

# 燃料電池電気自動車開発に向けた 水素拡散シミュレーション手法の研究

Research of Simulation Method of Hydrogen Diffusion for Fuel Cell Electric Vehicle Development

松本 充功\* 清水 研一\*  
Mitsunori MATSUMOTO Kenichi SHIMIZU

## 要 旨

燃料電池電気自動車において水素タンク周りは複雑な空間形状となる。この空間に万一水素が漏れた場合を想定して水素拡散挙動をシミュレーションできる手法について研究した。

従来の計算領域分割法では車両開発で許容される期間内で計算できないため、三段分割計算手法を考案して計算時間を短縮した。また、精度向上を目的とし、乱流による拡散、混合を適切に計算できる乱流モデルを選定した。

その結果、計算時間を4日に抑えつつ、水素噴出時のピーク濃度と噴出後の残留濃度が精度5%以内で計算できることを確認した。また、異なる水素噴出条件に対しても適用できる見通しを得た。以上より本手法が燃料電池電気自動車の開発に有用であることを明らかにした。

## ABSTRACT

Research was conducted on a method that can simulate hydrogen diffusion behavior in the event that hydrogen leaks into the complexly shaped space around the hydrogen tank of a fuel cell electric vehicle.

Calculations cannot be performed in a permissible time period for the vehicle development with the conventional analysis region partitioning method, so a three-part partitioning calculation method was newly devised to shorten the calculation time. In addition, in order to enhance the calculation accuracy, the turbulence models that can appropriately calculate turbulent diffusion and mixing were selected.

The results confirmed that the peak concentration when hydrogen spouts and the residual concentration after spouting can be calculated at an accuracy of within 5%, while keeping the calculation time to just four days. In addition, it was presumed that the new method can be applied to differing hydrogen spouting conditions. These results indicated that the new method is useful for the development of fuel cell electric vehicles.

## 1. まえがき

Honda では、低炭素化の究極の姿である燃料電池電気自動車をはじめとして、水素社会の実現に向けた水素応用技術の研究開発をおこなっている。

水素は、無色かつ無臭で比重が最も小さく拡散が早いといった、従来の燃料にはない特性を持っており、これらの特性に配慮した設計をおこなうことが重要である。

燃料電池電気自動車では、万一の水素漏洩を検出するために水素センサを設置している (Fig. 1)。従来は、車両を用いたテストによって検討していたため、この設置位置を決定するまでに数ヶ月を要していた。水素が拡散をとまないうちに流れる挙動をシミュレーションで短期間に解析できれば、設計段階から水素センサの適切な設置位置を検討することができる。

\* 四輪 R&D センター

しかし、これまで、単純な形状に対して水素拡散シミュレーションをおこない精度検証した報告はあるが<sup>(1), (2)</sup>、燃料電池電気自動車の複雑な形状に対してシミュレーションの精度を検証し、設計検討に適用できる手法であることを実証した例は、水素応用技術分野の研究報告を調査した限り見当たらない。

従来、車両の複雑な形状での水素拡散シミュレーションは、計算規模が大きく、実用的な時間で計算できなかった。

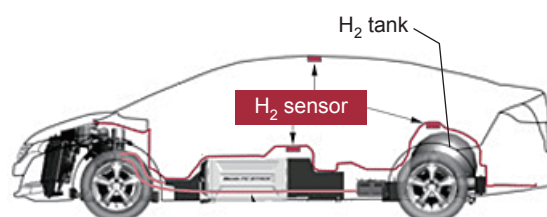


Fig. 1 Position of hydrogen sensors

そこで、計算領域の分割法を改良し、計算時間を短縮した。また、設計検討に適用できる精度を確保するために、水素の乱流拡散、混合を高精度で計算できる乱流モデルの選定をおこなった。

これらの手法を用いて、車両の水素タンク周りについて水素拡散シミュレーションを実施し、高速応答濃度計測で得た実測値と比較検証した。

## 2. 開発のねらい

燃料電池電気自動車の設計検討に有用な水素拡散シミュレーション手法の構築をねらいとした。車両の複雑形状で水素濃度の時間変化を解析するため、CATIA モデルを反映した 3D 空間形状で非定常計算ができる手法を検討した。計算時間、計算精度の目標は以下の通りに設定した。

