

УДК 662.769.21; 544-971; 54-19

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОНАПРЯЖЕННОГО И ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ТЕПЛОПРОВОДЯЩЕЙ МАТРИЦЫ МЕТАЛЛОГИДРИДНОГО АККУМУЛЯТОРА

А. Н. Авраменко, канд. техн. наук
an0100@ukr.net

А. М. Левтеров, канд. техн. наук

Н. Ю. Гладкова

Институт проблем
машиностроения
им. А.Н. Подгорного НАН
Украины,
61046, Украина, г. Харьков,
ул. Пожарского, 2/10

Проблемой безопасного и эффективного хранения водорода занимаются многие исследователи в разных странах. Способ хранения водорода в химически связанном состоянии в металлгидридных аккумуляторах обладает рядом преимуществ по сравнению со способами хранения в сжатом и сжиженном виде. Использование гидридов металлов позволяет добиться высокой плотности упаковки водорода, которая на сегодня достигает от 0,09 до 0,19 г/см³, а для интерметаллических гидридов – до 0,56 г/см³. Также следует отметить высокую безопасность хранения водорода в металлгидридных аккумуляторах, что особенно важно при использовании водорода на транспорте. С использованием численных методов рассматривается теплонпряженное состояние теплопроводящей матрицы металлгидридного аккумулятора цилиндрической формы. Матрица выполнена из алюминиевого сплава и имеет ячейки прямоугольного сечения, заполняемые металлгидридом в виде мелкодисперсного порошка. Нагрев матрицы осуществляется двумя электронагревательными элементами: центральным стержневого типа и периферийным в виде цилиндра. Радиальное и осевое расширения матрицы в корпусе ограничены упругими элементами из жаростойкой стали. Моделирование теплонпряженного и деформированного состояний теплопроводящей матрицы выполняется для режима десорбции водорода в течение 900 с при температуре 350 °С. В качестве металлгидрида выбран гидрид магния (MgH₂). Плотность упаковки водорода в металлгидриде принята равной 0,11 г/см³. Задача решается в декартовых координатах в трехмерной стационарной постановке. В результате расчета установлено, что в процессе десорбции водорода максимальный перепад температуры в радиальном направлении теплопроводящей матрицы составляет порядка 40 °С. Максимальное радиальное расширение теплопроводящей матрицы достигает 0,56 мм, что не критично для надежной работы металлгидридного аккумулятора. Уровень эквивалентных напряжений по Мизесу изменяется в пределах 10–60 МПа на участках ячеистой структуры теплопроводящей матрицы, что не превышает уровня граничных значений напряжений для алюминиевого сплава, т. е. для данных конструктивных параметров матрицы есть резерв повышения интенсивности теплообмена.

Ключевые слова: металлгидрид, водород, теплопроводная матрица, теплонпряженное состояние, уровень температур.

Введение

Проблемой безопасного и эффективного хранения водорода занимаются многие исследователи в разных странах [1–11]. Способ хранения водорода в химически связанном состоянии в металлгидридных аккумуляторах обладает рядом преимуществ по сравнению со способами хранения в сжатом и сжиженном виде [1, 3–5]. Использование гидридов металлов позволяет добиться высокой плотности упаковки водорода, которая на сегодня достигает от 0,09 до 0,19 г/см³, а для интерметаллических гидридов – до 0,56 г/см³ [1]. Также следует отметить высокую безопасность хранения водорода в металлгидридных аккумуляторах, что особенно важно при использовании его на транспорте.

Гидрид магния MgH₂ является одним из наиболее перспективных для создания водородных аккумуляторов. Как известно, MgH₂ относится к высокотемпературным металлгидридам (абсорбция и десорбция водорода может протекать только при повышенных температурах 250–350 °С), что требует высоких энергозатрат на реализацию процесса десорбции водорода.

Анализ публикаций

Металлогидридный аккумулятор представляет собой трубчатый корпус с теплообменником внутри [1, 6, 7]. Порошок металлгидрида размещают в кольцевом зазоре между стенками корпуса и нагрева-

тельным элементом [1]. Использование нагревателей/теплообменников обусловлено необходимостью подвода теплоты к металлгидриду в процессе десорбции водорода и низкой теплопроводностью металлгидридного порошка, в среднем до 2 Вт·м/К [1].

