがって、再生可能エネルギー時代を目指すにあたり、従来の炭化水素のみならず、窒素族（N や P）・酸素族（O や S）・ハロゲン族（F や Cl）元素などを含む化合物の燃焼特性の理解が、新・代替燃料の燃焼利用やバッテリー等の火災安全の観点から重要となる。本研究では、カーボンフリー燃料であるアンモニアや水素の実燃焼器への適用および発火事故が懸念されるバッテリーにおける難燃性添加剤候補であるリン系・フッ素化合物をはじめとした化学物質の燃焼特性の解明および化学反応モデリングを目的とする。

## 1.2 研究期間内の最終目標

アンモニアや水素など燃料利用を想定する物質については、反応解析を通じて実機に近い条件（大気圧～高圧、多様な混合気組成など）における燃焼特性を理解するとともに、化学反応モデルの将来的な CFD への適用を念頭に、モデル選定および（必要に応じて）修正・最適化を行うことを目標とする。バッテリー難燃剤などに関連するリン系・フッ素系化合物等に



用いて、昇圧条件（ $\sim 0.4$  MPa）におけるアンモニア酸化について実験および数値計算を実施し、当研究室で構築したアンモニア化学反応モデルの検証および反応素過程の調査を行った。図 2 に実験および数値計算によるアンモニア（ $\text{NH}_3$ ）、亜酸化窒素（ $\text{N}_2\text{O}$ ）および水素（ $\text{H}_2$ ）の分布を示す。実験および数値計算条件としては、温度（1100–1400 K）・圧力（0.1–0.4 MPa）・当量比（混合気の組成、図 2a：燃料希薄（0.5）、図 2b：量論比（1.0）、図 2c：燃料過濃（1.5））を振ることで、主に圧力と当量比の依存性を調査した。結果として、いずれの当量比においても圧力を上げるほどアンモニア（ $\text{NH}_3$ ）の消費は低温側へとシフトする、すなわち反応性が上がるのが分かった。反応解析を行ったところ、これは、昇圧条件において生成が促進されたヒドロペルオキシラジカル（ $\text{HO}_2$ ）が一酸化窒素（ $\text{NO}$ ）と反応することで、活性かつアンモニア消費において最も重要なヒドロキシルラジカル（ $\text{OH}$ ）および二酸化窒素（ $\text{NO}_2$ ）の生成も促進されることに起因することが判明した。なお昇圧によるアンモニア消費促進効果は、当量比が低いほど（図 2a）より顕著に現れた。これは当量比が低いほど燃料に対して酸素の割合が増え、酸素を消費して  $\text{HO}_2$  ラジカルを生成する反応経路が強化されるためであることが分かった。

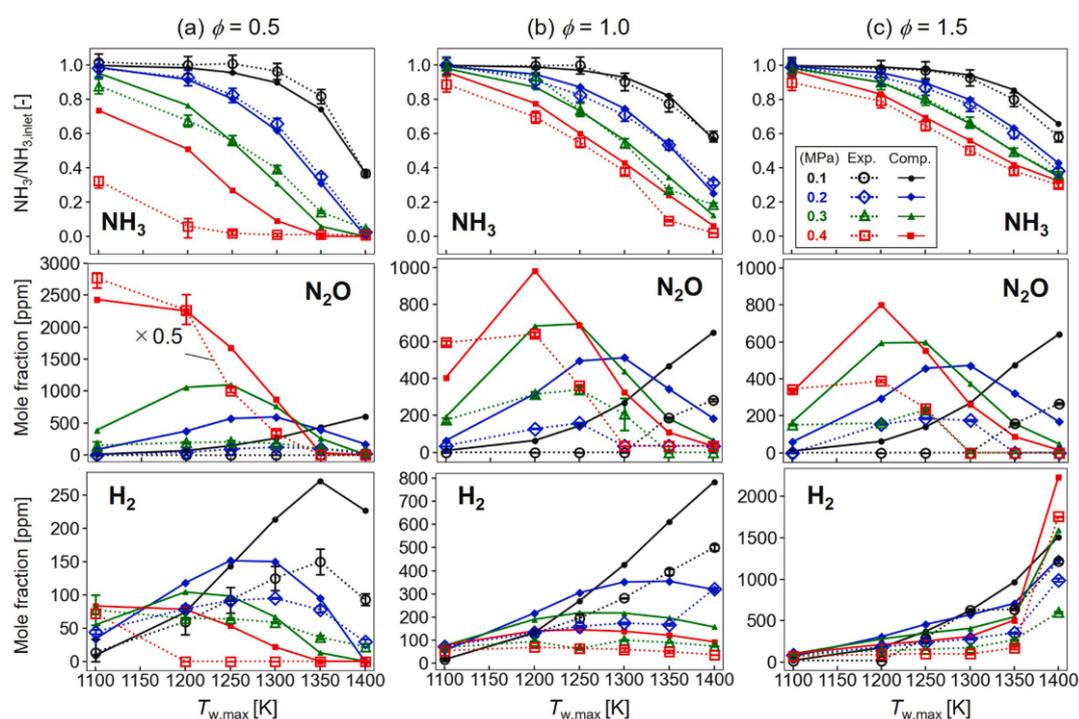


図 2 アンモニア酸化における圧力および当量比の影響

### 3. 研究目標の達成状況

現時点において概ね順調に進んでおり、目標の達成が期待できる。

### 4. まとめと今後の課題

バッテリー難燃剤候補のリン酸トリメチルについて量子化学計算による単分子解離反応の探究を行い、新たな反応経路を見つけた。今後これらの反応を基に化学反応モデルを構築し、温度分布制御型マイクロフローリアクタ等を用いた実験と数値計算を比較することでモデルの検証

を行う。燃料利用が進められているアンモニアの昇圧条件における酸化特性に対して、実験と数値計算を比較することで既存化学反応モデルの検証を行った。反応解析により、圧力や当量比を変化させた際のアンモニア酸化反応において支配的な因子を特定した。使用した化学反応モデルは概ね実験結果を再現したが、特に昇圧かつ燃料希薄条件で定量的な差異が見られた。より圧力の高い条件（高圧）においても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に取り組む予定である。

## 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）

Kenta Tamaoki, Yoshito Ishida, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Effects of difference in heating sources on ammonia reactivity: Possibility for photolysis-assisted ammonia combustion, Fuel Communications, Vol.21 (2024), 100130.

Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Self-induced radical sensitization in ammonia oxidation at intermediate temperatures and elevated pressures, Combustion and Flame, Vol.269 (2024), 113658.

Keisuke Kanayama, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Andras Bodi, Patrick Hemberger: Unimolecular Decomposition Mechanism of Trimethyl Phosphate, Chemistry A European Journal, (2024), e202401750.

#### 国際学会

Yoshito Ishida, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Species measurements for NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> mixtures at intermediate temperatures using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics (2024.11.20).

Koyo Igusa, Hisashi Nakamura: Clustering method of species characteristics for simplified reaction model of methane, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, (2024. 11. 18).

Yoshito Ishida, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Species Measurements for NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> Oxidation at Intermediate Temperatures in a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, Core-to-Core Joint Workshop Between KAUST & Tohoku University IFS (2024.12.3)

#### 国内学会・研究会等

石田誉人, 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 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 酸化における NO 生成に関する調査, 第 62 回日本燃焼シンポジウム (2024.11.27)

井草光遥, 中村寿 : 化学種の特徴のクラスタリングによる CH<sub>4</sub> の簡易反応モデルの構築, 第 62 回日本燃焼シンポジウム (2024.11.27)

## 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	GR02SEP24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.09～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 02 月 27 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

我々の研究室では、これまでに 固体高分子形燃料電池 (PEFC) 触媒層における Nafion アイオノマーの吸着特性を、粗視化分子動力学 (CGMD) シミュレーションを用いて詳細に調査してきた。PEFC の触媒層では、厚さ数 nm のアイオノマー薄膜が白金触媒を覆い、その構造が触媒層の性能に大きく影響する。アイオノマーが厚いほどプロトン伝導性が向上する一方で、酸素透過性が低下するため、PEFC の発電効率を最大化するには、プロトン伝導性と酸素透過性のバランスを最適化する触媒層の設計が不可欠である。

これまでの研究では、溶媒の種類や混合比が Nafion の凝集構造に与える影響、Pt 粒子のサイズと分布、およびナノ細孔のサイズが Nafion アイオノマーの分布に及ぼす影響を調査した。本研究では、一次細孔の存在が Nafion アイオノマーのナノスケールでの分布に与える影響を評価し、その傾向を明らかにすることを目的とする。Martini 力場を用いた CGMD シミュレーションを活用し、一次細孔の有無によるアイオノマーの形態や吸着特性の変化を解析することで、Pt の利用率やプロトン輸送効率に関する知見を得ることを目指す。

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、CGMD シミュレーションを用いて、一次細孔が Nafion アイオノマーの分布および吸着特性に及ぼす影響を評価する。本研究では、Martini 力場を用いた CGMD シミュレーションモデルを構築し、一次細孔の有無が Nafion の分布、形態、吸着特性に与える影響を解析する。動径分布関数 (RDF)、平均二乗変位 (MSD)、カーボン担体および Pt 粒子に対するアイオノマー被覆率、アイオノマーの厚さおよび粗さを用いて Nafion の動的挙動を定量評価することで、一次細孔の影響が顕著となる条件を特定し、Pt の利用率やプロトン輸送効率との関係を考察する。触媒層の最適設計に向けた指針を示し、研究成果を国際学会や論文として発表する。研究成果は、燃料電池関連の国際学術誌へ論文として投稿し、アメリカ電気化学会 (ECS) や日本伝熱学会などの学会で発表する。これにより、国内外の研究

者と議論を深め、研究の発展につなげる。本研究の成果は、PEFC 触媒層のナノスケール構造における一次細孔の役割を明確にし、触媒層設計の高度化に貢献することが期待される。

