

自動車用圧縮水素容器の急速充填シミュレーション<sup>\*1</sup>

—実在気体の影響—

Numerical Simulation of Thermal Behavior Due to Fast Filling of  
Compressed Gaseous Hydrogen Tanks for FCVs

—Real Gas Effect—

木枝 香織<sup>\*2</sup>

Kaori KIEDA

田村 陽介<sup>\*3</sup>

Yohsuke TAMURA

三石 洋之<sup>\*4</sup>

Hiroyuki MITSUISHI

渡辺 正五<sup>\*4</sup>

Shogo WATANABE

## Abstract

The thermal flow field in a gaseous hydrogen-storage tank during fast filling was numerically simulated. In this paper, we primarily concentrated on the real gas effect. A real gas model is therefore introduced into the simulation system. The results with the real gas model exhibited higher temperature and lower density than the results with the ideal gas model at the same pressure, suggesting that the real gas effect must be considered for fast-filling simulations. The temperature at the tank center agreed well with the experiment results, but the temperature difference in the tanks is larger. To determine why, we visualized and investigated the flow patterns.

## 1. はじめに

燃料電池自動車の圧縮水素容器への急速充填に関して、温度上昇を抑え充填時間を短くするための研究が進められている。実験的には充填速度、ノズル径や充填方向の影響が検討され<sup>1), 2)</sup>、モデル化による温度推定手法の提案や<sup>3), 4)</sup>、数値解析による温度分布や流れ場の調査が実施されている<sup>5), 6)</sup>。

水素では水素分子間の反発力に起因する圧縮係数により、圧力の増加とともに理想気体と比較して単位重量の水素が占める体積は増加する。タンクの設計にあたっては、この増加分を加味しなければならず<sup>7)</sup>、水素の急速充填時にも影響を与えるものと考えられる。本研究では、シミュレーションの精度向上を目指し、解析モデルに実在気体の効果を取り入れ、その影響について検討する。

## 2. 計算手法

## 2.1 アルゴリズム

支配方程式は以下に示す圧縮性流体の質量および運動量保存式とエネルギー保存式であり、アルゴリズムの詳細は既報<sup>5), 6)</sup>に記載した。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_{\text{eff}} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + F_i$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j (\rho E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ k_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial x_j} + \mu_{\text{eff}} u_i \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]$$

$\rho$ ,  $u_i$ ,  $p$ ,  $F_i$ ,  $\mu_{\text{eff}}$ ,  $T$ ,  $E$ ,  $k_{\text{eff}}$  はそれぞれ、ガスの密度、速度、圧力、外力、有効粘性係数、温度、全エネルギー、有効熱伝導率を表す。乱流モデルには、1方程式乱流モデルである Spalart-Allmaras モデルを採用した。計算には汎用熱流体解析ソフトウェア FLUENT を用いた。

\*1 原稿受理 2008年6月6日

\*2 (株)エィ・イー・エス所属

(財)日本自動車研究所 FC・EVセンター勤務 博士(工学)

\*3 (財)日本自動車研究所 FC・EVセンター 博士(工学)

\*4 (財)日本自動車研究所 FC・EVセンター

## 2.2 実在気体モデル

理想気体の状態方程式は以下であらわされる。z は圧縮係数と呼ばれ、理想気体では1である。

$$pV_m = zRT$$

$$z = 1$$

ここで  $V_m$ [m<sup>3</sup>/kg] は比体積 (=1/ρ), R は気体定数 (水素では4124.4[J/(kg K)]) である。水素ガスの圧力を上げると、水素分子間の反発等により理想気体からのずれが顕著となる。この効果を取り入れるため、ここでは Modified Redlich & Kwong モデル<sup>8)</sup> を採用した。z は圧力と温度の関数となり以下の式で表される。

$$z = \frac{V_m}{V_m - (b - c)} - \frac{a\alpha}{RT(V_m + b)}$$

$$a = \frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{0.08664RT_c}{P_c}$$

$$c = \frac{RT_c}{P_c + \frac{a}{V_c(V_c + b)}} + b - V_c$$

$$\alpha = \left(\frac{T_c}{T}\right)^{0.31}$$

$P_c$  は臨界圧力 ( $P_c = 1.2838$  [MPa]),  $V_c$  は臨界比体積 ( $V_c = 3.188788 \times 10^{-2}$  [m<sup>3</sup>/kg]),  $T_c$  は臨界温度 ( $T_c = 32.938$  [K]) である。

