

平成 21 年 4 月 13 日現在

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2006～2009

課題番号：18360050

研究課題名（和文） 多孔体内メソマクロ流動の階層シミュレーションに関する研究

研究課題名（英文） RESEARCH ON HIERARCHICAL MESO-MACRO SCALE FLOW SIMULATION  
IN POROUS MEDIA

研究代表者

須賀 一彦 (SUGA KAZUHIKO)

大阪府立大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：60374089

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：シミュレーション工学

## 1. 研究計画の概要

研究は(1)メソスケール（触媒表面化学反応の階層化計算モデル）、(2)メソマクロスケール（非連続体一連続体計算モデル）、(3)マクロスケール（多孔質壁一粗面壁解析的乱れモデル）、(4)（多孔体性状計測）の小テーマ毎に最初は基礎研究を行い、その後(1)～(3)の各スケールを連成させるための研究へと進める。

(1)メソスケール（触媒表面化学反応の階層化計算モデル）：触媒表面での化学反応における表面構造、反応分子の進入経路、反応分子の配向や内部振動といったミクロな情報を粗視化し、上層での反応の記述に有効な物理量を抽出することによって触媒表面反応を階層的に計算するためのモデル構築を目指す。反応物・生成物の濃度そのものではなくミクロスコピックな情報を含む分布関数の時間発展に注目した反応のモデル化を考察することにする。粗視化動力学計算における階層的計算モデルを、化学反応による性質の変化を含む階層的取り扱いに発展させるための方法論の検討に注力する。メソスケールの計算方法に対しては、格子ボルツマン法（LBM）における分布関数のモデル化に反映させることを意識した展開を行う。

また、メソスケールの流動解析法として、分子動力学（MD）シミュレーション法に関する研究も積極的に展開し、メソスケール流動現象の理解を進めるとともに次に述べる非連続体 LBM と連成させることも検討する。

(2)メソマクロスケール（非連続体一連続体計算モデル）：例えば燃料電池の拡散層、触媒層、電解質膜層はそれぞれスケールの異なる多孔体とみなせる。そして拡散層はセパレーター側で連続体領域と接しているが、触媒層、電解質膜内は Knudsen 数が臨界値 0.01 を超える非連続体領域である。この中の電気化学的流動現象を取り扱う有望な手法として LBM を候補として取り上げる。通常の LBM は連続体流動の解析手法として確立されているが、分布関数や緩和係数のモデル化等を検討することで連続体 LBM を非連続体側のリミットに対応できるように拡張することを試みる。同時にその物理的意味や数値的安定性の検討も行う。

(3)マクロスケール（多孔質壁一粗面壁解析的乱れモデル検討）：燃料電池の拡散層表面の粗さはわずかであっても流路が小さいため、流体力学的に壁面粗さ効果は無視できなくなる。また、ガスが浸透するため、モデル化するためには粗面効果を取り入れた壁モデルと拡散層にガスが透過していくモデルを重ねる必要がある。そこで本研究では連続体 Navier-Stokes コードで解くことを前提に壁面粗さ効果を含む水などの高プラントル数流体に適用できる解析的壁乱れモデルの研究と多孔質内流動効果を含む壁乱れモデルの研究を行う。その後モデルの融合化や非連続体 - 連続体モデルによる多孔体解析との連成法について検討する。

(4)多孔体性状計測：多孔体内の流動現象は、多孔体の構造および多孔体の表面性状の影響を大きく受けると考えられるので、対象とする多孔体の細孔構造、細孔性状を特定することは、計算モデルの検証に必要である。したがって各種多孔体に対し、水銀圧入法により細孔径分布を、また X 線 CT により構造を測定する。加えて純水圧入ポロシメトリーを実施し、多孔体内での水の流動特性に直結する撥水性の細孔と親水性の細孔とを分離して測定する。

## 2. 研究の進捗状況

(1)メソスケール流動に関しては、仮想的密度差を分子動力学法の境界条件に設定することでより現実的で汎用的な流動解析手法を確立した。この手法を活用し、メソスケールの模擬多孔体内流動解析を実施した。結果を以下(2)で開発した非連続体 LBM と比較検討することで、LBM モデルの妥当性の検証と最適な速度モデルの熟成を行うことができています。

