

ВИКОРИСТАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДЛЯ ВДОСКОНАЛЕННЯ МАСОГАБАРИТНИХ ПОКАЗНИКІВ МЕТАЛОГІДРИДНИХ УСТАНОВОК

Розроблено чисельно-аналітичний метод розв'язування нелінійної початково-крайової задачі з умовами Стефана на межі поділу двох фаз металогідриду з воднем і без нього. Наведено математичну модель термосорбційної взаємодії водню з металогідридом, яка дозволяє оптимізувати параметри конструкцій ключових елементів металогідридних установок відповідно до заданих характеристик з метою підвищення їхньої ефективності.

Ключові слова: математична модель, водень, металогідрид, неявна різницєва схема, лінійний прямокутний скінченний елемент.

Вступ. Водень широко використовують як екологічно чистий енергоносіє з метою зменшення шкідливого впливу на довкілля. Незалежно від області застосування, металогідридні установки є енергоперетворювальними системами, тому розробка науково-технічних принципів їх формування – це важливий науковий напрям промислової теплоенергетики. Основним робочим елементом таких установок є металогідрид, що відіграє роль перетворювача енергії, трансформуючи тепло в потенціальну енергію стисненого газу або, частково, в енергетично нерівноважні форми водню [9, 10].

При проектуванні металогідридних установок важливими є результати математичного моделювання, які дозволяють знизити матеріальні та виробничі витрати порівняно з прямими експериментальними дослідженнями. Однак, внаслідок складності фізико-хімічних процесів у металогідридних системах, математичні моделі, що описують теплофізичні та гідравлічні властивості середовища, яке акумулює кінетику реакцій сорбції–десорбції водню та теплообміну між газовою й твердою фазами, є недостатньо вивченими. Тому аналіз процесів тепломасообміну в таких середовищах і створення надійних математичних моделей для їхнього опису мають першочергове значення при розробці ефективних металогідридних систем.

Метою цієї роботи є: реалізація математичної моделі термосорбційної взаємодії водню з металогідридом у вигляді універсальних програмних засобів; верифікація розробленої моделі за допомогою числових досліджень процесів тепломасообміну в режимах сорбції–десорбції водню для конструктивно різних типів металогідридних акумуляторів і порівняння результатів розрахунку з наявними експериментальними даними; аналіз отриманих результатів та розробка рекомендацій з удосконалення конструкції й режимів роботи металогідридних акумуляторів.

1. Постановка і метод розв'язання початково-крайової задачі. В Інституті проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України розроблено математичну модель термосорбційної взаємодії водню з металогідридом, що описується рівняннями переносу тепла й маси для в'язкого режиму фільтрації водню крізь дисперсний шар металогідриду [3, 5, 6]. Ця модель враховує внесок конвективного переносу в загальний тепловий потік, рівноважні співвідношення, що описують зв'язок між тиском, температурою та концентрацією водню в металогідриді в усьому діапазоні концентрацій, хімічну кінетику сорбції (десорбції). Такий підхід відповідає реальним умовам експлуатації енергоперетворювальних металогідридних систем. Модель реалізовано чисельно у вигляді пакету програм [7, 8].

В умовах осьової симетрії за просторовими координатами в цю математичну модель входить рівняння теплопровідності

[✉] nataliyachernaya7@gmail.com

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a_h \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{\beta c_{H_2}}{c_h \rho_h} J \frac{\partial T}{\partial r}, \quad (1)$$

де a_h – коефіцієнт температуропровідності гідриду; β – поправковий коефіцієнт; c_{H_2} – коефіцієнт теплоємності водню; c_h і ρ_h – коефіцієнт теплоємності і густина гідриду; J – щільність потоку водню; $T(r, z, \tau)$ – температура поле; r, z – відповідно радіальна та осьова координати циліндричної системи координат; τ – часова змінна.

Рівняння тепломасопереносу для металогідридного елемента на межі поділу фаз збідненого і насиченого воднем гідриду має вигляд

$$q_s \rho_h \frac{\partial \chi}{\partial \tau} = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \beta c_{H_2} J \frac{\partial T}{\partial r}, \quad (2)$$

де q_s – тепловий ефект реакції термохімічної взаємодії металогідриду з воднем; χ – питомий масовміст водню в металогідриді; λ – коефіцієнт теплопровідності металогідриду.

