

平成 22 年 5 月 28 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・工学研究科・教授

研究者番号：60374089

研究成果の概要（和文）：

メソマクロスケール流動に対応できる非連続体格子ボルツマン法（LBM）を構築した。このモデルは直接法などによる非連続体流動域の傾向をよく再現するとともに、分子動力学法による結果とも十分よく対応した結果を示す。また、複雑な流れ系では簡便で実用上有利な2次のLBM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た。マクロスケール領域の解析では粗面、多孔質の両効果を考慮した壁面モデルの構築を行い、これをメソマクロ問題と連成させるためにLBMの壁モデルに組み込んだ。

研究成果の概要（英文）：

A lattice Boltzmann method for micro/nanofluidics (μ flow LBM) is developed. This μ flow LBM captures flow characteristic in the slip and transitional flow regimes at moderately high Knudsen numbers. Its results agree well with those of the DSMC and MD simulations. For complex micro/nano flow geometries, it is confirmed that the conventional second order discrete velocity models are good enough for simulating flow fields. Also, the presently developed macroscopic rough and permeable wall model is expanded to the LBM applications.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	7,500,000	2,250,000	9,750,000
2007年度	4,800,000	1,440,000	6,240,000
2008年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2009年度	1,500,000	450,000	1,950,000
年度			
総計	15,200,000	4,560,000	19,760,000

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. 研究開始当初の背景

一般的に工学機器に関する物理現象を階

層化し、より詳細な構造や状態を表す階層を下層と定義すると、最も下層は原子・分子レベルの動力学であり、最も上層に位置するの

はニュートン力学で記述されるマクロスケールの熱・流体や構造の連続体力学となる。材料シミュレーションの分野では、材料の分子構造等を粗視化して階層的にその動力学的挙動を解析する階層的な材料シミュレーションの研究が進んでいる。ここで用いられる粗視化動力学や熱流体力学、構造力学の解析そのものにも当然解決すべき問題は存在するが、階層的シミュレーションの実現を目指すには異なる階層間に特徴的な情報をいかに整合させて解析を進めるかといった観点が必要であり、原子・分子における非連続体的な表現から連続体の表現にかけての遷移過程を解析するための理論的背景が特に不足していると考えられた。このような問題に対して、半導体の熱拡散や高分子の粘弾性挙動に対する非連続体—連続体の扱いを協調させたシミュレーションの例はいくつか存在はするものの、まだまだ十分な研究が進んでいるとはいえなかった。分子スケールの構造から出発して、階層的にマクロスケールの現象までトータルに予測しようとするためには、このような非連続体—連続体の表現における遷移過程を含めて総合的にシミュレートするための理論の構築と解析が不可欠であることは疑いが無かった。

2. 研究の目的

本研究において非連続体—連続体遷移過程を含む熱・流動現象をシミュレートするための新たな手法の開発を行い、その有効性を示す計画を立てた。具体的な応用対象として燃料電池セル内の電解質膜層—触媒層—拡散層で構成される多孔体領域内の熱・流動、化学反応現象を取り上げた。ここではサブ・ナノメートルからミリメートルのスケールの幅がある。その中のガスや水の流動を化学反応による成分濃度変化も考慮してシミュレートできる方法を、並行して行う実験のデータを参考にしながら構築し、あわせてその精度や信頼性を実験等を通して確認することを目指した。

上述のように本研究は、高分子や触媒材料などの分子レベルの構造から出発して粗視化動力学によって電解質膜等の構造を予測し、各構造中の熱・流動を階層的にマクロスケールの現象までトータルに予想しようとする解析技術の中核となる方法の開発を目的とした。

3. 研究の方法

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)メゾマクロスケール（非連続体—連続体計算モデル）、(3)マクロスケール（多孔質壁—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た。

(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した。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した。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した。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。

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した。

(2)メゾマクロスケール（非連続体—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た。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た。

(3)マクロスケール（多孔質壁—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った。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した。

(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ことを試みた。

4. 研究成果

(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

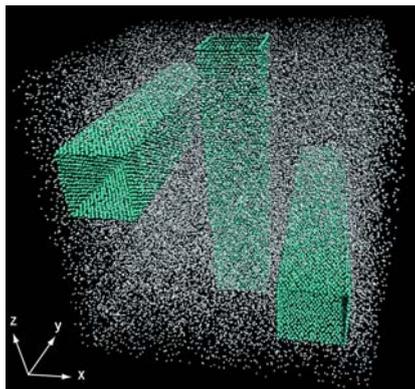


図1 ナノメッシュ多孔体内流動のMDシミュレーション

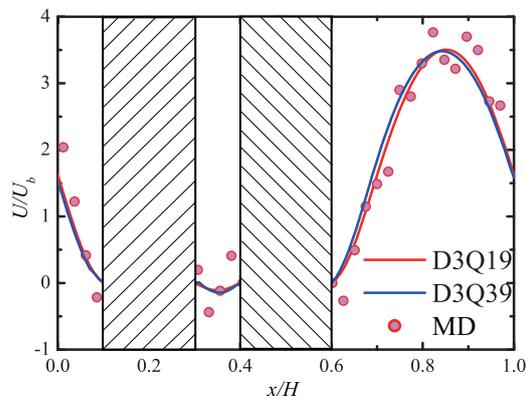


図2 ナノメッシュ多孔体内の速度分布

ルの模擬多孔体内流動解析を実施した (図1)。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構成を検討し、2次元および3次元の種々の流れ場で確認している。また、固体壁上に置かれたナノサイズの液滴の運動を解析した。化学反応に関しては、分子の重心運動と固有反応座標に沿った運動に注目した粗視化動力学方程式を經由した反応系の濃度表現を導出した。

