直接メタノール形燃料電池内の流動現象シミュレーション

高木洋平

静岡大学工学部物質工学科

1. はじめに

石油資源に替わるクリーンなエネルギーの研究開発が活発に進められている。そのうち、燃 料電池は次世代のエネルギー供給システムとして注目を浴びている。燃料電池は電気化学反応 から電力を取り出す電池であり、電解質の種類によって、固体高分子膜形燃料電池(Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell, PEMFC), りん酸形燃料電池 (Phosphoric Acid Fuel Cell, PAFC), 溶融炭酸塩形燃料電池(Molten Carbonate Fuel Cell, MCFC),固体酸化物形燃料電池(Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)の4種類に大別することができる。各燃料電池の性質について表1にまとめ て示す。本研究ではこの4種類のうち、PEMFC に着目し、特に燃料としてメタノールを用い る直接メタノール形燃料電池(Direct Methanol Fuel Cell, DMFC)を対象としている。表1に示し たとおり、PEMFC は動作温度が低く、小型化が容易であるため、携帯機器などのモバイル電 源や家庭用供給電源,およびオートバイや自動車への利用が期待されている。燃料自動車へ搭 載される通常の PEMFC では燃料に水素を用いているが、水素は常温では気体であり、燃料ガ スタンクを搭載する必要がある。一方, DMFC では燃料に液体のメタノールを用いているため 大きな燃料タンクが不必要であり、より一層の小型化が可能である。すなわち、燃料にメタノ ールを用いた場合、水素に比べてエネルギー密度が大きく向上することが利点の一つである。 また、水素に比べて爆発等の危険性が低減する。しかしながら、PEMFC および DMFC のエネ ルギー効率は他の燃料電池システムやリチウム電池よりも低く、実用化のためには一層の研 究・技術開発が必要である。

燃料電池に関する研究は広く活発に行われており,PEMFC では電気化学反応が起こる電解 質膜(イオン交換膜)の性能を向上させるために,その材料に関する研究が多く行われている。 また,反応生成物が電池性能に与える影響や燃料電池の操作条件及び全体構造に関する研究も 行われている。本研究では燃料電池内の流動状態に着目し,燃料・反応物質の移動現象を解明 するための数値シミュレーションを行った。特に,電解質膜上での化学反応によって液体・気 体が混在する二相流の状態となるため,その効果について詳細な検討を行った。

	固体高分子膜形	りん酸形	溶融炭酸塩形	固体酸化物形		
	(PEMFC)	(PAFC)	(MCFC)	(SOFC)		
電解質	高分子膜	りん酸	炭酸塩	セラミックス		
動作温度	80 − 100°C	190 − 200°C	600 – 700°C	800 − 1000°C		
効率	30 - 40%	40 - 45%	50 - 65%	50 - 70%		
特徴	小型化,低温動作	実用的	高効率,大容量	高効率		
適用	家庭用,自動車	建物電源	発電所	発電所,業務用		

表1 燃料電池の分類とその特徴⁽¹⁾

2. DMFC の仕組みと問題点

サーペンタイン流路(蛇行流路)と呼ばれる DMFC の全体構成を図1に,流路1本のみを拡

大したものを図2に示す。ここで、流れ方向をx、横断方向(スパン方向)をy、垂直方向をzとしている。DMFCでは中央にイオンを交換する高分子電解質膜が存在し、その表面上には白金などの触媒金属が担持された触媒反応層が形成されている。そしてその上下両側にアノード極、カソード極があり、燃料および空気が通過する流路と触媒反応層の間にはカーボン繊維から成る多孔質のガス拡散層(Gas Diffusion Layer, GDL)が存在している。図1に示したように電池セルは折曲がったサーペンタイン流路を成しており、実機燃料電池ではさらにこの形状を積み重ねてセルスタックとすることによって出力を高めている。

各電極において起こる化学反応は以下のようになる。

アノード側:

$$CH_3OH + H_2O \rightarrow CO_2 + 6H^+ + 6e^-$$
(1)

