

P-Stack[®] Cell Sketcher を用いた燃料電池のセル設計と最適化

塚本貴志ⁱ, 高山務ⁱⁱ, 宮本裕平ⁱⁱⁱ, 小宮山敬介^{iv}

Design and optimization of flow field pattern for polymer electrolyte membrane fuel cell by P-Stack Cell Sketcher

Takayuki TSUKAMOTO, Tsutomu TAKAYAMA, Yuhei MIYAMOTO, Keisuke KOMIYAMA

燃料電池においては反応ガスと冷却水を内部に均一に流す必要があり、各流体の流路設計が重要となる。本稿では当社が開発した燃料電池のセル設計ツール P-Stack Cell Sketcher の概要とこれを用いた流路設計の事例を紹介する。具体的には、車載用の実機を模したセル形状において発電性能を向上させるセル設計が可能であること、セル形状のパラメータスタディや流路の最適化によって最適なセル形状を広範囲に探索できることを示す。本技術は燃料電池に限らず、平板状の流路形状で化学反応を起こす様々なデバイス（水素製造の水電解セルなど）の設計へ適用可能である。

(キーワード): 燃料電池, 流路設計, 形状最適化, 遺伝的アルゴリズム, 3D CAD 自動生成, 発電計算

1 はじめに

燃料電池のセル形状の設計を支援するため、当社では燃料電池のセル設計ツール P-Stack Cell Sketcher を開発した（特許取得済み）。P-Stack Cell Sketcher ではユーザーが 2 次元のキャンバスに描画した流路のスケッチからセル全体の 3 次元形状を自動生成し、その発電特性を P-Stack でシームレスに評価できる。更に、流路のスケッチの段階から各流路の圧損や流量分配などを評価でき、それらの流体特性が最適になるように流路のスケッチを修正、最適化することもできる。本稿では P-Stack Cell Sketcher の概要を紹介すると共に、車載用を想定した燃料電池のセル設計についての活用事例を記載する。

1.1 燃料電池のセル構造

比較的低温で作動する固体高分子形燃料電池（PEFC）は、小型化や起動性の観点から、乗用車や商用車といった車載用途で特に注目されている燃料電池である。図 1 に固体高分子形燃料電池のセル単

体の構造の概要を示す。アノード流路には水素を流し、カソード流路には空気を流す。水素と空気中の酸素が膜電極接合体（Membrane Electrode Assembly；MEA）において電気化学反応し、電力が得られる。

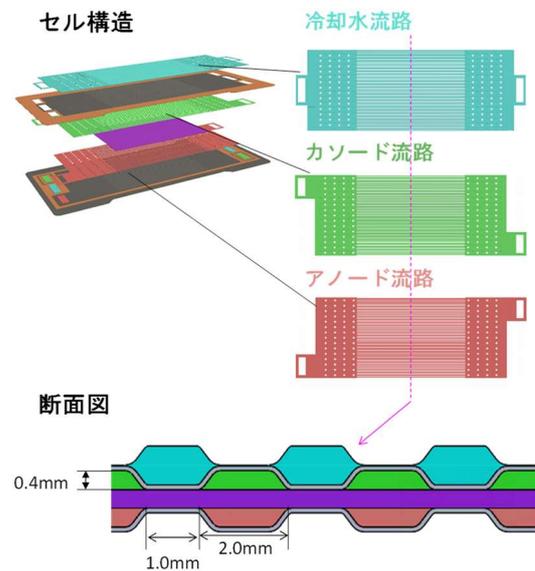


図 1 燃料電池のセル構造と断面図のイメージ

ⁱ サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム 上席主任コンサルタント 博士（工学）
ⁱⁱ サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム 課長 博士（理学）
ⁱⁱⁱ サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム 主任コンサルタント 博士（理学）
^{iv} サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム コンサルタント

セル単体の厚みは 1mm 程度であるが、このセルを数十から数百枚積み重ねたものをスタックと呼び、大きな電力を得る。スタック内部に熱がこもらないようにするため冷却水も流す。反応ガス（水素または空気）と冷却水はセパレーターによって隔てられるが、特に車載用の場合、セパレーターには量産性があるため薄くて損傷に強い金属セパレーターが用いられる。

ここで金属セパレーターの肉厚は 0.1mm 程度であり、プレス成型によって作られた凹凸が流路となり、表裏に反応ガスと冷却水が流れる。発電性能と耐久性を高めるため、MEA 全体にできる限り均一に反応ガスと冷却水をめぐらせるためには各流体の流路設計が重要となる。しかし、反応ガスと冷却水の流れ方を両方満足させ、さらに燃料電池のサイズが可能なかぎりコンパクトになるよう流路設計をすることは容易ではない。

1.2 セル形状の試作に関する課題

燃料電池のスタックを 1 つ試作するには家が 1 軒建つほどの費用がかかるとも言われている。特に金属セパレーターの場合、プレス成型するための金型には表面に精密な凹凸を切削する必要があるため、作成に長い工期と費用がかかることは容易に想像できる。そのため、様々な流路パターンでの金型や金属セパレーターを試作して、どのような流路パターンであれば発電性能が良いかといったスタディーを大量に行うことは非現実的である。

当社では 2003 年頃から燃料電池シミュレーター P-Stack¹⁾の開発・販売を行っている。P-Stack は、セルの形状、MEA などの材料物性、反応ガスや冷却水の流量や温度などの運転条件を決めた場合に、物理シミュレーションにより発電性能や内部状態を評価・解析できるソフトウェアである。

P-Stack においてセルの形状（金属セパレーターを含む）は、3D CAD データ（以下、単に CAD と呼ぶ）として入力するが、この CAD を用意するには以下に示す課題があった。

- ✓ CAD の作成に数週間など長い時間が掛かる
- ✓ 複雑な形状では CAD ソフトが重くなる、各操作にて都度待ち時間が発生する
- ✓ CAD 担当者によって作り方や品質が異なる
- ✓ 金属セパレーターをモデリングするため、その表裏に流れる流体空間をイメージしにくい（特に冷却水流路）
- ✓ 設計用 CAD（実物に忠実、締め付け前の形状）とシミュレーション用 CAD（適度に簡素化されたもの、締め付け後の形状）で要件が異なるため CAD の作り直しが必要となる

2 P-Stack Cell Sketcher の概要

P-Stack Cell Sketcher では、図 2 に示すようにユーザーが作成した流路のスケッチからセル全体の CAD を自動生成し、その後、燃料電池シミュレーター P-Stack による発電シミュレーションを実行する。

