



**HAL**  
open science

## Modélisation d'un compresseur à hydrogène par adsorption / désorption cyclique sur charbon actif

Giuseppe Sdanghi, Nicolas Vincent, Kevin Mozet, Gaël Maranzana, Alain Celzard, Vanessa Fierro

► **To cite this version:**

Giuseppe Sdanghi, Nicolas Vincent, Kevin Mozet, Gaël Maranzana, Alain Celzard, et al.. Modélisation d'un compresseur à hydrogène par adsorption / désorption cyclique sur charbon actif. 28e Congrès Français de Thermique, Jun 2020, Belfort, France. hal-03042333

**HAL Id: hal-03042333**

**<https://hal.univ-lorraine.fr/hal-03042333>**

Submitted on 6 Dec 2020

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

# Modélisation d'un compresseur à hydrogène par adsorption / désorption cyclique sur charbon actif

Giuseppe Sdanghi<sup>1,2</sup>, Vincent Nicolas<sup>1\*</sup>, Kevin Mozet<sup>2</sup>, Gaël Maranzana<sup>2</sup>, Alain Celzard<sup>1</sup>, Vanessa Fierro<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut Jean Lamour, UMR CNRS-Université de Lorraine n°7198, ENSTIB, 27 rue Philippe Seguin, BP 21042 - 88051 EPINAL Cedex 9, France

<sup>2</sup>Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée, UMR CNRS- Université de Lorraine n° 7563, 2 avenue de la Forêt de Haye, BP 160, F-54504 Vandœuvre-lès-Nancy, France

\*(Corresponding author: [vincent.nicolas@univ-lorraine.fr](mailto:vincent.nicolas@univ-lorraine.fr))

## Résumé

Ce travail porte sur la modélisation d'un compresseur d'hydrogène, non mécanique et pouvant atteindre une pression de 70 MPa, basé sur l'adsorption-désorption cyclique par entraînement thermique sur charbon actif. La compression de l'hydrogène et la décharge sont simulées par éléments finis. Le réservoir/compresseur est modélisé par une géométrie 2D axisymétrique en résolvant les équations de conservation de l'énergie et de la masse d'hydrogène. Les résultats présentés porteront sur la validation du modèle par comparaison avec les évolutions expérimentales (température, pression et débit de sortie). De plus, une étude paramétrique est réalisée.

**Mots-clés:** Simulation numérique ; hydrogène; charbon actif ; compresseur thermique; adsorption

## 1. Introduction

Bien que les compresseurs mécaniques soient utilisés pour la compression de l'hydrogène dans le monde entier, ils ne sont pas la meilleure option puisqu'ils ont une faible efficacité et qu'il y a une dégradation produite par l'hydrogène aggravée par la présence de plusieurs pièces mobiles [1].

Ainsi, un compresseur non mécanique pourrait représenter une alternative appropriée pour la compression de l'hydrogène. Dans un tel système, la compression d'hydrogène provient de la désorption d'une quantité pré-adsorbée d'hydrogène, à 77 K, sur un lit de matériau poreux, lors du chauffage du système. Nous proposons, un compresseur hybride constitué d'un électrolyseur et d'un compresseur à adsorption-désorption cyclique d'hydrogène qui pourrait être utilisé dans des stations de ravitaillement en hydrogène, et représenter une solution prometteuse pour le développement de la chaîne d'approvisionnement en hydrogène. Outre les compresseurs à hydrogène à hydrure métallique [2] et les compresseurs à hydrogène électrochimiques [3], les compresseurs à entraînement thermique basés sur l'adsorption-désorption cyclique d'hydrogène sur matériaux poreux présentent plusieurs avantages par rapport aux compresseurs mécaniques. Parmi ces avantages se trouvent une conception plus simple et l'absence de composants mobiles entraînant du bruit et des vibrations.

Les adsorbants carbonés se sont révélés être des matériaux appropriés pour une telle technologie. De tous les carbones nanoporeux étudiés pour le stockage de l'hydrogène, les charbons actifs (AC) sont la meilleure option. Outre le fait qu'ils fournissent en moyenne la capacité d'adsorption d'hydrogène la plus élevée de tous les matériaux carbonés (6,8% en poids à 77 K et 4 MPa), ils sont également moins chers et peuvent être produits à partir de matériaux renouvelables et à faible coût [4].

