

水素分離膜の熱伝導および応力分布解析

# 報告書

平成21年6月

Advanced Algorithm & Systems

## 1. 概要

V-Ni 合金箔を用いて水素精製処理を行う際に、膜のどの部位にどのような応力がかかるかの知見を得て、適正な構造体作成および運転条件設定のための指針とすることが重要である。本業務は、応力分布解析に不可欠である、V-Ni 合金箔内の水素および温度拡散を考慮した熱伝導解析をまずは 1) 水素拡散方向の 1 次元モデルで行い、次に 2) V-Ni 合金箔内の膜の半径方向への熱伝導を考慮した 2 次元モデルで行い、膜断面の応力分布を解析した結果を報告するものである。

## 2. 解析項目

全体として

- ・有限要素法 (FEM) による応力分布解析を次の条件にて行なった。

V-Ni 箔の断面寸法：膜厚 0.05mm、直径 8mm とした。

ガスの種類：水素ガスとした。水素の吸収による膨張を考慮した。

ガス圧は以下の条件とした。

イ) 上流側 1 気圧 - 下流側 0 気圧

雰囲気温度を以下の条件とした。

a) 200

箔を支持する境界での熱の授受を考慮した。

モデル 1)

厚さ方向への水素拡散、熱発生・伝導による非定常変化を考慮した。

モデル 2)

半径方向への熱伝導による非定常変化を考慮した。

### 3 . 解析の概略

#### 3 . 1 解析対象

解析対象とする V-Ni 合金箔の概略を図 3.1 に示す。前記 2 節の 2 つのモデルを図 3.2、図 3.3 のように設定する。

モデル 1 ) V-Ni 合金箔の厚さ方向への水素拡散、熱発生・伝導による非定常変化を考慮するために厚さ方向の 1 次元モデル。解析は 2 段階とする。

( 1 ) 最初に水素濃度拡散を求める。

( 2 ) 次に、水素拡散による発熱量を与えて温度拡散を解析する。

モデル 2 ) 1 次元解析で求めた発熱量を厚さ方向に平均して箔全体で一様と仮定した場合、周辺を固定された合金箔の半径方向への 2 次元温度拡散モデル。さらに同じ形状について応力解析モデルを設定。解析は 2 段階とする。