Рівняння переносу маси водню через шар металогідриду має вигляд

$$\chi(\Theta) = 2 \ln \left(\frac{\Theta}{1 - \Theta} \right) + \frac{\bar{H}_1(\Theta)}{R_{H_2} T}, \quad (3)$$

де Θ – ступінь заповнення міжвузлової металогідридної матриці атомами водню; $\bar{H}_1(\Theta)$ – концентраційна залежність парціальної мольної ентальпії взаємодії між прониклими атомами водню; R_{H_2} – газова стала водню.

Рівняння нерозривності має такий вигляд:

$$\frac{1}{\xi R_{H_2}} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{p}{T} \Pi \right) = \frac{J p}{r} + p \frac{\partial J}{\partial r} + J \frac{\partial p}{\partial r} - \rho_h \frac{\partial \chi}{\partial \tau}, \quad (4)$$

де Π – пористість металогідриду; ξ і p – відповідно коефіцієнт стисливості і тиск водню.

Потік водню через шар гідриду відіграє важливу роль у переносі тепла і маси при термосорбційному процесі. Встановлено, що через малий характерний розмір (середній діаметр частинок гідриду відповідає діапазону 3 ÷ 30 мкм) та швидкість руху водню в реальних умовах наявні режими течії, за яких число Рейнольдса $Re < 1$. За цих умов осереднення тиску і швидкості потоку водню при в'язкому режимі допускають використання рівняння руху у формі закону Дарсі. Тоді рівняння для щільності потоку водню має вигляд

$$J = h \frac{\Pi^3}{\mu} \frac{p}{\xi R_{H_2} T} \frac{d_{av}^2}{(1 - \Pi)^2} \frac{\partial p}{\partial r}, \quad (5)$$

де h – коефіцієнт фільтрації, d_{av} – середній еквівалентний діаметр частинки гідриду, μ – динамічний коефіцієнт в'язкості.

Рівняння швидкості реакції взаємодії металогідриду з воднем має вигляд

$$\frac{d\chi}{d\tau} = \frac{p(T, \chi) A}{p_d(T, \chi) f_{spec} \Delta \tau \mu'}, \quad (6)$$

де p_d – тиск десорбції, f_{spec} – питома площа частки гідриду, μ' – хімічний потенціал, $A = \Delta G_0 + R_{H_2} T \ln p$, ΔG_0 – зміна енергії Гіббса.

Систему замикає рівняння стану водню, записане з урахуванням вірйальних коефіцієнтів:

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = R_{H_2} T, \quad (7)$$

де v – об'єм водню; a , b – віріальні коефіцієнти.

Систему рівнянь (1)–(7) доповнюють початкові й крайові умови третього роду.

Теплотехнічні розрахунки металогідридних систем передбачають, що заданими є не лише термосорбційні, але й теплофізичні характеристики матеріалів. Наявні дані про теплофізичні властивості металогідридів є неповними і не враховують ряд факторів, істотних для процесів теплопереносу при взаємодії металогідриду з воднем. Відсутність цих даних не дозволяє встановити залежності теплофізичних характеристик від стадій процесу в реальному діапазоні зміни режимних параметрів, що збільшує похибку розрахунків конструкції металогідридних елементів.

Однією з основних величин, потрібних для теплотехнічних розрахунків металогідридних систем, є теплоємність, що залежить як від температури T , так і від масовмісту водню χ у гідриді. Для визначення розрахунково-аналітичним шляхом залежності масової теплоємності гідриду $c_h(T, \chi)$ використано термодинамічну теорію збурень молекулярних систем. На відміну від широко використовуваних моделей таких систем, які базуються на припущенні, що існує відповідність між властивостями прониклого водню та ідеального решіткового газу ($c_h = \text{const}$), теплоємність реальних гідридних систем, описана в рамках моделі неідеального решіткового H -газу, має складнішу залежність від параметрів стану.

Для дослідженого діапазону температури та масовмісту водню при визначенні теплоємності металогідриду c_{mh} використано рівняння

$$c_{mh}(T, \chi) = c_h(T) + \chi \left(R_{H_2} \left(\frac{3}{2} - \frac{a'}{T^2} \right) - c_h(T) \right),$$

де a' – коефіцієнт, що залежить від питомого масовмісту водню в гідриді.