(2)

カソード側:

 $O_2 + 4H^+ \rightarrow 2H_2O - 4e^-$

アノード側では燃料として供給されたメタノールが水と反応し、二酸化炭素と水素イオン(プ ロトン)が生成される。そして、発生した水素イオンが電解質膜を通過し、カソード側で空気 中の酸素と反応することによって水を生成する。この電極反応を活性化させることができれば より多くの電気エネルギーを取り出せるが、反応生成物である二酸化炭素および水の存在も多 くなる。このとき、アノード側流路では液体のメタノールと気体の二酸化炭素、カソード側で は気体の酸素と液体の水が混在し、いわゆる二相流の状態となっている。このような気液二相 流の存在が電池性能に及ぼす影響を調べるために、混合モデルを用いた数値シミュレーション を行った。



3. 数值計算手法

3.1 基礎方程式

燃料電池内の移動現象は電解質内のミクロなイオン交換から流路でのマクロな流動を含む マルチスケールな現象であり、セル内全体をモデル化せずに数値的に解くことは現実的ではな い。本解析では触媒反応層上での電気化学反応とイオン交換をモデル化^(2,3)して境界条件として 与え、アノード・カソードそれぞれにおいてガス拡散層および流路での流動・物質移動を数値 的に解いた。また、気液二相流の計算には、気相と液相の分率を用いて計算負荷を抑える混合 モデルを用いた。まずはじめに、基礎方程式を導出するに当たって用いた仮定を以下に述べる。

1. 燃料電池セル内を通過する流体は非圧縮性流体であり、時間的に変動しない定常流れで

ある。

- 2. 触媒反応層の厚さは考慮せず,電気化学反応はガス拡散層と触媒反応層の境界において 起こる。
- 3. セル電圧は一定である。
- 4. セル周囲温度は一定であり、燃料電池は等温条件で作動している。
- 5. 電解質膜をクロスオーバーしたメタノールはカソード側において酸素と完全に反応する。

基礎方程式は定常状態を仮定した連続式,Navier-Stokes 方程式,拡散方程式であり,以下に 具体的な式を示す。まず,連続式は以下のようになる。

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = S_{mi} \tag{3}$$

ここで、
$$\rho$$
は密度、 \mathbf{u} は速度、 S_{mi} は各物質の消費生成量であり、アノード側では、
 $S_{mi} = S_{MeOH} + S_{H_2O} + S_{CO_2}$
(4)

カソード側では,

$$S_{mi} = S_{O_2} + S_{H_2O}$$
(5)

である。添字 MeOH, H₂O, CO₂はそれぞれメタノール,水,二酸化炭素を表している。 次に、Navier-Stokes 式は定常計算であるため、時間微分項を除いた以下の式となる。

$$\nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^{T}\right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu \nabla \mathbf{u}\right) + \mathbf{S}_{p}$$
⁽⁶⁾

ここで、pは圧力、 μ は粘性係数、 S_p はガス拡散層での多孔質効果を表すダルシーの法則項⁽⁴⁾ であり、流路においては、

$$\mathbf{S}_{p} = \mathbf{0} \tag{7}$$

ガス拡散層では,

$$\mathbf{S}_{p} = -\frac{\mu}{\beta}\mathbf{u}$$
(8)

としている。ここで, β は多孔質の透過率である。

拡散方程式はアノード・カソード側それぞれにおいて異なる燃料・生成物を考える。アノー ド側においては、メタノールは全て液体であるとして、

$$\nabla \cdot \left(\rho_l \omega_{MeOH} \mathbf{u}\right) = \nabla \cdot \left(\rho_l s_l D_{MeOH} \nabla \omega_{MeOH}\right) + S_{MeOH}$$
⁽⁹⁾

