

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 31 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2015

課題番号：26820045

研究課題名(和文)相分離を伴う乱流熱対流の制御に基づいた機能性材料作製プロセスの創成

研究課題名(英文)Development of functional material processing based on the control of turbulent thermal convection with phase separation

研究代表者

高木 洋平 (Takagi, Youhei)

大阪大学・基礎工学研究科・助教

研究者番号：40435772

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：相分離を伴う乱流熱対流を能動的に制御することにより、混合流体中に生じる自己組織化構造を乱流中の渦構造の観点から制御する方法を開発した。対象としたのは良く混じり合った二成分溶液であり、急冷などの熱力学的不安定性によってスピノーダル分解が起こる材料作成プロセスである。相分離の作用を取り込んだ乱流の直接数値計算を実施することにより、乱流の渦構造生成によってスピノーダル分解による自己組織化構造の粗大化が抑制されることがわかった。この抑制効果は乱流中のスケールの大きい渦層上で顕著であり、このスケールに対して流体エネルギーを注入することによって機能性材料の特性を能動的に制御できる可能性を見出した。

研究成果の概要(英文)：We developed a novel control method of self-organized structure in a binary mixture fluid based on the turbulent vortical structure by using the active control of turbulent thermal convection with phase separation. The analysis model were well-mixed binary fluid and the material processing that accompanying spinodal decomposition caused by thermophysical instability such as quenching. From the numerical results of direct numerical simulation for turbulent flow with phase separation, it was found that the coarsening process of self-organized structure formation generated from the spinodal decomposition was suppressed by the formation of turbulent vortical structure. This suppression effect was remarkable on the large scale structure of vortex sheet. Therefore, the active control technique for changing the property of functional material might be developed by using the fluid energy injection into the large scale.

研究分野：化学工学、流体工学、数値流体力学

キーワード：相分離 スピノーダル分解 乱流 直接数値計算 渦構造 自己組織化構造 機能性材料

1. 研究開始当初の背景

機能性材料として自己組織化構造を持つ材料の利用が進んでいる。自己組織化構造とは、物理的・化学的要因によって二次元的・三次元的な構造を自律的に形成するものを示しており、具体的な形状としては図1に示すような層状のラメラ構造、一方向に伸びた柱状構造、三次元的な共連結構造が知られている。特に共連結構造は単位体積あたりの表面面積が大きくなることから、触媒などへの応用が期待されている。このような自己組織化構造は、初期溶液の化学的組成を調整したり、反応・生成過程を均一に進めることによって秩序だったパターンを形成できるが、環境・実験条件に敏感であるため生産性を向上させることが難しいという問題がある。実際の材料プロセスでは、かくはんや流通などの操作によって流体は複雑な乱れた“乱流”状態であり、流体の挙動が相分離によって発現する自己組織化構造に影響を与えることが予想されている。

一方、乱流を制御することによって様々な応用を図る技術開発が進んでおり、特に乱流の発生を抑制することで流体抵抗を削減する、いわゆる抵抗低減技術などは研究開発が盛んになされている。乱流を効果的に制御及び利用するためにはその発生メカニズムや維持機構を明らかにする必要があり、近年では乱流の直接数値計算(小スケールの構造までモデル化せずに解く数値計算手法)によって、図2に示すような乱流中に普遍的に存在する渦構造の特性が明らかになりつつある(引用文献)。このような乱流中の渦構造は管状の渦管と層状の渦層によって構成されており、図1に示した典型的な自己組織化構造と何らかの類似性があるように見られる。

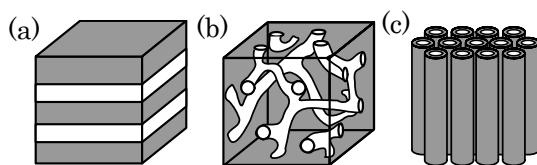


図1 自己組織化構造: (a) ラメラ, (b) 共連結, (c) 柱状.

