



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ - ΤΟΜΕΑΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΕΤΕΡΟΓΕΝΩΝ ΜΙΓΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΚΑΥΣΗΣ
Δ.Π.Μ.Σ ΣΧΟΛΗΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ «ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Υπολογιστική Μελέτη Διασποράς Υδρογόνου
σε Χώρο
Φόρτισης Συσσωρευτών**

Επιβλέπουσα καθηγήτρια
Φούντη Μαρία

ΜΙΧΑΛΑΚΗ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ

Αθήνα, Οκτώβριος 2018

Ευχαριστίες

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω την κ. Μαρία Φούντη, Καθηγήτρια της σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου και επιβλέπουσα της μεταπτυχιακής μου εργασίας, τόσο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε για την ανάθεση της εργασίας, όσο και για την υποστήριξή της κατά την διάρκεια εκπόνησης της παρούσας εργασίας.

Επιπλέον ευχαριστώ θερμά τους μεταδιδακτορικούς συνεργάτες Κατσουρίνη Δημήτρη και Κολλαΐτη Διονύση για την διαρκή τους βοήθεια, την αισιοδοξία τους και την επιστημονική τους στήριξη σε κάθε δυσκολία που παρουσιάστηκε καθόλη την διάρκεια διεκπεραίωσης της μεταπτυχιακής μου εργασίας.

Φυσικά δεν θα μπορούσα να παραλείψω να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου προς την οικογένειά μου για την συνεχή στήριξη κατά την διάρκεια των σπουδών μου και κυρίως τον σύζυγό μου Αντώνη, ο οποίος μου υπενθύμιζε τον στόχο μου κάθε φορά που απομακρυνόμουν από αυτόν.

Πίνακας περιεχομένων

Ευχαριστίες	3
Περίληψη	10
1. Εισαγωγή.....	12
1.1 Συσσωρευτές ηλεκτρισμού	12
1.1.1 Δομή και λειτουργία συσσωρευτών	12
1.1.2 Χαρακτηριστικά μεγέθη συσσωρευτών	14
1.2 Κατηγορίες συσσωρευτών	16
1.2.1 Συσσωρευτές μολύβδου - οξέως (lead - acid)	16
1.2.2 Συσσωρευτές Νικελίου – Καδμίου (NiCd)	18
1.3 Σκοπός της Εργασίας.....	19
2. Έκλυση υδρογόνου κατά τη φόρτιση συσσωρευτών	21
2.1 Γενικά Χαρακτηριστικά	21
2.2 Παράγοντες που επηρεάζουν τον ρυθμό ανάπτυξης αερίου υδρογόνου	23
2.3 Όρια Εκπομπών για Υγιεινή και Ασφάλεια στην Εργασία - Κίνδυνος Ανάφλεξης (όρια αναφλεξιμότητας).....	24
2.4 Υπολογισμός Εκλυόμενου Υδρογόνου από Φόρτιση Συσσωρευτών.....	25
2.5 Υπολογισμός Αερισμού Εσωτερικού Χώρου.....	27
2.5.1 Φυσικός αερισμός	29
3. Βιβλιογραφική ανασκόπηση.....	30
3.1 Πειραματική διερεύνηση διασποράς υδρογόνου	30
3.2 Υπολογιστικές προσομοιώσεις διασποράς υδρογόνου.....	31
4. Κώδικας Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής ANSYS CFX.....	33
4.1 Γενικά περί του λογισμικού ANSYS CFX	33
4.2 Εξισώσεις διατήρησης.....	35
4.3 Μοντελοποίηση τύρβης.....	36
4.3.1 Μοντέλο standard k-ε.....	36
4.3.2 Μοντέλο RNG k-ε	37
4.3.3 Μοντέλο SST k-ω.....	39
4.4 Μοντελοποίηση μεταφοράς θερμότητας.....	40
4.5 Μοντελοποίηση διάχυσης συστατικών	41
5. Πιστοποίηση υπολογιστικών αποτελεσμάτων - Validation	44

5.1 Περιγραφή Περίπτωσης.....	45
5.1.1 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά.....	46
5.1.2 Παραμετρική μελέτη πειραμάτων.....	48
5.1.3 Διαθέσιμες μετρήσεις.....	48
Η πειραματική συμπεριφορά μπορεί να εξαχθεί από τον παρακάτω πίνακα, τόσο για την φάση της έκλυσης υδρογόνου, όσο και για τη φάση της διάχυσης.....	48
5.2 Υπολογιστικές Προσομοιώσεις.....	49
5.2.1 Γεωμετρία.....	49
5.2.2 Υπολογιστικό Πλέγμα.....	50
5.2.3 Μοντελοποίηση.....	54
5.2.4 Παραδοχές.....	57
5.3 Παραμετρική μελέτη: Υπολογιστικό πλέγμα.....	57
5.4 Ανεξαρτησία πλέγματος.....	59
5.5 Παραμετρική μελέτη: Υπολογιστικό μοντέλο τύρβης.....	60
5.6 Πιστοποίηση αποτελεσμάτων.....	63
5.7 Γενικά Χαρακτηριστικά Αναπτυσσόμενου Πεδίου Ροής.....	66
6. Προσομοίωση μελέτης περίπτωσης εργασιακού χώρου.....	68
6.1 Περιγραφή Μελέτης Περίπτωσης.....	68
6.1.1 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά.....	68
6.1.2 Υπολογισμός εκλυόμενου υδρογόνου.....	69
6.2 Υπολογιστικές προσομοιώσεις.....	69
6.2.1 Γεωμετρία.....	69
6.2.2 Πλέγμα.....	70
6.2.3 Επιλογή Μοντέλου.....	72
6.3 Παραμετρική μελέτη – Περιπτώσεις που μελετήθηκαν.....	75
6.4 Υπολογιστικά αποτελέσματα – Ροϊκό πεδίο – Πεδίο συγκεντρώσεων.....	76
6.4.1 Περίπτωση 1: Κλειστός χώρος στους 25 ^o C.....	76
6.5 Παραμετρική μελέτη.....	81
6.5.1 Περίπτωση 2: Αριθμός συσσωρευτών 12 - Επίδραση αριθμού συσσωρευτών.....	81
6.5.2 Περίπτωση 3: Κλειστός χώρος στους 35 ^o C - Επίδραση θερμοκρασίας.....	85
6.5.3 Περίπτωση 4: Παράθυρα σε ανάκλιση - Επίδραση φυσικού αερισμού.....	89
6.5.1 Περίπτωση 5: Παράθυρα σε ανάκλιση - Επίδραση φυσικού αερισμού.....	93
6.5.2 Περίπτωση 6 - Επίδραση τεχνητού αερισμού.....	96

7. Γενικά συμπεράσματα - Προοπτικές	99
7.1 Βασικά συμπεράσματα	99
7.2 Προοπτικές βελτίωσης	100
8. Βιβλιογραφία	101
Εικόνα 1-1: Η δομή ενός συσσωρευτή	12
Εικόνα 1-2: Διαδικασία φόρτισης και εκφόρτισης ενός συσσωρευτή.....	14
Εικόνα 1-3: Βήματα αντίδρασης σε συσσωρευτή μολύβδου – οξέως.....	17
Εικόνα 2-1: Οι τάσεις ισορροπίας των θετικών και αρνητικών ηλεκτροδίων σε ένα ανοικτό κύκλωμα μπαταρίας μολύβδου οξέος και η εξέλιξη αερίου υδρογόνου και αερίου οξυγόνου ⁶	22
Εικόνα 2-2: Οι τάσεις ισορροπίας των θετικών και αρνητικών ηλεκτροδίων σε ένα ανοικτό κύκλωμα μπαταρίας νικελίου καδμίου και η εξέλιξη αερίου υδρογόνου και αερίου οξυγόνου ⁶	23
Εικόνα 4-1: Δομή του λογισμικού ANSYS CFX ²⁰	33
Εικόνα 5-1: Θάλαμος απελευθέρωσης υδρογόνου και θέσεις αισθητήρων	46
Εικόνα 5-2: Θέση της συσκευής απελευθέρωσης υδρογόνου στην x-κατεύθυνση	47
Εικόνα 5-3: Θέση της συσκευής απελευθέρωσης υδρογόνου στην γ-κατεύθυνση	47
Εικόνα 5-4: Συσκευή απελευθέρωσης υδρογόνου	47
Εικόνα 5-5: Συσκευή απελευθέρωσης υδρογόνου στο ANSYS / Design Modeller	49
Εικόνα 5-6: Η γεωμετρία του προβλήματος στο ANSYS / Design Modeller	50
Εικόνα 5-7: Διακριτοποίηση χωρίου με μη δομημένο πλέγμα (Πλέγμα 1).....	51
Εικόνα 5-8: Πύκνωση μη δομημένου πλέγματος στο πάνω μέρος της συσκευής εισόδου του υδρογόνου (Πλέγμα 1)	51
Εικόνα 5-9: Τοπική πύκνωση πλέγματος με σφαίρες επιρροής (Πλέγμα 1)	52
Εικόνα 5-10: Τοπική πύκνωση του πλέγματος στην οροφή (Πλέγμα 1)	52
Εικόνα 5-11: Διακριτοποίηση χωρίου με δομημένο πλέγμα (Πλέγμα 2)	53
Εικόνα 5-12: Πύκνωση δομημένου πλέγματος στο πάνω μέρος της συσκευής εισόδου του υδρογόνου (Πλέγμα 2)	53
Εικόνα 5-13: Οριακή συνθήκη εισόδου.....	55
Εικόνα 5-14: Μεγέθυνση της οριακής συνθήκης εισόδου	55
Εικόνα 5-15: Θέσεις σημείων παρακολούθησης στην διάταξη.....	57
Εικόνα 5-16: Παραμετρική μελέτη πλέγματος.....	58
Εικόνα 5-17: Ανεξαρτησία πλέγματος.....	59
Εικόνα 5-18: Διάταξη των αισθητήρων στον χώρο	60
Εικόνα 5-19: Οι γραμμές ροής στον πειραματικό θάλαμο	66
Εικόνα 5-20: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο xz για $\gamma=0m$	67
Εικόνα 5-21: Ισοεπιφανειακή κατανομή του γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο xz για $\gamma=0m$	67
Εικόνα 6-1: Προσομοίωση γεωμετρίας συσσωρευτή	70
Εικόνα 6-2: Υπολογιστικό χωρίο χώρου φόρτισης συσσωρευτών.....	70

Εικόνα 6-3: Διακριτοποίηση χώρου φόρτισης συσσωρευτών	71
Εικόνα 6-4: Τοπική πύκνωση στις επιφάνειες εισόδου του υδρογόνου – Τομή κατά τον άξονα γ.....	71
Εικόνα 6-5: Τοπική πύκνωση στις επιφάνειες εισόδου του υδρογόνου – Τομή κατά τον άξονα χ.....	72
Εικόνα 6-6: Τοπική πύκνωση στις επιφάνειες εισόδου του υδρογόνου – Τομή κατά τον άξονα z.....	72
Εικόνα 6-7: Οριακή συνθήκη εισόδου.....	73
Εικόνα 6-8: Opening επιφάνειες	74
Εικόνα 6-9: Οριακή συνθήκη εξόδου	74
Εικόνα 6-10: Σημεία παρακολούθησης (monitor points).....	75
Εικόνα 6-11: Οι γραμμές ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C.....	77
Εικόνα 6-12: Κάτοψη των γραμμών ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C.....	77
Εικόνα 6-13: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz, σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C	78
Εικόνα 6-14: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής στο επίπεδο xz σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C (α),(β) για το συσσωρευτή 3 και (γ),(δ) για το συσσωρευτή 10 αντίστοιχα.....	78
Εικόνα 6-15: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ στο επίπεδο yz, σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C.....	79
Εικόνα 6-16: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C	80
Εικόνα 6-17: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C για ποσοστό από 0.8% έως 2%	80
Εικόνα 6-18: Οι γραμμές ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης 12 συσσωρευτών στους 25°C.....	82
Εικόνα 6-19: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz, σε κλειστό χώρο φόρτισης 12 συσσωρευτών στους 25°C	82
Εικόνα 6-20: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής στο επίπεδο xz σε κλειστό χώρο 12 φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C (α),(β) για το συσσωρευτή 3 και (γ),(δ) για το συσσωρευτή 10 αντίστοιχα.....	83
Εικόνα 6-21: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ στο επίπεδο yz, σε κλειστό χώρο φόρτισης 12 συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C.....	84
Εικόνα 6-22: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C	84
Εικόνα 6-23: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C για ποσοστό από 0.8% έως 2%	85
Εικόνα 6-24: Οι γραμμές ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C.....	86
Εικόνα 6-25: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz, σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C	86
Εικόνα 6-26: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής στο επίπεδο xz σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C (α),(β) για το συσσωρευτή 3 και (γ),(δ) για το συσσωρευτή 10 αντίστοιχα.....	87
Εικόνα 6-27: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ στο επίπεδο xz για γ=0m σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς αερισμό) στους 35°C	87
Εικόνα 6-28: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H ₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C (χωρίς την ύπαρξη αερισμού)	88

Εικόνα 6-29: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $35^{\circ}C$ (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) για ποσοστό από 0.8% έως 2%	89
Εικόνα 6-30: Οι γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση)	90
Εικόνα 6-31: Οι γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση)σε πλάγια όψη	90
Εικόνα 6-32: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση) (α) για το σύνολο των συσσωρευτών (β) για τα ανοίγματα (γ) για τα ανοίγματα σε πλάγια όψη	91
Εικόνα 6-33: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση)	92
Εικόνα 6-34: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση).....	92
Εικόνα 6-35: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση) για ποσοστό από 0.8% έως 2%	93
Εικόνα 6-36: Οι γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A>1.78m^2$)	94
Εικόνα 6-37: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A>1.78m^2$) (α) για το σύνολο των συσσωρευτών (β) για τα ανοίγματα (γ) για τα ανοίγματα σε πλάγια όψη	95
Εικόνα 6-38: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A>1.78m^2$)	95
Εικόνα 6-39: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A>1.78m^2$).....	96
Εικόνα 6-40: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη τεχνητού αερισμού (α) ,(β) στο επίπεδο yz (γ) στο επίπεδο zx	97
Εικόνα 6-41: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη τεχνητού αερισμού	98
Εικόνα 6-42: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη τεχνητού αερισμού	98

Πίνακας 5-1: Συντεταγμένες των σημείων δειγματοληψίας (αισθητήρες) και των ανοιγμάτων στον θάλαμο	45
Πίνακας 5-2: Δεδομένα πειραμάτων H_2	48
Πίνακας 5-3: Δεδομένα πειραμάτων He.....	48
Πίνακας 5-4: Αδιάστατα μεγέθη πειραμάτων	48
Πίνακας 5-5: Μέσες πειραματικές γραμμομοριακές συγκεντρώσεις (molar %)	49
Πίνακας 5-6: Στατιστικά στοιχεία πλεγμάτων	54
Πίνακας 5-7: Μεγέθη στοιχείων πλεγμάτων	54
Πίνακας 5-8: Συντεταγμένες σημείων παρακολούθησης.....	56

Πίνακας 5-9:	Παρουσίαση σφαλμάτων παραμετρικής ανάλυσης ως προς το μοντέλο τύρβης	63
Πίνακας 5-10:	Συγκεντρώσεις H_2 και σφάλματα, κατά τη φάση έκλυσης, πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων	65

Περίληψη

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία πραγματεύεται την υπολογιστική προσομοίωση διασποράς υδρογόνου σε έναν εργασιακό χώρο φόρτισης συσσωρευτών. Σκοπός της εργασίας είναι η διερεύνηση διασποράς και διάχυσης του υδρογόνου που εκλύεται κατά την διάρκεια φόρτισης των συσσωρευτών και η ανάπτυξη ενός υπολογιστικού μοντέλου προσομοίωσης σε περιβάλλον ANSYS CFX. Το μοντέλο αυτό θα στοχεύσει σε εφαρμογή του σε ανάλογα προβλήματα διασποράς υδρογόνου ή άλλων επικίνδυνων ουσιών σε κλειστούς χώρους, με σκοπό την ευκολότερη και γρηγορότερη πρόβλεψη της κατανομής βραχυπρόθεσμων και μακροπρόθεσμων απελευθερώσεων υδρογόνου, σε περιορισμένους χώρους και κατά συνέπεια και των διορθωτικών ενεργειών που απαιτούνται. Η δομή της παρούσας διπλωματικής οργανώνεται ως εξής:

Αρχικά γίνεται μια γενική εισαγωγή στους συσσωρευτές ηλεκτρισμού, την δομή και τη λειτουργία τους, καθώς και τα χαρακτηριστικά μεγέθη των συσσωρευτών. Παρουσιάζονται οι βασικές κατηγορίες τους με βάση την δυνατότητα επαναφόρτισής τους και γίνεται μια περιγραφή των συσσωρευτών μολύβδου – οξέως και νικελίου καδμίου που χρησιμοποιούνται κυρίως στον εργασιακό χώρο για τον οποίο μελετάται και η παρούσα εργασία.

Κατόπιν περιγράφεται ο λόγος για τον οποίο η έκλυση υδρογόνου, σε ανοιχτούς και κλειστούς κυρίως χώρους, έχει αποτελέσει αντικείμενο παγκόσμιου ενδιαφέροντος. Η φόρτιση συσσωρευτών που πραγματοποιείται σε κλειστούς χώρους έχει ως αποτέλεσμα την συσσώρευση ποσοτήτων υδρογόνου, οι οποίες μπορούν να αποτελέσουν μια εκρηκτική ατμόσφαιρα για το εργαζόμενο προσωπικό. Η παγκόσμια νομοθεσία έχει θεσπίσει κάποια επιτρεπτά όρια για την συγκέντρωση του υδρογόνου σε τέτοιους χώρους ενώ βασική προϋπόθεση αποτελεί η ύπαρξη κατάλληλου εξοπλισμού για την αποτροπή και αντιμετώπιση επικίνδυνων καταστάσεων.

Στη συνέχεια παρατίθεται μια σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση των πειραματικών και υπολογιστικών διερευνήσεων διασποράς υδρογόνου και στην πορεία περιγράφεται το μοντέλο που δημιουργήθηκε στην παρούσα εργασία. Η πιστοποίηση του μοντέλου έγινε με την εφαρμογή του σε μια περίπτωση μελέτης που αφορούσε μεγάλη κλίμακα απελευθέρωσης υδρογόνου σε περιορισμένο χώρο σταθερής θερμοκρασίας, όπου ήταν διαθέσιμες οι πειραματικές μετρήσεις. Κατόπιν έγινε παραμετρική μελέτη του πλέγματος και του μοντέλου τύρβης, τα αποτελέσματα της οποίας αναλύονται στην αντίστοιχη ενότητα.

Ακολουθεί μια ανασκόπηση των εξισώσεων διατήρησης και των υπολογιστικών μοντέλων τύρβης που χρησιμοποιούνται από το λογισμικό ANSYS και απαντώνται στη βιβλιογραφία. Τα μοντέλα διαχωρίζονται σε τρεις κατηγορίες, ανάλογα με την πολυπλοκότητά τους και αναλύονται τα χαρακτηριστικά τους.

Τέλος γίνεται η εφαρμογή του μοντέλου σε μια πραγματική περίπτωση φόρτισης συσσωρευτών αεροπορικού τύπου, σε εργασιακό χώρο όπου στεγάζεται εντός του υποστέγου συντήρησης στρατιωτικών ελικοπτέρων. Μελετάται ο αριθμός και η θέση φόρτισης των συσσωρευτών, η επίδραση φυσικού και τεχνητού αερισμού στην συγκέντρωση του εκλυόμενου υδρογόνου καθώς

και η θερμοκρασία και η ταχύτητα φόρτισης. Αποτελέσματα της μελέτης παρουσιάζονται στο τελευταίο μέρος της εργασίας.

1. Εισαγωγή

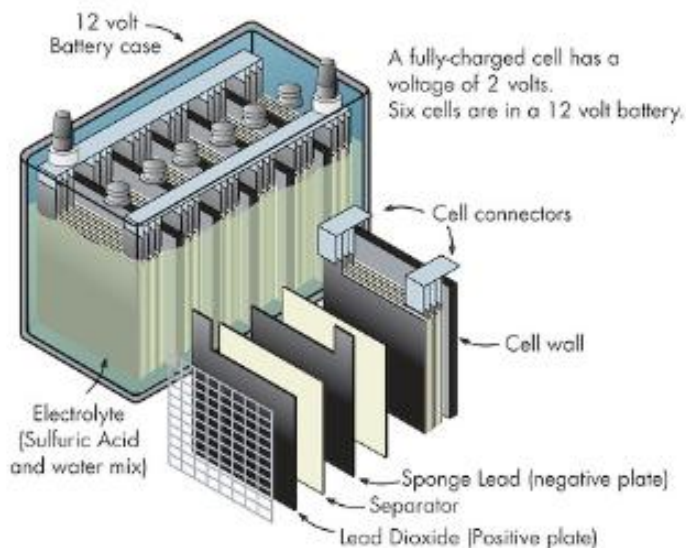
1.1 Συσσωρευτές ηλεκτρισμού

Με τους όρους συσσωρευτής και μπαταρία, οι οποίοι είναι ταυτόσημοι, νοείται η ίδια ηλεκτροχημική διάταξη, που χρησιμοποιείται για την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας.

Οι συσσωρευτές είναι μετατροπείς χημικής ενέργειας σε ηλεκτρική. Κάποια είδη συσσωρευτών (επαναφορτιζόμενοι) έχουν τη δυνατότητα να εκτελούν αυτή τη μετατροπή και προς την αντίθετη κατεύθυνση, παρέχοντας με άμεσο τρόπο τη δυνατότητα συσσώρευσης ηλεκτρικής ενέργειας.

1.1.1 Δομή και λειτουργία συσσωρευτών

Η βασική ηλεκτροχημική μονάδα του συσσωρευτή είναι το στοιχείο (ή αλλιώς κυψελίδα). Ένας συσσωρευτής αποτελείται από ένα ή περισσότερα στοιχεία τα οποία συνδέονται μεταξύ τους σε σειρά ή παράλληλα, ανάλογα με την επιθυμητή χωρητικότητα ή την επιθυμητή τάση εξόδου. Πολλές φορές μεμονωμένα στοιχεία ονομάζονται μπαταρίες¹. Στην Εικόνα 1-1 απεικονίζεται η δομή ενός συσσωρευτή 12V, των 6 στοιχείων (2 V έκαστο $\rightarrow 2V * 6 = 12V$).



Εικόνα 1-1: Η δομή ενός συσσωρευτή

Κάθε στοιχείο αποτελείται από τα εξής συστατικά που περικλείονται από ένα δοχείο:

- Την άνοδο ή το αρνητικό ηλεκτρόδιο, το οποίο παρέχει ηλεκτρόνια στο εξωτερικό κύκλωμα

και είναι αυτό που οξειδώνεται (αποβάλλει ηλεκτρόνια) κατά την ηλεκτροχημική αντίδραση.

- Την κάθοδο ή θετικό ηλεκτρόδιο, το οποίο δέχεται ηλεκτρόνια από το εξωτερικό κύκλωμα και ανάγεται (προσλαμβάνει ηλεκτρόνια) κατά την ηλεκτροχημική αντίδραση.
- Το πλέγμα που υποστηρίζει το ενεργό υλικό στις πλάκες και είναι καλός αγωγός του ηλεκτρικού ρεύματος.

Η άνοδος και η κάθοδος μαζί με το πλέγμα συνθέτουν τις πλάκες που είναι το βασικό στοιχείο του συσσωρευτή και συχνά αναφέρονται ως ηλεκτρόδια. Γενικά υπάρχει ένα πλήθος αρνητικών και θετικών πλακών μέσα σε μια κυψελίδα. Το πάχος τους και οι σχέσεις των επιφανειών μεταξύ θετικών και αρνητικών πλακών, έχουν σημαντική επίδραση στα χαρακτηριστικά ενός συσσωρευτή. Το ενεργό υλικό, το οποίο συνιστά την θετική και την αρνητική πλάκα, αποτελείται από ένα συνδυασμό υλικών το οποίο είναι υπεύθυνο για την ηλεκτροχημική αντίδραση μέσα στο στοιχείο. Η ποσότητα του ενεργού υλικού είναι ανάλογη με την χωρητικότητα του συσσωρευτή. Σε έναν τυπικό συσσωρευτή μολύβδου το ενεργό υλικό είναι ένας συνδυασμός διοξειδίου του μολύβδου (PbO_2) στη θετική πλάκα με μεταλλικό πορώδη μόλυβδο (Pb) στην αρνητική, που αντιδρούν σε διάλυμα θειικού οξέος (H_2SO_4) κατά τη λειτουργία του συσσωρευτή.

- Τον ηλεκτρολύτη που είναι το αγώγιμο μέσο που επιτρέπει τη ροή του ηλεκτρικού ρεύματος μέσω της ιοντικής ανταλλαγής ή της ανταλλαγής ηλεκτρονίων, επάνω στις πλάκες του στοιχείου. Είναι συνήθως υγρό, όπως νερό ή κάποιος άλλος διαλύτης, με διαλυμένα άλατα, οξέα ή αλκάλια, που επιτρέπει την ιοντική αγωγιμότητα. Μερικοί συσσωρευτές χρησιμοποιούν στερεούς ηλεκτρολύτες, οι οποίοι είναι ιοντικοί αγωγοί στη θερμοκρασία λειτουργίας του στοιχείου.

- Τον διαχωριστή που είναι ένα πορώδες απομονωτικό μέσο μεταξύ των πλακών, που εμποδίζει την αγώγιμη επαφή μεταξύ του θετικού και του αρνητικού ηλεκτροδίου. Στους συσσωρευτές μολύβδου οξέος οι διαχωριστές είναι ελάσματα πορώδους μόνωσης που τοποθετούνται μεταξύ των ηλεκτροδίων που έχουν αντίθετη πολικότητα για την πρόληψη της επαφής και βραχυκυκλώματος μεταξύ τους. Κάθε στοιχείο μπορεί να κατασκευασθεί σε διάφορες διατάξεις και σχήματα και για αυτό τα ηλεκτρόδια και ο ηλεκτρολύτης κατασκευάζονται με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε να χωρούν στο επιθυμητό σχήμα του στοιχείου του συσσωρευτή. Τα στοιχεία στη συνέχεια σφραγίζονται με διάφορους τρόπους για την αποφυγή διαρροής ή ξήρανσης των υλικών τους. Μερικά είναι εξοπλισμένα με συσκευές εξαερισμού ή άλλα μέσα που επιτρέπουν στα συγκεντρωμένα αέρια να διαφύγουν. Η κατασκευή των ηλεκτροχημικών στοιχείων ολοκληρώνεται με κατάλληλα κιβώτια ή δοχεία, με μέσα σύνδεσης του ακροδέκτη και με τη σήμανσή τους.

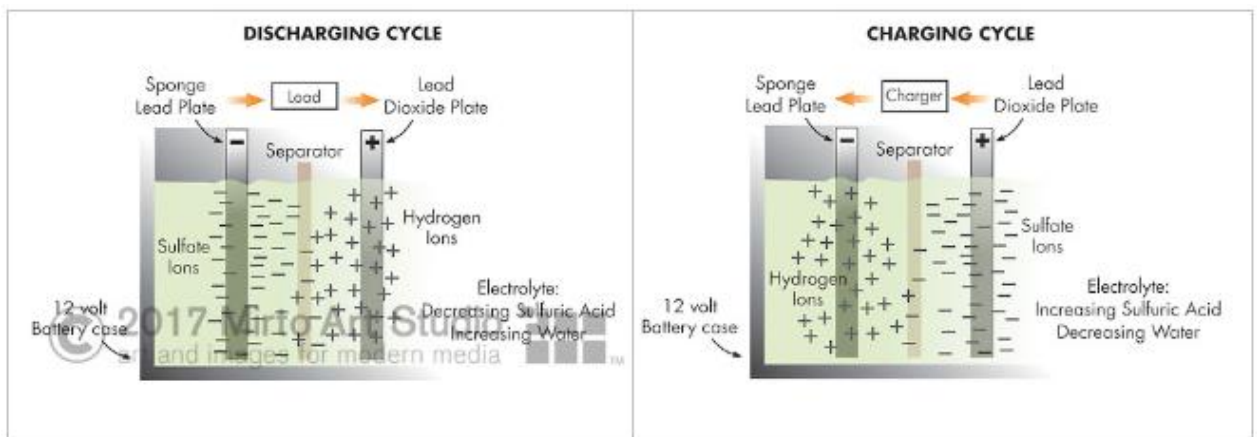
- Τους πόλους ή τερματικούς πόλους που είναι οι εξωτερικές θετικές ή αρνητικές, ηλεκτρικές συνδέσεις του συσσωρευτή. Ένα φορτίο ή ένα σύστημα γενικότερα συνδέεται με τον συσσωρευτή μέσω των πόλων^{1,2}.

Η **Εικόνα 1-2** απεικονίζει την διαδικασία εκφόρτισης και φόρτισης ενός συσσωρευτή.

Κατά τη διαδικασία εκφόρτισης, το ηλεκτροχημικό στοιχείο είναι συνδεδεμένο με ένα εξωτερικό

φορτίο. Ηλεκτρόνια ρέουν μέσω του εξωτερικού φορτίου από την άνοδο, η οποία οξειδώνεται, προς την κάθοδο, όπου δέχεται τα ηλεκτρόνια. Το ηλεκτρικό κύκλωμα ολοκληρώνεται με τον ηλεκτρολύτη και τη ροή ανιόντων (αρνητικών ιόντων) και κατιόντων (θετικών ιόντων) προς την άνοδο και την κάθοδο, αντίστοιχα.

Κατά τη διαδικασία φόρτισης, η ροή του ρεύματος (ροή των ηλεκτρονίων) αντιστρέφεται, η οξείδωση λαμβάνει χώρα στο θετικό ηλεκτρόδιο (άνοδος) και αυτό που ανάγεται είναι το αρνητικό ηλεκτρόδιο (κάθοδος). Καθώς εξορισμού, η άνοδος είναι το ηλεκτρόδιο στο οποίο γίνεται η οξείδωση και η κάθοδος το ηλεκτρόδιο στο οποίο γίνεται η αναγωγή, το θετικό ηλεκτρόδιο είναι τώρα η άνοδος και το αρνητικό η κάθοδος².



Εικόνα 1-2: Διαδικασία φόρτισης και εκφόρτισης ενός συσσωρευτή

1.1.2 Χαρακτηριστικά μεγέθη συσσωρευτών

Η συμπεριφορά φόρτισης/εκφόρτισης ενός συσσωρευτή εξαρτάται από έναν αριθμό παραμέτρων που αποτελούν τα χαρακτηριστικά μεγέθη για κάθε συσσωρευτή.

- Τάση

Η διαφορά δυναμικού που παρατηρείται μεταξύ του θετικού και του αρνητικού ηλεκτροδίου ονομάζεται τάση του ηλεκτροχημικού στοιχείου ή του συσσωρευτή. Η τιμή της τάσης εξαρτάται από το ρεύμα, την κατάσταση φόρτισης και το ιστορικό του στοιχείου, όπως η διάρκεια ζωής και η περίοδος αποθήκευσής του. Η μονάδα μέτρησης της τάσης είναι τα Volts (V).

- Χωρητικότητα

Η χωρητικότητα του συσσωρευτή ορίζεται ως η ποσότητα του ηλεκτρικού φορτίου που μπορεί αποθηκεύσει ο συσσωρευτής και να αντληθεί από αυτήν. Η ποσότητα δηλαδή του φορτίου που παράγεται από το ενεργό υλικό της ανόδου και καταναλώνεται από το ενεργό υλικό της καθόδου.

Η χωρητικότητα εξαρτάται από την ποσότητα του ενεργού υλικού του συσσωρευτή. Ένα πολύ μικρό

ηλεκτροχημικό στοιχείο έχει μικρότερη χωρητικότητα από ένα μεγαλύτερο στοιχείο ίδιας χημικής σύστασης. Επίσης, η χωρητικότητα επηρεάζεται από τις συνθήκες εκφόρτισης όπως είναι ο ρυθμός εκφόρτισης (μεγάλος ρυθμός εκφόρτισης συνεπάγεται μικρή χωρητικότητα συσσωρευτή), το ρεύμα εκφόρτισης, την τάση και τη θερμοκρασία. Επίσης, επηρεάζεται από την κατάσταση φόρτισης και το ιστορικό του συσσωρευτή. Όταν ο συσσωρευτής εκφορτίζεται με σταθερό ρεύμα τότε η χωρητικότητά του δίνεται από τη σχέση:

$$C_{Ah} = I * \Delta t$$

1-1

Η μονάδα μέτρησης της χωρητικότητας είναι το αμπερώριο (Ah). Για παράδειγμα, αν η χωρητικότητα ενός συσσωρευτή είναι 10Ah, αυτό σημαίνει ότι ο συσσωρευτής μπορεί να παρέχει ρεύμα έντασης 1A για 10 ώρες ή 2A για 5 ώρες κ.ο.κ. Η χωρητικότητα δηλαδή ενός συσσωρευτή καταδεικνύει ουσιαστικά πόση ώρα απαιτείται για την εκφόρτισή της.

- Ενεργειακή χωρητικότητα

Είναι η χωρητικότητα του συσσωρευτή σε αποθηκευμένη ενέργεια. Εκφράζεται σε Wh και υπολογίζεται προσεγγιστικά πολλαπλασιάζοντας τη χωρητικότητα (σε Ah) με την ονομαστική τάση του συσσωρευτή. Για παράδειγμα, συσσωρευτής 12V, 100Ah, έχει χωρητικότητα σε αποθηκευμένη ενέργεια 12*100= 1200Wh.

- Ειδική ενέργεια και ενεργειακή πυκνότητα

Ως ειδική ενέργεια ενός συσσωρευτή ορίζεται η ενεργειακή χωρητικότητα ανά μονάδα βάρους του συσσωρευτή (Wh/kg). Η θεωρητική ειδική ενέργεια είναι η μέγιστη ενέργεια που μπορεί να παραχθεί ανά μονάδα μάζας του ενεργού υλικού του συσσωρευτή. Οι πρακτικές τιμές της ειδικής ενέργειας είναι αρκετά χαμηλότερες από τις θεωρητικές. Για παράδειγμα, στο συσσωρευτή μολύβδου-οξέος που χρησιμοποιείται σε κάποιο όχημα αποδεικνύεται ότι μόνο το 26% του συνολικού του βάρους συμμετέχει στην παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας. Ως ενεργειακή πυκνότητα ορίζεται η ενέργεια που παρέχεται ανά μονάδα όγκου του συσσωρευτή (Wh/l ή Wh/cm³).

- Ειδική ισχύς

Η ειδική ισχύς ενός συσσωρευτή ορίζεται ως η μέγιστη ισχύς ανά μονάδα μάζας που μπορεί να παραχθεί σε ένα μικρό χρονικό διάστημα. Είναι χαρακτηριστικό της χημικής σύστασης του συσσωρευτή και εξαρτάται κυρίως από την εσωτερική του αντίσταση. Έχει μονάδα μέτρησης το W/kg και καθορίζει το βάρος του συσσωρευτή που απαιτείται για να επιτευχθεί η απαιτούμενη απόδοση.

- Εσωτερική αντίσταση

Η εσωτερική αντίσταση χαρακτηρίζει την ικανότητα του συσσωρευτή να χειρίζεται ένα συγκεκριμένο φορτίο. Εξαρτάται από τη χημική σύσταση του συσσωρευτή και επηρεάζεται από τη θερμοκρασία, το μέγεθος του συσσωρευτή, την ηλικία της και το ρεύμα εκφόρτισης. Συνήθως διαφέρει στη φόρτιση και την εκφόρτιση (χαμηλότερη στην εκφόρτιση και υψηλότερη στη φόρτιση). Επίσης η εσωτερική αντίσταση αυξάνεται όταν πλησιάζει το άκρο της εκφόρτισης, λόγω της μειωμένης αγωγιμότητας των σχηματισμένων ενώσεων. Η εσωτερική αντίσταση κάθε συσσωρευτή είναι απαραίτητο να είναι σημαντικά μικρότερη της αντίστασης του φορτίου. Διαφορετικά, καθώς αυξάνεται η εσωτερική αντίσταση του συσσωρευτή, η απόδοση του συσσωρευτή μειώνεται και η θερμική του ευστάθεια ελαττώνεται, διότι η ενέργεια που παρέχει η μπαταρία μετατρέπεται σε θερμότητα^{3,2}.

1.2 Κατηγορίες συσσωρευτών

Οι συσσωρευτές ανάλογα με την ικανότητα τους να επαναφορτίζονται ηλεκτρικά, χωρίζονται σε δύο βασικές κατηγορίες:

- Τους πρωτογενείς συσσωρευτές (primary), που έχουν αποθηκευμένη χημική ενέργεια την οποία και μπορούν να την αποδώσουν ως ηλεκτρική, δεν μπορούν όμως να επαναφορτιστούν. Αποδίδουν δηλαδή ηλεκτρική ενέργεια έως ότου περατωθούν οι ηλεκτροχημικές αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα στη διάταξη. Τα γενικά τους πλεονεκτήματα είναι η μεγάλη διάρκεια ζωής, η ελάχιστη, είτε καθόλου, συντήρηση και η ευκολία στη χρήση.

- Τους δευτερογενείς συσσωρευτές (secondary), οι οποίες έχουν τη δυνατότητα να επαναφορτίζονται και να επαναλαμβάνουν επομένως τις ηλεκτροχημικές αντιδράσεις τους ύστερα από κάθε εκφόρτισή τους. Χαρακτηρίζονται από υψηλή πυκνότητα ισχύος, καλή συμπεριφορά σε χαμηλές θερμοκρασίες και υψηλό ρυθμό εκφόρτισης. Η ενεργειακή τους πυκνότητα είναι γενικά χαμηλότερη από ότι στους περισσότερους πρωτογενείς συσσωρευτές, όπως και η διατήρηση της κατάστασης φόρτισης, κάτι που εξισορροπείται βέβαια από την δυνατότητά τους να επαναφορτίζονται. Οι πιο συνηθισμένοι τύποι δευτερογενών συσσωρευτών είναι οι συσσωρευτές μολύβδου-οξέος και νικελίου – καδμίου⁴.

1.2.1 Συσσωρευτές μολύβδου - οξέως (lead - acid)

Οι συσσωρευτές μολύβδου – οξέως³ είναι το παλαιότερο δευτερογενές σύστημα, που χρησιμοποιείται ευρέως και είναι γνωστό. Σχεδόν το 60% του βάρους τους είναι μόλυβδος ή συστατικά του, και αποτελούν τη βασικότερη χρήση του μολύβδου παγκοσμίως. Ανάλογα με την εφαρμογή για την οποία προορίζονται, καθορίζονται ο σχεδιασμός, το μέγεθος, οι ποσότητες και οι τύποι των υλικών που θα χρησιμοποιηθούν κατά την κατασκευή τους.

Χαρακτηρίζονται από το γεγονός ότι ο μόλυβδος χρησιμοποιείται και στα δύο ηλεκτρόδια ως ενεργό υλικό. Οι πλάκες του αφόρτιστου συσσωρευτή καλύπτονται από θειϊκό μόλυβδο $Pb^{2+}SO_4^{2-}$ ενώ ο

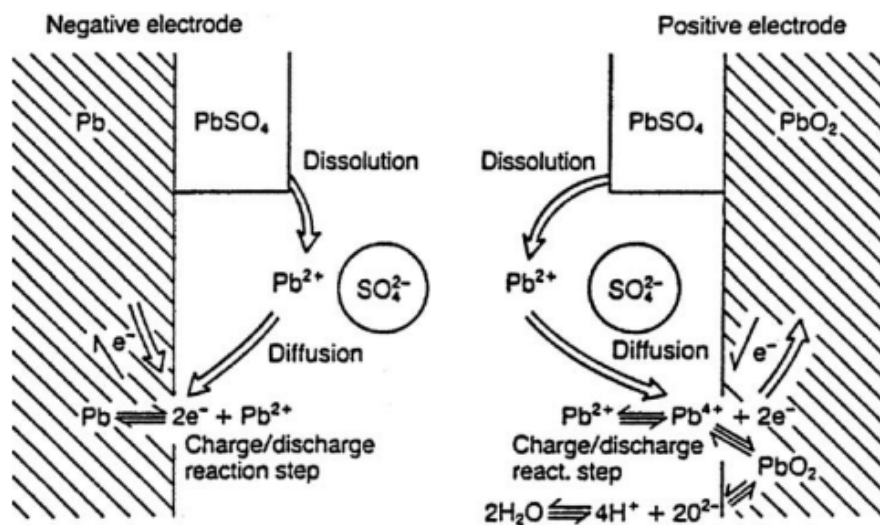
ηλεκτρολύτης είναι διάλυμα θειϊκού οξέος σε νερό, H_2SO_4 .

Κατά την διαδικασία της φόρτισης ο θειϊκός μόλυβδος $Pb^{2+}SO_4^{2-}$ διασπάται και σχηματίζεται διοξείδιο του μολύβδου PbO_2 στο ενεργό υλικό του θετικού ηλεκτροδίου και μεταλλικός μόλυβδος Pb στο ενεργό υλικό του αρνητικού ηλεκτροδίου.

Καθώς ο συσσωρευτής εκφορτίζεται, στο αρνητικό ηλεκτρόδιο ο μόλυβδος οξειδώνεται σε Pb^{2+} , μετακινούνται ηλεκτρόνια στο υπόλοιπο κύκλωμα και στον αραιωμένο ηλεκτρολύτη θειϊκού οξέος σχηματίζεται θειϊκός μόλυβδος $PbSO_4$. Στο θετικό ηλεκτρόδιο, το φορτισμένο ενεργό υλικό βασίζεται σε τέσσερα σθεναρά ιόντα Pb^{4+} , τα οποία με την εκφόρτιση μειώνονται σε Pb^{2+} αποσπώντας ηλεκτρόνια από το υπόλοιπο κύκλωμα.

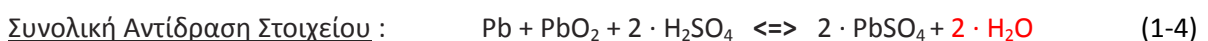
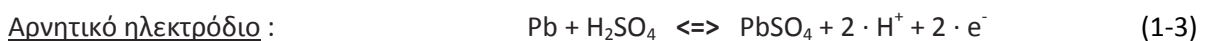
Τα προϊόντα των δύο αντιδράσεων, δηλαδή τα ιόντα Pb^{2+} ενώνονται με θειϊκά ιόντα (SO_4^{2-}) από το διάλυμα και επανασχηματίζουν θειϊκό μόλυβδο πάνω στις πλάκες. Έτσι, καταναλώνεται το θειϊκό οξύ και αραιώνεται το διάλυμα στα στοιχεία. Με τη διαδικασία της φόρτισης, τα θειϊκά ιόντα επιστρέφουν στο διάλυμα και η περιεκτικότητά του αποκαθίσταται στην κανονική τιμή.

Η Εικόνα 1-3 απεικονίζει την διαδικασία που προαναφέρθηκε.



