

研究论文

固液相变数学模型中有效热导率

陈敬良 田怀璋 陈林辉

(西安交通大学能动学院制冷与低温工程系, 陕西 西安 710049)

摘 要 在一维固液相变数学模型中有效热导率计算公式的研究基础上, 根据理论分析和实验数据, 对一维有效热导率进行了修正, 并把有效热导率计算公式应用到二维相变问题中. 通过对等热通量和等壁温边界条件的仿真计算结果与实验数据相比较, 说明了本文的有效热导率计算方法的合理性.

关键词 硬脂酸 有效热导率 相变蓄能

中图分类号 TK 512.4

文献标识码 A

文章编号 0438-1157 (2004) 07-1072-05

EFFECTIVE THERMAL CONDUCTIVITY WITHIN MATHEMATICAL MODEL OF SOLID-LIQUID PHASE CHANGE

CHEN Jingliang, TIAN Huaizhang and CHEN Linhui

(School of Energy & Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, Shaanxi, China)

Abstract Based on the empirical equation of one-dimensional effective thermal conductivity within mathematical model of solid-liquid phase change, a modified equation of effective thermal conductivity is proposed and applied to solving the two-dimensional problem according to mathematical analysis and experimental data. The results of the model simulation are compared with the experimental data and the computing method for effective thermal conductivity is reasonable.

Keywords stearic acid, effective thermal conductivity, phase change thermal energy storage

引 言

硬脂酸 (stearic acid) 又称十八酸, 分子式 $C_{18}H_{36}O_2$, 结构式 $CH_3(CH_2)_{16}COOH$, 是一种以甘油酯形式存在于动物脂肪中的饱和脂肪酸. 由于硬脂酸熔化潜热较高, 原料易得, 对人体无任何毒害作用, 且价格便宜, 是一种有较好应用前景的相变蓄能材料^[1]. 硬脂酸的熔点为 $64\sim 68\text{ }^\circ\text{C}$, 该相变温度为利用储存 $75\text{ }^\circ\text{C}$ 以上的余热和向供暖、生活用水装置提供热量, 提供了理想的传热温差.

虽然一维相变模型中有效热导率的研究在一些文献^[2,3]中已有了介绍, 但是二维相变模型中有效热导率的研究还开展得较少. 本文在理论分析和实

验研究的基础上, 提出了二维相变模型中有效热导率计算公式. 通过利用硬脂酸一维和二维相变模型的仿真计算, 验证了有效热导率公式的正确性.

1 固液相变数学模型

1.1 前人的基础工作

在建立数学模型之前, 需要进行一些合理的简化和假设^[4]:

(1) 对熔化过程, 假定固相初始过冷; 对凝固过程, 假定液相初始过热. 因为实验条件所限, 不可能使初始状态处于临界状态; 而另一方面, 在实际蓄能应用中, 过热或过冷的显热部分均可以被充分利用, 以提高蓄能能力;

- (2) PCM 为纯净物且各向同性；
- (3) 固相 PCM 导热遵从傅里叶导热定律；
- (4) 液相 PCM 为不可压缩 Newtonian 流体，作层流流动；
- (5) 流体密度与温度的关系，遵从 Boussinesq 假定，固液两相存在密度差。

相变问题的能量方程可以分为固相、液相和界面三部分描述^[4]

$$\text{固相 } (T < T_m): \rho C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \text{div}(k_s \text{grad} T_s) + S_{T,s} \quad (1)$$

液相 $(T > T_m)$:

$$\rho C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} + v \text{grad} T_l = \text{div}(k_l \text{grad} T_l) + S_{T,l} \quad (2)$$

界面 $(T = T_m)$:

$$\Gamma(t) = \{(x, y, z) | T(x, y, z, t) = T_m\} \quad (3)$$

实际相变过程中，液相流动速度非常小，流场的计算对蓄能并无多大意义。所以自然对流可简化为只影响换热，对其他的影响可忽略。因此，可将含自然对流的 Stefan 问题简化为仅用能量方程加以描述，速度对蓄能和释能的影响可以通过对热导率的修正来考虑^[5]。这样，去掉能量方程 (2) 含有速度分量的那一项之后，能量方程可进一步简化为^[4]：

液相 $(T > T_m)$

$$\rho C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \text{div}(k_l \text{grad} T_l) + S_{T,l} \quad (4)$$

这样处理后，由于方程中没有了速度项，液相的数学描述和固相完全一样，使边界条件和数学模型的求解大为简化。为了修正模型在液相计算中的误差，本文引入液相有效热导率 k_{ef} 的概念，通过液相 Prandtl 数 Pr 、Rayleigh 数 Ra 和相变界面位置 $s(t)$ 等参数对液相热导率加以修正。公式中的热导率 k 用自然有效热导率 k_{ef} 代替。

