

На правах рукописи

Абрамов Алексей Владимирович

**Моделирование тепломассопереноса в металлогидридном реакторе при
поглощении водорода**

Специальность 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва, 2026

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН), в лаборатории водородных энергетических технологий.

Научный руководитель:

Дуников Дмитрий Олегович, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией водородных энергетических технологий Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

1. Кудряров Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, Томский Политехнический Университет, доцент
2. Минко Константин Борисович, кандидат технических наук, НИУ МЭИ, доцент

Ведущая организация:

Федеральный Исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН

Защита состоится «___» _____ 2026 г. в ____ ч. ____ мин. на заседании диссертационного совета 24.1.193.01, созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, по адресу: 125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук: jiht.ru/science/dissert-council/.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные гербовой печатью, просьба направлять по адресу: 125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Автореферат разослан «___» _____ 2026 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета 24.1.193.01: к.ф.-м.н.

Тимофеев А.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность тематики

Водородная энергетика – совокупность технологий производства, транспортировки, аккумулирования и использования универсального вторичного энергоносителя – водорода. Использование переменных возобновляемых источников энергии (солнце, ветер) снижает устойчивость энергосистем из-за их непостоянной природы. Поэтому, энергетика будущего остро нуждается в разработке систем долговременного хранения энергии.

В качестве одного из перспективных способов аккумулирования водорода рассматривается хранение его в твердофазном связанном состоянии в гидридах металлов. Уникальное свойство некоторых интерметаллических сплавов (ИМС) на основе редкоземельных и других металлов, заключается в способности избирательно и обратимо поглощать большие объемы водорода с образованием гидридных фаз при умеренных давлениях [1, 2]. Это позволяет создавать на их основе разнообразные устройства, находящие все более широкое применение в современной и перспективной технике. В их числе не только аккумуляторы водорода для систем топливообеспечения транспортных установок и энергоустановок на базе топливных элементов, но и устройства для очистки и разделения изотопов водорода, тепловые насосы, компрессоры, системы кондиционирования, холодопроизводящие установки и т.д.

Актуальность работы определяется целями Климатической доктрины Российской Федерации. Ее ключевой долгосрочной целью является достижение с учетом национальных интересов и приоритетов социально-экономического развития не позднее 2060 года баланса между антропогенными выбросами парниковых газов и их поглощением.

Обычно водородопоглощающий сплав в системах аккумулирования представляет собой мелкодисперсную засыпку из частиц диаметром порядка 1 мкм. Мелкодисперсная засыпка имеет положительные и отрицательные последствия. К положительным можно отнести увеличение поверхности взаимодействия металла и водорода, что способствует росту скорости реакции. К отрицательным – низкая эффективная теплопроводность (порядка 0.1 – 1 Вт/м К), которая зависит от давления заполняющего газа и концентрации поглощенного водорода частицами металла и низкая газовая проницаемость порядка 10^{-12} м².

В обобщающих обзорах производительность металлогидридных систем характеризуется как фундаментально ограниченная отводом теплоты [4, 5]. Наряду с тепловым возможно и фильтрационное ограничение. Таким образом, существуют тепловое и фильтрационное ограничения производительности металлогидридных реакторов. Для разработки эффективных металлогидридных реакторов необходимо определить, какое из них является преобладающим в зависимости от химических и теплофизических свойств засыпки, условий внешнего теплообмена и геометрии реактора.

Сложившийся способ повышения динамической производительности – введение внутренних теплопроводящих элементов и подбор их конфигурации прямым расчетным

перебором [6–8]. Каждая такая работа отыскивает собственный оптимум для собственной геометрии. В большинстве работ результаты выражены в размерных величинах и относятся к рассмотренной конструкции, материалу и режиму.

Попытки обобщения предпринимаются, но относятся к геометрии теплообменного элемента, а не к режиму работы реактора [4]. Вводятся понятия эффективности ребра и коэффициента оребрения. Такие характеристики не отвечают на вопрос, какой процесс ограничивает скорость в заданной точке параметров, соответственно не позволяют обоснованно выбрать направление для оптимизации конструкции. Между тем эффект от изменения одного и того же параметра существенно зависит от условий для конкретной конфигурации реактора.

Также актуальным вопросом является описание фильтрации. В расчетных моделях проницаемость задается по осредненной пористости, тогда как металлгидридная засыпка деформируется при циклировании [11–13]. Эффективная проницаемость, определенная экспериментально, различается при зарядке и разрядке более чем на порядок [11].

Поэтому необходимо выполнить переход от подбора конфигурации перебором к расчетному определению преобладающего механизма ограничения. Такой подход заменяет расчеты с перебором параметров. В первом приближении определяется положение конструкции на карте режимов, затем выполняются итерации для поиска оптимального набора параметров или конструкции.

Такой переход требует, во-первых, критериального описания, при котором результат формулируется в безразмерных координатах и может быть перенесен на конструкции иного масштаба, и, во-вторых, средств проведения и обработки многопараметрического вычислительного эксперимента. Критериальные зависимости не могут быть получены из отдельных расчетных случаев, так как они требуют серий из десятков расчетов, обработанных по единым правилам. Без них критериальное обобщение остается единичным результатом, а не методом.

Степень разработанности темы

Математическое описание тепломассопереноса в металлгидридной засыпке развито и представлено в литературе [14–16]. Обобщающие обзоры систематизируют способы интенсификации на трех уровнях: модификация засыпки, выбор конструктивной схемы реактора, интенсификация теплообмена со стороны теплоносителя [4, 5].

Нерешенными остаются следующие вопросы:

1. Критериальное описание для металлгидридных реакторов отсутствует, так как в большинстве работ результаты опубликованы в размерном виде [6–8].
2. Отсутствует расчетный признак, по которому в заданной точке параметров устанавливается преобладающий механизм ограничения – внешний теплообмен, внутренний теплоперенос в засыпке или фильтрационный подвод водорода.

3. Не построена замыкающая зависимость проницаемости, учитывающая состояние слоя после предшествующего сорбционного процесса, при этом проницаемость засыпки при зарядке и разрядке, по экспериментальным данным, может различаться более чем на порядок [11]. Зависимость только от осредненной пористости не учитывает деформацию слоя и состояние путей фильтрации после предшествующего сорбционного процесса.

4. Ручная подготовка вариантов и обработка результатов, применяемые в рассмотренных работах, ограничивают объем таких серий [24].

Цель и задачи исследования

Цель работы – обосновать, разработать и реализовать расчетный метод, позволяющий определить преобладающий механизм ограничения тепломассопереноса при поглощении и выделении водорода в металлгидридных реакторах. Провести многопараметрические вычислительные расчеты и на основе критериального обобщения результатов выбрать направление интенсификации процессов тепломассопереноса в металлгидридных устройствах.

Задачи работы:

1. Разработать и верифицировать математическую модель тепломассопереноса в металлгидридном реакторе при поглощении и выделении водорода, учитывающую изменение плотности, пористости и проницаемости засыпки при наводороживании, и установить основные закономерности процесса абсорбции водорода.

2. Разработать метод автоматизированного многопараметрического вычислительного эксперимента и обработки массивов расчетных данных, обеспечивающий построение критериальных карт режимов.

3. Установить расчетные признаки лимитирующих факторов, определяющих преобладающий механизм переноса тепла и массы в металлгидридной засыпке, основе критериального анализа и подтвердить их результатами расчетов.

4. Исследовать возможность интенсификации тепломассопереноса за счет модификации геометрии реактора и использования внутренних теплопроводящих элементов в виде ребер и трубчатых элементов на динамические характеристики металлгидридных реакторов.

5. Исследовать влияние изменения структуры металлгидридной засыпки при циклическом наводороживании на процесс фильтрации водорода через засыпку.

Научная новизна работы

1. Установлена и описана стадийность процесса абсорбции, которая включает в себя начальный приближенно адиабатический участок, докритический рост давления, кризис тепломассопереноса и закритическую стадию. В математической модели тепломассопереноса в металлгидридном реакторе учитываются зависимости плотности твердой фазы, пористости и проницаемости слоя засыпки от степени наводороживания.

2. Впервые разработан и апробирован метод автоматизированного многопараметрического вычислительного эксперимента, включающий программно управляемое построение серий расчетов при согласованном изменении геометрических, теплофизических и режимных параметров, приведение расчетных зависимостей к единому формату, структурирование результатов в общую расчетную базу и формирование производных метрик, по которым строятся критериальные карты режимов. Метод обеспечил построение карты динамической производительности в координатах числа Био, а также карт в координатах числа Био и числа внутренних теплопроводящих элементов по сериям с пластинчатыми ребрами и трубчатыми элементами.

