

学位論文題名

Numerical Simulation of Gas Flow in Polymer Electrolyte Fuel Cell

(固体高分子形燃料電池内のガス流動計算)

学位論文内容の要旨

Polymer electrolyte fuel cells (PEFC) are considered as a prime candidate among the state-of-the-art fuel cells for the power source, particularly for the automotive applications, due to their high power density, low operating temperature, low emission and environmental friendly nature. But for PEFCs to become commercially viable, it is critical to reduce cost and increase power density. Therefore, understanding and predicting the phenomena inside a cell, and optimizing various parameters are of significant importance. The work presented in this thesis provides a profound insight into the flow behavior as well as the effect of the GDL deformation and flow cross-over on the flow field inside the gas channel and GDL of PEFCs.

For developing a numerical method, convergence of continuity is a major problem for the flow simulation including the porous media, and the situation becomes critical in lower-permeability cases. This research newly propose an implicit treatment of Darcy drag term to solve this key problem for faster convergence and a more accurate continuity condition. Explicit, implicit and semi-implicit treatments of the Darcy drag term are compared for various physical parameters of the GDL, e.g., Darcy number and porosity parameter, by 1D numerical simulation and superiority of the implicit scheme is confirmed. Moreover, by 3D numerical simulations outstanding performance of this implicit scheme is confirmed in terms of quicker convergence and strict continuity condition.

The operating conditions such as pressure and flow distribution in the flow channel and GDL has a great influence on the performance of PEFCs. It is desired to have an optimum pressure drop because a certain pressure drop helps to remove access liquid water from the fuel cell, too much of pressure drop would increase parasitic power needed for the pumping air through the fuel cell. In order to accurately estimate the pressure drop precise calculation of mass conservation is necessary. As a result, this newly developed numerical method based on the implicit treatment is successfully applied to a couple of major flow design problems in the channel and gas diffusion layers, which are regarded as the important elements of a PEFC to control transport of reactant gases towards the catalyst layer and also byproduct from the catalyst layer.

The first application of the newly developed 3D numerical method is to investigate the pressure drop

in the separator channel and gas diffusion layer of PEFC and deformation effect of porous media. The GDL deformation resulted from the compression pressure has a significant impact on the performance of PEFCs, because compression can change a number of operating parameters of a cell. To perform the numerical simulation, verification experiments and data acquisition of physical parameters were conducted by the mechanical measurement. The experimental result showed that, to estimate the actual flow configuration in the cell, the GDL deformation shape due to clamping by the separator lands has a significant influence. The numerical results shows, except for the GDL deformation shape, the variation in the GDL physical parameters also needs to be considered. Moreover, the pressure loss mechanism and the contribution of the flow field and physical parameters to the pressure loss are further identified.

Finally, newly developed 3D numerical method is adopted to study the flow cross-over through the GDL in PEFCs with serpentine flow channel. Serpentine flow channel is one of the most common and practical channel layouts for PEFCs, in that it can ensure the removal of water produced in the cell with an acceptable parasitic load. The results indicants the flow behavior in the serpentine channel is well captured. In addition, the amount of flow through the GDL can also be quantified. Furthermore, by comparing with the corresponding experimental results, it is further verified both the feasibility in large scale calculation and the capability to capture the flow phenomena in complicated channel by this newly developed numerical method.

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 大 島 伸 行

副 査 教 授 藤 川 重 雄

副 査 教 授 近 久 武 美

学 位 論 文 題 名

Numerical Simulation of Gas Flow in Polymer Electrolyte Fuel Cell

(固体高分子形燃料電池内のガス流動計算)

高分子形燃料電池は高効率、低エミッションかつ小型可搬性に優れるなどの利点から従来の燃焼機関に替わりうる車両や家庭用のエネルギー源として注目を集めている。その実用化に向けて低コスト、高出力のための開発研究が進められているが、燃料電池は微細な多孔質材料内で電気化学と物質移動が連成するため内部現象の直接計測は困難であり、数値シミュレーションによる予測解析が重要となっている。本研究論文では、高分子形燃料電池の数値シミュレーション技術の確立と実用化を目的とし、特に、高分子形燃料電池の主要構成要素である微小流路と多孔質ガス拡散層における流動予測に着目して、それらの数値解析法の改良と実機設計への応用を示した。

