

令和 5 年 6 月 10 日現在

機関番号：13201

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K04284

研究課題名(和文) 多成分系 - 熱流動格子ボルツマン法対応の計算手法構築と燃料電池内の熱流動現象解明

研究課題名(英文) Multiple-Component, Thermal Lattice Boltzmann Model for the Fuel Cell

研究代表者

瀬田 剛 (Seta, Takeshi)

富山大学・学術研究部工学系・教授

研究者番号：50308699

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)：時間刻み幅に基づくマルチスケール展開により、ステファン・マクスウェル方程式を満足する多成分系格子ボルツマン法の構築に成功した。曲面を有する壁面に対応した境界条件を用い、多孔質体内の多成分拡散の計算を実施したが、壁面上で異成分同士の衝突を適切に扱うことが出来なかった。透過係数を用い多孔質体をモデル化し、バルク粘性を考慮しつつ、ガリレイ不変性を満足するセントラルモーメント衝突則を適用した格子ボルツマン法により、多孔質体内熱流動解析に成功した。燃料電池内で生じる非線形熱流動現象を格子ボルツマン法により解析するためには、数値的安定性と計算精度に優れた境界条件が必要であることが明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

時間刻み幅に基づくマルチスケール展開により、格子ボルツマン法で用いられる運動方程式から、多成分系の拡散現象を記述するステファン・マクスウェル方程式を導出した点に学術的な意義がある。更に、粒子の分布関数を空間補完ではなく、時間補完により予測し、最も運動速度が遅く時間刻み幅が最小である粒子運動を基に、各粒子同士の衝突を計算する点に新規性がある。固体高分子形燃料電池では、水素と酸素の化学反応で発生する熱により、電極面内に不均一な温度分布が発生し、燃料電池の運転の障害となる。本研究によって提案された手法により、燃料電池の運転障害の要因の解明が期待される点に社会的な意義がある。

研究成果の概要(英文)：A recursive method with a time step successfully derives the lattice Boltzmann method for the generalized Stefan-Maxwell equation, which governs the behavior of a multicomponent system. We attempt to simulate the multicomponent diffusion in porous media by applying boundary condition for curved walls with the proposed lattice Boltzmann method. However, the different time intervals of the components result in numerical instability on the curved wall. Using a Galilean invariant central-moments-based collision operator with bulk viscosity, the lattice Boltzmann method calculates the natural convection in porous media with the permeability. To elucidate the nonlinear heat phenomena in the fuel cell, we propose a method that uses the lattice Boltzmann method with a stable and accurate boundary condition for thermal multicomponent.

研究分野：数値流体力学

キーワード：数値流体力学 ステファン・マクスウェル方程式 多成分系解析 熱流動解析 格子ボルツマン法

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) テーラ・プロードマンの不安定性理論等に代表されるように、自然対流の線形安定性理論やモード変化に関する研究が実施され、近年、数値計算を用いた自然対流の不安定解析も行われている。

(2) 自然対流における不安定振動において、レイリー数、プラントル数、境界形状等の僅かな条件の違いにより流動様式が大きく変化することが知られている。

(3) 固体高分子形燃料電池は、水素と酸素が化学反応することにより電気と熱を発生させるクリーンなエネルギーシステムである。燃料電池での化学反応で発生する熱により、電極面内の不均一な温度分布の発生が、燃料電池の運転障害を引き起こすことが知られている。

2. 研究の目的

(1) 格子ボルツマン法に基づく高速高精度計算手法を構築し、多成分系を考慮した場合の非線形熱流動現象を解明する。

(2) 多成分系モデルに熱流動モデルを組み合わせ、衝突則を数値的安定性が向上するように修正した格子ボルツマン法を提案する。

(3) 曲面を有する多孔質体内の熱流動解析により、提案された格子ボルツマン法が燃料電池の発電性能予想に有効な解析手法であることを実証する。

3. 研究の方法

(1) 時間刻み幅に基づくマルチ・スケール展開により、ステファン・マクスウェル方程式の計算が可能な格子ボルツマン法を定式化し、正確かつ単純なアルゴリズムにより、多成分系現象を解析する。