(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る。また、LBM の実用的な速度モデルの検討も詳細に行い、複雑な流れ系では簡便で実用上有利な2次の速度モデル(図2中 D3Q19)でも3次の速度モデル(図2中 D3Q39)と同等な結果を与え、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図3のような多孔体内マクロ流動の詳細な解析を LBM で行い、多孔体の構造と流動性能の関係を明らかにするとともに、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なかった。

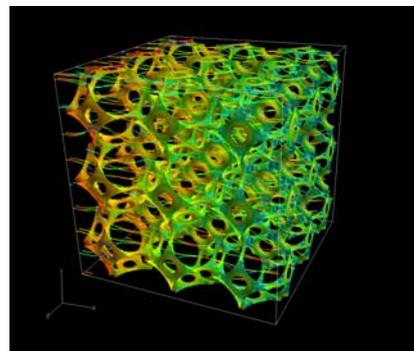


図3 マクロ多孔体内流動のLBMシミュレーション

た。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、従来の水銀ボ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。以上のように水ボ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た。

5. 主な発表論文等

(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 9 件)

- ① K. Suga, S. Takenaka, T. Ito, M. Kaneda, Lattice Boltzmann flow simulation in a combined nanochannel, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, vol.2 (2010) 査読有, 採択
- ② K. Suga, M. Kubo, Modeling turbulent high Schmidt number mass transfer across undeformable gas-liquid interfaces, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol.53, 2989-2995(2010) 査読有
- ③ K. Suga, Y. Nishio, Three Dimensional Microscopic Flow Simulation Across the Interface of a Porous Wall and Clear Fluid by the Lattice Boltzmann Method, *The Open Transp. Phenom. J.*, vol.1, 35-44(2009) 査読有
- ④ X.-D. Niu, S.Hyodo, K. Suga, H. Yamaguchi, Lattice Boltzmann Simulation of Gas Flow over Micro-scale Airfoils, *Computers & Fluids*, vol.38, 1675-1681(2009) 査読有
- ⑤ 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
- ⑥ K. Suga, S. Nishiguchi, Computation of turbulent flows over porous/fluid interfaces, *Fluid Dyn. Res.*, vol.41, 012401:1-15 (2009) 査読有
- ⑦ 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
- ⑧ 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
- ⑨ 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 48 件)

- ① K. Suga, S. Takenaka, T. Kinjo, S. Hyodo, Lattice Boltzmann Modeling for Nanoscopic Flow Simulation, *Int. Conf. Comput. & Experimental Enging and Sciences*, 2010, 2010.3.29, Las Vegas, USA (基調講演)
- ② K.Suga, Tackling complex turbulent surface phenomena by analytical surface-functions, 2nd Asian Symp. Comp. Heat Transfer and Fluid Flow, 2009.10.23 Jeju, South Korea, (基調講演)
- ③ K. Suga, S. Takenaka, T. Kinjo, S. Hyodo, LBM and MD simulation of a flow in a nano-porous medium, 2nd Asian Symp. Comp. Heat Transfer and Fluid Flow, 2009.10.22 Jeju, South Korea
- ④ S.Takenaka, K.Suga, T.Kinjo, S. Hyodo, Flow simulations in a sub-micro porous medium by the lattice Boltzmann and the molecular dynamics methods, 7th Int. ASME conf. on Nanochannels, Microchannels and Minichannels, 2009.6.24, Pohang, South Korea
- ⑤ K. Suga, M.Kubo, Modeling high Schmidt number turbulent scalar transport across air-water interfaces, 6th Int. Symp. Turb. Shear Flow Phenomena, 2009.6.23, Seoul, South Korea
- ⑥ 兵頭志明,粗視化動力学法に基づく反応系の濃度表現,第12回理論化学討論会,2009年5月29日,東京大学
- ⑦ K.Suga, Y. Nishio, Lattice Boltzmann flow simulation of porous medium- clear fluid interface regions, 19th Int. Symp. on Transp. Phenomena, 2008.8.19, Reykjavik, Iceland
- ⑧ K.Suga, S. Nishiguchi, Modeling turbulent flows over permeable walls, 7th Int. Symp. on Eng. Turbulence Modelling and Measurements, 2008.6.5, Limassol, Cyprus
- ⑨ K.Suga, T.Tanaka, Y.Nishio, M.Murata, A boundary reconstruction scheme for lattice Boltzmann flow simulation in porous media, 1st Asian Symp. Comp. Heat Transfer & Fluid Flow, 2007.10.18, Xi'an, China
- ⑩ T. Kinjo, S. Hyodo, A generalized coarse-grained equation of motion, 1st Asian Symp. Comp. Heat Transfer & Fluid Flow, 2007.10.18, Xi'an, China

[その他]

ホームページ等: なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

須賀 一彦 (SUGA KAZUHIKO)
大阪府立大学・工学研究科・教授
研究者番号：60374089

(2) 研究分担者

兵頭 志明 (HYODO SHIAKI)
㈱豊田中央研究所・主席研究員
研究者番号：20394520

(3) 連携研究者

金城 友之 (KINJO TOMOYUKI)
㈱豊田中央研究所・研究員
研究者番号：80399732

森本 友 (MORIMOTO YU)
㈱豊田中央研究所・主席研究員
研究者番号：90394501

山田 春彦 (YAMADA HARUHIKO)
㈱豊田中央研究所・主任研究員
研究者番号：50394557