

Type III 수소 저장 용기에서 난류 모델(Turbulence Model)에 따른 충전(Filling)현상의 수치 해석적 연구

김무선¹ · 류준형² · 이성권³ · 최성웅^{3,†}

¹한국철도기술연구원 도시철도연구팀, ²한국철도기술연구원 추진시스템연구팀, ³경상국립대학교 기계시스템공학과

Numerical Analysis of Filling Flow in Type III Hydrogen Tank with Different Turbulence Models

MOO-SUN KIM¹, JOON-HYOUNG RYU², SUNG-KWON LEE³, SUNG-WOONG CHOI^{3,†}

¹Urban Railroad Research Department, Korea Railroad Research Institute, 176 Cheoldobangmulgwan-ro, Uiwang 16105, Korea

²Propulsion System Research Department, Korea Railroad Research Institute, 176 Cheoldobangmulgwan-ro, Uiwang 16105, Korea

³Department of Mechanical System Engineering, Gyeongsang National University, 2 Tongyeonghaean-ro, Tongyeong 53064, Korea

†Corresponding author :
younhulje@gnu.ac.kr

Received 29 November, 2021
Revised 9 December, 2021
Accepted 17 December, 2021

Abstract >> With continuous emission of environmental pollutants and an increase in greenhouse gases such as carbon dioxide, demand to seek other types of energy sources, alternative energy, was needed. Hydrogen, an eco-friendly energy, is attracting attention as the ultimate alternative energy medium. Hydrogen storage technology has been studied diversely to utilize hydrogen energy. In this study, the gas behavior of hydrogen in the storage tank was numerically examined under charge conditions for the Tpe III hydrogen tank. Numerical results were compared with the experimental results to verify the numerical implementation. In the results of pressure and temperature values under charge condition, the Realizable k-ε model and Reynold stress model were quantitatively matched with the smallest error between numerical and experimental results.

Key words : Hydrogen tank(수소 탱크), Type III(타입-3), Numerical analysis(수치 해석), Turbulence model(난류 모델)

1. 서 론

산업혁명이 시작된 이후로 인류는 화석연료를 비롯한 많은 에너지 자원을 바탕으로 에너지를 소비하

고 있다. 화석연료 기반의 에너지 의존도는 효율이 높고 저장과 운송이 쉽다는 장점으로 인해 다른 에너지 자원보다 의존도가 높은 편이다¹⁾. 하지만 환경 오염물질의 지속적인 배출과 이산화탄소 같은 온실

가스의 농도 증가의 원인으로 인해 다른 에너지원의 발굴과 모색이 요구되고 있다. 대체 에너지의 발굴과 에너지 전략에 대한 수많은 논의가 계속되는 가운데 핵심적인 대체 에너지로 거론되고 있는 것 중 하나가 수소를 이용한 에너지원이다.

수소는 물, 유기물 등의 화합물로부터 제조할 수 있고 온실가스가 배출과 공해물질의 배출량이 없는 친환경 에너지이기 때문에 현재의 화석연료나 원자력 에너지원과는 다른 미래의 궁극적인 대체 에너지 매체로 꼽히고 있다. 또한, 특정 지역에 매립되어 지역적인 편중이 있는 화석연료와는 다르게 수소는 지역적 편중이 없는 장점이 있다^{2,3)}.

수소를 에너지원으로 활용하기 위해서는 수소의 생산, 저장과 같은 기술을 활용해야 하며 저장 및 운송에 대한 다양한 방법들의 연구가 진행되었다. 특히 수소를 안전하게 저장할 수 있는 저장 기술은 수소 에너지의 근본적인 활용기술로 고압 기체 저장방식, 액체수소 저장방식 및 매체 수소 저장방식 등으로 나누어지고 각 저장방식에 따른 다양한 연구가 진행되었다. 그리고 각각의 장단점으로 인해 저장 기술의 활용성이 다양화되었다. 고압 기체 저장법과 액체수소 저장법은 현재 일반적으로 적용되는 방법이지만, 고압 기체 저장법의 경우 상대적으로 체적 당 저장 밀도가 낮고 고압의 가스용기를 사용함으로써 위험성이 크다는 단점이 존재한다. 액체수소 저장법은 체적 당 저장 밀도가 고압 기체 저장법보다 크지만, 수소의 액화점인 -253°C 이하로 유지되어야 하는 특수 단열 시스템이 요구되고 장시간의 저장에 기술적 한계가 존재한다⁴⁾. 현재의 기술적 한계와 높은 활용성 측면에서 볼 때 고압 기체 저장법이 주로 사용되고 있다.

