



中国工程热物理学会

Chinese Society of Engineering Thermophysics

2023 年度传热传质学术年会 论文集

工业应用、换热器及其他分册

中国工程热物理学会

2023·北京

横掠扭曲/直扁管组合管束的流动与传热特性研究

孙恺, 王元涛, 高全福, 宋克伟
(兰州交通大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730070)
(Email: songkw@mail.lzjtu.cn)

摘要: 管束式换热器是一种常见的换热设备, 由于其具有结构简单、成本低廉等特点被广泛应用于工业生产制造。为了提高换热器的综合换热性能, 改变换热管的形状是常用的重要方式之一。然而, 在相同雷诺数下, 扭曲扁管管束的换热性能和综合换热性能优于圆管管束, 但流体横掠扭曲扁管管束的流动阻力同样显著增大。扁管作为一种强化换热器件, 在工业生产中得到广泛应用, 其特点包括尾迹区小和流动阻力小。因此, 本文基于扭曲扁管管束的布置方式, 通过将组合相同数量的扭曲扁管与直扁管, 分析了组合式管束的流动和传热性能。研究结果表明, 组合管束能够实现更好的综合换热效果。相比圆管管束, 组合管束的流动阻力减小达 28.13%, 综合换热性能最大提升约 16.52%。

关键词: 管束换热器; 横掠; 扭曲扁管; 组合管束; 强化换热

0 前言

近年来, 全球能源紧缺问题日益严重^[1]。如何合理高效地利用能源成为世界各国关注的焦点, 也是实现绿色发展和可持续发展的关键。在这一背景下, 强化换热器的换热性能受到越来越多国家的重视, 高性能换热设备的使用已成为有效利用能源的方法之一^[2]。管束换热器是一种常见的典型换热设备, 其综合换热性能主要由气体侧的对流换热系数和压力损失决定。研究表明, 在扭曲管束中, 流体的纵向和横向流动能显著增强传热效果。

圆管由于制造方便, 在早期的换热器中较为常见。Pierson^[3]、Bergelin 等^[4]报道了许多关于顺排和交错排列圆管管束的粘性流动传热和流体摩擦的实验数据。Grimson^[5]总结了顺排和交错排列管束的传热特性, 并提供了努塞尔数的相关公式。Jakob^[6]总结了顺排和交错排列管束的经验摩擦因子公式。Kim^[7]研究了纵向节距对管内对流换热的影响, 结果表明, 随着纵向节距的减小, 传热量将降低至 37.1%。然而, 当纵向间距比大于 2.7 时, 纵向间距对传热影响较小。Zhang 等^[8]研究了均匀壁热流边界条件下斜流管组的流体流动和对流传热。随着管轴斜角从 0°增加至 90°, 对流传热速率和摩擦系数均增加, 并提出了不同几何参数下斜角对传热系数和摩擦系数的预测。Li 等^[9]发现交叉微管束的平均传热系数不受热流密度的影响, 但随雷诺数和横向间距的增大而增大, 随纵向间距的增大而减小。阻力系数不受热流密度和纵向间距的影响, 但随雷诺数和横向间距的增大而减小。刘万旺等^[10]研究了顺布置的圆管管束的流动和传热性能, 通过数值模拟得出了不同纵向节径比和横向节径比对圆管管束努塞尔数和阻力系数的影响。研究结果显示, 管排结构相较于单管具有更强的湍流程度, 平均努塞尔数比单管提高了 37%。增大横向节径比和纵向节径比能够提高管束的换热效果, 但所受摩擦阻力也随着增大, 当横向节径比为 2.5、纵向节径比为 2.7 时综合传热能力最优。陈水林等^[11]实验研究了正五边形的排列方式对圆管管束传热和流动阻力的影响。实验结果表明, 当雷诺数在一定范围内, 圆管管束正五边形的排列方式要比正三角形的排列方式好, 其传热性能提高了约 9.3%, 阻力系数增加约 13.4%, 而且综合换热性能也得到提升, 因此正五边形的管排方

式更加具有应用价值。Zhao 等^[12]考察了振荡边界条件下 1 排和 2 排管束的强化换热,与稳态相比,1 排管束和 2 排管束模型的传热系数分别提高了 119.19 %和 150.36 %。Yang 等^[13]考虑了斜管束流倾斜角度对传热性能的影响,结果表明倾斜角度为 8°的交替排列方式可以显著提高传热效率,最高可达 33 %。Shen 等^[14]发现螺旋管束的螺旋角参数(15°、30°、45°、60°、75°)对流动和传热有显著影响,阻力系数和努塞尔数均随螺旋角的增大先增大后减小。

扁管是一种广泛应用于管束式换热器的强化换热器件,具有尾迹区小和流动阻力小等特点。相比圆管,在管壳内布置扁管可以实现更紧凑的结构,并且具有更好的换热效果,符合紧凑型换热器的设计要求,是一种高效率的换热器^[15,16]。近年来,学者们对扁管进行了广泛研究。喻九阳等^[17]改进了扁管管束换热器的结构,研究表明,在相同的进出口体积流量下,扁管换热器的传热系数比圆管增加了 50%,综合换热性能提高了 2 倍以上。Toolthaisong 等^[18]对空气迎角对交叉流式换热器的传热影响进行了实验研究,发现平均传热系数和空气压降随着空气迎角的增加而增加,但综合性能下降;高速气流对压降性能影响较大,因为速度增加会导致空气压降迅速增加。Refaey 等^[19]通过数值模拟研究了湍流下叉排扁管结构的对流传热,考察了管束的纵向间距比、横向间距比、雷诺数和换热管形状对传热和流动特性的影响。在层流状态下,Jassim 等^[20]研究了顺排布置的扁管管束的流动和传热特性,结果显示扁管管束的换热性能优于圆管管束,换热能力提高了 32.5%~60.6%,而阻力系数相比圆管管束下降了 11%~30.6%。Mazdak 等^[21]详细分析了截面为椭圆形和 triple cassini 换热器的换热特性和阻力特性,并与圆形的动力学特性进行了比较, triple cassini 截面的努塞尔数最高,且其 PEC 高于圆管 40% - 50%。He 等^[22]通过数值计算分别研究了横掠圆管束、椭圆管束、蛋形管束和凸轮形管束对传热的影响,研究发现椭圆管束的传热系数最大,圆管束的传热系数最低。Benarji 等^[23]研究了层流下非稳态扁管管束的特性,并总结了管间距对扁管换热器的流动和换热特性的影响随着雷诺数的变化。AbdRabo 等^[24]研究了空气迎角对扁管换热器传热和流动性能的影响,结果显示随着迎角的增大,传热系数和阻力系数也增大,较大的迎角能够提高扁管换热器的换热能力,但也带来了较大的阻力。Swain 等^[25]研究了管间距变化对扁管管束和椭圆管束的流动和换热特性的影响,发现随着管间距的增加,换热系数和压降减小,且横向管间距对传热和流动性能的影响大于纵向管间距。Eleiwi 等^[26]对具有不同迎角的平管进行了强制对流实验,结果显示随着雷诺数和迎角的增加,空气侧传热系数和努塞尔数也增加。Alnakeeb 等^[27]研究了翅片和平管换热器的换热性能,并与常规翅片和圆管换热器进行了比较,结果显示扁管的长宽比对压降和传热量有显著影响,且纵横比最低的扁管能够提高换热器的整体性能。

近年来,对于扭曲管的研究越来越多。扭曲管产生的旋流可以减小平均阻力,同时增加传热系数^[28]。通过将多个扭曲管组装在一起形成纯扭曲管换热器,旋转流动不仅消除了热边界层,还改善了传热效果^[29]。因此,扭曲椭圆管被广泛应用于提高换热器性能。通过调整扭曲椭圆管的几何参数,如长轴、短轴和扭距等,可以改善层流^[30]和湍流^[31]流动中内层管的传热效果。Yang 和 Li^[32]的研究表明,在层流状态下,增加普朗特数可以更好地促进热传递。此外,扭曲椭圆管内流体的旋流引起二次流,使流体速度和温度分布更均匀,从而有效增加传热效果。Zhang 等进行的实验研究^[33]表明,在湍流状态下,随着扭距的减小,换热系数和摩擦系数均增大。Gao 等^[34]的研究结果与 Zhang 等^[33]的发现相符,表明降低温度梯度与速度矢量的协同角可以获得较高的努塞尔数。Li 等^[35-38]的研究探究了扭曲椭圆管束在横流空气侧的换热和压降性能,结果显示与布置相同的圆管束或椭圆管束相比,扭曲椭圆管束在横流中具有出色的传热性能。Khan 等^[39]的数值研究发现,与传统的光滑圆管相比,扭曲椭圆管束具有更好的传热性能。

尽管国内外学者对异形换热管的流动与换热特性进行了广泛研究,但涉及流体横掠

直管与扭曲管组合管束的研究报道相对较少。研究直管与扭曲管的不同组合形式，以探究其流动和换热特性，对于开发高效紧凑型换热器具有积极推动作用。

1 物理模型及数值方法

1.1 物理模型

图 1 展示了流体横掠组合管束的几何模型。扭曲扁管是由直径为 20mm 的光滑圆管挤压形成的直扁管，然后沿着法线方向旋转 360° 进行扭曲。扭曲过程中，扁管与扭曲扁管的截面周长始终保持与圆管相等。扭曲扁管和直扁管的长短轴比为 $A/B=2.85$ 。扭曲扁管的扭距为 $S=100\text{ mm}$ ，直扁管的管长为 L ，横向管间距为 $S_t=60\text{ mm}$ ，纵向管间距为 $S_l=40\text{ mm}$ ，纵向管排数为 $N=4$ 。为了确保来流速度均匀，并避免在出口处产生回流现象，入口和出口进行了延长处理。

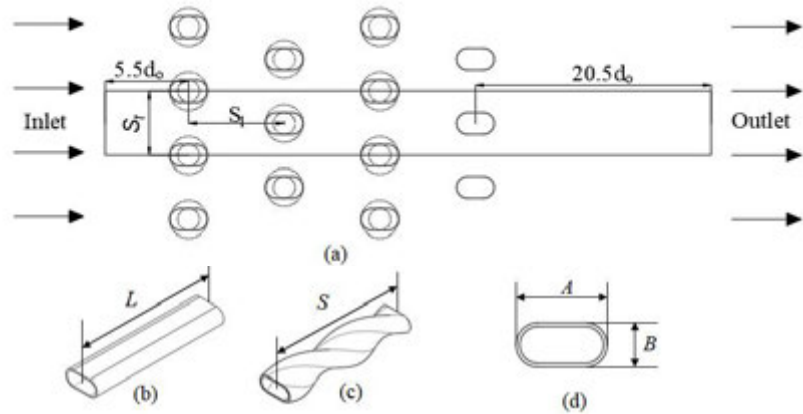


图 1 流体横掠组合管束示意图

为了提高计算效率，本文进行了计算域模型的简化，并选择任一重复单元作为计算单元。在计算域内，扭曲扁管和直扁管的长度为 $S=100\text{ mm}$ 。考虑到铜的传热性能较好且作为固体域材料，我们可以假设换热管的热阻可以忽略，并将换热壁面视为等温壁面。此外，换热管的厚度对计算结果影响可以忽略不计。图 2 展示了横掠管束的数值模型。

可以通过不同的组合来布置扭曲扁管和直扁管，如图 3 所示。具体而言，组合管束①的前三排为扭曲扁管，最后一排为直扁管；组合管束②的第一排为直扁管，最后三排为扭曲扁管；组合管束③的前两排为扭曲扁管，最后两排为直扁管；组合管束④的第一、三排为扭曲扁管，第二、四排为直扁管；组合管束⑤的前两排为直扁管，最后两排为扭曲扁管。

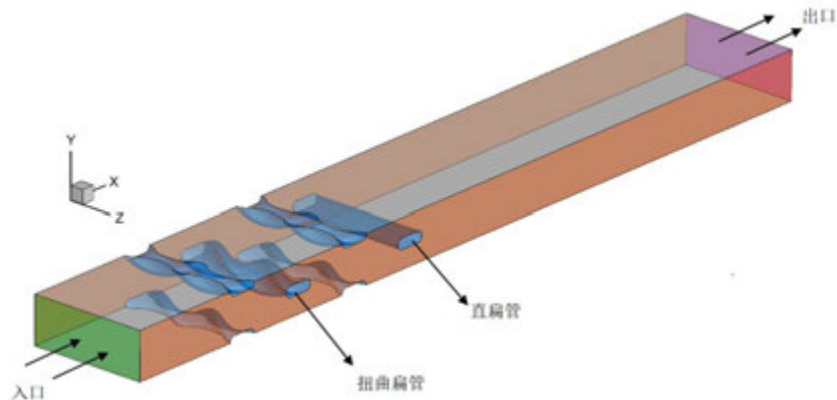


图 2 计算流体域数值模拟模型

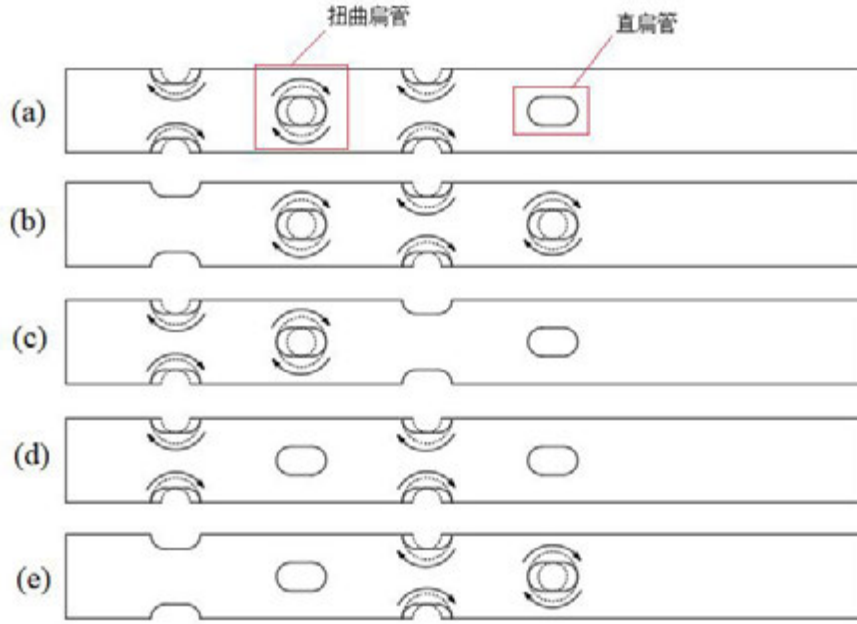


图3 组合管束布置示意图: (a) 组合管束①; (b) 组合管束②; (c) 组合管束③; (d) 组合管束④; (e) 组合管束⑤

1.2 控制方程及计算方法

本文使用 ANSYS FLUENT 软件对流体横掠组合管束进行三维数值模拟。流动介质为空气, 采用有限体积法进行求解。为了使模拟过程顺利进行, 并保证模拟过程能与实际情况无线吻合的前提下, 考虑以下假设条件: 流体是物性参数不变的空气; 流动和传热是稳态的; 流动是不可压缩、稳定的湍流; 不考虑重力、粘性耗散和辐射。流体湍流状态下的控制方程可以表示为:

连续性方程:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (1)$$

动量方程:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2)$$

能量方程:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho C_p u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

本文均采用 SST k - ω 湍流模型, 湍流动能方程 k 和扩散方程 ω 的运输方程如下:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho k u_x) = -\frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial y} \right] + G_k - Y_k \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \omega u_x) = -\frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial y} \right] + G_\omega - Y_\omega + D_\omega \quad (5)$$

式中, Γ_k 和 $\Gamma_{\omega-k}$ 为 ω 的扩散率; G_k 一由层流速度梯度产生的湍流动能; G_ω 一由扩散方程 ω 产生的湍流动能; Y_k 、 Y_ω 一湍流动能的耗散; D_ω 一正交发散项。

在 Fluent 进行计算时压力速度耦合采用 COUPLED 算法, 对流项和扩散项分别采用

二阶迎风格式和中心差分法，对动量和能量方程使用二阶迎风格式。此外，本文雷诺数 (Re) 变化范围为 2500 - 15000，进口选择速度入口边界条件， T_{in} 为 293.15K；出口采用压力出口边界条件；换热管壁面设置为无滑移，且管壁温度均匀， T_{wall} 为 333.15K；为了减少网格数量，提高计算效率，在 $y=St/2$ 与 $y=-St/2$ 设置为周期边界条件；将周期边界条件应用于 $z=0$ 与 $z=S$ 所在的平面。当能量方程的标准化残差值小于 10^{-8} ，其它方程的标准化残差值小于 10^{-5} 时，认为数值计算已经收敛。

1.3 参数定义

本文主要研究了流体横掠组合管管束的流动及传热性能，其中用 Nu 来评价换热器换热强度的高低，用欧拉数 Eu 作为评价流阻性能的指标，为了综合评价对流传热性能，采用 PEC 进行表征。公式定义如下：

雷诺数 Re ：

$$Re = \frac{\rho v_{max} D_{eq}}{\mu} \quad (6)$$

等效直径 D_{eq} ：

$$D_{eq} = \frac{C}{\pi} \quad (7)$$

其中， C 为换热管的截面周长。

努赛尔数 Nu ：

$$Nu = \frac{h D_{eq}}{\lambda} \quad (8)$$

表面对流换热系数 h ：

$$h = \frac{Q}{A_s \Delta T} \quad (9)$$

$$Q = mc_p (T_{out} - T_{in}) \quad (10)$$

欧拉数 Eu ：

$$Eu = \frac{2\Delta P}{N \rho v_{max}^2} \quad (11)$$

综合换热评价系数 PEC ：

$$PEC = \frac{Nu / Nu_0}{(Eu / Eu_0)^{\frac{1}{3}}} \quad (12)$$

其中， Nu_0 和 Eu_0 分别为圆管管束的努赛尔数和欧拉数。如果综合换热性能评价因子 $PEC > 1$ ，说明组合管管束相比圆管管束有更好的综合性能。

1.4 网格划分及独立性考核

使用多面体网格对扭曲扁管管束进行划分。在湍流状态下，除了需要高质量的网格，还需考虑近壁面边界层的网格尺寸，以确保能准确模拟边界层内的流动和换热情况。扭曲度较大的区域可能导致网格质量下降，进而影响计算的精度和收敛性。因此，需要合理增加网格数量，并检查网格单元的形状和密度。图 4 展示了计算域模型的网格及其细节。

为了确保数值计算结果的可靠性，本文进行了网格独立性考核，以针对组合管管束①在雷诺数为 10000 时进行评估。表 1 显示，第三套网格与第四套网格的压差和努赛尔数仅相差 -0.58% 和 -0.20%，证明该网格模型的数值解具有独立性。因此，在保证计算精度和效率的前提下，在第三套网格的基础上进行后续计算，并进行相应的调整。

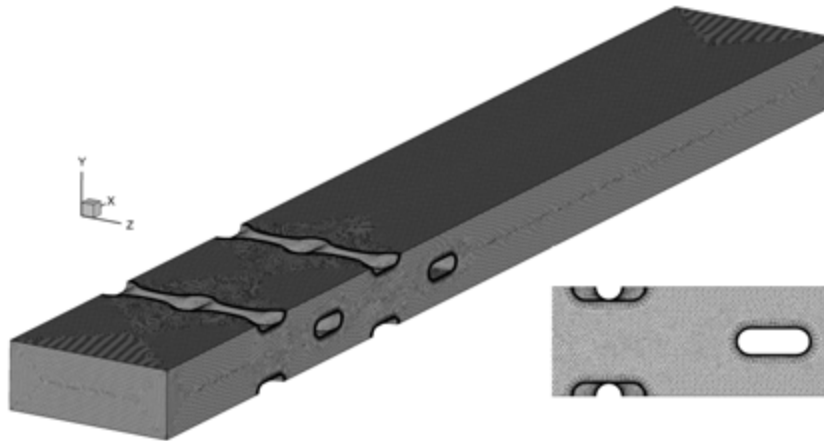


图4 计算域模型网格及网格细节

表1 网格独立性考核

NO.	网格数	$\Delta P(\text{Pa})$	误差	Nu	误差
1	621375	55.10	-1.50%	74.87	-0.76%
2	842851	55.35	-1.05%	75.07	-0.50%
3	1121474	55.62	-0.58%	75.29	-0.20%
4	1366948	55.94	—	75.44	—

1.5 数值方法验证

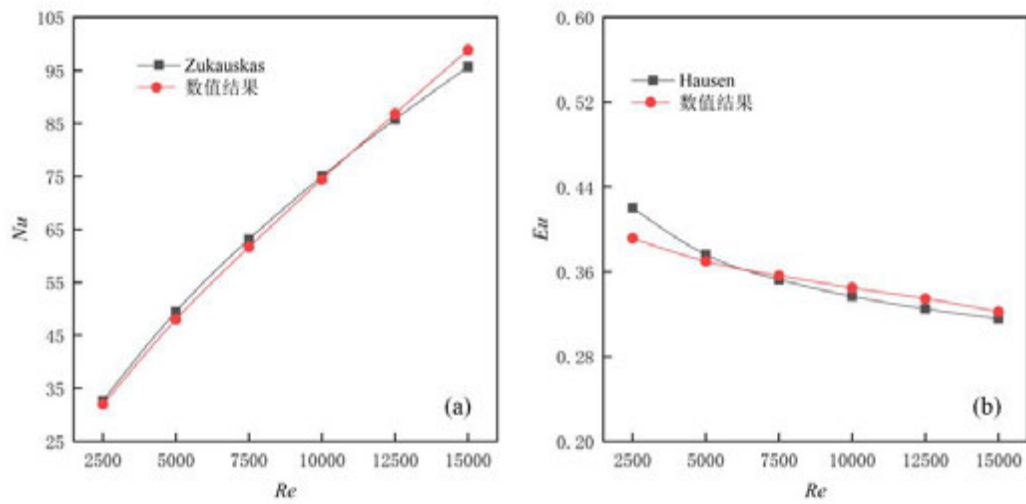


图5 数值结果与参考数值对比: (a) Nu 验证; (b) Eu 验证

在验证计算模型和方法的正确性和可靠性方面,本文对错排布置下的圆管管束进行了数值模拟计算,并将其结果与文献[40,41]中的结果进行了对比,如图5所示。在 Re 为 5000 时, Nu 的最大误差为-3.14%,而在 Re 为 12500 时,最小误差为-0.40%。对于 Eu ,在 Re 为 5000 时,最大误差为-3.04%,而在 Re 为 10000 时,最小误差为-0.64%。综合考虑各种因素,所有的误差都在允许的范围内,证明本文使用的数值模拟方法是可靠的,所得到的数值结果是可信的。

2 结果与分析

2.1 组合管束对温度场的影响

对不同组合管束进行了数值模拟，得到了温度的分布情况。以雷诺数等于 15000 时的工况为例，图 6 展示了同一截面上不同组合管束与扭曲扁管管束的温度场。管束阻挡流体流动，导致分流和回流区的形成，在背流面区域使得温度较高。图 6(I)显示了组合管束在截面 $z=S/2$ 处的温度云图。由于流体横掠扭曲扁管时的迎角与直扁管相同，对管束后流体的流动影响较小，高温区域较小。图 6(II)为组合管束在截面 $z=3S/4$ 处的温度云图。扭曲扁管在该截面处的迎角为 90° ，回流区增大，高温区域扩大；而直扁管的迎角保持不变，高温区域减小。扭曲扁管管束的换热性能最佳，横截面上的高温区域最大。组合管束⑤由于引入直扁管，减弱了流体的扰动，在出口处温度较低。综合比较各组合管束，将扭曲扁管布置在前排、直扁管布置在后排可以增大管束周围高温流体范围，增强换热性能。

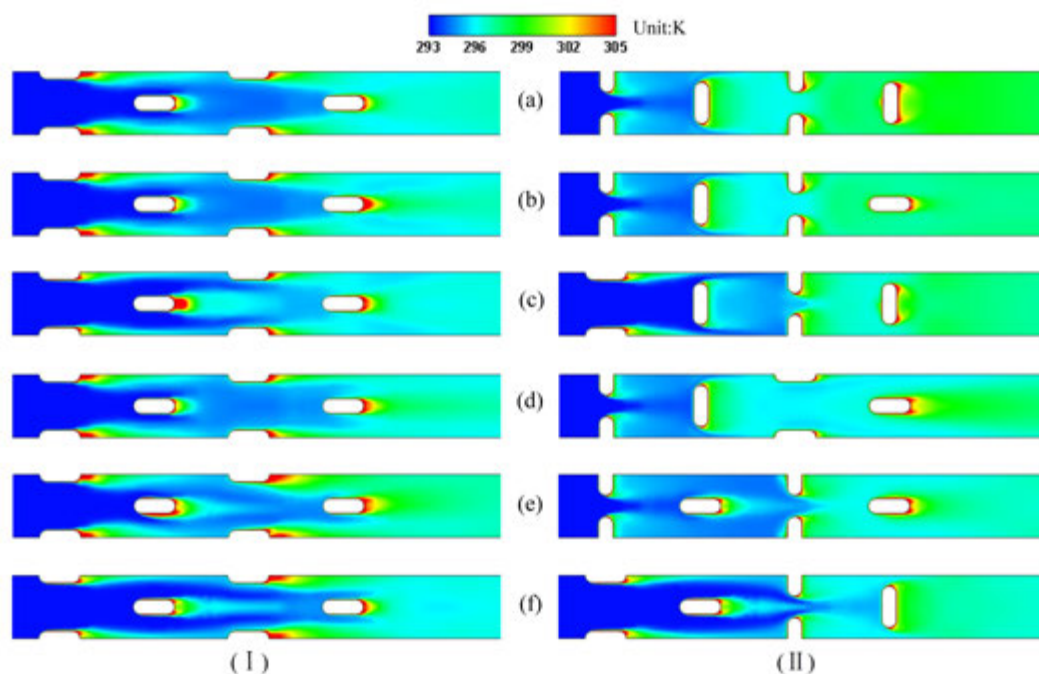


图 6 不同组合管束的温度云图：(I) 截面 $z=S/2$ ；(II) 截面 $z=3S/4$ ；(a) 扭曲扁管束；(b) 组合管束①；(c) 组合管束②；(d) 组合管束③；(e) 组合管束④；(f) 组合管束⑤

2.2 组合管束对流线图的影响

流线图能够展示流体横掠组合管束时漩涡形成和回流区域大小的情况。在雷诺数为 15000 时，图 7 显示了不同组合管束和扭曲扁管束的流线图。从图 7(I)可以观察到，在该截面上，迎角较小，导致流体通过管束时的阻力较小，流道流线性较好，回流区的面积较小。将直扁管放在第一排时，第一排管束后形成较大的回流区，而其他管束后的回流区较小。图 7(II)展示了不同组合管束和扭曲扁管束在截面 $z=3S/4$ 处的流线图。在该横截面上，由于流体横掠扭曲扁管的迎角增大，流体受到更大的阻力，形成的回流区域增大，改变了流动趋势，导致阻力增加。可以看出，扭曲扁管束对流体流动的影响最大，回流区最大，产生的流动阻力超过组合管束。而组合管束中的直扁管减小了回流区域，减弱了对流体流动的影响，导致流动阻力减小。

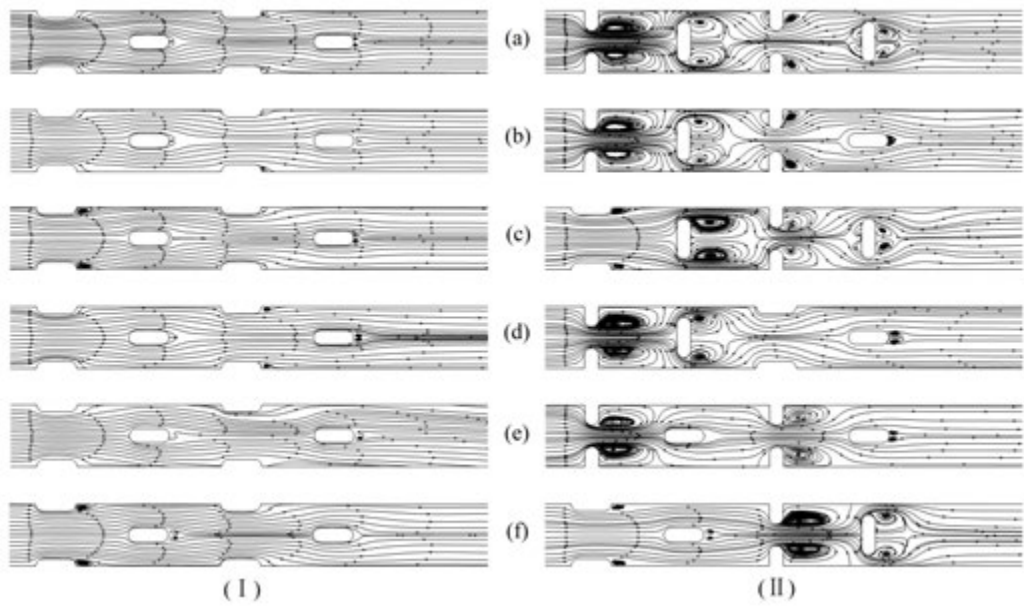


图7 不同组合管束的流线图：(I) 截面 $z=S/2$ ；(II) 截面 $z=3S/4$ ；(a) 扭曲扁管束；(b) 组合管束①；(c) 组合管束②；(d) 组合管束③；(e) 组合管束④；(f) 组合管束⑤

2.3 组合管束对湍动能的影响

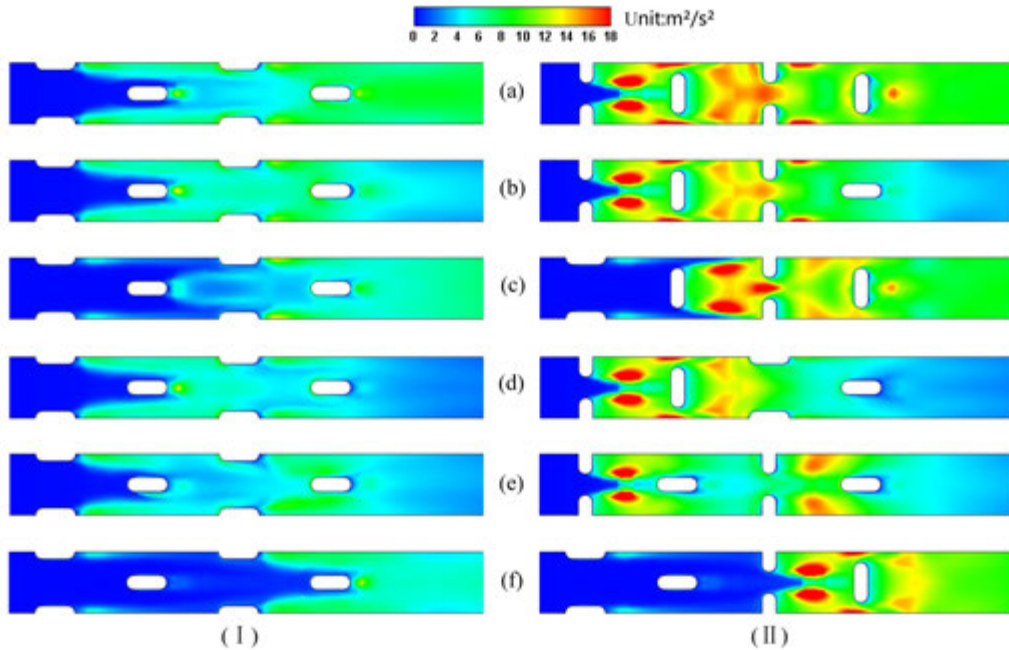


图8 不同组合管束的湍动能云图：(I) 截面 $z=S/2$ ；(II) 截面 $z=3S/4$ ；(a) 扭曲扁管束；(b) 组合管束①；(c) 组合管束②；(d) 组合管束③；(e) 组合管束④；(f) 组合管束⑤

流体横掠组合管束时会产生湍流扰动，湍动能的耗散对换热和压降性能有影响。在雷诺数为 15000 时，图 8 展示了不同组合管束对湍动能的影响。从图中可以清楚地看到，在流体通过管束后，由于组合管束的布置结构，流体速度和湍动能不断变化。此外，由于流体横掠管束形成了回流区，涡旋增加了湍动能，因此在管束后形成了高湍

流区。图 8(I)显示了组合管管束在截面 $z=S/2$ 处的湍动能分布，该截面上流体的扰动较弱，整个截面上的湍动能较小。而图 8(II)显示了扭曲扁管管束在截面 $z=3S/4$ 处的湍动能分布，该横截面上由于管束的布置结构，流体流向发生剧烈变化，导致高端动能区域增加。在组合管管束中，第 5 种布置方式的高端动能区域较小，表明管束后的回流区和湍动能耗散较小，压力损失较小；而扭曲扁管管束后的高端动能区域较大，换热通道内的压力损失也较大。

2.4 组合管管束对平均 Nu 和欧拉数 Eu 的影响

图 9 为不同组合管管束的 Nu 和 Nu/Nu_0 随雷诺数 Re 变化的曲线。从图 9(a)可以明显看出，随着 Re 增加，不同组合管管束的 Nu 呈线性增加。雷诺数的增加导致换热通道内流体速度增加，从而增强传热能力。值得注意的是，所有组合管管束的 Nu 明显小于扭曲扁管管束，即换热性能弱于扭曲扁管管束。在图 9(b)中， Nu/Nu_0 随雷诺数 Re 增大也呈上升趋势。具体来说，组合管管束①的 Nu 明显小于扭曲扁管管束，减小了 1.30%~2.93%，但仍大于其他组合管管束和圆管管束，增加了 7.38%~12.77%。组合管管束⑤的换热效果最差，其 Nu 比圆管管束减小了 7.01%~9.6%，比扭曲扁管管束减小了 16.90%~19.96%。其主要原因为组合管管束⑤的前两列均为横向布置的直扁管，当流体经过时，只起到分流器的作用，对流体在纵向上未形成有效扰动，图 7(f)和图 8(f)可进一步解释此现象。当流体经过前两列扁管，仅在扁管末端存在微小的涡和较小的湍动能，这减弱了流体的混合作用，从而导致换热性能较弱。组合管管束②和④的 Nu 相差不大，相较于圆管管束，分别最大增加了 3.77%和 4.07%，但仍小于组合管管束③。综上所述，通过将扭曲扁管布置在前排、直扁管布置在后排，可以提高换热性能，在此基础上增加扭曲扁管的数量也有利于提高组合管束的换热性能。

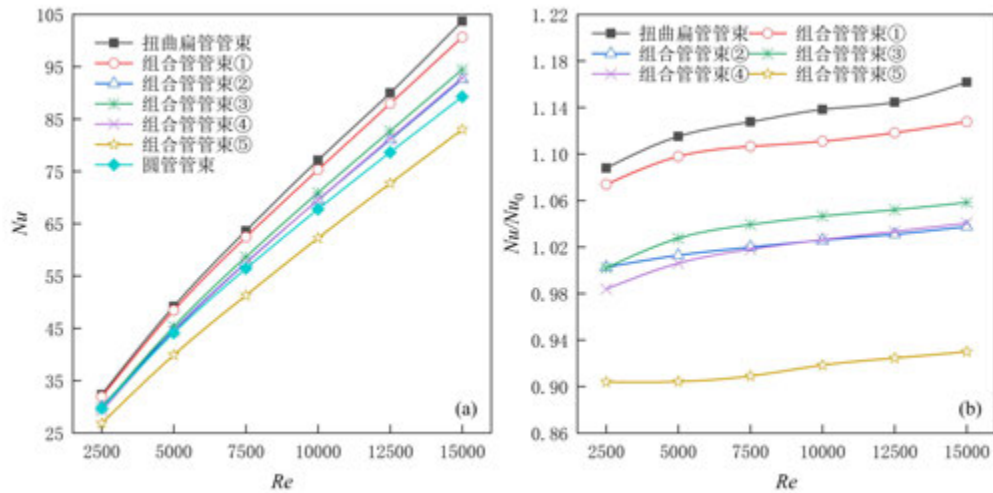


图 9 不同组合管管束: (a) Nu 随 Re 的变化图; (b) Nu/Nu_0 随 Re 的变化图

图 10 为不同布置方式下组合管管束的 Eu 和 Eu/Eu_0 随雷诺数 Re 的变化。从图 10(a)可以观察到，随着雷诺数 Re 的增加，不同组合管管束的 Eu 逐渐减小，且下降趋势逐渐减缓。在图 10(b)中，扭曲扁管管束的 Eu/Eu_0 大于 1，表示其流动阻力大于圆管管束；而组合管管束的 Eu/Eu_0 小于 1，意味着其流动阻力较小。在所有组合管管束中，组合管管束②具有最大的 Eu 值，比圆管管束减小了 4.89%~6.12%，比扭曲扁管管束减小了 18.44%~19.17%。而组合管管束①的 Eu 略小于组合管管束②。组合管管束⑤的 Eu 最小，比圆管管束减小了 26.53%~28.13%，比扭曲扁管管束减小了 37.75%~38.18%。在相同工

况下，组合管管束的流动阻力明显小于圆管管束，因此选择组合管管束换热器可以减少设备功率损耗，从而降低能源消耗。

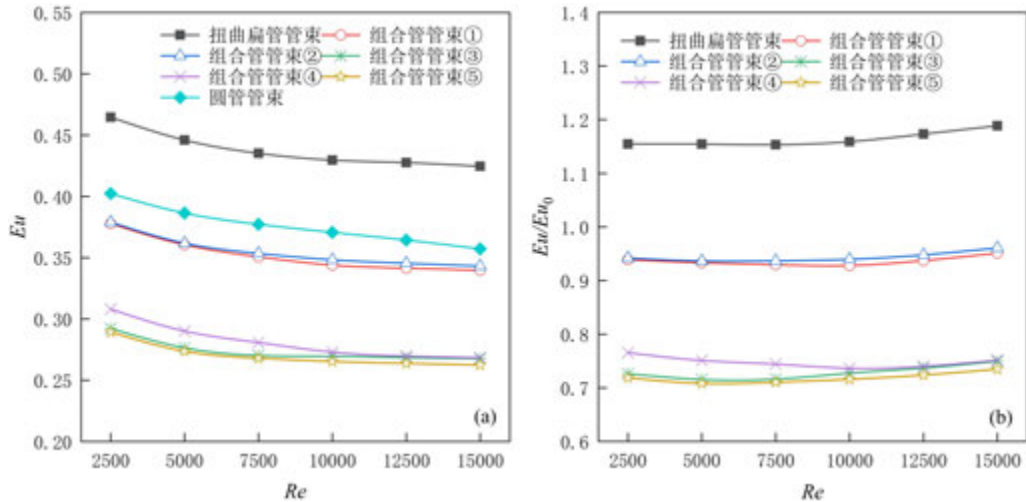


图 10 不同组合管管束: (a) Eu 随 Re 的变化图; (b) Eu/Eu_0 随 Re 的变化图

2.5 组合管管束对综合换热性能 PEC 的影响

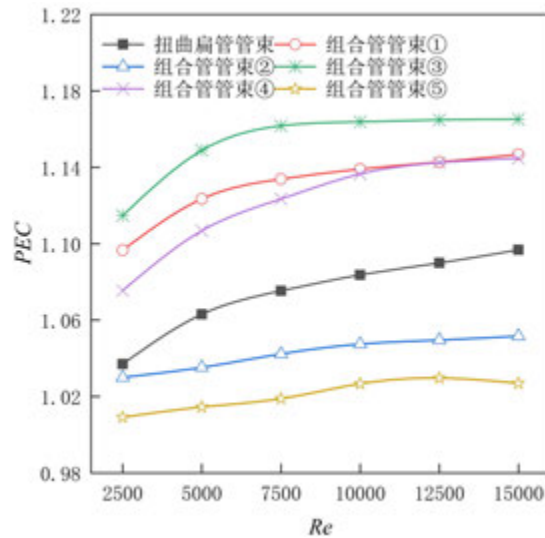


图 11 不同组合管管束 PEC 随 Re 的变化图

图 11 为综合换热性能评价因子 PEC 随雷诺数 Re 的变化。随着 Re 的增加, PEC 也呈增加趋势。由图可知, 在较低的 Re 范围内, 组合管管束的 PEC 显著增加, 但当 Re 增加到约 10000 时, 增加速率明显变缓。这表明在较高的空气流速下, 组合管管束的流动阻力大于换热性能的提升, 从而导致 PEC 的变化呈平缓趋势。并且图 11 中的组合管管束的 PEC 都大于 1, 这说明其综合换热性能明显均优于圆管管束。虽然扭曲扁管管束的 Nu 较大, 但其流动阻力也较高, 这限制了其换热性能的发挥, 因此在综合评价下其综合换热性能并不是最佳的, 比圆管管束提升了 3.70%~9.68%。而组合管管束③具有较小的流动阻力, 因此具有最佳的综合换热性能, 比圆管管束提升了 11.48%~16.52%; 而组合管管束⑤的综合换热性能最差, 仅比圆管管束提升了 0.92%~2.69%。总的来说, 由于组合管管束具有较低的流动阻力, 能够有效增强换热器的综合性能。

3 结 论

本文研究分析了流体横掠组合管束的传热和流动特性,并与扭曲扁管束和圆管束进行了比较。得出以下结论:

(1) 不同组合管束使得截面处温度场和速度场产生了显著的变化。其中,在 $z=3S/4$ 处,不同组合对应的流线和湍动能差异明显,扭曲扁管束产生了最大的回流区,而加入直扁管后,回流区减小,阻力减小。另外,相比于独立分布的扁管,对称分布的扁管对流体产生更大的扰动,在其尾端表现出更大的湍动能。

(2) 对五种组合管束的流动和传热特性进行比较发现,组合管束①的 Nu 最大,相较于圆管束增加了 7.38%~12.77%;组合管束⑤的 Nu 最小,相较于圆管束减小了 7.01%~9.6%。组合管束②的 Eu 最大,比圆管束减小了 4.89%~6.12%;组合管束⑤的 Eu 最小,比圆管束减小了 26.53%~28.13%。

(3) 本文所提出的管束组合方式均具有良好的综合换热性能($PEC>1$),并且随着 Re 的增大, PEC 明显提高,其增加趋势逐渐趋于平缓。与其他管束组合相比,组合管束③的综合换热性能最佳,比圆管束提高了 11.48%~16.52%。因此,改变扭曲扁管和直扁管的组合方式对综合换热具有显著作用,这可用于指导管束式换热器的优化设计。

参考文献

- [1] 李辉, 庞博, 朱法华等. 碳减排背景下我国与世界主要能源消费国能源消费结构与模式对比[J]. 环境科学, 2022, 43(11):5294-5304.
- [2] 刘纪阳. 换热器发展现状与未来趋势研究综述[J]. 中国设备工程, 2022 (21):261-263.
- [3] Pierson O L. Experimental investigation of the influence of tube arrangement on convection heat transfer and flow resistance in cross flow of gases over tube banks[J]. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, 1937, 59:563-572.
- [4] Bergelin O P. Heat transfer and fluid friction during flow across banks of tubes-IV a study of the transition zone between viscous and turbulent flow[J]. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, 1952, 74:953-960.
- [5] Grimson E D. Correlation and utilization of new data on flow resistance and heat transfer cross-flow of gases over tube banks[J]. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, 1937, 59:583-594.
- [6] Jakob M. Heat transfer and flow resistance in cross flow of gases over tube bank[J]. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, 1938, 60:384.
- [7] Kim T. Effect of longitudinal pitch on convective heat transfer in crossflow over in-line tube banks[J]. Annals of Nuclear Energy, 2013, 57:209-15.
- [8] Zhang L Z, Ouyang Y, Zhang Z, et al. Oblique fluid flow and convective heat transfer across a tube bank under uniform wall heat flux boundary conditions[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 91:1259-1272.
- [9] Li S, Li J, Liu Z. Simulation Study on Flow and Heat Transfer of Cross-Arrangement Tube Bundle[J]. Journal of Thermal Science, 2023: 1-10.
- [10] 刘万旺, 许志美, 宗原等. 顺排管束流动和传热数值模拟[J]. 华东理工大学学报(自然科学版), 2019,45 (01):15-22.
- [11] 陈水林, 马培勇, 许本海. 正五边形管排方式管束传热和流动阻力特性研究[J]. 合肥工业大学学报(自然科学版). 2018, 41(06):748-751+756.
- [12] Zhao L, Deng J. Numerical study on the heat transfer enhancement outside the pipe bundle under the effect of continuous pressure waves[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2023, 207: 123994.
- [13] Yang Y, Wang C, Zhang D, et al. Heat transfer evaluation of liquid lead-bismuth eutectic cross flow tube bundle: Numerical simulation part[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2023, 146: 106892.
- [14] Shen C, Liu L, Xu Z, et al. Influence of helix angle on flow and heat transfer characteristics of lead-bismuth flow in helical-coiled tube bundles[J]. Annals of Nuclear Energy, 2023, 180: 109483.
- [15] 范广铭, 孙中宁, 宿吉强. 扁管单相对流换热实验研究[J]. 原子能科学技术, 2013, 47(10):1735-1739.

- [16] 贺士晶, 孙中宁, 阎昌琪等. 扁管传热与阻力特性的实验研究[J]. 核动力工程, 2013, 003(002):12-15.
- [17] 喻九阳, 王泽武, 冯兴奎. 扁管管束结构优化实验研究[J]. 石油化工设备, 2004, 033(005):14-17.
- [18] Toolthaisong S, Kasayapanand N. Heat transfer enhancement in a cross-flow heat exchanger with modified air angles of attack[J]. Journal of Energy Engineering, 2016, 142(3):04015044.
- [19] Refaey H A, Sultan A M, Moawad M, et al. Numerical investigations of the convective heat transfer from turbulent flow over staggered tube bank[J]. The Institution of Engineers (India), 2018, 100 (6):983-993.
- [20] Jassim A H, Tahseen T A, Mustafa A W, et al. An experimental investigation in forced convective heat transfer and friction factor of air flow over aligned round and flattened tube banks[J]. Heat Transfer-Asian Res, 2019, 48(2):2350-2369.
- [21] Mazdak S, Sheikhzadeh G A, Fattahi A. Numerical analysis of a heat exchanger with curved segmental baffle and Cassini oval cross-section tubes in various bundle arrangements[J]. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2023: 1-18.
- [22] He X, Li Z, Wang J, et al. Effects of tube cross-sectional shapes on flow pattern, liquid film and heat transfer of *n*-pentane across tube bundles[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2023, 60: 16-25.
- [23] Benarji N, Balaji C, Venkateshan S P. Unsteady fluid flow and heat transfer over a bank of flat tubes[J]. Heat & Mass Transfer, 2008, 44(4), 445-461.
- [24] AbdRabb M F, PASHA K M. Controlling the heat transfer and pressure drop within economical working conditions for a movable flat tube bundle [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2016, 107:259-271.
- [25] Swain A, DAS M K. Convective heat transfer and pressure drop over elliptical and flattened tube [J]. Heat Transfer-Asian Research, 2016, 45(5): 462-481.
- [26] Eleiwi M A, Zainal O A, Tahseen T A, et al. Effect of front air attack angles on heat transfer coefficient of the cross-flow of four flat tube[J]. Heat Transfer, 2020, 50:638-654.
- [27] Alnakeeb M A, Saad M A, Hassab M A. Numerical investigation of thermal and hydraulic performance of fin and flat tube heat exchanger with various aspect ratios[J]. Alexandria Engineering Journal, 2021, 60:4255-4265.
- [28] Yoon H S, Kim H J, Wei D J. Forced convection heat transfer from the helically twisted elliptic cylinder inspired by a daffodil stem[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 119:105-116.
- [29] Yang S, Zhang L, Xu H. Experimental study on convective heat transfer and flow resistance characteristics of water flow in twisted elliptical tubes[J]. Applied Thermal Engineering, 2011, 31:2981-2991.
- [30] Feizabadi A, Khoshvaght-Aliabadi M, et al. Numerical investigation on Al₂O₃/water nanofluid flow through twisted-serpentine tube with empirical validation[J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 137:296-309.
- [31] Hong Y, Du J, Wang S. Experimental heat transfer and flow characteristics in a spiral grooved tube with overlapped large/small twin twisted tapes[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 106:1178-1190.
- [32] Yang L, Li Z. The lowest order solution of the crack – inhomogeneity interaction for mode I cracks[J]. Mechanics Research Communications, 2003, 30:143-149.
- [33] Zhang X X, Wei G H, Sang Z F. Experimental research of heat transfer and flow friction properties in twisted tube heat exchanger[J]. Chemical Engineering, 2007, 35:17-20.
- [34] Gao X N, Zou H C, Wang D Y, et al. Heat transfer and flow resistance properties in twisted oblate tube with large twist ratio[J]. Journal of South China University of Technology, 2008, 36(11):17-21.
- [35] Li X, Zhu D, Yin Y, et al. Experimental study on heat transfer and pressure drop of twisted oval tube bundle in cross flow[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2018, 99:251-258.
- [36] Li X, Zhu D, Sun J, et al. Heat transfer and pressure drop for twisted oval tube bundles with staggered layout in crossflow of air[J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 148:1092-1098.
- [37] Li X, Zhu D, Yin Y, et al. Parametric study on heat transfer and pressure drop of twisted oval tube bundle with in line layout[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 135:860-872.
- [38] Li X, Wang L, Feng R, et al. Thermal-Hydraulic Characteristics of Twisted Elliptical Tube Bundle in Staggered Arrangement[J]. Journal of Thermal Science, 2021, 30:1925-1937.
- [39] Khan S, Zou R, Yu A, et al. Computational simulation of air-side heat transfer and pressure drop performance in staggered mannered twisted oval tube bundle operating in cross-flow[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2021, 161:106748.
- [40] Žkauskas A. Heat transfer from tubes in crossflow[M]. Advances in heat transfer, 1987, 18:87-159.
- [41] Helmuth Hausen. Heat Transfer in Counterflow, Parallel-Flow and Cross-Flow[M]. New York, McGraw-Hill, 1983.

石蜡基相变材料电子芯片散热器温控特性 模拟研究

陈昆仑^{1,2}, 王维龙¹, 丁静¹, 刘书乐¹, 陆建峰^{1*}

1. 中山大学材料科学与工程学院 2. 清华大学深圳国际研究生院

(Tel: 020-39332320, E-mail: lujfeng@mail.sysu.edu.cn)

摘要:

随着信息技术的快速发展,电子器件趋向于微型化、集成化和高功率化,电子芯片热流密度快速增加,导致器件内部环境温度剧烈升高,其“温控”难题为热管理材料的研发带来了全新的挑战。石蜡由于其具有理想的熔点以及高潜热的优势,在电子芯片热管理领域受到越来越多的关注。本文建立了相变材料电子芯片温控散热器的多相态传热模型,揭示了其流场、相场及温度场在非稳态下的变化规律。结果表明,相变温控区石蜡融化过程中,其温度场由四周向内部呈梯度分布,石蜡融化完成后速度场达到最大值,流速达到了 0.009 m/s,自然对流与重力因素产生的浮升力效应增强了石蜡在相变温控区的流动传热特性,为电子设备的热设计与热管理提供了理论依据。

关键词: 相变材料石蜡; 电子芯片散热器; 多相态传热; 数值模拟

0 前言

随着 5G 通信、智慧城市、物联网、人工智能以及可穿戴器件等为代表的高新技术的迅速发展,电子器件正趋向于小型化、高度集成化和高功率化,由此产生高热流使得电子器件的运行环境更加的复杂[1-4]。研究表明,电子器件服役温度升高 10 °C,则其可靠性将会下降 50 % [5,6]。因温度过高而导致电子元件失效占有故障原因的 55 % [7]。因此,为了确保电子器件运行时的可靠性、稳定性和服役寿命,设计研发高性能的温控技术成为日益重要和紧迫的课题。

电子器件温控方式主要有自然风冷、强迫风冷以及液体冷却等散热技术[8]。自然风冷是指在不使用外部能量的情况下,发热部件向低温环境散热达到降低温度的目的,而这种方式对于大功率集成电路不适用。强迫风冷是利用风扇迫使周围气体流动,把热量从器件中带走,这种方式增大了散热面积,但是风源的加入增加了系统的复杂性。液体冷却是针对电子芯片提出,其工作原理是使用冷却剂吸热并把热量带走,但是在长时间服役过程中管路易被沉积物堵塞,严重影响散热的效果。目前基于相变材料的温控技术受到了广泛关注,相变温控是利用相变材料在相态演变过程中吸收/释放热量而温度基本保持不变,从而实现对受控器件的温度控制[9]。与其他温控方式不同,相变温控因其结构简单、性能可靠、节能环保等优势在大功率集成电路与便携式电子器件的温控等领域得到了越来越多的应用。

数值模拟是研究相变材料温控散热器重要的方法。通过数值模拟实现了相变材料传热过程的可视化、定性和定量分析[10,11]。Alshaer 等 [12]提出了碳纳米管基定型复合相变材料作为热管理模块,使用基于单域能量方程的体积平均技术建立了数学模型。采用 CFD 代码求解了控制方程,通过数值模拟的方式定量的研究了壳体-复合相变材料结合处和复合相变材料内不同表面之间传热过程的界面效应。模拟结果表明,由于纳米碳管的插入,CF-20 +

* 本项目得到国家自然科学基金项目 (U22A20213) 资助

RT65/MWCNTs 的热导率显著增加，电子器件模块表面温度降低 11.5%。Yang 等[13]制备了 Field's metal/泡沫铜定型相变材料散热器与电路集成安装在氮化镓（GaN）芯片器件上，通过三维有限元方法集成装配的（FEM）仿真，模拟对比了有无定型相变材料的散热器对氮化镓器件冷却效率的影响。模拟结果表明，有定型相变材料的散热器器件结温度比无相变材料的散热器温度降低了 10 ~20 °C，有效的实现了对氮化镓芯片的热管理。Cao 等[14]将形状稳定的复合相变材料定型复合到波纹芯 ITPS 结构中，制备了集成热防护系统，通过瞬态传热分析研究了其相变热管理特性。与传统 ITPS 相比，该系统可使底面板最高温度降低 18.46 %。此外，与传统 ITPS 相比，ITPS 重量减少了 14.32 %，厚度减少了 46.09 %，有助于实现整车轻量化和结构的优化设计。

因此，数值模拟在电子器件热设计中具有非常重要的作用，数值模拟可以结合实验数据对电子器件的结构进行优化。从而设计出性能与结构优异的电子器件，进一步提升电子器件的热管理效率。而且数值模拟研究还可以对实验获取的少数特征点进行拟合，得到连续曲线并进行工艺优化。

1 模型构建

1.1 物理模型

针对电子芯片发热高的特点，研究选用填充相变材料的热沉对芯片进行温度控制研究。把芯片简化为二维热源，位于热沉基板中央位置，芯片正上方为相变热沉，热沉材料选用电子器件常用材料金属铜，芯片大小为 25.4 mm*5 mm，模拟芯片运行产生的热流密度为 10000 W·m⁻²，相变材料散热器具体尺寸如图 1-1 所示。

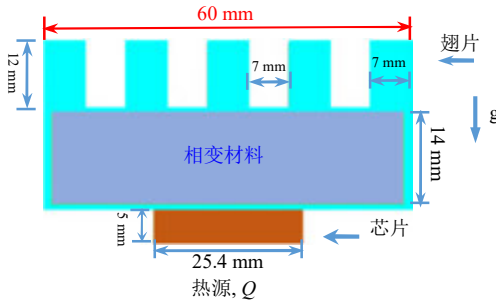


图 1-1. 相变材料电子芯片温控散热器物理模型与计算域

将芯片的均匀热流施加到定型复合相变材料填充的热沉底壁上。在本研究中，由于忽略了芯片与相变材料填充热沉之间的接触热阻，因此可以采用相变材料填充热沉的底部平均温度来监测芯片的温度。相变材料石蜡热物性如表 1 所示。环境初始温度为 25 °C，重力方向沿 y 轴负方向垂直向下。

表 1 石蜡材料热物性

Property	ρ (kg/m ³)	c_p (kJ/(kg·°C))	T_0 (°C)	Δh (kJ/kg)	λ (W/(m·°C))
Paraffin	818	2.14	48.28-54.21	266	0.24

1.2 数学模型

数值模拟的连续方程如下：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = u \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u \quad (2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = v \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v \quad (3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial H}{\partial t} + u \frac{\partial H}{\partial x} + v \frac{\partial H}{\partial y} \right) = \frac{\lambda}{c_p} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} \right) + S_h \quad (4)$$

式中： u, v 为速度 V 的 x 方向上和 y 方向上的分量； ρ -密度； μ -粘性系数； λ -导热系数； c_p -比热容； p -压强； S_u, S_v 分别为 x, y 方向上的动量源项； S_h 为能量源项。加热过程中，相变材料温度升高并出现熔化现象，相变材料区固液两相采用线性处理：

$$T > T_l \text{ 时 } f_l = 1 \quad (5)$$

$$T_s \leq T \leq T_l \text{ 时 } f_l = (T - T_s) / (T_l - T_s) \quad (6)$$

$$T < T_s \text{ 时 } f_l = 0 \quad (7)$$

其中 f_l 表示变材料中液相的含量， f_s 表示材料中固相的含量。Mushy 区域的阻力为：

$$A = \alpha_m \cdot \frac{\mu v_m}{K} \quad (8)$$

其中 $K = f_l^3 / [D(1 - f_s)^2]$ [15]。

固液相变引起的热量变化为

$$Q = -\alpha_m \rho_m H \cdot \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (9)$$

其中 H 为相变材料固液相变的潜热。

1.3 相变过程模拟

首先对相变传热的基本理论进行简要概述，然后建立相变材料基电子芯片散热器数值与物理模型，最后利用 Gambit 软件进行网格划分，在经过反复的调试与对比后，最终确定时间步长设置为 0.1 s，网格数量为 336116 个进行数值模拟，此时模拟结果不受网格数量影响。将网格导入软件 Fluent 进行求解，详细的介绍了 Fluent 使用模型和参数的选择与设置。设置两个温度监测点，其坐标分别为 T_{bottom} (6 mm, 0 mm)， T_{top} (20 mm, 0 mm)。为了节省机时，把连续性方程的残差线调到 0.01，以加快收敛。利用 Patch 面板指定复合相变材料区域的初始温度 25 °C。时间步长设置为 0.1 s。

3 模拟结果与分析

图 1 显示了通过数值模拟计算出时间 t 分别在 233.6 s、500 s、600 s、700 s、900 s 和

1155 s 时，电子芯片温控散热器内相变材料的温度场分布图。由于传热模型采用了对称边界条件设置，所以云图采取了对称化放置，可以更加直观地进行分析比较不同时间下温度场的变化。在传热过程初期（ $t=233.6\text{ s}$ ），相变温控区也是以热传导的方式进行传热，但是由于有机相变材料的热导率较小，所以内外温差较大，在芯片运行时温度上升较慢。温度较高大约在 $56.9\text{ }^{\circ}\text{C}$ 左右，在垂直方向远离芯片发热源一侧，翅片上温度分布较低在 $49.8\text{ }^{\circ}\text{C}$ 附近，最高温与最低温相差约 $7.1\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。随着传热过程的进行，温度在散热器铜基外壳的热导率要远远大于有机相变材料的热导率，所以在相变区相变材料四周的温度要远远高于内部的温度。另外在相变区存在较为明显的温度梯度，在垂直芯片方向上的翅片温度也是升高的最快。

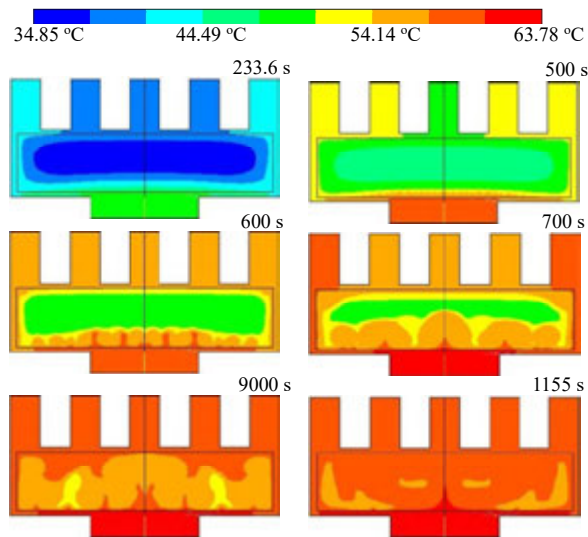


图 1. 石蜡基相变材料散热器温度场变化过程

如图 2 所示，石蜡基相变材料散热器在不同时刻轴线上温度分布曲线图。由于电子芯片运行时从底部发热，所以相变材料从底部首先吸收热量，温度沿轴线由高温向低温处翅片的传递。当加热时间约为 233.6 s 时，相变材料石蜡达到了相变点。在时间为 $233.6\text{ s} \sim 1155\text{ s}$ 的相变过程中，相同时间段内相变区域的温差非常大，并且随着时间的增加，温度起伏越加的明显，这是因为密度与热流的原因，漂浮的石蜡产生了浮动。

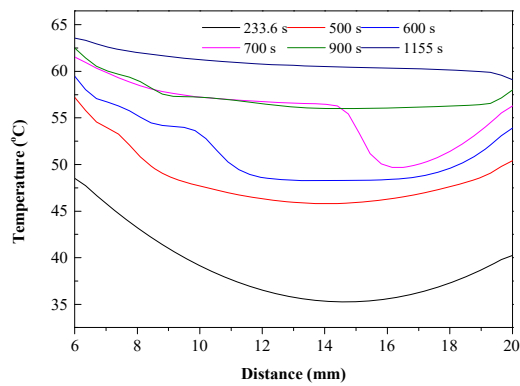


图 2. 相变材料石蜡散热器轴线上不同时间、不同距离温度分布

如图 3 所示，有机相变材料石蜡基电子芯片温控散热器中相界面随时间变化演化过程。图形上方的颜色表示熔化过程中固液相所占的比例，既黄色区域表示固体，红色区域表示液体，分析可知：

第一阶段 $0\text{ s} \sim 233.6\text{ s}$ 时：电子芯片温控散热器中相变材料处发生的是显热吸热，相变

材料从底部开始吸收芯片放出的热量开始熔化。

第二阶段 233.6 s~1155 s 时：温度在散热器铜基外壳的热导率要远远大于有机相变材料的热导率，所以在相变区相变材料由四周向着中心熔化。随着相变的进行，固相不断的融化并开始上浮；图中黄色的区域由四周向着中间不断的变小，即图中红色的区域不断变大。

第三阶段 1155 s 时：相变材料区域熔化完成，相变材料以液相显热的方式进行升温。

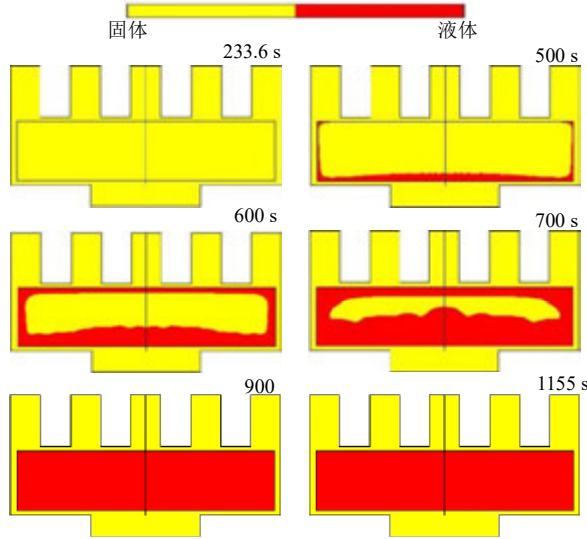


图 3. 石蜡基相变材料散热器相变界面变化过程

如图 4 所示，有机相变材料石蜡基电子芯片温控散热器在不同时间下平均温度与固相率分布图。相变区域的平均温度随着电子芯片运行时间的增加而升高，而石蜡的固相率随着运行时间的增加而减小。在 233.6~500 s 时，温度的斜率最大既在这一阶段相变材料区升温最快，温度的变化率约为 24.2 %。而与之相应的相变材料的固相率变化的斜率在这一过程中也是最大的，这是因为在这一阶段相变材料间的温差较大，所以开始熔化的速度最快。当时间达到在 500~900 s 时，平均温度随着加热时间的变化，各时间段的斜率约相同。当时间达到在 1155 s 时，相变材料石蜡的固相份数趋于零，既此时相变区熔化完成。

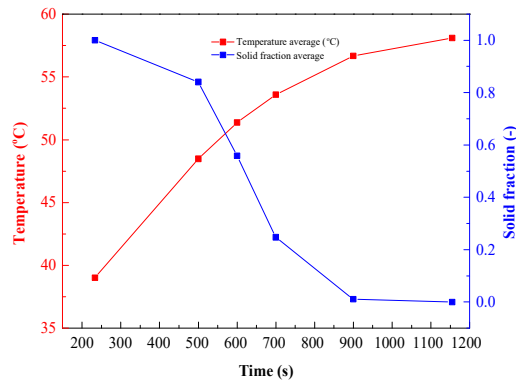


图 4. 相变材料石蜡基相变区域不同时间下温度与固相分布

如图 5 所示，电子芯片温控散热器中有机相变材料石蜡随时间变化过程的速度分布云图。分析可知：芯片运行时产生的热量最先由底部传递到相变材料，相变材料的底部会先发生熔化产生了流速，但是相变材料石蜡的热导率远远小于封装相变的基体材料铜，所以在芯片继续运行时产生的热量由铜基体向翅片传递的速度要远远大于相变材料石蜡，此时石蜡的熔化过程由四周向内部进行熔化。在重力与浮力的作用下，熔化的四周区域也形成了速度场。随

随着相变材料加热熔化的进行，固体区域越来越小，液体区域逐渐的增大。流速也越来越大。当完全熔化时，流速最大达到了 0.09 m/s 。自然对流与重力因素产生的浮升力效应对有机相变材料的速度场产生了较大的影响。流速方向是，在轴线上两股流体在中心处汇合后沿着中心轴向上流动，其流速在轴线上最大然后与上表面接触后，流速向相反的方向流动速度逐渐变的缓慢。

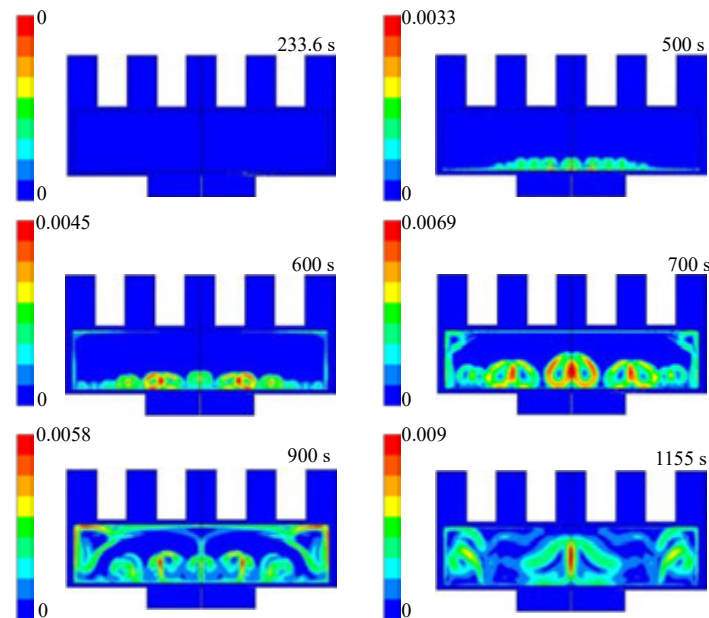


图 5. 石蜡基相变材料散热器速度场变化过程

如图 6 所示，有机相变材料石蜡基芯片散热器，芯片与翅片表面温度随时间的变化检测图。与金属基电子芯片散热器相比，芯片（监测点 T_{bottom} ）与翅片（监测点 T_{top} ）的升温整体传热过程有着很大的不同，首先没有明显的相变阶段，这是因为石蜡属于非晶材料没有固定的熔点。与金属热导率相比，有机材料相变石蜡的热导率较小约为 $0.24 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ ，所以其传热速率比较慢，达到相变点所用时间较长。在监测点检测到芯片表面与翅片处的温差约为 $7.1 ^\circ\text{C}$ 。

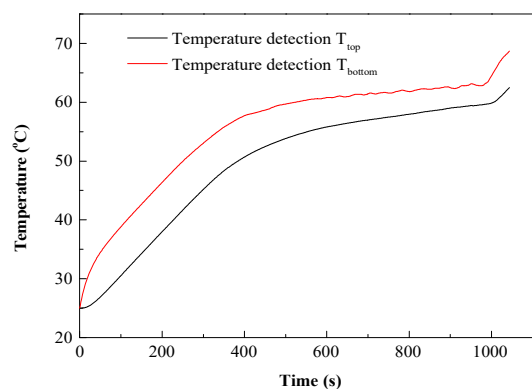


图 6. 相变材料石蜡电子芯片温控散热器相变区域监测点温度随时间的变化

4 结论

本文建立了相变材料基电子芯片温控散热器多相态传热模型,分析其在传热过程中,温度分布、相态的演化、速度场变化。并进一步模拟了非稳态下电子芯片表面的温度与时间的关系。主要结论如下:

- (1) 电子芯片散热器铜基外壳的热导率要远远大于有机相变材料石蜡的热导率,所以在相变区域温度场分布由四周向相变材料内部进行分布。
- (2) 在相变过程中由于有机相变材料石蜡热导率低,温度在电子器件中分布不均匀,电子芯片表面的温度与翅片之间的最大温差约为 $7.1\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。
- (3) 电子芯片温控散热器相变区域,相态演化与温度场趋势类似,石蜡完全融化时,其中流速达到最大值约为 $0.009\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 。
- (4) 电子器件散热区域石蜡相态演变过程中自然对流与重力因素产生的浮升力效应增强了相变区域的流动。为电子设备的热设计与热管理提供了理论依据。

参考文献

- [1] V.A. Kharchenko. Problems of reliability of electronic components. *Modern Electronic Materials*, 2015, 3: 88-92.
- [2] M.M. Mohamed. Air cooling characteristics of a uniform square modules array for electronic device heat sink. *Applied Thermal Engineering*, 2005, 26: 486-493.
- [3] L.Y. Yang, C.P. Feng, L. Bai, et al. Flexible shapestabilized phase change materials with passive radiative cooling capability for thermal management. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 425:131466.
- [4] 杨小虎, 刘静. 液态金属高性能冷却技术:发展历程与研究前沿. *科技导报*, 2018, 36: 54-66.
- [5] Ball P. Computer engineering: Feeling the heat. *Nature News*, 2012, 7428: 174.
- [6] Belhardja S, Mimounia S, Saidanea A. Using micro-channels to cool microprocessors: a transmission-line-matrix study. *Microelectronics Journal*, 2003, 34: 247-253.
- [7] Kharchenko V A. Problems of reliability of electronic components. *Modern Electronic Materials*, 2015, 3: 88-92.
- [8] M.M. Mohamed. Air cooling characteristics of a uniform square modules array for electronic device heat sink. *Applied Thermal Engineering*, 2005, 26: 486-493.
- [9] L.Y. Yang, C.P. Feng, L. Bai, et al. Flexible shapestabilized phase change materials with passive radiative cooling capability for thermal management. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 425:131466.
- [10] C.Y. Cao, R.X. Wang, X.D. Xing, et al, ChenguangHuang. Performance improvement of integrated thermal protection system using shaped-stabilized composite phase change material. *Applied Thermal Engineering*. 2020, 164: 114529.
- [11] G. Liu, T. Xiao, P. Wei, et al. Experimental and numerical studies on melting/solidification of PCM in a horizontal tank filled with graded metal foam. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2023, 250: 112092.
- [12] Alshaer W G, Nada S A, Rady M A. Numerical investigations of using carbon foam/PCM/Nano carbon tubes composites in thermal management of electronic equipment. *Energy Conversion and Management*, 2015, 89: 873-884.
- [13] Yang T Y, Braun P V, Miljkovic N. Phase Change Material Heat Sink for Transient Cooling of High-Power Devices. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 170: 121033.
- [14] C.Y. Cao, R.X. Wang, X.D. Xing, et al, Performance improvement of integrated thermal protection system using shaped-stabilized composite phase change material. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 164: 114529.
- [15] Mohammadnejad F, HossainpourS. A CFD modeling and investigation of a packed bed of high temperature phase change materials (PCMs) with different layer configurations. *Journal of Energy Storage*, 2020, 28:101209.

铅铋超临界二氧化碳微通道换热器氧化腐蚀分析

廖英杰 1, 郭张鹏 1, 高冲 1, 鹿一鸣 1

(1. 华北电力大学, 非能动核能安全技术北京市重点实验室, 北京, 102206)
(Tel:18081032213, Email:lyj863566@163.com)

摘要: 微通道换热器 (PCHE) 是铅冷快堆小型化的关键设备之一。液态铅铋合金会对不锈钢中某些元素产生腐蚀, 目前采用表面氧化工艺, 降低液态铅铋合金对结构材料的腐蚀, 因此有必要对换热器中氧化腐蚀特性进行研究。本研究基于 Fluent 软件耦合氧化动力学模型, 模拟了奥氏体钢制成的直通道 PCHE 在与超临界二氧化碳换热的不同工况下的氧化腐蚀行为。结果显示, 流体通过直通道时, 壁面氧化层厚度随温度增加而增加, 缺氧时间随温度和氧浓度增加而增加。

关键词: PCHE, 液态铅铋合金, 超临界二氧化碳, 氧化腐蚀。

0 前言

铅冷快堆采用液态铅或液态铅铋合金作为冷却剂, 采用闭式燃料循环方式, 具有良好的核废料嬗变和核燃料增殖能力, 因其能很好地满足第四代反应堆安全性、经济性、持续性和核不扩散的目标要求, 因此被认为是第四代反应堆的六种主要堆型之一^[1]。

微通道印刷电路板式换热器 (PCHE) 在换热器中具有优异的性能, 可以承受高温高压易小型化。超临界二氧化碳 (S-CO₂) 布雷顿循环可配备近十几年发展起来的核能、太阳能等不同热源。S-CO₂ 循环成为核能系统最有前景的循环之一, 特别是对于铅冷快堆, 由于具有稳定性好、结构紧凑、器件体积小等特点^[2], 被认为是二回路工质的候选之一。Li 等^[3]对比了不同动力循环的热效率, 认为在四代堆中采用 S-CO₂ 动力循环是有前景的。

液态铅铋合金对于结构材料的腐蚀, 是液态铅铋合金在 PCHE 中使用的一个关键难题, 在高温下暴露于液态铅铋合金中时, 结构材料会发生严重的腐蚀。减少腐蚀的可行途径之一是通过降低钢构件的溶解速率, 在钢材表面形成并维持保护性氧化膜, 防止钢材进一步腐蚀^[4]。Tedmon^[5] 建立了对于 Fe-Cr 合金的氧化物增长氧化动力学模型; Marino 等^[7]对带有绕丝的燃料组件进行了氧传质模拟, 采用固定氧化层高度的稳态模拟在节省计算资源的同时可以大概计算出组件中氧传质分布, Churbanov 等^[8]提出线性与非线性结合氧化模型对横掠管束工况下氧化层的生长进行了瞬态模拟, 但是没有实验证明模型是否适用; Feng 等^[9]对燃料组件进行了氧化层生长的瞬态模拟, 对氧气分布进行了分析; Martinelli^[10]等通过实验提出了有用空间理论并建立了针对马氏体钢的双层氧化模型; Martinelli^[11]等还通过静态和动态流动实验验证并且建立了液态铅铋合金在 T91 和纯铁中的腐蚀行为的数学模型。Martinelli 等^[12]通过实验确定了不同温度区间下氧气浓度的适用范围, 本文所开展的工况均在适用范围内。

在 PCHE 中液态铅铋合金对结构钢材料高温段腐蚀产物的产生可以通过在管壁处形成氧化膜来抑制，避免在冷端的大量沉积造成堵塞。本文通过对 316L 钢作为结构材料的直通道 PCHE，液态铅铋合金和 S-CO₂ 分别作为热冷侧工质进行换热模拟，并且耦合氧化模型，对不同进口速度和进口温度的液态铅铋合金采用 ANSYS FLUENT 软件仿真模拟，通过对不同时刻 PCHE 内氧传质的分布与不同位置氧化层生长曲线的变化，可以对以后 PCHE 在铅冷快堆中的应用提供参考。

1 数值模型

1.1 计算模型

图 1 展示了本文所选用的几何结构，几何结构为半圆形直通道 PCHE，换热单元半径（R）为 1mm，左右间距为 0.4mm，上下间距为 0.5mm，考虑到充分发展段对计算的影响，流动长度（L）设置为 220mm，热侧工质为液态铅铋合金，冷测为超临界二氧化碳，上下左右壁面采用周期边界条件，前后壁面设置为绝热，入口边界条件为速度入口边界条件，出口为压力出口边界条件。为使换热器换热性能达到最佳，液态铅铋合金与超临界二氧化碳采用逆流布置方式^[13]。图 2 展示了计算中所采用的网格，壁面附近网格加密处理。

本研究针对进口氧浓度为 10⁻⁶wt%进口氧浓度的工况展开，对比不同进口温度和流速的液态铅铋合金的氧气分布与氧化层厚度，固定冷侧进口温度和速度。表 1 展示了本文模型的几何参数，表 2，3 展示了边界条件的设置。

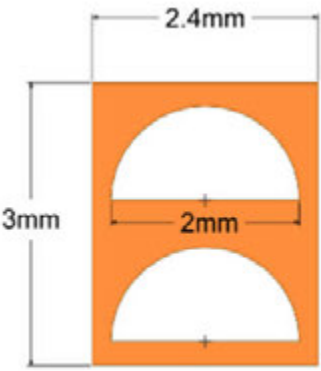


图 1 几何模型

表 1 几何参数

流动长度/mm	半径/mm	通道间距/mm
220	1	0.4

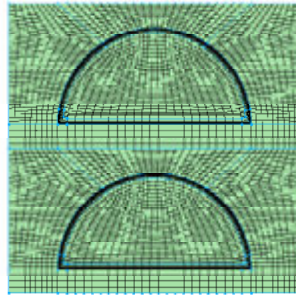


图2 网格分布

表2 热侧边界条件

温度/K	速度/m/s	氧浓度/wt%
773	1.8	10^{-4}
723	1.8	10^{-4}
673	1.8	10^{-4}
773	1.8	10^{-4}
773	1.5	10^{-4}
773	1.2	10^{-4}
773	1.8	10^{-5}
773	1.8	10^{-6}
723	1.8	10^{-6}
673	1.8	10^{-6}

表3 冷侧边界条件

温度/K	速度/m/s
600	4.2

1.2 控制方程及离散格式

采用瞬态雷诺时均控制方程：

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + v_t) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial u_i T}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(a + a_t) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right] \quad (3)$$

采用 SST $k-\omega$ 模型解耦。

对于湍流热扩散系数 α_t 的计算采用雷诺类比的方法，假定湍流粘度 ν_t 与湍流热扩散系数 α_t 之比近似为 1，这一比值称为湍流普朗特数 Pr_t ，对于液态铅铋合金 ($Pr_t \gg 1$)，其湍流

普朗特数分布与普朗特数、流动几何和流动状态呈非线性相关,因此雷诺类比方法并不适用,需要引进新的 Pr_t 模型计算液态金属湍流换热。

本文采用 kays^[14] 提出的 Pr_t 模型来计算液态铅铋合金湍流换热的湍流热扩散系数 α_t :

$$Pr_t = \frac{1}{\left[0.5882 + 0.228 \frac{v_t}{v} - 0.441 \left(\frac{v_t}{v} \right)^2 \left(1 - e^{-\frac{5.165}{v_t/v}} \right) \right]} \quad (4)$$

压力和速度解耦采用 simple 算法,二阶迎风格式离散对流项,时间步长设置为 0.001s,保证库朗数 $Co \leq 1$ 。

1.3 氧化模型

不锈钢在液态铅铋合金中的氧化腐蚀机理非常复杂,对于氧化腐蚀过程的数学模型的建立是非常困难的,因此在建模的过程中采用了很多假设。考虑到氧化物薄膜很小,可以近似与稳态条件,这一条件下,在液态铅铋合金与氧化物薄膜之间的来自铅铋侧的氧气的质量通量等于来自氧化物薄膜侧的氧化物质量通量与参与氧化反应的氧气的质量。本文使用的氧化模型假设的其他条件如下:

- (1) 假设在钢表面上形成的氧化物层是 Fe_3O_4 (磁铁矿)。
- (2) 钢的氧化过程是扩散控制的,遵循抛物线生长规律。
- (3) 氧化膜的形成不影响流体流动。

采用对流扩散方程来表示氧浓度的输运:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + S_i \quad (5)$$

其中 Γ 为组分的扩散系数。不锈钢管壁氧化可以由下式表示:



在流动的液态铅铋合金中,铅铋与不锈钢表面同时有两个过程发生,分别是氧化与溶解。氧化物薄膜的厚度可以由下式导出:

$$X(t) = (K_p t)^{1/2} - Q_c t \quad (7)$$

X 表示氧化层厚度单位为厘米 (cm), K_p 为氧化层生长速率常数, Q_c 为氧化层消除速率常数, t 为时间单位为秒 (s)。 K_p 和 Q_c 可以被结合为经验表达式 K 。

$$X(t) = (K \cdot t)^{1/2} \quad (8)$$

对于奥氏体 316L 不锈钢, soon 等^[15]通过实验拟合,该实验中温度范围为 773K-623K, K 被表示为式 (12):

$$K(T) = 3.027 \times 10^{-3} \exp \left(-\frac{161626}{RT} \right) \quad (9)$$

其中 R 为气体常数 8.314J/mol/K, T 为局部壁面温度,单位为开尔文 (K)。延通道的轴向与径向存在氧浓度梯度,并不是所有位置都会发生氧化反应,因此,需要求出发生氧化

反应的最小氧浓度。在不锈钢表面上形成磁铁矿所需的氧浓度可以从化学反应的热力学标准导出。本文采用的 $K(T)$ 由实验数据拟合，可以很好满足温度为 773K，673K 与 623K。

氧化所需的最小氧浓度可以被导出为：

$$\log C_{O,\min}[\text{wt}\%] = 1.53 - \frac{11047}{T} + \frac{3285}{T_c} \quad (10)$$

其中 T 是以开尔文 (K) 为单位的局部壁面温度， T_c 是最冷处的液态铅铋合金温度。假设当局部氧浓度高于最小氧浓度时，抛物线速率常数 K 与氧浓度的大小无关而只与温度相关。磁铁矿中的氧来源于铅铋中溶解氧，因此，氧化过程的耗氧速率可以由氧化膜的生长关系得到：

$$\frac{dq_O}{dt} = \omega_O \rho_{\text{magnetite}} \cdot \frac{dV}{dt} = \omega_O \rho_{\text{magnetite}} \cdot \frac{dX}{dt} dA \quad (11)$$

$$\omega_O = \frac{4M_O}{3M_{Fe} + 4M_O} \quad (12)$$

1.4 网格无关性验证

在保证所有算例满足 $y^+ < 1$ 的前提下，采用网格总量分别为 784378、1406418、2183866 的 4 种不同疏密程度的网格对最大雷诺数的算例进行计算以验证网格无关性。图 3 描述了在不同位置处液态铅铋合金的流速与温度，网格数量为 1406418 的网格与最大网格数量网格在计算结果上相差小于 3%，因此认为继续增大网格数量对计算结果是没有影响的，因此在本文中选择网格数量为 1406418 的网格。

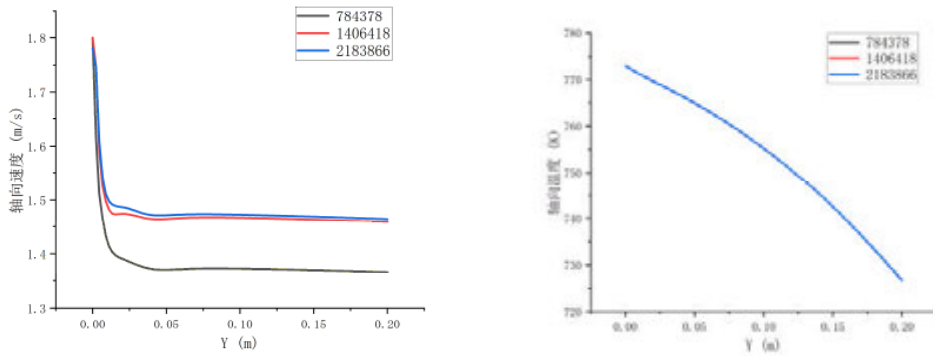


图 3 不同网格数量对速度和温度分布的影响

1.5 kays 模型验证

采用 Johnson 等^[15]实验数据对本文所采用的数值方法进行验证后，通过比较图表中 Kays 的数值结果与实验结果，发现它们之间的最大偏差为 10%。表明本文所采用的模型能够准确地计算液态铅铋合金的流动换热特性。

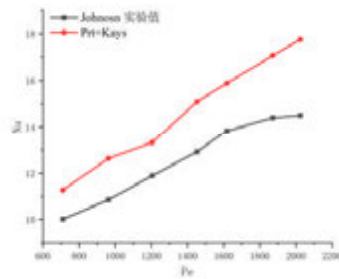


图 4 kays 模型验证

2 结果与讨论

本文的主要目标是预测 PCHE 内氧浓度的分布于氧化膜厚度，并且确定在液态铅铋合金与不锈钢交界面出的氧是否满足氧化层的生长，在 PCHE 中液态铅铋合金对管壁的氧化腐蚀是受温度的影响，本文采用控制变量法，讨论在不同工况下，两种因素对 PCHE 的管壁产生的影响。

2.1 耦合方法验证

对于耦合方法进行简单验证，设置算例，在等壁温条件下，保证氧气浓度大于满足氧化层生长的最小氧浓度，用 CFD 软件进行模拟与理论值进行对比。如图 5 所示，理论值与耦合解值吻合，证明耦合方法是适用的。

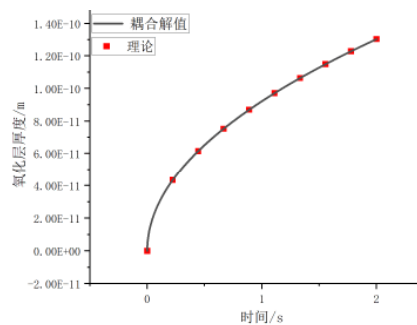


图 5 耦合解值与理论值对比

2.2 高氧浓度下热工水力影响

对于 PCHE 管壁，温度的变化对于氧化层的厚度变化是不可忽视的，图 6 展示了 0.15s 时进口流速和氧浓度分别为 1.8m/s 和 1×10^{-6} wt%，温度为 773K 的距离进口 120mm 处的氧浓度，温度和速度云图，氧浓度的最小值在尖角处，这是由于涡流所导致的，温度分层相对于速度云图更加明显，但是在考虑氧化腐蚀的情况下，这种情况会随氧浓度的输运而加剧；边界处的流速较小会导致氧浓度的迁移减小，在氧浓度较小时需要注意。在速度云图中最大流速达到 2.2m/s。图 7 展示了温度为 773K 流速为 1.8m/s 时的出口氧气浓度变化图，由计算所得， $C_{O,min}$ 的量级在 10^{-11} ，在氧气浓度达到最低点时，出口氧气浓度仍然远大于生成氧化

层的最低氧浓度，说明在当前氧浓度下，不存在缺氧情况。图 8 和图 9 展示了不同位置处氧化层的高度与不同温度下距离入口 0.02m 位置处的氧化层高度。图 10 展示了 2s 时，壁面温度与氧化层厚度的分布，氧化层厚度与温度呈正相关。

由于冷侧温度和流速保持不变，超临界二氧化碳的比热容较低，每单位质量携带的热量较少。因此，随着流速的增加，壁面温度相对较高。在图 11 中，展示了在不同流速下，距离入口 0.02m 处氧化层的生长情况。由于超临界二氧化碳的吸热能力有限，壁面温度的变化不大，导致氧化层的高度非常相似。当进口流速降低时，壁面温度下降，进而导致氧化层的高度也减小。氧化层的生长形式呈现抛物线曲线，随着时间的推移，最终会趋于平衡状态。

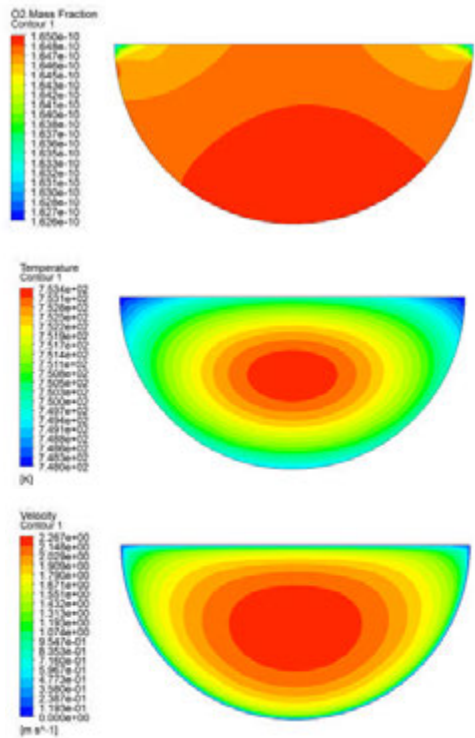


图 6 温度为 773K，进口流速为 1.8m/s， $t=0.15s$ 时 120mm 处氧气，温度和速度云图

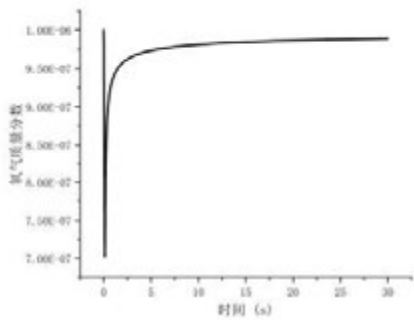


图 7 速度为 1.8m/s 温度为 773K 时出口氧气浓度图

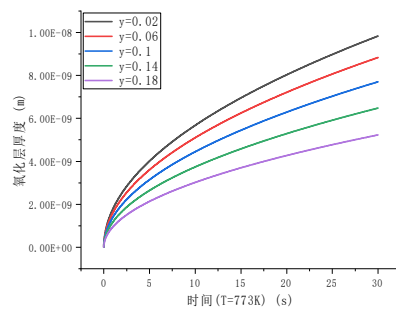


图 8 距离进口不同位置处的氧化层厚度

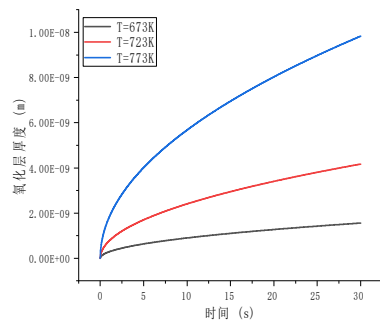
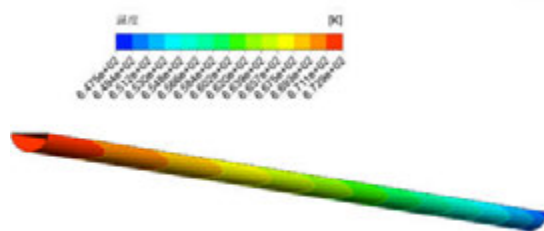
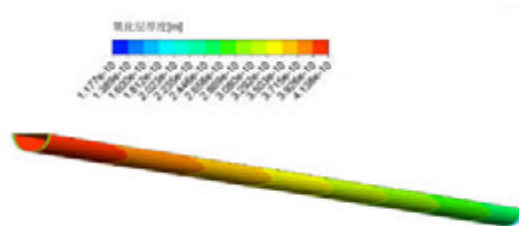


图 9 距离进口 0.02m 不同温度下氧化层厚度



a 温度分布



b 氧化层厚度分布

图 10 温度为 673K，进口流速为 1.8m/s，t=2s 时壁面温度与氧化层分布

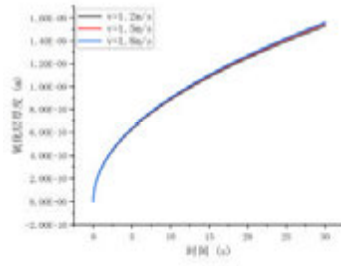


图 11 不同流速下距离入口 0.02m 的氧化层厚度

2.3 不同氧浓度影响

正常工况下，通常控制氧浓度为 $1 \times 10^{-6} \text{wt\%}$ 。在本研究中，当氧浓度为 $1 \times 10^{-6} \text{wt\%}$ ，一定时间内液态铅铋合金中氧气浓度小于生成氧化层所需的最小氧浓度，在这段时间内结构钢材料的腐蚀需要被考虑，本文通过对局部氧气浓度进行归一化处理来观察腐蚀状态。定义归一化氧浓度：

$$C_{O, \text{归一化}} = \frac{C_o}{C_{O, \min}} \quad (13)$$

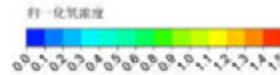


图 12 进口氧浓度为 $1 \times 10^{-6} \text{wt\%}$ ，温度为 773K，2s 时壁面归一化氧浓度

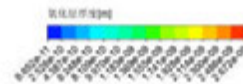


图 13 进口氧浓度为 $1 \times 10^{-6} \text{wt\%}$ ，温度为 773K，2s 时壁面氧化层厚度

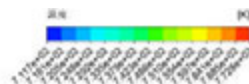


图 14 进口氧浓度为 $1 \times 10^{-6} \text{wt\%}$ ，温度为 773K，2s 时壁面氧化层厚度

图 12 展示了进口温度为 773K，速度为 1.8m/s，氧浓度为 $1 \times 10^{-6} \text{wt\%}$ 时的壁面氧浓度分布，图 13、14 展示了壁面的氧化层和温度分布，结果展示了 2s 时氧化层厚度不是仅由温度

决定， $C_{O,归一化}$ 分布说明结构钢材料的腐蚀将发生在大部分区域。记录最后一次出口氧浓度大于 $C_{O,min}$ 的时间为缺氧时间。

模拟结果表明，缺氧时间与进口氧气浓度，温度和流速有关，表 4、5、6 展示了不同氧浓度，温度和速度导致的缺氧时间变化，随进口氧浓度的下降，缺氧时间呈现阶跃式增加；随温度增加，耗氧速率增大，缺氧时间增加；流速不会导致温度出现明显变化，因此，缺氧时间变化不明显。在对换热器进行设计时这些因素需要被需要考虑。

表 4 温度 773K，速度 1.8m/s 不同进口氧气浓度导致的缺氧时间

氧浓度/wt%	缺氧时间/s
10^{-4}	0
10^{-5}	0.72
10^{-6}	>30

表 5 进口氧浓度 10^{-6} wt%，速度 1.8m/s 不同温度导致的缺氧时间

温度/K	缺氧时间/s
673	2.2
723	14.7
773	>30

表 6 进口氧浓度 10^{-6} wt%，温度 673K 不同速度导致的缺氧时间

速度/m/s	缺氧时间/s
1.8	2.2
1.5	2.8
1.2	4.5

3 结论

本文采用 SST $k-\omega$ 模型、Kays 湍流普朗特数 (Pr_t) 模型和氧化模型数值模拟了液态铅铋合金在不同工况下的直通道 PCHE 的流动下的腐蚀行为。首先基于实验数据对数值模型进行验证，模拟结果表明模型是适用的。对耦合方法得到的数值解与理论值进行比较，研究了温度，速度对 PCHE 的管壁的氧化腐蚀影响。在 30s 的模拟中，发现当进口氧气浓度为 1×10^{-4} wt%时，在任何工况下，缺氧时间不会出现，壁面氧浓度始终大于生成氧化层的最小氧浓度，满足氧化层生长要求，腐蚀不会发生，本文得到的主要结论如下：

- (1)在归一化氧浓度始终大于 1 的情况下，壁面温度与氧化层厚度呈正相关；由于超临界二氧化碳的比热容较小，导致了提高液态铅铋合金流速时，壁面温度变化不大，因此在 PCHE 中，随流速的增加，氧化层变化不明显。
- (2)在低氧浓度入口条件下，缺氧时间与温度呈正相。
- (3)在高温工况下，进口氧浓度应高于 1×10^{-6} wt%，避免因缺氧时间导致的腐蚀效应。

参考文献

[1] Han Jinsheng. Summary of Lead-Cooled Fast Reactor Research.Nuclear Science and Technology,2018,06(03):87—97

- [2] Li Ming-Jia, Xu Jin-Liang, Cao Feng, et al. The investigation of thermo-economic performance and conceptual design for the miniaturized lead-cooled fast reactor composing supercritical CO₂ power cycle. *Energy*, 2019, 173: 174—195
- [3] Li Ming-Jia, Zhu Han-Hui, Guo Jia-Qi, et al. The development technology and applications of supercritical CO₂ power cycle in nuclear energy, solar energy and other energy industries. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 126: 255—275
- [4] Courouau J L, Trabuc P, Laplanche G, et al. Impurities and oxygen control in lead alloys. *Journal of Nuclear Materials*, 2002, 301(1): 53—59
- [5] Tedmon C S. The Effect of Oxide Volatilization on the Oxidation Kinetics of Cr and Fe-Cr Alloys. *Journal of The Electrochemical Society*, 1966, 113(8): 766
- [6] Marino A, Lim J, Keijers S, et al. Numerical modeling of oxygen mass transfer in a wire wrapped fuel assembly under flowing lead bismuth eutectic. *Journal of Nuclear Materials*, 2018, 506: 53—62
- [7] Churbanov Alexander G, Iliev Oleg, Strizhov Valery F, et al. Numerical simulation of oxidation processes in a cross-flow around tube bundles. *Applied Mathematical Modelling*, 2018, 59: 251—271
- [8] Feng Wenpei, Zhang Xue, Chen Hongli. Simulation of oxygen mass transfer in fuel assemblies under flowing lead-bismuth eutectic. *Nuclear Engineering and Technology*, 2020, 52(5): 908—917
- [9] Martinelli L, Balbaud-Célériér F. Modelling of the oxide scale formation on Fe-Cr steel during exposure in liquid lead-bismuth eutectic in the 450–600 °C temperature range: Modelling of the oxide scale formation on Fe-Cr steel. *Materials and Corrosion*, 2011, 62(6): 531—542
- [10] Martinelli L, Ginestar K, Botton V, et al. Corrosion of T91 and pure iron in flowing and static Pb-Bi alloy between 450 °C and 540 °C: experiments, modelling and mechanism. *Corrosion Science*, 2020, 176: 108897
- [11] Ma Teng, Li Ming-Jia, Xu Jin-Liang, et al. Thermodynamic analysis and performance prediction on dynamic response characteristic of PCHE in 1000 MW S-CO₂ coal fired power plant. *Energy*, 2019, 175: 123—138
- [12] Martinelli L, Balbaud-Célériér F, Terlain A, et al. Oxidation mechanism of an Fe–9Cr–1Mo steel by liquid Pb–Bi eutectic alloy at 470°C (Part II). *Corrosion Science*, 2008, 50(9): 2537—2548
- [13] Kays William M. Turbulent Prandtl Number—Where Are We? *Journal of Heat Transfer*, 1994, 116(2): 284—295
- [14] Hwang Il Soon, Lim Jun. Structural Developments for Lead-Bismuth Cooled Fast Reactors, PEACER and PASCAR. 2010.
- [15] Johnson H A, Hartnett J P, Clabaugh W J. Heat Transfer to Molten Lead-Bismuth Eutectic in Turbulent Pipe Flow. *Journal of Fluids Engineering*, 1953, 75(6): 1191—1198

基于成本最小的 S-CO₂ 印刷电路板式换热器 构形优化

林道光^{11,2}, 谢志辉^{1*}, 孟凡凯¹, 奚坤¹, 陆卓群^{1,2}, 纪祥鲲¹, 戈延林^{3,4}

(1 海军工程大学 动力工程学院, 武汉 430033;

2 湖南人文科技学院 能源与机电工程学院, 娄底 417000;

3. 武汉工程大学 热科学与动力工程研究所, 武汉 430205;

4. 武汉工程大学 机电工程学院, 武汉 430205)

(联系电话: 18086608390, E-mail: zhihui-xie@163.com)

摘要: 本文将构形理论与总成本分析相结合, 针对半圆直通道超临界二氧化碳印刷电路板式换热器, 以无量纲总成本为优化目标, 在换热器总体积和换热通道体积一定的约束条件下, 以换热器长宽比和换热通道半径为优化变量, 进行了单自由度和双自由度构形优化。结果表明: 单自由度优化时, 存在最佳长宽比, 使得无量纲总成本取得最小值, 与初始设计结构相比, 无量纲总成本降低了 27.2%。存在长宽比与冷/热流体质量流率的最佳匹配, 均可使无量纲总成本取得最小值极值。提高冷/热流体进口压力和热流体进口温度, 降低冷流体进口温度, 可进一步降低无量纲总成本。双自由度优化的结果表明, 存在长宽比和通道半径的最佳匹配, 使得无量纲总成本取得双自由度最小值, 相比初始设计结构, 无量纲总成本降低了 46.8%, 相比于长宽比单自由度优化时, 降低了 26.92%。提高冷/热流体进口压力和热流体进口温度, 降低冷流体进口温度, 可进一步降低无量纲总成本, 且长宽比和换热通道半径的最佳匹配值各有不同。存在换热器长宽比、通道半径和冷/热流体质量流率的最佳匹配, 均可使得无量纲总成本分别再次取得最小值极值, 无量纲总成本得到显著降低。

关键词: 构形设计; 印刷电路板式换热器; 超临界二氧化碳; 总成本; 广义热力学优化

0 前言

能源消耗的快速增长加剧了资源短缺和环境污染问题。超临界二氧化碳 (S-CO₂) 布雷顿循环具有循环热效率高、系统结构紧凑、功率密度高、经济效益好等突出特点, 在核能开发、太阳能光热利用、余热回收等领域具有非常广阔的应用前景^[1-2]。换热器是 S-CO₂ 布雷顿循环的关键设备, 印刷电路板式换热器 (PCHE) 因其换热密度高、结构紧凑、重量轻、可在极端压力和高温条件下运行等优点, 被认为是 S-CO₂ 布雷顿循环

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (52371341, 51979278)

*通讯作者: 谢志辉, E-mail: zhihui-xie@163.com

的首选换热器，备受关注^[3-5]。

为了提高 PCHE 在不同应用场景下的工作性能，学者们开展了大量的优化研究。Jin 等^[6]以总成本为目标，研究得到了翼型肋 PCHE 的优化结构。Yang 等^[7]以传热温差和压降为优化目标，通过优化换热器整体尺寸来改善其热工水力性能。优化后的换热器压降可降低近 26%，传热温差可提高 0.4%。Pandey 等^[8]提出了一种包含热阻网络模型和 CFD 模型的混合建模方法，用于估算直通道和 Z 型通道结构的传热和压降，并验证了该混合模型的有效性。Xu 等^[9]以换热率和压降为优化目标，开展了直通道 PCHE 的优化研究。Jin 等^[10]以节距、弯角和弯道半径为设计变量，以压降和换热率为优化目标，对锯齿形通道 PCHE 的性能和尺寸进行了优化。Cheng 等^[11]从总成本角度出发对氢冷却器用 PCHE 的性能进行了比较和评价，采用多目标优化方法对通道几何参数进行了优化。研究发现，通道半径对制造成本和运行成本影响显著。Wang 等^[12]研究表明，单面刻蚀的 PCHE 在直通道内的换热性能优于双面刻蚀印刷电路板式换热器。Xu 等^[13]开展了铅铋快堆冷却用 PCHE 的研究，结果表明，PCHE 的单位体积换热率可达 181MW/m³，是相同工质条件下壳管式换热器的近 8 倍，紧凑型板式换热器的 2 倍；在换热率和压降满足条件的情况下，增加工质入口速度或减小换热通道直径，可使 PCHE 的总体积和总质量减小。

Bejan 在 1996 年提出了构形理论^[14]，该理论认为生命和非生命体结构均是在一定的约束条件下，按照为“流”提供更容易的路径不断寻优进化。这为各种工程结构的演化设计提供了新的理论指导^[15-21]。构形理论自提出以来，被广泛应用于自然、社会和各种工程领域的研究，特别是传热传质结构的研究^[22-28]。一些学者将其引入换热器的结构优化。Feng 等^[29]和 Cai 等^[30]以换热率和总泵功率组成的复合函数最小为目标对管壳式换热器进行了构形优化，所得最优构形在牺牲一定传热性能的前提下使得换热器流体流动性能显著提高。Wu 等^[31]对板式蒸发器进行了构形优化，优化后泵功率比初始值降低了 37.1%。Hajabdollahi^[32]以换热器效率和年总成本为优化目标对板翅式换热器进行了构形优化，当换热器效率高于 0.747 时，构形优化所得的换热器热经济性能更优，而当换热器效率低于 0.747 时，常规的换热器性能更优。Xie 等^[33]开展了增压锅炉蒸发器的构形优化，优化后换热率和流动压降的复合函数降低了 10.9%。Ariyo 和 Bello-Ochende^[34]以热阻最小化为目标，对微通道换热器进行构形优化，探讨了通道宽高比、通道水力直径、轴向流长度的优化设计。Dehaj 和 Hajabdollahi^[35]以换热器效率和年总成本为优化目标，对翅片管换热器开展了构形优化，优化后换热器的最高效率提高了 6.65%。淡智嵩等^[36]以换热率和总泵功率组成的复合函数为优化目标，对半圆换热通道的 S-CO₂ 循环 PCHE

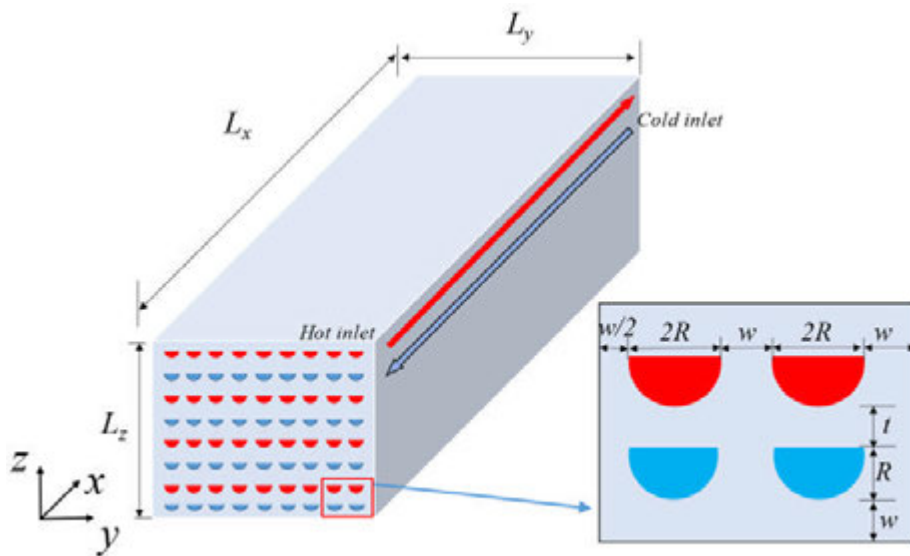
回热器进行构形设计，得到了最小复合函数和最佳换热通道半径，并分析了入口压力、温度、质量流率、平板层数和单板通道数等参数对构形优化结果的影响。Liu 等^[37]提出了一种双层非对称花格折流板，以效能评价系数为目标，在折流板体积一定的情况下，以错位角和非对称体积比为变量对换热器进行了构形优化。研究表明，与单弓形折流板相比，双层非对称花格折流板可显著提高换热器的综合热工水力性能，其效能评价系数平均提高了 106%。

本文将构形理论与总成本分析方法相结合，以无量纲总成本为优化目标，采用分段热设计方法，在换热器总体积和换热通道体积一定的约束条件下，以换热器长宽比和换热通道半径为优化变量，开展单自由度和双自由度构形优化，以探明无量纲总成本与几何设计参数之间的变化规律，寻找最佳设计尺寸，并研究冷/热流体质量流率、进口温度和进口压力对换热器总成本和最优构形的影响，可为 S-CO₂ 循环 PCHE 的优化设计提供理论指导。

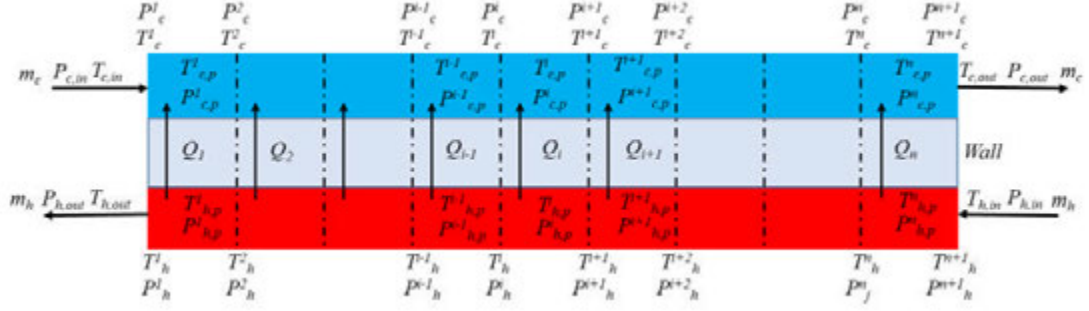
1 S-CO₂ 印刷电路板式换热器模型

1.1 几何与物理模型

S-CO₂ 循环印刷电路板式换热器及分段计算模型^[10,38]如图 1 所示。该 PCHE 的长宽高分别为 L_x 、 L_y 和 L_z (m)，冷/热流体换热通道为半圆直通道，半径均为 R (mm)。冷/热换热流体均为 S-CO₂。冷/热流体的进口总质量流率分别为 $m_{total,c}$ 和 $m_{total,h}$ (kg/s)，进口温度分别为 $T_{c,in}$ 和 $T_{h,in}$ (°C)，进口压力分别为 $P_{c,in}$ 和 $P_{h,in}$ (MPa)。假设冷/热流体在每个换热通道中分布均匀，忽略换热器表面和周围环境的热量交换。



(a) 几何结构模型



(b) 分段计算方法原理示意^[10,38]

图 1 印刷电路板式换热器模型

换热器的总体积为：

$$V = L_x \cdot L_y \cdot L_z \quad (1)$$

换热器入口端面的面积为：

$$A_d = L_y L_z = V / L_x \quad (2)$$

换热通道的总体积为：

$$V_{channel} = V \Phi \quad (3)$$

式中， Φ 为换热器孔度。

换热器冷、热流体通道各自总的截面积为：

$$A_{channel,h} = A_{channel,c} = A_d \Phi / 2 = \pi R^2 n_y n_z / 2 \quad (4)$$

式中， n_y 为换热器每层水平板上的通道个数， n_z 为换热器截面竖直方向上每列的通道个数。

换热器的换热单元数为（相邻的一组冷/热流体通道为一个换热单元）：

$$N_{unit} = n_y \cdot n_z / 2 \quad (5)$$

单个通道中冷/热流体的质量流率分别为：

$$\begin{cases} \dot{m}_c = \frac{\dot{m}_{total,c}}{N_{unit}} = \frac{2\dot{m}_{total,c}}{n_y n_z} \\ \dot{m}_h = \frac{\dot{m}_{total,h}}{N_{unit}} = \frac{2\dot{m}_{total,h}}{n_y n_z} \end{cases} \quad (6)$$

每个冷/热通道的横截面积为：

$$A = \pi R^2 / 2 \quad (7)$$

式中， R 为换热通道半径。

通道中冷/热流体的流速分别为：

$$\begin{cases} v_c = \frac{\dot{m}_c}{\rho_c A} \\ v_h = \frac{\dot{m}_h}{\rho_h A} \end{cases} \quad (8)$$

热流体在第 i 段通道的换热率为：

$$Q^i = m_h (H^{i+1}_h - H^i_h) = K^i_{unite} A^i_{unite} \Delta t^i_m \quad (9)$$

式中， H^{i+1}_h 和 H^i_h 分别为通道内热流体在 $i+1$ 节点和 i 节点的比焓。

第 i 段通道的总换热系数为：

$$K^i_{unite} = \left(\frac{1}{h^i_h A^i_{unite,h}} + \frac{1}{h^i_c A^i_{unite,c}} + \frac{t}{\lambda_{wall} A_{wall}} \right)^{-1} \quad (10)$$

式中， h ， A_{unite} ， λ ， t 分别为冷/热流体对流换热系数、换热面积、板片导热系数和通道间纵向距离。

第 i 段通道冷流体和热流体的对数平均温差为：

$$\Delta t^i_m = \frac{(T^{i+1}_h - T^{i+1}_c) - (T^i_h - T^i_c)}{\ln[(T^{i+1}_h - T^{i+1}_c) / (T^i_h - T^i_c)]} \quad (11)$$

第 i 段通道冷/热流体的对流换热系数为：

$$h^i = \frac{Nu^i \cdot \lambda^i}{d_{eq}} \quad (12)$$

式中， d_{eq} 为通道当量直径。

第 i 段通道冷/热流体的努塞尔数 Nu^i 为^[39]：

$$Nu^i = \begin{cases} 4.089, Re < 2300 \\ 4.089 + \frac{Nu_{Re=5000} - 4.089}{5000 - 2300} (Re_i - 2300), 2300 \leq Re < 5000 \\ \frac{\frac{f}{8} (Re - 1000) Pr}{1 + 12.7 \sqrt{\frac{f}{8}} (Pr_b^{2/3} - 1)}, Re \geq 5000 \end{cases} \quad (13)$$

式中， Re 、 Pr 和 f 分别为第 i 段通道中流体的雷诺数、普朗特数和摩擦系数。

第 i 段通道的换热面积为：

$$A^i_{unite,h} = A^i_{unite,c} = (\pi + 2) R L^i_x \quad (14)$$

每一个换热单元的换热率为：

$$Q_{unite} = \sum_{i=1}^N Q^i \quad (15)$$

换热器总换热率为：

$$Q_{total} = N_{unite} \cdot Q_{unite} \quad (16)$$

第*i*段通道中冷/热流体的摩擦系数 f 为^[11]：

$$f = \begin{cases} \frac{63.12}{Re}, Re < 2300 \\ \frac{1}{(1.8 \lg Re - 1.5)^2}, Re \geq 2300 \end{cases} \quad (17)$$

第*i*段冷/热通道中流体摩擦阻力引起的压降分别为^[11]：

$$\begin{cases} \Delta P_{c,f}^i = f_c^i \frac{L_{x,c}^i}{d_{eq}} \frac{\rho_c^i v_c^2}{2} \\ \Delta P_{h,f}^i = f_h^i \frac{L_{x,h}^i}{d_{eq}} \frac{\rho_h^i v_h^2}{2} \end{cases} \quad (18)$$

式中， ρ^i ， v 分别为冷/热流体的密度和流动速度。

每一个冷/热通道中流体摩擦阻力引起的压降分别为：

$$\begin{cases} \Delta P_{unite,c,f} = \sum_{i=1}^N \Delta P_{c,f}^i \\ \Delta P_{unite,h,f} = \sum_{i=1}^N \Delta P_{h,f}^i \end{cases} \quad (19)$$

冷/热通道进出口效应引起的压降分别为^[11]：

$$\begin{cases} \Delta P_{c,a} = \rho_{c,in} v_{c,in}^2 - \rho_{c,out} v_{c,out}^2 \\ \Delta P_{h,a} = \rho_{h,in} v_{h,in}^2 - \rho_{h,out} v_{h,out}^2 \end{cases} \quad (20)$$

冷/热通道流体压降分别为：

$$\begin{cases} \Delta P_c = \Delta P_{unite,c,f} + \Delta P_{c,a} \\ \Delta P_h = \Delta P_{unite,h,f} + \Delta P_{h,a} \end{cases} \quad (21)$$

1.2 优化目标

S-CO₂ 循环印刷电路板式换热器的总成本可计算为^[40]：

$$C_{total} = C_{co} + C_{op} \quad (22)$$

式中， C_{co} 和 C_{op} 分别为制造成本和运行成本，\$。

制造成本 C_{co} 为：

$$C_{co} = \rho_{mat} C_{mat} V_{mat} \quad (23)$$

式中， ρ_{mat} 和 C_{mat} 分别为印刷电路板式换热器材料的密度和单价。

运行成本 C_{op} 为：

$$C_{op} = \sum_{k=1}^{k_y} \frac{C_o}{(1+J)^k} \quad (24)$$

$$C_o = P k_p B \quad (25)$$

$$P_{pump} = \frac{1}{\eta} \left(\frac{m_{total,c} \Delta P_c}{\rho_{c,ave}} + \frac{m_{total,h} \Delta P_h}{\rho_{h,ave}} \right) \quad (26)$$

式中， k_y 是换热器工作年限， J 为年折现率， C_o 为每年运行成本， P_{pump} 为泵耗功率， k_p

为能源价格， B 为每年运行小时数， η 为泵效率， $\rho_{c,ave}$ 和 $\rho_{h,ave}$ 分别为冷/热流体的平均密度。

无量纲总成本 $\tilde{C}_{total}$ 为：

$$\tilde{C}_{total} = \frac{C_{co}}{C_{co,int}} + \frac{C_{op}}{C_{op,int}} = \tilde{C}_{co} + \tilde{C}_{op} \quad (27)$$

式中， $C_{co,int}$ 和 $C_{op,int}$ 为换热器初始条件下的制造成本和运行成本， C_{co} 和 C_{op} 为当前换热器条件下的制造成本和运行成本。

2 超临界 CO₂ 印刷电路板换热器构形优化

在构形优化计算中，初始参数取值如下： $\Phi = 0.65$ ， $\tilde{L}_x = 8.55$ （换热器长宽比

$\tilde{L}_x = L_x / \sqrt{A_d}$ ）、 $T_{h,in} = 230^\circ\text{C}$ ， $T_{c,in} = 80^\circ\text{C}$ 、 $P_{h,in} = 9.2 \text{ MPa}$ 、 $P_{c,in} = 10 \text{ MPa}$ 、

$\dot{m}_{total,h} = \dot{m}_{total,c} = 0.3 \text{ kg/s}$ 、 $R_h = R_c = R = 1 \text{ mm}$ 。 $\rho_{mat} = 8360 \text{ kg/m}^3$ 、 $C_{mat} = 120 \text{ \$/kg}$ 、

$k_y = 10$ 年、 $J = 10\%$ 、 $k_p = 0.12 \text{ \$/kWh}$ 、 $B = 7000 \text{ h/year}$ 、 $\eta = 0.8^{[41,42]}$ 。在无特殊说明时，以上各初始参数均不变。

2.1 换热器长宽比单自由度优化

图 2 给出了换热器长宽比 $\tilde{L}_x$ 对换热器无量纲制造成本 $\tilde{C}_{co}$ 、无量纲运行成本 $\tilde{C}_{op}$ 和无量纲总成本 $\tilde{C}_{total}$ 的影响。从图 2 可以看出，随着长宽比 $\tilde{L}_x$ 的增大， $\tilde{C}_{co}$ 逐渐减小，而 $\tilde{C}_{op}$ 逐渐增大。这是因为在换热通道体积一定的条件下，增大 $\tilde{L}_x$ ，流体总流通截面积变小，流体质量流率变大，总换热率增加，换热器的单位体积换热率也随之增大，单位换热率所需

换热器体积减小，所以制造成本减小；而随着 $\tilde{L}_x$ 的增大，压降随之增加，泵耗功率增大，这导致运行成本增加。无量纲总成本 $\tilde{C}_{total}$ 随着 $\tilde{L}_x$ 的增大先减小后增大。这是因为，长宽比 $\tilde{L}_x$ 较小时增大 $\tilde{L}_x$ ，制造成本减小的幅度比运行成本增大的幅度更大，所以无量纲总成本逐渐下降；但随着 $\tilde{L}_x$ 继续增大，运行成本增大的幅度逐渐超过了制造成本减小的幅度，所以无量纲总成本转而逐渐提高。存在最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ (3.61)，使得无量纲总成本取得最小值 0.728；与初始设计结构相比，此时，PCHE 的无量纲制造成本 $\tilde{C}_{co}$ 增加了 24.6%，无量纲运行成本 $\tilde{C}_{op}$ 则减小了 78.9%，无量纲总成本 $\tilde{C}_{total}$ 减小了 27.2%。即， $\tilde{C}_{op}$ 减小的幅度远大于 $\tilde{C}_{co}$ 增加的幅度；通过优化长宽比，换热器的总成本得到大幅降低。

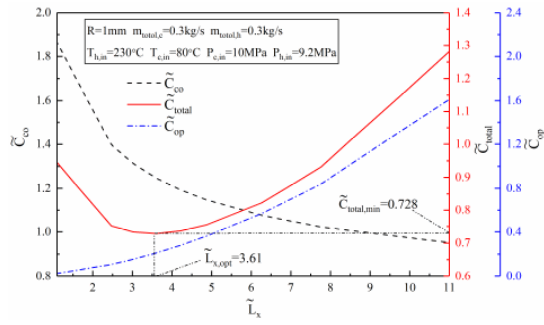


图2 $\tilde{L}_x$ 对 $\tilde{C}_{co}$ ， $\tilde{C}_{op}$ 和 $\tilde{C}_{total}$ 的影响

图3和图4给出了冷/热流体质量流率对换热器最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 以及换热器最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的影响。随着冷/热流体质量流率的增加，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 不断减小，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 均先减小然后逐渐增加。即，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 均存在最小值极值 $\tilde{C}_{total,2min}$ ，冷流体质量流率最优 ($m_{total,c,opt} = 0.61 \text{ kg/s}$)

时 $\tilde{C}_{total,2min} = 0.656$ ，热流体质量流率最优 ($m_{total,h,opt} = 0.41 \text{ kg/s}$) 时 $\tilde{C}_{total,2min} = 0.719$ ，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,2opt}$ 分别为 2.22 和 2.48。即，进一步优化冷/热流体质量流率所得的无量纲总成本最小值极值 $\tilde{C}_{total,2min}$ ，相比无量纲总成本最小值 $\tilde{C}_{total,min}$ 分别下降了 9.89% 和 1.24%。这是因为，当冷/热流体质量流率较小时，增大质量流率，制造成本降低的幅度大于运行成本增加的幅度，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 不断减小；随着冷/热流体质量流率的继续增加，运行成本增加的幅度超过制造成本降低的幅度，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 不断增加；故 $\tilde{C}_{total,min}$ 先减小后增加，无量纲总成本存在最小值极值。

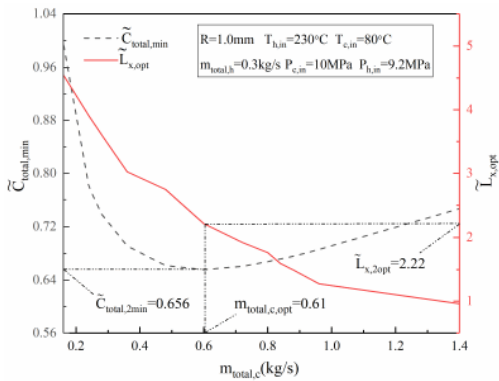


图3 $\tilde{C}_{total,min}$ 和 $m_{total,c}$ 与 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的关系

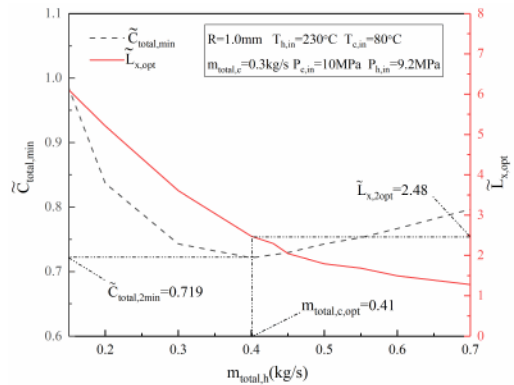


图4 $\tilde{C}_{total,min}$ 和 $m_{total,h}$ 与 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的关系

图 5 和图 6 给出了冷/热流体进口温度对换热器最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 以及换热器最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的影响。

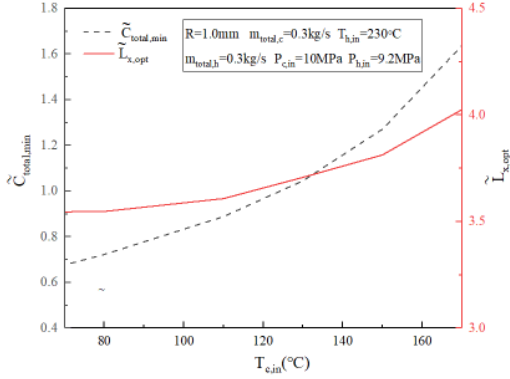


图 5 $\tilde{C}_{total,min}$ 和 $T_{c,in}$ 与 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的关系

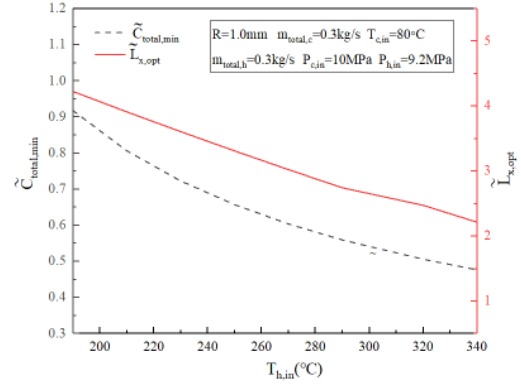


图 6 $\tilde{C}_{total,min}$ 和 $T_{h,in}$ 与 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的关系

随着冷流体进口温度 $T_{c,in}$ 的下降和热流体进口温度 $T_{h,in}$ 的上升，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 和最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 均不断减小。这是因为，降低冷流体进口温度 $T_{c,in}$ 或提高热流体进口温度 $T_{h,in}$ ，增加换热器内流体换热温差，导致换热器单位体积换热率显著增大，单位换热率所需换热器体积减小，从而使得制造成本显著降低；降低冷流体进口温度 $T_{c,in}$ 或提高热流体进口温度 $T_{h,in}$ ，运行成本小幅度增加。制造成本降低的幅度大于运行成本增大的幅度，所以，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 不断减小。

图 7 和 8 分别给出了冷/热流体进口压力对换热器最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 以及换热器最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的影响。

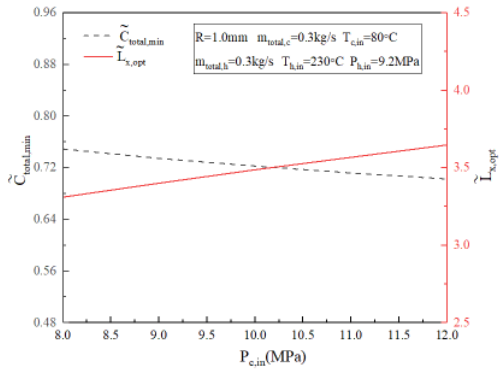


图 7 $\tilde{C}_{total,min}$ 和 $P_{c,in}$ 与 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的关系

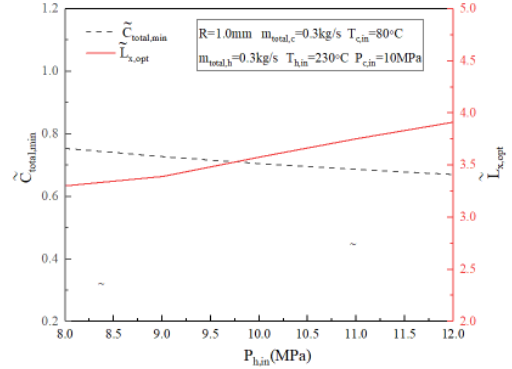


图 8 $\tilde{C}_{total,min}$ 和 $P_{h,in}$ 与 $\tilde{L}_{x,opt}$ 的关系

由图 7 和图 8 可知，随着冷/热流体进口压力 $P_{c,in}$ 和 $P_{h,in}$ 的提高，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 逐渐减小，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 不断变大，但变化幅度不大。这是因为，提高冷/热流体进口压力，冷/热流体的密度、定压比热和导热系数均变大，运动粘度变小，提高了冷/热流体的总换热系数，导致换热器的单位体积换热率显著增大，单位换热率所需换热器体

积减小，从而使得制造成本明显降低，提高冷流体进口压力，无量纲运行成本略微增加，提高热流体进口压力，无量纲运行成本减小，所以，换热器最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 不断减小。

2.2 长宽比与通道半径双自由度优化

同时释放换热器长宽比 $\tilde{L}_x$ 和换热通道半径 R 两个几何变量，开展以 $\tilde{L}_x$ 与 R 为变量的双自由度构形优化。图 9 给出了 $\tilde{L}_x$ 和 R 对 $\tilde{C}_{total}$ 的影响。从图可以看出，给定 $\tilde{L}_x$ ， $\tilde{C}_{total}$ 随 R 的增大先减小后增大，给定 R 时， $\tilde{C}_{total}$ 随 $\tilde{L}_x$ 的增大先减小后增大。由图 9 可知，存在长宽比和通道半径的最佳匹配，使得无量纲总成本取得双自由度优化最小值 $\tilde{C}_{total,2v,min} = 0.532$ ，此时，对应的最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt} = 1.78$ ，最佳通道半径 $R_{opt} = 0.39 \text{ mm}$ ；相比初始设计结构，PCHE 的无量纲总成本降低了 46.8%，相比长宽比单独优化取得的最小无量纲总成本，下降了 26.92%。

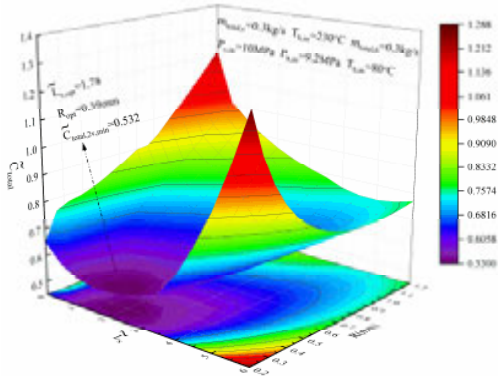


图 9 $\tilde{L}_x$ 和 R 对 $\tilde{C}_{total}$ 的影响

图 10 和图 11 给出了冷/热流体质量流率对换热器最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 、换热器最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 以及最佳换热通道半径 R_{opt} 的影响。由图可知，随着冷/热流体质量流率的增加，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 不断减小，最佳通道半径 R_{opt} 不断增加，但增加幅度不大，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 则先减小然后逐渐增加。即，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 存在最小值极值 $C_{total,2v,2min}$ ，冷流体质量流率最优（ $m_{total,c,opt} = 0.48 \text{ kg/s}$ ）时 $C_{total,2v,2min} = 0.493$ ，热流体质量流率最优（ $m_{total,h,opt} = 0.33 \text{ kg/s}$ ）时 $C_{total,2v,2min} = 0.529$ ，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,2opt}$ 分别为 1.26 和 1.59，最佳通道半径 R_{2opt} 分别为 0.41 mm 和 0.40 mm。在最佳冷/热流体质量流率下取得的双自由度无量纲总成本最小值极值 $C_{total,2v,2min}$ ，相比初始设计结构，无量纲总成本分别降低了 50.7%和 47.1%；相比初始质量流率下双自由度优化时取得的无量纲总成本最小值分别下降了 7.91%和 0.56%；相比最佳冷/热流体质量流率下长宽比单自由度优化取得的无量纲总成本最小值极值分别下降了 24.85%和 26.43%。

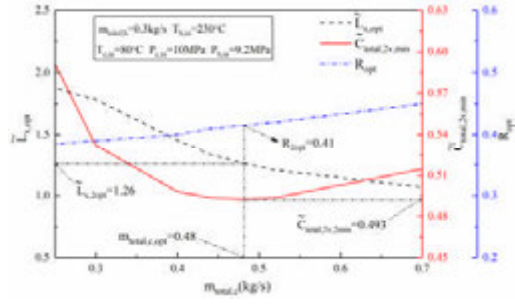


图 10 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 和 $m_{total,c}$ 、 $\tilde{L}_{x,opt}$ 与 R_{opt} 的关系

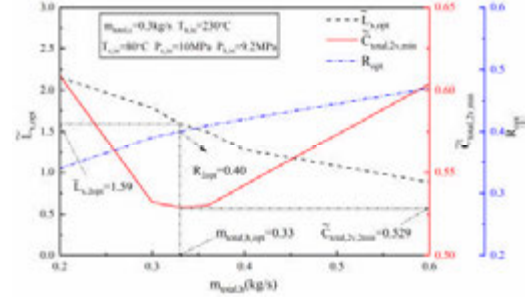


图 11 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 和 $m_{total,h}$ 、 $\tilde{L}_{x,opt}$ 与 R_{opt} 的关系

图 12 和图 13 给出了冷/热流体进口温度对换热器最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 、最佳换热器长宽比 $\tilde{L}_x$ 以及最佳通道半径 R_{opt} 的影响。由图可知，随着冷流体进口温度 $T_{c,in}$ 的下降和热流体进口温度 $T_{h,in}$ 的上升，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 和最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 均不断减小，但最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 减小幅度较小，最佳通道半径 R_{opt} 略微增大。

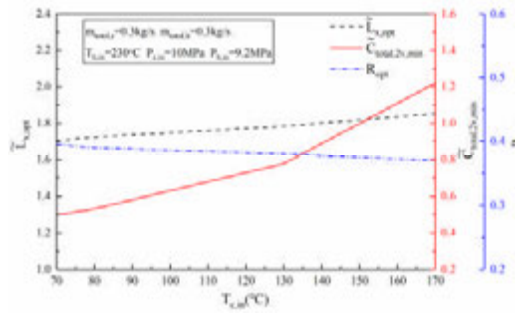


图 12 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 和 $T_{c,in}$ 、 $\tilde{L}_{x,opt}$ 与 R_{opt} 的关系

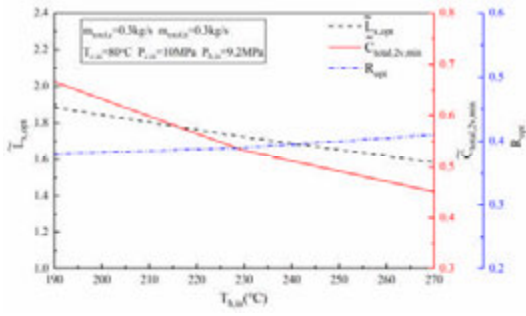


图 13 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 和 $T_{h,in}$ 、 $\tilde{L}_{x,opt}$ 与 R_{opt} 的关系

图 14 和图 15 给出了冷/热流体进口压力对换热器最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 、最佳换热器长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 以及最佳通道半径 R_{opt} 的影响。由图可知，随着冷/热流体进口压力 $P_{c,in}$ 和 $P_{h,in}$ 的提高，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 均逐渐减小，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 均不断变大，但变化幅度不大。最佳通道半径 R_{opt} 则随着冷流体进口压力 $P_{c,in}$ 的提高略微增加，随着热流体进口压力 $P_{h,in}$ 的提高略微减小。

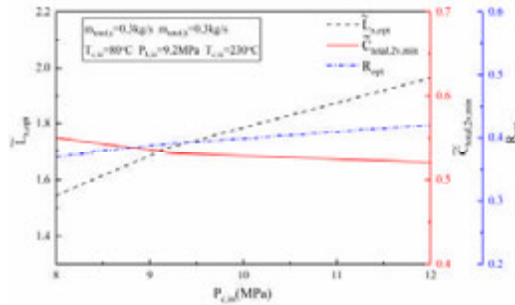


图 14 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 和 $P_{c,in}$ 、 $\tilde{L}_{x,opt}$ 与 R_{opt} 的关系

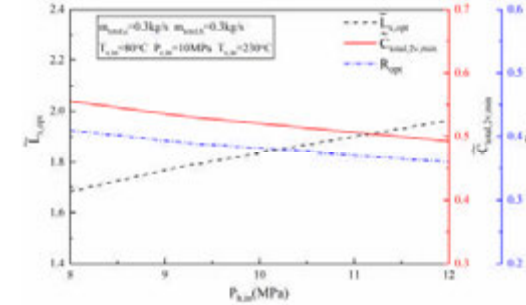


图 15 $\tilde{C}_{total,2v,min}$ 和 $P_{h,in}$ 、 $\tilde{L}_{x,opt}$ 与 R_{opt} 的关系

3 结论

本文将构形理论与总成本分析方法相结合，以无量纲总成本最小为优化目标，在换热器总体积和换热通道总体积一定的条件下，分别以换热器长宽比和换热通道半径为优化变量，对 S-CO₂ 循环 PCHE 开展了单自由度和双自由度构形设计。本论文研究结果可为 S-CO₂ 循环 PCHE 的优化设计提供指导。研究结果表明：

(1) 存在换热器最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ ，使得无量纲总成本取得单自由优化最小值，与初始设计结构相比，无量纲总成本降低了 27.2%。降低冷流体进口温度或提高热流体进口温度，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 和最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 均不断减小。提高冷/热流体进口压力，最小无量纲总成本 $\tilde{C}_{total,min}$ 逐渐减小，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 增加，但变化幅度不大。

(2) 存在长宽比和冷/热流体质量流率的最佳匹配，使得最小无量纲总成本分别取得最小值极值，冷流体质量流率最优时 $\tilde{C}_{total,2min} = 0.656$ ，热流体质量流率最优时 $\tilde{C}_{total,2min} = 0.719$ ，相比无量纲总成本最小值，分别减小了 9.89% 和 1.24%。

(3) 双自由度优化发现，存在长宽比和通道半径的最佳匹配，使得无量纲总成本取得最小值，相比初始设计结构，无量纲总成本下降了 46.8%，相比于长宽比单自由度优化的结果，下降了 26.92%。降低冷流体进口温度或提高热流体进口温度，最小无量纲总成本和最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 均不断减小，最佳通道半径 R_{opt} 均略微增大；提高冷/热流体进口压力，最小无量纲总成本逐渐减小，最佳长宽比 $\tilde{L}_{x,opt}$ 均逐渐变大，最佳通道半径 R_{opt} 则随着冷流体进口压力 $P_{c,in}$ 的提高略微增加，随着热流体进口压力 $P_{h,in}$ 的提高略微减小。

(4) 存在长宽比、通道半径和冷/热流体质量流率的最佳匹配，使得无量纲总成本分别取得双自由度优化最小值极值，冷流体质量流率最优时 $C_{total,2v,2min} = 0.493$ ，热流体质量流率最优时 $C_{total,2v,2min} = 0.529$ ，相比初始设计结构，总成本分别下降了 50.7% 和 47.1%；相比初始质量流率双自由度优化取得的无量纲总成本最小值分别下降了 7.91% 和 0.56%；相比最佳冷/热流体质量流率下长宽比单自由度优化取得的无量纲总成本最小值极值分别降低了 24.85% 和 26.43%。

参考文献：

- [1] Guo J Q, Li M J, He Y L, et al. A systematic review of supercritical carbon dioxide(S-CO₂) power cycle for energy industries: Technologies, key issues, and potential prospects [J]. Energy Conversion and Management, 2022, 258: 115437.

- [2] Ehsan M M, Awais M, Lee S, et al. Potential prospects of supercritical CO₂ power cycles for commercialisation: Applicability, research status, and advancement [J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2023, 172: 113044.
- [3] Huang C Y, Cai W H, Wang Y, et al. Review on the characteristics of flow and heat transfer in printed circuit heat exchangers [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 153: 190-205.
- [4] Ma Y, Xie G N, Hooman K. Review of printed circuit heat exchangers and its applications in solar thermal energy[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2022, 155:111933.
- [5] Chung S, Lee S W, Kim N. Experimental study of printed-circuit heat exchangers with airfoil and straight channels for optimized recuperators in nitrogen Brayton cycle[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2023, 218: 119348.
- [6] Jin G K, Kim T H, Park H S, et al. Optimization of airfoil-type PCHE for the recuperator of small scale brayton cycle by cost-based objective function [J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2016, 298: 192-200.
- [7] Yang Y, Li H, Yao M, et al. Optimizing the size of a printed circuit heat exchanger by multi-objective genetic algorithm [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 167: 114811.
- [8] Pandey V, Kumar P, Dutta P. Thermo-hydraulic analysis of compact heat exchanger for a simple recuperated sCO₂ Brayton cycle [J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2020, 134: 110091.
- [9] Xu H, Duan C J, Ding H, et al. The optimization for the straight-channel PCHE size for supercritical CO₂ Brayton cycle[J]. *Nuclear Engineering and Technology*, 2021;53(6):1786–1795.
- [10] Jin F, Chen D Q, Hu L, et al. Optimization of zigzag parameters in printed circuit heat exchanger for supercritical CO₂ Brayton cycle based on multi-objective genetic algorithm [J]. *Energy Conversion and Management*, 2022, 270: 116243.
- [11] Cheng Y, Li Y X, Wang J H, et al. Multi-objective optimization of printed circuit heat exchanger used for hydrogen cooler by exergoeconomic method [J]. *Energy*, 2023, 262: 125455.
- [12] Wang Y M, Xie G N, Zhu H T, et al. Assessment on energy and exergy of combined supercritical CO₂ Brayton cycles with sizing printed-circuit-heat-exchangers [J]. *Energy*, 2023,263:125559.
- [13] Xu J H, Ma Y F, Han Z R, et al. Thermal design of printed circuit heat exchanger used for lead-bismuth fast reactor [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2023, 226: 120343.
- [14] Bejan, A. Street network theory of organization in nature [J]. *Journal of Advanced Transportation*. 1996, 30, 85–107.
- [15] Bejan A. Constructal-theory network of conducting paths for cooling a heat generating volume [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1997, 40(4): 799-816.
- [16] Chen L G. Progress in study on constructal theory and its applications [J]. *Science China: Technology Science*, 2012, 55: 802-820.
- [17] Feng H J, Chen L G, Xie Z H. Multi-disciplinary, multi-objective and multi-scale constructal optimizations for heat and mass transfer processes performed in Naval University of Engineering, a review [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 115: 86-98.
- [18] Chen L G, Feng H J, Xie Z H, et al. Progress of constructal theory in China over the past decade [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 130: 393-419.

- [19] Bejan A. Constructal design evolution versus topology optimization [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023, 141: 106567.
- [20] Bejan A. Perfection is the enemy of evolution [J]. *Biosystems*, 2023, 229: 104917.
- [21] Bejan A. The principle underlying all evolution, biological, geophysical, social and technological [J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2023, 381(2252): 20220288.
- [22] Xie Z H, Chen L G, Sun F R. Constructal entropy generation rate minimization of line-to-line vascular networks with convective heat transfer[J]. *International Journal of Thermal Science*, 2013, 74: 72-80.
- [23] Cetkin E, Lorente S, Bejan A. Vascularization for cooling and reduced thermal stresses[J]. *International Journal of Thermal Science*, 2015, 80: 858-864.
- [24] Mirzaei M, Hajabdollahi H, Fadakar H, Multi-objective optimization of shell-and-tube heat exchanger by constructal theory[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 125: 9-19.
- [25] Shi H N, Xie Z H, Chen L G, et al. Constructal optimization for line-to-line vascular based on entropy generation minimization principle[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 126: 848-854.
- [26] Miguel A F. Optimal Y-shaped constructs heat sinks under different size constraints[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 131: 64-71.
- [27] Dutra R F, Zinani F S F, Rocha L A O, et al. Effect of non-Newtonian fluid rheology on an arterial bypass graft: A numerical investigation guided by constructal design [J]. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 2021, 201: 105944.
- [28] Nava-Arriaga E M, Hernandez-Guerrero A, Luviano-Ortiz J L, et al. Heat sinks with minichannels and flow distributors based on constructal law[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 125: 105122.
- [29] Feng H J, Chen L G, Wu Z X, et al. Constructal design of a shell-and-tube heat exchanger for organic fluid evaporation process[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 131: 750–756
- [30] Cai C G, Feng H J, Chen L G, et al. Constructal design of a shell-and-tube evaporator with ammonia-water working fluid[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 135: 541–547.
- [31] Wu Z X, Feng H J, Chen L G, et al. Pumping power minimization of an evaporator in ocean thermal energy conversion system based on constructal theory [J]. *Energy*, 2019, 181: 974-984.
- [32] Hajabdollahi H. Multi-objective optimization of plate fin heat exchanger using constructal theory[J]. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2019, 108:104283.
- [33] Xie Z J, Feng H J, Chen L G, et al. Constructal design for supercharged boiler evaporator [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 138: 571-579.
- [34] Ariyo D O, Bello-Ochende T. Constructal design of subcooled microchannel heat exchangers[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 146:118835.
- [35] Dehaj M S, Hajabdollahi H. Fin and tube heat exchanger: Constructal thermo-economic optimization[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 173(4):121257.
- [36] 淡智嵩,冯辉君,陈林根,等.半圆换热通道的印刷电路板式回热器构形设计[C]. 高等学校工程热物理第二十九届全国学术会议, 论文编号: B-2023040, 2023年5月19日-5月22日, 青岛.
- [37] Liu H Y, Xi K, Xie Z H, et al. Constructal design of double-layer asymmetric flower baffles [J]. *Energy*. 2023, 280: 128254.

- [38] Saeed M, Radaideh M I, Berrouk A S, et al. Machine learning-based efficient multi-layered precooler design approach for supercritical CO₂ cycle[J]. Energy Conversion and Management X, 2021, 18, 100104.
- [39] Ruiz-Casanova E, Rubio-Maya C, Pacheco-Ibarra J J, et al. Thermodynamic analysis and optimization of supercritical carbon dioxide Brayton cycles for use with low-grade geothermal heat sources[J]. Energy Conversion and Management, 2020, 216: 112978.
- [40] Asadi M, Song Y, Sunden B, et al. Economic optimization design of shell-and-tube heat exchangers by a cuckoo-search-algorithm[J]. Applied Thermal Engineering, 2014, 73(1):1030-1038.
- [41] Kim E S, Oh C H, Sherman S. Simplified optimum sizing and cost analysis for compact heat exchanger in VHTR[J]. Nuclear Engineering and Design, 2008, 238(10):2635–2647.
- [42] Jamil M A, Goraya T S, Shahzad M W, et al. Exergoeconomic optimization of a shell-and-tube heat exchanger[J]. Energy Conversion and Management, 2020, 226: 113462.

