GS1-1 Modelica モデリング言語を用いた ロータリー型太陽反応装置の動的モデリング手法の検討

Dynamic Modeling of Rotary-Type Solar Reactor using Modelica Modeling Language

○ 松本秀行 (東工大)

正 黒田千秋 (東工大)

Hideyuki Matsumoto, Tokyo Institute of Technology

Chiaki Kuroda, Tokyo Institute of Technology

Key Words: *Dynamic Modeling, Solar Reactor, Modelica, Process Simulation*

A purpose of this study is to investigate methods for dynamic modeling and unsteady simulation to design of innovative reactors. In the present paper, we investigate a method for dynamic modeling of Rotary-Type Solar Reactor (RSR) by using the open Modelica modeling language. In the dynamic modeling, three model components, which are the solid component, the fluid component and the radiation component, are developed to express energy balance inside the RSR. Thus heat transfer network in RSR could be modeled by combination of the three kinds of components. It is demonstrated that the heat transfer network simulation base on the object-oriented modeling approach could clarify energy efficiency of RSR developed at Tokyo Institute of Technology, by comparing with different type of RSR, e.g. CR5 developed at Sandia National Laboratories. Moreover, process simulations for the transient response analysis show extendibility and reusability of the above-mentioned model components.

1. 緒言

近年、再生可能エネルギーの一つである太陽熱を水素エネルギーに変換する技術として、水の熱分解による水素生成プロセスが注目されている。直接水を熱分解するためには約 4300 K の高温が必要とされるため、熱分解温度を低温化させるために多段階の熱化学サイクル反応を利用したプロセスが開発されてきた。近年では、以下に示すような金属酸化物を利用した 2 段階の熱化学サイクルの開発が活発に行われている。

高温太陽熱集光システムの利用により、2 段階水熱分解プロセスの実用化検討は促進されており、同プロセスを連続的に進行させるために様々なコンセプトの反応装置が提案されている。東京工業大学 (以下、東工大) では、反応性セラミックスを焼結させたシリンダーを回転し、熱還元反応セルと水分解反応セルを交互に通過させるロータリー型反応装置 (Rotary-Type Solar Reactor; 以下、「RSR」と記述) を開発している^[1]。米国 Sandia 国立研究所で開発されている CR5 反応装置 (以下、「CR5」と記述) も東工大の装置と類似しているが、反応性フェライトを取り付けたリングをスタック状に配置し、互いに逆方向に回転させることで復熱を行う構造を有している^[2]。また、ドイツ宇宙航空センターは、ハニカム構造のセラミックスに反応性フェライトを担持させ、セラミックスの温度に合わせてキャリアガスを切り替えることにより 2 段階水熱分解プロセスを繰り返し進行させる方式の反応装置を開発している。

既往の研究においては、太陽反応装置の性能の定常解析に関する報告が多くなされている。しかし、反応装置に供給される集光太陽熱の流束の変動や反応装置システムの故障などは安定性や生産性に大きく影響すると考えられるが、反応装置の設計のためのプロセスシステムの非定常解析手法の検討は十分になされていない。熱・物質収支に基づく速度論モデルを用いた太陽反応装置内部の反応・拡散現象シミュレーションはプロセス装置の詳細設計の効率化に貢献しうると考えられる。しかし、RSR についてはプロセスの循環構造と反応性セラミックス層の回転移動によって、動的シミュレーションの初期・境界条件が複雑であり、前述の反応・拡

散現象シミュレーションの収束性に十分注意する必要がある。つまり、対象プロセス装置の動的挙動が複雑な場合、精緻で詳細な反応・拡散現象シミュレーションを行う前に、次元を減らしたモデル (Reduced model) と初期・境界条件の組み合わせによって得られる対象プロセス装置の動的挙動を概観することが重要である。

本研究では、再生可能エネルギーを用いた革新的な反応装置の開発を支援しうる化学プロセスの動的モデリングとダイナミックシミュレーションについて階層的な手法を検討することを目的とし、オブジェクト指向の物理モデリング言語である Modelica の RSR の基本設計への適用性を明らかにする。具体的には、RSR 内部の反応性セラミックス温度の時空間的变化が装置全体の性能に大きく影響を及ぼすことを鑑み、構造の異なる二つの RSR 内部の熱移動ネットワークの巨視的モデリング手法を検討する。

2. Modelica を用いた熱移動ネットワークのモデル化

2-1 Modelica の利用

Modelica はオブジェクト指向モデリング言語であり、クラスに相当する「コンポーネント」という概念がある。また、コンポーネントは物理ポートとも呼ばれる「コネクタ」を有し、コネクタはコンポーネントを他のコンポーネントと結合した時の結合点 (ノード) における変数を定義するためのものである。Modelica を用いることで、対象の物理システムの全方程式を、各コンポーネント内部で定義された構成方程式 (微分方程式) と、コンポーネントの結合により自動生成される保存方程式 (代数方程式) の組み合わせによる連立微分代数方程式 (DAEs) で記述することができる。

2-2 熱移動ネットワークの動的モデル化手法

本研究では、Modelica を用いたモデリング・シミュレーション環境として、Dymola (Dassault Systemes 社製) を利用した。現在公開されている Modelica の標準ライブラリには、熱系パッケージ (Modelica.Thermal) や流体系パッケージ (Modelica.Fluid) が含まれている。しかし、RSR のように、移動する反応性セラミックス層に着目した解析を行うような場合には、既存のパッケージを適用することは難しいと考えられた。

