

2009/07/10

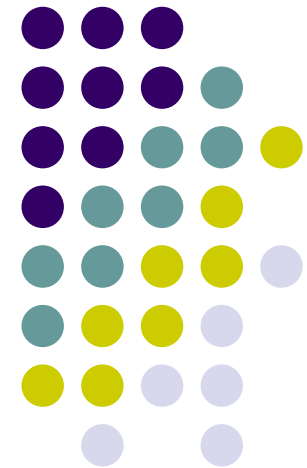
水素拡散シミュレーション

九州大学 大学院 機械工学部門

金山 寛

with

月川久義(西部ガス + D3)、Idris ISMAIL(D1)、中村嘉平(M1)





目次

- 研究背景・目的
- 数値解析手法
- 解析結果
- 結言
- 今後の課題



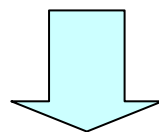
目次

- 研究背景・目的
- 数値解析手法
- 解析結果
- 結言
- 今後の課題



研究背景

- 近年，水素が炭化水素燃料に替わる新たな燃料として利用が進められている。
- 水素は危険な性質を持つ(着火に必要なエネルギーが小さい，可燃範囲が広いなど)。
- 水素利用社会の実現には「安全」が重要課題となる。

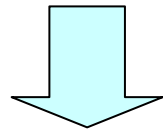


計算機上で水素の拡散挙動を解析し，安全性の向上に貢献する。



研究目的

- 漏洩した水素に対する検討は、直接着火にいたる危険性を防ぐものであり、水素脆化やシーリングの不具合に対するフェイルセーフとしても位置づけられる。
- 密閉度の高い空間では、たとえ小流量でも長時間漏洩すれば、危険性が大きい。



- そこで密閉度の高い室内のモデルとして、Hallway Modelと呼ばれる部分開放空間における水素拡散挙動の数値解析を行うことを目的とする。
- また、解析手法としてはBoussinesq近似を用いた熱対流方程式のアナロジーによって水素の拡散現象をモデル化し、有限要素法による解析を行う。この解析手法の精度検証も本研究の目的とする。



これまでの研究の発端

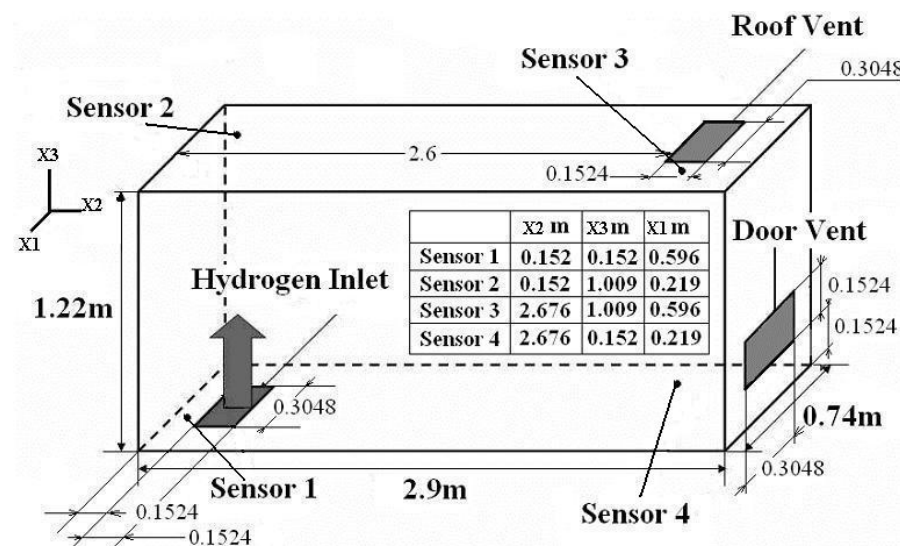
- 圧縮性、乱流など考慮したモデルでの解析 (Ex.Fluent , Phoenics)

Valdimir AGARANT, Zhong CHENG and Andrei TCHOUELEV : CFD modeling of hydrogen releases and dispersion in hydrogen energy station, Proceedings of the 15th World Hydrogen Energy Conference, 2004.

- 非圧縮性のBoussinesq近似を用いた熱対流モデルでの解析

Hiroshi KANAYAMA, Kengo MAEDA and Masayuki MINO : Finite element simulation of hydrogen dispersion, Proceedings of the 13th Annual Conference on Computational Fluid Dynamics, 2005.

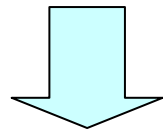
Hallway Model





現在までの研究の流れ

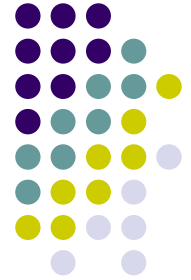
- 我々の初期の解析では, 実験値と比較して水素濃度が定量的に大きかった.
- 単一のコンピュータだけの計算だと大幅に計算時間がかかる.



- 境界条件の設定を見直し適切な設定をすることで, 解析結果が実験値に近づく.
- 並列計算により計算時間の短縮を図る.

Hiroshi KANAYAMA, Hisayoshi TSUKIKAWA, Stephane Boris NDONG-MEFANE and Osamu SAKURAGI: Finite element simulation of hydrogen dispersion by the analogy of the Boussinesq approximation, Journal of Computational Science and Technology, Vol. 2, No. 4, pp.643-654, 2008.

(Another paper submitted to JJIAM for parallel computation.)



目次

- 研究背景・目的
- **数値解析手法**
- 解析結果
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更前)
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更後)
 - ・ HDDM版による解析
- 結言
- 今後の課題

水素の拡散現象のモデル化



熱対流問題と水素拡散問題はともに基礎方程式が Navier-Stokes の方程式, 連続の式, 移流拡散方程式



Boussinesq 近似を用いた熱対流方程式のアナロジーによって水素の拡散現象をモデル化

水素拡散問題

- Navier-Stokes 方程式
- 連続の式
- 化学種保存則

未知関数

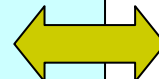
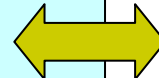
- u : 混合気体の流速
- p : 混合気体の圧力
- C : 水素の濃度

熱対流問題

- Navier-Stokes 方程式 (Boussinesq 近似)
- 連続の式
- エネルギー保存則

未知関数

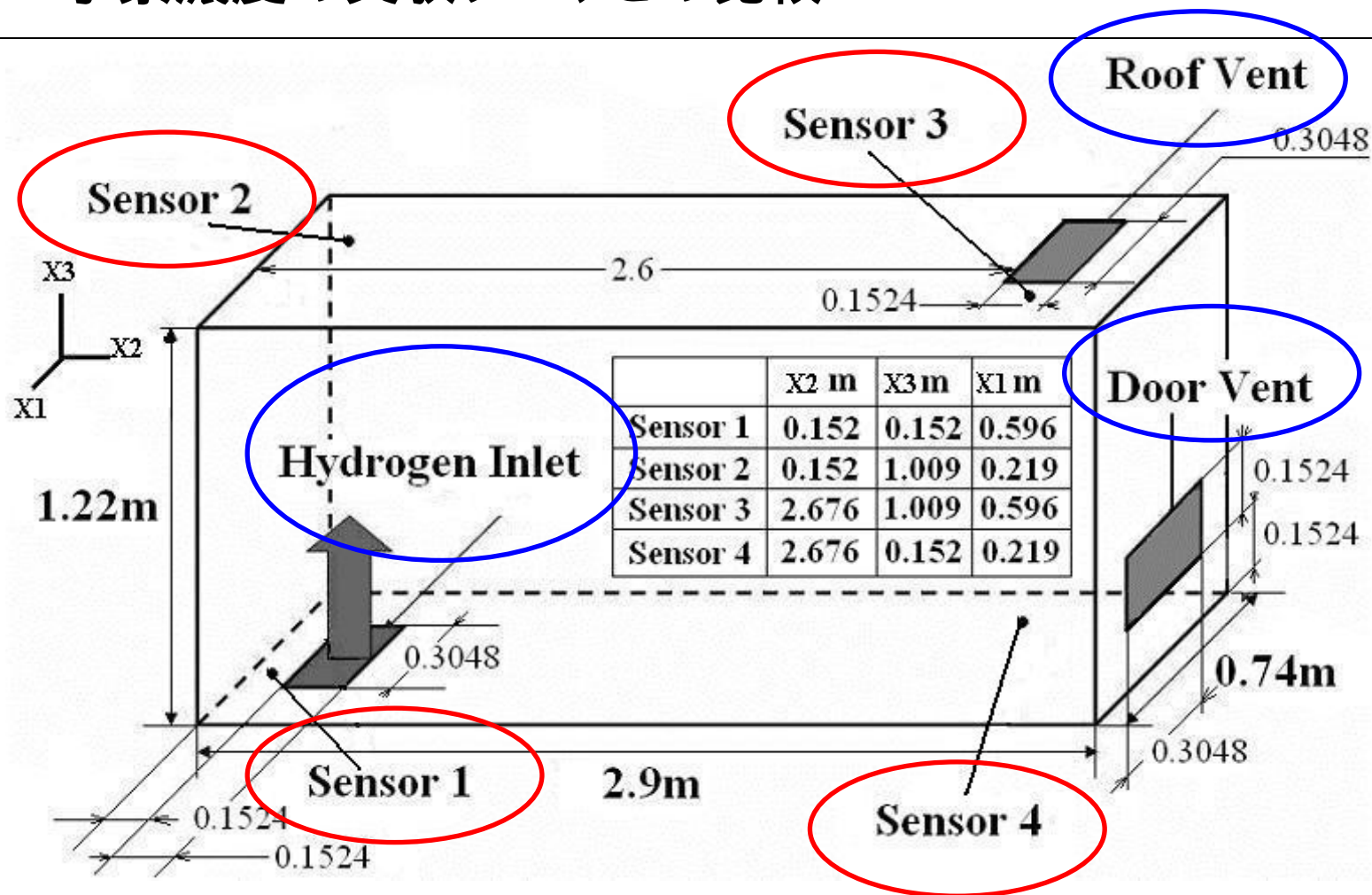
- u : 流速
- p : 圧力
- T : 温度



解析モデル (Hallway Model)



- Hydrogen Inlet部から流入した水素の拡散挙動を解析
- 水素濃度の実験データとの比較





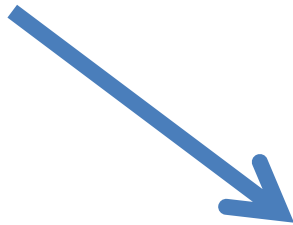
Hallway Modelの解析

- 1CPU版の非定常熱対流ソルバーを用いた解析と
並列計算が可能なHDDM(階層型領域分割法)版
ADVENTURE_sFlow熱対流ソルバーを用いた解析の
2種類の方法で解析

1CPU版
定常熱対流ソルバー



1CPU版
非定常熱対流ソルバー



HDDM版
定常熱対流ソルバー
ADV_sFlow



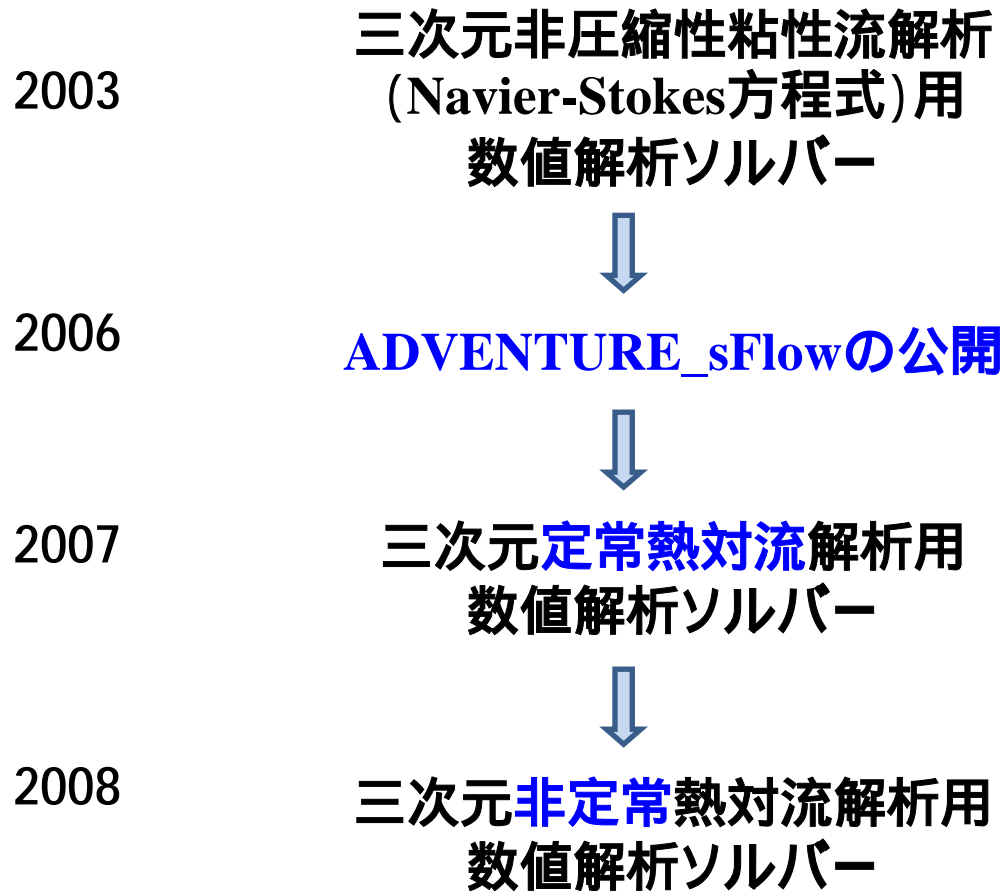
HDDM版
非定常熱対流ソルバー
ADV_sFlow

熱対流ソルバーの概要(HDDDM版)



- Navier-Stokes方程式と移流拡散方程式をBoussinesq近似により連成し, 熱対流方程式を扱う
- 定常, 非定常の解析が可能
 - 定常解析: 非線形反復にNewton法を用いる
 - 非定常解析: 時間方向を後退Euler法で近似
- 四面体1次要素に対応
- 安定化有限要素法を導入
- 反復解法としてGPBiCG法, BiCGSTAB法, BiCGSTAB2法のいずれかを用いる(解析時に選択)
- 階層型領域分割法(HDDDM)による負荷分散を行った並列処理が可能
- 並列処理ライブラリにMPI(Message Passing Interface)を採用