Εικόνα 1-3: Βήματα αντίδρασης σε συσσωρευτή μολύβδου – οξέως

Ο μηχανισμός λειτουργίας των συσσωρευτών μολύβδου - οξέως βασίζεται σε προαναφερθείσα αντιστρεπτή ηλεκτροχημική διαδικασία που περιγράφεται από τις αντιδράσεις εκφόρτισης/φόρτισης που ακολουθούν:



Σε κατάσταση πλήρους εκφόρτισης και τα δύο ηλεκτρόδια αποτελούνται από θειικό μόλυβδο, η τάση στα άκρα του στοιχείου μηδενίζεται και ο ηλεκτρολύτης δεν περιέχει πλέον θειικό οξύ και ουσιαστικά μετατρέπεται σε νερό. Κατά την ηλεκτρόλυση του νερού, το νερό διασπάται με την παροχή του ηλεκτρικού ρεύματος σε υδρογόνο και οξυγόνο όπως περιγράφεται και από τις αντιδράσεις που ακολουθούν:



Η λειτουργία των συσσωρευτών μολύβδου - οξέος μπορεί να γίνεται βάσει της ίδιας αρχής, ωστόσο υπάρχουν διαφορετικοί τύποι συσσωρευτών, με χαρακτηριστικά και ιδιαιτερότητες, τα οποία πρέπει να είναι γνωστά στους χρήστες. Πιο συγκεκριμένα, υπάρχουν οι εξής τύποι:

- Συσσωρευτές με ρύθμιση βαλβίδων (Valve regulated lead acid batteries – VRLA)

Θεωρούνται ως σφραγισμένοι και αναφέρονται συχνά ως κλειστού τύπου γιατί υπό κανονικές συνθήκες δεν επιτρέπουν την προσθήκη ή την απώλεια υγρών. Το υδρογόνο και το οξυγόνο που παράγονται κατά τη φόρτιση δεν διαφεύγουν αλλά μετατρέπονται πάλι σε νερό. Είναι γνωστοί ως συσσωρευτές μολύβδου-οξέος ρυθμιζόμενοι με βαλβίδα από όπου προκύπτει και ο όρος Valve Regulated Lead-Acid batteries – VRLA. Οι βαλβίδες ασφαλείας που διαθέτουν, επιτρέπουν την εκτόνωση της πίεσης, σε περίπτωση που συγκεντρωθεί αέριο στο εσωτερικό γρηγορότερα από ότι μπορεί να μετατραπεί πάλι σε νερό. Επομένως σε ακραίες συνθήκες ενδέχεται να υπάρχει έκλυση υδρογόνου και σε αυτούς τους συσσωρευτές.

- Συσσωρευτές με εξαερισμό (Vented lead acid batteries)

Αναφέρονται και ως μπαταρίες ανοιχτού τύπου διότι είναι δυνατή η πρόσβαση στα στοιχεία τους. Αυτού του τύπου οι συσσωρευτές, εκλύουν συνεχώς υδρογόνο και χρειάζεται περιοδικός έλεγχος της στάθμης του ηλεκτρολύτη με την προσθήκη νερού.

1.2.2 Συσσωρευτές Νικελίου – Καδμίου (NiCd)

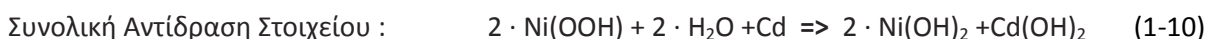
Οι μπαταρίες νικελίου – καδμίου³ κατέχουν ισχυρή θέση στην αγορά και βρίσκονται σε χρήση σχεδόν όσο και οι συσσωρευτές μολύβδου-οξέος. Ανήκουν σε μια ολόκληρη οικογένεια δευτερευουσών μπαταριών που βασίζονται σε υδατικό, αλλά αλκαλικό ηλεκτρολύτη που συνήθως είναι αραιό υδροξείδιο του καλίου.

Σε κατάσταση πλήρους φόρτισης το θετικό ηλεκτρόδιο αποτελείται από οξύ-υδροξείδιο του νικελίου ενώ το αρνητικό ηλεκτρόδιο από κάδμιο. Ανάμεσά τους παρεμβάλλεται ένας διαχωριστής από λεπτό πορώδες μονωτικό υλικό ενώ ο αλκαλικός ηλεκτρολύτης είναι υδροξείδιο του καλίου.

Κατά την εκφόρτιση το οξύ-υδροξείδιο του νικελίου μεταπίπτει σε υδροξείδιο του νικελίου με τη συμμετοχή του νερού και το κάδμιο σε υδροξείδιο του καδμίου. Κατά τη φόρτιση συμβαίνει η αντίστροφη διαδικασία μέχρι το δυναμικό του στοιχείου να αυξηθεί και το νερό να ελαττωθεί

εξαιτίας της ανάπτυξης υδρογόνου στην αρνητική πλάκα και οξυγόνου στην θετική πλάκα. Η ονομαστική τάση για κάθε στοιχείο συσσωρευτή νικελίου – καδμίου είναι 1.2 V.

Ο μηχανισμός λειτουργίας των συσσωρευτών νικελίου – καδμίου βασίζεται στην προαναφερθείσα αντιστρεπτή ηλεκτροχημική διαδικασία που περιγράφεται από τις αντιδράσεις εκφόρτισης/φόρτισης που ακολουθούν:



Ο ηλεκτρολύτης, σε αντίθεση με τους συσσωρευτές μολύβδου οξέως, δεν μεταβάλλεται κατά τη φόρτιση ή την εκφόρτιση, με αποτέλεσμα να μην αποτελεί δείκτη της κατάστασης φόρτισης του συσσωρευτή, όπως συμβαίνει με τους συσσωρευτές μολύβδου – οξέως.

Ένα αξιοσημείωτο χαρακτηριστικό κατά την φόρτιση / εκφόρτιση, είναι ότι ούτε το υδροξείδιο του καλίου (ΚΟΗ) ούτε το κάλιο εμφανίζονται στη συνολική αντίδραση στοιχείου ή σε μία από τις αντιδράσεις ηλεκτροδίων (οι ποσότητες ιόντων Κ που ενσωματώνονται στο ηλεκτρόδιο υδροξειδίου του νικελίου είναι τόσο μικρές ώστε δεν έχουν καμία επίδραση στη συγκέντρωση καλίου). Μόνο το H_2O και τα ιόντα OH ως προϊόν διάσπασης συμμετέχουν σε αυτές τις αντιδράσεις. Το νερό, ωστόσο, είναι το κυρίαρχο τμήμα του ηλεκτρολύτη, επειδή οι συνήθως εφαρμοζόμενες συγκεντρώσεις ΚΟΗ κυμαίνονται μεταξύ 20 και 30% κατά βάρος^{3,5}.

Οι συσσωρευτές νικελίου – καδμίου μπορούν να κατασκευαστούν με βαλβίδα εκτόνωσης της πίεσης που αναπτύσσεται στο εσωτερικό τους από αέρια, χωρίς όμως αυτό να είναι απαραίτητο στοιχείο της κατασκευής τους.

Στην περίπτωση όπου δεν χρησιμοποιηθεί βαλβίδα πίεσης, οι συσσωρευτές νικελίου – καδμίου είναι σφραγισμένοι και δεν απαιτούν καθόλου συντήρηση παρά μόνο επαναφόρτιση.

Ανάλογα με τη μέθοδο κατασκευής των πλακών των ηλεκτροδίων, οι συσσωρευτές νικελίου – καδμίου διακρίνονται σε δύο βασικούς τύπους. Ο πρώτος τύπος συσσωρευτή καλείται rocket plate (πλάκα με θυλάκια), διότι το ενεργό υλικό των ηλεκτροδίων είναι τοποθετημένο μέσα σε διάτρητες θήκες από χάλυβα, ενώ ο δεύτερος τύπος συσσωρευτή ονομάζεται sintered plate (πεφρυγμένη πλάκα) και στη μέθοδο αυτή, το ενεργό υλικό των ηλεκτροδίων περιέχεται σε μια πεφρυγμένη πλάκα.

1.3 Σκοπός της Εργασίας

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία πραγματεύεται την υπολογιστική προσομοίωση διασποράς υδρογόνου σε έναν εργασιακό χώρο φόρτισης συσσωρευτών. Σκοπός της εργασίας είναι η διερεύνηση διασποράς και διάχυσης του υδρογόνου που εκλύεται κατά την διάρκεια φόρτισης των συσσωρευτών και η ανάπτυξη ενός υπολογιστικού μοντέλου προσομοίωσης σε περιβάλλον ANSYS CFX. Το μοντέλο αυτό θα στοχεύσει σε εφαρμογή του σε ανάλογα προβλήματα διασποράς

υδρογόνου ή άλλων επικίνδυνων ουσιών σε κλειστούς χώρους, με σκοπό την ευκολότερη και γρηγορότερη πρόβλεψη της βραχυπρόθεσμης και μακροπρόθεσμης κατανομής υδρογόνου ή άλλων ουσιών, σε περιορισμένους χώρους και κατά συνέπεια και των διορθωτικών ενεργειών που απαιτούνται.

Στην εργασία αυτή αρχικά περιγράφεται ο λόγος για τον οποίο η έκλυση υδρογόνου, σε ανοιχτούς και κλειστούς κυρίως χώρους, έχει αποτελέσει αντικείμενο παγκόσμιου ενδιαφέροντος. Η φόρτιση συσσωρευτών που πραγματοποιείται σε κλειστούς χώρους έχει ως αποτέλεσμα τη συσσώρευση ποσοτήτων υδρογόνου, οι οποίες μπορούν να αποτελέσουν μια εκρηκτική ατμόσφαιρα για το εργαζόμενο προσωπικό. Η ύπαρξη κατάλληλου εξαερισμού είναι απαραίτητη για την διατήρηση της ποσότητας υδρογόνου κάτω από το κατώτατο όριο που προβλέπει η σχετική νομοθεσία.

Στη συνέχεια γίνεται μια σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση των πειραματικών και υπολογιστικών διερευνήσεων διασποράς υδρογόνου και στην πορεία περιγράφεται το μοντέλο που δημιουργήθηκε στην παρούσα εργασία. Η πιστοποίηση του μοντέλου έγινε με την εφαρμογή του σε μια περίπτωση μελέτης που αφορούσε μεγάλη κλίμακα απελευθέρωσης υδρογόνου σε περιορισμένο χώρο σταθερής θερμοκρασίας, όπου ήταν διαθέσιμες οι πειραματικές μετρήσεις. Κατόπιν έγινε παραμετρική μελέτη του πλέγματος και του μοντέλου τύρβης, τα αποτελέσματα της οποίας αναλύονται σε επόμενη ενότητα.

Τέλος γίνεται η εφαρμογή του μοντέλου σε μια πραγματική περίπτωση φόρτισης συσσωρευτών αεροπορικού τύπου, σε εργασιακό χώρο όπου στεγάζεται εντός του υποστέγου συντήρησης ελικοπτέρων στρατιωτικού τύπου. Μελετάται ο αριθμός και η θέση φόρτισης των συσσωρευτών, η επίδραση φυσικού και τεχνητού αερισμού στην συγκέντρωση του εκλυόμενου υδρογόνου καθώς και η θερμοκρασία. Τα αποτελέσματα της μελέτης παρουσιάζονται στο τελευταίο μέρος της εργασίας.

2. Έκλυση υδρογόνου κατά τη φόρτιση συσσωρευτών

2.1 Γενικά Χαρακτηριστικά

Η φόρτιση συσσωρευτών είναι μια δραστηριότητα που πολλές φορές δεν αντιμετωπίζεται με την προσοχή που θα έπρεπε, καθώς οι κίνδυνοι που ελλοχεύουν δεν είναι ευρέως γνωστοί, αν και μπορούν να οδηγήσουν ακόμα και σε έκρηξη. Οι χώροι φόρτισης συσσωρευτών παρουσιάζουν ενδογενείς κινδύνους, λόγω της πιθανής έκλυσης εκρηκτικού αερίου αλλά και εξωγενείς κινδύνους λόγω της παρουσίας εργαζομένων, οι δραστηριότητες των οποίων μπορεί να δημιουργήσουν συνθήκες έκρηξης (ηλεκτροστατικές εκφορτίσεις, σπινθήρες από τη χρήση εργαλείων, χρήση κακής πρακτικής, κλπ).

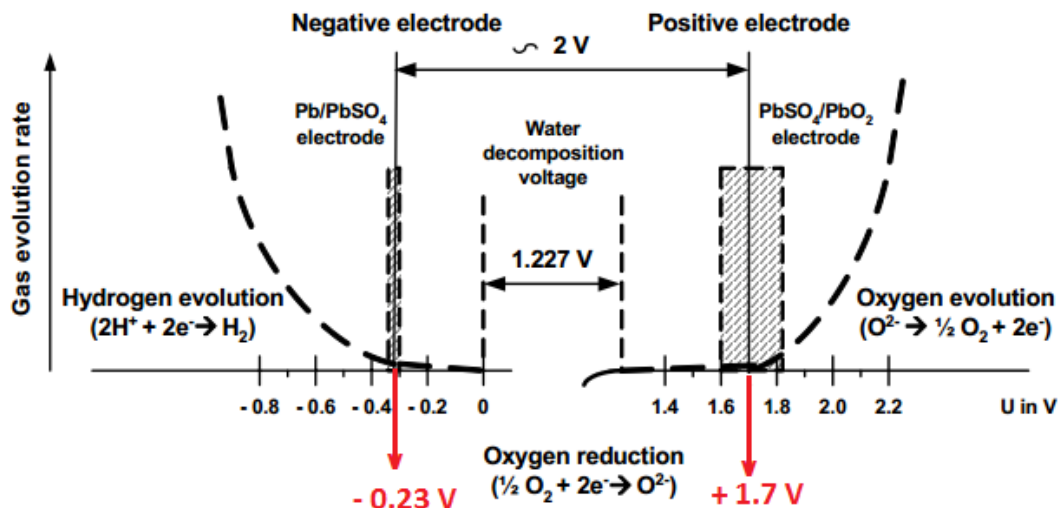
Σύμφωνα με τη Νομοθεσία (ΠΔ 42/2003) ως εκρηκτική ατμόσφαιρα νοείται μείγμα με αέρα, σε ατμοσφαιρικές συνθήκες, εύφλεκτων ουσιών υπό μορφή αερίων, ατμών, συγκεντρώσεων σταγονιδίων ή σκόνης, στο οποίο, μετά από ανάφλεξη, η καύση μεταδίδεται στο σύνολο του μη καιγόμενου μείγματος.

Η δημιουργία εκρηκτικής ατμόσφαιρας αφορά στους συσσωρευτές που έχουν τη δυνατότητα επαναφόρτισης, καθότι η έκλυση του αερίου υδρογόνου αποτελεί αναπόφευκτο και εγγενές χαρακτηριστικό των δευτερογενών συσσωρευτών. Σε αυτή την κατηγορία ανήκουν οι συσσωρευτές νικελίου - καδμίου (Ni-Cd) και μολύβδου οξέος (Pb/lead acid), που περιγράφηκαν σε προηγούμενο κεφάλαιο και είναι αυτές που χρησιμοποιούνται κυρίως στον εργασιακό χώρο για τον οποίο μελετάται και η παρούσα εργασία.

Το οξυγόνο σχηματίζεται στο θετικό ηλεκτρόδιο, ενώ το υδρογόνο παράγεται στο αρνητικό ηλεκτρόδιο. Η τάση ισορροπίας στην οποία γίνεται η ηλεκτρόλυση του νερού είναι $U_0 (E_0) = 1.227$ Volt.

Στην Εικόνα 2-1 φαίνονται στον άξονα x του διαγράμματος, τα δυναμικά των ηλεκτροδίων ενός συσσωρευτή μολύβδου οξέος ενώ ο άξονας y αντιπροσωπεύει τον ρυθμό ανάπτυξης των αερίων και αντιστοιχεί στο ρεύμα αποσύνθεσης του νερού και είναι ισοδύναμος με τον ρυθμό της ηλεκτροχημικής αντίδρασης. Για τάση μεγαλύτερη από +1,7 V για το θετικό ηλεκτρόδιο και μικρότερη από -0,23V για το αρνητικό ηλεκτρόδιο έχει ξεκινήσει η παραγωγή οξυγόνου και υδρογόνου αντίστοιχα.

Όταν η τάση του στοιχείου - που όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 1.1.1 είναι η διαφορά δυναμικού που παρατηρείται μεταξύ του θετικού και του αρνητικού ηλεκτροδίου - είναι μεγαλύτερη από 1.227 V, η ηλεκτρόλυση του νερού είναι αναπόφευκτη. Ο ρυθμός της ηλεκτρόλυσης και οι αντίστοιχοι όγκοι του οξυγόνου και του υδρογόνου που σχηματίζονται, εξαρτώνται από το δυναμικό του μεμονωμένου ηλεκτροδίου ή από την τάση υπερφόρτισης.



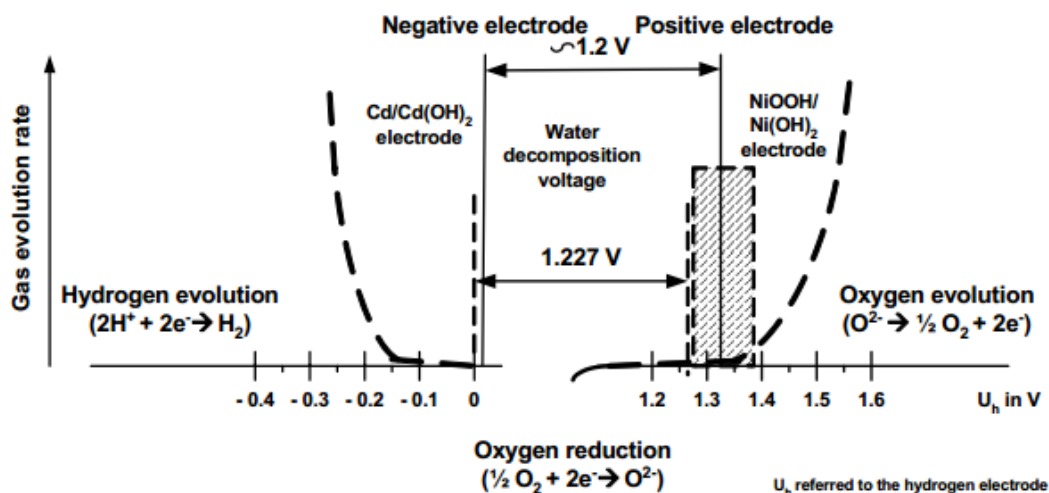
Εικόνα 2-1: Οι τάσεις ισορροπίας των θετικών και αρνητικών ηλεκτροδίων σε ένα ανοικτό κύκλωμα μπαταρίας μολύβδου οξέος και η εξέλιξη αερίου υδρογόνου και αερίου οξυγόνου⁶

Η τάση του στοιχείου στην αρχή των δύο καμπυλών υποδεικνύει ότι, τόσο οι αντιδράσεις δημιουργίας υδρογόνου όσο και οξυγόνου εμφανίζονται πιο αργά. Αν όμως η τάση αυτή υπερβεί ορισμένες τιμές (π.χ. 2.40 V), τότε και οι δύο καμπύλες παρουσιάζουν μια απότομη αύξηση. Αυτό σημαίνει ότι τόσο η παραγωγή υδρογόνου όσο και του οξυγόνου αυξάνονται ουσιαστικά σε όγκο, όταν το δυναμικό του ηλεκτροδίου αυξάνεται.

Όταν ο συσσωρευτής υπερφορτίζεται, η ανάπτυξη υδρογόνου και οξυγόνου είναι πρωταρχικές αντιδράσεις που συμβαίνουν. Στη συνέχεια, το δυναμικό του θετικού ηλεκτροδίου μετατοπίζεται σε μια πιο θετική τιμή, ενώ το δυναμικό του αρνητικού ηλεκτροδίου μετατοπίζεται σε πιο αρνητικές τιμές.

Το γεγονός ότι η εξέλιξη του υδρογόνου ξεκινά με δυναμικά χαμηλότερα από το δυναμικό τάσης του ανοικτού κυκλώματος του αρνητικού ηλεκτροδίου, σημαίνει ότι η παραγωγή του υδρογόνου δεν μπορεί ποτέ να αποφευχθεί εντελώς. Αυτό είναι σημαντικό για το σχεδιασμό σφραγισμένων συσσωρευτών που ρυθμίζονται με βαλβίδες. (Προφανώς ένα σχέδιο για έναν συσσωρευτή κλειστού τύπου 100% δεν είναι δυνατό και πρέπει να αποφευχθεί.)

Η σημαντικότερη διαφορά μεταξύ των συσσωρευτών Ni-Cd και μολύβδου-οξέος σε σχέση με την ηλεκτρόλυση του νερού, είναι ότι το δυναμικό ισορροπίας του αρνητικού ηλεκτροδίου (ηλεκτρόδιο καδμίου) είναι θετικότερο από το δυναμικό όταν αρχίζει να αναπτύσσεται το υδρογόνο, όπως φαίνεται και από την Εικόνα 2-2. Η εξέλιξη του οξυγόνου δεν μπορεί να αποφευχθεί στο θετικό ηλεκτρόδιο, επειδή το δυναμικό αυτού του ηλεκτροδίου υπερβαίνει την τιμή ισορροπίας της εξέλιξης του οξυγόνου. Αλλά ο ρυθμός εξέλιξης υπό κανονικές συνθήκες είναι μάλλον χαμηλός σε σύγκριση με τους συσσωρευτές μολύβδου οξέος σε συνθήκες ανοικτού κυκλώματος⁶.



Εικόνα 2-2: Οι τάσεις ισορροπίας των θετικών και αρνητικών ηλεκτροδίων σε ένα ανοικτό κύκλωμα μπαταρίας νικελίου καδμίου και η εξέλιξη αερίου υδρογόνου και αερίου οξυγόνου⁶

2.2 Παράγοντες που επηρεάζουν τον ρυθμό ανάπτυξης αερίου υδρογόνου

- Τάση φόρτισης

Όσο υψηλότερη είναι η τάση επαναφόρτισης, τόσο μεγαλύτερος είναι ο ρυθμός έκλυσης υδρογόνου. Η τάση αυτή επιταχύνεται σε ασυνήθεις συνθήκες, όπως η υπερβολική τάση του φορτιστή ή στην περίπτωση των συσσωρευτών VRLA υπό συνθήκες γνωστές ως «θερμική διαφυγή», οι οποίες μπορεί να προκληθούν από διάφορες καταστάσεις όπως βλάβη φορτιστή ή υπερβολική τάση, υψηλές θερμοκρασίες περιβάλλοντος, αποτυχία στοιχείων ή οποιοσδήποτε συνδυασμός αυτών των μεταβλητών. Και στις δύο περιπτώσεις, οι μη φυσιολογικές συνθήκες μπορούν να προκαλέσουν σημαντική έκλυση υδρογόνου και οξυγόνου.

- Θερμοκρασία περιβάλλοντος

Η χημική κινητική (ταχύτητα της αντίδρασης) ενός συσσωρευτή εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Η γενική προσέγγιση είναι ότι η αύξηση της θερμοκρασίας κατά 10K (10 °C) διπλασιάζει τον ρυθμό αντίδρασης των εσωτερικών διεργασιών, π.χ. τη διάβρωση (γήρανση), την αυτοεκφόρτιση και τους αντίστοιχους ρυθμούς έκλυσης υδρογόνου και οξυγόνου. Έτσι αν οι θερμοκρασίες χώρου είναι υψηλότερες από το συνιστώμενο περιβάλλον (συνήθως 20 °C - 25 °C) θα επιταχυνθούν οι ρυθμοί έκλυσης υδρογόνου.

- Χρήση μολυσμένου νερού

Εάν το νερό που χρησιμοποιείται για την επαναπλήρωση του ηλεκτρολύτη των στοιχείων είναι μολυσμένο (δεν είναι απεσταγμένο ή καθαρισμένο νερό) τότε προστίθενται μεταλλικοί ρύποι με χαμηλότερες δυνατότητες. Αυτό προκαλεί υψηλότερη κατανάλωση νερού και κατ'επέκταση υψηλότερο ρυθμό έκλυσης υδρογόνου.

2.3 Όρια Εκπομπών για Υγιεινή και Ασφάλεια στην Εργασία - Κίνδυνος Ανάφλεξης (όρια αναφλεξιμότητας)

Κατά τη φόρτιση των συσσωρευτών εξαιτίας της ηλεκτρόλυσης, λαμβάνουν χώρα χημικές αντιδράσεις που οδηγούν στην έκλυση υδρογόνου και οξυγόνου. Το υδρογόνο που εκλύεται κατά τη φόρτιση αποτελεί εκρηκτικό αέριο. Η δημιουργία αερίου υδρογόνου παρατηρείται κυρίως στο τέλος της περιόδου φόρτισης.

Το **κατώτερο όριο εκρηκτικότητας (Lower Explosive Limit - LEL)** για μίγμα αέρα / υδρογόνου είναι 4% συγκέντρωση σε υδρογόνο, κατ'όγκον. Αν η συγκέντρωση του H₂ υπερβεί το 4% κατ'όγκον, τότε δημιουργείται εκρηκτικό μίγμα, καθώς υπερβαίνει το κατώτερο όριο εκρηκτικότητας^{3,6}.

Σε επίπεδα που προσεγγίζουν την συγκέντρωση 4%, η συσσώρευση αερίου υδρογόνου μπορεί να αποτελέσει κίνδυνο για το προσωπικό, την εγκατάσταση και την ασφάλεια του συστήματος.

Ο κίνδυνος ενισχύεται και λόγω των ιδιοτήτων του υδρογόνου, οι οποίες το καθιστούν ιδιαίτερα επικίνδυνο. Τέτοιες ιδιότητες⁷ είναι:

- Το μεγάλο εύρος αναφλεξιμότητας 4% (Lower Explosive Limit – LEL) έως 74% (Upper Explosive Limit – UEL) κατ'όγκον.
- Η μεγάλη διαχυτότητα και ταχύτητα άνωσης. Το υδρογόνο αναμιγνύεται πολύ γρήγορα με τον περιβάλλοντα αέρα κατά την έκλυσή του. Η ταχύτητα διάχυσης είναι ανάλογη του συντελεστή διαχυτότητας (0.61cm²/s) και μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία βάσει της σχέσης T^{3/2}. Ο ρυθμός διάχυσης του H₂ στον αέρα είναι μεγαλύτερος κατά 4 φορές περίπου από τον αντίστοιχο ρυθμό διάχυσης του αέρα στον αέρα. Η θετική άνωση του H₂ είναι ευνοϊκή για θέματα ασφαλείας σε ανοιχτούς χώρους. Αντιθέτως, μπορεί να προκαλέσει επικίνδυνες συνθήκες σε κλειστούς ή μερικώς κλειστούς χώρους όπου το H₂ μπορεί να συσσωρευτεί π.χ. κάτω από την οροφή. Η διάχυση και η ταχύτητα άνωσης λοιπόν επηρεάζουν τον ρυθμό ανάμιξης του H₂ με τον αέρα. Η ταχεία ανάμιξη του H₂ με τον αέρα οδηγεί πολύ γρήγορα σε αναφλέξιμο νέφος αλλά στη συνέχεια, για τον ίδιο λόγο, αραιώνεται ταχέως συνήθως σε μίγμα συγκέντρωσης μικρότερης από το κατώτατο όριο αναφλεξιμότητάς του.
- Η χαμηλή πυκνότητα του. Το H₂, με πυκνότητα 0,0838 kg/m³ σε κανονικές συνθήκες είναι πολύ πιο ελαφρύ από τον αέρα (1,204 kg/m³) με συνέπεια να διαφεύγει ταχέως προς τα πάνω και να συσσωρεύεται ψηλά σε κλειστούς χώρους.
- Η ενεργειακή πυκνότητα (θερμογόνος δύναμη) του H₂ βάσει της μάζας του είναι πολύ υψηλή: 1 kg H₂ περιέχει 132,5MJ η οποία είναι περίπου 2,5 φορές μεγαλύτερη από αυτήν του φυσικού αερίου.
- Η ελάχιστη ενέργεια έναυσης (η απαιτούμενη ενέργεια για την έναυση του πιο ευκόλως αναφλέξιμου μίγματος H₂-αέρα, όπου συνήθως δεν είναι το στοιχειομετρικό μίγμα) είναι 0,017mJ η οποία είναι πολύ χαμηλότερη από αυτήν των μιγμάτων υδρογονανθράκων με τον

αέρα. Ένας ασθενής σπινθήρας ή μια ηλεκτροστατική φόρτιση προκαλούμενη από την ροή H_2 υπό πίεση ή από ανθρώπινη πηγή (~10 mJ) είναι επαρκής για την έναυση του H_2 . Η ελάχιστη ενέργεια έναυσης μπορεί να ελαττωθεί είτε με αύξηση της θερμοκρασίας, της πίεσης ή της περιεκτικότητας του μίγματος σε O_2 .

- Το μικρό μοριακό βάρος και χαμηλό ιξώδες. Το H_2 έχει την τάση διαρροής με ταχύτητα μεγαλύτερη από αυτήν άλλων αερίων. Διάχυση σε μικρό ποσοστό είναι πιθανή ακόμα και δια μέσου άθικτων υλικών, ιδιαίτερα οργανικών, η οποία μπορεί να οδηγήσει σε συσσώρευση H_2 σε κλειστούς χώρους. Ο ρυθμός διαρροής είναι κατά 40 φορές μεγαλύτερος από αυτόν του H_2O και κατά 10 φορές από αυτόν του N_2 .
- Το υδρογόνο είναι ένα άοσμο και άχρωμο αέριο, το οποίο υπάρχει στην ατμόσφαιρα σε φυσικές συγκεντρώσεις 0,01% με αποτέλεσμα η συγκέντρωσή του σε μεγαλύτερες ποσότητες να μην γίνεται αντιληπτή.
- Η μεγάλη ταχύτητα διάδοσης φλόγας που το καθιστά ιδιαίτερα επικίνδυνο και δύσκολα αντιμετωπίσιμο αφότου εκδηλωθεί πυρκαγιά.
- Η μη ορατότητα της φλόγας H_2 -αέρα ακόμα και σε σκοτεινό χώρο (εκτός κι αν υπάρχουν ρύποι στον αέρα) με συνέπεια να είναι δύσκολη η αναγνώριση και ο εντοπισμός της. Από την άλλη πλευρά, πλεονέκτημα των φλογών H_2 -αέρα είναι η απουσία καπνού (με την υπόθεση ότι δεν καίγεται παράλληλα κάποιο άλλο υλικό) η οποία είναι πολύ σημαντική ιδιαίτερα στους κλειστούς χώρους.

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι μια βασική συνθήκη που θα πρέπει να καλύπτεται σε χώρους φόρτισης συσσωρευτών, για την προστασία τους από εκρήξεις, είναι η διατήρηση της συγκέντρωσης του υδρογόνου κάτω από το κατώτατο όριο εκρηκτικότητας. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με τη χρήση φυσικού ή τεχνητού εξαερισμού.

Οι περισσότεροι κώδικες και κανονισμοί απαιτούν σχεδιασμό εγκατάστασης για να εξασφαλιστεί μέγιστο επιτρεπτό όριο συγκεντρώσεως υδρογόνου 1% στις αίθουσες φόρτισης συσσωρευτών.

Υπάρχουν αρκετοί ρυθμιστικοί οργανισμοί και υπηρεσίες που έχουν θεσπίσει και επιβάλλουν προστατευτικές κατευθυντήριες γραμμές και καλά καθορισμένα πρότυπα ασφάλειας και υγείας στο χώρο εργασίας. Η Υπηρεσία Ασφάλειας και Υγείας στην Εργασία (Occupational Safety and Health Administration - OSHA), το Αμερικανικό Εθνικό Ινστιτούτο Προτύπων (American National Standards Institute - ANSI), το Ινστιτούτο Ηλεκτρολόγων και Ηλεκτρονικών Μηχανικών (Institute of Electrical and Electronics Engineers – IEEE), η Εθνική Ένωση Πυροπροστασίας (National Fire Protection Association - NFPA) και διάφορα άλλα είναι μερικά από αυτά.

2.4 Υπολογισμός Εκλυόμενου Υδρογόνου από Φόρτιση Συσσωρευτών

Κατά τη διάρκεια υπερφόρτισης των συσσωρευτών ανοιχτού τύπου, η ηλεκτρόλυση του νερού που

λαμβάνει χώρα οδηγεί στην παραγωγή αερίου υδρογόνου το οποίο εκλύεται με ρυθμό ανάλογο της έντασης φορτίσεως. Ένας συσσωρευτής που φορτίζεται και εκφορτίζεται σε τακτική βάση θα καταναλώσει περισσότερο νερό από έναν συσσωρευτή που βρίσκεται σε λειτουργία αναμονής και άρα θα απελευθερώσει και περισσότερο υδρογόνο στην ατμόσφαιρα⁸.

Σύμφωνα με τη θεωρία⁶, η ποσότητα του νερού που χρησιμοποιείται μπορεί να βρεθεί από την εξίσωση του Faraday όπου κάθε Ah υπερφόρτισης διασπά 0.336 cm³ νερού. Συγκεκριμένα, ο Νόμος ηλεκτρόλυσης ή Νόμος του Faraday, ορίζει ότι η μάζα ενός στοιχείου που απομονώνεται κατά την ηλεκτρόλυση είναι ανάλογη του διερχόμενου ηλεκτρικού φορτίου και του ατομικού βάρους του στοιχείου. Συγκεκριμένα:

$$m_{H_2O} = \left(\frac{It}{F}\right) \cdot \left(\frac{M}{z}\right) = \left(\frac{1 A \cdot 1 h}{26.8 \frac{Ah}{mol}}\right) \cdot \left(\frac{18 \frac{g}{mol}}{2}\right) = \frac{18g H_2O}{53.6Ah \text{ transferred energy}} \quad 2-1$$

$$= 0.336 \frac{g_{H_2O}}{Ah}$$

Όπου:

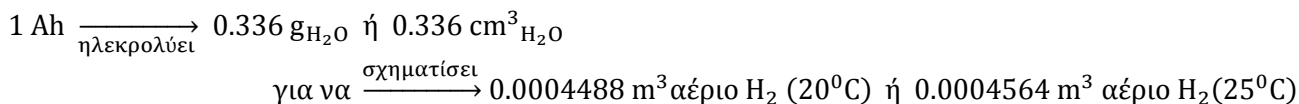
- m είναι η μάζα του νερού που ηλεκτρολύεται σε g για κάθε Ah
- I είναι η ένταση του ρεύματος ηλεκτρόλυσης
- t είναι ο συνολικός χρόνος που εφαρμόζεται το ρεύμα
- F= 96487 Cb/mol= 96487 A·s/mol=26.8 A·h/mol είναι η σταθερά Faraday και προσδιορίζει το ηλεκτρικό φορτίο κάθε mol e⁻
- M=18 είναι το μοριακό βάρος του νερού σε g/ mol
- z=2 είναι ο αριθμός των ηλεκτρονίων που μεταφέρονται ανά ιόν (όπως προκύπτει από την αντίδραση ηλεκτρόλυσης)

Τα επίπεδα του υδρογόνου που παράγονται από την αντίδραση της ηλεκτρόλυσης, εξαρτώνται από τη θερμοκρασία και την πίεση. Έτσι για θερμοκρασία περιβάλλοντος 20°C ή 25°C και κανονική πίεση 1atm (0.1013Mpa), το υδρογόνο που παράγεται από κάθε στοιχείο που φορτίζεται, για κάθε 1 Ah φορτίσεως, είναι περίπου 0.0004488m³ (20°C) ή 0.0004564m³ (25°C) αντίστοιχα^{3,9}.

$$q = 0.0004488 \frac{m^3}{Ah} (20^\circ C) \text{ ή } 0.0004564 \frac{m^3}{Ah} (25^\circ C) \rightarrow \text{generated amount of hydrogen per Ah} \quad (2-2)$$

Η ηλεκτρόλυση 1m³ H₂O παράγει 0,001870 m³ αέριου μίγματος (αφού 1 Ah υπερφόρτισης διασπά 0.336 cm³ H₂O και παράγει 0.0004564 m³ H₂) το οποίο αντιστοιχεί σε αναλογία 2/3 υδρογόνου και 1/3 οξυγόνου. Επομένως η ηλεκτρόλυση 1m³ H₂O παράγει 0,0012469 m³ H₂.

Συνοψίζοντας:



Επομένως, μετρώντας τη συνολική ποσότητα του νερού που απαιτείται για την επαναπλήρωση όλων των στοιχείων ενός συσσωρευτή στο σωστό επίπεδο μετά από κάθε φόρτιση, είναι απλό να υπολογιστεί η συνολική ποσότητα του αερίου υδρογόνου που σχηματίζεται κατά την περίοδο μιας φόρτισης.

Σημειώνεται ότι το αέριο υδρογόνο δεν παράγεται με σταθερό ρυθμό κατά τη διάρκεια της φόρτισης, αλλά κυρίως όταν το δυναμικό του στοιχείου υπερβεί τα 2.37 V που συμβαίνει κυρίως όταν η φόρτιση πλησιάζει στο τέλος της.

2.5 Υπολογισμός Αερισμού Εσωτερικού Χώρου

Λόγω του μεγάλου εύρους εκρηκτικότητας του υδρογόνου (4% έως 74%) καθώς και των ιδιοτήτων που αναφέρθηκαν παραπάνω, η παροχή αποτελεσματικού αερισμού είναι ένας τρόπος πρόληψης της ανάφλεξης εύφλεκτου μείγματος υδρογόνου και αέρα/οξυγόνου.

Οι "Κανονισμοί περί επικίνδυνων ουσιών και εκρηκτικών ατμοσφαιρών" (Dangerous Substances and Explosive Atmospheres Regulations - DSEAR), που έχει θέσει σε εφαρμογή η ευρωπαϊκή νομοθεσία μέσω της οδηγίας ATEX, απαιτούν ότι «ο επαρκής εξαερισμός πρέπει να διατηρεί τη μέση συγκέντρωση επικίνδυνων ουσιών κατά τη διάρκεια της κανονικής λειτουργίας κάτω από εκείνη που θα μπορούσε να σχηματίσει εκρηκτική ατμόσφαιρα». Πρέπει λοιπόν να παρέχεται επαρκής αερισμός για να εξασφαλιστεί ότι η συγκέντρωση του υδρογόνου αραιώνεται πολύ κάτω από το κατώτερο όριο εκρηκτικότητας (LEL).

Το μέγεθος του «περιθωρίου ασφαλείας» που παρέχεται από τον αερισμό αραιώσης πρέπει να αντικατοπτρίζει τον κίνδυνο για το ανθρώπινο δυναμικό. Στις περιοχές φόρτισης συσσωρευτών όπου εισέρχεται ανθρώπινο δυναμικό, η συγκέντρωση υδρογόνου δεν πρέπει να υπερβαίνει το 0,8% κ.ο. (20% του LEL).

Η αποτελεσματική αραιώση εξαρτάται από διάφορους παράγοντες. Αυτοί περιλαμβάνουν το ρυθμό παραγωγής υδρογόνου, τη θέση του συσσωρευτή μέσα στο χώρο φόρτισης, το σχήμα και το μέγεθος του χώρου καθώς και οτιδήποτε θα εμπόδιζε τη φυσική κυκλοφορία του αέρα.

Οι απαιτήσεις για αποτελεσματικό εξαερισμό βασίζονται:

- Στον αριθμό των στοιχείων / συσσωρευτών
- Στον ρυθμό φόρτισης – ένταση ρεύματος κατά τη φόρτιση (σε ampere)

Εξαιτίας της άνωσης του υδρογόνου που το αναγκάζει να συσσωρευτεί σε υψηλά επίπεδα, οι χώροι φόρτισης θα πρέπει να είναι εφοδιασμένοι με κατάλληλες οπές εξαερισμού, δηλαδή εισόδους σε

χαμηλό ύψος και εξόδους σε υψηλό. Το καλύτερο είναι να βρίσκονται σε δύο απέναντι εξωτερικούς τοίχους ή σε μια πόρτα και σε ένα απέναντι εξωτερικό τοίχωμα.

Η απαιτούμενη παροχή αέρα, καθώς και οι διαστάσεις των ανοιγμάτων για φυσικό αερισμό δίνονται από μαθηματικούς τύπους που περιγράφονται σε εθνικά και ευρωπαϊκά πρότυπα ανάλογα με τον τύπο των συσσωρευτών (π.χ. συσσωρευτές έλξης, συσσωρευτές μόνιμης εγκατάστασης κλπ). Επιπλέον, περιγράφεται ο τρόπος υπολογισμού της απόστασης ασφαλείας γύρω από τον συσσωρευτή, στον οποία η συγκέντρωση είναι πολύ χαμηλότερη από το κατώτατο όριο εκρηκτικότητας.

Για κατώτερο όριο εκρηκτικότητας (LEL) 4%, η απαιτούμενη ροή όγκου αέρα μπορεί να υπολογιστεί με τον ακόλουθο τύπο⁹:

$$Q = v \cdot N \cdot q \cdot s \cdot n \cdot I \cdot \frac{C_n}{100Ah} \quad 2-3$$

Όπου:

- Q η απαιτούμενη ροή όγκου αέρα σε m³/h
- N ο αριθμός των συσσωρευτών που φορτίζονται
- v ο απαιτούμενος συντελεστής αραίωσης υδρογόνου $v = 24$
- S ο συντελεστής ασφαλείας = 5
- q 0,00045m³/Ah η ποσότητα υδρογόνου που παράγεται από κάθε στοιχείο
- n ο αριθμός των στοιχείων για κάθε συσσωρευτή
- I το ρεύμα υπερφόρτισης που παράγει αέριο σε A για κάθε 100Ah
- C_n ονομαστική χωρητικότητα σε Ah

Σύμφωνα με τις προδιαγραφές που θέτει η παγκόσμια εταιρεία SAFT⁸, η οποία προμηθεύει με μπαταρίες αεροπορικού τύπου τον ελληνικό στρατό και θέτει αυστηρότερα κριτήρια, η απαιτούμενη ροή όγκου αέρα σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών προκειμένου τα επίπεδα του υδρογόνου να διατηρούνται κάτω από το 0.8%, μπορεί να υπολογιστεί σύμφωνα με τον ακόλουθο τύπο:

$$Q = N \cdot D_f \cdot q \cdot n \cdot I_{gas} \quad 2-4$$

Όπου:

- Q η απαιτούμενη ροή όγκου αέρα σε m³/h
- N ο αριθμός των συσσωρευτών που φορτίζονται
- D_f ο απαιτούμενος συντελεστής αραίωσης ροής υδρογόνου $D_f = \frac{100\% - \frac{4}{5}\%}{\frac{4}{5}\%} = \frac{100\% - \frac{4}{5}\%}{\frac{4}{5}\%} = 124$
- S ο συντελεστής ασφαλείας = 5

- q 0,00045m³/Ah η ποσότητα υδρογόνου που παράγεται από κάθε στοιχείο
 n ο αριθμός των στοιχείων για κάθε συσσωρευτή
 I_{gas} το ρεύμα υπερφόρτισης που παράγει αέριο σε A για κάθε 100Ah

Επιπλέον σύμφωνα με τις προδιαγραφές της SAFT⁸, είναι αναγκαίο να ληφθεί υπόψη η πιθανότητα αστοχίας της συσκευής φόρτισης η οποία μπορεί να οδηγήσει σε υψηλούς ρυθμούς υπερφόρτισης. Σε αυτή την περίπτωση το σύστημα εξαερισμού πρέπει να διαστασιολογηθεί αντίστοιχα. Ωστόσο, αν είναι απαραίτητο να υπάρξει πρόσθετο περιθώριο ασφαλείας σε αυτή την περίπτωση, ο ρυθμός εξαερισμού μπορεί να αυξηθεί κατά ένα συντελεστή:

$$\frac{(100 - P_f)}{100} + \frac{\left(\frac{P_f \cdot I_{max}}{0.1C_{max}}\right)}{100} \quad 2-5$$

Όπου:

- I_{max} το μέγιστο ρεύμα αστοχίας του φορτιστή
 C_{max} το κανονικό ρεύμα υπερφόρτισης για τη μέγιστη χωρητικότητα του συσσωρευτή
 P_f το ποσοστό των φορτιστών που παρουσιάζουν αστοχία κατά την φόρτιση

2.5.1 Φυσικός αερισμός

Ανάλογα με την ποσότητα και τον ρυθμό παραγωγής του αέριου υδρογόνου και οξυγόνου, η απαιτούμενη ανταλλαγή αέρα μπορεί να εξασφαλιστεί και με φυσικό εξαερισμό.

Οι αίθουσες φόρτισης συσσωρευτών και οι μεμονωμένοι αποθηκευτικοί χώροι απαιτούν τροφοδοσία φρέσκου αέρα και απαγωγή του μίγματος αέρα / υδρογόνου, με ανοίγματα εισόδου και εξόδου, καθένα με ελάχιστη ελεύθερη επιφάνεια υπολογιζόμενη σύμφωνα με τον ακόλουθο τύπο:

$$A [cm^2] = 28 \cdot Q \left[\frac{m^3}{h} \right] \quad 2-6$$

Ο παραπάνω τύπος υποθέτει ταχύτητα ροής του αέρα 0.1m/s.