管壳式相变储热单元内肋片结构的拓扑优化研究

谢昀¹, 赵耀^{1,2,*}

(1-上海交通大学智慧能源创新学院, 上海 200240; 2-上海非碳基能源转换与利用研究院, 上海 200240)

(Tel: 021-64355111-6185, Email: zhaoyao@sjtu.edu.cn)

摘要: 肋片是强化管壳式相变储热单元传热性能的有效手段, 但肋片结构优化多基于工程经验, 难以实现明确目标下的最优化。本文建立了相变储热单元的二维拓扑优化数学模型, 揭示了自然对流对肋片结构及其换热性能的影响机理, 得到了不同目标函数和储热时间下的最优肋片结构。研究表明, 拓扑优化肋片能比响应面曲线法所得肋片多熔化 10%相变材料; 缩短储热时间将削弱自然对流对肋片结构的贡献; 最大化焓目标函数生成的肋片可多吸收 9.1%热量。

关键词: 相变储热; 拓扑优化; 肋片; 自然对流

0 前言

可再生能源的高效利用是能源结构转型的重要一环, 为解决可再生能源的间歇性与波动性问题, 需要高效的长时储能技术。相变储热具有能量密度高、工作温度稳定、体积变化小等特点, 具有较好的研究与应用前景^[1]。除金属外, 常见相变储热材料(烷烃、糖醇、无机盐等)的导热系数普遍较低, 制约了相变材料的储放热速率^[2]。具体到管壳式相变储热单元, 在换热管外侧设置肋片扩展换热表面以强化传热性能, 是一种低成本且易实现的方法^[3]。

目前, 肋片结构的优化方法主要有三种: 尺寸优化、形状优化和拓扑优化^[4,5]。在上述三类结构优化方法中, 尺寸优化与形状优化的应用较为成熟, 但设计变量有限; 拓扑优化则能够计算空间内最优的材料分布, 具有极高的设计自由度^[6]。连续体结构拓扑优化最初被应用于力学结构设计, 近二十年, 拓扑优化方法开始逐步用于解决传热问题, 实现了稳态导热下的散热器优化设计^[7]。此后, 更复杂的传热模型被用于拓扑优化设计。Alexandersen 等^[8]使用密度基拓扑优化方法, 探索了大尺度三维自然对流问题。Pizzolato 等^[9,10]首次将拓扑优化应用于优化管壳式相变储热单元的肋片结构, 并探究了自然对流对肋片形状的影响。游吟等^[11]基于纯导热相变储热模型, 分别得到了以平均温度最大化和焓最大化为目标函数的肋片结构; Tian 等^[12]尝试以焓耗散为目标函数, 但优化结构没

(No.ZJUCEU2022022)

有显著强化自然对流。

综上，对于相变储热单元肋片结构的拓扑优化研究多停留在固定储热工况，不能贴合工程应用中储热时间灵活变化的需求。此外，在考虑自然对流的情况下，目标函数对肋片结构的影响尚不明确。本文将建立相变储热单元的二维拓扑优化数学模型，研究自然对流对肋片结构与性能的影响机理，探索储热时间对肋片结构的影响规律，验证最大化焓目标函数对储热能力的实际意义。

1 物理模型

1.1 设计域

图 1 (a)为管壳式相变储热单元的三维简化模型。在水平放置的圆柱体储罐中，传热流体沿换热管流动，周围填充 RT60 石蜡作为相变储热材料。本文取储热单元的径向截面作为设计域，为简化计算，沿对称轴取截面的一半，如图 1 (b)所示。设计域 Ω 中填充有相变材料 (PCM) 与导热材料 (HCM) 组成的虚拟复合材料，换热管的外壁面 Γ_1 可视为恒温^[13]，储罐壁面 Γ_2 与外界环境无热交换。设计域的内外半径 r_1 、 r_2 分别为 20 mm 与 50 mm。表 1 列出了计算所用的材料热物性参数。

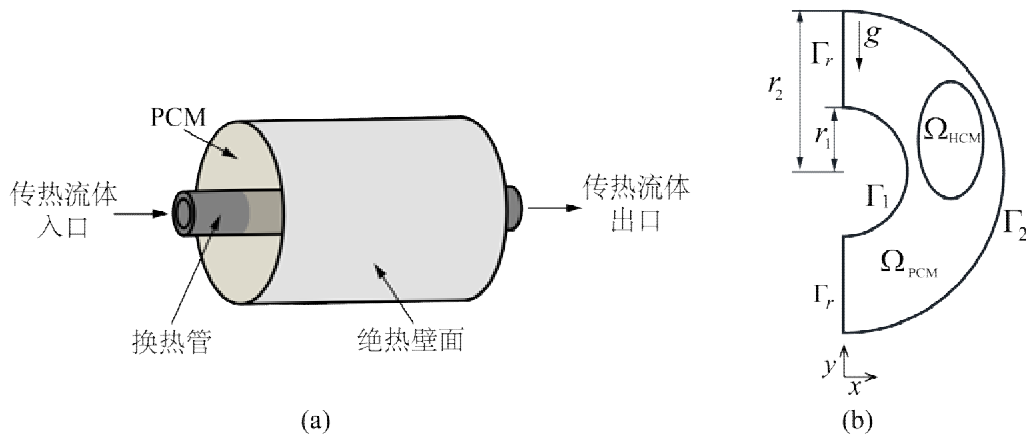


图 1 储热单元示意图：(a) 三维简化模型；(b) 二维截面设计域

表 1 热物性参数表

参数	名称	数值
k_{PCM}	相变材料热导率	0.15 W/(m·K)
k_{HCM}	导热材料热导率	214 W/(m·K)
ρ_{PCM}	相变材料密度	780 kg/m ³
ρ_{HCM}	导热材料密度	2700 kg/m ³
L	相变焓	200 kJ/kg
$c_{p,\text{PCM}}$	相变材料比热容	2120 J/(kg·K)
$c_{p,\text{HCM}}$	导热材料比热容	891 J/(kg·K)
β	热膨胀系数	0.002 K ⁻¹
T_S / T_L	相变温度范围（下限/上限）	323.15 K / 343.15 K

1.2 模型假设

本文所建立的固液相变传热模型采用以下假设：(1) 相变材料在液相下视为不可压缩牛顿流体，流动为层流；(2) 固液相间的界面是具有一定宽度的、由固液相混合构成的糊状区，视为多孔介质；(3) 忽略相变传热过程中的辐射和粘度耗散；(4) 忽略相变材料固液相的密度差异，因此不发生固相运动与接触熔化；(5) 忽略相变材料热物性参数随温度的变化。

2 数学模型

本文基于焓-孔隙率法^[14]建立固液相变传热模型，并采用 Boussinesq 近似模拟相变材料的自然对流。

2.1 控制方程

基于质量守恒定律，连续性方程如下：

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

考虑自然对流的动量方程如下：

$$\begin{aligned} x \text{ 方向 } \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \left(u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho u)}{\partial y} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - P(f)u \\ y \text{ 方向 } \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \left(u \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho \beta g (T - T_{\text{ref}}) - P(f)v \end{aligned} \quad (2)$$

式中，浮力项使用 Boussinesq 近似表示，取决于当前温度 T 与参考温度 T_{ref} 的温差。源项中，孔隙率函数 $P(f)$ 用于惩罚固相相变材料的流动，定义参考 Carman-Kozeny 方程：

$$P(f) = \frac{(1-f)^2}{f^3 + \varepsilon} A_{\text{mush}} \quad (3)$$

其中， ε 为取值较小的计算常数，用于防止分母为 0。 A_{mush} 为糊状区常数，通常在 $10^5 \sim 10^8$ 间选取，本文采用 Ziskind 等^[14]给出的推荐值 10^8 。相变温度区间内的液相分数 f 采用线性函数^[15]，用以描述固液相间具有一定宽度的糊状区：

$$f = \begin{cases} 0 & T < T_s \\ (T - T_s) / (T_L - T_s) & T_s \leq T \leq T_L \\ 1 & T > T_L \end{cases} \quad (4)$$

能量方程采用焓法表示：

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \left(\frac{\partial(\rho u h)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v h)}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (5)$$

焓 h 为显热焓 h_{sens} 与潜热焓 h_{lat} 之和：

$$h_{\text{sens}} = h_{\text{ref}} + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_p dT, \quad h_{\text{lat}} = Lf \quad (6)$$

其中， h_{ref} 与 T_{ref} 分别表示参考焓和参考温度。

2.2 边界与初始条件

设计域内壁为恒定温度边界，温度高于相变温度：

$$T_{r_1} = 373 \text{ K} \quad (7)$$

外壁为绝热边界：

$$q_{r_2} = 0 \quad (8)$$

内外壁面均无滑移：

$$u_{r_1} = v_{r_1} = 0, u_{r_2} = v_{r_2} = 0 \quad (9)$$

整个设计域的初始温度为 293.15 K。

2.3 模型验证

数学模型的验证参考 Rozenfeld 等^[16]所发表的相变储热实验数据。实验装置为由内径 46 cm 的有机玻璃与 7075 铝合金肋片管制造的管壳式储罐，填充十二烷作为相变储热材料。实验将储罐置于室温，传热流体温度为 329.85 K。图 2 给出了通过该模型所得的液相分数-储热时间曲线，发现数值计算结果与实验结果吻合较好。

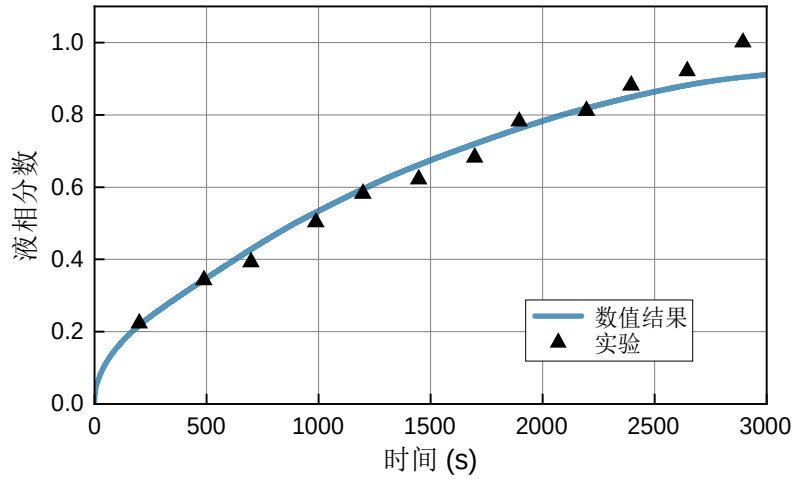


图 2 模拟结果与实验数据的对比

3 拓扑优化模型

3.1 优化问题

本文中，拓扑优化问题可以表述：在满足数学模型约束和肋片体积分数约束（ $f_v = 0.15$ ）的条件下，找到可实现最大化变量 M 的材料分布。

$$\begin{aligned}
 &\text{Find} && x \in X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\} \\
 &\text{Maximize} && Z = \int_{\Omega} M dx / V \\
 &\text{S.T.} && F(T(x), x) = 0 \\
 &&& \int_{\Omega} x_c dV \leq f_v \int_{\Omega} dV
 \end{aligned} \quad (10)$$

3.2 插值模型

在密度基拓扑优化模型中，设计变量 x_e 被定义为 0~1 间连续变化的密度，密度为 0 表示相变材料，密度为 1 则表示导热材料。本文使用 SIMP 插值模型^[17]实现设计域内不同材料物性的区分，重新定义后的物性参数如下：

$$\begin{aligned}
k(x_c) &= k_{\text{PCM}} + x_c^P (k_{\text{HCM}} - k_{\text{PCM}}) \\
\rho(x_c) &= \rho_{\text{PCM}} + x_c (\rho_{\text{HCM}} - \rho_{\text{PCM}}) \\
c_p(x_c) &= c_{p,\text{PCM}} + x_c (c_{p,\text{HCM}} - c_{p,\text{PCM}}) \\
L(x_c) &= (1 - x_c)L \\
\mu(x_c) &= \mu_{\text{PCM}} + x_c^P (\mu_{\text{HCM}} - \mu_{\text{PCM}})
\end{aligned} \tag{11}$$

其中，对动力粘度 μ 的插值用于惩罚导热材料（肋片）处的流动， μ_{HCM} 被定义为一个较大的值，取 $10^6 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 。由于导热系数 k 和动力粘度 μ 对温度场和流场的影响较大，为确保这两种物性参数的分布更符合实际情况，定义惩罚指数 P 对设计变量的中间值进行惩罚，使设计变量尽可能实现 0、1 分布^[18]。为获得较好的惩罚效果，本文中 P 取值为 6。

3.3 目标函数

设计域平均温度最大化是传热拓扑优化问题普遍采用的目标函数（优化结果如无特殊说明，均采用该目标函数），定义如下：

$$\text{Maximize } Z = \int_{\Omega} T dx / V \tag{12}$$

然而，温度无法直接对应相变材料的储热量，将焓最大化作为目标函数能够同时考虑相变材料储存的显热和潜热，反映储罐的储热能力：

$$\text{Maximize } C = \int_{\Omega} H dV = \int_{\Omega} [L(x_c)f + c_p(x_c)\Delta T] dV \tag{13}$$

3.4 优化算法

移动渐近线法 MMA 在求解具有大量连续设计变量的问题时非常有效。该方法基于目标函数的梯度^[19]，将优化问题转化为一组凸的子问题，在每一步迭代中求解这些子问题来更新设计变量^[20]。本文采用 MMA 的全局收敛型 GCMMA^[21]，前后迭代间控制变量的相对变化小于 10^{-8} 判断为收敛。

3.5 过滤与后处理

每一次迭代后对更新的设计变量进行过滤，能够改善棋盘格效应^[22]，避免相邻节点间设计变量的突变影响收敛性。该过滤过程通过求解 Helmholtz 型偏微分方程实现：

$$\nabla \cdot (-r_f \nabla x_f) + \nabla x_f = x_c \tag{14}$$

其中， x_f 为过滤后的设计变量， r_f 为过滤半径，本文采用的取值为网格尺寸的 1/2。

为减少连续设计变量中间值的影响，并处理过滤过程增加的模糊边界，引入了双曲正切函数对优化结果进行后处理^[23]：

$$x_p = \frac{\tan(\gamma\eta) + \tan(\gamma(x_f - \eta))}{\tan(\gamma\eta) + \tan(\gamma(1 - \eta))} \tag{15}$$

其中， η 表示映射门槛，为保证肋片体积分数与规定一致，此处取 η 为 0.5。 γ 为投影斜率，控制映射陡峭程度，取值通常在 5 ~ 8 之间。投影后得到的设计变量 x_p 将具有锐利的、可分辨的边界。

4 优化结果分析

4.1 自然对流对肋片结构的影响

图 3 展示了储热时间为 1200 s 时分别基于自然对流模型与纯导热模型得到的拓扑优

化结果,图 3 (b)底部的肋片与储热单元外壁面间存在微小间隙,自然对流未被完全阻挡。在纯导热模型的结果中,肋片的高度基本一致,具有较好的对称性。在考虑自然对流的模型中,液相的相变材料受 Y 轴方向重力与浮升力的作用,形成自然对流。在对流换热较强的储罐上方,肋片仅在顶部一处竖直生长,为涡旋结构提供较大的空间,使换热管侧的热量得以迅速向储罐外侧传递。储罐下方以热传导为主,肋片分布更密集且趋于向储罐外壁延伸。由于较大的惩罚系数会阻碍肋片生长^[24],肋片末端缺少分支。

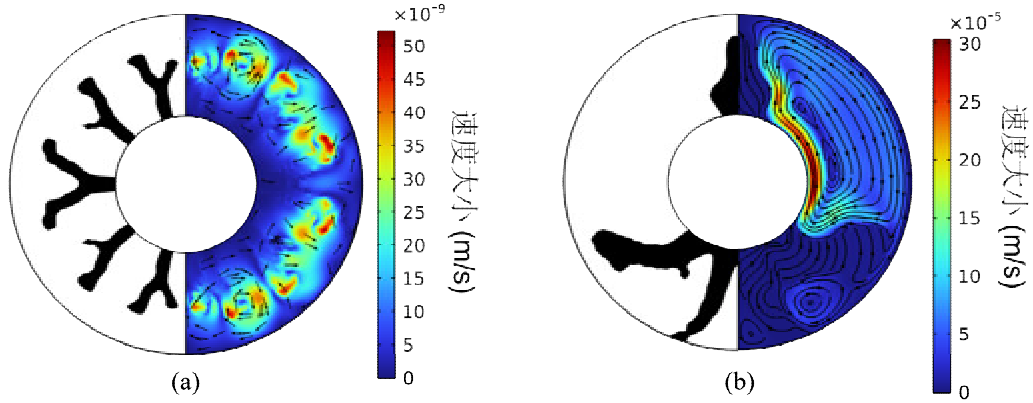


图 3 肋片结构与流场对比: (a) 导热模型; (b) 自然对流模型

对自然对流作用下的拓扑优化肋片进行几何重构,与采用其他方法优化的肋片进行了传热能力的对比。肋片高度与角度参考 Sciacovelli 等^[25]对管壳式相变储热单元的响应面曲线法 (RSM) 优化结果,肋片宽度根据本文所采用的肋片体积分数做了修正。图 4 (a) 给出了储热过程中的平均温度变化。拓扑优化肋片在前期表现出更强传热能力,拓扑优化肋片较大的竖直加热面强化了对流换热,但其表面积稍小,约为 RSM 肋片的 96%,使拓扑优化肋片在后期不具备优势。图 4 (b)对比了两种肋片作用下的相变材料液相分数。在储热时间达到 900 s 后, RSM 肋片的液相分数变化率显著降低。结合图 5 可以观察到, RSM 肋片的高度相同,因而在储热过程后期,肋片无法接触到储罐底部未熔化的相变材料。传热依靠小范围内的自然对流与相变材料内的热传导,使这部分相变材料熔化速度较慢。拓扑优化肋片在储罐下方延伸至外壁面的结构则有效解决了这一问题,储热结束时额外熔化了 10%的相变材料。

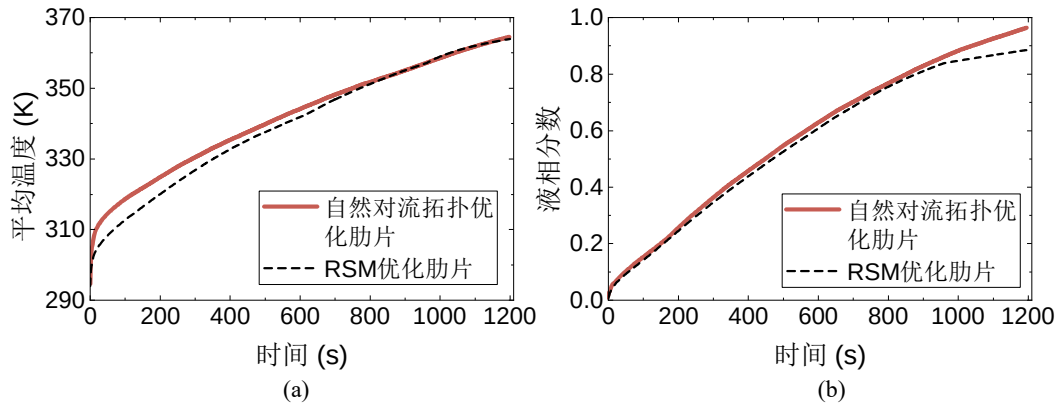


图 4 拓扑优化肋片与 RSM 肋片的对比: (a) PCM 平均温度; (b) PCM 液相分数

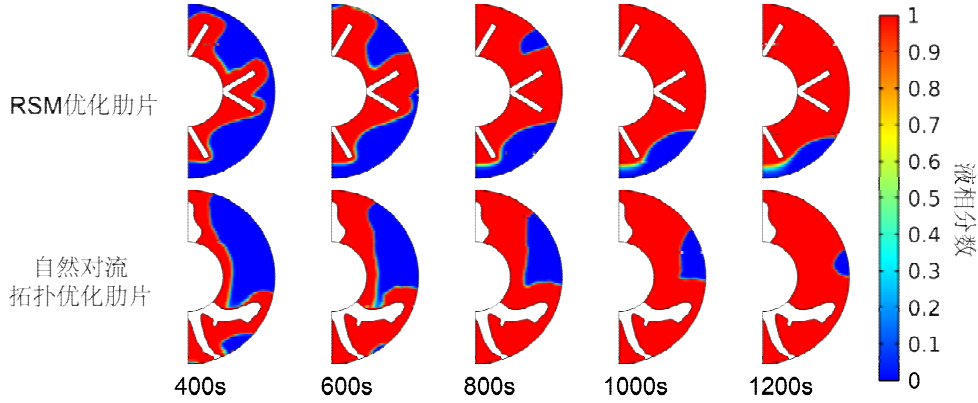


图5 储热过程的相场分布对比

4.2 储热时间对肋片结构的影响

考虑到相变储热在实际应用中对储热时间有不同的需求,比较了 600 s、900 s、1200 s 三种储热时间对肋片结构的影响。如图 6 (a) ~ 6 (c)所示,对于纯导热模型,储热时间与肋片高度正相关。随着储热时间的增加,热量得以向更外侧的相变材料传递,肋片趋向于覆盖更大的热传导范围,使肋片分支开始向储罐外壁发展。图 6 (d) ~ 6 (f)所展示的是基于自然对流模型的结果。相较于储热时间为 1200 s 的肋片,图 6 (d)与图 6 (e)中仅有部分区域肋片较矮。由于储热时间的缩短,储罐内相变材料无法完全熔化,自然对流在整体传热中的贡献降低,使肋片趋向于纯导热的对称、分支结构。

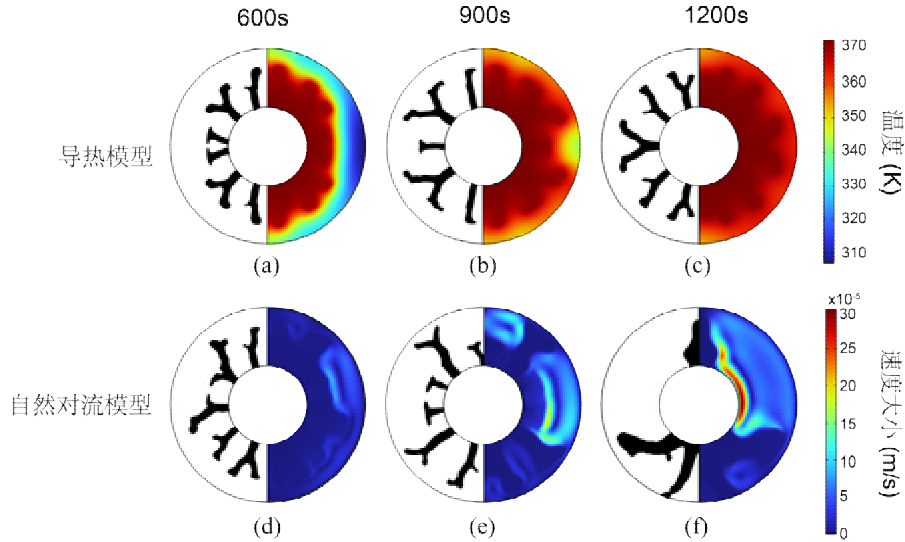


图6 储热时间 $t = 600\text{ s}$, 900 s , 1200 s 的优化肋片结构: (a~c) 导热模型; (e~h) 自然对流模型

4.3 目标函数对肋片的影响

基于自然对流模型,分别采用式 13 中提出的最大化焓目标函数进行肋片拓扑优化,结果如图 7 (b)所示。相较图 7 (a)中通过最大化平均温度所得到的肋片结构,最大化焓所得到的肋片结构具有更多末端分支。由于最大焓目标函数考虑了相变材料的潜热,肋片生长趋向使更多相变材料熔化,吸收潜热,而非提高局部温度。图 8 所示储热性能对比

验证了目标函数的作用，使用焓最大化肋片的储热单元在储热后具有更高的焓值，在 1200 s 时储热区域单位质量多储存了 $2.6 \times 10^4 \text{ J/kg}$ 热量，储热量相较平均温度最大化肋片提高了 9.1%。此外，图 8 (b) 中的液相分数曲线反映出焓最大化肋片具有更快的相变材料熔化速率。

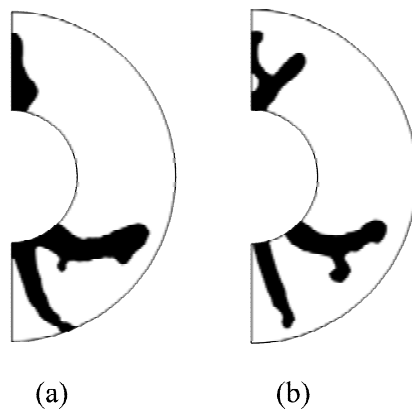


图 7 不同目标函数的优化肋片结构：(a)平均温度最大化肋片；(b)焓最大化肋片

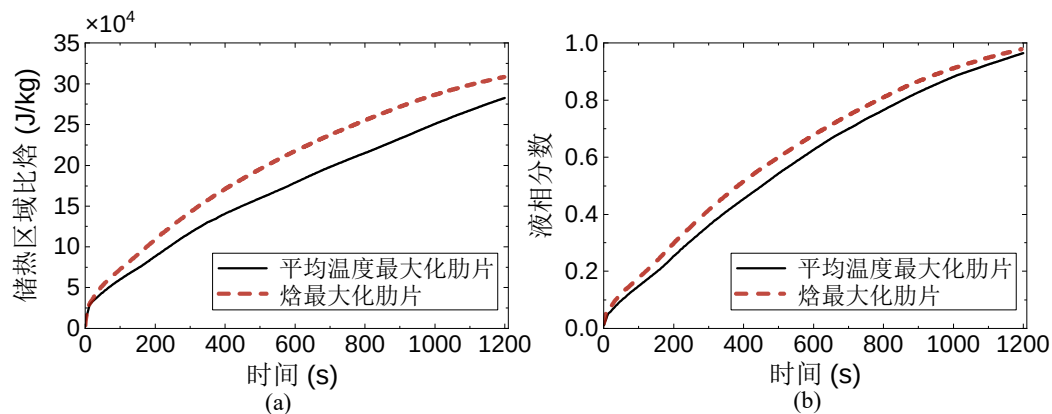


图 8 不同目标函数储热性能对比：(a) 储热区域比焓；(b) PCM 液相分数

5 结 论

本文建立了考虑自然对流的二维固液相变传热模型，对管壳式相变储热单元的肋片结构进行了拓扑优化，研究了储热时间与目标函数对优化肋片结构的影响，得到如下结论：

- (1) 基于自然对流模型的拓扑优化肋片具有高度不对称结构，上方的竖向肋片与较大的空间能够增强对流换热，下方向外壁延伸的肋片能够充分熔化相变材料。与 RSM 优化肋片相比，拓扑优化肋片可额外熔化 10% 的相变材料，对增强储热能力有积极意义。但本文选用了较大的惩罚指数，不利于扩展肋片换热面积，对传热能力的增强有限。
- (2) 储热时间对考虑自然对流的拓扑优化肋片有显著影响。缩短储热时间将使自然对流在传热中的贡献降低，肋片结构趋向于优化热传导能力的高对称性、多分支结构。这部分将为探索适应多种储热工况的肋片结构打下了基础。
- (3) 目标函数对肋片整体结构的影响有限，但能够针对性地优化目标性能。以最大

化焓为目标函数的肋片相比最大化平均温度的肋片，能够熔化更多相变材料，从而多吸收 $2.6 \times 10^4 \text{ J/kg}$ 热量。考虑到相变储热的应用场景，最大化焓、最大化焓等更贴合工程应用的目标函数值得进一步探索。

参考文献

- [1] Oró E, De Gracia A, Castell A, et.al. Review on phase change materials (PCMs) for cold thermal energy storage applications. *Applied Energy*, 2012, 99: 513—533.
- [2] Nagar S, Shaema K, Pandey A K, et.al. Effect of graphene and its derivatives on thermo-mechanical properties of phase change materials and its applications: a comprehensive review. *Frontiers in Energy*, 2022, 16(2): 150—186.
- [3] Abdulateef A M, Mat S, Abdulateef J, et.al. Geometric and design parameters of fins employed for enhancing thermal energy storage systems: a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2018, 82: 1620—1635.
- [4] DENG Sheng-xiang, NIE Chang-Da, WEI Guang-Ya, et.al. Improving the melting performance of a horizontal shell-tube latent-heat thermal energy storage unit using local enhanced finned tube. *Energy and Buildings*, 2019, 183: 161—173.
- [5] LI Qi, LI Chuan, DU Zheng, et.al. A review of performance investigation and enhancement of shell and tube thermal energy storage device containing molten salt based phase change materials for medium and high temperature applications. *Applied Energy*, 2019, 255: 113806.
- [6] Dbouk T. A review about the engineering design of optimal heat transfer systems using topology optimization. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 112: 841—854.
- [7] Bendsøe M P, Sigmund O. *Topology Optimization*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004. 1—8
- [8] Alexandersen J, Sigmund O, Aage N. Large scale three-dimensional topology optimisation of heat sinks cooled by natural convection. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, 100: 876—891.
- [9] Pizzolato A, Sharma A, Maute K, et.al. Topology optimization for heat transfer enhancement in Latent Heat Thermal Energy Storage. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 113: 875—888.
- [10] Pizzolato A, Sharma A, Maute K, et.al. Design of effective fins for fast PCM melting and solidification in shell-and-tube latent heat thermal energy storage through topology optimization. *Applied Energy*, 2017, 208: 210—227.
- [11] 游吟. 相变储热单元内肋片结构的拓扑优化[硕士论文]. 上海: 上海交通大学, 2019
- [12] TIAN Yang, LIU Xiang-Lei, XU Qiao, et.al. Bionic topology optimization of fins for rapid latent heat thermal energy storage. *Applied Thermal Engineering*, 2021, 194: 117104.
- [13] Kozak Y, Rozenfeld T, Ziskind G. Close-contact melting in vertical annular enclosures with a non-isothermal base: Theoretical modeling and application to thermal storage. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2014, 72: 114—127.
- [14] Cabeza L F. *Advances in Thermal Energy Storage Systems (Second Edition)*. Cambridge: Woodhead Publishing, 2021: 359—379

- [15] Voller V R, Swaminathan C R. Eral Source-Based Method for Solidification Phase Change. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 1991, 19(2): 175—189.
- [16] Rozenfeld T, Kozak Y, Hayat R, et.al. Close-contact melting in a horizontal cylindrical enclosure with longitudinal plate fins: Demonstration, modeling and application to thermal storage. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2015, 86: 465—477.
- [17] ZHOU M, Rozvany G I N. The COC algorithm, Part II: Topological, geometrical and generalized shape optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1991, 89(1): 309—336.
- [18] Bendsøe M P. Optimal shape design as a material distribution problem. *Struct Optim*, 1989, 1: 193—202.
- [19] Bruyneel M, Duysinx P, Fleury C. A family of MMA approximations for structural optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2002, 24(4): 263—276.
- [20] 罗震, 陈立平, 黄玉盈, 等. 连续体结构的拓扑优化设计. *力学进展*, 2004(4): 463--476.
- [21] Svanberg K. A Class of Globally Convergent Optimization Methods Based on Conservative Convex Separable Approximations. *SIAM Journal on Optimization*, 2002, 12(2): 555—573.
- [22] Sigmund O, Petersson J. Numerical instabilities in topology optimization: A survey on procedures dealing with checkerboards, mesh-dependencies and local minima. *Structural optimization*, 1998, 16(1): 68—75.
- [23] Sigmund O, Maute K. Topology optimization approaches. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2013, 48(6): 1031—1055.
- [24] 游吟, 赵耀, 赵长颖, 等. 相变储热单元内肋片结构的拓扑优化. *科学通报*, 2019, 64(11): 1191--1199.
- [25] Sciacovelli A, Gagliardi F, Verda V. Maximization of performance of a PCM latent heat storage system with innovative fins. *Applied Energy*, 2015, 137: 707—715.

无膜流动式反应器电化学还原 CO_2 性能 数值模拟

蔡宇豪^{1, 2}, 叶丁丁^{1, 2*}, 朱恂^{1, 2}, 杨扬^{1, 2}, 陈蓉^{1, 2}, 廖强^{1, 2}

(1 重庆大学低品位能源利用技术及系统教育部重点实验室, 重庆 400030;

2 重庆大学能源与动力工程学院工程热物理研究所, 重庆 400030)

(Tel: 023-65102015, Email: dingdingye@cqu.edu.cn)

摘要: 针对无膜流动式反应器电化学还原 CO_2 过程建立等温稳态数学模型, 耦合反应器内流体流动、物质传输、电荷传递及电极动力学过程进行模拟, 计算了反应器电化学还原 CO_2 性能, 研究了气相反应物浓度及流速、电解质中反应物浓度、催化层厚度及孔隙率对性能的影响。结果表明, 提升反应物浓度及流量可以有效提升反应器性能; 受扩散速率限制, 电解质中反应物浓度对反应器性能的提升效果不明显; 催化层厚度增加有利于提升反应器性能, 同时会增加传质及流动阻力, 在 40 mol/m^3 的条件下, 催化层厚度 0.08 mm 时电流密度最高; 在 -1.9 V 的电压下, 随着催化层孔隙率从 0.3 增加至 0.45 , 电流密度和法拉第效率分别提升了 51.4% 和 8.4% 。

关键词: 二氧化碳; 电化学还原; 流动式反应器; 性能

0 前言

二氧化碳(CO_2)常温常压下为无色无嗅的气体, 是温室气体的主要组成部分^[1]。近年来, 随着世界各国工业化的快速发展, 大量使用的化石燃料导致大气中 CO_2 浓度快速增加。据统计, 近六十年来大气中 CO_2 浓度一直在急剧增加, 从 1960 年的不到 320 ppm 到 2021 年大气中 CO_2 浓度已超过 417.2 ppm ^[2,3]。大气中 CO_2 浓度的增加使得地表热量不易散失, 从而导致全球温度上升, 甚至造成两级冰川融化、海平面上升等气候问题。 CO_2 减排已成为热点问题, 我国提出了“碳达峰、碳中和”的战略目标。

在 CO_2 转化技术中, 电化学还原 CO_2 以其温和的反应条件、方便可控的反应过程及多种反应产物而受到广泛关注。其基本原理是通过对电化学反应器施加外加电位, 使得二氧化碳在阴极上得电子发生还原反应, 通过不同的反应路径反应生成不同产物^[4]。反应过程一般可以分为以下几个步骤: 1) CO_2 扩散到电极表面; 2) CO_2 吸附于催化剂表面反应活性位点; 3) CO_2 得电子并发生还原反应; 4) 还原产物从电极脱附并进入本体溶液。

由于催化剂对反应产物及法拉第效率的影响很大, 大多对电化学还原二氧化碳的研究集中在催化剂开发上^[5-7]。电化学还原 CO_2 过程需在反应器中实现, 大部分研究采用 H 型反应器, 阴极采用平面电极, 但由于 CO_2 在水中溶解度较低, CO_2 扩散到电极表面这一步骤较为困难, 会产生严重的传质受限, 这导致电极电流密度不高, 通常被限制在几十毫安每平方厘米的范围内, 远低于工业应用所需要的电流密度^[8]。因此有学者提出使用气体扩散电极 (Gas diffusion electrode, GDE) 强化 CO_2 传输, 并增加三相反应界面, 从而提高性能^[9]。GDE 包括沉积在多孔疏水基底上的催化层 (Catalyst Layer, CL) 及气体扩散层 (Gas diffusion layer, GDL), 使用 GDE 可以使反应物 CO_2 直接以气相的形式到达反应活性位点, 显著减轻了 CO_2 在电解质中由扩散速度慢导致的传质受限问题^[10]。由于 H 型反应器中电极间距大,

基金项目: 国家自然科学基金创新研究群体项目 (52021004); 重庆市自然科学基金面上项目 (cstc2020jcyj-msxmX0827); 中央高校基本科研业务费 (2020CDJ-LHZZ-046); 重庆英才计划包干制项目 (cstc2021ycjh-bgzxm0034)

反应面积小等缺点,有学者提出了连续流动式反应器,CO₂和电解液在两个平行流道中并流通过,这一设计可以缓解CO₂的传质受限问题且有利于产物的收集^[11,12]。使用GDE的流动式反应器可以将阴极电流密度提高至200-300 mA/cm²^[9,13]。此外,由于膜的成本昂贵且易损耗,有学者提出使用无膜流动式反应器还原CO₂,这种反应器使用流动电解液分离阴极和阳极,这可以有效减小反应器欧姆损失并节约了膜的成本^[14]。

在理论研究方面,Li等人^[15]针对连续式反应器建立了电化学还原CO₂的阴极动力学模型。Wang等人^[16]建立了无膜流动式反应器电化学还原CO₂的数学模型,研究了析氢反应对反应器性能的影响。Omnia等人^[17]对使用GDE的流动式反应器进行数值模拟,建立了CO₂电化学还原为CH₃OH的模型,研究了反应物浓度等对反应器性能的影响。Wu等人^[18]针对无膜流动式反应器建立了将CO₂电化学还原为CO的数学模型,研究了反应物流量等对反应器性能的影响。Zenyuk等人^[19]对气体扩散电极建立了数学模型,研究了孔隙率对气体扩散电极传质特性的影响。Weng等人^[20]建立了带有气体扩散电极的流动式反应器理论模型,研究了催化剂载量,电极孔隙率等对气体扩散电极性能的影响。目前对于不同运行条件下无膜流动式反应器电化学还原CO₂性能的理论研究较缺乏。

本文针对使用GDE的无膜流动式反应器建立二维稳态数学模型,考虑流体流动、物质传输、电荷传输及电极动力学,研究反应器内部的物质传输及电化学还原CO₂的法拉第效率及转化率等,并基于此模型研究气相反应物浓度、流速,电解液流速及催化层结构参数对反应器性能的影响。

1 数值模拟

1.1 物理模型

图1所示为物理模型示意图。模型计算区域包括阴极气体流道(Cathode gas channel, CGC)、阴极气体扩散层(Cathode GDL)、阴极催化层(Cathode CL)、电解液流道(Electrolyte Channel, ELEC)、阳极催化层(Anode CL)及阳极气体扩散层(Anode GDL)。模型几何参数如表1所示。电解液为0.5 M KHCO₃,从电解液流道入口流入,CO₂以气相形式流入气体流道,通过气体扩散层扩散到阴极催化层,到达反应活性位点进行还原反应,同时阴极还发生副反应析氢反应,反应液相产物进入电解液流道与电解液一同排出,生成的气相产物H₂和未反应完的CO₂经气体流道排出反应器。阳极催化层发生析氧反应,产生的氧气直接通过阳极气体扩散层排出至大气。

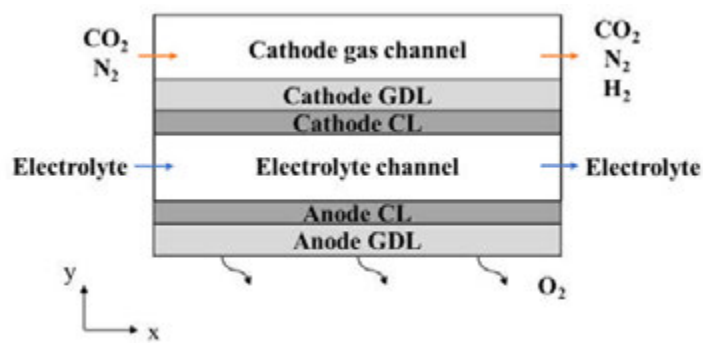


图1 物理模型示意图

Fig.1 Schematic diagram of physical model

电极反应方程式如下所示:

阴极还原反应:



阳极氧化反应：



表 1 模型几何参数

Table 1 Model geometric parameters

几何参数	符号	数值	单位	来源
流道长度	L	20	mm	文献 ^[16]
电极长度	L _{GDE}	20	mm	文献 ^[21]
CGC 高度	H _{CGC}	4	mm	文献 ^[21]
GDL 高度	H _{GDL}	3	mm	文献 ^[18]
CL 高度	H _{CL}	0.06	mm	文献 ^[17]
ELEC 高度	H _{ELEC}	0.3	mm	文献 ^[21]

1.2 模型假设

模型采用的假设如下：

- ① 反应器处于稳态、等温条件下运行；
- ② 气体及液体流动均为不可压缩流体的层流流动，忽略体积力；
- ③ 气体为理想气体，电解质各项物理性质均匀；
- ④ 阴极及阳极气相产物分别及时通过阴极和阳极气体扩散电极排出，电解液流道内为单相流动；
- ⑤ 扩散层和催化层为各向同性的多孔介质；
- ⑥ 催化剂均匀分布在催化层。

1.3 数学模型

1.3.1 控制方程

①流体流动

阴极气体流道、电解液流道及气体扩散电极的流动连续性方程如下：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4)$$

阴极气体流道与电解液流道内的动量方程为：

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u})] \quad (5)$$

具有多孔结构的阴极 GDE 及阳极 GDE 内的动量方程为：

$$\frac{\rho}{\varepsilon^2} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon} \mu(\nabla \mathbf{u}) - \frac{2}{3} \frac{\mu}{\varepsilon} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] - \left(\frac{\mu}{K} \right) \mathbf{u} \quad (6)$$

其中 ρ 为流体密度， $\mathbf{u}$ 为流体速度矢量， P 为流体压强， μ 为流体动力粘度， K 为多孔介质渗透率， ε 为多孔介质孔隙率。

②物质传输

阴极气体流道和气体扩散层组分质量守恒方程为：

$$\nabla \cdot \mathbf{N}_i = 0 \quad (7)$$

其中 $\mathbf{N}_i$ 为各物质通量， i 代表 $\text{CO}_2, \text{N}_2, \text{H}_2$ ，通过 Maxwell-Stefan 方程^[17]获得：

$$\mathbf{N}_i = -\rho_g \omega_i \sum_{j=1}^N D_{ij}^{\text{eff}} \left[\frac{M_g}{M_i} \left(\nabla \omega_i + \omega_i \frac{\nabla M_g}{M_g} \right) + (x_i - \omega_i) \frac{\nabla P}{P} \right] + \rho_g \mathbf{u} \omega_i \quad (8)$$

由总的质量平衡算出 N_2 的质量分数：

$$\omega_{\text{N}_2} = 1 - \omega_{\text{CO}_2} - \omega_{\text{H}_2} \quad (9)$$

ρ_g 为混合气体的密度，通过理想气体状态方程计算：

$$\rho_g = M_g \frac{P}{RT} \quad (10)$$

式(8)中的 M_g 为混合气体摩尔质量, 由混合气体摩尔质量计算公式得到:

$$M_g = x_{N_2} M_{N_2} + x_{CO_2} M_{CO_2} + x_{H_2} M_{H_2} \quad (11)$$

对于多孔介质, 采用 Bruggeman 方程对物质在多孔介质内的扩散系数进行修正, 得到有效扩散系数为:

$$D_{ij}^{eff} = \varepsilon^{1.5} D_{ij} \quad (12)$$

式(12)中 D_{ij} 为多组分二元扩散系数, 可以用 Fuller 等给出的公式^[22]计算:

$$D_{ij} = \frac{1.01325 \times 10^{-2} T^{1.75} \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)^{1/2}}{P(v_i^{1/3} + v_j^{1/3})} \quad (13)$$

催化层组分质量守恒方程为

$$\nabla \cdot N = R_i \quad (14)$$

其中:

$$N_i = \nabla \cdot (-\rho_l D_i^{eff} \nabla \omega_i - \frac{z_i F \rho_l \omega_i D_i^{eff} \nabla V_i}{RT} + \rho_l \omega_i \mathbf{u}) \quad (15)$$

式(15)中 D_i^{eff} 为各物质的在多孔介质中的有效扩散系数, 用 Bruggeman 方程进行修正:

$$D_i^{eff} = \varepsilon^{1.5} D_i \quad (16)$$

R_i 为反应源项, 反映在电化学反应过程中反应物的消耗或产物的生成:

$$R_i = \frac{a_v i_{loc}}{nF} M_i \quad (17)$$

电解液流道内组分质量守恒方程为:

$$\nabla \cdot N_i = 0 \quad (18)$$

其中 D_i 为物质 i 在溶液中的扩散系数, D_{ij} 为物质 i 和物质 j 的二元扩散系数, M_i 为物质 i 的摩尔质量, x_i 为物质 i 的摩尔分数, ω_i 为物质 i 的质量分数, i_{loc} 为电极电流密度, F 为法拉第常数, T 为温度, R 为理想气体常数, v_i 为物质 i 的分子扩散体积。

③电荷传输

主流道中电解液离子电势满足电荷守恒方程:

$$\nabla \cdot (-\sigma_{ele}^{eff} \nabla \phi_{ele}) = 0 \quad (19)$$

多孔介质催化层中。离子在液相电解质中传输形成离子电流, 电子在固相电极中传输形成电子电流, 离子电势和电子电势的电荷守恒方程分别为:

$$\nabla \cdot (-\sigma_{ele}^{eff} \nabla \phi_{ele}) = i \quad (20)$$

$$\nabla \cdot (-\sigma_s^{eff} \nabla \phi_s) = -i \quad (21)$$

其中 σ_{ele}^{eff} 及 σ_s^{eff} 分别为多孔介质中离子有效电导率及电子有效电导率:

$$\sigma_{ele}^{eff} = (1 - \varepsilon)^{1.5} \sigma_{ele} \quad (22)$$

$$\sigma_s^{eff} = \varepsilon^{1.5} \sigma_s \quad (23)$$

其中 σ_s 为电子电导率, σ_{ele} 为离子电导率, ϕ_s 为电子电势, ϕ_{ele} 为离子电势。

④电极动力学

在阴极催化层及阳极催化层分别发生电化学反应和电化学反应, 电化学反应动力学用 Butler-Volmer 方程描述:

$$i_{loc} = i_0 \left[\frac{C_R}{C_{R,ref}} \exp \left(\frac{a_{v,a} z F}{RT} \eta \right) - \frac{C_O}{C_{O,ref}} \exp \left(\frac{a_{v,c} z F}{RT} \eta \right) \right] \quad (24)$$

其中 η 为过电势:

$$\eta = \phi_s - \phi_e - E_{eq} \quad (25)$$

其中 i_0 为交换电流密度, a_v 为电极体积比表面积, E_{eq} 为反应平衡电位, C_{ref} 为参考浓度。

1.3.2 边界条件

模型中各边界条件如表 2 所示。

表 2 数学模型边界条件

Table2 Mathematical model boundary conditions

边界位置	边界条件	表达式
气体流道入口	恒定入口流速	$\mathbf{u} = \mathbf{U}_g^0$
	恒定入口气体组分	$\omega_{\text{CO}_2} = \omega_{\text{CO}_2, \text{in}}$
气体流道出口	恒定压力（大气压）	$P = P_{\text{atm}}$
电解液流道入口	恒定入口流速	$\mathbf{u} = \mathbf{U}_l^0$
电解液流道出口	恒定压力（大气压）	$P = P_{\text{atm}}$
气体流道-阴极 GDL 交界面	给定电势	$\phi = \phi_c$
	通量连续性	$N_{i, \text{GC}} = N_{i, \text{GDL}}$
	电荷连续性	$i_{s, \text{GDL}} = i_{s, \text{CL}}$
	零通量	$N_i = 0$
阴（阳）极 GDL-阴极 CL 交界面		$(i = \text{OH}^-, \text{HCOO}^-, \text{H}^+, \text{H}_2\text{O})$
	给定通量	$m_{\text{gl}} = k_{\text{CO}_2} \left(\frac{p + p_{\text{ref}}}{H_{\text{CO}_2}} - c_{\text{CO}_2, \text{aq}} \right) M$
	电荷连续性	$i_{l, \text{CL}} = i_{l, \text{ele}}$
	通量连续性	$-N_i = \sum_m R_i; R_i = \frac{v i_v}{z_i F}$
阴（阳）极 CL-电解液流道交界面	电接地	$\phi_a = 0$
	通量连续性	$-N_i = \sum_m R_i = \frac{v i_v}{z_i F}$
	无滑移	$\mathbf{u} = 0$
阳极 GDL 外表面	零通量	$N_i = 0$
	电绝缘	$i_l = 0; i_s = 0$
其他边界		

1.3.3 反应器性能

① 电流密度

电流密度(Current density)反映了电化学反应的速率，由于还原反应在阴极发生，因此主要计算阴极电流密度，电极电流密度的计算公式如下：

$$i_c = \frac{\int_0^H \int_0^L (i_{\text{HCOO}^-} + i_{\text{H}_2}) dx dy}{L} \quad (26)$$

② 法拉第效率

法拉第效率(Faradaic efficiency, FE)反映了输入的能量被应用于所需反应的部分，可表征电化学反应的选择性，计算公式如下^[23]：

$$FE_i = \frac{\int_0^H \int_0^L i_{\text{loc}} dx dy}{i_c} \times 100\% \quad (27)$$

③ CO₂ 转化率

CO₂ 转化率(CO₂ conversion)反映了所通入的气相反应物通过反应器的转化率：

$$\text{Conv}(\%) = \frac{\int_0^{H_{\text{cgc}, \text{top}}} N_{\text{CO}_2} \cdot e_{\text{x}} |_{\text{in}} dy - \int_0^{H_{\text{cgc}, \text{top}}} N_{\text{CO}_2} \cdot e_{\text{x}} |_{\text{out}} dy}{\int_0^{H_{\text{cgc}, \text{top}}} N_{\text{CO}_2} \cdot e_{\text{x}} |_{\text{in}} dy} \times 100\% \quad (28)$$

1.4 模型求解

采用 Comsol Multiphysic 5.5 对上述数学模型进行求解，使用有限元方法进行计算，模

型所需的参数如表 3 所示。

表 3 模型中所用的参数

Table3 Parameters used in the model

参数	符号	数值	单位	来源
电解质密度	ρ	1031	kg/m ³	文献 ^[20]
电解质动力粘度	μ	0.0012	Pa·s	文献 ^[20]
CO ₂ 密度	ρ_{CO_2}	1.83	kg/m ³	文献 ^[20]
H ₂ 密度	ρ_{H_2}	0.083	kg/m ³	文献 ^[20]
N ₂ 密度	ρ_{N_2}	1.16	kg/m ³	文献 ^[20]
混合气体动力粘度	μ_{g}	1.47×10^{-5}	Pa·s	文献 ^[20]
GDL 孔隙率	ε_{GDL}	0.7	1	文献 ^[16]
CL 孔隙率	ε_{CL}	0.3	1	文献 ^[16]
GDL 渗透率	K_{GDL}	1.34×10^{-12}	m ²	文献 ^[18]
CL 渗透率	K_{CL}	1.6×10^{-14}	m ²	文献 ^[18]
电解质电导率	σ_{ele}	35	S/m	文献 ^[20]
GDL 电导率	σ_{GDL}	8000	S/m	文献 ^[20]
CL 电导率	σ_{CL}	7270	S/m	文献 ^[17]
CO ₂ 分子扩散体积	v_{CO_2}	26.9	1	文献 ^[19]
H ₂ 分子扩散体积	v_{H_2}	6.12	1	文献 ^[19]
N ₂ 分子扩散体积	v_{N_2}	17.9	1	文献 ^[19]
催化层平均孔隙半径	d_{CL}	5×10^{-8}	m	文献 ^[20]
CO ₂ 亨利系数	H_{CO_2}	2938.4	Pa·m ³ /mol	文献 ^[30]
CO ₂ 气液传质系数	k_{CO_2}	0.021	cm/s	文献 ^[22]

1.5 模型验证

将模型计算得到的阴极电极电流密度与实验结果^[21]相比较进行模型验证。电解液流量为 500 $\mu\text{L}/\text{min}$ 、气相 CO₂ 流量为 25 SCCM 时，输入气相为纯 CO₂ 气体条件下，图 2 所示为计算结果与实验结果的对比图，可以看出，计算结果与实验结果吻合程度较好。最大误差出现在 -1.8 V 电压下，误差为 24%，这是由于在较高电流密度下电极表面被气泡覆盖导致电极反应面积减小，电流密度降低，而本模型未考虑气泡带来的影响，导致电流密度较高。在较低电流密度下，误差均小于 20%，验证了本模型的正确性。

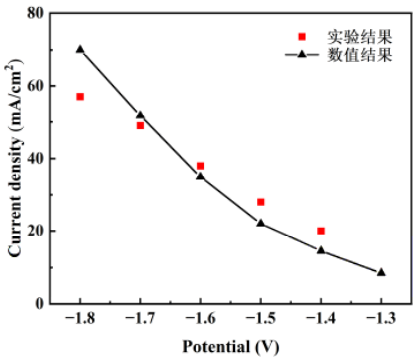


图 2 模型验证

Fig.2 Model validation

2.结果与讨论

2.1 不同电压下反应器性能

图 3 为电解电压对反应器性能的影响。当施加的反应器电压绝对值增加(变得更负)时，

法拉第效率先上升后下降，在-1.5 V 的电压下达到峰值 71%。这可能是由于电压较低时，由于过电位较小，反应速率较慢，从而导致法拉第效率较低。随着电解电压升高，过电位增大，反应速率变大，法拉第效率有所升高。但进一步增加电解电压，法拉第效率又下降，这是由于电压过高时，析氢反应更容易发生，抑制还原反应的进行，从而导致法拉第效率下降。 CO_2 转化率随着电压绝对值的增加而上升，这是因为反应过电位增大，反应更剧烈，更多的 CO_2 参与反应，使得 CO_2 转化率升高。

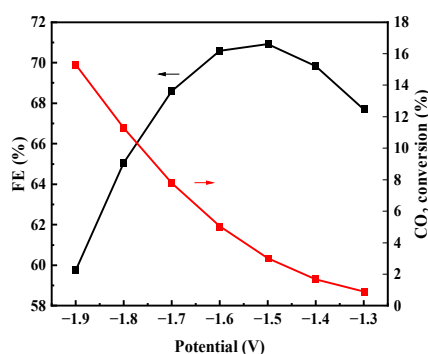


图 3 电解电压对反应器性能的影响

Fig.3 The effect of electrolytic voltage on the performance of the reactor

2.2 气相反应物浓度的影响

气相反应物浓度对反应器性能的影响如图 4 所示。从图 4(a)可以看出，随着入口气相反应物 CO_2 浓度从 5 mol/m^3 增加到 44 mol/m^3 （纯 CO_2 气体浓度），电极电流密度逐渐上升，且气相反应物入口浓度越高，电流密度随电压增加的幅度越大。当入口气相反应物浓度为 5 mol/m^3 时，在电压为-1.2 V 到-1.8 V 的区间内，电流密度从 1 mA/cm^2 增加到 20.1 mA/cm^2 ，但入口气相反应物浓度为 44 mol/m^3 时，在同样电压区间内，电流密度从 3.1 mA/cm^2 增加到 74.8 mA/cm^2 。这是由于在较低的反应物入口浓度下，虽然随着电压的增大，过电位增大，从而导致电极反应更剧烈，但在较高的电压下，反应物 CO_2 的消耗更大，导致还原反应严重受到传质的限制，电流密度的增加主要由析氢副反应导致，而对于较高的反应物入口浓度，传质受限问题可以得到缓解，所以总的电极电流密度增幅较大^[24]。在相同电压下进行电解，随着入口反应物浓度的增加，电流密度增加，但增速逐渐变缓。当在-1.8 V 电压下电解时，入口反应物浓度从 5 mol/m^3 增加到 15 mol/m^3 时，电流密度从 20 mA/cm^2 增加到 38.4 mA/cm^2 ，增幅为 92%，但入口反应物浓度从 25 mol/m^3 增加到 35 mol/m^2 时，电流密度从 53.5 mA/cm^2 增加到 66.4 mA/cm^2 ，增幅仅为 24.1%，这是由于在较低的反应物入口浓度时，增加入口反应物浓度可以明显缓解传质受限问题，而在较高的入口浓度时，反应传质受限问题已经得到较好的缓解，进一步提升入口浓度对反应器性能的改善有限。当反应物浓度分别为 5 mol/m^3 、 25 mol/m^3 及 44 mol/m^3 时，沿 x 方向阴极催化层内前段中段和后段区域的反应物浓度分布如图 5 所示。可以看出，随着入口气相反应物浓度增加，催化层内反应物浓度升高。图 4(b) 为入口反应物浓度对法拉第效率的影响，随着入口反应物浓度的增加，法拉第效率有显著提升，这是由于反应物入口浓度的增加显著缓解了反应物传质受限问题^[25]。结果表明，增加入口反应物浓度能有效提升反应器性能。图 4(c) 为入口气相反应物浓度对 CO_2 转化率的影响，随着入口反应物浓度增加， CO_2 转化率下降，这是由于较高的入口浓度使得部分 CO_2 不能充分参与电化学反应就从出口排出反应器，导致 CO_2 转化率下降。

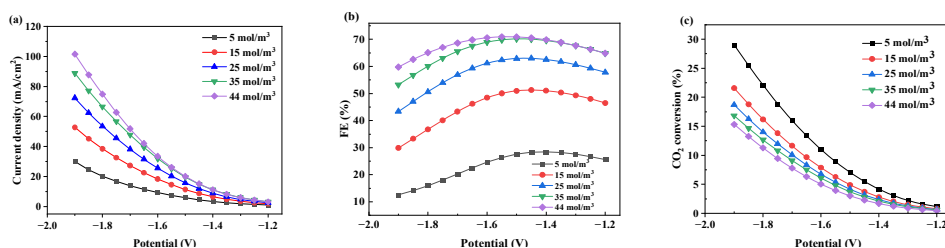


图 4 入口气相反应物浓度对(a)电流密度、(b)法拉第效率和(c)CO₂转化率的影响

Fig.4 The effect of gas phase reactant inlet concentration on (a) current density, (b) Faraday efficiency and (c) CO₂

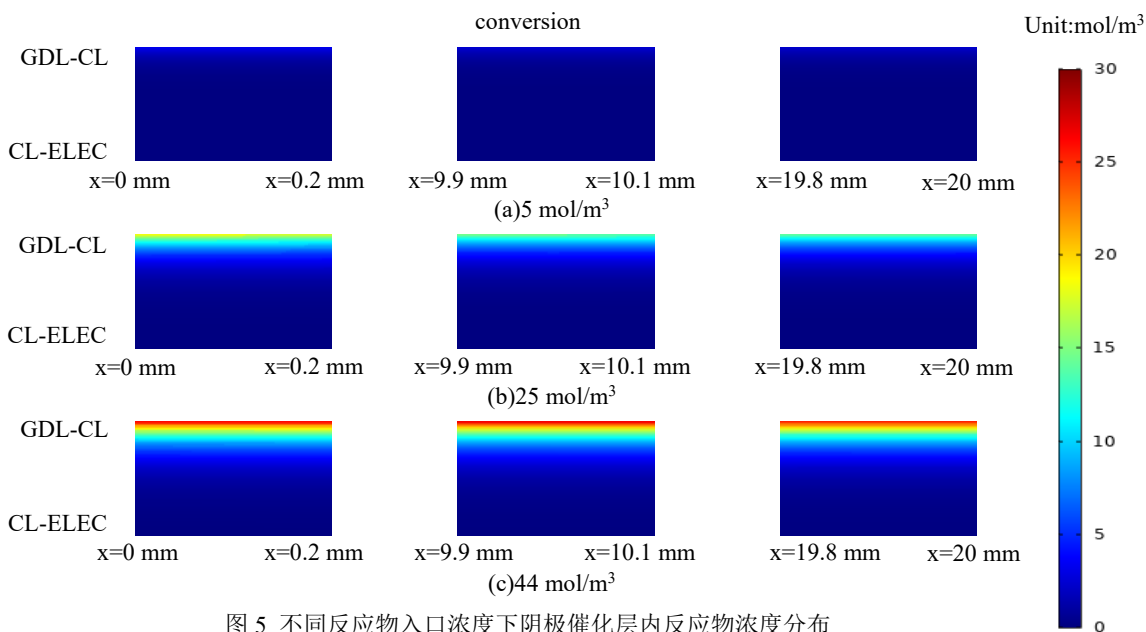


图 5 不同反应物入口浓度下阴极催化层内反应物浓度分布

Fig 5 Reactant concentration distribution in the catalytic layer under different reactant inlet concentrations

2.3 气相反应物流量的影响

气相反应物流量对反应器性能的影响如图 6 所示。结果表明，电流密度和法拉第效率均随着气相反应物流量的增加而上升，气相反应物流量的增加提升了反应器性能。在-1.8 V 的电压下电解时，反应物流量从 5 SCCM 增加到 25 SCCM，电流密度从 60 mA/cm² 上升到 69 mA/cm²，法拉第效率从 56% 上升到 62.4%。不同气相反应物流量下气体流道内流场如图 7 所示，气相反应物流量越大，气体流速越快。沿 x 方向阴极催化层内前段中段和后段区域 CO₂ 浓度分布如图 8 所示，可以看出，较低的气体流量下催化层内 CO₂ 浓度较低，反应物无法得到及时补充，从而发生传质受限问题，较高流量下，气体流速快，反应物可以得到及时补充，CO₂ 浓度较高，从而提升反应器性能。图 6(c) 为气相反应物入口流量对 CO₂ 转化率的影响，较高的反应物流量导致 CO₂ 转化率下降，这是因为较高的流量导致更快的流速，使得 CO₂ 在反应器内的停留时间更短，不能充分参与电化学反应，导致 CO₂ 转化率的下降。

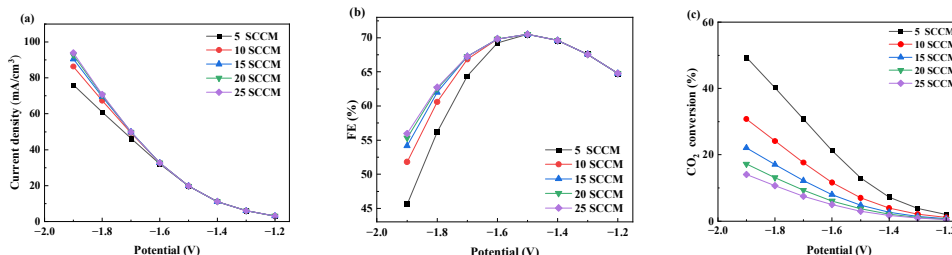


图 6 气相反应物流量对(a)电流密度、(b)法拉第效率和(c)CO₂转化率的影响

Fig.6 The effect of gas phase reaction flow rate on (a) current density, (b) Faraday efficiency and (c) CO₂

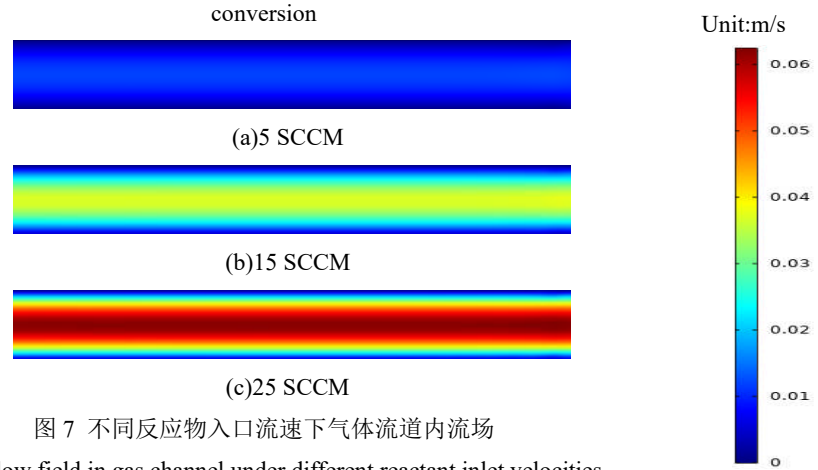


图 7 不同反应物入口流速下气体流道内流场

Fig.7 Flow field in gas channel under different reactant inlet velocities

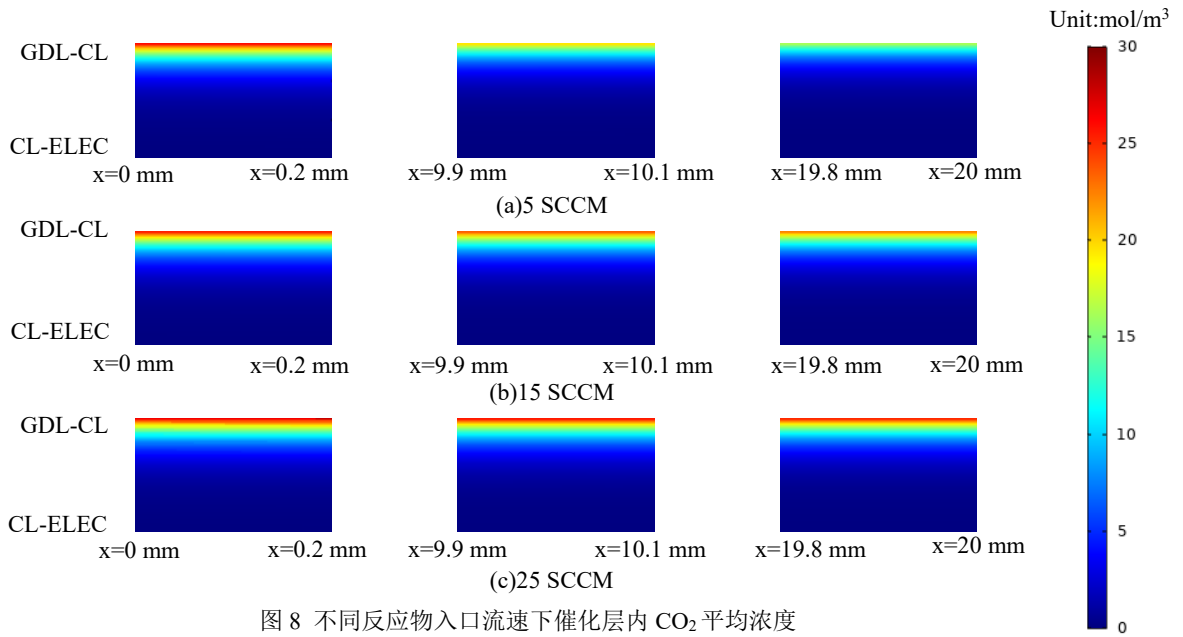


图 8 不同反应物入口流速下催化层内 CO_2 平均浓度

Fig.8 CO_2 concentration in the catalyst layer under different reactant inlet flow rate

2.4 电解质中 CO_2 浓度的影响

除了通过气体流道供给气相 CO_2 ，还可以在电解质中以溶解的液相方式供给。因此，为研究电解质中反应物 CO_2 浓度对反应器性能的影响，选取电解质中 CO_2 浓度为 5、15、25 mol/m^3 进行计算，并与相同浓度的气相 CO_2 供给方式进行对比。电解质中 CO_2 浓度对反应器性能的影响如图 9 所示。电流密度及法拉第效率均随着电解质中 CO_2 浓度的增加而增加，反应物浓度从 5 mol/m^3 增加到 25 mol/m^3 时，电流密度最大增幅在 -1.9 V 出现，增加了 5.3 mA/cm^2 ，法拉第效率最大增幅在 -1.4 V 出现，增加了 26%，这同样是由于传质强化所致。与图 4 中不同气相反应物入口浓度下的反应器性能相比，液相方式供给时电流密度及法拉第效率均比气相供给时降低，而且图 4 中反应物浓度从 5 mol/m^3 增加到 25 mol/m^3 时，电流密度最大增幅在 -1.9 V 出现，增加了 42 mA/cm^2 ，法拉第效率最大增幅在 -1.7 V 出现，增加了 36.7%。显然，虽然电解质中 CO_2 浓度增加及入口气相 CO_2 浓度增加都能提升反应器性能，但同样的浓度变化幅度下，气相 CO_2 浓度增加带来的反应器性能提升远大于电解质中 CO_2 浓度增加所导致的反应器性能提升，这是由于气相直接供给 CO_2 ，扩散速率更快，可以避免在液相中 CO_2 缓慢的传质，从而使反应物以气相形式直接到达反应活性位点。结果表明采用气相直接供给 CO_2 的形式可以有效缓解传质问题。

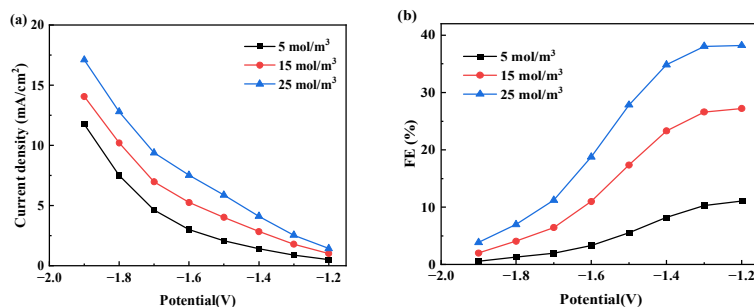


图 9 电解质中 CO_2 浓度对(a)电流密度和(b)法拉第效率的影响

Fig.9 The effect of CO_2 concentration in electrolyte on (a) current density and (b) Faraday efficiency

2.5 催化层厚度的影响

催化层厚度会影响反应活性位点数量,还会影响催化层内 CO_2 传质,因此,为研究催化层厚度对反应器性能的影响,采用不同催化层厚度对反应器性能进行计算。气相入口浓度 40 mol/m^3 、流量为 25 SCCM 时,催化层厚度对反应器性能的影响如图 10 所示。可以看出,电极电流密度随着催化层厚度的增加而增加,法拉第效率随催化层厚度增加而降低。这是由于催化层厚度增加,反应活性位点增加,使得电流密度增加,同时析氢副反应的反应活性位点也增加,由于副反应竞争作用增强,从而导致法拉第效率降低。催化层内平均 CO_2 浓度如图 11 所示。从图 11(a)可以看出,在气相入口浓度为 40 mol/m^3 、反应器电压为 -1.8 V 时,随着催化层厚度的增加,催化层内平均 CO_2 浓度增加,这表明在 -1.8 V 电压下,气相反应物入口浓度为 40 mol/m^3 时,催化层厚度增加,反应活性位点增加,参与反应的 CO_2 更多,平均 CO_2 浓度升高。相同电压下,气相入口浓度为 10 mol/m^3 时催化层内平均 CO_2 浓度如图 11(b)所示。可以看出,催化层厚度为 0.06 mm 时平均 CO_2 浓度出现最大值 1.32 mol/m^3 ,继续增加厚度至 0.08 mm ,平均 CO_2 浓度有所下降,这说明催化层厚度继续增大时,其内部流动及传质阻力均增大,反应物 CO_2 难以传递到整个催化层内就已经被完全消耗,此时进一步增加催化层厚度只能增强析氢副反应,无法提升反应器性能。以上结果表明,催化层厚度的增加一方面使得反应活性区域增加,反应器性能提高;另一方面也增大了反应物的流动及传质阻力,当气相反应物无法及时扩散到增大催化层厚度所增加的反应活性区域时,增加催化层厚度则无法提升反应器性能。

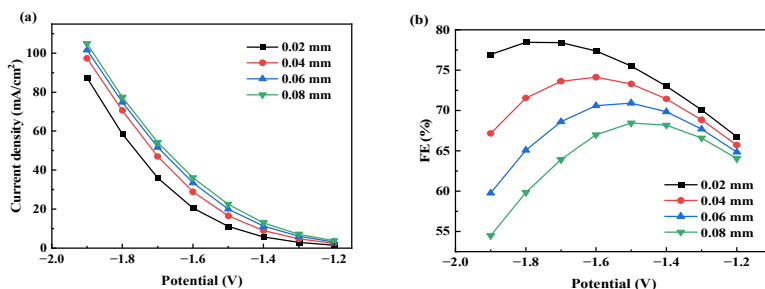


图 10 催化层厚度对(a)电流密度和(b)法拉第效率的影响

Fig.10 The effect of catalyst layer thickness on (a) current density and (b) Faraday efficiency

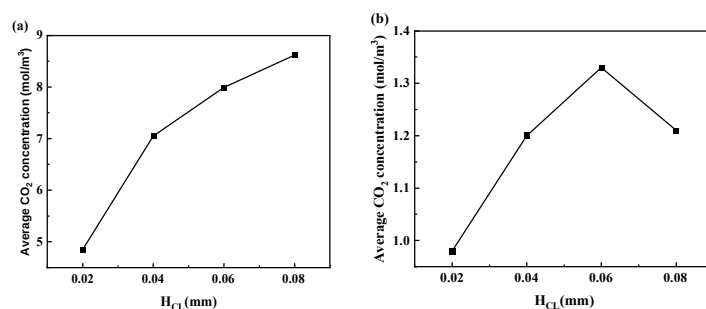


图 11 气相反应物入口浓度为(a)40 mol/m³ 和(b)10 mol/m³ 时催化层内平均 CO₂ 浓度

Fig.11 The average CO₂ concentration inside the catalyst layer when the inlet concentration of gas-phase reactants is (a) 40 mol/m³ and (b) 10 mol/m³

2.6 催化层孔隙率的影响

催化层孔隙率的变化不仅会导致催化层内流动及传质阻力的变化,还会导致催化层活性比表面积的变化^[26,27]。为研究催化层孔隙率对反应器性能的影响,选取催化层孔隙率分别为 0.3、0.35、0.4、0.45 进行计算,并对催化层比表面积进行修正,电极比表面积与孔隙率关系如式(26)所示^[28,3]。

$$a_v \approx \frac{K_s}{d} [(1 - \varepsilon_{CL})^{\frac{1}{2}} - (1 - \varepsilon_{CL})] \cdot (1 - \varepsilon_{CL})^{-1.41} \quad (29)$$

其中, a_v 为催化层比表面积, K_s 为常数,取决于材料种类和制备方法, d 为平均孔径, ε_{CL} 为催化层孔隙率。

催化层孔隙率对反应器性能的影响如图 12 所示。可以看出,随着催化层孔隙率从 0.3 增加到 0.45,电流密度及法拉第效率显著提升,尤其在高电压下提升幅度较大,在-1.9 V 的电压下,电流密度从 101 mA/cm² 上升到 153 mA/cm²,提升了 51.4%,法拉第效率从 59% 上升到 64%。这是由于催化层孔隙率上升有利于降低催化层内的流动及传质阻力,并提升催化层体积比表面积,从而强化传质并促进电化学反应的进行。但在较低电压下,随着孔隙率上升,法拉第效率反而略微下降,这是由于在较低电压下,由于过电位较小,二氧化碳还原反应速率较低,比表面积的增加反而会促进析氢副反应的进行,从而导致法拉第效率随着孔隙率的提高略微下降。

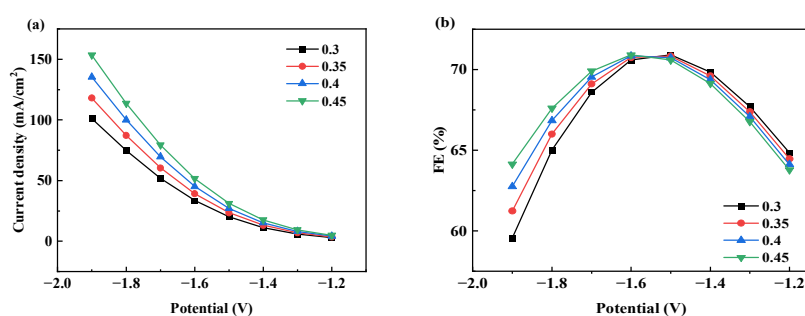


图 12 催化层孔隙率对(a)电流密度和(b)法拉第效率的影响

Fig.12 The effect of catalyst layer porosity on (a) current density and (b) Faraday efficiency

3 结论

本文针对无膜流动式电化学还原 CO₂ 反应器建立二维稳态数学模型,考虑流体流动、物质传输、电荷传输及电极动力学,研究运行条件及结构参数对反应器性能的影响,得到了以下主要结论:

- (1) 法拉第效率随着电压增加先上升后降低,在-1.5 V 时达到最大值 71%。
- (2) 与液相供给 CO₂ 相比,直接供给气相 CO₂ 可以有效缓解传质受限问题,且提升气相

CO₂ 浓度对反应器性能的增强显著强于提升电解液中溶解态 CO₂ 浓度。

(3) 增加气相反应物流量有助于增强传质,当气体流量从 5 SCCM 增加到 25 SCCM 时,电流密度和法拉第效率分别提升了 29%和 39%,但 CO₂ 转化率降低。

(4) 催化层厚度及孔隙率的增加均有利于提升反应器性能,但当催化层厚度过大,反应物无法及时扩散到反应活性位点时,进一步增加厚度无法提升反应器性能,反而降低法拉第效率。

参考文献:

- [1] SONG J, SONG H, KIM B, et al. Towards Higher Rate Electrochemical CO₂ Conversion: From Liquid-Phase to Gas-Phase Systems[J]. Catalysts, 2019, 9(3): 224.
- [2] 张琪,许武韬,刘予宇,张久俊.二氧化碳电化学还原概述[J].自然杂志,2017,39(04):242-250.
- [3] Liu P S. A new method for calculating the specific surface area of porous metal foams[J]. Philosophical Magazine Letters, 2010, 90(6): 447-453.
- [4] E.Lamy, L.Nadjo, J.M.Saveant. Standard potential and kinetic parameters of the electrochemical reduction of carbon dioxide in dimethylformamide[J].Chem, 1977,78:403-407.
- [5] Cheng F, Zhang X, Mu K, et al. Recent progress of Sn - based derivative catalysts for electrochemical reduction of CO₂ [J]. Energy Technology, 2021, 9(1): 2000799.
- [6] C.Tornow, M.R.Thorson, Ma S, et al. Nitrogen-based catalysts for the electrochemical reduction of CO₂ to CO[J]. Journal of the American Chemical Society, 2012, 134(48): 19520-19523.
- [7] E.J.Dufek,et al. Influence of electrolytes and membranes on cell operation for syn-gas production[J]. Electrochemical and Solid-state Letters, 2012, 15(4): b48.
- [8] Chen C, Khosrowabadi, Sheehan S.W, Progress toward commercial application of electrochemical carbon dioxide reduction[J]. Chem, 2018, 4(11): 2571-2586.
- [9] M.G.Kibria, J.P.Edwards, C.M.Gabardo, et al. Electrochemical CO₂ reduction into chemical feedstocks: from mechanistic electrocatalysis models to system design[J]. Advanced Materials, 2019, 31(31): 1807166.
- [10] Nguyen T, Dinh C T, et al Gas diffusion electrode design for electrochemical carbon dioxide reduction[J]. Chemical Society Reviews, 2020, 49(21): 7488-7504.
- [11] Li H, Oloman C. Development of a continuous reactor for the electro-reduction of carbon dioxide to formate – part 2: scale-up[J]. Journal of Applied Electrochemistry, 2007, 37(10): 1107-1117.
- [12] Leli F K, Atilan T, Palamut N, et al. Electrochemical reduction of CO₂ at Pb- and Sn-electrodes in a fixed-bed reactor in aqueous K₂CO₃ and KHCO₃ media[J]. Journal of Applied Electrochemistry,2003,33:447-450.
- [13] Weekes D M, Salvatore D A, Reyes A, et al. Electrolytic CO₂ reduction in a flow cell[J]. Accounts of Chemical Research, 2018, 51(4): 910-918.
- [14] Whipple D T, Finke E C, Kenis P. Microfluidic reactor for the electrochemical reduction of carbon dioxide: the effect of pH[J]. Electrochemical and Solid-State Letters, 2010, 13(9): B109.
- [15] LI H, OLOMAN C. The Electro-Reduction of Carbon Dioxide in a Continuous Reactor[J/OL]. Journal of Applied Electrochemistry, 2005, 35(10): 955-965. DOI:10.1007/s10800-005-7173-4.
- [16] Wang H, Leung D, Xuan J. Modeling of a microfluidic electrochemical cell for CO₂ utilization and fuel production[J]. Applied Energy, 2013, 102: 1057-1062.
- [17] El-Shafie O A, El-Maghraby R M, Albo J, et al. Modeling and numerical investigation of the performance of gas diffusion electrodes for the electrochemical reduction of carbon dioxide to methanol[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2020, 59(47): 20929-20942.
- [18] Wu K, Birgersson E, Kim B, et al. Modeling and Experimental Validation of Electrochemical Reduction of

- CO₂ to CO in a Microfluidic Cell [J]. *Journal of The Electrochemical Society*, 2015, 162(1): F23-F32.
- [19] ZENYUK I V, DAS P K, WEBER A Z. Understanding Impacts of Catalyst-Layer Thickness on Fuel-Cell Performance via Mathematical Modeling[J/OL]. *Journal of The Electrochemical Society*, 2016, 163(7): F691-F703. DOI:10.1149/2.1161607jes.
- [20] Weng L C, Bell A T, Weber A Z. Modeling gas-diffusion electrodes for CO₂ reduction[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2018, 20(25): 16973-16984.
- [21] 张宇航. 基于 SnO₂ 纳米片阴极的电化学还原 CO₂ 产甲酸性能[D].重庆大学,2021.
- [22] Fuller E N, Schettler P D, Giddings J C. New method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients[J]. *Industrial and Engineering Chemistry*, 1966, 58(5): 18-27.
- [23] Yang Z, Li D, Xing L, et al. Modeling and upscaling analysis of gas diffusion electrode-based electrochemical carbon dioxide reduction systems[J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2021, 9(1): 351-361.
- [24] Kamkeng A D N, Wang M, Hu J, et al. Transformation technologies for CO₂ utilisation: current status, challenges and future prospects[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 409: 128-138.
- [25] Fang Y, Cui H, Chen B, et al. A kinetics-mass transport model for CO₂ electroreduction reactor to investigate performance limitation factors[J]. *Chemical Engineering Science*, 2022, 262: 117996.
- [26] Wang Q, Chen W, Zhao C, et al. Analysis of overpotential in discharge process associated with precipitation for vanadium-manganese flow battery[J]. *Journal of Power Sources*, 2022, 517: 230717.
- [27] Pitois O, Lorenceau E, Louvet N, et al. Specific surface area model for foam permeability[J]. *Langmuir*, 2009, 25(1): 97-100.
- [28] Liu P S, Chen G F. Mechanical relation of foamed metals under uniaxial and biaxial loads of collective tension and compression[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2009, 507(1-2): 190-193.
- [29] Han j, Eimer D A, Melaaen M C. Liquid phase mass transfer coefficient of carbon dioxide absorption by water droplet[J]. *Energy Procedia*, 2013, 37: 1728-1735.
- [30] Staudinger J, Roberts P V. A critical compilation of henry's law constant temperature dependence relations for organic compounds in dilute aqueous solutions[J]. *Chemosphere*, 2001, 44(4): 561-576.

数据中心高温冷冻水系统节能优化研究

廖炜铖¹, 姜宇光², 李震¹

(1.清华大学航天航空学院, 北京 100084; 2.中国移动通信集团设计院, 北京 100080)

(Tel: 010-62794679, Email: lizh@tsinghua.edu.cn)

摘要: 数据中心冷却系统的能耗随着时间的推移而不断增加, 使用自然冷却技术可以降低冷却系统的机械冷却能耗。在保证服务器安全稳定运行的情况下, 提高数据中心冷冻水温度可以有效增加天然冷源的利用时间, 本文建立了冷冻水温度和送风温度之间的模型, 用实验方法探讨提高冷冻水温度对数据中心热环境和能耗的影响。此外, 本文进行了案例研究, 通过对数据中心制冷系统、空调末端和服务器展开研究分析, 结果表明数据中心能耗存在极值点。

关键词: 数据中心冷却; 冷冻水系统; 精密空调

0 前言

数据中心用电量与日俱增, 其中数据中心冷却系统的用电量占比达到 30%以上, 如何减少数据中心的能耗成为了数据中心节能的重点目标。利用环节中的冷源是减少数据中心机械制冷的关键, 而自然冷源的利用收到冷冻水温度的限制, 冷冻水温度决定了数据中心全年自然利用时长。在保障机房安全运行的前提下, 提升冷冻水温度涉及到诸多换热环节, 使用较高温度的冷冻水是对传统冷冻水型冷却系统的数据中心节能优化的关键。

数据中心自然冷却是利用室外的低温冷源从而实现冷却散热, 其目的是降低数据中心的能耗, 冷冻水系统自然冷却即通过增加换热器, 在室外温度较低时关闭压缩机, 利用冷却塔制取低温冷水的系统。

Yingbo Zhang 等^[1]综述了下一代高温数据中心的研究和技术, 高温数据中心可以通过改变其冷却机制来节省大量的冷却能量。更有效地使用自然冷却是高温数据中心降低冷却能耗的基本和有效的手段。但是 IT 设备的可靠性和性能成为高温数据中心发展的限制因素。

闫睿等^[2]使用商业软件对数据中心进行能耗模拟分析, 探索数据中心供冷能耗及 PUE 规律特征, 对充分利用自热冷源和优化冷源系统运行参数两中优化方法。提出基于物理模型的空调系统运行参数优化, 基于空调设备的能耗和传热模型建立系统总能耗优化目标。以实际数据中心为案例, 冷水机组使用时间减少了 7.5%, 完全利用自然冷源时间增加了 36.87%, 整体节能 20.4%。雷奥君等^[3]模拟分析了利用湖水自然冷源的冷冻水系统, 发现系统全年能耗随机房送风温度与冷冻水温度温差设定值的增大先减小后增大, 温差为 7℃时能耗为极小值, 冷冻水供水温度和送风温度分别为 14℃、21℃时为系统的

最佳运行状态点。唐辉等^[4]模拟研究数据中心水冷自然冷却系统，发现冷冻水供回水温度对冷却塔的使用室外自然冷源的时间有决定性的作用，通过提高冷却塔的冷却单元数可以延长自然冷源的利用时间。张萌等^[5]分析了大温差和提高冷冻水供水温度的方式，7℃/12℃冷冻水供回水温度在冷却塔供水温度低于 9.5℃时开启部分自然冷却模式；7℃/14℃冷冻水供回水温度在冷却塔供水温度低于 12.5℃时开启部分自然冷却模式，大温差方案延长了数据中心自然冷却的时长。黄若琳等^[6]分析了广州、重庆两地的节能效益，提高冷冻水温度延长了自然冷却时间，但自然冷却带来的节能效果有限，提出常规制冷冷凝热回收-水源热泵供暖系统与常规制冷高温冷冻水余热回收-水源热泵供暖系统，对冷凝热回收复合供暖系统进行以冷却水进水温度为主的优化，发现冷冻水供水温度对节能影响不明显。康致博等^[7]研究了数据中心提高了冷冻水供回水温度运用是适配的精密空调末端，开发适用于大温差高温供冷技术的新型换热器，设计了三种相匹配的换热器参数，冷冻水供回水温度从 7/12℃提高到 15/25℃后，年节费率达到 34.35%。陈沛霖等^[8]分析了空调冷冻水系统大温差设计的能耗分析，提高冷冻水温差相对减小了系统循环水量，减小水泵扬程及耗电量，但是由于蒸发温度降低，冷水机组的制冷效率降低，从而会导致能耗增大。Yuya Suzuki 等^[9]通过对办公楼高温冷冻水冷却系统进行优化，通过运行控制优化进一步提高了设备的效率，高温冷却水的空调设备的流量下降，同时保持等量的热量提取，水冷式冷水机组和整个系统的性能系数分别提高了 0.40 和 0.45，泵和冷却塔的能耗比水冷冷却机的能耗降低了 59%。

为了进一步分析数据中心提升冷冻水系统的可行性和节能效果，本文对数据中心传热环节展开分析，并针对空调末端的换热环节展开实验，最后对案例数据中心微模块整体全年能耗进行测算，以指导实际应用。

1 冷却系统传热过程分析

数据中心制冷系统是为了将机房内服务器、存储设备、交换机、路由器等设备产生的热量排至室外，服务器等 IT 设备的散热特点是制冷系统设计和运行的关键。典型的水冷型冷却系统传热环节包括服务器机架将热量释放到机房，有数据中心精密空调排放至室外。数据中心常规的空调系统主要由冷水机组、冷却塔、水泵和精密空调四部分构成。

精密空调是数据中心机房中最常见的末端换热器，数据中心精密空调包括房间级空调、列间级空调以及机柜级空调，精密空调水-空气换热器的 $\varepsilon - NTU$ 模型计算公式如下：

$$\varepsilon = 1 - \exp \left[\left(\frac{C_{\max}}{C_{\min}} \right) \left(\frac{UA}{C_{\min}} \right)^{0.22} \left\{ \exp \left[- \frac{C_{\max}}{C_{\min}} \left(\frac{UA}{C_{\min}} \right)^{0.78} \right] - 1 \right\} \right] \quad (1)$$

$$UA = \left(\frac{Re}{Re_r} \right)^{0.766} UA_r \quad (2)$$

精密空调的制冷量可由下式计算：

$$Q_{CRAH} = \varepsilon C_{\min} (T_{a,i} - T_{c,w,i}) \quad (3)$$

冷水机组的主要参数包括冷冻水供回水温度、冷冻水流量以及冷凝器进水温度，冷源测的能耗主要由冷水机组、冷却塔、水泵组成，冷水机组的能耗受其 PLR 以及冷凝器进水温度的影响，冷却塔能耗受其风机频率的影响，水泵能耗也受其运行频率的影响。

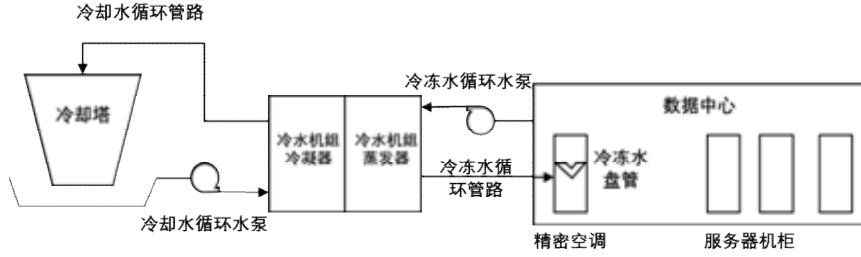


图 1 数据中心冷冻水系统典型传热过程

水侧直接自然冷却在夏季，开启冷水机组正常运行模式，为传统机械式制冷方案。在冬季，关闭冷水机组，将冷却水作为冷冻水使用直接导入空调末端设备，从而实现自然冷却。水侧间接自然冷却如图 1 所示，其基本原理是在冷却塔与冷水机组之间增加一个板式换热器。在夏季，开启冷水机组正常运行模式，板式换热器停止使用在冬季，关闭冷水机组，冷却塔中的冷却水与空调末端设备中的冷冻水通过板式换热器进行换热，从而实现自然冷却。

2 冷却系统末端实验研究

焓差实验台可以测试在一定工况（干球温度、湿球温度、风量等）条件下，被测机的换热能力。焓差试验台可以通过计算被测机吸入空气与吹出空气的焓值，从而获得空气进出口的焓差，计算相应风量下被测机的换热能力。

分为室内侧和室外侧，可以分别模拟不同季节的室内外温湿度情况。焓差实验台环境模拟功能灵活，除利用冷空气作为冷源外，还可利用冷水作为冷源。焓差实验台室内侧温度可实现 10-50 °C 的连续变化，相对湿度 35-90% RH 的调节，模拟机房内部实际运行环境。室外侧温度可实现-15~45°C 的连续变化，相对湿度 35-90%RH 的调节，模拟实际系统中室外侧环境，这种温湿度条件完全可以模拟全国从严寒到热带所有地区全年典型的气候分布情况。焓差实验台室内侧及室外侧制冷能力均为 1500-25000 W，还具有温度、压力、耗电量等基本参数的测量功能。

如图 2 所示，实验测试采用焓差实验台室内侧进行测试，将空调末端安装在内测空调柜中，控制室内侧的环境温度模拟空调的回风温度，空调的送风量可通过空调内部进行控制，水侧管路中冷冻水的供回水温度为设定值，从而平衡空调的出风温度。当整个系统参数达到稳态或动态平衡时改变冷冻水供回水温度进入下一个工况进行测试。

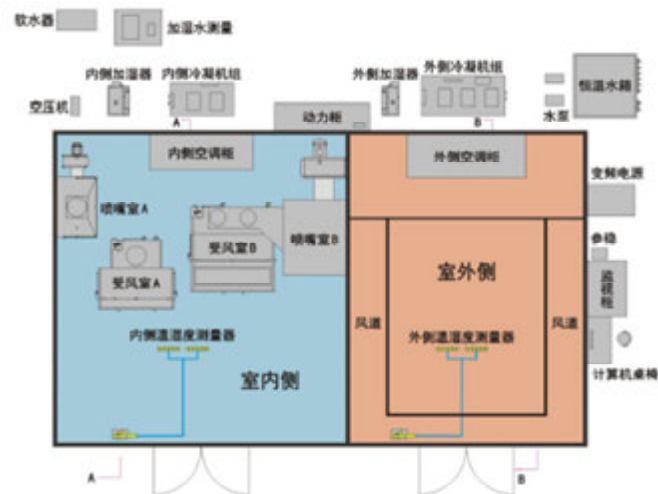


图2 焓差实验台平面示意图

通过测试冷冻水型列间空调、热管背板在不同温度的冷冻水下的性能，研究分析提高数据中心冷冻水供水温度对数据中心节能降耗的效果及可行性。冷冻水型列间空调设备尺寸宽 600×深 1200×高 2200mm，测试回风温度为 35℃，供水温度为 15℃、21℃下的制冷量及出风温度。重力热管型背板空调的设备尺寸宽 600×高 2200mm，厚度不大于 200mm，测试回风温度 35℃，供水温度为 15℃、21℃下的制冷量及出风温度。

这两种空调末端在冷冻水 21℃供/27℃回的工况下，出风温度可达到 25℃以下，满足机房内温度控制的要求。在空调回风温度为 35℃时，冷冻水型列间空调的制冷量由 47.81kW 降低至 29.81kW，降低幅度约为 37%，由于冷量降低，而风机功耗没变，能效比由原来的 50.38 降低至 31.38。在空调回风温度为 35℃时，重力热管型背板空调的制冷量由 15.64kW 降低至 10.33kW，降低幅度约为 34%，能效比由原来的 64.66 降低至 43.21。因此，由于末端功耗增加，冷源功耗降低，数据中心空调系统 PUE 因子可降低。

进一步地探究数据中心使用的冷冻水典型设计温度的精密空调，实验测试实物图如图 3 所示。



图3 空调末端实验实物图

空调末端的显冷量随着空调的风量增加而增加，低温供回水温度的显冷量显著高于高温供回水温度。如图4所示，在15/21℃工况下显冷量为12844W，当提高到23/29℃时降低至5949W。空调回风温度从35℃提升至38℃可有效提升显冷量，在不同供回水温度的显冷量增量随空调风量的增加趋势保持一致。随着供回水温度增加，空调送风温度随之增加，其增量近似于线性关系，当空调回风温度提升至38℃时，送风温度增量显著增加。空调末端从单换热器变为双换热器在不同供回水温度下趋势一致。

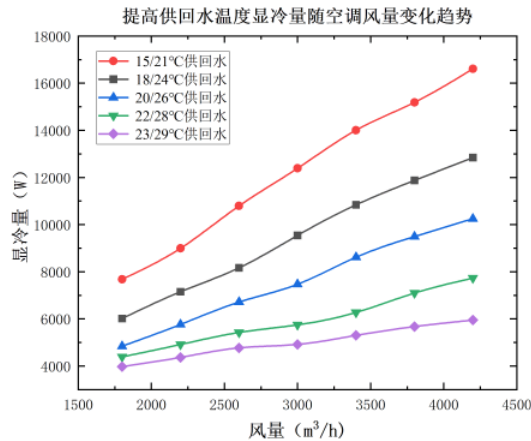


图4 制冷量随风量的变化趋势图

3 案例研究

为了估计提高冷冻水温度增加自然冷源而实现的节能效果，基于实际测试的空调和服务器功耗数据，根据测试的流量对水泵、冷却塔的功耗进行计算得到。案例研究的数

据中心微模块包括五个背板空调和一台冷水机组，基于北京的气象数据为例计算冷冻水供回水温度提高后的数据中心全年总能耗变化趋势。

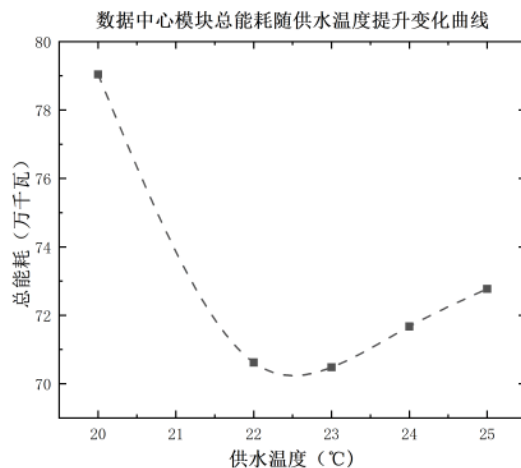


图 5 数据中心总能耗随供水温度变化曲线

如图 5 所示，案例数据中心计算的总能耗在供回水温度提高到 22-23℃达到极小值，总能耗随着供回水温度的升高而降低是由于供回水温度地提高增加了自然冷源利用时间，降低了冷水机组的功耗。而当供回水温度继续升高时，总能耗随着升高是由于供回水温度提高导致精密空调的出风温度随着提高，服务器风扇转速达到阈值时功耗阶跃式增长，导致整体能耗地升高。因此，针对不同数据中心案例，在服务器入口温度保证在 27℃的推荐温度下，提高原有冷冻水温度能够有效地实现节能效果，具体地温升需要根据实际情况进行调整。

4 结 论

数据中心冷却设计到多个散热环节，本文对数据中心冷冻水型冷却系统展开分析，提高冷冻水供回水温度能够增加自然冷源利用时间，减少全年机械运行时间，从而达到数据中心节能的目的。对数据中心精密空调进行了测试。

在空调回风温度为 35℃时，冷冻水型列间空调的供回水温度从 15/21℃提高至 21/27℃后，空调的制冷量由 47.81kW 降低至 29.81kW，降低幅度约为 37%。在空调回风温度为 35℃时，冷冻水供回水温度从 15/21℃提高至 21/27℃后：空调的制冷量由 15.64kW 降低至 10.33kW，降低幅度约为 34%。对冷冻水型列间空调、热管型列间空调、热管型背板空调三种末端性能测试，结果表明现有数据中心冷冻水系统中空调末端换热换热环节能够维持空调制冷量保持不变的情况下，提高冷冻水供回水温度后，将出风温度控制在推荐标准内。最后对数据中心冷却系统整体的全年能耗进行测算，在设定的数据中心场景下，冷冻水温度提高到 22~23℃时能耗达到极小值，提高冷冻水温度能够增加自然冷源的利用时间，系统总能耗不断降低，但当达到特定阈值时，服务器风扇的转速增加会导致整体能耗升高。

参考文献

- [1] Zhang Y, Shan K, Li X, et al. Research and Technologies for next-generation high-temperature data centers—State-of-the-arts and future perspectives[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2023, 171: 112991.
- [2] 闫睿. 数据中心能耗特征分析及空调系统优化控制研究[D].清华大学,2022.
- [3] 雷奥君. 基于 Trnsys 的数据中心湖水源自然冷却系统的模拟研究[D].湖南大学,2018.
- [4] 唐辉. 数据中心水冷自然冷却模拟研究与冷却系统参数分析[D].湖南大学,2018.
- [5] 张萌.数据中心空调水温选择的技术经济分析[J].洁净与空调技术,2019(03):53-57.
- [6] 黄若琳. 大型数据中心机房冷却系统研究与优化[D].重庆大学,2018.
- [7] 康致博. 基于大温差高温供冷技术的数据中心冷却节能研究 [D]. 东北电力大学,2020.DOI:10.27008/d.cnki.gdbdc.2020.000015.
- [8] 陈沛霖.空调冷冻水系统大温差设计的能耗分析[J].建筑热能通风空调,1999(02):18-19.
- [9] Suzuki Y, Imazu M, Shinoda J, et al. Efficient Operation of Heat Source using High-temperature Chilled Water in an Advanced Office Building[C]//E3S Web of Conferences. EDP Sciences, 2019, 111: 03071.

固定床内 CaCO_3/CaO 热化学储放热一体化研究

田希坤, 闫君, 赵长颖*

(上海交通大学工程热物理研究所, 上海 200240)

(Tel: 021-34204541, Email: changying.zhao@sjtu.edu.cn)

摘要: 针对 CaCO_3/CaO 体系在反应器层面研究单一、集成程度低的问题, 在固定床反应器内开展了储热-放热一体化实验。研究表明, 储热阶段, 由于床层的低热导率, 不同位点的分解转化率各不相同, 且床层填充率会影响材料的整体分解转化率; 放热阶段, 受传质影响, 反应器床层上方材料的碳酸化转化率高于底部材料, 且采用辅助加热的方式能提升材料碳酸化转化率。随着床层填充率从 0.39 降至 0.13, 反应器整体的热能存储效率从 42.8% 升至 67.1%, 具有较高的一体化程度。

关键词: 热化学储能; 钙基材料; 传热传质; 一体化储放热

0 前言

在碳中和愿景下, 太阳能聚光集热技术存储的高温热量, 可以替代现有化石燃料满足工业生产及电力行业对高品位热源的需求^[1], 但受限于太阳能的波动性、间歇性和不稳定性, 需要结合储热技术实现能量的连续稳定输出。与显热储能和相变储能相比, 热化学储能具有宽温区、在环境温度下长期储存热损小、适合长距离运输等优点。其中, 基于 CaCO_3/CaO 循环的热化学储热体系具有原料成本低、反应温度高和储能密度高等优势, 应用前景广阔^[2]。

目前许多学者对钙基储能体系在反应器上的储放热性能开展了研究。Tregambi 等^[3]研究了直接照射式流化床反应器中的钙循环性能, 采用了 3 个 4 kW 的 Xe 灯阵列模拟太阳辐射, 最大分解转化率和碳酸化转化率分别可达 100% 和 19.6%。他们还通过降低分解温度、预煅烧、采用白云石等方式提升反应器性能^[4]。此外, 他们还研究了电加热式流化床反应器内的钙基热化学储能性能^[5], 其性能相比太阳能辐射加热有所提升, 但在 20 次循环中的 CaO 碳酸化转化率仍然从 62% 降低至 14%。Esence 等^[6]采用了 55 kW 的中试规模的太阳能流化床反应器用于 CaCO_3 的分解, 当 CaCO_3 的质量流量为 $20 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ 时, CaCO_3 的分解转化率可达 95.2%。相比流化床反应器, 固定床反应器具有设计及运行成本低的优势, 但性能也相对较差。尽管固定床反应器已广泛用于 $\text{Ca}(\text{OH})_2/\text{CaO}$ 的储放热^[7-11], 但在 CaCO_3/CaO 体系中的应用较少。文献调研表明, 固定床反应器大多用于氧化还原反应及甲烷重整^[12,13], 很少用于 CaCO_3/CaO 热化学储热。Peng 等^[14]模拟了固定床

* 通讯作者: 赵长颖, 教授, E-mail: changying.zhao@sjtu.edu.cn
基金项目: 国家自然科学基金重大项目 (No.52090063)

反应器用于不同热化学储能体系时的性能,包括 CaCO_3 、 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 和 Mn_2O_3 , 其中 CaCO_3 储热速率及转化率最高,整体床层转化率为 76%。Xu 等^[15]研究了固定床反应器内 CaCO_3 的储放热性能,并利用 TiO_2 进行改性。当掺杂 10%摩尔分数的 TiO_2 时, CaCO_3 的分解转化率为 50.6%。考虑到固定床反应器的低成本、易操作、有规模化应用潜力等特性,有必要进一步深入开展研究。

由此可见,尽管国内外学者已对用于 CaCO_3 分解和 CaO 碳酸化的不同类型的反应器开展研究,且部分反应器能够与太阳能聚光集热进行有效整合。然而,现有的反应器研究大多局限于 CaCO_3 的单一分解或者 CaO 的单一碳酸化,装置集成度低,没有实现储热-放热的一体化。且多数反应器在设计之初并非用于钙基热化学储能,运行工况和储放热性能也有待深入研究。此外,用于 CaCO_3/CaO 储放热的固定床反应器很少见诸报道,且仅有的研究中也存在一体化程度低、效率低下等问题。因此,本研究针对上述缺陷,采用固定床反应器对 CaCO_3/CaO 体系开展一体化储放热实验,深入探究不同工况下反应器的储放热性能和整体的热能存储效率,为钙基热化学储能的大规模应用提供理论和技术指导。

1 研究方法

1.1 反应器基本布局

本研究采用的固定床反应系统如图 1 所示。 CaCO_3 储热材料堆积在反应器腔体内,反应器圆柱腔体总深度为 18.4 cm,直径为 8 cm。通过控温单元调节反应器内的温度,利用壁面的加热电阻丝进行升温,通过热电偶 1-5 监测壁面温度,热电偶 6-10 插入反应器腔体内,部分热电偶与材料接触,从而测定储热及放热阶段的材料温度和气体温度。储热阶段, N_2 通过质量流量计进入反应器内,使 CaCO_3 在 N_2 气氛下分解,分解产生的 CO_2 和 N_2 混合经过气体干燥过滤装置以及出口流量计后从而流出反应器;放热阶段, CO_2 气体通过质量流量计进入反应器内,与高温的 CaO 进行反应,多余的 CO_2 经过气体干燥过滤装置以及出口流量计后从而流出反应器。气体的流入和流出通道均位于反应腔上方。a-d 位点为 CaCO_3 分解结束以及 CaO 碳酸化结束后的取样位点,其中 a 位于床层顶部中心, b 位于床层顶部边缘, c 位于床层底部中心, d 位于床层底部边缘。考虑到反应床层的旋转对称特性、储放热过程中反应气体的扩散方向、以及实际取样过程中的可操作性,采用以上 4 个取样点进行后续测试,基本能够全面反映床层各区域的转化率差异。

反应器内部外构型及测温点布局如图 2 所示。图 2(a)显示了监测壁面温度的热电偶布局,其中 T1 为控温热电偶,距底边高度为 8.7 cm; T2-T4 位于同一高度,距底边高度为 4.3 cm, T5 位于上方,距底边高度为 13.6 cm。图 2(b)显示了监测材料温度的热电偶布局,其中 T6 位于中心, T7-T10 呈圆环状分布。其中 T8 插入材料最深,距底部 2.6 cm, T6 和 T7 次之,处于同一高度,距底部 2.9 cm; T9 插入腔体相对较浅,距底部 7.2 cm, T10 插入腔体最浅,靠近气体出口,距底部 14.7 cm。通过设置不同位置的热电偶,从而监测反应器腔体内多个位点的温度变化。反应器腔体及材料堆积的实物图如图 2(c)所示。

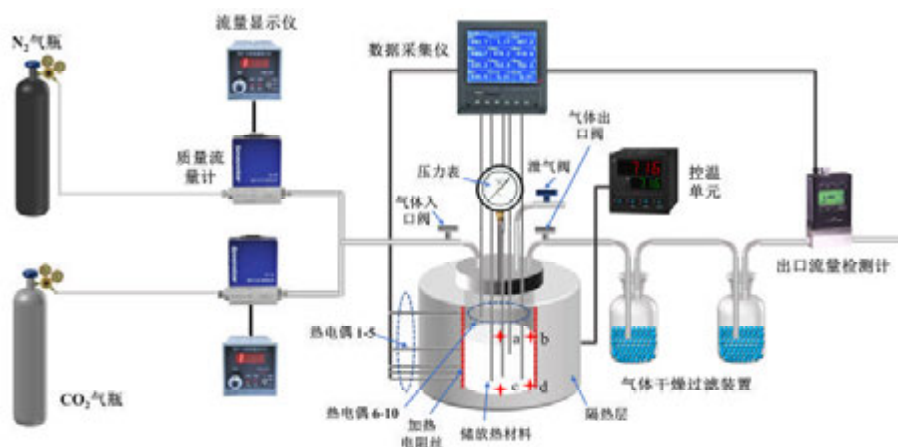


图 1 高温固定床反应系统示意图.

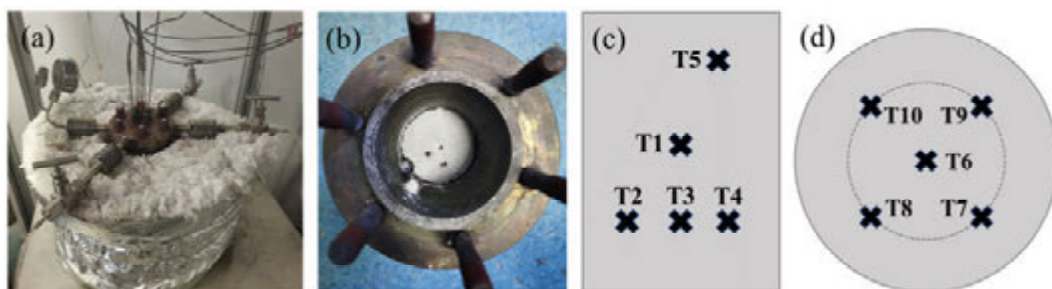


图 2 反应器内部外构型及测温点布局. (a) 反应器外部构型. (b) 反应器内部构型. (c) 热电偶布局侧视图. (d) 热电偶布局俯视图.

1.2 性能表征方法

储热阶段，称量适量的 CaCO_3 样品放入反应器内腔，封闭反应器后，通入 $1 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ 的 N_2 气体，设定反应器加热的目标温度为 850°C ，反应器升温到目标温度后维持 8 h ，随后关闭反应器加热使其自然冷却至室温。将分解后的样品取出称重，计算整体分解转化率，并收集反应器内如图 1 所示的 a-d 位点的材料，在同步热分析仪（STA8000，PE）中进行热重分析，通过测定样品中剩余的 CaCO_3 含量，从而计算各位点的分解转化率。在实际应用过程中，考虑到储热材料完成储热过程中会储存在对应储罐中，因此本实验中储热材料完全取出并在后续放热阶段进行填充是符合实际的。放热阶段，将 CaCO_3 的分解产物放入反应器内腔，封闭反应器后，通入 $1 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ 的 N_2 气体，设定反应器加热的目标温度，当反应器升温到目标温度时，气体气氛切换为 $1.5 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ 的 CO_2 气体，并关闭反应器的加热，维持 4 h ，此工况称为无辅助加热工况；另一种工况为辅助加热工况，即反应器升温到目标温度后，不关闭反应器的加热，维持 4 h 。将碳酸化反应后的样品取出进行称重，并根据碳酸化前后的质量差计算整体碳酸化转化率。并收集反应器中特定位点 a-d 的材料，在同步热分析仪中进行热重分析，通过样品中生成的 CaCO_3 含量计算各位点的碳酸化转化率。定义床层填充率 σ 为床层内材料体积与床层容积的比值。

整体分解转化率的计算公式如下：

$$X_{cal} = \frac{m_{ini} - m_{cal}}{m_{ini}} \cdot \frac{M_{CaCO_3}}{M_{CO_2}} \quad (1)$$

瞬时分解速率的计算公式如下：

$$\frac{dX_{cal,t}}{dt} = \frac{Q_{CO_2} \cdot \rho_{CO_2}}{m_{ini}} \cdot \frac{M_{CaCO_3}}{M_{CO_2}} \quad (2)$$

整体碳酸化转化率的计算公式如下：

$$X_{car} = \frac{m_{car} - m_{cal}}{m_{ini} - m_{cal}} \quad (3)$$

瞬时碳酸化速率的计算公式如下：

$$\frac{dX_{car,t}}{dt} = \frac{P_{CO_2} \cdot \rho_{CO_2}}{m_{ini} - m_{cal}} \quad (4)$$

其中， X_{cal} 和 X_{car} 分别表示整体分解转化率和整体碳酸化转化率， $\frac{dX_{cal,t}}{dt}$ 和 $\frac{dX_{car,t}}{dt}$ 分别表示瞬时分解速率和瞬时碳酸化速率； m_{ini} 、 m_{cal} 和 m_{car} 分别表示分解反应前、分解反应后和碳酸化反应后的样品质量， M_{CaCO_3} 和 M_{CO_2} 分别表示 $CaCO_3$ 和 CO_2 的摩尔质量。此外，瞬时分解速率和瞬时碳酸化速率由进出口气体流量差换算得到。 Q_{CO_2} 表示分解阶段检测到的释放出的 CO_2 的净流量， P_{CO_2} 表示碳酸化阶段检测到的被吸收的 CO_2 的净流量，单位均为 $L \cdot min^{-1}$ 。 ρ_{CO_2} 表示常温下的 CO_2 密度，为 $1.977 g \cdot L^{-1}$ 。

反应器的热能存储效率 η_{TSE} 定义为碳酸化阶段实际释放的热量 Q_{car} 与分解阶段理论上能够吸收的最大热量 Q_s 的比值：

$$\eta_{TSE} = \frac{Q_r}{Q_s} = \frac{Q_{cal}}{Q_s} \cdot \frac{Q_r}{Q_{cal}} = X_{cal} \cdot X_{car} \quad (5)$$

2 结果与讨论

2.1 床层填充率对储热性能的影响

研究表明，在 N_2 气氛下， $CaCO_3$ 的起始分解温度约为 $650^\circ C$ ，因此设置热电偶 6 (T6) 达到 $650^\circ C$ 时作为起始分解参照点。当放入反应器的 $CaCO_3$ 的质量为 $300 g$ 时，对应床层高度为 $7.2 cm$ ，床层填充率为 0.39 。 $CaCO_3$ 在 $850^\circ C$ 的目标温度经过 $8 h$ 的分解后各位点的温度和转化率变化如图 3 所示。从图 3(a)中可以看出床层上方材料的温度显著低于床层下方的材料温度，这主要是由于床层热导率低，以及床层上方材料与气体的对流换热导致的。反应器腔内气体温度最低，低于 $650^\circ C$ 。此外，中心温度 T6 略低于同一高度下的边缘温度 T7，T7 和 T8 的温度最高，约为 $808^\circ C$ ，这说明由于 $CaCO_3$ 堆积床的低热导率，沿床层径向也存在温度差，壁面的热量难以传递到床层内部，导致内部分解转化率降低。在初期的 $0-100 min$ 内， $CaCO_3$ 材料开始分解，当加热到设定温度 $850^\circ C$ 时，各位点温度整体趋于稳定，在 $100-500 min$ 内存在微弱的下降趋势。这主要是由于 $CaCO_3$ 分解反应吸热导致；大约 $520 min$ 后，由于关闭加热，各位点的温度迅速下降，导致分解速率显著降低。如图 3(b)所示，最终的整体分解转化率为 63.8% ， $CaCO_3$

分解速率在升温到最高温度时达到最大值，随后缓慢下降，随着关闭加热，分解速率出现拐点，最终速率降低至 0。这表明 CaCO_3 的分解速率较慢，如果延长加热时间， CaCO_3 仍能进行有效的分解。

不同反应器位点内的 CaCO_3 的分解产物在热分析仪上测定的分解转化率如表 1 所示。可以看出反应器内不同位点的材料分解差异很大，只有位点 d 的 CaCO_3 材料完全分解，说明材料的分解主要集中在靠近反应器底部和壁面的部分，床层上方由于低温和相对较高的 CO_2 浓度，导致材料分解缓慢。整体而言，在固定床反应器中，分解温度和分解时间是限制 CaCO_3 储热性能的主要因素。

表 1 床层填充率为 0.39 时储热阶段各位点的分解转化率

位点	a	b	c	d
$X_{cal} (\sigma = 0.39)$	3.9%	11.2%	20.6%	100%

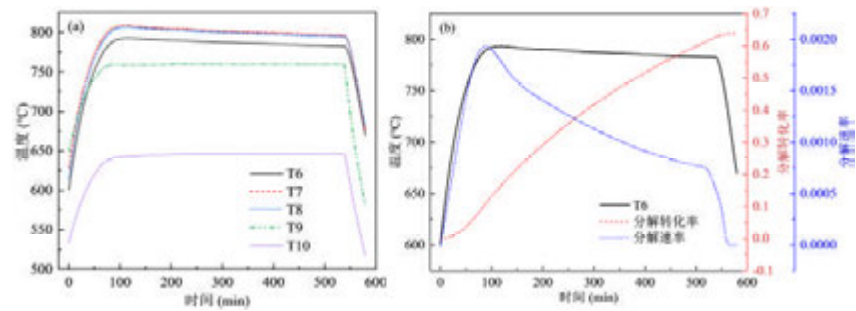


图 3 床层填充率为 0.39 时储热阶段的各位点温度和整体分解程度. (a) 各位点温度. (b) 整体分解程度.

将放入反应器的 CaCO_3 质量调整为 200g 和 100g，此时对应的床层填充率分别为 0.26 和 0.13。 CaCO_3 在 850 °C 下经过 8h 的分解后整体转化率变化如图 4 所示。当床层填充率为 0.26 时， CaCO_3 整体分解转化率为 81.2%，而当床层填充率为 0.13 时， CaCO_3 能够实现完全分解，400min 后分解转化率已接近 100%。可以看出随着床层填充率的下降， CaCO_3 的整体转化率逐渐提升，说明固定床反应器内由于 CaCO_3 材料的传热性能有限，当床层填充率较低时材料才能够实现完全分解。不同床层填充率下的各位点的分解转化率如表 2 所示。当床层填充率为 0.26 时，除了床层上方中心位点 a 的转化率为 33.6% 以外，其余位点的转化率均接近 100%，这进一步说明低温和高 CO_2 浓度导致位于床层上方中心的材料的分解性能受限。当床层填充率进一步降低至 0.13 时，位于床层上方中心的材料才实现完全分解。随着床层填充率的降低，底层分解产生的 CO_2 更容易逸出床层并离开反应器腔内，使反应腔内 CO_2 浓度降低，从而更有利于 CaCO_3 的分解。因此，对于钙基固定床反应器，由于 CaCO_3 储热材料的低热导率，需要更高的温度、更长的分解时间，或者较低的床层填充率，才能实现 CaCO_3 的完全分解。

表 2 不同床层填充率下储热阶段各位点的分解转化率

位点	a	b	c	d
$X_{cal} (\sigma = 0.26)$	33.6%	99.2%	99.8%	100%
$X_{cal} (\sigma = 0.13)$	100%	100%	100%	100%

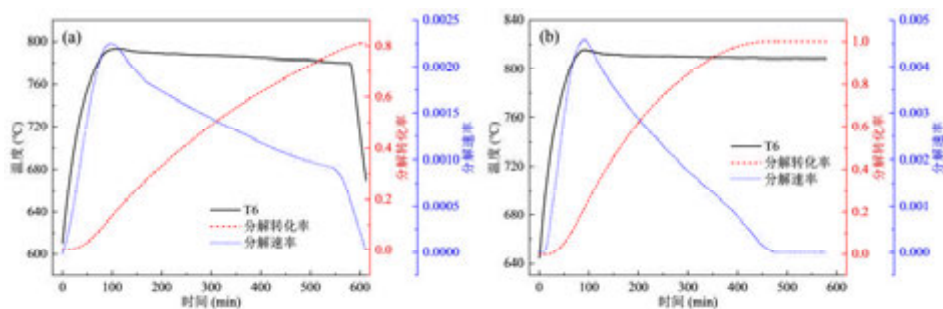


图4 不同床层填充率下储热阶段的材料整体分解程度. (a) 床层填充率 0.26. (b) 床层填充率 0.13.

由此可见,反应器内的传热、传质与化学反应的耦合对 CaCO_3 储热的高效进行具有重要意义。反应器加热壁面的高温和反应床的高导热特性是实现高效传热的关键,由于 CaCO_3 分解产生的 CO_2 会抑制分解的进一步进行,因此采用 N_2 气氛降低 CO_2 浓度,后续可通过强化床层传热、抽真空等方式进一步优化传热传质,进而实现 CaCO_3 的有效分解。

2.2 床层填充率对放热性能的影响

前述研究表明,床层填充率对钙基材料在固定床反应器内的储热性能有显著影响。因此,接下来通过对储热阶段的 CaCO_3 分解产物进行碳酸化反应放热,实现储热-放热的一体化,并进一步研究床层填充率对放热的影响。当床层填充率为 0.39 时,在无辅助加热的情况下, CaCO_3 分解产物在预热到 750°C 后碳酸化 4 h 的结果如图 5 所示。由于反应过程中反应器向外散热,所以整体温度呈现下降趋势。T6、T7、T8 能够检测到明显的温度上升,说明该区域的反应放热明显,碳酸化反应放出的热量最高可使材料升温至 865°C 。T9 和 T10 处基本检测不到温升主要是热电偶未与材料接触所致。在 750°C 的预热温度下,其最终碳酸化转化率为 67.2%。后续由于反应的放热量小于床层的散热量,从而导致温度下降。碳酸化反应结束后,取靠近壁面的 2 个位点 b 和 d 处的样品,在热分析仪上测试碳酸化转化率,其中位点 b 处的碳酸化转化率为 82.5%,位点 d 处的碳酸化转化率为 78.0%,高于整体的碳酸化转化率,说明靠近壁面处的材料碳酸化程度高,且上部材料的碳酸化程度高于下部。

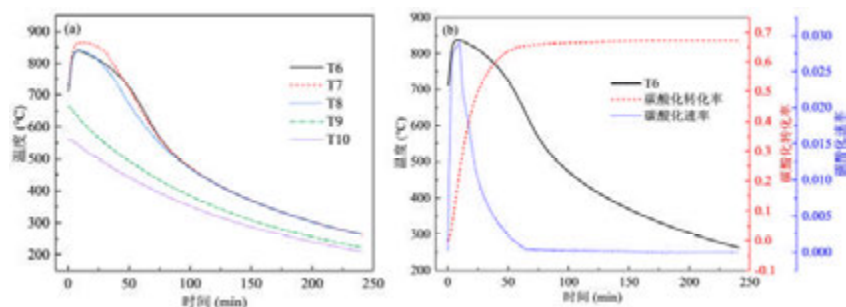


图5 床层填充率为 0.39、放热阶段无辅助加热时各位点温度和整体碳酸化程度

此外还探究了碳酸化阶段反应器的辅助加热对性能的影响。目前的许多研究采用了无辅助加热的工况进行放热反应^[10,15],但由于反应器散热快,导致反应后期由于温度太低而使得 CaO 与 CO_2 难以进一步反应。因此本研究进一步测试了当床层填充率为 0.39 时在辅助加热工况下的 CaCO_3 分解产物的碳酸化情况,如图 6 所示。

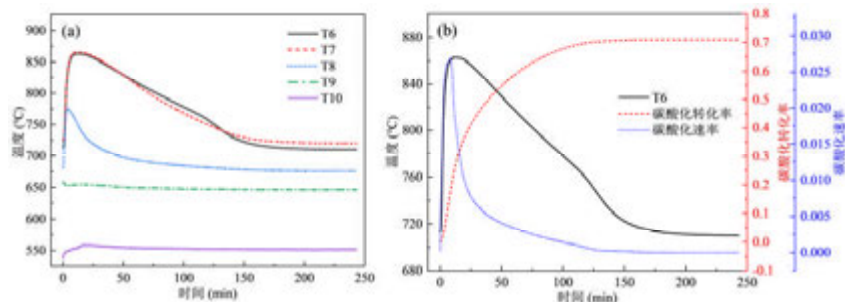


图6 床层填充率为0.39、放热阶段有辅助加热时各位点温度和整体碳化程度

可以看出，在辅助加热情况下各测温位点的温度先快速上升随后缓慢下降，经过约150 min后趋于稳定，说明整体的碳酸化反应大约持续了150min，显著高于图4(b)所示的50 min，整体的碳酸化转化率为71.0%，略高于无辅助加热的碳酸化转化率67.2%，这说明尽管该工况下没有传热限制，但碳酸化反应仍然受限于气固传质， CO_2 难以向床层下方扩散，导致部分 CaO 无法与 CO_2 完全反应。因此，尽管采用辅助加热对整体碳酸化转化率有所提升，但提升效果有限，且存在大量的能量输入与损耗，在实际应用过程中经济性差。因此，接下来均采用无辅助加热的方式开展碳酸化实验与分析。

进一步研究了当床层填充率为0.26和0.13时的整体碳酸化情况，如图7所示。相比图5(b)中明显的温升，图7(a)中的温度峰较窄，由于床层填充率低导致总体放热量降低。在750 °C预热温度下，当床层填充率为0.26时，碳酸化反应主要集中在前75 min，且在9.3 min时碳酸化反应速率达到最大，最终整体碳酸化转化率为70.6%。碳酸化反应结束后，取靠近壁面的2个位点b和d处的样品，在热分析仪上测试碳酸化转化率，其中位点b处的碳酸化转化率为76.3%，位点d处的碳酸化转化率为75.5%，低于床层填充率为0.39时对应位点的转化率，这说明随着床层填充高度的下降， CO_2 难以充分向下扩散并与 CaO 进行反应。当床层填充率为0.13时，碳酸化反应主要集中在前50 min，且在9.5 min时碳酸化反应速率达到最大，最终整体碳酸化转化率为67.1%。因此，随着床层填充率的降低，分解产物整体碳酸化转化率也进一步降低。且由于样品量的减少，检测的放热量大幅度降低，且碳酸化反应结束后位点b和d的碳酸化转化率均为73.4%，随着床层填充率的降低而进一步降低。尽管低床层填充率能够使 CaCO_3 的分解更加完全，但在后续的碳酸化阶段的转化率也会有所降低。

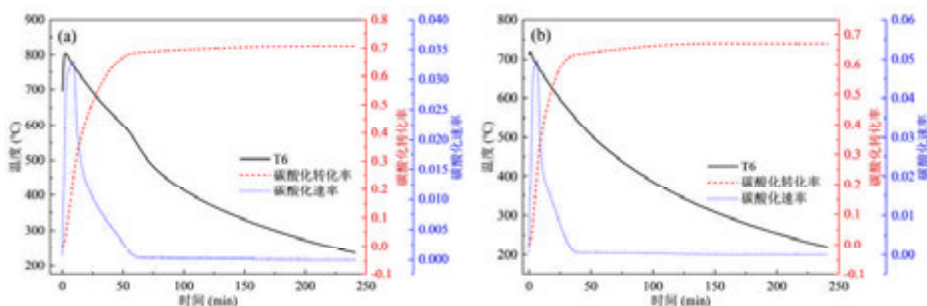


图7 不同床层填充率下放热阶段的材料整体碳酸化程度. (a) 床层填充率0.26. (b) 床层填充率0.13

因此，在放热阶段， CO_2 的传质是限制 CaO 碳酸化反应的主要因素。由于 CaO 的碳酸化活化能低，所以温度对碳酸化的影响并不明显， CO_2 从床层上方向下方扩散导致了

不同床层高度下材料碳酸化转化率的差异,床层高度低导致 CO_2 难以在床层内充分扩散。因此,在合适的床层高度下,通过强化 CO_2 在床层内的传质,如采用扩散管、更改气体通入方式等,能够提升 CaO 在放热过程中的转化率。

2.3 储放热一体化综合分析

为了进一步衡量固定床反应器内的钙基材料的储放热性能,将相同的 CaCO_3 材料在同步热分析仪中开展储热-放热一体化测试,其结果如图8所示。储热阶段, CaCO_3 在 650°C 左右开始分解,并在5 min左右达到最大分解速率,最终的分解转化率为97.3%,分解反应达到最大速率时的转化率占最终转化率的比值为0.588;放热阶段,分解产物 CaO 在反应初期碳酸化转化率迅速上升,在1 min左右时即达到最大速率,最终的碳酸化转化率为89.2%,碳酸化反应达到最大速率时的转化率占最终转化率的比值为0.512。由于钙基材料在热分析仪内进行充分的传热传质,因此可视为理想状态下的材料储放热。相比之下,不同床层填充率下反应器内 CaCO_3 材料的分解反应达到最大速率时的转化率占最终转化率的比值在0.154-0.238之间,即使当床层填充率很低时, CaCO_3 能够完全分解,但其分解速率仍然偏低。这说明反应器内的传质阻力较大, CO_2 的向上扩散抑制了上部 CaCO_3 的分解,从而降低了整体的分解速率。对于反应器内的碳酸化,在有辅助加热的情况下, CaO 碳酸化速率达到最大值时转化率占最终转化率的比值仅为0.258,低于理想状态下的0.457。这主要是受到反应平衡的影响;即使在辅助加热的情况下进行长时间碳酸化,其整体碳酸化转化率为71.0%,仍然低于理想状态下的89.2%,这说明传质的影响仍然存在,由于 CaO 碳酸化体积膨胀堵塞了 CO_2 向下扩散的通道,从而使床层下方的材料难以反应完全;在无辅助加热的情况下, CaO 碳酸化速率达到最大值时转化率占最终转化率的比值为0.334-0.359,仍然低于理想状态,这说明除了 CO_2 传质外,反应器温度下降过快也是限制碳酸化转化率的关键因素。

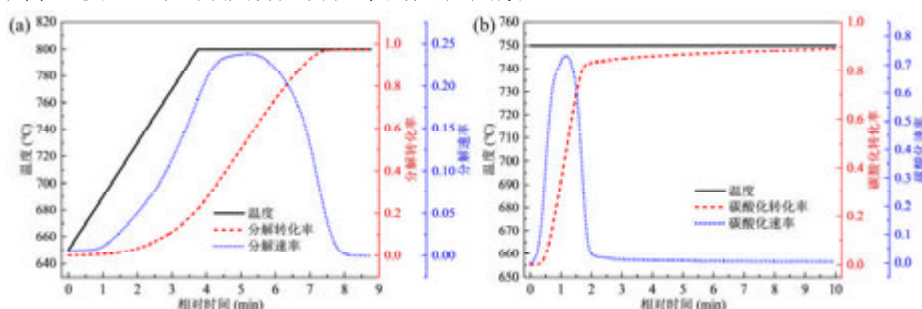


图8 理想状态下的 CaCO_3 分解与分解产物的碳酸化. (a) CaCO_3 分解. (b) 分解产物的碳酸化.

理想状态以及不同床层填充率下 CaCO_3 的一体化热能存储效率对比如表3所示。可以看出,随着床层填充率从0.39下降至0.13,热能存储效率从42.8%提升至67.1%。而文献中报道的钙基热化学储能反应器,除了存在储热阶段和放热阶段采用不同的材料进行独立反应、难以一体化的缺陷外,其整体的热能存储效率低于20%^[15,16]。因此,本文采用的钙基固定床反应器及一体化运行测试方式具有更大的应用优势。然而,由于受到传热传质的限制,反应器内的热能存储效率仍然低于理想状态下的86.8%。随着床层填充率的降低,传热的限制逐渐减弱,因此分解转化率逐渐提升,但在碳酸化阶段增大了

气固传质阻力，且碳酸化产生的总热量也进一步减少。因此，对于固定床反应器，在实际应用过程中需选择合适的温度压力工况以及床层填充率，在提升整体热能存储效率的同时，也提高热能存储量。后续可通过填充高导热材料、肋片强化传热，或者通过气体扩散管增强反应器内的气体扩散，以及优化反应器的气体通道布局，从而进一步提升热能存储效率，推动钙基热化学储能的实际应用。

表 3 CaCO_3 的一体化热能存储效率对比

床层状态	$\sigma = 0.39$	$\sigma = 0.26$	$\sigma = 0.13$	理想状态
X_{cal}	63.8%	81.2%	100%	97.3%
X_{car}	67.2%	70.6%	67.1%	89.2%
η_{TSE}	42.8%	57.3%	67.1%	86.8%

3 结 论

本文通过在钙基热化学储能反应器中开展储热-放热一体化运行测试，研究了钙基热化学储能材料在固定床反应器内的实际传热传质和转化特性，以及床层填充率和辅助加热工况对反应器内材料实际储能性能的影响。堆积床内靠近反应器壁面的材料温度高于反应器中心的材料温度，且由于气体对流换热，床层上方材料温度也显著低于下方。储热阶段，不同位点的温度的差异导致了分解转化率的差异。当床层填充率从 0.39 降低至 0.13 时，反应器内 CaCO_3 的整体分解转化率从 63.8% 升至 100%。这主要是低床层填充率降低了反应腔内 CO_2 浓度，有利于 CaCO_3 的分解。放热阶段，受 CO_2 扩散传质影响，床层上方材料的碳酸化转化率高于下方，且靠近反应器壁面的材料的碳酸化转化率高于中心材料的转化率。采用辅助加热对整体的碳酸化转化率提升并不明显，且实际应用过程中还会增加额外的能量损耗，因此无辅助加热碳酸化工况经济性和实用性更强。当床层填充率从 0.39 降低至 0.13 时，反应器内 CaCO_3 的整体分解转化率为 67.1%-70.6%，说明床层填充率对整体碳酸化转化率影响不大。

系统整体的一体化热能存储效率在 42.8%-67.1% 之间，且随着床层填充率的下降逐渐上升。然而，低床层填充率会导致实际的储放热量减少，因此，在实际应用中需选择合适的运行工况和床层填充率，在提升整体热能存储效率的同时，也提高热能存储量。本研究采用的钙基固定床反应器及一体化运行测试方式，实际热能存储效率高于文献中报道的钙基固定床储放热反应器的效率，具有更大的应用优势。后续可通过填充高导热材料、肋片强化传热，或者通过气体扩散管增强反应器内的气体扩散，以及优化反应器的气体通道布局，从而进一步提升热能存储效率，推动钙基热化学储能的实际应用。

参考文献

[1] ORTIZ C, VALVERDE J M, CHACARTEGUI R, et al. The Calcium-Looping (CaCO_3/CaO) process for thermochemical energy storage in Concentrating Solar Power plants[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2019, 113: 109252.

- [2] TIAN X K, LIN S C, YAN J, et al. Improved durability in thermochemical energy storage using Ti/Al/Mg Co-doped Calcium-based composites with hierarchical Meso/Micro pore structures[J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 450: 138142.
- [3] TREGAMBI C, SALATINO P, SOLIMENE R, et al. An experimental characterization of Calcium Looping integrated with concentrated solar power[J]. Chemical Engineering Journal, 2018, 331: 794-802.
- [4] DI LAURO F, TREGAMBI C, MONTAGNARO F, et al. Improving the performance of calcium looping for solar thermochemical energy storage and CO₂ capture[J]. Fuel, 2021, 298: 120791.
- [5] TREGAMBI C, DI LAURO F, PASCUAL S, et al. Solar-driven Calcium Looping in Fluidized Beds for Thermochemical Energy Storage[J]. Chemical Engineering Journal, 2023: 142708.
- [6] ESENCE T, GUILLOT E, TESSONNEAUD M, et al. Solar calcination at pilot scale in a continuous flow multistage horizontal fluidized bed[J]. Solar Energy, 2020, 207: 367-378.
- [7] SCHAUBE F, KOHZER A, SCHÜTZ J, et al. De- and rehydration of Ca(OH)₂ in a reactor with direct heat transfer for thermo-chemical heat storage. Part A: Experimental results[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2013, 91(5): 856-864.
- [8] SCHAUBE F, UTZ I, WÖRNER A, et al. De- and rehydration of Ca(OH)₂ in a reactor with direct heat transfer for thermo-chemical heat storage. Part B: Validation of model[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2013, 91(5): 865-873.
- [9] SCHMIDT M, SZCZUKOWSKI C, ROSSKOPF C, et al. Experimental results of a 10 kW high temperature thermochemical storage reactor based on calcium hydroxide[J]. Applied Thermal Engineering, 2014, 62(2): 553-559.
- [10] YAN J, ZHAO C Y. Experimental study of CaO/Ca(OH)₂ in a fixed-bed reactor for thermochemical heat storage[J]. Applied Energy, 2016, 175: 277-284.
- [11] YE H, TAO Y B, WU Z H. Performance improvement of packed bed thermochemical heat storage by enhancing heat transfer and vapor transmission[J]. Applied Energy, 2022, 326: 119946.
- [12] ALVAREZ RIVERO M, RODRIGUES D, PINHEIRO C I C, et al. Solid–gas reactors driven by concentrated solar energy with potential application to calcium looping: A comparative review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2022, 158: 112048.
- [13] NIKULSHINA V, HALMANN M, STEINFELD A. Coproduction of Syngas and Lime by Combined CaCO₃-Calcination and CH₄-Reforming Using a Particle-Flow Reactor Driven by Concentrated Solar Radiation[J]. Energy & Fuels, 2009, 23(12): 6207-6212.
- [14] PENG X, YAO M, ROOT T W, et al. Design and analysis of concentrating solar power plants with fixed-bed reactors for thermochemical energy storage[J]. Applied Energy, 2020, 262: 114543.
- [15] XU T X, TIAN X K, KHOSA A A, et al. Reaction performance of CaCO₃/CaO thermochemical energy storage with TiO₂ dopant and experimental study in a fixed-bed reactor[J]. Energy, 2021, 236: 121451.
- [16] CHEN X, JIN X, ZHANG Z, et al. Experimental investigation of CaCO₃/CaO in a spiral coil reactor for thermochemical energy storage[J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 428: 131971.

密闭空间内掺氢天然气分层数学模型对比研究

苏越¹, 李敬法^{*2}, 陈宇杰², 宇波², 赵彦琳¹

1. 中国石油大学(北京), 机械与储运工程学院, 北京

2. 北京石油化工学院, 机械工程学院并氢能研究中心, 北京

(Tel: 18810114816, Email: lijingfa@bupt.edu.cn)

摘要: 掺氢天然气在密闭空间内输送和储存时是否存在分层现象备受关注。目前常用描述分层现象的模型有组分输运模型和多相流 Mixture 模型两类。为了厘清上述两种模型对分层现象模拟的适用性, 首先结合实验数据对两种模型的计算准确性进行了验证, 然后基于吉布斯自由能理论对密闭空间内二元混合气体浓度分布的自发趋势进行了分析。结果表明混合气体静置在密闭空间内其浓度会逐渐均匀, 最终达到平衡后不会产生自发分层。本研究可为掺氢天然气安全输送与储存提供参考。

关键词: 掺氢天然气; 分层; 数值模拟; 组分输运模型; 多相流 Mixture 模型。

0 前言

氢能具有清洁无碳、绿色高效、可再生、应用场景丰富等特点, 发展氢能已成为我国能源结构转型和实现双碳目标的重要途径^[1-3]。氢能输送是制约氢能产业发展的瓶颈之一, 利用在役天然气管道将氢气与天然气掺混后输送是经济高效的输氢方式之一^[4-7]。欧盟、中国等均开展了掺氢天然气管道输送的示范项目^[8,9], 未来掺氢天然气将广泛应用于工业、家庭、交通等领域的能源消费, 有效减少温室气体排放。

研究表明, 天然气中掺混少量氢气并不会对管输系统及下游终端燃气器具产生明显影响^[10-12]。但由于氢气和天然气的密度相差较大, 掺混均匀的氢气和天然气是否在密度差的作用下自发分层, 是备受关注的问题。掺氢天然气一旦发生分层, 将会在管道局部位置形成氢的高浓度区域, 影响管道输送系统中管材力学性能和关键设备的适用性^[13,14], 而且对于城镇用户, 掺氢天然气通过立管输送至高层居民时, 氢气分层将影响终端燃气灶具的安全使用, 严重情况下可能导致燃具回火并产生爆炸风险。

目前氢气的分层现象主要出现在氢气与天然气的掺混过程。在注气初期, 氢气以较高流速进入天然气中, 局部浓度和速度梯度较大, 产生较强的惯性力和动量传递, 对流效应明显, 此时对流效应会引起气体分层, 氢气作为密度较小的气体而上浮。注气停止后, 对流效应减弱, 气体之间的扩散效应开始占主导作用, 气体分子会自发地从高浓度

区域向低浓度区域扩散,使得浓度逐渐趋于均匀。当最终两种气体达到平衡态时,是否由于密度差的作用在重力方向上仍然存在浓度梯度,是本研究需要厘清的一个重要问题。如果气体混合后的平衡态存在浓度梯度,说明即使是对于已掺混均匀的掺氢天然气,仍有可能在管道或储罐中产生分层。

天然气管道掺氢的方式主要有两种,一种是支管混合,支管混合初期氢气与天然气由于密度差会存在分层现象,之后经过流动发展会充分混合^[15,16];另一种是在混气设备中掺混至均匀再进行管道输送,即管道一开始输送的就是掺混均匀的氢气与天然气的混合物^[17,18]。文献研究表明,无论何种混气方式,对于运行的管道而言,已充分混合的掺氢天然气不会发生分层,主要是因为流动中的掺氢天然气存在交叉流动和剪切等,促进了气体混合。而对于停输管道或储气装置,已经充分混合的氢气和天然气是否会因为重力作用而重新分层,目前许多学者的研究结论并不一致。对于密闭空间内不同组分气体分层的研究方法主要包括实验研究和数值模拟。在实验研究方面,Wu^[19]进行了掺氢天然气的立管分层实验,首先利用混气装置将甲烷与氢气充分混合,之后静置于总高度为11m的立管中,1小时和2小时后分别测量立管顶端和底端的氢气与甲烷浓度比,发现顶端和底端的氢气浓度比基本一致,没有出现分层现象。Punetha^[20]在密闭方腔内进行了氢气和空气的混合实验,在方腔顶端和底端安装了氢气浓度传感器用于测量氢气浓度。结果表明在注气过程中氢气会在方腔顶端聚集,但在关闭注气阀门后氢气会逐渐与空气混合均匀,最终顶端和底端的氢气浓度相同,无分层现象产生。Ren^[21]在储罐内进行了空气和甲烷的混气实验,该实验利用分压法向空气储罐中注入甲烷之后静置,并在储罐中的上中下三个位置安装了甲烷浓度传感器。结果表明随着时间的增大,达到平衡状态时三个位置处甲烷浓度存在差异,甲烷平衡态浓度与高度满足正相关关系,认为存在分层现象。在数值模拟方面,Liu^[22]利用多相流 Mixture 模型模拟了掺氢天然气在立管和水平管静置后的分层情况,对于长3m、掺氢比30%(体积分数)的立管,在静置50分钟后立管顶端的氢气浓度接近97.5%,底端的氢气浓度接近0,天然气与氢气的分层现象明显。Ren^[21]使用多相流 Mixture 模型对其甲烷和空气的混合实验进行了验证,结果表明模拟与实验结果一致,甲烷在储罐中存在分层现象。Punetha^[20]采用组分输运模型对其氢气与空气的混合实验进行验证,表明实验与模拟结果一致,氢气与空气在储罐内充分混合后不发生分层。

以上研究表明,目前关于混合均匀的掺氢天然气在密闭空间内是否自发分层仍存在争议,研究结论甚至相反。在数值模型方面,研究者们主要采用多相流 Mixture 模型和组分输运模型研究气体的分层现象,但上述文献表明这两种模型的计算结果存在较大差异,多相流 Mixture 混合模型计算结果倾向于气体在密闭空间达到平衡时存在分层现象,而组分输运模型的计算结果倾向于气体在密闭空间达到平衡时其浓度趋于均匀。Wang^[23]等研究专门结合实验数据对比了两种模型在流动状态下的计算精度,发现两种模型在气体流速越低时差异越显著,组分输运模型的在低速流动下的计算精度要高于多相流 Mixture 模型。

为了进一步探究多相流 Mixture 模型和组分输运模型在模拟掺氢天然气分层现象时的差异,厘清这两种模型对掺氢天然气分层现象的适用性,本文首先比较了多相流

Mixture 模型和组分输运模型在数学及物理意义上的区别,然后通过文献中氢气混合与静置实验对比了这两种模型在计算掺氢天然气流动与静置现象时的准确性和适用性,最后从热力学角度证明了两种气体在密闭空间混合达到平衡后是否会产生分层现象的条件。本研究对掺氢天然气管道输送与储存的安全提供重要参考。

1 掺氢天然气分层现象的数学模型

掺氢天然气分层现象涉及到混合气体的流动、传热、传质现象,目前主要有基于组分输运模型的流动传热传质模型和基于多相流 Mixture 模型的流动传热传质模型。

1.1 基于组分输运模型的流动传热传质模型

(1) 连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

式中, ρ 是气体密度, kg/m^3 ; t 是时间, s ; $\mathbf{u}$ 是掺氢天然气的速度矢量, m/s 。

(2) 动量方程

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{f} \quad (2)$$

式中, p 为压力, Pa ; $\boldsymbol{\tau}$ 为应力张量, Pa ; $\mathbf{f}$ 为质量力。

(3) 能量方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{u} \left(e + \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 \right) \right] = \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) + \nabla \cdot (-p \mathbf{u} + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} + S \quad (3)$$

式中, e 为单位质量气体的内能, J/kg ; k_{eff} 为气体的有效热传导率, $\text{W/(m} \cdot \text{K)}$; T 为气体温度, K ; S 为源项。

(4) 组分输运方程

$$\frac{\partial (\rho Y_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_n) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_n + R_n + S_n \quad (4)$$

式中, Y_n 是组分 n 的质量分数 ($n=1,2,3,\dots$); R_n 为化学反应生成物质 n 的净速率,由于掺氢天然气中氢气与天然气之间不存在化学反应,此项忽略; S_n 是用户自定义源项,在本研究中忽略; $\mathbf{J}_n$ 为物质 n 的扩散通量,由浓度梯度和温度梯度引起,假设掺氢天然气处于等温状态,忽略温度梯度变化,在层流中可表示为

$$\mathbf{J}_n = -\rho D_{n,m} \nabla Y_n \quad (5)$$

在湍流中可以表示为

$$\mathbf{J}_n = - \left(\rho D_{n,m} + \frac{\eta_t}{S_{ct}} \right) \nabla Y_n \quad (6)$$

式中, $D_{n,m}$ 为组分 n 在混合气体中的扩散系数, S_{ct} 为湍流施密特数, η_t 为湍流黏度。

1.2 基于多相流 Mixture 模型的流动传热传质模型

(1) 连续性方程

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}_m) = 0 \quad (7)$$

式中, $\rho_m = \sum_{k=1}^q a_k \rho_k$, $\mathbf{u}_m = \frac{\sum_{k=1}^q a_k \rho_k \mathbf{u}_k}{\rho_m}$, a_k 是第 k 相的体积分数; ρ_k 是第 k 相的密度, kg/m^3 ;

$\mathbf{u}_k$ 是第 k 相的速度矢量, m/s ; q 为总的相数。

(2) 动量方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \mathbf{u}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}_m \mathbf{u}_m) = & -\nabla p + \nabla \cdot [\eta_m (\nabla \mathbf{u}_m + \nabla \mathbf{u}_m^T)] \\ & + \rho_m \mathbf{g} + F + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n a_k \rho_k \mathbf{u}_{dr,k} \mathbf{u}_{dr,k} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

式中, $\mathbf{u}_m = \sum_{k=1}^n a_k \mathbf{u}_k$, $\mathbf{u}_{dr,k} = \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_m$, η_m 是混合气体的黏度, $\text{Pa}\cdot\text{s}$ 。

(3) 能量方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{k=1}^n (a_k \rho_k E_k) + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n [a_k \mathbf{u}_k (\rho_k E_k) + p] = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_E \quad (9)$$

式中, $E_k = h_k - \frac{p}{\rho_k} + \frac{u_k^2}{2}$; S_E 为热源; h_k 为第 k 相气体的显焓。

(4) 第二相体积分数方程

$$\frac{\partial}{\partial t} (a_k \rho_k) + \nabla \cdot (a_k \rho_k \mathbf{u}_m) = -\nabla \cdot (a_k \rho_k \mathbf{u}_{dr,k}) + \sum_{k=1}^n (m_{k'} - m_k) \quad (10)$$

式中, $m_{k'}$ 为主相气体至第 k 相气体的传质, m_k 为第 k 相气体至主相气体的传质。

需要说明的是, 式(7)~(10)均与第 k 相气体相对主相气体的速度 $\mathbf{u}_k$ 有关。由于两种气体的密度和速度各不相同, 通过相对速度描述不同相气体的运动, 第 k 相气体相对主相气体的速度为

$$\mathbf{u}_k = \frac{t_k}{f_{drag}} \frac{(\rho_k - \rho_m)}{\rho_k} \mathbf{a} \quad (11)$$

式中, t_k 是第 k 相气体的粒子弛豫时间, $t_k = \frac{\rho_k d_k^2}{18 \mu_q}$, d_k 是第 k 相气体的粒子直径, μ_q 是

主相气体的粘度; f_{drag} 为拉拽函数, $f_{drag} = \begin{cases} 1 + 0.15 \text{Re}^{0.687} & \text{Re} \leq 1000 \\ 0.0183 \text{Re} & \text{Re} > 1000 \end{cases}$; $\mathbf{a}$ 是第 k 相气体的

加速度, $\mathbf{a} = \mathbf{g} - (\mathbf{u}_m \cdot \nabla) \mathbf{u}_m - \frac{\partial \mathbf{u}_m}{\partial t}$ 。

1.3 湍流模型

掺氢天然气在注气过程中若处于湍流状态, 为了节约计算时间和计算资源, 通常采用 $k-\varepsilon$ 湍流模型和大涡模拟方法 (LES) 进行计算^[24, 25]。

(1) $k-\varepsilon$ 湍流模型

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\eta + \frac{\eta_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (13)$$

式中, G_k 为平均速度梯度产生的湍流动能; G_b 是由于浮力产生的湍流动能; Y_M 为可压缩湍流中的脉动膨胀对整体耗散率的贡献; 模型常数 $C_{1\varepsilon}=1.44$, $C_{2\varepsilon}=1.92$, $C_{3\varepsilon}=0.09$, $\sigma_k=1.0$, $\sigma_\varepsilon=1.3$ 。

(2) LES 模型

LES 主要对湍流中的大尺度结构进行直接求解, 而对小尺度结构则采用亚格子模型进行模化计算, 因此求解之前首先将湍流中的大尺度量和小尺度量通过滤波分开。假设 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 为湍流场中位于某位置处的一瞬时物理量, 通过滤波操作可以将其分为两部分

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t) \quad (14)$$

式中, $\bar{\phi}(\mathbf{x}, t)$ 表示大尺度量, $\phi'(\mathbf{x}, t)$ 表示小尺度量。

对上述两种模型中的流动方程进行滤波操作, 然后求解滤波后的方程即可。

2 实验结果对比

本部分采用文献中氢气混合与静置实验的公开发表数据, 对上述两种模型在计算掺氢天然气流动与静置现象时的准确性和适用性进行验证。

2.1 密闭空间内充气实验

Marangon 等^[26]进行了氢气与甲烷在密闭空间中的充气实验, 密闭空间为一个 25m^3 的立方腔体, 注气孔位于底部中心位置处, 孔径为 0.5 英寸(12.7mm)。在密闭空间的不同位置处安装了氢浓度传感器, 其几何示意图和传感器分布如图 1(a)所示。实验气体由体积分数 30% 的氢气与 70% 的甲烷组成, 注气流量为 2.016g/s 。采用结构化网格对密闭实验空间进行网格划分, 在泄漏孔处采用 O 型剖分并进行网格加密, 如图 1(b)所示。

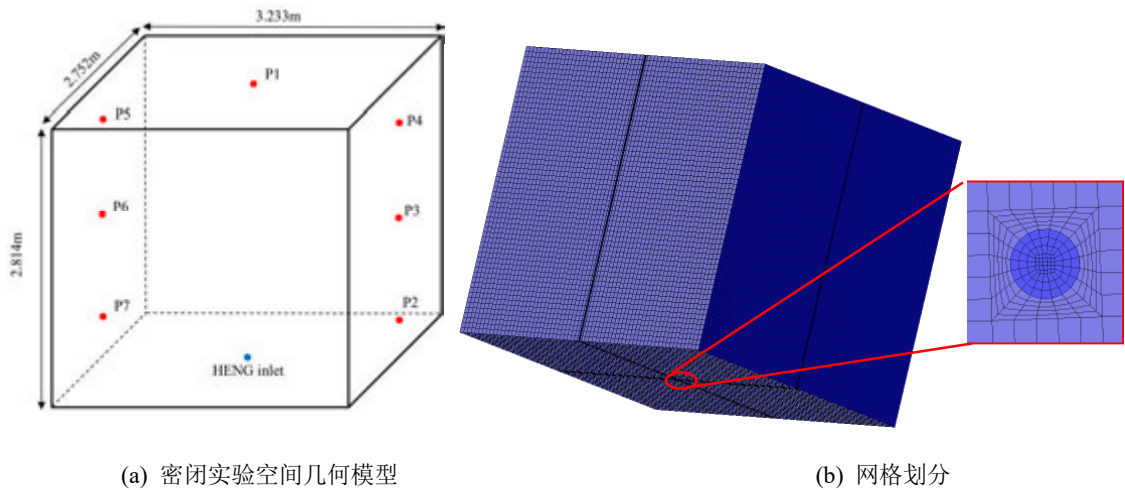


图 1 Marangon 等^[26]的实验几何建模及网格划分

Marangon 等^[26]的实验结果表明, 同一高度处的气体浓度基本一致。为了简化计算, 模拟过程中只监控了顶部 P1、底部 P2 和中部 P3 三个位置的气体浓度变化。泄漏口位于坐标原点, P1、P2 和 P3 的坐标分别为(0, 0, 2.814)、(1.6165, 0, 0.03)、(1.6165, 0, 1.45)。图 2 给出了采用多相流 Mixture 模型和组分输运模型在三个监控点处气体浓度随充气时间变化与实验数据的对比, 其中湍流模型采用 $k-\varepsilon$ 模型。结果表明, 虽然组分输运模型的模拟结果与实验结果存在一定偏差, 但浓度变化趋势与实验结果一致。而多相流 Mixture 模型的模拟结果与实验结果偏差较大, P1 点处混合气体浓度在短时间内接近于 100%, 远高于实验值, 而 P2、P3 点混合气体的浓度均低于实验值。

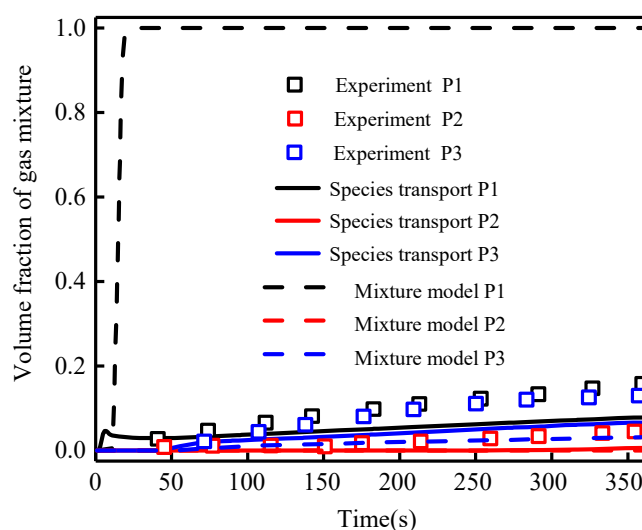


图 2 组分输运模型和多相流 Mixture 模型与实验结果对比

图 3 给出了 350s 时, 在 $y=0$ 的 xz 方向切片上两种模型得到的混合气体浓度分布云图。图 3(a)是组分输运模型的计算结果, 气体注入后迅速向四周扩散, 在注气孔附近存在小范围的高浓度区。图 3(b)是多相流 Mixture 模型的计算结果, 可以看出气体的扩散趋势比图 3(a)弱很多, 气体在到达腔体顶部之前几乎不存在向周围扩散的趋势, 浓度分布与水的射流轨迹类似。以上对比结果表明, 组分输运模型的模拟结果优于多相流 Mixture 模型, 并且组分输运模型更侧重于考虑气体分子布朗运动的引起的宏观扩散效应, 由于氢气和甲烷均匀混合且注入速度相同, 因此多相流 Mixture 模型重点考虑的相间滑移作用在该问题中并没有得以显现。对于低流速、惯性作用较弱的注气过程, 选用组分输运模型比 Mixture 模型更合适。

图 4 给出了在采用组分输运模型时, $k-\varepsilon$ 模型和 LES 模型计算结果与实验值的对比。与 $k-\varepsilon$ 模型不同, LES 模型的计算结果存在明显波动, 与湍流实际情况更相符。可以看出, LES 模型的计算结果与实验结果吻合更好, P2 点处 LES 模型的计算结果与实验值吻合几乎达到完全吻合, P3 点处 LES 模型的计算值与 $k-\varepsilon$ 模型的计算值比较接近, 相较于实验值变化趋势一致, 但整体结果偏小。图 5 为 $y=0$ 的 xz 方向切片上的两种湍流模型计算的混合气体浓度分布云图, 可以看出相比于 $k-\varepsilon$ 模型完全对称的结果, LES 计算结

果中气体浓度分布更加紊乱。

通过以上模拟与实验结果的对比可以看出，对于密闭方腔的氢气和甲烷注气过程，组分输运模型相比于多相流 **Mixture** 模型更加准确，这主要是因为组分输运模型充分考虑了气体之间的传质现象，即扩散效应。由于气体分子之间作用力相比于固体和液体而言要小得多，并且布朗运动更为剧烈，因此这种扩散效应不能被忽略。而多相流 **Mixture** 模型偏重于相间的滑移作用，并没有考虑氢气和甲烷之间的相互扩散，对于可以互溶的两相气体的模拟存在一定偏差。

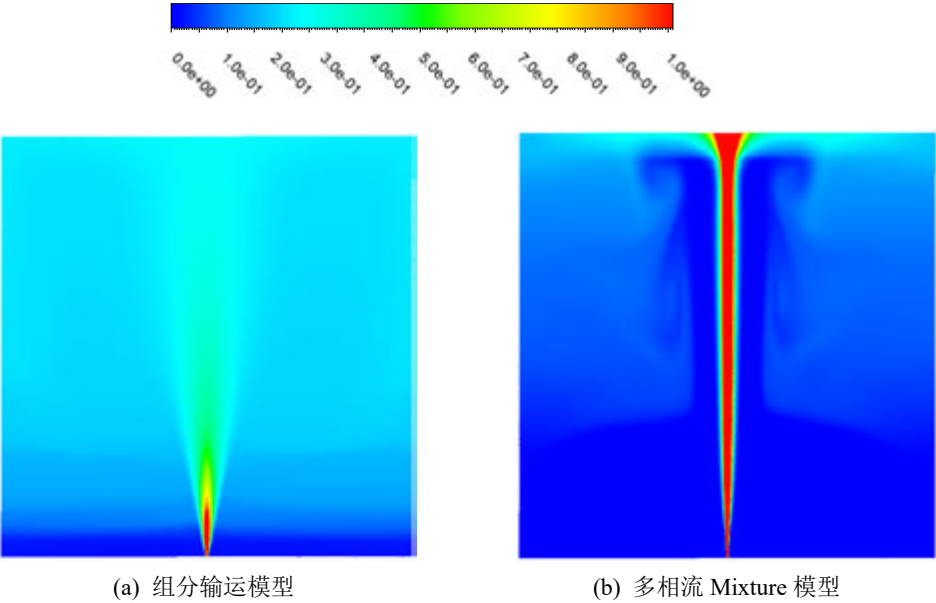


图 3 $t=350s$ 时在 $y=0$ 的 xz 方向切片混合气体浓度分布

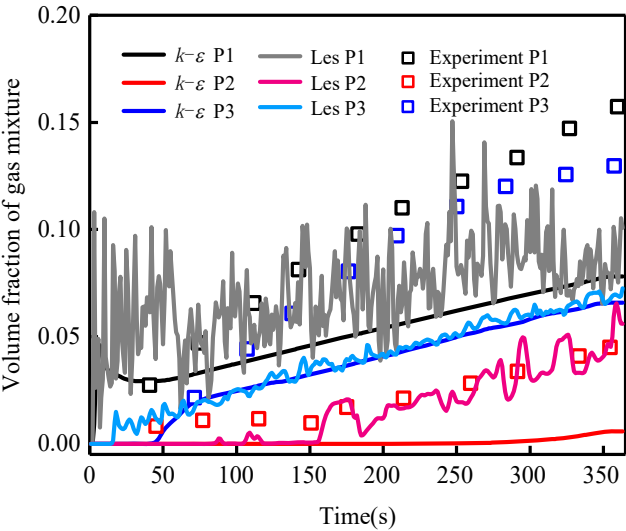


图 4 $k-\varepsilon$ 模型和 LES 模型结果与实验结果对比

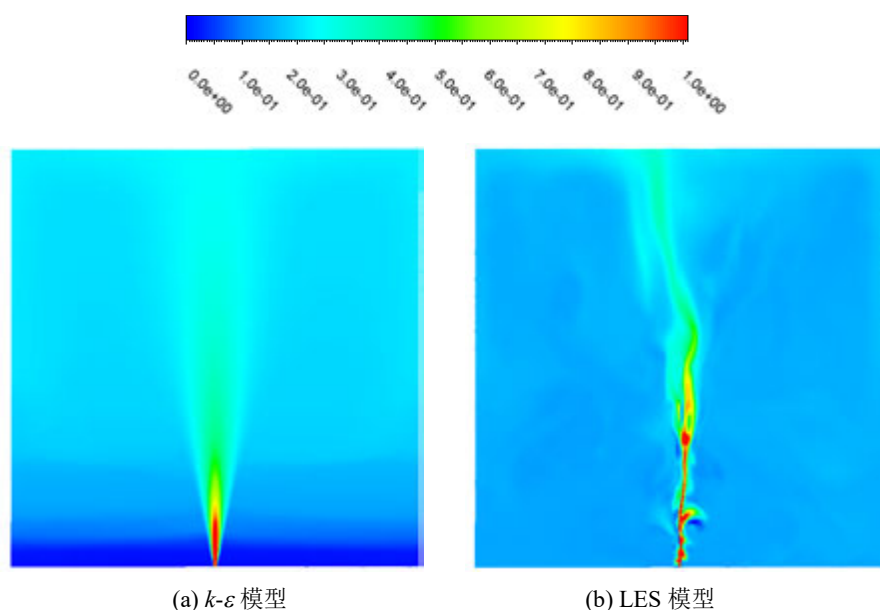


图 5 $k-\varepsilon$ 模型与 LES 模型结果与实验结果对比

2.2 密闭空间内气体充气及静置实验

Punetha 等^[20]对储罐内的注氢过程及停止注氢后气体静置过程进行了模拟和实验研究，考虑到实验安全，采用与氢气性质较为相近的氦气替代氢气进行实验。储罐尺寸为 $0.24\text{m} \times 0.24\text{m} \times 0.97\text{m}$ ，注气孔为孔径 2mm 的圆孔，位于储罐底部中心处。储罐内安装两个氢浓度传感器，以底部中心为原点，两个传感器的坐标分别为 $P_a(0.01, 0.887, 0)$ 和 $P_b(0.06, 0.086, 0)$ 。对实验空间采用结构化网格进行划分，注气孔位置采用 O 型剖分并且周围进行网格加密，几何建模及网格划分如图 6 所示。

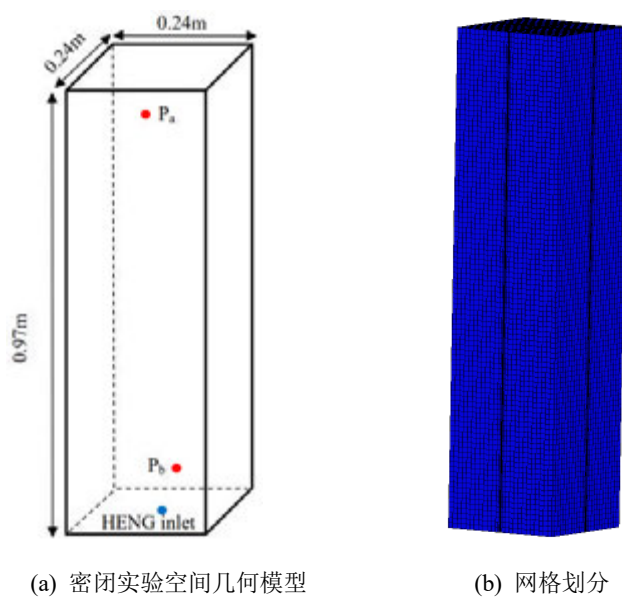


图 6 Punetha 等^[20]实验几何建模及网格划分

实验中注气过程共持续了 373s，并且以较低的流速注入氢气，保证气体的流动处于层流状态。图 7(a)给出了注气过程中组分输运模型和多相流 Mixture 模型模拟得到的监控点 P_a 、 P_b 的浓度随时间的变化与实验数据的对比。可以看出组分输运模型的计算结果相较于实验结果分层趋势更强一些，即 P_a 点浓度的模拟值要高于实验值，而 P_b 点浓度的模拟值则低于实验值，但总体上浓度变化趋势与实验结果一致。多相流 Mixture 模型的计算结果虽然 P_a 点浓度呈现上升的趋势，但 P_b 点浓度始终为 0，这与实验结果不符。从图 7(b)中组分输运模型模拟的不同时刻下的气体浓度分布云图可以看出，气体呈射流状注入储罐内，之后从上到下逐渐扩散。对于多相流 Mixture 模型，气体也存在着在顶部堆积的过程，但其向下扩散非常慢，即使在注气结束时储罐内中下部气体浓度也始终为 0。

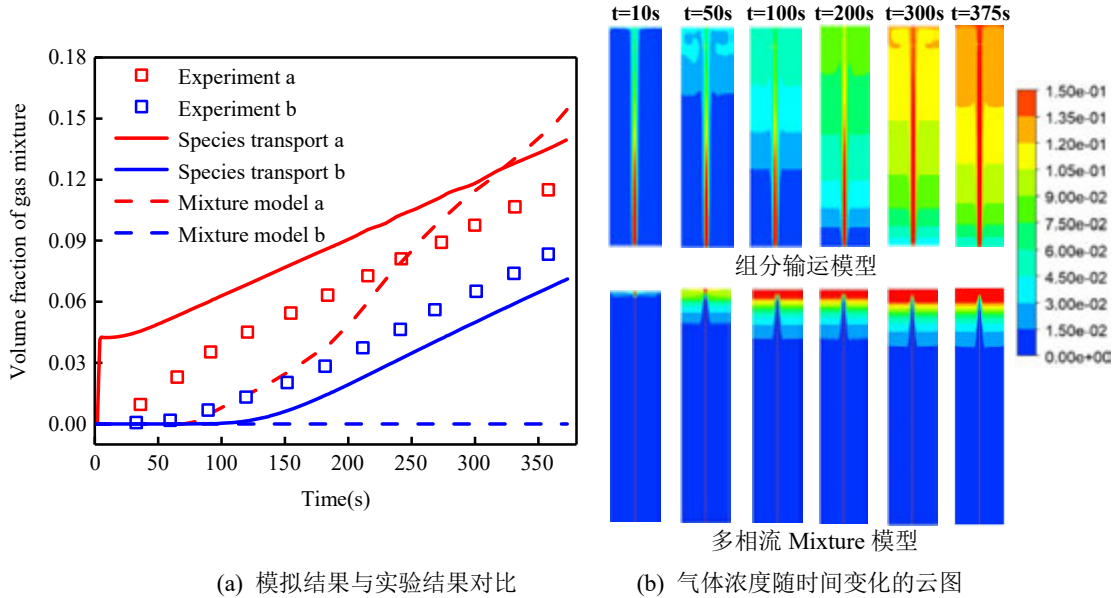


图 7 组分输运模型与多相流 Mixture 模型对 Punetha 等^[20]实验充气过程的模拟结果

图 8(a)给出了停止注气后静置过程中储罐内气体浓度随时间的变化，组分输运模型的模拟结果是 a、b 两点浓度逐渐趋于均一，与实验结果的趋势一致。实验中大约静置 1600s 后 a、b 两点的气体浓度基本一致，但组分输运模型模拟达到平衡的时间要更长，大约需要 9000s。造成上述现象的原因一部分来源于组分输运模型本身，此外实验中所使用的气体浓度传感器也存在一定误差。对于多相流 Mixture 模型的模拟结果，a、b 两点并没有气体浓度逐渐趋于均匀的趋势，在停止注气初期 a 点浓度仍在增大，而 b 点浓度为 0，600s 后 a 点浓度基本保持平衡，从 8(b)中可以看出这种分层现象一直持续，与实验结果不符。

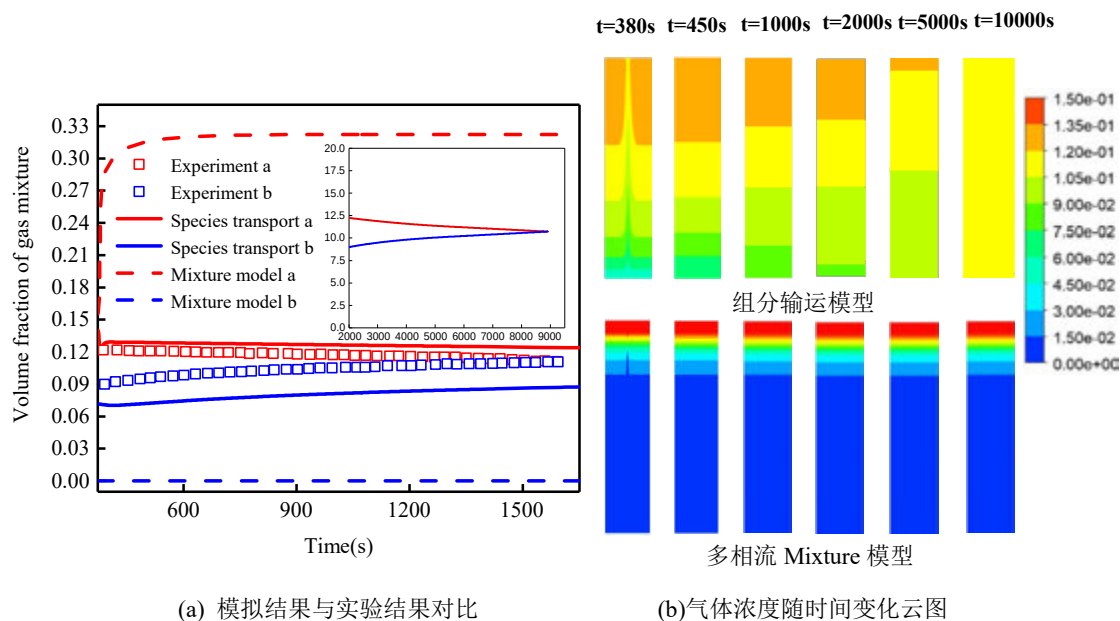


图 8 组分运输模型与多相流 Mixture 模型对 Punetha 等^{错误!未找到引用源。}实验静置过程的模拟结果

3 基于吉布斯自由能的气体静置浓度分布模型

本部分从热力学吉布斯自由能的相关理论入手，对混合气体在密闭空间内静置过程中浓度分布的自发变化进行研究。如图 9 所示，气体 A 和气体 B 处于一个压力温度恒定的密闭容器中，中间用挡板隔开，此时气体处于分层状态。假设在某一时刻将中间的挡板突然抽走，此时气体 A 和气体 B 之间开始相互扩散。

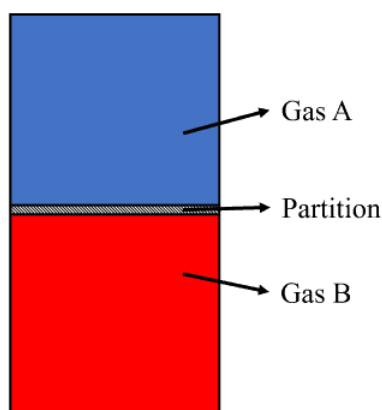


图 9 密闭空间气体 A 和气体 B 分布示意图

扩散过程中混合气体的吉布斯自由能微分变化表达式如下所示

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^N \mu_i dn_i \quad (15)$$

式中, G 为系统的吉布斯自由能, J; S 为系统的熵, J/K; V 为系统体积, m^3 ; μ_i 为混合气体中组分 i 的化学势, J/mol, n_i 为混合气体中组分 i 的物质的量。

假设系统在初始时刻的吉布斯自由能为 G^* , 抽走挡板后系统达到平衡态时的吉布斯自由能为 G^{**} , 由于温度和压力恒定, G^* 和 G^{**} 分别可以表示为

$$G^* = \sum_{i=1}^N \mu_i^* n_i, \quad G^{**} = \sum_{i=1}^N \mu_i^{**} n_i \quad (16)$$

这一过程中系统的吉布斯自由能变化为

$$\Delta G = \sum_{i=1}^N n_i (u_i^{**} - u_i^*) = \sum_{i=1}^N n_i RT \ln c_i = n_{\text{total}} RT \sum_{i=1}^N c_i \ln c_i \quad (17)$$

式中, c_i 为气体组分 i 的偏摩尔浓度。由于系统内仅包含 A 和 B 两种气体, 假设气体 A 的偏摩尔浓度为 c , 则气体 B 的偏摩尔浓度为 $1-c$, 因此可得

$$\Delta G = n_{\text{total}} RT \sum_{i=1}^N c_i \ln c_i = n_{\text{total}} RT [c \ln c + (1-c) \ln (1-c)] \quad (18)$$

假设系统达到平衡态时, 混合气体之间是存在浓度分层的, 为了简化计算, 假设气体 A 的偏摩尔浓度随高度分布是线性的, 满足 $c = kz + a$ 的关系, 其中 k 反应了平衡态时的分层程度, 而 a 反应了气体 A 和气体 B 物质的量的大小关系。忽略水平方向气体浓度的变化, 将该混合过程转化为一维问题, 吉布斯自由能变化量 ΔG 对高度 z 的导数满足以下形式

$$\frac{d(\Delta G)}{dz} = n_{\text{total}} RT \frac{d[c \ln c + (1-c) \ln (1-c)]}{dz} = n_{\text{total}} RT k \ln \frac{kz + a}{1 - kz - a} \quad (19)$$

为方便计算, 假设容器总高度为 1m, 上式进行积分可得

$$\begin{aligned} \Delta G &= \int_0^1 \frac{d(\Delta G)}{dz} dz = n_{\text{total}} RT k \int_0^1 \ln \frac{kz + a}{1 - kz - a} dz \\ &= n_{\text{total}} RT [(k+a) \ln(k+a) - (k+a-1) \ln(-k-a+1) - [a \ln a + (a-1) \ln(1-a)]] \end{aligned} \quad (20)$$

由式(20)可知, 系统内吉布斯自由能的变化量是关于 k 和 a 的二元函数。由于在等温、等压的封闭体系内, 在不做非体积功的前提下, 任何自发反应总是朝着吉布斯自由能 G 减小的方向进行, 当吉布斯自由能 G 达到最小值时, 反应达到平衡, 此时吉布斯自由能变化量 ΔG 取得极小值。为了确定此时的浓度分布, 对式(20)的二元函数进行求极值计算可得

$$\begin{cases} \frac{\partial(\Delta G)}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial(\Delta G)}{\partial k} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \ln \frac{a+k}{1-a-k} = 0 \\ \ln \frac{(a+k)(1-a)}{a(1-a-k)} = 0 \end{cases} \quad (21)$$

上式解得

$$k=0, \quad a=0.5 \quad (22)$$

即吉布斯自由能最小时, 气体在 z 方向的偏摩尔浓度变化应满足 $a=0.5$ 、 $k=0$, 说明系统达到平衡时浓度梯度为 0, 不存在分层现象, 而 $a=0.5$ 说明初始时刻气体 A、B 等物

质的量混合时吉布斯自由能减小量最大。以上推导说明, 气体在恒温恒压无外部因素的干扰下, 其浓度变化会自发朝着掺混均匀的方向进行, 平衡态时整个系统的浓度是均匀的。这一结论与组分输运模型的模拟结果相吻合, 而与多相流 Mixture 模型的模拟结果不符。因此在计算掺氢天然气的掺混分层问题时, 推荐采用组分输运模型。

4 结 论

本文研究了掺氢天然气在密闭空间中是否存在氢气与天然气之分层现象。通过对比文献实验结果, 分析了目前两种常用的研究掺氢天然气分层的组分输运模型与多相流 Mixture 模型, 并采用热力学中吉布斯自由能相关理论, 对密闭空间内二元混合气体的浓度变化趋势进行了分析。通过以上研究, 本文的主要结论如下。

(1) 密闭空间注气过程的模拟结果表明, 组分输运模型重点考虑了气体之间的扩散效应, 注气口附近存在小范围的高浓度区, 之后逐渐向空间中扩散, 而多相流 Mixture 模型的模拟结果表明高浓度区集中在射流方向上。与实验结果对比表明, 组分输运模型的结果比多相流 Mixture 模型与实验结果吻合更好。同时对比了 $k-\varepsilon$ 与 LES 两种湍流模型, 结果表明 LES 模型的计算精度优于 $k-\varepsilon$ 模型。

(2) 密闭空间混合气体静置过程的模拟结果表明, 组分输运模型中混合气体会随着静置时间的增加而逐渐趋于均匀, 而多相流 Mixture 模型中混合气体随着静置时间的增加气体分层现象愈发明显, 两种模型呈现完全相反的趋势。通过与实验数据对比, 组分输运模型的模拟结果更接近实验结果。

(3) 从热力学吉布斯自由能相关理论入手, 证明了在恒温、恒压的密闭系统中, 两种气体混合后静置达到平衡态时, 系统内气体分布的浓度梯度为 0, 即气体不存在分层, 该结论与组分输运模型和实验结果一致。

以上结论表明, 掺氢天然气分层现象仅可能出现在气体混合的初期, 对于已经充分掺混后的氢气和天然气, 混合气体不会自发产生分层。

参考文献

- [1]. Department of energy hydrogen program plan. U.S Department of Energy, 2020.
- [2]. Lagioia G, Spinelli MP, Amicarelli V. Blue and green hydrogen energy to meet European Union decarbonisation objectives. An overview of perspectives and the current state of affairs. Int J Hydrogen Energ 2023;48(4):1304-1322.
- [3]. Li YF, Suryadi B, Yan JJ, et al. A strategic roadmap for ASEAN to develop hydrogen energy: Economic prospects and carbon emission reduction. Int J Hydrogen Energ 2023; 48(30): 11113-11130.
- [4]. Liu B, Liu SX, Guo SS, et al. Economic study of a large-scale renewable hydrogen application utilizing surplus renewable energy and natural gas pipeline transportation in China. Int J Hydrogen Energ 2020; 45(3): 1385-1398.
- [5]. Erdener BC, Sergi B, Guerra OJ, et al. A review of technical and regulatory limits for

- hydrogen blending in natural gas pipelines. *Int J Hydrogen Energ* 2023; 48(14):5595-5617.
- [6]. Pluvinaige G, Capelle J, Meliani MH. Pipe networks transporting hydrogen pure or blended with natural gas, design and maintenance. *Eng Fail Anal.* 2019; 106:104164.
- [7]. Pellegrini M, Guzzini A, Saccani C. A Preliminary Assessment of the Potential of Low Percentage Green Hydrogen Blending in the Italian Natural Gas Network. *Energies*, 2020; 13(21):5570.
- [8]. Olfa T, Christine M, David F, et al. Hydrogen market penetration feasibility assessment: Mobility and natural gas markets in the US, Europe, China and Japan. *Int J Hydrogen Energ* 2019; 44(31): 16048-16068.
- [9]. Mahajan D, Tan K, Venkatesh T, et al. Hydrogen Blending in Gas Pipeline Networks—A Review. *Int J Hydrogen Energ* 2022; 15(10): 3582.
- [10]. Ohaeri E, Eduok U, Szpunar J. Hydrogen related degradation in pipeline steel: A review. *Int J Hydrogen Energ* 2018; 44(31):14584-14617.
- [11]. Zhao Y, McDonell V, Samuelsen S. Influence of hydrogen addition to pipeline natural gas on the combustion performance of a cooktop burner. *Int J Hydrogen Energ* 2019; 44(23):12239-12253.
- [12]. Zhao Y, McDonell V, Samuelsen S. Experimental assessment of the combustion performance of an oven burner operated on pipeline natural gas mixed with hydrogen. *Int J Hydrogen Energ* 2019; 44(47):26049-26062.
- [13]. Meng B, Gu CH, Zhang L, et al. Hydrogen effects on X80 pipeline steel in high-pressure natural gas/hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energ* 2017; 42(11):7404-7412.
- [14]. Zhou CS, Ye BG, Song YY, et al. Effects of internal hydrogen and surface-absorbed hydrogen on the hydrogen embrittlement of X80 pipeline steel. *Int J Hydrogen Energ* 2019; 44(40):22547-22558.
- [15]. Su Y, Li JF, Guo WY, et al. Prediction of Mixing Uniformity of Hydrogen Injection in Natural Gas Pipeline Based on a Deep Learning Model. *Energies* 2022;15(22):8694.
- [16]. Eames I, Austin M, Wojcik A, et al. Injection of gaseous hydrogen into a natural gas pipeline. *Int J Hydrogen Energ* 2022;47:25745–25754.
- [17]. Kong MM, Feng SM, Xia Q, et al. Injection of gaseous hydrogen into a natural gas pipeline. *Sustainability*, 2022;13(8):4225.
- [18]. 苏越, 李敬法, 宇波等. 氢气和天然气在静态混合器中的掺混模拟. *天然气工业*, 2023,43(3):113-122.
- Su Y, Li JF, Yu B, et al. Simulation study on the mixing of hydrogen and natural gas in static mixers. *Natural Gas Industry* 2023; 43(3): 113-122.
- [19]. 吴嫦. 天然气掺混氢气使用的可行性研究:[硕士论文]. 重庆, 重庆大学, 2018.
- Wu C. Feasibility study on Blending hydrogen into Natural gas Distribution Networks[B.S. Thesis]. Chongqing: Chongqing University; 2018.

