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

第二十九巻
（2025年4月～2026年3月）

2026年11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

第二十九巻

（2025年4月～2026年3月）

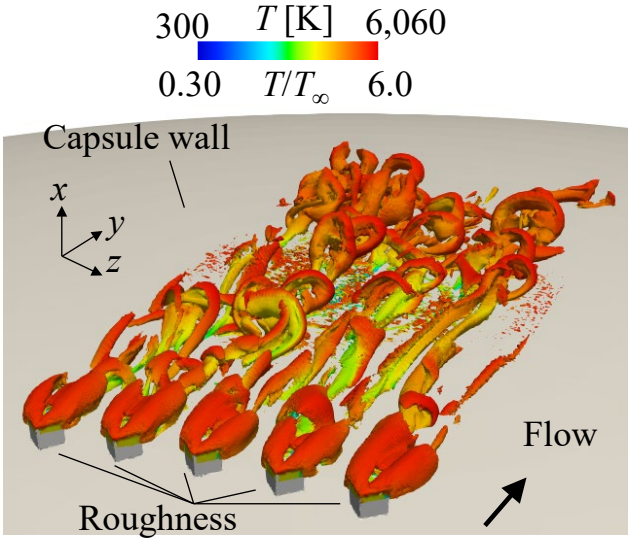
2026年11月

東北大学流体科学研究所

未来流体情報創造センター

SP01APR25

航空宇宙熱流体工学および数理物理学：非線形動力学と確率過程

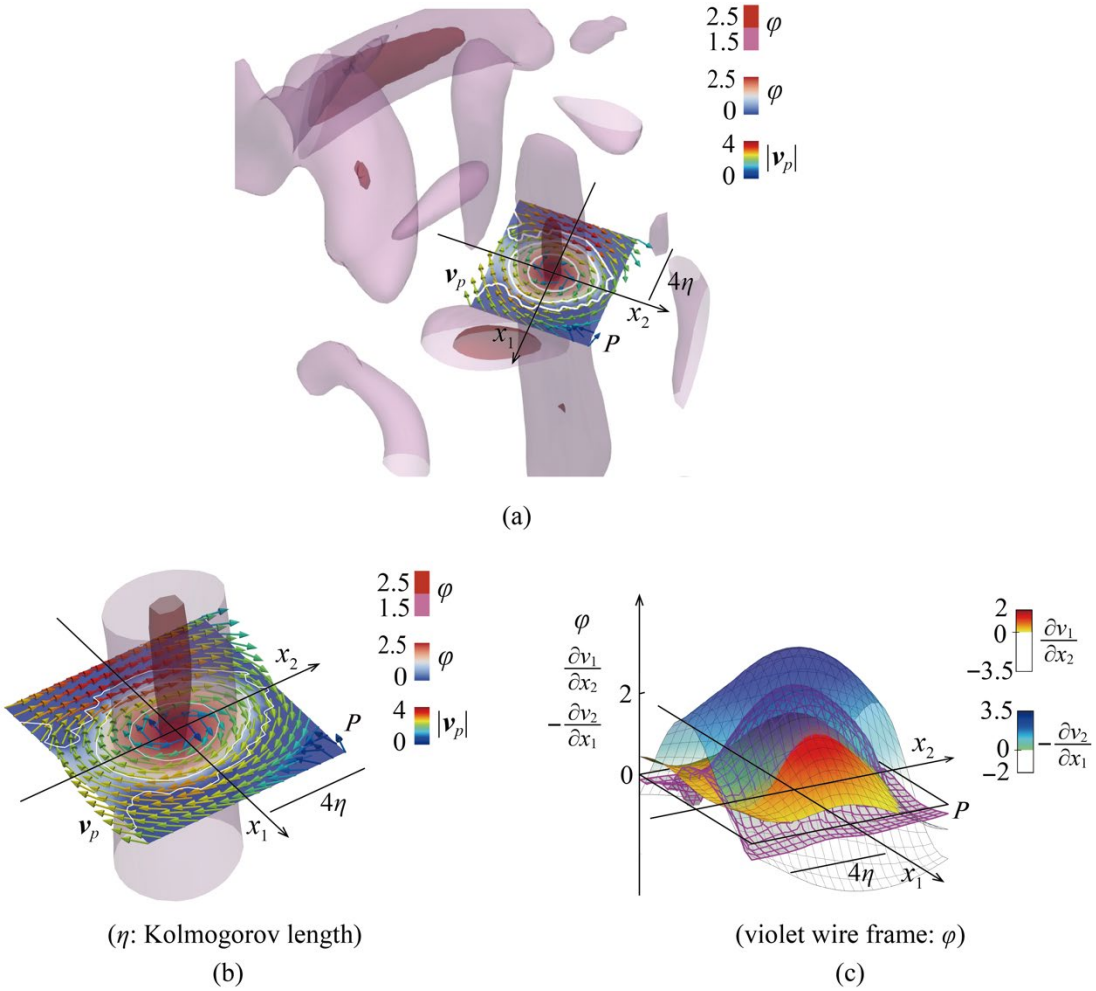


速度勾配テンソル第二不変量（$Q = 1 \times 10^{10}$）の等値面；色は温度を示す

ラフネスを敷設したマッハ 6.3 極超音速 Apollo カプセルの LES を行った. 壁面上のヘアピン渦が，衝撃層の高温流体を壁面近傍に取り込む結果を得た.

CP04APR25

乱流中の渦の 3 次元渦流構造と乱流場との相対特性に関する解析

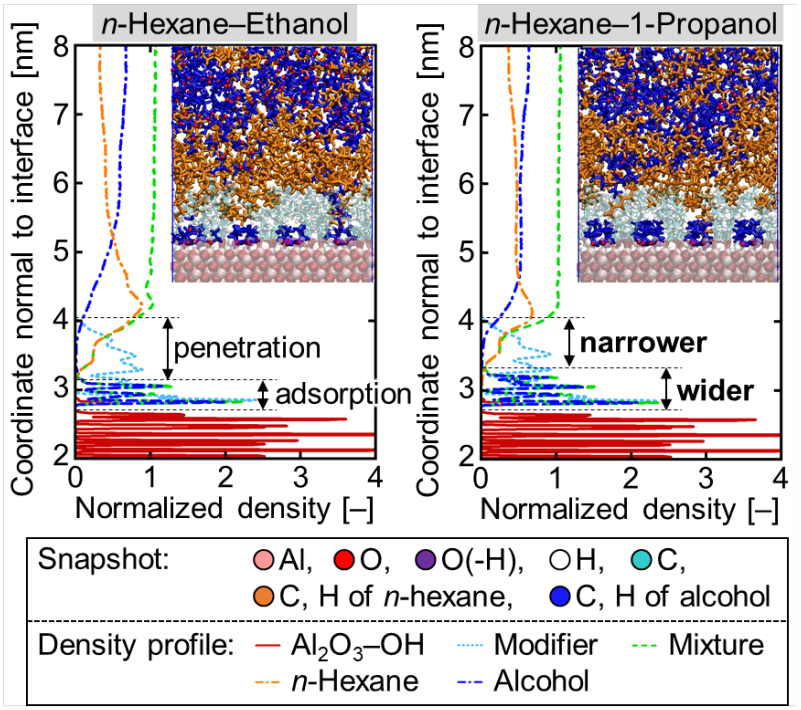


渦領域・渦流と旋回平面上における速度勾配テンソルのせん断成分の分布

(a) swirlity φ のコンターで表された渦領域，(b) 旋回平面 P と渦流 $\boldsymbol{v}_p$，並びに(c) 旋回平面上の速度勾配テンソルの二つのせん断成分と swirlity の分布．

CP05APR25

表面修飾ナノ材料／媒体間のナノ・メゾスケール界面現象に関する研究

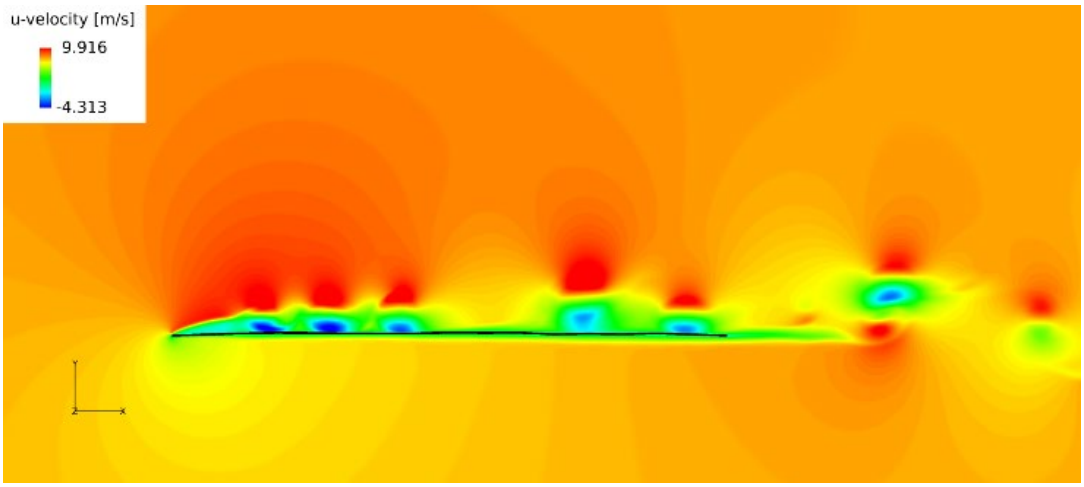


デカン酸修飾 Al2O3/混合溶媒界面近傍における界面垂直方向の質量密度分布および側面図（60 vol%）

異なる混合溶媒系おいて混合溶媒が修飾鎖層に浸入する様子を可視化するとともに溶媒の分布を定量的に評価した.

CP06APR25

火星飛行機実現に向けた柔軟膜翼の非定常空力特性解明

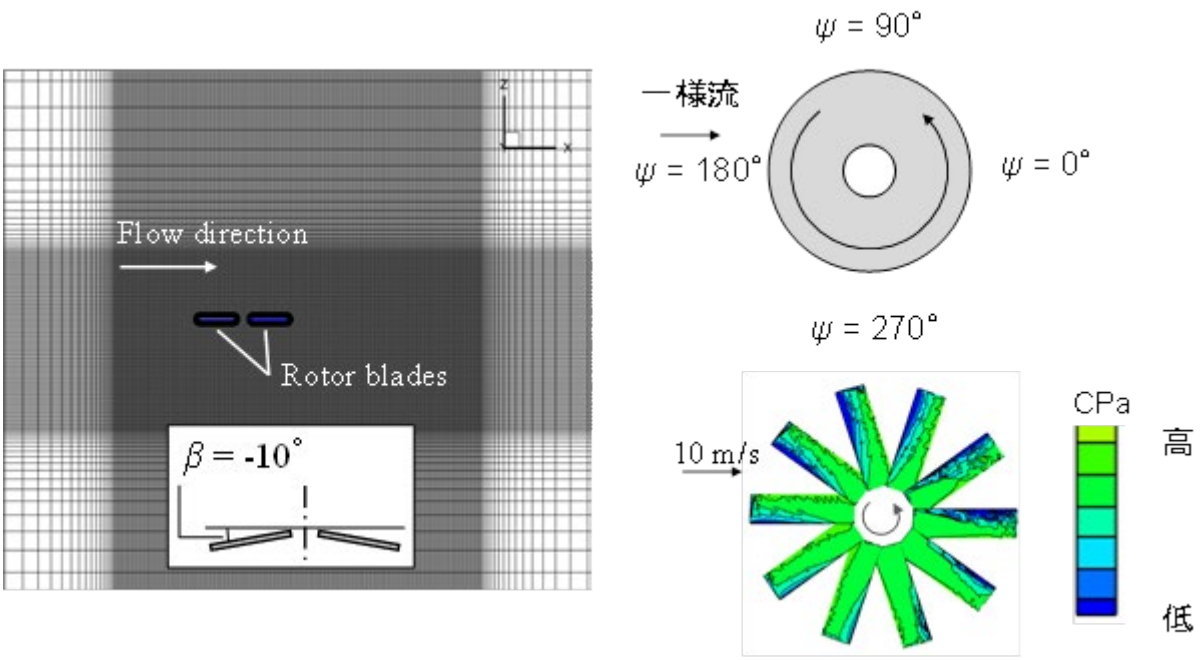


流体構造連成解析による極薄い柔軟膜翼周りの流れ場

非常に薄い柔軟膜翼に対する空力構造連成解析を実施し，膜翼の振動に伴う流れ場の変化を明らかにした.

CP07APR25

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

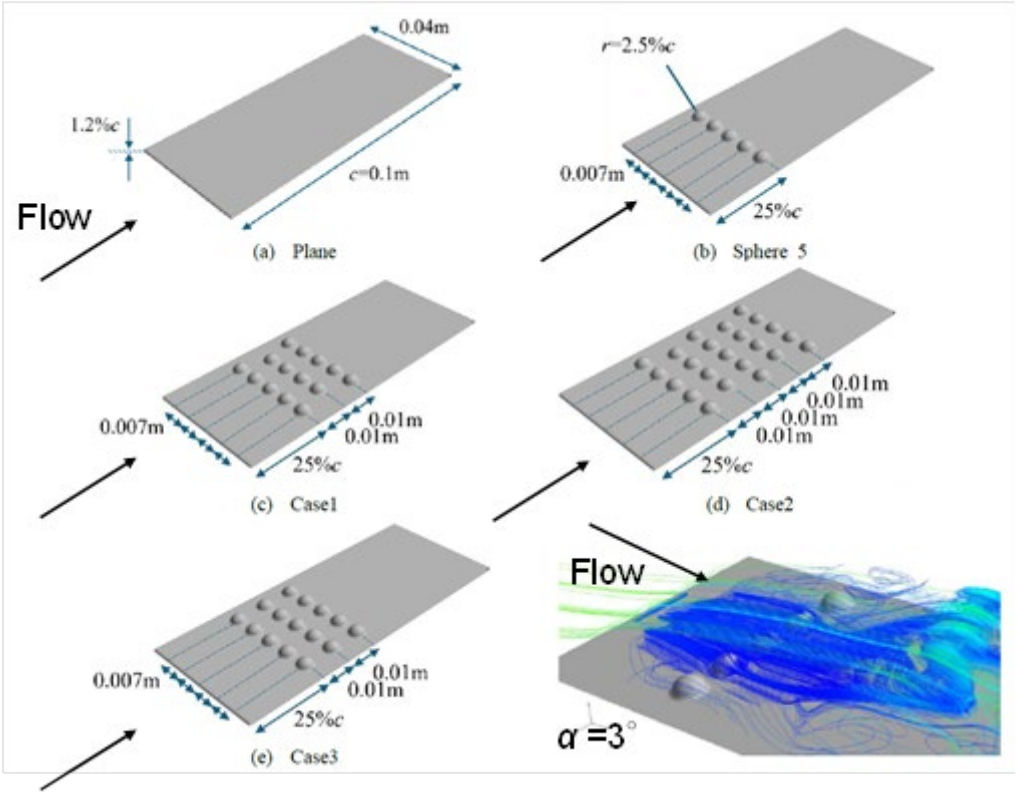


負のプリコニング角を持つロータブレードの表面圧力

負のプリコニング角を与えたロータに加わる空気力を把握するため，数値解析によるロータブレード表面の圧力分布を解析した.

CP08APR25

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

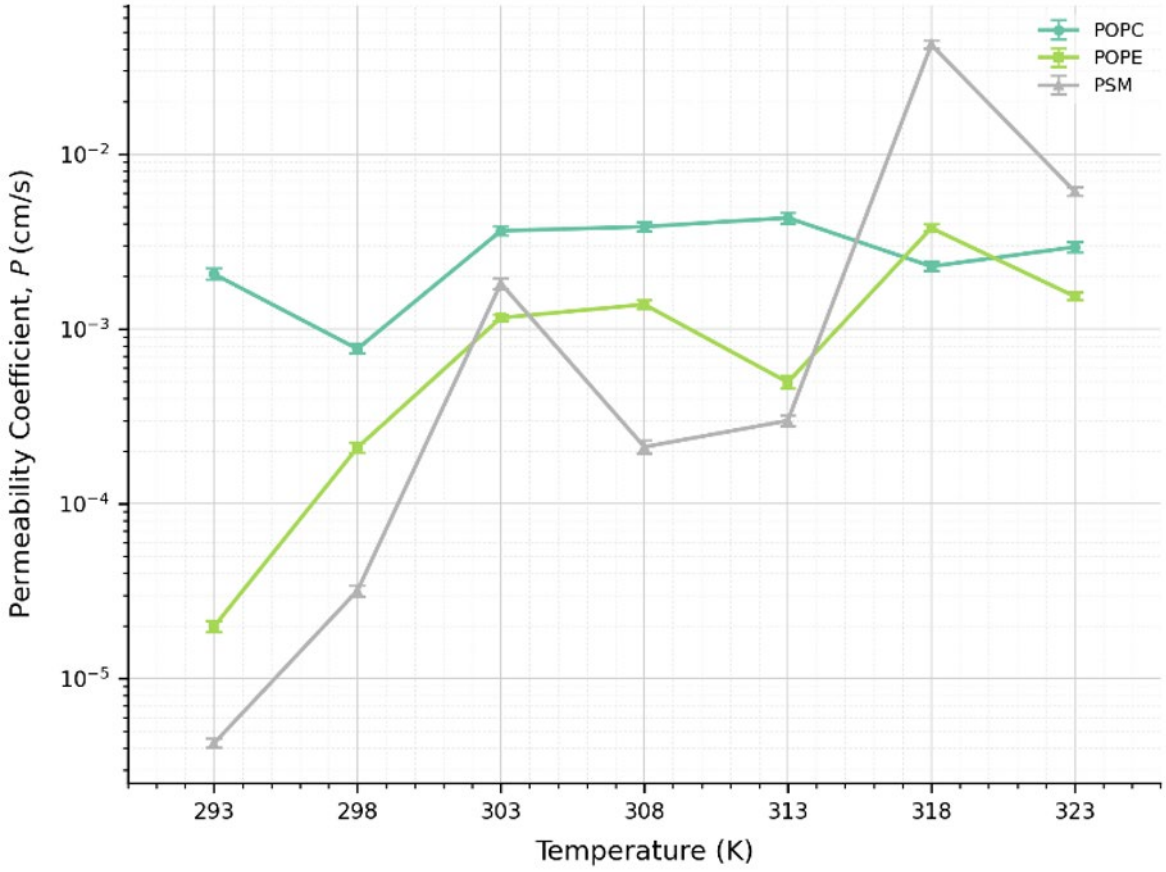


平板上突起配置による剥離構造の比較

平板上での再付着を促すため，突起を取り付けた．突起の列数や前後列でスパン方向位置を変えることで，翼の揚力係数と抗力係数を比較した．

CP01MAY25

プラズマ―生体界面における電荷, 電界および活性種挙動の大規模数値解析

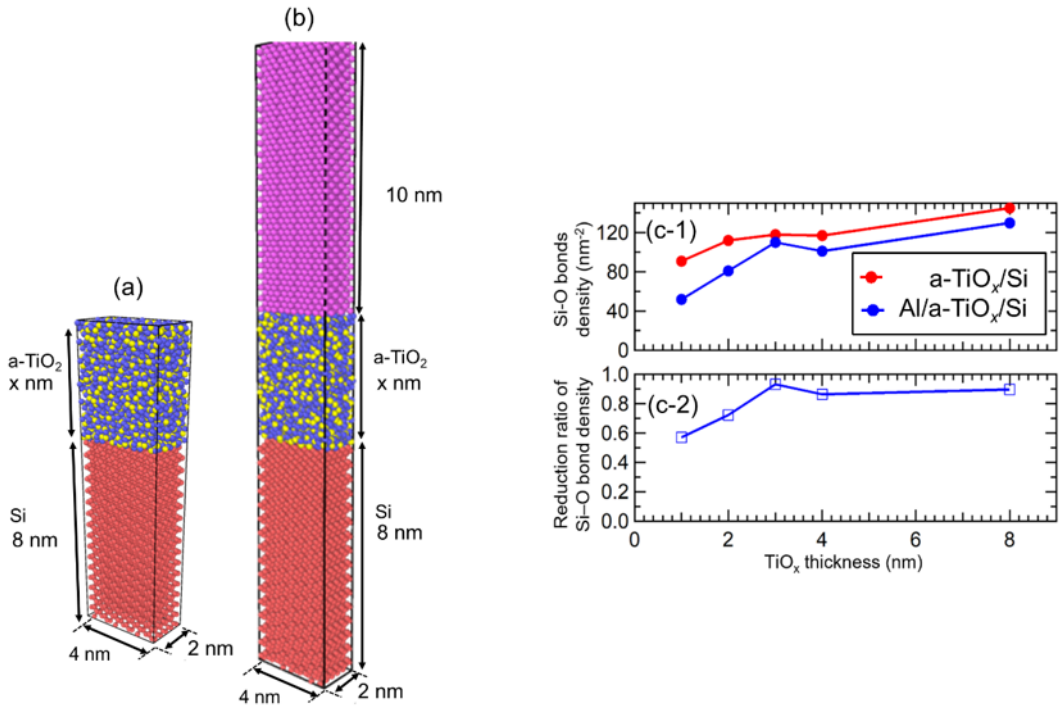


膜透過係数の膜種および温度依存性

透過対象は過酸化水素である. 相転移温度に依存して, 温度上昇とともに膜透過係数が大きく増加した.

CP04MAY25

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

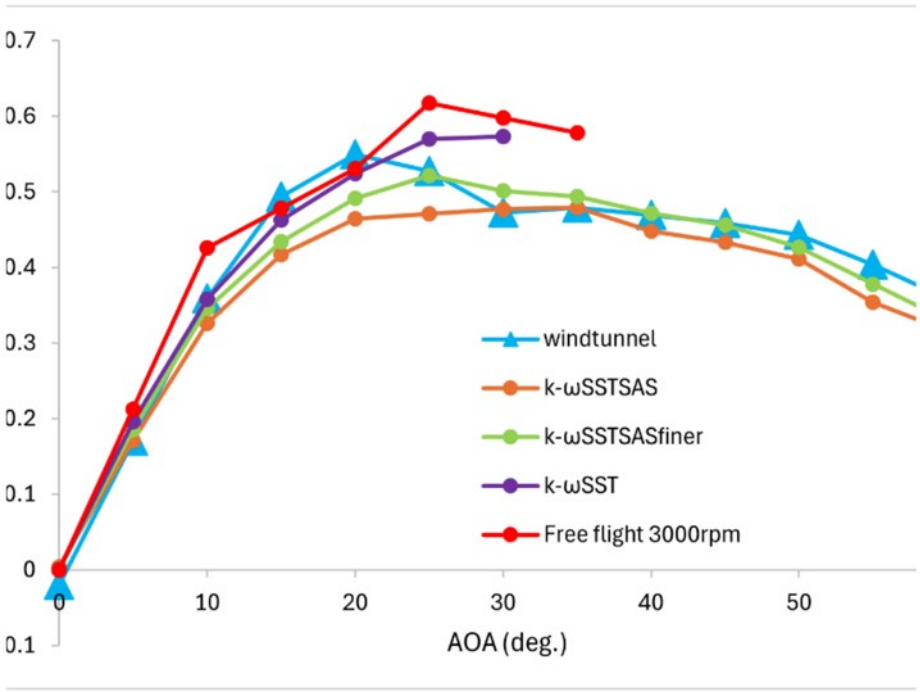


a-TiO_2/Si および Al/a-TiO_2/Si ヘテロ構造における TiO_2膜厚と
界面 Si-O 結合形成の関係

Al の存在により TiO_2/Si 界面における Si-O 結合形成が抑制されることが確認された．一方，TiO_2膜厚の増加に伴って Al による影響は小さくなり，TiO_2膜厚が界面パッシベーションを制御する重要な因子であることが示唆された．

CP01JUN25

飛行しながら回転する中空円筒の実験と数値解析

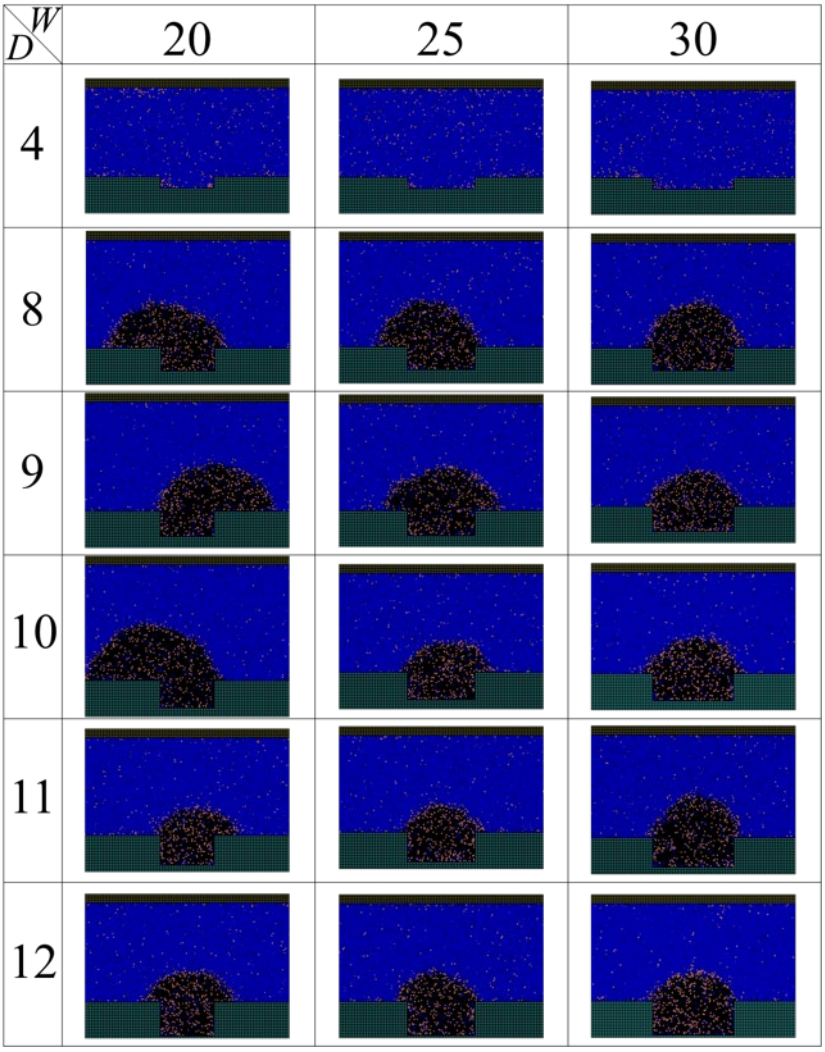


CL vs AOA のグラフ

実験の結果と計算結果を比較したグラフである．k-ω SST SAS の finer 版が実験と近い失速角を示した．

CP03JUN25

固体表面ナノバブルと表面特性の分子動力学的解析

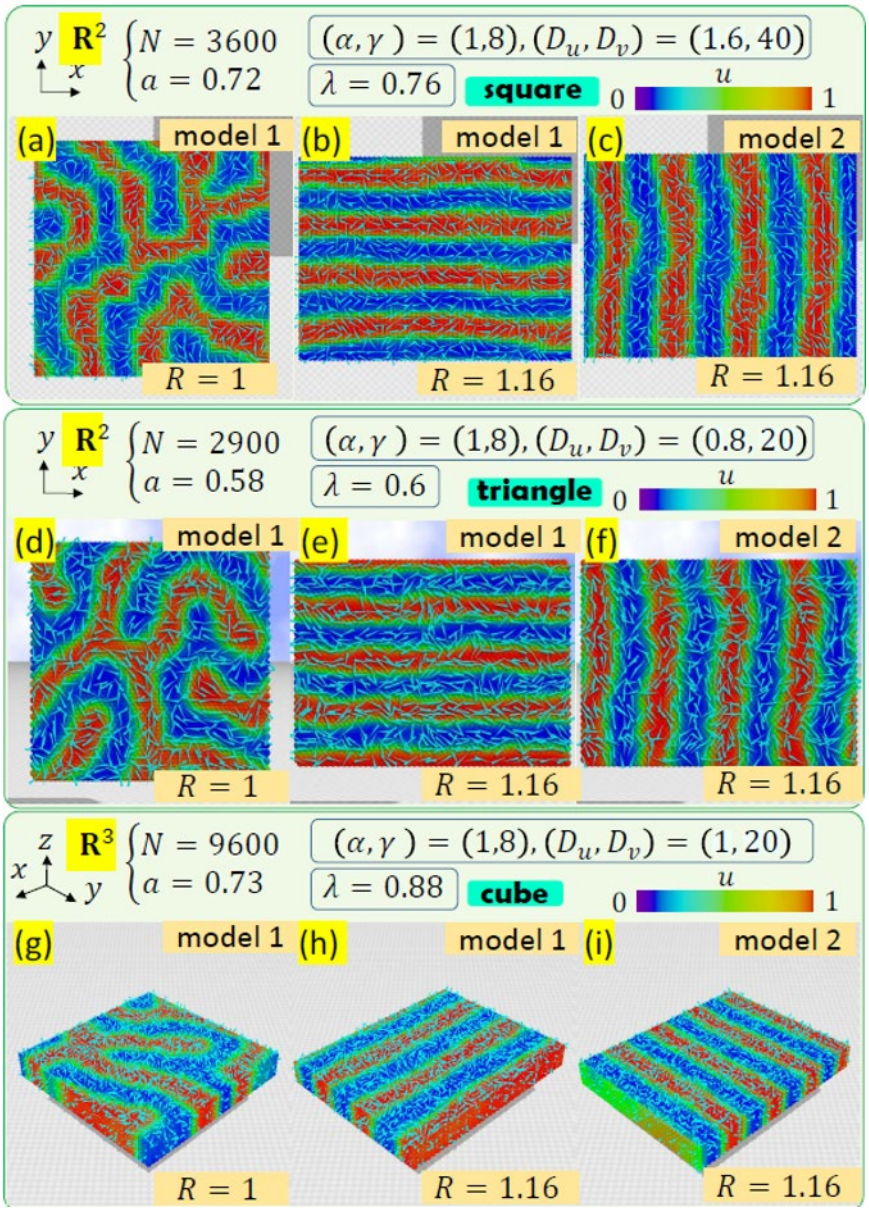


凹み構造の幅および深さが固液界面ナノバブルの形成・形状に及ぼす影響

凹み形状によるナノバブルの形成・形状変化を示す．小さな凹みでは形成されず，断面積の増加に伴い凹み内部に収まる傾向を示した．

CP04JUN25

熱的に揺動する内部応力によって現われる弾性膜上のチューリングパターン

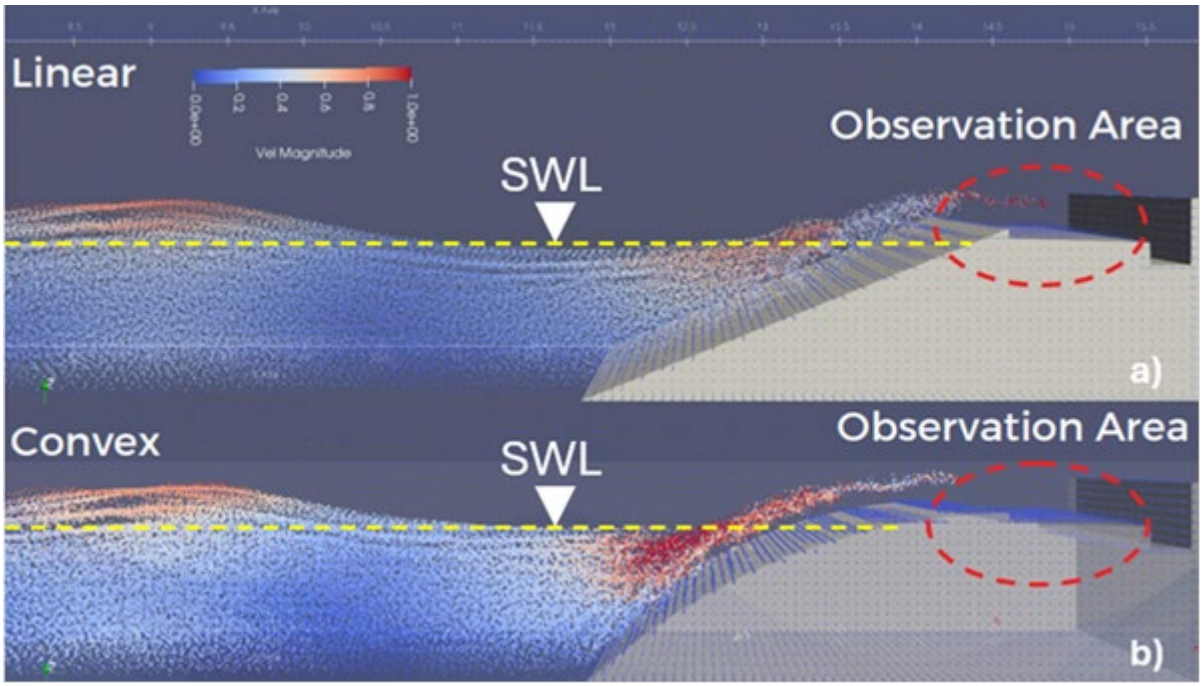


硬い物体上に現われる Turing Pattern (TP)の膜引き延ばしに対する応答

2 次元と 3 次元の硬い弾性膜を x 方向または y 方向に引き伸ばしたときの TP の異方性は内部応力という弾性内部構造の異方性を反映している.

CP01JUL25

Utilization of Coastal Wave Energy as Renewable Energy and Enhancement of Coastal Protection through Turbine Optimization in the Overtopping Breakwater for Energy Conversion (OBREC)

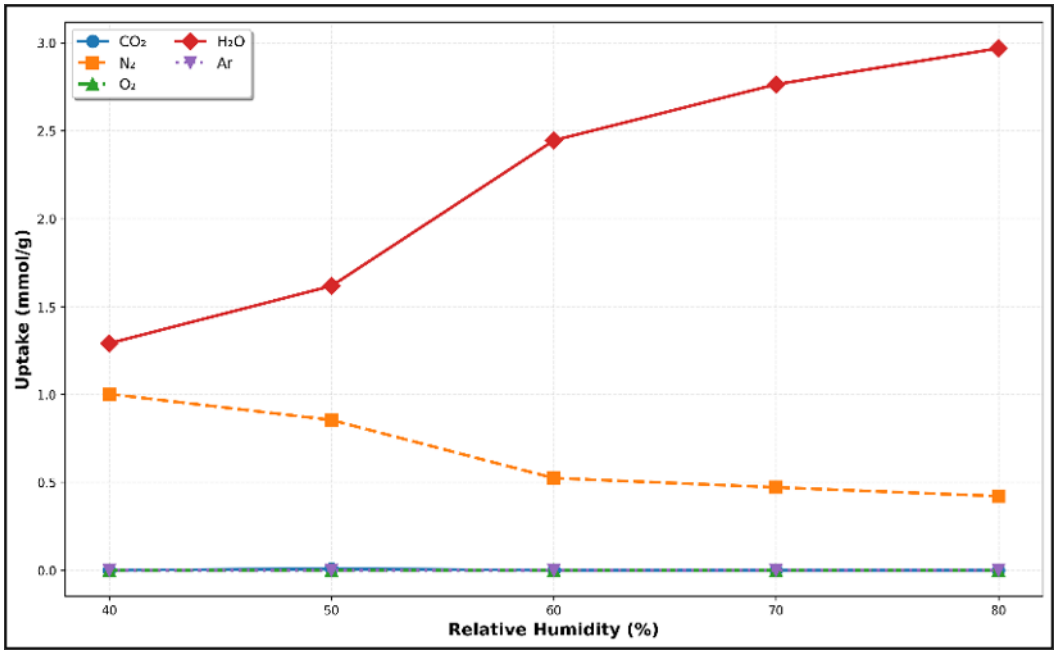


Linear 型および Convex 型 OBREC ランプにおける速度場分布の比較

SPH 法を用いて OBREC システムの越波流動を解析した. Linear 型では越波流量および貯水槽流入量が大きく，Convex 型では流れの散逸により越波が抑制されることが確認された．これらの結果はタービン設計のための重要な流動条件を提供する.

CP01AUG25

直接空気回収技術（DAC）の応用における CO_2 吸着の静的・動的パラメータ決定のための分子動力学シミュレーション

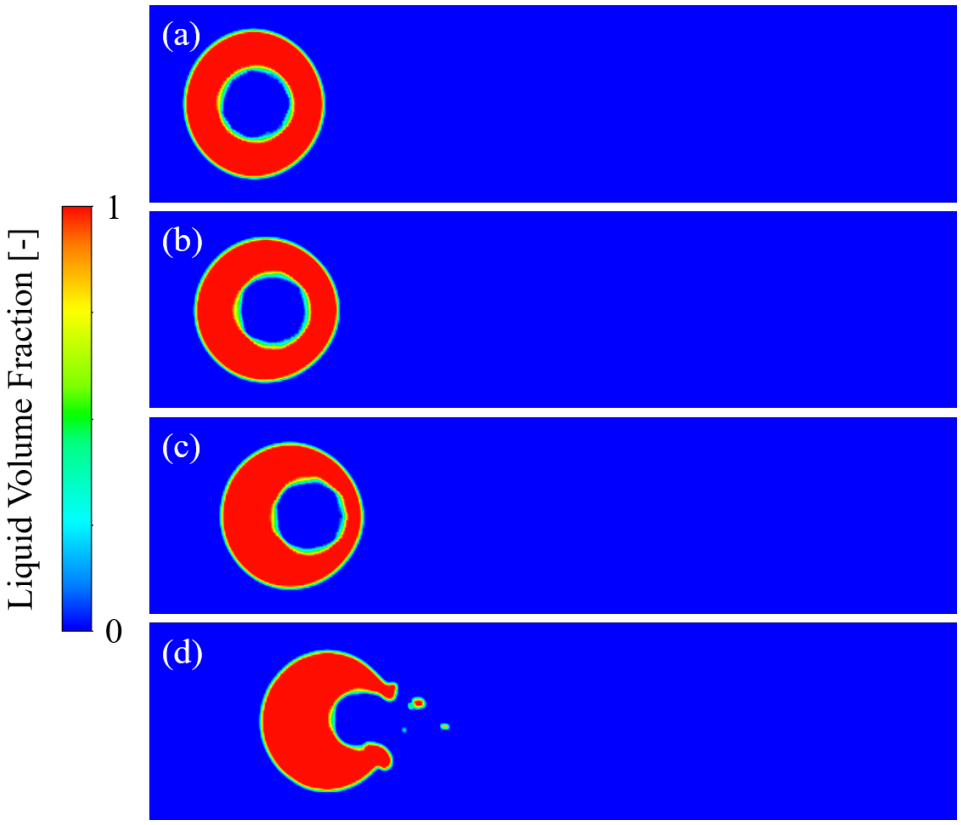


現実的な直接空気回収（DAC）条件下における SIFSIX-3-Cu MOF への大気ガスの競争吸着

現実的な大気組成における 298 K，100 kPa での SIFSIX-3-Cu 上の GCMC シミュレーションによる平衡吸着量の相対湿度依存性．水の吸着量が支配的であり，CO_2の吸着量は全相対湿度範囲でほぼゼロであった．

CP01SEP25

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

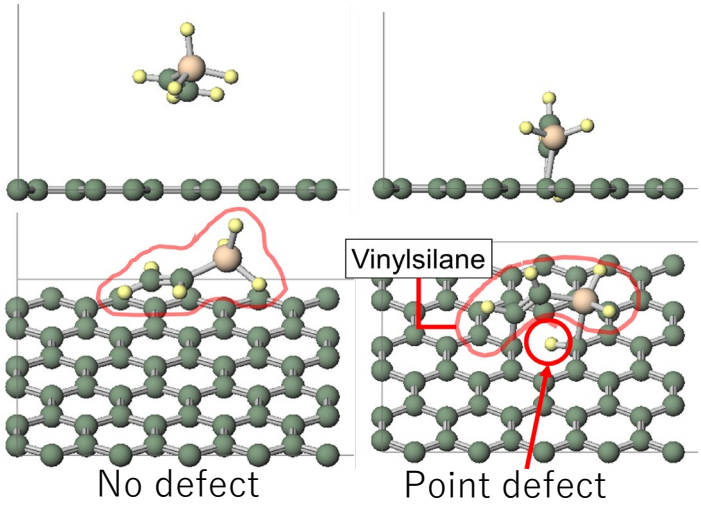


気孔密度をアルゴン密度とした場合の気孔の排出過程

図(a)から(d)へと時間が経過するにつれ，液滴(赤)に比べて内部気孔(青)はより早く前進し，最終的に気孔は排出される．

CP02SEP25

異種材料 3 次元構造への炭化ケイ素結晶成長と反応性力場分子動力学法を用いたシミュレーション

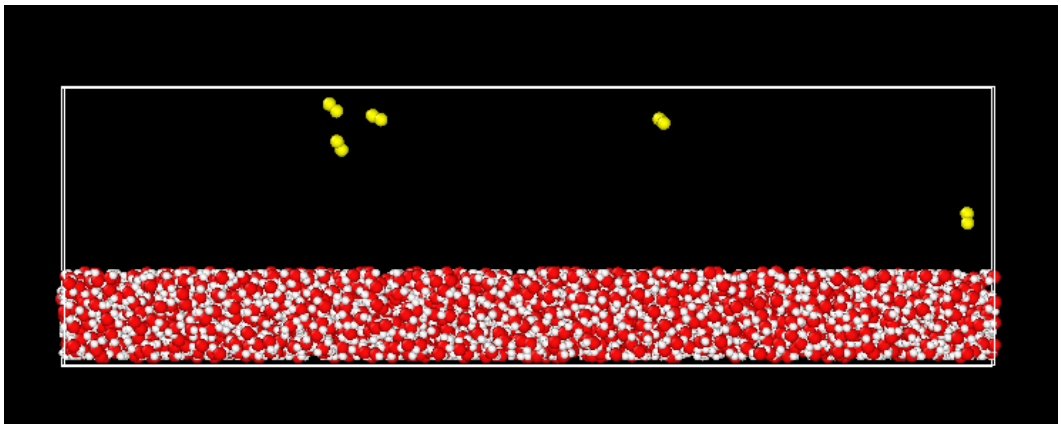


ビニルシランのグラフェン表面への吸着構造に関する第一原理計算

ビニルシラン分子の構造最適化結果を示す．単空孔欠陥近傍で安定な吸着構造が形成され，欠陥が初期吸着サイトとなる可能性が示された．

CP01NOV25

微細水滴と窒素プラズマの界面反応を用いた高効率アンモニア製造

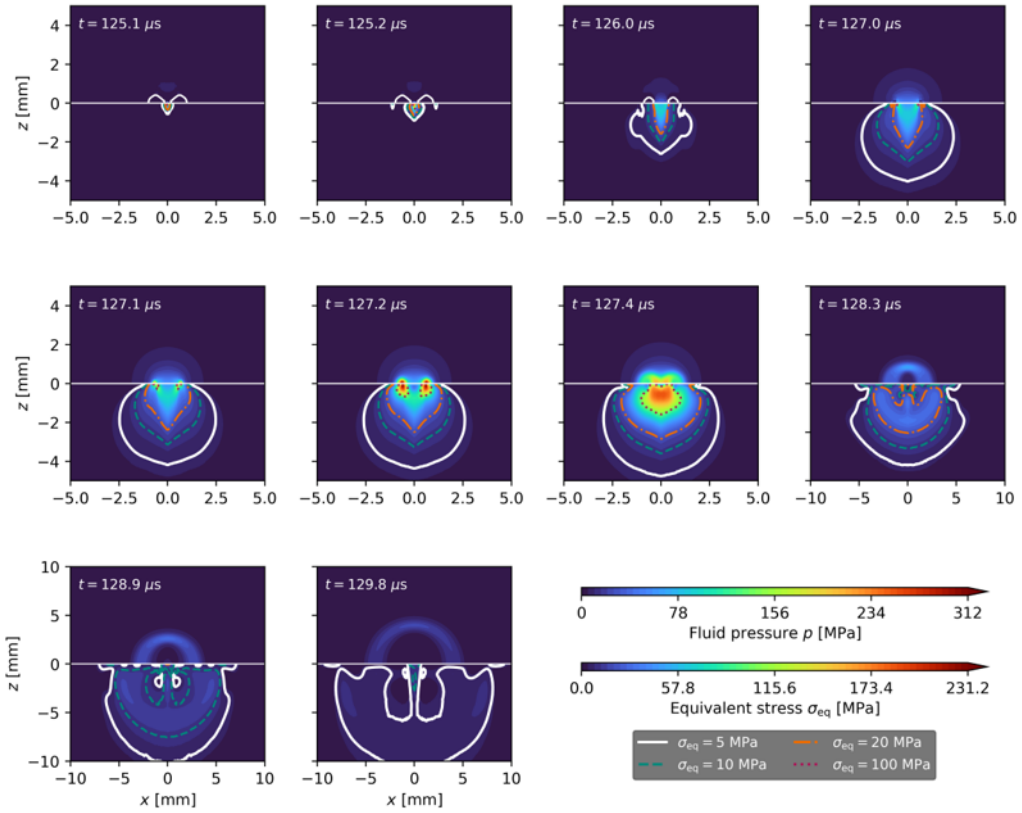


ReaxFF を用いて構築した気体窒素－水界面モデル

窒素分子（黄）と水分子（酸素原子：赤，水素原子：白）による気液界面モデルを構築した．プラズマ生成活性種と水界面の反応解析に向けた基盤モデルとして利用する．

CL01APR25

レーザ誘起気泡圧潰衝撃力による材料変形における流体の物性値の影響に関する流体／材料連成数値解析

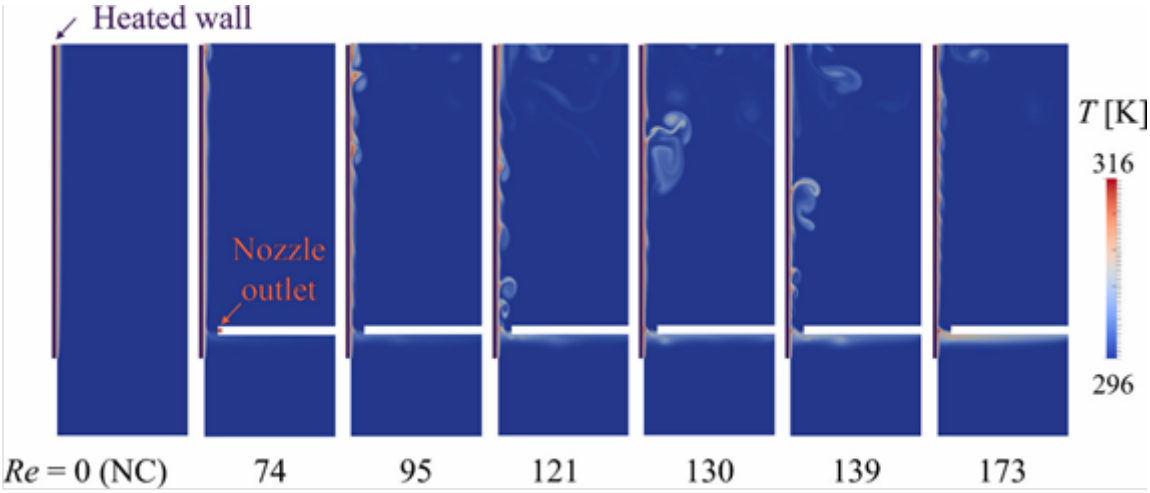


マイクロジェットおよび衝撃波による圧力・相当応力分布の時間発展

初期気泡半径 $R_0 = 2.8$ mm，圧力差 $\Delta p = 0.5$ MPa および $\gamma = 0.3$ における流体圧力と材料内部の相当応力分布を示す．マイクロジェット衝突後，気泡のリバウンドに伴う衝撃波によって応力影響領域が材料内部へ伝播・拡大する．

CL02APR25

自然対流の境界層制御技術の創成

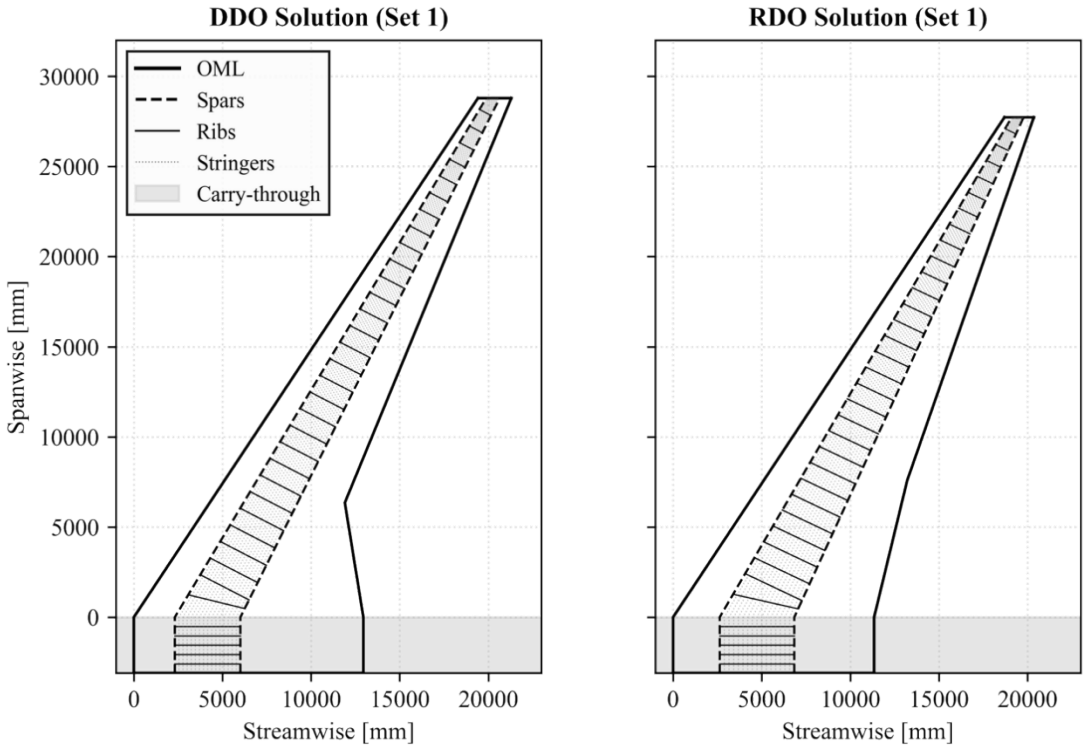


微弱な定常衝突噴流による垂直自然対流の振動状態の変化

噴流レイノルズ数の増加に伴い，定常な境界層から周期的振動，複雑な渦を伴う状態へと温度場が変化する．振動は 95 付近で強く発達し，衝突部から下流へ移流・発達して伝熱促進に寄与する．

CL02MAY25

複合材主翼設計における多様な不確実性を考慮した最適化

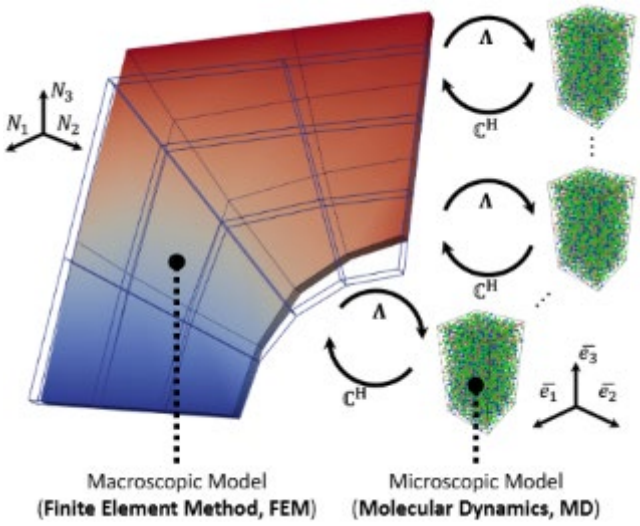


炭素繊維初期不整角の不確かさを考慮した複合材主翼のロバスト設計最適化

炭素繊維初期不整角に対して構造重量があまり変動しないように主翼形状を最適化した.

CL01OCT25

分子動力学と有限要素法の両連成相互応答解析による高分子界面破壊の解明

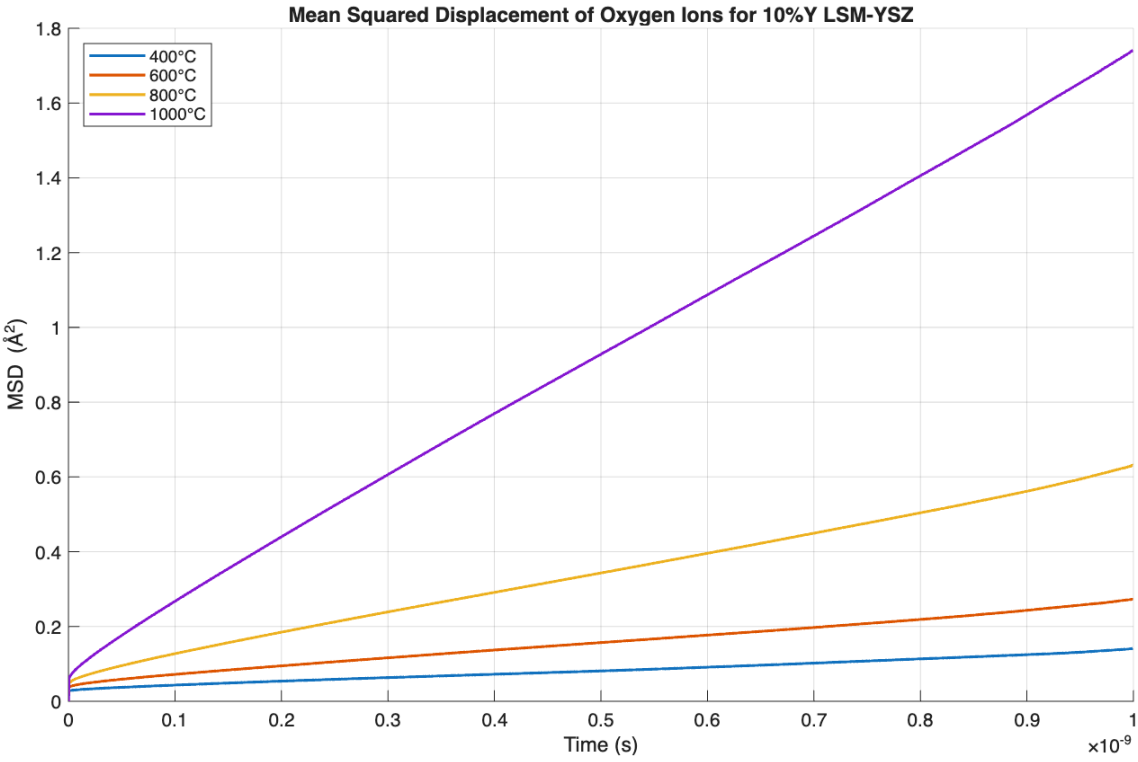


クラスタリングに基づく原子 - 連続体解析

積分点へ局所的な変形・力学状態を表す MD 計算を割り当てることで，原子 - 連続体均質化解析を実施

CL02OCT25

固体酸化物形燃料電池における一酸化窒素分解プロセスの解明

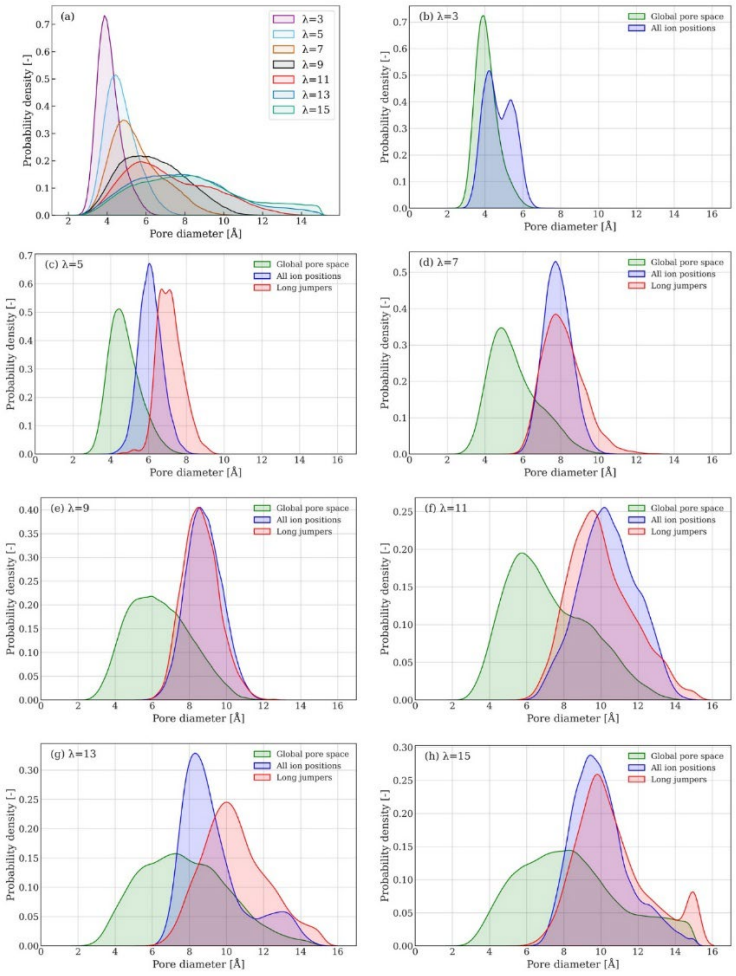


イットリア 10% LSM-YSZ における酸素イオンの平均二乗変位

MSD は, YSZ に 10%のイットリアを含む SOFC 陰極材料 LSM-YSZ について計算した. この図は，高温における MSD の変化率の増加傾向と，それにより材料の酸素拡散係数およびイオン導電率が高くなることを示している.

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



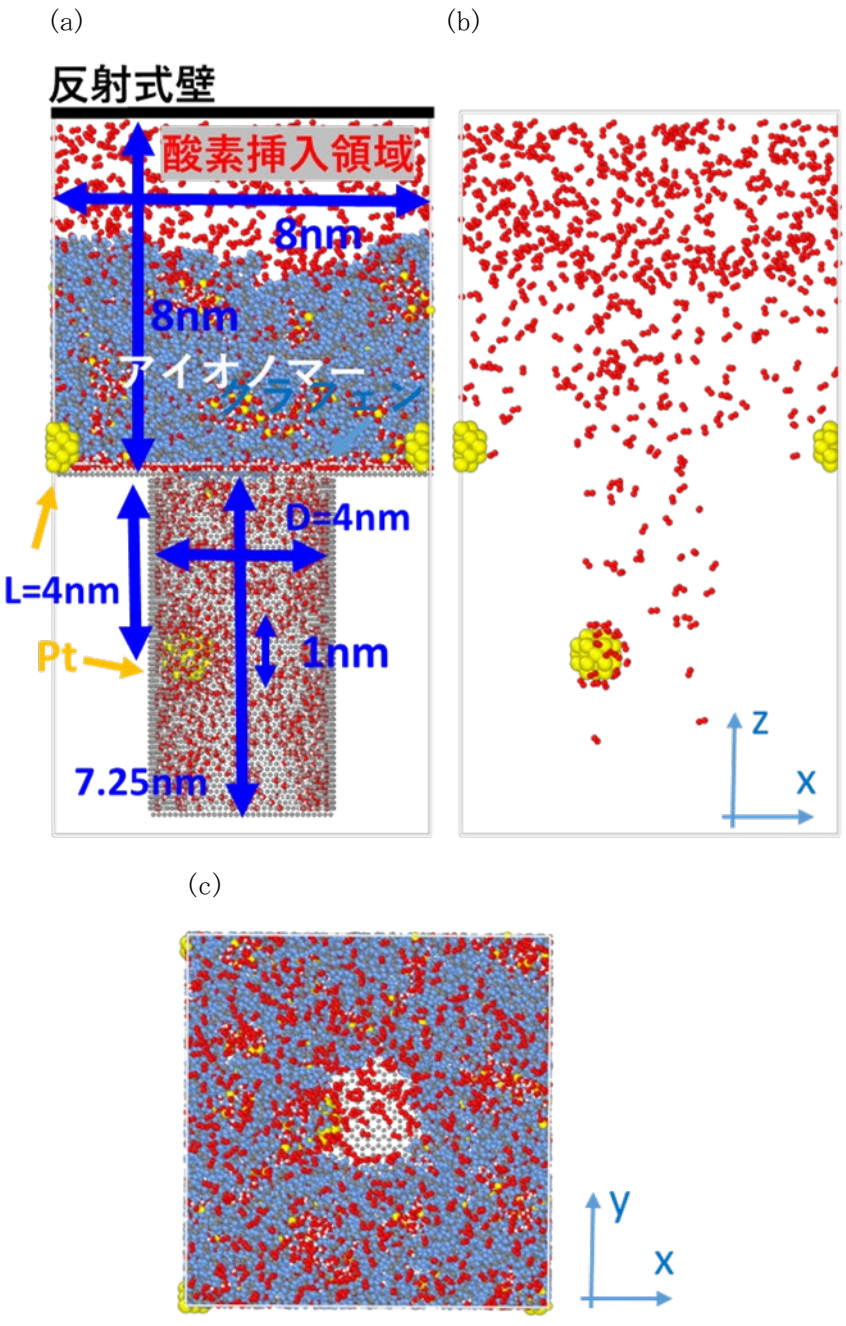
(a) すべてのλ条件（λ ＝3～15）における全体的な細孔径分布.

(b-h) 各λ（λ ＝3, 5, 7, 9, 11, 13, および 15）における細孔径分布の比較.これらの分布は,全体的な細孔空間,すべての Ce イオン周辺でサンプリングされた細孔空間,およびホッピング拡散に関連する長距離跳躍を行う Ce イオン周辺でサンプリングされた細孔空間に対応する.

含水率の変化による高分子膜内部のイオン輸送経路径の分布を解析した.さらに,セリウムイオンが輸送される条件を調べるため,すべてのセリウムイオンが通った径と拡散したセリウムイオンが通った径を比較することによって,膜内でセリウムイオンが拡散できる有効径を解析した.

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

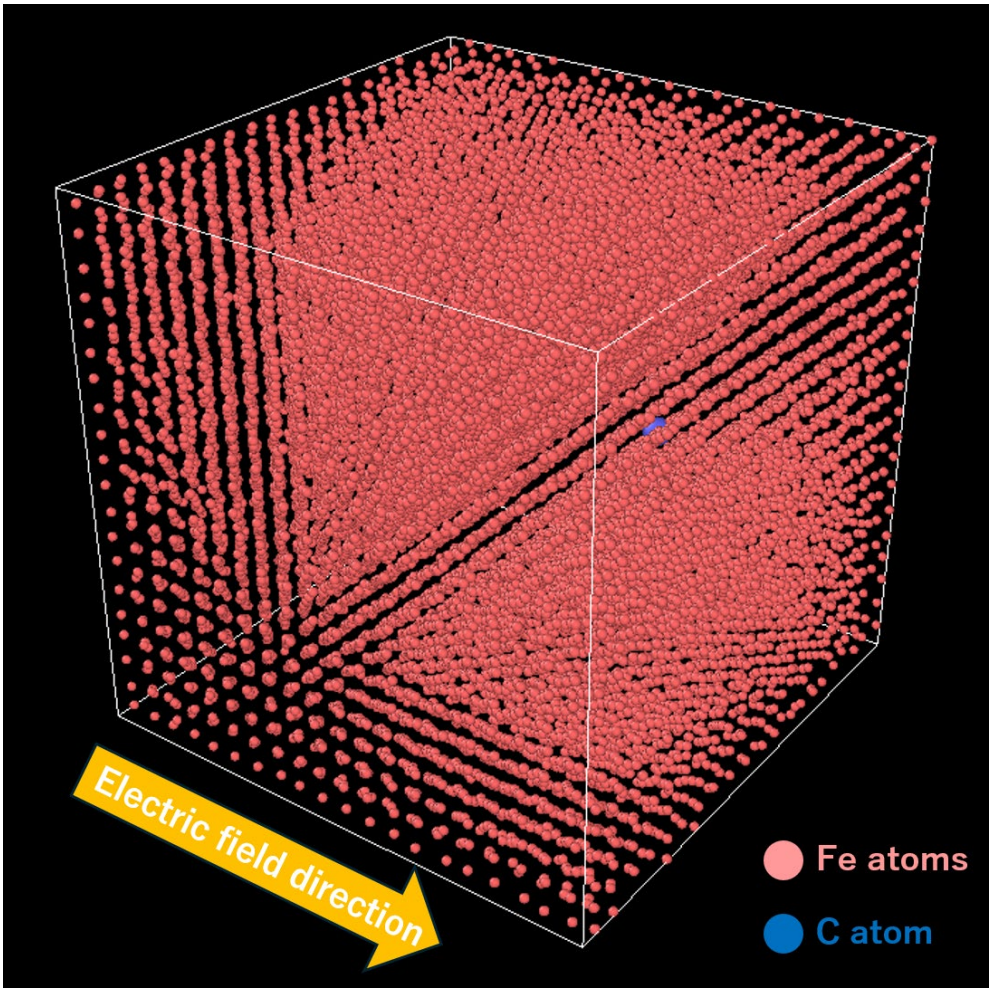


一次細孔酸素透過シミュレーション計算系

(a)計算系イメージ図，(b)酸素と白金粒子のみ表示，(c)計算系上面図.

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

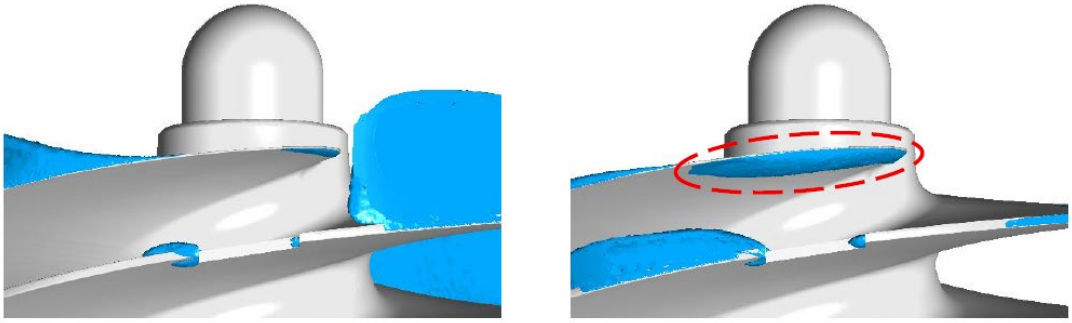


電場下における Ferrite 中の炭素輸送シミュレーションのスナップショット

Ferrite 中の炭素輸送挙動を解析するために実施したシミュレーションのスナップショットを示す．鉄結晶中に炭素原子を配置して電場を印加し，電場下における炭素原子の輸送挙動を解析した．

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



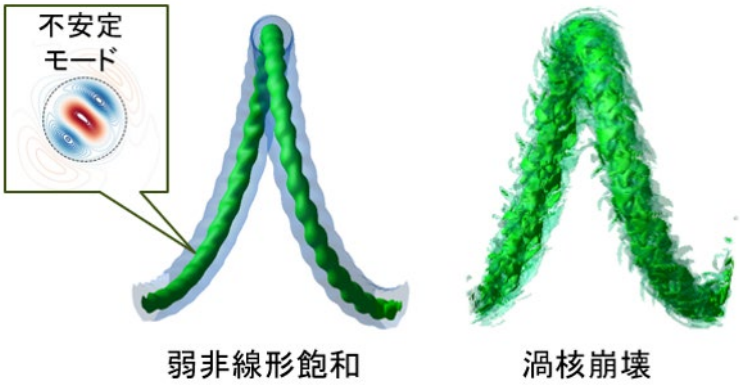
(a) Notch-Straight　　(b) Notch-BRS

インデューサ前縁近傍のキャビテーションの様相（Q/Qd = 1.05，σ = 0.060）

ケーシングに BRS を設けることで，インデューサの迎角が低下し，圧力面側にキャビテーションが生じた様子.

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

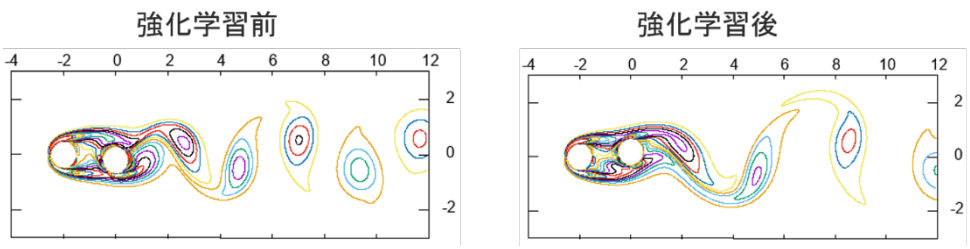


らせん渦に現れる不安定モードと非線形発展後の典型的な状態

短波長不安定性により不安定化したらせん渦の非線形発展後の状態として，成長が飽和した状態と渦核が乱流化する状態があることを示している．

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

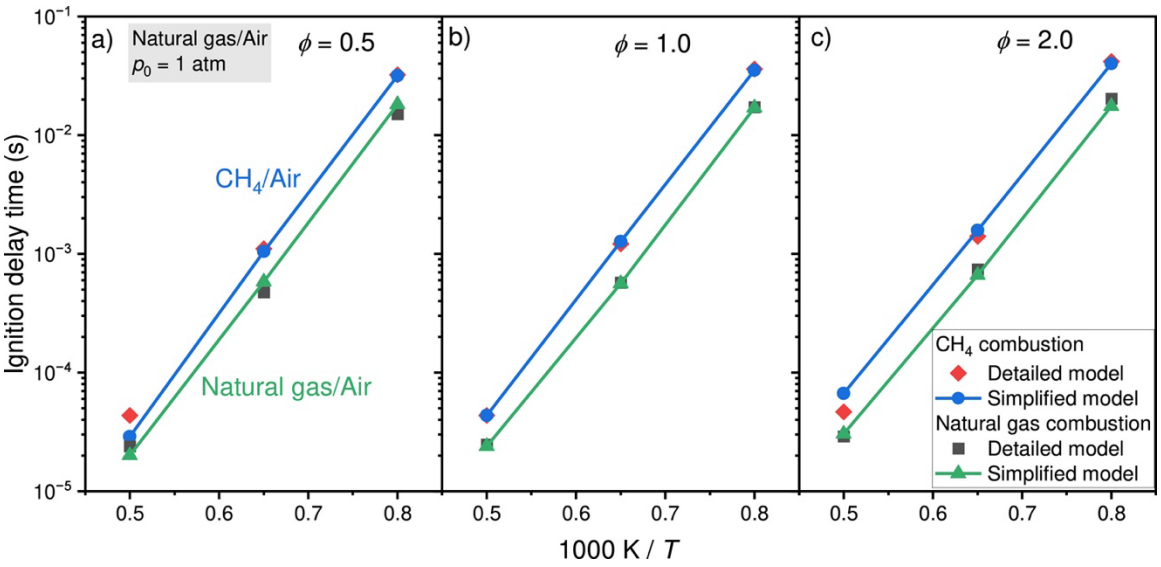


強化学習前後の渦度の可視化

強化学習により流れに対して垂直方向に振動する後方の円柱の運動を制御した結果，渦の放出間隔が長くなり，音圧の低減に至ったことを示している．

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

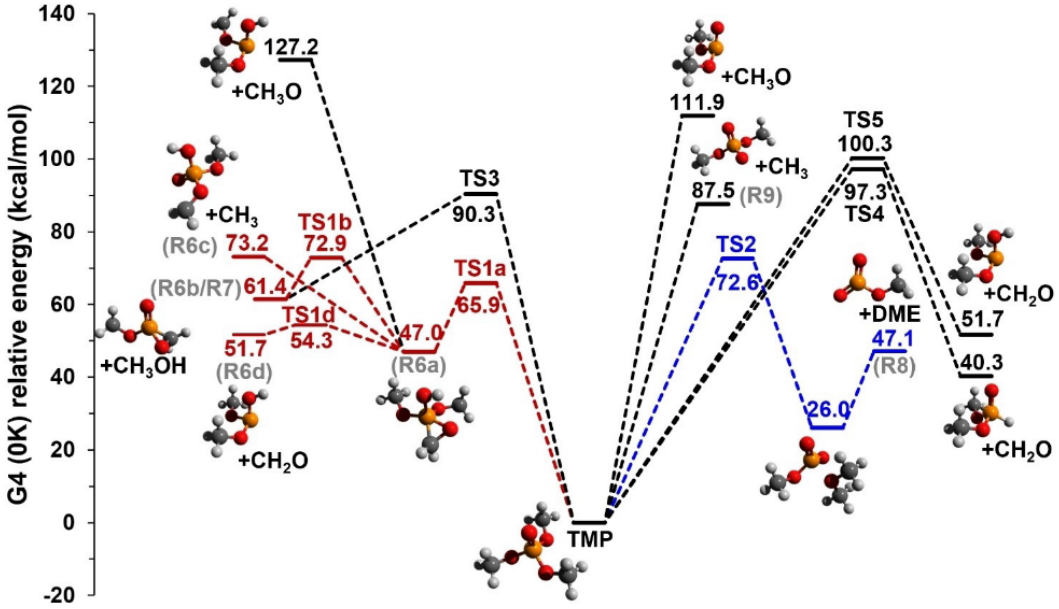


メタン・天然ガスの着火遅れ時間における，簡易反応モデルと
詳細反応モデルによる予測結果の比較

天然ガスとメタンににおける着火遅れ時間の差異は C2～C4 の化学種に起因するものであり，簡易反応モデルにおいてもその挙動が精度良く再現されることがわかった.

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

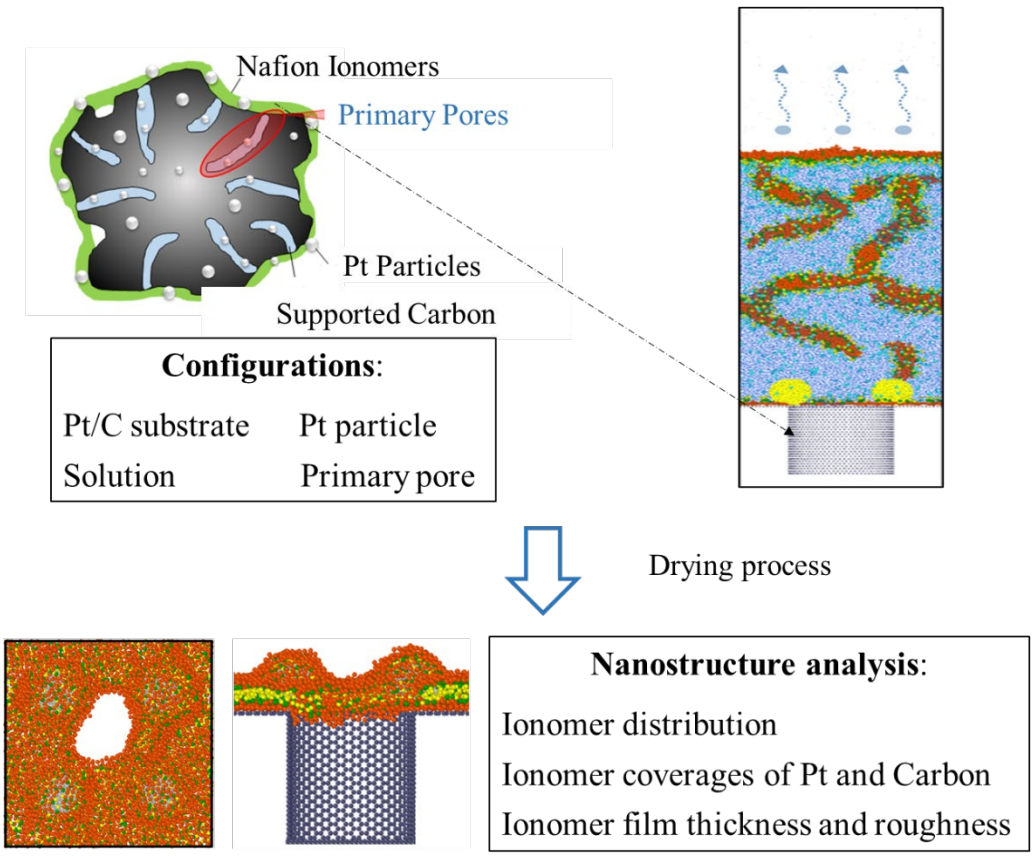


リン酸トリメチル（TMP）の単分子解離反応におけるエネルギー図

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

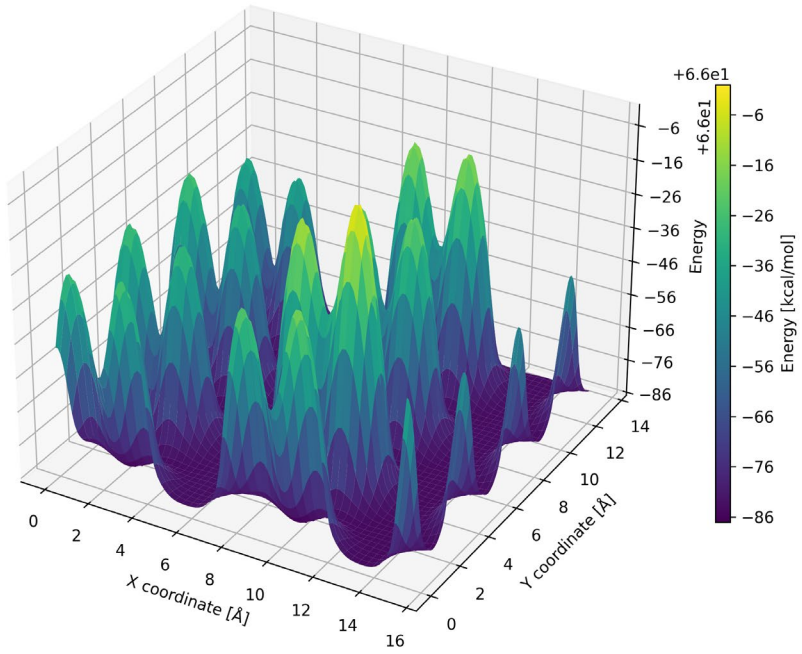


一次細孔を有する Pt/C 触媒層における Nafion アイオノマーの分布と構造変化

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．

GR02APR25

IV 族半導体基板に対する薄膜成長メカニズムの分子動力学的解析

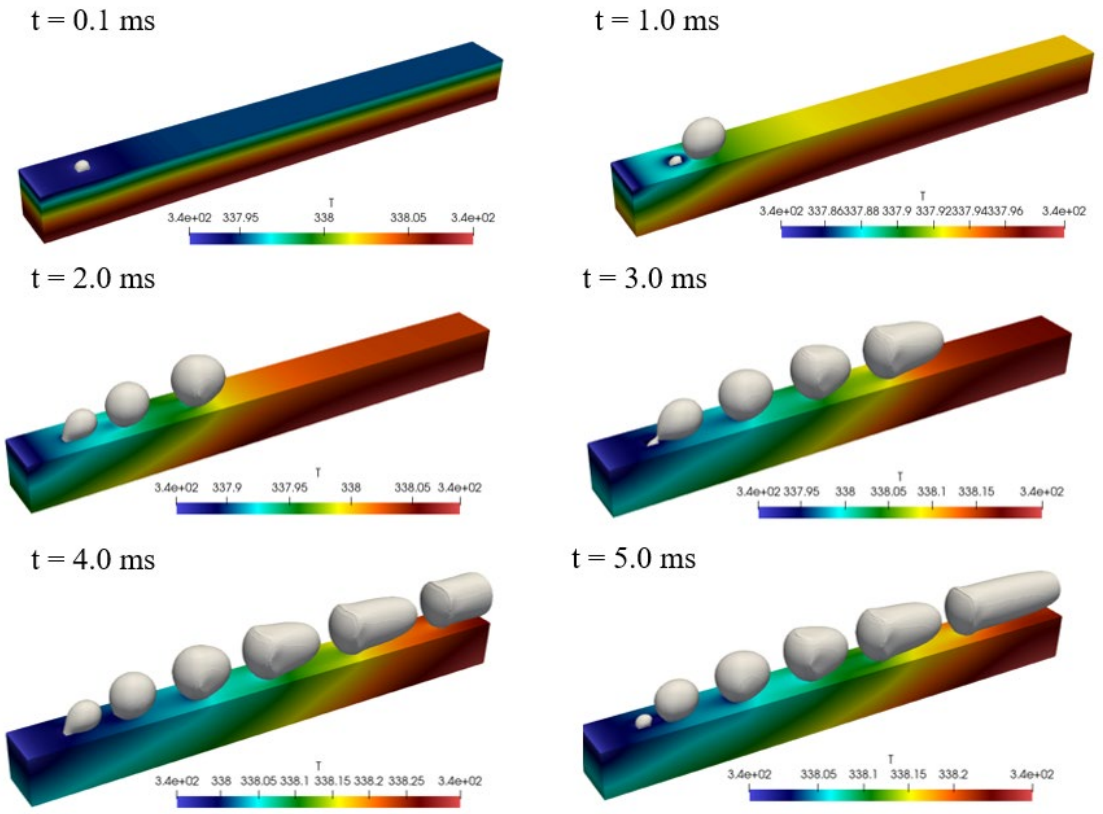


Si 基板上に BCl3 分子が吸着する際のエネルギーを表したエネルギー表面

基板再表面の Si と BCl3 間に吸着が生じる高さにおいて水平方向に BCl3 分子の座標をずらして吸着エネルギーを計算した結果．エネルギー表面において溝となっている部分でエネルギーが低く吸着サイトとなっていることが確認できる．

GR03APR25

高熱流束冷却にむけた液膜形成およびその蒸発熱伝達の数値解析

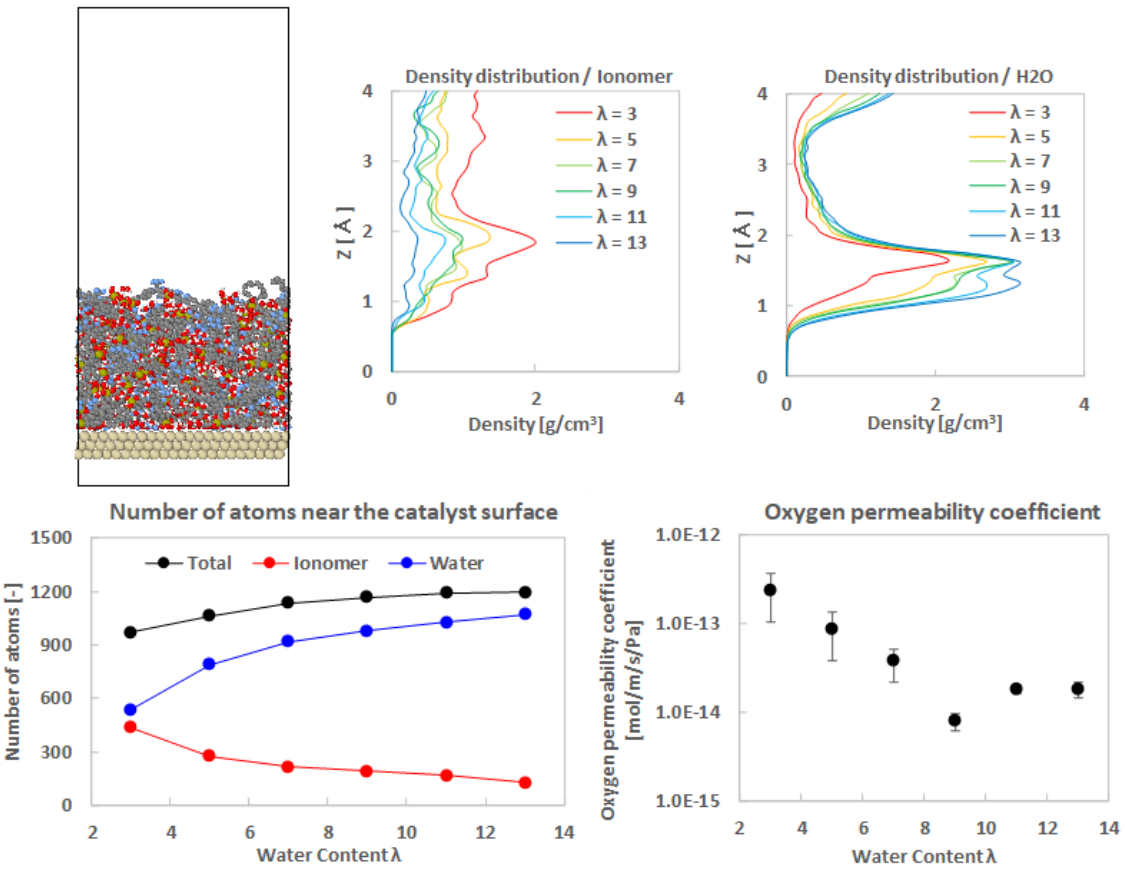


マイクロ流路内蒸気気泡流による熱伝達

キャビティを有したマイクロ流路内に連続的に生成された蒸気気泡とその熱伝達過程を可視化した.