对于一维相变问题，由文献 [2, 3] (在 $Ra < 10^{10}$, $Pr < 10^5$ 的范围内)，得到有效热导率的经验公式如下

$$\frac{k_{ef}}{k_l} = Nu \quad (5)$$

$$Nu = 0.22 \left(\frac{Pr}{Pr + 0.2} Ra \right)^{0.28} \left[\frac{l}{s(t)} \right]^{0.25} \quad \text{if } \frac{l}{s(t)} > 2 \quad (6)$$

$$Nu = 0.18 \left(\frac{Pr}{Pr + 0.2} Ra \right)^{0.29} \quad \text{if } 1 \leq \frac{l}{s(t)} \leq 2 \quad (7)$$

$$Pr = \frac{\nu_l}{\alpha_l}, Ra = \frac{g \beta l^3 \Delta T}{\alpha_l \nu_l}, \Delta T = |T_w - T_m|$$

Pr 取决于物性， Ra 与物性有关。不同的相变材料，其物性不同， k_{ef} 不同。特征尺度 l 取 x 方向的

长度。

1.2 应用于二维相变问题求解

在现实生活中，相变问题一般都是多维问题。为了增加有效热导率在实际相变问题中的应用范围，有必要将其应用到二维相变问题的计算中。二维相变问题 (如图 1 所示) 与一维相变问题有很大的不同。在一维相变问题中，相变界面是一个平面，而在二维相变问题中，相变界面是一个曲面。当有效热导率的经验公式应用于二维相变问题时， $s(t)$ 、 l 所表示的含义已改变。通过仿真和实验的多组数据比较，发现取特征尺度 l 等于对角线 OB 的长度、 $s(t)$ 等于 OA 的长度，计算出来的结果与实验的结果吻合得比较好。

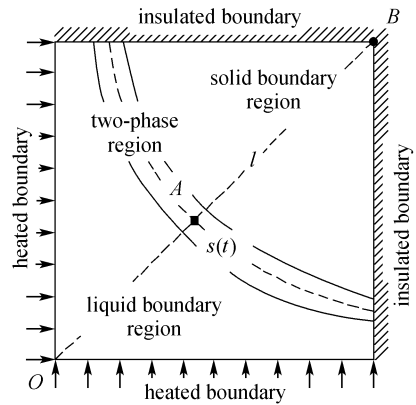


Fig. 1 Schematic of two-dimension phase change problems

1.3 有效热导率的修正

在一维的数学模型中，在同一时刻， k_{ef} 在整个液体区域为常数，没有考虑到由于液体区域各处流动的速度并不相同，导致了 k_{ef} 的差异。靠近热壁面处的流体的重力较小，从而形成的水平方向压力梯度无任何力与之平衡，必然引起流体的流动。由于黏滞力的作用，壁面附近的流体流速下降，且直接贴附于壁面的流体将停滞不动。当 Ra 较低时，靠近中心区域的流体流动最强烈；随着 Ra 的增加，运动越来越集中在热壁面。图 2 中所示的速度剖面是在实验装置的中间高度上测得的，其他高度处的速度剖面与此类似。对流换热的强度与流动方式密切相关。流体流动速度越大，对流传热系数越大，相应地 k_{ef} 也越大^[6]。考虑到 k_{ef} 与流动速度的关系，通过反复的计算，对公式 (5) 进行如下修正，数值模拟结果与实验结果吻合得比较好

$$\frac{k_{ef}}{k_l} = Nu D_{eff} \quad (8)$$

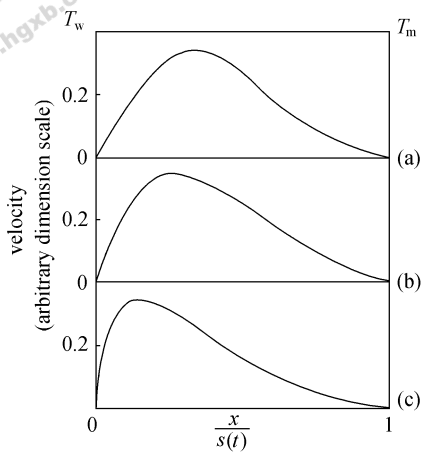


Fig. 2 Vertical velocity distribution of middle high section in vertical container

$Ra^{[6]}$: (a) 3.1×10^4 ; (b) 2.95×10^5 ; (c) 3.6×10^6

D_{eff} 定义为有效热导率的修正系数

$$D_{eff} = 2.26^{(T_w/100)} [x/s(t)] e^{-(T_w/100)[x/s(t)]} \quad (x > 0) \quad (9)$$

x 为所计算节点的位置, Nu 仍然按照式 (6) 和式 (7) 进行计算.