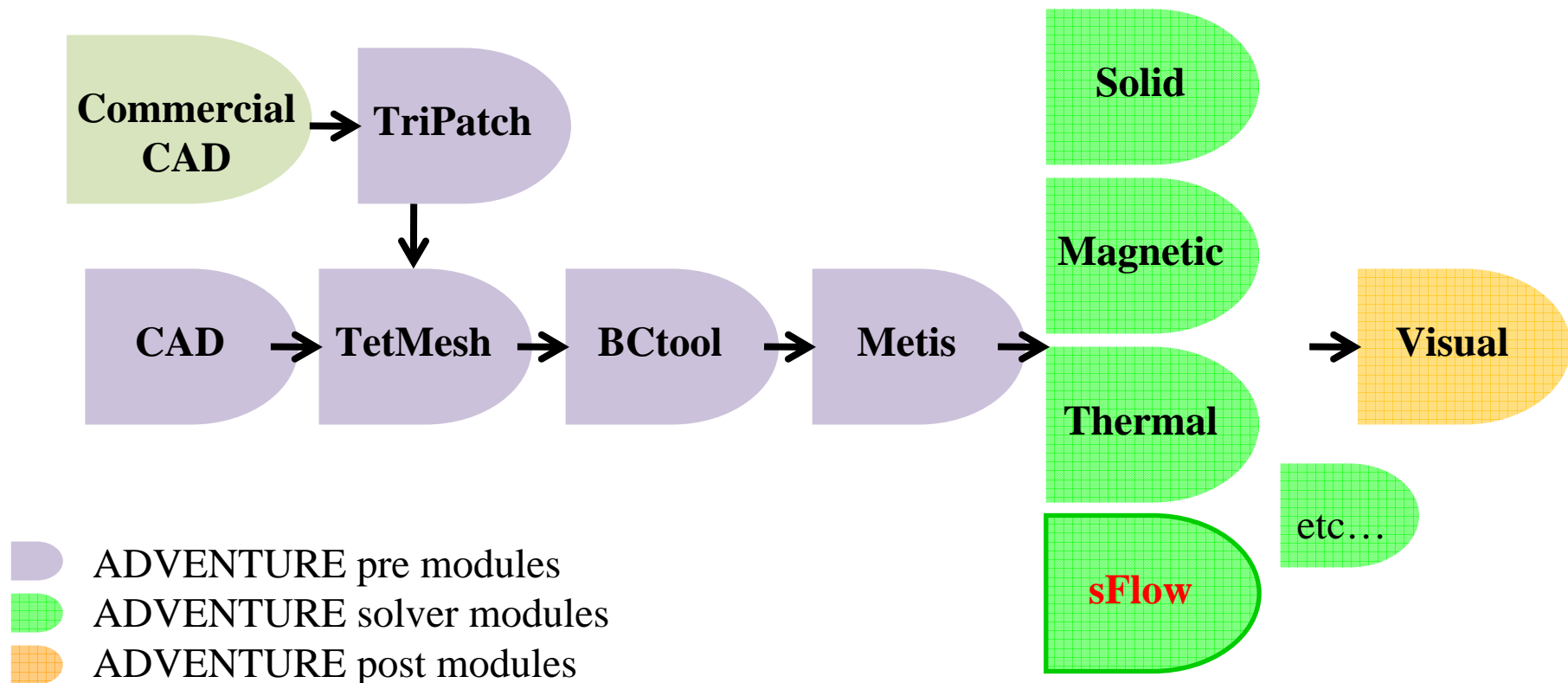
階層型領域分割法 (HDDM) を用いた 大規模解析用ソルバーの流れ



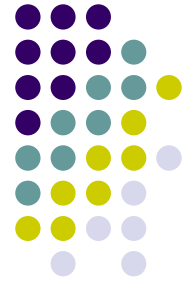
ADVENTUREシステム



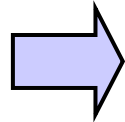
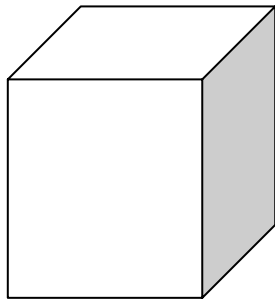
- 日本学術振興会未来開拓推進事業(1997年8月～2002年3月)
以後ADVENTUREプロジェクトとして継続中
- オープンソースのフリーウェア
- 2006年7月にADVENTURE_sFlowを公開



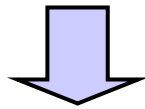
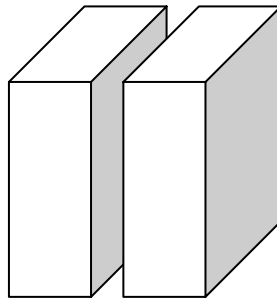
階層型領域分割法 (HDDM)



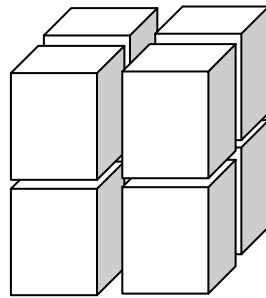
Whole domain



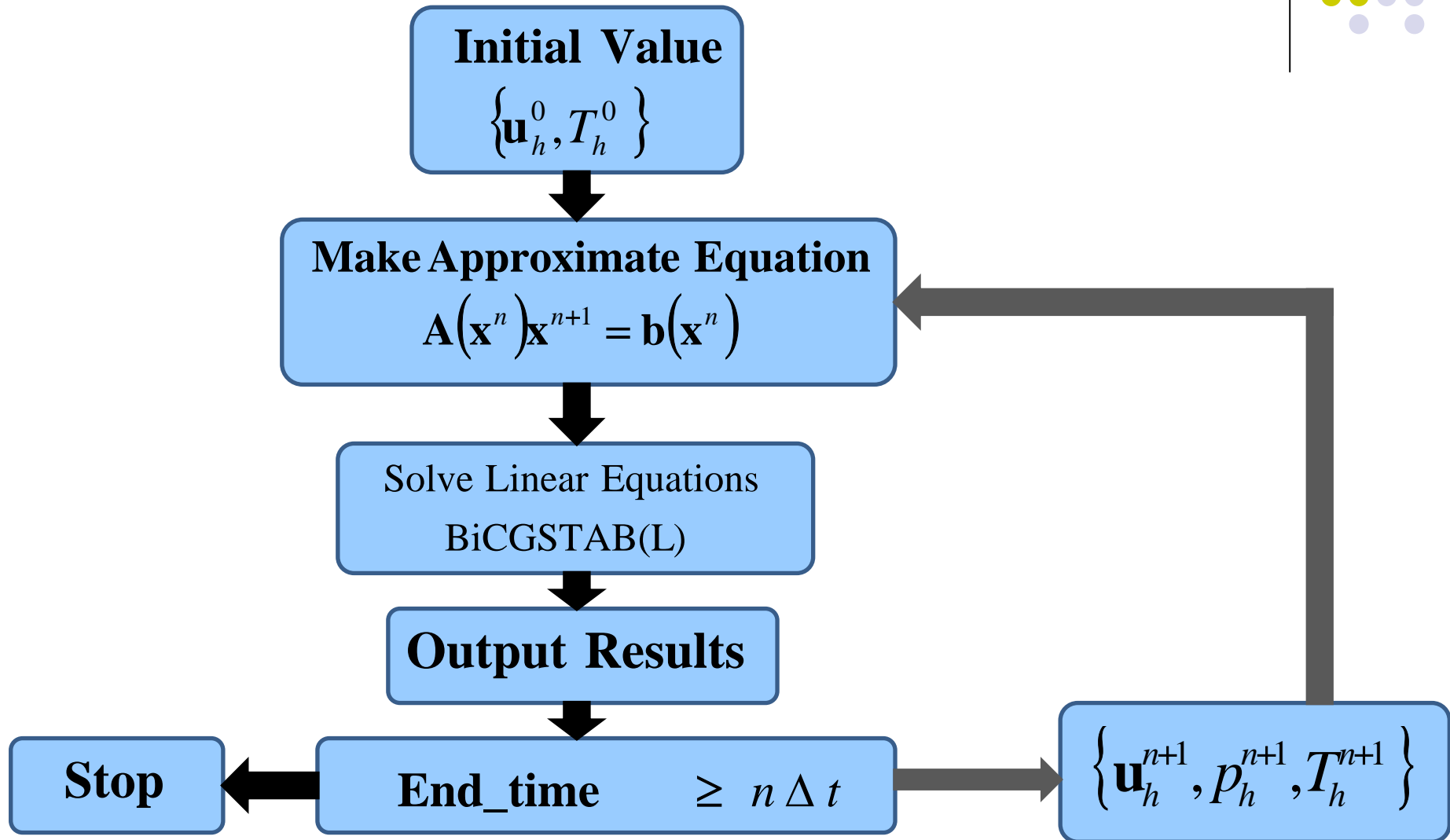
Parts



Subdomains

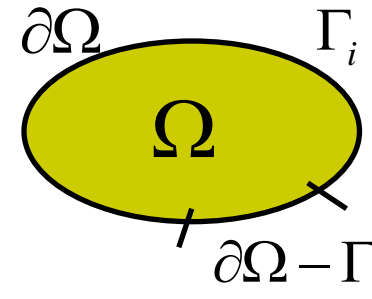


解析の流れ(1CPU版)



基礎方程式

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - 2\nu \nabla \cdot D(\mathbf{u}) + \nabla p = -\beta C \mathbf{g} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \partial_t C + \mathbf{u} \cdot \nabla C - a \Delta C = S \end{array} \right.$$



in $\Omega \times (0, T)$

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} \quad \text{on } \Gamma_1 \times (0, T)$$

$$C = \hat{C} \quad \text{on } \Gamma_2 \times (0, T)$$

$$\sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} n_j = 0 \quad \text{on } (\partial\Omega - \Gamma_1) \times (0, T) \quad a \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad \text{on } (\partial\Omega - \Gamma_2) \times (0, T)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^0, C = C^0 \quad \text{in } \Omega \quad \text{at } t = 0$$

\mathbf{u} : 流速 [m/s]

p : 密度で正規化した圧力 [m²/s²]

C : 質量濃度 [mass%]

ν : 動粘性係数 [m²/s]

a : 拡散係数 [m²/s]

\mathbf{g} : 重力加速度 [m/s²]

β : 膨張係数 [-]

S : ソース項 [1/s]

$$D_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

: 変形速度テンソル [1/s]

有限要素近似

領域 の4面体分割

- 速度, 濃度, 圧力を4面体要素で近似

- 空間方向の離散化

- ・ 1CPU版 (BP要素)

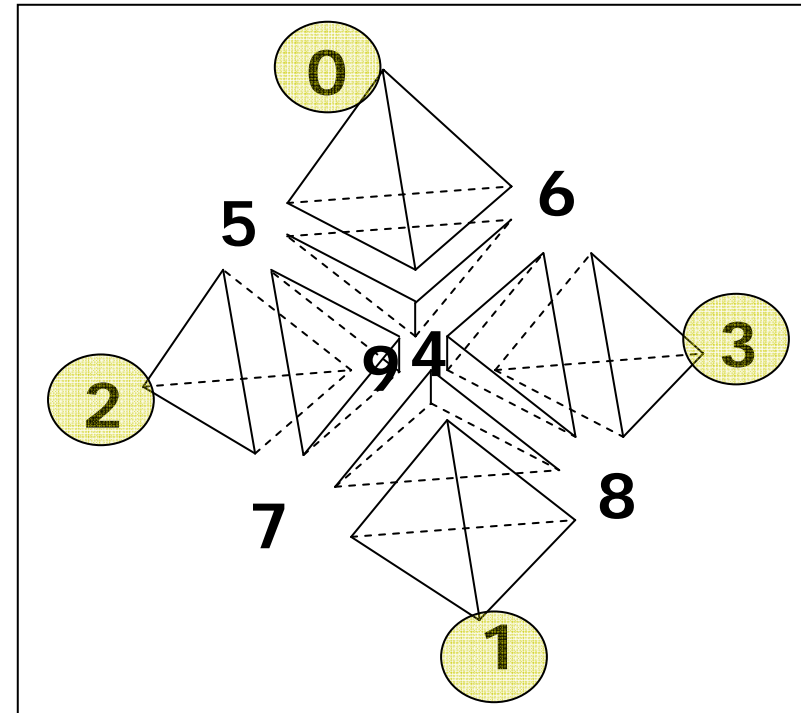
u 速度 } 小4面体1次
 C 濃度 }

p 圧力 4面体1次

- ・ HDDM版 4面体1次

- 時間方向の離散化

後退 *Euler* 法



小4面体: 節点[0 ~ 9]からなる8つの4面体
4面体: 節点[0 ~ 3]からなる1つの4面体

安定化有限要素法(1CPU版)

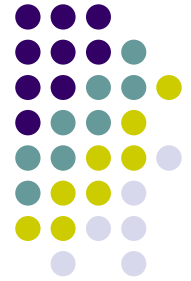


基礎方程式 弱形式 有限要素法, 後退Euler法による離散化
安定化項の導入

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\mathbf{u}_h^{(n+1)} - \mathbf{u}_h^{(n)}}{\Delta t}, \mathbf{v}_h \right) + \left((\mathbf{u}_h^{(n)} \cdot \nabla) \mathbf{u}_h^{(n+1)}, \mathbf{v}_h \right) + \left(2\nu D(\mathbf{u}_h^{(n+1)}), D(\mathbf{v}_h) \right) - \left(\nabla \cdot \mathbf{v}_h, p_h^{(n+1)} \right) \\
 & + \left(\mathbf{g} \beta C_h^{(n+1)}, \mathbf{v}_h \right) + \sum_{K \in \mathfrak{T}_{h/2}} \tau_K^{NS} \left(\frac{\mathbf{u}_h^{(n+1)} - \mathbf{u}_h^{(n)}}{\Delta t} + (\mathbf{u}_h^{(n)} \cdot \nabla) \mathbf{u}_h^{(n+1)} + \nabla p_h^{(n+1)} + \mathbf{g} \beta C_h^{(n+1)}, \right. \\
 & \quad \left. (\mathbf{u}_h^{(n)} \cdot \nabla) \mathbf{v}_h - \nabla q_h \right)_K \\
 & - \left(\nabla \cdot \mathbf{u}_h^{(n+1)}, q_h \right) + \sum_{K \in \mathfrak{T}_{h/2}} \tau_K^{CO} \left(\nabla \cdot \mathbf{u}_h^{(n+1)}, \nabla \cdot \mathbf{v}_h \right)_K \\
 & + \left(\frac{C_h^{(n+1)} - C_h^{(n)}}{\Delta t}, \theta_h \right) + \left(\mathbf{u}_h^{(n)} \cdot \nabla C_h^{(n+1)}, \theta_h \right) + \left(a \nabla C_h^{(n+1)}, \nabla \theta_h \right) \\
 & + \sum_{K \in \mathfrak{T}_{h/2}} \tau_K^{AD} \left(\frac{C_h^{(n+1)} - C_h^{(n)}}{\Delta t} + \mathbf{u}_h^{(n)} \cdot \nabla C_h^{(n+1)}, \mathbf{u}_h^{(n)} \cdot \nabla \theta_h \right)_K \\
 & = (S, \theta_h) + \sum_{K \in \mathfrak{T}_{h/2}} \tau_K^{AD} (S, \mathbf{u}_h^{(n)} \cdot \nabla \theta_h)_K
 \end{aligned}$$