このモデルによって計算した圧縮係数zをFig. 1に示す。zは圧力が高いほど大きくなり、温度は高いほうが小さい。温度300[K]のとき、圧力35[MPa]ではz=1.22、水素1kgが占める体積は0.043[m<sup>3</sup>]、圧力70[MPa]ではz=1.47で体積は0.026[m<sup>3</sup>]と計算され、体積は逆比例しない。

なお、水素ガスの実在気体モデルは、FLUENT Ver.6.2には無い機能であったため、ユーザ定義関数として導入した。

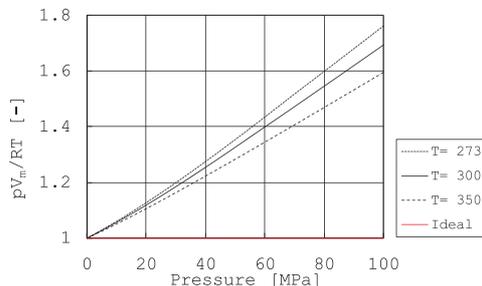


Fig. 1 Real gas model for H<sub>2</sub>

## 2.3 解析モデルと解析条件

解析を実施したVH3容器 (35[MPa], 34[L]) の形状とタンク内部の解析格子をFig. 2に示す。構造はアルミライナーとCFRP層およびトップ側 (充填口側)・エンド側のボス部と充填ノズルからなる。解析格子には、解析精度が高くセル数も抑えられる六面体格子を採用した。セル数は約100,000個である。図中のT1~T3はトップとエンドを結ぶ中心線上に位置しており、圧力と温度の出力点を示している。



Fig. 2 Grid for simulation

解析条件をTable 1にまとめる。実験条件と合わせるため、初期温度は298.15[K], 初期圧力は2[MPa]とした。水素の流入条件には一定の質量流量を与え、0.5[kg/min]の設定に関しては、実在気体モデルと理想気体モデルの解析を実施した。容器外表面 (CFRP層) から外気への熱放出には、熱伝達係数4.5[W/m<sup>2</sup>K]を与え、外気温度は298.15 [K]とした。

Table 1 Simulation cases

case	state equation	filling rate[kg/min]
1	real gas	0.5
2	ideal gas	0.5
3	ideal gas	0.75

## 3. 解析結果

### 3.1 時間変化

流入部の速度の大きさとT1の圧力の時間変化をFig. 3に示す。case2は充填が完了していない。参照する実験データ<sup>1)</sup>には充填速度が異なる2ケースを示し、充填速度の速いほうをExp.1、遅いほうをExp.2で表す。Exp.2は初期温度が異なるため、後に示す温度データにおいて暫定的に温度グラフを平行移動させ、他の結果と合わせている。

Fig. 3において流入部の速度は破線で示したが、

充填の初期流れは、case1とcase2では最大流速37[m/s]、case3では57[m/s]に達する噴流である。その後の速度変化は、質量流量が等しいcase1とcase2の二つのケースではほぼ一致しており、密度の時間変化も一致していると考えられる。

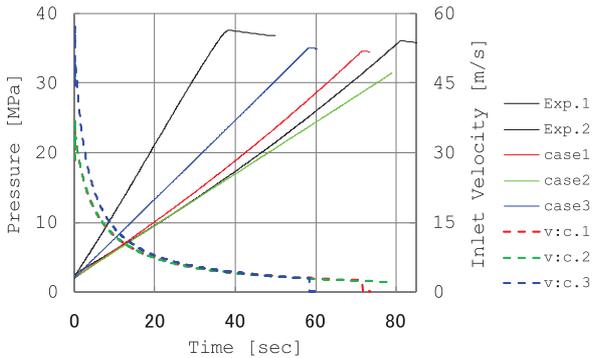


Fig. 3 Time histories of pressure at T1 and inlet velocity

圧力と温度の時間変化には、実在気体と理想気体の解析結果に差異が現れた。質量流量を一定としたシミュレーションでは圧力は直線的に増加するが、case1の実在気体モデルのほうがcase2に比べ圧力の上昇率は大きい。Fig. 4には、タンク中央T2の温度の時間変化を示すが、これも実在気体のほうが高くなる。実在気体の影響は、熱的にも厳しい結果となることが明らかになった。

