求解等温相变问题的解耦法

吴 斌 邢玉明

(北京航空航天大学 航空科学与工程学院,北京 100191)

摘 要:基于焓法模型导出了一种求解等温相变问题的简单计算模型.计算模型将温度场与液相分数场进行解耦,即可分别求解出相变控制体和非相变控制体的温度;以长方体容器为例,用计算模型进行计算并将计算结果与实验数据及焓法计算结果进行对比验证,结果吻合的很好;利用计算模型,对长方体容器和圆柱体容器内相变材料熔化时间进行数值计算比较.结果表明,在容器体积和特征尺寸相同的条件下,长方体容器内相变材料的熔化时间几乎只有圆柱体容器的一半.

关 键 词:焓法;等温相变;解耦;熔化

中图分类号:TK 512^{+}.4

文献标识码:A **文 章 编 号**:1001-5965(2008)12-1398-04

Decoupling method for solving isothermal phase change problem

Wu Bin Xing Yuming

(School of Aeronautic Science and Engineering, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: A simple computational model for isothermal phase change problem was based on the enthalpy formulation. The temperature field and liquid fraction field were decoupled of the computational model to solve the temperature of the control volume separately which was melting/freezing or not. The computational model was verified with a test problem of a rectangular container. The agreement of the computation results with the experimental data indicates this method could be used to estimate the model's isothermal phase change quickly and effectively. The numerical analysis of the melting time of phase change material for rectangular and cylindrical containers was then performed using the computational model. The results show that the phase change material of rectangular container requires nearly half of the melting time as for the cylindrical container of the same volume and characteristic size.

Key words: enthalpy formulation; isothermal phase change; decouple; melting

在能源日趋紧张的今天,新能源利用已成为社会普遍关注的焦点,而太阳能与其它新能源相比在资源潜力和持久适用性方面更具优越性,且经济环保,已得到广泛的应用.将日照太阳能辐射贮存用于加热是一种经济有效环保的能源利用手段.在各种蓄能方式中,相变材料 PCM(Phase Change Material)潜热蓄热因其高蓄能密度和吸热/释热近似等温的特点使其在蓄能领域获得了广泛的应用.

为了对太阳能加热系统进行长期的性能分析和研究,需要建立合理的蓄热单元模型,已有分析潜热贮存 LHES(Latent Heat Energy Storage)单元的物理模型大多为壳-管式 LHES 单元模型[1].文献[2]采用壳-管式 LHES 单元模型分别对基于空气和水(以空气/水为传热流体)的太阳能加热系统进行了长期性能研究分析,他们假定传热流体 HTF(Heat Transfer Fluid)流动方向及其垂直方向上的 PCM 导热系数和热阻都可忽略.基于文献中多以空气作为 HTF 对 LHES 单元模型进行研究分析,本文也将对此模型进行计算和分

收稿日期:2008-01-03

作者简介:吴 斌(1983—),男,江西永丰人,博士生,wb_buaa@126.com.

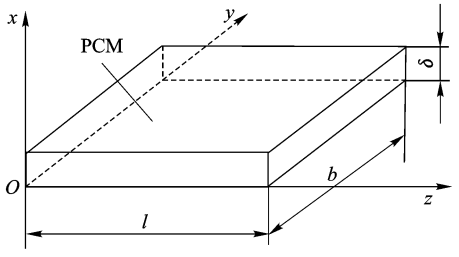
析.

PCM 相变问题在数学上是强非线性问题,多采用数值方法进行求解,在已有的数值解法中以焓法的应用较为广泛.焓法将热焓和温度一起作为待求函数,在整个区域(包括液相、固相和两相界面)建立一个统一的能量方程,利用数值方法求解出热焓分布,然后确定两相界面.焓法最大的优点就是不需要跟踪固液两相界面位置,但由于其控制方程中包含两个待求变量,求解时需采用高斯-赛德尔或类似的异步迭代,迭代收敛速度很慢,每一时间步通常需要多次迭代,且一般采用显示模式.出于稳定性考虑,时间步长一般都很小,因而计算时间较长,计算量较大.基于这些考虑,本文对非线性方程采用隐式差分离散,推导出一种简单有效易行的解耦算法模型.

1　数学模型

根据文献[3]得出的结论:当容器尺寸较小(长度为 200～400 mm)且 HTF 对流换热系数较小时,可忽略 HTF 流动方向和垂直方向上 PCM 导热的影响.本文 LHES 单元数学模型不考虑 HTF 流向和垂直方向上 PCM 的导热,HTF 与 PCM 的对流换热采用平均传热系数(α_{conv}).

