

# OpenFOAMによる固体高分子型 燃料電池内の水輸送シミュレーター開発

栗原央流, 呉 広鎬, 小串健作, 大島伸行, 濱川洋充

OpenCAE シンポジウム 2012 (岐阜)

# 固体高分子形燃料電池(PEFC)の特徴

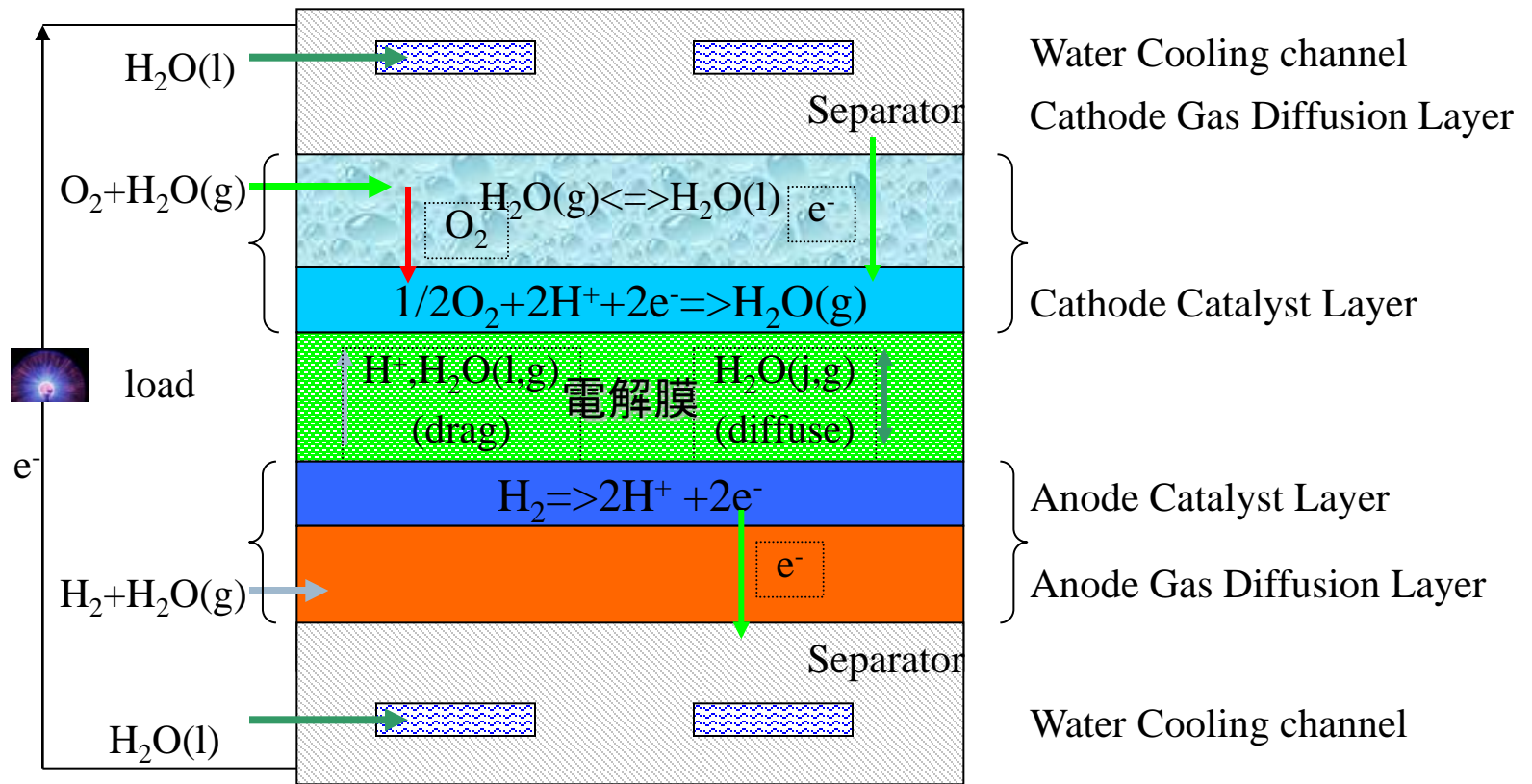
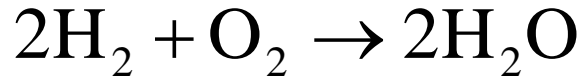
---