2 实验装置

为确定参数之间的经验关系式和验证数学模型的正确性, 设计了一套实验装置 (如图 3 所示). 实验装置为一个长方体, 其外形尺寸为: $200 \text{ mm} \times 200 \text{ mm} \times 200 \text{ mm}$. 实验装置外壁包有绝热材料. 实验装置中心区域为由四块导热隔板围成的长方体 A, 其尺寸为 $150 \text{ mm} \times 150 \text{ mm} \times 150 \text{ mm}$, 内装有相变材料硬脂酸. 四块导热隔板与外壁围成四个独立的小长方体 B、C、D、E, 其中每一个内装加热液体和固定有电加热器的铝板. 可以根据实验的需要, 接通所需要的加热器, 实现一面、两面、三面和四面加热, 从而实现一维和二维的边界条件. 由于铝板表面的温度均匀并且其截面与容器截面的大小基本相同, 所以在实验过程中, 加热液体的温度始终是均匀的. 热量沿导热隔板由加热液体均匀传入 A 内相变材料, 使其慢慢溶解, 产生相变. 在 A 内放有上、下两层、每层放有 6 条水平测温线, 每条测温线等间距布有 7 个测点, 每个测点上布有热电偶一个, 以测定 A 内点的温度随时间的变化关系, 从而测定相变过程的整个温度场变化规律. 实验共用 5 个铂电阻. 一个置于环境中, 测环境温度; 另四个分别置于 B、C、D、E 内, 测量被加热液体温度.

在本实验系统中, 计算机数据采集系统 DAS

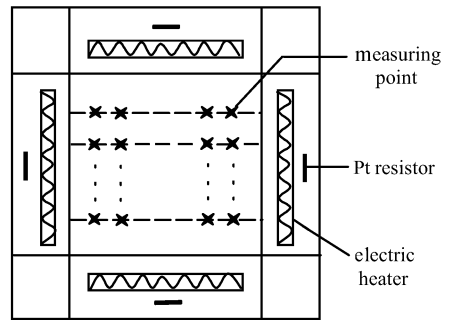


Fig. 3 Experimental apparatus

由板卡 PCL-818HG 和 PCLD-789D 组成. PCL-818HG 板卡集 IO 接口 (ISA)、AD 转换、DO 输出 (作为多路选通的控制)、直流放大、采样保持和多路选通于一体. 由于通道数太多, 使用 PCLD-789D 来扩展输入通道.

在实验中, 需要实现等热通量和恒壁温边界条件. 等热通量边界条件很容易实现, 只需要调节调压器的电压值即可, 并且通过功率变送器实现即时监测. 恒壁温条件的实现需要用计算机控制功率继电器输出板 PCLD-885.

3 数学模型的处理方法

本文采用显热容法求解数学模型. 显热容法就是把物质的潜热看作是在足够厚度的相变区域内有一个很大的显热容量. 显热容法假设相变是发生在 T_m 附近的一个温度范围内 $T_m \pm \Delta T$, 因此, 相变区域上温度随时间的变化 $T-t$ 曲线是连续的^[7]. 因此对整个区域, 能量方程式 (1)、式 (3) 和式 (4) 可以合并为^[8]

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(k \text{grad} T) + S_T \quad (10)$$

式中 $S_T = S_m - \rho L \frac{\partial \phi}{\partial t}$

考虑内热源 $S_m = 0$, 则控制方程为

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \rho L \frac{\partial \phi}{\partial t} = \text{div}(k \text{grad} T) \quad (11)$$

为了求解方便, 引入有效比热容 C_{eff} ^[9]

$$C_{eff} = C + L \frac{\partial \phi}{\partial T} \quad (12)$$

能量方程式 (10) 可简化为

$$\rho C_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(k \text{grad} T) \quad (13)$$

这里, 密度 ρ 和有效比热容 C_{eff} 的表述分别如下

$$\begin{aligned} \rho &= \phi \rho_l + (1 - \phi) \rho_s \\ C_{eff} &= \phi C_l + (1 - \phi) C_s + L d\phi/dT \end{aligned} \quad (14)$$

