

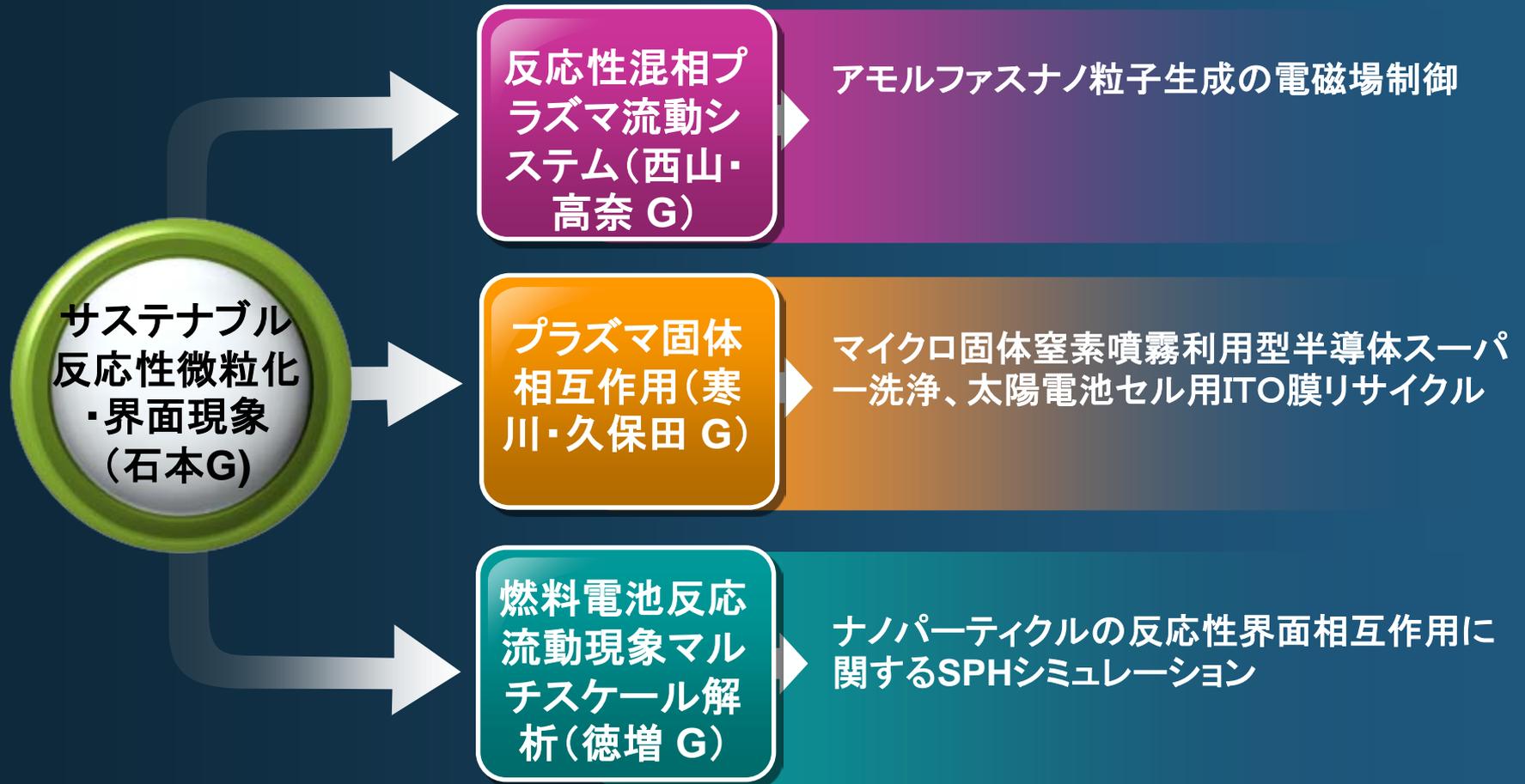
# 高応答性流体の異分野融合展開

## 1. 研究目的

外的要因に対し特有の反応・応答・機能性を表出化する流体・熱流動を対象とし、その異分野融合型研究開発手法を通して、ナノ機能性創出、反応性界面物理、環境調和型エネルギー、低炭素社会構築、リサイクル科学、流体－固体材料連成科学への学術的貢献と先端応用展開を目指す。

