

T.C.  
NİĞDE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

METAL-HİDROJEN REAKTÖRLERİN SİMÜLASYONU

FUAT KAYA

T.C. YÜKSEK ÖĞRETİM KURULU  
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

112650

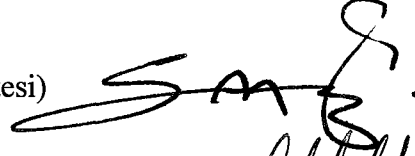
YÜKSEK LİSANS TEZİ  
DANIŞMAN: Yrd. Doç. Dr. Yüksel KAPLAN

Ekim 2001

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğüne;

Bu çalışma jürimiz tarafından MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI'nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

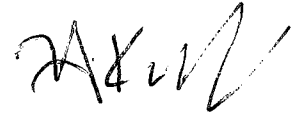
Başkan : Doç. Dr. Şefik BİLİR (Selçuk Üniversitesi)



Üye : Yrd. Doç. Dr. Mahmut D. MAT (Niğde Üniversitesi)



Üye : Yrd. Doç. Dr. Yüksel KAPLAN (Niğde Üni., Danışman)



ONAY:

Bu tez, 10.10/2001 tarihinde, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nca belirlenmiş olan jüri üyeleri tarafından uygun görülmüş ve Enstitü Yönetim Kurulu'nun kararıyla kabul edilmiştir.



27.11./2001

Doç. Dr. Aydın TOPÇU

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

## ÖZET

### METAL-HİDROJEN REAKTÖRLERİN SİMÜLASYONU

KAYA, Fuat

Niğde Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Makine Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Yüksel KAPLAN

Ekim 2001, 58 sayfa

Bu çalışmada, metal-hidrojen reaktöründe iki boyutlu ısı ve kütle transferi için bir matematiksel model geliştirilmiş ve nümerik olarak çözülmüştür. Bu modelde, reaktördeki iki boyutlu ısı transferi, kütle transferi ve kimyasal reaksiyonlar göz önüne alınmış hidrit oluşumuna etki eden proses parametreler araştırılmıştır.

Bu parametrelerden ısı transfer katsayısı ( $h$ ) ve yarıçapın yüksekliğe oranının ( $r/H$ ), hidrid oluşumuna etkileri incelenmiştir. Hidrit oluşumu cidardaki ısı transfer miktarının artmasıyla önemli ölçüde arttığı görülmüştür. Ayrıca belirli bir ısı transferi miktarından sonra yatak ısı iletim katsayısının düşüklüğü nedeniyle ısı transfer katsayısı artışının önemli olmadığı gözlenmiştir. Elde edilen sonuçlar yatak boyutlarında depolama hızında önemli bir etken olduğunu göstermiştir.  $r/H$  oranı azaldıkça, ısı transferi iyileştiği için hidrid oluşumu erken tamamlanmaktadır.

Elde edilen nümerik sonuçlar deneysel sonuçlarla karşılaştırılmış ve sonuçların uyum içerisinde olduğu görülmüştür.

## SUMMARY

### SIMULATION OF METAL-HYDROGEN REACTORS

KAYA, Fuat

Niğde University

The Institute of Science and Engineering

Department of Mechanical Engineering

Advisor: Yrd. Doç. Dr. Yüksel KAPLAN

October 2001, 58 pages

In this study, a two-dimensional heat and mass transfer model has been developed and solved numerically in a metal-hydrogen reactor. In this model, two-dimensional heat and mass transfer and chemical reactions in the reactor have been considered. Process parameters effecting hydride formation have been investigated. Some of these parameters are  $h$ , heat transfer coefficient and,  $r/H$ , the ratio of radius to height. Hydride formation increases as heat transfer rate on the wall increases. However, after a certain value of heat transfer rate from the boundary wall, further increase in heat transfer rate does not significantly affect the hydride formation due to the low thermal conductivity of the bed. It is found that the bed geometry also significantly affect the hydride formation. Hydriding proces complete faster at lower  $r/H$  ratios due to enchanced heat transfer.

The numerical results satisfactorly agree with the experimental data in the literature.

## TEŐEKKÖR

Çalıőmalarım boyunca deęerli yardımlarını esirgemeyen danıőman hocam Yrd. Doç. Dr. Yüksel KAPLAN'a ve kıymetli hocam Yrd. Doç. Dr. Mahmut D. MAT'a teőekkür ederim. Ayrıca mesai arkadaşlarıma ve her zaman destek olan aileme teőekkürü bir borç bilirim.



## İÇİNDEKİLER DİZİNİ

ÖZET.....	iii
SUMMARY.....	iv
TEŞEKKÜR.....	v
İÇİNDEKİLER DİZİNİ.....	vi
TABLolar DİZİNİ.....	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	ix
SEMBOLLER.....	x
BÖLÜM I GİRİŞ.....	1
1.1 Literatür Taraması.....	2
BÖLÜM II TEMEL KAVRAMLAR.....	6
2.1 Hidrojenin Özellikleri.....	6
2.2 Hidrojenin Depolanması.....	7
2.2.1 Hidrojenin basınçlı gaz olarak depolanması.....	7
2.2.2 Hidrojenin sıvı olarak depolanması.....	7
2.2.3 Hidrojenin metal-hidrid şeklinde depolanması.....	8
2.3 Atık Isı Depolama.....	9
2.4 Elektrik Depolama.....	10
2.5 Isıtma veya Soğutma.....	11
2.6 Elektrik Üretilmesi.....	11
2.7 Hidrojen Temizleme.....	11
2.8 Döteryum Ayırma.....	11

BÖLÜM III MATERYAL ve METOD.....	12
3.1 Matematiksel Model.....	12
3.1.1 Hidrojen depolama işlemini karakterize eden denklemler.....	13
BÖLÜM IV NÜMERİK METOD.....	17
4.1 Nümerik Çözüm.....	17
BÖLÜM V NÜMERİK SONUÇLAR.....	21
5.1 Depolama Prosesinin Detayları.....	21
5.2 Isı Transferinin Hidrid Oluşumuna Etkisi.....	31
BÖLÜM VI SONUÇ ve ÖNERİLER.....	34
KAYNAKLAR.....	35
EKLER.....	38

## TABLolar DİZİNİ

Tablo 2.1	Hidrojen depolama sistemlerinde bazı karşılaştırmalar.....	8
Tablo 2.2	Hidrojen depolanma sistemlerinin karşılaştırılması.....	9
Tablo 2.3	Elektrik depolanmasında kullanılan iki metodun karşılaştırılması.....	10
Tablo 3.1	Metal ve hidrojenin termofiziksel özellikleri.....	16





## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1 Metal-hidrojen reaktörün şematik olarak gösterilişi.....	12
Şekil 4.1 Nümerik Grid.....	18
Şekil 5.1 $t= 100$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	22
Şekil 5.2 $t= 300$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	23
Şekil 5.3 $t= 500$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	23
Şekil 5.4 $t= 1000$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	24
Şekil 5.5 $t= 1500$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	24
Şekil 5.6 $t= 2000$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	25
Şekil 5.7 $t= 2500$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	25
Şekil 5.8 $t= 3000$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	26
Şekil 5.9 $t= 4000$ sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı.....	26
Şekil 5.10 $t= 100$ sn'de yatak içinde H/M değişimi.....	27
Şekil 5.11 $t= 500$ sn'de yatak içinde H/M değişimi.....	28
Şekil 5.12 $t= 1500$ sn'de yatak içinde H/M değişimi.....	28
Şekil 5.13 $t= 2500$ sn'de yatak içinde H/M değişimi.....	29
Şekil 5.14 $t= 3000$ sn'de yatak içinde H/M değişimi.....	29
Şekil 5.15 Sıcaklığın zamana göre değişimi ve deneysel karşılaştırılması.....	30
Şekil 5.16 Isı transfer miktarının yatak sıcaklığı üzerindeki etkisi.....	31
Şekil 5.17 Isı transfer miktarının yatak geometrisinde hidrid oluşumuna etkisi.....	32
Şekil 5.18 Yatak geometrisinin $r/H$ oranına bağlı olarak hidrid oluşumuna etkisi.....	33
Şekil 5.19 Yatak içinde sıcaklığın $r/H$ oranına bağlı olarak zamana göre değişimi.....	33

## Semboller

$C_p$	:özgül ısı (J/kgK)
$E_a$	:aktivasyon enerjisi (J/mol)
$H$	:reaktör yüksekliği (m)
$K$	:geçirgenlik
$m$	:depolanan hidrojen miktarı (kg/m <sup>3</sup> s)
$M$	:molekül ağırlığı (kg/mol)
$P$	:basınç (Pa)
$R$	:genel gaz sabiti (J/mol K)
$T$	:sıcaklık (K)
$t$	:zaman (sn)
$V$	:gaz hızı (m/s)
$\lambda$	:ısı iletim katsayısı (W/mK)
$\rho$	:yoğunluk (kg/m <sup>3</sup> )
$\varepsilon$	:gözeneklilik
$\mu$	:dinamik viskozite (kg/ms)
$\nu$	:kinematik viskozite (m <sup>2</sup> /s)
$S$	:katı-gaz değişim alanı (m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> )
$H_{gs}$	:katı-gaz oranındaki ısı transfer katsayısı (W/m <sup>2</sup> K)

## İndisler

$e$	:etki
$eq$	:denge
$f$	:soğutucu akışkan
$g$	:gaz
$s$	:katı
$ss$	:doymuş

## BÖLÜM I

### GİRİŞ

Fosil kökenli yakıt rezervlerinin azalması ve günümüz şartlarında kullanılan yakıtların çevreye verdikleri zararlar nedeniyle araştırmacılar alternatif enerji kaynakları üzerine yoğun çalışmalar yapmışlardır. Hidrojen enerjisi, dünyada bol miktarda bulunan sudan elde edilmesi ve çevreyi kirletmemesi nedeniyle çok iyi bir alternatif enerji kaynağı olarak ortaya çıkarmaktadır. Hidrojen çevrede bileşik halde bulunmaktadır. Dolayısıyla hidrojeni kullanmak için önce diğer bileşiklerden ayırmak ve gerekli yerlerde kullanabilmek için depolamak gerekir.

Hidrojen enerjisinin kullanılmasında en önemli sorun olarak karşımıza depolama problemi çıkmaktadır. Hidrojen üç farklı şekilde depolanabilmektedir. Bunlar; gaz, sıvı ve bazı metallerle kimyasal reaksiyonu sonucunda katı fazında depolanabilmektedir. 17 Mpa basınçta 60 litre gazı depolayabilmek için yaklaşık 1 ton ağırlığında ve 2 m<sup>3</sup> hacminde bir ekipman gerekmektedir. Ayrıca aynı miktarda hidrojeni sıvı olarak depolayabilmek için yaklaşık 20 kg ağırlığında ekipman gerekmektedir. Buradan; hidrojeni sıvı olarak depolayabilmek için çok daha hafif depo gerektiği görülmektedir. Fakat aynı miktarda hidrojeni sıvılaştırma işlemi çok pahalıdır ve sıvılaştırmak için elde edilecek enerjinin 1/3'ü kadar bir enerjiye ihtiyaç duyulmaktadır. Dolayısıyla hidrojeni sıvı olarak depolama işlemi esnasında ihtiyaç duyulan bu enerji maliyeti artırmaktadır. Hidrojeni depolama yöntemlerinden bir diğeri ise hidrojeni metal-hidrid yataklarında düşük basınçta ve daha küçük bir hacimde depolayabilmektir. Bu yöntem hidrojenin bazı metal veya alaşımlarla kimyasal reaksiyona girmesi prensibine dayanır. Bu metallere bazıları Ti, Mg, Zr, LaNi<sub>5</sub>, SmMg<sub>3</sub>, Mg<sub>2</sub>Ni vs dir. Ayrıca metal-hidrit içerisinde depolanan hidrojen kullanılmak istenildiğinde, metal hidritin ısıtılmasıyla istenilen miktarda hidrojen elde edilebilir.

Hidrojenin uygulama alanları çok geniştir. Bu uygulama alanlarından bazıları; ısıtma, soğutma, pompalama, otomotiv, elektrik üretimi gibi sanayi ve evlerde kullanılmaktadır. Dolayısıyla hidrojenin depolanması çok önem kazanmıştır.

Metal hidrid yataklarda hidrojeni depolayabilmek için hidrit maddeleri kullanılır. Bu depolama işlemi esnasında sürekli dışarıya ısı vermek, yani soğutmak gerekir. İkinci uluslar arası enerji konferansındaki bilim adamları hidrojenin sekiz değişik uygulama alanı olduğunu ve çalışmaların bu alanlar içerisinde yapılması konusunda karara varmışlardır. Bu uygulama alanları ise aşağıda maddeler halinde verilmiştir (Veziroğlu,1998).

1. Hidrojen Depolama
2. Atık Isı Depolama
3. Elektrik Depolama
4. Isıtma veya Soğutma
5. Elektrik Üretimi
6. Pompalama veya Basınçlama
7. Hidrojen Temizleme
8. Döteryum Ayırma

## **1.1 Literatür Taraması**

Hidrojenin depolanması esnasında kimyasal reaksiyonlar meydana gelir. Bu reaksiyonların ısı ve kütle transferine etkisi detaylı bir şekilde incelenmelidir. Daha önce bu konuda yapılan bir çok teorik ve deneysel çalışma vardır.

Lucas ve Richard (1984), hidrojen depolama işlemini karakterize eden matematiksel bir model geliştirmişlerdir. Burada ısı taşınım denklemini ve hidrojen depolama sisteminin performansını, tek boyutlu olarak ele almışlardır. Bu modelde hidrid ve dehidrid durumlarını nümerik olarak çözmüşler ve literatürdeki dotalar ile karşılaştırmışlardır. Fakat geliştirilen modelde reaksiyonla açığa çıkan ısı hesaba katılmamıştır.

Mayer ve arkadaşları (1987), hidrojenin depolanması esnasında oluşan ısı ve kütle transferini deneysel olarak incelemişler ve teorik olarak desteklemişlerdir. Çalışmalarında konsantrasyon, basınç ve sıcaklığı zamana ve yatak yarıçapına bağlı olarak değişimlerini incelemişlerdir.

Bernauer (1988). metal hidrid teknolojisi alanında son on yıldır yapılan çalışmalar neticesinde meydana gelen gelişmeleri açıklamıştır. Hidrojenin depolanmasıyla hidritin hareketli ve hareketsiz uygulamalarda, emniyetli bir şekilde kullanılabileceğini

göstermiştir. Ayrıca hidrid teknolojisini, teknik ve ekonomik açıdan uygunluğunu göstermiştir.

Sun ve Deng (1990), silindirik ve kartezyen koordinat sistemlerinde ısı ve kütle transferini tek boyutlu ve iki boyutlu olarak incelemiştir. Bu çalışmalarında transport denklemlerini sonlu farklar kullanılarak implicit olarak çözmüşlerdir. Elde ettikleri nümerik sonuçlarla deneysel sonuçların uyum içinde olduğunu göstermişlerdir.

Wang ve Suda (1992), hidrid/dehidrid reaksiyonlarının kompleks gaz-katı reaksiyonları olduğunu göstermişler ve aktivasyon enerjisini ayrıntılı bir şekilde incelemiştir. Aktivasyon enerjisinin hidrid/dehidrid reaksiyonlarına etkisinin büyük ve sürekli olduğunu ortaya koymuşlardır.

