

## بررسی پارامترهای مؤثر بر واجذب هیدروژن از مخزن هیدرید فلزی صنعتی

احمدعلی ربیع‌نجاج درزی<sup>۱</sup>، حمید حسن‌زاده افروزی<sup>۲\*</sup>، کورش صدیقی<sup>۳</sup>، موسی فرهادی<sup>۴</sup>

<sup>۱</sup> استادیار گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه مازندران، بابل، ایران

a.rabienataj@umz.ac.ir

<sup>۲</sup> دانشجوی دکتری دانشگاه صنعتی بابل، بابل، ایران

hamidhasanzade@yahoo.com

<sup>۳</sup> دانشیار گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی بابل، بابل، ایران

ksedighi@nit.ac.ir

<sup>۴</sup> استاد گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی بابل، بابل، ایران

mfarhadi@nit.ac.ir

**چکیده:** در مطالعه حاضر، فرایند واجذب هیدروژن برای استفاده در پیل سوختی در بستر هیدرید فلزی با اندازه صنعتی به همراه سیستم گرمایش ژاکتی شبیه‌سازی شده است. برای حل عددی مسئله مورد بررسی، از نرم‌افزار فلونت استفاده شده است. برای اعمال ترم‌های چشمه در معادلات پیوستگی و انرژی، از توابع تعریف‌شده توسط کاربر (UDF) استفاده شده است. شرط تعادل حرارتی بین هیدروژن و بستر آلیاژ در نظر گرفته شده و جریان هیدروژن از رابطه گاز کامل پیروی می‌کند. تأثیر دمای آب گرم‌کننده و ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی روی فرایند واجذب هیدروژن از بستر متخلخل بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند که افزایش دمای آب گرم‌کننده و ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی منجر به کاهش زمان کل واجذب می‌شود. به طور خاص با افزایش ضریب انتقال حرارت از  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  به  $4000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  باعث کاهش ۷ درصدی زمان کل واجذب هیدروژن از مخزن می‌شود، درحالی‌که افزایش ۱۰ درجه‌ای آب گرم‌کننده باعث کاهش ۸ درصدی زمان واجذب می‌شود.

**واژه‌های کلیدی:** ذخیره‌سازی هیدروژن، هیدرید فلزی، واجذب هیدروژن، انتقال حرارت و جرم، گرمایش ژاکتی، پیل سوختی، دینامیک سیالات محاسباتی.

در سال‌های اخیر، تحقیقات متعددی توسط محققان در زمینه بررسی فرایند انتقال حرارت و جرم و پارامترهای مؤثر روی آن‌ها در بسترهای هیدرید فلزی انجام شده است. جمنی و نصراله [۱-۲] طی دو مطالعه در سال‌های ۱۹۹۵ و ۱۹۹۷، فرایند جذب و واجذب را در بستر آلایز  $LaNi_5$  مدل‌سازی کردند. جمنی و همکاران [۳] نمودار تغییرات دما با زمان را در نقطه‌ای از بستر مورد آزمایش خود، طی فرایند جذب هیدروژن ارائه کردند که در سال‌های بعد، به مرجعی برای اعتبارسنجی تحقیقات عددی روی مخازن هیدرید فلزی تبدیل شد. آن‌ها همچنین در تحقیق ذکر شده، رابطه فشار تعادلی را به شکل تابعی از کسر هیدروژن موجود در بستر ارائه دادند، درحالی‌که عموماً قبل از آن، از رابطه معروف به ون هوف که فشار تعادلی را به شکل تابعی از دمای بستر ارائه می‌داد، استفاده می‌شد.

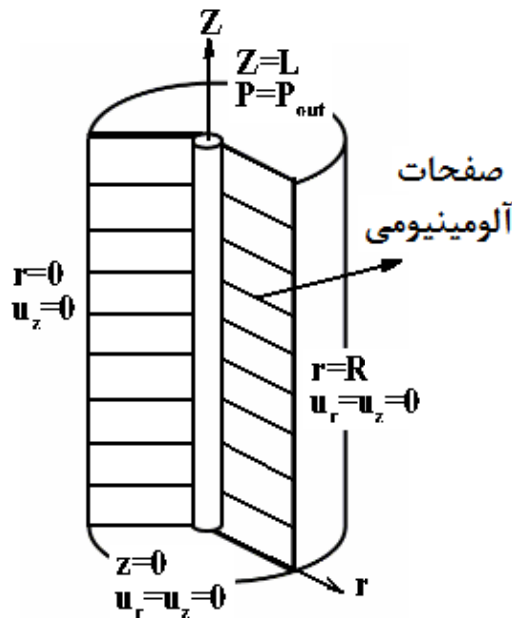
موتوکومار و همکاران [۴] انتقال حرارت و جرم را در مخزن استوانه‌ای هیدرید فلزی با آلایز سرد معروف به میش متال با فرمول شیمیایی  $MmNi_{4.6}Fe_{0.4}, MmNi_{4.6}Al_{0.4}$  مدل‌سازی کرده و اثر دمای جابه‌جایی و فشار خروجی هیدروژن را روی فرایند واجذب بررسی کردند. چانگ و همکاران [۵] با استفاده از روش المان محدود، اثر نسبت حجم انبساط به حجم بستر را در عملکرد حرارتی مخزن بررسی کردند. وانگ و همکاران [۶] شبیه‌سازی عددی سه بعدی بستر هیدرید فلزی را انجام دادند. آن‌ها برای مدل‌سازی، کدی را توسعه دادند. نام و همکاران [۷] اثر هندسه مختلف بستر هیدرید فلزی را در حجم ثابت روی فرایند جذب بررسی کردند. آن‌ها همچنین برخی از پارامترهای تأثیرگذار در فرایند جذب هیدروژن را مطالعه کردند. جیائو و همکاران [۸] اثر ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی، دمای جابه‌جایی، فشار و دمای هیدروژن ورودی را روی فرایند جذب هیدروژن در بستر آلایز  $LaNi_5$  بررسی کردند.

