

令和 4 年 6 月 17 日現在

機関番号：23201

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2021

課題番号：19K04243

研究課題名（和文）気液界面に生じる柔軟薄膜のシミュレーション技術に関する基礎研究

研究課題名（英文）Fundamental study of membrane deformation simulation at gas-liquid interface

研究代表者

中川 慎二（Nakagawa, Shinji）

富山県立大学・工学部・教授

研究者番号：30337878

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：液体の表面に薄い固体膜が形成されることがある。このような薄膜は、液体の動きを変えたり、液体の蒸発を抑制したりする。このような現象は、乾式紡糸工程と呼ばれる糸の製造、ハンダ付けでの酸化皮膜形成、湯葉のような食品製造など、様々な産業界で見られる。このような現象を詳しく調べるための技術として、コンピュータシミュレーションプログラムを開発した。オープンソースソフトウェアをベースとし、パソコンやスーパーコンピュータで実行可能となった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

様々な産業や自然現象に関係する液体表面上の固体薄膜の大きな変形をコンピュータシミュレーションで再現するための基礎技術が確立された。このプログラムを発展させることで、これまでは経験に頼っていた製造工程を科学的に解明し、理解し、効率を向上させることが可能となる。プログラムを一般に公開する予定であり、多くの科学者や技術者の研究に役立つだけでなく、協働してプログラムを発展させることが期待できる。

研究成果の概要（英文）：A three-dimensional particle-based membrane model, which is used to predict the shape of a membrane with large deformation, is implemented into OpenFOAM, open-source CFD software. The membrane is represented by the series of particles. The tensile and bending forces in the membrane is calculated as the forces between the particles. Deformation of the membrane with flow is simulated. Validation of the model was executed with simple configurations.

研究分野：伝熱工学

キーワード：CFD 薄膜 シミュレーション

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

本研究は、気液界面に存在する柔軟な固体薄膜・皮膜の動きを再現可能なシミュレーション技術を開発するものである。この薄膜とは、例えば、溶融したハンダ液の表面を覆う酸化膜やドロス(酸化膜や不純物などの複合した固体)、乾式紡糸過程で吐出した溶媒表面に形成される高分子膜、牛乳を温めた際に生じる皮膜、豆乳を加熱してつくられる湯葉などである。

液表面に形成された薄膜は液の流動に影響を与えることはもちろん、液の蒸発や凝縮を含む伝熱現象、および、薄膜を通じた物質移動や液内部に生じる物質濃度分布を含む物質移動現象に影響を及ぼす。

これらは、様々な科学技術・産業分野に関係する現象であるが、次のような要因から自由度の高いシミュレーション手法が一般的に利用できる状況ではない。

- (1) 気体・液体・固体の3つの相を含み、相互に運動量が交換される、
- (2) 薄膜が柔軟構造体であり変形量が大きい、
- (3) 薄膜の厚さ(薄さ:数nmから100 μ m)が気液流れの空間スケール(mmからm)に比べて極めて小さい。

そのため、自由度の高いシミュレーション技術とソフトウェアを開発することが求められている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、上記の課題を克服することで、液面に存在する柔軟薄膜の動きを気液流動とともにシミュレーションできる技術を開発することである。汎用シミュレーションソフトウェアの一部として利用可能な技術を創出し、オープンソースとして広く公開することを目指している。

3. 研究の方法

柔軟な薄膜の動きは、薄膜の内部に代表点として配置した粒子と粒子間のバネ要素を利用する「多粒子膜モデル」で表現する。これによって、膜の収縮や曲げ、せん断などを考慮することが可能になる。膜モデルにおいては、膜の変形や移動に関してはその厚さを考慮しながら、流体計算上では厚さを無視して扱うことを可能とする。これにより、スケールの違いによるメッシュ解像度の問題を解決する。

数値シミュレーションには、オープンソースCFDソフトウェアOpenFOAMを基盤として採用し、必要な機能をカスタマイズする。

4. 研究成果

OpenFOAMのDEM(Discrete Element Method 離散要素法)機能をベースとして、多粒子膜モデルのプログラムを作成した。薄膜の厚み方向には1つの粒子、膜の広がる方向に多くの粒子を配置し、粒子間の伸縮や曲がりを粒子間のバネで表現する。図1に多粒子膜モデルの概念図を示す。元のDEMプログラムでは2つの粒子の距離を求め、衝突を判断し、フォークトモデルで計算する。多粒子膜モデルでは、粒子に付与した個別の識別番号からつながりを判断し、膜の内部で隣接する3つの粒子の間で膜内の力を算出する。