Sun (1992), hidrid reaktörlerinin konfigürasyonunun, metal-hidrit reaktörlerinin maliyeti ve performansı üzerinde etkisini incelemiştir. Optimum ısı performansı için bu reaktörlerin en uygun konfigürasyonda olmasının önemli olduğunu göstermiştir. Hidrit reaktörü bir boyutlu ve iki boyutlu olarak incelemiş, ve elde ettiği sonuçları karşılaştırmıştır. Ayrıca üç basit reaktörü karşılaştırmıştır. Benzer konfigürasyonlardaki reaktörlerin pratikte metal hidrit reaktörlerde kullanılabileceğini tavsiye etmiştir.

Gopal ve Murthy(1992) metal-hidrid yatakların performansına yatak kalınlığı, efektif ısı iletkenlik ve soğutucu sıcaklığının etkilerini incelemiştir. Burada optimum efektif ısı iletkenliğinin kafes kalınlığının artmasıyla arttığını belirtmişlerdir.

El-Osairy ve arkadaşları (1993), metal hidrid yataklarında ısı ve kütle transfer nümerik olarak incelemiştir. Nümerik çözümde implicit metodu kullanmışlar ve enerji ve kütle denklemlerini iki boyutlu olarak çözmüşlerdir.  $LaNi_5H_6$  metal hidrit yatakta soğutucu akışkan olarak su kullanmışlardır.

Song ve Park (1993), hidrid/dehidrid oluşumu esnasında,  $Mg_{51}Zn_{20}$ 'nin ayrışması sonucu Mg ve Mg-Zn metaller arası bileşiklerin ortaya çıktığını ve bu metallerden sadece Mg'da hidrid/dehidrid oluşumlarının ortaya çıktığını göstermişlerdir.

Gambini (1994), hidrit/dihidrit oluşumuna etki eden proses parametreleri teorik ve deneysel olarak incelemiştir. Elde ettiği teorik sonuçlarla deneysel sonuçları karşılaştırmış ve geliştirdiği matematiksel modelin geçerliliğini test etmiştir.

Gambini (1994). hidrojenin kullanım alanlarından ısı pompaları üzerine basit bir model geliştirmiştir. Geliştirdiği bu modeli, deneysel sonuçlarla karşılaştırmış ve pratikte kullanılabilirliğini göstermiştir.

Gopal ve Murthy (1995), metal-hidrit reaktörlerin performansına etki eden proses parametreleri teorik ve deneysel olarak incelemiştir. Elde ettikleri sonuçlardan yatak basıncının önemli bir parametre olduğunu göstermişlerdir.

Jemni ve Nasrallah (1995), metal-hidrojen reaktörlerinde absorpsiyon işlemini iki boyutlu olarak incelemiş ve sonlu elemanlar yöntemiyle bir matematiksel model geliştirmişlerdir. Sıcaklık, basınç ve hidrit yoğunluğunun zamana göre değişimi ve bu değişkenlerin reaktör geometrisi, giriş sıcaklığı ve basıncı gibi parametrelerle olan alakasını incelemiştir. Fakat ısı ve kütle transferinin reaksiyon hızına etkileri incelenmemiştir.

Jemni ve arkadaşları (1995), hidrojen akışını hesaba katarak katı ve gazın termal dengesini incelemiştir. Çalışmalarında ilk olarak reaktörde oluşan ısı ve kütle transferini karakterize eden denklemleri vermişlerdir.

Shmal'ko ve arkadaşları (1998), metal-hidrid yataklarda bir matematiksel model geliştirmişler ve hidrid oluşumunu akışsız olarak modellemiş ve nümerik olarak çözmüşlerdir.

Jemni ve arkadaşları (1999), metal-hidrid reaktöründe deneysel ve teorik olarak incelemiştir. Bu çalışmada; ilk olarak; deneylerle ısı iletim katsayısının etkilerini belirlemişler ve burada denge basıncı ve kinetik reaksiyonunun etkilerini incelemiştir. İlk durumla ilgili olarak olumlu avantajların elde edildiğini anlatmışlardır. Sıcaklık, basınç ve H/M oranının zamanla değişimini grafiklerle göstermişlerdir. İkinci olarak da; teorik modelin geçerliliğini deneysel sonuçlarla test etmişler ve bulunan sonuçların uyum içinde olduğunu göstermişlerdir.

Mat ve Kaplan (2001)  $\text{LaNi}_5\text{H}_2$  hidrid reaktöründe hidrojen absorpsiyonu nümerik olarak incelemiştir. Çalışmalarında hidrit yatakta gerçekleşen kompleks ısı ve kütle transferini ve kimyasal reaksiyonu göz önüne almışlardır. Nümerik sonuçlar, hidrit oluşumunun denge basıncından önemli ölçüde etkilendiğini göstermiştir. Elde ettikleri nümerik sonuçlarda hidrit oluşumu sırasında yatakta meydana gelen kimyasal reaksiyon sonucunda sıcaklığın arttığı gözlenmektedir. Belli bir zaman sonra sistemde kimyasal reaksiyon yavaşlamakta ve yatak soğutulduğu için sıcaklık düşmektedir.

Bir sonraki çalışmada Mat ve arkadaşları (2001) hidrit oluşumunu üç boyutlu (3D) olarak modellemişlerdir. Bu çalışmada basınç, sıcaklık ve reaksiyon hızı gibi parametrelerin hidrit oluşumuna etkilerini incelemişler ve elde ettikleri sonuçlarla deneysel sonuçları

karşılaştırmışlardır. Elde edilen sonuçların, deneysel sonuçlarla uyum içinde olduğunu göstermişlerdir.

Mat ve arkadaşları (2001), metal-hidrojen reaktörlerinde ısı ve kütle transferini ve kimyasal reaksiyonu iki ve üç boyutlu olarak incelemişlerdir. Hidrit yatak içinde basınç gradyentinden kaynaklanan akış göz önüne alınmadığı durumda prosesin iki boyutlu, akış dikkate alındığında problemin üç boyutlu olduğu sonucuna varılmıştır.

Mevcut çalışmada ise, reaktör malzemesi olarak  $\text{LaNi}_5$  öngörülmüştür. Hidrojen depolama işlemi esnasında oluşan ısı ve kütle transferini karakterize eden transport denklemleri nümerik olarak çözülmüş ve hidrojen depolanmasına etki eden proses parametreleri detaylı olarak incelenmiştir. Bu parametreler; denge basıncı, ısı transfer katsayısı,  $r/H$  oranı, hidritin metale oranı ( $H/M$ ) oranı, sıcaklık ve reaksiyon hızı gibi hidrojenin depolanmasına etki eden proses parametreleridir. Bu parametrelerin etkileri detaylı olarak araştırılmıştır.



## BÖLÜM II

### TEMEL KAVRAMLAR

#### 2.1 Hidrojenin Özellikleri

Sembolü “H” ile tanımlanan hidrojenin atom ağırlığı 1.00797 ve atom numarası 1’dir. Bu nedenle hidrojen yapı bakımından çok basit, hafif ve kokusuz bir elementtir. Hidrojenin 0°C’ deki yoğunluğu 0.08987 g/lit ve havaya göre özgül ağırlığı 0.0695’dir. Hidrojen yanma ısısı açısından oldukça yüksek ısıya sahip olduğu ve yanma sonucu olarak sadece su buharının ortaya çıktığı bir elementtir. Hidrojen elementinin zehirli etkisi ise bulunmamaktadır. Hidrojen enerjisini birincil enerji kaynakları ile karşılaştırdığımızda;

- kolayca taşınabilme
- tükenmezlik
- yenilenebilirlik
- depolanabilme
- çevreyi kirletmemesi
- birincil enerji kaynaklarına bağımlı olmaması
- yeryüzünde bol miktarda bulunan sudan elde edilebilmesi
- yüksek alevlenme hızı ve geniş tutuşma aralığı
- hafif olması
- yakıt olarak ideallik

gibi bir çok özellikleri bulunmaktadır.



## **2.2 Hidrojenin Depolanması**

Hidrojen enerjisinin kullanılmasında en önemli sorun olarak karşımıza depolama problemi çıkmaktadır. Hidrojen üç farklı şekilde depolanabilmektedir. Bunlar; gaz, sıvı ve bazı metallerle kimyasal reaksiyonu sonucunda katı fazında depolanabilmektedir.

### **2.2.1 Hidrojenin basınçlı gaz olarak depolanması**

Hidrojenin basınçlı gaz olarak depolanması ve bu depolama işlemi neticesinde kullanılacak olan hidrojenin taşınması işlemi çevre sıcaklığında yapılabilmektedir. Yüksek basıncın etkisiyle depo içerisinde sıvı hale geçen hidrojende enerji kaybı olmamaktadır.

Bu yöntemle hidrojen depolanmak için büyük hacimli depo kullanılması gerekmektedir. Büyük hacimli depolar kullanılması bir çok problemi ortaya çıkarmaktadır. Bu sıkıntılardan en önemlisi depolanmayla kullanılacak olan hidrojenin taşınmasında ortaya çıkmaktadır.

### **2.2.2 Hidrojenin sıvı olarak depolanması**

Hidrojenin sıvı olarak depolanmasının bir takım avantaj ve dezavantajları vardır. Bu yöntemle hidrojenin depolanması işlemi diğer yöntemlere göre ağırlık olarak hafif bir depolama şeklidir. Fakat hidrojenin sıvılaştırılması işlemi için gerekli olan enerji çok yüksektir.

Hidrojenin gaz halden sıvı hale geçmesi esnasında hidrojenin bir kısmı buharlaşır. Dolayısıyla hidrojenin gaz fazından sıvı faza geçişi büyük önem taşımaktadır. Ayrıca deponun uğrayacağı herhangi bir zarardan dolayı sıvı halde bulunan hidrojen aniden buharlaşacağı için diğer sıvı yakıtlar gibi çevreye yayılma olasılığı yoktur. Havadan çok daha hafif olan hidrojenin direkt olarak atmosfere yükselir ve yanıcı bir karışım meydana gelmez.

### 2.2.3 Hidrojenin metal hidrid şeklinde depolanması

Hidrojenin metal-hidrid şeklindeki depolama yöntemi, bir tank içerisinde hidrojen gazının metal alaşım parçacıkları ile bileşik oluşturma şeklidir. Bu depolama işleminde kullanılacak olan hidridlerin hafif kütleli olması gerekmektedir. Bu şekilde depolanan hidrojen kullanılmak istenildiğinde hidridlerin ısıtılmasıyla istenilen miktarda hidrojen elde edilebilir

Hidrid maddesinin yapısını oluşturan metaller ve alaşımlar, hidrojeni absorbe etme özelliğine sahiptir. Bu metal ve alaşımlar hidrojeni çok yoğun bir şekilde depolayabilmektedir. Hidrojen katı metallerin kafes şeklindeki iç yapılarına nüfuz etmekte ve böylece kristal yapıda depolama işlemi gerçekleşmektedir.

Hidrojen depolamada bazı karşılaştırmalar aşağıdaki Tablo 2.1 ve Tablo 2.2’de verilmiştir.

Tablo 2.1 Hidrojen depolama sistemlerinde bazı karşılaştırmalar

<b>Hidrojen Depolama Hacmi (1 Nm<sup>3</sup>=90 gr)</b>	<b>Basınç Kabı</b>	<b>Fe-Ti Kabı</b>	<b>Kap (sıvı)</b>
Hacim (l)	10	1.0	1.3
Toplam Kütle (kg)	17	6.5	4.0
Çalışma Basıncı (bar)	0-1000	5-30	1.0

Tablo 2.1’den görüldüğü gibi 90 gr hidrojeni depolayabilmek için gerekli olan Fe-Ti hidrid kabının ağırlığı toplam ağırlığının 6.5 kg, gerekli olan basınç kabının ağırlığı 17 kg, sıvı durumundaki hidrojeni depolamak için basınç kabının toplam ağırlığının ise 4 kg olması gerekmektedir.

Tablo 2.2 Hidrojen depolama sistemlerinin karşılaştırılması

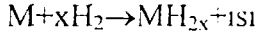
Metal-hidrid	Hidrojenin Miktarı (Wt %)	Hidrojen Depolama Kapasitesi (g/ml)	Tutuşma Isısı (en yüksek)	
			cal/g	cal/ml
MgH <sub>2</sub>	7.0	0.101	2373	3423
Mg <sub>2</sub> NiH <sub>4</sub>	3.16	0.081	1071	2745
VH <sub>2</sub>	2.07	-	701	-
FeTiH <sub>1.95</sub>	1.75	0.096	593	3245
TiFe <sub>0.7</sub> Mn <sub>0.2</sub> H <sub>1.9</sub>	1.72	0.09	583	3050
LaNi <sub>5</sub> H <sub>7</sub>	1.37	0.089	464	3051
R.E.Ni <sub>5</sub> H <sub>6.5</sub>	1.35	0.09	458	3050
Sıvı H <sub>2</sub>	100	0.07	33900	2373
Gazlı H <sub>2</sub> (100 atm. basınç)	100	0.1007	33900	2244
N-Oktan	-	-	11400	8020

Tablo 2.2'de hidrojenin gaz, sıvı ve metal-hidrit şeklinde depolanma işlemlerinin karşılaştırılması verilmiştir. Gaz ve sıvı şeklinde depolama esnasında maksimum tutuşma ısısı 33900 cal/gr iken metal-hidrit yataklarda bu değer daha düşüktür. Hidrojenin gaz ve sıvı şekilde depolanma işlemi esnasında maliyetin yüksek oluşu, deponun ağırlığının fazla oluşu gibi parametrelerin etkisinden dolayı, tutuşma ısıları daha düşük olmalarına rağmen metal-hidrit yataklar tercih edilmiştir.

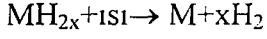
### 2.3 Atık Isı Depolama

Hidrojen, metal veya alaşım ile kimyasal reaksiyona girdiğinde yani hidrit oluşumu esnasında ısı üretilir. Hidrit oluşumu esnasında açığa çıkan ısı ekzotermiktir. Dihidrit oluşumu yani deşarj olayı ise endotermiktir. Hidrit oluşumu esnasında metal-hidrit yatak soğutulmalı, hidritten hidrojeni gerektiğinde almak yani dihidrit işlemi için ise hidrite ısı verilmelidir. Bu işlem aşağıda kimyasal ilişkilerle gösterilmiştir.

Hidrit oluşumu (hidrojen depolama)



Dihidrit oluşumu (hidrojen boşalma)



Burada M metali ifade etmektedir. Hidrit maddesinin yüzey alanının artmasıyla depolanan hidrojen miktarı artar. Bu yüzden reaksiyon hızını artırmak için genellikle hidrit maddeleri toz halinde kullanılırlar. Hidrit oluşumu esnasında ortaya çıkan ısıyı ısıtma alanlarında kullanılabiliriz. Dihidrit oluşumu esnasında ise atık ısı enerjilerinden yararlanılabilir.

## 2.4 Elektrik Depolama

Hidrid maddesinden elektrik depolamasında başlıca iki metod vardır. Bunlar aşağıda gösterilmiştir.

- Direkt yaygın olarak elektrolizli su kullanımı
- Hidrid maddesini elektrot katodu ile kaplayarak ve ısıtma işlemine tabi tutarak toz haline getirmek

Tablo 2.3 Elektrik depolanmasında kullanılan iki metodun karşılaştırılması

Depolama Metodu	Kısmi Verim	Toplam Verim
1 ) elektrik → elektroliz → H <sub>2</sub> → hidrid →	70-80 %	40-50 %
2 ) H <sub>2</sub> → yakıt odası → elektroliz	60-70 %	
3 ) elektrik → elektrot-hidrid elektrot-hidrid → elektrik	85 %	70 %

Tablo 2.3'den görüldüğü gibi elektrik depolanmasında kısmi verimler birinci metoda göre ikinci metod da yüksek olurken toplam verimler de ikinci metod da yine yüksek olduğu görülmektedir.

