

COMSOL在金属氢化物贮氢罐传热传质模拟中的应用

林羲¹, 朱琦², 李谦^{1,3,*}

1. 上海大学材料基因组工程研究院, 上海, 中国

2. 上海大学机电工程与自动化学院, 上海, 中国

3. 上海大学材料科学与工程学院及省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室, 上海, 中国

简介: 面对金属贮氢罐的实际指标(吸氢速率 1.5 L min^{-1}), 采用COMSOL软件中的多孔介质传热、地下流动以及数学模块, 构建吸氢过程中的传热、传质及反应动力学方程, 并进行耦合求解。贮氢罐中填充的合金为ZrCo合金, 通过与实验数据的对比, 验证计算模型的准确性和可靠性。通过参数化扫描的手段, 得到贮氢罐不同直径 d ($4 < d < 20 \text{ cm}$)、高度 L ($4 < L < 20 \text{ cm}$)、粉末床孔隙率 ($0.4 < \epsilon < 0.6$)下, 贮氢罐整体吸氢容量和吸氢速率分布。通过模拟得到的吸氢速率分布, 筛选出符合速率指标的贮氢罐直径和高度和孔隙率的组合。

图 1. 氢能应用背景



模型建立

(1) 传热方程
$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g C_{pg} \vec{u} T) = \nabla \cdot (\lambda_e \nabla T) + S$$

$$S = \frac{\rho_s (1 - \epsilon) M_H}{M_{H_2} M_s} \frac{\partial (H/M)}{\partial t} \Delta H$$

(2) 传质方程
$$\vec{u} = -\frac{K}{\mu_g} \nabla P \quad \frac{\partial \epsilon \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}) = -S$$

$$S = \rho_s (1 - \epsilon_0) \frac{M_H}{M_s} \frac{\partial (H/M)}{\partial t}$$

(3) 热力学和动力学方程
$$P_{eq} = f(H/M) \exp\left(-\frac{\Delta H}{R_g} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right)$$

$$\frac{\partial (H/M)}{\partial t} = k(H/M_{max} - H/M) \quad k = k_0 \exp\left(\frac{-E_a}{R_g T}\right) \ln\left(\frac{P}{P_{eq}}\right)$$

(4) 参数方程及材料热物性参数

$$\epsilon = 1 - (1 - \epsilon_0)[1 + (\beta - 1)\xi] \quad R = R_0[1 - (\beta - 1)\xi]^{1/3}$$

$$\lambda_e = \epsilon \lambda_g + (1 - \epsilon) \lambda_s \quad \rho C_p = \epsilon \rho_g C_{pg} + (1 - \epsilon) \rho_s C_{ps}$$

(5) 初始和边界条件

初始: $T_0, P_0, H/M=0$;

边界: 顶部 $\frac{\partial T}{\partial n} = 0, P = P_0$ 其他面 $-\lambda_e \frac{\partial T}{\partial n} = h_e(T - T_f), \frac{\partial P}{\partial n} = 0$