GR04APR25

嵩高構造を導入した炭化水素系高分子膜の酸素透過特性の分子動力学解析

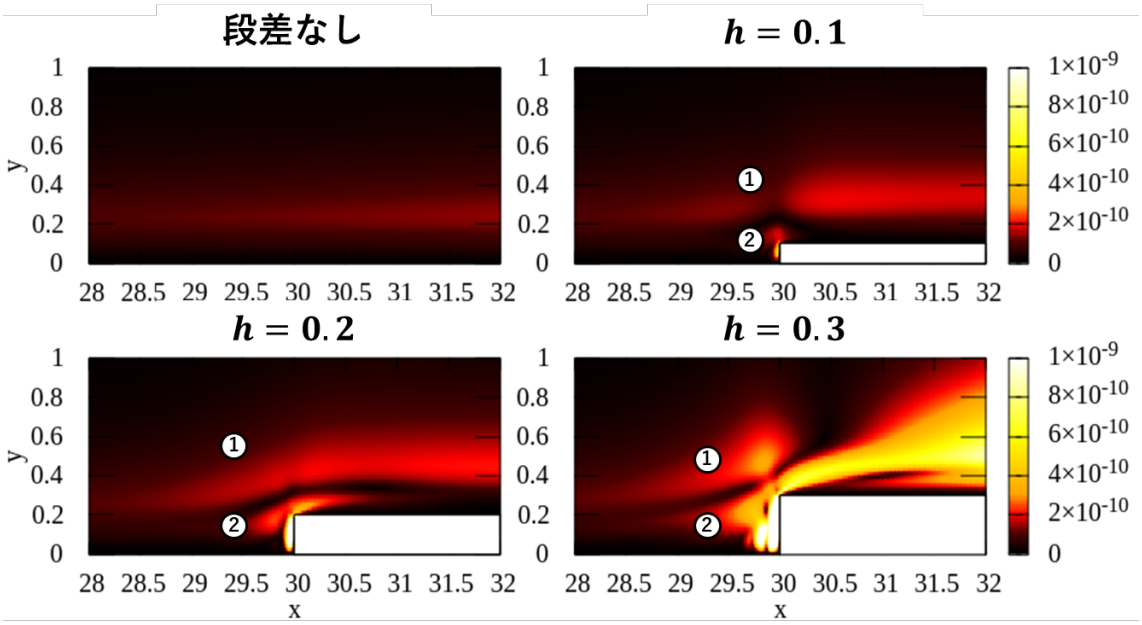


炭化水素系高分子膜の密度および酸素透過係数の含水率依存性

触媒表面近傍の密度分布の含水率依存性は高分子膜と水分子とで逆の傾向を示し，酸素透過係数は含水率の増加に伴い減少するが，高含水率になるとほぼ横ばいになる．

GR06APR25

隆起構造によって歪められた境界層の安定性解析と乱流遷移の予測



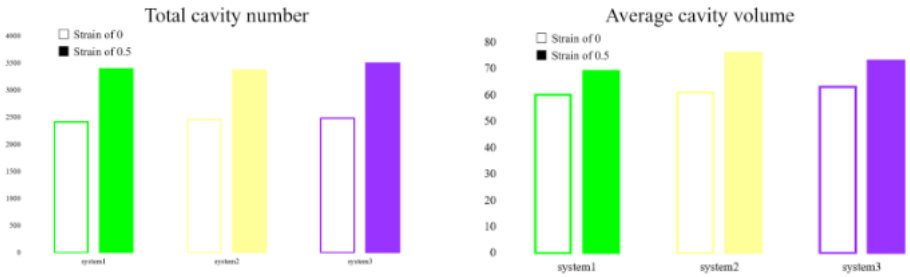
波数$\beta = 3.333$のスパン方向フーリエモードの空間分布図

三次元境界層の横流れ不安定性に対する前向き段差の影響

微小擾乱の振幅の空間分布の図．①は元から存在する横流れ不安定モードであり，②は段差に起因する新たな不安定性．高さ 0.3mm では②の方へとモード変換が起きており，擾乱振幅が飛躍的に増大する．

GR07APR25

固体高分子形燃料電池高分子電解質膜の分子量が機械的特性に与える影響に関する分子論的解析

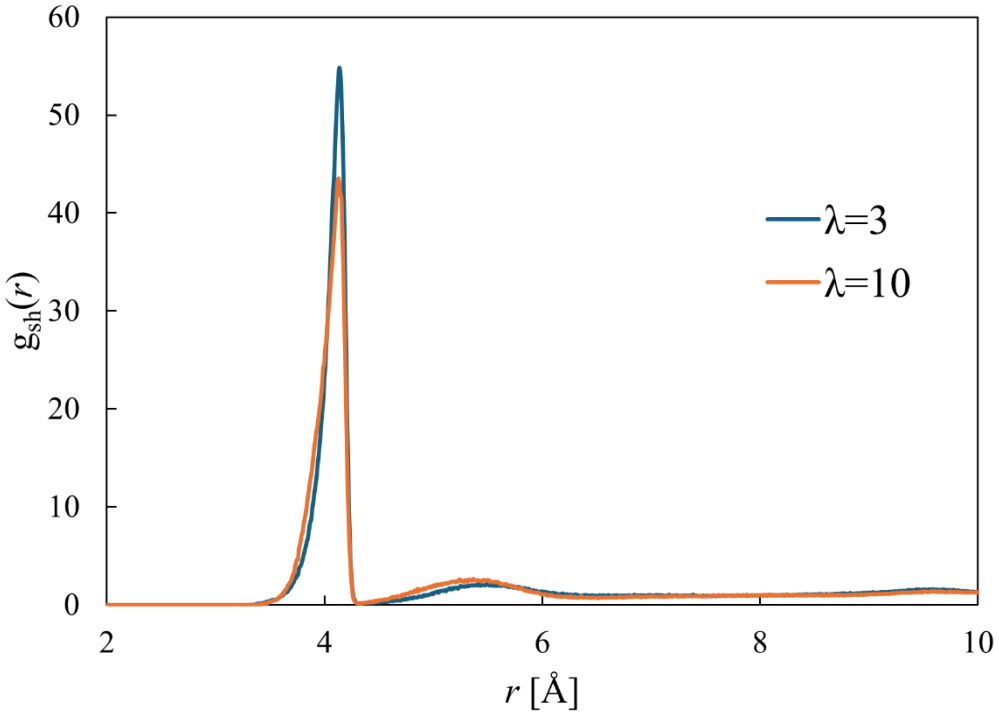


異なる系の空洞解析

鎖長分布が異なる系で引張ひずみが 0 と 0.5 の場合の空洞の総数と平均体積.

GR01MAY25

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構造の分子論的解析

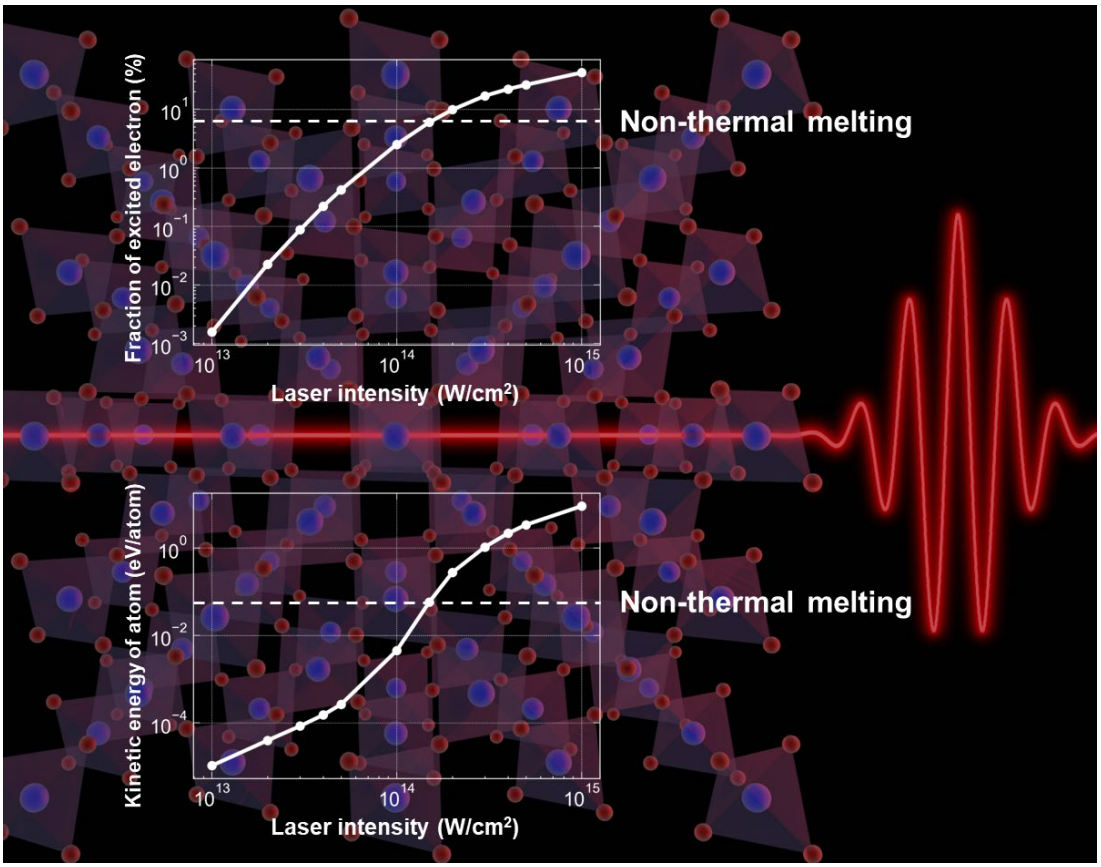


スルホ基とヒドロニウムイオンの動径分布関数の結果

この図はスルホ基とヒドロニウムイオンの動径分布関数の結果を示している．この結果から含水率が 10 になるとピークが小さくなることが分かる．これはスルホ基とヒドロニウムイオンの間に水分子が入り込む遮蔽効果が再現できていることを示している．

GR01AUG25

第一原理計算による光熱変換現象の解明

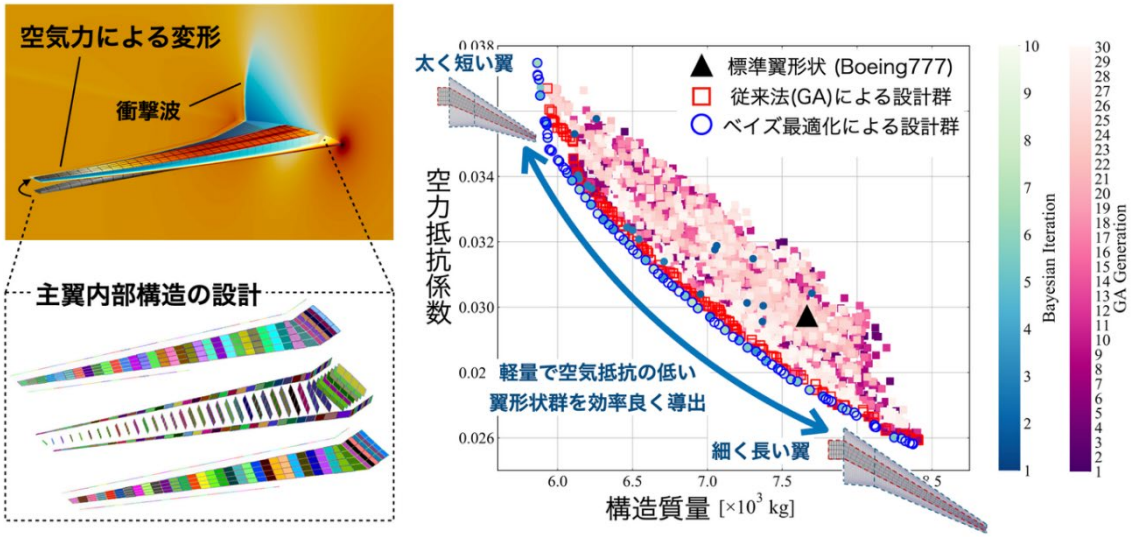


非熱融解の発生とその励起電子密度の閾値

超短パルスレーザーを物質に照射すると，ある励起電子密度で非常に高速な結晶崩壊を引き起こす「非熱融解」が発生することが明らかになった.

YG01APR25

流体構造連成解析におけるデータ駆動型アプローチの研究

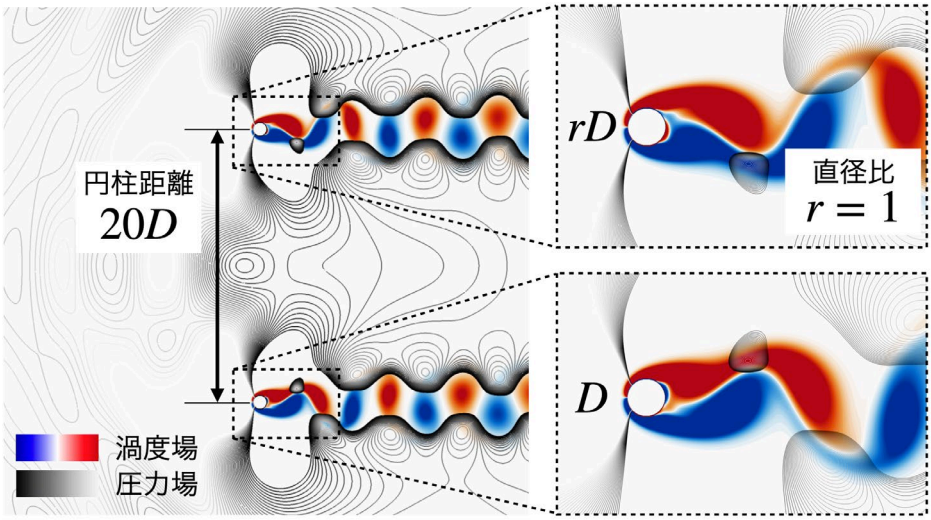


多目的ベイズ最適化による主翼設計のパレートフロント

構造質量と空力抵抗（Cd）のトレードオフ関係を最適化した結果である．AI 手法（ベイズ最適化）を用いることで，従来の遺伝的アルゴリズム（GA）の 1/10 という劇的に少ない計算回数で，より優れた設計解（パレートフロント）を導出できることを示した．

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

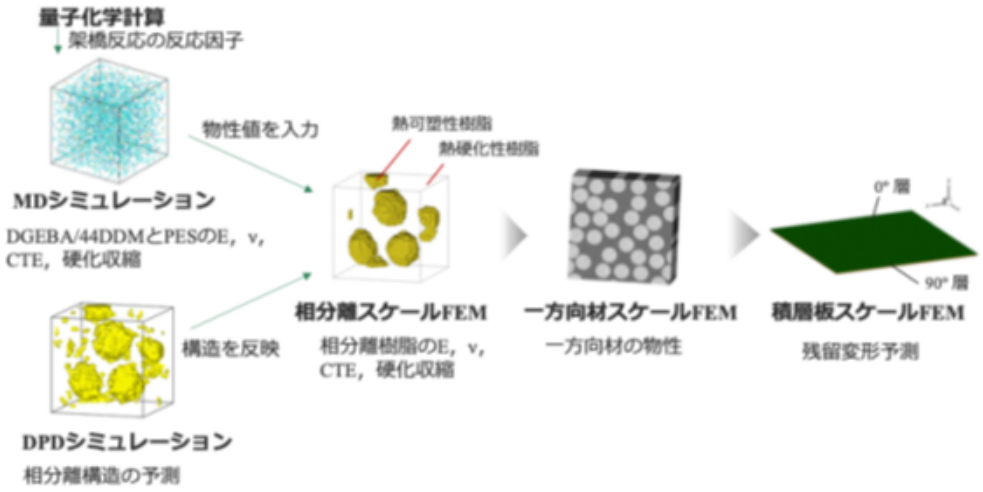


音波を介した横並び二円柱流れの同期現象

横並び二円柱周りの渦度場（青・赤色のコンター）と圧力場（灰・黒のコンター）を示しており，渦どうしの直接干渉ではなく音波を介した渦列の逆位相同期が生じている．

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

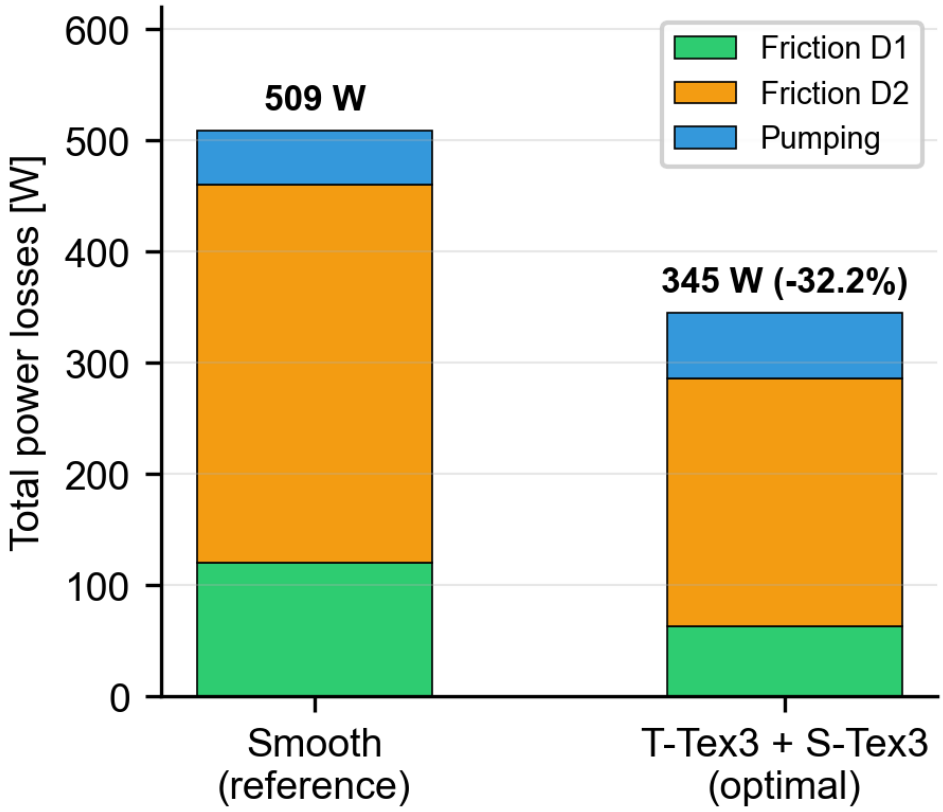


相分離樹脂 CFRP のマルチスケールモデリング

MD シミュレーションから得られた樹脂物性，DPD から得られたモルフォロジー，3 スケールの FEM を連携し，相分離樹脂を母材とした CFRP の成形時変形解析を可能とした．

FS01DEC24

油潤滑静圧軸受のエネルギー効率向上

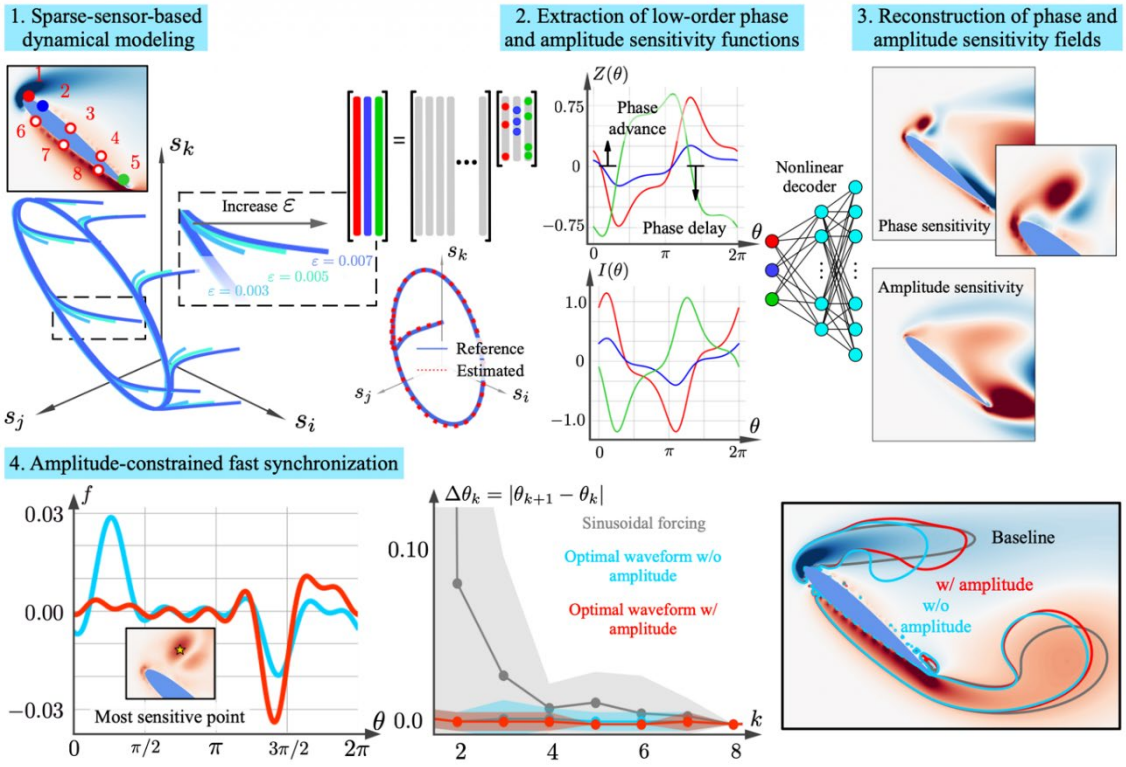


矩形微細テクスチャによる静圧軸受の全体動力損失低減効果

円周方向ランド（D1）への transverse 方向テクスチャと軸方向ランド（D2）への streamwise 方向テクスチャを組み合わせた構成（T-Tex3＋S-Tex3）により，軸受全体の総動力損失をスムース基準の 509 W から 345 W（約 32%減）まで低減できることを示した．摩擦・ポンピング損失の内訳から，低減は主に両ランドの摩擦損失の減少によることが分かる．

FS01JUL25

超高速最適制御に向けた非定常流体現象の機械学習位相振幅モデリング



航空流体系における振幅ペナルティを伴う高速周波数制御.

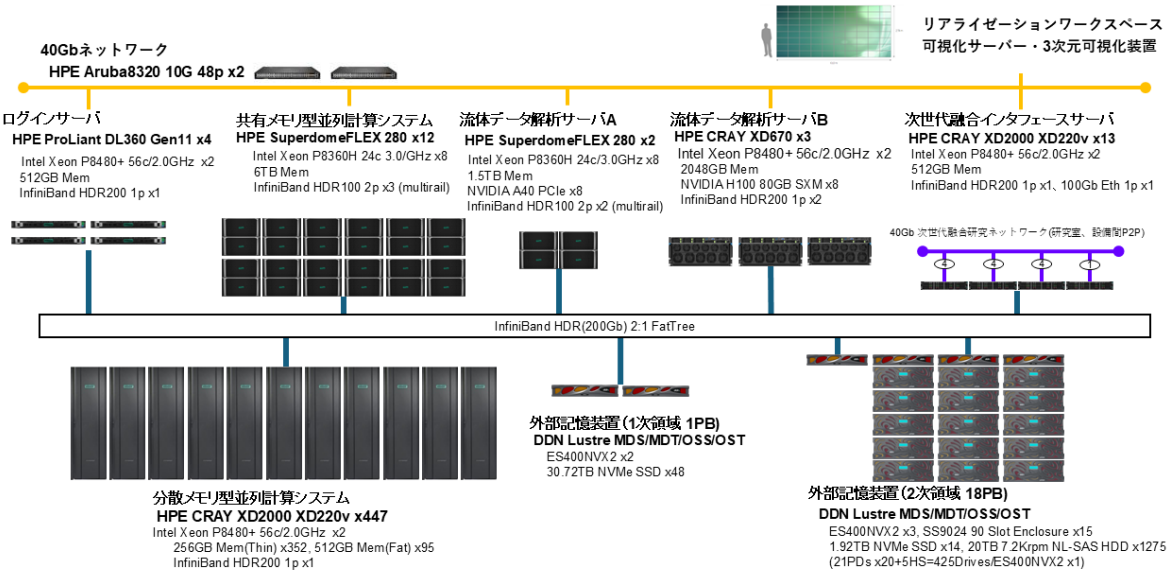
スパースセンサーを用いた動的モデリングにより，低次元の位相および振幅感度関数を抽出し，全体の感度場を再構築する．これにより，航空流体系において過度な振幅の増大を抑制しつつ，目的の状態へ高速に同期させる制御手法を実現する．

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[*1]）」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.

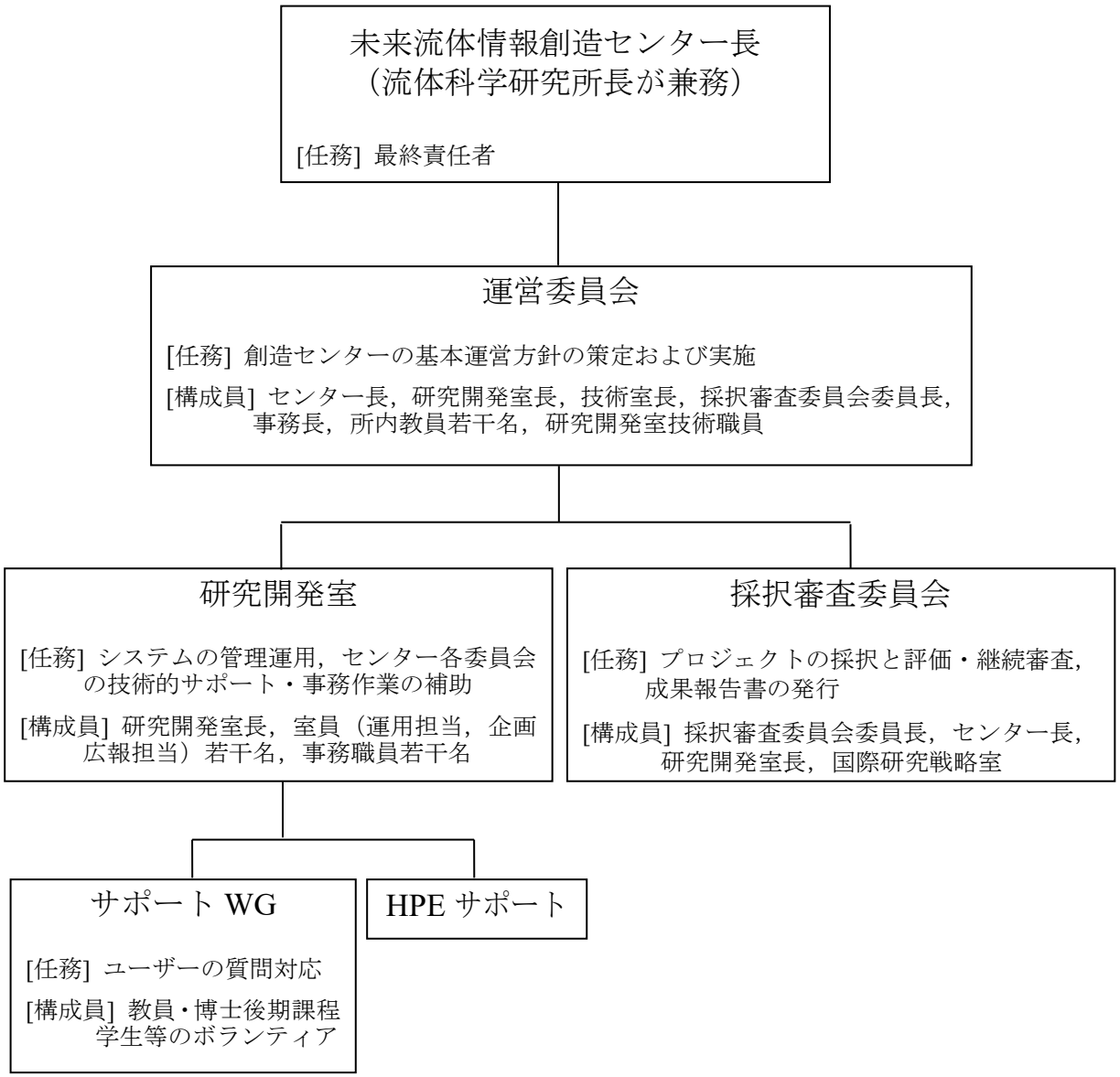
計算サーバ群は，HPE による分散メモリ型並列計算システムと共有メモリ型並列計算システムを主力として構成されており，システム総理論演算性能合計 4.4PFLOPS・最大共有メモリ 6TB・主記憶容量合計 223TB の計算機能を提供します.

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.

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

[非プロジェクト研究]

将来，プロジェクト研究へ移行するための準備研究を行う.

次世代融合研究システム利用研究成果報告書
（スーパーコンピュータ利用研究成果報告書）
第二十九巻
（2025 年 4 月～2026 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　SP01APR25　航空宇宙熱流体工学および数理物理学：非線形動力学と確率過程
焼野　藍子　　准教授　……1

＜公募共同研究＞

2　CP01APR25　Non-Boussinesq effects on the turbulent natural convection
小宮　敦樹　　教授　……6

3　CP02APR25　ソニックブーム評価関数の気象モデルへの実証
焼野　藍子　　准教授　……9

4　CP03APR25　非平衡的挙動を示す乱流場におけるエネルギ・スカラ輸送機構に関する数値研究
服部　裕司　　教授　……14

5　CP04APR25　乱流中の渦の 3 次元渦流構造と乱流場との相対特性に関する解析
服部　裕司　　教授　……18

6　CP05APR25　表面修飾ナノ材料／媒体間のナノ・メゾスケール界面現象に関する研究
小宮　敦樹　　教授　……22

7 CP06APR25 火星飛行機実現に向けた柔軟膜翼の非定常空力特性解明
永井 大樹 教授 ……25

8 CP07APR25 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 ……28

9 CP08APR25 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 ……31

10 CP09APR25 部分電離プラズマ流によって駆動される高速宇宙輸送システムにおける数値的研究
永井 大樹 教授 ……34

11 CP10APR25 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 教授 ……39

12 CP11APR25 機械学習における特徴量設計と重要度解析による有機材料の熱物性予測
菊川 豪太 教授 ……42

13 CP01MAY25 プラズマ―生体界面における電荷,電界および活性種挙動の大規模数値解析
佐藤 岳彦 教授 ……45

14 CP02MAY25 YSZ 相転移とイオン伝導性メカニズム
小原 拓 教授 ……48

15 CP03MAY25 CO_2 permeability through (microalgae) lipid membrane using molecular dynamics simulation
馬渕 拓哉 准教授 ……51

16 CP04MAY25 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 ……58

17 CP05MAY25 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 ……62

18 CP06MAY25 高速変形下の脂質単分子膜の局所表面張力場の計算
馬渕 拓哉 准教授 ……66

19 CP07MAY25 Molecular Simulation of conductive polymer electrolyte composite membranes for application in electrochemical devices
馬渕 拓哉 准教授 ……70

20 CP01JUN25 飛行しながら回転する中空円筒の実験と数値解析
石本 淳 教授 ……76

21 CP02JUN25 糸状菌由来機能性アミロイドの界面特異的自己組織化機構の解明
馬渕 拓哉 准教授 ……80

22 CP03JUN25 固体表面ナノバブルと表面特性の分子動力学的解析
徳増 崇 教授 ……83

23 CP04JUN25 熱的に揺動する内部応力によって現われる弾性膜上のチューリングパターン
内一 哲哉 教授 ……86

24 CP01JUL25 Utilization of Coastal Wave Energy as Renewable Energy and Enhancement of Coastal Protection through Turbine Optimization in the Overtopping Breakwater for Energy Conversion (OBREC)
大島 逸平 助教 ……92

25 CP01AUG25 直接空気回収技術（DAC）の応用における CO_2 吸着の静的・動的パラメータ決定のための分子動力学シミュレーション
徳増 崇 教授 ……96

26 CP01SEP25 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 ……100

27 CP02SEP25 異種材料 3 次元構造への炭化ケイ素結晶成長と反応性力場分子動力学法を用いたシミュレーション
徳増 崇 教授 ……103

28　CP01NOV25　微細水滴と窒素プラズマの界面反応を用いた高効率アンモニア製造
徳増　崇　　教授　……105

＜共同研究＞

29　CL01APR25　レーザ誘起気泡圧潰衝撃力による材料変形における流体の物性値の影響に関する流体／材料連成数値解析
伊賀　由佳　　教授　……109

30　CL02APR25　自然対流の境界層制御技術の創成
小宮　敦樹　　教授　……112

31　CL03APR25　雰囲気 X 線光電子分光装置用差動排気ノズル周辺の圧力分布計算
服部　裕司　　教授　……116

32　CL04APR25　Development and implementation of a novel framework for extracting flow details and high-quality flow field restoration using machine learning
服部　裕司　　教授　……118

33　CL05APR25　大規模 DNS に基づく粗視化した高レイノルズ乱流のデータ駆動科学
服部　裕司　　教授　……122

34　CL06APR25　有機分子修飾された固液界面におけるナノスケール輸送現象の解明
菊川　豪太　　教授　……125

35　CL07APR25　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　……128

36　CL01MAY25　詳細反応 CFD/数理的手法 CEMA によるアンモニア非予混合バーナー保炎消炎構造の解明
中村　寿　　教授　……131

37　CL02MAY25　複合材主翼設計における多様な不確実性を考慮した最適化
阿部　圭晃　　准教授　……140

38　CL01JUL25　高速気液二相流動現象と材料内応力状態の関係に関する流体/材料連成数値解析
伊賀　由佳　教授　……143

39　CL01OCT25　分子動力学と有限要素法の両連成相互応答解析による高分子界面破壊の解明
菊川　豪太　教授　……146

40　CL02OCT25　固体酸化物形燃料電池における一酸化窒素の分解プロセスの解明
徳増　崇　教授　……149

＜一般研究＞

41　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

42　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　……157

43　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　……162

44　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　……165

45　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　……169

46　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　……172

47　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　……175

48 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 ……179

49 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 ……184

50 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 ……188

51 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 ……195

52 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 ……202

53 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 ……205

54 GR01APR25 液体・ソフトマターの相変化と輸送現象の分子動力学解析
小原 拓 教授 ……210

55 GR02APR25 IV 族半導体材料に対する薄膜成長メカニズムの分子動力学解析
徳増 崇 教授 ……213

56 GR03APR25 高熱流束冷却にむけた液膜形成およびその蒸発熱伝達の数値解析
岡島 淳之介 准教授 ……216

57 GR04APR25 嵩高構造を導入した炭化水素系高分子膜の酸素透過特性の分子動力学計算
徳増 崇 教授 ……220

58 GR05APR25 機能性流体による水圧破砕のメカニズム解明とケーススタディ
椋平 祐輔 准教授 ……223

59　GR06APR25　隆起構造によって歪められた境界層の安定性解析と乱流遷移の予測
廣田　真　　准教授　……226

60　GR07APR25　固体高分子形燃料電池高分子電解質膜の分子量が機械的特性に与える影響に関する分子論的解析
徳増　崇　　教授　……231

61　GR08APR25　人工膜貫通チャネルの外部刺激応答性およびイオン整流性に関する分子論的解析
馬渕　拓哉　　准教授　……234

62　GR09APR25　エラスチン様ポリペプチドの液-液相分離と液滴内部への分子取込に関する分子論的研究
馬渕　拓哉　　准教授　……237

63　GR10APR25　スーパーコンピューティングによる先端車輌基盤技術研究
石本　淳　　教授　……239

64　GR01MAY25　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構造の分子論的解析
徳増　崇　　教授　……241

65　GR02MAY25　液体アンモニアおよび気体アンモニア燃焼における更なる低 NOx 化とふく射強度の予測に関する研究
小林　秀昭　　教授　……244

66　GR01AUG25　第一原理計算による光熱変換現象の解明
小宮　敦樹　　教授　……249

＜若手研究＞

67　YG01APR25　流体構造連成解析におけるデータ駆動型アプローチの研究
阿部　圭晃　　准教授　……251

＜特定研究＞

68　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　……255

69　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　……261

70　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　……264

71　FS01DEC24　油潤滑静圧軸受のエネルギー効率向上
大西　直文　教授　……268

72　FS01APR25　電磁場によるプラズマ中のイオン加速過程のマルチスケールシミュレーション
大西　直文　教授　……271

73　FS01JUL25　超高速最適制御に向けた非定常流体現象の機械学習位相振幅モデリング
深見　開　准教授　……274

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	SP01APR25
研究種別	計画研究
利用期間	2025.04～2028.03
報告回数	第　1　回報告

2025 年 3 月 11 日提出

航空宇宙熱流体工学および数理物理学：非線形動力学と確率過程

焼野　藍子，猪熊　建登
東北大学流体科学研究所　准教授，特任助教
谷口　伸隆，中川　皓介
東北大学流体科学研究所　特任研究員
Ridolfi Baptiste, Hermanto Billy
東北大学大学院工学研究科　特別研究学生，IMAC-G 学生

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

高速輸送機器の摩擦抵抗低減および熱保護を目的とし、大規模並列計算機を用いた直接数値計算（DNS）と最新の数理科学、高度な風洞実験を融合させる。線形安定性理論を超えた有限振幅擾乱によるバイパス遷移経路の特定や、表面微細構造（DMR）による抵抗低減メカニズムの解明を目指す。あわせて、大規模並列計算による非定常流れ場を機械学習に援用することで、低計算コストかつ高精度なデータ同化・流れ場予測モデルの構築を進め、実機設計への応用を加速する。

1.2 研究期間内の最終目標

亜音速から極超音速までの幅広い領域における遷移現象の包括的理解と、実機（航空機・船舶・自動車）への適用可能性の実証である。

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 数理手法の開発と遷移経路の特定（谷口）：

変分モード分解（VMD-NCS）の実装と、超音速（M = 3.0）境界層における乱流遷移を直接引き起こす「最短経路（Minimal seed）」の特定に成功した。壁面近傍の縦渦と剪断層の斜め波の干渉が遷移に寄与する物理的メカニズムを解明した。

2.2 表面微細構造（DMR）による抵抗低減（中川）：

総格子数約 2.27 億の DNS により、DMR の高さが境界層厚さの 20% 以下で遷移遅延に最

も有効であることを特定し、乱流状態でも 2-7% の抵抗低減効果を確認した。

2.3 極超音速熱流束予測とカプセル周りの LES（猪熊）：

アポロ型カプセル周りの LES 解析を実施し、実験データ（弾道飛行装置）との比較から熱流束特性を詳細に再現した。赤外線カメラ計測と熱流束補償法を組み合わせ、飛行環境下での空力加熱評価手法を確立した。

2.4 実用機器への展開（ビリー）：

自動車サイドドアミラーを対象とした 3900 万セルの大規模メッシュによる RANS/LES 解析を実施し、後流構造の可視化を行った。

3. 研究目標の達成状況

超音速・極超音速域における擾乱源の特定、DMR の形状最適化指針の獲得、実機スケール（船舶・車両ミラー）の計算基盤構築など、当初の計画を概ね達成した。

4. まとめと今後の課題

本プロジェクトにより、流体解析に関わるデータ科学の高度化と実問題解決の融合が進展した。今後は得られた知見を基に、より複雑な実機飛行・航行条件における性能予測の汎用化と制御の実装を目指す。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

- N. Taniguchi and A. Yakeno, "Minimal seed in supersonic boundary layer at M = 3," arXiv:2601.11964 (2026).

- A. Kawabata, A. Yakeno, S. Obayashi and R. D. Sandberg, "A machine learning-based closure for unsteady RANS simulations of vortex shedding," Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, 20 (1), (2026).

- A. Yakeno, H. Okuizumi, K. Inokuma and Y. Watanabe, "DMR effect on drag reduction of a streamlined body measured by Magnetic Suspension and Balance System," Journal of Fluid Mechanics, 1034 (2026). DOI: 10.1017/jfm.2026.11520.

- K. Inokuma, A. Yakeno, Y. Watanabe and K. Ohtani, "Combined thermographic measurement and heat-flux compensation methods for aerodynamic heating in hypersonic ballistic ranges," Experimental in Fluids (under revision).

著書

該当なし

国際学会

- Inokuma, K., Yakeno, A., Colusso, F., Yatsuyanagi, S., and Tanno, H., "Numerical simulations on aerodynamic heating and flow characteristics of hypersonic Apollo-shaped capsule induced by boundary-layer trip," Proceedings of 11th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer (THMT-25) (2025), p. C000261.

- Inokuma, K., Yakeno, A., Ridolfi, B., Yatsuyanagi, S., and Tanno, H., "Large Eddy Simulations on heat flux characteristics of Apollo-shaped capsule," 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025) (2025).

- Taniguchi, N., and Yakeno, A., "Study on laminar-turbulence transition process in compressible boundary layer based on VMD and optimal perturbation analysis," 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025) (2025).

- Osaki, R., Nakagawa, K., Yakeno, A., and Kawata, T., "On the Friction Drag Reduction Mechanism by Distributed Micro Roughness in Transitional Boundary Layer Flow," 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025) (2025).

- ICFD 2025 国際シンポジウム内 OS23: "Aerospace Heat, Fluid Engineering and Mathematical Physics: Nonlinear Dynamics and Stochastic Process" を主催

- Yakeno, A., "Exploring Flow Dynamics Challenges and Breakthroughs in Aerospace Fluid Engineering," The 9th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics/The 7th Australasian Conference on Computational Mechanics (APCOM 2025) (2025), Invited.

- Yakeno, A., "Frontiers of Fluid Mathematics in Aircraft Development: From Non-modal Stability Analysis to Data Assimilation," The 7th RIKEN AIP Mathematical Science Team Retreat (2026), Invited.

国内学会

- 猪熊建登, 焼野藍子, 渡辺佳是, 大谷清伸, "弾道飛行装置・高速度赤外線カメラを用いた極超音速プロジェクタイルの熱流束計測", 2025 年度衝撃波シンポジウム (2026).

- 谷口伸隆, 焼野藍子, "非線形非モード解析による超音速圧縮性境界層の遷移過程に関す

る研究", 第 39 回数値流体力学シンポジウム (2025).

- 中川皓介, 焼野藍子, "後退平板境界層乱流遷移における表面粗さの影響調査", 第 39 回数値流体力学シンポジウム (2025).

- 猪熊建登, 焼野藍子, 八柳秀門, 丹野英幸, "ピザボックスラフネス付き極超音速 Apollo 型カプセル周りの熱流束予測に関する LES", 日本航空宇宙学会北部支部 2026 年講演会 (2026).

- 谷口伸隆, 焼野藍子, "極超音速境界層の非線形増幅機構に関する研究", 日本航空宇宙学会北部支部 2026 年講演会 (2026).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

国内特許出願

- 特願 2025-091819「粗面、システム、移動体、配管、及び熱交換機器」(出願日: 2025 年 6 月 2 日、発明者: 焼野藍子 ほか)

国際特許出願（PCT および国内段階移行）：

- PCT/JP2025/045248「粗面、システム、移動体、配管、及び熱交換機器」(国際出願日: 2025 年 12 月 24 日。2026 年 2 月 10 日付の国際調査報告にて進歩性の見解を受領)

- 米国出願番号 18/881,848 「EVALUATION DEVICE, ROUGH SURFACE, EVALUATION METHOD, AND PROGRAM」(2025 年 4 月 15 日 米国国内段階移行手続き完了)

受賞

- 2025.11.13: 第 5 回サイエンスフォトコンテスト「科学の幽玄 - Beauté cachée de la science」ファイナリストに選出

- 2025.10.01: Billy Hermanto, 公益財団法人松下幸之助記念財団 2025 年度 KMMF 奨学生に選出

- 2025.09.02: 谷口伸隆, 最優秀賞（流体力学部門）, 第 57 回流体力学講演会／第 43 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム (FDC/ANSS)

- 2025.04.16: 発表論文（Geophysical Research Letters, Vol. 50, 2023）が、2023 年の Most-viewed papers トップ 10% に認定

マスコミ発表

- 2026.02.05: 「AI 導入で流体計算低コストに 航空機・風力の建設向け」, 日刊工業新聞（AI 駆動型機械学習による RANS クロージャー、Kawabata et al., EACFM 2026 に関する報道）

- 2026.02.11: 「高精度の空気流れ予測 ＡＩで風力機開発加速」, 環境新聞（オンライン）（同上）

- 2026.02.17: 「AI で「刻々と変化する風」を低コストで正確に予測」, アンドラ（同上、東北大学プレスリリース 2026.2.3）

- 2026.05.12: 「東北大が“流体工学 80 年の常識”覆す発見 微細凹凸で空気抵抗 43.6%低減を世界初実証」, マイナビニュース TECH+（DMR・JFM 論文に関する報道）

- 2026.05.13: 「飛行機や車の燃費を変える歴史的発見。東北大、空気抵抗を 43.6%低減する「見えない微細加工」を解明」, XenoSpectrum（同上）

- 2026.05.17: 「東北大学、1.0%の微細粗さで空気抵抗 43.6%低減を世界初実証」, Car Watch（同上）

- 2026.05.19: 「「空気抵抗は表面が滑らかなほど小さくなる」という“常識”を覆す効果、初めて実証される」, WIRED（同上）

- 2026.05.24: 「細かい凹凸で空気抵抗抑える可能性 航空機へ応用目指す 東北大」, NHK NEWS（テレビ・オンライン、同上）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 18 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

Accurate prediction of the heat transfer from a turbulent natural convection is of crucial importance to industrial geophysical applications. Most existing studies have adopted the incompressible Oberbeck—Boussinesq (OB) formulations where the local density difference is assumed small ($\Delta\rho/\rho\infty < 5\%$) and can be ignored except for the buoyancy term in the momentum. While these studies are able to make relatively accurate predictions under small temperature differences, early studies (e.g., Siebers et al. 1985) have shown that local fluid property variations resulting from the large temperature differences would greatly affect the laminar—turbulent transition as well as the turbulent statistics and heat transfer behaviour --- making predictions based on OB conditions dangerously unreliable. These extreme conditions (high temperature difference and large in scale) are difficult to investigate in controlled laboratory environments.

In this study, we focus on the turbulent natural convection boundary layer flow along a vertically heated isothermal wall using direct numerical simulation (DNS) for both air and water.

1.2 研究期間内の最終目標

In this study we aim to investigate the mechanisms that affect the heat transfer of these thermally driven buoyant flow with and without Oberbeck-Boussinesq (OB) conditions in 3D. The non-OB flows are obtained by a weakly compressible Navier-Stokes solver to incorporate both the local density variation and fluid property variations. Preliminary studies reveal that the non-OB effects would shift the laminar—turbulent transition and therefore modify the heat transfer of the flow. By quantitatively analyzing the non-OB effect in both spatially developing and temporally developing flows, this study provides necessary corrections to the existing heat transfer model and unique insights for heat transfer modelling and enhancement.

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

2.1 本研究における解析手法

A three-dimensional direct numerical simulation has been carried out by IFS super computing system. The code is modified from a massively parallelized and benchmarked incompressible FORTRAN solver in our earlier studies. The code uses a finite volume method on a regular structured grid with a co-located storage arrangement for all flow variables. Fourth order accurate central differences are used for all spatial derivatives combined with second order accurate time integration using Adams-Bashforth time advancement for the non-linear terms and the Crank-Nicolson scheme for diffusive terms. Mass conservation is enforced using a fractional step method.

For the temporal framework, the Rayleigh number increases with time and the flow field are instantaneous and transient. To gain sufficient turbulence data and to reach the ultimate turbulent regime, simulations were run for ~35 non-dimensional time. Over 1 billion cells are used in the simulations to ensure the Komogorov scales (for Pr <1) and Batchelor scales (for Pr>1) are resolved.

2.2 本研究による新知見

The attached figure shows an instantaneous remultiplied spanwise power spectra for the streamwise velocity fluctuation. The data was obtained using the temporal framework at different Prandtl numbers, varying from Pr =0.71, Pr =4.16 and Pr =6. Evidently, as Prandtl number increases the turbulence streaky signature expands its width when normalized by the friction scales. At Pr =0.71, the streaks has a similar spacing to the canonical forced flows; whereas at Pr =4.16 and Pr =6 these spacing becomes wider suggesting the shear is less energetic as buoyancy becomes stronger.

3. 研究目標の達成状況

This year, the project has resulted in two papers presented at international conferences and another presentation at the domestic ICFD2025 in Tohoku University. The project has also resulted in one joint journal publication in the Journal of Fluid Mechanics. There is one more paper, focusing on the turbulent statistics of spatially developing turbulent boundary layers, under preparation. In conclusion, it can be said that 90% of the research objectives were achieved.

4. まとめと今後の課題

The present study investigates the vertical natural convection in both spatial and temporal framework, with Prandtl number covering from 0.71 (air) to 6 (water). This year, we are able to successfully quantify the effect of the Prandtl number, using a temporal framework, on the turbulent natural convection, and revealed that how buoyancy mechanistically modify the turbulence structure in the turbulent regime.

In future study, we will continue our ongoing simulations to explore the effects of the non-OB condition on the flow transition, as well as the turbulent heat transfer for the buoyant flow in both spatially developing and temporally developing setups.

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）

Junhao Ke, Atsuki Komiya, Steven W. Armfield, Nicholas Williamson, On the role of moderate Prandtl numbers in vertical natural convection. J. Fluid Mech., 1029 (2026), A37.

国際学会

Ke Junhao: On the role of Prandtl number in turbulent natural convection, in the 13th Australasian Natural Convection Workshop (2025), Canberra ACT Australia.

Lu Jinshuyang: Turbulence statistics for vertical natural convection boundary layer, in the 13th Australasian Natural Convection Workshop (2025), Canberra ACT Australia.

Lu Jinshuyang: Turbulent modelling and statistics for vertical natural convection, in the International Conference on Flow Dynamics (2025), Miyagi Japan.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

N/A

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP02APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 01 日提出

ソニックブーム評価関数の気象モデルへの実証

焼野　藍子
東北大学流体科学研究所　准教授
Hiroshi Yamashita, Bastian Kern
Institute of Atmospheric Physics, German Aerospace Center
鵜飼　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を基づき，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．

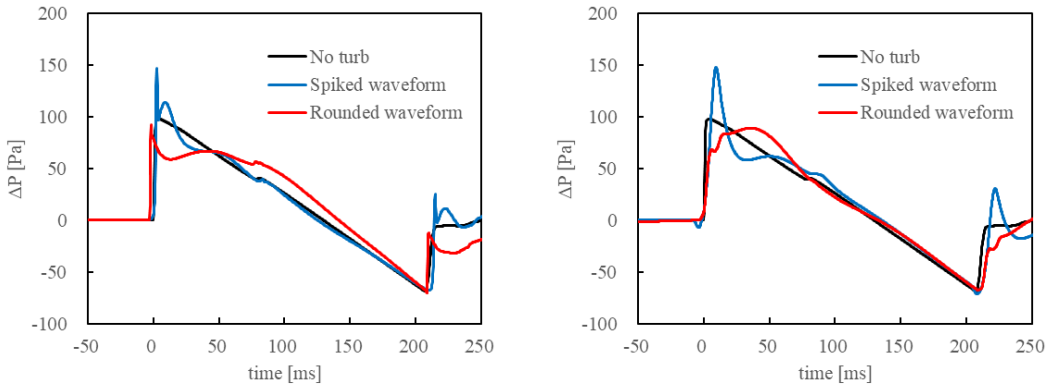
2. 研究成果の内容（共同研究の場合はその意義について最初に記述してください）

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± 15°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± 90°までの圧力伝播を模擬可能な一方向近似によるソニックブーム伝播解析法（HOWARD：heterogeneous one-way approximation for resolution of diffraction）を構築し，乱流場の通過時に生じる回折現象を高精度に捉える．この手法の有効性を検証するため，KZK 法および HOWARD 法を用いて，一様等方性乱流場を通過するソニックブーム伝播計算を行い，それぞれの結果を比較した．

圧力伝播シミュレーションの妥当性を評価するための解析対象機体として，過去に唯一の商業運航実績を有する超音速旅客機「コンコルド」のブーム伝播計算を行った．コンコルドの機体形状の詳細な数値データが一般に公開されていないため，外形情報を基に作成した「疑似コンコルド形状」に対し，CFD 解析を実施して得られた近傍場圧力波形を用いた．乱流場には，観測された気象データに基づき，大気乱流を空間的に一様な均質乱流場として仮定し，慣性領域から散逸領域までの乱流エネルギー分布を適切に表現できる von Karman-Pao の乱流エネルギースペクトルを用いてモデル化した．乱流速度変動はランダムフーリエモード法によって生成し，均質な乱流場を構築した．この乱流場を用いて，ソニックブームが乱流中を伝播する際の圧力波形の変化を数値的に解析した．数値計算では，乱流による回折波や音圧場の変化を十分に再現できるよう，広い計算領域を設定した．また，計算精度と計算コストのバランスを考慮して，音圧場および乱流場の空間分解能を決定した．さらに，乱流の影響を統計的に評価するため，空間分布の異なる複数の乱流場を生成してシミュレーションを実施した．ただし，各ケースでは乱流の強度やエネルギー散逸率などの乱流特性は一定とし，乱流の空間構造のみを変化させることで，ソニックブームの圧力波形に及ぼす乱流の影響を評価した．

その結果，HOWARD 法は，従来手法である KZK 法によるブーム伝播計算と同等のブーム波形計算が可能であることが確認された．各手法によって得られた特徴的なブーム波形を図 1 に示す．乱流場および圧力場の空間分解能は，地上で観測されるブーム波形に影響を及ぼすことが知られており，KZK 法と HOWARD 法では要求される適切な空間分解能が異なる．本研究では，各手法の特性に応じて空間分解能を設定しているため，両手法による結果の比較には注意が必要である．しかしながら，KZK 法と同様に，HOWARD 法においても乱流場の通過によって生じる特徴的な波形であるスパイク型およびラウンド型のブーム波形を再現できることが確認された．今後，統計的な比較検討を行う必要があるものの，本研究で構築した HOWARD 法により，乱流干渉を受けたブーム波形を推定可能であることが示された．さらに，厳密解との比較による基礎評価から，Lighthill-Westervelt 方程式に対する一方向近似である HOWARD 法は，放物線近似に基づく KZK 法と比較して，より広範囲にわたる圧力波の回折現象を高精度に計算できることが確認されている．このことから，地上におけるブーム波形の推定においても，従来手法である KZK 法を上回る精度が期待される．



(a) KZK 法　　(b) HOWARD 法

図 1　各手法によって得られた地上におけるブーム波形の比較

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，鉛直プロファイルをそのまま Kriging 法の入力変数とするには次元が大きすぎるため，固有直交分解（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．

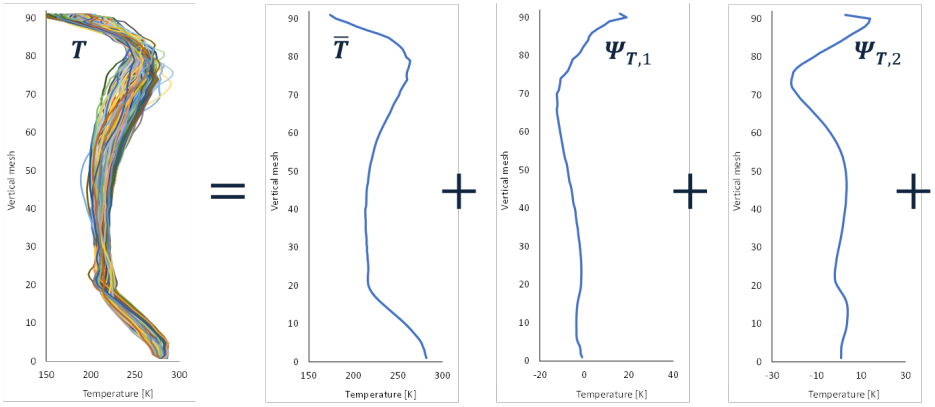


図 2　固有直交分解による温度鉛直プロファイルのモード分解例

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た. 図 3 は 10 年間の最大過剰圧を示しており，黒の実線は移動平均を表し，灰色のハッチングは平均からの日ごとの偏差を示している．クリギング代理モデルは，2009 年 3 月から 2018 年 2 月までのデータセットを用いて構築されている．図 4 はクリギング代理モデルを用いて，2018 年 3 月から 2019 年 2 月までの期間（図 3 の赤い枠内）における低位置ブーム型超音速航空機による最大過圧の予測値を，シミュレーションによる最大過圧値と比較したものである．この結果から年間の季節性の変動の予測は可能であることが確かめられた．一方で，日々のランダム性の強い変動は直接予測するのではなく，統計的な扱いが必要であると考えられる．

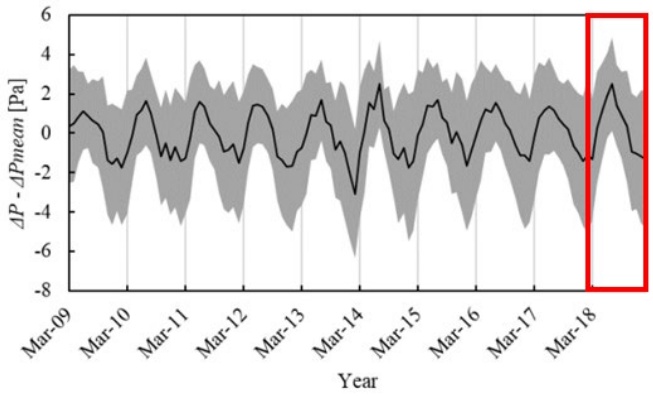


図 3　過去 10 年間の過圧の推移.（黒の実線は移動平均を示し，灰色のハッチングは平均からの日ごとの偏差を表す）

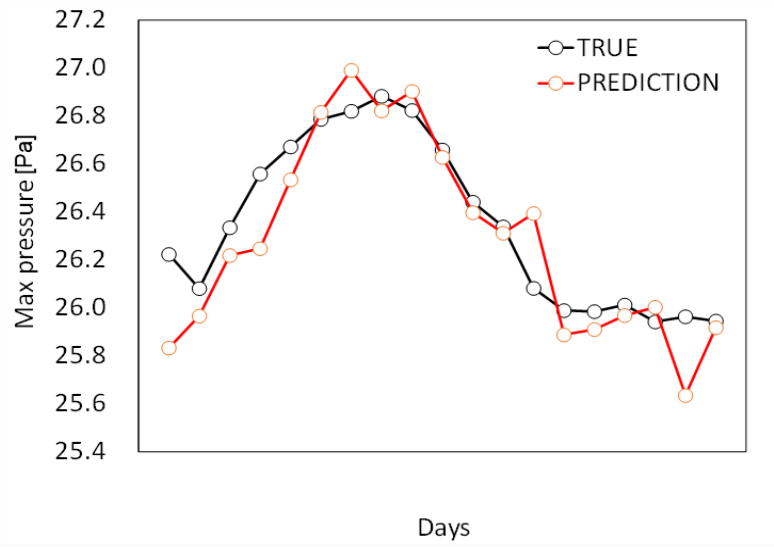


図 4　クリギング代理モデルを用いた 2018 年 3 月から 2019 年 2 月までの期間（図 3 の赤い枠）の予測と，シミュレーションによる最大過剰圧との比較

3.　研究目標の達成状況

10 年間の気象データに基づくソニックブーム伝播解析結果を用いて，Kriging 法によるサロゲートモデルの構築について検討した. その結果, 年間スケールで生じる季節変動については, サロゲートモデルによる予測が可能であることが確認された．一方で，日々の気象条件に起因するランダム性の高い変動については，直接的な予測ではなく，統計的な取り扱いが必要であることが示唆された．さらに，大気乱流を含む複雑な気象条件に対応可能な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伴う音波回折現象を高精度に解析する手法として HOWARD 法を構築した．以上の成果から，本年度に設定した目標は概ね達成されたと判断される.

4.　まとめと今後の課題

本研究では，気象条件を考慮したソニックブーム推定手法の高度化に向けて，大きく二つの課題に取り組んだ．まず，大気乱流との干渉によるソニックブーム波形の変化を高精度に解析するため，Lighthill-Westervelt 方程式に基づく一方向近似手法である HOWARD 法を構築し

た．従来手法である KZK 法と比較した結果，乱流通過によって生じる特徴的なスパイク型およびラウンド型のブーム波形を再現できることを確認するとともに，広範囲の回折現象をより高精度に解析できる可能性を示した．次に，過去 10 年間の気象データに基づくソニックブーム伝播解析結果を用いて，Kriging 法によるサロゲートモデルの構築について検討した．その結果，最大過剰圧の年間スケールにおける季節変動は良好に予測できることが確認された一方，日々の気象条件に起因するランダムな変動については，統計的な取り扱いを導入する必要があることが明らかとなった．今後は，HOWARD 法を用いて多数の乱流条件に対する統計的評価を実施するとともに，その解析結果を学習データとしてサロゲートモデルへ反映することで，日々の変動を含めたソニックブーム騒音の予測が可能な，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-first International Conference on Flow Dynamics, ICFD 2024, 18-20 November 2024, Sendai.

[2] Hiroshi Yamashita, Bastian Kern, Takahiro Ukai, Takashi Misaka, Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi, Surrogate Modeling of Sonic Boom Loudness Under Atmospheric Variability, Twenty-Second International Conference on Flow Dynamics, ICFD 2024, 10-13 November 2025, 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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP03APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 13 日提出

非平衡的挙動を示す乱流場における
エネルギ・スカラ輸送機構に関する数値研究

服部裕司
東北大学流体科学研究所　教授
伊藤靖仁，Muyang Wang
名古屋大学大学院工学研究科　教授，ハルビン工程大学　講師
長田　孝二，渡邉　智昭，Yi Zhou
京都大学大学院工学研究科　教授，准教授、南京理工大学　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，本研究グループでは「非普遍的な乱流場における乱流エネルギ・スカラ輸送機構に関する基礎研究」「非普遍的な乱流場における乱流エネルギ･スカラ輸送機構に関する基礎研究」というテーマで共同研究を行ってきた．その結果，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，得られた結果に対して乱流統計解析を行う．特に平衡性やエネルギとスカラの相似性に着目した現象解明を行う．

1.2 研究期間内の最終目標

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

本節では矩形物体の後流に関する研究成果について述べる．本研究では，特に境界条件が通常の Non-slip ではない場合に着目した．鈍体後流における乱流は，渦放出や剥離せん断層によって乱流のエネルギーカスケードが生じる非平衡的な流れである．こうした流れにおいて，境界条件が乱流エネルギー輸送をどのように変化させるかを理解することは重要である．この点において，超疎水性表面で見られるような Navier すべり境界条件，すなわち流れ方向すべり成分のみが有効となる異方的な性質を有する場合には，壁面における抗力低減をもたらすことが知られている．しかし，この異方性の影響が剥離を伴うような流れでも見られるか，またその場合のメカニズムは未解明である．そこで本研究では，Navier すべり境界条件を含む様々な境界条件を課した角柱周りの乱流流れに対して 直接数値計算（DNS）を実施し，特に流れ方向すべり条件がエネルギー輸送に及ぼす影響およびその機構を明らかにすることを目的とした．

計算領域および角柱周りのグリッドメッシュを 図 1 に示す．シミュレーションは高次スペクトル法ソルバーである Nektar++を用いた．角柱幅基準のレイノルズ数は $Re_D = 3900$ とした．ただしコーナー特異性を緩和するために小さなフィレット（$r/D = 0.02$）が施されている．スパン方向長さは πD で，128 のフーリエモードを用い，要素次数は 6 とした．境界条件として，基準となる滑り無し条件，均質な滑り条件および Navier 滑り条件を設定した．ただし，滑り条件については滑り長を λ/D=0.01 または 0.2 とした．計算精度については，滑り無しの場合に対して既存データとの整合性を確認した．

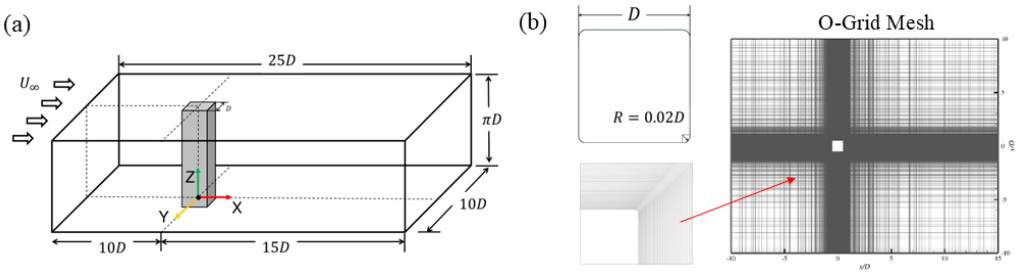


Fig. 1. (a) Computational domain and (b) O-grid mesh around the square prism with fillet corners ($r/D = 0.02$).

図 2 に乱流エネルギーTKE の空間分布を示す．5 つのケースの中で，$\lambda/D = 0.2$ の流れ方向すべりのみを与えた条件が最も顕著な変化を示した．流れ方向すべり条件の場合では，角柱近傍に明確な低 TKE 領域が形成され，下流の高 TKE コアが大幅に短縮されることがわかる．これに対して，同じ λ における均一すべり条件では，変化が小さく質的にも異なる応答を示した．つまり，すべり量ではなく**すべり方向**が後流応答を支配することを示唆している．

図 3 に，後流中心線上の TKE 収支解析結果を示す．すべりなし条件では角柱直後から TKE 生成が正となるのに対して，大きな流れ方向すべりを与えたケースでは近傍領域で TKE 生成が負となる．このため，乱流エネルギー生成が抑制され，乱流バーストの発生が遅延し，結果としてコヒーレント構造の出現が下流側へ移動すると言える．

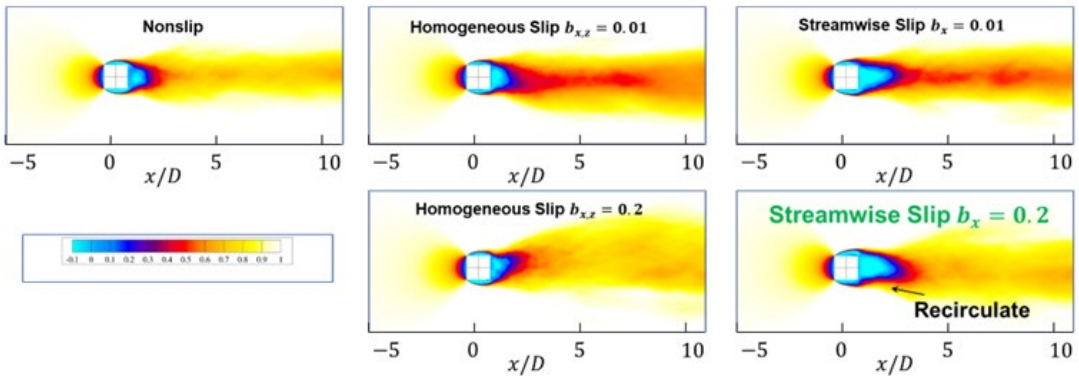


Fig. 2. Two-dimensional distribution of turbulent kinetic energy for the five cases.

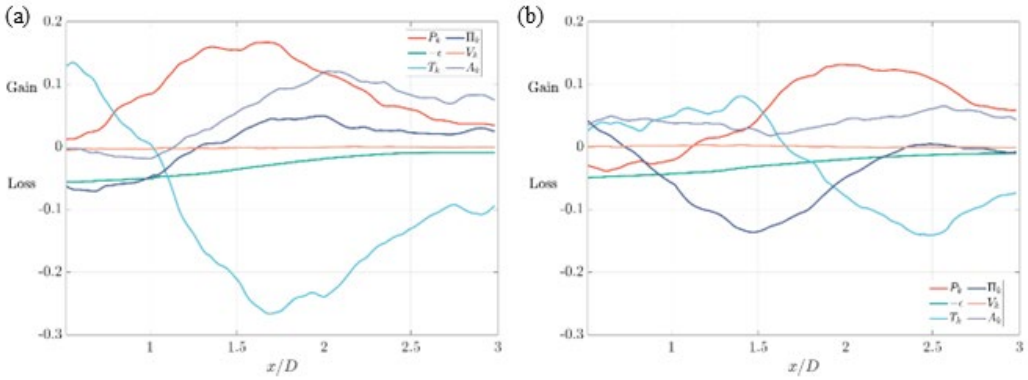


Fig. 3. Turbulent kinetic energy budget along the wake centreline for (a) no-slip and (b) streamwise-only slip at $b_x/d = 0.2$.

3. 研究目標の達成状況

本研究では非平衡的乱流場というキーワードの元に様々な流れ場に対して研究を行っている．プロジェクトの 2 年目である本年度は，上記のような通常とは異なる境界条件を有する物体後流流れに対しての新しい知見を得るなど，研究はおおむね順調に進捗していると言える．これから得られた成果を論文発表することで，学術的な意義を強固なものにしていく所存である．

4. まとめと今後の課題

これまで後流流れや圧縮性を伴う流れ場のエネルギ・運動量輸送に関する研究を中心に行ってきた．次年度は速度場に関する理解を深めるとともに，スカラ輸送に及ぼす非平衡性の影響についても取り組み，運動量輸送とスカラ輸送の相似性/非相似性についても議論する．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. Rongji Hu, Yuanliang Xie, Xue-Lu Xiong, Yuling Zheng, Jianyu Chen, Yi Zhou: Turbulent/nonturbulent interface in a spatially evolving compressible turbulent boundary layer, Phys. Fluids 37, 035101 (2025)

国際学会

2. Muyang Wang, Yasumasa Ito: On the Effect of Navier Slip Length on Turbulent Transport in the Wake behind a Square Prism, Proc. of the 25th Int. Conf. Flow Dynamics, Sendai, 2025, pp.1149-1150.
3. Muyang Wang, Yasumasa Ito, Koji Nagata, Tomoaki Watanabe, Yi Zhou, Yuji Hattori: Numerical study on turbulent transport of energy and scalar behind a square prism with Navier slip boundary, AFI, Sendai, (2025), CRF52.

国内学会・研究会等

4. 楠畑天音，渡邉智昭，長田孝二: 乱流と干渉した垂直衝撃波の圧力等値面による波面変形の解析"，2025 年度衝撃波シンポジウム（2025）

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP04APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 13 日提出

乱流中の渦の 3 次元渦流構造と乱流場との相対特性に関する解析

服部裕司
東北大学流体科学研究所　教授
中山　雄行
愛知工業大学工学部機械学科　准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

乱流における渦は、気象や海洋・河川等の自然界また機械・発電・自動車等様々な工学分野の流れの特性に影響を与え、特に工学分野では製品の性能や信頼性・健全性に大きく関わる。渦の発生の予測、また工学分野における渦の完全な抑制は困難であるが、渦が発生する環境や条件、また発生した後に形成する渦構造、即ち外部流れに対して形成する渦構造の特性を把握することは流動設計の信頼性において重要である。

圧力極小、また渦伸長による渦の発達等の渦の特性を定めるものは、速度ではなく速度勾配テンソルの場の構造である。この場が渦流の旋回平面上でどの様な分布を有しているか、という点が渦の重要な上記特性を定めている。一方で、この速度勾配テンソルは、渦流のローカルトポロジーを定め、局所的な渦流の楕円構造等の特定にも用いられている。このローカルトポロジーに基づき、渦流の旋回平面上の楕円軌道の長短軸を基底とするガリレイ不変の渦空間座標系が提案され、渦中心における本座標系を定義することにより、旋回平面上の渦流や渦流に関連付けられた速度勾配テンソルの場の特性を評価することが可能となった。

本研究では、一様等方性乱流の DNS(Direct Numerical Simulation)において、渦流の楕円構造・非軸対称性に基づく座標系を用いて速度勾配テンソル場の幾何学的特性・周期特性を明らかにすると共に、これらの渦流構造と渦コア領域外の乱流場との相違、相対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

一様等方性乱流の DNS において、swirlity を用いて同定する渦領域・渦中心にて渦空間座標系を定義し、旋回平面上の楕円的渦流の長短軸方向に関する速度勾配テンソルの歪み成分、せん断成分の分布を渦領域内外を含めて特定し、その幾何学的特性を明らかにする。これら

の幾何学的特性では、速度勾配テンソルの成分をフーリエ変換し、その周期特性と支配的な成分を明らかにする。

2. 研究成果の内容

本研究は、以下に示す様な速度勾配テンソル場の解析手法、並びに一様等方性乱流での渦流の速度勾配テンソル場の特徴ある幾何学的特性を明らかにした。これは、本共同研究におけるスパコンの利用、また解析に関する意見交換により実現できたものであり、渦構造の解明において重要な成果であると考えられる。

2.1 旋回平面上の渦流に関連付けた速度勾配テンソル場の解析手法の開発

swirlity の極大値を渦中心とし、この点での渦空間座標系を定義して楕円的渦流軌道の長短軸に関わる速度勾配テンソルの歪み、せん断成分の分布特性を求め、更に渦中心周りのテンソル成分の分布に関するスペクトル解析を行うことにより、これらの波数特性を評価する解析を構築した。これにより、現実的な渦の速度勾配テンソルの幾何学的特性を詳細に特定することが可能となる。また、旋回平面上の全てのテンソル成分について分析を行うことにより、軸流の特性を解析することも可能である。これらは、現実的な渦モデルの構築にも有益な知見を提供できる。

2.2 旋回平面上の速度勾配テンソル場の幾何学的特性の解明

一様等方性乱流の渦において、楕円的渦流の長短軸に関する速度勾配テンソルの二つのせん断成分は、共に渦中心周りにて極大領域を形成し、楕円的な分布を有する。短軸に関するせん断成分の極大分布は長軸側のものより大きく、楕円的極大領域は渦領域外にも伸びている。一方、長軸側のせん断成分は渦領域内で極大領域を形成しており、従って短軸側のせん断成分が渦形成のバックグラウンドであると考えられる。また、長短軸方向に関する歪み成分は、渦中心で同じ値を有し、共に渦中心周りに正負の周期的な分布を有する。即ち、山と谷が存在する幾何学的特性を有する。渦中心近傍の歪み成分の分布特性は、渦領域外のものと異なっており、渦の形成により構成される特性であると考えられる。この複雑な幾何学的特性は、座標系を回転することにより変化するが、何れもこれらの分布特性は二次形式により表されると考えられる。

渦中心周りのこれらのせん断並びに歪み成分の分布をフーリエ変換し、スペクトルを評価すると、全てのテンソル成分において波数 0, 2 のフーリエ係数が主な成分であり、これらのテンソル成分の主要な特性は二次形式により表すことができることを確認した。

3. 研究目標の達成状況

一様等方性乱流の DNS において、渦流を構成する旋回平面上の速度勾配テンソルの歪み成分、せん断成分の場の分布を渦領域内外を含めて特定し、これらの幾何学的特性が全て二次曲線的な分布であることを明らかにした。せん断成分は楕円的な極大領域、また歪み成分は双曲線的な分布を有し、渦中心周りのこれらの分布のスペクトルでは波数 0, 2 のフーリエ係数が主要な成分であることを示した。これらにより、現実的な非対称渦の一つである本乱流の渦の速度勾配テンソル場の構造が明らかにされ、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 DNS における渦に関し、渦流を形成する速度勾配テンソルの分布についてこれらの渦領域内外の幾何学的特性を明らかにした。今後は、渦モデルを用いた歪み中の渦に関する解析における速度勾配テンソル特性との比較を行うと共に、異なるレイノルズ数での変化について引き続き解析を行う。

また、非対称性の渦モデルは未確立であり、この構築に向けた適性条件として本研究成果の活用を進める。

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）

なし

著書

なし

国際学会

(1) Katsuyuki Nakayama: A Foundational asymmetric vortex model based on local flow geometry and interaction with bundle of vorticity lines, Proceedings of the International Conference - Toward World Consensus on Vortex Definition and Prediction: Vortex 2025, Springer Proceedings in Physics (Springer Nature), (2026) (accepted).

(2) Katsuyuki Nakayama: A Foundational asymmetric vortex model based on local flow geometry and interaction with bundle of vorticity lines, US NSF Sponsored International Conference VORTEX2025 Toward World Consensus on Vortex Definition and Prediction, (2025).

(3) Katsuyuki Nakayama: Characteristics of formation of vortical structure in homogeneous isotropic turbulence, Proceedings of the Twenty-second International Conference on Flow Dynamics, (2025), pp. 1170-1171.

(4) Katsuyuki Nakayama, Kazuki Sakurai, Tomoki Nishino, and Yuji Hattori: An analysis of geometrical characteristics of bundles of vortical axis lines and formation of turbulent vortical flow structure, Proceedings of the Twenty-fifth International Symposium on Advanced Fluid Information, (2025), pp. 218-219.

(5) Kazuki Sakurai and Katsuyuki Nakayama: Characteristics of an axial flow of a vortex in homogeneous isotropic turbulence, Proceedings of the Twenty-second International Conference on Flow Dynamics, (2025), pp. 1630-1631.

国内学会・研究会等

(1) 中山雄行 : 渦の生成に関する速度勾配テンソル場の解析, 第 29 回応用力学シンポジウム/第 68 回理論応用力学講演会, (2026), 11013.