Pour autant que nous le sachions, la compression d'hydrogène dans un compresseur d'adsorption-désorption est une technologie assez nouvelle, et aucune étude n'a été menée à ce sujet jusqu'à présent. Dans une de nos précédentes études, nous avons montré, grâce à un modèle zéro dimension, que l'hydrogène peut être comprimé en utilisant cette technologie

innovante jusqu'à 70 MPa. Pour atteindre ce résultat, 0,25 kg d'AC ont dû être utilisés, ainsi qu'un processus de chauffage de 77 à 298 K. Richard et al. [5] ont publié des résultats préliminaires sur la compression de l'hydrogène dans un système à base de carbone lors de l'introduction d'hydrogène à température ambiante dans un réservoir rempli d'AC initialement à 80 K et 0,14 MPa. L'augmentation de température qui en a résulté a fait augmenter la pression d'hydrogène, atteignant ainsi une valeur d'environ 5 MPa.

Dans cette étude, un modèle 2D axisymétrique a été développé pour modéliser la compression d'hydrogène jusqu'à 70 MPa dans un compresseur d'adsorption-désorption. Un système composé d'un volume de réservoir de 0.5 L, rempli de 0,135 kg d'AC (MSC-30 de Kansai, Japon) et chauffé de 77 à 322 K a été considéré. Le chauffage s'est effectué en deux étapes: (i) de 77 K à la température ambiante, où le chauffage se produit par convection naturelle avec l'air; et (ii) de la température ambiante à 322 K où le réservoir est chauffé par des résistances thermiques. Seule la deuxième étape est étudiée ici (chauffage résistif), afin d'étudier la quantité d'hydrogène à haute pression qui peut être produite par un tel système.

## 2. Modélisation

### 2.1. Géométrie et maillage

La Figure 1 montre la géométrie axisymétrique bidimensionnelle utilisée dans cette étude. Les rayons intérieur et extérieur du réservoir de compression sont respectivement de 0,025 et 0,04 m. La hauteur du réservoir intérieur est égale à 0,256 m, tandis que la hauteur totale comprenant les parois du réservoir est de 0,276 m. En haut, la section de décharge a un diamètre de 4 mm. Des données expérimentales ont été enregistrées afin de suivre la température et la pression au point de localisation nommé TTC (0, 0,239 m). De plus, le débit de décharge d'hydrogène a également été enregistré.

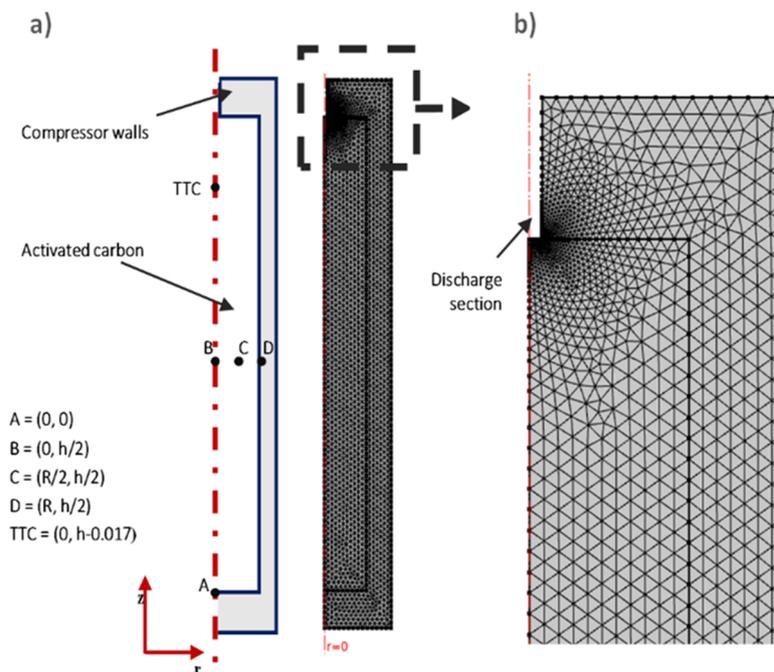


Figure 1: a) *Modèle géométrique et maillage par éléments finis utilisés dans ce travail; et b) zoom sur la section de décharge*

## 2.2. Équation de conservation de masse

Afin de décrire le bilan massique de notre compresseur à entraînement thermique, nous avons pris en compte la contribution de l'hydrogène à la fois dans la phase gazeuse et dans la phase adsorbée. Les hypothèses suivantes ont été émises:

- i. Le terme source de masse,  $K_g$ , indique la quantité d'hydrogène subissant un changement de phase, de la phase adsorbée à la phase gazeuse.
- ii. La vitesse moyenne liée au flux d'hydrogène à travers le milieu poreux,  $\vec{v}_g$ , est décrite par la loi de Darcy.
- iii. Aucun changement de volume avec le temps.

