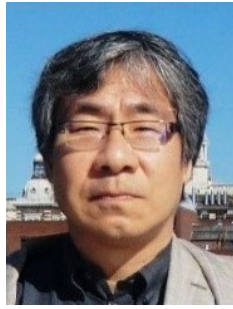


わたしたちの研究 (13) 熱物理工学研究室



黒瀬良一
(H5/1993卒)



松本充弘
(S56/1984卒)



若林英信
(H3/1991卒)



Abhishek L. Pillai
(2010卒)

1. 本研究室の概要と教員紹介

機械理工学専攻熱物理工学研究室の現体制は、黒瀬が本研究室の教授として着任した2017年7月から始まりました。本研究室の前任教授は、2013年3月に退職された牧野俊郎先生です。本研究室は、2022年2月現在、黒瀬良一教授、松本充弘准教授、若林英信助教、Abhishek L. Pillai助教、研究員2名、事務補佐員2名、博士後期課程学生7名、修士課程学生13名、学部卒研究生10名、研究生2名の計40名が所属する比較的大所帯の研究室です (図1、<http://www.tse.me.kyoto-u.ac.jp/>)。また、

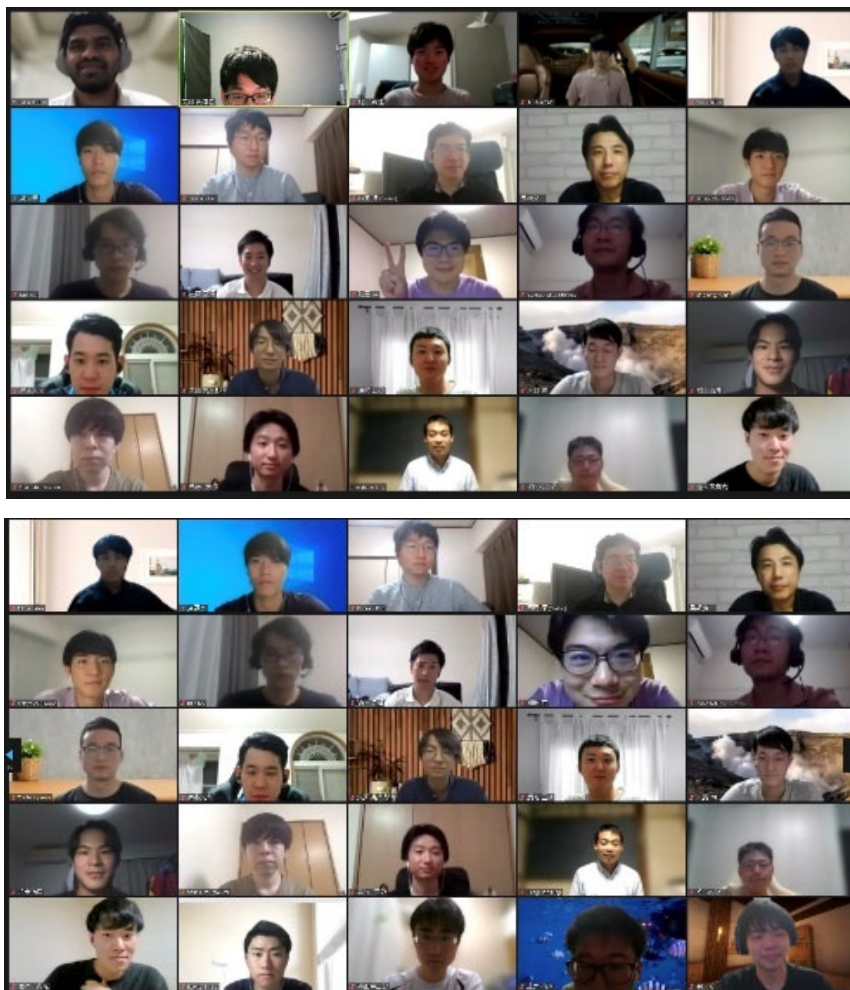


図1 ZOOM懇親会の様子

このうち、教員を含めて10名が中国、インド、韓国に国籍をもつ外国人であり、にぎやか、かつ国際色が豊かな研究室でもあります。本研究室では、熱力学、伝熱学、流体力学、分光学、電磁気学を基礎として、流体および固体の熱力学性質、熱輸送性質、熱ふく射性質、ならびにそれらの複合現象をナノ～マクロスケールで解明することを目的とした研究に取り組んでいます。また、このような基礎研究に基づいて、“ものづくり”の工学を支える数値解析技術および計測技術の開発・高度化を進めています。