## 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、一次細孔が Nafion アイオノマーの分布と吸着特性に与える影響を解析するため、CGMD シミュレーションを用いた解析手法を開発した。一次細孔を考慮した Pt/C 触媒層モデルを構築し、I/C 比、Pt 粒子サイズ、一次細孔サイズを変化させた計算を行い、Nafion の動的挙動を評価した。解析には、RDF、MSD、カーボン担体および Pt 粒子に対するアイオノマー被覆率、アイオノマーの厚さおよび粗さを用いて解析を行った。

### 2.2 新しい現象の解明

シミュレーションの結果、一次細孔のサイズが Nafion の分布均一性に影響を与え、Pt 粒子のサイズが Nafion の吸着量と炭素基板の露出領域に影響を及ぼすことが明らかになった。また、乾燥過程において Nafion は初期に円柱状の凝集体を形成し、乾燥の進行とともに Pt に吸着しながら層状構造へと変化することが確認された。これらの知見は、触媒層の構造制御において一次細孔や Pt 粒子の影響を考慮する必要性を示唆しており、今後の触媒層設計の最適化に重要な指針を提供する。

## 3. 研究目標の達成状況

研究の目標であった一次細孔を含む Pt/C 触媒層における Nafion の分布特性の解析を完了し、異なる I/C 比、Pt 粒子サイズ、一次細孔サイズの条件下でのシミュレーションを実施した。CGMD を用いた定量的解析手法を確立し、Nafion の吸着・分布に関する動的挙動を明らかにした。これらの成果の一部は ECS 会議で発表済みであり、現在論文化を進めており、ここまでは順調に目標を達成できていると考えている。

## 4. まとめと今後の課題

本研究では、一次細孔が Nafion の吸着と分布に及ぼす影響をナノスケールで解析し、Pt 粒子サイズと分布が Nafion の拡散・吸着挙動を左右することを示した。今後は、湿度や温度条件を考慮した追加シミュレーションを行い、吸着エネルギー解析を導入して Nafion の吸着安定性を評価する。また、研究成果を国際学術誌へ投稿する。

## 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）

Liu R, Wang S, Guo Y, et al. Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Ionomer-Mediated Carbon Cluster Bonding in Polymer Electrolyte Fuel Cell Catalyst Layers[J]. ECS Transactions, 2024, 114(5): 151.

#### 著書

なし

#### 国際学会

Wang S, Guo Y, Liu R, et al. 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[C]//Electrochemical Society Meeting Abstracts prime2024. The Electrochemical Society, Inc., 2024 (43): 2883-2883.

#### 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	GR03SEP24
研究種別	一般研究
利用期間	2024.09~2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025年2月27日提出

## 水素吸蔵合金内部の水素の挙動および金属の相変化に関する

## 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、化石燃料に代わるクリーンエネルギーとして水素が注目されており、国内外を問わず「水素吸蔵合金」の開発が進められている。水素を安定的に運搬・供給するためには、エネルギー効率の高い合金材料を選定するだけでなく、合金材料自体の水素吸蔵率を増加させることが重要である。しかし、貯蔵合金内への水素吸蔵・放出の際に生じる熱エネルギーのロスが課題となっている。

そこで、より多くの水素を常温・常圧に近い条件で吸蔵および放出を繰り返し行うことが可能な水素吸蔵合金の開発が早急に求められている。我々はこの問題を解決するため、第一原理(first principles)計算に基づく密度汎関数理論(DFT)により新規水素吸蔵合金の評価および開発を行う。具体的には、水素吸蔵合金の計算モデルを用い、実験では観察し得ない原子・分子レベルでの量子力学的挙動の可視化や、特異的物性の評価方法を開発・確立する。さらに、量子化学計算によって得られる熱力学特性の評価より、水素の吸収・放出時における固体金属の相変化によって生じるエネルギー量や熱力学特性を計算し評価を行う。

## 1.2 研究期間内の最終目標

*in silico* による大規模数値シミュレーションを用いた新規水素吸蔵材料の開発は、世界的規模においても未だ途上である。密度汎関数理論(DFT)を用いた大規模計算化学シミュレーションでは、実験では観察し得ない水素吸蔵合金内部の水素原子レベルの挙動や、金属の相変化などの可視化が可能となる。そこで、水素吸蔵合金の結晶を構成する最適な原子間距離や安定化構造の計算を行い、より水素分子が吸着しやすい原子で構成される合金材料を選定する。さらに、合金内で水素が効率よく吸蔵されやすいサイトを可視化し定量的評価を行う。

次に、これらの高い水素充填率を持つ水素吸蔵合金を、熱力学的観点から特性評価および

解析する。具体的には、水素吸蔵・放出反応におけるエンタルピー変化、エントロピー変化、およびギブズ自由エネルギーの温度依存性を評価し、より高効率・高吸蔵率に水素を吸蔵する合金の探索を行う。これらの結果により、新規水素吸蔵合金の反応の自発性や平衡状態を理論的に予測することが可能になるため、国際的なエネルギー問題の解決に貢献できると考えている。将来的には、水素吸蔵合金の車載実装システム開発を行う実験分野と連携し、国際社会における実用化に向けた新規材料開発の一助を担うことが我々の最終目標である。

## 2. 研究成果の内容

「DFT 計算による固体結晶モデル内の空隙評価手法の開発および熱力学特性評価」

新規水素吸蔵合金内における水素吸蔵前後の空隙を定量的に評価するため、第一原理 (first principles) 計算に基づく密度汎関数理論 (DFT) の mGGA-SCAN 汎関数を用いた Fukui 関数を算出した。Fukui 関数は、値が大きいほど固体結晶モデル内の水素吸収サイトへの吸着エネルギーが低くなる (=吸着障壁が低くなる) ことと相関するため[1]、特に未知の固体結晶における水素吸蔵量の評価に対して有用である。

我々は、水素吸蔵合金計算モデル  $Mg_2Ni$  を用いて水素分子が結晶構造内へ吸蔵する量子計算シミュレーションを行った (図 1)。水素分子は、Mg-Mg 結合の中間にある Ni と結合し (図 1 上)、水素が吸蔵される前の Fukui 関数の値は、吸蔵後の値よりも大きいため赤く可視化されている (図 1 下)。さらに同じ計算モデルを用いて、量子力学的熱力学シミュレーションを行い、熱力学特性を分析した (図 2)。この  $Mg_2NiH_4$  結晶モデルは、理論上約 3.6 wt% の水素貯蔵が可能であり、水素分子 1 個あたりの標準生成ギブズ自由エネルギー ( $\Delta fG^\circ$  [per  $H_2$ ]) は、-12.33 kcal/mol であった。よって、負の値を持つ  $\Delta fG^\circ$  は安定した水素貯蔵を可能にするが、同時に水素放出のためには外部からの熱エネルギーの入力が必要になることを示す。これらの解析手法の確立により、新規水素吸蔵合金開発への応用が可能となった。

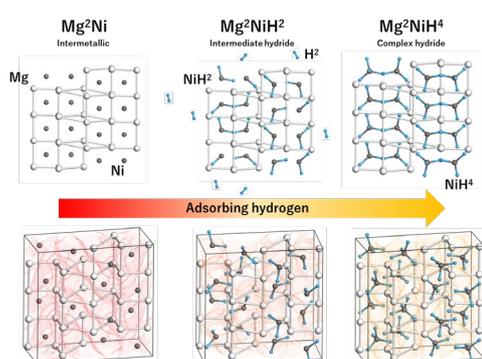


図 1. Fukui 関数による空隙の可視化

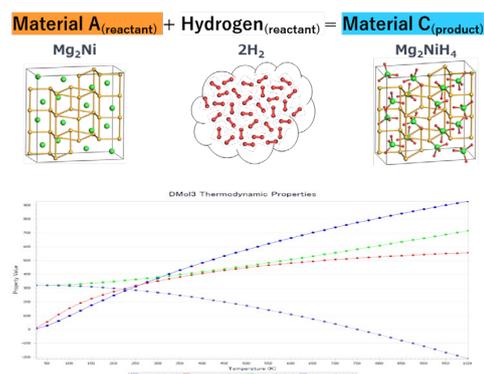


図 2. 熱力学解析による物性値

参考文献[1] Journal of Physical Chemistry, 116 (1), pp.126-133

## 3. 研究目標の達成状況

プロジェクト 1 年目に、DFT 計算による水素吸蔵合金モデル内の空隙評価手法の開発および熱力学特性評価方法を確立するという目的を達成することができたため、次の段階である新規材料によって構成される水素吸蔵材料開発に着手する。具体的には、三元系元素種から構成される合金 (Mg・La・Ni、Ca・Sr・Si など) を用いた解析である。また、それぞれの原子比率を

変化させることで、結晶構造や熱力学特性が変化し、また水素吸蔵量や吸蔵サイトも異なるため、順次量子化学計算を行い、物性評価を進めていく。

#### 4. まとめと今後の課題

大規模数値シミュレーションによる水素吸蔵材料の空隙の可視化・定量評価および熱力学特性の評価方法を確立した。一方で、机上の空論とならぬように水素吸蔵合金の車載実装システム開発を行う実験分野との連携が重要となる。特に、実験値と計算値の整合性が必要である。今後は、新規材料によって構成される水素吸蔵材料開発に着手し、実験分野との連携を強化しながら、in silico の観点より社会的実用化に向けた開発に取り組んでいく。

#### 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）

- ・GteX 水素領域・SV 会議（2024. 7. 11 仙台）：研究進捗口頭発表（徳増崇教授）
- ・GteX 水素領域・第2回全体会議（2024. 10. 31 東京）：研究進捗状況のポスター発表（徳増崇教授・今野聖絵特任研究員）
- ・GteX 水素領域・水素貯蔵チーム会議（2025. 3. 11-12 仙台）：研究進捗状況の発表（徳増崇教授・今野聖絵特任研究員）
- ・GteX 水素領域・第3回全体会議（2025. 5. 16 東京）：研究進捗状況のポスター発表（徳増崇教授・今野聖絵特任研究員）

##### 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

無し

# I. 研 究 成 果 概 要

## 若手研究

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	YG01APR23
研究種別	若手研究
利用期間	2023.4～2025.3
報告回数	第 2 回報告