수소저장시스템은 수소연료전지의 에너지원이 되는 수소가스를 최대 70 MPa의 고압으로 압축하여 저장 밀도를 높인 상태로 용기 내에 충전이 진행된다. 수소충전소에서 충전기를 통한 수소가스 충전 시 탱크의 내부 압력 제한선까지 충전을 지속되면서 탱크 내부는 고압의 수소가스가 급속으로 충전되는 상태가 진행되는데 이때 안정적인 충전을 위해 탱크

내부 상태 변화를 고려한 충전방안이 필요하다.

수소 충전에 대한 연구들⁵⁻⁷⁾은 수소 연료전지 수소용 연구들을 토대로 다방면으로 진행되었고 많은 경우 실험의 제약성으로 인해 수치 해석적인 방법을 통해 진행되었다. 특히 내부의 고압 압축 수소를 충전 시 안정적인 저장 시스템의 운용을 위해 저장 탱크 내부의 특성변화를 예측할 수 있는 수치해석 기반의 연구 등이 진행되었다. 하지만 고압 수소의 거동으로 인해 정확성과 해석의 효율성 등에 관해서는 응용 연구가 더 필요한 상황이다.

본 연구에서는 Type III 수소 저장 탱크를 대상으로 고압 수소의 충전 조건에서 수소의 거동과 내부 수소 상태의 변화를 수치적으로 접근하였다. 특히 수소 유체의 정확한 모사를 위해 난류 모델별 계산의 정확성과 유체 거동의 영향성에 대해 논의하였다.

2. 배경

2.1 수소 고압 기체 저장용기

고압 기체 저장은 현재 일반적으로 사용하는 방식 중 하나이며 수소기체를 15-70 MPa 등의 고압으로 압축하여 고압용기에 저장하는 방식이다. 고압 기체 저장방식은 무게 밀도가 13%, 부피밀도가 $40 \text{ kg H}_2/\text{m}^3$ 으로 낮은 단점과 공간상의 제약이 많아 수송비가 높은 단점이 있다 하지만 충전 방법이 간단하여 많이 사용되고 있다⁸⁾. 수소 저장을 위한 용기는 Fig. 1에서 보는 바와 같이 Type 1에서 Type 4까지 4가지 종류가 있으며 용기의 몸통 부분과 용기 내측(라이너) 부분을 구성하는 재질 및 강도에 따라 구분된다. Type 1은 강 또는 알루미늄으로 만들어진 금속제 용

Type I	Type II	Type III	Type IV
Steel container (Aluminum, steel)	Steel container (Aluminum, steel)	Aluminum liner	Plastic liner

Fig. 1. Hydrogen tank type and its characteristics⁴⁾

기로 복합재료에 의한 구조적 강화 없이 금속재료만으로 압력 하중을 견디는 방식의 용기이다. Type 2 용기는 강 또는 알루미늄으로 만들어진 금속제 라이너 위에 수지를 함침시킨 탄소섬유나 유리섬유를 원주 방향으로 감아서 만든 용기이다. Type 3 용기는 강 또는 알루미늄으로 만들어진 얇은 금속제 라이너 위에 수지를 함침시킨 탄소섬유나 유리섬유를 원주 방향과 길이 방향으로 감아서 만든 용기이다. 금속제 라이너는 하중을 부담하지 않거나 극히 일부분만을 부담한다. Type 4 용기는 용기의 경량화를 목적으로 비금속 재료로 만들어진 라이너 위에 수지를 함침시킨 탄소섬유나 유리섬유를 원주 방향과 길이 방향으로 감아서 만든 용기이다. 비금속 재료로 만들어진 라이너는 하중을 거의 부담하지 않는다⁹⁾.

