



岐阜工業高等専門学校 山本 高久

'11.06.18 OpenCAE beginner seminar

# OpenFOAMのカスタマイズ 事例：PEFCの性能解析



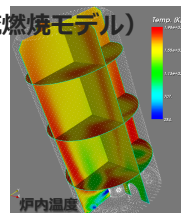
## CONTENTS OF THIS PRESENTATION

- 1 あらためて自己紹介を...
- 2 OpenFOAM de PEFC ANALYSIS
- 3 Tips
- 4 まとめ, 雑感

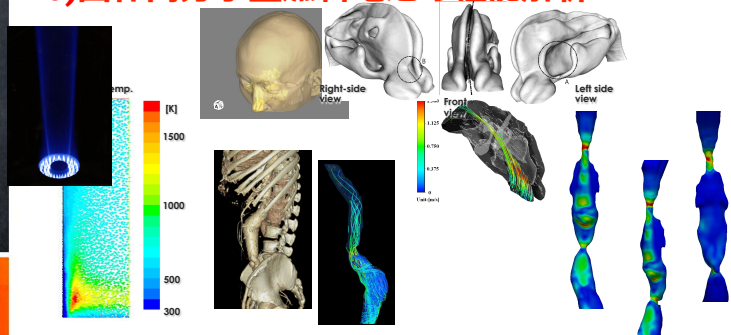


これまで行ってきたCFD解析例

- 1) ガスタービン燃焼器の燃焼解析 (乱流 + 乱流燃焼モデル)
- 2) 改質反応器の反応解析
- 3) 原子炉内の熱流動-核分裂反応の連成解析
- 4) めっき処理装置内の流動-電場の連成解析
- 5) 生体内の熱物質輸送現象解析

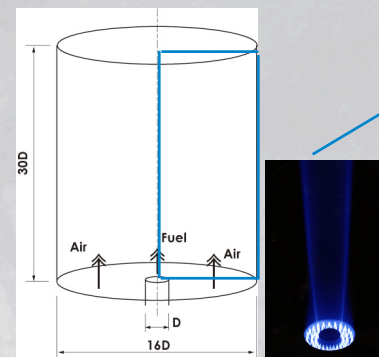
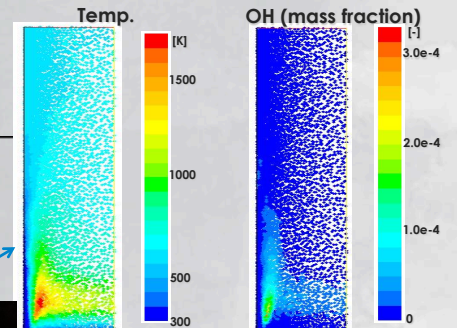


### 6) 固体高分子型燃料電池の性能解析



## H3-Flameの数値解析例 (FLUENT + original solver)

Fuel	H2:N2=50:50 (vol.)
co-flow	Air
Diameter of fuel nozzle, D	8mm
bulk velocity at fuel nozzle	34.5m/s
co-flow velocity	0.2m/s
Reynolds number	10000



モンテカルロ粒子の解析結果  
※ 解析にはFluent (ANSYS Co.)を用い、乱流モデルにはrealizable k-ε modelを適用

※ 新たな燃焼モデルを構築し、火炎の浮き上がりの予測精度向上を図る

乱流燃焼場において、化学種輸送および燃焼反応は非線形性が極めて強くなる。方程式を閉じることが出来ないため、通常、無限反応速度（混合即反応）をベースとしたモデルにて解析が行われている。

ここでは、乱流変動の影響を確率密度関数を用いて表すことにより有限反応速度にて解析を行う。

### Realizable k-epsilonモデル

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \epsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu_t + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} C_{3\epsilon} G_b + S_\epsilon$$

### Composition PDF Transport モデル

一点一時刻の結合確率密度関数(Probability Density Function)を解くことにより、非線形性を示す化学反応項を閉じる（完結問題）ことができる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho P) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i P) + \frac{\partial}{\partial \psi_k}(\rho S_k P) = - \frac{\partial}{\partial x_j}[\rho \langle u_j'' | \psi \rangle P] + \frac{\partial}{\partial \psi_k} \left[ \rho \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{i,k}}{\partial x_i} | \psi \right\rangle P \right]$$

非定常項
対流項
化学反応項
乱流に起因する対流項
分子混合・拡散項

→ 勾配拡散モデル
→ 修正カルモデル

➡ モンテカルロ法により、上記の方程式を解く。  
乱流場の浮き上がり火炎などに適用できないかを検討中

## OpenFOAM de PEFC ANALYSIS



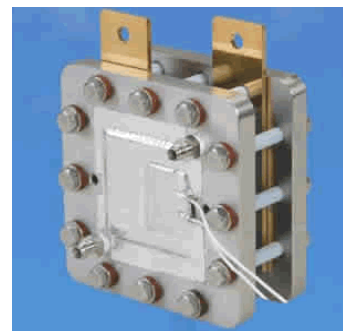
### まえおき ...