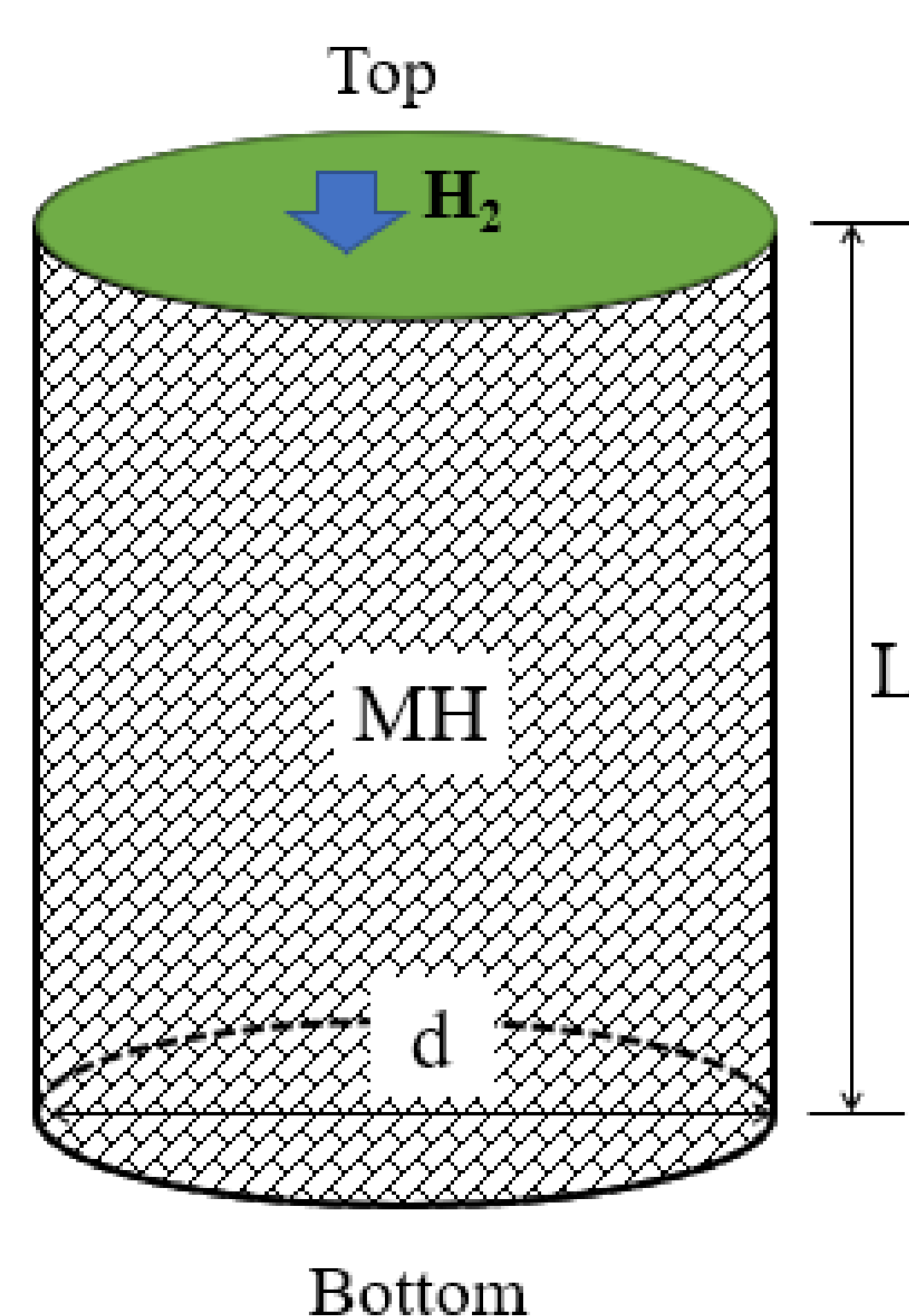


图 2. 贮氢罐结构