对图 1 所示的长方体相变蓄热容器建立数学模型,为简化分析作以下假设:①忽略 HTF 流动方向上 PCM 的导热;②忽略 PCM 熔化阶段自然对流的影响;③PCM 性能理想,不考虑过冷等现象;④PCM 熔点固定(等温相变);⑤固液态 PCM 的热物性参数不同,但都与温度无关;⑥忽略容器壁的热阻;⑦容器侧壁绝热,即传热只发生在沿 x 的方向上.



l—长度;b—宽度;δ—厚度.

图 1　长方体容器几何外形

基于上述假设,焓法模型的能量控制方程为

$$\frac{\partial H}{\partial t}=\mathrm{div}\left(\frac{k}{\rho}\mathrm{grad}\,T\right) \tag{1}$$

式中,H 为 PCM 总焓;k 为 PCM 导热系数;ρ 为 PCM 密度;t 为时间;T 为 PCM 温度.

将 H 表述为显热和潜热部分:

$$H=h+L\cdot f_l \tag{2}$$

$$h=\int_{T_m}^{T}c\mathrm{d}T \tag{3}$$

式中,h 为显热;L 为相变潜热;T_m 为 PCM 熔化温度;f_l 为局部液相分数;c 为固态或液态比热.

$$f_l(T)=\begin{cases}1 & \text{如果 } T>T_m\\ 0 & \text{如果 } T<T_m\end{cases} \tag{4}$$

将式(2)代入式(1)整理得

$$\frac{\partial h}{\partial t}=\mathrm{div}\left(\frac{k}{\rho}\mathrm{grad}\,T\right)-L\frac{\partial f_l}{\partial t} \tag{5}$$

2　数值解法和算法

长方体 PCM 封装容器几何外形如图 1 所示,其一维 PCM 的能量控制方程为

$$\frac{\partial h}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{k}{\rho}\frac{\partial T}{\partial x}\right)-L\frac{\partial f_l}{\partial t} \tag{6}$$

将上式在内节点"i"处离散,则有

$$\frac{\partial h_i}{\partial t}=\frac{k}{\rho\Delta x^2}(T_{i-1}-2T_i+T_{i+1})-L\frac{\partial f_{li}}{\partial t} \tag{7}$$

式中,Δx 为空间步长.边界节点的离散方程取决于边界条件,并由边界控制体的能量平衡获得.

熔化过程中,非相变控制体"i"内 PCM 为纯固态或纯液态,则由式(3)和式(4)可得

$$\frac{\partial h_i}{\partial t}\equiv c\frac{\partial T_i}{\partial t} \tag{8}$$

$$\frac{\partial f_{li}}{\partial t}\equiv 0 \tag{9}$$

式中,c 值取决于控制体的相态.

此时,控制方程离散为一般的热扩散方程形式:

$$\frac{\partial T_i}{\partial t}=\frac{k}{\rho c\Delta x^2}(T_{i-1}-2T_i+T_{i+1}) \tag{10}$$

将式(10)左边的瞬态项向后差分,整理可得全隐式有限差分方程:

$$a_{i-1}\cdot T_{i-1}+a_i\cdot T_i+a_{i+1}\cdot T_{i+1}=b_i \tag{11}$$

式中,$a_{i-1}=a_{i+1}=-Fo$;$a_i=1+2Fo$;$b_i=T_i^{old}$,上标 old 表示前一个时间步长;Fo 为有限差分形式 Fourier 数:$Fo=\alpha\cdot\Delta t/\Delta x^2$,$\alpha=k/(\rho\cdot c)$为 PCM 热扩散系数.

当控制体"i"熔化(或凝固)时,液相分数 f_{li} 在(0,1)内取得,对于等温相变有 $T_i\equiv T_m$.

由式(3)得

$$\frac{\partial h_i}{\partial t}\equiv 0 \tag{12}$$

则式(7)变为

$$L\frac{\partial f_{li}}{\partial t}=\frac{k}{\rho\Delta x^2}(T_{i-1}-2T_m+T_{i+1}) \quad (13)$$

对式(13)左边液相分数项向后差分可得

$$f_{li}=f_{li}^{old}+\frac{k}{\rho\Delta x^2}(T_{i-1}-2T_m+T_{i+1}) \quad (14)$$

式(14)即为相变控制体内液相分数更新式,由此式可以看出,液相分数由温度场计算得到而与焓无关.相变时,PCM温度场由式(11)计算,此时控制方程中 $a_{i-1}=a_{i+1}=0$,$a_i=1$,$b_i=T_m$,即温度场与液相分数解耦.此外,从式(14)可见:对于等温相变,相变时提供给相变控制体的所有热量都用于改变控制体内的潜热量.