3. Разработан подход определения преобладающего механизма ограничения производительности металлгидридного реактора – теплового или фильтрационного – на основе комплексного применения безразмерных критериев, а именно чисел Био и Стефана, в результате разработан критерий, сопоставляющий предельные возможности фильтрационного и теплового режимов.

4. Установлены закономерности влияния геометрии реактора и внутренних теплопроводящих элементов на динамическую производительность при неизменной массе металлгидридной засыпки с помощью безразмерных критериев.

5. Впервые предложено описание проницаемости металлгидридной засыпки с помощью двухчленной зависимости от степени наводораживания. Учтено влияние дополнительных путей фильтрации, образующихся при релаксации слоя после десорбции и перекрываемых расширяющимися частицами при абсорбции. Подтверждено согласование предлагаемой расчетной модели двойной проницаемости с опубликованными данными прямого экспериментального наблюдения структуры засыпки сплава АВ5.

Теоретическая и практическая ценность работы

Теоретическая значимость. Установлено и продемонстрировано, что динамика зарядки металлгидридного реактора определяется не отдельными теплофизическими свойствами засыпки или параметрами конструкции, а соотношением тепловых и фильтрационных ограничений, определяемых с помощью безразмерных критериев. Развито замыкающее описание фильтрации в металлгидридной засыпке, учитывающее зависимость проницаемости от предшествующего сорбционного процесса.

Практическая значимость.

1. Установлена последовательность расчетного выбора конфигурации металлгидридного реактора – определение положения конструкции с учетом геометрии и теплофизических свойств на карте режимов, определение преобладающего механизма ограничения, определение направления интенсификации и лишь затем выбор способов оптимизации. Такой подход позволяет отказаться от перебора конкретных конструктивных вариантов на ранней стадии проектирования.

2. Карты режимов построены в безразмерных координатах и в пределах указанных в работе границ применимости переносятся на реакторы иного масштаба без проведения новых расчетов.

3. Карты режимов применимы при проектировании систем хранения и очистки водорода, термосорбционных компрессоров, буферных накопителей и систем сопряжения с топливными элементами.

4. Метод автоматизированного вычислительного эксперимента реализован программно. Программная реализация зарегистрирована как программы для ЭВМ (свидетельства о государственной регистрации № 2025689987 от 01.11.2025 и № 2025688277 от 17.10.2025) и применена при выполнении расчетных исследований глав 3 и 4. За пределами области применимости построенных карт метод позволяет получить карту режимов заново – для другого сплава, иной геометрии или процесса десорбции.

Положения, выносимые на защиту

1. С помощью математического моделирования установлена стадийность процесса абсорбции водорода в металлгидридном реакторе, описанного с учетом зависимости плотности, пористости и проницаемости засыпки от степени наводораживания.

2. Разработан метод автоматизированного многопараметрического вычислительного эксперимента и критериального обобщения его результатов, обеспечивший построение карт режимов работы металлгидридного реактора в безразмерных координатах и делающий такое построение воспроизводимым для объектов, выходящих за границы применимости полученных карт.

3. Разработан подход определения преобладающего механизма ограничения тепломассопереноса, основанный на совместном использовании числа Био и числа Стефана, выведен параметр соотношения предельных возможностей фильтрационного и теплового режимов работы металлгидридного реактора.

4. Результаты исследований, определяющих влияние геометрии реактора и внутренних теплопроводящих элементов на динамическую производительность металлгидридного реактора с помощью введения характерной длины теплопереноса как объединяющей координаты.

5. Предложена и верифицирована на экспериментальных данных для металлгидридного реактора проточного типа двухчленная замыкающая зависимость проницаемости металлгидридной засыпки от степени наводораживания.

Методология и методы исследования

Использованы методы механики гетерогенной среды в приближении взаимопроникающих континуумов [17]: законы сохранения массы, импульса и энергии, уравнение Бринкмана [18], переходящее в закон Дарси, зависимость Козени–Кармана для проницаемости засыпки [19], уравнение Вант-Гоффа с учетом формы РСТ-диаграммы [20, 22]

и кинетические зависимости аррениусова типа. Задача решается методом конечных элементов в COMSOL Multiphysics в осесимметричной постановке с контролем сеточной независимости решения. Многопараметрические расчетные серии выполняются и обрабатываются средствами разработанной расчетно-аналитической платформы.

Достоверность полученных результатов

Достоверность обеспечена использованием фундаментальных законов сохранения и общепринятых замыкающих соотношений, контролем сеточной независимости решения, верификацией по данным Jemni, Ben Nasrallah и Lamloumi [20] и по эксперименту на реакторе проточного типа. Физический механизм, положенный в основу двухчленной зависимости проницаемости, независимо подтверждается опубликованными результатами прямого наблюдения структуры засыпки сплава AB_5 при циклировании, в которых зафиксированы закрытие трещин при абсорбции вследствие объемного расширения частиц и их раскрытие при десорбции [25].

Публикации

По теме диссертации опубликовано 4 работы, из них 4 в изданиях перечня ВАК и международных баз данных, и тезисы двух докладов. Получены два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ: № 2025689987 и № 2025688277.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на:

1. Восьмой Российской национальной конференции по теплообмену (г. Москва, 2022 г.).
2. XXIV Школе-семинаре молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А. И. Леонтьева «Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках» (г. Казань, 2023 г.).
3. Научных семинарах лаборатории водородных энергетических технологий ОИВТ РАН.

Личный вклад автора

Все результаты, составляющие содержание диссертации, получены автором лично либо при его определяющем участии. Автором выполнены построение и численная реализация модели тепломассопереноса в COMSOL Multiphysics, ее верификация, подготовка, проведение и обработка всех расчетных серий, разработка архитектуры и программная реализация расчетно-аналитической платформы, построение карт режимов в безразмерных координатах и обобщение полученных результатов. Постановка задачи, выбор направления исследования и обсуждение результатов выполнены совместно с научным руководителем.

Соответствие паспорту специальности

Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника (технические науки) по следующим направлениям исследований:

п. 6 – экспериментальные исследования, физическое и численное моделирование процессов переноса массы, импульса и энергии в многофазных системах и при фазовых превращениях;

п. 7 – экспериментальные и теоретические исследования процессов совместного переноса тепла и массы в бинарных и многокомпонентных смесях веществ, включая химически реагирующие смеси;

п. 9 – разработка научных основ и создание методов интенсификации процессов тепло- и массообмена и тепловой защиты.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и приложений. Работа изложена на 160 страницах, содержит 50 рисунков, 18 таблиц и 103 наименования в списке литературы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение

Во введении обоснована актуальность темы исследования, дана оценка степени ее разработанности и сформулирована научная проблема, поставлены цель и задачи работы, определены объект и предмет исследования, охарактеризованы методы исследования, изложены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, обоснована достоверность полученных результатов, приведены положения, выносимые на защиту, указаны личный вклад автора, сведения об апробации результатов, публикациях по теме диссертации и свидетельствах о государственной регистрации программ для ЭВМ, а также кратко изложена структура работы.

Первая глава

В первой главе рассмотрено современное состояние исследований металлгидридных аккумуляторов водорода. Охарактеризованы области применения систем хранения, очистки водорода и свойства сплавов AB₅ на основе LaNi₅ [1–3]. Изложены физико-химические основы обратимого взаимодействия водорода с гидридообразующим материалом, термодинамика системы металл–водород и представление равновесия РСТ-диаграммой, кинетические зависимости сорбционной реакции и сопряженное описание реакции, теплопереноса и фильтрации в пористой металлгидридной засыпке [14–16]. Структурированы конструктивные методы интенсификации теплообмена [4–8], математические модели металлгидридных реакторов, данные об изменении структурных свойств засыпки при наводороживании и циклировании [11–13], а также опыт автоматизации и применения машинного обучения для анализа металлгидридных систем [24].

В рассмотренных моделях засыпка рассматривается как эквивалентная пористая среда. Сопряжённо описываются сорбционная реакция, теплоперенос и фильтрация водорода [14–16]. Применяются однотемпературное и двухтемпературное приближения (для засыпок AB_5 при характерных размерах частиц около 10 мкм принято однотемпературное приближение, скорость зарядки определяется совместным протеканием реакции, переноса теплоты и фильтрации. При этом выделено, что в работах проницаемость задаётся по осреднённой пористости, рассчитанной по формуле Козени-Кармана и не зависит от истории наводороживания, результаты приводятся в размерном виде для конкретной конструкции, а критериальное обобщение отсутствует, следовательно отсутствуют рекомендации по оптимизации на основании критериального анализа.

В результате анализа обзора сформированы следующие направления для исследования:

1. Агрегирование расчетных данных в безразмерных координатах с целью сопоставления реакторов разного масштаба. В рассмотренных параметрических исследованиях получены зависимости в размерном виде для отдельных конструкций.