2025 年 8 月 5 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パーン・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、航空機の設計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、計算リソース

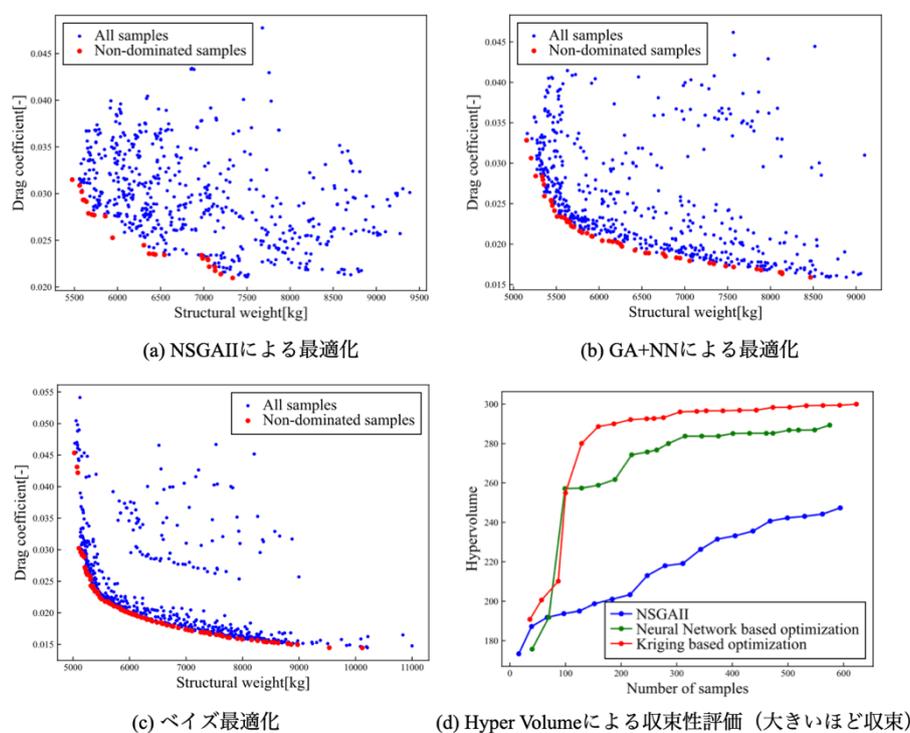


図 1：ベイズ最適化および GA+NN モデルによる多目的最適化 (T800S)

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、マルチフィジッ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、2024 年度の飛行機シンポジウムにおいて学会発表済みである。

## 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、従来線形解析で行な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。本内容は業績 1 において国際学術誌に掲載され、現在 1 篇が査読中、1 篇が投稿準備中である。

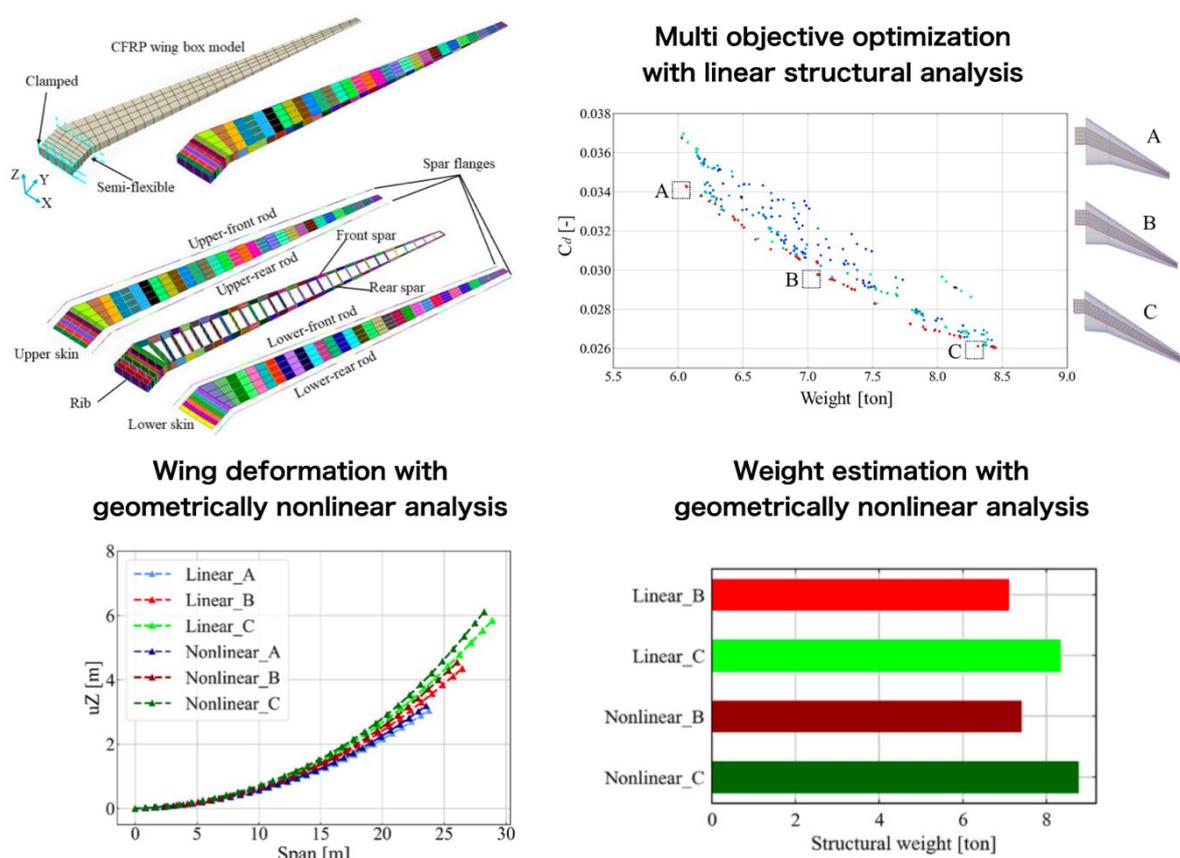


図 2 : 幾何非線形解析による翼平面最適化

### 2.3 項目 B に関する翼形状に対する主成分分析

前項目で得られたパレート解に対し、翼平面形を変数とした主成分分析（proper orthogonal decomposition: POD）を行なった。さらにその結果に対して自己組織化マップ（self-organizing map: SOM）を施すことで、主要な形状パラメータの同定を試みた。下図に SOM の結果を示す。これによってパレート解を再現するために必要な主翼平面形状のパラメータのうち、目的関数への寄与が大きなものを同定することができた。特にスパン長を表す L1 の変化を捉えるような平面形状モードが重要であり、これによって変数の次元を削減した平面形状モデルを再構築することが可能となった。

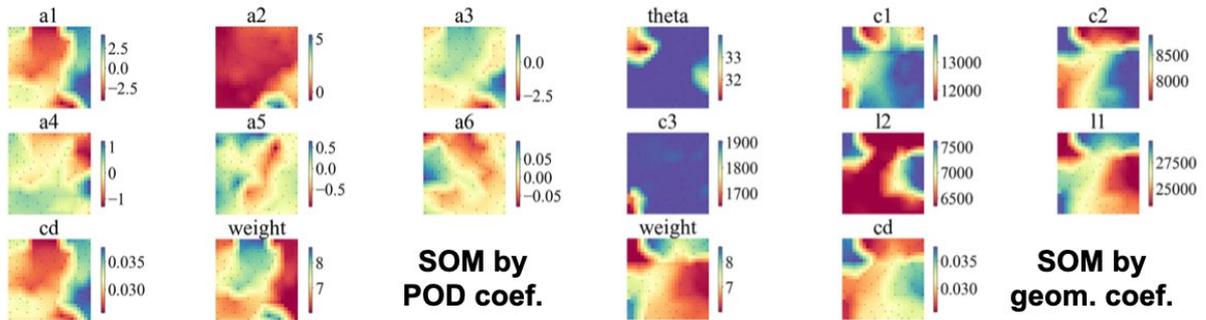


図 3：自己組織化マップ（SOM）による翼平面形主成分分析の解析結果

図 4 には、再構築モデルを用いた流体・構造解析結果を示す。図左側には主翼表面の圧力分布を示し、再構築モデルと参照解がよく一致していることがわかる。また右側には構造解析結果を示し、変形についてはよく一致していることがわかる。一方で構造解析には、主翼表面パネルの板厚設計解析が含まれることから、設計後の板厚分布は多少差が生じることがわかった。このような違いは設計解の変化を生むものの、変形状態や空力係数といった目的関数には大きく影響しないことが示唆された。

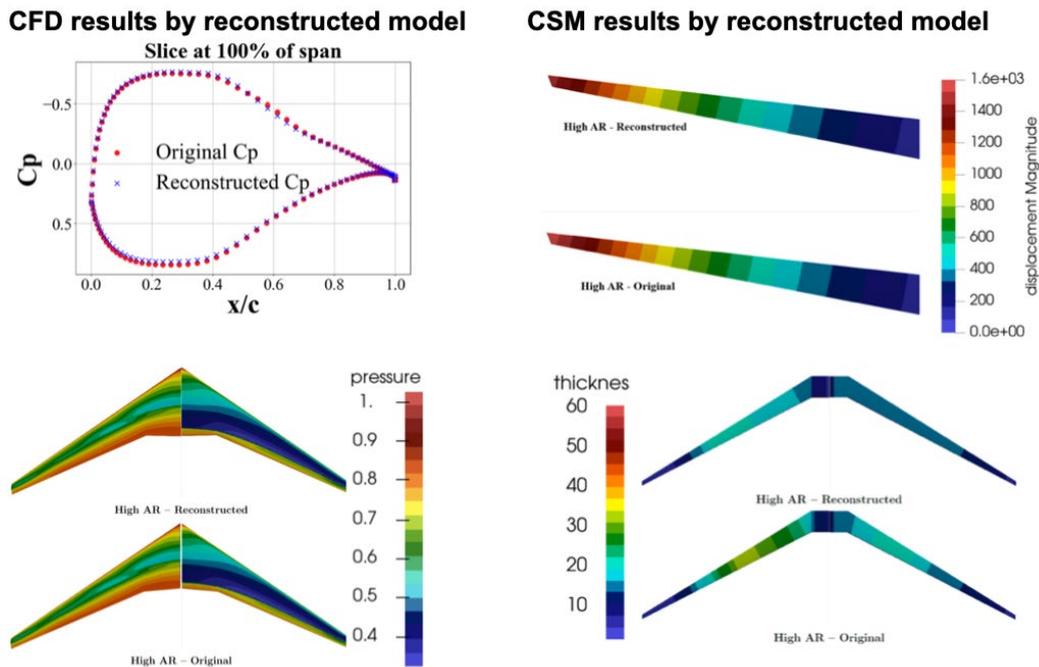


図 4：主成分分析による再構築モデルを用いた流体・構造解析結果の比較

### 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ことが可能となった。また得られた最適化結果を元に、主翼平面形の主成分分析を行い、最適解群を与える主要な形状パラメータを同定することができた。以上のことから当初目的とした研究項目は達成できたと考えている。

