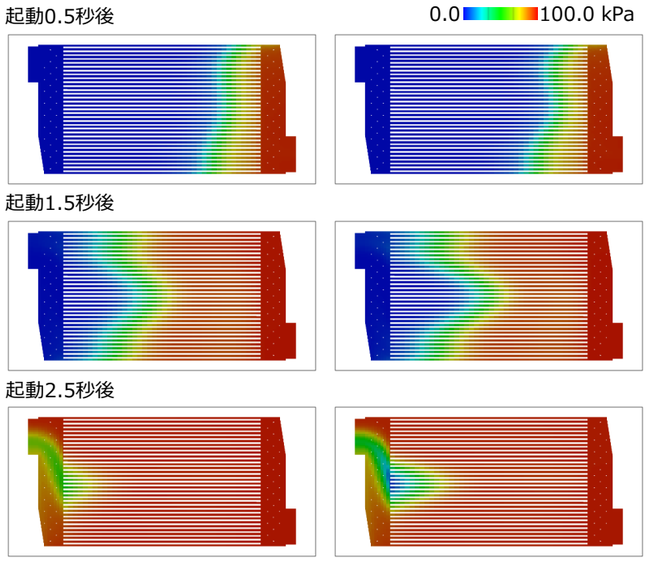
解析事例③：実機セル･スタックの耐久性能予測

【セル短ピッチ化がカーボン劣化に与える影響の評価】

起動時における水素置換、アノード水素欠乏による触媒層カーボン腐食の抑制は燃料電池の耐久性向上に向けて重要な設計課題です。ここでは、短ピッチ化による起動時のカーボン腐食量の増大について解析しました。右図に(a)基準セルとセルピッチの低減によるコンパクト化に向けた(b)短ピッチセル(流路深さ▲20%)の起動時の水素挙動を比較します。短ピッチ化により、アノード流量分布が不均一となり、水素置換が遅い領域が発生。それに伴い、全体でカソード触媒層のカーボン腐食量が増大する要因となることがわかりました。セル短ピッチ化を目指す際、起動時カーボン劣化抑制の観点からも、流量分配の均一性を満たす流路設計が必要となります。

226th ECS meeting, Cancun (2014)



(a) 基準セル　　(b) 短ピッチセル

起動後の水素置換の変化（アノード流路）

製品詳細

解析対象	固体高分子形燃料電池 セル単体からスタック全体（400枚規模）
解析可能な物理量	電流-電圧特性（I-V特性）、電流密度分布、過電圧分布、膜含水分布、ガス濃度分布、 圧力分布（流路、GDL/MPL）、液相体積率分布、温度分布、等
評価可能な項目	【発電性能解析】 ■ スタックの発電分布･含水分布の均一性、セル間流量バランスの設計基準を満たすための流路形状･マニホールド形状の評価 ■ 低ストイキ（水素デッドエンドを含む）、高温（100℃以上）作動時のスタック内物質移動（水分･ガス濃度）バランスと発電分布の均一性の評価 ■ Pt量削減時のMEA特性の変化に応じたセルおよびスタック内発電分布への影響の評価 ■ 低温起動時のスタック昇温時間を満たすための発熱･伝熱の評価、等 【耐久性能解析】 ■ 流路･マニホールド形状に対する起動･停止時の水素置換状況およびカソードカーボン劣化要因の評価 ■ 負荷変動時に発生する乾湿変動、過電圧変動、温度変動が大きい領域の推定、等
解析モデル	スタック解析までを高精度かつ、実用的な時間で実行可能とした当社独自の工学モデルを適用 ■ 起電力モデル：開回路電圧（クロスリークモデル）、電気化学反応（Butler-Volmer式）、触媒層モデル（触媒層構造に起因する輸送抵抗モデル）、等 ■ 熱･物質輸送モデル（流路/GDL/MPL） ■ 膜内輸送モデル：水逆拡散、電気浸透、プロトン伝導、ガス輸送 ■ 二相流動モデル（流路/GDL/MPL） ■ 熱輸送モデル（固体部分）
計算時間	スタック400セル積層を対象とした負荷ホールド時の解析で約1日（目安） 注）1セルあたり1コアを用いたときのベンチマーク結果です。計算時間は実行環境によって変動します。
動作環境要件	【プリ･ポスト】OS：Windows 7（64ビット版、Microsoft .NET Framework 4.5以上）など 【ソルバ】OS：Linux（64ビット版、Red HatまたはCentOS 6.4等）など