本研究の内容は以下の 8 章にまとめられている。

第 1 章においては、本研究の背景、高分子形燃料電池の数値シミュレーションに関する従来の研究を概観し、多孔質ガス拡散層の流動予測の重要性を述べて、それに基づき本研究の目的と構成を示している。

第 2 章においては、本研究の対象となる高分子形燃料電池の原理と構造、および、ガス拡散層に用いられる多孔質流動の物理的特性を解説している。また、第 3 章において、高分子形燃料電池シミュレーションを構成する基礎式系を導出し、それらの数値解析法を示すとともに、シミュレーション全体において流速と圧力場の予測が最大の計算負荷を占めることため、その予測精度と計算速度の向上が重要であることを指摘している。

第 4 章においては、高分子形燃料電池の主要構成要素である微小流路と多孔質ガス拡散層に対する流速と圧力場の予測方法を構成するにあたり、多孔質の速度透過率が低い場合の質量保存則の収束精度に課題があることを指摘し、従来用いられているフラクショナル・ステップ法では多孔質内のダルシー抵抗則を表す項が時間陽的に扱われていたものを、時間陰的に扱うように改良した新しい計算法を提案している。また、これらの計算法の数値安定解析により計算収束性と計算精度を支配する無次元パラメータを示すとともに、その特性を数値検証によって確認している。

第 5 章においては、第 4 章で得た新しい計算法を、燃料電池の流路と多孔質を模擬した 3 次元問題に適用して、計算精度と収束性を検証している。その結果は理論解析と良く一致しており、特に、多孔質内のダルシー抵抗則を時間陰的に扱う新しい計算法が従来法に比較して燃焼電池内の圧力損失

の予測精度と収束速度を大幅に改善し、燃料電池内の物質移動現象シミュレーションには必須の改善であることを結論付けている。

第 6 章においては、上記の新しい計算法の実機設計への応用として、高分子形燃料電池の実機運用においてしばしば問題となっている装置締め付け圧による多孔質ガス拡散層の変形の影響を予測評価している。ここでは、実機の模擬した試験装置を対象に締め付け圧による多孔質ガス拡散層の変形を数値計算格子により再現して圧力損失への影響を予測し実験計測と比較を行っている。その結果、ガス拡散層の変形による流路閉塞の効果とともに、多孔質の透過率変化の影響が加わることであり実機の圧力損失の増加が生じることが予測解明されている。

第 7 章においては、実機設計応用へ向けての実証として、実機においてしばしば用いられる複列サーペンタイン流路をもつ燃料電池試験装置を対象として予測シミュレーションを適用している。複雑な流路と多孔質ガス拡散層を再現する約 1000 万要素の格子を用いた大規模数値計算が実行され、流動場の圧力損失の予測結果は実験計測値と良く一致し、従来に比較し極めて収束性の良い高精度な計算が可能であることが実証された。また、数値計算結果から流路間の多孔質クロスフローの流量、流速などの設計上重要な定量値の推定が示された。

第 8 章においては、本研究の結論並びに高分子形燃料電池の数値シミュレーションに対する今後の開発指針を述べている。

以上のように本論文では、高分子形燃料電池の数値シミュレーションにおいて重要である質量保存則の収束性を大幅に向上する新しい計算法を提案することにより、実機設計にも適用可能な多孔質流動における圧力損失の高精度な予測を可能とした。この成果は、燃料電池設計開発に大きな寄与であるとともに、数値流体力学の新しい知見を与えるものとしても評価でき、それらは機械工学の発展に寄与するところ大である。よって、著者は北海道大学博士(工学)の学位を授与される資格あるものと認める。