- **グループ1: 石本 淳<sup>1)</sup>**,  
サステナブル反応性微粒化・界面現象に関する研究
- **グループ2: 西山 秀哉<sup>1)</sup>, 高奈 秀匡<sup>1)</sup>**,  
環境浄化・エネルギー促進用反応性混相プラズマ流動システムの構築
- **グループ3: 寒川 誠二<sup>1)</sup>, 久保田 智広**  
プラズマ固体相互作用の解明とナノ界面制御
- **グループ4: 徳増 崇<sup>1)</sup>**,  
燃料電池内部の反応流動現象のマルチスケール解析

# 高応答性流体グループ間連携 (連携研究テーマの提案)

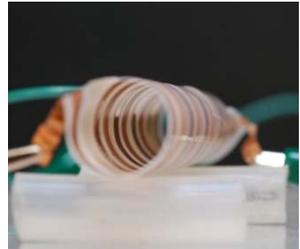


[サブテーマ3, 西山・高奈グループ]  
静電効果による管内微粒子攪拌・搬送特性

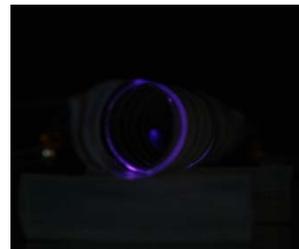
Characteristics of Electrostatic Micro Particle Mixing and Transportation in a Tube

西山 秀哉<sup>1)</sup>†, 高奈 秀匡<sup>1)</sup>

管内に誘電体バリア放電(DBD)発生機構を有するDBDプラズマチューブを製作し, 流れがない状態でのプラズマ生成実験および粒子攪拌・搬送実験を行い, 高電圧印加時における微粒子の搬送挙動を明らかにした.



(a)  $V=0.0\text{ kV}_{pp}$



(b)  $V=14.2\text{ kV}_{pp}$



(c)  $V=14.6\text{ kV}_{pp}$

図 2 DBD プラズマチューブの発光写真



(a)  $V=0.0\text{ kV}_{pp}$



(b)  $V=14.6\text{ kV}_{pp}$

図 3 DBD プラズマチューブによるアルミナ粒子搬送の様子

[サブテーマ3, 寒川・Huangグループ]

計算と実験の融合によるプラズマとナノ構造表面界面相互作用に関する研究

Research on plasma-surface interaction by combination of simulation and experiment

黄啓賢<sup>1)</sup>, 久保田智広<sup>2)</sup>, 寒川誠二<sup>1)</sup> †

<sup>1)</sup>東北大学流体科学研究所, <sup>2)</sup>東京大学生産技術研究所、†グループリーダー

固体表面におけるプラズマ-固体相互作用を直接観測するため、固体表面にセンサを組み込んだオンウェハセンサを開発した。コンタクトホール内の電位分布を計算することに成功した。さらに、コンタクトホールにプラズマからイオンが入射した際にイオンの軌道が電位分布によって曲げられる様子をシミュレーションすることができた(図3)。