### 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 NSGAII 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。また、主成分分析を用いることで最適解群を再現する主要な設計パラメータを同定することに成功し、従来の変数の次元を大幅に削減する再構築モデルを作ることができた。

### 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）

##### 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] Y. Liu, S. Date, T. Nagashima, T. Okabe, Y. Abe: Effects of aeroelastic coupling accuracy and geometrical nonlinearity on performances of optimized composite wings, *Aerospace Science and Technology* 158 (2025), 109926 (15 pages), doi: 10.1016/j.ast.2024.109926.

[2] (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.

[3] Y. Abe, K. Shirasu, S. Date, T. Okabe, S. Obayashi: Toward Integrated Aircraft Design with Carbon Fiber Reinforced Thermoplastic (CFRTP), *Advanced Computational Methods and Design for Greener Aviation / Computational Methods in Applied Sciences*, 59 (2024), pp.229-239.

##### 国際学会

[1] 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

[2] Y. Liu, K. Nakamura, S. Date, T. Nagashima, Y. Abe: Geometrically Nonlinear Analysis and Structural Sizing of Composite Aircraft Wings, *Twenty-first International Conference on Flow Dynamics*, Sendai (2024), OS7-10.

[3] R. Kano, Y. Abe, K. Ryuzono, T. Okabe: Multi-Objective Optimization for Aircraft Wing Shapes Using Advanced Composite Materials, *Twenty-first International Conference on Flow Dynamics*, Sendai (2024), OS7-14.

[4] K. Nakamura , Y. Abe, K. Shimoyama, S. Obayashi: Uncertainty Quantification of Aerostructural Properties on Composite Wing Design, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, Sendai (2024), OS7-15.

[5] Rashmikant, Y. Abe: Drag Polar Prediction of an Aircraft Using Inviscid and Various Viscous Models, Twenty-first International Conference on Flow Dynamics, Sendai (2024), OS7-16.

#### 国内学会・研究会等

[1]西山 晶, 稲葉 裕太, 阿部 圭晃, Hariansyah Muhammad Alfiyandy, 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)

[2]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)

[3]狩野 良輔, 阿部 圭晃, 下山 幸治, 龍菌 一樹, 岡部 朋永: 先進複合材料を適用した航空機主翼形状の最適化手法の検討, 第 62 回飛行機シンポジウム, 福井 (2024).

[4]谷津 優希, 阿部 圭晃, 岡部 朋永: 完全分離解法による航空機主翼の静的空力弾性解析, 日本航空宇宙学会北部支部 2025 年講演会, 仙台 (2025).

#### 5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

(受賞)

・学生優秀講演賞, 先進複合材料を適用した航空機主翼形状の最適化手法の検討, 第 62 回飛行機シンポジウム, 狩野 良輔, 2024.10.16, 日本航空宇宙学会

・優秀学生講演賞, 完全分離解法による航空機主翼の静的空力弾性解析, 日本航空宇宙学会北部支部 2025 年講演会, 谷津 優希, 2025.3.10, 日本航空宇宙学会

(マスコミ発表)

・プレスリリース: 航空機主翼の空気抵抗と構造重量の両方を低減する設計手法を開発 一様々々な次世代型航空機設計への展開に期待— (2025.1.22), 東北大学

・2024 年 4 月号『子供の科学』「航空機主翼を最適化する設計方法を開発」

## 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 2 回報告

2025 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

東北大学流体科学研究所 准教授

和田 琉

東北大学大学院環境科学研究科 修士 2 年

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

## 1.1 研究の背景と目的

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., IJRMMS, 2025）。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。地殻応力の状態に制約を受けずに多方向にき裂を造成できるようになれば、資源流体へのアクセスが大きく改善できるため、生産性の向上や掘削する坑井の本数を抑えられることによるコスト削減が期待できる。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、室内実験だけではこの仮説の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 2 次元個別要素法（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の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砕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、水圧破砕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る。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に実装を行った。また、増加した粘度の緩和に要する時間をモデル化した。

### 2.2 メカニズムについての新たな知見の獲得

粘度計算の実装を施した 2 次元 DEM プログラムを用いて、差応力なしの条件下での岩石モデルへの STF 圧入シミュレーションを実施した。岩石モデルは、先行研究の室内実験で用いられた岩石試験片の寸法や物性値を参考に作成したものをを用いた。また、比較としてニュートン流体の圧入シミュレーションも実施した。その結果、STF の場合では坑井から多方向へのき裂の造成が見られ、ニュートン流体の場合では一方向のみへのき裂造成が見られた。STF の場合でのみ多方向へのき裂造成が起きたため、実験事実が再現されたとしてき裂造成挙動の詳細を解析した。

岩石モデル内での STF の粘度分布や流体圧分布、モデルに生じた応力の解析の結果、STF を用いた場合に多方向にき裂が進展するメカニズムについて新たな知見が得られた。初期に坑井周辺で微小き裂が形成すると、STF がそこに流入することによって高粘度化し、その微小き裂を閉塞させる。微小き裂が坑井周辺で閉塞されることによって、き裂先端への流体圧伝播が抑制されることと、坑井からの流体流出が減少して坑井の流体圧が高くなりやすいことの二つの影響がある。まず、き裂先端まで流体圧が作用しないと、作用する場合と異なり、更なるき裂の進展にはより高い坑井の流体圧が必要になることが知られている。したがって、最初に形成された微小き裂が更に進展するのに時間を要することになる。次に、より高い坑井の流体圧は、岩石に対してより広い範囲に強い引張応力を生じさせることになる。これら二つの要素が組み合わさって、坑井周辺で最初に形成した微小き裂が進展する前に、別の方向に新たな微小き裂が形成したと考えられる。

## 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、先行研究の実験結果の再現・メカニズムの解明について、差応力が無い場合に関しては達成したと言える。

## 4. まとめと今後の課題

本研究は、STF を用いた水圧破砕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、差応力がない場合については多方向にき裂が造成される現象をシミュレーション上で再現することができ、メカニズムについても考察できたため、概ね目的を達成することができたと言える。今後は差応力が無い場合についても多方向へのき裂造成が起きることをシミュレーション上で確認し、より詳細なメカニズム解明を目指す。

## 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

- Ryu Wada, Yusuke Mukuhira, Hiroyuki Shimizu, Shingo Ishihara, Noriaki Watanabe, Lu Wang, Takatoshi Ito: Discrete element modeling of rock fracturing with shear thickening fluid, Proceedings of CouFrac2024, (2024)
- Ryu Wada, Yusuke Mukuhira, Hiroyuki Shimizu, Shingo Ishihara, Noriaki Watanabe, Lu Wang, Takatoshi Ito: Investigation on the mechanism of multi-directional fracturing with shear thickening fluid by DEM, Proceedings of 59th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium (2025)

#### 国内学会・研究会等

- 和田琉, 椋平祐輔, 石原真吾, 渡邊則昭, 伊藤高敏: せん断増粘流体を用いた岩石破碎の個別要素法によるシミュレーションに関する研究, 石油技術協会誌, 89 巻 6 号 (2024), pp. 440-442.
- 和田琉, 椋平祐輔, 石原真吾, 渡邊則昭, 伊藤高敏, せん断増粘流体による岩石の多方向水圧破碎の DEM シミュレーション, 日本地球惑星科学連合 2025 年大会, 幕張メッセ, (2025)

### 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

- 令和6年, 石油技術協会優秀発表賞（ポスター発表）, 令和6年度石油技術協会春季講演会
- 令和6年, Best Poster Presentation Award, CouFrac2024

# 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	EF01APR24
研究種別	連携研究
利用期間	2024.04～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 3 月 6 日提出

## 表面形状、加飾による空力向上の検討

焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 准教授

青山 俊介

豊田合成株式会社

## 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

BEV の普及に伴い、航続距離延長のために自動車メーカーは空気抵抗低減に向けた取り組みを活発化させている。車両の空気抵抗を下げる方法の 1 つに外観造形の変更が挙げられる。しかし、低抵抗を追い求めた造形と高いデザイン性は必ずしも一致するとは限らない。そこで、航空機分野で採用されている技術（リブレット、ボルテックスジェネレータ等）に着目し、車両への応用ができるか可能性を探ってきた。昨年度は数値計算により考案したデバイス A に対して、実際の車両を用いて風洞試験をした結果、効果を得ることができた。デバイスの意匠性を上げるため、これまでのデバイス A とは異なるデバイス E を考案、効果があるか確認をする。

## 1.2 研究期間内の最終目標

従来デバイス A に対して、考案デバイス E の効果が同等レベルであること

## 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）

流線型模型の後端を切り落とし、後端面から数十 mm の位置にデバイス A, E を設け、MSBS 風洞試験機による抵抗測定を実施

3. 研究目標の達成状況

デバイス A、デバイス E の CD 値はデバイスなしの場合と比較して低下することがわかった。  
デバイス E もデバイス A 同等の抵抗低減効果があると言える。

4. まとめと今後の課題

モデル E をベースに効果の最適化、形状自由度の向上を、指標とする物理量を目的変数として数値計算により行う。

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）

発表予定なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

特許出願：P 2 0 2 4 0 0 1 9

# 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	FS01APR24
研究種別	特定研究
利用期間	2024.04～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 27 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

航空宇宙分野における未解決流体力学的課題の多くは, 高レイノルズ数の圧縮性乱流現象と深く関わっている. 流体物理現象の理解に基づく課題解決においては DNS や LES のような高忠実な流体シミュレーションが重要な役割を果たすが, 計算コストが莫大になることがしばしば問題となる. このような問題に対し, 必要な計算コストを大幅に削減し, 高レイノルズ数流れの高忠実なシミュレーションを実現する手法として壁面モデル LES がある. しかし, 「層流から乱流への遷移や, 乱流から層流に戻る再層流化」および「物体が移動・変形する問題」への壁面モデル LES の展開については課題が多く, 未だに課題が多いのが現状である.