本日、お話しさせて頂く内容は、  
OpenFOAM ver. 1.4 (2007) のころに作成したPEFCモデル"ipemSimpleFoam.C"についてです。

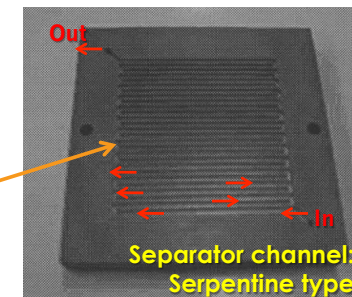
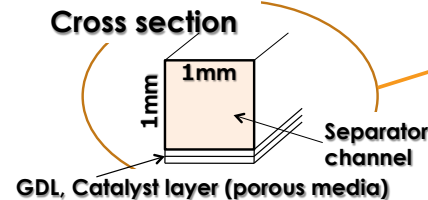
従って、やり方が古い点多々あるとおもいます。

その点、予めご了承ください。

### 固体高分子型燃料電池の構造



- Area of Electrode: 50mm×50mm
- Electrolyte: Nafion112
- Pt(anode): 0.51mg/cm<sup>2</sup>
- Pt(cathode): 0.52mg/cm<sup>2</sup>

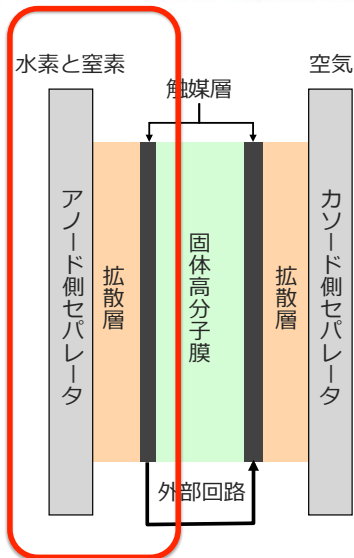


## PEFCの概略図

### □ 仮定

- ガス流路と拡散層の境界のガス濃度は供給ガス濃度に等しい
- 水分はすべて蒸気で存在する
- PEFCセル構成部品の温度はすべて等しい
- PEFCセル温度とガス温度は等しい
- 固体高分子膜のイオン伝導度はアノードの水の活量で決まる

解析系



## PEFCの解析を行う際の課題

PEFCの解析においてOFに組み込むべきモデルは大きく以下の2つ:

- 電気化学反応モデル
  - 過電圧 (抵抗のこと)
  - 電流密度
  - 水素の消費
- 触媒層, ガス拡散層 (両者とも多孔質体)

## PEFC性能解析モデルの概要

### ● CFD MODEL

- |                               |                                     |
|-------------------------------|-------------------------------------|
| □ Governing Eqs.:             | ■ Transport eq. of chemical species |
| ■ Continuity eq.              |                                     |
| ■ Momentum eq.                | □ Porous Media:                     |
| ■ State equation of ideal gas | ■ Darcy's law                       |

+

### ● PEFC MODEL

- Equation of current density
- Hydrogen consumption rate calculated by current density

## PEFC性能解析モデルの流動場支配方程式

### □ Continuity eq.:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = S_c$$

### □ Momentum eq.:

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = -\nabla p + (\mu \nabla U) + S_u$$

Pressure drop in GDL (porous media)

### □ Transport eq. of chemical species:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (U Y_i) = \nabla \cdot (D_i^{eff} \nabla Y_i) + S_{Y_i}$$

Hydrogen consumption (catalyst layer)

### □ Pressure-velocity coupling -> SIMPLE scheme

### □ Discretization of governing eqs.:

Diffusion terms -> 2<sup>nd</sup> order central

Convection terms -> QUICK, Time terms -> Implicit

## とりあえず、どうしよう...

- reactingFoamをベースにする！  
 化学種の輸送解析モデル（化学反応を含む）  
 乱流  
 温度計算
- 層流
  - 化学反応は止める。輸送部分のみ流用。  
今回考える化学種は水素と窒素のみ。
  - PEFCの運転温度70℃一定と仮定。  
温度計算を止める。  
電気化学反応の計算の時のみ温度を使用。
  - 水は十分に加熱されており、  
PEFC全体で十分に供給されていると仮定。

