

УДК 536.421.1

Д. Н. Попов, кандидат технических наук
 В. Н. Диденко, доктор технических наук, профессор
 Р. З. Касимов, старший преподаватель кафедры «Теплоэнергетика»
 ИжГТУ имени М. Т. Калашникова

МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ, ЗАКЛЮЧЕННЫХ В ДВУМЕРНЫЙ ОБЪЕМ

Работа посвящена компьютерному моделированию процессов теплообмена, сопровождающихся изменением фазового состояния теплоаккумулирующего материала. Излагается авторская методика решения двумерной задачи теплопроводности при наличии фазовых переходов «плавление – отвердевание». Представлены результаты тестовых расчетов для материала, заключенного в капсулы различных форм. Исследован вопрос о целесообразности учета неравномерности теплоотдачи на поверхности капсулы при определении времени полного завершения фазового перехода во всем объеме материала.

Ключевые слова: численное моделирование, фазовые переходы, теплоаккумулирующие материалы.

Предполагается, что ряд технологических аппаратов различных производств, включая тепло- и массообменные установки, могут содержать в составе емкостей, трубопроводов, воздухопроводов и т. п. теплоаккумулирующие материалы (ТАМ), функционирующие по принципу «плавление – отвердевание», заключенные в капсулы различных форм и размеров [1].

В качестве примеров можно назвать хранилища и емкости нефтеперерабатывающих и химических предприятий [2], устройства для утилизации солнечной энергии, биореакторы для производства биогаза и др., т. е. там, где требуется стабильность температуры рабочего тела (жидкости или газа) при переменных внешних условиях. Рабочее тело в таких объектах подвергается различным тепловым воздействиям, под влиянием которых формируются поля температуры и концентрации в объеме ТАМ. В результате происходящих фазовых переходов забирается или выделяется теплота, необходимая для поддержания требуемых технологических условий в установках. Поэтому при создании и оптимизации технических объектов, включающих ТАМ, необходимо уметь прогнозировать отмеченные процессы при различных (в том числе знакопеременных) внешних тепловых потоках.

Данная работа посвящена исследованию процессов теплообмена и фазовых превращений, происходящих в капсулированном ТАМ и является логическим продолжением работ [3–5], где дано описание методики расчета процессов плавления и отвердевания и представлены результаты, характеризующие распределение параметров по одной координате и время процесса.

Рассматривается функционирование ТАМ в капсулах, формы которых позволяют выделить двумерную расчетную область (плоская стенка, цилиндр, шар). На поверхности оболочки капсулы, имеющей несущественные толщину и термическое сопротивление, задается тепловой поток:

$$q = q(\tau, \xi),$$

где τ – время, а ξ принимает значения x, z или ψ – дополнительная к модели [6] линейная или угловая координата. При реализации граничных условий третьего рода это достигается переменностью по поверхности коэффициента теплоотдачи α и температуры окружающей капсулу среды T_f . Процесс теплообмена можно разделить на три этапа. На первом этапе реализуется инертный нагрев или охлаждение материала, в зависимости от соотношения между T_f и начальной температурой T_0 . Далее, при достижении на внешней границе фиксированной температуры фазового перехода T^* происходит образование новой фазы, сопровождающееся изменением положения межфазной границы $S(\tau)$, соответствующей диапазону изменения массовой доли, например жидкой неподвижной фазы $0 < \eta < 1$ (степени фазового перехода). Третий этап связан с изменением температуры образовавшейся фазы. Дополнительно рассматривается вариант с наличием двух межфазных границ.