( 1 ) 最初に温度拡散を求める。

( 2 ) 次に、水素濃度と温度分布を与えて、応力解析を行う。

上記 2 つモデルについて、下記の共通ケース名を設定する。

表 3.1 解析ケース

Case 番号	Case 名	ガス圧 (気圧)		雰囲気温度 ( )
		上流側	下流側	
1	Caes1a	1	0	200

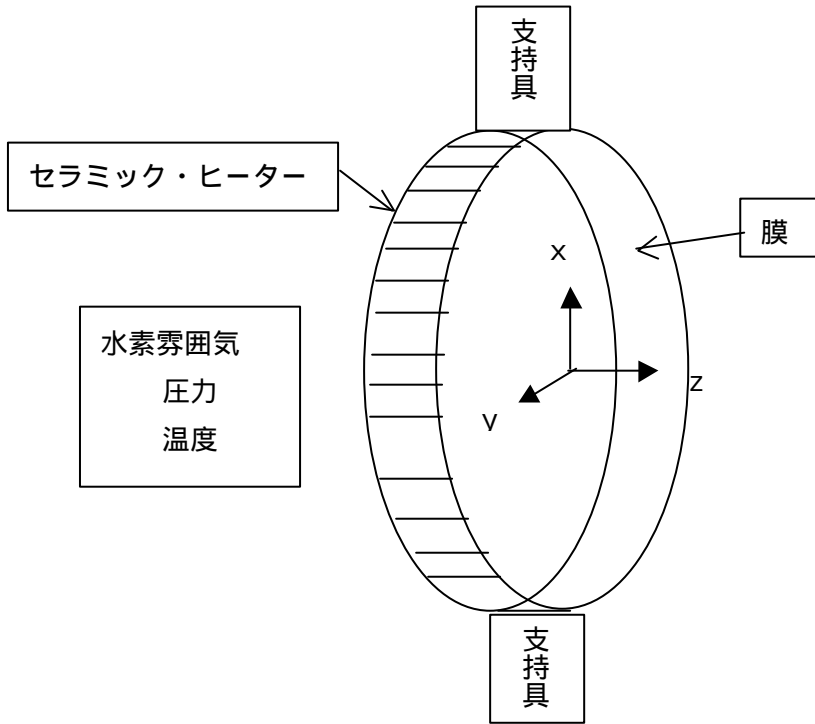


図 3.1.1 解析対象概念図

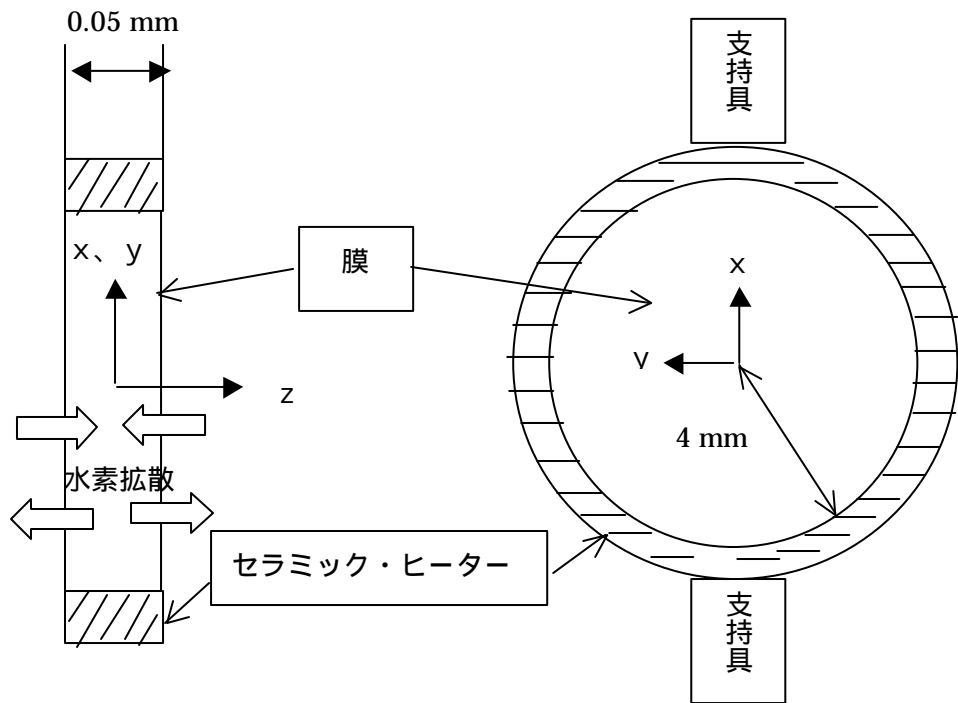


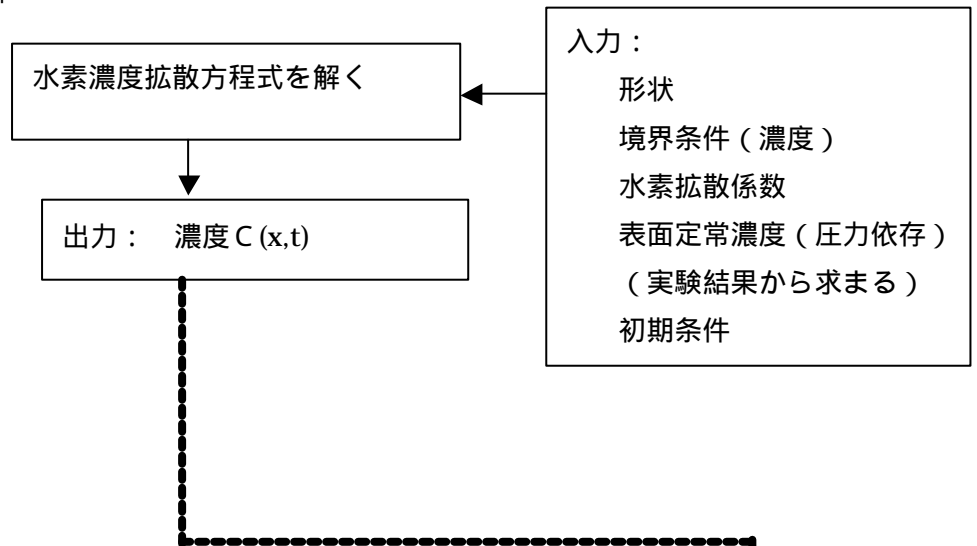
図 3.1.2 厚さ方向断面図

図 3.1.3 箔表面図

### 3.2 解析の流れ

#### モデル1：1次元解析

Step1：水素濃度拡散解析



Step2：温度拡散解析

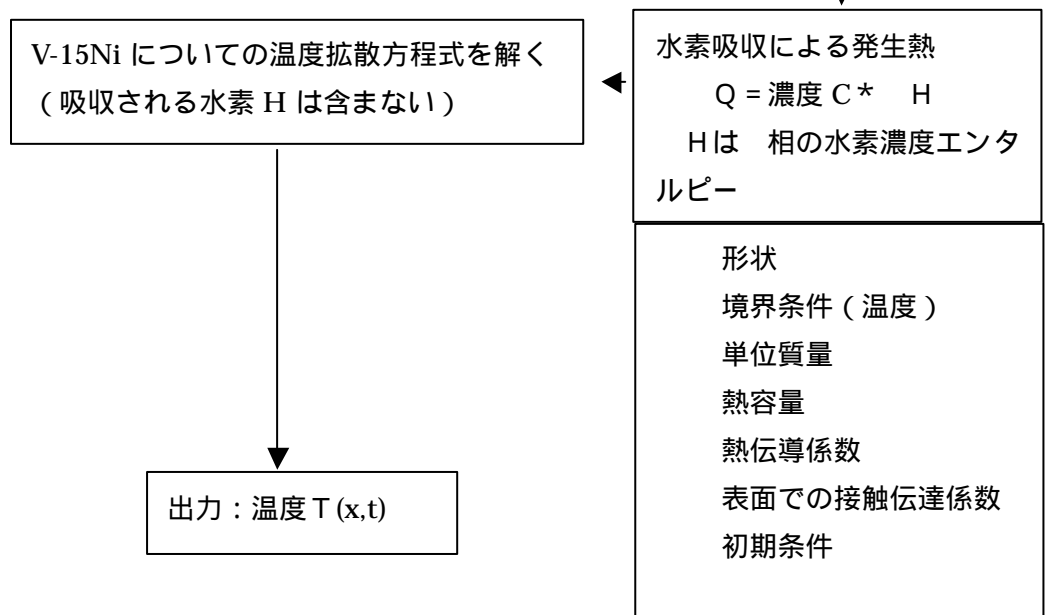


図 3.2.1 1次元解析の流れ

## モデル2：2次元解析

### Step1：2次元温度拡散解析

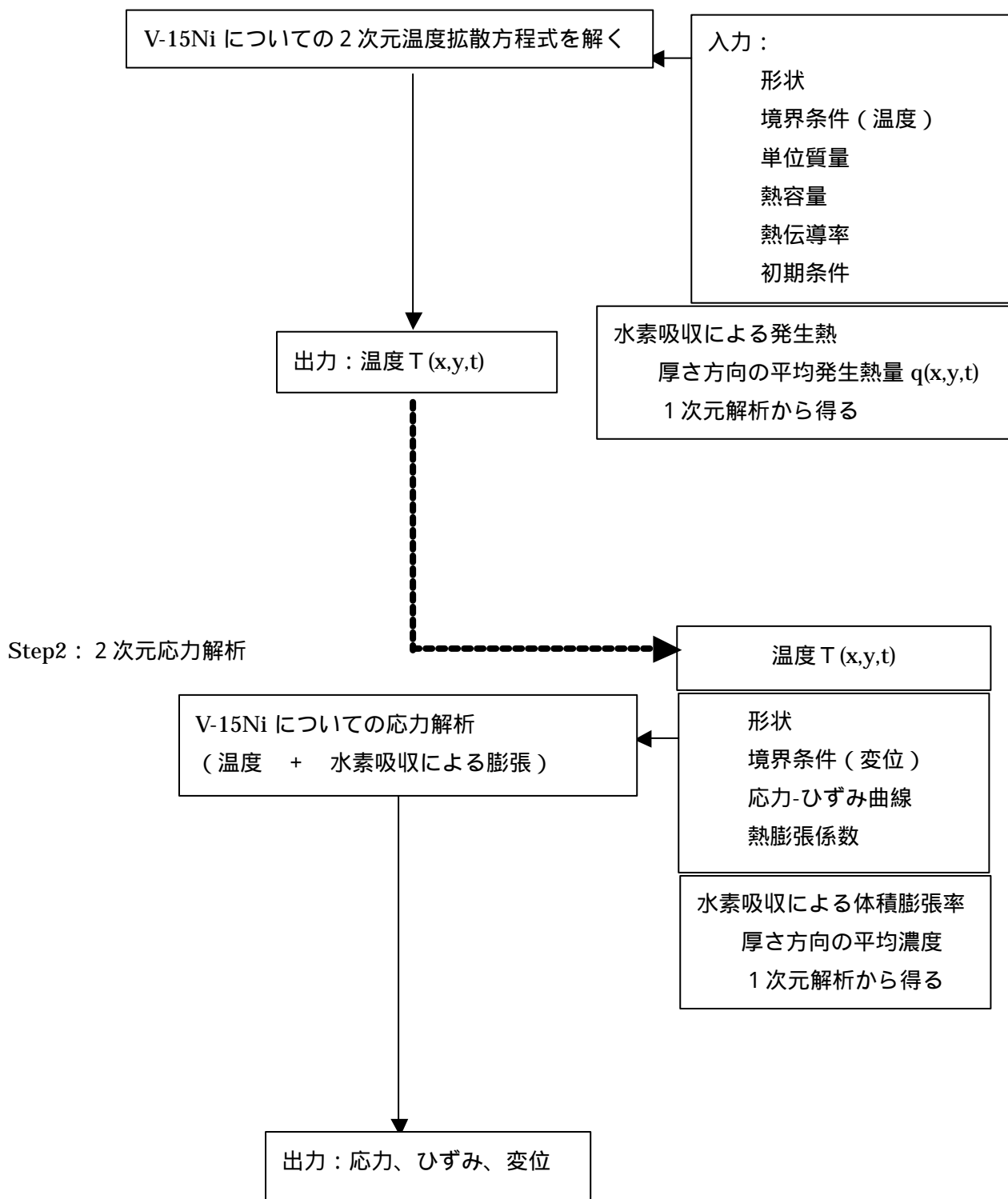


図 3.2.2 2次元解析の流れ

## 4. モデル1の解析条件：1次元解析

### 4.1 水素濃度の1次元拡散解析

#### 4.1.1 水素濃度の1次元拡散方程式

基礎方程式は以下で与えられる

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$$

ここで、C：濃度、D：拡散係数である

以下のように変数変換を行う。

$$f_D = \frac{C_1 - C}{C_1 - C_0} \quad \text{ここで } C_0 \text{ は初期濃度、} C_1 \text{ は表面濃度}$$

$$e = \frac{y}{h} \quad \text{ここで } h \text{ は膜の厚さ}$$

$$q = \frac{Dt}{h^2}$$

変数変換によって正規化された以下の無次元方程式が得られる。

$$\frac{\partial f_D}{\partial q} = \frac{\partial^2 f_D}{\partial e^2}$$

初期条件は

$$q \leq 0, -1 \leq e \leq 1: f_D = 1$$

境界条件は

$$q > 0, e = \pm 1: f_D = 0$$

で与える。

#### 4.1.2 水素の拡散係数

また、用いた水素の拡散係数は次の通りである。

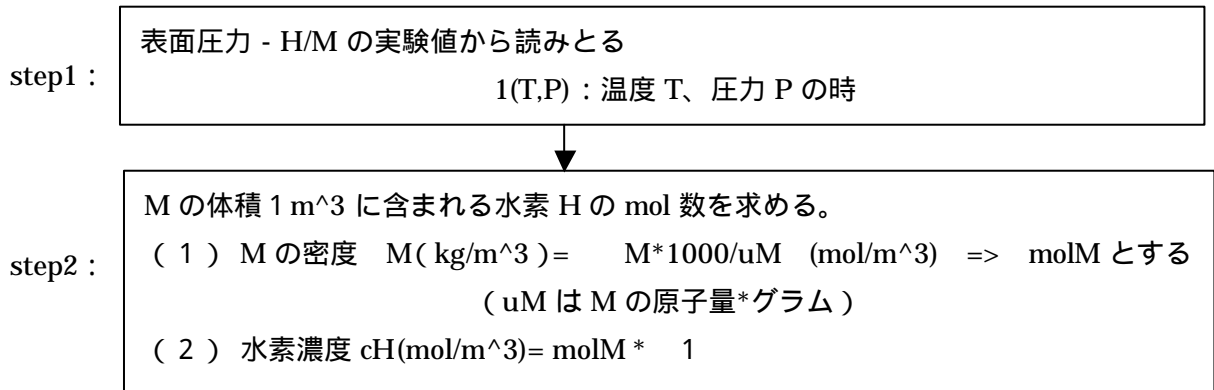