3. 수치 해석

고압 수소의 충전 조건에서 수소의 거동과 내부 수소 상태의 변화를 수치적으로 모사하기 위해서 수소 충전에 대한 모델링을 수립하고 정식화하는 과정이 필요하다. 수치해석 기법을 검증하는 과정은 공개된 실험 값¹⁰⁾과의 비교를 통해 해석적 방법의 검증이 이루어졌다. 이런 과정으로 Type III 수소 저장 탱크

충전 시 수치 해석적 방법의 검증이 진행되었다.

해석을 위한 고압 탱크는 74 L 용량의 실린더 구조의 저장 탱크로 내부 길이가 1,030 mm, 내경이 354 mm이며 normal working pressure는 70 MPa인 고압 탱크이다(Table 1). 고압의 수소 충전을 통한 내부 상태 변화의 수치 해석적 접근법은 고압 기체의 충전에 따른 내부 기체의 유동과 열전달을 같이 해결하는 문제로 정식화할 수 있다.

3.1 모델링

Type III 모델을 통한 수소 충전 해석에서는 ANSYS (Ansys Inc., canonsburg, PA, USA)의 Design modeler를 이용하여 Type III의 형상과 해석영역을 생성하였으며 크기 정보와 물성치는 Table 1에 나타내었다. 해석을 위해 각 요소는 surface로 두께는 무시한 surface body로 진행하였으며 전체 해석은 Axi-symmetry 모델로 수행하였다. Type III 저장 탱크 모델은 Fig. 2에서 보는 바와 같다.

고압 수소의 충전 조건에서 수소의 거동과 내부 수소 상태 변화의 해석을 수행하기 위해서는 수소의 가스(gas)모델과 난류(turbulence) 모델에 따라 결과 값들이 많은 편차를 보인다. 따라서 적합한 모델을 선택하는 것이 중요하다. 이전 진행되었던 연구들에서는 가스모델로서 Redlich-Kwong gas 모델이 가장 적합한 모델임을 밝힌 바 있다^{11,12)}. 본 연구에서는 적합한 난류 모델을 결정하기 위해 realizable $k-\epsilon$ ¹³⁾, Renormalization group (RNG) $k-\epsilon$, Shear stress transport (SST) 모델과 Reynolds stress model (RSM) 등을 비교하여 난류 모델의 검증을 진행하였다.

Table 1. Geometry and material properties

Geometry and material properties		
Cylinder	Total length (mm)	1,030
	Inner diameter (mm)	354
	Outer diameter (mm)	427
Laminate (CFRP layer)	Thickness (mm)	27-30
	Density (kg/m ³)	1,570
	Specific heat (J/[kg·K])	840
	Thermal conductivity (W/[m·K])	0.612
Liner (aluminum alloy)	Thickness (mm)	5-10
	Density (kg/m ³)	2,700
	Specific heat (J/[kg·K])	902
	Thermal conductivity (W/[m·K])	238

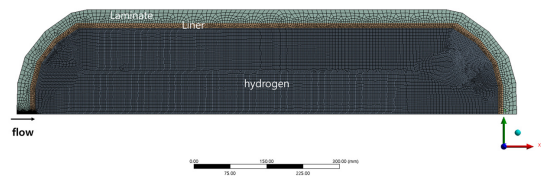


Fig. 2. Type III model

3.2 지배방정식

고압 수소의 충전 조건에서 수소 저장 탱크 내부 유동은 2차원 비정상 상태, 압축성 난류 유동으로 설정하였고 작동 유체의 밀도는 real gas effects를 지배 방정식에 적용하여 산출하였다. 연속방정식과 momentum conservation 방정식, 에너지방정식은 아래 식과 같다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial (-\overline{\rho u_i u_j})}{\partial x_j}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j C_p T) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)$$