(2)メソマクロスケールに対応できる非連続体 LBM を構築した。このモデルは Knudsen 数の依存度を緩和時間係数に含み、拡散・散乱境界条件を修正することで LBM とは異なるモンテカルロ法などの従来手法によるデータをよく再現するとともに、MD によるメソ多孔体内解析の結果とも十分よく対応した期待通りの結果を示すことができています。また、LBM の実用的な速度モデルの検討も行い、複雑な流れ系では簡便で実用上有利な一層速度モデルでも十分妥当な解析が可能であることを確認している。

(3)マクロスケール解析では粗面、多孔質の両効果を考慮した新たな壁面モデルと水などの高プラントル数流体に対応した壁モデルの構築を行った。開発した壁モデルをメソマクロ問題に連成させるための手法として LBM の壁モデルとしての展開を進め、基礎的検討を行った。

(4)水ポロシメーターによる細孔率計測を実施した。残念ながら、購入したプロトタイプ計測装置の不具合と解析アルゴリズムの秘匿により、所定の計測目標を達成できていない。自作の改良装置により計測を継続するも精度に難点が判明し、従来の水銀ポロシメーターのデータとの整合がとれる段階にまで達していない。以上のように水ポロシメーター計測手法の問題点を明らかにするとともに改善方策について検討している。

## 3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

(理由)

現在までに購入した水ポロシメーターの欠陥により、当初目的の親疎水性を考慮する多孔体性状解析はできなかったが、その他の各階層のシミュレーションについては各手法開発が順調に進んでいる。(遅れている化学反応モデルの LBM モデルへの展開は現在進めているところである。)また、マイクロ流れ解析が主体の LBM による解析法を改良し、ナノメソ側およびマクロ側の両方向に対応スケールを拡張することで全階層を一つの手法でシームレス解析できるコードができつつあり、おおむね順調に目標を達成しつつあると考えられる。

## 4. 今後の研究の推進方策

計画最終年度では、各階層間スケールを連成させる技術をまとめあげることが主題におき、4つの小テーマ：

(1)メソ：触媒表面化学反応の階層化計算モデル、(2)メソマクロ：非連続体一連続体計算モデル、(3)マクロ：多孔質壁粗面壁乱れ解析、(4)多孔体性状解析、の推進計画を以下のように定める。

(1)これまでに開発し、検証してきた分子動力学法によって流動を解析するための手法を用いて、燃料電池触媒層を想定した現実的なメソ～マイクロ多孔体内系の流動を解析する。そして化学反応現象を格子ボルツマン方程式に反映させる技法の検証を行う。この結果とテーマ(2)の格子ボルツマン解析手法による結果を連成させる手法について検討し、試行する。

(2)これまでの成果である高～中Knudsen数流れに対応した格子ボルツマン方程式を用い、燃料電池触媒層内流れを解析する。化学反応やナノ、メソ流動のモデルは(1)の分子動力学法の解を連成させることを実施する。

(3)前年度に開発した熱輸送も取り扱い可能な乱流解析格子ボルツマンコードを活用し格子ボルツマン法によるマクロ側の多孔体界面を含む層流～乱流にわたる連成解析を行う。そしてテーマ(2)の計算コードとの統合化を実施しメソマクロのシームレスなシミュレーションコードの確立を目指す。

(4)多孔体性状解析実験に関しては、水ポロシメーターの試行実験により得られた知見をとりまとめ論文公表する。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

- ① K.Suga, T.Tanaka, Y.Nishio, M.Murata, A boundary reconstruction scheme for lattice Boltzmann flow simulation in porous media, Progress in Comp. Fluid Dynamics, vol.9, 201-207(2009) 査読有
- ② K. Suga, S. Nishiguchi, Computation of turbulent flows over porous/fluid interfaces, Fluid Dyn. Res., vol.41, 012401:1-15 (2009) 査読有
- ③ K. Suga, Computation of High Prandtl Number Turbulent Thermal Fields by the Analytical Wall-Function, Int. J. Heat Mass Transfer, vol.50, 4967-4974 (2007) 査読有
- ④ X.-D. Niu, T.Munekata, S.Hyodo, K. Suga, Kinetic lattice Boltzmann method for microscale gas flows:Issues on boundary condition, relaxation time, and regularization, Physical Review E, vol.76, 036711:1-8 (2007) 査読有
- ⑤ X.-D. Niu, T.Munekata, S.Hyodo, K. Suga, An investigation of water-gas transport process in the gas-diffusion-layer of a PEM fuel cell by a multiphase multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model, J. Power Sources, vol.172, 542-552 (2007) 査読有

[学会発表] (計 31 件)