以下に4名の教員の紹介を簡単にさせていただきます。

黒瀬は、1998年に九州大学大学院工学研究科化学機械工学専博士後期課程を修了後、(一財)電力中央研究所に入所し、2006年4月に本専攻環境熱流体工学研究室(2016年3月に退職された小森 悟先生の研究室)の助教授(後に職名変更により准教授)に着任しました。燃焼流や混相流など、様々な熱流体現象のメカニズム解明とモデリングを研究テーマとしています。

松本は、1989年に本学大学院理学研究科の博士後期課程(化学専攻)を修了して博士(理学)を取得、米国コーネル大学での博士研究員、名古屋大学工学部応用物理学科の助手・講師を経て、1997年に本専攻(当時は機械物理工学専攻)熱物理工学分野の助教授(後に職名変更により准教授)として着任しました。マイクロ・分子スケールでのさまざまな物質の特性をモデリングと数値シミュレーションにより解明することを主な研究テーマとしています。

若林は、1995年に京都大学大学院博士後期課程退学(物理工学専攻)、機械物理工学専攻(改組により機械理工学専攻)・助手(職名変更により助教)に着任しました。実在表面のふく射性質とその測定法を研究テーマとしています。

Pillaiは、2010年6月にVisvesvaraya National Institute of Technology (インド)の機械工学科を卒業、2013年7月にIndian Institute of Technology, Bombay (インド)の航空工学専攻修士課程を修了の後、本専攻研究生を経て2015年4月に博士後期課程入学、2018年3月に同課程修了し、2019年11に助教に着任しました。燃焼騒音や燃焼振動など、燃焼が引き起こす複雑な現象の解明とモデリングを研究テーマとしています。

以下に、いくつかの研究例を紹介します。

2. 研究紹介

2. 1 燃焼に関する研究

我が国は、温室効果ガスの排出を2030年度に13年度比で46%削減、2050年までに実質ゼロとすることを宣言しました。温室効果ガスとして寄与が大きい二酸化炭素（CO₂）の排出量の大部分が化石燃料（石炭、石油、天然ガス）の燃焼によるものであるため、「燃焼」というワード自体にあまり良い印象を持たれていない方も多いかもかもしれません。しかし、昨今、様々な分野で注目されている風力や太陽光などの再生可能エネルギーを使って水を電気分解して製造、貯蔵、輸送が可能な水素（H₂）、いわゆるグリーン水素（一方、石炭から製造する水素をブルー水素と呼ぶ）やアンモニア（NH₃）を燃料とし、燃焼させてエネルギーを取り出す方法が注目されています。例えば、このような水素やアンモニアをガスタービンで燃やしてエネルギーを得る発電は、CO₂排出量がゼロとなるため、究極のカーボンフリー発電システムとも言われています。しかし、水素は燃焼速度が速い（天然ガスの約5倍）ことによって生じる火炎の逆流（フラッシュバック）や希薄燃焼条件で発生しうる火炎の不安定化と圧力変動の相互作用（燃焼振動）がガスタービンの損傷を引き起こす危険性があること、また、アンモニアは逆に燃焼速度が遅い（天然ガスの約5分の1）ことによって生じる失火が起こりやすくなることから、これら異常燃焼の対策が不可欠となっています。