En accord avec les définitions précédentes, l'équation de conservation de masse pour l'hydrogène en phase gazeuse peut s'écrire:

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{v}_g) = K_g \quad (1)$$

où  $\rho_g$  [kg/m<sup>3</sup>] est la densité de la phase gazeuse de l'hydrogène,  $\varepsilon_g$  [v/v] est la fraction volumique de la phase gazeuse de l'hydrogène,  $\vec{v}_g$  [m/s] est la vitesse moyenne liée au flux d'hydrogène à travers le milieu poreux et  $K_g$  [kg/(m<sup>3</sup>.s)] est le terme source de masse tel que défini ci-dessus. De la même manière, l'équation de conservation de masse suivante peut être écrite pour l'hydrogène en phase adsorbée:

$$\frac{\partial(\varepsilon_a \rho_a)}{\partial t} = -K_g \quad (2)$$

où  $\rho_a$  [kg/m<sup>3</sup>] est la densité de l'hydrogène adsorbé et  $\varepsilon_a$  [v/v] est la fraction volumique correspondante.

Le bilan massique lié à l'hydrogène dans la phase adsorbée peut être écrit en termes de quantité absolue d'hydrogène adsorbée sur la masse totale d'AC contenue dans le réservoir de compression,  $x_a$  [mol/kg]. Ainsi, nous pouvons écrire:

$$\varepsilon_a \rho_a = \frac{V_a}{V_{tank}} \frac{x_a m_s M}{V_a} = x_a \rho_b M \quad (3)$$

où  $\rho_b$  [kg/m<sup>3</sup>] est la densité du lit d'AC ( $m_s / V_{tank}$ ), et  $M$  [kg/mol] est la masse molaire de l'hydrogène (0.002 kg/mol).

Selon les hypothèses susmentionnées, en sommant (1) et (2) et considérant (3), l'équation globale de conservation de la masse se lit comme suit:

$$\frac{\varepsilon_g \partial \rho_g}{\partial t} + \rho_b M \frac{\partial x_a}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left( -\varepsilon_g \rho_g \frac{k}{\mu} \vec{\nabla} P \right) = 0 \quad (4)$$

où  $k$  [m<sup>2</sup>] est la perméabilité intrinsèque de l'AC et  $\mu$  [Pa.s] est la viscosité dynamique de l'hydrogène.

## 2.3. Équation de conservation de l'énergie

Le bilan énergétique exprime l'équilibre entre la quantité d'énergie accumulée dans le réservoir et les changements d'énergie dus principalement au flux de chaleur par conduction, à la chaleur transférée par le transfert de masse, à la chaleur dégagée lors de l'adsorption et à celle échangée avec l'environnement extérieur. Il peut être exprimé comme suit [6]:

$$\frac{\partial(\rho\hat{H})}{\partial t} + (\vec{\nabla} \cdot \rho\hat{H}\vec{v}) + (\vec{\nabla} \cdot \vec{q}) = Q \quad (5)$$

où  $\hat{H}$  [J/kg] est l'enthalpie totale du système,  $q$  [W/m<sup>2</sup>] est le flux de chaleur dû à la conduction, et  $Q$  [W/m<sup>3</sup>] est le terme source d'énergie. L'Eq. (5) a été appliquée à deux domaines différents: (i) le volume actif du réservoir,  $V_{tank}$ , où l'adsorption et la désorption d'hydrogène se produisent, et (ii) les parois du réservoir.

En considérant la contribution de l'hydrogène à la fois dans la phase gazeuse et celle dans la phase adsorbée, ainsi que la contribution de l'AC dans la quantité d'énergie accumulée à l'intérieur du réservoir, l'équation (5) peut être réécrite sous la forme suivante:

