

研究成果展開事業 研究成果最適展開支援プログラム
FS ステージ シーズ顕在化タイプ 事後評価報告書

研究開発課題名	: 高分子形燃料電池内の物質移動シミュレーション・ソフトウェアの開発
プロジェクトリーダー	: (株)数値フローデザイン
所属機関	: (株)数値フローデザイン
研究責任者	: 大島伸行(北海道大学)

1. 研究開発の目的

燃料電池内の過渡的な流動・物質拡散現象の高精度・高速な数値解析法として大学申請者が新たに開発した多孔質内の流動場解析プログラムおよび電気化学反応の電場解析プログラムとその基本計算アルゴリズムを、汎用流体解析ソフトウェアとして基盤研究から産業応用まで幅広い実績ある NuFD/FrontFlowRed に実装することによって、高精度かつ効率的な大規模シミュレーション(数千万要素規模)を実用的レベルで実行可能なソフトウェアシステムを提供し、固体高分子燃料電池を始めとする各種の熱・化学機器の性能設計で重要な多孔質内ガス置換や液水輸送メカニズムの詳細予測などの産業ニーズへの応用を可能とする。

本研究のシーズとなる「固体高分子形燃料電池の流動・物質拡散数値シミュレーション」成果では基盤技術検証のためのソフトウェア試作がなされているが、それを産業応用に適用可能なレベルで提供するためには、実際のシミュレーション運用に際しての実効性、汎用性、操作性などの実用化技術の実装が不可欠となる。本研究開発において申請者(株)数値フローデザインは、大学シーズ成果である高精度・大規模な燃料電池シミュレーションの汎用商用化に関わる技術、(1)複数機能モデルの統合化、(2)多機種コンピュータシステムへの移植、(3)実用化利用における実効性、操作性の改良などの試作を行い、協力者となる大学シーズ研究者および企業ユーザ利用者らによる評価を経て、産業利用へ提供しうるソフトウェア技術を確立する。

2. 研究開発の概要

①成果

本研究では、大学シーズ成果「流動場解析プログラムおよび電場解析プログラム」(特開 2010-211356)、および、「輸送方程式解析プログラムおよび輸送方程式解析方法」(特願 2011-197755)の基盤技術をもとに実用的シミュレーション・ソフトウェアを産業応用に適用可能なレベルで提供するために、実際のシミュレーション運用に際しての実効性、汎用性、操作性などの実用化技術の実装とその検証を行い、協力者となる大学シーズ研究者および企業ユーザ利用者らによる評価を経て、産業利用へ提供しうるソフトウェア技術として特に以下の3点についての実現性を検討した。

(1)複数機能モデルの統合化:多孔質流動場解析プログラム、電場解析プログラム、および、触媒層水輸送モデルを商用版ソフトウェア NuFD/FrontFlow/red(以下、略称 NuFD/FFR)に実装し、燃料電池の実用化研究開発に利用可能なレベルのシミュレータを完成し、複数の実機形状を模した燃料電池の性能シミュレーションにより研究シーズと同じ精度予測(保存則の収束精度 0.5%)を大規模並列計算(64 並列)により高速(1500 万要素規模計算を約 2.5 時間)に得られることを示した。

(2)多機種コンピュータシステムへの移植:商用版ソフトウェア NuFD/FrontFlow/red に統合したソフトウェアをハイエンド並列システムとして Hitachi SR16000 および汎用クラウドシステムとして Hitachi BS8000 に

実装してそれぞれ 512 並列および 40 並列までの線形的速度向上(並列効率 95%以上)を確認し、「京」クラス超並列計算機(~10000 並列)への実装の見通しを得た。

(3) 実用化利用における実効性、操作性の改良: 汎用クラウドシステム上で実機設計を模した計算実行により操作性、データベース運用などについて実用化へ向けての評価を得た。また、技術研究組合 FC-Cubic 等の最新の研究成果や技術動向を調査しシミュレーション技術展開に対応できるソフトウェア汎用性を検討した。

