

DOI: 10.19666/j.rlfed.202404071

基于换热管束优化布置的固态储氢反应器 储氢性能模拟研究

陈泽祺¹, 曹红梅², 田忠玉³, 张民⁴, 朱世铭⁴, 时德泰⁴, 高明¹

(1.山东大学能源与动力工程学院, 高效储能及氢能利用山东省工程研究中心, 山东 济南 250061;

2.华能山东发电有限公司, 山东 济南 250014;

3.华能青岛热电有限公司, 山东 青岛 266000;

4.华能国际发电有限公司日照电厂, 山东 日照 276800)

[摘要] 为探究固态储氢反应器内的热质传递过程, 建立了反应器的二维数值计算模型, 分析了反应器内固态储氢材料的径向反应分率分布特性, 以及储氢材料床层厚度与换热管径对饱和半径的影响规律, 进而开展了换热管束优化布置研究。结果表明: 换热管存在对应的最大饱和半径, 且随管径增加而增大; 当管半径为 1.00~6.00 mm 的单管布置时, 最大饱和半径分别为 2.60、3.30、3.50、3.70、3.80、3.90 mm, 其中半径为 1.00、2.00、3.00 mm 的换热管体积分数较小, 分别为 7.72%、14.24%、21.30%, 当这 3 种换热管以管束布置时, 较优的管间床层厚度分别为 4.86、6.09、6.38 mm; 此外, 增设换热管束可有效改善反应器内反应死区的储氢性能。在半径 2.00 mm 换热管束的反应器内, 与未增设换热管束相比, 在反应死区增设 12 根半径 1.00 mm 换热管后储氢时间减少了 40.00%, 为 267 s, 而换热管束体积分数仅增加了 1.92%, 储氢量仅减少 2.17%。该研究成果可为固态储氢反应器的优化设计奠定基础, 并为后续的工程应用提供指导。

[关键词] 固态储氢; 换热管束; 储氢性能; 饱和半径; 数值模拟

[引用本文格式] 陈泽祺, 曹红梅, 田忠玉, 等. 基于换热管束优化布置的固态储氢反应器储氢性能模拟研究[J]. 热力发电, 2024, 53(9): 100-108. CHEN Zeqi, CAO Hongmei, TIAN Zhongyu, et al. Simulation of hydrogen storage performance in solid-state hydrogen storage reactor based on optimal arrangement of heat exchange tube bundles[J]. Thermal Power Generation, 2024, 53(9): 100-108.

Simulation of hydrogen storage performance in solid-state hydrogen storage reactor based on optimal arrangement of heat exchange tube bundles

CHEN Zeqi¹, CAO Hongmei², TIAN Zhongyu³, ZHANG Min⁴,
ZHU Shiming⁴, SHI Detai⁴, GAO Ming¹

(1.Shandong Engineering Research Center for High-efficiency Energy Storage and Hydrogen Energy Utilization, School of Energy and Power Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China;

2.Huaneng Shandong Power Generation Co., Ltd., Jinan 250014, China; 3.Huaneng Qingdao Thermal Power Co., Ltd., Qingdao 266000, China;

4.Huaneng International Power Generation Co., Ltd. Rizhao Power Plant, Rizhao 276800, China)

Abstract: To explore the heat and mass transfer process in a solid-state hydrogen storage reactor, a two-dimensional numerical calculation model for the reactor is developed. The radial reaction rate distribution characteristics of the solid-state hydrogen storage material within the reactor is investigated, and the influence laws of bed thickness of the hydrogen storage material and diameter of the heat exchange tube on saturation radius are also studied. Based on this, the arrangement of the heat exchange tube bundle is optimized. The results show

收稿日期: 2024-04-10

基金项目: 中国华能集团有限公司总部科技项目 (HNKJ24-HF36); 广东省自然科学基金项目 (2023A1515012808)

Supported by: Science and Technology Project of China Huaneng Group Co., Ltd. (HNKJ24-HF36); Natural Science Foundation of Guangdong Province (2023A1515012808)

第一作者简介: 陈泽祺 (1998), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为固态储氢技术, 202214469@mail.sdu.edu.cn.

通信作者简介: 高明 (1977), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为高效储能及氢能利用技术, gm@sdu.edu.cn.

that, the heat exchange tube has the corresponding maximum saturation radius, and it increases with the tube radius. When the tube radius is 1.00~6.00 mm with single-tube arrangement, the maximum saturation radius is 2.60, 3.30, 3.50, 3.70, 3.80 and 3.90 mm, respectively. The volume fraction of heat exchange tubes with radius of 1.00, 2.00 and 3.00 mm is relatively small, which is 7.72%, 14.24% and 21.30%. The optimal bed thickness between tubes is 4.86, 6.09 and 6.38 mm when arranging the above three types of tubes in a tube bundle. Moreover, adding heat exchange tube bundles can effectively improve the hydrogen storage performance of reaction dead zone in the reactor. In the reactor equipped with heat exchange tube bundles with radius of 2.00 mm, adding 12 heat exchange tubes with radius of 2.00 mm in the reaction deadzone can reduce the hydrogen storage time to 267 s (by 40.00%), while the volume fraction of tube bundle only increases by 1.92%, and the hydrogen storage capacity just decreases by 2.17%. The research findings can establish a fundamental basis for the optimal design of solid-state hydrogen storage reactors and offer valuable guidance for subsequent engineering applications.