温度 ( )	D(m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
200	2.2372 x 10 <sup>-9</sup>

#### 4.1.3 その他の物性値

各元素の物性値として以下を用い、V-15Niの物性は、単にNiとVの物性から成分比によって求めた。

#### 4.1.4 表面水素濃度(mol/m<sup>3</sup>)の設定

表面圧力 - H/M の実験値を読みとって、以下のように換算する。



実験から読みとった値は以下の通りである。

気圧 ( atm )	MPa	H/M ( 200 )	H/M ( 300 )
1	0.101325	0.411	0.247

注) 1 気圧 ( 標準大気圧 ) ( atm ) = 0.101325MPa とする

#### 4.1.5 水素吸収による発生熱

水素濃度  $cH(\text{mol/m}^3)$  の発生熱を以下のように与える。これは、Meuffe が無限希釈剤に対して外挿したものである。

$$Q = cH \cdot \Delta H_H^0$$

ここで、層の水素濃度エンタルピー

$$\Delta H_H^0 = 30.2 \text{kJ} / (\text{mol} \cdot H), 200 < T < 550 \quad \text{とした。}$$



## 4.2 温度の1次元拡散解析

### 4.2.1 温度の1次元拡散方程式

基礎方程式は以下で与えられる

$$rC_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + rQ$$

ここで、 $T$  : 温度、 $k$  : 熱伝導係数、 $r$  : 密度、 $C_p$  : 定圧比熱容量、 $Q$  : 単位質量あたりの発生熱量である。  $Q = cH \cdot e$  とする。ここで  $e$  (kJ/mol) は発生エンタルピー。

以下のように変数変換を行う。

$$T_k = \frac{T - T_0}{T_0} \quad \text{ここで } T_0 \text{ は初期温度}$$

$$q_k = \frac{rh^2Q}{KT_0}$$

$$e = \frac{y}{h} \quad \text{ここで } h \text{ は膜の厚さ}$$

$$q = \frac{Kt}{rC_p h^2} \quad \text{ここで } K \text{ は代表熱伝導率、}$$

変数変換によって正規化された以下の無次元方程式が得られる。

$$\frac{\partial T_k}{\partial q} = a \frac{\partial^2 T_k}{\partial e^2} + q_k \quad \text{ここで熱伝導率 } k = K$$