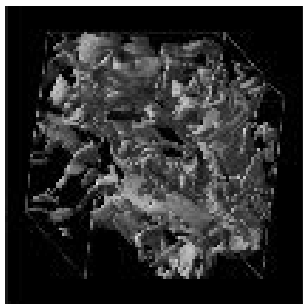


図2 乱流中の渦構造(引用文献)。

2. 研究の目的

本研究では工学的なプロセスで通常見られる乱流を能動的に活用し、自己組織化構造を持つ機能性材料を流体操作によって作製するための手法を提案することを目的とする。特に、二成分以上の組成から成る混合溶液が、過冷却などの熱力学的不安定性によって引き起こす相分離現象(スピノーダル分解)に対して乱流が及ぼす影響を調べ、乱流中の普遍的構造である渦構造と機能性材料を特徴づける自己組織化構造との相関について明らかにする。さらに、従来の機能性材料の性能を向上させるために、共連結構造において表面面積を増大させるための流体制御技術についても検討する。

3. 研究の方法

実際の機能性材料作製プロセスは複雑な物理的・化学的過程を含んでおり、乱流と相分離の関係を選択的に実験によって調べることは非常に難しいため、本研究では簡易化した解析モデルによる数値シミュレーションによって検討を行った。

初期成分比率が 50%-50%である非圧縮性の二成分混合流体(組成 A、B)に対して、各成分の質量密度から相分離の度合いを見積もるオーダーパラメータを定義する。このオーダーパラメータに対して、相分離の支配方程式は Cahn-Hilliard 方程式となる。Cahn-Hilliard 方程式は拡散方程式に似た輸送方程式であるが、拡散項に化学ポテンシャルを含む形であり、このポテンシャルの取り方によって相分離が進行して二成分に流体が分離する。本研究で用いた化学ポテンシャルは Landau-Ginzburg 型の自由エネルギーである。一方、流体場の支配方程式は連続の式と Navier-Stokes 方程式であり、Navier-Stokes 式で化学ポテンシャルの勾配による相分離寄与項を外力項として加えることによって相分離と流体場をカップリングする。これらの支配方程式は有限差分法によって空間離散化され、Runge-Kutta 法及び Crank-Nicholson 法を用いて時間積分された。

対象とした流れ場は均一にかくはんされた乱流を単純化した一様等方乱流であり、各境界に周期境界条件を適用した立方領域を 256^3 の格子点で分割した。乱流場は乱流状態を維持するために強制外力を注入し、定常状態でのテイラーマイクロスケールに基づくレイノルズ数は 21 である。オーダーパラメータは初期条件としてホワイトノイズを加えて相分離が徐々に進行する条件とし、Cahn-Hilliard 式に含まれるパラメータは 3-methylpentane と nitroethane を用いた既往の実験(引用文献)に対応する値を用いた。解析は Cahn-Hilliard 式と Navier-Stokes 方程式を連成する条件(SPTU)以外に、Cahn-Hilliard 式のみを解く場合(SP)と Navier-Stokes 方程式のみを解く場合(TU)も

比較のために行った。

4. 研究成果

相分離による自己組織化構造の発現を見るために、オーダーパラメータの任意断面における時間発展を図3に示す。まず流体場を考慮しない条件 SP の結果に注目すると、斑点状の相分離ドメインが現れて粗大化(ネットワーク化)する典型的なスピノーダル分解が数値的に再現できていることがわかる。これに対して流体場の影響を考慮する(条件 SPTU)と、分離した領域は現れるが乱流混合の影響を受けて引き伸ばされた薄い構造が入り組んで存在しており、乱流の影響が相分離に強く現れていることがわかる。次に相分離が発生することによる乱流場への影響を調べるために、相分離が進行した時刻における流体場のエネルギースペクトルを図4に示す。ここで、比較のために乱流場みの条件 TU の結果についても同時に示している。純粋な流体場みのエネルギースペクトルは波数域 $k \sim 10^1 - 10^2$ において発達した乱流場の性質である慣性小領域が存在し、大スケールから小スケールへのエネルギーカスケードが見られているが、相分離を連成した場合、大スケール($k < 10^1$)からエネルギーが著しく減少し、乱流のエネルギーカスケードが相分離の発生によって阻害されていることがわかる。乱流中の構造としては比較的スケールが大きいシート状の渦層と最小スケールに相当する渦管の存在が知られているが、このエネルギースペクトルの減少は相分離の効果が微細な渦管構造ではなく大きいスケールの渦層に対して現れていることを示唆している。この結果は図3の可視化結果において層状の引き伸ばされた自己組織化構造が観察されたことにも一致している。このように相分離と渦層構造が関連していることを確かめるために、図5に発達した時刻においてひずみ生成項とオーダーパラメータの確率密度関数の分布を示す。ここで求めたひずみ生成項は流体要素が強い伸長(ひずみ)を

