# 高圧タンクのき裂伝ばを伴う水素漏えい反応流に関する 粒子法-Euler連成解析

Coupled Particle-Euler Analysis for Hydrogen Leakage Reaction Flow with Crack Propagation in High Pressure Tank

嶋田悟,東北大学大学院情報科学研究科,仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3-09
石本淳,東北大学流体科学研究所,仙台市青葉区片平 2-2-1, E-mail: ishimoto@alba.ifs.tohoku.ac.jp
落合直哉,東北大学流体科学研究所,仙台市青葉区片平 2-2-1

Satoru Shimada, GSIS, Tohoku University, 6-3-09 Aoba, Aramaki-aza Aoba-ku, Sendai 980-8579, Japan Jun Ishimoto, Institute of Fluid Science, Tohoku University, 2-2-1 Katahira, Sendai 980-8577, Japan Naoya Ochiai, Institute of Fluid Science, Tohoku University, 2-2-1 Katahira, Sendai 980-8577, Japan

Advanced computational approach for hydrogen leakage with wall crack propagation problem was conducted by using a hybrid of the coupled particle and Eulerian methods. The present computational analysis procedures consisted of two main parts. The first part was crack propagation analysis of a thin square plate, which simulated the wall of a high-pressure tank walls under two different types of initial conditions, and in both cases, the direction of crack propagation was freely determined by the direction of stress field. The differences and features of hydrogen diffusion during hydrogen leakage were analyzed for two types of wall data and two types of boundary conditions, as a result, the effect of wall boundaries on the hydrogen concentration distribution was computationally predicted.

## 1. 緒言

近年,従来の化石燃料に替わる新エネルギーの一つとして水素エネルギーが注目されている.水素は低炭素社会の実現に大いに貢献すると考えられているものの,常 圧でのエネルギー密度が従来の化石燃料に比べて非常に小さいため,高密度水素として貯蔵輸送を行う必要がある.高圧に充填された水素を安全に運用するためには,水素の引火限界濃度や安全性を十分考慮した設備設計,ならびに水素脆化や繰り返し応力の発生に基づく材料劣化の影響を考慮した高圧水素容器の水素脆化によりき裂が発生・材料破壊が生じた場合に付随して発生する水素ガスの漏えい現象を研究対象とし,材料のき裂破壊と混相流体解析を同時に扱う連成解析手法を開発した.これにより安全性の高い水素設備の設計に貢献することを目指す.

## 2. き裂伝ば解析の数値解析

## 2.1 数值解析手法

材料側の解析には連続体力学に基づいた粒子法の一種で ある Peridynamics モデル<sup>(1)</sup>を使用する. Peridynamics モデルとは連続体を粒子群として扱い,個々の粒子同士 の相互作用によって連続体の運動を決めるモデルである. 連続体を粒子の集合として表現するため,材料の破壊を伴 う現象の取り扱いが容易となる. Peridynamics モデルに おける連続体の運動方程式は式(1)のように記述される.

$$\rho(\boldsymbol{x})\ddot{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x},t) = \int_{H_x} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x'},t) - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t), \boldsymbol{x'} - \boldsymbol{x})dV_{x'} + \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x},t) \quad (1)$$

 $H_x$ はxを中心とした近傍領域,uは変位ベクトルである. ここで,fは Pairwise force function と呼ばれ $x \ge x' \ge$ の間に作用する相互作用力ベクトルである.Peridynamics 理論では点 $x \ge x'$ に存在する粒子間に働く物理的関係 は bond と呼ばれる.接触力ではなく有限距離間の粒子 同士に力が作用するという点において,Peridynamics は 従来の連続体力学と性質を異にする.また,粒子間相互 作用力の影響範囲を horizon と呼び,影響範囲を適切な 有限距離で打ち切ることによって,数値解析のコストを 抑えることが可能となる.