- [20]. Punetha M, Choudhary A, Khandekar S. Stratification and mixing dynamics of helium in an air filled confined enclosure. *Int J Hydrogen Energ* 2018;43(42):19792-19809.
- [21]. 任少云. 密闭空间内气体混合及可燃性规律研究: [博士论文]. 北京, 北京理工大学, 2016.
- Ren SY. Gas mixing process and flammability in confined space[Ph.D. Thesis]. Beijing: Beijing Institute of Technology; 2016.
- [22]. Liu CW, Pei YB, Cui ZX, et al. Study on the stratification of the blended gas in the pipeline with hydrogen into natural gas. *Int J Hydrogen Energ* 2023; 48:5186-5196.
- [23]. 王浩, 亢燕铭, 钟珂, 等. Mixture 和 Species 模型模拟低速通风管道内气体混合时的差异分析. *东华大学学报(自然科学版)*. 2022, 48(2):100-104.
- Wang H, Kang YM, Zhong K, et al. Analysis of difference between Mixture and Species models simulating gas mixing in low-speed ventilation ducts. *Journal of Donghua university (Natural Science)*. 2022; 48(2):100-104.
- [24]. FLUENT 6.3 User's Guide, 2006. FLUENT Inc.
- [25]. Launder B, Spalding D. *Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, Waltham. 1972.
- [26]. Marangon A, Carcassi MN. Hydrogen-methane mixtures: Dispersion and stratification studies. *Int. J. Hydrogen Energ*. 2014; 39: 6160-6168.

不同燃料组分下 DIR-SOFC 多物理特性 数值研究

陈伟文, 屈治国, 魏国盟, 张剑飞*

(热流科学与工程教育部重点实验室, 西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049)

(Tel: 029-88960038, Email: zhangjf@mail.xjtu.edu.cn)

摘要: 近年来, 固体氧化物燃料电池 (SOFC) 因其电效率高和燃料适应性广等优点而被广泛研究。然而部分 SOFC 模型对热辐射的考虑不充分, 模型准确率有提高的空间; 甲烷、氨气等燃料对直接内重整固体氧化物燃料电池 (DIR-SOFC) 性能影响的机理有待进一步研究。为解决上述问题, 本文建立了考虑热辐射的不同燃料组分下 DIR-SOFC 单流道三维模型, 探究了甲烷和氨气体积分数对电池性能的影响, 通过分析温度场、浓度场和化学反应速率, 解释了不同燃料组分对电流密度影响的机理。结果表明, 在电压 0.7 V、进口温度 1173 K、阳极进口速度 0.2 m/s、阴极进口速度 0.8 m/s 条件下, 与纯氢作为燃料的 SOFC 相比, 在氢气中掺入甲烷能够在提升平均电流密度的同时降低电池整体温度, 在氢气中掺入氨气能够在牺牲少量平均电流密度的情况下提升电池温度的均匀性; 当掺入 20% 甲烷时, 靠近电池出口处的局部电流密度增大, 当掺入 20% 氨气时, 靠近入口处的局部电流密度增大, 靠近出口处的局部电流密度减小。

关键词: 燃料, 直接内重整, 固体氧化物燃料电池, 数值研究

0 前言

固体氧化物燃料电池 (SOFC) 是一种在 500-1000°C 下工作的高温燃料电池。SOFC 在所有的燃料电池中电效率最高, 并且燃料适应性广, 氢气、天然气、煤气、液化石油气等气体以及甲醇、乙醇、氨水等液体都可以作为燃料。

燃料通常有三种利用方式。第一种是通过外部重整将燃料重整为氢气或一氧化碳后通入 SOFC, 第二种是将燃料通入 SOFC 阳极后直接发生电化学反应, 第三种是将燃料与重整氧化剂一起引入 SOFC 的阳极, 利用阳极中的镍作为催化剂, 实现内部重整, 这被称为直接内重整固体氧化燃料电池 (DIR-SOFC)。由于 SOFC 的工作温度较高, 因此普遍认为 DIR-SOFC 有助于提高能量利用率并降低成本。

相同电压下的电流密度、相同电流密度下的电压或电功率是评价燃料电池性能的重要指标, 影响电池性能的原因包括温度、反应物浓度、化学反应速率等。Luo Y 等^[1]通过实验和数值仿真发现, 以纯氨为燃料的 SOFC 的功率略低于以纯氢为燃料的 SOFC, 并确定了在氢气中掺入氨气的最佳比例, 以匹配氨的分解速率与电化学氢的消耗速率。

基金项目: 国家重点研发计划项目 (编号: 2022YFB4003600)

通讯作者: 张剑飞, 教授, 主要研究方向: 热质输运过程调控及其数值预测

Wu Y 等^[2]建立了以部分预重整甲烷为燃料的 SOFC 三维模型, 研究发现甲烷蒸汽重整能使气相组成、电流密度和温度在电池平面内更均匀分布。Ramírez-Minguela J J 等^[3]考虑了四种不同沼气成分的瓦楞式 SOFC, 计算了不同沼气组成的熵产率的局部贡献和全局贡献。宋彪^[4]研究了在稳态和瞬态工况下通入混合煤气、水煤气、沼气和天然气时 SOFC 的内部温度、电流密度和反应速率。阮鹏等^[5]总结了以天然气和水蒸气为燃料的 SOFC 系统中常用的重整器配置方式、重整参数以及重整燃料利用方式。魏胜利等^[6]对各种燃料 SOFC 进行了优缺点的总结, 并指出针对不同动力系统和燃料, 需要设计不同的系统结构。

虽然对 DIR-SOFC 模型的研究已经取得了很大的进展, 但是对热辐射的考虑不够充分, 模型准确率有提升的空间, 并且关于多元燃料组分对电池性能影响有待进一步研究。

本研究基于 Fluent 软件, 建立了考虑热辐射的多元燃料 DIR-SOFC 单流道三维模型。通过参数化分析, 分析了甲烷和氨气体积分数对 SOFC 平均电流密度的影响, 详细阐述了甲烷和氨气对 SOFC 平均电流密度和局部电流密度影响的机理。

1 DIR-SOFC 数值计算模型

1.1 SOFC 几何模型

SOFC 单电池的结构如图 1 所示。SOFC 单电池由阳极、阴极、电解质和集流板组成。阳极材料一般由掺钇的氧化锆(YSZ)和金属镍制成。阴极材料一般为掺杂锰酸镧的合金陶瓷。允许氧离子通过的电解质是由三氧化铈稳定的氧化锆制成的。图 1 中的虚线框为 SOFC 单通道结构。

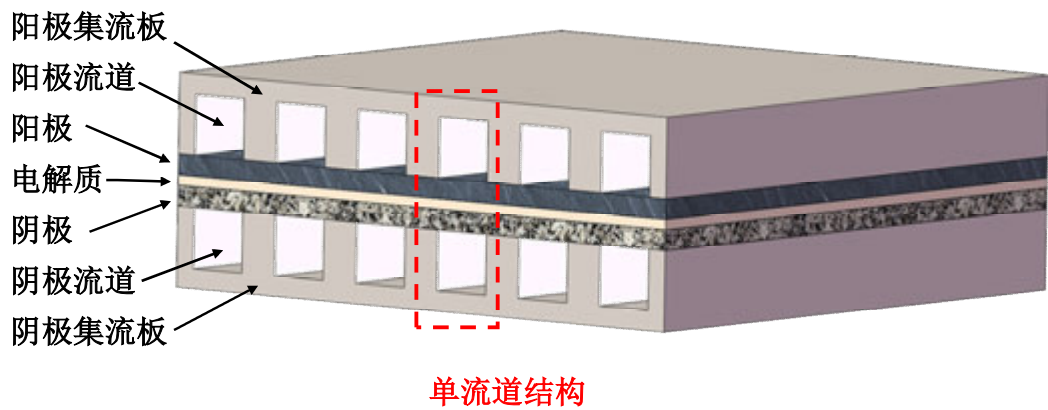


图 1 SOFC 单电池结构

Fig.1 SOFC single cell structure

1.2 SOFC 工作原理

图 2 为 SOFC 的工作原理。在 SOFC 的阴极, 氧气得到外部电子变为氧离子, 氧离子穿过电解质层到达阳极。在阳极, 氢气、一氧化碳与氧离子相结合, 生成水、二氧化碳并释放电子, 电子再次通过外部电路回到阴极, 完成电化学反应过程。

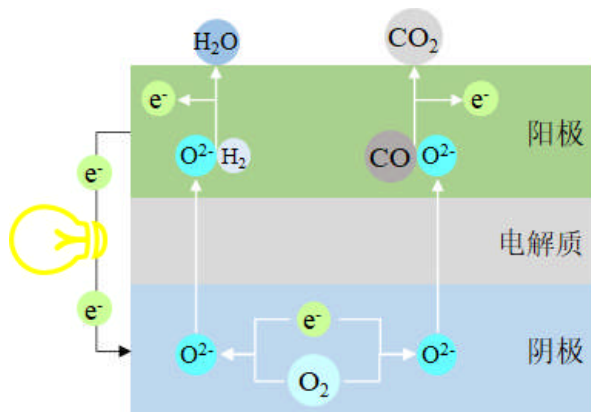


图 2 SOFC 工作原理

Fig. 2 SOFC working principle

1.3 SOFC 数值模型

为了更精确地计算 SOFC 多物理场，根据文献[7]，建立了三维板式单流道 SOFC 物理模型，如图 3 所示。其中，阳极厚度为 0.2 mm，阴极厚度为 0.1 mm，流道宽度和高度为 3 mm，流道长度为 30 mm，集流板的厚度为 0.1 mm，电解质处理为一个无厚度的面。模型原点位于进口所在面与电解质面交线的中点，如图 3 中红色的点所示。

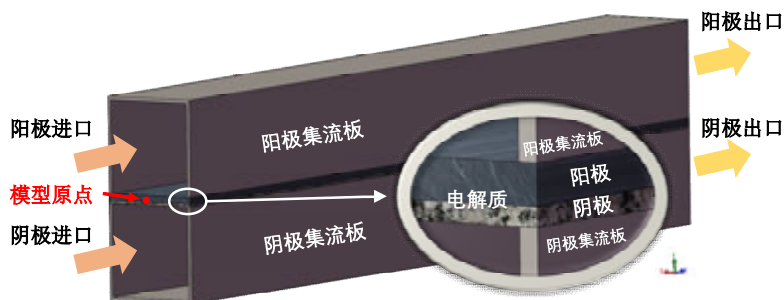


图 3 SOFC 几何模型与物理模型

Fig. 3 SOFC geometric models and physical models

1.4 模型假设

- (1) 阳极只考虑甲烷蒸汽重整反应、水汽转移反应和氨分解反应三种化学反应。
- (2) 以上三种反应均视为体积反应，不考虑其逆反应。
- (3) SOFC 处于稳态运行。
- (4) 所有的气体都被认为是理想气体。
- (5) 空气成分为 79% N_2 和 21% O_2 。
- (6) 气体流动状态为层流。
- (7) 忽略固体材料的变形。

1.5 控制方程

SOFC 内部的电化学反应、传热、传质等过程用表 1 中的守恒方程表示。

表 1 控制方程
Table.1 Governing equation

方程名称	数学描述
质量守恒	$\nabla \cdot (\varepsilon \rho_j v_j) = S_m$
动量守恒	$\nabla(\varepsilon \rho_{mix} v) = -\varepsilon \nabla p + \nabla(\varepsilon \mu_{mix} \nabla v) + S_u$
能量守恒	$\nabla(\rho_j c_{p,eff} v T) = \nabla(k_{eff} \nabla T - \sum_1^N J_j h_j - q_{rad}) + S_T$
电荷守恒	$-\nabla(\sigma_{eff}^{ele} \nabla \Phi_{ele}) = S_{ele}$
离子守恒	$-\nabla(\sigma_{eff}^{ion} \nabla \Phi_{ion}) = S_{ion}$
化学反应和扩散方程	$\nabla \cdot (\rho_j v_j \omega_j) = \nabla \cdot (\rho_j \omega_j \sum_{j \neq k}^N D_{eff}^{jk} \nabla \chi_j) + R_j + S_j$

其中热辐射使用 DO 模型进行计算，其表达式如下

$$\nabla \cdot (I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \mathbf{s}) + (a + \sigma_s) I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') \Phi(\mathbf{s}, \mathbf{s}') d\Omega' \quad (1)$$

DO 模型考虑了气体的吸收、发射、散射对热辐射的影响，能够计算固体与固体、固体与气体、气体与气体之间的辐射换热。热辐射相关参数见文献[8]。

1.6 边界条件

阳极进口速度为 0.2 m s^{-1} ，阴极进口速度为 0.8 m s^{-1} ，阴极和阳极进口温度均为 1173 K ，阴极和阳极出口压强均为 0 （表压）。SOFC 阴极和阳极和集流板的外边界采用绝热边界条件，其他面均采用耦合边界条件。阳极集流板上表面电势为 0 ，阴极集流板下表面为 SOFC 工作电压值 0.7 V 。

2 计算结果与讨论

2.1 模型验证

为了避免网格数对结果的干扰，根据文献[7]的参数，以电解质面上的平均电流密度作为网格独立性验证的参考值，进行了网格无关性验证，结果如图 4 所示。由图 4 可以看出，网格数从 56 万增加到 178 万，平均电流密度从 1454.9 A m^{-2} 增加到 1455.1 A m^{-2} ，相对变化率为 0.014% 。考虑到数值模拟的精度和计算效率，本文选取 56 万个网格进行计算。

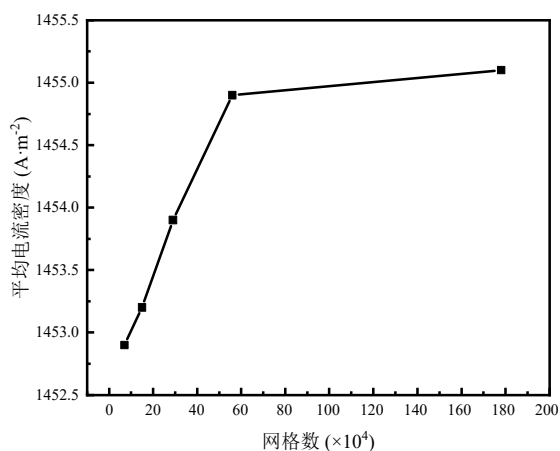


图 4 网格无关性验证

Fig.4 Grid independence verification

为了验证本文建立的 SOFC 模型的准确性和可靠性,利用本文建立的模型与文献[1]和文献[7]的实验数据进行对比,仿真与实验的极化曲线如图 5 所示。与以甲烷为燃料的实验数据相比,最大相对误差为 4.87%。与以氨气为燃料的实验数据相比,最大相对误差为-5.71%,满足数值模型验证的要求。由图 5 可以看出,当电流密度较低时,模型预测结果与实验结果误差较大。误差主要由低电流密度段的活化损失引起。在数值仿真中,通过定义 SOFC 电化学模型中的交换电流密度和其他参数来描述活化损失,这些参数在仿真中是固定的值。但在实验中可能变化较大,因此低电流密度下仿真结果的相对误差略高于高电流密度下的相对误差。

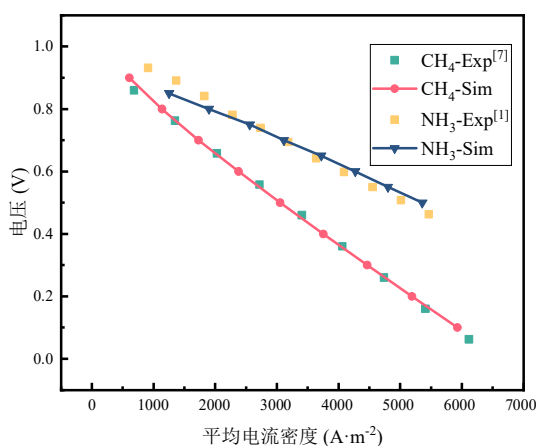


图 5 模型验证

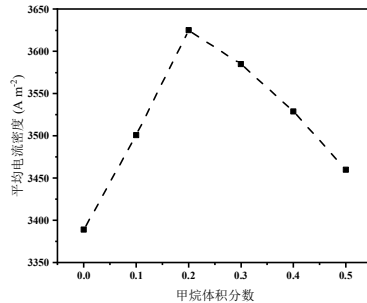
Fig.5 Model verification

2.2 甲烷和氨气体积分数对 SOFC 平均电流密度和温度的影响

为了研究甲烷和氨气体积分数对 SOFC 平均电流密度和温度的影响，采取参数化研究的方法，在氢气中添加不同体积分数的甲烷或氨气组成新的混合燃料，分别选取 6 组不同的甲烷-氢气、氨气-氢气的体积分数组合进行研究，甲烷或氨气的体积分数为 0-0.5，每组间隔 0.1。平均电流密度指的是单位面积内通过电池的电流，它代表了对外输出的电流大小，可以以电解质面（ $y=0$ ）上的平均电流密度值为参考值；对于温度，通过考察流道宽度方向中心面（ $x=0$ ）上集流板、阳极、阴极和流道的最高温度、最低温度以及两者之间的温差。

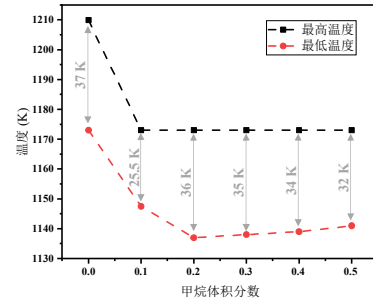
图 6（a）所示为甲烷体积分数对 SOFC 平均电流密度的影响。当甲烷体积分数小于 0.2 时，随着甲烷体积分数增加，平均电流密度不断升高；当甲烷体积分数为 0.2-0.5 时，随着甲烷体积分数增加，平均电流密度不断降低，但是仍高于纯氢气作为燃料时的平均电流密度。这说明当甲烷体积分数为 0-0.5 时，掺入甲烷能够提升平均电流密度。

图 6（b）为甲烷体积分数对 SOFC 温度的影响。当燃料为纯氢气时，最高温度出现在阳极流道出口处，最低温度出现在阴极和阳极流道进口处，进出口温差约为 37 K。当燃料中含有甲烷时，最高温度和最低温度都比纯氢时的低，最高温度出现在阴极和阳极流道进口处，最低温度出现在阳极流道出口处，当甲烷体积分数为 0.1 时，进出口温差为 25.5 K，当甲烷体积分数为 0.2-0.5 时，进出口温差为 32-36 K，与纯氢气为燃料时的进出口温差相近，这说明掺入一定量的甲烷能够降低电池整体温度而对电池温度均匀性影响不大。



(a) 平均电流密度随甲烷体积分数变化

(a) The average current density varies with methane volume fraction



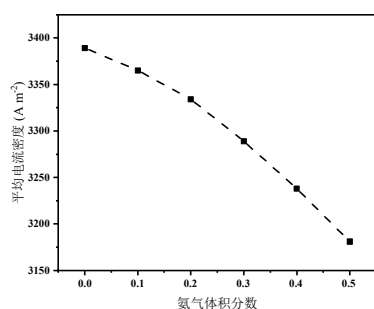
(b) 温度随甲烷体积分数变化

(b) The temperature varies with methane volume fraction

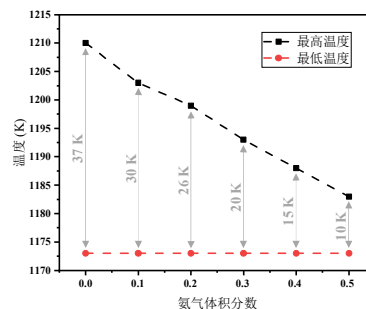
图 6 甲烷体积分数对 SOFC 性能影响

Fig.6 Effect of methane volume fraction on SOFC properties

如图 7（a）所示为氨气体积分数对 SOFC 平均电流密度的影响，当氨气体积分数为 0-0.5 时，随着氨气体积分数的增加，平均电流密度逐渐下降。如图 7（b）所示为氨气体积分数对 SOFC 温度的影响，随着氨气体积分数的增加，最高温度出现在阳极流道出口并且逐渐下降，最低温度出现在阴极和阳极流道进口且保持不变，进出口温差逐渐减小。说明当氨气体积分数为 0-0.5 时，掺入氨气会使平均电流密度有所下降，但是能够减小进出口温差，提升电池温度的均匀性。



(a) 电流密度随氨气体积分数变化



(b) 温度随氨气体积分数变化

(a) The current density varies with the volume fraction of ammonia (b) The temperature varies with the volume fraction of ammonia

图 7 氨气体积分数对 SOFC 性能影响

Fig.7 Effect of ammonia volume fraction on SOFC performance

2.3 甲烷和氨气体积分数对 SOFC 电流密度影响的机理分析

SOFC 涉及传热、传质、流动、导电、化学反应等多个场耦合，本节从温度场、浓度场和化学反应速率的角度，在 3 种典型燃料组分下，对平均电流密度和局部电流密度的影响机理进行分析。3 种典型燃料组分如下：组分 1 中氢气体积分数为 1，其代表实验室中常见的燃料组分；由图 6 (a) 可知，当氢气和甲烷的体积分数分别为 0.8 和 0.2 时平均电流密度最大，因此选取该组分作为典型组分；为了和组分 2 进行对照，组分 3 选取氢气和氨气的体积分数分别为 0.8 和 0.2。

对电流密度影响机理研究需要将电流密度分布、温度分布、浓度分布、化学反应速率变化进行协同分析。图 8 为电解质层 ($y=0$) 的电流密度分布图，图 9 为流道宽度方向中心面 ($x=0$) 温度分布图。由于化学反应均在阳极内发生，因此绘制了沿流动方向阳极中心线上 ($x=0$ $y=0.1$) 的物质浓度变化图和化学反应速率变化图，如图 10 和图 11 所示。

由图 8 (a) 和图 8 (b) 可知，与组分 1 相比，组分 2 的平均电流密度提高了 7%。一方面，从图 9 (b) 中可知，沿着气体流动方向电池温度下降约 36 K，说明该组分下甲烷蒸汽重整反应 (MSR) 的吸热量大于电化学反应和水汽转移反应 (WGS) 的放热量，这会造成电解质中氧离子传输速率、集流板中电子传输速率以及气体扩散能力的降低。另一方面，由图 10 (a) 可知，沿着气体流动方向，氢气浓度不断升高，说明电化学反应速率达到最大限度。其原因是同等体积下甲烷分解产生的氢气大于纯氢气的体积，氢气浓度增大，从而使平均电流密度上升。综上所述，掺入 20% 体积分数的甲烷，氢气浓度增大对平均电流密度提高起了主导作用，大于温度降低的负面影响。

对比图 8 (a) 与图 8 (b)，组分 2 靠近出口处的局部电流密度大于组分 1，关键原因在于低浓度的水蒸气。虽然从平均电流密度角度看电化学反应速率达到最大限度，即水蒸气生成速率已达到最大，但是阳极中水蒸气浓度接近于 10^{-7} 数量级 (未绘制在图 10 (b) 中)，说明电化学反应生成的水蒸气不足以提供给 MSR 和 WGS 所需的水蒸气。

MSR 速率的阿伦尼乌斯公式为

$$k = A \times T^b \times \exp\left(\frac{-Ea}{RT}\right) \times c_{CH_4}^\alpha \times c_{H_2O}^\beta \quad (2)$$

式中, k 为化学反应速率, $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$, A 为指前因子, T 为温度, K, b 为温度指数, Ea 为活化能, J mol^{-1} , R 为气体常数, $\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$, c 为浓度, mol m^{-3} , α 和 β 为浓度指数, 分别取 0.85 和 -0.35^[9]。

根据阿伦尼乌斯公式可知, 虽然温度降低和甲烷浓度下降都不利于 MSR 速率的提升, 但是结合图 11 (a) 可知, MSR 速率依然不断上升。这是因为水蒸气浓度与 MSR 速率负相关, 低浓度水蒸气加快了甲烷重整产生氢气的速率, 提高了局部氢气浓度, 因此组分 2 靠近出口处的局部电流密度高于组分 1。

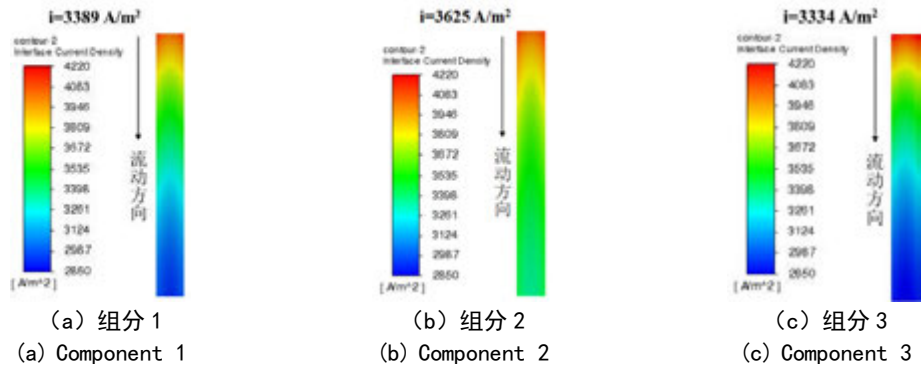


图 8 不同组分下 SOFC 电解质层电流密度云图

Fig.8 Current density cloud image of SOFC electrolyte layer with different components

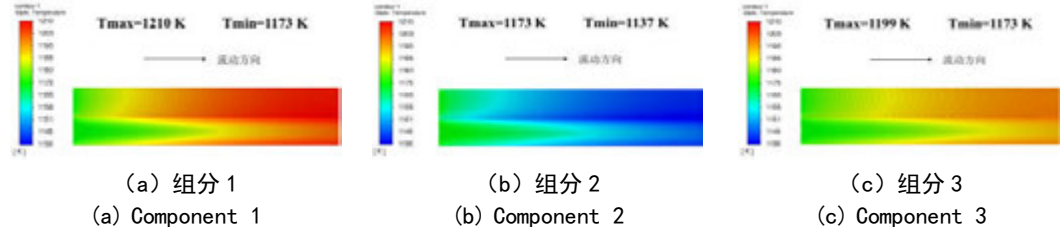


图 9 不同组分下 SOFC 流道宽度方向中心面温度云图

Fig.9 Temperature cloud image of SOFC channel width direction under different components

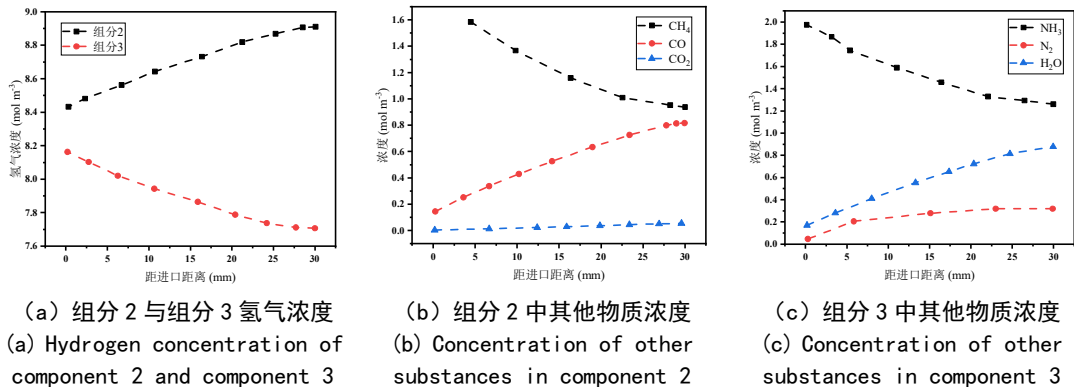


图 10 不同组分下 SOFC 沿流动方向阳极中心线上的物质浓度

Fig.10 Substance concentration of SOFC along the anode center line in different components

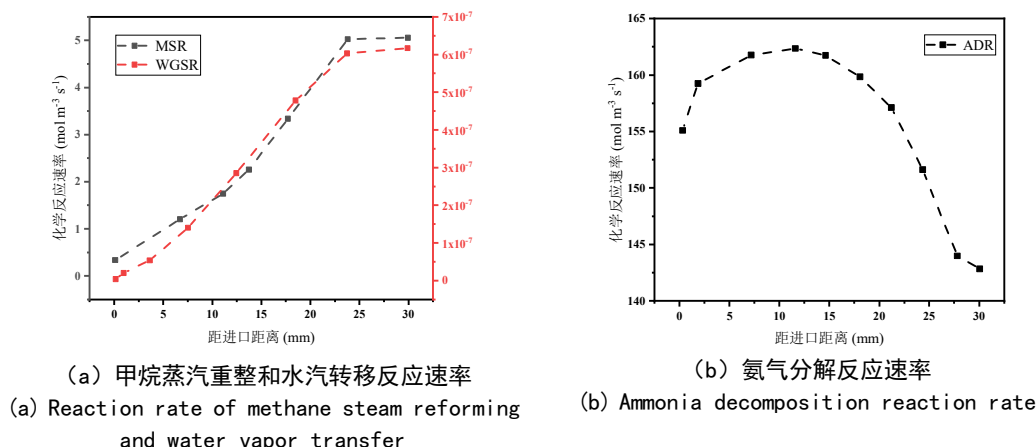


图 11 不同组分下 SOFC 阳极中心面化学反应速率

Fig.11 Chemical reaction rate of SOFC anode center surface with different components

由图 8 (a) 和图 8 (c) 可知, 与组分 1 相比, 组分 3 的平均电流密度降低了 1.6%。由图 9 (a) 和图 9 (c) 可知, 组分 3 的温度分布与组分 1 一致, 只是最高温度降低了 11 K, 这有利于电池整体温度均匀性, 但是降低了离子、电子输送速率和气体扩散能力, 从而减小了平均电流密度。由图 10 (a) 可知, 氢气浓度不断下降, 说明电化学反应速率未达到最大极限。随着反应进行, 氢气浓度下降, 电流密度不断减小。因此从温度和浓度角度看, 两者都使平均电流密度减小。

对比图 8 (a) 和图 8 (c), 组分 3 靠近进口处的局部电流密度高于组分 1, 而靠近出口处的局部电流密度低于组分 1, 这与氨气浓度、温度和氨气分解反应 (ADR) 速率有关。由图 10 (c) 和图 11 (b) 可知, 距进口 0-10 mm 处的氨气浓度高, 氨气分解速率不断上升, 根据图 9 (c), 电池温度缓慢上升, 因此靠近阳极进口处的局部电流密度大于组分 1。距进口 10 mm 后, 组分 3 局部电流密度衰减很快, 主要原因在于沿着气体流动方向氨气浓度下降, ADR 速率下降。

3 结 论

本文建立了考虑热辐射的多元燃料直接内重整固体氧化燃料电池三维模型, 模型耦合了传热传质、电荷离子传递、动量传递和化学反应动力学, 通过实验验证了该模型具有一定的可靠性。通过综合分析温度场、浓度场和化学反应速率, 解释了在电压 0.7 V、进口温度 1173 K、阳极入口速度 0.2 m/s、阴极入口速度 0.8 m/s 条件下, 在氢气中掺入甲烷或氨气对平均电流密度和局部电流密度影响的机理。主要研究结果如下:

(1) 掺入甲烷体积分数小于 20% 时, 平均电流密度随甲烷体积分数的增大而增大, 氢气浓度的增加为主导因素; 掺入甲烷体积分数为 20%-50% 时, 平均电流密度随甲烷体积分数的增加而减小, 温度降低造成的电子、离子传输速率降低为主导因素。

(2) 平均电流密度随氨气体积分数的增大而减小, 原因为温度降低和氢气浓度降低的共同作用。

(3) 掺入甲烷能够提升平均电流密度的同时降低电池整体温度, 掺入氨气能够在

牺牲少量平均电流密度的同时提升电池温度的均匀性。

(4)相较于纯氢气为燃料的 SOFC, 对于氢气中掺入 20%体积分数甲烷的混合燃料, 低浓度水蒸气是使靠近出口处的局部电流密度较大的原因; 对于氢气中掺入 20%体积分数氨气的混合燃料, 靠近入口处的局部电流密度较大, 因为靠近入口处氨气浓度大, 氨气分解速率快, 使局部氢气浓度很大, 靠近出口处局部电流密度下降较小, 因为氨气浓度下降快, 氨气分解速率减缓。

本文所建立的模型考虑了热辐射的影响, 提升了模型的预测精度, 所揭示的掺入其他燃料对电流密度影响机理对提升电池性能及电池热管理有重要意义。

参考文献

- [1] Luo Y, Liao S, Chen S, et al. Optimized Coupling of Ammonia Decomposition and Electrochemical Oxidation in A Tubular Direct Ammonia Solid Oxide Fuel Cell for High-Efficiency Power Generation[J]. Applied Energy, 2022, 307: 118158.
- [2] Wu Y, Shi Y, Cai N, et al. Thermal Modeling and Management of Solid Oxide Fuel Cells Operating with Internally Reformed Methane[J]. Journal of Thermal Science, 2018, 27(3): 203-212.
- [3] Ramírez-Minguela J J, Rangel-Hernández V H, Alfaro-Ayala J A, et al. Energy and Entropy Study of A SOFC Using Biogas from Different Sources Considering Internal Reforming of Methane[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 120: 1044-1054.
- [4] 宋彪. 不同燃料的固体氧化物燃料电池数值模拟研究[D]. 武汉: 武汉科技大学, 2020
SONG Biao. Numerical Simulation of Solid Oxide Fuel Cells with Different Fuels[D]. Wuhan: Wuhan University of Science and Technology, 2020
- [5] 阮鹏, 林梓荣, 白帆飞, 等. 天然气水蒸气重整与 SOFC 耦合应用[J]. 新能源进展, 2023, 11(1): 29-37.
RUAN Peng, LIN Zirong, BAI Fanfei, et al. Coupling Application of Natural Gas Steam Reforming and SOFC[J]. New Energy Progress, 2023, 11(1): 29-37.
- [6] 魏胜利, 马万达, 杜振华, 等. 固体氧化物燃料电池新型阳极燃料的研究进展[J]. 江苏大学学报(自然科学版), 2023, 44(2): 151-158.
WEI Shengli, MA Wanda, DU Zhenhua, et al. Research Progress of New Anodes for Solid Oxide Fuel Cells[J]. Journal of Jiangsu University (Natural Science Edition), 2023, 44(2): 151-158.
- [7] Fedorov A G, Damm D L. Spectral Radiative Heat Transfer Analysis of the Planar SOFC[J]. Journal of Fuel Cell Science and Technology, 2005, 2(4): 258-262.
- [8] Klein J M, Bultel Y, Georges S, et al. Modeling of A SOFC Fuelled by Methane: From Direct Internal Reforming to Gradual Internal Reforming[J]. Chemical Engineering Science, 2007, 62(6): 1636-1649.
- [9] Ahmed K, Foger K. Kinetics of Internal Steam Reforming of Methane on Ni/YSZ-Based Anodes for Solid Oxide Fuel Cells[J]. Catalysis Today, 2000, 63(2-4): 479-487.

非均匀辐射对太阳能温差发电器的性能影响研究

葛明慧, 玄志伟, 李文杰, 刁红梅, 赵玉龙*

(能源与环境工程学院, 河北工业大学, 天津, 300401)

(Email: zhaoyulong@hebut.edu.cn)

摘要: 太阳能温差发电机 (STEG) 能够将太阳能直接转换为电能。本文建立 STEG 三维模型, 研究了非均匀太阳辐射对 STEG 的热电性能影响。结果表明非均匀太阳辐射使输出功率降低 0.31%, 且热电臂上的最高温度容易超过材料的适用温度。在保证热电材料在安全使用温度范围内, 通过对中心区域热电臂尺寸进行优化, 输出功率会小幅降低 3%, 进一步对周边热电臂进行优化, 可使输出功率提高 1.27%。

关键词: 非均匀太阳辐射; 太阳能温差发电机; 热电性能; 热电臂尺寸优化

0 前言

近年来, 化石能源消耗量的增加, 不仅带来了严重的环境污染[1], 而且由此引起的气候变化问题威胁人类生存, 可再生能源高效利用成为解决能源问题的关键。太阳能被认为是最清洁的可再生能源之一, 在发电, 热利用以及海水淡化等领域均得到了广泛的应用。温差发电机 (TEG) 是基于 Seebeck 效应的能量转换装置, 可将热能直接转换为电能, 具有无噪音、无污染、灵活稳定等特点[2], 在余热回收与海水淡化领域得到了广泛应用[3-5]。太阳能温差发电机 (STEG) 利用太阳辐射加热 TEG 热端, 使 TEG 两端形成温差进而产生电压, 从而为外部设备供电。

作为 TEG 核心部件的热电臂, 其结构影响 STEG 的热电输运, 因此直接决定了 STEG 的热电性能。Ge 等[6]综合考虑热电臂高度与截面因子提出了新的结构参数, 指出存在最佳结构参数可使 STEG 发电效率最大, 并且最佳结构参数与运行条件相关。Ji 等人[7]分析了热电臂几何参数对 STEG 发电性能的影响, 通过田口法获得最大输出功率 5.47W。Maduabuchi 等[8]对纳米改性热电材料的变截面热电臂进行三维数值模拟, 发现其与传统变截面热电臂相比, 功率密度与热电转换效率可提升 12 倍和 6 倍。为提高 STEG 的输出性能, 还可以使用聚光设备将太阳光聚焦若干倍率后再照射至 STEG 热端, 提高 STEG 的冷热端温差。而聚焦后的太阳光往往并不是均匀的, 在一定程度上会影响 STEG 的输出性能: Shittu 等[9]对分段式 STEG 进行了数值模拟, 在 STEG 热端施加复合抛物面聚光器聚光后的非均匀太阳辐射, 在相同的辐射量下, 采用非均匀辐射较均匀辐射, 在方钴矿占比为 50%及以上时, 输出功率至多降低了 2.5W, 约 26.3%。Yin 等人[10]对尺寸为 16mm×16mm 的碲化铋基 STEG 热端施加不同非均匀度的太阳辐射, 在不考虑一切热损失的前提下对比不同施加非均匀度时 STEG 的输出功率差别, 中心太阳辐射集中度最高时, STEG 的输出功率较均匀热流时降低了约 1.4%。Gao 等人[11]在非均匀热流条件下研究加入相变材料对含 TEG 的光伏热电系统性能的影响, 发现施加非均匀热流时, 输出功率至多降低 0.33W。

综上所述, 目前针对在非均匀太阳辐射下 STEG 热电性能的研究较少。本研究采用有限元法, 建立 STEG 热电耦合模型, 以二维高斯分布的太阳辐射模拟集中光照, 在保证总输入热流不变的条件下研究非均匀太阳辐射对 STEG 热电性能的影响, 并提出通过局部热电臂尺

寸优化实现 STEG 高效安全运行，所得结果对于 STEG 优化运行具有一定的参考意义。

1 模型与方法

为研究非均匀太阳辐射对 STEG 系统热电性能的影响，本文构建了完整 STEG 的三维模型。如图 1 所示，STEG 系统主要由三部分组成，分别为：聚光镜、STEG 与冷却系统（水冷热沉）。太阳辐射通过聚光镜后被聚焦，集中照射至 STEG 热端，形成高温源。通常 STEG 热端的工作温度取决于聚光倍率，聚光倍率越高，STEG 热端温度越高，在冷端换热性能良好的情况下，冷热端温差升高，输出性能越强。

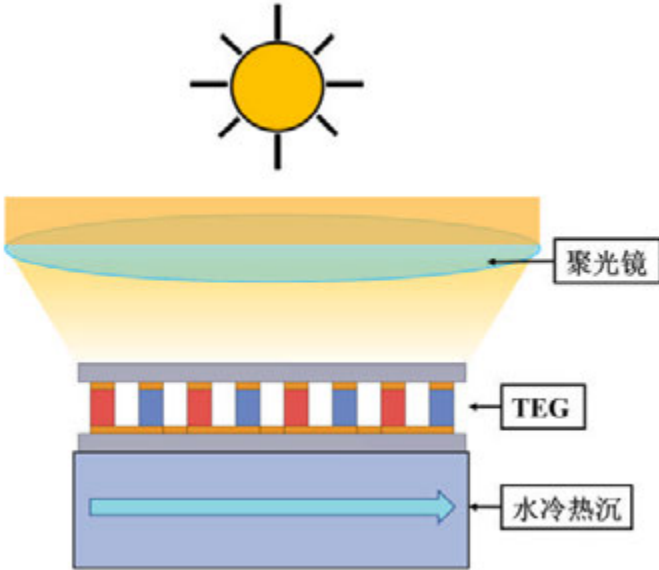


图 1 太阳能温差发电器的示意图

本研究采用的 STEG 由 128 对热电臂组成。首先固定所有热电臂的长、宽、高一致为 1mm、1mm、2mm，为保证所有热电臂所占陶瓷板的面积相同，令各个热电臂的中心距离为 2.5mm；铜导线的长、宽、高分别为 3.5mm、1.8mm 与 0.35mm；陶瓷板的尺寸为 40mm×40mm×0.8mm。

热电臂材料采用方钴矿，其物性参数均考虑温度相关性，其热导率、电导率与塞贝克系数如表 1 所示。此热电材料的适用温度在 870K 以内[18]。

表 1 热电材料物性参数

Table1 Physical parameter

	P-type	N-type
$k(T)$	$5.9282-0.01006\times T+1.24656\times 10^{-5}\times T^2-4.48389$	$1.79585+0.00522\times T+1.1765\times 10^{-5}\times T^2+8.72739\times$
$W/(m\cdot K)$	$\times 10^{-9}\times T^3$	$10^{-9}\times T^3$
$\sigma(T)$	$10^5\times(2.56635-0.00102\times T-2.4437\times 10^{-6}\times T^2+2.$	$10^5\times(4.82374-0.00921\times T+9.52702\times 10^{-6}\times T^2-3.6$
$\Omega^{-1}\cdot m^{-1}$	$35178\times 10^{-9}\times T^3)$	$5761\times 10^{-9}\times T^3)$
$\alpha(T)$	$10^{-4}\times(0.309+0.00118\times T+2.90885\times 10^{-6}\times T^2-3.$	$10^{-4}\times(-0.32918-0.00299\times T+1.22554\times 10^{-6}\times T^2+2.$
V/K	$13655\times 10^{-9}\times T^3)$	$55067\times 10^{-10}\times T^3)$

本文使用的计算方法为有限元数值模拟。采用 COMSOL Multiphysics 处理多物理场耦合问题。在 STEG 的 P/N 型热电臂中，涉及 Seebeck 效应、Peltier 效应与 Thomson 效应。热电效应方程是传热方程与电流密度连续性方程的耦合方程[14]。首先，传热方程可以描述为：

$$\nabla \cdot (\lambda_p(T) \nabla T_p) = -\sigma_p(T) J^2 + \nabla \alpha_p(T) J T_p \tag{1}$$

$$\nabla \cdot (\lambda_N(T) \nabla T_N) = -\sigma_N(T) J^2 + \nabla \alpha_N(T) J T_N \quad (2)$$

式中 $\lambda_{P/N}$ 、 $\sigma_{P/N}$ 和 $\alpha_{P/N}$ 分别为 P 型和 N 型半导体的导热系数、电阻率和塞贝克系数。 $\vec{J}$ 为电流密度矢量。假设热电效应只发生在热电臂上，铜电极的传热方程如下：

$$\nabla \cdot (\lambda_{co} \nabla T) = -\sigma_{co} \vec{J}^2 \quad (3)$$

式中， λ_{co} 与 σ_{co} 分别为铜电极的导热系数和电阻率。此外，陶瓷板只涉及热传导，无电流通过，则其传热方程为：

$$\nabla \cdot (\lambda_{ce} \nabla T) = 0 \quad (4)$$

式中 λ_{ce} 为陶瓷板导热系数。关于电流密度连续性，在式(1)~(3)中，电流密度矢量可由如下式表达：

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} = \sigma (-\nabla \varphi + \alpha \nabla T) \quad (5)$$

其中， $\vec{E}$ 是热电臂中的电场强度矢量， φ 为电势， $\alpha \Delta T$ 是 Seebeck 效应产生的电动势。在热电臂中，电流连续性方程如下：

$$\nabla \cdot J = 0 \quad (6)$$

TEG 的输出功率 P_{out} 为：

$$P_{out} = \left[\frac{(\alpha_p - \alpha_n) \Delta T}{R_L + R_{in}} \right]^2 \times R_L \quad (7)$$

式中， R_{in} 与 R_L 分别为 STEG 内电阻与负载阻值。当负载阻值与内电阻相等时，可获得最大输出功率。

STEG 的热电转换效率 η_{out} 为：

$$\eta_{out} = \frac{P_{out}}{Q_{in}} \quad (8)$$

式中， Q_{in} 为输入到 STEG 热端的辐射量，由热端边界条件确定。由于热电臂的体积有差异，使用功率密度 P_d 来衡量发电性能，其计算式如下：

$$P_d = \frac{P_{out}}{V_P + V_N} \quad (9)$$

式中， V_P 与 V_N 分别为 P 型热电臂与 N 型热电臂的体积。

由于通常使用菲涅尔透镜对太阳辐射进行聚光，因此聚光后太阳辐射并不是均匀分布的，而是中心高四周低的形式。二维高斯分布可以用于模拟此类非均匀太阳辐射。本研究采用此种分布进行研究。关于高斯分布，可以写作如下表达式：

$$G(x,y) = \frac{\mu}{2\pi D^2} e^{-\frac{1}{2D^2}(x^2+y^2)} \quad (10)$$

其中 G 为聚光后的太阳辐射强度； D^2 为高斯分布中的方差，用于控制高斯分布的均匀程度； μ 为标准化因子，用来保证在不同分布时总输入辐射量是相同的，其表达式如下：

$$\mu = \frac{G_0 A_h}{\iint_{A_h} \frac{1}{2\pi D^2} e^{-\frac{1}{2D^2}(x^2+y^2)} dx dy} \quad (11)$$

式中, G_0 为均匀分布下的太阳辐射, A_h 为 STEG 热端面的面积。则最终的输入辐射强度 q_{in} 分布表达式为:

$$q_{in}(x,y) = \eta_c G(x,y) \quad (12)$$

其中 η_c 是聚光镜的光学效率。

在本研究中, 设计了一种太阳辐射分布, 如图 2 所示。所有工况下的总辐射量相同。其中 CASE1 指均匀分布, CASE2 为高斯分布。

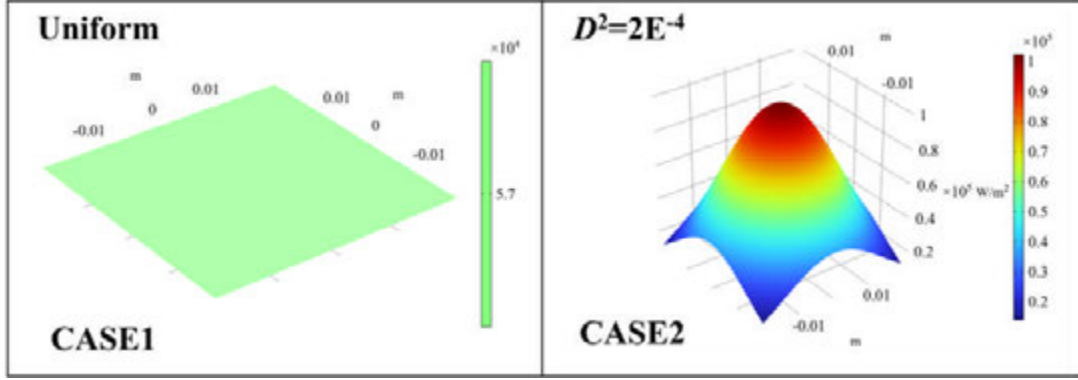


图 2 两种辐射形式

根据能量守恒, STEG 的能量方程可表示为:

$$Q_{in} = Q_{con} + Q_{rad} + Q_c + P_{out} \quad (13)$$

式中, Q_{in} 为入射到 STEG 热端的太阳辐射, Q_{con} 与 Q_{rad} 分别为 TEG 热端与环境的对流换热损失与辐射热损失, P_{out} 为 STEG 输出功率。

入射到 TEG 热端的太阳辐射表达式如下:

$$Q_{in} = CGA_s \alpha_s \eta_{opt} \quad (14)$$

式中, C 是聚光倍数, G 为太阳辐射强度, 取 1000 W/m^2 , A_s 是 STEG 陶瓷表面面积, α_s 为吸收比, η_{opt} 为光学效率。此外, 考虑了 STEG 热端与外界的对流换热和辐射散热, 本文采用与[17]相同的边界条件。

2 网格无关性与模型验证

图 3 给出了模型网格无关性与可靠性验证。如图 3(a)所示, 随着网格划分的数量增多, 考察不同数量网格划分对 STEG 输出功率的影响, 当网格数量大于 88331 后, 输出功率就不再产生变化。考虑到计算速度与计算精确度, 最终网格划分数量确定为 88331 个。为保证模型的可靠性, 本研究与文献中结果进行了对比, 如图 3(b)所示。文献[10]中 STEG 横截尺寸为 $16 \times 16 \text{ mm}^2$, 包含 32 对尺寸为 $1 \times 1 \times 1.5 \text{ mm}^3$ 热电臂, 在聚光倍率为 50, 获得了 6 种非均匀热流分布下的 STEG 开路电压, 与文献[10]结果的对比如图 4 所示, 本文模拟结果与文献结果最大相差小于 1%, 可以认为本文使用的物理模型是可靠的。

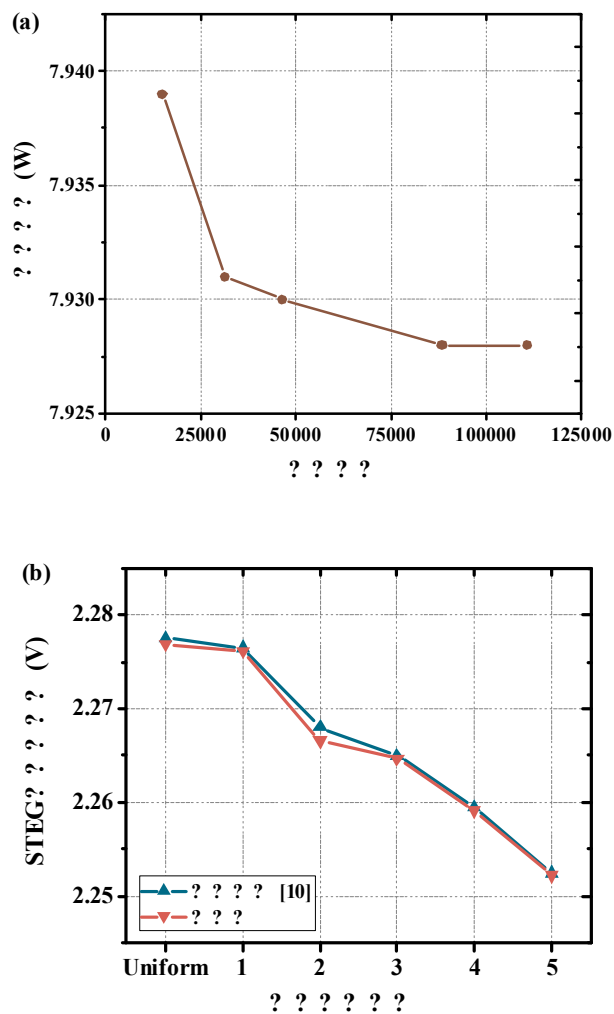


图3 模型 (a) 网格无关性验证与 (b) 可靠性验证

3 结果与讨论

增大聚光倍率可以有效提高 STEG 的输出功率。图 4 为 STEG 在均匀太阳辐射与非均匀太阳辐射在冷热端温差与输出功率随聚光倍率的变化, 差值均为均匀辐射结果与非均匀辐射结果做差所得。在聚光倍率为 100 时, 对 TEG 施加非均匀太阳辐射有利于提升其输出功率, 提升约为 2.5mW, 随着聚光倍率增大, 施加均匀太阳辐射时的输出功率超过了施加非均匀辐射, 在聚光倍率为 200 时达到 26.1W, 高出后者 82.5mW。此外, 施加非均匀太阳辐射的 STEG, 其冷热端温差始终低于施加均匀辐射的 STEG, 这是前者的辐射散热损失过多导致的。

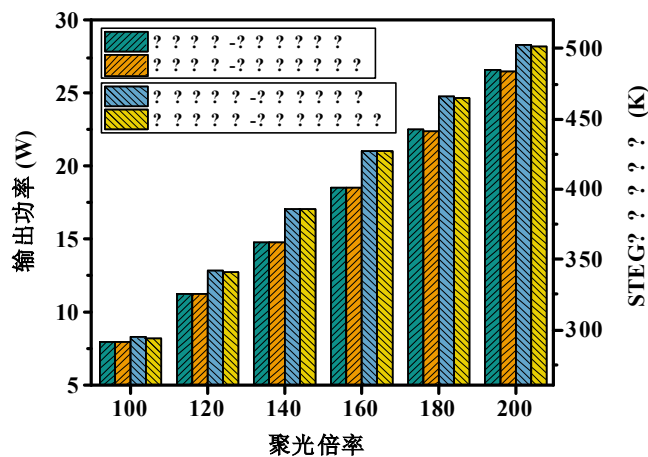


图 4 均匀/非均匀太阳辐射时冷热端温差与输出功率

图5为STEG施加非均匀太阳辐射与均匀太阳辐射时热电臂上的最高温度随聚光倍率的变化。明显可见，在太阳辐射非均匀时，由于局部区域受到的辐射量高，热电臂上的最高温度总是远高于施加均匀太阳辐射的情况，在聚光倍率为200时，前者的热电臂最高温度达到909K，高出后者约95.5K，超过了热电材料的适用温度[17]。因此，需要对施加非均匀太阳辐射时的STEG进行结构优化，以改善因辐射集中对热电性能带来的负面影响。

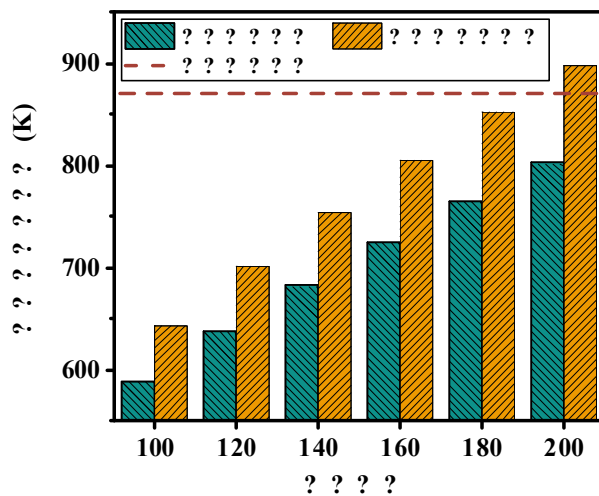


图 5 施加不同形式太阳辐射时热电臂上的最高温度

图 6 为聚光倍率为200时，对STEG施加均匀太阳辐射与非均匀太阳辐射的温度分布云图，其中黄色框选区域内的热电臂最高温度已超过材料适用温度。可见在非均匀太阳辐射下，STEG中心处的热电臂温度明显高于周边区域，因此需要重点关注。

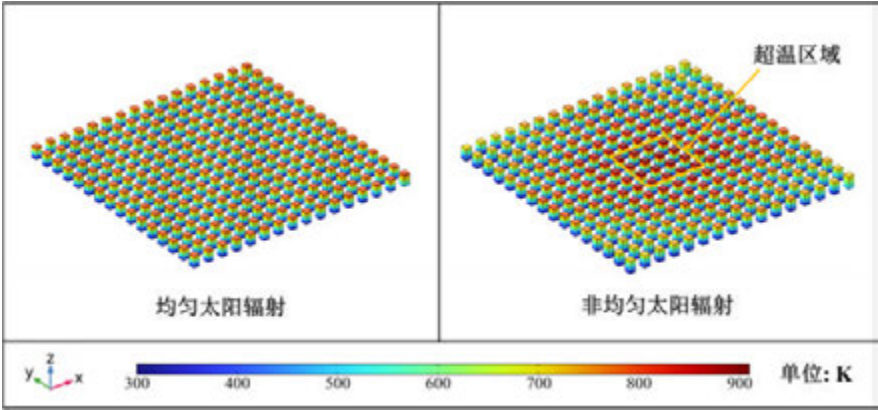


图 6 STEG 在均匀太阳辐射与非均匀太阳辐射下的温度分布

根据图 6 中的非均匀太阳辐射工况的温度分布，将全部热电臂由外到内划分为 4 部分，命名为 Part 1 至 Part 4，如图 7 所示，以针对各区域内分别进行尺寸优化。选择聚光倍率为 200 时的 STEG 进行优化。

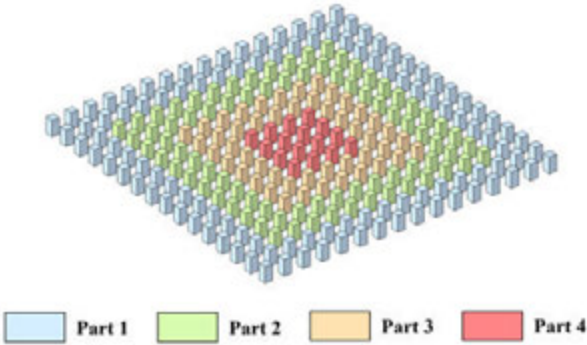


图 7 热电臂划分区域示意图

为了使 STEG 中心区域热电臂的温度，首先固定 Part1、2、3 的横截尺寸为 1mm，令 Part4 的横截尺寸由 1mm 等间距增大至 1.3mm，命名为组合 1 至组合 4，尺寸分别为 1mm、1.1mm、1.2mm 与 1.3mm，施加聚光倍率为 200 的非均匀太阳辐射，所得到的结果如图 8 所示，随着 Part4 区域热电臂横截尺寸增大，尽管 STEG 的输出功率有微小的降低，至多相对降低 3%，但其最高温度明显降低，当尺寸为 1.3mm 时，最高温度为 865.2K，低于适用温度，可以确保 STEG 的运行安全。也即，可以通过优化太阳辐射集中的区域以改善非均匀太阳辐射下 STEG 的运行状况。

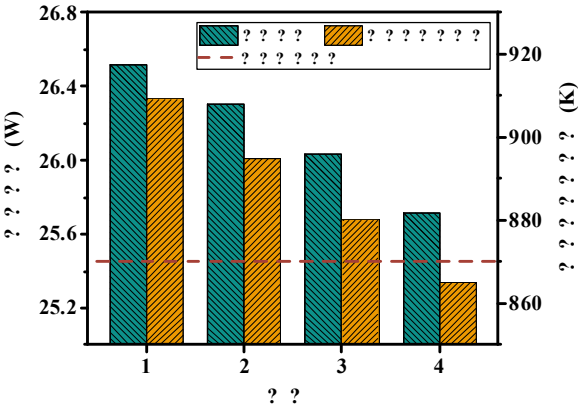


图 8 各组合的输出功率与热电臂最高温度

结合上述结果,固定 Part4 内热电臂的横截尺寸为 1.3mm 时,其他区域热电臂的发电量仍有待提升。若在保证热电臂最高温度在适用范围内且提高 TEG 的输出功率,可以适量降低其他 Part 内热电臂的横截尺寸。固定 Part4 内热电臂的横截尺寸为 1.3mm,适量减小其他区域内的热电臂横截尺寸,具体组合见表 2,以组合 a 至 b 命名。对这些组合的 STEG 施加聚光倍率为 200 的非均匀太阳辐射。与组合 4 的结果比较如图 9 所示,组合随着周边热电臂的横截尺寸减小,STEG 输出功率有所升高,同时伴随最高温度的升高,其中输出功率最高且温度满足限制的为组合 b,其输出功率达到 26W,较组合 4 相对提高 1.27%,且能保证 STEG 安全运行,证明该优化途径是可行的。

表 2 三种尺寸组合

Table2 Three size combinations			
组合	Part1	Part2	Part3
a	1mm	1mm	0.98mm
b	1mm	0.98mm	0.98mm
c	0.98mm	0.98mm	0.98mm

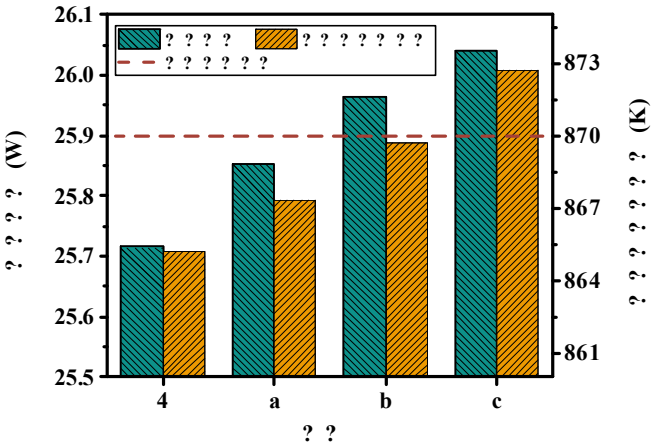


图 9 各组合的输出功率与热电臂最高温度

4 结论

本研究采用有限元法,建立 STEG 热电耦合模型,以二维高斯热流密度模拟非均匀太阳辐射,在保证总输入热流不变的条件下研究非均匀太阳辐射对 STEG 热电性能的影响。结果显示,非均匀太阳辐射使输出功率降低 0.31%,且热电臂上的最高温度容易超过材料的适用温度。在保证热电材料在安全使用温度范围内,通过对中心区域热电臂尺寸进行优化,输出功率会小幅降低 3%,进一步对周边热电臂进行优化,可使输出功率提高 1.27%。

参考文献

[1] Li J, Dong K, Dong X. Green energy as a new determinant of green growth in China: The role of green technological innovation[J]. Energy Economics, 2022, 114: 106260.

[2] 王军,李幸军,孟庆天,黄志强.非对称热阻对温差发电器性能的影响[J].江苏大学学报(自然科学版),2023,44:213-220.

WangJun, Li Xingjun, Meng Qingtian, Huang Zhiqiang. Effect of asymmetric thermal resistance on the performance of temperature difference generators [J]. Journal of Jiangsu University (Natural Science Edition), 2023,44:213-220.

[3] 王世学,梁昭军,赵玉龙,李彦哲.部分填充泡沫金属对温差发电器性能影响的实验研究[J].中国科学院大学学报,2018,35:233-239.

Wang Shixue, Liang Zhaojun, Zhao Yulong, Li Yanzhe. Experimental study on the effect of partially filled

- foam metal on the performance of temperature difference generators[J]. Journal of the University of Chinese Academy of Sciences, 2018,35:233-239.
- [4] 杨玉荣,王世学.具有 PCM 的汽车尾气温差发电器的变工况模拟[J].热科学与技术,2020,19:270-275.
Yang Yurong, Wang Shixue. Variable-conditions simulation of an automotive exhaust gas temperature difference generator with PCM[J]. Thermal Science and Technology, 2020,19:270-275.
- [5] 金花,赵宇含.汽车尾气温差发电系统热电模块优化仿真分析[J].自动化与仪表,2018,33:67-70+79.
Jin Hua, Zhao Yuhan. Optimization simulation analysis of thermoelectric module for automotive exhaust gas temperature difference power generation system[J]. Automation and Instrumentation, 2018,33:67-70+79.
- [6] Ge M, Wang Z, Liu L, Zhao J, Zhao Y. Performance analysis of a solar thermoelectric generation (STEG) system Check for with spray cooling [J]. Energy Conversion and Management, 2018, 177: 661-670.
- [7] Ji D, Hu S, Feng Y, Qin J, Yin Z, Romagnoli A, Zhao J, Qian H. Geometry optimization of solar thermoelectric generator under different operating conditions via Taguchi method [J]. Energy Conversion and Management, 2021, 238:
- [8] Maduabuchi C. Improving the performance of a solar thermoelectric generator using nano-enhanced variable area pins [J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 206:
- [9] Shittu S, Li G, Xuan Q, Zhao X, Ma X, Cui Y. Electrical and mechanical analysis of a segmented solar thermoelectric generator under non-uniform heat flux [J]. Energy, 2020; 199: 117433.
- [10] Yin E, Li Q, Xuan Y. Effect of non-uniform illumination on performance of solar thermoelectric generators [J]. Frontiers in Energy, 2018; 12: 239-48.
- [11] Gao Y, Dai Z, Wu D, Wang C, Chen B, Zhang X. Transient performance assessment of a hybrid PV-TEG system integrated with PCM under non-uniform radiation conditions: A numerical investigation [J]. Renewable Energy, 2022; 198: 352-66.
- [12] Karri N, Mo C. Structural Reliability Evaluation of Thermoelectric Generator Modules: Influence of End Conditions, Leg Geometry, Metallization, and Processing Temperatures [J]. Journal of Electronic Materials, 2018, 47: 6101-6120.
- [13] Maduabuchi C. Improving the performance of a solar thermoelectric generator using nano-enhanced variable area pins [J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 206: 118086.
- [14] Chen L, Lee J. Effect of pulsed heat power on the thermal and electrical performances of a thermoelectric generator [J]. Applied Energy, 2015, 150: 138-149.
- [15] Ming T, Yang W, Wu Y, Xiang Y, Huang X, Cheng J, Li X, Zhao J. Numerical analysis on the thermal behavior of a segmented thermoelectric generator [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017, 42: 3521-3535.
- [16] Shittu S, Li G, Zhao X, Akhlaghi Y G, Ma X, Yu M. Comparative study of a concentrated photovoltaic-thermoelectric system with and without flat plate heat pipe [J]. Energy Conversion and Management, 2019, 193: 1-14.
- [17] Shittu S, Li G, Xuan Q, Zhao X, Ma X, Cui Y. Electrical and mechanical analysis of a segmented solar thermoelectric generator under non-uniform heat flux [J]. Energy, 2020, 199: 117433.
- [18] Kraemer D, Poudel B, Feng H. High-performance flat-panel solar thermoelectric generators with high thermal concentration[J]. Nature materials, 2011, 10: 532-538.

不同结构相变储能装置内熔化特性对比研究

刘华阳, 李友荣*

(重庆大学能源与动力工程学院, 重庆 400044)

(E-mail: liyurong@cqu.edu.cn)

摘要: 为了强化储能装置内的自然对流、提高温度分布的均匀性, 提出了增大容器顶部容积、减少底部和距离热壁面最远端边角处容积的五边形结构。采用数值模拟方法对比了相同容积不同结构的五边形、梯形和正方形储能装置内相变材料 (PCM) 的熔化特性, 确定了最优几何参数。结果表明, 五边形储能装置内的自然对流最强, 熔化速率和储能功率最高, 温度均匀性最好。在加热壁面温度为 57°C 时, 相较于正方形, 五边形的熔化完成时间可降低 9.3%, 储能功率提高 8.47%。

关键词: 储能装置; 几何结构; 自然对流; 熔化特性; 数值模拟

0 前言

大多数可再生能源都存在间歇性和不稳定的问题, 很难直接满足能源需求。潜热储能作为目前应用价值最高的储能技术, 能够很好地解决能源在时间和空间上不匹配的问题^[1, 2]。而有机相变材料普遍存在的低导热系数和熔化过程中温度分布不均匀问题, 严重影响了储能效率^[3-5]。目前, 强化换热和提高相变过程温度分布均匀性已成为研究重点。

强化传热的方式可分为主动强化、被动强化和混合强化三种形式。主动强化通过在储能系统外部增设力场、电场或磁场等外场强化液相 PCM 的流动传热^[6-8], 但是由于主动强化需要额外消耗能量, 目前在实际应用中相对较少^[6]。被动强化由于不需要额外消耗能量, 通过结合高效传热装置或优化储能容器的几何参数来强化换热, 是目前研究和应用最广泛的强化方式。

被动强化又可分为导热强化和对流传热强化。学者探究了在储能装置内部增设金属翅片或泡沫金属、或添加高导热系数纳米粒子、或制备高导热系数复合相变材料等来强化导热^[9-12]。上述措施增强了 PCM 导热, 但也阻碍了自然对流对熔化过程的促进作用, 增大的导热系数可能无法补偿对流换热的损失, 同时降低了容器内的 PCM 填充量。因此, 在不改变容器质量和体积的条件下, 可以通过强化对流换热来提高储能效率和温度均匀性。

PCM 熔化过程中存在的对流传热极大提高了熔化速率, 但也导致 PCM 的温度分布不均匀。Kamkari 等^[13]实验研究了月桂酸在侧壁面加热矩形储能装置内的熔化过程, 探究了增设翅片和改变容器倾角对熔化速率的影响, 结果表明, 熔化速率随着倾斜角度 (90°、45°、0°) 的减小和翅片数量的增加而逐渐增大, 同时发现, 翅片对自然对流具有阻碍作用, 而简单的倾斜容器比添加翅片可以更有效地提高熔化速度。Han 等^[14]通过固定装 PCM 的体积和传热面积, 采用数值模拟方法对比了管壳式储能装置水平和竖直

放置方式、HTF 入口位置对管道模型（PCM 位于壳内）和圆柱模型（PCM 位于管内）储热性能的影响，结果表明，由于自然对流作用，水平放置时采用圆柱模型具有较高的熔化和蓄热速率，竖直放置时管道模型具有最高的熔化速率。Seddegh 等^[15]设计了一种圆锥形管壳式储能容器以强化对流换热，结果表明，圆锥形储能装置可以显著提高 PCM 的熔化速率，但是由于导热主导 PCM 的凝固过程，锥形换热器对凝固速率影响不大。Akshayvee 等^[16]采用数值模拟方法探究了强化对流型非矩形（直线型和曲线型梯形）储能装置对集成光伏板的电学和热性能的影响，并与矩形储能装置进行了对比，结果表明，与传统矩形容器相比，熔化速率最大可提高 17%，电转换效率可接近 12%。

综上所述，通过改变系统朝向、HTF 流动条件和储能容器几何结构等方式强化对流换热同样可以提高储能效率。目前对侧壁加热矩形装置的结构优化研究较少，同时没有关于最佳结构的报道。因此，本文设计了五边形储能容器以强化对流换热、降低最终熔化阶段对熔化速率的影响。采用数值模拟的方法探究了 PCM 在不同几何参数的五边形储能装置内的熔化特征，并与相同容积不同结构的梯形和正方形进行蓄热性能对比。

1 模型和方法

1.1 物理模型

图 1 示出了研究的五边形、梯形和正方形三种几何结构的物理模型，选用 RT-42 作为相变材料，具体的热物性参数如表 1 所示。为使三种结构具有相同的换热条件和 PCM 填充量，控制三种结构的左侧热壁面长度相同，都为 10mm，面积都为 100mm²。通过改变五边形结构的上下壁面长度比(L_T/L_B)和右侧竖直壁面的长度(L_R)来改变容器顶部和右侧边角处面积大小，将五边形结构分为九种情况。通过改变梯形结构的长度比将梯形分为五种情况。具体几何参数如表 2 所示。

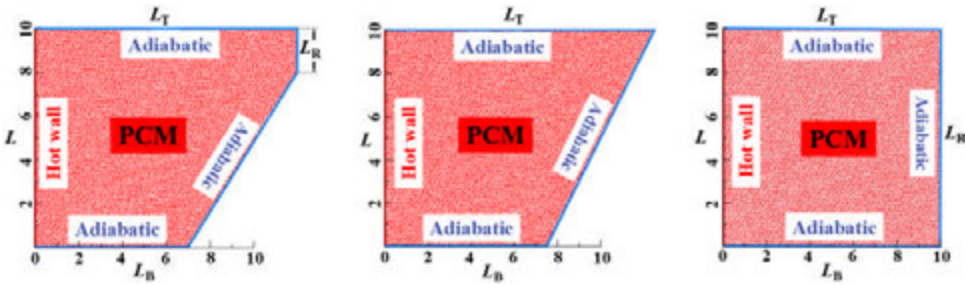


图 1. 正方形（左）、梯形（中）和五边形（右）结构二维平面示意图

表 1. RT-42 和铝的热物性参数^[15]

物性	RT-42	物性	RT-42
固相线温度 T_s , K	311	潜热 L , J/kg	165000
液相线温度 T_l , K	315	动力粘度 μ , Pa·s	0.0235
固相密度 ρ_s , kg/m ³	880	膨胀系数 γ , K ⁻¹	0.0001
液相密度 ρ_l , kg/m ³	760	导热系数 k , W/(m·K)	0.2
比热容 c_p , J/(kg·K)	2000		

表 2. 几何结构及不同案例参数设置（单位：mm）

结构	Case	上壁面 长度 (L_T)	下壁面 长度 (L_B)	右侧竖直壁面 长度 (L_R)	上下壁面长度比 (L_R)
五边形	P1-A	11.35	8.35	1	1.36
	P1-B	11.8	7.8	1	1.51
	P1-C	12.7	6.7	1	1.90
	P2-A	11.5	7.75	2	1.48
	P2-B	12	7	2	1.71
	P2-C	12.4	6.4	2	1.94
	P3-A	11.4	7.4	3	1.54
	P3-B	12.1	6.1	3	1.98
	P3-C	12.8	4.8	3	2.67
梯形	T1	13.5	6.5	-	1.35
	T2	13	7	-	1.86
	T3	12.5	7.5	-	1.67
	T4	12	8	-	1.50
	T5	11.5	8.5	-	2.08
正方形	S1	10	10	10	1

1.2 数学模型

焓-孔隙率法模型是将糊状区视为多孔材料，在每次的计算迭代过程中依据焓平衡确定 PCM 域中每个单元位置的液体分数。其中，液态 PCM 的孔隙率为 1，固态 PCM 的孔隙率为 0，对于固液共存的区域则认为是糊状区域，其孔隙率等于液相分数 β 。由于 PCM 熔化过程十分复杂，为了简化计算，引入以下假定^[4, 14]：(1) 不考虑固体 PCM 的体积变化和运动，忽略温度对 PCM 热物理性质的影响；(2) 液相 PCM 的流动过程为层流、非定常和不可压缩流动；(3) 采用 Boussinesq 近似来考虑密度分布的影响，即假设动量方程中除浮力项外的所有项中的流体密度都是恒定的。控制方程如下：

连续性方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

动量方程：

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P + \mu \cdot \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{S} + \rho g \gamma (T - T_m) \mathbf{e}_v \quad (2)$$

式中， ρ 为 PCM 的密度； μ 为动力粘度； $\mathbf{S}$ 为动力下沉项，以抑制固体区流速； γ 为体积膨胀系数； $\mathbf{e}_v$ 为垂直方向单位矢量。

能量方程：

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} H) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3)$$

式中, H 为 PCM 的焓值 (J/kg), 可以表示为显热焓值 h 和潜热焓值 ΔH 之和:

$$H = h + \Delta H \quad (4)$$

$$h = h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T c_p dT \quad (5)$$

$$\Delta H = \beta L \quad (6)$$

式中, T_{ref} 和 h_{ref} 分别为参考温度及参考温度下的焓值; L 为 PCM 的潜热; β 为液相分数。

动量方程中的动力下沉项需要考虑到孔隙度的变化, 因此与液相分数有关:

$$\mathbf{S} = \frac{C(1-\beta)^2}{\beta^3 + \varepsilon} \mathbf{u} \quad (7)$$

式中, C 为糊状区常数, 取值常在 $10^4 \sim 10^7$ 之间, 对石蜡材料常用值 10^5 [15]; ε 为极小值, 用于避免除零, 常取 0.001。 β 为 PCM 液相分数, 与温度有关, 满足以下关系:

$$\beta = \begin{cases} 1 & \text{if } T_l \leq T \\ \frac{T - T_s}{T_l - T_s} & \text{if } T_s \leq T \leq T_l \\ 0 & \text{if } T \leq T_s \end{cases} \quad (8)$$

式中, T_s 和 T_l 分别为 PCM 的固相线温度和液相线温度, T 为 PCM 温度。

相变材料的储热量和储能功率可表示为 [10]:

$$Q = m [\beta L + c_p (T - T_{ini})] \quad (9)$$

$$q = Q / t \quad (10)$$

式中, T_{ini} 为 PCM 的初始温度; m 为 PCM 质量; t 为相变蓄热时间。

1.3 初始条件及边界条件

由于本文主要研究不同结构和几何参数的储能容器对强化对流传热和提高温度均匀性的影响。因此, 计算过程中不考虑壳体厚度和过冷效应的影响, 即相变材料初始温度设定为固相线温度 311K。随着储热开始, 左侧热壁面保持固定温度 330K, 其余壁面均不与外界发生热量交换, 即为绝热边界。

1.4 网格无关性及时间步长独立性验证

为了避免时间步长和网格数量对计算结果的影响, 选用五边形结构 P3-B 进行了网格无关性和时间步长独立性验证。如图 2(a)所示, 在时间步长取 0.3s 时, 对 26861、51844 和 187438 三种网格进行了独立性验证, 可以看出不同网格数量间的液相分数误差最大不超过 0.6%。图 2(b)为 51844 网格条件下, 时间步长分别取 0.1、0.3 和 0.6 s 时液相分数的计算结果, 可以发现误差不大。综合考虑, 最终选取的网格是 51844, 时间步长是 0.3s。需要指出的是, 其它结构均采用相同数量级的网格和时间步长。

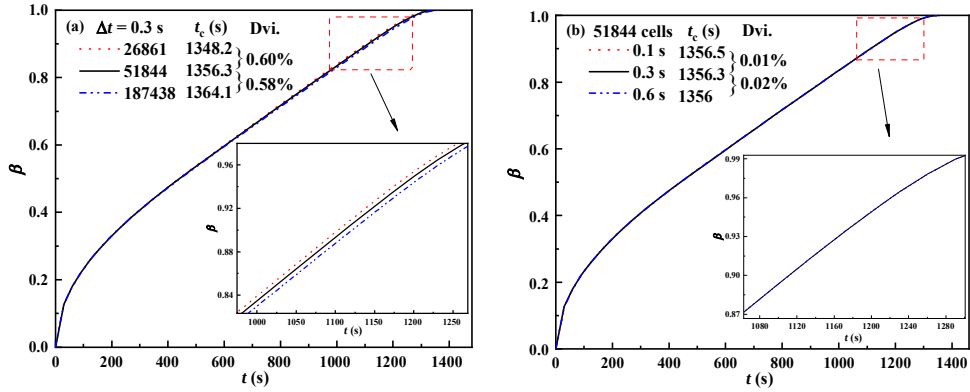


图 2. 网格 (a) 和时间步长 (b) 验证结果

1.5 模型验证

为了验证建立的相变模型的准确性，将侧壁加热矩形容器内纯镓熔化过程中固液界面随时间变化与 Gau 等^[17]的实验结果进行对比验证，其中，矩形结构的竖直和水平几何参数为分别为 8.89cm 和 6.35cm，上下壁面绝热，左右侧壁分别保持 38°C 和 28.3°C，结果如图 3 所示。比较熔体前沿位置随时间的变化可以发现，界面发展趋势一致，整体吻合较好。存在误差的原因可能是由于实验过程不能完全保证绝热，同时数值模拟做出的假设也会存在影响。考虑这些因素，可以认为模型有效，能够用来进行相关研究。

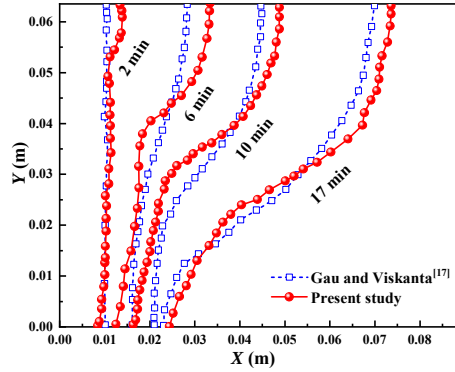


图 3. 固-液界面随时间变化与实验结果^[17]对比

2 结果分析与讨论

2.1 不同结构对储能过程的影响

图 4 对比了不同五边形储能装置的液相分数随时间的变化和熔化完成时间。由图 4(a)可以发现，在熔化初始阶段 PCM 的熔化速率较快，在 1000s 前不同几何参数的五边形几乎存在着相同的熔化速率。这是由于初始传热温差较大，热阻较小，导热主导熔化过程，随着熔化的进行，液相 PCM 逐渐增加，熔化过程的传热热阻逐渐增大，温差逐渐减小，熔化速率逐渐降低。在熔化最终阶段，不同五边形存在不同熔化速率，其中 P2-B 的熔化速率最快，其次是 P3-B，而 P3-C 的熔化速率最慢。由图 4 (b) 可以看出，不同右侧竖直壁长度的五边形分别存在一个熔化完成时间最短几何结构，在右侧壁长度分

别为 1、2、3mm 时，P1-B、P2-B 和 P3-B 的熔化完成时间最短。其中 P2-B 的熔化完成时间分别比 P1-B 和 P3-B 的熔化完成时间缩短了 2.7%和 0.2%。因此，针对不同右侧竖直壁面长度五边形的最佳几何结构做更进一步的对比研究。

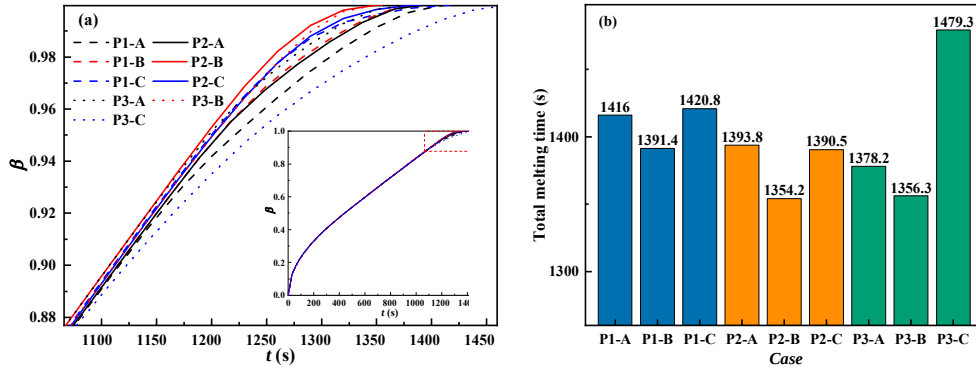


图 4. 不同几何参数的五边形液相分数随熔化时间变化 (a) 和熔化完成所需时间 (b) 对比

如图 5 所示，正方形、梯形和五边形三种结构储能装置的液相分布云图在 900s 之前几乎完全相同。当 $t=900$ s 时，正方形结构顶部的液相 PCM 已接触到右侧壁面，而梯形和五边形结构由于增大了顶部容积，此时的液相 PCM 均未接触到右侧壁面。在 $t=1290$ s 时，正方形仍存在固相 PCM，其余结构的 PCM 均已熔化。对比不同结构熔化最终阶段的位置可以看出，当储能装置的 L_T/L_B 比值较大时，熔化最终阶段常位于容器顶部，如梯形 T1 和 T2，此时容器顶部容积增大的同时也增加了最终熔化阶段 PCM 距热壁面的距离，导致传热热阻增大，延长了熔化最终阶段的时间； L_T/L_B 比值较小时，熔化最终阶段常位于容器底部，如梯形 T4 和 T5，由于底部 PCM 的熔化速率低于顶部，而顶部容积提升不大，储能速率提升不明显。可以发现，五边形结构的熔化速度普遍较快。

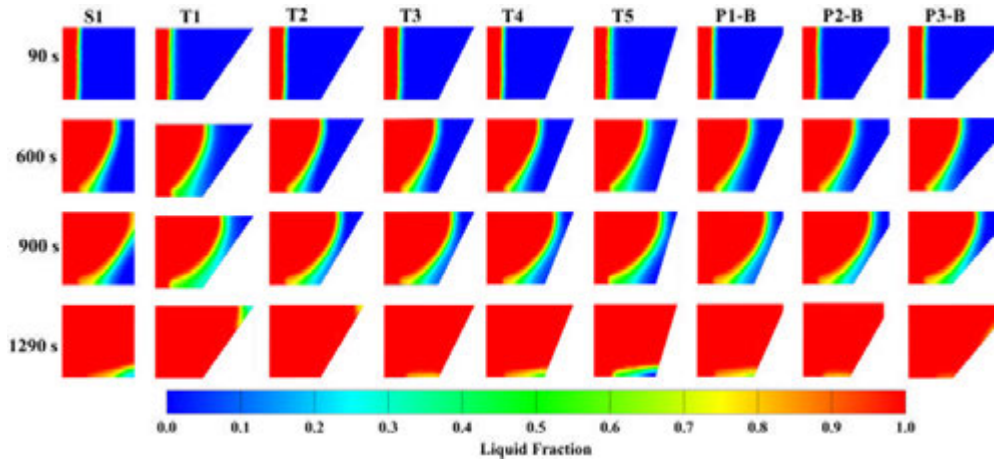


图 5. 不同几何结构在不同时刻下的液相分布云图对比

由图 6(a)可以发现，在熔化初始阶段液相分数随时间的变化几乎相同，随着熔化的进行，五边形和梯形结构的熔化速率明显高于正方形，五边形 P2-B 的熔化速率最高。

这主要是由于正方形结构内的液相 PCM 首先接触到右侧壁面，随着熔化的进行，固液接触面积逐渐减小，熔化速率降低，而梯形和五边形结构则是由于增大了顶部容积，延长了液相 PCM 接触到右侧壁面的时间。如 6(b)所示，正方形熔化完成所需时间最久，五边形 P2-B 的熔化时间最短，分别较正方形和梯形 T3 分别降低了 9.3%和 1.5%。距离热壁面较远处的 PCM 熔化速率较慢，延长了熔化完成的时间，而五边形结构在尽可能增大顶部容积的同时，又降低了最终熔化阶段边角处 PCM 对熔化速率的影响，因此，五边形 L_T/L_B 的最佳比值 1.714 大于梯形的 1.667。

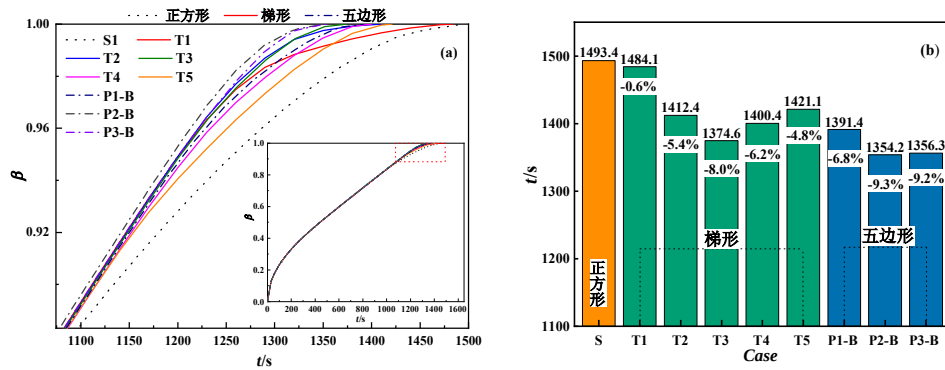


图 6. 不同几何结构液相分数随熔化时间变化 (a) 和熔化完成所需时间 (b) 对比

如图 7(a)所示，由于正方形的熔化完成时间最久，储能量相对较大，梯形 T3 的熔化时间最短，储能量最小，而梯形 T1 的熔化完成时间低于正方形但储能量较正方形约提高 0.24%，五边形的储能量则不完全与熔化完成时间有关，五边形 P3-B 的熔化完成时间大于 P2-B，储能量却最小。这主要是由于梯形和五边形强化了对流换热，梯形 T1 熔化完成时的平均温度高于正方形，而五边形 P2-B 熔化完成时间虽低于五边形 P3-B，但五边形 P2-B 的温度分布更均匀，平均温度更高。通过图 7(b)可以发现，不同结构储能容器的平均储能功率与熔化完成时间成反比，正方形的熔化时间最久，储能功率最低，梯形 T3 和五边形 P2-B 的储能功率最大，分别较正方形约提高 7.08%和 8.47%。可以得出，梯形结构 T3 和五边形结构 P2-B 的性能最佳，因此继续对五边形 P2-B、梯形 T-3 和正方形结构做更进一步的对比研究。

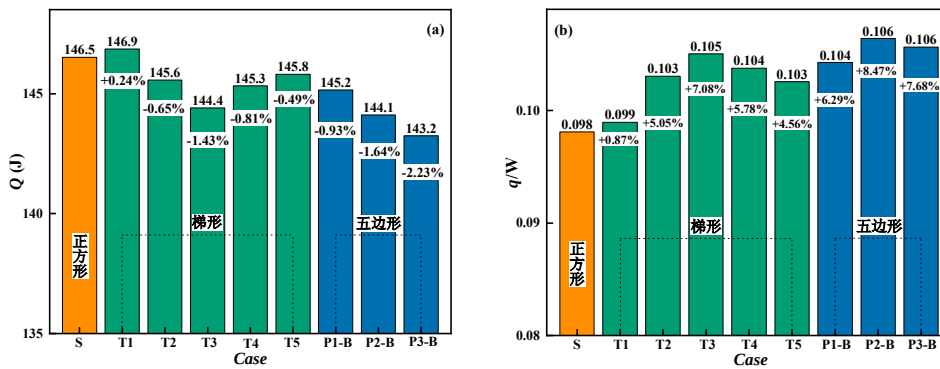


图 7. 不同几何结构熔化完成时的储能量 (a) 和平均储能功率 (b) 对比

2.2 最佳结构熔化特性对比

图 8 对比了不同结构内 PCM 熔化最终阶段不同时刻的温度分布云图。可以发现，储能容器左上部分的平均温度均高于右下部分，左上角温度最高，右下角温度最低，正方形顶部的温度高于梯形和五边形，而底部的温度则低于梯形和五边形。在 $t=1350\text{s}$ 时，正方形右上角的平均温度比梯形和五边形约高出 2.5°C ，右下角的平均温度则比梯形和五边形约低 $4\sim 5^\circ\text{C}$ ，同时可以发现，五边形右侧壁面附近的温度高于梯形。这是由于熔化过程中存在的浮力对流导致高温液态 PCM 上浮，低温液态 PCM 下沉，因此容器顶部的温度较高，底部温度较低。由于正方形结构的液态 PCM 首先到达右侧壁面，在容器顶部聚集了大量显热，而梯形和五边形增大了容器顶部容积，降低了顶部 PCM 的平均温度，通过减少底部容积则提高了底部 PCM 的平均温度，同时，由于五边形减少了右上角 PCM 的占比，降低了最终熔化阶段的传热热阻，进一步提高了温度的均匀分布。

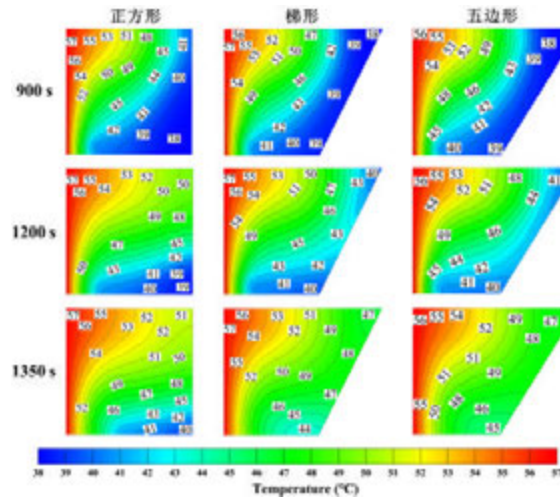


图 8. 不同结构在不同时刻下的温度分布云图

图 9 对比了不同结构储能装置在 1500s 内平均温度和温升速率的变化。通过图 9(a) 可以看出，在 900s 之前，三种结构的平均温度变化几乎完全相同，随着熔化进行，正方形首先出现温度跃升，而梯形和五边形的温度跃升约滞后于正方形 230s 。在梯形和五边形熔化结束时的平均温度略高于正方形，加热完成时，梯形和五边形的平均温度约高于正方形 1°C ，五边形的平均温度高于梯形。这是由于正方形内的液态 PCM 首先接触到了右侧壁面，随着熔化的进行，固液接触面积逐渐减小，对流传热减弱，熔化速率降低，储存的潜热量减少，显热量增大，升温速度逐渐增大。梯形和五边形由于增大了容器顶部容积，延长了液态 PCM 接触右侧壁面的时间，而由于右侧壁面的倾斜作用，液态 PCM 接触到壁面时的面积更大，导致温度跃升更加明显。图 9(b) 对比了平均温升速率随时间的变化，可以发现，在熔化开始时温升速率较大，正方形的液相 PCM 接触到右侧壁面时温升速率明显升高，随着熔化继续进行，此时 PCM 的固液热接触面积的减少量和 PCM 熔化所需的潜热减少量接近平衡，出现了均匀温升的阶段，当熔化至边角处时温升速率再次增大。同样，梯形和五边形在液相 PCM 在接触右侧壁面后温升速率增大，此现象维持至熔化完毕，随着继续加热，温升速率则逐渐降低。

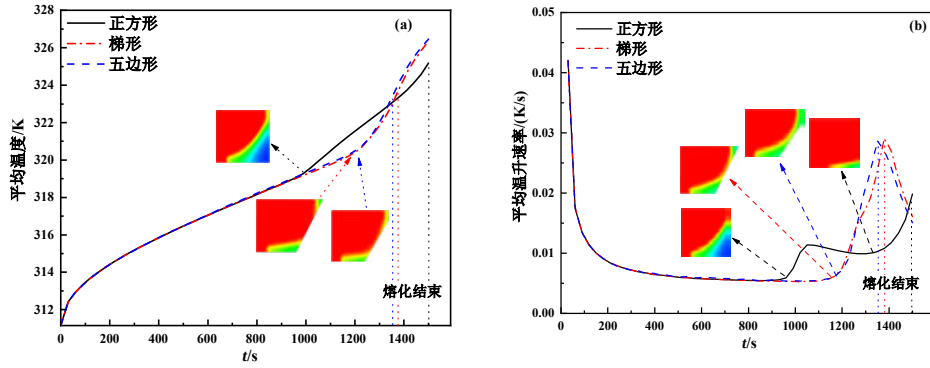


图 9. 不同结构的平均温度 (a) 和平均温升速率 (b) 随时间的变化

由图 10 可以发现, 在初始阶段, 三种结构的平均流速几乎完全相同, 流速均随着熔化的进行逐渐增大, 在液相 PCM 接触到右侧壁面时出现流速降低的现象, 梯形和五边形流速降低时间约滞后于正方形 230s, 其中五边形的流速最大, 较正方形和梯形分别约提高 19.1%和 2.9%。通过对比不同结构的流速变化和最大流速出现的时间可以得出, 梯形和五边形通过增大容器顶部容器, 提高了对流强度, 延长了对流换热时间。

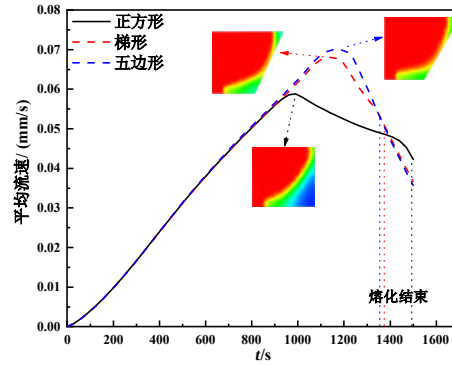


图 10. 不同结构内平均流速随时间的变化

3 结 论

为了强化 PCM 熔化过程中的对流换热、提高温度均匀性, 提出了一种新型五边形储能装置, 采用数值模拟对不同几何参数的五边形进行了性能对比, 针对得出的最优几何参数的五边形与梯形和正方形结构进行了熔化特性对比分析。得出以下结论:

- (1) 不同右侧竖直壁长度的五边形结构均存在一个最佳几何参数。当 $L_R=2\text{mm}$ 和 $L_T/L_B=1.71$ 时, 五边形表现出最高的对流强度、熔化速率和平均功率。
- (2) 五边形储能装置的熔化完成时间最短, 储能效率最高, 最佳五边形结构相较于正方形的熔化完成时间降低 9.3%, 储能量和储能功率分别提高 2.5%和 8.47%。
- (3) 五边形结构在强化对流换热同时也提高了温度的均匀性, 在 1500s 的储热时间内, 五边形最大平均流速比正方形提高 19.1%, 平均温度约升高 1°C 。

参考文献

- [1] N'Tsoukpoe K E, Liu H, Le Pierrès N, et al. A review on long-term sorption solar energy storage. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2009, 13, 2385-2396.
- [2] Xiong T, Zheng L, Shah K W. Nano-enhanced phase change materials (NePCMs): A review of numerical simulations. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 178, 115492.
- [3] Agyenim F, Hewitt N, Eames P, et al. A review of materials, heat transfer and phase change problem formulation for latent heat thermal energy storage systems (LHTESS). *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2010, 14, 615-628.
- [4] Ghosh D, Kumar P, Sharma S, et al. Numerical investigation on latent heat thermal energy storage in a phase change material using a heat exchanger. *Heat Transfer*, 2021, 50, 4289-4308.
- [5] Kalapala L, Devanuri J K. Influence of operational and design parameters on the performance of a PCM based heat exchanger for thermal energy storage – A review. *Journal of Energy Storage*, 2018, 20, 497-519.
- [6] Saha S K. Dynamics of phase change of gallium under magnetic field and thermocapillary effects under variable gravity conditions. *Thermal Science and Engineering Progress*, 2022, 29, 101234.
- [7] He K, Ma B, Wang L. Electrohydrodynamic enhancement of phase change material melting in cylindrical annuli under microgravity. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 215, 119005.
- [8] Jena S K, Yettella V K R, Sandeep C P R, et al. Three-dimensional Rayleigh–Bénard convection of molten gallium in a rotating cuboid under the influence of a vertical magnetic field. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2014, 78, 341-353.
- [9] Biwole P H, Groulx D, Souayfane F, et al. Influence of fin size and distribution on solid-liquid phase change in a rectangular enclosure. *International Journal of Thermal Sciences*, 2018, 124, 433-446.
- [10] S A, Sharma A, Kothadia H B. Performance analysis of PCM melting in a fin-assisted thermal energy storage system – A numerical study. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2023, 144, 106747.
- [11] Ji C Z, Qin Z, Low Z H, et al. Non-uniform heat transfer suppression to enhance PCM melting by angled fins. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 129, 269-279.
- [12] Wang Z L, Zhu M S, Zhang H, et al. Experimental and simulation study on the heat transfer mechanism and heat storage performance of copper metal foam composite paraffin wax during melting process. *Energy*, 2023, 272, 127167.
- [13] Kamkari B, Groulx D. Experimental investigation of melting behaviour of phase change material in finned rectangular enclosures under different inclination angles. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2018, 97, 94-108.
- [14] Han G S, Ding H S, Huang Y, et al. A comparative study on the performances of different shell-and-tube type latent heat thermal energy storage units including the effects of natural convection. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2017, 88, 228-235.
- [15] Seddegh S, Wang X L, et al. Comparison of heat transfer between cylindrical and conical vertical shell-and-tube latent heat thermal energy storage systems. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 130, 1349-1362.
- [16] Akshayveer, Kumar A, Singh A P, et al. Effect of novel PCM encapsulation designs on electrical and thermal performance of a hybrid photovoltaic solar panel. *Solar Energy*, 2020, 205, 320-333.
- [17] Gau C, Viskanta R. Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall. *Journal of Heat Transfer*, 1986, 108, 174-181.

VT-RWCE 算法优化质量交换网络

熊思恒, 崔国民*, 肖媛

(上海理工大学能源与动力工程学院; 上海市动力工程多相流动与传热重点实验室, 上海 200093)

摘要: 强制进化随机游走算法 (RWCE) 在优化质量交换网络时, 个体间独立进化在一定程度上能够避免算法早熟收敛, 但也会造成种群中一些落后个体由于缺乏信息交流, 长期处于劣势地位。鉴于此, 本文提出一种模拟病毒扩散的强制进化随机游走算法 (VT-RWCE), 将种群中的个体定义为四类, 模拟病毒传播的行为, 通过变异操作进行解的邻域搜索。此外, 通过感染机制实现个体间的信息交流, 促使落后个体实现强制更新。最后通过算例验证了算法的可行性与有效性。

关键词: 质量交换网络; 强制进化随机游走算法; 启发式算法; 优化

0 前言

质量交换网络^[1]作为过程系统的重要环节, 能够在保证经济性的前提下有效降低排放流股的污染物浓度, 实现清洁生产^[2]。质量交换网络优化方法可分为分步优化^[3]和同步优化^[4]方法。其中同步优化方法以同步综合优化模型^[5]为基础, 实现传质单元数量、传质负荷与贫流股流量的同步优化, 优化效果较好。

启发式算法受模型非凸、非线性影响较小, 在可接受的时间内能够得到不错的结果, 因此被广泛应用于质量交换网络综合问题的求解。李绍军等^[6]提出一种 Alopex—遗传算法, 对匹配顺序和传质量进行不同的交叉与变异操作, 提升算法的结构变异能力。都健等^[7]以传质溶度差作为优化变量, 并提出一种模拟退火遗传混合算法进行求解, 提升优化效率。谢会等^[8]基于组分区间的无分流超结构模型, 使用列队竞争算法进行求解, 是一种模拟生物进化的群体搜索算法。Tao 等^[9]在粒子群算法的基础上提出了一种混合离散粒子群算法, 采用一种新的方式更新粒子速度, 优化了算法性能。马秀宝等^[10]使用强制进化随机游走算法^[11]优化质量交换网络, 算法通过连续变量的随机进化同步影响整型变量的优化, 同时利用接受差解极值跳出局部极值。

RWCE 算法在优化质量交换网络时, 种群内个体单独进化, 在一定程度上避免了算法的早熟收敛, 但也造成了种群内一些落后个体无法通过与优势个体进行信息交流更新结构。本文提出一种借鉴病毒传播的 RWCE 算法 (VT-RWCE), 将个体结构定义为病毒的 RNA, 模仿病毒感染传播 RNA 的过程实现个体信息交流。通过质量交换网络算例验证算法的可行性与有效性。

1 质量交换网络数学模型

1.1 有分流节点非结构模型

本文使用有分流节点非结构模型^[12]优化质量交换网络。该模型基于非结构的思想, 尽可能简化结构模型参数, 减少匹配限制, 结构表达形式更加灵活, 潜在的结构更多。模型示意图如图 1 所示, 富、贫流股分别用红色和蓝色线条表示, 箭头代表流动方向, 富、贫节点使用空心圆圈表示。在结构参数中, $ir(ir \in Nr)$ 和 $is(is \in Ns)$ 分别表示富、贫流

股编号, $jr(jr \in Ndr)$ 和 $js(js \in Nds)$ 分别表示富、贫流通股主节点编号, $kr(kr \in Nfr)$ 和 $ks(ks \in$

N_f s)分别表示富、贫流通股分支数编号。图中贫富流通股的两个节点的连线代表形成了一个质量交换器,初始状态下网络为空结构。

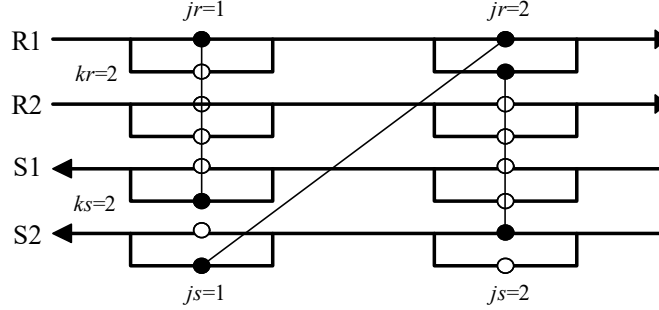


图1 有分流节点非结构模型

Fig.1 Schematic of the Nodes-based Non-structural Model with streams split

1.2 目标函数

在节点非结构模型的基础上,质量交换网络以最小年综合费用(TAC)作为目标函数,包含设备投资费用和贫流通股操作费用,如式(1)所示:

$$\min TAC = \sum_{is=1}^{Ns} (C_{is}^O \times L_{is}) + \sum_{ir=1}^{Nr} \sum_{jr=1}^{Ndr} \sum_{kr=1}^{Nfr} (C^N \times N_{ir,jr,kr}) + \sum_{ir=1}^{Nr} \sum_{jr=1}^{Ndr} \sum_{kr=1}^{Nfr} (C^H \times H_{ir,jr,kr}) \quad (1)$$

式中,第一项为贫流通股的操作费用, L_{is} 为贫流通股流量, C_{is}^O 为贫流股的年费用;后两项分别为板式塔与填料塔的投资费用, C^N 为单位塔板的费用, C^H 为单位等效塔板高度的费用; $N_{ir,jr,kr}$ 为板式塔的塔板总数, $H_{ir,jr,kr}$ 为填料塔的填料高度。

本文采用 Shenoy 等提出的公式^[13]计算质量交换器的塔板数,式中 n 取 1/3:

$$N_{ir,jr,kr} = \left(\frac{\Delta y_{ir,jr,kr}^n + \Delta y_{ir,jr,kr}^{*n}}{\Delta y_{left,ir,jr,kr}^n + \Delta y_{right,ir,jr,kr}^n} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (2)$$

式中, Δy 为传质单元富流通股进出口浓度差; Δy^* 为贫流通股出口与进口传质平衡浓度差; Δy_{left} 与 Δy_{right} 为传质单元左右两端传质驱动力。

对于填料塔,填料高度计算公式如下:

$$H_{ir,jr,kr} = \frac{M_{ir,jr,kr} \times \ln(\Delta y_{left,ir,jr,kr} / \Delta y_{right,ir,jr,kr})}{K_y a \times S \times (\Delta y_{left,ir,jr,kr} - \Delta y_{right,ir,jr,kr})} \quad (3)$$

式中, $M_{ir,jr,kr}$ 为填料塔的传质负荷; $K_y a$ 为总体积传质系数; S 为贫富流通股相互接触的传质面积。

1.3 主要约束条件

1) 流通股质量守恒

$$G_{ir} (Y_{ir}^{in} - Y_{ir}^{out}) = \sum_{jr=1}^{Ndr} \sum_{kr=1}^{Nfr} G_{ir,jr,kr} M_{ir,jr,kr} \quad ir \in N_R \quad (4)$$

$$L_{is} (X_{is}^{out} - X_{is}^{in}) = \sum_{js=1}^{Nds} \sum_{ks=1}^{Nfs} L_{is,js,ks} M_{is,js,ks} \quad is \in N_S \quad (5)$$

2) 传质单元内部质量守恒

$$G_{ir,jr,kr} (y_{ir,jr,kr}^{in} - y_{ir,jr,kr}^{out}) = L_{is,js,ks} (x_{is,js,ks}^{out} - x_{is,js,ks}^{in}) \quad (6)$$

3) 分流比约束

$$\sum_{kr=1}^{Njr} SPR_{ir,jr,kr} = 1 \quad ir \in N_R, jr \in Ndr \quad (7)$$

$$\sum_{ks=1}^{Njs} SPR_{is,jr,ks} = 1 \quad ir \in N_S, jr \in Nds \quad (8)$$

4) 质量交换器内的传质可行性约束

$$\Delta y_{left,ir,jr,kr} = y_{ir,jr,kr}^{in} - (m_{ir,is} x_{is,jr,ks}^{out} + b_{ir,is}) > 0 \quad (9)$$

$$\Delta y_{right,ir,jr,kr} = y_{ir,jr,kr}^{out} - (m_{ir,is} x_{is,jr,ks}^{in} + b_{ir,is}) > 0 \quad (10)$$

5) 贫流股流量约束

$$0 \leq L_{is} \leq L_{is}^{\max} \quad (11)$$

2 VT-RWCE 算法

RWCE 算法的种群内个体之间互相独立进化，互不干扰，这在一定程度上避免了传统群智能算法的早熟收敛问题，但这种做法仍然存在一些问题：1 部分个体可能长期处于劣势地位，无法对优化做出贡献，而且由于个体间缺乏信息交流，此类个体无法凭借正常游走进化进行良好的自我更新，只能消耗计算资源；2 因为接受差解机制的存在，一些个体搜寻到的优解可能被差解替代，可能导致错失一些潜在的更优解，如果能将这些结构传给种群内的劣势个体，则可帮助劣势个体实现结构更新的同时实现优解的保护。

2.1 算法的参数定义

种群内个体可分为四类，健康个体，轻微个体，严重个体与关键个体。其中健康个体不具备传染性，变异强度为 RH；轻微个体具有 M 的传染性，RM 的变异强度；严重个体具有 S 的传染性，变异强度为 RS；关键个体是种群内 TAC 最低的个体，具有最强的传染性 C，但是停止变异。

质量交换网络问题的一个解即为病毒的 RNA，如下所示：

$$X_i = [M_i^{D_1}, C_i^{D_2}, N_i^{D_3}, L_i^{D_4}]$$

多维数组 X_i 为一个解， i 是迭代次数， D 代表各变量的维度， M ， C ， N 和 L 分别代表传质质量多维数组，节点匹配关系多维数组，分流比和贫流股流量多维数组，这些多维数组都是基于节点非结构模型所构建的，代表一个完整的质量网络结构。

2.2 算法步骤：

Step1 初始化：初始化阶段，种群内所有个体被初始化为健康个体，健康个体的病毒 RNA 是在网络中随机产生 $\gamma \cdot N_{max}$ 个传质单元，其中 γ 为 (0,1) 的随机数， N_{max} 为初始化最大传质单元数目。

Step2 选择：选择阶段，将个体按 TAC 由低到高进行排序，选择 TAC 最低的个体作为关键个体，如果关键个体被替换，则原关键个体降级为严重个体。

Step3 恢复：恢复阶段，若种群中所有个体都为患病个体，对种群中的所有患病个体进行降级处理：即轻微个体降级为健康个体，严重个体降级为轻微个体，关键个体不降级。

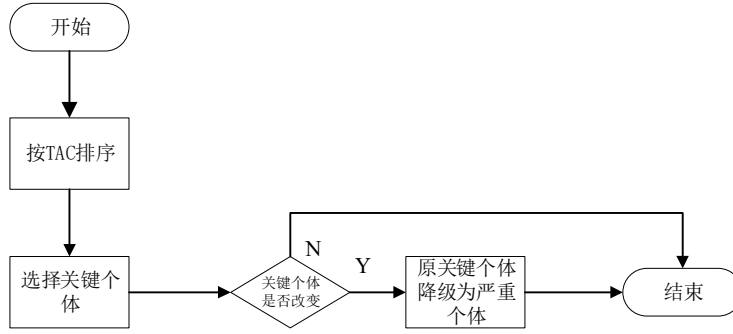


图2 选择操作流程
Fig.2 Selective operation flow chart

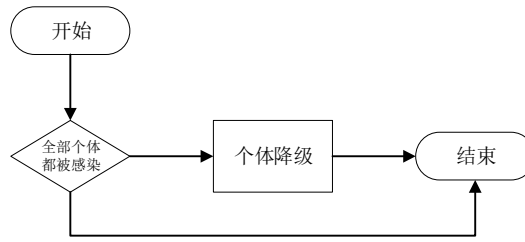


图3 恢复操作流程
Fig.3 Recovery operation flow chart

Step4 感染: 感染阶段是实现优解保护和劣势个体更新的关键阶段。在此阶段，感染个体可以通过感染健康个体将自身的 RNA 进行复制传递。首先将种群分为感染群与健康群，感染群体按照 TAC 由低到高进行排序，健康群体由高到低进行排序。然后每一个感染个体在每次迭代中最大接触 Hmax 个健康个体。健康个体被感染个体接触后有概率被感染，概率由如下的转换矩阵决定：

$$P_{trans} = \begin{bmatrix} P_{H \rightarrow S}^C & P_{H \rightarrow M}^C & P_{H \rightarrow H}^C \\ P_{H \rightarrow S}^S & P_{H \rightarrow M}^S & P_{H \rightarrow H}^S \\ P_{H \rightarrow S}^M & P_{H \rightarrow M}^M & P_{H \rightarrow H}^M \end{bmatrix}$$

其中， $P_{H \rightarrow S}^C$ 代表的即使被关键个体接触后，健康个体被感染为严重个体的概率， $P_{H \rightarrow H}^C$ 代表被关键个体接触后不被感染的概率。每一行的三个事件为互斥事件，即三者概率之和为 1，特别的被轻微个体接触后不能转变为严重个体，故 $P_{H \rightarrow S}^M = 0$ 。

为了保证种群的结构多样性，被感染后的健康个体应遵守如下规则：

- (1) 被关键个体感染的健康个体，直接复制关键个体的 RNA，以实现最优解的保护；
- (2) 被其余个体感染的健康个体可能出现如下三类情况：①直接复制传染个体的 RNA 部分复制传染个体的 RNA;②在复制过程中可能概率丢失几个传质单元;③保留健康个体的 RNA，但是成为患病个体，具有传染性以及相应的变异强度。

Step5 变异: 变异阶段，设置变异周期 ITT，主要步骤是 RWCE 算法中的个体随机游走，单元生成以及接受差解，而不同个体的变异强度由不同的算法参数确定：

$$X = [X1, X2, X3, X4, X5, X6]$$

其中 X 是变异操作中的六个关键算法参数：进化概率，传质量进化概率，最大游走

步长,生成概率,最大生成传质量,接受差解概率。不同变异强度选取不同的算法参数。健康个体采取较小参数,轻微个体与严重个体的算法参数则适当选取更大的。关键个体不参与变异。

在变异阶段,如果出现比关键个体更优的个体结构,则会保留其结构,在变异阶段结束后,将该结构传给对应个体,然后算法流程到选择阶段,进行关键个体的选择。整个算法流程如下:(初始化-选择-恢复-感染-变异)

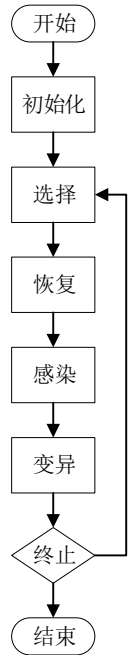


图 4 VT-RWCE 算法流程图
Fig.4 Flowchart of the VT-RWCE algorithm

3 算例分析

R2S2 算例最早由 El-Halwagi 等^[1]提出,包含两条富流股与两条贫流股,目的是为了去除焦炉气尾气中的 H_2S 和 CO_2 ,过程贫流股 S1 为稀氨水,外部贫流股 S2 为甲醇。完整的流股数据见表 1,此算例的质量交换器为板式塔,单块塔板的费用 $4,552 \$\cdot tray^{-1}\cdot a^{-1}$,年操作时间 $8150 h\cdot a^{-1}$ 。

表 1 算例 1 的流股数据
Table 1 Stream data of case 1

流股	最大流量 $/(kg\cdot s^{-1})$	入口溶度 $/(kg\cdot kg^{-1})$	目标溶度 $/(kg\cdot kg^{-1})$	m	b	C^0 $/(\$\cdot kg^{-1}\cdot a^{-1})$
R1	0.9	0.07	0.0003			
R2	0.1	0.051	0.0001			
S1	2.3	0.0006	0.031	1.45	0	117,360
S2	∞	0.0002	0.0035	0.26	0	176,040

在针对 R2S2 的算例优化研究中,Chen 和 Hung^[5]基于分级超结构模型求得最优费用为 $429,700 \$\cdot a^{-1}$,结构中含有 4 个质量交换器,S1 与 S2 上各有一组分流。近年,候创等^[14]将取整函数应用于目标函数中,得到优化结果为 $411,166 \$\cdot a^{-1}$,但结构与 Chen 的

一致，只是连续变量有所优化。目前文献最优结果是 Zhou^[9]优化得到的年综合费用为 410,476 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$ 的结果,结构中含有 4 个传质单元，但相比于 Chen 和候创等人的结构，S2 上的两个质量交换器为串联，即 S2 没有分流，这减小了外部贫流股 S2 的流量并得到了更优的传质负荷分配，从而获得了更低的年综合费用。本文的 VT-RWCE 算法得到优化结果为 406,761 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$ ，结构如图 5 所示，含有 6 个传质单元与目前文献优化结果都不相同且费用更低，表明算法良好的全局搜索能力与结构变异能力。

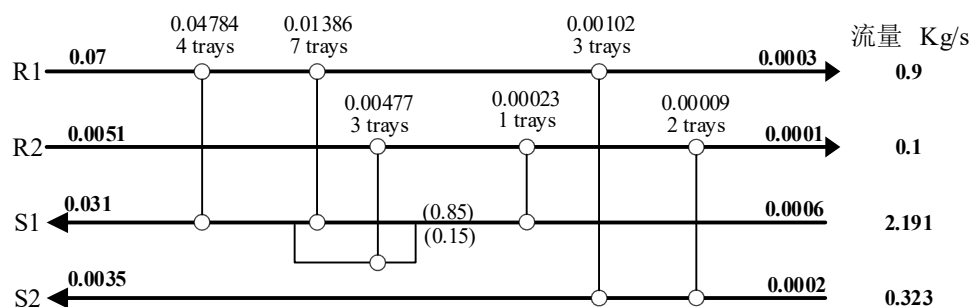


图 5 VT-RWCE 算法优化结果，TAC=406,761 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$

Fig.5 VT-RWCE algorithm optimization results, TAC=406,761 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$

表 2 算例的结果对比
Table 2 Stream data of case

文献	方法	单元数	分流：富/贫	TAC/($\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$)
Azeez[14]	SBS-GMAS	5	0/2	469,968
Chen[5]	SWS-GMAS	4	0/2	429,700
Tao[9]	PSO	4	0/2	413,200
候创[15]	LINGO	4	0/2	411,166
Zhou[9]	NNM-RWCE	4	0/1	410,476
Fig.2	VT-RWCE	6	0/1	406,761

4 结 论

本文提出了一种借鉴病毒传播的强制进化随机游走算法（VT-RWCE），将种群内给体分为四类，模拟病毒的传播过程并使用强制进化随机游走算法完成结构的进化，感染过程作为结构的传递，促使种群内的落后个体转变为最优个体。此外，在感染过程中，设立了突变机制，即结构的传递不是全部复制，而是有概率的会丢失某些单元，保证了不会出现所有个体结构相同的情况。最后通过一个算例验证，相比目前文献最优所得结果下降了 3,715 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$ ，表明了算法的可行性与有效性。

参考文献

- [1] El-Halwagi M M, Manousiouthakis V. Synthesis of Mass Exchange Networks. *AIChE Journal*, 1989, 35(8): 1233-1244.
- [2] Short M, Isafiade A J. Thirty Years of Mass Exchanger Network Synthesis—A systematic review. *Journal of Cleaner Production*, 2021, 304: 127112.
- [3] Yanwarizal, Oladosu W A, Wan Alwi S R, Manan Z A, Fraser D. A New Graphical Approach for Simultaneous Trgeting and Design of Mass Exchange Networks. *Computers & Chemical Engineering*, 2020, 142: 107061.
- [4] Papalexandri K P, Pistikopoulos E N, Floudas A. Mass-exchange Networks for Waste Minimization-a Simultaneous Approach. *Chemical Engineering Research & Design*, 1994, 72(3): 279–294.

-
- [5] Chen C L, Hung P S. Simultaneous Synthesis of Mass Exchange Networks for Waste Minimization. *Computers & Chemical Engineering*, 2005, 29(7): 1561-1576.
- [6] 李绍军, 阳永荣. 利用改进的遗传算法进行质量交换网络的最优综合. *化工学报*, 2002, 53(01): 60-65.
LI Shao-Jun, YANG Yong-Rong. Mass Exchanger Networks Synthesis Using Genetic-alopex Algorithms[J]. *CIESC Journal*, 2002, 53(01): 60-65.
- [7] 都健, 高志辉, 陈理, 等. 采用浓度差同步优化的质量交换网络设计. *化工学报*, 2007, 58(7): 1768-1775.
DU Jian, GAO Zhi-Hui, CHEN Li, et al. Mass Exchange Network Design Using Simultaneous Optimization of Composition Differences. *CIESC Journal*, 2007, 58(7): 1768-1775.
- [8] 谢会, 史彬, 鄢烈祥, 等. 列队竞争算法综合质量交换网络. *计算机与应用化学*, 2010, 27(12): 1617-1620.
XIE Hui, SHI Bing, YAN Lie-Xiang, et al. Mass exchange networks synthesis using line-up competition algorithm. *Computers and Applied Chemistry*, 2010, 27(12):1617-1620.
- [9] Tao S H, Jiang M M, Liu M Y, et al. A Mixed Discrete PSO Algorithm for Synthesis of Mass Exchange Network with Incompatible Multicomponent. *Chemical Engineering Transactions*, 2017, 61: 709-714.
- [10] 马秀宝, 盖照亮, 崔国民, 等. 基于强制进化随机游走算法的质量交换网络综合. *计算物理*, 2021,39(04): 479-490.
MA Xiu-Bao, GAI Zhao-Liang, CUI Guo-Ming, et al. Mass Exchanger Network Synthesis Based on Random Walk Algorithm with Compulsive evolution. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2021, 39(4): 479-490.
- [11] Zhou Z Q, Cui G M, Xiao Y. A Novel Node-based Non-structural Model for Mass Exchanger Network Synthesis Using a Stochastic Algorithm. *Journal of Cleaner Production*, 2022, 376: 134227.
- [12] Xu Y, Kayange H A, Cui G M. A Nodes-based Non-structural model Considering a Series Structure for Heat Exchanger Network Synthesis. *Processes*, 2020, 8(6): 695.
- [13] Shenoy U V, Fraser D M. A New Formulation of the Kremser Equation for Sizing Mass Exchangers. *Chemical Engineering Science*, 2003, 58(22): 5121-5124.
- [14] Azeez O S, Isafiade A J, Fraser D M. Supply-based Superstructure Synthesis of Heat and Mass Exchange Networks. *Computers & Chemical Engineering*, 2013, 56: 184-201.
- [15] 侯创, 罗明生, 徐文星. 取整函数优化基于超结构模型的质量交换网络. *化学反应工程与工艺*, 2020, 36(02): 108 - 116.
HOU Chuang, LUO Ming-Sheng, XU Wen-Xing. An Integral Function to Optimize the Mass Exchange Network Based on Superstructure Model. *Chemical Reaction Engineering and Technology*, 2020, 36(2): 108-116.

横掠管束湍流流动标量混合实验研究

罗昀昊¹, 谢箫阳¹, 付浩², 赵后剑², 李晓伟¹, 吴莘馨¹

(1. 清华大学核能与新能源技术研究院, 北京 100084

2. 华北电力大学核科学与工程学院, 北京 100084)

(Tel: 010-62784825, E-mail: lixiaowei@tsinghua.edu.cn)

摘要: 高温气冷堆主换热器(蒸汽发生器和中间换热器)传热管是工作温度最高的一回路冷却剂压力边界, 其温度已接近高温合金的使用极限。管束内部温度均匀性对其设计及安全可靠运行具有重要影响。蒸汽发生器和中间换热器的螺旋管束对温度标量的混合效应会帮助展平温度不均匀性, 标量混合系数是准确分析和预测管束内部温度不均匀性的前提。在冷态风洞中, 使用 CO₂ 浓度标量混合扩散代替温度标量混合扩散, 测量了不同雷诺数下横掠直管束和倾斜交叉管束流动的标量混合过程。然后基于多孔介质假设, 通过高斯拟合方法获得了描述管束多孔介质标量扩散的宏观 Pe 数。结果发现, 在实验雷诺数范围内, Pe 数对雷诺数变化不敏感。在相同雷诺数下, 交叉倾斜管束相比直管束具有更小的 Pe 数, 即更好的混合效果。实验测量得到的 Pe 数将应用于中间换热器多孔介质热工水力程序, 从而使其能够准确预测温度分布并研究温度均匀性影响因素。

关键词: 二氧化碳, 标量混合, 横掠管束, 多孔介质

0 前言

高温气冷堆具有固有安全性和能够提供高温工艺热等优点。在高温气冷堆的热量输运和传递路径中, 主换热器(中间换热器或蒸汽发生器)传热管是所有一回路冷却剂压力边界中承受温度最高的金属部件。与航空发动机叶片和涡轮盘等小尺寸、短时(几千小时)、可更换的高温部件不同, 高温气冷堆主热交换器的高温部件具有尺寸大、设计寿命长(30 万小时)、不可更换等特点。长时高温会使材料的蠕变断裂应力大大降低、蠕变变形量大大增加。即便采用耐高温合金(如 Inconel 6617 合金、GH3128 合金和 Hasteloy X 合金等), 也会导致其高温许用应力仅为个位数(例如 950°C 时), 仅为常温的十分之一甚至二十分之一。如果管束内部出现过大的温度不均匀性, 当一二次侧平均温度达到设计值时, 传热管最高工作温度必然会超过设计值。另外, 过大的温度不均匀性还会导致管束汇集联箱或者管板出现非常大的热应力, 最终会导致大体积金属部件出现热疲劳损坏。因此高温气冷堆蒸汽发生器及中间换热器螺旋管束内部需要保证合理的温度均匀性。螺旋管束的热混合效应可以帮助展平温度不均匀性, 热混合系数是蒸汽发生器及中间换热器多孔介质分析程序的重要输入参数。因此需要针对横掠管束流动的热混合效应进行研究。

对于工业大体积且结构复杂的换热设备(如高温气冷堆中间换热器以及蒸汽发生器), 目前仍难以直接采用 N-S 方程或雷诺平均 N-S 方程全部模拟其内部对流换热温度场, 使用多孔介质简化的模拟仍是目前最为方便有效的方法。Fallows 等人[1]基于多孔介质模型针对英国先进气冷堆(Advanced Gas-cooled Reactor, AGR)开发了一个计算蒸汽发生器传热管束内温度不均匀性的程序。通过程序计算结果调整了 AGR 蒸汽发生器二次侧给水的质量流量分配, 降低了蒸汽发生器内部温度不均匀性, 提高了反应堆功率。Olson 等人[2]基于多孔介质假设编写了高温气冷堆螺旋管式直流蒸汽发生器壳侧二维、管侧一维的多孔介质分析程

序,分析研究了高温气冷堆蒸汽发生器的温度敏感性。从横掠管束多孔介质能量控制方程分析可知, Peclet 数 (Pe) 可以描述管束区域的宏观温度混合效应, 如方程(1)所示。

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

式中 u 和 v 分别是多孔介质平均速度的流向 (x) 和横向 (y) 分量, $a = \lambda_{\text{eff}} / \rho c_p$ 为有效热扩散系数, 其中 λ_{eff} 为有效导热系数, ρ 是多孔介质平均密度, c_p 是定压比热。 $Pe = uD/a$, 因此 Pe 数可以描述宏观混合效应。

Liu 和 Masliyah[3]以及 Taylor[4]研究发现在多孔介质中热量有以下六种运输方式,

- (1).通过固相 (此时把固相看作连续介质) 的导热;
- (2).通过液相或气相 (此时把液相或气相看作连续介质) 分子扩散运输的热量;
- (3).通过液相或气相对流运输的热量;
- (4).通过液相或气相热弥散运输的热量;
- (5).从固相传递到液相或气相的热量;
- (6).由于热辐射造成相邻固体间的热量传递 (该过程仅当流体为气体时发生)。

在流体横掠管束过程中, 会在传热管后形成随时间不断摆动的涡, Gao 等人[5]在文中提到尾迹摆动会对热混合效应造成巨大影响。因此, 等效导热系数 λ_{eff} 主要包括分子扩散系数, λ_m , 湍流扩散等效导热系数, λ_{turb} , 热弥散等效导热系数, λ_{disp} 。其中热弥散包含多孔介质中的流道迂曲度效应以及管束中的尾迹摆动、流束的分离与合并等效应。对于横掠管束流动的温度混合效应, 起最主要作用的是热弥散作用。

目前有两种针对横掠管束流动获得宏观 Pe 数的方法。其一是 Fallows 等[1]提出的差分法, 即采用测量数据直接对温度的二阶导数进行中心差分离散计算得到 Pe 数, 具体计算方法如下式所示。

$$Pe = D \frac{d^2 T}{dy^2} = D \frac{\Delta x}{2(\Delta y)^2} \left[\frac{T_{i+1,j+1} + T_{i+1,j-1} - 2T_{i+1,j}}{T_{i+1,j} - T_{i,j}} + \frac{T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 2T_{i,j}}{T_{i+1,j} - T_{i,j}} \right] \quad (2)$$

Jones 等人[6]通过实验方法研究了气体横掠管束时的温度混合效应, 并使用差分法计算得到了顺排光滑管束、顺排翅片管束、叉排光滑管束和叉排翅片管束的 Pe 数。其在文中提到因为实验是点测量, 差分法很难精确计算温度的二阶导数, 精度有限 (误差在 38%)。

另一种方法是 Li 等人[7]提出的高斯拟合法。在流动入口处设置高斯分布边界条件, 可得到多孔介质假设下经简化的二维对流扩散标量方程的解析解, 得到标量分布的函数表达式 (其中含有 Pe 数)。采用标量分布函数形式对测量结果进行拟合, 对比解析解和拟合曲线指数项即可得到 Pe 数。Li 通过数值计算并应用高斯拟合方法分析了高温气冷堆蒸汽发生器横掠管束流动的温度混合效应, 并与前人研究结果对比验证了方法的准确性。高斯拟合方法的具体内容将在 1.2.2 小节介绍。

前人对于横掠管束流动状态对管束热混合效应也进行了研究, 但总体来说分散度较大, 研究结果不统一。Achenbach[8]通过实验方法研究顺排管束, 得到 Pe 数随雷诺数不变化为常数的结论。Gulich[9]研究了顺排管束流动以及 Efferding 等人[10]研究了顺排和叉排管束流动, 认为 Pe 数随 Re 增大会显著下降; Li 等人针对顺排和错排管束进行研究, 认为 Pe 随 Re 略有下降, 但下降幅度很小, 且 Pe 数在 10 附近, 这与和 Marshak 等人[11]和 Gao 等人[5]的结论一致。

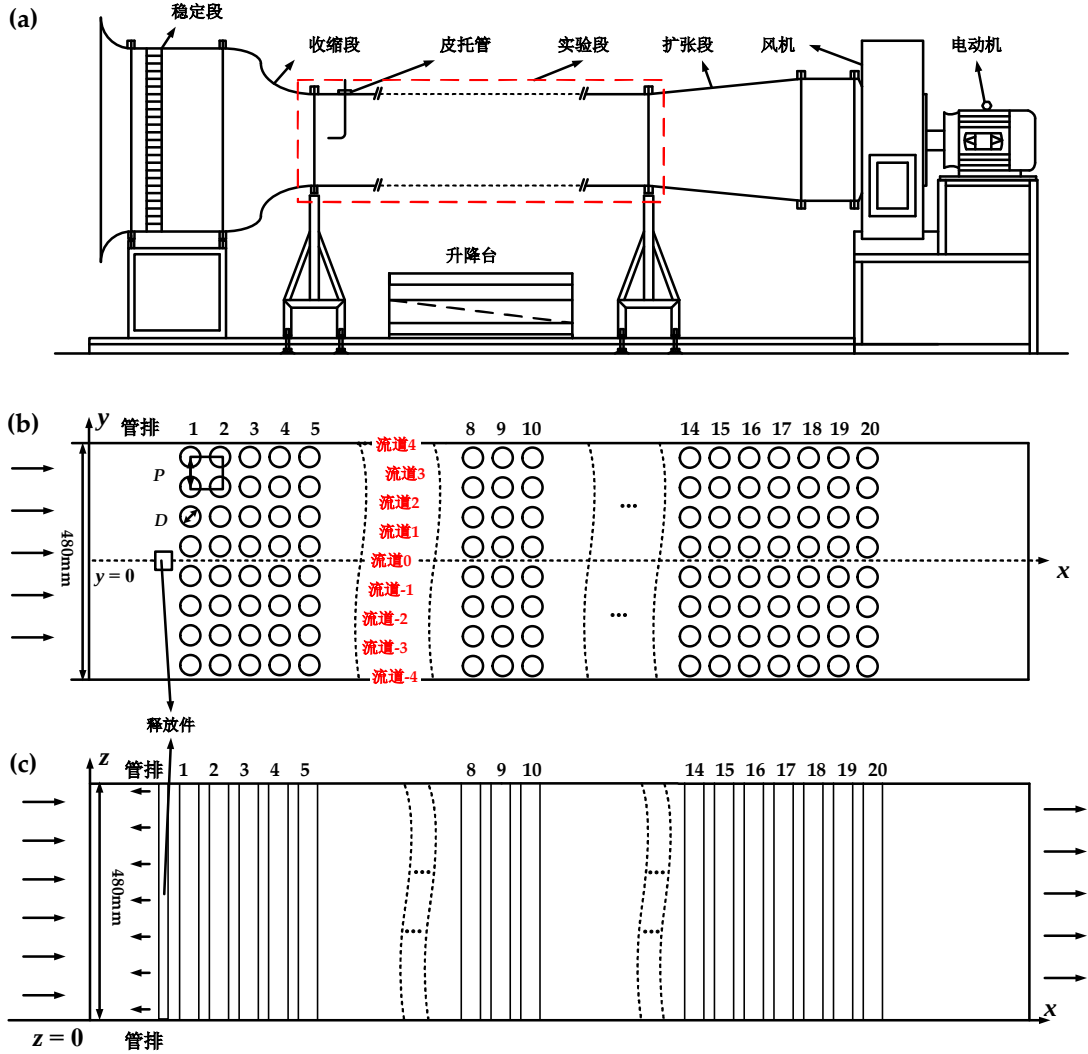
由此可见, 目前关于横掠管束流动的温度混合效应研究并不充分, 并且对于不同管束排布方式的研究还有待补充。基于以上研究现状, 本文提出以 CO_2 浓度测量代替温度测量的实验方法, 研究不同雷诺数时两种管束排布方式的标量混合效应, 得到 Pe 数并与前人的结

果进行对比。实验测量得到的 Pe 数将应用于中间换热器多孔介质热工水力程序（将基于蒸汽发生器器多孔介质程序改编[2]），从而使其能够准确预测温度分布并研究温度均匀性。

1 实验方法

1.1 实验设备

图 1(a)为实验所用的风洞系统示意图,图 1(b)至(d)分别展示直管束和交叉管束两种排布方式的实验件俯视图和主视图。风洞为开式,其主要结构由收缩段、稳定段、实验段、扩散段以及风机组成。皮托管固定于实验段前部,用于实时测量风洞入口处的风速。通过变频器调整风机频率改变风速,以实现不同雷诺数测量。实验截面为 $480\text{mm} \times 480\text{mm}$ 。关于风洞实验系统的更多介绍可参见文献[12]和[13]。本次实验共有两个实验件,一个为正方形排列的直管束,其内部为流向 25 排横向 8 列管束,管间距为 60mm ,管直径为 38mm ,间径比为 1.58,其主视图和俯视图分别如图 1(b)和(c)所示;另一个为交叉管束,其内部为流向 20 排横向 8 列管束,其管间距和管直径与直管束一样,但相邻两列分别向前后倾斜 21° ,模拟相邻层反向缠绕的螺旋管束,其主视图和俯视图分别如图 1(d)和(e)所示。为了便于说明,我们设定坐标如图 1(f)所示, x 方向表示流动方向, y 方向表示同时垂直于流动方向和高度方向的纵深方向, z 方向表示实验件的高度方向。其中 $y = 0$ 位于流道 0 中心处, $z = 0$ 位于实验件底部,又因为实验截面为 $480\text{mm} \times 480\text{mm}$,即 y 方向坐标下限为 -240mm ,上限为 240mm , z 方向坐标下限为 0mm ,上限为 480mm 。



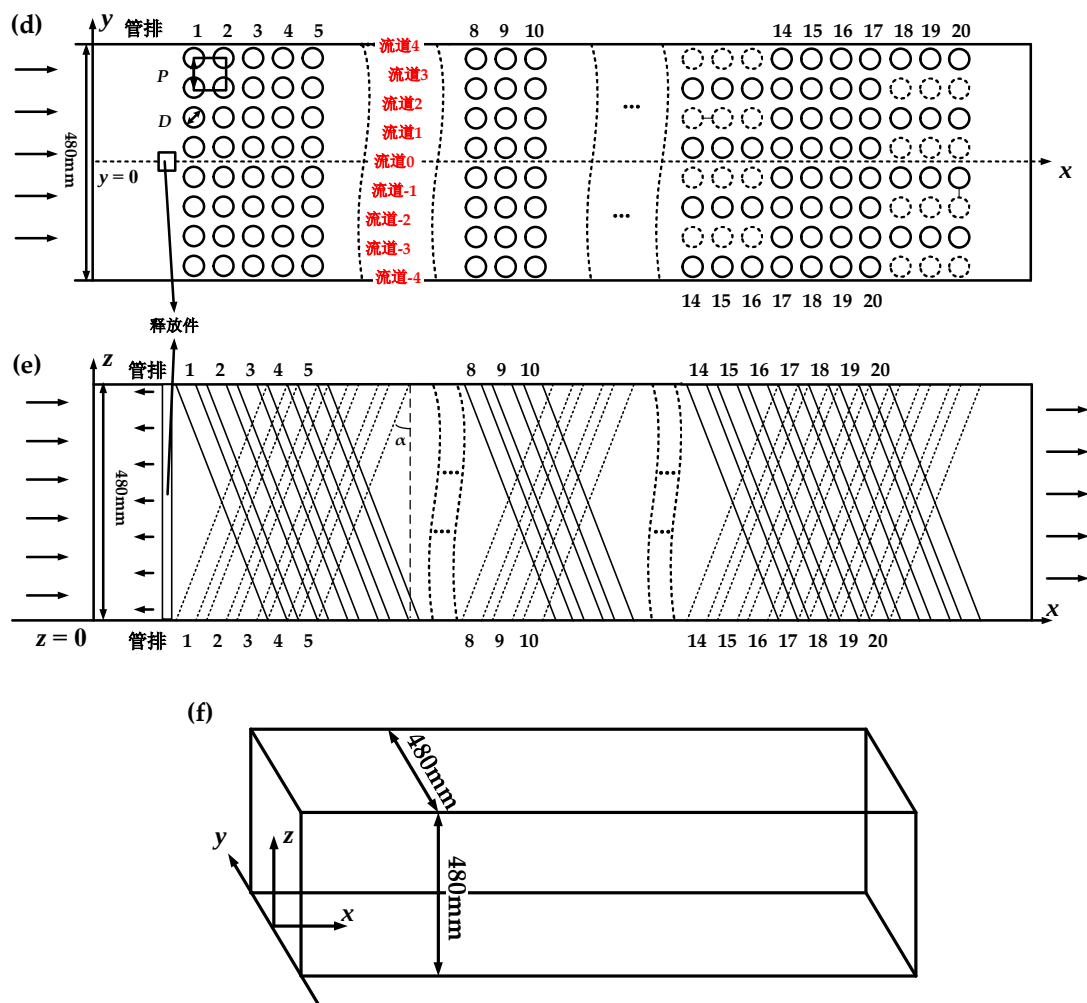


图1 实验台和实验件示意图 (a)风洞实验台 (b)直管束实验件俯视图 ($P/D = 1.58$) (c)直管束实验件主视图 (d)交叉管束实验件俯视图 (倾斜角度 $\alpha = 21^\circ$) (e)交叉管束实验件主视图 (f)实验台坐标系[12]

由于温度和浓度均为被动标量，本文实验中通过测量 CO_2 浓度分布代替温度分布以获得横掠管束湍流流动标量混合系数。实验中首先检验了释放件释放的 CO_2 沿 z 方向均匀性，结果如图 2 所示，结果表明释放件释放的 CO_2 在 z 方向上的分布均匀性较好。实验时将释放件[14]放在如图 1(c)所示位置 ($y = 0$)。释放口朝向风洞入口，如图 1(c)所示。

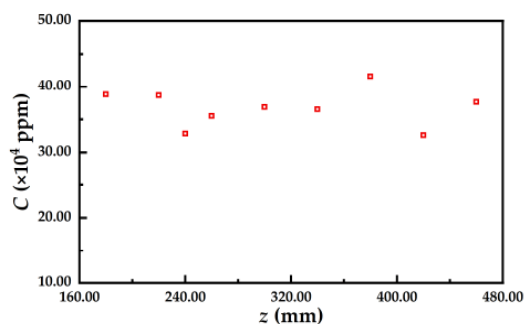


图2 沿高度方向 CO_2 释放均匀性

实验中，采用 Testo 570 分析仪测量管束间二氧化碳浓度在 y 方向的分布，测量点位于图 1(b)中红点所示位置（测量点均位于 $z = 240\text{mm}$ 的平面）。直管束测量点在 5、10 排管后，交叉管束测量点在 5、9 排管后。每排测量 9 个点，分别位于流道-4 至流道 4 中心处。

采样频率为 1/3Hz，采样时间为 2min。分析仪吸入流量为 1L/min，被吸入的气体经由分析仪检测 CO₂ 浓度。测量前分析仪需要调零，具体方法是设备在初始化时吸气口接含 CO₂ 吸收剂（生石灰）的管段，以获得测量零点。

1.2 数据处理方法

1.2.1 管束 Re 数定义

实验需要研究不同 Re 下的混合效应，而横掠管束流动 Re 定义如下：

$$u_{gap} = \frac{u_{in}P}{P-D}, \quad Re = \frac{u_{gap}D}{\nu} \quad (3)$$

式中 u_{in} 为实验段入口风速， u_{gap} 为管间速度，其中 D 是管的外径， P 是管束间距。

1.2.2 管束 Pe 数及其获取方法

Pe 数用于描述多孔介质标量混合效应，其由经简化的二维对流扩散标量方程得到。将流体横掠管束的流动简化为流体流过多孔介质的流动。假设管束是二维的，二维对流扩散能量方程可以描述热混合过程，假设温度沿 y 方向分布服从高斯分布。因为横向温度二阶梯度 $\partial^2 T / \partial y^2$ 远小于流向温度二阶梯度 $\partial^2 T / \partial x^2$ ， y 方向平均速度 ν 等于 0。由(1)式可得，二维对流扩散标量方程可简化为以下形式：

$$\frac{\partial T}{\partial x} = K \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (4)$$

式中 K 的定义是 $K = a/u = D/Pe$ 。Pe = uD/a ，代表流动的对流能力与扩散能力的相对大小，因此 K 也是表征混合能力的参量。由此可知管束温度混合效应越小，等效导热系数越小，Pe 越大；反之亦然。

采用具有高斯分布的入口温度边界条件，方程以及求解条件如下所示：

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{1}{K} \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \\ T(0, y) = A + B e^{-\frac{y^2}{2\Delta^2}} \\ \left. \frac{\partial T(x, y)}{\partial y} \right|_{y=\pm\infty} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

运用分离变量法进一步得到带有待定系数的温度表达式，如下所示。

$$\begin{aligned} T(x, y) &= C_1 + C_2 e^{-\frac{y^2}{g(x)} f(x)} \\ g(0) &= 2\Delta^2 \\ f(0) &= 1 \end{aligned} \quad (6)$$

进一步求解得到二维对流扩散能量方程解，如下所示。

$$T(x, y) = A + B \frac{\Delta}{\sqrt{K}} \left(2x + \frac{\Delta^2}{K} \right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{y^2}{4Kx + 2\Delta^2}} \quad (7)$$

本文中采用的拟合曲线表达式如下所示。

$$T = T_0 + A_0 e^{-\frac{(y-y_c)^2}{2w^2}} \quad (8)$$

对比以上两者可得解的指数分母项应该与拟合表达式的指数分母项一致，如下所示。其中 Δ 是初始高斯分布的半高宽， x 是目标处截面和初始高斯分布的截面位置之间的 x 方向距离。由此可以得到参数 K 值，进而得到 Pe 数。

$$2w^2 = 4Kx + 2\Delta^2$$

$$K = \frac{w^2 - \Delta^2}{2x} \quad (9)$$

同时对比两者系数项也可以获得参数 K ，不同于指数分母项，系数项需要初始分布中的系数项 B ，即初始高斯分布幅值。但对于目标处也只需要高斯分布的峰值和边界值即可得到拟合处的幅值 A_0 。具体表达式如下所示：

$$A_0 = B \frac{\Delta}{\sqrt{K}} \left(2x + \frac{\Delta^2}{K} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$K = \frac{\left(\frac{B^2}{A_0^2} - 1 \right) \Delta^2}{2x} \quad (10)$$

具体实验中以第 5 排 CO_2 浓度为初始高斯分布，而第 10 排 CO_2 浓度（交叉管束为第 9 排）为目标高斯分布。

1.3 数据处理方法的验证

上文提到两种获得 Pe 数的方法，以交叉管束数据为例分别用两种方法多次得到 Pe 数如图 3 所示。此可证明两种方法得到的 Pe 数相对误差在 10% 以内，两种方法均可获得准确的 Pe 数。

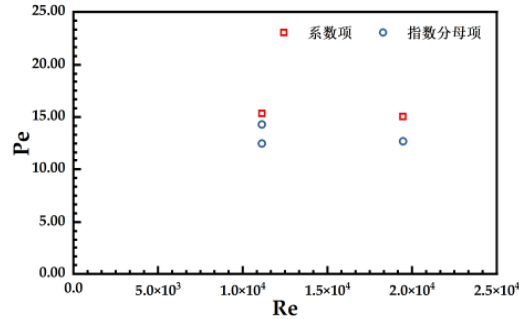


图 3 两种方法获得 Pe 数对比 ($P/D=1.58$ 的交叉管)

2 结果与讨论

图 4 是当 $Re = 10285$ 和 18000 时， $P/D=1.58$ 直管束管后的经过时间平均的二氧化碳浓度以及拟合得到的高斯分布曲线，10 排管后峰值浓度降低，由此可知初始分布的峰值由于流动的混合效应而得到不同程度的展平。图 5 为 $Re = 10285$ 和 18000 时， $P/D=1.58$ 倾斜管束管后经过时间平均的二氧化碳浓度以及拟合得到的高斯分布曲线。

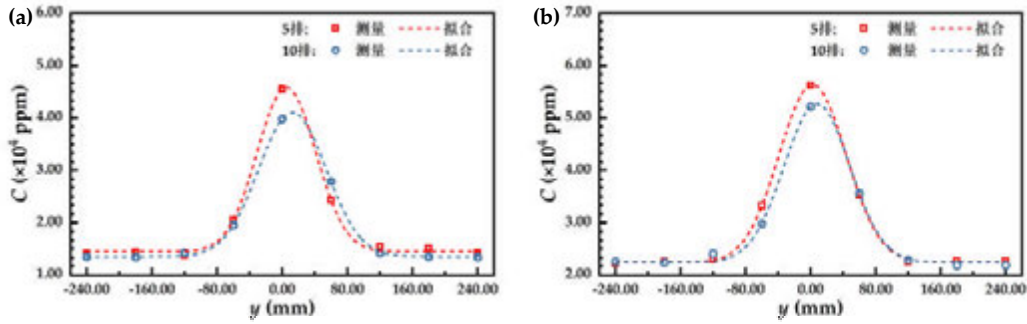


图4 $P/D=1.58$ 的直管束管后位置 CO_2 浓度分布

(a) $\text{Re} = 10285$ (b) $\text{Re} = 18000$

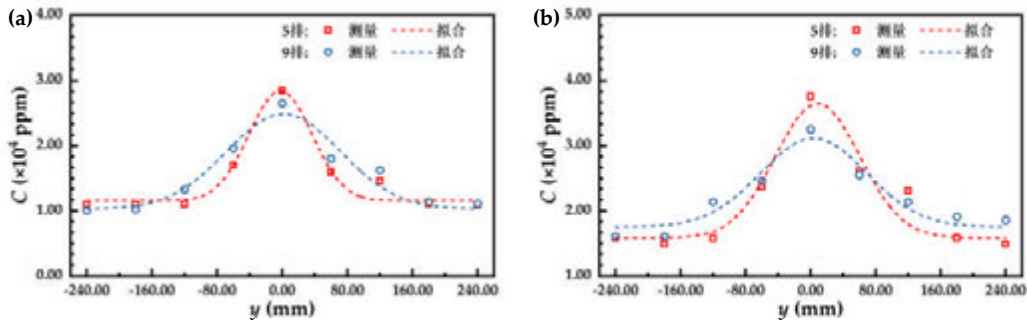


图5 $P/D=1.58$ 的 21° 倾斜交叉管束管后位置 CO_2 浓度分布

(a) $\text{Re} = 10285$ (b) $\text{Re} = 18000$

图6为相同间距比 ($P/D = 1.58$) 下通过系数项对比得到的在不同 Re 数下 ($\text{Re} = 5491$ 、 10285 、 18000) 的两种不同管束的 Pe 数，由此可见 Re 数变化时 Pe 数基本不变，即混合效果与速度基本无关。这是因为管后尾迹摆动是混合效应的主要组成部分，在涉及到的 Re 范围内横掠管束尾迹流动结构不变。此外，直管束的 Pe 数为 24，约为 2 倍交叉管束的 Pe 数，说明交叉管束的混合效应明显好于直管束。这是由于交叉管束使内部流动通道更加曲折，致使流体的宏观混合效果更好。

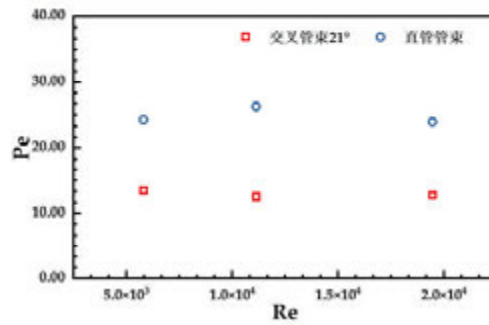


图6 两种管束排布方式的 Pe 数随 Re 数变化

图7为本文以及之前各学者通过数值模拟或者实验得到的横掠管束流动混合 Pe 数的对比图。从图中可以看出，在 $\text{Re}=5000\sim 150000$ 范围内，横掠管束流动 Pe 的范围大致在 $1\sim 30$ 。

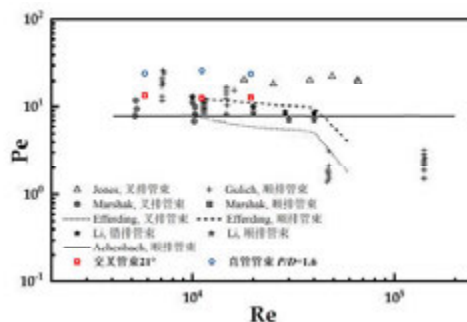


图 7 各学者得到的 Pe 数对比

3 结论

将标量在管束内的扩散过程进行简化,求解得到了具有高斯型分布的浓度在管束内沿流向扩散过程的解析解,在此基础上提出了准确获取标量混合系数(Pe 数)的两种方法。然后利用湍流对标量输运的一致性,在冷态直流风洞中采用 CO_2 浓度扩散代替温度扩散过程,实现了标量混合系数的测量。得到的结论主要包括:

1. 根据简化的二维对流扩散方程的解析解,提出以拟合高斯型曲线系数项获取 Pe 数的方法,并将结果与指数项方法对比,验证了其正确性。
2. 在冷态风洞实验台上,测量了 CO_2 浓度沿流向的扩散过程,拟合得到了横掠管束湍流流动扩散的标量混合系数,可用于多孔介质程序能量方程中的温度混合系数。
3. 对于 $P/D = 1.58$ 的直管束与 21° 倾斜交叉管束,直管束的混合效应明显低于交叉管束,直管束的 Pe 数约为交叉管束 Pe 数的 2 倍。
4. 在 $Re = 5000 \sim 20000$ 范围内, $P/D = 1.58$ 的倾斜交叉管束和直管束的混合 Pe 数数值基本不随雷诺数变化。

4 致谢

本工作在大型先进压水堆及高温气冷堆国家科技重大专项(ZX06901)和国家自然科学基金(51906068)资助下完成,在此表示感谢。

5 参考文献

- [1] T. Fallows, C.R. Gane, R.C. Jones, Recent developments in multi-tube steadystate nuclear boiler codes [C]. Proceedings of the third international conference on boiler dynamics and control in nuclear power stations, Harrogate, 1985.
- [2] Olson J T, Li X, Wu X. Tube and shell side coupled thermal analysis of an HTGR helical tube once through steam generator using porous media method [J]. Annals of Nuclear Energy, 2014, 64: 67-77.
- [3] Liu S, Masliyah J H. Dispersion in porous media [M]. Handbook of porous media. CRC Press, 2005: 99-160.
- [4] Taylor G. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube [C]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1953, 219(1137): 186-203.
- [5] Gao W, Li X, Wu X. Numerical simulation of thermal mixing of cross flow over tube bundles [C]. International Heat Transfer Conference Digital Library. Begel House Inc., 2018.
- [6] Jones R C, Lis J, Massey T H. An experimental investigation of thermal mixing in cross-flow tube banks [C]. Sixth International Heat Transfer Conference, 1978(IV): 255-60.