Key words: solid state hydrogen storage; heat exchange tube bundles; hydrogen storage performance; saturation radius; numerical simulation

氢能作为兼具高能量密度和零排放的理想能源和储能介质备受瞩目^[1]。氢气作为已知密度最小的气体, 储存是一个极具挑战的问题。而固态储氢具有储氢压力低、体积密度高、安全性好等优点, 特别是金属氢化物固态储氢有望成为未来储氢技术的主流发展方向^[2-3]。但金属氢化物存在导热系数低、储氢过程热效应强的缺点^[4-5], 导致难以充分吸附氢气。因此, 设计高效的传热结构, 强化储氢反应器内热质传递性能是提高其储氢性能的关键^[6]。

换热管结构简单、制造容易, 是最具可行性、应用最广泛的传热强化措施。前人针对换热管束储氢反应器开展了大量研究。Meng 等人^[7]在保持换热管体积不变的情况下, 研究了不同数量微通道换热管对储氢速率的影响, 结果表明换热管数越多, 换热面积越大, 管间床层厚度越小, 储氢性能越强。Liu 等人^[8]通过二维储氢反应器模型, 研究了换热管在储氢反应器内的位置对储氢性能的影响, 结果表明存在使储氢性能达到最佳的换热管束分布。Raju 等人^[9]将换热管以层叠的形式分布在储氢反应器内, 推导出了每一叠管的径向位置和管数以优化储氢性能。Mohan 等人^[10]通过改变反应器内换热管间距, 研究了换热管间床层厚度对储氢速率的影响, 结果表明床层厚度是控制床层内所有位置储氢速率的主要参数。

然而, 由于换热结构与储氢反应器几何结构的不匹配, 存在储氢速率较慢的反应死区。针对反应死区, Bai 等人^[11]研究并优化了含矩形换热通道的储氢反应器, 通过增设环形翅片, 使储氢时间减少了 70.96%, 有效减轻了换热通道之间反应死区对储氢性能的影响。Wang 等人^[12]提出了圆盘式微通道储氢反应器, 通过优化换热流体层和金属氢化物层的几何尺寸, 防止反应死区的产生。Feng 等人^[13]

针对金属氢化物储热反应器内螺旋换热管的几何尺寸进行了优化研究, 并通过切除反应死区的方法改进反应器几何形状, 使单位质量有用能输出速率提升了 54.30%。

可见, 前人主要研究了特定几何结构的储氢反应器内换热管束的优化布置, 部分学者研究了换热管间的床层厚度对储氢过程的影响, 但研究结果普遍受反应器几何形状限制, 且未考虑最大饱和半径的影响, 也较少涉及通过换热管束优化布置改善反应死区内热质传递过程的研究, 限制了反应器的储氢性能的进一步提高。

基于此, 本文建立了二维数值计算模型, 研究了床层厚度与换热管径对饱和半径的影响规律, 并结合最大饱和半径开展了固态储氢反应器中换热管束的优化布置研究, 以减少反应死区, 提高储氢性能, 为金属氢化物固态储氢性能的优化研究奠定基础, 并为反应器的优化设计提供指导。

1 储氢反应器物理模型

本文储氢反应器结构示意图如图 1a)所示。换热管位于反应器轴线, 反应器壁面绝热; 由多个单管反应器模型组合为换热管束储氢反应器, 并于边缘增设半径 1.0 mm 换热管束, 其结构示意图分别如图 1b)和图 1d)所示, 二维截面如图 1c)和图 1e)所示。



a) 单管反应

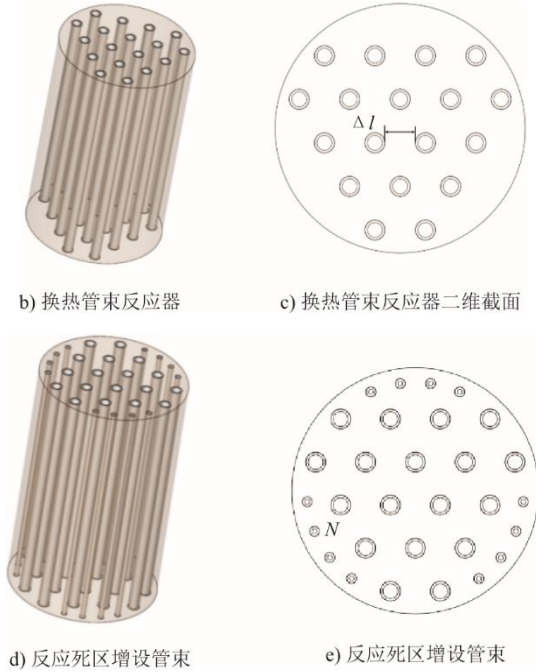


图 1 储氢反应器结构示意图

Fig.1 Structural diagram of hydrogen storage reactor

氢气由顶端流入储氢反应器并渗入床层中，储氢反应产热仅经固态储氢材料传导并通过换热管传至换热流体。反应器各径向截面传热特性相同，所以取某一径向截面作为研究对象。

图 1 中： L 为床层径向厚度，mm，即换热管壁到反应器内壁的径向距离； R 为储氢反应器内径，mm； r 为换热管半径； Δl 为相邻换热管间的床层厚度，mm； N 为反应死区内增设换热管数。取换热管壁厚 $d=0.5$ mm，储氢压力 $p=800\ 000$ Pa，换热流体温度 $T_f=293.15$ K，对流换热系数 $h=2\ 000$ W/(m²·K)^[14-15]。

2 储氢反应器数学模型

由于金属氢化物床层中热质传递复杂，为简化计算，做出如下假设^[3,16-17]：1) 金属氢化物均匀分布，且各向同性；2) 金属氢化物的热物性不受温度、压力等因素的影响；3) 氢气视为理想气体；4) 氢气与金属氢化物处于局部热平衡；5) 忽略床层中的对流和辐射传热；6) 忽略储氢过程中金属氢化物的膨胀；7) 忽略氢气在金属氢化物床内的压力梯度。本研究采用 LaNi₅ 作为储氢材料，铝作为换热管材料，相应的热物性参数见表 1^[14,18-19]。