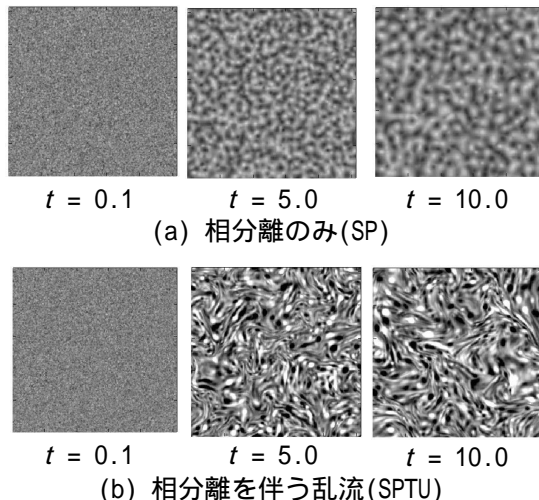


図3 相分離進行度を表すオーダーパラメータの時間発展

受けていることを表し、渦層上で大きくなる値である。この分布より、ひずみ生成が大きい渦層状ではオーダーパラメータが0に近い値を取っており、すなわち相分離が進まずに粗大化過程が抑制されていることがわかる。一方、オーダーパラメータが大きくなって相分離が進んだ領域では、逆にひずみ生成が0に近くなり、乱流中の渦構造は層状態を維持していないことが明らかである。

以上の数値シミュレーションによる結果をまとめると、本研究で用いた計算条件では相分離の粗大化過程が乱流場の存在によって阻害され、自己組織化構造がシート状の乱流構造(渦層)と類似の形態となることがわかった。また、乱流のエネルギーカスケードの観点から相分離の影響を考えると、比較的大きいスケールにおいてエネルギーカスケードの初期段階が相分離によって抑制されており、この相分離が影響するスケール領域を能動的に制御することによって自己組織化構造を流体制御の観点から変化させることが期待できる。

<引用文献>

- K. Horiuti, and Y. Takagi, "Identification method for vortex sheet structures in turbulent flows", Phys. Fluids, 17, 121703 (2005).
D. J. Pine, N. Easwar, J. V. Maher, and W. I. Goldberg, "Turbulent

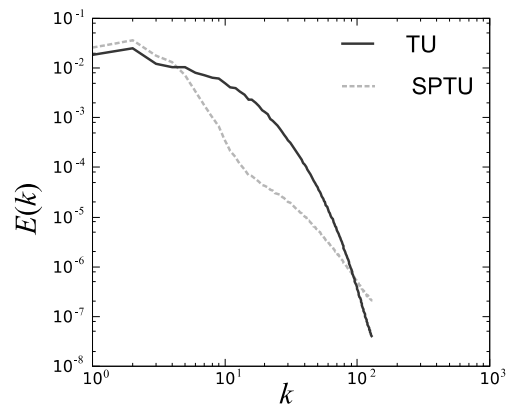


図4 $t = 10.0$ におけるエネルギースペクトル

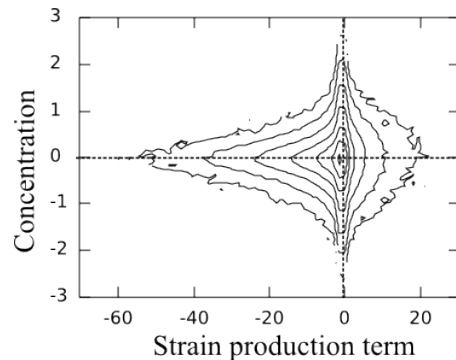


図5 ひずみ速度生成項とオーダーパラメータの結合確率密度関数

suppression of spinodal decomposition”, Phys. Rev. A, 29, pp.308-313 (1984).

5. 主な発表論文等

〔学会発表〕(計3件)

S. Okamoto, Y. Takagi, and Y. Okano, “Interaction between phase separation and turbulence in binary mixture”, 2015 Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2015), Dec. 22-25 (2015), Bexco, Busan, Korea.

Y. Takagi, S. Okamoto, “Suppression of turbulence energy cascade due to phase separation in homogeneous binary mixture fluid”, 68th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (APS DFD 2015), Dec. 22-24 (2015), Hynes Convention Center, Boston, United States.

岡本幸也, 高木洋平, 岡野泰則, “相分離を用いた機能性材料作製過程における自己組織化構造の乱流渦による変化”, 化学工学会第81年会, 2016年3月13日~15日, 関西大学千里山キャンパス, 大阪.

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/okanolab/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

高木 洋平 (TAKAGI, Youhei)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・助教

研究者番号: 40435772