

B205 格子ガスオートマトン法による固体高分子形燃料電池内の流動均一化

Design of Uniform Flow in Polymer Electrolyte Fuel Cell by Lattice Gas Automata Method

○正 松隈洋介(九大工),井上元(九大工),峯元雅樹(九大工), 正 阿部豊(筑波大工), 正 柄尾大輔(筑波大工)

Yosuke MATSUKUMA*, Gen INOUE*, Masaki MINEMOTO*, Yutaka ABE** and Daisuke TOCHIO**

*Department of Chemical Engineering, Kyushu University, Fukuoka 812-8581, Japan

**Institute of Engineering Mechanics and Systems, University of Tsukuba, Tsukuba 305-8573, Japan

Fuel cells are recently developed in all kinds of fields from the viewpoint of effective energy utilization and environmental protection. Especially, Polymer Electrolyte Fuel Cell (PEFC) is expected to be effective power resources of the next generation car. However, flow patterns in the PEFC are complicated mainly due to the complex geometry of the PEFC separator and it is thus important for the improvement of performance to precisely estimate the gas flow through the PEFC and to design the optimum shape of the separator. Lattice gas automata method could be powerful tools to simulate such a complex geometry in mesoscopic level. In the present paper, a new technique to simulate flow through narrow channels in pseudo-three dimensional systems is proposed based on FHP model. The FHP model is a basic model of the lattice gas automata method. To examine a validity of the present technique, the velocity distribution of flow through the narrow channel are compared with the results of finite difference method. The comparison showed the good agreement. By using the proposed technique, fundamental numerical simulations are demonstrated for the single-phase flow through the PEFC separator in pseudo-three dimensional systems. Though flow stagnation was observed in the original separator, the stagnation was removed and the uniform flow through was achieved by using the improved separator shape. It was clarified that lattice gas automata analyses were useful for good estimation of gas flow through the PEFC. It was concluded that the lattice gas automata method could be the powerful tool for design the optimum shape of the PEFC separator.

Key Words: Lattice Gas Automata, FHP model, Polymer Electrolyte Fuel Cell, High-porosity Porous Media

1. 緒論

近年、環境保護及びエネルギーの効率的利用の観点から燃料電池が注目されており、中でも固体高分子型燃料電池 (Polymer Electrolyte Fuel Cell:PEFC) は自動車搭載用電池として開発が盛んに進められている。PEFC 内の燃料の流れを均一にすることは PEFC の性能向上にとって非常に重要である。しかしながら PEFC の流路は分岐路のある複雑な構造を持つため、流れを詳細に解析して、流れが均一になる最適流路形状を設計することが課題となっている。そこで本研究は複雑形状流路内の流れを容易に計算できる格子ガスオートマトン法を改良して擬似的に厚さ方向の壁面の影響を取り扱うことのできる新たなモデルを提案し、本モデルを用いて PEFC 内の流れを計算する。さらに入口・出口の形状を工夫して内部流動の均一化を試みる。これらの数値計算から格子ガスオートマトン法が PEFC の設計計算に有効なツールであるか否かを調べることを目的とする。

2. PEFC の概要

PEFC の構造を図 1 に示す。イオン交換膜の両側を白金触媒が混入した電極で挟み込んだ構造を持ち、膜-電極接合体と呼ばれる。この膜-電極接合体をさらに一対のセパレータで挟み込んで、1 つのセルを形成する。一方のセパレータには燃料である水素を供給し、他方のセパレータには酸素を供給する。電極上で水素は水素イオンと電子に分かれ、水素イオンはイオン交換膜内を移動して酸素側セパレータに到達し、外部回路を通ってきた電子と反応して水となる。図 2 はセパレータの流路の一例である。水素は流入部より供給された後に 10 数本に分割された幅 1mm 程度の流路に分岐して流れ込み、

流路内でイオン交換膜を介して紙面裏側を流れる酸素と反応した後に、流出部より排出される。水素を酸素と効率よく反応させて PEFC の性能向上を図るためには、各流路の水素流量を均一にする必要がある。