2.1 控制方程

本文采用多孔介质模型描述储氢反应器中的金属氢化物床层。多孔介质中，氢气的连续性方程为^[15]：

表 1 LaNi₅、H₂ 和铝的主要参数
Tab.1 Main parameters of LaNi₅, H₂ and Al

参数	LaNi ₅	H ₂	铝
初始密度 $\rho_{\text{emp}}/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	7 164	0.089	2 719
饱和密度 $\rho_{\text{s,sat}}/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	7 259		
比热容 $c_p/(\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1})$	419	14 890	871
导热系数 $\lambda/(\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1})$	2.400 0	0.167 2	202.400 0
孔隙率 ε	0.5		
活化能 $E_a/(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1})$	21 170		
Van't Hoff 常数 A	12.99		
Van't Hoff 常数 B/K	3 704.59		
相对分子质量 $M/(\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1})$	0.432	0.002	0.027
渗流率 K/m^2	10 ⁻⁸		
储氢速率常数 C_a/s^{-1}	59.187		
反应焓变 $\Delta H/(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1})$	31 000		
气体常数 $R/(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$		8.314	
动力黏度 $\mu_g/(\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$		8.41×10 ⁻⁶	

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}) = \dot{m} \quad (1)$$

$$\rho_g = \frac{p_g M_g}{RT} \quad (2)$$

式中： ε 为金属氢化物床层的孔隙率； ρ_g 为通过理想气体状态方程得到的氢气密度，kg/m³； \vec{u} 为氢气在床层内的流动速度，m/s； p_g 为储氢罐内氢气的实际压力，Pa； M_g 为氢气的相对分子质量，kg/mol。多孔介质中金属氢化物的连续性方程为^[20]：

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial \rho_s}{\partial t} = -\dot{m} \quad (3)$$

式中： ρ_s 为金属氢化物在反应过程中的实际密度，kg/m³； \dot{m} 为单位体积内的氢气质量变化速率，kg/(m³·s)；LaNi₅的化学反应动力学方程为^[21]：

$$\dot{m} = -C_a \ln \left(\frac{p_g}{p_{\text{eq}}} \right) \exp \left(\frac{-E_a}{RT} \right) (\rho_{\text{s,sat}} - \rho_s) \quad (4)$$

式中： C_a 为储氢速率常数，s⁻¹； p_{eq} 为储氢过程中，储氢反应器内部的热力学平衡压，MPa，由范特霍夫关系得到^[22]：

$$\ln(p_{\text{eq}}) = A - \frac{B}{T} \quad (5)$$

式中： A 和 B 为金属氢化物材料所对应的范特霍夫常数； T 为金属氢化物床层温度，K。

氢气在床层中的流动速度由达西定律获得^[23]：

$$\vec{u} = -\frac{K}{\mu_g} \nabla p_g \quad (6)$$

式中： K 为金属氢化物多孔介质床层的水力渗流率，m²。

采用局部热平衡模型 (LTE) 描述床层中的热量传递。床层的能量方程为^[24]:

$$(\rho c_p)_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho c_p)_g \vec{u} \cdot \nabla T = \lambda_{\text{eff}} \nabla^2 T + \dot{m} \left(\frac{\Delta H}{M_g} + T(c_{p,g} - c_{p,s}) \right) \quad (7)$$

$$(\rho c_p)_{\text{eff}} = \varepsilon (\rho c_p)_g + (1 - \varepsilon) (\rho c_p)_s \quad (8)$$

$$\lambda_{\text{eff}} = \varepsilon \lambda_g + (1 - \varepsilon) \lambda_s \quad (9)$$

式中: ΔH 为储氢反应的反应热, J/mol; $(\rho c_p)_{\text{eff}}$ 为床层的有效热容, J/(m³·K); λ_{eff} 为床层热有效导热系数, W/(m·K); $(\rho c_p)_g$ 为氢气的热容, J/(m³·K); $(\rho c_p)_s$ 为金属氢化物的热容, J/(m³·K); λ_g 为氢气的导热系数, W/(m·K); λ_s 为金属氢化物的导热系数, W/(m·K)。

铝制换热管壁内的能量方程为^[25]:

$$(\rho c_p)_{\text{Al}} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{\text{Al}} \nabla^2 T \quad (10)$$

式中: $(\rho c_p)_{\text{Al}}$ 为铝的热容, J/(m³·K); λ_{Al} 为铝的导热系数, W/(m·K)。

2.2 初始和边界条件

初始温度、氢气压力、金属氢化物的密度在整个床层中是均匀且相同的定值:

$$p_g = p_0, T = T_0, \rho_s = \rho_0 \quad (11)$$

储氢反应器壁面和上下端面设为绝热且与外界无质量交换:

$$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0, \frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (12)$$

换热管内外壁的边界条件为:

$$\frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0, -\lambda \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h(T_r - T) \quad (13)$$

2.3 性能指标

定义单位体积内氢气吸收质量与总氢气吸收质量之比为反应分率 (X), 表示储氢反应的瞬态反应速率^[17]。

$$X = \frac{\rho_s - \rho_{\text{emp}}}{\rho_{s,\text{sat}} - \rho_{\text{emp}}} \quad (14)$$

式中: ρ_s 为金属氢化物在反应过程中的实际密度, kg/m³; ρ_{emp} 为金属氢化物的初始密度, kg/m³; $\rho_{s,\text{sat}}$ 为金属氢化物的饱和密度, kg/m³。

