

УДК 53.072.8

**МОДЕЛЬ ПОЭТАПНОЙ ПРОЦЕДУРЫ ПОСТРОЕНИЯ ИЗОТЕРМЫ ДАВЛЕНИЕ-СОСТАВ
МАТЕРИАЛА НАКОПИТЕЛЯ ВОДОРОДА НА АППАРАТЕ ТИПА СИВЕРТСА**

Д.Е. Халеев

Научный руководитель: доцент, к.т.н. Г.В. Гаранин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: deh6@tpu.ru

**MODEL OF THE STEPWISE PROCEDURE FOR CONSTRUCTING THE PRESSURE COMPOSITION
ISOTHERM OF HYDROGEN STORAGE MATERIAL ON A SIEVERTS-TYPE APPARATUS**

D.E. Khaleev

Scientific Supervisor: Assoc. Prof., Ph.D. G.V. Garanin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: deh6@tpu.ru

Abstract. *This work is devoted to the development of a mathematical model of a step-by-step procedure for constructing a pressure-composition isotherm of hydrogen storage material on a Sievers-type apparatus.*

Введение. Наиболее популярным экспериментальным методом для построения изотерм давление-состав материалов накопителей водорода является волюметрический метод. Однако автоматизация оборудования усложняется в виду наличия неопределенных промежуточных состояний системы в ходе эксперимента. Данная работа посвящена разработке математической модели поэтапной процедуры построения изотермы давление-состав материала накопителя водорода на аппарате типа Сивертса.

Экспериментальная часть. Аппарат типа Сивертса, схематически изображенный на рис. 1а, в общем случае имеет реакционную камеру и эталонный резервуар. В реакционной камере располагается образец, а эталонный резервуар используется для накопления и распределения водорода по системе. Изотерма давление-состав, изображенная на рис. 1б., отражает термодинамические условия равновесия водорода с водородом, размещенным в металлической матрице материала накопителя [1].

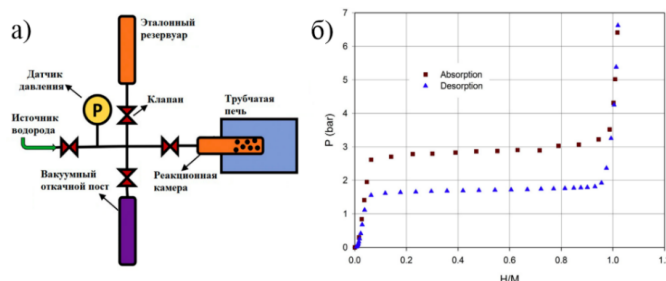


Рис. 1. Изотерма давление-состав

а) схема аппарата типа Сивертса, б) изотерма давление-состав [1]

Для построения изотермы давление-состав необходимо последовательно повышать давление водорода в камере и на каждом шаге проводить измерение количества сорбированного газа. Водород в

камеру поступает из эталонного резервуара посредством открытия клапана, разделяющего эти объемы. Когда клапан будет открыт и газ перераспределится, давление водорода в реакционной камере должно соответствовать давлению равновесия на текущем шаге изотермы.

Построение изотермы давление-состав на аппарате типа Сиверта производится при помощи трех основных действий: водород поступает в эталонный резервуар, после чего стравливается в реакционную камеру, в которой происходит реакция сорбции. В свою очередь, алгоритм автоматизации эксперимента должен определять условия выполнения этапов обратном порядке. Исходя из требуемого на текущем шаге значения давления водорода в реакционной камере, определяется давление, которое необходимо получить в эталонном резервуаре. Предварительный расчет опирается на изотерму давление-состав, поскольку она определяет давление водорода в реакционной камере на каждом шаге эксперимента.

Результаты. Разработка модели поэтапной процедуры построения изотермы давление-состав материала накопителя водорода на аппарате типа Сиверта производилась при помощи математического пакета Wolfram Mathematica 12. В качестве исследуемого образца был выбран хорошо изученный материал накопитель водорода LaNi_5 . Экспериментально полученная изотерма давление-состав образца LaNi_5 была записана в виде точек зависимости давление-концентрация и представлена в виде графика на рис. 2а. Затем была найдена разность масс. % соседних точек, чтобы рассчитать количество молей водорода, которое будет сорбировано на каждом шаге. Увеличение масс. % и падение давления в реакционной камере связывается выражением:

$$\Delta \text{масс. \%} = \Delta \nu \frac{M_{\text{H}_2}}{m_{\text{обр}}} \cdot 100\% = \Delta P \frac{V_{\text{к}}}{RT} \frac{M_{\text{H}_2}}{m_{\text{обр}}} \cdot 100\%, \quad (1)$$

где $\Delta \nu$ – это количество молей водорода, сорбированное образцом, $m_{\text{обр}}$ – масса образца, M_{H_2} – молярная масса водорода, ΔP – изменение давления в камере с образцом, $V_{\text{к}}$ – объем реакционной камеры.

Для образца LaNi_5 массой 0.55 г. используя выражение (1) была рассчитана величина, на которую уменьшится давление водорода в реакционной камере после прохождения каждого этапа сорбции. Графически зависимость падения давления в реакционной камере от масс. % изображена на рис. 2б.