本研究室では、水素やアンモニアの燃焼メカニズムの解明とその数理モデリングに関する研究を、最新の数値シミュレーション技術を駆使することにより取り組んでいます。また、まだしばらくは燃焼からの脱却は難しいと思われる、航空機用エンジンやロケットエンジンの設計・開発、および最適操作条件の選定に有用な数値シミュレーション技術の高度化に関する研究も進めています。図2に、水素燃焼のフラッシュバック[1]および吹き上がり火炎[2]の数値シミュレーションの一例を示します。これらの研究により、メタン（CH₄）を主成分とする天然ガスの燃焼特性と水素の燃焼特性の違いを明らかにしてきました。さらに、その燃焼特性を精度良く予測するための数理モデルについても検討を進めています。また、図3に、航空機用ジェットエンジン燃焼器を対象に実施した、噴霧乱流燃焼場の数値シミュレーションの一例[3]を示します。この数値シミュレーションは、当時世界一となったスーパーコンピュータ「京」を用いて、航空機用ジェットエンジン燃焼器全体を対象に、その中で起こる噴霧燃焼現象を世界で初めて解いたもので

あり、燃焼器の丸ごと解析が可能な時代に突入したことを示す象徴的な成果となりました。さらに、噴霧燃焼に関しては、液体燃料の微粒化、蒸発現象に関する厳密な数値シミュレーションを実施し、それらのメカニズムの一端を明らかにすることにも成功しています[4]。これらの数値シミュレーションで作成したアニメーションについては、本研究室のHPのギャラリーのページ (<http://www.tse.me.kyoto-u.ac.jp/study/gallery.php>) に置いてありますので、是非ご覧ください。