Рекомендуемая толщина слоя металлгидрида ограничена 5–6 мм, а объем засыпки его в корпусе аккумулятора не должен превышать 40–50% [1, 7]. Если металлгидридные аккумуляторы большого размера, используют теплопроводящие матрицы различной конфигурации [1, 7].

С учетом большого коэффициента объемного расширения металлгидрида (от 20 до 30%) в процессе абсорбции и десорбции водорода такие теплопроводящие матрицы должны обладать достаточной механической прочностью и компенсировать расширение металлгидрида в процессе работы аккумулятора [1, 10].

Из приведенного обзора можно заключить, что исследование тепло- и массообменных процессов в металлгидридных аккумуляторах, повышение плотности упаковки водорода, совершенствование конструкции и теплофизических свойств теплопроводящих матриц является важным и перспективным направлением развития водородной энергетики.

Цель и задачи исследования

Цель работы – расчетная оценка теплонапряженного и деформированного состояния теплопроводящей матрицы металлгидридного аккумулятора в процессе десорбции водорода.

В работе ставились такие задачи:

- провести литературный обзор по современным технологиям хранения водорода в металлгидридах;

- разработать конструкцию теплопроводящей матрицы металлгидридного аккумулятора;

- синтезировать расчетную область и расчетную сетку, описывающую конфигурацию теплопроводящей матрицы;

- выполнить расчет теплонапряженного и деформированного состояния теплопроводящей матрицы для режима десорбции водорода;

- сделать выводы и рекомендации по использованию теплопроводящей матрицы для интенсификации тепло- и массообменных процессов в металлгидридном аккумуляторе.

На рис. 1 показана конструкция фрагмента металлгидридного аккумулятора. Отвод тепла в процессе абсорбции водорода может быть реализован путем обдува внешней поверхности корпуса аккумулятора. Теплопроводящая матрица выполнена из алюминиевого сплава АЛ25. Матрица представляет собой ячеистую структуру цилиндрической формы диаметром 150 мм и высотой 28 мм. Ячейки имеют размер 6 на 6 мм и высоту 25 мм.

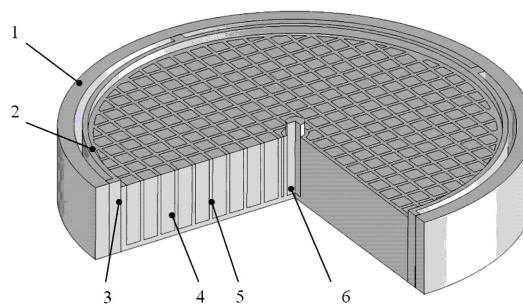


Рис. 1. Особенности конструкции металлгидридного аккумулятора:

- 1 – корпус; 2 и 6 – нагревательные элементы;
- 3 – упругий элемент; 4 – металлгидрид (MgH_2);
- 5 – теплопроводящая матрица

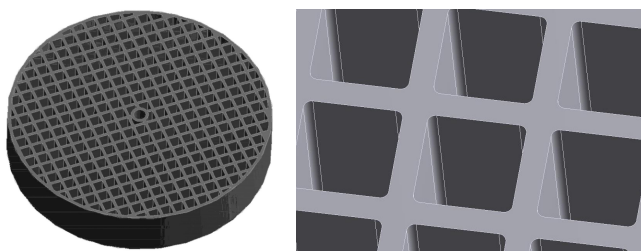
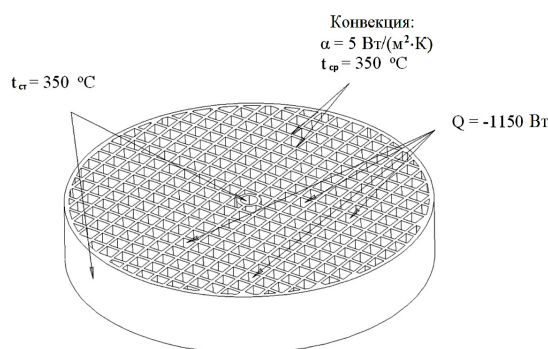


Рис. 2. Расчетная область теплопроводящей матрицы металлгидридного аккумулятора



$t_{ст}$ – температура стенки; Q – тепловой поток; конвекция: $t_{ср}$ – температура среды; α – коэффициент теплоотдачи

Рис. 3. Схема задания ГУ теплообмена на участках теплопроводящей матрицы

Расчетная область, описывающая конфигурацию теплопроводящей матрицы, представлена на рис. 2. В расчетной области учитываются литейные радиусы.