- (1) 計算時間:一週間以内
- (2) 計算精度:水素濃度が実測値と定量的に一致

計算時間の目標値は、従来のテストによる水素センサ設置位置の検討に要した時間に対して優位性がある値とした。

## 3. シミュレーション手法の構築

### 3.1. 水素拡散現象の特徴と計算上の課題

車両内で万一水素が漏れ出た場合、Fig. 2 に示す現象を経て、水素は流動、拡散すると考えられる。まず、噴出部では圧縮をとまなう噴流乱流が形成され、周囲の気体を巻き込みながら拡散していく。その後、車両内の構造物により流れの向きを変えつつ、壁面粘性影響によって壁乱流による流動、拡散に移行する。さらに流れが進むと、噴出による慣性力は弱まり、相対的に浮力影響が支配的となるため、水素は上昇して上部に滞留する。

これらを解析するためには、以下の二点が課題である。

- (1) 計算負荷の高い圧縮性計算を、大量の空間メッシュかつ細かい時間ステップで非定常計算しなければならない、計算時間が長くなる。
- (2) 乱流による流動、拡散影響を精度良く解析できる乱流モデルが不明。

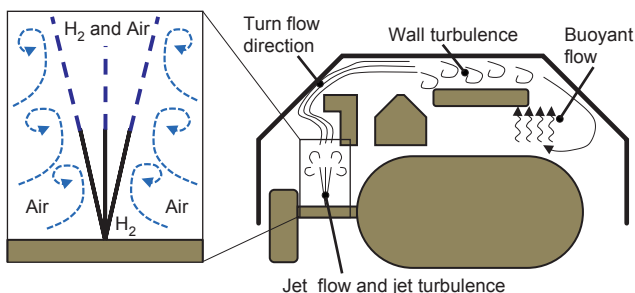


Fig. 2 Flow phenomena in case of hydrogen leak inside vehicle

前者については 3.2. 節で、後者については 3.3. 節で詳細を述べる。

### 3.2. 計算時間の低減

#### 3.2.1. 要因分析

計算時間が長くなる要因は 3.1. 節で述べたように、以下の三点がある。

- (1) 圧縮性計算を要する。
- (2) 空間メッシュ数が大きくなる。
- (3) 時間ステップ数が大きくなる。

圧縮性が影響するのは噴出口近傍のみであるが、解析領域全体を圧縮性計算しなければならない、計算負荷が高まってしまう。

空間メッシュ数が大きくなる原因は、車両内全体の複雑形状を再現するためのメッシュ数が必要なことに加え、噴流現象を解像するために、噴出口近傍にさらに細かいメッシュを要するためである。

時間ステップ数が大きくなる原因は、非定常計算におけるクーラン数の制約を満たす必要があるためである。クーラン数  $C$  は式 (1) で表される。

$$C = \frac{v\Delta t}{\Delta x} \quad (1)$$

$v$ : Velocity

$\Delta t$ : Time step

$\Delta x$ : Mesh size

クーラン数は時間ステップ当たりの流体の移動メッシュ数を表し、過度に大きいと反復計算中の数値の発散や、時間変化の高周波成分の喪失による精度低下を引き起こす。1 以上のクーラン数で非定常計算が可能な陰解法を用いても、信頼性のある計算をおこなうための上限値は 40 程度とされている<sup>(3)</sup>。流速  $v$  が高く、メッシュサイズ  $\Delta x$  が小さい噴出口近傍を含む非定常計算において、クーラン数の制約を満たすためには、時間ステップ  $\Delta t$  を小さくしなければならない。したがって、時間ステップ数が大きくなってしまう。

#### 3.2.2. 従来技術

水素拡散シミュレーションの計算時間短縮技術として、独立行政法人新エネルギー産業技術総合開発機構の「水素の有効利用ガイドブック」では、仮想煙源法と計算領域分割法が紹介されている<sup>(4)</sup>。

仮想煙源法は、圧縮計算を要する噴出部近傍を計算せず、円形の噴出口からの噴流に対する理論式を用いて、境界条件を設定し、残りの領域を計算する。この方法は噴出部近傍に障害物がある場合には適用が困難であることから、複雑形状の解析には適さない。

