LBM を用いた固体高分子形燃料電池における GDL 内液水流動に及ぼす濡れ性分布影響

LBM Analysis of the Effect of Wettability Distribution on Liquid Water Transport in GDL of PEM FC

○学 本庄 佑次 (北大) 正 鈴木 研悟 (北大) 正 田部 豊 (北大) 正 近久 武美 (北大)

Yuji Honjo, Kengo Suzuki, Yutaka Tabe and Takemi Chikahisa

Hokkaido University, N13 W8, Kita-ku, Sapporo 060-8628

Flooding is one of the problems to be solved for practical use of PEFC. In this study, the numerical simulation using the lattice Boltzmann method (LBM) was developed to elucidate the liquid water behavior in a gas diffusion layer. In the equal density LBM code developed by the authors, there is a problem that setting value of water flow rate was not ensured. This paper explains the applied improvements for setting the inlet boundary conditions, keeping the fast calculation for the large-scale simulation, and the improved results. The instability of simulation, however, still remains as an unsolved issue, and the cause is also discussed.

Key Words: PEFC, Lattice Boltzmann Method, GDL, Wettability, Distribution

1. はじめに

固体高分子形燃料電池 (PEFC) の実用化において解決すべき問題の一つとして、ガス拡散層 (GDL) 内に生成凝縮水が滞留することで反応ガスの供給を妨げるフラッディング現象が挙げられる。この現象の解決のために電池内、とりわけ GDL 内の流れの解明とその流れの制御をする必要がある。本研究の目的は高い排水性を有する GDL 特性の定量的検討であり、液水挙動を評価するために格子ボルツマン法 (LBM) を用いたシミュレーションを行った。本稿では、高速計算のために適用した等密度モデルによる流入速度影響の検討結果、および現コードで確認された液水流入速度の制御が不完全な問題に対して行った改良について報告する。

2. 計算モデルと計算条件

本研究で用いた等密度 LBM では、界面を識別する index function ϕ を求めるための速度分布関数 f_i と、流体の速度および圧力を求めるための速度分布関数 g_i を用い、時刻 t で格子点 x 上の粒子速度 c_i を持つ粒子の分布関数 $f_i(x, t)$ および $g_i(x, t)$ の時間発展を以下の格子ボルツマン方程式で計算する⁽¹⁾。

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau_f} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)]$$

$$g_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = g_i(x, t) - \frac{1}{\tau_g} [g_i(x, t) - g_i^{eq}(x, t)]$$

ここで、 f^{eq} , g^{eq} は局所平衡分布関数であり、 ϕ および速度 u は次式から求められる。

$$\phi = \sum f_i \quad u = \sum c_i g_i$$

後述する図 1 のような GDL 内液水挙動を模擬して行ったシミュレーションにおいて、計算領域は GDL 面方向、厚さ方向の順に格子数 50, 50, 100 であり、実次元では 100, 100, 200 μm である。また、MPL (Micro Porous Layer) を模擬した穴から液水が流入すると想定し、下面中心の一辺 20 μm の穴から一定速度 U_{in} で液水を流入させた。領域の四方側面は固体壁、上面は自由流出とした。領域内部には実際の GDL 繊維の構造データを配置し、接触角 130°に設定した。表面張力 $\sigma = 7.29 \times 10^{-2} \text{ N m}^{-1}$, $\tau_g = 0.8377$ で、重力は働かないものとした。

3. 流入速度の影響

図 1 に流入速度 $U_{in} = 0.2 \text{ m/s}$, 0.02 m/s で液水が上部に達したときの 3 次元液水分布の結果を示す。両条件ともに、液水の表面の形状は疎水性 GDL の影響を受け丸みを帯び、液水は比較的大きい空孔をパスとしていることが確認できる。流入速度が変わることで液水分布が僅かに変わっており、例えば $U_{in} = 0.02 \text{ m/s}$ のみに GDL 中段の手前に液水の滞留が見られる。図 2 は図 1 の GDL 厚さ方向 (MPL から Channel) の液水量分布を示している。流入速度が異なるにも関わらず、厚さ方向に概ね 3 領域に分かれて分布する様子は互いに似ていることが確認できる。これは、液水挙動に対して、液水慣性力よりも表面張力が支配的となっているためであると考えられる。

(a) $U_{in} = 0.2 \text{ m/s}$ (b) $U_{in} = 0.02 \text{ m/s}$

Fig.1 Water distribution

Fig.2 Mass of water along thickness of GDL from MPL side to channel side

このように GDL 内の液水分布は GDL の繊維構造、物性などから決まるものと推察される。本研究では、GDL 内液水分布の動的特徴を一般化するとともに、GDL 繊維の濡れ性が及ぼす影響も明らかにし、これにより排水性に優れた濡れ性制御方法を検討していく予定である。