- [7] Li X, Wu X. Thermal mixing of the cross flow over tube bundles [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013, 67: 352-361.
- [8] Achenbach E J. Dispersion of hot spots in steam generators [C]. Proceedings of Technology of Steam Generators for Gas-Cooled Reactors, 1987: 9-12.
- [9] Gülich J F. Bestimmung der turbulenten Austauschkoefizienten in quer angeströmten Rohrbündeln [J]. Wärme-und Stoffübertragung, 1973, 6(2): 92-100.
- [10] Efferding L E, Landa J F. Experiment on gas mixing in a cross-flow tube bundle [R]. Gulf General Atomic, Inc., San Diego, Calif., 1969.
- [11] Marshak Y, Kuvaev Y, Chernavskii S. Study of the mixing capacity of turbulence promoting tube bundles [J]. Thermal Engineering, 1967, 14(10): 5.55-61.
- [12] 谢箫阳, 马安祥, 赵后剑, 李晓伟, 吴莘馨. 气体横掠顺排管束流动特性实验研究 [J]. 工程热物理学报, 2023, 44(4): 1015-1022.
- [13] Xie X, Ma A, Zhao H, Li X, Wu X. Experimental investigation and analysis on the cross flow characteristics over inline tube bundles with $S/D=1.875$ [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2023, 203: 123800.
- [14] 李晓伟, 吴莘馨, 秦亥琦, 谢箫阳, 马安祥. 气体释放构件及设备. 中国发明专利 (CN202210780002.1) (公开) .

一种基于非结构模型的换热网络经济性和可靠性综合优化方法

陈怡^{1,2}, 肖媛^{*1,2}, 崔国民^{1,2}

(1.上海理工大学 能源与动力工程学院, 上海 200093; 2.上海市动力工程多相流动与传热重点实验室, 上海 200093)

(Tel: 18317049950, Email: xiaoyuan@usst.edu.cn)

摘要: 传统上, 换热网络的设计主要是以经济性作为驱动目标, 但可靠性作为换热网络中的一个性能参数, 也是十分重要的。本文基于节点非结构模型建立了一种换热网络经济性和可靠性综合优化方法, 首先提出了非结构化网络的可靠性识别方法; 在此基础上通过约束处理和罚函数法将多目标优化问题转化为单目标优化问题; 进而采用强制进化随机游走算法实现了经济性和可靠性的综合优化。通过 9SP 算例的验证, 得到年度综合费用为 2,894,052 USD $\cdot$ a⁻¹ 时, 换热网络可靠性为 0.75; 年度综合费用为 2,924,858 USD $\cdot$ a⁻¹ 时, 可靠性为 0.83, 为最优换热网络的经济性和可靠性匹配, 证明了经济性和可靠性同步综合优化方法的有效性。

关键词: 换热网络; 可靠性; 节点非结构; 经济性

0 前言

换热器网络是过程系统工程中的一个重要研究领域。钱学森教授明确指出, “在研究一个大而复杂的系统(不论是技术领域或经济领域)时就不能不考虑它的可靠性。不仅是其各个组成部分的可靠性, 更要研究它们组成的整个系统的可靠性”。因此, 协调经济性和可靠性的换热网络结构分析, 具有十分重要的意义。

随着国家经济的不断发展, 环境污染日益加重, 经济性不再成为唯一优化的目标, 可靠性等因素被考虑, 从而将单目标优化问题转化为多目标优化问题。近些年来, 很多专家和学者也对此做出了研究。Rad 等^[1]采用状态空间方法, 并将生产成本与效用可靠性(提高系统的修理率或降低系统的故障率)相结合; Yi 等^[2]提出了一种全新的方法, 通过识别依赖于 HES 连接类型的不相关子网络, 使用数学表达式来估计 HEN 的系统可靠性, 对于不满足约束条件的换热网络, 采用网络解耦的方式提高系统的可靠性。相较于仅优化经济性的单目标优化问题, 多目标优化问题中各个目标函数之间的权重是一个有待解决的难点问题, 即无法在保证经济性最优的条件下, 得到具有较好的可靠性的换热网络结构。传统的多目标优化算法有加权求和法、 ϵ -约束法。加权求和法就是给每个目标函数分配一个权重因子, 加和, 其中各权重因子加和为 1, 缺点是权重的选择较为困难; ϵ -约束法是选取多个目标函数中的一个为目标函数, 其余作为约束条件, 从而可以将多目标优化问题转换为单目标优化问题。无论是加权求和法, 还是 ϵ -约束法, 均受人主观意识的影响较大, 无法与实际情况紧密联系。

本文针对以上多目标优化问题中的权重难以平衡的问题, 建立了基于多目标优化的节点非结构模型 (NNM), 给出了基于该模型的可靠性识别方法, 对经济性和可靠性进行了同步综合优化, 避免了对经济性和可靠性权重的选择, 得到经济性和可靠性最佳的换热网络匹配。

1 基于节点非结构 (NNM) 的换热网络的经济性模型

1.1 问题描述

节点非结构模型^[2]是以节点形式完成换热单元之间的匹配等功能。以 2 条热流股($N_H = 2$)、4 条冷流股($N_C = 4$)为例, 如图 1 所示。其中, 冷热流股上的节点数 $N_{GDH} = 6$, $N_{GDC} = 6$ 。

所以换热网络中的热流股上的总节点数为 $P_H = N_{GDH} * N_H$ ，冷流股上的总节点数为 $P_C = N_{GDC} * N_C$ 。冷流股和热流股的末尾处节点代表冷热公用工程。

针对节点非结构模型的换热网络进行可靠性的分析，换热网络的已知初始数据为：冷热流股主节点数 N_C 、 N_H ，冷热流股的进出口温度 T_{in} 、 T_{out} ，热容流率 F ，传热系数 h 以及冷热公用工程的温度 T_{CU} 、 T_{HU} 。换热网络的优化变量为：流股匹配关系、热交换器的热负荷以及孤立换热器的个数。

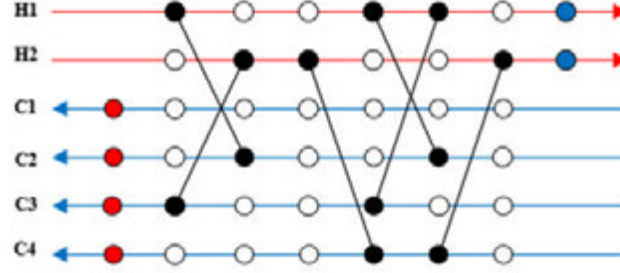


图 1 节点非结构模型
Fig.1 Node non-structural model

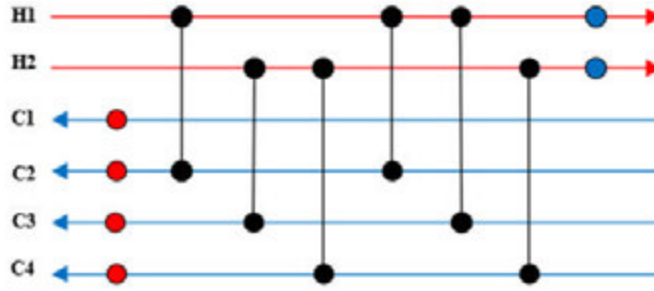


图 2 节点非结构模型（垂直处理）
Fig.2 Node non-structural model (vertical processing)

1.2 数学模型

本文建立的模型中包含两个目标函数：以 TAC 形式表示的经济性目标函数和以 R 形式表示的可靠性目标函数。

1.2.1 经济性

以最小年度综合费用（ TAC ）衡量换热网络的经济性，费用组成主要包括三个部分：固定投资费用、公用工程费用、换热器费用。数学表达式如式(1)所示：

$$\begin{aligned} \min TAC = & \sum_{i=1}^{N_H} \sum_{NUM_{H,i}=1}^{SUM_H} (F_{FIX} E_{i,NUM_{H,i}} + C_A A_{i,NUM_{H,i}}^\beta) \\ & + \sum_{i=1}^{N_H} (F_{FIX} E_{CU,i} + C_A A_{CU,i}^\beta + C_{CU} Q_{CU,i}) + \sum_{j=1}^{N_C} (F_{FIX} E_{HU,j} + C_A A_{HU,j}^\beta + C_{HU} Q_{HU,j}) \end{aligned} \quad (1)$$

i, j ——热、冷流体编号

SUM_H, SUM_C ——每股热、冷流体上的节点总数

$NUM_{H,i}, NUM_{C,j}$ ——每股热、冷流体上的节点编号

F_{FIX} ——换热单元固定投资费用

$E_{i,NUM_{H,i}}, E_{CU,i}, E_{HU,j}$ ——判断换热单元、冷热公用工程存在与否的 0-1 变量

C_A ——换热单元面积费用系数

β ——换热单元面积费用系数

$A_{i,NUM_{H,i}}$ ——换热单元的换热面积

$A_{CU,i}, A_{HU,j}$ ——冷、热公用工程换热面积

C_{CU}, C_{HU} ——冷、热公用工程运行费用系数

$Q_{CU,i}, Q_{HU,j}$ ——冷、热公用工程换热量

换热单元的面积 A_i 、 $A_{CU,i}$ 以及 $A_{HU,i}$ 的计算公式如式(2)-(4)所示:

$$A_{i,NUM_{H,i}} = \frac{Q_{i,NUM_{H,i}}}{U_{i,j} * LTMD_{i,NUM_{H,i}}} \quad (2)$$

$$A_{CU,i} = \frac{Q_{CU,i}}{U_{CU,i} * LMTD_{CU,i}} \quad (3)$$

$$A_{HU,j} = \frac{Q_{HU,j}}{U_{HU,j} * LMTD_{HU,j}} \quad (4)$$

$Q_{i,NUM_{H,i}}, Q_{CU,i}, Q_{HU,j}$ ——换热器以及冷热公用工程的换热量

$U_{i,j}, U_{CU,i}, U_{HU,j}$ ——换热网络中的换热器、冷公用工程、热公用工程的传热系数

$LTMD_{i,NUM_{H,i}}, LTMD_{CU,i}, LTMD_{HU,j}$ ——换热网络中的换热器、冷公用工程、热公用工程的对数平均温差

其中, 对数平均温差的计算公式如式(5)-(7)所示:

$$LTMD_{i,NUM_{H,i}} = \frac{(T_{in,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{out,C}^{L_i,NUM_{H,i}}) - (T_{out,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{in,C}^{L_i,NUM_{H,i}})}{\ln((T_{in,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{out,C}^{L_i,NUM_{H,i}})/(T_{out,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{in,C}^{L_i,NUM_{H,i}}))} \quad (5)$$

$$LTMD_{CU,i} = \frac{(T_{out,H}^{i,last,H} - T_{out,CU}^{i}) - (T_{out}^i - T_{in,CU}^i)}{\ln((T_{out,H}^{i,last,H} - T_{out,CU}^{i})/(T_{out}^i - T_{in,CU}^i))} \quad (6)$$

$$LTMD_{HU,j} = \frac{(T_{in,HU} - T_{out}^j) - (T_{out,HU} - T_{out,C}^{j,1})}{\ln((T_{in,HU} - T_{out}^j)/(T_{out,HU} - T_{out,C}^{j,1}))} \quad (7)$$

$T_{in,H}^{i,NUM_{H,i}}, T_{out,H}^{i,NUM_{H,i}}$ ——第 i 股热流体上的 $NUM_{H,i}$ 个节点处进出口温度;

$T_{in,C}^{L_i,NUM_{H,i}}, T_{out,C}^{L_i,NUM_{H,i}}$ ——第 i 股热流体上的第 $NUM_{H,i}$ 个节点所连接的冷节点的进出口温

度;

$T_{out,H}^{i,last,H}$ ——第 i 股热流体上的最后一个节点处的进出口温度;

$T_{out,CU}^{i}$ ——热流股上的冷公用工程的出口温度;

$T_{out,C}^{j,1}$ ——第 j 股冷流体上的第一个节点处的进出口温度;

$T_{in,HU}^{i}$ ——冷流股上的热公用工程的进口温度;

另外, 当 $T_{in,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{out,C}^{L_i,NUM_{H,i}} = T_{out,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{in,C}^{L_i,NUM_{H,i}}$, $T_{out,H}^{i,last,H} - T_{out,CU}^{i} = T_{out}^i - T_{in,CU}^i$, $T_{in,CU}^{i} - T_{out}^j = T_{out,HU}^{i} - T_{out,C}^{j,1}$ 时, 对数平均温差的计算公式如下 (8) - (10) 式所示:

$$LTMD_{i,NUM_{H,i}} = T_{in,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{out,C}^{L_i,NUM_{H,i}} \quad (8)$$

$$LTMD_{CU,i} = T_{out,H}^{i,last,H} - T_{out,CU}^{i} \quad (9)$$

$$LTMD_{HU,j} = T_{in,HU}^{i} - T_{out}^j \quad (10)$$

1.2.2 经济性约束

(1) 热平衡约束

热平衡条件是指每个换热匹配要满足的平衡条件以及每股流体要满足的平衡条件。换热匹配间的热平衡条件如式(11)、式(12)所示:

$$Q_{NUM_{H,i}} = (T_{in,H}^{i,NUM_{H,i}} - T_{out,H}^{i,NUM_{H,i}}) * FC_{pi} = (T_{out,C}^{L_i,NUM_{H,i}} - T_{in,C}^{L_i,NUM_{H,i}}) * FC_{pj} \quad (11)$$

$$Q_{NUM_{C,j}} = (T_{out,C}^{j,NUM_{C,j}} - T_{in,C}^{j,NUM_{C,j}}) * FC_{pj} = (T_{in,H}^{L_j,NUM_{H,j}} - T_{out,H}^{L_j,NUM_{H,j}}) * FC_{pi} \quad (12)$$

每股流体上的公用工程均要满足下面的热平衡条件,如式(13)、式(14)所示:

$$Q_{CU,i} = (T_{out,H}^{i,last_H} - T_{out}^i) * FC_{pi} \quad (13)$$

$$Q_{HU,j} = (T_{out}^j - T_{out,C}^{j,1}) * FC_{pj} \quad (14)$$

因此,每股流体必须满足以下的热平衡条件,如式(15)、式(16)所示:

$$(T_i^{in} - T_i^{out}) * FC_{pi} = \sum_{NUM_H=1}^{last_H} Q_{NUM_H,i} + Q_{CU,i} \quad (15)$$

$$(T_j^{in} - T_j^{out}) * FC_{pj} = \sum_{NUM_C=1}^{last_C} Q_{NUM_C,j} + Q_{HU,j} \quad (16)$$

(2) 温度可行性约束

对于温度可行性的约束,热流股的出口温度大于目标温度,冷流股上的出口温度小于目标温度。因此,温度可行性约束条件的表达式如式(17)、式(18)所示:

$$T_{out}^i \leq T_{out,H}^{i,last_H} \quad (17)$$

$$T_j^{out} \geq T_{out,C}^{j,1} \quad (18)$$

(3) 最小温差的约束

对于最小平均温差的约束,主要是为了保证对数平均温差以及算术平均温差的非负性,最小温差的约束主要包括:热流股的进口温度大于热流股的出口温度等约束条件。

2 换热网络可靠性以及识别方法

对于换热网络的可靠性计算流程,主要基于强制进化随机游走算法(RWCE)^[4]进行计算。对于算法的计算流程,主要包括初始化、进化、选择、变异等步骤。

换热网络的系统可靠性可以对单个单元或者整个系统进行测量。对于可靠性的评估指标,主要是搜索换热网络中的不相关子系统,即孤立系统。选取初始换热网络的可靠性为 0.98,基于此,对换热网络的可靠性评估,公式如式(19)所示:

$$R = 0.98^{NUM_{EX} - NUM_{GL}} \quad (19)$$

NUM_{EX} 是指换热网络中所有换热器的个数; NUM_{GL} 是指换热网络中孤立的换热器个数。

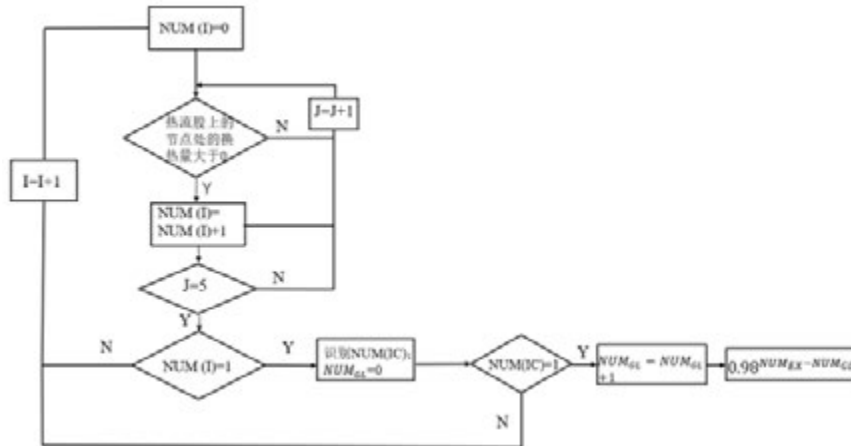


图3 可靠性流程图

Fig.3 Reliability flowchart

其中, $NUM(I)$ 是第 I 条热流股上的节点数目, $NUM(IC)$ 是第 IC 条冷流股上的节点数; NUM_{GL} 是换网络中热流股的编号; J 是指换热网络中热流股上的主节点的编号(由于流股上

的节点数个数为 5，所以当 $J=5$ 时表明第 I 条热流股遍历结束）。

对于可靠性的计算过程，最主要是对孤立换热器的个数进行识别。因为孤立换热器与其它换热器之间并不存在耦合关系，因此在计算可靠性时，对孤立的换热器采用消除机制。首先遍历换热网络热流股上的数目，对于节点数目为 1 的热流股，记作数组 1；当节点数目不为 1 时，记作数组 0；对于数组为 1 的热流股，识别其节点所连接的冷流股的节点数，当冷流股上仅有一个节点时，说明该换热器是一个孤立换热器。换热网络可靠性的具体实现流程如图 3 所示。

为了进一步清楚地说明换热网络的可靠性计算过程，对图 2 所示的经过垂直处理的 6SP 换热网络的结构图进行可靠性计算。首先遍历第一条热流股上的节点数，发现第一条热流股上有 3 个换热量大于 0 的节点，此时对孤立换热器的个数情况不做处理；紧接着遍历第二条热流股上的节点数，发现第二条热流股上换热量大于 0 的节点数为 3。此时热流股上的节点数已经搜索结束，换热器的个数为 6，根据可靠性的计算公式，可靠性为 0.98⁶。

3 经济性和可靠性的相互影响分析

为了更好地耦合经济性和可靠性之间的关系，并不只是单纯地追求经济性的提升，因而对换热网络的可靠性和经济性随着迭代步数的变化进行分析，如图 4 和图 5 所示是在个体数为 1 的情况下，对 9SP 和 15SP 算例进行了 5×10^7 次迭代得到的经济性和可靠性随着迭代步数变化的趋势图，为后续进行换热网络可靠性的计算提供理论支撑。

由图 4 和图 5 可知，在迭代的前期，随着迭代步数的增加，费用迅速下降，而可靠性却呈现出上下浮动的状态，但是总体来看还是位于上升的状态；在迭代后期，随着迭代步数的增加，费用和可靠性均逐渐趋于稳定。经过分析，基于节点非结构模型的换热网络具有较好的可靠性主要是因为在前期换热网络之间存在较少的匹配关系，换热器结构较少。因而，在迭代前期，存在一个费用较优，可靠性较好的状态，此时就是经济性和可靠性最好的耦合状态。经过比较两个算例的可靠性，15SP 的算例相较于 9SP 的算例在后期具有较好的可靠性，主要是由于 15SP 存在较多的流股数，后期匹配的可能性较大，结构变化幅度不大，算法中的一系列机制对其影响较小。

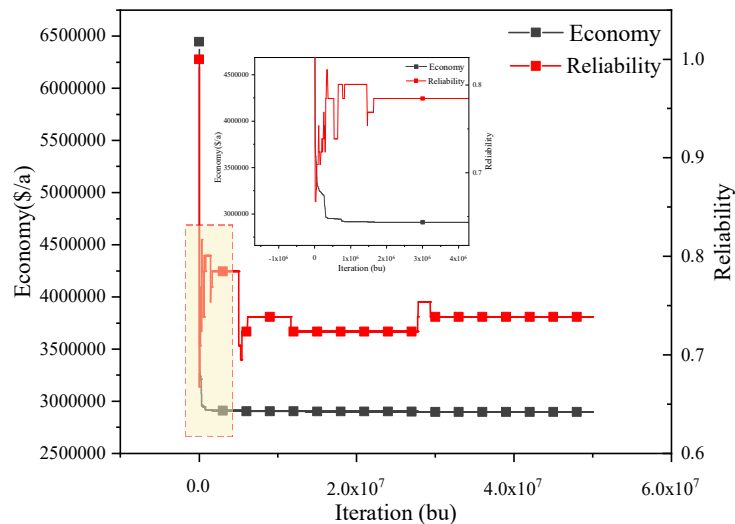


图 4 可靠性和经济性随步长变化曲线图(9SP)
Fig.4 Reliability and economy with step size (9SP)

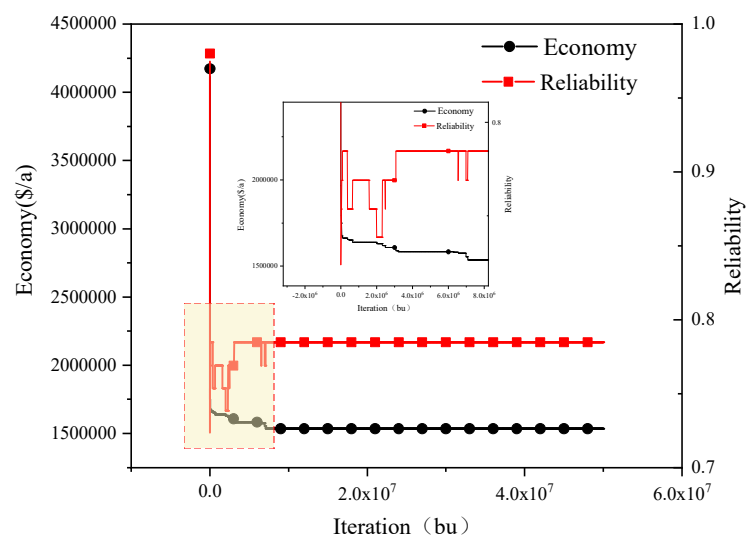


图 5 可靠性和经济性随步长变化曲线图(15SP)
Fig.5 Reliability and economy as a function of step size (15SP)

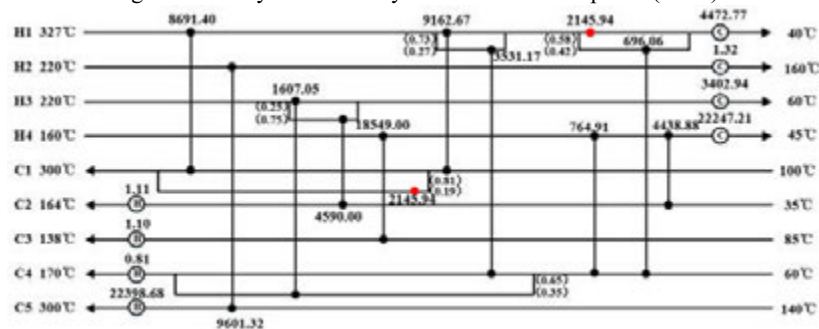


图 6 换热网络结构图(9SP 算例, R 为 0.83)

Fig.6 Heat exchange network structure diagram (9SP study, R is 0.83)

如图 6 所示为个体数为 1 时的 9SP 算例的换热网络结构图。经过可靠性流程的计算, 得到上述换热网络的可靠性为 0.83。为了证明可靠性计算流程的准确性, 利用文献^[5]中的方法对可靠性进行校核计算, 过程如表 1 所示。

表 1 换热网络转化为矩阵图

Tab.1 Conversion of heat exchange network into matrix diagram

	H1	H2	H3	H4	C1	C2	C3	C4	C5
E1	1 →	0	0	0	1 ↓	0	0	0	0
E2	0	1	0	0	0	0	0	0	1
E3	0	0	→ 1	0	0	0	0	1 ↓	0
E4	0	0	→ 1	0	0	↓ 1	0	0	0
E5	0	0	0	1	0	0	1	0	0
E6	↓ 1	0	0	0	← 1	0	0	0	0
E7	↓ 1 →	0	0	0	0	0	0	← 1 ↓	0
E8	0	0	0	↓ 1	0	0	0	← 1	0
E9	→ 1	0	0	0	0	0	0	↓ 1	0
E10	0	0	0	↓ 1 →	0	← 1	0	0	0

经过对文献^[4]中可靠性方法的参考, 在 9SP 算例中进行可靠性方法的检测, 第一轮搜索结束后, 得到 E1 和 E6 之间存在耦合关系, 记作数[1,6,7,8,10];第二轮搜索后, 得到 E3、

E7 和 E9 之间存在耦合关系，记作数组[3,7,9]；第三轮搜索后，得到 E4 和 E10 之间存在耦合关系，记作数组[4,10]；最后一轮搜索，得到 E5、E8 和 E10 之间存在耦合关系，记作数组[5,8,10]。

上述四个数组之间求交集后，可以得到[1,3,4,5,6,7,8,9,10]，以得到换热器的可靠性计算结果为 $0.98^9=0.83$ ，满足可靠性的约束条件，与上述得到的可靠性结果一致，证明了上述可靠性计算方法的有效性，但是相较于上述文献方法，本文的识别方法可实现优化过程中结构可靠性的自动识别，提升可靠性计算效率。

4 经济性和可靠性综合优化

基于上述对经济性和可靠性之间关系分析，进一步实现经济性和可靠性之间的综合优化，因此将可靠性的约束条件转换为更加明确的参数指标，经过大量的程序运行可知，基于节点非结构模型的可靠性位于 $R = 0.7$ 左右。因此，当可靠性的约束条件小于 0.7 时，利用惩罚的机制进行处理。对于进入程序的约束条件个数，当存在过多的约束条件进入程序，不仅会增加程序运行的时间，还会在一定程度上影响计算结果的精度。

所以，对于经济性的约束条件，只是将最小温差的限制条件作为约束条件，对于其他的限制条件仅作为判断条件；对于可靠性的约束条件，当约束条件得不到满足时，即 $R < 0.7$ ，将其加入到罚函数中，由于在罚函数中存在经济性的目标函数，所以可以实现经济性和可靠性之间的一个耦合提升。由于惩罚涉及到经济性和可靠性，所以目标函数主要是包括最小年度综合费用 TAC 以及可靠性目标函数 R。对于惩罚函数的形式，如式(20)所示：

$$F_{(x,y,r^{(k)})} = \phi_{(x)} + r^{(k)} \left(\sum_{u=1}^m g_{u(x)}^2 + \sum_{v=1}^p |h_{v(x)}| \right) + r^{(k)} \left(\sum_{u=1}^m g_{u(y)}^2 + \sum_{v=1}^p |h_{v(y)}| \right) \quad (20)$$

在经济性和可靠性综合优化的过程中，其中的 $\phi_{(x)} = \min TAC + R$ ，设计变量为各个换热器的面积 $x = [A_{i,j}]$ $i \in N_H, j \in N_C$ 。采用自适应惩罚机制，对于惩罚系数的更新关系，如下式(21)-(23)所示：

$$r^{(k+1)} = \frac{1}{\beta_1} * r^{(k)} \quad \text{if case1} \quad (21)$$

$$r^{(k+1)} = \beta_2 * r^{(k)} \quad \text{if case2} \quad (22)$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} \quad \text{otherwise} \quad (23)$$

其中case1代表前 k 代均为可行解，case2代表前 k 代均为不可行解，其中 $\beta_1 > 1, \beta_2 > 1$ 。为了能够更大范围搜索到求解域边界处的点，引入约束裕量 δ ，也能有效防止对换热网络迭代过程的影响。由于变量量级存在影响，导致灵敏度影响约束条件无法得到满足，因而会影响迭代过程，因而在计算的过程中必须要对变量进行规格化，使变量发生在 0—1 之间。约束条件如式(24)所示：

$$g(y) = 1 - \frac{R - \delta}{0.7} \quad (24)$$

采用惩罚机制对可靠性约束条件进行处理，从而实现经济性和可靠性之间的耦合关系，实现两者之间的综合优化。

5 算例分析

基于节点非结构模型的可靠性方法计算，将其应用于下列 9SP 算例。个体数增加为 20，如表 2 所示为算法的主要进化参数。在进行换热网络优化的过程中，可靠性和经济性之间总是成反比例的关系。

根据上述图 4 和图 5 明显可以看出：在迭代 5×10^7 步之后，换热网络的结构愈加复杂，

结构较为稳定,可靠性不会再出现很明显的上升或者下降。因此,在迭代步数为 5×10^7 时,增加换热网络中的个体数,为换热网络流股之间提供更多的匹配可能性,平衡经济性和可靠性之间的关系,利用经济性和可靠性的综合优化方法,得到经济性和可靠性均处于较优状态的换热网络结构图,如图 7 所示, TAC 为 2,894,052 USD $\cdot$ a $^{-1}$, 可靠性为 0.75。该结果与目前文献中的换热网络结构优化结果对比如表 3 所示,由此证明了基于节点非结构模型的经济性和可靠性的综合优化方法的有效性。

表 2 RWCE 算法优化主要参数

Tab.2 Main parameters of RWCE algorithm optimization

算例	φ	ΔL_Q	ΔL_{SP}	δ	η	个体数
9SP	0.3	100	0.03	0.01	0.2	20

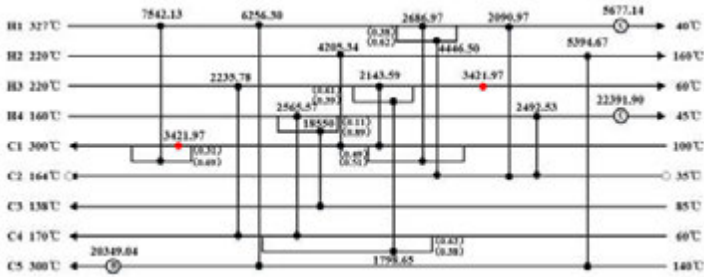


图 7 换热网络结构图 (TAC 为 2,894,052 USD $\cdot$ a $^{-1}$, 可靠性为 0.75)

Fig.7 Structure diagram of heat exchange network (TAC is 2,894,052 USD $\cdot$ a $^{-1}$, reliability is 0.75)

表 3 9SP 算例的经济性比较结果

Tab.3 Economic comparison results of the 9SP study

Ref.	Unit	TAC/USD $\cdot$ a $^{-1}$	R
Fieg et al. ^[6]	14	2,922,298	0.88
Xiao et al. ^[7]	15	2,901,696	0.85
this work (图 6)	12	2,924,858	0.83
this work (图 7)	14	2,894,052	0.76

6 结论

基于节点非结构模型,本文提出了换热网络的可靠性识别方法,并且采用惩罚的方式对换热网络的经济性和可靠性进行耦合提升,从而实现换热网络中经济性和可靠性的同步综合优化。在经济性和可靠性的优化过程中, NUM_{GL} 参数对换热网络的可靠性存在明显影响,孤立换热器存在的个数越多,各个换热器之间的耦合关系越差,换热网络的可靠性越好。换热网络经济性和可靠性的同步优化,能够保证较优年度综合总费用的情况下,存在小的失效概率,但是,由于换热器个数的限制,可靠性还是限制在 0.7 左右,后续可以进一步建立多目标综合模型,在保证较高可靠性的前提下提升换热网络系统经济性能。

参考文献

- [1] Rad M, Pouyan, et al. New procedure for design and exergoeconomic optimization of site utility system considering reliability. *Applied thermal engineering: Design, processes, equipment, economics*, 2016, 94: 478-490
- [2] Yi D, Han Z, Wang K, et al. Strategy for Synthesis of Flexible Heat Exchanger Networks Embedded with System Reliability Analysis. *中国化学工程学报: 英文版*, 2013(7): 12
- [3] Xiao Y, Ka yange H A, Cui G. Heat integration of energy system using an integrated node-wise non-structural model with uniform distribution strategy. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 152: 119497
- [4] 肖媛, 崔国民, 李帅龙. 一种新的用于换热网络全局优化的强制进化随机游走算法. *化工学报*, 2016, 67(12): 8
Xiao Yuan, Cui Guo-Min, Li Shuai-Long. A novel random walk algorithm with compulsive evolution for global optimization of heat exchanger networks. *CIESC Journal*, 2016, 67(12): 8
- [5] Lv J, Jiang X, He G, et al. Economic and system reliability optimization of heat exchanger networks using NSGA-II algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 124: 716-724
- [6] Fieg G, Luo X, Jezowski J, A monogenetic algorithm for optimal design of large-scale heat exchanger networks. *Chemical Engineering Process*, 2009, 48(11-12): 1506-1516
- [7] Xiao Y, Sun T, Cui G. Enhancing strategy promoted by large step length for the structure optimization of heat exchanger networks. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 173: 115199

基于卷积神经网络的微细通道运行参数热 诊断方法

李沛¹, 刘心怡¹, 蒋琳², 王秋旺¹, 马挺^{1*}

(1. 西安交通大学, 热流体科学与工程重点实验室, 西安 710049

2. 中国工程物理研究院应用电子学研究所)

(18789436708, mating715@mail.xjtu.edu.cn)

摘要: 本文通过微细通道流动传热可视化实验结果构建神经网络样本数据库, 在此基础上构建基于卷积神经网络的微细通道运行参数热诊断方法, 并对该方法进行了对比分析和验证。结果表明, 本文所构建的热诊断模型具有判断实验目标运行工况和热边界条件的功能, 预测精度较高, 能够实现对于流动传热参数的热诊断。

关键词: 卷积神经网络; 微细通道; 热诊断; 沸腾传热

0 前言

卷积神经网络 (CNN) 作为深度神经网络中一种经典的结构, 在视觉识别领域取得了广泛的应用。卷积神经网络诞生于上世纪 80 年代, 但当时计算机硬件水平较低, 且有效的训练数据不足。这导致卷积神经网络常常出现过拟合的现象, 对复杂图像的适用性较低, 因此该技术一直被搁置。在 2012 年, Krizhevsky 等人^[1]提出了 Alex 的深度学习模型, 在 120 万张图片中进行识别, 错误率降低到了 15.3%, 成功论证了深度学习在图像识别和特征提取上的应用潜力, 卷积神经网络便重新引领了计算机视觉领域的发展。

继 Alex 模型^[2]提出后, 众多学者在此基础上不断优化和改进, 提出了 VGG16^[3,4]、GoogLeNet、ResNet^[5]等不同的卷积神经网络模型, 并将其应用于不同的工作场景。众多学者将神经网络应用在流动传热方面, Hajir 等人^[6]利用人工神经网络将水平管内的流型和局部换热系数进行关联, 并与 Kim-Ghajar 经验关联式进行对比, 发现提出的模型准确率约 95.6%。Chu 等人^[7]利用神经网络提出了基于时频分析的间接流型识别方法, 利用

自适应最优核算法对典型压力信号进行分析，对加热和非惯性条件下窄矩形通道内的流型进行识别，发现该技术有效反映不同流态信号的特征，且具有较高的识别精度。综上所述，当前热诊断技术经过国内外学者的研究取得较大进展^[8-10]。然而由于电子束收集工作环境的特殊性，需要对多种热诊断方法进行适用性评估，并对热诊断方法进行优化。此外，神经网络流动传热方面的研究正在蓬勃发展，但将神经网络应用于热诊断方面研究不够深入，有必要开展相关的研究。

¹本文通过微细通道流动传热可视化实验结果构建神经网络样本数据库，在此基础上构建基于卷积神经网络的微细通道运行参数热诊断方法，并对该方法进行了对比分析和验证。

1 实验与分析

1.1 实验系统及实验步骤

图 1 展示了高热流密度条件下微细通道流动传热实验系统示意图，实验系统由流体回路系统、测试段、冷热源、数据采集系统等组成。流体回路系统采用开式流体回路，主要包括恒温水箱、水泵、流量计、热电阻、压力变送器、压差变送器、阀门及不锈钢管，各部件通过卡套密封连接。具体实验步骤如下：

- (1) 检查各测量装置完备良好后，调整测量仪器仪表确保示数归零，调整恒温水箱控温值达到指定温度；
- (2) 启动循环水泵，驱使去离子水从恒温水箱流经流量计、压力压差变送器，进入测试段的热壁面完成能量交换，之后返回恒温水箱；调节循环流量达到指定流量；
- (3) 改变调压器的输出电压为热源负载供电，调节循环流体流量，开展不同工况下的流动传热实验；
- (4) 采用数据采集仪记录需要测量的实验物理量（包括测试段进出口水温、循环水流量、测试段进口压力、测试段进出口压降等），并采用红外热像仪、高速摄像机分别观测通道内壁面温度变化、气泡特征。

¹ 基金项目：该工作受国家自然科学基金项目（批准号：52022080）资助。

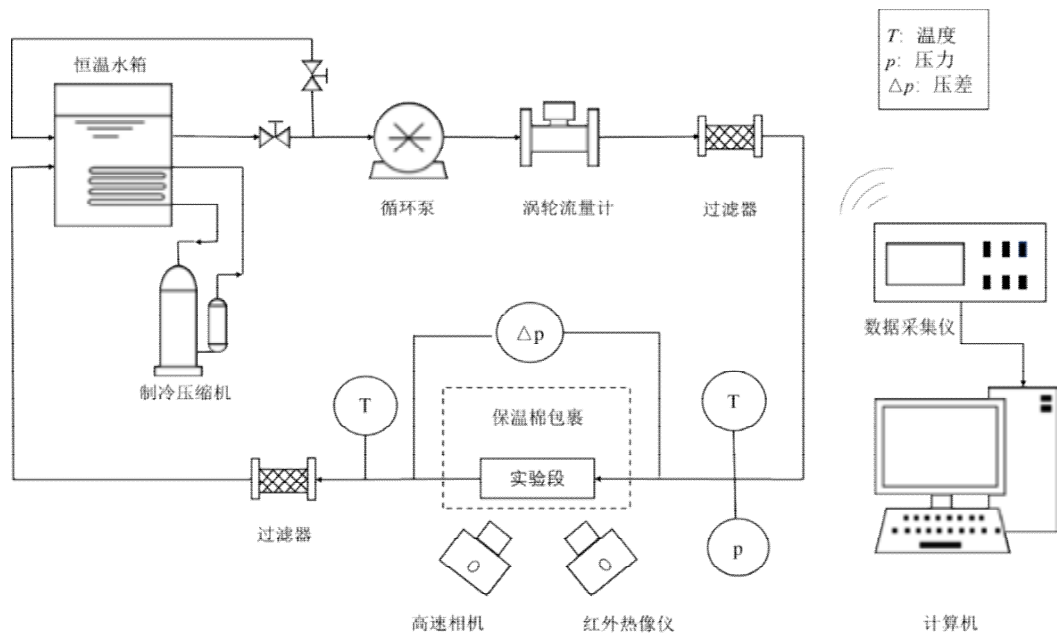


图 1 高热流密度条件下微细通道流动传热实验系统的示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the experimental system for heat transfer in microfine channel flow under high heat flow density conditions

1.2 实验不确定度分析

实验中的不确定度主要来自两个方面，一方面来自参数的直接测量不确定度，其与仪器的准确性有关。另一方面来自于直接测量参数处理得到的计算参数不确定度，可通过误差传递理论^[1]来计算得出。直接测量参数的不确定度分析如表 1 所示，计算参数的不确定分析如表 2 所示。

表 1 直接测量参数不确定度分析

Table 1 Uncertainty analysis of direct measurement parameters

参数	测量工具	最大不确定度
体积流量	涡轮流量计	2.55%
压力	压力变送器	0.75%
压降	差压变送器	4.29%
电压	调压器	3.33%
电流	电流表	8.92%
水温	热电阻	0.36%
壁温	T 型热电偶	1.48%

表 2 计算参数不确定度分析

Table 2 Uncertainty analysis of calculation parameters

参数	最大不确定度
质量流量	2.55%
质量流速	3.24%
有效热流密度	2.58%
换热系数	3.00%

2 基于卷积神经网络的热诊断预测模型

2.1 样本数据库

本文将收集归纳实验获得的不同工况条件下的气泡图像，并对实验中热源宽度、热流密度、流体流速、入口水温等流动传热指标进行精细量化，集成现有的实验条件，建立覆盖特定条件的流动传热可视化图片样本数据库。神经网络预测模型所依据的样本数据库参数如表 3 所示，数据库共分为 107 类。

表 3 流动传热可视化样本数据库

Table 3 Flow heat transfer visualisation sample database

热源宽度/mm	入口水温/℃	体积流速/m ³ ·h ⁻¹	热流密度/W·cm ⁻²	分类数量
20	30-50	0.056-0.268	57.5-114	41
30	30-50	0.056-0.268	24.2-46.7	33
50	30-50	0.056-0.268	23.3-46.4	33

2.2 热诊断神经网络预测模型构建

参考 AlexNet 模型，利用 MATLAB 深度网络设计器，采用自堆叠方式，通过修改输入层、修改卷积层、分组卷积、修改全连接层和输出层等，建立起运行参数神经网络预测模型。将其得到的预测值与经典的神经网络预测值进行对比（如表 4 所示），发现运行参数热诊断神经网络的训练准确度和验证准确度较高，在预测可靠性方面具有优势。

表 4 运行参数热诊断神经网络预测模型与经典神经网络模型准确度的对比

Table 4 Comparison of the accuracy of the neural network prediction model for thermal diagnosis of operational parameters with the classical neural network model

模型	训练准确度	验证准确度
AlexNet	94.81%	94.73%
VGG19	96.41%	95.96%
ResNet-50	95.74%	95.32%
SqueezeNet	96.51%	95.33%
运行参数热诊断神经网络	97.21%	96.88%

2.3 热诊断神经网络预测模型测试

在神经网络训练和测试完成后，将训练好的神经网络模型进行测试。在测试神经网络预测模型中，对比了 50 组不同的预测情况，整体神经网络预测性能良好，准确率约 86%。图 2 展示了神经网络预测模型的部分测试结果图。通过测试神经网络发现，运行参数热诊断神经网络预测模型具有面向微细通道运行参数进行热诊断的能力，且大部分的神经网络预测值与测试集的数据标签相吻合，仅少部分的数据存在偏差。

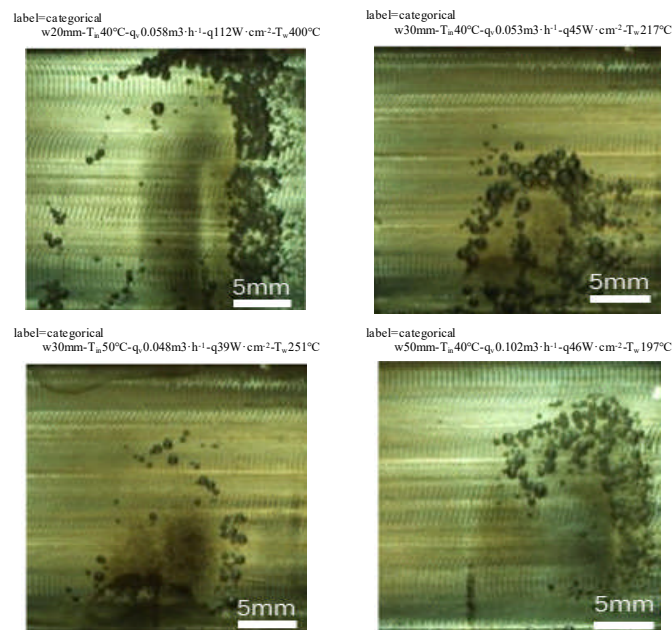


图 2 神经网络预测模型的部分测试结果

Fig.2 Selected test results of neural network prediction models

2.4 热诊断神经网络预测模型适用性分析

在获取测试集的过程中，获得热电偶测量温度和气泡特征图片，将气泡特征图片输入神经网络获得神经网络测试温度，将热电偶测量温度与神经网络测试温度值进行对比。图 3 展示了热电偶测量温度与神经网络测试温度对比结果，发现误差在±30%以内，可以满足预测要求，适用性良好。

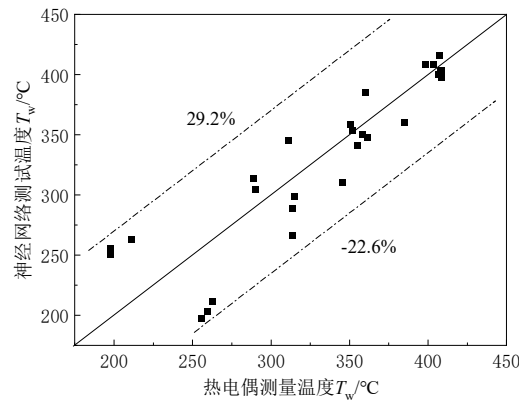


图 3 热电偶测量温度与神经网络测试温度的对比

Fig. 3 Comparison of thermocouple measured temperature and neural network tested temperature

3 结论

本文基于微细通道流动传热可视化实验数据通过修改卷积层数量、采用分组卷积、全局平均池化代替全连接层等方法，构建了运行参数热诊断神经网络预测模型，训练准确度 97.21%，验证准确度 96.88%。基于测试集对神经网络预测模型进行测试，测试准确度约 86%。经神经网络预测模型适用性评估，发现误差在 $\pm 30\%$ 以内，满足预测要求。本文所构建的热诊断模型具有判断实验目标运行工况和热边界条件的功能，预测精度较高，能够实现流动传热参数的热诊断。

参考文献

- [1] Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G, et al. ImageNet classification with deep convolutional neural networks[J]. Communications of the ACM, 2017, 60(6): 84-90.
- [2] 党宇, 张继贤, 邓喀中, 等. 基于深度学习 AlexNet 的遥感影像地表覆盖分类评价研究[J]. 地球信息科学学报, 2017, 19(11): 1530-1537.
DANG Yu, ZHANG Ji-Xian, DENG Ka-Zhong, et al. Research on ground cover classification evaluation of remote sensing images based on deep learning AlexNet [J]. Journal of Geoinformation Science, 2017, 19(11): 1530-1537.
- [3] 吴开华, 张赫, 张竞成, 等. 一种基于 VGG16 在昆虫分类学上的图像识别方法: CN111832642A[P]. 2020.

- WU Kai-Hua, ZHANG He, ZHANG Jing-Cheng, et al. An image recognition method based on VGG16 for insect taxonomy: CN111832642A [P]. 2020.
- [4] Harirchian T, Garimella S V. A comprehensive flow regime map for microchannel flow boiling with quantitative transition criteria[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010, 53(13-14): 2694-2702.
- [5] 朱媛媛, 王佳婧, 王笑梅, 等. 一种基于 CBAM-ResNet50 纸币图像检索方法: CN115661427A[P]. 2023.
- ZHU Yuan-Yuan, WANG Jia-Jing, WANG Xiao-Mei, et al. A CBAM-ResNet50 banknote image retrieval method based on CBAM-ResNet50: CN115661427A [P]. 2023.
- [6] Hajir K, Sobhanifar N. ANN-Based correlation for heat transfer coefficient of gas-liquid flow for different flow patterns in horizontal pipes[J]. Heat Transfer-Asian Research, 2015, 45(8): 815-831.
- [7] Chu A W, Liu B Y, Pan C L, et al. Identification of boiling flow pattern in narrow rectangular channel based on TFA-CNN combined method[J]. Flow Measurement and Instrumentation, 2022, 83: 102086.
- [8] Nie F, Wang H, Song Q, et al. Image identification for two-phase flow patterns based on CNN algorithms[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2022, 152: 104067.
- [9] Poletaev I, Pervunin M, Konstantin S, et al. Bubble patterns recognition using neural networks: application to the analysis of a two-phase bubbly jet[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2020, 126: 103194.
- [10] Chu W, Liu Y, Pan L, et al. Study on measure approach of void fraction in narrow channel based on fully convolutional neural network[J]. Frontiers in Energy Research, 2021, 9: 636813.
- [11] Moffat R J. Describing the uncertainties in experimental results[J]. Experimental Thermal & Fluid Science, 1988, 1(1): 3-17.

Research on Energy and Exergy analysis of new hydropower technology

Liang Chen, Xinyi Wang, Lu Wang, Xuezhi Li, Zhen li*

Key Laboratory of Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, Department of Engineering Mechanics,
Tsinghua University, Beijing 100084, China
(Tel: 010-62794679, Email: lizh@tsinghua.edu.cn)

ABSTRACT:

Owing to pressing global warming and energy crisis, the power generation technology that converts green environmental energy into electric energy has attracted enormous research interest. Water is a recyclable resource and the largest energy carrier on Earth. New hydropower generation technologies are the future, and the ability to generate electricity through the interface between water and materials is very valuable. Water evaporation power generation and moisture absorption power generation are two important methods. Hot and humid air is an important carrier of water, we establish a thermodynamic hot and humid air energy conversion analysis method based on the principle of hydropower generation, and conduct research on the energy between the difference between heat, electricity and humidity of hydropower generation technology, so as to provide solutions for improving energy utilization. The first law of thermodynamics and the second law of thermodynamics are the two foundations of thermodynamics, and the maximum available energy of hydropower generation is analyzed by exergy and parametric calculations. Energy is contained in various differences. The greater the difference, the greater the available energy. Through analysis, the energy and efficiency of hydropower generation are evaluated, and relevant application strategies are provided to provide theoretical and practical support for the development of green energy. In order to improve the power generation capacity of this power generation mode, it is necessary to constantly improve the difference between the two states. Also, a power generation with Al_2O_3 nanoparticles is fabricated, and an open-circuit voltage is above 2.5V and a short-circuit current is around 150nA.

KEY WORDS: Exergy Analysis, water evaporation power generation, moisture absorption power generation, renewable energy

1. INTRODUCTION

Since the industry revolution, human has continuously created a diversified world through technological innovation. The consumption and demand of energy resources have been growing. Energy crisis, environmental pollution and other problems have been growing. Green and sustainable development has become a new development requirement. Electric energy is a high quality secondary energy, and the thermal power generation is an important way at present. At the same time, nuclear power, wind power, solar power and other new energy also account for a certain proportion. These power generation technologies can relieve energy pressure. In addition, there are some new environmental energy conversion technologies, such as thermoelectric power generation^[1], piezoelectric generation^[2], triboelectric generation^[3], water evaporation power generation, moisture absorption power generation, etc. Among them, water evaporation power generation and moisture absorption power generation are self driven in the environment, requiring only water. They are promising clean renewable energy sources.

In recent years, new functional materials have involve nanoscale materials and inorganic-organic materials containing carbon elements. Upon the interaction between water molecules and new functional materials, they can induce the migration of anions and cations at the solid-liquid interface or inside the material. There is charge migration at different end faces of the material, resulting in potential differences. Current and voltage can be measured in external circuits.

The two main types of electricity generation methods and mechanisms, namely water evaporation and moisture absorption, are based on various micro-scale electricity generation mechanisms. The first and

基金项目: 清华大学中国移动通信集团有限公司联合研究院项目 (20232930009)

Tsinghua University China Mobile Communication Group Co., Ltd. Joint Research Institute Project(20232930009).

foremost is the theory of the "electrical double layer" (EDL) at the solid-liquid interface^[4]. Li et al.^[5] produced biological nano-generators which including cellulose, chitin, silk fibroin, and amyloid, are produced either by liquid-exfoliation of biomasses or by supramolecular assembly of bio-acromolecules. And it can produce an open-circuit voltage and short-circuit current around 0.11V and 0.022uA, respectively. Wang et al.^[6] develop a heterogeneous moisture-enabled electric generator (HMEG) based on a bilayer of polyelectrolyte films. Through the spontaneous adsorption of water molecules in air and induced diffusion of oppositely charged ions, one single HMEG unit can produce a high voltage of 0.95V and a current of up to 0.04uA.

Water contains enormous energy, and the generation of electricity in water has significant application prospects. However, the mechanism of hydrovoltaic power generation lacks systematic clarity. There is a lack of overall connection between meso and macro aspects, which restricts the theoretical, preparation, and application development of hydropower technology. Furthermore, while there are evaluation indicators for output electricity, unit area, and unit volume, there is no unified standard for electricity generation efficiency and evaluation. we establish a thermodynamic hot and humid air energy conversion analysis method based on the principle of hydropower generation, and conduct research on the energy between the difference between heat, electricity and humidity of hydropower generation technology, so as to provide solutions for improving energy utilization.

2. Theoretical and experimental research on Energy and Exergy analysis

2.1. Principle analysis

Moisture absorption power generation does not require external mechanical energy input. It can generate power by using the gaseous water in the ambient humid air, which interacts with materials to generate electrical energy. First, set the difference of the environment or the internal structure of the material. The difference of the environment is realized by applying humid air with varying humidity, that is, air with varying water content. The difference of the internal structure of the material is to form gradient chemical functional groups in the membrane material through physical and chemical methods. Wet air is adsorbed on the material. Inside the material, water molecules and functional groups interact, water molecules dissociate, and free anions and cation are generated inside the material. Cation (hydrogen ions) are relatively small in size, which are easy to migrate freely in the material. Due to the gradient of water content or the gradient of functional groups, the concentration of anions and cation generated inside the material is different, which further generates ion diffusion, cation will diffuse to areas with high anion concentration. If the external circuit is connected to the material, the directional migration of ion in the material will produce two extremes. After the external circuit is connected, electrons begin to migrate and generate current. In a circuit, the movement of charge depends on electrons, while in a solution it is cation and anion. Therefore, electricity is generated through the action of water and materials in the membrane material, which is called moisture absorption power generation. When the wet air desorbs on the surface of the material, the anion and cation return to their original positions under the action of electrostatic force, completing an electricity generation cycle. In the process of moisture absorption power generation, wet air is the only material that can provide energy from the outside. It does not require input of other mechanical energy. Instead, it outputs wet air and generates electric energy without other harmful additional substances. It is a green, highly sustainable power generation technology.

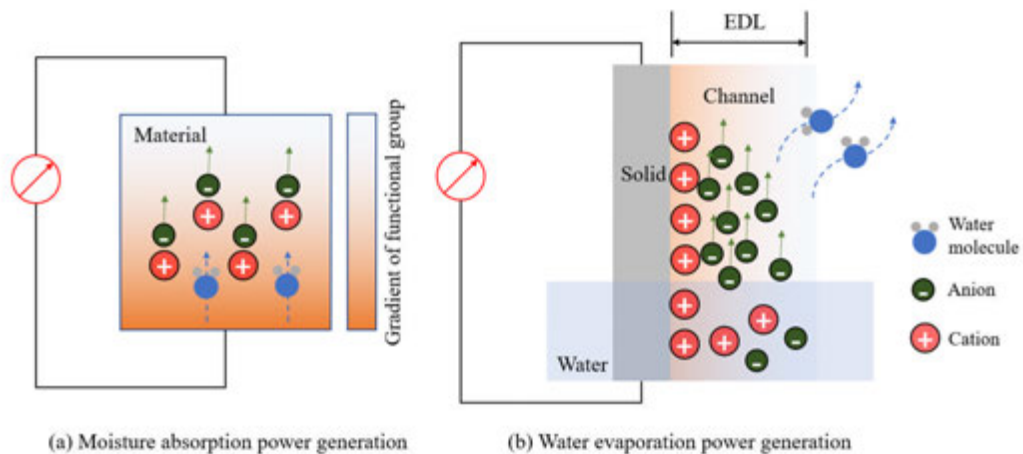


Fig. 1 Power generation schematic diagram.

For this power generation technology, a large number of researchers have carried out a series of studies. With Qu as the representative, the materials in the moisture absorption and power generation process can be of different dimensions^{[7][8][9]}. Shao selects a silver wire as an electrode at one end, and then soaks the silver wire into the graphene oxide suspension for many times to obtain a silver wire with a graphene oxide layer of the required thickness^[7]. Then, a longer silver wire was selected as an electrode at the other end and wraps it outside the graphene oxide layer to obtain a fibrous moisture generator with electrodes. Because it is one-dimensional, DIY can be formed into various shapes, and can produce electrical energy about 0.21 $\mu\text{W}/\text{cm}$ under 70% humidity change. The fiber electrical component makes use of gradient moisture, and the material is stable and uniform. It regulates the internal structure of two-dimensional graphene oxide film through electric field treatment, so that the functional groups inside the membrane material are distributed in gradient from top to bottom, thus promoting the concentration gradient of hydrogen ions generated by dissociation from top to bottom after water absorption, so as to promote the migration of electrons and generate current. It can generate electrical energy about 18mV voltage and 5.7 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ through the moisture generated by human respiration^[8]. On the basis of two-dimensional materials, three-dimensional functional materials can also be used to adsorb moisture and generate electricity. 3D foam is a porous material. Because of the existence of pores, the cross-linking between pores and the large specific surface area provided by pores, it can improve the speed of moisture adsorption in wet air, facilitate the diffusion and dissociation of water molecules, and improve the power generation performance. Huang et al. treated graphene foam materials with laser treatment to obtain the inhomogeneous structure of gradient reduced graphene oxide and graphene oxide, and then used gold and silver as electrodes to generate 1.5V voltage.^[9]

The other is water evaporation power generation. When the solid is still immersed in the water, the solid molecules contact with the water molecules. Due to the effect of the solid surface charge or chemical potential, the solid surface molecules will selectively adsorb some charged components in the water, while the components with opposite charges in the water and the adsorbed ions will be enriched at the solid-liquid interface near the adsorbed components due to Coulomb force. The overall result is that two layers of enrichment areas with heterogeneous charges are formed near the contact surface of the two phases, which is called double electric layer(EDL). The adsorption of solid forms a double electric layer structure in the channel, while the radius of the channel is small, and the liquid double electric layers on the upper and lower surfaces overlap, so that the channel has selective permeability. As the siphon effect of the outflow solution evaporation forces the solution to be passed through the solid channel continuously, forming a stable flow potential on both sides of the channel, so far the water evaporation induced power generation effect has been realized theoretically. It was the first time that Zhou research group of Huazhong University of Science and Technology found this effect in carbon black nano films in 2017. They directly burned carbon black in quartz chips with an alcohol lamp. After annealing and plasma treatment, they measured the water evaporation induced power generation effect with an open circuit voltage of about 1 V and a short circuit current of 100 nA, respectively.^[10] The nano materials containing nano pores are prepared into a sheet device, one part of which is put into water, and the other part is exposed to the air. Some nano materials in water absorb water, rise through capillary adsorption, and evaporate from the surface of nano materials at the air interface. In the process of water moving in nano pores, in the EDL the flowing water molecules to generate electric energy.

The above researches on moisture absorption and water evaporation power generation mainly focus on the construction of functional materials and internal structural gradient of materials, and the continuous exploration of carbon nano materials, porous materials, structural surface treatment and other aspects to improve the power generation capacity. In the process, we are constantly improving the mechanism of moisture absorption and water evaporation power generation, and studying its various influencing factors. However, a unified standard has not been formed on how to evaluate the power generation capacity, which is mainly characterized by the power generation capacity per unit area. There is no detailed description on the power generation efficiency.

2.2. Exergy analysis

Exergy not only includes the size of energy, but also can measure the size of work ability, representing the level of energy taste. Through exergy, we can directly calculate the change of energy in moist air under two air conditions. In the exergy analysis, the following reference points should be determined first. There are generally three types:

- a) In the first method, environmental parameters are taken as reference points for exergy analysis;
- b) The second is to take the average meteorological parameters of the ambient atmosphere as the reference

point for exergy analysis;

c) The third method takes the saturated air state at ambient temperature as the reference point for exergy analysis.

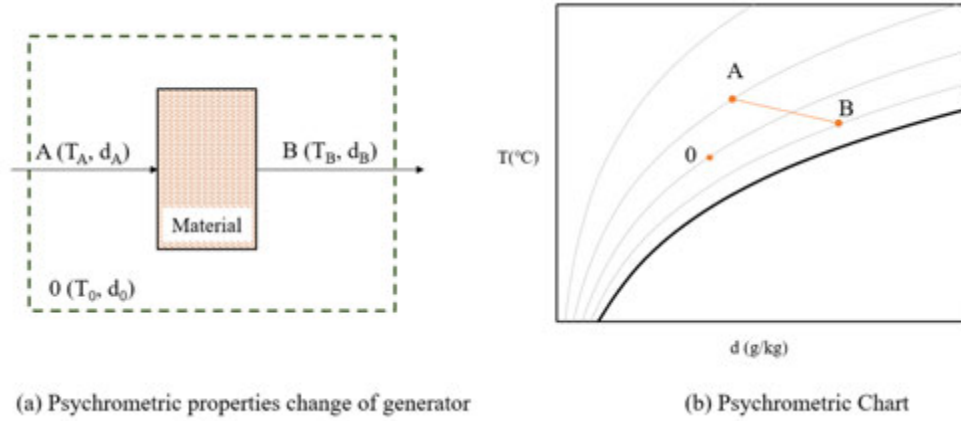


Fig. 2 Air state diagram during power generation.

In this study, the environmental parameters are taken as the reference point, the temperature is T_0 , moisture content is d_0 . In this reference environment, a wet air state is (T_A, d) , then its exergy is^[11]

$$E = (c_{p,a} + dc_{p,v})T_0\left(\frac{T}{T_0} - 1 - \ln \frac{T}{T_0}\right) + (1 + 1.608d)R_a T_0 \ln \frac{P}{P_0} + R_a T_0 \left[(1 + 1.608d) \ln \frac{1 + 1.608d_0}{1 + 1.608d} + 1.608d \ln \frac{d}{d_0} \right] \quad (1)$$

In the formula, the first item is heat exergy, the second item is mechanical exergy, the third item is humidity exergy, and the three items together are the total exergy of moist air. For the problem analyzed, in the category of constant pressure open system, the mechanical exergy is zero. Now suppose that the state of a stream of wet air absorbed is $A(T_A, d_A)$, The state of the other wet air released is $B(T_B, d_B)$, the exergy of the two states are

$$E_A = (c_{p,a} + d_A c_{p,v})T_0\left(\frac{T_A}{T_0} - 1 - \ln \frac{T_A}{T_0}\right) + R_a T_0 \left[(1 + 1.608d_A) \ln \frac{1 + 1.608d_0}{1 + 1.608d_A} + 1.608d_A \ln \frac{d_A}{d_0} \right] \quad (2)$$

$$E_B = (c_{p,a} + d_B c_{p,v})T_0\left(\frac{T_B}{T_0} - 1 - \ln \frac{T_B}{T_0}\right) + R_a T_0 \left[(1 + 1.608d_B) \ln \frac{1 + 1.608d_0}{1 + 1.608d_B} + 1.608d_B \ln \frac{d_B}{d_0} \right] \quad (3)$$

The states of A and B are unknown, while 0 is the reference point. 0 has no influence on the analysis of efficiency, but has an influence on the size of work capacity. It is a state quantity. Calculate the partial derivative of the exergy of the two state points, and then make the difference to get the exergy difference of the unit water vapor under the two state points.

$$\frac{\partial E_A}{\partial d_A} = c_{p,v} T_0 \left(\frac{T_A}{T_0} - 1 - \ln \frac{T_A}{T_0} \right) + 1.608 R_a T_0 d_A \ln \frac{(1 + 1.608d_0)d_A}{(1 + 1.608d_A)d_0} \quad (4)$$

$$\frac{\partial E_B}{\partial d_B} = c_{p,v} T_0 \left(\frac{T_B}{T_0} - 1 - \ln \frac{T_B}{T_0} \right) + 1.608 R_a T_0 d_B \ln \frac{(1 + 1.608d_0)d_B}{(1 + 1.608d_B)d_0} \quad (5)$$

$$E'_w = \frac{\partial E_A}{\partial d_A} - \frac{\partial E_B}{\partial d_B} = c_{p,v} T_0 \left(\frac{T_A - T_B}{T_0} - \ln \frac{T_B}{T_A} \right) + 1.608 R_a T_0 \ln \frac{(1 + 1.608d_B)d_A}{(1 + 1.608d_A)d_B} \quad (6)$$

The first item of the above equation is the difference caused by sensible heat. The sensible heat difference caused by different steam temperatures in the two states is actually very close. If this item is ignored, it can be rewritten as

$$E'_w = \frac{\partial E_A}{\partial d_A} - \frac{\partial E_B}{\partial d_B} = 1.608 R_a T_0 \ln \frac{(1+1.608d_B)d_A}{(1+1.608d_A)d_B} \quad (7)$$

The minimum input energy consumption in the process of unit moisture adsorption and release (i.e. A to B state) is the exergy difference.

The energy generated by Moisture absorption or water evaporation is [8]

$$W_g = \int I(t)V(t)d(t) \quad (8)$$

it can be changed to

$$W_g = \frac{1}{4} \int I_{sc}(t)V_{oc}(t)d(t) \quad (9)$$

where I , I_{sc} , V , V_{oc} , t , respectively representing the current, short circuit current, voltage, open circuit voltage and time of the power generator. This energy can be measured in the experiment.

The final efficiency is

$$\eta = \frac{W_g}{E'_w} \quad (10)$$

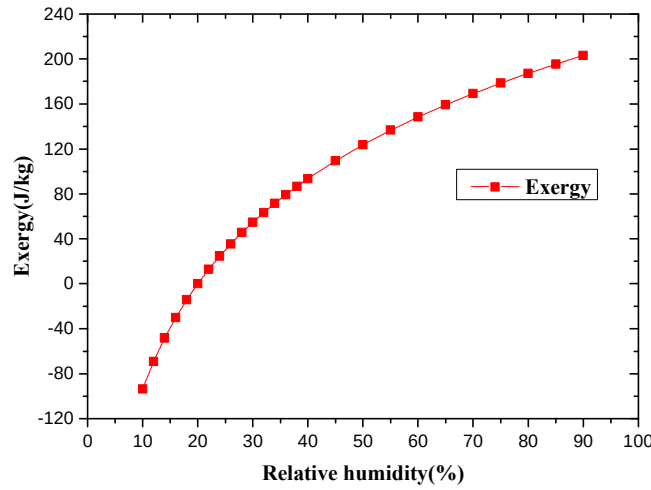


Fig. 3 Relationship between exergy and relative humidity.

As shown in the Fig.3, the state A is 20 °C and the relative humidity is 20% (Moisture content is 2.883g/kg dry air), and the state B is 20 °C, the relative humidity increases from 10% (Moisture content is 1.438g/kg dry air) to 40% (Moisture content is 5.793g/kg dry air), and then increases from 40% to 90% (Moisture content is 13.188g/kg dry air), with an increase of 5% relative humidity each time. The whole power generation environment is selected as 0, and the relative humidity is also 20%. As the difference between the two states increases, the exergy becomes larger and larger. If there is a greater potential difference in the environment, there will be more exergy. The potential difference between dry and wet is changed, and the amount of energy remains unchanged. It can be imagined that the amount of energy remains unchanged from state B to state A when state A and state B are exchanged. In order to improve the power generation capacity of this power generation mode, it is necessary to constantly improve the difference between the two states. However, under natural circumstances, the difference between the two states is limited. How to maintain this difference at a low cost so as to improve the power generation capacity is a problem for the more in-depth research.

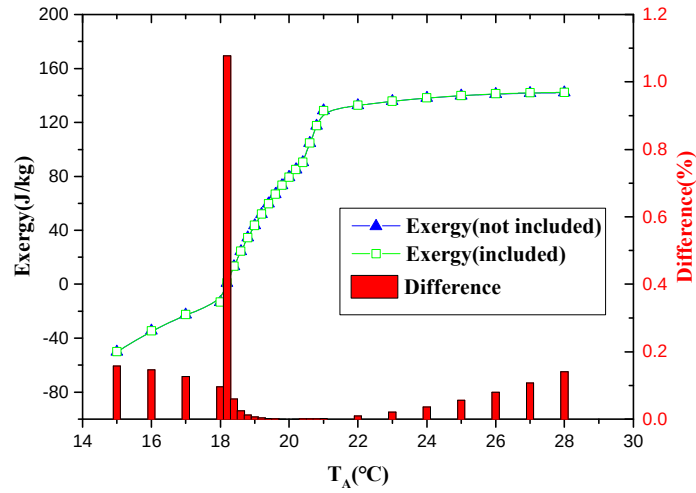
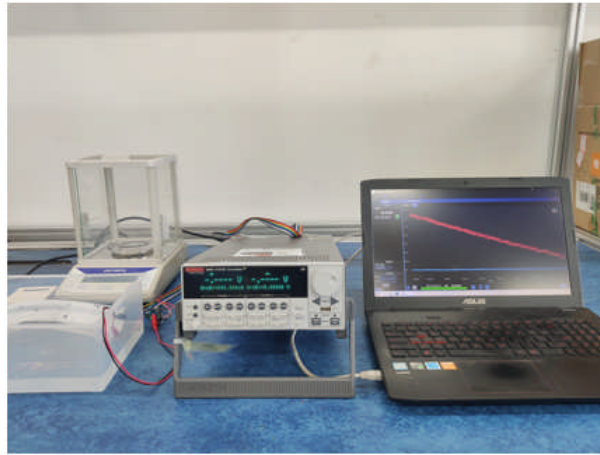
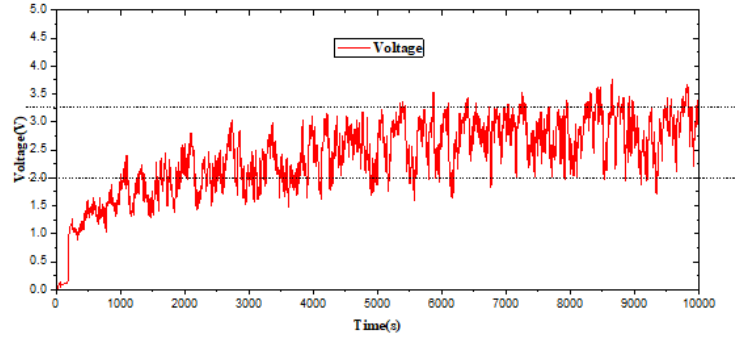


Fig. 4 Relationship between exergy and relative humidity.

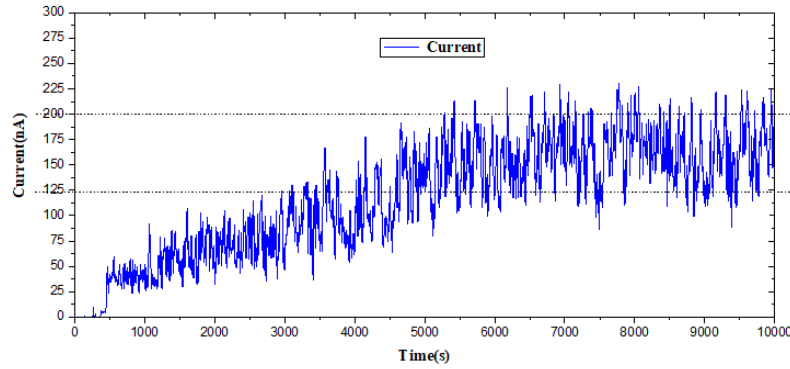
Exergy calculation at different temperatures, T_A selects 15-28 °C, increases 0.2 °C each time between 18-21 °C, and increases 2 °C each time for other intervals. T_0 is the same as T_A , T_B is 20°C. One method is to include the sensible heat difference caused by different water vapor temperatures in two states, and the other is not to include. The results are shown in the Fig.4. It is found that the difference between the two methods is small. The values on the curves calculated by the two methods almost overlap, and the relative difference between the two is less than 0.25%. The method of calculating the maximum electricity generation through the difference has been verified to be feasible from the perspectives of theoretical analysis and previous research comparison. As the difference between the two states increases, the exergy also increases. A larger environmental potential difference results in more exergy. It is verified that the exergy of the sensible part can be ignored in the very small range of temperature change. It is reasonable to go from Formula 1 to Formula 2. However, in natural circumstances, the difference between the two states is limited. Finding cost-effective ways to maintain and enhance this difference for improved power generation capacity is a subject for further in-depth research.



(a) Experimental system



(b) The open circuit voltage



(c) The short circuit current

Fig. 5 Experiment system and result.

At the same time, some experiments are in progress. The water evaporation generator containing oxide nanoparticles was prepared and the power generation was measured. The preparation of flexible power generation devices is primarily divided into three steps. (1) The first step is to select a certain size of PET film for cleaning and drying as a backup material. (2)The second step is to apply a certain width of conductive carbon paste on the film, with a total of 2 tapes applied as positive and negative electrodes. After the carbon paste is dried, it will be used as a backup. (3)The third step is to coat alumina nanoparticles onto a PET plastic film with a carbon paste electrode, cover the electrode, and retain a portion of the electrode end for subsequent connection. The coating solution adopts a solution of alumina nanoparticles, with the solute being alumina nanoparticles and the solvent being anhydrous ethanol, with a concentration of 0.5g/mL. Finally, air dry naturally. Based on exergy analysis and experimental measurements. As shown in the Fig.5, the final short-circuit current and open-circuit voltage are maintained at 125-200nA and 2.0-3.2V, respectively. After removing the device from the water and drying it for a period of time, it can still be used. It exhibits a certain degree of stability.the exergy efficiency is calculated as follows:

$$\eta = \frac{W_g}{E'_w} = 1.25 \times 10^{-4}\%$$

where, an open-circuit voltage of 2.5V and a short-circuit current of 150nA are selected. It is estimated that there is still great room for improvement in efficiency. However, further specific research is needed on the exergy losses that exist in the specific power generation process.

3. Conclusion

In this study, the exergy analysis model is established by analyzing the principle of new hydropower technology (moisture absorption and water evaporation power generation), and the maximum available energy is obtained by theoretical analysis and calculation of the available energy for power generation. Power generation efficiency is also defined. The greater the difference between the two states, the greater the difference between relative humidity and temperature, the more energy available. The difference that provides continuous stability is the driving force for power generation. At the same time, the relevant water evaporation generator was also prepared, and the short-circuit current and open-circuit voltage of the Al_2O_3

nanoparticles nanoparticles device are maintained at 125-200nA and 2.0-3.2V, respectively.

NOMENCLATURE

c_p	specific heat capacity at constant pressure	[J/(kg·K)]	T	temperature	[°C]
d	moisture content	[g/kg dry air]	t	time	[s]
E	exergy	[J/kg]	V	voltage	[V]
I	current	[A]	W	energy	[w]
P	pressure	[Pa]	η	generation efficiency	[]
R_a	ideal gas constant	[kJ/(kg·K)]			

REFERENCES

- [1] Ding L C, Akbarzadeh A. “Performance and reliability of commercially available thermoelectric cells for power generation”. *Appl Therm Eng.*, 102, pp. 548–556, (2016). **Journal Paper**
- [2] Wang Z L, Song J. “Piezoelectric nanogenerators based on zinc oxide nanowire arrays”. *Science*, 312: 242–246. (2006). **Journal Paper**
- [3] Mengxiao Chen, Xiaoyi Li, Long Lin, Weiming Du, Xun Han, Jing Zhu, Caofeng Pan, Zhong Lin Wang. “Triboelectric nanogenerators as a self-powered motion tracking system”. *Adv Funct Mater*, (2014). **Journal Paper**
- [4] Huhu. Cheng, Yaxin. Huang, Liangti, Qu, Qilong, Cheng, Gaoquan. Flexible in-plane graphene oxide moisture-electric converter for touchless interactive panel. *Nano Energy*. 37-43 (2018). **Journal Paper**
- [5] Mingjie Li, Lu Zong, Weiqing Yang, Xiankai Li, Jun You, Xiaochen Wu, Zehui Li, Chaoxu Li. Biological Nanofibrous Generator for Electricity Harvest from Moist Air Flow. *Advanced Functional Materials*. 29 (2019). **Journal Paper**
- [6] Haiyan Wang, Yilin Sun, Tiancheng He, Yaxin Huang, Huhu Cheng, Chun Li, Dan Xie, Pengfei Yang, Yanfeng Zhang, Liangti Qu. Bilayer of polyelectrolyte films for spontaneous power generation in air up to an integrated 1,000 V output. *Nat Nanotechnol*. 16 (2021) 811-9. **Journal Paper**
- [7] Changxiang Shao, Jian Gao, Tong Xu, Bingxue Ji, Yukun Xiao, Chang Gao, Yang Zhao, Liangti Qu. “Wearable fiberform hygroelectric generator”. *Nano Energy*, (2018). **Journal Paper**
- [8] Zhao F, Cheng H.H., Zhang Z.P. Jiang L, Qu L.T. “Direct power generation of a graphene oxide film under moisture”. *Adv Mater*, 27(29), pp. 4351–4357. (2015). **Journal Paper**
- [9] Huang YX, Cheng HH, Yang C, Zhang PP, Liao QH, Yao HZ, Shi GQ, Qu LT. “Interface-mediated hygroelectric generator with an output voltage approaching 1.5 volts”. *Nat commun*, 9, (2018), **Journal Paper**
- [10] Xue G, Xu Y, Ding T, Jia L, Jun Y, Wenwen F, Yuanzhi C, Jin Y, Longyan Y, LI G, Jian C, Shaozhi D, Jun Z, Wanlin G. “Water-evaporation-induced electricity with nanostructured carbon materials”. *Nat Nanotechnol*, 12, pp 317–321. (2017). **Journal Paper**
- [11] Bejan A., “Advanced engineering thermodynamics”. pp. 229-231, (1997). **Book**

单光谱高能流辐射下热光伏电池转换性能的模拟与测试分析

柳秀丽, 李潇磊, 陈学, 孙创, 夏新林*

(能源科学与工程学院 空天热物理工信部重点实验室 哈尔滨工业大学 哈尔滨 150006)

(Tel:0451-86412148 Email: xiaxl@hit.edu.cn)

摘要: 依据热光伏电池结构组成和工作原理, 建立相对应的单片热光伏电池表面电流流动的二维有限元模型。为了验证模型的可靠性, 搭建单光谱高能流辐射测试平台, 进行实际辐射条件下热电转换性能测试和验证。结果表明: 在入射光斑的大小保持不变时, 随着入射辐射能量增加, 热光伏电池的输出功率增加, 且入射辐射能量对短路电流的影响与入射辐射能量呈线性增加, 约为 1.25 倍, 但对开路电压的影响很微小, 约为 1.02 倍; 在入射能量一定, 光斑大小发生改变时, 短路电流也会随着光斑的增大而增大, 但开路电压保持不变, 电池的输出功率增加。应尽可能增大电池的工作区域, 以提升电池的性能。

关键词: 单光谱; 高能流; 热光伏电池; 理论模型; 实验测试

0 引言

热光伏发电作为一项新的能源技术, 可以将红外辐射能转换为电能, 而且不受时间和空间限制, 可靠性高, 满足低碳、高效、环保的能源发展需求^[1,2]。但是能量转换效率低一直是制约热光伏技术进一步开发与应用的主要障碍。尤其是热光伏电池作为发电技术的核心器件^[3,4], 其转换性能的优良直接影响整项技术的发展。而且热光伏电池的生产工艺复杂, 造价高昂, 应尽可能的获取不同种类热光伏电池最适宜的工作条件, 通过匹配电池最佳的工作条件^[5,6], 使电池发挥最大的工作性能, 获得最大输出功率^[7]。

多年来, 众多的研究学者都在探索影响电池工作性能的因素, 以期望获得较高的功率输出。针对电池自身的工艺, Lou 等^[8]探究了掺杂浓度对热光伏电池能量转换的影响。其结果表明, 对于 N 型 GaSb 电池, 最佳掺杂浓度应为 $N_d=7-9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_a=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 可使热光伏电池的输出性能达到最佳。Rashid 等^[9]探究了热光伏电池 P 型发射极厚度对热光伏电池性能的影响。从结果看, 随着发射极厚度的增加, 电池的能量转换效率也在增加。Tang 等^[10]理论探究了扩散深度对热光伏电池性能的影响。其探究结果显示, 电池的量子效率曲线随着扩散厚度变薄而增加, 所以扩散深度在 $0.1 \mu\text{m}$ 时性能达到最佳。针对电池工作的外部环境, Zhang 等^[11]通过实验测量探究了温度对热光伏电池性能的影响。其结果表明温度会显著影响电池的性能, 但对电池不同参数的影响不同。开路电压和输出功率随着电池温度的升高呈线性降低, 而短路电流却是略微增加。所以为了获取较高的输出功率, 热光伏电池工作在高温环境时应进行温度管理。Esther 等^[12]通过实验测试探究了角系数大小对热光伏电池性能参数的影响。其测试结果表明, 当测量的角系数范围为 0.91-0.98 时, 随着角系数的增大, 电池的工作效率提高, 输出功率密度增大。当辐射源温度为 1592°C 时, 电池输出功率密度可达到 4.3 W/cm^2 。Mansur 等^[13]通过理论计算探究了不同入射辐射能流对热光伏电池光电转换性能的影响。通过理论计算发现, 随着入射辐射能量的增加, 电池的能量转换性能增加。Garcia 等^[14]通过实验测试了不同光谱辐射下电池的光谱能量转换特性。通过调控光谱, 将电池置于光谱响应度高的波段, 从而提高电池的能量转换特性^[15]。

从上述研究发现, 无论针对电池自身的工艺设计或者电池外部工作环境的改善, 都可以提升电

池自身的工作性能。但从研究数据来看，外部环境的影响相对于工艺的影响更大。所以本文从电池外部工作环境出发，针对单片热光伏电池，在单光谱高能流入射辐射下，开展电池的理论实验探究。首先建立了单片热光伏电池在高入射辐射能流下的光电转换模型，然后通过实验数据拟合获取模型中的关键影响参数，最后通过理论模拟，获取热光伏电池在高能流入射辐射下的转换性能及能流分布信息，为更好的利用热光伏电池提供有价值的参考。

1 理论模型

为了准确的对电池进行建模，对采购于美国 JX 公司的 GaSb 电池进行电镜扫描。电镜采用的是蔡司场发射扫描电镜(型号：Merlin Compact)，此仪器可以获得高分辨率的电子图像。测试流程主要包括制样、打磨抛光、喷金和扫描四步。通过上述处理过程，获得如错误!未找到引用源。所示的电池微观结构图。

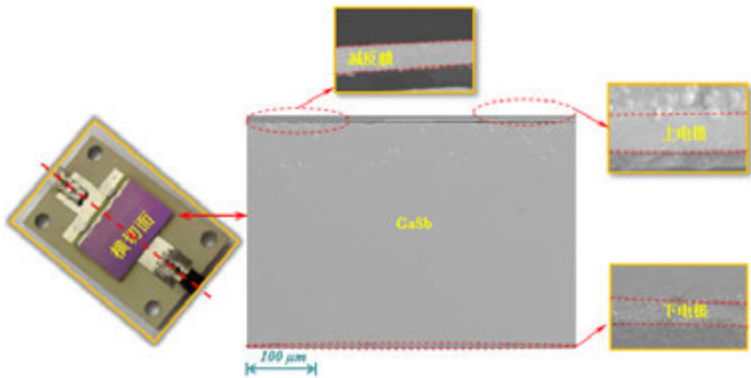


图 1 GaSb 电池电镜扫描图

单结热光伏电池 GaSb 的结构如错误!未找到引用源。所示。一片封装完整的单结 GaSb 电池主要包括正负接触电极，基底，发射极，减反射膜以及栅线等。发射极为 P 型半导体，含有较多的空穴；基底是 N 型半导体，含有较多的电子；当二者结合到一起时，在接触界面迅速形成电势差，即 PN 结。当辐射能照射到 GaSb 电池表面时，电池表面的减反射膜(ARC) 会减少反射和散射辐射，提高电池的光吸收率和转换效率。辐射能进入电池内部后，激发形成更多的非平衡载流子(电子和空穴)，当外接电路时，在内建电场和扩散作用的驱动下，非平衡载流子定向移动，产生电流。栅线作为电池重要的构成元素，其作用是收集载流子将电流引到外部，输送到正负极。栅线的结构、数量、布置的疏密等均会影响电池的输出功率。栅线设计的好，将使电池的串联电阻最小，从而使功率损耗最小，输出功率最大。

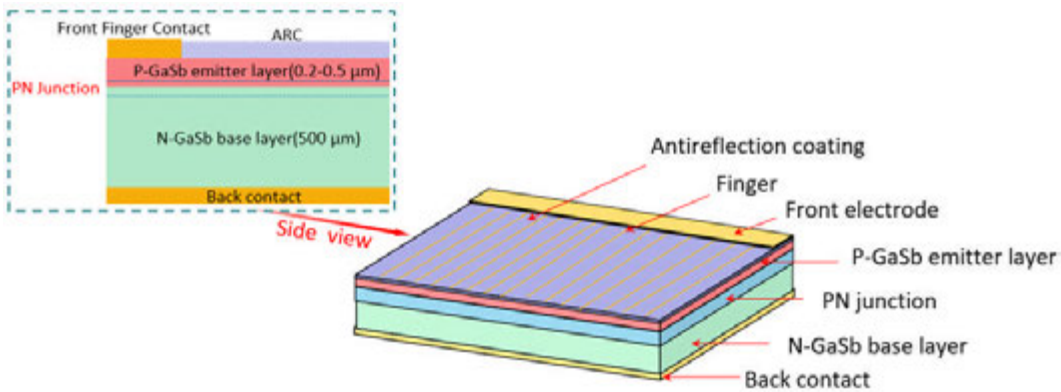


图 2 GaSb 电池结构示意图

1.1 选择计算域

依据单片 GaSb 电池的结构和栅线分布图，将整片电池等效为若干个紧密排列的小电池片，一

片完整的热光伏电池等效为多块小电池片的并联，如图 3 所示。为了充分展现热光伏电池在不同入射辐射时的工作性能，并考虑栅极边缘区域的影响，选择发射极表面作为研究区域，考虑边缘效应，计算区域如图 4 所示。

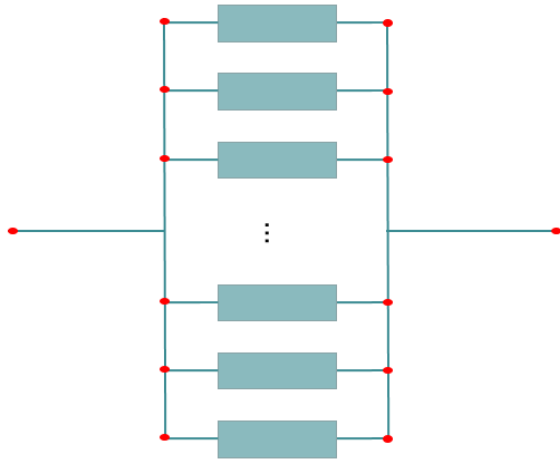


图 3 单片 GaSb 电池等效电路图

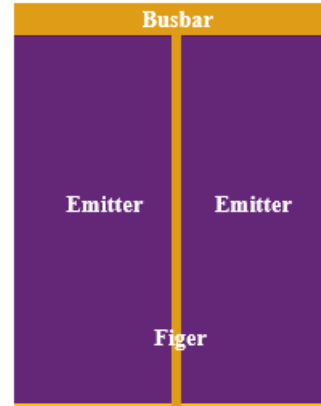


图 4 电池模型结构图

1.2 二维模型

假设 GaSb 电池表面对于有效截止波长内的单光谱吸收率为 α ，对于进入电池内的有效辐射表示如下：

$$G = \alpha \cdot G_0 \quad (1)$$

式中， G_0 为电池表面接收的辐射能， W/m^2 。

对于激光作为入射辐射，能量沿栅线方向的分布通常是不均匀的，呈典型的高斯分布^[16]：

$$G(x) = G_0 A_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2S_0^2}\right) \quad (2)$$

式中， S_0 控制曲线的宽度，并且与最大值一半处的全宽度相关，表示如下^[17]：

$$L = 2\sqrt{2\ln(2)}S_0 \quad (3)$$

式中， A_0 为确保整个电池平均辐射度是 G_0 的归一化因子，相当于峰值与平均辐射的比值：

$$A_0 = \frac{W}{\sqrt{2\pi}S_0 \operatorname{erf}\left(\frac{W}{2\sqrt{2}S_0}\right)} \quad (4)$$

式中， $\operatorname{erf}(\cdot)$ 代表误差函数。

当处理电介质中的直流电流时，在求解域中的偏微分方程^[18]：

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla V - \mathbf{I}^e) = Q_j \quad (5)$$

式中， V 为电势； $\mathbf{I}^e$ 为电流密度， Q_j 为电流源项， σ 为栅极的电导率：

$$\sigma = 1 / R_{\text{sheet}} \quad (6)$$

式中， R_{sheet} 为电阻； w 为栅极宽度， $R_{\text{p.u.l}}$ 为栅线单位长度的电阻值。

$$R_{\text{sheet}} = R_{\text{p.u.l}} \times w \quad (7)$$

电流源项采用单二极管模型(如图 5 所示), 照明区域源项的计算^[19]:

$$Q_i = C_1 G + C_2 T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{eV_j}{nk_B T}\right) - 1 \right] + C_3 V_j \quad (8)$$

式中, C_1 , C_2 , C_3 分别为系数值; n 为理想因子; k_b 为玻尔兹曼常数; e 为单位电荷电量; E_g 为带隙能; V_j 为结电压, 表达式如下:

$$V_j = V + IR_s \quad (9)$$

式中, R_s 为串联电阻。

暗区(栅极和汇流排) 的计算:

$$Q_d = C_2 T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{qV_j}{nk_B T}\right) - 1 \right] + C_3 V \quad (10)$$

不同辐射强度下, 热光伏电池可获得的电流为:

$$I = C_1 G + C_2 T^3 \exp\left[-\frac{E_g}{k_B T}\right] \exp\left[\frac{V_j}{nV_T} - 1\right] + C_3 V_j \quad (11)$$

式中, V_T 为热电压, 表达式如下:

$$V_T = \frac{k_B T}{e} \quad (12)$$

为了获取电池的电流、电压特性(I-V 曲线), 采用如下计算方法^[20]。

$$I = I_{\text{ph}} - I_0 \left[\exp\left(\frac{V_j}{nV_T}\right) - 1 \right] - \frac{V_j}{R_{\text{sh}}} \quad (13)$$

式中, I_{ph} 为光生电流; R_{sh} 为并联电阻; I_0 为反向饱和电流。

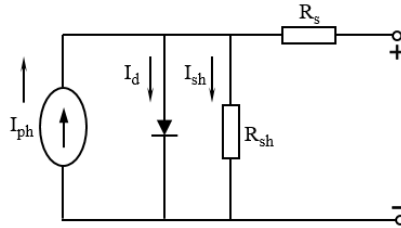


图 5 单二极管模型图

1.3 边界条件

在上述模型设置中, 需要考虑三种典型的边界条件:

接口条件:

$$-n_b \cdot (I_1 - I_2) = 0 \quad (14)$$

式中 n_b 为边界的垂直向量; I_1 和 I_2 分别为相邻介质边界处的电流密度;

电绝缘:

$$n_b \cdot \mathbf{I} = 0 \quad (15)$$

式中 $\mathbf{I}$ 为外部边界处的电流密度矢量。

汇流排电势：

$$V = V_{\text{cell}}$$

(16)

式中， V_{cell} 为电池工作时的外部输入电压。

2 实验设计

2.1 搭建实验台

搭建单片热光伏电池高功率辐射下的实验测试平台，如图 6 所示。实验平台主要包括最大功率为 50 W 的 1064 nm 的半导体激光器，P300 I-V 测试仪，热光伏电池 GaSb，电脑以及支架等。激光与电池之间的距离控制为 14 cm，光斑大小在 4-8 mm 范围内可调。GaSb 电池的基本物性参数列于表 1 中。

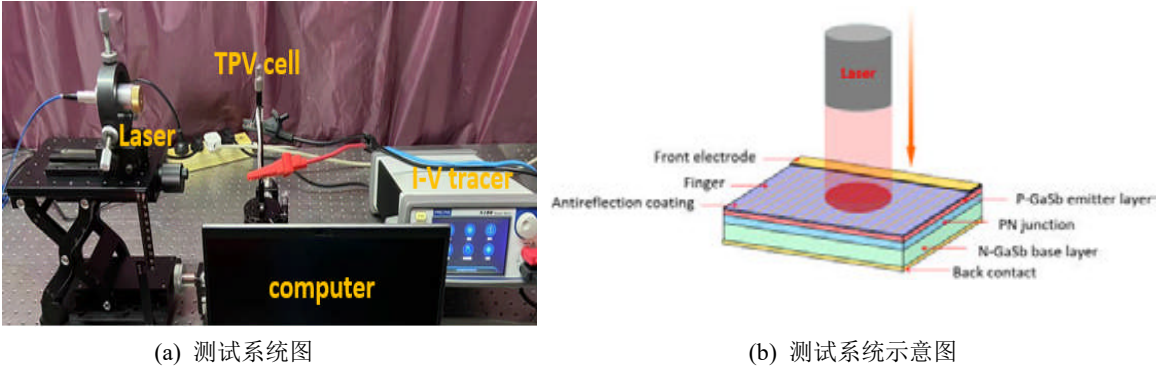


图 6 实验测试系统图

表 1 GaSb 基本物性参数表

组成	材料	长度(mm)	宽度(mm)	电导率(S/m)
发射区	GaSb	12.65	10.49	0.01
栅线	铜	10.49	0.0163	952
汇流排	银	12.65	0.89	13.33

为了获取上述模型中 C_1 ， C_2 和 C_3 的值，可根据公式(11)提供的电池在特定辐射度下的 I-V 曲线理论值，结合实验测试数据获取。光电流 I_{ph} ，反向饱和电流 I_0 ，串联电阻 R_s ，并联电阻 R_{sh} ，以及理想因子 n ，可根据电池制造商给出的标准测试条件下的 I-V 特性曲线(如图 7 所示)提取^[21]。通过反复迭代计算，最终将获取的 GaSb 电池建模特性参数列于表 2 中。

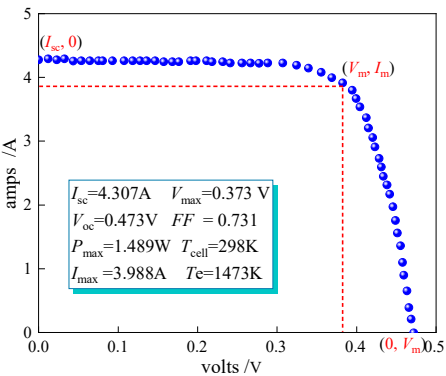


图 7 标准 GaSb 电池的性能曲线

表 2 GaSb 电池建模特性参数的提取值

I_{ph}	I_0	R_s	R_{sh}	N	C_1	C_2	C_3	R_{emitter}	R_{finger}
-----------------	-------	-------	-----------------	-----	-------	-------	-------	----------------------	---------------------

(A)	(10^{-7} A)	($10^{-3}\Omega$)	(Ω)	(-)	(AW^{-1}m^2)	(AK^{-3})	($\text{AW}^{-2}\text{V}^{-1}$)	($\Omega\cdot\text{m}$)	($10^{-8}\Omega\cdot\text{m}$)
3.48	4.21	6.02	295.48	1.15	1.3052E-5	-1.0991E+5	-0.79399	0.2	6.542

2.2 模型参数验证

为了验证模型及获取参数的可靠性，将实验测试数据与拟合结果进行对比，如图 8 所示。从图中可以看出，理论计算结果与实验数据拟合较好，可证明我们的参数选取合理。所以在后续的结果与分析中，均采用模拟结果进行分析与讨论。

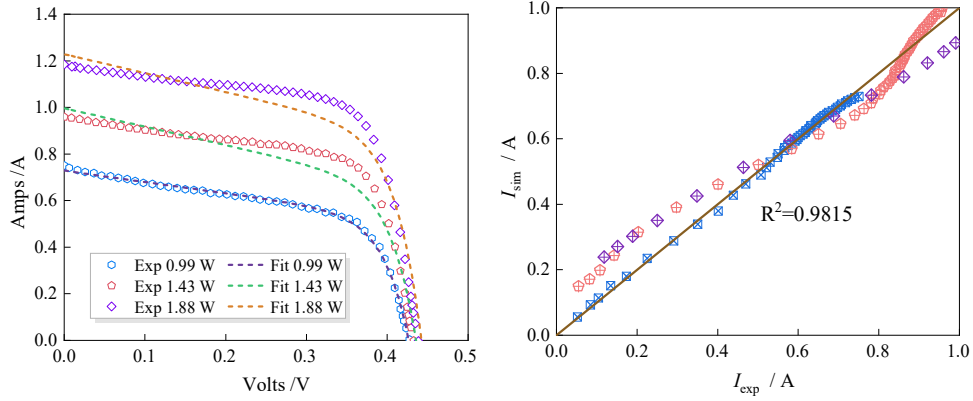


图 8 不同辐照度下 I-V 特性曲线实验测试与拟合结果

2.3 网格无关性验证

对于本文中采用的热光伏电池光电转换性能模型，通过电池的输出电流随网格数的变化来研究网格的独立性。如图 9 所示。从图中可以清晰的看出，在网格总数为 200000 左右时，电池输出的电流开始恒定。网格数的进一步增加，数据没有显著的变化，但是计算时间会延长。因此，为了减少计算时间成本，本文采用 221400 网格数进行仿真，以获得与网格大小无关的仿真结果。网格质量高于 0.95，结果是可靠的。

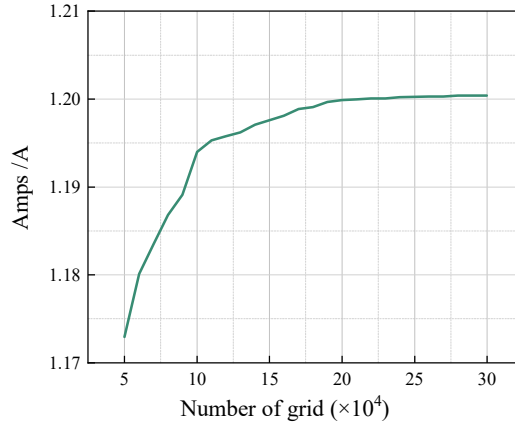


图 9 输出电流随网格数量的变化

3 结果分析与讨论

3.1 入射辐射能流的影响

从图 10 中可以看出，当入射光斑的大小不变(光斑直径 D 为 8 mm)时，随着入射能量的增加，电池的输出功率密度增大。当入射能量为 0.99 W 时，GaSb 电池的短路电流和开路电压分别为 0.751 A 和 0.407 V；当入射能量为 1.43 W 时，短路电流和开路电压分别为 0.959 A 和 0.423 V；当入射能量为 1.88 W 时，短路电流和开路电压分别为 1.185 A 和 0.433 V。从数据对比来看，入射辐射能对短路

电流的影响较大，对开路电压影响较小。而短路电流的增加，与入射能量的增加几乎是成比例的增加，约为 1.25 倍，但开路电压的增加比例约为 1.02 倍，远小于入射能量的比例。

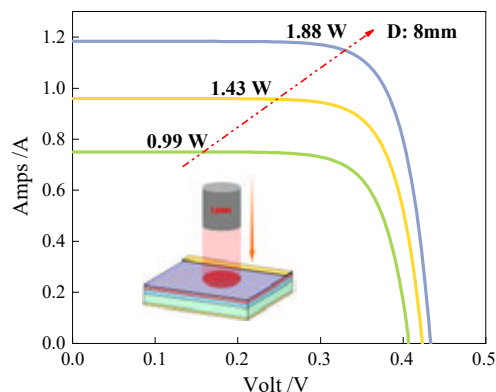


图 10 I-V 曲线与入射能量的关系

在图 11 中，黑色箭头代表了电场强度分布较强的区域。从图中可以看出，在入射光斑直径一定时，随着入射能量的增加，电场强度增大。电场最强的区域主要集中在栅线附近，并且电场强度的方向由发射区指向栅线。结合图 12 中电流密度分布图，电流密度分布与电场强度的分布是一致的。虽然初看时，在强电场区域中产生的正向电流和在弱电场区域中产生的反向电流似乎是违背电流电压规律的。但事实上，电流从其流动的区域和流向其他区域分别对应电压的最大值和最小值，这与电流必须与负电压梯度保持一致的规律相符合。而且，由于结电压的空间依赖性和照明区域的空间依赖性，电流和电压也会有空间依赖性。

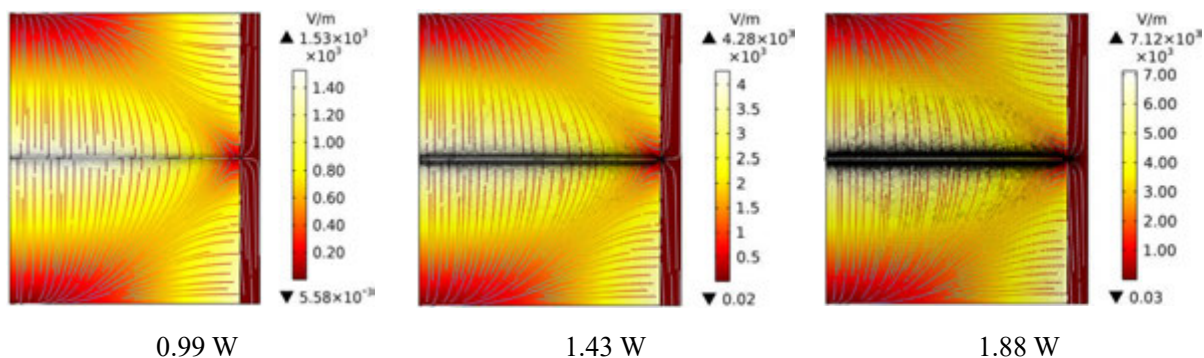


图 11 电场密度分布

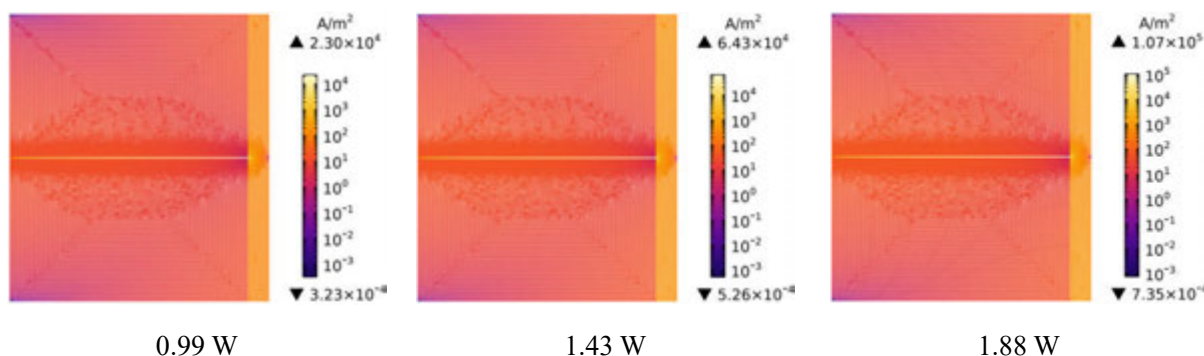


图 12 电流密度分布

3.2 不同光斑大小的影响

从图 13 中可以看出，当入射能量一定(为 0.99 W)时，随着光斑直径的增加，电池的输出功率密

度增大。当入射光斑直径为 4 mm 时，GaSb 电池的短路电流和开路电压分别为 0.740 A 和 0.407 V；当入射光斑直径为 6 mm 时，对应的短路电流和开路电压分别为 0.745 A 和 0.407 V；当入射光斑直径为 8 mm 时，对应的短路电流和开路电压分别为 0.751 A 和 0.407 V；通过数据对比可以发现，随着入射光斑直径的增大，对开路电压没有影响，短路电流随着光斑直径的增加呈线性增加，约为 1.01 倍。

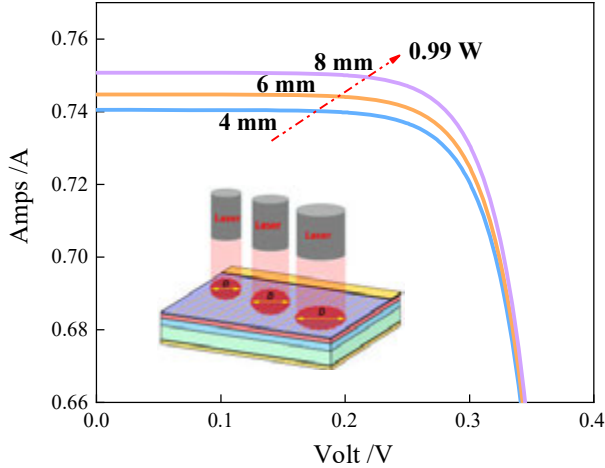


图 13 I-V 与不同光斑大小的关系

在图 14 中，显示了电场强度随入射光斑大小的变化。从图中电场强度分布的最大值和最小值可以看出，随着光斑的增大，电场强度的最大值增大，但最小值也变小，这与入射能量不变，光斑增大的同时能流密度分布变小有关。从图 15 中可以看出，电流密度的变化规律与电场密度的分布一致，说明光斑的大小会影响电池的工作性能。在入射辐射能量一定时，应尽可能的增大电池的工作区域。

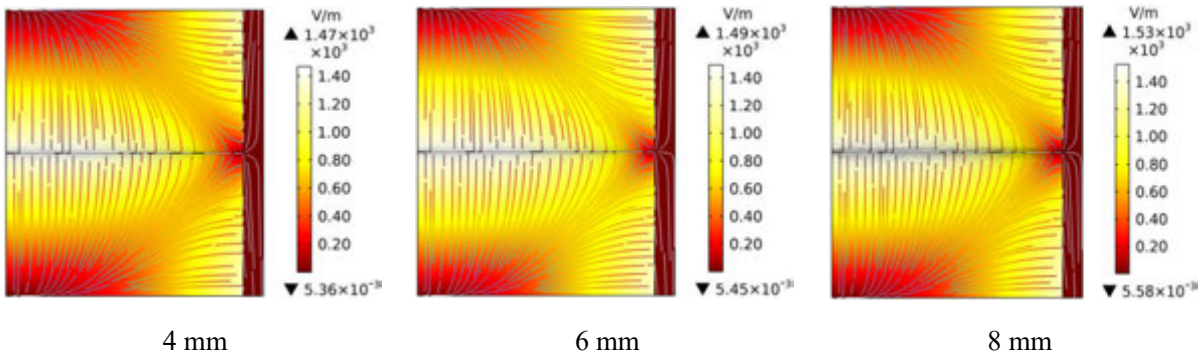


图 14 电场密度分布

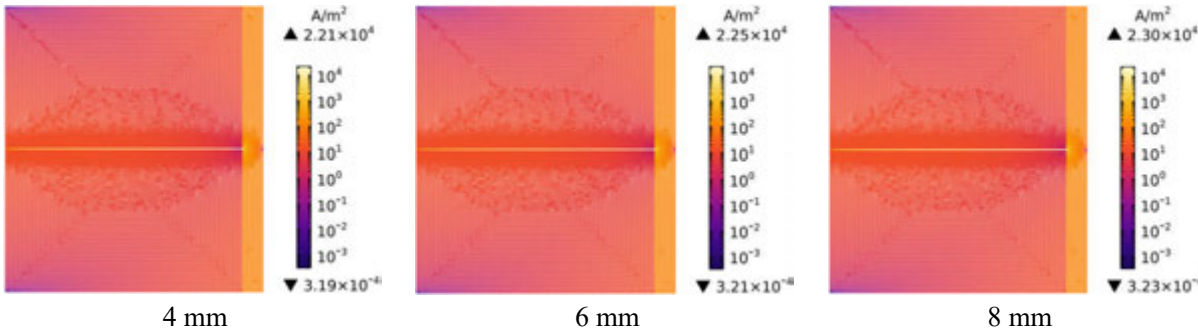


图 15 电场密度分布

4 结论

本文针对单片热光伏电池在单光谱高能流入射辐射时开展理论与实验探究。首先针对热光伏电池进行电镜扫描,获得精确的电池结构及组成。依据电池的结构,构建单片热光伏电池的理论模型。通过实验测试数据,获得模型中的重要参数,并与理论结果进行对比。最后,通过理论模型,获取热光伏电池在不同环境下的工作性能。总结结论如下:

(1) 对于单片热光伏电池,由于正负电极位于电池上下两个表面,且栅线集中分布在电池的上表面,由汇流排统一收集电流后输出,所以可以将单片热光伏电池等效为若干个并联的小电池,进而分析热光伏电池的工作性能。

(2) 对于单片热光伏电池,在入射光斑大小保持一致,入射能量发生改变时,电池的输出功率密度会随着入射能量的增加而增加;且通过理论计算发现,入射能量对于短路电流的影响远大于开路电压的影响。短路电流随着入射能量的增加呈线性变化,约为 1.25 倍,但开路电压的增加比例约为 1.02 倍,远小于入射能量的比例。

(3) 对于单片热光伏电池,在入射能量保持不变增加光斑大小时,电池的输出功率也会随着光斑的增大而增大,对开路电压没有影响,短路电流随着光斑直径的增加呈线性增加,约为 1.01 倍。而且随着光斑的增大,入射能量的均匀度提高,更有助于提高电池的输出功率。所以在入射能量一定时,应尽可能的增大电池的工作面积,提高能量转换效率。

参考文献

- [1] Xiu-Li Liu, Xiao-Lei Li, Xin-Lin Xia, Xue Chen, Shi-Chao Liu, Yang Liu, Multi-field coupling characteristics of the thermophotovoltaic cell under high-intensity laser beam radiation, *Infrared Physics & Technology*, 2023, 131: 104679.
- [2] Bosun Roy-Layinde, Tobias Burger, Dejiu Fan, Byungjun Lee, Sean McSherry, Stephen R. Forrest, Andrej Lenert, Sustaining efficiency at elevated power densities in InGaAs airbridge thermophotovoltaic cells, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2022, 236: 111523.
- [3] Tao Liang, Tong Fu, Cong Hu, Xiaohang Chen, Shanhe Su, Jincan Chen, Optimum matching of photovoltaic-thermophotovoltaic cells efficiently utilizing full-spectrum solar energy, *Renewable Energy*, 2021, 173: 942-952.
- [4] Z. Omair, G. Scranton, L. M. Pazos-Outon, T. P. Xiao, M. A. Steiner, V. Ganapati, P. F. Peterson, J. Holzrichter, H. Atwater, E. Yablonovitch, Ultraefficient thermophotovoltaic power conversion by band-edge spectral filtering, *Proc Natl Acad Sci U S A*, 2019, 116(31): 15356-15361.
- [5] E. Blandre, R. Vaillon, J. Drevillon, New insights into the thermal behavior and management of thermophotovoltaic systems, *Opt Express*, 2019, 27(25): 36340-36349.
- [6] Qingguo Peng, E. Jiaqiang, W. M. Yang, Hongpeng Xu, Jingwei Chen, Feng Zhang, Tian Meng, Runzhi Qiu, Experimental and numerical investigation of a micro-thermophotovoltaic system with different backward-facing steps and wall thicknesses, *Energy*, 2019, 173: 540-547.
- [7] 于海童 刘东, 杨震, 段远源., 全碳太阳能热光伏系统, 2015, 36(04): 698-702.
Yu Hai-tong, Liu Dong, Yang Zhen, Duan Yuan-Yuan, All carbon solar thermal photovoltaic systems, 2015, 36 (04): 698-702
- [8] Yi-Yi Lou, Xiao-Long Zhang, A. Bao Huang, Yu Wang, Enhanced thermal radiation conversion in a GaSb/GaInAsSb tandem thermophotovoltaic cell, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2017, 172: 124-132.
- [9] Pin Jern Ker* W. Emilin Rashid, M. Z. Jamaludin, N. A. Rahman and Mahdi All Khamis, Optimization of p-type Emitter Thickness for GaSbBased Thermophotovoltaic Cells, 2018 IEEE International Conference on Semiconductor Electronics (ICSE). 2018: 109-112.
- [10] Liangliang Tang, Lewis M. Fraas, Zhuming Liu, Chang Xu, Xingying Chen, Performance Improvement of the GaSb

Thermophotovoltaic Cells With n-Type Emitters, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2015, 62(9): 2809-2815.

- [11] Chao Zhang, Zhenghai Liao, Liangliang Tang, Zhuming Liu, Rongling Huo, Zhiping Wang, Kuanrong Qiu, A comparatively experimental study on the temperature-dependent performance of thermophotovoltaic cells, *Applied Physics Letters*, 2019, 114(19): 193902.
- [12] Esther López, Irene Artacho, Alejandro Datas, Thermophotovoltaic conversion efficiency measurement at high view factors, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2023, 250: 112069.
- [13] Mansur Mohammed Ali Gamel, Pin Jern Ker, Wan Emilin Suliza Wan Abdul Rashid, Hui Jing Lee, M. A. Hannan, Md Zaini Bin Jamaludin, Performance of Ge and In_{0.53}Ga_{0.47} as Thermophotovoltaic Cells under Different Spectral Irradiances, *IEEE Access*, 2021, 9: 37091-37102.
- [14] J. García, H. Socolovsky, J. Plá, On the spectral response measurement of multijunction solar cells, *Measurement Science and Technology*, 2017, 28(5): 055203.
- [15] Xiu-Li Liu, Xiao-Lei Li, Xin-Lin Xia, Xue Chen, Shi-Chao Liu, Yang Liu, Design and evaluation of a quasi-monochromatic and high-energy flow thermophotovoltaic test system, *Applied Thermal Engineering*, 2023, 230: 120844.
- [16] R. T. Chang, C. Liu, C. G. Huang, C. W. Wu, Behaviors of photovoltaic cells illuminated by a laser of different operation modes, *Appl Opt*, 2022, 61(19): 5728-5733.
- [17] A. Mellor, J. L. Domenech-Garret, D. Chemisana, J. I. Rosell, A two-dimensional finite element model of front surface current flow in cells under non-uniform, concentrated illumination, *Solar Energy*, 2009, 83(9): 1459-1465.
- [18] J. I. Rosell, M. Ibáñez, Modelling power output in photovoltaic modules for outdoor operating conditions, *Energy Conversion and Management*, 2006, 47(15-16): 2424-2430.
- [19] Meng Xian-long, Liu Bei, Carlos Felipe Aristizabal Lopez, Liu Cun-liang, Multi-field coupling characteristics of photovoltaic cell under non-uniform laser beam irradiance, *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 2022, 52: 101963.
- [20] Xiu-Li Liu, Xue Chen, Xiao-Lei Li, Xin-Lin Xia, Shi-Chao Liu, Yang Liu, A Single Spectral Optical Path Design of the Thermophotovoltaic System for Improving Irradiance Intensity and Uniformity, *Energy Technology*, 2022, 10(9): 2200326.
- [21] 柳秀丽, 陈学, 孙创, 夏新林, 直漏斗二次聚光对单光谱氙灯-热光伏系统性能的影响分析, *光学学报*, 2022, 42(15).
Liu Xiu-Li, Chen Xue, Sun Chuang, Xia Xin-Lin, Analysis of the Effect of Straight Funnel Secondary Focusing on the Performance of Single Spectral Xenon Lamp Thermophotovoltaic System, *Journal of Optics*, 2022, 42 (15)

不同球体大小对球形止回阀的特性模拟

牛万源, 周俊杰*, 汤松臻
(郑州大学 机械与动力工程学院, 河南 郑州 450001)
(Tel:13903842482; Email:2361550291@qq.com)

摘要:球形止回阀是一种非常实用的流体控制装置,在工业领域的应用十分广泛。通过球形止回阀的运用,可以有效防止倒流液体对设备的损害,保障管道系统的安全运行,同时还能提高流体控制的准确性和稳定性。球阀球体大小对止回阀的开关性能以及特性有很大影响,本文利用 CFD 方法针对球形止回阀球体大小进行了数值计算,结果表明随着球体大小的增加,阀门末端的速度会相应减小,而球体与尼龙 O 型槽之间的最大速度会有一定程度的增加,此外球体越大,阀门关闭时的密闭性能更好。

关键词: CFD, 球形止回阀, 优化

0 引言

止回阀作为重要操纵元件,使流体管道可以调节流量、防止回流,为流体管道的安全运行提供了重要保障。此外止回阀的用途极广,无论是在电力、石油、航天、农业等人类生活的各个方面,都需要各式各样的止回阀,因此阀门的发展对各行各业的尖端发展有很大意义。目前,虽然阀门的工程应用十分成熟,但关于止回阀的内部特性研究还十分不足^[1],主要的原因是阀门的研究主要以实验为主,通过实验结果改进阀门内部结构,从而优化其开关性能,但传统的方法成本高,时间长。基于 CFD 方法的数值模拟技术能够解决这一问题,通过改变止回阀不同的几何参数,可以更加直观地显示阀门内部流体的流速与压强分布情况,最终结合少量的实验验证即可有效地指导阀门的优化设计,因此 CFD 方法具有成本低、周期短的优势。

随着 20 世纪 60 年代 CFD 技术的兴起,大量学者开始进行系统模拟阀门内部流体运动状态,如今相关理论分析已经发展的十分成熟。Kim, Nam-Seok^[3]通过选择合适的 CFD 移动网格技术来描述止回阀的动态行为和评估压力累积对阀门关闭行为的响应,对四种不同的移动网格技术进行比较; Song Xueguan^[4]等利用有限元分析软件结合 UDF 编程技术,模拟了安全阀的启闭过程,分析了弹簧力的变化,以及作用在阀瓣上的介质力,优化了安全阀结构,减小了阀门的振动。与国外相比我国对阀门的研究较晚,大部分学者通过稳态分析的方法研究阀门,付佳^[5]等对不同开度下的阀门进行了数值模拟,对不同入口压力下阀瓣所受流体的压力情况和阀瓣重力进行对比,确定阀门开启条件;刘梦瑶^[7]对阀门启闭过程中的非定常流动特征进行了分析解释极端工况下阀门内的流动机理,也为阀门的设计与安全运行提供参照;综上,国内外学者从利用 CFD 流场仿真软件对止回阀内部介质流动状态的稳态分析^[8],到利用自定义函数对阀门的开闭进行动态模拟^[10],分析此种阀门的特性与止回响应。并通过多种优化手段相结合,使得止回阀综合性能得到提升。

本文以球形止回阀为研究对象,基于 CFD 方法对其内部介质流场进行数值模拟计算,并针对不同球体大小对球形止回阀的模拟结果进行分析。该研究对于指导止回阀的优化设计具有重要意义,也为流体管道的安全、经济、高效运行提

供有效保障。

1 结构及工作原理

球形止回阀作为流体管道的开关阀门，主要由阀体、球体和挡板等组成，采用滚球为阀瓣，其平面结构如图 1 所示。

其工作原理是：钢球在球罩内作短行程滚动来实现阀门的启闭。当水泵开启时，水在压力的作用下冲开钢球，使钢球滚至上侧，由后阀体中的槽体固定其位置，止回阀开启；泵停后，由于管路系统中的回水压力，迫使钢球滚至下侧前阀体，与尼龙 O 型圈相挤压，达到止回阀的关闭。本文阀瓣采用钢球，O 型圈采用弹性很好的尼龙材料，尼龙既保证密封，又能保证减小关阀过程中对管道系统的破坏。后阀体在阀门打开时对钢球起固定作用和消除钢球与后阀体接触面积的压强，使其接触为面接触，减小胶球在阀体内的颤抖引起的水力损失。

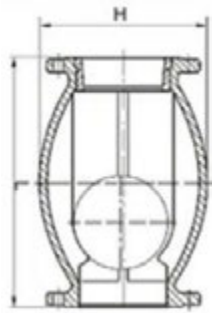


图 1 球形止回阀内部结构

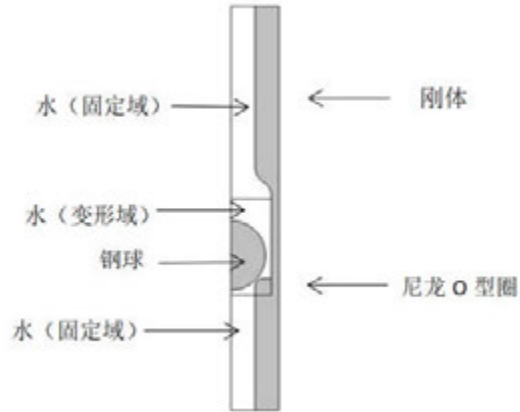


图 2 简化模型

由于模型具有二维轴对称特性，为了节约计算时间并获得可靠性的数据，本文对球形止回阀模型进行了合理简化，具体简化模型如图 2 所示。刚球可沿对称轴自由移动，并承受弹簧载荷和流体力。尼龙 O 形圈连接到假定为刚性的阀体，后者通过对整个阀体应用固定约束来指定刚度。将球固定在 O 形圈上的弹簧未出现在几何结构中，而是使用了弹簧基座条件进行简化。弹簧常数为 4 N/m，当球在阀中静止时，弹簧的预变形小于 5 mm。边界分别定义为压力变化的入口和出口条件，且最大压力为 2500Pa。

2 模型预处理

2.1 数学方程

所有的流体流动都受制于质量守恒定律、动量守恒定律以及能量守恒定律，数值模拟研究就是在这三个守恒定律的基础上来描述流体的流动状态。

其中：质量守恒定律可以表述为：在一定时间和单位体积内，流入该单位体积的质量应与流出的质量相等。可以用质量守恒方程即连续性方程来表述：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (2-1)$$

式 (2-1) 中, 流体的密度为 ρ , t 是时间。流体流动时的速度矢量在 x 、 y 、 z 轴方向上的分速度 u 、 v 和 w 都是时间以及空间的函数。

流体的流动也受到动量守恒定律的制约。该定律可以表述为: 单位时间单位体积流体内的动量的变化率应与外界所有作用在该单元体的应力的加和值相等。可以用动量守恒方程 (N-S 方程) 也叫运动方程来描述, 该方程是对流体进行微元动量上的衡算。

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} = \nabla(\eta \text{grad} u) + S_u - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (2-2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = \nabla(\eta \text{grad} v) + S_v - \frac{\partial P}{\partial y} \quad (2-3)$$

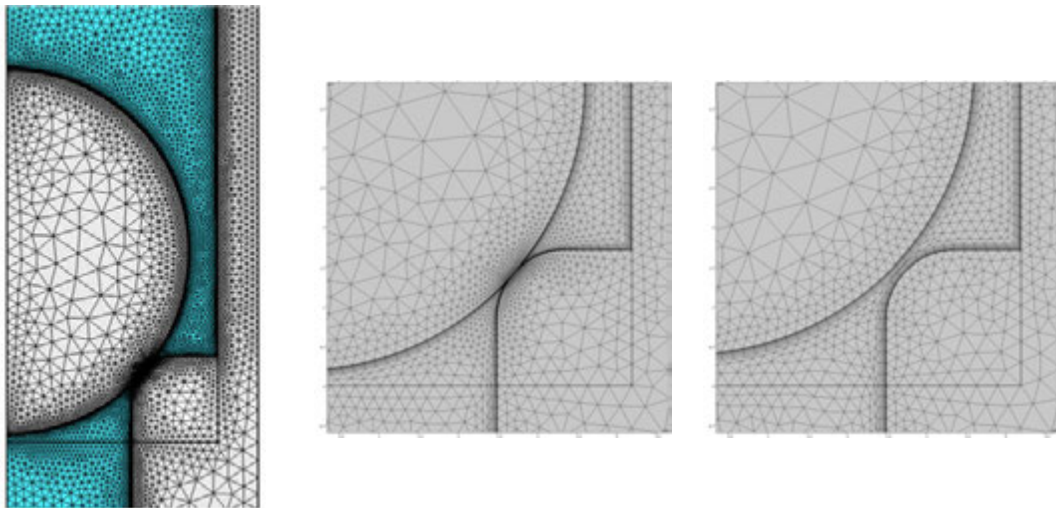
$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} = \nabla(\eta \text{grad} w) + S_w - \frac{\partial P}{\partial z} \quad (2-4)$$

式中 t 表示时间, P 是流体微元上的静压, η 是动力粘性系数, S_u 、 S_v 、 S_w 是流体微元上的各方向的体积分力。

2.2 网格划分

该模型的主要问题是求解流固耦合问题, 被流体分隔开的两个弹性部分 (即钢球和尼龙 O 型圈) 相互接触。在实际接触情况下, 流体域的拓扑随着零件的接触而发生变化。对于数值分析, 需要在接触设置中包含一个偏移量, 以防止零件发生物理接触。在此模型中, 偏移量设置为非常小的值 (5um), 这使得保持流体域的拓扑结构, 同时仍能防止阀关闭时发生明显的反向流动。

本论文在球将要与 O 形圈接触或将要移开时, 采用自动重新划分网格来获得更为精确的求解。由于边界层网格的缘故, 使用失真作为重新划分网格的条件, 当最大单元扭曲的平方根超过 0.5 时, 将为几何结构重新划分网格。图 3(a) 显示为整体网格划分。图 3(b)(c) 为球形止回阀关闭和开启时的网格划分状态。



(a) 整体网格划分

(b) 球阀关闭时

(c) 球阀开启时

图 3 止回阀不同工作时网格

3 止回阀工作模拟

由图 4(a) 可以看到阀最大开度时的流体速度, 最大速度约为 2.5 m/s, 主流道及其周围的回流清晰可见。图 4(b)(c)(d) 可以看出在 0 到 5 秒的时间里, 随着入口压力的不断加大, 止回阀里的钢球所承受的流体压力和 Mises 应力也不断加

大，在第 1 秒时，钢球所承受的流体压力和 Mises 应力达到即将开启阀门的状态，此时流体压力达到 $8.665 \times 10^3 \text{Pa}$ ，Mises 应力达到 $1.16 \times 10^6 \text{Pa}$ 。在 5s 时，入口压力达到最大，此时钢球在流体的压力下向上移动与尼龙 O 形槽相距达到最远，并且此时流体经过钢球后方后形成涡流，阻碍钢球继续上移。

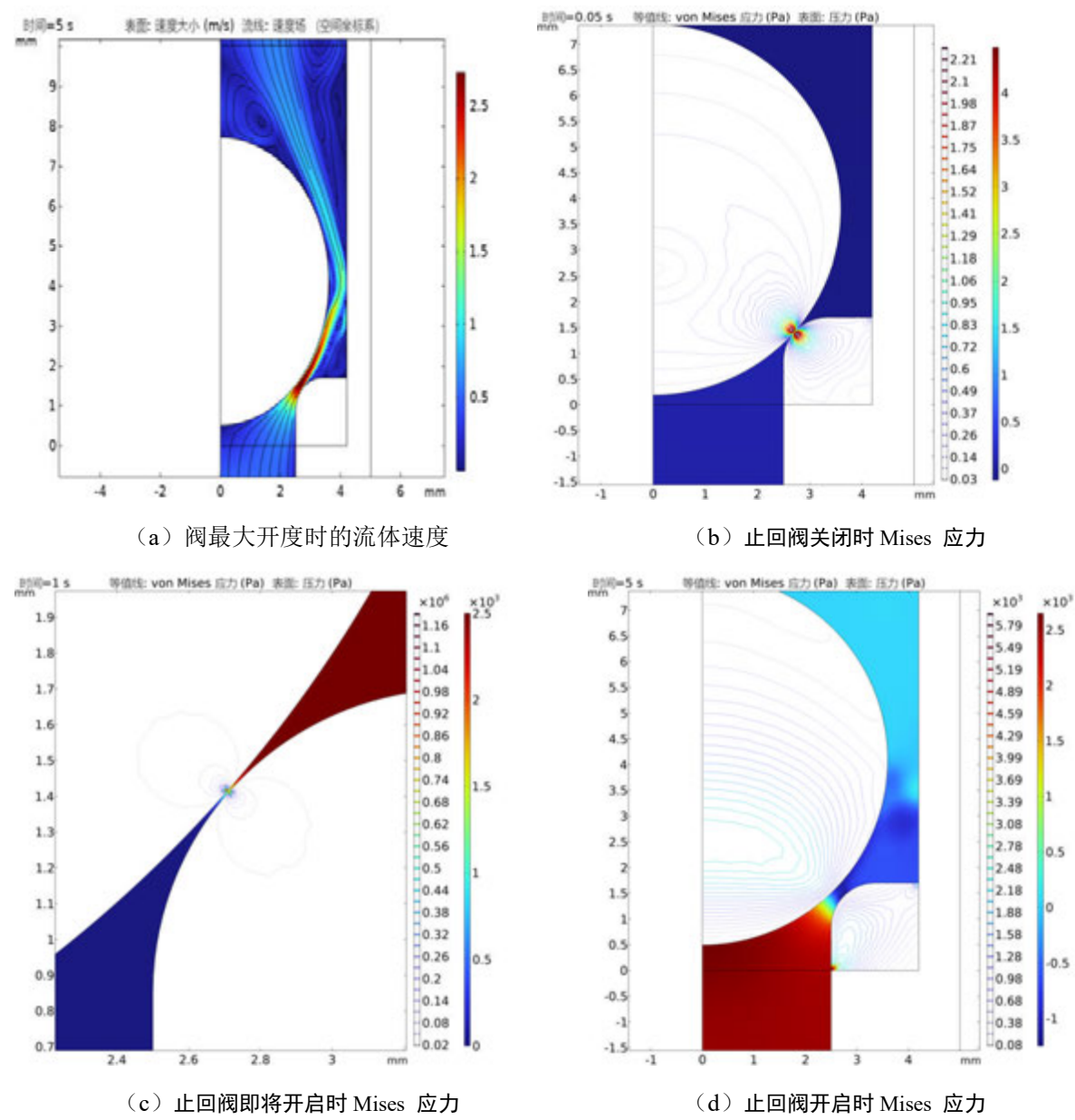
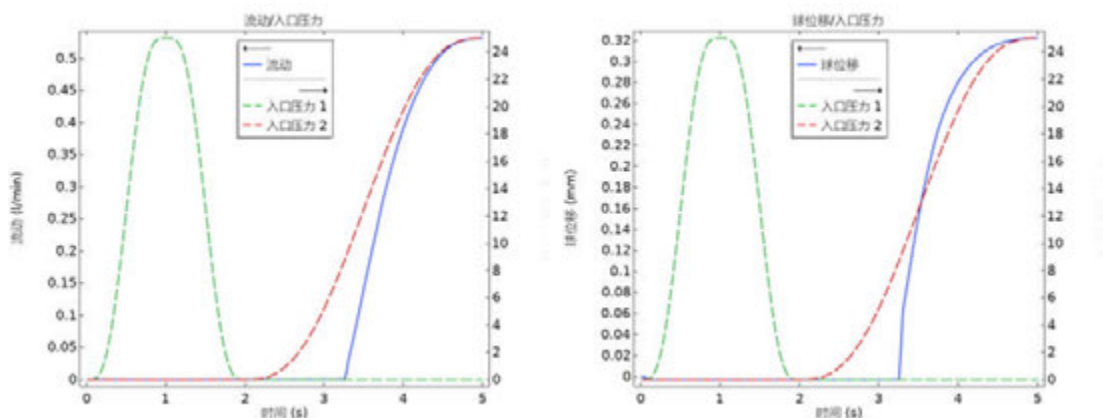


图 4 阀最大开度时的流体速度

此外，从图 5(a)(b)可以看出阀中的流体流动、球心位移及压力随时间变化情况，在 0 到 1 s 以内，压力沿反向流动方向增加，在 1s 达到最大，此时最大反向流动约为 0.53 ml/min。施加弹簧预变形后，球会稍微向下移动。随着反向压力的增加，球的位移可以忽略不计。3 秒钟后，沿工作方向的流量增加，球阀开始移动直到球达到约 0.32 mm 的最大位移。



(a) 阀中的流体流动随时间变化情况

(b) 球心位移随时间变化情况

图 5 阀中的流体流动、球心位移及压力随时间变化情况

4 钢球大小对阀门特性影响

本次仿真模拟对球形止回阀的钢球大小进行参数优化, 利用参数化扫描, 研究钢球大小对球阀末端速度以及球阀最大速度和入口压力的影响, 考察 3.57 mm、3.58 mm、3.59 mm、3.60 mm 四组不同钢球大小, 经过扫描后图像如下图 6 所示, 不同钢球大小对入口压力影响不大, 当随着钢球大小的增加, 阀门末端速度下降, 球阀的最大速度增加, 这是由于随着钢球的增大, 导致阀门打开的程度减小, 在压力一定的情况下其最大速度一定会增加。

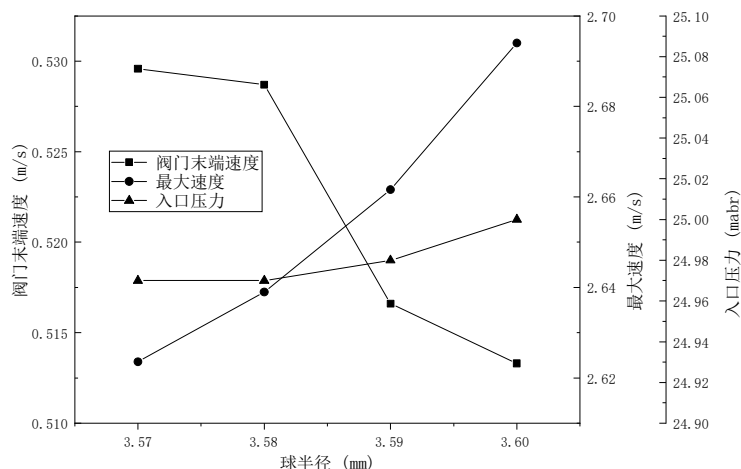


图 6 不同球腔长度对阀门末端速度影响

5 结论

1. 当流体进入止回阀后, 压力会有突然减小的瞬间, 但随着时间的推移, 阀门内部的压力会趋于稳定, 此外当增加阀瓣钢球的大小, 阀门末端的速度会相应减小, 而钢球与尼龙 O 型槽之间的最大速度会有一定程度的增加。钢球越大, 阀门关闭时的密闭性能更好, 阀体内的压力分布过渡较为均匀, 符合流体的实际流动情况, 并且速度分布情况也较为理想。

2. 通过建立了球形止回阀的模型, 可以直观的看到球阀的工作状态以及球阀内部的流体速度和压力, 可以很好的改进阀体的设计, 但与实验相比, 数值模拟方法对实际工况进行假设和简化, 可能导致模型与实际情况存在差异。

参考文献

- [1] 齐长鑫. 考虑流固耦合的止回阀启闭过程分析与优化[D].兰州理工大学,2021.
- [2] 张伟涛. 轴流式止回阀阀瓣瞬态压力分布与冲击分析 [D]. 兰州: 兰州理工大学, 2014, 1-2.
- [3] Kim, NS , Jeong, YH, et al.An investigation of pressure build-up effects due to check valve's closing characteristics using dynamic mesh techniques of CFD, 2021.
Song X G, Cui L, Park Y C. Three-dimensional CFD analysis of spring-loaded pressure safety valve from opening to re-closure. Proceedings of the ASME 2010 Pressure Vessels and Piping Division [C]. K-PVP Conference, PVP2010.Washington: ASME, 2010, 5: 295-303.
- [4] 付佳,汝强.旋启式止回阀低压差开启能力模拟分析[J].阀门,2021(05):266-270.
- [5] 穆岩,孙宝杰,张峰.基于 CFD 的止回阀流体分析与结构优化设计[J].阀门,2021(04):183-186.
- [6] 刘梦瑶,康灿,丁可金,等.某核电止回阀开启过程中的瞬态流动与结构特征 [J].核动力工程, 2020, 41 (03) : 45-51.
- [7] 赵云,胡光忠,文华斌,邹亮,纪博凯.球形止回阀关闭过程流固耦合特性研究[J].流体机械,2019,47(05):28-32.
- [8] 张欣. 圆盘式止回阀开启过程的数值模拟及优化分析[D].重庆大学,2018.
- [9] 王宏伟,刘小兵,刘德民.球形止回阀的 CFD 分析[J].流体传动与控制,2009(02):8-11.
- [10] 李梦科. 轴流式止回阀启闭过程分析及减阻设计[D].兰州理工大学,2020.
- [11] 肖斌,孟姝姮.微阻低压差旋启式止回阀的设计及应用[J].阀门,2019(05):8-10.
- [12] 孙淑慧,董江峰.基于 CFD 的止回阀优化设计与数值研究[J].区域供热,2020(01):111-116.
- [13]

面向储热强化的双驱动力热管传热性能研究

刘凯豹, 陈赫, 刘昌会, 赵佳腾*

(中国矿业大学 低碳能源与动力工程学院, 徐州, 221116)

(Tel: 0516-83592000, Email: zhaojiateng@cumt.edu.cn)

摘要: 本文针对传统热管式相变储热系统存在结构不紧凑、储放热过程中的温度波动等问题, 设计了一种具有双驱动力的新型内嵌式热管。在储热系统的蓄热过程中, 利用重力和微槽管的毛细力的双重作用促进冷凝段凝结液的回流, 提高热管的干涸极限。在放热过程中, 微槽管的毛细作用既可以促进冷凝段凝结液的回流, 又可以帮助液池中的工质更好地浸润绝热段壁面。并对不同加热模式下热管的传热特性进行了实验研究。结果表明: 在热管底部加热条件下, 充液率较小时的热管热阻随加热功率增加减小, 充液率较大时的热阻先增大后减小, 在所测所有加热功率中, 热阻低至 0.039 K/W 。在模拟相变材料对热管加热条件下, 同一加热功率下, 当充液高度小于 130mm 时, 热管热阻随着充液率增加先减小后增大此时热管的最佳充液率为 15% , 热阻低至 0.1 K/W 。

关键词: 双驱动力热管; 充液率; 热阻; 传热性能

0 引言

储能是指以设备或介质为容器存储能量, 并在不同的时间空间释放能量的过程^[1]。热管式储能系统作为一种新型储能技术, 具有调控电能品质、移峰填谷、提高电能利用率的优势, 对建设以绿色能源为主的新型能源结构以及实现“双碳”目标具有重要作用^[2, 3]。热管式储热系统的传热热阻主要由热管传热热阻、相变材料的导热热阻和系统的对外换热热阻组成^[4, 5]。热管作为储热系统的核心部件, 在储热材料特性不变的前提下, 如何强化储热过程中的热管传热就成了发展储热技术的又一突破口^[6, 7]。张等^[8]通过深入开展复合强化传热特性研究发现: 同时采用内螺纹及自湿润流体两种强化方法可以降低重力热管运行温度, 减小热阻, 增大换热系数, 有效改善重力热管在垂直放置时的传热性能。战等^[9]采用数值模拟方法对 U 形管蒸发冷凝和热管内部流动传热过程进行了研究。马等^[10]在室温环境下分别测试了平板重力热管和翅片重力热管在不同加热功率条件下的瞬态热响应速率、稳态沿程温度分布及平板热管的等效热导率。对于平板热管, 加热功率增大, 均温段长度增大; 与平板热管相比, 翅片热管由于散热面积的增加, 相同加热功率条件下的均温段长度更长, 均温性更好, 整体温度更低。Zou 等^[11]通过在重力热管蒸发端添加翅片, 通过实验和模拟发现: 当翅片数为 4 和 12 片时, 热管总热阻平均降低了 4.93% 和 13.43% 。

传统重力热管由于没有毛细芯, 蒸汽在冷凝段凝结成液态后只能依靠重力沿热管管壁回流至热管的液池内^[12-14]。但当热管内的充液率较小时, 热管内绝大部分工质转变为蒸汽, 但蒸汽冷凝回流不及时, 易使蒸发段底部的工质出现干涸现象, 甚至液池内工质全部蒸干出现“干烧”的情况, 出现干涸极限^[15-17]。针对传统的热管式储热系统存在结构不紧凑, 在储热和放热过程中热管的传热性能波动, 工质浸润壁面能力弱等问题^[18-20], 本文设计了一种具有双驱动力的新结构热管, 并采用实验方法对不同加热模式下双驱动力热管的传热特性和工作稳定性进行了研究。