موتوکومار و رامانا [۹] اثر شرایط مرزی مختلف و ضخامت‌های مختلف مخزن ذخیره هیدرید فلزی را روی فرایند واجذب بررسی کردند. یک مبدل حرارتی حلزونی برای مخزن ذخیره هیدرید فلزی توسط ملولی و همکاران [۱۰] طراحی شد و نتایج آن‌ها نشان داد که استفاده از مبدل حرارتی در بستر هیدرید، اثر قابل توجهی در فرایند جذب و واجذب دارد. دائو و همکاران [۱۱] در یک تحقیق دیگر، مبدل مورد نظر را بهبود داده و صفحاتی به آن اضافه کردند. آن‌ها نتیجه گرفتند که استفاده از مبدل حرارتی حلزونی، به همراه صفحات متصل شده، کارایی بهتری در افزایش انتقال حرارت و در نتیجه، کاهش زمان جذب و واجذب دارد. موتوکومار و همکاران [۱۲] فرایند جذب را به شکل عددی مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها از لوله‌های خنک‌کننده

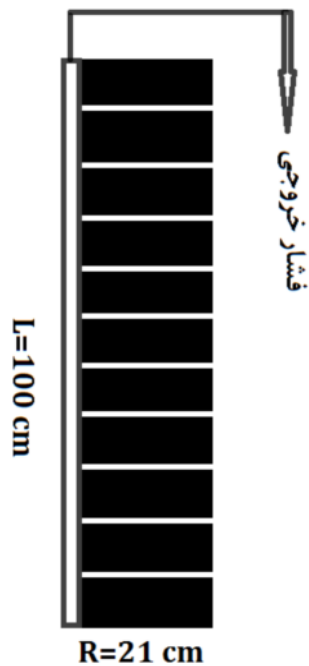
استفاده زیاد از سوخت‌های فسیلی با توجه به ایجاد آلودگی زیست‌محیطی مشکلاتی را برای جوامع بشری به بار آورده است. علاوه بر این، از نظر مدیریت انرژی، عملکرد مولدهای قدرت که با این سوخت‌ها کار می‌کنند، نشان می‌دهد که در وضعیت موجود، این مولدها بازده کمی دارند. بازده انرژی موتورهای احتراق داخلی حدود ۵۰ درصد و بازده نیروگاه‌های گازی حدود ۳۵ درصد است. بهترین سیکل حرارتی کاربردی که تاکنون مورد استفاده بشر قرار گرفته، سیکل ترکیبی برایتونرینکین<sup>۱</sup> است که در نیروگاه‌های حرارتی تولید برق مورد استفاده قرار گرفته و بازده آن قریب به ۴۵ درصد است. علاوه بر این، ظرفیت محدود بودن سوخت‌های فسیلی و عدم وجود جایگزینی مناسب برای مواد فسیلی در برخی از صنایع، مشکلات دیگری است که محققان استفاده از انرژی‌های نوین برای تولید توان سوق داده است. پیل سوختی نوعی از مولد قدرت است که در سال‌های اخیر، به‌طور ویژه، مورد توجه محققان و صنعتگران قرار گرفته است. علت اصلی این موضوع را می‌توان در راندمان بالای پیل سوختی دانست که با وجود استفاده از هیدروژن خالص، بازده آن به ۸۰ درصد می‌رسد. علت راندمان بالا در پیل سوختی، این است که این مولد قدرت از سیکل کارنو تبعیت نمی‌کند و به‌صورت مستقیم و به‌واسطه فرایند الکتروشیمیایی، انرژی شیمیایی سوخت را به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کند. در واقع می‌توان گفت که هیدروژن سوخت اصلی پیل سوختی است.

سه روش عمده برای ذخیره‌سازی هیدروژن وجود دارد: ۱. ذخیره‌سازی به صورت گاز فشرده در مخازن فولادی و کامپوزیتی، ۲. ذخیره‌سازی به صورت مایع در مخازن فوق سرد، ۳. ذخیره‌سازی هیدریدهای فلزی. مشکلات ذخیره‌سازی در فشار بالا و ایزوله کردن مخازن هیدروژن مایع، به علت دمای جوش پایین هیدروژن و همچنین مشکل حمل و نقل مخازن مایع، دو روش اول را در مقایسه با روش سوم که ذخیره‌سازی در مخازن هیدرید است، ناکارآمد جلوه می‌دهد. از نگاه مدیریت انرژی نیز میزان ذخیره‌سازی هیدروژن در حجم ثابت، در بسترهای هیدرید فلزی، به مراتب بیشتر از روش‌های دیگر ذخیره‌سازی هیدروژن است. علاوه بر این، امکان ذخیره‌سازی در دما (۲۰ تا ۴۰ درجه سانتی‌گراد) و فشار (۲ تا ۱۰ بار) نه چندان زیاد، هیدریدهای فلزی را به انتخاب اول ذخیره‌سازی هیدروژن تبدیل کرده است. از آلایزهای مرسوم برای ذخیره‌سازی هیدروژن، آلایز لانتانید-نیکل پنچ ( $LaNi_5$ ) است.