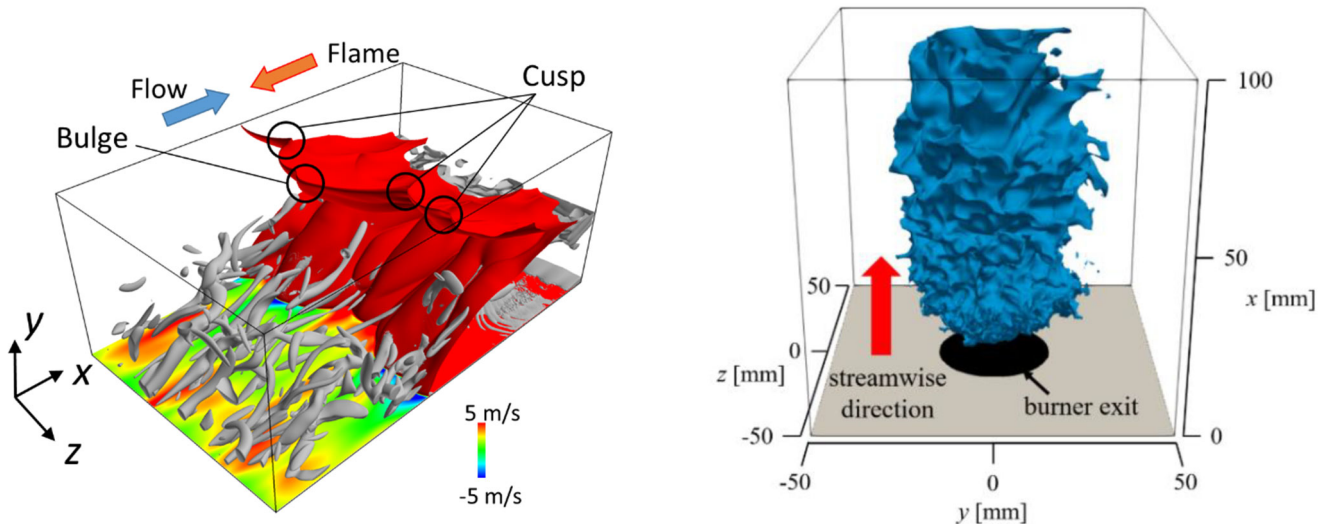


図2 水素燃焼の数値シミュレーション：左図、フラッシュバック（赤色は火炎温度等値面、灰色は乱流渦）；右図、浮き上がり火炎（青色は火炎温度等値面）

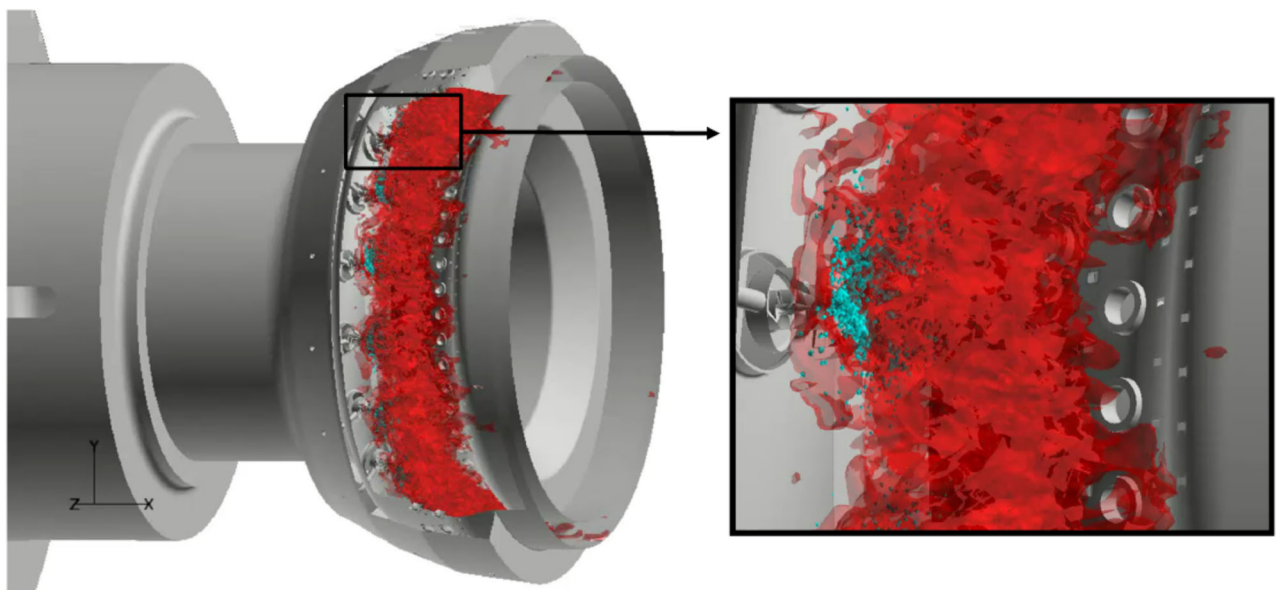


図3 航空機用ジェットエンジン燃焼器内の噴霧乱流燃焼場の数値シミュレーション（赤色は火炎温度の等値面、青色は燃料噴霧分布）

ご存じの方も多いかと思いますが、スーパーコンピュータ「京」に続いて、最近、スーパーコンピュータ「富岳」もスーパーコンピュータの性能世界一となりました。燃焼の数値シミュレーションは、この「富岳」をはじめとするスーパーコンピュータ性能の飛躍的な向上に伴い、より高精度かつ高速な計算が可能となってきています。本研究室では、現在、2つの文部科学省・「富岳」成果創出加速プログラム、『スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用(2020~2022)』および『「富岳」が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン(2021~2025)』の下、燃焼数値シミュレーションとデジタルツインやAIとの連携を進めるべく、研究を行っています。また、黒瀬は、「燃焼システム用次世代CAEコンソーシアム」(<https://www.riken.jp/collab/consortium/cngc/>) を立ち上げており、この中でも、(1) 燃焼を扱う装置の設計や最適操作条件の選定を支援するためのツールとしてのCAEの信頼性・有用性の検証し、その「富岳」等の高性能コンピュータを利用した高精度化・高速化について検討を行うこと、(2) 学术界と産業界の緊密な議論及び情報交換を促すことで、次世代の燃焼システムのものづくりフレームワークを産学官で連携して構築し、その迅速な実用化を目指すこと、(3) 本コンソーシアムでの議論を国策や次世代スパコンの仕様に反映させる活動に取り組み、産業界の意見を集約し代表する役割も果たすことを目的として、活動を行っています。

2. 2 マイクロ／ナノスケールの物性に関する研究

さまざまな物質の物性を原子・分子スケールで解明する試みは理工学の広い分野で半世紀以上にわたって行われていますが、計算機の発達とともにその広がりが飛躍的に増しています。機械工学の関連分野において、本研究室では、これまでに、液体の相変化や輸送現象を対象に、nmスケールのサイズをもつ微小気泡(ウルトラファインバブル)の物性評価、核沸騰の最初期過程の探究、液晶の構造発現機構などを、古典力学(ニュートン運動方程式)に基礎を置く分子シミュレーションによって調べてきました。図4は、関節潤滑における生体高分子(例えばヒアルロン酸)の寄与を大規模分子シミュレーションで調べた例です[5]。