1 双驱动力热管制作及实验系统搭建

1.1 双驱动力热管结构设计

*基金项目: 江苏省自然科学基金 (BK20190628)

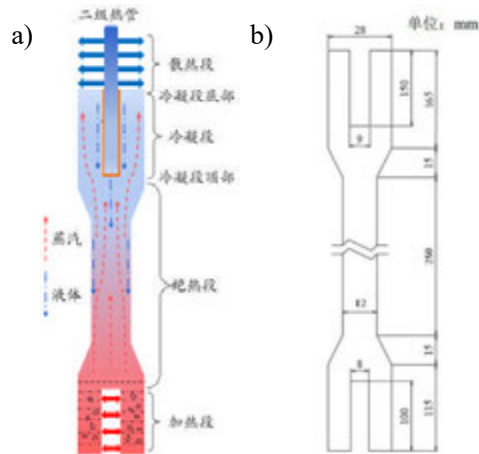


图 1 新型内嵌式热管工作原理图和结构尺寸

本文主要研究双驱动力热管在不同工质和不同加热方式下的传热性能,因此实验系统在满足传统重力热管通过底部蒸发段加热工质的同时,又要具备模拟相变材料通过绝热段加热工质的能力。同时,作为面向储热强化的研究,双驱动力热管的设计也要考虑到与相变储热材料的耦合等问题。图 1a 为新型内嵌式热管的工作原理示意图,新型内嵌式热管与普通两相闭式热虹吸管工作原理相似,管内壁没有吸液芯结构,工作时只能蒸发段位于冷凝段下部,当蒸发段输入热量,管内工质吸热达到饱和状态后开始相变,并在蒸发段与冷凝段之间进行两相流传热。其中新型内嵌式热管的蒸发段和冷凝段管径相同且都大于绝热段的管径,这样减少了绝热段所占有的体积,与相变材料耦合利用时,可以增加相变材料的储量;而蒸发段又内嵌有一段短管,使用时,将电加热棒插入其中。图 1b 为新型内嵌式热管的结构尺寸图,其中热管的壁厚为 1mm,考虑到加工精度的问题,电加热棒和新型内嵌式热管、新型内嵌式热管和一级热管之间均采用间隙配合,后期使用时在间隙中填入高导热性材料。

图 2 是双驱动力热管实物图和微槽铜管截面实物图与示意图,其中热管的壁厚为 1mm,毛细微槽的宽度和深度在 0.6mm 左右。为了减小导热热阻和强化传热,实验前会在电热棒与热管蒸发段内嵌的短管间填充导热硅脂。热管的制作采用分体加工再焊接的方法,即先将双驱动力热管各部件加工好,再焊接成一个整体。为确保热管的密封性和焊接强度,热管的焊接选择了气焊。

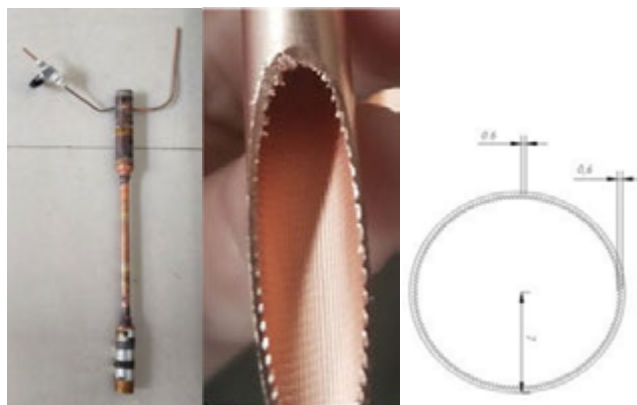


图 2 双驱动力热管实物图和微槽铜管截面实物图与示意图

1.2 双驱动力热管结构加工

加工既要考虑加工的精度、难易程度又要考虑成本,因此对各种加工方法进行比较后再进行选择。其中二级热管可以用一体加工的方法实现,网上有商业化的产品,可以直接购买使用,主要考虑新型内嵌式热管的加工。如图 3 所示,本设计将内嵌式热管分为 11 个

部分，采用分体加工再焊接的方法。紫铜的导热性较好，热管每部分都采用紫铜材质。关于紫铜的焊接，前期采用过锡焊、氩弧焊及气焊，其中锡焊属于渗透焊接，是一种不伤害母材的焊接，且锡焊的表面比较干净，但锡焊耐温比较低，牢固性较差，重摔后容易从焊口断裂。氩弧焊温度比较高，是一种伤害母材的焊接，但由于铜管壁厚只有 1mm，电弧容易将铜管穿透形成小孔，造成焊接处密封性不佳。气焊也是一种伤害母材的焊接，采用银焊丝，用焊枪将母材和焊丝烧熔使之紧密结合，密封性和强度较好，但母材在高温下容易氧化，焊接表面比较脏。相比之下，考虑到热管的密封性和焊接强度最终选择了气焊。

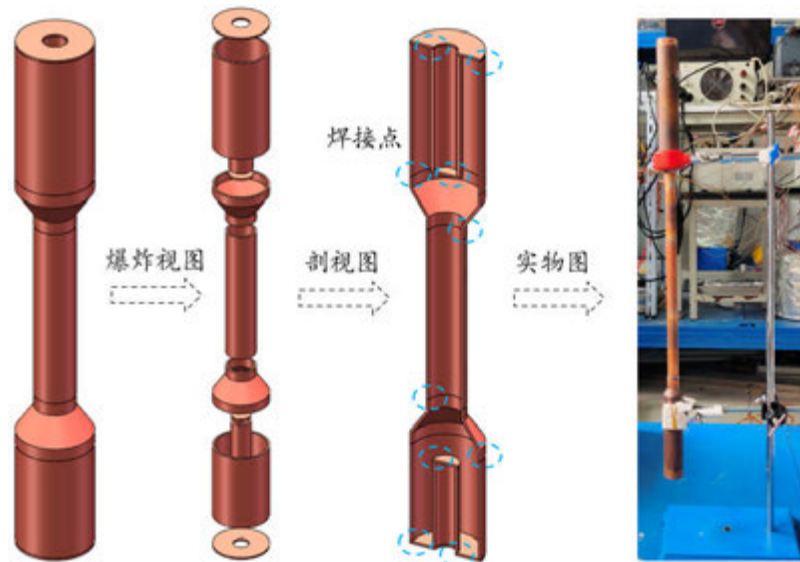


图 3 新型内嵌式热管结构示意图

1.3 新型内嵌式热管优点

相比于传统重力热管，新型内嵌式热管的蒸发段和冷凝段管径相同且都大于绝热段的管径，这样减少了绝热段所占有的体积，与相变材料耦合利用时，可以增加相变材料的储量；而蒸发段又内嵌有一段短管，使用时，将电加热棒插入其中。这样设计的好处有以下几点：

（1）蓄热过程对应加热棒加热，绝热段的微槽管的毛细力可以加速凝结液回流，可以防止蒸发段出现干涸现象；（2）放热过程对应电热丝加热，微槽管的毛细力可以促进底部工质向上浸润加热壁面，提高干涸极限；（3）热管的加热与传热分开进行，电热棒在蒸发段内嵌的短管中进行加热，避免了加热棒与相变材料直接接触导致相变材料对电热棒的腐蚀，同时热量从热管内部导入可以减少热量损失；（4）热管的蒸发段和冷凝段也可以参与传热，不必独立于蓄热器而裸露在外，有利于蓄热器的封装。热管管外加热还会造成一部分热损失，而管内加热几乎没有热损失。与蒸发段类似，冷凝段也内嵌有一段短管，使用时，将二级热管插入其中，加强冷凝段的散热，这段既是新型内嵌式热管的冷凝段也是二级热管的蒸发段。

1.4 热管传热性能测试系统

双驱动力热管传热性能测试实验系统如图 4 所示。实验数据测取过程中所用设备包括恒温水槽、直流稳压电源、真空泵、水泵、电加热棒、热电偶、数据采集器、电脑等。按照这些设备的功能和用途，可将整个实验系统分为五个部分，即热管本体、加热系统、冷却系统、辅助系统和数据采集系统。为了模拟储热相变材料放热对热管加热的过程，将加热方式改为热管绝热段均匀缠绕电热丝加热，来验证微槽管的毛细力对工质浸润壁面的强化作用，并对热管的传热性能进行研究。为了探究不同充液率对双驱动力热管传热性能和传热稳定性的影响并确定满足双驱动力热管启动的最小充液率，本文选用去离子水作为工质，冷却水温度控制为 15℃，选取 5%、10%、15%、30%、50%、70% 共六组充液率进行研究。选取 10-120 W 共 12 个功率作为加热功率。

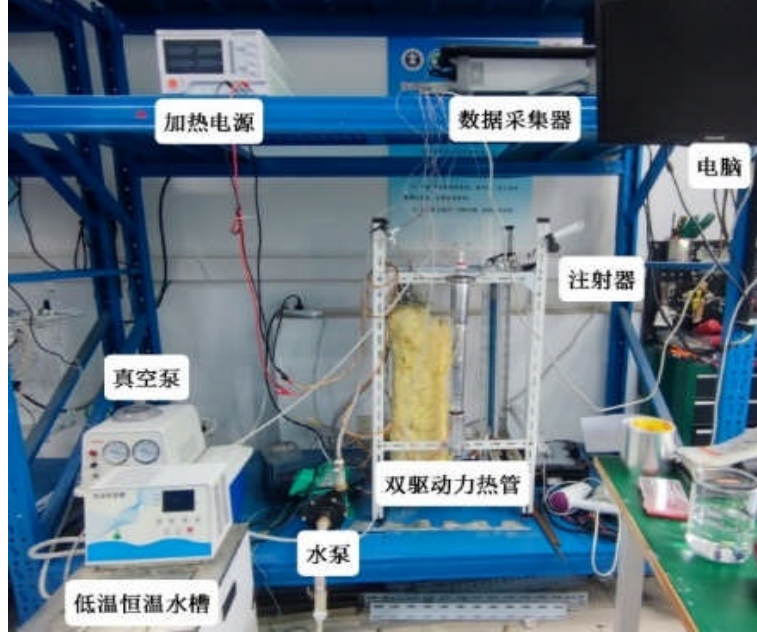


图 4 实验系统实物图

1.5 实验数据处理

热管的平均温度可由式 (1) ~ (3) 计算得到, 其中 T_1 、 T_2 、 T_3 为蒸发段测温点温度, T_4 、 T_5 、 T_6 为绝热段测温点温度, T_7 、 T_8 、 T_9 为冷凝段测温点温度。

$$\bar{T}_e = \frac{1}{3}(T_1 + T_2 + T_3) \quad (1)$$

$$\bar{T}_a = \frac{1}{3}(T_4 + T_5 + T_6) \quad (2)$$

$$\bar{T}_c = \frac{1}{3}(T_7 + T_8 + T_9) \quad (3)$$

$$Q = P = UI \quad (4)$$

式中, Q 为热管的热负荷, U 为输入电压, I 为输入电流, $\bar{T}_e$ 为蒸发段平均温度, $\bar{T}_a$ 为绝热段平均温度, $\bar{T}_c$ 为冷凝段平均温度。引入热管热阻来分析热管整体的传热性能, 热管的热阻体现了在一定加热功率和一定平均温差下的热管传热阻力, 其定义见式 (2-5)

$$R = \frac{\bar{T}_e - \bar{T}_c}{Q} \quad (5)$$

在结合等效导热系数法和等效对流换热系数法两种评价方法后, 本文从宏观出发, 利用傅里叶定律, 即利用式 (6)、(7) 来计算热管的等效导热系数 λ_e 。

$$Q = -\lambda A \frac{dt}{dx} \rightarrow \lambda = \frac{Q dx}{A|dt|} \quad (6)$$

$$\lambda_e = \frac{4L_a}{\pi d_{ao}^2} \frac{Q}{\Delta T} \quad (7)$$

另外本研究用电热丝均匀缠绕在热管绝热段上来模拟相变材料放热加热热管的过程, 对电热丝加热时的热管传热性能进行研究, 此时热管热阻用式 (8) 计算。

$$R = \frac{\bar{T}_a - \bar{T}_c}{Q} \quad (8)$$

式中 Q 为直流电源的加热功率, L_a 为热管绝热段长度, d_{ao} 为绝热段铜管外径, ΔT 为蒸发段与冷凝段的平均温差。

2 实验结果与讨论

2.1 底部加热模式下的热管传热性能研究

不同充液率和加热功率时热管的热阻变化规律图如图 5 所示。从图上可知，同一加热功率下，当充液高度比加热段高度小时，在充液率增加的情况下，热阻先降低后升高，在 15% 充液率时热阻降至最小，加热功率为 120 W 时热阻低至 0.039 K/W。当充液率较小时，液池内工质高度较小，从汽化核心处生成的气泡很容易冲出液面。气泡携带一部分液态工质以气液两相流的形式上升，但由于气泡初始动能较小，气液混合态工质只能上升到绝热段，不能冲击到冷凝段顶部，因此无法冲刷冷凝段壁面。所以冷凝段可以视为传热系数较小的典型膜状凝结换热，限制了冷凝段的传热能力，导致热管整体热阻较大。当充液率增大时，气液两相流虽然能够冲击到冷凝段顶部，对冷凝段形成有效的冲刷，但液态工质质量太大，工质升温更缓慢，导致同功率下需要对工质进行更长时间的加热，才能使气泡推动液柱向上运动。因此气液两相流的脉动频率和壁温变化剧烈程度大幅下降，导致传热恶化，相比于小充液率，整体热阻反而更大。

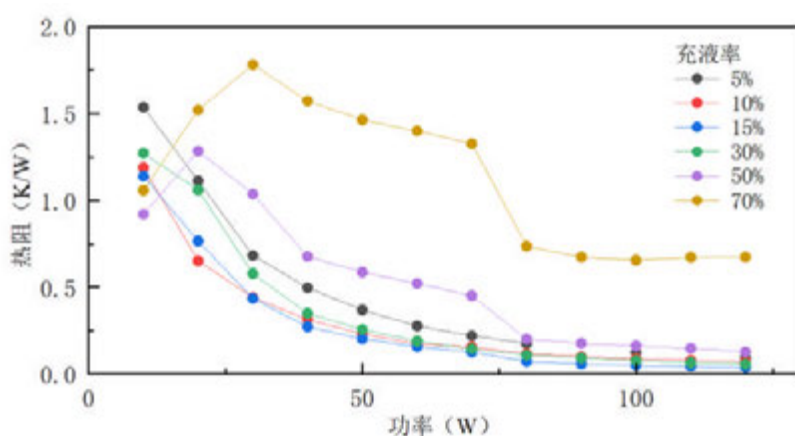


图 5 各充液率下热管在不同加热功率下的传热热阻

当充液高度大于加热段高度时，热阻随充液率增加逐渐增大，而且充液高度比加热段高度小时的热阻基本上均低于充液高度比加热段高度大时的热阻。当热管内充注的工质较多、热管充液率较大时，充液高度大于有效的加热高度，液面高度较大导致蒸发段产生的气泡处于更大的压力下。这使气泡从壁面上汽化核心处脱离所需的初始动能增加，气泡很难冲破液面形成气液两相流。气泡只能在液面下不断生长，气泡之间相互合并逐渐形成汽弹推动液体向上运动。液体撞击冷凝段顶部后与壁面交换动量，使液体流速方向转向下，并在重力作用下沿着冷凝段壁面向下流动。液态工质在冷凝段壁面形成一层液膜，增大了冷凝段凝结换热热阻，因此充液高度比加热段高度小时的热阻普遍低于充液高度比加热段高度大时的热阻。

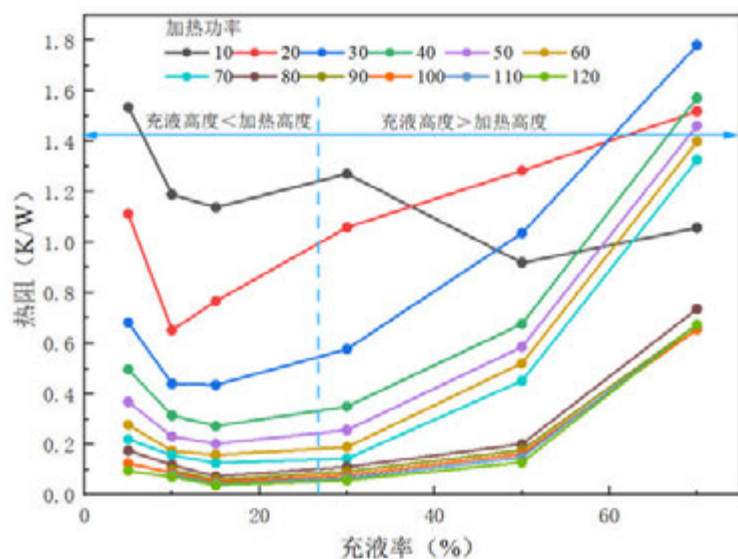


图6 同一功率下不同充液率时的热阻

从图 7 可以看出，在同一充液率下，热阻随着加热功率的增加大幅度减小。以充液率为 10% 的热管为例进行分析，液池内的汽化核心数随加热功率的增大而增多，气泡生成和脱离的速率加快，气泡从壁面上汽化核心处脱离时的初始动能更大，气液两相流可以更频繁更快速地向上传动，对冷凝段壁面地冲刷频率也随之增加。冲刷可以破坏冷凝段壁面上的液膜，将膜状凝结换热变为强制对流传热，提高了冷凝段的换热能力，使热管的整体热阻降低。当充液率较大时，虽然热管内压力更高，工质沸点也随之升高，导致热管启动前的显热蓄热阶段时间更长、启动温度更高，并且由于显热蓄热阶段蒸发段温度不断升高，而冷凝段换热系数小温度基本不变，导致热管启动前蒸发段和冷凝段间的平均温差增大，整体热阻也不断增加。但热管启动后，随着加热功率的增加，管壁温度升高，液体显热蓄热时间减小，间歇沸腾的频率增加，气液两相流可以更频繁更快速地向上传动，对冷凝段壁面地冲刷频率也随之增加。液柱上升时对冷凝段的冲刷增大了热管冷凝段的换热系数，液柱下降时对液池的冲击造成剧烈扰动提高了冷凝段的换热系数，致使热管的热阻也随加热功率的增大而大幅减小。

从图 7 和图 8 可以看出等效导热系数随加热功率和充液率的变化关系。当充液高度比加热高度小时，在充液率增加的条件下，等效导热系数先增大后减小；当充液高度比加热高度大时，在充液率增加的条件下，等效导热系数逐渐减小。所测所有充液率中，充液率为 15% 时的等效导热系数最大，最大可达 $63955 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 。

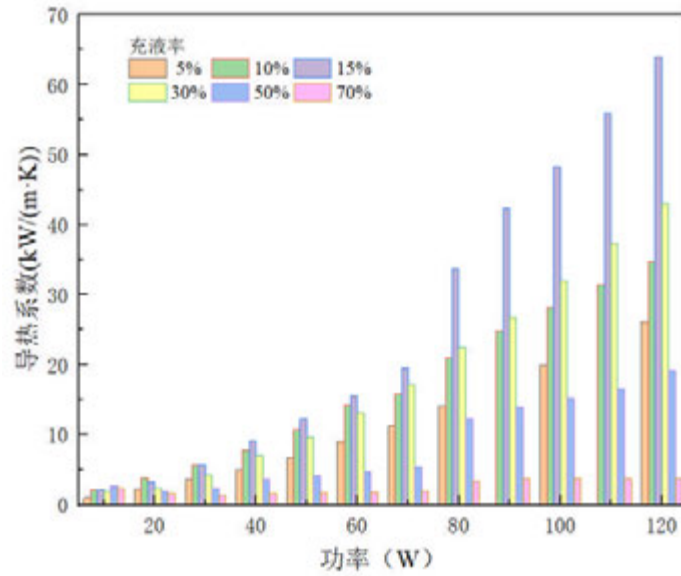


图7 各充液率下热管在不同加热功率下的等效导热系数

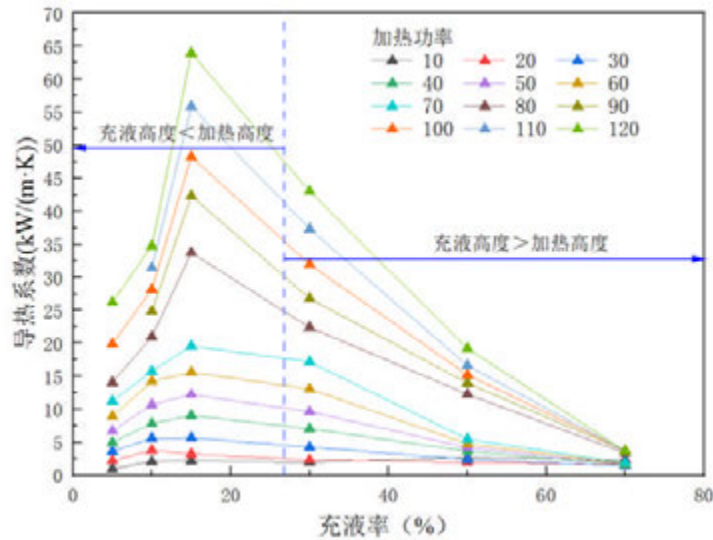


图8 同一功率下不同充液率时的等效导热系数

所测全部充液率中,在加热功率增大的条件下,等效导热系数均增大,等效导热系数在加热功率为 120 W 时达到最大,此时热管尚未达到传热极限,热管传热性能依然良好。若是要探究热管的传热极限,可以选择使用电阻更小的加热棒来达到更大的加热功率。当热管达到传热极限时,将出现等效导热系数不再随加热功率的增大而增大或随加热功率的增大而减小的现象。

2.2 模拟相变材料加热下双驱动力热管传热性能研究

由于双驱动力热管的绝热段为内表面刻有螺旋微槽的铜管,所以在模拟相变材料加热模式下,只有充液高度达到 130 mm 时,工质才能接触到内壁面的微槽,因此充液率大小对热管的传热性能具有很大影响。

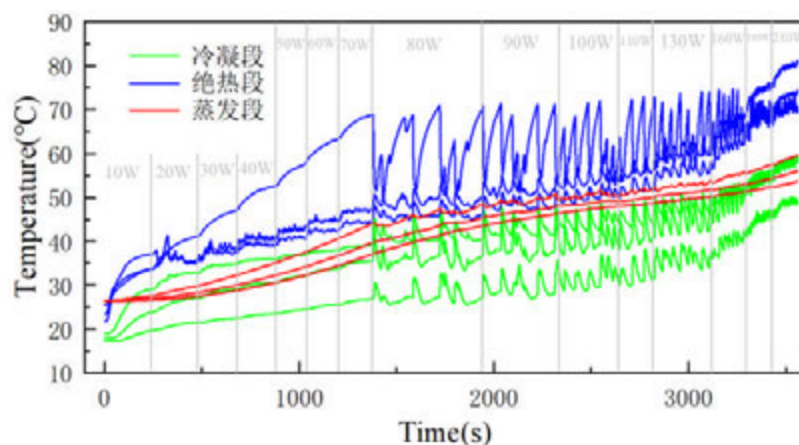


图 9 30%充液率下的热管壁面温度变化曲线

从图 9 可以看出，当充液率达到 30%时，充液高度约为 128 mm，虽然略低于 130 mm，但由于部分工质受热汽化后形成气泡体积增大，所以实际液面已经接触到微槽管内壁面。从图中可以看出，在毛细力的作用下，绝热段下部的微槽管壁面已经得到了浸润，由于热管内部压力在脉动，而绝热段底部靠近蒸发段并远离冷凝段，内部的温度与工质的饱和温度对应。而 30%充液率下，在启动过程中液池内已经生成大量的蒸汽流动到冷凝段，所以有足够多的凝结液回流，使绝热段上部和中部温度温升更缓慢，因此绝热段下部壁面温度上升幅度更大。

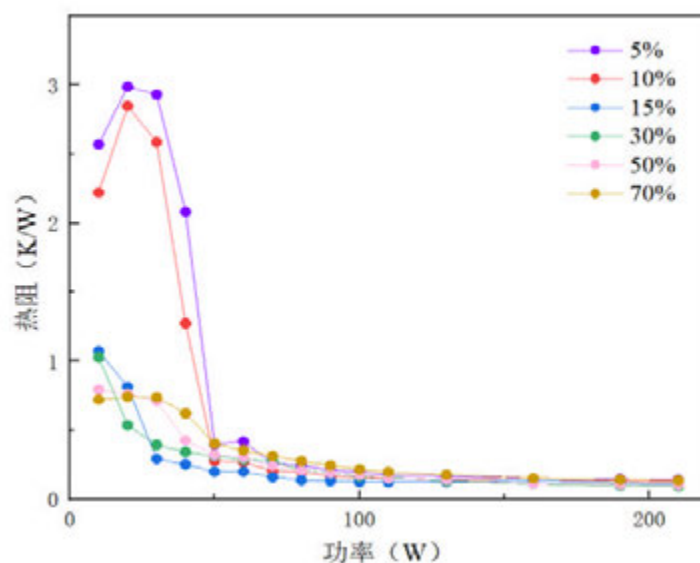


图 10 各充液率下热管热阻随加热功率变化曲线

图 10 为各充液率下热管热阻随加热功率变化曲线，图 2 为同一功率下不同充液率时的热阻。从图 10 可以看出，随着加热功率的增大，小充液率下的整体热管先增大后减小，大充液率下的整体热阻逐渐减小。这可能是由于小充液率时，绝热段壁面得不到工质的浸润，壁面温度不断升高，但蒸发段的加热速率却很缓慢，导致热管均温性差，热管整体热阻较大。从图 2 可以看出，同一加热功率下，当充液高度小于 130 mm 时，热管热阻在充液率增加的情况下先减小后增大，在充液率为 15%时热阻降至最小，只有 0.1 K/W；当充液高度大于 130 mm 时，随着充液率增加，热管热阻逐渐增大，在充液率为 50%时热阻最小。

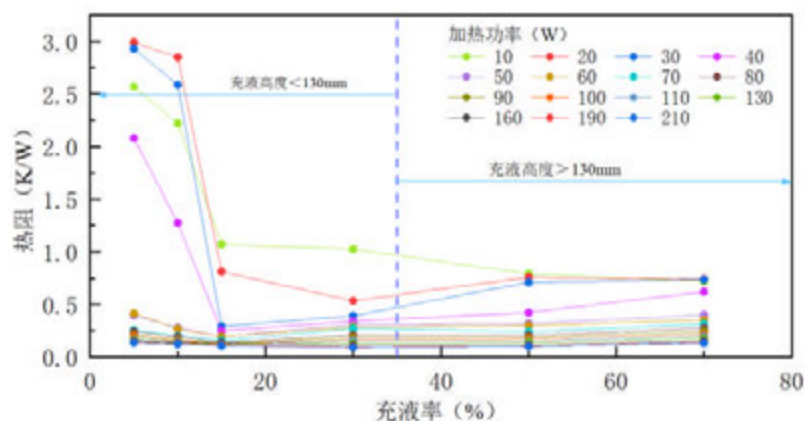


图 11 同一功率下不同充液率时的热阻

从图 11 与图 6 对比可以发现，电热丝加热模式下，热阻随充液率的变化规律与电热棒加热时基本一致，但相同充液率下，小充液率时热阻随加热功率的变化幅度更大，大充液率时热阻变化幅度更小。这可能是因为小充液率时，热量需要通过导热传递到蒸发段，绝热段和冷凝段的平均温差较大，热管热阻也较大，但热管启动时壁面温度骤变，均温性在瞬间得到改善，热阻大幅减小；而大充液率时热量可以直接加热，这使大充液率时热管的启动温度更低，启动前的均温性更好，热阻较小，在热管启动时温度和热阻不会出现骤变。

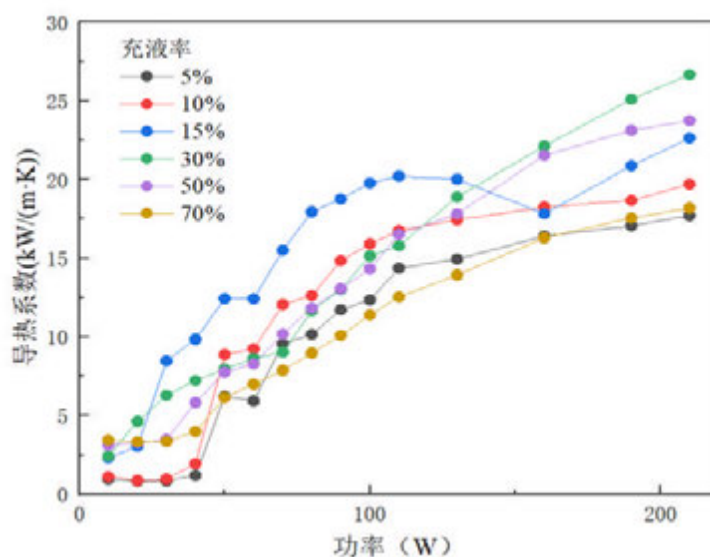


图 12 各充液率下热管在不同加热功率时的等效导热系数

图 12 为各充液率下热管等效导热系数随加热功率变化曲线，图 11 为同一功率下不同充液率时的等效导热系数。从图 12 可以看出，随着加热功率的增大，小充液率下的等效导热系数先减小后增大，大充液率下的等效导热系数逐渐增大。并且在所测全部充液率中，在加热功率增加的条件下，等效导热系数均增大，当加热功率增加到 210 W 时等效导热系数达到最大，说明此时热管传热性能依然良好，没有达到传热极限。从图 13 可以看出，同一加热功率下，当充液高度小于 130 mm 时，热管的等效导热系数随着充液率增加先增大后减小，在充液率为 15% 时等效导热系数最大，最大可达 26670 kW/(m·K)；当充液高度大于 130 mm 时，随着充液率增加，热管的等效导热系数逐渐减小，在充液率为 50% 时等效导热系数最大。

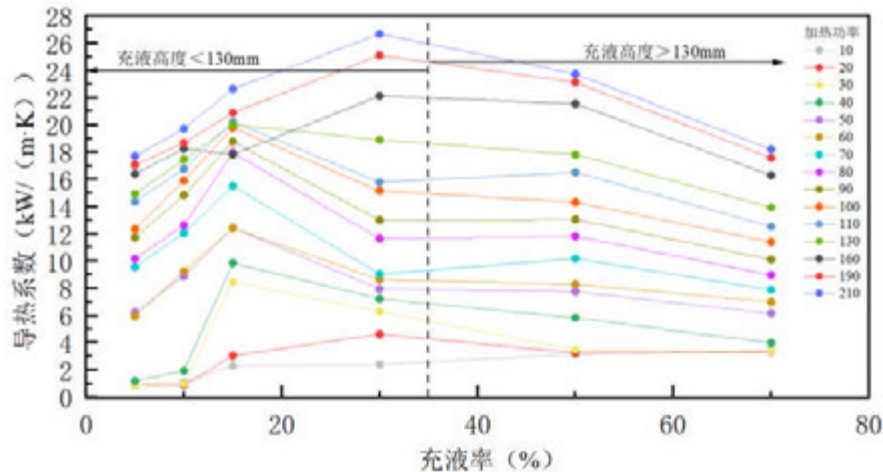


图 13 同一功率下不同充液率时的导热系数

3 结论

本文旨在解决传统热管式相变储热系统存在的结构不紧凑、储放热过程存在温度波动等问题，在内嵌式重力热管的基础上，设计了一种双驱动力动力热管。通过搭建热管传热性能实验测试系统，对双驱动力热管在不同加热方式、不同充液率以及不同加热功率下的传热性能进行了实验研究。主要内容和结论如下：

(1) 热管底部加热条件下，充液率较小时的热管热阻随加热功率增加减小，充液率较大时的热阻先增大后减小，在所测所有加热功率中，热阻低至 0.039 K/W 。当充液高度小于蒸发段的高度时，热阻随充液率增大先降低后升高，15%充液率时热阻最小；当充液高度比加热段高度小时，热阻逐渐增大，30%充液率时热阻最小，充液高度比加热段高度大时的热阻基本上均高于充液高度比加热段高度小时的热阻。

(2) 模拟相变材料对热管加热条件下，充液率较小时，热管的整体热阻随加热功率增加先增大后减小；充液率较大时，整体热阻随加热功率增加逐渐减小。同一加热功率下，当充液高度小于 130mm 时，热管热阻随着充液率增加先减小后增大此时热管的最佳充液率为 15%，热阻低至 0.1 K/W ；当充液高度大于 130 mm 时，热管热阻随着充液率增加逐渐增大此时热管的最佳充液率为 50%。

参考文献

- [1] 吴皓文, 王军, 龚迎莉, 等. 储能技术发展现状及应用前景分析. 电力学报, 2021,36(05): 434-43.
WU Hao-Wen, WANG Jun, GONG Ying-Li, et al. Development Status and Application Prospect Analysis of Energy Storage Technology. Journal of Electric Power. 2021,36(05): 434-43.
- [2] 李亚溪, 李传常, 白开皓, 等. 热储能技术及其工程应用. 长沙理工大学学报(自然科学版), 2022, 19(03): 1-19.
LI Ya-Xi, LI Chuan-Chang, BAI Kai-Hao, et al. Thermal energy storage technology and its engineering applications. Journal of Changsha University of Science & Technology(Natural Science), 2022, 19(03): 1-19.
- [3] 赵佳腾, 王增鹏, 徐旺, 等. 新型内嵌式热管流型演化与传热特性实验研究. 工程热物理. 学报. 2022, 43(10): 2659-66.
ZHAO Jia-Teng, WANG Zeng-Peng, XU Wang, et al. Investigation on the Flow Pattern Evolution and Heat Transfer Characteristics of an Embedded Heat Pipe. Journal of Engineering Thermophysics, 2022, 43(10): 2659-66.
- [4] SHEN T A, QY A, NA H A, et al. Discharging process and performance of a portable cold thermal energy storage panel driven by embedded heat pipes [J]. Energy, 2020, 205.
- [5] 戴宇成, 王增鹏, 刘凯豹, 等. 基于相变材料的储热器及其传热强化研究进展. 储能科学与技术. 2023,

12(02): 431-58.

DAI Yu-Cheng, WANG Zeng-Peng, LIU Kai-Bao, et al. Research progress of heat storage and heat transfer enhancement based on phase change materials. *Energy Storage Science and Technology*. 2023, 12(02): 431-58.

- [6] HU B-W, WANG Q, LIU Z-H. Fundamental research on the gravity assisted heat pipe thermal storage unit (GAHP-TSU) with porous phase change materials (PCMs) for medium temperature applications [J]. *Energy Conversion and Management*, 2015, 89: 376-86.
- [7] TIAN E, HE Y-L, TAO W-Q. Research on a new type waste heat recovery gravity heat pipe exchanger [J]. *Applied Energy*, 2017, 188: 586-94.
- [8] 张鲁生. 自湿润流体重力热管传热特性. [博士论文]. 济南: 山东大学, 2015.
ZHANG Lu-Sheng. Self-wetting fluid gravity heat pipe heat transfer characteristics. [Ph.D. Thesis]. Jinan: Shandong University, 2015.
- [9] 战洪仁, 李春晓, 王立鹏, 等. 基于 VOF 模型对重力热管内部沸腾冷凝过程的仿真模拟. *冶金能源*, 2016, 35(01): 30-4+43.
HONG Zhan-Ren, LI Chun-Xiao, WANG Li-Peng, et al. Simulation of the thermosyphon's ebullition and condensation based on VOF model. *Energy for Metallurgical Industry*, 2016, 35(01): 30-4+43.
- [10] 马奕新, 金宇, 张虎, 等. 翅片重力热管传热性能实验研究. *化工学报*, 2020, 71(02): 594-601.
MA Yi-Xin, JIN Yu, ZHANG Hu, et al. Experimental study on heat transfer performance of finned gravity heat pipe. *CIESC Journal*, 2020, 71(02): 594-601.
- [11] ZOU L, WANG F, YAN D, et al. Synergy investigations for the thermal transportation performance of a coaxial gravity heat pipe with internally finned in evaporator section [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2022, 184.
- [12] LI Z, HUANG W, CHEN J, et al. An enhanced super-long gravity heat pipe geothermal system: Conceptual design and numerical study. *Energy*, 2023, 267.
- [13] WERMER L R, WARD M J, SIMPSON J D, et al. A high capacity self-priming counter-gravity heat pipe: Modeling and experimental demonstration. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 125: 1369-78.
- [14] XU Q, YANG G, WANG C, et al. Experimental study on the reinforcement of a gravity heat pipe based on a latent thermal functionally fluid. *Energy*, 2023, 278.
- [15] LIU G, ZHOU C, LIAO S. Comparative study on heat extraction performance between gravity heat pipe system and enhanced geothermal system [J]. *Geothermics*, 2021, 96.
- [16] ZHANG X, WU S, ZHANG C, et al. Dynamic heat transfer characteristics of gravity heat pipe with heat storage [J]. *Journal of Energy Storage*, 2022, 53.
- [17] ZHANG L, LIU Y, LIU X, et al. Experimental Investigation of Gravity Heat Pipe Exchanger Applied in Communication Base Station [J]. *Procedia Engineering*, 2015, 121: 1326-33.
- [18] NIKOLAENKO Y E, PEKUR D V, SOROKIN V M, et al. Experimental study on characteristics of gravity heat pipe with threaded evaporator [J]. *Thermal Science and Engineering Progress*, 2021, 26.
- [19] PENG H, JIA X. Experimental study on heat energy recovery and utilization of coal gangue hill based on gravity heat pipe [J]. *Energy Reports*, 2022, 8: 220-9.
- [20] YİLDİRİM R, AKYÜZ A, KUMAŞ K, et al. Experimental and numerical investigation of the use of new generating refrigerant R513A in the gravity-assisted heat pipe [J]. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 2023, 57.

基于特征选择和 GRU 神经网络的增压锅炉趋势预测研究

姚仰森, 李彦军*, 于国兴

(哈尔滨工程大学 青岛创新发展基地, 山东省 青岛 266400)
(Tel:15216725037, Email:753387045@qq.com)

摘要: 为确保船用增压锅炉的稳定运行, 本文提出一种船用增压锅炉运行参数的趋势预测模型。该模型结合了随机森林和门控循环单元 (GRU), 用于对小型增压锅炉的过热蒸汽温度进行预测。通过随机森林筛选出对预测结果影响较大的特征, 并利用 GRU 神经网络进行时序预测, 令模型能够提供更准确的预测结果。实验结果表明, 采用随机森林结合 GRU 的预测模型具有较低的误差, 表明该模型具备较高精度的预测能力和良好的泛化性能。

关键词: 小型增压锅炉; 神经网络; 随机森林; 门控循环神经网络

0 前言

作为船舶动力系统的核心设备^[1], 增压锅炉工作环境恶劣, 容易发生故障。如果设备异常未能及时发现, 将会威胁船舶整体动力系统, 并可能带来不可预见的危害^[2]。因此, 有必要研究增压锅炉安全性能参数趋势预测技术。基于门控循环 (Gated Recurrent Unit, GRU) 神经网络模型以其出色的时间和空间特征提取能力而著名, 已被广泛应用于趋势预测。GRU 神经网络结合了传统循环神经网络 (RNN) 和长短期记忆 (LSTM) 的优点, 并在时序数据建模任务中表现出了出色性能。

刘晓剑等^[3]采用 GRU 神经网络模型, 预测某高速公路路基沉降演变规律并结合实际数据对比, 结果表明基于 GRU 的路基沉降预测方法可靠。刘兴伟^[4]提出基于 GRU 神经网络的锅炉用户用气量预测方法, 能够在不考虑天气因素的情况下实现较高的预测精度。张艳君等^[5]提出一种基于 GRU 神经网络的桥梁变形预测方法, 并与其他预测模型进行比较, 实验结果表明该方法具有更强的学习能力和预测效果。

上述研究虽表明 GRU 模型具备良好的预测性能, 但没有考虑特征选择在提升模型预测性能方面的研究。通过特征选择可以避免模型学习与目标参数关联不大的映射关系, 从而令预测的最终结果更加准确有效。综上, 本文采用随机森林模型与 GRU 神经网络模型结合的方法建立小型增压锅炉的趋势预测模型。

1 基础理论

1.1 基于随机森林的特征选择算法

在神经网络的训练中, 并非特征参数越多, 所构建模型的预测性能便越好。由于目标变量与其他特征参数均有一定的关联性, 而在这种关联性中, 存在着较弱的联系, 迫使神经网络模型学习这些不显著的关联性, 会令模型建立起不稳定的映射关系, 降低模型整体的预测性能, 甚至出现过拟合的情况。因此, 有必要在保证最终的预测结果精确度情况下, 减少数据冗余。

随机森林是一种常见的机器学习算法^[6], 其基本思想是基于决策树集成的方法, 通过构建多个决策树, 并综合考虑它们的结果来评估特征的重要性。这种集成的方式能够充分考虑

特征之间的相关性和非线性关系，提供可靠的特征评估结果，并帮助我们选择最具有预测能力的特征子集^[7]。本文中的随机森林算法流程如下所示：

(1) 从原始训练数据集中随机选择一定数量的样本，有放回地进行抽样，构成一个子样本集。这个子样本集将用于每个决策树地训练。

(2) 根据每个子样本集构建对应决策树模型。在构建决策树的过程中，对于每个节点，在随机选择的特征子集上进行划分，选择最佳的划分特征和划分点。

(3) 重复步骤(1)和步骤(2)，构建多个决策树模型组成随机森林。

(4) 使用随机森林模型对测试样本进行预测，并由票选法决定最终预测结果。

随机森林算法流程如图 1 所示。

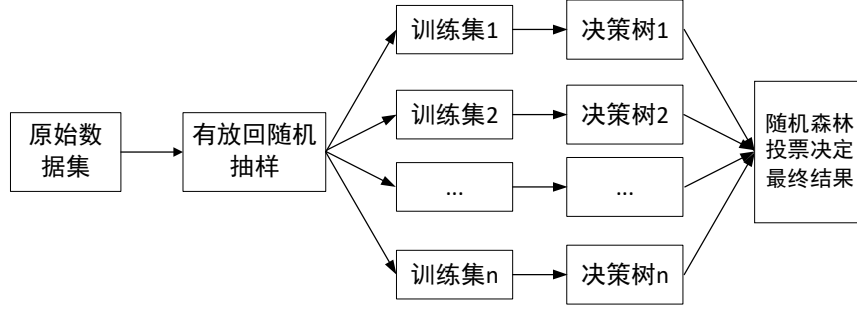


图 1 随机森林算法训练过程

在随机森林回归器中，平均不纯度减少值 (Mean Decrease Impurity, MDI) 是一种特征重要性度量^[8]，它通过计算每个特征在随机森林中减少的不纯度的平均值来评估特征的重要性。具体计算步骤如下：

(1) 对于每棵树，计算每个特征在树中减少的不纯度值。通过衡量在特征划分前后的不纯度差异实现。在回归问题中，不纯度度量指标常见为均方误差 (Mean squared error, MSE)。

(2) 对于每个特征，将其在所有树种减少的不纯度值进行平均。

(3) 最终的特征重要性得分即为各特征在所有树中平均减少的不纯度值。

重要性分数 I 计算公式如下：

$$I = \sum \frac{MSE1 - MSE2}{N} \quad (1)$$

式中， $MSE1$ 为节点划分前的总方差， $MSE2$ 为节点划分后的总方差， N 为随机森林的决策树总量。由于平均不纯度减少值 I 衡量每个特征对模型预测能力的贡献的指标，因此可以用于评估特征参数对目标参数的重要性。

1.2 门控循环单元神经网络模型

时序数据建模一直是机器学习领域的热门领域方向之一^[9]。在这个领域，一种备受关注的神经网络模型是门控循环单元 (Gated Recurrent Unit, GRU)。GRU 神经网络结合了传统循环神经网络 (RNN) 和长短期记忆 (LSTM) 的优点，并在时序数据建模任务中表现出了出色性能^[10]。

GRU 神经网络是一种用于时序数据建模的递归神经网络模型，其基本结构如图 1.2 所示。通过引入门控机制，能够在保留长期依赖性的同时，有效地捕捉重要地时序信息。与传统地 RNN 相比，GRU 具有更少地门控单元，从而减少了模型的复杂性和参数数量。

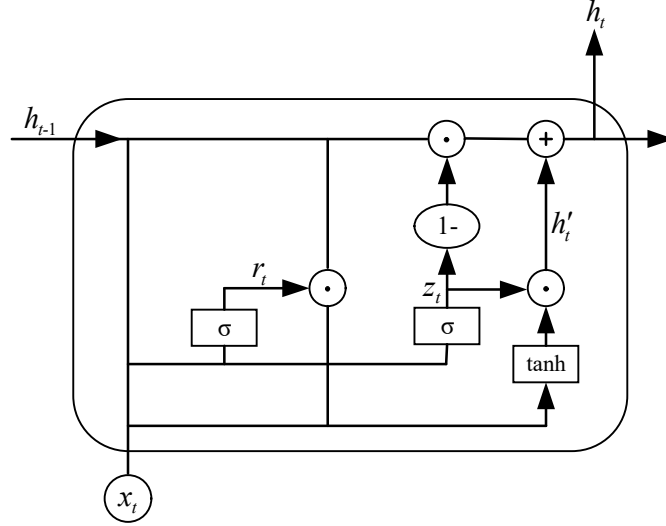


图 2 GRU 单元内部结构

GRU 神经网络的核心思想是使用两个门控单元：更新门（Update Gate）和重置门（Reset Gate）。更新门用于控制当前输入与前一时刻的信息更新程度，而重置门则决定了前一时刻的信息在当前时刻的重要性。这种门控机制使得 GRU 网络能够更好地处理长期依赖性，并更好地捕捉时序数据中的关键信息[11]。

此外，GRU 神经网络还具有一种候选隐藏状态，它计算当前时刻的隐藏状态。这个候选隐藏状态是根据当前输入和前一时刻的隐藏状态算得到的，同时受到更新门和重置门的控制。通过这种方式，GRU 网络能够在每个时刻灵活地更新隐藏状态，从而更好地适应时序数据的变化。整个过程可以被简洁地表示为：

更新门 z_t 的表达式为：

$$z_t = \sigma(W^{(z)}x_t + U^{(z)}h_{t-1}) \quad (2)$$

重置门 r_t 的表达式为：

$$r_t = \sigma(W^{(r)}x_t + U^{(r)}h_{t-1}) \quad (3)$$

t 时刻的候选向量 h'_t 的表达式为：

$$h'_t = \tanh(Wx_t + r_t \odot Uh_{t-1}) \quad (4)$$

t 时刻的新状态向量 h_t 的表达式为：

$$h_t = z_t \odot h_{t-1} + (1 - z_t) \odot h'_t \quad (5)$$

式中， W 、 U 为权值向量； x_t 为第 t 个时间步的输入向量； h_{t-1} 为 $t-1$ 时刻的单元状态向量； σ 为 Sigmoid 激活函数； $\tanh$ 为双曲正切函数； $\odot$ 为 Hadamard 乘积运算。

由于其门控机制的引入，GRU 网络能够处理长期依赖性并捕捉重要的时序信息，使其成为时序数据建模的理想选择[12-13]。因此，基于 GRU 神经网络的模型被广泛应用于趋势预测任务中。相较于传统的 RNN，GRU 具有较少的门控单元，减少了模型的复杂性和参数数量，从而提高了计算效率。借助更新门和重置门，GRU 网络能够控制信息的更新程度和前一时刻信息的重要性，以及通过候选隐藏状态适应时序数据的变化。综上所述，使用 GRU 神经网络模型作为趋势预测模型能够有效地捕捉时序数据中的规律和趋势，为决策提供有力支持。

2 预测模型

2.1 GRU 模型设计

趋势预测任务旨在通过提取现有的时序信息，预测未来目标参数的变化趋势。在小型增压锅炉运行参数中，本身便存在一定的时序关系，具备一定的可预测性。因此，选择在时序

数据分析和预测方面表现出良好效果的 GRU 模型，以实现目标参数的准确预测。

本文采用单层 GRU 层完成时序信息的提取和特征学习，神经元数量设定为 64 个，选择双曲正切函数（tanh）作为激活函数；为了适配 Dense 层的输入要求，添加 Flatten 层，将 GRU 层的输出展平；最后添加 Dense 层接收参数，其中激活函数选择了线性激活函数，完成模型的输出。

为了提供可靠、稳定和有意义的输入给模型，本文还对实验参数进行了进一步的处理。应用特征选择、数据降噪、数据归一化、数据加窗和时间序列差分等预处理步骤，以提高数据的质量，满足模型的要求。通过上述操作，实验参数得到了更加准确和可靠的表示，为模型的训练和预测提供了更好的基础。趋势预测模型如图 3 所示。

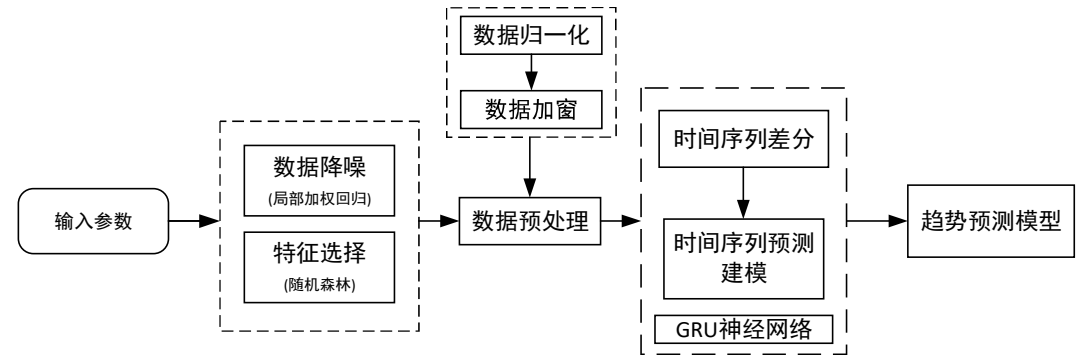


图 3 GRU 趋势预测模型流程图

2.2 训练方法优选

为了确保模型具有良好的预测精度与泛化能力，我们需要在训练过程中设置适当的参数。以下是针对 GRU 神经网络模型的参数设置的详细说明：

（1）损失函数。损失函数是在训练神经网络模型时使用的目标函数，用于衡量预测值与真实值之间的差异，选择适当的损失函数可以帮助模型学习正确的模型并优化模型的参数。常见的损失函数包括：均方误差、交叉熵误差以及 KL 散度损失。其中均方误差常用于回归问题，故本文选择均方误差作为 GRU 神经网络的损失函数。

（2）网络学习率与迭代次数。学习率决定了模型参数在每次迭代中更新的步长或速率，对模型的训练效果和收敛性能起着关键的作用。本文通过试错法设定学习率为 0.01，同时采用学习率衰减策略和提前停止策略防止模型的过拟合，从而提高模型的泛化能力。

（3）优化算法。优化算法用于更新神经网络的参数，以最小化损失函数并提高模型的性能。常见的优化算法包括随机梯度下降（SGD）、自适应矩估计优化算法（Adam）、均方根传播（RMSprop）。本文分别采用上述三种优化算法对 GRU 模型进行 100 次训练，结果如图 4 所示。由图可知，Adam 训练的网络效果最好，收敛最高，损失函数最小，RMSprop 则次之，SGD 的训练效果最差。故本文最终选择 Adam 作为模型优化器。

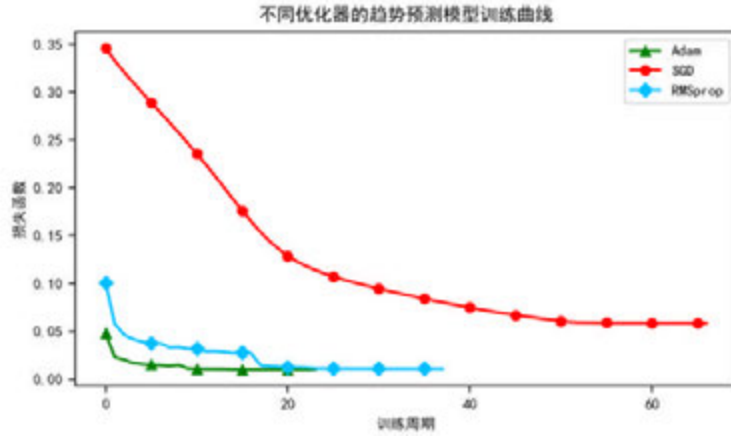


图4 优化算法对比

2.3 评价指标

为定量分析与评价模型性能,将测试集输入数据经数据预处理后依次输入训练好的网络中,将模型的输出结果与真实值进行比较,计算结果的平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE), 平均绝对百分比误差 (Mean Absolute Percentage Error, MAPE) 和均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE) [14], 误差值越小, 代表模型的预测性能越好。计算公式如下所示:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\hat{y}_i - y_i| \quad (6)$$

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{\hat{y}_i - y_i}{y_i} \right| \quad (7)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \hat{x}_i)^2} \quad (8)$$

上式中, n 为序列的长度; x_i 为真实值; $\hat{x}_i$ 为模型输出值。

3 实例分析

3.1 实验数据来源

本文所使用数据基于小型增压锅炉系统实验,通过开展旁通阀扰动实验获得,在实验期间的运行状态包括正常运行和旁通阀受扰动两部分,共有 18554 各采样点,采样间隔为 1s,时间范围在 12:36:51 至 17:46:05 间。所采集参数有汽包温度、汽包压力、汽包水位、烟气压力、烟气温度、过热蒸汽压力、过热蒸汽流量、过热蒸汽温度、给水压力、供风压力、风机频率反馈信号、旁通阀阀位、燃油压力、燃油压力调节阀开度、给水流量、给水电动阀阀位、锅炉进风温度等 17 个参数。

在上述参数中,过热蒸汽温度作为锅炉工况的关键指标,对系统的正常运行有着至关重要的影响,参数的异常轻则影响锅炉的热效率和设备寿命,严重时会导致爆炸事故的发生。故本文选取过热蒸汽温度作为趋势预测模型的预测目标。

3.2 特征参数选择

本文采用随机森林算法来选择特征参数,并构建了一个由 100 个决策树组成的随机森林模型进行测试和评估,评估结果如图 5 所示。根据特征重要性图示,我们可以选择过热蒸

汽流量、过热蒸汽压力以及汽包压力作为模型的输入参数。

由热力学角度分析可知，过热蒸汽流量是锅炉内蒸汽的单位时间通过量，直接影响热能的输入；根据理想气体定律，温度和压力成正相关，增大过热蒸汽压力会导致温度上升；而增加汽包压力可以提高对过热蒸汽压力的支持，从而令其温度升高。因此，基于随机森林算法的特征选择结果在热力学角度上是合理的。

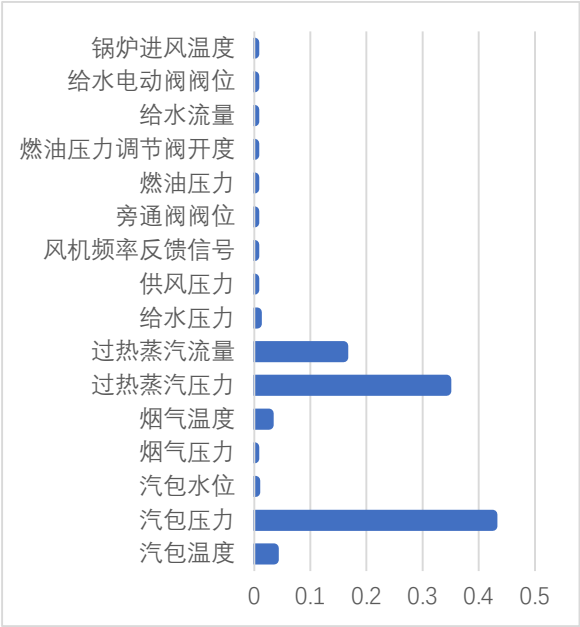


图 5 特征选择评估结果

3.3 实验结果对比

为进行测试结果对比，验证模型的有效性，此处设置了两个对照组，即将所有参数作为特征输入的预测模型（B 组），使用长短期记忆（Long Short-Term Memory，LSTM）网络模型（C 组）。以小型增压锅炉运行数据作为实验数据，其中实验数据 70%作为训练集，30%作为测试集。将所有测试集样本输入至各个训练完毕的预测模型中，获得其预测输出值并进行结果对比，计算 3 个预测模型在测试集上的评价指标，结果如表 1 所示。

表 1 三组趋势预测模型在测试集上的评价结果

预测目标	实验组别	评价指标		
		MAE	RMSE	MAPE
过热蒸汽温度	A	0.0244℃	0.0422℃	0.0087%
	B	0.0893℃	0.1225℃	0.0319%
	C	0.0928℃	0.1302℃	0.0331%

根据上述表格可知，随机森林结合 GRU（A 组）模型在各项评价指标上表现更加出色，具有更高的预测精度和准确度。为了直观地比较各个模型的预测结果，本文绘制了目标参数在不同模型输出结果与真实值的对比图，如图 6 所示。该图展示了模型预测结果与实际数值之间的差异，并帮助我们评估模型的预测精度和准确性。通过观察图形，可以直观地了解模型的预测能力以及其与真实值之间的接近程度，从而判断模型的性能和效果。由图像可知，A 组模型的输出曲线很好契合了真实值，具备良好在预测精度，而其余两组模型则均存在一定程度的预测偏离，与真实值存在一定的误差。

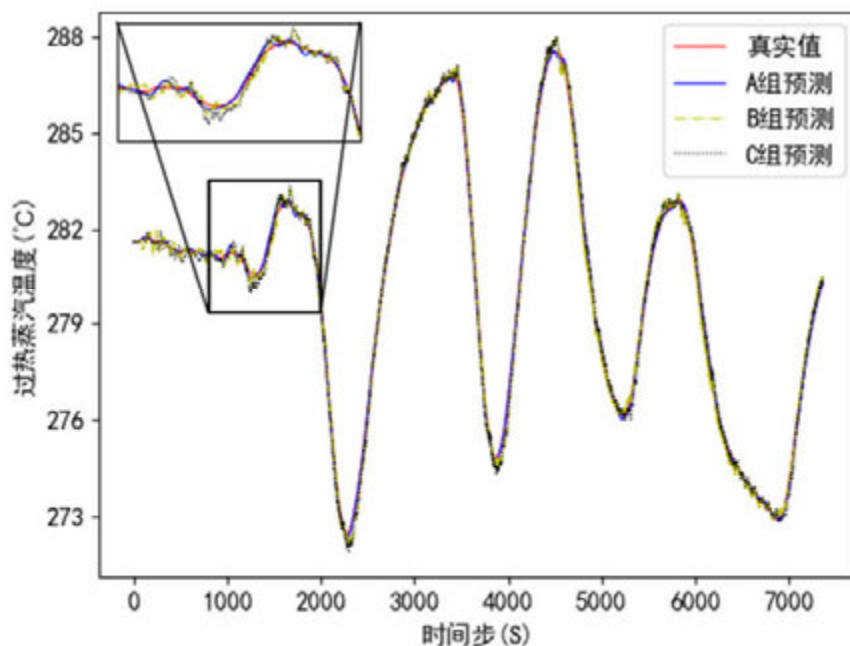


图 6 过热蒸汽温度预测结果对比

4 结 语

本文以小型增压锅炉的过热蒸汽温度参数预测为主题,提出了一种综合应用随机森林和 GRU 神经网络趋势预测方法。通过随机森林选取对预测结果影响较大的特征,并输入到基于门控循环单元神经网络中,以提取参数的时序信息。实验对比结果表明,所构建的复合模型相较于未使用特征选择的 GRU 模型和传统的 LSTM 模型,其预测精度具有较大幅度的提高。这证明了该模型能够充分利用输入数据的特征,并有效地利用数据的时序信息进行准确的趋势预测。这一研究结果对于实现小型增压锅炉的稳定运行和实时监控具有重要的实际意义。

参考文献

- [1] 赵世泉. 大型船舶蒸汽动力装置汽/水回路协调最优控制技术研究[D]. 黑龙江:哈尔滨工程大学,2020.
- [2] 刘长和. 船用增压锅炉技术的新进展[J]. 热能动力工程, 1999, 14(4): 241-245.
- [3] 刘晓剑,金可云,温勇兵.基于 GRU 神经网络的软土地区公路路基沉降预测方法[J].公路与汽运,2023(02):62-67.
- [4] 刘兴伟,柴家风,王倩微,等.基于 GRU 神经网络的燃气用气量预测[J].煤气与热力, 2023, 43(4):7.
- [5] 张艳君,丁德平,沈平,郭安辉.基于 GRU 神经网络的桥梁变形预测方法研究[J].建筑结构,2022,52(S2):1938-1943.
- [6] 李扬,祁乐,聂佩芸.大规模数据的随机森林算法[J].统计与信息论坛,2020,35(06):24-33.
- [7] 赵庆媛,叶春茂,鲁耀兵.基于随机森林的微动特征重要性评估研究[J].现代防御技术, 2022, 50(4):8.
- [8] 李航.统计学习方法[M]. 北京:清华大学出版社,2019.
- [9] Lipton Z C , Berkowitz J , Elkan C .A Critical Review of Recurrent Neural Networks for Sequence Learning[J].Computer Science, 2015.
- [10] Cho K , Merrienboer B V , Gulcehre C ,et al.Learning Phrase Representations using RNN Encoder-Decoder for Statistical Machine Translation[J].Association for Computational Linguistics, 2014.
- [11] 王文广,赵文杰.基于 GRU 神经网络的燃煤电站 NO_x 排放预测模型[J].华北电力大学学报(自然科学版),

2020.

- [12] Yue Z X , Ding Y L , Zhao H W .Deep Learning-Based Minute-Scale Digital Prediction Model of Temperature-Induced Deflection of a Cable-Stayed Bridge: Case Study[J].Journal of Bridge Engineering, 2021(6):26.
- [13] Yang J , Yang F , Zhou Y ,et al.A Data-Driven Structural Damage Detection Framework Based on Parallel Convolutional Neural Network and Bidirectional Gated Recurrent Unit[J].Information Sciences, 2021.
- [14] 刘晴晴,陈华友.基于赋权 KNN-LSTM 模型的 PM2.5 质量浓度预测[J].合肥工业大学学报:自然科学版, 2021.DOI:10.3969/j.issn.1003-5060.2021.12.017.

光合细菌对 MFC 产电性能的影响及种群分析

刘艺峰, 李艳霞*, 马玮琦, 王振强, 刘中良

(北京工业大学, 传热强化与过程节能教育部重点实验室暨传热与能源利用北京市重点实验室, 北京 100124)

(Tel:13671359425, Email:liyanxia@bjut.edu.cn)

摘要: 光合藻类微生物燃料电池(Photosynthetic algal microbial fuel cell, PAMFC)是将光合藻类引入微生物燃料电池(Microbial fuel cell, MFC)阴极室, 通过在 MFC 阴极室引入小球藻构建 PAMFC, 在长时间光照影响下阳极室菌液逐渐呈粉色向红色转变。为探明光照及红色菌液对 MFC 的影响, 本文利用红色菌悬液(Red)和白色菌悬液(Vol)分别构建 MFC, 研究得到 Vol-MFC 和 Red-MFC 的产电性能; 并进行 16S rDNA 扩增子测序, 确定种群分布。结果显示, 以 Vol 构建的 MFC (Vol-MFC) 输出电压达到了 588.9mV, 远高于 Red-MFC 的输出电压 488mV, 同时 Vol-MFC 具有更长的运行时长。与 Red-MFC 相比, 采用菌悬液 Vol 为阳极微生物的 Vol-MFC 具有更高的产电能力。

关键词: 微生物燃料电池; 光合细菌; 微生物; 产电性能; 生物能源

0 前言

伴随着经济的增长, 环境问题和能源问题成为国家关注的焦点。“双碳”目标(即在 2030 年前完成碳达峰, 2060 年前达到碳中和)是党中央在深思熟虑以后做出的重大战略部署, 也是为了应对全球的气候变化做出的庄严承诺。近年来, 我国正在寻求更具可持续性、包容性和韧性的经济增长方式, 已经具备了实现 2030 年前碳排放达峰的客观条件。“双碳”目标的提出将我国的绿色发展、可持续发展之路提升到了新的台阶, “双碳”目标的完成将会成为未来几十年内社会经济发展经济建设的主基调之一。顺利实现“双碳”目标需要国家机关通过政策性的引导, 同时也需要能源技术的不断革新。加强可再生能源和能效方面的新技术开发应用, 探索可持续发展新能源, 通过发展关键负排放技术, 包括自然减排措施, 碳捕获碳封存措施等, 增加减排潜力^[1, 2]。

微生物燃料电池(Microbial fuel cell, MFC)以电化学活性生物膜为催化剂直接将污水中丰富的化学能转化为电能, 具有清洁高效、安全无污染且反应条件温和的特点, 近年来受到了广大学者的关注和研究^[3]。

早在 1910 年, 英国植物学家 Potter 发现在厌氧条件下酵母菌可以产电, 自此拉开了 MFC 研究的序幕^[4]。21 世纪以来, 针对微生物燃料电池的研究越来越多, 并取得了一系列的重要成果^[5-11]。随着 MFC 不同方向研究的不断深入, 生物阴极微生物燃料电池受

基金项目: 国家自然科学基金(52076004)

到了学者的广泛关注^[12]。藻类作为公认的高效的“太阳能转换器”，可以通过光合作用达到固定二氧化碳的效果。将光合藻类引入 MFC 构建光合藻类微生物燃料电池（Photosynthetic algae microbial fuel cell, PAMFC），由于光合藻类通过光合作用产生的 O₂ 可以作为电子受体，所以 PAMFC 阴极不需额外机械供氧的情况下工作。采用光合藻类作为生物阴极，与传统的对阴极进行机械供氧相比，将光合藻类作为 MFC 的阴极时，阴极室的溶解氧浓度最高可达 20mg/L，这要高于机械供氧的溶解氧浓度^[13]。

本课题组在 MFC 阴极室引入小球藻构建 PAMFC，在 1000Lux 光照条件下长期运行，发现阳极室微生物菌液从白色向粉色转变直至变为大红色，原因是阳极室中光合菌群的种群比例增大。微生物在 MFC 阳极通过呼吸作用消耗有机物产生电子，而光合微生物在阳极可以通过自身光合作用或者呼吸作用产生电子直接产电，或者通过光合作用产生氢气作为阳极底物间接产电。微生物是影响 MFC 产电性能的关键因素之一^[14]，阳极室微生物中光合微生物数量的增多对 MFC 性能的影响仍不明确。

为此，本文通过将红色菌悬液 Red 和白色菌悬液 Vol（如图 1 所示）分别构建 MFC（Red-MFC 和 Vol-MFC），研究长期光照驯化的红色光合菌群对 MFC 的产电性能的影响，为构建 PAMFC 做前期准备。



图 1 红色菌悬液 Red 和白色菌悬液 Vol

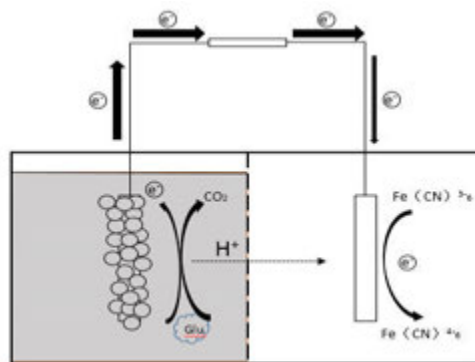


图 2 MFC 结构示意图

1 实验

1.1 材料与方法

构建了双室 MFC，阴极阳极体积均为 50ml，采用 CMI-7000S 阳离子交换膜（购自美国 MI 公司）将两室分隔开（如图 2 所示）。采用 2×2cm 碳毡作为阳极和阴极两个电极，电极在使用前采用丙酮浸泡 3h，去除表面油渍等杂质，去离子水冲洗干净，60℃烘干备用。菌种来源于北京工业大学住宅的化粪池，以葡萄糖为碳源驯化三个月以上，白色菌悬液 Vol 置于黑暗环境培养，红色菌悬液 Red 在培养 PAMFC 时光照下阳极室获得，采集后置于光照 1000Lux，25℃驯化培养。化学试剂为分析纯，均购自北京通广精细化工有限公司，实验用水均为去离子水。

1.2 MFC 的运行

本文中平行运行两组 MFC 反应器，均以浓度为 1g/L 的葡萄糖（Glu）为底物。在实验开始时，分别将两种菌悬液各接种 10ml 并放入两个 MFC 阳极室，然后将阳极液注入

阳极室，将阴极液加入阴极室，构建形成 Red-MFC 和 Vol-MFC。阴、阳极液成分如表 1 所示。利用钛丝分别将阴极、阳极引出与外接负载电阻（1kΩ）连接构成电流回路。输出电压使用数据采集仪（34970A, Agilent）以 10min/次的频率自动采集并记录。MFC 运行时置于 25℃恒温箱中保持恒温，其中 Red-MFC 置于 1000Lux 光照下，Vol-MFC 置于黑暗条件下。当 MFC 的输出电压小于 50mV 时更换阴极液、阳极液。

表 1 MFC 阴、阳极液成分^[3]

	药品	浓度（g/L）
阳极液	Na ₂ HPO ₄ • 12H ₂ O	14.32
	KH ₂ PO ₄	1.36
	NH ₄ Cl	0.5
	NaCl	0.1
	MgSO ₄	0.1
	CaCl ₂ • 2H ₂ O	0.02
	K ₃ [Fe(CN) ₆]	32.9
阴极液	Na ₂ HPO ₄ • 12H ₂ O	14.32
	KH ₂ PO ₄	1.36

1.3 测试方法

循环伏安法（cyclic voltammetry, CV）在电化学工作站（Autolab，瑞士万通）上完成。CV 最常用的电极表征方法之一，能够对电极表面发生氧化还原反应的容易程度进行表征^[15]。采用原位测量方法，待电池运行稳定后且升到最大电压时将其开路，直至开路电位（open circuit potential, OCV）稳定，再开始测量。在阳极室插入 Ag/AgCl 参比电极，使其位于阳极电极与阳离子交换膜之间且靠近阳极处，阳极为工作电极，阴极为辅助对电极^[3]。

16S rDNA 扩增子测序（16S rDNA Amplicon Sequencing）技术能够分析微生物种群，鉴定优势产电微生物菌种。16S rRNA 位于原核细胞核糖体小亚基上，包括 10 个保守区域（Conserved Regions）和 9 个高变区域（Hypervariable Regions），其中保守区在细菌间差异不大，高变区具有属或种的特异性，随亲缘关系不同而有一定的差异。因此，16S rDNA 作为揭示生物物种的特征核酸序列，被认为是最适于细菌系统发育和分类鉴定的指标。16S rDNA 扩增子测序，通常是选择某个或某几个变异区域，利用保守区设计通用引物进行 PCR 扩增，然后对高变区进行测序分析和菌种鉴定，16S rDNA 扩增子测序技术已成为研究环境样品中微生物群落组成结构的重要手段^[16, 17]。

2 结果与讨论

2.1 微生物种群分析

依据取样的不同，将两个测序样品分别命名为 Vol 和 Red。其中 Vol 取自以葡萄糖为底物黑暗条件下运行的 MFC 的白色阳极液；Red 取自以葡萄糖为底物 1000Lux 光照强度 25℃条件下的 PAMFC 的红色阳极液，两个样品均为 5mL，送检。稀释曲线可以直观的反映测序数据量的合理性，并间接反映样品中物种的丰富程度，当曲线趋向平坦时，说明测序数据量渐进合理，更多的数据量只会产生少量新物种；反之表明不饱和，增加

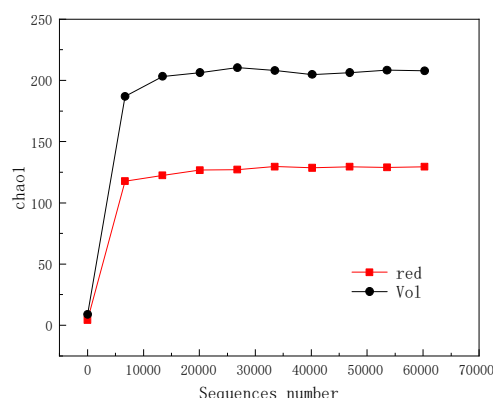


图 3 稀释曲线图

数据量可以发现更多新物种^[18]。如图 3 所示，从图中可以看出，随着取样数量的增加，两个样品所含有的物种数均有一个较大幅度的提升，而后趋于稳定，能够说明后续的实验数据可信度较高。

图 4 展示了 Red 和 Vol 两个样品在门水平上的物种相对丰度柱形图。如图所示，两个样品中的菌种比例不完全一致，但是其中优势菌种归属相同的门，这归结于样品微生物的碳源相同，均为葡萄糖。结果显示，*Proteobacteria* 门的微生物在两个样品中均为含量最高的菌种。图 5 展示了 Red 和 Vol 两个样本在属水平的相对丰度。结果显示，样品 Red 群落中 *Escherichia-Shigella* 为占优菌株，样品 Vol 群落中 *Pseudomonas* 为占优菌株。经过长期光照驯化后，随着电极表面电化学反应的进行，适合在光照条件下生存的产电菌逐渐具有种群优势，不适菌种逐渐淘汰，样品 Red 中 *Arcobacter* 属种群占比约为 29.85%，在样品 Vol 中该属占比不足 0.43%，该属大多数为呈现粉色至红色颜色的光合细菌菌液，正是由于 *Arcobacter* 属种群丰度的提升导致样品 Vol 菌悬液变为红色。在样

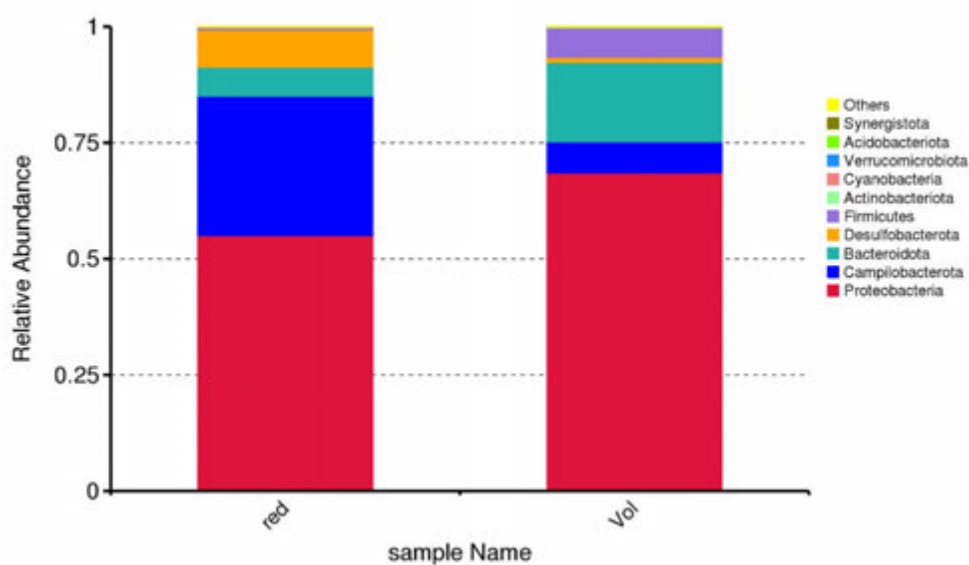


图 4 Red 和 Vol 在门水平上的种群相对丰度柱状图

品 Vol 中各菌株的相对丰度差别不大，具有更广泛的种群多样性。

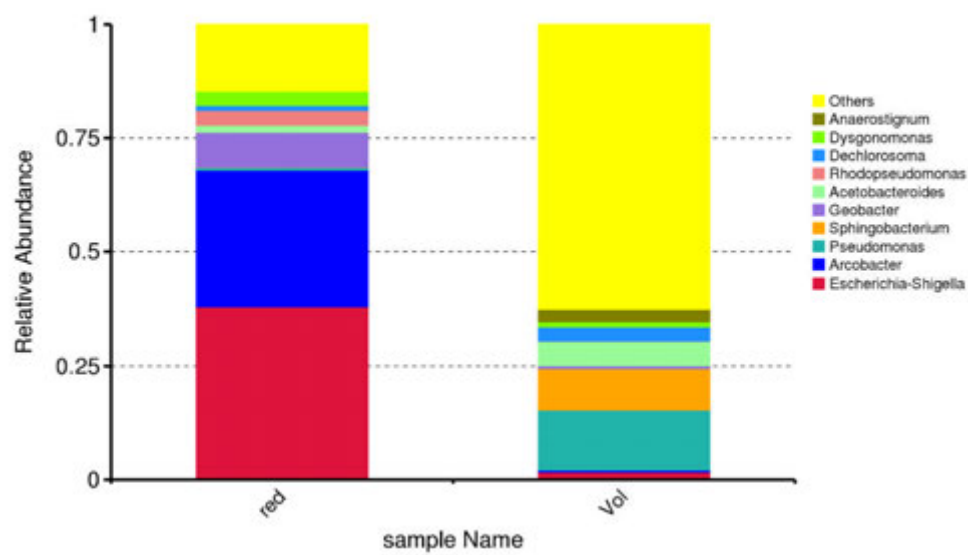


图 5 Red 和 Vol 在属水平上的种群相对丰度柱状图

2.2 MFC 的性能

表 2 所示为本文 MFC 的运行条件。

表 2 MFC 运行条件		
	Red-MFC	Vol-MFC
电极	碳毡（2×2cm）	
阳极液、阴极液成分	如表 1	
运行温度	25℃	
阳极微生物	菌悬液 Red	菌悬液 Vol
环境光照	1000Lux	黑暗

2.2.1 MFC 输出电压

图 6 为 Vol-MFC 和 Red-MFC 电压输出曲线,从图中可以看出 Vol-MFC 在接种后的 293h 启动成功,而 Red-MFC 的启动时间超过了 1096h,大约是 Vol-MFC 启动时间的 3.7 倍。Red-MFC 的启动时间明显长于 Vol-MFC。这表明 Vol 中含有的微生物在黑暗条件下生物膜生长更快,微生物的生化反应水平更快,产生电子速度更快。从输出电压上看,在启动后的第三个周期 Vol-MFC 达到了最高的输出电压 588.9mV,而 Red-MFC 的最大输出电压仅为 488.1mV,比 Vol-MFC 的输出电压低了 17.12%。在稳定周期运行时间上看,Vol-MFC 最小周期为第二周期,周期时长为 71h;从第三周期开始周期时间逐

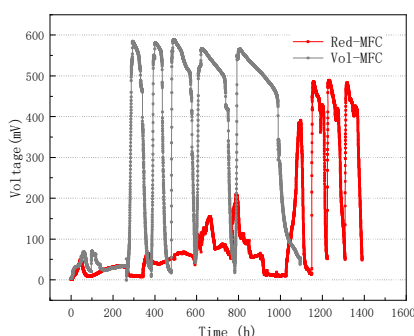


图 6 Red-MFC 和 Vol-MFC 电压输出曲线

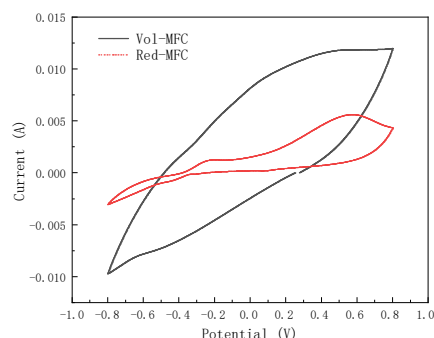


图 7 Red-MFC 和 Vol-MFC 的循环伏安曲线

渐增加,在启动后稳定运行第五周期运行时间达到了 308h,而 Red-MFC 的启动后的周期时长最多仅可以达到 85h (第三周期)。以上结果说明光照诱导后的 Red 菌群的光合细菌比例提高,降低了 MFC 的产电性能。

2.2.2 循环伏安曲线分析

循环伏安法可以用来考察微生物种群的电化活性^[3]。CV 测试前,将 MFC 外接电阻断开,静置至开路电压稳定。图 7 为 Red-MFC 和 Vol-MFC 两个电池的循环伏安曲线。从图 7 可以看出两个 MFC 都显示出一对明显的氧化还原峰,其中 Red-MFC 产生的电流范围更小,产生的电压范围也更窄。这说明与 Red 菌悬液相比,黑暗的阳极环境可以有效帮助建立更多样化和更稳定的阳极微生物群落,会极大的促进阳极中不同菌种的相互协调作用,从而提高阳极生物膜的生物电催化能力。以 Vol 菌悬液构建 MFC 产生的阳极生物膜具有更强的电化活性,即有更强的向外输出电子的能力。

3 结 论

MFC 在光照条件下长期运行,其阳极室微生物菌液从白色向粉色转变直至变为大红色,为探究红色菌悬液 Red 与白色菌悬液 Vol 的种群组成不同和产电性能的优劣,本文分别以白色菌悬液 Vol 和红色菌悬液 Red 为阳极微生物,构建了 Vol-MFC 和 Red-MFC,通过 Red-MFC 和 Vol-MFC 的运行性能的结果对比分析,得到以下结论:

(1) Vol-MFC 的整体性能明显好于 Red-MFC,产电能力更优。Vol-MFC 的输出电压是 588.9mV,高出 Red-MFC 的输出电压 20.65%。

(2) Red-MFC 的启动时间为 1096h,是 Vol-MFC 启动时间(293h)的 3.7 倍,并且输出最高电压仅为 488.1mV,明显低于 Vol-MFC。

(3) Vol-MFC 具有更长的稳定周期，最多高达 308h，远远高于 Red-MFC 的 85h。

(4) 通过 16S rDNA 扩增子测序技术发现光照培养后的阳极红色产电菌群 Red 中红色光合细菌种群比例明显提高，种群多样性降低；在黑暗条件下的白色菌悬液 Vol 具有更到的种群多样性。

(5) 黑暗的阳极环境可以有效帮助建立更多样化和更稳定的阳极微生物群落，会极大的促进阳极中不同菌种的相互协调作用，从而提高阳极生物莫的生物电催化能力。证明阳极微生物在黑暗条件下的混合菌种更有利于 MFC 的运行，为小球藻 PAMFC 阳极构建提供了研究依据。

参考文献

- [1] 徐朝晖. 我国实现“双碳”目标面临的挑战及对策[J]. 租售情报. 2023(05): 135-137.
Xu Zhaohui. The challenges and Countermeasures of realizing the goal of "double carbon" in China [J]. Rental and Sales Information. 2023(05): 135-137.
- [2] 樊星, 李路, 秦圆圆, 等. 主要发达经济体从碳达峰到碳中和的路径及启示[J]. 气候变化研究进展. 2023, 19(01): 102-115.
Fan Xing, Li Lu, Qin Yuanyuan, et al. The path from carbon peak to carbon neutrality in major developed economies and its implications [J]. Advances in Climate Change Research, 2023, 19(01): 102-115.
- [3] 陈稳稳. 微生物燃料电池性能调控及电极界面传质特性研究[D]. 北京工业大学, 2021.
Chen is steady. Study on performance regulation and electrode interface mass transfer characteristics of microbial fuel cells [D]. Beijing University of Technology, 2021.
- [4] Logan B E, Hamelers B, Rozendal R, et al. Microbial fuel cells: methodology and technology[J]. Environ Sci Technol. 2006, 40(17): 5181-5192.
- [5] 刘志丹, 连静, 杜竹玮, 等. 利用异化金属还原菌构建含糖微生物燃料电池[J]. 生物工程学报. 2006, 22(1): 131-137.
Liu Zhidan, Lian Jing, Du Zhuwei, et al. Construction of sugar-containing microbial fuel cells by dissimilated metal-reducing bacteria [J]. Chinese Journal of Bioengineering, 2006, 22(1): 131-137.
- [6] 尤世界, 赵庆良, 姜珺秋. 废水同步生物处理与生物燃料电池发电研究[J]. 环境科学. 2006, 27(9): 1786-1790.
You Shi-shi, ZHAO Qing-Liang, Jiang Jun-Qiu. Study on simultaneous biological treatment of wastewater and biofuel cell power generation [J]. Environmental Science, 2006, 27(9): 1786-1790.
- [7] 梁鹏, 范明志, 曹效鑫, 等. 微生物燃料电池表观内阻的构成和测量[J]. 环境科学. 2007, 28(8): 1894-1898.
Liang Peng, Fan Mingzhi, Cao Xiaoxin, et al. Composition and measurement of apparent internal resistance of microbial fuel cells [J]. Environmental Science, 2007, 28(8): 1894-1898.
- [8] 李明, 李俊, 朱恂, 等. 阳极流场对单室微生物燃料电池性能的影响[J]. 工程热物理学报. 2011, 32(05): 855-858.
Li Ming, Li Jun, Zhu Xun, et al. Effect of anode flow field on performance of single-chamber microbial fuel cells [J]. Chinese Journal of Engineering Thermophysics, 2011, 32(05): 855-858.
- [9] Logan B E, Rabaey K. Conversion of wastes into bioelectricity and chemicals by using microbial electrochemical technologies[J]. Science. 2012, 337(6095): 686-690.
- [10] 吴义诚, 王泽杰, 傅海燕, 等. 光合细菌在微生物燃料电池中的应用研究进展[J]. 微生物学通报. 2016, 43(12): 2707-2713.
Wu Yicheng, Wang Zejie, Fu Haiyan, et al. Research progress of photosynthetic bacteria in microbial fuel cells [J]. Bulletin of Microbiology, 2016, 43(12): 2707-2713.
- [11] Wu X, Song T, Zhu X, et al. Construction and Operation of Microbial Fuel Cell with *Chlorella vulgaris* Biocathode for Electricity Generation [J]. Applied biochemistry and biotechnology. 2013, 171(8): 11.

- [12] 李超, 梁丹丹, 田妍, 等. 微生物隔膜在生物阴极 MFC 中的应用及效能评价[J]. 中国环境科学. 2021, 41(4): 1655-1662.
- Li Chao, Liang Dandan, Tian Yan, et al. Application and efficacy evaluation of microbial diaphragm in bio-cathode MFC [J]. China Environmental Science, 2021, 41(4): 1655-1662.
- [13] Clauwaert P, Van der Ha D, Boon N, et al. Open air biocathode enables effective electricity generation with microbial fuel cells[J]. Environ sci technol. 2007, 41(21): 7564-7569.
- [14] 唐岳. 污水中光合产电菌在电极表面的富集及群落结构分析[D]. 西北农林科技大学, 2017.
- Tang Yue. Accumulation and community structure analysis of photosynthesizing electricity-producing bacteria on electrode surface in wastewater [D]. Northwest A&F University, 2017.
- [15] 周宇. 尿液微生物燃料电池阳极性能的研究[D]. 北京工业大学, 2017.
- Zhou Yu. Study on anode performance of urine microbial fuel cell [D]. Beijing University of Technology, 2017.
- [16] Youssef N, Sheik C S, Krumholz L R, et al. Comparison of Species Richness Estimates Obtained Using Nearly Complete Fragments and Simulated Pyrosequencing-Generated Fragments in 16S rRNA Gene-Based Environmental Surveys[J]. Applied and environmental microbiology. 2009, 75(16): 5227-5236.
- [17] Caporaso J G, Lauber C L, Walters W A, et al. Global patterns of 16S rRNA diversity at a depth of millions of sequences per sample[J]. Proceedings of the national academy of sciences of the united states of america. 2011, 108: 7.
- [18] 夏瑜, 何绪文, 文湘华. 微生物群落多样性数学表征方法及其在污水处理系统研究中的应用[J]. 微生物学通报. 2018, 45(08): 1778-1786.
- Xia Yu, He Xuwen, Wen Xianghua. The mathematical characterization method of microbial community diversity and its application in the study of wastewater treatment system [J]. Bulletin of Microbiology, 2018, 45(08): 1778-1786.

用于热水生产的水合盐基太阳能热化学系统的热性能研究

李威^{1*}, 曾敏², 张廉洁^{2,3}, 凌祥¹

(南京工业大学机械与动力工程学院, 南京, 211816

西安交通大学热流科学与工程教育部重点实验室, 西安, 710049

南洋理工大学机械与航天工程学院, 新加坡, 639798)

(Tel: 13122388125, Email: wli@njtech.edu.cn)

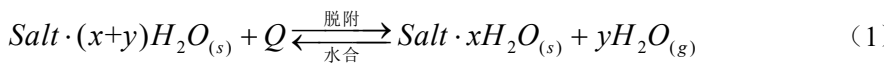
摘要: 本文以生活热水(DHW)生产为目标, 通过对 GJ 规模的储热系统进行热性能分析, 研究了增压辅助的水合盐基热化学转化(THT)系统的热提升性能。结果表明, 所选用的几种水合盐中, 大部分均能实现 65°C 以上的释热温度(T_{dis}), 满足 DHW 生产需求。基于 $SrBr_2$ 的 THT 系统表现出最佳的热性能, 其 T_{dis} 为 74.3°C, 系统输出的可用能为 11,667 MJ, 最大火用效率为 89.16%。虽然 $CaCl_2$ 基系统可实现更高温度的 DHW ($\geq 90^\circ C$), 但热力学性能并不如意; 相反, K_2CO_3 基 THT 系统在达到较高输出温度的同时可以确保较高的热力学性能和可用能。

关键词: 热水生产; 水合盐; 太阳能热化学系统; 热性能

0 前言

据国际能源署(IEA)报道, 2019 年全球能源相关二氧化碳排放量增加至 33.1 Gt, 为有史以来的最高水平, 建筑领域占总能耗的 40%以上^[1], 这其中, 欧盟等国家用于空间供暖的能耗为人均总能耗的 60~70%^[2]。随着传统化石燃料枯竭和全球性环境恶化等问题的日益严重, 着重发展新能源和可再生能源是缓解能源危机和资源短缺的必经之路^[3-5]。虽然太阳能、风能等新能源技术近年来蓬勃发展, 但由于其固有的间断性和不稳定性等特点, 导致供给侧和需求侧在时空上的不匹配, 使得可再生能源的高效利用受到限制^[6]。在此背景下, 热能储存(TES)技术为能源的有效利用提供了途径。

相比于传统的显热和潜热储热, 热化学储能(TCES)技术具有储热密度大、热损失小等优势, 因此可用于季节性长周期热能储存与转化^[7]。其中, 基于水合盐的吸附式热化学储热与其他类型的纯化学储能反应(如金属碳酸物的分解、甲烷重整等)相比, 其充热温度低, 200°C可使水合盐完全或基本脱附水分从而完成储热再生, 且气体反应物为水蒸气, 无安全隐患。这使得水合盐热化学储能应用于工业余热和太阳能直接利用从而实现空间供暖和生活热水生产成为可能。水合盐的充热(脱附)和释热(吸附)过程可由下式描述:



当前水合盐热化学储热技术处于小规模研究阶段。Zhang 等^[8]制备了活性氧化铝/LiCl 复合吸附剂用以实现低温($\leq 120^{\circ}\text{C}$)条件热存储。通过控制吸湿盐 LiCl 含量在阈值之下以防止溶液渗漏,获得的体积储热密度高达 $318 \text{ kW}\cdot\text{h}/\text{m}^3$ 。Xu 等^[9]合成了沸石/ MgCl_2 复合吸附剂并提出多形式吸附方式,即包括多孔基质的物理吸附、水合盐的化学吸附以及盐溶液的吸收效应,最终在 200°C 充热条件下取得 1368 kJ/kg 的高储热密度。Wei 等^[10]研制了介孔炭/ CaCl_2 复合材料在 $1000 \text{ W}/\text{m}^2$ 辐照条件下蓄热密度可达 $254 \text{ kW}\cdot\text{h}/\text{m}^3$, 伴随的最高蒸汽吸附量为 0.81 g/g , 具有中低温条件下化学储热的应用前景。类似地, SrBr_2 /天然石墨^[11]、 MgCl_2 /氧化石墨烯气凝胶^[12]、 K_2CO_3 /膨胀蛭石^[13]、 MgSO_4 /硅泡沫蜂窝孔^[14] 等复合热化学材料均被制备用以改善蓄热性能。

由上述文献研究可发现,目前关于吸附式 TCES 主要聚焦于储热材料的开发与改进。关于其实际应用的热力系统研究极为有限。且释热条件一般在 $25\text{--}40^{\circ}\text{C}$ 内,难以用于建筑热水生产($\geq 65^{\circ}\text{C}$)。鉴于此,本文提出一种用于热能品质提升的热化学转化(THT)系统,通过对反应蒸汽增压,实现反应温度的调控,从而提高释热温度。针对提出的热化学转化系统,研究了系统的综合热性能。研究结果可为大规模水合盐基热规模储热系统的设计提供参考。

1 物理模型

图 1 (a) 为以 DHW 生产为目标的水合盐基太阳能 THT 系统,其 p - T 关系如图 1 (b) 所示。气-固反应平衡关系可由 Clausius-Clapeyron 描述:

$$\ln\left(\frac{p_{eq}}{p_{ref}}\right) = -\frac{\Delta H_r}{RT_{eq}} + \frac{\Delta S_r}{R} \quad (2)$$

式中, p_{ref} 为参考压力, ΔH_r 和 ΔS_r 分别反应焓和熵。

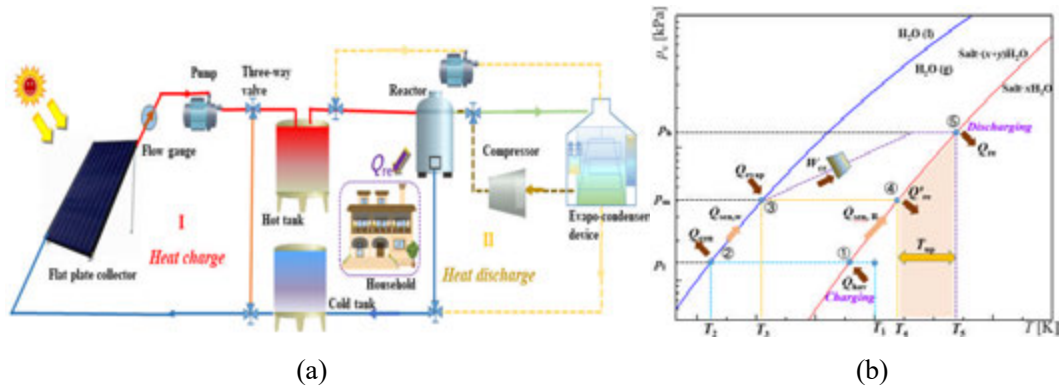


图 1 物理模型

在有日照的充热阶段,平板集热器收集太阳能加热传热流体(HTF)至指定温度。考虑传热温差,设定集热温度高于反应平衡温度 15°C (T_1)。HTF 流向热罐后一部分流过储热反应器使充热反应进行,而后流入冷罐等待再次加热。反应器中解吸出的水蒸气在环境温度 T_2 下冷凝 (15°C)。当夜间或冷天用热时,储罐中 HTF 对蒸发-冷凝器中环境温度的液态水加热至蒸发温度 T_3 ,蒸汽经压气机加压后送入反应器发生水合反应,释

放的热量可提取用于 DHW 的生产。由图 1 (b) 可见, 与传统 TCES 系统相比, 蒸汽的压力由 p_m 升高至 p_h , 相应的释热反应温度则由 T_4 增大至 T_5 , 实现了温度的提升(T_{up})。

本文选取文献中一些推荐的具有应用潜力的水合盐作为热化学材料, 描述其脱附/吸附反应平衡关系的曲线如图 2 所示。

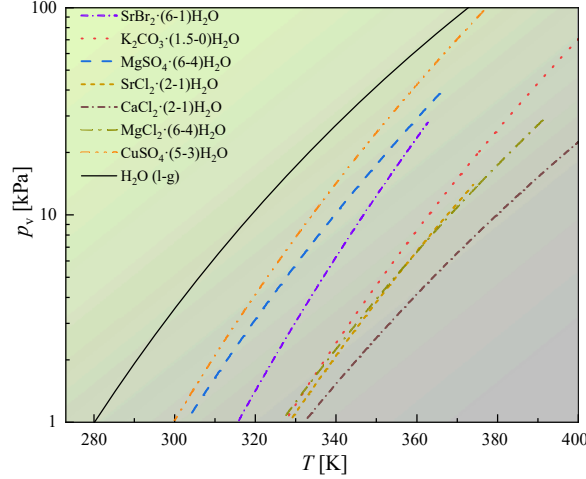


图 2 水合盐反应平衡曲线

2 数学模型

2.1 条件与假设

由于在低水蒸气压力条件下反应的平衡温度低于 100°C , HTF 可由平板集热器直接加热, 释热过程中水蒸气被加热至高于环境温度 10°C ; 太阳平均辐照强度和时长为 400 W/m^2 和 6h 。为了达到吉焦(GJ)级的储热规模, 设定储热材料的体积为 10 m^3 , 孔隙率为 0.4 [15]。所用反应器为文献[16]中拓扑设计的反应器, 其翅片所占体积约 17% , 该反应器具有高效的热质传递能力, 故本文假定热质传递为理想过程。此外, 还采用如下假设:

(1) 反应盐在反应过程中热物性不变, 不考虑反应过程中的团聚、液解等问题, 吸附过程的最高转化率为 0.9 ; (2) 各部件中温度场均匀, 不计管道和设备中压降; (3) 进入压气机的蒸汽不含液态水, 其等熵压缩效率为 0.8 ; (4) 工质泵消耗的功忽略不计。

2.2 理论计算

充热过程中反应器中所需的热量输入为 HTF 从太阳能集热器收集的能热:

$$Q_{\text{coll}} = m_{s1} \cdot \alpha \cdot \Delta H_{r,m} + c_{p,s1} \cdot m_{s1} \cdot (T_1 - T_2) + c_{p,met} \cdot m_{met} \cdot (T_1 - T_2) \quad (3)$$

等式右边一至三项为反应器中水合盐脱附反应热、显热和金属材料所需的显热。 m 和 α 为质量和转化率, $\Delta H_{r,m}$ 为比反应, kJ/kg ; c_p 为比热容 kJ/kg/K ; 下标 $s1$ 表示水合状态。

将液态水从环境温度预热至蒸发温度所需的显热为:

$$Q_{\text{sen,w}} = c_{p,w} \cdot \alpha \cdot m_w \cdot (T_3 - T_2) \quad (4)$$

其中充热阶段解吸的水蒸气量 m_w 等于水合盐中结晶水的质量。

使水蒸发所需的潜热为:

$$Q_{\text{evap, w}} = \alpha \cdot m_w \cdot L \quad (5)$$

式中 L 为水的汽化潜热, kJ/kg。

释热阶段从系统提取的可用能为反应盐释放的热量与各种显热之差:

$$Q_{\text{usa}} = m_{s1} \cdot \alpha \cdot \Delta H_{r,m} - c_{p,s0} \cdot m_{s0} \cdot (T_5 - T_2) - c_{p,met} \cdot m_{met} \cdot (T_5 - T_2) - c_{p,v} \cdot m_v \cdot \alpha \cdot (T_5 - T_o) \quad (7)$$

等式右侧第二和第三项分别为反应盐和金属反应器所需的显热, 第四项为蒸汽从压气机排出后至反应温度所用的显热。需要指出, 若压气机出口温度高于反应温度, 则高温蒸汽有利于增加系统的放热量。

压气机压缩蒸汽消耗的功为:

$$W_{cr} = \alpha \cdot m_v \cdot \frac{R}{M_v} \cdot T_3 \cdot \frac{n}{n-1} \left(\kappa^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right) / \eta_{cr} \quad (8)$$

式中 m_v 和 M_v 为水蒸气质量及摩尔质量, n 为蒸汽的绝热指数 (1.33), η_{cr} 为压气机的等熵压缩效率, k 表示蒸汽的压缩比 (p_h / p_m)。

相应地, 压气机的排气温度可由下式计算:

$$T_o = T_3 + \frac{T_3 \cdot \kappa^{\frac{n-1}{n}} - T_3}{\eta_{cr}} \quad (9)$$

根据热力学第一定律, 该 THT 系统是热效率可表示为:

$$\eta_{th} = Q_{usa} / (Q_{coll} + Q_{sen, w} + Q_{evap} + Q_{cr}) \quad (10)$$

式中, Q_{cr} 为压气机压缩蒸汽的功耗。设定压气机由电力驱动, 热电厂的热电转化效率为 40%, 电力转化为有效功的效率为 80%, 则压气机消耗的等效热量为:

$$Q_{cr} = W_{cr} / 0.32 \quad (11)$$

反应器系统在放热阶段消耗的显热可表示为:

$$Q_{sen, dis} = c_{p, s0} \cdot m_{s0} \cdot (T_5 - T_2) + c_{p, met} \cdot m_{met} \cdot (T_5 - T_2) + c_{p, v} \cdot m_v \cdot \alpha \cdot (T_5 - T_o) \quad (12)$$

因此, 放热过程中消耗的总显热量为:

$$Q_{sen} = Q_{sen, dis} + Q_{sen, w} \quad (13)$$

进一步地, 该系统的火用效率表示释热条件下最大有用能与充热条件下输入系统的最大有用能之比, 依据热力学第二定律, 可由下式计算:

$$\eta_{ex} = \frac{Q_{usa} \cdot (1 - T_2 / T_5)}{Q_{coll} \cdot (1 - T_2 / T_1) + (Q_{sen, w} + Q_{evap}) \cdot (1 - T_2 / T_3) + Q_{sen, r} \cdot (1 - T_2 / T_5) + W_{cr}} \quad (14)$$

3 结果与讨论

3.1 储热材料升温能力

在本研究中，一些具有应用前景的水合盐作为热化学材料，分析其在 THT 系统中的热升级能力。水合盐的熔点和反应热见表 2。由于熔点和压气机工作温度的限制，储热材料的释热温度和蒸汽的排气温度分别不超过材料熔点和 160℃。

表 1 水合盐的熔点和反应热

水合盐	SrBr ₂ ·(6-1) H ₂ O	K ₂ CO ₃ ·(1.5-0) H ₂ O	MgSO ₄ ·(6-4) H ₂ O	CuSO ₄ ·(5-3) H ₂ O	SrCl ₂ ·(2-1) H ₂ O	CaCl ₂ ·(2-1) H ₂ O	MgCl ₂ ·(4-2) H ₂ O
熔点 (°C)	89	>180	93	110	100	175	118
反应热 ΔH (kJ/kg)	947.9	577.5	241.6	450.57	303.3	384.3	352.8

图 3(a)显示了同压缩比下 THT 系统的释热温度 T_{dis} 。可以看出随着压缩比的增加， T_{dis} 明显增大。例如，当 κ 由 1 增加至 3 时，SrBr₂ 基系统的 T_{dis} 由 57.59℃ 提升至 74.3℃。说明该 THT 系统可通过调控蒸汽的压缩比实现热升级以满足用户的热需求。CaCl₂ 基系统具有最高的释热温度而 CuSO₄ 基系统的释热温度则最低，当 κ 为 3.25 时，二者的 T_{dis} 分别为 107.35℃ 和 61.61℃。可见，除了基于 CuSO₄ 的 THT 系统，其他系统均有望实现用户 DHW 生产需求（65℃）。图 3（b）表明了与传统 TCES 模式相比，该 THT 系统能够获得明显的温度提升。随着 κ 的增大，温升随之变大。CaCl₂ 基系统拥有最大的温度提升。例如，当 κ 为 2 时，基于 SrBr₂，K₂CO₃，MgSO₄，CuSO₄，SrCl₂，CaCl₂ 和 MgCl₂ 的系统温升分别为 21.96℃，29.95℃，21.04℃，19.59℃，31.84℃，33.47℃，23.91℃。

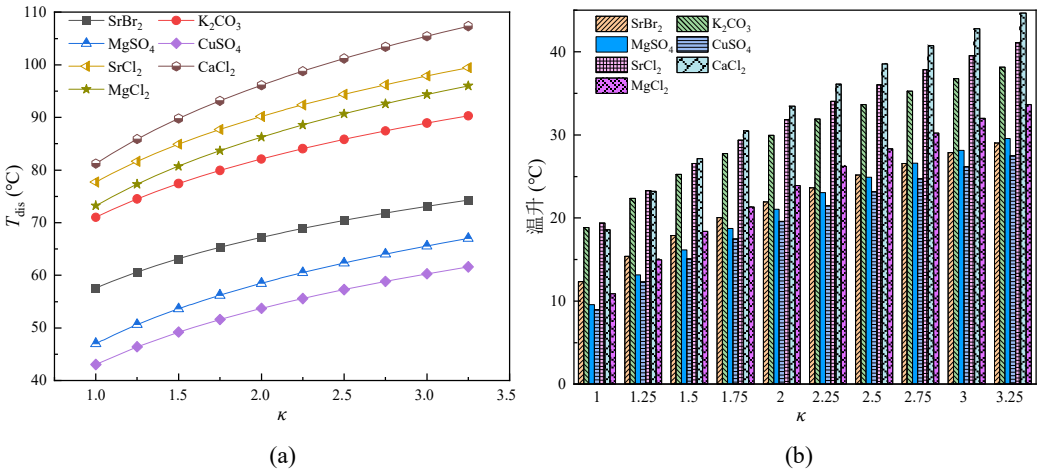


图 3 不同压缩比下 THT 系统的 (a) 释热温度和 (b) 温升

3.2 THT 系统热性能

3.2.1 转化率的影响

图 4（a）和（b）显示了热效率 η_{th} 和火用效率 η_{ex} 随吸附反应转化率 α 的变化。可以看出系统的效率随着的 α 增大而增大，其原因在于，当 α 变大时，储热材料可释放更多的热量。例如，当 α 从 0.2 增加至 0.9 时，K₂CO₃ 基系统的 η_{th} 和 η_{ex} 分别由 11.29% 和 35.19% 升高至 47.89% 和 59.41%。SrBr₂ 基系统取得了最高的 η_{th} 和 η_{ex} 而 MgCl₂ 基系统的

相应值则最低，这主要是因为后者的储热密度较低，且含水量较高，释热过程消耗的能量较大。尽管 η_{th} 和 η_{ex} 随着 α 增大而增大，但增长速率逐渐变缓，这是因为系统所需的蒸汽量也在不断加大，导致能耗的升高。

从图 4 中还可发现，绝大多数盐基系统存在特定的阈值，在反应盐的转化率大于阈值后，效率才为正值，也即意味着系统可有效工作。这是因为，较小的转化率使得系统释放的热量太低，不足以弥补放热温度下系统消耗的总能量。可以看出， $SrBr_2$ 基系统的阈值明显低于其他系统，不到 0.1，而对于基于 $MgCl_2$ 和 $MgSO_4$ 的 THT 系统，当 α 大于 0.3 时效率才为正值。上述结果也强调了在实际应用中反应器单元优异的热质传递性能对系统整体性能有着重要意义。

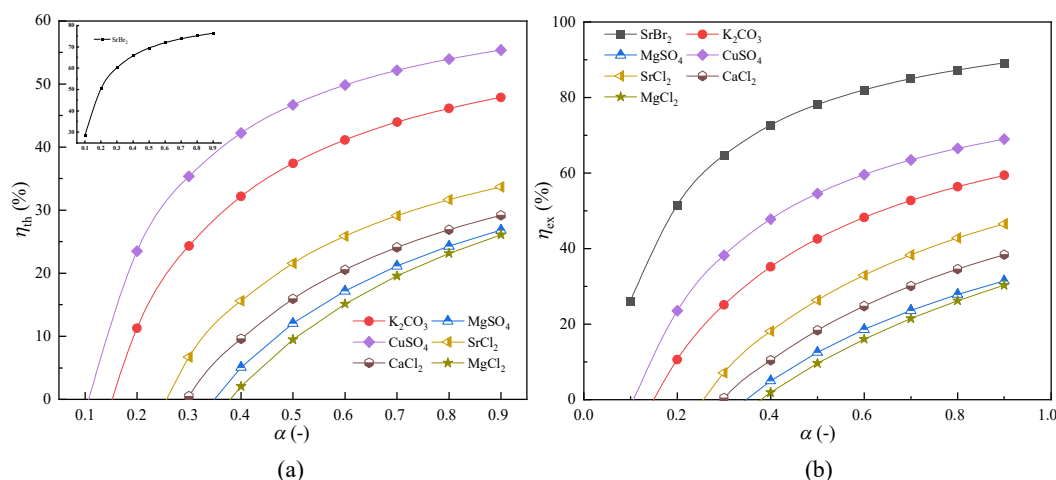


图 4 转化率 α 对 (a) 热效率 η_{th} 和 (b) 火用效率 η_{ex} 的影响

3.2.2 压缩比的影响

图 5 (a) 表明 η_{th} 随着 κ 的增大呈现缓慢降低的趋势。原因在于，当 κ 增大时，系统的 T_{dis} 也相应升高，因此需消耗更多的热量。 $SrBr_2$ 基系统可获得最高的 η_{th} 。当 κ 由 1 增长至 3.25 时， η_{th} 由 79.09% 降低至 76.32%。其次是 $CuSO_4$ 基系统，尽管其释热温度低于 $65^\circ C$ 。相比之下，基于 $MgCl_2$ 和 $MgSO_4$ 系统的热效率最低，当逐渐增大时，二者的差别不再明显。同 η_{th} 一样， $SrBr_2$ 基系统表现出最高的 η_{ex} 。不同的是，对于基于 $SrBr_2$ ， $CuSO_4$ 和 K_2CO_3 的系统，当 κ 变大时， η_{ex} 呈现上升的趋势。例如，当 κ 由 1 增加至 3.25 时， K_2CO_3 基的 η_{ex} 由 56.72% 增大至 59.41%。除了上述系统，其他系统的 η_{ex} 均不断下降，这是释热阶段的可用能 Q_{usa} 与放热温度 T_{dis} 共同作用的效果。

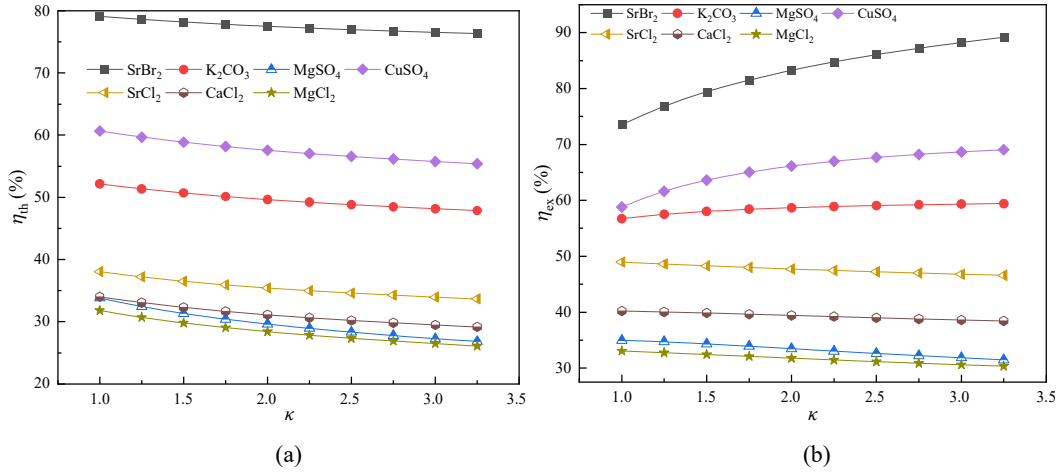


图5 压缩比 κ 对 (a) 热效率 η_{th} 和 (b) 火用效率 η_{ex} 的影响

3.2.3 热性能对比

THT 系统旨在提高住宅用途的释放温度。为实现这一目标，本节以尽可能高的 T_{dis} 为目的，同时确保 T_{dis} 保持在水合盐的熔点以下，并且压缩机的排气温度不超过允许的温度。

图6展示了不同系统的充热阶段太阳能收集的热量 Q_{ch} ，释热阶段系统消耗的显热 Q_{sen} ，液态水汽化消耗的热量 Q_{evap} ，系统释热阶段的可用能 Q_{usa} ，压气机功耗 W_{cr} ，以及释热温度 T_{dis} 。可以看出， $CaCl_2$ 基系统具有最高的 T_{dis} ，为 $107.35^{\circ}C$ ， $SrCl_2$ 基和 $MgCl_2$ 基系统分别位列第二和第三，为 $99.45^{\circ}C$ 和 $90.02^{\circ}C$ 。此三种系统虽表现出较高的输出温度，但由于储热介质的能量密度较低，因此所得的 Q_{usa} 较低，分别为 $2646.4 MJ$ ， $3270 MJ$ 和 $1783.5 MJ$ 。 $SrBr_2$ 基和 K_2CO_3 基系统的可用能分别为 $11667 MJ$ 和 $5815.8 MJ$ ，且后者的释热温度为 $90.31^{\circ}C$ 。 $CuSO_4$ 基系统也具有较高的可用能，但 T_{dis} 仅为 $61.61^{\circ}C$ ，未达到 DHW 生产所需温度 ($65^{\circ}C$)。相比于其他类型的能量， W_{cr} 的大小可基本忽略。

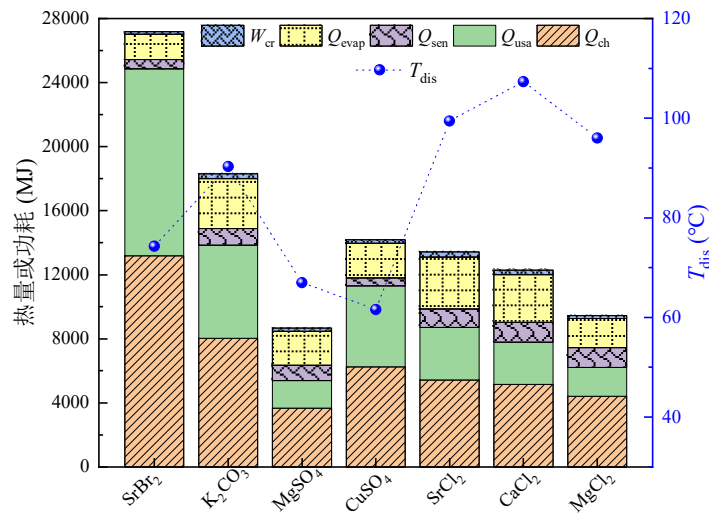


图6 基于不同反应盐的 THT 系统的各类能量占比和放热温度

4 结 论

本文以生活热水 (DHW) 生产为目标, 通过对 GJ 规模的储热系统进行热性能分析, 研究了增压辅助的水合盐基热化学能量转化 (THT) 系统的热提升性能。得到结论如下:

(1) 具有 GJ 级储热容量的增压辅助 THT 系统在释热阶段表现出高效的热升级能力和灵活性, 通过调节 κ 以满足用户热需求。除 CuSO_4 外, 基于不同盐的 THT 系统均可以实现 DHW 生产 ($> 60^\circ\text{C}$), 基于 CaCl_2 的系统可以容易地实现更高温度的 DHW 生产 ($> 100^\circ\text{C}$), 但储热容量和热力学性能相对较低。

(2) SrBr_2 基 THT 系统具有最佳的热性能, 其最大 η_{ex} 为 89.16%, 伴随的 Q_{usa} 和 T_{dis} 分别为 11667 MJ 和 74.3°C 。

(3) K_2CO_3 基 THT 系统的可用能为 5815.8 MJ, 虽低于 SrBr_2 基系统, 但其 T_{dis} 更高, 为 90.31°C , 且热力学性能和可用能也明显高于除 SrBr_2 基系统外的其他系统。

参考文献

- [1] I.E. Agency. Global Energy & CO2 Status Report 2021. Int. ENERGY AGENCY Together Secure 2021.
- [2] Strong C, Carrier Y, Handan Tezel F. Experimental optimization of operating conditions for an open bulk-scale silica gel/water vapour adsorption energy storage system. *Applied Energy* 2022;312:118533.
- [3] Hassan F, Jamil F, Hussain A, Ali HM, Janjua MM, Khushnood S et al. Recent advancements in latent heat phase change materials and their applications for thermal energy storage and buildings: A state of the art review. *Sustainable Energy Technologies and Assessments* 2022;49:101646.
- [4] Yang X, Liu S, Zou Y, Ji W, Zhang Q, Ahmed A et al. Energy-saving potential prediction models for large-scale building: A state-of-the-art review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2022;156:111992.
- [5] Zare Ghorbaei S, Ale Ebrahim H. Comparison of kinetics and thermochemical energy storage capacities of strontium oxide, calcium oxide, and magnesium oxide during carbonation reaction. *Renewable Energy* 2022;184:765–75.
- [6] Potrč S, Čuček L, Martin M, Kravanja Z. Sustainable renewable energy supply networks optimization – The gradual transition to a renewable energy system within the European Union by 2050. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2021;146:111186.
- [7] Ahmad A, Ding Y. A thermochemical energy storage based cooling and heating system: Modelling, experimental validation and lab-scale demonstration. *Energy Conversion and Management* 2021;247:114748.
- [8] Zhang YN, Wang RZ, Li TX. Thermochemical characterizations of high-stable activated alumina/LiCl composites with multistage sorption process for thermal storage. *Energy* 2018;156:240–9.

- [9] Xu JX, Li TX, Chao JW, Yan TS, Wang RZ. High energy-density multi-form thermochemical energy storage based on multi-step sorption processes. *Energy* 2019;185:1131–42.
- [10] Wei S, Han R, Su Y, Zhou W, Li J, Su C et al. Development of pomegranate-type $\text{CaCl}_2@\text{C}$ composites via a scalable one-pot pyrolysis strategy for solar-driven thermochemical heat storage. *Energy Conversion and Management* 2020;212:112694.
- [11] Cammarata A, Verda V, Sciacovelli A, Ding Y. Hybrid strontium bromide-natural graphite composites for low to medium temperature thermochemical energy storage: Formulation, fabrication and performance investigation. *Energy Conversion and Management* 2018;166:233–40.
- [12] Zhou H, Zhang D. Effect of graphene oxide aerogel on dehydration temperature of graphene oxide aerogel stabilized $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ composites. *Solar Energy* 2019;184:202–8.
- [13] Shkatulov AI, Houben J, Fischer H, Huinink HP. Stabilization of K_2CO_3 in vermiculite for thermochemical energy storage. *Renewable Energy* 2020;150:990–1000.
- [14] Calabrese L, Brancato V, Palomba V, Frazzica A, Cabeza LF. Assessment of the hydration/dehydration behaviour of $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ filled cellular foams for sorption storage applications through morphological and thermo-gravimetric analyses. *Sustainable Materials and Technologies* 2018;17:e00073.
- [15] Kant K, Pitchumani R. Analysis of a novel constructal fin tree embedded thermochemical energy storage for buildings applications. *Energy Conversion and Management* 2022;258:115542.
- [16] Stengler J, Bürger I, Linder M. Performance analysis of a gas-solid thermochemical energy storage using numerical and experimental methods. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2021;167:120797.

微波法制备牛粪/钢渣活性炭及其降解养殖废水研究

蔡庆峰¹, 耿文广^{2*}, 刘芳^{1*}

(1. 山东建筑大学 热能工程学院, 山东 济南 250100; 2. 齐鲁工业大学 (山东省科学院) 山东省科学院能源研究所, 山东 济南 250014)

(Tel: 13791051508; 13688601458, Email: gengwg@sderi.cn; fliu@sdjzu.edu.cn)

摘要: 为了缓解畜禽粪污带来的日益严重的环境问题, 本文从“以废止废”的资源化利用角度出发, 采用微波法制备了牛粪/钢渣复合活性炭, 同时对养殖废水进行降解研究, 探究了不同反应条件下养殖废水中化学需氧量 (COD) 的降解率。结果表明: 适量的钢渣掺混比可以提高 COD 降解率, 以抵消复合炭比表面积降低带来的消极影响; COD 的降解率随微波功率和微波时间的增加会呈逐渐上升的趋势; 在最优反应条件下, 养殖废水的 COD 降解率最高为 55.4%。

关键词: 微波法; 复合活性炭; 化学需氧量; COD 降解率

0 引言

随着国家经济的快速发展和人民生活水平的不断提高, 国内对畜牧产品的需求也在不断增加, 使得畜禽养殖业得到了迅速发展。目前, 国内畜禽养殖场共有6700万家左右, 其中成规模养殖场约40万家^[1-2]。但是, 随着国内养殖规模的快速扩大, 畜禽废弃物的排放量也在逐年攀升, 其带来的环境问题变得日益突出。

为了缓解环境压力, 一些学者采取“以废止废”的方式对畜禽废弃物进行综合利用。郭^[3]以牛粪为原料, 采用管式炉法制备了吸附材料活性炭, 通过正交实验的方法得知该活性炭最佳活化温度为 700°C。Khan^[4]等人以山羊粪为原料活制备了活性炭吸附剂, 通过响应曲面法发现该吸附剂可以有效的用于染料废水的处理。曹^[5]等人以鸭粪为原料, 采用 KOH 为活化剂制备活性炭。结果表明, 在最佳制备工艺下, 其碘吸附值为 32.3%。同时, 发现在该条件下添加 25%的锯木屑能明显提升吸附性能。可以看出, 不同原料的掺混可以一定程度上改善活性炭的性能, 因此, 一些对复合原料活性炭制备的研究也在不断增加。其中利用钢渣中所含有的大量金属元素对活性炭进行改性并将其应用于环境治理已经取得一定的成效。钢渣成分较多^[6], 主要包括 CaO、SiO₂、Fe₂O₃ 等, 理论上完全满足代替金属氧化物对活性炭改性的条件。孙^[7]等人以特殊钢渣超微粉与废弃核桃壳为原料, 利用管式炉加热的方式制备了钢渣基生物炭, 并对氯气进行了吸附处理, 发现核/钢比为 100: 6 时, 活性炭对氯气的吸收能力较好。杜^[8]等人采用传统管式炉法制备了钢渣/木屑复合活性炭, 并对其降解甲醛的性能进行了研究。研究发现, 钢渣掺混量为 25%时, 2 小时后的甲醛降解率为 40.7%。

¹综合上述研究, 发现文献中复合活性炭的制备大多为管式炉制备法, 此方法制备耗时过长, 而微波反应的速度非常快, 可以在短时间内处理大量的废水, 节省时间和人

力成本。因此，为了进一步高效地处理畜禽废弃物，本文以牛粪和钢渣为原料，采用微波法^[9-10]进行复合活性炭的制备，并以此为催化剂对养殖废水进行微波降解处理，研究不同条件下养殖废水中化学需氧量（COD）的降解率。

1 实验部分

1.1 主要实验材料与设备

干牛粪、养殖废水，济南市某养殖场；钢渣，山东钢铁集团日照有限公司；氢氧化钾（AR），国药集团；盐酸，国药集团；实验用水均为蒸馏水。

采用微波反应器（青岛麦克威 MKX-H1C1S）进行活性炭的制备与养殖废水的降解；采用 COD 消解仪、COD 测定仪（北京华美沃特 DT-3900、HM-12B）进行养殖废水的降解率检测；采用比表面积及孔径分析仪（美国麦克 ASAP 2020 plus）进行活性炭比表面积测定；采用场发射扫描电镜（捷克泰思肯 MIRA3）进行活性炭微观结构分析。

1.2 复合活性炭制备方法

干牛粪清洗去除表面灰尘，干燥后破碎成 2-3mm 颗粒备用，钢渣经研磨后过 200 目筛，得钢渣粉备用。将牛粪颗粒和钢渣粉按不同比例混合均匀，按固液质量比 1:2 加入 40% 的 KOH 溶液，浸渍 24h。取 5g（干重）混合原料于石英玻璃反应器中，通入一定时间氮气后开启微波反应器。在微波功率 600W 条件下活化 15min。待反应完成后持续通入氮气至样品冷却至室温。取出样品用（1+9）盐酸进行酸洗，去除表面金属离子，然后用 80℃ 左右蒸馏水进行水洗，直至滤液 pH 为 5~7，最后放入恒温干燥箱干燥一定时间既得成品复合活性炭。

1.3 微波降解实验原理及方法

微波辅助处理废水是一种高效、快速的废水处理方式，它通过直接加热废水中的水分子，使废水中有机物和微生物等分子产生热效应，达到分解的作用，同时催化剂可以将废水中难以被热分解的分子进行吸附，进一步达到降解废水的效果。

将 300ml 养殖废水（COD 浓度为 500~600mg/L）倒入三口烧瓶内，加入 10g 复合活性炭，然后将其放入微波反应器内，开启磁力搅拌和冷凝装置，设定微波功率和时间，反应开始，图 1 为微波降解实验的装置图。反应完成后待冷却到室温后过滤，取 2mL 滤液于预制试剂中，将其置于 COD 消解仪中，在 165℃ 下消解 20min。取出冷却至室温后放入 COD 测定仪中进行测定^[11]。

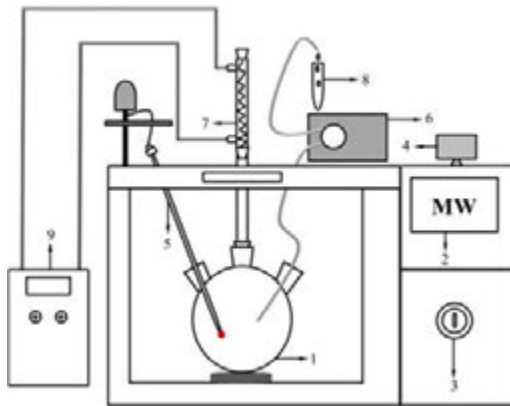


图 1 微波降解实验装置图

1-三口烧瓶；2-控制器；3-磁力搅拌开关；4-监视器；5-热偶；6-蠕动泵；7-冷凝管；8-试管；9-恒温水浴

1.4 养殖废水中 COD 检测

本研究中采取 COD 光度法快速测定仪技术要求及检测方法(HJ 924-2017)^[12]进行检测。预制试剂中的 Cr^{6+} 与养殖废水中的还原性物质发生反应后成为 Cr^{3+} 。利用 COD 测定仪在一定波长下测得其含量，然后可以快速的换算出 COD 浓度。该研究中每组实验进行了 3 次重复实验，COD 降解率的误差均在 5% 以内。

2 结果分析与讨论

2.1 原材料组分分析

在复合活性炭的制备前对牛粪和钢渣的主要成分进行了测定。通过测定计算^[13]，牛粪的主要成分如表 1 所示，牛粪中水分含量最高，高达 77.2%，灰分含量为 3.6%，有机质含量为 19.2%。由测定结果可以看出，牛粪中有机质的含量较高，适合作为制备活性炭的原料。

表 1 牛粪主要成分 (%)		
水分	灰分	有机质
77.2	3.6	19.2

从表 2 可以看出钢渣的主要成分包括 CaO 、 Fe_2O_3 、 SiO_2 、 MgO 、 MnO 、 Al_2O_3 、 P_2O_5 等。其中 CaO 和 SiO_2 属于凝胶物质， P_2O_5 属于营养物质^[14]， Fe_2O_3 为磁性成分，易在活性炭表面产生富集现象，有利于提高活性炭的吸附性能。 MgO 和 MnO 有较强的催化性，可以进一步增强复合活性炭对废水的降解能力^[15]。 Fe_2O_3 、 MgO 和 MnO 三者占比接近 31%，这说明钢渣的存在对活性炭吸附性能的提高可以起到较大的积极作用。

表 2 钢渣的化学成分 (%)									
CaO	Fe_2O_3	SiO_2	MgO	MnO	Al_2O_3	P_2O_5	TiO_2	Cr_2O_3	其他
45.68	24.17	14.64	3.49	3.30	2.88	2.46	1.21	1.02	1.15

2.2 钢渣掺混量对 COD 降解率的影响

为了保证畜禽粪便的资源化充分利用，本研究中钢渣的掺混量不超过 50%，依据上文中实验方法，在微波功率 300W、微波时间 15min 的条件下，探究不同钢渣掺混比对养殖废水中 COD 的降解影响。

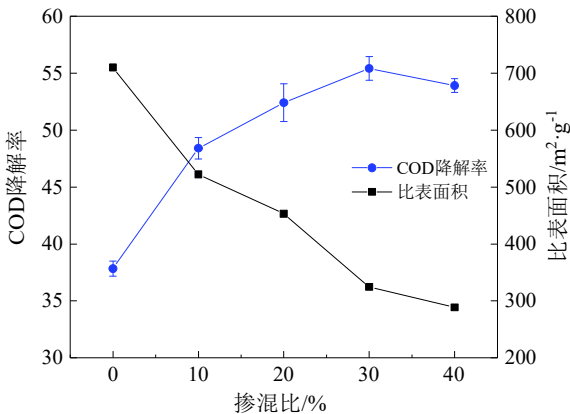


图 2 不同钢渣掺混比下复合炭的 COD 降解率及比表面积

从图 2 可以看出，随着钢渣掺混比的增加，复合炭对 COD 的降解率是增大后减小的趋势。在掺混比为 30% 时，复合炭对 COD 的降解率达到了最高，为 55.4%。这表明

适量的钢渣可以提高活性炭对 COD 的降解率。同时，图中还可以看出复合炭的比表面积是随钢渣掺混比的增加而逐渐减小的，这是因钢渣影响了复合炭的多孔结构中，占据了一部分的孔容，从而导致复合炭的比表面积减小。

综合图 2 中两条曲线可以得知，在掺混比达到最优之前，复合炭的中钢渣里 Fe_2O_3 、 MgO 和 MnO 成分的吸附和催化作用对 COD 降解率带来的积极影响要大于活性炭比表面积降低带来的消极影响。当掺混比过高时，这种影响平衡发生了转换，导致 COD 降解率开始降低，因此复合炭的制备要确定合适的掺混比，本研究中钢渣的最优掺混比为 30%。

2.3 复合活性炭结构表征

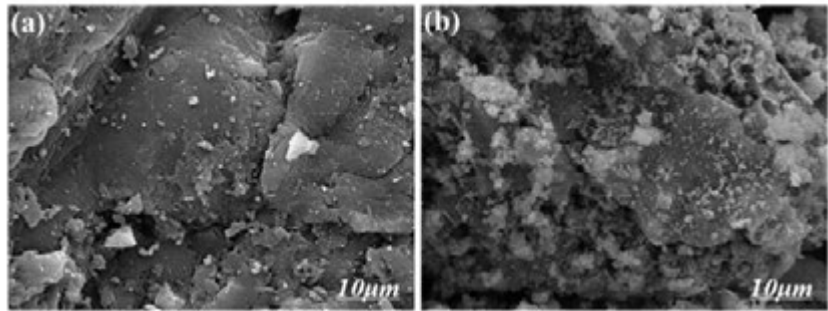


图 3 复合活性炭扫描电镜图.(a)掺混比 0%；(b)掺混比 30%

图 3 为不同掺混比复合活性炭的扫描电镜图。从图中可以看出钢渣掺混比为 0% 的时，纯牛粪活性炭呈现出良好且规则的形貌，表面光滑，具有较为清晰的层状结构，说明纯牛粪活性炭具有丰富的孔隙结构，吸附性能较好。同时，从图 3(b)中可以看出，最优掺混比下的复合炭块体和粒径明显减小，但是依旧呈现出良好的外形与层状结构，钢渣无散落现象，钢渣团聚程度较轻，说明钢渣已经被活性炭充分包裹。

2.4 微波功率对 COD 降解率的影响

在钢渣掺混比 30%，微波时间为 15min，微波功率分别为 150W、200W、250W、300W、350W 的条件下，探究不同微波功率下最佳掺混比复合炭对养殖废水 COD 降解率的影响。

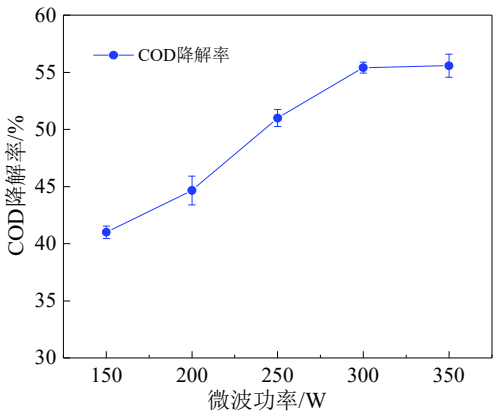


图 4 不同微波功率下的 COD 降解率

从上图中可以看出，COD 的降解率随微波功率的增大是逐渐增加的，这说明微波功率的增大有利于 COD 的降解。但是随着微波功率的增大，降解率增量越来越小，COD

降解率变化曲线越来越平缓。这是因为 COD 降解率在一定程度限制于所投入复合炭的吸附总量，在一定条件下，复合炭达到了吸附极限，微波功率的增大对 COD 降解率的影响会越来越小。当微波功率从 300W 增大到 350W 时，COD 降解率的增加不足 1%，因此本研究中最优的微波功率为 300W。

2.5 微波时间对 COD 降解率的影响

在钢渣掺混比 30%，微波功率为 300W，微波时间分别为 5min、10min、15min、20min、25min 的条件下，探究不同微波时间下最佳掺混比复合炭对养殖废水 COD 降解率的影响。

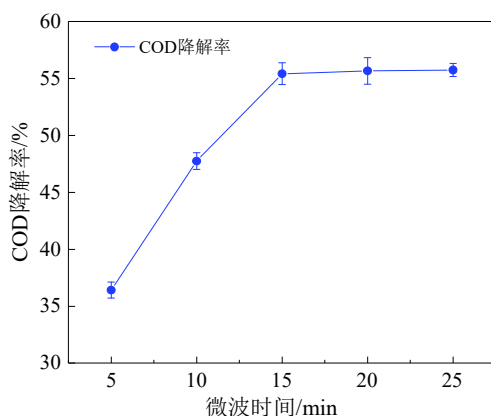


图 5 不同微波时间下的 COD 降解率

图 2 展示了不同微波时间下的 COD 降解率。可以看出，微波时间对 COD 降解率的增加是呈现积极作用的，与图 4 相似，当微波时间增加到一定程度时，COD 降解率的变化曲线变得越来越平缓，其原因与微波功率相同。当微波时间大于 15min 时，COD 降解率的增加小于 1%，因此本研究中最优的微波时间为 15min。

2.6 微波辅助废水降解体系经济性研究

微波辅助降解养殖废水过程主要运行成本为能量消耗，所以反应过程的能量消耗越低，其经济性越高，能量消耗的计算公式见公式 1^[16]。

$$EEC = \frac{P \times t \times 10^3}{V \times 60 \times \log(c_i / c_f)} \quad (1)$$

式中：P 为 MW 功率，kW；t 为加热时间，min；V 为反应废水体积，L； c_i 和 c_f 分别为初始和最终 COD 浓度，mg/L。

上式通过微波功率、反应时间、废水体积和反应前后的 COD 比值之间的数学关系来表示改过程的能量消耗，EEC 越小，每处理单位体积废水所需的能量越小。通过上式计算最佳工艺参数下的能量消耗为 712.93kWh/m³，若按照电力成本为 0.54 元/ kWh 计算，则每处理单位体积养殖废水的运行成本约为 384.98 元。

3 结论

本文通过对牛粪和钢渣的再利用，将其制备成复合活性炭，对废弃物进行了充分的资源化利用。探究了不同条件下复合活性炭对养殖废水中 COD 的降解率，确定了最优的降解反应条件。

(1) 牛粪中有机质的含量较高, 可以作为制备活性炭的原料; 钢渣中 Fe_2O_3 、 MgO 和 MnO 三者占比可达 30%以上, 它们的富集现象与催化作用可进一步提高活性炭的吸附性能。

(2) 适量的钢渣可以提高复合活性炭的吸附性能, 在一定程度上抵消由于比表面积降低导致的活性炭吸附能力下降问题。

(3) COD 的降解率随微波功率和微波时间的增加都呈逐渐上升的趋势, 但是当微波功率和微波时间增大到一定程度时, 曲线逐渐平缓, COD 的降解率的增加会小于 1%。

(4) 在降解反应中, 选择钢渣掺混比为 30%的复合炭, 微波功率 300W, 微波时间 15min 时, 对养殖废水中 COD 的降解率最高, 可达 55.4%, 且在最佳工艺参数下的能量成本约为 384.98 元。

参考文献

- [1] Qi-Yu Zhang, Ping Yang, Lai-Sheng Liu, et al. Formulation and characterization of a heterotrophic nitrification-aerobic denitrification synthetic microbial community and its application to livestock wastewater treatment. *Water*, 2020, 12(1): 218.
- [2] Yi-Min Zhang, Ming Kong, Ming Hua, et al. Association of robust nitrogen removal with spatiotemporal nitrifying bacterial community dynamics in a new bioreactor for treatment of simulated livestock wastewater with high ammonia content. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 2019, 94(2): 618-627.
- [3] 郭祥. 牛粪活性炭的制备及性能研究: [硕士学位论文]. 重庆: 西南大学, 2013.
GUO Xiang. Preparation and performance study of activated carbon from cow dung: [MSc. Thesis]. Chongqing: Southwest University, 2013.
- [4] Tabrez Alam Khan, M. Fuzail Siddiqui, Neha Abbasi, et al. Adsorptive decolouration of anionic dye from water by goat dropping activated carbon prepared via microwave-assisted H_3PO_4 activation: process optimization using response surface methodology, isotherm and kinetics modelling. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 2022, 12(11): 5409-5425.
- [5] 曹伟, 王晓雪, 贾斌, 等. 资源化利用鸭粪制备活性炭的研究. *安徽农业科学*, 2014, 42(27): 9495-9498+9634.
CAO Wei, WANG Xiao-Xue, JIA Bin, et al. Study on the preparation of activated carbon from duck manure by resource utilization. *Anhui Agricultural Science*, 2014, 42(27): 9495-9498+9634.
- [6] Huang Yi, Guo-Ping Xu, Hui-Gao Cheng, et al. An overview of utilization of steel slag. *Procedia Environmental Sciences*, 2012, 16: 791-801.
- [7] 孙大为, 邓军. 特殊钢渣超微粉改性废弃核桃壳制备钢渣基生物质活性炭及其吸收氯气的性能. *工程科学学报*, 2021, 43(07): 946-951.
SUN Da-Wei, DENG Jun. Preparation of steel slag-based biomass activated carbon by modification of waste walnut shells with special steel slag ultrafine powder and its performance in absorbing chlorine gas. *Journal of Engineering Science*, 2021, 43(07): 946-951.
- [8] 杜晓燕, 陈华, 杨晓军, 等. 钢渣/木屑复合活性炭的制备及其降解甲醛性能. *材料工程*, 2023, 51(03): 131-137.
DU Xiao-Yan, CHEN Hua, YANG Xiao-Jun, et al. Preparation of steel slag/wood chips composite

- activated carbon and its formaldehyde degradation performance. *Materials Engineering*, 2023,51(03):131-137.
- [9] Pravin Sukharaj Bhandari, Parag Ratnakar Gogate. Microwave assisted persulfate induced degradation of sodium dodecyl benzene sulfonate. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 2019, 36: 2000-2007.
- [10] Priyanshu Verma, Sujoy Kumar Samanta. Microwave-enhanced advanced oxidation processes for the degradation of dyes in water. *Environmental chemistry letters*, 2018, 16: 969-1007.
- [11] 张潇. 微波辅助有机废水降解的实验研究: [硕士学位论文]. 济南: 山东建筑大学, 2022.
ZHANG Xiao. Experimental study of microwave-assisted degradation of organic wastewater: [MSc. Thesis]. Jinan: Shandong Jianzhu University, 2022.
- [12] 中华人民共和国生态环境部. HJ924-2017 COD 光度法快速测定仪技术要求及检测方法. 北京: 中国标准出版社, 2018.
Ministry of Ecology and Environment, PRC. HJ924-2017 Technical requirement and test procedures for rapid COD photometric analyzer. Beijing: Standards Press of China; 2018.
- [13] 陈龙. 禽畜粪便制活性炭技术研究: [硕士学位论文]. 重庆: 重庆工商大学, 2011.
CEHN Long. Research on Activated Carbon Technology from Livestock Manure: [MSc. Thesis]. Chongqing: Chongqing Technology and Business University, 2011.
- [14] 张浩, 徐远迪, 张磊, 等. 钢渣改性活性炭的制备及其降解甲醛性能. *过程工程学报*, 2019, 19(06): 1228-1233.
ZHANG Hao, XU Yuan-Di, ZHANG Lei. Preparation of steel slag modified activated carbon and its performance in degrading formaldehyde. *Journal of Process Engineering*, 2019, 19(06): 1228-1233.
- [15] Kui-Hao Chuang, Chi-Yuan Lu, Ming-Yen Wey, et al. NO removal by activated carbon-supported copper catalysts prepared by impregnation, polyol, and microwave heated polyol processes. *Applied Catalysis A: General*, 2011, 397(1-2): 234-240.
- [16] Ying Wang, Sheng-Peng Guo, Zhe-Pei Gu, et al. Comparison study on microwave irradiation-activated persulfate and hydrogen peroxide systems in the treatment of dinitrodiazophenol industrial wastewater. *Chemosphere*, 2020, 242: 125139.