- ▶ 高効率(化学エネルギー → 電気エネルギー)
- ▶ 環境負荷が小さい
- ▶ 起動性に優れる, コンパクト

## 自動車用動力装置への利用

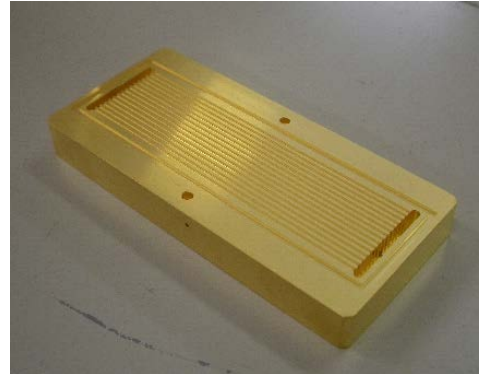
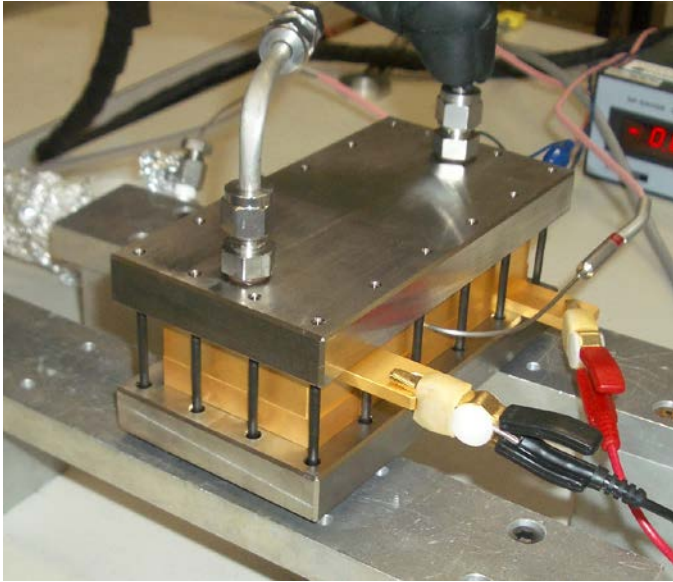
- カソード触媒層より発生する液体水によるガス流路閉塞(フラッディング)
  - 電解質膜の保水
  - コスト, 水素運搬・貯蔵
-

# PEFCの構成



Schematic of model region for PEFC

# PEFCシステム実機



Anode separator



Cathode separator



End plate

(北海道大学 近久・田部研究室)

# 支配方程式

---

質量保存

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{v}) = 0$$

Darcy's Law による  
多孔質内の流動抵抗

運動量保存

$$\frac{\partial\varepsilon\rho\mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla(\varepsilon p) - \nabla \cdot (\varepsilon\boldsymbol{\tau}) + \varepsilon\mathbf{F} - \frac{\mu}{\kappa} \varepsilon^2 \mathbf{v}$$

$\varepsilon$  : ポーラス度 (多孔質度)

$$\varepsilon = \varepsilon_d (1 - s)$$

$\varepsilon_d$  : Dry porosity (多孔質の体積に占める空隙の割合)

---

# エネルギー保存

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho h) + \nabla \cdot (\varepsilon\rho h\mathbf{v})$$
$$= -\nabla \cdot \mathbf{q} - (\varepsilon\tau \cdot \nabla\mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \nabla(\varepsilon\rho) - J\eta + \frac{\mathbf{i}_s \cdot \mathbf{i}_s}{\sigma_s} + \frac{\mathbf{i}_f \cdot \mathbf{i}_f}{\sigma_f} + h_{phase}$$