となり、二酸化炭素は気相・液相状態をそれぞれ考えて、

$$\nabla \cdot \left(\rho_g \omega_{CO_2,g} \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \left(\rho_g s_g D_{CO_2,g} \nabla \omega_{CO_2,g} \right) + S_{CO_2,g}$$
(10)

$$\nabla \cdot \left(\rho_{l}\omega_{CO_{2},l}\mathbf{u}\right) = \nabla \cdot \left(\rho_{l}s_{l}D_{CO_{2},l}\nabla\omega_{CO_{2},l}\right) + S_{CO_{2},l}$$
(11)

となる。ここで、 ω_i は質量分率、 s_i は飽和度、 D_i は拡散係数を示しており、添字のl、gはそれ ぞれ液相、気相を示している。カソード側の拡散方程式はアノード側と同様にして考え、酸素 は全て気体であるとし、

$$\nabla \cdot \left(\rho_g \omega_{O_2} \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \left(\rho_g s_g D_{O_2} \nabla \omega_{O_2} \right) + S_{O_2}$$
(12)

となる。水は気体の水蒸気と液体をそれぞれ考えて,

$$\nabla \cdot \left(\rho_g \omega_{H_2 O, g} \mathbf{u}\right) = \nabla \cdot \left(\rho_g s_g D_{H_2 O, g} \nabla \omega_{H_2 O, g}\right) + S_{H_2 O, g}$$
(13)

$$\nabla \cdot \left(\rho_{l}\omega_{H_{2}O,l}\mathbf{u}\right) = \nabla \cdot \left(\rho_{l}s_{l}D_{H_{2}O,l}\nabla\omega_{H_{2}O,l}\right) + S_{H_{2}O,l}$$
(14)

となる。これらの拡散方程式(9)-(14)の右辺に現れる生成項 *S_i*はガス拡散層と触媒反応層の境界において以下のように与えられる⁽³⁾。

$$S_{MeOH} = -\frac{1}{6F} M_{MeOH} A_{cv}$$
⁽¹⁵⁾

$$S_{CO_2} = \frac{I}{6F} M_{CO_2} A_{cv} \tag{16}$$

$$S_{O_2} = \frac{(I+I_p)}{4F} M_{O_2} A_{cv}$$
(17)

$$S_{H_2O} = \frac{(I+I_p)}{2F} M_{H_2O} A_{cv} - \frac{I_p}{6F} M_{H_2O} A_{cv} + \rho U_m$$
(18)

ここで、Iは局所電流密度、 I_p はクロスオーバーによって消費される電流密度、 M_i は分子量、Fはファラデー定数、 A_{cv} はコントロールボリュームの比表面積、 U_m は膜内の水速度である。

本解析では気液二相流を解くために混合モデルを用いている。このモデルでは、式(9)-(14) に含まれる液相・気相の飽和度 $s_l \cdot s_g$ より混合密度、混合粘度を以下のようにして求める。

$$\rho = \rho_l s_l + \rho_g s_g \tag{19}$$

$$\mu = \frac{\rho}{\left(s_l^3 / v_l + s_g^3 / v_g\right)} \tag{20}$$

ここで、v_iは動粘性係数である。これらの混合物性値を連続の式(3)および Navier-Stokes 方程式 (6)に代入して、気液二相流を混合流れとして取り扱う。また、ガス拡散層などの多孔質内で重 要となる毛管圧力を導入する。

$$P_c(s_g) = \sigma \cos \theta_c \left(\frac{\varepsilon}{\beta}\right) \left[1.417s_g - 2.120s_g^2 + 1.263s_g^3\right]$$
(21)