初期条件は

$$q \leq 0, 0 \leq e \leq 1: T_k = 0$$

境界条件は3種類

(1) 固定境界 :  $q > 0, e = 0, 1: T_k = 0$

(2) 伝達境界 :  $q > 0, e = 0, 1: q_b = g(T_k - T_a)$

ここで  $q_b$ 、 $g$ 、 $T_a$  はそれぞれ、境界での熱流入量、熱伝達係数、雰囲気温度

(3) 断熱境界 :  $q > 0, e = 0, 1: q_k = 0$

で与える。

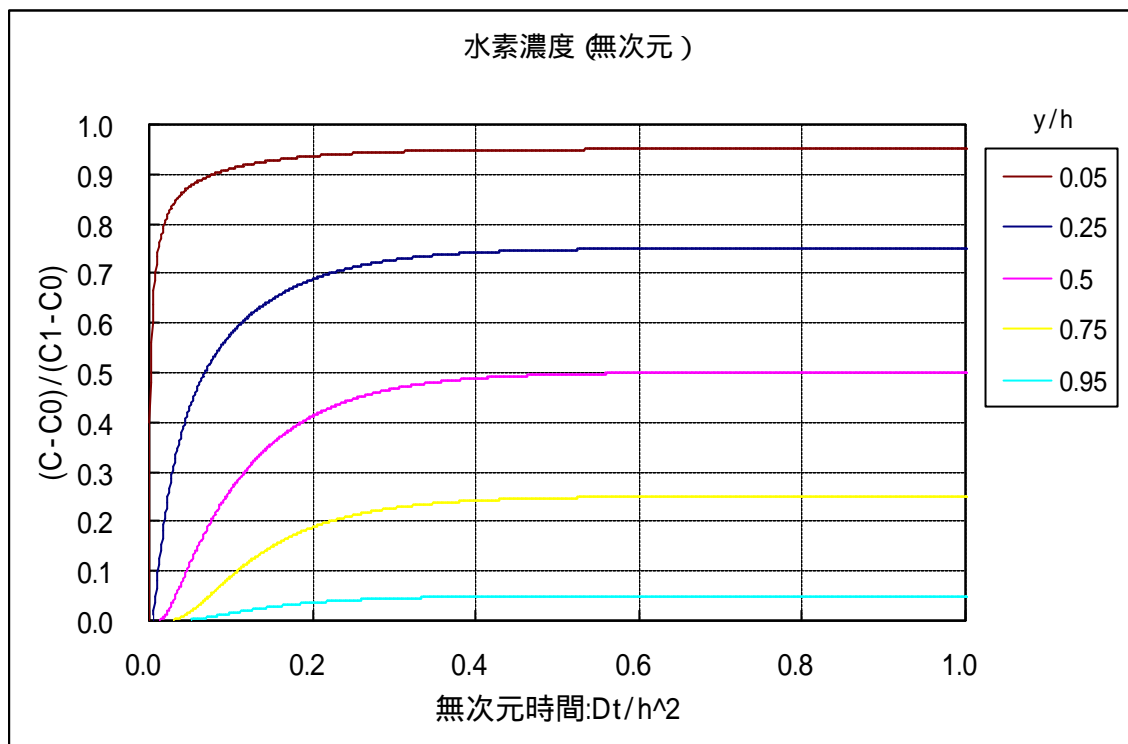
### 4.2.2 物性値

物性値は、4.1.3節で記述したものをを用いた。

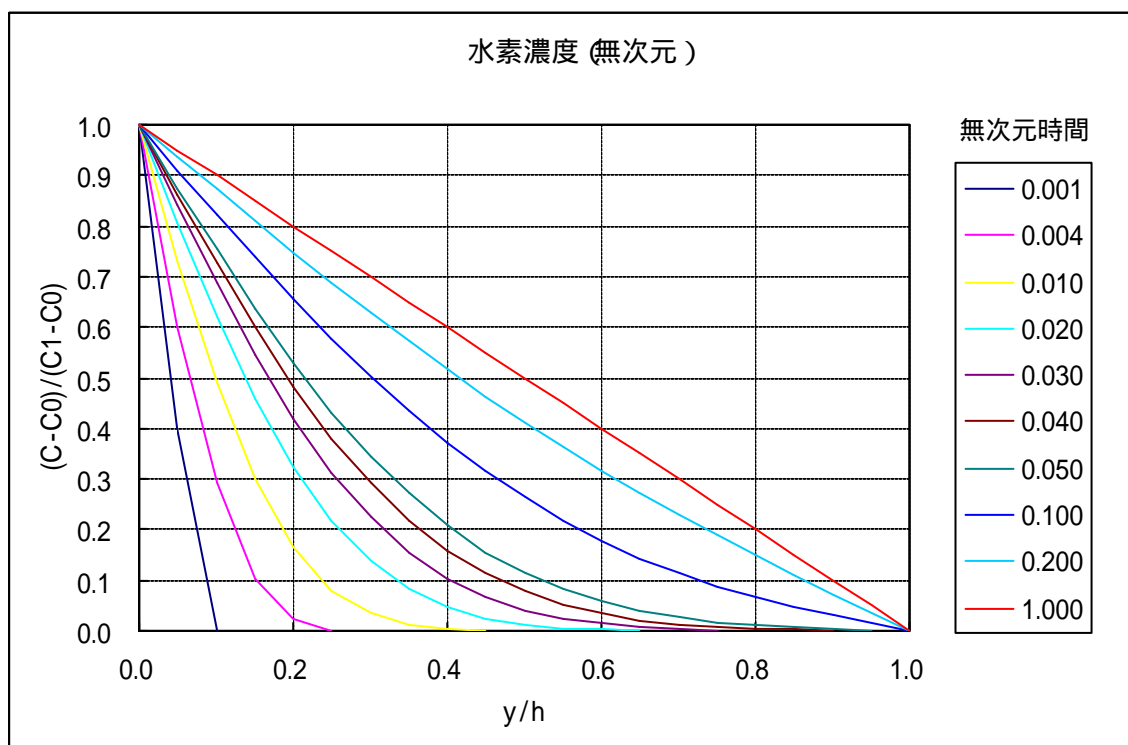
## 5. モデル1の解析結果：1次元解析

### 5.1 水素濃度の1次元拡散解析結果

時系列



分布

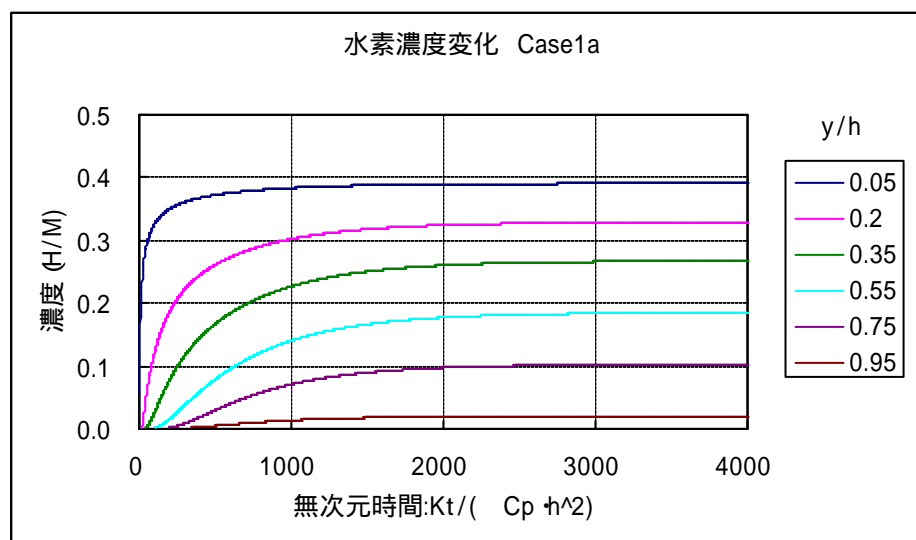
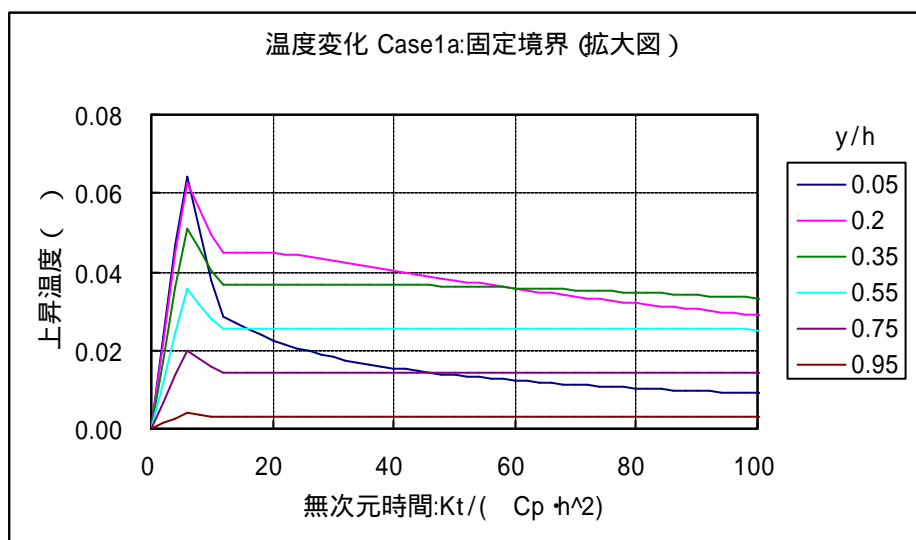
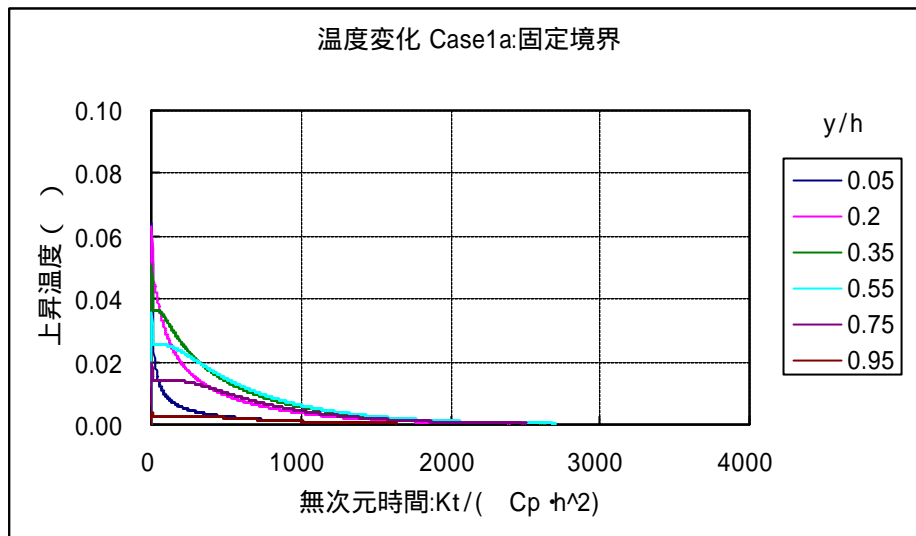


