

平成23年度北海道大学情報基盤センター共同研究成果報告書

1. 研究領域番号 A1 大規模計算機シミュレーション

2. 研究課題名 階層型連成現象シミュレーションによる燃料電池内の物質移動現象解明

3. 研究期間 平成23年4月27日 ～ 平成24年3月31日

4. 研究代表者

氏 名	所属機関・部局名	職 名	備 考
大島 伸行	北海道大学・ 大学院工学研究院機械宇宙工学部門	教授	

5. 研究分担者

氏 名	所属機関・部局名	職 名	備 考
渡部 正夫	北海道大学・ 大学院工学研究院機械宇宙工学部門	教授	
田部 豊	北海道大学・ 大学院工学研究院エネルギー環境システム部門	准教授	
栗原 央流	大分大学・機械工学科	准教授	H23.6 に異動
矢口 久雄	群馬高等専門学校・機械工学科	助教	H23.4 に異動
古山 通久	九州大学・稲盛フロンティア研究センター	教授	
大宮 学	北海道大学・情報基盤センター	教授	
長岡 佑昌	北海道大学・大学院工学研究科	MC1	
松谷 恭兵	北海道大学・大学院工学研究科	MC2	
林 元気	北海道大学・大学院工学研究科	M2	
斉 斌	北海道大学・大学院工学研究科	D1	
龔 加明	北海道大学・大学院工学研究科	D2	
サラウディン ケ ーエム	北海道大学・大学院工学研究科	D1	

6. 共同研究の成果

実用化が期待される固体高分子型燃料電池において、設計開発の鍵となるナノスケール電気化学反応機構とマクロスケール熱流体力学的機構によって維持される高分子型燃料電池内部の物質輸送現象に対して「階層型連成シミュレーション」の開発および実証研究により、触媒材料設計への応用を図るため、本研究では、これまで固体高分子型燃料電池内の物質移動現象の研究により得られたマクロからナノスケールまで複数の階層シミュレーション技術を応用して、統合的な階層型連成シミュレーション構築のための実証計算を行った。これらは、ハイパフォーマンス・コンピューティング、および、高度計測における大規模データベースの解析・評価に関する開発研究をスー

(研究成果のつづき)

パソコンコンピュータを用いて実施することで、触媒層内・界面の階層型連成現象シミュレーションを実現することを目指している。これは、燃料電池内の物質移動現象解明において必須技術であり、かつ、燃料電池材料設計にブレークスルーをもたらす可能性がある。

今年度は、連続体平均場（マクロ）、多孔質微細構造（メゾ）、界面ナノ構造（ミクロ）の3つの階層における以下の課題について数値解析の実証研究を行い、成果を得た。

課題1 階層型連成現象シミュレーションのための要素モデル計算の高速化

①平均場モデル解析：

ソフトウェアFrontFlow/redに基づく多孔質流動予測の高度化の実証として、実機サーペンタイン（複列折れ曲がり）流路とガス拡散層を対象とした大規模流れシミュレーション（約1500万要素）をソフトウェアFrontFlow/redに実装し、SR11000システムによる並列計算の実効性能評価を行った。また、電解質膜／触媒層／ガス拡散多孔質層における水輸送連成モデルを構築し、実証計算を行った。

（国内学会 自動車技術会秋季大会 2011.10 札幌にて 講演）

（国際学会 日韓機械学会合同熱工学会議 2012.3 Incheon・韓国にて 講演）

②格子ボルツマン直接解析：

phase field法に基づく気液2相LBM法による多孔質3次元形状を再現した直接シミュレーションの高度化として、界面保存性の観点から保存方程式カップリングの計算方法の改良と数値検証をおこなった。また、3次元模擬ガス拡散層モデルを用いた液水排出過渡現象メカニズム理解のための数値予測を試みた。（機械学会年次大会2012.9 東京にて講演予定）

③分子動力学解析：

ナノスケール気液界面物性予測のための分子動力学解析の応用として、水極性分子ポテンシャルを導入したナノスケール液膜の分子動力学解析モデルの導入を図るとともに、大規模解析の効率化のため計算プログラムチューニングを進めた。

（国内学会：機械学会年次大会2012.9 東京にて講演予定）

課題2 階層型連成現象シミュレーションのための高度計測データベースの効率的実装

連続体平均場（マクロ）、多孔質微細構造（メゾ）、界面ナノ構造（ミクロ）における3次元構造の再現モデルについての検討および上記解析モデルによる実証計算により、それらの有用性を検証した。それらの解析結果の相互検討により、各スケール現象間の連成モデルの構築に関する調査研究を行い、統合解析システムの基本設計を行った。これらの成果をもとに、ASTEP 助成を受けて商用版プログラムを行っている。

（国内成果発表：FC-EXPO 2012.3 東京にて 講演およびポスター展示）