「P-Stack」は、みずほ情報総研株式会社の登録商標です。Linux は、Linus Torvalds 氏の日本およびその他の国における登録商標または商標です。Microsoft, Excel, および Windows は、米国 Microsoft Corporation の、米国およびその他の国における登録商標または商標です。その他記載の製品、サービス名は各社の登録商標です。

お問い合わせ･資料のご請求　みずほ情報総研株式会社 ｻｲｴﾝｽｿﾘｭｰｼｮﾝ部
〒101-8443 東京都千代田区神田錦町2-3　Tel 03-5281-5415　Fax 03-5281-5331
URL　http://www.mizuho-ir.co.jp/solution/research/digital/manufacture/fc/index.html
E-mail　ss-toiawase@mizuho-ir.co.jp

MIZUHO　みずほ情報総研　One MIZUHO

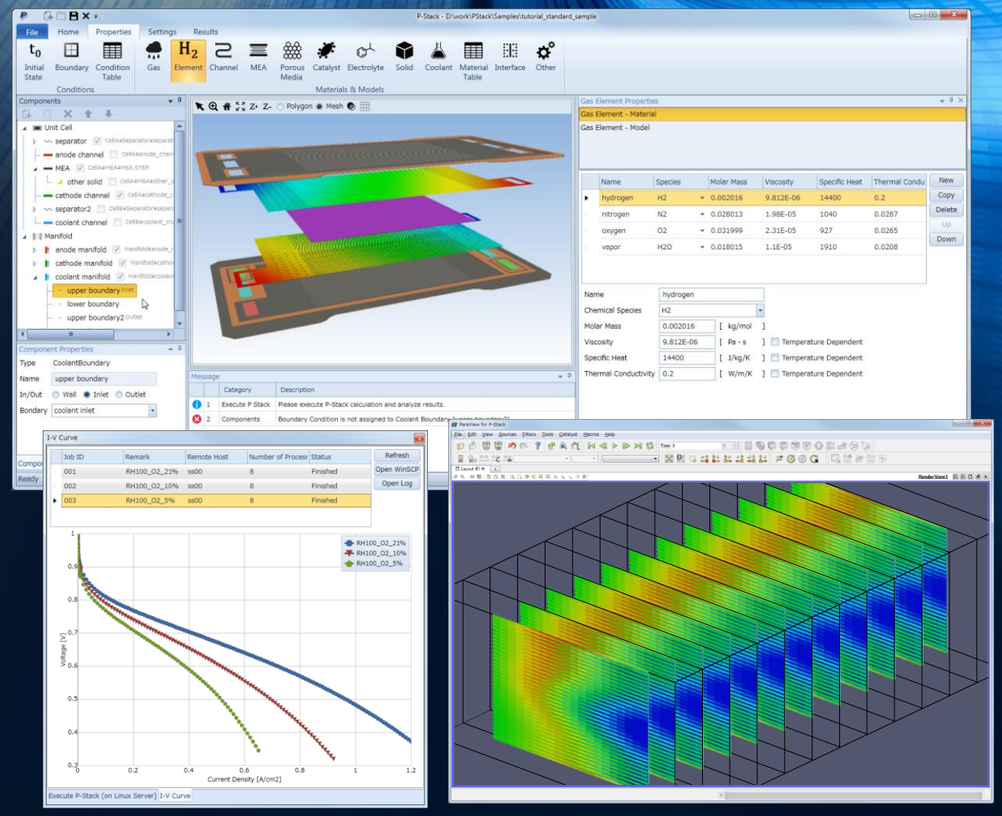
固体高分子形燃料電池シミュレータ
P-Stack® 4.0

Version 4.0
2016年8月リリース

燃料電池専用ソフトウェアだから可能な高精度かつ高速な解析により、

- ✓ 実験では"見えない"内部現象理解による設計指針の策定支援
- ✓ 新規開発スタックの性能事前予測による試作コストの削減
- ✓ 実験では部材劣化が発生する限界条件での性能予測

を可能とし、燃料電池開発を強力に支援します



【特徴】

- ✓ **運転条件･構造条件に対するセル～フルスタック発電性能予測を高速に実現（～3日、1セル/1コア計算時※）**
  - **セル間流量バランスと発電･含水･温度等内部分布との相関**
  - **負荷変動時の発電･含水変化、面内乾湿変動、過電圧変動の推定**
  - **起動、停止時のガス置換挙動と劣化、発電時の水素欠乏による影響、等**
- ✓ **流量･圧損分布、発熱バランス等のフルスタック熱流動評価を1日で実現（従来のCFDに比べて圧倒的に高速）**

※ 計算速度は動作環境、計算条件に依存します。

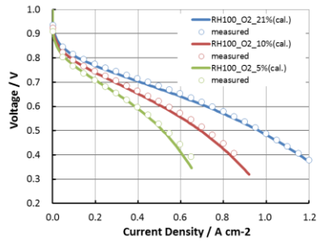
Copyright © 2016 Mizuho Information & Research Institute, Inc. All Rights Reserved.