ここで、 σ は表面張力、 θ_c は接触角、 ϵ は空隙率である。さらに、気液相互作用を考慮するために、液相・気相の相対流動性を以下のように定義する。

$$\xi_{l}(s_{l}) = \frac{s_{l}^{3} / v_{l}}{\left(s_{l}^{3} / v_{l}\right) + \left(s_{g}^{3} / v_{g}\right)}$$
(22)

$$\xi_g(s_l) = 1 - \xi_l(s_l) \tag{23}$$

これらの相対流動性を用いて、液相・気相の相速度が以下のように求まる。

$$\mathbf{u}_{l} = \frac{\left(\mathbf{J}_{l} + \boldsymbol{\xi}_{l} \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\rho} \mathbf{u}\right)}{\boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\rho}_{l}}$$
(24)

$$\mathbf{u}_{g} = \frac{\left(-\mathbf{J}_{l} + \boldsymbol{\xi}_{g} \boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\rho} \mathbf{u}\right)}{\boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\rho}_{g}}$$
(25)

ここで、J₁は毛管圧力式(21)を用いて以下のように定義される。

$$\mathbf{J}_{l} = \frac{\xi_{l}\xi_{g}\beta}{v} \Big[\nabla P_{c} + (\rho_{l} - \rho_{g})\mathbf{g} \Big]$$
⁽²⁵⁾

これらの相速度(24)・(25)を用いたとき,前述の拡散方程式の右辺項にその効果が付け加わる。 例えば,式(11)は以下のように修正され,他の方程式も同様に修正される。

$$\nabla \cdot \left(\rho_{l}\omega_{CO_{2},l}\mathbf{u}_{l}\right) = \nabla \cdot \left(\rho_{l}s_{l}D_{CO_{2},l}\nabla\omega_{CO_{2},l}\right) - \nabla \cdot \left(\rho_{g}\mathbf{u}_{g}\right) + S_{CO_{2},l}$$
(11')

また、Navier-Stokes 式(6)の右辺にも同様な修正が加わる。

3.2 一本流路モデルの解析条件

本報告では,基礎段階として行った一本流路モデルの解析条件について示す。用いたセル形 状は表2に示すとおりである。また,解析に用いた物性値および操作条件について表3に示す。

<u>我</u> 2		
Property		Value
Cell length		6.5×10^{-2} m
Cell width		1.2×10^{-3} m
Channel width		1.0×10^{-3} m
GDL thickness		1.4×10^{-4} m
Membrane thickne	ess	1.8×10^{-4} m

表2 セル形状 (一本流路モデル)

Property	Value
Temperature	343 K
Pressure	1.013×10 ⁵ Pa
Methanol concentration	1 M
Mole fraction of O_2/N_2	0.12/0.79
Diffusion coefficient of methanol in liquid	$10^{-5.4163-999.778/T} \text{ m}^2/\text{s}$
Electro-osmotic drag coefficient of water	2.5
Proton conductivity of membrane	0.123 S/cm
Thermodynamic potential of oxygen reduction	1.24 V
Thermodynamic potential of methanol reduction	0.03 V
Cathode transfer coefficient	1.0
Anode transfer coefficient	0.5
Reference exchange current density of anode	350 A/m^2
Reference exchange current density of cathode	0.07 A/m^2
Reference oxygen concentration of cahode	0.23 kg/kg
Porosity of GDL	0.5
Porosity of membrane	0.28
Permeability of GDL	$1.0 \times 10^{-11} \text{ m}^2$
Permeability of membrane	$7.18 \times 10^{-21} \text{ m}^2$

表3 物性値および操作条件(一本流路モデル)^(2,3)

3.3 計算アルゴリズム

上述した基礎方程式を有限体積法によって離散化し,SIMPLE法⁽⁵⁾によって収束解を求めた。 反復計算は速度場および濃度場の残差が10⁻⁶より小さくなるまで行い,収束状態では系全体の 物質収支の誤差が0.01%以下になっている。計算格子は直交矩形格子とし,ガス拡散層に格子 をよせる不等間隔格子を用いている。計算格子点数は流れ方向に75,スパン方向に6,各層に 垂直な方向に27を最も粗いケースとし,各方向に格子点を倍増させることによって解の格子依 存性を検証した。格子点数を増加させたケースでは計算時間が増大するため,領域分割法を用 いて HA8000 クラスタシステムで並列計算を行った。なお、サーペンタイン流路を用いた解析 を行う場合,格子点数が大幅に増加するため、マルチグリッド法を導入した並列計算を実施し たが、本報告ではその計算結果については割愛する。