2.4 模型验证

取反应器内任意径向截面为研究对象。数值模拟的计算区域包括金属氢化物床层和换热管壁, 使用 ICEM 生成四边形结构化网格, 选取 1/4 模型进

行网格划分 (图 2)。进行网格无关性验证, 结果如图 3 所示。图 3 纵坐标为床层平均反应分率达到 0.9 时所需的时间 (简称储氢时间 τ , s), 当网格单元数从 13 350 增至 45 254 时, 储氢时间的相对误差小于 0.1%, 因此研究中选取 13 350 个网格进行模拟。

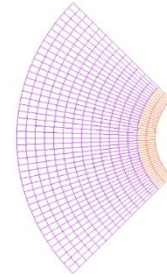


图 2 网格划分
Fig.2 Mesh generation

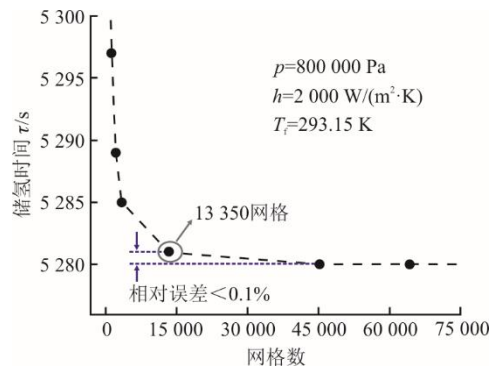


图 3 网格独立性验证
Fig.3 Grid independence validation

研究过程采用 Ansys Fluent 21R1 软件平台进行数值模拟, 为保证模拟结果的准确性, 需要对本文选取的数值计算模型进行验证。

Jemni 等人^[21]将填充 422 g LaNi₅ 的储氢反应器置于恒温水浴中冷却, 冷却水与壁面间对流换热系数为 1 652 W/(m²·K), 并在储氢压力为 800 000 Pa 时通过实验研究了反应器的储氢性能, 监测了内部特定位置的温度变化。该实验数据与本文数值计算结果的对比如图 4 所示。由图 4 可见: 换热流体温度为 293 K 时, 实验数据与本文数值温度最大偏差小于 1.5%; 313 K 时, 温度最大偏差小于 1%。可以认为本文数学模型能够准确预测储氢过程中储氢反应器内部温度变化的特征与趋势。

3 模拟结果与讨论

本文换热管壁面到反应分率为 0.9 的区域的径向距离为饱和半径 L_0 ^[8]。图 5 为不同时间下反应分率随径向距离的变化曲线。

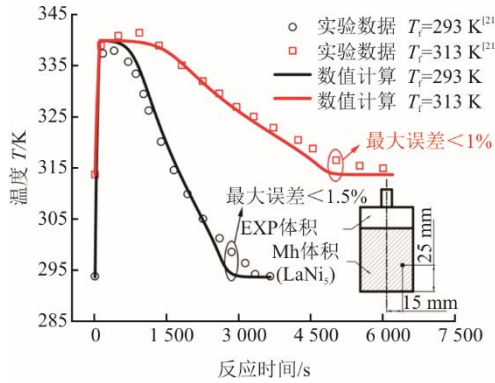


图4 储氢过程实验与模拟数据对比

Fig.4 Comparison between the experimental and simulated data of hydrogen storage process

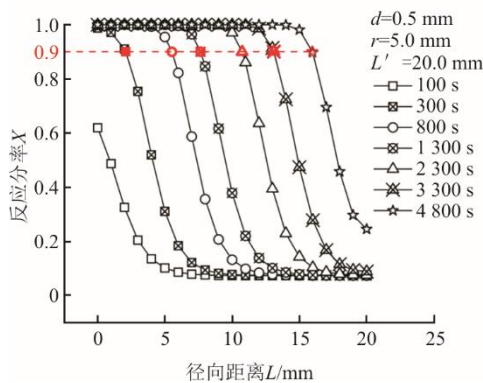


图5 不同时间下反应分率随径向距离的变化曲线

Fig.5 Variation curves of reaction fraction with radial distance at different times

由图5可见，不同时间下曲线变化趋势基本一致，到换热管壁的径向距离越近，金属氢化物床层反应分率越高，而远离换热面的床层反应分率较低，中间存在较狭窄的反应分率变化层。随反应时间增加，该变化层的径向距离逐渐增加，由换热管壁面向绝热壁面移动。因此，饱和半径与反应时间密切相关，二者关系见表2。本文基于反应时间300 s时的饱和半径，探索单根换热管模型的饱和半径变化特点，并据此获得较优的换热管间床层厚度^[26]。

表2 不同反应时间的饱和半径

Tab.2 Saturation radius for different reaction times

反应时间/s	300	800	1300	2300	3300	4800
饱和半径/mm	2.09	5.53	7.66	10.75	13.10	15.97

3.1 单根换热管饱和半径变化规律

增加金属氢化物床层厚度，会削弱床层与换热流体间的热交换，使饱和半径减小，因此，本文取半径5.0 mm 换热管，研究床层厚度为3.8~20.0 mm 时饱和半径的变化规律。饱和半径随床层厚度的变