## 5.2 温度の1次元核酸解析結果

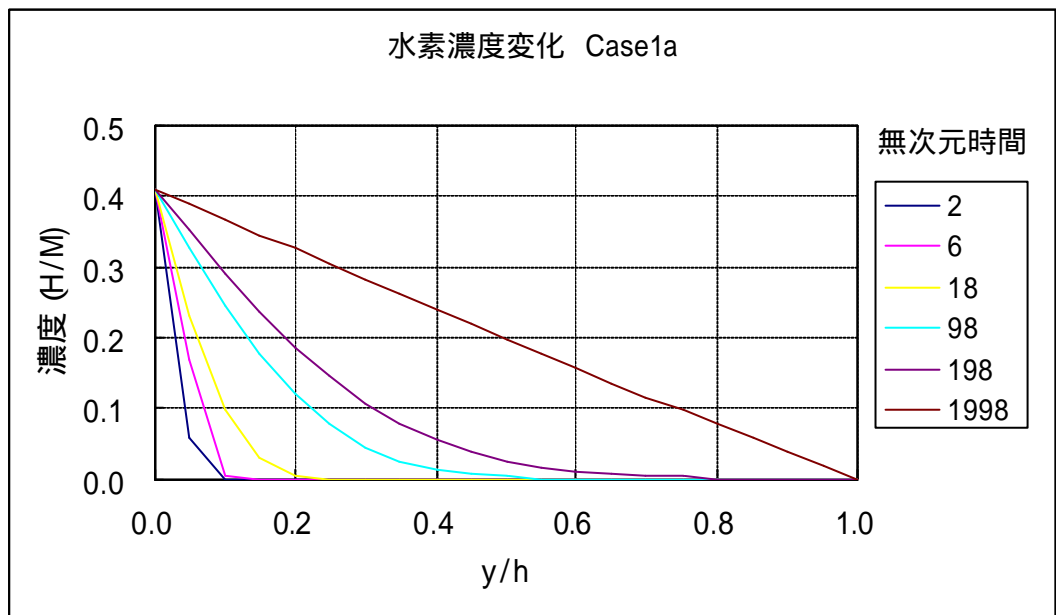
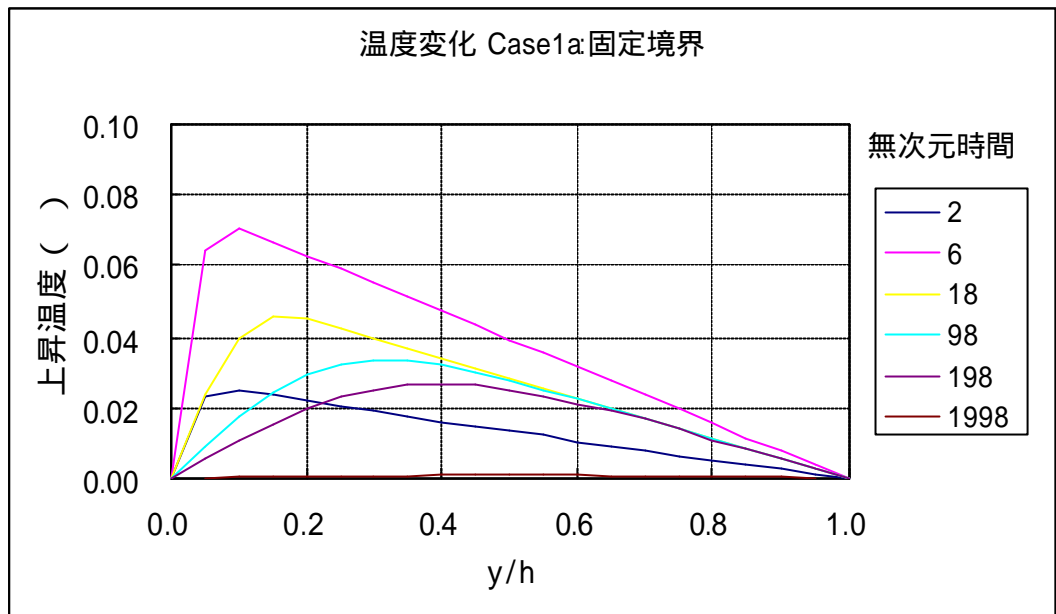
### 5.2.1 CASE1a: 200、1-0気圧

#### 5.2.1(a) 温度拡散(固定境界)

時系列



分布



## 6. モデル2の解析条件：2次元解析

### 6.1 2次元温度拡散解析

#### 6.1.1 2次元熱伝導方程式

基礎方程式は以下で与えられる

$$rC_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + rQ \quad \text{領域内}$$

ここで、 $T$ ：温度、 $k$ ：熱伝導係数、 $r$ ：密度、 $C_p$ ：定圧比熱容量、 $Q$ ：単位質量あたりの発生熱量である。 $Q = cH \cdot e$  とする。ここで  $e$  (kJ/mol) は発生エンタルピー。

初期条件は

$$t=0, T=0 \quad \text{領域内}$$

境界条件は

$$T = \text{一定} \quad \text{境界} d \text{ 上の一部}$$

#### 6.1.2 物性値

物性値は1次元解析と同一の物性値を用いた。

## 6.2 2次元熱応力解析

### 6.2.1 基礎方程式

平面応力を仮定した2次元弾性方程式に基づいて解析した。後述するように、応力ひずみ曲線が実験により与えられているが、対象とする解析は、全領域でひずみがほぼ一定となるため、塑性領域においては、等価な剛性を用いて線形解析を行った。

また、Von-Mises 応力  $Y$  を以下のように定義し、7.2節で応力分布を図示した。

$$\frac{1}{2} \left\{ (\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2 \right\} = Y^2$$

ここで 1、2、3 は主応力

### 6.3 解析メッシュ (温度拡散解析・応力解析共通)

解析領域の1/4をモデル化し、温度拡散解析および応力解析で共通とした。  
下図の は、温度解析結果から、温度の時系列変化を図示した節点である。

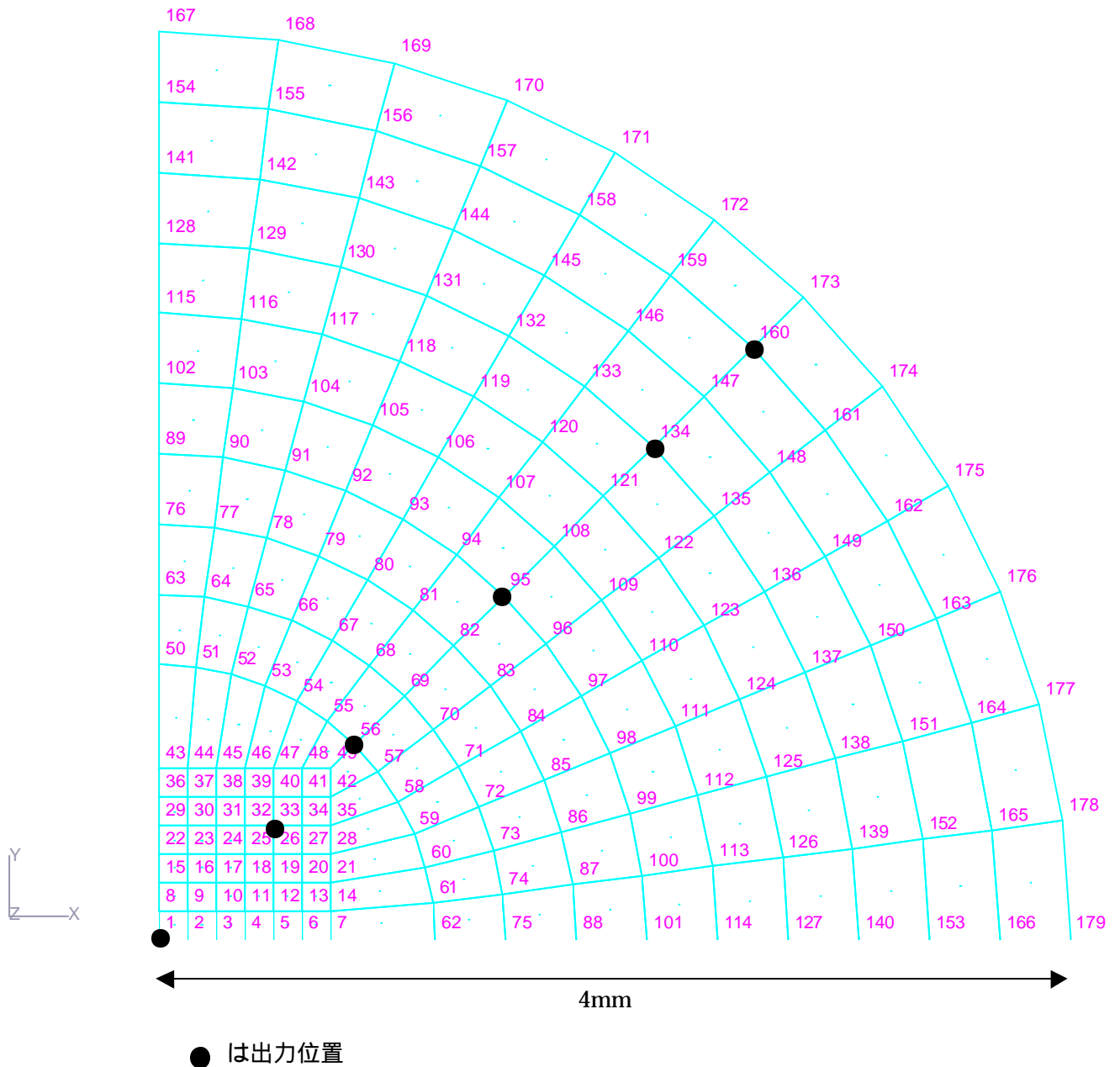
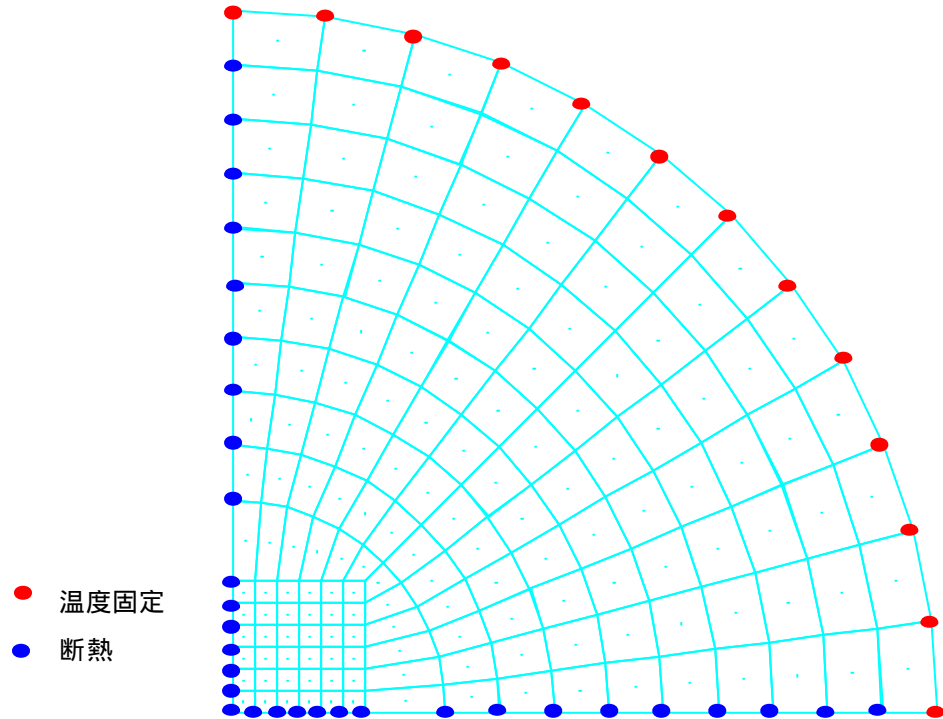