Результати порівняння свідчать, що при $T = 343 \text{ K}$, $\chi = 0.01$ отримане значення $c_{mh}(T, \chi) = 440 \text{ Дж}/(\text{кг}\cdot\text{K})$ питомої теплоємності гідриду LaNi_5H_x відрізняється від експериментального значення $c_{mh} = 449 \text{ Дж}/(\text{кг}\cdot\text{K})$ на 2 %, що є в межах допустимої похибки. Це підтверджує адекватність вибраної моделі неідеального решіткового H -газу й демонструє реальні можливості застосування методу модифікованої теорії збурень для розрахунків теплоємності металогідриду. Таким чином, запропонований підхід дає можливість підвищити точність визначення теплоємності металогідриду порівняно з результатами, отриманими за допомогою відомих методик.

2. Числова реалізація. Розглянемо задачу (1)–(7) з умовами Стефана на межі поділу фаз (металогідрид з воднем і без нього). Для розв'язання таких задач розроблено чисельні методи, які можна розбити на два класи. До першого класу віднесено методи, спрямовані на побудову сітки так, щоб для кожного моменту часу вузли сіткової моделі розташовувалися на межі поділу фаз. Такі методи є ефективними для розв'язання одновимірних задач. Однак для дво- чи тривимірних задач такі алгоритми виявляються занадто трудомісткими. Віднесені до другого класу методи дозволяють звести крайову задачу з умовами Стефана на межі поділу фаз до крайової задачі з коефіцієнтами, які враховують стрибок потоку на цій межі [1, 4]. Використовуючи такий підхід, крайову задачу для шуканих функцій $T(\tau, M)$ і $p(\tau, M)$ в осесиметричній постановці можна описати рівняннями

$$(c_h \rho_h + q_s \rho_h \chi_0 \delta(T - T^*)) \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_h r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_h \frac{\partial T}{\partial z} \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\beta h d_{av}^2 c_{H_2} \Pi^3 p}{\xi R_{H_2} (1 - \Pi)^2 \mu T} \left(\frac{\partial p}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial p}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \\
& \left(\frac{1}{\xi R_{H_2}} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\Pi p}{T} \right) + \rho_h \chi_0 \delta(p - p^*) \right) \frac{\partial p}{\partial \tau} = \\
& = \frac{h d_{av}^2}{\xi R_{H_2}} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r p \Pi^3}{\mu T (1 - \Pi)^2} \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p \Pi^3}{\mu T (1 - \Pi)^2} \frac{\partial p}{\partial z} \right) \right)
\end{aligned}$$

для пористої складової та

$$c_{sol} \rho_{sol} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_{sol} r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{sol} \frac{\partial T}{\partial z} \right)$$

для твердої з умовами ідеального контакту між твердою і пористою складовими, а також із відповідними крайовими й початковими умовами. Тут $\delta(\cdot)$ – дельта-функція Дірака; T^* і p^* – температура та тиск десорбції; λ_h – коефіцієнт теплопровідності металогідриду; χ_0 – початковий питомий масовміст водню в металогідриді; c_{sol} – коефіцієнт теплоємності гідриду; ρ_{sol} – густина гідриду. При чисельній реалізації використання функції Дірака у класичному розумінні є неможливим, тому її згладжують за допомогою описаного в [4] методу.

Для побудови числового розв'язку системи двох нелінійних рівнянь у частинних похідних параболічного типу застосуємо неявну різницеву схему за часовою координатою. Цю систему можна записати як послідовність систем двох нелінійних стаціонарних рівнянь для кожного кроку за часовою координатою

$$\begin{aligned}
& (c_h \rho_h + q_s \rho_h \chi_0 \delta(T_i - T^*)) \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_h r \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_h \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + \\
& + \frac{\beta h d_{av}^2 c_{H_2} \Pi^3 p_i}{\xi R_{H_2} (1 - \Pi)^2 \mu T_i} \left(\frac{\partial p_i}{\partial r} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{\partial p_i}{\partial r} \frac{\partial T_i}{\partial r} \right), \\
& \left(\frac{\Pi}{\xi R_{H_2} T_i} + \rho_h \chi_0 \delta(p_i - p^*) \right) \frac{p_i - p_{i-1}}{\Delta \tau} = \\
& = \frac{h d_{av}^2}{\xi R_{H_2}} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r p_i \Pi^3}{\mu T_i (1 - \Pi)^2} \frac{\partial p_i}{\partial r} \right) + \right. \\
& \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p_i \Pi^3}{\mu T_i (1 - \Pi)^2} \frac{\partial p_i}{\partial z} \right) \right) \tag{8}
\end{aligned}$$