Οι χώροι εργασίας θεωρούνται επαρκώς αεριζόμενοι όταν ο όγκος του χώρου φόρτισης υπερβαίνει τα $2,5 \cdot Q \text{ m}^3$.

Η πιο κατάλληλη θέση για την σωστή ανταλλαγή αέρα προϋποθέτει οι αγωγοί του αέρα τροφοδοσίας και του αέρα εξαγωγής να τοποθετούνται:

- Σε απέναντι τοίχους
- Σε ελάχιστη απόσταση 2m, εάν βρίσκονται στην ίδια πλευρά

3. Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Η αυξανόμενη χρήση του υδρογόνου ως εναλλακτικό καύσιμο σε συνδυασμό με τον βαθμό επικινδυνότητας που συνοδεύει τη χρήση του, οδήγησε στην ανάγκη διεξαγωγής έρευνας για τη μελέτη της διασποράς του σε περίπτωση ατυχήματος. Μέσα από την έρευνα διαπιστώνονται οι παράγοντες που επηρεάζουν το φαινόμενο και μπορεί να γίνει μια εκτίμηση των κινδύνων και των μέσων πρόληψης και αντιμετώπισης σε περίπτωση διαρροής. Τα μέσα για τη διεξαγωγή έρευνας είναι τα πειράματα και οι προσομοιώσεις.

Στη βιβλιογραφία υπάρχει πληθώρα δημοσιεύσεων που ερευνά το φαινόμενο της διασποράς και διάχυσης υδρογόνου, τόσο σε κλειστό χώρο, όσο και σε ανοιχτό. Παρακάτω παρουσιάζεται μια σύντομη αναφορά μερικών από αυτές.

3.1 Πειραματική διερεύνηση διασποράς υδρογόνου

Οι Tanaka et al. το 2007¹⁰ προκειμένου να αντλήσουν πληροφορίες σχετικά με την έκλυση, την διασπορά και τη συμπεριφορά έκρηξης σε έναν σταθμό ανεφοδιασμού υδρογόνου, παρουσίασαν πειράματα σε ένα κλειστό μοντέλο μεγάλης κλίμακας με φυσικό εξαερισμό. Τα πειράματα διασποράς αποκάλυψαν ότι η διάμετρος διαρροής, ο όγκος του εκλυόμενου υδρογόνου και τα χαρακτηριστικά εξαερισμού του χώρου επηρεάζουν σημαντικά την παραγόμενη συγκέντρωση υδρογόνου. Τα πειράματα έκρηξης έδειξαν ότι για συγκεντρώσεις υδρογόνου μέχρι 15% το μέγεθος της επικίνδυνης περιοχής ήταν αμελητέο, σε αντίθεση με την περίπτωση όπου η έκρηξη με συγκέντρωση υδρογόνου 30% έδειξε ότι το σύνολο του σταθμού πλήρωσης παρουσιάζει υπερπίεση που υπερβαίνει το ανεκτό όριο. Αντίθετα, οι εκρήξεις που δημιουργήθηκαν μετά από απελευθερώσεις από τον διανομέα έδειξαν ότι υπήρχε μόνο μια μικρή επικίνδυνη περιοχή γύρω από το ακροφύσιο απελευθέρωσης.

Οι Gupta et al. το 2008¹¹ στο πλαίσιο του "European Network of Excellence HySafe" και του εθνικού γαλλικού προγράμματος DRIVE (βάση πειραματικών δεδομένων για την εκτίμηση του κινδύνου που ενέχουν τα οχήματα υδρογόνου, για την επικύρωση των αριθμητικών εργαλείων και για την έκδοση κατευθυντήριων οδηγιών) διερεύνησε τα πιθανά μη καταστροφικά σενάρια που ενδέχεται να προκύψουν από ένα όχημα υδρογόνου σε έναν χώρο στάθμευσης. Μελέτησαν την επίδραση του εκλυόμενου όγκου υδρογόνου και τις αρχικές συνθήκες έκλυσής του, με βάση τα χαρακτηριστικά διασποράς σε ένα κλειστό περιβάλλον χωρίς εξαερισμό. Συμπέρανε ότι ο κίνδυνος να προκύψουν μεγάλα επίπεδα συγκέντρωσης υδρογόνου είναι μεγαλύτερος με την αύξηση του συνολικού εκλυόμενου όγκου υδρογόνου, αντί του ρυθμού ροής του. Καθώς επίσης και ότι στις περιπτώσεις με υψηλότερους όγκους έκλυσης υδρογόνου, ο χρόνος που απαιτείται για να μειωθούν τα επίπεδα συγκέντρωσης κάτω από το κατώτερο όριο αναφλεξιμότητας είναι μεγαλύτερος.

Οι Cerchiara et al. το 2009¹² πραγματοποίησαν πειράματα σε εγκατάσταση όπου ήταν τοποθετημένη μια ενεργειακή συστοιχία – κυψέλη καυσίμου, προκειμένου να προσδιορίσουν τις απαιτήσεις εξαερισμού, ώστε ο χώρος να μην χαρακτηριστεί ως ζώνη 2, βάσει της Ευρωπαϊκής Οδηγίας ATEX (Directive 1999/92/EC) για περίπτωση μικρής διαρροής υδρογόνου. Διερευνήθηκαν 3

διαφορετικές τιμές του ρυθμού διαρροής υδρογόνου και για την περίπτωση του φυσικού εξαερισμού εξετάστηκαν διάφορες διαμορφώσεις. Όταν ο φυσικός αερισμός απέτυχε να εξασφαλίσει συγκεντρώσεις H_2 μικρότερες από 2% κατ' όγκον στην εγκατάσταση, ερευνήθηκε εξαναγκασμένος εξαερισμός με χρήση δύο ανεμιστήρων. Διαπιστώθηκε ότι ο φυσικός εξαερισμός είναι επαρκής όταν η ροή του αέρα, που υπολογίζεται από τις οδηγίες της ATEX, είναι μεγαλύτερη από $0,009 \text{ m}^3/\text{s}$ και ο ρυθμός ροής έκλυσης αντιστοιχεί σε μη καταστροφική απελευθέρωση. Για υψηλότερες ταχύτητες ροής έκλυσης, οι περισσότερες από τις διαμορφώσεις εξαερισμού δεν ήταν επαρκείς για να διατηρήσουν συγκέντρωση H_2 μικρότερη από 2%. Όλες οι διαμορφώσεις εξαναγκασμένου εξαερισμού που εξετάστηκαν ήταν επαρκείς για να διατηρήσουν μια συγκέντρωση H_2 κάτω από 2% κατ' όγκον για ρυθμούς ροής έκλυσης 40 Nlt/min και 90 Nlt/min. Για τον υψηλότερο ρυθμό ροής απελευθέρωσης των 180 Nlt/min, οι περισσότερες από τις διαμορφώσεις εξαναγκασμένου εξαερισμού ήταν ανεπαρκείς, με εξαίρεση δύο ανεμιστήρες με ελεύθερη επιφάνεια εξαερισμού $0,28 \text{ m}^2$ και έναν ανεμιστήρα με μεγαλύτερη ελεύθερη περιοχή εξαερισμού ($0,89 \text{ m}^2$).

Οι Lacomme et al. το 2010¹³ στο Institut National de l'Environnement Industriel et des RISques (INERIS) της Γαλλίας πραγματοποίησαν πειράματα μεγάλης κλίμακας σε έναν χώρο χτισμένο σε βράχο συνολικού όγκου 80 m^3 . Στόχος των πειραμάτων ήταν να κατανοήσουν καλύτερα τους φυσικούς μηχανισμούς που οδηγούν στον σχηματισμό εκρηκτικών μίγμάτων και να διερευνήσουν πόσο γρήγορα τα εκρηκτικά μείγματα μπορούν να διαλυθούν ως αποτέλεσμα της διάχυσης. Τα πειράματα που διεξήχθησαν αφορούσαν ρυθμούς ροής μάζας που κυμαίνονται από $0,2 \text{ g/s}$ έως 1 g/s . Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι για τις εξεταζόμενους ρυθμούς έκλυσης μπορεί να παρατηρηθεί μια καθαρή διαστρωμάτωση ενός περισσότερο ή λιγότερο πλούσιου μείγματος υδρογόνου στο πάνω μέρος του δωματίου. Καθώς η έκλυση διαρκεί περισσότερο, αυτό το στρώμα γίνεται παχύτερο, αλλά η συγκέντρωσή του παραμένει σχετικά ομοιογενής και σταθερή με το χρόνο. Για τους υψηλότερους ρυθμούς ροής δηλαδή για 1 g/s , που θεωρείται από τις αντιπροσωπευτικότερες περιπτώσεις πιθανής έκλυσης τεχνολογιών υδρογόνου, και εξαιτίας της μεγάλης ορμής, το μίγμα αέρα/υδρογόνου που προέκυψε ήταν εκρηκτικό και ίσο με το 45% του όγκου του χώρου μετά τη φάση της έκλυσης. Αντίθετα για χαμηλότερους ρυθμούς ροής έκλυσης υδρογόνου ($0,2 \text{ g/s}$) η συγκέντρωση του υδρογόνου δεν υπερέβη ποτέ το κατώτερο όριο εκρηκτικότητας, ούτε κατά τη φάση της έκλυσης, ούτε κατά τη φάση της διάχυσης. Τα χαρακτηριστικά έκλυσης του υδρογόνου, δηλαδή η ταχύτητα και ρυθμός έκλυσης καθώς και η απόσταση μεταξύ του σημείου διαρροής και του σημείου αποτελούν βασικά κριτήρια για την πρόβλεψη της συγκέντρωσης του πλούσιου σε υδρογόνο στρώματος που σχηματίζεται στο ανώτατο όριο. Η διάρκεια είναι ένα άλλο κριτήριο για την εκτίμηση του όγκου του εύφλεκτου μείγματος και του χρόνου που χρειάζεται για να γεμίσει το δωμάτιο με αυτό το μείγμα.

3.2 Υπολογιστικές προσομοιώσεις διασποράς υδρογόνου

Οι Venetsanos et al το 2008¹⁴ στο πλαίσιο του προγράμματος InsHyde, κατέστρωσαν υπολογιστικά μοντέλα σε διαφορετικά λογισμικά, προκειμένου να μελετήσουν τη δυνατότητα να προβλέπουν τη

βραχυπρόθεσμη και μακροπρόθεσμη κατανομή και ανάμιξη του υδρογόνου σε έναν χώρο στάθμευσης. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν, συγκρίθηκαν με τα αποτελέσματα πειραμάτων που διεξήχθησαν προκειμένου να αξιολογηθεί η αξιοπιστία των μοντέλων.

Οι Heitsch et al το 2009¹⁵ μελέτησαν με τη βοήθεια του λογισμικού ANSYS CFX, τυχαίες απελευθερώσεις υδρογόνου από αγωγούς υψηλής πίεσης, σε ένα εργαστήριο, προκειμένου να εκτιμήσουν το μέγεθος και το χρόνο παραμονής του εύφλεκτου νέφους εντός του εργαστηρίου.

Ο Prasad το 2013¹⁶ έφτιαξε ένα αναλυτικό μοντέλο προκειμένου να προβλέψει τον κίνδυνο που σχετίζεται με την τυχαία απελευθέρωση υδρογόνου από συστήματα υψηλής πίεσης καθώς και για να μελετήσει τις συνέπειες του φυσικού και εξαναγκασμένου αερισμού σε τέτοιους χώρους.

Στα πλαίσια του προγράμματος HyIndoor, οι Giannissi et al το 2014¹⁶ μελέτησαν την έκλυση και διασπορά υδρογόνου σε περιορισμένο, φυσικά αεριζόμενο χώρο με ένα άνοιγμα για την έκδοση κατευθυντήριων οδηγιών. Προκειμένου να γίνει συγκριτική αξιολόγηση (benchmark) με διαφορετικούς κώδικες CFD (ANSYS Fluent, ADREA-HF, ANSYS CFX), είχαν προηγηθεί πειράματα από την CEA.

Στην εργασία των Hajji et al το 2015¹⁷ προσομοιώθηκαν στο ANSYS Fluent ατύχημα διαρροής υδρογόνου σε έναν ιδιωτικό χώρο στάθμευσης οχημάτων. Το υπολογιστικό μοντέλο εστίασε στην θέση και στην διάρκεια διαρροής καθώς και στον ρυθμό ροής του υδρογόνου καθώς επηρεάζουν τη διασπορά και τη συσσώρευση υδρογόνου.

Η δημοσίευση των Hoyes et al το 2016¹⁸ αφορά στην μοντελοποίηση της διαστρωμάτωσης υδρογόνου σε ένα δοχείο - αντιδραστήρα μεγάλης κλίμακας με αφορμή το ατύχημα που συνέβη στον πυρηνικό αντιδραστήρα της Fukushima, όπου οι συσσωρευτές έκτακτης ανάγκης που τροφοδοτούσαν τα συστήματα ψύξης εξαντλήθηκαν με αποτέλεσμα να υπερθερμανθούν και να οδηγήσουν στην απελευθέρωση σημαντικών εκρηκτικών ποσοτήτων υδρογόνου.

Η εργασία των Paranikolaou et al¹⁹ περιγράφει την αριθμητική προσομοίωση μικρών απελευθερώσεων υδρογόνου σε μια αεριζόμενη εγκατάσταση και την ανάγκη να προσδιοριστούν οι απαιτήσεις εξαερισμού. Πρόκειται για την υπολογιστική αξιολόγηση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από τα πειράματα που πραγματοποιήσαν οι Cerchiara et al¹².

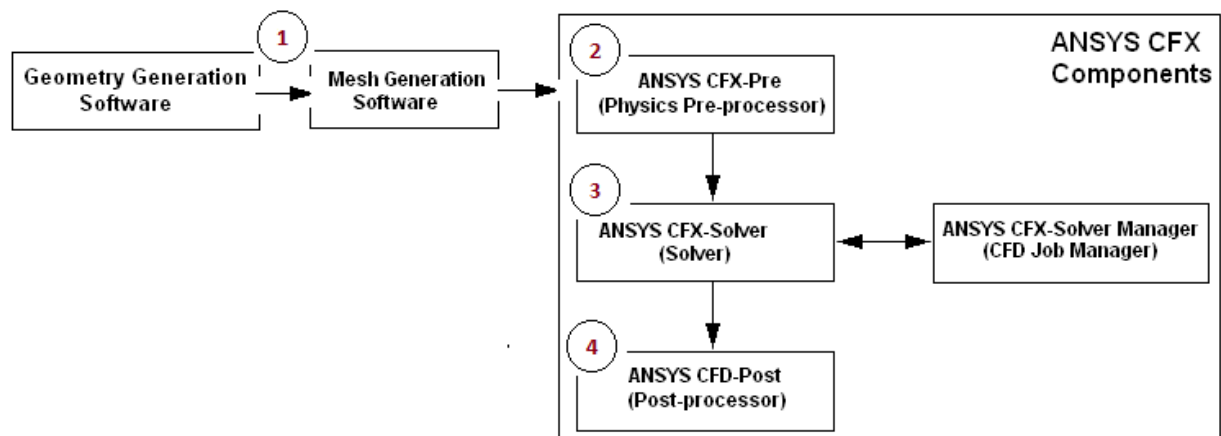
4. Κώδικας Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής ANSYS CFX

Στην παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύσσεται ένα υπολογιστικό μοντέλο προσομοίωσης φαινομένων μεταφοράς μάζας κατά την έκλυση και διασπορά υδρογόνου. Για την προσομοίωση χρησιμοποιήθηκε το εμπορικό λογισμικό πακέτο ANSYS CFX, το οποίο είναι κατάλληλο για την επίλυση ροών σε περίπλοκες 3D γεωμετρίες.

4.1 Γενικά περί του λογισμικού ANSYS CFX

Το ANSYS CFX είναι ένα εργαλείο Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (Computational Fluid Dynamics – CFD) που επιλύει φαινόμενα δύο ή και τριών διαστάσεων μέσω της αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων που περιγράφουν την μεταφορά ορμής, θερμότητας και μάζας. Χρησιμοποιεί την μέθοδο πεπερασμένων όγκων για να επιλύσει τις εξισώσεις της Ρευστομηχανικής και παρέχει μια μεγάλη βιβλιοθήκη φυσικών μοντέλων για την ανάλυση τυρβωδών ροών, μεταφοράς θερμότητας, χημικής αντίδρασης, πολυσυστατικών ροών, καύσης κλπ.

Το ANSYS CFX²⁰ είναι ένα λογισμικό γενικής χρήσης που συνδυάζει έναν προηγμένο επιλύτη με ισχυρές δυνατότητες προεπεξεργασίας και μετεπεξεργασίας. Αποτελείται από τέσσερις ενότητες λογισμικού, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 4-1 και περιγράφεται παρακάτω, που λαμβάνουν υπόψη την γεωμετρία και το πλέγμα και διαβιβάζουν τις πληροφορίες που απαιτούνται, προκειμένου να γίνει η ανάλυση CFD:



Εικόνα 4-1: Δομή του λογισμικού ANSYS CFX²⁰

1. Καθορισμός της γεωμετρίας και του αντίστοιχου πλέγματος (Geometry – Meshing)

Αυτή η διαδραστική διαδικασία είναι το πρώτο στάδιο προεπεξεργασίας. Βασικός στόχος είναι να δημιουργηθεί με βέλτιστο τρόπο η γεωμετρία του προβλήματος, να καθοριστούν οι περιοχές ροής του ρευστού, οι στερεές περιοχές και τα ονόματα ορίων επιφάνειας και στη συνέχεια να δημιουργηθεί το πλέγμα που θα αποτελέσει την είσοδο για τον ANSYS CFX-Pre. Το πλέγμα και όχι η γεωμετρία είναι αυτό στο οποίο θα λειτουργήσει ο αλγόριθμος επίλυσης. Η γεωμετρία και το πλέγμα μπορούν να δημιουργηθούν είτε απευθείας στις εφαρμογές που διαθέτει το ANSYS, Design Modeller και Meshing αντίστοιχα, είτε σε οποιοδήποτε άλλο εργαλείο/εφαρμογή δημιουργίας γεωμετρίας/πλέγματος.

2. Προεπεξεργαστής - Καθορισμός των φυσικών παραμέτρων του προβλήματος (CFX – Pre)

Πρόκειται για το δεύτερο στάδιο προ-επεξεργασίας και χρησιμοποιείται για τη δημιουργία ενός αρχείου εισόδου που απαιτείται από τον επιλύτη ANSYS CFX-Solver. Το αρχείο του πλέγματος εισάγεται στον προ-επεξεργαστή και εκεί ο χρήστης θέτει όλες τις αναγκαίες παραμέτρους. Εδώ καθορίζονται όλες οι παράμετροι όπως οι ιδιότητες του ρευστού και των στερεών σωμάτων, οι οριακές συνθήκες και η χρονική εξάρτηση του προβλήματος, αν πρόκειται δηλαδή για μόνιμη (steady state) ή χρονικά μεταβαλλόμενη κατάσταση (transient) και επιλέγονται τα μοντέλα μεταφοράς θερμότητας, ακτινοβολίας και τύρβης. Σε αυτό το στάδιο επίσης θέτονται τα κριτήρια σύγκλισης του αλγόριθμου επίλυσης καθώς και ο αριθμός των επαναλήψεων.

3. Επιλύτης - Επίλυση του προβλήματος (CFX – Solver)

Σε αυτό το στάδιο πραγματοποιείται η μαθηματική επίλυση του προβλήματος. Όπως προλέχθηκε, το ANSYS-CFX χρησιμοποιεί τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων προκειμένου να επιλύσει τις εξισώσεις που διέπουν το εκάστοτε πρόβλημα. Αφού πρώτα έγινε η διακριτοποίηση του χωρικού πεδίου με την μορφή ενός πλέγματος, τώρα το πλέγμα χρησιμοποιείται για την επίλυση των εξισώσεων διατήρησης των σχετικών ποσοτήτων, όπως μάζα, ορμή και ενέργεια σε κάθε έναν από τους πεπερασμένους όγκους που έχουν δημιουργηθεί. Όλες οι μεταβλητές της λύσης και οι ιδιότητες των ρευστών αποθηκεύονται στους κόμβους, δηλαδή στις κορυφές των στοιχείων του πλέγματος και γύρω από κάθε κόμβο του πλέγματος δημιουργείται ένας όγκος ελέγχου. Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις διατυπώνονται σε όλους τους όγκους ελέγχου του πλέγματος και στη συνέχεια μετατρέπονται σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων οι οποίες επιλύονται επαναληπτικά. Η επαναληπτική προσέγγιση απαιτείται λόγω της μη γραμμικής φύσης των εξισώσεων και καθώς η αριθμητική λύση προσεγγίζει την ακριβή λύση, λέγεται ότι συγκλίνει. Σε κάθε επανάληψη, ένα σφάλμα ή ένα υπόλοιπο καταγράφεται ως τιμή της συνολικής, σε όλο τον όγκο ελέγχου, διατήρησης των ιδιοτήτων ροής.

Πόσο κοντά είναι η τελική λύση στην ακριβή λύση εξαρτάται από διάφορους παράγοντες, όπως από το μέγεθος και το σχήμα των όγκων ελέγχου που δεν είναι άλλο παρά η μορφή – ποιότητα του πλέγματος, από το μέγεθος των τελικών υπολοίπων (residuals) και από τις προσεγγίσεις που χρησιμοποιούνται στα διάφορα μοντέλα (πχ καύσης, ακτινοβολίας και τύρβης).

Σε αυτό το στάδιο ο χρήστης δεν μπορεί να αλληλεπιδράσει με το πρόγραμμα επίλυσης αλλά μπορεί να έχει σαφή εικόνα για την εξέλιξη της επίλυσης μέσω παρακολούθησης διαγραμμάτων που είτε απεικονίζουν την πορεία σύγκλισης (υπόλοιπα RMS – MAX) είτε δίνουν πληροφορίες για κάποιο μέγεθος κάνοντας χρήση των User monitor points.

Τέλος, ο επιλύτης παράγει ένα αρχείο αποτελεσμάτων, το οποίο στη συνέχεια διαβιβάζεται στον μετα-επεξεργαστή.

4. Μεταεπεξεργαστής – Οπτικοποίηση και επεξεργασία αποτελεσμάτων (CFD – Post)

Το τελικό στάδιο αποτελεί την τελική επεξεργασία των αποτελεσμάτων. Μετά την επίλυση τα αποτελέσματα εισάγονται στον επεξεργαστή CFD – Post, έτσι ώστε να αναλυθούν, να απεικονιστούν και να παρουσιαστούν. Ο επεξεργαστής αυτός αποτελεί ένα πολύ σημαντικό και ισχυρό εργαλείο, αφού δίνει πολλές δυνατότητες στην οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων, τόσο μέσω διαγραμμάτων όσο και με σύνθετες μεθόδους απεικόνισης, όπως βίντεο και animation.

4.2 Εξισώσεις διατήρησης

Οι βασικές εξισώσεις που εκφράζουν τη ροή ενός ρευστού είναι οι εξισώσεις που περιγράφουν την διατήρηση μάζας, ορμής (γνωστές ως εξισώσεις Navier-Stokes) και ενέργειας. Οι εξισώσεις αυτές επιλύονται σε κάθε όγκο ελέγχου του πλέγματος και οι διαφορικές εκφράσεις τους, με χρήση τανυστικών συμβολισμών παίρνουν την παρακάτω μορφή²¹:

- Εξίσωση διατήρησης μάζας – Εξίσωση συνέχειας:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad 4-1$$

- Εξίσωση διατήρησης ορμής:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad 4-2$$

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad 4-3$$

Όπου:

U_i : στιγμιαία συνιστώσα του διανύσματος ταχύτητας στην κατεύθυνση x_i

ρ : πυκνότητα του ρευστού

P : στατική πίεση

μ_{eff} : συνολικό ιξώδες του ρευστού λαμβάνοντας υπόψη την ύπαρξη τύρβης

μ : δυναμικό ιξώδες του ρευστού

μ_t : τυρβώδες δυναμικό ιξώδες του ρευστού

4.3 Μοντελοποίηση τύρβης

Σημαντικό ρόλο στην ορθότητα των αποτελεσμάτων της μοντελοποίησης κατέχει η επιλογή του μοντέλου τύρβης. Τα διαφορετικά μοντέλα τύρβης βασίζονται σε διαφορετικές σχέσεις και περιλαμβάνουν μοντέλα μίας διαφορικής εξίσωσης και μοντέλα δύο διαφορικών εξισώσεων.

Για να επιτευχθεί το “κλείσιμο” του συστήματος των εξισώσεων, δηλαδή ο αριθμός των αγνώστων να είναι ίσος με τον αριθμό των εξισώσεων, είναι απαραίτητο να μοντελοποιηθούν οι τυρβώδεις τάσεις με γνωστές ποσότητες. Ένα μοντέλο τύρβης είναι μια υπολογιστική διαδικασία, που απαιτείται για να “κλείσει” το σύστημα των χρονικά ολοκληρωμένων εξισώσεων Navier - Stokes.

Το πεδίο ροής που μελετάται περιγράφεται με τις εξισώσεις RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) σε συνδυασμό με ένα από επιλεγμένα μοντέλα τύρβης που χρησιμοποιήθηκαν και στην παραμετρική μελέτη πιστοποίησης των υπολογιστικών αποτελεσμάτων, με σκοπό τη διερεύνηση της επίδρασης τους στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Τα μοντέλα αυτά είναι το k-ε, το RNG k-ε και το k-ω SST.

4.3.1 Μοντέλο standard k-ε

Το μοντέλο K-ε προτάθηκε από τους Launder και Spalding. Είναι ένα ημι-εμπειρικό μοντέλο που αναπτύχθηκε από τους παραπάνω επιστήμονες και μπορεί να καλύπτει ένα ευρύ φάσμα τυρβωδών ροών δίνοντας πολύ καλά αποτελέσματα για ένα μεγάλο φάσμα ρευστομηχανικών προβλημάτων. Βασίζεται στις εξισώσεις μεταφοράς για την τυρβώδη κινητική ενέργεια (k) και για τον ρυθμό εκφυλισμού της τυρβώδους κινητικής ενέργειας (ε) (dissipation rate). Τα μεγέθη k και ε υπολογίζονται με τη βοήθεια των παρακάτω εξισώσεων:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon$$

Όπου:

u_i : στιγμιαία συνιστώσα του διανύσματος ταχύτητας στην κατεύθυνση x_i

ρ : πυκνότητα

μ : δυναμικό ιξώδες του ρευστού

μ_t : ιξώδεις τύρβης σύμφωνα με την σχέση:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

G_k : παραγωγή κινητικής ενέργειας τύρβης λόγω κλίσεων των μέσων ταχυτήτων

G_b : παραγωγή κινητικής ενέργειας τύρβης λόγω άνωσης

Y_M : η επίδραση της συμπίεσότητας στον ρυθμό εκφυλισμού της τυρβώδους κινητικής ενέργειας

S_k, S_ε : όροι πηγής

$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$: τυρβώδεις αριθμοί Prandtl

Οι σταθεροί συντελεστές αποτελούν πειραματικές τιμές και δίνονται ως εξής:

$$C_{1\varepsilon} = 1,44 \quad , \quad C_{2\varepsilon} = 1,92 \quad , \quad C_\mu = 0,09 \quad , \quad \sigma_k = 1 \quad , \quad \sigma_\varepsilon = 1,3.$$

Ο συντελεστής $C_{3\varepsilon}$ συνοδεύεται μόνο με τον G_b και μία ενδεικτική τιμή είναι $C_{3\varepsilon} = -0,33$.

4.3.2 Μοντέλο RNG k-ε

Το μοντέλο RNG αναπτύχθηκε ως μία αυστηρή τεχνική που προήλθε από πειράματα τα οποία ομαδοποιήθηκαν και αναλύθηκαν στατιστικά για να επανα-κανονικοποιήσουν τις εξισώσεις Navier-Stokes, ώστε να λαμβάνουν υπόψη τους τις κινήσεις μικρότερης κλίμακας. Για αυτό αποκαλείται Re-Normalization Group theory (RNG). Μοιάζει με το k-ε αλλά περιλαμβάνει και τα εξής:

- Το μοντέλο RNG έχει έναν επιπλέον όρο στην εξίσωση για το ε που βελτιώνει την ακρίβεια του μοντέλου για την περίπτωση ταχύτατα αναπτυσσόμενων ροών.
- Η επίδραση της στροβιλότητας στην τυρβώδη ροή περιλαμβάνεται στο μοντέλο RNG, αυξάνοντας έτσι την ακρίβεια σε ροές με στροβιλότητα καθώς και για περιπτώσεις όπου έχει συμβεί αποκόλληση της ροής.
- Το μοντέλο RNG παρέχει αναλυτικούς τύπους υπολογισμού των τυρβωδών αριθμών Prandtl, σε αντίθεση με το k-ε όπου θεωρούνται σταθεροί.
- Ενώ το μοντέλο k-ε είναι κατεξοχήν κατάλληλο για μεγάλους αριθμούς Reynolds, το RNG παρέχει διαφορική εξίσωση για τον υπολογισμό του ιξώδους τύρβης μ_{eff} , καθώς και ένα νέο όρο στην εξίσωση του ε , δημιουργώντας ένα βελτιωμένο μοντέλο με μεγαλύτερη ευαισθησία, κατάλληλο και για χαμηλούς αριθμούς Reynolds.

Οι διαφορικές εξισώσεις που διέπουν το μοντέλο είναι της μορφής:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon$$

Όπου:

u_i : στιγμιαία συνιστώσα του διανύσματος ταχύτητας στην κατεύθυνση x_i

ρ : πυκνότητα

μ : δυναμικό ιξώδες του ρευστού

μ_{eff} : ιξώδες τύρβης σύμφωνα με την σχέση:

$$d\left(\frac{\rho^2 k}{\sqrt{\varepsilon \mu}}\right) = 1,72 \frac{\hat{v}}{\sqrt{\hat{v}^3 - 1 + C_v}} d\hat{v}$$

όπου $\hat{v} = \frac{\mu_{eff}}{\mu}$ και $C_v \approx 100$

G_k : παραγωγή κινητικής ενέργειας τύρβης λόγω κλίσεων των μέσων ταχυτήτων

G_b : παραγωγή κινητικής ενέργειας τύρβης λόγω άνωσης

Y_M : η επίδραση της συμπίεσότητας στον ρυθμό εκφυλισμού (ε) της τυρβώδους κινητικής ενέργειας

S_k, S_ε : όροι πηγής

$\alpha_k, \alpha_\varepsilon$: ανεστραμμένοι τυρβώδεις αριθμοί Prandtl που προσδιορίζονται από τη σχέση:

$$\left| \frac{\alpha - 1.3929}{\alpha_0 - 1.3929} \right|^{0.6321} * \left| \frac{\alpha + 1.3929}{\alpha_0 + 1.3929} \right|^{0.3679} = \frac{\mu_{mol}}{\mu_{eff}}$$

όπου $\alpha_0 = 1.0$

Για υψηλούς αριθμούς Reynolds (στο όριο) $\frac{\mu_{mol}}{\mu_{eff}} \ll 1$ οπότε $\alpha_k \cong \alpha_\varepsilon \cong 1.393$

R_ε = ιξώδες τύρβης σύμφωνα με την σχέση:

$$R_\varepsilon = \frac{C_\mu \rho \eta^3 (1 - \eta / \eta_0) \varepsilon^2}{(1 + \beta \eta^3) k}$$

Όπου:

$$\eta \equiv \frac{sK}{\varepsilon}, \quad \eta = 4.38, \quad \beta = 0.012$$

$$S = (2S_{ij}S_{ij})^{1/2} \quad (S_{ij} = \text{τανυστής παραμόρφωσης})$$

και σταθερές:

$$C_{1\varepsilon} = 1.42, \quad C_{2\varepsilon} = 1.68, \quad C_{\mu} = 0.0845$$

4.3.3 Μοντέλο SST k- ω

Το standard k- ω είναι ένα εμπειρικό μοντέλο βασισμένο στις εξισώσεις διατήρησης και ενσωματώνει τροποποιήσεις για φαινόμενα με χαμηλούς αριθμούς Reynolds, συμπιεστικότητα και εξαπλωση ροής με συνεκτικότητα. Το μοντέλο υπολογίζει την κινητική ενέργεια τύρβης k και τον ειδικό ρυθμό καταστροφής της ω (turbulent specific dissipation). Ο ρυθμός καταστροφής υποδηλώνει την κλίμακα της τύρβης.

Ακόμα, το μοντέλο λειτουργεί πολύ καλά σε απότομες κλίσεις πίεσης, κατά την αποκόλληση της ροής και σε προβλήματα μεταφοράς θερμότητας.

Μία τροποποίηση του standard k- ω είναι το SST k- ω . Η διατύπωση της Μεταφοράς Διατμητικών Τάσεων (Shear Stress Transport (SST)) επιτρέπει την αλλαγή της συμπεριφοράς του σε αυτή του μοντέλου k- ω στην περιοχή της ελεύθερης ροής, αποφεύγοντας παράλληλα το πρόβλημα που έχουν τα κλασσικά μοντέλα k- ω , δηλαδή την υπερευαισθησία στις συνθήκες τύρβης στην είσοδο της ροής. Το SST k- ω συνδέει αποτελεσματικά την εύρωστη και ακριβή διατύπωση του k- ω μοντέλου για περιοχές κοντά σε τοιχώματα με την αποτελεσματικότητα του k- ω μοντέλου για ελεύθερη τυρβώδη ροή μακριά από τοιχώματα. Για να γίνει αυτό, τα δύο μοντέλα πολλαπλασιάζονται με μία συνάρτηση βαρύτητας που παίρνει τιμή μονάδα κοντά στα τοιχώματα, ενεργοποιώντας το k- ω , και τιμή μηδέν μακριά από την επιφάνεια, ενεργοποιώντας το k- ω .

Οι εξισώσεις του μοντέλου είναι διαμορφωμένες ως εξής:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j}) + \tilde{G}_k - Y_k + S_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma_{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}) + G_{\omega} - Y_{\omega} + D_{\omega} + S_{\omega}$$

Όπου:

u_i : στιγμιαία συνιστώσα του διανύσματος ταχύτητας στην κατεύθυνση x_i

ρ : πυκνότητα

k : κινητική ενέργεια τύρβης

ω : ειδικός ρυθμός καταστροφής της τύρβης

\tilde{G}_k : παραγωγή κινητικής ενέργειας τύρβης λόγω κλίσεων των μέσων ταχυτήτων

G_{ω} : παραγωγή του ειδικού ρυθμού καταστροφής της τύρβης

$\Upsilon_k, \Upsilon_\omega$: ρυθμοί διασκεδασμού των k και ω λόγω τύρβης
 Υ_ω : ρυθμός διασκεδασμού του ω λόγω τύρβης
 S_k, S_ε : όροι πηγής
 Γ_k, Γ_ω : όροι αποτελεσματικής διάχυσης του k και ω

Όπου:

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$$

$$\Gamma_\omega = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}$$

μ : δυναμικό ιξώδες του ρευστού
 μ_t : ιξώδες τύρβης
 σ_k, σ_ω : αριθμοί Prandtl για τα k και ω

4.4 Μοντελοποίηση μεταφοράς θερμότητας

Η εξίσωση ενέργειας μπορεί να απλουστευθεί, στην ειδική περίπτωση όπου όλα τα είδη διάχυσης των επιμέρους συστατικών του μίγματος είναι ίδια και ισοδύναμα με την θερμική αγωγιμότητα διαιρούμενη με την ειδική θερμοχωρητικότητα, δηλαδή:

$$\Gamma_i = \Gamma = \frac{\lambda}{C_p} \quad 4-4$$

Η παραπάνω εξίσωση ισχύει όταν ο αριθμός Lewis είναι ίδιος για όλα τα συστατικά, δηλαδή $Le_i = \frac{\lambda}{(C_p \Gamma_i)} = 1$. Για την τυρβώδη ροή, υποθέτοντας ότι $Le_i = 1$ για όλα τα συστατικά (εξίσου καλή πρακτική και αν $Sc_i = \frac{\mu}{\Gamma_i} = 1$) τότε η εξίσωση ενέργειας απλοποιείται ως εξής²⁰:

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j H) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\lambda}{C_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial h}{\partial x_j} \right] + S_E \quad 4-5$$

$$Pr_t = \frac{C_p \mu_t}{\lambda_t} \quad 4-6$$

Όπου:

ρ : πυκνότητα του ρευστού
 H : ενθαλπία
 λ : συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας
 C_p : ειδική θερμοχωρητικότητα
 Pr_t : τυρβώδης αριθμός Prandtl

S_E : πηγή θερμότητας

4.5 Μοντελοποίηση διάχυσης συστατικών

Η βαθμωτή εξίσωση μεταφοράς για ένα πολυσυστατικό ρευστό, επιλύεται για την ταχύτητα, την πίεση, τη θερμοκρασία και άλλες ποσότητες του ρευστού. Παρόλα αυτά, πρέπει να επιλυθούν επιπλέον εξισώσεις προκειμένου να καθοριστεί η μεταφορά των συστατικών μέσα στο ρευστό. Οι κινήσεις του ρευστού προσομοιώνονται χρησιμοποιώντας ξεχωριστά τα πεδία της ταχύτητας, της θερμοκρασίας και της τύρβης. Η επίδραση των πολλαπλών συστατικών γίνεται αισθητή μόνο αν τα διάφορα συστατικά έχουν διαφορετικές ιδιότητες. Έτσι κάθε συστατικό i , έχει τη δική του εξίσωση για τη διατήρηση της μάζας, η οποία μπορεί να εκφραστεί στη μορφή²⁰:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i U_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_i(U_{ij} - U_j) - \overline{\rho_i'' U_j''}) + S_i \quad 4-7$$

Όπου:

ρ_i : συγκέντρωση/πυκνότητα μάζας κάθε επιμέρους συστατικού $\rho_i = \frac{m_i}{V_{\text{mixture}}}$

U_j : μέση ταχύτητα του πεδίου $U_j = \frac{\sum \rho_i U_{ij}}{\rho}$

U_{ij} : μέση ταχύτητα κάθε επιμέρους συστατικού i

$\rho_i(U_{ij} - U_j)$: σχετική ροή μάζας

S_i : όρος πηγής για το συστατικό i , ο οποίος περιλαμβάνει την επίδραση των χημικών αντιδράσεων

Αξιοσημείωτο είναι ότι αν όλοι οι όροι της εξίσωσης 4-7 προστεθούν για όλα τα συστατικά, τότε προκύπτει η εξίσωση συνέχειας του συνολικού μίγματος καθώς το άθροισμα του ρυθμού των αντιδράσεων είναι μηδέν:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j)}{\partial x_j} = 0 \quad 4-8$$

Ο σχετικός όρος της ροής μάζας αντιστοιχεί στη διαφορική κίνηση των επιμέρους συστατικών και μπορεί να μοντελοποιηθεί με διάφορους τρόπους συμπεριλαμβάνοντας τις επιδράσεις βαθμίδων συγκέντρωσης, κλίσης πίεσης, εξωτερικές δυνάμεις και κλίση θερμοκρασίας. Από αυτές τις πιθανές αιτίες που μπορούν να προκαλέσουν σχετική κίνηση μεταξύ των συστατικών του μείγματος, η κυριότερη επίδραση είναι αυτή της βαθμίδας συγκέντρωσης. Το μοντέλο για αυτό το αποτέλεσμα δημιουργεί στην εξίσωση 4-7 έναν όρο διάχυσης:

$$\rho_i(U_{ij} - U_j) = -\frac{\Gamma_i}{\rho} \frac{\partial \rho_i}{\partial x_j} \quad 4-9$$

$$\Gamma_i = \rho D_i \quad 4-10$$

Όπου:

Γ_i : συντελεστής μοριακής διάχυσης κάθε επιμέρους συστατικού

D_i : συντελεστής διάχυσης κάθε επιμέρους συστατικού

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι το άθροισμα των επιμέρους κλασμάτων μάζας όλων των συστατικών του μίγματος ισούται με την μονάδα:

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho} \quad 4-11$$

$$\sum Y_i = 1 \quad 4-12$$

Από τις εξισώσεις 4-9 και 4-12, η εξίσωση 4-7 γίνεται:

$$\frac{\partial(\rho_i Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i U_j Y_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho Y_i'' U_j''}) + S_i \quad 4-13$$

Οι βαθμωτές τυρβώδεις ροές μοντελοποιούνται χρησιμοποιώντας την υπόθεση της καταστροφής δίνης (eddy dissipation) ως εξής:

$$-\overline{(\rho Y_i'' U_j'')} = \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \quad 4-14$$

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t} \quad 4-15$$

Όπου:

Y_i : κλάσμα μάζας κάθε επιμέρους συστατικού

μ_t : τυρβώδες δυναμικό ιξώδες (συνεκτικότητα) του ρευστού

Sc_t : αδιάστατος τυρβώδης αριθμός Schmidt

Αντικαθιστώντας την εξίσωση 4-14 στην εξίσωση 4-13, προκύπτει:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{i\text{eff}} \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) \right) + S_i \quad 4-16$$

$$\Gamma_{i\text{eff}} = \Gamma_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad 4-17$$

Όπου:

Y_i : κλάσμα μάζας κάθε επιμέρους συστατικού

ρ_i : συγκέντρωση/πυκνότητα μάζας κάθε επιμέρους συστατικού $\rho_i = \frac{m_i}{V_{mixture}}$

ρ : πυκνότητα του ρευστού

Γ_{ieff} : συνολικός μοριακής συντελεστής διάχυσης κάθε επιμέρους συστατικού λαμβάνοντας υπόψη την τύρβη

Γ_i : συντελεστής μοριακής διάχυσης κάθε επιμέρους συστατικού

μ_t : τυρβώδες δυναμικό ιξώδες (συνεκτικότητα) του ρευστού

Sc_t : αδιάστατος τυρβώδης αριθμός Schmidt

Η εξίσωση 4-16 είναι μια γενική εξίσωση μεταφοράς – διάχυσης της γνωστής μορφής των εξισώσεων που επιλύονται για κάθε εξαρτημένη μεταβλητή για τον υπολογισμό της ροής του ρευστού. Συνεπώς, είναι βολική η επίλυση της εξίσωσης για το κλάσμα Y_i προκειμένου να καθοριστεί η σύσταση του μίγματος του ρευστού.

5. Πιστοποίηση υπολογιστικών αποτελεσμάτων - Validation

Πριν τη χρήση οποιουδήποτε μοντέλου ή κώδικα προσομοίωσης θα πρέπει να γίνεται μελέτη αξιοπιστίας του μοντέλου ή του κώδικα. Η συγκεκριμένη εργασία είναι γνωστή και ως validation. Η διαδικασία αυτή γίνεται με τη βοήθεια πειραματικών δεδομένων. Αρχικά, αναπτύσσεται το μοντέλο σύμφωνα με τη φυσική του προβλήματος, στη συνέχεια προσομοιώνονται σχετικά πειράματα και τέλος συγκρίνονται τα πειραματικά με τα υπολογιστικά αποτελέσματα. Με αυτό τον τρόπο γίνεται η αξιολόγηση του μοντέλου και η βελτίωση του όταν απαιτείται.

Έτσι και στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία, προκειμένου να διαπιστωθεί ότι το μαθηματικό μοντέλο που θα χρησιμοποιηθεί είναι λειτουργικό και παράγει λογικά αποτελέσματα, απαραίτητο είναι πρώτα να επαληθευτεί η λειτουργία του.

Η συγκεκριμένη εργασία βασίστηκε στα πειραματικά αποτελέσματα της δημοσίευσης του Lacombe et al¹³ που αφορά σε μεγάλης κλίμακας απελευθέρωση υδρογόνου σε περιορισμένο χώρο σταθερής θερμοκρασίας (Large-scale hydrogen release in an isothermal confined area).