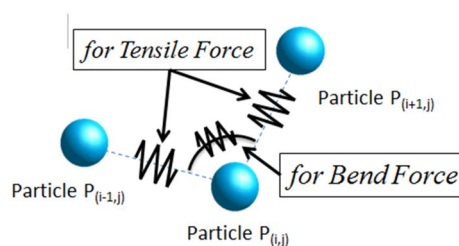


図1 多粒子膜モデル概念図

OpenFOAMは2つの開発元が公開する系統に分かれている。1つはOpenFOAM Foundationが公開するものである。こちらの系統に対して、本研究ではバージョン2.4, 4, 5の3つに対応するプログラムを作成した。もう1つはOpenCFD社が公開するものであり、こちらに対しては、バージョンv1612に対応させた。複数のバージョンに対応させることで、使用するスーパーコンピュータ等に応じて適切なバージョンを選択可能となり、応用性が高まっている。

OpenFOAM 5から、粒子の計算アルゴリズムと座標系が大きく変更された。本研究で開発した

多粒子膜モデルも、これに合わせて、改造している。従来は、粒子の移動を計算するとき、計算領域全体で定義されるグローバル座標を扱っていた。この方法では、流体計算のためのメッシュ品質が低いとき、粒子が消失したり、計算が不安定になったりするなどの問題が発生した。

このような問題を解決する方法として、粒子が存在する四面体セルでの重心座標系を使用することが提案された。本研究でも、その方式を採用し、計算の安定性とロバスト性を向上させた。ただし、膜を構成する粒子は粒子サイズよりも大きな間隔で設置するため、膜の力の計算にはグローバル座標系を利用する。

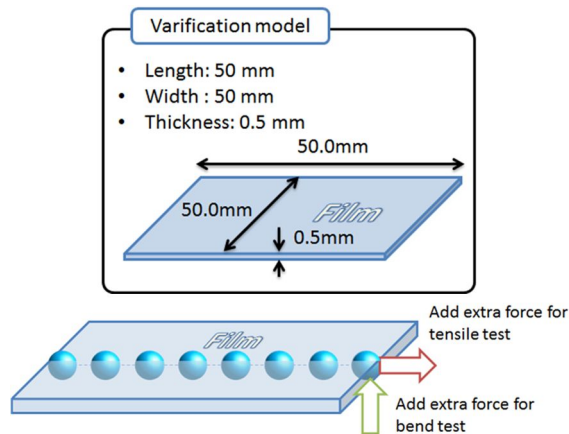


図2 検証用モデル

作成・更新した多粒子膜モデルの性能を検証するため、単純な平面的な膜を想定し、引っ張り試験と曲げ試験を実施した。図2に概要を示す。

引っ張り試験の結果を理論値と比較したグラフを図3に示す。開発したプログラムが正しく動作することが確認された。

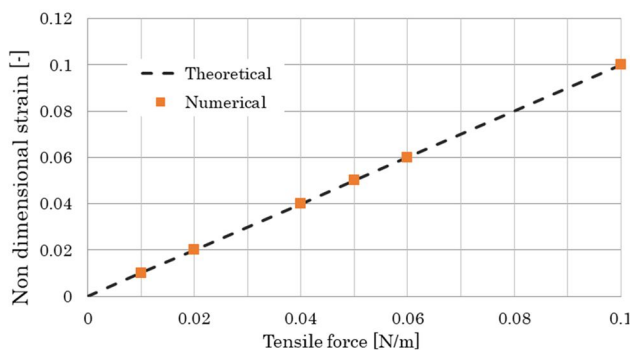


図3 引っ張り試験による検証結果

図4に、流体中に置いた薄膜が流れから受ける力で変形する様子を示す。膜の厚みを0.05 mmから1 mm、膜材料のヤング率を200 Paから20 kPaまで変化させて、膜の変形挙動を観察した。流体は図の左から右へ流れている。膜の左端を固定し、水平にまっすぐ伸ばした膜を初期状態とした。

厚さが小さい、または、ヤング率が小さい膜ほど、多くの折りたたみ構造が発生して小さくまとまる。ヤング率が大きい場合には、ほぼ水平な状態を維持しながら、緩やかに変形している。

以上の様な変形過程については、定性的に現実を再現している。定量的な精度や、粒子の数が結果に与える影響などは、さらに検討する必要がある。

Thickness	Young's module		
	$E = 200 \text{ Pa}$	$E = 2000 \text{ Pa}$	$E = 20000 \text{ Pa}$
$h = 0.05 \text{ mm}$			
$h = 0.5 \text{ mm}$			
$h = 1.0 \text{ mm}$			

図4 流体中の薄膜の厚みとヤング率による変形挙動の違い

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 田口雅之, 中川慎二
2. 発表標題 OpenFOAMへの多粒子系膜モデルの実装 (particleクラスでの座標系変更への対応)
3. 学会等名 オープンCAEシンポジウム2021
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

流体中の柔軟薄膜の変形シミュレーション https://eddy.pu-toyama.ac.jp/%E7%A0%94%E7%A9%B6/page_20210512101245 富山県立大学 機械エネルギー工学講座 中川グループ OpenFOAM情報 http://eddy.pu-toyama.ac.jp/OpenFOAM/

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------