一方、固体中の輸送現象の代表例としては、格子振動(フォノン)が担うエネルギー輸送、すなわち熱伝導のミクロ機構の解明を扱っています。半導体素子の

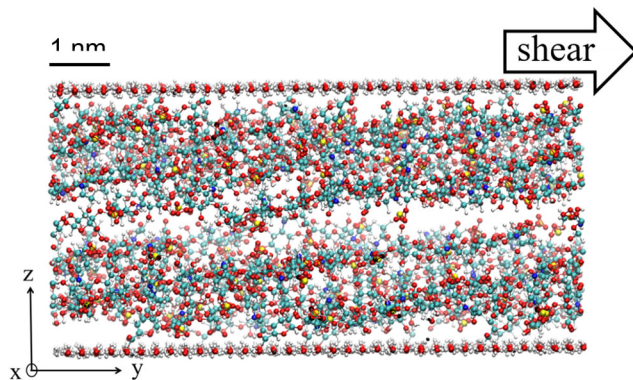


図4 ずり流動下でのヒアルロン酸水溶液のシミュレーション例；水分子は表示していない

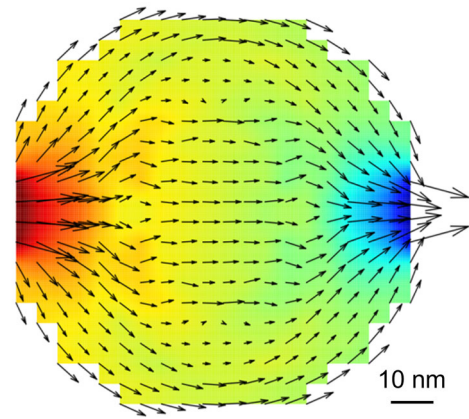


図5 フォノンシミュレーションで得られる、プロブ状ナノ構造体内部の温度分布（カラーマップ）と局所熱流束（矢印）の例

微細化などにより μm スケールの熱輸送が問題になることが増えていますが、そのような系ではフォノンの平均自由行程と系の代表長さが同じオーダーとなり、通常の熱伝導方程式では記述できなくなります。それに替わり、固体物理学と統計熱力学の知見に基づいてフォノンの相互作用を扱うような数値計算手法をいくつか提案していますが、そうしたフォノンシミュレーションによって得られる定常状態での温度分布の例を図5に示します[6]。

ナノスケールの輸送現象として電子輸送を扱おうとすると古典力学は破綻し、量子力学に基づくモデリングと数値シミュレーションが必要となります。従来、多電子系の量子計算にはたいへんな計算コストがかかっていましたが、密度汎関数法と呼ばれるモデルの深化とスーパーコンピュータなどでの大規模並列計算のおかげで、1000電子を超えるような大規模系のシミュレーションが可能となりました。図6は、太陽電池材料として有用な水素化アモルファスシリコンの電子物性を計算した例です[7]。太陽電池の新規材料開発への応用のほか、摩擦帯電現象を利用したエネルギーハーベストシステム中の電子移動過程の解析など、幅広く取り組んでいます。

本項の最後に、液体蒸発が関係する、ちょっと風変わりな可視化実験を紹介します。これは古い変圧器を廃棄する際に、鉄心に使われる積層鋼板に浸み込んだ絶縁油をどう処理するかという現実的な問題に端を発しています。多くのマイクロフルイディクスの研究対象とは異なり、ここで扱っている流路は普通の鋼板でできているので数十 μm オーダーの自然な表面粗さをもつことが特徴です。同程