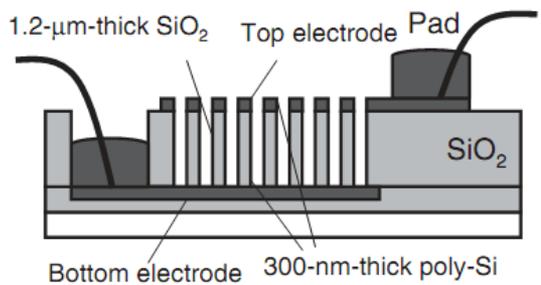


図1：オンウェハ電荷蓄積量センサの構造

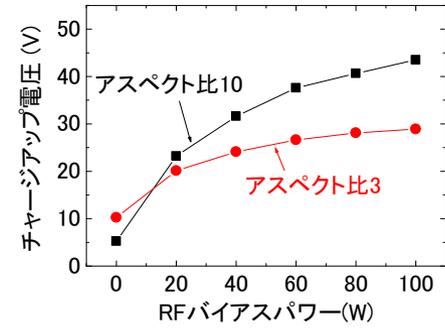


図2：チャージアップ電圧測定結果

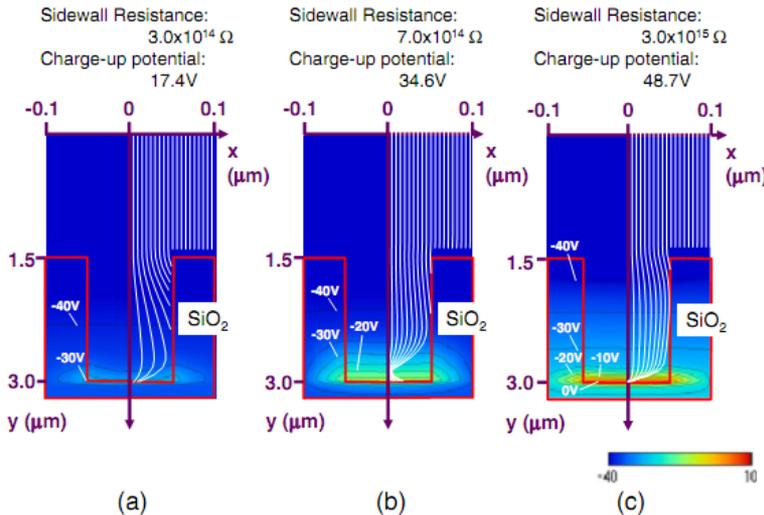


図3：オンウェハセンサの測定結果から計算したコンタクトホール内電位分布とイオン軌道

[サブテーマ3, 徳増グループ]

PEFC触媒層の酸素、プロトン輸送性能の評価シミュレータの構築

Development of simulation method to evaluate the performance of proton and oxygen transport in PEFC catalyst layer

徳増 崇<sup>1)</sup>†, 井上 元<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>東北大学流体科学研究所, <sup>2)</sup>九州大学 工学研究院 化学工学部門、†グループリーダー

触媒層アイオノマーのプロトン輸送、酸素透過現象を解析するプログラムのプラットフォームを作成した。、アイオノマーの厚さの評価や酸素分子の透過数を計算するところまでを行った。触媒層内のアイオノマーおよび空隙のネットワーク情報を計算し、実効的な長さを求めてこのアイオノマー及び空間における物質輸送現象のシミュレーションを行うこととした。

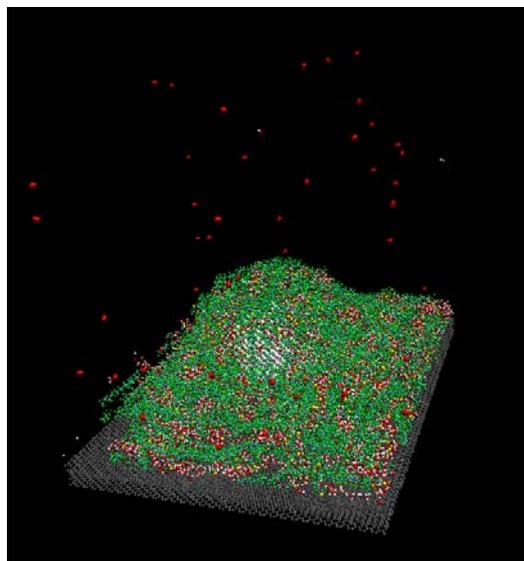


図1: 分子動力学法によるプロトン輸送、酸素透過現象のシミュレーションの概念図

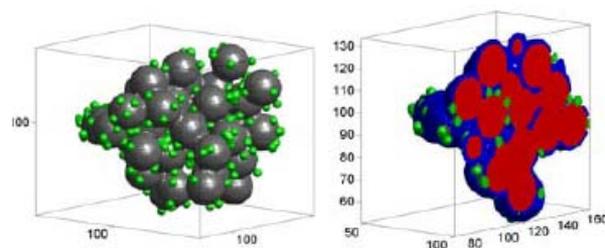
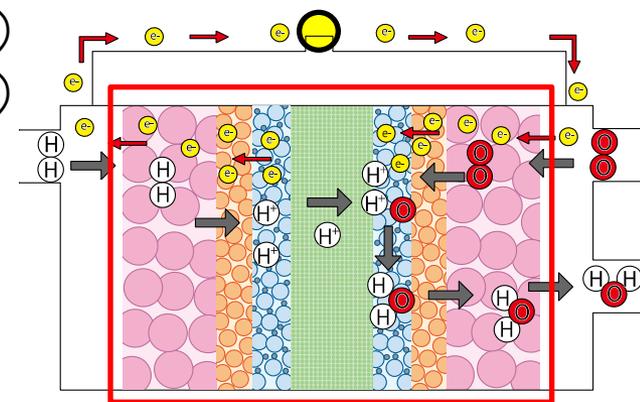