#### 2.2 解析条件

高圧容器の隔壁の破壊を模擬するために,中心に直径 2 mm の円形の初期欠陥をもつ一辺が 50 mm の二次元薄 板を上下方向から tension rate 2.0 m/s で張力を与える条件を課した.材料のパラメータは  $\rho$  = 7980 kg/m<sup>3</sup>,  $\nu$  = 0.33, E = 1.93×10<sup>11</sup> Pa とし,鋼材の性質を有する物質を 仮定した.初期き裂はき裂面に沿った粒子同士の bond を 切ることで模擬した.時間刻みは  $\Delta t$  = 5.0×10<sup>-8</sup> s,格子 幅と horizon 半径は  $\Delta x$  = 2.5×10<sup>-4</sup> m,  $\delta$  = 2.5×10<sup>-3</sup> m と設定した.

#### 2.3 解析結果

Fig.1 に弾性ひずみエネルギーの時間変化を示した.対



Fig. 1: 初期欠陥を有する高圧水素容器材料のき裂伝ば に伴う弾性ひずみエネルギー分布の時間変化

称な条件を課しているため,き裂の進展も対称に伝ばす る結果となっていることがわかる.き裂は応力を課した 軸に対し垂直方向に進展しており,応力が集中した個所 からき裂が進展していることが確認できた.また,粒子 法を用いた数値解析であるため,有限要素法(FEM)の 様にき裂進展部分に特殊な格子を用いることなくき裂伝 ぱ現象が再現された.このようにperidynamicsモデルで はき裂の進展方向がメッシュ形状に依存することなく自 由に決まるため,時間毎の応力場に忠実なき裂伝ぱ現象 を再現可能であることがわかる.

3. 高圧容器からの水素漏えい現象の数値解析

**3.1** 数值解析手法

き裂伝ば解析で得られた隔壁の形状を流体計算のオイ ラー格子にあける形状へ対応させるため,隔壁を含む計 算空間の三次元形状データを構造格子として生成するこ とにより,オイラー格子での流体解析を可能にした.高圧 水素漏えい解析に使用した支配方程式を示す.本研究に おいて,解析対象は高圧水素ガスと空気の圧縮性二相流 体である.Navier-Stokes方程式,連続の式,エネルギー 方程式はそれぞれ以下のようになる.

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U} \boldsymbol{U}) = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{F}_{S} + \rho \boldsymbol{g} \qquad (2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U}) = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho T \boldsymbol{U}) = \left(\frac{\alpha_a}{c_{va}} + \frac{\alpha_h}{c_{vh}}\right) \left[\lambda \nabla^2 T + \nabla \cdot (P \boldsymbol{U})\right] \quad (4)$$

ここで, $\rho$ , U, P,  $\tau$ , g, T,  $\alpha_a$ ,  $\alpha_h$ ,  $c_v$ ,  $\lambda$  はそれぞれ混 相密度,流速ベクトル, 圧力,粘性応力テンソル,重力 加速度ベクトル,絶対温度,空気の体積分率,水素の体 積分率,定積比熱,熱伝導率を表す. $F_S$  は Continuum Surface Force model(CSF モデル)<sup>(2)</sup> に基づいて表面張 力を体積力に置き換えて表現されている.