2. Определение преобладающего ограничения и оценка влияния внутренних теплопроводящих элементов с учетом одновременного изменения теплоотвода, тепловой массы и фильтрационного тракта. Одного увеличения площади теплообменной поверхности для оптимизации конструкции недостаточно.

3. Учет состояния порового пространства после предшествующего сорбционного процесса в зависимости от проницаемости. Такое замыкание требуется для воспроизведения различной проводимости слоя при зарядке и разрядке.

4. Автоматическое формирование расчетных серий и обработка их результатов по единой процедуре, необходимой для построения критериальных зависимостей в главах 3–6.

Вторая глава

Во второй главе сформулирована и численно реализована модель тепломассопереноса в металлгидридном реакторе и выполнена ее верификация. Расчет охватывает свободный газовый объем, металлгидридную засыпку, корпус и внутренние теплопроводящие элементы. Принципиальная схема металлгидридного реактора представлена на рис.1.

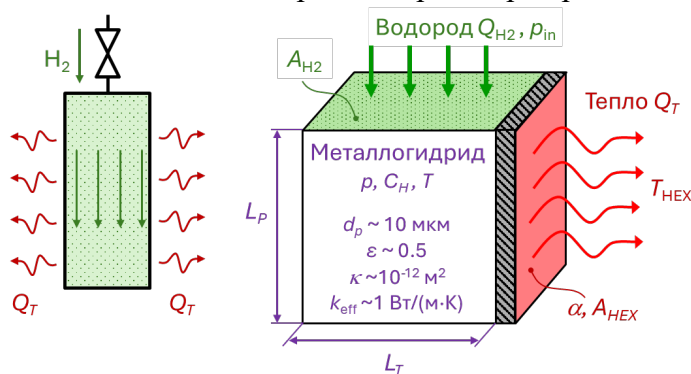


Рис. 1 – Принципиальная схема металлгидридного реактора

Используются уравнения механики гетерогенной среды в приближении взаимопроникающих континуумов: в каждой точке пористой области одновременно «присутствуют» газовая и твёрдая фазы, каждая со своей объёмной долей. Принято допущение о локальном тепловом равновесии и используется однотемпературная модель, так как засыпка обладает колоссальной удельной межфазной поверхностью (отношение площади к объёму порядка 10^6 м). Сохранение массы газовой фазы, фильтрация водорода и межфазный источник массы описываются уравнениями:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g u_D) = -m_r \quad (1)$$

$$u_D = -\frac{\kappa}{\mu_g} \nabla p_g \quad (2)$$

$$m_r = (1 - \varepsilon)\rho_s(C_{H,\max} - C_{H,\min})\frac{\partial X}{\partial t} \quad (3)$$

Перенос теплоты и тепловой эффект сорбционной реакции описываются уравнениями:

$$(\rho c_p)_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_g c_{p,g} u_D \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda_{\text{eff}} \nabla T) + q_{\text{rxn}} \quad (4)$$

$$q_{\text{rxn}} = -\frac{\Delta H}{M_{H_2}} m_r \quad (5)$$

где ε – пористость засыпки; ρ_g – плотность водорода; u_D – скорость фильтрации; m_r – объёмная скорость межфазного переноса массы; ρ_s – плотность твёрдой фазы; $C_{H,\max}$ и $C_{H,\min}$ – предельные массовые концентрации водорода, по которым нормирована степень наводороживания X ; κ – проницаемость засыпки; μ_g – динамическая вязкость водорода; p_g – давление водорода в порах; $(\rho c_p)_{\text{eff}}$ – эффективная объёмная теплоемкость засыпки; $c_{p,g}$ – удельная изобарная теплоемкость водорода; λ_{eff} – эффективная теплопроводность засыпки; T – температура; q_{rxn} – объёмный источник теплоты сорбционной реакции; ΔH – молярная энтальпия реакции образования гидрида; M_{H_2} – молярная масса водорода.

Скорость сорбционной реакции и равновесное давление задаются кинетической зависимостью аррениусова типа и уравнением Вант-Гоффа с учетом формы РСТ-диаграммы:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = C_a \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right) \ln\left(\frac{p_g}{p_{\text{eq}}^{\text{abs}}(T, X)}\right) (1 - X) \quad (6)$$

$$p_{\text{eq},j}(T, X) = p_{\text{ref}} \exp\left(\frac{\Delta S_j}{R_u} - \frac{|\Delta H|}{R_u T}\right) P_j(X), \quad j = \text{abs, des} \quad (7)$$

где C_a и E_a – предэкспоненциальный коэффициент и энергия активации абсорбции; R_u – универсальная газовая постоянная; p_{eq} – равновесное давление на соответствующей ветви РСТ-диаграммы; ΔS_j – изменение энтропии реакции на ветви j ; p_{ref} – стандартное давление; $P_j(X)$ – безразмерная функция формы ветви РСТ-диаграммы. Форма РСТ-диаграммы аппроксимирована суммой двух функций Ленгмюра [22] по данным [20, 23]. Гистерезис учитывается отдельными значениями ΔS для абсорбции и десорбции. При десорбции движущая сила задается нормированной разностью равновесного давления и давления в порах, а множитель $(1 - X)$ заменяется множителем X .

Изменение структуры засыпки при наводороживании учитывается зависимостями плотности твердой фазы, характерного размера частиц, пористости и проницаемости от степени наводороживания:

$$\rho_s(X) = \rho_{s,0}(1 - X\delta_\rho), \quad d_p(X) = d_{p,0}(1 - X\delta_\rho)^{-\frac{1}{3}} \quad (8)$$

$$\varepsilon(X) = \frac{\varepsilon_0 - X\delta_\rho}{1 - X\delta_\rho}, \quad \kappa_{KC}(X) = \frac{d_p^2(X) \varepsilon^3(X)}{150(1 - \varepsilon(X))^2} \quad (9)$$

где $\rho_{s,0}$ и $d_{p,0}$ – плотность и характерный размер частиц в исходном состоянии; ε_0 – начальная пористость; δ_ρ – относительное изменение плотности твердой фазы при полном наводороживании; κ_{KC} – проницаемость металлгидридной засыпки, рассчитываемая по зависимости Козени–Кармана [19].

Для учета гидравлического сопротивления подводящего тракта и регулирования расхода водорода при заданном давлении подачи вводится модель клапана. Клапан представлен отдельной областью в подводящей трубке с переменной динамической вязкостью, позволяющей воспроизвести работу реального расходомера-регулятора:

$$\mu_{valve} = \frac{\mu_\infty}{1+u(t)} \quad (10)$$

где μ_{valve} – динамическая вязкость в области модели клапана; μ_∞ – условно «бесконечная» вязкость, равная 10^5 Па с, обеспечивающая практически полное перекрытие потока; $u(t)$ – безразмерная управляющая функция, характеризующая степень открытия клапана и определяющая его гидравлическое сопротивление.

Для поддержания заданного расхода водорода функция $u(t)$ рассчитывается с помощью пропорционально-интегрально-дифференциального (ПИД) регулятора, реализованного в COMSOL Multiphysics:

$$u(t) = u_{bias} + k_p(Q_{set} - Q(t)) + k_i \int_0^t (Q_{set} - Q(\tau)) d\tau - k_d \frac{dQ(t)}{dt} \quad (11)$$

$$u_{min} < u(t) < u_{max}$$

где u_{bias} – базовое смещение управляющего сигнала, определяющее исходное положение клапана; Q_{set} и $Q(t)$ – заданный и текущий расходы водорода, приведенные к стандартным условиям, л/мин; $Q(t)$ определяется по поперечному сечению подводящей трубки; k_p , k_i и k_d – коэффициенты пропорциональной, интегральной и дифференциальной составляющих регулятора, подбираемые для воспроизведения работы реального регулятора расхода; t – время; τ – переменная интегрирования по времени; u_{min} и u_{max} – пределы управляющей функции, соответствующие полностью закрытому и полностью открытому клапану.

Для дальнейшего анализа вводятся безразмерные критерии и характерные длины для описания геометрии, свойства засыпки и условия:

$$L_T = \frac{V_{MH}}{A_T}, \quad A_T = A_{wall} + A_{fin}, \quad L_F = \frac{V_{MH}}{A_H} \quad (12)$$

$$Bi = \frac{\alpha L_T}{\lambda_{eff}}, \quad Ste = \frac{c_{p,eff}(T_{sp,in} - T_{ext})M_{H_2}}{C_{H,max} |\Delta H|} \quad (13)$$

$$\Gamma = \frac{Q_{H_2}^{MTL}}{Q_{H_2}^{HTL}}, \quad C-rate = \frac{3600 Q_{H_2}}{V_{H_2}}, \quad V_{H_2} = \frac{C_{H,max} m_{MH}}{\rho_{H_2,ST}} \quad (14)$$

где L_T – характерная длина теплопереноса; V_{MH} – объем металлгидридной засыпки; A_T – площадь теплоотводящей поверхности, складывающаяся из площади стенки A_{wall} и площади внутренних теплопроводящих элементов A_{fin} ; L_F – характерная длина фильтрации; A_H – площадь поперечного сечения фильтрационного тракта; α – коэффициент теплоотдачи на внешней поверхности; $c_{p,eff}$ – эффективная удельная теплоемкость засыпки с учетом тепловой массы конструкционных элементов; $T_{sp,in}$ – температура, при которой равновесное давление равно давлению подачи; T_{ext} – температура внешней среды; $Q_{H_2}^{MTL}$ и $Q_{H_2}^{HTL}$ – предельные расходы водорода, допускаемые фильтрационным подводом и отводом теплоты; Q_{H_2} – объемный расход водорода при стандартных условиях; V_{H_2} – объемная емкость реактора по водороду, приведенная к стандартным условиям.