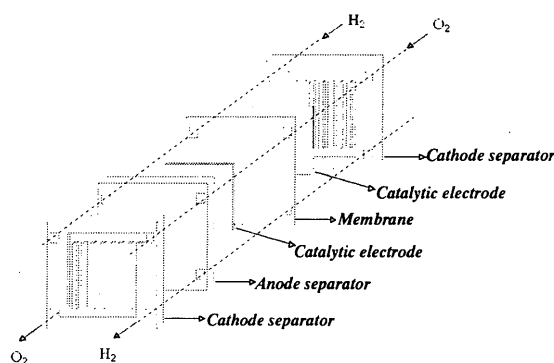


Fig.1 Schematic of Polymer Electrolyte Fuel Cell (PEFC)

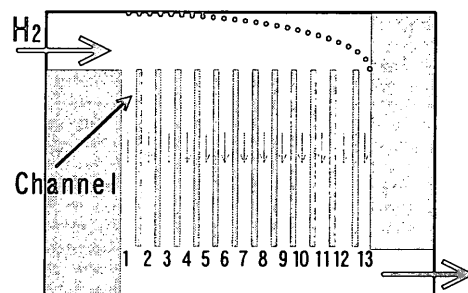


Fig.2 Flow diagram through the separator

3. 格子ガスオートマトン法

本解析には格子ガスオートマトン法の基本モデルであり、二次元単相流を計算する FHP モデル⁽²⁾を用いた。FHP モデルは図3のように空間を三角形の格子で離散化した格子上に仮想粒子を多数配置し、あらかじめ質量と運動量を保存するように定められた規則に従って衝突し、新たな速度を得た粒子が隣接する格子に並進するという過程を繰り返すことで流れを再現する。密度 ρ 、速度 $\mathbf{u}$ と圧力 p の巨視量は、格子の状態を空間で平均する粗視化の操作より得られる各速度方向 m の平均粒子数 N_m を用いて式(1)-(3)で定義される。ここで $\mathbf{c}_m$ は m 方向に移動する粒子の速度ベクトルである。

$$\rho = \sum_m N_m(x, t) \quad (1)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_m \mathbf{c}_m N_m(x, t) \quad (2)$$

$$p = \frac{3}{7} ? \quad (3)$$

多数の三角格子を用いる格子ガスオートマトン法は、多孔質体や燃料電池セパレータ内のように複雑形状流路内の流れを比較的容易に計算できるという特徴を持つ⁽¹⁾。

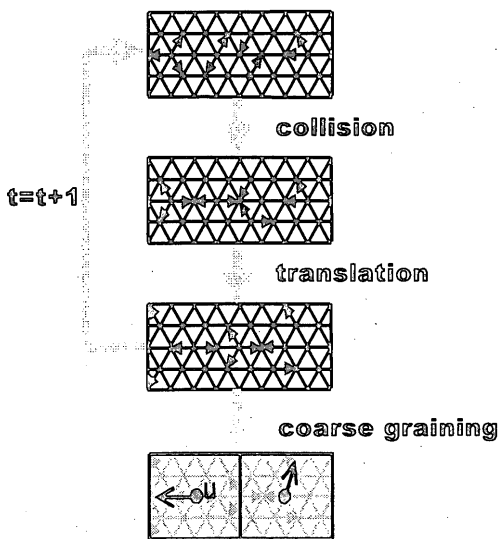


Fig.3 Time evolution of the lattice gas automata system

4. 厚さ方向にある壁面の影響のモデル化

解析対象を図2に示す13本のチャンネルを持つ流路とした。図2に示した本研究の解析対象領域は、紙面垂直方向(厚さ方向)を膜-電極接合体とセパレータで挟まれており、断面形状は厚さ方向が短い矩形の流路である。このため、厚さ方向の壁面による影響を考慮しなくてはならない。しかしながら FHP モデルは二次元単相流モデルのため、このままでは厚さ方向の壁面の影響を取り入れることができない。そこで本研究では、擬似的に厚さ方向の壁面の影響を取り扱うことのできる新たなモデルを FHP モデルに組み込むこととした。