超薄环路热管传热性能实验研究

崔庆杰¹, 马祥¹, 汪高翔¹, 杨小平^{1,*}, 魏进家^{1,2}

(1 西安交通大学化学工程与技术学院, 西安 710049)

2 西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 西安 710049)

(Tel: 15109115187, Email: yxping@xjtu.edu.cn)

摘要: 随着电子信息技术的迅速发展, 电子器件的集成度和性能不断提高, 使得芯片呈现高热流密度、高功率和小型化的发展趋势, 热控制系统的可用空间有限, 有必要使环路热管小型化—微型环路热管(mLHP), 以满足电子冷却的挑战性需求。基于环路热管理论, 设计并制备了超薄环路热管样品, 搭建热测试平台对其传热性能进行了一系列实验研究。在以无水乙醇为工质的条件下, 对充液率、一体化烧结、旋转角和稳定性等超薄环路热管影响因素进行探究。结果表明, 超薄环路热管的最佳充液率为30%, 一体化烧结能有效降低毛细芯与底板的接触热阻, 从而降低冷热端传热温差。在冷凝器自然对流散热状态下, 超薄环路热管的最高散热热流密度达到了 5 W/cm^2 , 散热热阻最低达到了 $1.34 \text{ }^\circ\text{C/W}$, 等效导热系数最高达到了 $19013 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ 。

关键词: 环路热管; 超薄; 电子器件散热; 相变传热

0 前言

随着微电子技术和电信工业的迅猛发展, 各类电子设备, 尤其是超薄移动设备, 如智能手机、平板电脑和VR/AR眼镜, 正以高性能、轻量化和小型化为核心目标。然而, 由于散热空间有限, 制造具备高热通量的大功率电子芯片变成了一项巨大挑战。这些芯片所产生的大量热量会导致恶劣的热环境, 从而严重降低电子器件的可用性和运行可靠性。因此, 迫切需要高效的电子器件热管理元件。环路热管通过“毛细管机制”泵送流体, 无需外部动力以及运动部件, 可以实现灵活布置和热量的远距离传输, 已广泛应用于在高热流密度电子器件散热^[1-3]、废热回收^[4, 5]、飞行器热管理^[6, 7]、太阳能利用^[8, 9]等领域。热控制系统的可用空间有限, 有必要使环路热管小型化—微型环路热管(mLHP)。Song^[10]等人提出了一种适用于微芯片集成的厚度为1.5mm的超薄环路热管, 实现了自循环散热。Watanabe^[11]等人采用Shirasu多孔玻璃作为毛细芯, 乙醇作为工作流体, 开发了一种微型环路热管(mLHP), 其最大传热性能达到了 $15 \text{ W/(60 W/cm}^2)$ 。Shioga^[12]等人利用薄铜板的化学刻蚀和扩散键合工艺制造了微型环路热管(mLHP)。Wang^[13]等人制作了厚度为8mm的扁平蒸发器铜水mLHP, 并研究了不同冷凝器位置和操作方向对环路热管性能的影响。Takuji^[14]等人设计和制造了厚度为0.3mm的超薄片状环路热管(mLHP), 用于冷却高性能移动设备, 展现出最大热传输性能达到 10 W/cm^2 的高热流密度。Phan^[15]等人

基金项目:

在微型环路热管（mLHP）中提出了PDMS-glass和PDMS-SUS两种混合结构，这两种结构在室温下具有超过100kPa的高结合强度。根据小米实验室发布的官方测试结果，小米Mix4手机采用微型环路热管代替传统手机的VC均热板，能够有效降低最高温度5℃。本文提出了一种超薄环路热管散热方案，对传统环路热管进行了轻量化改进，并建立了超薄环路热管传热性能测试平台，进行了一系列实验研究。

1 实验设计

1.1 超薄环路热管设计

超薄环路热管的设计图如图1所示，与传统环路热管不同，该环路热管的蒸发器入口与蒸发器出口需放在同一侧。另外，毛细芯被设计成阶梯型结构，这种结构能让蒸汽更好的排出。

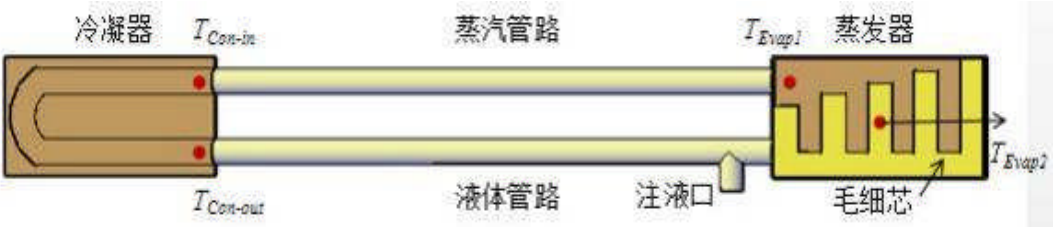


图1 超薄环路热管设计图

超薄环路热管的主要参数如表1所示，蒸汽和液体管路为圆形，工质为无水乙醇。

表1 超薄环路热管主要参数

部件	参数	取值
蒸发器	长×宽×高（mm）	30×15×0.7
	加热功率（W）	4
	孔隙率	40%~65%
毛细芯	毛细孔径（μm）	10~20
	粒径（μm）	30~150
	长（mm）	80
蒸汽管路	内径（mm）	2
	长×宽×高（mm）	30×15×0.7
冷凝器外表面	长×宽×高（mm）	40×3×1
液体管路	长（mm）	80
	内径（mm）	2

图2所示为本结构的蒸发器，蒸发器的内腔尺寸为26×11×0.5 mm，竖直方向上有一个长10 mm，直径2 mm的液体充灌口，液体由此注入蒸发器内部，水平方向上有两个长10 mm，直径2 mm的连接口，远离液体充灌口的是气路连接口，液体受热蒸发，蒸汽从此位置流出，流向冷凝器，靠近液体充灌口的是液路连接口，液体注入后，一部分被蒸发器内部的毛细吸液芯吸收，另一部分从此位置流向冷凝器。三个位置口均是先由一段长5 mm的渐扩段，之后连接一段长5 mm的水平段组成。蒸发器盖板的周围有

一宽为 2 mm 的裙边，用于焊接。蒸发器的下底板整体尺寸与蒸发器盖板相同。蒸发器上盖板和下底板均是采用厚度 0.1 mm 的磷青铜片冲压制成。

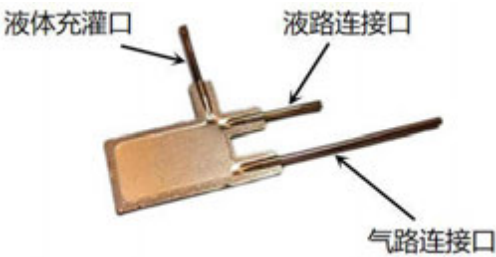


图 2 超薄环路热管蒸发器实物图

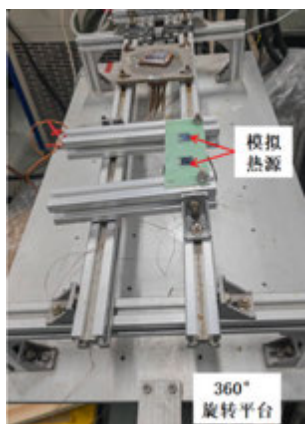
图 3 所示为冷凝器底板与盖板实物图，选用磷青铜，牌号为 6.5-0.1，厚度为 0.1mm。冷凝器设计为 U 型管结构，整体尺寸为 30×15×0.7 mm，管路总长约 40 mm，管径尺寸为 3×1 mm，两个 U 型口也是先由一段长 5 mm 的渐缩段，缩小后的口径为 1.1 mm，之后连接一段长 5 mm 的水平段连接而成。冷凝器盖板的周围有一宽为 2 mm 的裙边，用于焊接。冷凝器的下底板整体尺寸与冷凝器上盖板相同。冷凝器上盖板和下底板均是采用厚度 0.1 mm 的磷青铜片冲压制成。此外，在冷凝器的设计和制造过程中，还需注意防止材料变形和裂纹等问题的发生，以保证冷凝器在长期运行中始终保持稳定的性能和高效的热传输特性。



图 3 冷凝器底板与盖板实物图

1.2 实验系统

为准确测试超薄环路热管的传热性能，包括抗重力运行的能力，搭建了图 4 所示的超薄环路热管传热性能测试系统。该测试系统的硬件如图 4（a）所示，该测试系统包含多支高精度热电偶、模拟热源芯片和可 360°旋转的平台，可以研究超薄环路热管的抗重力运行性能。数据采集软件系统如图 4（b）所示，数据采集系统采用 LabView 软件编写，能够实时监测和采集热源芯片、蒸发器、冷凝器以及环境温度等。如图 5（a）、图 5（b）所示，本文提出的超薄环路热管总厚度在 0.75 mm 左右，装置总重量<4 g，

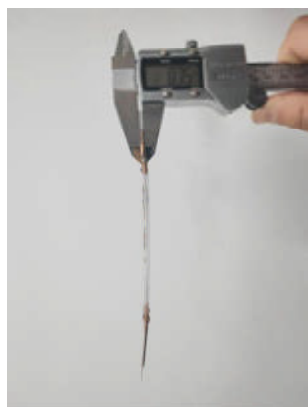


(a) 测试平台硬件

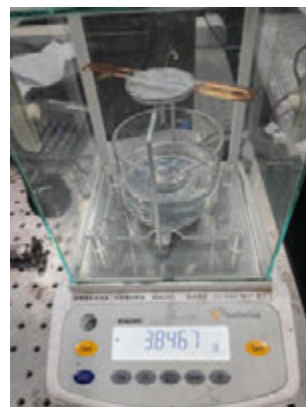


(b) 数据采集系统

图4 超薄环路热管传热性能测试系统



(a) 超薄环路热管厚度测量



(b) 超薄环路热管重量测量

图5 超薄环路热管厚度及重量测量

1.3 实验参数测量与数据处理

使用4根T型热电偶对超薄环路热管的运行温度进行测量，测点位置如图1所示，用于测量蒸发器温度的 $T_{\text{Evap}1}$ 与 $T_{\text{Evap}2}$ ，当两者温差小于 0.5°C 时表明热电偶有效，取两者较大者为 T_{Evap} ，测量冷凝器入口温度的 $T_{\text{Con-in}}$ 和测量冷凝器出口温度的 $T_{\text{Con-out}}$ 。另外还有一跟用于测量热源温度的热电偶记为 T_{si} 。

实验中使用直流稳压电源给掺磷硅片供电作为模拟热源，热源热负荷可用公式(1)计算：

$$Q = UI \quad (1)$$

式中： Q 表示热负荷，W； U 表示电压，V； I 表示电流，A。

热流密度可由式(2)计算：

$$q = \frac{Q}{A} = \frac{Q}{L_a L_b} \quad (2)$$

式中： q 表示热流密度， $\text{W}\cdot\text{cm}^{-2}$ ； A 表示加热面积， cm^2 ； L_a 表示加热面的长度，cm；

L_b 表示加热面的宽度，cm。

总热阻可由式（3）计算：

$$R_{total} = \frac{T_{Evap} - T_{Sink}}{Q} \quad (3)$$

式中： R_{total} 表示总热阻， $^{\circ}\text{C}\cdot\text{W}^{-1}$ ； T_{Evap} 表示蒸发器底板温度， $^{\circ}\text{C}$ ； T_{Sink} 表示热沉温度， $^{\circ}\text{C}$ 。

环路热管的等效导热率 λ_{eff} 可由式（4）计算：

$$\lambda_{eff} = \frac{L}{R \times S} \quad (4)$$

式中： λ_{eff} 表示等效导热率， $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ； L 表示环路热管的热传输距离，m； S 表示环路热管的截面面积， m^2 。

一些物理量可通过仪器直接测量，例如电压 U 、电流 I 、温度 T 和长度 L ，其不确定度取决于使用的测量设备的精确度。使用精度等级为 0.5 级的电压表和电流表分别测量电压 U 和电流 I ，此时其相应的不确定度 $\Delta U/U$ 和 $\Delta I/I$ 均为 0.5%。使用 T 型热电偶对温度 T 进行测量，此时其不确定度 ΔT 为 0.5°C 。其他相关参数的不确定性，如质量流速、热流密度、传热系数，可以按照误差传递分析方法计算，表 2 总结了实验中与测量和计算参数的最大相对误差。

表 2 超薄环路热管各物理量不确定度

变量	符号	不确定度
温度	ΔT	0.5°C
电压	$\Delta U/U$	0.5%
电流	$\Delta I/I$	0.5%
加热面积	$\Delta A/A$	0.7%
热负荷	$\Delta Q/Q$	0.7%
热流密度	$\Delta q/q$	1%
总热阻	$\Delta R_{total}/R_{total}$	1.3%
等效导热率	$\Delta \lambda_{eff}/\lambda_{eff}$	7.1%

2 实验结果与讨论

2.1 充液率的影响

充液率（FR）是指被充灌进环路热管内部工质的体积与环路热管实际内部总容积的比值。研究表明，充液率是影响环路热管能否正常启动以及启动平衡温度的重要因素，环路热管一般存在最佳充液率。对于超薄环路热管而言，热管内部总容积极小，充液率对装置运行的影响更为明显。使用工质为乙醇，充液率分别为 20%、30%、40%以及 50%，对装置进行升降功率实验探究，测温点分别为热源温度、蒸发器温度、冷凝器入口温度以及冷凝器出口温度。

图 6（a）为充液率为 20%的升降功率实验结果，加热功率为 1 W、2 W 时没有启动，这是因为自然对流已经可以带走低功率下的热量，3 W 时冷凝器测温点开始有示数，蒸

汽产生并逐渐形成循环，当加热功率到达 5 W 时，热源温度已经接近 $130\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，为了防止系统泄露，热源温度到达 $130\text{ }^{\circ}\text{C}$ 停止加热。因为当充液率为 20% 时，充液率过低，蒸汽温度很不稳定，且容易发生干烧现象，散热效果并不好；由图 6 (b) 和图 6 (c) 可知，充液率为 30% 、 40% 时超薄柔性 LHP 都能正常启动，两者在热负荷达到 5 W 时的平衡温度都在 $95\text{ }^{\circ}\text{C}$ 左右，但 30% 充液率时启动更早，重量更小，为本结构的最佳充液率；由图 6 (d) 可知，充液率为 50% 时，充液率过高，导致气线有液柱堵塞，且冷凝器出口处被工质浸没，蒸汽无法到达冷凝器处，冷凝器测温点没有升温现象，导致在较高功率下热量堆积，在 5 W 时温度无法平衡。

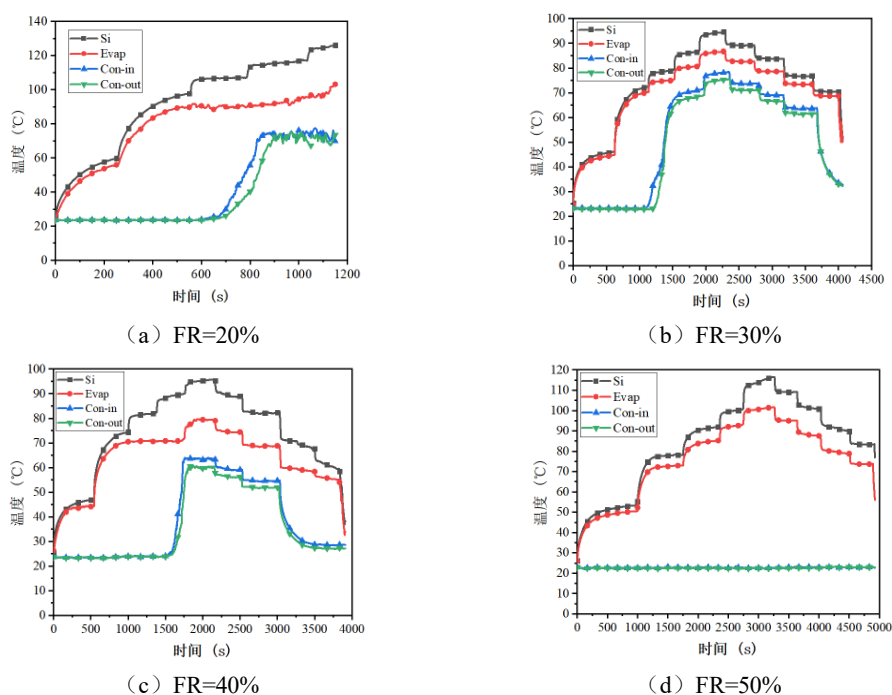


图 6 多种充液率 $1\text{--}5\text{ W/cm}^2$ 升降功率曲线图

2.2 旋转角的影响

旋转角影响的探究实验即探索装置的抗重力性能，抗重力性能是本装置能否实际应用的重要指标，对液线在气线正上方和气线在液线正上方这两种极限角度与正常水平角度进行对比，图 7 (a) 为水平角度（视为 0° ）下的升降功率图，图 7 (b) 为液线在气线正上方时视为 (-90°) 的升降功率图，图 7 (c) 为气线在液线正上方时（视为 90° ）的升降功率图。由图 7 (a) 和由图 7 (b) 所示，当液线在气线正上方时 (-90°) ，装置运行极为稳定，在 $1\text{--}4\text{ W/cm}^2$ 升降功率下，在热流密度到达 3 W/cm^2 时开始产生蒸汽，在 4 W/cm^2 的最高热流密度下最高温度都不超过 $90\text{ }^{\circ}\text{C}$ ；由图 7 (c) 可知，当液线在气线正上方时，虽然蒸汽能够产生，但此时装置内蒸汽不仅要克服阻力，还要克服重力的阻碍，这导致装置在 4 W/cm^2 的最高热流密度下温度出现波动。

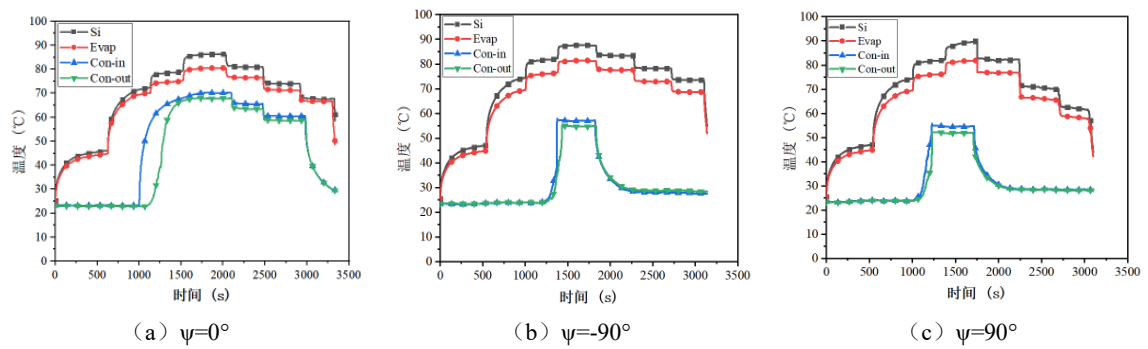


图7 抗重力实验 $1.4\text{W}/\text{cm}^2$ 升降功率曲线图

2.3 稳定性实验

稳定性是环路热管能否实际应用的另一个重要指标，恒功率启动也是中实际应用中的常见场景，变功率、恒定功率性能测试两种测试状态下相同热负荷下的运行温度存在明显差异。以热负荷达到 4W 为例，变功率下热负荷到达 4W 时热源温度约为 88.7°C ，恒功率 4W 时热源温度约为 80.3°C ，这是因为环路热管的运行温度与它的启动状态相关，虽然热负荷均为 4W ，但转变为 4W 的节点下两种状态下的气液分布大相径庭。将超薄环路热管分别进行 1W 、 2W 、 3W 、 4W 和 5W 恒功率启动，放置 48h 后再进行恒功率启动实验，比较前后两次实验结果，从而判断装置的稳定性。首次恒功率启动实验结果分别如图 6(a) - (e) 所示，由图 8(a) 和图 8(b) 所示，在热流密度为 $1\text{W}/\text{cm}^2$ 、 $2\text{W}/\text{cm}^2$ 的较低热流密度下自然对流就能将热源热量带走，此时不会产生蒸汽，热源温度也能保持稳定；对比图 8(c)、图 8(d) 和图 8(e)，超薄环路热管在 $3\sim 5\text{W}/\text{cm}^2$ 的热流密度下启动正常，通过蒸发产生蒸汽相变换热带走热源的热量，在 $5\text{W}/\text{cm}^2$ 的最高热流密度下，热源能保持在稳定温度不超过 85°C ，传热性能良好。

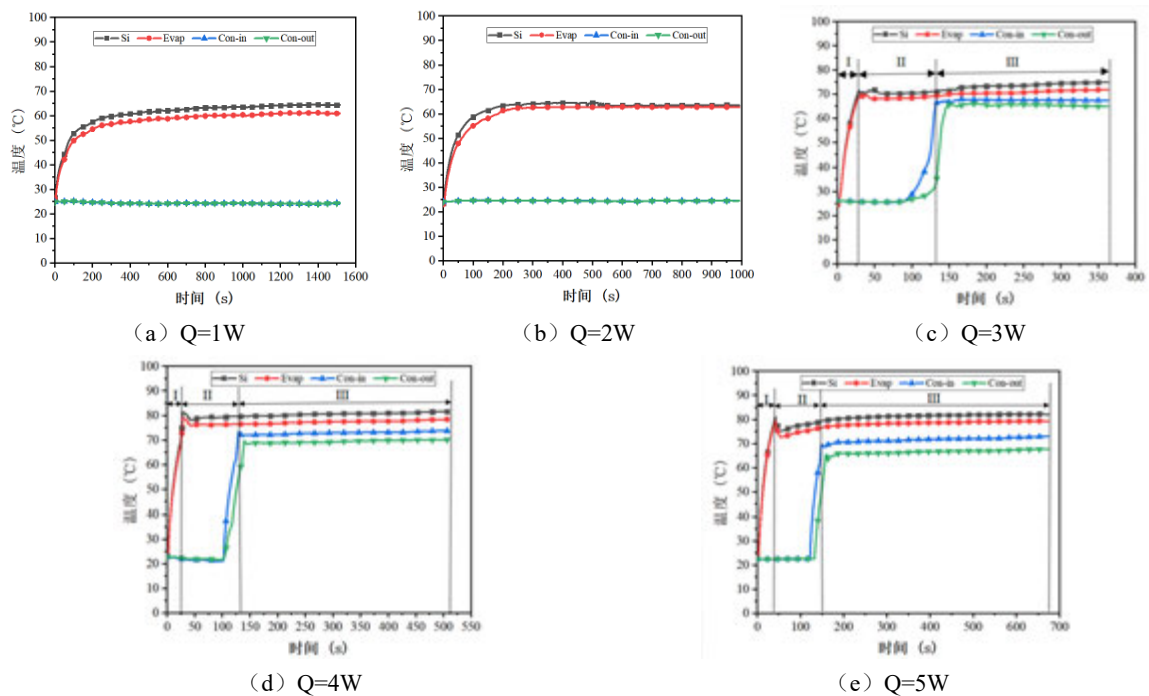


图 8 恒功率启动曲线图

放置 48h 后重复以上实验，恒功率启动实验结果分别如图 9（a）、图 9（b）、图 9（c）、图 9（d）和图 9（e）所示。

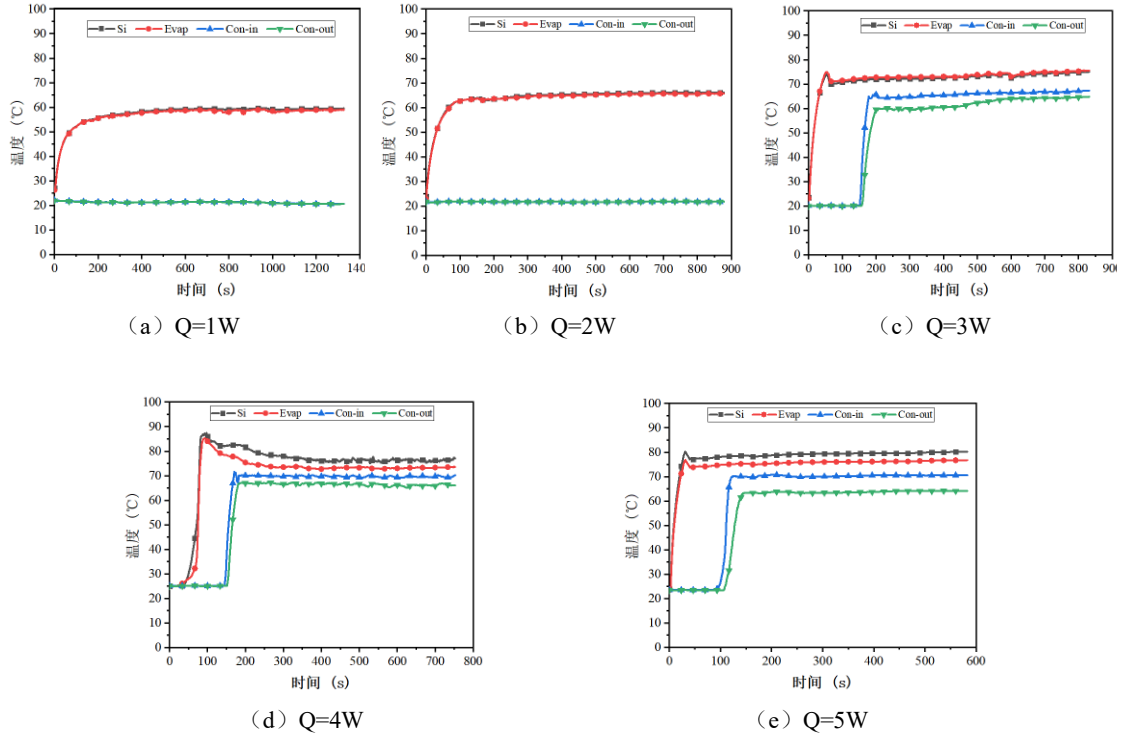


图 9 放置 48h 后恒功率启动曲线图

图 10 所示为 48h 前后蒸发器的热阻随热负荷的变化。从图中可以看出，热阻随热负荷的增大而减小，等效热导率随热负荷的增大而增大。当热负荷大于 3 W 时，热阻总体趋于稳定。一般而言，所有类型环路热管的总热阻都会随着热负荷或热流密度的增加而下降，但热负荷或热流密度达到较高值时，总热阻反而可能出现小幅的上升。这是由于在高热流密度下，蒸发器中的汽-液界面会转入毛细芯内部，毛细芯靠近热源的一侧会形成干涸层，且干涸层的厚度会随着热流密度的增加而增加。由于干涸层中蒸汽的导热率极低，阻碍了热量从热源向毛细芯蒸发界面的传递，导致总热阻出现一定程度的上升。初始热阻达到了 $1.58\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{W}$ ，初始等效热导率为 $16125\text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 。

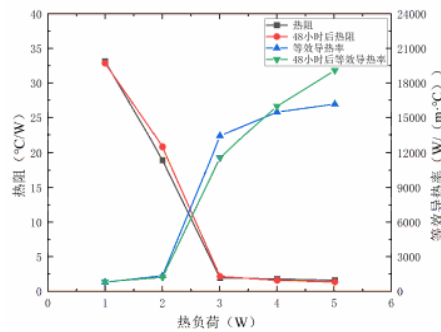


图 10 48h 前后蒸发器的热阻与等效热导率随热负荷变化图

表 3 给出了超薄环路热管的恒功率启动实验运行参数汇总,从表中可以看出,超薄环路热管首次的最大传热功率达到 5 W,热源温度为 83.4 °C,蒸发器温度为 79.5 °C。对于一个环路热管运行系统而言,热源温度直接反映了装置的散热性能,因此是最被关注的参数。与首次启动相比,48h 后装置同样在热负荷为 3W 时开始相变传热产生蒸汽,从而带走热源的热量,在 5 W/cm² 的热流密度下,热源温度为 79.4 °C,蒸发器温度为 76.2 °C。两个时间点表现出的相同的趋势,但由于实验条件例如室温不同的影响,48h 前后同样的热负荷实验条件下温度略有差异,总的来说,超薄环路热管实验装置能够正常启动循环,48h 后热源温度并没有明显升高,装置散热性能良好,48h 前后实验结果差距不大,稳定性良好。

表 3 48h 前后超薄环路热管典型运行参数

功率/W	热源温度/°C		蒸发端温度/°C		冷凝端温度/°C	
	初始	48h 后	初始	48h 后	初始	48h 后
1	60.9	55.9	57.8	55.5	24.7	22.7
2	63.2	63.8	62.6	63.6	24.7	21.9
3	66.2	71.2	65.9	70.8	60.2	64.2
4	80.3	77.3	77.3	74.1	70.7	67.7
5	83.4	79.4	79.5	76.2	71.6	69.5

4 结 论

本次工作设计了一种超薄环路热管,研究了不同充液率、不同旋转角下其换热特性,并探究了其在恒定功率下的稳定性,主要结论如下:

(1) 20%充液率过低,蒸汽温度很不稳定,且容易发生干烧现象,散热效果并不好。50%充液率过高,导致气线有液柱堵塞,且冷凝器出口处被工质浸没,蒸汽无法到达冷凝器处。30%充液率时启动更早,重量更小,为本结构的最佳充液率。

(2) 在 $\psi=0^\circ$ 和 $\psi=90^\circ$ 时,装置运行极为稳定,在 1~4 W/cm² 升降功率下,在热流密度到达 3 W/cm² 时开始产生蒸汽,在 4 W/cm² 的最高热流密度下最高温度都不超过 90 °C,在 $\psi=-90^\circ$ 时,装置运行不仅要克服阻力,还要克服重力的阻碍,导致装置在 4 W/cm² 的最高热流密度下温度出现波动。

(3) 在装置恒功率启动过程中,热阻随热负荷的增大而减小,等效热导率随热负荷的增大而增大。48h 后同样的热负荷条件下,实验装置能够正常启动循环,48h 后热源温度并没有明显升高,稳定性良好。

(4) 在冷凝器自然对流散热状态下,超薄柔性环路热管的最高散热热流密度达到了 5 W/cm²,散热热阻最低达到了 1.34 °C/W,等效导热系数最高达到了 19013 W/(m·K)。

参考文献

- [1] WANG X, LIU Y, TIAN T, et al. Directly air-cooled compact looped heat pipe module for high power servers with extremely low power usage effectiveness [J]. Applied Energy, 2022, 319: 119279.
- [2] MAYDANIK Y, CHERNYSHEVA M, VERSHININ S. High-Capacity Loop Heat Pipe with Flat Evaporator for Efficient Cooling Systems [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2020, 34: 1-11.
- [3] XUE Z, QU W, XIE M. High Performance Loop Heat Pipe With Flat Evaporator for Energy-Saving Cooling Systems of Supercomputers [J]. Journal of Heat Transfer-transactions of The Asme, 2020, 142.

- [4] WENG C, WANG Z, XIANG J, et al. Numerical and experimental investigations of the micro-channel flat loop heat pipe (MCFLHP) heat recovery system for data centre cooling and heat recovery [J]. *Journal of Building Engineering*, 2021, 35.
- [5] HUANG B-J, HSU P-C, TSAI R-J, et al. A thermoelectric generator using loop heat pipe and design match for maximum-power generation [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2015, 91: 1082-91.
- [6] YANG Z, ZHANG Y, BAI L, et al. Experimental study on the thermal performance of an ammonia loop heat pipe using a rectangular evaporator with longitudinal replenishment [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 207: 118199.
- [7] PHILLIPS A L, WERT K L. Loop Heat pipe Anti Icing System Development Program Summary [Z]. SAE International. 2000. <https://doi.org/10.4271/2000-01-2493>
- [8] ZHAO X, WANG Z, TANG Q. Theoretical investigation of the performance of a novel loop heat pipe solar water heating system for use in Beijing, China [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2010, 30(16): 2526-36.
- [9] CHIOU J P. The effect of nonuniform fluid flow distribution on the thermal performance of solar collector [J]. *Solar Energy*, 1982, 29(6): 487-502.
- [10] SONG W, XU Y, XUE L, et al. Visualization Experimental Study on Silicon-Based Ultra-Thin Loop Heat Pipe Using Deionized Water as Working Fluid [J]. *Micromachines (Basel)*, 2021, 12(9).
- [11] WATANABE N, MIZUTANI T, NAGANO H. High-performance energy-saving miniature loop heat pipe for cooling compact power semiconductors [J]. *Energy Conversion and Management*, 2021, 236.
- [12] SHIOGA T, MIZUNO Y, NAGANO H. Operating characteristics of a new ultra-thin loop heat pipe [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 151.
- [13] WANG S, HUO J, ZHANG X, et al. Experimental study on operating parameters of miniature loop heat pipe with flat evaporator [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2012, 40: 318-25.
- [14] MIZUTANI T, WATANABE N, ASO S, et al. Experimental and analytical investigation of a 0.3-mm-thick loop heat pipe for 10 W-class heat dissipation [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2022, 193: 122950.
- [15] PHAN N, NAGANO H. Novel hybrid structures to improve performance of miniature flat evaporator loop heat pipes for electronics cooling [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2022, 195.

不同结构换热器换热特性研究进展

刘建红^{1*}, 刘栋¹, 杨凯¹, 阎天海¹, 郑超凡¹, 曹欣¹, 巨海娇¹, 商福民¹

(1. 长春工程学院能源动力工程学院 吉林省 长春市 130012)

(Tel:18743099260, Email: liujianhong@ccit.edu.cn)

摘要：随着工业和市场需求，对热回收和节能的要求也越来越高，为满足工业和生活的需求，各种类型的换热器相继问世。本文通过阅读大量文献，总结了换热器的研究现状、类型结构及换热器的工程应用，对板式、管壳式、热管式换热器的研究发展和应用进行了重点阐述；并采用非稳态数值模拟方法，对套管式换热器的传热特性进行了模拟研究，通过分析不同时刻的流体温度，为换热器的进一步研究和推广应用提供了理论依据。

关键词：板式换热器；管壳式；热管式；数值模拟

0 前言

换热器是在工业发展过程中为了实现热量交换而设计和开发的一种器件，在诸多工业领域得到广泛应用，如化工、微电子、电力、空调制冷等。

十八世纪七十年代，瓦特在积累大量经验后成功实现了蒸汽机改造，最终设计了全球首台换热器，而这一成就距离当下已经接近 250 年^[1]。各种新材料、新工艺不断涌现且在持续进行迭代，也推动了换热器的开发进程，使得各种功能更完善更先进的换热器也在持续推陈出新，目前主流更倾向于高效节能型，如螺旋折流板换热器、焊接式板式换热器、热管换热器，此外各国也有其优势换热器产品^[2-5]。本文通过阅读大量文献，对不同结构换热器的结构类型和工程应用进行了综述，并对套管式换热器进行了数值模拟研究，得出其不同时刻换热温度变化，为换热器的进一步研究和推广应用提供了理论依据，最后展望了未来换热器的发展方向。

1 不同类型结构换热器

1.1 板式换热器研究

从当前市场来看，人字形波纹板式现在较受欢迎，如图 1 所示，Durmus 等^[6]开发出了波纹板和星形板，并与普通的板片进行对比，实验表明，波纹板式虽然有很高的传热速率，但是相对的其摩擦系数也很大。Doo 等^[7]开发一种新型航空发动机冷却器的交叉波纹表面，并利用三维模拟对曲面几何形状进行了分析，研究发现交叉波纹表面换热器的传热性能优于常规波纹表面。Vlasogiannis 等^[8]采用空气/水混合物作为冷流，研究发现在板式换热器中采用两相流动能得到良好的换热效果。赵镇南等^[9]研究发现波纹倾斜角能改变流动状态，从而影响板片通道的传热与阻力特性。

当今研究者们已经不满足于宏观结构的研究，开始立足于微通道换热器的研究。与

收稿日期：修订日期：

基金项目：吉林省发改委产业技术研究与开发项目“新型脉动热管换热器产业化关键技术研究”与开发(No. 2019C057-5)

Fund-supported Project: Industrial Technology Research and Development Project of Jilin Province (2019C057-5)

作者简介：刘建红 (1979-)，女，河北定州人，长春工程学院副教授。

传统换热器相比较,印刷电路板式换热器具有换热高效、结构紧凑等特点。Dong 等^[10]建立了印刷电路板式换热器三维分析模型,提出了一种新的流道结构,在相同的传热条件下,流道优化后的印刷电路板式换热器的压降能减少 20%。此外,郭浩等^[11]在板式换热器中加入翅片,研究发现与传统管式换热器相比,它具有传热系数高、单位体积换热面积大、结构紧凑、温度范围宽等优点。

自板式换热器问世以来,因其优越的换热性能,换热系数高、污垢系数小以及对数平均温差大等优点,日益得到重视,但板式换热器的缺点在于其周边密封的垫圈需要经常清洗更换并且无法在高温下工作,这也是目前板式换热器需要解决的关键问题。

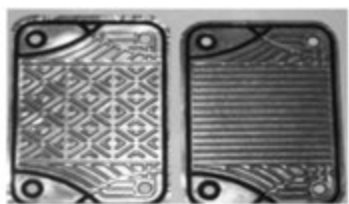


图 1 星形板和波纹板

Fig. 1. Star plate and corrugated plate

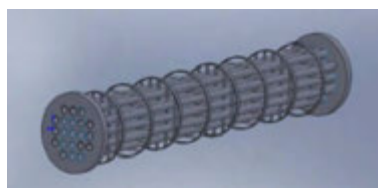


图 2 一种折流杆式换热器的壳体结构

Fig. 2. Shell structure of a baffle rod heat exchanger

1.2 管壳式换热器研究

管壳式换热器已问世超过百年,因此已经形成了一套规范而严密的设计标准和加工模式,从当前发展来看,针对管壳式换热器主要是对管程和壳程的结构进行发展和改进。管程结构的发展主要是改变传热面积的形状和管内插入物两种方法,前者通过加工在管壁面上形成有规律或者无规律的凸起物,凸起物既是无源扰动的促进体,又起断续阻断边界层发展的作用;后者则是在管内加入内插物来强化管内的单相流体传热性能,尤其是对强化气体、低雷诺数流体或高粘度流体的传热更为有效^[12]。

针对壳程结构的改进主要是优化管间支撑物。传统的管壳式换热器换热过程中的震荡易导致管束的损坏,而优化管束支撑结构不仅能够增加湍流强度,还可以支撑管束,减少系统震动,能显著提高换热性能,图 2 为折流杆换热器的壳体结构,这种折流杆结构则很好的解决了管束损坏的问题。

董其伍等^[13]建立一种周期性单元流道模型,用于研究折流杆换热器壳程结构优化,该模型能够对壳程流道内流体流动及传热装置等能够进行细微结构层面的观察和分析,同时得出折流栅间距的最佳取值范围。古新等^[14]也同样是围绕着折流杆换热器壳程结构展开分析,并构建了壳程周期性全截面模型,利用该模型能够对壳程近壁部位的流场和温度进行观察和分析,并在数值模拟中得到需要的数据值,为该换热器的关键部位传热效果优化提供了有效参考。

1.3 热管式换热器的研究

由于热管具有高热传导性,带有热管的热交换器在处理高热通量方面相比传统的热交换器体积要小得多^[15]。热管的种类有很多,如重力热管、普通吸液芯热管、脉动热管等等。

如图 3 所示，重力热管其工作原理是在蒸发段液态工质吸热汽化后，蒸汽上升遇到冷壁面，放出汽化潜热后变成液体，液体再沿内壁依靠重力回流到蒸发段，如此周而复始以实现热量的传递。曹小林等^[16]针对重力热管换热器建立相应的稳态传热数学模型，结果表明：热管正常工作时具有均温性，换热器壁面平均温度的计算值和实验值非常接近；充液率为 20% 时运行热阻最小。

脉动热管作为目前受关注度较高的新型热管技术，将脉动热管应用于换热器中，相比于其他热管，大大提高了传热性能。其构造形态的特征是毛细管呈蛇形弯折而成，优点在于构造简单，且内部无需吸液芯，与重力式热管相比它不受冷热段位置的限制，脉动热管中的流体流动驱动力主要有三个来源，即重力、脉动力、表面张力^{[17, [18]}。商福民等^[19]设计了一种气液式脉动热管换热器，其换热效果要比单个热管换热器换热效果提高 5%~10%。

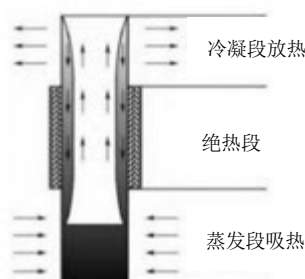


图 3 重力热管工作原理图

Fig. 3. Working principle of gravity heat pipe

2 套管式换热器数值模拟研究

2.1 几何模型与边界条件

本文建立套管式换热器三维几何模型，如图 4 所示，流动通道长为 1m，高为 0.1m，宽为 0.1m，其材质为铜，内置换热圆管，材质为铜，壁厚都为 0.003m，工质均为空气；圆管外进口温度设为 353.15K，速度入口边界条件为 5m/s；圆管内进口温度设为 293.15K，速度入口边界条件为 3m/s；冷热流体在换热器中逆向流动进行换热。

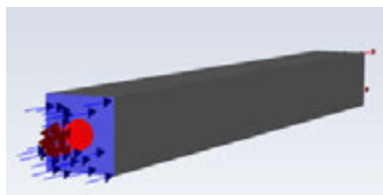


图 4 套管式换热器模型

Fig. 4. Model of tube heat exchanger

2.2 湍流模型

此模型需判断模型中冷热流体流体为层流还是湍流，首先判断圆管内的冷流体的流动形式，根据雷诺数公式（1）和（2）：

$$Re = \rho v d / \mu \quad (1)$$

$$2300 \leq Re \leq 10000 \quad (2)$$

式中，

Re —雷诺数；

ρ —流体密度， kg/m^3 ；

v —流体速度， m/s ；

d —当量直径， m ；

μ —运动粘度， $\text{Pa}\cdot\text{s}$ 。

计算得出冷流体的雷诺数为 9600，热流体的雷诺数为 5950，可知冷、热流体的流动形式为湍流，故数值模拟采用标准 k-e 湍流模型。

2.3 模拟结果分析

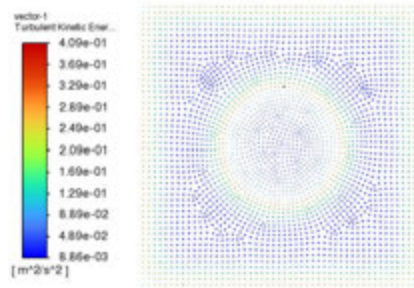


图 5 湍流动能矢量图

Fig. 5. Vector diagram of turbulent kinetic energy

图 5 为 $x=0.5\text{m}$ 处的中心截面的湍流强度矢量图，如图所示。雷诺数的大小反映了流体流动的湍动程度，一般来说，其值越大，流体的湍动程度愈剧烈，内摩擦力也越大，由公式（1）和公式（2）得出的冷热流体模型的雷诺数值可知，圆管内的冷流体的整体湍流强度比热流体湍流强度更剧烈。

根据图 5 的湍动能矢量图可知，圆管内冷流体越靠近圆管中心，其流速非常大，流动不稳定，因此流体湍流扰动更明显，湍动能大，能量波动剧烈，湍流耗散率也大，而越靠近圆管内壁面，湍流强度逐渐减弱，这是因为越靠近壁面，粘性滞力作用越强，使得流体的流速减缓，阻碍了流体流动，使得贴近壁面的流体流速几乎为零，湍流扰动性弱，湍动能小，相对圆管中心，贴近圆管内壁面流体流动比较稳定，流体流动方向相对整齐规律；长方体模型内的热流体也是如此，贴近圆管外壁面和长方体内壁面处流体流体因粘性滞力的作用，从中心往壁面流体流速成阶梯式下降，直至壁面处流速为零，而两壁面之间的流体流速大，湍流强度大，流动稳定性弱，湍流动能大，能量耗散率大，动能波动的更明显，流体流动较杂乱无规律，换热性能强。

图 6 为不同时刻套管式换热器内温度比较，从图中可以得知 120s 之前换热器内的温度一直变化，而且温度变化幅度非常明显，在 180s 后，温度已经趋于稳定，说明此时刻换热器内已经达到稳态换热。由图 7 中可知，在 164s 与 165s 时直线不同位置上温度曲线依然在波动，但波动幅度很小，在 165s 后，166s、167s、168s 三个时间片段直线上对

应位置的温度已经不再发生变化，由此可知此模型在 166s 由非稳态达到稳定状态，稳定状态后在靠近圆管内壁面的冷流体温度达到了 313K，热流体靠近圆管外壁面的温度下降至 345K，由此可见通过数值模拟对此模型进行仿真模拟最终实现了冷热流体的换热预期效果。

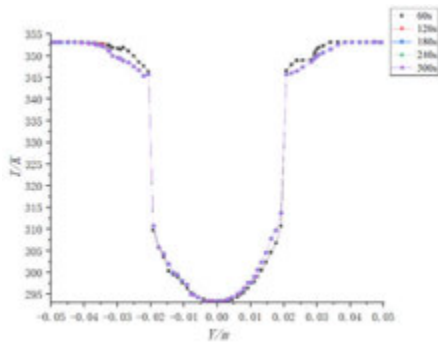


图 6 不同时刻温度变化曲线

Fig. 6. Temperature change curves of different time segments

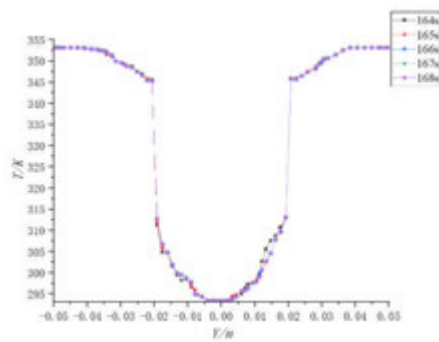


图 7 第 164s 到 168s 时间变化曲线

Fig. 7. Time change curve from 164s to 168s

3 不同结构换热器的工程应用

3.1 板式换热器的工程应用

杨德芯⁰在制酸系统尾气脱硫工段使用离子液循环吸收烟气中残余的 SO_2 时，为了减少能源消耗并且有效维持系统的热平衡，采用了 3 台板式换热器作为维持系统热平衡的关键设备。郭建等⁰自行研究开发了一种板式换热器来回收空调系统的热 / 冷量，在改善室内空气品质的同时回收室内的能量，既改善了室内的空气，又节约了能源。

此外，板式换热器不仅陆地上被应用，近年来也被应用于海上，成为了一种应用较为普遍的海上天然气处理设备，在持续进行印刷电路板式换热器（PCHE）技术攻关后，最近几年我国终于开发出了陵水半潜式平台，如图 8 所示，其优点在于节省了平台空间，同时能够较大幅控制项目成本，且已经通过验收，该设备也是国内首创，让 PCHE 国产化进程曙光初现。



图 8 印刷电路板式换热器在海洋平台上的应用

Fig. 8. Application of printed circuit plate heat exchanger in offshore platform



图 9 扭曲双壳式换热器壳体结构

Fig. 9. Shell structure of twisted double shell heat exchanger

3.2 管壳式换热器的工程应用

由华南理工及广东石化专用设备公司合作开发了一款在功能和设计方面都有新亮点的管壳式换热器⁰，这种新型换热器的优点在于其出色的传热性能，且流体阻力低，首次实际应用是在广东乐昌县磷肥厂的硫酸产能系统。

换热器在炼化行业是重要的设备，比较常用的是一种扭曲管管壳式换热器（见图9），该类型换热器采用螺旋扭曲管为传热元件，管程流体产生以旋转扰动为主要特征的流动，壳程靠排列紧凑的扭曲管外缘点的接触起到相互支撑作用，并在换热管间形成连续的螺旋流动，壳程无折流板，流体无流动死区。该技术目前国内中石化等企业有一定范围应用，并取得了较好的效果⁰。

3.3 热管式换热器的工程应用

张淇淇等^[24]将热管换热器应用于洁净手术室空调系统中，采用热管换热器对混合后的送风进行预冷，同时对经过表冷器后的低温送风进行预热，以降低再热能耗。云南省小龙潭电厂1号炉应用了热管预热器，将热管换热器用于工业排气的余热回收中，使之加热空气作为助燃空气使用或作为烘房的热源；也可以加热水，用作锅炉给水，或使水产生蒸汽供其他方面使用；也可以加热排气本身，避免腐蚀排烟设备^[25]。高春梅等^[26]将热管换热器余热回收技术应用于光学薄膜生产中，将生产线机体回风中的余热回收，减少蒸汽二次加热带来的能源浪费，达到了节能减排目的。

4 展望

随着各类应用市场不断增多，同时也推动着换热器技术频繁迭代，结构和性能日趋多样化，同时全球都在探索低碳节能型发展路线，换热器在这方面具有重要优势，其节能环保特性备受关注，我国换热器市场庞大，虽然起步晚，但是在换热器技术领域发展也很迅速，期望未来在换热器能在不同领域都能够有所突破。

参考文献

- [1] 阎皓峰, 甘永平. 新型换热器与传热强化[M]. 北京: 宇航出版社, 1991: 11-15.
YAN Hao-Feng, GAN Yong-Ping. New heat exchanger and heat transfer enhancement [M]. Beijing: Astronautical Publishing House, 1991: 11-15.
- [2] Gang Y, He Y L, Li R, et al. Effects of baffle inclination angle on flow and heat transfer of a heat exchanger with helical baffle[J]. Chemical Engineering Science, 2008(47): 2336-2345.
- [3] Wadek R V V. Compact heat exchangers[J]. Chemical Engineering Progress, 2000, 96(12): 392-401.
- [4] 何强, 杨启明. 强化传热节能技术的研究[J]. 石油和化工节能, 2007(06): 11-14.
HE Qiang, YANG Qi-Ming. Research on enhanced Heat transfer and energy saving technology [J]. Energy Conservation in Petroleum and Chemical Industry, 2007(06): 11-14.
- [5] Mohsen Sheikholeslami, Mofid Gorji-Bandpy, Davood Domiri Ganji. Review of heat transfer enhancement methods: focus on passive methods using swirl flow devices[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2015, 49: 444-469.

- [6] DURMUS A, BENLI H, KURTBAS I, et al. Investigation of heat transfer and pressure drop in plate heat exchangers having different surface profiles[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2009, 52(05): 1451-1457.
- [7] DOO J H, HA M Y, MIN J K, et al. An investigation of cross-corrugated heat exchanger primary surfaces for advanced intercooled-cycle aero engines: part-II: design optimization of primary surface[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013, 61: 138-148.
- [8] Vlasogiannis P, Karagiannis G, Argyropoulos P, et al. Air-water Two-phase Flow and Heat Transfer in a Plate Heat Exchanger[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2002, 28(05): 757-772.
- [9] 赵镇南. 板式换热器人字波纹倾角对传热及阻力性能影响[J]. 石油化工设备, 2001(S1): 1-3.
ZHAO Zhen-Nan. Effects of the corrugated inclination angle on heat transfer and resistance performances of plate heat exchangers. Petrochemical Equipment, 2001(S1): 1-3.
- [10] Dong E K, Kim M H, Cha J E, et al. Numerical investigation on thermal-hydraulic performance of new printed circuit heat exchanger model[J]. Nuclear Engineering & Design, 2008, 238(12): 3269-3276.
- [11] 郭浩, 杨洪海, 吴亚红. 板翅式换热器传热性能与流动阻力的研究进展[J]. 制冷与空调, 2016, 16(05): 11-15.
GUO Hao, YANG Hong-Mei, WU Ya-Hong. Research progress of heat transfer performance and flow resistance of plate-fin heat exchanger[J]. Refrigeration and Air Conditioning, 2016, 16(05): 11-15.
- [12] 谢学坚. 管壳式换热器的研究发展[J]. 科技视界, 2014(01): 45-52.
XIE Xue-Jian. Research and development of shell and tube heat exchanger[J]. Science and Technology Vision, 2014(01): 45-52.
- [13] 董其伍, 刘敏珊, 赵晓冬. 杆栅支撑纵流壳程换热器壳侧流体流动与传热的数值模拟[J]. 化工学报, 2006, 57(05): 1073-1078.
DONG Qi-Wu, LIU Min-Shan, ZHAO Xiao-Dong. Numerical simulation and research of fluid flow and heat transfer in the shellside of rod baffle heat exchanger with longitudinal flow of shellside fluid[J]. Journal of Chemical Engineering, 2006, 57(05): 1073-1078.
- [14] 古新, 董其伍, 王珂. 纵流壳程换热器壳程近壁区流场和温度场数值研究[J]. 工程热物理学报, 2009, 30(04): 683-686.
GU Xin, DONG Qi-Wu, WANG Ke. Numerical study of flow field and temperature field in shell side near wall area of longitudinal flow shell pass heat exchanger[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2009, 30(04): 683-686.
- [15] 张晨阳, 张晓明. 热管换热器的研究现状与应用[J]. 建筑与预算, 2020(11): 38-40.
ZHANG Chen-Yang, ZHANG Xiao-Ming. Research status and application of heat pipe heat exchanger[J]. Building and Budget, 2020(11): 38-40.
- [16] 曹小林, 曹双俊, 马卫武, 王芳芳, 曾伟. 新型重力热管换热器传热特性的数值模拟[J]. 中南大学学报, 2013, 44(04): 88-95.
CAO Xiao-Lin, CAO Shuang-Jun, MA Wei-Wu. Numerical simulation on steady-state heat transfer characteristic of a novel gravity-assisted heat pipe heat exchanger [J]. Journal of Central South University, 2013, 44(04): 88-95.

- [17] 冯锦新. 脉动热管技术研究综述[J]. 制冷, 2018, 37(01): 135-142.
FENG Jin-Xin. Summarization of research on pulse heat pipe[J]. Journal of Refrigeration, 2018, 37(01): 135-142.
- [18] Kwon G H, S J Kim. Operational characteristics of pulsating heat pipes with a dual-diameter tube[J]. International Journal of Heat& Mass Transfer, 2014, 75(7): 184-195.
- [19] 商福民, 刘建红, 董宜放, 曹魏佳. 一种气液脉动热管换热器[P]. 中国专利: CN205690946U, 2016-11-16.
SHANG Fu-Min, LIU Jian-Hong, DONG Yi-Fang, CAO Wei-Jia. A novel gas-liquid pulsating heat pipe Heat exchanger[P]. China Patent: CN205690946U, 2016-11-16.
- [20] 杨德鑫. 板式换热器在离子液循环吸收技术中的应用[J]. 硫酸工业, 2017(02): 77-84.
YANG De-Xin. Application of plate heat exchanger in ionic liquid circulation absorption technology[J]. Sulfuric Acid Industry, 2017(02): 77-84.
- [21] 郭建, 唐志伟, 马重芳. 板式换热器在空调余热回收系统中的传热研究[J]. 节能, 2004(11): 17-18.
Guo Jian, Tang Zhiwei, Ma Chongfang. Research on heat transfer of plate heat exchanger in air conditioning waste heat recovery system[J]. Energy Conservation, 2004(11): 17-18.
- [22] 邓先和. 空心环管壳式换热器的工业应用[J]. 石油炼制与化工, 1992(08): 33-40.
DENG Xian-He. Industrial application of hollow annular shell heat exchanger[J]. Petroleum Refining and Chemical Industry, 1992(08): 33-40.
- [23] 宋丹, 蹇江海, 张迎恺. 扭曲管双壳程换热器的研究及性能分析[J]. 石油化工设备技术, 2012, 33(05): 9-11.
SONG Dan, JIAN Jiang-Hai, Zhang Ying-Kai. Research and performance analysis of twisted tube double shell pass heat exchanger[J]. Petrochemical Equipment Technology, 2012, 33(05): 9-11.
- [24] 张淇淇, 陆琼文, 马伟骏. 热管换热器在洁净手术室空调系统中的应用[J]. 暖通空调, 2018, 48(01): 109-112.
ZHANG Qi-qi, LU Qiong-Wen, Ma Wei-Jun. Heat pipe exchanger in clean operating room application of air conditioning system[J]. Journal of Heating Ventilation and Air Conditioning, 2018, 48(01): 109-112.
- [25] 赵宝珠. 热管空气预热器在电站锅炉中的应用[J]. 节能技术, 1995(06): 18-20.
ZHAO Bao-Zhu. Application of heat pipe air preheater in power plant boiler[J]. Energy Saving Technology, 1995(06): 18-20.
- [26] 高春梅, 周阳. 热管换热器装置的研究与应用[J]. 信息记录材料, 2021, 22(07): 7-9.
GAO Chun-Mei, ZHAO Yang. Application of micro gravure coating technology[J]. Journal of Information Recording Materials, 2021, 22(07): 7-9.

一种直接评价换热器性能对布雷顿循环效率影响的方法

李小龙, 唐桂华*, 杨丹蕾, 范元鸿

(热流科学与工程教育部重点实验室, 西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049)

(Tel: 029-82665319, Email: ghtang@mail.xjtu.edu.cn)

摘要: 布雷顿循环中换热器性能对循环效率具有重要影响, 然而, 传统循环与换热器的耦合计算虽然精度较高, 但计算复杂, 不便于工程应用。本文提出了一种解耦方法——性能恢复系数 (PRC), 用于快速直接评价换热器部件性能对循环效率的影响, 避免换热器与循环的耦合分析。研究表明, PRC 评价方法具有通用性, 适用于多种构型、参数以及工质的布雷顿循环。基于 PRC, 对直接与间接吸热系统的加热器进行优化, 可使循环效率分别提升 1.4 和 0.4 个百分点。

关键词: 换热器; 布雷顿循环; 循环效率; 性能恢复系数; 评价方法

0 前言

为实现“双碳”目标, 发展高效率且适用于多种可再生能源的发电系统十分必要。以超临界二氧化碳 (S-CO₂)、氢气以及空气等作为工质的布雷顿循环被证明具有较高的效率与紧凑度, 已广泛应用于太阳能、核能、燃煤发电等多种热源的发电系统^[1]。

换热器是布雷顿循环的重要部件, 其性能对循环效率具有显著影响^[2], 通过提升换热器性能来提高循环效率十分必要。布雷顿循环中换热器主要分为三类: 加热器、回热器与冷却器。在传统系统层面的分析中, 往往通过能效模型或 UA 模型将换热器简化为 0 维, 同时换热器的压降设置为常数^[3]。然而, 0 维简化无法反映换热器流动传热性能对循环效率的影响^[4], 不足以支撑工程设计。

为评价换热器性能对循环效率的影响, 需要进行换热器与循环的耦合分析, 其中, 布雷顿循环为换热器提供边界条件, 而换热器设计则提供换热器的流动传热性能参数, 经过迭代, 可获得实际换热器性能参数下的循环效率。然而, 耦合分析具有明显的缺点: 首先, 换热器性能通常需要采用一维分段设计或三维数值模拟, 且耦合分析需要数次迭代, 计算量较大; 其次, 耦合分析主要依赖于一个特定的循环构型, 很难直接拓展应用于其他复杂构型; 第三, 耦合分析不能定量描述换热器性能对循环效率的内在影响, 从而很难指导换热器的优化, 因此, 尽管文献中对换热器提出了很多优化方案^[5], 但很少关注这些优化方案能否提升循环效率。

为避免上述缺点, 需要对循环与换热器进行解耦分析, 即评价换热器部件层面的性能对循环效率的影响, 从而获得换热器性能的评价方法。此时, 该问题转化为, 如何通

过提升换热器的性能来提高循环效率？换热器性能的提升一般有两种方法：强化传热与流动减阻。强化传热可以增加换热器能效，从而提升循环效率；流动减阻则可以降低换热器压降，降低压缩机耗功或增加透平输出功，从而有利于循环效率提升。考虑到大部分强化传热手段往往伴随着阻力的提升，因此，该解耦方法应基于换热器传热与阻力的综合性能评价。

文献中已有多种换热器的综合性能评价方法，被广泛应用于评估等流量、等压降、等泵功约束下强化传热手段是否有利于节能^[6-8]，然而，Li 等^[9]研究表明，现有的评价方法无法评价换热器性能对循环效率的影响，为了从循环效率角度评价布雷顿循环中回热器性能，提出了性能恢复系数（PRC），回热器的 PRC 越高，则循环效率越高。Li 等^[9]提出的 PRC 是对解耦方法的一个初次尝试，但其应用受限于两侧均为工质的回热器，而对于单侧工质的换热器，如布雷顿循环中的加热器，PRC 的应用还需要进一步发展。

本文旨在探索布雷顿循环中换热器的解耦方法，以直接评价换热器性能对循环效率的影响，并进一步指导换热器的选型与优化。因此，本文首先提出换热器性能评价方法的通用表达式，结合对换热器的流动传热性能参数的讨论，建立基于换热器的性能评价循环效率的性能恢复系数（PRC），并对不同构型、参数和工质的布雷顿循环中不同类型热交换器进行通用性验证，最后，提出直接加热和间接加热系统中加热器的优化构型与布置。

1 评价换热器的解耦方法

1.1 换热器综合性能评价方法的通用表达式

考虑到换热器的传热与阻力性能对循环效率均有影响，因此解耦方法应是一个反映换热器传热与阻力综合性能的参数，设该性能参数 ξ 的定义式为

$$\xi = XY^n \quad (1)$$

式中， X 、 Y 分别为换热器的传热与阻力性能参数； n 为阻力性能的权重系数。

显然，在布雷顿循环回热器的评价中，传热与阻力性能参数分别为回热器的能效 ε ($X=\varepsilon$) 与总体总压恢复系数 σ_a ($Y=\sigma_a$)，且阻力性能的权重系数 $n=1$ ，表示 ε 与 σ_a 对循环效率的贡献相近^[9]。而对于文献中广泛应用的 PEC 因子，两个性能参数分别为 (Nu/Nu_0) 与 (f/f_0) ，其在等流量、等压降与等泵功约束下的权重系数 n 分别为 -1 、 $-1/2$ 与 $-1/3$ 。

因此，式（1）可看作换热器综合性能评价方法的通用表达式，通过该表达式，可以将换热器的性能评价转化为寻找合适的流动与阻力性能参数 X 、 Y ，以及权重系数 n 。该通用表达式为换热器在各种工程背景下，特别是复杂热力循环中的评价提供了新思路。

1.2 布雷顿循环

为建立布雷顿循环中换热器的评价方法，即寻找合适的 X 、 Y 与 n ，本文采用一个较为通用的布雷顿循环以讨论换热器传热与阻力性能对循环效率的影响。回热器的评价方法已在文献^[9]中详细讨论，本文主要关注加热器的评价方法。需要注意的是，布雷顿循环与热源的耦合可分为直接吸热式与间接吸热式两种。对于直接吸热式，考虑到加热器的热安全性，流体的最高温度（透平入口温度）一般设为常数；而对于间接吸热式，则通过引入一个中间传热流体（heat transfer fluid, HTF），如液态金属或熔融盐，来吸收热源的热量，然后通过中间换热器将热量传递给工质，此时流体最高温度则与 HTF 的最高

温度 T_h 及中间换热器的性能密切相关。从透平入口温度的角度来看, 直接吸热式系统可看作间接吸热式系统的一个特殊工况, 因此, 本文将以间接吸热式系统来讨论加热器性能对循环效率的影响。

以典型的再压缩配合一次再热的布雷顿循环(下称 RC+SRH 循环)为例, 其布置见图 1, 系统包括两个压缩机(C1、C2)、两个透平(HPT、LPT)、两个回热器(HTR、LTR)、两个加热器(主加热器 MH 与再热器 RH)和一个冷却器。循环的主要假设及计算过程见文献^[9], 此处不再赘述。考虑到加热器性能主要影响透平入口温度及压降, 本文将通过改变透平入口温度和压降分析加热器传热与阻力性能的影响。

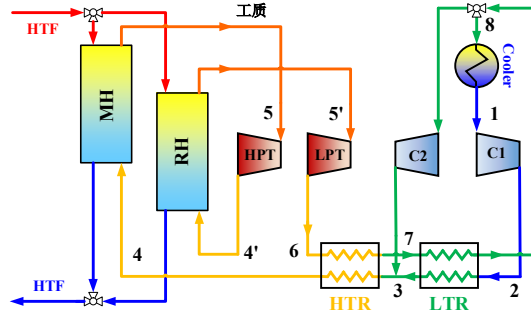


图 1 典型间接吸热式 RC+SRH 循环布置

1.3 传热性能参数

由于温熵 ($T-s$) 曲线的面积表示循环净功的大小, 因此可以通过 $T-s$ 图方便地分析透平入口温度的影响, 以 $S\text{-CO}_2$ 布雷顿循环为例, 图 2a 展示了理想工况下的 $T-s$ 图, 即透平入口温度与 T_h 相等且压降为 0, 此时 MH 与 RH 的热负荷可分别记为 $Q_{MH,ideal}$ 与 $Q_{RH,ideal}$ 。考虑到加热器性能变化对其他部件影响较小, 图 2b-d 展示了加热器与透平附近的局部放大图。可以看出, 当 HPT 温度降低时 ($T_5 = T_h - 20\text{ }^\circ\text{C}$), 循环净功 W_{net} 将减小 ΔW_1 , 如图 2b 的阴影部分所示; 同样地, 当 LPT 温度降低时, 循环净功 W_{net} 将减小 ΔW_2 , 见图 2c。而对于两个透平入口温度同时降低的情况 (图 2d), 其做功变化量即为 $\Delta W_{total} = \Delta W_1 + \Delta W_2$ 。根据循环效率的计算公式, 此时的循环效率 η_{cycle} 可由下式计算:

$$\eta_{cycle} = \frac{W_{net}}{\sum Q_h} = \frac{W_{net,ideal} - \sum \Delta W}{\sum Q_{h,ideal} - \sum \Delta W} = \frac{\frac{W_{net,ideal}}{\sum Q_{h,ideal}} - \frac{\sum \Delta W}{\sum Q_{h,ideal}}}{1 - \frac{\sum \Delta W}{\sum Q_{h,ideal}}} = \frac{\eta_{ideal} - \frac{\sum \Delta W}{\sum Q_{h,ideal}}}{1 - \frac{\sum \Delta W}{\sum Q_{h,ideal}}} \quad (2)$$

式中, η_{ideal} 为理想工况下的循环效率, $\sum Q_{h,ideal} = Q_{MH,ideal} + Q_{RH,ideal}$ 为理想工况下的加热器总热负荷。显然, 对于特定的循环构型及参数, η_{ideal} 与 $\sum Q_{h,ideal}$ 均为常数, 此时, 实际循环效率 η_{cycle} 为 $\sum \Delta W$ 的单值函数, $\sum \Delta W$ 越大循环效率越低。

然而, 换热器设计中 $\sum \Delta W$ 很难计算, 需要寻找一个便于计算的变量。由图 2d 可知, ΔW_1 与 ΔW_2 可以分别近似看作两个平行四边形的面积。根据平行四边形面积计算公式, ΔW_1 与 ΔW_2 分别正比于 ΔQ_{MH} 与 ΔQ_{RH} , ΔQ_{MH} 与 ΔQ_{RH} 分别表示 MH 与 RH 中理想工况与实际工况热负荷的差值, 可由下式计算:

$$\begin{cases} \Delta Q_{MH} = \dot{m} [H(T_h, P_5) - H(T_s, P_5)] \\ \Delta Q_{RH} = \dot{m} [H(T_h, P_{s'}) - H(T_s, P_{s'})] \end{cases} \quad (3)$$

式中， $\dot{m}$ 为质量流量， H 为工质的焓值。

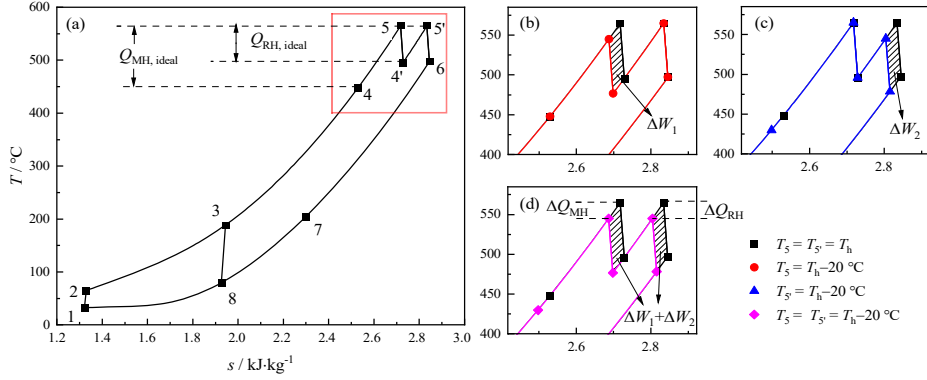


图 2 透平入口温度的影响：(a) 理想工况；(b-d) 局部放大 T - s 图

此时， $\Sigma \Delta W$ 可由 $\Sigma \Delta Q = \Delta Q_{MH} + \Delta Q_{RH}$ 代替。图 3a 展示了不同透平入口温度变化工况下，循环效率随 $\Sigma \Delta Q$ 的变化，可以看出，不同工况的数据高度重叠，说明 $\Sigma \Delta Q$ 可以表示加热器的传热性能参数。为增加普适性，采用 $\Sigma Q_{h,ideal}$ 对其进行无量纲化处理，提出一个新的无量纲数——能量恢复系数 χ ，其定义式为：

$$\chi = 1 - \frac{\Sigma \Delta Q}{\Sigma Q_{h,ideal}} \quad (4)$$

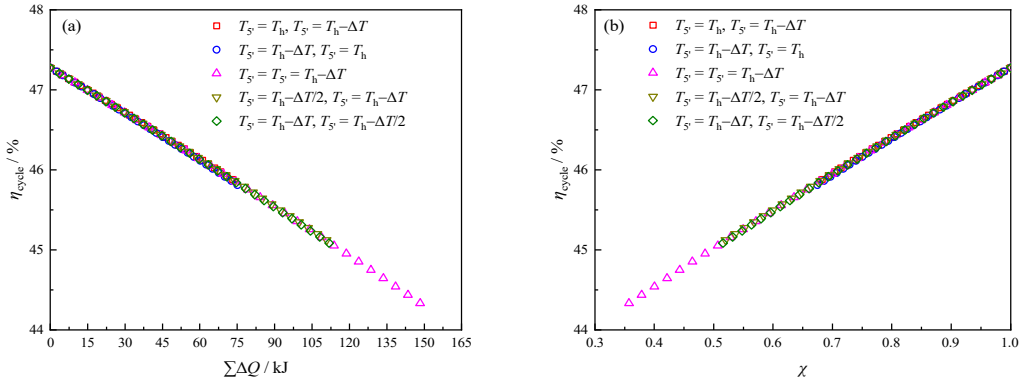


图 3 循环效率随 (a) $\Sigma \Delta Q$ 与 (b) 能量恢复系数的变化

能量恢复系数表征了加热器传热性能在实际工况下与理想工况下的比值，理想工况下 $\chi = 1$ 。由图 3b 可以看出，循环效率随能量恢复系数近似线性增加，且不同工况数据高度重叠，说明能量恢复系数可以作为表征加热器的传热性能参数。

1.4 阻力性能参数

循环效率随压降的变化如图 4a 所示，其中， ΔP_{MH} 与 ΔP_{RH} 分别为 MH 与 RH 的压降，可以看出，对于相同的 ΔP ， $\Delta P_{RH} = \Delta P$ 工况的循环效率低于 $\Delta P_{MH} = \Delta P$ 工况，说明 RH 的压降对循环效率影响更大，这主要是由于 RH 的工作压力低导致，该结果说明，

压降的绝对值不是循环效率的直接影响因素，对于阻力性能的评价必须同时考虑工作压力。因此，引入总压恢复系数 σ ，定义式为：

$$\sigma = \frac{P_{\text{out}}}{P_{\text{in}}} = 1 - \frac{\Delta P}{P_{\text{in}}} \quad (5)$$

式中， P_{in} 、 P_{out} 分别为进出口的压力； ΔP 为换热器压降。

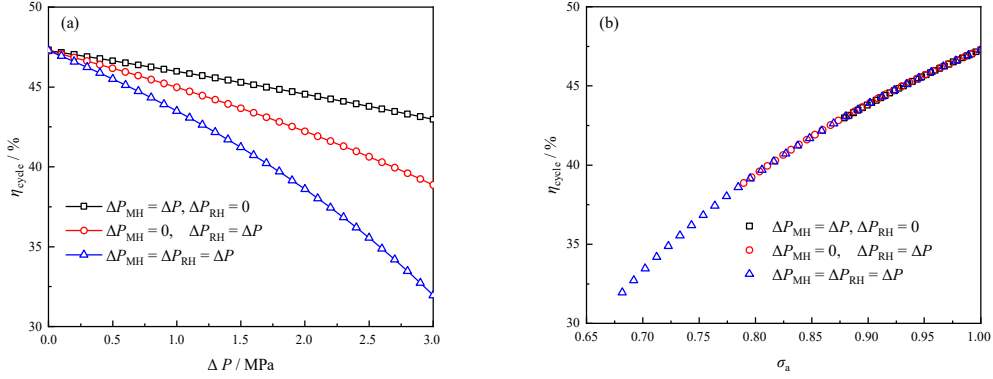


图4 循环效率随 (a) 压降 ΔP 与 (b) 总体总压恢复系数 σ_a 的变化

需要注意的是，当 $\Delta P_{\text{MH}} = \Delta P_{\text{RH}} = \Delta P$ 时，循环效率降低值大于另外两种工况之和，如图 4a 所示，该现象表明，MH 与 RH 的压降存在耦合作用。为同时考虑 MH 与 RH 阻力性能的影响，引入了总体总压恢复系数，它是各加热器工质侧总压恢复系数的乘积，定义式为

$$\sigma_a = \sigma_{\text{MH}} \sigma_{\text{RH}} = \prod \sigma_{\text{wf}} \quad (6)$$

式中， σ_{wf} 泛指工质侧的总压恢复系数。图 4b 展示了循环效率随总体总压恢复系数 σ_a 的变化，可以看出，不同工况的数据高度重叠，说明 σ_a 可以作为表征加热器的阻力性能参数。

1.5 权重系数

同样地，以 S-CO₂ 布雷顿循环为例，不同再热级数下权重系数 n 随压缩机出口压力 P_2 的变化如图 5a 所示，其中 RC 代表无再热循环，RC+DRH 代表二次再热循环， n 的值通过数据分析获得。可以看出，随着 P_2 增大， n 逐渐降低，说明低压工况下阻力性能对循环效率的影响更大。同时，随着再热级数增加，相同 P_2 下 n 也会升高，这主要是由于再热器的压力较低导致的，可以得出， n 受所有加热器中压力的影响。此时，需要一个特征压力来表征不同压力工况对 n 的影响。值得注意的是，由于 RC 循环中只有一个加热器，此时加热器压力即为特征压力，因此，RC+SRH 与 RC+DRH 循环中 n 随特征压力的变化应与 RC 循环具有相同的规律，即 RC+SRH 与 RC+DRH 的数据点回归到图 5a 中的虚线上。经过详细的数据分析，发现加热器中的算术平均压力 P_m 可以实现该回归。为了使该特征压力适用于多种压缩机入口压力工况，本文提出了平均压比 r_m ，定义式为：

$$r_m = P_m / P_1 \quad (7)$$

式中， P_1 为压缩机入口压力。图 5b 展示了 n 随 r_m 的变化，可以看出，不同再热级数下， n 随 r_m 的变化规律一致，且吻合较好，此时可通过函数拟合获得 n 的计算公式为：

$$n = 100r_m^{-2.4} \quad (8)$$

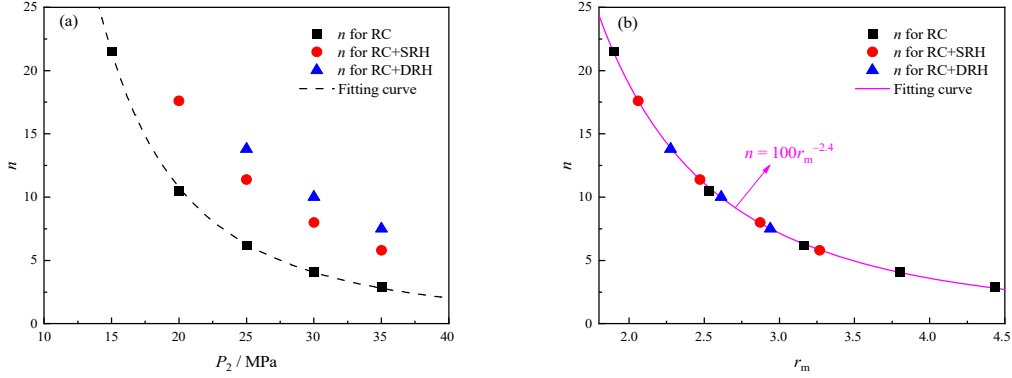


图5 权重系数 n 随 (a) 压缩机出口压力 P_2 与 (b) 平均压比 r_m 的变化

1.6 性能恢复系数

经上述分析可得，加热器的两个性能参数 X 与 Y 分别为能量恢复系数 χ 与总体总压恢复系数 σ_a ， χ 与 σ_a 越大，循环效率越高。结合式(1)，可获得性能恢复系数 (performance recovery coefficient, PRC) 的表达式：

$$\text{PRC} = \chi \sigma_a^n = \left(1 - \frac{\sum \Delta Q}{\sum Q_{h,ideal}} \right) (\prod \sigma_{wf})^{100r_m^{-2.4}} \quad (9)$$

显然，PRC 取值范围为 0-1，表示换热器实际性能与理想工况下性能的比值。上式中所有变量均可由换热器的流动传热参数计算获得，因此可以方便地由换热器部件层面的性能参数评价循环效率，从而避免复杂的耦合分析。

值得注意的是，由于回热器出口温度对其入口温度几乎无影响，此时可得回热器的能量恢复系数 χ 即为回热器的能效 ε ；回热器的总体总压恢复系数为 $\sigma_a = \prod \sigma_{wf} = \sigma_h \sigma_c$ ，其中 σ_h 、 σ_c 分别为回热器热侧与冷侧工质的总压恢复系数；同时，由于 ε 与 σ_a 对循环效率的贡献相近^[9]，权重系数 $n=1$ 。此时，回热器的性能恢复系数为 $\text{PRC} = \varepsilon \sigma_h \sigma_c$ ，与作者前期工作^[9]一致。因此，式(9)定义的性能恢复系数 PRC 是一个同时适用于加热器与回热器的通用评价方法。

2 性能恢复系数的验证

为验证性能恢复系数，采用常规的耦合分析方法，计算了不同设计工况（换热器能效 ε 、入口雷诺数 Re 、换热器型式、循环构型及循环工质）下的循环效率。采用两种典型的紧凑型换热器：印刷电路换热器 (PCHE) 与微管壳式换热器 (MSTE)。其中，PCHE 采用常见的直通道 (Straight)、之字形通道 (zigzag)、S 型肋片 (S-shape) 与翼型肋片 (Airfoil) 通道，MSTE 则采用了三角形 (MSTE-t) 与正方形 (MSTE-s) 两种布置。耦合分析及换热器设计的详细计算过程可见文献^[9,10]。

2.1 不同换热器型式及循环构型

由于循环构型中，再热对加热器影响最大，本文将通过改变再热级数来考查性能恢复系数 PRC 在不同循环构型中的适用性。首先以 S-CO₂ 布雷顿循环为例，图 6a 展示了不同循环构型与参数条件下，采用多种型式换热器时循环效率随 PRC 的变化，可以看出，

对于任一组循环构型及参数，不同换热器型式下的循环效率吻合较好，且循环效率随 PRC 单调递增，说明 PRC 是一种有效的解耦方法，适用于各种参数和不同布局的布雷顿循环中加热器的性能评价。

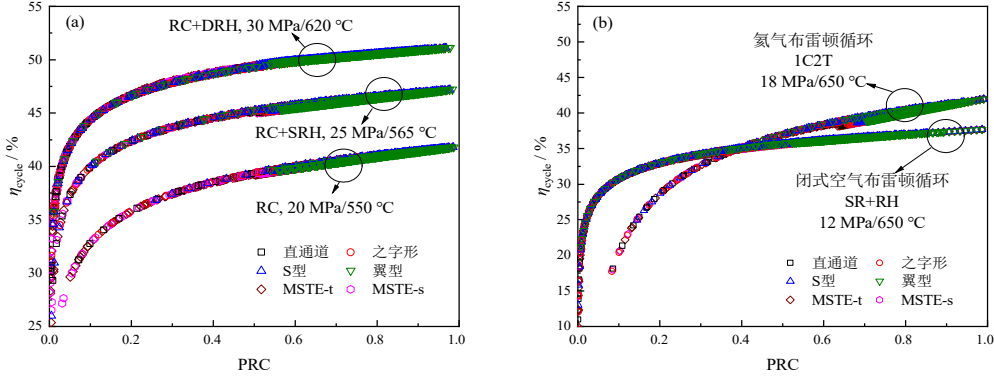


图 6 性能恢复系数的通用性验证：(a) 多种循环构型及参数；(b) 多种循环工质

2.2 不同循环工质

性能恢复系数 PRC 在 S-CO₂ 布雷顿循环中的适用性已在图 6a 中充分验证，为进一步验证 PRC 在不同工质布雷顿循环中的应用，本节采用了 1C2T 氢气布雷顿循环与简单回热+一次再热（SR+RH）的闭式空气布雷顿循环，如图 6b 所示。可以看出，循环效率随 PRC 单调递增，且不同换热器型式数据吻合较好，说明式（9）定义的性能恢复系数 PRC 可以直接拓展应用于多种工质的布雷顿循环。

综上所述，本文提出的性能恢复系数 PRC 是布雷顿循环中加热器与回热器的通用评价准则，适用于多种构型、参数及工质的布雷顿循环，同时适用于多种型式换热器。

3 性能恢复系数的应用

本文提出的性能恢复系数反映了换热器传热与阻力性能的权衡，有助于布雷顿循环中换热器的选型与优化。下面分别针对典型的间接吸热式塔式太阳能系统及直接吸热式 1000 MW 级 S-CO₂ 燃煤锅炉，研究了加热器的选型及优化布置形式。

3.1 间接吸热系统

对于间接吸热式系统，可以通过改变中间换热器（MH 与 RH）的型式来提高循环效率，下面主要对 PCHE 不同通道型式进行优化设计。由于式（9）中阻力性能的权重系数均大于 1，说明在加热器中，阻力性能对循环效率的影响大于传热性能，因此，为提高循环效率，应主要关注加热器的阻力性能。

翼型通道由于阻力较小，总压恢复系数较高（见图 7a），可以在四种 PCHE 通道中实现最高的 PRC 与循环效率，如图 7c 所示。然而，翼型通道紧凑度远低于之字形通道，若 MH 与 RH 均采用翼型通道时，其体积相对于采用之字形通道增加 43.9%，如图 7b 所示。因此，需要在保证循环效率的情况下，体积尽可能较小。

由式（5）可知，由于 RH 压力较低，压降对 RH 的总压恢复系数影响较大，而对 MH 的总压恢复系数影响较小，应优先考虑低压通道的流动减阻。如图 7a 所示，采用翼型通道后，尽管 MH 的压降由之字形通道的 0.14 MPa 显著降至 0.05 MPa，但 σ_{MH} 仅有提升。因此，本文提出采用之字形-翼型加热器，即 MH 采用之字形通道以提高紧凑度，

而 RH 采用阻力较低的翼型通道以提高效率。与之字形通道相比，之字形-翼型加热器可使循环效率提高 0.4 个百分点，与效率最高的翼型通道相比，优化后的结构可以减少 17.4% 的加热器总体积，而循环效率的损失只有 0.1 个百分点。

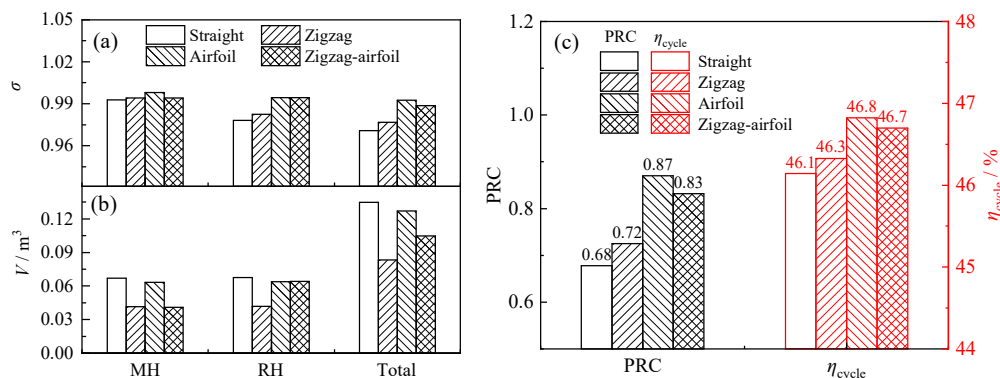


图 7 塔式太阳能系统加热器优化：(a) 总压恢复系数；(b) 体积；(c) PRC 与循环效率

值得注意的是，由于翼型通道的接触面积较小，其耐压性能较弱，因此在高压工况的 MH 中，应优先选用连续型通道以保证安全性，因此，综合考虑循环效率、紧凑度与耐压性能，推荐采用之字形-翼型加热器。

3.2 直接吸热系统

对于直接吸热式系统，由于透平入口温度不变，可得出 $\sum \Delta Q = 0$ 且 $\chi = 1$ ，此时 $PRC = \sigma_a^n$ ，因此，直接吸热式系统加热器的优化主要通过提升总体总压恢复系数实现。本文以 1000 MW 级 S-CO₂ 燃煤锅炉为例，对受热面布置进行优化，循环采用间冷+三级压缩+二次再热构型 (IC+TC+DRH)，主蒸汽参数 630 °C/35 MPa，计算方法详见文献[11-13]。

锅炉内的换热器主要包含两大类：一是辐射受热面，即冷却壁；二是对流受热面，即烟气换热器。冷却壁管数量受到锅炉表面积约束，冷却壁单管内质量流量较大，导致压降较高，而烟气换热器则可以简单地通过调整管数来控制压降。因此，冷却壁管中的压降一般远高于烟气换热器。因此，可以考虑对受热面进行优化布置以提高循环效率。

图 8a 展示了典型的锅炉受热面布置方式，其中 CW 代表冷却壁，HE 代表烟气换热器，M、1、2 分别代表主加热 (MH)、一次再热 (RH1) 与二次再热 (RH2)。初始布置中，采用分流减阻原理^[4]，将 MH、RH1 与 RH2 分为两部分，每部分依次流过冷却壁与对流受热面，该布置可以很好地防止冷却壁超温^[11]。然而，该布置下，RH2 的压降可达 1.3 MPa，由于其工作压力较低，总压恢复系数 σ_{RH2} 仅有 0.9，导致总体总压恢复系数 σ_a 较低，为 0.85。因此，必须降低 RH2 的压降以避免过大的压降惩罚效应。

为降低 RH2 的压降，需要避免 RH2 流过冷却壁，因此，本文提出如图 8b 所示的锅炉受热面优化布置形式。与初始布置相比，优化布置将 MH 与 RH1 在冷却壁部分增高，使其布满整个冷却壁，另外，将整个 RH2 布置在对流受热面，同时通过调整管数来控制单管质量流速约为 2000 kg·m⁻²·s⁻¹。优化后，虽然 MH 和 RH1 的压降分别提高了 43.66% 和 44.62%，但由于工作压力较大， σ_{MH} 和 σ_{RH1} 的变化不大。而 RH2 的压降降至 0.41 MPa， σ_{RH2} 由 0.90 显著提高到 0.97，从而使 σ_a 由 0.85 提高到 0.90，循环效率达到 52.2%，提高了 1.4 个百分点。

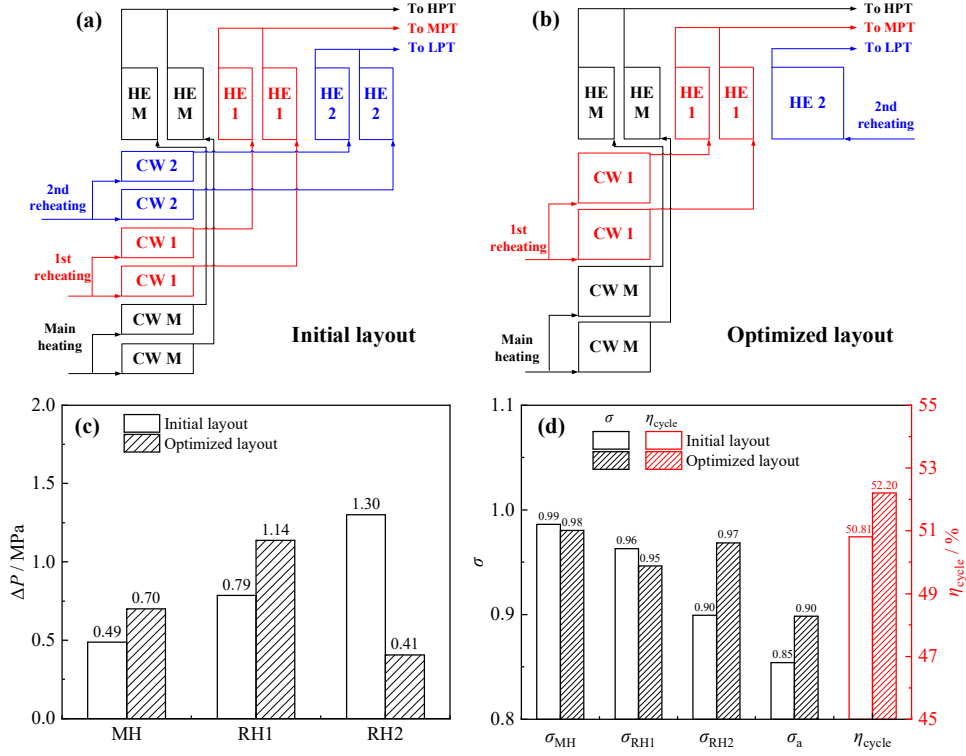


图 8 1000 MW 级 S-CO₂ 燃煤发电系统受热面优化：(a) 初始布置；(b) 优化布置；(c) 压降；(d) 总压恢复系数与循环效率

文献[13]对 1000 MW 级 S-CO₂ 燃煤发电系统进行了类似的优化，循环构型及主蒸汽参数与本节相同。不同的是，其初始布置未采用分流减阻策略，导致冷却壁压降较大，其中 RH2 的压降可达 5.05 MPa。优化方案与本节类似，通过将 RH2 从冷却壁移动到水平烟道，使 RH2 的压降显著降低至 0.59 MPa， σ_a 由 0.56 提高至 0.81，与初始布局相比，优化布局可将循环热效率从 35.4% 提高到 50.09%。该结果同样表明，应优先考虑降低低压 RH2 的压降，进一步验证了基于 PRC 的优化方法的适用性。

4 结 论

本文提出了一种解耦方法来评价换热器性能对循环效率的影响，同时基于该评价方法对直接与间接吸热系统的加热器进行优化设计，主要结论如下：

- 1) 提出了换热器综合性能评价方法的通用表达式，其定义式为 $\zeta = XY^n$ ，其中， X 和 Y 分别代表传热及阻力性能参数， n 为阻力性能的权重系数。
- 2) 提出了从换热器部件层面性能参数直接评价布雷顿循环效率的性能恢复系数 PRC，定义式为 $PRC = \chi \sigma_a^n$ ，其中， $\chi = 1 - \sum \Delta Q / \sum Q_{h,ideal}$ 、 $\sigma_a = \prod \sigma_{heater}$ 分别表征传热与阻力性能参数，结果表明，性能恢复系数是布雷顿循环中加热器与回热器的通用评价准则，适用于多种构型、参数及工质的布雷顿循环，同时适用于多种型式换热器。
- 3) 根据性能恢复系数的定义式，加热器的阻力性能对循环效率的影响大于传热性能，同时应优先考虑降低低压通道的流动阻力，基于性能恢复系数，对直接与间接吸热系统的加热器进行优化，使循环效率分别提升 1.4 和 0.4 个百分点。

参考文献

- [1] Fan Y H, Tang G H, Li X L, et al. General and Unique Issues at Multiple Scales for Supercritical Carbon Dioxide Power System: A Review on Recent Advances. *Energy Conversion and Management*, 2022, 268: 115993.
- [2] Saeed M, Berrouk A S, Salman Siddiqui M, et al. Effect of Printed Circuit Heat Exchanger's Different Designs on the Performance of Supercritical Carbon Dioxide Brayton Cycle. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 179: 115758.
- [3] Wang K, He Y L. Thermodynamic Analysis and Optimization of a Molten Salt Solar Power Tower Integrated with a Recompression Supercritical CO₂ Brayton Cycle Based on Integrated Modeling. *Energy Conversion and Management*, 2017, 135: 336-350.
- [4] Xu J, Sun E, Li M, et al. Key Issues and Solution Strategies for Supercritical Carbon Dioxide Coal Fired Power Plant. *Energy*, 2018, 157: 227-246.
- [5] Kwon J S, Son S, Heo J Y, et al. Compact Heat Exchangers for Supercritical CO₂ Power Cycle Application. *Energy Conversion and Management*, 2020, 209: 112666.
- [6] Fan J F, Ding W K, Zhang J F, et al. A Performance Evaluation Plot of Enhanced Heat Transfer Techniques Oriented for Energy-Saving. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2009, 52 (1-2): 33-44.
- [7] Ji W T, Fan J F, Zhao C Y, et al. A Revised Performance Evaluation Method for Energy Saving Effectiveness of Heat Transfer Enhancement Techniques. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 138: 1142-1153.
- [8] He Y L, Tang S Z, Tao W Q, et al. A General and Rapid Method for Performance Evaluation of Enhanced Heat Transfer Techniques. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 145.
- [9] Li X L, Tang G H, Fan Y H, et al. A Performance Recovery Coefficient for Thermal-Hydraulic Evaluation of Recuperator in Supercritical Carbon Dioxide Brayton Cycle. *Energy Conversion and Management*, 2022, 256: 115393.
- [10] Jiang Y, Liese E, Zitney S E, et al. Optimal Design of Microtube Recuperators for an Indirect Supercritical Carbon Dioxide Recompression Closed Brayton Cycle. *Applied Energy*, 2018, 216: 634-648.
- [11] Fan Y H, Tang G H, Yang D L, et al. Integration of S-CO₂ Brayton Cycle and Coal-Fired Boiler: Thermal-Hydraulic Analysis and Design. *Energy Conversion and Management*, 2020, 225: 113452.
- [12] Fan Y H, Yang D L, Tang G H, et al. Design of S-CO₂ Coal-Fired Power System Based on the Multiscale Analysis Platform. *Energy*, 2022, 240: 122482.
- [13] Yang D L, Tang G H, Li X L, et al. Capacity-Dependent Configurations of S-CO₂ Coal-Fired Boiler by Overall Analysis with a Unified Model. *Energy*, 2022, 245: 123246.

粒径对正六面体颗粒外掠换热管传热特性的影响

齐承鲁, 张忠良, 王明超, 李耀鹏, 孙鹏, 郑斌

(山东理工大学交通与车辆工程学院, 山东淄博 255049)

(Tel: 15621356575, Email: moqi725@163.com)

摘要: 明确颗粒外掠换热管的传热机理对提高移动床换热器的换热能力具有重要的理论指导意义。基于 CFD-DEM 法研究了正六面体颗粒粒径对其外掠换热管传热特性的影响, 揭示了不同粒径下正六面体颗粒外掠换热管的传热机理。结果表明, 随着粒径增大, 颗粒流动特性恶化, 进而导致其传热特性恶化。粒径由 5 mm 增大到 7 mm, 颗粒与管的平均接触数降低了 49.2%, 管周空隙率增加了 2.15%。相应的, 换热管平均热流量及平均有效换热系数分别降低了 34.42 W、7.2 W/m²·K。

关键词: 颗粒流, 粒径, 正六面体颗粒, 传热特性

0 前言

作为世界上最大的能源消费国, 我国能源消费量占据全球能源消费总量的 26.5%^[1], 其中, 工业耗能在我国能源总消耗中占据着 66.8% 的份额^[2]。据统计, 我国工业部门每年会产生约 4500 亿吨的高温颗粒, 而这些高温颗粒的余热回收率却不足 40%^[3], 若这部分热量得到有效回收, 我国每年能节省约 100 亿吨标准煤^[4]。因此, 发展固体颗粒余热回收技术是降低工业能耗、促进节能减排的重要途径。

移动床换热器因其成本低、安全性高和换热效率高等特点, 在固体颗粒余热回收领域得到了广泛应用^[5]。近年来, 颗粒在移动床换热器内的流动及传热特性不断被探究完善, 移动床换热器的换热能力逐渐提升^[6]。郭志罡等^[7]采用双欧拉法模拟了内置错排管束移动床换热器内颗粒的流动及换热过程, 结果表明, 颗粒与换热管之间的平均换热系数随颗粒密度、比热容及入口流速的增大而升高, 但热回收效率随之下降。Tian 等^[8]采用离散单元法模拟了球形颗粒在椭圆组合管、椭圆管和圆管周围的流动及传热特性。结果表明, 椭圆组合管的换热能力与椭圆管相似, 且优于圆管。

现有工作主要集中在换热器内部结构对颗粒流动及传热特性的影响, 且多将颗粒简化为球形, 这对于了解非球形颗粒外掠换热管时粒径对其传热特性的影响机理是不足的。由于正六面体颗粒与工业实际中的颗粒复合材料形状相似度极高, 因此其在非球形颗粒的建模过程中被广泛考虑^[9], 基于 CFD-DEM 法模拟了正六面体颗粒外掠换热管的传热过程, 研究了粒径变化对正六面体颗粒外掠换热管传热特性的影响。这可为深入了解非

球形密集固体颗粒流外掠换热管的换热机理以及提高能源综合利用效率提供理论支撑。

1 模型及验证

1.1 物理模型

正六面体颗粒外掠换热管的计算模型如图 1 所示，其中， W 、 H 、 L 所在方向分别代表计算模型的宽度、高度、厚度方向。为了尽可能减少计算负担，在宽度方向及厚度方向设置周期性边界条件^[10]。根据前人的研究，模型宽度、高度、厚度分别被设置为 174 mm、519 mm、36 mm，换热管直径 D_t 为 58 mm，保证颗粒在模型中正常流动传热^[3, 11]。基于多球法^[12]构建的正六面体颗粒如图 1 (b)所示。

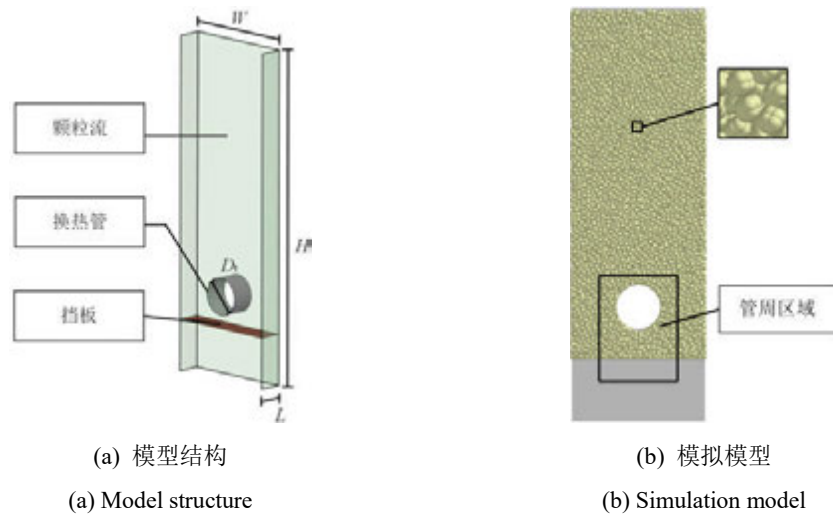


图 1 模型示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the model

表 1 模拟参数

Tab. 1 Simulation parameters

参数	数值	参数	数值
颗粒密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2848	换热管密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	7850
颗粒泊松比	0.25	换热管泊松比	0.3
颗粒杨氏模量/ Pa	5.5×10^8	换热管杨氏模量/ Pa	1.8×10^{11}
颗粒间静摩擦系数	0.3	颗粒-换热管静摩擦系数	0.3
颗粒间滚动摩擦系数	0.1	颗粒-换热管滚动摩擦系数	0.1
颗粒间碰撞恢复系数	0.3	颗粒-换热管碰撞恢复系数	0.5
颗粒初始温度/ $^{\circ}\text{C}$	800	换热管温度/ $^{\circ}\text{C}$	25
颗粒比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	1210	换热管比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	460
颗粒热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	0.55	换热管热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	15
空气比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	1006.43	空气热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	0.0257

采用先填料后流动的模拟流程。在填料过程，位于换热管下方 20 mm 处的挡板处于静止状态，颗粒自模型入口处自由下落填料至图 1 (b)所示状态。此时，颗粒与换热管之

间绝热，保证颗粒热量不会提前流失。填料完成后，进入流动过程。在流动过程，颗粒由挡板控制，以 2 mm/s 速度竖直向下运动外掠换热管并与管换热。模拟中的其余参数如表 1 所示。

1.2 数学模型

CFD-DEM 耦合计算方法能够准确模拟颗粒相与流体相之间的相互作用，已经在颗粒两相流系统中得到了广泛认可。在 CFD-DEM 耦合计算^[13]中，颗粒相由 DEM 求解，流体相由 CFD 求解。两相间的相互作用在数据交互中完成计算。

1.2.1 动力学模型

颗粒的运动由平移及旋转运动组成，模拟中颗粒的运动由牛顿第二定律描述，球形颗粒的运动方程^[14]如式(1)所示。

$$\begin{cases} m_i \partial \mathbf{v}_i / \partial t = \sum \mathbf{F} + m_i \mathbf{g} \\ I_i \partial \boldsymbol{\omega}_i / \partial t = \sum \mathbf{M} \end{cases} \quad (1)$$

模拟中的正六面体颗粒由多个球形颗粒组成，其运动方程如式(2)所示。

$$\begin{cases} m_{h,i} \partial \mathbf{v}_{h,i} / \partial t = \sum \mathbf{F}_h + m_{h,i} \mathbf{g} \\ I_{h,i} \partial \boldsymbol{\omega}_{h,i} / \partial t = \sum \mathbf{M}_h \end{cases} \quad (2)$$

其中 $m_{h,i}$, $I_{h,i}$, $\mathbf{v}_{h,i}$ 和 $\boldsymbol{\omega}_{h,i}$ 分别表示正六面体颗粒 i 的质量、惯性矩、速度和角速度， $\mathbf{F}_h$ 和 $\mathbf{M}_h$ 分别表示正六面体颗粒的子球 i 的接触力以及滚动力矩。

气相的质量及动量控制方程^[15]为：

$$\frac{\partial(\varepsilon_v \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_v \rho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_v \rho_g \mathbf{u}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_v \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\nabla p - \mathbf{f}_{g,p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \varepsilon_v \rho_g \mathbf{g} \quad (4)$$

其中， ε_v 为孔隙率， ρ_g 为气项密度， $\mathbf{u}_g$ 为气体流速， p 为气体压力， $\mathbf{f}_{g,p}$ 为颗粒与气体的体积相互作用力， $\boldsymbol{\tau}$ 为气项的应力张量， $\mathbf{g}$ 为重力加速度。

气项的能量方程为：

$$\frac{\partial(\rho_g \varepsilon c_g T_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \varepsilon \mathbf{u}_g c_g T_g) = -\nabla \cdot (-c_g \Gamma \nabla T_g) + \sum_{i=1}^{k_v} Q_{g,i} + Q_{g,\text{wall}} \quad (5)$$

其中， ε 为湍流耗散率， c_g 为气体的比热容， Γ 为气体的热扩散率， $Q_{g,i}$ 为气体与颗粒 i 对流换热的热流量， $Q_{g,\text{wall}}$ 为气体与壁面对流换热的热流量。

1.2.2 热传导模型

颗粒之间及颗粒与换热管之间的热流量由以下公式计算^[16]：

$$Q_c = h_c \Delta(T_c) \quad (6)$$

其中， T_c 为两接触面之间的温差， h_c 由式(7)计算：

$$h_c = \frac{4k_1k_2}{k_1+k_2} \left[\frac{3F_N R^*}{4E^*} \right] \quad (7)$$

其中， F_N 为两接触物体的法向力， k_1 和 k_2 为两接触体的导热系数。

1.2.3 对流换热模型

颗粒与周围气体之间的热流量 $Q_{i,g}$ 可以写成^[17]:

$$Q_{i,g} = h_{i,\text{conv}} \cdot A_i (T_i - T_{g,i}) \quad (8)$$

其中， A_i 与 T_i 分别为椭球颗粒 i 的表面积及温度， $T_{g,i}$ 为颗粒 i 周围气体的温度。导热系数 $h_{i,\text{conv}}$ 的表达式为:

$$h_{i,\text{conv}} = 6(1-\varepsilon_v)k_g Nu / d_{p,i}^2 \quad (9)$$

其中， k_g 为气体的导热系数。

1.2.4 辐射换热模型

辐射传热采用 DO 模型进行求解，DO 热辐射模型的控制方程为:

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I = 0 \quad (10)$$

其中， $\mathbf{s}$ 为辐射角度； I 为颗粒表面的辐射强度。

$$I(r_w \cdot \mathbf{s}) = \varepsilon_w \frac{\sigma T_p^4}{\pi} + (1-\varepsilon_w) \frac{q_{\text{in}}}{\pi} \quad (11)$$

其中， ε_w 为表面辐射率， T_p 为颗粒表面温度， q_{in} 为颗粒表面的入射热流量。

颗粒的温度变化^[16]由式(12)控制:

$$m_i C_p \frac{dT}{dt} = \sum Q_{\text{heat}} \quad (12)$$

其中 C_p 和 T 是颗粒的比热容和温度， Q_{heat} 表示热通量之和。

1.3 模型验证

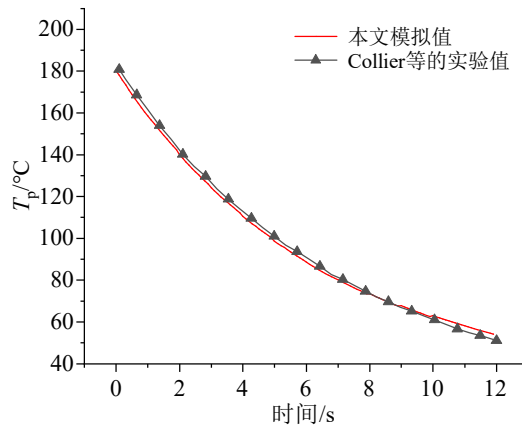


图2 模型验证

Fig. 2 Model validation

Collier 等^[17]的实验结果在验证 CFD-DEM 模型的准确性方面已经得到了学者们的广泛认可。实验及模拟过程为将直径为 2 mm 的磷青铜球颗粒埋入直径为 3 mm 的二氧化硅颗粒填充床中，磷青铜球颗粒的初始温度为 180 °C，二氧化硅颗粒的初始温度为 25 °C。同时，填充床内流经温度为 25 °C，速度为 0.43 m/s 的空气。图 3 展示了磷青铜球在填充床中的温度变化过程。将模拟结果与 Collier 的实验数据进行了比较。结果表明，本工作中颗粒的温度变化与 Collier 得到的结果具有良好的一致性，CFD-DEM 模型的准确性得到了验证。

2 结果与讨论

2.1 粒径对正六面体颗粒传热特性的影响

选取 5 mm、6 mm、7 mm 三种粒径作为研究参数，其中，正六面体颗粒的粒径以等体积当量径 d_p 表示，如无特殊说明，下文所述粒径则均为此等体积当量径。其计算如式 (13) 所示。

$$d_p = \left(\frac{6m_h}{\pi\rho_p} \right)^{1/3} \times 10^{-3} \quad (13)$$

其中， m_e 为颗粒的质量， ρ_p 为颗粒的密度。

图 3 展示了 35 s 时不同粒径下椭圆颗粒的温度分布。由图 3 可知，不同粒径下管周颗粒的温度分布相似，低温颗粒均分布在换热管周围，且相较于管两侧，管上方及管下方存在更多的低温颗粒。这是因为管束顶部的滞留区及管束下方的空区极大的影响了管周颗粒的运动。滞留区的存在使管束上方的颗粒运动缓慢，与换热管有更长的接触时间，换热更充分。而换热管下方空区的存在会使颗粒在绕管后向空区集中加速运动，在空区下方汇集后继续流动。虽然温度的分布情况相似，但不同粒径下管周颗粒的温度变化情况却有明显差异。 $T_{p,a}$ 为管周一倍粒径范围内颗粒的平均温度，其计算为：

$$T_{p,a} = \frac{\sum T_{p,\tau} \cdot \Delta t}{\sum \Delta t} \quad (14)$$

其中， $T_{p,\tau}$ 为第 τ s 时管周一倍粒径范围内颗粒的温度。随着粒径由 5 mm 增大到 7 mm，管周颗粒最高温度均保持在 799.9 °C 以上，颗粒最低温度从 759.33 °C 上升到 780.13 °C，上升了 20.8 °C。管周颗粒平均温度 $T_{p,a}$ 从 789.95 °C 上升到 794.95 °C，上升了 5 °C。

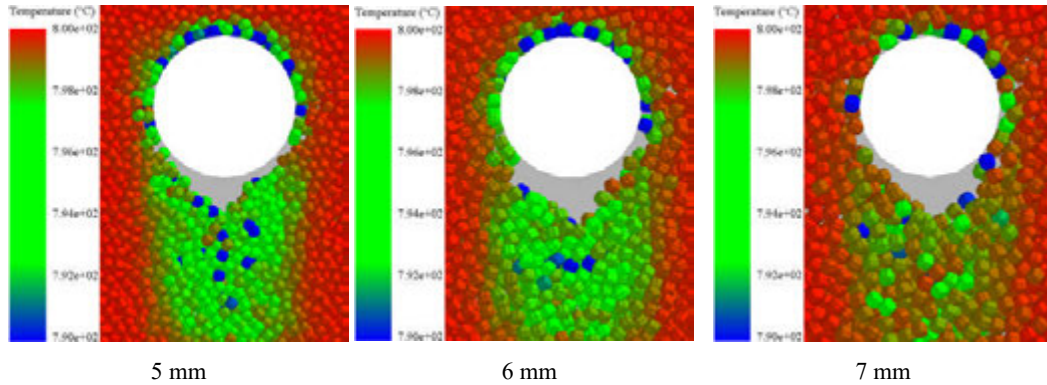


图 3 不同粒径下正六面体颗粒的温度分布

Fig. 3 Temperature distribution of hexahedral particles with different particle sizes

换热管平均热流量 Φ_a 是单位时间内通过换热管的平均热量,用来评价颗粒与换热管之间的换热能力。平均热流量越大,代表单位时间内颗粒与换热管之间的交换的热量越多,换热效果越好。其计算为:

$$\Phi_a = \frac{\sum \Phi_\tau \cdot \Delta t}{\sum \Delta t} \quad (15)$$

其中, Φ_τ 为第 τ s 的换热管热流量, Δt 为时间间隔。

不同粒径下的换热管热流量如图 4 所示。由图 4 可知,不同粒径正六面体颗粒下,换热管热流量曲线均呈现先迅速降低再缓慢回升,最终波动稳定的趋势。这是因为在填料过程结束、流动过程尚未开始时,换热管被热颗粒完全包围(如图 1 (b)所示),而在流动开始后,换热管下方会逐渐形成空区,直到空区完全形成,换热管热流量趋于稳定。由图 4,选取热流量波动稳定的 15 s~30 s 为研究时段。

在研究时段内,不同粒径下换热管热流量呈现出明显差异。粒径为 5 mm 的换热管热流量曲线明显高于其他两组,而粒径为 7 mm 的热流量曲线则位于最下方。从换热管平均热流量来看,粒径为 5 mm、6 mm、7 mm 的平均热流量分别为 295.41 W、282.89 W 及 260.99 W。随着粒径由 5 mm 增大到 7 mm,换热管平均热流量降低了 34.42 W。这代表随着颗粒粒径的增大,颗粒与换热管之间的换热效果变差。这与前文的温度差异是相对应的。

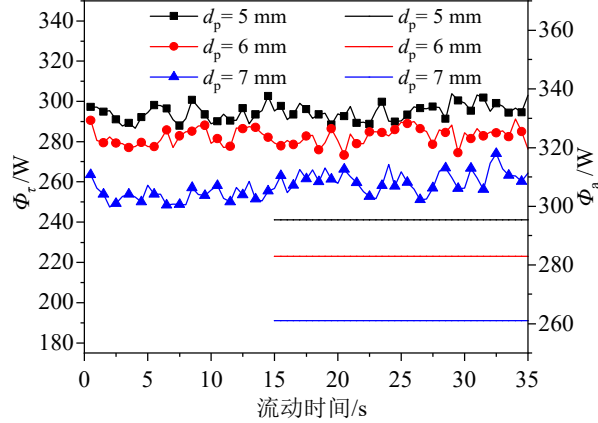


图 4 不同粒径下的换热管热流量

Fig. 4 Heat transfer rate of the tube with different particle sizes

2.2 粒径对正六面体颗粒流动特性的影响

颗粒的流动特性对其传热特性起着决定性的影响,因此,对颗粒换热机理的探究应该以其流动特性为基础。颗粒与换热管之间的平均接触数 $CN_{p-t,a}$ 是颗粒与换热管之间接触点数量的平均值,用来评价颗粒与换热管之间接触情况。 $CN_{p-t,a}$ 越大,代表颗粒与换热管之间的接触点越多。其计算为:

$$CN_{p-t,a} = \frac{\sum CN_\tau \cdot \Delta t}{\sum \Delta t} \quad (16)$$

其中， CN_τ 为第 τ s时颗粒与换热管的接触数。

不同粒径下颗粒与换热管之间的接触数如图 5 所示。由图 5 可知，不同粒径下颗粒与换热管之间的接触数曲线均呈现先迅速降低后波动稳定的趋势，这与换热管热流量曲线的走向是相同的，同样是流动初始阶段空区的形成导致的。在研究时段内， $d_p = 5$ mm 接触数曲线处于最高位置，其次为 $d_p = 6$ mm 的曲线， $d_p = 7$ mm 的接触数曲线则处于最低位置。从平均接触数来看，粒径为 5 mm、6 mm、7 mm 的 $CN_{p-t,a}$ 分别为 154.73、105.51 及 78.66。这代表随着粒径的增大，与换热管直接接触的颗粒数量减少，颗粒与换热管之间的接触情况变差。在密集颗粒移动床中，热传导是主要的传热途径，因此，随着颗粒与换热管之间的接触情况变差，能直接与换热管进行热传导的颗粒数量减少，颗粒与换热管之间的平均热流量减小。这与图 4 是相对应的。

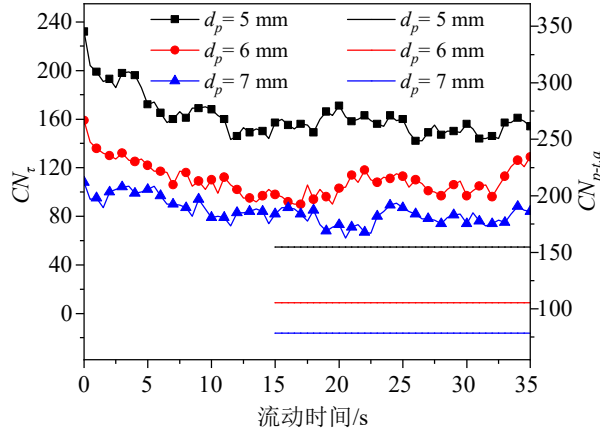


图 5 不同粒径下颗粒与换热管之间的接触数

Fig. 5 Number of contacts at different particle sizes

平均空隙率 $\varepsilon_{p,a}$ 是一定区域内空隙率的时间平均值，是评价颗粒在一定区域内密实程度的指标。 $\varepsilon_{p,a}$ 越小，代表颗粒在此区域内填充的越致密，其计算为：

$$\varepsilon_{p,a} = \frac{\sum \varepsilon_p \cdot \Delta t}{\sum \Delta t} \quad (17)$$

其中，空隙率 ε_p 是一定区域内除颗粒之外的空间体积占此区域总容积的百分比。

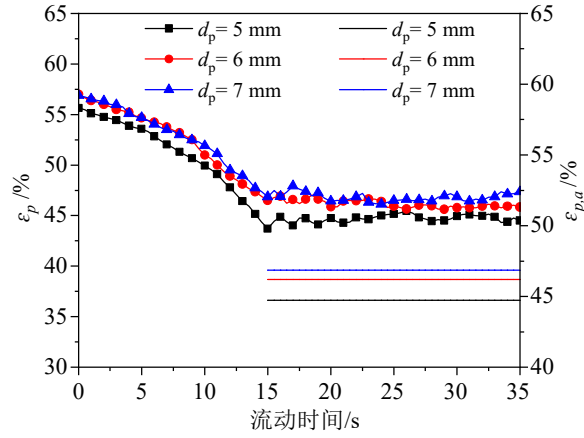


图 6 不同粒径下的管周空隙率

Fig. 6 Void ratio around the tube with different particle sizes

不同粒径下的管周空隙率如图 6 所示。由图 6 可知，不同粒径下管周空隙率曲线均呈现先持续下降，后波动平稳的趋势，这是由颗粒的流动决定的。14 s 前，颗粒并未填满管周统计区域，因此管周颗粒的体积分数持续上升，空隙率呈现持续下降的趋势。在 14 s 时，颗粒完全填满管周统计区域，且保持填满状态持续至流动过程结束，因此空隙率曲线在此时段趋向稳定。在空隙率稳定的时段，随着粒径的增加，空隙率曲线呈现出明显差距。 $d_p = 5 \text{ mm}$ 的空隙率曲线位于其余曲线的上方，其次为 $d_p = 6 \text{ mm}$ 的空隙率曲线， $d_p = 7 \text{ mm}$ 的空隙率曲线则位于最低位置。从平均空隙率来看，粒径为 5 mm、6 mm、7 mm 的 $\varepsilon_{p,a}$ 分别为 44.72%、46.19% 及 46.87%，这代表随着粒径的增大，换热器内颗粒的密实程度降低，颗粒之间的空隙变大，颗粒的传热受到更大的阻碍。这与图 3 及图 4 是对应的。

颗粒与换热管之间的有效换热系数 K_{p-t} 是评价颗粒与换热管之间换热过程强烈程度的评价指标。 K_{p-t} 越大，代表换热过程越强烈，换热能力越强。其计算为：

$$K_{p-t} = \frac{\Phi_a}{A_t \cdot (T_{p,a} - T_t)} \quad (18)$$

其中， A_t 为换热管的表面面积， T_t 为换热管温度。

研究时段内，粒径为 5 mm、6 mm、7 mm 的椭球颗粒外掠换热管时，其平均有效换热系数分别为 58.9 W/(m²·K)、56.23 W/(m²·K)、51.7 W/(m²·K)，由 5 mm 到 7 mm 降低了 7.2 W/(m²·K)。综上，随着粒径的增大，正六面体颗粒外掠换热管的换热性能恶化。

3 结 论

为了深入了解正六面体密固体颗粒流外掠换热管的换热机理，基于 CFD-DEM 法研究了正六面体颗粒外掠换热管的换热过程，揭示了不同粒径对正六面体颗粒外掠换热管传热特性的影响。主要结论如下。

随着粒径的增大，管周颗粒的最低温度和平均温度增加，换热管平均热流量和有效换热系数下降，颗粒传热特性恶化。粒径由 5 mm 增大到 7 mm，颗粒的最低温度从 759.33 °C 上升到 780.13 °C，平均温度从 789.95 °C 上升到 794.95 °C，换热管平均热流量

从 295.41 W 降低到 260.99 W, 有效换热系数从 58.9 W/m²·K 降低到 51.7 W/m²·K。

颗粒流动特性的恶化是其传热特性恶化的根本原因。随着粒径的增大, 颗粒与换热管之间的平均接触数降低, 管周空隙率增大, 颗粒流动特性恶化。粒径由 5 mm 增大到 7 mm, 颗粒与管之间的平均接触数由 154.73 降低到 78.66, 管周空隙率由 44.72%增大到 46.87%。

参考文献

- [1] Bernard Looney, BP Statistical Review of World Energy, BP p.l.c, London, 2022.
- [2] 中华人民共和国国家统计局, 中国统计年鉴[R]. 北京: 中华人民共和国国家统计局, 2022.
National Bureau of Statistics of People's Republic of China. China Statistical Yearbook[R]. Beijing: National Bureau of Statistics of the People's Republic of China, 2022.
- [3] Binfan Jiang, Dehong Xia, Huili Zhang, et al. Effective waste heat recovery from industrial high-temperature granules: A Moving Bed Indirect Heat Exchanger with embedded agitation. *Energy*, 2020, 208: 118346.
- [4] Zhilong Cheng, Zhigang Guo, Zhoutuo Tan, et al. Waste heat recovery from high-temperature solid granular materials: Energy challenges and opportunities. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2019, 116: 109428.
- [5] 齐承鲁, 张忠良, 王明超, 等. 内置管束布置对换热器内固体颗粒流动的影响. *化工进展*, 2023, 42(05): 2306-2314.
QI Chenglu, ZHANG Zhongliang, WANG Mingchao, et al. Effects of built-in tube bundle arrangements on solid particle flow characteristics in heat exchangers. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2023, 42(05): 2306-2314.
- [6] 刘丁赫, 弋治军, 周托, 等. 烧结矿余热回收装置技术发展综述. *冶金设备*, 2021, 268(04): 61-65.
LIU Dinghe, YI Zhijun, ZHOU Tuo, et al. Literature review on recovery technology of sinter waste heat equipment. *Metallurgical equipment*, 2021, 268(04): 61-65.
- [7] 郭志罡, 杨剑, 胡映学, 等. 颗粒流移动床换热器单元研究. *工程热物理学报*, 2019, 40(02): 403-408.
GUO Zhigang, YANG Jian, HU Yingxue, et al. Study on flow in moving bed heat exchanger element. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2019, 40(02): 403-408.
- [8] Xing Tian, Zhigang Guo, Haonan Jia, et al. Numerical investigation of a new type tube for shell-and-tube moving packed bed heat exchanger. *Powder Technology* 2021; 394: 584-596.
- [9] 张祺, 乔婷, 季顺迎, 等. 转动驱动圆角立方体颗粒有序堆积的离散元模拟. *力学学报*, 2022, 54(2): 336-346.
ZHANG Qi, QIAO Ting, JI Shunying, et al. DEM simulation of ordering of cubes with rounded corners by rotation driven. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2022, 54(2): 336-346.
- [10] 沈秦坚, 董世杰, 张丹城, 等. 移动床内颗粒共振行为的 DEM 模拟. *过程工程学报*, 2023: 1-11.
SHEN Qinjian, DONG Shijie, ZHANG Dancheng, et al. DEM modeling of resonant motion of particles inside moving bed. *The Chinese Journal of Process Engineering*, 2023: 1-11.
- [11] Yingkai Shen, Peng Sun, Zhongliang Zhang, et al. A tube heat transfer prediction model considering static

friction coefficient of dense particle flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023; 205: 123902.

- [12] 孙笑怡, 李同清, 张亚琛, 等. 基于球簇填充方法的铁矿石颗粒形状研究. *有色金属工程*, 2021, 11(12): 73-78+85.

SUN Xiaoyi, LI Tongqing, ZHANG Yachen, et al. The vestigation of particle shapes of iron ore based on multi-sphere method. *Nonferrous Metals Engineering*, 2021, 11(12): 73-78+85.

- [13] 蓬世豪, 丁旺, 薛雷平. 利用 CFD-DEM 研究颗粒形状对浆体管道运输过程中阻塞问题的影响. *水动力学研究与进展(A 辑)*, 2021, 36(04): 499-506.

QU Shi-hao, DING Wang, XUE Lei-ping. Investigating on influence of particle shape on blockage in slurry pipeline transportation by CFD-DEM. *Chinese Journal of Hydrodynamics*, 2021, 36(04): 499-506.

- [14] P. A. Cundall, O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique* 1979; 29: 331-336.

- [15] T. B. Anderson, R. Jackson. Fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of motion. *Ind. Eng. Chem. Fundamen* 1967; 6, 27-539.

- [16] Bodhisattwa Chaudhuri, Fernando J. Muzzio, M. Silvina Tomassone. Modeling of heat transfer in granular flow in rotating vessels. *Chemical Engineering Science* 2006; 61(19): 6348-6360.

- [17] A. P. Collier, A. N. Hayhurst, J. L. Richardson, S. A. Scott. The heat transfer coefficient between a particle and a bed (packed or fluidised) of much larger particles. *Chemical Engineering Science* 2004; 59(21): 4613-4620.

两段渐变式液冷板散热特性分析

常梦娜, 席奂^{1*}

西安交通大学 能源与动力工程学院, 陕西 西安, 710049;
(Email: huanxi@xjtu.edu.cn)

摘要 为提高锂电池组的热安全性和热均匀性, 本文在平直形通道液冷板的基础上, 经三次设计优化, 提出了两段渐变式液冷板结构。选择 12 个棱柱锂离子电池组成的模组作为散热模型, 利用 CFD 手段进行仿真计算, 对比了不同液冷板的散热特性, 研究了流速和不同导热介质对散热特性的影响规律。结果表明: 当液体流速为 0.08m/s, 5C 放电倍率, 电池间布置石墨导热片时, 与平直形相比, 两段渐变式电池组最高温度降低了 7.31℃ (18.28%), 最大温差减小了 6.37℃ (54.82%)。

关键词 锂离子电池; 电池热管理; 液冷板; 渐变通道

0 前言

石油能源的逐渐衰竭和化石燃料燃烧引起的环境污染、全球变暖等一系列问题使电动汽车和混合动力电动汽车成为未来发展的主流方向^[1]。与传统燃油汽车不同, 它们的动力主要由镍镉、镍氢和锂离子等不同种类的电池所提供。近年来, 锂离子电池因高功率、大容量、低放电率和长循环寿命的优点被广泛应用。有研究表明, 温度对锂离子电池性能的影响十分显著, 20℃~40℃ 为其最佳工作温度范围^[2]。若长期工作在温度过高的环境下, 锂离子电池的化学活性会降低, 导致不可逆的容量衰减和电池老化^[3], 更严重者会致使电池模组发生热失控, 引起电池自燃, 导致爆炸甚至火灾^[4]。而且, 单体和模组间的温差过大时, 会引发电池间不同的放电深度和异步老化过程, 导致电池组容量损失, 故最大温差应保持在 5℃ 以内^[5]。因此, 有效的电池热管理系统是必要的。适当的动力电池冷却技术可以将电池保持在最佳工作温度范围内, 减小峰值温度和温差对电池组的负面影响, 有效提高电池效率, 提高使用安全性, 降低老化率, 延长其使用寿命。

目前主流的动力电池冷却技术主要包括空气冷却、液体冷却、相变冷却和复合冷却。其中, 液体冷却系统具有较高的结构紧凑性和传热系数, 在提高电池组能量密度方面更有效, 但在改善温度均匀性方面效果仍不理想^[6]。鉴于直接冷却对密封和压力要求的严格性和冷却介质寻求的困难性, 浸入式冷却方法尚未在批量生产的电动汽车中广泛应用^[7]。相比之下, 间接冷却更通用, 已应用于特斯拉 Model 3, 比亚迪 e5 450 和雪佛兰 Volt 等许多商用电动汽车^[8]。作为间接冷却核心部件之一的液冷板的设计优化问题是众多学者的研究对象。Wang 等^[9]提出了一种基于全局收敛的移动渐近线(GCMMA)方法的拓扑优化设计的新型液冷板。与传统的直冷通道液冷板相比, 优化后的结构最大温差减小

¹基金资助项目: 本文得到国家自然科学基金面上项目(52076163)的资助。

48%，温度标准差减小 57%，液冷板表面温度分布更加均匀。Ma 等^[10]对 U 型转弯型液冷板流路进行不对称设计，可以改善流速的均匀性，温度标准差比常规设计降低了 20.75%。Silimi 等^[11]提出了具有可变振幅的新型波浪形微通道冷板，研究了同流和逆流模式，结果发现逆流时与传统的波浪形冷板相比，最大温差下降 73.1%，这种优化可改善层流状态下的传统波浪冷板温度梯度问题。李潇等^[12]提出了一种基于对角双向流道结构的液冷板新设计方案，结果表明双向流动可改善冷却介质冷却能力逐渐下降的问题，液冷板在满足散热能力的同时能够很好地控制电池组的温度一致性。魏士震^[13]以降低天线芯片最高温度为工程背景，设计了分段翻转组合式的液冷板结构。结果表明，这种设计使冷却介质在流动过程中被充分的扰动，液冷板的散热性能得到了提升。

由文献综述可知，虽然大部分液冷板能对最大温差做出较大改进，但缺少对减小压降的进一步优化，且很少有通过减小单体间导热热阻方式提高热均匀性的研究。鉴于此，本文基于翻转组合的技术思想，在平直形液冷板的基础上进行了一系列设计优化，提出了一种新型变通道宽度的两段渐变式液冷板结构，通过数值模拟的方式来研究其散热性能。以 12 块棱柱电池组成的模组为研究对象，分别在不同液冷板结构，不同流速，不同导热片材料三种场景下，利用 ANSYS FLUENT 进行仿真，分析了它对最高温度、最大温差和压降的影响。

1 电池组热模型

本研究所使用的电池为方形磷酸铁锂电池，如图 1 所示，基本参数如表 1 所示。

表 1 锂离子电池基本参数

参数	数值
容量/ Ah	15
电压/ V	3.2
重量/ kg	0.35
规格/mm	140×65×18
内阻/ mΩ	4
比热容/ J·(kg·K) ⁻¹	1633
持续放电电流	3C
瞬间放电电流	5C

由锂离子电池特性实验^[14]得到的数据，进行拟合可得电池的产热公式为：

$$Q = mc_p \frac{dT}{dt} = 4 \times 10^{-3} I^2 + 0.114I \quad (1)$$

电池单位体积生成的热量为：

$$q = \frac{Q}{V_b} = 24.42I^2 + 696I \quad (2)$$

其中， m 为电池单体质量，kg； c_p 为比热容，J·(kg·K)⁻¹； V_b 为电池体积，m³。

该模拟以汽车爬坡或急加速等电池高倍率放电工况为背景，选择在 5C 倍率下进行放电，根据公式(1)和(2)可得此倍率下电池单体的体积热。为了便于计算和分析，将电池视为单一材料，故其密度和导热系数均为固定常数，查询相关资料可得到具体数值，将

数据整理在表 2 中。

表 2 锂离子电池热物理参数

参数	数值
5C 放电倍率下体积热/ $\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$	189562.5
密度/ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	2136.8
长度、宽度、厚度方向导热系数/ $\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$	29、1、29

在得到上述数据的基础上，开始建立电池组模型。本文选用 4×3 结构进行研究。由于电池极耳尺寸和内阻都极小，在建立仿真模型时进行忽略^[14]。将电池单体等效为一个均匀发热的长方体，电池组网格模型如图 2 所示。

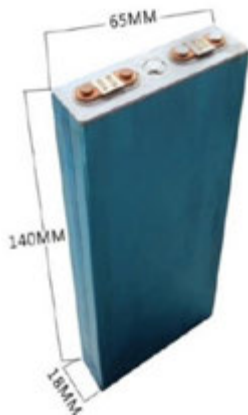


图 1 磷酸铁锂单体电池



图 2 电池组网络模型

仿真时，设置环境温度为 25°C ，电池表面与环境之间为自然对流换热，取换热系数为 $5 \text{ W} \cdot (\text{m}^2 \cdot \text{K})^{-1}$ 。对电池组进行 5C 倍率放电，模拟电池组随着放电时间增加温度场的不断变化。选取 $t=200\text{s}$ 、 $t=400\text{s}$ 、 $t=600\text{s}$ 三个时刻的仿真结果进行分析，如图 3 所示。由图可观察到，随着放电时间的增加，温度增长十分迅速。当放电 200s 时，最高温度为 37.48°C ，尚处于最适温度为的可接受范围内；在 400s 时，最高温度达到了 47.73°C ，偏离最佳工作温度范围较多，会对电池组性能产生极大影响；在 600s 时，电池组的最高温度达到了 57.59°C ，严重偏离了最佳工作温度范围。由此可见，仅依靠被动换热无法将电池组温度控制在合理的温度范围内。因此，需要设计合理的主动散热结构，控制电池组最高温度的同时，减小最大温差，提高整个电池组的温度均匀性。

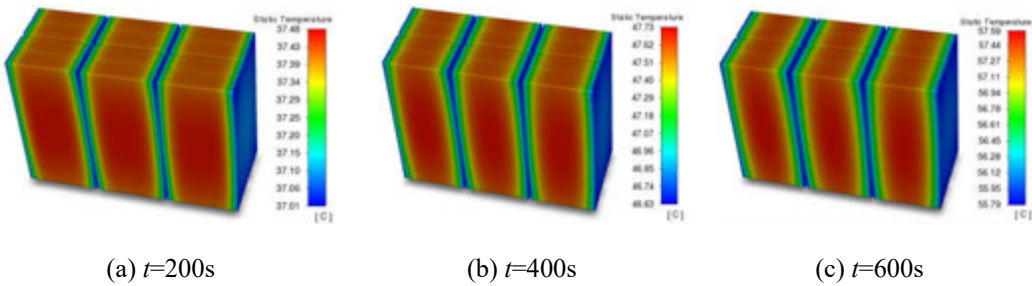


图 3 5C 放电倍率下电池组温度分布图

2 散热模型

2.1 液冷板设计

本文液冷板以常见平直形通道为设计原型，如图 4(a)所示。液冷板由三段所构成，其流道是等宽的。当冷却液流经第一段流道时，与壁面温差大，冷却能力强，流经第二和第三流道时，温差逐渐减小，冷却能力变弱，会导致单体电池温度分布不均匀。为了更加均匀的换热，可采用增加冷却液流速的方式。基于此，提出了图 4(b)所示的优化设计方案 1——三段式液冷板。该液冷板首先采用宽度依次递减的三段流道，这样可确保冷却液流速是依次增加的；其次，在设计中融入了翻转组合的思想，以电池宽度为基准将液冷板分为三段，将一个大流道分为两个流道，大小流道交错排列组合在一起。通过有序的翻转组合，可增加扰动效果，增强换热。由图 5(a)三段式流体迹线图可知，转弯挡板对冷却液流速有很大的限制作用，甚至部分流体与挡板碰撞后速度趋于 0。为了减少碰撞次数，将三段式改为了两段式，同时将挡板的转弯直角优化成了弧状，结构如图 4(c)所示。其流体迹线见图 5(b)，与图 5(a)相比，挡板处速度接近于 0 的流体区域确有明显减小。冷却液从大流道进入小流道时必然会产生很大的压力损失，为了减小能量损失，提高经济性，将直接流入式改为渐变式流入式，设计出两段渐变式液冷板，其结构如图 4(d)所示。流体由上下两个入口进入，相向流动，可进一步提高温度均匀性。

电池组散热结构如图 6 所示， 4×3 结构的电池组及 3 个液冷板采用图中放置方式。在单体电池之间插入厚为 2mm 的硅胶垫，既可以增加电池间的热交互，降低电池间的温差，也可以起到防震保护的作用。考虑到水易得，经济性高，环保等特点，冷却液选用液态水，液冷板材料为铝，其相应热物理参数如表 3 所示。

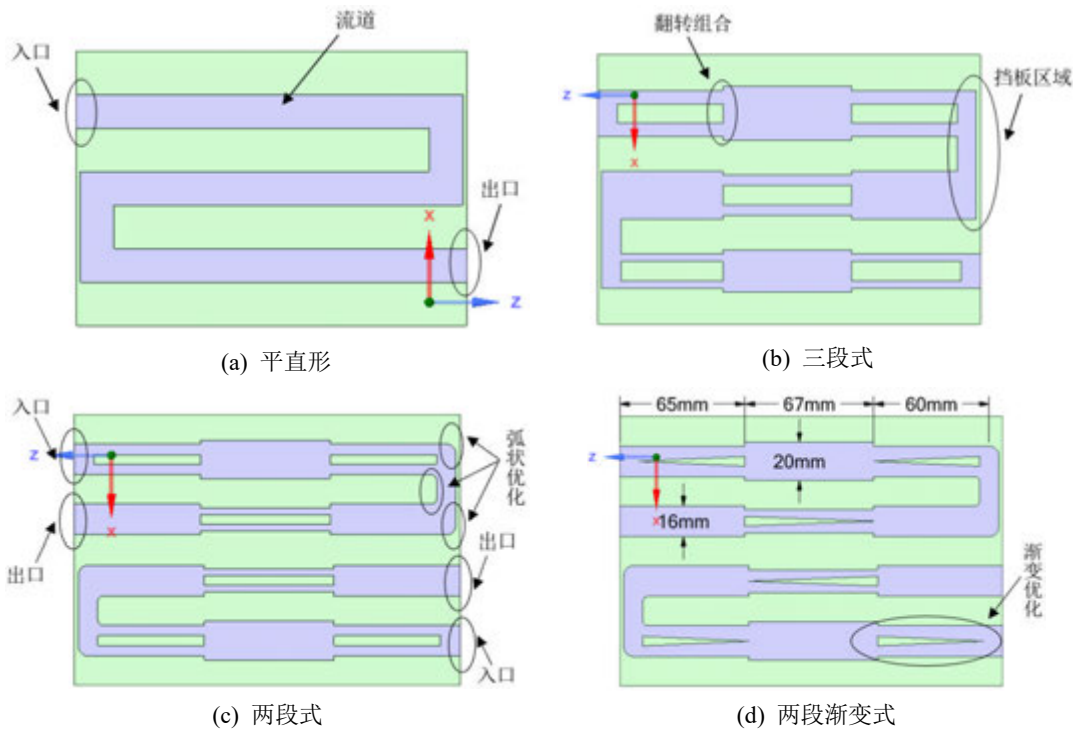


图 4 液冷板几何模型

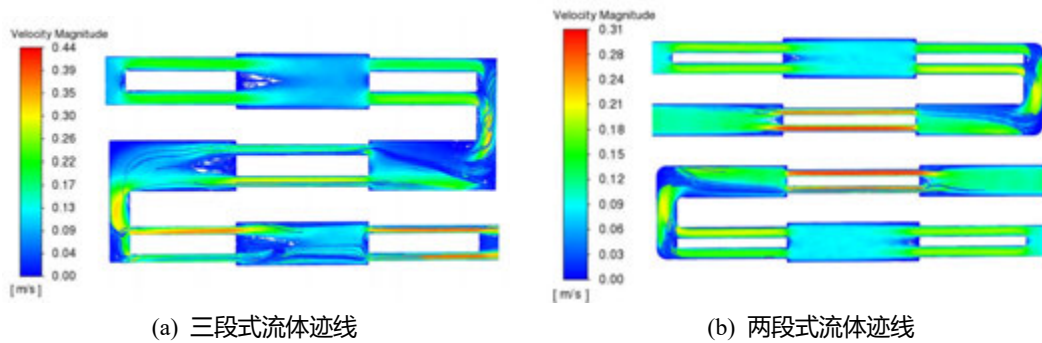


图 5 液冷板流体迹线图

表 3 材料热物理参数

材料	密度/ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	比热容/ $\text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	导热系数/ $\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
液冷板	2719	871	202.4
硅胶垫	2750	1500	2
冷却液	998.2	4182	0.6

2.2 数值模型

2.2.1 参数设置

本研究利用 FLUENT 软件进行稳态仿真模拟。入口和出口分别定义为速度入口和压力出口。环境和冷却液初始温度为 25°C ，电池模组与空气之间为自然对流换热，换热系数为 $5 \text{ W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$ 。经计算，在液冷板各个流道内雷诺数均小于 2300，所以，本研究中模拟工况均选择层流模型。在模拟时，单体电池以体积热源的方式进行生热。当残差小于 1×10^{-3} 时，认为计算结果收敛。

2.2.2 模型验证

电池散热采取体积热源的方式，为验证该散热方式的准确性，对研究所使用的 18/65/140 型电池在 2C 工况下进行仿真模拟生热，并与实验^[14]所得到的结果进行对比。模拟和实验过程中电池最高温度变化如图 6 所示，经过计算分析可得，两者变化趋势基本上是一致的，模拟的最大误差为 2.78%，由此可得，该仿真模型可准确反映电池的生热情况。

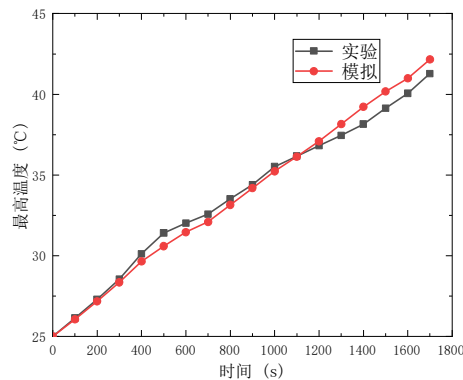


图 6 模拟与实验中电池放电温度变化对比图

2.2.3 网格独立性分析

网格划分是仿真计算中非常重要的一个步骤，节点的数量、网格的形状都会对计算的速度和结果精度产生重要影响。本文研究使用 Fluent Meshing 完成网格划分，以图 7 电池组为几何模型，其中液冷板选择两段渐变式，分别划分了 360705、879165、1624685、2188901、3245827 五种数量的多面体网格，对其进行独立性分析。在相同边界条件下，分别对电池组最高温度、平均温度和压降三个评价参数进行分析，如图 8 所示。从图中可以看出，小于 1624685 网格数时，三者变化均相对较大，大于或等于 1624685 时，最高温度和平均温度变化值在 0.1°C 以内，压降变化值在 1Pa 以内，故选择网格数 1624685 进行后续研究。

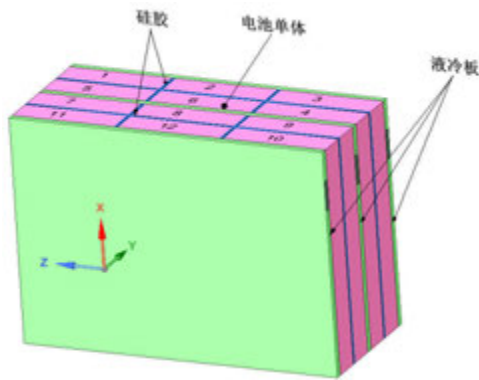


图 7 电池组几何模型

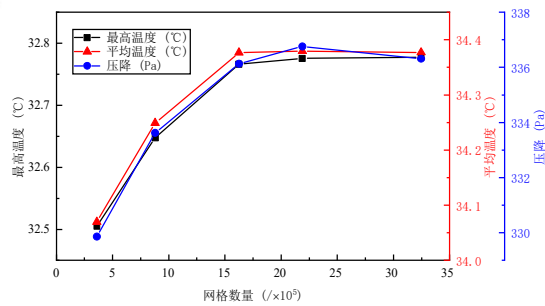


图 8 体网格数的独立检验

3 仿真结果与分析

3.1 不同液冷板散热特性对比

本节电池组以 5C 放电倍率生热，保持 2.2.1 中参数设置不变，取冷却液流速为 0.08m/s ，采用 FLUENT 软件进行仿真模拟，液冷板采用 2.1 中的四种不同形状。分别使用电池单体的最高温度来判断电池组是否工作在最佳温度范围内、电池组内的最大温差来反映温度均匀性、进出口压降来表征液冷板的经济性。

图 9 展示了四种液冷板的温度分布云图，由(a)、(b)可以看出选用平直形和三段式液冷板时，电池组的最高温度主要位于电池单体的下部区域，上部区域温度相对较低，上下温差较大。且与平直形对比来看，三段式云图下部高温区域明显减小。与平直形和三段式相比，两段式和两段渐变式最高温度主要位于中间 6 块电池单体上，而两侧电池温度明显比平直形和三段式更加均匀。使用四种液冷板时，电池单体的最高温度如图 10 所示。由图可知，三段式液冷板最高温度与平直形相比有明显下降，其原因是将翻转组合思想运用于流道设计，加强了流体扰动，从而增强了换热，其中 7 号电池改进最大，温度下降了 4.26°C ，9 号电池改进最小，温度下降了 2.97°C 。两段式与三段式相比，最高温度也有所降低，其中 7 号电池改进最大，温度下降了 4.26°C ，9 号电池改进最小，温度下降了 2.97°C ，显示，采用两段式设计减少流体碰撞次数，提高流速，更有利于电池组散热。两段渐变式与两段式相比，温度略有下降，改进最大为 7 号电池 0.22°C ，最小为 2 号电池 0.13°C 。综合来看，从原始设计模型平直形到最终设计模型两段渐变式，电池单体的最高温度都有明显降低。其中效果最明显的 7 号电池下降了 6.65°C ，最不明

显的 10 号电池下降了 5.80°C ，且两段渐变式最高温度为 34.38°C ，已位于锂电池最佳工作温度范围内^[2]。不同液冷板最大温差和降压如图 11 所示，由图可知，从平直形到两段渐变式，电池组的最大温差逐渐减小，温度均匀性逐步提高。两段渐变式相较于平直形，最大温差减小了 5.37°C (46.21%)。而三段式与平直形相比，由于翻转组合的设计增加了流道的复杂程度，流动阻力变大，致使压降增加了 359.85Pa ，与三段式相比，两段式在减少碰撞次数的同时还对挡板拐角进行了弧形优化，压降减小了 105.23Pa 。两段渐变式将两段式设计中大流道直入小流道优化为了渐变流入式，压降减小了 74.38Pa (17.63%)。

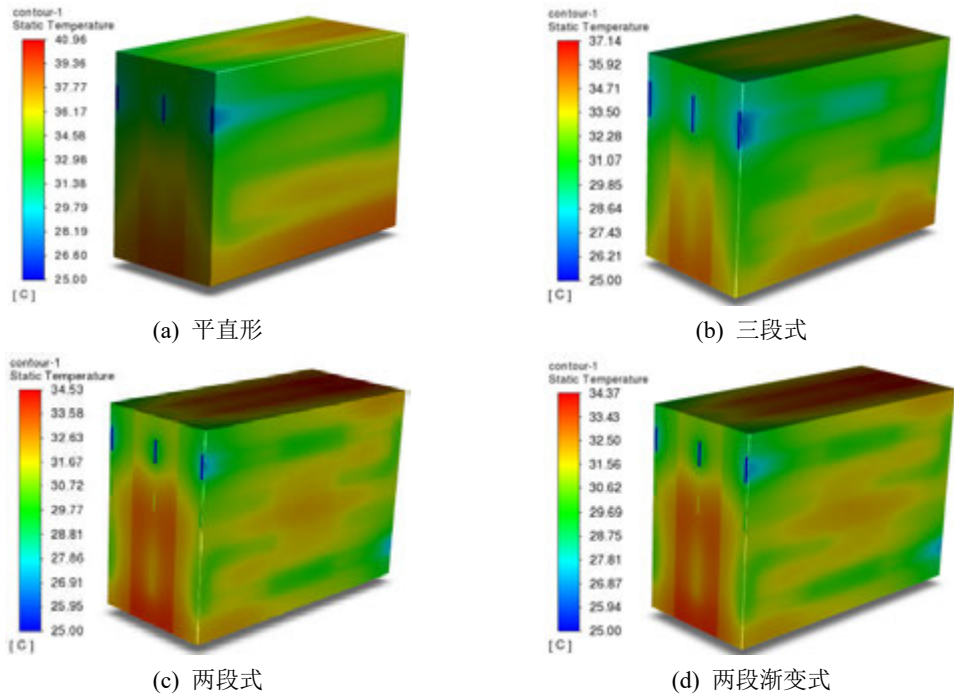


图 9 不同液冷板的电池组温度云图

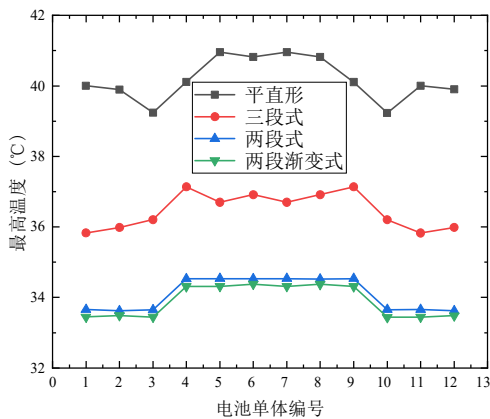


图 10 电池单体最高温度对比图

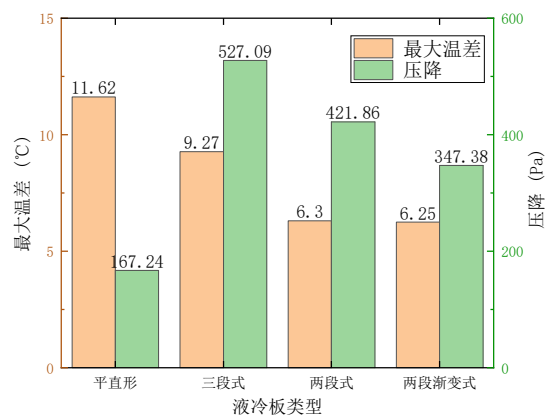


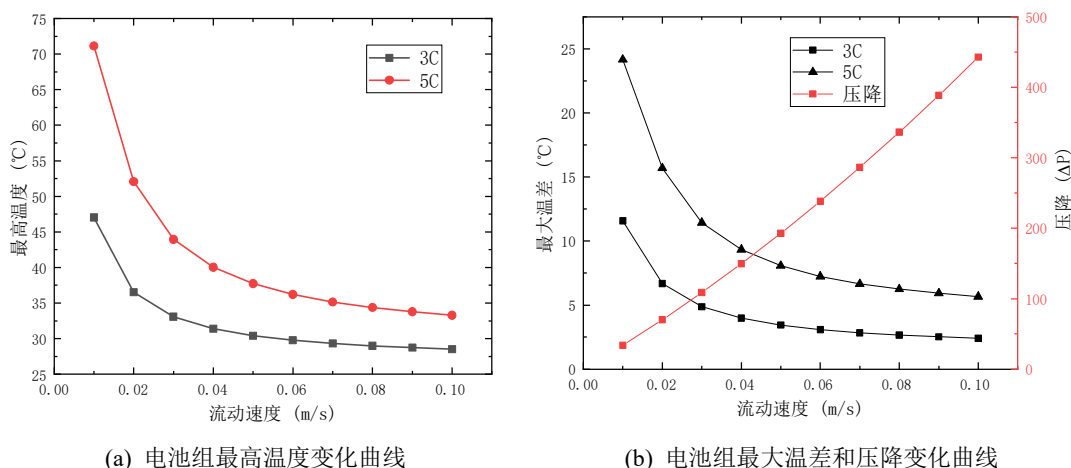
图 11 不同液冷板最大温差和压降对比图

3.2 不同冷却液流速对散热特性的影响

本节仍以 2.1 中电池组为几何模型，保持 2.2.1 中参数设置不变，分别在 3C 和 5C

放电倍率下，使液冷板流速从 0.01m/s 增加至 0.1m/s，对液冷板散热特性进行分析。

由图 12 可知，在不同放电倍率下，电池组的最高温度和最大温差随着流速的增加逐渐减小，且由图中相应曲线坡度可知，减小的幅度在逐渐变小，而压降却在逐渐增大，且增加的幅度在逐渐变大。3C 放电，流速为 0.02m/s 时，最高温度为 36.54℃，0.03m/s 时为 33.07℃，此时位于锂离子电池最佳工作温度范围内，且最大温差 4.87℃，小于 5℃，满足均匀性的设计要求。故 3C 放电时，在现有工况中流速选择 0.03m/s 最佳。5C 放电，流速大于 0.07m/s 时，最高温度低于 35℃，但所有工况最大温差均大于 5℃，无法满足热均匀性要求。



(a) 电池组最高温度变化曲线

(b) 电池组最大温差和压降变化曲线

图 12 电池组最高温度、最大温差和压降随不同流速的变化关系图

3.3 不同导热片对散热特性的影响

由 3.2 可知，5C 放电时，最大温差仍较大，本节选取最高温度低于 35℃ 的流速为 0.08m/s 的工况，继续进行最大温差的优化。要降低电池组的最大温差，需要增强电池单体间的换热，以均匀温度。可以考虑降低单体之间导热热阻的方式，即更换图 5 中导热硅胶片，使用导热系数更大的材料，这里选择铝和石墨两种，进行模拟仿真，研究它们对散热特性的影响，其物性参数如表 4 所示。由图 13(a)可知，将硅胶替换为铝和石墨后，位于中间的 6 块电池最高温度有所下降，两侧电池温度有所上升。显然，使用导热系数更大的材料能够将热量从高温单体传导至低温单体，更有效地降低了电池组的最高温度。与硅胶相比，使用铝时，改进最大的 6 号电池最高温度下降了 0.69℃，使用石墨时最高温度略低于铝。由图 13(b)可知，与硅胶相比，使用铝和石墨时最大温差明显减小，且在瞬间放电 5C 倍率下已处于 5℃ 左右，基本满足热需求。由表 4 可知，石墨密度远小于铝，重量更轻，故，导热片选择石墨材料为最佳。综合分析可知，与原始设计平直形相比，使用石墨作为导热片的两段渐变式液冷板，最高温度改进效果最好的 7 号电池下降了 7.31℃ (18.28%)，最大温差减小了 6.37℃ (54.82%)。

表 4 导热片材料热物理参数			
材料	密度/ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	比热容/ $\text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	导热系数/ $\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
硅胶	2750	1500	2
铝	2719	871	202.4
石墨	1000	850	151

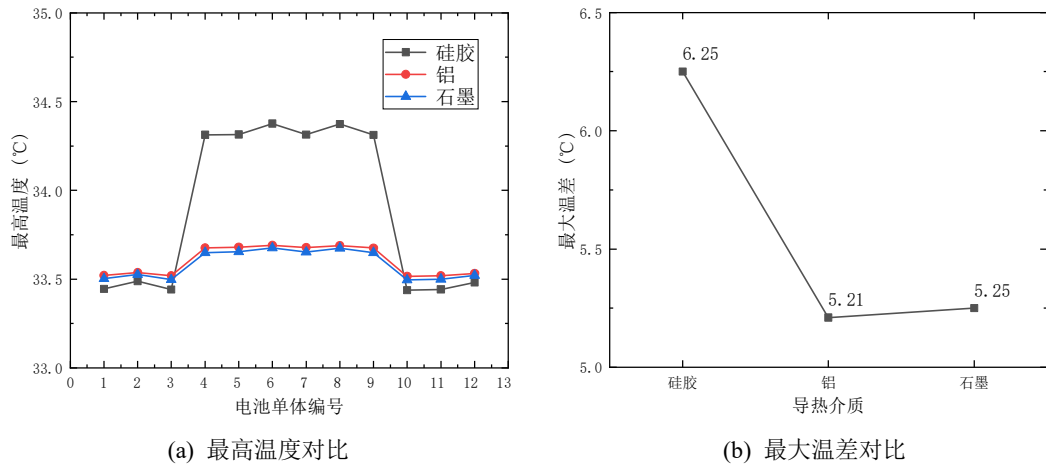


图 13 不同导热片下电池组最高温度、最大温差对比图

4 结 论

(1) 本文所提出的两段渐变式液冷板结构，与原始平直形通道相比，在降低最高温度和最大温差方面更具优越性。其中，最高温度改进效果最明显的 7 号电池下降了 6.65°C ，最大温差降低了 5.37°C 。

(2) 本文在设计过程中引入的渐变式通道有利于减小压损，提高经济性。仿真结果表明，与两段式相比，两段渐变式液冷板压降减小了 74.38Pa (17.63%)。

(3) 通过分析冷却液流速对散热特性的影响可知，在 3C 放电时，流速选取 0.03m/s 最为合适，既可将最高温度控制在最佳温度范围内，又可将最大温差控制在 5°C 以内。在 5C 放电时，流速大于 0.07m/s ，可将最高温度控制在最佳温度范围内，但最大温差仍无法满足热均匀性要求。

(4) 将导热片材料由硅胶替换为石墨，重量更轻且温度均匀性更好。与平直形相比，使用石墨作为导热片的两段渐变式液冷板，最高温度改进效果最明显的 7 号电池下降了 7.31°C (18.28%)，最大温差降低了 6.37°C (54.82%)，此时已基本满足最佳温度和热均匀性要求。

参考文献:

- [1] Yu L, Li Y P. A flexible-possibilistic stochastic programming method for planning municipal-scale energy system through introducing renewable energies and electric vehicles[J]. Journal of Cleaner Production, 2019, 207: 772-787.

- [2] Zhang G, Cao L, Ge S, et al. In situ measurement of radial temperature distributions in cylindrical Li-ion cells[J]. Journal of the electrochemical society, 2014, 161(10): A1499.
- [3] Rodrigues M-T F, Babu G, Gullapalli H, et al. A materials perspective on li-ion batteries at extreme temperatures: 8[J]. Nature Energy, 2017, 2(8): 1–14.
- [4] 张亚军, 王贺武, 等. 动力锂离子电池热失控燃烧特性研究进展[J]. 机械工程学报, 2019, 55(20): 17-27.
- [5] Feng X, Xu C, He X, et al. Mechanisms for the evolution of cell variations within a linixcoymnz o2/graphite lithium-ion battery pack caused by temperature non-uniformity[J]. Journal of Cleaner Production, 2018, 205: 447–462.
- [6] Rao Z, Qian Z, Kuang Y, et al. Thermal performance of liquid cooling based thermal management system for cylindrical lithium-ion battery module with variable contact surface[J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 123: 1514-1522.
- [7] Xia G, Cao L, Bi G. A review on battery thermal management in electric vehicle application[J]. Journal of power sources, 2017, 367: 90-105.
- [8] Wu W, Wang S, Wu W, et al. A critical review of battery thermal performance and liquid based battery thermal management[J]. Energy conversion and management, 2019, 182: 262-281.
- [9] Wang Y, Duong X Q, Zadeh P G, et al. Liquid-cooled cold plate for a Li-ion battery thermal management system designed by topology optimization[J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2023: 1-8.
- [10] Ma H, Su L, He B, et al. New design of U-turn type minichannel cold plate with hybrid fins for high temperature uniformity[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2022, 135: 106078.
- [11] Salimi A, Khoshvaght-Aliabadi M, Rashidi S. On thermal management of pouch type lithium-ion batteries by novel designs of wavy minichannel cold plates: Comparison of co-flow with counter-flow[J]. Journal of Energy Storage, 2022, 52: 104819.
- [12] 李潇, 陈江英, 李翔晟. 基于新型流道液冷板的动力电池热管理性能[J]. 电源技术, 2020, 44(10): 1438-1442.
- [13] 魏士震. 分段翻转组合式液冷板流道设计与散热性能分析[D]. 大连理工大学, 2021.
- [14] 劳永春. 液冷式锂离子电池热管理系统设计及优化研究[D]. 重庆交通大学, 2021.