## 2.5 Isıtma veya Soğutma

Hidrojen, hidrid maddesi ile birlikte ısı üretmek veya ısıyı havaya atmak için kullanılabilir. Isıtma veya soğutma sistemleri hidrid tankları, güneş kolektörleri ve ısı deęiřtiricileri ile bir sistem oluşturulur. Burada genel yapı hidrid tankları hidrojen boruları ile birbirine bağlanır. Bu tanklar içerisinde çeřitli metaller bulunabilir. Bu metaller; Ca ve Ni<sub>5</sub>, CaNi<sub>5</sub>, La ve Ni<sub>5</sub>, LaNi<sub>5</sub> gibi hidrid maddeleri bulunabilir.

## 2.6 Elektrik Üretilmesi

Eđer türbin veya genleşme motorunda, hareketli hidrojen bir hidrid tankından geçirilirse mekanik ve elektrik gücü üretir. Sistem olarak ısıtma veya soğutmaya oldukça benzeyen bir sisteme sahiptirler. Tanklar içerisinde benzer yapılarda maddeler içermektedir.

## 2.7 Hidrojen Temizleme

Hidrojenin yeryüzünde saf halde deęil de diđer elementlerle bileşik halde bulunması, bir çok uygulamada, bitkisel yağlar ve birçok labaratuvar deneylerinde, yüksek saflıktaki hidrojene ihtiyaç vardır. Hidrid maddesinin özellięi hidrojen absorbe etmesidir. Hidrid maddesinin özelliklerinin kullanılmasıyla hidrojen temizleme olayı basit ve ucuz bir yöntem olarak deęerlendirilebilir.

## 2.8 Döteryum Ayırma

Hidrojen saflıęı için kullanılan hidrid özellikleri, döteryum ayrılmasında kullanılır. Yüksek saflıktaki döteryum ve ağır su nükleer endüstri de kullanılır. Döteryum ayırma sisteminde ise ilk önce hidrojen döteryum karışımı sağlanır. Daha sonra hidrojen molekülündeki döteryum oranı tespit edilir. Buradaki işlemler belirli bir basınç altında ve belirli bir tank kapasitesinde gerçekleşmektedir.

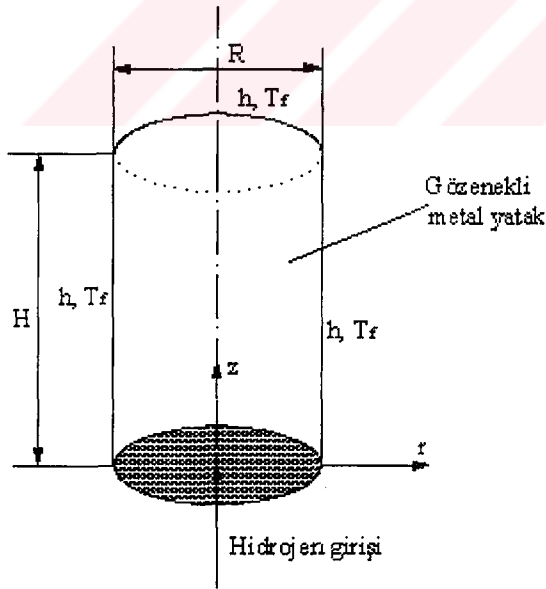
## BÖLÜM III

### MATERYAL VE METOD

#### 3.1 Matematiksel Model

Bu çalışmada, metal-hidrit yataklarda ısı transferi, kütle transferi ve kimyasal reaksiyonlar incelenmiş ve bir matematiksel model geliştirilmiştir. Matematiksel modeli karakterize eden enerji denklemi, kütle dengesi ve kinetik reaksiyon denklemleri nümerik olarak çözülmüştür.

Metal-hidrit reaktör şekil 3.1’de verilmiştir. Hidrojen gözenekli ortama sabit sıcaklıkta şarj edilmektedir. Reaktör üstten ve yan cidardan soğutulmaktadır.



Şekil 3.1 Metal-hidrit reaktörün şematik olarak gösterilişi.

### 3.1.1 Hidrojen depolama işlemini karakterize eden denklemler

Enerji denklemi:

Akışkan için;

$$\varepsilon \rho_g C_{pg} \frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial z}) - H_{gs} (T_g - T_s) S \quad (3.1)$$

Katı için;

$$(1 - \varepsilon) \rho_s C_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \lambda_{se} \frac{\partial T_s}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (\lambda_{se} \frac{\partial T_s}{\partial z}) + H_{gs} (T_g - T_s) S - m(\Delta H^0 + C_{ps} T_s - C_{pg} T_g) \quad (3.2)$$

Enerji denklemi katı ve gaz fazları için termal dengede olduğu farz edilerek;

$$(\rho C_p)_e \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \lambda_e \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (\lambda_e \frac{\partial T}{\partial z}) - m(\Delta H^0 - T(C_{pg} - C_{ps})) \quad (3.3)$$

eşitliği yazılabilir. Burada  $\rho$ ,  $C_p$ ,  $\lambda$  sırasıyla yoğunluk, özgül ısı ve ısı iletim katsayısıdır.

$(\rho C_p)_e$  ve  $\lambda_e$  ise,

$$(\rho C_p)_e = (\varepsilon \rho_g C_{pg} + (1 - \varepsilon) \rho_s C_{ps}) \quad (3.4)$$

$$\lambda_e = \varepsilon \lambda_g + (1 - \varepsilon) \lambda_s \quad (3.5)$$

bağıntısı ile ifade edilebilir. Burada  $\varepsilon$  gözeneklilik,  $\lambda_g$  ve  $\lambda_s$  ise sırasıyla gazın ve katının ısı iletim katsayılarıdır.

Hidrojen kütle dengesi:

$$\varepsilon \frac{\partial(\rho_g)}{\partial t} = -m \quad (3.6)$$

ideal gaz kanunundan  $\rho_g = M_g P_g / RT_g$  hidrojenin yoğunluğu bulunabilir.

Katı fazının kütle dengesi:

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial(\rho_s)}{\partial t} = m \quad (3.7)$$

şeklinde yazılabilir.

Kinetik reaksiyon:

$$m = -C_a \exp\left(-\frac{E_a}{RT_s}\right) \ln\left(\frac{P_g}{P_{eq}}\right) (\rho_{ss} - \rho_s) \quad (3.8)$$

Burada  $C_a$  malzemeye bağlı sabit,  $\rho_{ss}$  katı fazın doymuş haldeki yoğunluğu,  $E_a$  aktivasyon enerjisi ve  $P_{eq}$  ise denge basıncını ifade etmektedir. Denge basıncı van't Hoff denklemi yardımıyla hesaplandı.

$$\ln P_{eq} = A - \frac{B}{T} \quad (3.9)$$



Burada  $A$  ve  $B$  malzeme sabitleri olup, sırayla 52,5 ve 43876,45 değerleri almaktadır (Jemni ve arkadaşları, 1999).

### Başlangıç ve Sınır Şartları:

Başlangıçta hidrid yatağının her tarafı aynı sıcaklık ve basınçta olduğu kabul edilmiştir. Buna göre başlangıç şartı;

$t=0$

$$T = T_0 \quad (3.10)$$

Reaktörde soğutucu akışkanın sıcaklığı  $T_f$ 'dir. Hidrojen  $z=0$  noktasında şarj edilmekte bu durumda sınır şartları;

$t>0$

$$T(r, z) = T_0 \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial T(0, z)}{\partial r} = 0 \quad (3.12)$$

$$k \frac{\partial T(R, z)}{\partial r} = h(T(R, z) - T_f) \quad (3.13)$$

$$k \frac{\partial T(r, H)}{\partial z} = h(T(r, H) - T_f) \quad (3.14)$$

yazılabilir.

Tablo 3.1 Metal ve hidrojenin termofiziksel özellikleri

	Metal (LaNi <sub>5</sub> )	Hidrojen
Yoğunluk, $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	4230	0.0838
Özgül ısı, $C_p$ (J/kgK)	419	14.89
Isı iletim katsayısı, $\lambda$ (W/mK)	1.6	$0.761147 \cdot 10^{-4}$
Gaz giriş sıcaklığı, $T_0$ (K)		290
Isı transfer katsayısı, $h$ (W/m <sup>2</sup> K)	500	
Gözeneklilik, $\varepsilon$ (%)	50.5	
Aktivasyon enerjisi, $E_a$ (J/mol H <sub>2</sub> )	25817	
Üniversal gaz sabiti, $R$ (J/kgK)	8.13	

Tablo 3.1’de hidrit oluşumu esnasında metal (LaNi<sub>5</sub>) ve hidrojenin yoğunluk, özgül ısı, ısı iletim katsayısı, gaz giriş sıcaklığı, ısı transfer katsayısı gözeneklilik yüzdesi, aktivasyon enerjisi ve üniversal gaz sabiti gibi termofiziksel sabitler nümerik çözümde kullanılmıştır.

## BÖLÜM IV

### NÜMERİK METOD

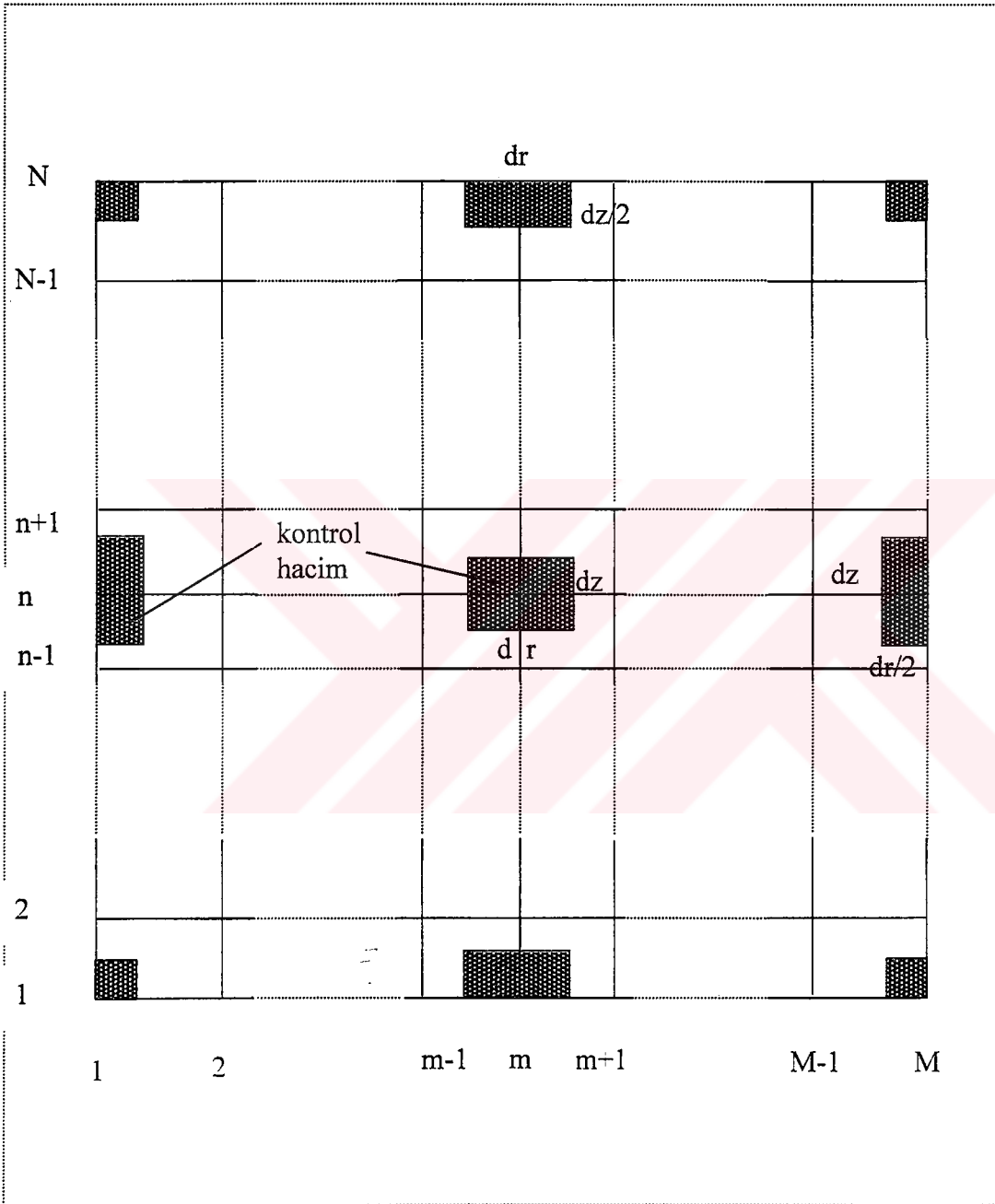
#### 4.1 Nümerik Çözüm

Hidrit oluşumunu karakterize eden transport denklemleri, çözüm hacmi küçük bölgelere ayrıldı ve her bir bölge için integre edilerek, PHOENICS programı ile çözüldü. PHOENICS bir CFD programı olup aşağıdaki genel transport denklemini çözmektedir.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho u\phi) = \nabla(\Gamma\nabla\phi) \quad (4.1)$$

burada  $\phi$  genel bir değişken olup süreklilik denkleminde 1, momentum denkleminde  $u$  veya  $v$  ve enerji denkleminde  $h$  değeri almaktadır. Bu denklemde olmayan özel kaynak terimlerinde PHOENICS' in temel yapısına uygun bir şekilde yazılan bir subroutinle eklenmiştir. Metal hidrit yatak  $r, z$  yönlerinde sırayla 30 ve 60 gride bölünmüştür.

Kontrol hacimdeki denklemler sonlu farklar metodu kullanılarak nümerik olarak çözülmüştür.  $P_{n,m}$  grid noktaları oluşturularak tanımlamalar yapılmış ve kontrol hacim noktaları hesaplanmıştır. Burada implicit şema kabul edilerek denklemler kontrol hacim içerisinde hesaplanmıştır.



Şekil 4.1 Nümerik Grid

Enerji denklemi katı ve gaz için termal dengede olduğu farz edilerek ele alınan (3.3) denklem kontrol hacminde integre edilirse;

$$(\rho C_{ps}) \int_w^e \int_s^i \int_t^{t+\Delta t} \frac{dT}{dt} dt dr dz = \int_w^e \int_s^i \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \lambda \frac{dT}{dr}) dz dr dt + \quad (4.2)$$

$$\int_w^e \int_s^i \int_t^{t+\Delta t} \frac{d}{dz} (\lambda \frac{dT}{dz}) dz dr dt - \int_w^e \int_n^i \int_t^{t+\Delta t} s dz dr dt$$

haline gelir. İntegrasyon sonlu farklar şeklinde yazılırsa denklem;

$$(\rho C_{ps})_{ef} \Delta z \Delta r (T_p - T_p^o) = \left(\frac{1}{r}\right)_n (r \lambda)_n \frac{(T_N - T_p)}{(\delta r)_n} \Delta z \Delta t - \left(\frac{1}{r}\right)_s (r \lambda)_s \frac{(T_p - T_s)}{(\delta r)_s} \Delta z \Delta t + \lambda_e \frac{(T_E - T_p)}{(\delta z)_e} \Delta r \Delta t - \frac{\lambda_w (T_p + T_w)}{(\delta z)_w} \Delta r \Delta t - s_c \Delta z \Delta r \Delta t \quad (4.3)$$

bu denklem sıcaklığı elde edilecek P hücresi ve komşu hücrelerin sıcaklıkları cinsinden;

$$a_p T_p = a_E T_E + a_w T_w + a_N T_N + a_s T_s + b \quad (4.4)$$

yazılabilir. Bu denklem;

$$b = \frac{(\rho C_{ps})_{ef} \Delta z \Delta r}{\Delta t} - s_c \Delta t \Delta z \Delta r \quad (4.5)$$

$$a_E = \frac{(\lambda_e \Delta r)}{(\delta z)_e} \quad (4.6)$$

$$a_w = \frac{\lambda_w \Delta r}{(\delta z)_w} \quad (4.7)$$

$$a_N = \frac{(\lambda r)_n \Delta z}{r_n (\delta r)_n} \quad (4.8)$$

$$a_s = \frac{(\lambda r)_s \Delta z}{r_s (\delta r)_s} \quad (4.9)$$

$$a_p = a_E + a_w + a_N + a_s \quad (4.10)$$

olarak elde edilir.