図4に示すような z 方向の両端を壁面とした場合の x, y 平面での流動を考える。

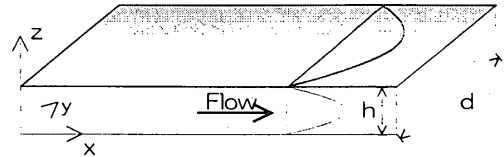


Fig.4 Flow through the narrow channel

流動域厚さ h と流路幅 d との比をアスペクト比を a とし、 x - z 平面内では放物型の流速分布が形成されるとすると、厚さ方向の壁面から受ける粘性力を考慮した x - y 平面での x 方向の運動量収支式は式(1)であらわすことができる⁽³⁾。

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{\text{Re}} \frac{12v_x}{a^2} \quad (4)$$

式(4)は右辺第二項までの Navier-Stokes 方程式に厚さ方向の壁面により誘起された抵抗を示す右辺第三項が付加されている。この右辺第三項は Reynolds 数とアスペクト比 a を一定とすると、 x 軸方向の流速 v_x に比例している。そこで FHP モデルに厚さ方向壁面の影響を取り入れるため、あるタイムステップ毎に粗視化を行い、図5に示すように仮想粒子を流速 v_x に比例した確率 p で進行方向と逆方向に向けることで厚さ方向の壁面の影響を表現することとした。

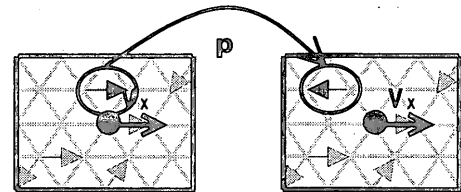


Fig.5 Automaton model to describe the wall effects

図6は平行平板間の流れを厚さ方向の壁面の影響を考慮した場合としない場合についてそれぞれ計算した結果である。白四角印と点線は、壁面の影響をしない場合の FHP モデルの結果と理論解による流速分布をあらわす。理論解である Poiseuille 流れの放物型分布と FHP モデルの結果は誤差の範囲でよく一致することが確認できる。

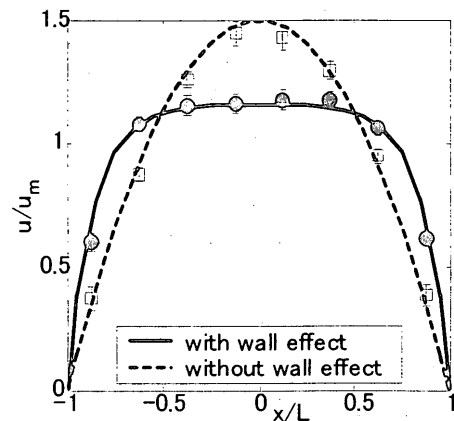


Fig.6 Comparison of velocity distribution with the results of finite difference method ($\text{Re}=90$)

また、黒丸印と実線はアスペクト比 $a=0.2$ で壁面を考慮した場合の FHP モデルと差分法による三次元計算の結果の比較で

ある。壁面の効果により流路中心付近の流速分布が平坦になることが分かる。また FHP モデルと差分法の三次元計算の結果は誤差の範囲でよく一致している。このことから、本論文で提案したモデルが薄い流動域厚さを持つ流動域を二次元で解析する場合に有効であるといえる。

5. PEFC セパレータ内の流動解析と流動均一化

4 章の厚さ方向の壁面の影響を考慮した FHP モデルを用いて図 2 に示すセパレータ内の流動を解析した。格子数は x 方向と y 方向にそれぞれ 8320×5120 格子とし、入口流速 u_{in} と入口長さ L を代表速度と代表長さにとった Reynolds 数 $Re = u_{in}L/\nu$ は約 100 である。但し ν は動粘性係数を表す。このレイノルズ数は、自動車用燃料電池として想定されている $50\text{mm} \times 50\text{mm}$ のセパレータに NEDO 指定標準条件で燃料を供給した際の酸素側セパレータ内のレイノルズ数に相当する。図 7(a) に計算結果を示す。