計算領域分割法は噴出部近傍のマッハ数 0.5 より大きい

領域を圧縮性領域として分割して計算し、その結果を境界条件として残りの非圧縮性領域を計算する。圧縮計算を必要な領域のみに限定するため、計算時間の短縮ができる。計算領域分割法の概念を Fig. 3 に示す。仮想煙源法とは異なり、複雑な空間形状を再現して計算できる。

計算領域分割法を用い、マッハ数 0.5 の位置で分割し、二段目を非定常計算した場合の計算時間を検討した。水素の音速を 1200 m/s と考えると流速  $v$  は 600 m/s、クーラン数を 40、複雑形状の再現に必要なメッシュサイズを最低 5 mm とすると、時間ステップは式 (1) より  $3.3 \times 10^{-4}$  秒となる。現状の計算機性能では並列計算をおこなったとしても、1 秒分の計算に約三週間を必要とする。水素拡散挙動は数秒から数十秒のオーダーで解析したいため、目標の一週間では計算できない。

二段目の計算時間を短縮するため、分割位置を噴出口に対してより遠方に設定し、非定常計算が扱う流速を下げた場合についての検討もおこなった。しかし、この場合は一段目の圧縮計算領域が広がるため、一段目の計算に一週間以上要してしまう。

### 3.2.3. 三段分割計算手法

従来の計算領域分割法では、一段目の圧縮計算と二段目の非定常計算のいずれかの計算時間が長くなってしまうのを回避できないので、さらに分割数を増やした三段分割計算を考案した。三段分割計算手法の概略を Fig. 4 に示す。三段分割計算手法では、一段目は従来の計算領域分割法と同様に圧縮計算が必要な噴出口近傍のみを計算する。二段

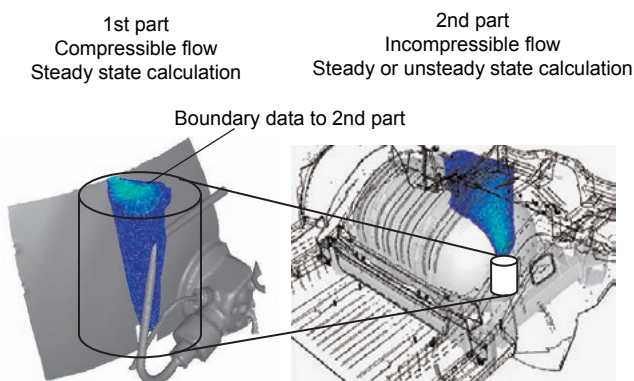


Fig. 3 Analysis region partitioning method

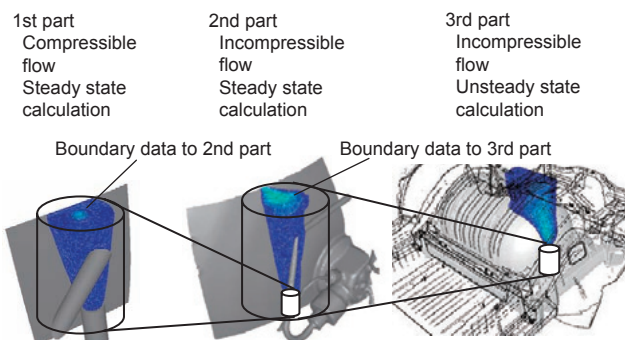


Fig. 4 Three parts partitioning method

Table 1 Turbulence models

| Model                    | Number of equations | Characteristics                                                 |
|--------------------------|---------------------|-----------------------------------------------------------------|
| k- $\omega$ standard     | 2                   | Possible to calculate near wall region without wall function    |
| k- $\omega$ SST          | 2                   | Hybrid model of k- $\omega$ standard and k- $\epsilon$ standard |
| k- $\epsilon$ standard   | 2                   | Basic 2 equations model and popular in engineering field        |
| k- $\epsilon$ realizable | 2                   | k- $\epsilon$ standard model with enhanced wall function        |
| RSM                      | 7                   | Possible to calculate turbulent anisotropy                      |

SST : Shear Stress Transport  
RSM : Reynolds Stress Model

目は三段目の非定常計算のクーラン数が 40 以下になるまでの領域について非圧縮定常計算をおこなう。二段目と三段目の分割位置における流速は 10 m/s 以下が目安となる。そして三段目で解析対象全体の非圧縮非定常計算をおこなう。この方法により、すべての計算領域で実用的な時間で計算が可能になると考えた。