## BÖLÜM V

### NÜMERİK SONUÇLAR

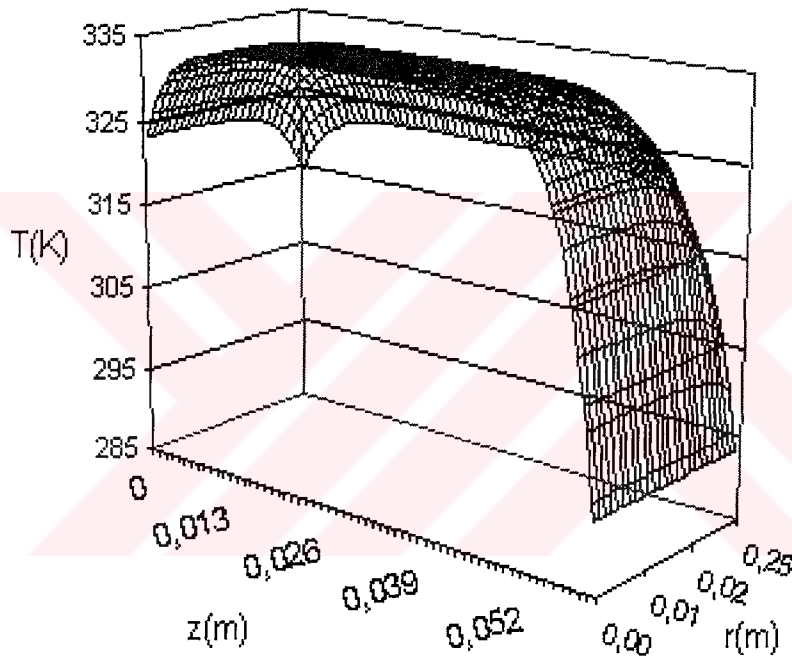
Bu çalışmada, hidrojenin depolama prosesinin detayları ve etki eden proses parametreler araştırılmıştır. Bu proses parametrelerden ısı transfer katsayısı(h) ve yarıçapın yüksekliğe oranı (r/H) detaylı olarak incelenmiştir. Ayrıca yatak içerisindeki sıcaklık ve konsantrasyonun zamana göre değişimleri grafikler halinde verilmiştir.

#### 5.1 Depolama Prosesinin Detayları

Hidrojen reaktöre sabit sıcaklık ve basınçta şarj edildiği kabul edilmiştir. Hidrojenin giriş sıcaklığı 290 K olup soğutucu akışkan sıcaklığına eşittir.  $t > 0$  anlarında hidrojenin yatağa şarj edilmesiyle depolama prosesi başlamaktadır. Kimyasal reaksiyonlar sonucu ortaya çıkan ısı, yatakta sıcaklığın hızlıca artmasına sebep olur.

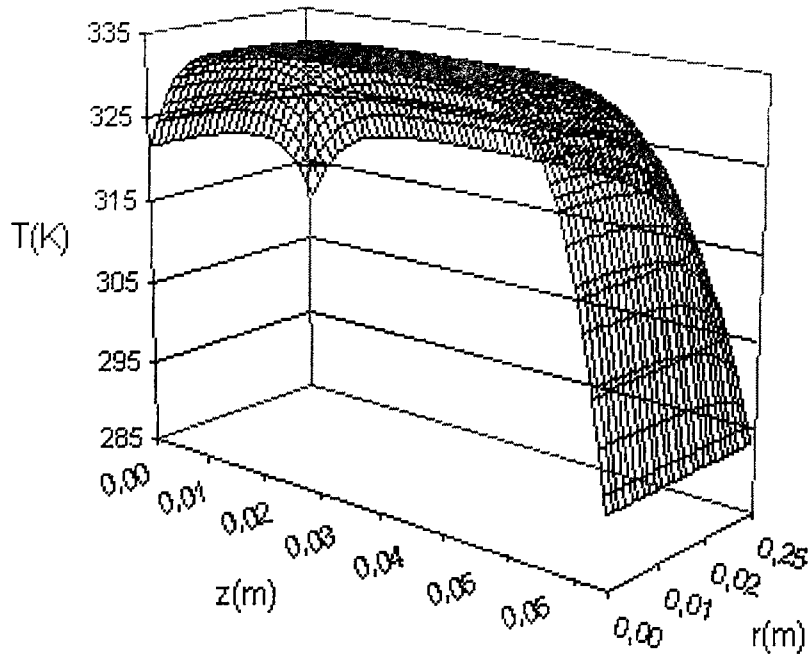
Farklı zamanlarda, r-z düzleminde sıcaklık dağılımları şekil 5.1-5.9 da verilmiştir.  $t=100$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.1'de görülmektedir. Yatak içinde sıcaklığın başlangıç sıcaklığına göre önemli ölçüde arttığı görülmektedir. Yatak içinde bu sıcaklık artışı ekzotermik kimyasal reaksiyonlardan kaynaklanmaktadır. Reaktörün yan ve üst cidarlarında soğutucu akışkan etkisiyle sıcaklık düşüktür.  $t=300$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.2'de görülmektedir. Bu saniyedeki sıcaklık dağılımı  $t=100$  saniyedeki sıcaklık dağılımına benzemekte fakat cidardaki soğutma etkisi daha büyüktür.  $t=500$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.3'de verilmiştir. Görüldüğü gibi kimyasal reaksiyon reaktörün merkezinde devam etmektedir. Dolayısıyla merkezdeki sıcaklık yüksek olmaktadır. Cidarlara yakın yerlerde ise soğutucu akışkan etkisi ve kimyasal reaksiyonun azalması nedeniyle sıcaklık önemli miktarda düşmektedir.  $t=1000$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.4'de verilmiştir. Merkez bölgeleri ile cidarlar arasında büyük sıcaklık gradyanlarının olduğu görülmüştür. Bu durum kimyasal reaksiyonun cidara yakın bölgelerde önemli ölçüde tamamlandığını fakat merkezde devam ettiğini göstermektedir.

$t=1500$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.5'de verilmiştir. Bu aşamada kimyasal reaksiyonun reaktörün merkezinde devam ettiği görülmektedir.  $t=2000$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.6'da verilmiştir. Bu aşamada merkez bölgesinde oluşan büyük sıcaklık gradyentinde azalmaya başladığı görülmektedir.  $t=2500$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.7'de verilmiştir. Bu saniyede ise sıcaklık gradyenti iyice azalmıştır. Reaktör merkezinde az da olsa ısı üretiminin devam ettiği görülmektedir.  $t=3000$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.8'de verilmiştir. Bu aşamada yatağın merkez bölgesindeki ve cidardaki sıcaklık gradyentinin denge durumuna iyice yaklaştığı fakat merkez bölgelerde çok az bir miktarda ısı üretimi olduğu görülmektedir.  $t=4000$  saniyedeki sıcaklık dağılımı şekil 5.9'da verilmiştir. Bu aşamada ise merkez bölgesinde ve cidarlarda da sıcaklık gradyeninin denge durumuna ulaştığı görülmektedir.

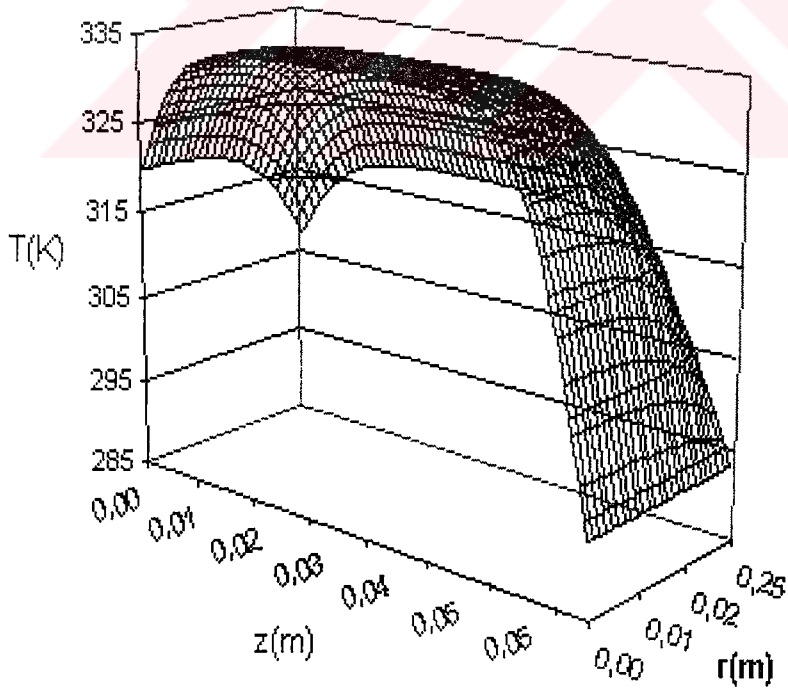


Şekil 5.1  $t=100$  sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı

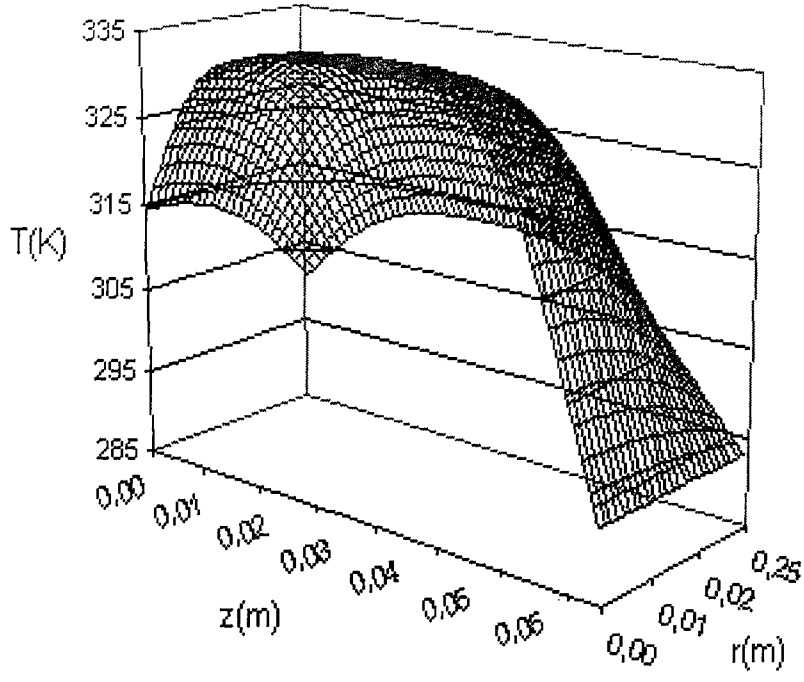




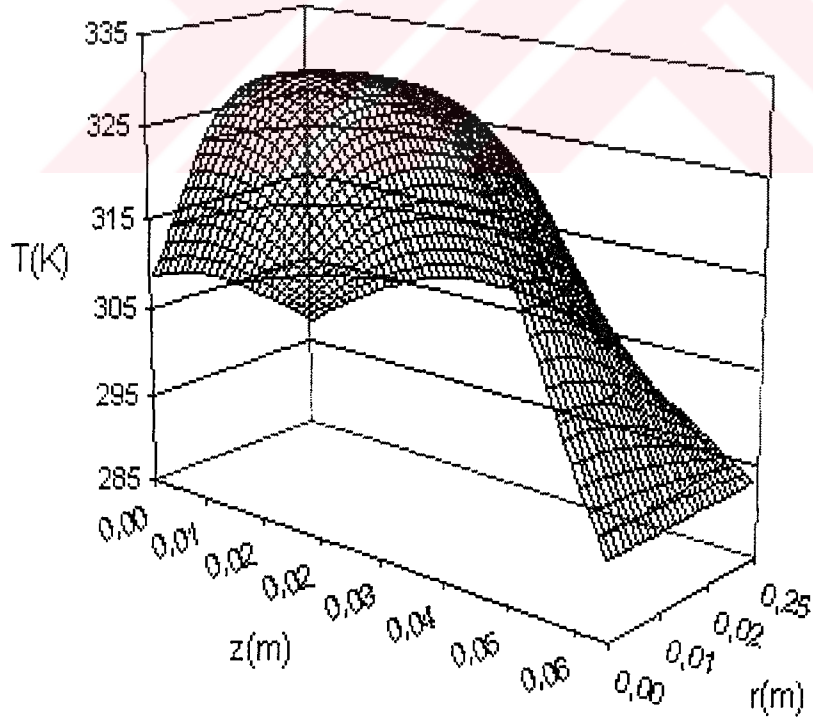
Şekil 5.2  $t=300$  sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı



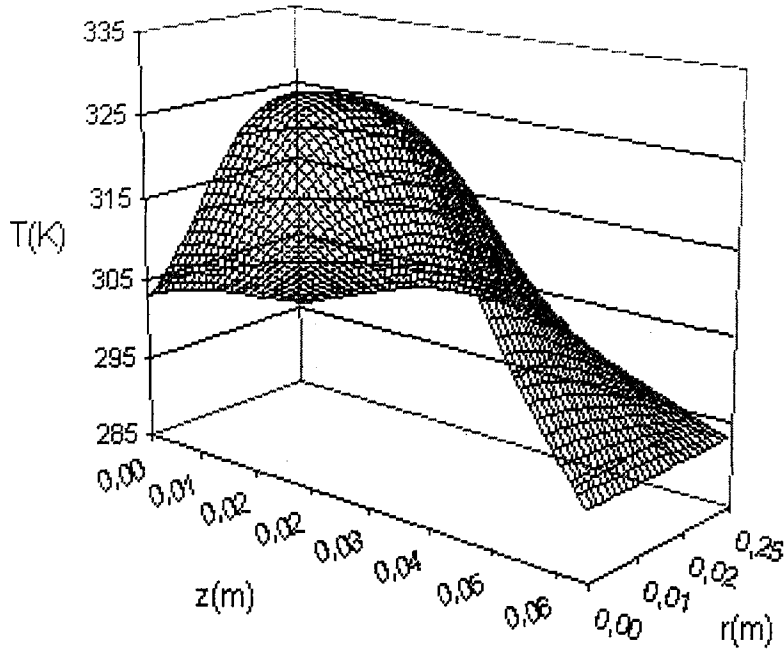
Şekil 5.3  $t=500$  sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı



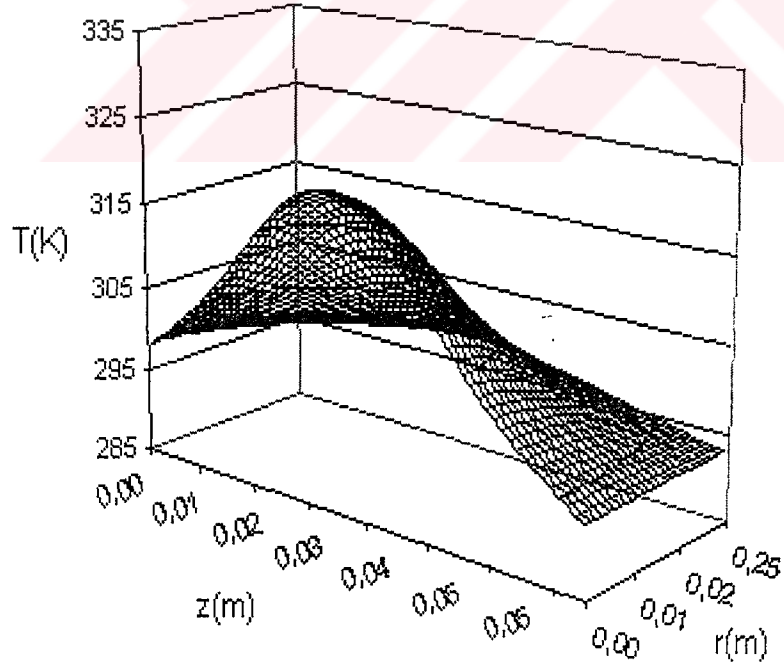
Şekil 5.4  $t=1000$  sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı



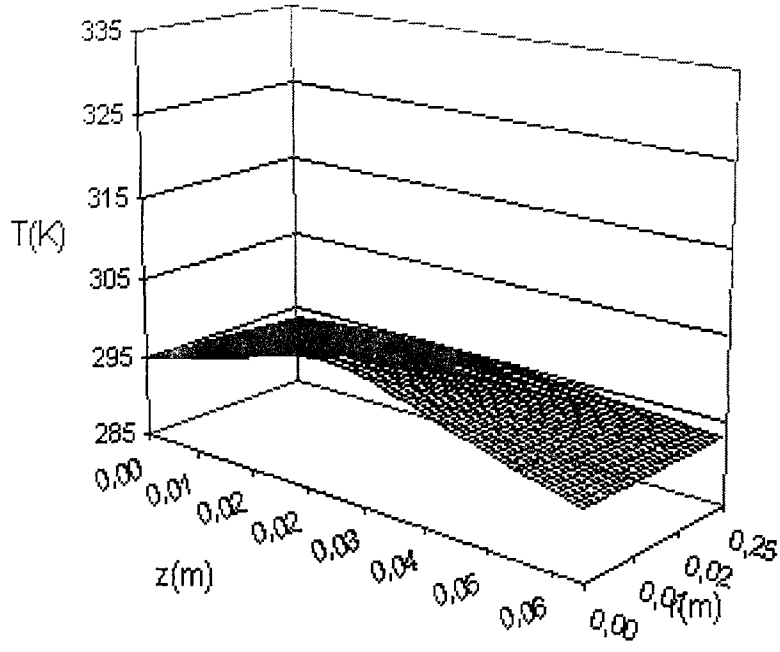
Şekil 5.5  $t=1500$  sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı



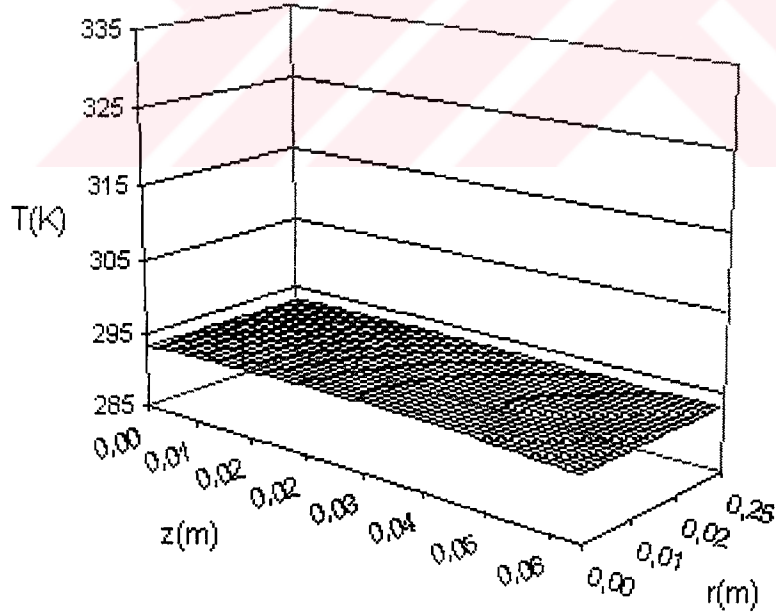
Şekil 5.6  $t=2000$  sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı



Şekil 5.7  $t=2500$  sn'de reaktördeki sıcaklık dağılımı

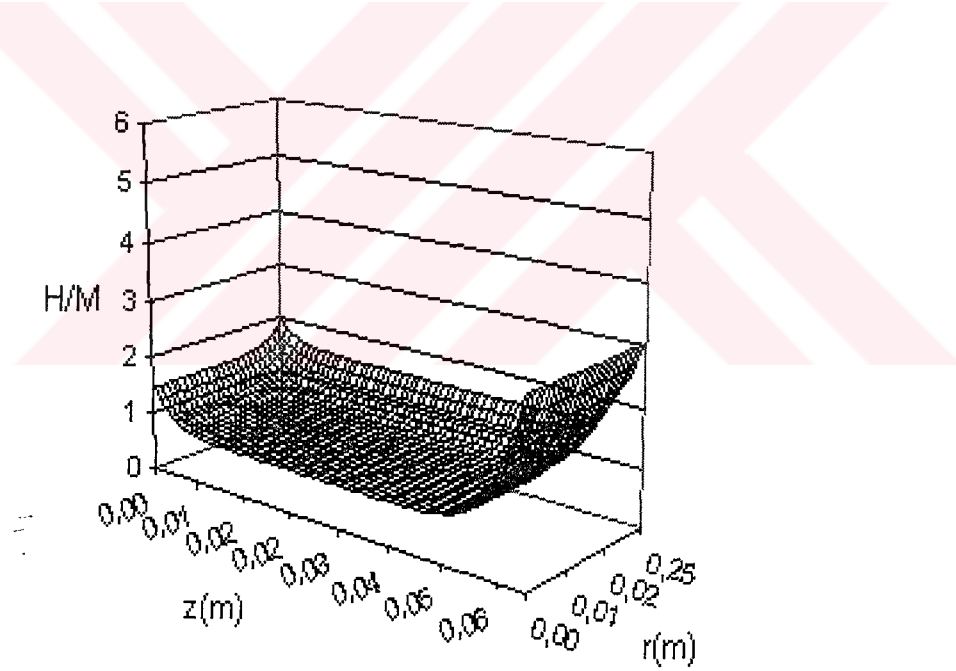


Şekil 5.8  $t=3000$  sn`de reaktördeki sıcaklık dağılımı

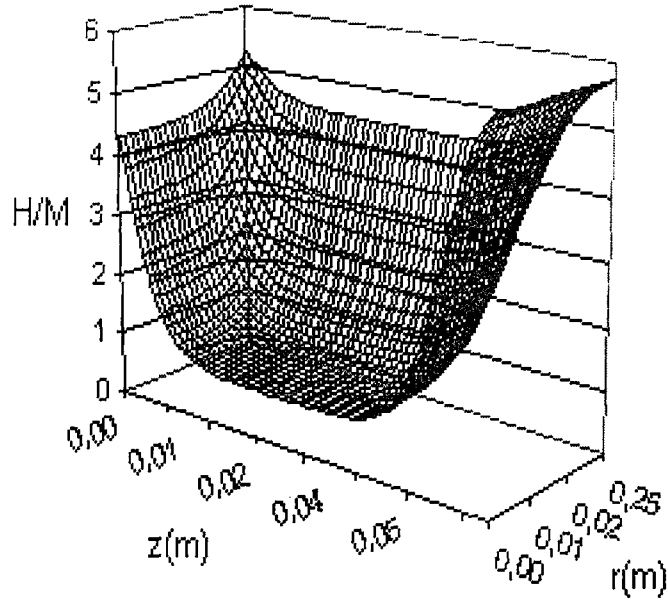


Şekil 5.9  $t=4000$  sn`de reaktördeki sıcaklık dağılımı

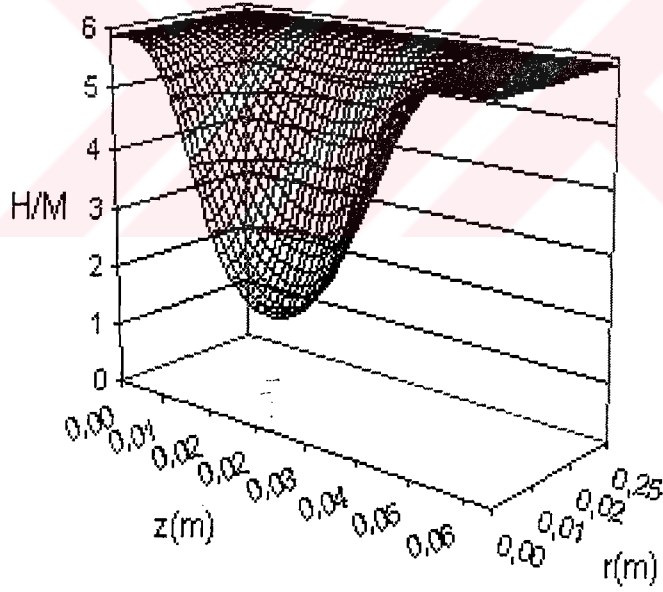
Yatak içindeki hidrit oluşumunun zamana göre değişimi, H/M (oluşan hidritin metale oranı) yüzeyleri ile şekil 5.10-5.15'de verilmiştir. Şekil 5.10'da  $t=100$  saniyede yatak içindeki oluşan hidrit oranı gösterilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi hidrit oluşumu reaktörün girişinde ve soğutulan yan yüzeylerde daha hızlıdır. Bunun nedeni düşük sıcaklık bölgelerinde reaksiyonun daha hızlı gerçekleşmesidir. Yatak sıcaklığının hidrit oluşuma etkisi şekil 5.11'de daha belirgin olarak ortaya çıkmıştır.  $t=500$  saniyede soğutulan cidarla merkez arasında çok önemli bir H/M gradyenti meydana gelmiştir.  $t=1500$  saniyede yatak içindeki hidrit oranı şekil 5.12'de gösterilmiştir. Görüldüğü gibi cidara ve girişe yakın bölgelerdeki hidrit oluşumu bitmiş metal hidrojen doygunluğa ulaşmıştır. Hidrojen şarjı 1500 saniyede tamamlandığı halde merkezde hidrit oluşumu devam etmektedir. Prosesin yavaş olması ve yatağın cidarı ve merkezi arasında hidrit miktarındaki önemli fark, depolama ortamı metalin düşük ısı iletim katsayısından kaynaklanmaktadır. Depolama prosesinin son aşamaları  $t=2500$  saniyedeki ve  $t=3000$  saniyedeki durumlar şekil 5.13 ve şekil 5.14'de gösterilmiştir. şekil 5.14'den anlaşıldığı gibi  $t=3000$  saniyede yatak içinde hidrit oluşumu büyük bir çoğunlukla tamamlanmıştır.



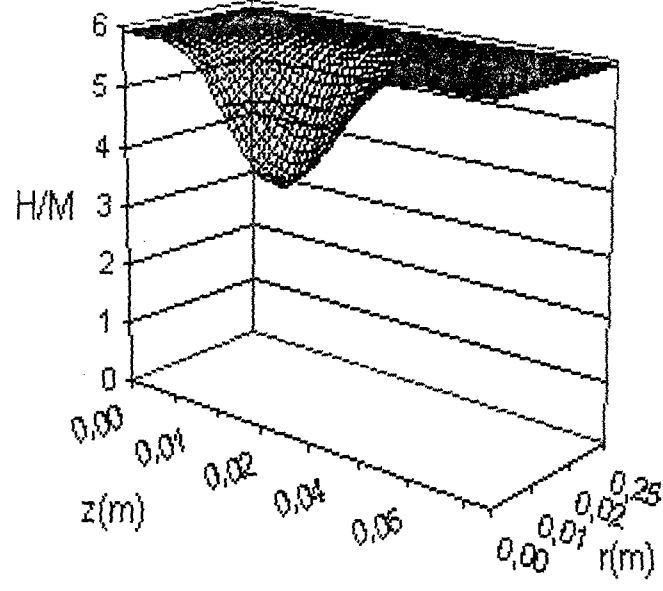
Şekil 5.10  $t=100$  sn'de yatak içinde H/M değişimi



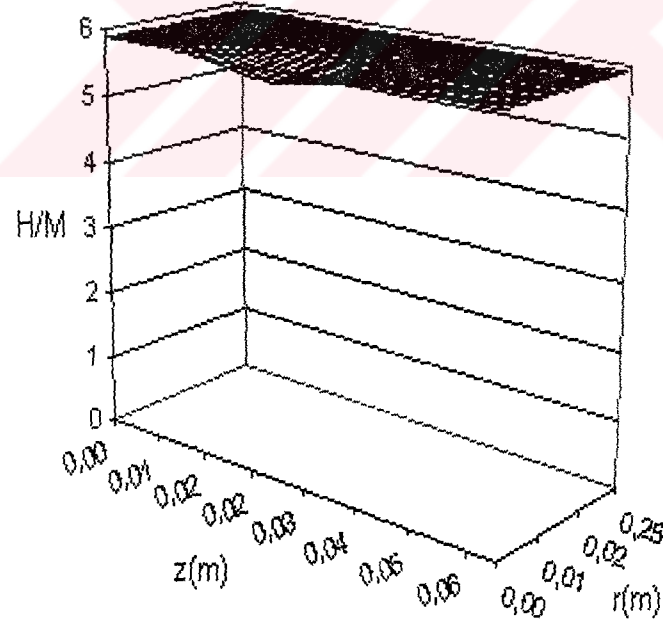
Şekil 5.11  $t=500$  sn'de yatak içinde  $H/M$  değişimi