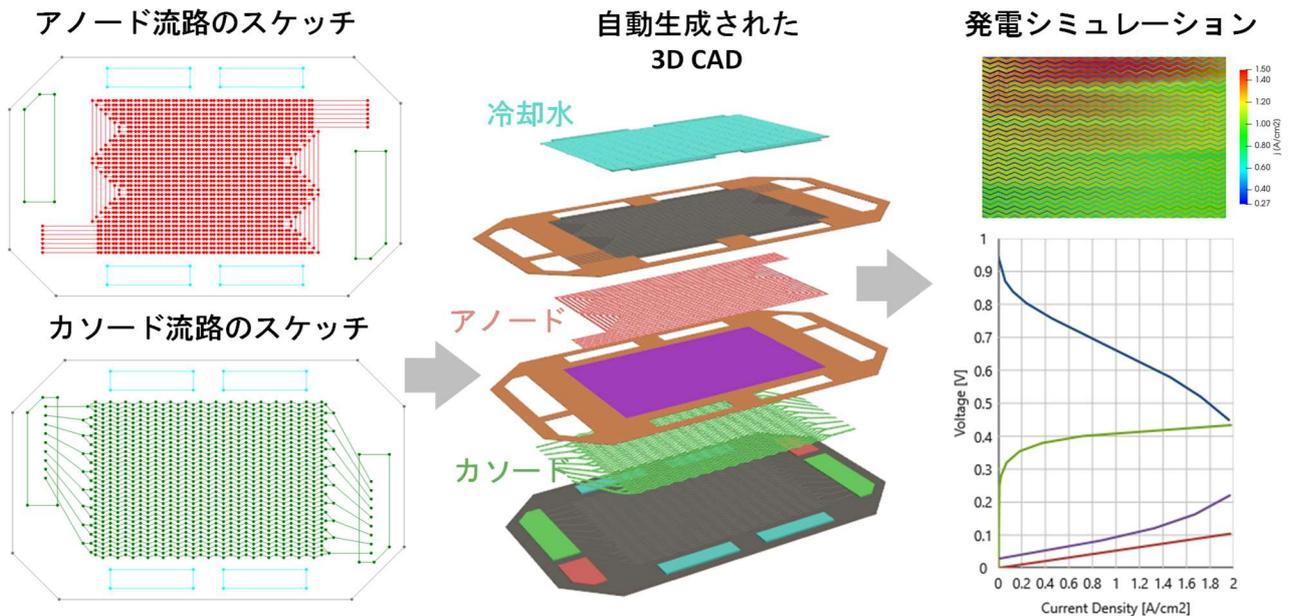


図 2 P-Stack Cell Sketcher による流路スケッチからの 3D CAD 生成と発電シミュレーションの自動実行

プレス加工による金属セパレーターの場合、ユーザーは反応ガスの流路のスケッチをキャンバスに描画する。流路のスケッチでは、流路の中心軸を線分で描画し、流路の幅と深さと壁角度を指定する。これにより反応ガスの流路の3D形状が決定され、隣接するセパレーターおよび冷却水の3D形状も決定される。

定置用燃料電池などでの採用が多いカーボンプレートの両面に溝を掘って反応ガスと冷却水の流路を成形するタイプのセパレーターの場合は、反応ガスと冷却水流路のスケッチをそれぞれ用意する。

流路のスケッチは P-Stack Cell Sketcher の GUI (グラフィカルユーザーインターフェース) を用いて作成しても良いが、流路のスケッチを STEP ファイル形式でインポート/エクスポートすることも可能であり、ユーザーが使い慣れた CAD ソフトで描画した流路のスケッチを P-Stack Cell Sketcher にインポートすることもできる。

2.1 3D CAD の自動生成

流路のスケッチから 3D CAD を自動生成する際の流れについて説明する。まず、図 3 に示すように流路のスケッチから流路平面図を生成する。具体的には流路の中心軸を表す線分をユーザーが指定した流路幅で矩形化し、矩形同士の交点を算出することで流路平面図を生成する。

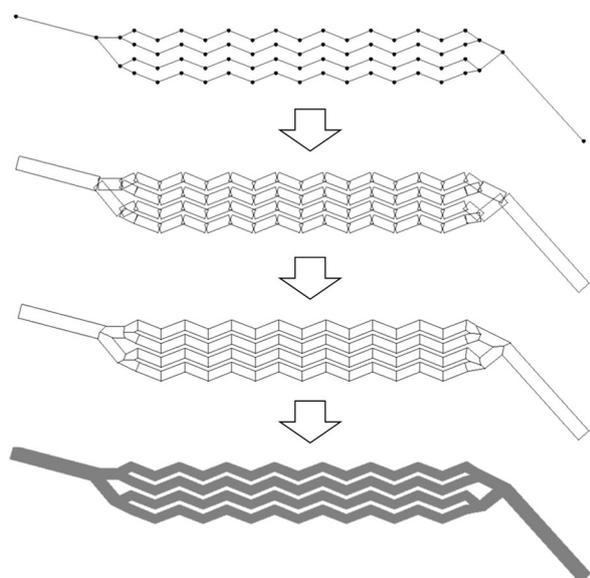


図 3 流路のスケッチから流路平面図を生成する様子

次に、この流路平面図からセル全体の 3D CAD を自動生成するが、その手順について図 4 に流路の断

面図を示して説明する。手順①では MEA またはガスケットの表面から反応ガスの流路平面図をユーザー指定の流路深さで厚み付けし、反応ガスの流路空間を生成する。この際、流路深さは場所ごとに異なって良い。手順②では反応ガスの流路空間の壁面をユーザー指定の角度で傾斜させる。手順③ではセパレーターの厚み分、反応ガスの流路空間と MEA を膜貫通方向 (図中上下方向) にずらすことでセパレーターの形状を抽出する。手順④では残りの空間を冷却水流路として抽出し、手順⑤で両極に位置する冷却水流路を片側に寄せる。なお、これらの 3 次元形状の操作は市販の 3D CAD ソフトをバッチ実行することで実現している。

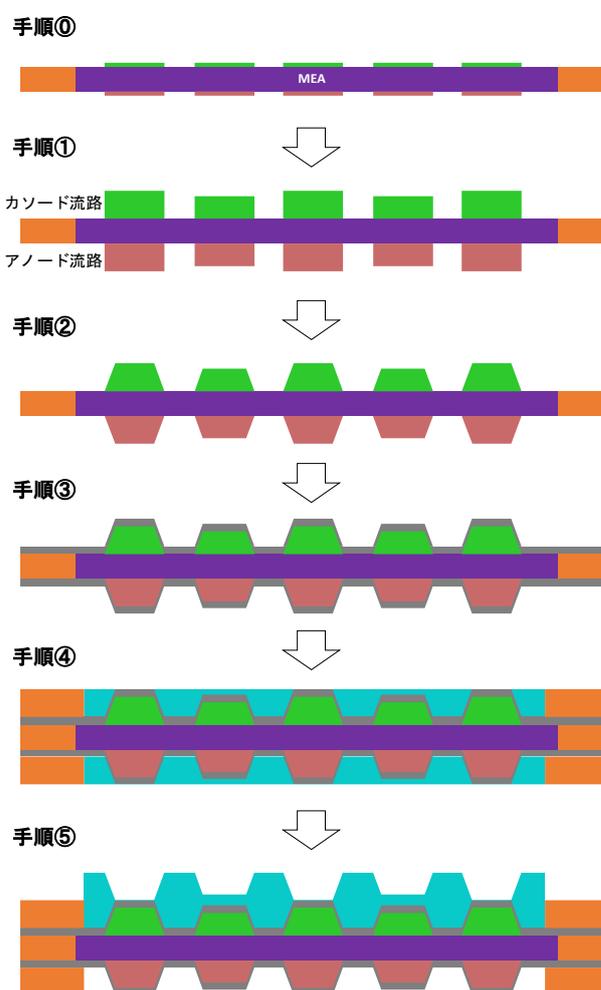


図 4 断面図で見る 3D CAD の生成手順

本手順により生成される 3D 形状ではセパレーターの凹凸の角に丸みがないため実際にプレス加工で成形される形状とは少し異なるが、シミュレーション用にメッシュを生成する観点では好都合となる。

2.2 スケッチ段階でのセル面内流れの評価

P-Stack Cell Sketcher では、スケッチの段階で各流路のセル面内の圧損および流量分配を評価することができる。圧損および流量分配の評価はモデル化された流体計算によって行われ、数秒から数十秒程度の短時間で結果を得ることができる。これにより、ユーザーは圧損と流量分配を評価しながら、性能が向上するようにスケッチをインタラクティブに修正することが可能になる。

燃料電池のセル面内の流れは幅・深さ共に 1 mm あるいはそれ以下となる狭いチャンネルを通過するため、燃料電池として一般的な流量においては摩擦による抵抗が支配的となり、流量と圧力の関係が線形となるダルシー則が概ね仮定でき、配管に用いられるネットワークモデルを適用できる²⁾。P-Stack Cell Sketcher では、スケッチの各線分の流路深さ、幅、壁角度、断面積等を考慮したネットワークモデルを構築する。管摩擦係数 λ 、粘性係数 μ 、流路長さ L 、流路断面積 A 、流路の平均深さ m (=断面積/断面の周長)、レイノルズ数 Re に対し、以下の圧力 p と流量 Q の関係式(1)に従って、ガスの流れを計算する²⁾。

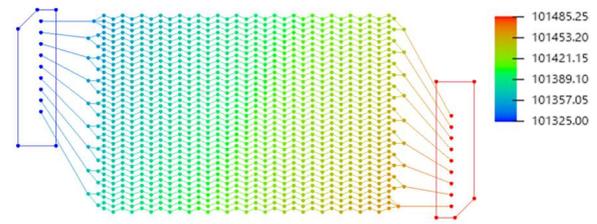
$$Q = \frac{32m^2}{\lambda Re} \frac{1}{\mu L} \Delta p A \quad (1)$$