触媒層において  
電流Jのなす仕事

電子・イオンの移動に  
伴うジュール熱

$h$  : エンタルピー

$\mathbf{q}$  : 熱流速

$h_{phase}$  : 水の相変化潜熱

$J$  : トランスファー電流

$\eta$  : 電子とイオンによるポテンシャル

# 電流の保存

$$\nabla \cdot \mathbf{i}_s + \nabla \cdot \mathbf{i}_f = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{i}_s = -\nabla \cdot (\sigma_s \nabla \phi_s) = \begin{cases} +\vec{J}^+ & \text{cathode - catalyst - layer} \\ -\vec{J}^- & \text{anode - catalyst - layer} \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

$$\nabla \cdot \vec{i}_f = -\nabla \cdot (\sigma_f \nabla \phi_f) = \begin{cases} -\vec{J}^+ & \text{cathode - catalyst - layer} \\ +\vec{J}^- & \text{anode - catalyst - layer} \\ 0 & \text{esle} \end{cases}$$

$\Phi_s, \phi_f$  はそれぞれ電子, イオンによるポテンシャル  
 $J$  はトランスファー電流 (触媒層のみ)



# Butler-Volmer 方程式(電気化学表面反応レート)

$$J^{\pm} = ai^{\pm} = ai_0^{\pm} \left\{ \exp\left[\frac{\alpha_a^{\pm} F}{RT} \eta\right] - \exp\left[-\frac{\alpha_c^{\pm} F}{RT} \eta\right] \right\}$$

オーバーポテンシャル:  $\eta = \phi_s - \phi_f$

$$\text{充電電流密度: } i_0 = -i_0^{\text{ref}} \left( \frac{C_{O_2,w}}{C_{O_2,w}^{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{O_2}} \left( \frac{C_{H_2O,w}}{C_{H_2O,w}^{\text{ref}}} \right)$$

線形化

線形化されたAnodeトランスファ電流

$$J^- = ai_0^- \left\{ \frac{\alpha_a^- + \alpha_c^-}{RT} F \eta \right\}$$



# 化学種の輸送

$$\frac{\partial \varepsilon \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho Y_i \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + \dot{\omega}_i$$

$\mathbf{j}_i$ : 濃度勾配による化学種( $i$ )の拡散流速  
 $\dot{\omega}$ : 触媒層における化学種の生成レート

## 液体水飽和度 $s$ の輸送

Electro osmotic drag

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\varepsilon_d \rho_l s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_d \rho_l \mathbf{v}_l) + \nabla \cdot \left( \frac{\alpha M_l}{F} \mathbf{i}_f \right) \\ & = \nabla \cdot (\varepsilon_d \rho_l D_c \nabla s) - \nabla \cdot \left( \frac{\lambda_l (1 - \lambda_l) \kappa (\rho_l - \rho_g)}{\nu} \mathbf{g} \right) + \dot{m} \end{aligned}$$