本研究の目的は, 壁面モデル LES を (a) 再層流化現象, および (b) 移動・変形物体解析に展開可能とするモデルの開発である. 具体的には, 高忠実な大規模シミュレーションから得られる大規模データから (a) 再層流化において重要な流体構造や因果関係を導くために, 機械学習やデータ科学的手法 (モード解析等) を活用し, 従来は十分に利用されてこなかった乱流瞬時場の大規模データを反映した解析およびモデル構築を目指す. また, 階層型直交格子をベースとした物体非適合格子において, (b) 移動・変形物体にも適用可能な壁面モデルを, 保存則などの基礎方程式や物体近傍の差分評価法に立ち返って構築する.

## 1.2 研究期間内の最終目標

## (a) 再層流化現象

再層流化現象の物理的メカニズムを解明し, その知見を活用して, 再層流化を予測可能とする壁面モデルの構築を目指す. 検証ケースとしては, 超音速膨張コーナール流れの他, ロケットフェアリング部の流れなどの実問題に対して空力性能や振動評価を行うことで, 壁面モデル LES を用いた再層流化の予測性能を確認する.

## (b) 移動・変形物体解析

物体境界の移動・変形を伴う物体非適合格子における壁面モデルの構築を試みる．具体的には、波状に変化する平板上の乱流境界層（波状壁面境界層）の DNS と既存の壁面モデルを用いた LES を実施し、壁面モデルの移動物体非適合格子への適用可能性の調査および課題の抽出を行う．特に、物体非適合格子では物体近傍で保存則が厳密には満たされないことや、物体境界が移動することで流体セルから物体セルに切り替わる瞬間（あるいはその逆の瞬間）における差分評価法でエラーが発生しやすいことをすでに明らかにしており、その点に特に留意し、モデルの開発を行う．

## 2. 研究成果の内容

### (a) 再層流化現象

本年度は、超音速流膨張コーナー再層流化現象の DNS を実施し、再層流化現象の高忠実なデータベースの構築を進めた．計算条件として、レイノルズ数 3 ケース×マッハ数 3 ケースの計 9 ケースの計算を行い、各条件における現象の比較を行った．

図 1 に  $Re_\theta \doteq 5000$ ,  $M_\infty=2.0$  条件における計算結果の瞬時場を示す．上流側の乱流境界層が膨張コーナーにおける順圧力勾配の影響で層流化し、渦構造が消滅していることが確認できる．図 2 に、膨張コーナー前後の境界層における乱流運動エネルギーの変化を示す．図中で  $X=0$  にコーナーが存在する．乱流境界層の内層ではコーナーにおいて急速に乱流変動が減衰・再増加に転じるのに対し、外層では比較的緩やかに減少していく様子が確認される．また、層流とされる膨張コーナー後の領域でも比較的乱流変動が残っており、完全な層流化とは言えないことが示唆される．図 3 に各計算ケースにおける膨張コーナー前後の壁面摩擦係数を示す．低レイノルズ数・高マッハ数であるほど層流領域が長く続くことが示されている．また、ここでは示さないが、壁面摩擦と境界層内層における乱流運動エネルギーの間に強い相関が確認された．加えて、層流領域の長さは乱流境界層で一般的に用いられる壁単位でよくスケールされることもわかっている．これらのことから、境界層内層部分をモデル化する壁面モデルの構築に向け、乱流境界層内層の物理に関する知見が応用できる可能性が示唆されている．

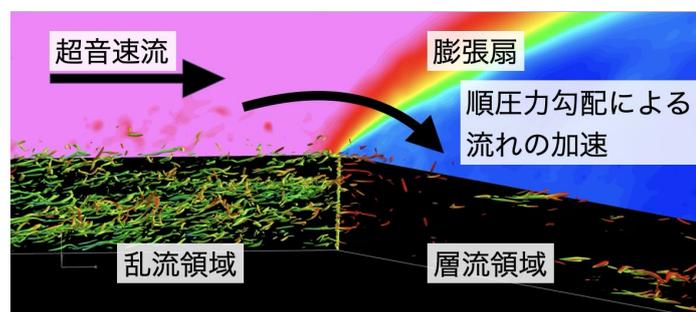


図 1：膨張コーナーにおける渦構造．マッハ数によって色付けられた速度勾配テンソルの第二不変量の等値面が示されており、背景は圧力分布を示す．

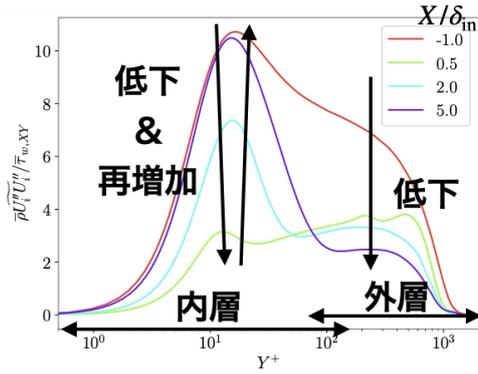


図 2：膨張コーナー前後における壁面垂直方向の乱流運動エネルギー分布。

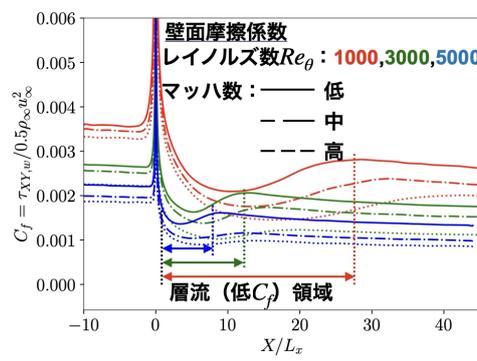


図 3：膨張コーナー前後における流れ方向の壁面摩擦係数分布。

(b) 移動・変形物体解析

本年度は、物体適合格子を用いた DNS により壁面モデル開発に用いる乱流データベースを取得した。具体的には、摩擦レイノルズ数  $Re_\tau = 180$  の波状壁面境界層を対象として、波状壁面の無次元位相速度  $c/u_b$  を変えた計算を行った。図 4 に位相速度の違いによる波状壁面境界層の瞬時流れ場の変化を示す。位相速度の増加により乱流の細かい渦構造が消失し、 $c/u_b = 1.8$  のときには流れが層流化していることがわかる。また、3 ケースで主流方向速度の大きさを見ると、壁面が静止している  $c/u_b = 0$  のケースと比較して、 $c/u_b = 0.6$  は流れが減速している一方で、さらに位相速度の大きい  $c/u_b = 1.8$  においては流れが加速していることが確認できる。

図 5 に平均速度分布とレイノルズせん断応力分布を示す。平均速度分布を見ると、静止波状壁面のケースでは平板乱流境界層の対数速度プロファイルに近い分布を示す一方で、 $c/u_b = 0.6$  では対数分布よりも下にシフトすることがわかる。これは、図 4 で  $c/u_b = 0.6$  のケースにおいて波状壁面の移動により流れが減速していたことに対応している。 $c/u_b = 1.8$  のケースでは流れの層流化が見られたように、平均速度分布も慣性層においても対数分布からずれて線形分布に近づいている。レイノルズせん断応力分布を見ると、波状壁面の移動により発生したレイノルズ応力が内層を通して外層のレイノルズ応力に影響を及ぼすことがわかる。より詳細なメカニズムについては、周期現象の三項分解に基づく乱流エネルギー収支などを通して今後調べる予定である。