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_g c_{p,g} \rho_g + \rho_b M c_{p,a} x_a + \varepsilon_s c_{p,s} \rho_s) \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon_g c_{p,g} T \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_b M c_{p,a} T \frac{\partial x_a}{\partial t} + \\ & \vec{\nabla} \cdot \left( -\varepsilon_g \rho_g c_{p,g} T \frac{k}{\mu} \vec{\nabla} P \right) + \\ & \vec{\nabla} \cdot \left( -(\varepsilon_g \lambda_g + \varepsilon_g \lambda_a + \varepsilon_s \lambda_s) \vec{\nabla} T \right) = -\rho_s^a \Delta H_{ads} \frac{\partial x_a}{\partial t} \end{aligned} \quad (6)$$

où  $c_{p,g}$ ,  $c_{p,a}$  et  $c_{p,s}$  [J/(kg.K)] sont les capacités thermiques spécifiques à pression constante pour la phase d'hydrogène gazeuse, la phase adsorbée d'hydrogène et l'AC, respectivement.  $\lambda_{eff}$  [W/(m.K)] est la conductivité thermique effective du système, et  $\Delta H_{ads}$  [J/mol] est la chaleur d'adsorption, considérée comme constante dans le modèle numérique actuel.

$c_{p,s}$  a été considéré comme constant dans notre modèle (825 J/(kg.K)), alors que la dépendance à la température de  $c_{p,g}$  [J/(kg.K)] a été calculée à partir des données de l'Institut national des normes et de la technologie (NIST), indiquée dans (7).

$$c_{p,g} = -2 \cdot 10^{-10} T^4 + 10^{-6} T^3 - 0.0024 T^2 + 3.0534 T + 13332 \quad (7)$$

D'autre part, la dépendance à la température de  $c_{p,a}$  [J/(kg.K)] a été évaluée dans nos travaux précédents [7]:

$$c_{p,a} = -5.3 \cdot 10^{-2} T^2 + 33.5 \cdot T + 3698.1 \quad (8)$$

$\lambda_{eff}$  a été calculé en tenant compte de la contribution de chaque composant au transfert de chaleur global, donnant ainsi:

$$\lambda_{eff} = \varepsilon_g \lambda_g + \varepsilon_a \lambda_a + \varepsilon_s \lambda_s \quad (9)$$

où  $\lambda_g$ ,  $\lambda_a$  et  $\lambda_s$  [W/(m.K)] sont les conductivités thermiques de la phase d'hydrogène gazeuse, de la phase adsorbée d'hydrogène, et de l'AC, respectivement. La dépendance à la température de  $\lambda_g$  a été calculée à partir des données du NIST:

$$\lambda_g = 5 \cdot 10^{-4} T + 0.0243 \quad (10)$$

$\lambda_a$  a été considéré comme égal à la conductivité thermique de l'hydrogène en phase liquide. La dépendance en température correspondante a été trouvée dans la littérature [8]:

$$\lambda_a = (7.12 + 0.233 T) \cdot 10^{-2} \quad (11)$$

D'autre part,  $\lambda_s$  a été considéré comme constant dans le présent travail (0.7 W/(m.K)) [9]. Enfin, l'Eq. (12) a été appliquée aux parois du réservoir:

$$\rho_w c_{p,w} \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (-\lambda_w \vec{\nabla} T) = 0 \quad (12)$$

où  $\rho_w$  [kg/m<sup>3</sup>] est la densité,  $c_{p,w}$  [J/(kg.K)] la capacité thermique spécifique, et  $\lambda_w$  [W/(m.K)] la conductivité thermique de la paroi. Nous avons supposé que les propriétés thermiques de

l'acier inoxydable A286 utilisé étaient équivalentes à celles de l'acier inoxydable AISI 304. Par conséquent, la dépendance thermique de  $c_{p,w}$  a été trouvée dans la littérature [10] et peut être ajustée par l'équation suivante:

$$c_{p,w} = 143.68 \log(T) - 370.51 \quad (13)$$

$\rho_w$  et  $\lambda_w$  ont été considérés comme constants par rapport à la température.

#### 2.4. Équation d'état de l'hydrogène et modèle d'adsorption

Afin de tenir compte de l'écart par rapport aux conditions idéales en raison des hautes pressions atteintes pendant la compression, l'équation de Van der Waals a été choisie parmi toutes les autres équations d'état possibles pour l'hydrogène. [11]:

$$\left(P + \frac{an_g^2}{V_g^2}\right)(V_g - n_gb) = n_gRT \quad (14)$$

où  $a$  et  $b$  sont les paramètres constants de l'équation de Van der Waals ( $0.02476 \text{ J.m}^3/\text{mol}^2$  et  $2.661 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$ , respectivement) et  $R$  est la constante des gaz parfaits,  $8.314 \text{ m}^3.\text{Pa}/(\text{K.mol})$ .