для пористої складової і одного рівняння

$$c_{sol} \rho_{sol} \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_{sol} r \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{sol} \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) \tag{9}$$

для твердої складової. Тут T_{i-1} і p_{i-1} – розв'язки, отримані на попередньому кроці, $\Delta \tau$ – крок за часовою координатою.

Для розв'язання систем (8), (9) подамо їх у лінеаризованому вигляді:

$$\begin{aligned}
& (c_h \rho_h + q_s \rho_h \chi_0 \delta(T_{i,j-1} - T^*)) \frac{T_{i,j} - T_{i-1}}{\Delta \tau} = \\
& = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_h r \frac{\partial T_{i,j}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_h \frac{\partial T_{i,j}}{\partial z} \right) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\beta h d_{av}^2 c_{H_2} \Pi^3 p_{i,j-1}}{\xi R_{H_2} (1 - \Pi)^2 \mu T_{i,j-1}} \left(\frac{\partial p_{i,j-1}}{\partial r} \frac{\partial T_{i,j-1}}{\partial r} + \frac{\partial p_{i,j-1}}{\partial r} \frac{\partial T_{i,j-1}}{\partial r} \right), \\
& \left(\frac{\Pi}{\xi R_{H_2} T_i} + \rho_h \lambda_0 \delta (p_{i,j-1} - p^*) \right) \frac{p_{i,j} - p_{i-1}}{\Delta \tau} = \\
& = h \frac{d_{av}^2}{\xi R_{H_2}} \operatorname{div} \left(\frac{\Pi^3 p_{i,j-1}}{\mu (1 - \Pi)^2 T_{i,j-1}} \operatorname{grad} p_{i,j} \right), \\
& c_{sol} \rho_{sol} \frac{T_{i,j} - T_{i-1}}{\Delta \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_{sol} r \frac{\partial T_{i,j}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{sol} \frac{\partial T_{i,j}}{\partial z} \right),
\end{aligned}$$

де $T_{i,j-1}$ і $p_{i,j-1}$ та $T_{i,j}$ і $p_{i,j}$ – розв’язки, отримані відповідно на попередній та поточній ітерації для кожного кроку за часом.

За початкове наближення на кожному кроці за часом взято розв’язок, отриманий на попередньому кроці. Для одержання просторової залежності шуканих функцій для кожного лінійного рівняння можна застосувати метод скінченних елементів (тут застосовано лінійний прямокутний скінченний елемент). Ітераційний процес триває, доки відносні похибки для функцій $T_{i,j}$ та $p_{i,j}$ не стануть меншими, ніж задані значення ε_T та ε_p відповідно.

Розроблені алгоритми верифіковано для крайової задачі Стефана, яка має аналітичний розв’язок [4], що підтвердило їх коректність. Валідацію моделі виконано на основі реальних фізичних експериментів [2], що підтвердило адекватність обраної розрахункової схеми.

3. Числові результати. Для створення раціональних конструкцій акумуляторів водню металогідридних установок використано математичну модель, що описує нестационарний процес термосорбційної взаємодії металогідриду з воднем, яка дозволяє здійснити вибір гідридоутворюючого матеріалу з необхідними характеристиками; визначити геометрію та структуру шару, а також розташування теплообмінних поверхонь; дати оцінку ефективності методів інтенсифікації термосорбційного процесу та обрати найбільш доцільний метод залежно від цільового призначення; оптимізувати параметри конструкції відповідно до заданих характеристик, які визначають загальну вагу системи, робочі тиски, необхідні витратні параметри, діапазон температури та ін.