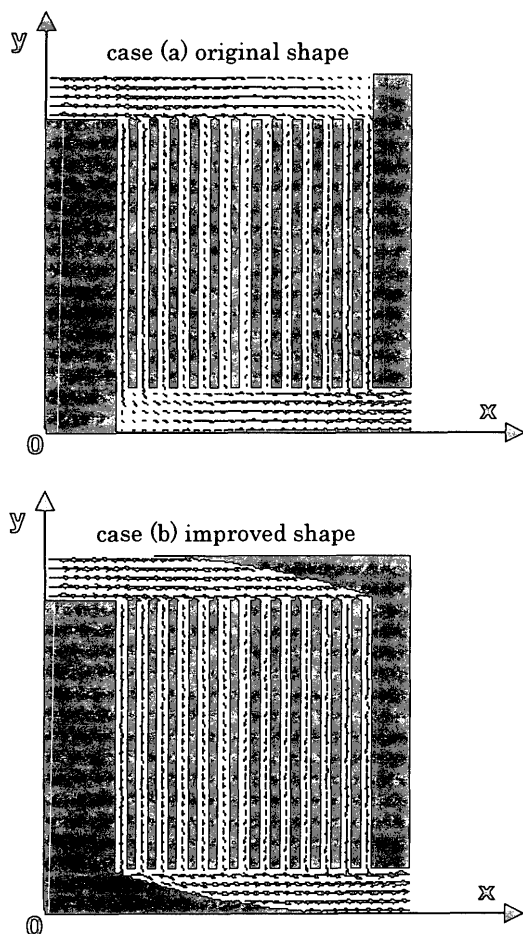


Fig. 7 Comparison of velocity distribution in the separator ($Re=100$)

流入部より供給された流体が 13 本に分割されたチャンネルに分岐して流れ込み、チャンネル通過後、再び合流して流出部より排出される。以後、流入部からチャンネル分岐部までの区間を入口マニホールド部、チャンネル合流部から流出部までの区間を出口マニホールド部と呼ぶこととする。チャンネルその際に各チャンネルの流量は均一ではなく、入口マニホールド部右上と出口マニホールド部左下には流れが殆どないよどみ領域があることが分かる。各チャンネルの流量比を定量的に比較するため、図 8 に実線で各チャンネルの流量

q を平均流量 q_m で割った値を示す。図 8 の横軸は図 2 中に示した各チャンネル番号で、1 番が流入側、13 番が流出側をあらわす。図 8 より中心部のチャンネルの流量が少なく、外側のチャンネルの流量が多く、その差は 3 倍程度になることが分かる。実際の PEFC では、チャンネル間の流量比が大きいと流量の少ない流路で水素の欠乏が起こる可能性があり、性能と安全性の面から好ましくない。そこで図 7(a) で見られたよどみ領域を取り除き、各チャンネルの流量を均一にするため入口マニホールド部と出口マニホールド部を図 7(b) に示す二次曲線を持つ形状に変更した。図 7(b) の形状に変更することにより、流れがセパレータの形状に沿うように流れ、中央部のチャンネルの流量が増加していることが確認できる。図 8 中の点線は改良したセパレータ形状での各チャンネル流量である。改良前のセパレータで 3 倍程度の偏りがあった流量が、30% 程度の偏りがあるものの、ほぼ均等に配分されていることが確認できる。