図 6.3 要素分割図

## 6.4 境界条件

(1) 温度解析：周上温度を固定し、仮想境界では断熱とした。



(2) 応力解析：周上で変位を固定し、仮想境界では半径方向へ滑ることとした。

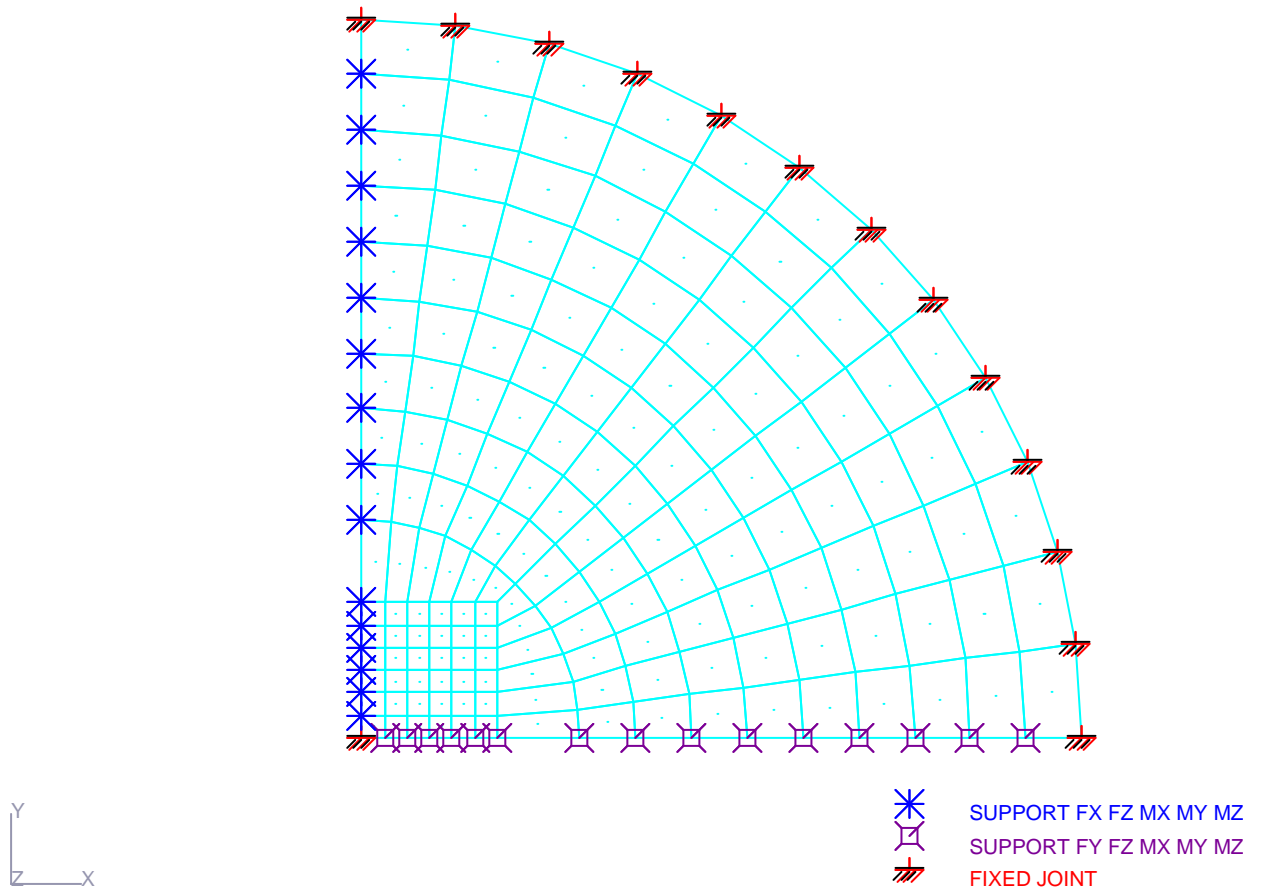


図 6.4 境界条件

## 7. モデル2の解析結果：2次元解析

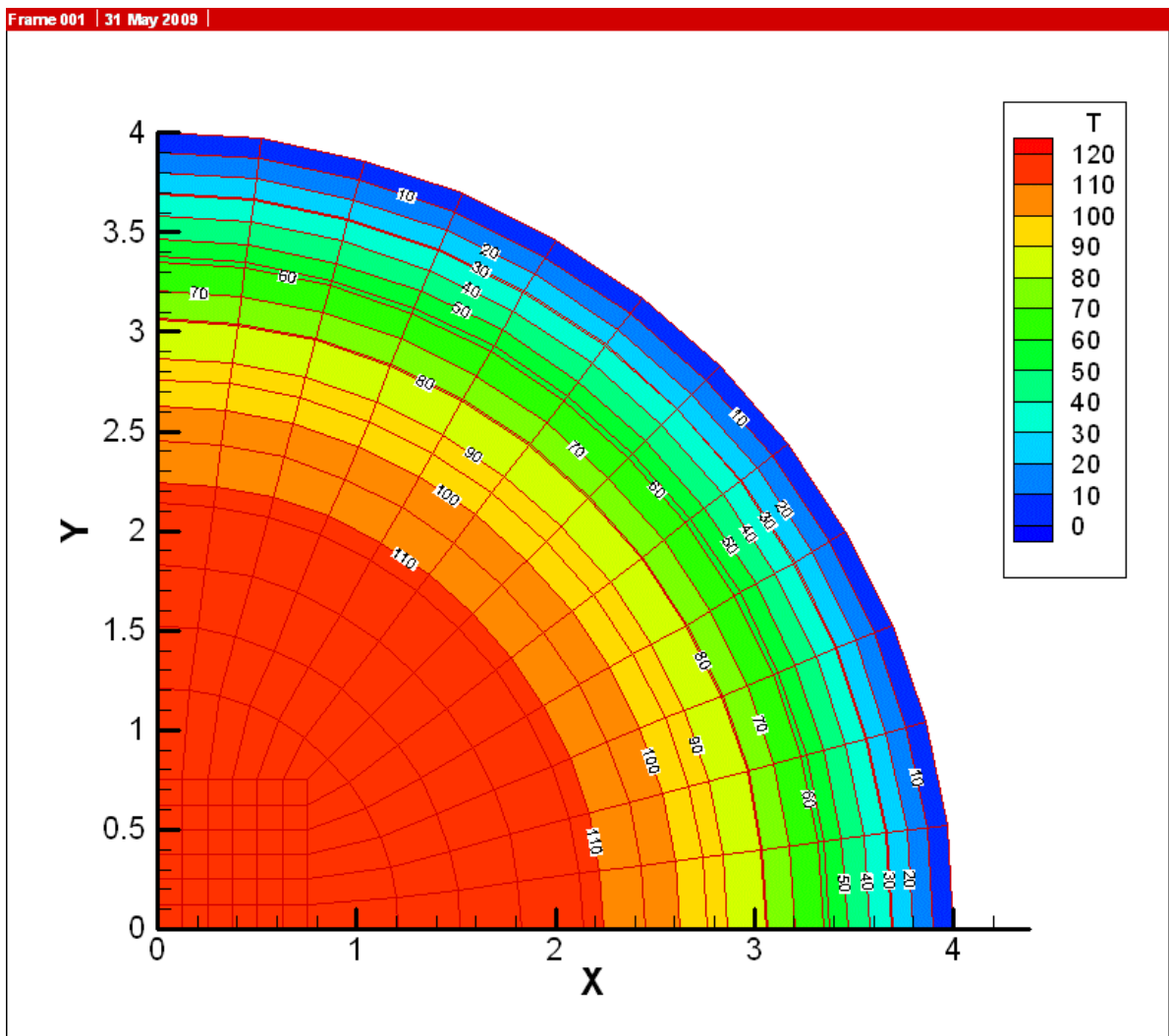
7.1節に温度解析結果、7.2節に応力解析結果を示す。

### 7.1 2次元温度拡散解析結果

以下に、温度分布を示す。

#### 7.1.1 温度分布

Case1a





### 7.1.2 温度の時間変化

図 6.4 で示した節点における温度の時間変化を 4 ケースについて以下に示す。

Case1a

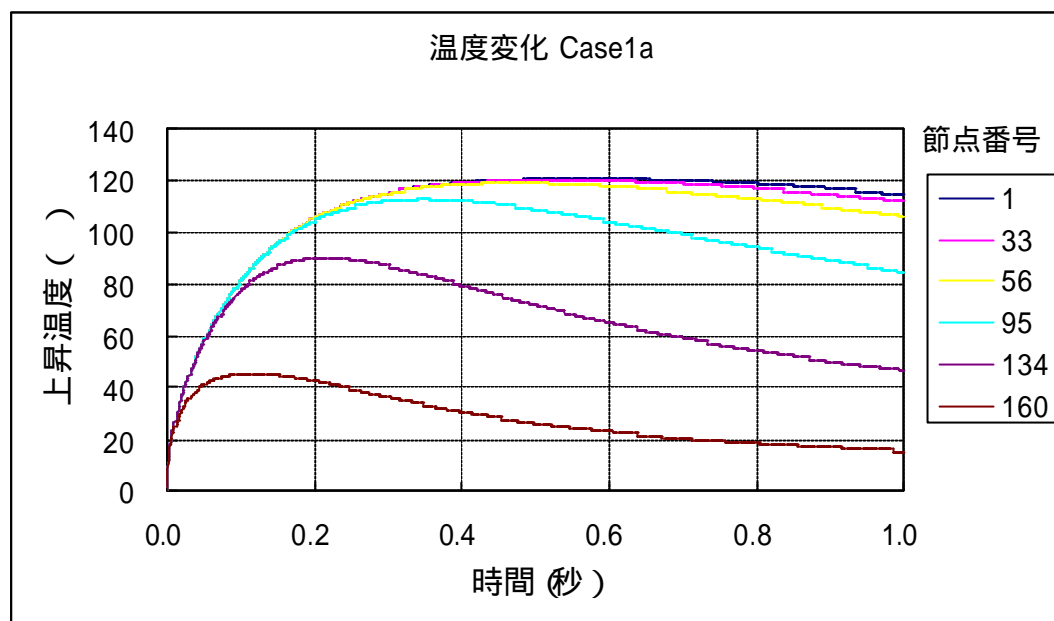


図 7.1.2a-1 温度変化 (Case1a)

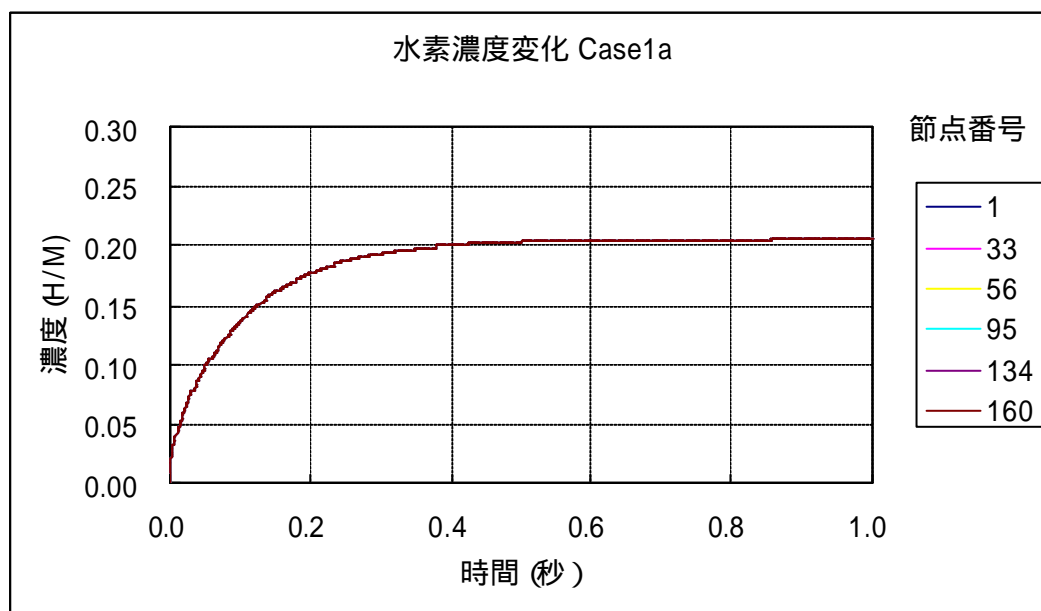


図 7.1.2a-2 濃度変化 (Case1a)

## 7.2 2次元応力解析結果

応力分布、変形、主応力分布を以下に示す。Case1a については主ひずみ分布も図示した。

### 7.2.1 Case1a

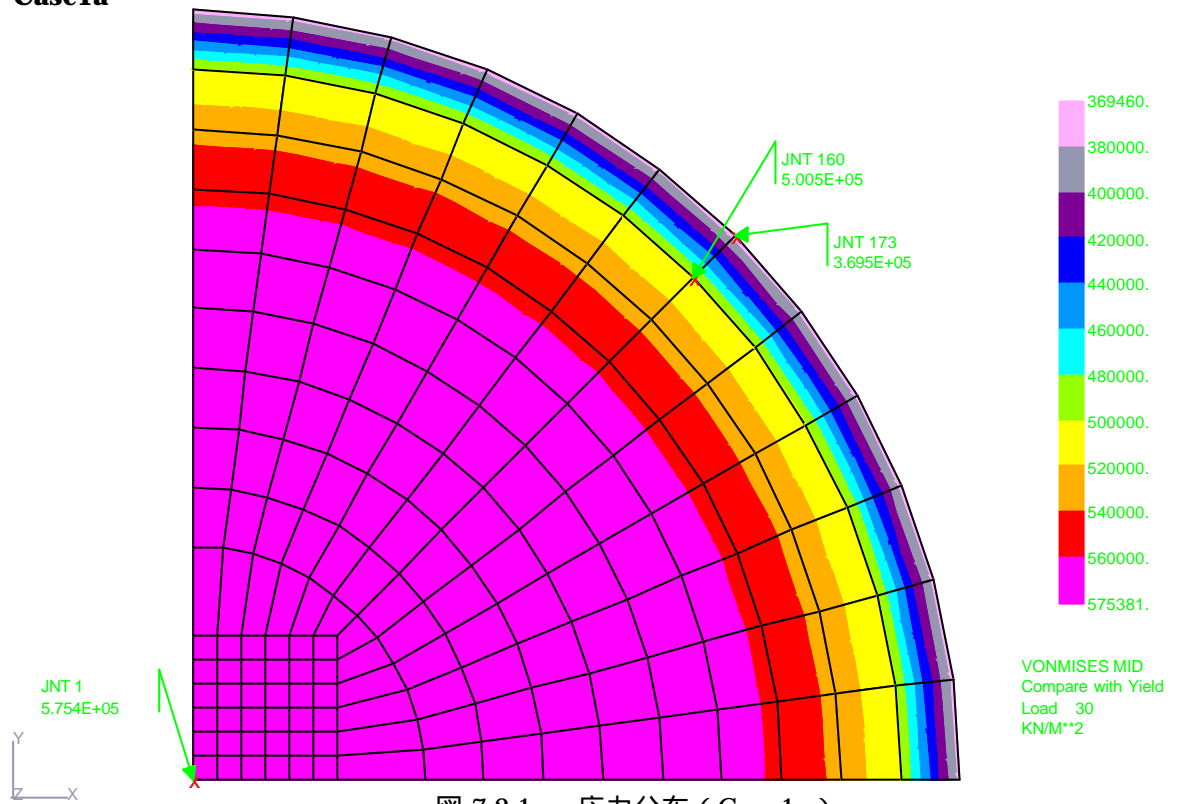


図 7.2.1a 応力分布 (Case1a)