Για την συγκεκριμένη δημοσίευση καταστρώθηκαν πειράματα μεγάλης κλίμακας προκειμένου να μελετηθούν οι μηχανισμοί δημιουργίας και διασποράς των εύφλεκτων νεφών υδρογόνου - αέρα σε ένα δωμάτιο σταθερής θερμοκρασίας. Με βάση τα αποτελέσματα που λαμβάνονται τόσο κατά την φάση της απελευθέρωσης (release phase) όσο και κατά τη φάση της διάχυσης (diffusion phase), αξιολογούνται οι συνέπειες της έκλυσης του υδρογόνου σε κλειστό χώρο και συνεπώς είναι καλύτερη η εκτίμηση κινδύνου προκειμένου να λαμβάνονται τα κατάλληλα μέτρα ελέγχου.

Αυτά τα πειραματικά αποτελέσματα στη συνέχεια χρησιμοποιήθηκαν για την αξιολόγηση και τη σύγκριση των δυνατοτήτων των εργαλείων CFD μέσα από την δημοσίευση του Venetsanos et al¹⁴. Στο συγκεκριμένο επιστημονικό άρθρο καταστρώθηκαν μοντέλα CFD και μελετήθηκε η δυνατότητά τους να προβλέπουν τη βραχυπρόθεσμη και μακροπρόθεσμη κατανομή και ανάμιξη του υδρογόνου σε ένα γκαράζ. Πρόκειται δηλαδή για την υπολογιστική μελέτη (CFD) της δημοσίευσης του Lacombe et al¹³ που δεν είναι άλλο παρά η κατάστρωση διαφόρων μοντέλων προκειμένου να επαληθευτούν τα πειραματικά αποτελέσματα.

Μια αντίστοιχη προσέγγιση γίνεται και στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία, ώστε να προκύψει ένα αξιόπιστο εργαλείο που θα προσομοιώνει με ακρίβεια το φυσικό φαινόμενο εντός λογικών χρονικών ορίων και στο οποίο θα μπορούσαν να βασιστούν ανάλογα προβλήματα, τόσο για μελέτες ασφαλείας, όσο και για βαθύτερη κατανόηση του φαινομένου.

Έχοντας διαθέσιμο ένα καλό μαθηματικό μοντέλο είναι σαφώς ευκολότερη και γρηγορότερη η πρόβλεψη της κατανομής βραχυπρόθεσμων και μακροπρόθεσμων απελευθερώσεων υδρογόνου σε περιορισμένους χώρους και κατά συνέπεια και των διορθωτικών ενεργειών – μέτρων ασφαλείας.

5.1 Περιγραφή Περίπτωσης

Τα πειράματα έλαβαν μέρος στο Institut National de l'Environnement Industriel et des RISques (INERIS), στη Γαλλία.

Σκοπός του INERIS ήταν να δημιουργήσει πειράματα μεγάλης κλίμακας για την μελέτη ενός τυρβώδους, μονοφασικού (αέρια φάση), πολυσυστατικού και αντιδρώντος πεδίου ροής με την μορφή εύφλεκτων νεφών, τα οποία δημιουργούνται από την διαρροή υδρογόνου πεπερασμένης διάρκειας σε ένα δωμάτιο ηρεμίας.

Διεξήχθησαν πειράματα για ρυθμούς ροής μάζας που κυμαίνονται από 0,2 g/s έως 1 g/s. Τα όργανα που χρησιμοποιήθηκαν επέτρεψαν την παρατήρηση και την ποσοτικοποίηση των αποτελεσμάτων διαστρωμάτωσης των πλούσιων στρωμάτων υδρογόνου.

Οι μετρήσεις της συγκέντρωσης, της θερμοκρασίας και της ροής μάζας παρακολούθηθηκαν κατά τη διάρκεια της περιόδου απελευθέρωσης και αρκετές ώρες μετά.

Συγκεκριμένα χρησιμοποιήθηκαν τρεις παραμαγνητικοί ανιχνευτές οξυγόνου (sensors) για την διεξαγωγή μετρήσεων συγκέντρωσης στον θάλαμο. Κάθε ένας από τους αναλυτές δίνει την μέτρηση της συγκέντρωσης για τέσσερα σημεία. Η συγκέντρωση υδρογόνου υπολογίζεται από τη διαφορά με τις μετρούμενες συγκεντρώσεις οξυγόνου με σφάλμα μέτρησης μικρότερο από 0,1% (v/v).

Συνολικά έγιναν μετρήσεις για 12 σημεία στον θάλαμο, κυρίως πάνω από την πηγή υδρογόνου, δηλαδή για $x=0\text{mm}$ και για $x=140\text{ mm}$ και σε διάφορα ύψη. Οι συντεταγμένες των σημείων φαίνονται στον **Πίνακας 5-1**.

Πίνακας 5-1: Συντεταγμένες των σημείων δειγματοληψίας (αισθητήρες) και των ανοιγμάτων στον θάλαμο

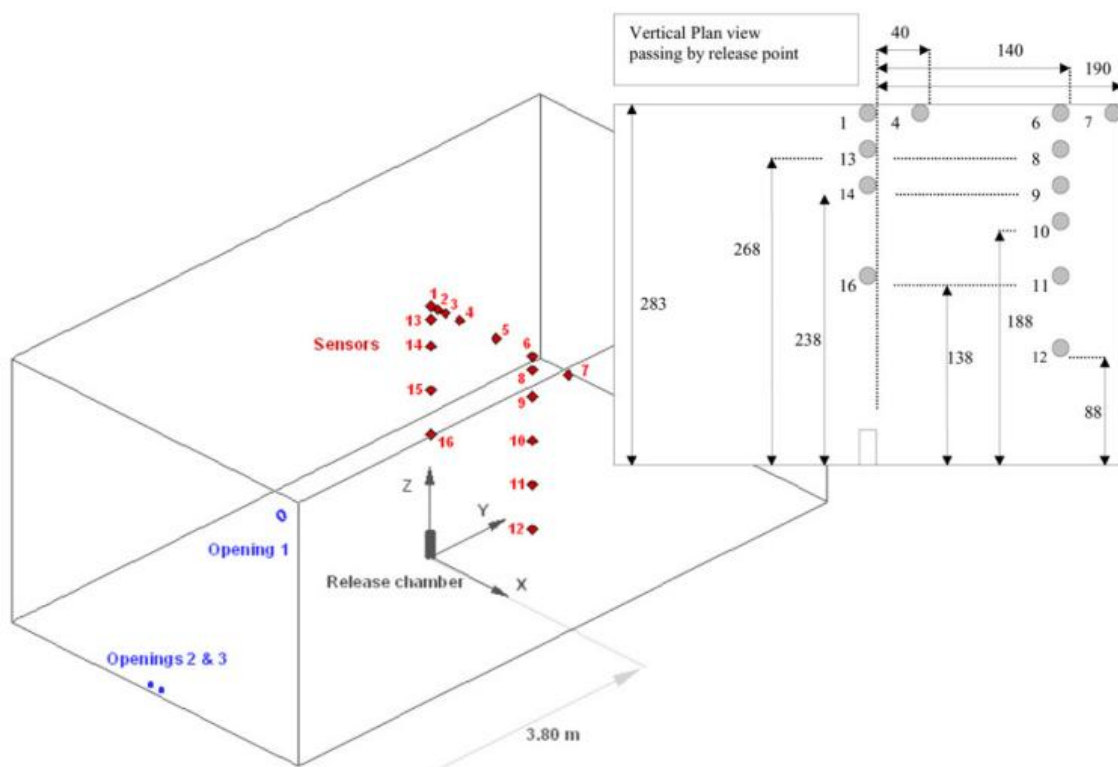
	X (cm)	Y (cm)	Z (cm)
Chamber size	378	720	288
Source location	0	0	0
Opening 1 centre location	180	-380	273
Opening 2 centre location	7.5	-380	7.5
Opening 3 centre location	-7.5	-380	7.5
Sensor 1 location	0	0	283
Sensor 4 location	40	0	283
Sensor 6 location	140	0	283
Sensor 7 location	184	0	283
Sensor 8 location	140	0	268
Sensor 9 location	140	0	238
Sensor 10 location	140	0	188
Sensor 11 location	140	0	138
Sensor 12 location	140	0	88
Sensor 13 location	0	0	268
Sensor 14 location	0	0	238
Sensor 16 location	0	0	138

Επιπλέον πραγματοποιήθηκε εγγραφή βίντεο προκειμένου να δώσει πρόσθετες πληροφορίες σχετικά με το πώς το υδρογόνο αναμειγνύεται και διαχέεται μέσα στον θάλαμο. Για λόγους ασφαλείας, η διάρκεια απελευθέρωσης περιορίστηκε σε 240 δευτερόλεπτα, αλλά η παρατήρηση χρειάστηκε περισσότερο χρόνο ώστε να διερευνηθεί το φαινόμενο της διάχυσης. Για τη λήψη εικόνων, διεξήχθησαν επίσης δοκιμαστικές περιπτώσεις με ήλιο σε τέτοιους ρυθμούς ροής, ώστε να διατηρηθεί η ομοιότητα μεταξύ των δύο αερίων.

Η θερμοκρασία περιβάλλοντος του θαλάμου μετρήθηκε μεταξύ 9 και 10,5 ° C για όλα τα πειράματα, ενώ οι πειραματικές μεταβολές της θερμοκρασίας στο κέντρο του θαλάμου ήταν μικρότερες από $\pm 0,5$ °C.

5.1.1 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά

Τα πειράματα του Lacomme et al¹³ έλαβαν μέρος σε έναν χώρο χτισμένο σε βράχο συνολικού όγκου 80 m³ περίπου, σε σταθερή θερμοκρασία και χωρίς φαινόμενα συναγωγής. Πρόκειται ουσιαστικά για ένα κλειστό θάλαμο – γκαράζ, διαστάσεων 7.2 x 3.78 x 2,88m (Μ x Π x Υ) όπως φαίνεται και στην Εικόνα 5-1.

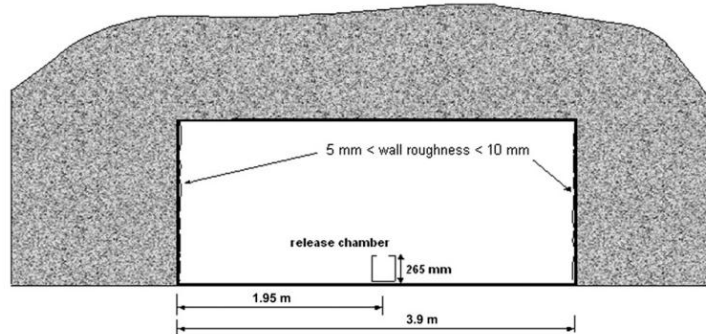


Εικόνα 5-1: Θάλαμος απελευθέρωσης υδρογόνου και θέσεις αισθητήρων

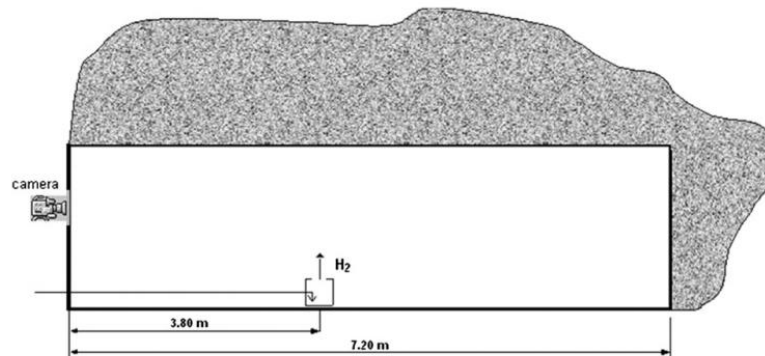
Στην μπροστινή πλευρά του θαλάμου υπάρχουν τρεις (3) οπές που αναφέρονται ως “opening 1”, “opening 2” και “opening 3”, με διαμέτρους $d=0.15$ m, $d=0.05$ m και $d=0.05$ m αντίστοιχα. Τα ανοίγματα αυτά χρησιμοποιούνται για το πέρασμα των καλωδίων καθώς και για να αποτραπεί η

αύξηση της πίεσης. Κατά την διάρκεια των πειραμάτων τα ανοίγματα αυτά παρέμειναν κλειστά.

Στο κέντρο του θαλάμου υπάρχει ένα σύστημα πηγής υδρογόνου. Πρόκειται για μια συσκευή με εσωτερική διατομή 120 mm και ύψος 265 mm, όπως φαίνεται και στην **Εικόνα 5-2** και **Εικόνα 5-3**.

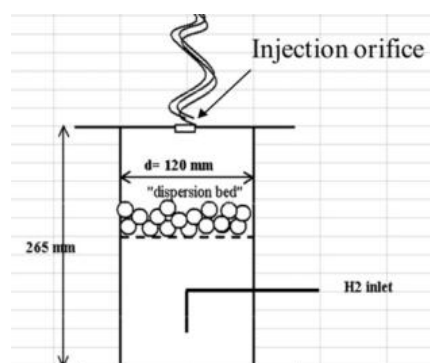


Εικόνα 5-2: Θέση της συσκευής απελευθέρωσης υδρογόνου στην x-κατεύθυνση



Εικόνα 5-3: Θέση της συσκευής απελευθέρωσης υδρογόνου στην y-κατεύθυνση

Το υδρογόνο απελευθερώνεται στον χώρο από τη συσκευή με εσωτερική διατομή 120 mm και ύψος 265 mm, μέσω ενός στομίου κυκλικής επιφάνειας, με διατομή $D=20$ mm όπως δείχνει η **Εικόνα 5-4**.



Εικόνα 5-4: Συσκευή απελευθέρωσης υδρογόνου

5.1.2 Παραμετρική μελέτη πειραμάτων

Διεξήχθησαν δοκιμές με διαφορετικούς ρυθμούς ροής μάζας που κυμαίνονταν από 0,2 g/s έως 1 g/s και διάμετρο απελευθέρωσης από 5 mm έως 20 mm. Οι Πίνακας 5-2 και Πίνακας 5-3 συνοψίζουν τις συνθήκες των πειραμάτων που διεξήχθησαν με υδρογόνο και με ήλιο αντίστοιχα, ενώ ο Πίνακας 5-4 παρουσιάζει τα αδιάστατα μεγέθη για κάθε περίπτωση.

Πίνακας 5-2: Δεδομένα πειραμάτων H₂

Test	Leaking gas temperature: T (°C)	Flow rate (g/s)	Release diameter (mm)	Release direction	Measured exit velocity (m/s)	Release duration (s)	Opening status (open/closed)	Observation time (s)	Released mass (g)	Maximum explosive volume (m ³)
1	9 < T < 10.5	1	20	Vertical	53	240	Closed	7200	240	~40
2		1	10		210	240	Closed	7200	240	~40
3		0.2	20		11	240	Closed	7200	48	Explosive volume not detected
4		0.2	5		170	240	Closed	7200	48	Explosive volume not detected

Πίνακας 5-3: Δεδομένα πειραμάτων He

Test	Leaking gas temperature: T (°C)	Flow rate (g/s)	Release diameter (mm)	Measured exit velocity (m/s)	Release duration (s)	Opening status (open/closed)
5	9 < T < 10.5	1.84	20	55	240	Closed

Πίνακας 5-4: Αδιάστατα μεγέθη πειραμάτων

	Test 1	Test 2	Test 3	Test 4	Test 5
Mass flow rate (g/s)	1	1	0.2	0.2	1.84
Injection velocity: U _j (m/s)	53	210	11	170	55
Release diameter: D (mm)	20	10	20	5	20
Reynolds number: $R_e = \frac{\rho_a U_j D}{\mu}$	10062	19935	2088	8069	10442
Richardson number R _i : $R_i = \frac{(\rho_a - \rho_j) g D}{2 \rho_j U_j^2}$	4.70E-04	1.50E-05	1.09E-02	1.14E-05	4.36E-04
Froude number Fr: $Fr = \frac{\rho_a U_j^2}{(\rho_a - \rho_j) g D}$	15381	482964	663	633001	16564
Transition length L _{jet} (mm) proposed by Chen and Rodi [4]: $L_{jet} = \frac{3D}{2\sqrt{R_i}}$	1384	3878	287	2220	1436

5.1.3 Διαθέσιμες μετρήσεις

Η πειραματική συμπεριφορά μπορεί να εξαχθεί από τον παρακάτω πίνακα, τόσο για την φάση της έκλυσης υδρογόνου, όσο και για τη φάση της διάχυσης.

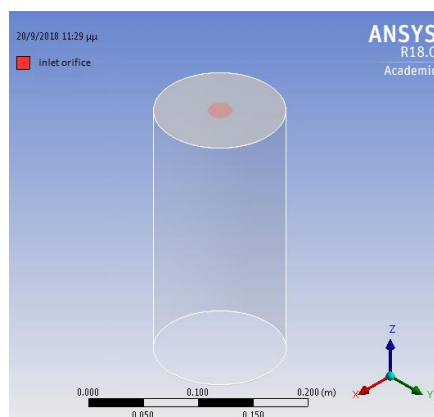
Πίνακας 5-5: Μέσες πειραματικές γραμμομοριακές συγκεντρώσεις (molar %)

Sensor	Release phase	Diffusion phase
	C_o (%)	C_o (%)
1	7.34	7.37
4	5.97	7.36
6	5.30	7.39
7	4.69	7.21
8	4.70	7.19
9	3.78	6.84
10	3.07	5.57
11	0.66	2.87
12	0.06	0.89
13	6.52	7.29
14	8.04	6.84
16	16.50	2.75

5.2 Υπολογιστικές Προσομοιώσεις

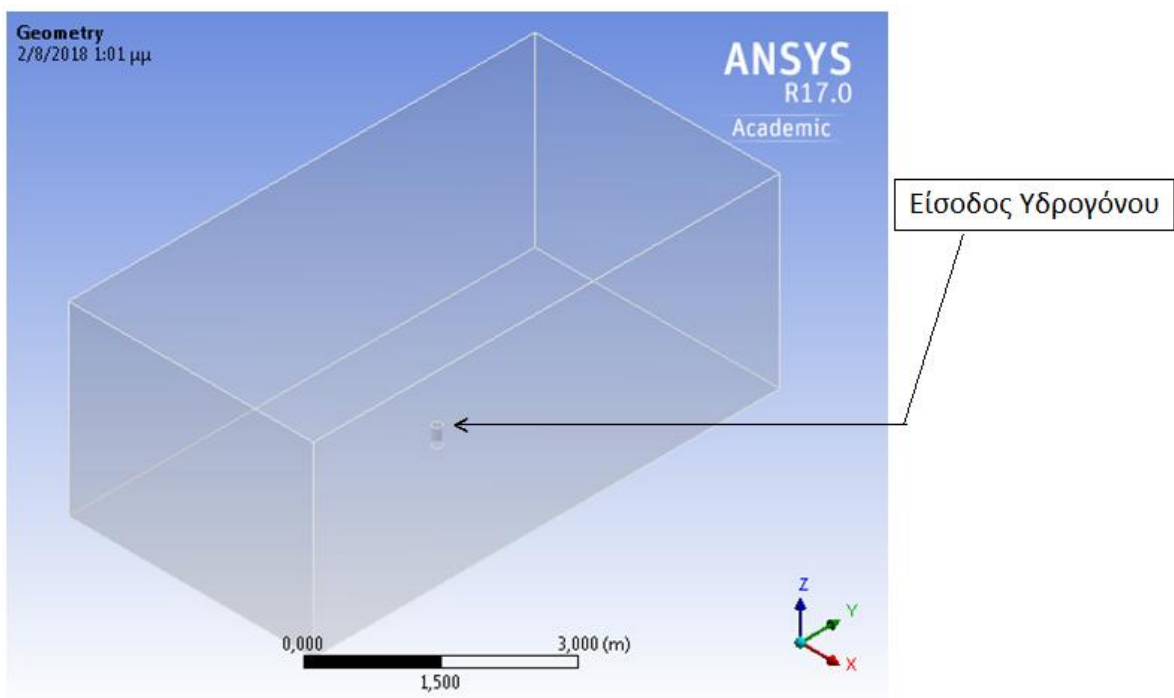
5.2.1 Γεωμετρία

Η γεωμετρία του προβλήματος αποτελείται από τον πειραματικό θάλαμο και τη συσκευή απελευθέρωσης υδρογόνου. Ο πειραματικός θάλαμος είναι ένα ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο διαστάσεων 7.2 x 3.78 x 2.88 m, ενώ η συσκευή απελευθέρωσης υδρογόνου προσομοιώνεται με έναν κύλινδρο διατομής 120 mm και ύψος 265 mm, στο κέντρο του θαλάμου. Η επιφάνεια εισόδου του υδρογόνου στον θάλαμο προσομοιώνεται με μια μικρότερη ομοκεντρική διατομή 20 mm που βρίσκεται στο πάνω μέρος του κυλίνδρου όπως απεικονίζεται στην **Εικόνα 5-5**.



Εικόνα 5-5: Συσκευή απελευθέρωσης υδρογόνου στο ANSYS / Design Modeller

Η γεωμετρία κατασκευάστηκε στο πρόγραμμα σχεδιασμού Design Modeller του υπολογιστικού πακέτου ANSYS 17 και το υπολογιστικό χωρίο στο οποίο θα υπολογιστούν οι απαιτούμενες εξισώσεις φαίνεται στην Εικόνα 5-6. Αξίζει να σημειωθεί ότι για τον σχεδιασμό της γεωμετρίας προτιμήθηκε το ANSYS Design Modeller από κάποιο άλλο σχεδιαστικό πακέτο λόγω της δυνατότητας που δίνει για την άμεση σύνδεση με το πρόγραμμα δημιουργίας του υπολογιστικού πλέγματος, όπως επίσης και της δυνατότητας αυτόματης ανανέωσης του πλέγματος σε περίπτωση ανανέωσης της γεωμετρίας.

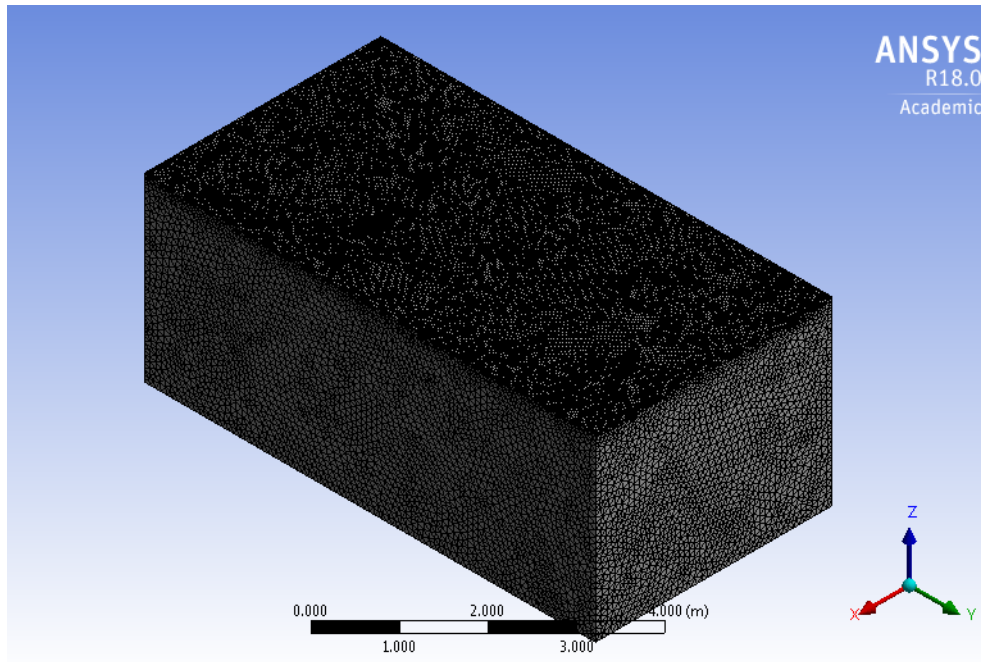


Εικόνα 5-6: Η γεωμετρία του προβλήματος στο ANSYS / Design Modeller

5.2.2 Υπολογιστικό Πλέγμα

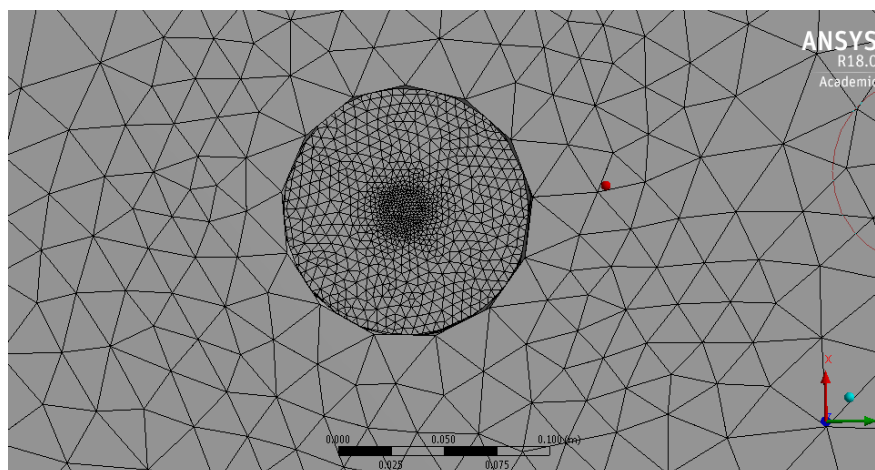
Η διακριτοποίηση του υπολογιστικού χωρίου έγινε στο Meshing του λογισμικού ANSYS 17 και 18.

- Αρχικά κατασκευάστηκε ένα μη δομημένο πλέγμα σαν αυτό στην Εικόνα 5-7. Λαμβάνοντας υπόψη τις ευαισθησίες του προβλήματος θεωρήθηκε αναγκαίο να γίνει πύκνωση του πλέγματος σε περιοχές που μπορεί να υπάρχουν μεγαλύτερες μεταβολές των μεγεθών ώστε να εξάγουμε καλύτερα αποτελέσματα, αλλά και να επιτευχθεί γρηγορότερη σύγκλιση της επαναληπτικής διαδικασίας επίλυσης των εξισώσεων και να υπάρχει σημαντικό κέρδος σε χρόνο και μνήμη. Καθότι λοιπόν η είσοδος του υδρογόνου στον χώρο, γίνεται από μια πολύ μικρότερη επιφάνεια συγκριτικά με τις υπόλοιπες διαστάσεις του θαλάμου ($d_{\text{apparatus}}=120\text{mm}$ και $d_{\text{inlet}}=20\text{mm}$, όπως παρουσιάστηκε και στην **Εικόνα 5-4**), θεωρήθηκε αναγκαία η πύκνωση σε αυτές τις επιφάνειες.



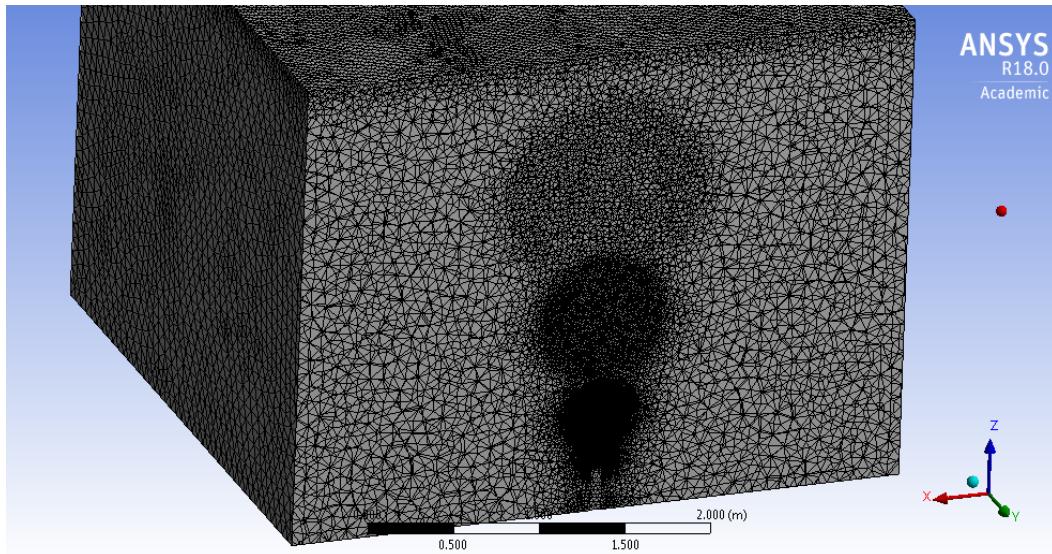
Εικόνα 5-7: Διακριτοποίηση χωρίου με μη δομημένο πλέγμα (Πλέγμα 1)

Στην **Εικόνα 5-8** που ακολουθεί, φαίνεται η πύκνωση που έγινε στην επιφάνεια εισόδου καθώς και μια μικρότερη πύκνωση στον δακτύλιο που περιβάλλει την είσοδο για ομαλότερη μετάβαση στο μεγαλύτερο πλέγμα.



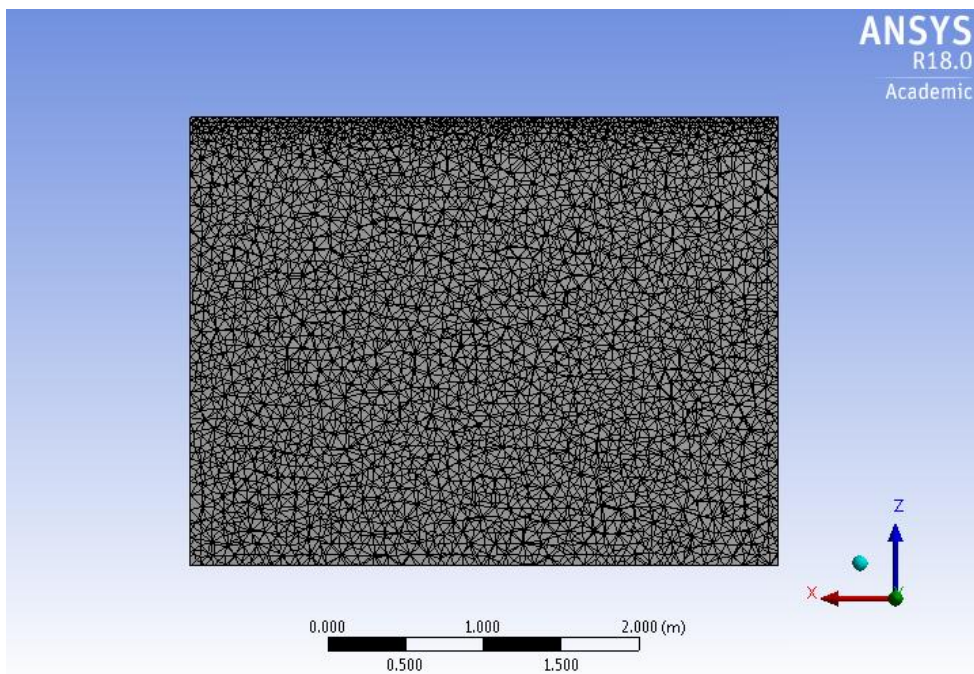
Εικόνα 5-8: Πύκνωση μη δομημένου πλέγματος στο πάνω μέρος της συσκευής εισόδου του υδρογόνου (Πλέγμα 1)

Επιπλέον χρησιμοποιήθηκαν σφαίρες επιρροής διαφορετικών διαστάσεων για τοπική πύκνωση του πλέγματος, προκειμένου να υπάρχει σταδιακή μετάβαση από την πιο μικρή διάσταση της επιφάνειας εισόδου στην, κατά 60 περίπου τάξεις μεγέθους, μεγαλύτερη διάσταση του ευρύτερου πλέγματος. Η Εικόνα 5-9 αναπαριστά αυτή την πύκνωση σε μια τομή του υπολογιστικού χωρίου.



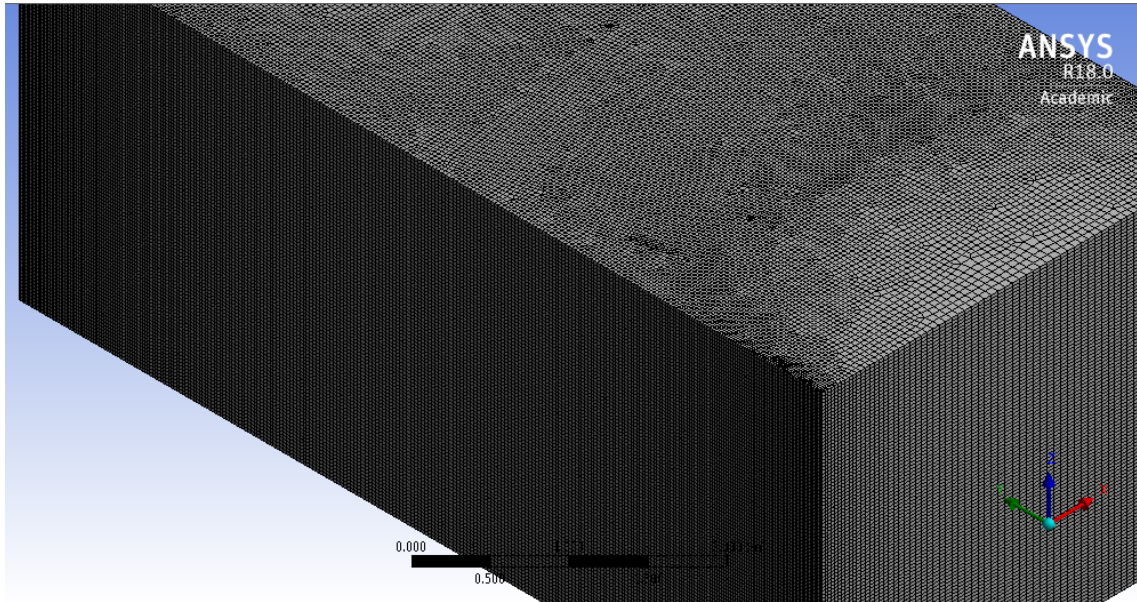
Εικόνα 5-9: Τοπική πύκνωση πλέγματος με σφαίρες επιρροής (Πλέγμα 1)

Τέλος, εξαιτίας της πολύ χαμηλής πυκνότητας του υδρογόνου και της ικανότητάς του να συσσωρεύεται ψηλά σε κλειστούς χώρους, ένα λεπτομερέστερο πλέγμα στην οροφή θεωρείται αναγκαίο. Επομένως η πύκνωση του πλέγματος στην επιφάνεια της οροφής είναι απαραίτητη και φαίνεται στην Εικόνα 5-10.



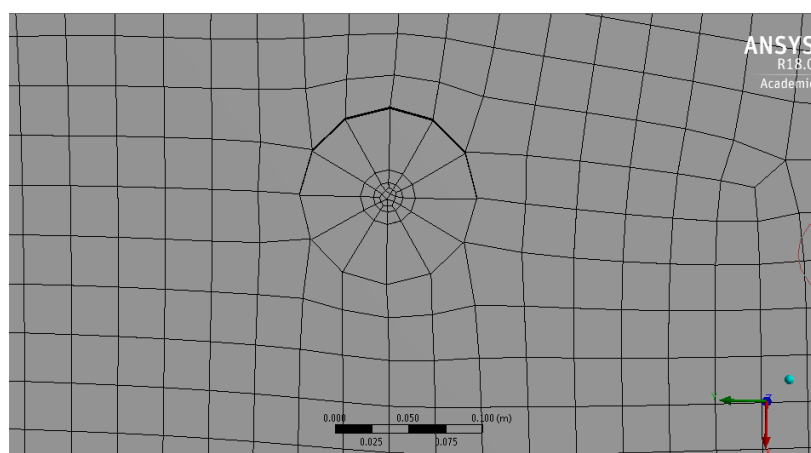
Εικόνα 5-10: Τοπική πύκνωση του πλέγματος στην οροφή (Πλέγμα 1)

- Εν συνεχεία για να μελετηθεί η επίδραση του πλέγματος, χρησιμοποιήθηκε δομημένο πλέγμα, όπως φαίνεται στην Εικόνα 5-11. Όπως στο μη δομημένο πλέγμα, έτσι και εδώ έγιναν οι απαιτούμενες πυκνώσεις στα αντίστοιχα σημεία ενδιαφέροντος.



Εικόνα 5-11: Διακριτοποίηση χωρίου με δομημένο πλέγμα (Πλέγμα 2)

Στην **Εικόνα 5-12** που ακολουθεί, φαίνεται η πυκνωση που έγινε στην επιφάνεια εισόδου. Εδώ ο δακτύλιος που περιβάλλει την είσοδο δεν φαίνεται να έχει μεγάλη διαφορά με την είσοδο καθότι το ευρύτερο πλέγμα είναι αρκετά πυκνότερο από το προηγούμενο.



Εικόνα 5-12: Πύκνωση δομημένου πλέγματος στο πάνω μέρος της συσκευής εισόδου του υδρογόνου (Πλέγμα 2)

Ο Πίνακας 5-6 συνοψίζει τον αριθμό των κόμβων και των στοιχείων που απαρτίζουν το κάθε πλέγμα, καθώς και κάποια χαρακτηριστικά που αποτελούν μετρικά μεγέθη της ποιότητας κάθε πλέγματος. Επίσης ο Πίνακας 5-7 δίνει μια εικόνα του μεγέθους των στοιχείων στην συνολική διάταξη.

Πίνακας 5-6: Στατιστικά στοιχεία πλεγμάτων

	Πλέγμα 1 (Μη δομημένο)	Πλέγμα 2 (Δομημένο)
Nodes	390805	2821658
Elements	2234632	2754980
Mesh Metric	Element Quality	Element Quality
Min	0.21753	6.8852e-002
Max	0.99989	0.99999
Average	0.84764	0.96207
Standard Deviation	9.4656e-002	6.3781e-002

Πίνακας 5-7: Μεγέθη στοιχείων πλεγμάτων

	Πλέγμα 1	Πλέγμα 2
Μέγεθος στοιχείων	0.09 m	0,06 m
Μέγεθος στοιχείων εισόδου	0,0015 m	0.002 m
Μέγεθος στοιχείων δακτυλίου	0,005 m	0.004 m
Μέγεθος στοιχείων οροφής	0.04 m	0,03 m

5.2.3 Μοντελοποίηση

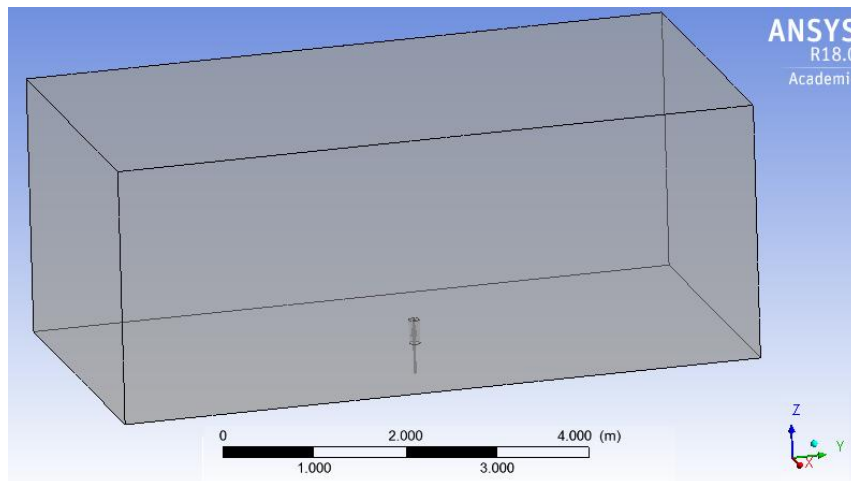
Η μοντελοποίηση του προβλήματος έκλυσης και διασποράς υδρογόνου έγινε με τη βοήθεια του λογισμικού CFX ANSYS 17.0 και 18.0.

- Ιδιότητες ροής

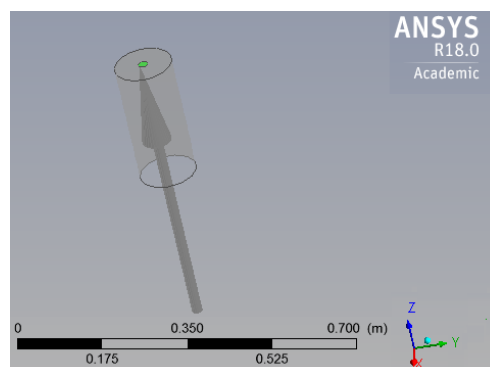
Το ANSYS CFX επιλύει το σύστημα των εξισώσεων που αναπτύχθηκε αναλυτικά στην ενότητα 4.2 έως 4.5, για το μίγμα αέρα / αέριου υδρογόνου που προκύπτει μετά την είσοδο του αέριου υδρογόνου στον θάλαμο. Το μίγμα θεωρήθηκε μεταβλητής σύνθεσης (variable composition mixture), ενώ τόσο ο αέρας όσο και το υδρογόνο που χρησιμοποιήθηκαν για την δημιουργία του μίγματος από την βιβλιοθήκη των χημικών ειδών που διαθέτει το ANSYS, θεωρήθηκαν ιδανικά αέρια. Στην μοντελοποίηση λήφθηκε υπόψη η επίδραση της βαρύτητας $-9,81 \text{ m/s}^2$ κατά τον κατακόρυφο άξονα z. Το αρνητικό πρόσημο οφείλεται στην αντίθετη κατεύθυνση της ροής σε σχέση με το διάνυσμα της βαρύτητας. Η πυκνότητα αναφοράς λήφθηκε 1.2 kg/m^3 (για τον αέρα που υπάρχει ήδη στον χώρο) και η πίεση αναφοράς 1 atm . Η θερμοκρασία σε κάθε περίπτωση διατηρείται σταθερή και ίση με $T=10 \text{ }^\circ\text{C}$.

- Οριακές συνθήκες

Για τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν έγινε προσομοίωση ενός χρονικά μη μεταβαλλόμενου (steady state) προβλήματος, ορίζοντας ως οριακές συνθήκες, την κατακόρυφη είσοδο αέριου υδρογόνου με παροχή μάζας $Q=1$ g/s, από την επιφάνεια εισόδου κυκλικής διατομής $d=20$ mm όπως απεικονίζει και η **Εικόνα 5-13** και Εικόνα 5-14. Η συγκεκριμένη παροχή αντιστοιχεί σε κατακόρυφη ταχύτητα εισόδου $U_w=36.7$ m/s, για επιφάνεια εισόδου $0,000314$ m² και πυκνότητα υδρογόνου $0,0868$ kg/m³. Η ένταση τύρβης λήφθηκε 10%, δεδομένου ότι το υδρογόνο εισέρχεται στον θάλαμο με σχετικά μεγάλη ταχύτητα και προκαλεί τυρβώδη ροή. Επιπλέον, επειδή η συγκέντρωση του αέρα δεν προκύπτει από κάποια αυτόνομη εξίσωση (constrained), αλλά από την διαφορά με τις μετρούμενες συγκεντρώσεις υδρογόνου δηλαδή $Y_{air} = 1 - Y_{H_2}$, η συγκέντρωση του υδρογόνου στην είσοδο είναι απαραίτητο να δηλωθεί. Επομένως για την επιφάνεια εισόδου ισχύει $Y_{H_2} = 1$. Επιπρόσθετα τα πλαϊνά τοιχώματα του πειραματικού θαλάμου καθώς και το δάπεδο θεωρήθηκαν επιφάνειες σκληρότητας 7 mm, ενώ οι υπόλοιπες επιφάνειες του θαλάμου θεωρήθηκαν λείες.



Εικόνα 5-13: Οριακή συνθήκη εισόδου



Εικόνα 5-14: Μεγέθυνση της οριακής συνθήκης εισόδου

- Μοντέλο τύρβης

Καθότι η ροή που εξετάζεται είναι τυρβώδης, θεωρήθηκε αναγκαία η μοντελοποίηση της τύρβης. Τα μοντέλα k-ε, RNG k-ε, SST χρησιμοποιήθηκαν για τον σκοπό αυτό.