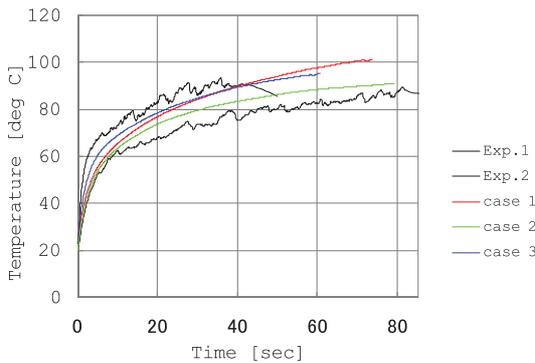


Fig. 4 Time histories of temperature at T2

次に、解析結果と実験データとを比較する。Fig. 4に示したタンク中央T2の温度に関しては、解析結果は、実験値と比較して若干高めではあるが、充填速度が最も速いExp.1の温度を超えず、Exp.2よりは高いなどの一致を示している。一方、Fig. 5、Fig. 6はトップ側T1とエンド側T3の温度の時間変化であるが、T1は実験値より低くT3は実験値より高い結果となった。実験結果と比較して、タンク内の温度差が大きくなっている。

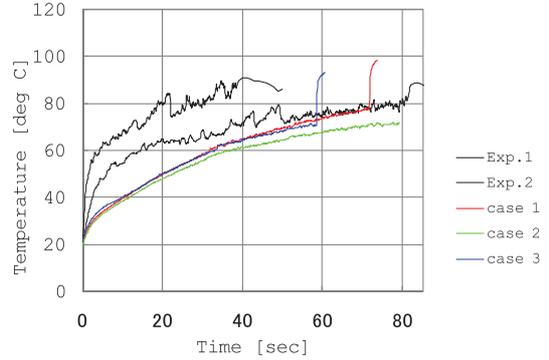


Fig. 5 Time histories of temperature at T1

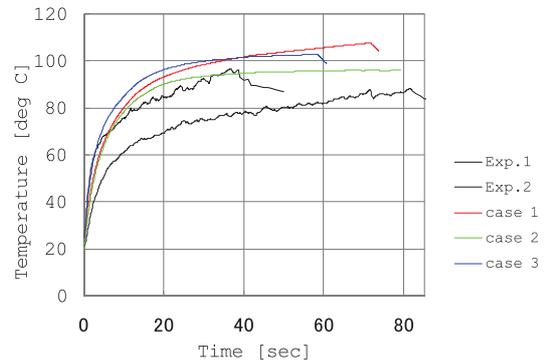
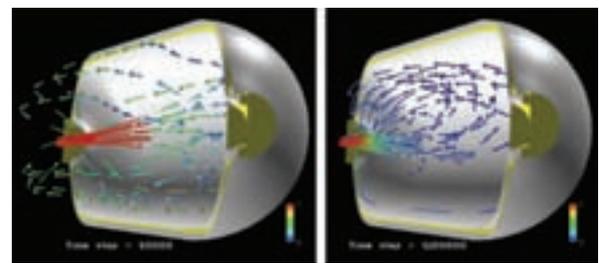


Fig. 6 Time histories of temperature at T3

この原因を探るため、流れの様子を調べた。case1のパーティクルシミュレーション結果をFig. 7に示す。これは与えられた速度場において、充填口に配置したパーティクルの動きを積分によって求めたもので、矢印は動きの向きを表し、色わけは速度の大きさを表している。時刻T=2.5[sec]では軸対称に近い流れ場であり、充填口付近のT1ポイントでは、流入噴流の影響が大きい。T=60[sec]では浮力の影響で容器の上側領域を回る流れが支配的となっている。これらの流れのパターンは容器内の温度分布に影響を与えると考えられる。特に、充填初期の充填口付近の精度良い解析には、より適切な噴流乱流のモデル化が必要と考えている。



a) T=2.5 [sec]      b) T=60 [sec]

Fig. 7 case1: Particle simulation

### 3.2 温度分布・密度分布

実在気体モデルと理想気体で、同じ圧力に達した時点の温度分布と密度分布を比較する。Fig. 8は、圧力が26[MPa]に到達した時点での鉛直中央断面の温度分布であり、Fig. 9は密度分布である。実在気体のほうが温度は高めで、密度は小さいことがわかる。実在気体の効果によって密度は上がらず、温度は上昇する結果となっている。また、Fig. 3に示したように実在気体のほうが早く35[MPa]に到達するゆえ、充填できる水素の量は少ない。