1) 熔化开始

在假定的时间步,如果 $T_i\geqslant T_m$ 而 $T_i^{old}<T_m$,则表示在这一时间步控制体内PCM开始熔化.此时需对式(14)进行修正:

$$f_{li}=f_{li}^{old}+\frac{k}{\rho\Delta x^2}(T_{i-1}-2T_m+T_{i+1})-\frac{c}{L}(T_m-T_i^{old}) \quad (15)$$

式(15)中最后一项表示部分潜热用于将上一时间控制体的温度提高至 T_m,该部分热量不能用于熔化PCM.

2) 熔化结束

在假定的时间步,如果 $f_{li}\geqslant 1$ 而 $f_{li}^{old}<1$,则表明在这一时间步控制体内PCM完全熔化,$a_{i-1}=a_{i+1}=0$,$a_i=1$,$b_i=T_m$,此时需对该控制体的离散方程(11)中的系数 b_i 进行修正:

$$b_i=T_m-\frac{L}{c}(1-f_{li}^{old}) \quad (16)$$

右边最后一项表示完全熔化控制体内PCM所需的热量,该部分热量不能用于升高PCM的温度.

3) 算法

整个计算的执行过程如下:

① 计算式(11)中的系数.当 f_{li} 的数值位于区间(0,1)内即 $0<f_{li}<1$,式(11)中的各系数为:$a_{i-1}=a_{i+1}=0$,$a_i=1$,$b_i=T_m$.

② 利用TDMA(Tridiagonal-Matrix Alogorithm)求解得到式(11)中的各节点的温度值.

③ f_{li} 利用温度场由式(14)计算得到.

④ 判断相变是否开始或是否结束.如果开始相变,则需按式(15)对 f_{li} 进行修正,并返回①;否则,再判断相变是否结束,结束则需按式(16)进行修正,返回①中再次计算,否则对下一时间步重复①~④.

大多数时间步都只需一次迭代,只有当某个控制体内的相变完成时,相变边界从该控制体移至下一个控制体时才需用到两次迭代.

3 算例及分析

长方体容器(如图1所示)$l=b=100$ mm,$\delta=20$ mm,内填充 $CaCl_2\cdot 6H_2O$(固态),$CaCl_2\cdot 6H_2O$ 热物性参数见表1[4],容器侧壁绝热,将该容器置于恒温空气中,空气沿 y 方向流动且流速 $w=5$ m/s,$T_\infty=60$ ℃,$\alpha_{conv}=16$ W/m$^2\cdot$K[5]. $CaCl_2\cdot 6H_2O$(固态)初始温度场均匀 $T_0=17$ ℃.

表1 $CaCl_2\cdot 6H_2O$ 热物性参数

参数	固态	液态
熔点/℃	29.9	29.9
潜热/(kJ·kg^{-1})	187	187
密度/(kg·m^{-3})	1710	1530
比热/(kJ·kg^{-1}·K^{-1})	1.4	2.2
导热系数/(W·m^{-1}·K^{-1})	1.09	0.53

采用本文介绍的解耦法,时间步长 Δt 取5 s,空间步长 Δx 取2 mm进行计算.如图2所示为长方体容器中心 T-t 变化的计算结果和实验测量结果.

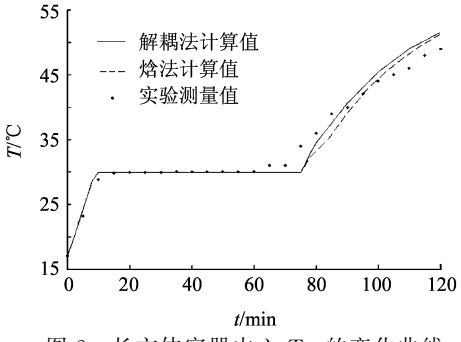


图2 长方体容器中心 T-t 的变化曲线

图2中得出的液相区的计算结果曲线斜率大于测量值,是因为计算中Grashof数中的 $\Delta T=T_\infty-T_m\approx 30$ K,而实际上随着 f_l 的增加和 T 的升高 ΔT 逐渐减小,这就导致计算中采用的空气与容器壁的 α_{conv} 比实际情况大,因此,T 上升的也就更快.图2所示解耦法计算结果和实验测量数据吻合的很好(实验测量值存在一定误差),从图中可以观察到PCM达到 T_m 的计算值比实验测量值更快,这是由于模型假设容器壁热阻被忽略导致的;计算得出的PCM熔化时间比实验数据更长,这可能是因为忽略了液态PCM自然对流换热的结果;忽略液态PCM的自然对流和HTF流动方向上PCM的导热在PCM熔化过程中没有导致重大误差.