Введенные величины характеризуют разные стороны процесса. Число Био сопоставляет сопротивление теплопереносу внутри засыпки и сопротивление теплоотдаче на внешней границе. Число Стефана связывает тепловую инерцию с тепловым эффектом реакции. Критерий Γ сопоставляет предельные возможности подвода водорода и отвода теплоты и проверяется по расчетным полям и условиям конкретной задачи. Показатель C-rate нормирует расход водорода на количество, необходимое для полной зарядки за один час, и является интегральной характеристикой динамической производительности.

Нестационарная задача решается методом конечных элементов в COMSOL Multiphysics. Используются интерфейсы «Free and Porous Media Flow», «Heat Transfer in Porous Media» и «Domain ODEs and DAEs». Обмен между ними осуществляется через источники массы и теплоты, равновесное давление и переменные свойства засыпки. При последовательном сгущении сетки сопоставляются максимальная температура, степень наводороживания, входной расход и перепад давления. Пример расчетной сетки приведен на рис.2.

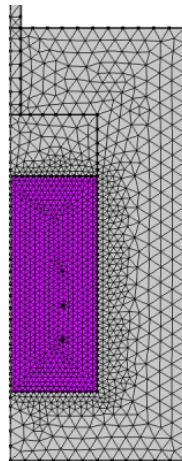


Рис. 2 – Пример расчетной сетки для рассматриваемой геометрии

Верификация выполнена по экспериментальным данным A. Jemni, S. Ben Nasrallah и J. Lamloumi [20] для цилиндрического реактора с засыпкой LaNi_5 внутренним диаметром 50 мм, высотой камеры 80 мм и высотой засыпки 60 мм, содержащей 422 г сплава при начальной пористости 0,57. При проведении расчета определялась температура в контрольных точках А, В и С, расположенных в металлогидридной засыпке для сопоставления с экспериментальными данными (рис.3). Давление подачи водорода задавалось равным 10 бар, температура внешней среды 20 °С.

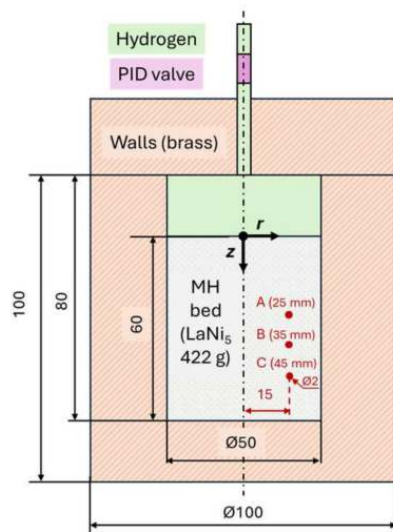


Рис.3 – Домены расчётной области: засыпка LaNi_5 , свободный объём, стенки корпуса, входной патрубков с клапаном

Расчет воспроизводит момент роста температуры, амплитуду максимума, пространственное различие температур по высоте слоя и продолжительность последующего охлаждения. Точность локального сопоставления ограничена также неопределенностью положения термодары: перепад температуры на расстоянии 2 мм в области фронта наводороживания превышает различие расчетной и экспериментальной зависимостей (рис.4).

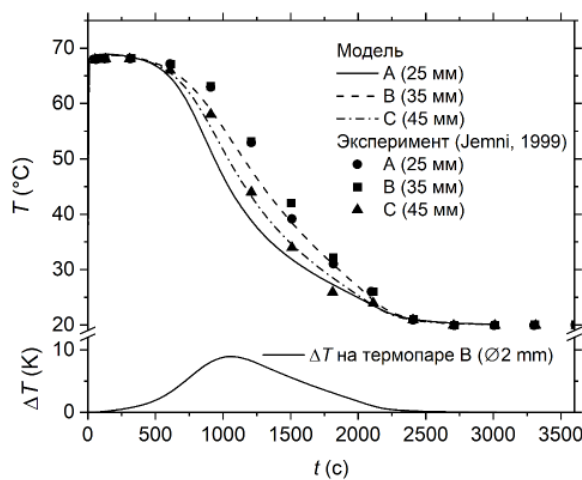


Рис. 4 – Пример расчетной сетки для рассматриваемой геометрии

Третья глава

В третьей главе разработан метод автоматизированного многопараметрического вычислительного эксперимента, реализованный в расчетно-аналитической платформе ComPyRub. Платформа позволяет задавать изменяемые геометрические, теплофизические и режимные параметры. Программа формирует сочетания их значений, выполняет расчеты, сохраняет результаты в общей базе и вычисляет производные характеристики для построения критериальных карт. Данный метод необходим, поскольку критериальные зависимости не могут быть получены из отдельных расчетных случаев: они требуют серий из десятков расчетов, выполненных в согласованной постановке и обработанных по единым правилам.

Работа платформы разделена между тремя контурами (рис.5). В первом контуре из параметризованной численной модели извлекается перечень изменяемых величин, формируются задания и выполняется серия. Во втором временные зависимости приводятся к единому формату. По ним рассчитываются характеристики, которые сохраняются вместе с исходными параметрами варианта. Третий контур обрабатывает аналитические запросы к этой базе. COMSOL Multiphysics выполняет численный расчет как внешняя система. Языковая модель также подключается извне. Обе системы можно заменять независимо от порядка проведения вычислительного эксперимента.

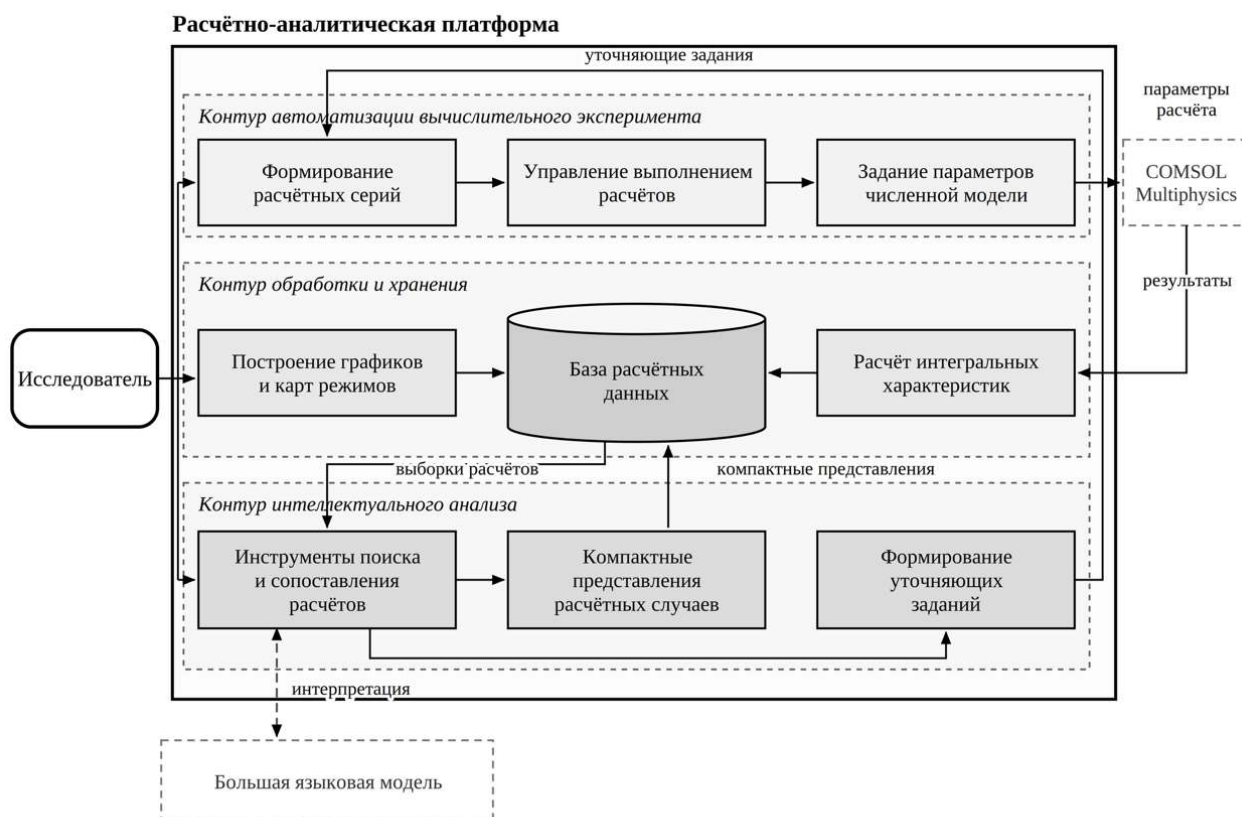


Рис. 5 – Состав расчётно-аналитической платформы и потоки данных между компонентами.