- ・上付きの添え字 $n, n+1$ は、対応する時間ステップを表す
- ・下付きの添え字 h は有限要素近似を表す

安定化パラメータ(1CPU版)



解の不安定性を取り除くため以下の安定化項を導入

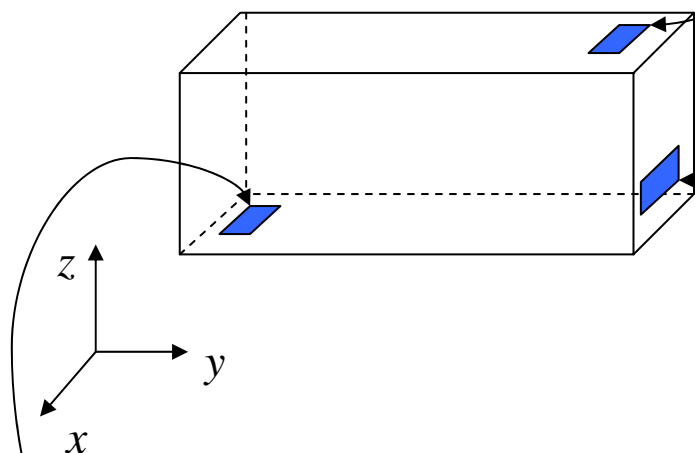
$$\tau_K^{NS} = \min \left\{ \frac{\Delta t}{2}, \frac{h_K}{2|\mathbf{u}_h^{(n)}|_\infty}, \frac{h_K^2}{24\nu} \right\}$$

$$\tau_K^{AD} = \min \left\{ \frac{\Delta t}{2}, \frac{h_K}{2|\mathbf{u}_h^{(n)}|_\infty}, \frac{h_K^2}{12a} \right\}$$

$$\tau_K^{CO} = \min \left\{ \frac{\lambda |\mathbf{u}_h^{(n)}|_\infty^2 h_K^2}{12\nu}, \lambda |\mathbf{u}_h^{(n)}|_\infty h_K \right\}$$

K : 小要素
 h_K : 小要素の直径
 $|\mathbf{u}_h^{(n)}|_\infty$: 小要素での流速の最大値
 $\lambda = 1$

境界条件



Roof vent 部について

$$\sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} n_j = 0 \quad [\text{m}^2/\text{s}^2]$$

$$a \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad [\text{m/s}]$$

Door vent 部について

$$\sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} n_j = 0 \quad [\text{m}^2/\text{s}^2]$$

$$C = 0 \quad [\text{mass}\%]$$

壁面, 床, 天井部について

$$u_x = u_y = u_z = 0 \quad [\text{m/s}]$$

$$a \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad [\text{m/s}]$$

Hydrogen inlet 部について

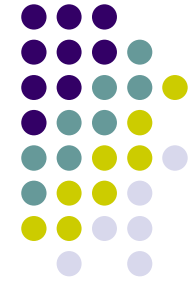
流れ場: $u_x = 0, u_y = 0, u_z = 0.02 \quad [\text{m/s}]$
 濃度: $C = 100/14.4 = 6.94 \quad [\text{mass}\%]$

変更前濃度: $C=100 \quad [\text{mass}\%]$

物性値

動粘性係数: $= 1.05 \times 10^{-4} \quad [\text{m}^2/\text{s}]$
 拡散係数: $a = 6.1 \times 10^{-5} \quad [\text{m}^2/\text{s}]$
 浮力に関する係数: $= 13.4 \quad [-]$
 重力加速度: $\mathbf{g} = (0.0, 0.0, -9.8) \quad [\text{m/s}^2]$

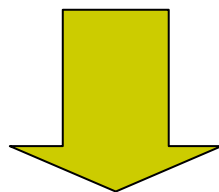
Hydrogen inlet 部の濃度の変更について



過去の解析ではHydrogen inlet 部の濃度の境界条件を
 $C=1.0(100\text{mass}\%)$ と与えていたが、

空気と水素の密度比 $1.2043/0.083804 = 14.4$ で割った値

$C=1.0/14.4=0.0694=6.94\%$ が 適切な境界条件ではないのかと考え、



水素(293K)の密度 : $\rho_1 = 0.083804 \text{ kg/m}^3$

空気(293K)の密度 : $\rho_2 = 1.2043 \text{ kg/m}^3$

Hydrogen inlet 部の濃度 $C=6.94[\text{mass}\%]$ と指定

外力の評価 (の値について) (1/2)



$$\text{外力項} : \mathbf{g} \left(1 - \frac{\rho_{air}}{\rho} \right) \longleftrightarrow -\beta C \mathbf{g}$$

$$\text{混合気体の密度} \quad \rho = \frac{P}{[CR_{H_2} + (1-C)R_{air}]T}, (P = p\rho)$$

P : 正規化していない圧力 [Pa]

T : 絶対温度 [K]

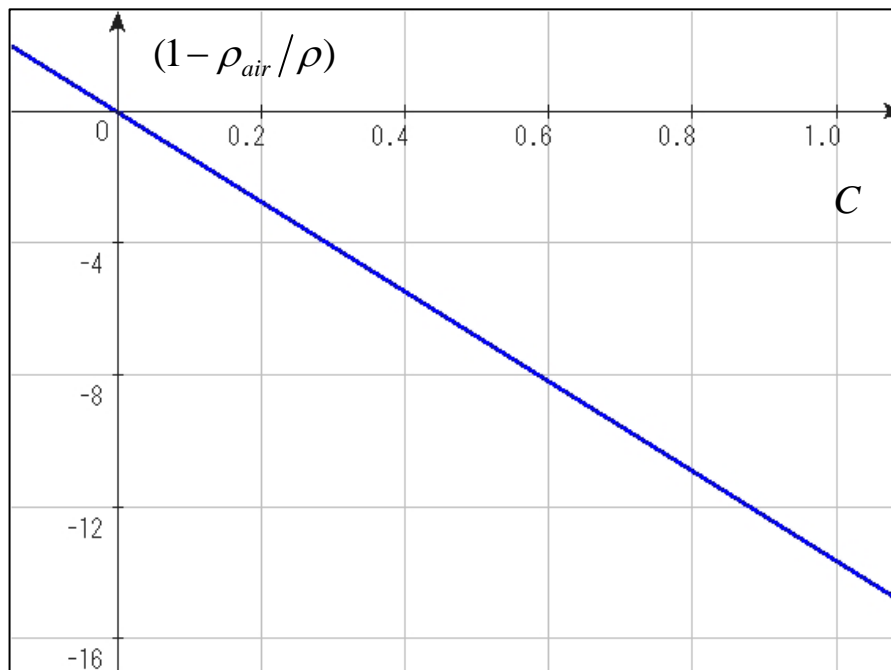
R_{H_2} : 水素のガス定数 [J/(kg·K)]

R_{air} : 空気のガス定数 [J/(kg·K)]

外力の評価(の値について) (2/2)



質量濃度 C と $(1 - \frac{\rho_{air}}{\rho})$ のグラフ



$$\rho = \frac{P}{[CR_{H_2} + (1 - C)R_{air}]T}$$

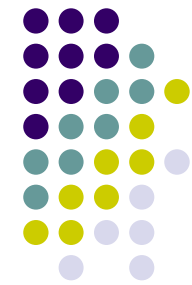
$$\begin{aligned}\rho_{air} &= 1.209 \text{ [kg/m}^3\text{]} \\ R_{H_2} &= 4,122 \text{ [J/(kg} \cdot \text{K)]} \\ R_{air} &= 287 \text{ [J/(kg} \cdot \text{K)]} \\ T &= 293 \text{ [K]} \\ P &= 1.01 \times 10^5 \text{ [Pa]}\end{aligned}$$



浮力に関する係数として

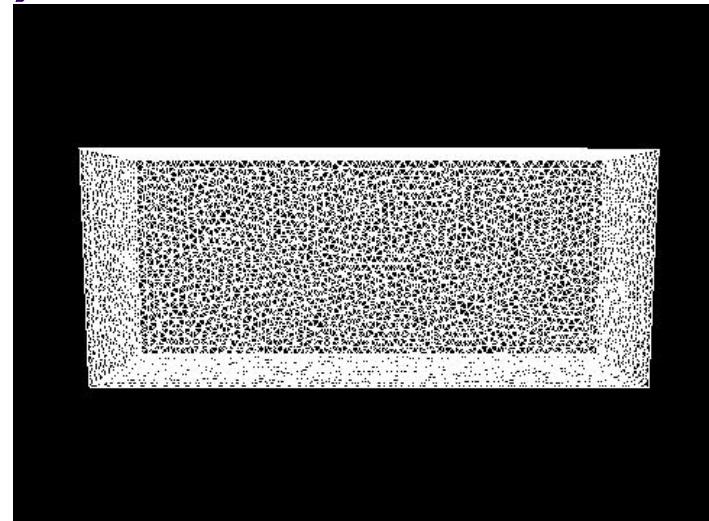
$$\beta = 13.4 \text{ [-]}$$

解析条件 (1CPU版)



メッシュ

- ・ 要素数: 165,434
- ・ 節点数: 235,245
- ・ 自由度: 870,447



メッシュ図

ソルバー

- ・ 非定常反復の各ステップの連立1次方程式の解法は BiCGSTAB(L)法
- ・ ILU前処理 (加速係数:1.05)
- ・ 収束条件: 相対残差が 1.0×10^{-6} 以下

計算機

Core 2 Duo 2.4 [GHz]
メモリー 4 [Gbyte]

初期条件 : $u_x = u_y = u_z = 0$
 $C = 0$

解析条件 (HDDM版)



メッシュ

モデル1

要素数: 527,109

節点数: 92,062

自由度: 460,310

モデル2

要素数: 1,155,450

節点数: 198,390

自由度: 991,950

モデル3

要素数: 11,540,027

節点数: 1,894,757

自由度: 9,473,785

計算条件

非定常解析 反復計算 GPBiCG法

収束判定: 相対残差の2ノルムが 1.0×10^{-6} 以下

解析例 DD1. モデル1 $t = 1.0[s]$, $T = 300[s]$

解析例 DD2. モデル2 $t = 1.0[s]$, $T = 300[s]$

計算機

1台あたり

CPU: Core 2 Duo 2.4GHz

Memory 8GB

× 8台



解析条件の比較

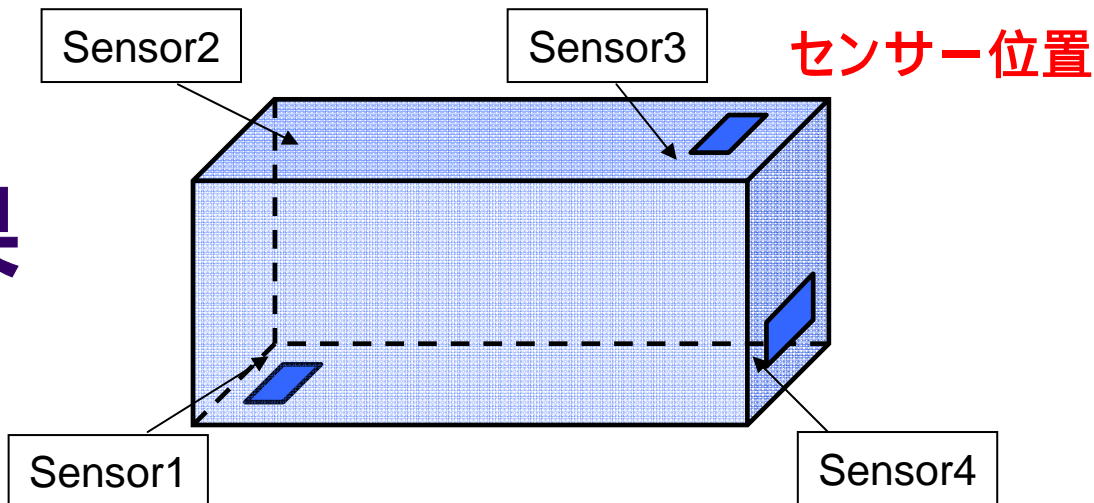
ソルバー	DOF	Timestep	Total run time	CPU数
1CPU版 (濃度変更前)	870,447	0.2s	200 s	1
1CPU版 (濃度変更後)	870,447	0.5 s	300 s	1
1CPU版 (濃度変更後)	870,447	1.0 s	300 s	1
HDDM版	460,310 (モデル1)	1.0 s	300 s	8
HDDM版	991,950 (モデル2)	1.0 s	300 s	8
HDDM版	11,540,027 (モデル3)	1.0 s	200 s	8



目次

- 研究背景・目的
- 数値解析手法
- **解析結果**
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更前)
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更後)
 - ・ HDDDM版による解析
- 結言
- 今後の課題