(2) 曲面を有する固体壁に対する境界条件の設定手法により多孔質体を構成し、多孔質体内の多成分系拡散現象を解析する。

(3) 格子ボルツマン法の衝突則に、多緩和時間衝突則やセントラル・モーメント衝突則を適用し、衝突則における自由パラメータの最適値を求め、多孔質体内自然対流解析を実施する。

4. 研究成果

(1) クヌッセン数に基づくチャップマン・エンスコグ展開の代わりに、時間刻み幅に基づくマルチ・スケール展開により、ステファン・マクスウェル方程式を満足する多成分系格子ボルツマン法の定式化に成功した。離散速度の大きさが違う異成分同士の衝突において、従来用いられてきた空間補間の代わりに時間補間を適用し、格子点上の分布関数を予測した。時間補間された分布関数を用い、異成分間の衝突を計算することで、一種類の格子上の線形補完のみでステファン・マクスウェル方程式の解析が可能な多成分系格子ボルツマン法の提案に成功した。図1に示すように、ロシュミット・チューブ内で、アルゴン、水素、メタンのモル分率を左半分の領域と右半分の領域で異なる初期条件を設定し、提案手法による多成分拡散現象を解析した。図2(引用文献より)にアルゴン、水素、メタンのモル分率の時間変化を示す。ロシュミット・チューブ内において、提案手法で計算された各成分の時間変化は、商用ソフト FLUENT で計算した結果と良い一致を示すことが実証された。図2から、ロシュミット・チューブにおいてアルゴンが濃度勾配に逆行するアップヒル拡散が提案手法により再現されたことが分かる。

(left)	(Right)
Ar = 0.509	Ar = 0.485
CH ₄ = 0	CH ₄ = 0.515
H ₂ = 0.491	H ₂ = 0

図1 モル分率の初期条件

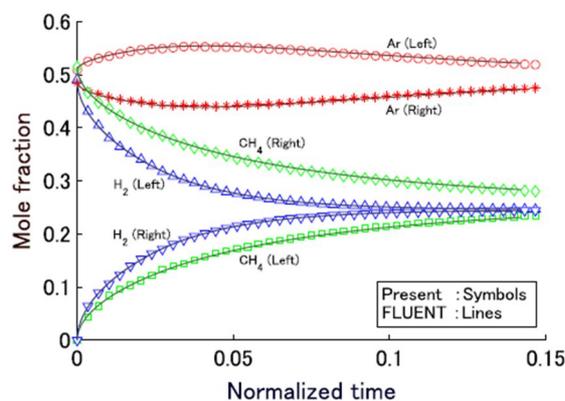
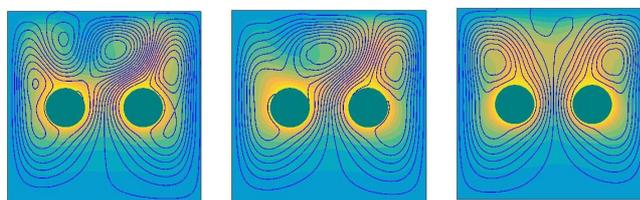


図2 アルゴン、メタン、水素のモル分率の時間変化

(2) 多成分系自然対流解析に対する計算手法の構築のために、曲面を有する境界における熱流動現象の高精度解析手法の提案に既に成功している。図3に示されるように、高温な2つの円柱の距離が、低温矩形容器の幅に対し0.2倍の時のみ、周期的な振動が発生する。これにより、多孔質体内自然対流解析に対し、境界条件が僅かに変化しただけで、振動様式がカオ

動的に遷移する自然対流の非線形現象の解明が可能である。この境界条件を用い多孔質体を模擬した構造物内での多成分系拡散の計算を、格子ボルツマン法を用い試みた。単一成分の拡散の場合は空間補完や時間補完が不要なため、図4に示されるように、多孔質体内における拡散現象の再現は成功した。しかし、異なる成分同士の多孔質体内の拡散現象の計算を試みた場合、曲面を有する境界での分布関数の取り扱いが困難になり、計算を進めるにつれ、数値解が発散した。そのため、ミクロなスケールから多孔質体内における多成分系と熱流動現象の連成問題を解くことが困難であった。



