



# GPUを用いたアルカリ水電解の大規模二相流電気化学連成シミュレーション

## 背景・目的

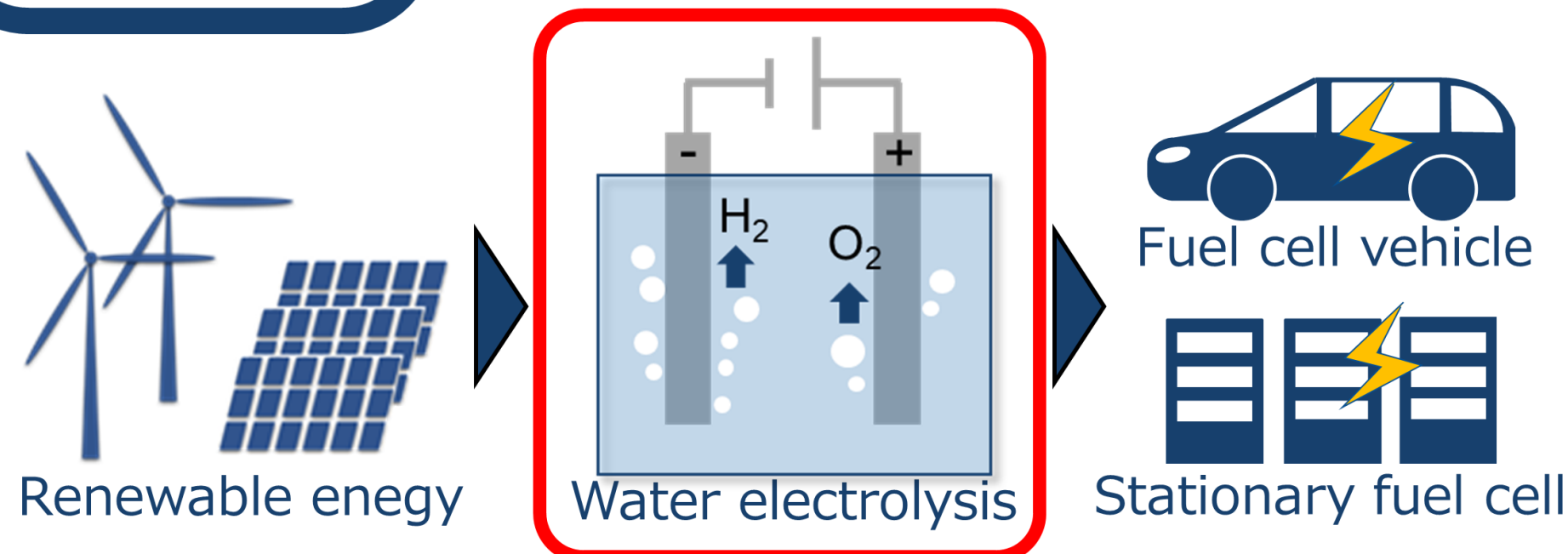
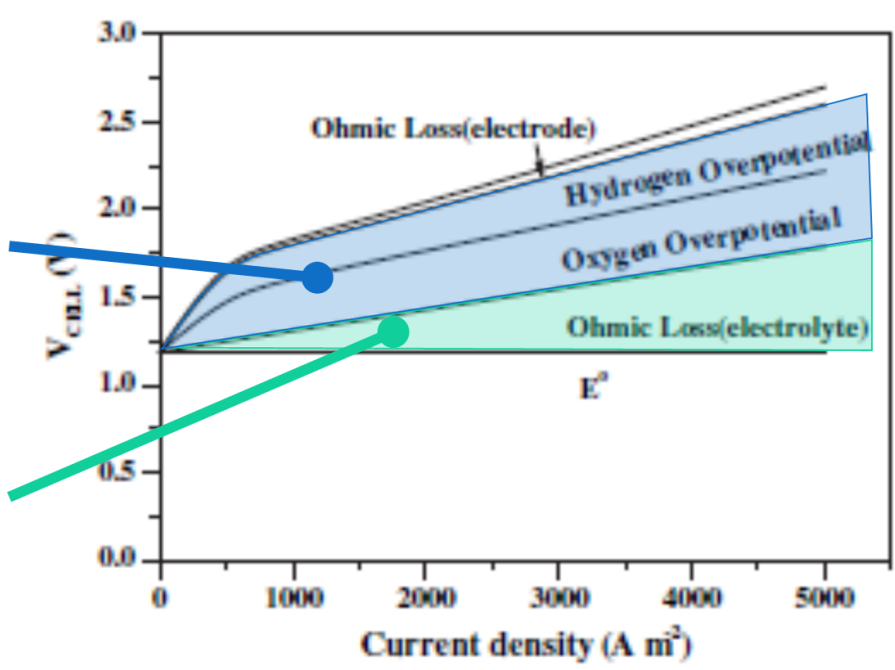