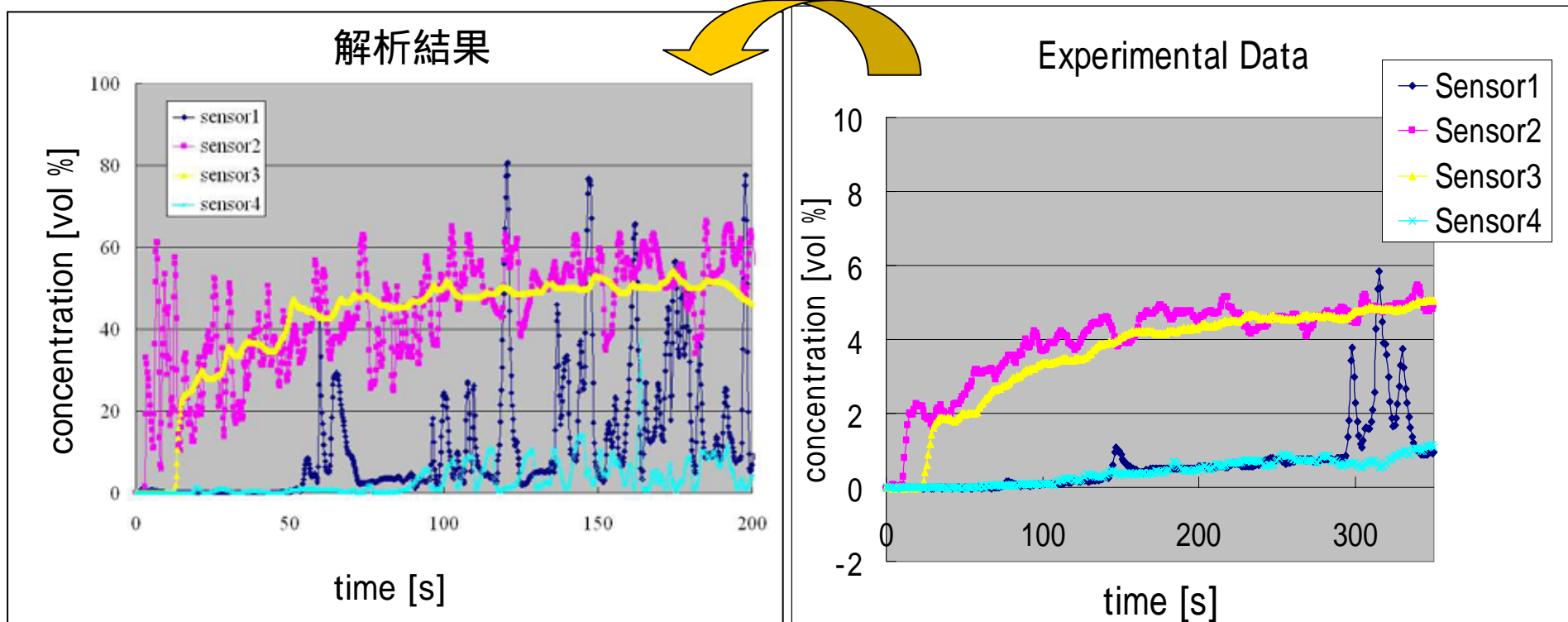
解析結果



$\Delta t = 0.2 \text{ s}$

濃度約10倍

提供：工学研究院地球資源システム
工学部門 井上雅弘先生





目次

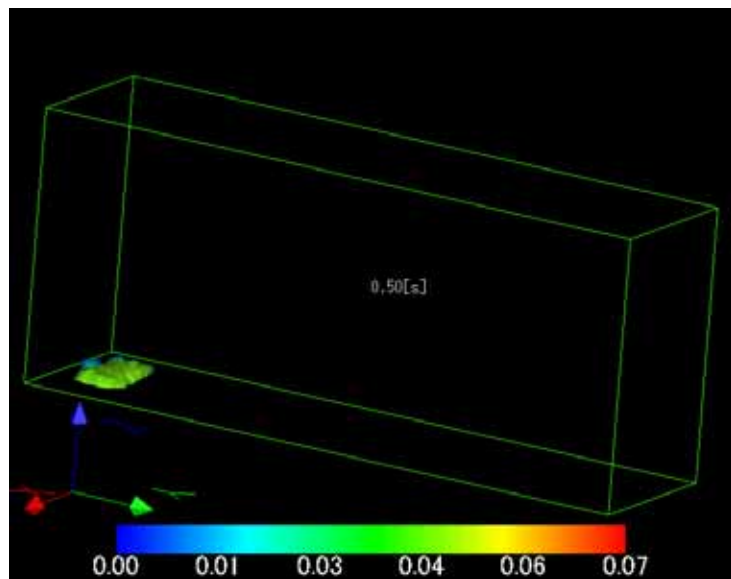
- 研究背景・目的
- 数値解析手法
- **解析結果**
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更前)
 - ・ **1CPU版による解析(濃度変更後)**
 - ・ HDDDM版による解析
- 結言
- 今後の課題

解析結果(水素体積濃度の可視化)

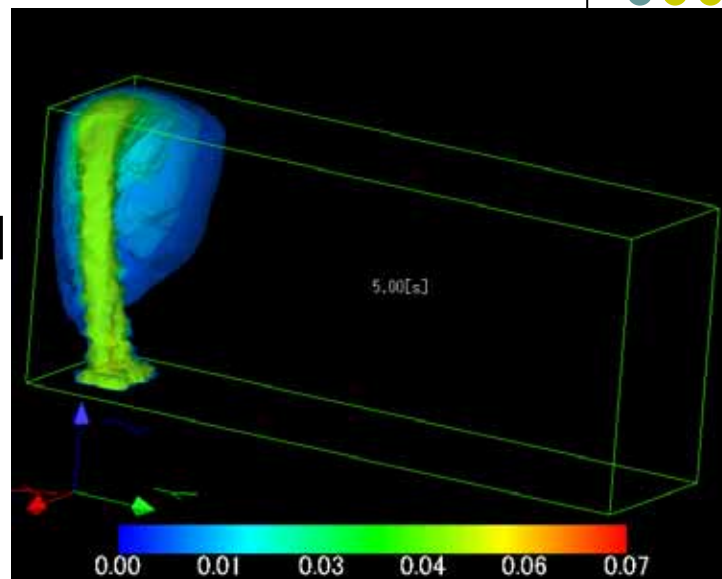
$\Delta t = 0.5 \text{ s}$



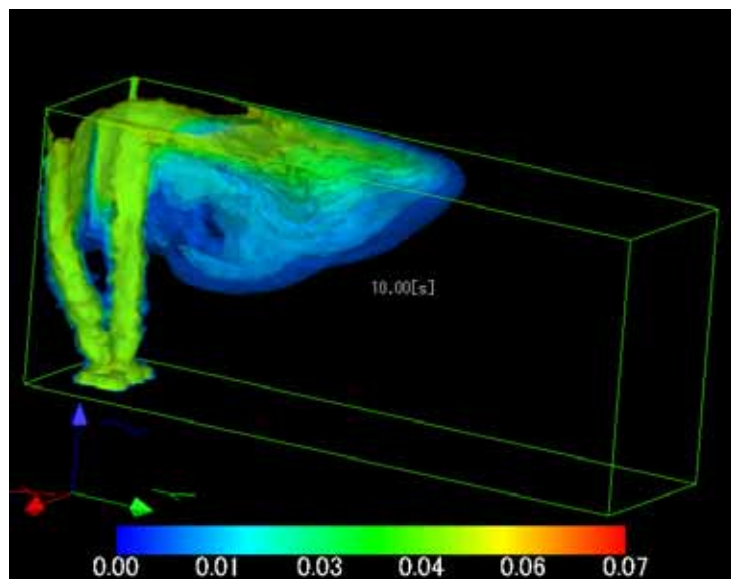
0.5[s]



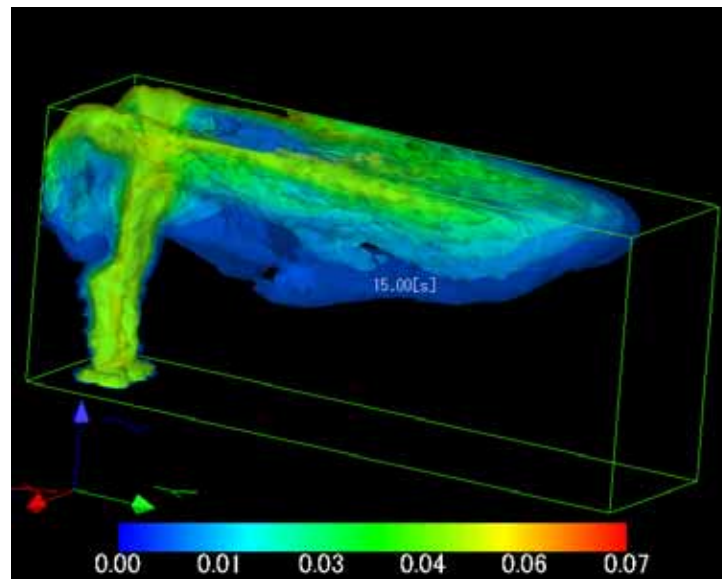
5[s]



10[s]



15[s]

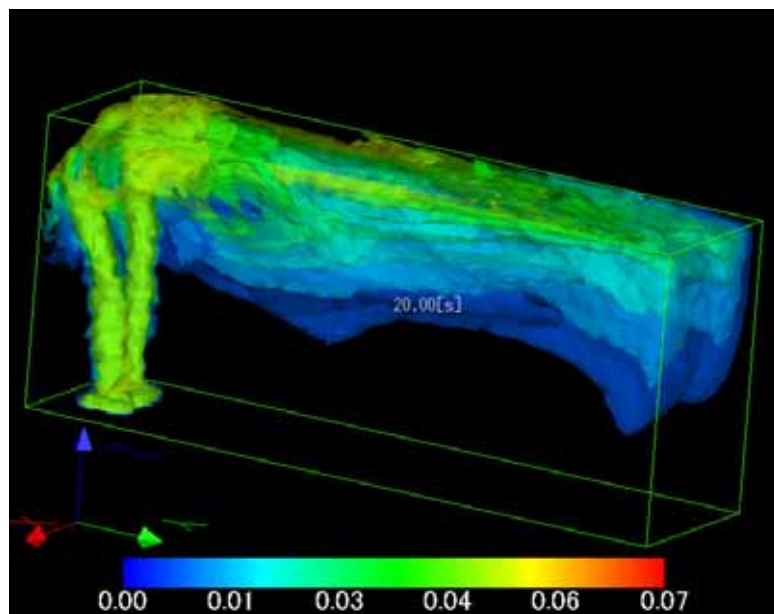


解析結果(水素体積濃度の可視化)

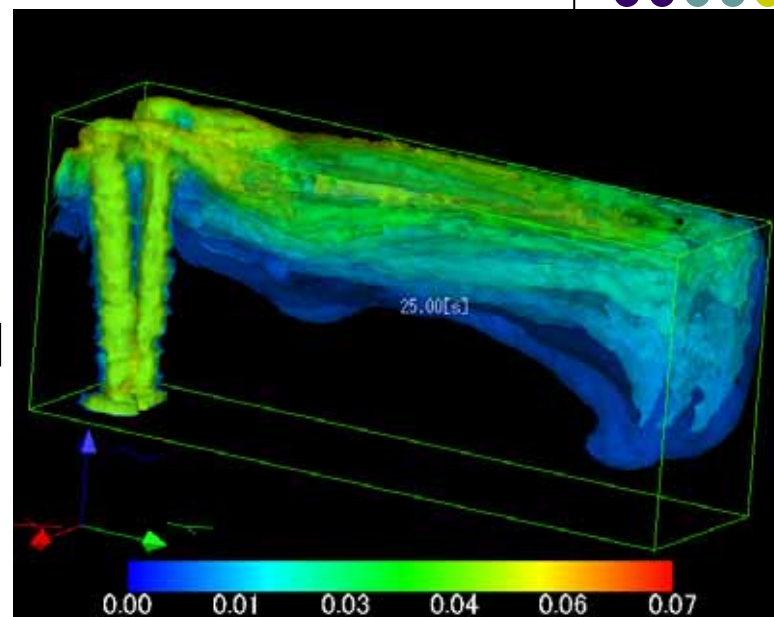
$\Delta t = 0.5 \text{ s}$



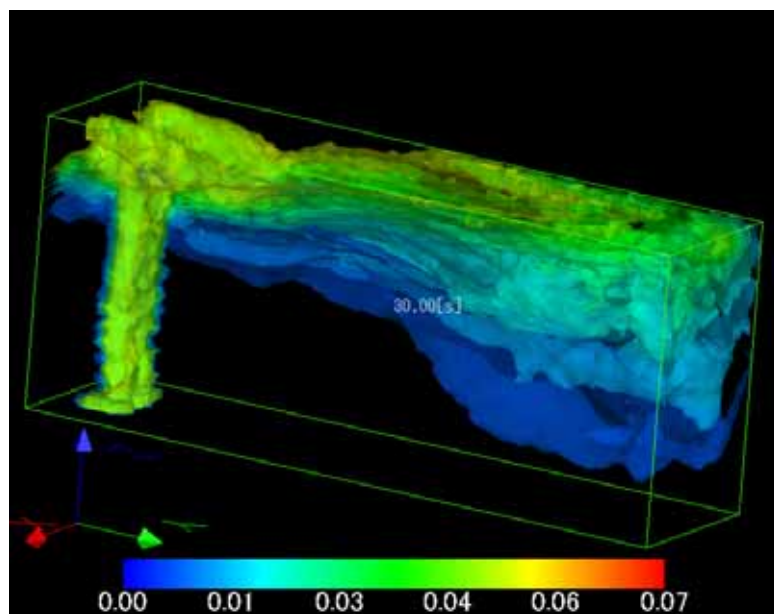
20[s]



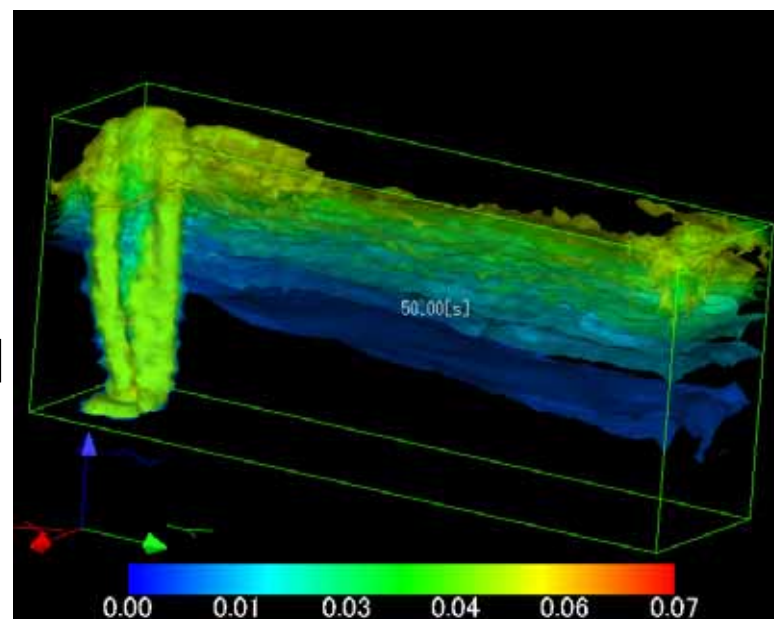
25[s]



30[s]



50[s]

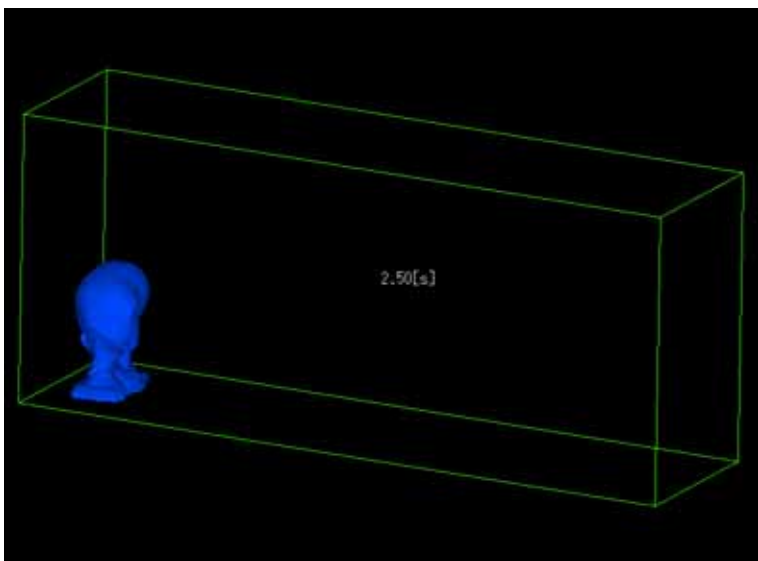


解析結果(水素体積濃度:4%等濃度面)