3. 4 DMFC 性能に影響を及ぼす因子の調査

本研究では DMFC 性能に及ぼす気液二相流の影響を調査するために、まずアノード側では 液体のメタノール、カソード側では気体空気のみを考慮した単相流計算を行った。そして、上 述した基礎方程式を用いて、アノード側での二酸化炭素の発生、アノード側での気相・液相の 相互作用、およびカソードでの液体水の発生を考慮した解析をそれぞれ行った。各解析につい てまとめたものを表4に示す。なお、基礎方程式の説明において、二酸化炭素および水につい て気相・液相それぞれの方程式を導出したが、本解析では単純化のためにアノード側の二酸化 炭素は気相のみ、カソード側の水は液相のみとして解析を行った。

	CO ₂ の発生	H ₂ Oの発生	気液相互作用			
単相流計算 (Case 1)	×	×	×			
Case 2	0	×	Х			
Case 3	0	×	0			
Case 4	0	0	0			

表4 セル性能に影響を及ぼす気液二相流の因子と計算条件

4. 計算結果

4.1 DMFC 性能に及ぼすアノード極における二酸化炭素の影響

アノード側では液体のメタノールが反応して気体の二酸化炭素が発生し、気相と液相が混在 する状態になる。図3はCase2の計算結果より得られたスパン方向に垂直な断面(x-z平面)にお ける気相(二酸化炭素)分率をアノード側のGDLに対して示している。セル電圧は0.6 V, 0.4 V, 0.3 Vとした。ここで、図中の下端部境界は触媒反応層表面、上端部境界は流路側に対応してい る。気相の分布は反応が起こる触媒反応層表面で多く、流路に向かうにつれて減少している。



図 3 アノード側 GDL における気相分率(Case 2).



図 4 アノード側 GDL におけるメタノール質量分率: (a)単相流(Case 1), (b) Case 2.



図5 二酸化炭素の発生による I-V 曲線の変化

また、セル電圧が低くなるにつれて反応が活性化されるため、気相の存在する割合も対応して 増加し、0.6 V では触媒反応層表面では気相割合が 30%に対して 0.3 V では 70%まで上昇し、0.6 V の場合に比べて約 2.3 倍の気相が存在している。

図3と同様な x-z 断面におけるメタノールの質量分率を, Case 1, 2 の結果から得られたもの を図4に示す。触媒反応層表面では反応によりメタノールが消費されるため, 流路側に比べて 質量分率が低くなっていることがわかる。また, 前述したように 0.3 V において触媒反応層表 面に気相が約70%存在しており, そのため触媒反応層に供給されるメタノール量が二酸化炭素 の発生を考慮しない単相流計算(Case 1)の場合に比べ触媒反応層表面で約70%減少している。よって、触媒層に供給されたメタノールは反応によって消失し、メタノールの枯渇が起きていることがわかる。

図5に燃料電池の出力特性を表す指標の一つである電流密度とセル電圧の関係を表す I-V曲線を示す。二酸化炭素の発生による効果を調べるために単相流計算(Case 1)と Case 2 の計算結果,および Ge and Liu による実験結果⁽⁶⁾を示している。二酸化炭素の発生を考慮しない単相流計算の場合,気相が存在しないために安定的にメタノールが触媒反応層に供給され,低電圧時においても電流密度の値は増加する。一方,二酸化炭素の発生を考慮した Case 2 では前述したように 0.3 V 以下でメタノールの枯渇が起こり,得られる電流密度が増加しない限界電流密度が現れている。この計算結果と実験結果を比較すると,二酸化炭素の発生が増加する低電圧状態において両者のずれが大きくなっていることがわかる。これは Case 2 の計算では気相・液相の相互作用を無視しているためだと考えられる。しかし,二酸化炭素の発生を考慮することで、実験値と同様に高電流密度域における電圧降下の傾向をよく表している。