②今後の展開

燃料電池の複合解析における大規模並列計算の実用化には概ね成功し、操作性改良についてもほぼ計画どおりに達成されたが、競合商用ソフトウェアとの比較では不十分な点も多い。このため、大規模並列計算性能に特化した差別化を明確に図ることが実用商業化に必要と思われる。

また、燃料電池の実用化設計に貢献できる実用数値シミュレーションを供用できれば、少なくとも数億円/年の新しいソフトウェア技術市場を創出できるものと考え、今後も公的な研究開発支援制度を活用し多孔質液水分布とフラッディング現象の予測などの実用化研究を継続したい。

本研究が実現を目指す新技術は、従来シミュレーション技術に対して以下の優位性を有する。

(1) 従来技術では 10 万要素規模の定常解析が一般的であったのに対して、1000 万要素規模の時間過渡応答解析を実現した。

(2) 従来技術では流量などの保存則の収束精度が不十分であったのに対して、シーズ技術の新しい計算アルゴリズムにより実用的な計算時間で収束誤差 0.5% の高精度解析を実現した。

(3) 従来技術では、電池反応を含む複合シミュレーションの効率的な並列計算が困難であったが、新しい計算アルゴリズムを並列性能の高い商用プログラムに実装することで 100 並列規模(10000 並列規模まで拡張可能)の並列化を実現した。

これらのソフトウェア上の優位性を生かし、燃料電池シミュレーションに以下のような新しいニーズを創出できると考える。

1) 従来技術では単純な平均モデルの定常解析のみが活用されているが、拡散層や触媒層の不均一性や間歇性などを考慮した電池性能予測解析が可能となる。

2) 従来技術では平行単純流路での定常シミュレーションのみが活用されているが、折り返し流路などの実機セル全体の時間過渡応答の解析を直接実行し、電池性能のより詳細な解析を可能となる。

3) 将来において「京」クラスの次世代スーパーコンピュータなどの計算機性能向上を有効に活用することで、実機スタック規模の全体性能シミュレーションが可能となる。

たとえば、最近の高性能電池設計課題とされる高電流条件での酸素拡散やフラッディング特性など多くは単純な並行流路で検討されているが、本成果が示すように実機セルにおいては流路形状により一定、均一ではなく、また、拡散層クロスフローの影響も指摘される。これらをシミュレーションするには、複雑な物理モデルの連成計算を少なくとも 1000 万要素規模で高精度に実行することが不可欠であり、本提案が提供する技術は、その計算性能において優位性を有するといえる。

さらに、これらの高精度な電池性能シミュレーションを産業技術として実用化するには、従来技術におけるシミュレーション以上に計算実行における実効性、操作性の向上が求められる。企業利用者などの協力から電池シミュレーション・ソフトウェアとしての改良要望、a)電流、電圧条件の自動設定機能、b)触媒層内のマイクロ物理モデルの組み込み、c)スタック解析への拡張 などを得ており、これらの実用化を計画している。また、本開発での成果を基盤に、現在、新たな計算技術開発の発想を得ており、現在実用化された電池セル相当 1000 万要素規模から数 10~100 倍程度のスタック設計相当に拡張し、また、現在実

装されている μ オーダースケールの物理モデルから触媒層性能をより正確に再現するナノオーダースケールの物理モデルに拡張した合理的な計算方法を実現できると考える。

3. 総合所見

目標通りの成果が得られ、イノベーション創出が期待される。当初目標(多孔質電場解析、電場解析、触媒層水輸送モデルのプログラム実装と、並列処理の実現、計算速度と鮮度の実証実験など)はほぼ達成された。機能的・性能的には優れたシミュレーションソフトであるが、シミュレーションソフト市場は外国製品が主流であるので、それらを凌駕するには、今後ユーザの要望を汲み取って競合ソフトに先んじて性能・機能・操作性などを改善していくことが重要である。