Fig.1 Overall concept for the use of hydrogen

アルカリ水電解は**構造が簡単で安価** → 大規模水素生成  
エネルギー変換効率が60%程度, **効率の向上が課題**

## 電解効率低下の要因

- ✓ 生成される気泡が電極表面に付着することによる**反応抵抗**の増加
- ✓ 気泡の存在による電解液中の**イオン輸送抵抗**の増加

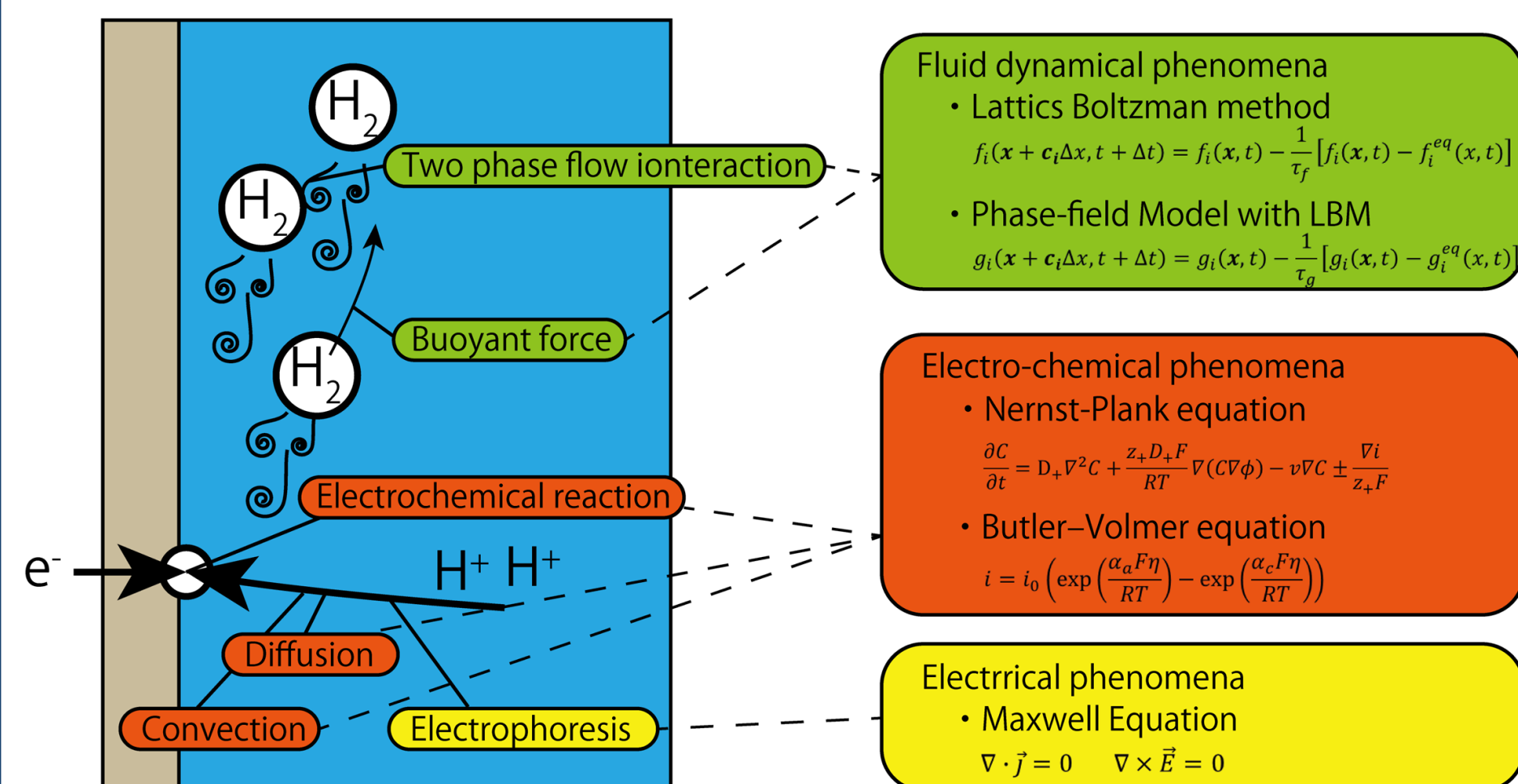


## 研究目的

- 気泡の成長・上昇がイオン輸送に及ぼす影響を解析
- 高効率水電解に向けた指針の確立

## 計算手法

支配方程式		解析手法
流体	Navier-Stokes方程式	気液二相流格子ボルツマン法
電気化学	Nernst-Planck式 Butler-Volmer式	有限体積法、有限差分法
電磁気学	Maxwell方程式	有限体積法



- ✓ 気液二相流, 電気化学, 電磁気の多重連成系の解析
- ✓ 電解層内の気泡数~1000個/cm<sup>3</sup>
- ✓ 現象スケール サイズ~100μm 時定数~0.1ms

**実験規模電解槽の直接解析 = 計算量大**

使用計算機: TSUBAME3.0

**Compute Node**

CPU: Intel Xeon E5-2680v4(14core) × 2  