Для проверки метода выполнен полный перебор 7 значений множителя эффективной теплопроводности и 9 значений коэффициента внешней теплоотдачи. Эффективная теплопроводность изменялась в диапазоне от 0,5 до 2 Вт/м К, а коэффициент внешней теплоотдачи – от 10 до 2000 Вт/м² К. Это позволяет использовать построенную карту режимов для дальнейшего анализа без проведения новых расчетов.

Численные операции в аналитическом контуре выполняются по сохраненным временным зависимостям. Алгоритмические модули находят экстремумы и времена достижения заданных уровней, интегрируют расход водорода и определяют среднюю скорость зарядки. Для анализа результатов существует возможность использовать подключенную большую языковую. Она распознает тип вопроса, выбирает доступные инструменты, запрашивает параметры и метрики расчетных случаев и формулирует их интерпретацию. Поэтому при смене языковой модели численные значения в базе сохраняются, хотя полнота и точность ответа могут измениться. Стоит отметить, что большая языковая модель используется исключительно для аналитики по полученным данным.

Так же разработана методика проверки результатов анализа данных с использованием больших языковых моделей. Тестирование выполнено для трех языковых моделей. Методика и результаты тестирования на трех больших языковых моделей приведены в приложении № 1 к работе. Программная реализация зарегистрирована как программы для ЭВМ и применена при получении расчетных результатов глав 4–6.

Четвертая глава

В четвертой главе исследована зарядка цилиндрического реактора при изменении теплофизических параметров и геометрии и установлены расчетные признаки преобладающего механизма ограничения. Для базового варианта получено $X = 0,98$ за 1875 с: реактор поглощает 65 стандартных литров водорода при средней скорости зарядки 1,92С.

На временных зависимостях выделены начальный приближенно адиабатический, докритический и закритический режимы. Между двумя последними происходит кризис тепломассопереноса (рис. 6).

В начале зарядки наблюдается большая разница между давлением подачи и равновесным давлением. Входной расход максимален, а выделяющаяся теплота нагревает засыпку и конструкцию. Затем внутри слоя формируется горячее ядро, поскольку теплоотвод отстает от тепловыделения. В охлаждаемых областях наводораживание идет быстрее, чем в ядре, и среднее давление растет. За момент кризиса принято достижение давлением в засыпке давления подачи [9, 10].

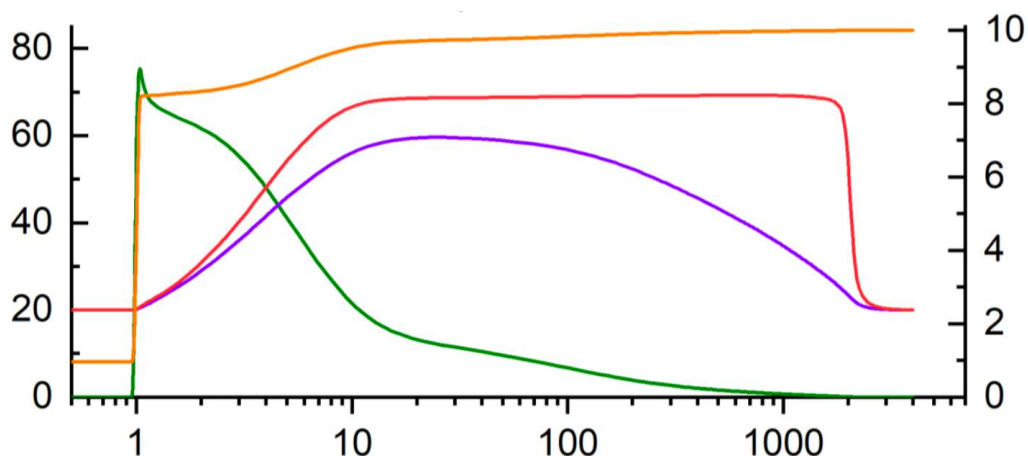


Рис. 6 – Временные зависимости расхода водорода (зеленый график), максимальной температуры металлгидридной засыпки (красный график), средней температуры металлгидридной засыпки (фиолетовый график) и среднего давления (оранжевый график) при различных значениях эффективной теплоемкости

Одновременно наблюдаются максимум температуры, исчерпание доступного перепада давления на входе и резкое падение расхода. Абсорбция при этом продолжается. Скорость абсорбции определяется отводом теплоты из нагретого слоя. В закритическом режиме давление остается близким к давлению подачи. Водород поглощается преимущественно в реакционной зоне толщиной около 2–4 мм, которая смещается вглубь засыпки по мере охлаждения. Полученная структура соответствует задаче типа Стефана с движущейся границей конечной толщины (рис.7). После наступления кризиса реакции скорость зарядки заметно снижается.

При малых Bi скорость зарядки ограничивается внешней теплоотдачей. В этой области повышение теплопроводности засыпки демонстрирует низкую результативность. При больших Bi преобладает внутреннее тепловое сопротивление: удвоение теплопроводности повышает производительность примерно на 79 % при коэффициенте теплоотдачи 2000 Вт/(м²·К), а при 10 Вт/(м²·К) прирост составляет примерно 15 %. Граница областей внешнего и внутреннего теплового ограничения в рассмотренной серии проходит при числе Био порядка единицы. Изменение эффективной теплоемкости дает иной результат: с увеличением числа Стефана температура растет медленнее и кризис смещается во времени, но сопротивление теплоотводу сохраняется, а накопленная теплота отводится на последующей стадии.

Совместное использование трех величин образует расчетный признак преобладающего ограничения. Падение входного расхода само по себе о причине замедления не свидетельствует: при тепловом кризисе первично торможение абсорбции вследствие нагрева, а при самостоятельном ограничении подачи расход задается сопротивлением входного тракта или предельным состоянием регулятора. Эти случаи различаются по временным зависимостям и полям температуры, давления и степени наводороживания. Одного значения Γ для автоматической классификации режима недостаточно.

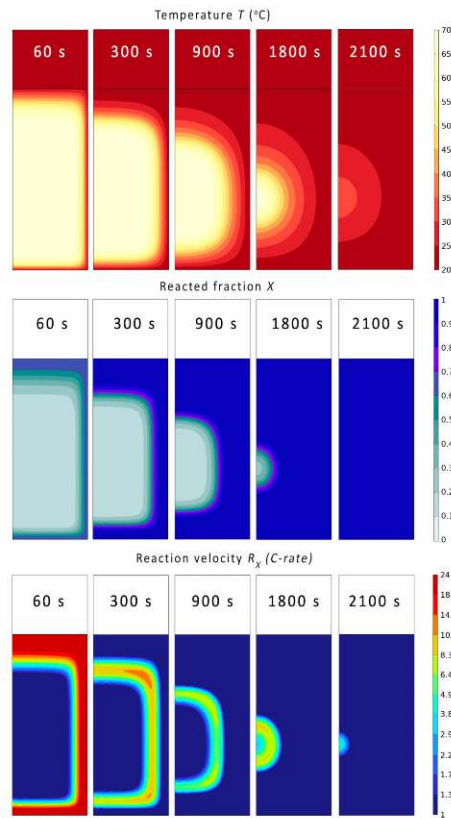


Рис.7 – Поля температуры, степени наводораживания и скорости реакции

Для сопоставления влияния эффективной теплопроводности и внешней теплоотдачи результаты представлены в координатах числа Био (рис. 6).