変位

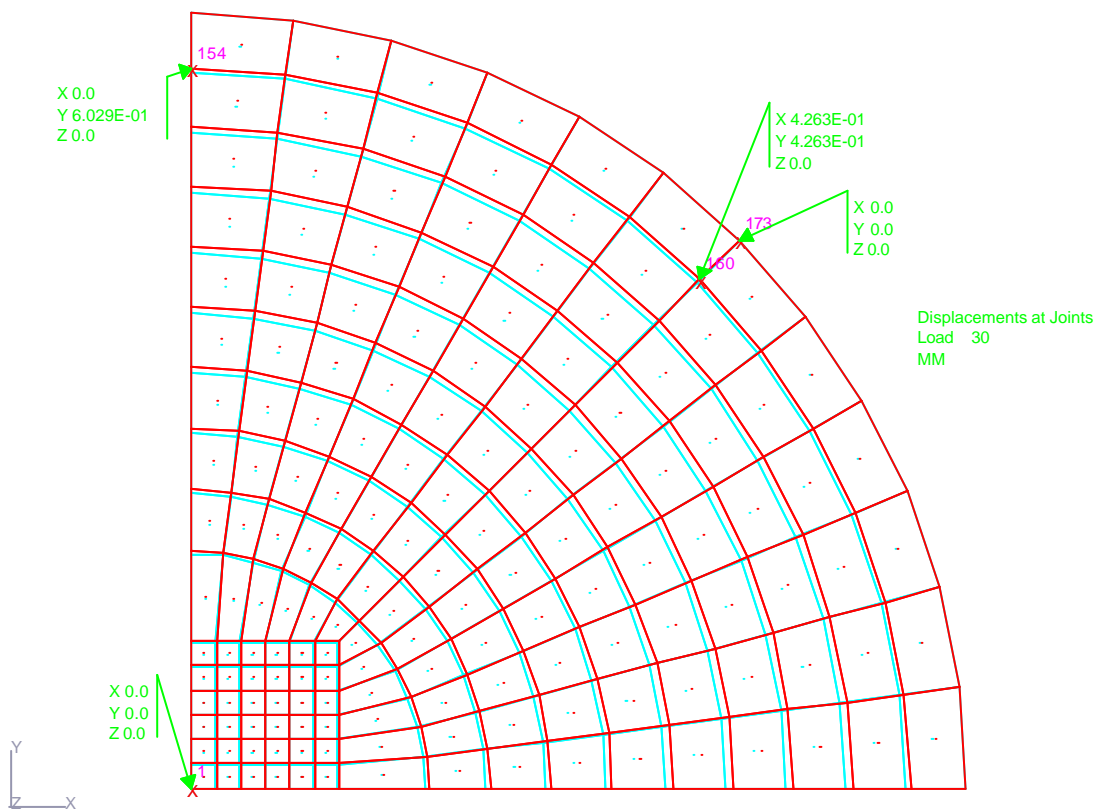
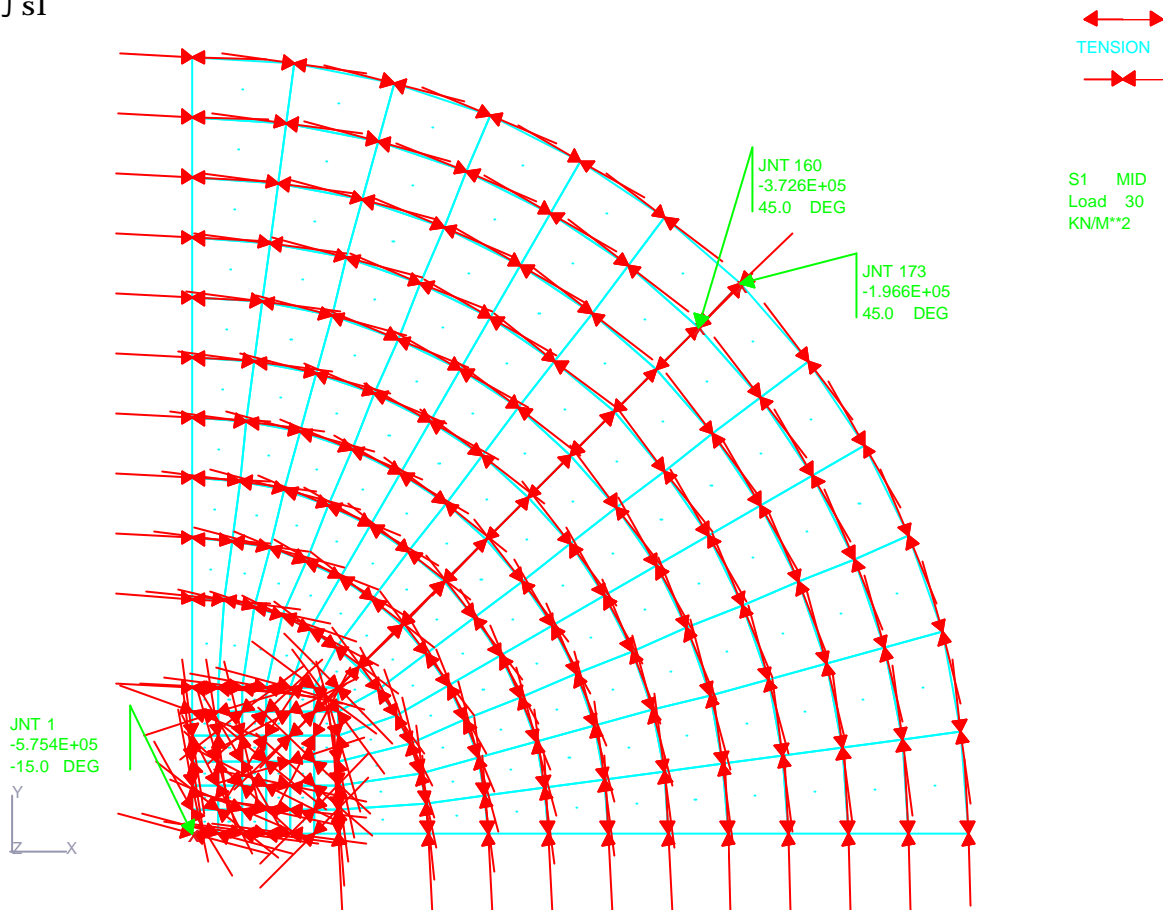


図 7.2.1b 変形図 (Case1a)

主应力 s1



主应力 s2

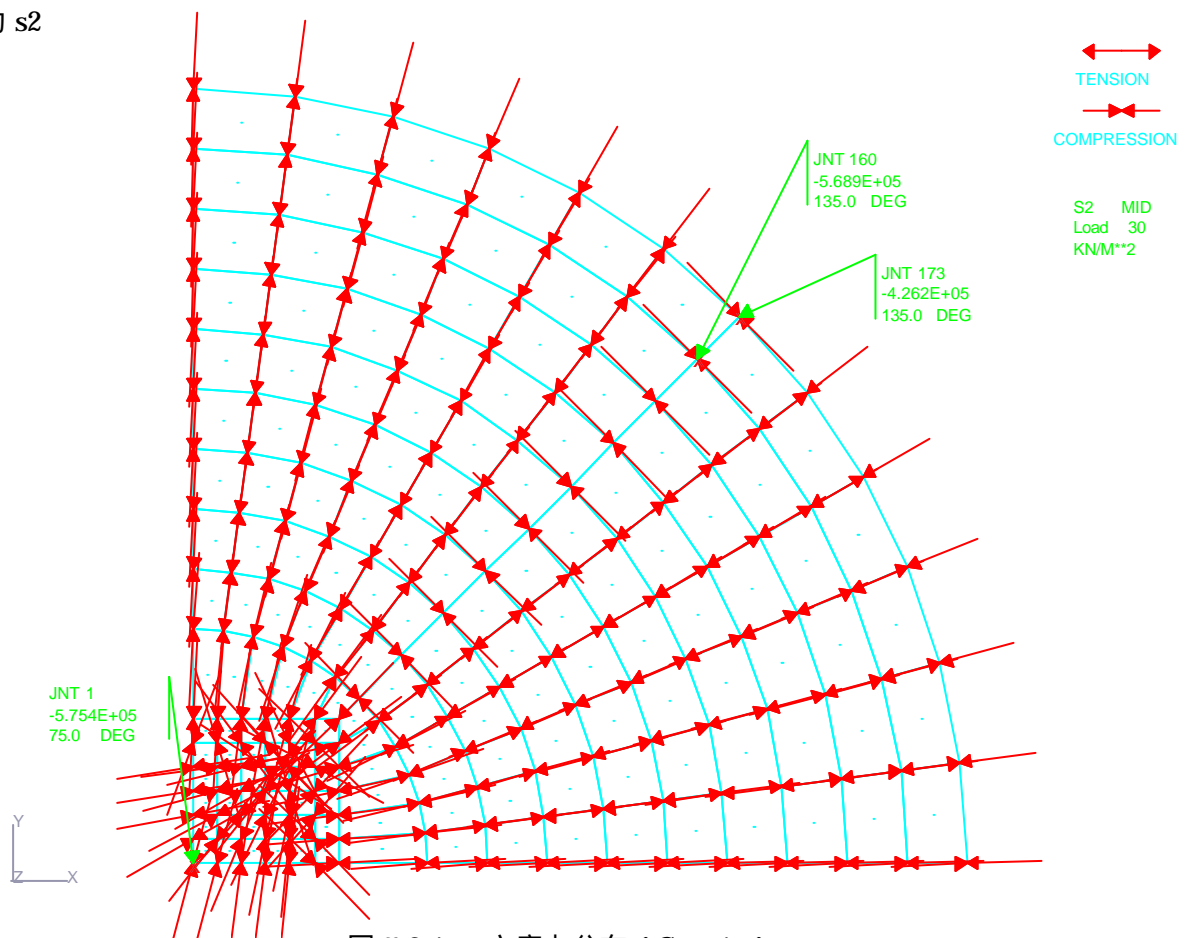
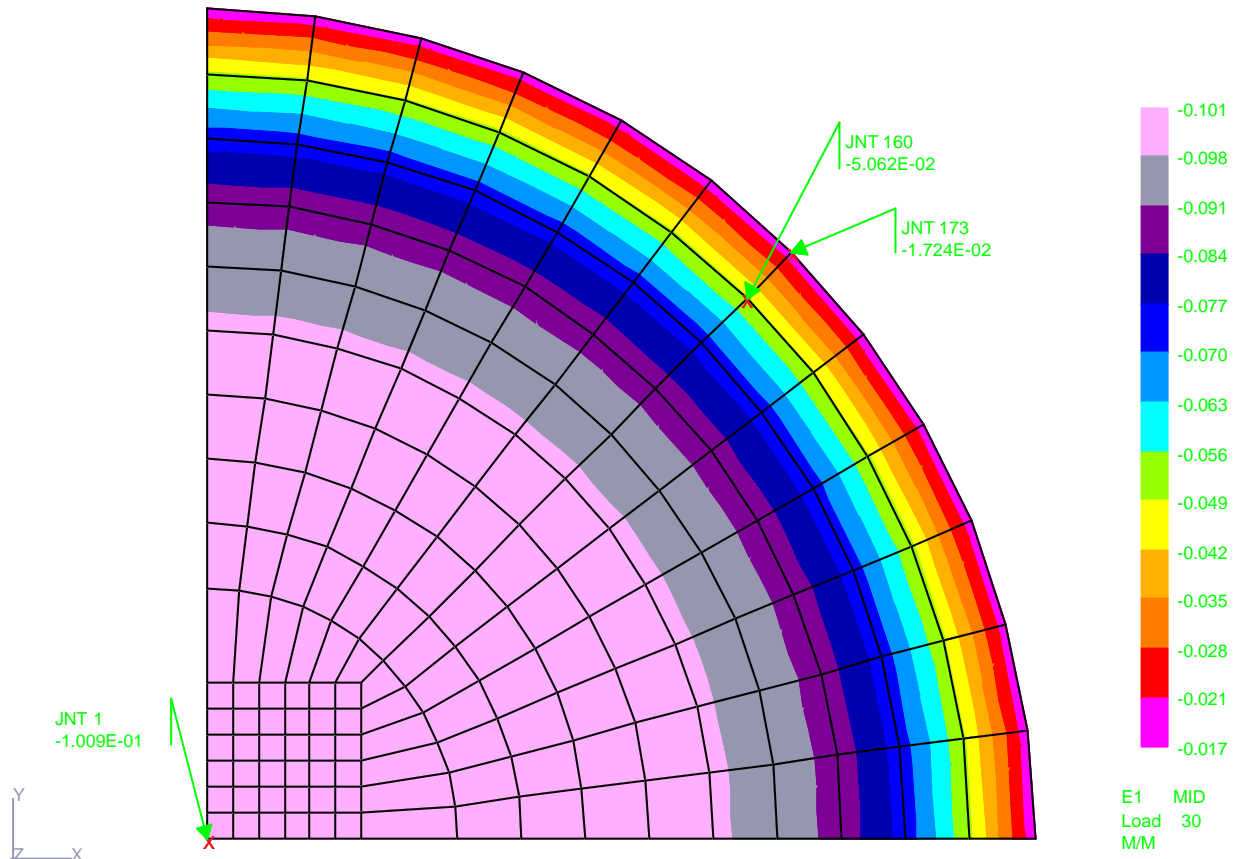