(2) 櫻井和貴，中山雄行：一様等方性乱流の乱流渦における軸流発生メカニズムの解析，日本機械学会 2025 年度年次大会, (2025), J051p-06.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP05APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 18 日提出

表面修飾ナノ材料／媒体間のナノ・メゾ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，斎藤高雅，佐藤悠都，黒沢陽一朗
東北大学大学院工学研究科　教授，助教，博士課程後期 2 年，博士課程後期 1 年
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およびナノ粒子を高分子中に内包したナノコンポジット材料は，バルク体とは異なる特異な性質を発現することから，広範な分野での応用が期待されている。これらのナノ材料では，媒体中におけるナノ粒子の空間構造が機能を左右するため，精緻な構造設計手法の確立が必要である．ナノ粒子表面への有機分子修飾は，媒体中においてナノ粒子を分散安定化する手法として有効である．表面修飾はナノ粒子と媒体間の界面親和性を向上させるため，目的とするナノ粒子の空間構造を得るには粒子・修飾鎖・媒体の適切な選定が重要である．

混合溶媒は，混合比や溶媒種によって分散安定性を効果的に調整できるため，ナノ粒子製造プロセスにおける分離精製や構造形成に利用される．したがって，界面構造に及ぼす溶媒組成の影響を明らかにすることが重要である．

本研究では，表面修飾ナノ粒子を用いた各種材料の製造プロセスの設計・最適化に資するため，表面修飾ナノ粒子と媒体間とのナノ・メゾ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種々の混合溶媒との界面現象

本年度は，粒子スケールシミュレーションに必要な情報の獲得を志向して，分子動力学シミュレーションによる表面修飾ナノ粒子/分散媒界面現象の解明を行った．特に，実用系において重要となる混合溶媒系に着目して検討を行った．

ナノ粒子表面の一部を模擬した表面修飾固体平板上に溶媒膜を配置した界面系を対象とした. 固体には表面を水酸化した α-Al_2O_3 (0001), 修飾鎖にはデカン酸を用い, 表面修飾率は 50% (2.4 分子/nm2)とした．混合溶媒には粒子に対する良溶媒としてヘキサン，貧溶媒としてエタノール，1-プロパノールを用いた．混合溶媒中のアルコール体積分率を種々変更した．温度は 300 K，圧力は 1 MPa で制御した．計算には LAMMPS を用いた．

アルコール体積分率 60 vol%でのデカン酸修飾 Al_2O_3 と混合溶媒との界面近傍の状態を可視化するとともに，界面垂直方向の質量密度分布を評価した．いずれの系においても溶媒は修飾鎖層に浸透し，アルコールは Al_2O_3 表面に強く吸着した．質量密度分布において，1-プロパノールの吸着ピーク，すなわち Al_2O_3 表面近傍の質量密度分布はエタノール系よりも幅広かった．これは，1-プロパノールが Al_2O_3 表面に対して垂直に吸着したためである．その結果，修飾鎖層内に溶媒が浸透可能な空間はエタノール系よりも小さかった．

2.2 異なる溶媒種における界面親和性と溶媒組成との関係の評価

密度分布の結果を用いて，修飾鎖層への溶媒の浸透度を評価することができる．そこで，種々の溶媒種においてアルコールの浸透度とアルコール体積分率との関係を調べた．いずれの溶媒種においてもアルコール浸透割合の変化は非線形であった．0–40 vol%において浸透割合は小さく同程度であった．これは修飾鎖層内が親和性の高いヘキサンで満たされているためである．60 vol%において，1-プロパノールの浸透割合はエタノールよりも大きかった．これは，分子中により多くの炭化水素基を有し，修飾鎖との疎水性相互作用が強いためと考える．80 vol%においていずれのアルコールも浸透度は大きくなった．

3. 研究目標の達成状況

これまでの検討によって，実プロセスで重要となる混合溶媒を対象に，MD シミュレーションを用いて，表面修飾ナノ粒子と混合溶媒間における界面現象を解析した．そして，様々な溶媒種に対して，混合溶媒の浸透挙動ならびに固体表面への吸着挙動を分子スケールの観点から解明する成功した．分子スケールの解析結果から，粒子スケールシミュレーションに必要となるナノ粒子表面における表面修飾剤の界面構造，すなわち表面修飾鎖の層の厚さならびに表面修飾鎖の層における溶媒の存在割合などの情報を獲得することが可能になった．以上のことから，概ね目標達成と見なせると考える．

4. まとめと今後の課題

本研究により，実プロセスにおいて重要な混合溶媒に対して，MD シミュレーションを用いて，表面修飾ナノ粒子と混合溶媒間における界面現象を解析し，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ための知見を獲得することができた．そして，粒子スケールシミュレーションに必要となる情報を獲得する手法を確立することができた．

今後は，分子スケールシミュレーションで獲得した情報を，実際に粒子スケールシミュレーションに組み込み，媒体中における表面修飾ナノ粒子の構造形成挙動を解析する．そして，表面修飾ナノ粒子を含有する媒体を用いたナノ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し，これまで試行錯誤的であったナノ材料の構造および機能を，理論的知見に基づいて設計・制御すること手法を確立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（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

1. Yuto Sato, Yoichiro Kurosawa, Takamasa Saito, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Atsuki Komiya, Takaaki Tomai, Masaki Kubo : Evaluation of interfacial affinity between surface-modified metal oxide and solvent mixture using molecular dynamics simulations, The Journal of Chemical Physics, 163, (2025), 074702.

国際学会

2. Yuto Sato, Takamasa Saito, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Atsuki Komiya, Masaki Kubo: Effect of Solvent Mixture on Interfacial Phenomena between Surface-Modified Metal Oxide and Binary Mixtures of Organic Solvents, The 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, (2025), CRF-31.
3. Yuto Sato, Yoichiro Kurosawa, Takamasa Saito, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Atsuki Komiya, Takaaki Tomai, Masaki Kubo: Evaluation of Interfacial Structure and Affinity between Surface-Modified Inorganic Solid and Solvent Mixture Using Molecular Dynamics Simulations, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu, Hawaii, (2025), 4330687.

国内学会・研究会等

4. 佐藤悠都, 斎藤高雅, 庄司衛太, 菊川豪太, Surblys Donatas, 笘居高明, 久保正樹: 表面修飾固体／混合溶媒界面の構造に及ぼすアルコール溶媒種の影響, 化学工学会第 91 年会, 京都, (2026), K113.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP06APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 17 日提出

火星飛行機実現に向けた柔軟膜翼の非定常空力特性解明

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，船田　光星，木村　泰士
大阪公立大学大学院工学研究科　教授，修士，修士
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（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

超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，実験と同様の解析を実施し，薄い柔軟膜翼に生じる振動の再現を目指す．そのために，格子幅より薄い翼の非定常空力構造連成解析の妥当性を実験との比較を通して示す．更に，その解析結果を分析し，柔軟膜翼の振動が流れ場に及ぼす影響とその要因の解明を目指す．

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，格子幅よりも薄い物体を対象とした流体解析を実現するために Ghost cell 法を改良した．さらに，多粒子系モデルに基づく構造解析手法を統合し，流体構造連成解析へと拡張させた．構造解析における数値減衰の除去と，流体・構造間の時間同期を実現することで，非定常連成解析を可能にした．

更に，拡張した流体構造連成解析手法を用いて柔軟膜翼の解析を行った．解析対象は風洞実験で使用されている翼模型を参考にした，翼弦長 $c=5.0\times10^{-2}$ m，弾性係数 E=7.4 MPa の柔軟膜翼である．膜翼には予ひずみを与えることで剛性を変化させることが可能である．解析条件は迎角 4 度，レイノルズ数 30000，計算格子幅は 0.800×10^{-4} m である．その結果，膜翼に与える予ひずみの大きさにより，翼変動の様子が変化することが確認できた．予ひずみを 3.5%与えた膜翼では，翼のどの位置においてもほぼ同一の位相で周期的な変形が繰り返されている．一方で，予ひずみを 1.4%与えた膜翼では，翼全体で平均的な変位が生じて正のキャンバを維持しつつ，各位置において細かな振動が表れている．翼の変動を表す波形は高周波数成分を含んでおり，膜翼は高次モードで振動している．これは，張力の減少により膜の剛性が低下した結果，前縁から放出される渦による微細な圧力変動に対して，翼の各位置において局所的に追従しやすくなったためであると考えられる．揚力係数の変動に関しても，高周波数の振動が確認されており，膜の変形と流れ場の変動が相互的に干渉していることが明らかとなった．

なお，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．しかし，実験との詳細な比較をするためには解析条件等が不足しており，今後迎角を変更した解析をして，比較を進める予定である．

3. 研究目標の達成状況

本研究では，構築した流体構造連成解析手法により，格子サイズより薄い柔軟膜翼の非定常流れ場の解析が可能であることを示した．その結果，風洞実験の解析条件を模した柔軟膜翼の解析を実行することが可能となった．風洞実験のレイノルズ数である 30000 において，柔軟膜翼の解析により膜の剛性による揚力係数の変動の影響を明らかにした．また，柔軟膜翼を使用することで，より前縁に近い位置での圧力回復が確認でき，剥離した流れの再付着が促進されていると考えられる．ただし，今年度解析できた迎角は 4 度のみであることから，当初計画である実験との詳細な比較や解析精度等の検証は未実施である．

4. まとめと今後の課題

本研究では，格子幅よりも薄い物体を解析対象とする流体構造連成解析手法を構築した．また，構築した手法を用いて，風洞実験と同じレイノルズ数域における柔軟膜翼の運動とそれがもたらす空力性能への効果を調査した．膜翼に与えられる予ひずみによって変形の様子に差が見られ，揚力係数の変動にも影響が表れることが確認できた．一方，今年度実施できた解析は迎角 4 度のみであることから，迎角を変えた解析を実施して，風洞実験との比較を行うことが必要である．また，解析手法の妥当性や解析精度の検証も行う必要がある．更に，高迎角での現象解明には本解析手法の 3 次元化が不可欠である．

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, Taishi Kimura, Daisuke Sasaki, Koji Fujita, Masato Okamoto, Yuki Kawamoto, Shun Takahashi, Tsubasa Ikami, Hiroki Nagai: Unsteady Aerodynamic Characteristics of a Thin Elastomeric Membrane Wing by Fluid-Structure Interaction Analysis, Proceedings of the Twenty-Second International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2025), OS7-5.

Taishi Kimura, Kosei Funada, Shota Inoue, Daisuke Sasaki, Yuki Kawamoto, Masato Okamoto, Tsubasa Ikami, Hiroki Nagai: Computational Study of Thickness Effect on Aerodynamic Performance of a Flat Plate at Low Reynolds Number Flow, Proceedings of the Twenty-Second International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2025), OS27-10.

国内学会・研究会等

船田光星，井上翔太，佐々木大輔，川本裕樹，高橋俊，伊神翼，永井大樹：エラストマー素材を用いた柔軟膜翼の流体構造連成解析，日本流体力学会年会 2025 講演論文集，(2025).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP07APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 18 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
金沢大学理工学域フロンティア工学系　助教，教授
永井　大樹
東北大学流体科学研究所　教授
赤羽　峻瑛，原　大生
金沢大学大学院自然科学研究科，修士

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

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，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．回転翼空気力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．

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．

1.2 研究期間内の最終目標

2025 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，システム更新に伴い解析に用いていた CFD ソルバーが利用できなくなったため，プロジェクトにおける作業は既解析データの可視化に限定された．

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 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．

2.2 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 2024 年 4 月以前に，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．解析データの可視化と空気力の比較を行い，学術雑誌に投稿した．

3. 研究目標の達成状況

2024 年 5 月から 2026 年 3 月まで解析作業を行えていない．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，作業を中断していた．システム上で可視化作業を行い，流れ構造の把握とロータブレード表面の圧力分布を把握した．

4. まとめと今後の課題

一連の研究により，実験では難しいロータ間流れの流れ構造を 3 次元的に把握することができた．特に，風洞試験での予備実験が難しい初期段階で，ロータ形状の変更によりピッチングモーメント低減効果の示唆を得たことで，風洞試験を速やかに進めることができた．ロータ間の干渉流れは実験による可視化では乱れた様子を得られるものの速度場の評価が難しかった．本数値解析は，平均場についてロータ間の流れ干渉構造を明らかにした．

今後の課題は，体系化に至っていない流れ干渉時のロータ推力と，ロータの効率を示す Figure of merit についての機体パラメータ変化に対する感度評価である．2025 年度末を持ってプロジェクトでの数値を終了するが，風洞実験による評価を継続する予定である．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

[1] Hikaru Otsuka, Shunei Akaba, Taisei Hara, Hiroki Nagai, Hiroshi 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.

[2] Hikaru Otsuka, Hiroki Nagai, Hiroshi Tokutake, “Negative coning angled blades for reducing small rotor pitching moment in forward flight,” Transactions of the Japan

Society for Aeronautical and Space Sciences, (2026), in press.

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.

[4] Taisei Hara, Hikaru Otsuka, Hiroshi Tokutake, Hiroki Nagai, "Design Considerations for Landing Pads with Airflow Holes for Small Rotorcraft," The 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, Japan, 11/11, 2025.

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）

[1] 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, 日本航空宇宙学会.

[2] The 22nd International Conference on Flow Dynamics Best Presentation Award for Young Researcher, “Design Considerations for Landing Pads with Airflow Holes for Small Rotorcraft,” Taisei Hara, Hikaru Otsuka, Hiroshi Tokutake (Kanazawa University, Japan), Hiroki Nagai (Tohoku University, Japan), ICFD2025, Sendai, Japan.

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP08APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　2　回報告

2026 年 08 月 17 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
金沢大学理工研究域　助教
伊神　翼
東北大学流体科学研究所　助教
佐々木　大輔，大崎歩乃花
大阪公立大学工学研究科　教授，修士
佐々木　悠斗
金沢大学大学院自然科学研究科　修士
川本　裕樹
東海大学工学部　研究員

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

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の流れの 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．低迎角で流れが剥離する平板について，突起の付加による空力特性変化の作用の有無を評価する．

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 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 平板上の突起配置の違いによる剥離流れの 3 次元解析

平板上に，半球突起を配置して，迎角を変えた際の剥離領域の大きさを比較した．本研究期間においては，突起のピッチと形状を共通として，列数と前後列のスパン方向の相対位置を変化させて，揚力係数と抗力係数を比較した．また負圧面の圧力分布を比較した．

本解析の範囲内で突起配置を変化させ，迎角 3° 以下では，突起が空力特性に影響しないことを確認した．一方で，ロータブレードで想定している有効迎角に相当する 6° では突起を 3 列として前後の突起が重複するように配置すると推力係数が増加した．ただし，推力係数の差異は，数値の振動に比べて小さいため，有意な差は認められなかった．さらに，揚抗比で比較すると，形態間の差は見られなかった．

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．

解析条件の範囲内では，平板の前縁から生じた剥離泡の中に突起が埋没し，空力特性にほとんど作用しないと考えられる．

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，配置の異なる半円柱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，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埋没し，空力特性へ作用しないことが示唆された.. 一方で，迎角 3°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，平板ではなく，キャンバーを持つ薄い翼型について解析を行い，突起の付加による剥離泡の変化を調べる．

なお, 現在の解析では, 計算領域全体が細かい直交格子となっており計算に時間を要している．ケーススタディに備え，解適合格子での計算を試みる．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

[1] 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.

[2] Hikaru Otsuka, Haruto Sasaki, Hiroshi Tokutake, Tsubasa Ikami, Hiroki Nagai, Honoka Osaki, Daisuke Sasaki, and Yuki Kawamoto, "Study of Vortex Generators on Small Rotor Blades for Minimizing Noise Emissions" Twenty-fifth International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI2025), CRF-06, Sendai, Japan, Nov. 11, 2025.

[3] Honoka Osaki, Daisuke Sasaki, Yuki Kawamoto, Masato Okamoto, Tsubasa Ikami, Haruto Sasaki, Hikaru Otsuka, "Numerical Analysis of the Three-Dimensional Flow Around Installed Protuberances on a Flat Plate at Low Reynolds Numbers," 16th Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT 2025), Seoul Korea,10/27, 2025.

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP09APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 18 日提出

部分電離プラズマ流によって駆動される高速宇宙輸送システムにおける数値的研究

高橋　聖幸，宇野　耀，阪本　健
東北大学大学院工学研究科　准教授，D1，M2
永井　大樹
東北大学流体科学研究所　教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

地球超低軌道（VLEO : 高度約 100–450 km）は，高解像度地表観測や低遅延通信の実現に向けて注目されている．また，VLEO の持つ自浄作用にも注目が集まっており，従来の低軌道 600–1,000 km と比較してより高い大気抵抗により，衛星の運用終了後は自然と飛行高度が低下して燃え尽き，デブリを生じさせない点も魅力的である．しかし，この高い大気抵抗は衛星の軌道維持においては“敵”として働く．即ち，軌道維持には大気抵抗に抗って飛行を維持するための継続的推力生成が必要となる．大推力を継続的に生成することが必要となる．この課題に対して，大気を推進剤として利用する大気吸込式電気推進機が提案されているが，軌道維持必要推力の増大に伴い太陽電池パネル（SAP）の大型化が不可避となる．この SAP 面積の増加は摩擦抵抗の増加を招き，より大きな推力と電力を必要とするというフィードバックを生じさせる．結果として，高度約 160 km 以下では理論的に飛行が不可能となることが指摘されている．

この問題を解決するため，本研究では電力供給を衛星内部に依存しない新たな推進方式として，部分電離プラズマを使った新しい宇宙推進方式である“希薄流吸込式レーザーブラストライダー”を提案する（図 1）．本システムは地上から照射されるレーザーパルスによってプラズマを生成し，高温のイオンを排気することで推力を得るものであり，太陽電池に依存しないため低高度での飛行が可能となる潜在性を有する．一方で，レーザーパルスによるプラズマ生成を着実に行うためには，VLEO の希薄大気をインテークによって吸い込み，効率良く圧縮していく技術の確立が必要となる．また，レーザー照射によりどのようなプラズマ

流が誘起されるのか，数値モデルを使った議論が必要となる．加えて軌道維持に必要な飛行条件等が明らかとなっていない．これら推進機設計や軌道設計に加えて，地上試験を行うための VLEO 環境模擬風洞の構築も課題として挙げられる．というのも VLEO 環境は，軌道速度約 8 km/s で希薄な一様流が生成され，しかも気流中に原子状酸素が存在するという特殊な環境で，これを再現可能な地上設備は存在しない．

従って本研究の目的は，従来の電気推進機では実現困難であった高度 160 km 以下，特にカーマン・ライン付近（高度 100 km）における衛星の軌道維持を実現するために，本提案システムの成立条件を明らかにすることである．そのために，希薄大気環境を対象とした 3 次元テスト粒子計算により大気抵抗および推力生成過程を評価するとともに，レーザー加熱モデルを構築してエネルギー輸送を解析する．さらに，粒子間衝突の影響を考慮した 2 次元 DSMC 計算により圧縮性能をより詳細に評価し，得られた推力・抗力を用いた軌道計算を通じて必要レーザーパワーを定量的に評価する．また VLEO 環境模擬に向け，“レーザーデトネーション膨張波菅”を新たに提案し，その基本的なテスト気流生成能力を数値シミュレーションによって確認する．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では，大気吸い込み式の新しい推進システムを提唱し，数値計算を介してシステムの成立要件を精査することである．並行して実験的な研究を進め，実験と数値計算とを組み合わせることでより正確な数値モデル構築へとフィードバックし，システム成立の予測精度を高めていく．加えて，VLEO 環境模擬風洞としての可能性を秘めるレーザーデトネーション膨張波菅の基本的な特性を理解することが最終目標である．

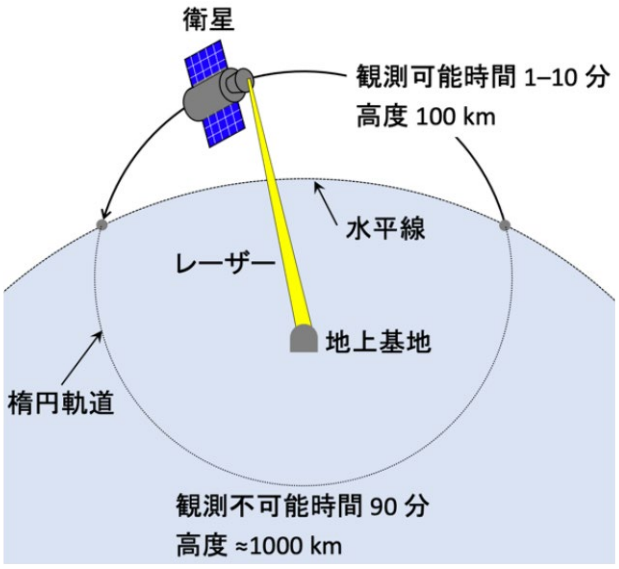


図 1：レーザーブラストライダー．

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

本研究では，提案する希薄流吸込式レーザーブラストライダーの成立性を評価するため，流体・プラズマ・軌道の各観点から数値シミュレーションを実施した．また，レーザーデトネーション膨張波菅の基礎特性を調べるために，数値流体力学 (CFD) シミュレーションを実施した．

まず，粒子間衝突を無視した 3 次元テスト粒子計算により，インテーク形状が空力特性および推力性能に与える影響を評価した．その結果，インテークにテーパを取り入れ，且つ推力壁を拡大した改良モデル（モデル B）は，電気推進向けに設計された従来モデル（モデル A）と比較して抗力係数を低減できることが示され，前面形状の最適化が抗力低減に有効であることが明らかとなった．また，レーザー加熱による推力生成過程については，単純なレーザー照射では電子による吸収率が約 4%，イオンへのエネルギー輸送効率が約 1/350 と極めて低いことが判明した．これに対し，レーザーの多重反射によって吸収長を拡大することで，吸収率を 60%以上，イオンへのエネルギー輸送効率を約 40%まで向上できることを示した．さらにこの条件を反映した場合，モデル B の推力力積はモデル A の約 2.7 倍となり，推力壁面積の拡大が推力向上に有効であることが確認された．一方で，運動量結合係数は両モデルで同程度であり，圧縮比低下による吸収率低下が性能制約となることも明らかとなった．

次に，粒子間衝突の影響を評価するため，2 次元 DSMC 計算を実施した。独自に開発した AMR（適応格子細分化）および Null-collision 法を用いた計算コードにより流れ場を解析した結果，分子間衝突を考慮するとインテーク内部に強い圧力勾配が形成され，対流が促進されることで圧縮比が約 80 から 250 へと約 3 倍向上することが示された．これは従来重視されてきた壁面形状に加え，圧力勾配が圧縮性能向上の重要因子であることを示す世界初の知見である．

続いて，得られた推力および抗力を用いて衛星軌道計算を行い，軌道維持に必要なレーザー出力を評価した。高度 100 km（近地点）と 1,000 km（遠地点）の楕円軌道において，地上からの可視時間に間欠的に推力を供給する条件下で，約 5 MHz のパルス周波数により軌道維持が可能であることを示した。このとき必要な平均ビーム出力は約 48.3 MW と見積もられ，非可視時間中の抗力補償が大きな負担となることが明らかとなった．今後は凍結軌道を導入するなどして，必要パワーが低減可能かを検討していく予定である．

最後に，VLEO 環境模擬に向けたレーザーデトネーション膨張波菅の特性を CFD シミュレーションによって調べた．レーザー照射位置を上流のノズルスロート付近とした場合，レーザーデトネーションによって駆動される衝撃波が，第一隔膜の破膜によって生じた衝撃波と一体となって第二隔膜に到達する条件を満たすと，希薄な高速気流が生成されることが示された．第二隔膜通過後の気流マッハ数は 7.5 であり，バルクの気流速度は 2,200 m/s にまで到達し，VLEO 環境の気流速度とオーダーが同程度であるテスト気流を生成可能であることが世界で初めて示された．

以上より，本研究は低高度 VLEO における新しいビーム推進型衛星の成立可能性を示すとともに，推進機設計，エネルギー輸送，圧縮機構，および軌道運用に関する重要な設計指針を明らか

にした．また，レーザーデトネーション膨張波菅の基礎設計を行い，レーザー照射タイミングが高速気流生成に重要であることを見出した．

3. 研究目標の達成状況

本研究では，高度 100 km における希薄流吸込式レーザーブラストライダーの成立条件を明らかにすることを目的とし，流体解析・プラズマ加熱評価・軌道計算を統合的に実施した．推進機形状最適化による抗力低減，レーザー多重反射によるエネルギー輸送効率の大幅向上，および分子間衝突による圧縮性能向上を定量的に示した．さらに，軌道維持に必要なレーザー出力を評価し，本方式の実現可能性と課題を明確化した．また VLEO 環境の一様流速度と同程度のオーダーを持つテスト気流を，レーザーデトネーション膨張波菅のコンセプトによって生成可能であることが示された．以上より，当初の研究目的は概ね達成されたといえる．

4. まとめと今後の課題

今後はレーザーブラストライダーの飛行軌道として凍結軌道を選択することで，成立に必要なレーザーパワーを低減可能か調べる予定である．加えて，風洞と推進機の実機開発及び実証実験が今後の課題として挙げられる．レーザーデトネーション膨張波菅の実機を開発した上で，インテークをそのテスト気流中に挿入し，圧縮比やイオン加速性能を実測する予定である．その際，希薄流に特化したピトー計測システムを構築し，圧縮比の実測を試みる．また，排気される電子・イオン流はプローブ計測によってその流速や密度を評価する．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

[1] Masayuki Takahashi and Takumi Hosoya, “Numerical Simulation on Laser-detonation Expansion Tube for VLEO Hypersonic Flow Generation,” *Journal of Evolving Space Activities*, Vol. 4, 259 (2026). (査読あり)

[2] Sakira Uno, Koki Ito, Anass El Khmisi, and Masayuki Takahashi, “Numerical Simulation of Thrust Performance of Laser-plasma-driven Explorer for Untouched Low Altitude (LUNA) Hypersonically Orbiting in a Rarefied Atmosphere,” *Journal of Evolving Space Activities*, Vol. 4, 274 (2026). (査読あり)

著書

なし

国際学会

[1] Masayuki Takahashi, Sakira Uno, Ken Sakamoto, Koki Ito, Hiroyuki Suzuki, and Hiroki Nagai, “Numerical Studies for Plasma Dynamics on a Space Propulsion System,” Twenty-two International Conference on Flow Dynamics, CFR-1, Sendai (2025).

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP10APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.4～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 15 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　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　博士後期課程
谷村　雄紀
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では空間的・時間的スケールが大きく隔たっており，これまで単一の数値計算手法による再現は困難であった．本研究では，分子動力学計算や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技術として，散逸粒子動力学（DPD）法を採用するが，熱物性，機械特性の高精度な予測には全原子分子動力学（MD）法の併用が必要となる．したがって，MD 法と DPD 法に加え，化学反応を正確に予測する量子化学計算を有機的に接続するマルチスケール計算手法の開発を継続して行ない，各種新規ポリマー材料へ適用する．

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．特に，側鎖の置換位置および種類が架橋反応過程と熱機械特性に及ぼす影響を詳細に解析した．DGEBA に対し，ビフェニル骨格上のメチル基および塩素基の置換位置を変えた 4 種類のアミン硬化剤を用い，反応率 80%までの架橋過程を再現した．その結果，一軸引張シミュレーションから得られるヤング率は硬化剤の種類によらずほぼ同一であり，これは各系の架橋密度が同程度であることに起因すると考えられる．ヤング率を運動項，非結合項，結合項の寄与に分解した解析においても各系の寄与はほぼ等しく，結合項が支配的である一方，熱伝導率の場合に比べて非結合項の寄与が相対的に大きくなることを示した．

3. 研究目標の達成状況

架橋高分子材料（エポキシ樹脂）を構成するモノマー分子の側鎖を変化させ，熱伝導率および熱機械特性との関連を明らかにできた．特に側鎖については，アミン基の反応進行の遅延や架橋密度を通じて熱機械特性に及ぼす影響を定量的に評価できた．また，DPD シミュレーションについては，動的架橋反応を示すエポキシ樹脂へ適用し，全原子 MD シミュレーションと整合する結果を得た．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，側鎖の置換位置および種類を変えたエポキシ／アミン系の比較により，架橋反応の進行挙動は側鎖に依存して変化する一方で，ヤング率は架橋密度に強く支配されることを明らかにした．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. Yukun Bai, Gota Kikugawa, Naoki Kishimoto, Modeling and moisture uptake analysis of transition metal-catalyzed thermosetting resins via hybrid quantum chemistry and molecular dynamics simulations, Polymer, Vol. 330 (2025), 128508.
2. Yukun Bai, Gota Kikugawa, and Naoki Kishimoto, Hydrolytic degradation and property aging in highly crosslinked cyanate ester resins: A computational study, Polymer Degradation and Stability, Vol. 242 (2025), 111685.

国際学会

1. Kaiwen Li, Yingxiao Xi, Naoki Kishimoto, Gota Kikugawa, IMPRES2025, Sendai, Japan, (2025), 3B09.
2. Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, AFI-2025, Sendai, Japan, (2025), CRF-26.

国内学会

1. Kaiwen Li, Yingxiao Xi, Naoki Kishimoto, Gota Kikugawa, 第 62 回日本伝熱シンポジウム/HTSJ 国際伝熱シンポジウム, (2025), IGS09-2-04.
2. 菊川 豪太, JSOL CAE フォーラム 2025, (2025), C-1-1 (基調講演).

5.2 その他（特許，受賞，マスコミ発表，等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP11APR25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.4～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 15 日提出

機械学習における特徴量設計と重要度解析による有機材料の熱物性予測

菊川　豪太
東北大学流体科学研究所　教授
小松　一彦
東北大学グリーンクロステック研究センター　教授
Hari Krishna Chilukoti
National Institute of Technology (NIT) Warangal, India　助教
豊田　翔稀
東北大学工学研究科ファインメカニクス専攻　博士前期課程

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

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

1.2 研究期間内の最終目標

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．具体例として，直鎖および単・二分岐アルカンの分子構造を，全炭素原子数，主鎖の端から最近接の分岐までの C-C 結合数，その分岐内の C-C 結合数など 5 つの非負の記述子として符号化し，データセットの 80%を学習用，20%を検証用に分割して各モデルの動粘度予測精度を決定係数（R^2），平均絶対誤差（MAE），平均絶対相対偏差（%AARD)により評価した．その結果，ランダムフォレスト回帰および決定木回帰が特に優れた回帰性能を示し，RFR では $R^2 = 0.999$ が得られた．さらに，相関係数行列（ヒートマップ）による解析から，アルカンの動粘度は分子内の全炭素原子数と最も強い正の相関を示す一方，主鎖端から最近接分岐までの C–C 結合数および当該分岐内の C–C 結合数とは弱い負の相関を示すことが明らかとなった．

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．特にアルカン液体の動粘度予測では決定係数 0. 999 に達する精度が得られ，比較的小規模なデータセットにおいても物理的背景を反映した記述子が有効に機能することを確認した．また，特徴量と物性の相関解析により，予測精度に寄与する支配的な記述子を特定できた．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．加えて，分子構造記述子と物性の相関解析により，予測精度に寄与する支配的な特徴量を抽出でき，目的物性を狙った分子設計への指針が得られることを示した．今後は，幅広い有機液体材料を対象として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を構築し，実験データに加えて in silico での高速なデータ生成を行う．これを機械学習と密に連携させることで，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）

国内学会・研究会等

1. 豊田 翔稀，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 2025,

(2025), 4-11.

国際学会

1. Hari Krishna Chilukoti, Yusuke Takaoka, Gota Kikugawa, AFI-2025, Sendai, Japan, (2025), CRF-51.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01MAY25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 7 月 17 日提出

プラズマ―生体界面における電荷，電界および活性種挙動の大規模数値解析

内田　諭
東京都立大学大学院システムデザイン研究科　教授
佐藤　岳彦
東北大学流体科学研究所　教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

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

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

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

1.2 研究期間内の最終目標

上記に示した目的に基づいて，本研究期間内に行う目標課題を以下に示す．

① 放電活性種を内在する数値生体膜モデルを構築する．
② 膜構成分子と放電活性種との反応過程を定量化する．
③ 生体膜中における放電活性種の輸送パラメータを導出する．

④　電荷電界に対する生体膜変位の特性を把握する．

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

本研究では，流体モデル計算や分子動力学法による数値解析の実績を有する報告者が，センターの計算機に実装されている解析ソフトウエア（COMSOL および AMBER）を用いて，大容量並列高速計算によるマルチスケールの解析結果を統計的に精査している．本年度は，流体ー回路統合モデルおよび生体膜モデルを用いて，膜電位・膜チャネル電流特性と膜種・温度依存性について検証した．

2.1 細胞膜電位および膜チャネル電流の変動

生体細胞の膜電位および膜チャネル電流を考慮した等価回路モデルを構築し，交流電圧を印加した場合の周波数特性を検証した．膜電位については，文献実験値と概ね傾向が一致した．膜チャネルについては，今回の周波数範囲（0.1-100 kHz）においてチャネル開放率が変化して，膜電位に大きな影響を与えることを示唆した．

2.2 膜透過係数の膜種および温度依存性

酸素活性種の一つである過酸化水素を内在した数値生体膜モデルを用いて，アンブレラサンプリングにより自由エネルギーおよび膜浸透係数を導出した．相転移温度に依存して，温度上昇とともに膜透過係数が大きく増加した（図参照）．

3. 研究目標の達成状況

今回の研究目標において，流体近似計算と等価回路を併用した統合的モデリングから，細胞膜電位や膜チャネル電流を定量的に導出した．また，膜種や温度に対する膜内自由エネルギーを計算し，膜浸透係数に対する依存性を定量化できたことから，所定の成果が得られたと言える．また，本計算センターに実装された解析ソフトウエア（COMSOL および AMBER）で，より実際的な並列高速計算による大規模膜解析の検証も実施できた．本研究期間における目標はおおむね達成できたと思われる．

4. まとめと今後の課題

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

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

1. Kosuke Tachibana, Yuki Iijima, Ippei Yagi, Akinori Oda, Satoshi Uchida, "Molecular Dynamics Simulations on Structure and Permeability of Lipid Bilayer under Superimposed Electric Field", The 2nd Asian Symposium for Building Future of Plasma (2025) O-13.
2. Yuki Iijima, Gakuya Miura, Ippei Yagi, Satoshi Uchida, Kosuke Tachibana, Akinori Oda, Takehiko Sato, "Molecular Dynamics Analysis of Membrane Transport of Reactive Species in a Cell Membrane Model Taking into Account the Inner and Outer Layers", 22nd International Conference on Flow Dynamics (2025) CRF-70.

国内学会・研究会等

1. 笠井直弥, 石原卓也, 八木一平, 立花孝介, 内田諭, 小田昭紀 : 低温大気圧プラズマ照射が細胞に与える電気的影響の数値解析, 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会 (2025) 9p-P10-6.
2. 立花孝介, 飯島優樹, 八木一平, 小田昭紀, 内田諭 : 外部電界下における脂質二重層の構造および膜透過性に関する分子動力学シミュレーション, 第 39 回分子シミュレーション討論会 (2025) 217P.
3. 飯島優樹, 八木一平, 小田昭紀, 立花孝介, 内田諭 : 分子動力学シミュレーションを用いた細胞膜における放電活性種透過性の膜種および温度依存性解析, 第 73 回応用物理学会春季学術講演会 (2026) 15p-M_107-14.
4. 石原卓也, 八木一平, 立花孝介, 小田昭紀, 内田諭 : プラズマと種子間の電気的相互作用の数値解析(1)ー植物細胞の等価回路モデルにおける回路素子の周波数応答の計測および数値解析ー, 第 73 回応用物理学会春季学術講演会 (2026) 15p-PA1-6.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP02MAY25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.5 ~ 2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 7 月 21 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

イットリア安定化ジルコニア（YSZ）は，固体酸化物形燃料電池（SOFC）や固体酸化物形電解セル（SOEC）の電解質として広く用いられており，高い酸化物イオン伝導性と優れた熱的・化学的安定性を有する材料である．一方，長時間運転や高温環境下では，結晶構造の変化やイオン伝導性の低下が生じることが報告されており，その劣化メカニズムの解明はセルの高耐久化に向けた重要な課題となっている．近年，実験的には Ni-YSZ 燃料極において，焼結過程や長時間運転中に Ni が YSZ 中へ固溶し，その後の Ni 析出や相転移が劣化挙動に関与することが報告されている．しかし，Ni 固溶が YSZ の局所構造や酸化物イオン輸送にどのような影響を与え，さらに相転移へどのようにつながるのかについては，原子レベルでの理解は十分ではない．そこで本研究では，分子動力学（MD）シミュレーションを用いて，Ni 固溶が YSZ の局所構造および酸化物イオン輸送に及ぼす影響を解析するとともに，相転移との関連について分子論的な理解を深めることを目的とする．得られた知見を通じて，YSZ の高耐久化および SOFC・SOEC 電解質材料の設計指針の構築に貢献することを目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間では，Ni 固溶が YSZ の局所構造および酸化物イオン輸送に及ぼす影響を分子動力学シミュレーションにより定量的に評価し，イオン伝導性低下の要因を原子レベルで明らかにすることを目標とする．また，Ni 近傍に形成される局所構造の変化と酸化物イオンの拡散挙動との関係を解析し，YSZ の相転移や劣化挙動との関連について分子論的な知見を得ることを目指す.

2. 研究成果の内容

2.1 Ni 固溶が YSZ のイオン伝導性に及ぼす影響

本研究では，Ni 固溶が YSZ のイオン伝導性に及ぼす影響を明らかにするため，Ni を固溶させた YSZ モデルを構築し，分子動力学（MD）シミュレーションを実施した．Ni^{2+}が Zr^{4+}サイトに置換固溶すると仮定し，電荷中性条件を満たすよう酸素空孔を導入したモデルを用いて解析を行った．

まず，Ni-O および Y-O の動径分布関数に基づき，Ni および Y 周囲の第一近接領域（1NN）および第二近接領域（2NN）を定義した．その後，各局所環境に存在する酸化物イオンの拡散係数を評価した結果，Y 2NN では比較的高い拡散係数を示し，酸化物イオンの有効な輸送経路として機能していることが確認された．一方，Ni 近傍では 1NN，2NN ともに拡散係数が全体平均より低く，Ni 固溶濃度の増加に伴い拡散係数はさらに低下した．特に，本来高いイオン輸送能を有する Y 2NN 領域において，Ni 固溶による拡散係数の低下が顕著であった．

2.2 Ni 固溶による局所構造変化と酸化物イオン輸送メカニズム

Ni 固溶によるイオン伝導性低下の要因を明らかにするため，酸化物イオンの局所輸送挙動および局所構造の解析を行った．まず，MD 計算で得られた酸化物イオンの軌跡に対して k-means クラスタリングを適用し，酸化物イオンサイト間のジャンプ挙動を解析した．その結果，Ni 近傍ではバックジャンプの割合が高く，局所的な往復運動が支配的であった．一方，Y 2NN ではバックジャンプ割合が低く，有効な長距離輸送に寄与することが確認された．さらに，酸化物イオンサイトの平均占有率および時間相関関数を解析した結果，Ni 1NN では酸化物イオンが存在しにくく，滞在時間も短いことから，酸素空孔が形成されやすい局所環境であることが示された．一方，Y 1NN では酸化物イオンが長時間保持されやすく，局所構造の安定化に寄与していることが確認された．また，各カチオンの変位を評価したところ，Ni は Zr や Y と比較して大きな変位を示し，Ni 近傍では局所構造の歪みが生じていることが明らかとなった．以上より，Ni 固溶によって生じる局所構造の変化は，酸化物イオンの存在安定性および移動特性を変化させ，有効な長距離輸送を阻害することで，YSZ のイオン伝導性低下を引き起こす要因であることが示唆された．また，これらの局所構造の変化は，YSZ の相転移や長期耐久性とも密接に関連する可能性があり，今後さらなる検討が必要である．

3. 研究目標の達成状況

本研究では，Ni 固溶が YSZ の局所構造および酸化物イオン輸送に及ぼす影響を分子動力学シミュレーションにより評価し，イオン伝導性低下の要因について分子論的な知見を得ることができた．拡散係数解析により，Ni 固溶が酸化物イオンの有効な輸送経路を阻害し，YSZ 全体のイオン伝導性を低下させることを明らかにした．また，k-means クラスタリングを用いた局所輸送解析により，Ni 近傍では酸化物イオンの局所的な往復運動が増加し，長距離輸送への寄与が低下することを示した．さらに，占有率，時間相関関数およびカチオン変位の解析から，Ni 近傍では局所構造の歪みや酸化物イオンの存在安定性の変化が生じていることが確認された．

以上より，本研究期間で設定した目標である，Ni 固溶が YSZ の局所構造および酸化物イオン輸送に及ぼす影響の解明については，概ね達成することができた．一方，本研究では主として酸化雰囲気下における Ni 固溶の影響を対象としており，実際の SOFC・SOEC 運転条件下

における Ni の還元・析出や相転移との直接的な関係については，今後さらに検討を進める必要がある．

4. まとめと今後の課題

本研究では，分子動力学シミュレーションを用いて，Ni 固溶が YSZ の局所構造および酸化物イオン輸送に及ぼす影響を解析した．その結果，Ni 固溶は有効な酸化物イオン輸送経路を阻害し，YSZ 全体のイオン伝導性を低下させることが明らかとなった．また，局所輸送解析および局所構造解析により，Ni 近傍では酸化物イオンの存在安定性や移動特性が変化し，局所構造の歪みが輸送特性の変化に関与していることが示唆された．

今後は，本研究で得られた知見を基に，Ni の還元・析出や粒界への移動を考慮した Ni/YSZ 界面モデルへ解析を発展させ，YSZ の相転移や電解質劣化との関連について検討を進める予定である．また，第一原理計算や機械学習ポテンシャルを活用することで，より実際の SOFC・SOEC 運転条件に近い長時間スケールでの劣化メカニズムの解明を目指す．

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）

なし

著書

なし

国際学会

Yuting Guo, Jin Shiomi, Taiyo Taniuchi, Haiyi Sun, Taku Ohara, Masashi Kishimoto, Hiroshi Iwai: Influence of Ni Dissolution on Ionic Transport and Structure in YSZ: A Molecular Dynamics Study, The Twenty-first International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, Japan, Poster.

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP03MAY25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.05～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 3 日提出

CO2 permeability through (microalgae) lipid membrane using molecular dynamics simulation

Fakhri Putra Nasution, Nasruddin
インドネシア大学　博士学生, 教授
Fayza Yulia
プルタミナ大学　助教
馬渕　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 (CO2) molecules across microalgae's lipid membranes. This approach allows for a detailed exploration of the interaction dynamics between CO2 and lipid membranes, offering insights that may not be readily achievable through experimental techniques.

1.2 研究期間内の最終目標

The study seeks to achieve three main objectives:

a) Showcase Mechanism and Dynamics of CO2 Permeation

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

b) Partially Quantitative Insights into Gas Penetration

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

c) Analysis of Properties Related to Gas Permeation

The main properties that this research aims to evaluate is permeation coefficient, which refers to the rate of the CO2 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 CO2 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 2025, 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.

In this research, we quantify CO_2 permeation through a model microalgae membrane and pinpoint its rate-limiting region at atomic resolution. Using all-atom molecular dynamics with the inhomogeneous solubility-diffusion model, combining free energies from umbrella sampling with position-dependent diffusivities from the Woolf-Roux method, we mapped CO_2 transport across a DPPC bilayer. We found that CO_2 meets a modest free-energy barrier of about 15 kJ mol^{-1} at the hydrated headgroup interface but is thermodynamically favored in the hydrophobic core, where the free energy reaches its minimum. Its diffusivity also falls by roughly an order of magnitude from bulk water to the ordered acyl region. When these profiles are combined, the local resistance peaks sharply at the interface and becomes negligible in the core, giving a permeability of 0.109 cm s^{-1} that agrees closely with experiment. Permeation is therefore controlled by the energetic cost of crossing the interface rather than by mobility inside the membrane. These findings show that the lipid bilayer poses little barrier to passive CO_2 uptake and identify the headgroup interface as the key target for engineering microalgal strains optimized for carbon.

3. 研究目標の達成状況

In our research, we have examined the process of CO2 permeation through microalgae cell membranes, which is modeled by DPPC (Dipalmitoylphosphatidylcholine) molecules, focusing on the interactions and dynamics of this process at the molecular level.

DPPC structure is a type of phospholipid molecule with hydrophilic head group, and hydrophobic hydrocarbon tails, each serving specific functions in relation to water molecules, creating a stable, cohesive, and impermeable barrier. This fatty acid-dominated structure can be found in several microalgae species.

The cell in the microalgae cell layer consists of a 64 DPPC lipid membrane with 2340 water molecules as illustrated in Figure 1. The structure and interaction parameters of the lipid membrane and water molecules were obtained using Charmm GUI. The bounded interactions of the lipid membrane were modeled using Chemistry Harvard Macromolecular Mechanics (CHARMM). Similarly, the interaction parameters for the CO2 gas molecules were obtained using CGenFF (Charmm General Force Field) [8]. The simulation cell size used was 44.90 x 44.90 x 80 Ao. Because the membrane is highly heterogeneous across its thickness, each leaflet was partitioned into four distinct regions, following the methodology detailed in earlier studies.

- Region 1: low headgroup density, 20-27 Å from the bilayer center.

- Region 2: high headgroup density, 13-20 Å from the bilayer center.
- Region 3: high tail density, 6-13 Å from the bilayer center.
- Region 4: low tail density, 0-6 Å from the bilayer center.

The entire structure underwent minimization and was subjected to a 10 ns molecular dynamics (MD) simulation with a timestep of 1.0 ps. The simulation process was carried out in seven stages, with the final stage involving the insertion of a CO_2 gas molecule into the simulation box to observe their interactions with the DPPC lipid membrane.

Once the system reaches equilibrium, it becomes feasible to calculate transport and permeation properties of the solute molecule.

To measure permeability quantitatively, the inhomogeneous solubility diffusion model is assumed to calculate the permeation coefficient (P). With this approach, the permeation coefficient is calculated using the following equation:

$$\frac{1}{P} = \int_{z1}^{z2} R(z)\, dz = \int_{z1}^{z2} \frac{\exp\left(\frac{\Delta G(z)}{k_B T}\right) dz}{D_z}$$

Here, z1 and z2 represent the z-coordinates of the two sides of the bulk aqueous phase, R(z) is defined as the local resistance to permeation, ΔG(z) and DZ(z) are the excess free energy and the local diffusion coefficient of a small molecule permeating the membrane, kB is the Boltzmann constant, and T is the temperature.

Excess free energy (ΔG(z)), or Potential of Mean Force (PMF), could be calculated using various methods. In this work,we are using a non-equilibrium method to calculate PMF, which is called Umbrella Sampling. Umbrella Sampling attempts to overcome problems occurring because of limited sampling by biasing the original potential energy surface to enhance the sampling of the unfavorable states. In this method, a series of simulations are performed with the solute restrained relative to the center of mass of the membrane using a harmonic potential.

$$u_i(z) = \frac{1}{2} k(z - z_{0,i})^2$$

Where $u_i(z)$ is the potential energy of the restraint for simulation i, k is the force constant of the restraint, and $z_{0,i}$ is the reference position along the z axis the simulation is biased to sample near. In our simulation, we used window spacings of 1.0 A^o and force constant of 3.0 Kcal/mol/A^o.

After a data set containing the position of the solute over time is collected, ΔG(z) is constructed using distributions sampled in the simulations. The Weighted Histogram Analysis Method (WHAM) is used in this research for this purpose.

To evaluate permeability based on the inhomogeneous solubility diffusion model, we also need to determine the position-dependent diffusion coefficient of the solute as a function of the axis perpendicular to the lipid bilayer, which in this case is the z-axis, D(z). One of the methods to calculate position dependent diffusion coefficient is the Woolf-Roux (WR) method. Hummer derived a simpler expression of WR method that relates D(z) to the variance of z and the correlation time, which resulted in the following formula.

$$D(z) = \frac{\langle \Delta z \Delta z \rangle^2}{\int_0^\infty \langle \Delta z(t) \Delta z(0) \rangle dt}$$

Where $\Delta z(t) = z(t) - \langle z \rangle$ Thus, the calcuation of diffusion coefficient requires an additional molecular dynamics simulation with the permeant fixed at particular z position, similar to the PMF.

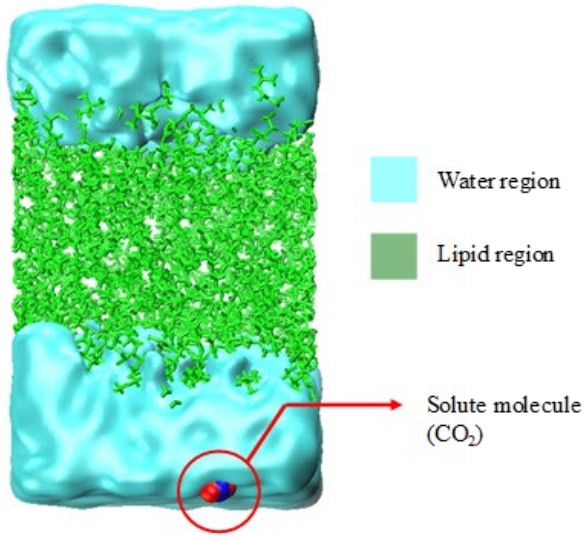


Figure 1: Simulation system

Figure 2 presents the free-energy profile, or potential of mean force (PMF), $\Delta G(z)$, for CO_2 permeation across the bilayer. The PMF represents the reversible work required to transfer a solute from bulk solution to a position z along the membrane normal. It therefore reflects the relative solubility of the permeant in water versus the membrane interior: a positive PMF denotes lower solubility at that location than in the aqueous phase, whereas a negative value signifies greater solubility.

The PMF obtained for CO_2 follows the behaviour expected of a hydrophobic species. A modest barrier appears at the charged, highly hydrated water–lipid interface. Beyond this point, the free energy decreases sharply as the molecule penetrates the ester and aliphatic tail regions (regions III and IV), reaching its minimum at z = 0 Å. This minimum indicates a thermodynamic preference for CO_2 to reside at the bilayer center.

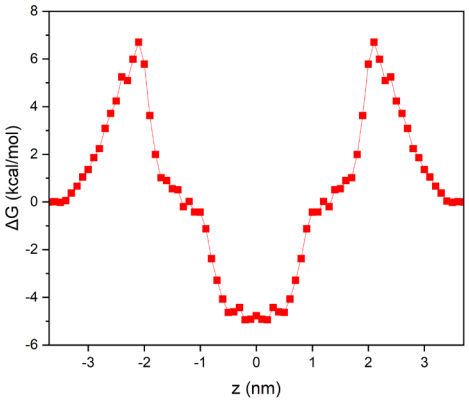


Figure 2: Free Energy Profiles (ΔG) of CO_2 molecules

Diffusion coefficient D(z) profiles for the carbon dioxide molecule are plotted in Figure 3.

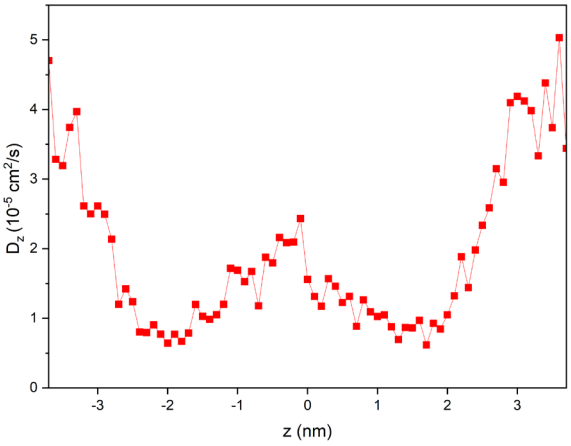


Figure 3: Diffusion Coefficient Profile of CO_2 molecules

D(z) decreases as entering the membrane in regions 1 and 2 to below 1×10^{-5} cm^2/s, then it is quite uniform in region 3, and increases slightly in region 4. This is due to region 1 and 2 are highly charged and crowded with water molecules. Diffusion coefficients inside the membrane are generally lower than in the bulk water phase because of the higher density of the lipid environment.

Using Equation 1 to combine the free-energy profile in Figure 2 with the diffusion-coefficient profile in Figure 3 gives a CO_2 permeability of 0.82 cm s^{-1}. This result lies very close to the typical experimental value of about 1 cm s^{-1} for cholesterol-free phosphatidylcholine membranes, confirming that the simulation captures the main barrier and mobility features that govern gas transport; the small (~20 %) difference is well within the usual experimental and modelling uncertainties.

4. まとめと今後の課題

We have successfully determined the key parameter required to quantify solute transport across a membrane system, namely the permeation coefficient, for carbon dioxide (CO_2)

molecules diffusing through a microalgal cell membrane. This parameter serves as a critical indicator of mass transfer efficiency and provides fundamental insight into the transport behavior of small molecules across biological membranes. The permeation coefficient was obtained using non-equilibrium molecular dynamics (NEMD) simulations, with particular emphasis on the umbrella sampling technique to accurately characterize the free energy profile associated with CO_2 translocation. This approach enables a detailed resolution of the energy barriers and favorable pathways encountered by the solute as it permeates through the lipid bilayer, thereby ensuring a robust and physically meaningful estimation of permeability.

The results obtained thus far establish a strong computational framework for investigating solute–membrane interactions at the molecular scale. Building upon this foundation, the next phase of this research will expand the scope of investigation to include additional solutes that are highly relevant to microalgae cultivation systems. In particular, bicarbonate ions (HCO_3^-) will be studied due to their significant role in inorganic carbon uptake mechanisms in microalgae. Unlike CO_2, bicarbonate transport involves additional complexities such as charge effects, hydration shells, and potential interactions with membrane components, which may lead to distinct permeation behaviors.

By incorporating bicarbonate into the analysis, this work aims to enhance both the novelty and practical relevance of the study, especially in the context of optimizing carbon utilization in microalgal bioprocesses. Furthermore, comparative analysis between CO_2 and HCO_3^- transport properties is expected to provide deeper insight into the dominant carbon acquisition pathways and their dependence on environmental and membrane conditions. Ultimately, this research contributes to a more comprehensive understanding of mass transfer phenomena in biological membranes, which may inform the design and optimization of advanced systems for carbon capture, biofixation, and sustainable bioproduction.

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）

Thermodynamics and kinetics of CO_2 transport across a DPPC bilayer: a molecular dynamics study. Status: Draft. Author: Fakri Putra, Fayza Yulia, Takuya Mabuchi, Nasruddin.

著書

なし

国際学会

Molecular Simulation of CO2 Permeation through Microalgae Lipid Membrane Presented in International Conference on Flow Dynamic 2025.

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP04MAY25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.5～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 20 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

宇佐美　徳隆*†，徳増　崇**††
後藤　和泰***，深谷 昌平*
*名古屋大学工学研究科，**東北大学流体科学研究所
***新潟大学工学部
†申請者，††所内対応教員または所外対応研究者

1. 研究目的

1.1 研究背景と目的

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結晶シリコン（Si）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（TiO*x*）/Si の各界面における構造変化や化学結合状態の変化を解明することである．

TiO*x* は，そのバンドギャップエネルギーがおよそ 3.3 eV と大きく，さらに Si 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[1]．これまで TiO*x* 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，電極として用いる金属が TiO*x* と接触することで，TiO*x* の Si に対する表面保護性能が低下することが報告されている[2,3]．TiO*x* の電子選択層としての応用を考えた場合，金属/TiO*x*/Si 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/TiOx/Si 界面における構造変化に着目する．TiO*x* の場合，接触する金属と熱処理条件に依存して TiO*x* の還元反応や TiO*x*/Si 界面への原子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得ることが困難であり，その界面の構造的変化は十分に明らかにされていない．本研究では，機械学習力場の一種であるニューラルネットワークポテンシャル（Neural Network Potential: NNP）を用いた MD シミュレーションにより，金属と TiO*x* 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し，高品質界面の設計指針を提示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は，Al/a-TiO*x*/c-Si ヘテロ界面における原子挙動および化学結合状態

を原子スケールで解明し，金属電極形成によるパッシベーション性能低下の起源を明らかにするとともに，高品質界面を実現するための設計指針を提示することである．研究は，①a-TiO_2/c-Si モデルに適用可能な機械学習ポテンシャルの構築，②a-TiO_2/c-Si モデルにおける熱処理 MD シミュレーションと妥当性の検証，③Al/a-TiO_2/c-Si モデルに適用可能な NNP の構築，④Al/a-TiO_2/c-Si モデルにおける熱処理 MD シミュレーションと界面構造・化学結合状態の解析，の 4 段階で進める．2025 年度は特に③および④を中心として研究を進めた．

[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] V. Titova and J. Schmidt, Phys. Status Solidi RRL 15, 2100246 (2021).

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 Al/a-TiO_2/c-Si ヘテロ構造を記述する NNP の構築

本項目の共同研究における意義は，実際に解析対象とする Al/a-TiO_2/c-Si ヘテロ構造を原子スケールで模擬可能な NNP を確立する点にある．これまでの研究において，a-TiO_2/c-Si ヘテロ構造を模擬する NNP を作成し，実験で得られた原子拡散の結果との比較により妥当性を確認してきたが，NNP が量子化学計算の結果に対してどの程度の精度を有するかについて定量的な比較は行っていなかった．そこで 2025 年度は，これまで作成した NNP に金属 Al を追加し，Al/a-TiO_2/c-Si ヘテロ構造へ適用可能な NNP を構築するとともに，密度汎関数法（DFT）により得られるエネルギーとの比較により妥当性を検証した．

図 1 に，（a）Si，（b）TiO_2/Si 界面，（c）バルク TiO_2，（d）Al/TiO_2界面，（e）バルク Al モデルにおける，NNP によって予測されたエネルギーと DFT によって計算されたエネルギーを比較したパリティプロットおよび平均絶対誤差 MAE（eV/atom）を示す．各モデルは約 100 原子程

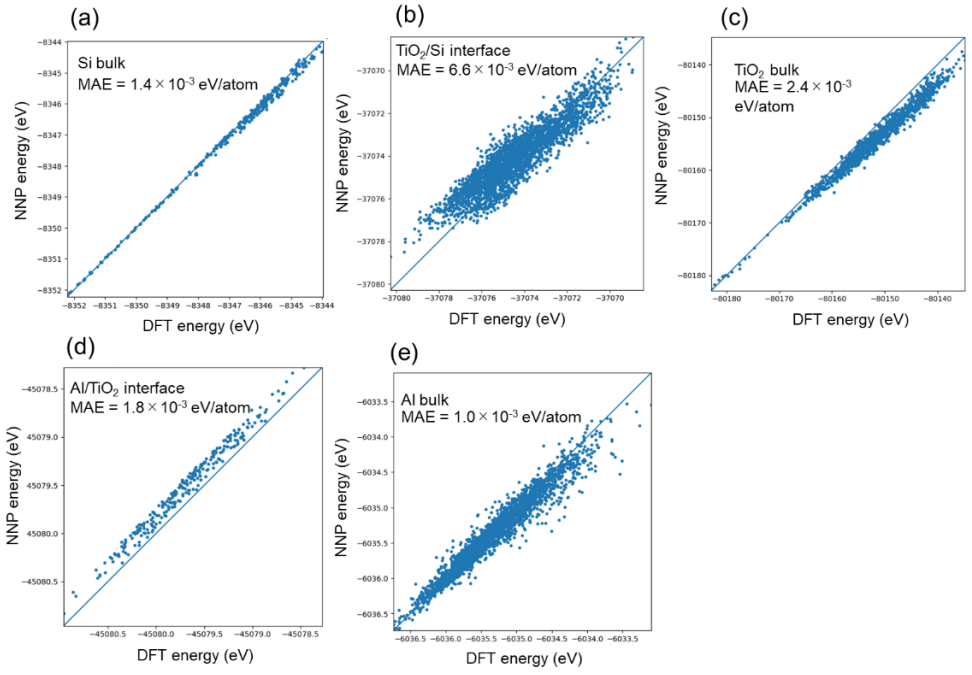


図 1：（a）Si，（b）TiO_2/Si 界面，（c）バルク TiO_2，（d）Al/TiO_2界面，（e）バルク Al モデルにおける NNP 予測エネルギーと DFT 計算エネルギーの比較．

度から構成され，約 1000 K まで加熱した条件で得られた同一構造に対して NNP および DFT 計算を行った．

2.2 NNP を用いた Al/a-TiO_2/c-Si ヘテロ界面での熱処理時の Si-O 結合の解析

2.1 項で構築した Al/a-TiO_2/Si ヘテロ構造を記述する NNP を用いて，a-TiO_2膜厚を変化させた．図 2（c-1）から，全ての a-TiO_2膜厚において，1000 K での熱処理後の a-TiO_2/c-Si ヘテロ構造の Si-O 結合密度は Al/a-TiO_2/c-Si ヘテロ構造と比較して高い値を示した．これは，金属 Al の成膜が a-TiO_2/Si 界面における Si-O 結合形成を抑制していることを示唆している．さらに，図 2（c-2）より，a-TiO_2膜厚が厚くなるほど Al 成膜による Si-O 結合密度の低下が小さくなる傾向が確認された

3. 研究目標の達成状況

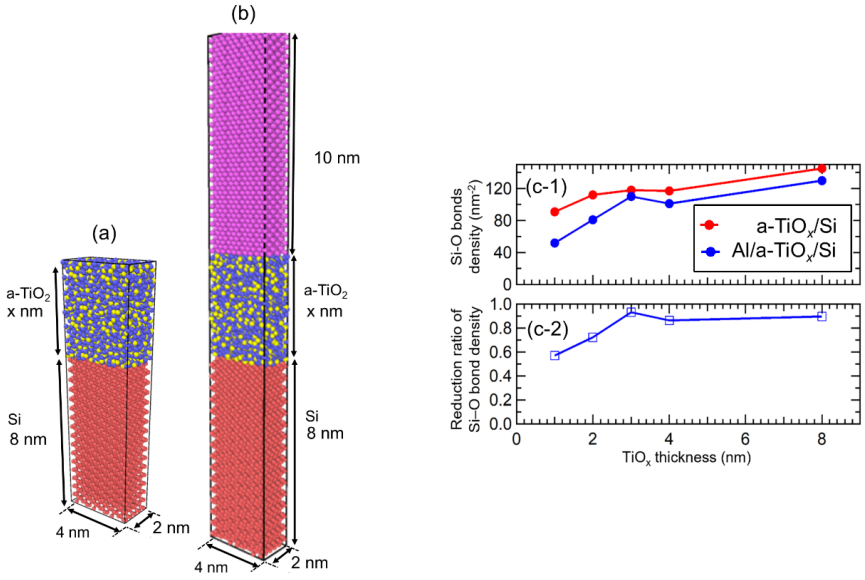


図 2：（a）a-TiO_2/Si，（b）Al/a-TiO_2/Si ヘテロ構造モデルと，（c-1）TiO_2膜厚に対する界面 Si-O 結合密度の変化，（c-2）Al 成膜前後における Si-O 結合密度比．

本研究を遂行する段階として，①a-TiO_2/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_2/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_2/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_2/c-Si モデルの熱処理を模擬したシミュレーションとその解析，の四つのステップがある．現在は④のうち Al/a-TiO_2/c-Si モデルの熱処理を模擬したシミュレーションが終了した段階であり，当初計画の全体の約 85%を達成したといえる．特に，前年度には計算コストの観点から困難であった Al，Ti，O，Si の多元素系を記述する NNP を構築し，Al 電極を直接含むヘテロ構造の MD 解析へ展開できたことは大きな進展である．今後は，作成した力場を用いてさらなる条件についてシミュレーションおよび解析を行い，Al 成膜による影響をより詳細に明らかにする．

4. まとめと今後の課題

本研究では，Al/a-TiO_2/c-Si ヘテロ界面を記述する NNP の作成とその妥当性の検証を行った後，Al 成膜前後における熱処理時の Si-O 結合状態への影響を解析した．その結果，本研究で作成した Al/a-TiO_2/Si ヘテロ界面を記述する NNP は，DFT 計算を高精度に再現することが確認された．さらに，Al/a-TiO_2/c-Si ヘテロ構造では，金属 Al 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．また，その影響の抑制には a-TiO_2膜厚が重要であることが明らかとなった．

今後の課題として，より現実の系を反映した酸化チタンである，酸素空孔を有する a-TiOx へモデルを拡張して調査を行う必要がある．さらに，実際のパッシベーション膜として用いられる TiOx には多量の水素原子が含まれているため，水素濃度を変化させた TiOx についても研究が必要である．これらの解析を通じて，金属/TiOx/Si 界面における原子スケールの構造変化とデバイス特性との関係を明確化し，高効率シリコン系太陽電池のためのキャリア選択性パッシベーションコンタクトの設計指針の確立を目指す．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし．

著書

なし．

国際学会

S. Fukaya, N. Uene, K. Gotoh, T. Tokumasu and N. Usami, “Insights into Passivation Mechanisms at Ti/TiO_x/Si Interfaces by Molecular Dynamics Simulation: Role of Metal and Oxide Layer Thickness”, 21st International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 10–13, 2025.

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．

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP05MAY25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.05～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 07 月 20 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
難波克好
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　D3
藤野　貴康
筑波大学システム情報系　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，テイラークエ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クエ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．さらに，円周方向にも周期境界条件が利用できるので，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現象の学理的理解を 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クエット流れに対して，軸方向に磁場を印加し，磁場に比例するハルトマン数（Ha）を固定した，円筒間の負荷抵抗を変化させた条件下で，波動テイラー渦が発電特性に与える影響を明らかにすることを最終目標とする．

2. 研究成果の内容（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現象を 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 発電特性に及ぼす波動テイラー渦の影響の解明

外円筒が停止し，内円筒のみが回転する液体金属を用いたテイラークエット流れを検討する．波動テイラー渦の軸方向振幅が軸方向位置によって影響を受けないように，本研究では，軸方向に周期境界条件を用いた．内円筒と外円筒間のギャップ幅に対して軸方向長さが 4 倍となるアスペクト比 4 での検討を行った．結果として，テイラー渦のセルが軸方向に 4 つ形成される．最大発電出力が得られる Ha では波動テイラー渦が消失する．本研究では，波動テイラー渦の発電性能への影響を調査することが目的であるので，最大発電出力が得られる Ha より小さい Ha=5 に設定した．内外円筒間に接続した負荷抵抗を変化させることで，負荷電圧と誘導起電力の比である負荷率 Kを変化させ，負荷率に対する発電特性を調査した．

その結果，Kが 0.83 以上の場合には，波動テイラー渦の軸方向振幅が一定となって周方向へ進行する．このような場合，電流，電圧，発電出力や入力などの電気諸量が一定となり，平均流速も一定となることがわかった．一方，Kが 0.83 以下の場合には，波動テイラー渦の軸方向振幅の最大値が周期的に変調し，電気諸量や平均流速が周期的に時間変動することがわかった．ただし，発電出力の変動幅は，入力の変動幅に対して無視できるほど小さいことを確認している．

入力の時間平均値への寄与は，慣性力（テイラー渦による対流）とローレンツ力によるバランスで決まるが，負荷率の増加に対して電流が減少することから，慣性力の寄与は増加し，ローレンツ力の寄与は減少する．これらの結果から，入力の時間平均値は基本的に負荷率の

増加に対して減少するが，変調していた波動テイラー渦が安定な渦へ遷移する K=0.83 において，慣性力は極小値をとり，入力も極小値をとる．また，慣性力が増加に転じることから K=0.91 において入力が極大となることもわかった．

3. 研究目標の達成状況

風力発電の翼の大きさや風速によっては，波動テイラー渦が出現するレイノルズ数域での本装置の運転が考えられる．そのため，波動テイラー渦が発電性能へ及ぼす影響を検討しておくことは重要である．3 次元 MHD テイラークエット流れの数値計算によって，低負荷率において波動テイラー渦が変調し，入力や電流電圧などの電気諸量が変動することがわかったが，その変動の発電出力への影響は小さいことがわかった．一方で，それらの時間平均値が波動テイラー渦の変調の有無で，電流電圧曲線などの電気特性が変わることもわかった．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，このような波動テイラー渦が出現する条件下で起こり得る，流れ場の変調や発電特性の影響を明らかに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．本結果は，電気学会誌に掲載された．

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，ハルトマン数や負荷率の時間変化に対する内円筒の回転トルクの過渡応答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）

難波克好，長谷部喬大，藤野貴康，高奈秀匡，小林宏充：同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置の発電特性に及ぼす波動 Taylor 渦の影響，電気学会論文誌Ｂ，146 巻 (2026), pp.475-480.

国際学会

Takahiro Hasebe, Katsumi Namba, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana, Hiromichi Kobayashi: Numerical simulation of Taylor-Couette flow in a co-axial MHD energy conversion device, Twenty-second International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, Japan (2025).

Katsumi Namba, Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana, Hiromichi Kobayashi: Numerical study of wavy vortex flow in a rotating co-axial cylindrical channel with MHD interaction, The Eleventh JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Naha, Japan (2025).

Hiromichi Kobayashi, Takahiro Hasebe, Katsumi Namba, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: Study on the influence of MHD interaction on Taylor-Couette flow with end walls, 11th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer

(THMT'25), Tokyo, Japan (2025).

Hiromichi Kobayashi, Takahiro Hasebe, Katsumi Namba, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: Emergence of triplet streaks near the inner wall in MHD turbulent Taylor-Couette flow with end walls, 23rd International Couette-Taylor Workshop (ICTW 2025), Durham, UK (2025).

国内学会

難波克好，長谷部喬大，藤野貴康，高奈秀匡，小林宏充：同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置の発電特性に及ぼす波動 Taylor 渦の影響に関する三次元数値解析，電気学会　新エネルギー・環境研究会，仙台，(2025).

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP06MAY25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2024.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 7 月 29 日提出

高速変形下の脂質単分子膜の局所表面張力場の計算

Nguyen Nam Quoc, 金川 哲也
筑波大学理工情報生命学術院 博士学生，筑波大学システム情報系 准教授
馬渕 拓哉
大学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

超音波下における気泡の振動は医療応用において注目を集めている．これらの応用において，気泡は脂質単分子膜によって被覆されている．脂質単分子膜の表面張力はひずみに対して非線形に変化することが知られている．したがって，超音波誘起による気泡振動および気泡を含む媒体中の超音波伝播に影響を及ぼす．

従来の脂質単分子膜の表面張力モデルは実験に基づいて構築されているが，到達可能な変形速度が低領域（10^{-1}~10^{1} Hz）に限られており，超音波誘起気泡振動に対応する高変形速度領域(10^{5}~10^{6} Hz)での挙動・力学特性は未解明である．したがって，気泡振動を適切に記述するために，脂質単分子膜の新たな表面張力モデルを構築する必要がある．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では，分子動力学シミュレーション（MD）を用いて，高変形速度下における脂質単分子膜の挙動および表面張力を解明する．さらに，MD により得られた表面張力の傾向を基に，新たな表面張力モデルを構築する．加えて，局所的な変形と局所表面張力との関係を理解するため，局所表面張力の計算を行う

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）

シミュレーション条件は以下の通りである．DPPC 脂質 64 分子からなる単分子膜を 2 層配置し，その間に水層を挟んだ系を構築する．面積当たり脂質分子数（APL）は 0.63 nm^2 とする．平衡化後，8 ns の NVT シミュレーションで表面張力を計算する．その後，8 ns でボックスサイズを双方向に変化させる．さらに，変形後の状態を維持したままボックスサイズを固定し，8 ns のシミュレーションを行う．変形は，(a) 圧縮および (b) 膨張の 2 種類

について，一定の変形速度で実施する．圧縮過程において，LAMMPS の Nakamura パッチ（Comput. Phys. Commun., 2015）を用いて，100,000 ステップの間，250 ステップごとに局所表面張力場の平均を算出する．また，表面抽出，法線ベクトルの算出，および応力テンソルの法線方向への整列には Python コードを用いる．

図 1 は系全体の表面張力を示すものである．一定速度での膨張（赤）では表面張力は線形に増加する一方，一定速度での圧縮（青）では非線形に減少し，その変化はより顕著である．さらに，変形直後において，膨張の場合には表面張力は緩やかな振動を示すのに対し，圧縮の場合には表面張力の回復挙動が観測される．また図 1 の右より，圧縮の場合も含め，表面張力がゼロ付近に達するまで，表面張力と APL の間には線形関係が成立することが分かる．

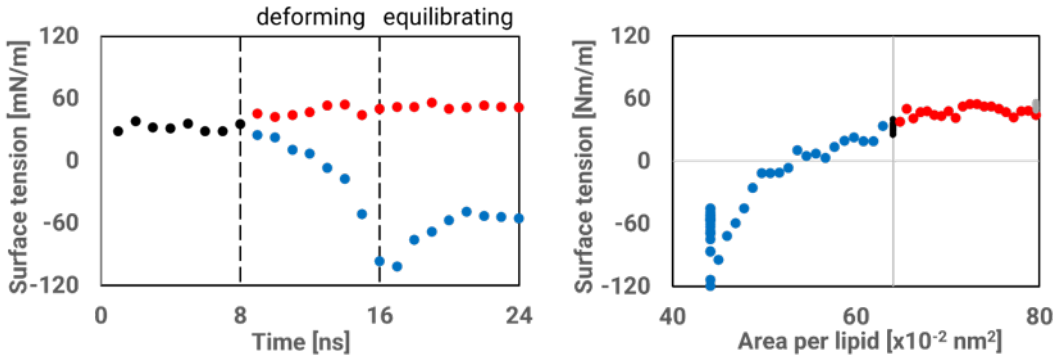


図 1：脂質単分子膜の表面張力の時間変化（左）および表面張力と面積当たり脂質分子数（APL）の関係（右）．

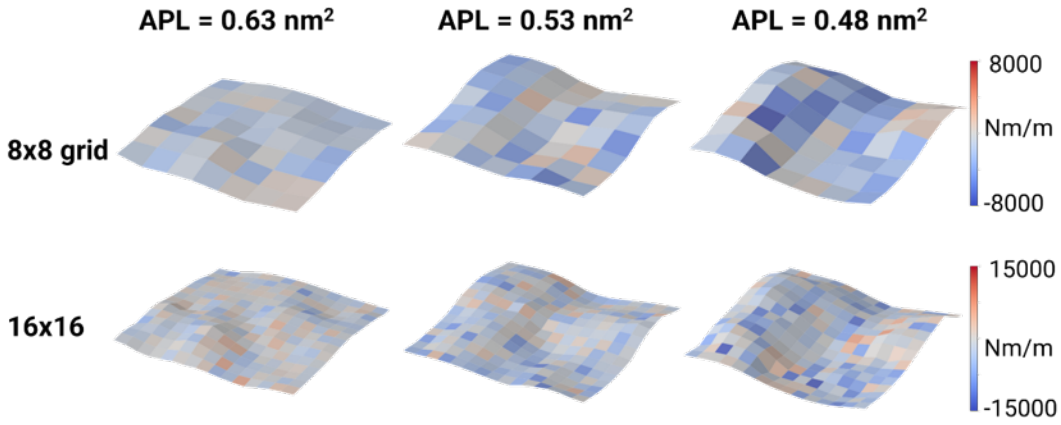


図 2：圧縮過程における異なる面積当たり脂質分子数に対する脂質単分子膜の局所表面張力分布．

図 2 は圧縮過程における局所表面張力場を示すものである．脂質単分子膜の変形が進行するにつれて，局所表面張力の振幅は増大し，特に負の値が支配的となる．なお，現在の結果は十分に収束しておらず，表面張力の値が高いこと，およびグリッドサイズへの依存性が見られることからも確認される．

3. 研究目標の達成状況

高変形速度下における脂質単分子膜の変形挙動をシミュレーションした．その結果，表面張力と面積当たり脂質分子数（APL）の関係は，従来モデルから乖離し，特に表面張力がゼロ付近および負の領域において顕著であることが示された．また，局所表面張力場の計算ワークフローを構築し、初期的な結果を得られた．

4. まとめと今後の課題

超音波下の医療用気泡の振動モデルは，安全な超音波医療応用に向けて重要である．本研究では，振動のモデル化に適した脂質単分子膜の新たな表面張力モデルを構築することを目的とする．脂質単分子膜の変形に関する MD を通じて，当該条件下における挙動および力学応答を解明し，既存の表面張力モデルからの乖離の可能性を示す．さらに，局所表面張力場の解析により，単分子膜内部における張力分布が一様ではないことを明らかにする．今後は，MD 結果を連続体理論による予測と比較する．さらに，MD および理論の両結果に基づき，新たな表面張力モデルの提案を行う．また，再現計算を実施し，周期境界条件の影響および局所表面張力場の収束性についても検討する．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

Nguyen, Mabuchi & Kanagawa: Calculation of Surface Tension Field of Lipid Monolayer under High Strain Rate, *22nd International Conference on Flow Dynamics ICFD2025*, Sendai, (2025), CRF-71.

Nguyen, Mabuchi & Kanagawa: Molecular Dynamics study on surface tension model for phospholipid coated (micro)bubble ultrasound contrast agents, 第 12 回混相流国際会議 ICMF2025, Toulouse, (2025), ID: 340.

国内学会・研究会等

Nguyen, Mabuchi, Takeishi & Kanagawa: 医療用気泡を覆う脂質単分子膜の力学挙動の考察：変分法に基づく膜の数理モデルと分子動力学計算，混相流シンポジウム 2025，神戸，(2025), SS0505.

Nguyen, Takeishi, Mabuchi & Kanagawa: MHz 帯で振動する脂質単分子膜の理論解析と分子動力学計算，第 36 回バイオフロンティア講演会，弘前, (2025), 2A03.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP07MAY25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.05～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 3 日提出

Molecular Simulation of conductive polymer electrolyte composite membranes for application in electrochemical devices

Thabakgolo T. Letsaua
ヨハネスブルグ大学　学術研究員
Phumlani F. Msomi
南アフリカ大学　教授
馬渕　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

There's a global demand for reducing carbon footprint, which is known to threaten the planet with extreme warnings such as global warming, which leads to ecosystem disruption. To minimize carbon footprints and accommodate the increasing demand for energy, fuel cell technology, as shown in Figure 1, has been considered a promising candidate for producing abundant clean energy. Its working principle involves utilizing the chemical energy stored in fuels and converting it into electrical energy [1]. The membrane serves as the powerhouse of the fuel cell, conducting ions (cations or anions) from the anode to the cathode while blocking electrons, forcing them to travel through the external circuit and generating electricity [2]. Recently, anion exchange membrane fuel cells (AEMFCs) have gained attention due to their ability to utilize non-precious metal catalysts, enhanced reduction kinetics, tolerance to carbon dioxide poisoning, low fuel cell crossover, and minimal production costs [3].

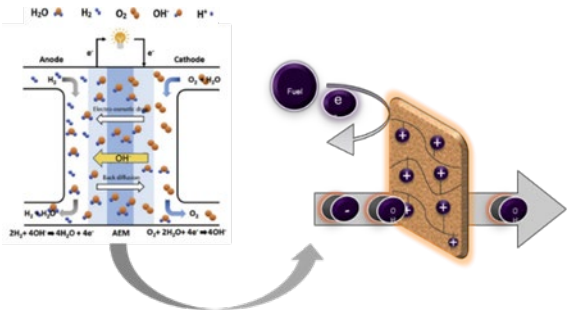


Figure 1. Schematic representation of an AEMFC [4].

Unfortunately, the currently reported anion exchange membranes in the literature suffer from cation degradation, leading to low conductivities [5]. The nucleophilic attack by the hydroxide ions on the cationic groups attached to the polymer backbone causes membrane degradation in the AEMFCs, which leads to a drop in the properties of the membranes over time. Low membrane properties lead to low fuel cell performance, which hinders the commercialization of this technology. The membrane's degradation rate is determined by the type of cation, polymer backbone, and positions of cations on the polymeric structure [6]. Therefore, an ideal AEM can be designed if the polymer backbone and cationic group with excellent properties are identified. MD simulations provide a tool to predict and study the polymer fabrication, degradation, and conductivity under "real conditions" to expect a membrane and conditions that will be suitable to fabricate an ideal membrane for fuel cell application practically [7]. This will ensure improved basic properties and increased lifetime to render a fuel cell with higher power output.

References

[1] B. Tanç et al. International Journal of Hydrogen Energy, 44 (2019) 10120.
[2] S. Jiang et al. Chemosphere, 282 (2021).
[3] H. Dang et al. Materials for energy and sustainability, 5 (2017) 21965.
[4] R. Gutru et al. International Journal of Hydrogen Energy, 45 (2020) 19642.
[5] K.F.L. Hagesteijn et al. Journal Materials Science, 53 (2018) 11131.
[6] V. Vijayakumar et al. Journal of Membrane Science, 591 (2019) 117314.
[7] M. Lee. Journal of Physical Chemistry. C, 123 (2019) 10802.

1.2 研究期間内の最終目標

Aim: The goal of this research is to design advanced membranes with enhanced stability and performance by leveraging molecular dynamics (MD) simulations to predict degradation resistance, conductivity, and structural integrity in fuel cell applications. By identifying an optimal polymer backbone, cationic group, and nanomaterial integration, this study will contribute to the development of membranes that have enhanced efficiency in AEMFCs .

Objectives:

- To find the best cationic group by designing chitosan quaternized with different cationic groups.
- To functionalise the quaternized chitosan with different nanomaterials.

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）

This research was conducted through an international collaboration between the

University of Johannesburg (South Africa), Tohoku University (Japan), and the University of South Africa. The collaboration combined expertise in molecular dynamics simulations, computational chemistry, and polymer electrolyte membrane design. Through the NRF Research Cooperation Programme and collaboration with Tohoku University, advanced computational methodologies and high-performance simulation techniques were applied to investigate anion exchange membrane materials. This partnership strengthened research capacity, facilitated knowledge exchange, and enabled the development of computational models that can guide future experimental membrane design.