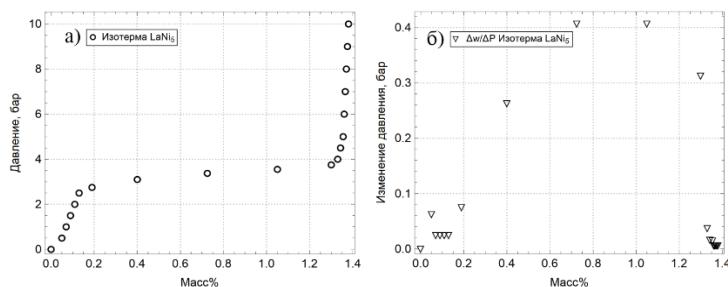


Рис. 2. Зависимость падения давления в реакционной камере от масс. %

а) изотерма давление-состав образца LaNi_5 , б) падение давления в реакционной камере от масс. %

Значения изотермы давление-состав для LaNi_5 и изменения давления в реакционной камере затем использовались для нахождения оптимального количества молей водорода, которое необходимо аккумулировать в эталонном резервуаре. Оптимизация производилась по двум факторам: минимизация давления в эталонном резервуаре и минимизация количества повторений подачи газа в систему.

Моделирование этапов процедуры построения изотермы давление-состав на аппарате типа Сиверта осуществлялось имитацией повторения трех основных действий, обозначенных выше.

Результат расчета представлен на рис.3 в виде поэтапной временной зависимости давления в эталонном резервуаре и реакционной камере.

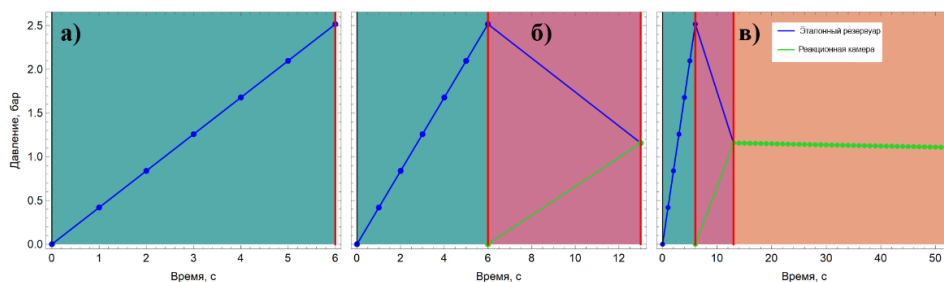


Рис. 3. Поэтапная временная зависимость давления водорода в участках аппарата типа Сиверкса: а) подача водорода в эталонный резервуар, б) стравливание газа в реакционную камеру, в) регистрация изменения давления в ходе реакции сорбции водорода материалом накопителем

Результат работы алгоритма предварительного расчета использовался для построения поэтапной временной зависимости давления в эталонном резервуаре и реакционной камере на протяжении всей процедуры моделирования эксперимента. После первой подачи водорода, в эталонном резервуаре было установлено давление равное 11,2 бар, которое затем последовательно напускалось в реакционную камеру. Анализируя поэтапную временную зависимость, изображённую на рис. 4а, можно определить, что одной процедуры подачи газа является достаточной для 13-ти последующих этапов сорбции. Это оказывает положительное влияние, поскольку основное время эксперимента отводится на регистрацию процесса сорбции. Завершение процесса построения изотермы давление-состав происходит, когда образец LaNi_5 достигает максимальной концентрации водорода. Сравнение изотерм давление-состав, полученной экспериментально и в результате работы модели, представлено на рис. 4б.

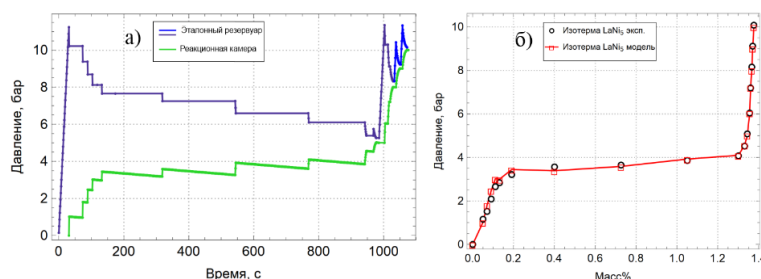


Рис. 4. а) поэтапная временная зависимость, б) сравнение изотерм давление-состав

Закключение. Разработана математическая модель поэтапной процедуры построения изотермы давление-состав материала накопителя водорода. Результаты работы модели позволяют определить промежуточные состояния газовой системы аппарата типа Сиверкса и упростить автоматизацию оборудования. Изотерма давление-состав, полученная в результате работы модели, соответствует изотерме, полученной экспериментально, из чего можно сделать вывод о корректности работы модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mohammadshahi S.S., Gray E. MacA., Webb C.J.A review of mathematical modelling of metal-hydride systems for hydrogen storage applications // International Journal of Hydrogen Energy. – 2016. – V. 41., № 5. – P. 3470–3484.