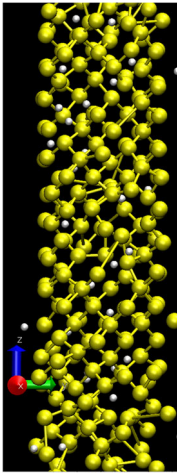


図6 水素化アモルファスシリコンの原子配置と電子輸送係数の計算例

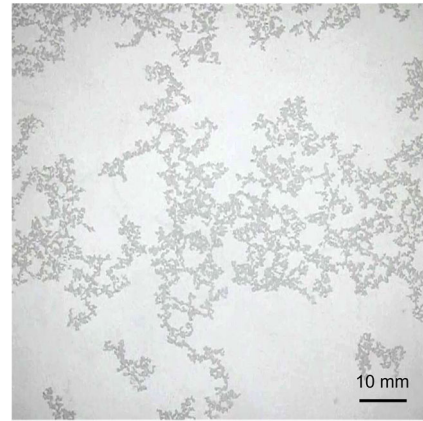
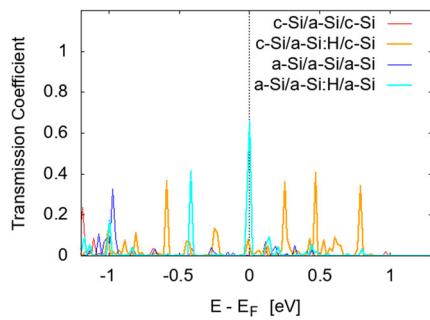


図7 2枚のすりガラス板で挟んだ液体が、減圧下で蒸発する過程の可視化実験；エタノールの例。暗く見える乾燥領域が複雑なパターンを形成して広がる

度の粗さを持つ「すりガラス」系をモデルとして、減圧下での液体の流動や相変化ダイナミクスを可視化実験により調べています[8]。図7に示すような複雑な流動パターンが見られており、表面粗さや濡れ性に大きく依存することを見出しています。

2. 3 ふく射に関する研究

伝熱は伝導、対流、ふく射の3種からなり、ふく射伝熱は、(熱) ⇒ (ふく射) ⇒ (熱) の形をとるエネルギーの変換、輸送です。また、ふく射の放射 (= 熱放射) は、ふく射伝熱の最も重要なエネルギーの変換プロセスですが (伝熱学では「ふく射の放射」、物理学では「熱放射」といいます)、ふく射の伝搬、吸収、反射、透過に比べて、実験、理論、計算において扱いが極めて難しい現象です。自然界、生活空間、工業装置において、物質や表面が放射するふく射は、多くの場合、主に可視から赤外の波長域の量子論的に光子としてではなく、古典論的に電磁波の正体であるところの振動電磁場として扱われます (すると、例えば波の位相差によりふく射の干渉が起こるというわかりやすい理解ができます)。そこで、本研究室では、熱放射の古典論計算法として、(1) (巨視的・連続的な) FDTD 計算法 (Finite Difference Time Domain method)、(2) (微視的・離散的な) 電磁力学のモデル計算法の2種類の方法を提案しています (図8、9に、それぞれの計算法の概要を示します)。