表面張力項  
 $D_c$ : 毛細拡散係数

気相と液相のすべり効果を  
考慮した重力項

# シミュレーションコードの構成

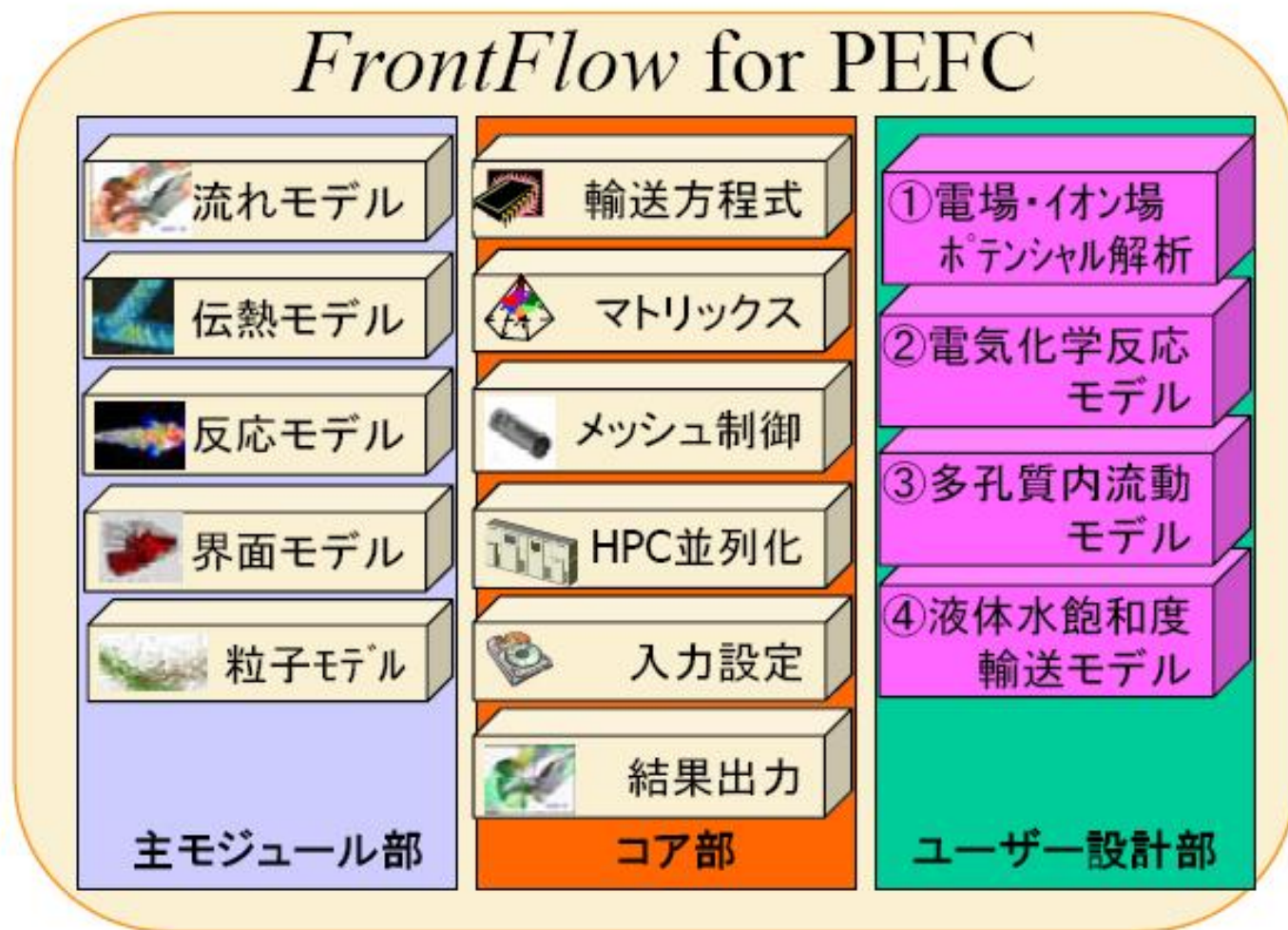
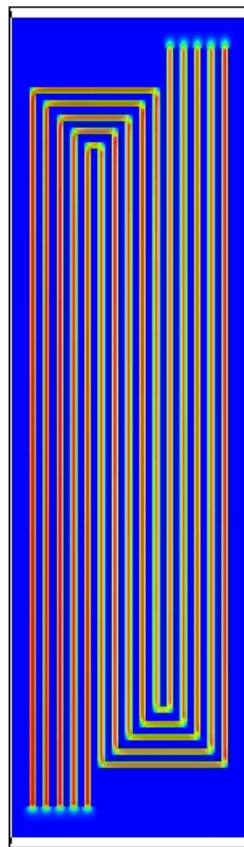