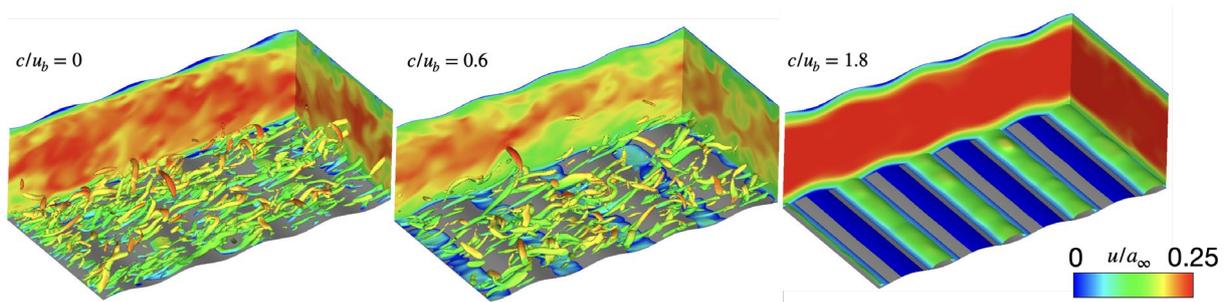


図 4：波状壁面境界層の瞬時流れ場（主流方向速度によって色付けられた  $Q$  値の等値面）。

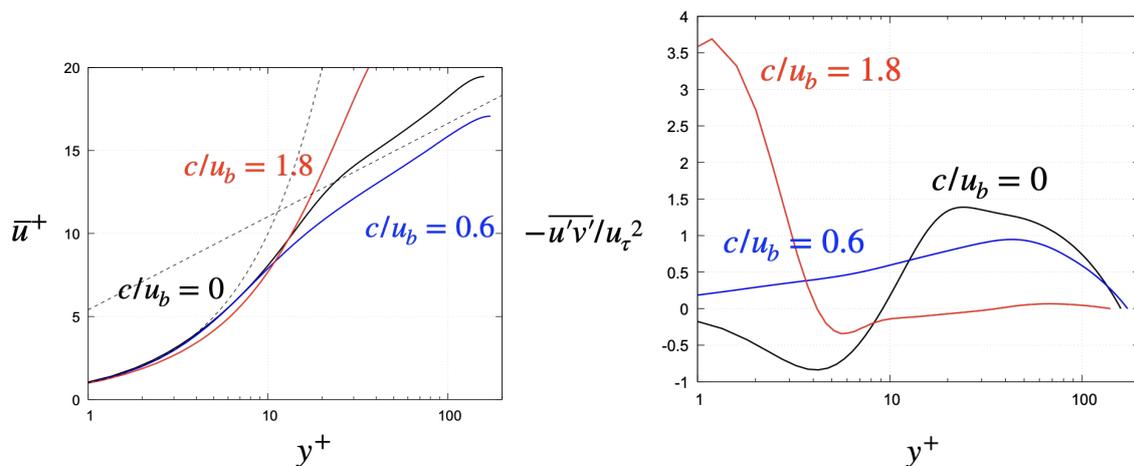


図 5：波状壁面境界層の平均速度分布（左）とレイノルズせん断応力分布（右）。左図の破線は平板境界層乱流の線形速度分布と対数速度分布を表す。

### 3. 研究目標の達成状況

本課題では、壁面モデル LES の乱流境界層再層流化現象および移動・変形物体解析への展開を目標としている。本年度は DNS による基礎的な乱流統計量の取得・分析や、機械学習・データ科学的解析に用いる瞬時場の取得を行い、研究目標の達成に向け概ね順調に進行している。

### 4. まとめと今後の課題

本年度は主に、再層流化現象および移動・変形物体解析の DNS を実施し、壁面モデル構築のための乱流統計量と瞬時場の取得を含むデータベースの構築を行った。境界層における乱流変動の変化や壁面摩擦係数の相関性が明らかとなり、壁面モデル構築に向けて重要な知見が得られた。今後は壁面モデルの具体的な定式化や、実用化に向けた検証を進める予定である。

### 5. 研究成果リスト

#### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

##### 学術雑誌（解説等を含む）

- Soju Maejima, Kazuki Tanino, and Soshi Kawai, “Physics-informed

machi-learning solution to log-layer mismatch in wall-modeled large-eddy simulation,” *Physical Review Fluids*, 9, 084609 (2024).

## 著書

該当なし

## 国際学会

- Soju Maejima and Soshi Kawai, Machi-Learned Sub-Grid Scale Backscatter in Coarse-Grid LES, Thirteenth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP13) (2024).
- Soju Maejima and Soshi Kawai, SGS backscatter effects in coarse-grid LES predicted by a machine-learning-based SGS model, the 78th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (APS-DFD) (2024).

## 国内学会・研究会等

- 前島颯樹, 河合宗司: 機械学習 Attention matrix を通した複雑流体データ解析への試み, 第38回数値流体力学シンポジウム, 2024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	FS02APR24
研究種別	特定研究
利用期間	2024.4~2025.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 7 月 29 日提出

## 複数の分岐点を含む流れ場を記述する低次元モデリング手法の確立

大西直文, 中村悠斗

東北大学工学研究科 教授,

東北大学大学院工学研究科 博士後期課程 2 年

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

## 1.1 研究の背景と目的

わずかなパラメータの変化に対して, 流れの特徴が著しく変化する分岐現象は, 流れの力学系を調べる上で非常に重要である. また, 工学機械の設計においても, 流れの突発的な変化は, 工学機械影響を及ぼすため, その予測 / 制御が必要である. 本研究では, 大規模な流れの分岐を再現する低次元モデルを開発し, 流れの力学系の理解と, 高速な予測 / 制御モデルの構築を目指す.

## 1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内においては, 流れ場における特定の 1 つのパラメータを変化させた時に生じる複数の分岐点を, 固有直交分解 (POD) を用いた射影ベースの低次元モデルで表現することを目指す. 先行研究でよく知られた分岐として, 円柱において, レイノルズ数が変わると発生する分岐点がある. 研究期間内においては主にレイノルズ数が 50 付近で発生する分岐点 (定常 → 非定常) とレイノルズ数 200 付近で発生する分岐点 (二次元 → 三次元) を表現するモデルの開発, および, それら両方を再現できる統一的なモデリング手法の構築指針を示す. 研究初期では, 個々の分岐点を低次元モデルで表現することを目指し, 先行研究の結果をもとに調査を行う. そして調査した結果をもとに複数の分岐点を両立するモデルの構築と検証を研究期間内に行い, 提案する低次元モデルにおける分岐点を明らかにする.

## 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 定常流れから非定常流れへの低次元モデリング

最も低いレイノルズ数で発生する分岐としてレイノルズ数 50 付近の分岐を対象に低次元モデリングを行った. この分岐では, レイノルズ数が低い時に定常場であった流れ場が非定常場へと移行する. この分岐の低次元モデルに関する先行研究<sup>[1]</sup>では, 分岐前の定常場を表現する Shift mode と分岐後の非定常場のリミットサイクルを表現する mode を用いて低次元モデルを構築すると, 分岐点を表現できると言われている. 本研究では, まず, レイノルズ数 20 から 100 の範囲で 1 つずつレイノルズ数を変えて二次元の円柱周り流れの数値計算を行った. 得ら

れたデータに POD を適用し、データを表現するのに最適な部分空間の基底を抽出した。抽出した基底で張られる部分空間に支配方程式を射影し、低次元モデルを構築した。構築したモデルで検証した結果、Noack らのモデルでは、モードを取得したデータのレイノルズ数と低次元モデルで予測するレイノルズ数が異なる場合、低次元モデルは、誤った分岐位置を示すことがわかった。低次元モデルで分岐点を正確に同定するために本研究では、予測したいレイノルズ数に合わせてモードを変化させることとした。これを実現するために、分岐前のレイノルズ数の振動モードを全体安定性解析によって抽出した。分岐点を挟んで、全体安定性解析のモードと、準定常流れのリミットサイクルのモードから予測したいレイノルズ数のモードを補完することで、低次元モデルで分岐点を正確に予測できることがわかった。これによって、分岐点を捉えるために、そのレイノルズ数に対応したモードを補完することが有効であることが明らかとなった。

## 2.2 二次元流れから三次元流れへの低次元モデリング

より高いレイノルズ数で発生する分岐としてレイノルズ数 200 付近で、二次元流れが三次元流れに移行する分岐を対象に低次元モデリングを行った。この分岐では、分岐点前にスパン方向に一様な二次元流れであったものが、スパン方向に分布を持つ三次元流れへと変化する。この分岐点においては Ma & Karniadakis<sup>[2]</sup>の先行研究が存在する。彼らはレイノルズ数 183 の二次元流れのリミットサイクルを表すモードと分岐後のレイノルズ数 185 のリミットサイクルを表す POD モードを用いて低次元モデルを構築すると分岐位置を正確に予測できることを示した。本研究ではこれを再現するため、三次元の数値計算においてレイノルズ数を細かく変えて計算を実施し、本研究の数値計算スキームにおける分岐レイノルズ数を調べた。その結果 185 から 190 付近に存在することがわかった。しかし、レイノルズ数 190 の数値計算では三次元流れが発達するのに膨大な計算時間が必要であったため、レイノルズ数 200 の数値計算結果で以降の計算を実施することとした。まず、Ma らのモデルのように分岐前のリミットサイクルと、分岐後のリミットサイクルを用いて低次元モデルを構築した。ただし、本研究では、分岐前のレイノルズ数に 180、分岐後のレイノルズ数に 200 を採用した。その結果、低次元モデルではレイノルズ数 180 においても分岐後のリミットサイクルの振動が確認され、分岐点を再現することができなかった。

## 3. 研究目標の達成状況

本研究では、定常流れから非定常流れへ移行する分岐を捉える低次元モデルの構築に成功した。このモデルでは、支配方程式のレイノルズ数と、POD データセット、すなわち部分空間のレイノルズ数を同時に変化させることで、分岐点を捉えることができることがわかった。この知見に基づいて、低次元モデルを構築すれば、二次元流れから三次元流れへの分岐についても捉えられる可能性がある。今後、様々なレイノルズ数の三次元流れのモードを、安定性解析などによって取得し、これを実証していく。

## 4. まとめと今後の課題

定常場から非定常場への分岐点表現のために、モードを取得したレイノルズ数と支配方程式のレイノルズ数を同時に変化させた低次元モデルが有効であることがわかった。これを三次元流れへの分岐でも実証することで、複数の分岐点を含めて広い範囲のレイノルズ数の流れ場を予測できる低次元モデルの構築が可能になる。また、本研究では、低次元モデルのレイノルズ数

を変えるために、モデルと同じレイノルズ数でフルオーダーの数値計算を実施し、モードを取得した。少ない計算コストでモデルを構築するという実用的な観点から、モードをレイノルズ数に応じて変化させるために、いくつかの代表的なレイノルズ数のデータセットからモードのレイノルズ数依存性を再現する手法の構築が必要である。

## 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）

#### 学術雑誌（解説等を含む）

- Y. Nakamura, Y. Kuroda, S. Sato, and N. Ohnishi. "Energy transfer and budget analysis for transient process with operator-driven reduced-order model" *Journal of Fluid Mechanics, Under Review*

#### 著書

- 該当なし

#### 国際学会

- **Yuto Nakamura**, Shintaro Sato, Naofumi Ohnishi, "Analytical approach to identifying a bifurcation point in reduced-nonlinear dynamical systems formed by shift mode and oscillation modes," 77th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, X11.00011, 2024/11/24-11/26 (Oral presentation, Salt-Lake City, USA).
- **Yuto Nakamura**, Shintaro Sato, Naofumi Ohnishi, "Data-driven reduced-order modeling for investigating spanwise instability in the wake of an infinitely long bluff body," Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology 2024, 2024/10/29-10/28 (Oral presentation, Adelaide, Australia).
- **Yuto Nakamura**, Shintaro Sato, Naofumi Ohnishi, "Investigation of three-dimensional instability behind a circular cylinder via low-dimensional space spanned by optimal proper orthogonal decomposition modes," 9th International Colloquium on Bluff Body Aerodynamics and Applications 11.5, 2024/7/29-8/2 (Oral presentation, Birmingham, UK).