管摩擦係数 λ は流路の断面形状によって異なる値を用いる必要がある。断面形状ごとの管摩擦係数 λ の値は経験的に知られており、これを用いる。

図 5 にカソード流路のスケッチに対してネットワークモデルで計算した圧力分布を示す。ネットワークモデルによる計算時間は 1 秒未満であり、一般的な 3 次元 CFD 計算では並列計算でも数十分から数時間程度掛かることに比べると圧倒的に高速である。

プレス加工による金属セパレーターの場合、冷却水流路は反応ガス流路の裏面に相補的に形成されるため、冷却水流路の圧力分布と流量分配を計算するためには図 6 に示すように反応ガス流路から相補的に冷却水流路を抽出する。0.1~0.2mm 程度の細かい格子に対し、各セルが冷却水領域かどうか判定し(図 6(a))、要素数を減らすため粗視化を行う(図 6(b))。これをカソード流路とアノード流路のそれぞれに行い、互いの冷却水を結合することで図 6(c)に示すように冷却水の圧力等を計算することができる。

ネットワークモデルによる圧力分布 (計算時間: 1秒未満)



CFDによる圧力分布 (計算時間: 32並列で約1時間半)

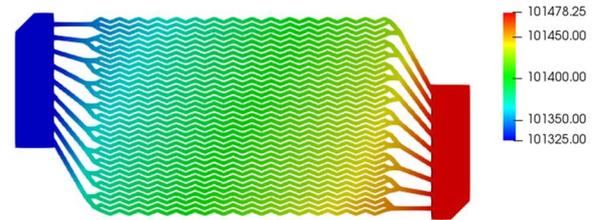


図 5 ネットワークモデルおよび一般的な 3 次元 CFD 計算によって計算したカソード流路の圧力の比較

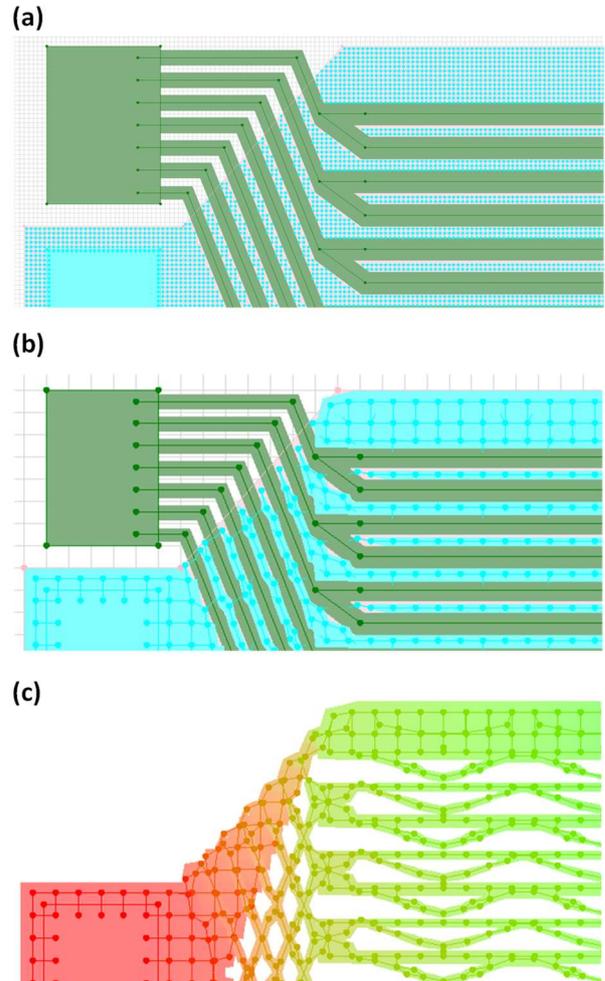


図 6 冷却水流路のネットワーク抽出

2.3 スケッチ段階でのセル積層方向流れの評価

スタックにおいて各セルへの反応ガスと冷却水の流量の均一性は重要な評価項目である。各セルに均一に流体が入るかはセルの圧損とマニホールド（セル積層方向に流体を通すための穴）の圧損の比が重要となる。セルの圧損に対し、マニホールドの圧損が十分小さければ各セルに均一に流体が入ると考えて良いが、それにはマニホールドの断面積を大きくする必要があり、コンパクト化と相反することになる。

セルの積層方向の圧力分布・流量分配の評価には動圧の考慮が必要となる。断面の寸法がサブ mm オーダーとなるセル面内のチャネルとは異なり、マニホールドの断面の寸法は数 cm となるため、マニホールド内の流れにおいてはレイノルズ数が大きくなる。また、マニホールドの入口側では例えばセル 300 枚分の流量があるのに対し、反対側では最終的にセル 1 枚分の流量となる。マニホールドの入口側と反対側では流速が全く異なり、動圧の考慮が必要不可欠となる。

P-Stack Cell Sketcher ではセル積層方向の圧力分布・流量分配の計算は、等間隔に積層したセル間に定義した圧力と流量から流量保存の式、圧力損失式を解くことで求める²⁾。図 7 に積層方向の流れ計算の概念図を示す。

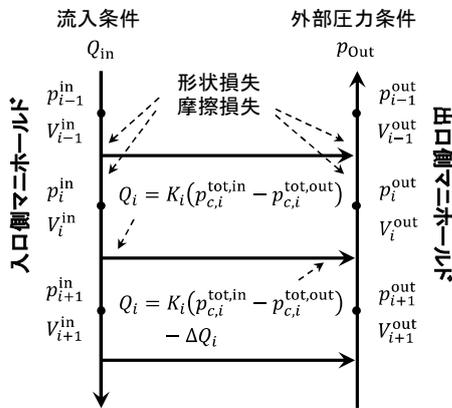


図 7 積層方向の流れ計算の概念図

流量の保存式は、入口側マニホールド、出口側マニホールドそれぞれで以下のように表せる。

$$(\text{入口側マニホールド}) \quad \rho_i^{in} AV_i^{in} = \rho_{i-1}^{in} AV_{i-1}^{in} - Q_i \quad (2)$$

$$(\text{出口側マニホールド}) \quad \rho_i^{out} AV_i^{out} = \rho_{i-1}^{out} AV_{i-1}^{out} + (Q_i - \Delta Q_i) \quad (3)$$

ここで、 ρ は密度、 A は断面積、 V は流速、 Q はセル流量、 ΔQ はセル内の反応による消費生成に伴う流量変化である。

圧力損失の式は、入口側マニホールドでは以下のように表せる。

$$(\text{入口側マニホールド}) \quad p_i^{in} + \frac{1}{2} \rho_i^{in} V_i^{in^2} = p_{i-1}^{in} + \frac{1}{2} \rho_{i-1}^{in} V_{i-1}^{in^2} - \left(\zeta + \lambda_{i-1} \frac{\delta}{D} \right) \frac{1}{2} \rho_{i-1}^{in} V_{i-1}^{in^2} \quad (4)$$

ここで、 ζ は形状損失係数、 λ は摩擦損失係数、 δ はセル間距離、 D はマニホールドの等価直径である。出口側のマニホールドも同等の圧力損失の式を用いるが、流れが逆向きのため式 (4) の添え字 i と $i-1$ を入れかえて上流・下流を交換した式を用いる。

セル流量 Q は以下の式で求める。

$$Q_i = K(p_{c(i,i-1)}^{in} - p_{c(i,i-1)}^{out}) \quad (5)$$

ここで、 $p_{c(i,i-1)}$ はセル両端の圧力であり、 p_i と p_{i-1} の中心の圧力である。 $p_{c(i,i-1)}$ は式 (2) の圧力損失の式と同等の式で求める。 K はセル流量係数で、セル両端の圧力差に対するセル流量を決定するパラメータである。これはセル面内の流体の流れの計算から求めることができる。