Расчеты теплонапряженного и деформированного состояний теплопроводящей матрицы выполнялись с использованием метода конечных элементов, реализованного в открытом программном обеспечении – комплекс Caelinux Salome Меса [12].

Схема задания граничных условий теплообмена и значения задаваемых граничных условий (ГУ) представлены на рис. 3. На боковой поверхности теплопроводящей матрицы и на поверхности отверстия под нагревательный элемент (в месте установки нагревательных элементов 2 и 6) задавались ГУ 1-го рода – температура. На участках ячеистой структуры теплопроводящей матрицы задавались ГУ в виде теплового потока (эквивалентного отводу теплоты при десорбции водорода [1] – возможности программного комплекса позволяют задавать тепловой поток или удельный тепловой поток). На наружной поверхности теплопроводящей матрицы, с учетом рекомендаций работ [1], задавались ГУ 3-го рода.

Теплонапряженное и деформированное состояния теплопроводящей матрицы рассматриваются в стационарной трехмерной постановке. Плотность насыщения водородом металлгидрида принята равной $0,11 \text{ г/см}^3$. Процесс десорбции водорода продолжается 900 с.

Для расчета температурного поля теплопроводящей матрицы используются уравнения стационарной теплопроводности в виде

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + R \cdot T + Q = 0; \quad (1)$$

$$T|_{s_T} = T_0; \quad (2)$$

$$q|_{s_q} = - \left(\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} n_x + \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} n_y + \lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} n_z \right); \quad (3)$$

$$\alpha_{cp} (T - T_{cp})|_{s_\alpha} = - \left(\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} n_x + \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} n_y + \lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} n_z \right), \quad (4)$$

где T – температура; Q – плотность источника теплоты; $R \cdot T$ – компонента этого источника, пропорциональная температуре; T_{cp} – температура среды; $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ – коэффициенты теплопроводности в направлении осей анизотропии, в случае изотропии $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z$; n_x, n_y, n_z – направляющие косинусы внешней нормали; q – тепловой поток на внешней границе S_q .

Краевые условия (4) соответствуют теплообмену с внешней средой по закону Ньютона – Рихмана. Для случая ГУ 3-го рода решение находим путем минимизации соответствующего функционала для поля температур $T(x_1, x_2, x_3)$:

$$\Phi(T) = \frac{1}{2} \iiint_V \left(\lambda_x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \lambda_y \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 + \lambda_z \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right) dv + \frac{1}{2} \iint_S \alpha_{cp} (T - T_{cp}) T dS \rightarrow \min. \quad (5)$$

Результаты численного исследования температурного поля и удельного теплового потока в теплопроводящей матрице металлгидридного аккумулятора в процессе десорбции водорода представлены на рис. 4. Как видно из результатов, приведенных на рис. 4, а, перепад температуры по радиусу теплопроводящей матрицы между зонами подвода и отвода теплоты составляет порядка $40 \text{ }^\circ\text{C}$, а распределение плотности удельного теплового потока – порядка $1,1\text{--}1,82 \text{ Вт/мм}^2$ (рис. 4, б).

При описании схемы закрепления теплопроводящей матрицы на участках её контакта с внешним нагревательным элементом (рис. 1, пункт 2) и элементами крепления матрицы в корпусе металлгидридного аккумулятора (на рис. 1 не показано) задавались усилия от воздействия упругих элементов (рис. 1, пункт 3).

Результаты расчета напряженно-деформированного состояния теплопроводящей матрицы с учетом воздействия тепловой нагрузки приведены на рис. 5. Радиальное тепловое расширение теплопроводящей матрицы по её внешней поверхности достигает $0,56 \text{ мм}$ (рис. 5, а). Уровень эквивалентных напряжений по Мизесу изменяется в пределах от 10 до 60 МПа по участкам ячеистой структуры матрицы (рис. 5, б).