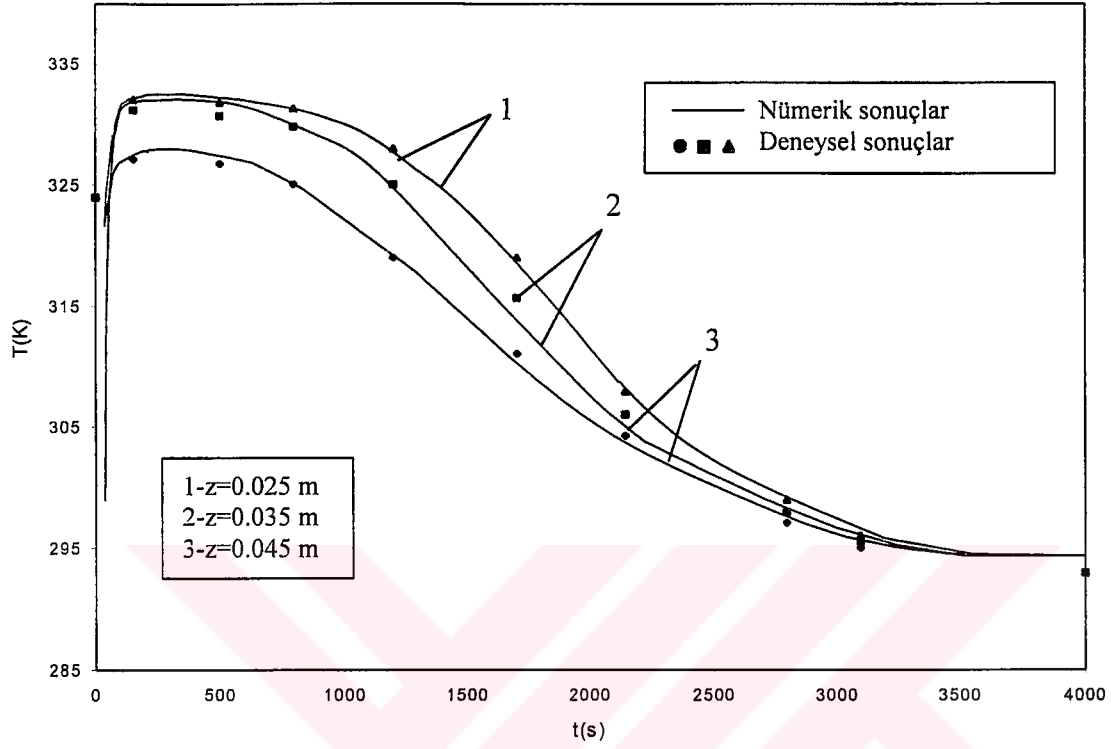
Şekil 5.12  $t=1500$  sn'de yatak içinde  $H/M$  değişimi



Şekil 5.13  $t=2500$  sn'de yatak içinde H/M değişimi



Şekil 5.14  $t=3000$  sn'de yatak içinde H/M değişimi



Şekil 5.15 Sıcaklığın zamana göre değişimi ve deneysel karşılaştırılması

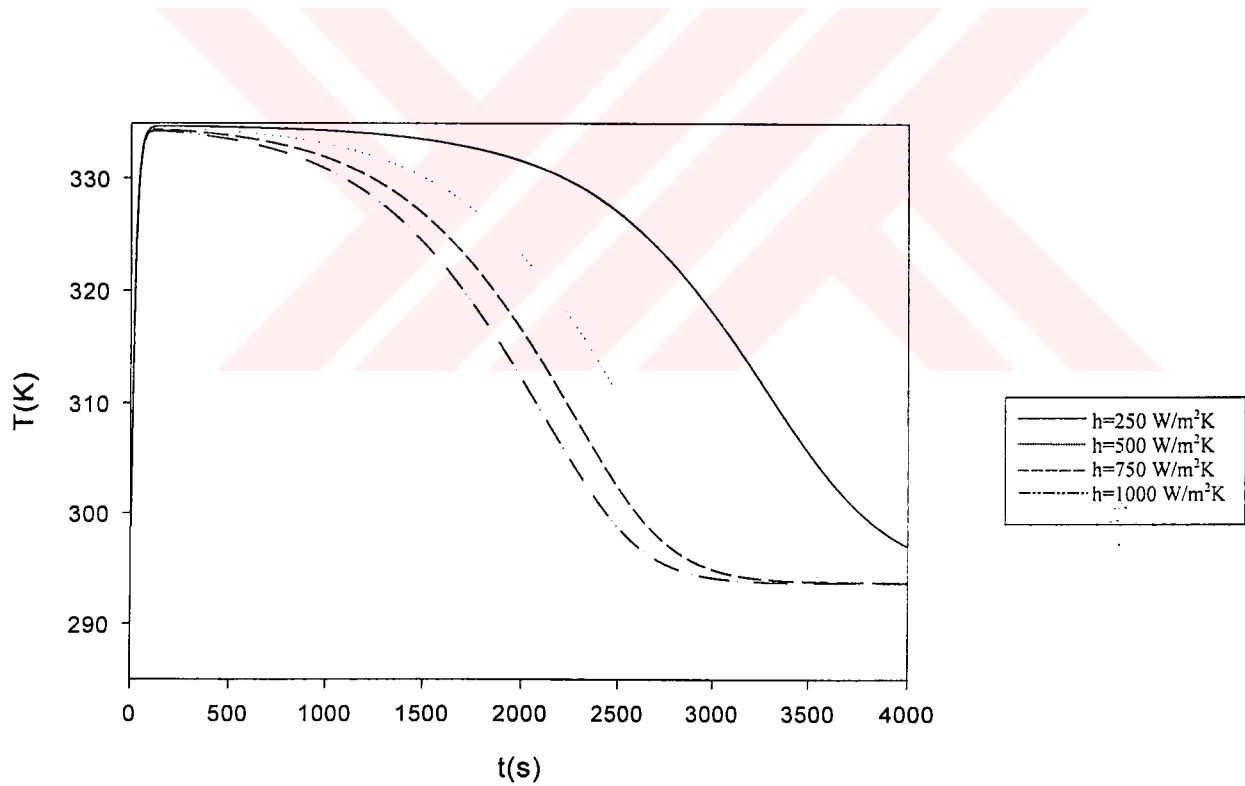
Şekil 5.15’de elde edilen nümerik değerler literatürdeki deneysel sonuçlarla (Jemni ve arkadaşları, 1999) karşılaştırılmıştır. Genel olarak nümerik sonuçlarla deneysel sonuçların uyum içinde olduğu görülmektedir. Deneysel sonuçlarla hesaplanan sonuçlar arasındaki küçük farkın termofiziksel özellikler ile reaksiyon kinetiğindeki belirsizliklerden olduğu kabul edilebilir.



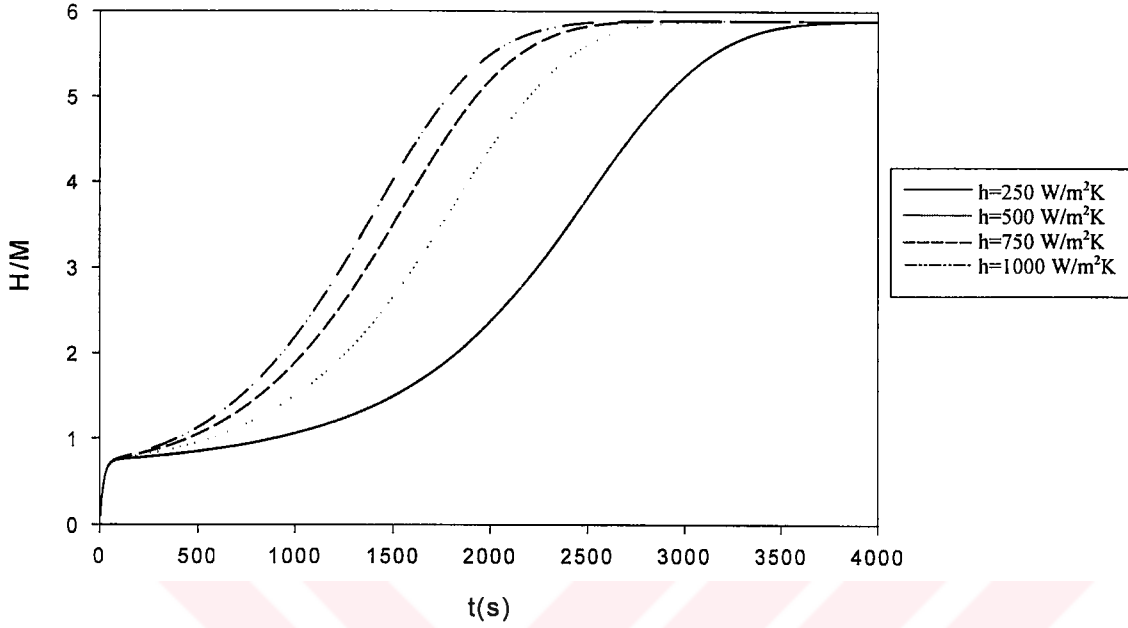
## 5.2 Isı Transferinin Hidrid Oluşumuna Etkisi

Cidarlarda meydana gelen ısı transfer miktarının hidrit oluşumuna etkisi şekil 5.16 ve şekil 5.17'de verilmiştir. Bunun için cidardaki ısı transfer katsayısı 250-1000 W/m<sup>2</sup>K arasında değiştirilmiştir. Şekil 5.16'da yatak içinde  $r=r_0/2$ ,  $z=H/2$  noktalarındaki sıcaklığın değişimi verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi yüksek ısı transfer miktarında yatak içinde hızlı bir şekilde ısıl dengeye ulaşılmakta, ısı transfer katsayısı düşürüldüğünde, ısıl dengeye ulaşmak daha uzun zaman almaktadır.

Şekil 5.17'de ısı transfer miktarının hidrit oluşumuna etkisi gösterilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi ısı transfer miktarı arttıkça hidrit oluşumu hızlanmaktadır. Fakat oluşum hızındaki artış  $h=500$  W/m<sup>2</sup>K kadar ısı transfer katsayısı ile önemli ölçüde artmakta fakat bu değerden sonra reaksiyon hızındaki artış ısı transfer katsayısı artış miktarından daha az olmaktadır. Bu durum yatağın düşük iletkenlik katsayısı ile açıklanabilir.

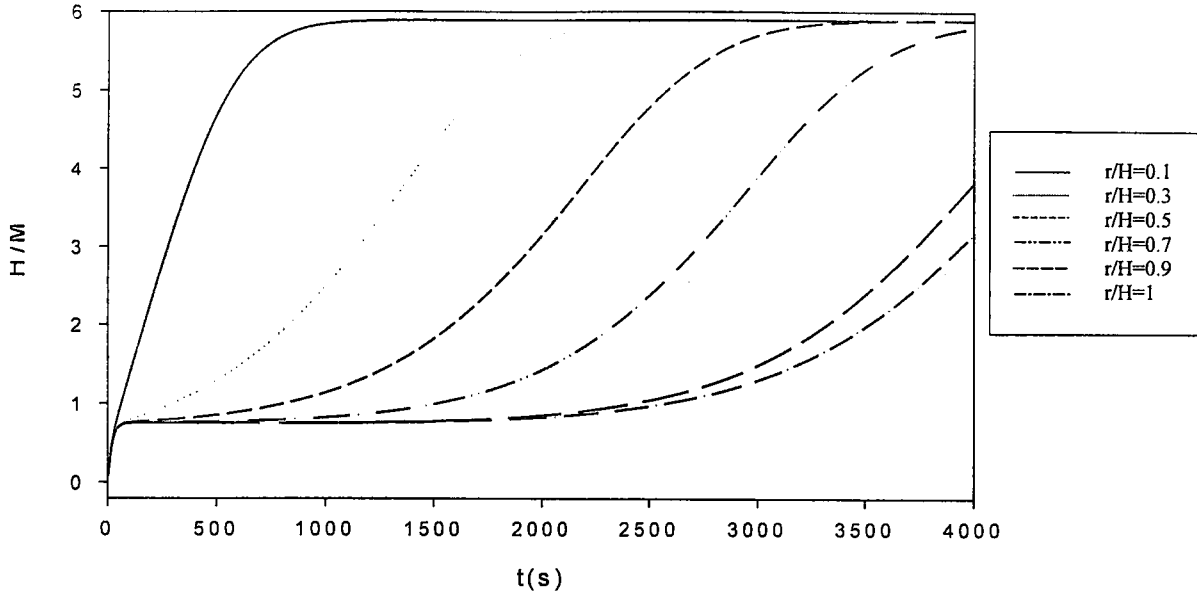


Şekil 5.16 Isı transfer miktarının yatak sıcaklığı üzerindeki etkisi

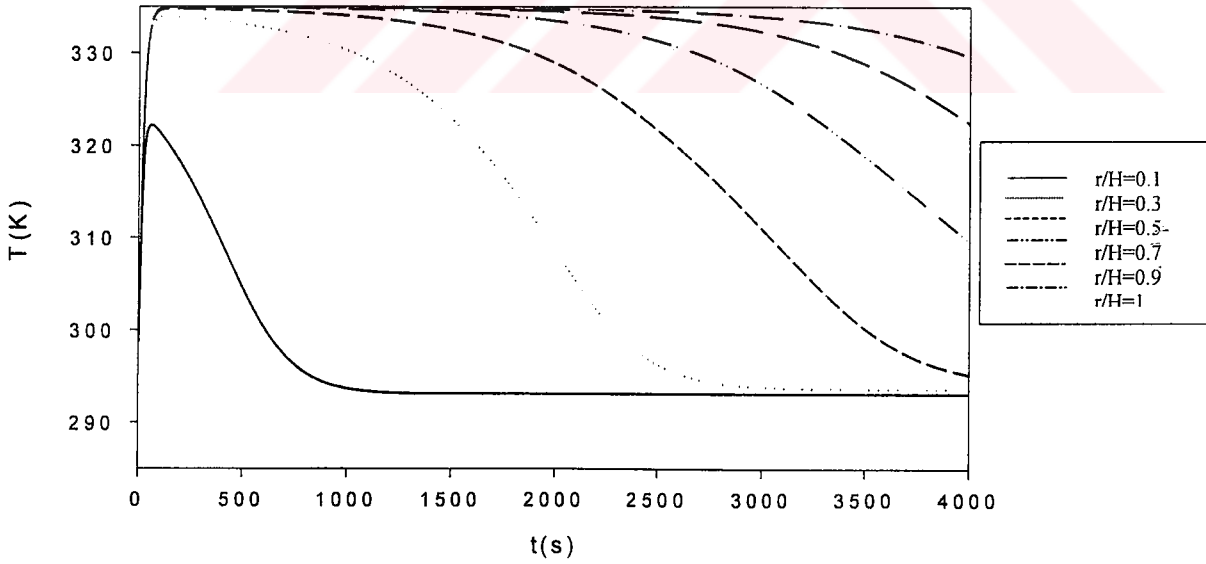


Şekil 5.17 Isı transfer miktarının yatak geometrisinde hidrit oluşumuna etkisi

Şekil 5.18 ve şekil.5.19'da  $r/H$  (yatak yarıçapının yüksekliğe oranı) oranının hidrit oluşumuna etkisi verilmiştir.  $r/H$  oranı etkisi  $0.1 \leq r/H \leq 1$  aralığında araştırılmıştır. Şekil 5.18 hidrit oluşum hızının zamana göre değişimini göstermektedir. Şekilde  $H/M$  oranının bütün yatak içindeki dağılımı ortalama değer alınarak verilmiştir.  $r/H$  oranının küçük değerlerinde hidritleme reaksiyonu önemli ölçüde hızlanmıştır. Küçük  $r/H$  oranı ince ve uzun yatağa karşılık gelmektedir. Bu sonuç bize  $r/H$  oranının reaktör tasarımında çok önemli bir faktör olduğunu göstermektedir. Yatak malzemesinin ısı iletkenliğinin çok düşük olduğu için  $r/H$  oranı küçük olan hidrit yataklarda çok daha iyi bir ısı transferi elde edilebilir. Yani hidritleme süresini kısaltmak için yatak yarıçapının mümkün olduğu kadar küçük seçilmesi gerekir. Şekil 5.19'da  $r/H$  oranına bağlı olarak  $r=R_0/2$  ve  $z=H/2$  noktasındaki sıcaklığın zamana göre değişimini gösterilmektedir. Burada şunu açıkça görmekteyiz ki  $r/H=1$  değeri için, sıcaklık  $t=3000$  saniyeye kadar önemli ölçüde değişmemektedir. Ancak  $r/H=0.1$  için sıcaklık bu noktada denge durumuna kısa bir sürede (yaklaşık 100 saniye) ulaşmaktadır.