フルスタック全体を解析できる唯一の燃料電池専用シミュレータ

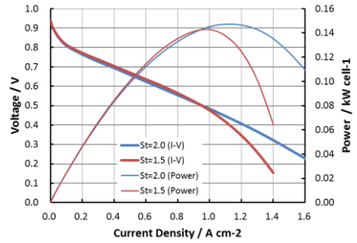
【高速な解析を実現するモデルコンセプト】

燃料電池の内部現象は複数の物理が連成するマルチフィジックスであり、汎用的なCAEソフトで取り扱う場合には計算コストの大きさが問題になります。

P-Stackでは、各種工学モデル（実測によるMEA特性を再現する触媒層モデル、CFD計算で得られる流動特性を再現する配管流動モデルなど）の導入により、要求される計算精度を確保しつつ、実機セル・スタックの評価を高速に実現します。



実測による小型セルのIV特性を忠実に再現する工学モデル

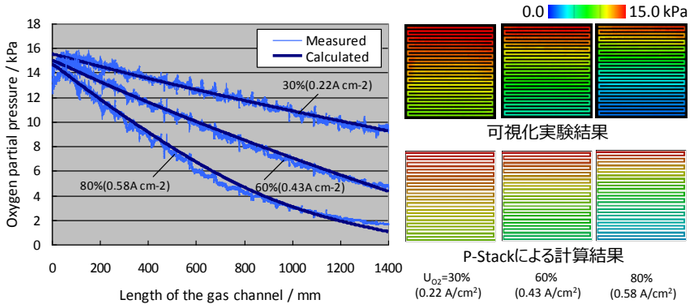


実機セル・スタックの発電特性を高速に計算

【実験結果を定量的に再現する基本性能】

実測による小型セルのIV特性・IR特性を基に決定したP-Stackのモデルパラメータを用いて、実測と同じ条件で小型セルの解析を行いました。

右図に出力電流密度に対する酸素分圧分布の変化について実測と計算結果を比較して示します。いずれの出力電流密度においても両者が良く一致していることがわかります。また、出力電流密度が低い条件（0.22 A/cm²）では、酸素利用率が低く発電分布が均一となるため酸素分圧がほぼ線形に減少するのに対し、出力電流密度が高い条件（0.58 A/cm²）では、酸素利用率が高くなるため発電分布がカソード上流側に集中し、上流側の酸素消費量増加に起因する分布の変化も再現しています。



カソード流路内の酸素分圧分布の実測※と計算結果の比較

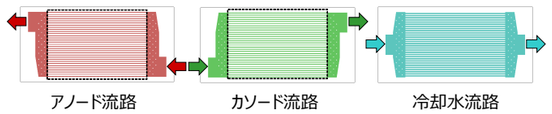
※ 可視化セルによる実測データは国立大学法人山梨大学様から提供頂きました

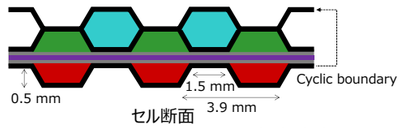
M. Yoneda, et al., ECS Trans., 11, 1105 (2006). 11th ASME, Minneapolis, (2013)

解析事例①：実機セルの負荷変動解析

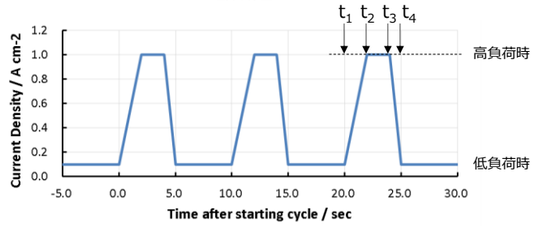
【負荷変動時の膜乾湿サイクルの解析】

電解質膜の機械劣化の要因となる負荷変動時の乾湿変化の非定常挙動を解析しました。発電面積が260 cm²のセルに負荷変動（低負荷t_1→高負荷t_2～t_3→低負荷t_4：5秒）を与えたときのMEAにおける物理量分布を下図右側に示します。リブ下と流路下の差異に注目すると、低負荷時（t_1、t_4）は電流密度差が小さいため含水量に違いはみられませんが、高負荷時（t_2、t_3）では電流密度差が増大するため、含水量に明らかな違いがみられます。また、高負荷時では発熱によって温度が上昇しますが、低負荷に戻した直後（t_4）では温度が十分に低下せず、膜内の含水分布も乾く傾向が見られます。このように、実機セルの負荷変動時における含水変化を過渡的な変化まで含めて解析することにより、機械劣化を引き起こしやすい領域を予測することができます。