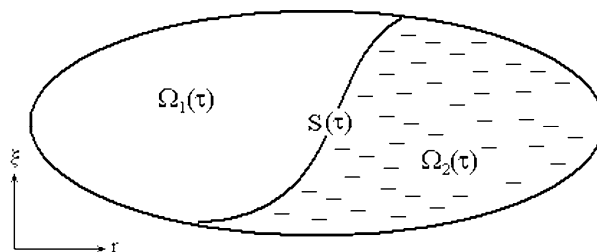


Рис. 1. Схема расчетной области

С учетом этого математическая формулировка задачи представляется следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{\partial T_1}{\partial \tau} = a_1 \left[\frac{1}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\gamma \frac{\partial T_1}{\partial r} \right) + D_1 \right], & \vec{r} = (r, \xi) \in \Omega_1(\tau); \\ \frac{\partial T_2}{\partial \tau} = a_2 \left[\frac{1}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\gamma \frac{\partial T_2}{\partial r} \right) + D_2 \right], & \vec{r} = (r, \xi) \in \Omega_2(\tau); \end{cases} \quad (1)$$

$$\tau = 0: T_k(r, \xi) = T_0 \quad (k = 1, 2);$$

$$r = R: \frac{\partial T_k(\tau, \xi)}{\partial r} = \alpha(\tau, \xi) [T_f(\tau) - T_k(\tau, \xi)]; \quad (2)$$

$$\xi = 0, \Xi: \frac{\partial T_k(\tau, r)}{\partial \xi} = 0;$$

$$\bar{r} = (r, \xi) \in S(\tau): \begin{cases} T_k = T^*, \\ \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial n} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial n} = Q_\phi \rho_1 (1 - \eta) V_n, \end{cases} \quad (3)$$

где индекс 1 относится к параметрам исходной, а индекс 2 – к параметрам новой фазы; $\gamma = 0, 1, 2$ – соответственно для пластины, цилиндра и шара; $a_k = \lambda_k / (c_k \cdot \rho_k)$ – коэффициент температуропроводности k -й фазы;

$$D_k = \begin{cases} \frac{\partial^2 T_k}{\partial x^2} \text{ при } \gamma = 0; \\ \frac{\partial^2 T_k}{\partial z^2} \text{ при } \gamma = 1 \text{ и } \alpha = \alpha(\tau, z); \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T_k}{\partial \psi^2} \text{ при } \gamma = 1 \text{ и } \alpha = \alpha(\tau, \psi); \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T_k}{\partial \psi^2} + \frac{\cos \psi}{r^2 \sin \psi} \frac{\partial T_k}{\partial \psi} \text{ при } \gamma = 2; \end{cases}$$

Q_ϕ – теплота фазового перехода; V_n – скорость движения межфазной границы по нормали n .

Конечно-разностная аппроксимация уравнений (1) и реализация условий (2) обычно затруднений не вызывает. Второе из представленных условий (3) на границе фазового перехода $S(\tau)$ используется для расчета приращения степени фазового перехода [7, 8]:

$$\Delta \eta = \frac{\Delta \tau \left(\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial n} S_1 - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial n} S_2 \right) + 0,5 c_1 m (1 - \eta) \Delta T_\tau}{Q_\phi \cdot W \cdot \rho_1 (1 - \eta)},$$

где площади $S_{i+\frac{1}{2}, j}, S_{i-\frac{1}{2}, j}, S_{i, j+\frac{1}{2}}, S_{i, j-\frac{1}{2}}$, объем $W_{i, j}$

и масса $m_{i, j}$ отдельно взятого контрольного элемента с центром в точке i, j определяются из геометрических соображений. Фазовый переход считается законченным, когда концентрация $\eta_{i, j}$ становится равной единице (или нулю). За весь период времени фазового перехода в контрольном объеме, при $0 < \eta_{i, j} < 1$, температура $T_{i, j}$ принимается равной T^* .

Расчеты проводились для системы «лед – вода» с характеристиками: $T^* = 273 \text{ К}$; $Q_\phi = 3,34 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$; $c_1 = 2300 \text{ Дж/(кг·К)}$; $c_2 = 4200 \text{ Дж/(кг·К)}$; $\rho_1 = 917 \text{ кг/м}^3$; $\rho_2 = 1000 \text{ кг/м}^3$; $\lambda_1 = 2,2 \text{ Вт/(м·К)}$; $\lambda_2 = 0,551 \text{ Вт/(м·К)}$; $T_0 = 263 \text{ К}$; $R = 0,005 \text{ м}$; $\Xi = 0,3 \text{ м}$. Отработанные для двумерного варианта расчетные алгоритмы были протестированы при коэффициенте теплоотдачи, постоянном по всей внешней

поверхности капсулы (табл. 1 и 2). Результаты расчетов тождественны таковым для одномерного случая.