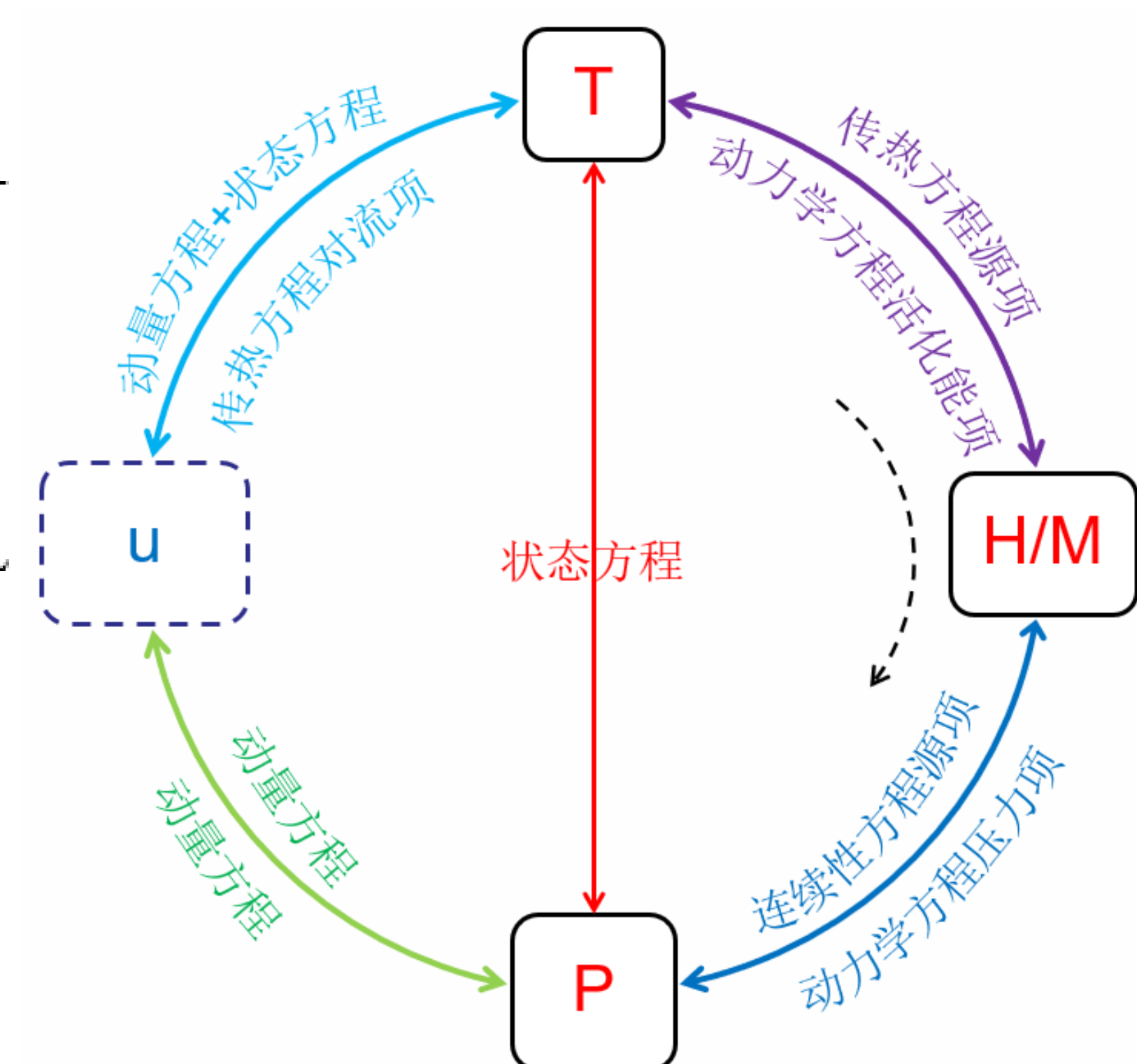


图 3. 方程间的耦合

结果:

模型验证

- 模拟计算的结果和实验结果基本符合。这说明了模型计算的可靠性和准确性。

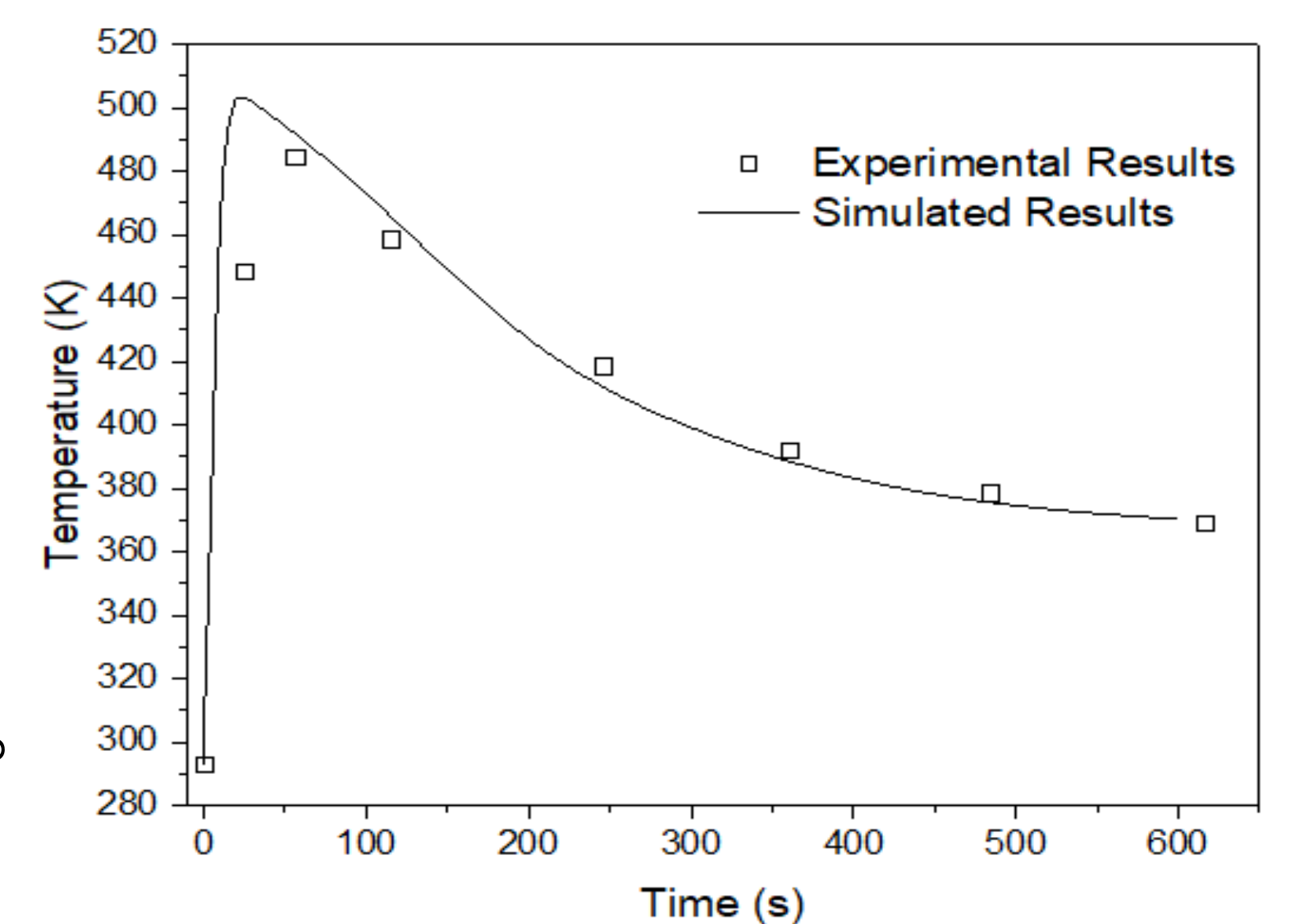


图 3. 模拟结果和实验结果[1]对比

吸氢容量

- 随着 d 和 L 从4增加20 cm, 孔隙率从0.6减小0.4, 粉末床中合金的量增加, 贮氢罐的最大吸氢容量也增加, 从最小的1.12 mol, 增加到210.60 mol