そこで、3 種類のコンポーネント (装置内の固体領域と流

体領域、および輻射熱計算)を構築した。固体領域および流体領域コンポーネントの支配方程式は1次元非定常のエネルギー方程式を有限体積補により離散化することで導出される。各コンポーネントの核である方程式モデルとその機能は以下のとおりである。

固体領域コンポーネント (Solid Component)

固体領域コンポーネントでは、 x 軸方向の熱伝導と熱の移流、領域内で生じる反応熱、および周囲より流入する熱からエネルギー収支を計算する。

コンポーネントで定義した支配方程式を以下に示す。

$$\frac{dH}{dt} = \dot{H}_{in} - \dot{H}_{out} - kA \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{in} + kA \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{out} + \dot{Q}_{rxn} + \dot{Q}_{ext}$$

ここで、 in , out は検査領域の x 軸方向の界面より出入りする量であることを表し、 H はエンタルピー、 $\dot{H}$ は固体の移動によるエンタルピー移流速度、 $\dot{Q}_{rxn}$ は反応熱発生速度、 $\dot{Q}_{ext}$ は周囲より流入する伝熱速度を表している。

気固触媒反応による反応熱はすべて固体領域内で生じるものとし、以下の式で計算を行った。

$$\dot{Q}_{rxn} = r\Delta H$$

反応速度 r と反応エンタルピー ΔH は温度に関わらず一定であるとし、検査領域内の温度が設定した閾値を超えた場合に反応熱を考慮するようにした。また、シミュレーション領域の幾何学的形状は直方体とし、 x 軸方向の検査領域の分割は任意に設定できるようにした。

流体領域コンポーネント (Fluid Component)

流体領域コンポーネントでは、 x 軸方向の対流による伝熱と、周囲より流入する熱からエネルギー収支を計算する。コンポーネントで定義した支配方程式を以下に示す。

$$\frac{dU}{dt} = \dot{H}_{in} - \dot{H}_{out} + \dot{Q}_{ext}$$

ここで U は内部エネルギー、 $\dot{H}$ は対流による伝熱速度を表している。対流による伝熱においては、風上差分法を利用し上流側のエンタルピーより計算を行った。物性値の計算は標準ライブラリ内の気体の物性値計算パッケージ (Modelica.Media) を利用した。その他は固体領域コンポーネントと共通である。

輻射熱計算コンポーネント (Radiation Component)

輻射熱計算コンポーネントを介して固体領域コンポーネントを結合させることで、固体領域コンポーネントと別の固体領域コンポーネントとの間における輻射熱の計算を行う。同コンポーネントで定義した支配方程式を以下に示す。

$$\frac{\sigma T_i^4 - J_i}{(1-\varepsilon_i)/\varepsilon_i} = \sum_{j=1}^n \frac{J_j - J_i}{1/F_{ij}}$$

σ はボルツマン定数、 ε は射出率、 J は射度、 F は形状係数である。

輻射熱計算コンポーネントは結合する固体領域コンポーネントの数だけコネクタを持つので、直接、固体領域コンポーネント内のコネクタ間で保存方程式が生成されることがなく、各々のコネクタ変数を独立させて計算を行うことができた。

以上の3種類のコンポーネントの再利用と結合により、東工大で開発された RSR^[3] と米国の CR5 (Fig. 1) の両方の装置内部の熱移動ネットワークのモデル化ならびに動的シミュレーションシステムの構築を容易に行うことができた。

3. RSR の過渡応答シミュレーション

RSR の運転管理において、反応性セラミックスが固定さ

れたシリンダーの回転速度の変動が水素の生産性やプロセス全体のエネルギー効率に影響を及ぼすと考えられる。本研究では、前述のシミュレーションシステムを用いて、回転ギアの故障によってシリンダーの回転速度が徐々に減少するケースの動的シミュレーションを行った。

前節で構築されたシミュレーションシステムの適用においては、回転速度を変動させるために固体領域コンポーネントの部分的修正が必要であった。Modelica を用いたモデリングでは変数の因果性や計算の収束性に特別な注意を払うことなく、固体領域コンポーネントで宣言された回転速度を固定パラメータから変数へ容易に修正することができた。

東工大で開発された RSR について、操作開始から 10 s 後から 60 s 間で回転速度が 1 rpm から 0.5 rpm へ線形的に失速するケースの動的シミュレーション結果を Fig. 2 に示す。RSR 内部の 4 つのセクション (熱還元、水蒸気発生、水分解、フィードバック) の各人口におけるセラミックス温度の時間的変化を解析することで、回転速度の変動が輻射による外部への放熱速度や太陽熱供給量の変化に影響を及ぼすという知見が得られた。

Fig.1 Schematic diagram of heat transfer network in CR5

Fig.2 Transient response of temperature to time-variation of rotational speed of the cylinder

参考文献

- [1] H. Kaneko *et al.*, "Rotary-type solar reactor for solar hydrogen production with two-step water splitting process", *Energy Fuels*, **21**, 4048-4077 (2007)
- [2] R. B. Diver *et al.*, "Solar thermochemical water-splitting ferrite-cycle heat engines", *J. Solar Energy Eng.*, **130**, 041001 (2008)
- [3] H. Matsumoto *et al.*, "Process analysis of rotary-type solar reactor for hydrogen production systems", *Proc. of ESCAPE 22*, London, UK, 1103-1107 (2012)