#### 国内学会・研究会等

- **中村悠斗**, 黒田悠馬, 岡野泰人, 佐藤慎太郎, 大西直文, "全体安定性解析と固有直交分解を用いた円柱周り流れにおける Hopf 分岐の低次元モデリング" 流体力学学会年会 2024, 3M101-04-02, 2024/9/25-27(口頭発表, 宮城).
- **中村悠斗**, 佐藤慎太郎, 大西直文, "固有直交分解による低次元モデルを援用した円柱後流の不安定現象の可視化" 第52回可視化情報シンポジウム, OS16-3, 2024/7/19-21(口頭発表, 沖縄).

## 5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

- ・ 該当なし

[1] B. R. Noack, K. Afanasiev, M. Morzyński, G. Tadmor, and F. Thiele, A hierarchy of low-dimensional models for the transient and post-transient cylinder wake, *Journal of Fluid Mechanics* 497 (2003) 335—363.

[2] X. Ma and G. E. Karniadakis, A low-dimensional model for simulating three-dimensional cylinder flow, *Journal of Fluid Mechanics* 458 (2002) 181—190.

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS03APR24
研究種別	特定研究
利用期間	2024.04~2026.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 27 日提出

## 多様体構造を考慮した parameterized ROM の構築に向けた

## 大規模数値解析

大西 直文, 佐藤 慎太郎

東北大学大学院工学研究科 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

乱流を伴う流れを理解することは流体機械周りの流れの理解や制御を実現するうえで不可欠であるが, 乱流場の挙動を理論的なアプローチに基づいて詳らかに記述することは困難である. 一方, 近年の実験・数値流体力学の飛躍的な発展に伴い, 乱流場の挙動に関する精緻な時系列データの取得が可能になった. しかし, 同時にデータ容量が大規模化したため, 得られた結果をどのように流体力学知見へと還元するのが自明でない場合が多い. 本研究では, モード分解法を用いて流体现象を低次元空間での力学系として近似することで理解することを考える. これまでの研究は, 特定の条件に対する計算 (実験) 結果の流動現象に対する低次元モデル (reduced order model: ROM) の構築はできても, 流れの条件が変化すると非物理的な解が得られることに課題があった. 本研究では多様体論的な観点を導入することでこの課題を解決し, 様々な流れの条件に対する流動現象を低次元空間での力学系で表現できる ROM の実現を目的とする.

## 1.2 研究期間内の最終目標

本研究では, 主に翼周りの流れ場を解析対象とする. 翼周りの流れ場は, 迎え角に応じて変化することが知られている. 本研究では, それぞれの迎え角に対する翼周りの流れ場に対する特徴構造を抽出し, 得られた特徴構造の迎え角依存性を行列多様体上の曲線として解釈し, 曲線をモデリングすることによって, 様々な迎え角に対する流れ場を低コストで予測できる parametric な ROM の開発を目指す. 加えて, 流れ場のレイノルズ数依存性を記述するために, 迎え角・レイノルズ数をパラメータとする行列多様体上の曲面をモデリングすることで, 任意の迎え角・レイノルズ数に対する翼周りの流れ場を低コストで予測できる技術を確立することが本研究の最終目標である.

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

### 2.1 翼周りの流れ場の数値計算および特徴構造の抽出

NACA0015 周りの流れ場の **Large Eddy Simulation** 解析を実施した。具体的には、レイノルズ数 63,000 を解析対象とし、迎え角が小さい時の流れ場および大きい時の流れ場の **LES** 解析を実施し、流れが翼に付着している時の状態と剥離している時の状態のデータベースを作成した。また、3次元流れ場の **spectral proper orthogonal decomposition (SPOD)** 解析を実施するための数値解析コードの開発を行った。

### 2.2 行列多様体に基づく特徴構造の感度解析

流れ場の特徴構造が張る部分空間のパラメータ依存性を評価するために、**Grassmann** 多様体上での特徴構造の感度解析を実施するための手法を開発した。例えば、円柱周りの流れ場を対象とした場合、レイノルズ数の増大に伴い、レイノルズ数の変化に対する部分空間の感度は低くなることがわかった。加えて、**Stiefel** 多様体を考えることで、特徴構造のパラメータ変化に対する感度を計算し、それに基づいて流れ場の感度解析を実施する手法を考案した。提案した流れ場の感度モードを用いることで、パラメータの微小変化に伴う流れ場の応答の時間発展を記述できることを示した。

## 3. 研究目標の達成状況

本年度は、翼周りの流れ場の迎え角依存性を表現できる **parametric** な **ROM** の構築に向けて、さまざまな迎え角条件に対して、**LES** 解析を実施し、データベースの構築を行った。加えて、翼周りの流れ場から3次元的な特徴構造を抽出するための **SPOD** 解析コードを開発した。これらの成果に基づいて、次年度より、本研究の目的である **parametric** な **ROM** の開発に取り組むことができる。

## 4. まとめと今後の課題

レイノルズ数や翼の迎え角、翼形状をパラメータとした **parametric** な低次元モデルの開発に向けて、本年度は主にデータベース作成のために、複数の迎え角に対する **LES** 解析を実施した。また、乱流場の3次元構造の特徴を抽出するための **SPOD** 解析が実施できる数値解析コードの開発を行った。

次年度では、開発した **SPOD** 解析コードを用いて翼周りの流れ場の特徴構造を抽出し、それに基づく **ROM** を開発する。その後、多様体論に基づく特徴構造の推定手法を用いて、データベースに含まれていない迎え角に対する流れ場を予測できる **ROM** が構築できることの実証を目指す。加えて、レイノルズ数をパラメータとして、レイノルズ数依存性を表現するためのデータベースを構築し、レイノルズ数依存性を記述できる **ROM** の開発にも取り組む。

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

### 5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

著書

### 国際学会

Shintaro Sato, Oliver T. Schmidt: Parameterized reduced-order modeling based on matrix manifolds, APS Division of Fluid Dynamics, (2024).

Shintaro Sato: Estimation of subspace spanned by proper-orthogonal-decomposition modes for parametrized reduced-order model in aerodynamics, AIAA AVIATION Forum, (2024).

### 国内学会・研究会等

佐藤 慎太郎, 「部分空間の推定に基づくロバストな低次元モデリングに関する研究」, 日本流体力学会 年会 (2024).

佐藤 慎太郎, 「Grassmann 多様体に基づいた流れ場の低次元モデリングに関する研究」, 第5回 TREFOIL 研究会 (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	FS04APR24
研究種別	特定研究
利用期間	2024.4～2026.3
報告回数	第 1 回報告

2025 年 2 月 27 日提出

## 相分離構造を有する複合材料の力学特性に関するマルチスケール数値解析

岡部 朋永, 山本 剛, 川越 吉晃  
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。母材である熱硬化性樹脂は単体では靱性が劣ることから、構造材料向け CFRP では熱硬化性樹脂に少量の熱可塑性樹脂を添加し、靱性を向上させている。これにより母材樹脂では反応誘起相分離が生じ、その相分離形態によって特性が大きく異なることが知られている。このような微視的な構造特性とマクロ物性の相関の理解・予測のためには、熱硬化性樹脂の化学反応スケール、熱硬化/熱可塑高分子鎖が作る相分離スケール、樹脂および複合材のマクロ物性スケールと、幅広い時空間スケールにおける固有な現象を正確に捉える必要があり、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 1 つは CFRP がもつマルチスケール性に対して、反応誘起相分離樹脂というメゾスコピックな構造を持つ階層が加わることで、その複雑性がさらに増すためである。そこで、本研究では量子化学計算（QM）、分子動力学法（MD）、散逸粒子動力学法（DPD）、有限要素法（FEM）を接続することにより、熱硬化性樹脂を構成するモノマー同士の化学反応から、熱硬化/熱可塑高分子が作る相分離構造、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解析手法の開発を行う。本研究はオングストロームからメートルスケールまでの現象を対象としており、各スケールに適した解析手法をスーパーコンピュータを用いて大規模に実施・接続することで、高い解像度で現象解明を可能とし、計算科学およびその活用法の展開にも繋がる研究提案である。

## 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、反応誘起相分離樹脂を母材とした 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 反応誘起（重合誘起）相分離シミュレーション手法の構築

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。加えて、ハイドロゲルのような親水性モノマーと疎水性モノマーの重合によって生じる重合誘起相分離にも本手法を拡張し、TEM 観察や放射光による小角散乱から得られる構造特性を再現することに成功した。

### 2.2 熱硬化性樹脂の反応シミュレーションと放射光の連携

従来の熱硬化性樹脂の硬化反応シミュレーションでは計算された架橋構造の妥当性は力学物性の比較からのみ検証されていた。本研究では計算で得られた架橋構造に対して、部分動径分布関数を計算し、フーリエ変換を行うことで散乱強度分布を算出した。また、同材料の広角散乱スペクトルを NanoTerasu を用いて計測し、その比較を行った。MD から得られた散乱スペクトル分布と NanoTerasu から得られた分布はよく一致しており、モノマー種由来の微細構造特性（側鎖長の違いなど）をよく表現していた。以上から、反応シミュレーションによって計算された架橋構造の妥当性が確認された。

### 2.3 反応誘起相分離樹脂を母材とした CFRP の残留変形予測

前プロジェクトで構築した CFRP 残留変形のマルチスケールモデリングに相分離樹脂を考慮した階層を追加し、反応誘起相分離樹脂を母材とした CFRP の残留変形予測と比較実験を行った。本解析では熱硬化性樹脂と熱可塑性樹脂を個別に解析し、それぞれの熱機械特性を取得した。海島相分離構造を模したナノスケール FEM によって相分離樹脂の熱機械特性を均質化し、より上位の FEM へ接続した。熱可塑性樹脂を添加することで、特に線膨張係数と硬化収縮量が低下し、結果的に残留変形量が低下することが予測された。比較・検証として Non-crimp fabric (NCF) /反応誘起相分離樹脂複合材料の成形実験を行い、マルチスケールモデリングの妥当性が確認された。