Şekil 5.18 Yatak geometrisinin  $r/H$  oranına bağlı olarak hidrid oluşumuna etkisi



Şekil 5.19 Yatak içinde sıcaklığın  $r/H$  oranına bağlı olarak zamana göre değişimi

## BÖLÜM VI

### SONUÇ ve ÖNERİLER

Bu çalışmada metal-hidrit reaktörde iki boyutlu ısı ve kütle transferi analizi yapılmıştır. Yatakta hidrit oluşumunun denge basıncına göre çok önemli ölçüde değiştiği görülmüştür. Ekzotermik reaksiyondan dolayı açığa çıkan ısının yataktan uzaklaştırılması gerekmektedir. Yüksek sıcaklıklarda denge basıncının artmasından dolayı hidrit oluşumu yavaşlamaktadır.

Hesaplanan sonuçlar literatürdeki deneysel sonuçlarla mukayese edilmiştir. Deneysel sonuçlarla, hesaplanan sonuçlar arasındaki farkın termofiziksel özellikleri ile reaksiyon kinetiğindeki belirsizliklerden dolayı olduğu kabul edilebilir. Hidrit oluşumunda ısı transfer katsayısı ile yatağın  $r/H$  oranının etkisi araştırıldı. Hidrit oluşumu reaktör cidarlarında soğutma artıkça önemli ölçüde artmaktadır. Bununla birlikte belirli bir soğutma miktarından sonra soğutmanın artırılması hidrit oluşumunu fazla artırmamaktadır. Nümerik sonuçlar aynı zamanda hidrit yatakların ısı transferini iyileştirmek için küçük çaplı dizayn edilmeleri gerektiği gösterilmiştir.

Bu çalışmanın devamı olarak ileriki çalışmalarda;

- Hidrojen depolanmasına etki eden proses parametrelerden hızın etkileri araştırılması
- Hidrit oluşumu üç boyutlu (3D) olarak incelenmesi
- Geliştirilen matematiksel modelin geçerliliği analitik ve deneysel çalışmalarla desteklenmesi

ele alınacaktır.

## KAYNAKLAR

- Lucas, G. G., and Richards, W. L., "Mathematical Modelling of Hydrogen Storage Systems", Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 9/3, pp.225-231, 1984.
- Mayer, U., Groll, M., Supper, W., "Heat and mass transfer in metal hydride reaction beds: Experimental and theoretical results", J Less-Common Metals;Vol. 131, pp: 235-44, 1987.
- Bernauer, O., "Metal Hydride Technology", Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 13/3, pp. 181-190, 1988.
- Sun, Da-Wen and Deng, Song-Jiu, "Numerical Solution of the Two-Dimensional Non-Steady Heat and Mass Transfer Problem in Metal Hydride Beds", Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 15/11, pp. 807-816, 1990.
- Wang, X.-L. and Suda, S., "Kinetic of the Hydriding-Dehydriding Reactions of the Hydrogen-Metal Hydride Systems", Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 17/2, pp. 139-147, 1992.
- Sun, Da-Wen, "Designs of Metal Hydride Reactors", Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 17/12, pp. 945-949, 1992.
- Gopal. M.R., Murty. S. S., "Prediction of heat and mass transfer in annular cylindrical metal hydride beds." Int J Hydrogen Energy ,Vol. 17/10, pp:795-805, 1992.
- El-Osairy, M. A., El-Osery, I. A., Metwally, A. M. and Hassan, M. A., 1992, "Two-Dimensional Dynamic Analysis of Metal Hydride Hydrogen Energy Storage Conduction Bed Models", Int. J. Hydrogen Energy. Vol. 18/6, pp. 517-524, 1993.
- Song, M. Y. and Park. H. R.. "A Study on the Reaction of  $Mg_{51}Zn_{20}$  With Hydrogen", Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 18/8. pp. 653-660, 1993.

- Gambini, M., "Metal Hydride Energy Systems Performance Evaluation. Part A: Dynamic Analysis Model of Heat and Mass Transfer", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 19/1, pp. 67-80, 1994.
- Gambini, M., "Metal Hydride Energy Systems Performance Evaluation. Part B: Performance Analysis Model of Dual Metal Hydride Energy Systems", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 19/1, pp. 81-97, 1994.
- Gopal, M. Ram and Murthy, S. Srinivasa, "Studies on Heat and Mass Transfer in Metal Hydride Beds", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 19/1, pp. 911-917, 1995.
- Jemni, A. and Ben Nasrallah, S., "Study of Two-Dimensional Heat and Mass Transfer During Absorption in a Metal-Hydrogen Reactor", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 20/1, pp. 43-52, 1995.
- Jemni, A. and Ben Nasrallah, S., "Study of Two-Dimensional Heat and Mass Transfer During Desorption in a Metal-Hydrogen Reactor", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 20/11, pp. 881-891, 1995.
- Shmal'ko, Yu. F., Kolosov V. I., and Solovey, V. V., Kennedy, L. A., and Zelepouga, S. A., "Mathematical Simulation of Heat-and-Mass Transfer Processes in Metal Hydride-Hydrogen-Gas Impurities Systems", *Int. J. Hydrogen Energy*; Vol. 23/6, pp: 463-468, 1998
- Jemni, A., Ben, Nasrallah, S., Jilani, L., "Experimental and theoretical study of a metal-hydrogen reactor", *Int. J. Hydrogen Energy*; Vol. 24(1): 631-644, 1999
- Mat, M. D., Kaplan, Y., "Numerical Study of Hydrogen Absorption in an Lm-Ni<sub>5</sub> hydride reactor", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 26, pp. 957-963, 2001.
- Mat, M. D., Kaplan, Y., Veziroğlu N. Modeling of Three-Dimensional Heat and Mass Transfer in a Metal Hydride Reactor. Workshop on New Trends and Breakthroughs in Hydrogen Energy, April (02-05) 2001, Istanbul, Turkey.
- Mat, M. D., Kaplan, Y., Aldaş K. Investigation of Three-Dimensional Heat and Mass

Transfer in a Metal Hydride Reactor. Int. J. Energy Research (2001-  
Değerlendirmede)

Aldaş, K., Mat, M. D., Kaplan, Y., A Three Dimensional Mathematical Model for  
Absorption in a Metal Hydride Bed. Int. J. Hydrogen Energy (2001,  
Değerlendirmede)



11

## EKLER

### Ek 1 Programda Kullanılan Q1 dosyası

```
TALK=F;RUN( 1, 1)
      GROUP 1. Run title and other preliminaries
TEXT(Hydrogen Reactor denenem high hreac)
REAL(RESCON,TOUT,TIN)
REAL(XCOF,HREAC)
TOUT=293.
TIN=293.
XCOF=-30.
HREAC=10.0
STEADY=F;GRDPWR(T,1600,4000.,1.0)
      GROUP 3. X-direction grid specification
CARTES=F;XULAST=0.01
GRDPWR(X,60,2*3.141592654,1.0)
      GROUP 4. Y-direction grid specification
GRDPWR(Y,6,0.006,1.0)
      GROUP 5. Z-direction grid specification
GRDPWR(Z,60,0.06,1.0)
      SOLVE(TEM1,C1,C2)
TERMS (C1 ,N,N,Y,Y,Y,N)
TERMS (C2 ,N,N,N,Y,Y,N)
STORE(C3,C4,C5,C6,C7)
NAME(C3)=KUTLE
NAME(C4)=HM
NAME(C5)=EQP
XCYCLE=T
      GROUP 9. Properties of the medium (or media)
RHO1=4000.
      RHO1A=0.0;RHO1B=8.314
PRNDTL(TEM1)=-.001
```



PRNDTL(C1)=-200.

CP1=1500.

FIINIT(C1)=1.0

FIINIT(C2)=4160.

FIINIT(TEM1)=TIN

FIINIT(KUTLE)=0.0

FIINIT(HM)=0.0

FIINIT(EQP)=1.E6

GROUP 13. Boundary conditions and special sources

REAL(HCOF)

HCOF=500.

PATCH(GIRIS,HIGH,1,NX,1,NY,NZ,NZ,1,LSTEP)

COVAL(GIRIS,C1,FIXVAL,1.0)

COVAL(GIRIS,TEM1,FIXVAL,TOUT)

PATCH(COLDW,LOW,1,NX,1,NY,1,1,1,LSTEP)

COVAL(COLDW,TEM1,HCOF,TOUT)

PATCH(DUVAR,NORTH,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,LSTEP)

COVAL(DUVAR,TEM1,HCOF,TOUT)

PATCH(SINKC1,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)

COVAL(SINKC1,C1,FIXVAL,GRND)

\*\*\*SINK FOR C2

PATCH(SINKC2,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)

COVAL(SINKC2,C2,FIXFLU,GRND)

PATCH(REACHEAT,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)

COVAL(REACHEAT,TEM1,FIXFLU,GRND)

GROUP 16. Termination of iterations

RG(1)=XCOF

RG(2)=HREAC

\*\*Set the number of iterations to be performed at each forward

GROUP 23. Field print-out and plot control

LSWEEP=15

TSTSWP=1

RELAX(TEM1,FALSDT, 1.)

RELAX(C1 ,FALSDT, 1.)

RELAX(C2 ,FALSDT, 1.)

IXMON=NX/2

IYMON=NY/2

IZMON=NZ/2

\*\*Settings to secure PHOTON-plottable print-out

STOP



..

## Ek 2 Programda Kullanılan Ground Dosyası

```
C.... FILE NAME GROUND.FTN-----230597
SUBROUTINE GROUND
INCLUDE '/phoenics/d_includ/satear'
INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdloc'
INCLUDE '/phoenics/d_includ/satgrd'
INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdear'
INCLUDE '/phoenics/d_includ/grdbfc'
COMMON/GENI/NXNY,IGFIL1(8),NFM,IGF(21),IPRL,IBTAU,ILTLS,IGFIL(15),
1 ITEM1,ITEM2,ISPH1,ISPH2,ICON1,ICON2,IPRPS,IRADX,IRADY,IRADZ,IVFOL
COMMON/DRHODP/ITEMP,IDEN/DVMOD/IDVCGR
CXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX USER SECTION
STARTS:
C
C 1 Set dimensions of data-for-GROUND arrays here. WARNING: the
C corresponding arrays in the MAIN program of the satellite
C and EARTH must have the same dimensions.
PARAMETER (NLG=100, NIG=200, NRG=200, NCG=100)
C
COMMON/LGRND/LG(NLG)/IGRND/IG(NIG)/RGRND/RG(NRG)/CGRND/CG(NCG)
LOGICAL LG
CHARACTER*4 CG
C
C 2 User dimensions own arrays here, for example:
C DIMENSION GUH(10,10),GUC(10,10),GUX(10,10),GUZ(10)
C
C 3 User places his data statements here, for example:
C DATA NXDIM,NYDIM/10,10/
C
C 4 Insert own coding below as desired, guided by GREX examples.
C Note that the satellite-to-GREX special data in the labelled
C COMMONs /RSG/, /ISG/, /LSG/ and /CSG/ can be included and
C used below but the user must check GREX for any conflicting
```

C uses. The same comment applies to the EARTH-spare working  
 C arrays EASP1, EASP2,....EASP20. In addition to the EASPs,  
 C there are 10 GRound-earth SPare arrays, GRSP1,....,GRSP10.  
 C supplied solely for the user, which are not used by GREX. If  
 C the call to GREX has been deactivated then all of the arrays  
 C may be used without reservation.

C

c\*\*\*\*\*

c

```
IXL=IABS(IXL)
IF(IGR.EQ.13) GO TO 13
IF(IGR.EQ.19) GO TO 19
GO TO (1,2,3,4,5,6,25,8,9,10,11,12,13,14,25,25,25,25,19,20,25,
121,23,24),IGR
25 CONTINUE
RETURN
```

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 1. Run title and other preliminaries

C

```
1 GO TO (1001,1002,1003),ISC
```

C

```
1001 CONTINUE
```

C

C \* -----GROUP 1 SECTION 3 -----

C--- Use this group to create storage via MAKE, GXMAKE etc which it is

C essential to dump to PHI (or PHIDA) for restarts

C User may here change message transmitted to the VDU screen

```
IF(.NOT.NULLPR.AND.IDVCGR.EQ.0)
```

```
1 CALL WRYT40('GROUND file is GROUND.F of: 230597')
```

C

```
RETURN
```

C \* -----GROUP 1 SECTION 3 -----

C--- Use this group to create storage via GXMAKE which it is not

C necessary to dump to PHI (or PHIDA) for restarts

C

1003 CONTINUE

GO TO 25

1002 CONTINUE

RETURN

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 2. Transience; time-step specification

C

2 CONTINUE

RETURN

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 3. X-direction grid specification

C

3 CONTINUE

RETURN

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 4. Y-direction grid specification

C

4 CONTINUE

RETURN

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 5. Z-direction grid specification

C

5 CONTINUE

RETURN

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion

C

6 CONTINUE

RETURN

C\*\*\*\*\*

C \* Make changes for this group only in group 19.

C--- GROUP 7. Variables stored, solved & named

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices

C

8 GO TO (81,82,83,84,85,86,87,88,89,810,811,812,813,814,815,816)

1,ISC

81 CONTINUE

C \* ----- SECTION 1 -----

C For U1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD

RETURN

82 CONTINUE

C \* ----- SECTION 2 -----

C For U2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD

RETURN

83 CONTINUE

C \* ----- SECTION 3 -----

C For V1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD

RETURN

84 CONTINUE

C \* ----- SECTION 4 -----

C For V2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD

RETURN

85 CONTINUE

C \* ----- SECTION 5 -----

C For W1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD

RETURN

86 CONTINUE

C \* ----- SECTION 6 -----

C For W2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD

```

RETURN
87 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Volumetric source for gala
RETURN
88 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Convection fluxes
C--- Entered when UCONV =.TRUE.; block-location indices are:
C LD11 for east and north (accessible at the same time),
C LD12 for west and south (accessible at the same time),
C LD2 for high (which becomes low for the next slab).
C User should provide INDVAR and NDIREC IF's as appropriate.
RETURN
89 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Diffusion coefficients
C--- Entered when UDIFF =.TRUE.; block-location indices are LAE
C for east, LAW for west, LAN for north, LAS for
C south, LD11 for high, and LD11 for low.
C User should provide INDVAR and NDIREC IF's as above.
C EARTH will apply the DIFCUT and GP12 modifications after the user
C has made his settings.
C
RETURN
810 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 --- Convection neighbours
RETURN
811 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 --- Diffusion neighbours
RETURN
812 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 --- Linearised sources
RETURN
813 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 --- Correction coefficients
RETURN

```

814 CONTINUE

C \* ----- SECTION 14 --- User's own solver  
RETURN

815 CONTINUE

C \* ----- SECTION 15 --- Change solution  
RETURN

816 CONTINUE

C \* ----- SECTION 16 --- Change DVEL/DPs  
RETURN

C

C \* See the equivalent section in GREX for the indices to be  
C used in sections 7 - 16

C

C \* Make all other group-8 changes in GROUP 19.

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 9. Properties of the medium (or media)

C

C The sections in this group are arranged sequentially in their  
C order of calling from EARTH. Thus, as can be seen from below,  
C the temperature sections (10 and 11) precede the density  
C sections (1 and 3); so, density formulae can refer to  
C temperature stores already set.