Таблица 1. Значения времени полного плавления ТАМ

Форма капсулы	Одномерный вариант расчета [3] при $\alpha = 150 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$	Двумерный вариант	
		$\alpha = 150 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$	$\bar{\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha(\zeta)}{n} = 150 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$
Цилиндр	365,1 с	359,6 с	376,1 с
Шар	260,9 с	255,2 с	252,3 с

В табл. 2 приведены расчетные значения энтальпии ТАМ в момент завершения процесса плавления по всему объему.

Таблица 2. Значения итоговой энтальпии (после полного расплава ТАМ)

Форма капсулы	Одномерный вариант расчета [3] при $\alpha = 150 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$	Двумерный вариант	
		$\alpha = 150 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$	$\bar{\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha(\zeta)}{n} = 150 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$
Цилиндр (длина 1 м)	94250 Дж/кг	95340 Дж/кг	94040 Дж/кг
Шар	639,7 Дж/кг	649,3 Дж/кг	644,6 Дж/кг

На рис. 2 показаны положение границы раздела фаз и температурные поля в расплавленной части цилиндра в различные моменты времени при линейном изменении коэффициента теплоотдачи ($\alpha = 17,4 \div 46 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$) по продольной оси капсулы. Видно, что распределение межфазной границы и изотерм также близко к линейному до достижения расплавом оси симметрии. Во всей области, занимаемой твердой фазой, температура близка к T^* .

В работе [9] представлено изменение относительного коэффициента теплоотдачи $\alpha_\psi / \bar{\alpha}$ по окружности поперечно обтекаемого цилиндра для чисел Прандтля $Pr \approx 1$, характеризующееся снижением величины от лба цилиндра к его середине и минимумом при $\psi = 100^\circ$. Обработка графика с использованием SVD-алгоритма [10] представляет для дальнейшего использования следующие корреляции:

$$\frac{\alpha_\psi}{\bar{\alpha}} = \begin{cases} 1,6554 + 0,3244\psi - 2,0207\psi^2 + 2,977\psi^3 - \\ - 2,0529\psi^4 + 0,4623\psi^5 \text{ при } \psi \leq 1,745 \text{ рад}; \\ - 4,0645 + 5,479\psi - 2,2759\psi^2 + 0,3323\psi^3 \\ \text{при } \psi \geq 1,745 \text{ рад}. \end{cases}$$

Относительная погрешность аппроксимации здесь не превышает 4,9 %.

Результаты расчетов для данного варианта представлены на рис. 3. На ранней стадии плавления заметен излом межфазной границы, соответствующий минимуму $\alpha_\psi / \bar{\alpha}$, который впоследствии постепенно сглаживается. Время полного плавления материала и конечное значение энтальпии с неравномерной по окружности цилиндра теплоотдачей и средним коэффициентом $\bar{\alpha} = 150 \text{ Вт/(м}^2\cdot\text{К)}$ приведено в табл. 1 и 2.