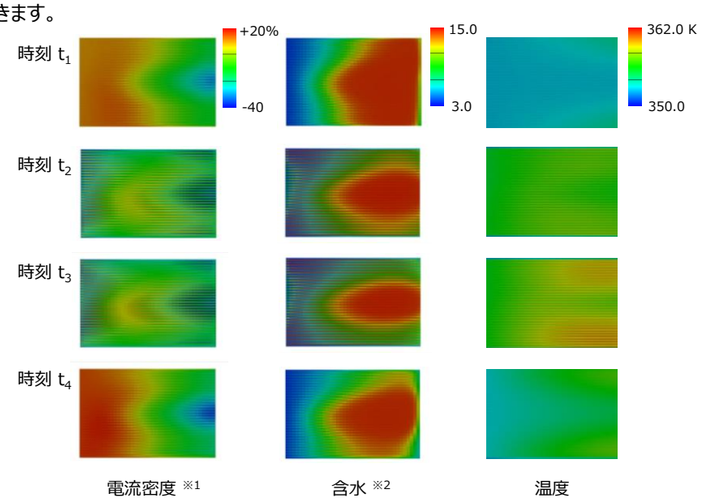




セル断面



解析条件として与えた負荷変動のサイクル

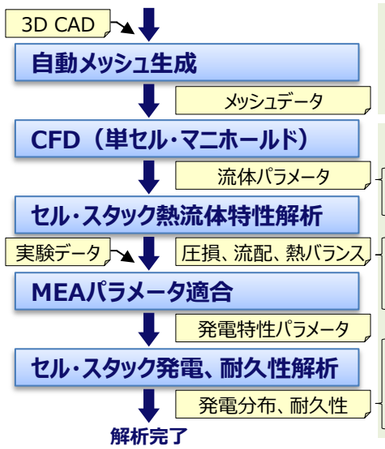


負荷変動時の各時刻におけるMEAの電流密度、含水、温度分布

※1 単位は平均電流密度に対するパーセンテージ
※2 単位は含水量λ（スルホン酸基一つあたりの水分子数）

228th ECS meeting, Phoenix (2015)

自動化を追求したP-Stackの解析フローと使い易くなった専用GUI



目的
- セル、スタックの性能を評価したい
- 出力変動時の過渡応答を評価したい
- 運転条件と電極劣化の関係を推測したい

設計への評価項目
- セル圧損評価、流配バランス
- 澱み領域による液水滞留領域の推定
- スタック圧損評価、セル間流配バランス
- 起動、停止時の圧力変動評価・水素置換
- 構造、運転条件による電流・含水・温度分布（～高負荷）
- 出力変動（低負荷⇔高負荷）時における加湿状態の過渡応答

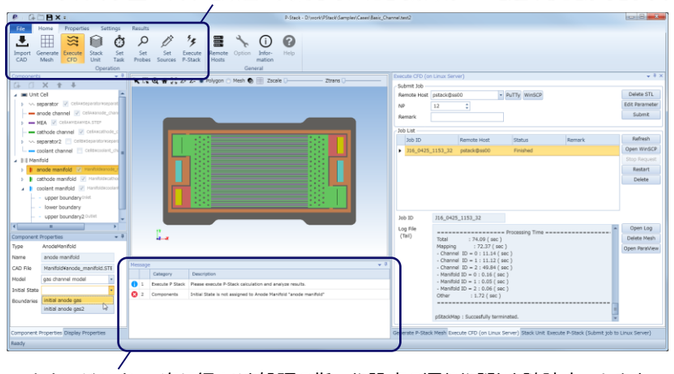
【解析フロー：メッシュ生成、パラメータ自動化】

P-Stackを用いた解析では、実機セルの3D CADデータと小型セルのMEA特性の実験データを入力とし、左図に示す流れで解析を進めます。

P-Stack 4.0では3D CADからのメッシュ生成※およびCFDによる流体パラメータの決定を自動化し、わずかなGUI操作で処理を実行できるようになりました。これによりシミュレーションのセットアップにかかる時間と労力を大幅に削減しました。さらにP-Stackでは工学モデルの採用により計算時間が汎用的なCAEソフトに比べ大幅に短縮されるため、解析工程のさらなる短縮を実現します。