(ρ : density, t: time, u: velocity tensor, x: distance, subscript i: direction [i=1, 2, 3은 각각 x, y, z 방향], p: pressure, C_p : specific heat, T: temperature, k: thermal conductivity)

3.2 해석 조건

고압 수소의 충전 조건에서 수소 저장 탱크 내부 유동 해석은 압축성 난류 유동에 대한 비정상상태의 유동 해석으로 진행하였다. 고압 수소 충전 해석은 전산유체역학 상용 프로그램인 Ansys (Fluent ver. 18)를 사용하였으며 해석 영역은 Ansys workbench의 design modeler 및 mesh를 통해 모델링하였다. 해석

Table 2. Hydrogen charging condition

Initial pressure (MPa)	9.5
Final pressure (MPa)	60
Charging time (s)	180
Ambient temperature (K)	298
Pre-cooling temperature (K)	265

의 신뢰도를 위해 residual value 값은 1×10^{-6} 이하 값에서 수렴성을 판단하였으며 매 time step 당 20회 이상 반복 계산을 수행하였다. 수소 충전 수치해석은 실험값¹⁰⁾과 비교를 통해 검증하였으며 실험값의 충전 조건¹⁰⁾은 아래 Table 2와 같다.

4. 결과 및 고찰

고압 수소의 충전 실험 조건¹⁰⁾은 초기 충전 시 60 MPa 조건의 압력을 가해 가압되는 조건이며 동일한 조건으로 수치해석을 진행하였다. 수치 결과 값은 시간대별 결과 값과 final 시간(180초)에서 수소 내부 압력 값의 비교를 통해 검증을 진행하였다. 충

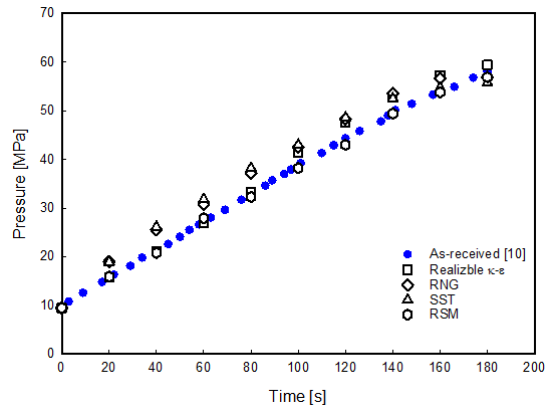


Fig. 3. Pressure behavior with turbulence models

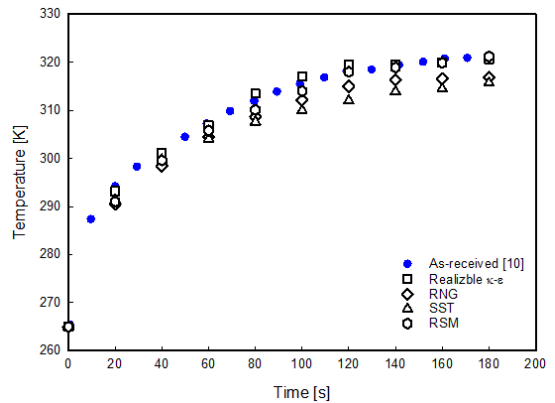


Fig. 4. Temperature behavior with turbulence models

전 시 중요 결과 값인 압력 값과 내부 온도 변화 값과의 비교를 통해 계산의 검증과정이 진행되었다.

Figs. 3, 4는 난류 모델 별 시간에 따른 압력 변화 값과 온도 변화 결과를 보여준다. 난류 모델별 turbulence energy 값의 변화를 Figs. 5, 6에서 볼 수 있다. Table 3에서 볼 수 있듯이 평균 값에 관한 결과 비교를 보면, 압력 값은 약 40초 근방에서 11% 정도의 오차를 보여주고, 온도 값은 약 100초 근방에서 1% 오차를 보여준다. 압력 그래프에서 보는 바와 같이 Realizable k-ε 모델과 Reynolds stress model이 가장 근접한 결과 값을 보인 반면, RNG k-ε 모델과 SST 모델은 다소 차이가 나는 결과를 보여줌을 알 수 있다. 특히 압력 값에서는 Realizable k-ε 모델과 RSM은 실험값과 약 2%와 1.6%의 오차를 보여준다.