L'équation modifiée de Dubinin-Astakhov (MDA) proposée par Richard et al. [12] s'est avérée être un bon outil analytique pour représenter des données expérimentales de l'adsorption de différents gaz sur une large gamme de pressions et de températures dans des conditions supercritiques, en particulier dans le cas de l'adsorption d'hydrogène sur des ACs [5,13]:

$$x_a = x_{max} \exp\left(-\left(\frac{RT}{\alpha + \beta T}\right)^2 \ln^2\left(\frac{P_s}{P}\right)\right) \quad (15)$$

L'Eq. (15) donne l'évolution de la quantité absolue d'hydrogène adsorbé en fonction de la pression et de la température, des quantités plus élevées d'hydrogène étant adsorbées à des pressions plus élevées et à des températures plus basses [14]. Le modèle nécessite 5 paramètres:  $x_{max}$  [mol/kg] est la quantité d'hydrogène adsorbé correspondant à la saturation de tout le volume poreux disponible,  $\alpha$  [J/mol] est un facteur d'enthalpie,  $\beta$  [mol/(J.K)] est un facteur d'entropie [15], et  $P_s$  [MPa] est la pression de pseudo-saturation [16][17][7].

#### 2.5. Conditions initiales et limites

Le débit de décharge d'hydrogène,  $\dot{n}_{out}$  [kg/(m<sup>2</sup>.s)], obtenu une fois les 70 MPa désirés atteints, a été simulé en utilisant l'expression suivante:

$$\dot{n}_{out} = h_m(P_{max} - P) \quad (16)$$

où  $P_{max}$  [MPa] est la pression d'utilisation de l'hydrogène (70 MPa),  $P$  [MPa] est la pression d'hydrogène à l'intérieur du réservoir, et  $h_m$  [kg/(m<sup>2</sup>.s.Pa)] est une constante reliant le débit de refoulement à la différence de pression, et considérée comme un paramètre d'ajustement.

Le réservoir est soumis à un flux de chaleur radiatif et convectif avec des radiateurs électriques. Ainsi, le flux de chaleur provenant des parois extérieures du réservoir de compression,  $\dot{Q}$  [W/m<sup>2</sup>], est donné par l'expression suivante:

$$\dot{Q} = h_c(T_F - T) \quad (17)$$

où  $h_c$  [W/(m<sup>2</sup>.K)] est le coefficient de transfert de chaleur global, et  $T_F$  [K] est la température de l'environnement extérieur et est égale à 322 K pendant le processus de chauffage. De plus, la chaleur est également libérée du système lors de la décharge  $\dot{n}_{out}$ . Cette contribution supplémentaire a été calculée comme suit:

$$\dot{Q}_{flow} = \dot{n}_{out} c_{p,g} T \quad (18)$$

### 3. Résultats et discussion

Les Figures 2 et 3 montrent la comparaison avec les valeurs expérimentales et les valeurs données par le modèle numérique pour le débit de décharge d'hydrogène, la pression et la température, pour deux variations paramétriques: (i) le coefficient d'échange thermique,  $h_c$ , et (ii) le coefficient de transfert de masse,  $h_m$ .

Cette étude montre que le modèle a bien prédit les données expérimentales pour les valeurs de  $h_c = 100 \text{ W}/(\text{m}^2.\text{K})$  et  $h_m = 3 \cdot 10^{-5} \text{ kg}/(\text{m}^2.\text{s}.\text{Pa})$ . Néanmoins, une sous-évaluation du débit de décharge d'hydrogène et une surévaluation de l'évolution de la température peuvent être observées. L'observation attentive de l'évolution de la température montre une perturbation de la cinétique lors de la décharge d'hydrogène du compresseur à environ 310 K, comme le montre la Figure 2. Cette perturbation est similaire à un court plateau, également observé expérimentalement. Ce phénomène s'explique par le caractère endothermique de la décharge d'hydrogène lors de la désorption de l'hydrogène pré-adsorbé.

L'étude paramétrique sur le coefficient d'échange thermique met en évidence le fait que lorsque le flux de chaleur est augmenté, la pression arrive plus rapidement à la pression de fonctionnement (Figure 2b). De plus, un débit d'hydrogène plus important est disponible lors qu'on augmente le flux de chaleur (Figure 2a).