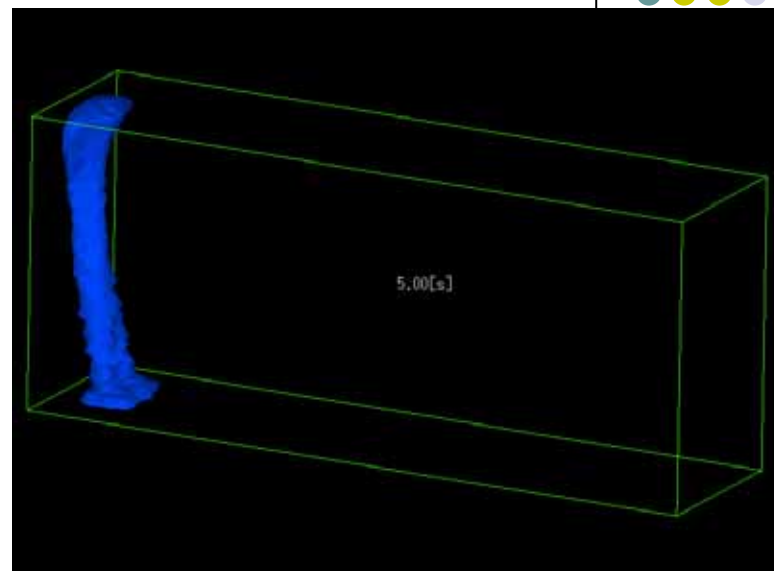
$\Delta t = 0.5 \text{ s}$



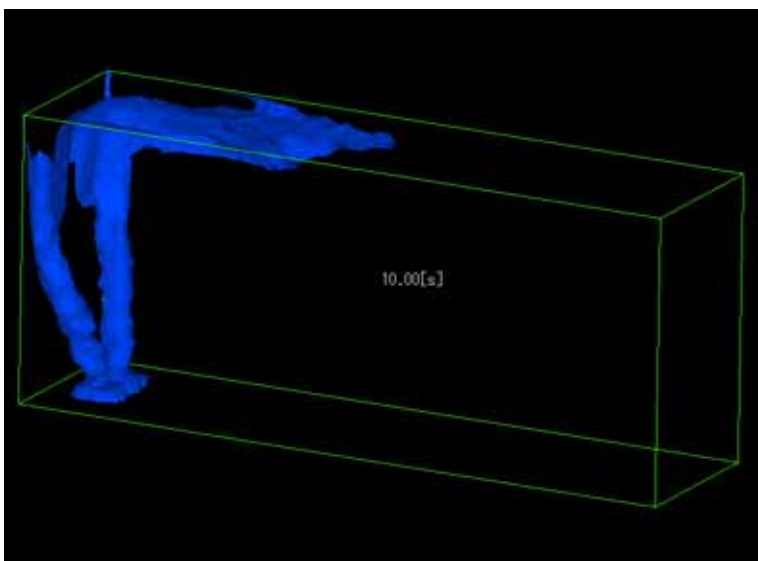
2.5[s]



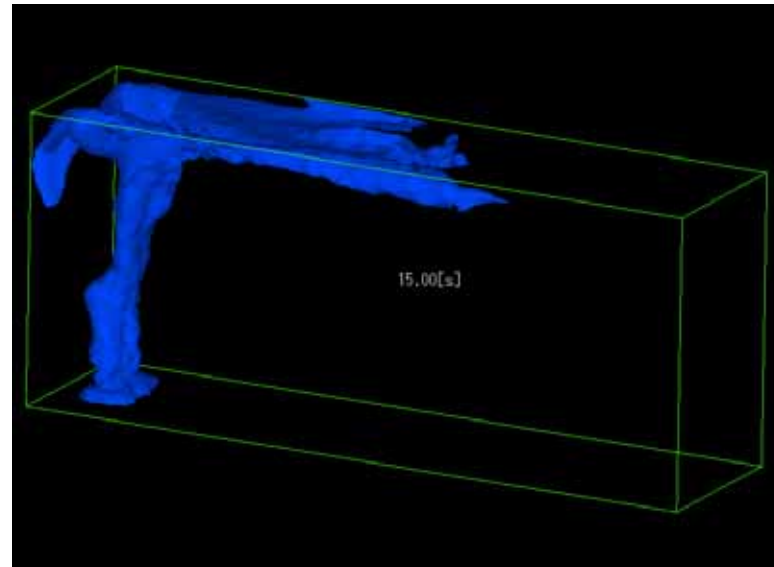
5[s]



10[s]



15[s]

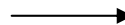
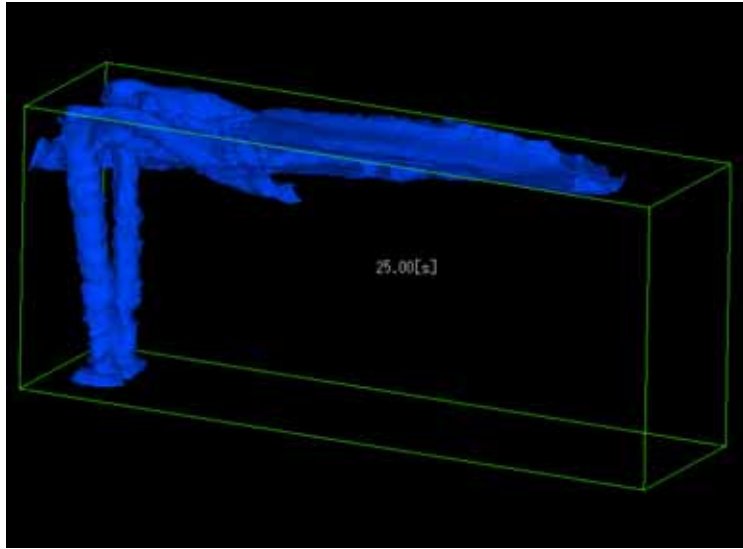


解析結果(水素体積濃度:4%等濃度面)

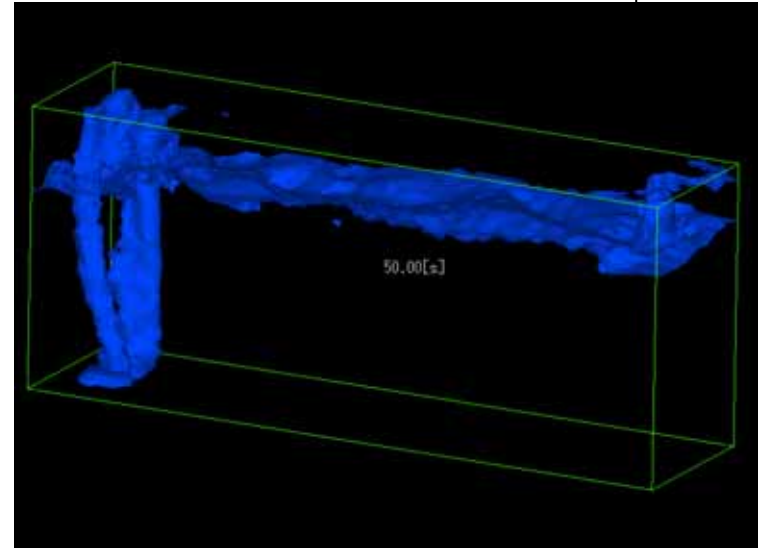
$\Delta t = 0.5 \text{ s}$



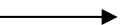
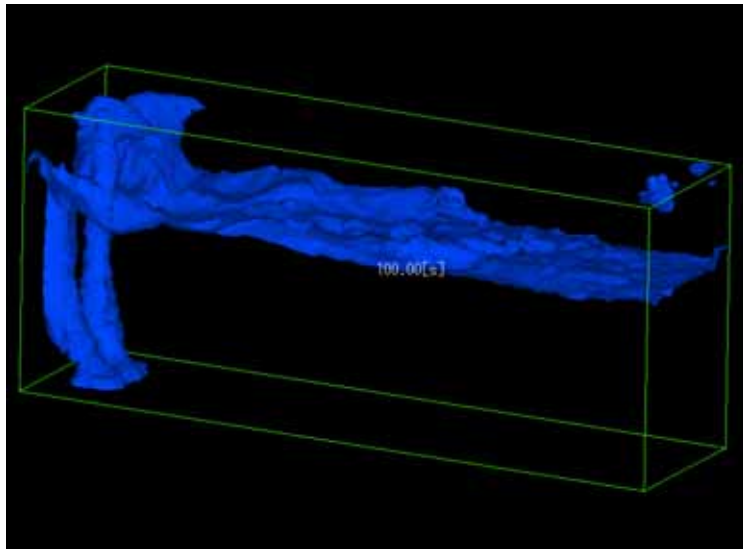
25[s]



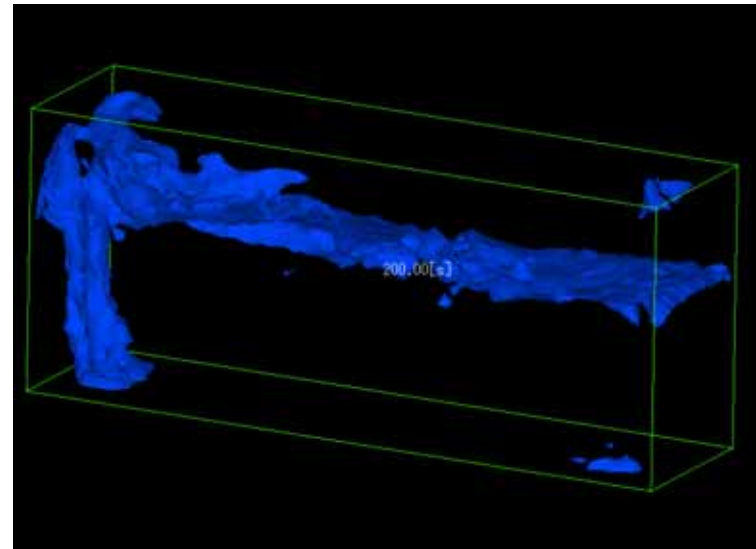
50[s]



100[s]



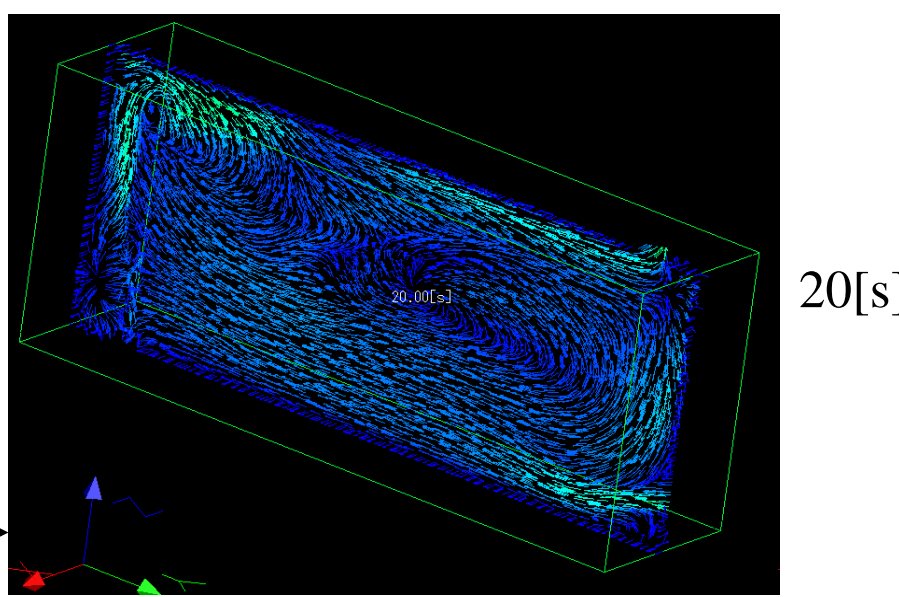
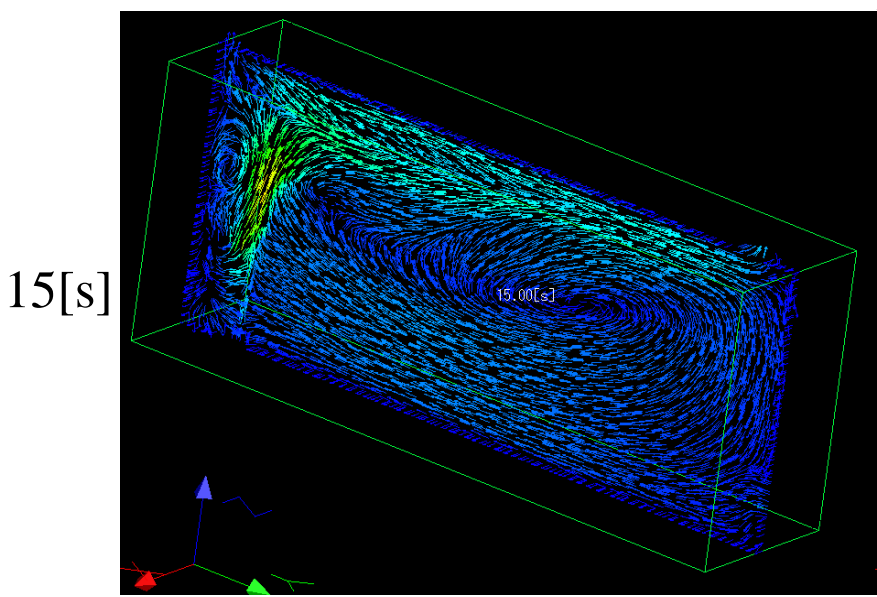
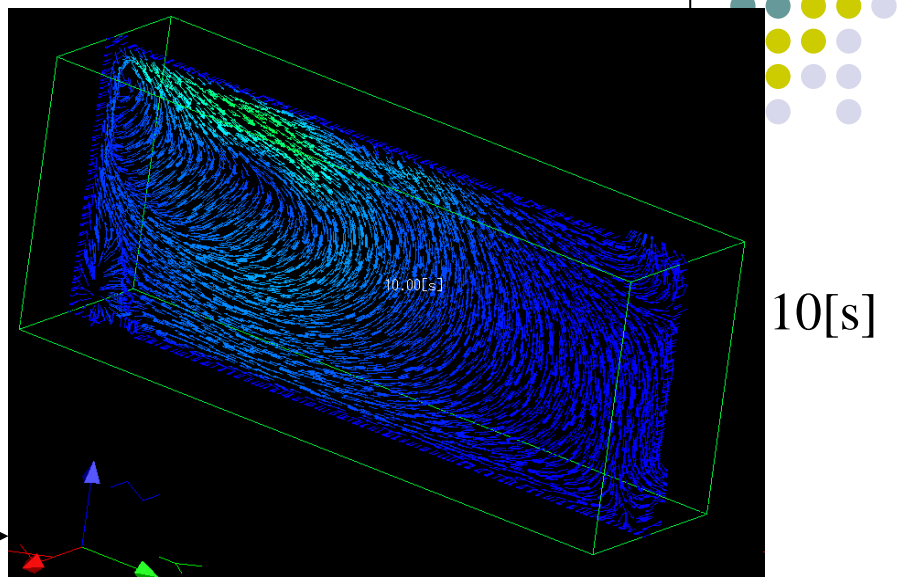
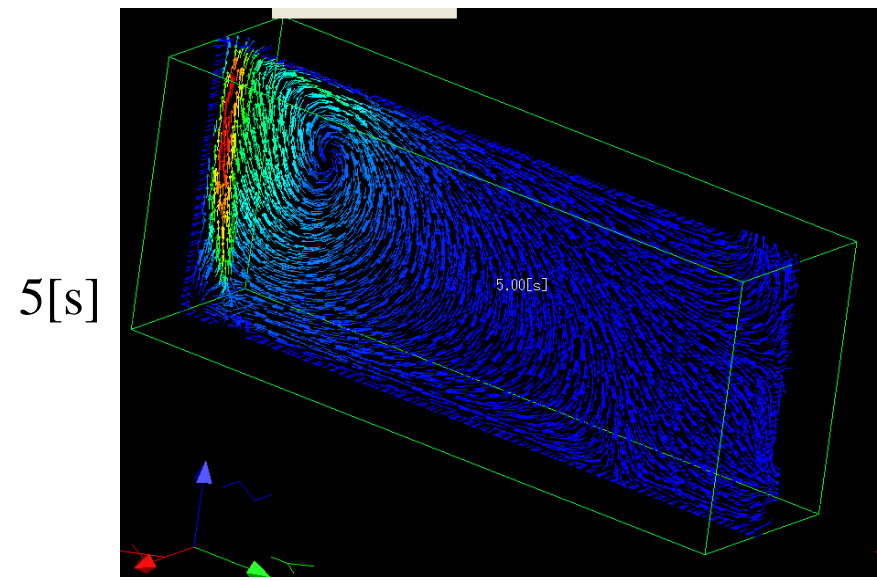
200[s]



