



钯吸氢动力学性能的数值模拟

刘启航¹, 罗子峰¹

1.材料科学与工程学院, 上海大学, 中国, 上海

简介:

储氢合金的PCT曲线和氢化动力学性能是描述合金储氢性能的重要标准, 目前对合金的PCT曲线测试一般采用体积法, 对合金氢化反应动力学的研究一般采用等容差压法。但在实际生产过程中, 储氢合金通常是在恒定氢气流速的情况下工作的, 与实验条件差别较大。所以研究合金在恒定氢气流速条件下的性能是必要的。

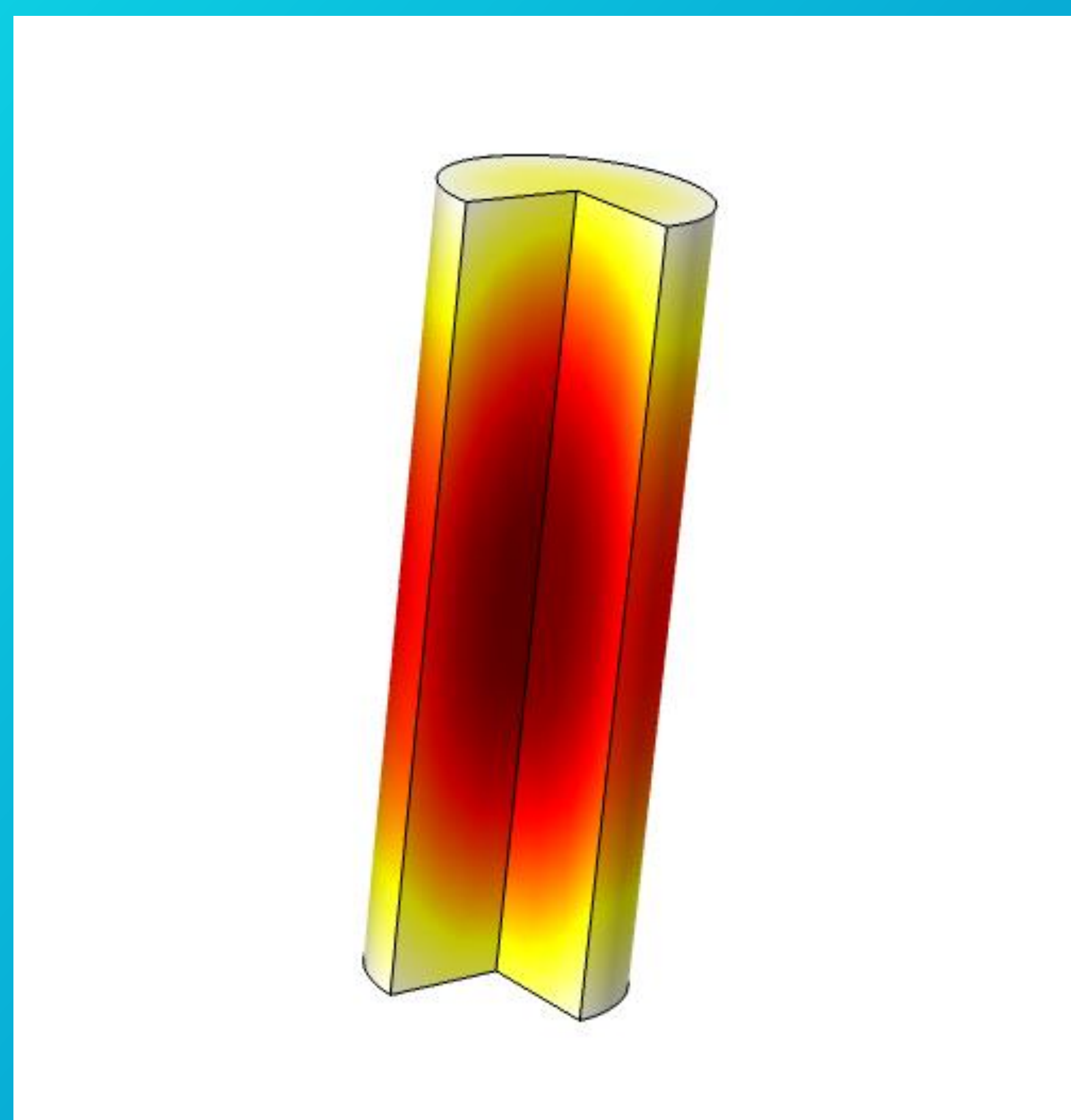


图 1. 恒流吸氢容器简化

基本假设:

在研究恒流吸氢过程中, 遵循以下基本假设:

- (1) 气体流动是单向的, 忽略径向扩散;
- (2) 吸附是瞬间完成;
- (3) 气相和固相之间的反应是可逆的;
- (4) 符合理想气体状态方程;
- (5) 分离柱中Pd颗粒均为球体且分布均匀;
- (6) 各相的热物性质保持不变。

物理场接口和基本方程:

本次研究采用传热(多孔介质传热)、流体流动(达西定律)和 Δu 数学(域常微分和微分代数方程)模块研究了整个恒流吸氢过程。

基本方程如下^[1-3]:

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

$$\vec{u} = -\frac{K}{\mu_g} \nabla P \quad \text{达西定律}$$

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}) = -S_p \quad \text{连续性方程}$$

仿真结果:

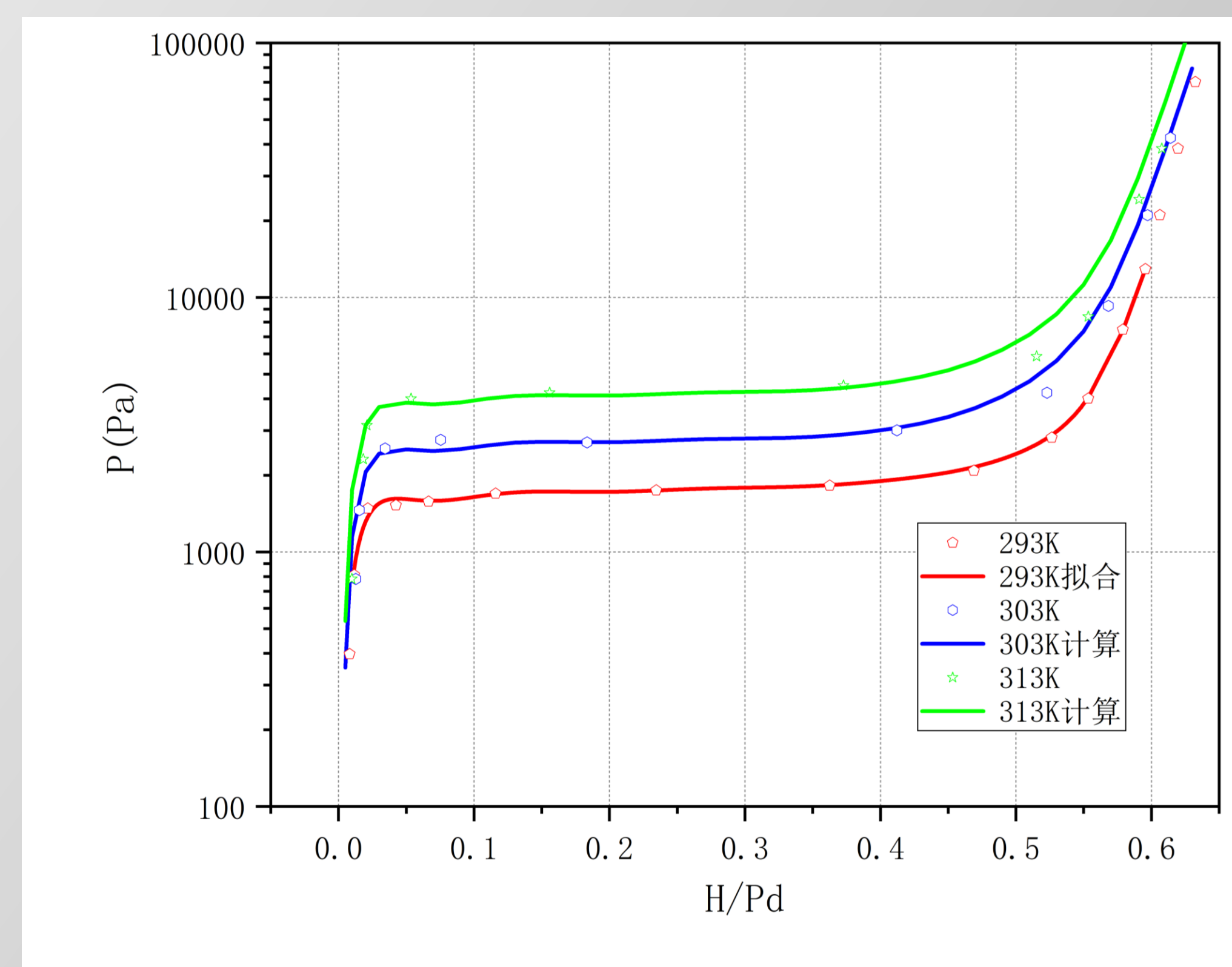


图 2. 体积法测定吸氢PCT曲线与预报曲线

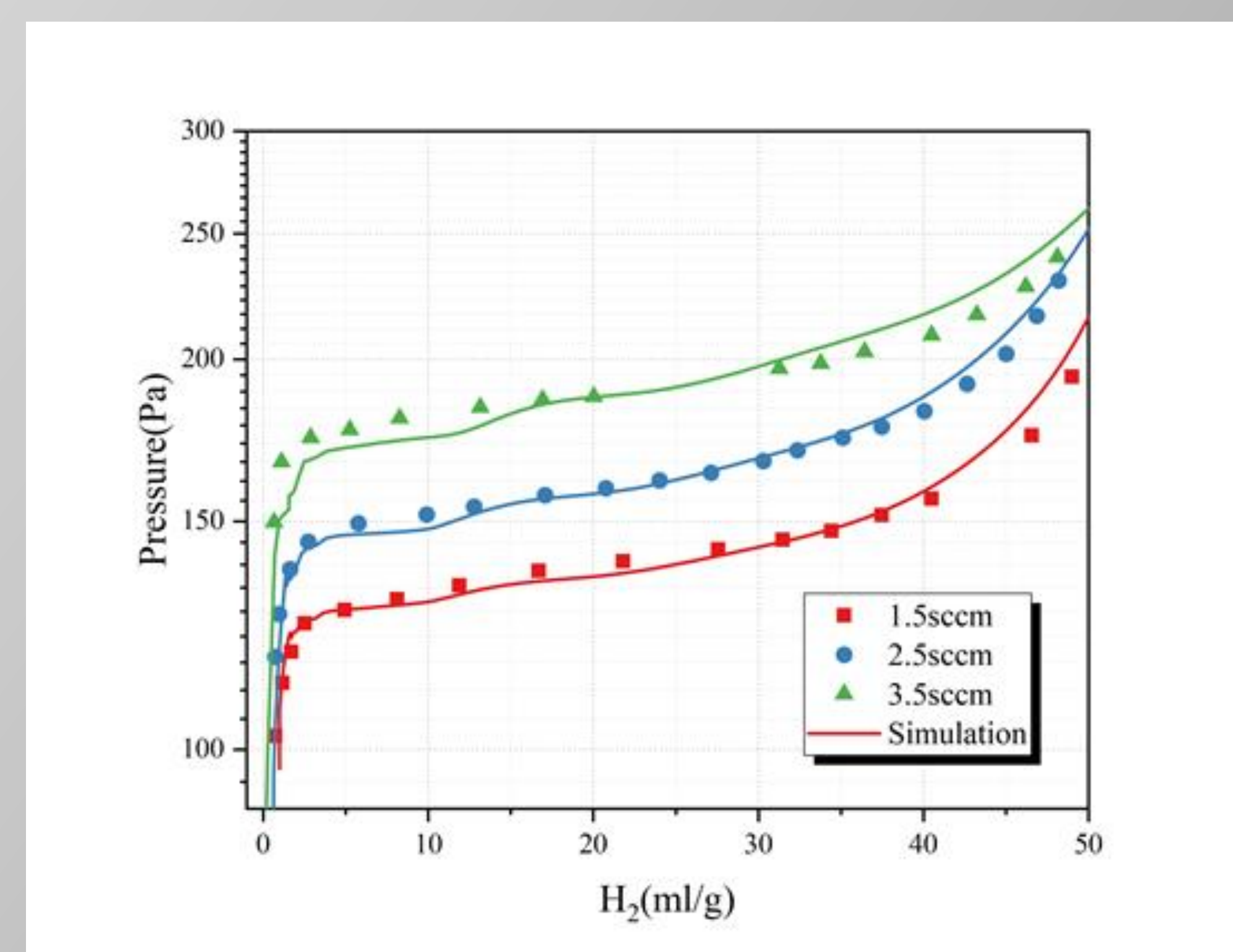


图 3. 钯在不同流速下的吸氢动力学曲线 (实心点为实验值, 实线为模拟计算结果)

结论

如图2、图3所示, 采用COMSOL对材料的吸氢过程模拟与实验结果符合均较好。与实验相比, 采用数值模拟预报合金在恒定氢气流速条件下的吸氢性能节省了大量的时间和成本, 具有突出优势。

数值模拟能够较为准确的对材料的吸氢过程进行模拟, 这对实验结果有预报和判断正确性的作用, 且能够根据预报结果指导实验的设定。

参考文献:

1. Mayer U, Groll M, Supper W. Heat and mass transfer in metal hydride reaction beds: experimental and theoretical results. J Less Common Met, 131, 235-44(1987)
2. Valizadeh M, Delavar MA, Farhadi M. Numerical simulation of heat and mass transfer during hydrogen desorption in metal hydride storage tank by Lattice Boltzmann method. Int J Hydrogen Energy, 41, 413-24(2016)
3. Nam J, Ko J, Ju H. Three-dimensional modeling and simulation of hydrogen absorption in metal hydride hydrogen storage vessels. Appl Energy, 89, 164-75(2012)