化曲线如图6所示。

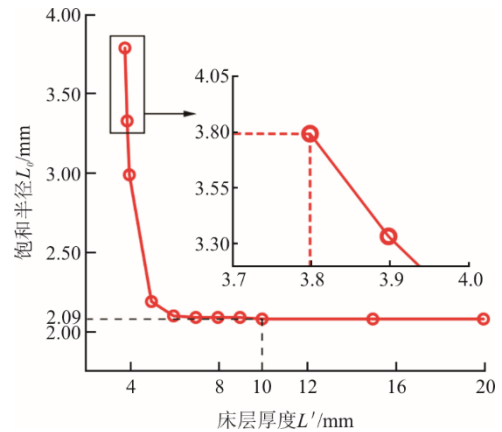


图6 饱和半径随床层厚度的变化曲线

Fig.6 Variation curve of saturation radius with bed thickness

由图6可见，随床层厚度的增加，饱和半径先迅速减小后保持不变，存在单管对应的最佳床层厚度，即最大饱和半径。床层厚度小于3.80 mm 时，金属氢化物床层反应分率均高于0.9，不存在饱和半径；床层厚度为3.80 mm 时，反应器壁面处反应分率为0.9，床层厚度等于饱和半径；床层厚度从3.80 mm 升至20.00 mm 时，饱和半径先迅速下降至2.09 mm，后保持不变。这是由于床层厚度增加时，金属氢化物总量迅速增加，反应产热和导热距离增加，使床层温度升高，反应分率下降，饱和半径迅速减小。

换热管径增大使换热面积增加，换热能力增强，但相同厚度床层所含金属氢化物量和储氢反应热显著增加。因此，本文取半径1~6 mm 的换热管，分别研究管径对饱和半径的影响。图7为不同换热管径下饱和半径随床层厚度的变化曲线。

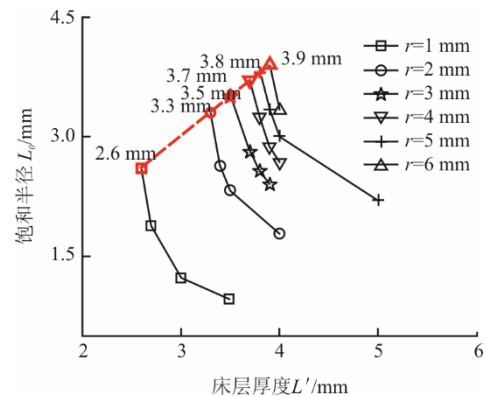


图7 不同换热管径下饱和半径随床层厚度的变化曲线

Fig.7 Variations of saturation radius with bed thickness with different heat exchange pipe radius

由图 7 可知,对于不同管径换热管,其饱和半径均随床层厚度增加而减小,且均存在最大饱和半径。最大饱和半径随管径增加而增大,且增加量逐渐减少。换热管径为 1~6 mm 时,对应的最大饱和半径分别为 2.6、3.3、3.5、3.7、3.8、3.9 mm;对应的换热管体积分数分别为 7.72%、14.24%、21.30%、26.99%、32.28%和 36.73%。当换热管径为 1、2、3 mm 时,体积分数较小,因此取半径为 1、2、3 mm 的换热管开展后续研究。

3.2 基于单管最大饱和半径的换热管束优化研究

3.2.1 换热管束局部优化几何模型

本文换热管束呈等边三角形分布,取最大饱和半径范围内金属氢化物区域为控制区域。图 8a)为相邻换热管控制区域边界分别相切时的换热管束分布,图中控制区域为虚线圆与换热管壁所围环形区域,环宽即为换热管的最大饱和半径。此时,换热管间床层厚度为 2 倍最大饱和半径。

3 个换热管圆心连线为等边三角形,该三角形中心处存在控制区域外的金属氢化物,即图 8a)中 3 条蓝色弧线所围区域。为减弱该区域对储氢性能的影响,确定较优的换热管间床层厚度,将三角形区域划分为中心对称的 3 个特征单元,几何形状如图 8b)所示。其中,Group a 为换热管控制区域边界相切的换热管分布;Group b 为特征单元面积与控制区域相等的换热管分布。

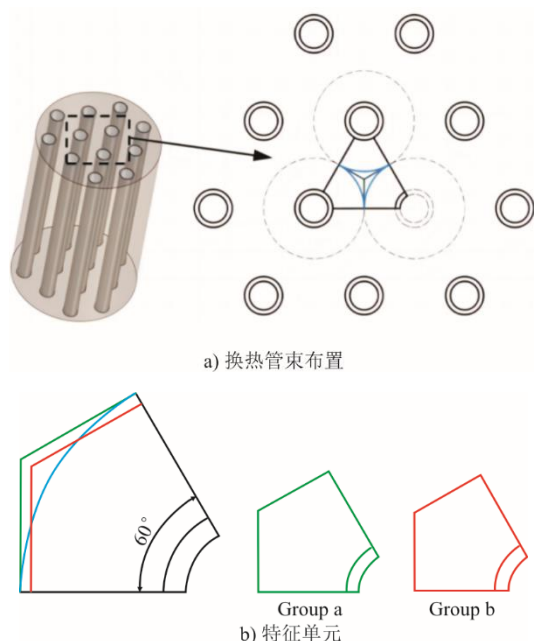


图 8 换热管束布置方案
Fig.8 Arrangement schemes of heat exchange tube bundles

Group a 面积大于 Group b,因此 Group a 具有较大的床层厚度,使得饱和半径较小。为减少管间金属氢化物反应热对饱和半径的影响,缩短相邻换热管间距,使换热管对应的特征单元与控制区域面积相同,即 Group b。不同换热管半径的换热管间床层厚度 Δl 见表 3。

表 3 Group a 和 Group b 不同管径的换热管间床层厚度
单位: mm

Tab.3 Bed thickness between heat exchange tubes with different pipe diameters in Group a and Group b

项目	数值		
换热管径 r	1	2	3
管间床层厚度 Group a Δl	5.20	6.60	7.00
管间床层厚度 Group b Δl	4.86	6.09	6.38