図2: 触媒層多孔体のモデリング

# 共同研究テーマ:触媒層の酸素、プロトン輸送性能の評価シミュレータの構築

## 燃料電池: 将来のエネルギー供給源として様々な場所で活躍

- エネルギー変換効率高(カルノーサイクル等と比較して)
- 環境負荷小(発電プロセスにおいて $\text{NO}_x$ ,  $\text{SO}_x$ 等が出ない)
- 低振動・低騒音(爆発・燃焼を伴わない)



MEA内の基本的な物質輸送現象の解明が極めて重要

数値シミュレーション

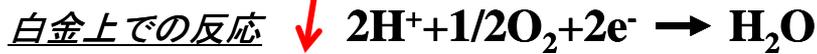
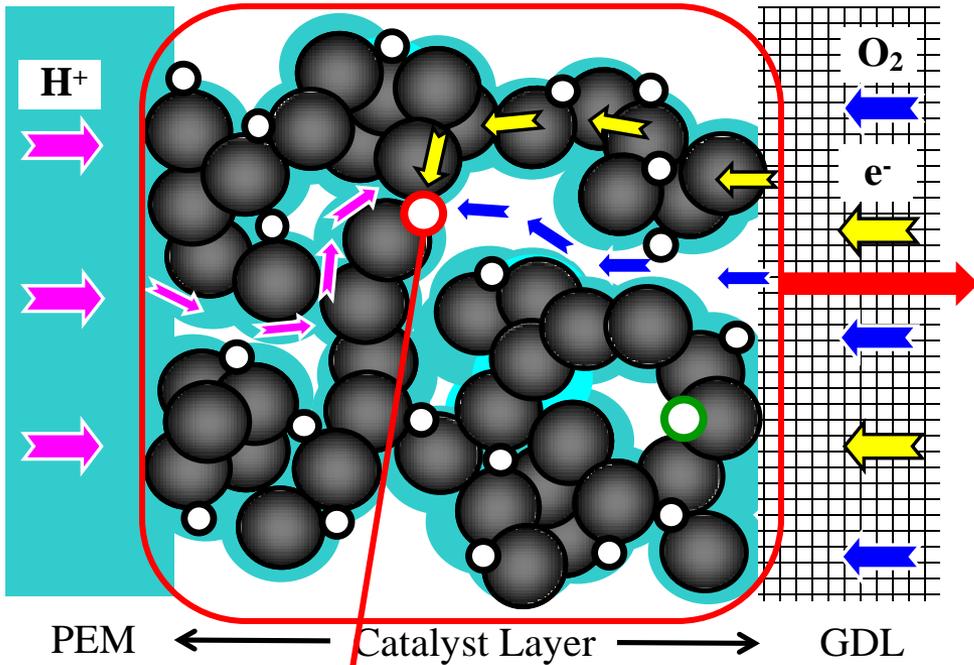
## MEA内の流動現象

- ・ガス拡散層(Gas Diffusion Layer)
- ・撥水層(Micro Porous Layer)
- ・高分子膜(Polymer Electrolyte Membrane)
- ・触媒層(Catalyst Layer)