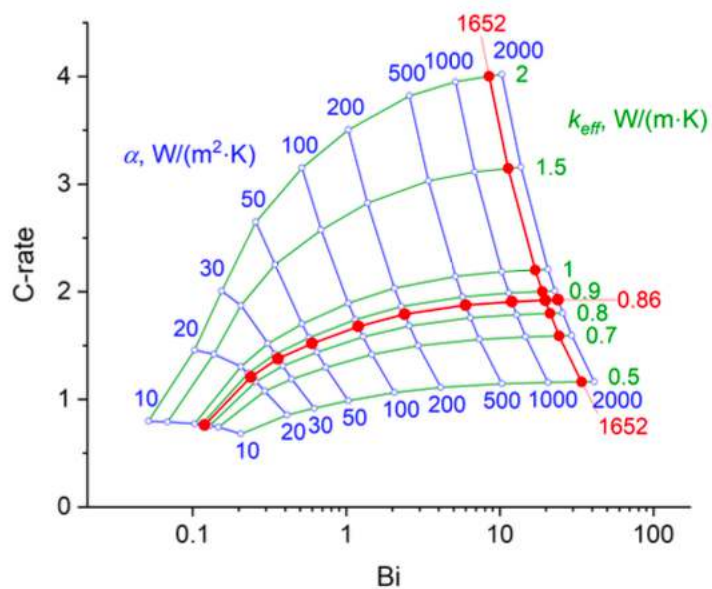


Рис. 6 – Карта режимов абсорбции цилиндрического реактора в координатах Bi – C-rate при различных значениях эффективной теплопроводности металлогидридной засыпки и коэффициента внешней теплоотдачи

Пятая глава

В пятой главе исследована интенсификация тепломассопереноса за счет модификации геометрии реактора и введения внутренних теплопроводящих элементов, а также сформулирована последовательность выбора направления интенсификации по результатам диагностики режима.

После определения преобладающего ограничения выбирается воздействие на соответствующее сопротивление. При малых Bi требуется улучшение внешнего теплообмена: повышение теплопроводности уменьшает лишь малую долю общего сопротивления. При больших Bi требуется уменьшать сопротивление внутри слоя. Дальнейший рост коэффициента теплоотдачи не меняет самих условий переноса теплоты через засыпку. Увеличение теплоемкости замедляет нагрев, но накопленную теплоту впоследствии все равно приходится отводить. Если же ограничен подвод газа к удаленным областям, одной тепловой интенсификации недостаточно.

Внутренний теплопроводящий элемент сокращает характерную длину теплопереноса, но одновременно занимает объем камеры и добавляет тепловую массу. При сохранении количества металлгидрида засыпка становится выше, фильтрационный тракт удлиняется, а свободный газовый объем перед слоем уменьшается. Поэтому варианты оребрения сопоставляются с учетом всех этих изменений, а конструкция с наибольшей площадью внутренних поверхностей не обязательно обеспечивает наибольшую скорость зарядки.

В расчетной серии рассмотрены горизонтальные пластинчатые ребра и трубчатые теплопроводящие элементы. Масса засыпки во всех вариантах одинакова. С изменением числа элементов пересчитываются высота слоя и свободный газовый объем перед ним. Пластины расположены поперек направления фильтрации: между ними вместо общего горячего ядра образуются отдельные нагретые области, а наводораживание идет послойно. Трубчатые элементы ориентированы вдоль движения газа и отводят теплоту из нескольких внутренних областей. Вокруг них возникают локальные зоны наводораживания, распределенные по объему засыпки (рис.7).

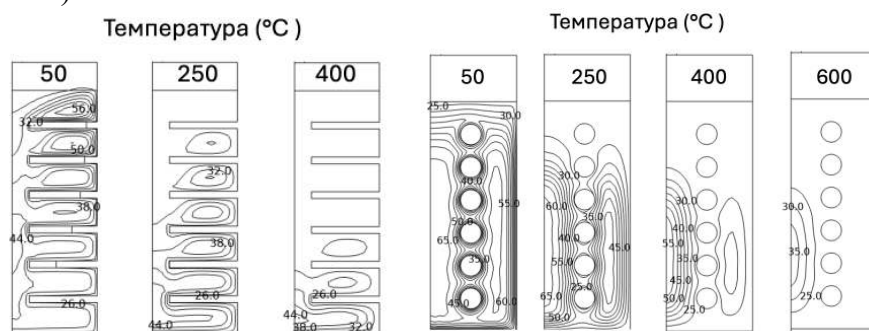


Рис.7 Поля температуры при $N_f = 6$ для пластинчатых ребер и трубчатых элементов в различные моменты времени

На картах $C\text{-rate}(Bi, N_f)$ (рис. 8) для пластинчатых ребер виден максимум: $C\text{-rate}$ около 6,9–7,0 при $N_f = 6$. Дальнейшее увеличение числа ребер снижает среднюю скорость зарядки.

При росте N_f сокращается характерная длина теплопереноса, но возрастает высота слоя, удлиняется фильтрационный тракт, уменьшается газовый объем перед засыпкой и увеличивается тепловая масса. Для трубчатых элементов C-rate растет во всем диапазоне $N_f = 1-10$ и достигает около 8,0–8,1 при $N_f = 10$ – это наибольшее из рассчитанных значений; внутренний максимум зависимости C-rate(N_f) для трубчатых элементов не найден.

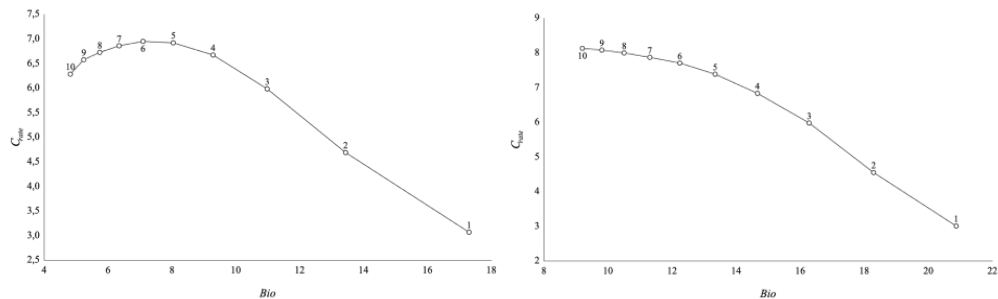


Рис. 8 – Карты режимов абсорбции для реактора с горизонтальными пластинчатыми ребрами и трубчатыми элементами: зависимость C-rate от числа Био и числа внутренних элементов N_f

Так же исследовано влияние геометрии реактора. Рассматривалось изменение высоты реактора L и диаметра d . При постоянной массе металлгидрида уменьшение диаметра требует увеличения высоты засыпки: путь теплоты к стенке сокращается, а путь водорода вдоль слоя удлиняется. Для $L/d = 1,2$ получено $\Gamma = 250$ – возможности фильтрационного подвода значительно выше тепловых, и зарядка ограничена теплоотводом. При $L/d = 18,8$ получено $\Gamma = 1$, а продольный перепад давления достигает 8–9 бар: возможности подвода газа и отвода теплоты становятся сопоставимыми [21]. В этой серии влияние фильтрации проявлялось при $L/d > 5$ для больших Bi и при $L/d > 10$ для малых Bi .

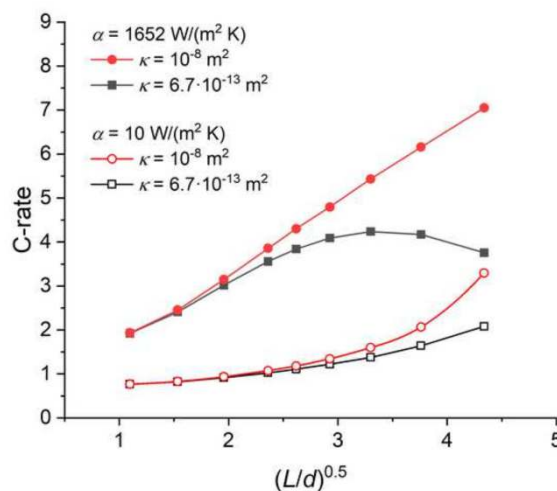


Рис.9 – Средняя скорость зарядки в зависимости от $(L/d)^{0.5}$ при двух значениях проницаемости и двух значениях коэффициента теплоотдачи

Шестая глава

В шестой главе рассмотрено влияние изменения структуры металлгидридной засыпки при циклическом наводороживании на фильтрацию водорода. Зависимость Козени-Кармана

описывает движение водорода через основную систему межчастичных пор, формируемую статистически однородной упаковкой частиц. После активации и последовательных циклов абсорбции и десорбции структура слоя отличается от структуры однородной засыпки: в ней возникают локально разуплотненные области, зазоры между группами частиц и дополнительные пути фильтрации с меньшим гидравлическим сопротивлением [11–13]. Расчет по Козени–Карману для исходной засыпки дает 0,61 мкм², что согласуется с величиной 0,42 мкм², измеренной на газах, не реагирующих с металлгидридом, тогда как оценка «по Дарси» по эксперименту с водородом дает величину порядка 10 мкм². Проницаемость металлгидридной засыпки задается суммой двух слагаемых:

$$\kappa(X) = \kappa_{\text{КС}}(\varepsilon(X), d_p(X)) + \kappa_a e^{-a_\kappa X} \quad (15)$$

где $\kappa_{\text{КС}}$ – проницаемость основной межчастичной структуры, рассчитываемая при текущих значениях пористости и характерного размера частиц; κ_a – проницаемость дополнительных путей фильтрации в исходном состоянии слоя; a_κ – безразмерный показатель перекрытия этих путей при наводороживании. Первое слагаемое свободных параметров не содержит; второе вводит два подбираемых параметра, имеющих отдельный физический смысл – уровень избыточной проводимости при $X = 0$ и характерный масштаб ее перекрытия.