解析結果(速度ベクトルの可視化)



$\Delta t = 0.5 \text{ s}$

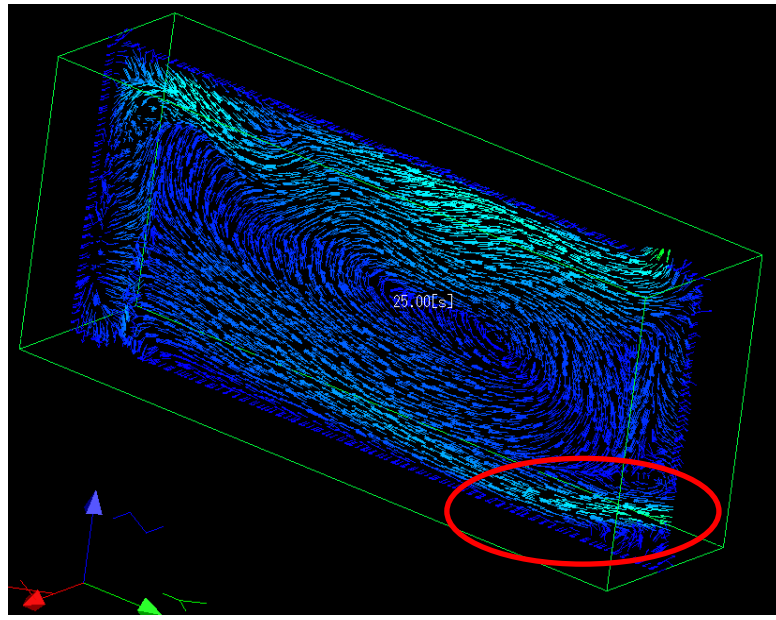


解析結果(速度ベクトルの可視化)

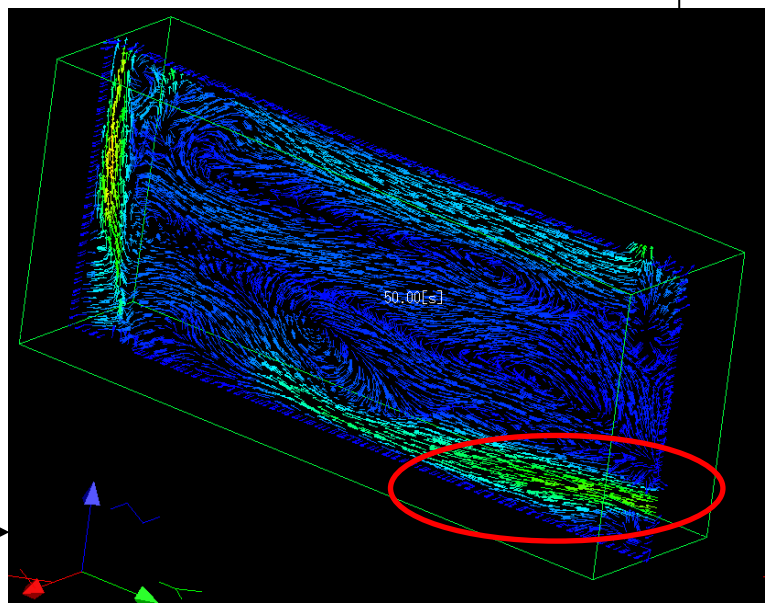


$\Delta t = 0.5 \text{ s}$

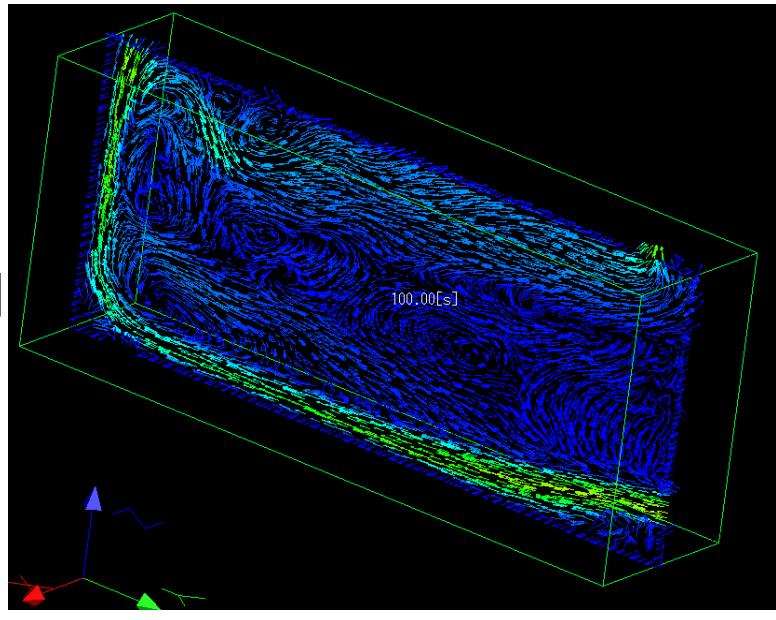
25[s]



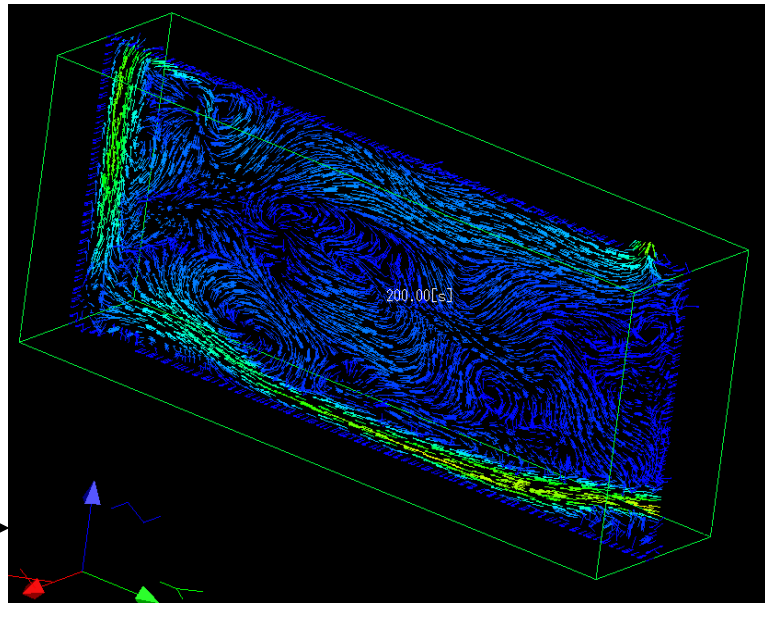
50[s]



100[s]



200[s]

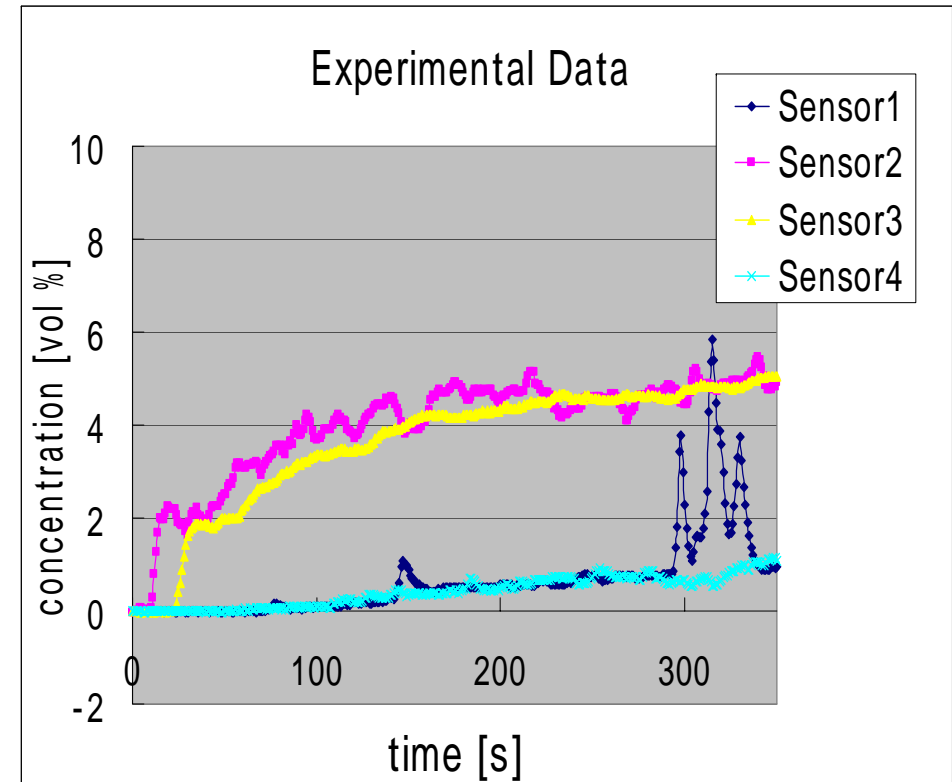
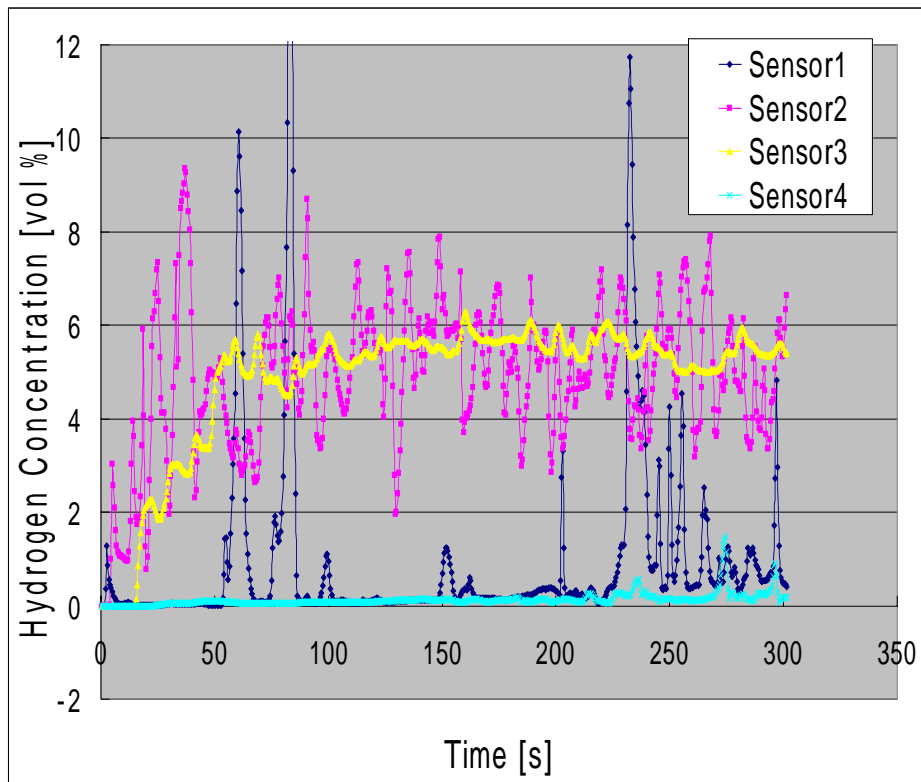
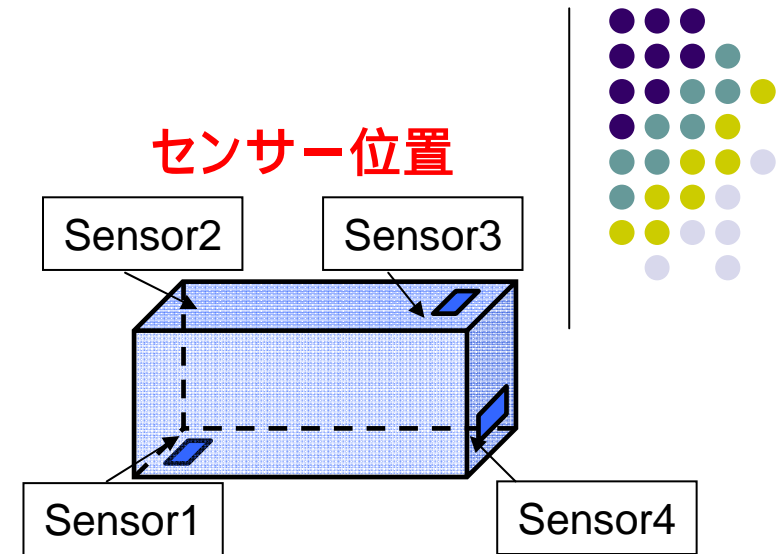