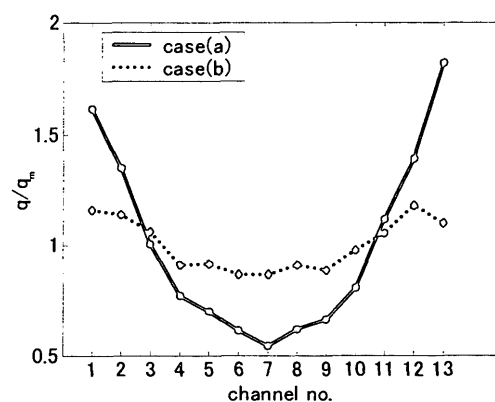
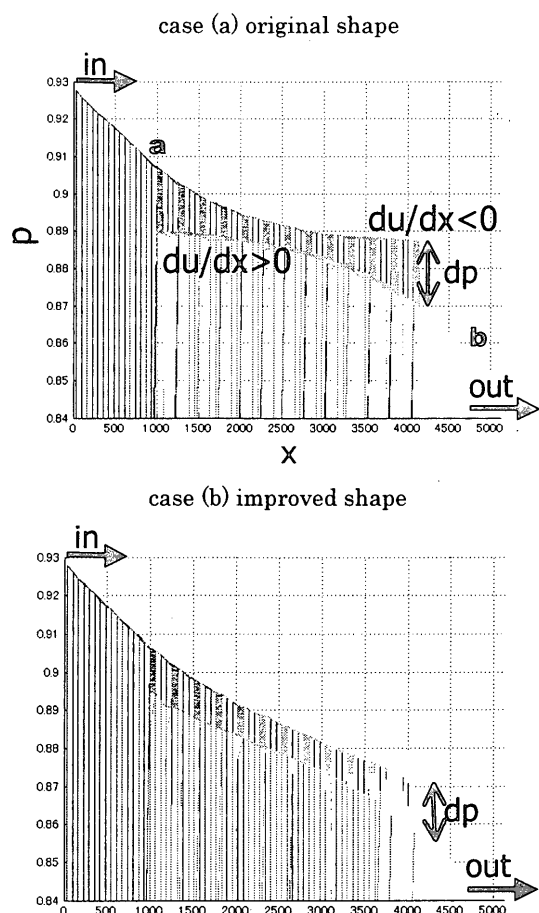


Fig. 8 Comparison of flow rate per channel

セパレータ入口・出口部の形状を二次曲線にすることで、流量の偏りが軽減された原因を詳しく調べるために、図 9(a), (b) にオリジナル形状と改良した形状での圧力分布を示す。図は $y=0$ より見た $y>0$ 方向の圧力を表しており、流れは図左より流入し、各チャンネルに分岐した後、紙面奥から手前方向に流れ、図右の流出部より排出される。このため図中 a で示された曲線が入口マニホールド部での圧力分布を、b で示された曲線が出口マニホールド部での圧力分布を表し、両曲線の差が、各チャンネルの入口・出口での圧力差 dp である。オリジナルのセパレータ形状では、入口マニホールド部の圧力勾配 dp/dx が負で、出口マニホールド部では逆に正となる。これは入口部では各チャンネルに流れが分岐して流速が減少し ($du/dx < 0$)、出口部では各チャンネルを通過した流れが合流するために流速が増加するためと考えられる。その結果、各チャンネルの入口・出口での圧力差 dp は中央部で小さく、両端が大きくなり、図 8 のような流量の偏りがおきると考えられる。

一方、マニホールド部が二次曲線の改良セパレータでは、流速の減少・増加を補うように流路幅が変化するため、流入部と流出部の圧力勾配がほぼ一定で、圧力が直線的に減少する。その結果、各チャンネル出入り口の圧力差 dp がほぼ等しくなり、各チャンネルの流量が均一となる。以上のことから、流入・流出部付近の形状を、各チャンネル間の圧力差が均等になるように工夫することで、複雑な形状を持つ分岐路の流量を均一にすることができると分かった。



6. 結論

格子ガスオートマトン法で擬似的に厚さ方向の壁面の影響を取り扱うことのできる新たなモデルを提案し、本モデルを用いて PEFC 内の流れを計算した。提案したモデルの計算結果は差分解析とよい一致を示し、PEFC 内の流動計算に有効であることが分かった。PEFC 内の各チャンネルに分配される流量には3倍程度の偏りがあったが、入口・出口の形状を二次曲線とすることにより均一化が計れることが分かった。以上より、格子ガスオートマトン法がPEFCの設計計算に有効なツールであることが確認できた。今後、よどみ領域は固体壁を追加し、流量の多い流路では固体壁を削るという一種の固体・流体連成解析により最適セパレータ形状を自動的に得るモデルの開発を行う予定である。

謝辞

本研究は平成13年度日本学術振興会科学研究費補助金(奨励研究 A 13750147)の助成を受けて行われた。ここに記して感謝の意をあらわす。

参考文献

- (1) 松隈洋介, 後藤秀樹, 阿部豊, 安達公道, 日本混相流学会誌 13-2 (1999) 126.
- (2) U.Frish, et al, Complex Systems 1(1987) 649.
- (3) 井上元, 松隈洋介, 峯元雅樹, 化学工学会論文誌, 投稿中