На основі детальних розрахунків конструкції акумулятора водню у вигляді циліндра з діаметром 0.04 м, у якому теплопередавальну матрицю виконано з мідних пластин, досліджено вплив зміни геометрії внутрішнього оребрення акумулятора на процес тепломасообміну в металогідриді.

Встановлено, що для обраної конструкції акумулятора водню найбільш доцільною товщиною пластини оребрення є $\delta = 1.0 \times 10^{-4}$ у діапазоні зміни товщини в межах 20 %.

При дослідженні впливу відстані між пластинами на процес десорбції водню встановлено, що при зменшенні проміжку між пластинами процес інтенсифікується. Однак збільшення кількості пластин оребрення на одиницю довжини акумулятора веде до скорочення корисного об’єму металогідриду і, як наслідок, до зменшення вмісту в ньому водню (до 13 %). Для обраної конструкції акумулятора водню відстань між пластинами оребрення товщиною $\delta = 1.0 \times 10^{-4}$ м не повинна перевищувати $\ell = 5.0 \times 10^{-3}$ м.

Досліджено вплив висоти мідної пластини оребрення на динаміку процесу десорбції водню за допомогою порівняння трьох варіантів розрахунку. Для варіанта I висоту пластини R та радіус r_{ac} акумулятора водню взято рівними 20 мм; для варіанта II – $R = 1.5r_{ac}$; для варіанта III –

$R = 2r_{ac}$. Для цих варіантів розрахунку товщина мідної пластини оребрення становила $\delta = 1.0 \times 10^{-4}$ м, корисний об'єм металогідриду між пластинами був однаковим. Температурні поля в шарах металогідриду для різних значень R та $\tau = 70$ с наведено на рис. 1. У варіанті I водень виділювався швидше, ніж у двох інших варіантах.

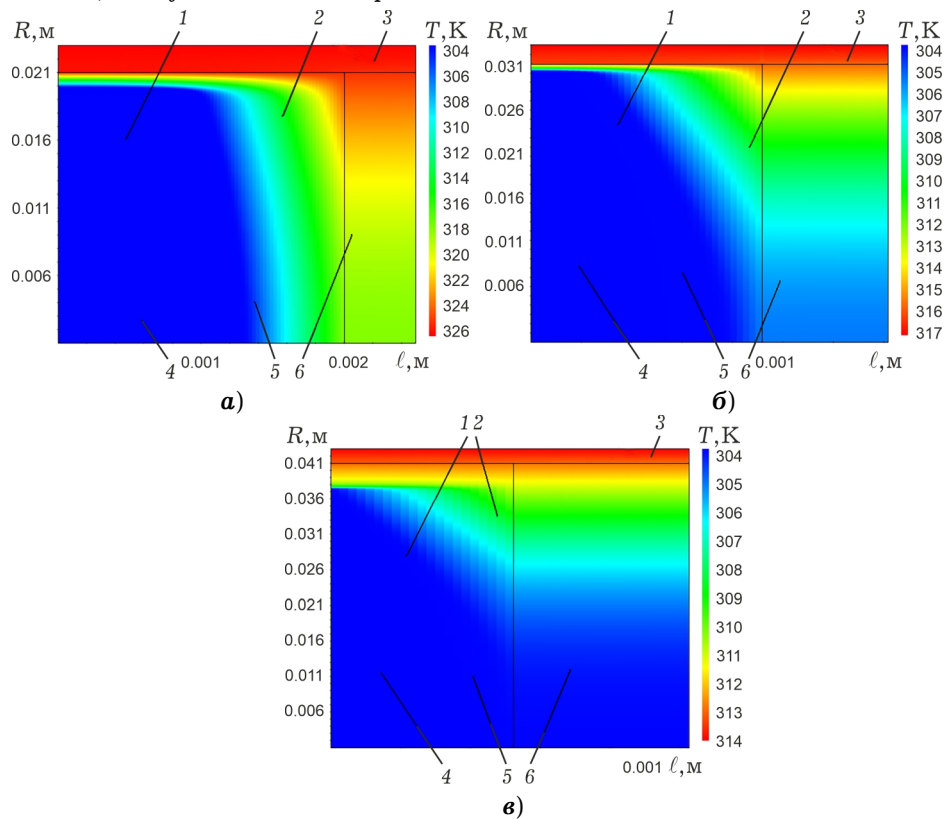


Рис. 1. Розподіл температури в металогідридному елементі при $\tau = 70$ с для варіантів I (а), II (б) і III (в), де **1** – зона насиченого металогідриду, **2** – зона збідненого металогідриду, **3** – канал теплоносія, **4** – зона десорбції водню, **5** – металогідриду, **6** – мідна пластинка оребрення.