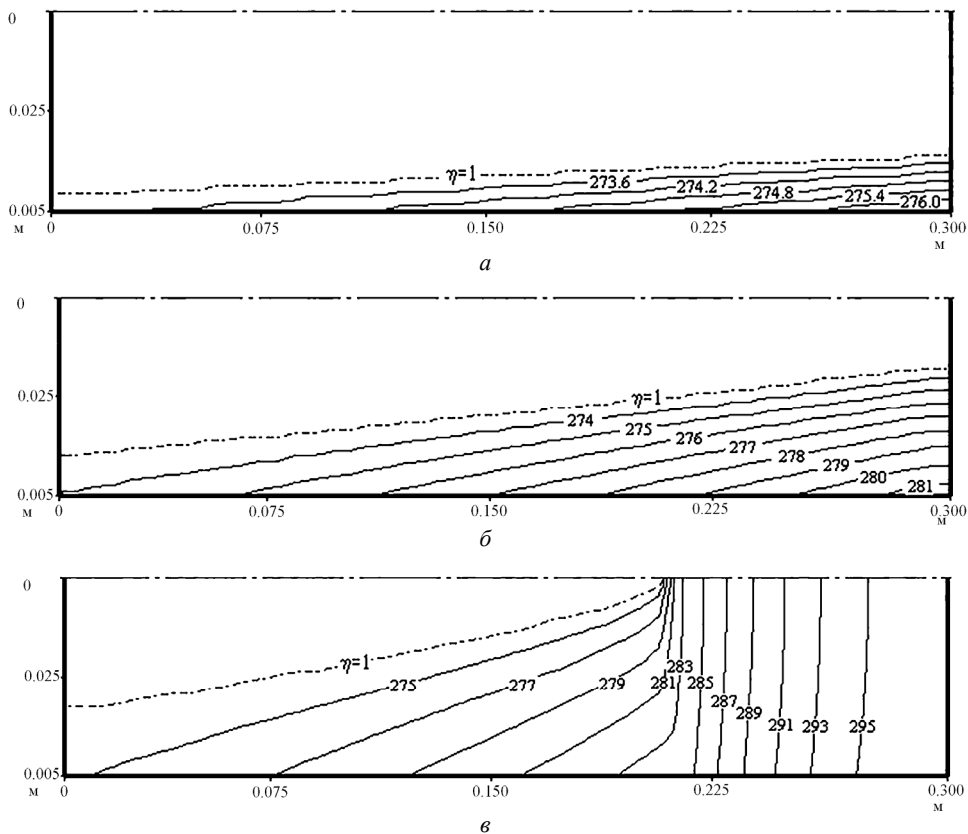


Рис. 2. Положение межфазной границы и распределение температуры в жидкой фазе ТАМ в цилиндре ($\gamma = 1$) при $\alpha = \alpha(z)$ и $\bar{\alpha} = 34$ Вт/(м²·К) в моменты времени: а – $\tau = 300$ с; б – $\tau = 600$ с; в – $\tau = 900$ с

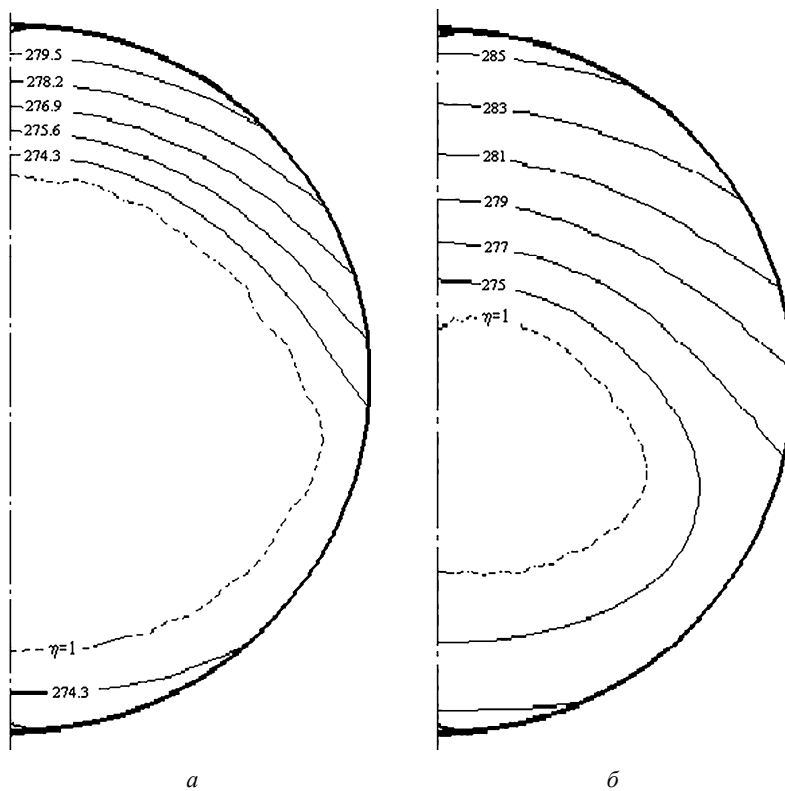


Рис. 3. Положение межфазной границы и распределение температуры в жидкой фазе ТАМ в цилиндре ($\gamma = 1$) при $\alpha = \alpha(\psi)$ и $\bar{\alpha} = 50$ Вт/(м²·К) в моменты времени: а – $\tau = 300$ с; б – $\tau = 600$ с