A comprehensive molecular dynamics simulation framework was developed to evaluate both hydroxide ion transport and alkaline degradation of triazolium-functionalised poly(2,6-dimethyl-1,4-phenylene oxide) (TriPPO) composite anion exchange membranes containing graphene oxide (GO), ZIF-8, and ZIF-67 nanofillers.

- The analysis integrated several complementary computational techniques, including:
- Mean square displacement (MSD) analysis to determine hydroxide self-diffusion coefficients.
- Radial distribution functions (RDFs) and coordination number analyses to quantify local molecular interactions.
- Water cluster analysis to evaluate the connectivity of ion-conducting pathways.
- Hydrogen-bond network analysis to investigate hydroxide transport mechanisms.
- Water channel morphology analysis to visualise ion transport pathways.
- Solvation analysis of both cationic groups and hydroxide ions to assess membrane stability against alkaline degradation.
- This integrated computational methodology provides a robust framework for simultaneously evaluating transport properties and chemical stability before experimental membrane synthesis, thereby reducing development time and experimental costs.

The study revealed that ZIF-67 is a significantly more effective nanofiller than GO or ZIF-8 for improving the performance of TriPPO anion exchange membranes.
The principal findings include:

- Incorporation of ZIF-67 increased hydroxide ion diffusivity by up to 96.8% compared with the pristine membrane at higher nanofiller loading.
- The highest hydroxide diffusion coefficient (3.64×10^{-8} m^2 s^{-1}) was obtained for the TriPPO3ZIF67 membrane.
- Enhanced transport originated from the formation of highly interconnected water channels, fewer isolated water clusters, shorter distances between neighbouring

cationic groups, increased hydrogen-bond connectivity, and greater hydration around the conducting sites.

- The study also demonstrated that the N1 position of the triazolium cation is the primary site susceptible to hydroxide attack.
- Among all membranes investigated, TriPPO3ZIF67 exhibited the greatest alkaline stability because fewer hydroxide ions accumulated around the cationic group while a larger hydration shell protected the hydroxide ions.
- These results provide molecular-level insight into how nanofiller chemistry influences both hydroxide transport and degradation mechanisms in anion exchange membranes, offering valuable design principles for next-generation electrochemical energy devices.

3. 研究目標の達成状況

The objectives of the study were successfully achieved.

Specifically, the research:

- Developed atomistic molecular models of TriPPO membranes functionalised with GO, ZIF-8, and ZIF-67.
- Evaluated hydroxide ion transport under different hydration levels.
- Identified the structural factors controlling hydroxide conductivity, including water cluster formation, hydrogen bonding, cation spacing, and water channel morphology.
- Determined the degradation susceptibility of triazolium cationic groups in alkaline environments.
- Demonstrated that ZIF-67 provides the greatest enhancement in both hydroxide transport and alkaline stability.
- Produced computational design guidelines that can be used to prioritise promising membrane materials before undertaking expensive laboratory synthesis and experimental testing.

4. まとめと今後の課題

This collaborative study successfully demonstrated that molecular dynamics simulations can be used to predict the transport behaviour and degradation characteristics of advanced composite anion exchange membranes. Among the nanofillers investigated, ZIF-67 showed the greatest potential for improving hydroxide conductivity while simultaneously enhancing

alkaline stability. The findings establish an efficient computational strategy for screening membrane materials prior to experimental development.

Future work should include:

- Experimental synthesis and validation of the predicted TriPPO/ZIF67 composite membranes.
- Investigation of additional metal-organic frameworks and two-dimensional nanomaterials.
- Longer molecular dynamics simulations and multiscale modelling to capture long-term membrane behaviour.
- Integration of reactive molecular dynamics and quantum chemical calculations to investigate degradation mechanisms in greater detail.
- Evaluation of membrane performance under realistic fuel cell, electrolyser, battery, and supercapacitor operating conditions.

These future studies will accelerate the rational design of durable, high-performance anion exchange membranes for clean energy technologies.

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）

- （Letsau, T. T., Mabuchi, T., and Msomi, P. F. (2025). Effect of graphene oxide and ZIF materials on anion exchange membranes, a molecular dynamics study. *Molecular Physics*, e2507319.

著書

n/a

国際学会

- Thabakgolo T. Letsau, Lesego Malepe, Takuya Mabuchi, Phumlani F. Msomi. (2025). Molecular Dynamics (MD) Simulations of the Effect of Bulky Substituents at the N3 Position of Imidazolium-Functionalized Poly (p-phenylene oxide). 22nd International Conference on Flow Dynamics（ICFD）, Sendai International Center, Sendai, Miyagi, Japan, 10-13 November 2025.

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01JUN25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.6～2026.3
報告回数	第 1 回報告

2026 年 08 月 08 日提出

飛行しながら回転する中空円筒の実験と数値解析

Experiment and Simulation of a Rotating Hollow Cylinder in Flight

平田 勝哉*†，石本 淳**††，中野 政身**††，
足立 高弘***，日尻 昂希*，小川 学人*
*同志社大学理工学部，**東北大学流体科学研究所
***秋田大学理工学部
†申請者，††所内対応教員または所外対応研究者

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

航空分野では世界的なゼロエミッション化に向けて，航空機のさらなる燃費改善が求められている．そのため，従来の翼とは異なる形状を持つ翼の空力特性について研究することは重要である．本研究で対象とする円筒翼は，同じアスペクト比の矩形翼と比較して揚力曲線勾配が約 2 倍となるなど，優れた空力特性を有することが過去の実験から明らかになっている．また中空円筒翼は，平面翼と比較して誘導抗力を低減できる可能性がある．

一方で，一様流中に置かれた中空円筒翼周りの流れやその空力特性に関する研究は少なく,特に回転による影響については十分に明らかにされていない．そこで本研究では，AR=1.6 の中空円筒翼を対象として風洞実験および三次元数値シミュレーションを行い，円筒翼周囲の流れを詳細に解析するとともに，揚力や抗力などの空力特性を明らかにすることを目的とする．さらに，円筒翼の回転が飛行時の姿勢安定性や空力特性に及ぼす影響についても検討する．

1.2 研究期間内の最終目標

AR=1.6 の中空円筒翼を対象として，風洞実験および三次元数値シミュレーションにより一様流中における円筒翼周囲の流れを解析する．その結果から，迎角に対する揚力・抗力などの空力特性を明らかにするとともに，円筒翼の回転が周囲流れや空力特性に及ぼす影響について検討する．最終的には，得られた実験結果と数値解析結果を比較・検証し，円筒翼の飛行体としての空力特性および飛行特性について考察することを目標とする．

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

2.1 新しい解析手法の開発

シミュレーションにおいてはメッシュを物体近傍で均一にする，乱流モデルの変更といった工夫を凝らし，既存のものから実験とより定性的に合う環境づくりを行った．図 2～4 よりシミュレーションと実験の誤差が小さく，近い迎角で失速特性を示したことより，定性的に実験と一致したと考えた．

2.2 新しい現象の解明

図 1 より回転の影響は小さく，主に飛行安定性に寄与するパラメータである可能性が示された．また，レイノルズ数 10^4 の低レイノルズ数領域において，風洞試験および自由飛行試験を実施した．風洞試験では矩形翼との比較によるレイノルズ数の影響を，自由飛行試験では回転の影響を評価した．その結果，レイノルズ数の影響は小さいことが示された．また，矩形翼と比較して最大揚力係数は約 60%低下したが，抗力係数も低減し，結果として誘導抗力の低減が確認された．さらに，飛行安定性は矩形翼より向上しており，高い実用性が示唆された．

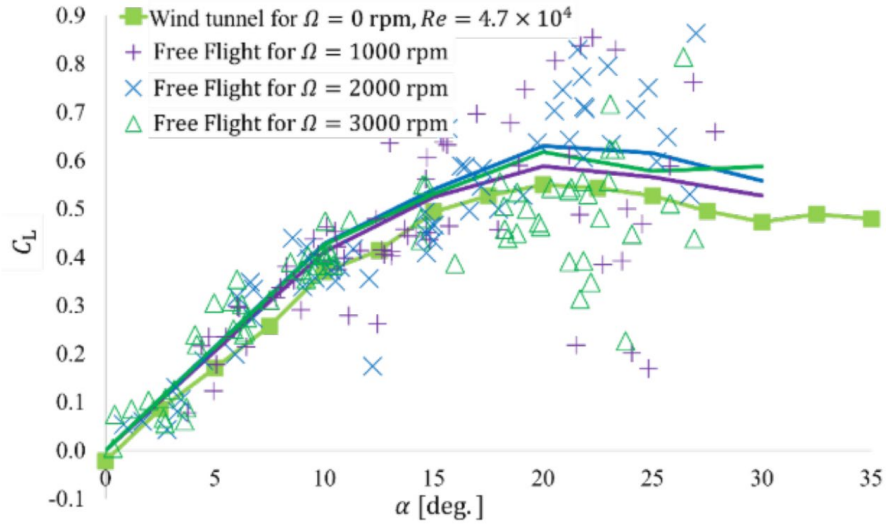


図 1：The graph of C_L of Free Flight and Wind tunnel.

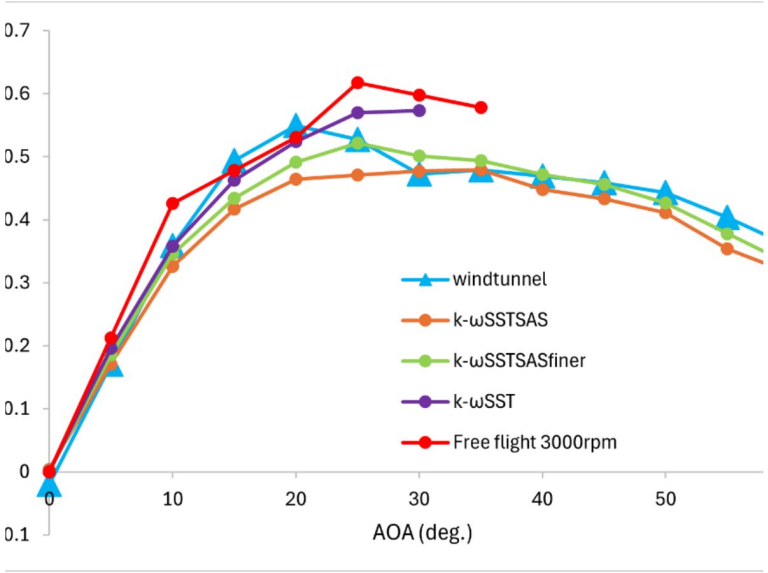


図 2：The graph of C_L vs AOA.

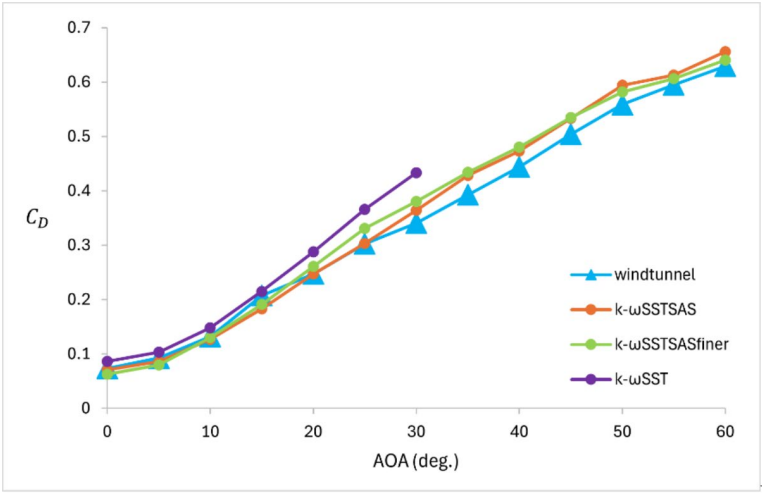


図 3：The graph of C_D vs AOA.

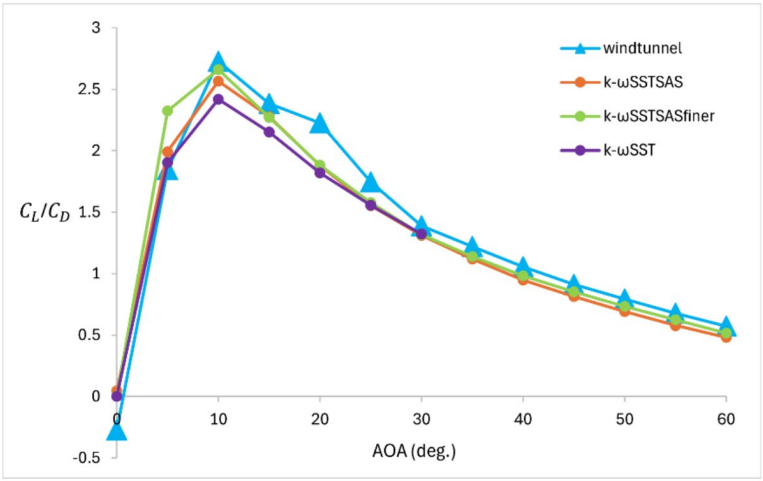


図 4：The graph of C_L/C_D vs AOA.

3. 研究目標の達成状況

シミュレーションの妥当性は担保できたと考えている．これより翼開発に向け AR 等の一定パラメータを変更し，シミュレーションを進めていく．

4. まとめと今後の課題

回転による円筒翼の飛行特性の差は生まれなかった．しかし飛行安定性には大きく影響を及ぼすことが分かった．また，スパコンを利用することでより詳細なシミュレーションが可能になり定性的に概ね一致する結果が得られた．これによりシミュレーションによる開発のフェーズに移れるので，パラメータ依存で形状を変更し今後も研究を進める．

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] 日尻昂希，小口晃太朗，石本淳，中野政身，足立高弘，平田勝哉：円筒翼に関する数値解析と実験, 2025 年度 研究成果報告会（2024 年度研究成果報告）, 同志社大学光喜館 (2025).

[2] 小口晃太朗，日尻昂希，石本淳，中野政身，足立高弘，平田勝哉：風洞実験と飛行試験による円筒翼の空力特性, 第 63 回飛行機シンポジウム, 沖縄県市町村自治会館 (2025), 3D07.

[3] 日尻昂希，小口晃太朗，石本淳，中野政身，足立高弘，平田勝哉：数値シミュレーションによる円筒翼の空力特性と流れ，第 63 回飛行機シンポジウム，沖縄県市町村自治会館 (2025), 3D08.

国際学会

[4] K. Oguchi, K. Hijiri, J. Ishimoto, M. Nakano, A. Adachi, K. Hirata: Investigation of the Aerodynamic Characteristics of a Cylindrical Wing using Wind Tunnel Testing and Free Flight Testing, ICFD2025, Sendai, (2025), OS1-12.

[5] K. Hijiri, K. Oguchi, J. Ishimoto, M. Nakano, A. Adachi, K. Hirata: Investigation of the Aerodynamic Characteristics of a Cylindrical Wing using Wind Tunnel Testing and Free Flight Testing, ICFD2025, Sendai, (2025), OS1-13.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP02JUN25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.6～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 7 月 24 日提出

糸状菌由来機能性アミロイドの界面特異的自己組織化機構の解明

阿部　敬悦，高橋　尚央
東北大学大学院農学研究科　教授，博士 3 年
馬渕　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

機能性アミロイドと呼ばれるタンパク質は，自己組織化して線維構造を形成することで生物の形態形成に寄与する．機能性アミロイドにおいては，自己組織化が「界面」によって促進される現象がよく観察される．タンパク質は天然環境で様々な種類の界面(気液界面・固体表面・脂質膜など)に曝されるため，界面とタンパク質の相互作用は普遍的な現象であるといえるが，その分子機構の体系的な理解は為されていない．

日本の伝統的な醸造産業を支える麹菌(*Aspergillus oryzae*)の細胞表層は，ハイドロフォビン RolA と呼ばれる機能性アミロイドで被覆されている．RolA は界面活性タンパク質としての特徴も有し，界面に強く吸着する．吸着後，RolA は界面で特異的に自己組織化して硬い線維状構造を形成し，免疫ステルス性や表面疎水化などの機能を発現する．RolA の詳しい機能発現機構を解明するためには，線維構造形成過程を理解する必要があるが，界面という微小領域で生じる RolA の特異的な構造変化を実験的に補足することは困難である．そこで本研究では，実験と計算(MD シミュレーション)を統合することで界面上での RolA の構造変化を分子レベルで明らかにすることを目指した．

1.2 研究期間内の最終目標

溶液中 RolA と界面吸着後 RolA の構造状態をそれぞれ MD シミュレーションによって解析し、界面特異的な RolA の構造変化を分子レベルで説明することを最終目標とした。

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）

RolA が界面上でのみ特異的に自己組織化するためには，RolA モノマーは界面吸着時に特異な構造状態をとる必要があると考えられる．そこで、RolA のバルクと界面での構造差異を，実験とシ

ミュレーションの双方向から解析した.
実験には，麹菌が分泌した RolA をイオン交換クロマトグラフィーで精製したものを使用した. Langmuir-Blodgett 法で気液界面上に形成された RolA 膜をシリコンウエハに転写し，原子間力顕微鏡(AFM)と全反射フーリエ変換赤外分光法で(ATR-FTIR)で構造状態を評価した．RolA は気液界面でアモルファスと線維という二状態で存在しうるため，両者とも解析対象とした．AFM 観察の結果，アモルファス状態では明瞭な構造は観察できなかったが，線維状態では基板表面が線維で密に被覆されていることが確認できた．続いて、ATR-FTIR によってタンパク質の二次構造情報を含有する Amide I バンド域のスペクトル形状を確認した．その結果，アモルファス・線維状態ともに，β シート構造の含有割合がバルクの RolA よりも大きいことが明らかになった．アミロイドタンパク質では一般にモノマー分子間で β シート構造をつくることで線維構造へと変化するため，線維状 RolA ではこの分子間 β シート構造形成が検出されたと考えられる．一方でアモルファス RolA は線維化していないにも関わらず β シート構造形成が検知されており，RolA が界面に吸着したことでモノマーレベルでの特異な構造変化が生じたことが示唆された.

実験で示唆された RolA モノマーの界面特異的な構造変化を分子レベルで理解するため，MD シミュレーションを実施した．RolA のアミノ酸配列情報から Alphafold2 によって予測立体構造を取得し，これをシミュレーションの初期構造として使用した．シミュレーション系には水層と真空層とを配置し，その界面（気液界面）に RolA が吸着したときの構造状態を解析した．水層に RolA モデルを配置してシミュレーションを開始したところ，RolA は界面に移行し，安定に保持された．界面吸着過程及び、界面で安定化後の RolA の二次構造を DSSP プログラムで解析したところ, RolA は界面吸着の前後でほとんど二次構造を変化させていないことが明らかになった. 二次構造変化に表れない全体構造の変化や構造揺らぎの変化を検出するために，界面吸着前後での RolA 分子の radius of gyration (Rg)と root mean square fluctuation (RMSF)を算出した．その結果，界面 RolA はバルクよりもやや大きい Rg を示し，拡張的な構造状となっていることが明らかになった．また界面 RolA の N 末端領域はバルクよりも大きい RMSF を示し，当該領域の構造揺らぎが増大していることが示唆された.

以上の実験・シミュレーションの結果より、RolA はバルクから界面に移行することでモノマー一分子レベルで全体構造が拡張，部分的な構造揺らぎが増大することが明らかになった．また，実験的には界面上 RolA は線維形成前でも β シート構造を形成していることが推測されたが，これは界面上モノマー間で線維形成には至らない相互作用が生じて部分的に β シート構造が形成されていた可能性がある．以上の複合的な要因によって，RolA は界面吸着時にのみ線維形成すると考えられる．この界面特異的な構造変化は界面応答性の分子スイッチとも考えられ，さらなる研究の深化により，生物機能解明に留まらず，界面特異的に構造形成するナノ材料開発への応用が期待できる.

3. 研究目標の達成状況

RolA モノマーの界面上での構造変化の解析は実験・シミュレーションともに目的を達した.
当初はさらに, RolA モノマーのうちの特に自己組織化に関与することが明らかになっている領域を抜き出した 12 アミノ酸残基の短鎖ペプチドを用いた, 実際の自己組織化過程のシミュレーションも計画していたが，自己組織化に伴う β シート構造の増大をシミュレーションで観測することができなかった．したがって，当初予定していた論文執筆には遅れが生じている.

4. まとめと今後の課題

本研究では RolA モノマーの界面特異的な構造変化を実験とシミュレーションの双方向から解析し，微小な構造変化を明らかにすることができた．この構造変化は RolA の自己組織化の界面特異性を規定している可能性がある．しかし、今回のシミュレーション結果は，FT-IR で検出されたアモルファス RolA の β シート構造形成を反映していなかった．したがって，今後は RolA 一分子に留まらず，複数分子が自己組織化して分子間 β シート構造を形成する過程をシミュレーションで再現し，分子論的な観点からその機構を明らかにする必要がある．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

[1] N. Takahashi, T. Mabuchi, Y. Terauchi, T. Tanaka, A. Yoshimi, H, Yabu, K. Abe: Mechanistic Insights into the Interface-Specific Self-Assembly of Fungal Functional Amyloid RolA, *Twenty-second International Conference on Flow Dynamics,* Sendai, (2025), CRF-72.

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP03JUN25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.06～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 18 日提出

固体表面ナノバブルと表面特性の分子動力学的解析

永島 浩樹[1]，伊地知 卓己[2]，城ノ園 優佑[2]
琉球大学工学部　准教授[1]
東北大学工学研究科ファインメカニクス専攻[2]
徳増 崇[3]
東北大学大学流体科学研究所
ナノ流動研究部門 量子ナノ流動システム研究分野 教授[3]

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、直径約 1 ㎛以下の微細な気泡であるナノバブルは、洗浄や水質浄化など様々な分野への応用が期待されている。特に、固体表面に形成される固液界面ナノバブルは、長時間安定して存在することが知られているが、その安定化機構については十分に明らかになっていない。これまで、三相界線の固定や固体表面の濡れ性などが安定性に関与すると考えられている一方、固体表面の幾何学的構造がナノバブルの形状および三相界線近傍の力学的状態に及ぼす影響については未解明な点が多い。申請時にも、凹み構造によるナノバブルの形状変化と安定性、および三相界線近傍の微視的バランスの解明を研究目的としている。そこで本研究では、分子動力学（Molecular Dynamics: MD）法を用いて、固体表面に設けた凹み構造の幅および深さを変化させ、形成される固液界面ナノバブルの形状変化を解明するとともに、三相界線近傍に作用する表面張力を評価することで、凹み構造がナノバブルの形状および力学バランスに及ぼす影響を明らかにすることを目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

固体表面に形成した凹み構造の大きさと固液界面ナノバブルの形成・形状との関係を明らかにするとともに、凹み内部に収まるナノバブルと凹み外部まで広がるナノバブルについて、三相界線近傍の微視的力学バランスを定量的に評価することを最終目標とした。特に、固液、固気および気液界面の表面張力を算出し、表面張力のみでは説明できない力学的寄与の有無を明らかにすることで、固体表面構造による固液界面ナノバブルの安定化機構に関する知見を得ることを目指した。これは申請時に設定した、凹みに収まる場合と収まらない場合の双

方について形状と安定性を解析するという目標に対応する。

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 凹み形状によるナノバブルの形成および形状変化の解析

固体表面に幅および深さの異なる凹み構造を設け、各条件について MD 計算を行い、ナノバブルの形成状態および形状を比較した。その結果、凹みサイズが小さい条件ではナノバブルが形成されないことが確認された。一方、ナノバブルが形成された条件では、凹み形状の変化に伴ってナノバブルの三相界線間距離、曲率半径および見かけの接触角が変化した。特に、凹み断面積の増加に伴い、ナノバブルの凹み外部への広がりが小さくなり、凹み内部に収まる形状へと遷移する傾向が確認された。また、この形状変化に伴って曲率半径が減少し、見かけの接触角が増加する傾向が得られた。これらの結果から、固体表面の凹み構造がナノバブルの形成の有無だけでなく、形成後の形状および三相界線の位置を変化させる重要な因子であることを明らかにした。

2.2 三相界線近傍における力学的バランスの解明

形成されたナノバブルについて、圧力テンソルから固液界面、固気界面および気液界面の表面張力を算出し、三相界線近傍の力学的バランスを評価した。特に、凹み内部に収まったナノバブルについて、各表面張力を水平方向および垂直方向に分解して比較した。その結果、凹み断面積の増加に伴い、水平方向の表面張力成分の差は減少する一方、垂直方向の表面張力成分の差は増加する傾向を示した。また、水平方向および垂直方向の差から求めた表面張力の合力は、解析した条件において 0.487~0.574 となり、ゼロにはならなかった。一方、これらの条件においてナノバブルは安定した位置を維持していた。したがって、凹み内部に形成されたナノバブルの静止状態は、固液、固気および気液界面の表面張力のみでは説明できないことが示された。このことから、凹み形状による幾何学的拘束や三相界線の移動を制限する付加的な力学的寄与が、三相界線近傍の力学的バランスに関与している可能性が示唆された。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、凹み構造の幅および深さを変化させた MD 計算を実施し、凹み形状によってナノバブルの形成状態および形成後の形状が変化することを明らかにした。また、三相界線間距離、曲率半径および見かけの接触角を用いることで、凹み構造による形状変化を定量的に評価した。さらに、圧力テンソルから各界面の表面張力を算出し、三相界線近傍における力学的バランスを評価した結果、ナノバブルが静止しているにもかかわらず表面張力成分のみでは力学的釣り合いを説明できないことを示した。以上より、当初の研究目標であった、固体表面構造によるナノバブルの形状変化と三相界線近傍の微視的力学バランスの解明について、一定の成果を得ることができた。一方、表面張力の不均衡を補う付加的な力学的寄与の起源およびその定量化については、引き続き検討が必要である。

4. まとめと今後の課題

本研究では、MD 法を用いて固体表面の凹み構造が固液界面ナノバブルの形成、形状および三相界線近傍の力学的バランスに及ぼす影響を解析した。その結果、凹み形状によってナノバ

ブルの形成の有無が変化するとともに、凹み断面積の増加に伴ってナノバブルの広がり、曲率半径および見かけの接触角が変化することを確認した。また、凹み内部に収まったナノバブルでは、三相界線近傍に表面張力成分の不均衡が残存しているにもかかわらず、ナノバブルが静止した状態を維持することが確認された。今後は、三相界線近傍の局所的な圧力分布や分子構造をより詳細に解析し、表面張力の不均衡を補う力学的寄与の起源を明らかにする必要がある。また、凹みに収まらない条件を含めた解析を進め、凹み形状と三相界線の移動との関係を定量化することで、固体表面構造によるナノバブルの安定化機構をより詳細に明らかにする。

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）

Yusuke Jonosono, Shin-ichi Tsuda, Takashi Tokumasu and Hiroki Nagashima, Molecular Dynamics Study of the Microscopic Mechanical Balance at the Three-Phase Contact Line of Interfacial Nanobubble, Langmuir, 2024, 40, 8440-8449.

国際学会

1. Y. Jonosono, S. Tsuda, H. Nagashima and T. Tokumasu, Molecular Dynamics Study of the Effect of Concave Interfaces on the Shape and Stability of Nanobubble, 9th International Conference on Micro and Nano Flows (MNF 2025), September 2025, Edinburgh, U.K.
2. Y. Jonosono, S. Tsuda, H. Nagashima and T. Tokumasu, Molecular Dynamics Study of Nano-Bubble on Solid Surface and Surface Property, The 22rd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), November 2025, Miyagi
3. Y. Jonosono, S. Tsuda, H. Nagashima and T. Tokumasu, Effect of Concave Surface Structures on the Mechanical Balance at the Three-Phase Contact Line of Interfacial Nanobubbles, the 2026 International Conference on Nanobubbles, Nanodroplets (Nanobubble2026), August 2026, New Jersey, USA (presented)
4. Y. Jonosono, S. Tsuda, H. Nagashima and T. Tokumasu, Molecular Dynamics Study of Nano-Bubble on Solid Surface and Surface Property, Rhe 23rd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2026), November 2025, Miyagi (presented)

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP04JUN25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.06～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 28 日提出

熱的に揺動する内部応力によって現われる

弾性膜上のチューリングパターン

内一　哲哉

東北大学流体科学研究所　教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

本申請研究では，図 1 に示すような硬い物質上の Turing パターンの発生起源が外力で発生する内部応力にあることを数値的に研究する。



図 1.　貝殻に現れる Turing パターン

申請者らはこれまで, 弾性膜として 2 次元面内の弾性膜(文献[1])と 3 次元空間内の曲面状弾性膜(文献[2])の上で膜弾性と相互作用するような Turing パターンを数値的に研究してきた。ここで，膜弾性とは，膜内部に分子の位置の自由度を仮定し，その最近接分子間にばねの弾性エネルギーを持たせることで，膜全体を 2 次元の弾性体と見なすモデルである。これらの研究で新しいのは，異方的，即ち，方向性を持った Turing パターンを発生させている異方的拡散の起源は内部応力の異方性にあるのではないかという視点である。そのモデリングの方法としては Finsler 幾何モデルと呼ばれる手法を用いる。特に，分子の位置の自由度が揺らぐ場合には，膜揺らぎのエントロピーが計算できるため，Turing パターンを膜の引き延ばしで発生する非平衡定常状態を特徴づけるものと見なせる。

1.2 究期間内の最終目標

本研究の目標は，柔らかい膜上で現われる Turing パターンの発生起源と考えられる内部応力による Turing 変数u, vの拡散異方性が，固い物質にも現れるかどうかを確認することである。加えて，固い膜で発生した Turing パターンも柔らかい膜においてと同じように，内部状態の変化に関連する非平衡な定常状態と見なせるかどうかも明らかにする。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

固い物質における拡散異方性は，柔らかい膜上の拡散異方性からほぼ自明な内容にも見えるが，実は，硬い物質はその内部の分子位置を固定したものと考えるので，通常は膜弾性エネルギーが定義されない。一方，FG モデル化の方法では，弾性エネルギーの示強変数部分が変化するため，膜弾性エネルギーが内部自由度の向きに依存するようになるという機構自体は働くものの，エントロピーは分子に動きがあるときにだけ計算できるため，固い膜で発生する Turing パターンは非平衡な定常状態と見なせるかどうか分からなくなるという問題がおこる。この問題とその解決方法を図示したのが図 2 である。

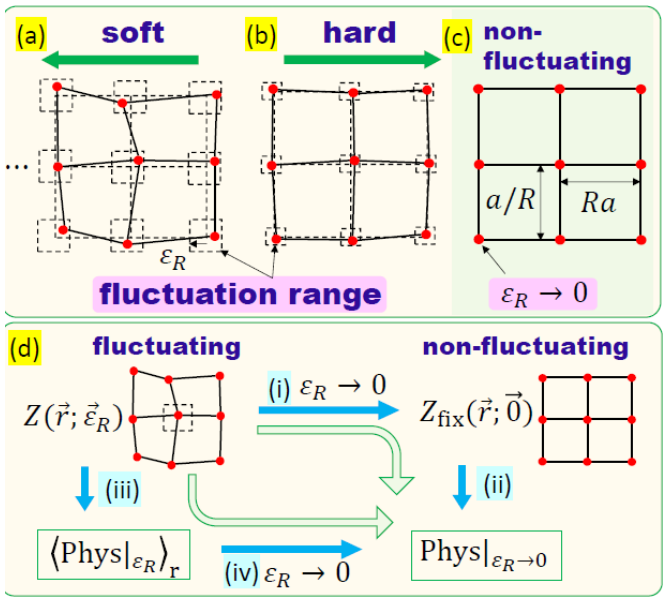


図 2　柔らかい物質と硬い物資の違い

図 2(a),(b),(c)には柔らかい・硬いを特徴づける格子点の位置の揺らぎ ε_R の大きさを，(a)soft, (b)hard, (c)non-fluctuating の順で小さくしたものであり，(c)がこの研究で取り扱いたい硬い物質である。この硬い物質では，格子頂点の位置が固定されている($\varepsilon_R = 0$)ため，格子点間距離は一定になる。従って，ボンドの長さは変動しないので，分子に動きに依存する部分の弾性エネルギーは一定になり，エントロピー計算のための Hamiltonian の役割を果たさない。従って，ボンドの長さが変動しない弾性エネルギーを持つような硬い物質では応力状態に関連したエントロピーが求まらない。エントロピーが計算できなければ，Turing パターンと応力緩和現象などの関係は議論できなくなる。しかし，エントロピーの計算を揺らいでいる膜で計算して，その計算結果の ε_R 依存性を $\varepsilon_R \to 0$ とすることはできるので，そのようにして得られたエントロピーと，硬い膜において柔らかい膜の公式をそのまま用いて計算したエントロピーが同じものであれば問題ない。そこで，一般に，物理量に対して

$$\lim_{\varepsilon_R \to 0} \langle \mathrm{phys}|_{\varepsilon_R} \rangle_{\mathrm{r}} = \mathrm{phys}|_{\varepsilon_R \to 0}$$

が成り立つことを示した(文献[3]supplementary material 1)。左辺は揺らいでいる膜で計算した物理量の揺らぎ依存性を計算した後に揺らぎゼロの極限をとったものであり，右辺は揺らぎのない膜で，揺らぎのある膜における公式を使って計算した物理量である。左辺の $\langle \cdots \rangle_{\mathrm{r}}$ は頂点の位置 $\vec{r}$ を揺らして平均するという意味である。この等式をイラストで表わしたものが図 2(d)である。

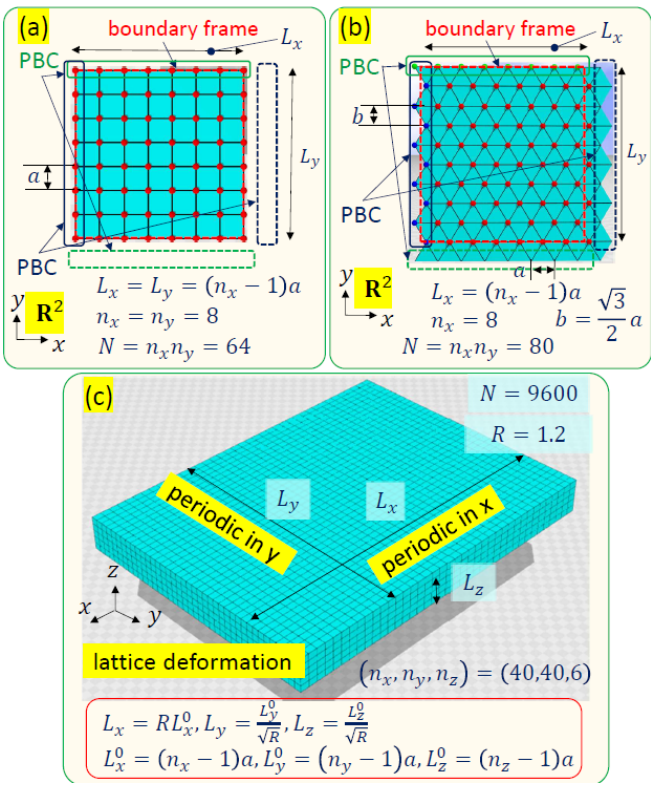


図 3　4 角形格子，3 角形格子と立方体格子

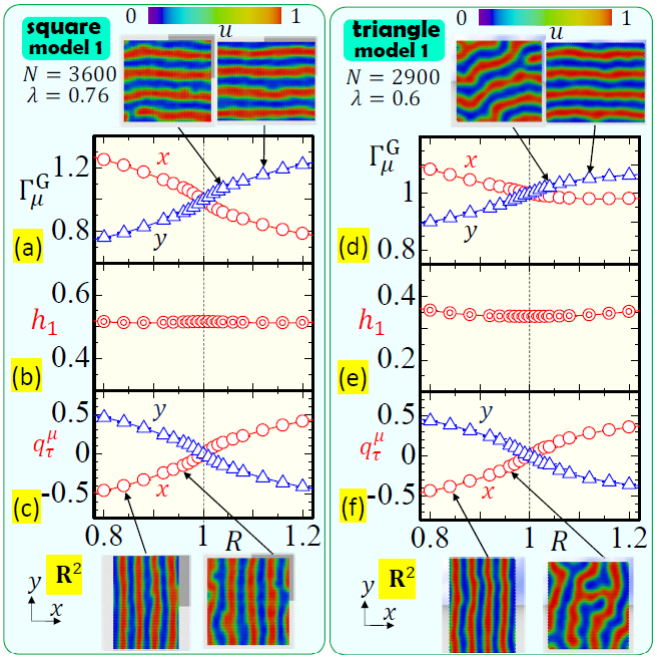


図 4　4 角形と 3 角形格子の計算結果

2　数値計算結果

初めに，計算に用いる 4 角形格子，3 角形格子と立方体格子を図 3 に示す．2 次元格子では，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．2 次元格子では完全な周期的境界条件を仮定している。一方，3 次元の立方体格子では，z 方向は自由境界，x,y 方向は周期境界としている。

図 4(a),(b),(c)に 4 角形格子による計算結果，図 4 (d),(e),(f)に 3 角形格子による計算結果を TP の snapshot とともに示す。

図 4(a),(d)には膜弾性エネルギー

$$H_1 = \sum_{ij} \Gamma_{ij}^G(\tau)\ell_{ij}^2,$$

の示強変数部分$\Gamma_{ij}^G(\tau)$の方向依存性を取り出した

$$\Gamma_\mu^G = \frac{1}{\sum_{ij} \vec{e}_{ij} \cdot \vec{e}_\mu} \sum_{ij} \Gamma_{ij}^G(\tau)\, \vec{e}_{ij} \cdot \vec{e}_\mu,$$

$$(\mu = x, y)$$

を変形パラメータ R に対して示す。$R > 1$ は x 方向，$R < 1$は y 方向に引き伸ばされていることを表わす。Γ_μ^Gの意味は，x,y 方向に依存する有効張力または比張力である。x または y 方向にプレートを引き伸ばすと，その方向の比張力が垂直な方向に比べて減少することが分かる。減少する理由はH_1の示量変数部分ℓ_{ij}^2(ボンドの長さの 2 乗)が引き延ばすと大きくなるために，全体としてエネルギーが大きくならないように$\Gamma_{ij}^G(\tau)$の部分が小さくなるためである。なお，引き延ばすことと分子の位置が揺らぐことは別である。

図 4(b),(e)は$h_1 = \frac{H_1}{N_B}$であり，弾性エネルギーはほぼ一定であることが分かる。図 4(c),(f)には秩序パラメータ

$$q_\tau^\mu = 2\left[\frac{1}{N}\sum_i \left(\vec{\tau}_i \cdot \vec{e}_\mu\right)^2 - \frac{1}{2}\right], (\mu = x, y)$$

を示す。内部状態 $\vec{\tau}$の異方性が秩序パラメータに反映されていることが分かる。

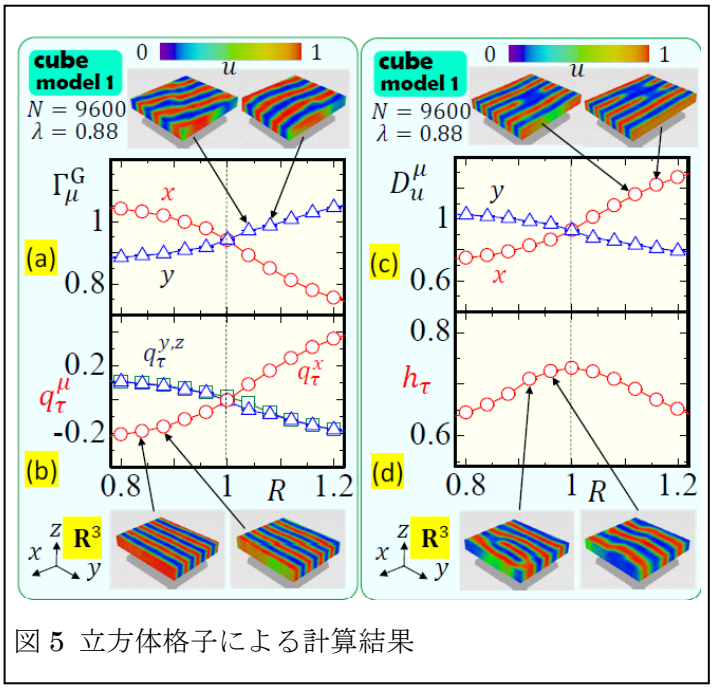


図 5 立方体格子による計算結果

図 5 (a),(b)には，立方体格子で計算した比張力$\Gamma_{ij}^{G}(\tau)$と秩序パラメータq_{τ}^{μ}である。結果は，２次元の格子の場合とほぼ同じである。$R>1$と$R<1$でこれらの物理量が少し非対称な理由は，変形自体が，x,y 方向で対称ではないためである。

図 5 (c)には，Turing 変数uの比拡散定数の x,y 方向成分$D_u^{\mu},(\mu=x,y)$を示す。比拡散定数D_uは拡散エネルギー

$$H_u^D=\sum_{ij}D_{ij}^{u}(\tau)\left(u_i-u_j\right)^2$$

の示強変数部分$D_{ij}^{u}(\tau)$から

$$D_u^{\mu}=\frac{1}{\sum_{ij}\vec{e}_{ij}\cdot\vec{e}_{\mu}}\sum_{ij}D_{ij}^{u}(\tau)\,\vec{e}_{ij}\cdot\vec{e}_{\mu},\qquad(\mu=x,y)$$

で計算したものである。D_u^{μ}は$\Gamma_{ij}^{G}(\tau)$とは逆に引張った方向にはそれと垂直な方向に比べて大きくなっていることが分かる。Turing パターンは引張った方向に伸びているので，この場合，パターン方向に比拡散定数D_u^{μ}が大きくなっている。即ち，示量変数$\left(u_i-u_j\right)^2$自体は引張った方向には小さくなっている。図 5 (c)には，

$$h_{\tau}=\frac{H_{\tau}}{N_B},\qquad H_{\tau}=\frac{3}{2}\sum_{ij}\left[1-\left(\vec{\tau}_i\cdot\vec{\tau}_j\right)^2\right]$$

を示す。N_B はボンドの総数，H_{τ}は内部自由度$\vec{\tau}$同士の近接相互作用を表わす。図 5 (d)で R=1 でH_{τ}が最大値になっていることの意味は，x,y 方向に引き伸ばすと，$\vec{\tau}$は隣同士がそろい易くなるということである。

図 6 には，立方体格子で計算した応力σ_x，エントロピー s，自由エネルギーf_{re}を示す．σ_xは格子を引き伸ばした状態に保つために必要な x 方向の力である．図 5 (a),(b)の横軸 λ は内部自由度$\vec{\tau}$の近接相互作用ハミルトニアンH_{τ}の係数である．

図 6 (a) は$R=1$の引き伸ばされていない状態と$R=1.2$の引き延ばされた状態におけるσ_xの比較で，$R=1.2$ではσ_xは$\lambda=0.88$付近で大きく変化する．$\lambda=0.88$では図 6 (b) から分かるように，エントロピーsが極大になる．このsの極大点はRが変化しても変わらないことも分かる．図 6 (c) はσ_xとsのR依存性である．$R\geq1$の x 方向への引張りの領域ではσ_xはRとともに増加し，sは減少する．sが減少するのは，内部自由度$\vec{\tau}$が格子を引き伸ばすとその方向に平行または垂直に揃うからである．図 6 (d) のf_{re}は格子の変形に対応する自由エネルギーで，それはエントロピーの計算に必要な物理量であり，σ_xはf_{re}から計算する．

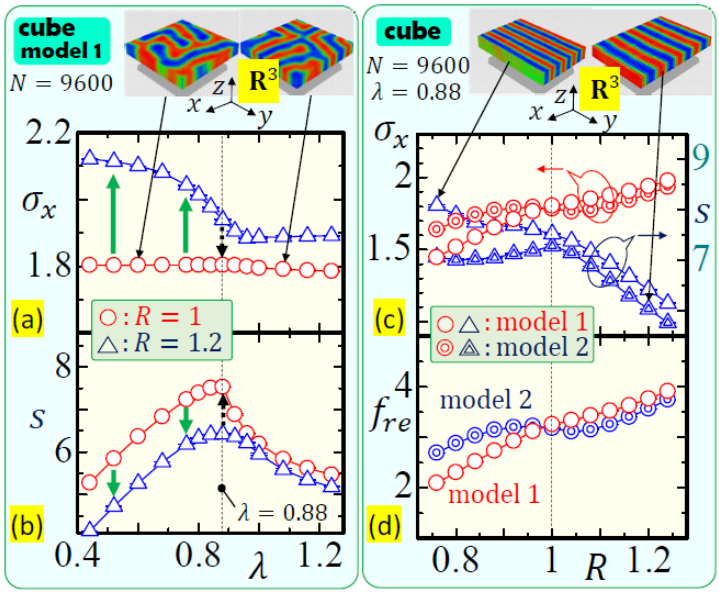


図 6　3 次元の立方体格子で計算したエントロピー密度 s と張力 σ^x と自由エネルギー fre

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 ArXiv に upload している[文献 3]. その supplementary material では，図 2 で述べた硬い膜上のモデルと柔らかい膜上のモデルの関係を示した。この考え方は，応力という内部自由度によって，硬い格子上の強磁性体などのモデルにおいてもエントロピーをとおして弾性的性質に関連する非平衡現象を議論する場合にも役に立つ。また，２次元の２種類の格子と３次元の立方体格子による 3 種類の数値計算プログラム（fortran）も supplementary material として解説書付きで upload している。

4.　まとめ

硬い物質上の Turing パターンの発生起源が外力で発生する内部応力にあることを数値的に示した[3,4]。モデル化の方法としては Finsler 幾何モデルの手法を用いた。この手法によれば，応力の向きを内部自由度として扱うことで，膜弾性エネルギーの示強変数部分が有効ばね定数または有効張力定数として向きに依存するようになる。この向き依存性が，Turing 変数に対する拡散定数にも反映されて，これにより拡散異方性が説明できる。即ち，向きに依存する外力が膜弾性の異方性を引き起こし，膜弾性の異方性が拡散異方性を引き起こす，という 2 段階の機構が働くことで，Turing パターンの異方性を説明できる。このほか，内部自由度変数が非平衡現象の記述に有用なことが分かってきたので，動的 Monte Carlo 法という時間に依存する外力が働いている場合の MC 法が Turing パターンに適用でき，非平衡緩和現象を表わす各種の物理量のヒステリス計算ができことなども示した[5]。

参考文献

[1] G. Diguet, M. Nakayama, S. Tasaki, F. Kato, H. Koibuchi and T. Uchimoto, Numerical study of anisotropic diffusion in Turing patterns based on Finsler geometry modeling,

Phys. Rev. E, 2024, 109, 014213, https://doi.org/10.1103/physreve.109.014213.
[2] Fumitake Kato, Hiroshi Koibuchi, Elie Bretin, Camille Carvalho, Roland Denis, Simon Masnou, Madoka Nakayama, Sohei Tasaki and Tetsuya Uchimoto, Turing patterns on polymerized membranes: coarse-grained lattice modelling with an internal degree of freedom for polymer direction, Soft Matter, 2025, 21, pp. 2317–2338, https://doi.org/10.1039/d4sm01309c

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）

[3] F.Kato, H.Koibuchi, M.Nakayama, S.Tasaki and T.Uchimoto, Turing patterns on non-fluctuating surfaces under mechanical stresses, http://arxiv.org/abs/2604.26309

著書

国際学会

[4] Fumitake Kato, Hiroshi Koibuchi, Madoka Nakayama, Sohei Tasaki and Tetsuya Uchimoto, Turing Patterns on 3D Rigid Materials, Twenty-second International Conference on Flow Dynamics, November 10--13, 2025, Sendai, Miyagi, Japan, ICFD2024 proceedings, OS29: IFS Lyon Center Collaborative Research Forum, pp.1774-1776, (2025).

[5] Fumitake Kato, Hiroshi Koibuchi, Madoka Nakayama, Sohei Tasaki and Tetsuya Uchimoto, Dynamic Monte Carlo Simulations of Turing Pattern, ELyT Workshop 2026 March 7--8, 2026, Sendai, Miyagi, Japan.

国内学会・研究会等

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01JUL25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.07～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 07 月 20 日提出

Utilization of Coastal Wave Energy as Renewable Energy and Enhancement of Coastal Protection through Turbine Optimization in the Overtopping Breakwater for Energy Conversion (OBREC)

大島　逸平

東北大学流体科学研究所　助教

Raditya Hendra Pratama, Ahmad Taufiqur Rohman

Center for Energy Conversion Technology, National Research and Innovation Agency

Yeddid Yonatan Eka Darma

Ocean Engineering, Institut Teknologi Sepuluh Nopember

Samsu Dlukha Nurcholik

Department of Naval Architecture, Kalimantan Institute of Technology

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 increasing demand for renewable energy and the global commitment to carbon neutrality have accelerated the development of marine renewable energy technologies. Among various wave energy conversion technologies, the Overtopping Breakwater for Energy Conversion (OBREC) system is considered a promising solution because it combines coastal protection and renewable energy generation within a single infrastructure.

The effectiveness of the OBREC system depends largely on the hydraulic behavior of overtopping flow and the performance of the turbine used to convert the stored water energy into electricity. However, the characteristics of overtopping-induced flow differ significantly from those encountered in conventional hydropower systems, and the influence of wave conditions and structural geometry on turbine operating conditions remains insufficiently understood.

The objective of this research is to investigate the hydrodynamic characteristics of overtopping flow in the OBREC system through advanced numerical simulations and to provide fundamental design information for the subsequent optimization of turbine systems suitable for OBREC applications in Indonesia and Japan. The study also aims

to establish a reliable numerical framework that can be used to evaluate the relationship between wave conditions, OBREC geometry, overtopping behavior, and turbine operating conditions.

1.2 研究期間内の最終目標

The final goal of this research period is to establish a validated numerical simulation framework capable of predicting wave propagation, overtopping behavior, and reservoir inflow characteristics in the OBREC system under representative wave conditions.

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

2.1 Development of a Numerical Analysis Framework

A numerical analysis framework based on the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method was developed and applied to simulate wave propagation and overtopping processes in the OBREC system. The numerical model was verified against second-order wave theory, demonstrating reasonable agreement between numerical predictions and analytical solutions.

Mesh sensitivity and particle resolution studies were conducted to determine an appropriate computational setup that balances simulation accuracy and computational efficiency. The results indicated that a particle spacing of 0.03 m provides satisfactory accuracy while maintaining practical computational costs.

The developed numerical framework successfully reproduced free-surface deformation, overtopping flow generation, and reservoir inflow processes, providing a reliable platform for future turbine optimization studies.

2.2 Clarification of Overtopping Flow Characteristics in OBREC Systems

Comparative simulations were conducted for Linear and Cubic OBREC geometries under various wave conditions. The results revealed that structural geometry significantly influences overtopping behavior and reservoir inflow characteristics.

The Linear geometry consistently generated larger overtopping volumes and higher inflow velocities than the Cubic geometry. In contrast, the Cubic geometry exhibited lower overtopping rates due to increased wave energy dissipation associated with its structural configuration.

The simulations further demonstrated that overtopping occurrence is strongly affected by wave height and wave period. Non-dimensional analysis using relative water depth and wave steepness indicated that structural geometry remains the dominant factor governing reservoir inflow behavior, while wave parameters exert a secondary influence.

The obtained results provide quantitative information regarding overtopping velocity ranges and flow conditions that can serve as design inputs for future turbine performance evaluation and optimization.

3. 研究目標の達成状況

The research objectives established for the project period were successfully achieved.

A validated SPH-based numerical framework was established and applied to investigate overtopping phenomena in the OBREC system. The numerical results showed reasonable agreement with theoretical predictions and successfully reproduced key hydrodynamic processes relevant to wave energy conversion.

Furthermore, the influence of wave conditions and structural geometry on overtopping flow characteristics was clarified. The study identified overtopping velocity ranges, overtopping occurrence conditions, and dominant geometric factors affecting reservoir inflow behavior.

The generated numerical database provides essential boundary conditions and design information for the next stage of the project, which focuses on turbine blade optimization and energy conversion efficiency enhancement.

4. まとめと今後の課題

This study successfully established a numerical simulation framework for analyzing overtopping behavior in the OBREC system and clarified the influence of wave conditions and structural geometry on reservoir inflow characteristics. The results demonstrated that OBREC geometry significantly affects overtopping performance and identified key hydrodynamic parameters governing flow conditions relevant to turbine operation.

The findings provide fundamental design information for future turbine development and optimization in OBREC applications.

Future research will focus on integrating turbine models into the OBREC system and conducting detailed CFD-based optimization of turbine blade configurations. Additional studies will investigate turbine performance under site-specific wave conditions in Indonesia and Japan, aiming to maximize wave energy conversion efficiency while maintaining structural reliability. The ultimate objective is to develop an optimized OBREC turbine design suitable for practical implementation and contribution to renewable energy deployment and Net Zero Emission targets.

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）

(Submitted) Yeddid Yonatan Eka Darma, Raditya Hendra Pratama, Ahmad Taufiqur Rohman, Samsu Dlukha Nurcholik, and Ippei Oshima: Impact of Reservoir Inflow Velocity on Flow Dynamics and Turbine Design in OBREC Systems: A Numerical Study Using the SPH Method, submitted to Journal of Ocean Engineering and Marine Energy (2026).

著書

-

国際学会

Yeddid Yonatan Eka Darma, Raditya Hendra Pratama, Ahmad Taufiqur Rohman, Samsu Dlukha Nurcholik, and Ippei Oshima: Numerical Simulation of Overtopping Behavior and Reservoir Flow in OBREC Systems for Turbine Design, Proceedings of the 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, Japan, (2025), OS13-12, pp. 1010–1013.

国内学会・研究会等

-

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

-

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01AUG25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.08～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 27 日提出

直接空気回収技術（DAC）の応用における CO_2 吸着の静的・動的パラメータ決定のための分子動力学シミュレーション

Nasruddin Yusuf Rodjali, Erdiyanto Munandar
インドネシア大学工学部機械工学科　教授, 大学院生
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

大気中の CO_2 濃度は 420 ppm を超え、直接空気回収技術（DAC）は重要なネガティブエミッション戦略となっている。400 ppm での CO_2 回収は、10~15%の排煙ガス流と比較して熱力学的に大きく不利であり、環境濃度において強い親和性を持つ吸着材が必要とされる。超微細多孔性フッ素化フレームワークである SIFSIX-3-Cu は有力な候補であり、ヤーン・テラー効果による細孔収縮（3.5 Å まで）によって、CO_2 分圧 0.04 kPa において 1.24 mmol/g に達し、吸着等量熱は約 54 kJ/mol となる。

しかしながら、材料特性評価とプロセスエンジニアリングの間には知識のギャップが存在する。プロセスモデルには、速度論的係数、熱物性、そして現実的な湿潤・多成分大気下における CO_2 と H_2O の共吸着挙動といった、報告されることが稀な固有パラメータが必要とされる。平衡論的な議論では、フッ素サイトにおいて水が CO_2 を凌駕して優先的に吸着すると予測されるが、一部の破過実験では、フレームワークが水で飽和する前に CO_2 回収を可能にする速度効果が存在する可能性が示唆されている。本プロジェクトでは、シミュレーションによってこの仮説を直接検証する。

1.2 研究期間内の最終目標

1.　代表的な DAC 条件（相対湿度 40～80%、圧力 20～100 kPa、温度 298 K）下における、現実的な大気混合物（CO_2、H_2O、N_2、O_2、Ar)の多成分平衡吸着データを生成する。

2.　これまで文献に報告されていない、SIFSIX-3-Cu 中の CO_2 の拡散係数および速度論的パラメータを決定する。

3. 湿潤条件下での性能が熱力学的要因あるいは速度論的要因のいずれによって規定されるかを明らかにする。

4. 検証済みで移行可能なマルチスケールワークフロー（DFT > 力場 > GCMC > MD）、およびプロセススケールの DAC モデリングに使用可能なパラメータセットを提供する。

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

本共同研究の意義：本研究は、インドネシア大学の DAC プロセスエンジニアリングおよび吸着材材料に関する専門知識と、東北大学流体科学研究所（IFS）の分子シミュレーション手法および大規模計算リソースとを組み合わせたものである。IFS のスーパーコンピューティング環境がなければ、多成分 GCMC 計算および長軌道 MD 解析はいずれも実行不可能であった。

2.1 マルチスケール計算手法の開発

第 I 期（量子スケール電子構造）

代表的な SIFSIX-3-Cu フラグメント（Cu 中心、配位したピラジン配位子、ヘキサフルオロケイ酸アニオン）に対して DFT 計算を実施した。原子部分電荷は CHELPG 法により導出し、ファンデルワールス表面外側の密なグリッド上における静電ポテンシャルに点電荷をフィッティングすることで、非共有結合性の静電相互作用を実行可能なコストで精度良く再現した。

第 II 期（古典力場の開発と検証）

CHELPG 電荷が静電項を提供し、UFF がフレームワーク原子のレナード・ジョーンズパラメータを提供した。CO_2、N_2、O_2、Ar には TraPPE を、水には TIP4P を使用した。完成した力場は実験的な単成分 CO_2 吸着等温線に対して検証され、DAC に関連する圧力範囲全体で良好な一致が得られた。

第 III 期（グランドカノニカルモンテカルロ法）

3×3×4 スーパーセル上で、フレームワークを剛体として固定し、298 K における μVT アンサンブルで GCMC シミュレーションを実施した。実験 A では、現実的な大気組成（CO_2 400 ppm、N_2 78%、O_2 21%、Ar 1%）の下、全圧 100 kPa において相対湿度を 40～80%まで変化させた。実験 B では、相対湿度 60%において全圧を 20～100 kPa まで変化させた。

第 IV 期（分子動力学法と速度論的解析）

平衡化された GCMC 構成から初期化を行い、フレームワークを剛体として固定した 298 K での NVT MD を実施した。得られた軌道は自作の Python スクリプトで後処理し、分子ごとの平均二乗変位（MSD）を計算し、アインシュタインの関係式により自己拡散係数を抽出した。本研究における方法論的貢献の一つは、不均一な集団を単純に平均化するのではなく、分子ごとの MSD に対してガウス混合モデル（GMM）によるクラスタリングを適用し、吸着質の集団を捕捉状態と移動状態にある部分に客観的に分類した点である。

2.2 吸着・輸送現象の解明

電子構造

ヘキサフルオロケイ酸アニオンの全電荷は、形式電荷である−2 e ではなく−1.416 e であり、著しい共有結合性を示している。細孔内壁に並ぶ軸方向フッ素原子は−0.572 e の電荷を持ち、これは赤道方向フッ素原子の−0.472 e と比較して、細孔の静電場に顕著な異方性をもたらし

ている。ケイ素中心（+1.614 e）は多極子場を生成し、銅中心は全体として負（−0.655 e）であることから、SiF_6^{2-}ピラーが金属ノードではなく主要な吸着サイトであることを裏付けている。

多成分平衡

水の吸着量はすべての試験湿度において支配的であり、相対湿度 40%での 1.3 mmol/g から相対湿度 80%（100 kPa）での 3.0 mmol/g まで単調に増加し、相対湿度 50%と 60%の間で最も急激な増加を示した。これらの条件下での CO_2 吸着量は無視できるほど小さく、事実上ゼロと区別できない。プロセスモデルにおいて一般に不活性として扱われる窒素は、無視できない吸着量を示した（相対湿度 40%で 1.0 mmol/g、相対湿度 80%では 0.4 mmol/g に減少）。圧力系列（20～100 kPa、相対湿度 60%）においても同様の定性的挙動が見られ、すべての検討圧力において水が支配的で CO_2 は無視できる量であった。

輸送

分子ごとの MSD に対する GMM クラスタリングにより、2 つの動的集団が識別された：分子の 70%（70 個中 49 個）は長距離変位がほぼゼロの捕捉状態にあり、30%（70 個中 21 個）は移動性を持つものの閉じ込められた状態にある。移動部分の自己拡散係数は 5.98×10^{-7} cm^2/s であり、気相の値よりおよそ 5 桁小さい。MSD 曲線は線形的に増加するのではなくプラトーに達しており（アインシュタインの関係式によるフィッティングの $R^2 \approx 0.000$）、準安定サイト間の活性化ホッピングに規定された非フィック輸送であることが確認された。

機械論的解釈

SIFSIX-3-Cu に乾燥条件下での優れた CO_2 親和性をもたらす 3.5 Å の開口部は、同時に現実的な大気条件下での脆弱性の原因でもある。軸方向フッ素からの強い異方性場は、CO_2 と H_2O の両方を捕捉する深いポテンシャル井戸を生じさせる。水はより高い極性とフッ素との水素結合能力を持つため、CO_2 の四極子相互作用よりも強い相互作用エネルギーを示し、さらに水の大気中濃度は CO_2 の 25～50 倍高い（10,000～20,000 ppm に対して 400 ppm）。したがって、平衡は圧倒的に水に有利に働く。

プロセスの含意

従来の平衡に基づく TSA あるいは PSA は、湿潤条件下では無視できるほど低い CO_2 生産性しか示さない。速度論的選択性を利用するアプローチも実行可能ではない。CO_2 の拡散時間スケールは実用的なサイクル時間よりも桁違いに長く、70%の捕捉部分は部分的な再生を行っても作業能力を低下させる。事前の脱湿あるいは極めて短い接触時間はこれを部分的に緩和し得るが、その代償として複雑性とエネルギー消費の増加を伴う。

3. 研究目標の達成状況

目標	状況	備考
(1) 多成分平衡データ	達成	相対湿度系列（40～80%）と圧力系列（20～100 kPa）は完了
(2) 拡散/速度論的パラメータ	達成	移動部分の自己拡散係数 $D_{self} = 5.98 \times 10^{-7}$ cm^2/s、 捕捉部分については定量化済み
(3) 熱力学的制御と速度論的制御の比較	達成	両メカニズムが制限要因であり、速度論的選択性仮説は反証された

(4) マルチスケールワークフローの検証	達成	DFT > FF > GCMC > MD パイプラインは実験的吸着等温線に対して検証済み
公表・周知	進行中	ICFD2025 における口頭発表を実施済み、論文原稿は現在準備中

4. まとめと今後の課題

本研究は、多成分大気条件下における SIFSIX-3-Cu の包括的なマルチスケール特性評価を実施し、これまで得られていなかったパラメータ、すなわち五成分混合物における競争的吸着等温線、捕捉・移動集団それぞれに対応する不均一な拡散係数、および第一原理に基づく静電ポテンシャル分布を生成した。中心的な結論は、単一成分性能に優れた材料であっても、現実的な原料ガスの複雑性のもとでは性能が失われうるということであり、これは吸着材スクリーニングの標準的な段階として多成分評価を実施すべきであることを強く示唆している。

今後の計画：

・温度スイング最適化に向けた温度依存性の競争的吸着・拡散速度論、各運転戦略における再生エネルギー、熱サイクル安定性および劣化挙動の検討。

・微量汚染物質（SO_2、NO_2、VOCs）への拡張、および現実的な曝露条件下でのフレームワーク劣化機構の検討。

・完全なエネルギーバランスモデリングを可能にするため、すべての大気成分の吸着等量熱、および負荷状態のフレームワークの比熱容量・熱伝導率の算出。

・代替 MOF アーキテクチャの計算スクリーニング。特に湿潤条件下でも CO_2 選択性を維持する疎水性候補材料に着目し、フッ素化フレームワークと非フッ素化フレームワークとの比較を行う。

・マルチスケール統合：MD と連続体スケールシミュレーションとの連携、不均一な拡散集団を組み込んだ破過曲線モデル、および充填層／構造化コンタクターの設計。

・実験的検証パートナーシップ（DSC、TGA、破過実験）の構築による、シミュレーションと実測の拡散係数および多成分予測の相関検証。

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

E. Munandar, Nasruddin, T. Tokumasu: Molecular Dynamics Simulation for Determining Static and Kinetic Parameters of CO_2 Adsorption in Direct Air Capture (DAC) Applications, 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, Japan, November 10–13, 2025, oral presentation, CRF-34.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01SEP25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.09～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 5 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　穣，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，溶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生成時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

過去の著者らの研究により，ウェーバー数が大きい条件では液滴が自転運動によって変形し，内部気孔が排出されることがわかっている．一方で，今年度は液滴の並進加速運動に着目し，内部気孔の排出可能性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構築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ことで，改良案やその先の進め方を協議する．本計算では，内部に気孔を含む液滴が，静止した初期状態から一様流によって加速する系を対象とした．なお，3 次元シミュレーションの事前検討として，昨年度に引き続き 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. 液滴直径を 0.10 mm, 気孔直径を 0.05 mm とし, 初期の速度場として液滴外部に円柱周りのポテンシャル流を与えた. 流入境界に与えた一様流速は 53.56 m/s で, それに基づくウェーバー数は 0.26 である. 液相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, 気相にはアルゴンの物性値を採用し, 全て定数として扱った. その際, 気孔密度をパラメータとし, 常温のアルゴン密度の場合(1.623 kg/m^3), 液相密度の 0.5 倍の場合(3790 kg/m^3), 液相密度に等しい場合(7580 kg/m^3)と変化させた.

図に, 気孔密度を常温のアルゴン密度とした場合の計算結果を示す. 初期に静止していた液滴は一様流によって加速されるが, 液滴よりも内部気孔の方が早く前進し, 最終的に排出に至った. 一様流にさらされた液滴は, ウェーバー数が 1 程度で振動が発生し, 10 を超えると崩壊することが知られている. 本計算で対象としたウェーバー数は, それらのウェーバー数に比べて小さいことから, 振動する様子は観察されない. そこで, 液滴が大きく変形することなく, 気孔が排出されるメカニズムを探るため, 気孔密度を液相密度の 0.5 倍, 1.0 倍と変化させて計算を行った. その結果, 液相密度の 0.5 倍の場合には気孔の排出が遅れ, 液相密度に等しい場合には気孔は排出されなかった. 以上の結果から, 気孔が液滴に比べて早く前進し排出に至る原因は, 液滴, 気孔間の密度差により, 一様流から受けた力に対する加速度に差が生じたためであることが示唆された. 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(28 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

液滴が一様流によって並進加速運動することで, 内部気孔が排出されることを示したことで, 今年度の目標は達成された. 現実のガスアトマイズプロセスにおいては, 溶湯を微粒化させるために高速で噴射されたアルゴンガスが液滴内部に取り込まれることで気孔として残留すると言われており, 本計算で扱った液滴と周囲ガス流との速度差はアトマイズチャンバー内部で実現され得る値である. したがって, 本条件にて気孔排出の可能性が示されたことで, 気孔レスアトマイズ条件を現実的に見出すことが可能であることが示唆された.

4. まとめと今後の課題

今年度の研究では, 液滴の並進加速運動により内部気孔が排出され得ることを示し, その駆動力が液滴, 気孔間の密度差に起因することを提案した. 一方で, 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, 上述のメカニズムが抑制される原因を突き止め, その条件を探る必要がある. 来年度の研究では, 気孔の排出条件を無次元数により整理し, アトマイズプロセスにおける気孔レス実現のための指針を得る.

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

[1] 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.

[2] J. Yoshikawa, K. Itoh, H. Takana: Collapse Process of Gas Pore inside Metal Liquid Droplet in Flow Field, *Proceedings of the Twenty-second International Conference on Flow Dynamics*, (2025), OS5-5, pp.509-510.

国内学会・研究会等

[1] 吉川穣，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.

[2] 吉川穣，伊藤桂介，高奈秀匡：金属液滴の加速運動による内部気孔の排出，日本混相流学会混相流シンポジウム 2025，(2025), OS0101.

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.

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP02SEP25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.09～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 20 日提出

異種材料 3 次元構造への炭化ケイ素結晶成長と反応性力場分子動力学法を用いたシミュレーション

Silicon Carbide Crystal Growth and Its Simulation on Three-dimensional Structure of Different Materials using ReaxFF

竹内 和歌奈*†，田沢　家錦*，徳増 崇**††
遠藤 和彦**，安原 重雄***
*愛知工業大学工学部，**東北大学流体科学研究所，***ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ
†申請者，††所内対応教員

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

炭化ケイ素（SiC）は、耐熱性、耐食性および化学的安定性に優れることから、高温環境用デバイスや耐環境コーティングへの応用が期待されている。特に、カーボンナノチューブ（CNT）などの三次元ナノカーボン構造体を SiC で被覆することにより、CNT の大きな比表面積と SiC の高い耐久性を兼ね備えた複合材料の実現が期待される。一般的な SiC 成膜では高温プロセスが必要となる場合が多いが、ビニルシランは分子内に Si と C を含む単一前駆体であり、比較的低温で SiC を形成できる特徴を有する。このため、CNT などの熱的に劣化しやすい三次元ナノ構造体への SiC 形成に適している。一方、ビニルシランを対象とした計算研究は少なく、表面吸着や分解反応に関する基礎データは十分でない。将来的に ReaxFF を用いて SiC 成長過程を解析するためには、第一原理計算による安定構造、結合距離およびエネルギー情報を教師データとして整備する必要がある。そこで本研究では、完全グラフェンおよび単空孔欠陥グラフェン上におけるビニルシラン分子の吸着挙動を解析した。

1.2 研究期間内の最終目標

欠陥のない完全なグラフェンおよび空孔欠陥を有するグラフェン上にビニルシラン分子を配置した計算モデルを構築し、構造最適化後の分子配置、原子間距離および全エネルギーを比較することにより、欠陥部位がビニルシラン分子の初期吸着サイトとして機能する可能性を明らかにすることを目標とした。さらに、得られた安定構造、結合距離およびエネルギー変化を、将来的な ReaxFF パラメータの構築および検証に用いる基礎データとして整理することを目指した。

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

本研究では、実験による SiC 成膜研究と第一原理計算による原子レベルの解析を組み合わせた。ビニルシランは、一般的な SiC 原料と比較して低温成膜が可能である一方、計算科学的な研究例が少なく、表面吸着や分解反応に関する基礎データが十分に整備されていない。特に、ビニルシランを用いた SiC 成長を ReaxFF により大規模かつ動的に解析するためには、安定構造、結合距離、反応前後のエネルギー差などの第一原理計算データが必要となる。そこで本研究では、ReaxFF 計算に必要な教師データの基礎となる情報を取得するため、完全なグラフェンおよび単空孔欠陥グラフェン上におけるビニルシラン分子の構造最適化を実施した。

3. 研究目標の達成状況

第一原理計算には、密度汎関数理論（DFT）に基づく計算パッケージ **Quantum ESPRESSO（Version 7.5）** を用いた。交換相関汎関数には GGA-PBE、擬ポテンシャルには PBE 型擬ポテンシャルを採用し、平面波カットオフエネルギーを 55 Ry、電荷密度カットオフエネルギーを 440 Ry とした。k 点メッシュには 4×4×1 を用いた。グラフェンとビニルシラン分子間の分散力を考慮するため、van der Waals 相互作用には Grimme の DFT-D3 法を適用した。また、2 次元周期系を考慮するため、Z 方向のクーロン相互作用補正（assume_isolated='2D'）を適用した。電子状態計算の収束条件は 1.0×10^{-4} Ry、構造最適化における力の収束条件は 2.0×10^{-4} Ry/Bohr とした。計算モデルには完全グラフェンモデル（C60）および単空孔欠陥グラフェンモデル（C59）を用い、それぞれの表面上にビニルシラン分子を配置して構造最適化を行い、安定構造および全エネルギーを評価した。

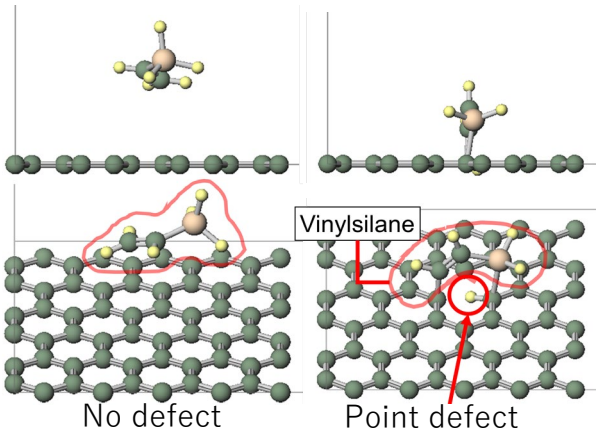


図 1　ビニルシランのグラフェン表面への吸着モデルおよび構造最適化結果

4. まとめと今後の課題

本研究では、第一原理計算によりビニルシランの吸着挙動を解析し、単空孔欠陥近傍で安定な吸着構造が形成されることを明らかにした。得られた構造およびエネルギー情報は、ReaxFF パラメータ構築・検証のための教師データとして活用する。今後は、SiC 成長過程の大規模シミュレーションへ展開する予定である。

5. 研究成果リスト

[1] N. Ohshima, K. Uehara, Y. Nakai, S. Fukuchi, S. Yasuhara, T. Tokumasu, K. Goshima, N. Taoka, W. Takeuchi: Formation of SiC Coating on MWCNTs via Thermal CVD with Vinylsilane, *Proceedings of the Twenty-fifth International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2025)*, CRF-32, pp. 90-91.

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01NOV25
研究種別	公募共同研究
利用期間	2025.11～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 18 日提出

微細水滴と窒素プラズマの界面反応を用いた高効率アンモニア製造

徳増　崇
東北大学流体科学研究所　教授
早水　庸隆，中本　大翔
米子工業高等専門学校　教授，専攻科 2 年
白石　僚也
山口大学大学院創成科学研究科　准教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

プラズマ法によるアンモニア合成は，常温常圧下で CO_2 を排出することなく，水からアンモニアを 1 工程で製造可能であり，カーボンニュートラル社会の実現に向けた重要な技術として期待されている．共同研究者の白石准教授は，微細な水滴（ミスト）を窒素プラズマジェットに衝突させる新規技術「ミスト・アンド・プラズマ（MAP)」を用いたアンモニア合成法を提案し，エネルギー効率の向上を実現している．MAP のエネルギー効率は 57.6 mg-NH_3/MJ であり，従来の液中プラズマ法や窒素プラズマと静止バルク水との界面反応と比較して 8～36 倍高い値を示している．これは，常温常圧条件下において，水を用いた触媒不要のアンモニア 1 工程合成法として，これまでに報告された最高水準の性能である．

更なる高効率化を実現するためには，アンモニア合成反応メカニズムの解明が不可欠である．しかし，プラズマ法では熱分解反応やラジカル反応など複数の反応プロセスが同時に進行するうえ，反応場における原料および生成物の輸送現象も反応に大きく影響するため，その反応機構は極めて複雑である．このため，現在に至るまで詳細なアンモニア生成メカニズムは十分には明らかになっていない．

そこで本研究では，eReaxFF を用いた分子シミュレーションによりプラズマ界面反応場を再現し，反応過程を原子・分子レベルで解析する．さらに，得られた知見を実験へフィードバックすることで，シミュレーションと実験を融合したマルチスケール解析により，アンモニア合成メカニズムの解明を目指す．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の最終的な目的は，プラズマ法によるアンモニア合成の効率を現状の 5 倍にあたる 300 mg-NH_3/MJ にすることである．この目標を達成するために，ファインバブル水を用いた実験および分子シミュレーションによる解析を行う．特に分子シミュレーションにおいては，プラズマ化学，分子流体力学を融合したマルチフィジックス流動現象解析モデルを構築することを目指す．

具体的には，気液界面における水分子の状態を分子動力学シミュレーションによって再現し，表面近傍における水素結合の状態がバルク水の状態とどのように異なるのかについて解析を行い，ファインバブルの半径や温度によるこれらの変化について評価を行う．

また，化学反応を考慮できる分子動力学シミュレーションを用いて，プラズマによって生成された化学種が水表面に到達した際に，どのようなプロセスを経てアンモニアに化学変化するのかを解析する．その際に必要なパラメータは，アンモニア合成反応の反応経路を量子化学計算により求め，そのときの分子結合の変化の過程や結合エネルギーがこの量子化学計算結果と一致するように決定する．分子シミュレーションで得られた知見を実験にフィードバックすることでマルチスケールにアンモニア合成メカニズムを解明し，さらなる効率化を狙う．

2. 研究成果の内容

2.1 共同研究の意義

本研究では，アンモニア合成メカニズムの解明に向けて，実験と分子シミュレーションを組み合わせた研究アプローチを採用している．特に，シミュレーションではプラズマ界面反応場の複雑な現象を再現し，原子・分子レベルで得られた知見を実験へフィードバックすることで，反応機構の理解を深めることを目指している．

共同研究者である早水教授および白石准教授は，プラズマ法によるアンモニア製造装置の開発ならびに実験研究に関する豊富な知見を有している．そのため，シミュレーション条件の妥当性や実験結果との整合性について専門的な助言を受けることができ，シミュレーションと実験を相補的に発展させることが可能である．以上より，本共同研究はアンモニア合成メカニズムの解明を推進する上で極めて有意義である．

2.2 シミュレーションモデルの構築

本研究では，将来的に eReaxFF を用いてプラズマ界面反応を解析することを目指している．しかし，eReaxFF は活用事例が少なく，現時点ではプラズマ状態を適切に再現できる条件や適用範囲が十分に確立されていない．そのため，本研究では，結合の生成・切断を伴う化学反応を取り扱うことが可能な ReaxFF を用いてシミュレーションモデルを構築した．

まず，ReaxFF の複数のパラメータセットについて，アンモニア，水および窒素分子の基本構造を適切に再現できるか評価し，解析に用いるパラメータセットを選定した．続いて，気液界面近傍における水素結合構造がバルク水とどのように異なるかを解析するため，気体アンモニアー水界面モデルを構築した．界面モデルでは，実験系を模擬するため，界面法線方向を非周期境界条件とし，温度および圧力を実験条件に近づけた．さらに，将来的にプラズマによって生成された活性化学種が水表面へ到達し，アンモニアへと化学変化する反応過

程を解析するため，窒素ラジカルを導入したシミュレーションモデルを構築した．

2.3 シミュレーションモデルの妥当性評価

構築したシミュレーションモデルの妥当性を評価するため，まず複数の ReaxFF パラメータセットについて，アンモニア，水および窒素分子の結合距離および結合角を文献値と比較した．その結果，これらの分子構造を最も良好に再現できるパラメータセットを選定した．

次に，気体アンモニアー水界面モデルについて分子動力学シミュレーションを実施し，動径分布関数（RDF）を用いて界面近傍の分子構造を評価した．その結果，既報の構造特性と概ね一致する結果が得られ，気液界面における水素結合構造を解析可能なモデルであることを確認した．

さらに，窒素ラジカルを導入したモデルについて，ラジカルの挙動および原子電荷の時間変化を解析した．その結果，ラジカル状態を維持したまま計算が可能であることを確認し，プラズマによって生成される活性化学種を用いた界面反応解析へ適用できる見通しを得た．

3. 研究目標の達成状況

本期間では，これらの解析に向けた基盤構築として，ReaxFF を用いた反応性分子動力学シミュレーションモデルの構築および妥当性評価を実施した．具体的には，アンモニア，水，窒素分子の構造再現性を評価することで計算条件を決定し，気液界面解析に向けた水ー気体界面モデルを構築した．また，動径分布関数（RDF）による構造評価を行い，構築したモデルが分子間相互作用を解析可能であることを確認した．

さらに，ReaxFF では電子状態や励起状態を含む完全なプラズマ環境を直接再現することは困難であるため，プラズマ中で生成される活性種を個別に導入し，それぞれの反応性を評価する解析手法を検討した．その第一段階として，窒素ラジカル（N 原子）を反応場へ導入したモデルを構築し，計算中における挙動および電荷状態を確認した．その結果，N 原子の妥当性を確認し，今後，窒素ラジカルをはじめとする各種活性種によるアンモニア生成反応の比較評価へ展開できる可能性を示した．

一方で，本研究期間内では，気液界面における水素結合状態の詳細解析や，活性種からアンモニア生成に至る反応経路の解明には至っていない．しかしながら，ReaxFF を用いた界面反応解析のための計算基盤を構築するとともに，プラズマ反応を活性種単位で評価する新たな解析方針を確立した．

4. まとめと今後の課題

本研究では，プラズマを利用したアンモニア合成反応の分子レベルでの理解に向けて，ReaxFF を用いた反応性分子動力学シミュレーションモデルの構築を行った．まず，アンモニア，水，窒素分子の構造再現性を評価し，化学反応を扱うための計算条件を決定した．また，気液界面における反応場を解析するため，水ー気体界面モデルを構築し，分子間構造を評価可能なシミュレーション環境を整備した．さらに，ReaxFF ではプラズマ中の電子状態や励起状態を直接再現することが困難であることを考慮し，プラズマによって生成される活性種を個別に導入する解析手法を検討した．その第一段階として窒素ラジカル（N 原子）をモデル中に導入し，安定した解析が可能であることを確認した．これにより，今後のプラズマ界面反応解析

に向けた基盤を構築することができた.

今後は，構築した水－気体界面モデルを用いて，気液界面近傍における水素結合状態を詳細に解析し，バルク水との構造の違いや温度，ファインバブル径などの条件による影響を評価する予定である．また，窒素ラジカルだけでなく，プラズマ中で生成される他の活性種についてもモデルへ導入し，それぞれの化学種がアンモニア生成反応に与える影響を比較することで，アンモニア生成メカニズムの解明を目指す.