解析結果

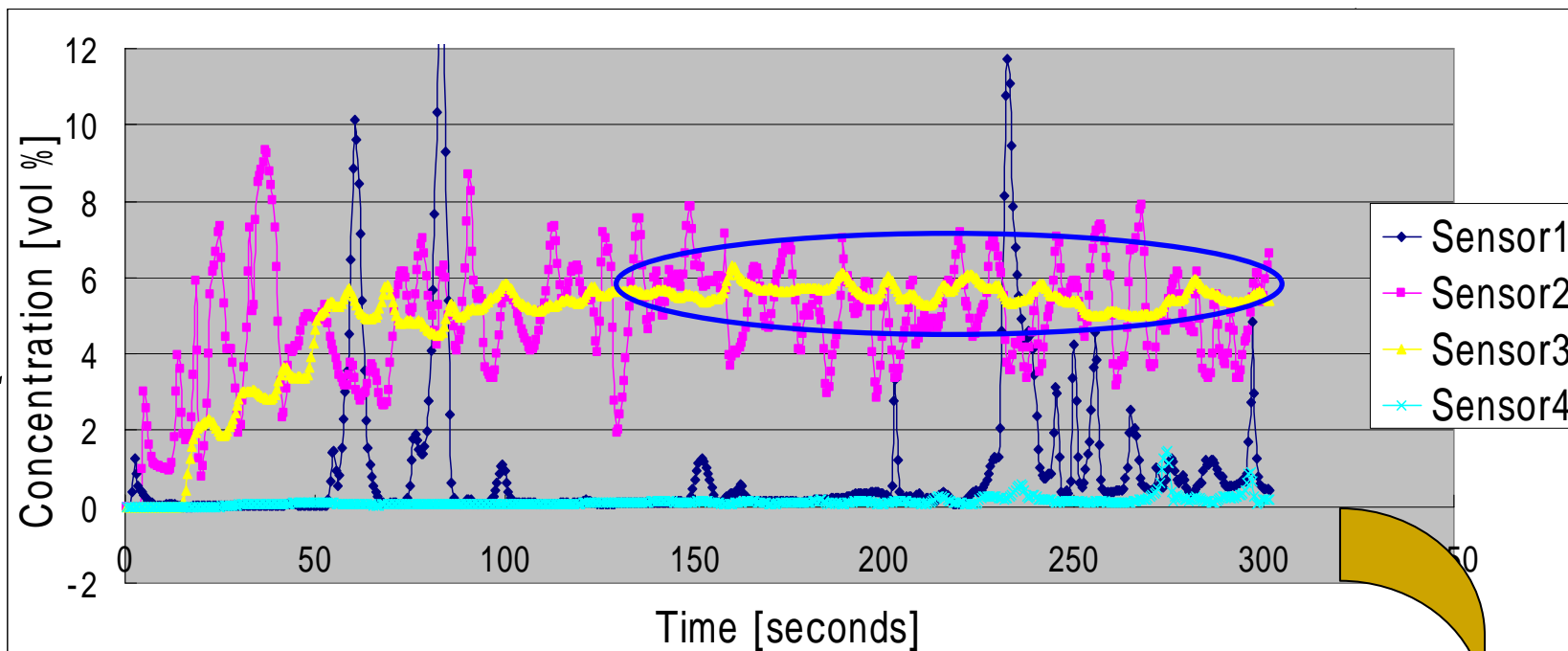
(センサー部における水素濃度の推移)

- ・ 実験データと比較 濃度推移の傾向としては類似した結果といえる
- ・ 濃度変更前より解析精度が向上
- ・ しかし, Sensor1,2には濃度値の大きな振動が見られる

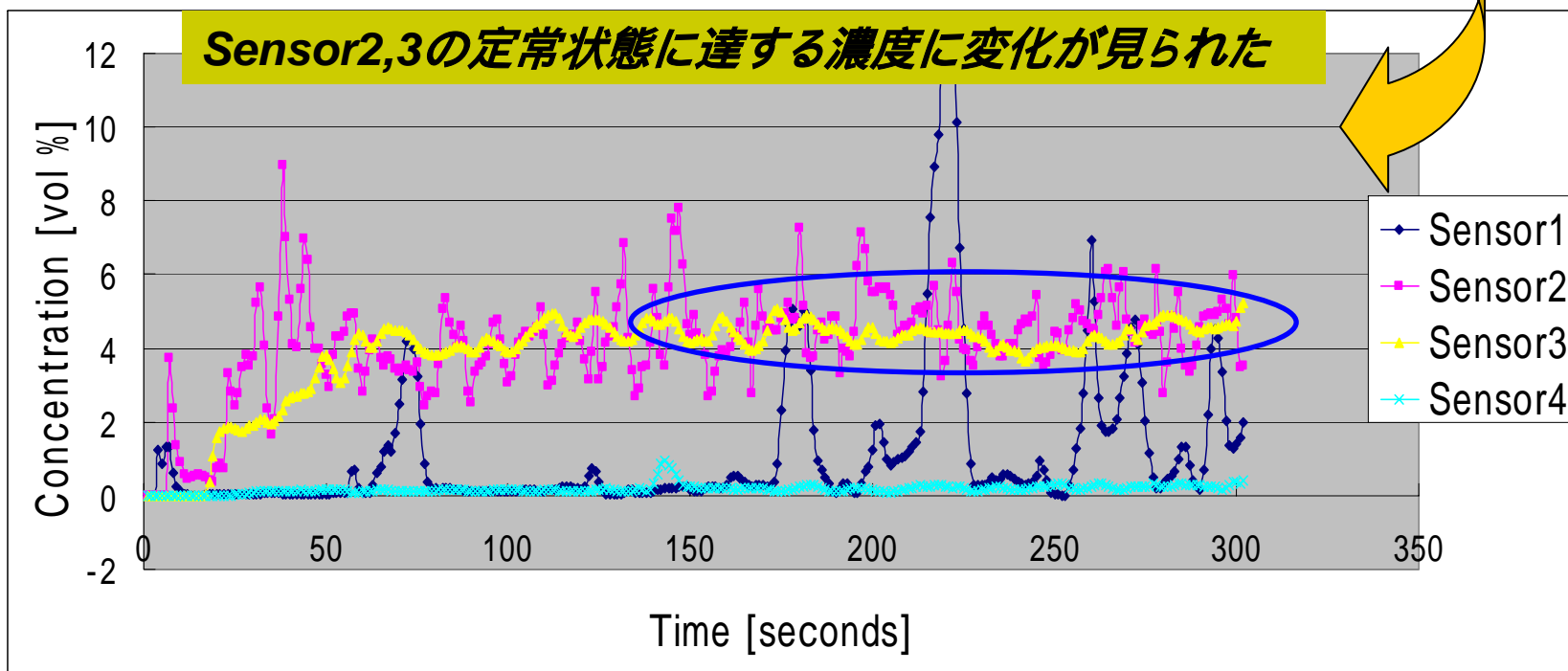
$$\Delta t = 0.5 \text{ s}$$



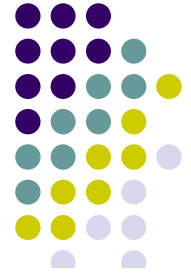
$\Delta t = 0.5 \text{ s}$



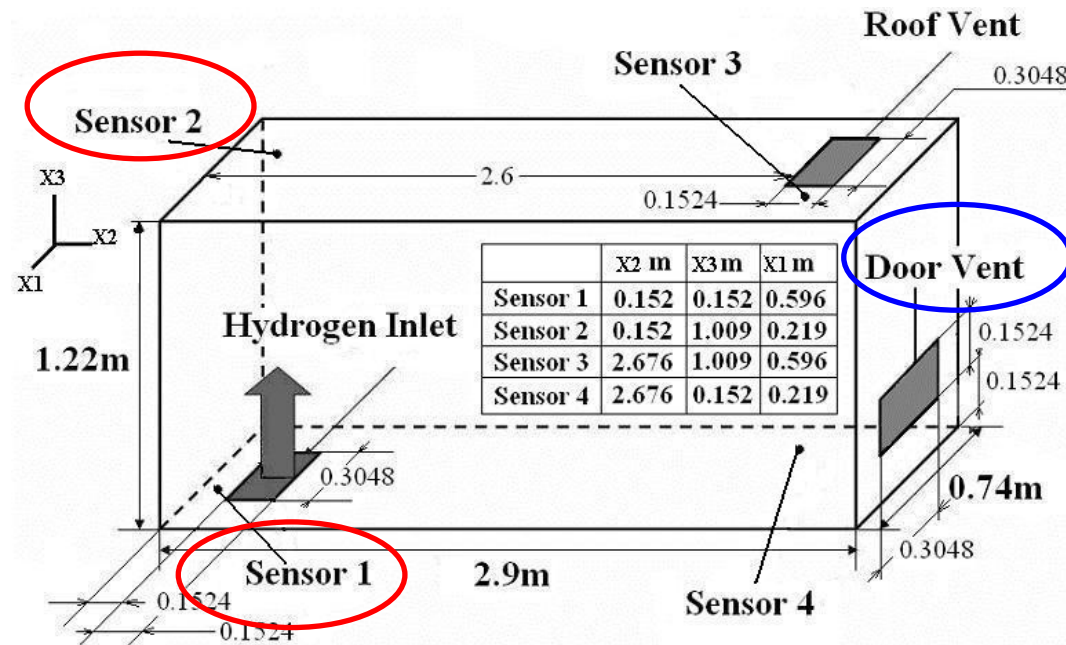
$\Delta t = 1.0 \text{ s}$



解析結果のまとめ



- Door Ventからの外気の流入によって室内に循環が生じている
- センサー部での濃度推移の全体的な傾向は実験結果に類似
- 解析結果や実験データには細かな水素濃度の振動が見られる
- 特に解析結果の水素流入口側Sensor1,2 では激しい振動が見られる





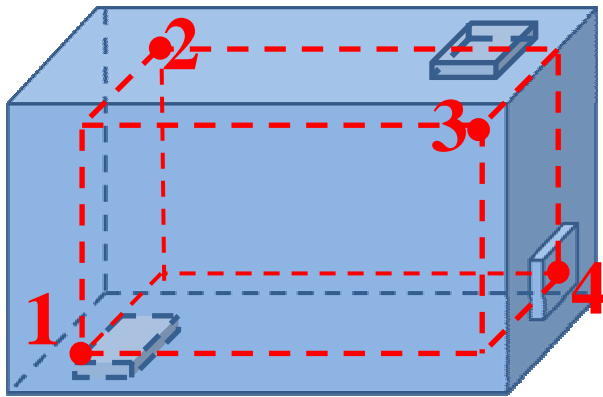
目次

- 研究背景・目的
- 解析手法
- **解析結果**
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更前)
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更後)
 - ・ **HDDM版による解析**
- 結言
- 今後の課題

解析結果1

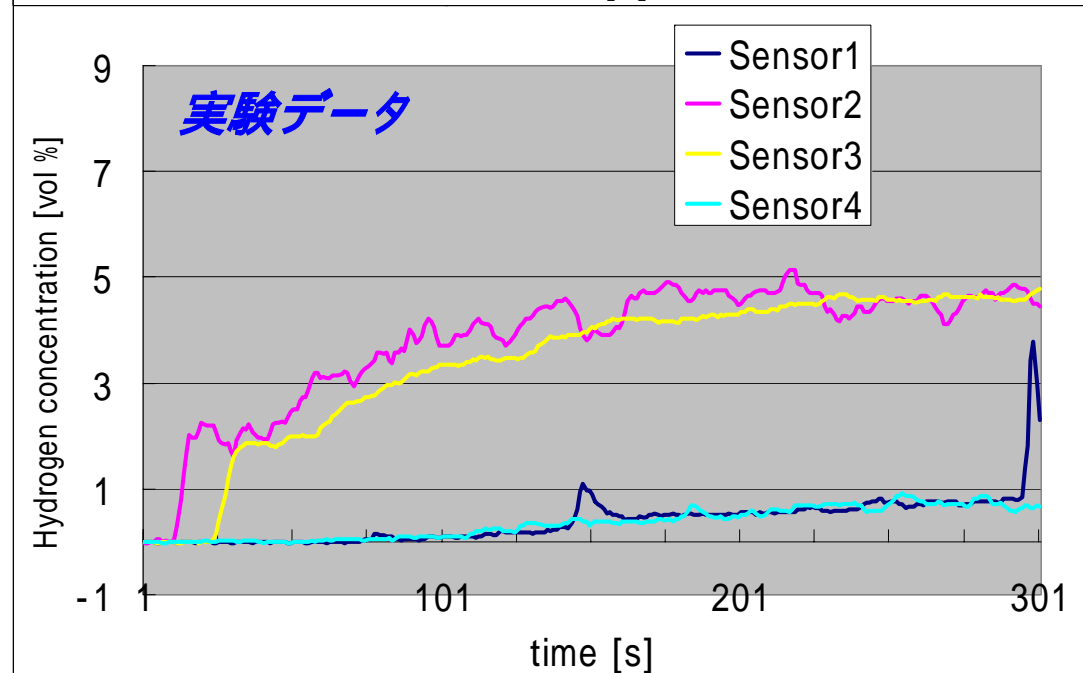
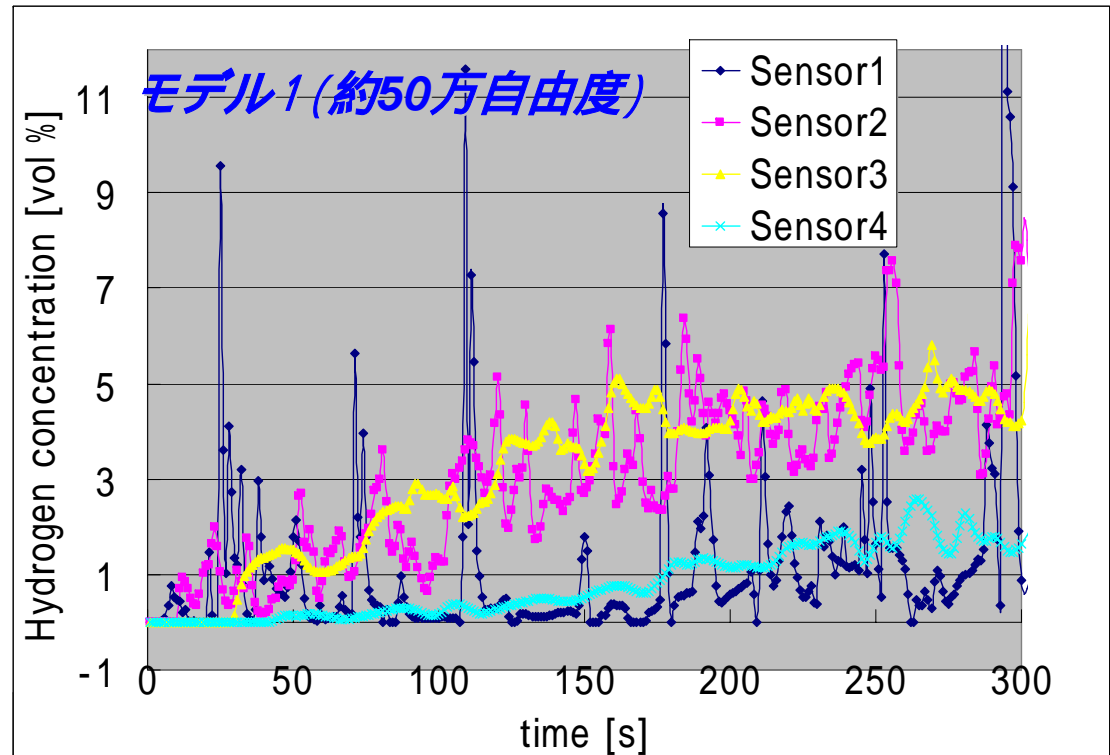
(センサー部における水素濃度時刻歴)