此外,还将解耦法计算模型与传统的焓法计算结果进行了比较,图3为两者对容器内PCM熔化率的比较,从图2和图3的计算结果对比可

见两种计算模型的计算结果差别不大;传统的焓法模型一般采用显式差分离散,求解时需采用高斯-赛德尔或类似的异步迭代,收敛速度很慢,每一时间步通常需要多次迭代.出于稳定性考虑,时间步长一般都很小(本例中 Δt 取 0.5 s),计算时间较长,计算量较大,而解耦法模型采用 TDMA 求解无需迭代,时间步长可取较大值(本例中 Δt 取5 s),计算时间显著减少,大大减少了工作量.由此可见,解耦法用于求解 PCM 相变问题是可行的,且在计算时间方面较焓法也有相当的优势.

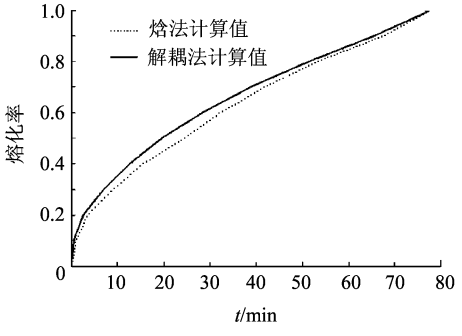


图 3　焓法与解耦法熔化率计算结果比较

4　两种容器内 PCM 熔化时间比较

PCM 胶囊的熔化时间是确定容器尺寸和形状的一个重要因素,PCM 容器设计要求容器内的 PCM 在设定的加热时间内完全熔化,以达到 LHES 单元的最大效率.据此,以长方体和圆柱体为例对容器尺寸和形状的影响进行数值比较分析.

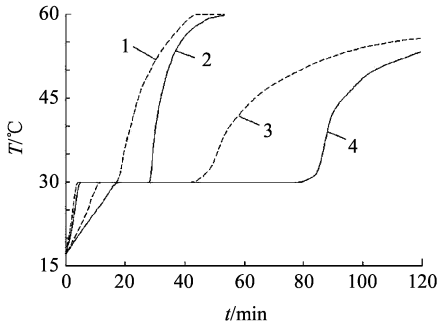
按前述假定,圆柱体容器内 PCM 的能量控制方程为

$$\frac{\partial H}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{k}{\rho}-\frac{\partial T}{\partial r}\right) \tag{17}$$

其中,r 为圆柱体容器半径.

对式(17)进行前述处理,其计算模型和程序与前述相同.

圆柱体容器和长方体容器的体积和传热面积相等,分别取圆柱体容器的 r 和长方体容器的 δ 作为各自的特征尺寸,此时两者的 PCM 质量和容器的特征尺寸相同.如图 4 所示为不同特征尺寸下圆柱体容器和长方体容器内中心 T-t 变化的计算结果(两者 HTF 流向分别为沿轴向和 y 向),可以看到,在特征尺寸相同的情况下,长方体容器比圆柱体容器内 PCM 熔化的更快,完成熔化的时间也更短,熔化时间几乎为后者的一半,而且特征尺寸越大该结果越明显.由此可见,长方体容器 PCM 熔化的效率更高.



1—长方体,δ=10 mm;2—圆柱体,r=10 mm;
3—长方体,δ=20 mm;4—圆柱体,r=20 mm.

图 4　长方体和圆柱体容器中心 T-t 变化比较

5　结　论

1) 在焓法模型的基础上,推导出了求解等温相变问题的解耦法,即:在 PCM 相变时将温度场与液相分数进行解耦.该法简单易行,与传统的焓法相比,求解时间大为减少;

2) 通过算例计算比较,解耦法计算等温相变问题结果合理可靠,验证了该算法模型的有效性;

3) 对长方体和圆柱体容器内 PCM 熔化时间进行计算比较,得出在体积和特征尺寸相同的前提下,前者的熔化效果更好,且随着特征尺寸的增加熔化效果更为突出.因此,在容器外形的选择上更倾向于选择长方体容器.

参考文献(References)

[1] Saman W, Bruno F, Halawa E. Thermal performance of PCM thermal storage unit for a roof integrated solar heating system[J]. Solar Energy, 2005, 78: 341－349

[2] Morrison D J, Abdel-Khalik S I. Effects of phase-change energy on the performance of air-based and liquid-based solar heating system[J]. Solar Energy, 1978, 20: 57－67

[3] Ghoneim A A. Comparison of theoretical models of phase-change and sensible heat storage for air and water-based solar heating systems[J]. Solar Energy, 1989, 42(3): 209－220

[4] Vyshak N R, Jilani G. Numerical analysis of latent heat thermal energy storage system[J]. Energy Conversion & Management, 2007, 48: 2161－2168

[5] Incropera F P, Dewitt D P. Introduction to heat transfer [M]. New York: John Wiley & Sons, 1985

(责任编辑:刘登敏)