گاز و بستر. تخلخل محیط در طی فرایند واجذب ثابت فرض شده است. هیدروژن در فشار ثابت از بستر خارج می‌شود. فشار تعادلی از رابطه ون هوف محاسبه می‌شود. رابطه گاز کامل برای هیدروژن در شرایط مسئله صدق می‌کند.



شکل (۱): شکل قیاسی مخزن مورد بررسی و شرایط مرزی



شکل (۲): شکل قیاسی و اندازه‌های مدل ساخته شده

داخلی برای افزایش نرخ انتقال حرارت استفاده کردند. اسکری و همکاران [۱۳] در تحقیق دیگری، اثر لوله‌های خنک‌کننده را در هندسه‌های متفاوت مخزن هیدرید فلزی، روی فرایند جذب بررسی کردند.

اکثر محققان، مطالعات خود را روی بسترهای آزمایشگاهی بسیار کوچک هیدرید فلزی انجام داده‌اند، درحالی‌که مخازن مورد استفاده در برخی صنایع مانند صنایع دریایی، بسیار بزرگ‌ترند. در تحقیق حاضر، سعی شده است تا مدل‌سازی فرایند واجذب هیدروژن در بستر هیدرید فلزی، در ابعاد صنعتی انجام شود. استفاده از صفحات آلومینیومی برای افزایش انتقال حرارت در بستر و در نظر گرفتن مخزن فولادی که در نمونه‌های واقعی از این مخازن برای تحمل فشار هیدروژن داخل مخزن از آن‌ها استفاده می‌شود، در این شبیه‌سازی اعمال شده‌اند تا نتایج تا حد امکان، رفتار واقعی این مخازن را پیش‌بینی کنند.

## ۲. مدل ریاضی

با توجه به پیچیدگی فرایند انتقال حرارت و جرم در بستر هیدرید فلزی طی فرایند جذب، اعمال فرض‌های ساده‌کننده بدون تحمیل خطای قابل ملاحظه، امری ضروری به نظر می‌رسد. شکل قیاسی مخزن در شکل (۱) نشان داده شده است. در شکل (۲) نیز مدل ریاضی در نظر گرفته شده برای شبیه‌سازی بستر هیدرید، در مخزن شکل (۱) نشان داده شده است. مدل متشکل از یک مخزن استوانه‌ای با شعاع ۲۱ سانتی‌متر و طول ۱ متر است. صفحاتی آلومینیومی در بستر تعبیه شده تا نفوذ حرارت را به سطوح داخلی تسریع کند.

فولاد با ضخامت ۱ سانتی‌متر در دور بستر در نظر گرفته شده است. در واقع در ساخت مخازن واقعی، بستر را در یک مخزن فولادی قرار می‌دهند تا فولاد، وزن بستر را تحمل کند. برای در نظر گرفتن اثر همزمان آلومینیوم و فولاد، از مفهوم مقاومت حرارتی استفاده شده و صفحه‌ای معادل با دو جنس با ضخامت و هدایت حرارتی مختلف در نرم‌افزار اعمال شده است. در شکل (۱)، مسیر خروج هیدروژن با شرط فشار خروجی نشان داده شده است. در واقع با انتقال حرارت از آب جاری در ژاکت به بستر، از طریق جداره فولادی، با انجام واکنش در بستر هیدروژنی واجذب شده و تخلیه می‌گردد.

برای مدل‌سازی، چند فرض ساده‌کننده انجام شده است. فرض اول دو بعدی بودن انتقال حرارت و جرم است که فقط در راستای شعاعی و محوری در نظر گرفته شده و باعث می‌شود بتوان سیستم را با فرض متقارن محوری مدل‌سازی کرد. تعادل ترمودینامیکی بین فاز

انرژی می‌توان سیستم را مدل نمود که به فرض فوق، شرط تعادل حرارتی گفته می‌شود. نکته‌ای که باید به آن توجه شود، این است که معادله انرژی برای فاز گاز جاری در بستر متخلخل اعمال می‌شود و بنابراین، باید از خواص مؤثر بستر متخلخل استفاده شود [۱۴] (رابطه ۷).

$$(\rho C_p)_{ef} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left( k_{ef} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_{ef} \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left( \varepsilon \rho_g C_{p,g} u_r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \left( \varepsilon \rho_g C_{p,g} u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \dot{m} \left( (1 - \varepsilon) \Delta H + T(C_{p,g} - C_s) \right) \quad (7)$$

مقدار  $(r C_p)_{eff}$  ظرفیت حرارتی بوده و توسط رابطه (۸) محاسبه می‌شود [۶].

$$(r C_p)_{eff} = \varepsilon r_g C_{pg} + (1 - \varepsilon) r_g C_{ps} \quad (8)$$

$k_{eff}$  ضریب هدایت حرارتی بستر متخلخل است [۸] (رابطه ۹).

$$k_{eff} = \varepsilon k_g + (1 - \varepsilon) k_s \quad (9)$$

مقدار هیدروژن واجذب شده در زمان  $t$  براساس سینتیک واجذب از رابطه (۱۰) محاسبه می‌شود [۵].