高比能锂离子电池热失控机理与电解液安全调控

赵丽琦¹, 侯俊先^{*1}, 冯旭宁², 卢兰光², 徐佳³, 包成¹, 顾英哲³, 欧阳明

高²

(1. 北京科技大学能源与环境工程学院, 北京 100083)

(2. 清华大学车辆与运载学院, 北京 100084)

(3. 阿利昂斯汽车研发(上海)有限公司, 上海 200031)

(* Tel: 17611240831, Email: houjunxian@ustb.edu.cn)

摘要: 高能量密度锂离子电池可以有效提高新能源汽车续航里程, 但面临着急剧下降的热安全性问题。本文解析了高比能电池热失控机理, 并开发了高安全电解液, 提高电池的电化学性能和热安全性能。结果表明, 高比能电池热失控自产热反应、热失控触发反应、主放热反应分别为负极与电解液反应、正极与电解液反应、正极与负极反应。针对热失控触发反应开发了高安全电解液, 在单体层级将电池热失控触发温度从 193°C 升高至 207°C, 将硅碳电池安全性提升至与石墨电池相当。该研究为下一代高比能动力电池高安全设计提供理论基础。

关键词: 锂离子电池; 热失控; 安全调控; 硅碳负极; 超高镍

0 前言

我国宣布力争 2030 年前实现碳达峰、2060 年前实现碳中和^[1,2], 发展新能源汽车是实现双碳目标的重要途径之一。电动汽车快速发展的同时也伴随着消费者的“里程焦虑”, 为提高续航里程, 需要进一步提升锂离子电池的能量密度。高镍三元正极搭配硅碳负极的动力电池可实现 $350\text{Wh}\cdot\text{kg}^{-1}$ 的能量密度, 使电动汽车续航里程达到 600km 以上, 被认为是下一代最具商业化潜力的电池体系。因此高镍三元正极材料搭配硅碳负极材料电池体系为未来的发展趋势。高镍三元正极与硅碳负极可实现超高能量密度, 但存在安全性差、寿命短的两大大瓶颈问题。

硅碳负极能量密度高, 合金化 $\text{Li}_{22}\text{Si}_5$ 理论克容量为 $4000\text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$ ^[3], 通常 5%SiO 和石墨复合负极的比容量可达 $450\text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$ ^[4] 高于普通石墨材料 ($372\text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$)^[5]。但与常规的石墨负极相比, 硅负极在锂化和脱锂过程中通常会有剧烈的体积变化 (300-400%), 导致活性材料的粉化、固体电解质界面 (SEI) 的无节制生长、循环性能和安全性恶化^[6]。同时, 高镍三元层状正极材料 $\text{LiNi}_x\text{Co}_y\text{Mn}_z\text{O}_2$ (NCM, $x+y+z=1$, $x>0.6$) 包含 NCM622、NCM70、NCM811、NCM90, 其中 NCM90 的克容量最高, 可达到 $220\text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$ 。目前面

临主要挑战是由于 Li 在层状氧化物中的大量利用，其容量保持能力和热稳定性呈线性断崖式下降，并且释氧量增加^[7]。

近年来，电动汽车的起火爆炸事故频发，电动汽车平均事故率约万分之 2.5，造成重大生命安全及财产损失，而锂离子电池热失控是事故的核心原因。高温下动力电池热失控由内部化学反应引发，副反应前期产热较为缓慢，如 SEI 膜的分解，负极与电解液发生反应导致热量积累，进而引发热失控触发反应导致热量释放温度急剧上升，发生火灾和爆炸^[8]。针对高镍硅碳电池的安全改进一般采用正极包覆、电解液改进与隔膜优化等方法。Li 等^[9]人采用 TiO_2 包覆三元层状正极，可显著增强 NCM523 正极材料的界面稳定性，提高正极相变温度。He 等^[10]人采用离子液体电解液与局部高浓度醚类电解液稳定 NCM811|SiC 电池正负极界面，拓宽电化学窗口并提高电池的循环性能。Xiong 等^[11]人发现采用聚合物粘结剂与无 EC 电解液配合可在硅和石墨颗粒表面形成钝化层，适应硅碳负极的体积膨胀，从而提高电池的循环稳定性。Song 等^[12]人通过凝胶拉伸方法制备了一种纳米多孔非收缩隔膜阻断电池热失效过程中的化学物质串扰和放热反应，从而抑制电池发生热失控，同时，该隔膜优异的润湿性可以提高电池化成过程中电解液浸润的效率，从而实现稳定的电极界面和循环性能。但是，目前的研究缺少对于硅基电池热失效机理的深入认识，无法建立单体热失效与内部材料组分“关键反应”间的联系对应关系，此外，锂离子电池的安全调控技术多基于中高镍-石墨电池体系进行研究，且大多数只在扣电层级进行优化，未从全电池进行寿命和安全的验证，严重阻碍了高比能硅碳负极锂离子电池的开发和应用。针对下一代高镍硅碳商业化电池亟需从电池层级解析热失控机理并开发相应的安全调控技术。

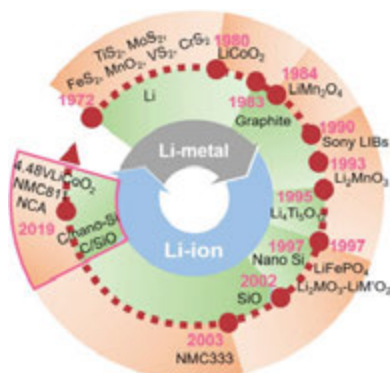


图 1 锂离子电池发展历史^[5]

Fig.1 History of lithium-ion battery development

本文针对高比能 NCM90|Gr@5%SiO 动力电池开展热失控机理研究，并从电解液角度开展安全调控。研究表明，NCM90|Gr@5%SiO 动力电池热失控自产热反应来源于负极与电解液放热反应，热失控触发反应为正极与电解液之间的反应，主放热反应为正极与负极放热反应。针对热失控触发这一关键反应，开发了高安全电解液，从材料层级使 NCM90|Gr@5%SiO 动力电池在 230°C 之前的放热量从 622.5J/g 降低为 548.2J/g，在单体层级上可将电池单体的热失控触发温度 T_2 从 193°C 升高至 207°C，将硅碳电池安全性提升至与石墨电池相当。同时，电化学性能测试表明高安全电解液可改善

NCM90|Gr@5%SiO 动力电池的容量与循环稳定性。本研究为高比能锂离子电池选型与安全性分析提供参考依据。

1 实验部分

1.1 电池样品

本研究采用的干电芯采购于科路得，均为 1Ah 单晶小软包干电芯。超高镍硅碳电池（NCM90|Gr@5%SiO）正极为单晶三元层状材料 $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ （NCM90），负极为石墨掺杂百分之五的氧化亚硅（Gr@5%SiO）；超高镍石墨电池（NCM90|Gr）正极为 $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ （NCM90），负极为石墨（Gr）。电解液采购于苏州新锐研科技有限公司，含水量小于 20ppm，常规电解液为 1M LiPF₆ in EC:EMC(3:7by vol)+0.5%VC+0.5%FEC（Based Electrolyte），安全电解液为 1M LiPF₆+0.3M LiFSI in EC:EMC(3:7by vol)+0.5%VC+0.5%FEC（Advanced Electrolyte）。

1.2 电化学性能测试

在手套箱（Super1220，米开罗那有限公司）内将 4g 电解液注入 1Ah 软包干电芯中，静置 24h。在 25℃恒温箱（MJS-SP250，南京莫杰斯能源科技有限公司）内，以 C/20 倍率对电池进行化成，形成良好的电极-电解质界面膜。采用真空封口机（MSK-115A-111，深圳市科晶智达有限公司）将气袋剪除、抽真空二封后静置 12h，再以 C/2 倍率在 2.8-4.2V 电压范围内循环 5 圈后，采用电化学工作站（Chi760，上海辰华仪器有限公司）对电池进行交流阻抗（EIS）测试。随后电池继续在 25℃下，以 C/2 倍率在 2.8-4.2V 电压范围内进行充放电，循环 150 圈后再次进行 EIS 测试，循环过程中记录电池容量及电压的变化。

1.3 绝热热失控测试

采用加速量热仪（ES-ARC）测试电池单体绝热热失控特性。ES-ARC 由英国 Thermal Hazard Technology 公司制造，腔体内径为 10cm，深度为 10cm。在 ARC 测试之前，将热电偶插入待测电池内部的中心位置，如图 2 所示。然后，用硅酮高温密封胶密封电池。ARC 工作时采用“加热-等待-搜寻”模式来探测样品的放热反应，从起始温度开始对样品进行加热，当温度升高一个步阶后，系统转入等待模式；让样品、样品容器和量热腔三者达到热平衡，使系统更精确的搜寻到样品的自放热反应；等待过程结束后，系统将自动进入搜寻模式，当样品温升速率达到 $0.02^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ ，系统判定样品出现自放热，进入绝热模式，记录自产热起始温度 T_1 与自放热速率^[13]。当样品温升速率达到 $1^\circ\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$ ，则达到了电池热失控的触发温度 T_2 。绝热热失控测试中达到的最高温度为 T_3 ，如果电池在预先设定的 350℃下没有热失控，ARC 系统将进入冷却模式。绝热热失控测试过程中采集电池热失控过程中的 T_1 、 T_2 、 T_3 以及温升速率 dT/dt ^[14]。

1.4 材料热稳定性测试

采用同步热分析-质谱联用仪（DSC-TG-MS）测试电池组分间的产热、产气与失重特性。同步热分析仪型号为 DSC/TGA Discovery SDT 650，由美国沃特世科技有限公司制造，质谱仪型号为 Agilent 5977B，由安捷伦科技有限公司制造。图 3 为 DSC-TG-MS



图 2 ES-ARC 测试示意图^[14]

Fig.2 Test diagram of ES-ARC

制样流程，在惰性气体氛围手套箱内拆解满电电池，采用 DMC 浸泡清洗三次正负极极片，60℃真空干燥 12h 后从极片上刮取正负极粉末。在手套箱中采用铝坩埚制备电池材料组分样品，样品质量基于全电池中各材料组分配比计算得到，如表 1，并在流动的高纯氩气气氛中以 10℃·min⁻¹ 的升温速率从 40℃加热到 550℃。测试结果的热流采用“正极+负极+电解液”总质量归一化。测试过程中记录热流、失重和产气的变化，探究电池组分间的关键放热反应与触发反应，并与电池单体热失控建立对应关系。

表 1 DSC-TG-MS 测试样品组合

Table 1 Samples of DSC-TG-MS

编号	样品组成	样品质量 (mg)	扫描速度 (°C·min ⁻¹)
1	正极 (Ca)	2	10
2	负极 (An)	1.5	10
3	电解液 (Ely)	1.5	10
4	正极+电解液 (Ca+Ely)	2+1.5	10
5	负极+电解液 (An+Ely)	1.5+1.5	10
6	正极+负极 (Ca+An)	2+1.5	10
7	正极+负极+电解液 (Ca+An+Ely)	2+1.5+1.8	10



图 3 DSC-TG-MS 制样流程

Fig.3 Sample preparation process of DSC-TG-MS

2 结果与讨论

2.1 高比能动力电池循环特性

图 4(a)为 1Ah 的 NCM90|Gr@5%SiO 和 NCM90|Gr 软包电池在使用 1M LiPF₆ in EC:EMC(3:7by vol)+0.5%VC+0.5%FEC 电解液时的循环性能。实验结果表明，硅碳电池在化成后容量为 1.15Ah，能量密度为 260Wh·kg⁻¹；而石墨电池的容量为 1.12Ah，能量密度为 230 Wh·kg⁻¹，这是由于 SiO 的理论克容量高于 Gr，因此在全电池中，含有 5%SiO 的硅碳电池初始容量略高于石墨电池。在 25℃下，采用 C/2 倍率于 2.8-4.2V 间循环 160 圈后，硅碳电池的容量保持率仅为 85.70%，而石墨电池的容量保持率为 86.34%，表明相较于石墨电池，硅碳电池由于体积膨胀大导致 SEI 膜易破碎分解，降低了电池的循环

稳定性。然而，从图 4(b)和图 4(c)可以看出，随着循环圈数的增加，硅碳电池的电化学窗口和放电容量并没有发生大幅度的变化，其稳定性和石墨电池相近。综上所述，当石墨负极添加 5%SiO 时，电池的容量和能量密度可以得到相应的提高，因 SiO 材料结构不稳定、体积膨胀大等缺点导致硅碳电池在循环性能上较石墨电池更差，但由于负极中 SiO 添加量只有 5%，因此其对电池循环寿命造成的影响并不大。

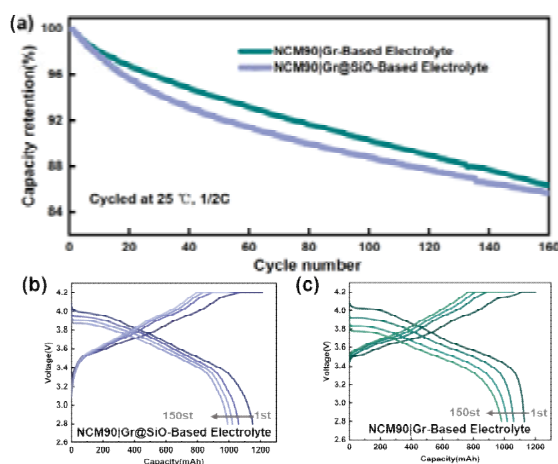


图 4 (a) 硅碳电池和石墨电池的循环性能图 (b) NCM90|Gr@5%SiO 和 (c) NCM90|Gr 电池充放电曲线
Fig.4 (a) Cycling performance curves, Charge and discharge curves of (b)NCM90|Gr@5%SiO and (c) NCM90|Gr batteries

2.2 高比能动力电池热失控机理

本文通过 ARC 测试从电池单体级别对比分析 NCM90|Gr@5%SiO 电池和 NCM90|Gr 电池的热失控特征，解析负极掺杂 SiO 材料对于全电池安全性的影响，同时开展 DSC-TG-MS 测试从材料层级表征电池内部各材料组分的热稳定性，探究硅碳电池热失控链式反应中的关键热触发反应和主要放热反应，将 ARC 数据和 DSC-TG-MS 数据结合，可对该电池热失控时序进行解析。图 5(a)为满电 1Ah 硅碳电池和石墨电池基于常规电解液的 ARC 测试结果，硅碳电池和石墨电池的自产热温度 T_1 ($dT/dt=0.02^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$) 均为 132°C ，电池从此时开始积累自放热热量，随着温度进一步升高，电池内部的其他副反应被触发开始产热将电池温度推升至热失控的触发温度 T_2 ($dT/dt=1^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$)，硅碳电池和石墨电池的热失控触发温度分别为 193°C 和 200°C ，说明硅碳电池自产热速率与热量积累大于石墨电池，这一点与图 5(c)中两款电池全组分材料释热量相吻合，在 230°C 之前，硅碳电池累积释热量为 622.5J/g ，大于石墨电池的释热量， 600.4J/g 。硅碳电池热失控达到的最高温度 T_3 为 773°C ，比石墨电池高 75°C ，说明硅碳电池整体放热量大于石墨电池，这与材料热特性测试中的结果一致，如图 5(c)，硅碳全组分放热总量比石墨电池大 150J/g ，此外通过图 5(d)和(e)对比可以发现硅碳电池全组分材料发生反应时会吸收更多的氧气参与到氧化还原反应中加剧反应放热。和综上所述，5%SiO 的加入，降低了热失控触发温度 T_2 ，提高了热失控最高温度 T_3 ，增加了热失控过程的总放热量，恶化了电池单体的热安全性能。

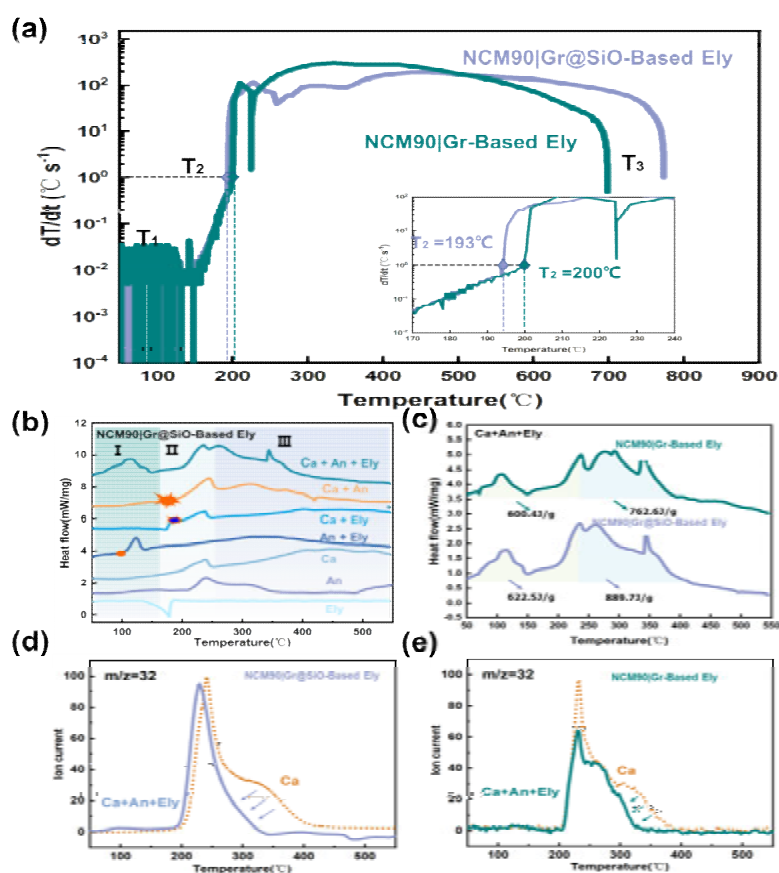


图 5(a) 硅碳电池和石墨电池的 ARC 结果 (b) 硅碳电池 DSC 时序图 (c) 硅碳电池和石墨电池全组分释热量对比图 (d) 硅碳电池全组分和单独正极的释氧图 (e) 石墨电池全组分和单独正极的释氧图

Fig.5 (a) ARC test of NCM90|Gr@5%SiO and NCM90|Gr cells. (b) Time sequence diagram of NCM90|Gr@5%SiO (c) Heat flow of Ca+An+Ely. Oxygen release of (d) NCM90|Gr@5%SiO and (e) NCM90|Gr batteries

图 5(b)对 NCM90|Gr@5%SiO 电池进行了时序解析, 综合 ARC 结果, 发现区域 1 内负极电解液反应在 100°C 左右的放热峰作用于全电池中的第一个峰, 说明负极 SEI 受热分解后, 嵌锂负极会与电解液中的 LiPF_6 发生反应释放热量导致初始热积累, 这与单体电池 ARC 测试中的自产热起始温度 T_1 相吻合; 区域二的热量来自于正极电解液反应以及正极负极间的反应, 高镍三元正极在 200°C 左右开始释氧, 氧气与电解液中的 EC 发生反应释放大量的热^[15], 触发电池热失控, 这与单体电池热失控 T_2 相对应。同时, 多余的氧气被释放出来串扰到负极, 与嵌锂负极发生剧烈氧化还原反应释放大量热量将电池推升至最高温度 T_3 。在热失控过程中, 负极电解液导致了初始热量累积, 正极释氧与电解液的反应为触发反应, 正极与嵌锂负极反应为主放热反应, 释放出来的热量将电池推升至最高温度^[16]。

通过与石墨电池对比, 发现硅碳电池的热安全性更差。一方面, 这与硅碳本身具有结构不稳定易膨胀、反应活性高等特征有关, 另外, 与石墨负极不同的是, 硅碳负极在嵌锂过程中会形成锂硅合金、硅酸锂等物质, 推测这些物质与电解液和正极之间会发生

反应释放热量^[17]。

2.3 高安全电解液提升电池寿命

电解质中锂盐是电池的重要组成成分，理想的锂盐应当具备较好的电化学稳定性和热稳定性，且具有良好的成膜性能。 LiPF_6 是目前应用最广泛的锂盐， LiPF_6 具有较高的离子电导率和溶解性，可在电极表面形成良好的钝化膜，但其热稳定性较差，遇微量水易分解形成 HF 和 POF_3 ，继而催化负极界面膜 SEI 分解，造成正负极活性材料损失，导致电池在循环过程中不可逆的容量和寿命衰减^[18]。 LiFSI 是有望取代 LiPF_6 的一种有前景的锂盐^[19]。 LiFSI 分子中的氟原子有较强的吸电子性，能够使 N 上的负电荷离域，离子缔合配对的作用比较弱，使得 Li^+ 容易解离，因此其离子电导率较高^[20]。

表 2 等效电路拟合结果

Table 2 Equivalent circuit fitting results

电池	NCM90 Gr@5%SiO-Based Electrolyte				NCM90 Gr@5%SiO-Advanced Electrolyte			
阻抗	R_b	R_{sei}	R_{ct}	W	R_b	R_{sei}	R_{ct}	W
新鲜电池	0.015	0.018	0.040	0.132	0.015	0.017	0.035	0.131
循环 150 圈	0.019	0.014	0.038	0.146	0.016	0.012	0.036	0.141

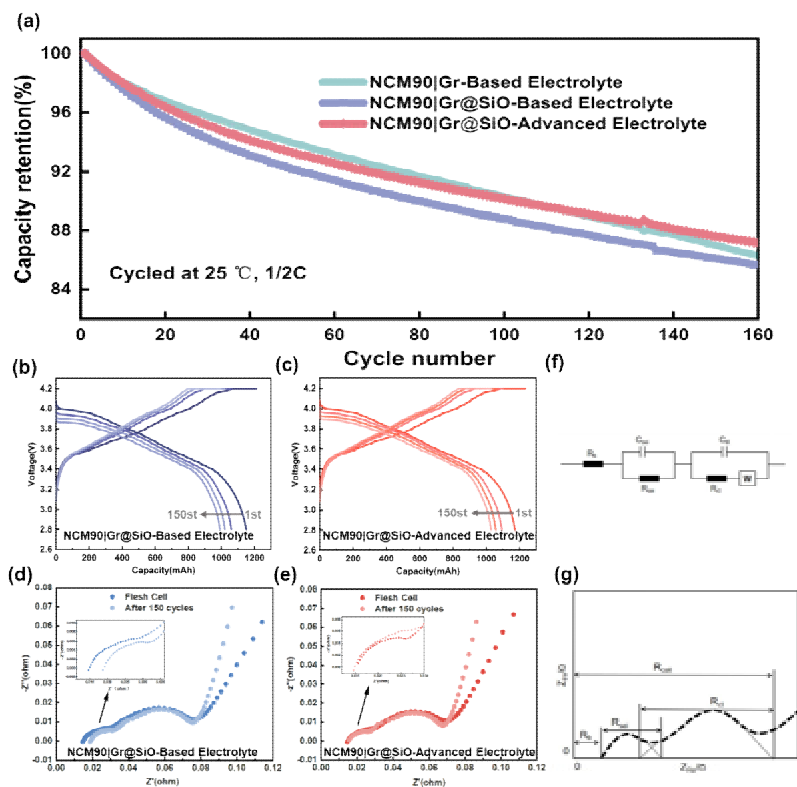


图 6 (a) 硅碳电池和石墨电池的循环性能图，NCM90|Gr@5%SiO 电池采用(b)常规电解液和(c)安全电解液充放电曲线，NCM90|Gr@5%SiO 电池采用(d)常规电解液和(e)安全电解液交流阻抗谱，(f)等效电路模型，(g)电化学阻抗谱

Figure 6 (a)The cycle performance of batteries, Charge and discharge curve of NCM90|Gr@5% SiO battery using (b)based electrolyte and (c) advanced electrolyte, Impedance spectrum of NCM90|Gr@5% SiO battery using (d) based electrolyte and (e) advanced electrolyte, (f) Equivalent circuit model, (g) Electrochemical impedance spectroscopy

相比商用锂盐 LiPF_6 , LiFSI 具有对水不敏感、离子电导率高和热稳定性好等优点, 应用于全电池中可形成更稳定的 SEI, 抑制过渡金属溶出。本研究中, 为调控 $\text{NCM90|Gr@5\%SiO}$ 电池的电化学性能和热安全性能开发了一种含有 LiFSI 锂盐的安全电解液。实验结果表明, 在常规电解液基础上添加 0.3M LiFSI 可有效提高电池的循环稳定性, 图 5(a)对比了 $\text{NCM90|Gr@5\%SiO}$ 电池基于常规电解液和安全电解液下循环的容量保持率, 在 25°C 恒温箱, 以 $\text{C}/2$ 倍率循环 160 圈后, 基于安全电解液的电池的容量保持率为 87.16% , 高于常规电解液电池 (85.70%)。从图 5(b)和图 5(c)可以看出, 随着循环圈数的增加, 安全电解液电池的电化学窗口和放电容量保持较好, 说明添加 0.3M LiFSI 可以构筑更稳定的 SEI 膜, 稳定硅碳负极界面, 减小体积膨胀带来的循环不稳定性。

采用电化学阻抗谱进一步探究 $\text{NCM90|Gr@5\%SiO}$ 动力电池基于不同电解液的电化学性能。如图 5(f)和 5(g)所示, 高频区为固体电解质膜电阻 (R_{sei}), 中频区为电荷转移电阻 (R_{ct}), 低频区域为锂离子扩散 (W), 采用等效电路拟合 EIS 谱, 其中 R_{el} 为欧姆电阻, R_{sei} 为固体电解质界面电阻, R_{ct} 为电荷转移电阻, W 为锂离子扩散电阻。图 5(d)和 5(e)分别为硅碳电池基于常规电解液和安全电解液时, 新鲜电池和循环 150 圈后的老化电池的 EIS 谱, 表 2 为等效电路模型拟合结果。可以看出, 两款电池循环前后的表面膜阻抗和电荷转移阻抗变化不大, 但欧姆阻抗和扩散阻抗增加, 且采用安全电解液时, 二者变化相较于常规电解液更小。通常, 循环过程中电解液消耗浓度降低, 影响电解液中锂离子的扩散, 同时电极表面活性物质的脱落损失也会消耗电池内部的可用锂离子, 增加电池的扩散阻抗。综上, 安全电解液可以构筑更稳定、柔性更大的固体电解质界面, 减少表面活性物质的脱落损失, 提高电池的循环寿命。

2.4 高安全电解液调控电池安全

$\text{NCM90|Gr@5\%SiO}$ 动力电池在常规电解液和安全电解液中的安全性能如图 7(a)所示, 使用安全电解液电池的自产热起始温度 T_1 为 132.23°C , 与采用常规电解液电池的 T_1 接近。安全电池的热失控触发温度 T_2 为 207°C , 比常规电池的 T_2 高了 14°C , 这表明安全电池的自产热反应速率更小, 且触发反应的起始温度被延后, 这与图 7(b)中的电池材料释热结果一致, 在 230°C 之前, 基于常规电解液电池的总放热量为 632.5J/g , 而基于安全电解液电池的放热量仅为 548.2J/g , 且图 7(c)表明, LiFSI 的分解温度为 305°C , 这表明, LiFSI 具有热稳定性, 添加 0.3M LiFSI 可以有效调控电池内部材料的反应时序, 推迟反应放热时间, 提高反应起始温度从而延缓全电池的热失控。但基于安全电解液的全电池热失控最高温度 T_3 为 799°C , 比基于常规电解液的电池高出 26°C , 这是由于 LiFSI 的加入使得整个电池的化学体系能量增加所导致的, 且与 LiPF_6 分解时吸热不一致的是, LiFSI 在 300°C 分解后会放出大量的热, 因此, 基于安全电解液电池的热失控最高温度高于常规电池是正常的。通常我们认为触发温度 T_2 是热失控的决定因素, 一旦电池温度达到 T_2 , 温度呈指数上升, 将造成无法挽回的损失, 因此, 调控 T_2 是改进电池安全性能的重要方向。经证实, 添加 0.3M LiFSI 的安全电解液可以有效提高 $\text{NCM90|Gr@5\%SiO}$ 电池的安全性能。

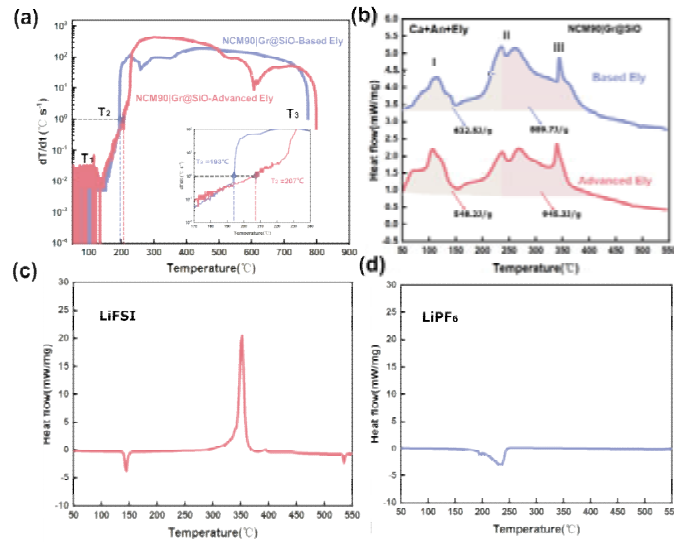


图 7 (a)基于常规电解液和安全电解液的硅碳电池 ARC 结果 (b) 基于常规电解液和安全电解液的硅碳电池全组分释热量对比图 (c) LiFSI 释热曲线 (d) LiPF₆ 释热曲线
Figure 7 (a) ARC results and (b) Heat release comparison of NCM90|Gr@5%SiO with based electrolyte and advanced electrolyte (c) Heat release of LiFSI (d) Heat release of LiPF₆

3 结论

本文从电化学性能和热安全性能两个方向探究了 NCM90|Gr@5%SiO 高比能动力电池的热失效机理, 并通过开发安全电解液调控电池的循环性能和安全性能, 获得的主要结论如下:

(1) NCM90|Gr@5%SiO 高比能动力电池发生热失控时, 首先由嵌锂负极与电解液发生反应导致初始热量积累, 随着温度上升, 正极释氧与电解液发生反应触发电池热失控, 继而引发正极释氧与嵌锂负极反应释放大量热将电池推升至热失控最高温度。

(2) NCM90|Gr@5%SiO 电池的循环性能相较于 NCM90|Gr 稍差, 循环 160 圈后, 硅碳电池容量保持率仅为 85.70%, 而石墨电池的容量保持率为 86.34%。使用安全电解液可以有效提高硅碳电池的循环性能, 使其循环 160 圈后容量保持率可达 87.16%。

(3) NCM90|Gr@5%SiO 电池由于硅碳材料的热不稳定性导致其安全性能比 NCM90|Gr 电池差, 副反应速率增加放热提前, 热失控触发温度 T₂ 比石墨电池低 7°C, 主放热反应更剧烈导致最高温度 T₃ 比石墨电池高 75°C。安全电解液可有效延缓硅碳电池自产热速率, 提高电池的热失控触发温度 T₂ 约 14°C, 改善电池安全性。

参考文献

- [1] 《节能与新能源汽车产业发展规划(2012-2020 年)》发布[J]. 电力系统自动化, 2012, 36(15): 119-119. Release of Energy Saving and New Energy Vehicle Industry Development Plan (2012-2020) [J]. Automation of Electric Power Systems, 2012, 36(15): 119-119.
- [2] 《节能与环保》编辑部. 实现“碳达峰、碳中和”中国在行动[J]. 节能与环保, 2021(4): 前插 1. Editorial Department of Energy Conservation and Environmental Protection. China is taking action to achieve "carbon peak and carbon neutrality" [J]. Energy Conservation and Environmental Protection, 2021(4): Front insert 1.

- [3] Feng K, Ahn W, Lui G, et al. Implementing an in-situ carbon network in Si/reduced graphene oxide for high performance lithium-ion battery anodes[J]. *Nano Energy*, 2016, 19: 187-197.
- [4] Wang L, Wu Z, Zou J, et al. Li-free Cathode Materials for High Energy Density Lithium Batteries[J]. *Joule*, 2019, 3(9): 2086-2102.
- [5] Xu C, Wang B, Luo H, et al. Embedding Silicon in Pinecone-Derived Porous Carbon as a High-Performance Anode for Lithium-Ion Batteries[J]. *ChemElectroChem*, 2020, 7(13): 2889-2895.
- [6] Son Y, Sim S, Ma H, et al. Exploring Critical Factors Affecting Strain Distribution in 1D Silicon-Based Nanostructures for Lithium-Ion Battery Anodes[J]. *Advanced materials (Deerfield Beach, Fla.)*, 2018, 30(15): e1705430.
- [7] 刘磊, 包珊珊, 何欢, 等. 锂离子电池富镍三元正极材料研究进展[J]. *电子元件与材料*, 2017, 36(12): 58-65.
- Liu, L., Bao, S. & He, H. et al. Research progress of nickel rich ternary cathode materials for lithium ion batteries [J]. *Electronic Components and Materials*, 2017, 36(12): 58-65.
- [8] Feng X, Ouyang M, Liu X, et al. Thermal runaway mechanism of lithium ion battery for electric vehicles: A review[J]. *Energy Storage Materials*, 2018, 10: 246-267.
- [9] Li Y, Liu X, Ren D, et al. Toward a high-voltage fast-charging pouch cell with TiO₂ cathode coating and enhanced battery safety[J]. *Nano Energy*, 2020, 71: 104643.
- [10] He S G, Huang S M, Zhao Y, et al. Design of a Dual-Electrolyte Battery System Based on a High-Energy NCM811-Si/C Full Battery Electrode-Compatible Electrolyte[J]. *ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES*, 2021, 13(45): 54069-54078.
- [11] Xiong J, Dupré N, Moreau P, et al. From the Direct Observation of a PAA-Based Binder Using STEM-VEELS to the Ageing Mechanism of Silicon/Graphite Anode with High Areal Capacity Cycled in an FEC-Rich and EC-Free Electrolyte[J]. *Advanced Energy Materials*, 2022, 12(12): 2103348.
- [12] Song Y, Liu X, Ren D, et al. Simultaneously Blocking Chemical Crosstalk and Internal Short Circuit via Gel-Stretching Derived Nanoporous Non-Shrinkage Separator for Safe Lithium-Ion Batteries[J]. *Advanced Materials*, 2022, 34(2): 2106335.
- [13] Feng X, Zheng S, Ren D, et al. Key Characteristics for Thermal Runaway of Li-ion Batteries[J]. *Energy Procedia*, 2019, 158: 4684-4689.
- [14] Feng X, Zheng S, Ren D, et al. Investigating the thermal runaway mechanisms of lithium-ion batteries based on thermal analysis database[J]. *Applied energy*, 2019, 246(Jul.15): 53-64.
- [15] Hou J, Feng X, Wang L, et al. Unlocking the self-supported thermal runaway of high-energy lithium-ion batteries[J]. *Energy Storage Materials*, 2021, 39: 395-402.
- [16] Hou J, Lu L, Wang L, et al. Thermal runaway of Lithium-ion batteries employing LiN(SO₂F)₂-based concentrated electrolytes[J]. *Nat Commun*, 2020, 11(1): 5100.
- [17] Strategies for improving the storage performance of silicon-based anodes in lithium-ion batteries[J]. *Nano Research*, 2019, 12(8): 1739-1749.
- [18] Yang H, Zhuang G V, Ross P N. Thermal stability of LiPF₆ salt and Li-ion battery electrolytes containing LiPF₆[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 161(1): 573-579.
- [19] Han S-D, Borodin O, Seo D M, et al. Electrolyte Solvation and Ionic Association: V. Acetonitrile-Lithium Bis(fluorosulfonyl)imide (LiFSI) Mixtures[J]. *Journal of The Electrochemical Society*, 2014, 161(14): A2042.
- [20] Evans T, Olson J, Bhat V, et al. Effect of organic solvent addition to PYR13FSI + LiFSI electrolytes on aluminum oxidation and rate performance of Li(Ni_{1/3}Mn_{1/3}Co_{1/3})O₂ cathodes[J]. *Journal of Power Sources*, 2014, 265: 132-139.

小电压下离子种类对过冷盐溶液冻结规律的影响

刘洋, 陈民*

(清华大学航天航空学院, 传热强化与过程节能教育部重点实验室, 北京, 100084)

(Tel: 010-62797062, Email: mchen@tsinghua.edu.cn)

摘要: 本文研究了低电压下多种盐溶液过冷液滴的冻结现象, 测量了液滴的冻结温度。实验表明正负方向电场对过冷液滴的冻结影响不同, 且不同盐溶液液滴对外电场的响应有差异。本文基于双电层假设, 提出了外电场影响液滴-电极界面形核率的机制。双电层内电场增加了形核所需能量, 从而抑制形核。不同方向的外电场介由增强或削弱双电层影响形核率。离子水合半径决定双电层厚度, 进而造成不同盐溶液液滴冻结温度对给定外电压的响应差异。

关键词: 过冷液滴; 盐溶液; 双电层; 电场强度; 形核率。

0 引言

实现对过冷液滴结冰温度的控制在防冰[1, 2]、食品保鲜[3, 4]等领域有重要价值。如在航空业中, 抑制机翼表面过冷水滴的冻结可以极大地降低除冰的开销[1]。在食品保鲜业中, 抑制食品内液滴在低温下的冻结可极大提升解冻后食品的质量[4]。调控过冷液滴结冰的一种有效途径是以外加电场控制液滴形核的电冻结方法。Dufour 最早观察到施加外电场能使水滴形核温度升高[5]。随后的诸多研究支持了这一结论, 并将其解释为极性水分子在外电场下倾向于规则排列, 促进冰核结构的形成[6, 7]。电场的大小、方向等性质对水滴形核过程有较大影响。根据分子动力学模拟和经典成核理论, 促进冰晶生成的典型电场需要达到 $10^9 V/m$ 量级, 但实验中观察到 $10^5 V/m$ 的电场强度已能明显促进水滴形核[6, 8, 9]。进一步的实验证明, 电场强度与水滴形核温度的升高呈显著正相关[10]。就静电场方向而言, Zhang 等人指出电场方向对液滴冻结过冷度无影响, 但也有实验表明分别携带正负电荷的表面对结冰有相反的影响[9, 11, 12]。由于电场对水滴形核的影响涉及环境湿度、液滴形状、水滴纯净程度等诸多因素, 现有的电场对水滴形核影响规律的实验研究尚未有统一的结果[13]。

在防冰除冰、食品冷冻等实际应用中, 水体常含有电解质离子, 离子在外电场下的局部富集行为会对过冷水的电冻结造成可观影响, 因此研究离子溶液的冻结规律同样具有重要意义。现有的溶液冻结研究主要聚焦于离子种类对溶液形核温度的影响[14, 15]。Javitt 等人指出, 由于离子空间结构的差异, 水溶液中 Cl^- 、 H_3O^+ 等“破冰离子”的加入可以抑制成核, 而 NO_3^- 等“制冰离子”促进成核[16]。在生理盐水的冻结研究中, 实验证明低

至 10^2V/m 的电场已能抑制溶液形核，且抑制效果与电场强度正相关[17]。另一方面，Petersen 等人在实验中未观察到外加电场对 NaCl 溶液形核的影响，并将其归因于 NaCl 的低熔点[18]。总之，虽然已有诸多研究探讨了电场对过冷盐溶液形核的影响，但离子种类、电场方向等因素对过冷盐溶液形核的影响规律有待进一步挖掘。

本文研究了直流小电压（1V）下不同过冷盐溶液的冻结规律，记录了同浓度的过冷 LiCl、KCl 和 CsCl 溶液液滴在外加不同方向电场下的形核温度。实验表明，正负电场均抑制过冷溶液的冻结，但不同方向电场的影响幅度与离子种类有关。据此，本文基于双电层模型提出了离子双电层影响过冷液滴冻结的机制，认为离子水合直径通过影响双电层厚度决定双电层内的场强，进而产生不同程度的抑制结冰效果，得出施加从结冰表面指向液滴的电场、加入水合半径更小的离子有助于抑制过冷溶液形核的结论。

1 实验方法

实验装置如图 1 所示，其中液滴冻结装置水平固定于三轴可调的光学平台上。液滴置于光滑铂箔上，铂箔通过导热硅脂与其下方的半导体制冷片粘接，半导体制冷片通过外加直流电压和循环水冷系统对液滴降温。铂丝竖直插入液滴顶部，和铂箔一同作为正负电极通过外加直流小电压对液滴施加电场。测温热电偶固定在贴近液滴的侧边，但不与液滴接触。整个冻结装置加盖一个覆有隔热棉的有机玻璃罩，以减少环境对液滴冻结的影响。

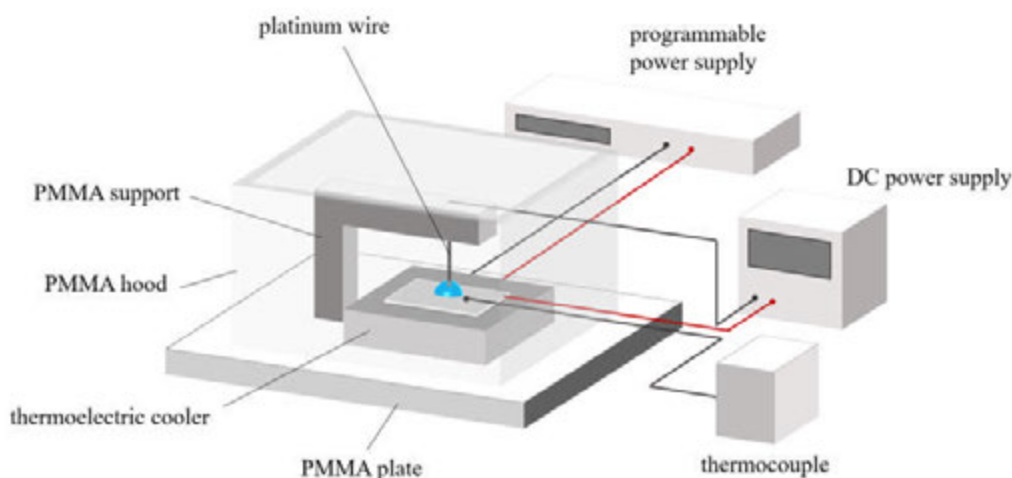


图 1 实验装置示意图

实验所用铂箔与铂丝采购自智丰益公司。铂具有良好的导热导电性，且电化学性质稳定，适合作为本实验的电极材料。实验所用铂丝直径为 0.05mm，穿过有机玻璃支架插入水中，支架保证其竖直和稳定。半导体制冷片输出功率与两端电压呈正相关，通过编写输入电压脚本，可编程电源（Keysight-N5767A 型，精度 0.01V）对制冷片施加变化的电压使冷端温度近似线性下降。通过铂电极施加在液滴上的电压由直流稳压电源（PS-6005D 型，精度 0.1V）提供，电源电压设置为 1V，低于盐溶液的电解电压，防止电化学反应的发生。电路中未观察到 μA 量级以上的宏观电流，保证了施加电压过程的稳定性。在本实验中，铂箔连接电源正极的电场方向规定为正方向，反之，铂丝连接电源正极称

为负方向。

考虑电化学性质稳定的简单离子，实验选择 0.1mol/L 的 LiCl 、 KCl 和 CsCl 溶液作为冻结工质，液滴体积均为 $4\mu\text{L}$ 。溶液浓度与体积的选取与现有研究相近，以确保良好的可比性[12, 17-19]。实验中观察到不同种类液滴在铂箔表面的接触角均保持在 62° 附近，且实验中控制铂丝下端与铂箔间距相同，液滴、铂丝和热电偶相对位置不变，铂箔表面平整与光滑程度不变，以保证实验的一致性。此外，实验中未观察到液滴上施加的电压对热电偶测温值的影响。

实验开始时，依次用超纯水、乙醇、超纯水清洗铂箔和铂丝表面，以排除前序实验可能带来的杂质干扰。从液滴放置于表面开始计时，向有机玻璃罩内持续通入氮气，经过相同时间（150s）后开始降温，并停止通入氮气，直至液滴冻结。实验使用热电偶（精度 0.1K ）实时记录液滴表面温度的变化曲线。预实验中使用多个热电偶同时测量液滴不同位置的温度，其最大偏差在 2°C 以内，同时由于实验中测量位置固定，因此测量点温度可以代表液滴的相对过冷度，可在不同组实验间比较。实验通过液滴冻结瞬间的再辉过程识别冻结时刻和温度。图 2 展示了单次 0.1mol/L KCl 溶液液滴的冻结实验中，热电偶测量的液滴表面温度变化曲线。由图 2 可见，240s 前后液滴表面出现约 7°C 的大幅温度回升，这是由于过冷液滴冻结瞬间的潜热释放。因此，可认为该时刻液滴发生冻结，回升前瞬间的温度（红色虚线所示）为液滴冻结温度。液滴再辉后，停止降温，使表面自然回升至室温，用吸水纸清除解冻的液滴。

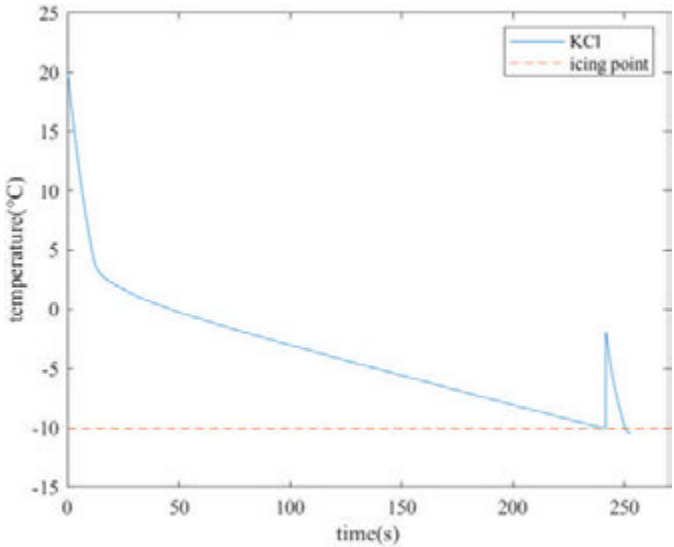


图 2 单次液滴冻结实验中的降温曲线图。图中蓝色曲线为热电偶测得的液滴表面温度，虚线为液滴冻结温度。

2 实验结果

依据上述实验方法，本文测量了 0.1mol/L 的过冷 LiCl 、 KCl 和 CsCl 溶液液滴在小电压下的冻结温度，每组实验重复 5 次，实验结果如图 3 所示。

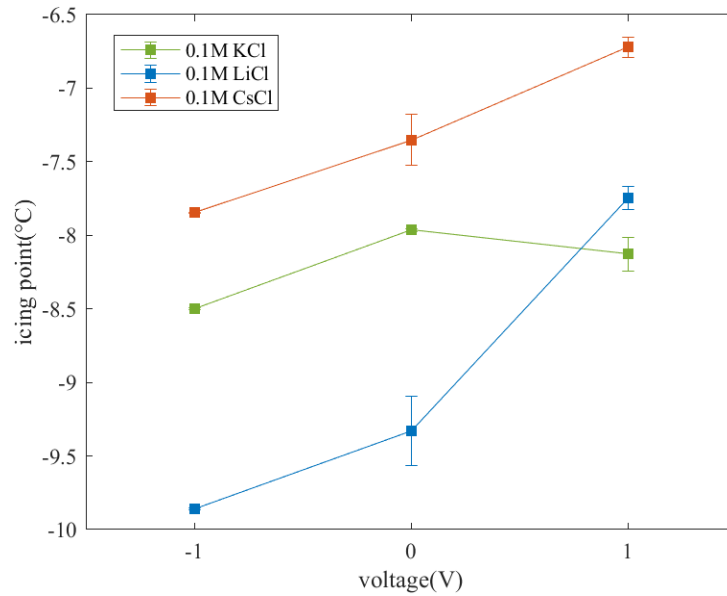


图3 相同浓度的过冷 LiCl 、 KCl 和 CsCl 溶液液滴在小电压下的冻结温度。图中的正方形代表5次实验的平均冻结温度，误差条代表多次实验的标准差。

如图3所示，三种溶液均在-1V的电场下有最低的平均冻结温度，且冻结温度随电压由负到正变化总体呈上升趋势，但 0.1mol/L KCl 溶液在0V时平均冻结温度高于+1V时的情况。此外，在0V及-1V下，各溶液液滴的平均冻结温度大小关系为 $\text{LiCl} < \text{KCl} < \text{CsCl}$ 。

本实验还通过高速摄影记录了液滴冻结时的形核位置，图4展示了其中一次典型的形核过程。由侧视和俯视图可知，液滴的初始形核位点发生在液滴、铂箔和空气的交界处，这与异质形核概率远大于均质形核概率相吻合。液滴的形核并不发生于铂丝电极与液滴顶部的接触处，这可能是由于液滴与铂丝的接触线长度过小，形核概率与底面相比过低。

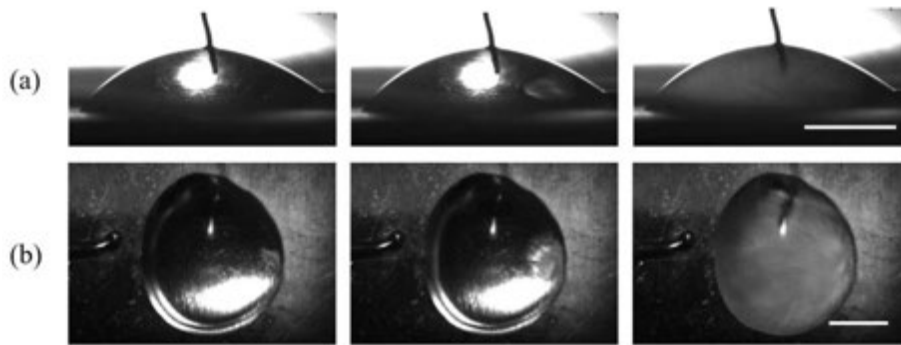


图4 单次过冷液滴结冰实验的高速摄影快照：(a)侧视图；(b)俯视图。每行照片从左至右：冻结前，冻结初始时刻，冻结后。侧视图顶部细线为铂丝电极，俯视图左侧细线为热电偶。图中比例尺均为1mm。

3 理论分析与讨论

由于液滴形核发生在液滴与铂箔的交界处，可采用适用于异质形核的模型讨论。在

盐溶液和金属表面存在电势差时，界面处将集聚金属表面的电荷和溶液中的异号离子，形成双电层。双电层结构可由 Gouy-Chapman-Stern 模型表示（见图 5），在金属表面吸附有一层水分子，异质形核在此处发生；当不存在特性吸附离子时，该层水分子外侧为一层水合电解质离子，该层以内的部分被称为外亥姆霍兹层（Outer Helmholtz plane, OHP），承受双电层的主要电压降[20]。OHP 的厚度与水合电解质离子半径正相关，一般为 1nm 量级[21, 22]。不同离子种类对应的 OHP 厚度大小关系可由相应水合离子半径推知。

形核开始时，在吸附水层产生形核位点后，冰晶在生长中需要将 OHP 层内的水合离子向外排挤，克服 OHP 层内的电场做功，因此盐溶液诱导的 OHP 层对形核有抑制作用，抑制程度与 OHP 层内场强正相关。在实验中外加的 1V 电压下，双电层上的压降在 1V 量级，因此 OHP 层内场强为 10^9V/m 量级，远高于现有实验研究中观察到的可影响过冷水形核的电场阈值，可对过冷液滴的形核产生可观影响。此外，由于水合离子直径往往远大于单个水分子直径，OHP 层内的水合离子在形核过程中挤占水分子空间，阻碍规则冰晶结构的形成，因此 OHP 层内的水合离子密度也会影响界面形核温度。

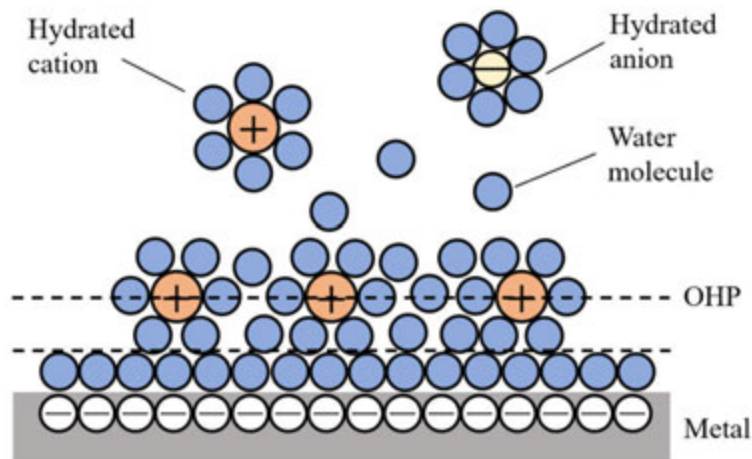


图 5 双电层的 Gouy-Chapman-Stern 模型示意图

即使不存在外电场时，金属表面与盐溶液接触也会自发感应出表面电荷，从而形成双电层[22]。由于金属表面电子逸出形成的表面电位的存在，自发形成的双电层金属侧一般带负电，从而在 OHP 层内形成溶质阳离子的集聚，在层内形成 0.1V 量级的电压降[23]。本实验中在液滴上施加负向电压时，外电场强化双电层的场强，提高形核所需能量，抑制形核；同时，外电场促进界面上溶质阳离子的富集，进一步破坏了形核结构。这两种因素导致了-1V 电压下三种溶液液滴相较 0V 时更低的形核温度。相反，在液滴上施加正向电压时，落在双电层上的外电压不超过 0.5V，该量级的外电压削弱了原有的双电层，且并未形成强的反向双电层。因此，正向电压一方面减弱了双电层内的场强，削弱了 OHP 内场强对形核的抑制作用；另一方面也降低了破坏冰晶结构的阳离子密度，相较 0V 情况有更高的形核温度。对 0.1mol/L 的KCl溶液反常的形核温度降低，可能的解释是KCl溶液在Pt表面的自发双电层较弱，导致正向电压建立了反向的双电层，从而抑制形核，该猜想有待细分电压进一步验证。

由于 Cs^+ 、 K^+ 、 Li^+ 的水合离子半径递增,三种对应溶液界面上由阳离子参与的双电层厚度相应递增,这导致相同的外电压下三种溶液界面的双电层内电场递减,双电层内电场对形核的抑制效果依序减弱[22]。更大半径的水合离子还可能对有序冰晶结构的形成产生更大的阻碍。因此,相同浓度的过冷 $LiCl$ 、 KCl 和 $CsCl$ 溶液液滴(除去+1V下 KCl 溶液的例外)形核温度依序递增。

4 结 论

本文通过实验方法研究了小电压下不同种类盐溶液的过冷液滴冻结规律,测量了 $0.1mol/L$ 的 $LiCl$ 、 KCl 和 $CsCl$ 过冷液滴在外加电压下的冻结温度。实验中电压值取 $\pm 1V$,液滴体积控制在 $4\mu L$ 。

实验表明,施加-1V电压时三种过冷液滴的冻结温度均相对无电压情况有约 $0.5^{\circ}C$ 的下降,施加正电压时冻结温度则呈上升趋势。横向比较三种溶液,在-1V和0V时过冷液滴冻结温度按 $LiCl$ 、 KCl 和 $CsCl$ 的顺序递增。

高速摄影证明,过冷液滴的形核发生于溶液、平板电极和空气的交界处,这是由于异质形核率远高于均质形核率。据此,本文基于双电层假设提出了外电场影响溶液-金属界面形核率的机制。由于溶液-金属界面双电层内的电场提高了形核所需的能量,同时双电层上的水合离子破坏形核结构,导致双电层抑制过冷盐溶液液滴的形核。如果外电场的方向使双电层内电场增强,液滴形核将被进一步抑制,反之则促进形核。就离子种类而言,更大水合半径的离子形成更厚的双电层,削弱外加电压形成的双电层内电场,导致外加电压对对应溶液的形核率影响更小。

总之,本文基于外电场影响溶液-金属界面形核率的理论,认为施加从结冰表面指向液滴的电场、选用水合半径更小的离子,有助于抑制过冷盐溶液的结冰。进一步细化电压分度有助于定量判断双电层可能的反转现象,完善外电场强度对过冷盐溶液冻结的影响规律。

参考文献

- [1] T. Cebeci, F. Kafyeke, Aircraft Icing, Annual Review of Fluid Mechanics, 35 (2003) 11-21.
- [2] A. Alizadeh, M. Yamada, R. Li, W. Shang, S. Otta, S. Zhong, L. Ge, A. Dhinojwala, K.R. Conway, V. Bahadur, A.J. Vinciguerra, B. Stephens, M.L. Blohm, Dynamics of ice nucleation on water repellent surfaces, Langmuir, 28 (2012) 3180-3186.
- [3] A.E. Delgado, D.-W. Sun, Heat and mass transfer models for predicting freezing processes – a review, Journal of Food Engineering, 47 (2001) 157-174.
- [4] T. Kang, Y. You, S. Jun, Supercooling preservation technology in food and biological samples: a review focused on electric and magnetic field applications, Food Science and Biotechnology, 29 (2020) 303-321.
- [5] L. Dufour, Uber das Gefrieren des Wassers and ubber die Bildung des Hagels, Poggend. Ann. Phys., 114 (1861) 530-554.
- [6] S. Wei, X. Xiaobin, Z. Hong, X. Chuanxiang, Effects of dipole polarization of water molecules on ice formation under an electrostatic field, Cryobiology, 56 (2008) 93-99.
- [7] R.W. Salt, Effect of Electrostatic Field on Freezing of Supercooled Water and Insects, Science, 133 (1961)

458-459.

- [8] J.Y. Yan, G.N. Patey, Molecular dynamics simulations of ice nucleation by electric fields, *Journal of Physical Chemistry A*, 116 (2012) 7057-7064.
- [9] X.-X. Zhang, X.-H. Li, M. Chen, Role of the electric double layer in the ice nucleation of water droplets under an electric field, *Atmospheric Research*, 178-179 (2016) 150-154.
- [10] M. Orlowska, M. Havet, A. Le-Bail, Controlled ice nucleation under high voltage DC electrostatic field conditions, *Food Research International*, 42 (2009) 879-884.
- [11] D. Ehre, E. Lavert, M. Lahav, I. Lubomirsky, Water freezes differently on positively and negatively charged surfaces of pyroelectric materials, *Science*, 327 (2010) 672-675.
- [12] K. Carpenter, V. Bahadur, Electrofreezing of water droplets under electrowetting fields, *Langmuir*, 31 (2015) 2243-2248.
- [13] P.V. Acharya, V. Bahadur, Fundamental interfacial mechanisms underlying electrofreezing, *Advances in Colloid and Interface Science*, 251 (2018) 26-43.
- [14] S. Curland, L. Javitt, I. Weissbuch, D. Ehre, M. Lahav, I. Lubomirsky, Heterogeneous Electrofreezing Triggered by CO₂ on Pyroelectric Crystals: Qualitatively Different Icing on Hydrophilic and Hydrophobic Surfaces, *Angew Chem Int Ed Engl*, 59 (2020) 15570-15574.
- [15] S. Curland, C. Allolio, L. Javitt, S. Dishon Ben-Ami, I. Weissbuch, D. Ehre, D. Harries, M. Lahav, I. Lubomirsky, Heterogeneous Electrofreezing of Super-Cooled Water on Surfaces of Pyroelectric Crystals is Triggered by Trigonal Planar Ions, *Angew Chem Int Ed Engl*, 59 (2020) 15575-15579.
- [16] L.F. Javitt, I. Weissbuch, D. Ehre, I. Lubomirsky, M. Lahav, Biguanide, an Efficient Electrofreezing “Ice-maker” Ion of Supercooled Water, *Crystal Growth & Design*, 22 (2021) 43-47.
- [17] Y. Ma, L. Zhong, H. Zhang, C. Xu, Effect of applied electric field on the formation and structure of ice in biomaterials during freezing, in, 2010, pp. 1-4.
- [18] A. Petersen, H. Schneider, G. Rau, B. Glasmacher, A new approach for freezing of aqueous solutions under active control of the nucleation temperature, *Cryobiology*, 53 (2006) 248-257.
- [19] Y. Ma, L. Zhong, J. Gao, L. Liu, H. Hu, Q. Yu, Manipulating ice crystallization of 0.9 wt. % NaCl aqueous solution by alternating current electric field, *Applied Physics Letters*, 102 (2013).
- [20] O. Stern, The theory of the electrolytic double shift, *Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie*, 30 (1924) 508-516.
- [21] F.H. Stillinger, J.G. Kirkwood, Theory of the Diffuse Double Layer, *The Journal of Chemical Physics*, 33 (1960) 1282-1290.
- [22] M.A. Brown, Z. Abbas, A. Kleibert, R.G. Green, A. Goel, S. May, T.M. Squires, Determination of Surface Potential and Electrical Double-Layer Structure at the Aqueous Electrolyte-Nanoparticle Interface, *Physical Review X*, 6 (2016).
- [23] R.R. Kumal, T.E. Karam, L.H. Haber, Determination of the Surface Charge Density of Colloidal Gold Nanoparticles Using Second Harmonic Generation, *The Journal of Physical Chemistry C*, 119 (2015) 16200-16207.

数据中心模拟热源设计及实验测试

力乙刚, 李楠, 陶文铨*

(西安交通大学西安市数据中心节能及低碳技术重点实验室, 热流科学与工程教育部重点实验室, 西安 710049)

*wqtao@mail.xjtu.edu.cn

摘要: 在数据中心的建设阶段, 通常使用假负载替代服务器对数据中心的设计指标进行验收。本文设计了外形与设置十分逼真的模拟热源替代真实的服务器, 该模拟热源可详细模拟服务器内部不同的散热部件, 并且散热功率可以根据需要调节; 通过全自动风量及压力测量仪实验测试了模拟热源的系统阻力特性。相比于纯电阻的假负载, 大大改进了模拟的真实性。

关键词: 数据中心, 模拟热源, 多档位发热功率调节, 系统阻力特性测试

0 前言

数据中心机房在建设完工后, 通常使用假负载来代替真实服务器等 IT 设备对设计指标及气流环境进行验收调试, 包括供配电系统、空调新风系统、消防联动系统、弱电系统及监控管理系统等。因此假负载设计及其可提供的实验项目的能力对数据中心的实验研究具有重要意义。

为实现我国的“碳中和碳达峰”目标, 对数据中心的绿色、低碳提出了更高要求^[1], 对假负载的使用也同样提出了更高的要求。传统的假负载通常使用大尺寸镍铬电加热棒、PTC 恒温电加热器等代替服务器发热芯片, 不仅发热机制和散热方式与真实服务器完全不同, 而且内部发热元器件的局部热点温度并没有实时监测^[2]。此外, 传统假负载并没有建立与服务器相似结构, 未考虑内部结构对进出口气流的压降影响, 使得假负载与实际服务器运行的热环境有所差异^[3]。因此采用传统的假负载测试的结果可靠性较差, 不利于数据中心实现绿色、低碳的目标。Fulpagare 等人^[4]使用 6U 模拟服务器布置在 32U 机柜对热通道的涡流进行了实验测试, 一定程度上还原流经服务器的气流组织。Mohsenian 等人^[5]设计了 4U 服务器模拟器准确地模拟了实际服务器的空气流动阻力和散热功能。图 1 为传统的商业模拟负载, 图 2 为较接近真实的服务器模拟器。实验结果表明, 图 2 的模拟器效果较好。



图 1 商业模拟负载



图 2 服务器模拟器内部结构

基金项目: 教育部实验室建设补助经费, 西安市科技局基金的资助(20192187 14SYS002CG024)及国家自然科学基金创新群体基金(No.51721004)的资助。

但是图 2 所示模拟器无论外形还是内部布置与真实服务器还有很大差别。为此，本文参考服务器内部的结构布局，设计了外形及内部设置更加逼真的模拟热源来替代数据中心的服务器，并进行了气流环境实验测试。本文主要介绍所设计的 4U 模拟热源如何通过内部元器件结构选型及整体功能设计以保证发热机制和内部气流组织更加贴近真实服务器，并通过内部布置相关测点实现整体设备的智能监测控制。通过全自动风量及压力测量仪测试了模拟热源的系统阻力特性参数，为其替代真实服务器建模仿真提供了实验数据支撑。

1 模拟热源设计

1.1 模拟热源结构

本文提出的模拟热源结构设计如图 3 所示，是参考了真实服务器的结构功能设计的。其主要部件包括模拟硬盘、风扇、厚膜电阻发热片、热管散热器、模拟内存条、PCB 电路板、数控可调电源、直流稳压电源、导风罩、显示屏等。模拟热源机箱尺寸为 773mm×443mm×177mm，可布置在数据中心 42U 标准机柜中。模拟热源机箱前面板布置了触摸显示屏、本地远程切换开关、指示灯、急停按钮等，机箱尾部布置了电源开关及插座。

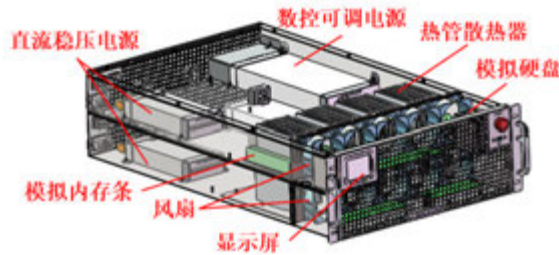


图 3 模拟热源结构布局图

如图 4 所示，机箱内部分为上下两层不同布局，上层进风口后两侧布置了 8 个模拟硬盘，两侧硬盘中间为 PCB 电路板，风扇位于硬盘和 PCB 电路板后端。5 个风扇直吹 4 个并排布置的厚膜电阻发热片和 10 个模拟内存条；下层进风口处布置了 PCB 电路板，PCB 电路板后的 5 个风扇正对 5 个交错布置的厚膜电阻发热片。

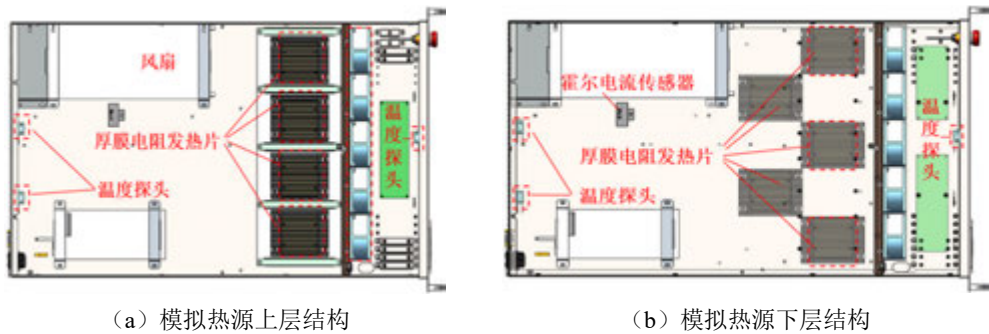


图 4 模拟热源上下层结构布局

每层均设置了数控可调电源和直流稳压电源，以实现设备的整体供电需求。以下对于各个部件做进一步说明。

1.1.1 模拟热源主要元器件

(1) 厚膜电阻发热片

厚膜电阻发热片是采用厚膜工艺把氧化铝陶瓷发热电阻浆料印刷烧结到陶瓷上，然后再整体焊接到铜基板上的。氧化铝陶瓷发热电阻浆料具有成膜紧致、电阻均匀、发热均匀的特性，因此制作的厚膜电阻体积小、功率密度大、可控性好、使用寿命长。图 5（a）为定制生产的小尺寸厚膜电阻，阻值约为 10Ω ，电阻温漂小于 $150 \text{ ppm}/^\circ\text{C}$ ，发热面积为 $23\text{mm} \times 40\text{mm}$ ，最大发热功率密度约 $29.3 \text{ W}/\text{cm}^2$ 。选用不同的厚膜电阻可以模拟服务器内部 CPU、GPU、NPU 等芯片的发热功率及封装外形尺寸。模拟热源选用 2 块小尺寸厚膜电阻并联成 1 块厚膜电阻发热片来模拟服务器内部的单块 CPU，如图 5（b）所示，整体发热尺寸为 $46\text{mm} \times 40\text{mm}$ ，模拟热源上下两层共布置了 9 个厚膜电阻发热片，整机发热功率可达到 5kW 。

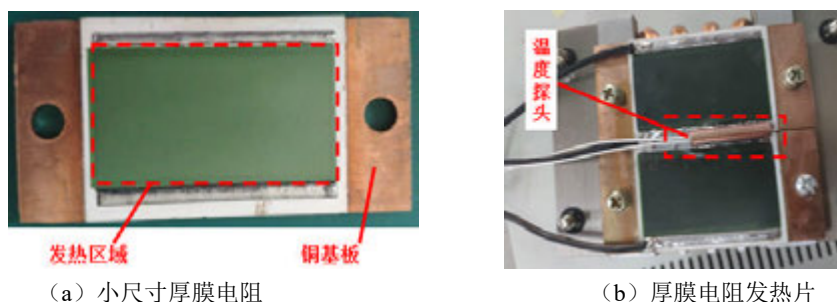


图 5 厚膜电阻发热元件

（2）热管散热器

图 6 所示是服务器内部安装的两款散热器，布置在芯片上可快速将热量转移。相比于图 6（a）的传统散热器，热管散热器（图 6(b)）将热管技术与传统散热器结合，大大提高了其散热能力。

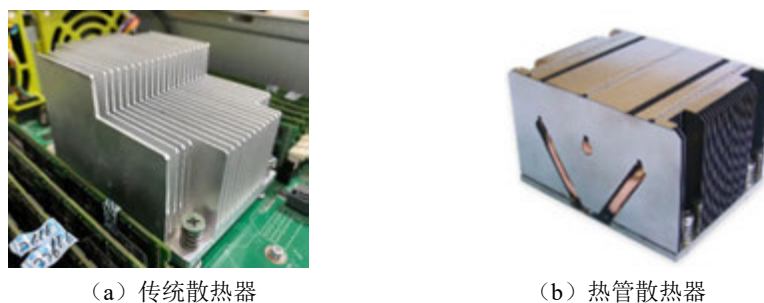


图 6 服务器散热器

（3）风扇

风扇的选择取决于模拟热源的发热功率和允许的温升，实际所需风量通过公式（1）计算：

$$Q = \frac{P}{c_p \rho \Delta T} \quad (1)$$

式中： Q ——模拟热源总风量/CFM； P ——模拟热源的发热功率/W； c_p ——空气定压比热容/ $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ，取 $1.005 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ； ρ ——空气密度/ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ，取 $1.146 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ； ΔT ——空气温升/ $^\circ\text{C}$ ，取 10°C 。

根据计算可得模拟热源总风量 $Q \approx 0.434 \text{m}^3/\text{s} = 919.6 \text{CFM}$

风扇的工作状态取决于由模拟热源的系统阻力特性曲线和风扇的特性曲线，两者的交点即为风扇的工作点。为了保证模拟热源散热系统的可靠性，设计时假定由于风扇内部的阻力损失风扇可以提供的流量为额定流量的 70%^[6]。据此计算选型的风扇额定流量总和应大于 1313.7CFM。模拟热源选择布置了 10 个四线制散热风扇，单风扇最大风量为 141.36CFM。图 7 所示风扇的尺寸为 80mm × 80mm × 38mm，额定转速为 12000RPM，支持脉冲宽度调节功能及信号读取功能反馈实时转速。

(4) 数控可调电源

数控可调电源作为模拟电源为厚膜电阻发热片供电，不同于常规供电电源，其通过接在整流电源和负载中间的可控硅半导体器件，调整输出电流或电压相应地可实现厚膜电阻发热片发热功率的调节。如图 8 所示，数控电源安装了 2 台小型风扇，强化了电源内部的散热，提高了设备的可靠性。



图 7 服务器风扇



图 8 数控可调电源

该数控电源通过电流调节实现模拟热源整体功率 0-5kW 的变化，启调电流为 5A，调节步长最小为 0.5A。考虑到实验测试需保证模拟热源功率的可调性和发热功率的不均匀性，模拟热源上下两层各布置 1 个数控可调电源，实现多档位发热功率调节，上层厚膜电阻发热片可设置 77 个档位，发热功率调节范围约为 0-2300W；下层可设置 95 个档位，发热功率调节范围约为 0-2700W。

1.2 模拟热源功能

上述可见，模拟热源的整体结构及内部元器件选型非常贴合一般服务器的情况，因此可以模拟实际服务器进出口压降随空气流量的变化。为了保证整体设备功能的可靠运行，设备布置了相关测点保证了内部热环境的监测控制。

模拟热源的控制主要分为温度功率监测和风扇智能控制系统。温度功率监测控制包括对上下层厚膜电阻的实时温度和发热功率进行监测，并通过本地或远程进行控制。模拟热源布置了 15 个温度测点，测量误差为 $\pm 0.5^\circ\text{C}$ ，上下层各布置一个霍尔电流传感器可测量每层并联厚膜电阻发热片的电流，精度为 $\pm 1\%$ 。

风扇智能控制系统的目的是指通过风扇的不同调节模式来保证模拟热源的散热及正常安全运行。图 9 显示的智能调节模式是利用编程算法对模拟热源系统运行调控，通过监测负载的功率、送回风温度去调节风扇占空比，进而控制风扇转速；同时实时监测风扇的转速信号及厚膜电阻发热片的表面温度，保证设备的安全运行。

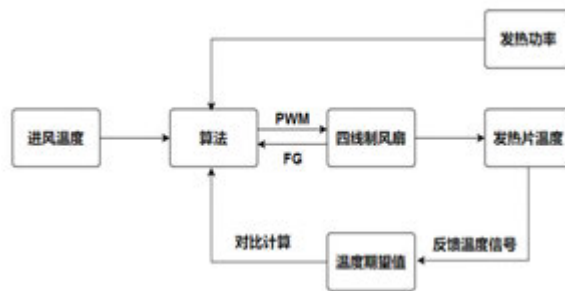


图9 智能调节模式

2 实验测试

2.1 实验设备介绍

模拟热源的阻力特性通过瑞领科技股份有限公司生产的全自动风量及压力测量仪进行实验测试。图10所示的设备型号是LW-9185-1500,其流量测量范围是4—1500CFM,测量精度可达到2%,实验重复性误差小于2%,可精确测试模拟热源进出口压降变化。



图10 全自动风量及压力测量仪

2.2 实验测试原理

本实验平台利用 Bernoulli 方程来测定气体流量，此处不再细述。

3 模拟热源压降实验结果分析

图11是测试得到的三组模拟热源的阻力特性曲线。总体上，三组实验曲线的重复性是可以接受的。本文选取实验测试A中风量0-600CFM范围内的数据，作为模拟热源最终的阻力特性曲线，如图12所示，该曲线可为仿真建模提供实验数据支撑，与内部风机曲线耦合可得到模拟热源的风机实际工作点。

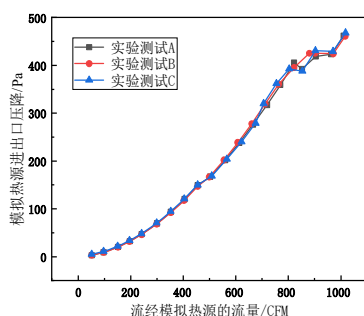


图11 模拟热源阻力测试曲线

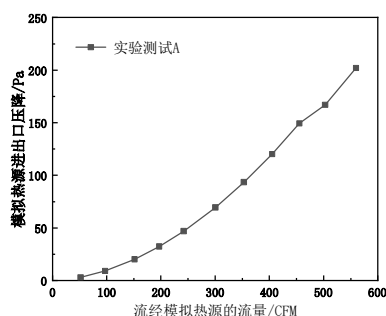


图12 模拟热源系统阻力特性曲线

4 结 论

本文详细介绍了所设计的替代真实服务器的模拟发热设备,以及模拟热源的阻力曲线,主要包括以下几方面的内容:

(1) 设计了 4U 模拟热源,单台最大发热功率可达到 5000W。详细介绍了模拟热源的结构布局、元器件的选型及整体的监测控制功能,使其发热机制和内部系统流动阻力工作特性更加接近真实的机架式服务器,同时满足小步长、多档位功率调节需求模拟不同功率的服务器等 IT 设备。

(2) 详细介绍了全自动风量及压力测量仪,并测试了本文设计的模拟热源的系统阻力特性曲线,结合内部风扇特性曲线可以确定模拟热源的工作点,为服务器数值仿真模型进风量的设置提供实验数据支撑。

参考文献

- [1] 周婷,李婷,常传源. 基于碳中和的数据中心绿色发展策略研究[J]. 河南科技,2023,42(6):155-158.
ZHOU Ting, LI Ting, CHANG Chuanyuan. Research on Green Development Strategy of Data Center Based on Carbon Neutralization[J]. Henan Science and Technology, 2023, 42(6):155-158.
- [2] Nada S A, Attia A M A, Elfeky K E. Experimental study of solving thermal heterogeneity problem of data center servers[J]. Applied Thermal Engineering, 2016,109: 466-474.
- [3] WANG Cheng-Hao, TSUI Yeng-Yung, WANG Chi-Chuan. Airflow management on the efficiency index of a container data center having overhead air supply[J]. Journal of Electronic Packaging, 2017,139(4): 041008.
- [4] Fulpagare Y, Xiong X, Lee P S, et al. Thermal characterization of vortex flow layout for data center: 2019 IEEE 21st Electronics Packaging Technology Conference (EPTC), [C]: 2019,167-170.
- [5] Mohsenian G, Hoang C H, Nemati K, et al. A novel design of rack mount server thermal simulator: design, assembly, and experimental verification[J]. Journal of Electronic Packaging, 2022,144(4): 041015.
- [6] 田洪元. 高密度存储服务器可靠性设计和实现方法研究[D]. 中国科学院大学, 2017.
TIAN Hongyuan. Reliability design and implementation of high density storage server[D]. University of Chinese Academy of Sciences, 2017
- [7] ANSI/ASHRAE 51-2016, Laboratory methods of testing fans for certified aerodynamic performance rating[S].

基于 POD 降阶的酸奶流固耦合冷却研究

赵传奇¹, 陈宝军^{2*}, 张帅², 马天歌¹, 黄清睿¹, 奚溪¹, 刘红^{1*}

(1. 大连理工大学 能源与动力学院, 辽宁, 大连, 116024

2. 大连冰山集团 大连冰山菱设速冻设备有限公司, 辽宁, 大连, 116699)

(Tel: 0411-84709822, E-mail: hongliu@dlut.edu.cn; chenbaojun@bingshan.com)

摘要: 本文首先通过实验测量了隧道式速冻机内单瓶酸奶冷却降温过程的温度, 并建立了单瓶酸奶冷却流固耦合共轭传热降温模型。使用 POD 降阶模型进行数值模拟计算, 并用有限元全阶模型和有限体积共轭传热模型进行对比。结果表明, 酸奶在冷却过程中温度分布不均, 酸奶的外侧降温相对于中心降温速度先快后慢, 到最后趋于一致。POD 降阶模型计算酸奶的冷却过程所用时间少, 且误差小, 可以应用于减少食品行业工程中的流固耦合冷却计算时间, 提升计算效率。

关键词: 酸奶冷却 流固耦合 快速计算 POD 降阶

0 前言

工厂发酵加工后的酸奶需及时进行冷却, 抑制其中细菌的发育, 保持酸奶的口感和营养价值^[1]。隧道式速冻机风速大, 降温速度快并且对食物的形状没有特别要求^[2], 经常用于生产线对大批量酸奶进行冷却降温。速冻机中酸奶的冷却降温过程是一个复杂流固耦合的换热问题, 目前针对流固温度场求解常见的数值方法如有限元法、有限体积法、有限差分法等, 由于流固温度场具有多尺度和多物理场耦合特性, 因此需要使用大量的网格来捕捉不同尺度的现象, 从而提高数值方法的准确性。流固温度场的数值求解方法一般面临着计算时间长、存储空间大等问题, 在处理流固温度场的数值求解时, 需要采用一些新的数值求解方法和优化策略, 以减少离散格式中自由度过大带来的计算时间和存储空间的负担。本征正交分解 POD (Proper Orthogonal Decomposition) 降阶模型是一种高效且精度较高的降维方法, 这种方法可以在保留数据的主要特征得同时, 减小高维数据的复杂度, 从而减少计算时间和储存需求, 以提高计算效率并减少内存占用。Sirvovech^[3]等人首次提出了一种新的降阶方法 Snapshot POD, 使得在流体动力系统中对大规模数据集更高效快捷地提取 POD 模态集成为了一种可能。Everson^[4]等采用在 Snapshot POD 的基础上, 提出并用于图像数据重建的 Gappy POD 方法, 其优点在于不需要原始问题控制方程的信息, 而且最终将问题转化为求解线性方程组的问题。Satyajic 等^[5]通过建立空间降阶模型, 通过实例证明该方法可以有效减少计算变量的维数, 是一种高效且精度较高的降维方法。冯俞楷等^[6]从温度场构成的瞬态图像中提取并建立常物性非稳态导热微分方程的 POD- Galerkin 降阶模型, 达到降维的目的。梁钰^[7]等人结合 POD 模型和有限元法, 利用简单线性问题的 POD 基底, 快速计算复杂非线性问题, 并具有良好的计算精度。本文针对酸奶在速冻机中的冷却降温过程开展流固耦合 POD 降阶模型计算研究, 建立单瓶酸奶共轭传热降温模型, 使用 POD 降阶模型、有限元全阶模型和有限体积增强的壁面函数法对该实验过程模拟计算, 并考察不同模型的计算时间。同时对不同模型计算结果进行精度分析, 考察不同模型对酸奶冷却降温过程温度的预测能

力。

1 模型介绍

1.1 物理模型

图1为单瓶酸奶大空间降温实验物理模型，模拟速冻机内部环境。大空间尺寸为0.3m×0.3m×0.7m，酸奶位于大空间的几何中间位置，风机位于入口处。单瓶酸奶的几何结构为上直径 $\Phi=66\text{ mm}$ ，下直径 $\Phi=54\text{ mm}$ ，高 $H=71\text{ mm}$ 的梯形圆台结构，净含量为100 ml。

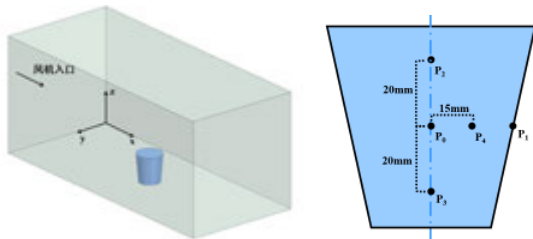


图1 单瓶酸奶大空间降温物理模型

其实验边界条件及酸奶的参数如表1所示。其中酸奶密度、导热系数、比热容皆在本实验室通过 Hot Disk 热常熟分析仪-TPS2500S 测量获得。

表1 单瓶酸奶降温参数

参数（单位）	数值
酸奶初始温度（℃）	30.7
酸奶密度（kg/m ³ ）	1200
酸奶导热系数（W/m·K）	0.540
酸奶比热容（J/kg·K）	3508
入口风速（m/s）	9
入口风温（℃）	5

1.2 数学模型

1.2.1 守恒方程

本文采用 Ansys Fluent 软件，应用有限体积法(FVM)，计算大空间单瓶酸奶降温模型，计算中所用控制方程如下：

其流体区域控制方程：

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi + S_{p\phi} \tag{1}$$

其中 ρ 为密度， ϕ 为通量， u, v, w 为求解变量， Γ 为扩散项， S 为源项。

采用 $k-\epsilon$ 两方程湍流模型，计算中的求解通量、各通量的扩散项、源项，如下表所示：

表2 控制方程参数

方程	通量	扩散项	源项
----	----	-----	----

设置了格式：字体：倾斜

设置了格式：字体：倾斜

设置了格式：字体：倾斜

连续方程	1	—	—
动量方程	u_i	$\rho(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p}{\partial x_j}$
能量方程	T	$-\rho c_p \left(\frac{v}{Pr} + \frac{v_t}{Pr_t} \right)$	—
湍动能 k 方程	k	$\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$	$G_k - \rho \varepsilon$
湍动耗散率 ε 方程	ε	$\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}$	$C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} G_k - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}$

其中湍流粘度：

$$u_t = \rho C_u \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{2}$$

G_k 为平均速度梯度引起的湍动能 k 的产生项：

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tag{3}$$

式中 σ_k 和 σ_ε 为湍动能 k 与耗散率 ε 相对应的湍流普朗特数，分别取 1.0、1.3， μ_t 为速度分量， μ_t 为湍动粘度； $C_{1\varepsilon}$ 、 $C_{2\varepsilon}$ 、 C_μ 为经验常数，分别取 1.44、1.92、0.09。

固体区域控制方程：

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right\} \tag{4}$$

式中： T 为温度， λ 为导热系数。

壁面函数法为实现近壁区速度场和温度场的计算提供了快速预测模型，直接使用实验或理论解析得到的规律，来描述近壁粘性影响区域，计算近壁边界层内的流体流动和传热传质。本文使用标准壁面函数、扩展壁面函数、非平衡壁面函数、增强壁面函数四种壁面函数模型对酸奶冷却过程进行数值模拟，结果显示增强的壁面函数与本文实验的拟合性更好，所以在有限体积计算时采用增强的壁面函数法计算。

1.2.2 共轭传热

流固耦合数值模拟耦合边界需要满足温度相等和热流密度相等的条件，这对近壁区流场和温度场的准确预测提出极为苛刻的要求。提高近场网格节点数量，应用直接数值模拟（DNS）方法虽然可以提高预测精度，但对非稳态酸奶降温过程研究所需计算时间过长，计算成本过高。

传统流固共轭传热分析将多物理场耦合问题看作一个统一的物理现象，构建描述该物理场统一形式偏微分方程组，采用统一的数值计算格式和时间步长求解该偏微分方程组，同时获得该多物理场耦合问题的所有变量。计算中流体与固体的交界面为共节点的耦合壁面。

T_s 和 T_f 为固体和流体域的节点温度， T_w 为交界面的温度， q_s 和 q_f 分别为固体域、流体域计算得到的通过交界面的热通量。需满足：

$$T_w|_{solid} = T_w|_{fluid}, q_w|_{solid} = q_w|_{fluid} \tag{5}$$

设置了格式：字体：倾斜

设置了格式：字体：倾斜

$$-\lambda_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_s |_{solid} = h(T_w - T_f) |_{fluid} \quad (6)$$

这样即满足了流、固交界面热流量和温度的平衡。在计算程序的实现中，经过反复的迭代，直到热流量和交界面温度达到收敛。

1.2.3 POD 降阶

使用共轭传热方法计算流固温度场，将非稳态计算流场达到稳定后的表面对流换热系数作为边界条件，此时的结构温度场作为结构温度场固体的初始温度条件，从此刻开始，对结构温度场进行有限元(FEM)全阶及降阶计算，具体流程如图 2 所示。



图 2 POD 降阶流程图

对固体微分方程做有限元离散，其离散格式为：

$$C\dot{T} + KT = F \quad (7)$$

其中 T 为节点温度列向量， C 为热容矩阵， K 为热传导矩阵， F 为温度载荷向量。 C 、 K 、 F 矩阵由以下对应元素组成：

$$\begin{aligned} K_{ij} &= \sum_e K_{ij}^e + \sum_e H_{ij}^e \\ C_{ij} &= \sum_e C_{ij}^e \\ F_i &= \sum_e F_{Q_i}^e + \sum_e F_{q_i}^e + \sum_e F_{H_i}^e \end{aligned} \quad (8)$$

其中各元素矩阵方程如下所示：

$$\begin{aligned} K_{ij}^e &= \int_{\Omega} \left(\lambda_x \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \lambda_z \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) d\Omega \\ H_{ij}^e &= \int_{\Gamma_3^e} h N_i N_j d\Gamma \\ C_{ij}^e &= \int_{\Omega} \rho c N_i N_j d\Omega \\ F_{Q_i}^e &= \int_{\Omega^e} Q N_i d\Omega \\ F_{q_i}^e &= \int_{\Gamma_2^e} q N_i d\Gamma \\ F_{H_i}^e &= \int_{\Gamma_3^e} h T_a N_i d\Gamma \end{aligned} \quad (9)$$

其中 λ 为材料导热系数， h 为表面对流换热系数， ρ 为材料密度， c 为材料比热， N_i 和 N_j 为型函数，用于将节点上的位移值插值到单元内部的任意位置。

求解方程组（1），获取局部时域网格节点温度值，生成瞬像矩阵 A ：

$$A = \{T(t_1), T(t_2), \dots, T(t_M)\} \tag{10}$$

其中：

$$T(t) = \{T_1(t), T_2(t), \dots, T_N(t)\}^T \tag{11}$$

定义相关矩阵 R 求其特征值 λ 及特征向量 ϕ_j ，构建 POD 基底：

$$R = A^T A \tag{12}$$

$$R \phi_j = \lambda \phi_j \tag{13}$$

对 R 做 POD 分解得：

$$\phi_j = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} A \phi_j \tag{14}$$

其中 $j=1, 2, \dots, l, 1 \leq l, \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_l > 0$

取前 r 个基底进行模型降阶分析， r 的选取规则为：

$$r = \operatorname{argmin} \left\{ I(r) : I(r) \geq \frac{\gamma}{100} \right\}, I(r) = \frac{\sum_{j=1}^r \sigma_j}{\sum_{j=1}^l \sigma_j}, \gamma = 99.99 \tag{15}$$

其中 argmin 函数为得到使目标函数 $f(x)$ 取最小值时的变量值。

构建 r 个基底的温度矩阵

$$T = \Phi \alpha \tag{16}$$

求解降阶后后的离散矩阵：

$$\Phi^T C \Phi \dot{\alpha} + \Phi^T K \Phi \alpha = \Phi^T F \tag{17}$$

即可实现全时域结构温度场的 POD 降阶预测计算。

2 模型验证

为了验证流固耦合数值模拟对酸奶降温预测的准确性，将单瓶酸奶降温数值模拟计算结果进行对比，如图所示为酸奶中心 P0 处的结果对比图。实验使用热电偶实时记录酸奶降温过程温度随时间的实时变化。考虑到食品冷却过程会出现温度为 -0°C 的情况，误差分析中皆以绝对温标 K 为单位进行对比分析。

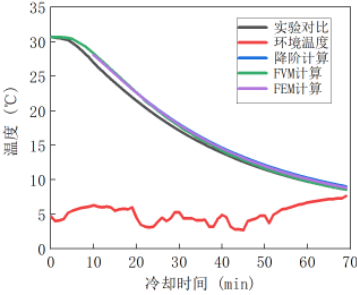


图 3 P0 位置酸奶中心点实验验证

其最大误差如下表所示:

表 3 同一时刻计算结果最大误差						
对比误差	实验结果		有限体积法 (FVM)		有限元法 (FEM)	
有限体积法	1.45℃	5.78%	——		——	
有限元法	1.28℃	5.07%	0.37℃	2.65%	——	
降阶模型	1.28℃	5.07%	0.50℃	3.60%	0.18℃	2.00%

分别将 POD 降阶计算模拟结果、有限体积法数值模拟结果与有限元全阶计算模型结果与实验对比，计算结果与实验结果吻合性良好,最大误差控制在 0.5%左右以内，符合工程模拟计算的误差允许范围。

3 结果讨论

本文使用有限体积法共轭传热模型计算 600s 大空间酸奶冷却数值结果，得到酸奶固体温度分布及换热系数等固体边界条件，其换热系数计算公式如下：

$$h = \frac{-\lambda_f \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_f}{(T_w - T_f)}|_{fluid} \tag{18}$$

将热边界条件导入进行有限元全阶模型酸奶固体冷却温度计算，同时使用降阶模型计算，时间步长为 2s。

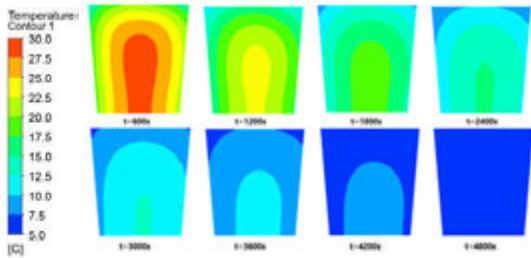


图 4 不同时刻酸奶大空间冷却温度分布

如图所示为不同时间酸奶大空间冷却温度分布云图，根据结果可知，酸奶从加工后的 30.7℃降温至 7.5℃对应的降温时间为 64min，在冷却过程中酸奶内部降温不均匀，在冷却过程中酸奶内外温度相差最大能达到 10.1℃以上。酸奶的外侧降温相对于中心降温速度先快后慢，到最后趋于一致。在冷却开始 4200s 后，酸奶外壁温度同环境温度趋于一致，所以将酸奶大空间冷却计算全程冷却时间设置为 4200s。

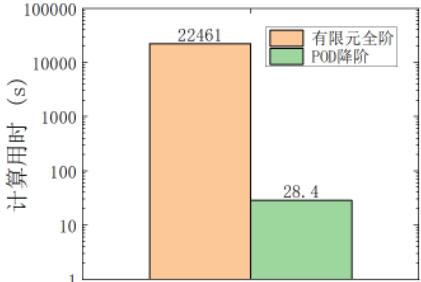


图 5 有限元全阶计算与计算时间对比

对比分析使用不同计算方法时酸奶冷却降温过程计算所需的时间可知，使用有限元全阶计算用时 22461s，使用 POD 降阶方法计算用时 28.4s，POD 降阶计算模型计算速度为有限元全阶计算模型的 790 倍，即使用 POD 降阶计算模型可以快速降低酸奶冷却计算时间。

在酸奶计算内部选取 5 个不同的点(如图 1b 中的 P_0 ~ P_4)来记录酸奶内部温度随时间的变化情况，并进行对比分析，其同一时刻计算最大误差结果如下图所示。

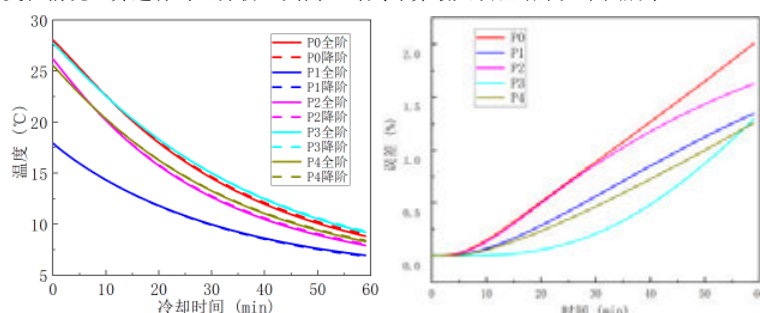


图 6 酸奶内部点(P_0 ~ P_4)温度随时间变化及误差情况

从结果可知，P1 壁面处的温度下降最快，P0 和 P3 的温度下降最慢，二者温度基本一致。降阶模型可以很好的控制计算误差，与实验结果同时刻最大误差为 5.07%，与全阶模型计算同时刻最大误差为 2%。

4 结 论

本文针对隧道式酸奶速冻机中单瓶酸奶的冷却过程中流固耦合共轭传热问题提出了基于 POD 降阶的快速计算模型，并使用有限体积法增强的壁面函数模型、有限元全阶模型和 POD 降阶模型对其计算及验证，其结论如下：

1. 单瓶酸奶的冷却过程，在速冻机中通风风速为 9m/s 时，单瓶酸奶从加工后的 30.7℃降温至 7.5℃对应的降温时间为 64min。同时酸奶内部存在着冷却不均匀的情况，其在冷却过程中出现最大温差为 10.1℃，在同一时刻的酸奶壁面降温相对于中心降温速度先快后慢，到最后趋于一致。

2. 本文使用有限体积法、有限元和 POD 降阶方法，三种方法均能有效模拟单瓶酸奶的冷却过程，与实验结果相对比，POD 降阶模型与有限元全阶模型的计算误差皆为 0.428 均在 5%左右，有限体积法的误差最大，但整体最大误差在 60.5%以下，数值计算准确性良好。

3. 从计算效率上看，POD 降阶模型能够大幅降低酸奶冷却过程数值模拟计算成本，使用有限元全阶计算模型计算用时为 22461s，POD 降阶模型计算时间为 28.4s，计算效率是有限元全阶的 790 倍。

参考文献

- [1] Akah A S, Unal G, Dinkci N, et al. Microstructural, textural, and sensory characteristics of probiotic yogurts fortified with sodium calcium caseinate or whey protein concentrate[J]. Journal of Dairy Science, 2012, 95(7): 3617-3628.
- [2] 祁艳会. 速冻隧道流场模拟及隧道的优化设计[硕士论文]. 郑州: 郑州大学, 2017.

- QI Yan-hui. Simulation of Flow Field in Quick Freezing Tunnel and Optimization Design of Tunnel [Master thesis]. Zhengzhou: Zhengzhou University, 2017 (in Chinese) .
- [3] Sirovich L. Turbulence and the dynamics of coherent structures. I. Coherent structures[J]. Quarterly of applied mathematics, 1987, 45(3): 561-571.
- [4] Everson R , Sirovich L . Karhunen–Loève procedure for gappy data[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1995, 12(8):1657-1664.
- [5] Ghoman S , Wang Z , Ping C , et al. A POD-based Reduced Order Design Scheme for Shape Optimization of Air Vehicles[C]// 53rd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference 20th AIAA/ASME/AHS Adaptive Structures Conference 14th AIAA. 2012.
- [6]冯俞楷,杜小泽,杨立军. 非稳态导热基于温度梯度的本征正交分解降维方法[J]. 中国科学(技术科学), 2018,48(1):39-47
- Feng Yukai, Du Xiaoze, Yang Lijun. Non-steady-state heat conduction intrinsic orthogonal decomposition reduction method based on temperature gradient [J]. Science and Technology in China, 2018, 48(1): 39-47.(in Chinese)
- [7]梁钰,郑保敬,高效伟,吴泽艳,王峰.基于 POD 模型降阶法的非线性瞬态热传导分析[J].中国科学:物理学 力学 天文学,2018,48(12):36-45.
- Liang Yu, Zheng Baojing, Gao Xiaowei. Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis Based on POD Model Reduction Method[J]. Science China: Physics, Mechanics & Astronomy,2018,48(12), 36-45.(in chinese).

超临界 CO₂/RP-3 煤油螺旋套管换热器的 热力性能分析

叶通骑^{1,2}, 韩鸿博^{1,2}, 鲍泽威^{1,2,*}

(1. 四川大学化学工程学院, 四川成都 610065;

2. 四川大学 空天动力燃烧与冷却教育部工程研究中心, 四川成都 610065)

(*通讯联系人, Tel: 028-85407797, Email: zewei.bao@scu.edu.cn)

摘要: 根据超燃冲压发动机热防护与发电一体化系统中热交换器的使用要求, 本文建立了适合该系统的超临界 CO₂/航空煤油螺旋套管换热器的数值模型, 通过实验对模型进行验证, 然后对换热器流动损失和换热性能的综合指标 PEC (Performance evaluation criteria) 进行分析, 结果表明: 螺距、螺旋直径和圈数与压力损失呈正相关, 但对于 PEC 影响较小; 内管内径 D_i 和环隙侧水力直径 D_h 与 PEC 呈负相关且对于 PEC 的影响较大。本文研究结果为该换热器的结构优化提供了一定参考。

关键词: 超临界 CO₂; 航空煤油; 螺旋套管换热器; 热防护

批注 [b1]: 结果太少了, 再加一条吧。

0 前言

在 6 马赫数以上飞行超过 1 小时的飞行器称为长航时高超音速飞行器^[1,2]。当高超音速飞行器以高马赫数飞行时, 燃烧室内的温度可高达 3220℃^[3], 超燃冲压发动机壁面结构处于恶劣的热环境中, 即使是最先进的复合材料也无法承受^[4]。因此, 超燃冲压发动机热防护技术已成为发展瓶颈之一^[5]。

对于超燃冲压发动机, 常用的热防护方式是再生主动冷却。再生冷却方案在高马赫数下需要大量的冷却用燃料。SEGAL^[6]指出当飞行马赫数大于 10 时, 将出现再生冷却所需要的热沉大于燃烧所用的燃料, 这意味着飞行器要携带的燃料量超过燃烧需要量, 多出的部分在完成冷却任务后没有经过燃烧而排掉, 既造成了燃料的额外损耗, 又增加了飞行器的负载。目前, 已有学者提出了基于闭式布雷顿循环的冷却方案, 这种冷却系统将一部分热量转化成电能, 间接提高了作为热沉的碳氢燃料的吸热能力, 为超燃冲压发动机的热防护提出了一种思路。在这种基于闭式布雷顿循环的冷却方案中, 超燃冲压发动机壁面冷却通道中的冷却剂是超临界二氧化碳 (sCO₂), sCO₂ 被用作中间介质。碳氢燃料仅用作热交换器处的低温流体, 避免了碳氢燃料在冷却通道中发生结焦沉积的可能性。此外, 热防护与发电一体化系统通过 sCO₂ 循环将超燃冲压发动机的部分高温余热转化为电能, 这大大降低了用于冷却的燃料质量流率。

Xu 等人^[7]用实验和数值的方法探究了超临界状态下的 CO₂ 在螺旋管内的传热特性, 他们的数值结果与实验结果对比表明 RNG k- ϵ 湍流模型可以很好的预测其流动与传热特性。同时他们还发现浮力和离心力的共同作用导致了螺旋管截面上流动和传热参数的特

殊分布, 流体温度会影响流动传热参数的非均匀分布。

Yang 等人^[8]采用 RNG $k-\epsilon$ 湍流模型研究了超临界状态下 CO_2 在水平非圆截面螺旋管内流动和传热的特性。其研究表明, 对非圆截面的传热系数和压降而言, 随着多边形边数的增加, 传热和压降增大, 但增大幅度逐渐减小。随着边数的持续增加, 压降减小。同时他们还研究了螺旋管的特征参数螺距 b 、直径 d 和半径 R 对非圆截面管内流动和传热的影响。其结论表明随着螺距 b 、直径 d 和半径 R 的增大, 在二次流与主流的共同作用下, 换热减小。在数值模拟结果的基础上, 将曲率参数引入到八边形截面螺旋管内超临界 CO_2 冷却换热的努塞尔数关联式中, 其具有较高的预测能力。

Farzaneh-Gord 等人^[9]基于熵产生最小化方法, 来优化螺旋套管换热器的几何形状。研究结果表明, 几何形状对性能显著影响, 他们通过熵产生最小化方法找到最佳曲率比的内管和环隙侧参数。这类方法的特点是没有考虑多个相互排斥的目标而没有得出最佳的综合性能。

尽管已有一些学者分析了热交换器的结构参数对流体流动和传热的影响, 但对于换热器综合性能的研究目前尚少, 本文指在根据热防护与发电一体化系统的使用要求, 建立合适的螺旋套管换热器数值模型, 以换热器流动和换热性能的综合指标 PEC (Performance evaluation criteria) 为评价因子, 通过对换热器热力性能分析来确定其各结构对于综合性能的影响, 为该螺旋套管换热器结构优化提供了一定指导。

1 物理和数值模型

1.1 物理模型和边界条件

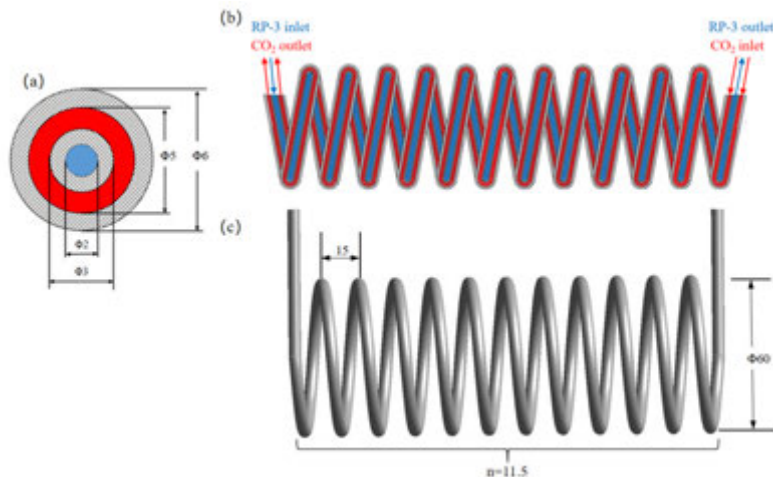


图 1 (a) 横截面图, (b) 内部流体流动示意图, (c) 螺旋套管换热器示意图

Fig. 1 (a) Cross-sectional view, (b) schematic diagram of internal fluid flow and (c) schematic diagram of the TTHC heat exchanger

考虑到碳氢燃料在高于 723K 左右时发生热裂解^[10]，为预防结焦对换热器的影响，需将 RP-3 航空煤油在换热器的出口温度控制在该温度以下。根据相关文献^[11]选择了应用于系统的 sCO₂/煤油 RP-3 螺旋套管换热器的运行条件，指定了以下操作条件：CO₂ 入口温度 $T_{in, h}=842\text{ K}$ ，RP-3 入口温度 $T_{in, c}=286\text{ K}$ ，CO₂ 出口压力 $p_{out, h}=8.35\text{ MPa}$ ，RP-3 出口压力 $p_{out, c}=3\text{ MPa}$ 。内外管的水力直径均采用 2mm，螺旋直径采用 60mm，根据所需流率设置 CO₂ 入口流量为 5 g/s^[12]，按比例确定 RP-3 入口流量为 2 g/s，圈数按换热需求确定为 11.5 圈，具体几何参数如表 1 所示。图 1 为空气-煤油螺旋换热器的示意图，换热器由 304 不锈钢制成，RP-3 航空煤油和压缩 CO₂ 分别进入内管和环隙侧。

批注 [b2]: 参考文献！

表 1 螺旋套管换热器的几何尺寸

Table 1 Geometrical specifications of TTHC heat exchanger

参数	内管	外管
节距, P (mm)	15	15
圈数, n	11.5	11.5
内侧直径, d_i (mm)	2	5
外侧直径, d_o (mm)	3	6
螺旋直径, D (mm)	60	60

1.2 流体物性

在本研究中，我们使用 NIST REFPROP 9 软件计算了 CO₂ 的热物理性质。然而 RP-3 航空煤油是多组分燃料，考虑到本文研究的工作条件的范围，最终将 Zhong 等人提出的 10 组分替代模型作为本章中 RP-3 的替代模型^[13]。他们在文献中对煤油的替代物及其准确性进行了仔细的讨论。利用 NIST SUPERTRAPP 程序计算了 RP-3 的热力学和输运特性。

表 2 为替代模型组分及摩尔分数。图 2 将 RP-3 的 10 组分替代模型的物理性质与 Xu 等人^[14]的实验测量结果进行了比较。如图 2 所示，在 RP-3 工作条件下 (300-800 K)，10 组分替代模型的数据与实验测量数据吻合较好。采用 50 个点的线性插值法进行数值模拟。在热物理性质变化更剧烈的区域上设置更多的点，以提高模拟结果的精度。

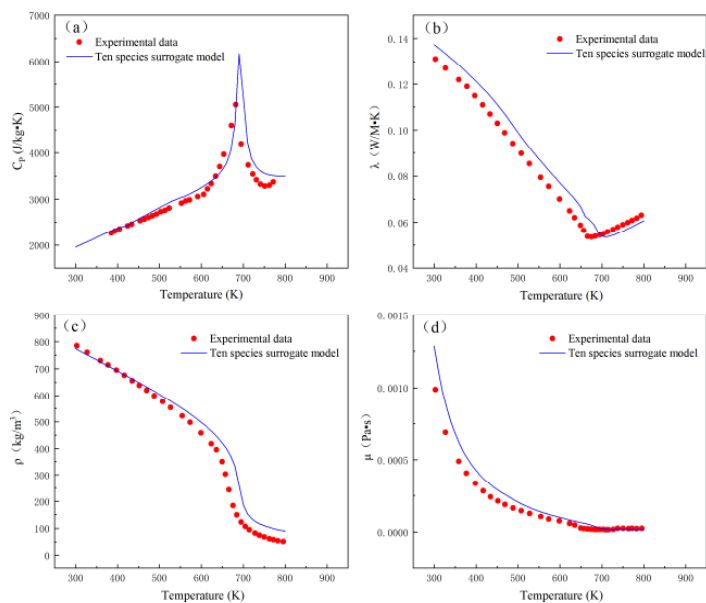


图2 3 MPa 下 10 组分替代模型数据与实验测量数据对比

Fig. 2 Comparison of data of 10-component model surrogate and experimental measurement data under the pressure of 3 MPa

表2 航空煤油的替代模型

Table 2 Representative surrogate models of aviation kerosene

模型	成分 (摩尔分数)	平均相对分子质量
一组分替代模型	n-Decane	142
三组分替代模型	49% n-Decane, 44% 1,3,5-Trimethylcyclohexane, 7% Propylbenzene	133.6
三组分替代模型	53% n-Undecane, 18% n-Butylcyclohexane, 29% 1,3,5-Trimethylbenzene	143.1

四组分替代模型	19.1% n-Decane, 36.5% n-Dodecane, 14.5% Methyl-cyclohexane, 29.9% n-Butylbenzene	143.7
六组分替代模型	3.12% n-Octane, 22.27% n-Dodecane, 7.06% n-Hexadecane, 21.11% Xylene, 16.32% Tetralin, 30.12% Decalin	142.8
十组分替代模型	6% n-Octane, 10% n-Decane, 20% n-Dodecane, 8% n-Tridecane, 10% n-Tetradecane, 10% n Hexadecane, 20% Methylcyclohexane, 8% Trans-1,3 dimethylcyclopentane, 5% Propylbenzene, 3% 1-Methylnaphthalen	150.1

1. 3 网格划分及求解设置

如图 3 所示三维结构化网格由 ICEM CFD 19.2 软件划分，用于离散化所有计算域。需要注意的是煤油侧边界层第一层网格的高度设置为 0.0035 mm，sCO₂ 侧边界层第一层网格的高度设置为 0.0004 mm，以使 Y+ 的值小于 1，目的是确保边界层的近壁流动的正确解析，网格的具体细节见图 3（b）。

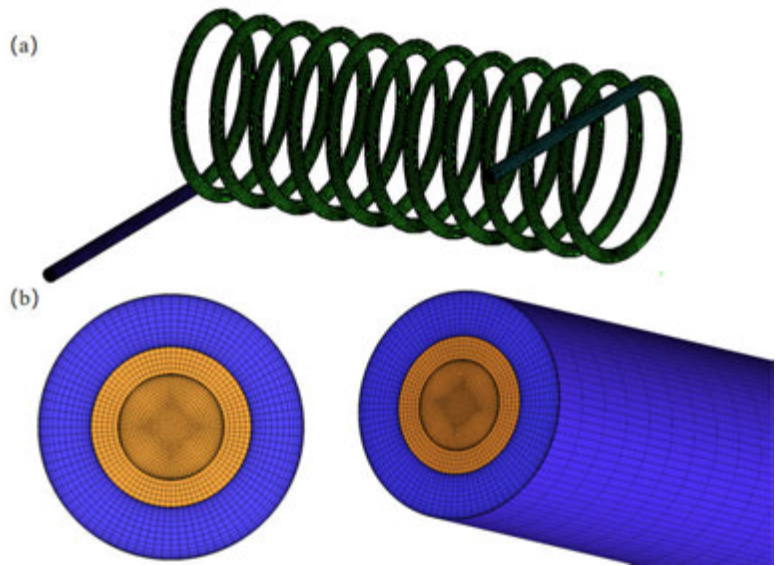


图 3（a）螺旋套管换热器的结构化网格,（b）网格细节

Fig.3. (a) Structural mesh for the TTHC and (b) meshing details adopted in this simulation

表 3 网格独立性研究

Table 3 Cases of mesh independency study

序号	网格数	传热量与序号 3 的 偏差(%)	CO ₂ 侧压降与序号 3 的偏差 (%)	油侧压降与序号 3 的偏差 (%)
1	5994956	2.1	1.7	2.5
2	8030972	0.2	0.15	0.2
3	10462508	0	0	0
4	13844524	0.01	0.018	0.02

使用 ANSYS FLUENT 19.2 软件进行求解，设置 SIMPLEC 算法用于解析速度和压力之间的耦合，QUICK 用于求解动量和能量方程的离散化问题，湍流动能和湍流耗散率方程采用二阶迎风格式进行处理，动量和能量方程的残差设置为小于 10^{-6} ，以获得精确的温度和速度分布。其他参数的残差设置为小于 10^{-5} 。

为了验证网格独立性，针对 SST k- ω 湍流模型测试了三种不同的网格。表 3 显示了传热量、CO₂ 侧压降、油侧压降的平均相对误差。对于所有参数，网格数为 8030972 和网格数为 13844524 相对于网格数为 10462508 的偏差均小于 0.2%。考虑到计算时间，为本数值研究选择了具有 8030972 总数的网格。

1.4 模型验证

1.4.1 RP-3 侧实验验证

为了验证模型的可靠性，分别对 RP-3 侧和 sCO₂ 侧的流体流动与换热情况进行模型验证。首先，进行了超临界压力下 RP-3 在水平螺旋管内的传热实验。图 4 为装置示意图，实验中所用到的仪器见表 4。该实验装置主要由四个系统组成。实验中使用的换热器的操作工况如表 5 所示。

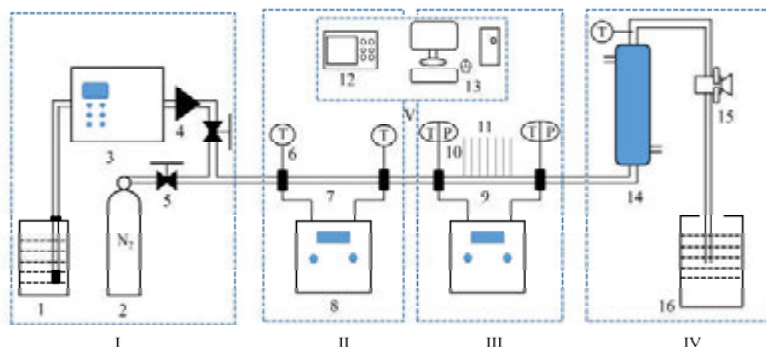


图 4 超临界压力 RP-3 在螺旋管内传热实验装置示意图

1, 燃料罐; 2, 氮气瓶; 3, 高压恒流泵; 4, 质量流量计; 5, 截止阀; 6, K 型热电偶; 7, 预热段; 8, 直流电源; 9, 试验段; 10, 压力传感器; 11, 焊接热电偶; 12, 数据采集; 13, 电脑; 14, 煤油-水冷却器; 15, 背压阀; 16, 废油桶

Fig. 4 Schematic of the experimental apparatus for heat transfer of RP-3 in helical tube.

1, fuel tank; 2, nitrogen cylinder; 3, high-pressure constant flow pump; 3, filter; 4, Coriolis mass flowmeter; 5, needle valve; 6, K-type thermocouples; 7, pre-heating section; 8, DC power; 9, test section; 10, pressure transmitters; 11, welding thermocouples; 12, data acquisition system; 13, computer; 14 water-cooled condenser; 14, pressure regulating valve; 15, waste oil tank.

输入系统主要由 RP-3 煤油、恒流泵、止逆阀和科里奥利质量流量计组成。预加热及加热系统和数据采集系统由两个直流加热器、温度传感器、压力传感器、预热管、实验螺旋管以及数据采集系统构成。冷却系统由煤油-水冷却器、温度传感器、背压阀、油料收集容器构成。

所用测试螺旋管段的材料为 304 不锈钢。为了确保测试段中流体完全流动，在测试前后预留 100 mm 长的未加热段。将两个 K 型铠装热电偶插入测试部分的进出口，以测量流体体积温度。每隔 180° (0.5 圈) 焊接一个热电偶。用压力传感器测量试验段压力的出口压力。试验部分覆盖有绝缘材料，以尽量减少热损失。操作工况如表 5 所示。

表 4 实验中螺旋管的结构参数

Table 4 Structural parameters of helical coiled tubes in the experiments

形状	内径 (mm)	外径 (mm)	节距 (mm)	螺旋直径 (mm)	圈数
螺旋管	2	3	15	40	4.5

表 5 操作工况

Table 5 Operating conditions

参数	范围
热流密度, q (kW/m ²)	300
入口流量, m (g/s)	1, 2, 3
出口压力, p (MPa)	4
入口温度, T (K)	292

建立与实验螺旋管相同的数值模型, 设置相同的边界条件: RP-3 为被加热流体, 壁面热流密度为 300 kW/m², 入口温度为 292K, 出口压力为 4MPa, 入口质量流量为 1-3g/s。采用沿螺旋管旋转角度对应的壁面温度为对比指标, 图 5 为实验与数值仿真的结果, 对壁面温度而言实验数据与数值结果的差异最大为 8.56%, 模拟结果和实验结果之间的误差可能来自数值计算的理想边界条件, 在实验过程中换热器被硅酸铝包裹以接近绝热边界条件, 但也很难完全消除热辐射和热对流的影响。

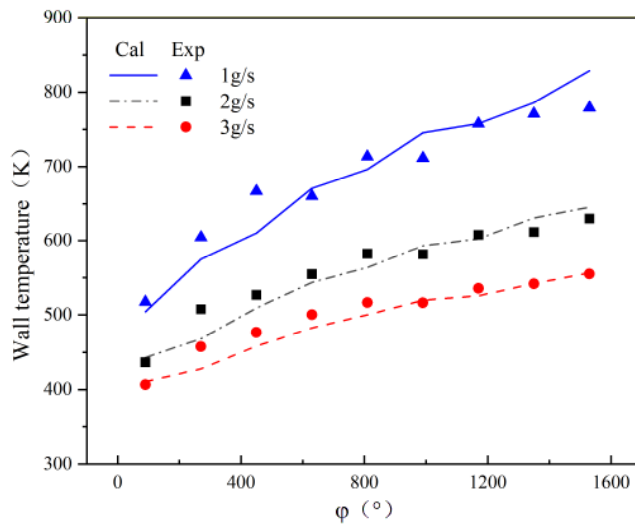


图 5 数值模型结果与实验数据的壁温沿角度分布对比

Fig. 5 The simulated and experimental results of wall temperature

1. 4. 2 sCO₂侧实验验证

sCO₂侧的模型验证在 Z 字型 PCHE 通道内进行，建立与张虎忠^[15]实验中相同的模型，设置相同的边界条件：冷热流体均为 sCO₂，质量流量均为 0.3kg/s，热流体入口温度为 715.15 K，出口压力为 8.5 MPa，冷侧流体入口温度为 355.05 K，出口压力 20.5 MPa；采用热侧 sCO₂ 进出口温差和压降为验证指标，得到对比结果如表 6 所示，可以看出热侧 sCO₂ 进出口温差和压降的误差分别为 1.12%和 5.20%，在误差允许范围内，可认为 sCO₂ 侧的数值模型可靠。总的来说，仿真结果与实验数据吻合良好，本文建立的数值模型是有效的。

表 6 SCO₂实验与模拟温差对比结果

	实验结果	模拟结果	误差/%
温差, ΔT _h (K)	351	347.07	1.12
压降, ΔP _h (kPa)	47.2	49.7	5.20

2 结果与讨论

本文采用范围分析的方法对各结构参数进行分析。通过改变一定范围内的单一结构参数来进行数值计算，以螺旋套管换热器综合流动 *Nu* 和换热性能 *f* 的综合指标 PEC 为评价指标，来讨论各参数的影响。各参数的讨论范围见表 7。

表 7 结构参数及范围

Table 7 Characteristic parameters and levels

序号	结构参数	范围		
1	螺距, <i>b</i> (mm)	10	20	30
2	螺旋直径, <i>D_c</i> (mm)	50	60	70
3	内管内径, <i>Di</i> (mm)	1	2	3
4	环隙侧水力直径, <i>D_h</i> (mm)	1	2	3
5	螺旋管圈数, <i>n</i>	8.5	10.5	12.5

套管换热器 CO₂ 侧的努塞尔数 (*Nu_h*) 和摩擦系数 (*f_h*)可由以下公式计算：

$$h_h = \frac{q}{T_w - T_b} \tag{1}$$

$$Nu_h = \frac{h_h d_h}{\lambda} \tag{2}$$

$$f_h = \frac{\Delta p_h}{(L/d_{h,h})\rho_h u_h^2/2} \quad (3)$$

其中 h_h 为 sCO₂ 侧的平均传热系数, q 为热流密度, T_w 为流体通道平均壁面温度, T_b 为 sCO₂ 的体积平均温度, dh 为通道水力直径, λ 为热导率, ΔP_h 为通道压力损失, u 为流体速度, L 为流道长度, ρ 为流体密度。

综合指标 (PEC) 定义如下:

$$PEC = \frac{Nu_h / Nu_0}{(f_h / f_0)^{1/3}} \quad (4)$$

其中 Nu_0 和 f_0 为初始结构的努塞尔数和摩擦系数。

2.1 各结构参数的影响

2.1.1 螺距的影响

螺距是螺旋套管换热器的一个基本结构参数, 它通过改变换热器的总长而影响整体的体积。对于给定的原始结构参数, 改变螺距对螺旋套管换热器的换热面积影响很小, 其对综合评价指标 PEC 的影响也可以忽略不计。因此, 螺距只是决定螺旋套管换热器热传导性能的一个基本因素。图 6(a) 给出了不同螺距下螺旋套管换热器的压力损失与 PEC 变化曲线图。随着螺距的增加, 换热器的 PEC 逐渐下降, 这说明传热量的提升效果低于压力损失的增大效果。从图中可以看出, 螺距的增加对于两侧流体的压力损失和整体性能指标 PEC 的影响很小。

2.1.2 螺旋直径的影响

螺旋直径是螺旋套管换热器的一个重要的结构参数, 它通过改变螺旋管的管长从而改变换热器的换热面积, 并且螺旋直径决定了螺旋管的曲率, 这会影响螺旋管通道内流体的流动形态和离心力的大小, 因此螺旋直径对于换热器的整体换热效果具有影响。图 6(b) 给出了不同螺旋直径下螺旋套管换热器的压力损失与 PEC 变化曲线图。随着螺旋直径的增加, 压力损失随之增加, 并且 PEC 也逐渐增大, 这说明传热量的提升效果大于压力损失的提高。但是, 由图可知, 螺旋直径的增加对 PEC 的提高率较小, 并且螺旋直径对于换热器的整体体积影响较大。

批注 [b3]: 符号变量斜体, 下同!

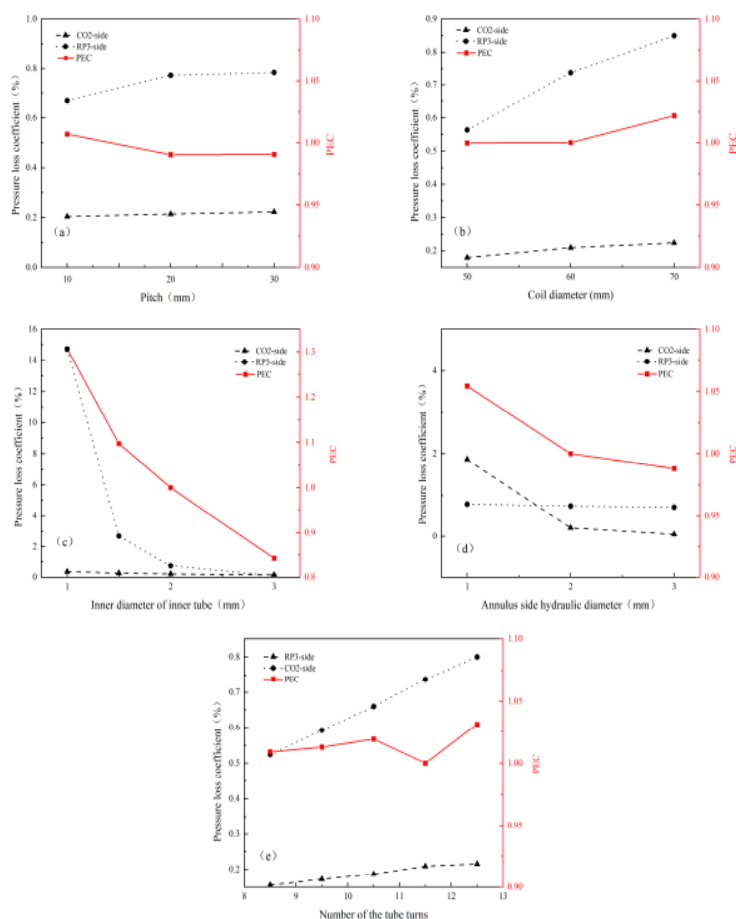


图 6 (a) 螺距, (b) 螺旋直径, (c) 内管内径, (d) 环隙侧水力直径, (e) 圈数对于 rp3 侧和 sCO₂ 侧的压力损失及综合指标 PEC 的影响

Fig. 6 Effect of (a) Pitch, (b) Coil diameter, (c) D_i , (d) D_h , (e) Turns on the pressure loss coefficient and PEC of the CO₂-side and RP3-side.

2.1.3 内管内径 D_i 的影响

螺旋套管换热器的内管内径 D_i 是影响换热器换热性能的决定性参数, 它不仅影响了管内流体间的换热, 还决定了管内流体的流动形态, 对于换热器的换热量和燃油侧压降具有决定性的影响。图 6 (c) 给出了不同 D_i 下螺旋套管换热器的压力损失与 PEC 变化

曲线图。从图中可看出, 换热器的整体评价指标 PEC 和两侧流体的压力损失随 D_i 的增加递减, 这是因为内管内径 D_i 越小, 燃油 RP-3 的流速越大, 加强了换热的同时也增加了压降, 但是换热效果的提高低于压力损失的增加, 因此可见, D_i 对于燃油侧压力损失和 PEC 的影响非常大。图上还可看出, D_i 为 1 时 PEC 达到最大值 1.31, 但是燃油侧压力损失较大 (大于 10%), 由此可知, 存在一个合适的 D_i 可令换热器的 PEC 尽量大的同时, 燃油侧的压降在 10% 之内。

2.1.4 环隙侧水力直径 D_h 的影响

螺旋套管换热器的环隙侧水力直径 D_h 是另一个影响换热器换热性能的决定性参数, 它也同时影响了外管内流体的换热和流体的流动形态, 对于换热器的换热量和 CO_2 侧压降具有决定性的影响。图 6 (d) 给出了不同 D_h 下螺旋套管换热器的压力损失与 PEC 变化曲线图。从图中可看出, 换热器的整体评价指标 PEC 随 D_h 的增加而减小, 这说明流速增加带来的换热效果的提高低于压力损失的增加, 因此, 环隙侧水力直径 D_h 对于 CO_2 侧压力损失和 PEC 的影响较大。

2.1.5 圈数的影响

圈数是螺旋套管换热器的基本结构参数, 它不仅影响了换热器的整体尺寸, 而且对于换热器的换热量和压力损失具有影响, 图 6 (e) 给出了不同圈数下螺旋套管换热器的压力损失与 PEC 变化曲线图。从图中可知, 两侧压力损失随着圈数的增加而增加, 换热器的综合性能指标 PEC 先增后减再增, 圈数对于 PEC 的影响较小但对于两侧的压降影响较大。

3 结论

本文建立了 $\text{sCO}_2/\text{RP-3}$ 煤油螺旋套管换热器的数值模型。基于换热器流动损失和换热性能的综合评价指标 PEC, 对该换热器的各结构参数对于整体性能的影响进行分析。得出以下结论:

(1) 对于 $\text{sCO}_2/\text{RP-3}$ 煤油螺旋套管换热器的数值模拟, 实验数据与数值计算的最大误差在 8.56% 以内, 仿真结果与实验数据吻合良好, 本文建立的数值模型有效。

(2) 通过对螺旋套管换热器结构的单因素讨论, 得出螺距和螺旋直径对于综合性能的影响较小, 圈数对于两侧流体通道的压力损失影响较大但对于综合性能的影响较小, 内管内径 D_i 和环隙侧水力直径 D_h 是决定换热器压力损失和换热综合性能的影响因素, 其中, 螺旋直径和圈数与压力损失呈正相关, D_i 和 D_h 与两侧通道压力损失和 PEC 呈负相关。

参考文献

- [1] VERMAAK N, VALDEVIT L, EVANS A G. Materials Property Profiles for Actively Cooled Panels: An Illustration for Scramjet Applications [J]. Metall Mater Trans A, 2009, 40(4): 877-90.
 - [2] ANDREI I. Rocket Propulsion Elements [J]. INCAS bulletin, 2015, 7(2): 165.
 - [3] LI H, BAO W, QIN J, et al. Analysis on the power generation scheme for wide speed range super/hypersonic air-breathing propulsion system; proceedings of the 2018 Joint Propulsion Conference, F, 2018 [C].
 - [4] ZHU Y, PENG W, XU R, et al. Review on active thermal protection and its heat transfer for airbreathing hypersonic vehicles [J]. Chinese Journal of Aeronautics, 2018, 31(10): 1929-53.
 - [5] BAO W, QIN J, YU D. Integrated thermal management method of energy based on Closed Brayton Cycle for Scramjet; proceedings of the Collection of Technical Papers - AIAA/ASME/SAE/ASEE 42nd Joint Propulsion Conference, F, 2006 [C].
 - [6] SEGAL C. The scramjet engine: Processes and characteristics [M]. 2009.
 - [7] XU J, YANG C, ZHANG W, et al. Turbulent convective heat transfer of CO₂ in a helical tube at near-critical pressure [J]. International journal of heat and mass transfer, 2015, 80: 748-58.
 - [8] YANG M, LI G R, LIAO F, et al. Numerical study of characteristic influence on heat transfer of supercritical CO₂ in helically coiled tube with non-circular cross section [J]. INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER, 2021, 176.
 - [9] FARZANEH-GORD M, AMERI H, ARABKOOHSAR A. Tube-in-tube helical heat exchangers performance optimization by entropy generation minimization approach [J]. APPLIED THERMAL ENGINEERING, 2016, 108: 1279-87.
 - [10] ALBRIGHT L F, MAREK J C. COKE FORMATION DURING PYROLYSIS - ROLES OF RESIDENCE TIME, REACTOR GEOMETRY, AND TIME OF OPERATION [J]. INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH, 1988, 27(5): 743-51.
 - [11] ZHOU X, ZUO J, LI X, et al. Thermal behavior of supercritical CO₂ inside scramjet cooling channels with different structural parameters [J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 217: 119153.
 - [12] HUANG Y, DUAN L, LIU D, et al. Computational investigation on heat transfer of supercritical CO₂ in horizontal U-tubes [J]. The Journal of supercritical fluids, 2022, 188: 105690.
 - [13] ZHONG F Q, FAN X J, YU G, et al. Heat transfer of aviation kerosene at supercritical conditions [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2009, 23(3): 543-550.
 - [14] XU K, RUAN B, MENG H. Validation and analyses of RANS CFD models for turbulent heat transfer of hydrocarbon fuels at supercritical pressures [J]. International journal of thermal sciences, 2018, 124: 212-26.
 - [15] 张虎忠. 超临界 CO₂ 印刷电路板换热器性能研究 [D]; 中国科学院大学(中国科学院工程热物理研究所), 2020.
- Zhang H Z. Study on performance of supercritical CO₂ heat exchanger for printed circuit board [D]; University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Engineering Thermophysics), 2020.

Zr-Mn 共掺杂实现 CaO 基储热材料的快速稳定释热

张华静, 孙项羽, 袁梦迪, 徐超*, 廖志荣

(华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京 102206)

(Tel:010-61773876, Email: mechxu@ncepu.edu.cn)

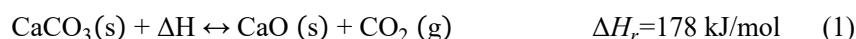
摘要: CaCO_3/CaO 储热体系具有高储热温度, 高储热密度以及能量损失低的特点, 成为第三代光热发电最有竞争力的候选者。然而, 传统的 CaCO_3/CaO 储热材料由于循环稳定性差、反应速率慢以及太阳能全光谱吸收率低, 严重制约了其工业应用。因此, 本文制备了一种可实现快速释热和提高太阳能全光谱吸收率的 Zr-Mn 共掺杂的 CaO 基复合储热材料, 并研究了其在 30 个循环过程中的储释热性能。结果表明, 30 个循环后, $20\text{Ca}-0.5\text{Zr}-0.5\text{Mn}$ 的储热密度下降率仅为 10.11%, 太阳能平均光谱吸收率可提高 376%。

关键词: 热化学储热, 释热反应速率, 光谱吸收率, 循环稳定性。

0 前言

太阳能是世界上最丰富的可再生能源, 是最有希望替代传统化石燃料的能源之一^[1]。然而, 太阳能具有波动性和间歇性的特点, 导致聚光光伏 (CPV) 技术无法将能量可靠地传输到电网^[2]。因此, 人们提出了储能技术来解决能源供需之间的不匹配问题^[3]。与其他储能技术 (电化学储能^[4]、电能储能^[5]、光化学储能^[6]) 相比, 热能储存 (TES) 技术, 在储热时间、储热密度、技术成本方面具有潜在的优势^[7]。

TES 技术主要分为三种类型, 显热储热、潜热储热和热化学储热。其中, 热化学储热具有储热密度高、储热时间长、能量损失小等优点^[8]。太阳能可以通过热化学可逆反应以化学能和显热的形式储存和释放。目前的高温热化学储热体系主要有: 金属氢化物体系、金属氧化物体系、氢氧化物体系以及碳酸盐体系^[9]。其中, 属于碳酸盐体系的 CaCO_3/CaO 储热体系, 工作温度超过 700 °C, 理论储能密度高达 1780 kJ/kg, 物料安全无毒, 可满足下一代太阳能热电厂提高效率的高温要求^[10]。其工作原理基于以下可逆反应:



近十年来, 研究人员对 CaCO_3/CaO 高温热化学储热体系的太阳能全光谱吸收率、循环稳定性和反应动力学等方面展开了广泛研究。在基于体吸收式的热化学反应器中, 储热材料可直接吸收太阳辐射, 避免了繁琐的传热过程, 从而实现太阳能的高效转化和储存。而纯 CaCO_3 储热材料的太阳能平均光谱吸收率极低^[11]。通常掺杂光学吸收增强元

基金项目: 国家自然科学基金 (52090062, 51821004)

素来提高 CaCO_3/CaO 储热体系的太阳能光谱吸收率。Zheng 等人^[11]研究发现, 通过掺杂 Cu 元素和 Cr 元素, 改性的 CaCO_3 储热材料的太阳能平均光谱吸收率可达 65%。Yang 等人^[12]通过模板法制备了共掺杂 Fe 元素和 Mn 元素的 CaCO_3 基储热材料, 其太阳能平均光谱吸收率为 81.5%; 循环稳定性是评价 CaCO_3/CaO 储热体系商业应用价值的重要指标。Li 等人^[13]讨论了共掺杂 SiC-Mn 的 CaO 基储热材料在 30 次循环中的稳定性。结果表明, 与纯 CaO 基储热材料相比, 共掺杂 SiC-Mn 的 CaO 基储热材料的循环稳定性和太阳能吸收率都得到了提高。Song 等人^[14]发现 Al-Fe 共掺杂的 CaCO_3 基储热材料 50 次循环后储能密度的衰减率只有 4.5%。热化学储热系统的热输出功率在很大程度上取决于释热反应速率。因此, 除了提升 CaCO_3/CaO 储热材料的循环稳定性和太阳能光谱吸收率以外, 对其动力学特性的调控也很重要。Khosa 等人^[15]研究了掺杂 ZnO 的 CaCO_3 复合储热材料的分解反应动力学。结果表明, 与纯 CaCO_3 相比, 掺杂 ZnO 可以提高煅烧反应的速率。Teng 等人^[16]提出一种考虑分压、反应温度和颗粒形态的动力学模型来研究 Mn-Fe 共掺杂的 CaCO_3 基复合储热材料的释热反应动力学特征。

总而言之, 虽然基于 CaCO_3/CaO 储热体系的瓶颈问题已展开了大量研究, 但是目前大部分 CaCO_3/CaO 储热材料很难兼具高全光谱太阳能吸收率、高循环稳定性和快速的反应动力学。因此, 本文采用改进的溶胶凝胶法制备了一种兼具全光谱太阳能吸收率、良好的循环稳定性和快速的释热反应速率的 Zr-Mn 共掺杂的 CaO 基复合储热材料。探究了 CaO 、20Ca-Zr、20-Mn 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 在 30 次循环中的循环性能。

1 实验方法

1.1 实验材料

四水硝酸钙($\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$), 纯度 99%; 四水硝酸锰($\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$), 纯度 98%; 硝酸氧锆($\text{ZrO}(\text{NO}_3)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$), 纯度 98%; 柠檬酸($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$), 分析纯。本文中使用的试剂均来自于上海阿拉丁生化科技股份有限公司。

1.2 材料合成方法

本文使用改进的溶胶凝胶法合成了 CaO 基复合储热材料。钙基前驱体为 $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 和 $\text{ZrO}(\text{NO}_3)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ 分别作为惰性掺杂元素 Zr 和 Mn 的前驱体, 柠檬酸作为络合剂。在所有改性的 CaO 基复合储热材料中, CaO 与掺杂金属元素的摩尔比为 20:1, 柠檬酸与金属阳离子的摩尔比为 1:1。在 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 中, Zr 元素与 Mn 元素的摩尔比为 1:1。下面以 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 为例, 合成流程如下: $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{ZrO}(\text{NO}_3)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ 和 $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 以一定的混合比例溶解在 20 mL 去离子水中; 使用磁力搅拌器把混合溶液在 95 °C 下进行搅拌, 直到混合溶液变成淡黄色的凝胶状态, 转速为 700 r/min; 搅拌得到的淡黄色溶胶在 150 °C 的烘箱中恒温 12 h, 淡黄色溶胶溶液变成蘑菇状的多孔蓬松材料, 并进行研磨; 之后将研磨好的样品在 850 °C 的马弗炉中加热 3 h; 最后, 将得到的蓬松粉末样品研磨以备使用。为了作为对比, 通过相同的制备方法制备了纯 CaO 。 CaO 基复合储热材料命名为“xxCa-(Zr/Mn)”, xx 代表复合储热材料中钙元素与掺杂金属元素的摩尔比。

1.3 材料表征方法

本文使用 X 射线衍射仪 (Rigaku Smart Lab) 对制备的样品进行了 XRD 图谱分析, 扫描范围是 10-90°, 扫描速率为 10 °/min, 步长为 0.02°。为了观察 CaO 基复合储热材

料在循环前后样品形貌的变化,使用扫描电子显微镜(SEM)(thermo scientific Apreo 2S)来获取样品的微观形貌特征。使用与 FEI Inspect F50 扫描电子显微镜(SEM)连接的 EDAX super octane 探测器进行能谱分析(EDS),确定 CaO 基复合储热材料中所含元素的元素分布。CaO 及 CaO 基复合储热材料的光学性能测试由紫外可见近红外分光光度计(Lambda 1050)来完成。

1.4 储释热循环实验

本文采用同步热分析仪(STA 449F5)进行了储释热循环实验。本实验所使用的样品质量为 8.5 mg。煅烧反应在纯 Ar 气氛中进行,反应温度为 750 °C, Ar 流量为 100 mL/min。碳化反应在 CO₂ 和 Ar 气氛中进行,反应温度为 850 °C, CO₂ (90 vol%) 和 Ar (10 vol%) 的流量总和为 100 mL/min。煅烧反应和碳化反应的持续时间都为 5 min。在本实验中,引入有效转化率($X_{eff,N}$)和储热密度($E_{g,N}$)来评价 CaO 基复合材料的储热性能。

$$X_{eff,N} = \frac{m_{carb,N} - m_{cal,N}}{m_{cal,N}} \cdot \frac{M_{CaO}}{M_{CO_2}} \quad (2)$$

$$E_{g,N} = \frac{1000\Delta m \cdot \Delta H_r}{M_{CO_2} \cdot m_{cal,N}} = X_{eff,N} \cdot \frac{1000\Delta H_r}{M_{CaCO_3}} \quad (3)$$

其中, $m_{carb,N}$ 为第 N 次碳化后样品的质量, $m_{cal,N}$ 为第 N 次煅烧后的质量。 M_{CaCO_3} (100 g/mol), M_{CaO} (56 g/mol)和 M_{CO_2} (44 g/mol)分别为 CaCO₃, CaO 和 CO₂ 的相对分子质量。 ΔH_r (178 kJ/mol) 为煅烧反应的反应摩尔焓。

1.5 CO₂-TPD 测试流程

本实验使用化学吸附仪(先权 TP-5080)对合成的样品进行了 CO₂-TPD 测试,所采用的测试流程为:

- (1) 预处理: 在 He 气氛下将样品从室温加热到 500 °C, 升温速率为 10 °C/min, 气体流量为 30 mL/min;
- (2) 吸附: 在室温下使用 10%CO₂-90%He 混合气氛对样品进行吸附, 直至基线平稳, 达到吸附饱和状态;
- (3) 升温吹扫: 在 He 气氛下, 升温至 50 °C, 开始吹扫, 直至基线平稳, 升温速率为 10 °C/min, 气体流量为 30 mL/min;
- (4) 程序升温脱附: 在 He 气氛下, 开始程序升温并记录数据, 以 10 °C/min 的升温速率升至 900 °C, 气体流量为 30 mL/min;
- (5) 测试结束: 之后在 He 气氛下降温至室温, 结束测试, 气体流量为 30 mL/min。

2 实验结果及讨论

2.1 CaO 及 CaO 基复合储热材料的储释热性能

图 1 为 CaO、20Ca-Zr、20-Mn 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 在 30 次循环中的有效转化率和储热密度。可以发现, 对于 CaO 和 20Ca-Mn, 有效转化率和储热密度随着循环次数的增加而降低。其中, 20Ca-Mn 的有效转化率和储热密度在前 15 个循环缓慢降低, 而在

后 15 个循环迅速下降。而 20Ca-Zr 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的有效转化率和储热密度先增加再逐渐降低。前几个循环中有效转化率和储热密度的增加现象被称为自活化现象^[17]。30 个循环后，20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的有效转化率和储热密度在四种样品中保持最高，分别为 56.24% 和 1001.08 kJ/kg。此外，还计算了这四种材料 30 个循环后的储热密度下降率，如表 1 所示。可以看到，30 个循环后，CaO 的储热密度下降率高达 62.62%。而 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的储热密度下降率只有 10.11%。因此，与 20Ca-Zr 和 20Ca-Mn 相比，共掺杂组合更有利于循环稳定性的提升。

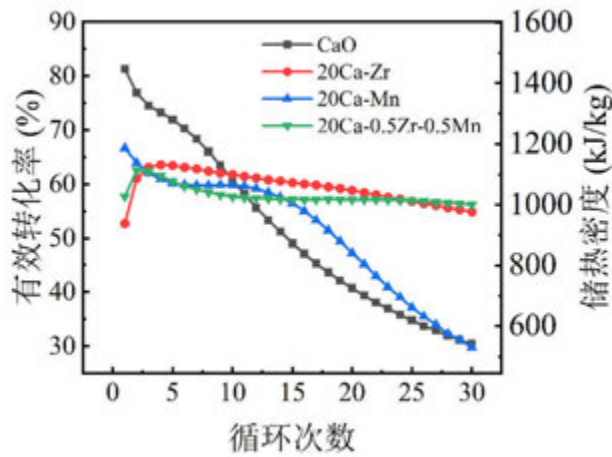


图 1 CaO 及 CaO 基复合储热材料循环性能对比：有效转化率和储热密度

表 1 CaO 及 CaO 基复合储热材料 30 个循环后的储热密度下降率

样品	CaO	20Ca-Zr	20Ca-Mn	20Ca-0.5Zr-0.5Mn
储热密度下降率	62.62%	13.67%	55.31%	10.11%

2.2 XRD 图谱和微观形貌表征

如图 2 为 20Ca-Zr、20Ca-Mn、20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的 XRD 图谱。在这三种 CaO 基复合储热材料中均可以观察到 CaO 的衍射峰。此外，还存在少量的 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 的衍射峰，表明 CaO 基复合储热材料的吸湿性导致了水分的吸收。在 20Ca-Zr 中，检测到了 CaZrO_3 晶相。在 20Ca-Mn 中，形成了 Ca_2MnO_4 晶相。而在 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 中，则形成了 CaZrO_3 和 Ca_2MnO_4 两种晶相。

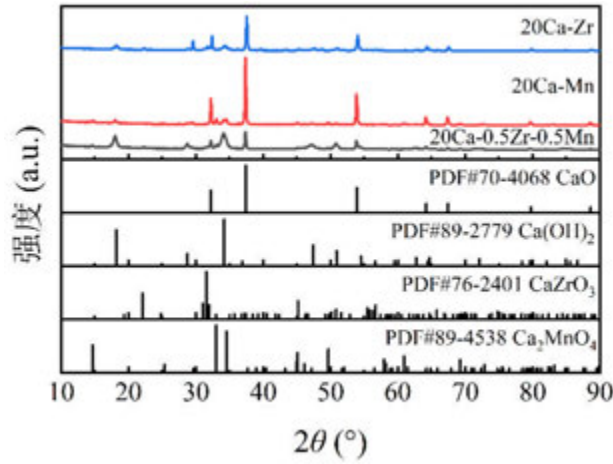


图2 所合成 20Ca-Zr, 20Ca-Mn 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的 XRD 图谱

图3为CaO、20Ca-Zr、20Ca-Mn和20Ca-0.5Zr-0.5Mn在循环前后扫描电镜微观形貌图。新鲜的CaO呈现颗粒状，没有明显的孔隙。新鲜的20Ca-Zr呈片状结构。新鲜的20Ca-Mn和20Ca-0.5Zr-0.5Mn则呈现相互连通的孔隙，有较小颗粒表观粒径。在这四种CaO基储热材料中，20Ca-Mn的表观粒径最小。新鲜的20Ca-0.5Zr-0.5Mn的表观粒径明显小于新鲜的20Ca-Zr。因此，Mn元素的掺入，可以明显降低CaO基复合储热材料的表观粒径。经过30个循环，CaO、20Ca-Zr、20Ca-Mn和20Ca-0.5Zr-0.5Mn的颗粒变得很大。使用过的“CaO”表面略微光滑。在其他三种CaO基复合储热材料中，20Ca-Mn颗粒聚集成大块结构，孔隙量变少。而20Ca-Zr和20Ca-0.5Zr-0.5Mn仍有一定量的大孔和介孔，有利于碳酸化反应。因此，CaZrO₃的存在可以在很大程度上抑制循环中CaO晶粒的生长和团聚。而Ca₂MnO₄的耐烧结性能则明显小于CaZrO₃。

此外，新鲜的20Ca-0.5Zr-0.5Mn所对应的EDS图谱如图4所示，表明Ca、Zr和Mn元素在样品中的均匀分布。均匀性有效保证了CaO复合储热材料中各元素的相互作用，从而延缓了CaO颗粒在储释热循环中的烧结和聚集。

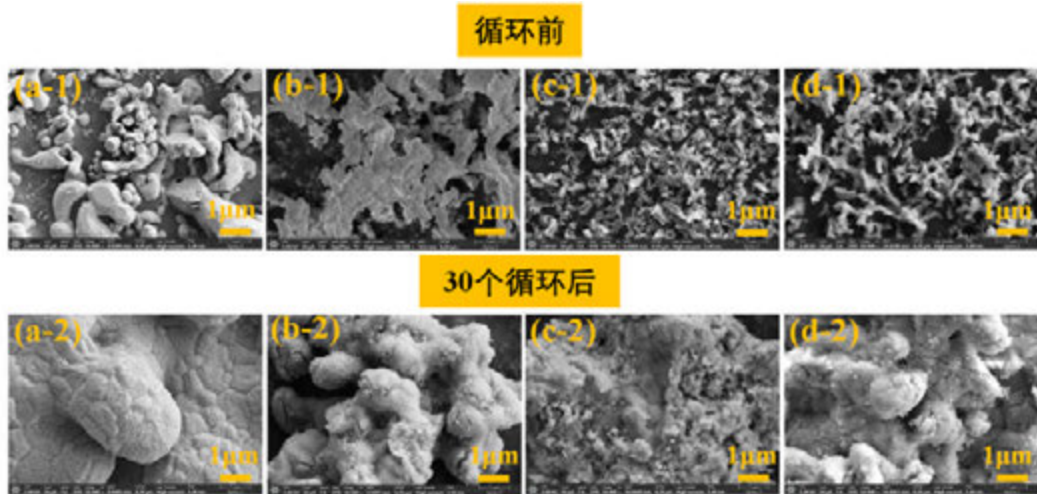


图3 CaO及CaO基复合储热材料在循环前后扫描电镜微观形貌图：(a)CaO，(b)20Ca-Zr，(c)20Ca-

Mn, (d)20Ca-0.5Zr-0.5Mn; (1) 循环前; (2) 30 个循环后

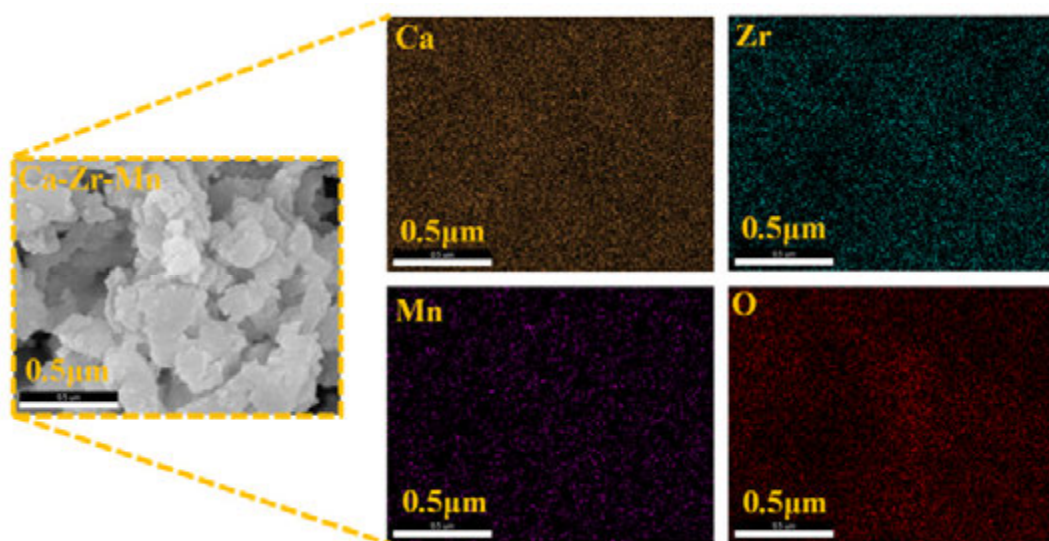


图 4 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的 EDS 图谱

2.3 释热反应动力学及 CO₂-TPD 测试

CaO 及 CaO 基复合储热材料在第 5 个, 第 10 个, 第 20 个以及第 30 个循环时的释热动力学如图 5 所示。可以发现, 释热反应过程由两个不同的反应阶段(即化学反应控制阶段和产物层扩散控制阶段)组成。随着循环次数的增加, CaO 的释热反应速率随着循环次数的增加而快速降低。这是由于 CaCO₃/CaO 的低塔曼温度(550 °C)^[18]导致了其循环过程中经历了严重的烧结, 孔隙结构塌陷和堵塞, 从而降低化学反应活性。

在三种 CaO 基复合储热材料中, 20Ca-Mn 在前 10 个循环具有较高的释热反应速率。而在后 10 个循环中, 由于 20Ca-Mn 的低耐烧结性能, 导致释热反应速率迅速降低。此外, 可以发现, 掺杂 Zr 元素并不有利于动力学控制阶段释热反应速率的提高, 尽管 20Ca-Zr 有不错的耐烧烧结性能。20Ca-0.5Zr-0.5Mn 在 30 次释热中, 维持着稳定的释热反应速率, 在后 10 个循环更为明显。因此, Zr-Mn 共掺杂的 CaO 基复合储热材料有利于实现快速稳定的释热反应。

为了进一步探索 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 对释热反应动力学(即碳酸化反应)的增强作用。本文对 CaO 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 进行了 CO₂-TPD 测试。CaO 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的 CO₂-TPD 曲线如图 6 所示。在 CO₂-TPD 测试中, 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 在 754 °C 时出现了强烈的峰值, 明显高于纯 CaO, 表明 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 具有良好的 CO₂ 捕集能力, 有利于释热反应。

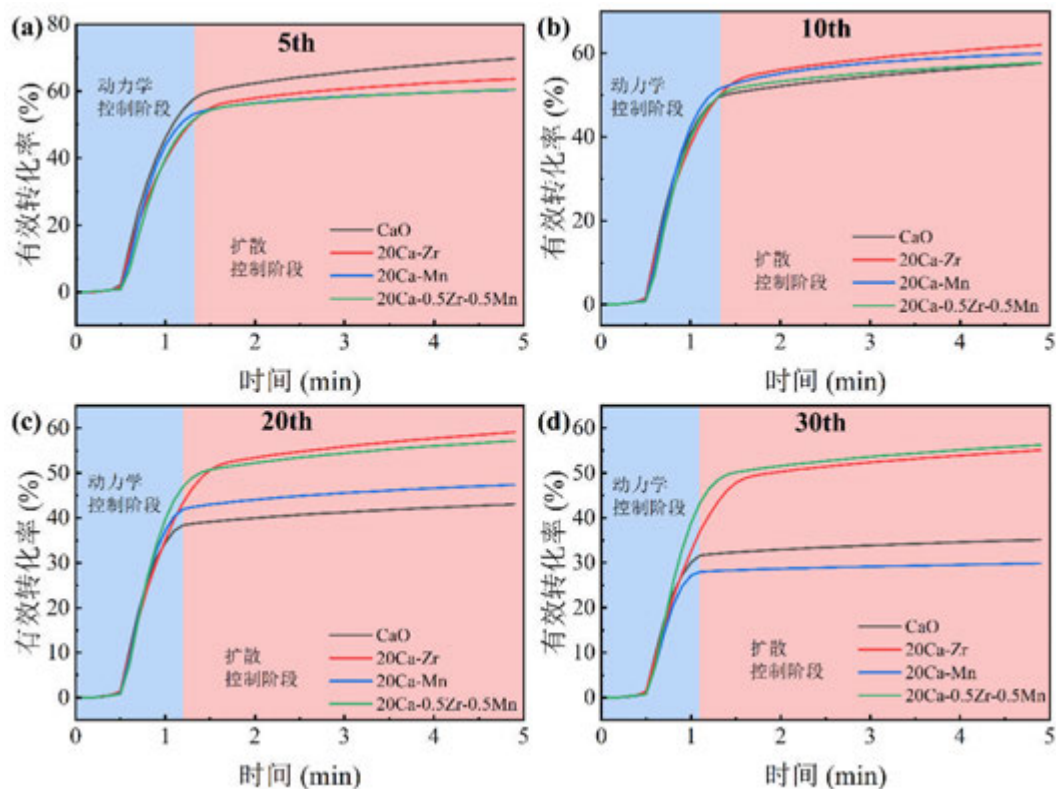


图5 CaO 及 CaO 基复合储热材料释热反应动力学: (a)第 5 个循环, (b)第 10 个循环, (c)第 20 个循环, (d)第 30 个循环

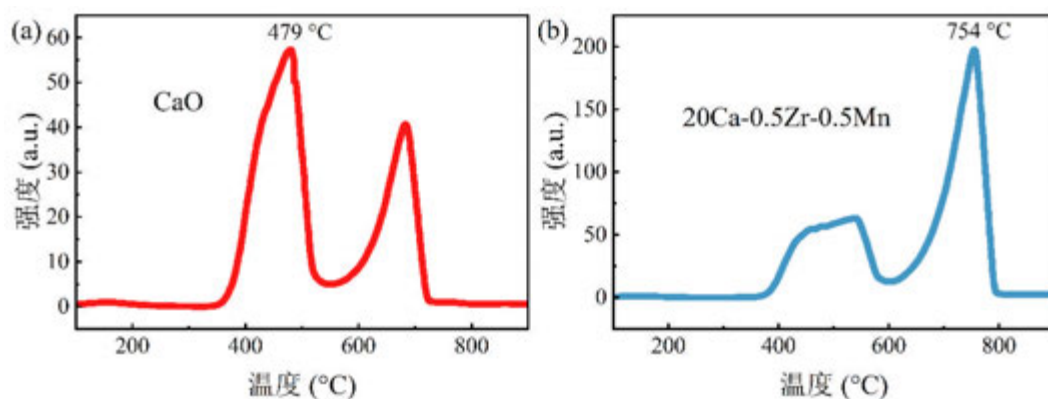


图6 CaO 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的 CO₂-TPD 图谱: (a)CaO, (b)20Ca-0.5Zr-0.5Mn

2.4 CaO 和 CaO 基复合储热材料太阳能光谱吸收特性

为了评价本文中所合成的 CaO 基复合储热材料的太阳能全光谱吸收性能, 通过紫外可见近红外分光光度计测得了 CaO、20Ca-Zr、20Ca-Mn 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的太阳能辐射吸收性能进行了测试, 如图 7(a)所示。可以发现, 纯 CaO 的太阳能光谱吸收率极低。掺杂 Zr 元素并不能提升 CaO 复合储热材料的太阳能光谱吸收率。而掺杂 Mn 元素

后, 20Ca-Mn 和 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的光谱吸收率显著增强, 尤其是对紫外和可见光的吸收。与 20Ca-Mn 相比, 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 对近红外波段的吸收率略微增加。

以 AM1.5D 标准光谱作为太阳能光谱能量输入基准, 将太阳能光谱吸收率与 AM1.5D 标准光谱进行加权平均计算, 得到 CaO 基复合储热材料的太阳能平均光谱吸收率 (A_{sol}), 如图 7(b)所示。具体计算方式如下:

$$A_{sol} = \frac{\int_{300nm}^{2500nm} \alpha(\lambda) I_{AM1.5D}(\lambda) d\lambda}{\int_{300nm}^{2500nm} I_{AM1.5D}(\lambda) d\lambda} \quad (4)$$

其中, λ 为波长, $\alpha(\lambda)$ 和 $I_{AM1.5D}(\lambda)$ 分别代表 CaO 基复合储热材料的太阳能光谱吸收率和 AM1.5D 条件下地表可接收的光谱辐照。

计算结果表明, 纯 CaO 的太阳能平均光谱吸收率仅有 7.87%。通过共掺杂 Zr 元素和 Mn 元素, 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的平均太阳能光谱吸收率为 37.5%, 提高了约 376%。

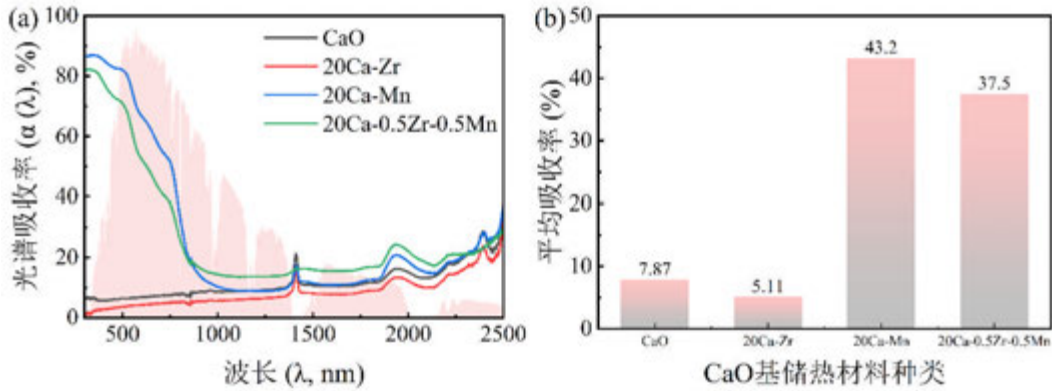


图 7 CaO 和 CaO 基复合储热材料辐射吸收性能: (a)太阳能光谱吸收率, (b)太阳能平均光谱吸收率

3 结 论

本文使用改进的溶胶凝胶法制备了 CaO 基复合储热材料, 从储释热循环性能、释热反应动力学以及太阳能光谱吸收性能等方面展开了研究。主要结论有以下三点:

(1) 与 20Ca-Zr 和 20Ca-Mn 相比, 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 可进一步提高循环稳定性。30 个循环后, 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 的储能密度下降率只有 10.11%。

(2) 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 稳定的释热反应速率源于 Zr 元素和 Mn 元素的共同作用。

(3) 通过共掺杂 Zr 元素和 Mn 元素, CaO 基复合储热材料的平均太阳能吸收率从 7.87% 提高到了 37.5%。与纯 CaO 相比, 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 在全光谱范围内的太阳能平均吸收率可提高约 376%。与 20Ca-Mn 相比, 20Ca-0.5Zr-0.5Mn 可提高近红外波段的太阳光谱吸收率。

参考文献

- [1] Zhao Y, Zhao C Y, Markides C N, et al. Medium- and high-temperature latent and thermochemical heat storage using metals and metallic compounds as heat storage media: A technical review. *Applied Energy*, 2020, 280: 115950.
- [2] Yang Y, Li Y, Yan X, et al. Development of Thermochemical Heat Storage Based on CaO/CaCO₃ Cycles: A Review. *Energies*, 2021, 14(20): 6847.
- [3] Khosa A A, Xu T, Xia B Q, et al. Technological challenges and industrial applications of CaCO₃/CaO based thermal energy storage system – A review. *Solar Energy*, 2019, 193: 618-636.
- [4] Wang T, Chen S, Pang H, et al. MoS₂-Based Nanocomposites for Electrochemical Energy Storage. *Advanced Science*, 2017, 4(2): 1600289.
- [5] GÜR T M. Review of electrical energy storage technologies, materials and systems: challenges and prospects for large-scale grid storage. *Energy & Environmental Science*, 2018, 11(10): 2696-2767.
- [6] Li Y, Hao J, Song H, et al. Selective light absorber-assisted single nickel atom catalysts for ambient sunlight-driven CO₂ methanation. *Nature Communications*, 2019, 10(1): 2359.
- [7] Ren Y, Xu C, Yuan M, et al. Ca(NO₃)₂-NaNO₃/expanded graphite composite as a novel shape-stable phase change material for mid- to high-temperature thermal energy storage. *Energy Conversion and Management*, 2018, 163: 50-58.
- [8] Tian X K, Lin S C, Yan J, et al. Improved durability in thermochemical energy storage using Ti/Al/Mg Co-doped Calcium-based composites with hierarchical Meso/Micro pore structures. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 450: 138142.
- [9] Teng L, Xuan Y, Da Y, et al. Direct solar-driven reduction of greenhouse gases into hydrocarbon fuels incorporating thermochemical energy storage via modified calcium looping. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 440: 135955.
- [10] Liu J, Xuan Y, Teng L, et al. Design and application of a novel direct light-driven thermogravimetric analyzer. *Solar Energy*, 2023, 253: 554-562.
- [11] Zheng H, Liu X, Xuan Y, et al. Thermochemical heat storage performances of fluidized black CaCO₃ pellets under direct concentrated solar irradiation. *Renewable Energy*, 2021, 178: 1353-1369.
- [12] Yang L, Huang G, Huang Z. Optimized design of Ca-based thermochemical heat storage materials for concentrated solar power. *Journal of Energy Storage*, 2021, 43: 103236.
- [13] Li B, Li Y, Dou Y, et al. SiC/Mn co-doped CaO pellets with enhanced optical and thermal properties for calcium looping thermochemical heat storage. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 423: 130305.
- [14] Song C, Liu X, Zheng H, et al. Decomposition kinetics of Al- and Fe-doped calcium carbonate particles with improved solar absorbance and cycle stability. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 406: 126282.
- [15] Khosa A A, Yan J, Zhao C Y. Investigating the effects of ZnO dopant on the thermodynamic and kinetic properties of CaCO₃/CaO TCES system. *Energy*, 2021, 215: 119132.
- [16] Teng L, Xuan Y, Liu X, et al. Blackened calcium-based composite particles and their apparent kinetics features for solar thermochemical energy storage. *AIChE Journal*, 2022, 68(3): e17546.
- [17] Manovic V, Anthony E J. Thermal Activation of CaO-Based Sorbent and Self-Reactivation during CO₂ Capture Looping Cycles. *Environmental Science & Technology*, 2008, 42(11): 4170-4174.
- [18] Da Y, Zhou J. Multi-doping strategy modified calcium-based materials for improving the performance of

direct solar-driven calcium looping thermochemical energy storage. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2022, 238: 111613.