Для цих самих трьох варіантів на рис. 2 наведено температурні поля в шарах металогідриду для часу $\tau = 130$ с. Як бачимо, у вказаний момент часу десорбція водню для варіанта III майже завершилась, тобто, висота пластини оребрення, як і частота установки пластин, головним чином впливає на просування теплового фронту в металогідриді. Тепло надходить до пластини оребрення як від нагрівальної поверхні, так і з бічних поверхонь від збіднених зон шару металогідриду. Якщо ж піти шляхом збільшення тривалості процесу, виходячи з теплової інерційності шару металогідриду, то крім зниження продуктивності, це призведе до зниження економічності через втрати тепла, що обумовлюються перегріванням шарів металогідриду, розташованих поблизу нагрівальної поверхні.

Оскільки найсуттєвіший вплив на динаміку виходу водню чинять внутрішній термічний і гідравлічний опори металогідриду, що накладає обмеження на геометричні розміри металогідридного елемента за заданої вихідної характеристики системи, висоту шару металогідриду потрібно вибирати з використанням умов мінімізації ексергетичних втрат, викликаних перегріванням зон шару металогідриду поблизу нагрівальної поверхні, а також шляхом оптимізації відношення маси металоконструкції до маси гідриду.

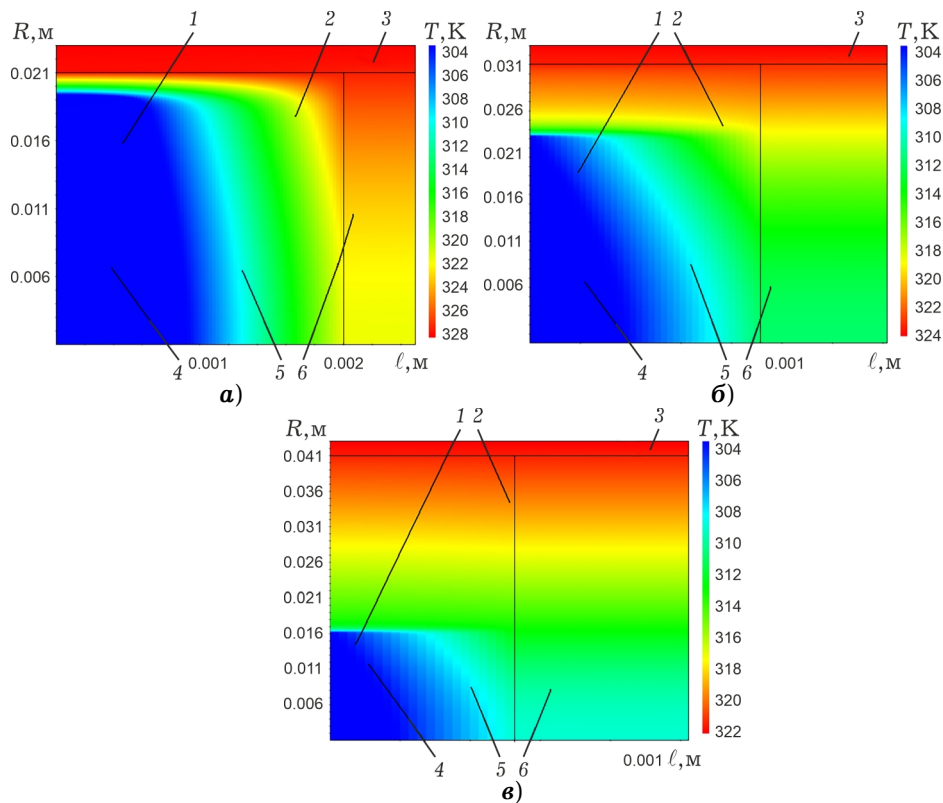


Рис. 2. Розподіл температури в металогібридному елементі при $\tau = 130$ с для варіантів I (а), II (б) і III (в), де позначки 1–6 такі самі, як на рис. 1.