2.4 GUI (グラフィカルユーザーインターフェース)

P-Stack Cell Sketcher には図 8 に示す専用 GUI があり、スケッチや流体計算に加え、CAD 生成から発電計算をボタン 1 つで連続実行できる。図 8 は JARI 標準セルを描画した場合を示している。本格的なセル形状の設計は勿論のこと、試験セルのような簡易なセル形状の設計も容易に行うことができる。

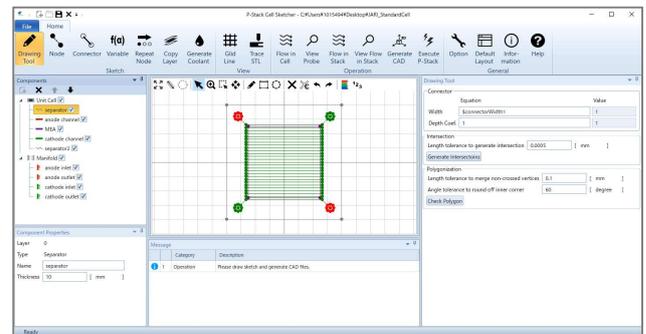


図 8 P-Stack Cell Sketcher の専用 GUI

3 車載用を想定した燃料電池のセル設計

3.1 車載用セルを模したスケッチの作成と評価

本章では P-Stack Cell Sketcher を使用した燃料電池のセル設計の事例について紹介する。より具体的な事例として紹介するため、ここではトヨタ自動車株式会社の新型 MIRAI のセルを模した形状を出発点に議論する。新型 MIRAI については、同社から積極的な情報開示がなされ、アノード/カソードのセパレーターについても同社の公式 YouTube チャンネル³⁾やその他の多くのメディアで公開されている。これは同社が世界の燃料電池開発を活性化し、市場全体を拡大しようとする姿勢の顕れだと拝察すると共に、同社の情報開示に心から敬意を表したい。

本節では新型 MIRAI のセパレーター写真（公開情報）を下絵とし、流路溝をトレースすることで図 9 に示すスケッチを作成した。トレースには 12 時間程度を要した。写真から把握できない流路深さなどの寸法は P-Stack のデフォルト値を使用しており、実物を正確に再現したものではない点に留意されたい。

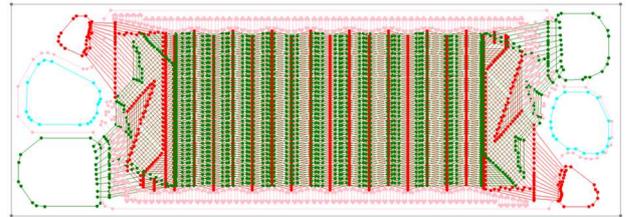


図 10 新型 MIRAI のセパレーター写真（公開情報）からトレースしたセル全体のスケッチ

図 10 に各流路の圧力分布および圧損について、ネットワークモデルまたは 3D CAD 生成後に CFD で計算した結果を示す。アノード/カソード流路についてはネットワークモデルが 3 次元 CFD で得た圧力分布の特徴を良く再現し、圧損についても誤差 10%未満に収まっている。また、冷却水流路についてはガス流路より誤差が大きいものの、分布を捉えているといえる。32 コアの CPU を使用して 12 時間程度の時間を要する CFD 計算結果を、ネットワークモデルではガス流路で 1 秒未満、冷却水流路を数分程度で計算できるため、セル設計においてネットワークモデルは非常に有用である。

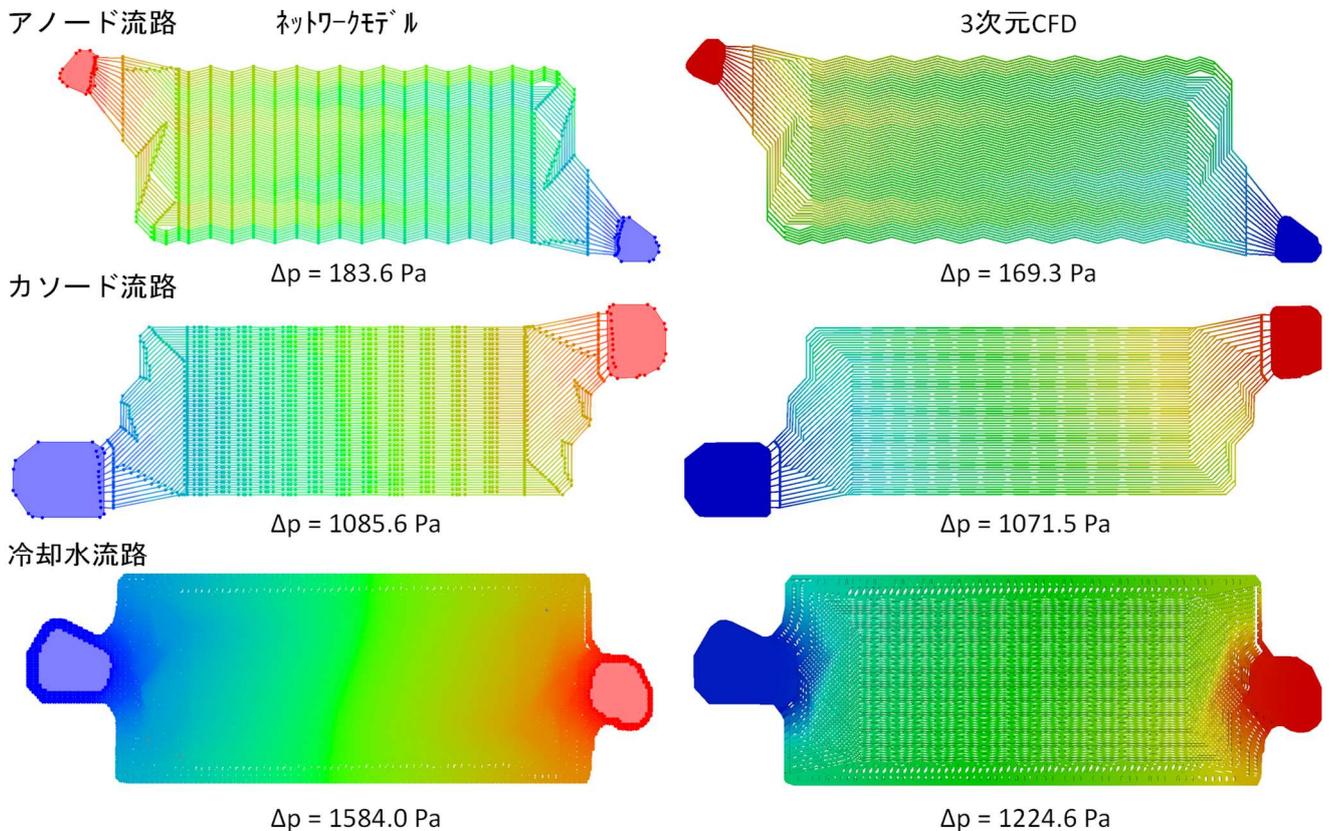


図 9 新型 MIRAI を模したスケッチのネットワークモデルによる流体計算と 3 次元 CFD 計算による反応ガス (St=1.0@0.1A/cm²相当流量)、冷却水 (0.3L/min) の圧力分布と圧損の比較

図 11 に各流路のチャンネルの流量分配について、ネットワークモデルと 3 次元 CFD から得た結果を示す。特にアノード流路とカソード流路についてはネットワークモデルにより CFD の結果を再現できている。冷却水流路についても両サイドに多くの冷却水が流れてしまう特徴を良く捉えている。