4.2 アノード極における気液相互作用の影響

ガス拡散層はカーボン繊維から成る多孔質媒体であるため、そのような多孔質を通り過ぎる 流れでは毛管圧力による影響が重要となってくる。DMFC内ではセル電圧が低くなるにつれて 反応が活性化されるため、アノード側では発生した二酸化炭素(気相)の割合が増加してくる。 このとき、毛管現象及び相対流動性による気相・液相の相互作用が強くなり、その効果は図 6 に示したアノード側 GDL 内気相分率の Case 2,3 における結果から明瞭である。また、図 6(b) の 0.3V の結果に注目すると、流路出口の気相分率が流路入口に比べて増加していることがわか る。これは気相が液相の流動影響を受けるためだと考えられる。すなわち、毛管圧力によって メタノールの触媒反応層表面への供給が促進され、それに伴う相対流動性の影響により、気相 が流路側に排出されると考えることができる。この気相の流路出口方向への排出効果によって 各セル電圧において GDL 内における気相分率が減少している。また、図 5 に示した I-V 曲線で 限界電流密度が発生する 0.3 V では、気液相互作用を考慮することにより気相の割合が 70%か



図 6 アノード側 GDL における気相分率: (a) Case 2, (b) Case 3.



図 7 アノード側 GDL 内でのメタノール質量分率: (a) Case 2, (b) Case 3



図 8 I-V 曲線での気液相互作用の効果

ら50%まで減少している。

アノード側 GDL 内でのメタノール質量分率を Case 2,3 に対して図7に示す。図6と同様 に気液相互作用の効果が現れ、メタノールの存在が増加していることがわかる。これは毛管現 象により、メタノールが触媒反応層表面により供給されることで GDL 内でのメタノール量が 増加したためだと考えられる。また、セル電圧が下がるにつれてメタノール分布の違いが顕著 となることがわかる。0.3 V において気液相互作用を考慮すると、Case 2 において見られたメタ ノールの枯渇が発生していないことが図7(b)よりわかる。また、流路出口付近の触媒反応層表 面において見られるメタノールの局所的減少は図6に示したように,流路出口側において徐々 に気相の存在が多くなっていることが原因であると考えられる。

図8に気液相互作用の有無を比較した I-V 曲線を示す。毛管現象による気液相互作用を導入 することによって限界電流密度の上昇が見られ、その分布は実験結果と良好に一致している。 この結果からも毛管現象によってメタノールの触媒反応層表面への供給が促進され、相対流動 性により二酸化炭素の流路への排出が向上することによってセル性能が向上していることがわ かる。

4.3 カソード極における液体の水の影響

カソード側での液体の水の発生およびそのときの気液相互作用を考慮した Case 4 での I-V 曲線 を Case 3,および実験結果とともに図 9 に示す。低電圧領域でわずかな違いが見られるが,全 体的には液体の水の発生はセル性能を著しく低下させない結果となった。液体の水の発生度合 いを調べるために,各電流密度における触媒反応層表面における水分(液相)の平均質量分率を 図 10 に示す。電流密度が増加するにつれて反応が活性化し,生成する水の質量も増加するが, その生成量の大きさに注目すると,10⁻³のオーダーで非常に小さく,液体の水は触媒反応層表 面にほとんど存在していないといえる。本解析で用いた一本流路モデルでは流路長さが 6.5 cm と短く,反応により生成した液体の水はセル内に蓄積することなく流路出口より排出されたた め,質量分率が微小になったと考えられる。しかしながら,セル形状や操作条件が異なる場合 液体の水の質量分率は約 10%近くまでになるとの解析結果^(7,8,9)も示されており,カソード極に おける液体の水が DMFC の性能に及ぼす影響についてはさらなる解析,特に実機形状での検証 が必要である。



図9カソード側での液体の水の発生が I-V 曲線に及ぼす効果



図 10 電流密度と触媒反応層表面での水質量分率の関係(Case 4).