$$\dot{m} = C_d \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \left(\frac{p_g - p_{eq,d}}{p_{eq,d}}\right) (\rho_s - \rho_{emp}) \quad (10)$$

در رابطه اخیر،  $C_d$  ضریب ثابت نرخ واجب،  $E_d$  انرژی فعال‌سازی واکنش،  $R_g$  ثابت جهانی گاز و  $p_{eq,d}$  فشار تعادلی طی فرایند واجذب می‌باشند. در مطالعه حاضر، برای محاسبه فشار تعادلی از رابطه ون-هوف<sup>۲</sup> استفاده شده است (رابطه ۱۱) [۵]. مقدار فشار مرجع  $P_{reff}$  برابر با ۱ مگاپاسکال است [۵].

$$\ln\left(\frac{P_{eq,d}}{P_{reff}}\right) = A - \frac{B}{T} \quad (11)$$

پارامترهای مورد نیاز به همراه مراجع مورد استفاده در جدول (۱) جمع‌آوری شده است.

در مرزهای جامد مانند دیواره‌های مخزن و فین‌های آلومینیومی، شرط عدم لغزش هیدرودینامیکی و حرارتی اعمال می‌شود. در خروجی مخزن، شرط فشار خروجی و روی دیواره‌های بیرونی نیز شرط مرزی جابه‌جایی اعمال شده است.

$$q'' = h(T_w - T) \quad (12)$$

در رابطه اخیر،  $T_w$  دمای آب ژاکت گرم‌کننده در طول واجذب و  $h$  ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی است.  $q''$  نیز معرف میزان شار حرارتی منتقل شده به سطح بیرونی جدار مخزن است.

## ۱.۲. معادلات حاکم و روش عددی

همان‌طور که در فرضیات مطرح شد، معادلات بقای جرم برای هر دو فاز گاز و بستر جامد، ممتم به همراه معادله انرژی برای گاز در بستر متخلخل باید به طور هم‌زمان حل شوند. با توجه به اینکه هیدروژن در طول فرایند جذب از بستر جدا شده و در واقع به فاز گاز اضافه می‌شود، معادله پیوستگی هیدروژن در حالت گذرا و با ترم چشمه ۱ به شکل زیر است [۱].

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_g u_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_g u_z) = \dot{m} \quad (1)$$

در رابطه (۱)،  $r_g$  چگالی گاز،  $u_r$  و  $u_z$  سرعت گاز در راستای شعاعی و محوری و  $\varepsilon$  معرف تخلخل‌اند. معادله پیوستگی برای بستر جامد از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۱].

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial \rho_s}{\partial t} = \dot{m} \quad (2)$$

در رابطه اخیر،  $r_s$  چگالی بستر بوده و  $\dot{m}$  جرم گاز اضافه‌شده یا کم‌شده از بستر است. علت علامت منفی در سمت راست معادله (۲)، کم شدن جرم بستر جامد در طول فرایند واجذب است. معادله ممتم در جهت شعاعی و محوری، به ترتیب در رابطه ۳ و رابطه ۴ ارائه شده است [۴].

$$\varepsilon \rho_g \frac{\partial u_r}{\partial t} = -\varepsilon \frac{\partial p_g}{\partial r} - \varepsilon \rho_g \left( u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) + \mu \left( \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\varepsilon r u_r) \right) + \varepsilon \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \right) - \varepsilon S_r \quad (3)$$

$$\varepsilon \rho_g \frac{\partial u_z}{\partial t} = -\varepsilon \frac{\partial p_g}{\partial z} - \varepsilon \rho_g \left( u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \mu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \varepsilon r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \varepsilon \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) - \varepsilon S_z \quad (4)$$

در روابط اخیر و ترم‌های چشمه هستند که معرف افت فشار در بستر متخلخل‌اند. ترم‌های  $u_r$  و  $u_z$  سرعت هیدروژن در راستای شعاعی و محوری هستند [۱۴].  $S_i$  از رابطه ۵ محاسبه می‌شود.

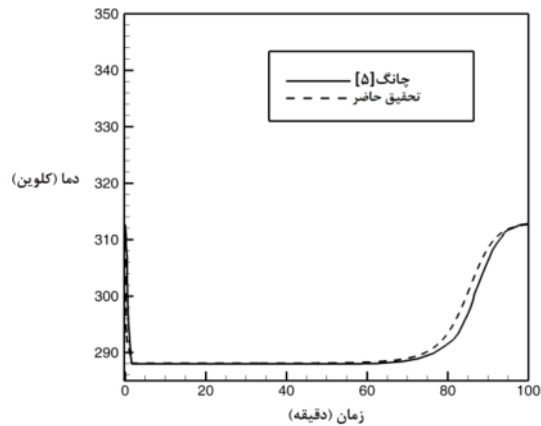
$$S_i = \left(\frac{m}{k}\right) u_i \quad (5)$$

$k$  ضریب تراوایی<sup>۲</sup> است و از رابطه ۶ محاسبه می‌شود [۱۵].