GPU: NVIDIA Tesla P100 × 4

Performance: 22.5 TFLOPS  
Memory: 256 GB(CPU)  
64 GB(GPU)

**System**

540 nodes: 1080 CPU sockets, 2160 GPUs  
Performance: 12.15 PFLOPS

**Interconnect**  
Intel Omni-Path HFI 100Gbps × 4  
Topology: Fat-Tree

**Job Scheduler**: UNIVA Grid Engine  
**Operating System**: SUSE Linux Enterprise Server 12

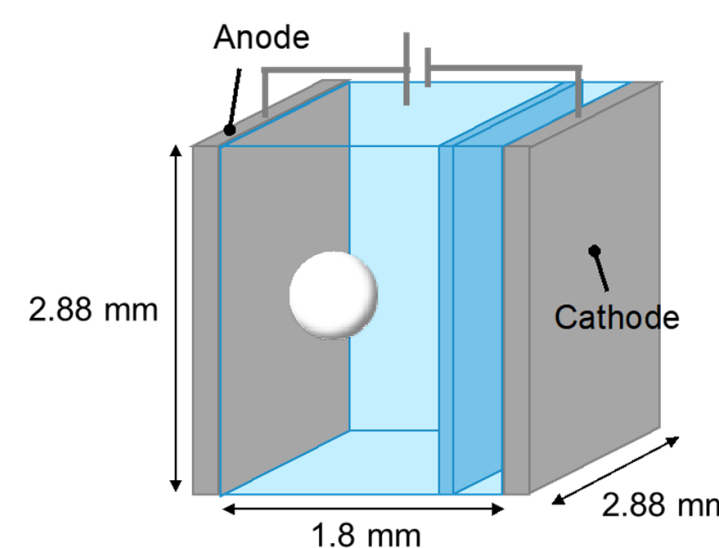
- ✓ GPU(NVIDIA Tesla P100)を主とするGPUスパコン
- ✓ GPUを用いた高並列計算(3584CUDAcore/GPU)
- ✓ 高メモリバンド幅(HBM2 720GB/s)

**GPU計算により大規模水電解解析を実現**

## 計算結果

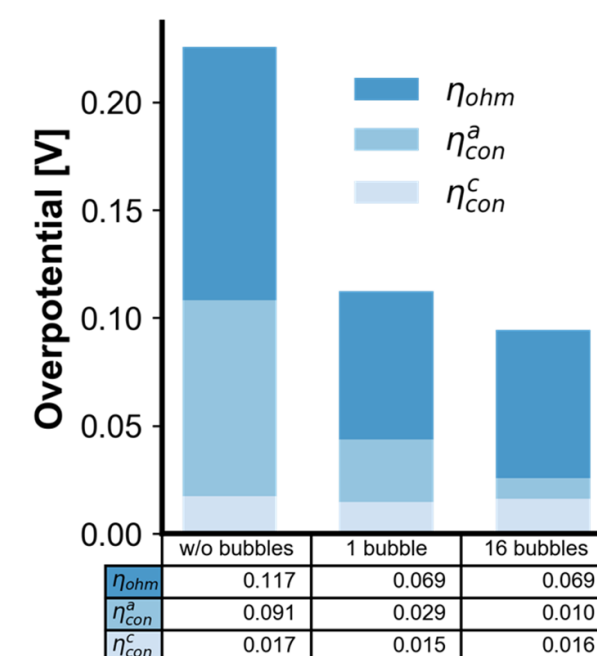
- ✓ CPUを用いた小規模解析を実施 (56core)  
※気泡は周期配置のみ, 気泡生成過程は非解析
- ✓ 気泡の微細化時の過電圧変化(電解効率変化)を検討