- Κριτήριο σύγκλισης

Για την υπολογιστική επίλυση του προβλήματος χρησιμοποιήθηκε σχήμα υψηλής ανάλυσης (High Resolution Scheme) και σχήμα διακριτοποίησης πρώτης τάξης για την μοντελοποίηση της τύρβης. Επιλέχθηκε κριτήριο σύγκλισης $RMS=10^{-5}$ και μέγιστος αριθμός επαναλήψεων 2000. Αυτό σημαίνει ότι ο επιλύτης θα τερματίσει την διαδικασία επίλυσης όταν θα ικανοποιηθεί ένα από τα προηγούμενα κριτήρια. Συγκεκριμένα σε κάθε στάδιο – επανάληψη ενός υπολογισμού, κάθε εξίσωση δεν ικανοποιείται με ακρίβεια και έτσι ένα σφάλμα ή ένα υπόλοιπο καταγράφεται ως τιμή της συνολικής, σε όλο τον όγκο ελέγχου, διατήρησης των ιδιοτήτων ροής. Αυτό το "υπόλοιπο" κάθε εξίσωσης προσδιορίζει πόσο η αριστερή πλευρά της εξίσωσης διαφέρει από τη δεξιά πλευρά σε οποιοδήποτε σημείο του χώρου. Εάν η λύση είναι "ακριβής", τότε το υπόλοιπο είναι μηδέν. Αυτό σημαίνει ότι κάθε μία από τις σχετικές εξισώσεις πεπερασμένων όγκων ικανοποιείται με ακρίβεια. Ωστόσο, επειδή αυτές οι εξισώσεις μοντελοποιούν τη φυσική κατά προσέγγιση, αυτό δεν σημαίνει ότι η λύση ταιριάζει ακριβώς με αυτό που συμβαίνει στην πραγματικότητα. Επομένως αν μια λύση συγκλίνει, τα υπόλοιπα θα πρέπει να μειώνονται διαδοχικά. Ο τύπος των υπολοίπων RMS ακολουθεί στην παρακάτω εξίσωση:

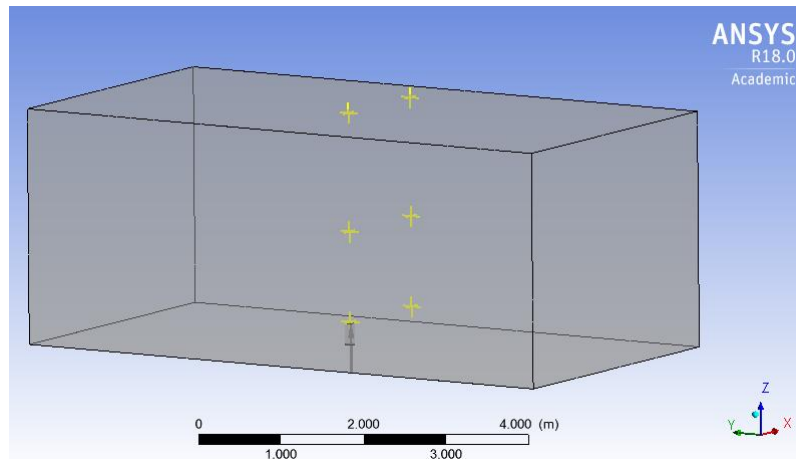
$$RMS = \sqrt{\frac{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 + \dots + S_n^2}{n}} \quad 5-1$$

- Σημεία παρακολούθησης (monitor points)

Προκειμένου να υπάρχει σαφής εικόνα για την εξέλιξη της επίλυσης και καλύτερη επίβλεψη των αποτελεσμάτων, χρησιμοποιήθηκε η δυνατότητα που δίνει το CFX Pre για σημεία παρακολούθησης (monitor points), όπου μέσω διαγραμμάτων αντλούνται πληροφορίες για διάφορα μεγέθη όπως το κλάσμα μάζας του υδρογόνου, η μοριακή συγκέντρωση κλπ. Τα σημεία αυτά τοποθετήθηκαν σε σημαντικές για το πρόβλημα θέσεις, όπως πάνω από την πηγή υδρογόνου καθώς και δεξιότερα από αυτήν προκειμένου να υπάρχει και η δυνατότητα για άμεση σύγκριση με τις θέσεις που ήταν τοποθετημένοι και οι αισθητήρες (sensors 1-16) στην πειραματική διαδικασία. Ο Πίνακας 5-8 δίνει τις συντεταγμένες των monitor points ενώ στην Εικόνα 5-15 φαίνεται η διάταξή τους στον χώρο.

Πίνακας 5-8: Συντεταγμένες σημείων παρακολούθησης

Σημεία Παρακολούθησης	X (m)	Y (m)	Z (m)
Πάνω από την πηγή H ₂	0	0	0.275
	0	0	1.38
	0	0	2.83
Δεξιά από την πηγή H ₂	1.4	0	0.275
	1.4	0	1.38
	1.4	0	2.83



Εικόνα 5-15: Θέσεις σημείων παρακολούθησης στην διάταξη

5.2.4 Παραδοχές

- Η συσκευή απελευθέρωσης υδρογόνου που φαίνεται στην Εικόνα 5-4, προσομοιώνεται με έναν κύλινδρο ίδιων διαστάσεων, η πάνω επιφάνεια του οποίου αποτελεί την επιφάνεια εισόδου του υδρογόνου στον χώρο. Το εσωτερικό της συσκευής αγνοήθηκε καθότι με την οριακή συνθήκη εισόδου σταθερής παροχής υδρογόνου, επιτυγχάνεται ομογενοποίηση της ροής χωρίς να απαιτείται η προσομοίωση της κλίσης διασποράς που βρίσκεται στο εσωτερικό της συσκευής, όπως περιγράφεται και στην δημοσίευση του Lacomte et al¹³.
- Η προσομοίωση του φαινομένου γίνεται ως να έχουμε ένα steady state φαινόμενο ενώ στην πραγματικότητα δεν είναι σταθερό διότι η παροχή του υδρογόνου πραγματοποιείται για 240s (release phase) και μετά διακόπτεται. Η συγκεκριμένη παραδοχή μπορεί να αποτελέσει μια πιο ρεαλιστική προσέγγιση αφού όπως φαίνεται και στα διαγράμματα πειραματικών μετρήσεων χρονικής μεταβολής της συγκέντρωσης, οι συγκεντρώσεις είναι σχετικά σταθερές συναρτήσει του χρόνου εκτός μικρών περιόδων στην αρχή του φαινομένου.

5.3 Παραμετρική μελέτη: Υπολογιστικό πλέγμα

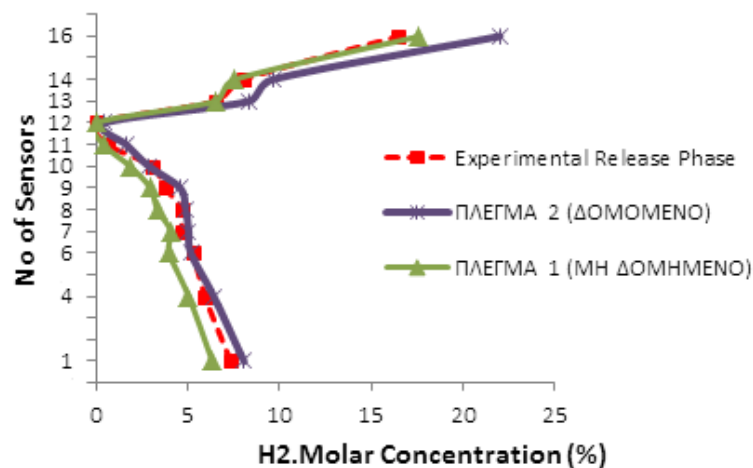
Για την παραμετρική μελέτη του πλέγματος, εξετάστηκαν συνολικά δύο διαφορετικές περιπτώσεις. Ένα δομημένο και ένα μη δομημένο πλέγμα όπως παρουσιάστηκαν και στην ενότητα 5.2.2.

Ο Πίνακας 5-9 συνοψίζει τον αριθμό των κόμβων και των στοιχείων που απαρτίζουν το κάθε πλέγμα, καθώς και κάποια χαρακτηριστικά μεγέθη των στοιχείων τους.

Πίνακας 5-9: Χαρακτηριστικά πλεγμάτων που εξετάστηκαν για την παραμετρική μελέτη

	Πλέγμα 1 (Μη δομημένο)	Πλέγμα 2 (Δομημένο)
Μεγεθος στοιχείων χώρου (m)	0.09	0.06 m
Μεγεθος στοιχείων εισόδου (m)	0.0015 m	0.002 m
Μεγεθος στοιχείων δακτυλίου (m)	0.005 m	0.004 m
Μεγεθος στοιχείων οροφής (m)	0.04 m	0.03 m
Αριθμός κόμβων	390805	2821658
Αριθμός στοιχείων	2234632	2754980

Από την **Εικόνα 5-16** όπου φαίνονται οι γραμμομοριακές συγκεντρώσεις (%) του υδρογόνου σε κάθε αισθητήρα, παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις υπολογιστική προσομοίωση με το Πλέγμα 1 είναι πολύ κοντά στα πειραματικά αποτελέσματα για τους αισθητήρες 13, 14, 16 που βρίσκονται πάνω από την πηγή σε σχέση με τις τιμές που προέκυψαν από το Πλέγμα 2. Αντίθετα για τους αισθητήρες που βρίσκονται σε μεγαλύτερη απόσταση από την πηγή φαίνεται ότι με το Πλέγμα 2 η προσέγγιση στις πειραματικές τιμές είναι μεγαλύτερη.

**Εικόνα 5-16:** Παραμετρική μελέτη πλέγματος

Ενώ το Πλέγμα 2 όπως φαίνεται από τον **Πίνακας 5-9** είναι πυκνότερο από το Πλέγμα 1 κατά 23% περίπου, επιλέχθηκε το Πλέγμα 2 ως καταλληλότερο, καθώς οι συγκεντρώσεις του υδρογόνου για τα σημεία που είναι πιο απομακρυσμένα από την πηγή πλησιάζουν περισσότερο τις πειραματικές τιμές, κάτι που είναι ενδιαφέρον και για την μελέτη περίπτωσης που αφορά στον χώρο φόρτισης συσσωρευτών που μελετάται στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία. Αν ληφθεί υπόψιν το μεγάλο μέγεθος του χώρου της μελέτης περίπτωσης όπου το μοντέλο πρέπει να προσομοιώσει επαρκώς τις

συγκεντρώσεις του υδρογόνου για το σύνολο των σημείων, το μεγαλύτερο μέρος των οποίων βρίσκονται μακριά από τις πηγές, το Πλέγμα 2 είναι προτιμότερο για αυτήν την περίπτωση.

5.4 Ανεξαρτησία πλέγματος

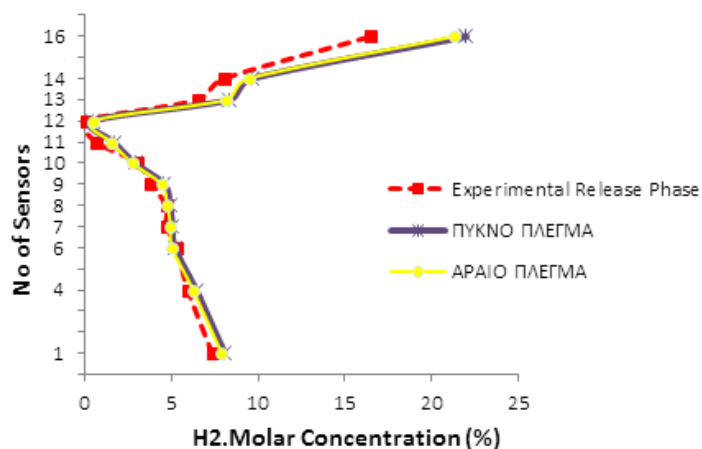
Για την ανεξαρτησία του πλέγματος εξετάστηκαν συνολικά δύο διαφορετικές περιπτώσεις. Ένα αραιό και ένα πυκνό πλέγμα και επιλύθηκε το ίδιο πρόβλημα, με τις ίδιες οριακές συνθήκες και ιδιότητες, που περιγράφηκαν στην ενότητα 5.2.3.

Ο Πίνακας 5-10 συνοψίζει τον αριθμό των κόμβων και των στοιχείων που απαρτίζουν το κάθε πλέγμα, καθώς και κάποια χαρακτηριστικά μεγέθη των στοιχείων στην συνολική διάταξη.

Πίνακας 5-10: Χαρακτηριστικά πλεγμάτων που εξετάστηκαν

	Μέγεθος στοιχείων χώρου (m)	Μέγεθος στοιχείων εισόδου (m)	Μέγεθος στοιχείων δακτυλίου (m)	Μέγεθος στοιχείων οροφής (m)	Αριθμός κόμβων	Αριθμός στοιχείων
Αραιό	0.1	0.002	0.004	0.03	1149475	1115472
Πυκνό	0.06	0.002	0.004	0.03	2821658	2754980

Από την Εικόνα 5-16 όπου φαίνονται οι γραμμομοριακές συγκεντρώσεις (%) του υδρογόνου σε κάθε αισθητήρα, παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις υπολογιστικές προσομοιώσεις τόσο με το πυκνό πλέγμα όσο και με το αραιό σχεδόν ταυτίζονται, που σημαίνει ότι θα μπορούσε να επιλεγεί ως καταλληλότερο πλέγμα η περίπτωση με το χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος. Από τον Πίνακα 5-10 φαίνεται ότι το αραιό πλέγμα είναι κατά 147% μικρότερο από το πυκνό πλέγμα που έχει ως αποτέλεσμα η εξοικονόμηση χρόνου και υπολογιστικής μνήμης να είναι αρκετά σημαντική για την προσομοίωση με το αραιό πλέγμα.

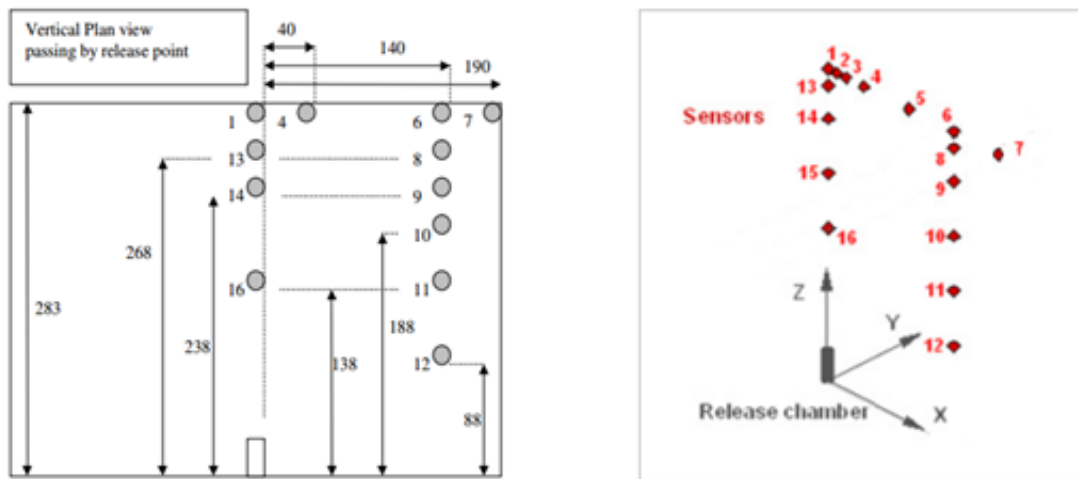


Εικόνα 5-17: Ανεξαρτησία πλέγματος

5.5 Παραμετρική μελέτη: Υπολογιστικό μοντέλο τύρβης

Παρακάτω παρουσιάζονται σε διαγράμματα οι υπολογιστικές μετρήσεις που προέκυψαν εφαρμόζοντας το υπολογιστικό μοντέλο για διάφορες περιπτώσεις μοντέλων τύρβης. Συγκεκριμένα εξετάστηκαν τα μοντέλα τύρβης k-e , RNG k-e και SST.

Το Πλέγμα 2 αντιστοιχεί στο δομημένο πλέγμα όπως περιγράφηκε και στην ενότητα 5.2.2.



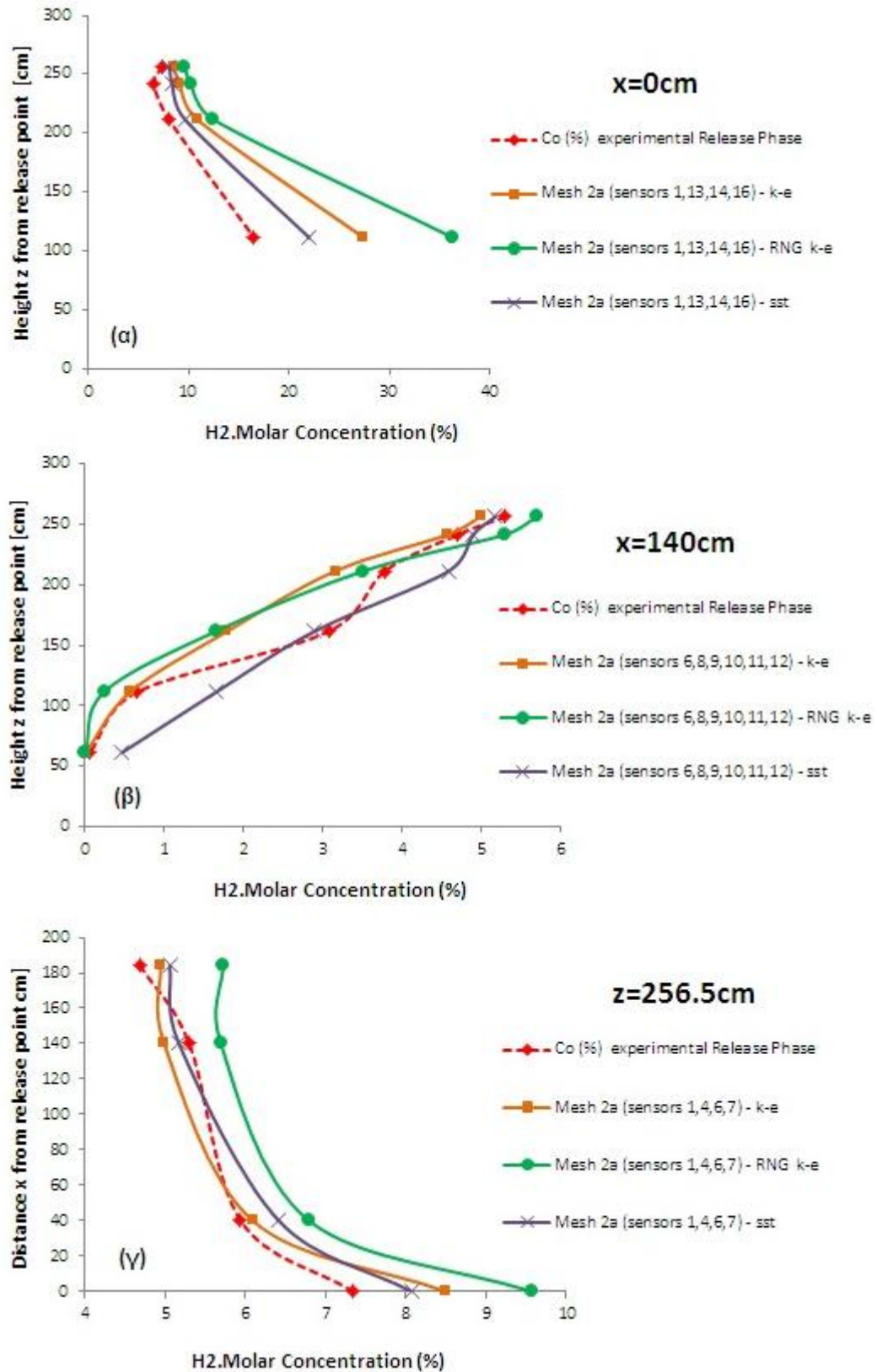
Εικόνα 5-18: Διάταξη των αισθητήρων στον χώρο

Το **Διάγραμμα 5-1** παρουσιάζει την μεταβολή της γραμμομοριακής συγκέντρωσης υδρογόνου (%) κατά την φάση έκλυσης H_2 , συναρτήσει του ύψους των αισθητήρων (που είναι τοποθετημένοι στο επίπεδο xz για $y=0m$) από την πηγή, μελετώντας την επίδραση του μοντέλου τύρβης.

Στο **Διάγραμμα 5-1 (α)** που απεικονίζονται οι συγκεντρώσεις συναρτήσει του ύψους από την πηγή στο $x=0cm$ (αφορά δηλαδή τους αισθητήρες 1, 13, 14, 16 που βρίσκονται πάνω από την πηγή) και τα τρία μοντέλα τύρβης φαίνεται ότι υπερεκτιμούν τις συγκεντρώσεις του υδρογόνου ενώ μεγαλύτερη απόκλιση προκύπτει για τον αισθητήρα 16 που βρίσκεται σε ύψος 111.5cm.

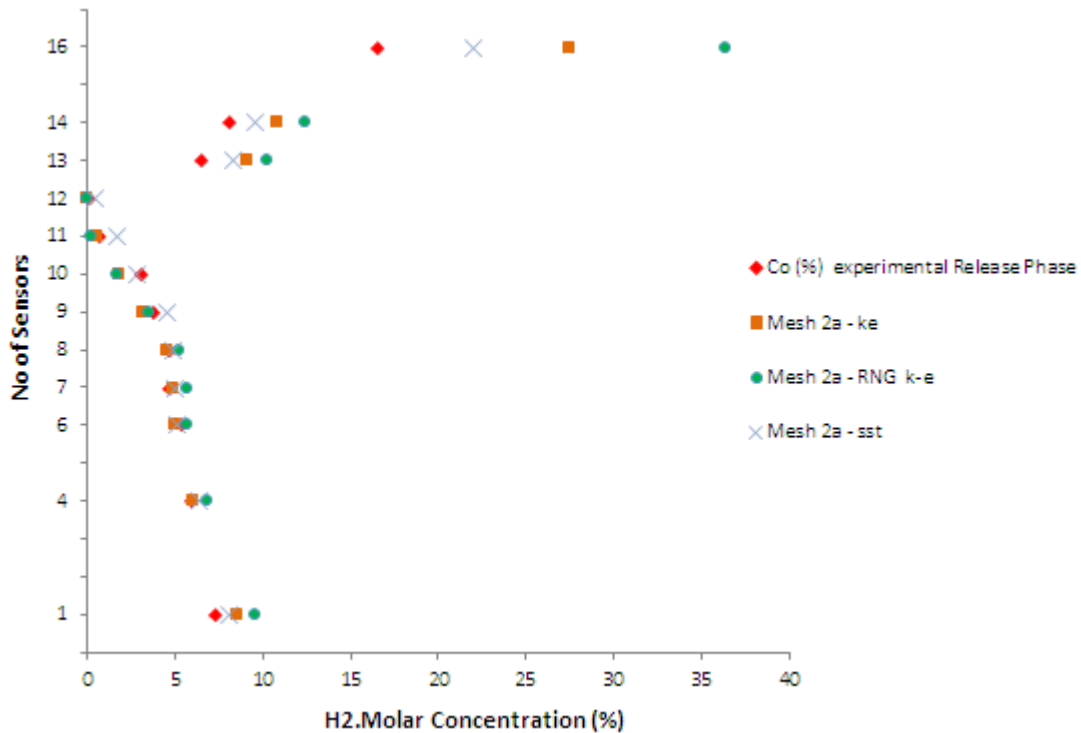
Στο **Διάγραμμα 5-1 (β)** που απεικονίζονται οι συγκεντρώσεις συναρτήσει του ύψους από την πηγή στο $x=140cm$ (αφορά δηλαδή τους αισθητήρες 6, 8, 9, 10, 11, 12 που βρίσκονται δεξιότερα από την πηγή) και τα τρία μοντέλα τύρβης είτε υπερεκτιμούν τις συγκεντρώσεις του υδρογόνου για ορισμένους αισθητήρες, είτε υποεκτιμούν τις συγκεντρώσεις για κάποιους άλλους αισθητήρες.

Στο **Διάγραμμα 5-1 (γ)** που απεικονίζονται οι συγκεντρώσεις συναρτήσει της απόστασης από την πηγή, στο $z=256.5cm$ από την πηγή (αφορά δηλαδή τους αισθητήρες 1, 4, 6, 7 που βρίσκονται περίπου στο ύψος της οροφής) και τα τρία μοντέλα τύρβης υπερεκτιμούν τις συγκεντρώσεις του υδρογόνου για τους αισθητήρες 1, 4, 7.



Διάγραμμα 5-1: Σύγκριση πειραματικών και υπολογιστικών τιμών, ως προς το μοντέλο τύρβης, κατά την φάση έκλυσης H_2 , (α) στο $x=0m$ (β) στο $x=1.40m$ (γ) στο $z=2.83m$

Το **Διάγραμμα 5-2** απεικονίζει τις πειραματικές και την υπολογιστικές τιμές για το σύνολο των αισθητήρων. Εδώ φαίνεται συνολικά ότι και τα τρία μοντέλα τύρβης πλησιάζουν αρκετά τις πειραματικές τιμές ενώ η μεγαλύτερη απόκλιση σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα προκύπτει για τον αισθητήρα 16.



Διάγραμμα 5-2: Σύγκριση πειραματικών και υπολογιστικών τιμών σε όλα τα σημεία – αισθητήρες

Η ποσοτική αξιολόγηση των αποτελεσμάτων πραγματοποιήθηκε επίσης χρησιμοποιώντας στατιστικά μέτρα. Ο υπολογισμός των σφαλμάτων έγινε με την εξίσωση 5-2 και χρησιμοποιήθηκε για τη σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων που προέκυψαν σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα της δημοσίευσης του Lacomte et al¹³ (που είναι και το paper στο οποίο βασίζεται η πιστοποίηση του μοντέλου της παρούσας εργασίας).

$$error_i = \frac{C_{EXP,i} - C_{CFX,i}}{C_{EXP,i}} \quad 5-2$$

Όπου:

$C_{EXP,i}$ → οι τιμές των πειραματικών γραμμομοριακών συγκεντρώσεων H_2 (%) σε δεδομένο ύψος από την είσοδο του καυσίμου, για την φάση της έκλυσης H_2

$C_{CFX,i}$ → οι τιμές των υπολογιστικών γραμμομοριακών συγκεντρώσεων H_2 (%) σε δεδομένο ύψος από την είσοδο του καυσίμου, για την φάση της έκλυσης H_2

Ο **Πίνακας 5-11** παρουσιάζει τις τιμές των σφαλμάτων error για κάθε αισθητήρα και για τα τρία

μοντέλα τύρβης που μελετήθηκαν για τη φάση της έκλυσης.

Πίνακας 5-11: Παρουσίαση σφαλμάτων παραμετρικής ανάλυσης ως προς το μοντέλο τύρβης

sensors	error		
	k-e	RNG k-e	sst
1	15,74	30,31	9,90
4	2,51	14,29	7,98
6	5,89	7,43	2,42
7	5,39	22,03	7,85
8	2,89	12,45	4,04
9	16,59	7,14	21,27
10	41,76	46,45	5,96
11	13,48	63,48	150,91
12	86,67	100,00	681,67
13	39,43	56,50	28,05
14	35,10	55,22	19,74
16	66,28	120,24	33,35
Μέσος όρος	27,64	44,63	81,09

Από τον **Πίνακας 5-11** παρατηρούμε ότι σε ορισμένες περιπτώσεις τα σφάλματα είναι αρκετά μεγάλα παρά το γεγονός ότι από το **Διάγραμμα 5-1** και το **Διάγραμμα 5-2** φαίνεται ότι δεν υπάρχουν σημαντικές αποκλίσεις από τα πειραματικά δεδομένα. Αυτό οφείλεται στις μικρές τιμές των συγκεντρώσεων που έχει ως αποτέλεσμα ο παρανομαστής της εξίσωσης **5-2** να είναι μικρός και επομένως το σφάλμα (error) να μεγαλώνει και να μην μεταφέρει με ακρίβεια την πραγματική εικόνα.

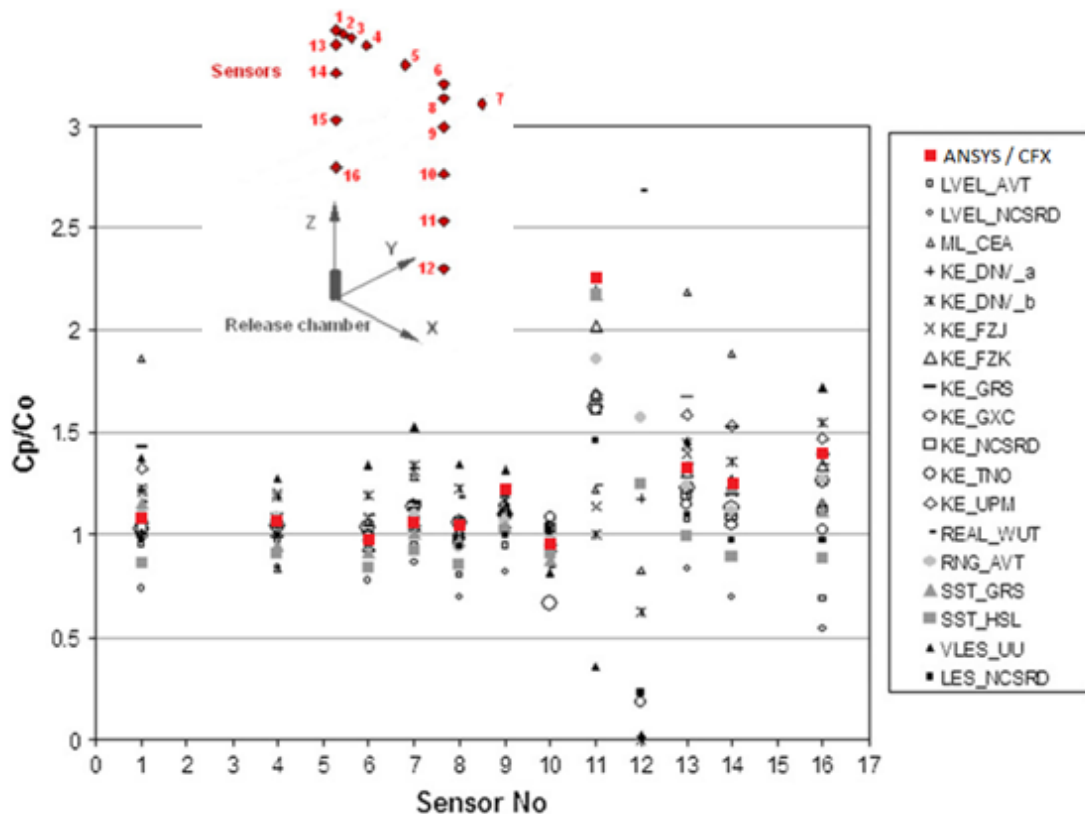
Το κριτήριο για την επιλογή του βέλτιστου μοντέλου τύρβης είναι το σφάλμα που παρουσιάζεται στον **Πίνακας 5-11** σε συνδιασμό με τα το **Διάγραμμα 5-1**. Εδώ παρατηρείται ότι το μικρότερο σφάλμα εντοπίζεται στο μοντέλο τύρβης k-e όπου $error=27,64\%$ και το μεγαλύτερο στο μοντέλο τύρβης SST, $error=81,09\%$. Παρόλο αυτά όμως αν δεν ληφθεί υπόψιν το πολύ μεγάλο σφάλμα που παρατηρείται για τους αισθητήρες 11 και 12 λόγω των μικρών συγκεντρώσεων που αλλοιώνουν την πραγματική εικόνα, τότε το μικρότερο σφάλμα αντιστοιχεί στο **μοντέλο τύρβης SST** και είναι περίπου **error=20%**. Η συγκεκριμένη προσέγγιση επαληθεύεται και στην δημοσίευση του Venetsanos et al¹⁴ όπου το μοντέλο τύρβης SST πλησιάζει περισσότερο τα πειραματικά αποτελέσματα σε σχέση με τα υπόλοιπα.

5.6 Πιστοποίηση αποτελεσμάτων

Η πιστοποίηση του μοντέλου γίνεται συγκρίνοντας τις υπολογιστικές τιμές που προκύπτουν με τις αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις στα σημεία αυτά. Από την παραμετρική μελέτη του υπολογιστικού πλέγματος και του μοντέλου τύρβης που περιγράφηκαν στην ενότητα 5.3 και 5.5,

επιλέχθηκε το μοντέλο τύρβης SST χρησιμοποιώντας το Πλέγμα 2 (δομημένο) καθώς η προσέγγιση του ως προς την πειραματική διαδικασία είναι αρκετά ικανοποιητική και με βάση αυτό μελετάται η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων του παρόντος μοντέλου. Το μέγεθος που εξετάζεται για την πιστοποίηση των αποτελεσμάτων είναι το γραμμομοριακό κλάσμα H_2 ή το κλάσμα όγκου H_2 (κλάσμα mole H_2 = κλάσμα όγκου H_2 για ιδανικά αέρια) κατά την φάση έκλυσης.

Το **Διάγραμμα 5-3** που ακολουθεί αποτελεί μια εποπτική εικόνα για την αξιοπιστία του μοντέλου που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία σε σχέση με τα υπόλοιπα μοντέλα που έλαβαν μέρος στην δημοσίευση του Venetsanos et al¹⁴, προκειμένου να μελετηθεί η αξιοπιστία τους. Αυτό που παρατηρείται είναι ότι στα περισσότερα σημεία – αισθητήρες οι υπολογιστικές τιμές βρίσκονται κοντά στις αντίστοιχες πειραματικές, ο λόγος τους δηλαδή C_p/C_o πλησιάζει στην μονάδα. Ενώ τα αποτελέσματα που προέκυψαν για αρκετά από τα υπόλοιπα μοντέλα¹⁴ είναι περισσότερο απλωμένα στο **Διάγραμμα 5-3**, παρουσιάζοντας δηλαδή μεγαλύτερη απόκλιση σε σχέση με το παρόν μοντέλο. Επομένως το παρόν μοντέλο αποτελεί μια καλύτερη προσέγγιση σε σύγκριση με τα περισσότερα μοντέλα που παρουσιάζονται στο **Διάγραμμα 5-3**.



Διάγραμμα 5-3: Λόγος υπολογιστικών (C_p) - πειραματικών (C_o) αποτελεσμάτων κατά την φάση της έκλυσης όπως προέκυψαν και στην δημοσίευση του Venetsanos et al¹⁴ (οι κόκκινες ενδείξεις αφορούν τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας)

Ο

Πίνακας 5-12 συγκεντρώνει τις τιμές των κλασμάτων mole –όγκου H_2 των πειραμάτων και του

υπολογιστικού μοντέλου που εξετάστηκε, καθώς και τα σφάλματα error του παρόντος υπολογιστικού μοντέλου.

Πίνακας 5-12: Συγκεντρώσεις H₂ και σφάλματα, κατά τη φάση έκλυσης, πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων

Release Phase			
sensors	Co (%) Experimental	Cp (%) ANSYS/CFX	error
1	7,34	8,07	9,90
4	5,94	6,41	7,98
6	5,3	5,17	2,42
7	4,69	5,06	7,85
8	4,7	4,89	4,04
9	3,78	4,58	21,27
10	3,07	2,89	5,96
11	0,66	1,66	150,91
12	0,06	0,47	681,67
13	6,52	8,35	28,05
14	8,04	9,63	19,74
16	16,5	22,00	33,35

Συνοψίζοντας παρατηρείται ότι η επίλυση με το μοντέλο τύρβης RNG k-ε έχει ως αποτέλεσμα μεγαλύτερες συγκεντρώσεις υδρογόνου σε σχέση με τα υπόλοιπα μοντέλα τύρβης, για το μεγαλύτερο αριθμό των αισθητήρων. Συγκεκριμένα οι συγκεντρώσεις προκύπτουν μεγαλύτερες από τις πειραματικές, για τους αισθητήρες που βρίσκονται πάνω από την πηγή στο $x=0m$ και κοντά στην οροφή στο $z=2.83m$, σε αντίθεση με τους αισθητήρες που βρίσκονται στο $x=1.40m$ και σε μεγαλύτερη απόσταση από την οροφή. Παρόμοια είναι και η εικόνα για το μοντέλο τύρβης k-ε όπου εδώ η υπερτίμηση των συγκεντρώσεων είναι ελαφρώς μικρότερη. Το μοντέλο τύρβης SST φαίνεται να παράγει αποτελέσματα πιο κοντά στα πειραματικά.

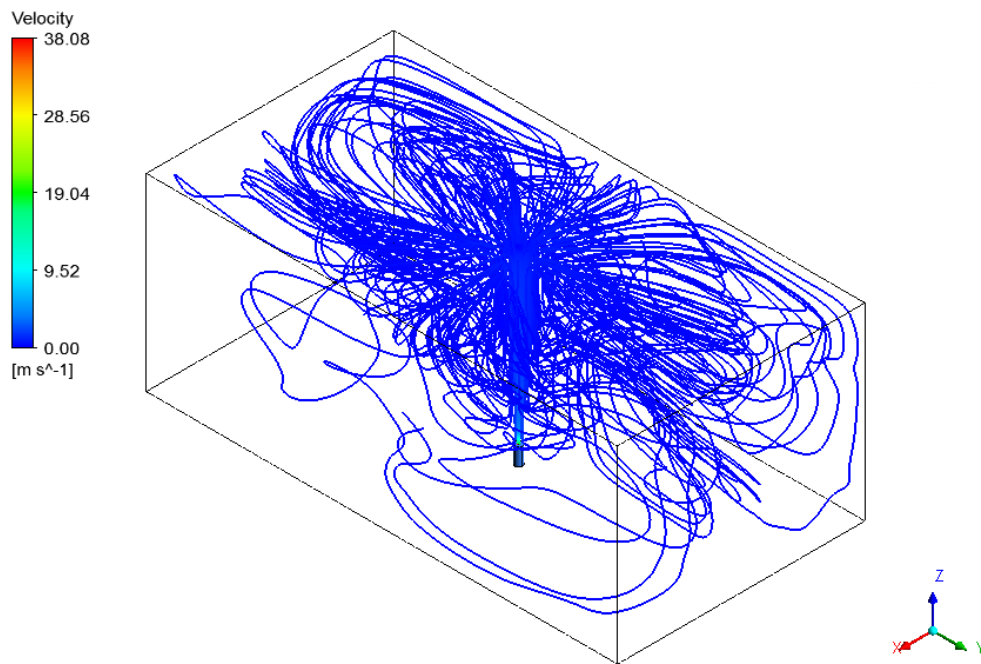
Αξιοσημείωτο είναι ότι, όπως και στην δημοσίευση του Venetsanos et al¹⁴, η μεγαλύτερη απόκλιση παρατηρείται για τον αισθητήρα 16 κάτι που είναι μη αναμενόμενο δεδομένου ότι βρίσκεται πολύ κοντά στην πηγή και πάνω από αυτήν.

Επιπρόσθετα μεγάλες απολίσεις παρατηρούνται για τους αισθητήρες 11, 12, οι οποίοι είναι τοποθετημένοι μακριά από την πηγή στο $x=140cm$ και χαμηλά σε σχέση με την οροφή του πειραματικού χώρου κάτι που επαληθεύεται και στην δημοσίευση του Venetsanos et al¹⁴ και αποδίδονται κυρίως στην ακρίβεια του πλέγματος, στην φυσική του υπολογιστικού μοντέλου και στην ακρίβεια του σχήματος διακριτοποίησης.

5.7 Γενικά Χαρακτηριστικά Αναπτυσσόμενου Πεδίου Ροής

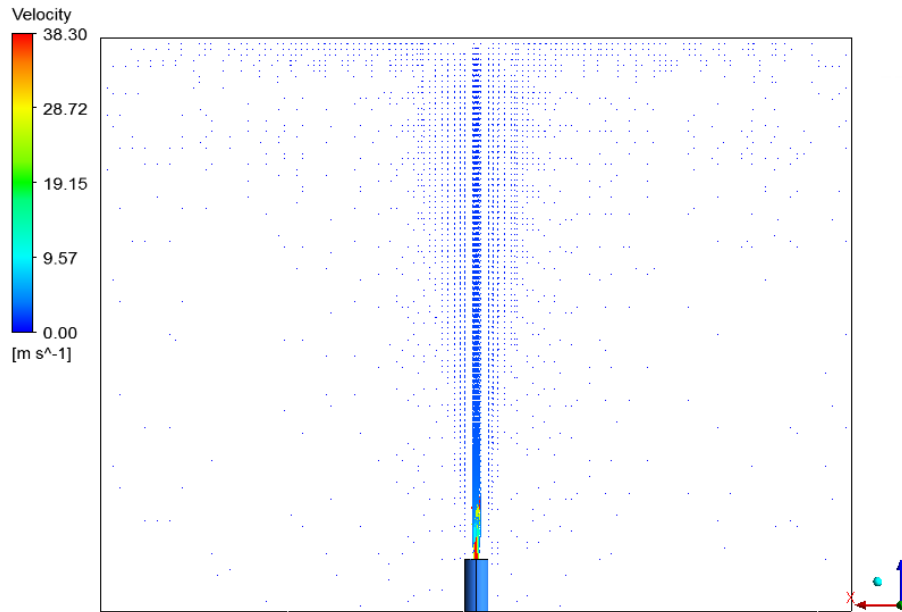
Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται διάφορα αποτελέσματα του πεδίου ροής του μείγματος αέρα – αέριου υδρογόνου στον πειραματικό θάλαμο.

Στην **Εικόνα 5-19** παρουσιάζονται οι γραμμές ροής του αέριου υδρογόνου στο εσωτερικό του πειραματικού θαλάμου. Το υδρογόνο φαίνεται να εισέρχεται στον χώρο με ταχύτητα 38.05m/s, ανυψώνεται και προσκρούει στην οροφή με ταχύτητα 0.05m/s περίπου. Εκεί οι γραμμές ροής απλώνονται προς όλες τις κατευθύνσεις όπου κινούνται με πολύ χαμηλές ταχύτητες σε όλο τον όγκο του θαλάμου.



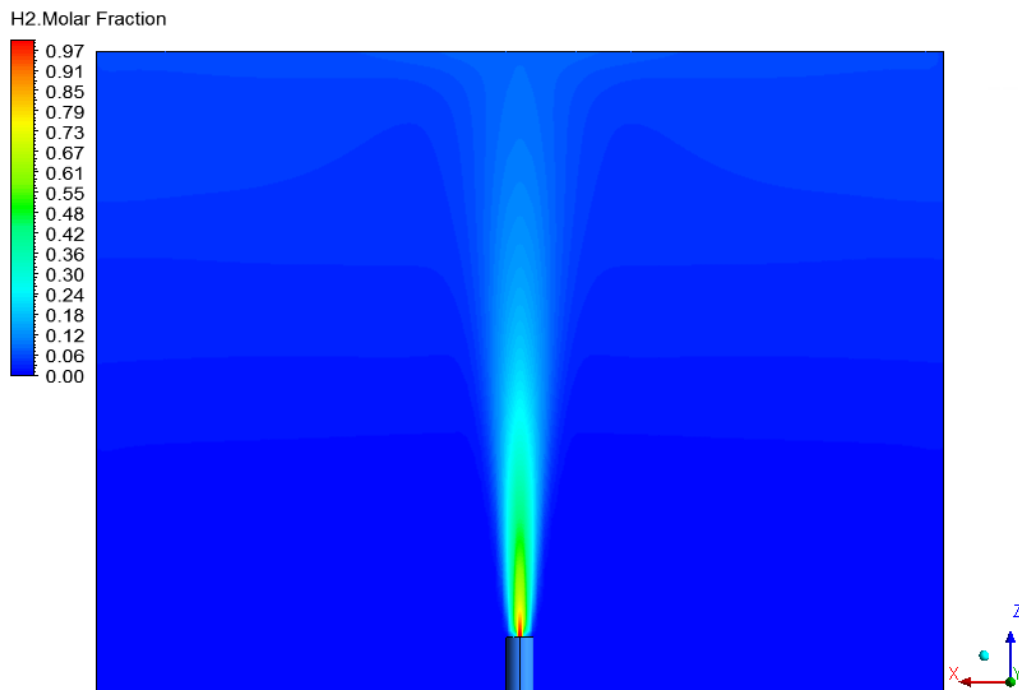
Εικόνα 5-19: Οι γραμμές ροής στον πειραματικό θάλαμο

Το πεδίο ροής μπορεί να κατανοηθεί και από την **Εικόνα 5-20** όπου παρουσιάζονται τα διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο που είναι τοποθετημένοι οι αισθητήρες, δηλαδή στο xz για $y=0\text{m}$. Το υδρογόνο εισέρχεται με την μέγιστη ταχύτητα 38.05m/s και σε απόσταση μικρότερη από το ύψος της πηγής (περίπου στο $z=0.5\text{m}$), η ταχύτητα έχει μειωθεί σε 3.9 m/s.