온도 결과 값을 비교해보면 Realizable k-ε 모델과 RSM은 약 0.2%와 0.4%의 오차를 보여준다. 실험값

과 평균적인 오차 값과 비교해볼 때 관련 두 모델은 실험값과 근접한 결과를 보여준다고 볼 수 있다.

RSM에서는 통상적인 two equation인 k-ε 모델에서 eddy viscosity의 isotropy한 특징을 제거하면서 anisotropic에 가까운 결과를 유도하는 방식으로 접근하기 때문에 실험값과 근접한 결과 값을 보여준다고 판단할 수 있다. 하지만 Reynolds stress를 풀기 위해 여섯 개의 transport equation을 하나씩 계산하면서 진행해야 하므로 비교적 긴 계산 시간이 필요하다¹⁴⁾. 따라서 계산 시간, 결과 값 등을 고려했을 때 realizable k-ε 모델을 선택하는 것이 수소 filling 현상을 계산하고 접근하는 데 합리적인 선택으로 보인다.

5. 결론

본 연구에서는 Type III 수소 저장 탱크를 대상으로 수치 해석 시 난류 모델의 적합성에 관한 연구를 진행하였다. 고압 수소의 충전 조건에서 수치 모사의 검증을 위해 난류 모델에 따른 수치 해석 결과 값을 실험 값과 비교하여 모델별 차이 값을 정량적으로 분석하였다. 저장 탱크의 내부 변화(압력, 온도)의 수치적 연구 결과, 난류 모델 중 Realizable k-ε 모델과 RSM이 실험 값과 가장 작은 오차를 보여주었다. 본 해석 방법론은 향후 진행될 다양한 수소 충전 시나리오 연구에 적용될 예정이다. 나아가 환경 조건에 따른 수소 저장 탱크의 구조적 영향성 연구에도 활용될 것으로 예상된다.

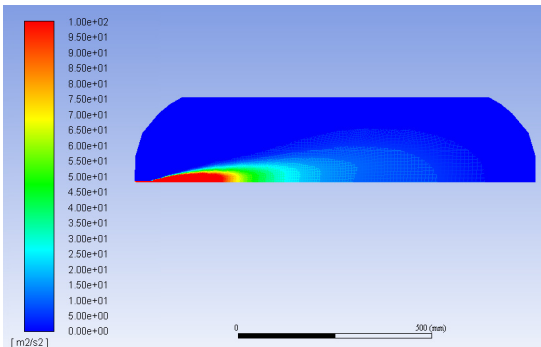


Fig. 5. Turbulent kinetic energy (realizable k-ε)

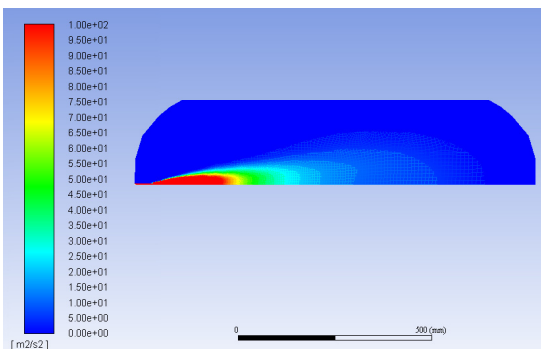


Fig. 6. Turbulent kinetic energy (RMS)

Table 3. Average error between numerical results and experimental results with turbulence models

Turbulence model	Error (%)	
	Pressure	Temperature
Realizable k-ε	7.60	0.2
Renormalization group (RNG) k-ε	44.0	1.0
Shear stress transport (SST)	18.2	1.3
Reynolds stress model (RSM)	3.20	0.4

후 기

본 연구는 국토교통부 철도기술연구개발사업의 연구비지원(21RTRP-B146010-04)에 의해 수행되었다.