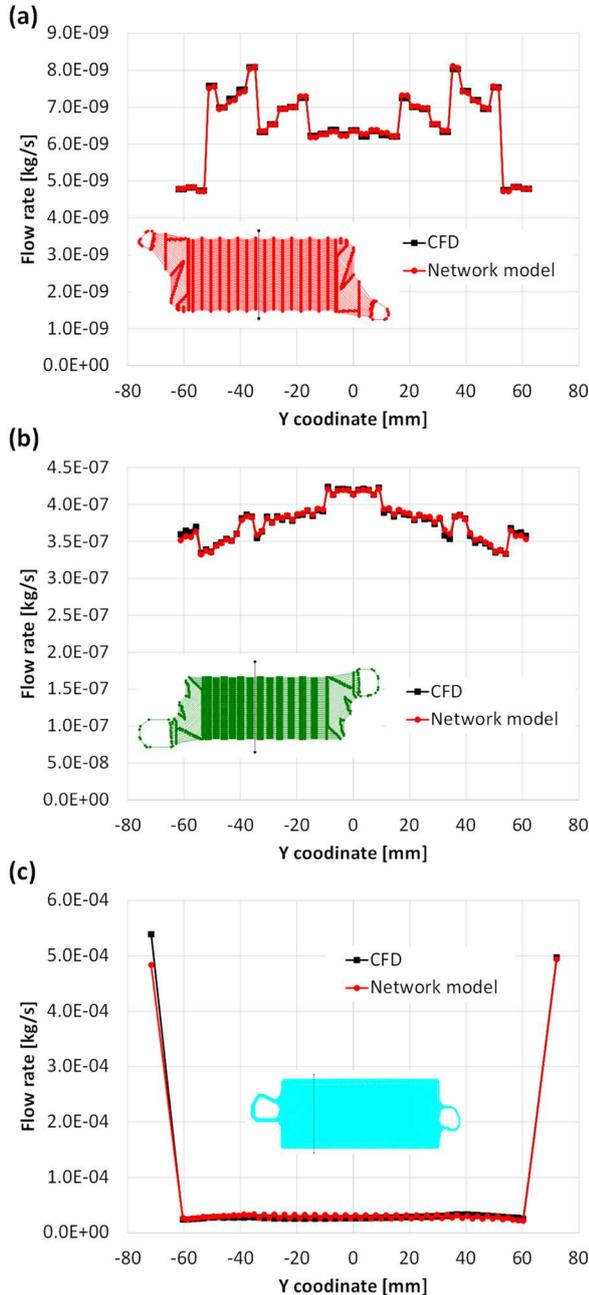


図 11 セル面内の流量分配：
(a)アノード流路，(b)カソード流路，(c)冷却水流路

アノード流路とカソード流路に関し、流量分配が均一とは言えず改善の余地がある。冷却水流路についても両サイドの流れを抑えることで中央部をより

冷却できる余地があると言える。

図 12 にセル積層方向の流量分配について、ネットワークモデルで計算した結果を示す。流体の入口と出口が片側に配置される U フロー形式であり、セル 1 番側が入口・出口側となる。

いずれの流路においても流量が増加すると入口・出口側のセルに流量が偏り、反対側の流量が減少する。特に冷却水流路において偏りが顕著となる結果となった。なお、これらの結果は実物を正確に再現したものではない模倣スケッチの結果であり、実物の結果とは異なると思われる点に注意されたい。

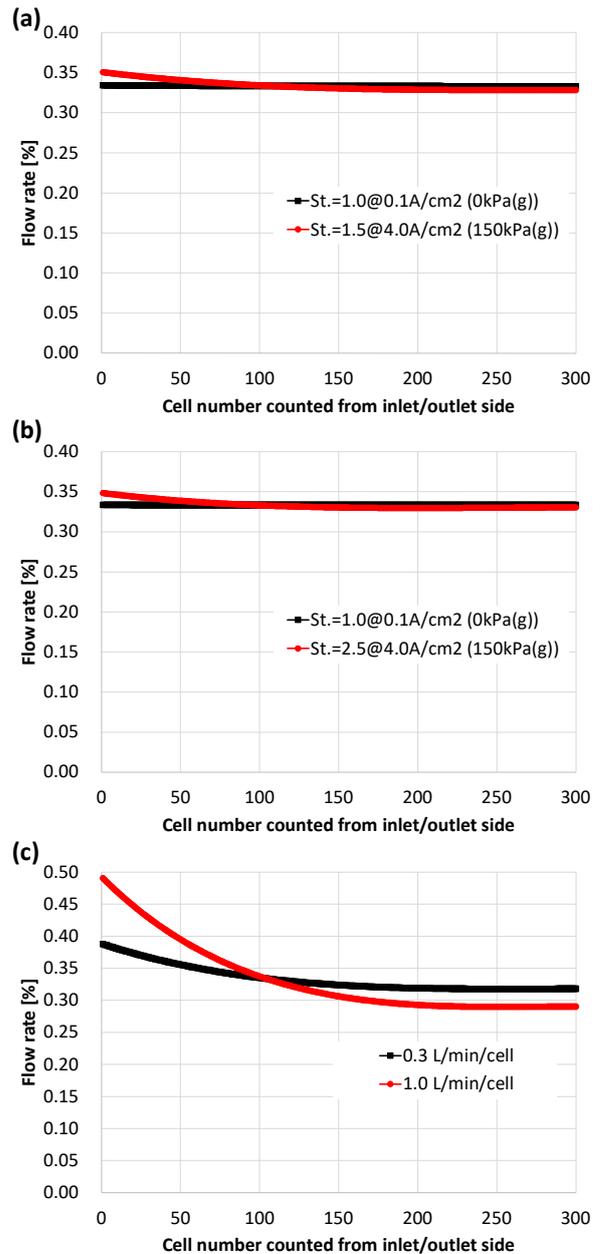


図 12 セル積層方向の流量分配：
(a)アノード流路，(b)カソード流路，(c)冷却水流路

3.2 流量分配を改善するためのスケッチの改良

セル面内およびセル積層方向の流量分配が均一化するようスケッチを改良した。図13に修正前後のスケッチを示す。カソード流路はセル面内の流量分配が均一になるようにマニホールドとアクティブエリア（MEAがあり、電気化学反応が起こる領域）を繋ぐ領域（以後、接続部と呼ぶ）における流路の分岐を修正した。冷却水面内の両サイドの流れを抑えるためにエンボス（図中オレンジ）の配置を修正し、セル積層方向の流量分配を均一化するため冷却水マニホールドの断面を大きくするなどの修正をした。これらの収支は流体計算の結果を確認しながらインタラクティブに行うことができる。

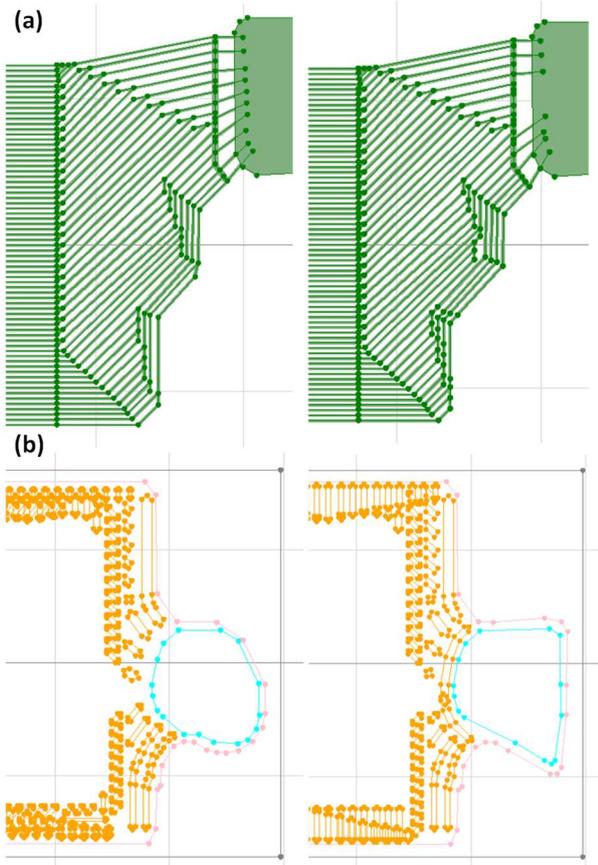


図13 スケッチの改良前後（左：改良前，右：改良後）
(a)カソード流路の接続部，(b)冷却水のマニホールドほか

図14にスケッチの修正前後のセル面内の流量分配を示す。アノード/カソード流路はいずれも均一化する方向に改善され、冷却水流路は両サイドの流れを抑えることでアクティブエリアの流量が増加した。図15に冷却水のセル積層方向の流量分配を示す。偏りが改善し、例えば250番セルの冷却水流量は0.855 L/min から 0.904 L/min に増加した。