Εικόνα 5-20: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο xz για $\gamma=0\text{m}$

Η **Εικόνα 5-21** παρουσιάζει τις ισοεπιφάνειες του γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο xz για $\gamma=0\text{m}$. Είναι φανερό πως το υδρογόνο εξερχόμενο από την πηγή στο 100%, καθώς ανέρχεται και αναμιγνύεται με τον αέρα του χώρου η συγκέντρωσή του ελαττώνεται ώσπου να φτάσει στην οροφή.



Εικόνα 5-21: Ισοεπιφανειακή κατανομή του γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο xz για $\gamma=0\text{m}$

6. Προσομοίωση μελέτης περίπτωσης εργασιακού χώρου

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται η εφαρμογή του μοντέλου που παρουσιάστηκε και πιστοποιήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο για μια πραγματική περίπτωση έκλυσης υδρογόνου που πραγματοποιείται σε έναν χώρο φόρτισης συσσωρευτών.

6.1 Περιγραφή Μελέτης Περίπτωσης

Η εφαρμογή του μοντέλου γίνεται σε έναν χώρο φόρτισης συσσωρευτών αεροπορικού τύπου, που στεγάζεται στο υπόστεγο συντήρησης στρατιωτικών ελικοπτέρων στην Πάχη Μεγάρων. Οι συσσωρευτές διαφόρων ειδών αφαιρούνται από το ελικόπτερο είτε κατά τη φάση προγραμματισμένης συντήρησης, είτε εξαιτίας κάποιας βλάβης και προωθούνται στο τμήμα φόρτισης συσσωρευτών. Εκεί ακολουθούνται όλες οι απαιτούμενες ενέργειες σύμφωνα με την βιβλιογραφία⁴ και εφαρμόζεται το απαιτούμενο πρωτόκολλο εργασιών που περιλαμβάνει μεταξύ των υπολοίπων την φόρτιση ή την εκφόρτιση του συσσωρευτή. Οι συσσωρευτές οι οποίοι διαχειρίζονται στο εν λόγω τμήμα είναι κυρίως νικελίου – καδμίου και μολύβδου – οξέως κλειστού και ανοιχτού τύπου.

Στην συγκεκριμένη μελέτη εξετάζεται η έκλυση υδρογόνου που συμβαίνει για τους συσσωρευτές νικελίου – καδμίου ανοιχτού τύπου BB433A/A, χωρητικότητας 30Ah, για το δυσμενέστερο σενάριο όσο αφορά στην έκλυση υδρογόνου. Πρόκειται για το σενάριο, το οποίο συμβαίνει στην περίπτωση όπου εφαρμόζεται το μεγαλύτερο δυνατό ρεύμα φόρτισης εξαιτίας του ότι η εκλυόμενη ποσότητα υδρογόνου είναι ανάλογη της έντασης του ρεύματος ηλεκτρόλυσης. Βάσει της βιβλιογραφίας οι μέθοδοι φόρτισης που εφαρμόζονται για την φόρτιση των συσσωρευτών είναι σταθερής τάσης (Constant Voltage Method), σταθερού ρεύματος (Constant Current Method) και μέθοδος φόρτισης με παλμούς (Reflex Charging Method). Η δυσμενέστερη περίπτωση όπου εφαρμόζεται το μεγαλύτερο ρεύμα φόρτισης, αφορά την παλμική μέθοδο κατά την οποία οι μπαταρίες BB433A/A φορτίζονται στα 60A για 1 έως 2 ώρες περίπου.

6.1.1 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά

Το τμήμα στο οποίο γίνεται η φόρτιση συσσωρευτών είναι ένας χώρος διαστάσεων 9.8 x 5 x 4.5 m (Μ x Π x Υ), κατά μήκος του οποίου βρίσκεται ένας πάγκος εργασίας διαστάσεων 9.8 x 0.8 x 0.8 m πάνω στον οποίο εδράζονται οι προς φόρτιση συσσωρευτές.

6.1.2 Υπολογισμός εκλυόμενου υδρογόνου

Όπως περιγράφηκε και στο κεφάλαιο 2, η ηλεκτρόλυση που συμβαίνει στο εσωτερικό των στοιχείων των συσσωρευτών όταν εφαρμόζεται σε αυτές ηλεκτρικό ρεύμα είναι μια μη αναστρέψιμη χημική αντίδραση που οδηγεί στην απελευθέρωση αέριου υδρογόνου.

Το ποσό του υδρογόνου που εκλύεται από έναν συσσωρευτή νικελίου καδμίου ανοιχτού τύπου, για το δυσμενέστερο σενάριο που εξετάζεται, είναι:

$$Q_{battery} = q \cdot n \cdot I_{gas} = 0,00045 \frac{m^3}{Ah} \cdot 19 \cdot 60 A = 0,513 \frac{m^3}{h} = 0,0001425 \frac{m^3}{s} \quad 6-1$$

Όπου:

$q = 0,00045 \text{ m}^3/\text{Ah}$ → η ποσότητα υδρογόνου που παράγεται από κάθε στοιχείο

$n = 19$ → ο αριθμός των στοιχείων για κάθε συσσωρευτή

$I_{gas} = 60 \text{ A}$ → το ρεύμα υπερφόρτισης που παράγει αέριο υδρογόνο

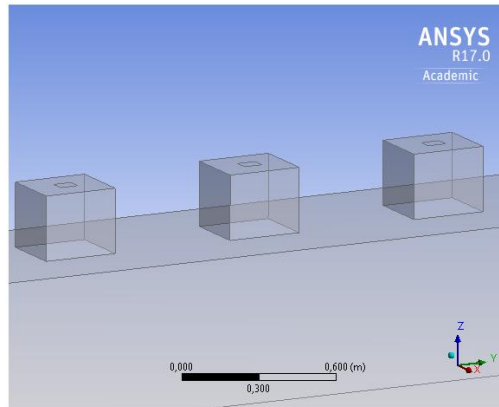
Λαμβάνοντας υπόψη την πυκνότητα του αέριου υδρογόνου $\rho = 0,0868 \text{ kg/m}^3$, προκύπτει:

$$Q_{battery} = 0,0001425 \frac{m^3}{s} \cdot 0,0868 \frac{kg}{m^3} = 0,000012369 \frac{kg}{s} = 0,012369 \frac{g}{s} \quad 6-2$$

6.2 Υπολογιστικές προσομοιώσεις

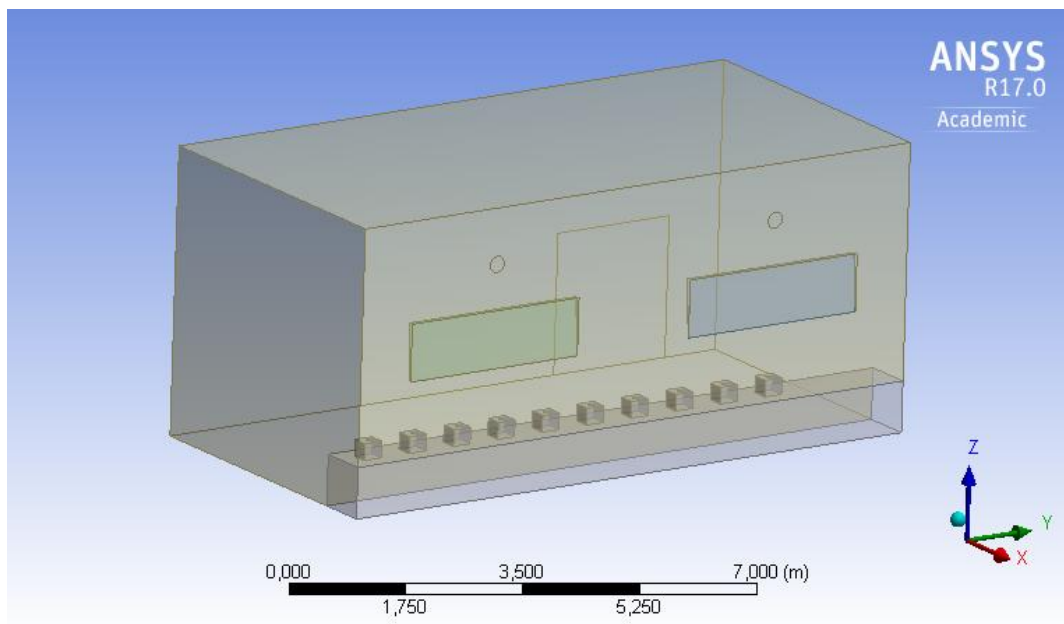
6.2.1 Γεωμετρία

Το υπολογιστικό χωρίο της μελέτης που εξετάζεται, περιλαμβάνει τον χώρο φόρτισης συσσωρευτών, διαστάσεων $9.8 \times 5 \times 4.5 \text{ m}$. Στο εσωτερικό του τμήματος και στο βάθος βρίσκεται ο πάγκος εργασίας διαστάσεων $9.8 \times 0.8 \times 0.8 \text{ m}$, πάνω στον οποίο εδράζονται 10 συσσωρευτές προς φόρτιση, διαστάσεων $0.3 \times 0.267 \times 0.26 \text{ m}$, έκαστη. Το αέριο υδρογόνο που παράγεται κατά τη φόρτιση, απελευθερώνεται στον χώρο από μια οπή κυκλικής διατομής 0.017 m περίπου, που βρίσκεται στο πάνω μέρος κάθε στοιχείου. Για τα 19 στοιχεία που απαρτίζουν κάθε συσσωρευτή BB433A/A η συνολική επιφάνεια απελευθέρωσης υδρογόνου είναι 0.0043 m^2 και προσομοιώνεται με μια επιφάνεια ορθογωνικής διατομής στο πάνω μέρος του συσσωρευτή όπως δείχνει και η **Εικόνα 6-1**.



Εικόνα 6-1: Προσομοίωση γεωμετρίας συσσωρευτή

Επίσης στον τοίχο που φορτίζονται οι συσσωρευτές υπάρχουν 2 ανοίγματα για φυσικό αερισμό και 2 μικρότερα ανοίγματα για μηχανικό αερισμό. Στον απέναντι τοίχο υπάρχει μια πόρτα εισόδου, η οποία παραμένει κλειστή κατά την διάρκεια φόρτισης των συσσωρευτών. Η **Εικόνα 6-2** παρουσιάζει τη γεωμετρία που κατασκευάστηκε σε περιβάλλον του λογισμικού ANSYS 17.

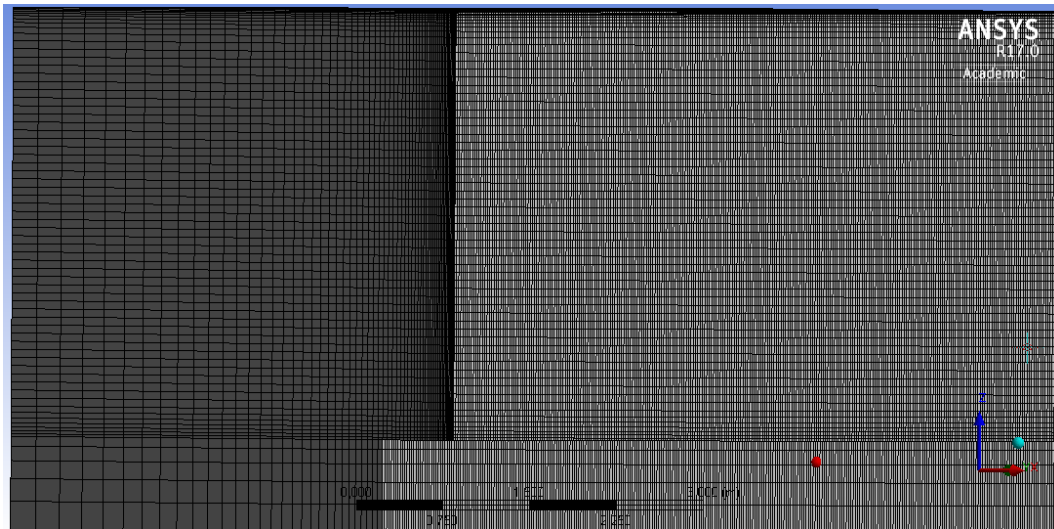


Εικόνα 6-2: Υπολογιστικό χωρίο χώρου φόρτισης συσσωρευτών

6.2.2 Πλέγμα

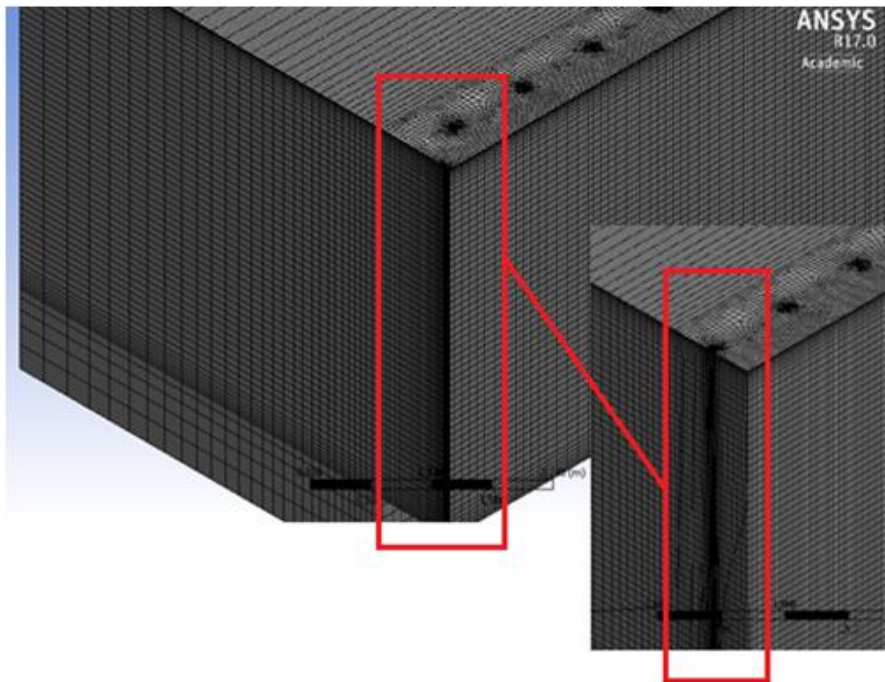
Η διακριτοποίηση του υπολογιστικού χωρίου έγινε στο Meshing του λογισμικού ANSYS 17. Το πλέγμα που δημιουργήθηκε φαίνεται και στην **Εικόνα 6-3**. Λαμβάνοντας υπόψη τις ευαισθησίες του προβλήματος θεωρήθηκε αναγκαίο να γίνει πύκνωση του πλέγματος σε περιοχές που μπορεί να

υπάρχουν μεγαλύτερες μεταβολές των μεγεθών όπως είναι οι επιφάνειες εισόδου του υδρογόνου καθώς και η οροφή για τους ίδιους λόγους που αναφέρθηκαν και στο προηγούμενο κεφάλαιο.

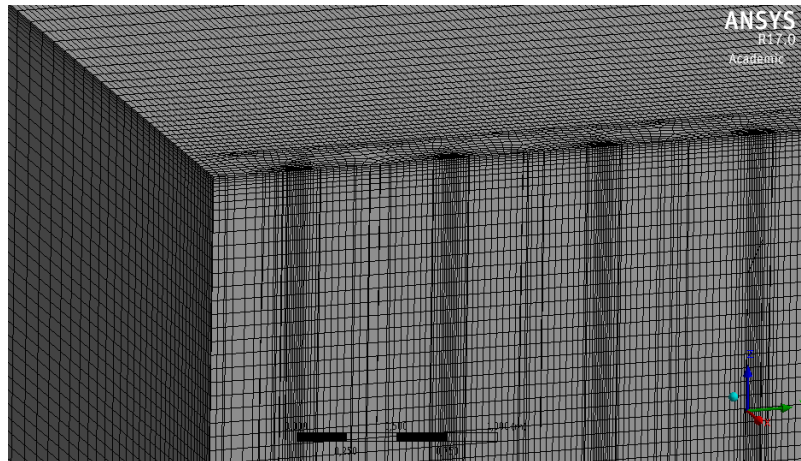


Εικόνα 6-3: Διακριτοποίηση χώρου φόρτισης συσσωρευτών

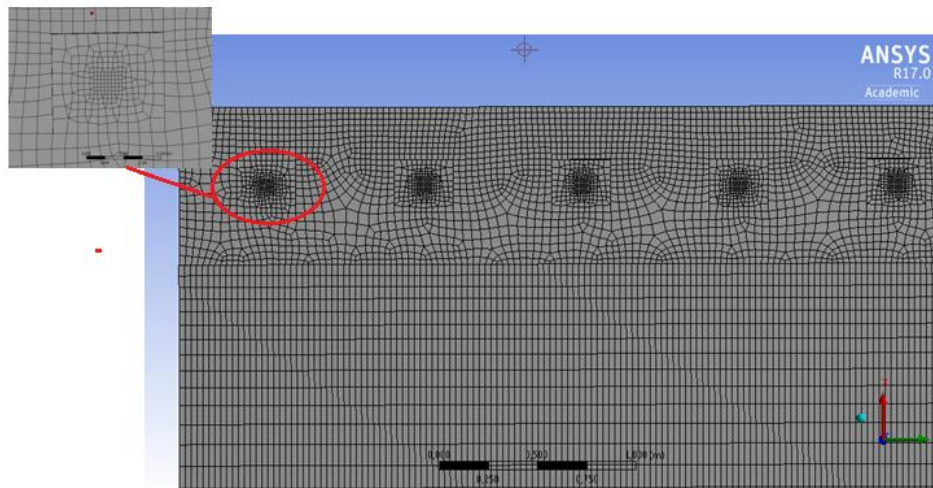
Οι εικόνες που ακολουθούν δείχνουν την τοπική πύκνωση που έγινε στις επιφάνειες ενδιαφέροντος σε τομή κατά τους άξονες y , x , z αντίστοιχα.



Εικόνα 6-4: Τοπική πύκνωση στις επιφάνειες εισόδου του υδρογόνου – Τομή κατά τον άξονα y



Εικόνα 6-5: Τοπική πύκνωση στις επιφάνειες εισόδου του υδρογόνου – Τομή κατά τον άξονα x



Εικόνα 6-6: Τοπική πύκνωση στις επιφάνειες εισόδου του υδρογόνου – Τομή κατά τον άξονα z

6.2.3 Επιλογή Μοντέλου

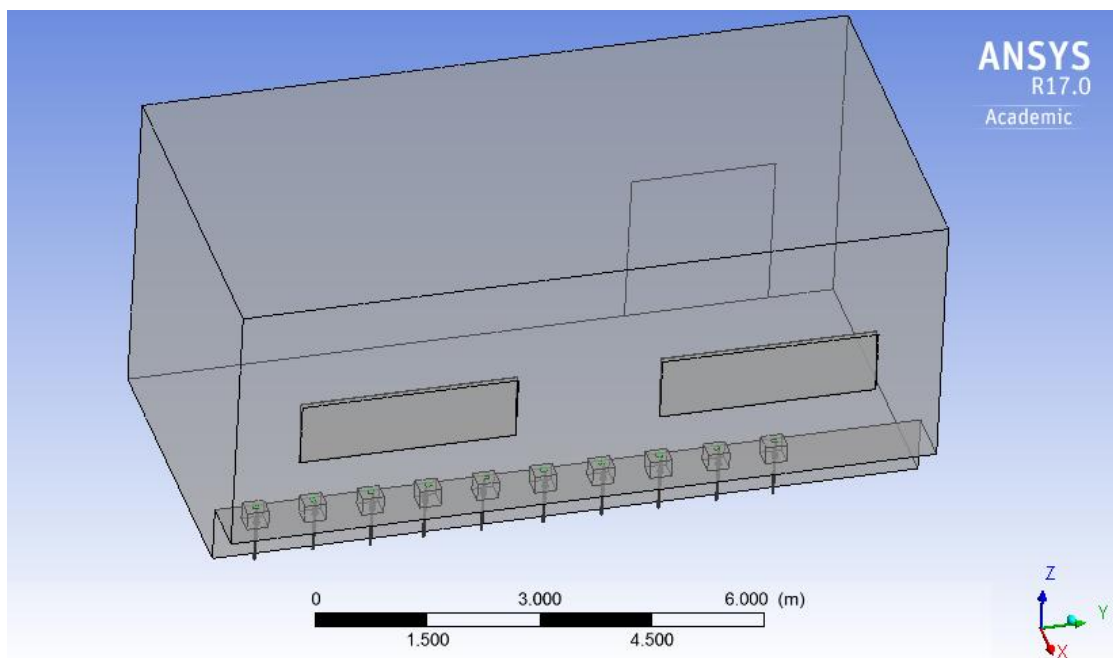
Η προσομοίωση της μεταφοράς μάζας τόσο κατά την έκλυση όσο και κατά την διασπορά του υδρογόνου, έγινε με χρήση του μοντέλου που αναπτύχθηκε και πιστοποιήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, με τη βοήθεια του λογισμικού ANSYS CFX 17.0.

- Ιδιότητες ροής

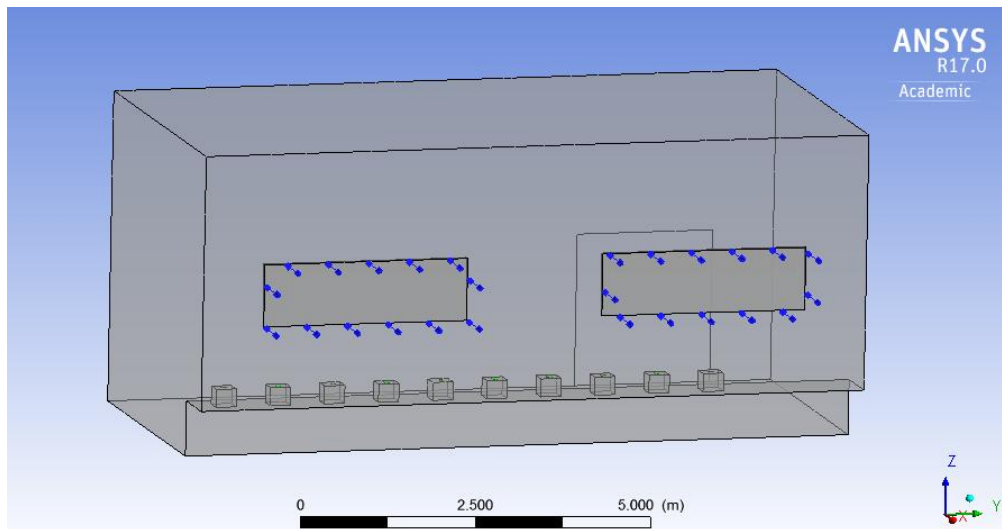
Όπως και στην περίπτωση του validation έτσι και στην μελέτη περίπτωσης το μείγμα θεωρήθηκε μεταβλητής σύνθεσης (variable composition mixture), ενώ τόσο ο αέρας όσο και το υδρογόνο που χρησιμοποιήθηκαν για την δημιουργία του μείγματος θεωρήθηκαν ιδανικά αέρια. Στην μοντελοποίηση λήφθηκε υπόψη η επίδραση της βαρύτητας $-9,81 \text{ m/s}^2$ κατά τον κατακόρυφο άξονα z. Το αρνητικό πρόσημο οφείλεται στην αντίθετη κατεύθυνση της ροής σε σχέση με το διάνυσμα της βαρύτητας. Η πυκνότητα αναφοράς λήφθηκε 1.2 kg/m^3 (για τον αέρα που υπάρχει ήδη στον χώρο) και η πίεση αναφοράς 1 atm . Η θερμοκρασία σε κάθε περίπτωση διατηρείται σταθερή και ίση με $T=25 \text{ }^\circ\text{C}$.

- Οριακές συνθήκες

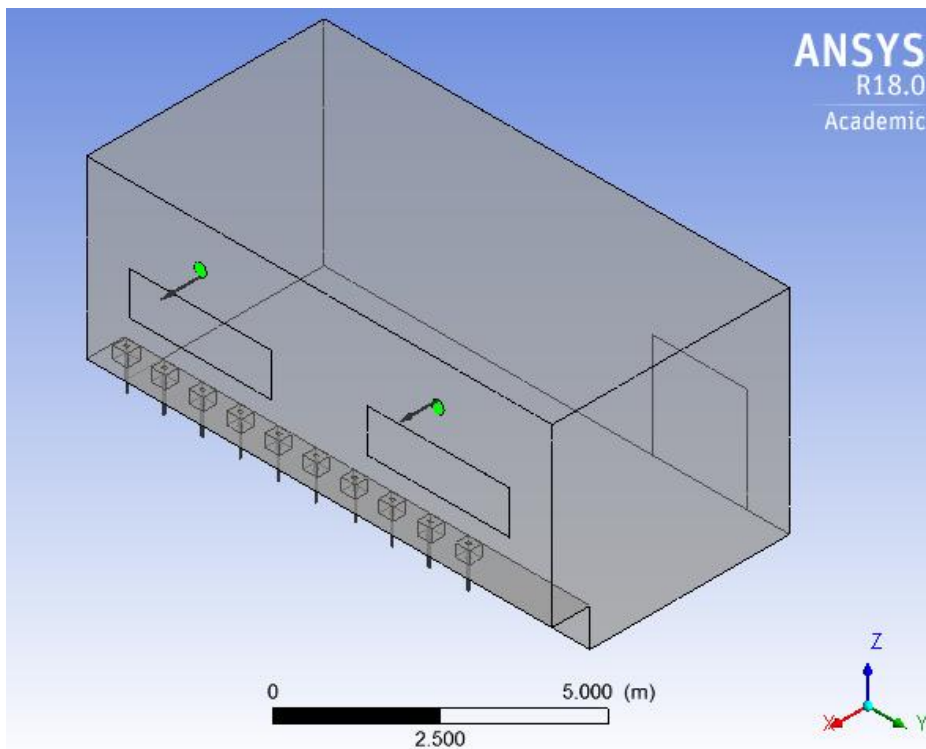
Για τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν, έγινε προσομοίωση ενός χρονικά μη μεταβαλλόμενου (steady state) προβλήματος λαμβάνοντας υπόψιν ότι κατά την φόρτιση των συσσωρευτών, η έκλυση του υδρογόνου είναι συνεχής. Ως οριακές συνθήκες εισόδου λήφθησαν οι μικρότερες επιφάνειες ($0,0045\text{m}^2$ έκαστη), που βρίσκονται στο πάνω μέρος κάθε συσσωρευτή με παροχή μάζας $Q_{\text{battery}}=0,012369\text{ g}_{\text{H}_2}/\text{s}$ από κάθε συσσωρευτή όπως υπολογίστηκε και από την Εξίσωση 6-2. Οι επιφάνειες εισόδου απεικονίζονται στην **Εικόνα 6-7**. Η συγκεκριμένη παροχή αντιστοιχεί σε κατακόρυφη ταχύτητα εισόδου $U_w=0,034\text{m/s}$, για επιφάνεια εισόδου $0,0045\text{m}^2$ και πυκνότητα υδρογόνου $0,0868\text{kg/m}^3$. Επομένως εξαιτίας της χαμηλής ταχύτητας εξόδου του υδρογόνου από κάθε συσσωρευτή, η ένταση τύρβης θεωρήθηκε χαμηλή 1%. Επιπρόσθετα τα τοιχώματα του δωματίου καθώς και το δάπεδο θεωρήθηκαν λείες επιφάνειες. Στα ανοίγματα (παράθυρα) επιβλήθηκαν ανοιχτές οριακές συνθήκες (opening) όπως φαίνεται και στην **Εικόνα 6-8**, με πίεση $P_{\text{atm}}=1\text{ atm}$, θερμοκρασία $T_{\text{atm}}=20\text{ }^\circ\text{C}$ και περιεχόμενο συστατικό τον ατμοσφαιρικό αέρα. Ως opening στο ANSYS νοούνται οι επιφάνειες εισόδου-εξόδου όπου το ρευστό μπορεί να εισέρχεται και να εξέρχεται. Επειδή δεν είναι γνωστή ακριβώς η κατεύθυνση της ροής, το πρόγραμμα ξεκινάει την επίλυση και στην πορεία, ανάλογα με τη μορφή της ροής "αποφασίζει" αν η ροή εισέρχεται ή θα εξέρχεται. Ως οριακές συνθήκες εξόδου λήφθησαν οι κυκλικές επιφάνειες που βρίσκονται πάνω από κάθε άνοιγμα (παράθυρο) με παροχή μάζας $Q=212,04\text{ g}_{\text{mixture}}/\text{s}$ όπως φαίνεται και στην **Εικόνα 6-9**. Η συγκεκριμένη παροχή αντιστοιχεί σε ταχύτητα εξόδου $U_w=2,58\text{m/s}$, για επιφάνεια εξόδου $0,049\text{m}^2$ και πυκνότητα μίγματος $1,19\text{ kg/m}^3$. Επομένως εξαιτίας της χαμηλής ταχύτητας εξόδου του μίγματος από κάθε ανεμιστήρα, η ένταση τύρβης θεωρήθηκε 5%.



Εικόνα 6-7: Οριακή συνθήκη εισόδου



Εικόνα 6-8: Opening επιφάνειες



Εικόνα 6-9: Οριακή συνθήκη εξόδου

- Μοντέλο τύρβης

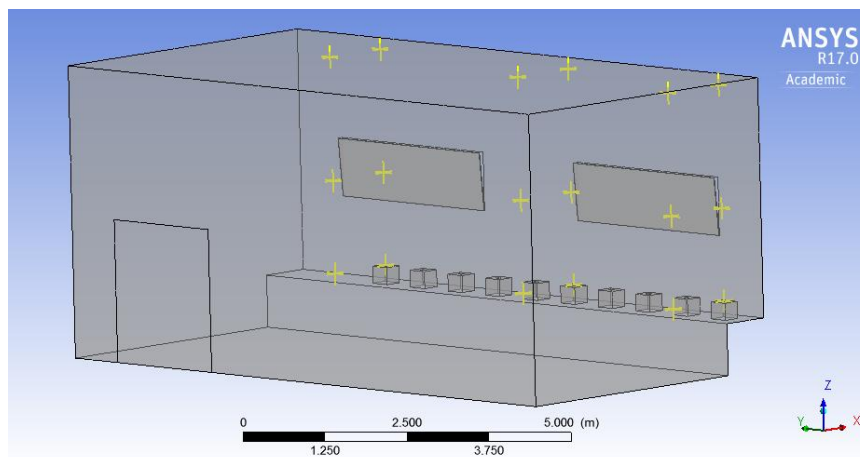
Χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο τύρβης SST καθότι ήταν το αποτέλεσμα της παραμετρικής μελέτης του κεφαλαίου 5.

- Κριτήριο σύγκλισης

Για την υπολογιστική επίλυση του προβλήματος χρησιμοποιήθηκε σχήμα υψηλής ανάλυσης (High Resolution Scheme) και σχήμα διακριτοποίησης πρώτης τάξης για την μοντελοποίηση της τύρβης. Ως κριτήριο για τον τερματισμό του επιλύτη επιλέχθηκε κατώτατο όριο υπολοίπου (residual) $RMS=10^{-5}$ και μέγιστος αριθμός επαναλήψεων 2500.

- Σημεία παρακολούθησης (monitor points)

Ως σημεία παρακολούθησης διαφόρων μεγεθών (κλάσμα μάζας/μολε υδρογόνου, ταχύτητες, συγκεντρώσεις) ορίστηκαν σε τρία διαφορετικά ύψη (πάνω από την πηγή υδρογόνου, στο μέσο του δωματίου και λίγο χαμηλότερα από την οροφή) στο οριζόντιο επίπεδο που τέμνει τις εισόδους των συσσωρευτών στο κέντρο, καθώς και στο παράλληλο με αυτό επίπεδο προς το κέντρο του δωματίου όπως απεικονίζεται και στην **Εικόνα 6-10**.



Εικόνα 6-10: Σημεία παρακολούθησης (monitor points)

6.3 Παραμετρική μελέτη – Περιπτώσεις που μελετήθηκαν

Στον **Πίνακα 6-1** που ακολουθεί παρουσιάζονται συνοπτικά τα διαφορετικά σενάρια – περιπτώσεις που μελετήθηκαν προκειμένου να διαπιστωθεί η επίδραση ορισμένων παραμέτρων στη συγκέντρωση του υδρογόνου στο χώρο φόρτισης συσσωρευτών. Μελετήθηκαν συνολικά έξι διαφορετικές περιπτώσεις μεταβάλλοντας τον αριθμό των συσσωρευτών, τη θερμοκρασία του χώρου και τα ανοίγματα που υπάρχουν στον χώρο.

Πίνακας 6-1: Διαφορετικές περιπτώσεις – σενάρια που μελετήθηκαν

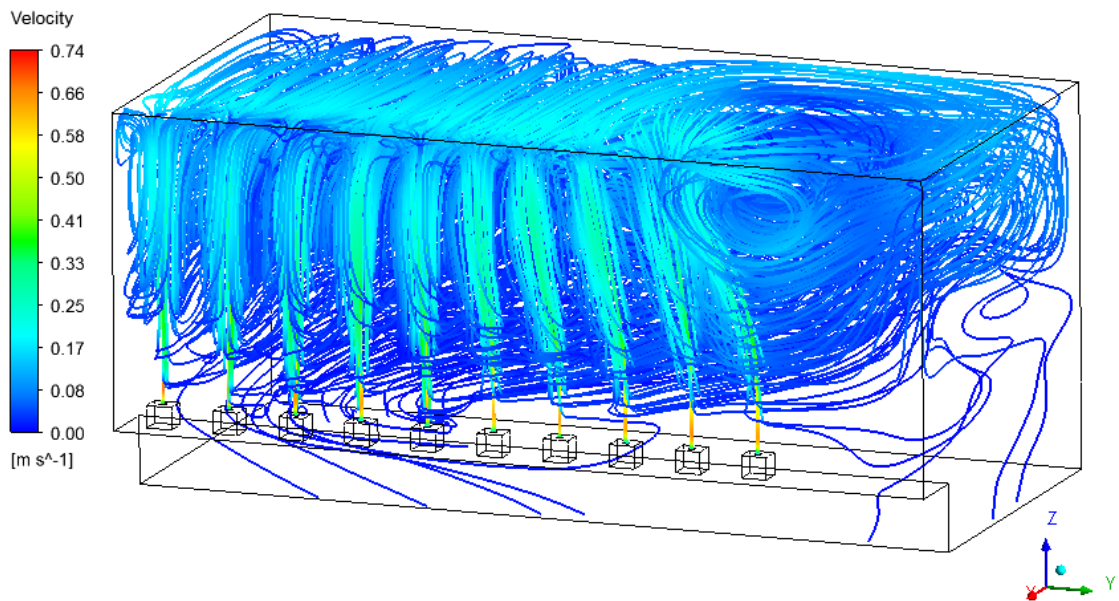
A/A	Test Case	Αριθμός Συσσωρευτών	Θερμοκρασία χώρου Tamb (°C)	Αερισμός
1	Όλα κλειστά	10	25	-
2	Όλα κλειστά	12	25	
3	Όλα κλειστά	10	35	
4	Παράθυρα σε ανάκλιση - επιφάνεια ανοιγμάτων 0.612 m ²	10	25	Φυσικός
5	Παράθυρα σε ανάκλιση - επιφάνεια ανοιγμάτων 0.1.78 m ²	10	25	Φυσικός
6	“Ανεμιστήρες”	10	25	Τεχνητός

6.4 Υπολογιστικά αποτελέσματα – Ροϊκό πεδίο – Πεδίο συγκεντρώσεων

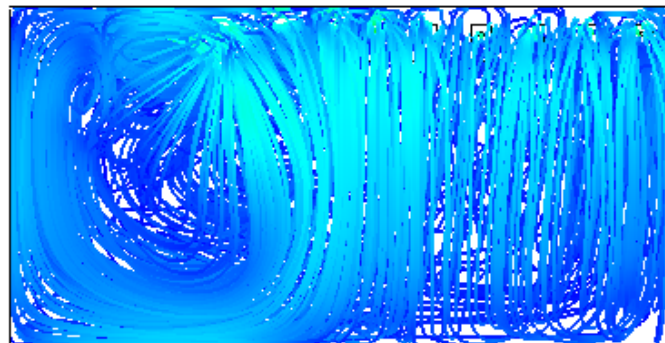
Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του πεδίου ροής του μείγματος αέρα – αέριου υδρογόνου που προέκυψαν εφαρμόζοντας το υπολογιστικό μοντέλο που αναπτύχθηκε και πιστοποιήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο για την κάθε περίπτωση του **Πίνακας 6-1**.

6.4.1 Περίπτωση 1: Κλειστός χώρος στους 25°C

Στην **Εικόνα 6-11** παρουσιάζονται οι γραμμές ροής του αέριου υδρογόνου στο εσωτερικό του χώρου φόρτισης συσσωρευτών. Το υδρογόνο φαίνεται να εισέρχεται στο χώρο με χαμηλή ταχύτητα 0,034m/s, ανυψώνεται και προσκρούει στην οροφή με ταχύτητα 0.098m/s περίπου. Εκεί οι γραμμές ροής σαρώνουν την οροφή κατά τον άξονα x μέχρι να φτάσουν στο απέναντι τοίχωμα όπου αρχίζουν να κατεβαίνουν και να επιστρέφουν προς το επίπεδο yz όπου βρίσκονται οι συσσωρευτές και εν συνεχεία ανακυκλοφορούν με χαμηλές ταχύτητες σε όλο τον χώρο.



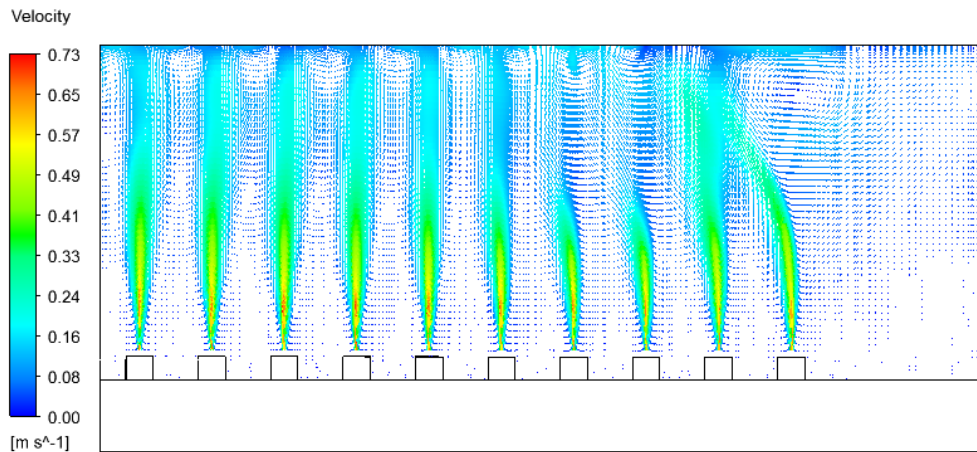
Εικόνα 6-11: Οι γραμμές ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C



Εικόνα 6-12: Κάτοψη των γραμμών ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C

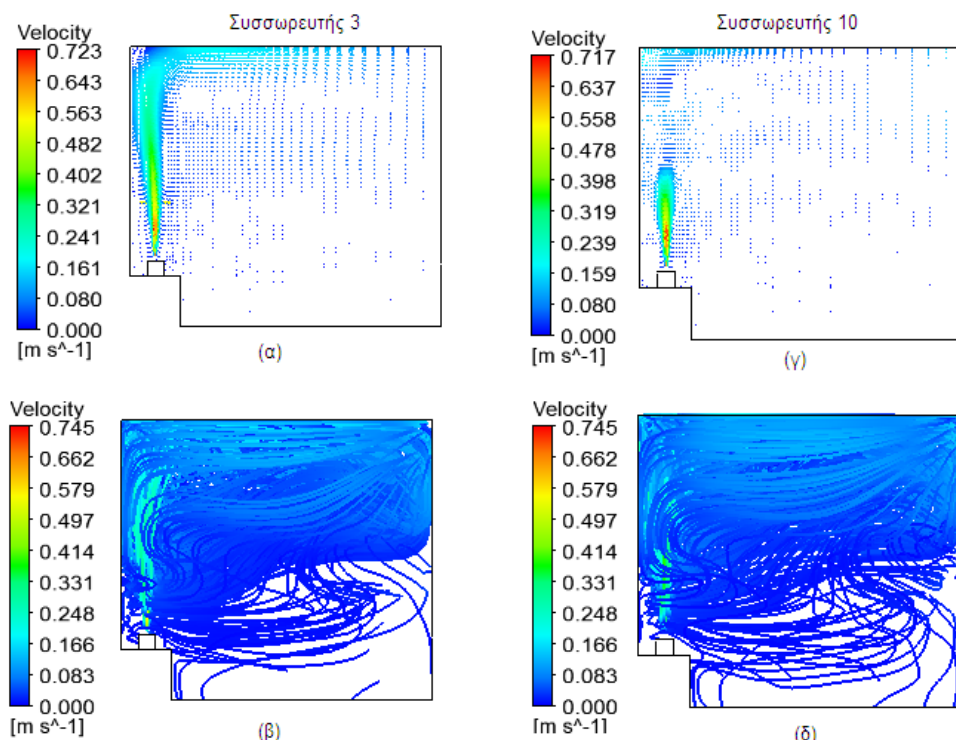
Αξιοσημείωτη είναι η αλλαγή στην κατεύθυνση προς την οποία ανυψώνεται το αέριο υδρογόνο από τον έβδομο συσσωρευτή και μετά και κυρίως στον τελευταίο. Στις γραμμές ροής του τελευταίου συσσωρευτή παρατηρείται μια κλίση προς τους υπόλοιπους συσσωρευτές και όχι προς την οροφή όπως θα ήταν αναμενόμενο. Όπως είναι γνωστό η κατεύθυνση της ροής είναι πάντα από τις υψηλότερες συγκεντρώσεις προς τις χαμηλότερες. Στην συγκεκριμένη περίπτωση το πιο λογικό θα ήταν οι γραμμές ροής να ανυψωθούν και να κινηθούν προς τον κενό χώρο όπου οι συγκεντρώσεις του υδρογόνου είναι χαμηλότερες. Παρόλα αυτά όμως συμβαίνει το αντίθετο. Οι γραμμές ροής του 10ου συσσωρευτή ανυψώνονται παρουσιάζοντας μια έντονη κλίση προς τους υπόλοιπους συσσωρευτές, προσκρούουν στην οροφή και ενώ αρχίζουν να κινούνται προς τα πίσω όπως και οι γραμμές ροής των υπόλοιπων συσσωρευτών, τελικά κατευθύνονται προς τον κενό χώρο όπως δείχνει και η **Εικόνα 6-12**. Ο κενός χώρος λοιπόν σε συνδιασμό με την ανωστική ροή έχει ως αποτέλεσμα να δημιουργείται ένας στροβιλισμός που προκαλεί έντονη ανακυκλοφορία.

Το πεδίο ροής μπορεί να κατανοηθεί και από την **Εικόνα 6-13** όπου παρουσιάζονται τα διανύσματα ταχυτήτων, στο επίπεδο που είναι τοποθετημένοι οι συσσωρευτές, δηλαδή στο yz για $x=2,1\text{m}$ (από το κέντρο του δωματίου).