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）

International Journal of Hydrogen Energy に 2027 年 10 月投稿予定である.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01APR25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.4～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 27 日提出

レーザ誘起気泡圧潰衝撃力による材料変形における流体の物性値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，Ｄ１）

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

本プロジェクトは、レーザ誘起気泡の圧潰衝撃力を機械材料の機械的表面改質などに活用する際の流体の物性値を最適化するために、気泡の圧潰衝撃力による材料変形における流体の物性値の影響を流体／材料連成数値解析を用いて評価するものである。キャビテーション気泡の圧潰については多くの研究が行われているが、マイクロジェットの形成が興味深い現象であるために、ほとんどの研究が、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 $\gamma > 0$ の領域において研究されており、レーザキャビテーションピーニングの実用上有用な $\gamma < 0$ の領域や $\gamma \approx 0$ の領域については、数値解析がほとんど行われておらず、不明な点が多い。これまで開発してきた流体／材料連成数値解析を活用すれば、これらの γ の領域について解析も可能であり、レーザキャビテーションピーニングの高効率化に貢献できる。また、キャビテーションを活用したバイオマス処理において、経験的にエタノール 30 vol%を使用しているが、濃度とともに音速や密度が変化することがわかっているが、その衝撃力発生機構への影響は不明であるので、本数値解析は最適な濃度選定に貢献できる。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究プロジェクトは、エタノール水溶液を用いてレーザ誘起気泡の圧潰衝撃力を材料の処理などに活用するために、流体／材料連成数値解析により、気泡の圧潰衝撃力の材料変形における流体の物性値の影響を明らかにするものである。エタノール水溶液を用いる場合、

濃度とともに音速や密度が変化することがわかっているが、実験ではトライ&エラー的な試行錯誤により濃度を決定しており、最適な濃度の発生機構が不明である。本研究では、流体の音速や密度を系統的に変化させた流体／材料連成数値解析を行い、レーザ誘起気泡の圧潰衝撃力における最適なエタノール水溶液の濃度を明らかにする。

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 流体物性の影響を評価するための圧潰衝撃力発生機構の分離

レーザ誘起気泡の圧潰衝撃力に及ぼす流体物性の影響を明らかにするためには、気泡の圧潰時に連続して発生するマイクロジェットと衝撃波による材料応答を個別に評価する必要がある。すなわち、圧潰衝撃力発生機構であるマイクロジェットと衝撃波を分離して評価する必要がある。しかし、実験では両機構が短い時間間隔で連続して発生するため、それぞれの影響を分離して評価することは困難である。

本研究では、流体物性を変化させた解析に先立ち、三次元流体／材料連成数値解析を用いて、$\gamma = 0.3$ におけるマイクロジェット衝突と気泡リバウンド時の衝撃波を時間的および空間的に分離する評価手法を構築した。その結果、材料内部の最大相当応力には二つのピークが現れ、第一ピークはマイクロジェット衝突、第二ピークは気泡リバウンドに伴う衝撃波に起因することを明らかにした。一方、$\gamma = 0$ では衝撃波が支配的となり、一つの顕著な応力ピークが発生することを確認した。

これにより、今後、流体の音速および密度を変化させた場合に、マイクロジェットと衝撃波のそれぞれが材料応答に及ぼす影響を個別に評価することが可能となった。

2.2 圧力差および気泡寸法が材料応答に及ぼす影響

流体物性の影響を評価するための基準データを得るため、初期気泡半径 R_0 および圧力差を系統的に変化させ、マイクロジェットと衝撃波による最大相当応力および応力影響体積を評価した。

その結果、圧力差の増加に伴って気泡圧潰が強くなり、材料内部に発生する最大相当応力および応力影響体積が増加することを確認した。また、マイクロジェットと衝撃波では、応力の集中位置、材料内部への伝播形態および応力影響体積の初期気泡半径 R_0 に対する依存性が異なることが明らかになった。

さらに、応力影響体積と R_0 の間にはべき乗関係が認められ、そのべき指数はマイクロジェットと衝撃波で異なることが判明した。特に、衝撃波による応力影響体積は、検討した圧力差の範囲において比較的安定した寸法依存性を示した。一方、マイクロジェットによる高応力領域は局所的であり、応力しきい値に対する感度が高いことが確認された。

これらの結果は、今後、音速および密度の変化による材料応答を評価する際の基準となる。

3. 研究目標の達成状況

本研究期間では、エタノール水溶液の濃度に対応した音速および密度の影響を直接評価する前段階として、マイクロジェットと衝撃波による材料応答を個別に評価する手法を構築した。

異なる初期気泡半径 R_0 および圧力差について三次元流体／材料連成数値解析を行い、$\gamma = 0.3$ におけるマイクロジェットと衝撃波による材料応答を時間的および空間的に分離した。また、

各機構による最大相当応力および応力影響体積を算出し、その寸法効果を明らかにした。

以上により、流体物性が各圧潰機構および材料応答に及ぼす影響を評価するための解析手法と基準条件を確立し、研究期間内の目標に対して重要な段階的成果を得た。ただし、エタノール水溶液の濃度に対応した流体物性の系統的な検討については、今後さらに解析を進める必要がある。

4. まとめと今後の課題

本研究では、三次元流体／材料連成数値解析により、$\gamma = 0.3$ におけるマイクロジェットと衝撃波による材料応答を分離し、それぞれが材料内部に発生させる最大相当応力および応力影響体積を明らかにした。また、初期気泡半径 R_0 および圧力差を変化させ、両圧潰機構における気泡の寸法効果を評価した。

今後は、本研究で構築した機構分離手法を用いて、エタノール水溶液の濃度に対応する流体の密度および音速を系統的に変化させる。これにより、流体物性がマイクロジェット速度、衝撃波の伝播、最大相当応力および応力影響体積に及ぼす影響を明らかにし、材料処理に適したエタノール水溶液濃度の選定指針を構築する。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02APR25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 18 日提出

自然対流の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

本研究は，浮力によって発達する自然対流境界層の性質を利用し，少ない外部入力で境界層の不安定性と伝熱を制御する手法の確立を目的とする．微弱な定常噴流を垂直加熱壁面に衝突させると，自然対流との相互作用により振動が自発的に生成される．この振動の生成条件と下流への発達過程を明らかにし，自然対流の伝熱促進に有効な噴流条件・ノズル構成を整理する．あわせて，自然対流境界層の三次元渦構造を数値解析と光学計測から理解し，境界層制御の物理的基盤を得ることを目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

微弱噴流による制御については，Direct Numerical Simulation により噴流速度・温度およびノズルの開口高さ・設置位置等が振動生成に与える影響を評価する．等温壁面を対象とした二次元解析で生成機構と有効条件を整理し，三次元解析および等熱流束壁面へ展開して，振動の発達と伝熱特性を明らかにすることを目標とした.

境界層の渦構造については，鏡面加熱壁面を用いた背景指向シュリーレン法による可視化と，微弱な温度変動を付与した Large Eddy Simulation を計画した．自然遷移と温度変動を付与した場合を比較し，二重渦列や特徴周波数を評価するとともに，数値場から求めた光学的変位分布と実験結果を定量比較することを目標とした.

2. 研究成果の内容

本共同研究では，小宮が研究統括と解析結果の考察，小泉が微弱噴流制御に関する数値解析，古川が解析手法・可視化手法の検討と結果の考察を担った．流体科学研究所のスーパーコンピュータと各研究者の数値解析・光学計測の知見を組み合わせ，噴流衝突領域の振動と

下流の伝熱を一体的に評価した．本年度の主要成果は，等温加熱壁面における噴流速度とノズル形状の影響を整理したことである．

2.1 解析対象と数値解析の検証

空気中の垂直自然対流に，周囲温度と等しい微弱な定常噴流を垂直に衝突させる二次元非定常解析を行った．壁面温度は 316 K，周囲温度は 296 K とし，高さ 1,200 mm の加熱壁面のうち下端から 1,000 mm を評価対象，その上方 200 mm を出口境界の影響を緩和する領域とした．プラントル数は 0.71，評価高さ 1,000 mm に基づくレイリー数は 1.98×10^{9}である．

Open-source Field Operation And Manipulation 2.3.1 を基盤とし，ブジネスク近似のもとで連続の式，運動方程式，エネルギー方程式を解いた．噴流出口には時間的に一定の放物線速度分布を与えた．噴流レイノルズ数は断面平均速度とノズル開口高さで定義し，基準形状で 0〜173 の範囲を調べた．自然対流単独の局所ヌセルト数を既往の相関式・実験値と比較し，約 31 万〜276 万セルの格子依存性を確認したうえで，基準格子として 1,064,340 セルを採用した．

2.2 噴流速度による振動状態の変化

基準形状は，ノズル下端の設置高さ 100 mm，壁面から噴流出口までの距離 50 mm，ノズル開口高さ 10 mm とした．噴流がない場合は定常な層流となる一方，噴流レイノルズ数 74 では弱い振動が現れ，95 付近で周期的な振動が強く発達した．さらに速度を上げると広い周波数帯をもつ変動が現れ，衝突領域の振動強度は単調には増加しなかった．

温度信号の高速フーリエ変換により，噴流レイノルズ数 95 では約 1.22 Hz の卓越周波数が流れ方向にほぼ維持されることを確認した．130 および 173 では，衝突領域に現れる低周波成分が下流で弱まり，より高い周波数帯の変動が発達した．この結果は，定常噴流によって生成される振動と，境界層内を移流・発達する振動を分けて評価する必要性を示している．

2.3 速度変動エネルギーによる機構の考察

時間平均からの速度変動二成分で定義したエネルギー，平均流からの生成項，浮力による生成・抑制項を評価した．噴流レイノルズ数 95 と 130 ではノズル出口付近に大きな変動が現れたが，173 では衝突領域の変動が弱くなった．また，衝突領域での変動強度が大きくても，下流の変動が同じ比率で大きくなるわけではなかった．

周期的な状態と広帯域の変動を伴う状態では，生成項と浮力項の分布・釣り合いが異なった．したがって，下流の振動強度と伝熱は，衝突部で生成された振動に加えて，浮力との相互作用を通じた下流での増幅・減衰によって決まることが示唆された．

2.4 振動による伝熱促進

伝熱促進率は，噴流ありと自然対流単独の平均ヌセルト数の差を，自然対流単独の平均値で規格化した百分率とした．壁面を上流側 0〜0.5 m，下流側 0.5〜1.0 m，および全体 0〜1.0 m に分けて評価した．基準形状では，下流側の伝熱促進率が噴流レイノルズ数 80〜100 で急増し，91 で約 38.3%に達した．この値は下流側の区間平均に対する促進率である．

噴流衝突部の下方では自然対流が妨げられ，高温流体の滞留と温度境界層の肥厚によって

局所的に伝熱が低下した．一方，衝突部より下流では境界層の薄化と振動の発達によって伝熱が促進された．噴流を強めるだけでは伝熱性能は単調に改善せず，振動を効果的に励起する条件の選定が必要である．

2.5 ノズル形状と有効な運転条件

基準形状に対して各寸法を独立に±20%変化させた．ノズル下端の設置高さ 80〜120 mm の比較では，伝熱促進のピーク値や低速側での振動発生条件の変化は比較的小さかった．ただし，この結果は今回調べた設置高さの範囲におけるものである．

壁面から噴流出口までの距離を 40，50，60 mm としたとき，下流側の最大伝熱促進率はそれぞれ約 47%，38%，28%となった．距離を短くするとピーク値は増加したが，大きな促進が得られる噴流レイノルズ数の範囲は狭くなった．このため，最大促進率と運転条件の変化に対する余裕を考慮して衝突距離を選ぶ必要がある．

ノズル開口高さ 8，10，12 mm の比較でも，振動・伝熱促進が急増する噴流レイノルズ数とピーク間の範囲が変化した．レイノルズ数の定義自体に開口高さが含まれるため，噴流中心速度による整理も行い，形状の影響を確認した．以上より，衝突距離と開口高さは，振動を利用した伝熱制御の有効な設計変数であることを示した．

2.6 関連する条件への展開

関連する国際会議報告では，等熱流束 500 W/m²の加熱壁面に対する二次元解析も行い，噴流中心速度 0.17〜0.18 m/s で下流の振動が急成長し，冷却が促進されることを示した．また，等温条件でノズル壁厚を変化させ，衝突部付近の渦の拘束が振動状態に影響する可能性を報告した．これらは，加熱条件とノズル構成を広げて振動生成機構を検討する成果である．

3. 研究目標の達成状況

微弱噴流による制御について，等温条件での振動生成・下流発達を定量化し，噴流速度とノズル形状が伝熱に及ぼす影響を明らかにした．さらに等熱流束条件やノズル壁厚の影響を国際会議で報告し，境界層制御に有効な条件を整理する目標を進展させた．主要成果は 2026 年 3 月に学術論文として公表した．

研究計画に掲げた三次元的な振動・渦構造の発達と，背景指向シュリーレン法による実験・数値解析の定量比較については，今回得た二次元解析の知見を基盤として，検証を進めるべき課題として位置づける．

4. まとめと今後の課題

微弱な定常噴流と垂直自然対流の相互作用により生じる振動を解析し，振動の生成と下流での発達が伝熱促進に寄与することを明らかにした．基準形状では噴流レイノルズ数 95 付近で周期的な振動が強く発達し，下流側 0.5〜1.0 m の区間平均伝熱促進率は，噴流レイノルズ数 91 で約 38.3%となった．また，衝突距離を短くした条件では最大約 47%の下流側伝熱促進が得られた一方，有効な速度範囲が狭まることを示した．

今後は，三次元解析により振動の空間的発達と渦構造を評価し，光学計測との比較を通じて検証を進める．等熱流束条件での振動と伝熱の関係を系統的に整理するとともに，衝突距離・

開口高さ・ノズル壁厚等の相互作用を調べる．さらに，伝熱促進率に加えて噴流供給に要する動力を評価し，低いエネルギー入力で安定した伝熱促進が得られる条件の選定につなげる．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Takuma Koizumi, Takuma Kogawa, Steven Armfield, Juan F. Torres, Atsuki Komiya: Oscillation dynamics in vertical natural convection induced by a weak steady impinging jet: Effects of jet velocity and nozzle geometry, International Communications in Heat and Mass Transfer, 174 (2026), 111000. https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2026.111000
オンライン公開日：2026 年 3 月 10 日

著書

N/A

国際学会

Takuma Koizumi, Takuma Kogawa, Juan F. Torres, Steven Armfield, Atsuki Komiya: Thermal Oscillation Grows on Vertical Natural Convection with Isoflux Heating, 13th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, Curtin University, Australia, 26-27 June 2025.

Takuma Koizumi, Takuma Kogawa, Steven Armfield, Juan F. Torres, Atsuki Komiya: Jet-Induced Resonance in Vertical Natural Convection under Isothermal Heating, The Eleventh Japan Society of Mechanical Engineers and Korean Society of Mechanical Engineers Thermal and Fluids Engineering Conference, Okinawa, Japan, 22-25 October 2025, 講演番号 JK-TFEC11-1445.

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL03APR25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第 1 回報告

2026 年 8 月 13 日提出

雰囲気 X 線光電子分光装置用差動排気ノズル周辺の圧力分布計算

服部　裕司
東北大学流体科学研究所　教授
中村　亮介
東北大学大学院工学研究科 応用物理学専攻　M2
山本　達
東北大学国際放射光イノベーションスマート研究センター　教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

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

最近急速な進展を見せているオペランド計測法の一つとして、雰囲気 X 線光電子分光法 (Ambient pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy; AP-XPS) が挙げられる。従来の XPS 測定は真空中に限られていたが、AP-XPS では高輝度放射光 X 線と多段差動排気型電子レンズを利用した新規電子分光器によりガス雰囲気下での XPS 測定が可能になった。我々は東北大学青葉山新キャンパスに建設された 3GeV 高輝度放射光施設 NanoTerasu（ナノテラス）において、大気圧（1 atm, 1013 mbar）で測定可能な硬 X 線 AP-XPS システムの開発を目指している。

AP-XPS では差動排気された小開口サイズのノズルを試料表面に近づけることで光電子のガス中での散乱を抑えている（図 1）。しかし、差動排気ノズルを試料に近づけすぎると、試料表面の圧力が低下してしまう。そのため、最適な試料・差動排気ノズル間距離を決定するためには、差動排気ノズル周辺のガス圧力分布を知る必要がある。

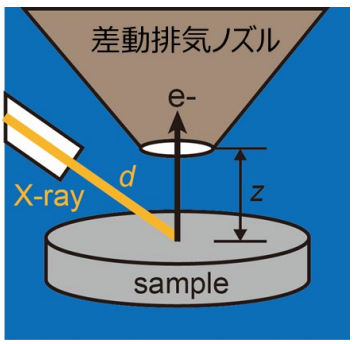


図 1 雰囲気 X 線光電子分光法における実験配置図

先行研究(J. M. Kahk *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **205**, 57 (2015).)では、ガス圧 30 mbar, ノズル開口サイズ 300 μm, 試料・ノズル間距離 300 μm の条件に対し、数値流体力学 CFD 計算により差動排気ノズル周辺のガス圧力分布のシミュレーションが行われた。しかし、より高いガス圧（大気圧)、より小さいノズル開口サイズおよび試料・ノズル間距離での計算例はまだない。そこで本研究では、差動排気ノズル周辺のガス圧力分布を CFD 計算によりシミュレーションし、大気圧測定を実現するために必要なノズル開口サイズや試料・ノズル間距離を決定することを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、AP-XPS の重要コンポーネントである差動排気ノズル周辺のガス圧力分布の CFD 計算を行い、大気圧測定を実現するために必要なノズル開口サイズや試料・ノズル間距離を決定する。そのシミュレーション結果を元に差動排気ノズルを作成し、ナノテラスで大気圧条件での硬 X 線 AP-XPS 計測を実現することを最終目標にしている。

2. 研究成果の内容

ノズル開口サイズ 30 μm, 試料・ノズル間距離 30 μm, ガス圧 1 atm の条件における差動排気ノズル周辺のガス圧力分布計算を行った。CFD シミュレーションは ANSYS Fluent を用いた。また、ガス圧力分布を元に光電子強度の減衰率を計算した。得られた知見を以下にまとめる。

- ✓ ガス圧 1 atm の条件では、試料・ノズル間距離をノズル開口サイズと同じに設定すれば、試料表面の局所的圧力は 99%以上に保持される。
- ✓ 小開口ノズルの肉厚が大きいとノズル内部で残留圧力が発生し、光電子強度の大きな減衰につながるため、できるだけ肉薄にする必要がある。
- ✓ ガス圧 1 atm における光電子強度の減衰率は 1.5×10^{-3} であり、十分測定可能である。

3. 研究目標の達成状況

大気圧硬 X 線 AP-XPS 計測を実現するために必要なノズル開口サイズや試料・ノズル間距離を決定することができた。

4. まとめと今後の課題

CFD シミュレーションにより決定した開口サイズのノズルを製作し、ナノテラスで大気圧硬 X 線 AP-XPS にトライする。また、実際の実験における光電子強度の減衰率を計算結果と比較する予定である。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

R. Nakamura, Y. Hattori, S. Yamamoto, under preparation. （投稿論文準備中）

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL04APR25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.4～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 13 日提出

Development and implementation of a novel framework for extracting flow details and high-quality flow field restoration using machine learning

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（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

High-resolution turbulent-flow fields are essential for analyzing fine-scale structures and turbulence statistics, but obtaining sufficiently resolved data is computationally expensive. Conventional super-resolution models often produce overly smooth predictions and fail to recover small-scale turbulent motions. The purpose of this research is to develop an accurate and efficient generative method for turbulent-flow super-resolution. A residual-based diffusion model operating directly in pixel space is trained using both homogeneous isotropic turbulence and turbulent boundary-layer data. The model reconstructs high-resolution velocity fields from low-resolution inputs while preserving fine-scale structures and important turbulence statistics.

1.2 研究期間内の最終目標

The final goal is to establish a practical diffusion-based framework for high-fidelity turbulent flow reconstruction. The specific objectives are to:

1. reconstruct high-resolution turbulent fields at multiple upsampling factors;
2. recover small-scale structures missing from low-resolution inputs;
3. reproduce important turbulence statistics;
4. evaluate the method for both homogeneous isotropic turbulence and turbulent boundary-layer flows.

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 残差型拡散モデルによる乱流超解像手法の開発

A residual-based diffusion model is developed to progressively reconstruct the difference between low-

and high-resolution turbulent flow fields. Unlike latent-space approaches, the proposed model operates directly in pixel space to preserve fine spatial information. It is trained and evaluated using both homogeneous isotropic turbulence and turbulent boundary-layer data.

2.2 境界層乱流に対する再構成性能

Only the turbulent boundary-layer results are presented here because they demonstrate the applicability of the method to anisotropic, wall-bounded turbulence.

The instantaneous velocity distributions are shown in Fig.1, where the ground-truth fields are compared with the diffusion-model (DM) reconstructions. The reconstructed fields closely reproduce the reference distributions and retain the principal fine-scale structures in the velocity components.

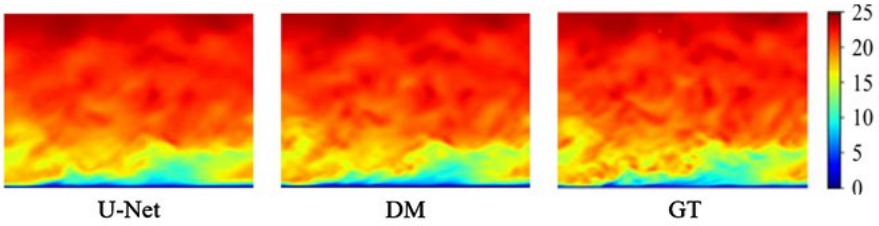


Figure 1. Comparison of the ground-truth, U-Net, and diffusion model reconstructions of instantaneous turbulent boundary-layer velocity fields.

The root-mean-square profile of the streamwise velocity fluctuations is shown in Fig.2. The reconstructed profile closely follows the ground truth and accurately reproduces the near-wall peak. This result shows that the model preserves both instantaneous flow structures and important turbulence statistics.

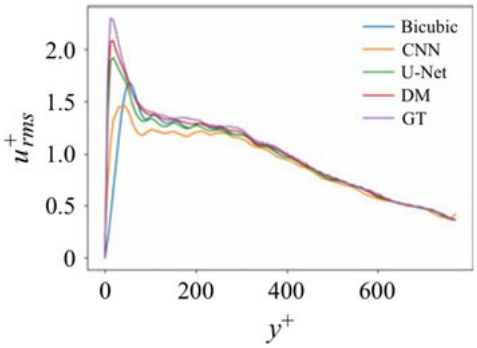


Figure 2. Root-mean-square profile of the streamwise velocity fluctuations obtained from the ground truth, bicubic interpolation, CNN, U-Net, and diffusion model reconstructions.

2.3 主な成果

The residual-based diffusion model successfully reconstructed high-resolution turbulent flow fields while preserving fine-scale structures and key turbulence statistics. The boundary-layer results demonstrate that the method can reproduce both instantaneous velocity distributions and the root-mean-square velocity profile with high fidelity. This study was published in the Journal of Fluid

Mechanics.

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

本研究では、高高精度な乱流の超解像（SR）再構成に向けて、ResShift に基づく効率的な拡散モデル（残差ベース DM と呼称）を開発した。潜在空間で動作する元の ResShift モデルとは異なり、乱流 SR に不可欠な微細なディテールをより的確に捉えるため、本モデルはピクセル空間で構築された。残差ベース DM により達成された向上効果を評価するため、バイキュービック補間、CNN モデル、U-Net モデル、ならびに DDPM との性能比較を実施した。

その結果、本研究で提示した拡散モデルが高倍率の拡大においても速度場の予測において優れた性能を示すことを確認した。バイキュービック補間や CNN、U-Net に基づくモデルとは異なり、高倍率の適用時にも視覚的に曖昧な流れ場を生成することがない。また、流体統計量の予測においても既存モデルや従来の超解像用 DDPM を上回り、様々なスケールの流動構造や渦度を効果的に再現した。さらに、高波数領域のエネルギースペクトルを精度よく再現し、粗いデータで失われがちな微細構造を復元できるため、格子小スケール応力の見積もりやラージエディシミュレーション（LES）の物理的精度の向上に寄与する。

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）

Golsa Tabe Jamaat, Takayuki Okatani, Yuji Hattori, High-fidelity turbulent flow field reconstruction using a residual-based diffusion model, J. Fluid Mech. (2026), vol. 1035, A3

著書

なし

国際学会

Golsa Tabe Jamaat, Takayuki Okatani, Yuji Hattori, Residual-based diffusion model for high-resolution flow field reconstruction, Proceedings of the Twenty-second International Conference on Flow Dynamics, pp. 1120-1123, November 10 - 13, 2025, Sendai, Miyagi, Japan

国内学会・研究会等

Golsa Tabe Jamaat, Takayuki Okatani, Yuji Hattori, Super-Resolution Reconstruction of Flow Fields Using Diffusion Model, 日本流体力学会　年会 2025, 2025 年 9 月 17 日～19 日, 大阪公立大学 中百舌鳥キャンパス, 堺

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL05APR25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 13 日提出

大規模 DNS に基づく粗視化した高レイノルズ乱流のデータ駆動科学

服部裕司
東北大学流体科学研究所　教授
石原　卓
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

乱流の大規模直接計算（DNS）は乱流現象解明のための道具として有効であることが知られている．乱流 DNS では格子点数（N）と解像度（$k_{max}\eta$）によって実現できるレイノルズ数（Re）の値がほぼ確定する（k_{max} は最大波数，η はコルモゴロフ長）．そのため，一般に与えられた計算資源で高 Re の実現には解像度，高解像度の実現には Re を小さくする必要がある．本研究では，これまでに京や富岳を用いて生成してきた高 Re 乱流の高解像度 DNS データを活用して，高 Re で解像度の小さい DNS データから高解像度 DNS の結果に匹敵する微細な渦構造を再構成する方法を開発することを目的としている．

1.2 研究期間内の最終目標

2025 年度はレイノルズ数がほぼ等しいが解像度が異なる乱流 DNS の複数データに対して，同一のスケール（$k_c\eta$）の粗視化を行えば，乱流 DNS の場の元の解像度によらずほぼ同一の乱流統計量が得られることを示し，乱流中の微細構造の復元可能性を確認する．また，超解像の数値実験を行い，超解像の技術の応用によって，低解像度の乱流 DNS データの高解像度がどの程度実現可能か検討を行う．

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）

超解像の技術の応用によって，低解像度の乱流 DNS データから高解像度の乱流 DNS データに匹敵する微細な渦構造の情報が得られれば，乱流 DNS データの活用範囲が広がり計算資源の節約につながる．

2.1 粗視化した乱流場の散逸・渦構造の解析

格子点数 16384^3 で解像度 $k_{max}\eta$=4，格子点数 8192^3 で解像度 2，格子点数 4096^3 で解像度 1 の

レイノルズ数がおよそ R_λ=1100 の乱流 DNS データで各々$k_c\eta$=0.5 で粗視化した乱流場を生成し，各々の場のエンストロフィーの PDF を比較したところ，粗視化する前の解像度の違いにかかわらずよく一致することが確認できた．この結果は，解像度が $k_{max}\eta$=1 と低い乱流 DNS で生成された乱流場も $k_c\eta$=0.5 程度で粗視化したスケールまでの渦構造は正しく表現できていることを示唆している．

2.2 超解像の数値実験

乱流 DNS（格子点数 1024^3，$k_{max}\eta$=2）で得られた乱流場の渦度成分を用いて，粗視化スケールを $k_c\eta$=0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.6, 1.0 といくつか変えて超解像モデルを生成し，そのモデルにより得られた超解像画像と高解像度画像の比較を行ったところ，$k_c\eta$ の値が 0.3 以下と 0.6 以上で明らかな復元精度に差が生じることが分かった．この結果は粗視化スケールが適切であり，あるスケール以上の流れの情報を保持していれば超過像技術で流れの詳細が復元しうることを示唆している．

3. 研究目標の達成状況

超解像技術を用いて，低解像度乱流 DNS データから，より高精細な乱流データを生成するために必要な知見を確認することができ，かつ，乱流データのどの程度の情報を保持していればその「生成」が可能かについて定量的な見積もりを得ることができた．これにより，本研究の当初目標は達成することができた．また，共同研究により，3 次元乱流 DNS データの 2 次元断面内の速度 2 成分データの超解像によりその面に垂直な渦度成分の超解像データが良好に得られることが確認できた．そのほか，超解像の複数のモデルの違いについての知見も得ることができた．

4. まとめと今後の課題

本研究の最終的な目標は，高レイノルズ数乱流の高解像度 DNS データを活用して，低解像度乱流 DNS データから高精細な乱流データを生成する「超過像技術」を開発し，その性能を定量的に明らかにする事である．2025 年度に得られた超解像の数値実験結果を踏まえ，低解像度乱流 DNS データから高解像度な乱流の 3 次元データをどのように復元するか具体的な方法を開発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）

該当なし

著書

該当なし

国際学会

T. Ishihara, Y. Kanao, Y. Hattori : Analysis of Coarse-grained Turbulent Vorticity Fields at High Reynolds Numbers using Large-scale DNS, ICFD 2025

国内学会・研究会等

新田 歩武, 石原 卓：乱流 DNS に基づく粗視化変形とエネルギー散逸率の相関評価 ， 日本流体力学会 年会 2025 2025 年 9 月 18 日

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL06APR25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.4～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 15 日提出

有機分子修飾された固液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　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
髙岡　勇佑，高橋　航大
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を用いた界面親和性の支配因子を特定することを目指す.

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 複合 SAM 修飾膜による液滴濡れの解析

金固体間上を異なる親水性末端を持つアルカンチオール SAM によって不均一に修飾した表面の計算系を構成し，表面上に水液滴の接触状態を構成する MD シミュレーションを行った．液滴の接触界線の動的挙動と液滴サイズの関係を解析した結果，不均一性のサイズによって液滴の三相界線がピニングおよびデピ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，SAM 分子および溶媒分子の分子式（SMILES）を入力するだけで，3 次元構造生成と構造最適化，電荷の決定や分子力場のアサイン，界面系の構築，MD シミュレーションの実行および結果解析までを自動的に行うフレームワークを構築することに成功した．本フレームワークを用い，データベースから抽出した分子群のクラスタリングにより選出した末端修飾基 50 種, 一般溶媒 30 種，SAM 被覆密度 3 種（50，75，100%）の計 4500 系について界面 MD シミュレーションを実施した．

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, MD シミュレーションの自動化フレームワークの構築，およびこれを用いた多数の界面系の網羅的解析と機械学習による界面親和性予測モデルの構築について，概ね目標を達成した．界面親和性の支配因子についても, 分子記述子の重要度解析から末端分子の大きさおよび極性の寄与が示唆されており，当初目標である支配因子の特定に向けて進展が得られた．

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，構築した機械学習モデルについては，予測精度が低下した SAM 高密度系に対して界面構造を反映した記述子（3 次元記述子等）の導入による改善を図り，界面親和性の支配因子をさらに絞り込む．さらに，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とともに，同様の枠組みを界面熱輸送特性の予測へ展開する．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

国内学会・研究会等

1. 髙岡 勇佑, 菊川 豪太, 第 62 回日本伝熱シンポジウム, (2025), BPA-53.
2. 趙 子毅, 楠戸 宏城, 菊川 豪太, 日本機械学会 2025 年度年次大会, (2025), J053-01.
3. 髙岡 勇佑, 菊川 豪太, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2025, (2025), E24.
4. 高橋 航大, 安 盟, 塩見 淳一郎, 菊川 豪太, 第 39 回数値流体力学シンポジウム, (2025), OS1-3-1-01.

国際学会

1. Yusuke Takaoka, Gota Kikugawa, NEMD2025, Osaka, Japan, (2025).
2. Ziyi Zhao, Hiroki Kusudo, and Gota Kikugawa, ISTP35, Busan, Korea, (2025).
3. Yusuke Takaoka, Gota Kikugawa, IMPRES2025, Sendai, Japan, (2025), P-57.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL07APR25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 13 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
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

スポーツ流体の分野では野球ボール，槍，矢，吹き矢，バトミントンの羽根，フリスビーなどの投擲物，飛翔体の空力が研究上の興味を集めてきた．このうちアーチェリー競技矢は矢（のシャフト）表面にはたらくせん断応力が抵抗係数の大きな部分を占めるため，解析の焦点を境界層の状態に絞れることが期待される．矢まわりの流れを支配する物理パラメータはレイノルズ数 Re（ここでは代表長として直径を使用する），飛翔中の迎角 α，矢軸回りの回転速度を表すスピンパラメータ SP の 3 個となる．また，代表的な鏃形状を模した流線形鏃と椎型鏃を矢の先端部に装着する．先行する実験的研究では競技矢のレイノルズ数範囲で表面境界層が層流と乱流と推定される抵抗係数が測定されている． シャフト表面での流れの状態を競技相当のパラメータ範囲で直接数値計算によって推定することが目標となる．

1.2 研究期間内の最終目標

数値解析によってアーチェリー競技のベアシャフト矢の表面流れが非定常となる原因について流体力学的に説明できるようにすることが最終的目標となる．

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

2.1 新しい解析手法の開発

新規解法ではないが，低容量ルンゲクッタ陽解法と射影法および，2 次精度の BDF と射影法を適用する非圧縮性流体の解析法を開発した．

2.2 新しい現象の解明

アーチェリー競技矢はシャフト長/直径で定義されるアスペクト比が大きく，また飛翔中の迎

角が小さいことが特徴的である．この形状は境界層方程式の適用を検討させるが，先行する射出実験の結果によれば，一射中に層流に相当する抵抗係数と乱流に相当する抵抗係数のいずれもが測定されており，シャフト表面境界層が不安定化する機構の解明が解決を要するひとつの課題となっている．スパコンを用いたこれまでの数値計算結果によれば，シャフト表面の流れが非定常になるレイノルズ数 Re は，鏃の形状に影響を受け，流線形鏃の場合には Re=20,000（競技矢のレイノルズ数の最大値にほぼ対応する）まで定常流となるのに対して，椎型鏃の場合にはそれより少し低い値（計算がおこなわれた 2 つのケース，Re=19,000 と 20,000）で初期値（一様流）からある程度の時間が経つと非定常となる．これは矢の迎角 α =0° とした場合についての計算結果である．流れに沿う方向に置かれた長い円筒形表面境界層を線形安定解析した Tutty ら(2002)の結果（周回方向のモード n=10 までの解析）によれば，不安定モードはより高いレイノルズ数か，20,000 より低いレイノルズ数であるが矢のシャフト長よりはるかに長い後方で増幅率が正となるかのいずれかである．そのため，数値計算結果の説明を境界層の不安定モードに求めることには無理があることが考えられる．計算結果の可視化によれば，椎型鏃をつけた矢の流れ場には流線型鏃をつけた矢にはない特徴があり，鏃付け根部分で剥離泡が観察される．鏃の付け根部分で剥離したあとにできるせん断流が非定常となって，それが後流の境界層を不安定化させていることが予想されている．

つぎに矢の迎角 α の影響について述べる．流線形鏃をつけた矢に迎角をつけると，矢の最後端部の背側から非定常化が起きる．その臨界迎角の値は Re の増加とともにほぼ直線的に緩やかに減少し，Re=15,000, 16,000, 17,000 に対してそれぞれ α ＝1.0°，0.8°，0.7° と変化する．一方，椎型鏃をつけた矢に迎角をつけると，2 通りの仕方で非定常化が起きる．高 Re 領域（Re>13,000）では鏃付け根部分における剥離泡の非定常化が発端となり，その臨界迎角の値は Re の増加とともに減少し, Re=15,000, 16,000, 17,000 に対してそれぞれ α ＝0.4°，0.2°，0.1° と変化する．低 Re 領域では，流線形鏃をつけた矢の場合のように矢の最後端部の背側から非定常化が起きて，その臨界迎角の値も同一（Re=10,000 では α ＝1°）となる．

最後にスピンパラメータ SP（矢表面回転速度の一様流速度に対する比）の影響について述べる．競技矢の飛翔中の SP の値は 0.03 と報告されている．このスピンパラメータの値を与えた数値計算結果を無回転（SP=0.0）の場合と比較すると，x 方向,r 方向の速度成分の値にはほとんど差がみられなかった．競技において飛翔中の矢は毎秒 100 回転するが，矢のシャフト直径（約 4-5mm）と矢速（60m/s）によって無次元化すると SP の値は 10^{-2} のオーダーとなり，スピンパラメータの影響は無視できるものと考えられる．

3. 研究目標の達成状況

シャフト表面での流れの状態を競技相当のパラメータ範囲で直接数値計算によって推定することについては達成できた．しかし円筒表面境界層の不安定化メカニズムの解明という最終目標達成までは至っていない．

4. まとめと今後の課題

シャフト表面での流れの状態が不安定化するレイノルズ数と迎角の範囲を計算することができた．今後は，上記の最終目標および，不安定化して非定常流となった流れが最終的には乱流になるまでの過程を追求することが課題である．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01MAY25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.05～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 18 日提出

詳細反応 CFD/数理的手法 CEMA によるアンモニア非予混合バーナー保炎消炎構造の解明

中村　　寿
東北大学流体科学研究所　教授
寺島　洋史
北海道大学工学研究院　准教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

低炭素社会の早期実現に向けて，二酸化炭素を排出しないクリーンな代替燃料の導入とその燃焼技術の開発が推進されている．アンモニアは，代替燃料の有力候補である水素の高密度キャリアであるだけでなく，アンモニア自体も直接燃焼可能な代替燃料の候補として注目されている．しかし，従来から広く用いられてきたメタンやプロパンなどの炭化水素燃料と比較して，アンモニア燃焼特性の知見は十分ではなく，その難燃性や燃料由来の窒素酸化物発生といった課題を克服する燃焼技術の確立が必要不可欠である．本研究では，アンモニア燃焼特性の理解を深めるため，基礎的な非予混合バーナー火炎を対象に詳細反応機構を用いた燃焼 CFD（Computational fluid dynamics）解析を行う．特に，バーナー火炎の保炎および消炎現象の解明を目的とした．非予混合火炎は，工業炉など幅広い用途に利用されている燃焼方式であり，逆火の恐れがない一方で，様々な条件下での確実な保炎が求められる．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では，燃料および酸化剤噴射速度の変化がアンモニア非予混合バーナー火炎の保炎消炎境界に与える影響を明らかにすることを目指す．また，代表的な炭化水素燃料であるメタン火炎との比較を行うことで，保炎消炎現象におけるアンモニアの特徴を抽出する．

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 解析手法

消炎現象のような限界的燃焼条件の数値予測には，流体現象だけでなく化学反応現象のモデ

リングが重要となる．本解析手法の特色は，燃焼 CFD 解析において詳細反応機構を適用することにあり，保炎消炎現象の高精度な予測を可能にする．支配方程式は，各化学種質量保存式を考慮した圧縮性 Navier-Stokes 方程式で，熱的完全気体を仮定した．方程式の解法については，文献 [Terashima and Koshi, Combust. Flame, 2015] を参照いただきたい．アンモニアの詳細反応機構には，Otomo ら [Otomo et al., Int. J. Hydrogen Energy, 2018] が提案した Otomo モデル（30 化学種，212 反応）を用いた．メタンの詳細反応機構には，スタンフォード大学のグループが開発した FFCM-1 [Smith et al., Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0] を適用した．

対象としたバーナーでは，軸対称バーナー中心から燃料が，その周りから酸化剤が噴射される．燃料と酸化剤噴流を隔てるリム壁厚さは 6 mm と設定した．バーナー形状の詳細は実験 [武石ら，機論，2017，石川ら，機論，2018] を参考にした．3 点軸対称解析を行い，計算格子点数は 268×3×254 とした．噴流間のせん断層や火炎形成領域には計算格子を密に配置し，最小格子幅は 20 μm である．

燃料にはアンモニアまたはメタン，酸化剤には酸素と窒素の混合気を用い，酸化剤の酸素富化率 [石川ら，機論，2018] は 25%に固定した．燃焼室圧力は 1 atm，噴射燃料および酸化剤の温度は 300 K とした．本研究では，噴射速度が保炎消炎に及ぼす影響を調べるため，燃料の噴射速度を 0.2 m/s から 10 m/s，酸化剤の噴射速度を 0.2 m/s から 5 m/s の範囲で変化させた．非予混合バーナー火炎では，燃料と酸化剤噴流の運動量流束比が火炎基部の再循環領域の形成や火炎安定性に影響することが知られている [水谷，矢野，機論，1976]．本研究で考慮した噴射速度の組み合わせでは，運動量流束比が 0.000367 から 942 と設定される．噴流のレイノルズ数は噴射速度条件により変化するが，最大のレイノルズ数は約 1730 である．

2.2 保炎消炎領域の予測

解析では，まずリム壁温度を 2000 K として火炎を強制的に形成させ，その後 500 K（等温壁）とすることで，保炎と消炎を判断した．図 1 に，アンモニア火炎で得られた保炎消炎の結果を示す．ここで，〇印は保炎，×印は消炎，灰色印は実験結果 [石川ら，機論，2018] を意味する．実験では，灰色印で囲まれた領域の内側で保炎が確認されているが，運動量流束比が小さい条件での実験は実施されておらず，境界線は示されていない．結果を比較すると，本解析によって保炎領域が正確に再現できたとはいえないが（本解析では，酸化剤噴流の外側に平行流として窒素を噴射しているが，保炎領域予測に対する影響が確認されており，今後解析を進める予定である），高または低運動量流束比条件で消炎すること，燃料と酸化剤両方の流速が大きい場合に消炎すること，これらの定性的傾向は再現されている．

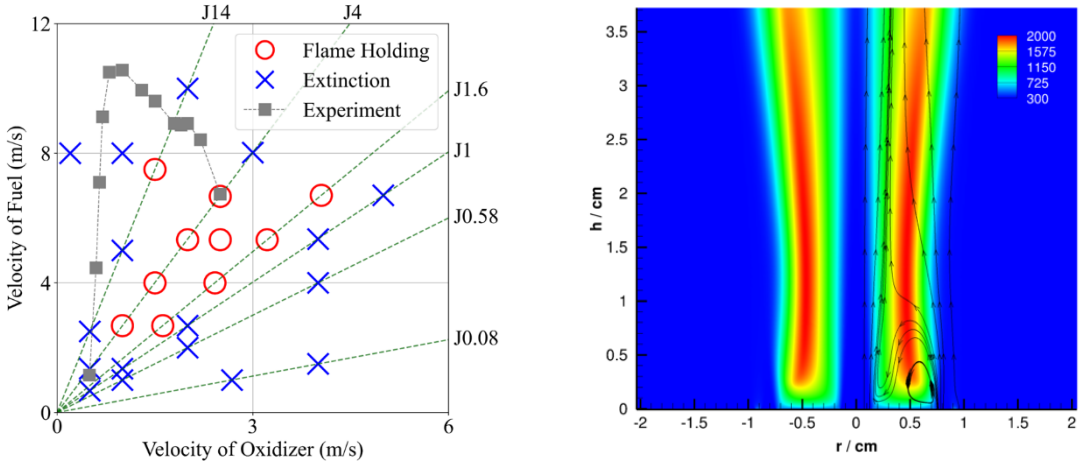


Fig. 1 Simulation and experimental results of flame stabilization and extinction regimes in terms of fuel and oxidizer injection speeds (left) and temperature distributions at V_{NH3} = 4.0 m/s and V_{OX} = 1.5 m/s (right).

2.3 運動量流束比による分類

解析結果から，保炎消炎領域が運動量流束比（以降 J と表記する）の大きさによって 4 つの領域に分類できることがわかった．図 2 にその分類図を示し，各領域は以下のように特徴付けられる．

① 1.6 < J < 14：（安定）保炎領域

② 1.0 < J < 1.6：遷移的保炎領域

③ J < 0.08, 14 < J：消炎領域

④ 0.08 < J < 1.0：遷移的消炎領域

以下で各領域における火炎流れ場構造と保炎消炎メカニズムを議論する．

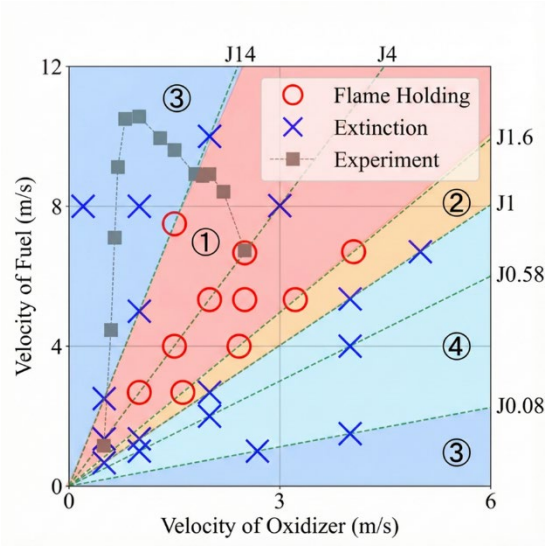


Fig. 2 Classification of flame stabilization and extinction regimes by momentum flux ratio.

2.3.1 ①安定保炎領域：1.6 < J < 14

この J の範囲では，図 1 の温度分布で示したようにリム壁上方に非予混合火炎が安定的に保持される．図 3 は，解析結果から得られた火炎および流れ場構造を模式的に示した概念図である．この J 条件での特徴は，酸化剤噴流側に再循環領域が形成されることにある．この条件では，J が 1 以上であり噴射燃料の運動量が大きく，未燃燃料が酸化剤側に引き込まれることがほとんどないため，ほぼ純粋な非予混合火炎が形成される．また，火炎は酸化剤噴流寄りに形成されており，理想的な対向流火炎としての構造的特徴を有する．

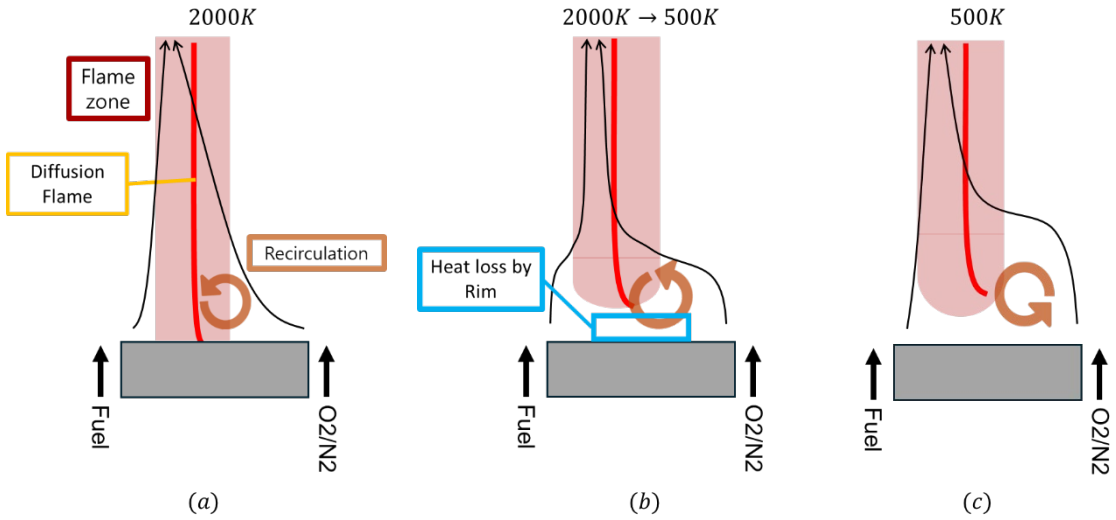


Fig. 3 Schematic diagram of flame and flow structures in the range of 1.6 < J < 14.

2.3.2 ②遷移的保炎領域：1.0 < J < 1.6

この J の範囲では，火炎は保持されるものの，予混合火炎がアンカーとして存在しながら非予混合火炎が形成という特徴的な火炎構造が確認された．図 4 は，解析結果から得られた火炎および流れ場構造の概念図である．この J 条件での特徴は，前節 2.3.1 の J 条件に対して燃料と酸化剤噴流の運動量がほぼ同じとなるため，酸化剤噴流側だけでなく，燃料噴流側にも再循環領域が形成されることにある（図 4(a)）．その結果，未燃燃料が酸化剤噴流側に輸送されるようになり（図 4(d)），小さい領域ながらも酸化剤噴流側のリム近傍に予混合火炎を形成する（図 4(e)）．この予混合火炎をアンカーに，さらに上方に非予混合火炎が形成される．予混合火炎と非予混合火炎の識別には Flame index を用いた．予混合火炎がアンカーとなっているが，これは保炎を強化するものではなく，消炎に強く関与する現象である．

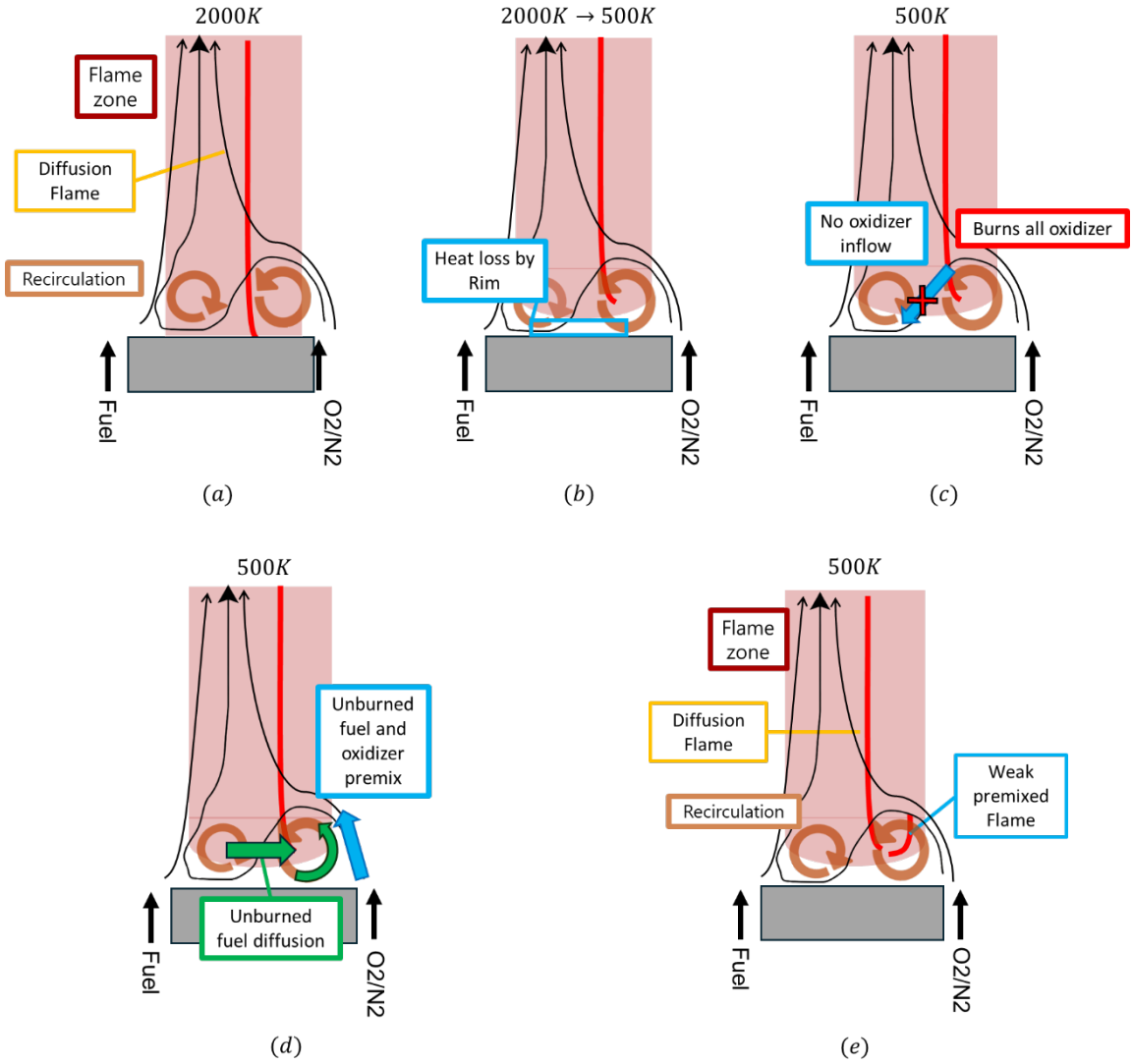


Fig. 4 Schematic diagram of flame and flow structures in the range of 1.0 < J < 1.6.

2.3.3 ④0.08 < J < 1.0：遷移的消炎領域

この J の範囲では消炎が観察された．最終的に消炎に至るが，火炎および流れ場構造は前節 2.3.2 で述べた遷移的保炎領域での構造と類似している．図 5 に概念図を示す．この J 条件での特徴は，酸化剤噴流の運動量が大きくなるため，未燃燃料の酸化剤側への引き込みが強化されることである．そのため，前節 2.3.2 の条件に比べて，予混合火炎の領域が拡大する．この構造から保炎が強化されるようにも思えるが，逆に消炎に強く関与する．これは，予混合火炎が定位置に留まるわけではなく，周囲の噴流流速の影響を受け下流へ押し流される可能性があるためである（blow-off）．特にアンモニアの燃焼速度は遅いため，blow-off が生じやすい．そのため，この条件では，前節 2.3.2 の J 条件に対して予混合火炎領域が拡大することによって保炎消炎現象に対する予混合火炎の影響が強くなり，予混合火炎領域の blow-off の結果，非予混合火炎も共に下流へ押し流されるため消炎に至った．リム上方に予混合火炎が形成される J 条件では，保炎に対する予混合火炎燃焼速度の重要性が高まるため，この領域は燃料依存性が出やすいと考えられる．

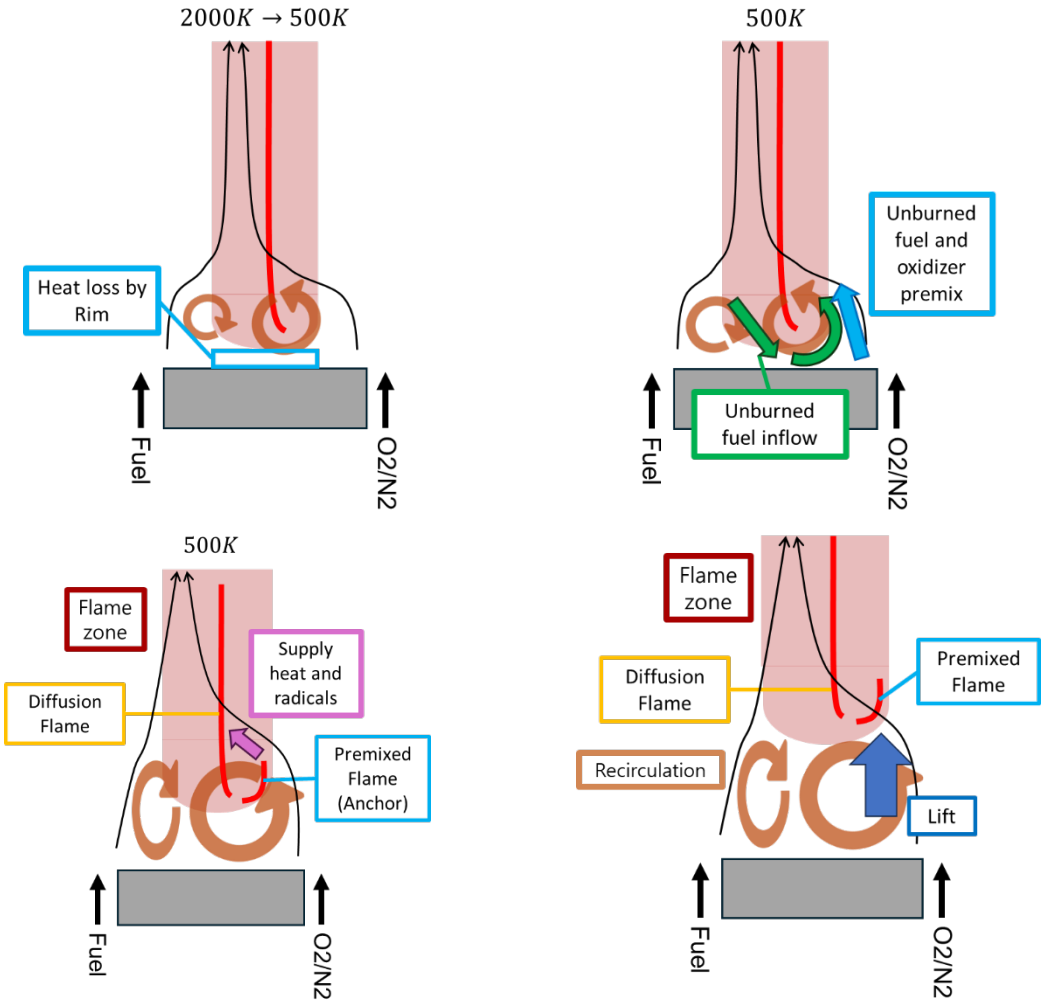


Fig. 5 Schematic diagram of flame and flow structures in the range of 0.08 < J < 1.0.

2.3.4 ③消炎領域：J < 0.08, 14 < J

このJの範囲は，運動量流束比が極端に小さい，あるいは大きい状態である．この場合には，保炎に必要な再循環領域がリム近傍に形成されないため，消炎に至る．また，この条件では，そもそも燃料または酸化剤の供給が非常に少なく，着火や保炎に必要な混合気の形成も難しい．

2.4 同運動量流束比における保炎消炎

以上の 2.3 節の議論によって，運動量流束比によって火炎流れ場構造が決定され，保炎消炎領域を分類できることが示された．しかし，同じ J 値だとしても保炎また消炎する場合がある．本解析結果から，噴射速度の大きさによって大きく 3 つの領域に分類されると考えられる．図 6 にその分類図を示し，各領域は以下のように特徴付けられる．

① 保炎領域

② 高流速消炎領域

③ 低流速消炎領域

解析から，高流速域の消炎（②）は火炎伸張の増大に伴う火炎温度の低下によるものと考え

ている．一方，低流速域の消炎（③）は熱消炎に分類され，燃料および酸化剤の供給量が少なくなり発熱量が減少したことに加え，周囲への熱損失の割合が大きくなったためと考えられる．ただし，運動量流束比による分類の議論も含め，保炎消炎境界に関する定量的議論は今後の課題である．

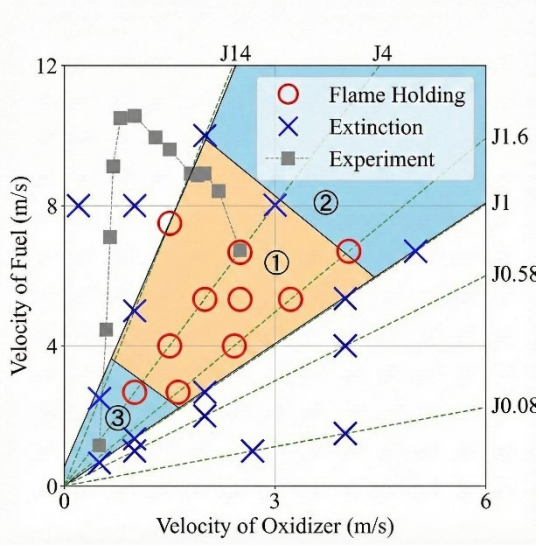


Fig. 6 Classification of flame stabilization and extinction regimes for 1 < J < 14.

2.5 アンモニアとメタン火炎の比較

保炎消炎現象におけるアンモニア火炎の特徴を抽出することを目的として，メタンを用いた比較解析を実施した．燃料をメタンとした以外は，アンモニアの解析と同じ条件を用いた．図 7 に，保炎消炎の結果を示す．比較を容易にするため，図 1 に示したアンモニアの結果を再度示した．アンモニアでは保炎消炎領域が 4 つに分類できることを議論したが，メタンの場合には，3 つの領域が確認された．まず，運動量流束比が大きい場合（J > 37）に消炎が観測される．これはアンモニアと同様に，再循環領域が形成されないこと，また酸化剤の供給不足が原因といえる．メタンの場合，アンモニアより大きな J 条件で保炎できるのは，メタンが広い可燃当量比範囲を有するからと考えられる．一方，運動量流束比が小さい場合にも消炎するが，2.3.3 節で議論したように，この領域では予混合火炎の存在が消炎範囲を決定付けている．つまり，低 J 領域における消炎は，予混合火炎の blow-off によって引き起こされるため，その条件は燃料固有の燃焼速度によって決定される．メタンの場合，アンモニアに対して燃焼速度が大きく，同じ噴射速度に対しても予混合火炎が定在し保炎しやすくなるといえる．つまり，J < 1 の領域では，予混合火炎形成を通して保炎消炎特性に燃料依存性が表れやすいと考えられる．極端に小さい J 領域における消炎は，アンモニアと同様に燃料の供給不足が原因である．

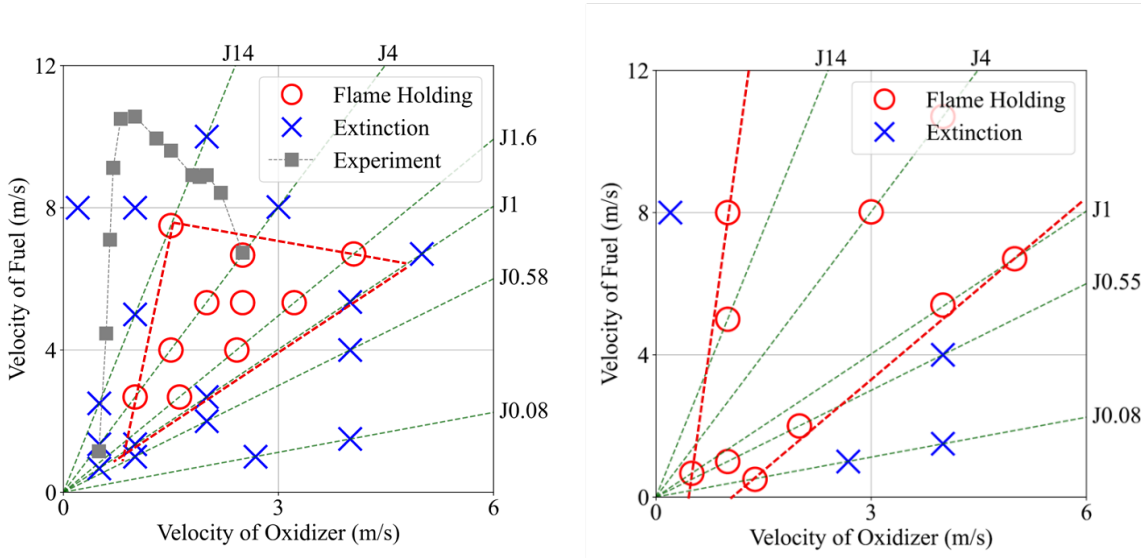


Fig. 7 Comparison of ammonia and methane regarding the flame stabilization and extinction regimes in non-premixed burner flames.

3. 研究目標の達成状況

アンモニアおよびメタン非予混合バーナー火炎に対して，燃料および酸化剤噴流流速を広範囲に変化させた解析を行い，保炎消炎境界を得ることができた．解析結果から，保炎消炎領域がアンモニアの場合には大きく 4 つ，メタンの場合には大きく 3 つに分類できることを明らかにした．さらに，火炎流れ場構造の分析により，燃料種による保炎消炎特性の違いが $J < 1$ の低運動量流束比条件で表れることを明らかにした．これには，リム近傍で形成される予混合火炎が重要な役割を担う．このように本研究では，アンモニアおよびメタン非予混合バーナー火炎に対して保炎消炎境界を提示し，さらにアンモニア火炎の特徴として，低運動量流束比条件で消炎領域が拡がることを明らかにした．

4. まとめと今後の課題

アンモニア非予混合バーナー火炎の保炎消炎機構を明らかにするため，詳細反応機構を用いた燃焼 CFD 解析を実施した．アンモニア非予混合バーナー火炎の保炎消炎境界は，運動量流束比に支配され，その値によって大きく 4 つの領域に分類できることを示した．本解析では，それらの分類がどのような火炎流れ場構造で決定されるのかを明らかにした．メタン火炎との比較によって，両者の保炎消炎機構は共通しているものの，保炎消炎領域に違いが生じることを示した．特に，低運動量流束比条件では，予混合火炎の形成を通して保炎消炎条件が決定されるため，大きな燃焼速度を有するメタンは，アンモニアよりも広い保炎領域を形成する．アンモニアの狭い可燃範囲と低い燃焼速度が，メタンに比べて保炎領域を狭める主要因である．運動量流束比による分類の議論も含め，保炎消炎境界に関する定量的議論は今後の課題である．

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）

なし

著書

なし

国際学会

Y. Cho, T. Cui, H. Terashima, H. Nakamura, N. Oshima, CSP analysis of ammonia flame structure near the extinction limit, the 41st International Symposium on Combustion, Kyoto, Japan, 2026.7.

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02MAY25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 7 月 20 日提出

複合材主翼設計における多様な不確実性を考慮した最適化

阿部　圭晃
東北大学流体科学研究所　准教授
下山　幸治，山崎　慎之助
九州大学工学研究院機械工学部門　教授，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

昨今の航空機では，軽量化を目的として先進複合材料が用いられるようになった．材料特性は耐空証明に必要な多様な条件下で複雑に変化することが知られており，材料特性を測定する際の計測誤差や試験環境の違い，製作過程における僅かなずれによる影響が無視できないため，これらの不確実性が設計にどのような影響を及ぼすのかを定量的に評価することが不可欠である. 既往の研究では, 不確実性の次元に応じて増える計算コストが原因となって, 不確実性の種類を限定した簡易的なケースでの検討に留まっており，多様な不確実性を包括的に考慮した現実的なケースに着手できていない．そこで本研究では，多様な不確実性が設計に及ぼす影響を高精度かつ安価に表現できる独自の数理近似モデルを開発し，これを複合材主翼の設計の最適化に応用することで，実用に足る複合材主翼の創出を目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

材料特性・空力変数などに現れる多様な不確実性因子と主翼の性能の関係を低次元形式で

近似表現できる数理近似モデルを開発する．そして，複合材主翼の設計の最適化に応用することで，モデルおよび設計ツールとして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 炭素繊維初期不整角に起因する材料特性の不確かさを考慮したロバスト最適化

炭素繊維初期不整角が最も支配的な要因となる材料の繊維方向圧縮強度を不確実性因子として，不確実性因子に対する構造重量の変動および抗力係数を同時に最小化するよう，主翼平面形状を最適化した．その結果，構造重量の変動を抑えるロバストな設計は，平面形の屈曲（キンク）を排除して直線化することで，内部構造の幅（スパー間隔）を拡張するという幾何学的特徴を有するしていることが判明した．この形状変更は，翼断面全体の曲げ剛性を向上させ，不確実な材料強度に対する構造重量の感度を低減させる効果を持つと考えられる（図 1）．

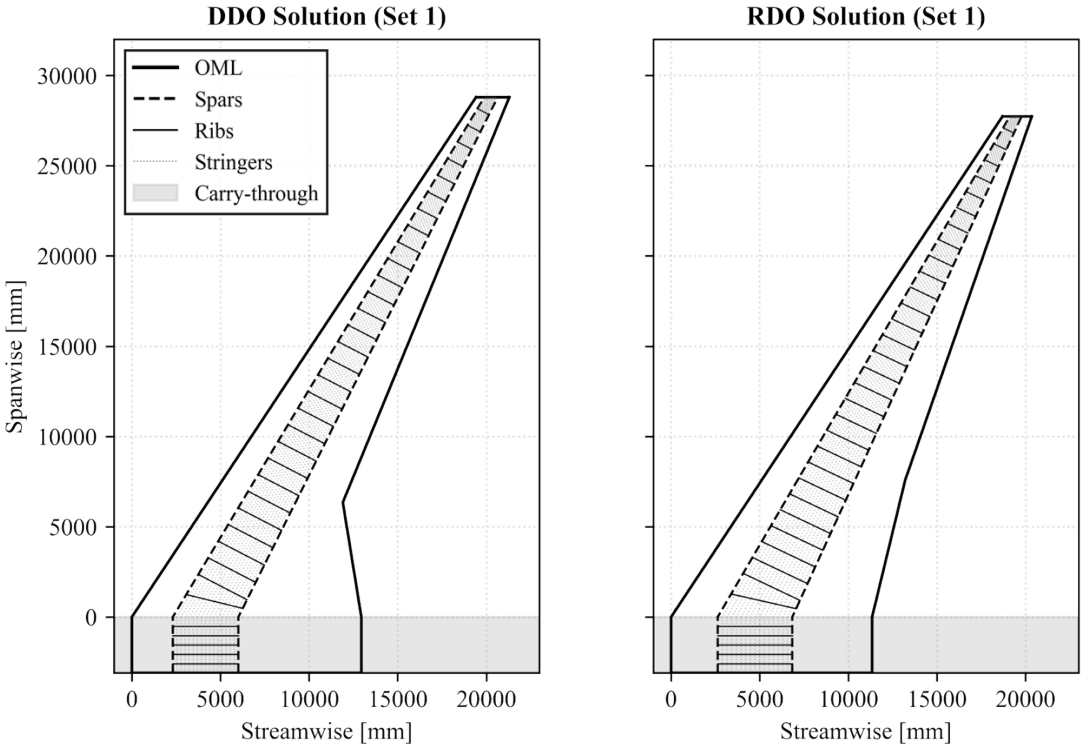


図 1 炭素繊維初期不整角に起因する材料特性の不確かさを考慮したロバスト最適化
（左図：不確かさを考慮せずに最適化，右図：不確かさを考慮して最適化）

3. 研究目標の達成状況

多様な不確実性が設計に及ぼす影響を高精度かつ安価に表現できる独自の数理近似モデルを開発し，これを炭素繊維初期不整角に起因する材料特性の不確かさを考慮した複合材主翼

の設計の最適化に応用した．その結果，材料特性の不確かさに強靭な翼平面形を設計できた．

4. まとめと今後の課題

炭素繊維初期不整角以外の複数の不確かさを考慮し，より複雑かつ現実的な条件下で複合材主翼の設計の最適化を実施する．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

なし．

著書

なし．

国際学会

なし．

国内学会・研究会等

1. 山崎慎之助，下山幸治，阿部圭晃，“製造に起因する不確かさを考慮した複合材主翼の多目的サロゲートベースロバスト設計最適化”，*日本機械学会九州支部九州学生会第 57 回学生員卒業研究発表講演会*，長崎，2026 年 3 月 9 日．

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし．

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01JUL25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.07～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 28 日提出

高速気液二相流動現象と材料内応力状態の関係に関する流体/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

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

キャビテーション気泡の崩壊圧は 1GPa にも達し，流体機械の金属材料にも穴を開けることが知られており，この材料の損傷はキャビテーションエロージョンと呼ばれている．また，雨粒が航空機や風車などの高速移動物体に衝突する際には，その相対速度に応じた高い衝撃圧が発生し，材料表面が損傷することが知られており，レインエロージョンと呼ばれている．この二つは気相と液相の関係は逆であるが，いずれも材料に損傷を及ぼすほどの高いエネルギーを有する高速気液二相流動現象である．本プロジェクトは，伊賀研究室でこれまで開発し，キャビテーション流れに対して適用してきた気液二相局所均質媒体モデルを，界面捕獲手法として用いることによって，上記二つの気液の逆転した高速気液二相流動現象の解明を試みるものである．本研究に用いる数値解析手法は，流体側の解析において液相の圧縮性を考慮することにより液相中での圧力波の伝播を取り扱い，材料側の解析では材料を弾性体とすることにより応力波の伝播や干渉を取り扱うものであり，気泡崩壊と液滴衝突時の圧力波と応力波の伝播現象を数値的に再現できる．同様の解析手法は申請者の知る限り他には見られず，世界的に見ても独創的な研究であると考えている．

1.2 研究期間内の最終目標

本プロジェクトでは壁面近傍気泡崩壊と壁面高速液滴衝突の流体/材料連成数値解析を行う．

気泡崩壊：近年，カーボンニュートラル実現に向けて注目されている水素において，大量輸送のための液体水素用流体機械の開発が行われるようになってきている．これまでは液体ロケットのターボポンプが液体水素用流体機械の代表であり，数時間の運転であることからキャビテーションエロージョンに関しては考慮する必要はなかったが，これから水素サプライチェーンで水素ポンプが用いられるようになれば，数カ月，数年の連続運転になるため，

エロージョンを評価することが必要となってくる．しかし，液体水素を数日はおろか数時間流し続けることは実験費用の面で不可能であり，数値解析を用いた評価に期待が寄せられ始めたところである．本プロジェクトでは，液体水素キャビテーション気泡と水キャビテーション気泡の壁面近傍での崩壊挙動の違いについて明らかにし，その際の材料内への影響の大小について定性的に示すことを本プロジェクトの目的とする．

液滴衝突：現在，本プロジェクト申請者が参画する科研費において，ナノスケール液滴の高速衝突現象の新機能が見いだされ，現象解明と学理構築に向けた研究が実施されている．ラプラス圧により 10MPa オーダーの高圧状態にあるナノスケールの液滴が，100m/s オーダーの速度で材料表面に衝突する際の衝突・崩壊挙動は，光学計測の限界により，実験的に観察することはできない．またその際に材料表面に作用する衝撃圧や材料内部の応力状態も同様である．慣性力の極めて小さいナノ液滴はそもそも衝突するのか，変形に伴い非一様となるラプラス圧により液滴は爆発的に崩壊するのか，等，本プロジェクトでは，実験的にとらえられない時間空間共にナノスケールの液滴衝突挙動について，連続体流体力学の仮定のもとに解明することを目的とする．

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

2.1 解析手法

本研究では，気泡の収縮，崩壊や，液滴の高速衝突という気液界面の複雑な形状変形を表現するため，気液二相局所均質媒体モデルを気泡および液滴の界面捕縛に用いる．本モデルは，液体の圧縮性を考慮しているため，気相だけでなく液相の圧力波伝播についても数値的に再現することができる．流体側の支配方程式は，気液混合相の質量保存，圧縮性 Navier-Stokes 方程式系，エネルギ保存，および気相の質量保存で構成される．また，気液界面における表面張力と相変化を考慮している．

材料内応力波伝播のシミュレーションでは，形状変化および密度変化を微小とみなし密度を一定とし，一様等方性弾性体の運動方程式，時間微分型の応力－ひずみ関係式を解く．特に，本解析手法では，材料を弾性体としていることにより，投入された応力は残留応力としてとどまらず，弾性波として伝播していく．そのため，気泡崩壊では第一崩壊中のマイクロジェットの衝突による応力上昇と，再膨張の瞬間に放出される圧力波による応力上昇を分離して評価することができる．

異種媒体がある面で接していると，この境界面に平面波が入射した場合，一部は反射し残りは透過する．本計算においては，流体・材料境界面上において流体の圧力と材料の垂直方向応力およびそれぞれの垂直方向の速度が釣り合っていると考え，この仮定の下に境界面における平面波の反射・透過を流体および材料の音響インピーダンスを用いて与えることにより，流体・材料境界を双方向に連成する．

2.2 得られた成果

気泡崩壊の解析では，液体水素キャビテーション気泡の崩壊挙動を解析するため，計算プログラムを液体水素系へ拡張したが，計算が不安定となったため，方程式系や熱物性値の確認等を行い安定化を図っている．同時に，水素気泡崩壊の比較対象となる水中気泡崩壊の解析を第 2 崩壊まで含めて，壁面とのスタンドオフ距離をパラメータとして実施し，過去の

実験的知見と一致する結果が得られることを確認した.

液滴衝突の解析も同様に，100nm 以下の液滴の高速衝突では計算が不安定になったため，時間刻みや計算格子を調整して安定化を図っている.

3. 研究目標の達成状況

今期は，気泡崩壊，液滴衝突ともに，計算が不安定となり，成果をまとめて公表するだけの結果が得られなかった.

4. まとめと今後の課題

引き続き計算の安定化を図り，水素気泡の非球形崩壊とナノ液滴の高速壁面衝突の解析を実施する.

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

Shoki Homma, Yuka Iga, “Fluid/Material Coupled Numerical Simulation of Pressure and Stress Wave Propagation Behavior in High-Speed Liquid Droplet Impingement,” ICFD2026, 2026(Sendai), 発表予定

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01OCT25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.10～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 4 日提出

分子動力学と有限要素法の両連成相互応答解析による

高分子界面破壊の解明

菊川　豪太
東北大学流体科学研究所　教授
村島　隆浩
東北大学大学院理学研究科　助教
村松　眞由
慶應義塾大学理工学部　准教授
寺島　悠登
慶應義塾大学大学院理工学研究科　後期博士課程
佐藤　維美
株式会社メカニカルデザイン

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

高分子をはじめとする材料の力学挙動は，非線形性・ひずみ速度依存性・温度依存性を示し，これらは原子スケールの相互作用に起源をもつため，連続体力学のみでは十分に記述できない．こうした挙動を捉えるには，巨視的な連続体と微視的な原子論的記述を橋渡しするマルチスケール解析が有効である．とくに計算均質化に基づく原子 - 連続体（atomistic-to-continuum）均質化法では，各有限要素積分点に分子動力学（Molecular Dynamics: MD）が支配する代表単位胞（R-Cell）を割り当て，巨視的変形こう配に整合させて変形させることで，微視的な力学情報を巨視モデルへ受け渡す．しかし従来の原子 - 連続体均質化法の多くは，参照配置での接線剛性の解析評価に依存しており，これは単純な原子間ポテンシャルにしか適用できず，現実的な高分子系では接線剛性の解析評価が一般に困難である．本研究では，この課題を解決するため，時間平均した MD の応力・ひずみからセカント係数を抽出して構成記述子とする，セカント法に基づく均質化有限要素法（Finite Element Method: FEM） - MD 連成解析の枠組みを確立することを目的とする．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の最終目標は，セカント法に基づく均質化 FEM- MD 連成により，高分子材料の非線形・ひずみ依存の力学挙動を，純粋な MD 解析の主要な特徴を再現しつつ連続体スケールで整合的に予測する枠組みを確立することである．具体的には，FEM と MD の境界条件処理の不整合を解消する圧力制御機構を導入し，各積分点で MD から抽出したセカント係数により巨視的剛性を逐次更新する連成手法を構築する．そのうえで，粗視化ポリカーボネートを R-Cell として，単一要素の一様引張・不均一引張，および穴あき構造の多要素モデルの各数値例により手法の有効性を実証する．さらに将来的には，大規模構造への適用に向けて計算コストの削減へと展開する．

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 セカント法に基づく均質化 FEM- MD 連成の構築

各 FEM 積分点に割り当てた R-Cell を巨視的変形こう配に整合させて変形させ，MD から得た応力・ひずみを平衡化時間窓で時間平均して準静的な値を求めた．引張こう配の主方向を R-Cell の座標基底に一致させ，非拘束方向には圧力制御を課すことで，FEM の自然境界条件と整合するトラクションフリー条件を MD 側で実現した．これにより剛体回転を排除しつつ物理的に意味のある実効的な構成特性を抽出できる．時間平均した応力・ひずみからセカント率およびセカント横収縮係数を求め，これらを用いて 4 次の均質化セカント剛性テンソルを構成し，均質化セカント剛性行列として FEM 計算に組み込むセカント法陽的更新スキームを構築した．

2.2 数値例による連成解析手法の実証

構築した連成手法を，8 節点六面体要素を用いた 3 つの FEM モデルで検証した．第一に単一要素の一様引張では，連成 FEM- MD により得られた応力 - ひずみ応答が，独立に実施した純粋な MD 解析の平均的な傾向をよく再現し，各積分点で MD から抽出したセカント率が巨視スケールへ正しく伝達されることを確認した．温度も 300 K に保たれ，分子系のダイナミクスが適切に反映された．第二に単一要素の不均一引張では，積分点ごとに異なる変形こう配とひずみ速度が課され，各 R-Cell が対応する局所履歴に応じた異なる応力 - ひずみ応答を示すことを捉えた．第三に穴あき構造の 1/4 を模した 12 要素モデルの引張では，穴内縁近傍での応力集中など，穴あき構造に期待される応力分布を再現した．各積分点の R-Cell が相互に独立で MD 段が並列化に適することも確認した．

3. 研究目標の達成状況

セカント法に基づく均質化 FEM- MD 連成手法の確立, および 3 種類の数値例による実証について, 目標を達成した. 純粋な MD 解析の非線形応力 - ひずみ挙動の主要な特徴を再現しつつ, FEM に必要な連続体スケールの整合性を保つことを確認し, 本手法の成果を国際論文誌に公表した.

4. まとめと今後の課題

本手法は，分子静力学に依存する従来の原子 - 連続体均質化法が動的効果とエルゴード性を失うのに対し，動的な MD 軌道から直接構成情報を抽出することで保持する点に意義がある．一

方で，計算コストは積分点数と R-Cell 粒子数に比例して増大するため，大規模な構造への適用が今後の課題となる．そこで，類似した変形状態の積分点をまとめ，クラスタごとに 1 回の R-Cell 更新で済ませる変形こう配クラスタリングの導入により，同時に実行する MD 計算数の削減を目指す.