3.2.2 换热管束局部优化

本节基于特征单元研究了换热管束间较优的布置方案。不同换热管布置下储氢时间和床层最低反应分率随管径的变化曲线如图 9 所示。换热管半径为 1、2、3 mm,在 300 s 时,Group a 的最低反应分率分别为 0.850 4、0.822 9 和 0.818 5,而 Group b 的最低反应分率分别升至 0.898 8、0.891 3 和 0.896 5,与 0.9 相差小于 1%,换热管对金属氢化物的冷却效果与单管反应器的研究结果相近。Group a 的储氢时间为 299、295、289 s; Group b 的储氢时间为 278、271、262 s,比 Group a 储氢时间分别减少了 7.02%、8.14%和 9.34%。因此,采用 Group b 换热管束布置可获得较优的管间床层厚度。

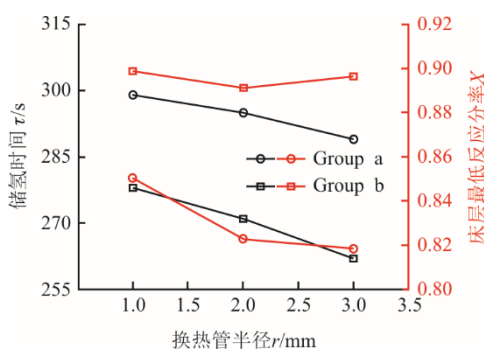


图 9 不同换热管布置下储氢时间和床层最低反应分率随管径的变化曲线

Fig.9 Variations of hydrogen storage time and bed minimum reaction fraction with tube diameter under different heat exchange tube arrangements

3.2.3 换热管束反应器优化效果

为验证换热管束局部优化获得的管间床层厚度,本文基于半径 25 mm 的换热管束储氢反应器研

究了管间床层厚度对反应器内温度和反应分率分布的影响。Group a 方案布置的换热管束反应器分别为 Case 1、Case 2、Case 3；Group b 方案布置的换热管束反应器分别为 Case 4、Case 5、Case 6，对应的换热管径和管间床层厚度见表 4。

表 4 不同管径的换热管束储氢反应器 单位: mm
Tab.4 Hydrogen storage reactor with different tube radius

项目	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6
换热管径 r	1	2	3	1	2	3
管间床层厚度 Δl	5.20	6.60	7.00	4.86	6.09	6.38

300 s 时不同管径换热管 Group a 方案布置的温度和反应分率分布云图如图 10 所示。由图 10 可见，换热管间大部分区域温度处于 311.4~316.0 K，反应分率处于 0.8~0.9，其中截面中心处温度为 315.2、315.8、314.6 K，对应位置反应分率为 0.849 4、0.822 9 和 0.824 5，相较局部优化模拟结果，变化小于 0.7%。

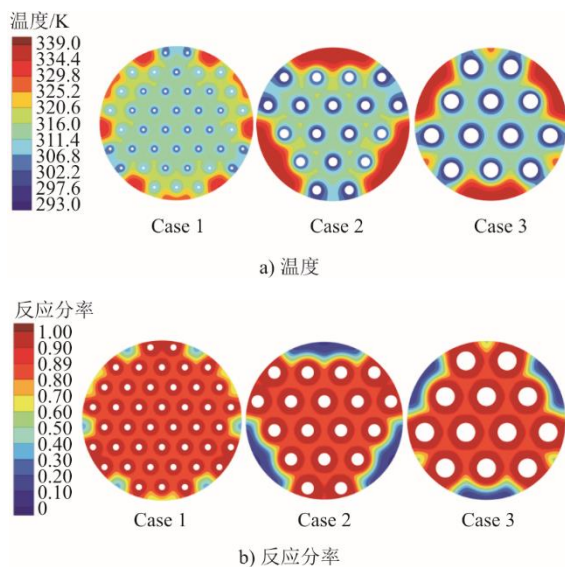


图 10 300 s 时不同管径换热管 Group a 方案布置的温度和反应分率分布

Fig.10 Cloud diagram of temperature and reaction fraction distribution in Group a with different tube radii at 300 s

减小相邻换热管间的床层厚度，增强了对控制区域外反应热的冷却能力。图 11 为 300 s 时不同管径换热管 Group b 方案布置的温度和反应分率分布。管间主要温度区间降至 306.8~311.4 K，而管间区域反应分率均升至 0.89 以上，其中，中心处温度降至 308.7、308.0、306.4 K，对应位置反应分率升至 0.894 8、0.890 8 和 0.896 0，与局部优化模拟结果差异小于 0.1%。因此，Group b 方案可明显提高换热管束间反应分率，降低床层温度，有效发挥换

热管的冷却能力，换热管半径为 1、2、3 mm 时较优的管间床层厚度见表 4。

然而，由于储氢反应器的圆柱形几何形状和换热管束的等边三角形分布，反应器内边缘区域存在较大的反应死区。300 s 时，死区内最高温度仍处于储氢压力下的平衡温度，约 339.15 K；反应分率仍维持较低水平，小于 0.2（图 11）。