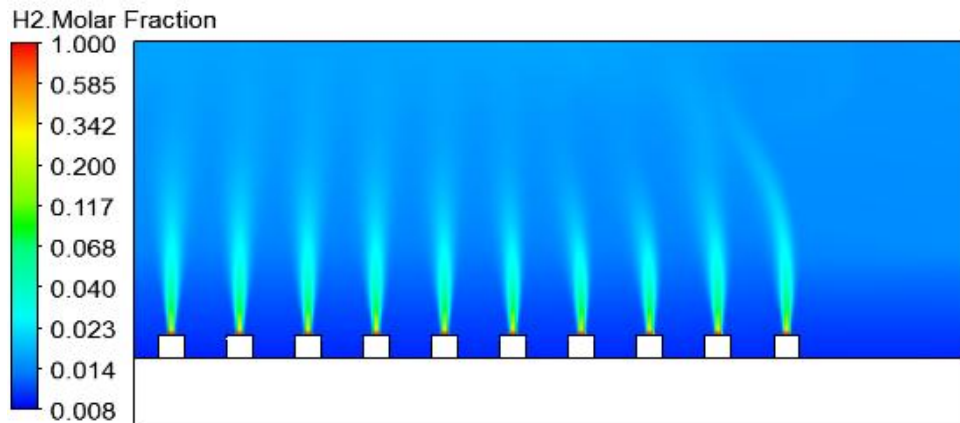
Εικόνα 6-13: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz , σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C

Στην **Εικόνα 6-14** φαίνονται σε τομή, στο επίπεδο yz που παίρνά από το κέντρο των συσσωρευτών 3 και 10, τα διανύσματα ταχυτήτων και οι γραμμές ροής.



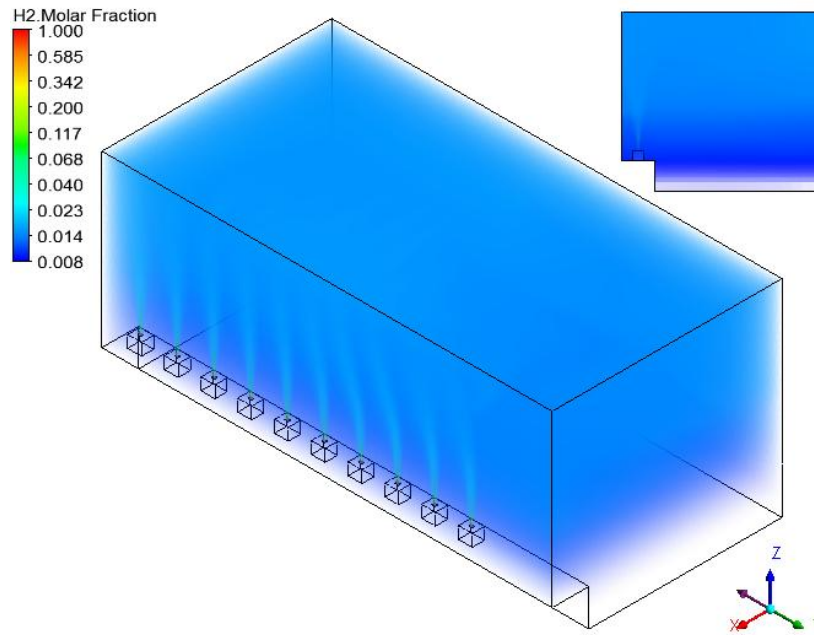
Εικόνα 6-14: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής στο επίπεδο xz σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C (α),(β) για το συσσωρευτή 3 και (γ),(δ) για το συσσωρευτή 10 αντίστοιχα

Η **Εικόνα 6-15** παρουσιάζει τις ισοεπιφάνειες του γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz όπου εδράζονται οι συσσωρευτές. Είναι φανερό πως το υδρογόνο εξερχόμενο από την πηγή στο 100%, καθώς ανέρχεται και αναμιγνύεται με τον αέρα του χώρου η συγκέντρωσή του ελαττώνεται μέχρι να φτάσει στην οροφή. Παρατηρείται ότι η συγκέντρωση κατόγκον του H_2 φτάνει ή και ξεπερνάει το κατώτερο όριο εκρηκτικότητας (LEL) 4%, για την περιοχή πάνω από τους συσσωρευτές και μέχρι τα 1,7m περίπου (όσο και το ύψος ενός μέσου ανθρώπου). Από την **Εικόνα 6-15** είναι ξεκάθαρο ότι στο σύνολο σχεδόν του επιπέδου yz , η συγκέντρωση κατόγκον του H_2 κυμαίνεται μεταξύ 1% - 2%.



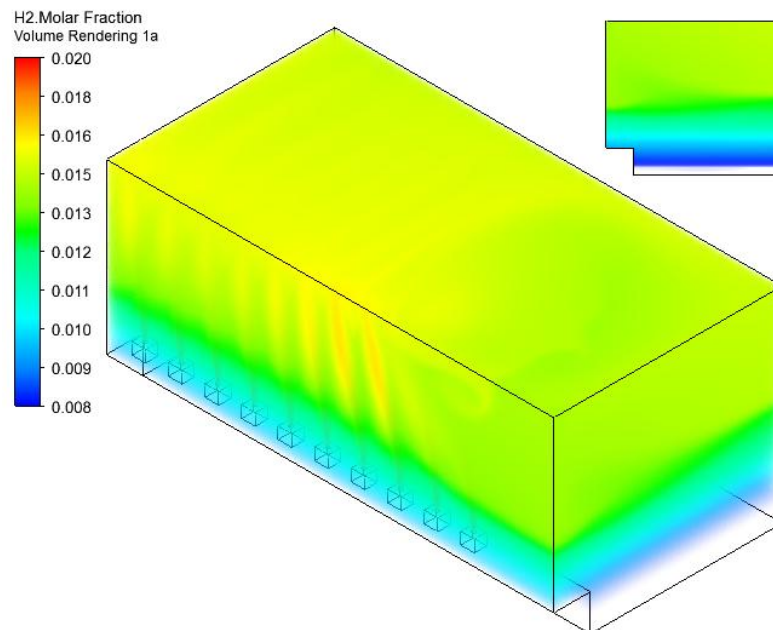
Εικόνα 6-15: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz , σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους $25^{\circ}C$

Η **Εικόνα 6-16** απεικονίζει το γραμμομοριακό κλάσμα H_2 στον συνολικό όγκο του χώρου που φορτίζονται οι συσσωρευτές. Είναι ξεκάθαρο ότι στο σύνολο σχεδόν του χώρου, η συγκέντρωση κατόγκον του H_2 κυμαίνεται μεταξύ 0.08% - 2%. Συγκεκριμένα όπως φαίνεται και στην πλάγια όψη της **Εικόνα 6-16** η συγκέντρωση έως το ύψος των συσσωρευτών είναι 0.8% και αυξάνει σταδιακά μέχρι την οροφή στο 1.6% περίπου.



Εικόνα 6-16: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C

Στην **Εικόνα 6-17** απεικονίζεται η συγκέντρωση του υδρογόνου από 0.8% έως 2% προκειμένου να είναι πιο διακριτή η διαστρωμάτωσή της.



Εικόνα 6-17: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C για ποσοστό από 0.8% έως 2%

6.5 Παραμετρική μελέτη

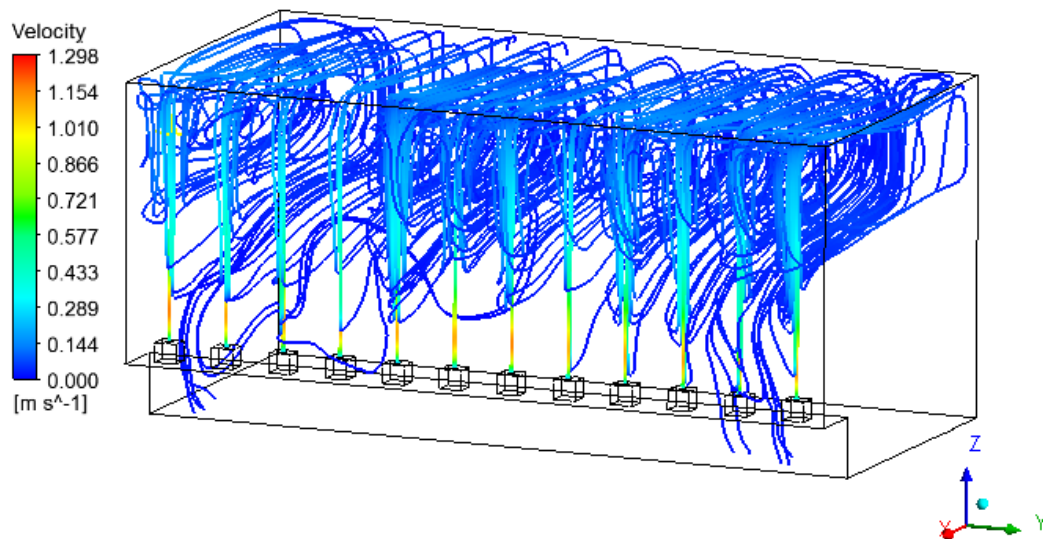
Στην παρούσα ενότητα μελετάται η επίδραση διαφόρων παραμέτρων που επηρεάζουν την συγκέντρωση του υδρογόνου στον χώρο όπου φορτίζονται οι συσσωρευτές.

Ένας παράγοντας που εξετάζεται είναι ο αριθμός των συσσωρευτών που φορτίζονται, η θερμοκρασία του χώρου αφού θεωρείται ότι επηρεάζει αρνητικά την συγκέντρωση του υδρογόνου⁶, καθώς φυσικά και ο αερισμός προκειμένου να διαπιστωθεί εάν με την χρήση φυσικού ή τεχνητού αερισμού αντιμετωπίζεται το πρόβλημα της συγκέντρωσης υδρογόνου και κατ'επέκταση η υπέρβαση του ορίου 0,8%.

6.5.1 Περίπτωση 2: Αριθμός συσσωρευτών 12 - Επίδραση αριθμού συσσωρευτών

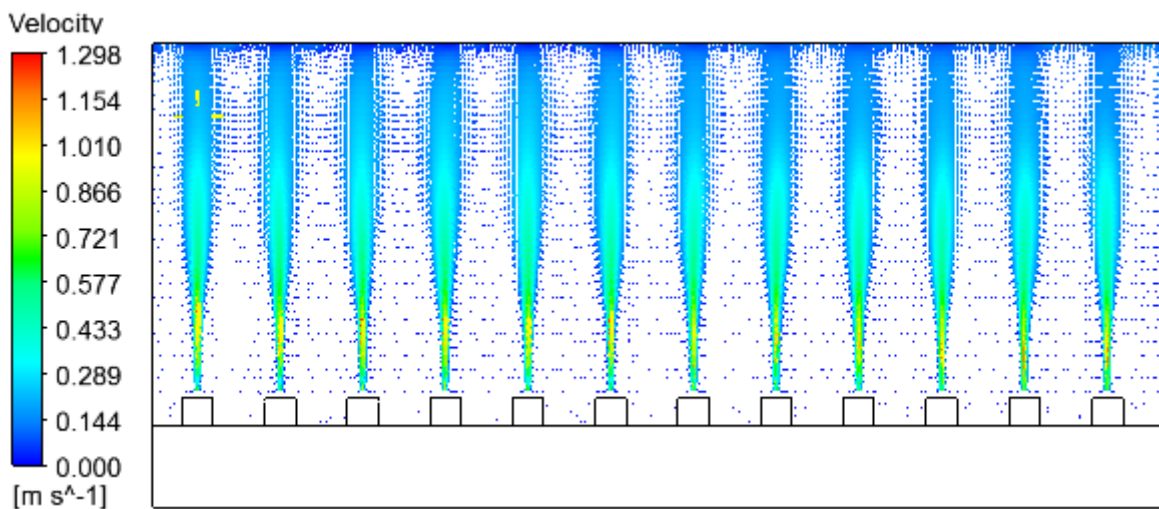
Προκειμένου να διαπιστωθεί η επίδραση του αριθμού των συσσωρευτών στη συγκέντρωση του υδρογόνου πραγματοποιήθηκε μια προσομοίωση αυξάνοντας τον αριθμό των συσσωρευτών στους 12 και διατηρώντας σταθερά τα υπόλοιπα μεγέθη.

Από την **Εικόνα 6-18** φαίνονται οι γραμμές ροής οι οποίες ανέρχονται προς την οροφή, την σαρώνουν κατά τον άξονα x μέχρι να φτάσουν στο απέναντι τοίχωμα όπου αρχίζουν να κατεβαίνουν και επιστρέφουν προς το επίπεδο yz όπου βρίσκονται οι συσσωρευτές και εν συνεχεία ανακυκλοφορούν με χαμηλές ταχύτητες σε όλο τον χώρο. Σε αυτήν την περίπτωση, σε αντίθεση με την περίπτωση των 10 συσσωρευτών δεν παρατηρούνται έντονες ανακυκλοφορίες στον χώρο. ενώ η αλλαγή στην κατεύθυνση των γραμμών ροής και η κλίση προς τα αριστερά που εμφάνιζε ο 10ος συσσωρευτής (**Εικόνα 6-11**) δεν παρατηρείται έχοντας 12 συσσωρευτές αφού πλέον δεν υπάρχει κενός χώρος στο πλάϊ.



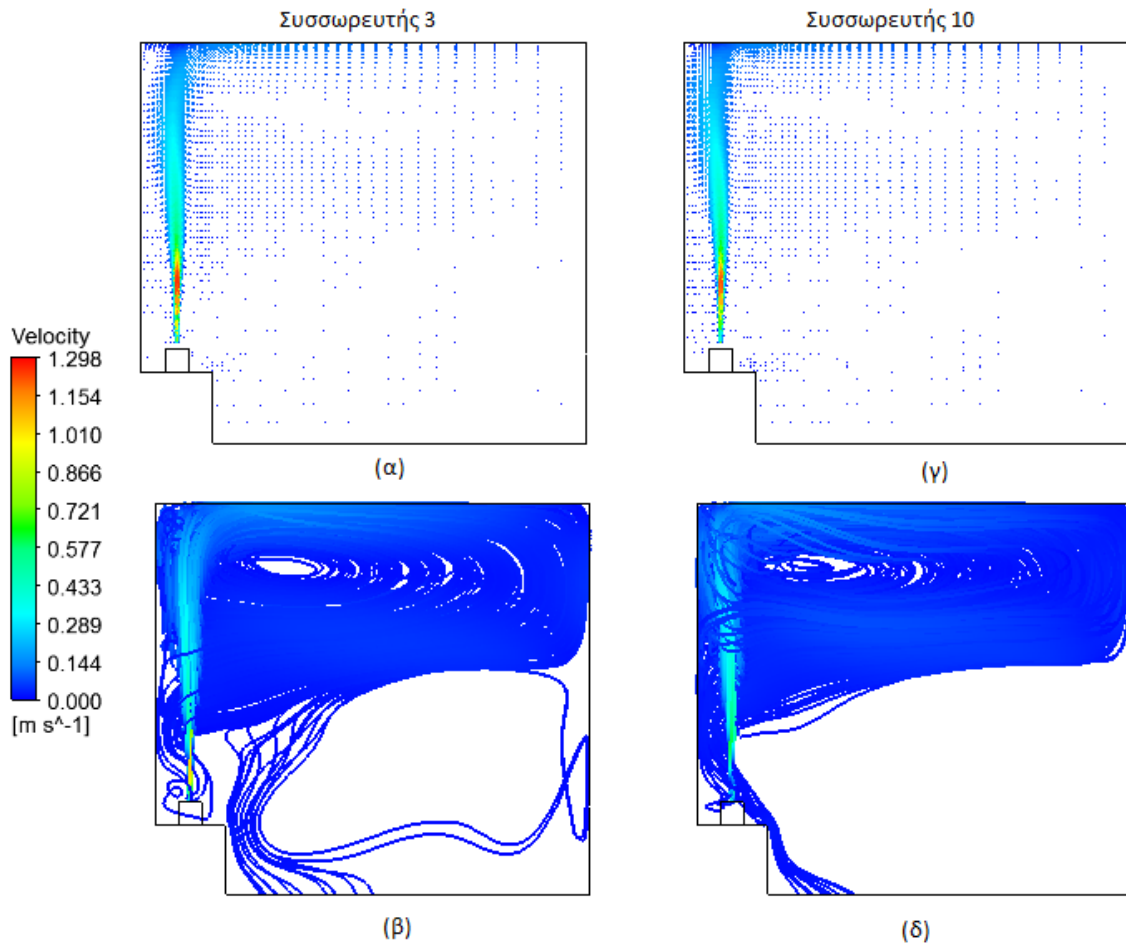
Εικόνα 6-18: Οι γραμμές ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης 12 συσσωρευτών στους 25°C

Το πεδίο ροής που προκύπτει για τους 12 συσσωρευτές φαίνεται και στην **Εικόνα 6-13** όπου παρουσιάζονται τα διανύσματα ταχυτήτων, στο επίπεδο που είναι τοποθετημένοι οι 12 συσσωρευτές, δηλαδή στο yz για $x=2,1\text{m}$ (από το κέντρο του δωματίου). Παρατηρούνται μεγαλύτερες ταχύτητες σε σχέση με την περίπτωση των 10 συσσωρευτών.



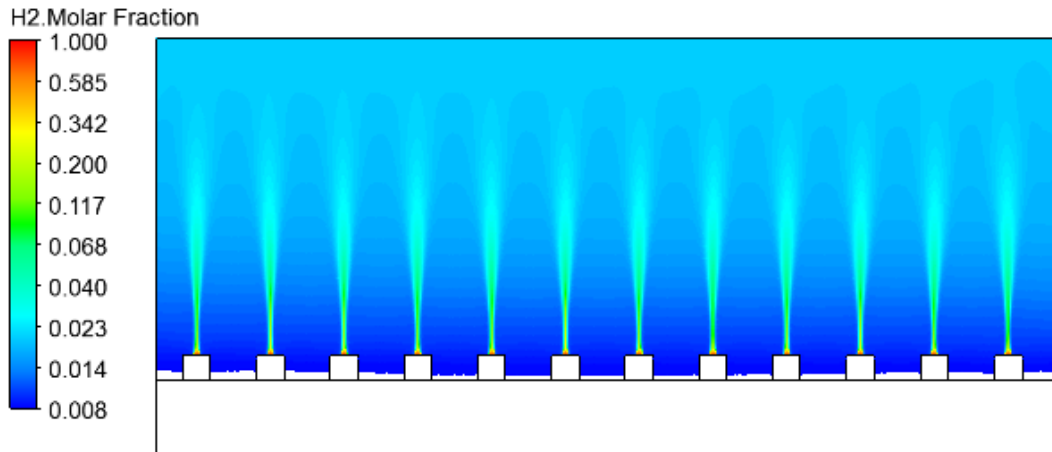
Εικόνα 6-19: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz , σε κλειστό χώρο φόρτισης 12 συσσωρευτών στους 25°C

Στην **Εικόνα 6-20** φαίνονται σε τομή, στο επίπεδο yz που παίρνει από το κέντρο των συσσωρευτών 3 και 10, τα διανύσματα ταχυτήτων και οι γραμμές ροής. Το πεδίο ροής τόσο για τον συσσωρευτή 3 όσο και για τον συσσωρευτή 10 δεν διαφέρει ιδιαίτερα σε σχέση με το πεδίο ροής της περίπτωσης των 10 συσσωρευτών όπου προέκυψαν σημαντικές διαφορές μεταξύ των συσσωρευτών 3 και 10.



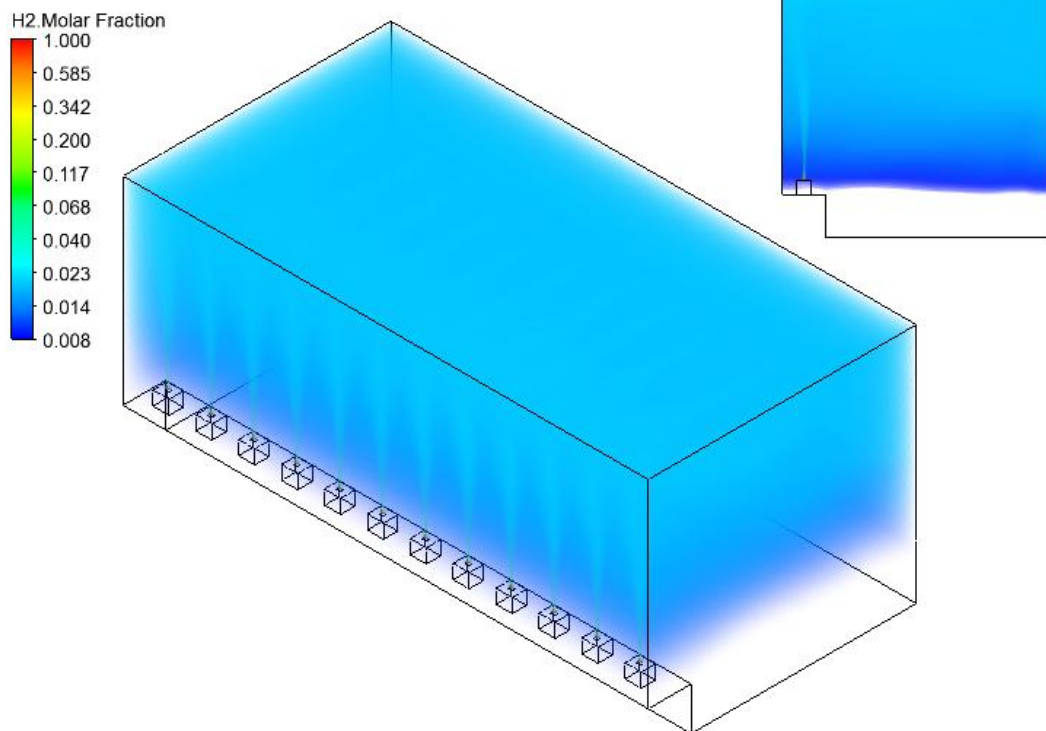
Εικόνα 6-20: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής στο επίπεδο xz σε κλειστό χώρο 12 φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C (α),(β) για το συσσωρευτή 3 και (γ),(δ) για το συσσωρευτή 10 αντίστοιχα

Η **Εικόνα 6-21** δείχνει ότι παρατηρείται αύξηση στις συγκεντρώσεις του υδρογόνου. Συγκεκριμένα η συγκέντρωση του υδρογόνου φτάνει στο 4% σε ύψος 2.3m σε σχέση με την περίπτωση των 12 συσσωρευτών όπου έφτανε το 4% στα 1,7m.



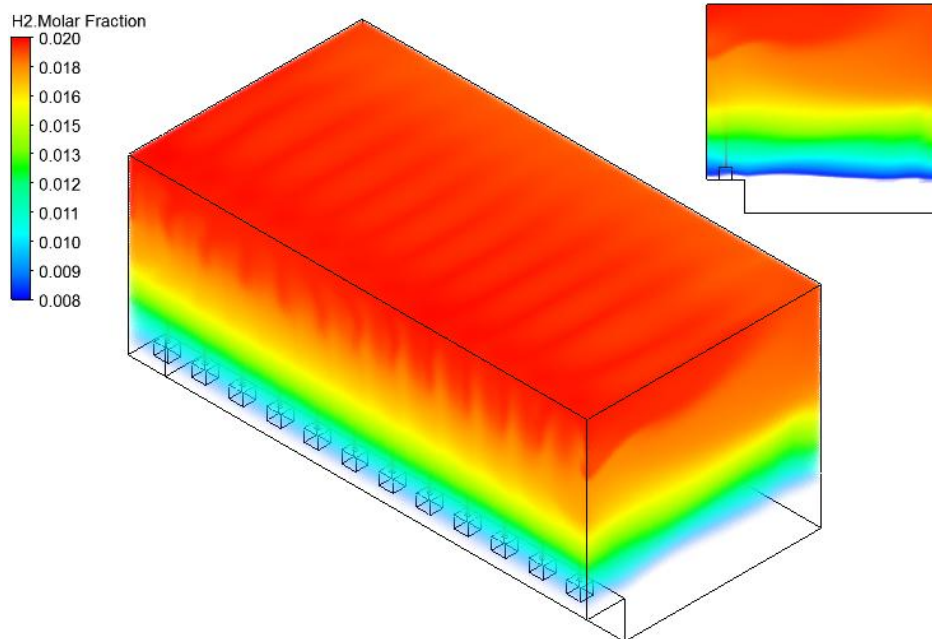
Εικόνα 6-21: Ισοεπιφάνειες γραμμομορικού κλάσματος H₂ στο επίπεδο yz, σε κλειστό χώρο φόρτισης 12 συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C

Από την **Εικόνα 6-22** φαίνεται η αύξηση του υδρογόνου στο συνολικό όγκο του χώρου όπου η μεγαλύτερη συσσώρευση υδρογόνου σε μεγαλύτερη ύψη έχει ως αποτέλεσμα από το ύψος των συσσωρευτών και κάτω να μην υπάρχει υδρογόνο.



Εικόνα 6-22: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C

Η **Εικόνα 6-23** δείχνει ότι το υδρογόνο που συσσωρεύεται κυρίως στην οροφή φτάνει το 2%.

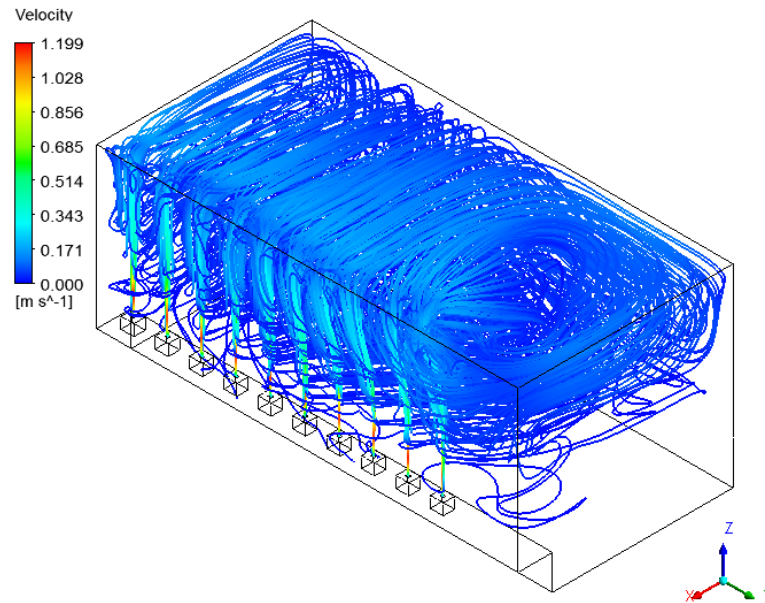


Εικόνα 6-23: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H₂ σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) στους 25°C για ποσοστό από 0.8% έως 2%

6.5.2 Περίπτωση 3: Κλειστός χώρος στους 35°C - Επίδραση θερμοκρασίας

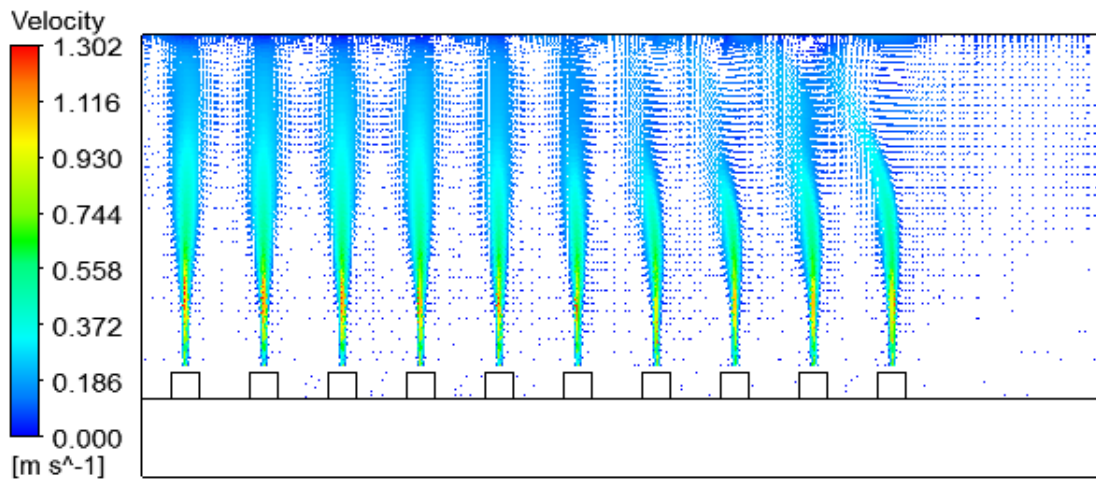
Προκειμένου να διαπιστωθεί η επίδραση της θερμοκρασίας στις συγκεντρώσεις του υδρογόνου πραγματοποιήθηκε μια προσομοίωση μεταβάλλοντας τη θερμοκρασία του χώρου από τους 25°C στους 35°C. Οι αυξημένες θερμοκρασίες είναι ένα σύνηθες πρόβλημα στο χώρο φόρτισης συσσωρευτών που μελετάται, καθότι κατά τη θερινή περίοδο οι θερμοκρασίες είναι πολύ υψηλές δεδομένου ότι δεν υπάρχει σύστημα κλιματισμού.

Στην **Εικόνα 6-24** παρουσιάζονται οι γραμμές ροής του αέριου υδρογόνου στο εσωτερικό του χώρου φόρτισης συσσωρευτών. Η διαδρομή που ακολουθούν οι γραμμές ροής δεν φαίνεται να διαφέρει ιδιαίτερα από την **Εικόνα 6-11**.

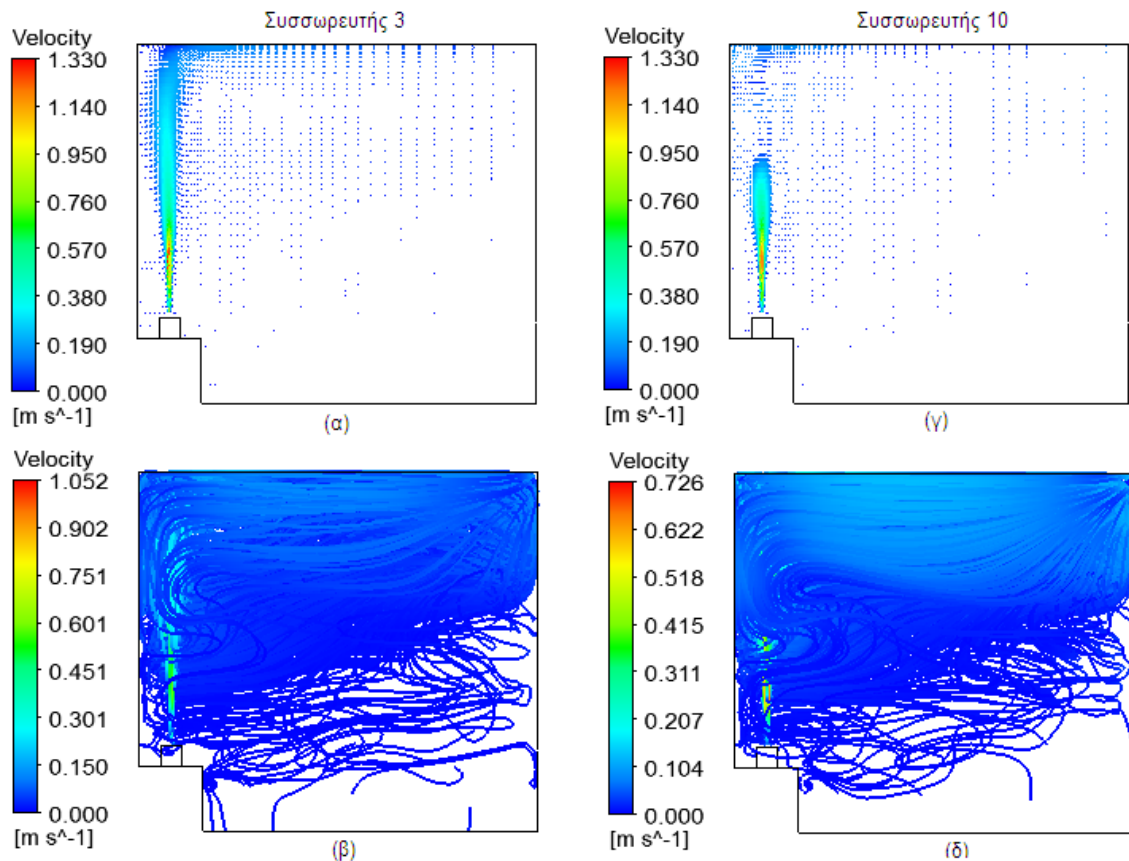


Εικόνα 6-24: Οι γραμμές ροής σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C

Το πεδίο ροής φαίνεται και από την **Εικόνα 6-25** όπου παρουσιάζονται τα διανύσματα ταχυτήτων, στο επίπεδο που είναι τοποθετημένοι οι συσσωρευτές, δηλαδή στο yz για $x=2,1\text{m}$. Το αέριο υδρογόνο εισέρχεται στον χώρο με πολύ χαμηλές ταχύτητες και στη συνέχεια καθώς ανέρχεται η ταχύτητα αυξάνει.

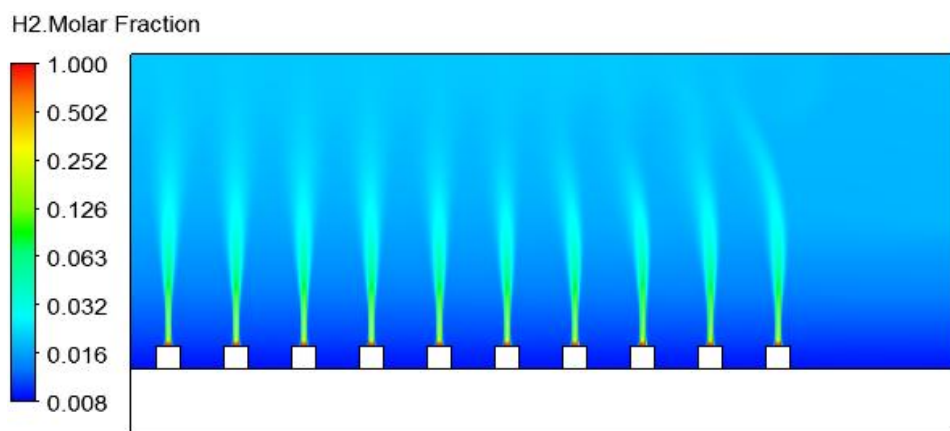


Εικόνα 6-25: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz , σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C



Εικόνα 6-26: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής στο επίπεδο xz σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C (α),(β) για το συσσωρευτή 3 και (γ),(δ) για το συσσωρευτή 10 αντίστοιχα

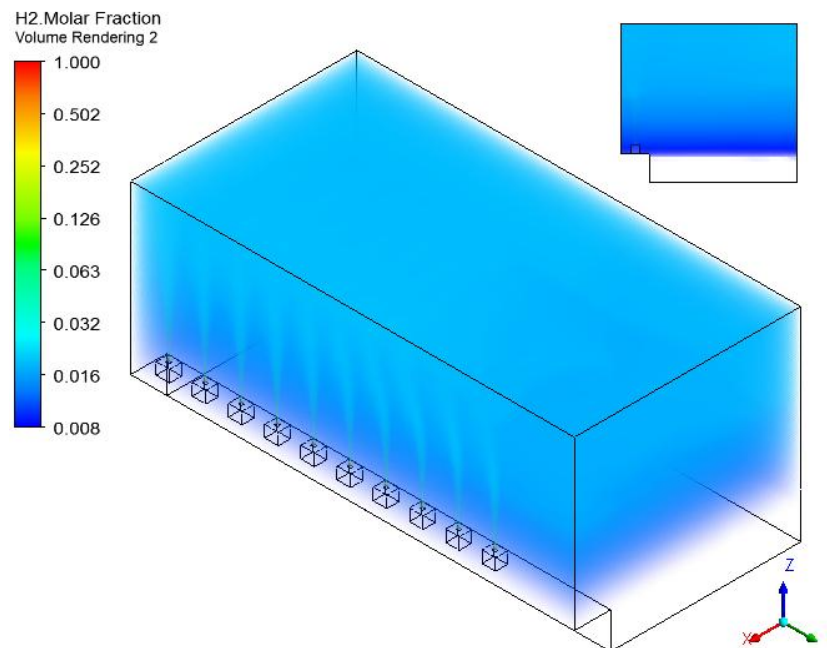
Από την **Εικόνα 6-27** φαίνεται ότι αυξάνοντας την θερμοκρασία του χώρου κατά 10°C η συγκέντρωση του υδρογόνου αυξήθηκε. Στο επίπεδο yz που περνά από το κέντρο των συσσωρευτών το ποσοστό του υδρογόνου φτάνει στο 15% περίπου σε ύψος 1.7m (όσο και το ύψος ενός μέσου ανθρώπου).



Εικόνα 6-27: Ισοεπιφάνειες γραμμομορικού κλάσματος H_2 στο επίπεδο xz για $\gamma=0m$ σε κλειστό

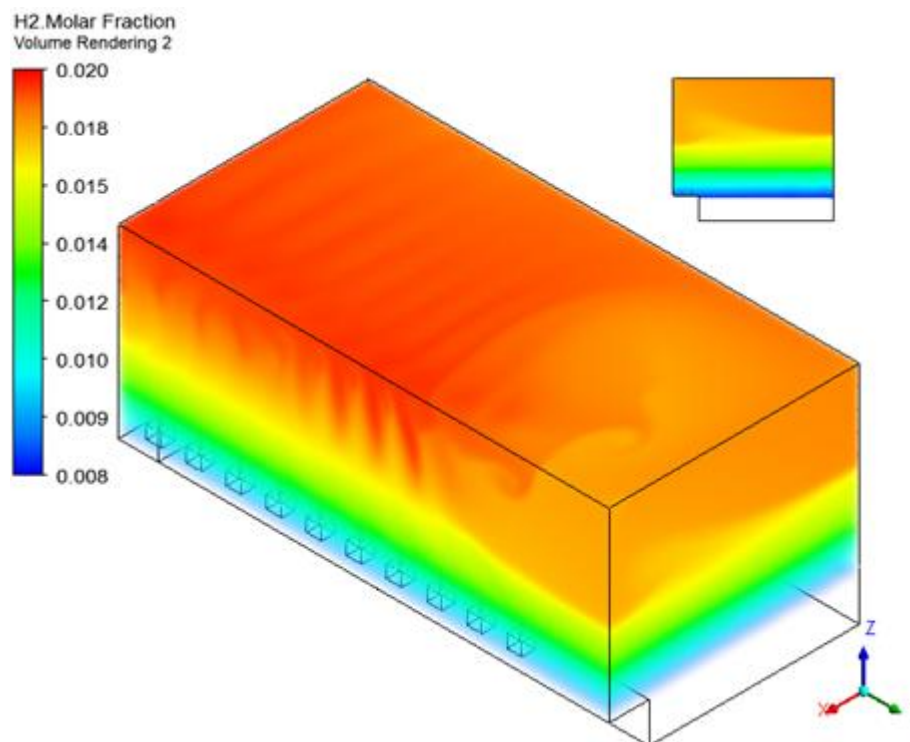
χώρο φόρτισης συσσωρευτών (χωρίς αερισμό) στους 35°C

Στην **Εικόνα 6-28** όπου απεικονίζεται το γραμμομοριακό κλάσμα H_2 σε ολόκληρο τον χώρο φόρτισης σε 35°C, φαίνεται ότι τα επίπεδα της συγκέντρωσης H_2 αυξάνουν. Πλέον η συγκέντρωση του H_2 έχει φτάσει το όριο 4% σε ύψος 2,4m περίπου πάνω από τους συσσωρευτές, ενώ ελλατώνεται στο 2% μέχρι τα 3,7m.



Εικόνα 6-28: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 35°C (χωρίς την ύπαρξη αερισμού)

Από την **Εικόνα 6-29** είναι ξεκάθαρο ότι η αύξηση της θερμοκρασίας επιδρά αρνητικά στη συγκέντρωση του υδρογόνου στο χώρο. Σε αυτήν την περίπτωση το υδρογόνο βρίσκεται σε ποσοστό 0.8% έως 1.1% περίπου στο επίπεδο των συσσωρευτών σε αντίθεση με την περίπτωση της χαμηλότερης θερμοκρασίας (25°C) της παραγράφου 6.4.1, όπου το υδρογόνο βρισκόταν σε ποσοστό 0.8% σε ακόμα χαμηλότερο ύψος. Επίσης από το επίπεδο των συσσωρευτών έως και το μέσο του χώρου το ποσοστό κυμαίνεται από 1.1% έως 1.6% περίπου ενώ στην περίπτωση των 25°C το ποσοστό φτάνει έως το 1.4% περίπου. Τέλος από το μέσο ύψος του χώρου και πάνω το ποσοστό συγκέντρωσης του υδρογόνου κυμαίνεται στο 2% σε σύγκριση με την περίπτωση των 25°C όπου το ποσοστό έφτανε το 1.6%. Παρατηρείται δηλαδή μια αύξηση κατά 25% στη συγκέντρωση του υδρογόνου.



Εικόνα 6-29: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε κλειστό χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $35^\circ C$ (χωρίς την ύπαρξη αερισμού) για ποσοστό από 0,8% έως 2%

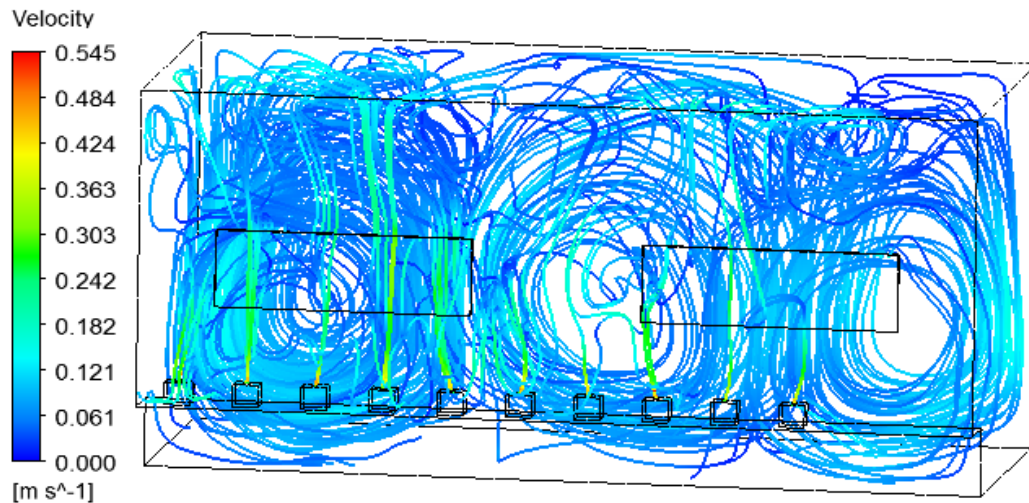
6.5.3 Περίπτωση 4: Παράθυρα σε ανάκλιση - Επίδραση φυσικού αερισμού

Αν ληφθούν υπόψιν τα αυστηρότερα όρια ασφαλείας που έχουν θεσπιστεί για χώρους φόρτισης συσσωρευτών⁸, τότε η συγκέντρωση υδρογόνου δεν πρέπει να υπερβαίνει το 0,8% κατ'όγκον (20% του LEL) στις περιοχές φόρτισης συσσωρευτών όπου εισέρχεται ανθρώπινο δυναμικό, όπως και η περίπτωση που μελετάται. Επομένως καθίσταται αναγκαία η ύπαρξη αερισμού για την διατήρηση της συγκέντρωσης κάτω από το 0,8%.

Επομένως προκειμένου να μελετηθεί αν με την ύπαρξη του αερισμού επιτυγχάνεται η αντιμετώπιση του προβλήματος της συγκέντρωσης H_2 στα ποσοστά που προέκυψαν από τις προηγούμενες ενότητες, εισάγεται το σενάριο ύπαρξης φυσικού αερισμού.