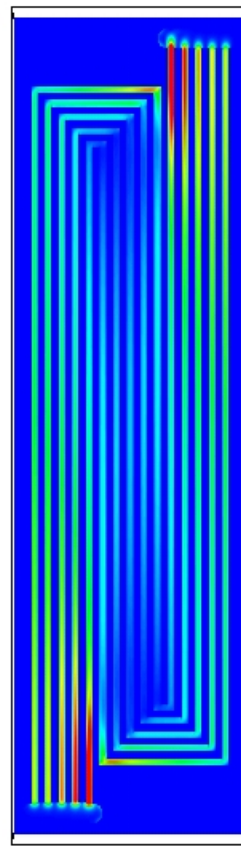
図1 PEFC シミュレータの構成

# カソード流路の流速分布・圧力分布

流速分布



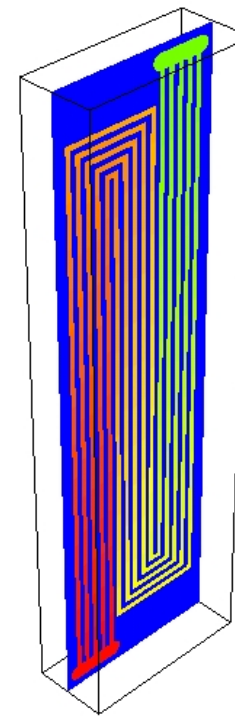
$\epsilon = 10^{-10}$



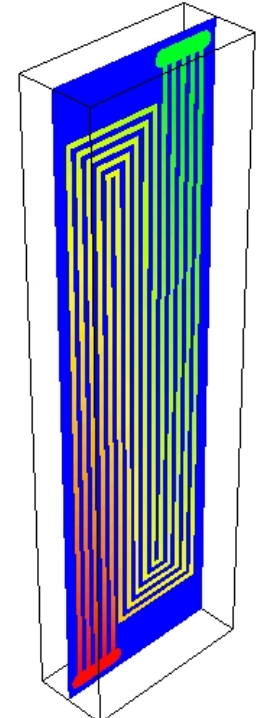
$\epsilon = 0.8$



チャンネル内圧力分布



$\epsilon = 10^{-10}$

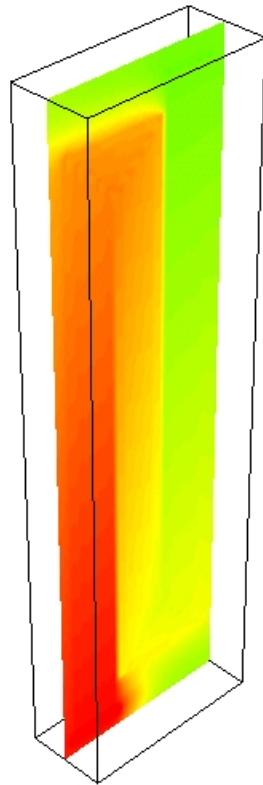


$\epsilon = 0.8$

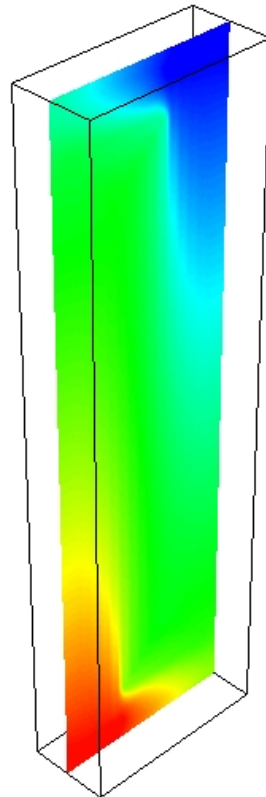
▶ Porosity が大きい場合、逆流部の流れが阻害されてしまう

# カソードGDL内の流速分布・圧力分布

圧力分布

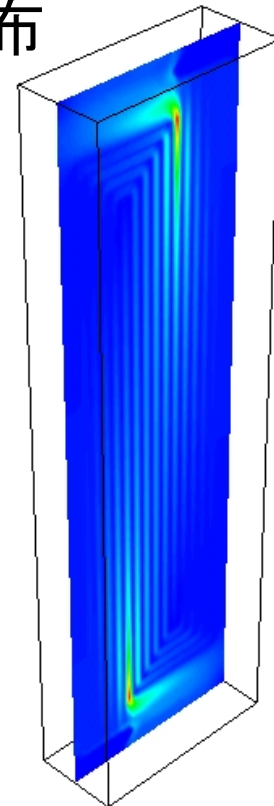
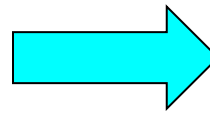


$$\varepsilon = 10^{-10}$$

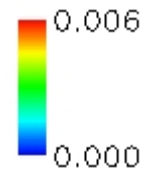


$$\varepsilon = 0.8$$

カソードChannel内  
流速分布



$$\varepsilon = 0.8$$



# PEFCシミュレーションコードの問題点

---

- ▶ 扱うモデル方程式, 変数, 定数が非常に多い
  - ▶ さらに多くのモデルが毎年提案されている
- ▶ 物理的・化学的な性質の異なるレイヤーで構成
  - ▶ レイヤー間の適切な境界条件の選択
- ▶ 流れの計算に加えて電界・電気化学反応等の評価