(a) $t = 400$ (b) $t = 410$ (c) $t = 420$

図3 自然対流解析における周期的な振動

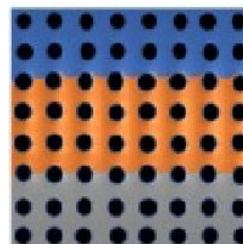
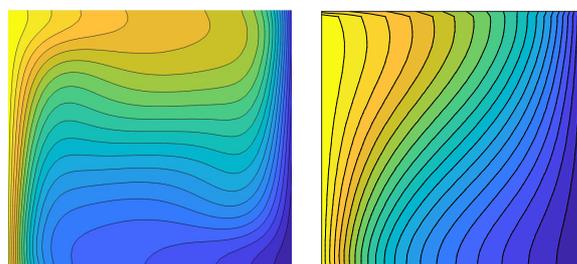


図4 多孔質内の拡散現象

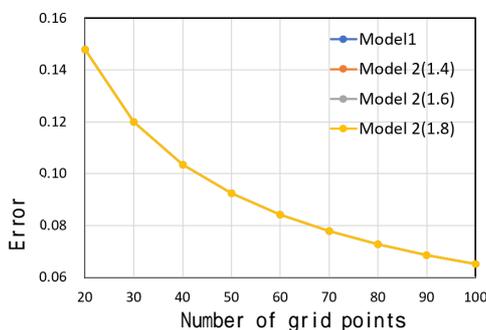
(3) 上記(2)の問題から、流体が多孔質体により抵抗を受けるブリンクマン・モデルにより、多孔質体をモデル化し熱流動解析を行った。つまり、多孔質体をミクロなスケールから解析するのではなく、透過係数を用いたマクロなスケールでモデル化し、熱流動解析を実施することに変更した。図5(a)、(b)それぞれに、多孔質体の影響がない場合と影響がある場合の温度分布を示す。ここでレイリー数は 10^5 である。図5(a)、(b)の比較から、多孔質体の影響がある場合、熱伝達が小さくなり温度分布が発達しないことが分かる。なお、多緩和時間衝突則ではガリレイ不変性が欠如している点に着目し、ガリレイ不変性を満足するセントラル・モーメント衝突則を適用し、数値的安定性を向上させた。燃料電池の性能評価を行う格子ボルツマン法を構築するためには、多成分系と熱流動現象の両方を安定かつ高精度に計算可能な境界条件の設定方法を提案する必要性が明らかになった。



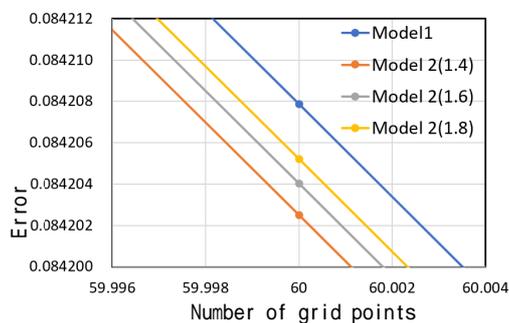
(a)多孔質体なし (b) 多孔質体あり

図5 自然対流解析における温度分布

(4) 多孔質体内熱流動解析で用いたセントラル・モーメント衝突則のフリーパラメータの設定や、衝突演算の違いによる精度検証を、平行平板間流れとクエット流れの数値計算により行った。セントラル・モーメント衝突則の定式化については、ブロック対角行列を緩和行列に導入することで、体積変形の速度に比例するバルク粘性を除去することが実証されている。バルク粘性の影響を除去していないセントラル・モーメント衝突則を Model 1 とし、バルク粘性の影響を除去したセントラル・モーメント衝突則を Model 2 とし、図6にクエット流れにおける格子点数と誤差項との関係を示す。また、図6に示す数値の1.4、1.6、1.8は、セントラル・モーメント衝突則のフリーパラメータの中で、バルク粘性に関するパラメータの値である。格子ボルツマン法は疑似圧縮性法の種類であるため、バルク粘性の精度への影響を検証したが、図6(a)より、バル