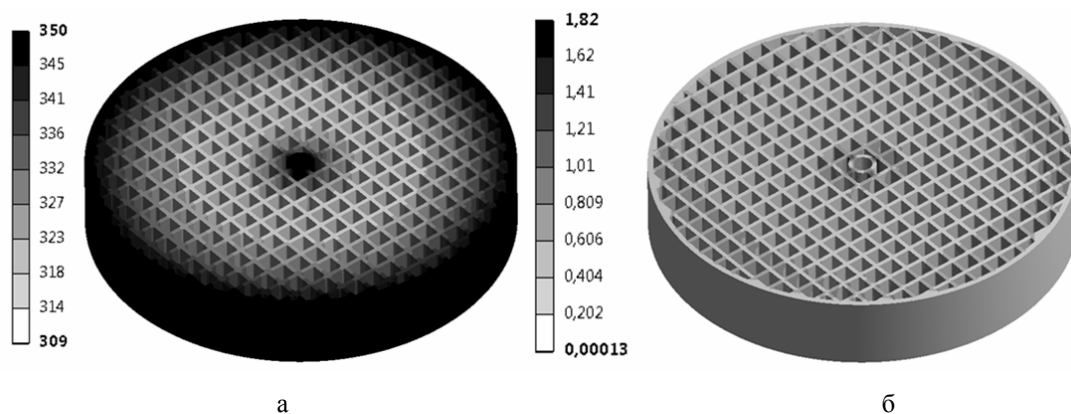


Рис. 4. Результати численного моделювання:

а – розподілення температури, °С; б – розподілення удельного теплого потоку Вт/мм² в теплопроводящей матрице металлогидридного аккумулятора в процессе десорбции водорода

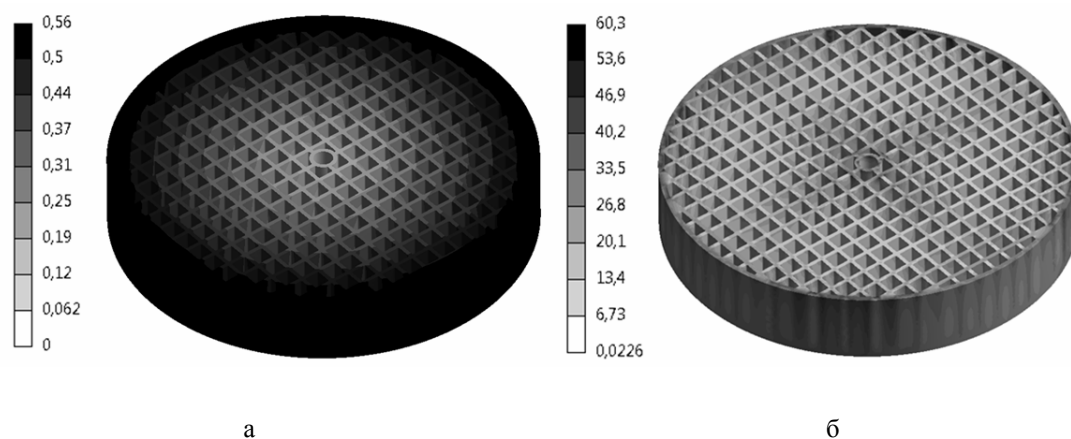


Рис. 5. Результати численного моделювання напружено-деформованного состояния:

а – радіальне розширення теплопроводящей матрицы, мм; б – уровень эквивалентных напряжений (по Мизесу), МПа в теплопроводящей матрице металлогидридного аккумулятора в процессе десорбции водорода

Полученные в результате расчета значения напряжений и деформаций в теплопроводящей матрице, возникающие в процессе десорбции водорода, согласуются с результатами, полученными другими авторами [13, 14].