References

1. H. L. Kim, S. K. Kang, Y. S. Huh, and J. S. Moon, "Analysis of overseas hydrogen refueling station design and operation requirements", Proceedings of the Korea Gas Society Conference, 2017, pp. 36-36.
2. S. J. Oh, J. H. Yoon, K. S. Jeon, J. K. Kim, J. H. Park, and J. Choi, "A study on the characteristics of temperature distribution related to geometry of tube in hydrogen storage vessel", Trans Korean Hydrogen New Energy Soc, Vol. 32, No. 4, 2021, pp. 205-211, doi: <https://doi.org/10.7316/khnes.2021.32.4.205>.
3. B. E. Lee, H. J. Lee, C. H. Moos, S. B. Moon, and H. K. Lim, "Preliminary economic analysis for H₂ transportation using liquid organic H₂ carrier to enter H₂ economy society in Korea", Trans Korean Hydrogen New Energy Soc, Vol. 30, No. 2, 2019, pp. 119-127, doi: <https://doi.org/10.7316/KHNES.2019.30.2.119>.
4. M. S. Kim, J. H. Ryu, S. Y. Jung, S. W. Lee, and S. W. Choi, "Numerical analysis of discharge flow in type III hydrogen tank with different gas models", Trans Korean Hydrogen New Energy Soc, Vol. 31, No. 6, 2020, pp. 558-563, doi: <https://doi.org/10.7316/KHNES.2020.31.6.558>.
5. T. Johnson, R. Bozinoski, J. Ye, G. Startor, J. Zheng, and J. Yang, "Thermal model development and validation for rapid filling of high pressure hydrogen tanks", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 40, No. 31, 2015, pp. 9803-9814, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.05.157>.
6. D. Mori and K. Hirose, "Recent challenges of hydrogen storage technologies for fuel cell vehicles", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 34, No. 10, 2009, pp. 4569-4574, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.07.115>.
7. Y. Z. Zhao, G. S. Liu, Y. L. Liu, J. Y. Zheng, Y. C. Chen, L. Zhao, J. X. Guo, and Y. T. He, "Numerical study on fast filling of 70 MPa type III cylinder for hydrogen vehicle", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 37, No. 22, 2012, pp. 17517-17522, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.03.046>.
8. C. T. Park, "Report on technology roadmap for hydrogen industry in Chungnam region", Chungnam Techno Park, 2017.
9. J. H. Lee, G. H. Yoo, and S. B. Heo, "High pressure hydrogen gas cylinder for fuel cell vehicle and station", Theories and Applications of Chem. Eng., Vol. 10, No. 1, 2007, pp. 1108-1111. Retrieved from https://www.cheric.org/proceeding_disk/kiche2004s/O1108.pdf.
10. J. Zheng, J. Guo, J. Yang, Y. Zhao, L. Zhao, X. Pan, J. Ma, and L. Zhang, "Experimental and numerical study on temperature rise within a 70 MPa type III cylinder during fast refueling", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 38, No. 25, 2013, pp. 10956-10962, doi: <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2013.02.053>.
11. M. S. Kim, J. H. Ryu, S. J. Oh, J. H. Yang, and S. W. Choi, "Numerical investigation on influence of gas and turbulence model for type III hydrogen tank under discharge condition", Energies, Vol. 13, No. 23, 2020, pp. 6432, doi: <https://doi.org/10.3390/en13236432>.
12. A. Suryan, H. D. Kim, and T. Setoguchi, "Three dimensional numerical computations on the fast filling of a hydrogen tank under different conditions", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 37, No. 9, 2012, pp. 7600-7611, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.02.019>.
13. T. Shih, J. Zhu, J. Lumley, "A realizable Reynolds stress algebraic equation model", National Aeronautics and Space Administration, Vol. 105993, 1993.
14. R. J. Prieler, M. Demuth, D. Spoljaric, and C. Hochener, "Numerical investigation of the steady flamelet approach under different combustion environments", Fuel, Vol. 140, 2015, pp. 731-743, doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.10.006>.