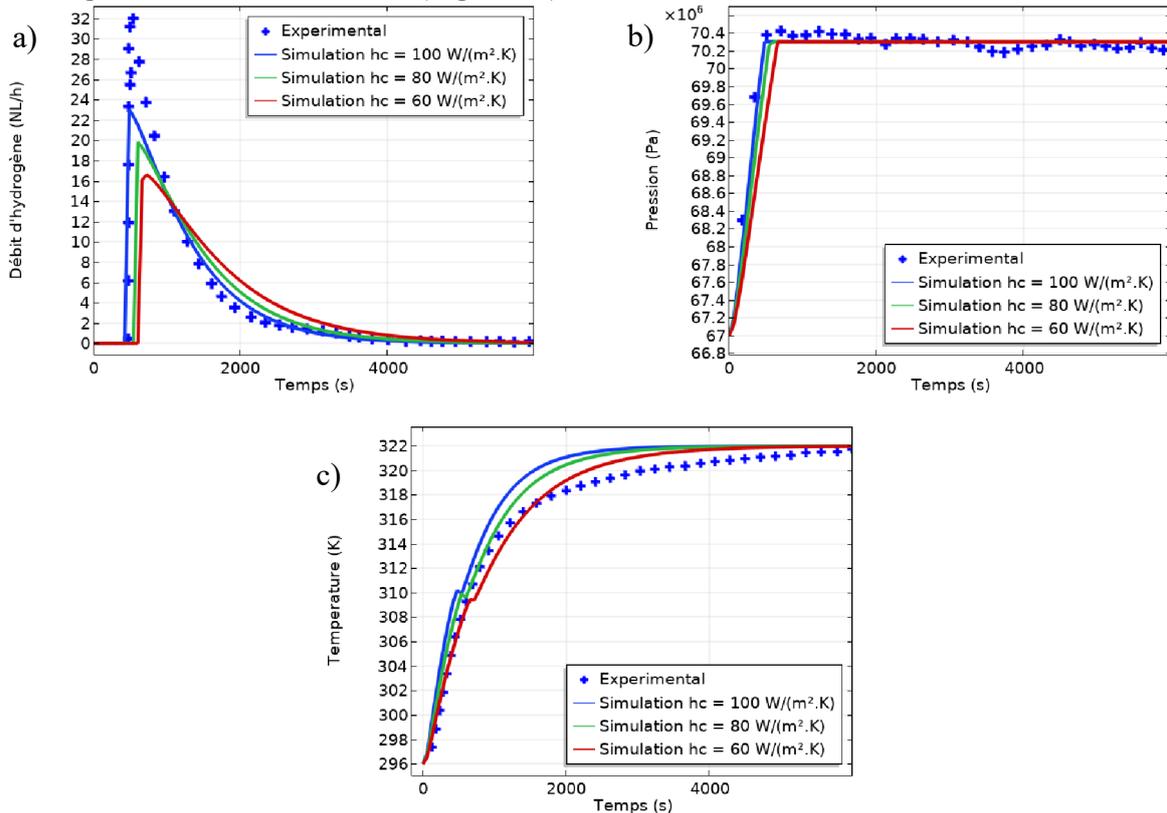


Figure 2: Comparaison des évolutions simulées et expérimentales (+) du débit de décharge d'hydrogène (a), de la pression (b) et de la température (c) en fonction du temps pour différentes valeurs de  $h_c$ .

La deuxième étude paramétrique concerne le coefficient de transfert de masse,  $h_m$ . Ce coefficient peut être comparé à un coefficient de perte de charge de la vanne d'ouverture et ne peut être obtenu que par ajustement des données expérimentales. On peut observer que plus  $h_m$  est faible, plus le débit de sortie est faible (Figure 3a) et, inversement, plus la pression dans

le compresseur est élevée même après ouverture de la vanne (Figure 3b). En effet, pour de faibles débits de sortie (Figure 3a) et avec une température qui augmente (Figure 3c), la pression d'hydrogène continue d'augmenter selon la loi de Van der Waals. Lorsque la température atteint l'équilibre, avec un faible débit de sortie, toujours existant, la perte de masse prime sur l'augmentation de température, ce qui se traduit par une perte de pression dans le compresseur.