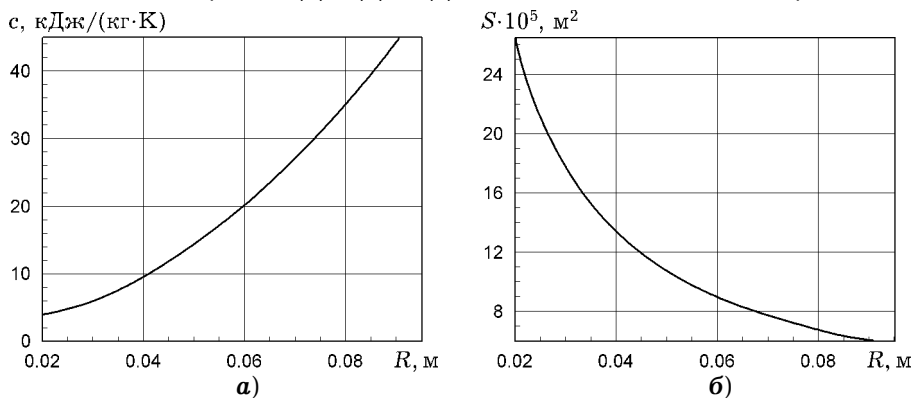


Рис. 3. Залежність об'ємної теплоємності (а) та нагрівальної поверхні (б) від висоти пластини оребрення.

За допомогою математичної моделі термосорбційної взаємодії металогібриду з воднем досліджено вплив об'ємної теплоємності та нагрівальної площі поверхні на радіус акумулятора водню (рис. 3).

Показано, що зі збільшенням внутрішнього радіуса (висоти пластини оребрення), з одного боку, потрібно більше тепла для того, щоб нагріти металогібридну конструкцію, а значить, пластинка за одиницю часу віддасть менше тепла насиченому металогібриду, що збільшить тривалість десорбції водню. З іншого боку, збільшення висоти пластини оребрення призводить до збільшення площі її поверхні, тому за одиницю часу ця пластинка віддасть більше тепла в металогібрид. Отже, висоту пластини оребрення потрібно вибирати з умов мінімізації ексергетичних втрат, викликаних перегрівом зон шару металогібриду поблизу нагрівальної поверхні, а також шляхом оптимізації відношення маси всієї конструкції та маси металогібри-

ду. Отримані результати свідчать, що вибір матеріалу та геометрії внутрішнього оребрення, які забезпечують заданий споживачем закон зміни витрат водню в часі на необхідному рівні тиску, є важливою складовою у визначенні та вдосконаленні технологічних і конструкційних характеристик металогідридних елементів водневих систем та визначенні кількісної оцінки витрат ексергії.

Висновки. За допомогою розробленої методики термосорбційної взаємодії металогідриду з воднем знайдено ефективні алгоритми розрахунку нестационарних полів температур та тиску в металогідриді на основі застосування методу скінченних елементів для двовимірних областей та методу скінченних різниць за часовою змінною. Для моделювання фазового переходу між металогідридом з воднем та металогідридом без водню застосовано метод розрахунку теплоємності металогідриду з урахуванням теплої сорбції або десорбції водню. Розроблено алгоритми розрахунку масової теплоємності металогідриду, коли масову теплоємність подано кусково-сталю функцією температури, причому межа поділу різних теплоємностей може проходити через довільний скінченний елемент розбиття досліджуваної області. Тому розроблені алгоритми не потребують підлаштування сітки скінченних елементів до границі сорбції або десорбції водню для кожного моменту часу при розв'язуванні системи рівнянь для температури та тиску, що суттєво знижує розрахункові затрати. Отримані результати можуть бути використані для вдосконалення металогідридних елементів водневих установок, що працюють у нестационарних режимах, з метою підвищення ефективності їхньої роботи та розробки теоретичних засад створення металогідридної техніки для інфраструктури водневої енергетики.