## 3.2 解析条件

作動流体は、水素の漏えい・拡散現象による濃度分布 を把握するため気体水素(H<sub>2</sub>)と空気の二種とした.初期 条件において、隔壁を挟んで高圧容器内側では水素の体 積分率 $\alpha_h = 1$ を与え、外側では空気の体積分率 $\alpha_a = 1$ を与えた( $\alpha_h + \alpha_a = 1$ ).この水素・酸素領域間には前 項のき裂伝ばに関する粒子計算結果から得られた、き裂 を伴う隔壁の幾何形状データを、オイラー型構造格子に マッピングすることで高圧容器の隔壁を模擬した.解析 に使用した水素と空気の圧力,温度,速度の初期条件はそ れぞれ水素側が $P_0 = 0.3$  Pa,  $T_0 = 350$  K,  $V_0 = 0.0$  m/s, 空気側が $P_0 = 0.1$  Pa,  $T_0 = 300$  K,  $V_0 = 0.0$  m/s, 空気側が $P_0 = 0.1$  Pa,  $T_0 = 300$  K,  $V_0 = 0.0$  m/s, であ る.また、漏えい側空間の終端において、自由流出の条 件(開空間)と壁面とした条件(閉空間)の二つの境界条 件を用いた.開空間条件は、隔壁の間隙から漏えいする 高圧水素の拡散挙動を解析するために、また、閉空間条 件は、水素スタンドに設置することが義務付けられてい る防火壁を模擬するために設定した.それぞれの境界条 件について、き裂進展の解析を行った二種類の高圧容器 の隔壁(前節のもの(Case1)に加え上下左右方向から同 じtension rate を与えた Case2 の解析を行った)を用い ることで4種計算条件下における混相流体解析を行った.

#### 3.3 解析結果

Fig.2 に Case1-2(隔壁形状:Case1, 漏えい側空間終端: 閉空間) における水素の体積分率  $\alpha_h = 0.5$  (GH<sub>2</sub> – Air 界面) の等値面分布に関する時間発展を示す.き裂形状に 沿った形で漏えいを開始した水素は x, y 軸方向に拡散し ながら z 軸方向に流動する.開空間条件の Case1-1, 2-1 は隔壁の間隙から定常的に水素ガスが漏えいし続けたが, 閉空間条件の Case1-2, 2-2 においては Fig.2 や Fig.3(b) に見られるように一度主流方向に漏えいした水素ガスが 逆流し中央付近に停留する結果となった.これは水素漏 えいによって押し出された空気が圧縮され,さらに流れが 防火壁を模擬した壁面で反射することで,水素の主流方 向の流れが抑制されることによると考えられる.また任 意の領域における漏えい水素濃度を予測するため, Fig.3 に Case1-1, Case1-2 における水素の体積分率の時間変化 について示した.体積分率は, z軸に垂直な面における断 面平均値を算出した.閉空間条件とした Case1-2 で,反 射した空気流が水素漏えいの主流方向流れを抑制し,押 し戻していることが判明した.また,水素は空気と混合 した場合の可燃濃度範囲(爆発限界)が4~75%であるこ とが知られており,開空間条件(Case1-1, Case2-1)にお いて水素の可燃濃度範囲内となる領域が存在し水素爆発 を発生させる可能性を有していることが明らかになった. また,閉空間条件(Case2-1, Case2-2)においては隔壁の 影響により水素の到達が遅延する領域が存在することが 明らかになった.



Fig. 2: 水素体積分率の等値面  $(\alpha_h = 0.5)$  に関する時間 発展計算結果 (Case1-2)



Fig. 3: 任意流路断面位置における平均 GH<sub>2</sub> 体積分率 (断 面平均水素濃度)の時間発展計算結果

#### 4. 結論

・ 正水素タンクのき裂伝ば・材料破壊に伴う水素ガスの漏えい現象に関し,材料側には粒子法の一種である Peridynamics モデルを,流体側にはオイラー法である圧縮性 二相 LES-VOF 型方程式を用いて解析した.高圧容器の 隔壁におけるき裂伝ば現象解析を二種類の初期条件について行い,どちらのケースにおいてもき裂進展方向に対 するメッシュ形状の影響を除外し,応力場がそのき裂進 展方向を自由に決定することを確認した.さらに2種類 の隔壁データと2種類の境界条件を設定し水素漏えい現 象の解析を実施することにより,それぞれの条件につい ての水素の拡散挙動の違いや流動特性に関して明らかに した.

### 参考文献

- (1) Silling SA, Askari E, A meshfree method based on the peridynamics model of solid mechanics, Computers and Structures, Vol.83(2005), pp.1526-1535.
- (2) J.U.Brackbill, D.B.Kothe, C.Zemach, A Continuum Method for Modeling Surface Tension, Journal of Computational Physics, Vol.100(1992), pp.335-354.