9 GO TO (91,92,93,94,95,96,97,98,99,900.901,902,903,904,905),ISC

C\*\*\*\*\*

900 CONTINUE

C \* ----- SECTION 10 -----

C For TMP1.LE.GRND----- phase-1 temperature Index TEMP1  
RETURN

901 CONTINUE

C \* ----- SECTION 11 -----

C For TMP2.LE.GRND----- phase-2 temperature Index TEMP2  
RETURN

902 CONTINUE



```

C * ----- SECTION 12 -----
C For EL1.LE.GRND----- phase-1 length scale Index LEN1
  RETURN
903 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 -----
C For EL2.LE.GRND----- phase-2 length scale Index LEN2
  RETURN
904 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 -----
C For SOLVE(TEM1)----- phase-1 specific heat
  RETURN
905 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 -----
C For SOLVE(TEM2)----- phase-2 specific heat
  RETURN
91 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For RHO1.LE.GRND--- density for phase 1   Index DEN1
  RETURN
92 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For DRH1DP.LE.GRND--- D(LN(DEN))/DP for phase 1
C                               Index D1DP
  RETURN
93 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C For RHO2.LE.GRND--- density for phase 2   Index DEN2
  RETURN
94 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C For DRH2DP.LE.GRND--- D(LN(DEN))/DP for phase 2
C                               Index D2DP
  RETURN
95 CONTINUE

```

```

C * ----- SECTION 5 -----
C For ENUT.LE.GRND--- reference turbulent kinematic viscosity
C
C                      Index VIST
C
C      RETURN
C
C 96 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 -----
C For ENUL.LE.GRND--- reference laminar kinematic viscosity
C
C                      Index VISL
C
C      RETURN
C
C 97 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 -----
C For PRNDTL(.).LE.GRND--- laminar PRANDTL nos., or diffusivity
C
C                      Index LAMPR
C
C      RETURN
C
C 98 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 -----
C For PHINT(.).LE.GRND--- interface value of first phase
C
C                      Index FII1
C
C      RETURN
C
C 99 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 -----
C For PHINT(.).LE.GRND--- interface value of second phase
C
C                      Index FII2
C
C      RETURN
C*****
C
C--- GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties
C
C      10 GO TO (101,102,103,104,105),ISC
C
C 101 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For CFIPS.LE.GRND--- inter-phase friction coeff.
C
C                      Index INTFRC
C
C      RETURN

```

102 CONTINUE

```
C * ----- SECTION 2 -----  
C For CMDOT.EQ.GRND- inter-phase mass transfer Index INTMDT  
c l0mdt=l0f(intmdt)  
c l0c2=l0f(c2)  
c l0r1=l0f(9)  
c l0vol=l0f(LVOL)  
c do i=1,nx*ny  
c   f(l0mdt+i)= - cmdta * (phint(c2) - f(l0c2+i)) *  
c   1          f(l0r1+i) * f(l0vol+i)  
c   enddo  
RETURN
```

103 CONTINUE

```
C * ----- SECTION 3 -----  
C For CINT(.).EQ.GRND--- phase1-to-interface transfer coefficients  
C                               Index COI1  
RETURN
```

104 CONTINUE

```
C * ----- SECTION 4 -----  
C For CINT(.).EQ.GRND--- phase2-to-interface transfer coefficients  
C                               Index COI2  
RETURN
```

105 CONTINUE

```
C * ----- SECTION 5 -----  
C For CVM.EQ.GRND--- virtual mass coefficient  
C                               Index LD12  
RETURN
```

```
C*****
```

```
C  
C--- GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields
```

```
C                               Index VAL
```

11 CONTINUE

RETURN

```
C*****
```

```

C
C--- GROUP 12. Convection and diffusion adjustments
C
  12 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 13. Boundary conditions and special sources
C          Index for Coefficient - CO
C          Index for Value    - VAL
  13 CONTINUE
  GO TO (130,131,132,133,134,135,136,137,138,139,1310,
  11311,1312,1313,1314,1315,1316,1317,1318,1319,1320,1321),ISC
  130 CONTINUE
C----- SECTION 1 ----- coefficient = GRND
  RETURN
  131 CONTINUE
C----- SECTION 2 ----- coefficient = GRND1
  RETURN
  132 CONTINUE
C----- SECTION 3 ----- coefficient = GRND2
  RETURN
  133 CONTINUE
C----- SECTION 4 ----- coefficient = GRND3
  RETURN
  134 CONTINUE
C----- SECTION 5 ----- coefficient = GRND4
  RETURN
  135 CONTINUE
C----- SECTION 6 ----- coefficient = GRND5
  RETURN
  136 CONTINUE
C----- SECTION 7 ----- coefficient = GRND6
  RETURN

```

```

137 CONTINUE
C----- SECTION 8 ----- coefficient = GRND7
      RETURN
138 CONTINUE
C----- SECTION 9 ----- coefficient = GRND8
      RETURN
139 CONTINUE
C----- SECTION 10 ----- coefficient = GRND9
      RETURN
1310 CONTINUE
C----- SECTION 11 ----- coefficient = GRND10
      RETURN
1311 CONTINUE
C----- SECTION 12 ----- value = GRND
c      this part is release of reaction energy
      IF(NPATCH(1:8).EQ.'REACHEAT'.AND.INDVAR.EQ.LBNAME('TEM1')) THEN
          LVAL=L0F(VAL)
          LC3=L0F(C3)
          LOLDC3=L0F(OLD(C3))
          NXNY=NX*NY
          HREC=RG(2)
          DO 3315 ICELL=1,NXNY
              F(LVAL+ICELL)=ABS((HREC*F(LC3+ICELL)-F(LOLDC3+ICELL))/DT)
3315      CONTINUE
          ENDIF
C
      IF(NPATCH(1:6).EQ.'SINKC1'.AND.INDVAR.EQ.C1) THEN
          LVAL=L0F(VAL)
          LMDOT=L0F(C3)
          LTEM=L0F(LBNAME('TEM1'))

          DO 4316 ICL=1,NXNY
              F(LVAL+ICL)=F(LMDOT+ICL)*8.314*F(LTEM+ICL)/1.E5
4316 CONTINUE

```

```

ENDIF
IF(NPATCH(1:6).EQ.'SINKC2'.AND.INDVAR.EQ.C2) THEN
  LVAL=L0F(VAL)
  LC3=L0F(C3)
  DO 5316 ICL=1,NXNY
    F(LVAL+ICL)=F(LC3+ICL)
5316 CONTINUE
  ENDIF
  RETURN
1312 CONTINUE
C----- SECTION 13 ----- value = GRND1
  RETURN
1313 CONTINUE
C----- SECTION 14 ----- value = GRND2
  RETURN
1314 CONTINUE
C----- SECTION 15 ----- value = GRND3
  RETURN
1315 CONTINUE
C----- SECTION 16 ----- value = GRND4
  RETURN
1316 CONTINUE
C----- SECTION 17 ----- value = GRND5
  RETURN
1317 CONTINUE
C----- SECTION 18 ----- value = GRND6
  RETURN
1318 CONTINUE
C----- SECTION 19 ----- value = GRND7
  RETURN
1319 CONTINUE
C----- SECTION 20 ----- value = GRND8
  RETURN
1320 CONTINUE

```

C----- SECTION 21 ----- value = GRND9

RETURN

1321 CONTINUE

C----- SECTION 22 ----- value = GRND10

RETURN

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE.

C

14 CONTINUE

RETURN

C\*\*\*\*\*

C\* Make changes to data for GROUPS 15, 16, 17, 18 GROUP 19.

C\*\*\*\*\*

C

C--- GROUP 19. Special calls to GROUND from EARTH

C

19 GO TO (191,192,193,194,195,196,197,198,199,1910,1911),ISC

191 CONTINUE

C \* ----- SECTION 1 ---- Start of time step.

RETURN

192 CONTINUE

C \* ----- SECTION 2 ---- Start of sweep.

RETURN

193 CONTINUE

C \* ----- SECTION 3 ---- Start of iz slab.

c this part calculates m and equilibrium pressure

LTEM=L0F(LBNAME('TEM1'))

LRS=L0F(C2)

LMDT=L0F(C3)

LHM=L0F(C4)

LEQP=L0F(C5)

LP1=L0F(C1)

LC6=L0F(C6)

```

LC7=L0F(C7)
NXNY=NX*NY
  RSS=4197.
  EACT=-5000.
  RU=8.314
  DO 5417 ICL=1,NXNY
    F(LHM+ICL)=(F(LRS+ICL)-4160.)/37
    F(LC6+ICL)=(F(LRS+ICL)-4160.)/6.27112
    F(LC7+ICL)=F(LRS+ICL)-4160.
    XHM=F(LHM+ICL)
    XTM=1./F(LTEM+ICL)-1./335.0
  C    F(LEQP+ICL)=84.811*XHM-402.122*XHM**2+908.541*XHM**3
  C    F(LEQP+ICL)=F(LEQP+ICL)-972.495*XHM**4+395.754*XHM**5
  C    F(LEQP+ICL)=F(LEQP+ICL)*EXP(-3593.82*(1./XTM-1./290.))*1.E5
  C    F(LEQP+ICL)=F(LEQP+ICL)
    F(LEQP+ICL)=1.0E8*EXP(-35885.0*XTM)
    IF(F(LEQP+ICL).GT.1.E8) THEN
      F(LEQP+ICL)=1.E8
    ENDIF
5417  CONTINUE
  DO 5416 ICL=1,NXNY
    F(LMDT+ICL)=-1.*RG(1)*EXP(EACT/(RU*F(LTEM+ICL)))
  C    WRITE(66,*)F(LMDT+ICL),F(LTEM+ICL)
    F(LMDT+ICL)=F(LMDT+ICL)*(RSS-F(LRS+ICL))*0.5
  c    IF(F(LEQP+ICL).GT.0.0.AND.F(LP1+ICL).GT.0.0) THEN
  c    BO=F(LP1+ICL)/F(LEQP+ICL)
  C    WRITE(35,*) BO
  C    IF(BO.LT.1.0) THEN BO=1.0
  c    AA=LOG(BO)
  c    KR=0.0
  c    IF(AA.LE.KR) THEN
  c    AA=0.0
  c    ENDIF
  c    WRITE(44,*)AA

```



```

IF(ISTEP.EQ.1) THEN
F(LEQP+ICL)=1.E8
ENDIF
AA=LOG(1.E8/F(LEQP+ICL))
F(LMDT+ICL)=F(LMDT+ICL)*AA
C F(LMDT+ICL)=-1.0*RG(1)*AA
C WRITE(55,*)AA,F(LEQP+ICL),F(LMDT+ICL),F(LTEM+ICL)
5416 CONTINUE
RETURN
194 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 ---- Start of iterations over slab.
RETURN
1911 CONTINUE
C * ----- SECTION 11---- After calculation of convection
C fluxes for scalars, and of volume
C fractions, but before calculation of
C scalars or velocities
RETURN
199 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Start of solution sequence for
C a variable
RETURN
1910 CONTINUE
C * ----- SECTION 10---- Finish of solution sequence for
C a variable
RETURN
195 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 ---- Finish of iterations over slab.
RETURN
196 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 ---- Finish of iz slab.
C THIS PART CALCULATES THE TOTAL HYDROGEN ABSORBED
C *****
C IF(ISWEEP.EQ.1) THEN

```

```

SUM=0.0
ENDIF
IF(ISWEEP.EQ.LSWEEP) THEN
LC7=L0F(C7)
DO 1545 ICL=1,NY
SUM=SUM+F(LC7+ICL)
1545 CONTINUE
IF(IZ.EQ.NZ) THEN
WRITE(25,*)DT*ISTEP,SUM*1.0E-3
ENDIF
C WRITE(25,*)IZ,SUM
ENDIF
IF(IZ.EQ.5) THEN
IF(ISTEP.EQ.LSTEP.AND.ISWEEP.EQ.LSWEEP) THEN
LHM=L0F(C4)
LTM=L0F(LBNAME('TEM1'))
LC6=L0F(C6)
DO IX=1,NX
write(55,1888)(F(LC6+IY+NY*(IX-1)),IY=1,NY)
1888 FORMAT(30F10.4)
WRITE(56,1888)(F(LTM+IY+NY*(IX-1)),IY=1,NY)
ENDDO
ENDIF
ENDIF
IF(IZ.EQ.20) THEN
IF(ISTEP.EQ.LSTEP.AND.ISWEEP.EQ.LSWEEP) THEN
LHM=L0F(C4)
LTM=L0F(LBNAME('TEM1'))
LC6=L0F(C6)
DO IX=1,NX
write(65,1889)(F(LC6+IY+NY*(IX-1)),IY=1,NY)
1889 FORMAT(30F10.4)
WRITE(66,1889)(F(LTM+IY+NY*(IX-1)),IY=1,NY)
ENDDO

```

```

ENDIF
ENDIF
IF(IZ.EQ.35) THEN
IF(ISTEP.EQ.LSTEP.AND.ISWEEP.EQ.LSWEEP) THEN
LHM=L0F(C4)
LTM=L0F(LBNAME('TEM1'))
LC6=L0F(C6)
do IX=1,NX
write(75,1887)(F(LC6+IY+NY*(IX-1)),IY=1,NY)
1887 FORMAT(30F10.4)
WRITE(76,1887)(F(LTM+IY+NY*(IX-1)),IY=1,NY)
ENDDO
ENDIF
ENDIF
IF (ISWEEP.EQ.LSWEEP) THEN
LC6=L0F(C6)
LTM=L0F(LBNAME('TEM1'))
IF (IZ.EQ.5) WRITE(96,1954)DT*ISTEP,F(LTM+NY/2)
IF (IZ.EQ.5) WRITE(97,1954)DT*ISTEP,F(LC6+NY/2)
IF (IZ.EQ.15) WRITE(98,1954)DT*ISTEP,F(LTM+NY/2)
IF (IZ.EQ.15) WRITE(99,1954)DT*ISTEP,F(LC6+NY/2)
IF (IZ.EQ.30) WRITE(80,1954)DT*ISTEP,F(LTM+NY/2)
IF (IZ.EQ.30) WRITE(90,1954)DT*ISTEP,F(LC6+NY/2)
IF (IZ.EQ.45) WRITE(91,1954)DT*ISTEP,F(LTM+NY/2)
IF (IZ.EQ.45) WRITE(92,1954)DT*ISTEP,F(LC6+NY/2)
IF (IZ.EQ.55) WRITE(93,1954)DT*ISTEP,F(LTM+NY/2)
IF (IZ.EQ.55) WRITE(94,1954)DT*ISTEP,F(LC6+NY/2)
1954 FORMAT(2F10.4)
C write(20,*) IZ, ISTEP,F(LTM+NY/2)
ENDIF
IF(ISTEP.EQ.LSTEP.AND.ISWEEP.EQ.LSWEEP) THEN
LC6=L0F(C6)
LTM=L0F(LBNAME('TEM1'))
5888 FORMAT(40F10.4)

```

```

WRITE(40,5888)(F(LTM+IY+NY*(NX/2-1)),IY=1,NY)
WRITE(45,5888)(F(LC6+IY+NY*(NX/2-1)),IY=1,NY)
ENDIF
RETURN
197 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Finish of sweep.
RETURN
198 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Finish of time step.
C
RETURN
C*****
C
C--- GROUP 20. Preliminary print-out
C
20 CONTINUE
RETURN
C*****
C--- GROUP 21. Special print-out to screen
21 CONTINUE
GO TO 25
C*****
C* Make changes to data for GROUP 22 only in GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 23. Field print-out and plot control
23 CONTINUE
RETURN
C*****
C
C--- GROUP 24. Dumps for restarts
C
24 CONTINUE
END

```

**T.C. YÖNEKÖÇERİTİM KURULU**  
**BAKURMANTASYON**