### 3.3. 乱流計算精度の向上

#### 3.3.1. 乱流計算手法

流れのある場における拡散現象は、濃度差によって生ずる分子拡散よりも、乱流によって混ざり合う乱流拡散や乱流混合の影響が支配的である。乱流の計算手法には、直接数値シミュレーション (DNS)、ラーズ・エディ・シミュレーション (LES)、レイノルズ平均モデル (RANS) などがある。渦の全部あるいは一部を厳密計算する DNS、LES は計算負荷が高すぎるため、実用上は RANS を選択するのが妥当である。RANS の乱流モデルは数多く開発されているが、どのような計算対象に対しても万能なモデルは存在しない。目標とするシミュレーションの精度を達成するためには、分割計算の各領域に対して精度良く計算できるモデルを選定することが必要である。

工学計算への適用実績のある五つの乱流モデルを候補とし、噴出口に発生する噴流乱流と壁面流れで発生する壁乱流の乱流モデルを選定した。候補の乱流モデルを Table 1 に示す。

#### 3.3.2. 噴流乱流計算モデルの選定

噴出口径を  $\phi$  1.4 mm、流量を 120 NL/min、鉛直上向きに噴出した場合をテストケースとして検証した。三段分割計算手法の二段目までに相当する定常計算をおこなない、噴出口から 0.2 m までの噴出軸上について、各乱流モデルで計算した水素濃度と実測値を比較した。結果を Fig. 5 に示す。

k- $\omega$  SST モデルが最も高精度である。さらに、噴出条

件(噴出口径, 流量)が変わっても  $k-\omega$  SST モデルを用いて精度良く計算できるかを検証した。結果を Fig. 6 に示す。どの噴出条件に対しても精度良く計算できた。  $k-\omega$  SST モデルは噴出条件によらず有効なモデルである。分割計算の一段目および二段目は噴流乱流の影響が支配的と考え、  $k-\omega$  SST モデルを採用した。