这里, 能量方程中的有效比热容项 C_{eff} 包含了固液

相变界面上的所有信息，因此，移动边界条件无需再独立列出。在上面的各式中， ϕ 为液相率，液相率 ϕ 和温度 T 间存在如下关系^[9]

$$\frac{d\phi}{dT} = (\epsilon\pi^{-\frac{1}{2}}) \exp[-\epsilon^2(T - T_m)^2]$$

误差函数 $\text{erf}(\epsilon\Delta T_m) = 1.0 - \lambda$ ， λ 为一极小正数。

4 计算与实验结果的比较

4.1 一维问题不同热通量下计算及实验结果

表 1 和表 2 分别为不同热通量下计算及实验所得熔解时间与硬脂酸完全溶解后导热隔板温度对照表（表中下标 exp 表示实验值，1 表示纯导热问题的计算值，2 表示改进模型前的计算值，3 表示改进模型的计算值）。表中纯导热问题的计算值表示在相变蓄能问题中不考虑对流传热，仅考虑纯导热时所得的计算结果；改进模型前的计算值表示按照公式（5）计算时所得的计算结果；改进模型的计算值表示按照公式（8）计算时所得的计算结果。从表 1 和表 2 可以看出，在不同的热通量下，纯导热问题的计算值与实验值相差极大。由此可见，在相变问题中，自然对流对热量传递的作用不可忽略，如将其考虑为纯导热问题求解的方法是不正确的。

Table 1 Comparison of melting time on stearic acid

Q/W	t_{exp}/s	t_1/s	t_2/s	t_3/s
72	12555	34665	13285	13139
150	6670	24876	7150	6914

Table 2 Temperature comparison of heat conductive partition after stearic acid melted

Q/W	$T_{\text{exp}}/^\circ\text{C}$	$T_1/^\circ\text{C}$	$T_2/^\circ\text{C}$	$T_3/^\circ\text{C}$
72	378	1009.63	381.56	382.07
150	406	1593.99	411.31	409.81

从表 1 和表 2 还可以看出，对于熔解时间与完全熔解后导热隔板温度，虽然改进模型的计算值比改进模型前的计算值更符合实验值，但是总的说来，实验值、引入有效热导率后的计算值和改进模型的计算值之间相差都不大。这是因为对于一定量的硬脂酸，不管其导热模型是否与机理相吻合，加入足够的热量，硬脂酸都会熔解。导热模型与机理是否相吻合会影响温度场。从图 4 和图 5 中可以看出：改进模型前的计算中，熔化部分硬脂酸的温度

场为一直线，这是由于同一时刻，所有熔化部分硬脂酸的 k_{eff} 都相同，这显然是对实际问题作了较大的简化；同时也可以看出，改进模型的温度场比改进模型前的温度场更符合实验值。

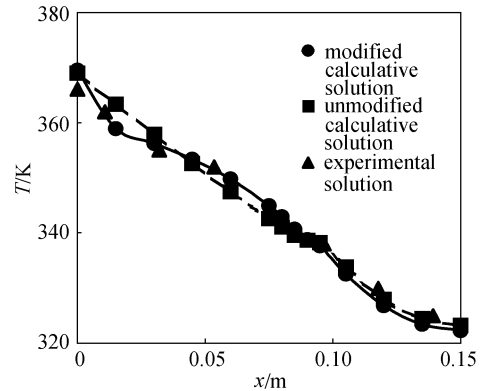


Fig. 4 Comparison of temperature fields at $Q=72\text{ W}$ and $t=9000\text{ s}$

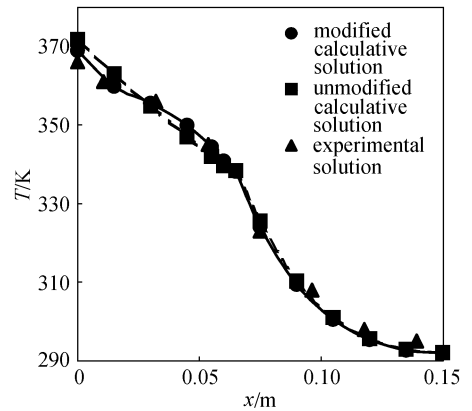


Fig. 5 Comparison of temperature fields at $Q=150\text{ W}$ and $t=3000\text{ s}$