1. Будак Б. М., Соловьева Е. Н., Успенский А. Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 1965. – 5, № 5. – С. 828–840.
Te same: Budak B. M., Solov'eva E. N., Uspenskii A. B. A difference method with coefficient smoothing for the solution of Stefan problems // USSR Comput. Math. Math. Phys. – 1965. – 5, No. 5. – P. 59–76.
– [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(65\)90005-4](https://doi.org/10.1016/0041-5553(65)90005-4).
2. Ивановский А. И. Повышение эффективности сжатия водорода в металлгидридном термосорбционном компрессоре: дис. ... канд. техн. наук / Ин-т проблем машиностроения им. А. Н. Подгорного НАН Украины. Харьков, 1990. – 243 с.
3. Мацевитый Ю. М., Соловей В. В., Черная Н. А. Повышение эффективности металлгидридных элементов теплоиспользующих установок // Пробл. машинобудування. – 2006. – 9, № 2. – С. 85–93.
4. Самарский А. А., Моисеенко Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 1965. – 5, № 5. – С. 816–827.
Te same: Samarskii A. A., Moiseyenko B. D. An economic continuous calculation scheme for the Stefan multidimensional problem // USSR Comput. Math. Math. Phys. – 1965. – 5, No. 5. – P. 43–58.
– [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(65\)90004-2](https://doi.org/10.1016/0041-5553(65)90004-2).
5. Соловей В. В., Ивановский А. И., Черная Н. А., Шевченко А. А. Энергосберегающие технологии генерации и энерготехнологической переработки водорода // Компрессор. и энерг. машиностроение. – 2010. – № 2(20). – С. 21–24.
6. Соловей В. В., Кошельник А. В., Черная Н. А. Моделирование тепломассообменных процессов в металлгидридных теплоиспользующих установках // Промышленная теплотехника. – 2012. – 34, № 2. – С. 48–53.
7. Чорна Н. А. Удосконалення математичної моделі тепломасообмінних процесів у водневих металогідридних системах // Пробл. машинобудування – 2013. – 16, № 3. – С. 68–72.
8. Чорна Н. А., Ганчин В. В. Моделювання тепломасообмінних процесів у металогідридних установках // Пробл. машинобудування. – 2018. – 21, № 4. – С. 63–70.
Te same: Chorna N. A., Hanchyn V. V. Modeling heat and mass exchange processes in metal-hydride installations // J. Mech Engng. – 2018. – 21, No. 4. – С. 63–70. – <https://doi.org/10.15407/pmach2018.04.063>.

9. Førde T., Næss E., Yartys V. A. Modelling and experimental results of heat transfer in a metal hydride store during hydrogen charge and discharge // Int. J. Hydrogen Energ. – 2009. – **34**, No. 12. – P. 5121–5130.
– <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.03.019>.
10. Meng X., Wu Z., Bao Z., Yang F., Zhang Z. Performance simulation and experimental confirmation of a mini-channel metal hydrides reactor // Int. J. Hydrogen Energ. – 2013. – **38**, No. 35. – P. 15242–15253.
– <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.09.056>.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ МАССОГАБАРИТНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ МЕТАЛЛОГИДРИДНЫХ УСТАНОВОК

Разработан численно-аналитический метод решения нелинейной начально-краевой задачи с условиями Стефана на границе раздела двух фаз металлогидрида с водородом и без него. Представлена математическая модель термосорбционного взаимодействия водорода с металлогидридом, позволяющая оптимизировать параметры конструкций ключевых элементов металлогидридных установок согласно заданным характеристикам с целью повышения их эффективности.

Ключевые слова: математическая модель, водород, металлогидрид, неявная разностная схема, линейный прямоугольный конечный элемент.

IMPLEMENTATION OF MATHEMATICAL MODELING FOR IMPROVEMENT OF MASS-DIMENSIONAL PROPERTIES OF METAL HYDRIDE PLANTS

A numerical-analytical method is developed for solving a nonlinear initial-boundary value problem with Stefan conditions on the interface between two phases of metal hydride with and without hydrogen. A mathematical model is presented for the thermosorption interaction of hydrogen with metal hydride, which allows for optimization of the design parameters for key elements of metal hydride plants according to given characteristics in order to increase their efficiency.

Key words: mathematical model, hydrogen, metal hydride, implicit difference scheme, linear rectangular finite element.

Ін-т проблем машинобудування
ім. А. М. Підгорного НАН України, Харків

Одержано
10.04.19