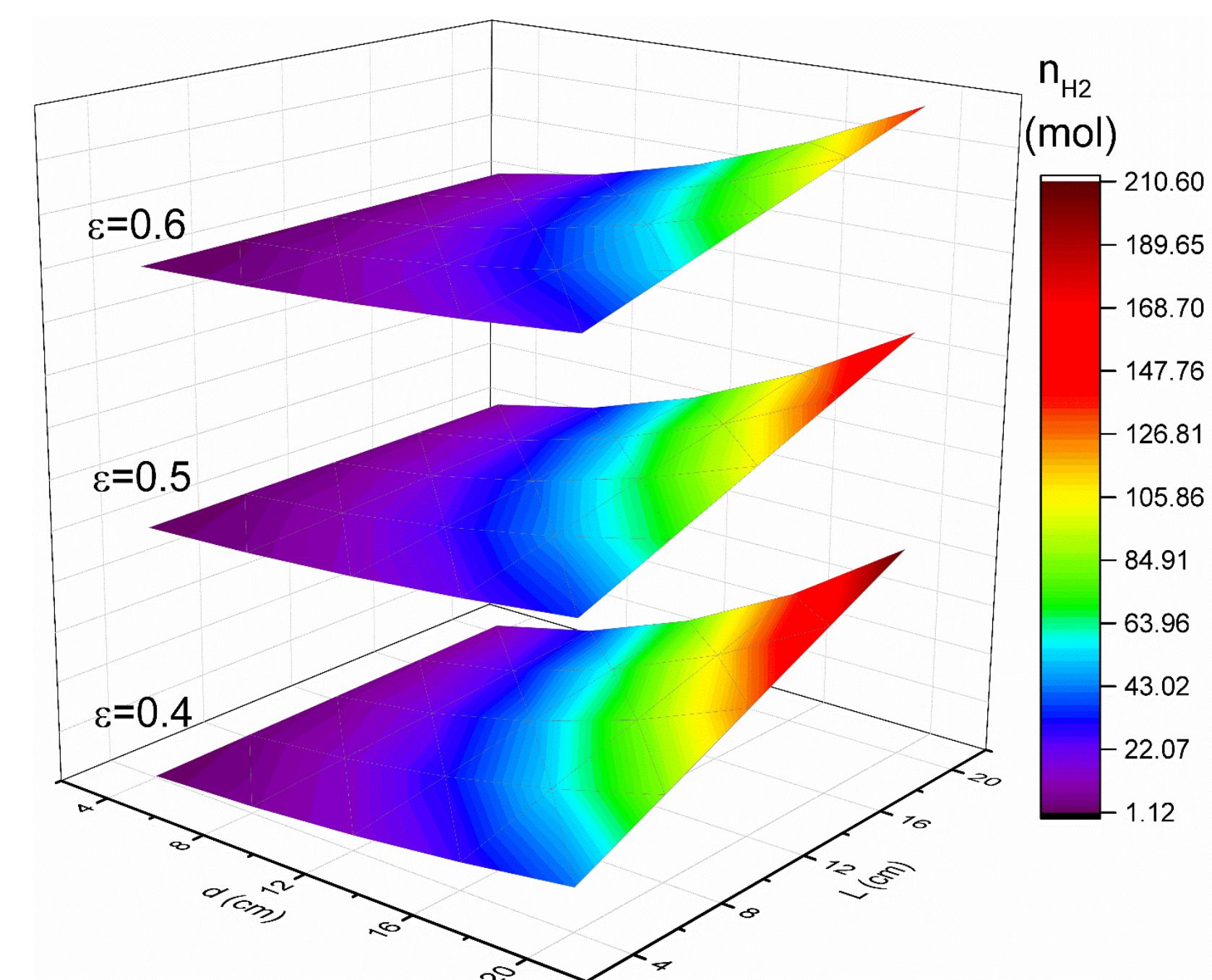


图 4. 不同 d 、 L 和 ϵ 对贮氢罐吸氢容量的影响

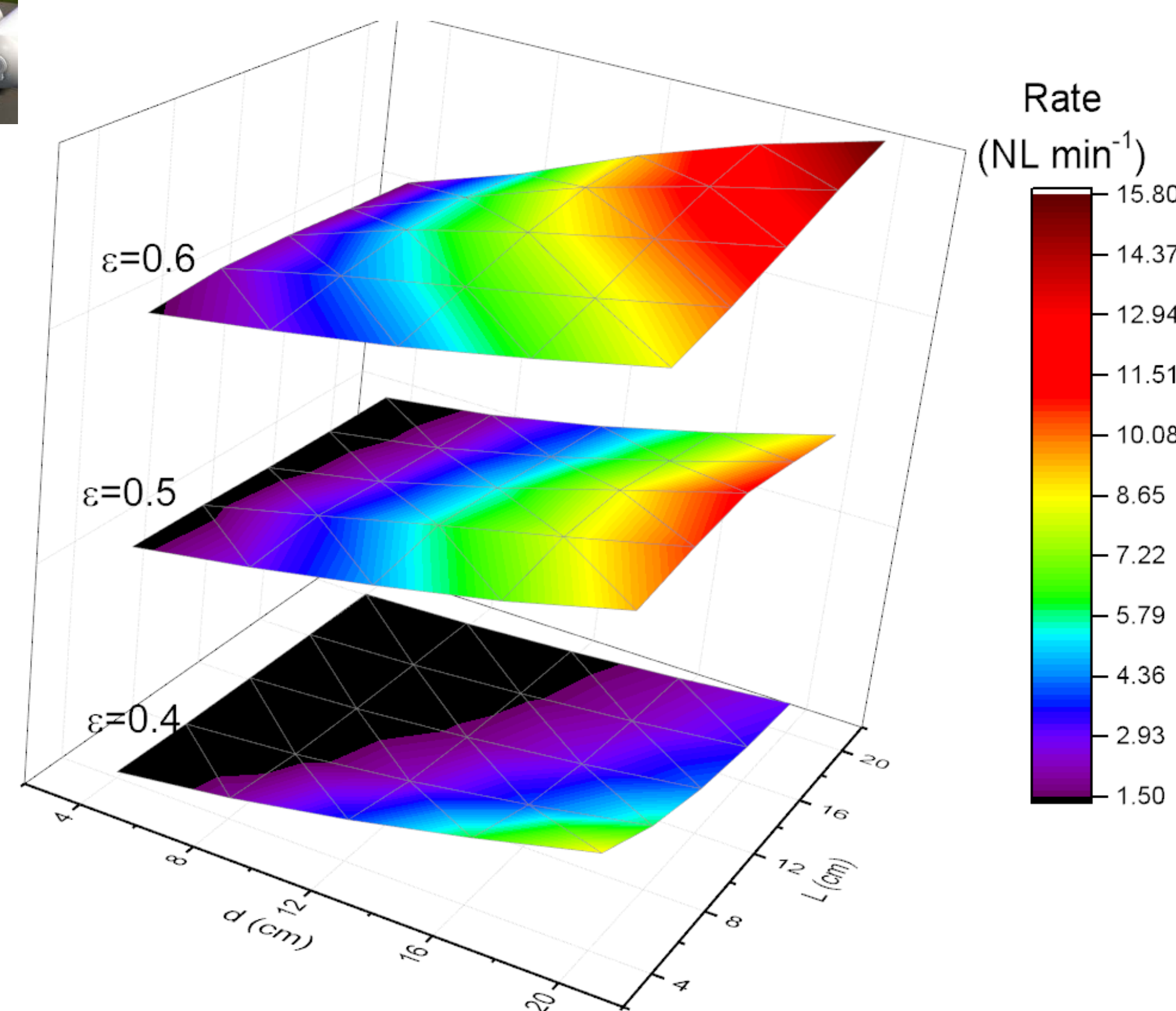


图 5. 不同 d 、 L 和 ϵ 对贮氢罐吸氢速率的影响

吸氢速率

- $d=L=20 \text{ cm}, \epsilon=0.6$ 时具有最大吸氢速率, 其值为 $15.77 \text{ NL min}^{-1}$, 此时储氢量为 140.34 mol
- 黑色区域的结构参数无法满足吸氢速率要求

表 1. 不同 d 和 L 取值范围内, 吸氢速率随 ϵ 值的变化规律

序号	d 取值范围	L 取值范围	速率随 ϵ 值变化
①	$4 < d < 12 \text{ cm}$	$4 < L \leq 8 \text{ cm}$	ϵ 增加, 速率增加
②	$12 \leq d < 20 \text{ cm}$	$4 < L \leq 8 \text{ cm}$	ϵ 增加, 速率先增后减
③	$4 < d < 12 \text{ cm}$	$8 < L < 20 \text{ cm}$	ϵ 增加, 速率增加
④	$12 \leq d < 20 \text{ cm}$	$8 < L < 20 \text{ cm}$	ϵ 增加, 速率增加

吸氢速率规律

- 氢压是贮氢罐吸氢速率的限制因素, 其大小与 ϵ 有关;
- 在 d 较大, L 较小的时候, 压力恢复较快, 但径向传热距离较大, 温度影响会突显, 这导致吸氢速率出现 ϵ 增加, 吸氢速率出现先增后减的情况

结论:

- 通过COMSOL软件对构建传热、传质和热力学、动力学方程进行求解, 模拟得到不同贮氢罐直径 d 、高度 L 和孔隙率 ϵ 值下的吸氢容量和吸氢速率值;
- 对比贮氢罐的吸氢速率指标, 筛选优化出符合要求的贮氢罐结构, 为实际储氢应用提供模拟结果参考。

参考文献:

- Kang H-G, Cho S, Lee M-K, et al., Fabrication and test of thin double-layered annulus metal hydride bed, Fusion Engineering and Design, 86, 2196-2199 (2011)