4. 流入計算の改良と結果

これまで本研究では、空気の流動影響が少ない GDL 内の液水挙動に対して等密度 LBM を適用することで解析の高速化を実現した⁽¹⁾。また、2次元だけではなく3次元の複雑形状内の計算にも等密度 LBM を適用し、高速かつ大規模な領域での液水挙動計算を可能にした。しかし元々の計算コードでは、適切な液水流入が保障されていない問題が明らかとなり、本節では流入計算の改良方法と結果について報告する。

図3では、計算で実際に入っている液水量と設定した一定流量で入るはずの液水量との差を、入るはずの液水量で除した値の時間変化として表している (No Correction と表記)。流入速度 $U_{in} = 0.2\text{m/s}$ 、時間刻み $\Delta t = 4.0 \times 10^{-8}\text{s}$ である。なお、後述する改良後の結果 ($U_{in} = 0.2\text{m/s}$, $\Delta t = 2.8 \times 10^{-8}\text{s}$) もあわせて示している。図から確認されるように、現コード (No Correction) では液水量の差が生じており、最大で設定値の2倍の量が過剰に領域内に流入している。計算が進むにつれてなだらかに液水量の差が小さくなっているが、同じ条件で行った流入速度 $U_{in} = 0.02\text{m/s}$ の場合では、 $t = 3.6 \times 10^{-3}\text{s}$ で7倍の量が過剰に流入しており、流入速度が正しく設定されていないことが確認された。

液水量が正しく設定されない原因として、流入境界条件での速度分布関数 f の与え方の不具合が考えられる。元々のモデル (図4左) では、流入境界となる格子 ($z = 1$) に、液相の ϕ と U_{in} から得られる速度分布関数 f_{eq} を設定していた。しかし、多孔体の計算領域のように流入方向の圧力損失が増大する条件では、流入境界 ($z = 1$) から一つ内側の2列目 ($z = 2$) の ϕ が大きくなり、計算領域に指定した質量流量が正しく流入されない場合が想定される。そこで、流入境界となる格子 ($z = 1$) と2列目の格子 ($z = 2$) の間の質量流量が必ず ϕU_{in} となるように格子2の値を用いて格子1の f_i を設定する改良を加え、これを 1st Correction とした。

図3に示した改良後の結果より、計算開始直後の極端な液水量の流入は改善されていることがわかるが、今度は逆に流入量が不足する結果となった。また、計算が不安定となり最後まで計算を行うことが困難であった。この液水が不足する原因としては、計算領域内で液相が気相に変化していることが考えられる。図5にその1例を示す。図は計

Fig.3 Comparison of differences of water mass with the corrections at $U_{in} = 0.2\text{m/s}$

Fig.4 Correction of velocity distribution function

Fig.5 Example of changing from droplet to gas

算領域の断面の一部を切り取った図であり、次に示す 2nd Correction 後の結果であるが、図左の気液界面において、液相の速度に対して気相の速度が大きくなっている箇所を確認できる。これは、相変化を考えていない本モデルにおいて、液相から気相への変化が不適切に起こってしまったためと考えられる。また、計算時間が早い段階で発散してしまった原因は、流入境界の f_i を一様に与えることが問題であると考えている。

不足する液水を補完するために 1st Correction の改良に加え、更なる改良を図った。各時刻に実際に入っている液水量と入るはずの設定量を比較し、入っている液水量が不足しているときには不足している分に相当する流速を流入速度に上乗せして流入させる改良を導入し、2nd Correction とした。図3より、1st Correction では計算が進むにつれて流入量の不足分が増大していくことに対して、2nd Correction ではほぼ設定量と等しい流入が保たれていることが確認できる。

このように設定量と異なる液水量の流入がなされる問題は解決することができたが、改良後の計算は不安定で発散しやすい問題が残っている。これは、主に流入面における速度分布関数 f_i の与え方に原因があると考えており、流入面内側の流速や圧力、 f_i の値なども考慮して、適切に境界条件を設定する方法を検討していく予定である。

5. 結言

GDL 内液水挙動を模擬した高速シミュレーションにおいて、液水流入量が適切に制御できない問題を確認した。これに対し、流入境界面における速度分布関数 f_i を、一つ内側の f_i を参照して設定することにより流入量を保証するとともに、液相から気相へと変化してしまう分を補完するために流入量を増加させる方法を導入し、一定の改善効果が得られた。今後、改良後の計算の安定性を向上させる方法を検討していく予定である。

参考文献

(1)田部, 他 4 名, 第 50 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, Vol. II+III (2013), 648