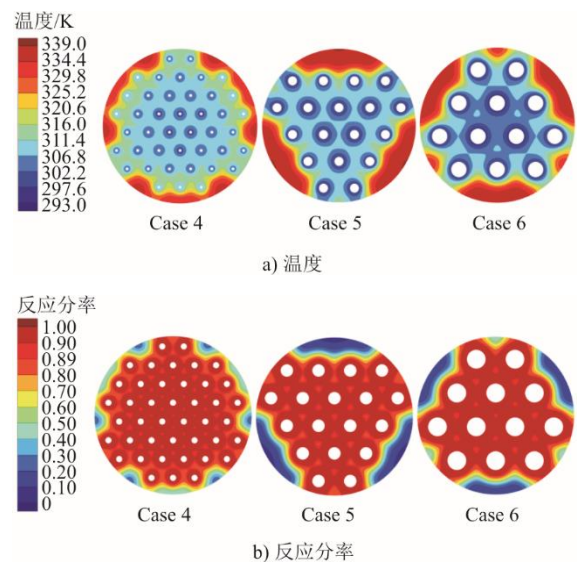


图 11 300 s 时不同管径换热管 Group b 方案布置的温度和反应分率分布

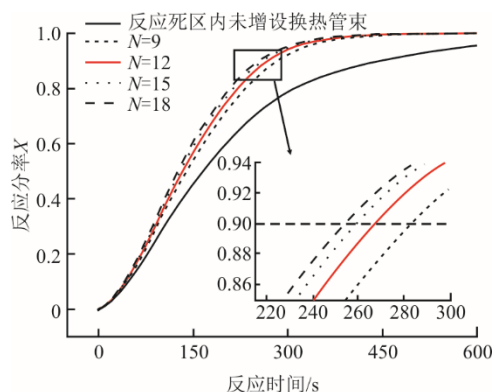
Fig.11 Cloud diagram of temperature and reaction fraction distribution in Group b with different tube radii at 300 s

相较 Case 1、Case 2、Case 3，Case 4、Case 5、Case 6 的管间床层厚度分别减少了 0.34、0.51、0.62 mm。这表明换热管径越小，控制区域外金属氢化物对储氢速率的影响越小，在换热管束储氢反应器内，应选用较小管径的换热管紧凑布置。然而，Case 4、Case 5、Case 6 中换热管数量分别为 42、18、12 根，Case 4 换热管数量远多于 Case 5 和 Case 6。因此，本文选用 Case 5 换热管束反应器进行反应死区优化研究。

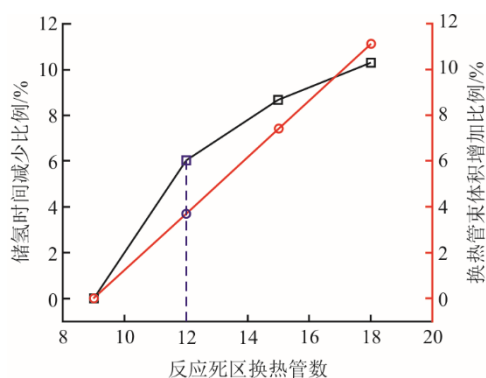
3.3 换热管束反应器的优化设计

为削弱反应死区对储氢性能的影响，本文研究了在 Case 5 反应死区内增设均匀分布半径为 1 mm 的换热管束对储氢性能的影响。储氢性能随反应死区增设换热管数的变化曲线如图 12 所示。由图 12 可见：未增设换热管束时，储氢时间为 445 s；增设换热管数 N 为 9、12、15、18 时，储氢时间分别为 283、267、259、254 s。这 5 种情况下，储氢反应器内金属氢化物体积分数分别为 88.48%、87.04%、86.56%、86.08%、85.60%，变化小于 2.90 百分点，

储氢量仅减少 3.26%。因此,在反应死区内增设换热管束可明显增强反应器储氢性能,且对储氢量的影响较小。当管数大于 12 时,增设换热管束对储氢性能的优化效果相对较弱。



a) 增设不同换热管数时反应分率随时间的变化曲线



b) 储氢时间和管束体积变化比值随增设管数的变化曲线

图 12 储氢性能随反应死区增设换热管数的变化
Fig.12 Variations of hydrogen storage performance with the number of tubes added in reaction dead zone

由图 12b)可见:当增设 9 根换热管束,体积增加比例随管数增加线性增大,而储氢时间减少比例随管数增加而逐渐增大,且曲线趋于平缓;当增设 12 根换热管时,储氢时间减少了 6.03%,而管束体积仅增加了 3.70%,储氢时间减少比例与换热管束体积增大比例的差值最大。因此,在反应死区内增设 12 根换热管时,储氢性能最好,相较未增设管束,储氢时间减少了 40.00%,储氢量仅减少了 2.17%,金属氢化物在反应器内的体积分数为 86.56%,仅减少了 1.92 个百分点,换热管束的体积分数为 13.44%,仅增加了 1.92%。

4 结 论

基于储氢反应器二维数值模型,本文研究了不同管径换热管对应的最大饱和半径,优化了换热管束的布置,确定了换热管束相邻管间的较优床层厚

度和反应死区内增设的最优换热管数量。

1) 针对单换热管模型,增加床层厚度,饱和半径急剧下降后趋于平缓。床层厚度对饱和半径影响显著,存在最大饱和半径,即为单管对应的最佳床层厚度。随换热管径增大,最大饱和半径逐渐增大,分别为 2.6 mm ($r=1$ mm)、3.3 mm ($r=2$ mm)、3.5 mm ($r=3$ mm)、3.7 mm ($r=4$ mm)、3.8 mm ($r=5$ mm) 和 3.9 mm ($r=6$ mm)。

2) 通过改变换热管束管间距,当换热管对应的特征单元与控制区域面积相等时,获得了不同换热管径所对应的较优的管间床层厚度,分别为 4.86 mm ($r=1$ mm)、6.09 mm ($r=2$ mm) 和 6.38 mm ($r=3$ mm)。