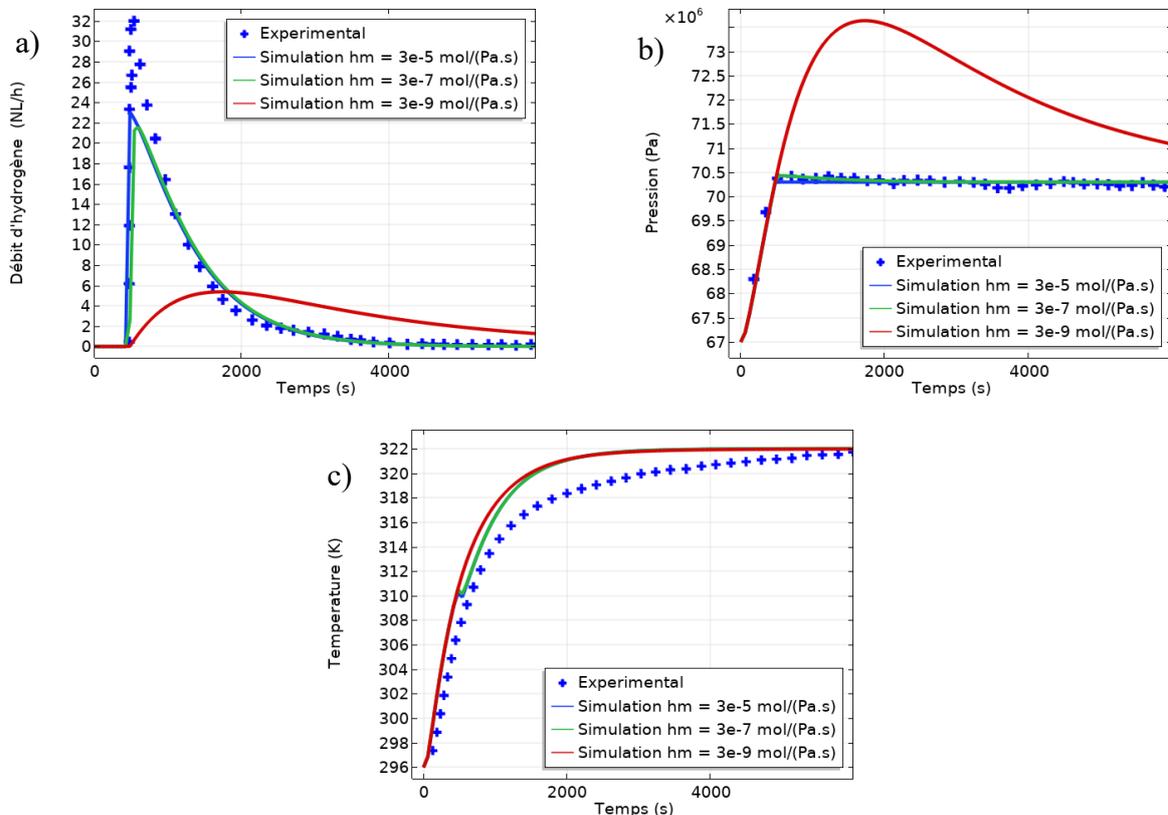


Figure 3: Comparaison des évolutions simulées et expérimentales (+) du débit de décharge d'hydrogène (a), de la pression (b) et de la température (c) en fonction du temps pour différentes valeurs de  $h_m$ .

## 4. Conclusions

Un compresseur à hydrogène non mécanique basé sur une adsorption-désorption cyclique, à entraînement thermique, d'hydrogène sur charbon actif (AC) a été modélisé. Une fois que l'hydrogène a été pré-adsorbé à 77 K, la désorption est déclenchée par échauffement du réservoir, augmentant ainsi la pression d'hydrogène à 70 MPa et plus. Cette pression correspond à l'objectif de pression requis de nos jours pour les véhicules à pile à combustible.

Ce travail décrit le chauffage et la décharge d'hydrogène à 70 MPa. La simulation numérique prédit correctement l'évolution de la pression, la température et le débit de décharge. Cette étude montre qu'un coefficient d'échange thermique,  $h_c$ , 100 W/(m<sup>2</sup>.K), et un coefficient de transfert de masse,  $h_m$ , de  $3 \times 10^{-5}$  kg/(m<sup>2</sup>.s.Pa), donnent les prédictions les plus proches des évolutions expérimentales. L'évolution de la température a montré une perturbation de la cinétique lors de la décharge d'hydrogène, qui peut s'expliquer par l'adsorption d'énergie liée à la désorption de l'hydrogène pré-adsorbé.

L'étude paramétrique de  $h_c$  montre qu'un débit de décharge plus important est disponible lorsque le flux de chaleur est plus élevé. La deuxième étude paramétrique concerne  $h_m$  et elle a montré que le débit de sortie est plus faible (Figure 3a), et que la pression à l'intérieur du compresseur est plus élevée lorsque le transfert de masse est plus faible.