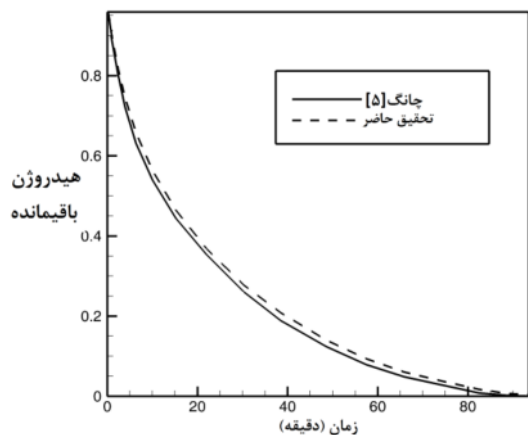
$$k = \frac{e^3 d_p^2}{150(1 - e)^2} \quad (6)$$

$d_p$  قطر ذرات بستر هیدرید فلزی است. با فرض هم‌دما بودن ذرات جامد هیدرید و گاز هیدروژن در مجاورت هم، با یک معادله

1. Source Term  
2. Permeability



شکل (۳): مقایسه منحنی تغییرات دما در یک نقطه در داخل بستر



شکل (۴): مقایسه منحنی تغییرات کسر هیدروژن موجود در بستر.

کسر هیدروژن موجود در بستر که در شکل (۴) نشان داده شده است، در واقع نشان‌دهنده نسبت جرم هیدروژن موجود در بستر به ظرفیت جذب هیدروژن بستر است. در واقع در شروع فرایند که هیدروژن به اندازه تمام ظرفیت بستر در آن وجود دارد، این پارامتر برابر با ۱ بوده و در انتها که تمام هیدروژن از بستر خارج می‌شود، این پارامتر به صفر می‌رسد.

در تحقیق حاضر، اثر پارامترهای دمای جابه‌جایی و ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی روی رفتار و جذب هیدروژن بررسی شده است. در شکل (۵)، نمایه دما در فاصله بین دو صفحه آلومینیومی بستر هیدرید در چند مقطع زمانی، بعد از شروع و جذب نشان داده شده است. علت این شیوه نمایش، تشخیص جزئیات تفاوت دما در لایه‌های مختلف شعاعی مخزن ذخیره هیدرید فلزی می‌باشد.

با توجه به نرخ بالای واکنش، به دلیل مقادیر اولیه پارامترهایی نظیر فشار و دما، با شروع فرایند و جذب دمای بستر به شدت کاهش می‌یابد. به دلیل ضریب رسانش بسیار کم آلیاژ بستر هیدرید، اما لایه‌های هیدرید که در نزدیکی جداره بیرونی قرار دارند، گرم شده، اما دما به سختی به لایه‌های درونی نفوذ می‌کند. این مسئله به خوبی در نمایه‌های دما مشخص است. علاوه بر این، همان‌طور که در شکل

جدول (۱): ثوابت و مقادیر به کاررفته در مطالعه حاضر

پارامتر	مقدار	واحد	شرح
$A$	۱۰/۵۷	-	ثابت معادله ون-هوف
$B$	۳۷۰۴/۶	-	ثابت معادله ون-هوف
$C_d$	۹/۵۷	$s^{-1}$	ثابت نرخ و جذب
$C_{pg}$	۱۴۸۹۰	$J.mol^{-1} K^{-1}$	گرمای ویژه گاز هیدروژن
$C_{ps}$	۴۱۹	$J.kg^{-1} K^{-1}$	گرمای ویژه آلیاژ
$E_d$	۱۶۴۷۳	$J.mol^{-1}$	انرژی فعال‌سازی
$k$	$۱۰^{-۸}$	$m^2$	تراوایی
$k_g$	۰/۱۸۱۵	$w.m^{-1} K^{-1}$	ضریب هدایت هیدروژن
$k_s$	۱/۰۸۷	$w.m^{-1} K^{-1}$	ضریب هدایت آلیاژ
$M_g$	۲/۰۱۵۸۸	$Kg.kmol^{-1}$	جرم مولکولی هیدروژن
$\epsilon$	۰/۵	-	تخلخل بستر
$\rho_{emp}$	۸۴۰۰	$Kg.m^{-3}$	چگالی بستر خالی از هیدروژن
$\rho_s$	۸۵۲۷	$Kg.m^{-3}$	چگالی بستر پر از هیدروژن

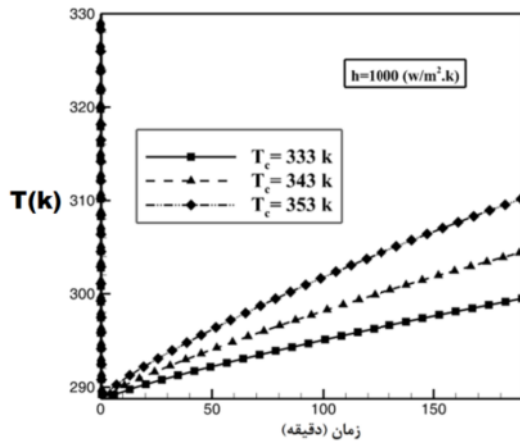
## ۲.۲. روش حل

برای اعمال توابع چشمه موجود در معادلات بقای جرم و انرژی، باید در تابع اعمال‌شده توسط کاربر روابط فشار تعادلی، جرم هیدروژن و حرارت تولیدشده به واسطه واکنش و جذب نوشته شود و دو تابع آخر در قسمت ترم چشمه (روابط ۱ و ۷) به معادلات اعمال شود. از شبکه یکنواخت برای تولید شبکه استفاده شده است. برای گسسته‌سازی معادله فشار از الگوریتم خطی و برای گسسته‌سازی بقیه معادلات از تفاضل پیش‌رو مرتبه ۲ استفاده شده است. در نهایت، برای حل مجموعه معادلات از نرم‌افزار فلونت نسخه ۶.۳.۲۶ استفاده شده است.