初学者(コード利用者)にとって負担が大きい



有限体積法に基づいた  
汎用コードとしてOpenFOAMを利用

---



# OpenFOAM利用のメリット

---

- ▶ 微分方程式とよく対応した文法
  - ▶ 初心者でも理解しやすい
  - ▶ モデル方程式の変更・改良が容易
- ▶ オブジェクト指向・カプセル化された処理
  - ▶ 処理の流れを理解しやすい
  - ▶ 物理的な性質の異なるレイヤーを扱いやすい



# PEFC内の水輸送コード

# 領域ごとの水の存在形態

	PEM	CL	GDL
$S$	×	○	○
$Y_w$	×	○	○
$\lambda$	○	○	×

- ▶ PEMでは水は固体高分子内に取り込まれる形( $\lambda$ )で存在
- ▶ GDL内では液体( $S$ )と水蒸気( $Y_w$ )として存在
- ▶ 3種の水は数 $\mu\text{m}$ の厚みの触媒層で接続する



# カソード水輸送モデル

	PEM	CL	GDL
$s$	$s = 0$	$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{CL}\rho_l s_{CL})$ $= -\nabla \cdot (-\varepsilon_{CL}\rho_l D_c \nabla s_{CL}) + \dot{m}_1$ $\frac{\partial s}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{GDL}\rho_l s)$ $= -\nabla \cdot (\varepsilon_{GDL}\rho_l u s(2-s)) - \nabla \cdot (-\varepsilon_{GDL}\rho_l D_c \nabla s)$ $- \left( \frac{s(2-s)(1-s(2-s))\kappa(\rho_l - \rho_g)}{\nu} g \right) + \dot{m}$ $P_c = P_c$ $J_{flux} = J_{flux}$
$Y_w$	$Y_w = 0$	$\frac{\partial}{\partial t} \varepsilon \rho Y_i$ $= -\nabla \cdot (\varepsilon \rho Y_i \bar{u}) - \nabla \cdot (-\rho D_{i,eff} \nabla Y_i)$ $+ \dot{\omega} - \dot{m}_1 - \dot{m}_2$ $\frac{\partial Y_w}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial}{\partial t} \varepsilon \rho Y_i$ $= -\nabla \cdot (\varepsilon \rho Y_i \bar{u}) - \nabla \cdot (-\rho D_{i,eff} \nabla Y_i) - \dot{m}$ $Y_w = Y_w$ $J_{flux} = J_{flux}$
$\lambda$	$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_m^{dry}}{EW \cdot V_{ex}} \lambda \right)$ $= \nabla \cdot \left( D_{wl} \nabla \frac{\rho_m^{dry}}{EW \cdot V_{ex}} \lambda - n_d \frac{\bar{i}}{F} \right)$ $J_{flux} = J_{flux}$	$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_m^{dry}}{EW \cdot V_{ex}} \lambda \right)$ $= -\nabla \cdot \left\{ \varepsilon \left( -D_{wl} \nabla \frac{\rho_m^{dry}}{EW \cdot V_{ex}} \lambda + n_d \frac{\bar{i}}{F} \right) \right\} + \dot{m}_2$	$\lambda = 0$



# GDLにおける液水ソルバ

---

```
tmp<fvScalarMatrix> sEqn
(
    fvm::ddt(ed*rhol, s)
  + fvm::div(phi, s, "div(phi,s)")
  ==
    fvm::laplacian(ed*rhol*Dc, s)
  + fvm::laplacian(temp, s)
  + sourceModel.source()
);
```

capillaryDiffusionModel

```
capillaryDiffusionHKUCoeffs
{
    surfaceTension    ...
    theta              ...
    dryPorosity       ...
}
```



sSourceModel

```
sSourceHKUCoeffs
{
    ...
}
```



# まとめ

---

- ▶ マルチフィジックス・シミュレーションの一例としてのPEFC解析コードの開発
  - ▶ 物質・エネルギー輸送, 相変化, 電気化学反応などの連成
  - ▶ 物理的な性質の異なる領域間の接続(境界条件)
- ▶ データの流れを追いやすい(理解しやすい)コードの開発
- ▶ 利用しやすいインターフェイス
  - ▶ 設定ファイル等の整理(どこで何を設定するかがわかりにくい)
  - ▶ GUIの導入?