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）

Yuto Lewis Terashima, Paul Edward Brumby, Takahiro Murashima, Varvara Kouznetsova, Mayu Muramatsu, “Secant-based Multiscale Constitutive Modeling toward Coupled Homogenized Finite Element Method and Molecular Dynamics for Polycarbonate”, Materials Today Communications, 115578, (2026).

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

なし（初年度のため発表実績なし．次年度以降追記予定）

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02OCT25
研究種別	共同研究
利用期間	2025.10～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 18 日提出

固体酸化物形燃料電池における一酸化窒素の分解プロセスの解明

徳増　崇
東北大学流体科学研究所　教授
Jeongmin Ahn, Aliza Marie Willsey
シラキュース大学機械-航空宇宙工学部　教授, 博士課程学生

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

本プロジェクトは、高温において触媒によって生じる一酸化窒素還元反応を調査するものであり、この反応では一酸化窒素が有害な中間体を生成することなく窒素と酸素に分解される。有害汚染物質に関するほとんどの研究が炭素回収に焦点を当てているため、この現象はほとんど注目されてこなかった。窒素酸化物の排出は炭素よりも大きな温室効果ガスとしての可能性があることから、その排出に関する研究は重要である。固体酸化物形燃料電池（SOFC）は、一酸化窒素還元反応における触媒として機能する。触媒が一酸化窒素を分解する能力は、酸素拡散やイオン導電率などのパラメータに依存する。本研究では、異なる SOFC 材料の酸素拡散とイオン導電率を様々な温度条件下で調査する。調査対象となる材料は、ランタンストロンチウムマンガンーイットリア安定化ジルコニア（LSM-YSZ）、ランタンストロンチウムコバルトフェライトーガドリニウムドープセリア（LSCF-GDC）、およびランタンストロンチウムコバルトフェライトーサマリウムドープセリア（LSCF-SDC）である。これらの材料を電解質のドーピング量を変えて作製し、それぞれ LAMMPS を用いた分子動力学シミュレーションを実行し、様々な温度における酸素イオンの平均二乗変位（MSD）を求める。この MSD を酸素拡散係数とイオン導電率の算出に使用する。これらのパラメータは各 SOFC の触媒特性を決定する上で有用である。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の目標は、様々な温度における SOFC 材料の包括的な研究である。この初期研究期間においては、LSM-YSZ の初期研究を 400℃から 1000℃の温度範囲で実施した。この研究期間の大部分をスーパーコンピュータシステムの使用方法の習得に費やし、その後に LSM-YSZ SOFC 材料の初期テストを行った。

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

2.1 LSM-YSZ の平均二乗変位

LSM-YSZ 材料は、SOFC 陰極をモデル化するために Atomsk を使用して作製した。YSZ には 10%のイットリアが含まれており、今後の研究では他のイットリア量との比較を行う予定である。この材料の MSD は、400℃から 1000℃の温度範囲において LAMMPS を用いて計算した。このテストは、一酸化窒素を窒素と酸素に還元する必要がある内燃機関の排気ガス中における温度条件をシミュレートすることを目的としている。

2.2 酸素拡散係数およびイオン導電率

MSD は、各温度における LSM-YSZ 陰極材料の酸素拡散係数とイオン導電率の算出に使用した。酸素拡散係数は MSD の変化率から求められ、各温度における値を下表に示す。

表 1　異なる温度における LSM-YSZ の酸素拡散係数

Temperature (°C)	Oxygen Diffusion Coefficient (cm^2/s)
400	$1.71 \bullet 10^{-9}$
600	$3.58 \bullet 10^{-9}$
800	$9.09 \bullet 10^{-9}$
1000	$2.98 \bullet 10^{-8}$

イオン導電率は Nernst-Einstein の式によって算出することができ、各温度における値を下表に示す。

表 2　異なる温度における LSM-YSZ のイオン導電率

Temperature (°C)	Ionic Conductivity (S/cm)
400	8.98
600	14.5
800	29.8
1000	74.6

これらの結果は、イットリア含有量 10%の LSM-YSZ 陰極が高温において最も導電性が高いことを示しているが、低温における値の差はそれほど大きくない。これらの結果は今後の研究において他の SOFC 材料と比較する予定であり、それにより各材料の触媒特性のより包括的な研究が実現されることとなる。

3. 研究目標の達成状況

初期研究から得られた結果は、単独で発表するには十分な包括性を持っていなかったが、今後の研究では様々な SOFC 材料のより詳細な調査を行い、各材料の触媒特性を解明する予定である。最初の研究はイットリア含有量 10%の LSM-YSZ 陰極について完了しており、今後の研究はイットリア含有量 8%の LSM-YSZ、ならびに様々な電解質ドーピング量を持つ LSCF-GDC および LSCF-SDC 陰極についても実施する。これらの研究により、一酸化窒素還元に最も適し

たSOFC材料が特定され、研究結果は燃焼システム向けの排出ガス低減膜の開発に活用されることになる。

4. まとめと今後の課題

本報告書で示した研究は、特定された一種類のSOFC材料についてのみ実施されたものであり、研究全体では複数のSOFC材料を対象とする予定である。本研究において直面した課題は、スーパーコンピュータシステムの導入および動作環境に関する問題に起因するものであった。これらの課題を克服し、初期研究が実施可能となったことから、次の研究はその後の研究期間内に完了することができる見込みである。

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）

該当なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 16 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　登冴，Qiao Mufan，酒井　太郎
東北大学流体科学研究所　准教授，M2，D1，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）

本研究では、「構造」と「流れ」の関係の定量化・定式化という目的に対し、(1) トレーサー応答からの流動経路特性の推定（2.1 節）、(2) トポロジカルデータ解析（TDA）による構造のグラフ表現と流動・熱輸送解析（2.2 節）、(3) 熱応答曲線からの亀裂密度推定（2.3 節）の三つのアプローチにより、計測データに基づく地下構造・流動・熱移動の統合的なモデル化に取り組んだ。

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。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 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かくなるほど間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.

さらに、本手法の妥当性をより広範に検証するため、砂岩・炭酸塩岩・単一亀裂系を含む 2 次元および 3 次元の岩石画像データを対象に、メディアルアクシスに基づくスケルトン化データを Mapper アルゴリズムへの入力とし、流路方向に沿ってノードを構築するグラフ表現を生成した。各ノードには内部の開口幅の調和平均を割り当て、入口から出口へ浸透する経路のうち最小開口幅を示すノードをボトルネックとして同定し、立方則とダルシー則に基づく開口幅ー透水係数関係式により浸透率を推定した。数値シミュレーションおよび室内実験値との比較の

結果、全ての岩石種・スケールにおいて概ね 1 桁以内の精度で浸透率を推定できることが確認され、提案するグラフ表現がスケールに依存せず浸透率を支配する構造的特徴を保持していることが示された。

この検証結果を踏まえ、本手法をキロメートルスケールの地熱貯留層を想定した 2 次元離散亀裂ネットワーク（DFN）モデルへ拡張し、流体流動と熱輸送の連成解析へ適用した。Mapper アルゴリズムにより複雑な亀裂形状を、注入井と生産井の間の主要な流路を捉えるグラフへと変換し、グラフ上で 1 次元の熱移流・熱伝導の解析解を実装することで、流路に沿った温度変化を効率的に評価した。周辺岩盤との熱交換は簡易的な解析式により組み込み、物理的本質を保持しつつ計算コストを大幅に低減した。有限要素法シミュレーションとの比較では、温度場および生産井温度履歴について良好な定性的一致が得られ、浸透率推定において検証したグラフ表現が、より複雑な時間依存の輸送過程にも適用可能であることが示された。一部の差異は、近接亀裂間の熱的干渉や Mapper 表現に含まれない副次的流路を無視する近似に起因するものであり、今後のモデル改良の方向性を示すものであるが、本アプローチの妥当性を損なうものではない。以上より、Mapper グラフに基づく本手法は、孔隙スケールから亀裂スケールに至る複数の空間スケール・物理過程を統一的に扱う枠組みとして機能しうることが確認された。

2.3 熱応答曲線に基づく亀裂密度推定手法の開発

地熱貯留層における熱回収効率は、注入井・生産井近傍における亀裂の空間分布に大きく左右される。そこで本研究では、単一亀裂および複雑な亀裂ネットワークにおける熱応答を数値シミュレーションにより系統的に解析し、Single Well Injection and Withdrawal（SWIW）試験から得られる熱応答曲線を亀裂密度の推定に活用する手法を検討した。

まず、COMSOL Multiphysics を用いて単一亀裂の数値モデルを構築し、比表面積（単位体積あたりの亀裂表面積）および流速が熱応答に与える影響を解析した。その結果、比表面積が大きいほど岩石マトリクスと流体間の熱交換が効率的となり初期の温度上昇が速くなる一方、比表面積が小さい場合は熱応答が遅延することが確認された。また、流速が高いほど初期の加熱は速いが最終的な熱回収量は低下し、逆に流速が低いほど緩やかながら熱回収量は高くなるという、亀裂形状と流動条件の熱交換効率への影響が明らかとなった。

次に、べき乗則に従う亀裂長・密度分布を用いてランダムな亀裂ネットワークを生成し、三次元マトリクス内で SWIW 試験を模した熱応答曲線を取得した。得られた熱応答曲線をクラスタリング手法により分類した結果、亀裂連結性・密度の違いに応じて 3 種類の応答パターン（Label 0：高密度・急速な温度上昇、Label 1：中密度・中程度の応答、Label 2：低密度・緩慢な応答）に分類できることが示された。各クラスタにおける亀裂交差数のヒストグラム解析により、熱応答が速い井戸ほど周辺の亀裂密度が高いという対応関係が確認され、熱応答解析が井戸近傍の亀裂密度を推定する代理指標として活用できることが示された。

本手法は、直接的な地下イメージングを必要としない非侵襲・低コストな貯留層評価手法であり、無次元化した熱応答解析により異なる地熱サイト間での知見の一般化も可能である。今後は、フィールド試験による検証および機械学習手法との統合により、予測精度のさらなる向上が期待される。

3. 研究目標の達成状況

本研究の最終目標は、複数の亀裂ネットワークパターンに対する流動・物質移動・熱移動特性の解析と、TDA による地下構造推定手法の有効性の数値シミュレーションに基づく検証であった。2 年間の研究期間を通じて、これらの目標は以下の通り達成された。まず物質移動については、3D プリントモデルを用いた制御実験と確率的最適化手法（RML 法）の統合により、単一流動経路から多経路環境に至る流動経路特性（流量比・滞留時間・表面積）の高精度推定を実現した。熱移動については、当初課題であった計算手法を再検討し、単一亀裂における比表面積・流速の影響を系統的に解析するとともに、ランダム亀裂ネットワークにおける SWIW 試験の熱応答シミュレーションとクラスタリングにより、熱応答曲線から井戸近傍の亀裂密度を推定できることを示した。さらに TDA については、Mapper グラフに基づく構造表現の妥当性を、複数岩種・スケールの岩石画像データを用いた浸透率推定（1 桁以内の精度）により検証したうえで、キロメートルスケールの DFN モデルにおける熱輸送解析へ拡張し、有限要素法との比較で良好な一致を確認した。以上より、計測データに基づく地下構造推定手法としての TDA の有効性が、流動・物質移動・熱移動の各側面から実証された。

4. まとめと今後の課題

本研究では、2 年間のプロジェクトを通じて、地下の「構造」と「流れ」の関係を計測可能なデータから定量化するための統合的な枠組みを構築した。第一に、熱・溶質トレーサー試験と RML 法を統合した流動解析手法を確立し、3D プリントモデルによる制御実験において、単一流動経路から多経路環境まで流動経路特性の高精度推定を実現した。第二に、TDA（Mapper アルゴリズム）による岩石構造のグラフ表現手法を開発し、複数岩種・スケールでの浸透率推定によりその妥当性を検証したうえで、キロメートルスケールの DFN モデルにおける熱輸送解析へ展開し、複雑な地質構造を少数のパラメータで記述する「連結性に基づくモデル化」の有効性を示した。第三に、SWIW 試験の熱応答曲線とクラスタリングを組み合わせることで、井戸近傍の亀裂密度を非侵襲的に推定する新たな貯留層評価手法を提案した。これらは、亀裂内部の流体流動・物質移動・熱移動を計測データと結びつける相補的な要素技術であり、本研究の目的である統合的モデル化の基盤をなすものである。

一方で、いくつかの課題も明らかとなった。多経路システムにおける RML 法の計算コスト増大に対しては、推定精度と計算効率のバランスを考慮した最適化アルゴリズムの改良が必要である。Mapper グラフによる解析では、セグメント数の選定が結果に大きく影響するため、適切なセグメント数を自動決定する手法の開発が求められる。また、グラフ上の熱輸送解析における近接亀裂間の熱的干渉や副次的流路の取り扱い、熱応答に基づく亀裂密度推定のフィールドデータによる検証も残された課題である。

今後は、本研究で確立した要素技術を統合し、実フィールドデータへの適用を進める。具体的には、トレーサー試験・熱応答データと Mapper グラフに基づく構造表現を組み合わせ、計測データから貯留層の構造・流動・熱回収予測までを一貫して結びつける枠組みへと発展させるとともに、機械学習手法との統合による予測精度の向上を図る。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).

Marco Fuchs, Anna Suzuki, Togo Hasumi, Sina Hale, Larissa Blesch, Kathrin Menberg, Gabriel C. Rau, Philipp Blum, Estimations of fracture permeability using imaging methods and persistent homology, CouFrac2024 Program and Abstracts, (2024).

Togo Hasumi, Yusuke Imoto, Tomoki Uda, Anna Suzuki, Mapping Heat Flow Paths in Fractured Rocks via Topological Data Analysis, Proc. of the 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025) (2025)

Mufan Qiao, Anna Suzuki, Coupled Thermal–Solute Tracer Analysis for Subsurface Fracture Structure Characterization, Proc. of the 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025) (2025)

国内学会・研究会等

蓮見登冴, 井元佑介, 宇田智紀, 鈴木杏奈, トポロジカルデータ解析を用いた岩石き裂ネットワーク内熱流動挙動の推定, 日本地熱学会 令和 7 年学術講演会（盛岡大会） (2025)

Mufan Qiao, Anna Suzuki, Integrated Thermal–Solute Tracer Testing with Uncertainty Quantification for Subsurface Fracture-Network Characterization, 日本地熱学会 令和 7 年学術講演会（盛岡大会） (2025)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

令和 8 年 3 月　東北大学優秀女性研究者賞「紫千代萩賞」（鈴木杏奈）, 紫千代萩賞, 東北大学

令和 7 年 12 月　日本地熱学会 学生ベストプレゼンテーション賞（蓮見登冴）, トポロジカルデータ解析を用いた岩石き裂ネットワーク内熱流動挙動の推定, 日本地熱学会

令和 7 年 4 月科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞（鈴木杏奈）, 文部科学省

書式（1）

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	2024.4～2026.3
報告回数	第　2　回報告

2026 年 8 月 18 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　教授
乗松　慧生，西浦　聡志，勝村　紀子，近藤　広海，吉川　涼真，松橋　康太

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

航空輸送の一層の高速化を実現するために，極超音速旅客機の実現が期待されている．とりわけマッハ５以上の飛行を達成するためには，スクラムジェットエンジンの利用が期待されている．しかしながら，スクラムジェットエンジンの利用に向けては，そのような速度域に達するまでの加速が必要である．ターボジェットエンジンとの併用を考えた場合，マッハ３から４程度の低飛行速度での安定作動が不可欠である．このような飛行速度では気流全温が 700 K 未満と低く，燃料の自着火が期待できず，保炎も困難である．そこで本研究では，申請者がこれまで着目・研究してきた燃焼ガス噴射をデュアルキャビティを有する燃焼器に適用し，低飛行条件での火炎安定化手法確立を目的とする．

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トーチを有する燃焼器に対し，飛行マッハが 3 程度の低飛行速度条件において，①着火過程の観点からの保炎特性の解明，②火炎安定化手法の確立を目的とする．

2. 研究成果の内容

2.1 着火過程の観点からの保炎特性の解明

燃料および予燃焼ガス噴射時の 3 次元定常 RANS 反応計算を行い，反応中間生成物の分布可視化を行った．燃焼器スパン方向中央面における温度分布と C_2H_4 モル分率分布をそれぞれ図 1，2 に示す．図 1 より，キャビティ付近およびキャビティ後流側で温度が上昇していることが分かる．しかし，燃焼による温度上昇に対する寄与がどの程度存在するかについてこの図のみでは判断が難しい．図 2 では，ジェット燃料の燃焼反応メカニズムとして，ジェット燃料が C_2H_4

に分解されたのちに燃焼する二段反応メカニズムを用いているため，C_2H_4 が存在している場所は燃焼反応が発生する場所であるといえる．この分布をみると，C_2H_4 の分布は予燃焼ガス噴流部に集中しており，他の領域にはあまり存在していないことが分かる．このことから，今回の条件においてはジェット燃料の燃焼は予燃焼ガスと接している部分でほとんどが発生している可能性が示された．

ここまでの燃料噴射を伴う反応計算で得られた条件を用いて，着火遅れ時間の算出を行い，その結果と上述の燃料噴射時のキャビティ内滞在時間との比較を行った．

燃料噴射時のキャビティ内圧力はおおむね 150 kPa 程度であったため，計算条件の圧力にはこの値を用いた．温度は 600 K 程度と低く，燃料の自着火は期待できないため，予燃焼ガスと混合されることで温度が上昇すると仮定し，複数の温度条件において理想的な定容容器内で燃焼反応にかかる時間を算出した．容器内は燃料と空気の予混合気を仮定して，その当量比は 1.0 とし，得られた結果を図 3 に示した．いずれの燃料を用いた場合でも，予混合気の温度が高いほど着火遅れ時間は短くなった．本研究で使用を想定しているジェット燃料の着火遅れ時間は他の燃料と比べ長く，水素は他の炭化水素系燃料と比べ着火遅れ時間が非常に短いことが分かる．燃料噴射時のキャビティ内平均滞在時間がおおむね 1 ms であったため，これよりも短い着火遅れ時間であればキャビティ内で燃焼反応が期待できると考えられる．燃料が水素の場合，予混合気が 1000 K 程度あればキャビティ内での燃焼が期待できるが，エチレンの場合 1200 K 程度，ジェット燃料の場合 1220 K 程度が必要であることが分かる．

図 1 より，予燃焼ガスの中心温度は 1500 K 以上と高いが，噴流を貫通して燃料がその温度まで達するのは難しいと考えられる．一方で外縁部も 1200 K 程度であるため，噴流外縁部との熱交換を行うことでキャビティ内部での着火・保炎を行うことは可能であると考えられる．

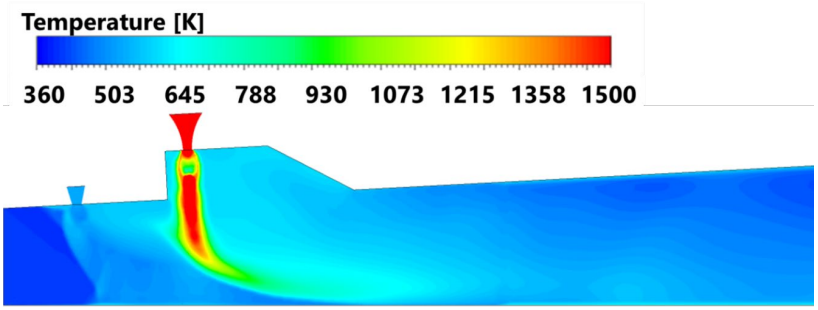


図 1　反応計算時の燃焼器スパン方向中央面における温度分布

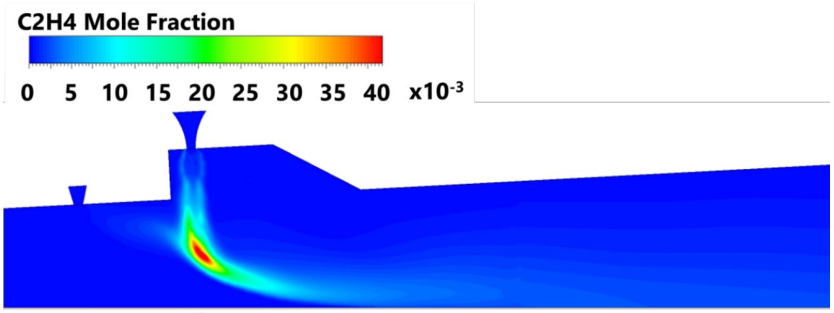


図 2　反応計算時の燃焼器スパン方向中央面における C_2H_4 モル分率分布

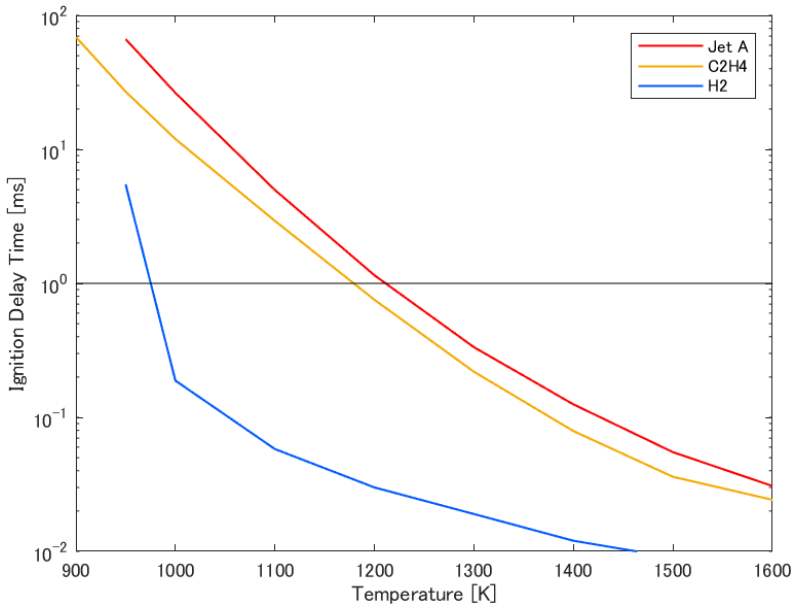


図 3　着火遅れ時間と予混合気の関係

2.2 シングルキャビティ保炎器形状の最適化

シングルキャビティの形状パラメータとしてキャビティ長さと深さの比 L/D とキャビティ深さ D，キャビティ後縁角度 θ に注目し，最適なキャビティ形状を検討した．評価基準は，圧力損失とキャビティ内部への気流取り込み量，キャビティ内部での気流滞在時間とした．計算には ANSYS Fluent を用い，３次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式を定常 RANS で解いた．

計算から得られた評価項目と形状パラメータの関係を表 1 にまとめる．L/D とキャビティ深さと燃焼器高さ h の比である D/h の増大に伴って，圧力損失と気流取り込み量が増大する．L/D=3，D/h=0.5~0.75，θ=30° で滞在時間は最大となった．

なお，キャビティ上流からの燃料噴射を含めた反応計算を行った場合でも，形状パラメータを変化させて得られた結果は同様の傾向を示した．

したがって，圧力損失および気流取り込み量，気流滞在時間の観点から，キャビティ長さ L とキャビティ深さ D の比が 3，キャビティ深さ D と燃焼器高さ h の比が 0.5~0.75，キャビティ後縁角度 θ は 30 度の形状が本条件において最も優れているといえる．

表 1 評価項目と形状パラメータの関係

	L/D	*D/h*	*θ*
圧力損失	*L/D* 大 で増大	*D/h* 大 で増大	*θ* 大 で減少
取り込み量	*L/D* 大 で増加	*D/h* = 0.75 で最大	*θ* 大 でわずかに増加
滞在時間	*L/D* = 3 で最大	*D/h* = 0.5~0.75 で最大	*θ* = 30 deg で最大

3. 研究目標の達成状況

目的１　着火過程の観点からの保炎特性の解明

燃料および予燃焼ガス噴射時の反応計算を行い，反応中間生成物の分布を可視化したことで，着火可能である領域が示唆された．また，着火遅れ時間の検討からも，着火・保炎が可能な領域が示唆された．

目的２　火炎安定化手法の確立

非反応/反応計算により，滞在時間の算出，流れ場の可視化を行い，滞在時間の観点で最も優れているシングルキャビティ形状が得られた．

4. まとめと今後の課題

マッハ 3 程度の低飛行速度条件における着火過程の観点からの保炎特性の解明と，火炎安定化手法の確立を目的とし，研究を行った．

燃料および予燃焼ガス噴射時の 3 次元定常 RANS 反応計算による反応中間生成物の分布可視化により，燃焼反応が発生し得る領域が示唆された．

また，キャビティ内滞在時間と着火遅れ時間の比較を行い，予燃焼ガス噴流の外縁部と熱交換を行うことでキャビティ内部で着火・保炎が可能であることが示唆された．

低飛行速度条件における保炎性能向上のため，キャビティ保炎器の形状最適化を目指し，複数のキャビティ形状を対象として 3 次元定常 RANS 計算を行った．圧力損失および気流取り込み量，気流滞在時間の観点から，キャビティ長さ L とキャビティ深さ D の比が 3，キャビティ深さ D と燃焼器高さ h の比が 0.5~0.75，キャビティ後縁角度 θ は 30 度の形状が優れているという結果が得られた．

今後は，得られたキャビティ形状をもとに燃焼実験を行い，保炎性能を検証することが今後の課題である．また，今回の検証はシングルキャビティに限られたものであり，先行研究で保炎性能がより優れているとされているデュアルキャビティ保炎器についても同様の検証をする必要がある．

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

特になし

著書

特になし

国際学会

特になし

国内学会・研究会等

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年講演会ならびに第６回再使用型宇宙輸送系シンポジウム, (2025)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

特　　に　　な　　し

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 08 月 18 日提出

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

徳増　崇
東北大学流体科学研究所　教授
鈴木　寛人
東北大学大学院工学研究科　博士課程後期 3 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

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 50，000 h 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 10，000 h 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 50,000 h 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．

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

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 は水の流速に対する Ce イオンの流束，w_m は水の流速，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，φ 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．さらに,高分子膜はポリマーなどからなる疎水部とイオンや水などが形成する親水部にナノスケールで相分離することが知られている.我々の研究で含水率の変化に伴い,イオンの輸送経路である親水部の連続性が変わることを確認し,また,親水部のチャネル径が含水率によって変化することもわかった.セリウムイオン輸送とチャネル径の解析から,チャネル径がある一定以上になるとセリウムイオンを通すようになることがわかった.

3. 研究目標の達成状況

拡散係数および水の対流による輸送係数の解析を達成した．また,セリウムイオンの拡散係数が含水率によって変化する理由について分子論的な解析を行い,論文化に至った.課題はおおむね達成済みである.

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 Transaction*, 114 191

Hiroto Suzuki, Takuya Mabuchi, and Takashi Tokumasu, Hydration-dependent transport mechanisms of Ce3+ ions in Nafion membranes revealed by molecular dynamics simulations, *Journal of Power Sources*, (Accepted)

著書

なし

国際学会

Hiroto Suzuki, Takuya Mabuchi, Takashi Tokumasu, Evaluating Eects of Cerium Concentration and Water Content on Diusivity 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, 馬渕拓哉, 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

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 14 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、内部にはア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 1.42Å、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、ランダムに-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。この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、各白金原子の位置を固定した。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布状態解析を行った。

2.2 一次細孔内水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を確認した。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し、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。高含水率の湿潤状態のアイオノマーでは内部の水が全部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分子も多く存在し、常に連結すると考えられる。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ている。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る、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。

2.3 一次細孔内計算系の改良

燃料電池触媒層の一次細孔内までは水や酸素分子が拡散でき、細孔開口部にアイオノマー薄膜が比較的に薄い、もしくは開口部を塞がないと仮定している。このような計算系を構築するため、アイオノマー薄膜構造作成段階で工夫を行った。厚さ約 4nm のアイオノマー薄膜を Nafion 高分子、水、ヒドロニウムイオンで構成し、平行(xy)方向のみ周期性を持ち、垂直(z)方向では仮想壁ポテンシャルを利用し移動可能領域を制限した。平衡状態までの緩和計算過程では従来の圧力制御は困難のため、xy 方向の応力を計算し、z 方向は即時に同じひずみで領域変更する方法を採用した。細孔部を塞がないため、細孔と同じ直径のシリンダー状仮想壁を使用し、緩和過程に薄膜の形状を制限した。さらに担持カーボン表面に付着する白金粒子を設置するため、球状の仮想壁で該当位置に空間を確保した。緩和過程で試行錯誤を行った結果、形状制限のアイオノマー薄膜の作成に成功し、開口部を塞がず、担持カーボン表面と細孔内の両方白金粒子を設置する計算系を構築した。計算結果では 40 ns まで温度 300K の NVT アンサンブルで MD 計算実行後に、構造は大きく崩れることがなく、安定な構造が得られた。

2.4 酸素透過シミュレーション

緩和後の平衡状態細孔計算系の上部真空層に酸素分子挿入領域を定義し、酸素透過シミュレーションを実行した。一定時間に領域内にランダム位置で定量の酸素分子を挿入し、各酸素分子に-z 方向の初期速度を与えた。領域内の酸素分子間最小距離を設定し、挿入する分子数を制限した。移動する酸素分子はアイオノマー薄膜を透過し、もしくは細孔内に進入し白金粒子までたどり着くと仮定した。温度 300K の NVT アンサンブルで 10ns の MD 計算後、酸素分子はアイオノマー薄膜内部に透過する現象を観測したが、担持カーボン表面(アイオノマー薄膜内)の白金粒子まで拡散する分子数はほぼなかった。一次細孔までの経路は塞がれていないので、細孔内部までは比較的に多数な酸素分子が侵入でき、細孔内白金粒子まで吸着した。細孔内壁は水分子が多く吸着したが、酸素分子は白金粒子のみ吸着し、もしくは細孔中央部に移動する現象を観測した。予測ではプロトンは細孔内壁に連結した水分子に経由し、酸素は直接細孔内白金粒子まで拡散する、シミュレーション結果はよく一致した。

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」、「一次細孔計算系安定化検証、水分布や連結性解析」、「一次細孔計算系構造の改良」、及び「酸素透過シミュレーションの導入」など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、これら解析や計算系構築の経験を生かして、反応力場での MD 計算にも応用する予定である。

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。

アイオノマー薄膜が一次細孔開口部を塞がない計算系構造を構築し、酸素透過シミュレーションを導入できた。担持カーボン表面(アイオノマー薄膜内)と細孔内同時に白金粒子を配置し、酸素分子の拡散状況と白金までの到達率も観測可能である。今後は定量な解析方法を確立し、温度や細孔大きさなど計算条件により酸素透過率の比較、及び反応力場 MD 計算でプロトン輸送特性解析の応用を検討する。

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）

Sheng-Feng Huang, Hidetoshi Matsumoto, Takashi Tokumasu: Liquid transport behavior through a carbon nanotube by molecular dynamics simulations, 20th Anniversary Commemorative Issue (JFST). (掲載予定)

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。

書式（1）

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	2024.04～2026.03
報告回数	第　2　回報告

2026 年 08 月 27 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

Joule 熱を使用した金属の熱処理手法は、金属材料内部から加熱することができるため、従来の加熱手法と比較して、熱処理時間の短縮やエネルギー利用効率の向上が期待できる。加えて、再生可能エネルギー由来の電気を使用して当該 Joule 熱を発生させることによって、熱処理プロセスに伴う温室効果ガス排出量の低減が期待できる。これらの利点から Joule 熱を使用した金属の熱処理手法は、材料科学分野で注目を集めている。鉄鋼の熱処理では、炭素濃度および炭素原子の分布が鉄鋼の微細組織形成に大きな影響を与えるため、熱処理後の鉄鋼材料の微細組織を予測・制御するためには、プロセス中の炭素輸送挙動を理解する必要がある。しかしながら、電場下での鉄鋼中の炭素原子の輸送現象(electromigration)に関する知見が十分ではなく、熱処理プロセス後の鉄鋼の微細組織を予測することが困難である。そこで本研究では、電場下における鉄鋼中の炭素輸送現象に関して、シミュレーション手法を用いて検討し、炭素原子の輸送挙動に対する電場の影響について基礎的な理解を深めることを目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の最終的な目標は、結晶粒界や ferrite/austenite 界面を多数含むより大きな空間スケールの鉄鋼系での炭素原子の electromigration を解析し、電場が炭素輸送特性や鉄鋼の粒成長、界面移動に与える影響を明らかにすることである。このようなマクロスケールの物理現象を解析するためには、その基礎となるミクロスケールの知見を把握する必要がある。そこで、ferrite 相中（ミクロスケール）における電場下の炭素原子の electromigration について、原子・分子スケールのシミュレーション手法を用いて検討し、その基礎的な知見を得ることを本研究期間内の最終目標とした。

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）

鉄鋼中の炭素輸送現象の電場依存性に関して、分子動力学シミュレーションを用いて解析した。特に本研究期間では、炭素原子のドリフト速度の電場依存性の解析に注力した。具体的には16,000 個の鉄原子を使用して体心立方格子構造を有する鉄結晶を構築し、その鉄結晶中の最安定なサイトである八面体空隙に炭素原子を配置することで鉄鋼(ferrite 相)をモデリングした。炭素原子に有効電荷を付与した上で計算系に電場を印加することにより、鉄鋼中の炭素原子の electromigration を模擬した。複数の電場強度条件に対する炭素原子の軌跡を解析することで、電場が鉄鋼中の炭素原子の電場方向のドリフト速度に与える影響を評価した。

3. 研究目標の達成状況

分子動力学シミュレーションを使用して、コンピュータ上で鉄鋼中の炭素原子の electromigration を模擬した。複数の電場強度条件における炭素原子の輸送挙動を解析することで、電場方向の炭素原子のドリフト速度と電場強度との関係について、ミクロスケールの基礎的な知見を得ることができた。加えて、当該分子動力学シミュレーションから得られたドリフト速度の電場依存性を再現するためのモデルについても検討を行った。その結果、シミュレーションから得られたドリフト速度の電場依存性を表現できるモデルを構築することができた。以上より、今後、結晶粒界や ferrite/austenite 界面を含むより大きな空間スケールでの炭素輸送シミュレーションへ展開するために必要となるミクロスケールの基礎的な知見を得ることができた。

4. まとめと今後の課題

本研究期間では、分子動力学シミュレーションを使用して、電場下の鉄鋼中の炭素輸送現象についてミクロスケールの解析を実施した。具体的には、電場方向の炭素原子のドリフト速度を解析し、シミュレーション結果から得られたドリフト速度の電場依存性を再現するためのモデルについて検討した。今後は、本研究期間で得られたミクロスケールの知見を活用して、マクロスケールにおける炭素輸送現象の解析へ展開する予定である。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

特になし。

著書

特になし。

国際学会

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 (ICFD2024), Sendai, Japan, 18-20 November (2024), pp. 1488-1489.

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, Honolulu, Hawaii, USA, 15-19 December (2024).

Ryuta. Onozuka, Patrice Chantrenne, Takashi Tokumasu: Analysis of the Drift Velocity of Carbon in Iron Crystal under High Electric Fields, Proceedings of Twenty-Second International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), Sendai, Japan, 10-13 November (2025), pp. 1759-1761.

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）

2025 年 3 月 31 日, 若手講演表彰, 一般社団法人 日本機械学会 熱工学部門

2025 年, 第 5 回サイエンスフォトコンテスト「科学の幽玄－Beauté Cachée de la Science」(Edition 2025) のファイナリストに選出

Ryuta Onozuka, Christophe Adessi, Joseph Kioseoglou, Patrice Chantrenne, Takashi Tokumasu: Electric Field Dependence of Parameters Related to the C Diffusivity in Steel and Improvement of Previous Analytical Model, ELyT workshop 2025, France, 19-21 February (2025).

Ryuta Onozuka, Christophe Adessi, Joseph Kioseoglou, Patrice Chantrenne, Takashi Tokumasu: Effect of non-equilibrium state on the C drift velocity in iron with electric field, ELyT workshop 2026, Sendai, Japan, 7-8 March (2026).

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 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
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

本プロジェクトは液体ロケットターボポンプに発生し，過去にロケット打上失敗の原因ともなった旋回キャビテーションや，キャビテーションサージというキャビテーション不安定現象の抑制手法について，先のプロジェクトで有効性を検討した逆流返しライナ（ケーシング）の最適形状を，数値解析を用いて検討するものである．ロケットターボポンプの実験は，それに必要な設備の規模や，毎回の実験費用の面から容易ではなく，最適な形状を求めるために複数の形状を比較実験することは現実的ではない．そこで数値解析による数値実験が有効となる．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試験と，本数値解析をリアルタイムで双方向にフィードバックしながら研究を進められる点で，世界最高水準の数値解析が実行できると考えている．実際に，前年度のプロジェクトにおいて，当研究グループが不安定現象抑制手法として開発してきたスリットインデューサと，逆流返しライナとの組み合わせの抑制効果について数値解析を用いて検討し，前年度最後の 3 月に JAXA 角田宇宙センターで組み合わせデバイスを実機に定期要旨検証実験を行うこととなっている．本数値解析でこれまで開発された抑制手法は，東北大と JAXA との共同でこれまで 2 件の特許出願がされており，本プロジェクトでもより有効な抑制手法の開発と特許出願，さらには将来の日本の液体ロケットエンジンへの技術採用を目指して研究を行う．

1.2 研究期間内の最終目標

今後のロケットエンジン開発の方向性として，広範囲の流量条件で作動するロケットポンプの開発が期待されており，より広範囲の流量条件で抑制効果が発現する形状を検討する必要がある．本研究プロジェクトでは，液体ロケットインデューサでのキャビテーション不安定現象の抑制に着目し，IHI が実機への適用に向けて過去に提案したものの，検証不足で実機適用には至らなかった逆流返しケーシング（BRS）について解析を行う．また，実験に置い

て高い抑制効果を示した，BRS と，当研究室で提案しているノッチインデューサ（Notch）との組み合わせの解析も行う．解析を通じ，BRS の流れ場の特性と，キャビテーション不安定効果抑制メカニズムを明らかにする．

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 数値解析手法

本研究では，インデューサまわりの基本的な速度場・圧力場の可視化のため，汎用熱流体解析ソフトウェアである ANSYS CFX 2025 R1 を用いてキャビテーション流れの三次元定常非圧縮解析を行った．本計算では，始めにキャビテーションがほとんど発生しないσ条件下の計算を行う．また，この時のσは，流量によってわずかに異なるが，およそ$\sigma = 0.500$ である．以後，この計算結果を初期値として，入口圧を徐々に減少させた条件の計算を行い，実験における減圧実験を数値解析で再現している．ここで，σ は主流圧力と飽和蒸気圧の差の無次元数であるキャビテーション数であり，その値が小さいほど，その流れ場ではキャビテーションが発生しやすいことを指す．

Notch-BRS の$Q/Q\mathrm{d} = 1.00$，$\sigma = 0.500$ における，Fine，Medium，Coarse メッシュの揚程係数の比較から，キャビテーション未発達時の計算において Medium メッシュが適当であると判断した．ここで，Fine，Medium，Coarse の格子数はそれぞれ 4,533 万，2,567 万，817 万である．また，Medium メッシュの揚程性能は実験結果と良好な一致を示すことが確認できた．また，Notch-BRS の$Q/Q\mathrm{d} = 1.05$ における吸込性能，キャビティ体積の比較からキャビテーション計算時にも Medium メッシュが適当であると判断した．また，Medium メッシュの揚程係数は揚程が低下していないσは範囲において実験値とおおむね一致することが確認できた．

2.2 得られた成果

異なる BRS 形状に対する水単相の三次元定常解析から，BRS の長さおよび深さを変更すると，BRS に生じる渦の大きさや半径方向位置が異なることがわかった．これにより，BRS に生じる渦と主流が合流する位置が変化し，BRS 形状によって流れ角が極小値をとる位置が変わることがわかった．

BRS の長さは，生じる渦の大きさに影響を与え，短い BRS は小さな渦を，長い BRS は大きな渦を生じることがわかった．短い BRS に生じる小さな渦は BRS 内に捕捉され，逆流の軸流速度をインデューサの半径内側を向く速度に転向することにより，逆流の発達を抑制できることがわかった．一方，BRS の深さは，BRS 内に生じる渦中心の半径方向位置，および BRS 内に渦が入り込む程度に影響を与えることがわかった．深い BRS では渦が BRS 内に入り込み，逆流の軸流速度をインデューサの半径内側を向く速度に転向することで，逆流の発達を抑制できることがわかった．

BRS は，その形状によらず，翼端近傍において大きな絶対周方向速度を生じるため，下流向きの軸流速度の増速のみならず，絶対周方向速度の増速によってもインデューサの入射角を低減していることがわかった．特に短い BRS は，流量の低下に伴って絶対周方向速度が大きく増速するため，異なる流量条件においても一定の流れ角を維持することがわかった．

Notch-BRS で亜同期旋回セルがより高σから生じたのは，BRS に生じる渦の低圧領域，

および BRS による大幅な入射角の低減によって生じる翼前縁の圧力面の低圧領域が，ノッチ部において翼圧力面から負圧面に大きな圧力勾配を生じることで，キャビティ後端がノッチに到達しないσ = 0.050 以上の条件において，より多くの局所漏れ流れを生じるためである．

3. 研究目標の達成状況

本研究成果は FEDSM2025 において発表され，2026 年度に国際学術雑誌に論文が 1 編投稿予定である．また，本数値解析結果をもって，抑制手法に関する特許を 1 件，追加で出願できた．よって，十分な成果が得られたと考えている．

4. まとめと今後の課題

今後は，数値解析結果から，キャビテーションの動特性パラメータであるマスフローゲインファクタとキャビテーションコンプライアンスを評価し，不安定予測式に適用することで，BRS や BRS-Notch の抑制メカニズムについて考察を行い，さらに最適形状の検討を行う．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

該当なし

著書

該当なし

国際学会

Takeru Yoshino, Satoshi Kawasaki, Yuka Iga, “Numerical Analysis of Cavitating Flow Fields in a Rocket Inducer With a Backflow Restriction Step ”, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting 2025 (FEDSM2025), Philadelphia (2025). FEDSM2025-169505.

国内学会・研究会等

田村浩紀，吉野剛瑠，川崎聡，伊賀由佳，「 不安定現象抑制デバイスを有する液体ロケットインデューサのキャビテーション動特性解析 」，ターボ機械協会第 93 回島根松江講演会,松江 (2025), D-10.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

出願番号：特願 2025-277620　出願日： 2025/12/23

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 17 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
Aditya Sai Pranith Ayapilla, 西山大裕
東北大学大学院情報科学研究科　D3, 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

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ィアはこれまでにもあったが、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え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 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の後流に形成され、その性質を特徴づける代表的な渦構造である。回転翼機の一例として風力タービンが挙げられる。大規模な風力発電施設では複数の風力タービンが連続して配置されるため、上流側の風力タービンが形成する後流は、下流側の風力タービンの発電効率に直接影響を及ぼす。実際、風力タービンが密集して配置された場合、後列の風力タービンでは、最前列と比べて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。したがって、回転翼後流における支配的な構造の一つ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である。

本研究では、主に数値計算を用いてらせん渦に現れる不安定モードを調べるとともに、その非線形発展を解析することにより、らせん渦の乱流遷移過程の詳細な理解を目指してきた。らせん渦に生じる代表的な不安定モードについては、理論解析によってその存在が既に予測されており、本研究では、これらの不安定モードを数値計算によって捉えることに成功した。さらに、それぞれの不安定モードの非線形発展を数値的に調べた結果、その発展過程は典型的に二つの種類に大別されることが分かった（Fig. 1）。一つは、弱非線形効果によって不安定モードの成長が飽和し、らせん渦の構造が比較的よく保たれる場合である。もう一つは、より強い非線形効果によって渦核が大きく変形し、小スケール構造の生成や渦核の崩壊に至る場合である。

特に、弱非線形効果による不安定モードの飽和は、らせん渦が直ちに乱流状態へ遷移せず、秩序立った構造が維持されることから特徴的な現象である。そこで、弱非線形解析を行い、その結果を数値計算と比較した。これにより、不安定モードが弱非線形的に飽和する場合と、より強い非線形発展を経て渦核の崩壊に至る場合とを分ける条件について、一定の知見を得た。

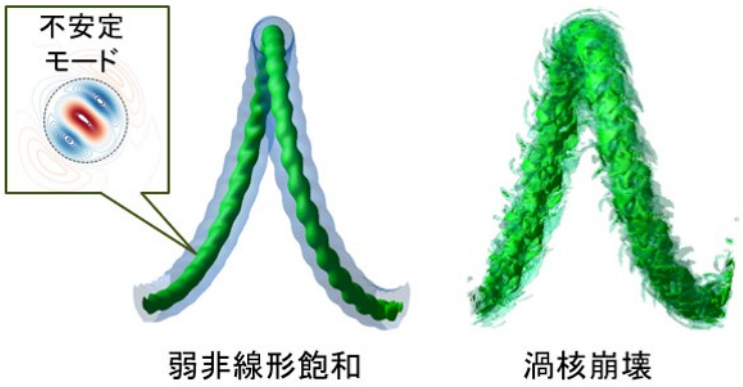


Fig. 1 らせん渦に現れる不安定モードと非線形発展後の典型的な状態

3. 研究目標の達成状況

進捗状況は順調であり、予定の計画にしたがって成果を挙げた。

4. まとめと今後の課題

らせん渦の短波長不安定性と非線形発展について、数値計算を用いてらせん渦に現れる不安定モードを調べるとともに、その非線形発展を解析した。らせん渦に生じる代表的な不安定モードを数値計算によって捉えることに成功した。また、非線形発展後の状態には二種類の状態があることを明らかにした。一つは、弱非線形効果によって不安定モードの成長が飽和し、らせん渦の構造が比較的よく保たれる場合である。もう一つは、より強い非線形効果によって渦核が大きく変形し、小スケール構造の生成や渦核の崩壊に至る場合である。今後はこれらの状態がどのような条件下で起こるかを明らかにすることが求められる。

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）

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, Stéphane Le Dizès, Triangular Instability of a strained Lamb-Oseen vortex, J. Fluid Mech. 1016 (2025) A9.

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, Stéphane Le Dizès, Triangular Instability of a strained Batchelor vortex, J. Fluid Mech. 1030 (2026) A52.

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

Daisuke Nishiyama, Yuji Hattori, Nonlinear Dynamics and Turbulent Transition of a Helical Vortex Disturbed by the Short-wave Instabilities, Proceedings of the Twenty-second International Conference on Flow Dynamics, pp. 1167-1169, November 10 - 13, 2025, Sendai, Miyagi, Japan

Daisuke Nishiyama, Yuji Hattori, Nonlinear processes of short-wave instabilities growing in a helical vortex: saturation and turbulent transition, 78th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, November 23–25, 2025, Houston, 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

西山大裕, 服部裕司, らせん渦における楕円型不安定性の非線形発展, 日本流体力学会 年会 2025, 大阪公立大学 中百舌鳥キャンパス, 堺, 2025 年 9 月 17 日～19 日

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 17 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
Liangkui Tan, 立原陽太
東北大学大学院情報科学研究科　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

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、対症療法的に行われることが多かった。これに対し、自動的な最適化を実現する本開発手法は人間のアイディ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 Aeroacoustic Noise Generation in Jet-Wing Interaction under the Wing-in-Ground Effect

This study investigates the receptivity and subsequent amplification of tonal acoustic disturbances in the laminar suction-side boundary layer of a NACA 4412 airfoil at an angle of attack of 5 degrees and a moderate Mach number M=0.3. The results show that the acoustic-receptivity location is wavelength dependent: longer-wavelength disturbances are received farther downstream. More importantly, the acoustic influence is not restricted to a narrow neighborhood of the initial receptivity site, but persists throughout the region extending from receptivity to the onset of transition. The principal findings are summarized below.

Wavelength matching determines the acoustic-receptivity location. The upstream-propagating acoustic wave and the downstream-convecting hydrodynamic disturbance form a standing-wave pattern whose effective wavelength is substantially shorter than the original acoustic wavelength. Strong acoustic-to-vortical conversion occurs where this standing-wave wavelength matches the locally preferred Tollmien-Schlichting (T-S) wavelength. As the boundary layer develops downstream, its preferred T-S wavelength increases; consequently, high-frequency disturbances, which generate shorter standing-wave wavelengths, are received farther upstream, whereas

lower-frequency disturbances are received farther downstream. Figure 1 compares the wavelength-matching prediction with the locally optimal frequencies obtained from spatial stability analysis. The two agree well over the upstream portion of the airfoil, supporting the proposed scaling. Their divergence farther downstream coincides with the onset of flow separation, where the instability is no longer adequately represented by a T-S mode and the matching model therefore loses validity.

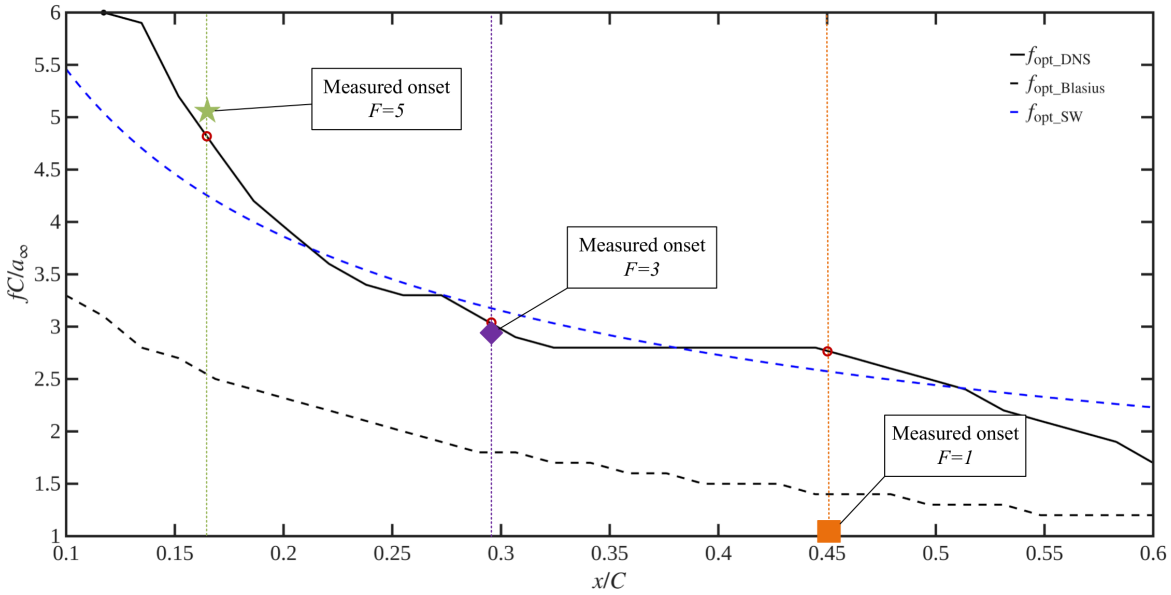


Fig. 1　Optimal excitation frequency as a function of chordwise location. The DNS-based spatial-stability result, the Blasius reference, and the standing-wave (SW) prediction follow an approximate F proportional to (x - x0)-1/2 scaling. Open circles denote the local optimal frequencies from the DNS-based stability analysis; symbols mark the receptive windows observed for F = 1 (■), 3 (◆), and 5 (★).

2.2 強化学習を用いた円柱まわりの空力騒音低減

近年、工学機器から発生する空力騒音の低減が重要な課題となっている。本研究では、振動円柱と固定円柱まわりの流れによって発生する空力騒音を対象に、直接数値シミュレーション（DNS）と強化学習を組み合わせた騒音低減手法を検討した。解析対象は、流れ方向前方に固定円柱、後方に振動円柱を配置し、レイノルズ数を Re=150 とした。DNS には修正 VP 法を用い、圧縮性ナビエ・ストークス方程式を直接解くことで空力騒音を解析した。

強化学習には Soft Actor-Critic（SAC）を採用し、状態を流れ場の位相および固定・振動円柱に作用する力の短時間平均値・標準偏差、行動を振動円柱の振動周波数の変化、報酬を両円柱に作用する力の和の短時間平均の対数と定義した。

学習初期には一時的に円柱に作用する力が増加したが、学習の進行に伴い長期的には減少し（Fig. 2）、これに連動して音圧の低減も確認された。 学習された行動を解析した結果、振動周波数を低下させる制御が行われており、これは先行研究で音圧低減が確認された条件と一致した。

また、Fig. 3 に強化学習前後における渦度分布の可視化結果を示す。 学習後の制御により 渦

の発生が抑制されていることが確認され、空力騒音低減に寄与していることが示された。以上より、SAC を用いた強化学習により、円柱まわりの空力騒音を効果的に低減できる可能性が示された。

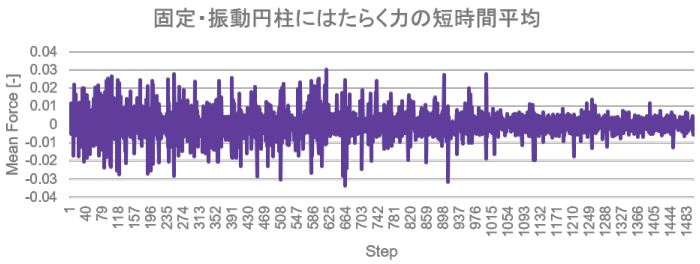


Fig.2 固定・振動円柱にはたらく力の短時間平均

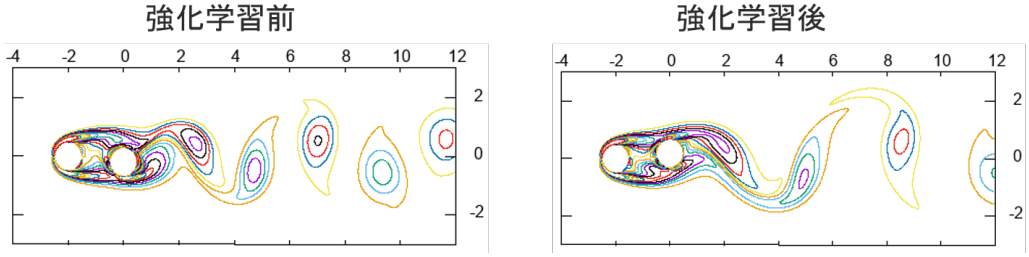


Fig.3 強化学習前後の渦度の可視化

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

地面効果翼から発生する空力騒音発生メカニズムの研究においては、翼後縁において発生した空力音が、翼前方の境界層で渦放出を促進するフィードバックループの存在を示し、T-S 波の不安定性を誘起している可能性を、安定性解析により論じた。今後は、このメカニズムの検証が課題である。

強化学習を用いた円柱まわりの空力騒音低減においては、固定円柱とその背後の振動円柱から発生する空力音の低減を目的として、強化学習により振動の制御を行った。その結果、空力音が低減されることを確認し、強化学習の有効性を確認することができた。今後は、制御パラメータが複数ある場合への適用と、学習効率の向上が課題である。

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）

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.
Liangkui Tan, Yuji Hattori, The mechanism of laminar boundary layer vortex shedding noise generation of jet–wing interaction under the wing-in-ground effect, J. Fluid Mech. (2026), vol. 1026, A29,

著書

なし

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
Liangkui Tan, Yuji Hattori, The Sound-Vortex Feedback Loop underWing-in-Ground Effect, Proceedings of the Twenty-second International Conference on Flow Dynamics, pp. 1130-1133, November 10 - 13, 2025, Sendai, Miyagi, Japan
Liangkui Tan, Yuji Hattori, Mechanisms of Vortex Evolution under Acoustic Excitation in Wing-in-Ground Effect, 78th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, November 23–25, 2025, Houston, USA
Yuji Hattori, Taihei Yamamoto, Effects of turbulence on the mechanism of Ranque–Hilsch effect at low Reynolds numbers, 78th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, November 23–25, 2025, Houston, USA

国内学会・研究会等

山本泰平, 服部裕司, Ranque-Hilsch ヴォルテックスチューブのエネルギー分離における乱流の役割, 日本流体力学会　年会 2025, 大阪公立大学 中百舌鳥キャンパス, 堺, 2025 年 9 月 17 日～19 日

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 17 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・捩り・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はなく、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 曲率不安定性の弱非線形解析

最低次でガウス型の渦度分布をもつ渦輪の曲率不安定性に対する非線形効果を調べるため、弱非線形解析を行った。振幅方程式は楕円型不安定性の場合と同様の形となり、曲率不安定性に対応する線形項と、3 次の非線形項、平均流変化の効果を含む。各項の係数を数値的に評価し、非粘性の場合の飽和振幅を評価した。その結果、曲率不安定性の場合は、楕円型不安定性の場合よりも非線形効果が強く、飽和振幅が小さくなる傾向があることがわかった。さらに、振幅方程式の数値解を直接数値シミュレーションの結果と比較した。2 次のモードや平均流の変化について、弱非線形解析による解が直接数値シミュレーションの結果をよく再現することを確認し、エネルギーの時間変化も非線形飽和付近までは整合することがわかった（Fig. 1）。以上の結果は、渦核半径と渦輪半径が 0.18 程度の場合、楕円型不安定性が渦輪の乱流遷移を引き起こすのに対し、曲率不安定性は非線形飽和にとどまることを説明する。

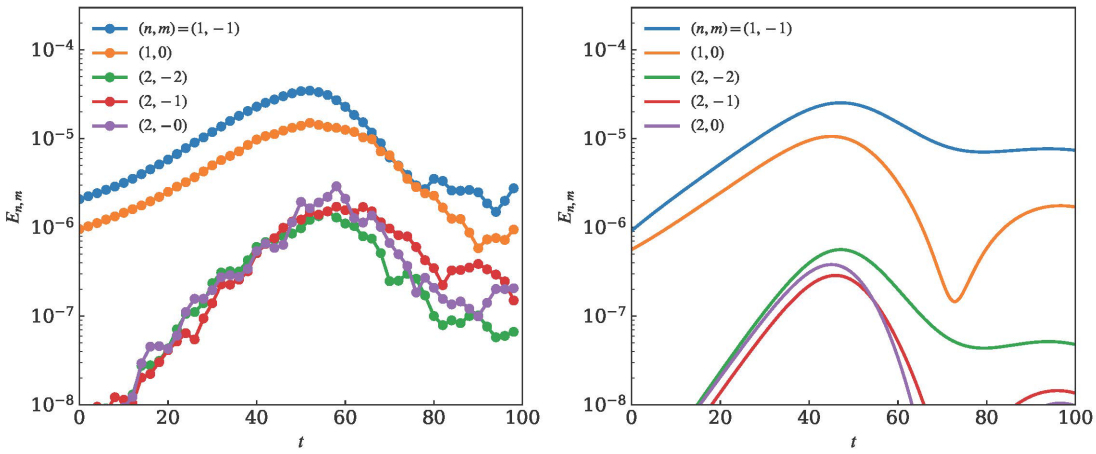


Fig. 1 擾乱のモードエネルギーの時間変化の比較。(左) 直接数値シミュレーション、(右)弱非線形解析による予測

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

曲率不安定性の弱非線形解析を行い、振幅方程式を導き、その係数を精度よく求めることに成功した。直接数値シミュレーションと振幅方程式による解の比較を行い、モードエネルギーの時間発展や 1 次、2 次モードの構造がよく一致することを確認した。この結果は、渦輪の非線形発展を体系的に調べるための重要なステップである。今後は楕円型不安定性や長波長不安定性に対する非線形効果を弱非線形解析により明らかにすること、また 2 次不安定性などの寄与を解明することが課題である。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

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

Ivan Delbende, Yuji Hattori, Maurice Rossi, Shortwave Instability of Helical Vortices with Swirl, Proceedings of the Twenty-second International Conference on Flow Dynamics, pp. 1163-1166, November 10 - 13, 2025, Sendai, Miyagi, Japan

国内学会・研究会等

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 20 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　准教授，教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

燃焼波の伝播形態には，拡散と反応によって伝播する「火炎」と，衝撃波と反応が一体となって伝播する「爆轟（デトネーション）」の 2 つが知られている．一方，燃焼の開始である「着火」には，火花などによる強制着火のほかに，高温・高圧の混合気が自発的に反応を開始する「自着火」があり，従来，伝播とは異なる現象として扱われてきた．しかし，温度や組成にむらのある混合気では，自着火のタイミングが場所ごとにずれることで自着火が波のように伝わる「自己着火反応波」が生じる．この自己着火反応波は，その伝播速度に応じて多様な様相を示し，条件によっては火炎や爆轟へと遷移する．我々はこれらの反応波の関係に着目し，着火と火炎を統一的に繋げる理論を提案してきた．

この理論は多様な燃焼器の開発に直結する．ガソリンエンジンでは，火炎の伝播中に未燃ガスが自着火する「ノッキング」が熱効率向上の最大の障壁となる．また，爆轟を直接利用するデトネーションエンジンでは，火炎から爆轟への遷移（DDT）の制御が運転の安定性に関わる．さらに我々の理論は，自己着火反応波を動作原理とする，爆轟より安定かつ高速な燃焼モード（weak detonation）を利用した新たな燃焼器の可能性を予測している．いずれも火炎・自己着火反応波・爆轟という燃焼モードの遷移や干渉が関わっており，これらを統一的に扱う本理論はその抑制と利用の基盤となる．本研究では，着火と火炎をつなげる理論に基づき，数値計算を用いて次の 3 つの課題に取り組んだ．

(1) ノッキング現象の理解

標準燃料 PRF（n-heptane と iso-octane の混合燃料）を対象としたノッキング実験と，それを再現する直接数値計算により，着火と火炎の相互作用としてノッキング現象の理解を進める．また，計算負荷の高い多次元計算に代わり，実機開発に資する簡易な計算でノッキングを予測する手法の確立を目指す．さらに，カーボンニュートラル燃料として期待されるアンモニア／水素混合燃料へも本手法を展開する．

(2) 温度分布制御型マイクロフローリアクタによる着火と火炎の関係の解明

温度分布制御型マイクロフローリアクタ（MFR）は，燃焼反応の時間的進行を空間的に分離して観測できる装置であり，着火と消炎が繰り返される FREI 現象をはじめ，着火と火炎の関係を精密に調べることができる．本装置を用いた実験とそれを再現する数値計算により，着火と火炎の関係をより詳細に解明するとともに，燃料の自着火特性の評価を進める．

(3) 新しい超音速燃焼器の実現

我々の理論は，自己着火反応波が爆轟と同等以上の速さで安定に伝播しうる燃焼モード「weak detonation」の存在を予測している．weak detonation は爆轟のような強い衝撃波を伴わないため，これを利用すれば，爆轟エンジンを超える安定かつ高効率な革新的超音速燃焼器が実現できる可能性がある．本研究では，weak detonation が成立する条件を数値計算により明らかにすることを主目的とする．あわせて，その実現を阻害しうる要因として，自己着火反応波から爆轟への遷移（DDT）の発生機構と，自己着火反応波の安定性（燃焼振動の発生条件）を解明する．

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，数値計算を併用することで現象理解を進める．ノッキングに関しては，1 次元直接数値計算などの簡易な計算により実機のノッキングを予測できる手法を確立し，アンモニア／水素混合燃料を含む多様な燃料へ展開する．温度分布制御型マイクロフローリアクタに関しては，実験とそれを再現する数値計算により，着火と火炎の関係の精密な理解を進める．さらに，weak detonation を利用した新しい超音速燃焼器の実現に向けて，その成立条件と，実現を左右する DDT の発生機構および自己着火反応波の安定性を明らかにし，実機開発に資する現象理解を確立する．

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

(1) ノッキング現象の理解

多次元の直接数値計算は計算負荷が高く実機開発への適用が難しいため，1 次元直接数値計算によりノッキングの発生を予測する手法を構築し，標準燃料 PRF を対象に，定容容器実験およびオクタン価測定用の標準エンジン（CFR エンジン）の実験データとの比較によってその有効性を実証した．定容容器実験では，PRF20/O_2/Ar 混合気を対象に火炎挙動とノッキングの観測を行い，1 次元直接数値計算との比較によりノッキング強度の評価を進めた．さらに，カーボンニュートラル燃料として期待されるアンモニアおよびアンモニア／水素混合燃料の火花点火エンジンにも本手法を適用し，ガソリン系燃料とは化学的性質が大きく異なる燃料に対しても本手法が有効であることを確認した．これにより，燃料種によらない予測手法としての適用範囲を確認した．あわせて，ノッキング発生に先行する火炎加速の解析や，火炎伝播理論との接続など，ノッキングを着火と火炎の相互作用として統一的に理解するための基礎を築いた．

(2) 温度分布制御型マイクロフローリアクタによる着火と火炎の関係の解明

温度分布制御型マイクロフローリアクタ（MFR）内では，着火・火炎伝播・消炎が周期的に繰り返される FREI 現象が観測され，着火と火炎の関係を精密に調べる題材となる．本研究では，標準燃料 PRF を対象にオクタン価が FREI 挙動に及ぼす影響を数値計算により調べ

た．その結果，低オクタン価燃料（PRF0～70）では一度の着火と火炎伝播・消炎からなる従来型の FREI が現れるのに対し，高オクタン価燃料（PRF80～100）では，一度目の弱い着火の後に，二度目のより強い着火が引き起こされる，従来知られていなかった多段着火型の FREI が現れることを発見した．すなわち，オクタン価に応じて FREI の様式そのものが質的に変化する．化学反応解析により，この多段着火は iso-octane の分解で生じる中間生成物（iso-butene）が一度目と二度目の着火の間に蓄積し，その反応が二度目の着火を引き起こすことによることを明らかにした．

(3) 新しい超音速燃焼器の実現

数値計算により，自己着火反応波が強い衝撃波を伴わずに超音速で伝播する weak detonation が存在しうることを示し，燃焼器として利用可能な条件を調べた．あわせて，その実現を左右する 2 つの要因について検討を進めた．第一に，爆轟への遷移（DDT）である．従来 DDT の数値的な再現には大規模な多次元計算が必要とされてきたが，自己着火反応波を対象とした 1 次元計算によって DDT が発生することを確認した．さらに，反応波内部の熱力学的経路に着目した解析により，燃焼の過程が圧力の解放を伴う定圧的な経路から圧力が閉じ込められる定容的な経路へと切り替わることが，遷移の引き金となることを見出した．第二に，反応波の不安定化（燃焼振動）である．亜音速の自己着火反応波を対象とした圧縮性数値計算により，流入速度がある臨界値の範囲内にあるとき，反応波の自励振動が発生することを明らかにした．

3. 研究目標の達成状況

3. 研究目標の達成状況

(1) ノッキングについては，1 次元直接数値計算による予測手法を構築し，定容容器実験および CFR エンジンの実験データによる検証を行った．さらにアンモニア／水素混合燃料への適用により燃料種によらない適用範囲を確認した．

(2) MFR を用いた着火と火炎の関係の解明については，オクタン価に応じて FREI の様式が質的に変化することを見出し，多段着火型 FREI という新しい着火様式の発見した．

(3) weak detonation を利用した超音速燃焼器については，その存在可能性と利用条件を示すとともに，実現を左右する DDT の発生機構の解明と自己着火反応波の自励振動の発生条件の特定に至り，実機開発の基礎となる知見を得た．

4. まとめと今後の課題

本プロジェクトでは，着火と火炎を繋げる理論を軸に，ノッキング予測手法の構築と多様な燃料への展開，オクタン価に依存する新しい多段着火型 FREI の発見，weak detonation の存在可能性の提示とその実現を左右する機構の解明という成果を得た．今後は，ノッキングについては定容容器実験による検証をより広い燃料種へ拡大するとともに，予測手法の実機開発への適用を進めることが課題である．また，多段着火型 FREI の実験的検証も必要である．weak detonation については，多次元では，境界層や流入条件の温度・組成のムラにより DDT が発生する条件が存在す，その解明が実現に向けた今後の課題である．

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）

1. Keisuke Akita, Peng Zhao, Youhi Morii, Kaoru Maruta,Double flame dynamics in hotspot ignition, Combustion and Flame, (2024), 269, 113660.
2. Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Effect of flame stretch on the transition boundary of "explosive transition of deflagration", Physics of Fluids, Vol. 37, No. 12, 123620 (2025).
3. Hinata Moriyama, Youhi Morii, Akira Tsunoda, Yuki Yasutake, Katsuhiro Misono, Yoshikatu Suzuki, Taketora Naiki, Manabu Watanabe, Kaoru Maruta, Bridging fundamental combustion analysis and engine knock behavior - 2nd report: detailed analyses of knock behavior based on fundamental 1D DNS and its relationship with engine knock, SAE Technical Paper, SAE 2025-01-0392 (2025).
4. Yuki Yasutake, Katsuhiro Misono, Yoshikatu Suzuki, Taketora Naiki, Manabu Watanabe, Hinata Moriyama, Youhi Morii, Akira Tsunoda, Kaoru Maruta, Bridging Fundamental Combustion Analysis and Engine Knock Behavior – 1st Report; CFR Engine Test for Various RON Fuels, SAE Technical Paper, SAE 2025-01-0391 (2025).
5. Florian HURAULT, Toshihiro FUKAYA, Akira TSUNODA, Hinata MORIYAMA, Fabrice FOUCHER, MOUNAÏM-ROUSSELLE, Youhi MORII, Kaoru MARUTA: 1D DNS Investigation of Knock Behavior in Ammonia–Hydrogen Spark-Ignition Engines, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 42 (2026), Accepted.
6. Akira Tsunoda, Kaoru Maruta, Youhi Morii, Theoretical Framework for Knock Onset: ZFK–FKPP-Transition-Based Analysis of Flame Acceleration with a Chemically Unfrozen Preheat Zone, Combustion and Flame, Vol.291,(2026), 115121.
7. Kaito Nishiyama, Joel Daou, Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Two-dimensional simulations of effect of stretch on ball-like flame in weakly stretched counterflow field using low-Lewis number premixture, Proceedings of the Combustion Institute, accepted (2026).

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 Diévart, 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 Battey 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, 15th 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”, 15th 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”, 13th Mediterranean Combustion Symposium, (2025), Accepted.
11. Hinata Moriyama, Youhi Morii, Akira Tsunoda, Yuki Yasutake, Katsuhiro Misono, Yoshikatsu Suzuki, Taketora Naiki, Manabu Watanabe, Kaoru Maruta: Validation of 1D DNS Knock-Onset Prediction Methodology Using CFR Engine Data, Intenational Conference on Fluid Dynamics, Sendai, Japan (2025).
12. Akira Tsunoda, Youhi Morii, Kaoru Maruta: heoretical Analysis on Flame Propagation with Chemically Unfrozen Preheat Zone: ZFKFKPP Transition and Knock Onset, Intenational Conference on Fluid Dynamics, Sendai, Japan (2025).
13. Shogo Miyazaki, Hinata Moriyama, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Kaoru Maruta: 1D DNS Analysis of Knocking in PRF20/O2/Ar Mixtures within a Constant Volume Chamber, Intenational Conference on Fluid Dynamics, Sendai, Japan (2025).
14. Toshihiro Fukaya, Hinata Moriyama, Youhi Morii, Kaoru Maruta: The Effect of Fuel

Lewis Number on the Behaviors of Highly Preheated Premixed Flames, Intenational Conference on Fluid Dynamics, Sendai, Japan (2025).

15. Florian Hurault, Fabrice Foucher, Pierre Brequigny, Christine Mounaim-rousselle, Hinata Moriyama, Toshihiro Fukaya, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Knocking Processes in NH3/H2 Engine, International Conference on Fluid Dynamics, Sendai, Japan (2025).
16. Haru Okada, Youhi Morii, Akira Tsunoda, Kaoru Maruta: 1D DNS on Shock Formation and Detonation Transition Triggered by Reaction Wave Speed Exceeding the Subsonic CJ Speed, Intenational Conference on Fluid Dynamics, Sendai, Japan (2025).
17. H. Okada, Y. Morii, A. Tsunoda, K. Akita, K. Maruta,「Elucidating the Mechanism of Shock Wave Generation within a Subsonic Reaction Wave through Extension of Zel′dovich′s Ignition Front Theory」, 30th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), Ottawa, Canada, (2025).
18. Toshihiro Fukaya, Florian Hurault, Christine Mounaim-rousselle, Youhi MORII, Kaoru MARUTA: One-Dimensional Direct Numerical Simulations of Knock Onset of NH3-Air Mixture in a Constant Volume Chamber, World Hydrogen Energy Conference, Bayfront Avenue, Singapore (2026).
19. Toshihiro Fukaya, Hinata Moriyama, Akira Tsunoda, Shogo Miyazaki, Yuki Yasutake, Katsuhiro Misono, Yoshikatsu Suzuki, Taketora Naiki, Manabu Watanabe, Florian Hurault, Christine Mounaim-rousselle, Youhi Morii, Kaoru Maruta: One-Dimensional DNS for Thermodynamic-State Comparison with SI Engine Knock Experiments for PRF90, International Symposium on Combustion, Kyoto, Japan (2026).
20. Toshihiro FUKAYA, Yuta SASAKI, Takashi YOSO, Youhi MORII, Kaoru MARUTA: One-Dimensional DNS of Flame Acceleration Preceding Knock Onset in Spark-Ignition Engines, International Symposium on Combustion, Kyoto, Japan (2026).
21. Shogo Miyazaki, Takuya Tezuka, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Study on flame behavior and knocking in n-heptane based fuels at RON 20: Observation experiments and 1 D DNS, International Symposium on Combustion, Kyoto, Japan (2026).
22. Tomoya Suzuki, Youhi Morii, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Effects of octane number on FREI behavior in PRF/air mixtures: Transition from one-step to multi-step ignition, International Symposium on Combustion, Kyoto, Japan (2026).
23. Haru Okada, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Stability of Weak Deflagration Solutions in Reactive Rayleigh Flow, Kyoto, Japan (2026).

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).
8. 鈴木 智也，森井 雄飛，手塚 卓也，丸田 薫: 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いたオクタン価に依存した多段階着火現象に関する数値的研究，第 63 回日本伝熱シンポジウム，札幌（2025）.
9. 宮﨑 将吾，森山 陽太，手塚 卓也，森井 雄飛，丸田 薫: 定容容器実験および 1D DNS 解析による PRF20/O2/Ar におけるノッキング強度に関する研究，第 63 回燃焼シンポジウム，横浜（2025）.
10. 鈴木 智也，森井 雄飛，手塚 卓也，丸田 薫: PRF における多重着火型 FREI 現象に関する数値的研究，第 63 回燃焼シンポジウム，横浜（2025）.
11. 深谷 峻大，宮﨑 将吾，森山 陽太，森井 雄飛，丸田 薫：顕著に予熱されたメタン/空気 平面予混合火炎の振る舞いに関する研究，第 63 回燃焼シンポジウム，横浜 (2025).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

無し

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 3 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　助教

SINGH ANAND SHANKAR

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航空宇宙工学専攻　博士学生

松本　凌太朗，石田　誉人，井草　光遥，北川　雄太，柳澤　浩子

東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻　修士学生

小野　崇良

東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻　学部学生

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. また, 燃焼数値シミュレーションの高速化を図るために, 簡易燃焼反応モデルの生成手法について検討する.

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ついては，比較的研究例が少なく文献から得られる化学反応モデルも限られているため，熱分解や酸化反応を主眼に置いて量子化学計算や化学反応モデルの構築・検証を実施することを目標とする．また，簡易燃焼反応モデルの生成手法を構築し，生成モデルの性能評価を行う．

2. 研究成果の内容

2.1 リン酸トリメチルの単分子解離反応経路の探索

リン酸トリメチル（TMP）は，リチウムイオン電池電解液への難燃性添加剤候補のひとつであり，電解液成分として一般に用いられている炭酸エステルと似た分子構造を有する有機リン化合物である．リン系難燃剤は，反応過程において生成する中間体が燃焼反応において重要な役割を担う活性種を効果的に捕集することで，燃焼反応を抑制する．したがって，難燃剤試料からリンを含む中間体がどのように生成するかが難燃効果に直結するため，その詳細な反応過程の理解が重要である．本研究では，今後のリン酸トリメチルの化学反応モデル構築を視野に入れ，まずリン酸トリメチルの単分子解離反応について量子化学計算を行うことで調査した．計算結果を図 1 に示す．リン酸トリメチルの単分子解離反応において，異性化が起き，その後メチルラジカル（CH_3）やホルムアルデヒド（CH_2O），ジメチルエーテル（DME）などを生成する反応経路を発見した（図 1 中それぞれ R6c，R6d，R8）．これらの反応はリン酸トリメチルの既存の化学反応モデルでは考慮されておらず，既存モデルにおいて主要なメチルラジカル（CH_3）を直接生成する反応経路（図 1 中 R9）よりもエネルギー的に有利である．反速度論的にも，これらの反応は難燃剤試料が分解し始めるような反応初期段階に当たる低～中温において重要となることが分かった．

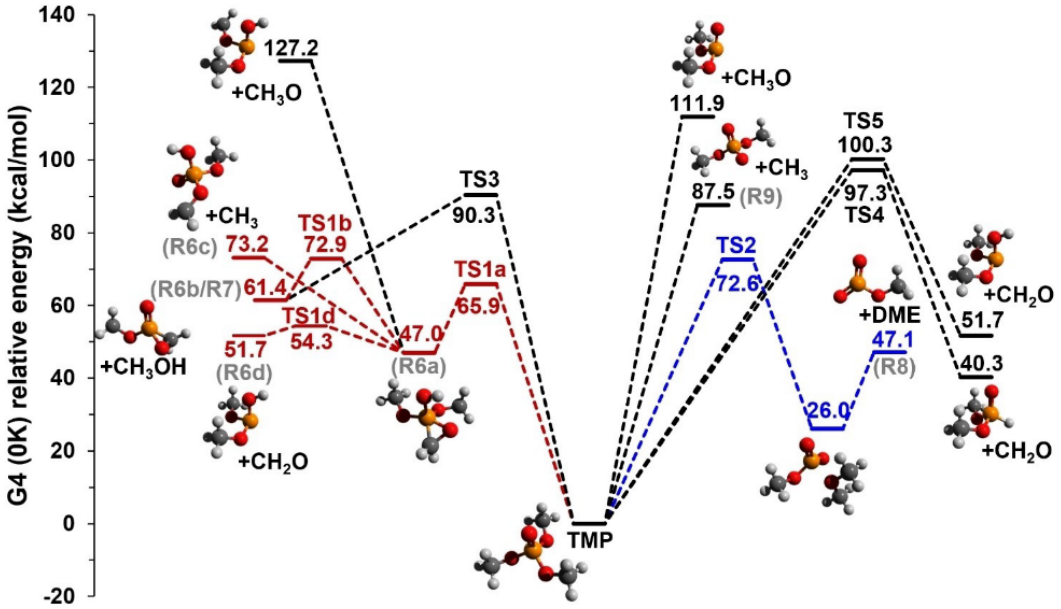


図 1　リン酸トリメチル（TMP）の単分子解離反応におけるエネルギーダイアグラム

2.2 昇圧条件におけるアンモニア酸化反応の調査

実燃焼器におけるアンモニア燃料の利用に向けて，昇圧・高圧条件におけるアンモニアの酸化特性に関する理解が求められる．本研究では，温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いて，昇圧条件（～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（NH_3），亜酸化窒素（N_2O）および水素（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（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ことが分かった．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ルラジカル（HO_2）が一酸化窒素（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（OH）および二酸化窒素（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 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．

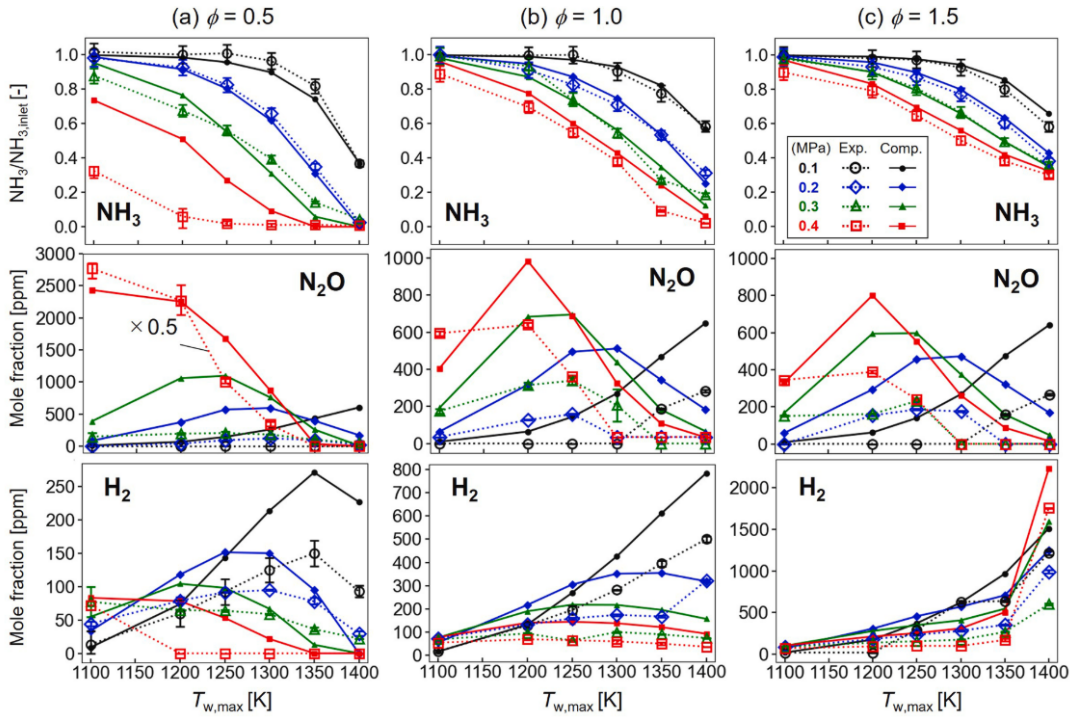


図 2　アンモニア酸化における圧力および当量比の影響

2.3 メタン及び天然ガスの簡易反応モデル生成手法

カーボンニュートラルの達成に向け，低炭素燃料である天然ガスやメタネーションで合成される純メタンが注目されている．これらの燃料を扱う実燃焼器に対する CFD シミュレーションを行う上では，詳細反応モデルと比較して極めて小規模でありながら高精度な反応モデルの構築手法の確立が求められている．本研究では，仮想化学種と簡易反応経路（SRP）を組み合わせ，遺伝的アルゴリズム（GA）で速度パラメータを最適化することで，コンパクトかつ高精度な反応モデル(簡易反応モデル)を構築する手法を提案した．簡易反応モデルは詳細な H_2/CO の酸化反応群と，燃料・燃料ラジカル・アルデヒドに対応する仮想化学種（FUEL, R, IO）からなる仮想的な反応群から構成される．天然ガスの場合には燃料成分を集約した仮想燃料化学種を導入した．GA による最適化の対象とする燃焼特性は着火遅れ時間（IDT）と層流燃焼速度（LBV）とし，詳細反応モデルである AramcoMech 3.0 との比較で評価した．結果として，14 化学種・57 反応からなる簡易反応モデルが構築され，メタンでは IDT の平均誤差 11.9%・LBV 2.5%，天然ガスでは IDT 10.5%・LBV 1.4%と高い精度を示した．反応解析を行ったところ，図 3 に示すように，詳細反応モデルにおける天然ガスとメタンにおける IDT の差異が，C_2–C_4 系化学種の影響によるものとわかり，簡易反応モデルにおいてもその傾向が定性的・定量的に精度良く再現されることがわかった．LBV の差異は小さかった．本手法は従来の削減手法の代替として，実用燃焼器向け CFD シミュレーションに適した小規模な反応モデルを効率的に生成できることを示した．

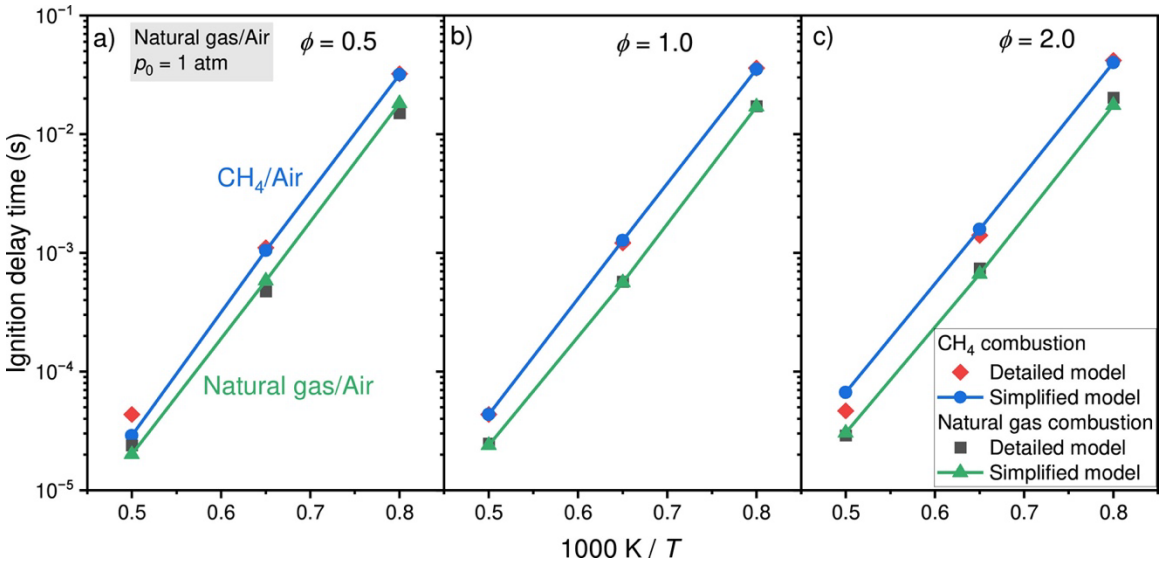


図 3　メタン・天然ガスの着火遅れ時間における，簡易反応モデルと詳細反応モデルによる予測結果の比較

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．また，低炭素燃料として利用が拡大している天然ガスやメタネーションで合成される純メタンを対象に，これらの燃焼数値シミュレーションを高速化するために、簡易反応モデルの生成方法を開発し，生成されたモデルの予測性能を評価した．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

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.