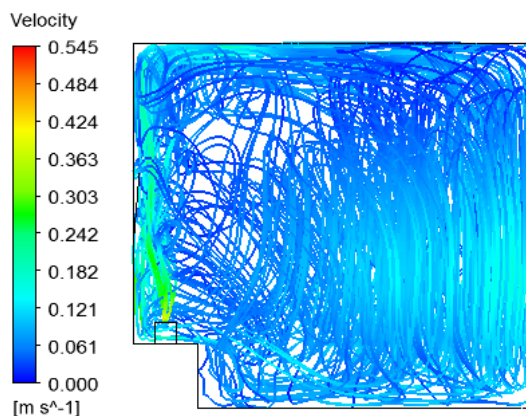
Αρχικά εξετάζεται το σενάριο ανοίγματος των παραθύρων στην θέση της ανάκλισης. Καθότι στον χώρο που μελετάται, δεν υπάρχει η δυνατότητα πλήρους ανοίγματος των παραθύρων (η ανάκλιση φτάνει μέχρι ένα ορισμένο σημείο) και επιπρόσθετα η φόρτιση των συσσωρευτών πρέπει να γίνεται τυπικά σε ένα εύρος θερμοκρασιών $+23^\circ C \pm 5^\circ C$, δηλαδή από τους $-18^\circ C$ έως τους $-28^\circ C$.

Στην **Εικόνα 6-30** φαίνονται οι γραμμές ροής του αέριου υδρογόνου στο εσωτερικό του χώρου φόρτισης συσσωρευτών. Η διαδρομή που ακολουθούν οι γραμμές ροής διαφέρει σημαντικά από τις προηγούμενες περιπτώσεις. Ανοίγοντας τα παράθυρα σε ανάκλιση 5° παρατηρείται ότι οι γραμμές ροής δημιουργούν τρεις μεγάλους στροβίλους στον υπόλοιπο κενό χώρο.



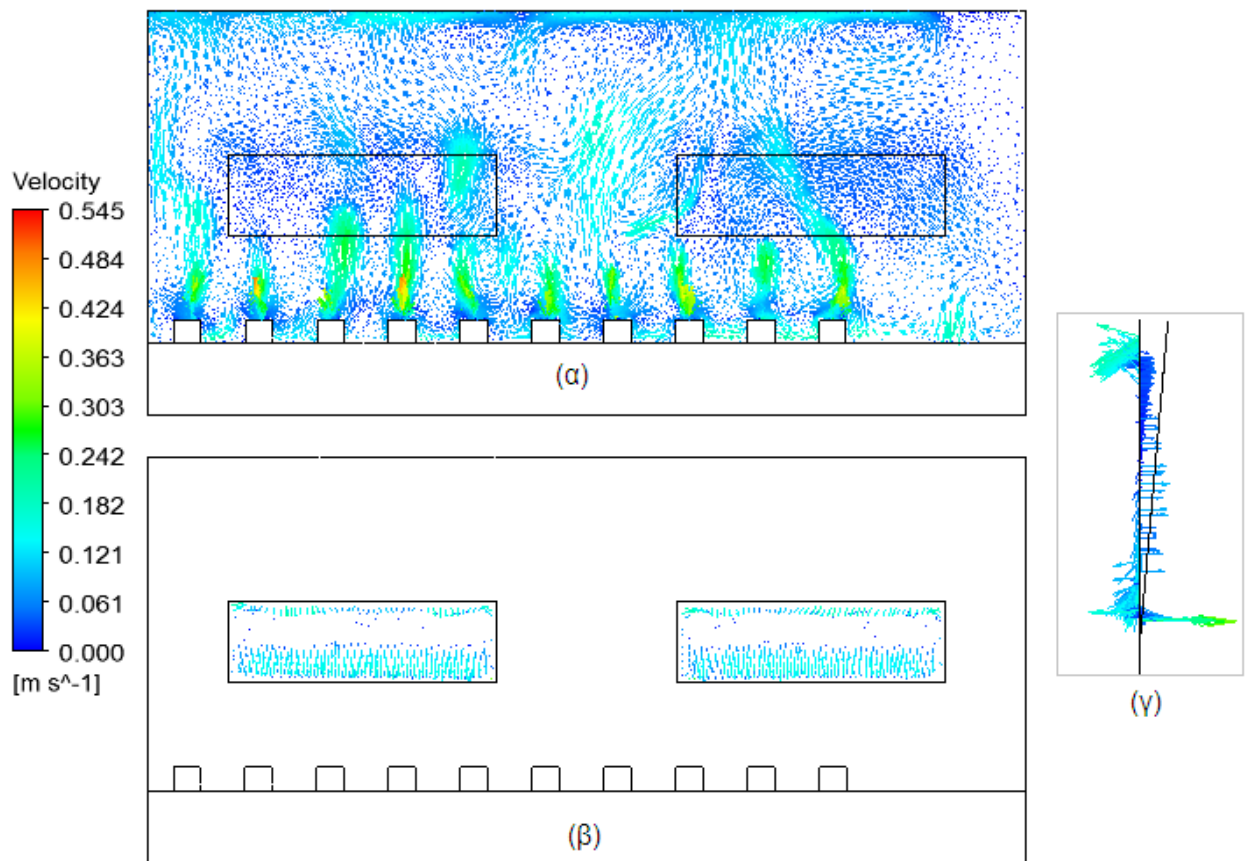
Εικόνα 6-30: Οι γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση)

Η **Εικόνα 6-31** δείχνει τις γραμμές ροής σε πλάγια όψη.



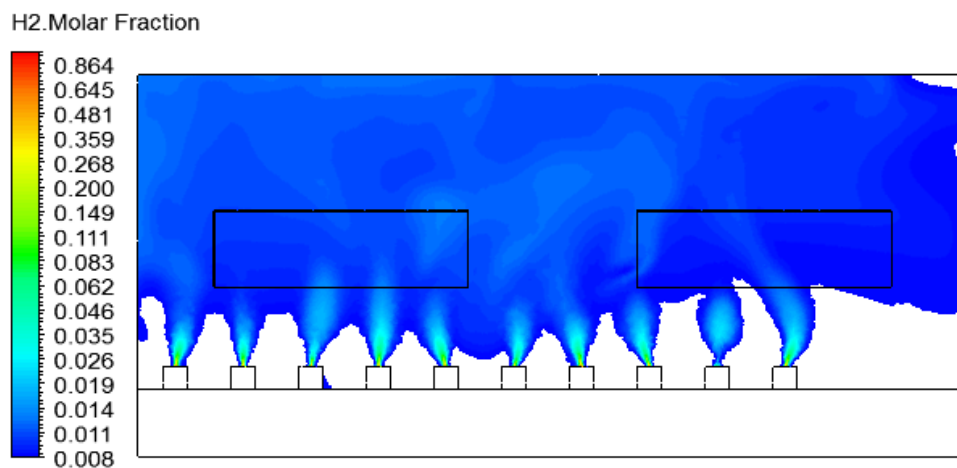
Εικόνα 6-31: Οι γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση) σε πλάγια όψη

Στην **Εικόνα 6-32** φαίνονται τα διανύσματα ταχυτήτων για το σύνολο των συσσωρευτών καθώς και για τα ανοίγματα. Παρατηρείται ότι ανοίγοντας τα παράθυρα ελαφρώς, υπάρχει μια έντονη διακύμανση στην κατεύθυνση της ροής. Όσο αφορά στα ανοίγματα – παράθυρα, η ροή εξέρχεται από το πάνω και κάτω μέρος του παραθύρου, ενώ εισέρχεται από όλη σχεδόν την επιφάνεια.



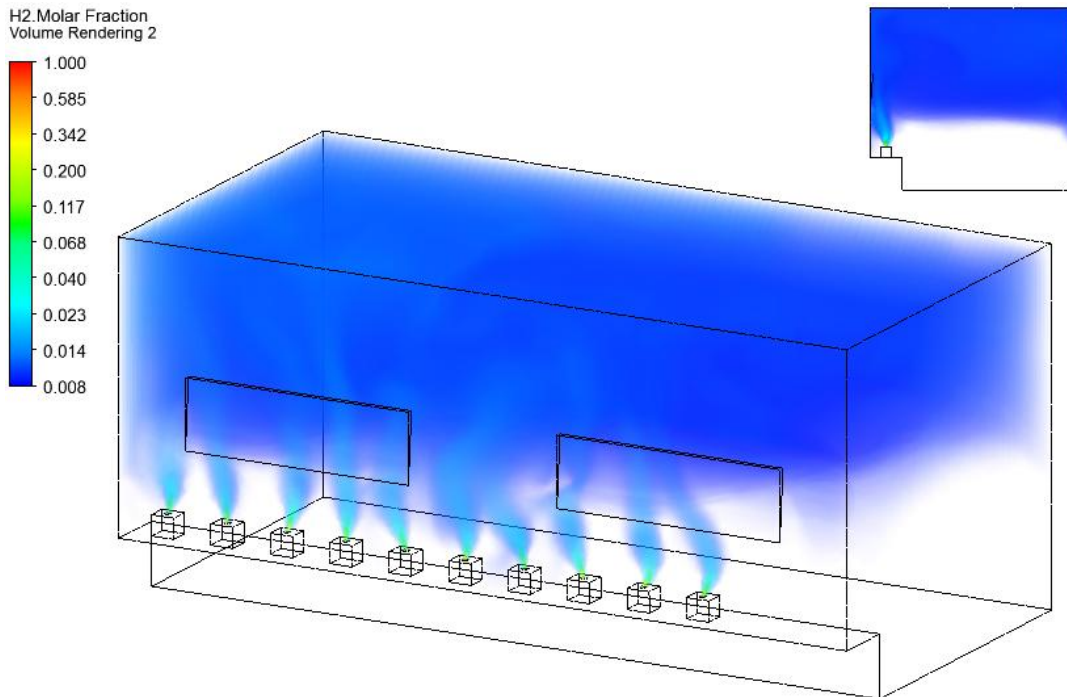
Εικόνα 6-32: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση) (α) για το σύνολο των συσσωρευτών (β) για τα ανοίγματα (γ) για τα ανοίγματα σε πλάγια όψη

Από την **Εικόνα 6-33** είναι εμφανές ότι οι συγκεντρώσεις του H_2 στο επίπεδο yz που περνά από τους συσσωρευτές μειώνονται.



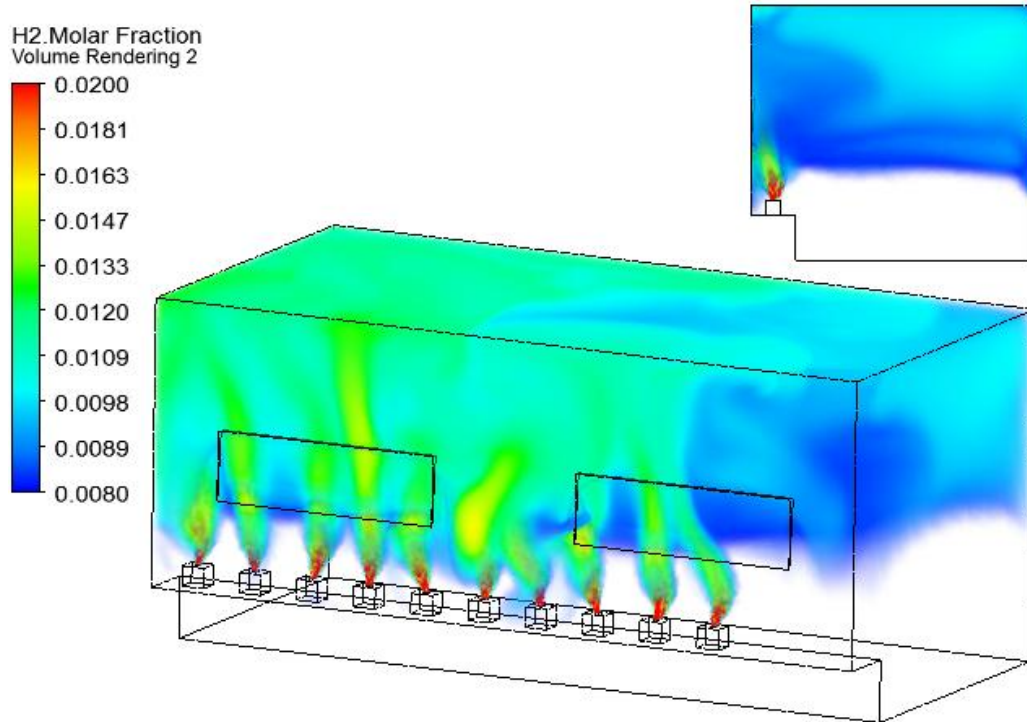
Εικόνα 6-33: Ισοεπιφάνειες γραμμομορικού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση)

Από την **Εικόνα 6-34** είναι εμφανές ότι τα επίπεδα του H_2 στον χώρο μειώνονται. Με το άνοιγμα των παραθύρων το υδρογόνο έχει εξαεριστεί στα χαμηλότερα ύψη σε σύγκριση με τις υπόλοιπες περιπτώσεις που μελετήθηκαν. Το πρόβλημα επομένως φαίνεται να αντιμετωπίζεται έως το ύψος 1.5m περίπου (εκτός του επιπέδου που περνά από τους συσσωρευτές).



Εικόνα 6-34: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση)

Η **Εικόνα 6-35** δείχνει πιο ξεκάθαρα τις τιμές των συγκεντρώσεων. Όπως φαίνεται το άνοιγμα των παραθύρων έχει προκαλέσει μια διακύμανση στις συγκεντρώσεις του υδρογόνου από από 0.8% έως 1.5% περίπου στο μεγαλύτερο μέρος του χώρου.



Εικόνα 6-35: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^\circ C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού (παράθυρα στην ανάκλιση) για ποσοστό από 0.8% έως 2%

6.5.1 Περίπτωση 5: Παράθυρα σε ανάκλιση - Επίδραση φυσικού αερισμού

Σύμφωνα με την ενότητα 2.5.1, για τον επαρκή εξαερισμό του χώρου τα ανοίγματα εισόδου και εξόδου πρέπει να έχουν μια ελάχιστη ελεύθερη επιφάνεια προκειμένου να λειτουργεί ικανοποιητικά η λύση του φυσικού αερισμού. Η επιφάνεια των παραθύρων στον χώρο που μελετάται είναι:

$$Q_{battery} = q \cdot n \cdot I_{gas} = 0,00045 \frac{m^3}{Ah} \cdot 19 \cdot 60 A = 0,513 \frac{m^3}{h} \quad 6-3$$

Λαμβάνοντας υπόψη τον συντελεστή αραιώσης και το σύνολο των υπό φόρτιση συσσωρευτών, η παροχή μάζας ενός συστήματος εξαερισμού είναι:

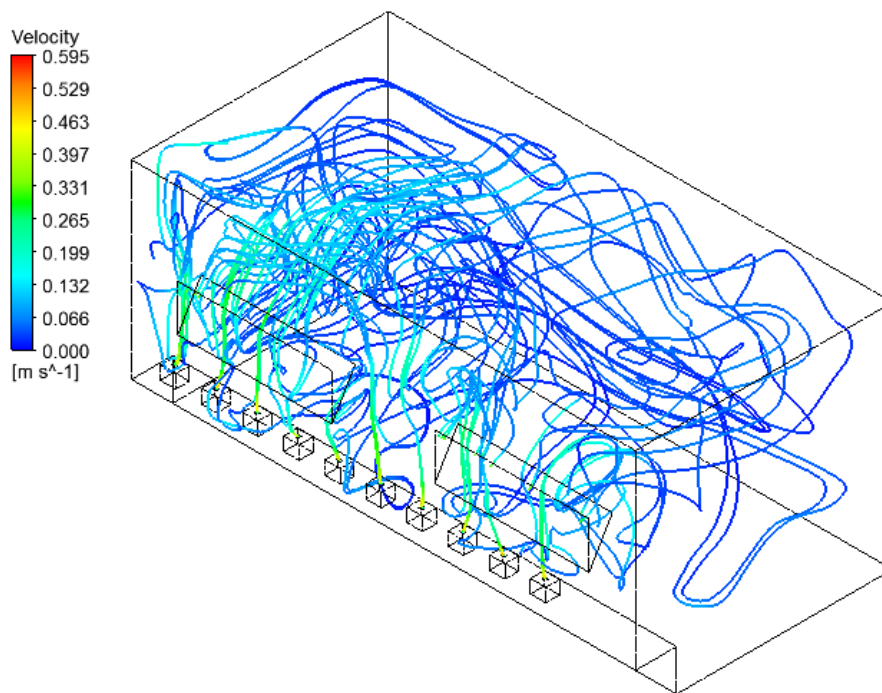
$$Q = D_f \cdot N \cdot Q_{battery} = 636,12 \frac{m^3}{h} \quad 6-4$$

Άρα βάσει της ενότητας 2.5.1 και της εξίσωσης 2-6, τα ανοίγματα στον χώρο που μελετάται πρέπει να έχουν ελάχιστη ελεύθερη επιφάνεια:

$$A [cm^2] \geq 28 \cdot Q \left[\frac{m^3}{h} \right] = 28 \cdot 636,12 \frac{m^3}{h} \Rightarrow A \geq 17811,36 [cm^2] \text{ ή } A \geq 1,78 [m^2] \quad 6-5$$

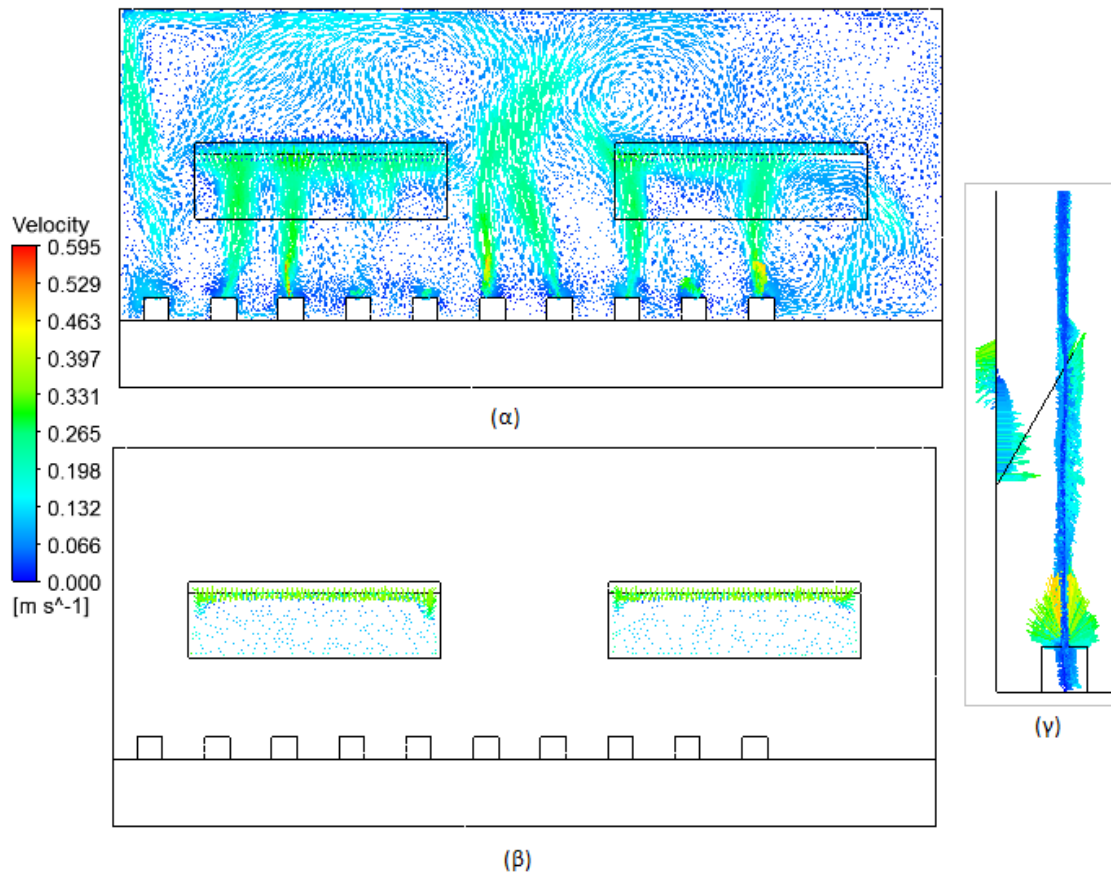
Πραγματοποιήθηκε λοιπόν μια προσομοίωση με τα παράθυρα στην ανάκλιση ώστε τα ανοίγματα που δημιουργούνται να έχουν συνολική επιφάνεια $1.78m^2$. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν έχουν ως εξής:

Στην **Εικόνα 6-36** φαίνεται ότι οι γραμμές ροής κινούνται ακατάληπτα προς όλες τις κατευθύνσεις εξαιτίας του ανοίγματος των παραθύρων σε μεγαλύτερη θέση ανάκλισης που προκαλεί μεγαλύτερη ένταση τύρβης.



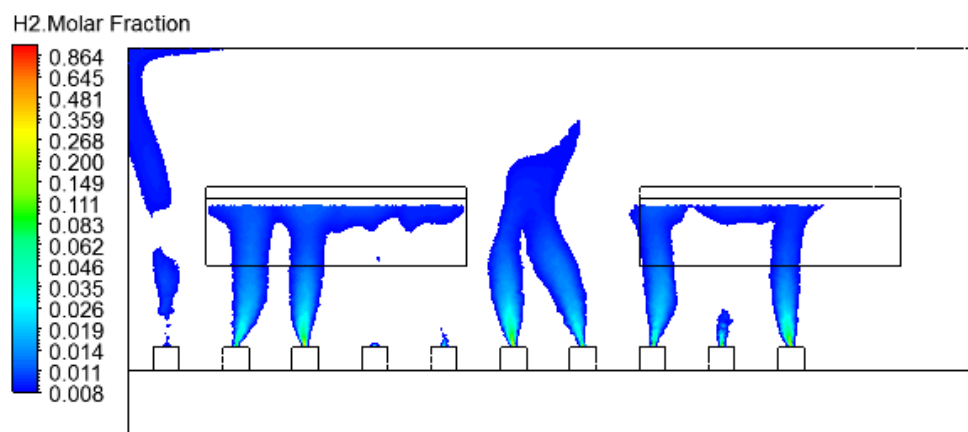
Εικόνα 6-36: Οι γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^{\circ}C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A > 1.78m^2$)

Στην **Εικόνα 6-37** φαίνονται τα διανύσματα ταχυτήτων για το σύνολο των συσσωρευτών καθώς και για τα ανοίγματα. Παρατηρείται ότι ανοίγοντας τα παράθυρα σε μεγαλύτερη ανάκλιση, η διακύμανση στην κατεύθυνση της ροής γίνεται ακόμα πιο έντονη. Όσο αφορά στα ανοίγματα – παράθυρα, η ροή εξέρχεται από το πάνω μέρος του παραθύρου, ενώ εισέρχεται από την υπόλοιπη επιφάνεια.



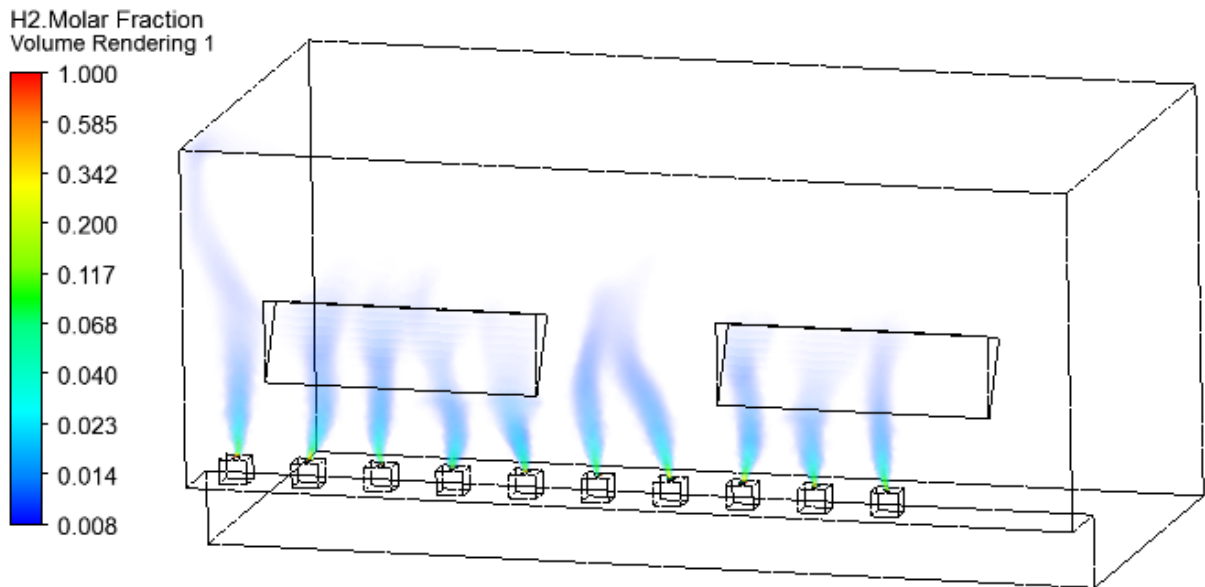
Εικόνα 6-37: Διανύσματα ταχυτήτων στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A > 1.78 \text{ m}^2$) (α) για το σύνολο των συσσωρευτών (β) για τα ανοίγματα (γ) για τα ανοίγματα σε πλάγια όψη

Από την **Εικόνα 6-38** είναι πια φανερό ότι είναι οι συγκεντρώσεις του H_2 στο επίπεδο yz που περνά από τους συσσωρευτές έχουν μειωθεί δραστικά.



Εικόνα 6-38: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25°C με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A > 1.78 \text{ m}^2$)

Από την **Εικόνα 6-39** εξάγεται το συμπέρασμα ότι βάσει της θεωρίας (ενότητα 2.5) ο φυσικός αερισμός με τα ανοίγματα να έχουν την ελάχιστη ελεύθερη επιφάνεια που απαιτείται λειτουργήσει αποτελεσματικά και οι συγκεντρώσεις του υδρογόνου διατηρούνται κάτω από το κατώτερο όριο εκρηκτικότητας για το σύνολο του όγκου του χώρου με εξαίρεση τον χώρο πάνω από τους συσσωρευτές και κυρίως εκείνους που δεν βρίσκονται κάτω από τα παράθυρα..

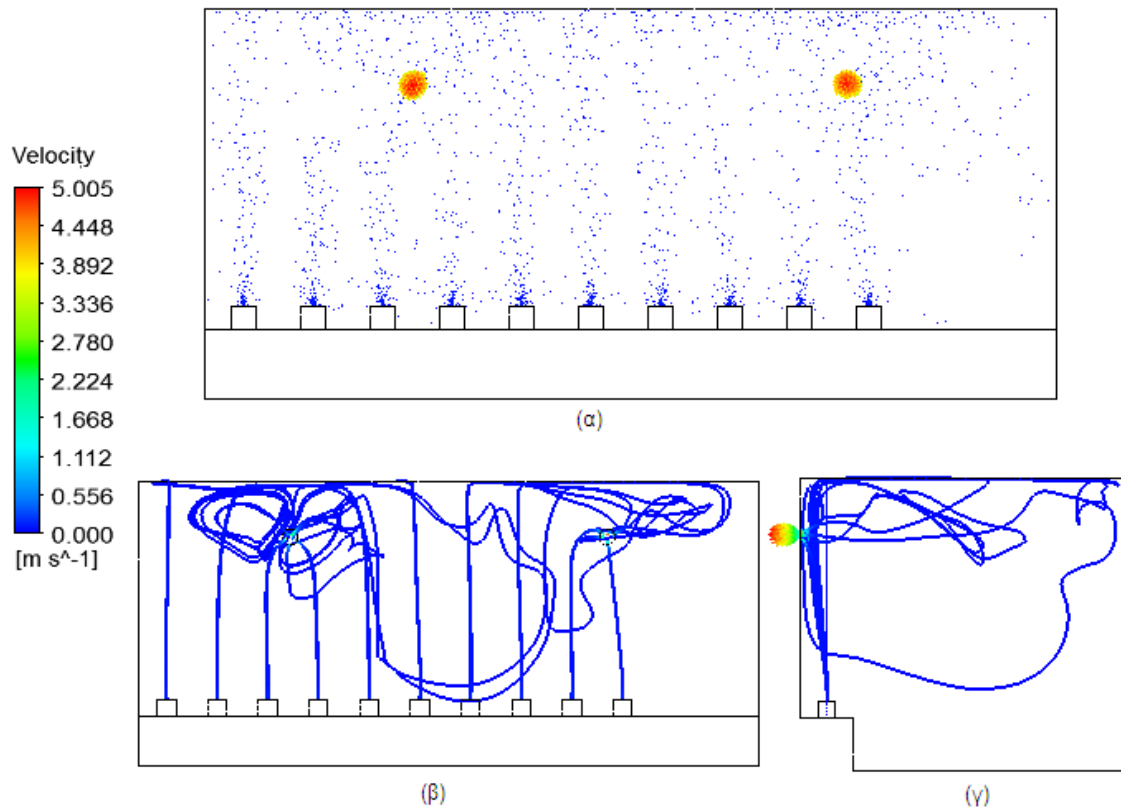


Εικόνα 6-39: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^\circ C$ με ύπαρξη φυσικού αερισμού ($A > 1.78 m^2$)

6.5.2 Περίπτωση 6 - Επίδραση τεχνητού αερισμού (από κεφ. 2.4)

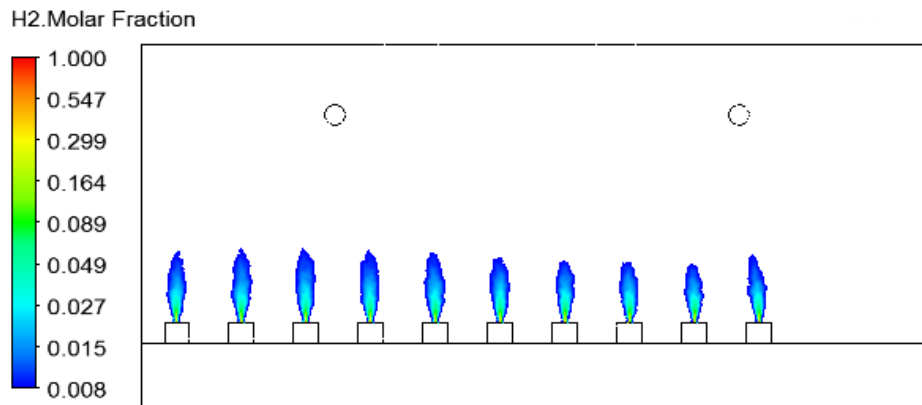
Όπως φαίνεται και από την **Εικόνα 6-9**, ως οριακές συνθήκες εξόδου λήφθησαν οι κυκλικές επιφάνειες που βρίσκονται πάνω από κάθε παράθυρο με παροχή μάζας $Q = 636,12 m^3/h = 212,04 g_{mixture}/s$, όπως υπολογίστηκε από την εξίσωση **2-4**, λαμβάνοντας υπόψιν την πυκνότητα του μίγματος αέρα – αέριου υδρογόνου $1,19 kg/m^3$ που είναι απαραίτητο να εξαεριστεί.

Από την **Εικόνα 6-40** φαίνεται ότι οι γραμμές ροής είναι ελάχιστες. Αυτό συμβαίνει γιατί το μεγαλύτερο μέρος του υδρογόνου που εκλύεται από τους συσσωρευτές, καθώς ανέρχεται προς την οροφή βρίσκει διαφυγή προς τα ανοίγματα – κυκλικές επιφάνειες με αποτέλεσμα να μην προλαβαίνει να κινηθεί και να συσσωρευτεί στον υπόλοιπο χώρο.



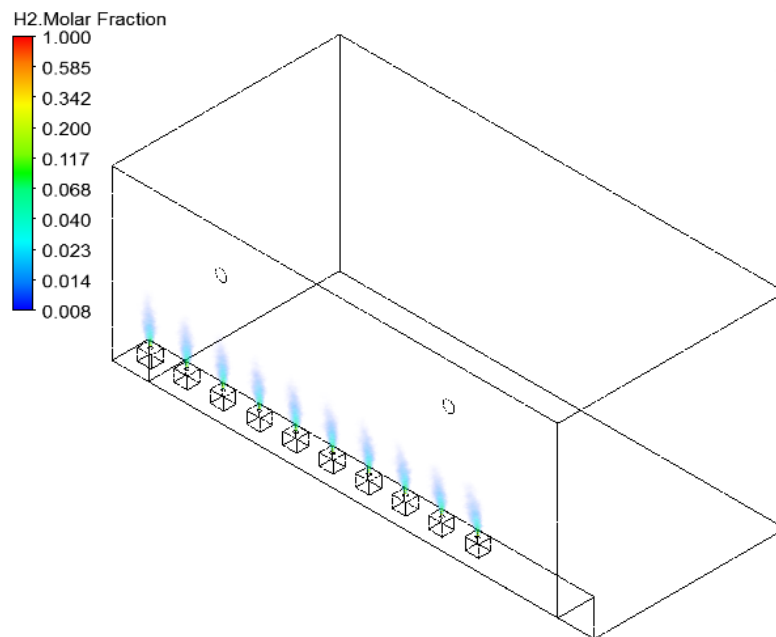
Εικόνα 6-40: Διανύσματα ταχυτήτων και γραμμές ροής σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους 25^oC με ύπαρξη τεχνητού αερισμού (α) ,(β) στο επίπεδο yz (γ) στο επίπεδο xz

Από την **Εικόνα 6-41** συμπεραίνεται ότι με την ύπαρξη του τεχνητού εξαερισμού οι τιμές της συγκέντρωσης υδρογόνου έχουν μειωθεί δραστικά. Το υδρογόνο πλέον φτάνει το ποσοστό 0.8% μόνο στο επίπεδο πάνω από τους συσσωρευτές και σε ύψος 1.6m περίπου.



Εικόνα 6-41: Ισοεπιφάνειες γραμμομοριακού κλάσματος H_2 στο επίπεδο yz, σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^\circ C$ με ύπαρξη τεχνητού αερισμού

Από την **Εικόνα 6-42** εξάγεται το συμπέρασμα ότι βάσει της θεωρίας (ενότητα 2.5) ο τεχνητός αερισμός λειτουργήσει αποτελεσματικά και οι συγκεντρώσεις του υδρογόνου διατηρούνται κάτω από το κατώτερο όριο εκρηκτικότητας.



Εικόνα 6-42: Απεικόνιση γραμμομοριακού κλάσματος H_2 σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών στους $25^\circ C$ με ύπαρξη τεχνητού αερισμού

7. Γενικά συμπεράσματα - Προοπτικές

7.1 Βασικά συμπεράσματα

Η παρούσα διπλωματική εργασία πραγματοποιείται την δημιουργία ενός μοντέλου προσομοίωσης φαινομένου μεταφοράς μάζας κατά την έκλυση και διασπορά υδρογόνου από συσσωρευτές που βρίσκονται υπό φόρτιση.

Το μοντέλο δημιουργήθηκε σε περιβάλλον ANSYS CFX και πιστοποιήθηκε σύμφωνα με τα πειραματικά δεδομένα της δημοσίευσης του Lacomme et al¹³. Στη συνέχεια τα υπολογιστικά αποτελέσματα που προέκυψαν από το μοντέλο, συγκρίθηκαν με εκείνα της δημοσίευσης του Venetsanos et al¹⁴ και βρέθηκαν να αποτελούν μια καλύτερη προσέγγιση σε σύγκριση με τα περισσότερα μοντέλα της δημοσίευσης. Συμπερασματικά προέκυψε μια αρκετά καλή προσέγγιση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων του παρόντος μοντέλου με τα αντίστοιχα πειραματικά.

Στη συνέχεια το μοντέλο που πιστοποιήθηκε χρησιμοποιήθηκε στην υπολογιστική μελέτη έκλυσης και διασποράς υδρογόνου σε χώρο φόρτισης συσσωρευτών τα αποτελέσματα της οποίας παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα. Οι σημαντικότερες παρατηρήσεις και συμπεράσματα που εξήχθησαν για τα διάφορα σενάρια συνοψίζονται ως εξής:

- Αρχικά εξετάστηκε η περίπτωση φόρτισης 10 συσσωρευτών σε θερμοκρασία χώρου 25°C. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν έδειξαν ότι υπάρχουν συγκεντρώσεις υδρογόνου που υπερβαίνουν το 0.8% κατ'όγκον (20% του κατώτερου ορίου εκρηκτικότητας – LEL0,) σύμφωνα με τα αυστηρότερα όρια ασφαλείας που έχουν θεσπιστεί για χώρους φόρτισης συσσωρευτών⁸ στους οποίους εισέρχεται ανθρώπινο δυναμικό, όπως και η περίπτωση που μελετάται.
- Εν συνεχεία μελετήθηκε η περίπτωση μεγαλύτερου αριθμού φόρτισης συσσωρευτών. Συγκεκριμένα τοποθετήθηκαν 12 συσσωρευτές κατά μήκος του χώρου φόρτισης χωρίς πλέον να μένει κενός χώρος. Σε αυτή την περίπτωση παρατηρήθηκε αξιόλογη αύξηση στις συγκεντρώσεις του υδρογόνου.
- Στην πορεία μελετήθηκε η επίδραση της θερμοκρασίας και εξάχθηκε το συμπέρασμα ότι αύξηση της θερμοκρασίας επέφερε και αύξηση στις συγκεντρώσεις του υδρογόνου σε σύγκριση με την αρχική περίπτωση των 10 συσσωρευτών.
- Στη συνέχεια ανοίχθηκαν τα παράθυρα σε μια μικρή θέση ανάκλισης όπου και παρατηρήθηκε μείωση των συγκεντρώσεων υδρογόνου χωρίς όμως το πρόβλημα του ελάχιστου ορίου συγκέντρωσης 0.8% να εξαλείφεται.
- Σύμφωνα με τη θεωρία ανοίχθηκαν τα παράθυρα σε θέση ανάκλισης ώστε να σχηματίζεται η ελάχιστη επιφάνεια που απαιτείται προκειμένου να εξαεριστεί σωστά ο χώρος. Παρατηρήθηκε ότι το πρόβλημα αντιμετωπίστηκε σημαντικά στο μεγαλύτερο μέρος του χώρου, με εξαίρεση την περιοχή πάνω από τους συσσωρευτές. Αυτό πιθανόν οφείλεται στις ανακλίσεις που υπάρχουν

μπροστά από τα παράθυρα που ενδεχομένως εμποδίζουν το υδρογόνο να διαφύγει με αποτέλεσμα να συσσωρεύεται σε μικρές όμως ποσότητες.

➤ Τέλος μελετήθηκε η περίπτωση με την ύπαρξη τεχνητού αερισμού, όπου σύμφωνα με την απαιτούμενη παροχή μάζας αερισμού που προβλέπει η θεωρία διαπιστώθηκε ότι ο τεχνητός αερισμός λειτούργησε ικανοποιητικά και αποτελεσματικά και οι συγκεντρώσεις του υδρογόνου έπεσαν κάτω από το όριο 0.8%.

Από την παρούσα μελέτη προέκυψε ότι η διαδικασία της φόρτισης συσσωρευτών μπορεί να οδηγήσει στη δημιουργία εκρηκτικής ατμόσφαιρας και επομένως ήταν αναγκαία η αξιολόγηση των κινδύνων έκρηξης στον συγκεκριμένο χώρο λαμβάνοντας υπόψη όλες τις αναφερόμενες παραμέτρους.

Συνοψίζοντας λοιπόν διαπιστώθηκε πόσο σημαντικό ήταν να εξεταστούν όλοι οι παραπάνω παράμετροι, προκειμένου να καταγραφούν και να προταθούν τα απαιτούμενα μέτρα προστασίας για ασφαλή εργασία.

7.2 Προοπτικές βελτίωσης

Μελλοντικές επεκτάσεις της παρούσας εργασίας θα μπορούσαν να περιλαμβάνουν ορισμένες βελτιώσεις όπως αυτές που επιγραμματικά αναφέρονται παρακάτω:

- Για μια ολοκληρωμένη μελέτη αξιόλογη θα ήταν η συνεισφορά μιας πειραματικής διαδικασίας και η σύγκρισή της με το υπολογιστικό μοντέλο για μια ρεαλιστικότερη εικόνα των αποτελεσμάτων.
- Εναλλακτική επιλογή είναι η προσομοίωση του φαινομένου ως ένα transient φαινόμενο δηλαδή χρονικά μεταβαλλόμενο πρόβλημα.

8. Βιβλιογραφία

1. Bommenede, H. & Harden, D. *Battery Technology Handbook*. (2013).
2. Ναταλία Η. Ιγγλέζου. Ανάλυση Λειτουργίας και Μοντελοποίηση Συσσωρευτών. (2013).
3. H.A.Kiehne. *Battery Technology Handbook*. (2003).
4. Army, U. TM 11-6140-203-23&P. (2004).
5. SAFT. Material Safety Data Sheet , Nickel – Cadmium aircraft battery / cell Product name. 9–12
6. O'Donnell, C. & Schiemann, M. Hydrogen Gas Management for Flooded Lead Acid Batteries. *Hoppecke Batter. GmbH Co KG* 1–17 (2008).
7. Παπανικολάου Α. Ε. Μοντελοποίηση διασποράς υδρογόνου και άλλων ανωστικών αερίων σε κλειστούς χώρους με την μεθοδολογία της υπολογιστικής ρευστομηχανικής. (2011).
8. Saft. Ni-Cd block battery: Technical manual. (2011).
9. IEEE 484:2002. Recommended practice for installation design and installation of vented lead-acid batteries for stationary applications.
10. Friedrich, A., Vesper, A., Stern, G. & Kotchourko, N. Hyper experiments on catastrophic hydrogen releases inside a fuel cell enclosure. *Int. J. Hydrogen Energy* **36**, 2678–2687 (2011).
11. Gupta, S., Brinster, J., Studer, E. & Tkatschenko, I. Hydrogen related risks within a private garage: Concentration measurements in a realistic full scale experimental facility. *Int. J. Hydrogen Energy* **34**, 5902–5911 (2009).
12. Cerchiara, G. M., Mattei, N., Schiavetti, M. & Carcassi, M. N. Natural and forced ventilation study in an enclosure hosting a fuel cell. *Int. J. Hydrogen Energy* **36**, 2478–2488 (2011).
13. Lacome, J. M., Jamois, D., Perrette, L. & Proust, C. H. Large-scale hydrogen release in an isothermal confined area. *Int. J. Hydrogen Energy* **36**, 2302–2312 (2011).
14. Venetsanos, A. G. *et al.* An inter-comparison exercise on the capabilities of CFD models to predict the short and long term distribution and mixing of hydrogen in a garage. *Int. J. Hydrogen Energy* **34**, 5912–5923 (2009).
15. Heitsch, M., Baraldi, D. & Moretto, P. Numerical analysis of accidental hydrogen release in a laboratory. *Int. J. Hydrogen Energy* **35**, 4409–4419 (2010).
16. Prasad, K. High-pressure release and dispersion of hydrogen in a partially enclosed compartment: Effect of natural and forced ventilation. *Int. J. Hydrogen Energy* **39**, 6518–6532 (2014).
17. Hajji, Y. *et al.* Numerical study of hydrogen release accidents in a residential garage. *Int. J. Hydrogen Energy* **40**, 9747–9759 (2015).
18. Hoyes, J. R. & Ivings, M. J. CFD modelling of hydrogen stratification in enclosures: Model validation and application to PAR performance. *Nucl. Eng. Des.* **310**, 142–153 (2016).
19. Papanikolaou, E., Venetsanos, A. G., Cerchiara, G. M., Carcassi, M. & Markatos, N. CFD simulations on small hydrogen releases inside a ventilated facility and assessment of ventilation efficiency. *Int. J. Hydrogen Energy* **36**, 2597–2605 (2011).

20. ANSYS. CFX. (2017).
21. Peube, J. *Fundamentals of Fluid Mechanics and Transport Phenomena*. (2006).
22. Duijm, N. J., Ott, S. & Nielsen, M. An evaluation of validation procedures and test parameters for dense gas dispersion models. *J. Loss Prev. Process Ind.* **9**, 323–338 (1996).