Физическая основа второго слагаемого – «дыхание» металлгидридного материала. При десорбции объем частиц уменьшается, слой механически релаксирует, и между группами частиц образуются связанные полости с малым гидравлическим сопротивлением. При последующей абсорбции частицы расширяются, зазоры сокращаются, дополнительные пути постепенно перекрываются, и вклад второго слагаемого затухает. Экспоненциальная форма отвечает именно постепенному перекрытию, а не исчезновению дополнительных путей в фиксированной точке. Отсюда следует, что одинаковой средней пористости могут отвечать различные конфигурации порового пространства в зависимости от того, достигнуто ли данное состояние при абсорбции или после десорбции и релаксации слоя (рис.10).

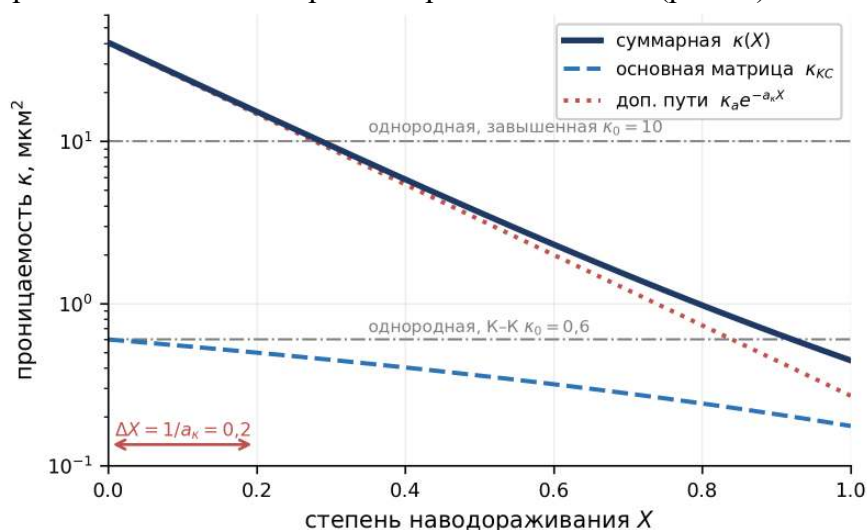


Рис.10 – Проницаемость засыпки в зависимости от степени наводороживания: суммарная кривая, вклад основной матрицы и вклад дополнительных путей

Зависимость проверена на эксперименте по зарядке реактора проточного типа (рис.11), содержащего 1 кг сплава $\text{La}_{0,9}\text{Ce}_{0,1}\text{Ni}_5$ при начальной пористости 0,56 и охлаждаемого водой с температурой 9 °С, при давлении подающей линии 0,58 МПа и уставке расходомера-регулятора 10 нормальных литров в минуту. Однородная засыпка не описывает эксперимент ни при $\kappa_0 = 0,6 \text{ мкм}^2$, ни при завышенной проницаемости 10 мкм^2 : в первом случае участок поддержания заданного расхода отсутствует, во втором он воспроизводится, но полная продолжительность процесса занижена, а немонотонность давления на выходе не воспроизводится. Двухчленная зависимость при $\kappa_0 = 0,6 \text{ мкм}^2$, $\kappa_a = 40 \text{ мкм}^2$ и $a_k = 5$ воспроизводит участок поддержания заданного расхода, полную продолжительность процесса и немонотонное изменение давления на выходе из засыпки. При $X = 0$ суммарная проницаемость превышает расчетную для однородной засыпки в 68 раз, а характерный масштаб перекрытия дополнительных путей составляет $\Delta X = 1/a_k = 0,2$.

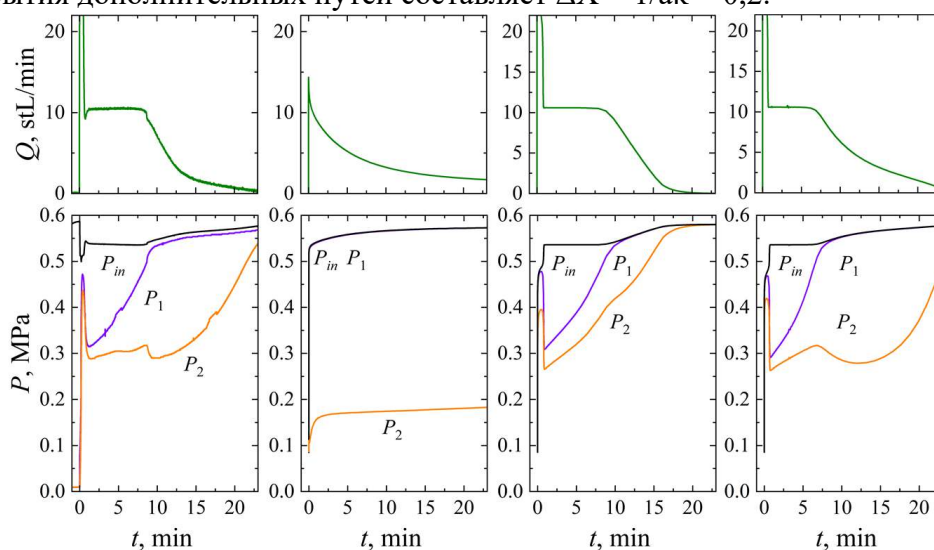


Рис.11 – Результаты верификации по эксперименту на реакторе проточного типа, где Q – расход водорода, p_{in} – давление на входе, p_1 – давление в верхней части засыпки, p_2 – давление на выходе: эксперимент, расчет при $\kappa_0 = 0,6 \text{ мкм}^2$ и $\kappa_a = 0$, расчет при $\kappa_0 = 10 \text{ мкм}^2$ и $\kappa_a = 0$, расчет при $\kappa_0 = 0,6$ и $\kappa_a = 40 \text{ мкм}^2$, $a_k = 5$

Заложенный в зависимость механизм согласуется с опубликованными результатами прямого наблюдения структуры засыпки сплава AB_5 при циклировании [25]: трещины в слое закрываются при абсорбции вследствие объемного расширения частиц, вновь раскрываются при десорбции, скорость их закрытия убывает с числом циклов, а скорость наводороживания по зонам реактора положительно связана с площадью трещин. Это подтверждает физическую основу второго слагаемого, но не заменяет независимого определения его параметров: κ_a и a_k идентифицированы по данным одного эксперимента и относятся к конкретной засыпке и ее истории циклирования, а не к свойствам сплава.

Заключение. Основные выводы

1. Разработана математическая модель тепломассопереноса в металлгидридном реакторе, объединяющая фильтрацию водорода, теплоперенос, кинетику сорбции и изменение состояния металлгидридной засыпки. Модель реализована в COMSOL Multiphysics и учитывает изменение свойств засыпки при наводороживании, включая изменение плотности, пористости и проницаемости слоя. Верификация выполнена по экспериментальным данным для реактора с LaNi_5 .

2. Разработан метод автоматизированного многопараметрического вычислительного эксперимента, включающий программно управляемое построение серий расчетов, структурирование результатов в единую расчетную базу и формирование производных метрик. Метод реализован в расчетно-аналитической платформе ComPyRub, апробирован серий из 63 расчетов, в которой сохранено 504 временных сигнала и вычислено 4032 характеристики, и зарегистрирован двумя свидетельствами о государственной регистрации программ для ЭВМ.

3. Обоснован гибридный принцип аналитического контура: численные операции выполняются алгоритмическими модулями, а языковая модель работает с уже рассчитанными величинами.

4. Установлено, что зарядка реактора не является единым квазистационарным процессом: последовательно реализуются адиабатический, докритический и закритический режимы, а кризис тепломассопереноса означает не прекращение абсорбции, а смену механизма, определяющего интегральную скорость зарядки. Положение кризиса определяет достижимую за заданное время степень наводороживания.

5. Установлено, что эффективная теплопроводность засыпки и внешняя теплоотдача действуют совместно и обобщаются числом Био, граница областей внешнего и внутреннего теплового ограничения проходит при его значениях порядка единицы, а тепловая инерция, характеризуемая числом Стефана, перераспределяет тепловую нагрузку во времени.

6. Выявлена конкуренция теплопереноса и фильтрации при изменении L/d : при $L/d = 1,2$ получено $\Gamma = 250$ и ограничение теплоотводом, при $L/d = 18,8 - \Gamma = 1$ и продольный перепад давления 8–9 бар.