(a) 格子点数と誤差の関係



(b) 拡大図

図6 セントラル・モーメント衝突則の誤差評価

ク粘性は、格子ボルツマン法の計算精度に対し、大きな影響を与えないことが判明した。図 6(b) に図 6(a)の拡大図を示す。図 6(b)から、セントラル・モーメント衝突則のバルク粘性に関するパラメータの値を 1.4 とした時、誤差が最も小さくなることが平行平板間流れおよびクエット流れの数値計算より判明した。図 5 に示すセントラル・モーメント衝突則を用いた多孔質体内熱流動解析の計算において、平行平板間流れとクエット流れの計算から求められた最適なフリーパラメータが用いられている。

<引用文献>

K. Yamamoto, T. Seta, Derivation of multicomponent lattice Boltzmann equations by introducing a nonequilibrium distribution function into the Maxwell iteration based on the convective scaling, Journal of Statistical Physics, Vol.182, pp.89-110, 2021. (<https://doi.org/10.1007/s10955-020-02686-x>)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 T. Seta, K. Yamamoto, M. Yoshino, N. Takada, Y. Matsukuma, K. Yamamoto, K. Hayashi, H. Kimura, A. Tomiyama	4. 巻 34
2. 論文標題 Lattice Boltzmann Method for Multiphase and Multicomponent Flows: A Review	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Multiphase Science and Technology	6. 最初と最後の頁 47-61
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1615/MultScienTechn.2022044039	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kimura Hidehito, Osaki Susumu, Hayashi Kosuke, Taniguchi Masaaki, Fujita Yuichi, Seta Takeshi, Tomiyama Akio, Sasayama Takashi, Kohmura Eiji	4. 巻 152
2. 論文標題 Newly Identified Hemodynamic Parameter to Predict Thin-Walled Regions of Unruptured Cerebral Aneurysms Using Computational Fluid Dynamics Analysis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 World Neurosurgery	6. 最初と最後の頁 e377 ~ e386
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.wneu.2021.05.107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Osaki Susumu, Hayashi Kosuke, Kimura Hidehito, Seta Takeshi, Sasayama Takashi, Tomiyama Akio	4. 巻 6
2. 論文標題 Numerical Simulations of Flows in a Cerebral Aneurysm Using the Lattice Boltzmann Method with the Half-Way and Interpolated Bounce-Back Schemes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Fluids	6. 最初と最後の頁 338 ~ 338
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/fluids6100338	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Keiichi Yamamoto, and Takeshi Seta	4. 巻 182
2. 論文標題 Derivation of multicomponent lattice Boltzmann equations by introducing a nonequilibrium distribution function into the Maxwell iteration based on the convective scaling	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Statistical Physics	6. 最初と最後の頁 89-110
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10955-020-02686-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 T. Seta, K. Yamamoto
2. 発表標題 Lattice Boltzmann method for multiphase flows with two-relaxation time collision operator
3. 学会等名 11th International Conference on Multiphase Flow (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 瀬田剛
2. 発表標題 IB-LBMにおける温度のとびに関する研究
3. 学会等名 第9回せん断流の多様な機能の探究と先端科学技術への応用に関する研究分科会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森友志, 宮本昌輝, 田中裕太, 瀬田剛
2. 発表標題 セントラルモーメント衝突則に基づく格子ボルツマン法による多孔質体内熱流動解析
3. 学会等名 日本機械学会 北陸信越支部2023年合同講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 水上祥, 瀬田剛, 松島紀佐
2. 発表標題 後流積分を用いた移動物体の空力抵抗算出精度の研究
3. 学会等名 日本機械学会 北陸信越支部 第58期総会・講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 瀬田剛
2. 発表標題 熱流動格子ボルツマン法の計算精度に関する研究
3. 学会等名 第25回計算工学講演会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 瀬田 剛	4. 発行年 2021年
2. 出版社 森北出版	5. 総ページ数 208
3. 書名 格子ボルツマン法	

〔産業財産権〕

〔その他〕

瀬田研究室のホームページ http://www3.u-toyama.ac.jp/seta/

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
研究協力者	山本 恵一 (Yamamoto Keiichi)		

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
---------	---------