图 7.2.1c 主应力分布 (Case1a)

主ひずみ E1



主ひずみ E2

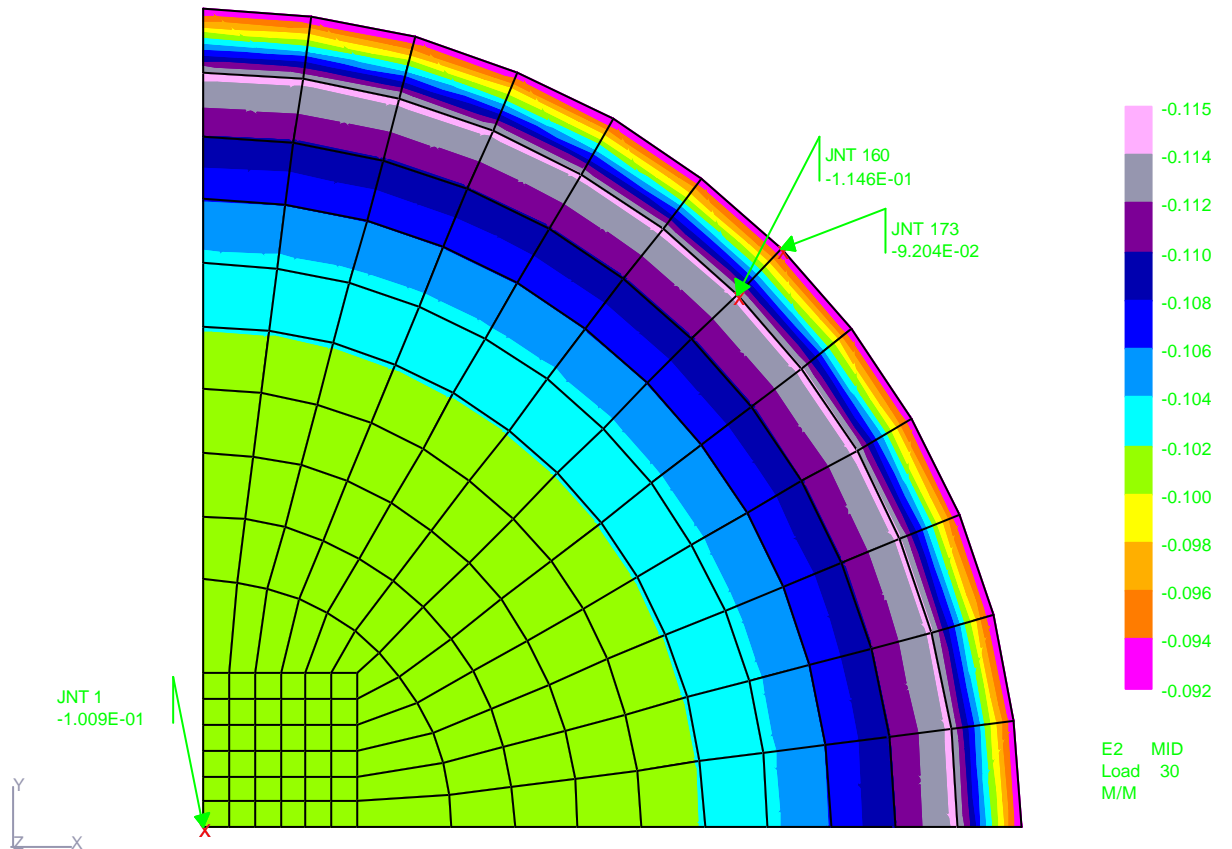


図 7.2.1d 主ひずみ分布 (Case1a)

## 7.2.2 応力の概算

全体領域でひずみ分布が一様である場合には、応力 - 温度曲線を用いて、前節の温度に対応する応力を読みとることで、応力値を推定することができる。ただし、箔周上での温度が内部よりも低いのでひずみは小さくなり、解析値は下図で得られる値よりも小さくなる。

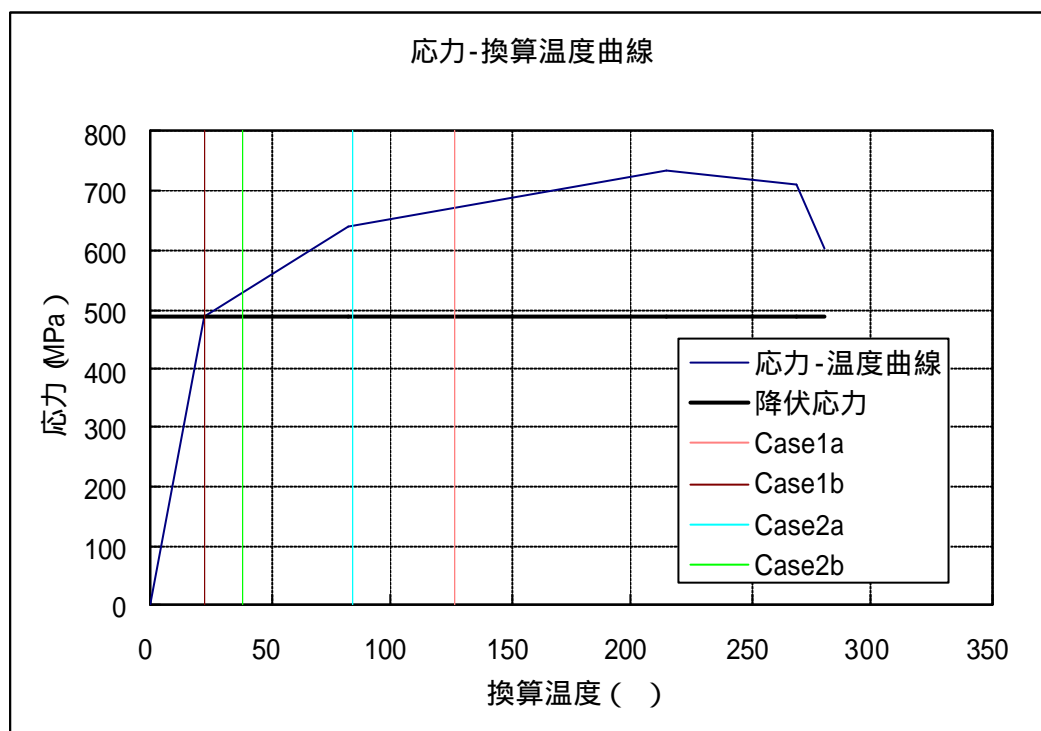


図 7.2.6 応力の概算

## 8 . 考察と今後の課題

以下に、解析結果から得られた主な知見と今後の課題をまとめた。

### 1次元解析

#### ( 1 ) 水素濃度拡散解析

\* 圧力条件によって、初期状態から定常状態への変化が大きく異なるので、発熱量は大きくこととなる。下流側の圧力が0気圧の場合の方が発熱量は大きくなる。

#### ( 2 ) 温度拡散解析

\* 境界条件の設定が重要である。温度固定境界、伝達境界、断熱境界を比較すると、伝達境界を設定するのが現実に近いと思われる。その際、熱伝達係数に依存するので実験を行うなどして現実的な値を調査する必要がある。

\* 温度の拡散は水素濃度の拡散の1000倍程度速い。従って、最大温度はかなり初期の段階で発生する。

### 2次元解析

#### ( 1 ) 温度拡散解析

\* 今回の解析は、厚さ方向には断熱として計算しているために、温度が高く評価されており、今後、1次元温度拡散解析において伝達境界を設定した解析結果から熱量を算定して、2次元解析に適用することが必要と思われる。

\* 温度拡散が水素濃度拡散よりも速いために、直径が小さい場合、箔周上で温度が固定されていれば周への熱流出の影響が大きく、発熱による温度上昇が中心部を除き抑えられる。

#### ( 2 ) 応力解析

\* 最大応力は、降伏応力に達して場合が多い。ただし、厚さ方向に断熱の仮定で解析しているので温度を高く評価している。したがって、発生応力も大きく評価していると思われる。

\* 合金箔を支持しているリングは熱膨張がないと仮定しているが、膨張を考慮すれば応力は緩和されられると思われる。

\* 今回の解析は、均質な物性を仮定しているので結果は半径方向へ1次元的な分布を示し、周方向には均一な分布となっている。物性、形状、荷重等の不均一性を考慮すれば、応力分布に強弱が現れ、その部分で最初の破壊が起こると考えられる。