## ۳. نتایج و بحث

برای اعتبارسنجی، تحقیق عددی چانگ و همکاران بازآفرینی و نتایج کار حاضر با نتایج تحقیق مذکور مقایسه شده است. نمودارهای تغییرات دما و جرم هیدروژن در یک نقطه مشخص موجود در مخزن مدل‌سازی شده توسط چانگ و همکاران [۵] با گذشت زمان، به ترتیب در شکل‌های (۳) و (۴) نشان داده شده‌اند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که مدل‌سازی حاضر توانسته است تا حدود خوبی، نمودار تغییرات دمای مخزن و نسبت جرم هیدروژن موجود در مخزن را پیش‌بینی کند.

1. Second Order Upwind
2. Fluent V.6.3.26

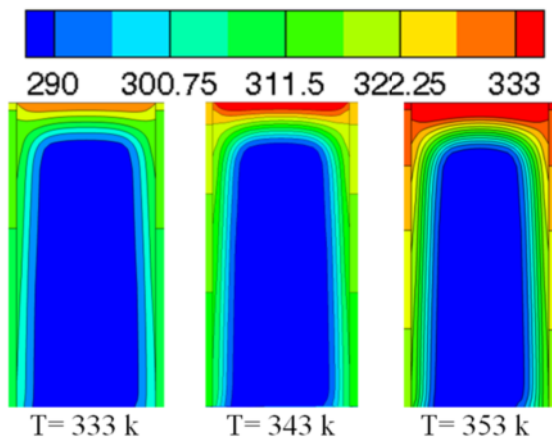


شکل (۶): تغییرات میانگین دمای بستر با زمان برای ۳ دمای مختلف آب گرم‌کننده  $T = 333K, 343K, 353K$

در شکل (۷)، تغییرات میانگین دمای بستر برای ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  و ۳ دمای ذکر شده بعد از ۱۱۰ دقیقه مقایسه شده است. در این مرحله، اثر دمای جابه‌جایی روی زمان واجذب هیدروژن موجود در مخزن با زمان برای دماهای مورد نظر نشان داده شده است. زمان مورد نیاز برای تخلیه ۹۰ درصد از هیدروژن موجود در مخزن، در جدول (۲) نشان داده شده است.

جدول (۲): زمان لازم برای تخلیه مخزن در ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  و ۳ دمای مختلف جابه‌جایی

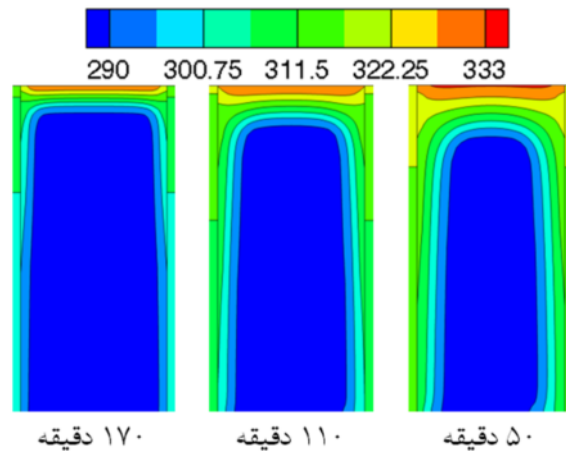
دما (کلوین)	زمان (دقیقه)	تفاوت (درصد)
۳۳۳	۱۷۷	-
۳۴۳	۱۶۳	۷/۹
۳۵۳	۱۵۰	۸



شکل (۷): نمایه دما برای ۳ دمای  $T = 333K, 343K, 353K$  بعد از ۱۱۰ دقیقه از شروع واجذب

مشخص است، با توجه به ضریب رسانش بسیار پایین بستر هیدرید و رسانش بالای صفحه آلومینیومی، حرارت از صفحات آلومینیومی که در واقع نقش انتقال‌دهنده حرارت را بر عهده دارند، زودتر به نواحی میانی بستر نفوذ می‌کند. در واقع آلومینیوم با ضریب رسانش بالا هیدرید را از ۳ طرف محاصره کرده است و به نفوذ حرارت و در نهایت، افزایش نرخ واکنش واجذب کمک می‌کند (شکل ۵). تغییرات دمای میانگین بستر هیدرید با زمان، برای ۳ دمای آب خنک‌کننده  $T = 333K$  و  $T = 343K$  و  $T = 353K$  و ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  در شکل (۶) نشان داده شده است. افزایش دمای جابه‌جایی در واقع سیستم را تحت دمای بالاتر ژاکت گرمایشی قرار می‌دهد. واکنش واجذب گرماگیر بوده و با توجه به عایق بودن بستر و عدم توان انتقال حرارت مورد نیاز از آب گرم به لایه‌های درونی بستر، حرارت مورد نیاز برای واکنش، از بستر هیدرید در ناحیه‌ای نزدیک گرفته شده و در نتیجه، کاهش دمای مناطق اطراف را به دنبال دارد. بدین ترتیب در لحظات اولیه، یک افت دما در سیستم قابل مشاهده است. میزان این افت دما و زمان برگشت آن به عوامل مختلفی بستگی دارد که از آن جمله می‌توان هندسه، شرایط مرزی و اولیه و خواص هیدرید را نام برد. در اینجا می‌توان به این نکته اشاره کرد که مطالعات روی مخازن هیدرید فلزی در راستای افزایش مجدد هرچه سریع‌تر دماست تا نرخ واکنش در حد بالایی بماند.