## 3. 研究目標の達成状況

当初の計画通りの進捗である。

## 4. まとめと今後の課題

変形までは概ね完了しており、相分離樹脂および複合材の破壊特性解析まで次年度は進める予定である。また、粘弾性特性にも議論を拡張する。

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）

Yoshiaki Kawagoe, Yuuki Kinugawa, Keigo Matsumoto, Masashi Ohno, Naoki Kishimoto, Takahiko Kawai, and Tomonaga Okabe, “Effects of the chain length of nonaromatic epoxy resins on thermomechanical and optical properties: experiments, and ab initio and molecular dynamics simulations”, *Physical Chemistry Chemical Physics* **26**, 24250-24260（ジャーナルカバーにも採択）

Tadashi Watanabe, Yoshiaki Kawagoe, Yamato Hoshikawa, Yosuke Nakai, Kazuki Ryuzono, and Tomonaga Okabe, “Multiscale model for bottom-up prediction of failure parameters of unidirectional carbon-fiber-reinforced composite lamina from the atomic to filament-scales, and its application to failure modeling of open-hole quasi-isotropic composite laminates”, *International Journal of Solids and Structures*, **308**, 113130

Yoshiaki Kawagoe, Gota Kikugawa, Shohei Komori, Keiichi Shirasu, and Tomonaga Okabe, “Thermal oxidative degradation of cyanate-and amine-cured epoxy resins: Experiment and ReaxFF simulation”, *Thermochimica Acta*, **747**, 179949

Yuuki Kinugawa, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, Kazuki Ryuzono, and Tomonaga Okabe, “Experiments and multiscale modeling of residual deformation in CFRP laminates using non-crimp fabric/reaction-induced phase separation resin”, *Journal of Composite Materials* (Under review)

著書

該当なし

国際学会

Redha A. Ramadhan, Chen Yu, Akira Kunitomo, Nozomu Shigemitsu, Tatsunori Shindo, Go Yamamoto, Structure-Mechanical Property Relationship in Carbon Nanotube Yarns, 8th International Conference on Materials Engineering and Nano Sciences (ICMENS 2024), 23 March 2024, Osaka, Japan.

国内学会・研究会等

衣川裕貴, 川越吉晃, 生稲晃汰, 干川大和, 龍菌一樹, 白須圭一, 岡部朋永, 「Non-crimp fabric 複合材料の残留変形マルチスケールモデリング:母材樹脂種の影響評価」, 第49回複合材料シンポジウム 2024年9月21日

川越 吉晃, 衣川 裕貴, 岡部 朋永, 「熱硬化/熱可塑反応誘起相分離樹脂のマルチスケールモ

デリング」, 第 73 回高分子討論会 2024 年 9 月 27 日

## 5.2 その他 (特許、受賞、マスコミ発表、等)

プレスリリース「次世代エポキシ樹脂の分子構造と力学・光学特性の相関を計算計測融合で  
解明 — 新規樹脂の設計手法となることに期待 —」, 2024 年 8 月 30 日,  
<https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2024/08/press20240830-01-epoxy.html>

## プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01DEC24
研究種別	特定研究
利用期間	2024.12～2025.03
報告回数	第 1 回報告

2025 年 02 月 27 日提出

## Energy efficiency gain of oil-lubricated hydrostatic bearings

大西 直文, フェドリネンコ ドゥミトロ  
東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 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

Green tribology is a new research field that aims to achieve carbon neutrality by creating environmentally friendly lubrication and energy-efficient operational conditions. One constantly evolving direction in green tribology is improving bearing performance by reducing friction and wear. Recently, bearing surface texturing has emerged to improve the performance of fluid bearings, resulting in the development of numerous texture patterns and micro geometries. It is reported that surface micro-texture influences fluid-bearing operational conditions such as carrying capacity, friction losses, and dynamic stability. However, there is currently no generalized explanation of how surface texturing affects bearing hydrodynamics and its performance. This leads to contradictory results when creating new textured fluid bearings and hence limits their industrial application. Understanding the hydrodynamic mechanism of a fluid bearing with surface texture is vital to designing energy-efficient rotating units adapted to industrial utilization.

#### 1.2 研究期間内の最終目標

The research for this project started in December 2024. Since the research period was relatively short, less than three months, the final goal for this period was defined as the creation of 3D geometry and analysis of the hydrodynamic patterns of a base hydrostatic journal bearing.

### 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)

The significance of this study lies in aiming to be the first to define the hydrodynamic mechanism of a textured oil-lubricated journal bearing considering fluid compressibility and viscosity effects. The established fluid flow patterns are expected to be the basis for

multicriteria optimization of the bearing surface microstructure to achieve high stiffness and energy efficiency indicators. However, the development of a novel approach to analyzing textured hydrostatic and hybrid bearings is planned at the later stages of this research.

## 2.2 新しい現象の解明(例)

This study is expected to provide insights into the hydrodynamics of a fluid bearing with surface texture, which is vital to designing energy-efficient rotating units. Understanding a textured bearing hydrodynamic is a fundamental step in creating the optimum pattern of the microstructure for journal oil-lubricated hydrostatic bearings. This is planned to be revealed in the following stages of the project.

## 3. 研究目標の達成状況

As planned, we created a 3D geometry of a front journal bearing with smooth bearing surfaces as a sample to compare the effect of texturing. Then, using CAD software, we defined the journal bearing fluid domain. A simplified domain was also created to facilitate simulation by CFD. Ansys Fluent software was used for volume meshing and refining local mesh to analyze flow patterns in narrow bearing gaps. This is the basis for accurately defining the characteristics of a fluid bearing by the finite volume method.

## 4. まとめと今後の課題

In March 2024, we plan to investigate the influence of different texture patterns on bearing operational conditions, such as carrying capacity, friction losses, and dynamic stability. Then, starting in April 2025, we will perform CFD simulations to investigate the effect of surface texturing on hydrodynamic stiffness and friction losses. The next challenging research issue that needs to be solved is the search for an optimum microstructure for bearing texture. This task will be carried out using modeFRONTIER software.

## 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)

The results of the research are expected to be reported at the International Conference of the American Society for Precision Engineering in November 2025 and JFPS International Symposium on Fluid Power in the fall of 2025. 2 papers are expected to be submitted to the Precision Engineering and Tribology International journals by the end of 2025 as well.

## 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 II」の利用状況を示す。本システムは2024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 (HPE Superdome FLEX 280)

CPU コア数 : 2304 コア  
演算性能 : 221.1 TFLOPS  
メモリ : 72 TB

### 分散メモリ型並列計算システム(Thin) (HPE CRAY XD2000 XD220v)

CPU コア数 : 39424 コア  
演算性能 : 2523.1 TFLOPS  
メモリ : 88 TB

### 分散メモリ型並列計算システム(Fat) (HPE CRAY XD2000 XD220v)

CPU コア数 : 10640 コア  
演算性能 : 681 TFLOPS  
メモリ : 47.5 TB

### 流体データ解析サーバーA (HPE Superdome FLEX 280)

CPU コア数 : 384 コア  
GPU 数 : 16 基  
演算性能 : 36.8 TFLOPS  
メモリ : 3 TB

### 流体データ解析サーバーB (HPE CRAY XD670)

CPU コア数 : 336 コア  
GPU : 24 基  
演算性能 : 837.3 TFLOPS  
メモリ : 6 TB

### 次世代融合インターフェースサーバー (HPE CRAY XD2000 XD220v)

CPU コア数 : 1456 コア  
演算性能 : 93.1 TFLOPS  
メモリ : 6.5 TB

### 外部記憶装置

一次領域 : 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: 2024年8月 ~ 2025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		流体データ解析サーバB	
	2024/8 - 2025/3		2024/8 - 2025/3		2024/8 - 2025/3	
	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[%]
電磁機流動研究分野	7.1	0.0%	947.8	6.3%	0.0	0.0%
融合計算工学研究分野	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	726.3	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
航空宇宙流体工学研究分野	175528.6	8.4%	72.6	0.5%	8.8	0.4%
宇宙熱流体システム研究分野	99977.0	4.8%	248.0	1.6%	0.0	0.0%
自然構造デザイン研究分野	5777.2	0.3%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
伝熱制御研究分野	127140.7	6.1%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
先進流体機械システム研究分野	28667.8	1.4%	1.3	0.0%	0.0	0.0%
計算流体物理研究分野	820314.8	39.1%	9100.4	60.0%	0.0	0.0%
非平衡分子気体流研究分野	54333.7	2.6%	538.1	3.5%	0.0	0.0%
分子熱流動研究分野	74797.8	3.6%	138.6	0.9%	0.0	0.0%
量子ナノ流動システム研究分野	267473.6	12.7%	242.2	1.6%	52.2	2.4%
生体ナノ反応流研究分野	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
分子複合系流動研究分野	198756.4	9.5%	143.3	0.9%	697.2	31.7%
生体分子流動システム研究分野	129288.4	6.2%	0.0	0.0%	1324.1	60.2%
高速反応流研究分野	16086.7	0.8%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
地殻環境エネルギー研究分野	349.9	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
エネルギー動態研究分野	83122.4	4.0%	3119.8	20.6%	96.1	4.4%
混相流動エネルギー研究分野	0.0	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	5032.5	0.2%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
反応性流動システム研究分野	5228.7	0.2%	497.8	3.3%	0.0	0.0%
流動・材料システム評価研究分野	945.5	0.0%	9.3	0.1%	0.0	0.0%
その他	2551.1	0.1%	110.4	0.7%	19.6	0.9%
合計	2096106.3	100.0%	15169.6	100.0%	2198.0	100.0%

2024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  
第二十八巻  
2025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