Выводы

По результатам литературного обзора и расчетного исследования установлено:

- исследование интенсификации тепломассообменных процессов и путей усовершенствования теплопроводящих матриц высокотемпературных металлогидридных аккумуляторов является перспективным направлением развития водородной энергетики;
- для теплопроводящей матрицы с выбранными геометрическими и теплофизическими параметрами максимальный перепад температур в радиальном направлении в процессе десорбции водорода составляет около 40 °С;
- максимальное увеличение внешнего диаметра теплопроводящей матрицы достигает 0,56 мм, что не критично для надежной работы металлогидридного аккумулятора;
- уровень эквивалентных напряжений по Мизесу изменяется в пределах 10–60 МПа по участкам ячеистой структуры теплопроводящей матрицы, что не превышает уровня граничных значений напряжений для алюминиевого сплава, т. е. для данных конструктивных параметров матрицы есть резерв повышения интенсивности теплообмена.

Литература

1. Тарасов Б. П., Лотоцкий М. В., Яртысь В. А. Проблема хранения водорода и перспективы использования гидридов для аккумулирования водорода. *Рос. хим. журн.* 2006. № 6. С. 34–48.
2. Соловей В. В., Оболенский М. А., Бастеев А. В. Активация водорода и водородсодержащих энергоносителей. Киев: Наук. думка, 1993. 168 с.
3. Сержантова М. В., Кузубов А. А., Аврамова П. В., Федоров А. С. Теоретическое исследование процесса сорбции водорода соединениями магния, модифицированными атомами. *Журн. Сиб. федерал. ун-та. Химия.* 2009. Vol. 2. № 3 С. 259–265.
4. Федоров А. С., Сержантова М. В., Кузубов А. А. Исследования адсорбции водорода внутри и на поверхности магниевых наночастиц. *Журн. эксперимент. и теорет. физики.* 2008. Т. 134. Вып. 1. С. 156–163.
5. Кузубов А. А., Попов М. Н., Федоров А. С., Кожевникова Т. А. Теоретическое изучение диссоциативной хемосорбции водорода на углеродных нанотрубках. *Журн. физ. химии.* 2008. Т. 82. № 12. С. 2117–2121.
6. Pranevicius L., Darius M., Thomas G. Plasma Hydrogenation of Mg-Based Alloy Films Under High-Flux, Low Energy Ion Irradiation at Elevated Temperatures. 2005. P. 611–616. doi: <https://doi.org/10.1002/3527603565.ch97>.
7. Satyapal S., Read C., Ordaz G. et al. U.S. DOE Hydrogen Program. *The Fourth U.S.-Korea Forum on Nanotechnology: Sustainable Energy*, Honolulu, HI, 2007. April 26–27, 19 p. URL: <https://pdfs.semanticscholar.org/presentation/0511/7f29c9491f370523114f1f8fd58645a61abf.pdf> (Дата обращения: 20.08.2018)
8. Yartys V. A., Lotosky M. V., Veziroglu N. N. et al. An Overview of Hydrogen Storage Methods. *Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials*. Kluwer Academic Publishers. 2004. P. 75–104. doi: https://doi.org/10.1007/1-4020-2669-2_7
9. Bulychev B. M. Alumo- and Borohydrides of Metals: History, Properties, Technology, Application. *Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials*. Kluwer Academic Publishers. 2004. P. 105–114. doi: https://doi.org/10.1007/1-4020-2669-2_8
10. Graetz J., Reilly J.J., Yartis V.A. et al. Aluminum hydride as a hydrogen and energy storage material: Past, present and future. *J. Alloys and Compounds September*. 2011. P. 517–528. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2010.11.115>
11. Glushkov I. S., Kareev Yu. A., Petrov Yu. V. et al. Generation of hydrogen isotopes with an electric pulse hydride injector. *Intern. J Hydrogen Energy*. 1999. Vol. 24. P. 105–109.
12. Программный комплекс Caelinux Salome-Меча. URL: <http://caelinux.com/CMS/index.php> (Дата обращения: 17.08.2018)
13. Puls M. P. The influence of hydride size and matrix strength on fracture initiation at hydrides in zirconium alloys. *Metallurgical Transactions A*. 1988. Vol. 19. Iss. 6. P. 1507 – 1522. doi: <https://doi.org/10.1007/BF02674025>.
14. Xu F., Holt R. A., Daymond M. R., Rogge R. B., Oliver E. C. Development of internal strains in textured Zircaloy-2 during uni-axial deformation. *Materials Sci. and Eng.: A*. 2008. Vol. 488. Iss. 1–2. P. 172–185. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2007.11.018>

Поступила в редакцию 06.06.2018