4.2 二维问题不同壁温下计算及实验结果

本文实验和计算所验证的二维问题为：相邻两面壁温保持相同温度，其余两面保持绝热。表 3 为二维问题中硬脂酸熔解时间对照表。从表中可以看出，计算值与实验值吻合得比较好。图 6 为计算二维相变问题界面的位置图（ $T_w=100^\circ\text{C}$ ，时间间隔相等且为 1000 s）。从图中可以看出，在开始界面移动得非常快，在第一个 1000 s，界面移动了约 1/4。随着时间的增加，由于热阻的增加，界面移动变得缓慢。到了后期，由于未熔化硬脂酸占全部硬脂酸的比例很小，界面移动得越来越快。计算出的固液界面的变化规律在实验中得到了很好的证明，从而也说明本文中提出的有效热导率的计算方法是合理的。

Table 3 Comparison of melting time on two-dimension problem ($\Delta t=1$ s)

$T_w/^\circ\text{C}$	t_{exp}/s	t_{cal}/s
100	13589	14386
120	8529	8922
140	5916	6349

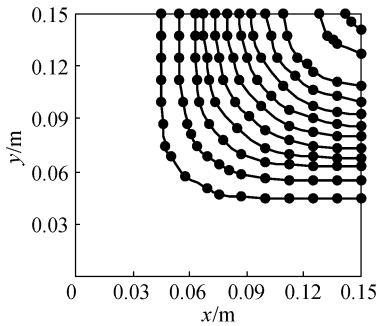


Fig. 6 Calculative interface movement of two-dimension problem ($T_w=100^\circ\text{C}$, $\Delta t=1000$ s)

5 结 论

本文研究了已有的固液相变数学模型. 通过对实验数据的分析和思考, 提出了模型的改进方向. 研究中得出的结论总结为以下几点:

(1) 根据文献 [2, 3], 引入了一维相变问题有效热导率概念, 并且将有效热导率应用到二维相变问题, 扩大了有效热导率的使用范围, 增加了有效热导率的实用价值.

(2) 提出了一种对已有的一维相变问题数学模型加以改进的方法, 对一维有效热导率进行了修正, 使有效热导率具有更加明确的物理意义, 使一维的计算结果更接近于实验结果.

符 号 说 明

- C ——比定压热容, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- D_{eff} ——有效热导率的修正系数
- g ——重力加速度, $\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$
- k ——热导率, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- k_{ef} ——修正前的有效热导率, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- k_{eff} ——修正后的有效热导率, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- L ——相变潜热, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$
- l ——特征尺度, m
- Nu ——Nusselt 数
- Pr ——Prandtl 数
- Ra ——Rayleigh 数

- S ——源项
- s ——界面位置
- T ——温度, K
- ΔT ——温度差 ($\Delta T=T-T_m$), K
- ΔT_m ——相变区温度半宽, K
- t ——时间, s
- v ——速度, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
- x, y ——横、纵坐标
- α ——热扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- β ——热膨胀系数, K^{-1}
- ν ——运动黏度, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- ρ ——密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
- ϕ ——液相率

下角标

- cal——计算值
- exp——实验值
- l ——液相
- m ——相变
- s ——固相
- w ——壁面

References

- 1 Chen Weike (陈伟珂), Chen Weilin (陈伟琳), Zhao Li (赵力), Zhang Tianjin (张天瑾). Experimental Study of Small-scale Cool Storage Air Conditioning System. *Journal of Tianjin University of Technology* (天津理工学院学报), 1999, **15** (2): 70—74
- 2 Berkovsky B M, Polevikov V K. Heat Transfer and Turbulent Buoyant Convection. In: Spalding D B, Afgan N, eds. Convective Heat Transfer. Washington D C: Hemisphere Publication Corporation, 1977. 453
- 3 Costa M, Buddhi D, Oliva A. Numerical Simulation of a Heat Thermal Energy Convection. *Mgmt.*, 1998, **39** (11): 1127—1138
- 4 Swaminathan C R, Voller V R. Heat Fluid Flow. *Int. J. Num. Meth.*, 1993, **3** (1): 233
- 5 Zhong Zhigang (钟志刚). Mathematics Model Investigation for Rules on Energy Charge and Discharge of Phase Change Thermal Energy Storage System: [dissertation] (学位论文). Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2001
- 6 Guo Zengyuan (过增元). Thermal Hydromechanics (热流体力学). Beijing: Tsinghua University Press, 1992. 123—125
- 7 Wrobel L C, Brebbia C A, Nowak A J. Advanced Computational Methods in Heat Transfer. UK: Portsmouth UK Press, 1990. 67—69
- 8 Kong Xiangqian (孔详谦). Application of Finite Element Method Within Heat Transfer (有限单元法在传热学中的应用). 3rd ed. Beijing: Science and Technology Press, 1998. 55—58
- 9 Rodeigues J F. Mathematical Models for Phase Change Problems. Obidos, Portugal: Basel Birkhauser Verlag, 1989. 75