Локальный характер теплоотдачи рассматривается также в работе [11], но применительно для свободной конвекции газа относительно поверхности сферы. Отмечается зона высокой интенсивности в диапазоне углов $20^\circ \leq \psi \leq 110^\circ$. Обработка результатов указанного исследования дает необходимую для упрощения расчетного алгоритма аппроксимационную зависимость:

$$\alpha_\psi = 7,9298 + 17,7917\psi - 40,5542\psi^2 + 41,9095\psi^3 - 22,1532\psi^4 + 5,6373\psi^5 - 0,5469\psi^6$$

с максимальной погрешностью 3,69 %. Результаты расчетов процесса плавления ТАМ, заключенного в капсулу сферической формы, представлены на рис. 4, время полного плавления материала и конечное значение энтальпии – в табл. 1 и 2.

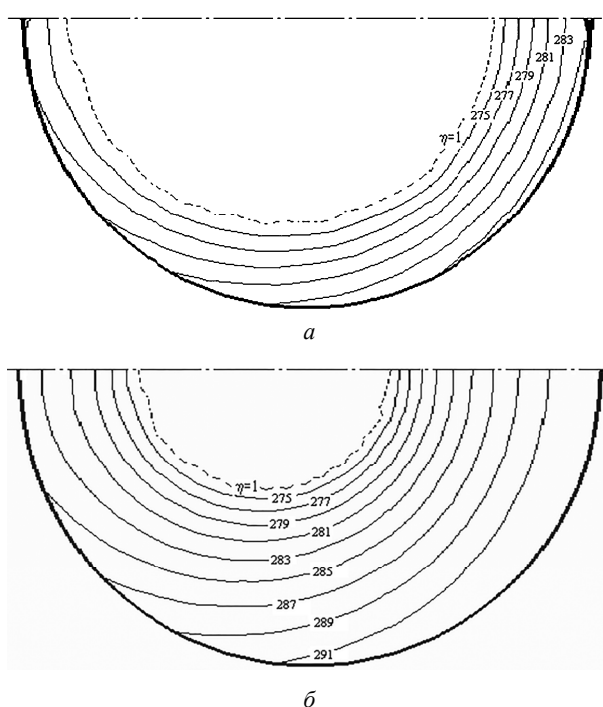


Рис. 4. Положение межфазной границы и распределение температуры в жидкой фазе ТАМ в шаре ($\gamma = 2$) при $\alpha = \alpha(\psi)$ и $\bar{\alpha} = 150$ Вт/(м²·К) в моменты времени: а – $\tau = 100$ с; б – $\tau = 200$ с

На рис. 5 представлен результат, характерный для циклического внешнего воздействия. Температура среды, окружающей сферическую капсулу, в первом цикле изменялась по закону:

$$T_f = \begin{cases} 303, & \text{при } \tau < 1000 \text{ с;} \\ 243, & \text{при } \tau \geq 1000 \text{ с.} \end{cases}$$

Особенностью здесь является наличие двух межфазных границ, обладающих различной скоростью. Наибольшим изменением температуры характеризуется вновь образовавшаяся твердая фаза, тогда как в жидкости и «старой» твердой фазе температура близка к T^* .