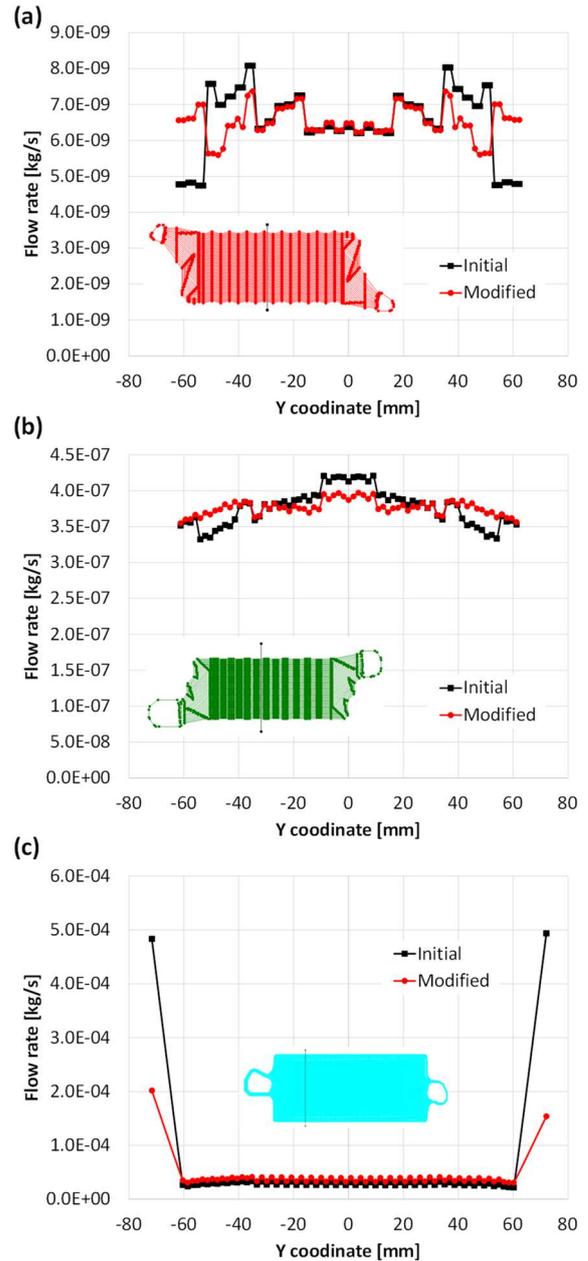


図14 改良前後のセル面内の流量分配

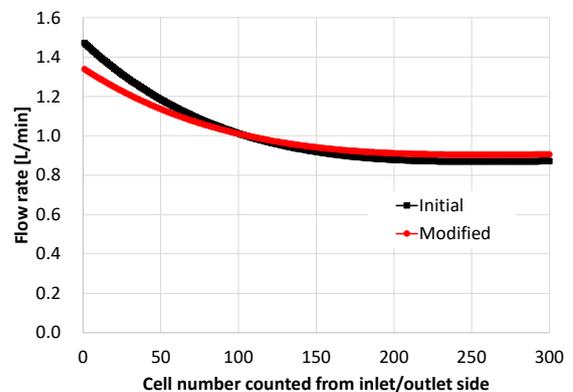


図 15 改良前後のセル積層方向の流量分配 (冷却水)

3.3 スケッチ改良前後の発電性能の評価

スケッチ修正前後の発電性能を燃料電池シミュレーターP-Stackにて評価した。P-Stackでは主に①セル形状、②材料物性、③運転条件の3つが決まると発電性能や内部状態をシミュレーションできる。P-Stackの詳細については文献¹⁾を参照されたい。

本評価において、材料物性および運転条件は文献¹⁾と同じものを使用した。MEA/GDLの材料物性はNEDOの標準プロトコルに記載の標準的なMEA/GDLに対してフィッティングした各種パラメーターをベースに、NEDOの技術開発ロードマップの2030年目標である0.7V@3.0A/cm²を達成できるようにPEM、触媒層、GDLのパラメーターを大幅に向上させたものである。具体的には、PEM厚みを2/5倍、触媒活性を10倍、触媒層の酸素輸送抵抗を1/4倍、GDLのガス拡散性を3倍、GDLの膜貫通方向の電気/熱伝度を4倍したものである。

運転条件は表1に示す通り、300枚積層したスタックの中の250番セルを再現するため、冷却水流量はスケッチ改良前後で0.855 L/minと0.904 L/minで異なる流量を与えた。

表 1 発電性能の評価に使用した運転条件

項目	値
ガス流量	アノードストイキ 1.5 カソードストイキ 2.5
ガス加湿	アノード 80% RH カソード 40% RH
冷却水流量	改良前スケッチ 0.855 L/min 改良後スケッチ 0.904 L/min
冷却水温度	温度 80 °C
背圧	150 kPa(g)

図16にI-Vカーブとパワーカーブを示す。材料物性と運転条件は現行の標準を大きく上回る設定になっているため、発電性能の絶対値にはあまり注目しないで頂きたいが、スケッチ改良前後の最大出力を比較するとスケッチ改良後におおよそ15%ほど最大出力が増加する結果となった。

図17に4.0A/cm²におけるセル全体の温度分布および水蒸気活量分布を示す。改良後のスケッチではわずかながらセル全体の温度上昇が抑えられており、MEAの水蒸気活量が上昇している。これは主に、スケッチの改良によって、250番セルに流入する冷却水

流量が増えたこと、アクティブエリアの冷却水流量が増加したことによるものだと考えられる。本節で示すようにP-Stack Cell Sketcherではセルのスケッチを修正しながら発電性能を評価できる。

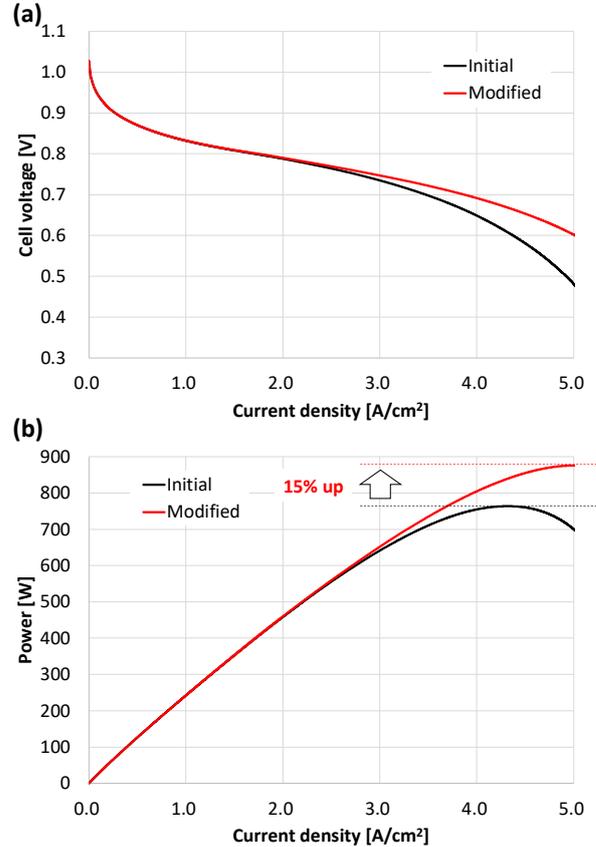


図 16 改良前後の I-V/Power カーブ比較

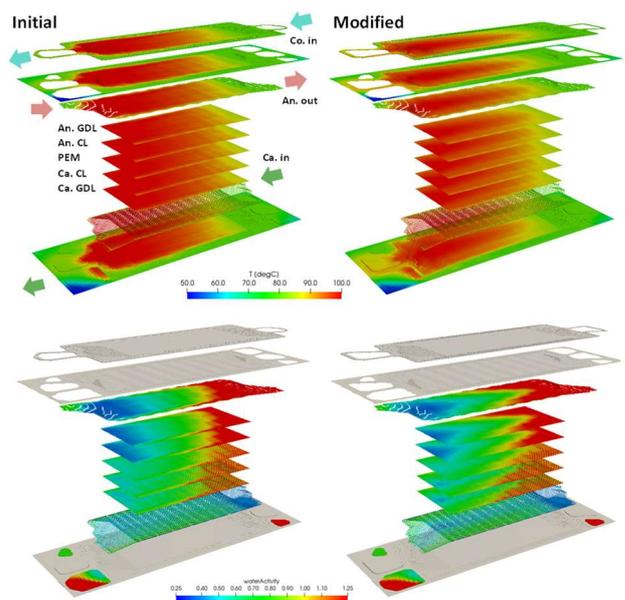


図 17 改良前後の内部状態比較 (@4.0A/cm2)