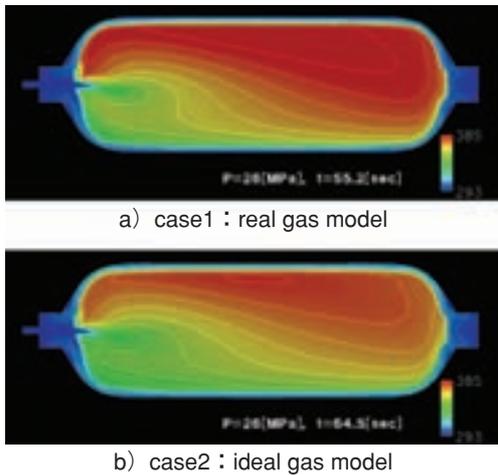


Fig. 8 Temperature distribution of vertical plane

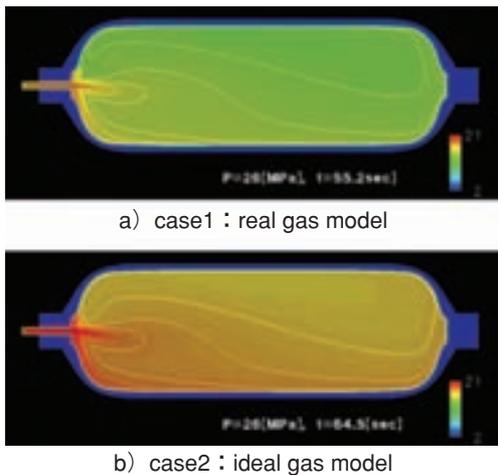


Fig. 9 Density distribution of vertical plane

### 4. まとめ

水素の急速充填シミュレーションの精度向上を目指し、広く用いられている理想気体近似を改良し、実在気体の効果を密度や比熱の計算に取り入れた。計算負荷は数%増えたが、安定に収束解を得ることができた。実在気体モデルと理想気体モデルの結果には差異が現われ、実在気体では、より温度上昇が大きくその影響は無視できないことから、急速充填シミュレーションには実在気体モデルの解析が必要であることを示すことができた。

実験値との比較では、タンク中央部の温度は一致傾向を示したが、タンク内の温度差はより大きくなった。実在気体モデルを導入してもこの傾向は改善されていない。これを改善するには、調べられた流れ場の様子から、噴流のような非定常な流れ場に有効な乱流モデルの導入が有効であると考えており、具体的にはラージエディシミュレーションなどを導入し、今後、改善させていく予定である。

なお、本報は、(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託により実施した「水素社会構築共通基盤整備事業」での一部の結果をまとめたものである。

#### 参考文献

- 1) 広谷龍一ほか：自動車用圧縮水素容器の急速充填における容器内温度挙動（第1報），自動車研究，Vol.28, No.7, p.269-272（2006）
- 2) 寺田利宏ほか：自動車用圧縮水素容器の急速充填における容器内温度挙動（第2報），自動車研究，Vol.29, No.7, p.291-294（2007）
- 3) 門出政則ほか：高圧水素容器への急速水素充てん中の伝熱特性，日本機械学会論文集B 72-715, p.738-744（2006）
- 4) P. L. Woodfield et al. : Heat Transfer Characteristics for Practical Hydrogen Pressure Vessels Being Filled at High Pressure, JSME Journal of Thermal Science and Technology, Vol.3, No.2, p.241-253（2008）
- 5) 伊藤裕一ほか：自動車用圧縮水素容器の急速充填の数値解析，Vol.28, No.7, p.273-276（2006）
- 6) Y. Itoh et al. : Numerical Study of the Thermal Behavior on Fast Filling of Compressed Gaseous Hydrogen Tanks, SAE Paper, 2007-01-0690,（2007）
- 7) 竹市信彦ほか：高圧水素と水素貯蔵材料，高圧力の化学と技術，Vol.17, No.3, p.257-263（2007）
- 8) R. H. Aungier : A Fast, Accurate Real Gas Equation of State for Fluid Dynamic Analysis Applications, Transac. of ASME, J. of Fluid Eng., Vol. 117, p. 277-281（1995）