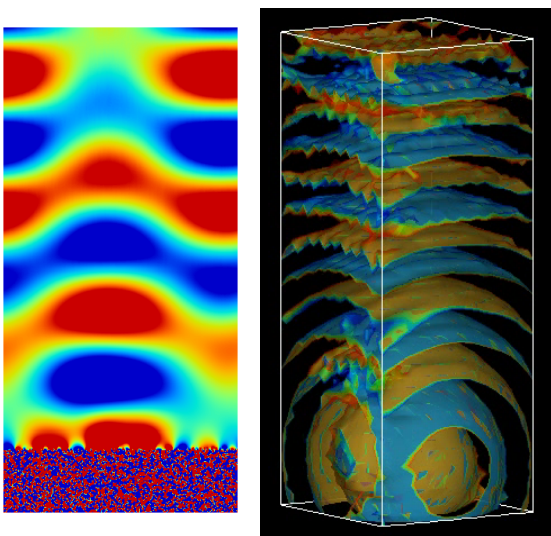


図8 FDTD計算法の計算結果の例

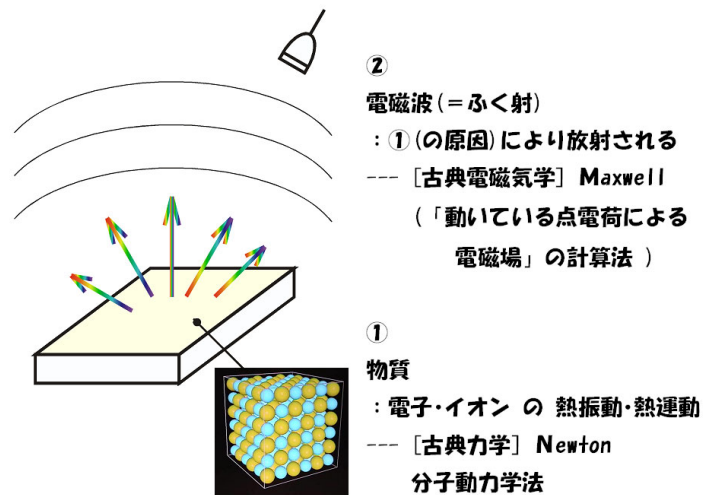


図9 電磁力学のモデル計算法の概要

3. おわりに

本研究室は現体制になってまだ4年余りと比較的新しい研究室ですが、これまで既に3名の博士を輩出し、現在も7名の博士後期課程学生と5名の博士後期課程進学希望学生（修士課程学生、学部卒研究生）が博士学位取得を目指して日々研究に取り組んでいます。また、博士学位取得者および博士後期課程学生の半数近くは社会人学生です。社会人の方々は、明確な目標をもって非常にアクティブに研究に取り組んでおられるので、学生にとってとても刺激になっているようです。博士学位取得をご検討の方が周囲にいらっしゃいましたら、是非お声がけください。また、本研究室では、機械工学の研究には基礎研究と応用研究の明確なボーダーは存在しない、という信念に基づき、幅広い研究に興味を持って取り組むような環境づくりに努力しています。実際、本研究室では、企業との共同研究も多く、学生は企業の研究者、技術者と接し、議論する機会にも多く恵まれていると自負しており、学生は共同研究者と様々な場で議論するたびに、成長し、目の輝きが変わっていくのを実感します。本研究室の研究内容は下記のHPにも掲載しています。少しでもご興味のあるテーマが有りましたら、是非ご一報を頂ければ幸いです。宜しく願いいたします。

熱物理工学研究室HP : <http://www.tse.me.kyoto-u.ac.jp/>

参 考 文 献

- [1] U. Ahmed, A. L. Pillai, N. Chakraborty, R. Kurose, "Surface density function evolution and the influence of strain rates during turbulent boundary layer flashback of hydrogen-rich premixed combustion," *Physics of Fluids*, 32, 055112 (2020).
- [2] A. L. Pillai, S. Inoue, T. Shoji, S. Tachibana, T. Yokomori, R. Kurose, "Combustion noise generated by an open lean-premixed low-swirl hydrogen flame: A hybrid CFD/CAA study," *13th Asia-Pacific Conference on Combustion 2021 (ASPACC2021)*, (2021).
- [3] T. Nishiie, M. Makida, N. Nakamura, R. Kurose, "Large-eddy simulation of turbulent spray combustion field of full annular combustor for aircraft engine," *International Gas Turbine Congress 2015 (IGTC2015)*, (2015).
- [4] J. Wen, Y. Hu, A. Nakanishi, R. Kurose, "Atomization and evaporation process of liquid fuel jets in crossflows: A numerical study using Eulerian/Lagrangian method," *International Journal of Multiphase Flow*, 129, 103331 (2020).
- [5] N. Kajinami, M. Matsumoto, "Polymer brush in articular cartilage lubrication: Nanoscale modelling and simulation," *Biophysics and Physicobiology*, 16, 466-472 (2019).
- [6] S. Kuwamoto, S. Akizuki, M. Matsumoto, "Investigation of energy transport in solids with a DSMC scheme," *Proceedings of 29th International Symposium on Transport Phenomena*, 023 (2018).
- [7] H. Li, M. Matsumoto, "Effects of hydrogen concentration and cooling speed on fabrication of hydrogenated amorphous silicon: Quantum simulation," *International Journal of Theoretical and Applied Nanotechnology*, 9, 1-7 (2021).
- [8] D. Xu, K. Ogawa, M. Matsumoto, "Evaporation and boiling in thin gap," *Proceedings of 16th International Heat Transfer Conference*, 22230 (2018).