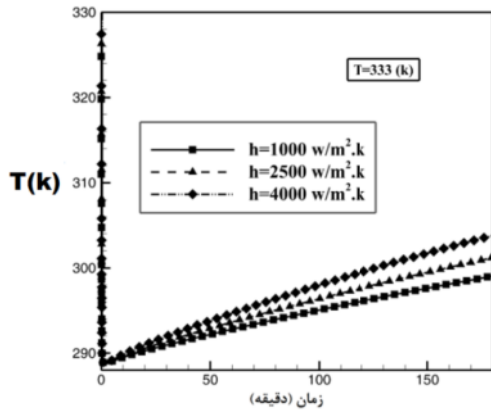
همان‌طور که از شکل (۶) مشخص است، دمای جابه‌جایی تأثیر بسزایی در رفتار حرارتی بستر هیدرید فلزی دارد و با افزایش دمای جابه‌جایی، بازگشت دما در زمان کمتری رخ می‌دهد. این امر باعث می‌شود که واکنش گرماگیر واجذب با نرخ بالاتری از تولید جرم هیدروژن صورت گرفته و در نتیجه، زمان کل فرایند واجذب هیدروژن کاهش یابد.



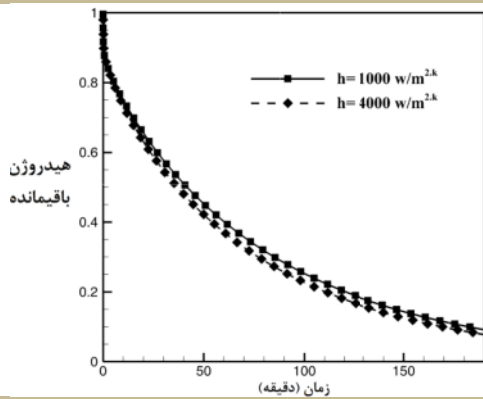
شکل (۵): نمایه دما بعد از شروع واجذب با گذشت زمان



با افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی از  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  به  $4000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  کاهش ۷ درصدی زمان مورد نیاز برای تخلیه بستر مشاهده می‌شود. در شکل (۹)، تغییرات دمای میانگین بستر با گذشت زمان، برای ۳ ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی ذکر شده، نشان داده شده است. تغییرات کسر هیدروژن موجود در بستر نیز در شکل (۱۰) نشان داده شده است.



شکل (۱۰): تغییرات دمای میانگین بستر با زمان با تغییر ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی در دمای آب  $T = 333\text{K}$

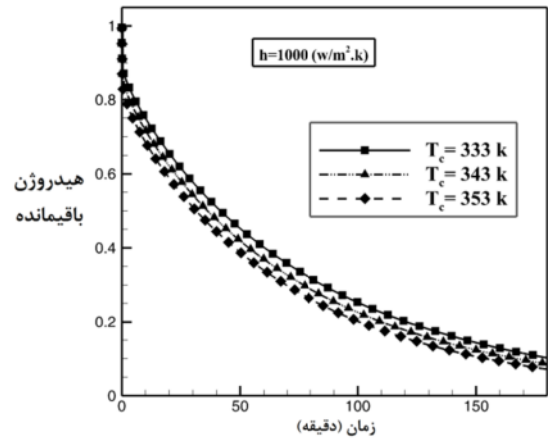


شکل (۱۱): تغییرات کسر هیدروژن موجود در بستر برای ۳ ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$ ،  $2500 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  و  $4000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$

درواقع نتایج نشان می‌دهند که هر دو پارامتر ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی و دمای جابه‌جایی روی گرمایش مخزن در فرایند واجذب و در نتیجه، روی نرخ واجذب و در نهایت، روی زمان لازم برای تخلیه مخزن مؤثرند.

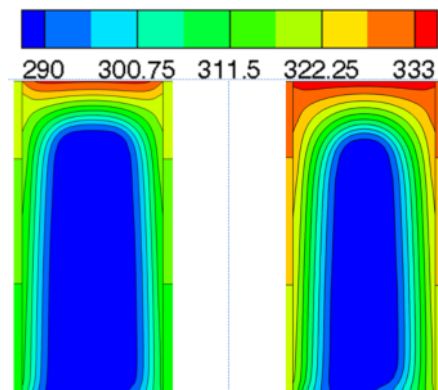
#### ۴. نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر، فرایند واجذب در بستر هیدرید فلزی در یک مخزن در ابعاد صنعتی و با در نظر گرفتن صفحات آلومینیومی و جداره‌های فلزی بررسی شده است. از کد تجاری فلونت برای حل دستگاه معادلات دیفرانسیلی استفاده شد. اثر دما و ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی روی رفتار حرارتی مخزن، سینتیک واجذب و زمان لازم



شکل (۸): تغییرات کسر هیدروژن موجود در بستر در  $T = 333\text{K}$ ،  $343\text{K}$ ،  $353\text{K}$  و ضریب جابه‌جایی انتقال حرارت  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$