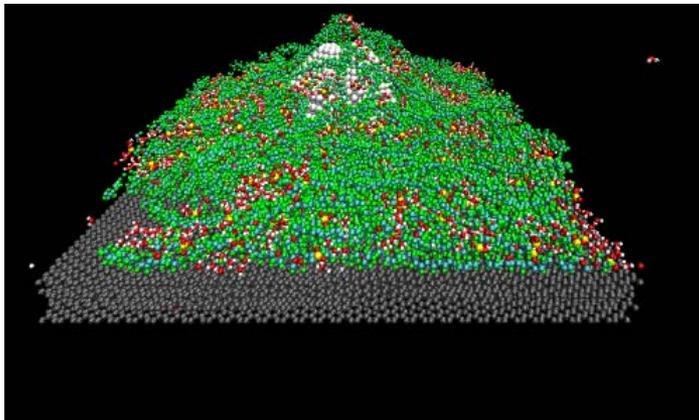
がマイクロメートルからナノメートルまでの様々な特性を有する流路を形成  
(**ミクروسケール**特有の流動現象を示す)

スケールごとのモデル化を行って、触媒層の酸素、プロトン輸送現象を数値計算により評価

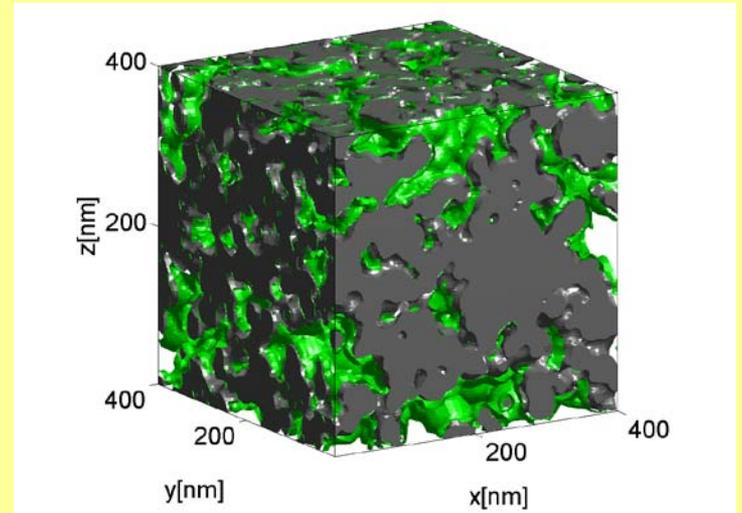
# 燃料電池触媒層の模式図



アイオノマーのプロトン輸送能力  
酸素透過能力の解析(ナノスケール)



## 触媒層メゾ構造の解析(メゾスケール)



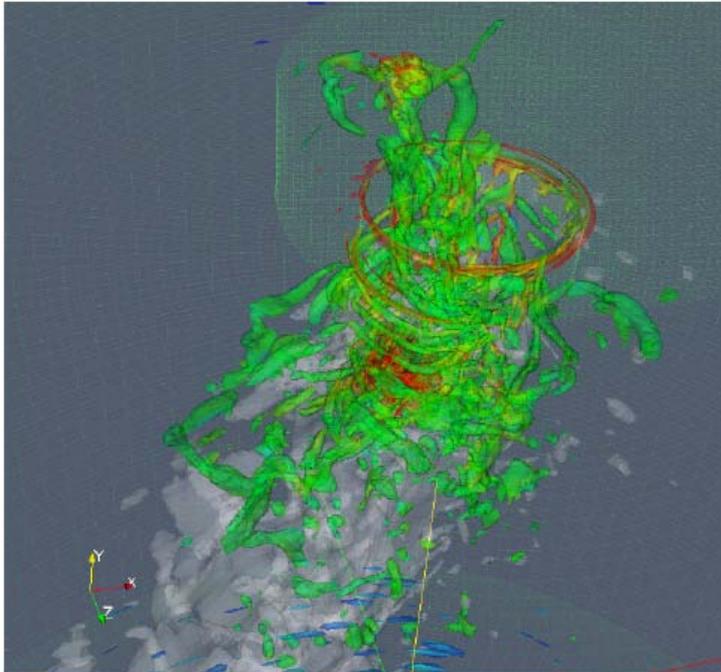
プロトン輸送経路(アイオノマー)  
酸素輸送経路(空隙) の実質長の解析

## 反応効率の計算(Butler-Volmerの式)

触媒表面での酸素濃度の見積もり(酸素透過確率)  
アイオノマー内のプロトン輸送速度の見積もり  
アイオノマー内部の水分布  
アイオノマーの親水基・疎水基の分布