- Time step : 1.0 [s]
- 実験データと比較



センサー位置

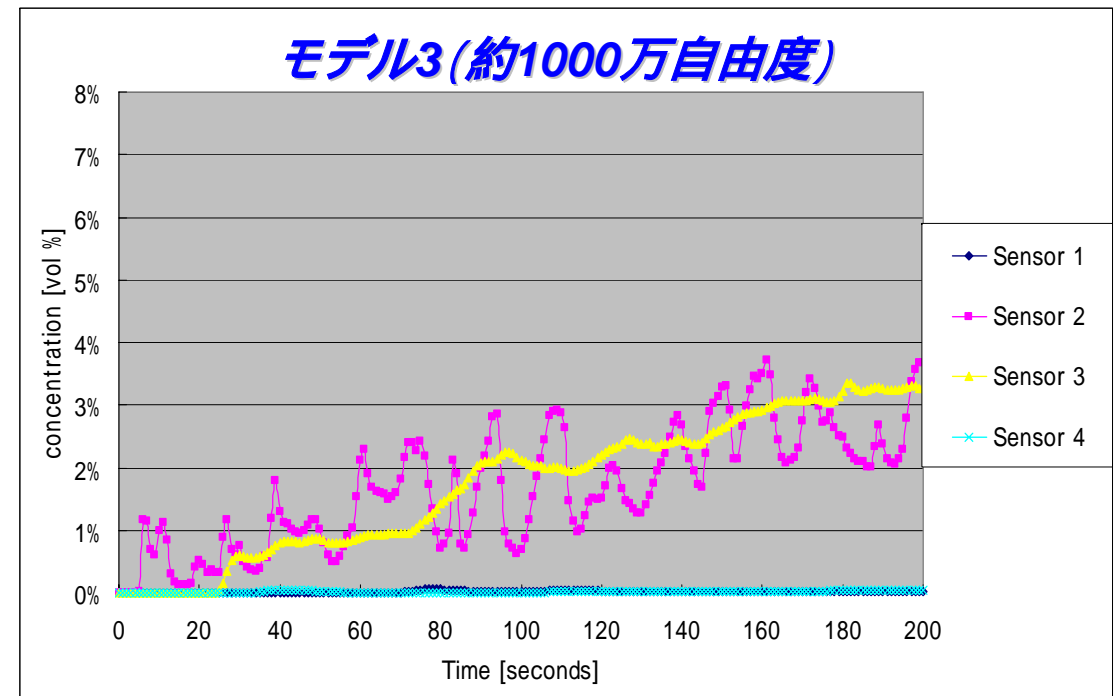
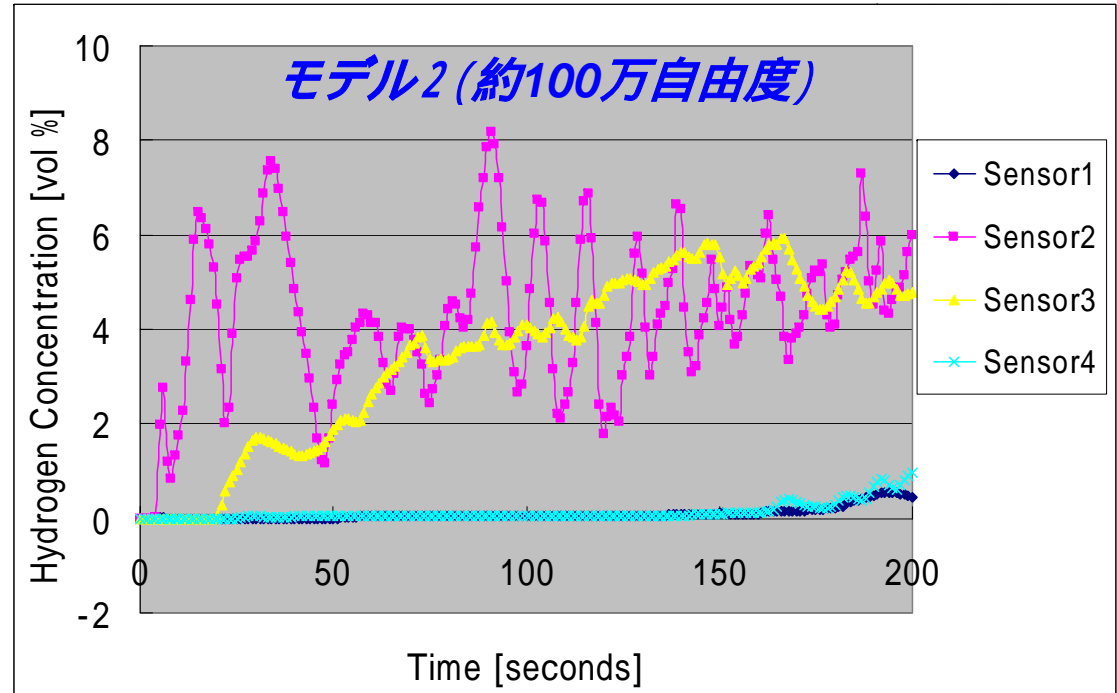
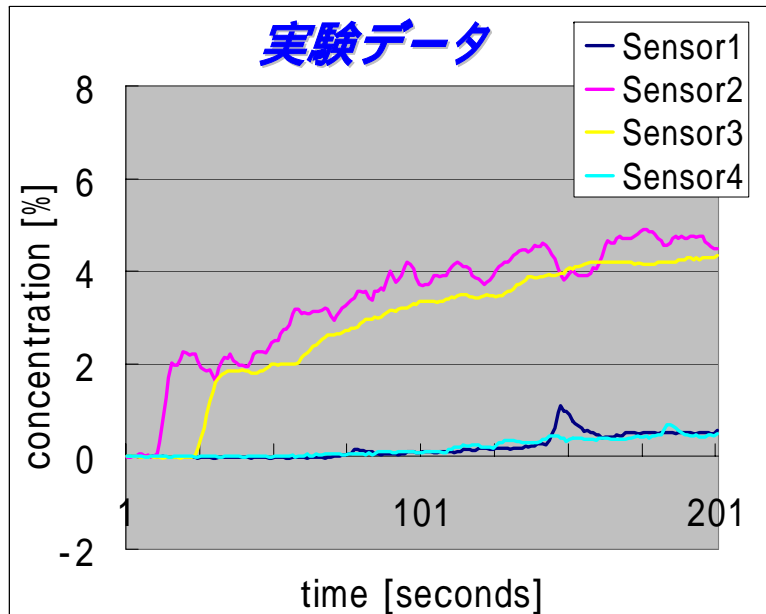
Masahiro INOUE, Hisayoshi TSUKIKAWA, Hiroshi KANAYAMA and Kazuo MATSUURA, "Experimental study on leaking hydrogen dispersion in a partially open space", *Journal of the Hydrogen Energy Systems Society of Japan*, Vol.33, No.4 (2008), pp.32-43.



解析結果2

- メッシュを細かくしたときの比較 (Time step : 1.0s)

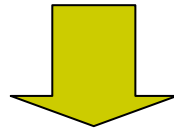
メッシュをより細かくすることで、激しい濃度変動が見られなくなった。





考察

- メッシュをより細かくしたことで、激しい振動を抑えられた。
- Time step : 0.1s での解析も試みたが非常に大きな濃度値となり正しい結果が得られなかった。



- ・ モデルの大きさにあった適切な時間刻み幅の設定が必要
- ・ メッシュをさらに細かくすることで実験データに近づくのではないか？

解析結果の比較



ソルバー	DOF	Time step	Total run time	CPU数	計算時間
1CPU版(変更前)	870,447	0.2 s	200 s	1	約122時間
1CPU版(変更後)	870,447	0.5 s	300 s	1	約88 時間
1CPU版(変更後)	870,447	1.0 s	300 s	1	約47 時間
HDDM版	460,310 (モデル1)	1.0 s	300 s	8	約15 時間
HDDM版	991,950 (モデル2)	1.0 s	300 s	8	約29 時間
HDDM版	11,540,027 (モデル3)	1.0 s	200 s	8	約125 時間

- 時間刻み幅の相違で解析結果に違い
- 解析モデルの規模の違いで解析結果に違い
- 1CPU版からHDDM版の解析に変更することで計算時間の短縮が可能



目次

- 研究背景・目的
- 数値解析手法
- 解析結果
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更前)
 - ・ 1CPU版による解析(濃度変更後)
 - ・ HDDDM版による解析
- **結言**
- **今後の課題**

結言



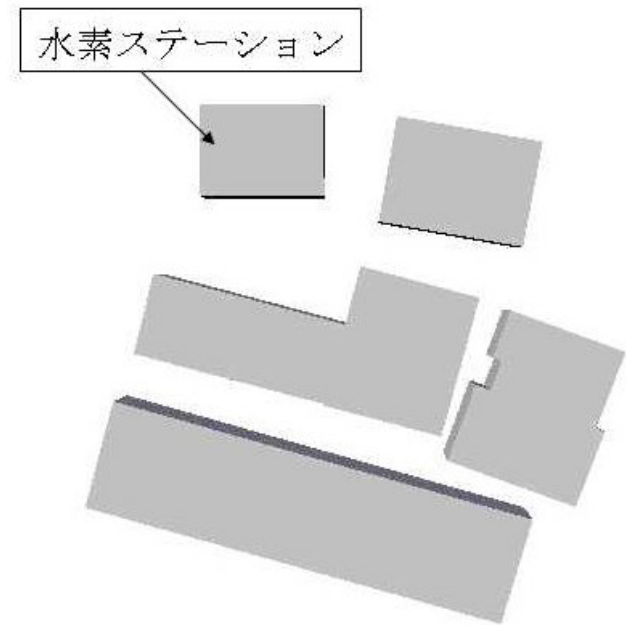
- Boussinesq近似を用いた熱対流方程式のアナロジーによって水素の拡散現象をモデル化し、有限要素法による3次元非定常解析を行った。
- Hallway Modelと呼ばれる部分開放空間における水素拡散挙動の数値解析を行い、それにより漏洩した水素の過渡挙動が示され、濃度推移に関しては、実験データに類似する結果が得られた。



今後の課題

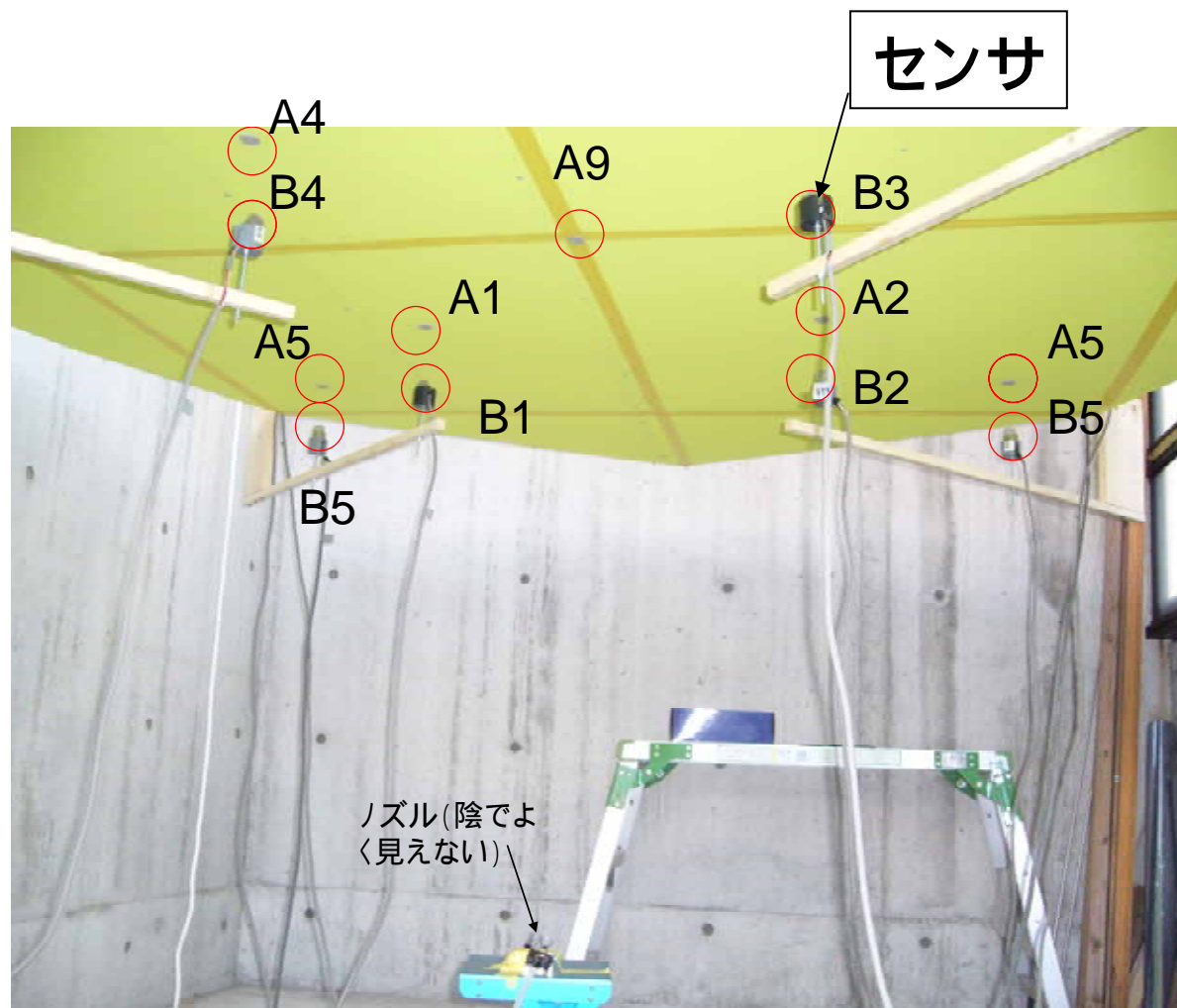
- 様々な環境下での水素の挙動を把握し、水素を安全に利用することに貢献するためには、更なる解析結果の精度検証が必要である。
- 非定常解析においては計算時間に比例してファイル容量が大きくなり可視化が困難になるため、適した可視化手法を検討する必要がある。

その他の解析モデルA(水素ステーション)



ケース1	ケース2
風速 4[m/s]	風速 10[m/s]

その他の解析モデルB (天井モデル)



CFD解析
直径2.5mの円
形で近似