## ちょっとその前に... OpenFOAM解析の妥当性の検証 (1)

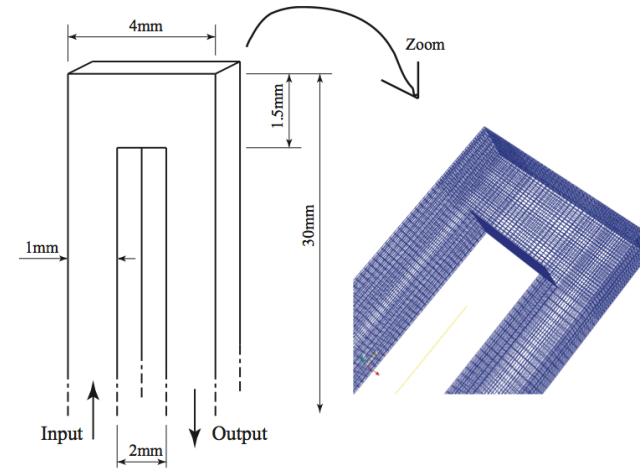


図 C.1: U字管ダクトの概略図

## OpenFOAM解析の妥当性の検証 (2)

対流項にはTVDスキーム, 拡散項には中心差分, 非定常項には完全陰解法を適用。

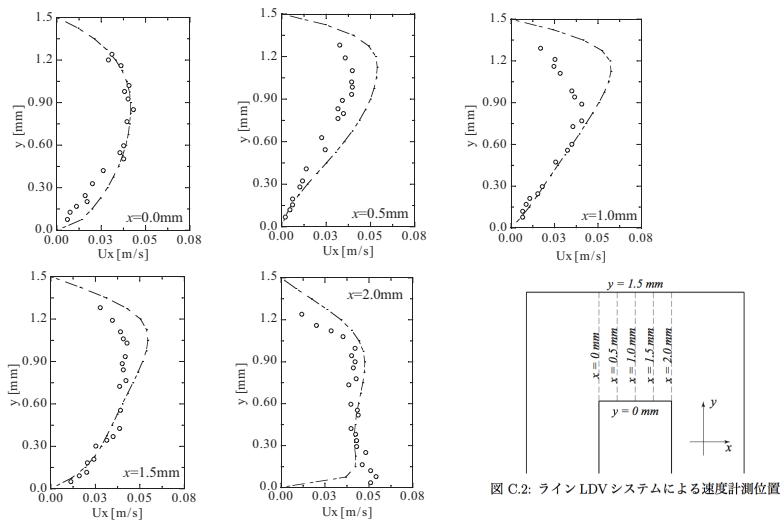


図 C.2: ラインLDVシステムによる速度計測位置

## ipemSimpleFoamの構成

```

-rwxr-xr-x 1 taka staff 247 5 18 15:28 Cleaner
-rwxr-xr-x 4 taka staff 204 6 14 18:21 Make
-rw-r--r-- 1 taka staff 2930 5 18 15:28 PEM.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 6049 5 18 15:28 PEMI.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 110 5 18 15:28 ReadMe.txt
-rw-r--r-- 1 taka staff 1157 5 18 15:28 Specie.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 1540 5 18 15:28 SpecieI.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 200 6 16 20:17 UEqn.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 1061 6 16 20:18 YEqn.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 52800 5 18 15:28 blockMeshDict
-rw-r--r-- 1 taka staff 157 6 17 15:20 calcMole.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 1452 5 18 15:28 calcPEM.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 1875 5 18 15:28 compressibleCreatePhi.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 209 5 18 15:28 constants.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 2637 6 17 14:14 createFields.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 587 5 18 15:28 hEqn.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 3876 6 16 20:20 ipemSimpleFlow.C
-rw-r--r-- 1 taka staff 216 6 14 18:19 ipemSimpleFlow.dep
-rwxr-xr-x 1 taka staff 7942 5 18 15:28 massCalc.ods
-rwxr-xr-x 1 taka staff 10809 5 18 15:28 mesher.rb
-rwxr-xr-x 1 taka staff 10869 5 18 15:28 mesher.rb.org
-rw-r--r-- 1 taka staff 996 6 16 20:18 oEqn.H
-rw-r--r-- 1 taka staff 3035 5 18 15:28 readPEMProperties.H
-rwxr-xr-x 1 taka staff 526 5 18 15:28 run.sh
-rwxr-xr-x 8 taka staff 272 6 16 10:14 serpentine
greenApple:ipemSimpleFlow taka$ █
    
```