### 3.3.3. 壁乱流計算モデルの選定

噴出口径を  $\phi 7$  mm, 流量を 212 NL/min とし, 水平の壁面に平行に噴出した場合について検証した。噴出軸上

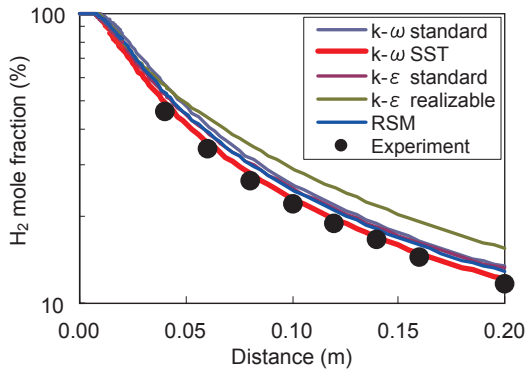


Fig. 5 Comparison of calculations with experiment to select jet turbulence model

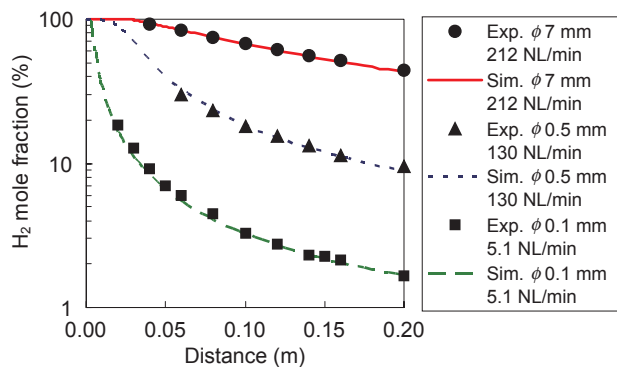


Fig. 6 Comparison of various jet flow calculations with experiments

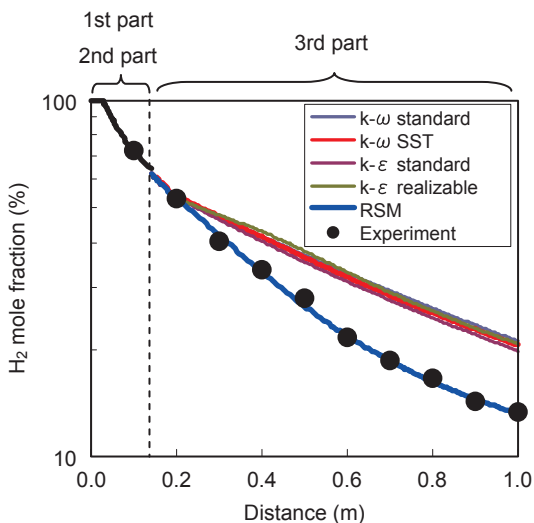


Fig. 7 Comparison of calculations with experiment to select wall turbulence model

0.14 m の位置までを, 三段分割計算手法の二段目までで計算し, 三段目の計算として 0.14 m から 1 m までの範囲について乱流モデルを変えて計算した。実測値と比較した結果を Fig. 7 に示す。

壁乱流では, 二方程式モデルはいずれも計算値の水素濃度が高くなり, 十分に拡散を表現できない。一方で七方程式モデルである RSM モデルは実測値に良く一致する。RSM モデルは乱流渦の異方性を計算可能であり, 壁面付近の速度差で発生する異方性の強い縦渦の影響を表現できたためと考えられる。主に車両フロアパネルに沿う流れを計算する分割計算の三段目には RSM モデルを採用した。

## 4. シミュレーション手法の検証方法

### 4.1. 検証対象と条件

計算手法の効果を確認するため, 開発初期段階の燃料電池電気自動車における水素タンク周りの車両床下空間を対象として, 実験と計算を実施し, 計算時間と計算精度を検証した。噴出条件は口径  $\phi 7$  mm, 流量 212 NL/min で代表した。噴出口を水素タンク横の配管継手付近に設置して鉛直上方に水素を噴出させた。噴出時間は 4 秒とした。Fig. 8 に水素噴出位置と水素濃度の評価ポイントを示す。

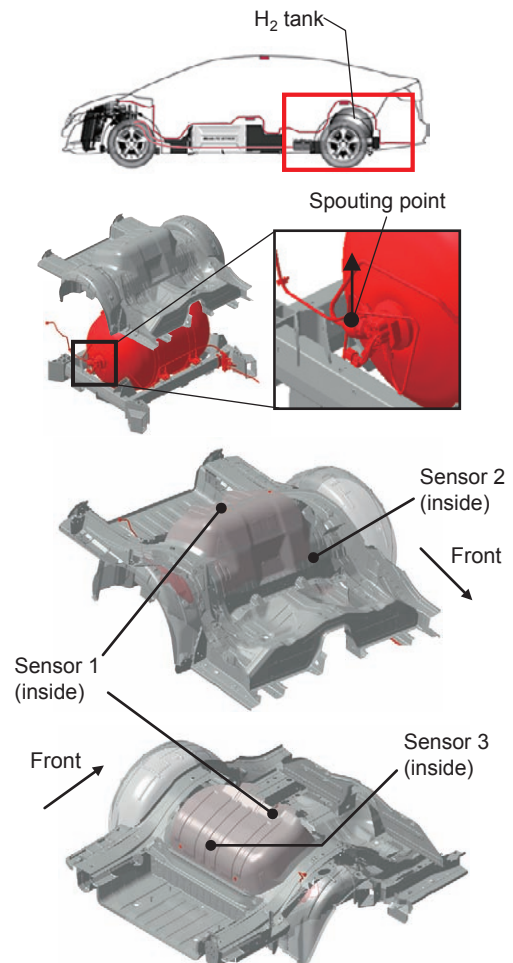


Fig. 8 Model used for experiment

水素濃度の評価ポイントはフロアパネルの最上部と前後の3か所に設定した。

#### 4.2. ソルバ

FLUENT6.3をソルバとして使用し、陰解法、SIMPLE法にて計算した。水素の浮力を考慮するため、ナビエ-ストークス方程式の体積力の項に重力式を追加したモデルを使用し、水素と空気の混合、拡散を計算するため、Fickの拡散式をベースに乱流拡散を考慮したSpeciesモデルを用いた。