3) 在反应器边缘反应死区内增设换热管束,可有效提高反应器的储氢性能。增设 12 根半径 1 mm 换热管,对反应器储氢性能强化效果最好,相较未增设管束,储氢时间由 445 s 降至 267 s,减少了 40.00%,而换热管束体积分数仅增加了 1.92%,储氢量仅减少了 2.17%。

[参 考 文 献]

- [1] WANG D, WANG Y, HUANG Z, et al. Design optimization and sensitivity analysis of the radiation mini-channel metal hydride reactor [J]. Energy, 2019, 173: 443-456.
- [2] 王兴国. 金属氢化物吸/放氢过程及储氢容器性能模拟研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2021: 1.
WANG Xingguo. Simulation research on the process of metal hydride absorption/desorption and the performance of hydrogen storage container[J]. Dalian: Dalian University of Technology, 2021: 1.
- [3] CHANDRA S, SHARMA P, MUTHUKUMAR P, et al. Modeling and numerical simulation of a 5 kg LaNi₅-based hydrogen storage reactor with internal conical fins[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45(15): 8794-8809.
- [4] NGUYEN H, SHABANI B. Review of metal hydride hydrogen storage thermal management for use in the fuel cell systems[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(62): 31699-31726.
- [5] KRISHNA K, PANDEY V, MAIYA M, et al. Bio-inspired leaf-vein type fins for performance enhancement of metal hydride reactors[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(56): 23694-23709.
- [6] GARRISON S, HARDY B, GORBOUNOV M, et al. Optimization of internal heat exchangers for hydrogen storage tanks utilizing metal hydrides[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2012, 37(3): 2850-2861.
- [7] MENG X, WU Z, BAO Z, et al. Performance simulation and experimental confirmation of a mini-channel metal hydrides reactor[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013, 38(35): 15242-15253.
- [8] LIU Y, WANG H, PRASAD A, et al. Role of heat pipes in improving the hydrogen charging rate in a metal hydride storage tank[J]. International Journal of

- Hydrogen Energy, 2014, 39(20): 10552-10563.
- [9] RAJU N, MUTHUKUMAR P, SELVAN P, et al. Design methodology and thermal modelling of industrial scale reactor for solid state hydrogen storage[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, 44(36): 20278-20292.
- [10] MOHAN G, PRAKASHMAIYA M, SRINIVASA-MURTHY S, et al. Performance simulation of metal hydride hydrogen storage device with embedded filters and heat exchanger tubes[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2007, 32(18): 4978-4987.
- [11] BAI X, YANG W, TANG X, et al. Hydrogen absorption performance investigation of a cylindrical MH reactor with rectangle heat exchange channels[J]. Energy, 2021, 232: 121101.
- [12] WANG D, WANG Y, WANG F, et al. Optimal design of disc mini-channel metal hydride reactor with high hydrogen storage efficiency[J]. Applied Energy, 2022, 308: 118389.
- [13] FENG P, LIU Y, AYUB I, et al. Optimal design methodology of metal hydride reactors for thermochemical heat storage[J]. Energy Conversion and Management, 2018, 174: 239-247.
- [14] JEMNI A, NASRALLAH S, LAMLOUMI J, et al. Experimental and theoretical study of a metal-hydrogen reactor[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 1999, 24(7): 631-644.
- [15] BAI X, YANG W, YANG Y, et al. Multi-variable optimization of metal hydride hydrogen storage reactor with gradient porosity metal foam and evaluation of comprehensive performance[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(83): 35340-35351.
- [16] MOU X, BAO Z, HUANG W, et al. Performance investigation of metal hydride reactor equipped with helically coiled heat exchanger during hydrogen absorption and desorption[J]. Thermal Science and Engineering Progress, 2023, 38: 101656.
- [17] NASRALLAH S, JEMNI A. Heat and mass transfer models in metal-hydrogen reactor[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 1997, 22(1): 67-76.
- [18] CHUNG C, HO C. Thermal-fluid behavior of the hydrating and dehydrating processes in a metal hydride hydrogen storage canister[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(10): 4351-4364.
- [19] YANG F, MENG X, DENG J, et al. Identifying heat and mass transfer characteristics of metal hydride reactor during adsorption: improved formulation about parameter analysis[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(4): 1852-1861.
- [20] WANG Y, ZHANG H, QI J, et al. Thermodynamic and exergy analysis of a novel PEMFC-ORC-MH combined integrated energy system[J]. Energy Conversion and Management, 2022, 264: 115709.
- [21] JEMNI A, NASRALLAH S. Study of two-dimensional heat and mass transfer during absorption in a metal-hydrogen reactor[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 1995, 20(1): 43-52.
- [22] TONG L, XIAO J, YANG T, et al. Complete and reduced models for metal hydride reactor with coiled-tube heat exchanger[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, 44(30): 15907-15916.
- [23] LI H, WANG Y, HE C, et al. Design and performance simulation of the spiral mini-channel reactor during H₂ absorption[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2015, 40(39): 13490-13505.
- [24] WANG Y, ZHANG H, HE S, et al. Dynamic analysis and control optimization of hydrogen supply for the proton exchange membrane fuel cell and metal hydride coupling system with a hydrogen buffer tank[J]. Energy Conversion and Management, 2023, 291: 117339.
- [25] BAI X, YANG W, TANG X, et al. Optimization of tree-shaped fin structures towards enhanced absorption performance of metal hydride hydrogen storage device: a numerical study[J]. Energy, 2021, 220: 119738.
- [26] VISARIA M, MUDAWAR I, POURPOINT T, et al. Study of heat transfer and kinetics parameters influencing the design of heat exchangers for hydrogen storage in high-pressure metal hydrides[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010, 53(9/10): 2229-2239.

(责任编辑 杨嘉蕾)