## References

- [1] G. Sdanghi, G. Maranzana, A. Celzard, V. Fierro, Review of the current technologies and performances of hydrogen compression for stationary and automotive applications, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 102 (2019) 150–170. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.11.028>.
- [2] M.V. Lototsky, V.A. Yartys, B.G. Pollet, R.C. Bowman, Metal hydride hydrogen compressors: A review, *International Journal of Hydrogen Energy*. 39 (2014) 5818–5851. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.01.158>.
- [3] B. Rohland, K. Eberle, R. Ströbel, J. Scholta, J. Garche, Electrochemical hydrogen compressor, *Electrochimica Acta*. 43 (1998) 3841–3846. [https://doi.org/10.1016/S0013-4686\(98\)00144-3](https://doi.org/10.1016/S0013-4686(98)00144-3).
- [4] G. Sdanghi, G. Maranzana, A. Celzard, V. Fierro, Hydrogen Adsorption on Nanotextured Carbon Materials, in: *Hydrogen Storage Technologies*, Wiley-Blackwell, 2018: pp. 263–320. <https://doi.org/10.1002/9781119460572.ch9>.
- [5] M.-A. Richard, D. Cossement, P.-A. Chandonia, R. Chahine, D. Mori, K. Hirose, Preliminary evaluation of the performance of an adsorption-based hydrogen storage system, *AIChE J.* 55 (2009) 2985–2996. <https://doi.org/10.1002/aic.11904>.
- [6] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, 2006.
- [7] G. Sdanghi, S. Schaefer, G. Maranzana, A. Celzard, V. Fierro, Application of the modified Dubinin-Astakhov equation for a better understanding of high-pressure hydrogen adsorption, *Applied Materials and Interfaces*. (n.d.) (Submitted).
- [8] R.W. Powers, R.W. Mattox, H.L. Johnston, Thermal Conductivity of Condensed Gases. II. The Thermal Conductivities of Liquid Normal and of Liquid Parahydrogen from 15 to 27 K, *Journal of the American Chemical Society*. 76 (1954) 5972–5973.
- [9] A. Delahaye, A. Aoufi, A. Gicquel, I. Pentchev, Improvement of hydrogen storage by adsorption using 2-D modeling of heat effects, *AIChE J.* 48 (2002) 2061–2073. <https://doi.org/10.1002/aic.690480919>.
- [10] F.P. Incropera, D.P. DeWitt, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 4th ed., Wiley, New York, USA, 1996.
- [11] K. Nasrifar, Comparative study of eleven equations of state in predicting the thermodynamic properties of hydrogen, *International Journal of Hydrogen Energy*. 35 (2010) 3802–3811.
- [12] M.-A. Richard, P. Benard, R. Chahine, Gas adsorption process in activated carbon over a wide temperature range above the critical point. Part 1: modified Dubinin-Astakhov model, *Adsorpt.-J. Int. Adsorpt. Soc.* 15 (2009) 43–51. <https://doi.org/10.1007/s10450-009-9149-x>.
- [13] R.K. Ahluwalia, T.Q. Hua, J.-K. Peng, S. Lasher, K. McKenney, J. Sinha, M. Gardiner, Technical assessment of cryo-compressed hydrogen storage tank systems for automotive applications, *International Journal of Hydrogen Energy*. 35 (2010) 4171–4184. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.02.074>.
- [14] P. Bénard, R. Chahine, Determination of the Adsorption Isotherms of Hydrogen on Activated Carbons above the Critical Temperature of the Adsorbate over Wide Temperature and Pressure Ranges, *Langmuir*. 17 (2001) 1950–1955. <https://doi.org/10.1021/la001381x>.
- [15] M.-A. Richard, P. Benard, R. Chahine, Gas adsorption process in activated carbon over a wide temperature range above the critical point. Part 2: conservation of mass and energy, *Adsorpt.-J. Int. Adsorpt. Soc.* 15 (2009) 53–63. <https://doi.org/10.1007/s10450-009-9150-4>.
- [16] M.M. Dubinin, Fundamentals of the theory of adsorption in micropores of carbon adsorbents: Characteristics of their adsorption properties and microporous structures, *Carbon*. 27 (1989) 457–467. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(89\)90078-X](https://doi.org/10.1016/0008-6223(89)90078-X).
- [17] D.D. Do, H.D. Do, Adsorption of supercritical fluids in non-porous and porous carbons: analysis of adsorbed phase volume and density, *Carbon*. 41 (2003) 1777–1791. [https://doi.org/10.1016/S0008-6223\(03\)00152-0](https://doi.org/10.1016/S0008-6223(03)00152-0).