Keisuke Kanayama, Kaoru Maruta, Hisashi Nakamura: Gas-phase pyrolysis and combustion characteristics of lithium-ion battery electrolyte components: difference from liquid-based fire hazard classification, Applications in Energy and Combustion Science, Vol. 24 (2025), 100396.

国際学会

Yoshito Ishida, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama,,Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Species measurements for NH3/CH4 mixtures at intermediate temperatures using a micro frow 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 NH3/CH4 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)

Keisuke Kanayama, Claire Grégoire, Kaoru Maruta, Eric L. Petersen, Olivier Mathieu, Hisashi Nakamura: CO Time-History Measurements and Kinetic Modeling of Trimethyl Phosphate Pyrolysis, 30th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS2025) (2025.7.31)

Koyo Igusa, Hisashi Nakamura: Generating a simplified reaction model for n-C7H16 using a genetic algorithm, 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025) (2025.11.10)

Kenta Tamaoki, Hisashi Nakamura: Impacts of thermochemistry on model prediction for NH3 oxidation, 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025) (2025.11.13)

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 NH3/CH4 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 ： 化学種の特性のクラスタリングによるCH4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)

金山 佳督, 丸田 薫, 中村 寿 ： 反応動力学モデルを用いたリチウムイオン電池電解液の気相燃焼特性に関する検討, 第 62 回日本伝熱シンポジウム/HTSJ 国際伝熱シンポジウム (2025.5.14)

井草 光遥, 中村寿 ： 簡易反応経路と速度定数の最適化による n-C7H16 簡易反応モデルの構築, 第 63 回日本燃焼シンポジウム (2025,11.7)

玉置 健太, 中村 寿 ： 熱物性がアンモニア燃焼のモデル予測に与える影響, 第 63 回日本燃焼シンポジウム (2025.11.7)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 08 月 18 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確立した。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、一次細孔サイズを体系的に変化させた計算を実施し、Nafion の動的挙動を定量的に評価した。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、ならびにアイオノマーの厚さおよび表面粗さを用いた。本手法は、従来の解析手法と比較して一次細孔の幾何学的形状を明示的に取り扱える点で優れており、触媒層のナノスケール構造解析における新たな基盤手法として機能することが確認された。

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

本研究期間内に設定した全ての研究目標を達成した。具体的には、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体系的に実施した。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。また、成果の一部は ECS 会議において発表済みであり、現在論文化を進めている。目標として掲げた「一次細孔の影響が顕著となる条件の特定」および「Pt 利用率やプロトン輸送効率との関係の考察」についても十分な知見を得ることができ、研究目標を全て達成したと判断する。

4. まとめと今後の課題

4.1 まとめ

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、以下の成果を得た。

- 一次細孔サイズが Nafion 分布の均一性を規定する主要因の一つであることを定量的に示した。
- 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明らかにした。
- 乾燥過程における Nafion の構造変化（円柱状凝集体から層状構造への転移）を初めて CGMD シミュレーションにより捉えた。

これらの成果は、PEFC 触媒層のナノスケール構造設計に対して具体的かつ実用的な指針を与えるものであり、燃料電池技術の高性能化に貢献するものと考える。

4.2 今後の課題と展望

本研究で確立した解析基盤をさらに発展させるため、今後はより実験環境に近い新たな一次細孔モデルを開発し、シミュレーションを行うことを計画している。現行モデルでは一次細孔の形状を単純化して取り扱っているが、実際の触媒担体カーボンブラックが持つ細孔構造は複雑な三次元形状を有する。そのため、実験的に得られた電子顕微鏡観察や小角 X 線散乱（SAXS）データを参照した、より現実に即した細孔形状モデルを構築することで、シミュレーション結果と実験結果との定量的な比較・検証が可能になると期待される。また、湿度・温度条件を考慮した追加シミュレーションや吸着エネルギー解析を組み合わせることで、多様な運転条件下における Nafion の吸着安定性評価へと展開する予定である。得られた成果は国際学術誌への論文投稿を通じて広く発信する。

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

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 18 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

1.1 研究の背景と目的

カーボンニュートラル社会の実現に向けて、水素エネルギーは次世代クリーンエネルギーキャリアとして世界的に注目されている。しかし、水素の安全・効率的な貯蔵や輸送技術の確立は、水素社会実現における最大のボトルネックの一つであり、高密度・高安全性を兼ね備えた水素貯蔵材料の開発が急務となっている。

現在実用化されている水素吸蔵合金材料には、$LaNi_5$（AB_5型）や Ti-V 系合金（AB_2型）等の金属間化合物水素化物が挙げられるが、これらは重い遷移金属を含むため貯蔵容量が 1.0～2.0 wt%程度に制限される。一方、MgH_2に代表される軽金属水素化物は 3.3～7.6 wt%の高容量を示すが、Mg–H 結合が強固であるため 300°C 以上の高温動作が必要であり、実用性に課題を残している。

こうした背景のもと、ケイ化カルシウム（Ca_2Si）は水素化によりCa_2SiH_8を形成し、6.9 wt%という高い理論水素貯蔵容量を発現することが予測されており、次世代の水素貯蔵材料候補として注目されている。さらに、カルシウム（Ca）とシリコン（Si）はともに地球上に豊富に存在する非毒性・低コスト元素であり、材料の持続可能性・経済性の観点からも優れた特性を持つ。

しかしながら、Ca_2SiH_8の実験的な合成は極めて困難であり、構造崩壊や非晶質化が報告されてきた。この「熱力学的には安定だが実験的に合成できない」という水素吸蔵時挙動および金属の相変化のメカニズムは長らく未解明のままであり、合理的な材料設計に基づく安定化戦略の確立が強く求められていた。

本研究では、第一原理密度汎関数理論（DFT）計算およびフォノン解析を用いて、Ca_2SiH_8の物理的不安定性の根本的な問題を解明することを目的とした。さらに、この不安定性を克

服するため、より重く大きなアルカリ土類元素であるストロンチウム（Sr）の部分置換による安定化戦略の検証を行った。本研究は、実験では直接的に観察することが困難な原子レベルの振動挙動・電子構造・電荷分布を第一原理的に解析することで、Ca–Si 系水素化物の相安定性に関する分子論的理解を深め、高容量・高安定性を兼ね備えた次世代水素吸蔵合金材料について計算科学的知見より提供するものである。

1.2 研究期間内の最終目標

(1) Ca_2SiH_8の不安定性の定量的解明

Ca_2Si および Ca_2SiH_8の結晶構造最適化、熱力学的安定性解析、フォノン分散計算を実施し、Ca_2SiH_8の実験合成困難の根本原因を原子・振動レベルで定量的に解明する。

(2) Sr 置換による安定化の実証

50% Sr 置換モデル（CaSrSi/$CaSrSiH_8$）を対象として、構造最適化・フォノン解析・電子状態密度計算・Bader 電荷解析を実施し、Sr 置換による安定化効果を定量的に実証するとともに、そのメカニズムを構造的・電子的観点から解明する。

(3) 安定化メカニズムの定量的解析

なぜ 50% Sr 置換モデルが安定するのか、またどの成分が安定化に寄与しているのかについて定量的な解析を行う。

2. 研究成果の内容

2.1 Ca_2SiH_8の不安定性の電子レベルによる解明

本研究の最も重要な成果の一つは、Ca_2SiH_8が熱力学的に安定（水素化エンタルピー：-33.4 kJ/mol·H_2）であるにもかかわらず、実験における材料合成が困難な理由を、DFT 計算によって原子・振動レベルで定量的に解明したことである。

フォノン分散計算の結果、Ca_2SiH_8は全フォノンモードの 2.4%が虚数振動数を示し不安定性を有することが明らかになった。この値は、最適化構造がポテンシャルエネルギー面上の局所極小ではなく高次鞍点に対応することを示している。有限温度下では、こうした動力学的不安定構造は自発的に歪み・分解・非晶質化し、結晶性 Ca_2SiH_8の形成を妨げる。これが、先行研究において化学量論的 Ca_2SiH_8相が報告されてこなかった根本原因であると推測される。

この不安定性の構造的起源は、水素化に伴う構造の過剰な圧縮状態の形成にあると考える。Ca_2Si 水素化の際、格子体積は+30.5%拡大するものの、単位胞内の原子数が 12 個から 44 個へと急増するため、原子あたり体積は 64.4%減少する（27.58 → 9.82 Å³/atom）。この結果、原子密度は 0.102 atoms/Å³という異常に高い値に達する。さらに、格子アスペクト比（a/b 比）が 1.58 から 0.52 へと反転し、極端な異方的歪みが生じる。制約された格子間サイトに押し込まれた H^-イオン間の強い静電反発が、フォノンモードの崩壊を引き起こし、最密充填だが不安定な構造を形成すると考える。

2.2 Sr 部分置換による安定化の実証

上記の不安定性メカニズムの解明に基づき、Ca^{2+}の 50%を Sr^{2+}で置換した $CaSrSiH_8$モデルを設計・評価した。Sr を選択した根拠は、(1) 第 2 族元素としての化学的類似性（同じ価

電子配置）による熱力学的安定性の保持、(2) イオン半径の 16%拡大（Ca^{2+}: 100 pm → Sr^{2+}: 116 pm）による格子歪みの緩和、(3) 2.18 倍の質量増加（Ca: 40.08 u → Sr: 87.62 u）によるフォノンの低減が予測される点である。

フォノン計算の結果、$CaSrSiH_8$において虚数振動数が劇的に低減（98.5%削減）することが確認された。フォノン PDOS における負振動数領域のスペクトル強度がほぼ完全に消失し、$CaSrSiH_8$の構造が真の局所エネルギー極小を占める（構造的に安定性であること）ことが確認された。

同時に、熱力学的特性の維持も確認された。CaSrSi の生成エネルギー（-43.7 kJ/mol）は Ca_2Si（-44.6 kJ/mol）とほぼ等しく、$CaSrSiH_8$の水素化エンタルピー（-35.9 kJ/mol·H_2）は Ca_2SiH_8（-33.4 kJ/mol·H_2）と同等の実用範囲を維持していた。Sr 置換により理論容量は 6.93 wt%から 4.92 wt%へ低下するが、この値は米国エネルギー省（DOE: U.S. Department of Energy）の 2025 年システムレベル目標（4.5 wt%）を依然として上回ることから、現時点では容量の観点では有望な候補材料の一つであると言える。また、実用化に向けては安定性・放出温度・サイクル特性等を含めた実験との総合的な整合性評価が必要である。

2.3 安定化メカニズムの定量的解析

安定化が構造的な要因によるものか電子的要因によるものかを明確にするため、バンドギャップ計算・電子状態密度（DOS/PDOS）解析・Bader 電荷解析を実施した。

電子構造解析の結果、Ca_2SiH_8と $CaSrSiH_8$のバンドギャップはそれぞれ 2.828 eV と 2.813 eV であり、その差はわずか 0.015 eV（0.5%）であった。H-s 軌道の Si–H 結合ピーク（-8～-4 eV）のシフトは 0.2 eV 未満、価電子帯端のシフトは 0.1 eV 未満であった。Bader 電荷解析では、すべての原子における電荷変化が 0.1e 未満（H: +0.01e、Si: -0.04e、Ca: -0.02e）であり、Sr（+1.51e）は Ca（+1.44e）と+0.07e しか差がなかった。これらの結果は、Sr 置換が電子構造・化学結合に対してほとんど影響を与えないことを示している。

安定化メカニズムの定量的分解により、寄与の内訳は以下のように推定された：

- 幾何学的再バランス（~55%）：a/b 比の 0.52 から 1.94 への回復による異方的歪みの解消
- 質量効果（~30%）：2.18 倍の質量増加によって虚数振動数が 32%低減
- 体積膨張（~10%）：原子体積の+6.8%増加（9.82 → 10.49 $Å^3$/atom）による構造緩和
- 電子遮蔽（~5%）：わずかな電荷再分配によるクーロン相互作用の調整

これらの結果により、Sr 置換が「電子修飾剤」ではなく「構造緩和剤」として機能し、高密度な水素の取り込みと幾何学的に適合する格子を強制しながら，構造の不安定性を質量効果で減衰させることが確認された。

3. 研究目標の達成状況

3.1 Ca_2SiH_8の不安定性の定量的解明

フォノン分散計算により、Ca_2SiH_8が熱力学的に安定であるにもかかわらず構造的に不安定性を有することを定量的に明らかにした。この値は、最適化構造がポテンシャルエネルギー面上の局所極小ではなく高次鞍点に対応することを示している。さらにこの不安定な構造になる起源として、水素化に伴う原子密度の上昇（0.102 atoms/$Å^3$）および格子アスペクト比の反転（a/b 比: 1.58 → 0.52）による過剰な圧縮状態が形成されていることを明らかにした。よって、

Ca_2SiH_8を用いた水素吸蔵実験が困難であることについて、ミクロスケールで説明することが可能となった。

3.2 Sr 置換による安定化の実証

50% Sr 置換モデル（$CaSrSiH_8$）を用い、虚数振動数が 98.5%削減されることを定量的に示し、Sr 置換がケイ化カルシウム（Ca_2Si）水素吸蔵材料の安定化戦略として有効であることを確認した。同時に、$CaSrSiH_8$の水素化エンタルピー（-35.9 kJ/mol·H_2）および理論容量（4.92 wt%）がいずれも実用範囲内に維持されることを確認し、熱力学的特性と動力学的安定性の両立を達成した。しかし理論容量 4.92 wt%は DOE 2025 年システムレベル目標（4.5 wt%）をやや上回っており、水素吸蔵合金として実用的な材料としての可能性を持つ。

3.3 安定化メカニズムの定量的分析

包括的な電子構造解析（バンドギャップ計算・DOS/PDOS 解析・Bader 電荷解析）と構造解析を組み合わせることで達成された。バンドギャップ変化がわずか 0.015 eV（0.5%）、全原子における電荷変化が 0.1e 未満という結果から、安定化への電子的寄与が 5%未満であることを定量的に示した。

さらに、本研究で得られた結果を統合することで、構造的に不安定な金属水素化物に対しては、より重く・大きな等価置換元素を選択することで、電子的な化学結合を損なうことなく新規材料を開発する計算化学的手法を提案することができた。この手法は Ca-Si 系にとどまらず、類似の構造的な問題を示す他の金属水素化物系への応用も可能である。

以上のように、研究目標を達成するとともに、なぜCa_2SiH_8の実験的な合成が困難であるかについて原子・分子レベルで解明、および Sr 置換による新たな水素吸蔵合金材料の計算化学知見より提案が可能になるという、大きな成果を得ることができた。

4. まとめと今後の課題

本研究では、第一原理 DFT 計算・フォノン解析・電子構造解析を組み合わせた系統的計算手法により、Ca_2Si 系水素吸蔵合金材料による水素吸蔵時金属の相変化（不安定化）の根本的な原因を原子・分子レベルで解明し、Sr 部分置換による効果的な新規水素吸蔵合金材料を提案した。主要な成果を以下にまとめる。

1) Ca_2SiH_8は、熱力学的に安定（水素化エンタルピー-33.4 kJ/mol·H_2、理論容量 6.93 wt%）である一方、水素化に伴う過圧縮状態の形成（原子密度 0.102 atoms/Å^3、a/b 比 0.52 への反転）により原子が過剰に密集した構造的に不安定な構造（2.4%の虚数振動数）を示した。これが、Ca_2Si を用いた水素吸蔵実験における構造崩壊（構造的な不安定性）を引き起こす根本的な原因であると推測される。

2) 50% Sr 置換（$CaSrSiH_8$）により、この構造的な不安定性を抑制しつつ、水素化エンタルピー（-35.9 kJ/mol·H_2）・理論容量（4.92 wt%）・熱力学的安定性（生成エネルギー-43.7 kJ/mol）について、実用的な範囲内に維持することに成功した。PDOS 等の解析により、Sr 置換による構造の安定化は，電子的な修飾によるものではなく構造的な効果によることを明らかにした. よって、Sr が水素吸蔵合金材料の構造的な安定化物質として機能することを明らかにした。

今後の課題

本研究の成果を踏まえ、以下の課題に取り組むことで更なる発展や社会的貢献が期待される。

1) 有限温度・動力学挙動の解析

第一原理分子動力学（AIMD）シミュレーションによる有限温度安定性評価と水素拡散障壁の定量化、および弾性定数計算による機械的強度評価の実施。

2) 関連材料系への展開

他原子・構造への適用可能性を検討し、今回我々が示した手法の普遍性を検証する。

3) 実験系との連携

ケイ化カルシウム（Ca_2Si）水素吸蔵材料の合成と制御雰囲気下での水素化実験を実施し、今回の一連の計算結果との整合性評価を行うことで，より現実的な新規水素吸蔵合金材料の提案が可能となる。

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

なし

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 2 月 20 日提出

液体・ソフトマターの相変化と輸送現象の分子動力学解析

小原　拓
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

熱伝導率などバルク液体の輸送物性や固液界面の熱コンダクタンスなど界面の輸送物性は、デバイス内の熱輸送や発熱体からの放熱などに直結する工学的に重要な特性である。また、潜熱蓄熱技術では、蓄熱材の相変化・潜熱特性が支配的な要因となる。

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のサーマルマネジメントや、大容量で起動特性の良好な熱エネルギーの貯蔵など、高度な要求に応える技術が求められており、熱工学において大きな課題となっている。一般に液体や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、分子スケールの熱現象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アプローチは未だ確立されておらず、世界的にホットな熱工学的課題となっている。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、この問題に関する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

2.1 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。2025年度の本研究では、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を実施した。糖アルコールは、高い潜熱と比較的高い熱伝導率を有する有機系相変化材料（PCM）として、エネルギー有効利用や熱マネジメント分野で広く研究・応用されている。代表的な糖アルコールを対象に、固相および液相における熱伝導率を平衡分子動力学法により温度依存的に評価した。その結果、熱伝導率は温度上昇とともに低下し、特に固液相転移時に顕著な減少を示すことが明らかとなった。固相では熱伝導率に異方性が見られ、振動状態密度（VDOS）の方向依存性とも対応していたが、液相では消失した。熱伝導率の分解解析からは、非結合性相互作用、特に水酸基の寄与が大きいことが示され、水素結合数は熱伝導率と強く相関し、その配向が異方性の発現に関与することが分かった。これらの知見は、高性能 PCM 設計の基盤となる。

2.2 ポリマー液体の運動量輸送特性

熱媒の性能を考えるとき、運動量輸送により発現する粘性は、配管系のポンプ動力と流量の関係を決定する重要な特性である。この観点から、単原子流体と高分子溶融体の中間的性質をもつ小分子液体の非線形粘性応答の分子機構を解明した。水やベンゼン、各種アルカンを対象に EMD/NEMD 解析を行い、応力を分子内・分子間成分に分解した。その結果、高せん断下でのシアシニングは分子サイズとともに増大し、せん断誘起の配向や構造異方性が運動量輸送経路のバランスを再編することが主要因であることを示した。

3. 研究目標の達成状況

研究は順調に進行しており、2026 年度には解析対象をさらに広く展開する予定である。

4. まとめと今後の課題

PCM や熱媒の特性を分子動力学シミュレーションにより解析し、おおむね期待した成果を得た。相変化材料の研究としては、既に一定の成果を得ている融解現象の解明に加えて、凝固（凍結）についても解明すべき点が多くある。また、成果が得られ始めた運動量輸送についても深く研究を進めたい。

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）

Shukai Cheng, Donatas Surblys, Taku Ohara: Thermal conductivity of sugar alcohols: A molecular dynamics insight, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 254 (2026), 127709.

国際学会

Shukai Cheng, Donatas Surblys, Taku Ohara: Insight into thermal conductivity of sugar alcohol phase change materials: a molecular dynamics study, International Heat Transfer Symposium (HTSJ 2025), May 17, 2025.

Masaharu Yoshida, Donatas Surblys, Taku Ohara: Molecular dynamics study on mechanism of momentum transport in liquids, 35th International Symposium on Transport Phenomena (ISTP35), Sep.

Shukai Cheng, Donatas Surblys, Taku Ohara: Molecular dynamics investigation of thermal conductivity in sugar alcohol-based phase change materials, 14th Asian Thermophysical Properties Conference (ATPC 2025), Oct. 17, 2025.

Shukai Cheng, Donatas Surblys, Taku Ohara: Molecular insight into thermal conduction mechanisms of sugar alcohol phase change materials, Twenty-second International Conference on Flow Dynamics (ICFD 2025), Nov. 12, 2025.

Masaharu Yoshida, Donatas Surblys, Taku Ohara: Momentum transport in sheared liquids: Insight from molecular dynamics simulations, Twenty-second International Conference on Flow Dynamics (ICFD 2025), Nov. 12, 2025.

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR02APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 03 月 18 日提出

IV 族半導体材料に対する薄膜成長メカニズムの分子動力学解析

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

昨今のデジタル社会化に伴い、ビッグデータの処理や工場の自動化が進んでおり、社会的・工業的に半導体需要が増加し続けている。現在では、このような需要に応じて高集積かつ省電力な次世代半導体デバイスの開発が期待されており、産官学が一体となって研究・開発に取り組んでいる。現在は量子効果による半導体素子の物理的な微細化限界に達しており、各種基板材料の材料特性を活かした半導体設計が主流となっている。特に電子の移動度は正孔の移動度より大きいことから次世代 n 型半導体の設計・製造は既に行われているものの、正孔の伝導で作動する p 型半導体の開発は未だ行われていない。ゲルマニウム（Ge）は他材料の追随を許さない高い正孔移動度から、次世代の p 型半導体材料として期待されている。しかし、従来材料のシリコン（Si）と成膜に至るメカニズムが異なるため、薄膜成長メカニズムの解明が次世代半導体設計に向けた課題となっている。また、窒化ホウ素（BN）は従来の集積回路の絶縁体として一般的に用いられるシリコン酸化物（SiO_2）と同等の絶縁破壊強さを有するほか、原子層堆積法（ALD 法）により原子レベルでの膜厚の制御が可能であり、集積回路の微細化・高品質化へ向けた応用が期待されている。しかしながら、その成膜メカニズムの解明や成膜に適した温度の効率的な特定方法の確立は未だ行われていない。

そこで本研究では、量子化学計算（化学反応）と分子動力学（分子運動）を同時に考慮できる反応性力場分子動力学法（ReaxFF MD 法）を用いた次世代 MD シミュレーションを行う。これにより薄膜成長メカニズムを解明し、膜質制御の手法を確立できれば、次世代 p 型半導体デバイスの設計に大いに役立つことができる。また、大規模な系において薄膜成長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、加えて工学的にも応用先が広いことから大変価値のある研究であると考える。成膜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

本研究では、IV 族半導体基板表面に対する希薄気体分子の入射・衝突から化学反応に至るまでの成膜プロセスの解析を行う。その後、原子種や基板温度、基板面方位といったパラメータが成膜プロセスに及ぼす影響を解明する

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 Si 基板酸化

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を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。

2.2 Si 基板上への熱 ALD 法による BN 膜成膜機構の反応性分子動力学解析

BN 膜の膜品質の向上にむけて成膜機構の解明を行うため反応性力場分子動力学シミュレーションを実施した。はじめに DFT 法により作成されたトレーニングデータを用いて反応性力場の最適化を行った。最適後の力場を用いて Si 基板へ NH_3 分子を入射するシミュレーションを行い化学吸着率が成膜温度の上昇に伴い上昇していることを確認した。また実験によって観測された成膜温度と化学吸着の関係と比較することで力場の妥当性を確認した。最適化後の力場を用いて Si 基板へ BCl_3 が吸着する際のエネルギーを座標ごとに計算し、吸着サイトの存在を確認した。

3 研究目標の達成状況

Si 基板上に BN 膜を成膜する際に、成膜温度によって材料となるガス分子の化学吸着率が変化することを確認した。また化学反応性の変化に伴い低温領域では化学反応性の低さから成膜が進行せず、高温領域では熱分解により膜品質が低下することを確認した。さらに、特有の酸化機構により、Ge の酸化速度が Si よりも低いことを確認した。

4 まとめと今後の課題

Si 基板に BN 膜を成膜する場合において、成膜温度を変化させた際の ALD プロセスへの影響が解明された。また、Si 基板と Ge 基板で酸化機構が異なることを解明し、製造プロセスへの提言を行った。本シミュレーションを基軸として、今後は成膜機構を原子レベルで解明し分類化することで成膜をモデル化しマルチスケールシミュレーションへと拡張する予定である。

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, D. Ohori, K. Endo, T. Tokumasu, 「Analysis of Oxidation Mechanism of Group IV Semiconductor Substrates by ReaxFF MD」, 『ISCSI-X & ICSI/ISTDM 2025』, TuA1-5, Yokohama, Kanagawa (November, 2025) .

国内学会・研究会等

1. ○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，千葉，3 月 2025 年

5.2 その他（特許，受賞，マスコミ発表，等）

特になし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR03APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 3 月 4 日提出

高熱流束冷却にむけた液膜形成およびその蒸発熱伝達の数値解析

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

様々な冷却デバイス内で生じる沸騰・蒸発現象の理解および冷却性能向上のため，液膜形成過程および固気液三相接触領域での微視的な濡れ現象及び蒸発現象がマクロスケールの気液二相熱流動挙動および冷却性能に与える影響を明らかにすることを目的にする。

気液二相流の数値シミュレーションはこれまでに数多くの研究のもと発展しており、汎用の熱流体解析ソフトウェアにも標準的なモデルを利用できる状態にあるが、沸騰現象の数値シミュレーションは十分に発展していない状態にある。特に薄い液膜形成および固気液三相接触線近傍の取り扱いは現在でも発展途上であり、熱輸送に大きな寄与がある固体壁面上での蒸発現象を適切に表現できていないことが原因である。本研究では、液膜形成過程を直接解像しつつ、移動接触線の蒸発モデルと、二相熱流動－固体内熱伝導の連成計算を組み合わせてマルチスケール解析を行う。

1.2 研究期間内の最終目標

冷却システム内の沸騰・蒸発現象において、固体壁から流体にどのような経路で熱が輸送されるかというのは、現象理解および工業的に重要な熱輸送促進を達成するために必要な知見である。特に壁面に形成される液膜や三相接触線が蒸発伝熱に大きな寄与を持っていることから、それらの数値シミュレーションを行うことは、現象の理解のために不可欠である。しかしながら、液膜や接触線のスケールと、気泡の熱流体挙動のスケールは大きく乖離しているため、マルチスケールの解析が必要となる。本研究は、このマルチスケール性を適切に表現することを目的の一つとしており、学術的に重要であると考えている。マルチスケール性を考慮した数値解析により、沸騰熱伝達を利用した冷却システムの熱輸送経路を明確にできると予想している。

2. 研究成果の内容

今年度はマイクロ流路内に設置したキャビティから連続して気泡が発生する現象について評価した．図 1 はマイクロ流路内のキャビティから気泡が連続生成し，固体壁面上を移動する様子および壁面温度分布を表した図である．流体は絶縁性流体の FC-72，固体はアルミニウムを仮定している．小さなキャビティから気泡が成長し，破断して孤立気泡となり，下流へ流動する様子を表している．本研究では図 2 に示すように異なる形状のキャビティに対して計算を実施し，キャビティ形状が気泡生成ならびに全体の熱伝達率に与える影響を評価した．結果として断面形状が円のキャビティよりも正方形の形状のキャビティがより，気泡発生頻度が高く，同時に熱伝達率も向上することが示された．図 2 に示すように，正方形キャビティでは，気泡が成長し界面が引き伸ばされた際に，角部から液体が流入することで気泡の離脱を促している．さらに気泡が高周波数で放出されることで，下流部において各気泡の成長が抑制され，液膜の蒸発・消失を防ぐことで熱伝達率を向上させることが明らかになった．

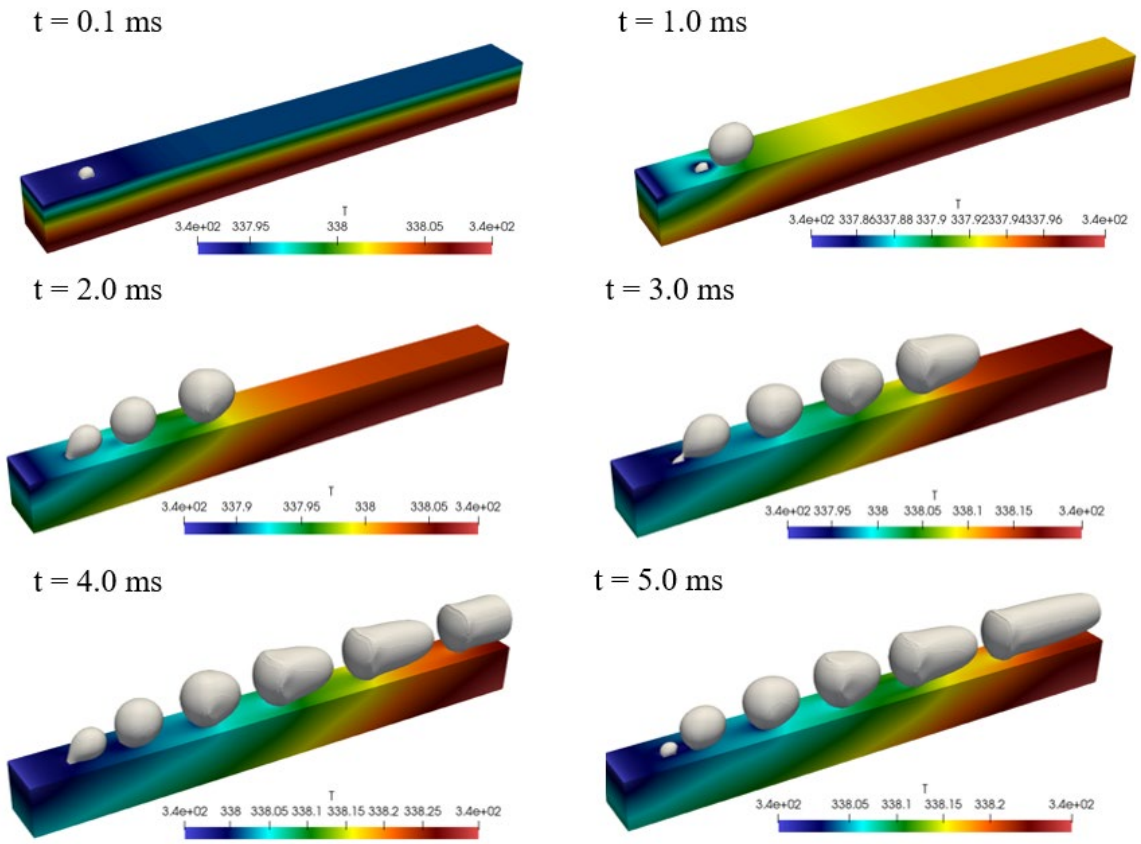


図 1．マイクロ流路内のキャビティから気泡が連続生成し，固体壁面上を移動する様子

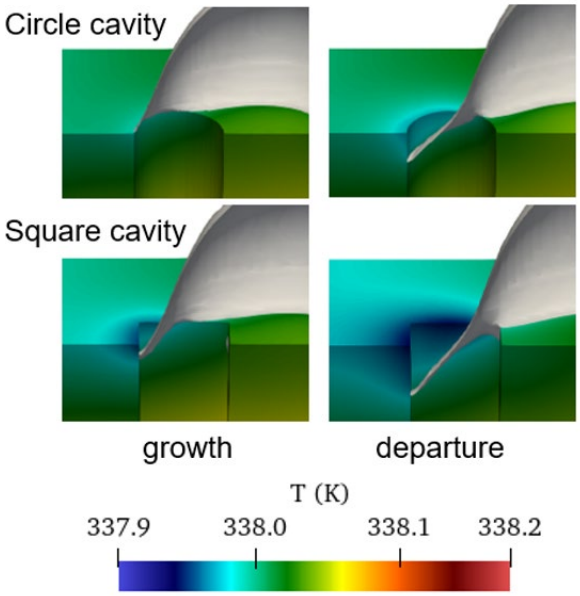


図 2. 異なる形状のキャビティから気泡が放出される様子

3. 研究目標の達成状況

実際の沸騰現象を再現するべく，気泡生成キャビティを設けた計算を実施し，微細構造と沸騰の関係を議論した．並行して，液膜を直接捉える解析と動的接触線の蒸発モデルの導入も進めており，十分な進捗が得られている．

4. まとめと今後の課題

マイクロ流路内での流動沸騰過程における気泡生成頻度と熱伝達率の関係を明らかにした．特に，微細構造であるキャビティ内での蒸気の膨張と気泡発生におけるキャビティ形状の影響を明らかにした。今後は動的接触線の影響を考慮するなど，引き続きモデルの高度化に取り組む．

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

Daisuke Tsuneoka, Junnosuke Okajima: Three-Dimensional Numerical Simulation of Microchannel Taylor Bubble: Effects of Internal Flow Structures on Liquid Film Formation, Proceedings of Twenty-second International Conference on Flow Dynamics (2025), pp. 1274–1275.

Taiga Akita, Peter Stephan, Junnosuke Okajima: Evaluation of Wetting and Evaporation Characteristics at 3-Phase Contact Region in Cryogenic Fluids with Moving Contact Line Evaporation Model, Proceedings of Twenty-second International Conference on Flow Dynamics (2025), pp. 1669–1671.

Ryo Miura, Junnosuke Okajima: Numerical Simulation of Subcooled Pool Nucleate Boiling considering Microlayer Formation Proceedings of the Eleventh JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (2025), No. 1108

Kojiro Kurosawa, Mitsuru Shimagaki, Junnosuke Okajima, Numerical Investigation of Liquid Film Flow and Heat Transfer on a Heated Rotating Disk, Proceedings of the Eleventh JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, (2025), No. 1109.

Yalong Lyu, Junnosuke Okajima: Numerical Analysis of Hydraulic and Thermal Characteristics of Flow Boiling in Microchannel with Single Cavity, Abstracts Book of the 35th International Symposium on Transport Phenomena (2025), P00142.

Yutaro Naka, Junnosuke Okajima: "Numerical Study of Evaporating Meniscus and Its Heat Transfer in Microstructured Surface," Abstracts Book of the 35th International Symposium on Transport Phenomena (2025), P00122.

Daisuke Tsuneoka, Junnosuke Okajima: Liquid film formation around a Taylor bubble in an inertia-dominant microchannel flow, Proceedings of 12th International Conference on Multiphase Flow (2025), p. 171.

国内学会・研究会等

黒沢航二朗, 島垣満, 岡島淳之介, 発熱回転円盤の冷却に向けた液膜蒸発熱伝達特性の数値的評価," 熱工学コンファレンス 2025 講演論文集 (2025), B23.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR04APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 03 月 04 日提出

嵩高構造を導入した炭化水素系高分子膜の酸素透過特性の分子動力学計算

徳増　崇
東北大学流体科学研究所　教授
石澤　由紀江
東北大学大学院工学研究科　学術研究員

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

現在、自動車や家庭用燃料電池に使われている固体高分子形燃料電池（Polymer Electrolyte Fuel Cell：PEFC）にはフッ素系電解質膜が広く用いられているが、環境負荷・高コスト・高温低加湿環境での出力低下などの点で問題があった。近年、それらの問題の改善が見込める非フッ素系（炭化水素系）の高分子電解質膜が次世代膜として強く期待されている。なかでも芳香族高分子のような嵩高い構造を主骨格とする電解質膜は学術誌などに非常に多くの報告例がある。しかし、これまで開発されてきた非フッ素系高分子電解質膜はプロトン伝導率や機械的強度など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、性能や耐久性などのすべての物性を同時に向上させる非フッ素系電解質膜は存在しなかった。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、気体透過性を高める目的で環状構造を持つ嵩高い炭化水素系高分子膜に焦点を当て、触媒表面における高分子膜の吸着状態や高分子膜の構造特性と気体輸送特性の相関関係の解明を目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、PEFC 触媒層において環状構造を持つ高分子を用いた炭化水素系高分子膜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 力場ファイルの作成

今回検討した新規材料の炭化水素系高分子は炭素 12 個が環状になった部位を有している。計算負荷を軽減するため、この環状構造の CH_2 基を Unaited Atom(UA)モデルとして扱う事とした。その為、まずは CH_2 基と他の原子との相互作用を表現できるポテンシャルを作成した。

2.2 新規炭化水素系高分子膜の作成

三面周期境界条件下で触媒表面における高分子膜の吸着構造と特徴を調べるために、分子シミュレーションを実施した。含水率は 3, 5, 7, 9, 11, 13 の 6 条件とした。得られた計算結果から密度分布を解析し、触媒表面近傍に存在する炭化水素系高分子と水分子の膜厚方向の密度分布の含水率依存性を検討した。その結果、含水率増加に伴い炭化水素系高分子のピーク高さは低下していたが、水分子のピーク高さは上昇していた。また、同範囲に存在する原子数をカウントしたところ、含水率増加に伴い炭化水素系高分子と水分子の原子数の総和は増加しており、徐々に密な構造になっていくことが分かった。このことが酸素透過性低下の一因になっていると考えられる。

2.3 新規炭化水素系高分子膜の酸素透過シミュレーション

触媒・炭化水素系高分子・水分子・酸素分子を用いて計算系の構築を行い、酸素透過シミュレーションを実施した。炭化水素系高分子・水分子・酸素分子の初期配置違いの計算系を 4 条件作成した。含水率は 3, 5, 7, 9, 11, 13 の 6 条件とし、温度 300[K]、酸素分子の圧力約 10[MPa]、酸素透過時間 100[ns]とした。具体的には、系内に酸素分子の密度勾配を定常的に発生させ、その状態における単位時間あたりの酸素分子の透過個数をカウントし、その値から酸素透過係数を算出した。初期配置違いの 4 条件の酸素透過係数の平均値と含水率との相関関係の解析から、含水率の増加に伴い酸素透過係数が低下する事が示された。

3. 研究目標の達成状況

本研究では気体透過性を高める目的で環状構造を持つ嵩高い炭化水素系高分子膜に焦点を当て分子動力学計算を実施した。まず計算系を構築し、構築した計算系を用いて触媒表面における炭化水素系高分子膜の膜厚方向の密度分布解析等から構造特性の解明に関しては目標を達成した。また、酸素透過シミュレーションから含水率増加に伴い酸素透過係数が低下する結果が示されたが、含水率によらず従来のフッ素系電解質膜（Nafion）よりも高い酸素透過性を示すことが確認できた。

4. まとめと今後の課題

触媒表面上に環状構造を持つ嵩高い炭化水素系高分子を配置した計算において、炭化水素系高分子膜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、環状構造を持つ嵩高い炭化水素系高分子膜は、 従来の Nafion を含むアイオノマーより酸素透過性が高くなることが分かった。今後は炭化水素系高分子の環状構造に着目し、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）

なし

著書

なし

国際学会

[1] K. Hikida, H. Suzuki, G. Inoue, T. Tokumasu, “Effect of oxygen transport properties in the ionomer thin film on cell performance of Polymer Electrolyte Fuel Cells”, J-K TEFC11, Ginowan, Okinawa, Japan (October 2025)

[2] K. Hikida, H. Suzuki, G. Inoue, T. Tokumasu, “Effect of oxygen transport properties in the ionomer thin film on cell performance of Polymer Electrolyte Fuel Cells”, 248th ECS Meeting, Chicago, IL U.S (October 2025)

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR05APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 3 月 4 日提出

機能性流体による水圧破砕のメカニズム解明とケーススタディ

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

水圧破砕は，地上から地下に向けて掘削した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。き裂の造成によって岩盤の透水性を改善し，地下資源の生産効率を向上させる。従来の水圧破砕法では，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，この方向の透水性の改善が期待される。この水圧破砕の特徴に対し，せん断増粘流体（Shear Thickening Fluid: STF）を破砕流体として用いることが提案され，従来の水圧破砕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 による岩石破砕の室内実験で，複数回の流体圧の急降下と，顕著な AE 活動，多方向への破砕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，破砕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，前プロジェクトで STF の粘度変化を取り扱う機能を実装したオリジナルの２次元個別要素法（Discrete Element Method: DEM）プログラムを用いて固体-流体連成の数値シミュレーションを行い，STF 水圧破砕による多方向き裂造成のメカニズムを解明することと，多方向破砕が発生する条件を絞り込むことを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

先行研究の実験結果である多方向へのき裂造成を，坑井軸直交面内に差応力が無い場合と有る場合のそれぞれについて再現し，そのメカニズムを解明する。また，複数の応力条件でシミュレーションを実施し，き裂が形成する方向についての定式化を行う。

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 新しいモデル化手法の開発

本研究では，従来の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った。本研究では，まずは可能な限り簡便に実装するために，流体の粘度を局所的な流路ごとの変数とし，ずり速度に応じた STF の粘度変化を解析的な独自の手順で計算するように実装を行った。また，増加した粘度の緩和に要する時間をモデル化し，極端な粘性変化挙動が起きないようにした。

2.2 メカニズムの解明

２次元の岩石モデルを使用して，差応力下での水圧破砕シミュレーションを実施した。また，比較用としてニュートン流体による水圧破砕シミュレーションも実施した。計算の結果，いずれの場合も最大主応力方向に，ボアホールからモデル端部まで貫通するき裂が造成したが，STF の場合ではニュートン流体の場合に比べて明らかに長いき裂がそれ以外の方向にも追加で形成した。

き裂の造成過程を可視化すると，差応力が無い場合と同様に，１度目の大きな流体圧降下までの間に，坑井壁面で多方向に微小なき裂が生じていたことが分かった。先行研究では実験後に試験片の薄片を作成して顕微鏡観察が実施されており，主き裂以外にも坑井壁面で多方向に微細なき裂が形成（「太陽き裂」と呼称）していたことが分かっている。本研究の数値シミュレーションによって，この太陽き裂が１度目の流体圧降下の前に形成していたことが示唆された。また，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，差応力が無い場合と同様のメカニズムで太陽き裂が形成していたことが明らかとなった。メカニズムは次の通りである。先に形成したき裂に STF が流れ込むとその流動によって粘度が急激に上昇しき裂を閉塞させる。き裂の閉塞によりボアホールからの流体流出が減少し，ボアホール圧力がより高くなる。高いボアホール圧力は坑井周辺で広い範囲により高い引張応力を生じさせ，多方向にき裂ができやすい応力状態となる。また，き裂の閉塞によって先に形成したき裂はその先端まで流体圧が作用しない。これにより先に形成したき裂の進展には，通常よりも高いボアホール圧力が必要となり，結果的に他の方向にき裂が形成する時間的猶予が生まれた。これら坑井周辺の応力状態と時間的猶予が，最初に形成したき裂以外にも別の方向にき裂が形成することを可能にし，実際の現象ではこうして形成した太陽き裂が２回目以降の長いき裂進展のきっかけとなったと考察できた。

3. 研究目標の達成状況

本研究の目的である STF 水圧破砕のメカニズム解明と発生条件の絞り込みのうち，前者は概ね達成されたと言える。後者については条件選定と調整を進めている。

4. まとめと今後の課題

本研究は，STF を用いた水圧破砕による多方向へのき裂造成という新しい現象について，メカニズムを解明し，発生条件を絞り込むことを目的に数値シミュレーションを実施するものである。現時点では，差応力条件下でも多方向へのき裂造成が再現でき，STF 水圧破砕に特有の現象として太陽き裂の形成を見出し，その形成メカニズムを考察できた。今後は複数の応力条件下での STF 水圧破砕シミュレーションを実施し，多方向き裂の発生条件の定式化を目指す。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Ryu Wada, Yusuke Mukuhira, Hiroyuki Shimizu, Shingo Ishihara, Noriaki Watanabe, Kazuki Yoshida, Atsushi Okamoto, and Takatoshi Ito: Near-wellbore mechanisms of multidirectional fracturing created by injecting shear-thickening fluid, International Journal of Rock Mechanics and Mining Science (**Submitted**)

著書

該当なし

国際学会

Ryu Wada, Yusuke Mukuhira, Hiroyuki Shimizu, Shingo Ishihara, Noriaki Watanabe, Takatoshi Ito: Discrete element modeling of rock fracturing using functional fluid, Proceedings of World Geothermal Congress, (2026) (**Accepted**)

国内学会・研究会等

和田 琉，椋平 祐輔，石原 真吾，渡邉 則昭，伊藤 高敏：せん断増粘流体を用いた多方向水圧破砕の個別要素法によるメカニズム解析, 日本地熱学会令和 7 年盛岡大会（日本地熱学会），岩手県，いわて県民情報交流センター（アイーナ）(2025)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR06APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.4～2027.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 3 月 4 日提出

隆起構造によって歪められた境界層の安定性解析と乱流遷移の予測

廣田　真
東北大学流体科学研究所　准教授
藤井 陽向
東北大学情報科学研究科　M1
奥山 太陽，原田 理郁，庭野 修平
東北大学工学研究科　B4，B4，B4

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

航空機の空力性能および燃費向上のためには、境界層の乱流遷移による摩擦抵抗の増加を低減する「層流化」が効果的とされており、厚さが 1mm にも満たない前縁領域の境界層流れの不安定性を予測して制御する研究が行われている。その一方で、乱流境界層では物体表面からの剥離が起きにくいため、ゴルフボールのディンプルに代表されるように、鈍い形状においては「乱流化」させることで圧力抵抗（形状抵抗）の低減に寄与する。航空機や車においても剥離が起きる位置にはボルテックスジェネレータによる乱流化が行われている。いずれにしても境界層遷移は物体表面の粗さや凹凸といった不規則性に対して非常に敏感であり、逆に言えば規則的な凹凸によって大きな制御効果も期待される。よって、何らかの形状の隆起構造を配置したとき、それによって境界層流れが安定になるのか不安定になるのかを定量的に明らかにすることが工学的に重要な課題である。

しかし、単純な突起物を置いた場合ですら直接数値シミュレーション（DNS）を必要とするため、擾乱に対する安定性や遷移の正確な予測は容易でない。よって、複雑な形状の隆起構造がもたらす層流化または乱流化の効果は十分に理解されていない。本研究では、埋め込み境界法の一種である Volume Penalization（VP）法を用いた直接数値シミュレーション（DNS）コードを活用し、境界層中に配置された任意形状の隆起構造まわりの流れに対して安定性解析を行い、遷移を予測することを目的とする。また、境界層制御には壁面において特定の吹き出し&吸い込み分布や加熱分布を与える手法も提案されており、具体的な応用としてこれらも DNS において再現しつつ、最も制御効果の高い方策を探ることも並行して行う。

1.2 研究期間内の最終目標

VP 法を用いた複雑な隆起構造まわりの DNS についてはすでに実施可能であり、これを活用してまずは全体安定性解析を可能にする。具体的には Selective Frequency Damping（SFD）法を組み合わせることで隆起構造まわりの不安定な定常流れを計算する。そして同じく DNS を活用することによって、この定常流れに生じる線形不安定性の解析を行う。さらには空間的不安定性に対しても DNS を用いた忠実な解析ができないか試行し、遷移位置の予測に挑戦する。

上記の解析手法の開発と並行して、その具体的な適用先として境界層の制御効果が最も高いと考えられる制御手法を探る。

2. 研究成果の内容

2.1 風洞実験 SPECTRA を再現した DNS

ドイツ航空宇宙センター(DLR)の SPECTRA と称される風洞実験では、後退平板上の境界層遷移を制御することを目的として、これまでに回転円盤や壁面加熱による制御が試された。これは後退翼において支配的とされる横流れ不安定性に起因する乱流遷移を抑制することが動機となっている。一方で、本研究では波型粗さ要素という波型の隆起構造によって横流れ不安定性を抑制する手法をすでに提案している。これらの手法の比較を本研究の DNS コードで数値的に検証するため、DLR からデータの提供をいただいて、SPECTRA の流れ場（境界層）を数値的に再現した。回転円盤による横流れ不安定性も再現することができており、今後さらに比較を進めていく。

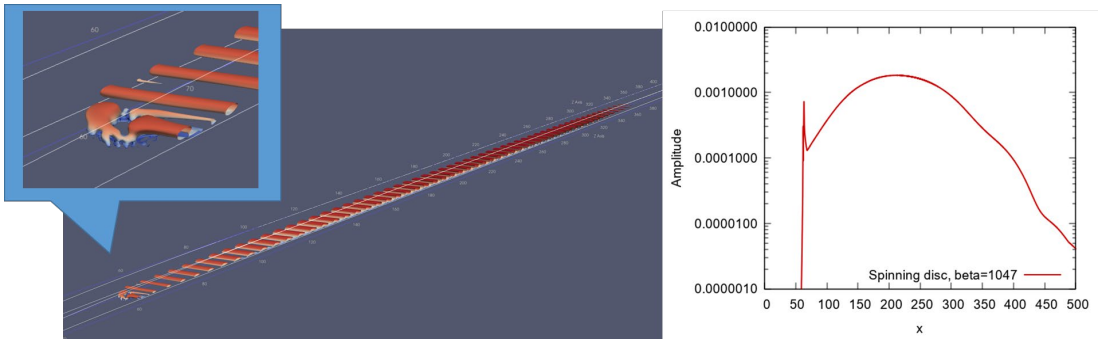


図 1　回転円盤（直径 2mm、回転速度 8.58m/s）によって誘起される横流れ不安定性の渦列（左）対応する不安定モードの振幅（右）

2.2 前向き段差による横流れ不安定性の制御

微小な前向き段差は翼面上の継ぎ目として設計上存在しがちな表面の不規則性であり、通常は乱流遷移を引き起こすことが懸念される。しかし、段差の高さによっては横流れ不安定性を抑制する効果があることも報告されており、そのメカニズムは明らかでない。本研究では埋め込み境界法によって段差の形状を様々に変えて DNS を行い、横流れ不安定性の抑制に至るメカニズムを調べた。段差位置では別の不安定性による擾乱が集中的に発生するものの、段差後部の再循環流が横流れ不安定性を安定化することが示唆された。その結果、段差の高さだけでなく、形状にも大きく依存することがわかった。

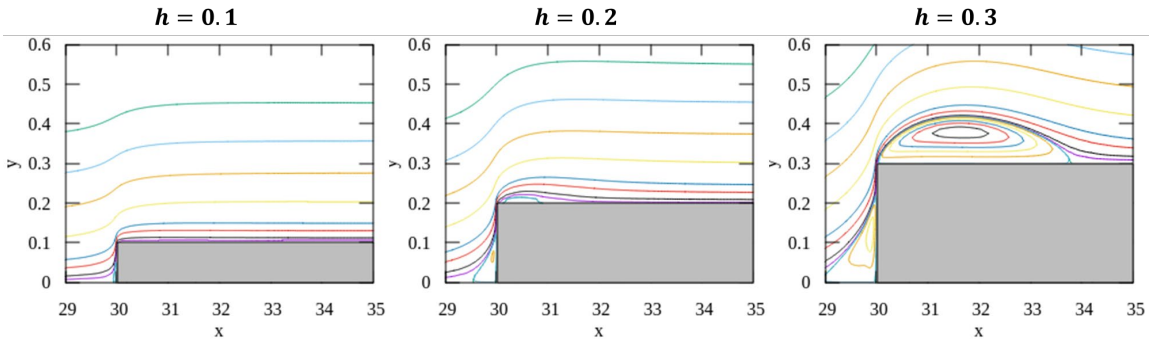


図２　前向き段差の高さ h(単位は mm)に応じた基本流の流線の変化

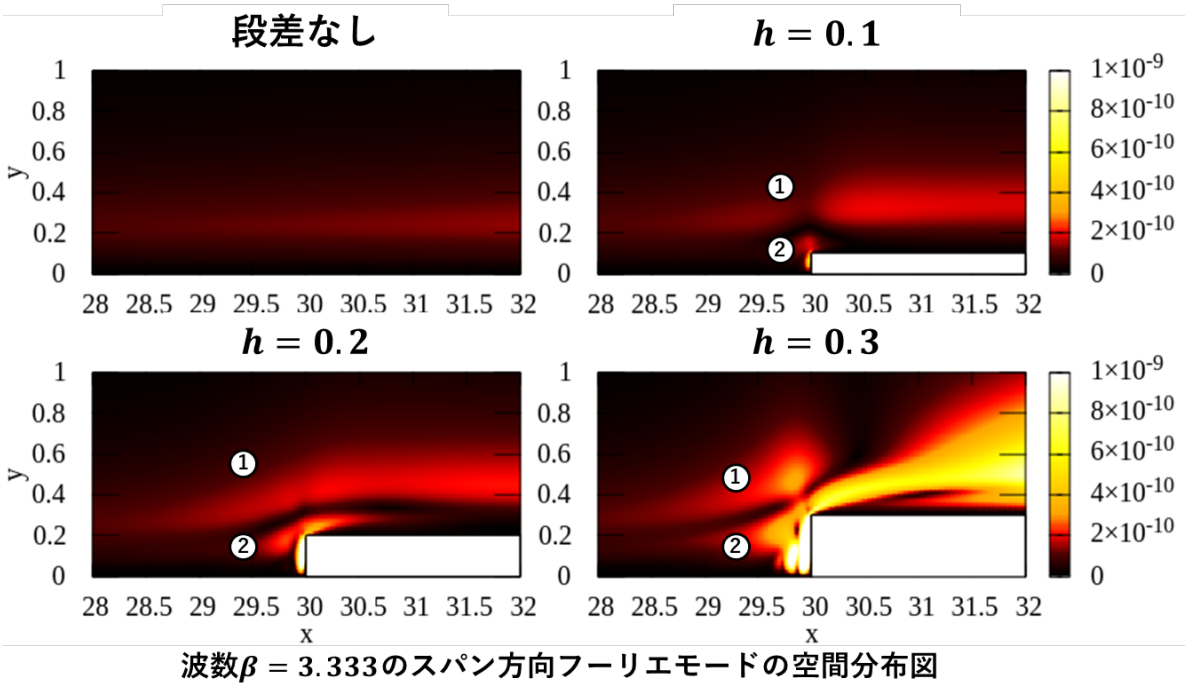


図３　微小擾乱振幅の空間分布(①は元から存在する横流れ不安定モード、②は段差に起因する新たな不安定性)

2.3 隆起構造によって歪められた境界層の全体安定性解析

DNS コードに Selective Frequency Damping（SFD）法を組み合わせることにより、隆起構造まわりの不安定な定常流れを精度よく算出することを可能にした。その後、SFD を解除して通常の DNS を再開することで、SFD によって抑制されていた不安定性が顕在化し、その線形成長過程を観測した。これにより、最も不安定な固有モードの成長率および固有振動数を定量的に推定することに成功した。円盤形状の孤立粗さ要素の場合には、不安定な固有モードの特徴として現れるカルマン渦的なパターンが後流に確認できた。Krylov 部分空間法を実装することで、複数の不安定固有モードが存在する場合にも、それらを分解して求めることができ、誤差評価も行えるようになった。

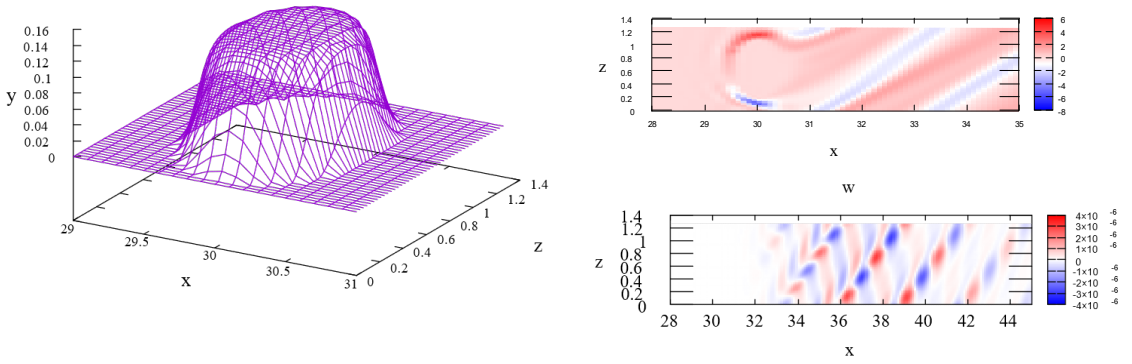


図 4　VP 法で表現した突起物の形状（左）、SFD によって得られた突起物まわりの定常流（右上）、定常流に発生する不安定固有モードのパターン（右下）

3.　研究目標の達成状況

VP 法は物体領域において流れを急激に減衰させる外力を与えることによって物体を表現しており、陰解法を用いていることから、対応する線形化方程式が具体的に定式化できないという問題に直面した。幸いにして SFD がこの複雑な非線形システムの定常解を非常に精度よく求めることができたため、そのまわりの微小攪乱の時間変化を DNS でそのまま計算することで線形化方程式を解くことと等価なデータを得ることができた。これによって任意の複雑な隆起構造まわりの流れの全体安定性解析が行えるようになったので、いつくかの解析事例や先行研究との比較を整理してひとまず論文にまとめる予定である。

4.　まとめと今後の課題

SFD によって得られた定常解が全体不安定（絶対不安定性、巨視的不安定性とも呼ばれる）である場合、それは乱流遷移が直ちに起こることを意味する。これは隆起構造の高さがある限界を超えたときの flow tripping という現象に対応する。実際にはそれより低い高さでも空間的不安定性が現れ、これが隆起構造の下流で発達して乱流遷移の起きる位置を決めている。これに対しても DNS を活用した忠実な安定性解析方法を今後検討する。

また、SPECTRA 実験を想定して横流れ不安定性を抑制するための様々な制御手法を比較し、層流化効果が最も高い方法を提案する。将来的には DLR で実験の計画が提案できるようなものを目標とする。

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

Makoto Hirota, Naoya Ueno, Yuji Hattori: A Low-Dimensional Description of the Vortex Merger Process Driven by Hyperbolic Instability of 2D Taylor-Green Vortex, 78th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (2025)

Makoto Hirota, Naoya Ueno, Yuji Hattori: Vortex Merging Triggered by Hyperbolic Instability of 2D Taylor-Green Vortex, 22nd International Conference on Flow Dynamics (2025)

Hinata Fujii, Makoto Hirota, Yuji Hattori: Global Stability Analysis of Boundary Layer Flow Over Complex Roughness Modeled by the Volume Penalization Method, 22nd International Conference on Flow Dynamics (2025)

国内学会・研究会等

藤井陽向, 廣田真, 服部裕司 : 埋め込み境界法を用いた複雑形状周りの境界層流れの全体安定性解析, 第 39 回数値流体力学シンポジウム(2025)

廣田真, 奥山太陽, 服部裕司 : 前向き段差による三次元境界層の横流れ不安定性制御効果の検証, 第 39 回数値流体力学シンポジウム(2025)

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR07APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 03 月 04 日提出

固体高分子形燃料電池高分子電解質膜の分子量が機械的特性に与える影響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

新たな低炭素排出エネルギー源の開発は、今日の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排出量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備える必要がある。この膜は高温・高圧などの過酷な条件下で作動することが多いため、その機械的特性の安定性は、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。本研究では分子動力学（MD）シミュレーション法を採用し、広く用いられている PEM 材料であるナフィオンをモデル化した。シミュレーションを通じて、PEM の分子量が固体高分子形燃料電池の機械的特性に与える影響、およびこれらの応答を推進する微視的メカニズムについて調査した。さらに本研究では、異なる鎖長と分子量を有する PEM について、特定の応力ひずみ挙動を系統的に検討した。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有力な手法となる。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究は、同一の含水率条件下において、全体的な構造を基本的に維持したまま鎖長のみが異なるナフィオン膜系が引張応力を受けた際の応答パターンおよび挙動特性を調査することに焦点を当てている。この系の設計は、高分子ネットワーク内の初期の長鎖分子を切断する操作に相当し、化学的腐食によって生じる鎖切断プロセスをシミュレーションするものである。このモデル系を通じて、本研究は分子鎖切断後における微細構造の進展メカニズムを明

らかにし、化学老化がナフィオン膜の機械的挙動に及ぼす影響の理解を深めることを目的としている。

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

2.1 新しい解析手法の開発

本研究の主な革新性は、以下の点に反映される。まず、モデル構築の段階において、粗視化手法を用いて同一の高分子鎖長を有するナフィオン膜の破断系を構築した。各系が同じ当量（EW）および総質量を有するように厳密に制御することで、鎖長以外の構造変数が機械的挙動に及ぼす影響を排除した。その上で、本研究では３つの独立した系を構築した。各系における高分子の合計鎖長は同じであるが、鎖の分布を調整することにより鎖長を系統的に変化させ、化学的腐食によって生じる分子鎖切断後の異なる微細構造の状態を効果的にシミュレーションした。さらに、膜内部における水分子の挙動および高分子マトリックスとの相互作用を正確に記述するため、既存研究に基づき開発した三部位粗視化極性水モデルを採用した。本モデルは水の分極特性を有効に再現することができ、水和条件下におけるナフィオン膜の微視的な進展メカニズムを詳細に解析するための基盤を提供する。

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、化学的劣化と切断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に顕著な影響を及ぼす。具体的には、鎖長が長い系では、材料は良好な延性を示し、より高い変形能力と破断抵抗性を有する。一方、鎖長が短い系では、材料は脆性破断特性を示す。破断強度がわずかに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。この現象は、高分子鎖長の変化が主としてエネルギー散逸メカニズムおよび亀裂進展経路に影響を及ぼし、延性から脆性へと挙動を転換する巨視的な機械的応答を引き起こすことを示唆している。

3. 研究目標の達成状況

本研究は、同一の含水率条件下において、化学的劣化による鎖長短縮後にナフィオン高分子膜系が引張応力を受けた際の微視的応答メカニズムを系統的に調査したものである。異なる鎖長を有する系の機械的挙動を比較することにより、材料の巨視的特性に対する鎖長変化の調整メカニズムが明らかになった。研究結果は、高分子鎖が切断されて鎖長が著しく短縮した場合でも、材料の弾性段階で決定するヤング率には顕著な変化が見られないことを示している。これは、初期剛性が鎖長の変化に対して感受性が低いことを示唆する。しかしながら、鎖長の短縮は材料の破断抵抗性および引張挙動に大きな影響を及ぼし、とりわけ延性の低下が顕著に現れる。短鎖系は典型的な脆性破断特性を示し、比較的低ひずみで材料破壊が生じる。これは、エネルギー散逸能力および亀裂進展抵抗性の低下を示すものであり、材料全体として脆性破壊が生じやすくなる。

4. まとめと今後の課題

既存の解析技術に基づくと、非晶性高分子であるナフィオンの構造特性評価には依然として一

定の限界が存在する。本研究では、高分子が劣化により短鎖構造へと変化した後の巨視的特性の変化を検討するとともに、その微細構造の変化の内在的メカニズムについても予備的に解明した。しかしながら、現行の解析手法は主に静的な構造特性評価に限定されており、空隙などの特定の微視的欠陥の動的進展プロセスに対して実時間追跡あるいは時間分解解析を実施することは困難である。この技術的ボトルネックをいかに克服し、劣化過程における微細構造変化をどのように In-situ（その場）かつ動的に解析するかは、今後の研究における重要な課題である。

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）

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR08APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 03 月 04 日提出

人工膜貫通チャネルの外部刺激応答性およびイオン整流性に関する分子論的解析

馬渕　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

1.1 研究の背景と目的

近年，生物の細胞が持つ機能（物質輸送，エネルギー代謝，情報処理など）を模倣して，脂質二重膜の中に分子レベルの部品を組み込むことで自律的な動作を可能とする人工細胞型分子ロボットが注目されている．人工細胞型分子ロボットは，医学や工学の幅広い分野での幅広い応用が期待されている．天然の細胞を覆う細胞膜に存在するイオンチャネルは，信号分子などの外部刺激に応答し，特定のイオンを一方向に輸送することでシグナル伝達や細胞内外の電位差である膜電位の制御を行っている．このような機能を人工的に模倣することで，人工細胞型分子ロボットにおけるセンサーや膜電位を生み出すことによるエネルギー供給を行うことが可能になる．そのためには，外部刺激に応答して構造を変形させることでイオン輸送のオン・オフを制御する技術(スイッチング)やイオンを一方向に選択的に輸送する技術（イオン整流）が必要である．イオン輸送のスイッチングやイオン整流性を実現するには，人工膜貫通チャネルのイオン輸送メカニズムについて理解することが重要であるが，人工膜貫通チャネルにおける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メカニズムの可視化及び解析を行うことを目的とする．

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の最終目標は，MD シミュレーションにより，DNA チャネルにおけるイオン輸送メカニズムを分子レベルで解明し，得られた知見から脂質膜で外部刺激に応答したイオン輸送のスイッチングやイオン整流が可能なチャネルの設計指針を確立することである．

2. 研究成果の内容

2.1 ATP アプタマーによる DNA チャネルの開閉制御

出入り口に ATP アプタマーを付与した DNA チャネルを用い, ATP がアプタマーに結合した閉状態と解離した開状態で MD シミュレーションを行った．電流値計測の結果，閉状態は開状態に比べてコンダクタンスが減少する傾向が確認され，実験結果と傾向が一致した．また，細孔径解析を行った結果，開状態と閉状態では，閉状態では ATP の結合により，チャネル構造が v 字型に大きく変形し，v 字の付け根部分でチャネルが狭窄することでコンダクタンスが減少することが明らかとなった．

2.2 内部に官能基を修飾した DNA チャネルにおけるイオン輸送メカニズム

チャネル内部に官能基を修飾した DNA チャネルにおいて，電流値解析および，チャネル内部の領域を分割した解析を行った．その結果，DNA のリン酸基から $4.5 < r \leqq 7.1$ Å の領域がイオン輸送に支配的な領域であることが明らかとなった．また，疎水基を修飾することで，DNA ヘリックスの静電反発の抑制により，$4.5 < r \leqq 7.1$ Å の体積が減少してコンダクタンスが減少することが明らかとなった．

3. 研究目標の達成状況

概ね計画通りに進行していると考える．

4. まとめと今後の課題

本研究では，人工細胞型分子ロボットにおけるセンサーや膜電位を生み出すことによるエネルギー供給を行うことを目的として，MD シミュレーションを用いて輸送メカニズムの可視化及び解析による調査を行った．その結果，ATP に応答したチャネルの開閉制御やイオン輸送の詳細なメカニズムが明らかとなった．今後は，イオン輸送経路や支配領域の知見を基に整流性を有する DNA チャネルの設計を行う予定である．

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）

Hiromu Akai, Taichi Hirano, Takuya Mabuchi, Kan Shoji, Specific ATP Detection Using Molecule-Responsive DNA Nanopores, Small, 2409293, May, 2025

国際学会

国内学会・研究会等

Taichi Hirano, Hiromu Akai, Yusuke Sato, Kan Shoji, and Takuya Mabuchi: Molecular Analysis of the Correlation Between Functional Group Modifications Inside DNA Channels and Ion Transport Properties（DNA チャネル内部の官能基修飾とイオン輸送特性の相関の分子論的解析)”，第 63 回日本生物物理学会年会

平野太一，佐藤佑介，赤井大夢，庄司観，馬渕拓哉：DNA ナノポア内部の疎水基修飾が小分子輸送に与える影響の分子論的解析”，第 39 回分子シミュレーション討論会

平野太一，佐藤佑介，赤井大夢，庄司観，馬渕拓哉：DNA ナノポア内部の疎水基がイオン・小分子輸送に与える影響の分子論的解析，第 9 回分子ロボティクス年次大会

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR09APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 3 月 2 日提出

エラスチン様ポリペプチドの液-液相分離と液滴内部への分子取込に関する分子論的研究

馬渕　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

液-液相分離(LLPS)は、生体分子が自己集合して局所的に高濃度な液滴を形成する現象であり、ドラッグデリバリーやマイクロリアクターへの応用が期待されている。エラスチン様ポリペプチド(ELP)は温度応答性の LLPS 誘発分子で、バリン(V)、プロリン(P)、グリシン (G)から構成される基本骨格$(VPGX_{aa}G)_n$ の繰り返し配列からなり、ゲスト残基 X_{aa} に導入するアミノ酸の選択により物性制御が可能である。LLPS 液滴はサイズや濃縮挙動の実験評価が可能な一方、内部構造や取込み分子のエネルギー的安定性の直接解析は困難である。そこで、本研究では、粗視化分子動力学シミュレーションを用い、ELP の疎水性度が液滴構造と RNA 取込みに及ぼす影響を構造解析および自由エネルギー的観点から調査した。

1.2 研究期間内の最終目標

液滴内部への RNA 分子の取込について、ELP 分子の性質の違いによる液滴の界面幅や内部の分子分布をはじめとする構造変化が RNA 分子の透過性に与える影響について解明する。

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 ELP の疎水性の違いによる液滴の構造変化

本研究で用いた ELP について、ゲスト残基 X_{aa} としてバリン(V)を用いた VPGVG(monoblock_V: MB_V)と X_{aa} としてグリシン(G)を用いた VPGGG を VPGVG と 1：1 でつなぎ合わせた diblock(DB)を用いて計算を行い、LLPS で形成された液滴の構造解析を行った。液滴中心からの ELP、水、イオンの数密度を解析した結果、DB の方が MB_V と比較して、ELP が広く分布しており、界面幅が広くなっていることが明らかになった。また、DB は液滴内部における含水率が MB_V よりも多くなっていることが明らかになった。

2.2 LLPS 液滴に対する RNA 分子の取込み挙動

本研究では、LLPS 液滴への RNA 分子の取込みについて、ELP の疎水性の影響を透過係数の算出によって調査した。アンブレラサンプリングを行い、反応座標に対する自由エネルギーである平均自由エネルギー(PMF)を算出した結果、両 ELP モデルにおいて、RNA はバルク領域よりも液滴内部に安定して存在できることが明らかになった。そして、モデル間を比較すると、MB_V の方が DB よりも RNA が安定して存在できることが明らかになった。その一方で、DB は MB_V よりも界面幅が広いことにより自由エネルギーが早い段階で減少に転じていた。さらに、アンブレラサンプリングから RNA の局所拡散係数を算出し、最終的に自由エネルギーと拡散係数から透過係数を求めた。その結果として、DB の液滴は MB_V よりも約 1.5 倍 RNA の透過性が高いことが明らかになった。このことから、ELP の物性を制御して界面幅を変えることで、液滴内部への原子・分子の透過性を制御し、マイクロリアクターにおける反応物の取込み、反応、そして放出タイミングの制御に繋がると考えられる。

3. 研究目標の達成状況

当初予定していた研究目標は概ね達成していると考えられる一方で、より統計的に正確なデータを取るためにより大規模かつ長時間の計算を実施予定である。

4. まとめと今後の課題

本研究では、粗視化分子動力学シミュレーションを用いて、ELP の疎水性が液滴構造および RNA 取込み挙動に及ぼす影響を、構造解析および自由エネルギーの観点から調査した。その結果、DB は MB_V と比較して界面幅が広く、それに伴い PMF はより早い段階から減少する傾向を示した。さらに、透過係数は MB_V に比べて約 1.5 倍高い値を示した。今後は、負電荷を有するアミノ酸を含む ELP 液滴に対して、同様に負電荷を有する取込み分子の電荷量が取込み挙動に与える影響について検討を行う予定である。また、マイクロリアクターを生体内での実装を見据えて、リポソームを活用した細胞膜透過現象についての計算を実施予定である。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

著書

国際学会

国内学会・研究会等

竹ケ原陽斗, 馬渕拓哉：エラスチン様ポリペプチドの疎水性が液-液相分離液滴の構造および RNA 取込みに与える影響の分子論的解析, 第 9 回分子ロボティクス年次大会

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR10APR25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.4～2026.3
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 3 日提出

スーパーコンピューティングによる先端車輌基盤技術研究

西村　祐輔
株式会社 Astemo
石本　淳
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

車載製品の製造において、はんだのぬれ性の制御が課題となっており、ぬれ現象の理解と予測が求められている。そのため、はんだのぬれ性を対象とした混相流解析手法を開発する。

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解析手法の構築

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

粒子法を採用した DualSPHysics を活用し、混相流解析プログラムを開発した。DualSPHysics は SPH（Smoothed Particle Hydrodynamics）法に基づくオープンソース CFD コードであり、影響半径 2h 以内の近傍粒子を用いて Navier-Stokes 方程式を局所的に積分し、ラグランジュ型メッシュレス手法による計算を GPU 並列で高効率に実行する。

本年度は多相ソルバ DSPH_v4.0_LiquidGas（液相–気相二相モデル）のソースコード（JSphCpu.cpp）を解析し、(1) 異種流体粒子間の色勾配から界面法線と曲率を評価し、Continuum Surface Force（CSF）法により表面張力による応力テンソルを算出し、粒子加速度に加算する表面張力モデル、(2) 基板法線と粒子法線の接線方向射影を用い、指定接触角に基づいて壁面近傍の色勾配を補正する接触角補正（Cen et al., 2024）、(3) 壁面距離に基づく遷移関数で補正範囲を 2h 以内に限定する平滑法線補正（Breinlinger et al., 2013）を実装・改良した。

解析条件として、定義ファイル（CaseSurfaceTension_LiquidGas_Def.xml）に固体基板と初期液滴の幾何形状を設定し、実製造を想定した物性値（Ni 基板：8,900 kg/m^3、Sn はんだ：

7,280 kg/m³〔250 ° C〕）を与えた。

2.2 新しい現象の解明

実製造条件を想定した物性値を用いてはんだのぬれ挙動を再現し、ぬれ角の予測可能性を検討した。Ni 基板上の Sn 液滴について 0〜0.1 s の非定常解析を実施し、境界形状および流体粒子分布の VTK 出力から液滴形状の時間変化を可視化した。指定接触角に応じて液滴形状が変化することを確認し、ぬれ性の異なる基板表面における液滴形状を数値的に評価できる見通しを得た。

3. 研究目標の達成状況

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。特に、実験で得られた固体表面自由エネルギーに関する知見を数値計算に反映し、計算精度の向上を図った。表面張力、接触角補正および平滑法線補正を組み込んだ解析プログラムの動作を確認し、指定接触角に基づくぬれ挙動を再現できたことから、研究はおおむね計画どおり進捗している。

4. まとめと今後の課題

本年度は、DualSPHysics の多相ソルバーに表面張力（CSF 法）、接触角補正および平滑法線補正を組み込んだはんだぬれ性解析プログラムを構築し、実際の物性値を用いて液滴のぬれ挙動を再現した。今後は、条件を変えた実験をさらに実施して数値計算の精度向上を図るとともに、表面自由エネルギーに影響を与える因子を明確にする必要がある。あわせて、ぬれ性の異なる基板表面における液滴形状の解析結果と実測ぬれ角との比較検証、ならびに境界処理に優れる DualSPHysics v5.2 への単相用 CSF モデルの実装を進める。

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）

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01MAY25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 3 月 3 日提出

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構造の分子論的解析

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　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

燃料電池はカーボンニュートラル社会の実現に向け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への応用が進められている。PEFC のさらなる普及に向けて、厳しい作動環境での作動に関する課題が大きな問題となっている。本研究では、厳しい作動環境の中でも氷点下条件に注目した。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しており、氷点下環境への適用に向けた重要な課題となっている。

PEM 中ではプロトンはヒドロニウムイオンとして存在しており、その輸送機構には Vehicle mechanism と Grotthuss mechanism の二種類がある。前者はヒドロニウムイオンが物理的に移動することによって拡散が起こる。一方、後者では水分子とヒドロニウムイオンの間の水素結合と共有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 による拡散が中心となり、非常に速い拡散が起こる現象も報告されている。そのため、本研究においても Grotthuss mechanism を考慮して計算を行う必要がある。

このような背景から、本研究では、氷点下条件における PEM 中の著しい物質輸送効率の低下に注目した。この課題について、PEM の内部構造、輸送特性の変化、両者の相関について分子論的に解析し、氷点下条件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反応性力場分子動力学(Reactive Force Field Molecular Dynamics: ReaxFF MD)法による数値計算を行う。そのために、再現性の高い ReaxFF MD の力場を開発し、その力場を用いた氷点下環境における PEM の解析を行い、新規 PEM 材料の設計指針に資する知見を提供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(ReaxFF MD)の力場開発　―官能基周りの構造を用いた改良―

反応性力場分子動力学法(ReaxFF MD)は化学反応と動力学を同時に扱うことができる計算手法である。この手法は、密度汎関数法(Density Functional Theory: DFT)や第一原理計算、第一原理分子動力学法と比べると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できる。ReaxFF MD では膨大な数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、分子系を正しく再現できる parameter set を用意する必要がある。本研究では、PEM に用いられる代表的な材料である Nafion を正しく再現できる parameter set の改良を行った。

第一回報告までに Nafion 膜の電離度、膜内部に発生する異常な結合に関する改良、密度に対する改良が終了していた。今回はこれに加えて、高分子膜の輸送性について改良を行った。従来の parameter set では輸送性が実験値よりも低くなっており、スルホ基周りに水が凝集することによって発生する遮蔽効果が弱いことが問題であった。

この改良では、Nafion 官能基周りの水、ヒドロニウムイオンの構造について DFT 計算を行い、得られた構造、エネルギーを教師データとした。改良の際には Amsterdam Modeling Suite: AMS というソフトウェアを用い、共分散行列適応進化戦略(Covariance Matrix Adaptation Evolutionary Strategy: CMA-ES)による parameter training を行った。この改良によって輸送性が従来よりも向上し、実験値に近い値を示すようになった。

2.2 反応性力場分子動力学法(ReaxFF MD)の力場開発　―官能基の電荷に関する改良―

前節に続いて輸送性、官能基周りの構造の妥当性をさらに向上させるために電荷に関する改良を行った。この改良では Nafion の官能基であるスルホ基の S 原子の電荷に関する parameter を変化させることによって電荷の調整を行った。この時は CMA-ES を使用せず、手動での調整を行った。これは、電荷に関連する parameter が少ないことに起因している。この改良によって水がスルホ基とヒドロニウムイオンの間に入り込む遮蔽効果が従来よりも強く表れるようになった。遮蔽効果はヒドロニウムイオンの輸送性とも強い相関があり、この改良によってさらに輸送性が適切なものとなったと考えられる。

3. 研究目標の達成状況

第一回報告も含めて現在までに、parameter set の改良を行い、さらに一部修正済みの parameter set を用いた氷点下条件における PEM の内部状態の解析を行った。その結果、従来の parameter set から電離度、異常な結合の防止、密度、輸送性に関する改良を加えることができた。さらに第一回報告時点までに行った氷点下条件における PEM 内部の構造特性、輸送特性に関する解析によって一部の構造と輸送の相関がすでに明らかになっている。

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 の力場開発を行った。

改良の際は DFT を用いて教師データを作成し、AMS によって最適化された CMA-ES を用いた parameter training を行った。その結果、官能基周りの構造を用いた改良によって輸送性が実験値に近いものとなり、官能基周りに見られる遮蔽効果もみられるようになった。これらの改良によって内部構造、輸送性の相関を解析するうえで必要な妥当性を向上させることができた。

今回は第一回報告の際よりも正確な parameter set を構築することに注力した。今後は今回改良された parameter set を用いて再度解析を行い、より詳細な内部構造と輸送の相関に関する知見を提供できるようにする予定である。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

国際学会

H. Nishizawa, T. Mabuchi, T. Tokumasu, “Molecular Analysis of the Relationship between the Structures Around Functional Groups and Transport Properties inside a Polymer Electrolyte Membrane in PEFC Under Subzero Conditions”, I01C-1944, 248th ECS meeting, October 2025.