5 DMFC 内流動シミュレーションのまとめ

気液二相流効果を考慮した直接メタノール形燃料電池内の流動シミュレーションを一本流 路モデルに対して行い,以下の結論を得た。

- 1. アノード側で発生した気体の二酸化炭素は触媒反応層表面上に多く存在し、反応活性時にはその二酸化炭素の存在にそってメタノールの供給が阻害され、限界電流密度が現れる。
- 2. ガス拡散層の多孔質形状による毛管現象によってメタノールの触媒反応層への供給が 促進され,限界電流密度の上昇すなわちセル性能の向上が起こる。
- 3. 流路長さが短い一本流路においてはカソード側での液体の水の発生は微小であり、セル 性能に影響を与えない。

本解析で行った数値シミュレーションを実機形状に対して拡張し,最適なセル形状の決定お よび操作条件に対する定量的な性能評価が今後の研究課題である。また,燃料電池内の移動現 象はイオンスケールから流体スケールまでに及ぶマルチスケールフィジクスであり,従来の流 体解析に分子動力学的手法や格子ボルツマン法などの数値計算手法を組み合わせたハイブリッ ドシミュレーションの適用が期待される。

6 情報基盤センターへの要望・意見

本研究課題では若手利用(試行)制度のもとで HA8000 クラスタシステムを活用させていた だいたが,非常に利用しやすいシステムであり,研究が大いにはかどったと感じている。数値 シミュレーションコードは以前に PC クラスタ上で開発したものをベースとしているため今回 は HA8000 クラスタの利用を選択したが,大規模な流体解析ではベクトル型スーパーコンピュー タの利用の方が適している場合も多い。ユーザのアプリケーションおよび分野によって、ベクトル並列型のSR11000システムとスカラー超並列型のHA8000クラスタシステムを選択できる東京大学情報基盤センターの存在は非常に貴重である。今後も両システムの維持・発展を期待したい。

7 謝辞

本研究課題で行った数値シミュレーションは、東京大学情報基盤センターの平成 21 年度ス ーパーコンピューター若手利用者推薦(試行)のもとで HA8000 を利用して行われた。東京大学 情報基盤センターおよび関係各位に謝意を表す次第である。 また、本研究課題に関連して、大 阪大学大学院基礎工学研究科岡野泰則教授より貴重な意見をいただいた。ここに記して謝意を 表す。

参考文献

(1) 田辺茂, 燃料電池の基礎マスター, 電気書院, 2009

- (2) Wang, Z. H. and Wang, Z. Y., "Mathematical modeling of liquid-feed direct methanol fuel cells", J. Electrochem. Soc., 150, A508-A519, 2003.
- (3) Ge, J. and Liu, H., "A three-dimensional two-phase flow model for liquid-fed direct methanol fuel cell", J. Power Sources, 163, pp.907-915, 2007.
- (4) Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., Transport Phenomena, John Wiley & Sons, 1960.
- (5) スハス V. パタンカー,コンピュータによる熱移動と流れの数値解析,森北出版, 1985.
- (6) Ge, J. Liu, H., "Experimental studies of a direct methanol fuel cell", J. Power Sources, 142, pp.56-69 (2005).
- (7) Chen, R., Zhao, T. S., Yang, W. W. and Xu, C., "Two dimensional two-phase thermal model for passive direct methanol fuel cels", J. Power Sources, 175, pp.276-287, 2008.
- (8) Liu, W. and Wang, C. Y., "Modeling water transport in liquid feed direct methanol fuel cells", J. Power Sources, 164, pp.189-195, 2007.
- (9) Liu, W. and Wang, C. Y., "Three-dimensional simulation of liquid feed direct methanol fuel cells", J. Electrochem. Soc., 154, B352-B361, 2007.