※ 3D CADからの自動メッシュ生成は株式会社エリジオンが開発したアルゴリズムを基に搭載した機能です。

リボンタブ上のボタンを順番に実行していくことで解析フローを進めることができます。



メッセージペイン：次に行うべき処理の指示や設定の漏れや誤りを随時表示します

【使い易くなったP-Stack専用GUI】

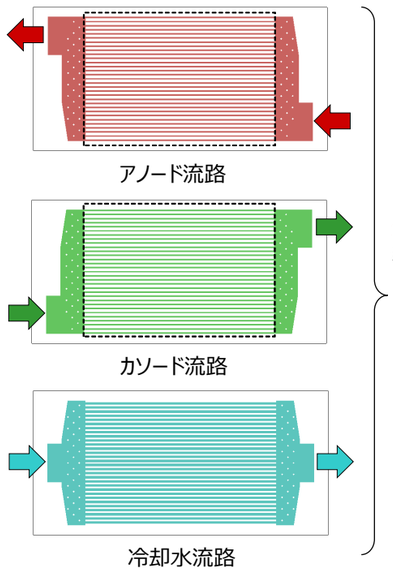
P-Stackでは一連の解析フローを専用のGUI（グラフィカルユーザーインターフェース）を用いて進めます。GUIの開発コンセプトは「マニュアルをあまり見ずに直感的に使えるGUI」。リボンタブ上のボタンを順番に実行していくことで解析フローを進めることができ、メッセージペインには次に行うべき処理の指示や設定の漏れや誤りを随時表示します。

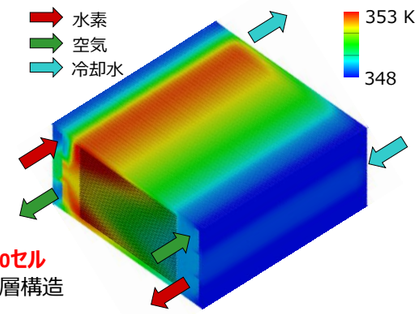
Linux®サーバ上でのCFDや発電解析の並列計算もボタン一つで実行でき、面倒なコマンド操作は必要ありません。また、数値データの入力はMicrosoft® Excel®からのコピー＆ペーストをサポートしており、実験で得られる時系列データの入力なども簡便に行うことができます。

解析事例②：実機セル・スタックの発電性能予測

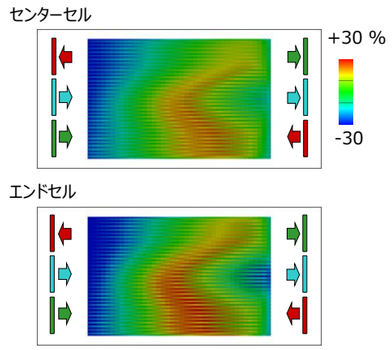
【構造・運転・部材条件に対する実機セル～スタック（数100枚積層）の発電特性と内部分布予測】

発電面積260cm²のセルを積層したスタックの構造条件と作動条件がスタック性能に与える影響を解析しました。下図に100枚積層したスタックに対して、負荷電流密度0.2 A/cm²、アノード利用率75%、カソード利用率50%、および両極の相対加湿度50%条件下における温度分布（左図）と電流密度分布（右図）を示します。また、マニホールド断面縮小による各セルへの供給ガス分配の不均一性拡大とそれに伴うセル間電圧のバラツキ発生、高電流密度時における生成水量増加と放熱によるエンドセル（積層方向の終端セル）の液水増加に伴う性能低下などの解析も行うことができます。

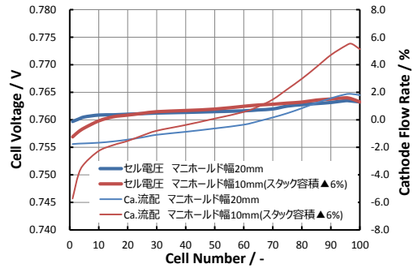




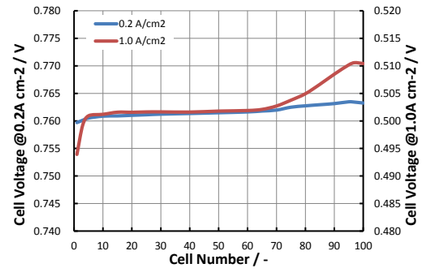
発電時のスタック温度分布



局所電流密度分布



マニホールドサイズに対する発電性能



出力電流密度に対する発電性能

226th ECS meeting, Cancun (2014)