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

西澤裕紀、馬渕拓哉、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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR02MAY25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.05～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 08 月 27 日提出

液体アンモニアおよび気体アンモニア燃焼における更なる低 NOx 化とふく射強度の予測に関する研究

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
伊藤 尚義
東北大学 流体科学研究所 特任助教
Kovaleva, Marina
東北大学 流体科学研究所 客員助教

1　研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

気体アンモニア（GNH3）と空気の燃焼に関する近年の研究の進展により、アンモニアは 2050 年までのカーボンニュートラル実現に向けた有望なエネルギーキャリアであることされている。当グループでは、2014 年から 2019 年にかけて SIP プロジェクトの一環として GNH3/空気および GNH3/CH4/空気燃焼に関する広範な研究を行い、NOx 排出濃度を低減する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、燃焼生成ガス中の NOx 排出濃度は 100 ppm 未満（数値解析に基づく値；その後の実験では 42 ppm 未満を実証）に低減され、未燃アンモニアの排出も解消された。これと並行して、産業技術総合研究所福島再生可能エネルギー研究所（AIST-FREA）では、世界初となる 50 kW 級 GNH3 ガスタービンシステムを用いた発電実証が行われた。しかし、アンモニアは常温・高圧ボンベ内で液体として貯蔵・供給されるため燃焼前に気化させる必要があり、GNH3/空気燃焼では、ガスタービン設備コストが増大する。また、気化潜熱がアンモニアの低位発熱量の約 7～8%を占めるため、ガスタービン前段のエネルギー消費が大きくなる。さらに、アンモニア気化器の応答性が低いことから迅速な出力調整が困難であり、ガスタービン発電の利点を十分に生かせないという制約もある。これらの課題を克服する解決策として、液体アンモニア（LNH3）を直接噴射して燃焼させる手法が検討されている。当グループでは AIST-FREA との共同研究により、2019 年から 2021 年にかけ、0.1 MPa においてガスタービン燃焼器を用い LNH3/CH4/空気燃焼試験を実施し、発熱量ベースで 50%の LNH3 置換率

を達成し数値解析にも成功した。同研究では、火炎を安定させるために、500 K 以上に加熱された旋回空気流を用いた。一方、水素（H2）と混焼させた液体アンモニア（LNH3）噴霧燃焼の数値解析により、LNH3 の発熱量比率 49%の条件で、低 NOx 燃焼が実現可能であることが確認された。これは、LNH3 フラッシュ噴霧の連続燃焼に関する世界初の数値解析的研究である。その後、2021 年 4 月から 2025 年 3 月にかけて、LNH3 の発熱量比率を 50%から 100%に高めた LNH3 フラッシュ噴霧燃焼へと研究が進展した。

このような背景の下、本研究の目的は、GNH3/空気燃焼に匹敵する LNH3/空気燃焼による低 NOx 燃焼を実現し、アンモニア燃焼技術をガスタービンだけでなく工業炉燃焼にも適用することにある。これまでの数値解析および実験的研究では、中空円錐（ホローコーン）型ノズルが用いられてきた。しかし、最も基本的な単孔噴射ノズルを用いた LNH3 噴霧のバックライト撮影により、十分な過熱度（40～50 K）があれば、単孔ノズルでも完全な LNH3 フラッシュ噴霧を形成できることが実証されている。そこで本研究では、単孔噴射ノズルおよび角度を有する 3 孔噴射ノズルを用い、0.1 MPa の燃焼器内における LNH3 フラッシュ噴霧の燃焼特性（700 K に加熱された旋回空気流を使用）に関する数値解析を行った。燃焼特性に加え、単孔ノズルと 3 孔ノズルにおける噴霧形成や噴霧・空気混合過程の差異についても詳細に検討を行った。

1.2 研究期間内の最終目標

液体アンモニア（LNH3）の直接噴霧燃焼は、燃焼工学の分野において、新たに注目されていると同時に技術的課題も多いテーマである。気体アンモニア（GNH3）を用いたガスタービン燃焼の基礎研究は東北大学を中心に 10 年近く前から行われ、その燃焼および燃焼生成ガス特性は概ね解明されている。一方、低圧または中圧ガスタービンや工業炉における液体アンモニア（LNH3）噴霧燃焼では、フラッシュ沸騰を伴う噴霧形成、LNH3 の過熱状態での蒸発、そして加熱された空気流や燃焼ガスとの混合といった複雑な現象が生じるが、これらは新たな研究課題となっている。また、フラッシュ噴霧の形成は、ノズル形状に大きく依存する。本数値解析では、3 孔噴射ノズルに形成される LNH3 噴霧の燃焼および燃焼生成ガス特性を詳細に検討し、単孔ノズルによる噴射の場合と比較しながら LNH3 噴霧燃焼の最適化を図ることを最終目標とする。なお、LNH3 噴霧燃焼において 3 孔ノズルによる連続噴霧燃焼の数値解析が行われたのは世界で初めてである。

2　研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

高圧の LNH3 をノズルから飽和圧力以下の低圧環境に噴射すると、激しいフラッシュ沸騰によりフラッシュ噴霧となり二相流が形成される。LNH3 フラッシュ噴霧の数値解析では、気相（連続相）、液相（離散相）および二相間の相互作用を考慮する必要がある。そのため、気相にはオイラーアプローチを、液相にはラグランジュアプローチを採用している。噴霧中の液滴は、分裂、抗力発生、フラッシュ沸騰、蒸発、伝熱など多くの物理現象が関与しているため、これらの相互作用については、ラグランジュアプローチを用いたサブモデルで計算された生成項をオイラーアプローチの気相方程式に導入する双方向結合が重要かつ新しい開発項目である。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。LNH3 フラッシュ噴霧は燃焼器内で急激に加熱されるため、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

液体アンモニア（LNH3）は、ガスタービン燃焼器のような中程度の圧力条件、高い正の過熱度、さらに連続噴射条件において、フラッシュ噴霧形成過程が敏感に変化する。それゆえ、新しい研究領域のテーマである。当グループの先行研究では、こうした特性を踏まえ、単孔噴射ノズルを用いて約 50 K の過熱度で液体アンモニアを噴射することで、良好な噴霧が形成された。これに続き、本研究では、分散噴射法の一形態として 3 孔噴射ノズルを用いた噴霧形成を数値解析し、周囲圧力 0.1 MPa の燃焼器内における燃焼および排出特性の解明を試みた。その結果、以下の点が明らかになった。

- 3 孔ノズル噴射では、噴霧を分散させることで液滴と加熱された空気との混合が促進され、燃焼器出口における温度分布が均一化する。
- ３孔ノズル噴射では、燃料過濃（リッチ）な条件において火炎の安定範囲が拡大する。これに伴い、NO および未燃 NH3 の燃焼器からの排出濃度が最小となる最適当量比は、より燃料過濃な条件にシフトする。
- ３孔ノズル噴射による燃焼では、最適当量比における NO および未燃 NH3 の排出濃度は、単孔ノズル噴射の場合と比較して低く抑えられる。

3　研究目標の達成状況

本研究では、旋回流燃焼器において、0.1 MPa の条件下で 3 孔噴射ノズルを用いた液体アンモニア（LNH3）のフラッシュ噴霧火炎の燃焼特性および排出ガス特性に関する数値解析を行った。液体アンモニア（LNH3）噴霧は高い過熱度でフラッシュ微粒化を起こすため、単孔噴射ノズルであっても約 50 K の過熱度で完全なフラッシュ噴霧が生成される。しかし、過熱状態でのフラッシュ沸騰およびアンモニアの蒸発潜熱の高さにより、噴霧内の温度は約 210 K 低下する。本研究では、旋回流燃焼器内での空気と噴霧液滴との混合を促進するため 3 孔噴射ノズルを提案した。この 3 孔ノズルは、直径 5.6 mm の円周上に 120°間隔で 45°の角度で傾斜した 3 つの単孔ノズル部を有している。当量比 0.9 から 1.5 の範囲で数値解析を実施したところ、3 孔噴射ノズルを用いた LNH3 火炎は、単孔噴射ノズルを用いた場合よりも燃料過濃側の広い範囲でより安定化することが確認された。さらに、3 孔噴射ノズルを用いた LNH3 火炎は、火炎長が短いという特性を示した。すなわち、3 孔ノズル噴射により噴霧液滴と空気の混合を促進されることが示された。また、NO および未燃 NH3 の排出濃度が最小となる最適当量比は、単孔ノズル噴射の場合よりも大幅に燃料過濃側にシフトすることが明らかになった。これらにより、液体アンモニア（LNH3）噴霧燃焼において、単孔噴射ノズルと多孔噴射ノズルによる噴霧形成と燃焼特性の違いを明らかにする研究目標は達成された。

4　まとめと今後の課題

単孔ノズルから大量の液体アンモニア（LNH3）を噴射すると、液滴が狭い領域に滞留しやすく、蒸発に伴う局所的な温度の急激な低下を招く。LNH3 液滴と空気との混合を促進するため、本研究では単孔噴射ノズルに代えて 3 孔噴射ノズルを提案した。LNH3 噴霧連続燃焼の数値解析

において 3 孔噴射ノズルが用いられたのは世界で初めてである。3 孔ノズルによる噴射は火炎の安定性を高め、NO 排出濃度を低減させることが確認された。これらの数値解析結果から、多孔噴射ノズルによる液体アンモニア（LNH3）噴霧燃焼の特性が明らかになり、開発した数値解析手法の有効性も確認された。今後の研究では、この新たな成果を高圧環境へと拡張する方法を検討するとともに、工業炉燃焼におけるアンモニア火炎のふく射伝熱の解明にも取り組む予定である。

5　研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

[1] K. D. Kunkuma A. Somarathne, Hirofumi Yamashita, Yi-Rong Chen, Hisayoshi Ito, Taku Kudo, Akihiro Hayakawa, and Hideaki Kobayashi, Numerical study of liquid ammonia/air flashing spray flames using a three-hole nozzle injector in a swirling burner for thermal applications, Proceedings of Combustion Institute, Vol. 42 (2026), In press.
[2] Yi-Rong Chen, K. D. Kunkuma A. Somarathne, Gauthier Reibel, Akihiro Hayakawa, Taku Kudo, and Hideaki Kobayashi, Spray and combustion characteristics of liquid ammonia using pressure-swirl, single-hole, and three-hole nozzles in a swirling burner, Combustion and Flame, Vol. 291 (2026), 15086.

著書

該当無し

国際学会

[1] K. D. Kunkuma A. Somarathne, Hirofumi Yamashita, Yi-Rong Chen, Akihiro Hayakawa, Taku Kudo, and Hideaki Kobayashi, Numerical study on liquid ammonia/air flashing spray flames using a three-hole nozzle injector in a swirling burner for thermal application, The 41st International Symposium on Combustion, Kyoto, Japan (2026), Paper No.1-10-03 (146).
[2] K. D. Kunkuma A. Somarathne, Hirofumi Yamashita, Yi-Rong Chen, Reibel Gauthoer, Hisayoshi Ito, Taku Kudo, Akihiro Hayakawa, Taku Kudo, and Hideaki Kobayashi, Numerical investigation of liquid ammonia spray flame characteristics using a single-hole nozzle in a swirling burner under various thermal wall conditions, The 11th JSME-KSME Thermal and Fluid Engineering Conference, Okinawa, Japan (2025), Paper No.JK-TFEC11-1117.
[3] K. D. Kunkuma A. Somarathne, Yi-Rong Chen, Hisayoshi Ito, Taku Kudo, Akihiro Hayakawa, and Hideaki Kobayashi, Stabilization of liquid ammonia flashing spray flames using a single-hole injector for thermal application, The 4th Symposium on Ammonia Energy, Minneapolis, Minnesota, USA (2025), Paper No.185.

国内学会・研究会等

[1] K.D .Kunkuma .A. Somarathne, Yi-Rong Chen, Hisayoshi Ito, Taku Kudo, Akihiro Hayakawa, and Hideaki Kobayashi, Numerical Study on Liquid Ammonia/Air Flashing Spray Flames and Emission Characteristics using a Three-hole Nozzle Injector in a Swirling Burner for Thermal Applications, The 63rd Symposium on Combustion (Japanese), Yokohama, Japan (2025).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当無し

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01AUG25
研究種別	一般研究
利用期間	2025.08～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 8 月 18 日提出

第一原理計算による光熱変換現象の解明

小宮　敦樹
東北大学流体科学研究所　教授
小野　泉帆
東北大学大学院工学研究科　D3

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

フェムト秒レーザーによって生成される超高速・高強度の光が物質に作用するとき、どのような経路を経て物質にエネルギーが伝達されるかを調査する。フェムト秒のオーダーで照射が行われる超短パルスレーザーでは、通常の連続発振レーザー、もしくは比較的長いパルスレーザーと比較して、非常に精密な処理を行うことが可能である。これは、時間・空間的に極限まで圧縮された光が物質に作用し、物質が高度な励起状態を経験し、非熱融解と呼ばれる通常と異なるエネルギーの伝達経路を作るためである。このような状況では、物質内部で電子および格子がそれぞれ高速に運動し、線形・摂動的応答から外れたはるかに複雑な様相を示す。本研究では、このようなフェムト秒レーザー照射時の超高速ダイナミクスにおいて、第一原理的シミュレーションによる光から物質へのエネルギー変換のメカニズムの理解を目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間内では、非熱融解の最初の段階となる電子励起の部分に注目し、異なる光子エネルギーで励起される電子の振る舞いの変化を明らかにす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）

第一原理計算を用いて、異なる周波数のレーザー照射下における物質内の電子励起を解析した。その結果、レーザー強度が高くなるにつれて、励起電子数の周波数依存性が失われることが確認された。これは、高強度レーザー場においてはレーザー電界によって原子核ポテンシャルが歪められ、トンネル効果による電子励起が支配的になるためである。このトンネル効果はレーザー強度にのみ依存するため、結果として周波数依存性の消失を引き起こす。

一方で、励起された電子の振る舞いは自由電子として説明可能であり、自由キャリアモデルに基づくエネルギー吸収の傾向と一致することが示された。

3. 研究目標の達成状況

本研究期間では、レーザーの周波数および強度が電子励起に与える影響を評価し、理論モデルと比較することで、その振る舞いを説明することに成功した。これにより、レーザーと電子励起の関係性が明らかになり、本研究の目標を十分に達成することができた。

4. まとめと今後の課題

本成果により、非熱融解の初期過程である電子励起段階における物質の振る舞いが明らかになった。この結果から、それに続く電子と原子核の相互作用を予測することが可能となる。すなわち、比較的弱い励起条件下では特定の電子軌道が形成され、規則的な構造が現れる可能性が考えられる。一方で、自由キャリア吸収が強く生じた場合、電子はガス状に振る舞い、構造の規則性は失われると推測される。今後は、分子動力学シミュレーションを用いて、これらの電子軌道が及ぼす効果について詳細に検証していく必要がある。

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

Mizuho Ono and Atsuki Komiya, “Orbital-Specific Origin of Laser-Induced Lattice Instability: Depletion of Bonding States and Emergence of Nonbonding Electrons”, *Physical Review B*, under review.

著書

N/A

国際学会

N/A

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	YG01APR25
研究種別	若手研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 3 月 4 日提出

流体構造連成解析におけるデータ駆動型アプローチの研究

阿部 圭晃
東北大学流体科学研究所　准教授

1. 研究の目的と目標（研究の背景と目的，具体的な目標を書いてください）

1.1 研究の背景と目的

自然界や工学分野における現象の多くは、複数の物理系が相互に影響を及ぼし合う「連成現象」として存在する。特に次世代航空機の設計においては、大変形や非定常乱流を考慮した高忠実な流体構造連成（FSI）解析が不可欠である。しかし、従来のモデル駆動型のアプローチ（分離反復型解法）は、流体・構造の双方で計算負荷の高い高忠実ソルバーを組み合わせることが難しく、どちらかの物理系で精度を犠牲にすることが一般的であった。本研究の目的は、既存のソルバーを独立させたまま連成させる**データ駆動型アプローチ**を導入し、高忠実解析同士を容易かつ低コストで組み合わせる手法を確立することにある。

1.2 研究期間内の最終目標

A. **完全分離解法（FFP/DFP）の確立と検証**：静的連成解析において、連成方向の並列化を可能とする手法を実証し、計算時間の劇的な短縮を実現する。

B. **界面制御原理（Interface Control Principle）法の構築**：界面の残差力を最小化する制御理論を用いた新しい動的連成解析手法を提案し、世界初のデータ駆動型動的連成解析の枠組みを構築する。

C. **実用的な設計フレームワークへの展開**：AI 手法（ベイズ最適化）を統合し、次世代航空機主翼の最適設計を実用的な時間内で行える環境を整備する。

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 静的空力弾性解析における完全分離解法の検証

本年度は、連成方向の並列化を実現する「変位ベース完全分離解法（DFP 法)」および「力ベース完全分離解法（FFP 法)」の開発と検証を行った。

- DFP および FFP に関する**解析ツールの整備**：オープンソースである Python および ParaView を基盤とし、空力荷重の抽出から構造変形の反映までを一貫して行うツール群を構築した。

- **B777 主翼の簡易モデルを用いた検証**：提案手法は、複数の変形候補を独立して評価できるため、従来の BGS 法と比較して実効的な反復回数を削減し、大規模並列計算機での実行効率を大幅に向上させることが可能であることを示した。

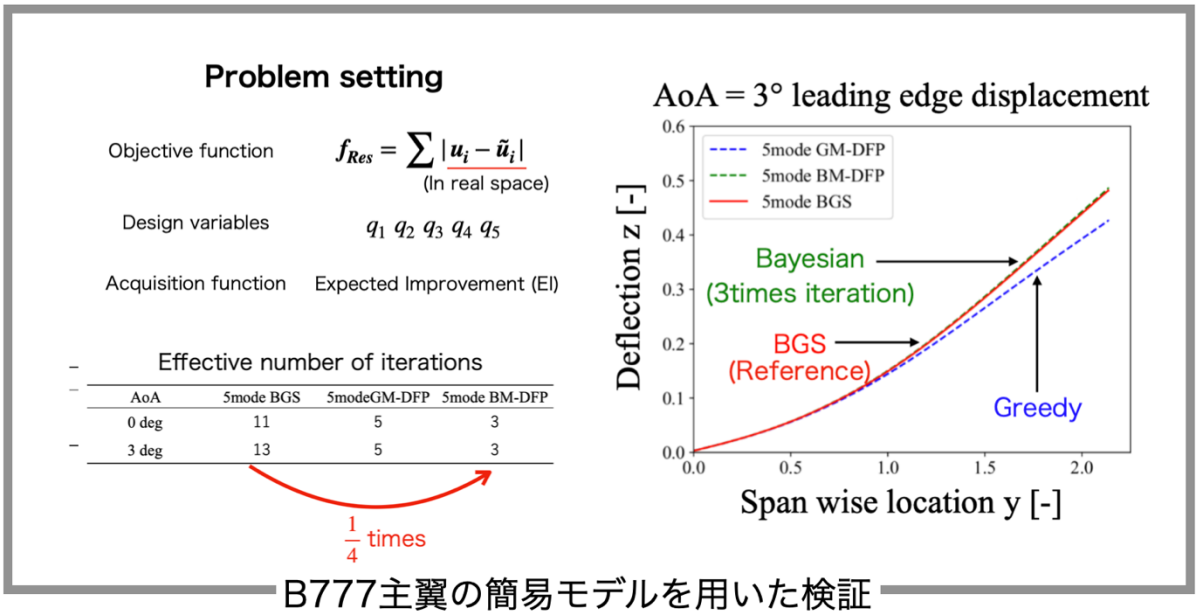


図 1 ：静的空力弾性解析における完全分離解法の検証

2.2 多目的ベイズ最適化（MBO）による航空機主翼の自律設計

AI 手法の一種であるベイズ最適化を主翼設計に導入し、その有用性を実証した。

- **計算コストの大幅低減**：CFRP 製主翼の設計において、構造質量と空力抵抗のトレードオフを最適化する際、従来の遺伝的アルゴリズム（GA）と比較して**約 1/10 の計算回数**で、より多様で優れたパレート最適解を導出することに成功した。
- **不確実性の考慮**：製造過程で生じる炭素繊維の配向ズレなどの不確実性が、主翼の破壊モードや重量に与える影響を定量的にはじめて明らかにした。本成果は国際学術雑誌 *Composite Structures* に掲載され、プレスリリースを通じて広く公開された。

2.3 動的連成解析手法の構築と HAPS 主翼への適用

動的連成解析を効率化するため、制御理論を応用した界面制御原理（Interface Control Principle 法）の研究を進めた。特にフラッター現象の影響が顕著となる高アスペクト比主翼を有する高高度無人機（HAPS）を対象とし、実用的な条件でフラッター境界を評価することに取り組んだ。

- **ICP 法の提案**：流体と構造の界面における残差力を制御システムの入力として捉え、これを最小化することで連成状態を予測する手法を提案した。2 次元剛体翼のフラッター解析において、本手法がリミットサイクル振動を再現できることを確認した。
- **HAPS 翼の解析**：成層圏を飛行する高アスペクト比無人機（HAPS）を対象とし、静的・動的空力弾性挙動を考慮した設計解析を実施した。揚力方向だけでなく負の荷重条件を設計に加味することで、重量増加を最小限に抑えつつ、フラッター安定境界を最大で約 1.75 倍に拡大できることを定量的に示した。

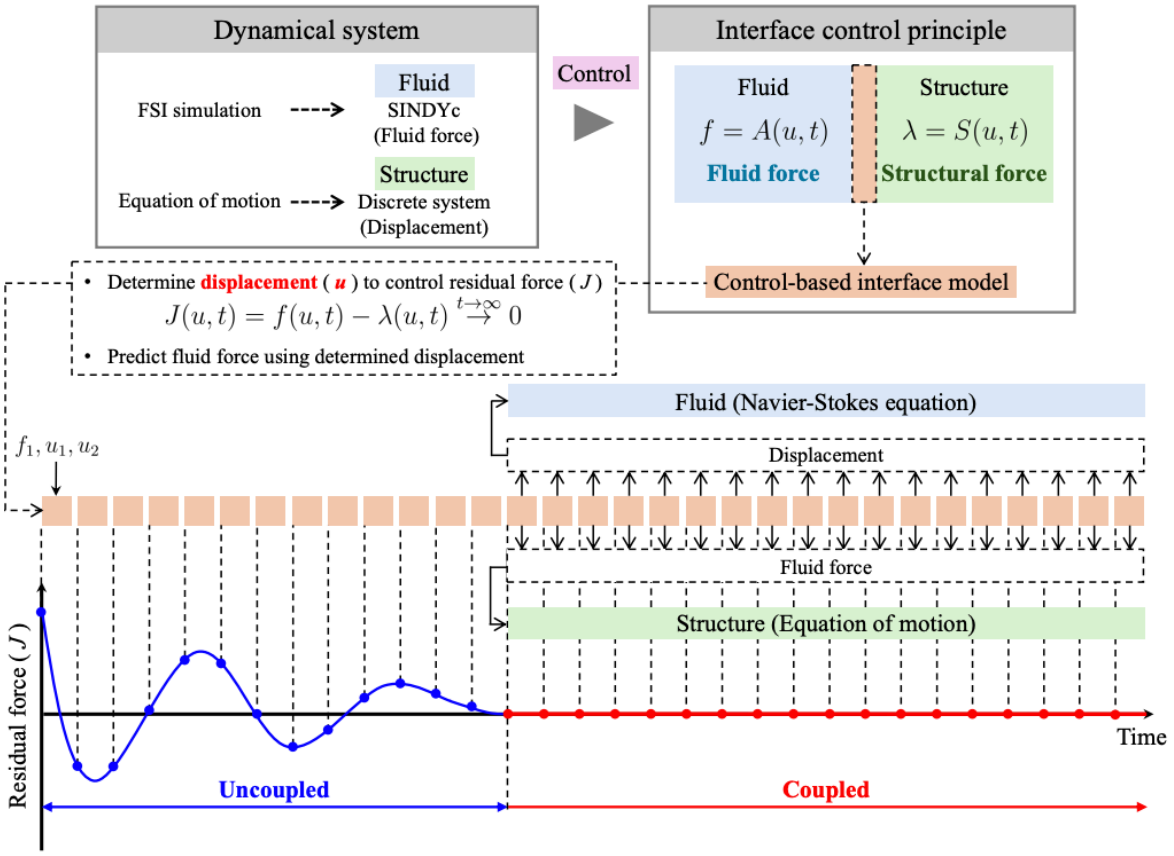


図 2：ICP 法の提案概要図

3. 研究目標の達成状況

初年度の目標であった「静的連成解析における完全分離解法の検証」および「動的連成解析手法（ICP 法）の基礎構築」は、当初の計画を上回る成果を上げている。特に、AI を用いた自律設計手法については、スーパーコンピュータを用いた大規模解析によって実用性を証明し、論文発表に至ったことは特筆すべき成果である。また、HAPS 翼を用いた具体的な設計指針の獲得により、手法の有用性が多角的に示された。

4. まとめと今後の課題

本年度の研究により、データ駆動型アプローチが航空機の連成解析および設計における計算コスト削減と精度向上に極めて有効であることが示された。 今後の課題として，以下が挙げられる：

- **高精度空力解析の導入**：高迎角側での剥離流れや衝撃波の干渉を正確に捉えるため、GPU 並列による非定常流れ解析への拡張を本格化させる。
- **幾何学的非線形性の考慮**：主翼のさらなる軽量化・柔軟化に伴い顕著となる、幾何学的非線形性を考慮可能な構造解析モデルとのカップリングを推進する。
- **ICP 法の 3 次元化**：開発した ICP 法を 3 次元主翼のフラッター問題へ適用し、高忠実ソルバーをそのまま用いた低コスト動的連成解析の実用性を検証する。

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）

Yajun Liu, Yoshiaki Abe, Ryosuke Kano, Yuki Yatsu, Katsumi Nakamura, Koji Shimoyama, Tomonaga Okabe, Shigeru Obayashi, Multi-objective Bayesian optimization of composite aircraft wings using various carbon fibers, *Composite Structures*, 383 (2026), 120105

国際学会

1. Yuki Yatsu, Yajun Liu, Yoshiaki Abe: Parallelization in Coupling Algorithm for Static Aeroelastic Analysis of Aircraft Wings, *ECCOMAS CM3 - Transport 2025*, Trieste, Italy, 2025.09.
2. （招待講演）Yoshiaki Abe: Advances in Data-Driven Aeroelastic Analysis for Multidisciplinary Aircraft Design, *France-Japan Forum 2025*, Lyon, France, 2025.11.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

プレスリリース： 東北大学,「AI が『理想の主翼』を自律設計、計算コスト 1/10 で大型旅客機主翼の最適形状を導出」, 2026 年 2 月 20 日, https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2026/02/press20260220-01-AI.html

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 6 日提出

航空宇宙工学に関わる圧縮性流体の高精度数値シミュレーション研究

河合　宗司
東北大学大学院工学研究科　教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

航空宇宙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．しかしながら，物体が移動・変形する問題への壁面モデル LES の展開については未だに課題が数多く残されているのが現状である．

また，高レイノルズ数の圧縮性乱流を含む流体現象の多くは自励振動現象を伴うため，複数の振動現象間の相互作用について理解することは流体物理現象のより深い理解につながる．そこで本研究が着目するのは，二つのカルマン渦列の同期現象である．特に，横並び二円柱の後流に生じる二つのカルマン渦列どうしの同期現象は，非圧縮性流体力学の観点から渦どうしの直接干渉に起因するとされてきたが，圧縮性流体では加えて音波が円柱間を伝播するため，音波による渦列の同期も生じうると考えられる．本研究では，音波による同期という新しい観点から流体現象を理解し，位相縮約理論を導入して圧縮性乱流のモデリングにつなげることを試みる．

以上より，本研究の目的は，(a) 壁面モデル LES を移動・変形物体解析に展開可能とする計算手法の開発と (b) 位相縮約理論に基づく流体の同期現象の解明･モデリングである．(a) では，階層型直交格子をベースとした物体非適合格子上で移動･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．(b) では，まず音波を介した渦列の同期現象が実現されることを明らかにし，位相縮約理論を導入することでその予測モデルの構築を目指す．

1.2 研究期間内の最終目標

(a) 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目指す．具体的には，物体非適合格子上での LES 壁面モデリングと，移動物体計算に特有のフレッシュセルへの inverse distance weighting 内挿を組み合わせることで，物体非適合格子法による移動変形物体まわり乱流の壁面モデル LES 解析の実現を試みる．

(b) 横並び二円柱流れの同期現象

横並び二円柱流れの同期現象において音波を介した相互作用に着目し，円柱間距離を十分大きくした条件においても二つのカルマン渦列間の同期が生じるかどうかを明らかにする．さらに，同期現象を数学的に記述する位相縮約理論を適用することで，本現象における同期条件式を導出し，同期可能な円柱直径比および同期位相差を理論的に予測する手法を構築する．その予測結果を数値計算結果と比較・検証することで，音波を介したカルマン渦列どうしの同期現象を理論的に説明できることを示す．

2. 研究成果の内容

(a) 移動・変形物体解析

摩擦レイノルズ数 1000 の高レイノルズ数進行波状壁面上の乱流境界層を対象として壁面モデル LES 手法の妥当性を検証した．計算対象と計算格子を図 1 に示す．図のように，平面チャネルの上下壁面形状が正弦波で表され，その位相が主流方向に進行する流れ場を対象として移動境界流れを扱う．壁面形状を表すパラメータは，振幅とチャネル半値幅の比 0.05，振幅と波長の比 10π，位相速度とバルク速度の比 $c/u_b=0.6$ である．

計算格子は図 1 に示す直交格子である．壁面垂直方向の格子幅は wall unit で 15（壁面近傍），50（チャネル中心線上），主流・スパン方向の格子幅は 50 wall units である．これは境界層の内層乱流を解像する wall-resolved LES と比較して非常に粗い格子である．本解析の総格子点数は約 600 万点であり，参照データ取得に用いた物体適合格子 DNS の格子点数約 2 億点と比較すると約 30 分の 1 である．

開発手法により得られた位相平均速度場を図 2 に示す．非常に粗い計算格子を用いているにもかかわらず，開発手法によって得られた位相平均流れ場は DNS データとよく一致している．いくつかの位相での壁面垂直方向の位相平均速度分布を図 3 に示す．図中の破線は壁面モデルに用いられた image point の高さを表しており，image point 以下の領域では意図的に乱流が格子で解像されず，壁面モデルでモデル化されている．図から，image point より上部の領域で壁面モデル LES の速度分布とレイノルズ応力分布が DNS とよく一致していることがわかる．Image point 以下の領域では壁面モデル LES が DNS よりもやや大きな速度分布を予測するが，これは壁面モデリングで計算される部分すべり壁条件の影響であり，それにも関わらず image point より上部で速度分布がよく予測できているということは，壁面モデリングによって境界層内のせん断応力バランスが正しく保たれていることを意味する．以上の結果から，物体非適合格子での壁面モデリングに基づく開発手法により，移動変形物体周りの高レイノルズ数流れの高忠実解析を安定かつ高精度で予測できたと言える．

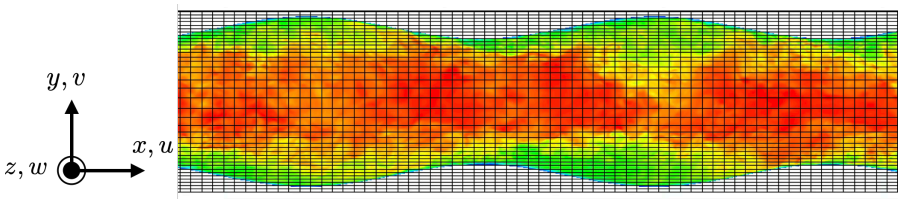


図 1：進行波状壁面乱流境界層の流れ場と計算格子．各方向 3 点おきに表示している．

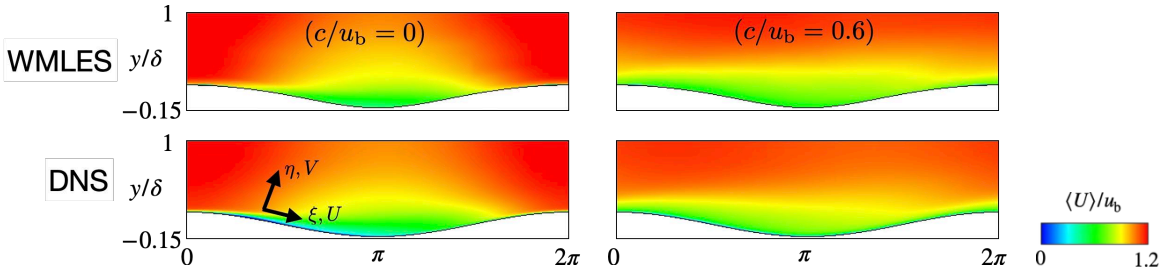


図 2：c/u_b=0 および 0.6 における進行波状壁面乱流境界層の位相平均された壁面接線方向速度場．上：壁面モデル LES，下：DNS，左：固定壁，右：移動壁．

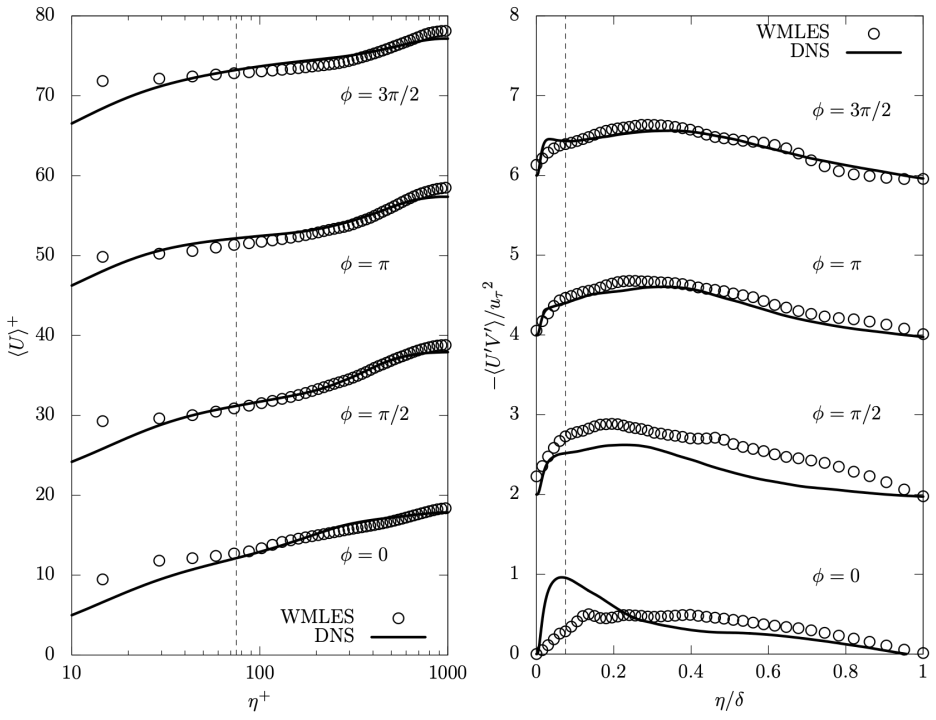


図 3：c/u_b=0.6 における位相平均壁面接線方向速度（左）とレイノルズせん断応力（右）の壁面垂直方向分布．破線は壁面モデルに用いられた image point の高さを表す．

(b) 横並び二円柱流れの同期現象

図 4 に示すように，円柱直径が D および rD の二つの円柱を横並びに配置した二次元圧縮性流れ（マッハ数 0.5，D を基準長さとしたレイノルズ数 100）の数値解析を行った．図 4 は円柱間距離が $20D$，直径比 $r=1$ の場合の瞬時渦度場・圧力場である．それぞれの円柱の後流にはカルマン渦列が独立に形成され，これらの渦構造どうしの直接的な干渉はない．一方で，圧力変動は円柱間を伝播しており，二つのカルマン渦列どうしの相互作用は音波を介したものであることがわかる．図 5 にそれぞれの円柱の揚力係数 C_L および渦列間の位相差の時間履歴を示す．ここでは初期位相差を変えた複数ケースの結果が示されており，図より位相差が初期値によらず時間とともに π に収束し，図 4 に示すような逆相同期が生じる．以上の結果より，二円柱を遠く離した渦列どうしの直接的な渦干渉がない条件下であっても音波を介してカルマン渦列の同期が生じることが明らかになった．

位相縮約理論によると，同一直径での位相差変化率を表す結合関数と，二円柱の直径比によって決まる自然振動数差の大小関係を調べることで，同期が起こる円柱直径比と同期した場合の位相差が予測できる．図 6a に円柱間距離 $20D$ における結合関数と，直径比 r = 1.01 および 1.02 での自然振動数差を示す．この図から，直径比 r = 1.01 では，自然振動数差と結合関数が交わっており，負の傾きをもつ交点すなわち位相差 0.79π で同期することが予測される．また，直径比 r = 1.02 では自然振動数差と結合関数の交点は存在せず，同期しないことが予測される．この理論的な予測を実証するために，r = 1.01 および 1.02 で数値計算した位相差の時間履歴を図 6b に示す．実際に，直径比 r = 1.01 では初期位相差によらず位相差が一定値に収束し，同期が生じている．収束した同期時の位相差は 0.76π であり，理論予測値の 0.79π ともよく一致している．また，r = 1.02 では位相差が絶えず変動し続けており，予測通りに同期が生じないことが確認できる．以上のように，位相縮約理論を導入することで，二円柱から生じるカルマン渦列の同期条件および同期後の状態を理論的に予測できることを示した．

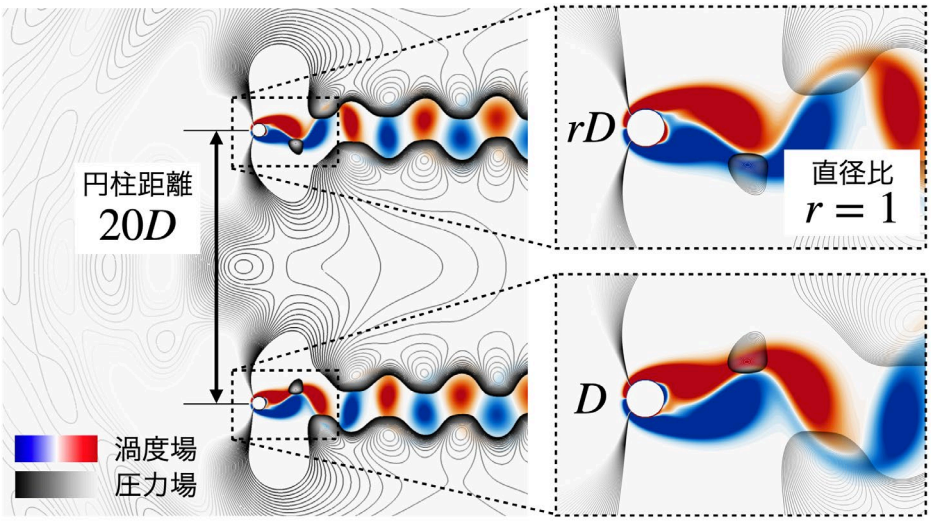


図 4：横並び二円柱流れの同期状態の流れ場（逆相同期）．

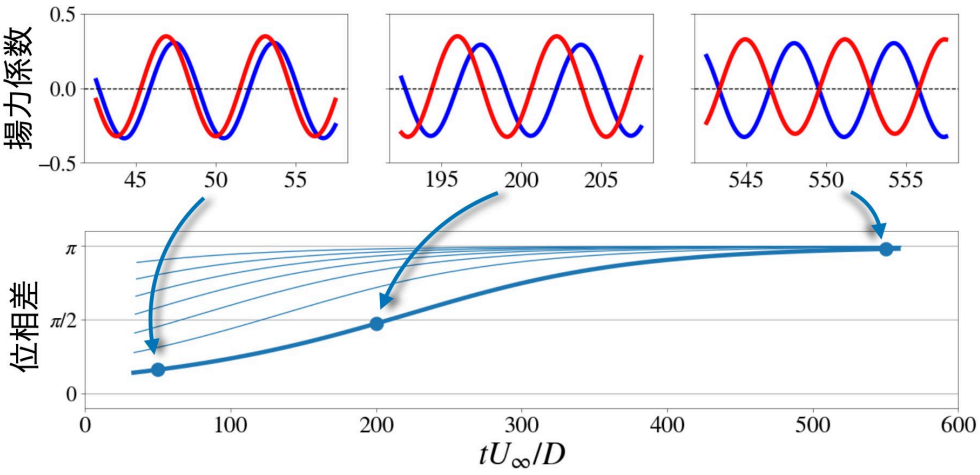


図 5：二円柱の揚力係数（上）と位相差（下）の時間履歴.

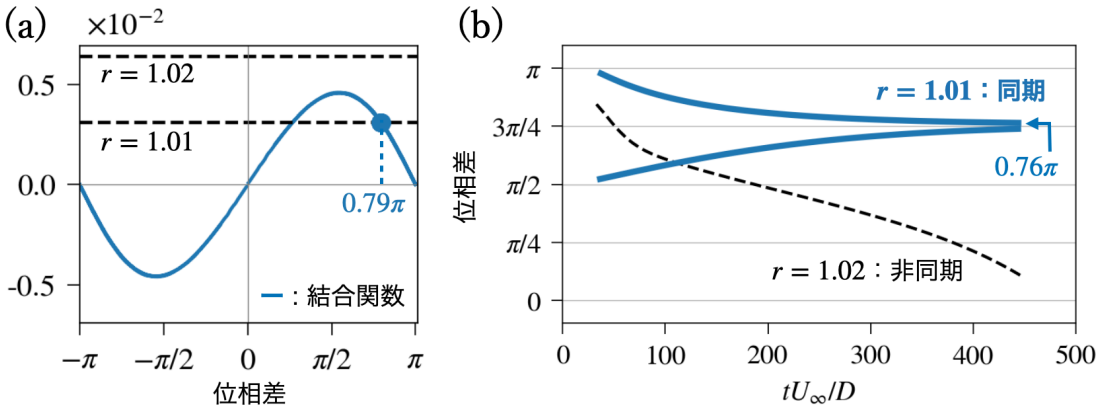


図 6：(a)円柱距離 20D における結合関数と直径比 1.01, 1.02 に対応する自然振動数差，(b) 円柱距離 20D における直径比 1.01, 1.02 の位相差の時間履歴.

3. 研究目標の達成状況

本課題では，壁面モデル LES の移動・変形物体解析への展開と位相縮約理論に基づく同期流体現象のモデリングを目標としている．開発した LES 壁面モデルにより安定かつ高精度な移動物体の壁面モデル LES を実現したこと，および位相縮約理論を導入することで音波を介したカルマン渦列の同期現象を予測できたことを踏まえると，研究目標は概ね達成できたと言える．

4. まとめと今後の課題

本課題では，(a) 壁面モデル LES を移動・変形物体解析に展開可能とする計算手法の開発と (b) 位相縮約理論に基づく流体の同期現象の解明・モデリングを実施した．(a)では，静止した階層型直交格子上で物体の移動・変形を伴う高忠実乱流解析を可能とする壁面モデル LES 手法を開発した．(b)では，音波を介したカルマン渦列の同期現象が生じることを明らかにし，位相縮約理論による予測可能性を示した．今後は移動物体の壁面モデル LES をより大規模な複雑形状解析に展開し，位相縮約理論については他の圧縮性乱流現象に展開することで，より実用

的な流体現象の解明やモデリング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: Machine-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, 78th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (APS-DFD) (2024).
- Shigetaka Kawai and Soshi Kawai: Cartesian Grid Method for Wall-Modeled Large-Eddy Simulations of Moving Boundary Flows, AIAA SciTech Forum 2026 (2026).
- Shigetaka Kawai and Soshi Kawai: Compressible turbulent channel flows over streamwise traveling wavy walls, 80th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (APS-DFD) (2026).

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.
- 山中宙也，服部泰知，河合成孝，岩谷優汰，前島颯樹，蓼沼烈，河合宗司：音波を介した横並び円柱流れの同期現象, 第 39 回数値流体力学シンポジウム, 2025 年 12 月.
- 河合成孝, 河合宗司 : 直交格子法における移動変形物体流れの壁面モデル LES, 第 39 回数値流体力学シンポジウム，2025 年 12 月.
- 河合宗司，山中宙也，服部泰知，河合成孝：音波による同期現象と理論予測，令和 7 年度 航空宇宙空力シンポジウム，2026 年 1 月.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

該当なし

書式（1）

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２回報告

2026 年 8 月 18 日提出

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，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か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現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）

本年度は，翼表面の圧力分布から流れ場を推定する問題に着目し，幅広いパラメータ範囲に渡って適用可能な手法を提案した．特に，流れのパラメータが判明していない状況下において，壁面圧力分布のみからパラメータを推定し，流れ場を推定する問題に取り組んだ．本研究では，NACA0012 翼周りの流れ場を対象とし，迎え角をパラメータとした数値計算を実施した．得られた数値計算結果を用いて，流れ場データとセンサ（壁面圧力分布）データを連結したスナップショットデータを構成し，POD 解析を実施することで，主要なモード分布を特定し，これらの主要なモード分布が迎え角の変化に応じて滑らかに変化することを確認した．さらに，モードが張る部分空間を Grassmann 多様体上の点として考え，迎え角に応じた部分空間の連続的な変化を曲線として表現した．この曲線を用いることで，流れのパラメータが判明していない状況下においても，与えられたセンサデータのみからパラメータを推定できることを示した．さらに，Grassmann 多様体上で補間を行うことで，推定されたパラメータに対応する流れ場の表現に適した部分空間を求め，その部分空間上で流れ場を推定する手法を提案した．提案手法は，学習データセットに含まれないパラメータに対するセンサデータが与えられた場合でも精度良く流れ場を推定することができ，幅広いパラメータ範囲に適用できることを実証した．

3. 研究目標の達成状況

本研究の遂行によって，流れ場のモードが張る部分空間のパラメータ依存性を Grassmann 多様体上において部分空間を補間する手法を適用することで，学習データに含まれていないパラメータの流れ場に対する Galerkin 射影に基づく ROMおよびセンサデータに基づく流れ場推定の枠組みを構築した．さらに，これらの解析において重要なモード行列の感度を Stiefel 多様体上の接ベクトルとして解釈し，幾何学的な解析手法を提案することができた．これらの成果は流れ場の特徴構造の集合を多様体上の幾何学に基づく新たな低次元モデリングの基盤を与えるものであり，幅広いパラメータに対する数値計算によって得られた大規模データを活用することで，能動的流体制御を実現するための堅牢な parametrized ROM の実現が期待できる．

4. まとめと今後の課題

本研究では，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，大規模数値計算を実施し，幅広いパラメータ範囲に渡る流れ場のデータベースを作成した．さらに，構築したデータベースを用いて，各パラメータに対する主要な構造をモードとして抽出し，モードが張る部分空間の集合を Grassmann 多様体上の部分集合として扱い，幾何学的に解析する手法を構築した．特に，多様体補間法を用いることで，学習データに含まれてないパラメータに対する部分空間を推定することができ，本手法を利用した Galerkin 射影に基づく ROM およびセンサデータを用いた流れ場推定手法を提案した．加えて，モードの感度を Stiefel 多様体上の接ベクトルとして解釈し，パラメータ変化に対するモード行列の感度解析を実施する手法も提案した．これらの手法を基礎とすることで，数値計算から得られた大規模データを用いて，低コストで流れ場を予測できる parametrized ROM の実現が期待できる．今後は，乱流場の表現に適した ROM を構築するために，spectral POD 法に基づく ROM と本研究の手法を組みあせた低次元モデルを開発し，より実用的な parametrized ROM を構築する予定である．

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

5.1 学術論文・学会発表（発表予定含む）

学術雑誌（解説等を含む）

国際学会

1. S. Sato, O. T. Schmidt: Parameterized reduced-order modeling based on matrix manifolds, APS Division of Fluid Dynamics (2024).
2. S. Sato: Estimation of subspace spanned by proper-orthogonal-decomposition modes for parametrized reduced-order model in aerodynamics, AIAA AVIATION Forum (2024).
3. S. Sato and O. T. Schmidt: “Parametric representation and sensitivity analysis of proper-orthogonal-decomposition modes on matrix manifolds,” APS Division of Fluid Dynamics (2025).
4. S. Sato: “Parametric analysis of locally optimal subspaces on the Grassmann manifold for fluid flow modeling and prediction, SIAM annual meeting (2026.)

国内学会・研究会等

1. 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).
2. 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).
3. 重清 雄大, 佐藤 慎太郎, 大西 直文, 「部分空間補間に基づく表面圧力データを利用した二次元翼周りの速度場推定」, 第 39 回数値流体力学シンポジウム (2025).
4. 佐藤 慎太郎, 「行列多様体に基づいた流体場の予測・制御に向けた研究」, 第 6 回 TREFOIL 研究会 (2025).
5. 佐藤 慎太郎, 「モード解析を用いたセンサ情報に基づく流れ場推定の試み」, 第 8 回 TREFOIL 研究会 (2026).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

書式（1）

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　2　回報告

2026 年 8 月 19 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，
東北大学リーンクロステック研究センター　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靭性が劣ることから、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、靭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．相分離モルフォロジーを散逸粒子動力学法（DPD）によって予測し，それをボクセルメッシュにマッピングすることで，海島相分離構造を模したナノスケール FEM を構築し，相分離樹脂の熱機械特性の均質化計算を実施した．これを繊維/均質化相分離樹脂をモデル化したミクロ FEM，積層構造をモデル化したマクロ FEM に接続し，成形時残留変形解析までを可能とした. 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．

2.2 マルチコンポーネント熱硬化性樹脂のガラス転移温度向上メカニズムの解明

トリアジン環を有する TEPIC を添加した多成分エポキシ樹脂について，WAXS，MD，量子化学計算を組み合わせ，ガラス転移点（Tg）の向上機構を分子レベルで解明した．TEPIC 添加量に対する Tg の非単調変化は架橋密度だけでは説明できず，環構造間に形成される非共有結合性の強い相互作用（π–π スタッキング）の数と強く相関していることを明らかにした．特にベンゼン–トリアジン間相互作用は強く，局所的に分子運動を拘束することで，高 TEPIC 濃度での Tg 上昇に寄与することを示した．

2.3 メゾスケール架橋不均一構造の形成過程の解明

エポキシ／アミン樹脂の配合比（EER）が硬化ネットワークの不均一性に及ぼす影響を，実験と粗視化 MD で解明した．低 EER では未反応 DGEBA を含む非連結分子が凝集し，高分岐な連結ネットワークと共存することで不均一性が増大した．一方，高 EER ではより均一だが直鎖的な構造が増加した．これらから，配合比が硬化度，メソスケール不均一性，ネットワークトポロジーを通じてガラス転移点を支配する機構を示した．

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

相分離樹脂を母材とする CFRP の残留変形に関しては完了し，破壊に関しては実験的な検証までを完了させた．また，相分離に限らずマルチコンポーネントや架橋不均一性など，微視的な構造不均一性が物性に与える影響を解明することができた．

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）

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** (2024), 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** (2025), 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** (2025), 179949

Yuuki Kinugawa, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, Kazuki Ryuzono, and Tomonaga Okabe, “Multiscale modeling of residual deformation in CFRP with reaction-induced phase separation”, International Journal of Mechanical Sciences, **306** (2025), 110779

Yuuki Kinugawa, Yoshiaki Kawagoe, Keigo Matsumoto, Masashi Ohno, Shoko Mishima, Takahiko Kawai, and Tomonaga Okabe, "Mechanism of glass transition temperature enhancement in multicomponent epoxy resins incorporating triazine rings", Physical Chemistry Chemical Physics, **28** (2026), 13821–13830（ジャーナルカバーにも採択）.

Yoshiaki Kawagoe, Shohya Yamamoto, Shoko Mishima, Tomonaga Okabe, "Stoichiometry-dependent network heterogeneity during epoxy curing: experiments and coarse-grained molecular dynamics simulations", Polymer, **362** (2026), 130504.

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.

Yoshiaki Kawagoe, Tadashi Watanabe, Yamato Hoshikawa, Kazuki Ryuzono, Keiichi Shirasu, and Tomonaga Okabe, “Multiscale modeling for bottom-up prediction of failure parameters of unidirectional carbon fiber reinforced composite lamina: from atoms to lamina-scale”, Twenty-fourth International Conference on Composite Materials (ICCM24), August 2025, US

（招待公演）Yoshiaki Kawagoe,“Combined Molecular Dynamics and Synchrotron X-ray Analysis of Structure–Property Relationships in Thermoset Resins”, Synchrotron Frontier 2026, March 11th, 2026

国内学会・研究会等

衣川裕貴，川越吉晃，生稲晃汰，干川大和，龍薗一樹，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

山本翔也，川越吉晃，岡部朋永，「熱硬化性樹脂の構造不均一性が力学特性に与える影響の実験および数値的研究」，第５０回複合材料シンポジウム 2025 年 9 月 19 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

書式（1）

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	2024.12～2026.03
報告回数	第 2 回報告

2026 年 8 月 18 日提出

油潤滑静圧軸受のエネルギー効率向上

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

グリーントライボロジーはカーボンニュートラル実現に向けた重要な研究分野であり，軸受における摩擦低減と省電力化はその中心的課題の一つである．静圧軸受は外部から加圧した潤滑油膜により荷重を支持する高精度機械要素であるが，油膜内の粘性せん断により生じる動力損失が装置全体のエネルギー効率を低下させる要因となっている．近年，軸受表面への微細テクスチャ（微小溝）加工がトライボロジー特性改善の有効な手段として注目されているが，静圧軸受スピンドルにおいてテクスチャ形状・配置方向が摩擦・漏れ流量・剛性に及ぼす影響についての体系的な知見は十分に得られていなかった．本研究の目的は，ANSYS Fluent を用いた CFD 解析および解析モデルの構築により，矩形微細テクスチャが油潤滑静圧ジャーナル軸受の摩擦損失に及ぼす影響を定量的に明らかにし，負荷容量（LCC）や剛性を損なうことなく軸受効率を向上させる設計指針を確立することである．

1.2 研究期間内の最終目標

・streamwise（すべり方向に平行）および transverse（直交）の 2 方向の矩形テクスチャについて，円周方向ランド（D1）と軸方向ランド（D2）の両流体領域で CFD 解析を行い，壁面せん断応力・漏れ流量・動力損失への影響を明らかにする．

・摩擦低減メカニズムを解明し、テクスチャ形状パラメータと摩擦低減率の関係を解析モデルで表現する．

・テクスチャが負荷容量（LCC）および剛性に及ぼす影響を評価し，絞り（キャピラリ restrictor）の再最適化による軸受性能回復策を示す．

・解析モデルを設計最適化へ展開する：加工制約下での最適テクスチャ形状を特定し，複数の運転速度域へ解析を拡張し，代替溝形状（三角溝／V 溝など）と矩形溝を比較する．

・得られた知見を国際会議・学術誌を通じて公表する．

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

2.1　CFD 解析による摩擦低減効果とメカニズムの解明

静圧軸受のランド部を円周方向（D1：純クエット流れ）と軸方向（D2：クエット・ポアズイユ複合流れ）の 2 つの流体サブドメインに分割してモデル化する新たなアプローチを提案し，ANSYS Fluent を用いて解析を行った．矩形微細溝を streamwise 方向・transverse 方向にそれぞれ配置した複数のテクスチャ条件について CFD 解析を実施した結果，テクスチャ表面近傍にリッド駆動キャビティ渦（lid-driven cavity vortex）が形成され，これが移動壁からのせん断応力をバルク流れから部分的に切り離すことで摩擦を低減する物理メカニズムであることを明らかにした．円周方向ランド（D1：純クエット流れ）では，移動壁に transverse テクスチャを施した場合に壁面せん断応力が最大 48.3%低減し，streamwise テクスチャ（約 33%）を大きく上回ることを確認した．軸方向ランド（D2）ではポアズイユ流れの重畳により transverse 方向の優位性が縮小し，最適構成に用いた streamwise テクスチャはこのランドで約 36%のせん断応力低減を達成した．transverse テクスチャ（D1）と streamwise テクスチャ（D2）を組み合わせた最適構成では，軸受全体の総動力損失を基準（スムーズ表面）の 509 W から 345 W へ，約 32%低減できることを実証した（図参照）．この構成では軸方向ランドの漏れ流量が約 23%増加し，負荷容量（LCC）が 10.2%，軸受剛性が 1.0%それぞれ低下したが，いずれも絞り径の再最適化（約 5%の口径拡大）により実質的に回復可能であることを示した．

2.2　解析モデルの構築と設計最適化への展開

CFD 解析結果に基づき，テクスチャ形状パラメータ（溝幅，溝深さ，面積比等）と摩擦低減率・漏れ流量を関係づける解析モデルを構築し，追加の 3 ケースの CFD 解析との比較により約±3%の精度で検証した．本モデルにより，CFD では計算コストの大きい広範なテクスチャ形状・運転速度条件を効率的に探索することが可能となった. 加工制約を考慮した結果，溝深さ約 9 μm，溝間隔約 10 μm，面積比約 0.64 という最適な矩形溝形状を特定し，負荷容量低下を 5%以内に抑えられることを示した．さらに最適化を 1500～3000 rpm の運転速度範囲に拡張し，この速度域で約 163 W（約 32%）の軸受全体の動力節減が見込まれることを予測し，CFD に基づく基準運転点の推定値と整合することを確認した. 比較のため三角溝（V 溝）形状についても CFD 解析を行った結果，矩形溝を用いた主設計よりも摩擦低減効果が小さいことが分かり（円周方向ランドで約 32%対 48%，軸方向ランドで約 17%対 36%），矩形溝がより優れた形状であることが確認された.

3. 研究目標の達成状況

本研究期間の目標であった「軸受性能（LCC・剛性）を損なわない 30%以上の動力損失低減」を，CFD 解析により実証した最適構成（32.2%低減）として達成した．摩擦低減メカニズムの解明および予測的解析モデルの構築という目標も達成し，当該モデルは CFD 結果に対して約±3%の精度で検証され，加工制約下での最適テクスチャ形状の特定，および 1500～3000 rpm の運転速度範囲への最適化の拡張（約 163 W，約 32%の動力節減を予測）にも適用された.

4. まとめと今後の課題

本研究では，CFD 解析と解析モデルの構築を通じて，矩形微細テクスチャによる静圧軸受の摩擦低減メカニズムを解明し，最適なテクスチャ配置により総動力損失を約 32%低減できることを明らかにした．また，負荷容量・剛性への影響を絞り再設計により回復可能であることを示し，実用的な設計指針を提示した．さらに，検証済みの解析モデル（±3%精度）を用いて加工制約下での最適テクスチャ形状を特定し，複数の運転速度域へ設計を拡張するとともに，三角溝（V 溝）形状との比較により矩形溝が優れた形状であることを確認した．今後の課題として，これまで等温解析にとどまっていた本研究を熱流体連成解析（THD 解析）へ拡張し，生分解性潤滑油等の環境配慮型潤滑油への適用，キャビテーションの影響評価，機械学習を活用した多目的最適化への展開などが挙げられる．これらは 2026 年度以降の研究課題として計画している．

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）

学術雑誌（解説等を含む）

- CFD-based investigation of the friction-reduction mechanism and power-loss performance of textured oil-lubricated hydrostatic bearings, Tribology International 誌へ投稿準備中.
- Analytical model and manufacturing-constrained design optimization of surface micro-texture for hydrostatic bearings, Precision Engineering 誌へ投稿を計画中.

著書

該当なし

国際学会

- Fedorynenko, D., Ohnishi, N., and Nakao, Y.: Simulation study on viscous friction reduction effect of textured oil-lubricated hydrostatic bearings, Proceedings of EUSPEN's 26th International Conference & Exhibition, Kraków, Poland (2026), pp.166-169.
- Fedorynenko, D., Ohnishi, N., and Nakao, Y.: Friction Reduction of Hydrostatic Journal Bearings with Rectangular Surface Microtexture, International Conference on Precision Engineering (ICPE) 2026, Nagoya, Japan (2026, in press).

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

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01APR25
研究種別	特定研究
利用期間	2025.04～2027.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 3 月 4 日提出

電磁場によるプラズマ中のイオン加速過程のマルチスケールシミュレーション

大西　直文，河合　涼太郎，Shlok Shrivastava，Dylan Bronville
東北大学大学院工学研究科　教授，D1，D1，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

極薄のグラフェンターゲットに高強度レーザーを照射することで, 100 MeV を超える高エネルギーイオンが得られることが実験的に確かめられているが，その加速過程を説明できるモデルは未だ提案されていない．申請者らのこれまでの研究によって，レーザー照射の初期過程におけるグラフェンの特性である高い熱伝導性等が後のイオン加速に影響を及ぼすことが示唆されているが，空間的にも時間的にも広いスケールに渡る解析が必要となる．高強度レーザーによって 100 MeV を超える高エネルギーイオンを得ることができれば，小型の加速器として多岐に渡る医療応用や工学応用が期待できるため，その原理の解明は世界的にも注目される成果となるだけでなく，このように非プラズマ状態の物質から高エネルギー密度となるプラズマ現象を解析する手法が確立されれば，その計算手法の宇宙プラズマや核融合プラズマの解析への適用も期待できる．

1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内においては，高強度レーザー照射時におけるグラフェンターゲットのメインパルス到着時までのイオン化度，温度，密度などの初期パラメータの取得を目指す．先行研究により，グラフェンはメインパルス前に発生するレーザーに対して他の物質よりも堅牢性が高いことが示されている．本研究では，レーザーと電子の相互作用を計算する時間依存密度汎関数法から進め，グラフェンの二次元性を考慮できる粒子法である古典分子動力学計算によるアプローチでその堅牢性を明らかにする．

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 グラフェン電子のレーザー吸収特性

グラフェンの吸収率は 2.3%であることが理論的にも実験的にも明らかになっているが，この数値はレーザーが低強度の線形領域での結果である．レーザー強度が高くなるにつれて電子が非線形な挙動を取り始めるとこの数値は大きく変化する．グラフェンのような半導体はレーザー照射により基底状態の電子は励起状態に移行するが電子はフェルミ粒子であるため，２つの電子が同時に同じ状態になることはない．高強度レーザー照射時ではこの過飽和吸収と呼ばれる現象が励起状態下において顕著に見られ，吸収率が低下する．固体電子の挙動は波動関数を解くことで得られるが，この手法は多大なコストがかかる．そこで電子密度を変数とした時間密度汎関数法を用い大きく計算コストを削減できる手法を用いてレーザーとグラフェン電子の相互作用を計算した．その結果，吸収率の低下が光強度と電子の緩和時間に大きく依存することを明らかにした．

2.2 粒子法によるグラフェンの堅牢性の実証

粒子法の古典分子動力学計算は通常，電子の挙動は扱うことができない．しかしレーザーのエネルギーは初め電子に供給され，次に原子に輸送される．そこで本研究では電子温度を考慮した熱伝導方程式と古典分子動力学計算をカップリングしたモデルをグラフェン用に開発した．そして時間密度汎関数法から得られた吸収率をこの計算に適用することで，グラフェンに対して高強度レーザー照射し，その結果としてメインパルスの前に発生するレーザーによってグラフェンは十分に堅牢であることが示された．

3. 研究目標の達成状況

本研究ではグラフェンが高強度レーザー照射よる影響を第一原理から始めることでその堅牢性を明らかにした．この研究はターゲットへのレーザー照射の包括的かつ段階的なアプローチであり，その物理現象の理解を深めるものである．

4. まとめと今後の課題

レーザーがグラフェンに与える影響を第一原理的に考えることは，その堅牢性を示すのに有効であることがわかった．電子系，原子系へのレーザー照射を段階的に計算することで物質が破壊されるまでの包括的な理解が進む．今後はメインパルス照射に向けた初期パラメータの取得に向けたモデルの構築やターゲットのイオン化過程を詳しく調査していく．

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）

・ 該当なし

著書

・ 該当なし

国際学会

・ Ryotaro Kawai, Masayuki Takahashi, Yasuhiro Kuramitsu, Kazuhiro Yabana and Naofumi Ohnishi, “Study on the structural changes of the target during the initial stage of laser-ion acceleration using ab-initio and classical molecular dynamics calculations,” International conference on high energy density sciences 2025, 2025/4/21-4/25 (Poster presentation, Yokohama, Japan).

- **Ryotaro Kawai**, Masayuki Takahashi, Yasuhiro Kuramitsu, Kazuhiro Yabana and Naofumi Ohnishi, “Comprehensive numerical analysis of laser-ion acceleration including prepulse plasma generation process,” 13th International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, 2025/9/14-9/19 (Poster presentation, Tours, France).
- **Ryotaro Kawai**, Masayuki Takahashi, Yasuhiro Kuramitsu, Kazuhiro Yabana and Naofumi Ohnishi, “Prepulse-induced saturable absorption and breakdown in graphene as a laser-driven ion acceleration target：multi-level analysis with DFT and classical MD,”2nd international symposium on Ab-initio electron dynamics simulation, 2026/3/11-13(Poster presentation, Nara, Japan).

国内学会・研究会等

- **Ryotaro Kawai**, Masayuki Takahashi, Yasuhiro Kuramitsu, Kazuhiro Yabana and Naofumi Ohnishi, “Prepulse-induced electronic excitation and initial defects: TDDFT–MD multiscale calculations on graphene”, International workshop on multiscale laboratory astrophysics with the aid of data science, 2026/1/7-1/9(Oral presentation, Tainan City, Taiwan).

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

- 該当なし

書式（1）

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01JUL25
研究種別	特定研究
利用期間	2025.07～2026.03
報告回数	第　1　回報告

2026 年 07 月 17 日提出

超高速最適制御に向けた非定常流体現象の機械学習位相振幅モデリング

深見　開
東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

流体システムにおいて見られるカルマン渦の放出やフラッターといった自励振動現象は、生物学や化学など様々な分野に普遍的に存在するリズミカルな現象と同様に、多くの工学的応用において重要である。しかしながら、このような周期的な流体現象を制御することは、流体特有の高次元性やマルチスケールな性質、さらには強い非線形性が壁となり、極めて困難である 。このような高自由度非線形系を解析するための有効なアプローチとして、高次元のダイナミクスを単一の位相変数に縮約する位相縮約法がある 。位相モデルを用いることで制御則の構築は容易になるが、一方で振幅のダイナミクスを無視して周波数の同期制御を行うと、制御入力によって振幅が予期せず増幅・減衰し、揚力係数といった重要な空力特性を劣化させるリスクが生じる。本研究は、この課題を解決するため、スパースなセンサ情報と機械学習に基づく位相・振幅縮約法を融合し、空力係数の振幅変動に対してペナルティを課しながら、翼型周辺の非定常な後流の放出周波数を高速に同期する新たな手法を確立することを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究における最終的な目標は、膨大な計算コストを要する全流動場の数値シミュレーション情報に直接依存することなく、翼表面に配置されたごく少数のスパースセンサ情報のみから、制御に最適な空間的位置および時間的タイミングを示す「位相および振幅の感度場」を推定するデータ駆動型フレームワークを構築することである。さらに、この感度場を利用して、空力応答の振幅変動を最小限に抑制しつつ、システムを目標の周波数へと最速で同期させるための最適な制御入力波形を導出することを目指す。

2. 研究成果の内容

2.1 スパースセンサ情報に基づく低次元モデリングと感度場の構築

本研究では、まず高次元な流体ダイナミクスを低次元空間で扱うため、非線形ダイナミクスのスパース同定法（SINDy）を用いて、翼表面上の 3 つのセンサ計測値からなるスパースセンサ空間における低次元の動的モデルを構築する。次に、この低次元モデルに対して随伴法を適用し、センサ空間内における位相および振幅の感度関数を解析的に導出する。ここで得られた低次元場における感度関数を高自由度流体場へと拡張するために、多層パーセプトロンを用いた非線形デコーダを導入する。これにより、計算コストの非常に高い全場での随伴解析を回避しつつ、わずか 3 つのセンサデータから高次元の位相・振幅感度場を空間的・時間的に再構築することができる。

2.2 振幅ペナルティを考慮した最適波形による高速同期制御

構築された位相および振幅の感度場を利用して、目標周波数への同期速度を最大化しつつ、振幅の変動に対してペナルティを課す最適化問題を定式化する。この手法の有効性を検証するため、失速後迎角を持つ様々な NACA 翼型の非定常な周期放出後流を例題に調査を行う。本手法で設計された最適波形入力を用いることで、単純な正弦波加振を用いた場合と比較し、8 倍の速度で後流の放出周波数を目標値へと同期させることができる。さらに、振幅ペナルティを導入した最適波形は、振幅を考慮せずに設計された最適波形と比較して、揚力係数の振幅変動を 31%も強力に抑制することができる。

3. 研究目標の達成状況

本研究で掲げた目標は、想定を上回る水準で達成された 。第一に、限られた 3 つのスパースセンサ情報のみから流動場の感度場を推定し、その情報を用いて流体システムを高速に同期させるための制御ルールを確立できたことは、学術的意義が高いと言える。さらに、単純な周波数の同期にとどまらず、揚力係数における過度な振幅変動を制御によって抑え込むことに成功した。このような振幅変動の抑制は、流体-構造連成系において対象物に予期せぬ疲労やダメージを与えることを防ぎ、空力性能の劣化を回避できることを意味しており、工学的な観点から有意義である。さらに本研究における位相に基づく知見を、情報理論的機械学習や時変平均流を持つ流れのモード分解、また高レイノルズ数流れの解析などに拡張することもできた。

4. まとめと今後の課題

本研究は、非線形機械学習によるスパースセンサの再構築技術と位相・振幅縮約法を融合させることで、非定常な翼型後流の放出周波数を高速に制御しつつ、空力特性の振幅変動を制約する新たなデータ駆動型フレームワークを提案した。シミュレータに依存しないこのデータ駆動的アプローチは、数値ソルバを持たない実験環境への適用など、実社会への実装に向けて大きな可能性を秘めている。

今後の課題としては、現在の低レイノルズ数かつ二次元の翼型流れにおける検証をさらに推し進め、より高レイノルズ数領域における複雑な三次元流れへの応用が挙げられる 。また、単一周波数を持つ流れだけでなく、複数の周波数成分が混在する流れへと本フレームワークを拡張していくことが必要である 。さらに、本手法は対象の支配方程式に依存しない汎用的なアーキテクチャを有しているため、航空流体力学の枠を超えて、周期的なリズミカル・ダイナミクスを示す化学反応系や生物学系などの他分野への応用展開も今後の重要な展望であろう。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌（解説，発表予定等を含む）

・D. Beppu, V. Godavarthi, K. Yawata, H. Nakao, K. Fukami, “Amplitude-penalized fast frequency modification of post-stall laminar airfoil wakes with data-driven sparse sensor reconstruction," to be submitted.

・K. Yawata, R. Sakuma, K. Fukami, K. Taira, H. Nakao, “Phase autoencoder for rapid data-driven synchronization of rhythmic spatiotemporal patterns," Physical Review E, 112, 064211, 2025

・K. Fukami, Y. Iwatani, S. Maejima, H. Asada, S. Kawai, “Compact representation of transonic airfoil buffet flows with observable-augmented machine learning,” Journal of Fluid Mechanics, 1021, A39, 2025

・K. Taira, G. Rigas, K. Fukami, “Machine learning in fluid dynamics: A critical assessment," Physical Review Fluids, 10, 090701 (invited), 2025

・K. Fukami, L. Smith, K. Taira, “Extreme vortex-gust airfoil interactions at Reynolds number 5000," Physical Review Fluids, 10, 084703, 2025

国際学会

・[Invited] K. Fukami, “Revealing unsteady flow physics with nonlinear machine learning,” in the seminar at the Department of Chemical Engineering, Kyoto University, Kyoto, Japan, Mar 2026.

・[Invited] R. Koshikawa, R. Araki, Q. Liu, K. Fukami, “Extracting transient causal modes of unsteady aerodynamics via information-theoretic manifold learning," in the Japan-Korea Fluid Mechanics Online Workshop (JK-FLOW), online, Feb 2026.

・H. Shin, K. Fukami, S. Lee, D. You, S. Bagheri, “Interpreting and modeling surface roughness effects via drag-augmented manifold learning," in the 78th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Houston, Texas, USA, Nov 2025.

・K. Fukami, R. Araki, “Extracting time-varying causal modes of aerodynamic flows with information-theoretic machine learning," in the 78th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Houston, Texas, USA, Nov 2025. (chosen as an interact session talk on Machine Learning for Fluid Mechanics)

・K. Fukami, R. Araki, “Machine-learning-based informative mode analysis for airfoil

wakes," in the 22nd International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, Japan, Nov 2025.

・[Invited] K. Taira, G. Rigas, K. Fukami, "Machine learning in fluid dynamics: A critical assessment," in the Physical Review Fluids Journal Club, online, Nov 2025.

・[Invited] K. Fukami, "Data-driven analysis of extremely gusty aerodynamic flows," in the JSME-KSME Joint Symposium on Computational & CAE 2025 at Gwangju Institute of Science and Technology, Gwangju, Korea, Aug 2025.

国内学会・研究会等

・深見 開, 荒木 亮, 越川 亮, Qiong Liu, "Information-theoretic machine learning for causal analysis of aerodynamics," 数学と諸分野の連携に向けた若手数学者交流会(第 7 回), 東京, 2026 年 3 月.

・別府 大輝, Vedasri Godavarthi, 深見 開, "Effect of different angle of attack and thickness on phase dynamics for laminar-airfoil wakes," 日本機械学会 東北支部 第 61 期総会・講演会, 仙台, 2026 年 3 月.

・牛田 悠太, 別府 大輝, 深見 開, "Cylinder-wing interactions at low Reynolds numbers: a parametric study," 日本機械学会 東北支部 第 61 期総会・講演会, 仙台, 2026 年 3 月.

・越川 亮, 荒木 亮, Qiong Liu, 深見 開, "Causality-based modal analysis of unsteady aerodynamics with information theory-supported machine learning," 日本機械学会 東北支部 第 61 期総会・講演会, 仙台, 2026 年 3 月.

・Golsa Tabe Jamaat, 岡谷貴之, 深見 開, "Super-resolving turbulent flows across multiple data sources with unpaired image-to-image translation," 日本機械学会 東北支部 第 61 期総会・講演会, 仙台, 2026 年 3 月.

・Shaghayegh Zamani Ashtiani, 深見 開, "Data-driven time-dependent basis analysis for extreme aerodynamic flows," 日本機械学会 東北支部 第 61 期総会・講演会, 仙台, 2026 年 3 月.

・深見 開, 岩谷 優汰, 前島 颯樹, 淺田 啓幸, 河合 宗司, "Observable-augmented manifold learning for transonic airfoil buffet flows," 日本機械学会 東北支部 第 61 期総会・講演会, 仙台, 2026 年 3 月.

・[招待講演] 深見 開, "Taming unsteady aerodynamic flows with nonlinear machine learning: phase and causal perspectives," 公立はこだて未来大学 複雑系知能セミナー, 函館, 2026 年 2 月.

・荒木 亮, 越川 亮, Qiong Liu, 深見 開, "因果関係に基づいた翼周り流れのモード分解," 日本機械学会 第 2 回技術講演・交流会, 東京, 2026 年 1 月.

・[招待講演] 深見 開, "非線形機械学習を用いた流体解析の基礎と実践応用：流れ場の再構築、モデリング、最適制御," 日本テクノセンター オンラインセミナー, 2025 年 12 月.

・S. Zamani Ashtiani, K. Fukami, "Data-driven time-dependent modal analysis for extreme vortex-gust airfoil interactions," 第 39 回数値流体シンポジウム, 北九州, 2025 年 12 月.

・R. Koshikawa, R. Araki, Q. Liu, K. Fukami, "Transient causal modal analysis of

unsteady aerodynamics: A global learning approach," 第 39 回数値流体シンポジウム, 北九州, 2025 年 12 月.

・K. Fukami, R. Koshikawa, R. Araki, “Transient causal modal analysis of unsteady aerodynamics: A local learning approach," 第 39 回数値流体シンポジウム, 北九州, 2025 年 12 月.

・[招待講演] 深見　開, “Data-oriented modeling and control of unsteady flows: generalized super-resolution and manifold learning,” 2025 年度研究集会「生物流体力学におけるデータ処理」, 京都, 2025 年 10 月.

・荒木 亮, 深見 開, “非定常剥離翼流からの情報理論的機械学習を用いた時変因果モード抽出,” 第 63 回飛行機シンポジウム, 沖縄, 2025 年 10 月.

5.2 その他（特許、受賞、マスコミ発表、等）

特になし

次世代融合研究システム　CPU利用状況

集計対象期間：2025年4月～2026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	
	2025/4 - 2026/3		2025/4 - 2026/3		2025/4 - 2026/3	
	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[%]
電磁機能流動研究分野	2578.0	0.1%	24454.8	68.5%	0.0	0.0%
融合計算医工学研究分野	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	7974.1	0.2%	400.0	1.1%	1967.7	17.5%
航空宇宙流体工学研究分野	344484.1	10.5%	143.2	0.4%	955.3	8.5%
宇宙熱流体システム研究分野	82849.6	2.5%	1950.2	5.5%	0.0	0.0%
自然構造デザイン研究分野	12306.8	0.4%	141.6	0.4%	0.0	0.0%
伝熱制御研究分野	173164.4	5.3%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
先進流体機械システム研究分野	594301.8	18.0%	1704.9	4.8%	0.0	0.0%
計算流体物理研究分野	638613.9	19.4%	659.1	1.8%	0.0	0.0%
非平衡分子気体流研究分野	45982.2	1.4%	86.4	0.2%	0.0	0.0%
分子熱流動研究分野	323901.4	9.8%	6.9	0.0%	0.9	0.0%
量子ナノ流動システム研究分野	468730.4	14.2%	2480.8	6.9%	943.9	8.4%
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	105794.4	3.2%	0.0	0.0%	4903.3	43.5%
生体分子流動システム研究分野	159429.3	4.8%	0.0	0.0%	1826.9	16.2%
高速反応流研究分野	38381.0	1.2%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
地殻環境エネルギー研究分野	2113.6	0.1%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
エネルギー動態研究分野	227007.6	6.9%	0.3	0.0%	260.2	2.3%
混相流動エネルギー研究分野	11953.2	0.4%	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	2615.4	0.1%	0.1	0.0%	401.7	3.6%
反応性流動システム研究分野	49598.2	1.5%	3700.6	10.4%	0.0	0.0%
流動・材料システム評価研究分野	422.6	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
その他	0.0	0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
合計	3292202.2	100.0%	35728.9	100.0%	11260.0	100.0%