7. Для горизонтальных пластинчатых ребер при неизменной массе засыпки получен максимум C-rate около 6,9–7,0 при $N_f = 6$. С ростом числа ребер сокращается характерная длина теплопереноса, одновременно увеличиваются высота засыпки, длина фильтрационного тракта и тепловая масса, а свободный газовый объем перед слоем уменьшается. Количественное разделение влияния этих факторов требует отдельной проверки.

8. Установлен рост средней скорости зарядки при увеличении числа трубчатых элементов во всем диапазоне $N_f = 1-10$; наибольшее среди рассмотренных значение C-rate около 8,0–8,1 получено при $N_f = 10$, внутренний максимум не установлен.

9. Систематизированы диагностические признаки преобладающего механизма ограничения, сформулированы принцип выбора направления интенсификации и

десятиэтапная последовательность инженерного анализа, алгоритмом оптимизации не являющаяся.

10. Предложена двухчленная замыкающая зависимость проницаемости засыпки от степени наводораживания, которая при $\kappa_a = 40$ мкм² и $\alpha_k = 5$ воспроизводит продолжительность процесса и немонотонность давления на выходе. Параметры идентифицированы по данным одного эксперимента; заложенный в зависимость механизм согласуется с опубликованными данными прямого наблюдения структуры засыпки при циклировании.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи

1. Dunikov D.O., Abramov A.V. Heat and mass transfer limitations in a cylindrical MH reactor // Journal of Energy Storage. **Принято к публикации.**

2. D.O. Dunikov, D.V. Blinov, D.A. Novikov, I.A. Romanov, A.N. Kazakov, A.A. Eronin, A.V. Bezdudny, A.V. Abramov, N.A. Repety. Metal hydride separation of a hydrogen/helium mixture // International Journal of Hydrogen Energy. **На рецензии**

3. Абрамов А.В., Дуников Д.О. Исследование влияния внутреннего оребрения на тепломассоперенос в металлгидридном реакторе // Теплофизика высоких температур. **Получена справка о принятии к публикации.**

4. Абрамов А.В., Дуников Д.О. Расчетно-аналитическая платформа для многопараметрического моделирования и анализа тепломассопереноса в металлгидридных реакторах с использованием искусственного интеллекта. // Тепловые процессы в технике. **На рецензии.**

Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ

5. № 2025689987 от 01.11.2025 «Программа для инициализации, управления и обработки результатов расчетов в среде COMSOL с предоставлением программного интерфейса взаимодействия».

6. № 2025688277 от 17.10.2025 «Программа для организации и мониторинга расчётов в среде COMSOL с возможностью задания параметров и отображения результатов».

Тезисы докладов и выступления на конференциях

7. Абрамов А.В., Дуников Д.О. Моделирование тепломассопереноса в металлгидридном реакторе при поглощении водорода // Восьмая Российская национальная конференция по теплообмену: тезисы докладов. Москва, 17–22 октября 2022 г. Т. 2. С. 259–260.

8. Абрамов А.В., Дуников Д.О. Моделирование тепломассопереноса в металлгидридном реакторе при поглощении водорода // Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках: тезисы докладов XXIV Школы-семинара молодых ученых под рук. акад. РАН А.И. Леонтьева. Казань, 23–27 мая 2023 г. С. 252–253.

9. Абрамов А.В., Дуников Д.О. Моделирование тепломассопереноса в металлгидридном реакторе при поглощении водорода // Девятая Российская национальная конференция по теплообмену

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lototsky M.V., Tarasov B.P., Yartys V.A. Gas-phase applications of metal hydrides // *Journal of Energy Storage*. 2023. Vol. 72. Art. 108165.
2. Hirscher M., Yartys V.A., Baricco M., Bellosta von Colbe J., Blanchard D., Bowman R.C. et al. Materials for hydrogen-based energy storage – past, recent progress and future outlook // *Journal of Alloys and Compounds*. 2020. Vol. 827. Art. 153548.
3. Joubert J.-M., Paul-Boncour V., Cuevas F., Zhang J., Latroche M. LaNi₅ related AB₅ compounds: Structure, properties and applications // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. Vol. 862. Art. 158163.
4. Cui Y., Zeng X., Xiao J., Kou H. The comprehensive review for development of heat exchanger configuration design in metal hydride bed // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2022. Vol. 47. P. 2461–2490.
5. Su J.-W., Tang X.-Y., Bai X.-S., Yang W.-W., Zhang J.-F., Qu Z.-G. Review on thermal design and thermal management for metal hydride reactors: Current status and future development // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2025. Vol. 114. P. 295–311.
6. Oi T., Maki K., Sakaki Y. Heat transfer characteristics of the metal hydride vessel based on the plate-fin type heat exchanger // *Journal of Power Sources*. 2004. Vol. 125, No. 1. P. 52–61.
7. Kaplan Y. Effect of design parameters on enhancement of hydrogen charging in metal hydride reactors // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2009. Vol. 34. P. 2288–2294.
8. Satya Sekhar B., Lototsky M., Kolesnikov A., Moropeng M.L., Tarasov B.P., Pollet B.G. Performance analysis of cylindrical metal hydride beds with various heat exchange options // *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. Vol. 645. P. S89–S95.
9. Борзенко В.И., Дуников Д.О., Малышенко С.П. Кризисные явления в металлгидридных устройствах хранения водорода // *Теплофизика высоких температур*. 2011. Т. 49, № 2. С. 256–264.
10. Dunikov D.O., Borzenko V.I. Heat and mass transfer crisis in a metal hydride accumulator // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. Vol. 1683. Art. 052018.
11. Dunikov D.O., Blinov D.V., Bozieva A.M., Kazakov A.N., Krapivina A.A., Romanov I.A., Zadneprovskaya E.V., Allakhverdiev S.I. Permeability of a deformable metal hydride bed during hydrogen absorption // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2024. Vol. 51. P. 375–387.
12. Gillia O. Hydride breathing and its consequence on stresses applied to containers: A review // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2021. Vol. 46, No. 72. P. 35594–35640.
13. Salque B., Chaise A., Iosub V., Gillia O., Charlas B., Dupuis C. et al. Measure of the hydride breathing while cyclically absorbing and desorbing hydrogen // *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. Vol. 645, Suppl. 1. P. S353–S356.

14. Mohammadshahi S.S., Gray E.M., Webb C.J. A review of mathematical modelling of metal-hydride systems for hydrogen storage applications // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2016. Vol. 41, No. 5. P. 3470–3484.
15. Hasnain M., Sezer H., Mason J.H. Mathematical modeling of heat and mass transfer in metal hydride hydrogen storage systems: A comprehensive review // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2026. Vol. 226. Art. 116294.
16. Minko K.B., Artemov V.I., Yan'kov G.G. Numerical simulation of sorption/desorption processes in metal-hydride systems for hydrogen storage and purification. Part I: Development of a mathematical model // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2014. Vol. 68. P. 683–692.
17. Whitaker S. *The Method of Volume Averaging*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1999.
18. Brinkman H.C. A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles // *Applied Scientific Research*. 1949. Vol. 1. P. 27–34.
19. Ergun S. Fluid flow through packed columns // *Chemical Engineering Progress*. 1952. Vol. 48, No. 2. P. 89–94.
20. Jemni A., Ben Nasrallah S., Lamloumi J. Experimental and theoretical study of a metal–hydrogen reactor // *International Journal of Hydrogen Energy*. 1999. Vol. 24, No. 7. P. 631–644.
21. Chaise A., Marty P., de Rango P., Fruchart D. A simple criterion for estimating the effect of pressure gradients during hydrogen absorption in a hydride reactor // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2009. Vol. 52. P. 4564–4572.
22. Bjurström H., Suda S., Lewis D. A numerical expression for the P-C-T properties of metal hydrides // *Journal of the Less-Common Metals*. 1987. Vol. 130. P. 365–370.
23. Sarhaddi R., Arabi H., Pourarian F. Structural, morphological, magnetic and hydrogen absorption properties of LaNi₅ alloy: A comprehensive study // *International Journal of Modern Physics B*. 2014. Vol. 28, No. 14. Art. 1450079.
24. Kumar A., Tiwari S., Gupta N., Sharma P. Machine learning modelling and optimization for metal hydride hydrogen storage systems // *Sustainable Energy & Fuels*. 2024. Vol. 8, No. 9. P. 2073–2086.
25. Zhang Y., Zhang X., Wu H., Huang Y., Huang C., Wang Y., Li Z., Xu C., He Z., Chang J. Intrinsic correlation of fragmentation and self-motion with macro-strain accumulation and hydriding/dehydriding in metal hydrides reactor in particle view // *Journal of Energy Storage*. 2026. Vol. 179. Art. 123871.