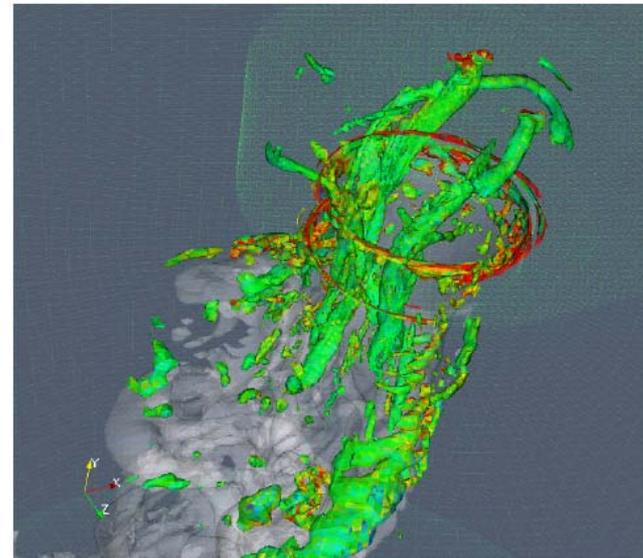
# マイクロキャビテーションを伴う界面変形・微粒化現象におけるマイクロ渦構造の解明 (Barotropic-LES-VOF model)

## *2<sup>nd</sup> Invariant*



(b)  $t = 8.6e-4$  s

(with cavitation model, barotropic)



(b)  $t = 8.6e-4$  s

(without cavitation model)

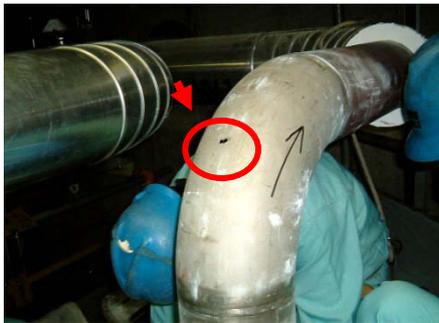
微小乱流縦渦のエネルギーがマイクロキャビテーション生成に消費され、界面変形と微粒化挙動に影響していることを明らかにした。

Instantaneous isosurface of the second invariant of velocity gradient tensor  $Q$  profiles just inside and downstream of the nozzle with scalar magnitude of vorticity  $|\omega|$ .

## 原子力発電所における配管減肉予測システムの開発に関する研究(東北電力と共同研究)

原子力発電所において最も多くトラブルが頻発し大事故に直結する事象となりうるのが、配管系における減肉現象である。

本共同研究は、原子力発電所の配管系と高速熱流動をスーパーコンピュータ上に再現し、トラブルの発生箇所・原因を事前に予測するシステムを確立することを目的とする。本システムの実用化により、原子炉保守・点検に要する時間的・人的コストは大幅に軽減化し、極めて安全性の高い原子力発電の運用が可能になると言える。



実際の配管減肉現象  
(女川原子力発電所)

### 流体研のエネルギークラスタ若手教員による共同研究

石本 淳	(液滴衝撃エロージョン解析専用コード開発)
伊賀 由佳	(単一液滴衝撃－材料連成解析, 2次元LDI解析)
松浦 一雄	(乱流解析数値スキーム, アルゴリズム検討)
内一 哲哉	(減肉箇所の非破壊検査予測)
鄭 信圭	(エロージョンデータマイニング)

