

# マルチスケールの熱流動シミュレーションに関する研究

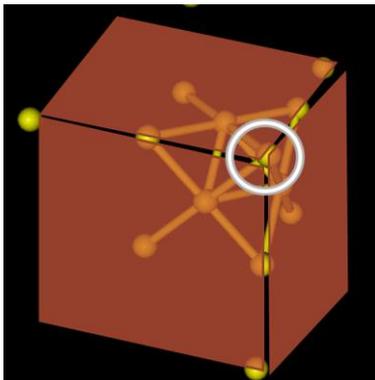
大阪大学大学院機械工学専攻 芝原正彦・植木祥高

(他 博士前期課程学生1名, 学部生1名)

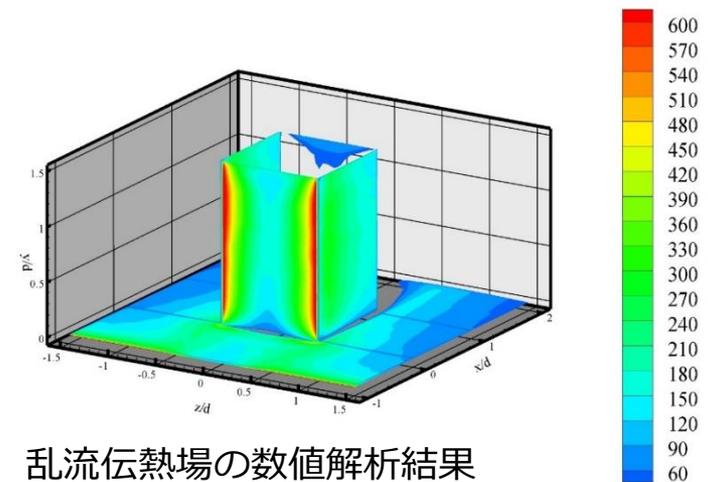
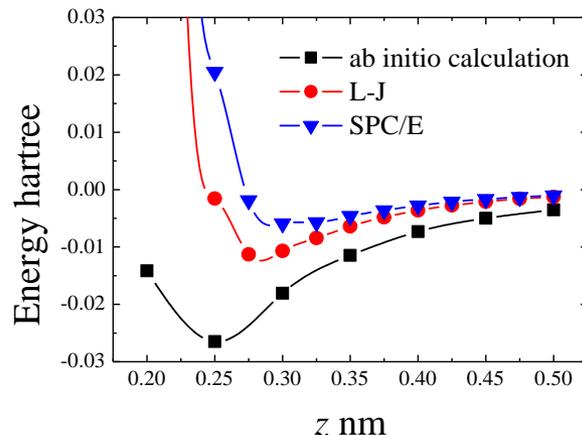
**目的** 原子分子から工業機械内の現象に至るまでマルチスケール熱流動シミュレーションの展開

**内容** 微細構造がポテンシャルエネルギーに与える影響を第一原理計算ソフトウェアGaussianを活用して第一原理計算により調査した。乱流伝熱場の数値解析にはSX-ACEを活用して実施した。

**結果** 左下に計算を行った一例であるPt表面-H<sub>2</sub>O単分子系と計算結果を示す。このような微細構造面が分子間ポテンシャルエネルギーに与える影響を定量的に調査した。右下には乱流伝熱場の数値解析結果の一例を示す。角柱回りのエントロピー生成量を評価し、数値解析モデル開発とその検証を行った。



第一原理計算で用いたPt表面モデル (左) と計算結果 (右)



乱流伝熱場の数値解析結果  
(角柱回りのエントロピー生成量評価)