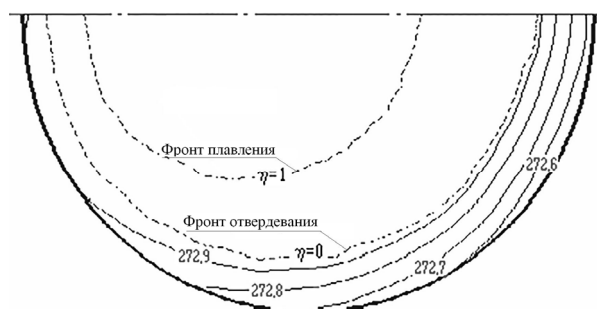


Рис. 5. Положение двух межфазных границ и распределение температур в твердой фазе ТАМ ($\gamma = 2$) при $\alpha = \alpha(\psi)$ и $\bar{\alpha} = 15,9$ Вт/(м²·К) в момент времени $\tau = 1500$ с

Выводы:

1. Методика, ранее разработанная авторами для решения одномерных задач теплопроводности с фазовыми переходами, распространена на двумерные задачи с использованием неподвижной сетки и явной конечно-разностной схемы. Зона фазового перехода также имеет ненулевую толщину и локализована в неизотермическом контрольном объеме между соседними узлами сетки, где степень (глубина) фазового перехода изменяется от 0 до 1.

2. Разработанная методика позволяет производить расчет процессов изменения фазового состояния теплоаккумулирующих материалов, заключенных в капсулы наиболее распространенных форм при различных внешних воздействиях, что и является основанием для проведения дальнейших вычислений параметров отмеченных процессов в областях более сложных форм, конвективных течений в расплавленной части материала и др.

3. Установлено, что в рассмотренных диапазонах изменения коэффициента теплоотдачи на внешней поверхности капсул размерность задачи слабо влияет как на время полного расплава материала капсул, так и на значения его энтальпии в момент полного расплава.

Библиографические ссылки

1. Диденко В. Н., Касимов Р. З., Попов Д. Н. О расчете фазовых переходов капсулированных ТАМ // Промышленная энергетика. – 2011. – № 12. – С. 14–17.
2. Попов Д. Н., Варфоломеева О. И., Хворенков Д. А. Численное исследование неизотермических течений нефтепродуктов с учетом нестабильных вязкопластичных свойств : монография. – Ижевск : Изд-во ИжГТУ, 2013. – 64 с.
3. Диденко В. Н., Касимов Р. З., Попов Д. Н. О расчете фазовых переходов капсулированных ТАМ. С. 14–17.
4. Диденко В. Н., Касимов Р. З., Попов Д. Н. Моделирование фазовых переходов в капсулированных ТАМ // Интеллектуальные системы в производстве. – 2013. – № 1 (21). – С. 13–17.
5. Диденко В. Н., Касимов Р. З., Попов Д. Н. Методика расчета процессов плавления и отвердевания теплоаккумулирующих материалов в мелкодисперсных капсулах // Инженерно-физический журнал. – 2015. – Т. 88; № 1. – С. 20–24.

6. Диденко В. Н., Касимов Р. З., Попов Д. Н. Моделирование фазовых переходов в капсулированных ТАМ. С. 13–17.

7. Там же.

8. Диденко В. Н., Касимов Р. З., Попов Д. Н. Методика расчета процессов плавления и отвердевания теплоаккумулирующих материалов в мелкодисперсных капсулах. С. 20–24.

9. Кутателадзе С. С. Основы теории теплообмена. – М. : Атомиздат, 1979. – 417 с.

10. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. – М. : Мир, 1980. – 280 с.

11. Ефимова А. В., Жилкин Б. П. Влияние нестационарности на локальную теплоотдачу при свободной конвекции для шара в газе // Исследовано в России (электронный научный журнал). – 2006. – С. 727–733.

* * *

D. N. Popov, PhD in Engineering, Kalashnikov ISTU

V. N. Didenko, DSc in Engineering, Professor, Kalashnikov ISTU

R. Z. Kasimov, Senior Lecturer, Kalashnikov ISTU

Method of numerical modeling of phase transformations of heat accumulating materials captured in a two-dimensional form

The paper is concerned with computer simulation of heat transfer processes, accompanied by a change of a phase state of heat accumulating materials. Author's method of solving the two-dimensional problem of heat conduction in the presence of phase change «melting-solidification» is represented. The test calculation results for the material contained in the capsules of various forms are presented. The problem of advisability to account the unevenness of heat transfer on the capsule's surface by timing of full completion of phase change in all material volume is studied.

Keywords: numerical modeling, phase transformations, heat accumulating materials.

Получено: 09.04.15