نتیجه جالبی که مشاهده شده، کاهش حدود ۸ درصدی زمان لازم برای واجذب هیدروژن، به‌زای هر ۱۰ درجه افزایش دمای جابه‌جایی است. این نتیجه می‌تواند در طراحی سیستم گرمایش این مخازن در طی فرایند واجذب، بسیار کاربردی باشد. پارامتر بعدی که اثر آن روی رفتار هیدرید فلزی بررسی شده است، تغییر ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی است. در مطالعه حاضر، ۳ ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$ ،  $2500 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  و  $4000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  بررسی شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد با افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی نیز بازگشت دما در زمان کمتری اتفاق افتاده و این به معنی افزایش نرخ واجذب هیدروژن است. در شکل (۹)، نمایه دما بعد از گذشت ۱۱۰ دقیقه از شروع فرایند واجذب برای دمای  $T=333\text{K}$  و دو ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  و  $4000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  نشان داده شده است.



شکل (۹): نمایه دما برای ۲ ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  و  $4000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  بعد از ۱۱۰ دقیقه از شروع زمان واجذب

نشان داد که تغییر این ضریب از  $1000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  به  $4000 \text{ w.m}^{-2}\text{K}^{-1}$  زمان لازم برای تخلیه به میزان ۷ درصد کاهش می‌یابد. نتایج به دست آمده می‌تواند به طراحان کمک کند تا در یک شرایط خاص انتخابی صحیح برای افزایش انتقال حرارت به بستر و در نتیجه، دستیابی به یک سیستم کارا برای استفاده از مخزن ذخیره هیدروژن از نوع هیدرید فلزی برسند.

برای تخلیه هیدروژن بررسی شد. با بازآفرینی یک تحقیق معتبر در این زمینه مشخص شد نتایج حاصل از پروسه عددی حاضر، تطابق خوبی با نتایج ارائه شده در مرجع ذکر شده دارد. نتایج نشان داد که افزایش دمای جابه‌جایی اثر قابل توجهی روی زمان لازم برای واجذب کامل می‌گذارد. افزایش دمای جابه‌جایی به میزان ۱۰ درجه، باعث کاهش ۸ درصدی زمان لازم برای واجذب تمام هیدروژن از بستر هیدرید فلزی می‌شود. زمان مورد نیاز برای تخلیه هیدروژن، همچنین با افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی، مورد بررسی قرار گرفت و نتایج

## مراجع

- [1] Jemni A., Ben Nasrallah S., "study of two-dimensional heat and mass transfer during desorption in a metal hydrogen reactor", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.20, No.11, pp.881-891, 1995.
- [2] Ben Nasrallah S., Jemni A., "heat and mass transfer models in metal hydrogen reactor", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.22, No.1, pp.67-76, 1997.
- [3] Jemni A., Ben Nasrallah S., Lamloumi L., "Experimental and theoretical study of a metal hydrogen reactor", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.13, pp.520-533, 1997.
- [4] Muthukumar P., Satheesh A., Madhavakrishna U., Dewa A., "Numerical investigation of coupled heat and mass transfer during desorption of hydrogen in metal hydride beds", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.50, pp.69-75, 2009.
- [5] Chung C.A., Ho C.J., "Thermal-fluid behavior of the hydriding and dehydriding processes in a metal hydride hydrogen storage canister", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.34, pp.4351-4364, 2009.
- [6] Wang Y., Adroher X.C., Chen J., Yang X.G., Miller T., "Three-dimensional modeling of Hydrogen sorption in metal hydride hydrogen storage beds", Journal of Power Sources, Vol.194, No.2, pp.997-1006, 2009.
- [7] Nam J., Ko J., Ju H., "Three-dimensional modeling and simulation of hydrogen absorption in metal hydride hydrogen storage vessels", Applied Energy, Vol.89, pp.164-175, 2012.
- [8] Jiao K., Li X., Yin Y., Zhou Y., Yu S., Du Q., "Effects of various operating conditions on the hydrogen absorption processes in a metal hydride tank", Applied Energy, Vol.94, pp. 257-269, 2012.
- [9] Muthukumar P., Ramana, S.V., "Study of heat and mass transfer in MmNi 4.6 Al 0.4 during desorption of hydrogen", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.35, pp.10811-10818, 2010.
- [10] Mellouli, S., Askri, F., Dhaou, H., Jemni, A., Nasrallah, S.B., "A novel design of a heat exchanger for a metal hydrogen reactor", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.32, pp.3501-3507, 2007.
- [11] Dhaou, H., Souahlia, A., Mellouli, S., Askri, F., Jemni, A., Nasrallah, S.B., "Experimental study of a metal hydride vessel based on a finned spiral heat exchanger", international journal of hydrogen energy, Vol.35, pp.1674-1680, 2010.
- [12] Muthukumar, P., Singhal, A., Bansal G., "Thermal modeling and performance analysis of industrial scale metal hydride based hydrogen storage container", International Journal of Hydrogen Energy, 37, pp.14351-14364, 2012.
- [13] Askri, F., Salah, M.B., Jemni, A., Nasrallah, S.B., "Optimization of hydrogen storage in metal-hydride tanks", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.34, pp.897-905, 2009.
- [14] Phate, A.K., Maiya M.P., Murthy S.S., "Simulation of transient heat and mass transfer during hydrogen sorption in cylindrical metal hydride beds", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.32, pp. 1969-1981, 2007.
- [15] Kaviany M., Principles of heat transfer in porous media. New York: Springer; 1991.