上段：温度分布，下段：水蒸気活量分布

4 セル形状のパラスタ，最適化

最高のセル形状とは何であろうか？最大出力密度が高い，内部状態が均一となり耐久性に優れる，など様々な評価項目があると思われるが，最適なセル形状は組み合わせる材料物性や運転条件（補機性能）に大きく依存する．例えば，革新的に性能が良いが乾き／高温に弱い MEA を用いる場合，MEA 全体の湿分／温度を保つセル形状が要求される．エアコンプレッサーやラジエーター，加湿器といった補機のスペックを大きく変更した場合，それらの性能下における最適なセル形状を設計しなければならない．車載用，定置用，ドローン用など異なる用途ごとにも最適なセル形状を設計する必要があるだろう．

本章では，材料物性や運転条件（補機性能）などが与えられた際に，その条件下において最適なセル形状を，自動的に探索する方法を検討したので紹介し

たい．

4.1 可変スケッチによるセル形状のパラスタ

P-Stack Cell Sketcher では，スケッチにおいて流路幅や深さなどの各種寸法はもちろんのこと，線分の位置や繰り返し数などを変数として描画することができる．これにより，例えば図 18 に示すように MEA のアスペクト比に応じてチャンネルの長さや本数，マニホールドの断面形状・位置などが変形する可変スケッチを作成できる．また，可変スケッチを変形させながら発電性能を評価することができる．

図 18 に示す可変スケッチについて，MEA 幅を変えながら発電性能を評価した結果を図 19 に示す．MEA 幅が小さいほど最大出力が高くなる結果となった．これは MEA 幅が小さいほどガス／冷却水の上流下流における内部状態のばらつきが小さくなるためと考える．一方，MEA 幅が小さいほど体積が増加する（チャンネルを 2 本毎に増減させているため体積変化は離散的になる）．そのため，MEA 幅が大きいほど

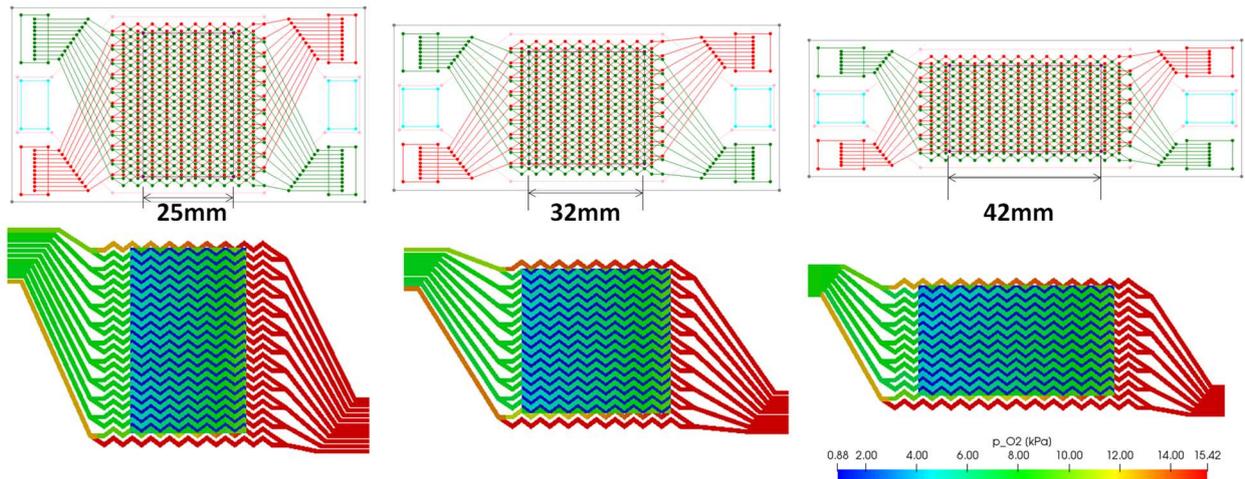


図 19 MEA の横幅に応じて変形するように描画した可変スケッチの例

左：幅 25mm，中：幅 32mm，右：幅 42mm，上段：スケッチ，下段：カソード流路／触媒層の酸素分圧

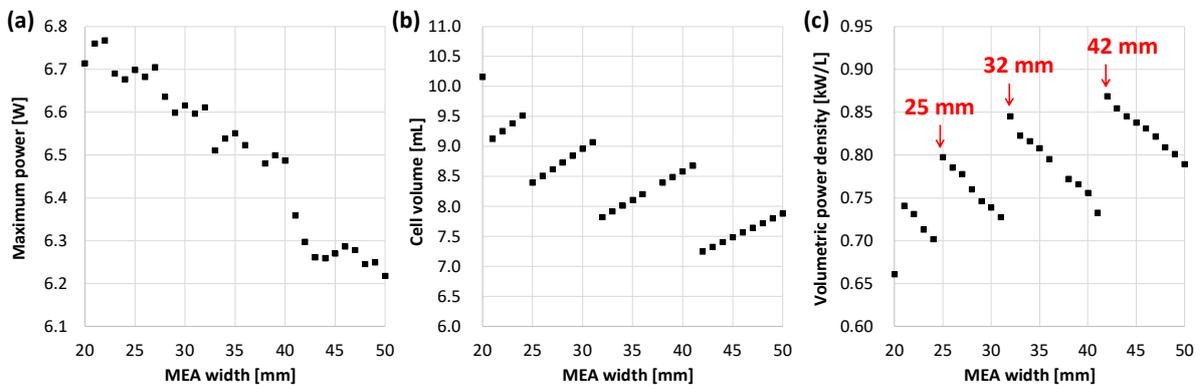


図 18 MEA 横幅を変化させながら 3D CAD 生成および発電計算した結果
(a) 最大出力[W], (b) セル 1 枚あたりの体積 [mL], (c) 最大出力密度 [kW/L]

最大出力密度が高くなる結果となった。

本例題では単純な形状を使用しているため、1形状の評価に掛かる時間はCAD生成に3分程度、発電計算に30分程度である。また、各発電計算は並列に実行できる。今回は単純化のため独立変数をMEA幅の1個としたが、複数の設計パラメーターを独立変数とし、実験計画法に基づいて各設計パラメーターを変化させながら発電性能を評価することができ、効率的に性能の良いセル形状を探索できる。

4.2 接続部の最適化

燃料電池において、アクティブエリア内の反応物や温度を均一にするため、アクティブエリアの流路は繰り返しのパターンを持つ比較的単純な形状となる。一方、マニホールドとアクティブエリアをつなぐ接続部は合流・分岐を含む複雑な流路となる。そのため、接続部の設計は難易度が高く、前述の可変スケッチを描画する際も接続部を各設計パラメーターに依存するように描画することが難しい。

そこで当社では、接続部の流路を自動的に生成し、最適化する機能を開発中である。具体的には、流路の自動生成とネットワークモデルによる圧損・流量分配の評価を繰り返し、遺伝的アルゴリズムによって評価結果が最良となるように最適化を行う。ここで、遺伝的アルゴリズムとは、生物の進化の過程を模した最適化アルゴリズムであり、多目的最適化問題を扱うことができる。

流路の自動生成においては、**図 20**に示すようにアノード流路およびカソード流路の接続部の範囲を指定し、その範囲内で流路を自動生成する。

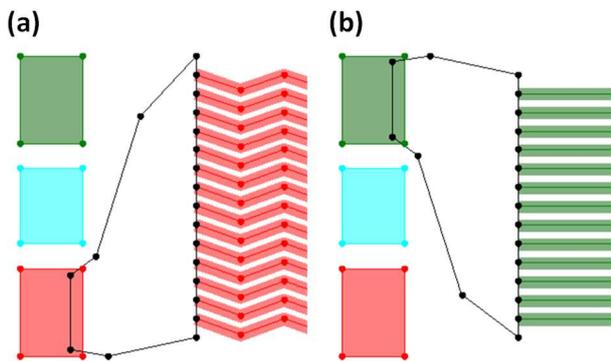


図 20 接続部の流路の最適化の範囲 (黒線)
(a)アノード流路, (b)カソード流路

このとき、アクティブエリア内のチャンネルに適切に接続すること、チャンネル同士の間隔が適度に離れていること、チャンネル同士が交差したり流路が行き

止まりになったりしないことなどの制約を満たすように、流路のネットワークを生成する。ノード(点)の数や合流・分岐位置、チャンネルの幅などは確率的に決定され、様々な流路を生成することができる。