#### 4.3. 解析メッシュ

解析メッシュはCATIAモデルをベースとし、各パーツに対する表面メッシュを作成後、表面メッシュをつなぎ合わせ、最後に空間全体のメッシュを生成させるという手順で作成した。空間形状再現のため、部品まわりに対してはメッシュサイズを最大5 mmとし、メッシュ形状はテトラメッシュとした。

#### 4.4. 実験手法

計算に使用したCATIAモデルに対応する車両部品と水素を用い、安全性に留意して計測した。

車両床下の非定常計算に対する比較検証には、広い濃度域に対して、高速な応答性かつ高精度な実測値が求められる。広範囲の濃度域の水素濃度計測に多く用いられている気体熱伝導式のセンサは90%応答時間がおおよそ5秒であり、今回の計測に対しては応答性が不足する。接触燃焼式のセンサは濃度4%以下の計測に用いられ、高濃度水素の計測には適さない。そこで測定可能な水素濃度の範囲が広く、かつ高速応答での計測に特化したイオン検知器HX-07i(能美防災株式会社製)<sup>(5)</sup>を用いて計測した。

### 5. 検証結果

三段分割計算における各段の計算結果について水素濃度のコンター図をFig. 9に示す。三段目の計算結果では水素が拡散を伴い流れる挙動が可視化できた。一段目、二段目の計算に要した時間は1日、三段目の計算に要した時間は3日の計4日であり、目標の一週間以内で計算できた。

水素濃度の評価ポイントにおいて実測値と比較した結果をFig. 10に示す。どの評価ポイントについても計算値と実測値は良く一致した。特にフロアパネル最上部(Sensor 1)については、水素噴出後30秒まで5%以内の精度で計算できた。またフロア前後の二点(Sensor 2, 3)についてはピーク濃度と30秒経過後の濃度が5%以内の精度で計算できた。水素濃度の立ち上がり時刻や水素噴出終了後の濃度振動挙動についても良く再現できた。

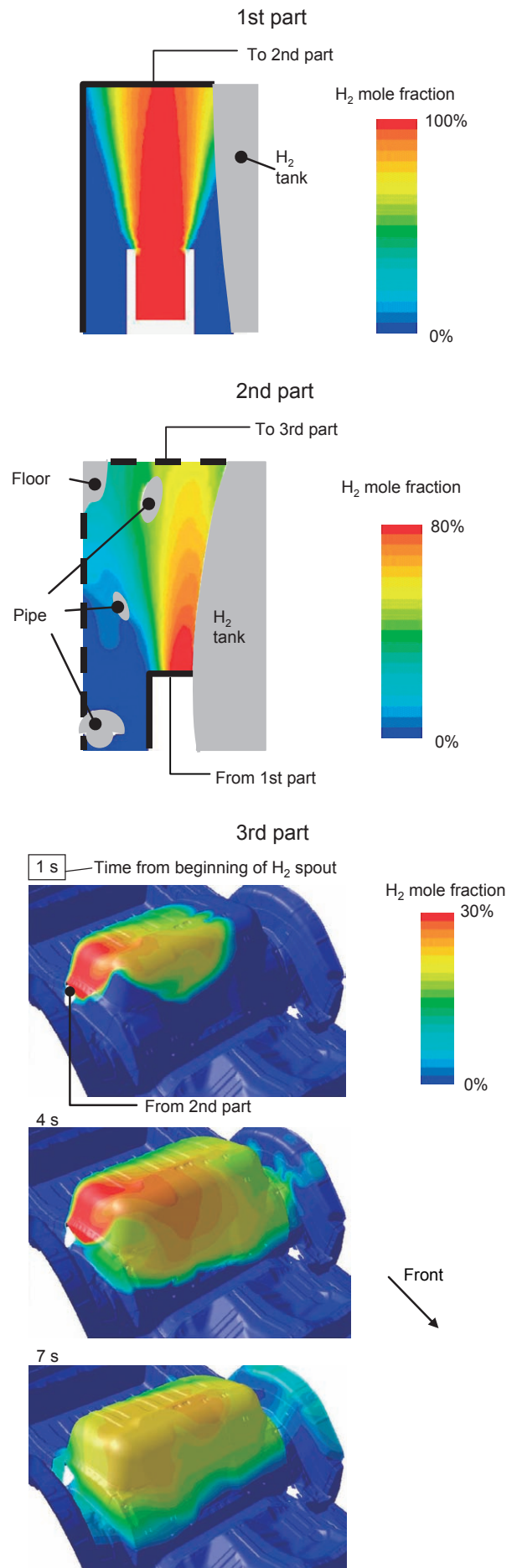
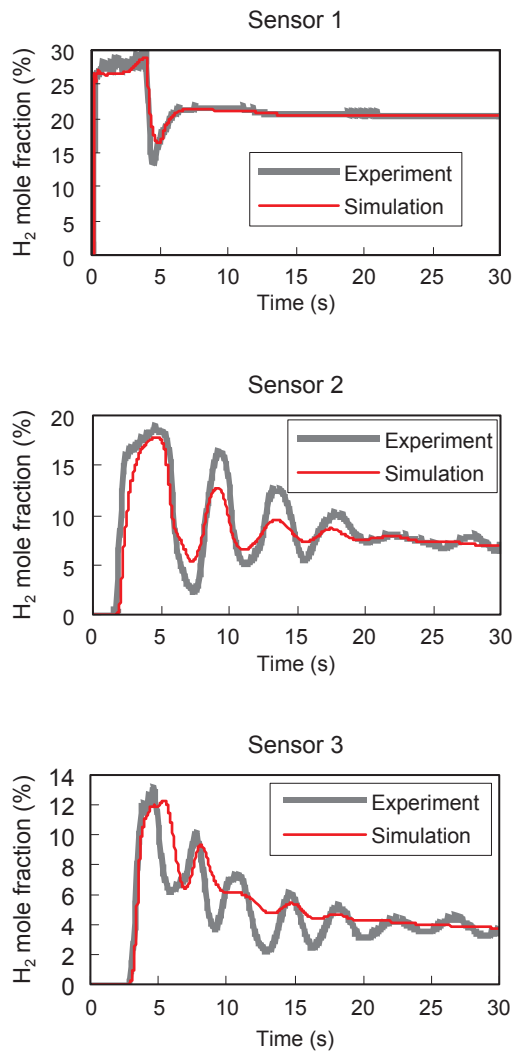