### Geometry of water electrolysis

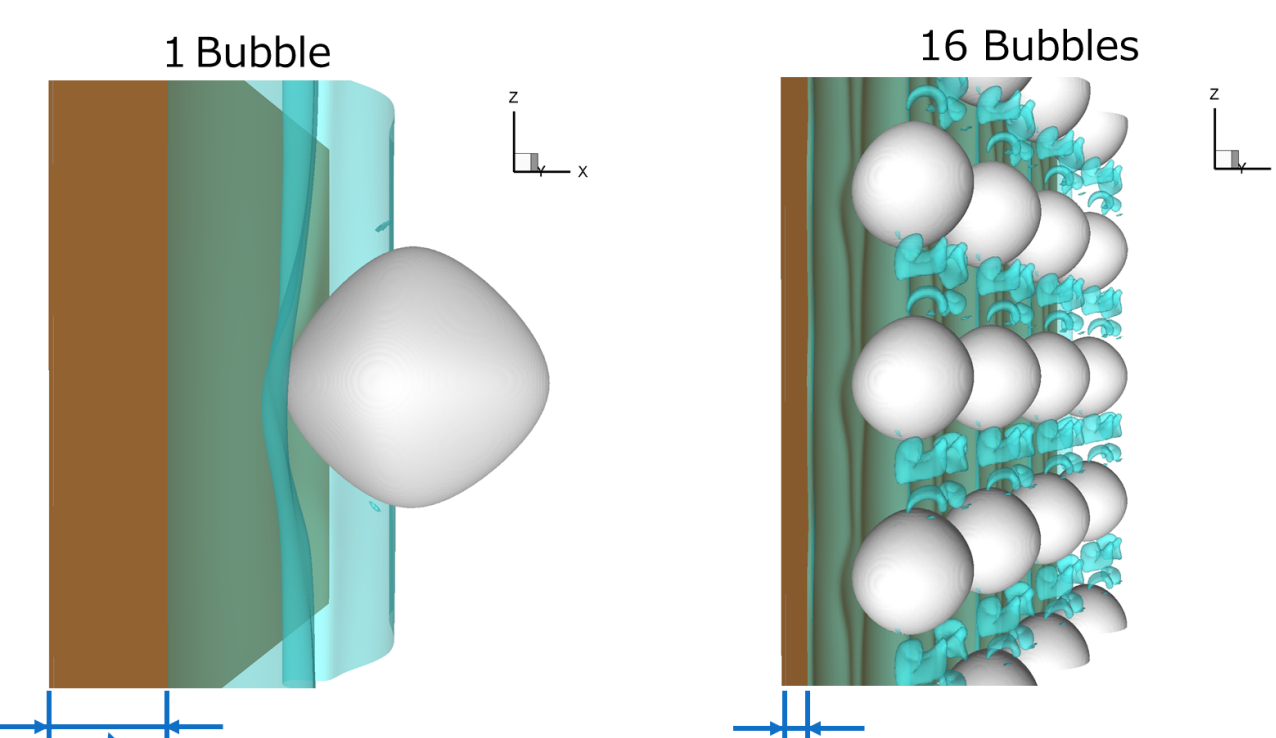


### Conditions

Lattice	180 x 288 x 288
Grid size	10 μm
Bubble diameter	1.1 mm (x 1) 0.44 mm (x 16)
Electrode	Ni
Electrolyte	30% KOH
Current Dens	6,900 A/m <sup>2</sup>
Temperature	298 K
Y, Z boundary	Periodic



- ✓ 気泡は過電圧を低減  
電流経路の遮蔽効果 < 電解攪拌効果
- ✓ 気泡の微細化により過電圧低下
- ✓ IR過電圧、アノード側濃度過電圧が過電圧変化要因



電極-高濃度域間距離: **大**  
⇒濃度過電圧 & IR過電圧: **大**

電極-高濃度域間距離: **小**  
⇒濃度過電圧 & IR過電圧: **小**

## 今後の予定

1. GPU計算の実装, 大量気泡系の計算の実現
2. 電極形状・配置条件・気泡微粒化等の検討