多目的最適化においては、各流路の圧損や流量分配の不均一さなど、ユーザーが指定した複数の物理量を目的関数とする。ユーザーは、世代数や個体数と呼ばれるパラメーターにより、自動生成して流体計算を行う流路の数を制御でき、計算機の規模や計算時間に応じて現実的な最適化を実施できる。最適化処理が終了すると最適解の候補が複数得られるので、燃料電池の用途や目的に応じて各目的関数の重要度を決定したうえで、最適な設計を絞り込むことができる。

図 20に示した例題に対し、カソード流路と冷却水流路の流量分配が均一になるように二変数最適化を行って得たパレート解を**図 21**に示す。横軸/縦軸はカソード/冷却水流路の均一性を表す指標であり、1に近づくほど流量分配が均一となる。図中には5世代目と30世代目のパレート解を示しており、世代が進むことでパレートフロントが前進していることがわかる。ほとんどの個体において、カソード流路は均一性が0.9以上になっている。これはガス流路を自動生成する際、その流量分配が均一になるように考慮しているためである。一方、冷却水流路は生成された2つのガス流路の隙間として間接的に決まるため、その流量分配の均一性は個体によって大きくばらついてしまう。冷却水流路の流量均一化は今後の課題である。

図 22にパレート解に含まれる個体 α , β , γ の接続部流路形状と流量分配を示す。

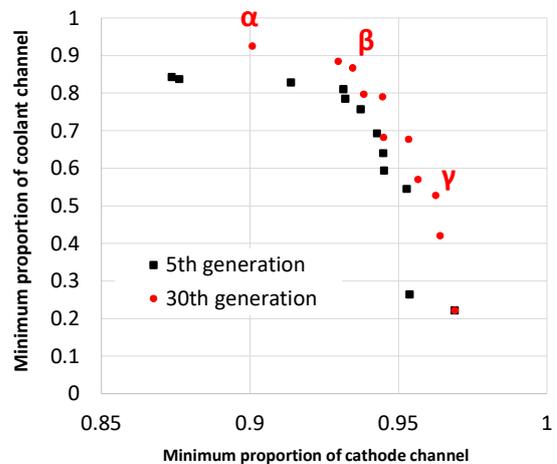


図 21 最適化で得た第5世代, 第30世代のパレート解 (カソード流路の均一性 vs 冷却水流路の均一性)

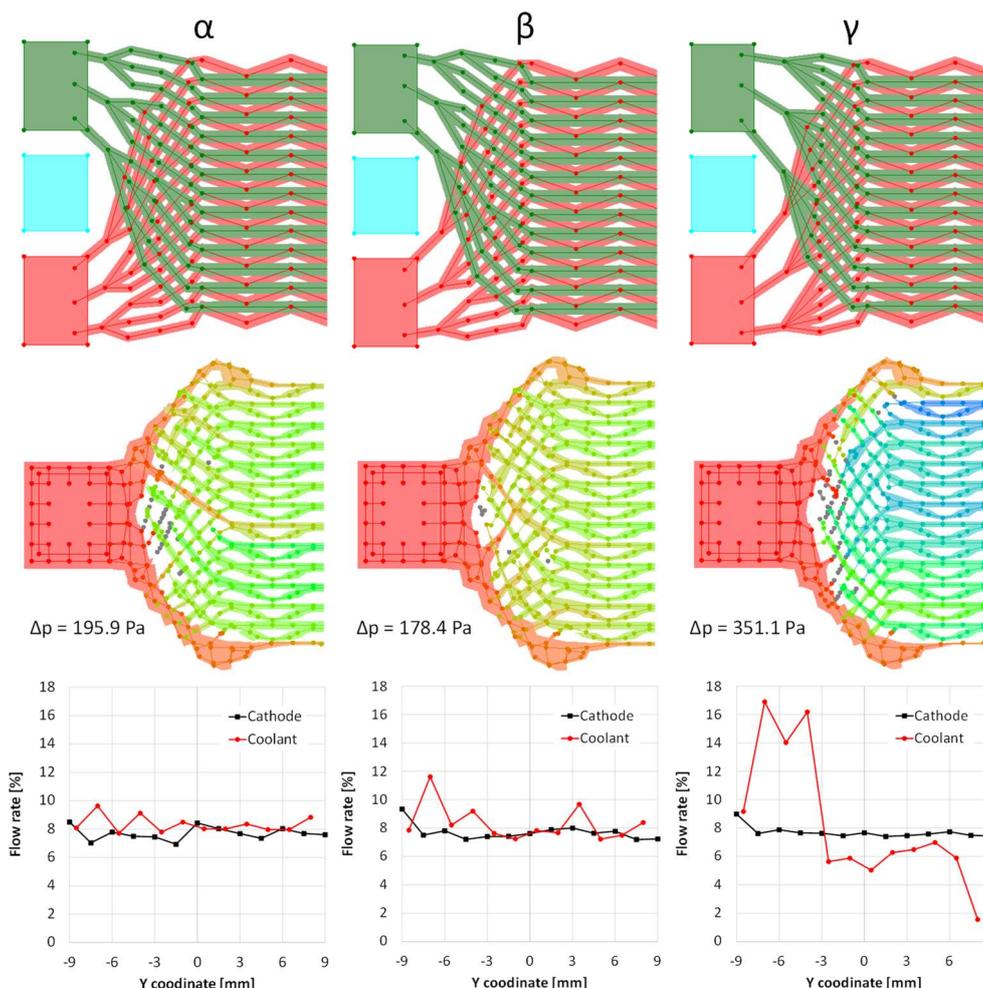


図 22 第 30 世代のパレート解に含まれる 3 タイプの流路スケッチ α , β , γ
 上段：ガス流路のスケッチ，中段：冷却水流路の圧力分布，下段：カソード/冷却水流路の流量分配

5 おわりに

本稿では燃料電池のセル設計支援ツール P-Stack Cell Sketcher の概要と活用事例を紹介した。新型 MIRAI のセル形状を模したスケッチをベースに、セル面内やセル積層方向の圧損・流量分配を評価しながらインタラクティブにスケッチを修正することで発電性能を向上させるセル設計が可能であることを示した。また、可変スケッチによる形状パラメータスタディーや接続部の流路最適化の事例を紹介し、燃料電池の用途や制約条件ごとに最適なセル形状を広範囲に探索できる可能性を示した。

燃料電池セルに限らず、水素製造の水電解セル、CO₂リサイクルで注目されている合成燃料製造の FT 合成リアクターなど電気化学反応を活用したデバイスはアクティブエリアの面積を効率的に大きくするため、平板状の触媒層とそこへ反応物を均一に流すための流路形状を有することが多い。そのため P-

Stack Cell Sketcher で開発した技術は、燃料電池以外の電気化学反応を活用したデバイスの設計にも応用できると考えている。

引用文献

- 1) T. Tsukamoto, T. Aoki, H. Kanesaka, T. Taniguchi, T. Takayama, H. Motegi, R. Takayama, S. Tanaka, K. Komiyama, M. Yoneda, "Three-dimensional numerical simulation of full-scale proton exchange membrane fuel cells at high current densities", *J. Power Sources* 488 (2021) 229412
- 2) 管路・ダクトの流体抵抗 (機械学会技術資料 1979 年)
- 3) 【新型 MIRAI】Fuel Cell システム紹介動画
https://youtu.be/_ipfuWeXHFE

P-Stack はみずほリサーチ&テクノロジーズ(株)の登録商標である。

MIRAI はトヨタ自動車(株)の商標である。