Fig. 9 Hydrogen mole fraction contours


 Fig. 10 H<sub>2</sub> mole fractions at sensor positions

## 6. まとめ

燃料電池電気自動車の設計検討に有用な水素拡散シミュレーション手法として三段分割計算手法を考案し、適切な乱流モデルを選定した。効果を検証した結果、以下の二点を確認した。

- (1) 全領域の計算時間は4日であり、目標の一週間以内を達成した。
- (2) 水素のピーク濃度および残留濃度が、実測値に対して5%以内で一致した。

また、噴出部近傍については、異なる水素の噴出条件に対しても精度良く計算できることを確認し、車両形状においてさまざまな漏洩事象の解析に汎用的に適用できる見通しを得た。

地球環境の未来において水素エネルギーへの期待は大きく、「見えない」水素を簡便に扱えることが望ましい。本研究をはじめ、水素を「見える」ようにする技術は着実に進化を遂げており、これらを活用することによって、水

素を制御、管理した車両およびシステム開発を加速させていきたい。

## 参考文献

- (1) Michael, R. S., Eric, S. G., Matthew, N. S.: Risk incurred by hydrogen escaping from containers and conduits, Proceedings of 1998 U.S. DOE Hydrogen Program Review, NREL/CP-570-25315 (1998)
- (2) Tchouvelev, A. V., Devaal, J., Cheng, Z., Corfu, R., Rozek, R., Lee, C.: CFD modeling of hydrogen dispersion experiments for SAE J2578 test methods development, 2nd International Conference on Hydrogen Safety (2007)
- (3) FLUENT Inc./FLUENT Asia Pacific: FLUENT6.3 ユーザーズガイド, 第25章, p.118 (2007)
- (4) 独立行政法人新エネルギー産業技術総合開発機構: 水素の有効利用ガイドブック, p.554-561 (2008)
- (5) 能美隆, 前川麻弥, 茂木俊夫: 水素イオンセンサ, 水素エネルギーシステム, Vol.33, No.2, p.54-59 (2008)

## 著者



松本 充功



清水 研一