# 原子力発電所における配管減肉予測システムの開発に関する研究 (東北電力と共同研究)

## 液滴自動生成・凝縮・蒸発モデルによる計算結果

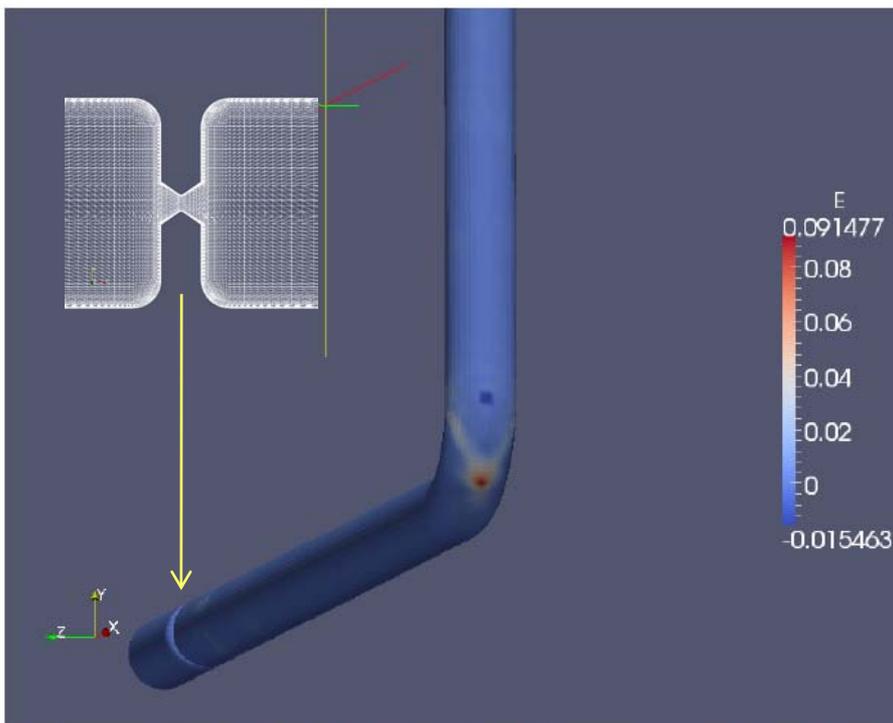


図 33: meshA 自動的に粒子を挿入する。液下滴が生成したエロージョン率を考慮する。

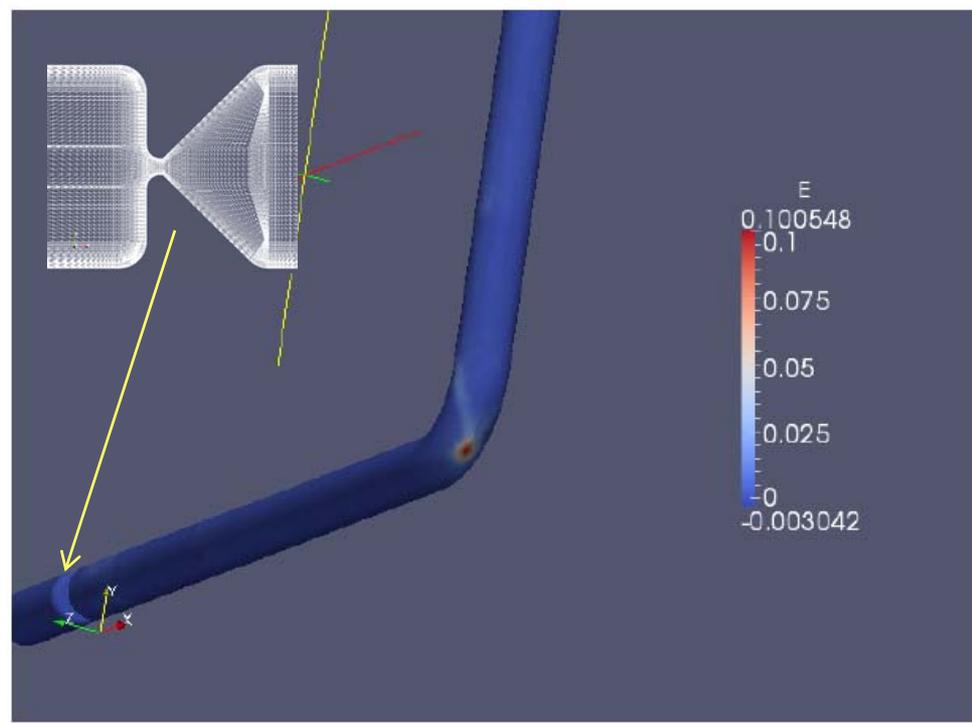


図 35: meshB 自動的に粒子を挿入する。液下滴が生成したエロージョン率を考慮する。

# 分野横断型プロジェクトサブテーマ融合研究

高応答性流体グループが中心となり、燃焼グループとライフサイエンスグループの2グループと共同で融合研究を推進します。