入射条件对大尺寸合成石英玻璃制备影响

李承帅, 尹素萍, 马千里, 方海生*

(华中科技大学能源与动力工程学院, 湖北 武汉 430074)

(Tel: 13437275182, Email: hafang@hust.edu.cn)

摘要: 本文对一种用于制备大尺寸光学石英玻璃的新型合成炉进行了数值模拟研究, 探究了氢氧当量比、氢氧质量流量及 SiCl_4 前驱体质量流量等气流入射条件对沉积面上温度及关键组分分布的影响。结果表明: 适当地增大氢氧当量比、降低氢氧质量流量或增大前驱体 SiCl_4 质量流量, 更有利于实际生产。据此本文提出了一种改进的进气工况, 在该工况下, 沉积面上的温度和 SiO_2 产物浓度分别提升了 1.1% 和 51.4%, 而 OH 杂质浓度则降低了 61.5%, 合成环境得到显著改善。

关键词: 石英玻璃; 化学气相沉积; 数值模拟; 入射条件

0 前言

高纯石英玻璃是一种性能卓越的功能性材料, 它具备极低的热膨胀系数、较宽的光学透过率以及稳定的物理化学性质, 因此被广泛应用于航天航空、半导体、高精度光学透镜等高科技现代产业^[1,2]。在众多制备方法中, 以四氯化硅(SiCl_4)为前驱体、氢气(H_2)和氧气(O_2)为燃料和氧化剂的化学气相沉积法(CVD)是工业上制备高纯光学石英玻璃的主要方法^[3]。在化学气相沉积过程中, 主要包括 $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-SiCl}_4$ 气相化学反应、二氧化硅(SiO_2)颗粒生成与长大、颗粒吸附沉积与熔融石英玻璃冷却成型四个子过程, 其中气相化学反应子过程直接决定了合成炉内温度与组分分布情况, 因此成为了关键一环。

研究气相化学反应过程, 详细的化学反应机理不可或缺, 针对 $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-SiCl}_4$ 化学反应体系, 目前学者已开展了大量研究。为提高计算效率, 一些学者在模拟或实验分析中采用了简化机理, 如: Nasonova 等人^[4]提出了一种只包含 $\text{H}_2\text{-O}_2$ 燃烧、 SiCl_4 氧化反应以及氯气-氢气($\text{Cl}_2\text{-H}_2$)反应的三步总包反应, 并用于数值模拟中; 徐驰等人^[5]在此基础上添加了 SiCl_4 的一步水解反应, 并用于实验结果的整理分析中。这种简化反应机理能大大降低计算成本, 并定性地表示温度及组分浓度的变化趋势, 但由于忽略了许多中间产物的生成, 往往会导致预测结果与实验测量值之间的巨大偏差。Kim 等人^[6]提出了一种更详细的反应机理, 其中包括了 19 步 $\text{H}_2\text{-O}_2$ 燃烧反应和 19 步含氯化物相关反应以及 5 步 SiCl_4 水解反应, 基于该机理的数值模拟结果虽然精确了很多, 但由于机理中忽略了高温下 SiCl_4 的氧化反应, 在 2700 K 以上的高温环境中的产物预测仍与实验结果有一定偏差。Moore 等人^[7]针对低压下的 $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-SiCl}_4$ 火焰体系中提出了详细的反应机理, 该机理采用了 GRI 3.0 中的详细 $\text{H}_2\text{-O}_2$ 燃烧机理以及 30 步的 SiCl_4 反应机理, 完整地描述了高温氢

氧焰中 SiCl_4 的氧化水解过程。模拟得到的温度值与实验测量值较为接近,但在羟基(OH)浓度的预测上还存在偏差,这表明该机理也存在一定的缺陷。通过整理总结已有的化学反应机理, Huang 等人^[8]得到了一种更为完整的反应机理,该机理由 $\text{H}_2\text{-O}_2$ 燃烧反应、 SiCl_4 氧化和水解反应以及含氯化合物的相关反应三个部分组成,共包含 28 种组分与 69 步基元反应,并通过对冲火焰实验进行了验证,证明了该反应机理的准确性。

除去对反应机理的研究,部分学者针对合成炉内的传热传质过程也进行了相关研究。Tao 等人^[9]对 CVD 合成石英玻璃过程建立了一种耦合模型,他们先用 CFD 软件计算得到了沉积表面附近的温度及速度分布,然后将其作为边界条件输入到 Chemkin 软件中,从而能获得 OH 、 Cl 等气相组分的浓度分布。牛臣基^[10]采用简化的 7 步反应机理对合成炉进行了数值模拟研究,并探究了不同燃烧器结构对沉积面上温度的影响。Huang 等人^[11]综合考虑了湍流气体燃烧、 SiO_2 颗粒的成核与生长、炉内辐射等现象,采用详细的 69 步反应机理,准确地描述了合成炉内部的温度及组分分布情况。这些研究揭示了高温合成炉内的热量传递与组分输运特征,也证明了数值模拟方法在合成炉内温度及组分分布预测方面的可行性与有效性。然而,值得注意的是,他们的研究主要集中在传统的立式合成炉上,在这种合成炉中,沉积表面中心与边缘位置的温差往往能达到 $200 \sim 300 \text{ K}$,当石英玻璃锭尺寸进一步增大时,可能出现热应力急剧增大甚至石英锭塌陷等现象,造成严重的性能和结构缺陷,因而更适合常规尺寸石英玻璃锭的生产。

随着技术的发展,现代工业对大尺寸高均匀石英玻璃的需求也越来越大。为了增大合成石英玻璃的尺寸,国内外一些企业对在传统合成炉的基础上进行了结构改造,提出了一种新型合成炉^[12]。这种新型合成炉内置一个坩埚,不仅能在生产时提供更均匀的高温环境,还能帮助石英玻璃锭在高温熔融状态下固定形状,因而更适合大尺寸(直径大于 600 mm)合成石英玻璃锭的制备。新型沉积炉的结构改动巨大,不仅会影响炉内的温度场和气体流场,还会影响沉积面上关键组分,如 OH 和二氧化硅(SiO_2)浓度的分布。其中较高的 OH 浓度会降低石英玻璃的热膨胀系数和光学均匀性,而 SiO_2 的浓度分布也会直接影响沉积时颗粒的尺寸与石英玻璃的微观结构,进而对产品的机械和光学性能产生巨大影响^[13-16]。考虑到目前对新型合成炉还缺乏相关研究,有必要对其炉内的传热传质过程进行探究,进一步指导实际生产过程。本文采用数值模拟方法,对新型合成炉在制备大尺寸合成石英玻璃时的温度及组分分布情况进行了研究,对比分析了不同气流入射条件对沉积面上温度和关键组分分布的影响,并进一步提出了改进方案。

1 物理和数学模型

1.1 物理模型

图 1 是新型合成炉的示意图,如图所示,新型合成炉主要由炉膛、坩埚、基板和燃烧器等部分组成。其中,炉膛由耐火砖制成,用以减少氢氧焰燃烧时的热量损失,维持炉内高温环境。坩埚由表面发射率较高的锆砖制成,在提供均匀的高温环境的同时,还能帮助熔融石英玻璃锭固定形状,避免增大尺寸时受重力作用导致的塌陷。为强化燃料和氧化剂的混合与燃烧效率,燃烧器采用了外径为 D_b 的八环燃烧器,包含 1 个中心管及从内到外交替布置的 4 个环路氧气管和 3 个氢气管。在工作时,氢气和氧气从外环路射

图 1 新型合成炉示意图

为保证计算效率和模型准确性, 本文对模型做出以下假设: (1) 将气体混合物视为连续介质, 并采用理想不可压缩气体模型; (2) 由于 SiO_2 的饱和压力较低, 而颗粒体积分教较小, 本文将 SiO_2 颗粒视为气体, 且忽略颗粒对气流速度的影响。

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varphi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\varphi}) = \nabla \cdot (D \nabla \tilde{\varphi}) + S \quad (1)$$

为描述辐射热源项 S_q ，本文采用离散坐标法（DOM）来求解辐射传递方程：

$$\nabla \cdot \overline{S_q} = \alpha \left[4\pi I_b(\mathbf{r}) - \int_{\Omega'=4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) d\Omega' \right] \quad (2)$$

$$\nabla \cdot [I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \mathbf{s}] = \alpha I_b(\mathbf{r}) - (\alpha + \sigma_{sc}) I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) + \frac{\sigma_{sc}}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') \Phi(\mathbf{s}, \mathbf{s}') d\Omega' \quad (3)$$

组分守恒方程中的化学反应源项 S_c 可以采用有限速率模型进行求解^[18]:

$$S_c = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} R_{i,r} \quad (4)$$

$$R_{i,r} = \Gamma(v''_{i,r} - v'_{i,r}) \left[k_{f,r} \prod_{i=1}^{N_R} (C_{i,r})^{\eta'_{i,r}} - k_{b,r} \prod_{i=1}^{N_R} (C_{i,r})^{\eta''_{i,r}} \right] \quad (5)$$

式中, 下标 i 表示第 i 个组分, r 表示第 r 个反应, f 和 b 分别表示正向反应与逆向反应。 M_w 为摩尔质量, N_R 为总反应数, R 为摩尔生成速率, Γ 为反应中第三体物质对反应速率的影响常数, v' 和 v'' 分别表示组分作为反应物和生成物时的当量系数, η' 和 η'' 分别表示对应的反应级数, C 为组分的摩尔浓度。 k 为反应速率常数, 可用 Arrhenius 公式计算:

$$k = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{R_g T}\right) \quad (6)$$

式中, A 为指前因子, T 为温度, β 为温度指数, E_a 为反应活化能, R_g 为理想气体常数。

为保证数学模型的顺利求解, 还需要提供初始条件和边界条件。在燃烧器入口, 设定了恒定质量流量的入口条件, 且入口气流温度被设为 300 K。在排气口处, 设定了恒定压力出口条件, 其表压力设为 -30 Pa。在气相与固相的交界面上, 速度与组分边界条件分别设为无滑移与零扩散通量条件; 热边界条件则有所不同, 在炉壳表面设置为绝热条件, 而在基板表面, 则设置为耦合传热条件, 其热通量由热对流和热辐射共同影响^[19]:

$$-\kappa_s \nabla T = h_t(T_s - T_g) + q_{\text{rad}} \quad (7)$$

式中, 下标 s 和 g 分别表示气相和固相。 κ 为导热系数, h_t 为对流换热系数, q_{rad} 为辐射热流密度。

1.3 数值模型

本文采用基于有限体积法的计算流体力学 (CFD) 软件, Ansys Fluent 来求解上述数学模型。考虑到新型合成炉炉膛与燃烧器结构的对称性, 本文选取图 1 的右半部分为计算域, 采用二维轴对称模型对其进行模拟。计算域网格由 Ansys Mesh 软件划分, 在燃烧器入口及固体壁面附近进行了加密处理, 最终质量满足网格独立性要求。

在模拟中采用了压力求解器, 其中速度与压力耦合采用了 SIMPLE 算法, 压力和对流项分别采用标准格式和二阶迎风格式进行离散, 线性项则采用 Gauss-Seidel 方法进行迭代求解。为准确预测合成炉内的温度和组分分布, 模拟采用了包含 28 种组分与 69 步基元反应的详细化学反应机理^[8]。描述反应用的有限速率模型采用了刚性求解器求解, 并用自适应建表法 (In-situ adaptive tabulation, ISAT) 加速计算。模型中气体的反应动力学参数和热力学参数由文献^[6,7]或 NIST-JANAF 表获得; 混合物吸收系数采用灰气体加权求和模型 (Weighted sum of the gray gases model, WSGGM) 计算, 其它热物性参数采用混合定律计算; 固体的相关热物性参数则从文献^[17]获得。

2 结果和讨论

2.1 参考工况

对于合成炉，我们关注的重点主要包括炉内的温度和关键组分（OH 和 SiO_2 ）的分布情况。为了展示这些基本特征，我们首先设置了一个参考工况，其中 SiCl_4 的质量流量为 0.4 g/s， O_2 的总质量流量为 6.43 g/s，从内环到外环分别为 0.79、1.48、2.25 和 1.80 g/s， H_2 的总质量流量则由氢氧当量比决定，在该工况中氢氧当量比被设为 1。

如图 2（a）所示是炉内的流场分布情况。由于质量流量较大，入射气流具有较大的初始速度。其中从中心喷嘴射入的 SiCl_4 气流速度较快，以避免生产时造成喷嘴堵塞；第二环入射的氧气速度同样较快，其作用是作为保护气体，避免喷嘴过热，同时限制产物 SiO_2 的扩散，以提高沉积效率。其它环路入射的氢气与氧气则相对较慢，以提高其混合及燃烧的效率。气体混合物射入炉膛后先是竖直向下流动，撞击在基板中心位置，形成一个滞留区，然后在坩埚斜壁面的导流作用下转向上流动，其中部分气体回到炉膛上部，形成两个对称的涡流。气体混合物最终都从出口被排出。

图 2（b）展示了炉内的温度分布情况。由于 H_2 和 O_2 的混合燃烧，在炉膛中心形成了高温射流火焰，温度最高达到 3060 K，且径向温度梯度较大；而炉膛其它位置的温度虽然相对更低，但更为均匀，这可能也是炉内高温气流循环流动所导致的。

炉内的 OH 和 SiO_2 组分分布分别如图 2（c）、（d）所示。从图中可以看出，OH 的分布与温度分布规律类似，主要集中在 H_2 - O_2 混合燃烧的高温火焰面上，这也反映出 OH 分布对温度的依赖性。而受限于周围气体， SiO_2 则主要聚集在中心区域，在轴向方向上， SiO_2 浓度先增大后减小，这可能是因为 SiO_2 的氧化水解反应都是吸热反应，随着远离喷嘴出口，炉内温度越来越高， SiO_2 的生成速率也逐渐提高；而在火焰下游，受到炉内流场的影响， SiO_2 组分在径向上的扩散效应更为明显。

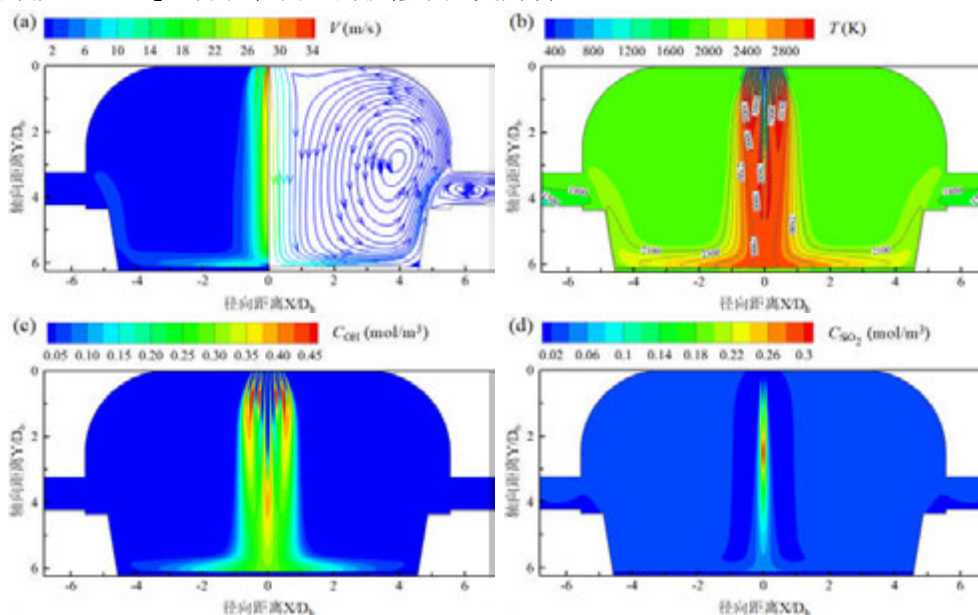


图 2 新型合成炉内：（a）速度分布，（b）温度分布，（c）OH 组分浓度分布，（d） SiO_2 组分浓度分布

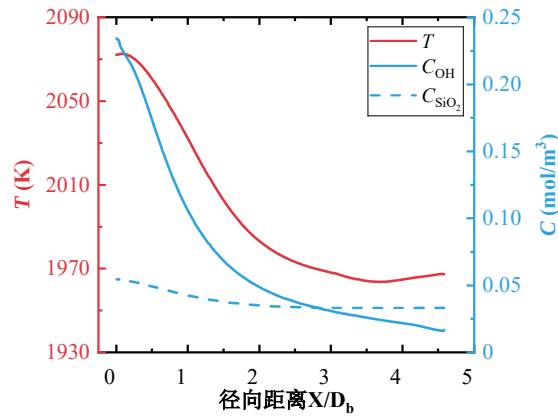


图3 沉积面上的温度及组分径向分布

炉内的特征进一步影响了沉积面上的温度与组分分布，这直接影响了石英玻璃产品的质量。如图3所示，是沉积面上温度及OH与SiO₂组分的分布情况，可以看出，它们都呈现出单峰分布趋势：在沉积面中心位置达到最大值，并沿径向方向递减，在靠近边缘处最小。其中温度最大值为2073 K，最大温差为109 K；OH浓度最大值为0.234 mol/m³，最大浓度差为0.218 mol/m³；SiO₂浓度最大值为0.055 mol/m³，最大浓度差为0.022 mol/m³。

2.2 气流入射条件的影响

气流入射条件会显著影响炉内的速度、温度及组分分布情况，并进一步对沉积面上的温度和组分分布造成影响。本文接下来将研究不同气流入射条件对沉积面上温度及组分分布的影响。为方便进行对比，所有工况都在参考工况的基础上进行调整：研究H₂-O₂当量比影响时，保持其他气体流量不变，只调整H₂质量流量；研究H₂-O₂质量流量影响时，保持其当量比和SiCl₄流量不变，同时改变H₂及O₂的流量；而研究前驱体SiCl₄质量流量影响时，则保持H₂和O₂流量不变，只改变中心喷嘴的SiCl₄质量流量。

2.2.1 H₂-O₂当量比 ϕ 的影响

如图4(a)所示，随着当量比增大，沉积面上的温度先升高，在 $\phi = 1.25$ 时达到最大值；而随着当量比继续增大，沉积面上温度反而稍有降低。这是因为当量比较小时，合成炉内氢气匮乏，难以提供足够高的温度，当 $\phi = 0.5$ 或0.75时，沉积面上平均温度分别为1658 K和1822 K，低于石英玻璃的软化温度（1858 K）^[20]，此时会造成沉积面的不光滑和翻泡现象，导致严重的结构缺陷，因此在实际操作中不可采用；而当量比较大时，过量的H₂无法完全反应，反过来也会使炉温降低。最大温差则呈现出相反的变化规律，即随着当量比增大，沉积面上最大温差先减小后增大，这说明适当增大H₂-O₂当量比，有利于提供高温均匀的合成环境。

图4(b)、(c)分别展示了不同当量比下沉积面上的OH与SiO₂分布情况。当H₂-O₂当量比大于1时，沉积面上OH的平均浓度和最大浓度差逐渐减小；SiO₂的平均浓度也随之减小，均匀性也有所降低。考虑到实际生产中的主要目标是在组分均匀分布的基础上，尽可能减少OH浓度和增大SiO₂浓度，因此需要适当地调小当量比。综上所述，当量比略大于1时综合效果最好。

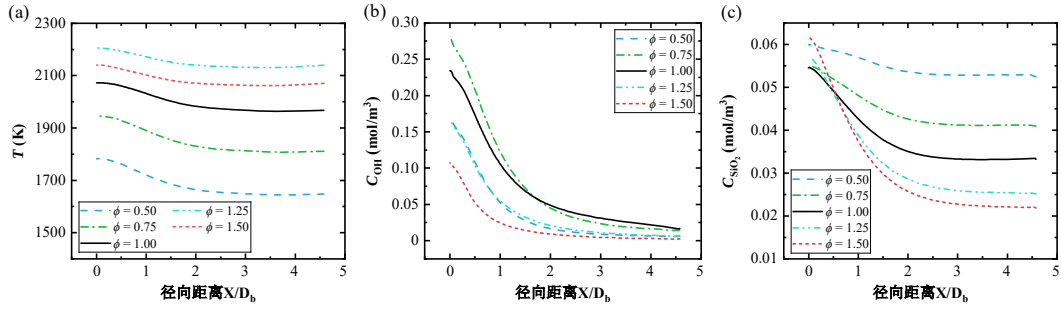


图4 不同当量比时沉积面上的温度及组分径向分布

2.2.2 H₂-O₂质量流量 Q_1 的影响

图5(a)展示了不同H₂-O₂质量流量 Q_1 下沉积面上的温度分布情况。随着 Q_1 的增大，燃烧产生的高温火焰变长，炉内温度整体升高，沉积面上的平均温度也逐渐提高，当H₂-O₂质量流量超过参考工况的75%时，沉积面上平均温度达到1925 K，超过了石英玻璃的软化温度(1858 K)；同时，由于高温气流的动量增大，沉积面边缘处受到的影响也越来越大，沉积面上温度均匀性随之提高。

沉积面上的OH浓度分布如图5(b)所示，作为H₂和O₂燃烧反应的产物，沉积面上OH浓度随 Q_1 的增大而增加，其分布均匀性则随之降低。沉积面上的SiO₂浓度分布如图5(c)所示，当 Q_1 由参考工况的50%增大到150%流量时，沉积面上的SiO₂平均浓度不断降低，其分布均匀性则略有提高。一方面，H₂-O₂质量流量较大时，反应产生的H₂O组分较多，使得SiCl₄水解反应占主导地位，从而产生了更多的其它含硅中间产物；另一方面，更大的气流速度使得这些含硅中间产物来不及充分反应转化为SiO₂组分，从而导致了沉积面上SiO₂浓度的降低。综合考虑上述影响，应适当地降低H₂-O₂质量流量。

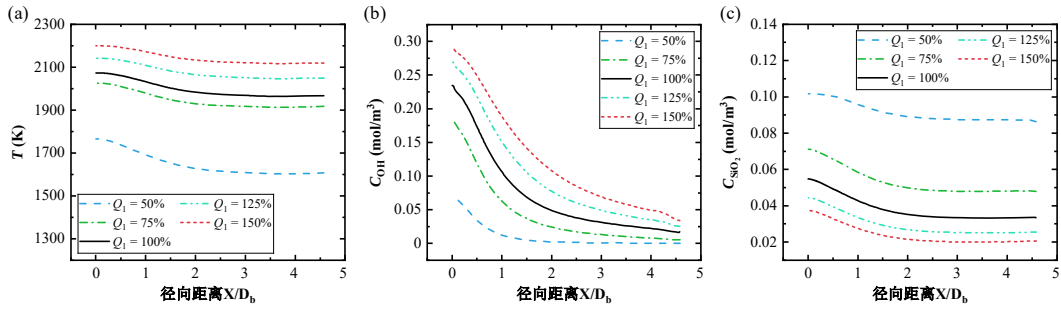


图5 不同H₂-O₂质量流量下沉积面上的温度及组分径向分布

2.2.3 前驱体 SiCl₄质量流量 Q_2 的影响

图6(a)为不同SiCl₄质量流量 Q_2 下沉积面上的温度分布情况。随着 Q_2 由0.2 g/s增大到1.6 g/s，沉积面上温度持续下降，这是因为前驱体SiCl₄比热容和密度较大，导致了混合气体比热容等物性参数的增大；同时，SiCl₄的氧化水解反应都是吸热反应，这两者共同作用，导致了沉积面上温度的降低。然而相对于H₂-O₂燃烧放出的热量，SiCl₄反应吸收的热量比例较少，因此温度下降的幅度也较小，当 Q_2 由0.2 g/s增大到1.6 g/s时，沉积面上平均温度由2002 K降低至1965 K，温度都在石英玻璃软化温度之上。

图6(b)、(c)分别展示了沉积面上的OH和SiO₂组分分布情况。如图所示，沉积

面上 OH 的浓度大小与分布趋势几乎不受影响。与之相反, SiO₂ 组分的分布则有明显变化: 随着前驱体 SiCl₄ 流量的增大, 沉积面上的 SiO₂ 浓度不断增大, 最大浓度差也随之增大。值得注意的是, 当 SiCl₄ 流量超过 0.8 g/s 后, 沉积面上的 SiO₂ 浓度增长趋势逐渐变缓, 这说明持续增大 SiCl₄ 质量流量并不始终有利于产量提高, 当 Q_2 超出某一范围后, SiCl₄ 无法完全反应并转化为 SiO₂ 产物, 这反而会导致沉积效率的下降和原料的浪费。因此, 可考虑在参考工况基础上适当提高 SiCl₄ 质量流量以提升 SiO₂ 产量。

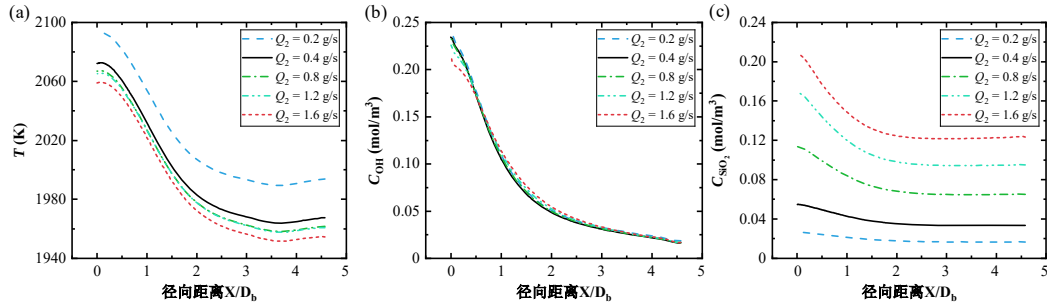


图 6 不同前驱体 SiCl₄ 质量流量下沉积面上的温度及组分径向分布

2.3 改进的进气工况

根据对上述结果可以发现: 适当地增大 H₂-O₂ 当量比、降低 H₂-O₂ 质量流量或增大前驱体 SiCl₄ 质量流量, 可以获得足够的高温环境, 并且能降低沉积面上 OH 浓度、提高 SiO₂ 浓度, 从而改善合成环境。据此, 本文进一步提出了一种改进的进气工况: 在参考工况的基础上, 将 H₂-O₂ 当量比提高至 1.1, H₂-O₂ 质量流量降低至原来的 90%, SiCl₄ 质量流量提高至 0.6 g/s。改进工况与参考工况下沉积面上的温度及组分分布对比如图 7 所示, 可以发现, 与参考工况相比, 在改进工况下, 沉积面上的平均温度由 1977 K 提升至 2000 K, 提高了 1.1%; OH 平均浓度由 0.039 mol/m³ 降低至 0.015 mol/m³, 下降了 61.5%; SiO₂ 平均浓度则由 0.035 mol/m³ 提升至 0.053 mol/m³, 提高了 51.4%。这表明改进工况下, 合成温度与 SiO₂ 产量更高, 而 OH 杂质含量显著降低, 合成环境得到明显改善。

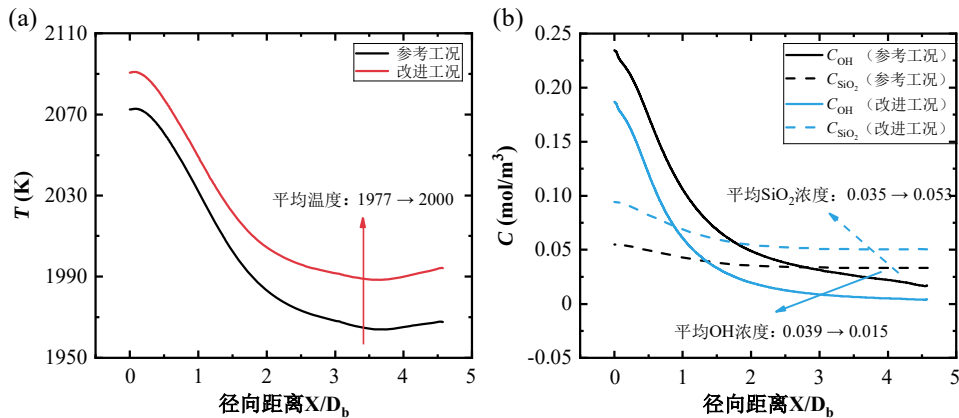


图 7 改进工况与参考工况下沉积面上的温度及组分分布对比图

3 结 论

本文采用数值模拟方法对大尺寸高均匀石英玻璃制备用的新型合成炉进行了数值模拟研究。研究首先揭示了合成炉内的热质输运特征, 发现高温区域及关键组分 (OH 及

SiO₂)主要集中在炉膛中央,这对沉积面上的温度与 OH 及 SiO₂ 组分分布也产生了影响,它们都表现出从沉积面中心到边缘单调递减的分布趋势。本文接着探究了气流入射条件的影响,结果表明,适当地增大 H₂-O₂ 当量比、降低 H₂-O₂ 质量流量或增大前驱体 SiCl₄ 质量流量,可以改善合成环境。据此本文进一步提出了一种改进的进气工况,即:将 H₂-O₂ 当量比提高至 1.1, H₂-O₂ 质量流量降低至原来的 90%, SiCl₄ 质量流量提高至 0.6 g/s,此时沉积面上的平均温度和 SiO₂ 组分浓度分别提高了 1.1%和 51.4%,而 OH 杂质浓度降低了 61.5%,合成环境得到明显改善,这对于大尺寸高均匀石英玻璃实际制备过程中的工艺改进有着重要的参考价值。本文在模拟中暂未考虑颗粒生成的影响,这一点将在后续工作中进行研究。

参考文献

- [1] Fanderlik Ivan. Silica Glass and its Application. Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1991
- [2] 王玉芬, 刘连城. 石英玻璃. 北京:化学工业出版社, 2007
WANG Yu-Feng, LIU Lian-Cheng. Silica Glass. Beijing: Chemical Industry Press, 2007.
- [3] 聂兰舰, 王玉芬, 向在奎, 等. 高性能光学合成石英玻璃的制备和应用. 光学精密工程, 2016, 24(12): 2916–2924
NIE Lan-Jian, WANG Yu-Fen, XIANG Zai-Kui, et al. Preparation and Application of High-performance Synthetic Optical Fused Silica Glass. Optics and Precision Engineering, 2016, 24(12): 2916–2924
- [4] Nasonova Anna, Park Dong Wha, Charinpanitkul Tawatchai, et al. Numerical Analysis on Premixed Combustion of H₂-SiCl₄-Air System to Prepare SiO₂ Particles. Journal of Industrial and Engineering Chemistry. 2012, 18(1): 509–512
- [5] 徐驰, 顾真安, 饶传东. 载料气体对化学气相沉积合成石英玻璃沉积速率的影响. 硅酸盐学报, 2009, 37(10): 1796–1802
XU Chi, GU Zhen-An, RAO Chuan-Dong. Influence of Carrier Gas on the Deposition Rate of Synthetic Silica Glass by Chemical Vapor Deposition Method. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2009, 37(10): 1796–1802
- [6] Kim J I, Hwang J Y, Lee J, et al. Numerical and Experimental Study on Silica Generating Counterflow Diffusion Flames. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2005, 48(1): 75–81
- [7] Moore Teresa, Brady Brian, Martin L Robbin. Measurements and Modeling of SiCl₄ Combustion in a Low-pressure H₂/O₂ Flame. Combustion and Flame, 2006, 146(3): 407–418
- [8] Huang Yaosong, Lu Zhen, Zheng Lili. Study of SiCl₄/H₂/O₂ Chemical Kinetics and its Application to Fused Silica Glass Synthesis. Combustion Science and Technology, 2018, 190(10): 1861–1885
- [9] Feng Tao, Wang Pei Yong. CFD Simulation of the Fused Silica Synthesis Furnace. Applied Mechanics and Materials, 2013, 284–287: 51–56
- [10] 牛臣基. 立式化学气相沉积石英玻璃工艺的热特性分析: [硕士论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2012

- NIU Chen-Ji. Thermal Characteristic Analysis of Vertical CVD Process to Produce Silica Glass: [Master. Thesis]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2012
- [11] Huang Yaosong, Zheng Lili, Zhang Hui, et al. Design and Optimization of Substrate Placement for Large-sized and High-quality Fused Silica Glass by SiCl_4 Flame Hydrolysis Deposition. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 111: 917–932
- [12] Groh Raymond D, Harper Brian Lee, Maxon John Edward. Method for Forming Fused Silica Glass Using Multiple Burners. United States, Utility Patent, US8230701B2, 2012
- [13] Kitamura Naoyuki, Fukumi Kohei, Nishii Junji, et al. Effect of Hydroxyl Impurity on Temperature Coefficient of Refractive Index of Synthetic Silica Glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2009, 355(45–47): 2216–2219
- [14] YAMAGATA Shigeru. Effects of OH-Group on Distribution of Refractive Index in Silica Glass. *Journal of the Ceramic Society of Japan*, 1992, 100(1159): 337–341
- [15] Santos J S, Ono E, Suzuki Carlos Kenichi. Effect of the Nanostructure Control on the Novel Optical Properties of Silica Photonic Glass Synthesized by VAD Method. *Materials Science Forum*. 2010, 636–637: 361–368
- [16] Wang Lei, Rao Chuandong, Gu Zhen'an. Effects of Flame Temperature and SiCl_4 Concentration on Particle Characteristics for Synthetic Silica Glass. *Journal Wuhan University of Technology*, 2010, 25(3): 419–422
- [17] 黄耀松, 郑丽丽, 任祝寅, 等. 气体流量对熔石英玻璃的影响. *燃烧科学与技术*, 2015, 21(6): 479–485
- HUANG Yao-Song, ZHENG Li-Li, REN Zhu-Yin, et al. Effects of Gas Flow Rates on Fused Silica Glass. *Journal of Combustion Science and Technology*, 2015, 21(6): 479–485
- [18] Huang Zeyu, Huang Yaosong, Zheng Lili, et al. Effects of Precursors on Silica Particle Generation in CVD Synthesis for Fused Silica Glass. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2018, 499: 86–94
- [19] Yuferev VS, Budenkova ON, Vasiliev MG, et al. Variations of Solid-liquid Interface in the BGO Low Thermal Gradients Cz Growth for Diffuse and Specular Crystal Side Surface. *Journal of Crystal Growth*, 2003, 253(1–4): 383–397
- [20] 黄泽宇, 黄耀松, 陈靖, 等. 入口条件对D4合成石英玻璃的影响. *燃烧科学与技术*, 2018, 24(6): 477–486
- HUANG Ze-Yu, HUANG Yao-Song, CHEN Jing, et al. Effects of Entrance Conditions on Fused Silica Glass Synthesis Using D4. *Journal of Combustion Science and Technology*, 2018, 24(6): 477–486

微通道粘弹性流体异质电势强化混合研究

李捷 1, 杨嘉杰 1, 魏玉琪 1, 徐均 1

(武汉理工大学, 武汉 430063)

(Tel:15007125296, Email:jieli@whut.edu.cn)

摘要: 试剂混合在微流控的应用中至关重要。然而, 微混合器中流体的流动往往是层流, 混合效果不佳。采用电渗流作为驱动方式, 并在通道壁面设置异质电势, 是提升微通道试剂混合效果的一种有效方法。此外, 微流控常用于分析生物流体, 其具有粘弹特性。本文对带异质电势障碍物的微通道中粘弹性流体的混合特性进行了模拟研究。矩形障碍物改善混合的效果最好。增加障碍物的长度和高度, 可提升混合效率, 但混合达到稳定所需的时间也更长。

关键词: 微流控, 非牛顿流体, 电渗流, 非均匀电势, 混合效率

0 前言

芯片实验室 (LOC) 试图使用体积小的芯片使分析设备小型化。在微流控中, 试剂混合十分重要。以较短的混合长度获得较高的混合效率是微混合领域的研究目标之一。然而, 微混合器中流体的流动往往是层流, 难以产生湍流, 混合效果不佳。采用电驱动, 在微通道中形成电渗流, 并在通道壁面设置异质电势, 是提高微通道试剂混合效果的一种有效手段^[1-3]。

近年来, 通道障碍物以及通道本身几何因素在微混合器中的应用引起了广泛的关注。Tang 等^[4]数值研究了简单微通道中横栏、壁面对称和非对称 zeta 电势分布对混合时间和效率的影响。结果表明, zeta 电势的对称分布比非对称分布更能提高混合效率。微通道中嵌入障碍物在不增加混合时间下提高了混合效率。Qaderi 等^[5]发现均匀电势下改变三角形障碍物的高度会提高混合效率, 而改变三角形障碍物的位置和长度混合效率没有显著改变。但在异质电势下, 增加三角形障碍物的长度会导致涡流大小发生变化, 从而提升混合效率。此外, 电势分布会影响通道中的流场以及混合性能。Saleel 等^[6]对带有三角形障碍物的微通道中的电渗压力流动和混合进行数值研究。分析表明, 增加障碍物的数量不仅扩大了两种物质之间的界面接触面积, 而且增加了混合时间, 因此提高了混合效率。Basati 等^[7]发现在均匀电势下收缩通道混合效率高, 质量流量低, 而发散通道则相反。采用异质电势时, 在较高的电势比下, 增加缩放比可以提高质量流量, 但混合性能也会下降。而在较低的电势比下, 几何结构的影响几乎可以忽略不记。

以上研究的对象主要是牛顿流体。而微流控的检测对象通常是生物流体, 其表现出粘弹特性。Yang 等^[8]对 PAA (聚丙烯酸) 溶液在异质电势微通道中的电渗流动混合进行数值模拟。结果表明, Weissenberg 数 (Wi) 越大, 通道中的流动越不稳定, 涡流在不断变化, 并且混合效率也会随着时间波动。然而, 该研究中未针对不同的障碍板结构进

行分析。本研究以粘弹性流体（PAA 溶液）为对象，将异质电势与微通道中障碍物几何特性相结合进行研究，探寻在异质电势下几何因素对电渗流动混合的影响机理，将主动方法与被动方法相结合从而更好地提升微混合器的混合效果，为开发高效微混合器提供理论基础。

1 数值模型

1.1 几何结构

研究对象为表面光滑的微通道，如图 1 所示。通道的高度为 $2H$ ，长为 L ，在通道的上下壁面分别安装高度为 H_0 ，长度为 L_0 的障碍物。障碍物分别位于距离通道入口 $L_1 = 6H$ 和 $L_2 = 10H$ 处，并且在障碍物表面为异质电势。两种溶液分别从入口 A 和入口 B 流入微通道，并在通道内进行混合。其中一种溶液中含有一种浓度为 C_0 的物质，另一种溶液中不含该物质。向溶液中加入 PAA 形成粘弹性流体。假设电极被放置在通道的入口和出口，并沿通道施加恒定电压。如图 1（a）所示，两种流体用红色和蓝色箭头表示。微混合器的进出口均为常压，通道内无压力梯度。仿真中所使用的几何和物理参数如表 1 所示。采用直角坐标系 $O-xy$ ， x 轴为通道长度方向， y 轴为通道高度方向，原点固定在通道入口的底角。计算中所使用的网格示意图如图 1（b）所示，在通道壁面和障碍物表面进行了网格加密。

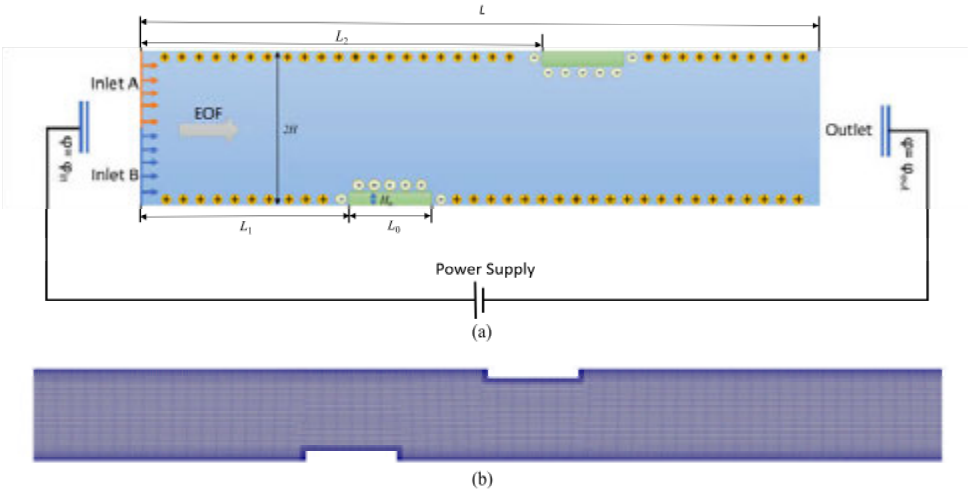


图 1（a）带有障碍物的异质电势微通道 EOF 示意图；（b）网格分布示意图

表 1 物性参数

符号	参数	值
e	电子的电荷量 (C)	1.6021×10^{-19}
$2H$	微通道高度 (μm)	20
L	微通道长度 (μm)	200
H_0	障碍物高度 (μm)	2
L_0	障碍物长度 (μm)	20
ρ	密度 (kg/m^3)	1000

k_b	玻尔兹曼常数 (J/K)	1.38×10^{-23}
ε_0	真空介电常数 (F/m)	8.854×10^{-12}
ε_r	介质的介电常数	80
T	绝对温度 (K)	300
ζ_c	通道壁面的 zeta 电势 (mV)	-20
φ_{in}	入口外加电压 (V)	15
φ_{out}	出口外加电压 (V)	0
D	扩散系数 (m^2/s)	1.52×10^{-11}

在分析中使用如下合理的假设：

- (1) 流动被认为是二维的、稳定的、不可压缩的。
- (2) 离子对流场的影响可以忽略不计。
- (3) 焦耳热对流场的影响可以忽略不计。

1.2 控制方程

(1) Laplace 方程

总电势 Φ 由 EDL 电势 ψ 和外加电场诱导电势 φ 线性叠加得到。总电势所产生的电场强度 E 为：

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi \quad (1)$$

外加电场电势由 Laplace 方程控制：

$$\nabla^2\varphi = 0 \quad (2)$$

(2) Poisson-Boltzmann 方程

假设离子服从 Boltzmann 分布，则 EDL 中的电势分布为：

$$\nabla^2\psi = \frac{2ezn_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \sinh\left(\frac{ze\psi}{k_bT}\right) \quad (3)$$

(3) 带电驱动力项的 Navier–Stokes 方程

外加电场诱导的非牛顿电解质溶液的稳态输运服从质量守恒和动量守恒方程：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta_s \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho_e \mathbf{E} \quad (5)$$

其中， u 是速度， ρ 是密度， p 是压力， η_s 是溶剂的动态粘度， τ 是粘弹性流体的应力张量， E 是电场强度。

(4) 组分输运方程

为了得到浓度场，求解组分输运方程如下：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = D \nabla^2 C \quad (6)$$

其中， C 为组分浓度， D 为扩散系数。

为了定量分析微通道任意截面的混合程度，我们将混合效率定义为 ME ，其表示为：

$$ME = \left(1 - \frac{\int_0^{2H} |C - C_\infty| dy}{\int_0^{2H} |C_0 - C_\infty| dy} \right) \times 100\% \quad (7)$$

其中， $C_\infty = 0.5$ 和 $C_0 = 0$ (或 1) 分别为完全混合和完全未混合的浓度。 H 为通道高度的一半。

1.3 边界条件

(1) 在通道入口 ($x = 0$):

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0, p = 0, \varphi = \varphi_{in}, \Theta = 0, \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, C = \begin{cases} 0, 0 < y < H \\ 1, H < y < 2H \end{cases} \quad (8)$$

(2) 在通道出口 ($x = L$):

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0, p = 0, \varphi = \varphi_{out}, \mathbf{n} \cdot \nabla \Theta = 0, \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

(3) 在通道壁面:

$$\mathbf{u} = 0, \mathbf{n} \cdot \nabla p = 0, \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0, \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \mathbf{n} \cdot \nabla \Theta = 0 \quad (10)$$

其中， φ_{in} 为入口电压， φ_{out} 为出口电压， $\mathbf{n}$ 为表面上的法向单位向量。

1.4 数值验证

为了验证本研究中的数值模型，将计算结果与 Biddiss 等^[9]的实验结果进行了比较，结果吻合较好，具体见此前的研究^[8]。

2 结果分析

2.1 障碍物形状

在本节中，通过在直通道中设置三种不同形状的障碍物，并和直通道不添加障碍物的情况进行了对比，以此来探究障碍物形状对微通道电渗流流场和强化混合的影响。图 2 为不同通道几何模型及电势 (ψ) 分布。通道上下壁面分布恒定电势 $\zeta_c = -20\text{mV}$ ，在障碍物表面以及简单直通道下壁面 $60\sim 80\mu\text{m}$ 和上壁面 $100\sim 120\mu\text{m}$ 处设置异质电势 $\zeta_w = 40\text{mV}$ 。

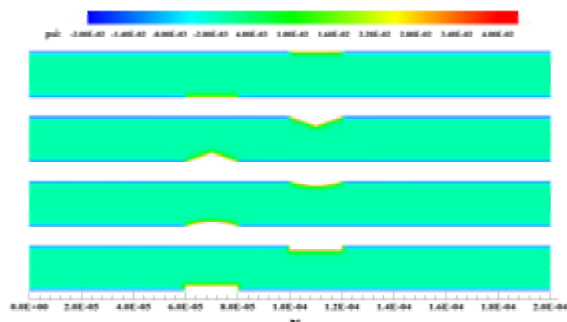


图 2 直通通道及不同障碍物形状微通道模型示意图及电势分布

图 3 显示了 200 ppm 的 PAA 溶液在外加电场强度为 15V 时,不同微混合器在通道不同截面的混合效率。当溶液流经异质电势所在的壁面时,混合效率会先下降,在涡流产生处混合效率降到最低,然后在涡流的下游混合效率又会急剧上升。通过曲线的斜率可以看出,由于涡流所导致的混合效率的提升是明显高于溶液自然扩散的。并且,在通道中添加障碍物之后,混合效率提升的幅度相较于简单直通通道更大。尤其是在溶液流经第二个涡流下游之后,带有矩形障碍物的微通道混合效率是最高的。然后流体继续向通道出口移动,溶液继续混合,混合效率进一步提高,但是提高的趋势比较平缓。在通道的出口,简单直通通道的混合效率为 60.71%。带有障碍物的微通道要比不带障碍物的微通道混合效率更高,三角形障碍物和弧形障碍物的混合效率分别为 71.34%和 67.78%。带有矩形障碍物的微通道混合效率最高,达到了 75.47%。

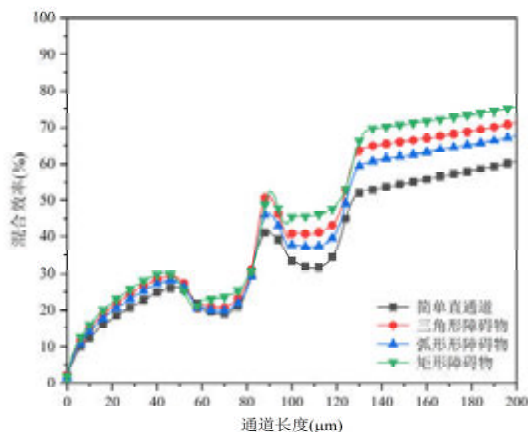


图 3 不同微混合器沿通道长度方向的平均 ($t = 15\sim 20s$) 混合效率

图 4 为不同障碍物形状下浓度分布云图和流线图。当流体流经异质电势壁面时,会产生涡流,这个涡流的中心并不在异质电势的中心位置,而是稍向后延伸。并且从图中可以看出,当通道中添加障碍物时,这个涡流的尺寸相较于简单直通通道来说会更大,对于涡流的测量结果如表 2 所示。简单直通通道的涡流尺寸最小,并且涡流的位置也更加远离通道中心。矩形障碍物的涡流尺寸最大,涡流位置也更加靠近通道的中心轴线。涡流的尺寸越大,强化混合的效果就越好。从通道出口的浓度分布来看,简单直通通道流体的分层现象还是比较明显,当通道中设置了障碍物,出口的浓度分布相对更加均匀,说明

混合效果也更好。

表 2 不同形状障碍物的涡流尺寸及涡流位置

障碍物形状	简单直通通道	矩形障碍物	三角形障碍物	弧形障碍物
涡流尺寸	1.45	1.73	1.56	1.45
涡流位置 (μm)	5.70	3.15	3.67	4.16

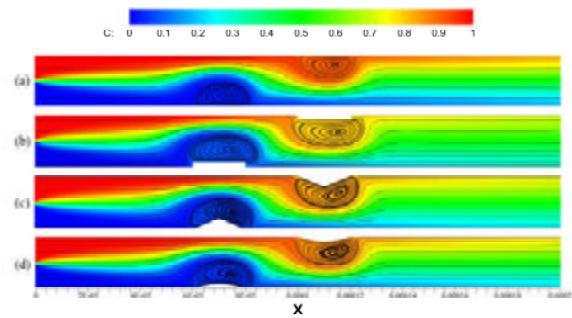


图 4 通道中不同形状障碍物的浓度云图及流线图：(a) 简单直通通道；(b) 矩形障碍物；(c) 三角形障碍物；(d) 弧形障碍物

从图 4 可以看出，涡流的中心位置都不在障碍物的中心，尤其是对于三角型障碍物来说，涡流的中心并不在三角形的顶点，而是在三角形的右边。为了解释这个原因，我们以三角型障碍物微通道为例，得到了速度分量 u_x 、 u_y 的云图如图 5 所示。从图中可以看出，尽管我们在三角型障碍物的两条边上都布置了异质电势，但是只在右侧边上存在较大的速度梯度。当流体到达三角型障碍物的左侧边时，即图 5 中的 S 区域，在惯性力的作用下，流体会继续沿着通道流动。这样在三角型左侧边就会抵消一部分由异质电势产生的反向速度，导致速度梯度只存在于三角型的右侧边，因此涡流中心也位于右侧边。

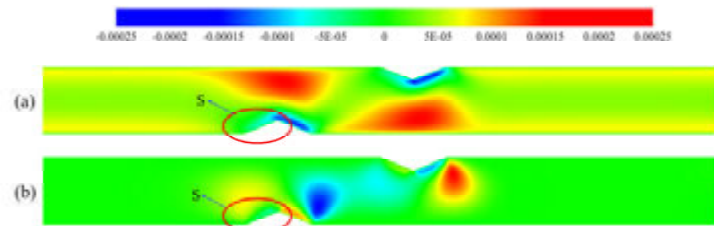


图 5 带有三角形障碍物通道速度分布：(a) u_x ；(b) u_y

图 6 为不同通道出口流体的主流速度分量 u_x 及浓度分布。在通道壁面附近双电层内带电离子在电场力的作用下速度迅速增大。在粘性力的作用下，离子的运动又带动溶液的运动，速度向着通道中心逐渐减小，在通道的中心轴线上速度达到最小。简单直通通道由于没有障碍物的存在，压降损失最小，因此出口的平均速度最大。带有矩形障碍物的通道出口速度最小。从图 6 (b) 可以看出由于带有矩形障碍物的通道出口速度较小，溶液在通道中具有更长的混合时间，因此出口浓度更加均匀。

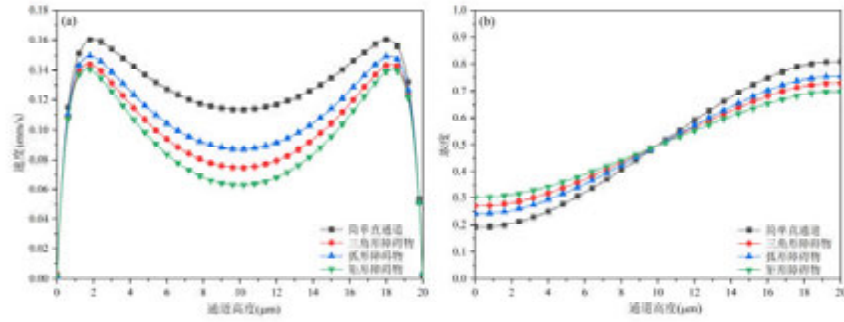


图 6 不同通道出口溶液的主流速度分量 (a) 及浓度分布 (b)

2.2 障碍物尺寸

在上一节的研究中我们发现，在通道中设置障碍物可以起到强化混合的作用，并且障碍物的形状也会影响到微通道混合器的混合质量。在这一节中，我们以带有矩形障碍物的微通道混合器为例，探究异质电势矩形障碍物的尺寸（高度和长度）对于电渗流动及混合的影响。

首先我们研究障碍物长度对于电渗流动和混合的影响。设置矩形障碍物的高度为 $2\mu\text{m}$ ，障碍物的长度分别为 $10\mu\text{m}$ 、 $15\mu\text{m}$ 、 $20\mu\text{m}$ 、 $25\mu\text{m}$ 、 $30\mu\text{m}$ 。并且障碍物表面为异质电势， $\zeta_w = 40\text{mV}$ 。图 7 (a) 为不同微通道混合效率随时间的变化。障碍物的长度越长，在通道出口处的混合效率越高，并且混合达到稳定所需要的时间也越长。从图中可以看出，障碍物长度为 $10\mu\text{m}$ 、 $15\mu\text{m}$ 、 $20\mu\text{m}$ 、 $25\mu\text{m}$ 的微通道混合效率是迅速上升然后降低最后趋于稳定的趋势。障碍物长度为 $30\mu\text{m}$ 的微通道混合效率是逐渐升高然后趋于稳定。图 7 (b) 为不同障碍物长度微混合器通道截面在 15-20s 内平均混合效率。在通道的各个截面，障碍物长度为 $30\mu\text{m}$ 的通道混合效率都是最高的。在第一个障碍物的上游，每种微通道混合效率都会先下降，然后在经过障碍物后迅速上升。不同的是，障碍物长度为 $10\mu\text{m}$ 、 $15\mu\text{m}$ 、 $20\mu\text{m}$ 、 $25\mu\text{m}$ 的微通道在第二个障碍物的上游混合效率仍然有下降的趋势，而障碍物长度为 $30\mu\text{m}$ 的微通道并没有这个现象，但是流体在流经第二个障碍物之后混合效率的提升效果也比较有限。

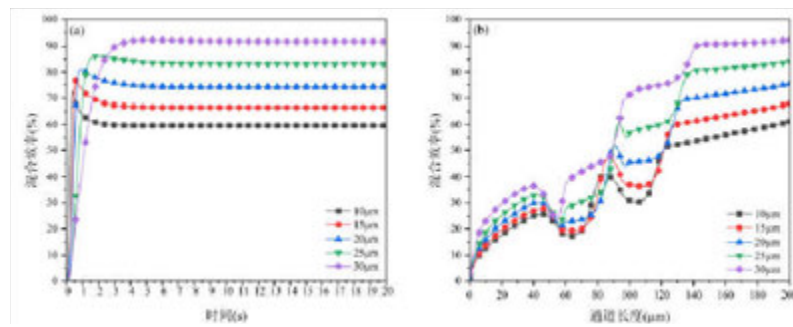


图 7 微通道出口出混合效率随时间的变化 (a) 和不同截面的混合效率 (b)

图 8 为不同障碍物长度下的浓度分布云图和流线图。从图中可以很明显的看出，在相同的电势条件下，障碍物的长度越长，所产生的涡流就越强。当障碍物的长度为 $10\mu\text{m}$ 时，在通道的出口两种流体没有混合完全。在通道的上方流体浓度较高，在通道的下方

流体浓度较低。当障碍物的长度为 $30\mu\text{m}$ 时，在第一个涡流范围内，流体有明显的混合。两种流体在经过第二个障碍物之后就基本混合完全了。我们对第一个涡流的尺寸进行了测量，测量结果如表 3 所示。障碍物长度从 $10\mu\text{m}$ 增加到 $30\mu\text{m}$ ，涡流的尺寸增加了一倍多，并且涡流的位置也更加靠近两种流体的液面交界处。这也是障碍物长度越长，混合效率越高的一个主要原因。

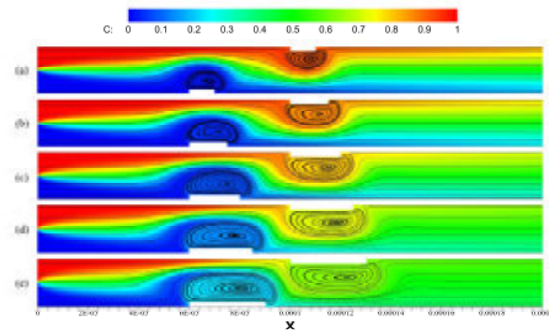


图 8 不同障碍物长度下微通道浓度分布及流线图：(a) $10\mu\text{m}$ ；(b) $15\mu\text{m}$ ；(c) $20\mu\text{m}$ ；(d) $25\mu\text{m}$ ；(e) $30\mu\text{m}$

表 3 不同长度障碍物的涡流尺寸及涡流位置

矩形障碍物长度	$10\mu\text{m}$	$15\mu\text{m}$	$20\mu\text{m}$	$25\mu\text{m}$	$30\mu\text{m}$
涡流尺寸	1.10	1.39	1.73	2.13	2.45
涡流位置(μm)	4.40	3.73	3.15	2.68	2.12

图 9 显示了障碍物长度对于通道电渗流速度的影响。图 9 (a) 为不同微通道障碍物中心轴线的主流速度分量 u_x 。在近壁面处速度迅速增大，然后沿着通道中心逐渐减低。障碍物长度越长， u_x 越小，但是在障碍物的中心，不同障碍物长度 u_x 差别不大。图 9 (b) 为通道出口的主流速度分量 u_x 。在出口，障碍物长度的增加对于速度的影响还是比较明显的。由于障碍物表面为异质电势，障碍物越长，异质电势所生成反向速度的区域就越大，对于主流速度的阻碍作用越强，这也导致了 u_x 在不同长度障碍物通道出口有较大差异。 u_x 越小，对于混合效率是有利的，流体在通道中有更多的混合时间，有助于充分混合。但是， u_x 越小，混合完全达到稳定需要更长的时间，这对于流体快速混合是不利的。

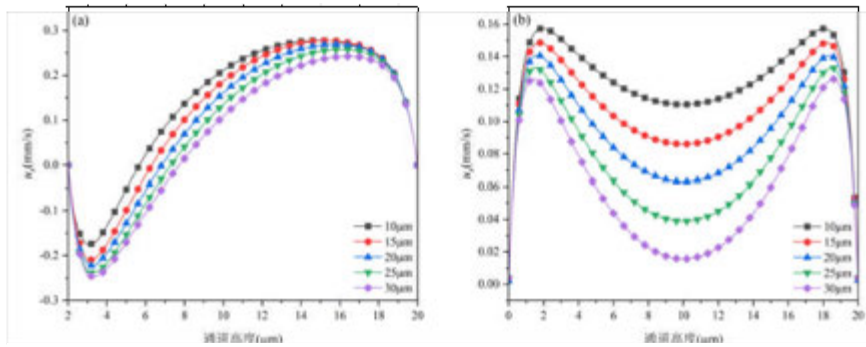


图 9 (a) 障碍物中心轴线；(b) 通道出口主流速度分量 u_x

图 10 (a) 为障碍物长度为 $10\mu\text{m}$ 微通道在不同时刻的浓度分布，在 $t=0.5\text{s}$ 时，由于第二个涡流在通道的上壁面附近，高浓度流体在流经第二个障碍物由于回流会延迟到达通道出口，使得此时通道的出口上部分为混合较为均匀的混合流体，通道的底部为低浓度流体，混合效率相对比较高。 $t=1.0\text{s}$ 时，在通道的顶部高浓度流体已经流过回流区域，逐渐流向通道的出口。此时在通道出口的顶部已经有少量的高浓度流体，因此混合效率与 0.5s 时相比，稍有下降。 $t=2.0\text{s}$ 时，高浓度流体已经到达通道的出口，此时通道的顶部为高浓度流体，中间大部分区域为混合较为完全的混合流体，底部为低浓度流体。 $t=2.5\text{s}$ 时，流场已经达到稳定，混合效率基本上也不再变化。图 10 (b) 为障碍物长度为 $30\mu\text{m}$ 通道不同时刻的浓度分布。当流体经过第二个障碍物之后，流体已得到较好的混合，没有明显的高低浓度流体分层现象。从图 9 (b) 截面的速度分布可以看出，通道中心的速度是远小于通道近壁面的速度。尽管由于回流区域的存在，使得通道上部分流体较晚到达通道出口，但是通道中间部分的混合流体速度更低，到达通道出口更慢。因此混合效率并没有出现先升高再下降然后达到稳定的趋势，而是一直升高然后趋于稳定。

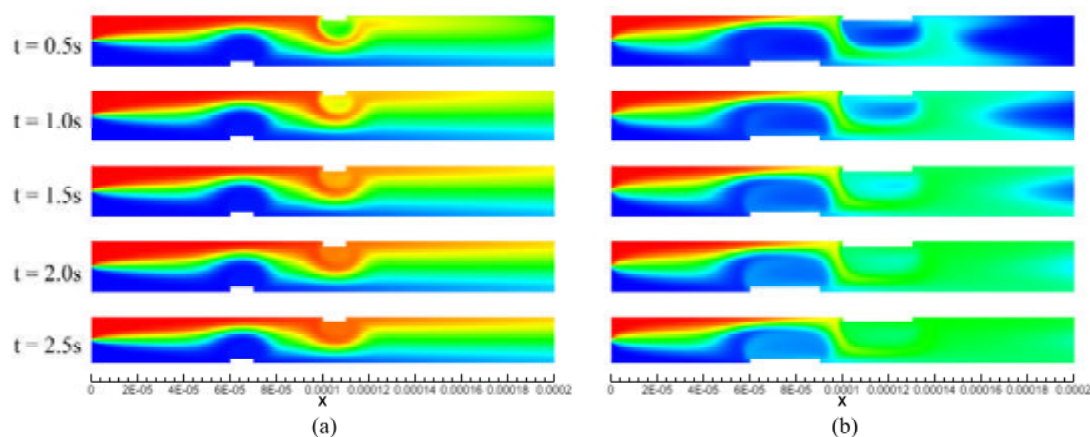


图 10 障碍物长度分别为 $15\mu\text{m}$ (a) 和 $30\mu\text{m}$ (b) 时通道在不同时刻的浓度分布

接着我们讨论障碍物的高度对于混合效率的影响。图 11 为障碍物长度为 $20\mu\text{m}$ ，高度分别为 $2\mu\text{m}$ 、 $3\mu\text{m}$ 、 $4\mu\text{m}$ 、 $5\mu\text{m}$ 、 $6\mu\text{m}$ 通道的混合效率。障碍物的高度越高，流体在流经障碍物之后混合效率提升的越多。障碍物高度为 $6\mu\text{m}$ 的微混合器，流体再流经第一个障碍物之后，混合效率就已经达到 90% 左右，以至于第二个障碍物对强化混合的作用较小。从图 11 (b) 可以看出，障碍物每增加 $1\mu\text{m}$ ，混合达到稳定所需要的时间成倍增加。当通道中障碍物高度为 $2\mu\text{m}$ 时，混合在 2s 左右就已经达到稳定。当障碍物高度为 $6\mu\text{m}$ 时，混合达到稳定需要 9-10s，混合效率达到了 99%，基本实现完全混合。 $4\mu\text{m}$ 障碍物高度的微通道，与 $2\mu\text{m}$ 相比，混合所需要的时间相差不大，但是混合效率提升了 15% 左右，达到了 90%。与 $6\mu\text{m}$ 相比，混合效率较低，但是混合时间大幅度减少。

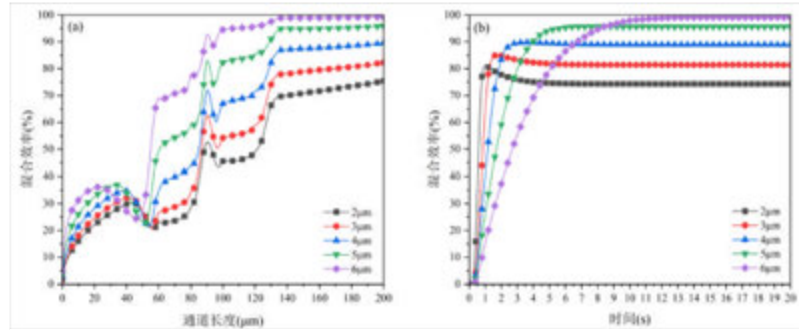


图 11 不同障碍物高度下沿通道长度方向的混合效率 (a) 和出口截面混合效率随时间的变化 (b)

2.3 障碍物数量

由于微通道流动普遍存在极低的雷诺数，在微流控系统中几乎不可能实现湍流流动。而在通道中添加横向激励是引起额外混合的一种很好的方法，这可以增强混合扩散过程。在这一节中，我们在微通道中加入了数量不同的矩形障碍物，并在障碍物表面设置异质电势（图 12），在通道中产生横向流动来增强微混合器中的混合过程。

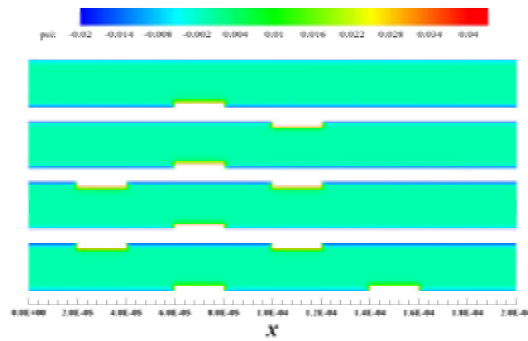


图 12 不同障碍物数量微通道示意图及电势分布

图 13 为不同障碍物数量下沿通道长度的混合效率。当通道中只有 1 个障碍物的时候，在经过这个障碍物之后，混合效率会急剧上升，在通道的后半段，混合效率缓慢上升。当通道中有 2 个障碍物时，混合效率会有两次大幅提升的阶段，因此出口段的混合效率比一个障碍物的高。但是经过第二个障碍物之后，混合效率提升的幅度没有第一个障碍物提升的幅度大。并且在障碍物之后的直通道段，混合效率增长的速度跟一个障碍物相比相对缓慢。通道中有 3 个障碍物时，在通道入口段混合效率提升较快。在经过前两个障碍物之后，混合效率就接近 90%，经过第三个障碍物之后，混合效率并没有明显提升。在障碍物之后的直通道段，混合效率保持稳定，不再提升。通道中有 4 个障碍物时，通道入口段混合效率增长最快，出口段的混合效率反而降低。

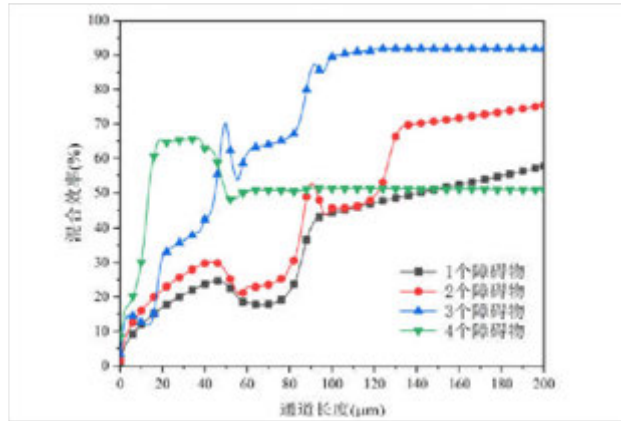


图 13 不同障碍物数量沿通道长度的混合效率

图 14 为 $t = 20\text{s}$ 时不同障碍物数量下通道中的浓度、速度分布及流线图。从图 14 (a) 浓度分布图来看，当流体流经第一个和第二个障碍物后，在涡流的扰动作用下，浓度分布会更加均匀。微通道中有三个障碍物时，流体在到达第三个障碍物之前，混合已经较为完全了，因此第三个障碍物上异质电势所产生的涡流对于强化混合并没有太明显的效果，这也是混合效率在经过第三个障碍物之后仅有小幅提升的原因。障碍物的数量增加到 4 个之后，通道中绝大部分区域流体的浓度都比较低，说明在通道入口高度浓度流体流动并不均匀，导致在整个通道中混合效率都比较低。图 14 (b) 是通道中速度云图及流线图。从图中可以看出，随着障碍物数量的增加，主流速度减小，障碍物表面异质电势所产生的涡流的强度逐渐增大。通道中具有 4 个障碍物时，由于涡流的强度过大，高浓度流体入口甚至会产生回流的现象，这也导致了高浓度流体的流量降低，因此通道中大部分为低浓度流体。

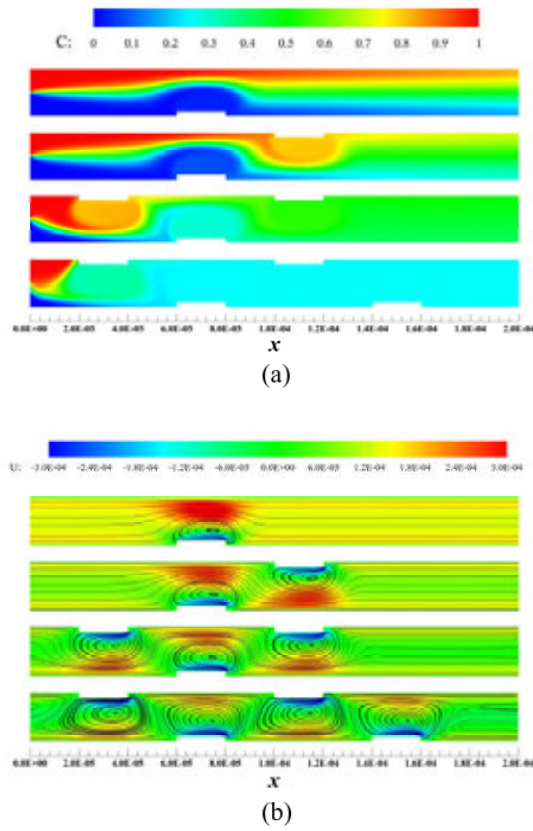


图 14 $t = 20s$ 时不同障碍物数量下微通道中浓度分布 (a) 和速度分布及流线图 (b)

在上文中我们提到，障碍物表面电势相同的条件下，数量越多，涡流强度越大，为解释这个现象，我们提取了第一个障碍物中心轴线上的主流速度分量如图 15 所示。从图中可以看出，障碍物数量不同时，其表面异质电势所产生的反向速度的大小差别不大，并且障碍物数量越多，反向速度反而越大。同时，障碍物数量越多，流体在通道中流动受到的局部阻力损失越大，障碍物表面异质电势产生的涡流也会影响主流速度。在多重作用下，障碍物数量多的通道中主流速度会远小于障碍物数量较少的通道。由于涡流是主流和障碍物表面反向流相互作用产生的，主流速度越小，反向流的作用越大，所产生的涡流也就越大。因此，通道中具有 4 个障碍物时，第一个障碍物距离入口太近，涡流强度过大，产生入口回流，影响了 A 入口高浓度流体的流入，通道中整体浓度比较低，因此混合效率低。

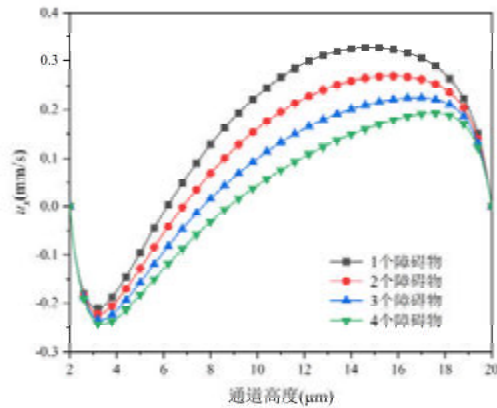


图 15 不同障碍物数量下第一个障碍物中心轴线上的主流速度分量

3 结 论

本文研究了在异质电势下通道中障碍物及几何因素（形状、尺寸、数量）对电渗流流动混合的影响。得到的主要结论如下：

（1）在通道中添加障碍物，障碍物上采用异质电势可以进一步提高通道的混合效率。障碍物能够增加涡流的尺寸，并且会增加通道中流动阻力，减缓电渗流速度，使得流体在通道中有更久的停留时间。不同的障碍物改善混合的效果不同，通道中采用矩形障碍物相较于简单直通道，混合效率可以提升 14.75%。

（2）由于障碍物上分布异质电势，因此障碍物的尺寸会严重影响涡流的尺寸。以矩形障碍物为例，增加障碍物的长度和高度，可以极大增加涡流的强度，使得溶液在通道中有更长的流动路径，从而提升混合效率。然而障碍物尺寸越大，混合达到稳定所需要的时间也越长。当障碍物的高度为 $6\mu\text{m}$ 时，混合效率可以达到 99%，但是混合也需要 10s 以后才能达到完全。

（3）当通道中的障碍物数量从 1 个增加到 3 个时，混合效率会持续改善。障碍物的数量越多，涡流越大。溶液在障碍物的下游，经过涡流作用之后，混合效率都会得到提升，但是提升的幅度越来越小。障碍物的数量增加到 4 个时，涡流强度过大，会产生入口回流现象，影响流体的流入，导致通道中流体浓度不均匀，混合效率较低。

参考文献

- [1] Mondal B, Mehta S K, Pati S, et al. Numerical analysis of electroosmotic mixing in a heterogeneous charged micromixer with obstacles. *Chemical Engineering and Processing*, 2021, 168: 108585.
- [2] Bag N, Bhattacharyya S. Electroosmotic flow of a non-Newtonian fluid in a microchannel with heterogeneous surface potential. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2018, 259: 48-60.
- [3] Cho C-C, Chen C-L, Chen C-K. Mixing enhancement of electrokinetically-driven non-Newtonian fluids in microchannel with patterned blocks. *Chemical Engineering Journal*, 2012, 191: 132-140.
- [4] Tang G H, He Y L, Tao W Q. Numerical analysis of mixing enhancement for micro-electroosmotic flow. *Journal of Applied Physics*, 2010, 107(10): 104906
- [5] Qaderi A, Jamaati J, Bahiraei M. CFD simulation of combined electroosmotic-pressure driven

micro-mixing in a microchannel equipped with triangular hurdle and zeta-potential heterogeneity. Chemical Engineering Science, 2019, 199: 463-477.

- [6] Saleel C A, Afzal A, Badruddin I A, et al. Numerical investigation on pressure-driven electro osmotic flow and mixing in a constricted micro channel by triangular obstacle. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 2020, 31(3): 982-1013.
- [7] Basati Y, Mohammadipour O R, Niazmand H. Numerical investigation and simultaneous optimization of geometry and zeta-potential in electroosmotic mixing flows [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 133: 786-799.
- [8] Yang J, Chen Y, Du C, et al. Numerical simulation of electroosmotic mixing of non-Newtonian fluids in a micromixer with zeta potential heterogeneity. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification, 2023, 186: 109339.
- [9] Biddiss E, Erickson D, Li D D. Heterogeneous surface charge enhanced micromixing for electrokinetic flows [J]. Analytical Chemistry, 2004, 76: 3208–3213.

基于空气和相变材料耦合的锂离子电池热管理性能研究

聂昌达^{1,2,3}, 刘新健^{1,2,3}, 李孟涵^{1,2,3}, 饶中浩^{1,2,3}

(¹河北工业大学能源与环境工程学院, 天津 300401)

(²河北工业大学先进储能技术与装备河北省工程研究中心, 天津 300401)

(³河北工业大学河北省热能科技与能源清洁利用重点实验室, 天津 300401)

(Tel: 022-60435784, Email: 2021101@hebut.edu.cn)

摘要：针对单一散热方式难以保证电池模组大倍率放电时的温度不均问题，本文提出风冷和相变材料（PCM）的冷却耦合热管理方式，利用数值计算方法检测了该设计的可靠性，探究了系统风速、翅片厚度和 PCM 用量对 4C 放电电池模组热管理性能的影响。结果表明，增大入口风速能有效地对正极耳散热，并且能够降低最高温度，但过大的入口风速会增大最大温差；另外，增大翅片厚度和 PCM 量可以显著降低最高温度，但过量的 PCM 会增大最大温差。

关键词：电池热管理；极耳；风冷；相变冷却¹

0 前言

发展电动汽车的关键是研发动力电池^[1]。锂离子电池因为具有能量密度高、循环寿命长等优势而成为国内外研究的重点。然而，锂离子电池在充放电过程中，会产生非常多的热量，若不及时处理，会使得电池温度升高，影响电池的充放电效率、使用寿命，甚至可能热失控，发生爆炸^[2]。此外，电池还受温差的影响比较大，若电池温差过大，将会导致电池容量衰减，老化加速^[3]。因此，开发有效的电池散热系统是非常必要的。

国内外研究人员采用实验或数值模拟的方法对锂离子电池的散热方式进行了大量研究，开发出了空气冷却、液体冷却和 PCM 冷却等热管理方案。Park 等^[4]设计了 5 种不同的通风结构对电池进行冷却，结果发现采用在远离出风口的位置进行开孔的结构能够显著降低电池组的最高温度，并且改善温度均匀性；Fan 等^[5]分析了电池组中单体电池布置间距、空气流量对于强制风冷热管理系统散热性能的影响。Zhang 等^[6]在单体电池的两侧错列排列铝扁管，并在铝扁管和电池之间插入了具有高导热性能的柔性石墨，结果表明，该方式可以很快地将电池表面各处的热量导走。徐晓明等^[7]采用实验的方法，研究了双进双出式的冷板液冷系统，结果表明，其散热效果存在一个临界值。靳鹏超等^[8]采用了石蜡-石墨复合 PCM 对电池组进行散热，结果表明其能够很好地保证电池的温度性能。Khateeb 等^[9]采用实验的方式，比较了自然对流冷却、泡沫铝冷却、纯 PCM 冷却、泡沫铝和纯 PCM 复合冷却 4 种散热系统的温度性能，结果表明，采用泡沫铝和纯 PCM 复合冷却的散热效果最好。

然而，目前所做的研究中，大部分是采用单一的冷却方式对电池进行散热^[1-15]，这对于正极耳产热不大时，可以有效地保障电池的温度性能，但当电池大倍率放电时，正极耳会产生大量热量，严重增大单体电池的局部温度^[16-17]，导致电池成组时采用单一的散热方式难以保证电池模组整体温度性能^[18]。因此，本文结合风冷和 PCM 冷却两种散热方式，提出了一种空气-PCM 耦合的电池模组热管理系统，并采用数值模拟的方法，以电池的最高温度和最大温差为评价指标，分析了电池 4C 大倍率放电情况下，该系统性能参数对于电池温度性能的影响。本文的研究对于大倍率放电情况下电池组散热结构的设计及其工业应用有着重要的意义。

1 锂离子电池的产热速率

1.1 锂离子电池内核产热速率

电池内核产热速率根据 BERNARDI 等^[19]提出的模型计算，见式(1)。

$$q = \frac{I}{V_b} [(E - U) - T \frac{\partial E}{\partial T}] = \frac{I}{V_b} (IR - T \frac{\partial E}{\partial T}) \quad (1)$$

式中， I 为充放电电流，放电时 $I > 0$ ； V_b 为单体电池的体积； E 和 U 分别为开路电压和工作电压； T 为电池温度； R 为内阻； $\partial E / \partial T$ 为温度系数。

1.2 电池正负极耳产热速率

由于正负极耳为单一的铝或铜金属，因此产热规律符合焦耳定律，则其产热速率计算表达式为：

$$q_e = \frac{Q_e}{V_e} = \frac{I^2 R_e}{V_e} = I^2 \frac{\rho l}{s l} = \frac{I^2 \rho}{s^2} \quad (2)$$

式中， ρ 为正负极耳电阻率，正极材料（铝）和负极材料（铜）的电阻率分别为 $2.83 \times 10^{-8} \Omega \cdot m$ 和 $1.75 \times 10^{-8} \Omega \cdot m$ ； s 为正负极耳横截面积。

2 电池模组仿真模型的建立

2.1 电池模组物理模型

电池模组结构如图 1 所示，10 块 10A·h 锰酸锂电池等间距排列，电池与电池间为铜导热翅片，电池两侧为 PCM，在电池组的上顶面、左侧面和下底面布置有空气流道。电池内核热量通过铜导热翅片传导至 PCM，被 PCM 吸收，空气由电池底部进入，掠过电池上顶面，对正负极耳进行散热，同时也可以将电池表面和 PCM 的热量带走。电池模组的结构尺寸同见图 1，其中 δ 为 PCM 的厚度， b 为翅片厚度。

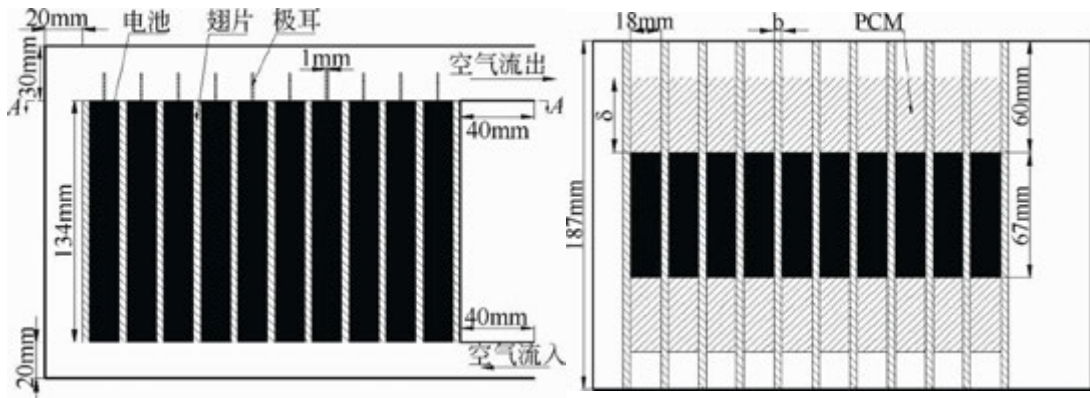


图 1 电池模组纵断面剖视图 (a) 和电池模组 A-A 剖视图 (b)

Fig. 1 Longitudinal section cutaway view (a) and A-A cutaway view of battery module (b)

利用 ICEM 对电池模组进行几何建模和网格划分, 并且对电池本体、正负极耳、翅片和 PCM 等重点关注区域进行网格局部加密。由于模型形状比较规则, 因此所采用的网格类型为结构化网格, 电池模组的网格划分结果如图 2 所示, 网格总数约为 220 万。

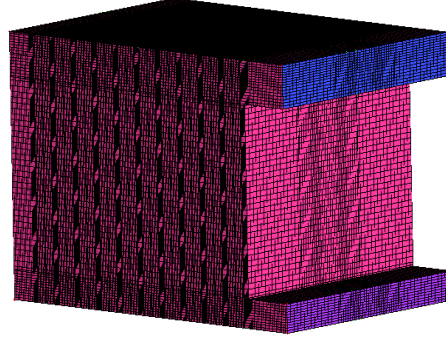


图 2 电池模组网格模型

Fig. 2 Grid model of battery module

2.2 控制方程

为了简化计算, 对电池模组作以下假设: 1) 电池内部电解液不流动, 忽略内部对流换热; 2) 忽略电池内部和 PCM 的辐射作用; 3) 电池和 PCM 的物性参数均为常数, 不受温度影响; 4) 电池内部发热均匀; 5) 忽略 PCM 固液相变时的体积变化。基于此, 电池模组的控制方程如下。

电池内核的能量方程为:

$$\rho_b c_{p,b} \frac{\partial T}{\partial t} = k_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + q \quad (3)$$

式中, ρ_b 为电池密度; $c_{p,b}$ 为电池比热容; t 为充放电时间; k_x 、 k_y 和 k_z 分别为电池长度、宽度和厚度方向的导热系数。

电池正负极耳的能量方程为:

$$\rho_e c_{p,e} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k_e \nabla T) + q_e \quad (4)$$

式中, ρ_e 为正负极耳密度; $c_{p,e}$ 为正负极耳比热; k_e 为正负极耳的导热系数; q_e 为正负极耳产热速率。

采用焓法^[20]计算 PCM 的传热, 则其能量方程为:

$$\rho_{pcm} \frac{\partial H}{\partial t} + \nabla(u_{pcm} \rho_{pcm} H) = \nabla(k_{pcm} \nabla T) \quad (5)$$

式中, ρ_{pcm} 为 PCM 密度; u_{pcm} 为 PCM 流动速度; H 为 PCM 总焓; k_{pcm} 为 PCM 导热系数。

空气的连续方程、动量方程和能量方程分别为,

连续方程:

$$\nabla(\rho_{air} u_{air}) = 0 \quad (6)$$

动量方程:

$$\rho_{air} \frac{\partial u_{air}}{\partial t} + \nabla(\rho_{air} u_{air} u_{air}) = -\nabla P + \nabla(\mu \nabla u_{air}) + \rho_{air} g + F \quad (7)$$

能量方程:

$$\rho_{\text{air}} c_{p,\text{air}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k_{\text{air}} \nabla T) \quad (8)$$

式中， ρ_{air} 为空气密度； u_{air} 为空气流动速度； P 为静压； μ 为动力黏度； F 为体积力源项； $c_{p,\text{air}}$ 为空气比热容； k_{air} 为空气导热系数。

2.3 边界条件

采用 FLUENT18.0 进行数值计算。电池模组的初始温度、环境温度和空气入口温度均设为 34 °C；空气入口为 Velocity-inlet，出口为 Pressure-outlet；电池、PCM、翅片、空气相互之间的接触面均为耦合壁面；电池模组外壁面设置为绝热条件；电池以 4C 倍率进行放电，时间步长设置为 1s，并通过用户自定义函数（User Defined Function, UDF）编写计算程序定义电池内核和正负极耳的热源项；PCM 融化后为不可压缩流体，考虑重力的影响，且密度采用 Boussinesq 假设。电池模组材料的物性参数见表 1。

表 1 电池模组材料物性参数
Table 1 Properties of battery module materials

物性参数	电池本体	空气	PCM ^[22]	正极耳/铝	负极耳/铜
密度/kg·m ⁻³	2039.63	1.177	789	2719	8933
比热容/J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹	1174.65	1006.43	1980	903	385
导热系数/W·m ⁻¹ ·K ⁻¹	$k_x=k_z=2.61, k_y=0.90$	0.0242	16.6	238	398
相变温度/°C	—	—	40	—	—
相变潜热/J·kg ⁻¹	—	—	185000	—	—

3 结果与分析

3.1 模型验证

文献^[21]对本文所研究的单体电池进行了实验测定，得到了单体电池的内阻和温度实验数据。因此本文引用其内阻数据，编写了 UDF 程序对单体电池的产热速率进行定义，并对单体电池的温度场进行了仿真模拟分析。环境温度为 27 °C，电池以 1C 倍率在自然环境下（放电仿真时设定电池表面自然对流系数为 5 W/(m²·°C)），监控电池侧面中央点的温度，仿真结果与文献^[21]中的实验数据对比如图 3 所示。

从图 3 可以看出仿真结果与文献中的实验数据基本吻合，最大相对误差仅为 0.8%，说明本文的仿真结果具有非常高的可信度，根据文献^[21]中的内阻实验数据所编写的电池产热

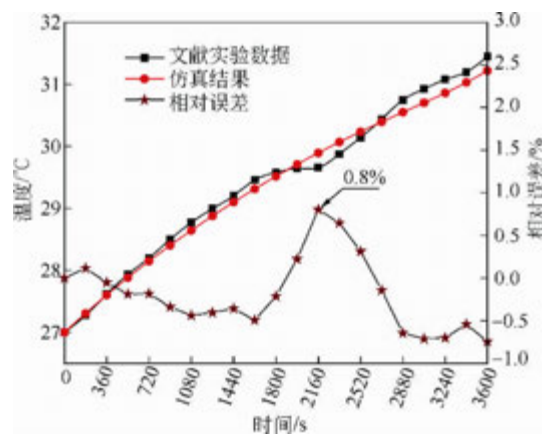


图 3 仿真数据与文献^[21]实验数据对比

Fig. 3 Comparison of simulation data and experimental data

UDF 程序可以用于之后对于电池模组的仿真，并且由于电池温度在测试的过程中存在自然对流，因此空气与电池之间传热过程的计算模型也同时得到了验证。电池放电的大部分时间里，仿真温度均要比实验温度稍低，这是因为测试的过程中，电池表面的对流散热条件是变化的，而在仿真的时候，设定的对流换热系数为定值。

3.2 入口风速的影响

PCM 厚度 $\delta = 60 \text{ mm}$ 、翅片厚度 $b = 3 \text{ mm}$ 、入口风速从 1 m/s 增加到 6 m/s 时，电池模组的最高温度和最大温差随时间的演变如图 4 所示。从图 4(a)可知，风速为 $2 \sim 6 \text{ m/s}$ 时，最高温度首先快速升高，然后升高速度放缓，最后再次快速升高。这是因为刚开始放电时，电池内核产热不大，电池模组的最高温度位于正极耳处（以 3 m/s 为例，如图 5(a)所示），并且此时正极耳与空气的温差不大，相互之间几乎没有热交换，产热完全被自身所吸收，因此最高温度快速升高；随着放电的进行，正极耳被空气带走的热量增多，最高温度的增速则放缓；最后阶段，电池内核产热增加，热量在电池内部堆积，内核温度迅速升高并超过正极耳温度成为了最高温度（如图 5(b)和 5(c)所示），并且由于其温度升高更快，因此电池模组最高温度以更快的速度升高。风速为 1 m/s 时最高温度没有再次快速上升阶段是因为风速过小，正极耳被带走的热量非常少，电池模组的最高温度一直处在正极耳处（如图 6 所示），最高温度没有发生位置转移所致。上述现象也说明，增大空气入口速度可以有效地对电池正极耳进行散热。从图 4(a)还可发现，放电结束时， 1 m/s 工况的最高温度达到了 45.9°C ，超过了 45°C （电池最佳工作温度范围为 $18 \sim 45^\circ\text{C}$ ^[23]），而 6 m/s 时降低到了 44.6°C ，这说明提高入口风速能够一定程度上降低最高温度。然而，速度从 2 m/s 增加至 6 m/s 时，最高温度仅下降了 0.3°C ，这说明提高入口风速对于降低最高温度是有限度的。

由图 4(b)可发现，所有工况在放电的 120 s 左右最大温差均达到了峰值，然后又快速降低，最后除了 1 m/s 工况以外均又快速升高，并且风速越大，增长速度越快。这是因为电池刚开始放电时，热量还未传导至电池表面，最低温度基本不变，而最高温度迅速增大，从而导致电池组最大温差迅速增大；随着放电的进行，电池内核产热逐渐增大，热量逐渐到达电池表面，最低温度开始上升，最大温差则开始降低；到最后阶段，由于最高温度再次快速升高，并且电池表面相变材料开始融化，最低温度增长得比较缓慢，导致最大温差又快速升高；风速越大，最大温差在最后阶段升高越快是因为风速越大，电池表面和 PCM 中的热量被带走的就越多，使得最低温度增长得越慢，电池组最大温差也就升高越快。 1 m/s 工况在最后阶段最大温差没有明显的升高，可能是因为该工况在最后阶段时最高温度并没有像其他工况一样再次快速升高，并且由于不同风速下电池模组的产热量是一样的，过小的空气速度使得空气从进入电池箱开始，其温度即以比较快的速度升高，在流过最小温度所处位置时反而对其进行了加热，导致即使之后相变材料开始融化，电池模组的最低温度增长幅度降低也不明显，所以最大温差在最后阶段也就不会像其他工况一样有明显的升高。从图 4(b)还可发现，放电结束时 6 m/s 的最大温差最大，达到了 6.4°C ，超过了电池模组的最大允许温差 5°C ^[23]，而 2 m/s 时最大温差最小，仅为 4.3°C ，但其有 26.7% 的放电时间超过了 5°C ，因此满足要求的只有 3 m/s ，此时最大温差为 4.9°C 。综合图 4(a)和图 4(b)，取入口风速为 3 m/s 探究翅片厚度的影响。

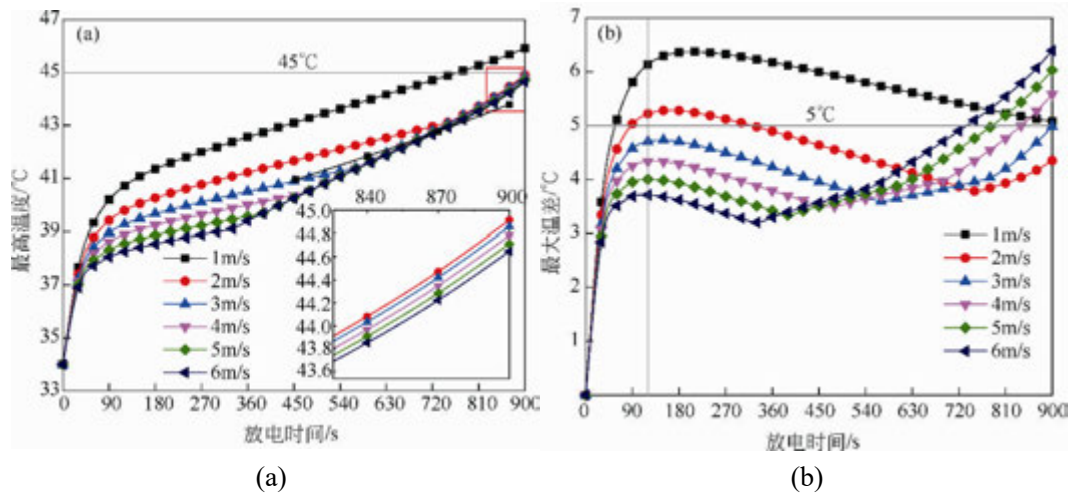


图 4 不同入口风速时电池模组的最高温度和最大温差变化情况

Fig. 4 Evolutions of maximum temperature and maximum temperature difference of battery module under different inlet wind speeds

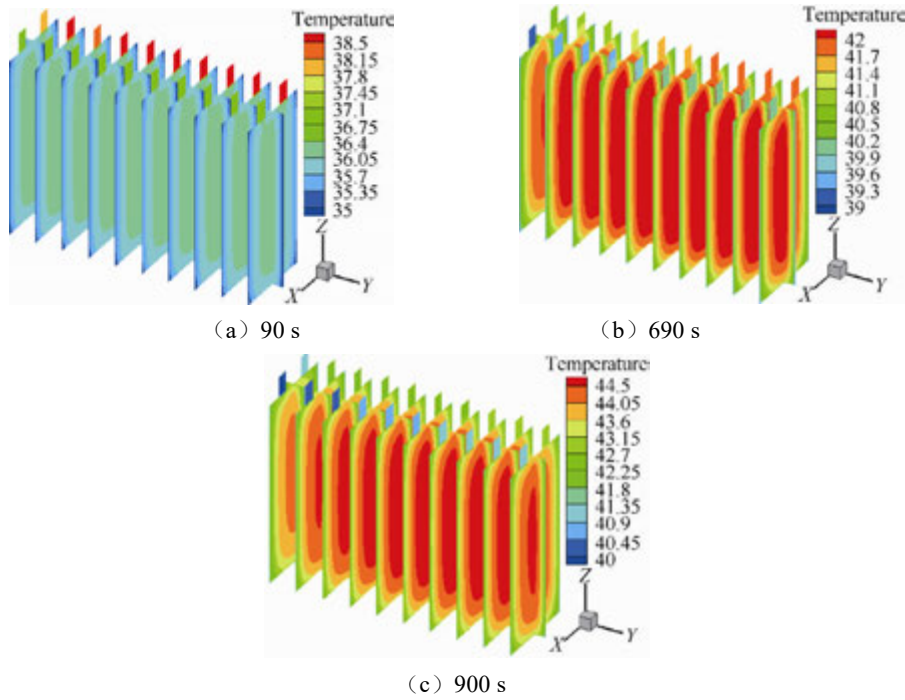
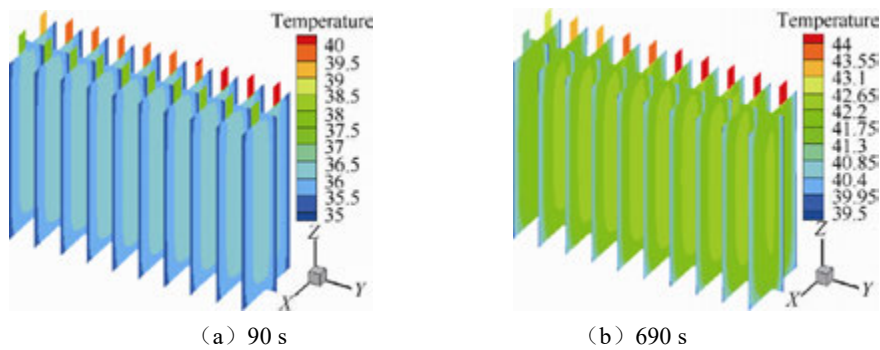
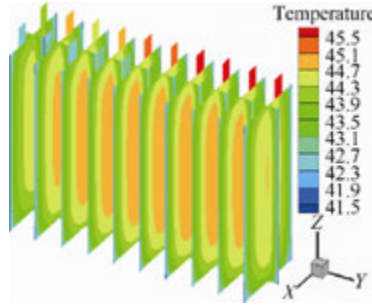


图 5 入口风速为 3 m/s 时电池模组不同放电时间点的温度云图

Fig. 5 Temperature contours under different discharge time points when the inlet wind speed is 3 m/s





(c) 900 s

图 6 入口风速为 1 m/s 时电池模组不同放电时间点的温度云图

Fig. 6 Temperature contours under different discharge time points when the inlet wind speed is 1 m/s

3.3 翅片厚度的影响

PCM 厚度 $\delta = 60$ mm, 翅片厚度 b 从 1 mm 增加到 6 mm 时, 电池模组的最高温度和最大温差随时间的演变如图 7 所示。从图 7(a)可以发现, 随着厚度的增大, 最高温度越来越低。厚度为 1 mm 和 2 mm 时, 放电结束的温度分别达到了 46.5 °C 和 45.5 °C, 超出了电池的最佳工作范围; 厚度为 3 mm 时最高温度为 44.8 °C, 已经处于最佳工作温度范围内。由图 7(b)可知, 不同厚度情况下, 放电前 500~600 s 内, 厚度越大, 其最大温差越大, 而之后情况发生逆转, 厚度越大, 其最大温差越小。这是因为在放电后期, 电池产热量急剧增加, 翅片越薄, 翅片以显热储存的热量就越少, 大部分热量被 PCM 吸收或者被空气带走, 使得 PCM 的温度达到相变温度, 开始融化, 从而以潜热吸收大量热量, 同时也使得最低温度增长幅度降低, 导致了到放电后期厚度越小, 最大温差越大的现象。从图 7(b)还可发现, 厚度为 1 mm 和 2 mm 的条件下, 放电结束后的最大温差分别为 6.3 °C 和 5.5 °C。3~6 mm 的条件下, 最大温差均在允许温差范围内, 并且 3 mm 时, 其最大温差为 4.9 °C, 刚好满足要求。综合图 7(a)和图 7(b), 同时为了减轻电池模组的重量以及节约材料, 取翅片厚度为 3 mm 探究 PCM 用量的影响。

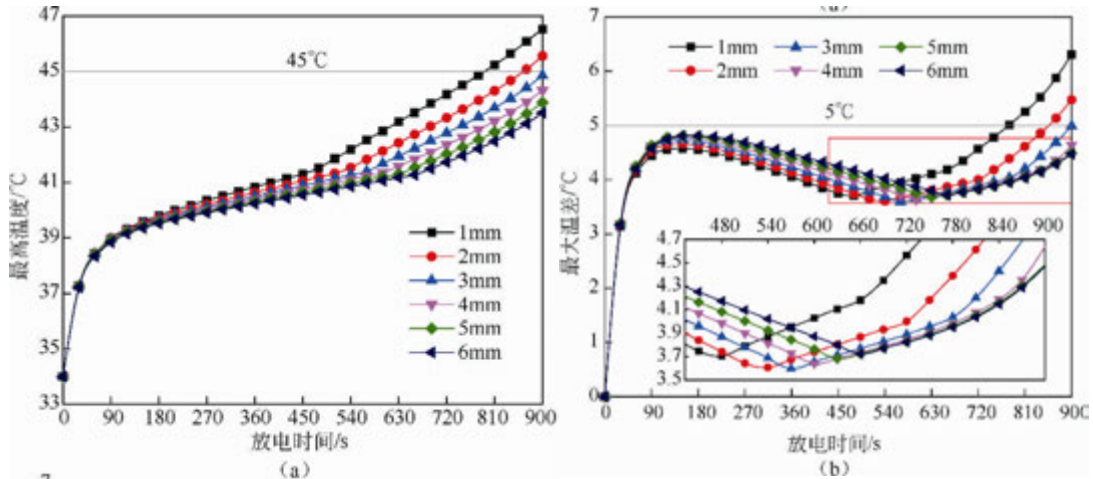


图 7 不同翅片厚度时电池模组的最高温度和最大温差变化情况

Fig. 7 Evolutions of maximum temperature and maximum temperature difference of battery module under different fin thicknesses

3.4 PCM 用量的影响

以 PCM 厚度 δ 来衡量 PCM 用量的多少, δ 从 0.5 mm 增加到 60 mm, 入口风速取 3 m/s

时, 电池模组的最高温度和最大温差随时间的演变如图 8 所示。由图 8(a)可以看出, 增大 δ 可以降低最高温度, 但随着 δ 的增大, 最高温度降低的幅度逐渐减小, 当 δ 增加至 50 mm 和 60 mm 时, 在放电最后的 200 s 左右, 两种工况的最高温度随时间变化的曲线几乎重合, 说明进一步增大 PCM 的用量, 对于降低最高温度已经没有太大作用。 δ 为 0.5~40 mm 时, 最高温度均超出了 45 °C, δ 为 50 mm 和 60 mm 时, 最高温度为 44.8 °C。由图 8(b)可知, δ 为 0.5~50 mm 时, δ 越大放电结束时的最大温差越小, 并且在 40 mm 和 50 mm 时, 两者的最大温差基本相等, 但 δ 为 60 mm 时, 最大温差在放电的最后 200 s 逐渐超过了 50 mm、40 mm 和 30 mm, 达到了 5 °C。这是因为 δ 增加至 40 mm 和 50 mm 时, PCM 的量已经足够, 继续增大 δ , 使得 PCM 的量过大, 与 δ 为 50 mm、40 mm 和 30 mm 工况相比, 同样多的热量, δ 为 60 mm 时, 温度增长幅度非常小, 导致最低温度增长非常缓慢, 而由图 8(a)细节图可知 4 种工况在放电的后期最高温度增长速度差别不大, 使得 δ 为 60 mm 的最大温差在放电的后期较 δ 为 50 mm、40 mm 和 30 mm 时增长更快。从图 8(b)还可发现, δ 为 0.5~50 mm 的最大温差均在放电 120~240s 左右超过了 5 °C, 仅有 60 mm 时, 在放电的整个过程中最大温差没有超过 5 °C。这说明增大 PCM 的用量可以在放电前期保证电池模组温度的均匀性。

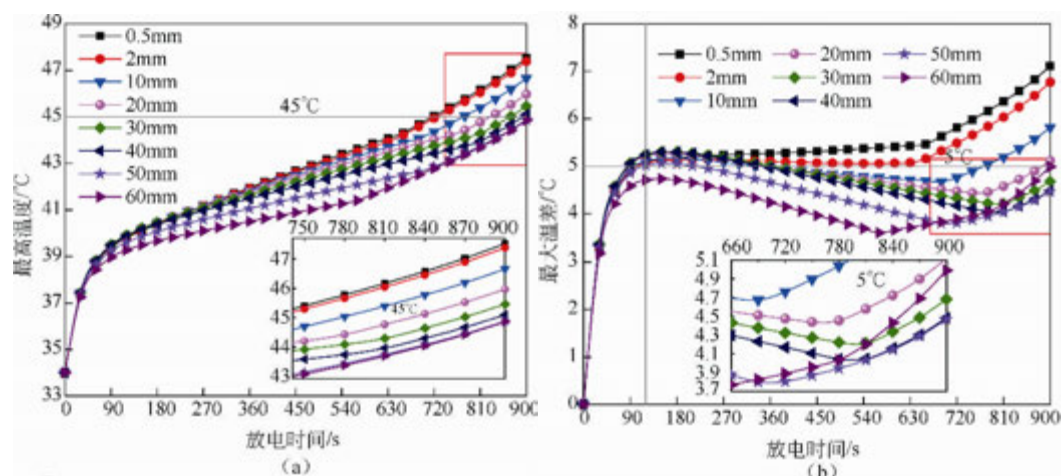


图 8 不同 PCM 厚度时电池模组的最高温度和最大温差变化情况

Fig. 8 Evolutions of maximum temperature and maximum temperature difference of battery module under different PCM thicknesses

4 结论

通过对电池模组仿真结果进行分析, 证实了空气-PCM 耦合散热的电池热管理系统能够有效地对电池正极耳散热, 并且能够保证电池模组的最高温度和最大温差在最佳范围之内, 还可得出以下结论。

(1) 增大入口风速能有效地对正极耳进行散热, 当入口风速为 1 m/s 时, 电池模组的最高温度点位于正极耳处, 而速度增加到 3 m/s 时, 最高温度点已经转移到了电池中心位置。

(2) 增大入口风速还能够降低电池模组最高温度, 但随着入口风速进一步增大, 电池模组最高温度降低不明显, 同时也会增大最大温差。风速从 1 m/s 增加到 2 m/s 时最高温度下降了 1.3 °C, 而风速从 2 m/s 增大到 6 m/s 时, 最高温度几乎没变, 但最大温差却越来越大。

(3) 增大翅片厚度可以显著降低电池模组最高温度, 减小最大温差, 但为了减轻系统重量及节约材料, 翅片厚度不宜过大, 建议取翅片厚度为 3 mm。

(4) PCM 量越多, 最高温度越低, 但过量的 PCM, 反而增大了最大温差。PCM 厚度为

0.5~50 mm 时, PCM 用量越多, 电池模组的最高温度越低, 最大温差越小, 但当 PCM 的厚度为 60 mm 时, 到放电的后期, 最大温差迅速增大, 并即将超过允许的最大温差。

参考文献

- [1] QIAN Z, LI Y, RAO Z. Thermal performance of lithium-ion battery thermal management system by using mini-channel cooling[J]. *Energy Conversion & Management*, 2016, 126: 622-631.
- [2] GRECO A, JIANG X, CAO D. An investigation of lithium-ion battery thermal management using paraffin/porous-graphite-matrix composite[J]. *Journal of Power Sources*, 2015, 278: 50-68.
- [3] 李涛. 纯电动汽车锂离子电池热效应及电池组散热结构优化[D]. 重庆: 重庆大学, 2013.
LI Tao. Study on thermal effects of lithium-ion battery in electric vehicle and battery package dissipation structural optimization[D]. Chongqing: Chongqing University, 2013.
- [4] PARK H. A design of air flow configuration for cooling lithium ion battery in hybrid electric vehicles[J]. *Journal of Power Sources*, 2013, 239: 30-36.
- [5] FAN L, KHODADADI J M, PESARAN A A. Parametric study on thermal management of an air-cooled lithium-ion battery module for plug-in hybrid electric vehicles[J]. *Journal of Power Sources*, 2013, 238: 301-312.
- [6] ZHANG T, GAO Q, WANG G, et al. Investigation on the promotion of temperature uniformity for the designed battery pack with liquid flow in cooling process[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 116: 655-662.
- [7] 徐晓明, 赵又群. 基于双进双出流径液冷系统散热的电池模块热特性分析[J]. *中国机械工程*, 2013(3): 313-321.
XU Xiaoming, ZHAO Youqun. Research on battery module thermal characteristics based on double inlet and outlet flow path liquid-cooled system[J]. *China Mechanical Engineering*, 2013(3): 313-321.
- [8] 靳鹏超, 王世学. 一种使用相变材料的新型电动汽车电池热管理系统[J]. *化工进展*, 2014, 33(10): 2608-2612.
JIN Pengchao, WANG Shixue. A novel thermal management system for EV batteries using phase-change material[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2014, 33(10): 2608-2612.
- [9] KHATEEB S A, AMIRUDDIN S, FARID M, et al. Thermal management of Li-ion battery with phase change material for electric scooters: Experimental validation[J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 142(1): 345-353.
- [10] LI Y, DU Y, XU T, et al. Optimization of thermal management system for Li-ion batteries using phase change material[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 131: 766-778.
- [11] KAI C, ZEYU L, YIMING C, et al. Design of parallel air-cooled battery thermal management system through numerical study[J]. *Energies*, 2017, 10(10): 1677-1698.
- [12] WANG W, ZHANG X, XIN C, et al. An experimental study on thermal management of lithium ion battery packs using an improved passive method[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 134: 163-170.

- [13] ZHANG S, ZHAO R, LIU J, et al. Investigation on a hydrogel based passive thermal management system for lithium ion batteries[J]. *Energy*, 2014, 68: 854-861.
- [14] ZHAO C, CAO W, DONG T, et al. Thermal behavior study of discharging/charging cylindrical lithium-ion battery module cooled by channeled liquid flow[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 20: 751-762.
- [15] AN Z, JIA L, LI X, et al. Experimental investigation on lithium-ion battery thermal management based on flow boiling in mini-channel[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 117: 534-543.
- [16] BAZINSKI S J, WANG X. Thermal effect of cooling the cathode grid tabs of a lithium-ion pouch cell[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2014, 161(14): A2168-A2174.
- [17] 彭敏, 申文静, 罗兆东. 层叠式锂离子电池二维热模型研究[J]. *电源技术*, 2018, 42(9): 1312-1315.
 PENG Min, SHEN Wenjing, LUO Zhaodong. Two-dimensional thermal modeling for laminated lithium ion battery[J]. *Chinese Journal of Power Sources*, 2018, 42(9): 1312-1315.
- [18] YEOW K, TENG H, THELLIEZ M, et al. Influence of terminal tabs/busbar ohmic heat on maximum cell temperature of a Li-ion battery system for PHEV applications[J]. *Sae Technical Papers*, 2012, 360(1): 57-61.
- [19] BERNARDI D, PAWLIKOWSKI E, NEWMAN J. A general energy balance for battery systems[J]. *Journal of Electrochemical Society*, 1985, 132 (1): 5-12.
- [20] JOULIN A, YOUNSI Z, ZALEWSKIL, et al. A numerical study of the melting of phase change material heated from a vertical wall of a rectangular enclosure[J]. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 2009, 23(7): 553-566.
- [21] 侯永涛, 赛羊羊, 孟令斐, 等. 纯电动汽车锂离子电池热效应的建模及仿真[J]. *电源技术*, 2016, 40(6): 1185-1188.
 HOU Yongtao, SAI Yangyang, MENG Lingfei, et al. Modeling and simulation of thermal effects of lithium-ion battery for electric vehicles[J]. *Chinese Journal of Power Sources*, 2016, 40(6): 1185-1188.
- [22] 张静静. 新能源汽车锂电池热管理仿真分析[D]. 天津: 天津大学, 2017.
 ZHANG Jingjing. Simulation analysis of thermal management of lithium battery for electric vehicle[D]. Tianjin: Tianjin University, 2017.
- [23] 喻昆仑. 电动汽车电池组液流热管理系统研究与设计[D]. 西安: 长安大学, 2017.
 YU Kunlun. Research and design of liquid thermal management system for electric vehicle battery pack[D]. Xi'an: Chang'an University, 2017.

多元固体颗粒系太阳能辐射吸收性能研究

杜佳蔚¹, 张晓晨¹, 费啸天¹, 吴江波², 杜小泽^{1,2*}

1 华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京, 102206; 2 兰州理工大学能源与动力工程学院, 兰州 071003

Tel: 010-61773923, Email: duxz@ncepu.edu.cn

摘要: 直接辐射太阳能粒子吸热器 (SPSR) 中, 作为传热及储热介质固体颗粒的表面辐射吸收能力对吸热器性能具有重要影响。为提升固体颗粒在太阳能全波段的吸收能力, 综合考虑不同波段吸收性能的互补性和经济性成本, 构建氮化硅-碳化硅多元颗粒。在不同的质量分数比条件下, 对多元颗粒样本的表面辐射吸收特性进行实验研究。以此为基础, 采用石英管 SPSR 模型, 研究了这种双组分混合介质对粒子吸热器性能的影响。结果表明, 质量比为 5:5 的氮化硅-碳化硅颗粒介质在所研究的范围内具有最佳的宽频吸收能力, 对应的粒子吸热器出口温度达 1050 K, 质量流量为 744 kg/s, 吸收效率达到 57.54 %。使用氮化硅-碳化硅多元颗粒为下一代聚光太阳能电站中吸热器传热介质的选择提供了思路。

关键词: 太阳能辐射; 固体颗粒; 传热介质; 吸收率

0 前言

太阳能代表了人类能源低碳转型的发展方向, 但面临转化效率低, 以及不稳定波动、难于利用等瓶颈问题有待突破。在太阳能的各种应用方式中, 聚光太阳能热发电技术因一系列优良特性而成为重要方向^[1]。根据聚光器和吸热系统不同, 可分为塔式、槽式、碟式和线性菲涅尔式四种太阳能热发电技术^[2]。其中, 太阳能吸热器是将太阳辐射能转化为高温热能的重要器件, 是整个系统的核心部件, 其性能直接影响发电效率^[3]。而吸热器内传热介质的选取对于吸热器性能的提升以及整个发电系统稳定性的提高都具有重要意义。

到目前为止, 聚光太阳能发电技术中第一代至第四代传热介质分别为水/水蒸汽、导热油、熔融盐和固体颗粒^[4]。以水作为直接储热介质, 很难增大容量; 采用间接储热时不同温度段的水蒸气焓值不均匀, 传递过程热损失很大, 所以以水/蒸汽作为传热介质的电站实现大规模高效储热的技术难度很大。目前市场上应用最广泛的是导热油和熔融盐。导热油是可燃、易挥发的液体, 在较高工作温度下将汽化, 限制了其高于 400 °C 的应用^[5]; 储热能力低也是需要考虑的一个问题。目前熔融盐工作温度范围为 220-600 °C。它会在温度高于 600 °C 时分解, 在温度低于 220 °C 时凝固^[6,7]; 熔盐在高温下变得不稳定, 容易分解产生具有高度腐蚀性的氧化物离子, 对系统造成损坏。这些因素制约了熔融盐吸热器效率的进一步提高。固体颗粒可以克服工作温度低和高温不稳定的缺点, 研究表明固体粒子太阳能吸热器可以实现 1000 °C 以上的高出口温度和高达数百度的温差, 还具有以下优点: 吸热器内固体颗粒同时具有传热和储热的功能, 并且材料成本较低; 体系在高温下稳定; 可驱动超临界朗肯循环或超临界二氧化碳(sCO₂)布雷顿循环, 发电效率高达 40%~48%^[8,9]。

作为传热/储热介质的固体颗粒的性质对吸热器的性能有很大影响, 为了在商业水平上实现固体颗粒吸热器的广泛应用, 对固体颗粒材料的选择是吸热器设计中需要考虑的一个重要问题。研究人员综合多方面因素考量, 致力于寻找价格低廉、性质优良、容易获取并且环保的颗粒材料。在吸热器和储热罐中, 材料温度很容易达到 1000 °C, 因此候选材料绝大多数情况下仅限于无机非金属材料, 如一些天然石材或陶瓷, 这些材料在远超过 1000 °C 的温

度下具有热稳定性^[10]。Falcone 等人^[11]鉴定出碳化硅、铝土矿、石英砂和硅玻璃是适合太阳能聚光吸热器系统的材料。Tayeb^[12]利用低成本循环利用废弃的陶瓷材料，研究了其在 CSP 应用中的适用性。Baumann 等人^[13]研究天然颗粒和陶瓷颗粒材料，除了测量其热物理性质，也测量了高温稳定性、机械性、流变性质的特征。Diago 等人^[14]从阿拉伯联合酋长国沙漠的不同位置采集了多个样本，并测量了相关的热物理性质和光学性质。研究发现，沙漠砂的比热容为 0.79-1.08 kJ/(kg·K)，在高温环境下会出现不同程度的团聚现象，并且在 408 °C 和 635 °C 附近出现两次质量损失，分别对应沙漠砂中氢氧化钙的脱水和碳酸钙的脱碳。Hellmann 等人^[15,16]对球形烧结铝土矿和熔融锆石陶瓷材料进行了高温抗烧结性的测试，结果表明，加压情况下静止的颗粒床 1100 °C 时会产生团聚现象，而无压力条件下抗烧结性能优异，可耐 1400 °C 高温。

Kang 等人^[17]评估了硅砂、石英砂、方石英、氧化铝、碳化硅、烧结铝土矿和橄榄石。碳酸钙或碳酸钡较软的矿物不包括在内，这类颗粒在较高温下 (≥ 900 °C) 出现运行不稳定、破裂和磨损等问题。Falcone 等人^[18]研究了一系列天然和合成材料作为候选介质，并且展示了应用材料纯度、熔点、与环境的反应性以及 1800-2400 K 温度范围内使用的标准。

对固体颗粒材料的选取标准是需要具有以下特性，以确保系统安全高效运行^[19,20]:

- (1) 耐热性好，温度超过 1000 °C 时颗粒不会烧结熔化，杂质含量较低，保证高温下不发生共晶熔化；
- (2) 良好的热物理性能，即固体密度高、导热系数高、比热容高，保证在一定温差范围内具有较大的传热和蓄热能力；
- (3) 可接受的健康和安全危害，以保障操作人员的健康；
- (4) 高抗裂性，减少高温循环过程中颗粒的磨损，提高传热性能的稳定性；
- (5) 对环境的影响小，特别是选择软颗粒时，因为它们容易磨损，导致粉尘污染；
- (6) 固体颗粒成本低，储存量大。

然而，对于直接吸收吸热器内的固体颗粒材料。除了满足上述要求之外，颗粒材料的光学吸收能力至关重要，计算分析表明，光谱吸收率对吸热器效率有着决定性的作用，对太阳投入辐射的吸收能力决定了吸热器的光热转换效率，进一步影响 CSP 电站热力学循环的初始温度与总电厂的效率^[7]。但是天然、价格低廉的颗粒材料往往自身光学性质并不优越，如砂子、铝土矿^[21]等。研究人员发现通过对颗粒进行表面涂覆或掺杂金属氧化物、颜料等。Siegel 等人^[22]向商业支撑剂（主要成分是 Al_2O_3 和 SiO_2 ）中添加吸收颜料合成并表征了 140 种新型商业吸收剂。在 700 °C 下加热 500 小时后，总共有 12 种材料的吸收率大于 0.9，24 种材料的吸收率大于 0.85，其中的无机金属氧化物涂料如表 9 所示。而发射率变化很小，所有材料的 α/ϵ 的平均值为 1.16，只有四种材料的 α/ϵ 大于 1.21。Gimeno-Furio 等人^[23]利用炭黑涂覆法和葡萄糖降解法将沙子涂成黑色，涂覆后的沙子的最高工作温度分别为 645 °C 和 441 °C，光学吸收率增加了约 140%，比热容略有升高，而热导率稍有降低。炭黑涂覆法的涂层更稳定，储存容量更高。这类处理手段使得颗粒材料吸收性质得到改良，进一步提高颗粒介质的光捕获能力，从而进一步提高系统效率，减少定日镜场面积和储热系统成本^[24]，但相对地材料成本和制备难度也会进一步上升。

尽管对于热物理特性方面的研究已经相当完备，但是对颗粒的表面辐射吸收特性有关研究则相对缺乏。本文主要从颗粒材料光学性能匹配角度出发，选取几种广泛使用的耐高温材料，构建优良吸收性能的双组分多元颗粒，并以重力驱动的直接吸收石英玻璃管固体颗粒吸热器为模型，计算了颗粒在吸热器内的最高温度、吸热器效率、质量流量，对二元颗粒样本的性能进行综合评价。

1 直接吸收式粒子吸热器模型

1.1 石英管吸热器数值模型

本文采用中科院电工所提出的一种石英玻璃管固体颗粒太阳能吸热器(SPSR)模型^[25], 其布局如图 1 所示, 包括位于顶部的颗粒分配器、位于底部的石英管束吸收区、用于固体颗粒循环的提升机等。吸收区由内部含耐磨、耐火插件的石英管束组成。内插件可以选用机械加工金属材料或具有小膨胀系数的莫来石或堇青石等陶瓷。每个石英管与内插件形成一个半环形固体颗粒流道。太阳能透过石英玻璃管照射在颗粒表面, 颗粒由于重力作用通过流道, 同时吸收能量不断升温, 通过玻璃管下方圆锥形料斗进入储热罐。石英管束中的薄颗粒层可以保持移动颗粒的温度非常均匀, 以避免在加热过程中被照射的一侧和面向内插件的一侧之间出现过大的颗粒温度差异。

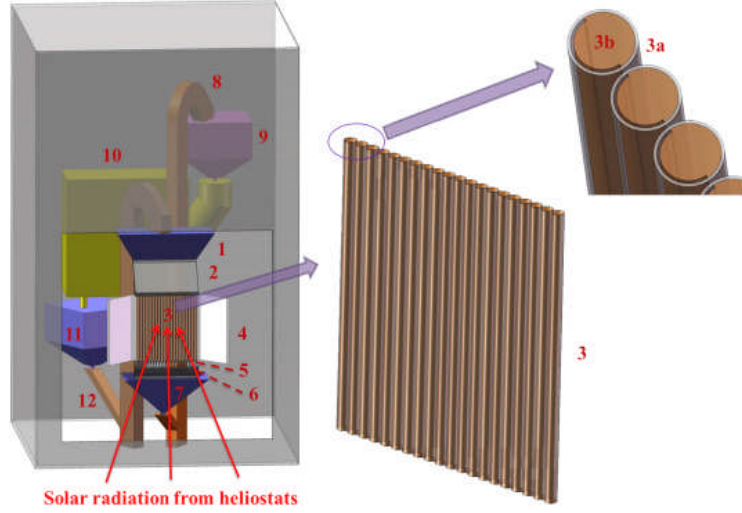


图 1 太阳能吸热器与热能储存系统的结合布局(1-粒子分配器, 2-低温导流槽, 3-吸收段, 4-绝缘材料, 5-圆锥形料斗, 6-高温导流槽, 7-粒子收集器, 8-高温斗式提升机, 9-热颗粒储存罐 10-热交换器 11-冷粒子储存罐, 12-低温斗式提升机)^[25]

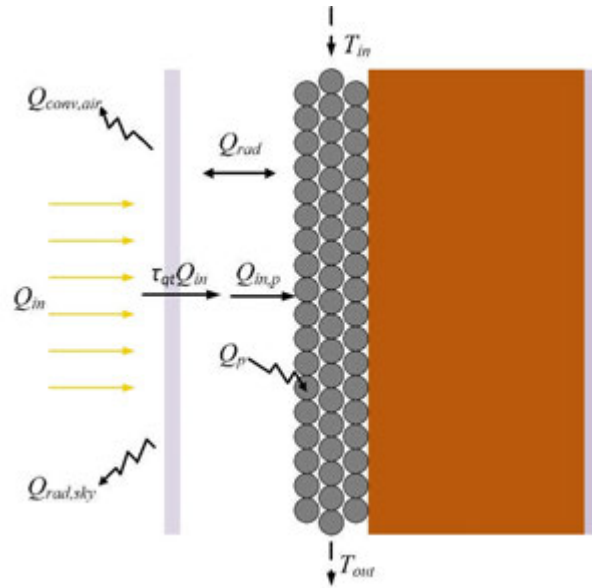


图 2 石英玻璃管直接吸收能量传递模型^[26]

其简化的能量传递模型如图 2 所示。石英玻璃管在太阳能光谱范围内透过率很高, 大多数太阳能被颗粒层捕获, 导致玻璃管温度远低于颗粒层温度; 高温下, 相比于导热和对流,

辐射传热占主导；而且石英玻璃管径小，管束中的颗粒层近似看作平面。故对模型进行了如下假设：

- (1) 石英管外壁与外界空气之间只有自然对流换热。
- (2) 忽略管内空气与管壁或颗粒之间的能量传递。
- (3) 在垂直下落过程中，粒子与管之间的辐射换热近似等于两个平行平面之间的辐射换热。
- (4) 颗粒与管壁之间的热传导可以忽略不计。

通过颗粒层表面反射到石英管上的太阳辐射可以忽略，颗粒薄层的能量守恒方程为：

$$\tau_{s,qt}\alpha_{s,p}Q_{tal} - A \cdot \frac{\sigma(T_p^4 - T_{qt}^4)}{\frac{1}{\varepsilon_p} + \frac{1}{\varepsilon_{qt}} - 1} = Q_p \quad (1)$$

其中 $\tau_{s,qt}$ 为石英管的太阳加权透过率， Q_p 为粒子吸收的净能量， T_p 和 T_{qt} 为粒子和石英管的

的平均温度， ε_p 和 ε_{qt} 分别为颗粒和石英管的发射率， A 表示吸热器的垂直加热区域面

积， σ 表示斯特藩-玻尔兹曼常数， $5.67 \times 10^{-8} \text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$ 。

石英管的能量守恒方程：

$$\alpha_{s,qt}Q_{tal} + A \frac{\sigma(T_p^4 - T_{qt}^4)}{\frac{1}{\varepsilon_p} + \frac{1}{\varepsilon_{qt}} - 1} = Ah(T_{qt} - T_{sur}) \cdot \frac{D_{\max}}{D_{\min}} + A\varepsilon_{qt}(T_{qt}^4 - T_{sky}^4) \cdot \frac{D_{\max}}{D_{\min}} \quad (2)$$

其中 $\alpha_{s,qt}$ 为石英管的太阳加权吸收率， T_{sur} 和 T_{sky} 为环境空气温度和晴空温度。

颗粒与管壁之间的对流换热有层流和湍流之分，判别流动状态的准则数为 Gr ，对流换热系数可表示为：

$$h = \begin{cases} \frac{0.59(Gr \cdot Pr)^{\frac{1}{4}} \lambda_{ref}}{L}; & 1.43 \times 10^4 < Gr < 3 \times 10^9 \\ \frac{0.0292(Gr \cdot Pr)^{0.39} \lambda_{ref}}{L}; & 3 \times 10^9 < Gr < 2 \times 10^{10} \\ \frac{0.11(Gr \times Pr)^{1/3} \lambda_{ref}}{L}; & Gr > 2 \times 10^{10} \end{cases} \quad (3)$$

其中 Gr 表示格拉晓夫数 ($Gr = \frac{ga\Delta t l^3}{\nu^2}$)； Pr 表示普朗特数； λ_{ref} 表示空气热导率， $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ ；

L 表示特征长度，竖圆柱取高度，此处为管长， m 。

粒子吸热器的效率定义为粒子净吸收热量与总输入的能量之比。稳态流动时，颗粒的温度保持不变，吸热器热效率可以表示为：

$$\eta = \frac{Q_p}{Q_{tal}} = \frac{\int_{T_{in}}^{T_{out}} q_m c_p(T) dT}{Q_{tal}} \quad (4)$$

其中 q_m 表示颗粒流量， kg/s ； T_{out} 表示出口处颗粒温度， K ； T_{in} 表示入口处颗粒温度； $c_p(T)$ 表示颗粒的比热容。

本研究对粒子下落和辐射传热作了一些假设。将太阳辐射能看作平行入射，不考虑不同

方向投射到颗粒层的太阳能。此外，本研究假设颗粒对邻近颗粒不存在红外辐射。颗粒与石英管壁存在辐射热交换，其传热面积可以等效为颗粒薄层的垂直投影面积。因此，一个简单的辐射模型如下所述。当粒子幕下落通过石英管时，颗粒层在太阳光入射方向上吸收太阳光并与石英管壁交换热量，在相反的方向上，由于温差很小，颗粒与内插件之间几乎不存在热交换。

1.2 初始条件和边界条件

假设单位面积平均聚光太阳能辐射为 300 kW/m^2 ，粒子的初始温度为 600 K 。假设石英管的太阳加权透过率和太阳加权吸收率分别为 0.935 和 0.065 。石英管的热发射率近似看作 1 。吸热器的受热面积为 1503 m^2 ，石英管受热区域高度为 3 m ，每个石英管的直径为 60 mm ，厚度为 5.25 mm 。环境温度为 300 K ，晴朗天空温度为 273 K ，发射率为 1 。颗粒材料看作漫灰体介质。假设石英管 SPSR 的设计热功率为 300 MW_t 。

2 多元颗粒光学性能实验研究

2.1 颗粒的匹配

考虑到多组分颗粒体系在太阳能吸收技术中的潜在应用，选取平均粒径为 $100 \mu\text{m}$ 的氮化硅和碳化硅粉末作为原材料，构建氮化硅-碳化硅的双组分多元颗粒样本。每个样品总质量均为 10 g 。两组原料所加入的颗粒质量比为 $10:0$ 、 $9:1$ 、 $8:2$ 、 $7:3$ 、 $6:4$ 、 $5:5$ 、 $4:6$ 、 $3:7$ 、 $2:8$ 、 $1:9$ 和 $0:10$ 。采用 PBM-0.4 行星球磨机对不同质量比双组分样本进行充分混合。将一定质量颗粒加入球磨罐中，在 800 rpm 运行 2.5 小时以充分混合。得到的具有不同质量比的样本如图 3 所示。

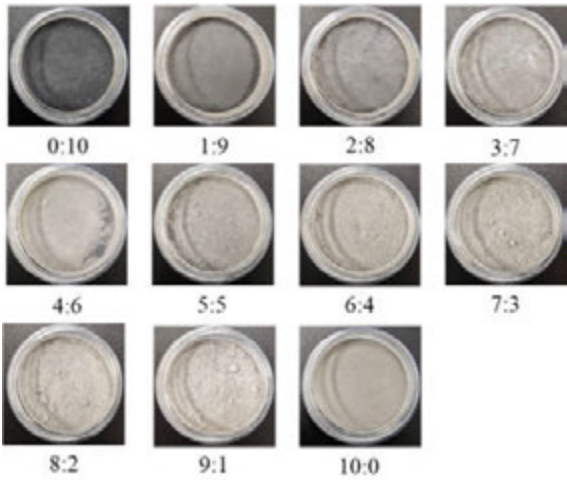


图 3 不同质量比氮化硅-碳化硅的实际样本图

2.2 实验研究方案

2.1.1 吸收性能实验设计

考虑到多组分粒子系统在太阳能吸收技术中的潜在应用，对双组分多元颗粒样本的吸收率进行了研究。目前对粉末及颗粒光学性质的测量主要采用两种方式。一种是采用反射探头与光纤光谱仪，适用于反射率低、表面粗糙（反射光几乎是漫反射）的样品；另一种是采用积分球搭配紫外-可见-近红外分光光度计，它的优点是具有积分球配置，可以收集样品的全部漫反射、镜面反射光。但是，由于反射光透过石英视窗，光强不可避免存在损失。对于高吸收率样品，反射光线功率低，样品反射光与样品视窗玻片的反射光相当（系统误差不可避免），造成结果偏低。这种方法适用于反射率不太低的样品，对材料表面形态无要求。

本文考虑到构成每个样本的两种颗粒材料密度不同，若采用分光光度计，在底部由视窗玻片构成的圆柱形样品室内填充混合粒子，密度大组分将下沉，导致测量结果趋向于接近密

度较大的粒子的反射率。为了解决这一问题，我们使用了反射探针和 QEPro XR 、 NIR Quest + 2.5 近红外光纤光谱仪来实现混合粒子系统的非接触测量。

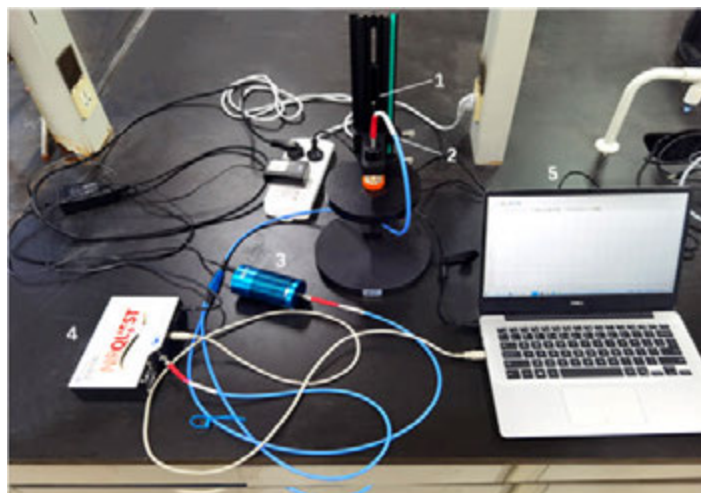


图4 吸收率测量系统（1-可调支架，2-反射探头，3-光源，4-光纤光谱仪，5-计算机）

测量系统的示意图如图4所示。样品放置在可调支架的样品平台的中心。反射探头安装在样品上方的采集平台上，探针由六根照明光纤和一根集束光纤组成。光纤的一端连接到激发光源，另一端连接到光谱仪上。在实验测量中，光源的能量通过六根照明光纤到达样品表面，反射光通过探针尖端中间的第七根光纤收集，然后进入光谱仪。光谱反射率数据采集使用 OceanView 光谱软件进行。

2.2.2 实验参数设置

两个光谱仪都将多次扫描的平均时间设置为 10 次，积分时间分别为 8ms 和 50ms。光源采用 HL-2000-FHSA 型卤素灯，光源波长范围覆盖太阳辐射波段。两台光谱仪的波长范围分别为 200-950nm 和 900-2500nm，但是考虑到边缘波段由于探测器等影响测量结果波动较大，应用波段范围设置为 380-2360nm。将颗粒样品视为不透明粒子层，通过 1 减去光谱反射率，得到光谱吸收率。需要注意的是，测量样品之前需要使用漫反射标准进行校准，以消除卤素灯和环境光谱对测试结果的影响。由于测量过程存在波动，为保证测量结果的准确性，相同样品重复测试 3 次并将其平均值作为最终结果。

3 结果与讨论

3.1 太阳能光谱吸收率特性

测量的多元颗粒材料的光谱吸收率如图4所示。可以看出，测量的光谱在约 1000nm 处发生波动，这是由于使用的两个光谱仪采用不同的分束器和探测器，实验中仪器元件耦合时造成的。可以发现，除了氮化硅与碳化硅的质量比为 9:1 时短波段吸收率低于纯氮化硅，多元颗粒样本吸收率曲线大致处于所构成的两种原料吸收率曲线之间。样本均在 430 nm 和 540 nm 处存在凸起的峰，这是由于环境光未完全扣除导致的系统误差。

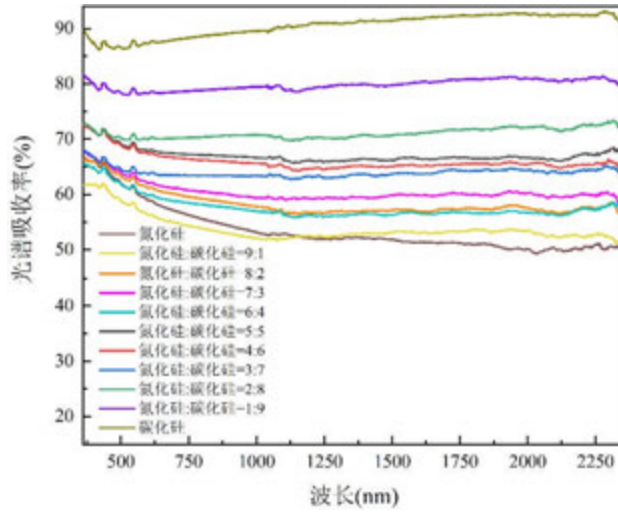


图4 氮化硅-碳化硅多元颗粒的光谱吸收率

基于 ASTM G173-03 太阳光谱的太阳直接光谱辐照度，通过下式得到对太阳能的平均吸收率：

$$\alpha_p = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \alpha(\lambda) I(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I(\lambda) d\lambda} \quad (5)$$

得到的太阳能平均吸收率结果如图 5。可以发现，多元颗粒样本并不全是高吸收率粒子占比越多，混合粒子样本的太阳加权吸收率越高。氮化硅与碳化硅的质量比为 9:1 时的太阳能吸收率低于纯碳化硅太阳能吸收率。

氮化硅与碳化硅的质量比为 4:6、5:5 时，多元颗粒吸收性能较优良，对太阳能平均吸收效率相比于纯氮化硅（氮化硅与碳化硅的质量比为 10:0）提高了 17.07 %、18.29 %。

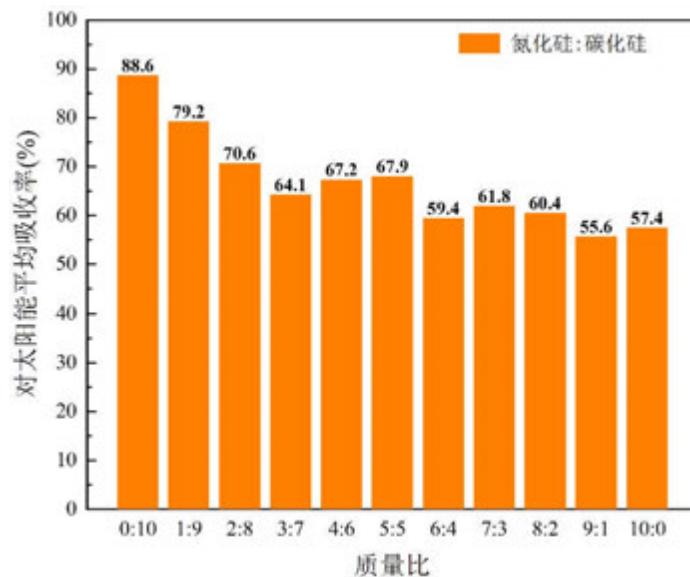


图5 氮化硅-碳化硅多元颗粒的太阳能平均吸收率吸收率

3.2 颗粒吸收性能对吸热器性能的影响

采用石英管吸热器数值模型对多组分颗粒系统的热性能进行了评价，其数值模型的验证

已在之前的研究中展示^[26]。对颗粒的接收器出口温度进行计算，如图 6 所示。这种氮化硅-碳化硅颗粒样品吸热器出口温度随质量分数变化不大，吸热器出口温度随粒子系统吸收率或质量比的变化呈现波动趋势，与材料吸收性变化不完全一致，这可能受到多元颗粒体系蓄热能力的影响。采用纯碳化硅颗粒作为传热储热介质时，吸热器出口温度高达 1115 K。质量比为 8:2、5:5 的氮化硅-碳化硅颗粒样本均比邻近质量比的氮化硅-碳化硅颗粒样本出口温度高，约为 1050 K。

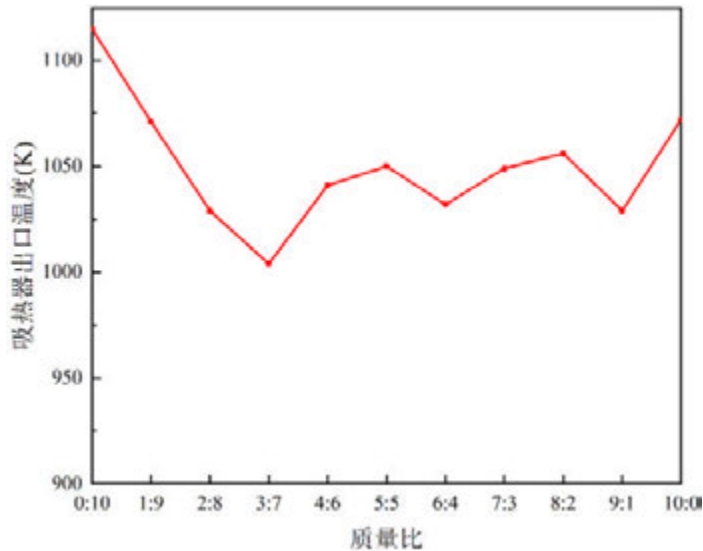


图 6 不同质量比氮化硅-碳化硅颗粒的吸热器出口温度

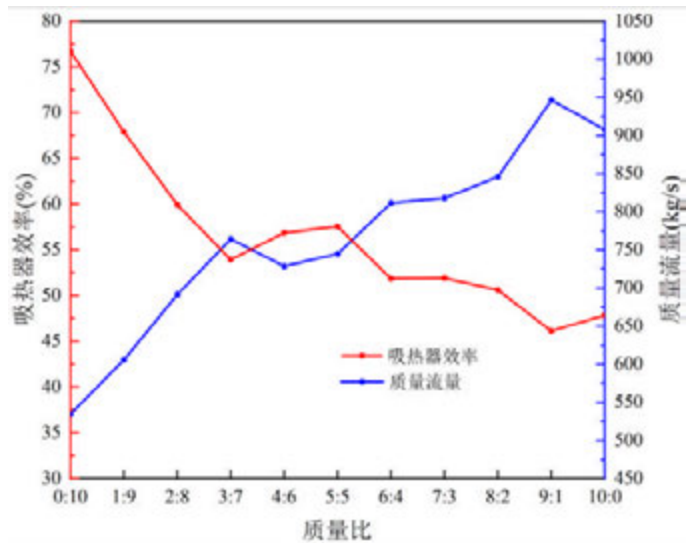


图 7 不同质量比氮化硅-碳化硅颗粒的吸热器效率与质量流量

图 7 为稳态条件下吸热器热效率和所需的质量流量。所研究的吸热器的热效率与吸热器出口温度大体上具有相同的趋势。相比于邻近多元颗粒样本，质量比为 4:6、5:5 的氮化硅-碳化硅颗粒样本作为传热储热介质，吸热器效率分别为 56.9 %、57.5 %，比相邻质量比为 3:7、6:4 的颗粒样本效率都高。而这两组颗粒样本所需质量流量较低，分别为 728 kg/s、744 kg/s；纯碳化硅颗粒样本的质量流速率最低，约为 534 kg/s，可有效降低固体颗粒吸热器塔式颗粒提升机的运行成本。

4 结束语

本文选取了氮化硅和碳化硅两种广泛商用的耐高温材料，基于颗粒运行成本、吸热器效

率等吸热器性能,采用石英管太阳能固体颗粒吸热器模型研究了双组分多元颗粒作为直接吸收介质的设计方法。

对双组分粒子体系的研究发现,随着高吸收率粒子的加入,吸收性能有所提高。在颗粒体系中,氮化硅-碳化硅颗粒体系的吸收率变化不均匀,随着碳化硅的加入,吸收率的增加幅度可能会降低。原因可能是两种材料吸收光谱的差异以及多元颗粒堆积产生的光线散射吸收。其中,以 5:5 的氮化硅-碳化硅颗粒介质为最佳选择,出口温度达 1050 K,所需质量流量为 744 kg/s,效率最终可以达到 57.54 %。使用这种氮化硅-碳化硅混合粒子系统为聚光太阳能塔式发电中吸热器颗粒材料的选择提供了新的思路。

参考文献

- [1] 苏亚琴.太阳能流化床粒子吸热器内流动与传热特性研究[D]. 兰州: 兰州理工大学, 2022.
- [2] Iea O. Technology roadmap: concentrating solar power[J].2010:11-12.
- [3] Clifford K. Ho. A review of high-temperature particle receivers for concentrating solar power[J]. Applied Thermal Engineering, 2016, 109 (Part B): 958-969.
- [4] 杜凤丽. 降低聚光太阳能发电成本的途径[J]. 太阳能, 2011(07): 11-13.
- [5] 封春菲, 田增华. 槽式太阳能热发电集热器型式及传热介质性质对电站经济性影响[J]. 电力勘测设计, 2021(01): 59-66.
- [6] Zhang H, Benoit H, Perez-Lopèz I, Flamant G, Tan T, Baeyens J. High-efficiency solar power towers using particle suspensions as heat carrier in the receiver and in the thermal energy storage[J]. Renewable Energy, 2017, 111: 438-446.
- [7] Pacheco J, Bradshaw R, Dawson D, Rosa W, Gilbert R, Goods S, Hale M, Jacobs P, Jones S, Kolb G, Pacheco J, Prairie M, Reilly H, Showalter S, Vant-Hull L. Final test and evaluation results from the solar two project[R]: Sandia National Lab. (SNL-NM), Albuquerque, NM (United States); Sandia National Lab. (SNL-CA), Livermore, CA (United States), 2002, 18-19.
- [8] Jiang K, Du X, Kong Y, Xu C, Ju X. A comprehensive review on solid particle receivers of concentrated solar power[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2019, 116: 109463
- [9] Benoit H, Spreafico L, Gauthier D, Flamant G. Review of heat transfer fluids in tube-receivers used in concentrating solar thermal systems: properties and heat transfer coefficients[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2016, 55: 298–315.
- [10] Baumann T, Zunft S. Properties of granular materials as heat transfer and storage medium in CSP application[J]. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2015, 143: 38-47.
- [11] Falcone P K, Hackett C E, Noring J E. Evaluation and application of solid thermal energy carriers in a high temperature solar central receiver system, F, 1982 [C].
- [12] Tayeb A M. Use of some industrial wastes as energy storage media [J]. Energy Conversion and Management, 1996, 37: 127-33.
- [13] Baumann T, Zunft S. Properties of granular materials as heat transfer and storage medium in CSP application [J]. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2015, 143: 38-47.
- [14] Diago M, Iniesta A C, Soum-Glaude A, et al. Characterization of desert sand to be used as a high-temperature thermal energy storage medium in particle solar receiver technology [J]. Applied Energy, 2018, 216: 402-13.
- [15] Hellmann J R, McConnell V S. Characterization of spherical ceramic particles for solar thermal transfer media: A market survey, F, 1986 [C].
- [16] Hellmann J R, Eatough M O, Hlava P F, et al. Evaluation of spherical ceramic particles for solar thermal transfer media, F, 1987 [C].
- [17] Kang Q, Flamant G, Dewil R, Baeyens J, Zhang HL, Deng YM. Particles in a circulation loop for solar energy capture and storage[J]. Particuology, 2019, 43: 149–56.

- [18] Falcone PK, Noring JE, Hruby JM. Assessment of a solid particle receiver for a high temperature solar central receiver system[R]. USA : Sandia National Lab(SNL-CA), Livermore, CA(United States), 1985.
- [19] 高妍. 太阳能粒子吸热器传热介质性能研究[D].华北电力大学 (北京),2021.
- [20] Tetreault-Friend M, Gray L A, Berdibek S, et al. Optical properties of high temperature molten salt mixtures for volumetrically absorbing solar thermal receiver applications[J]. Solar Energy, 2017, 153(sep.): 238-248
- [21] Diago M, Iniesta A C, Delclos T, et al. Characterization of desert sand as a sensible thermal energy storage medium, F, 2016 [C].
- [22] Siegel N P, Gross M D, Coury R A. The Development of Direct Absorption and Storage Media for Falling Particle Solar Central Receivers [J]. Journal of Solar Energy Engineering-transactions of The Asme, 2015, 137: 041003.
- [23] A G F, A L H, A M C, et al. New coloured coatings to enhance silica sand absorbance for direct particle solar receiver applications [J]. Renewable Energy, 2020, 152: 1-8.
- [24] Spelling J, Gallo A, Romero M, et al. A High-efficiency Solar Thermal Power Plant using a Dense Particle Suspension as the Heat Transfer Fluid [J]. Energy Procedia, 2015, 69: 1160-70.
- [25] Nie F, Cui Z, Bai F, et al. Properties of solid particles as heat transfer fluid in a gravity driven moving bed solar receiver[J]. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2019, 200:110007.
- [26] Du J, Gao Y, Wu J, Zhihua Ge, et al. Physical property design of multi-component particle systems as heat transfer medium for directly irradiated solar receiver. Applied Thermal Engineering, 2023, 219: 119470.

燃/滑油微通道换热器振动强化换热研究

魏凯, 吴建泽, 何明键, 任亚涛, 齐宏*
(哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨 150001)
(Tel: 0451-86412638, Email: qihong@hit.edu.cn)

摘要: 微通道换热器具有效率高、重量小、承压能力强等优点, 在高超声速飞行器燃/滑油换热器领域有着的应用潜力, 飞行器实际工作环境中会存在复杂的振动环境, 微通道内的流动、换热过程会受到影响。本文针对燃/滑油微通道换热器流动换热过程展开数值仿真研究, 创新性地基于微通道换热器应用环境的振动, 开展微通道换热器振动强化研究, 得到了振动的频率以及振动幅值对微通道换热器的影响规律, 实现了最高 37.4% 的对流换热系数提升。

关键词: 微通道换热器; 印刷板式换热器; 流动与换热特性; 振动工况

0 前言

随着现代航空国防科技力量的不断发展进步, 发动机润滑油、飞行器的航空电子设备及发动机部件在运行过程中的热负荷显著增加, 导致了更多低品位、高热流密度的热源, 同时燃料燃烧也在此过程中产生废热, 这部分热量均转移到了发动机结构中使发动机温度显著提升, 这种现象也被称为“热浸泡”^[1]。为了保证飞行器的隐身性能, 飞行器的尺寸及飞行器表面开口逐渐减小, 且高马赫飞行速度导致空气滞止温度升高, 冲压空气作为热沉的能力下降, 燃油热沉成为了飞行器热管理系统里中流砥柱的角色^[2]。航空燃料占据飞行器总重量的比重非常高^[3], 能够提供充足的热容量, 同时燃油作为内部资源, 不需要再额外引入其他类型的冷却介质热沉。燃油相比与空气, 有更高的热容和换热强度, 在换热效率上是比空气更有效的热沉, 此外由于燃料具有热惯性的特点, 在高热负荷的情况下, 仍然能保持小范围温度变化, 与热源的温差也不会存在巨大变化, 保证了热沉的可靠性和有效性^[4]。

根据预估未来的飞机需要的冷却水平是兆瓦级别, 而不是目前飞机所需的千瓦级别, 而热浸泡问题在军用飞机上显得更为严重^[5]。事实上, 限制现代先进飞行器的性能(耐力及任务能力)的不是燃料容量, 而是飞行器的热量限制^[6]。为了更好的缓解热浸泡的现象, 需要研制更先进的更复杂的燃滑油换热器来冷却这些系统^[7]。

随着电子设备的散热需求增加, 提出了一种用于电子设备制冷先进微型热交换器—紧凑式换热器也称为 PCHE^[8], 这是一种利用线切割加工、光刻、化学刻蚀等非传统先进制造技术在一层金属薄板上雕刻流道, 并将雕刻上流道的各个金属薄板进行金属焊接

在一起组成紧凑式换热器^[9]如图 1 所示。紧凑式换热器与管壳式换热器相比具有更高的换热能力, 更轻的重量以及更大的紧凑度、耐高温、耐高压、适用介质范围广^[10], 制造材料多样化等优点。微通道换热器的出现, 因其紧凑、高效的优点与高超速飞行器的设计理念完全相符, 且能给目前高超速飞行器的燃油换热器热容量限制所导致的技术瓶颈提供了一定思路。

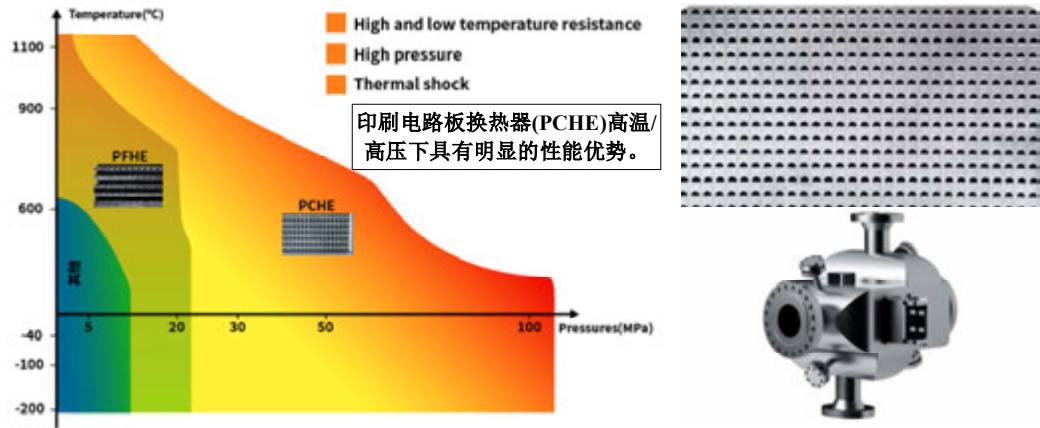


图 1 微通道换热器示意图

本文依据高超速飞行器的燃滑油换热系统的应用背景, 进行了燃/滑油微通道换热器流动换热特性研究工作, 考虑到飞行器应用环境存在随机振动, 利用数值模拟手段及 Fluent UDF 功能, 开展了微通道换热器振动强化换热研究。主要工作内容包括以下:

- (1) 基于第三方测定的航空燃油 RP-3 以及航空润滑油 4050 物性参数点, 拟合建立满足研究工况范围的航空燃油 RP-3 和航空润滑油 4050 物性模型;
- (2) 建立适用于燃/滑油微通道换热器的数值仿真模型, 开展基于仿真结构的微通道换热器流动、传热特性研究, 分析讨论换热器性能随工况、物性的变化规律, 揭示通道内冷热工质在 PCHE 内的流动特性、换热特性;
- (3) 分析飞行器随机振动加速度功率谱密度, 选择具有较高功率密度的振动频率范围, 探究振动频率及幅值对强化换热的影响机理, 揭示燃/滑油微通道换热器振动强化换热规律。

1 微通道换热器流动换热数值方法

1.1 微通道换热器工质物性参数

航空煤油 RP-3 是由上千种碳氢化合物和添加剂组成的混合物^[14], 为了减少由于航空煤油 RP-3 物性变化导致的实验数据偏差, 本文对航空煤油 RP-3 进行第三方物性检定, 选取 293.15 K~393.15 K 作为研究温度区间, 将检定航空煤油 RP-3 的物性进行多项式拟合, 拟合结果如图 2 所示。

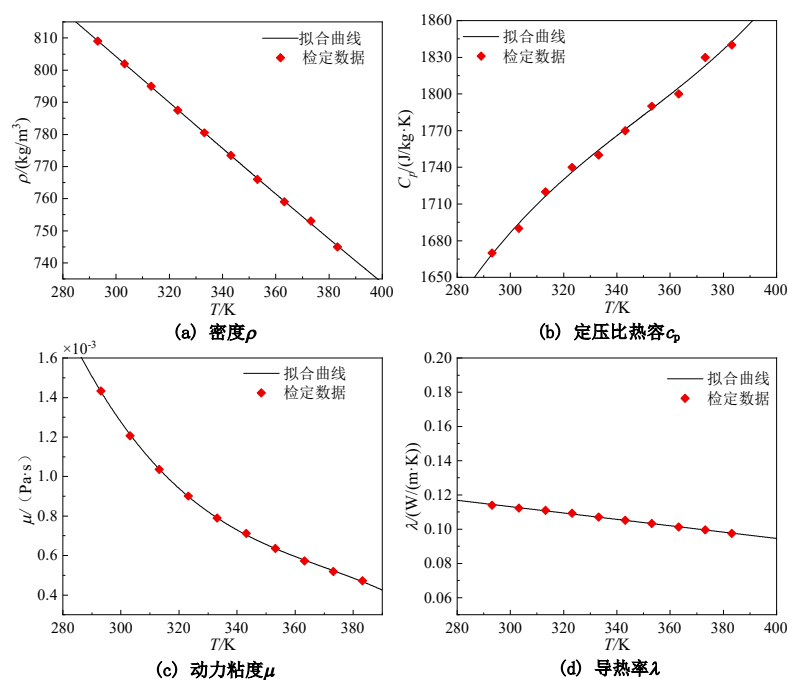


图 2 检定航空燃油 RP-3 物性拟合结果

对于热侧工质航空润滑油 4050，目前针对其研究相对较少。同样采用第三方标定的方法测量实验工质样品物性，以保证实验数据的准确性。本文所研究的航空润滑油 4050 温度区间为 393 K ~ 443 K，拟合航空润滑油 4050 密度、导热率、定压比热容、动力粘度随温度变化的曲线如图 3 所示。

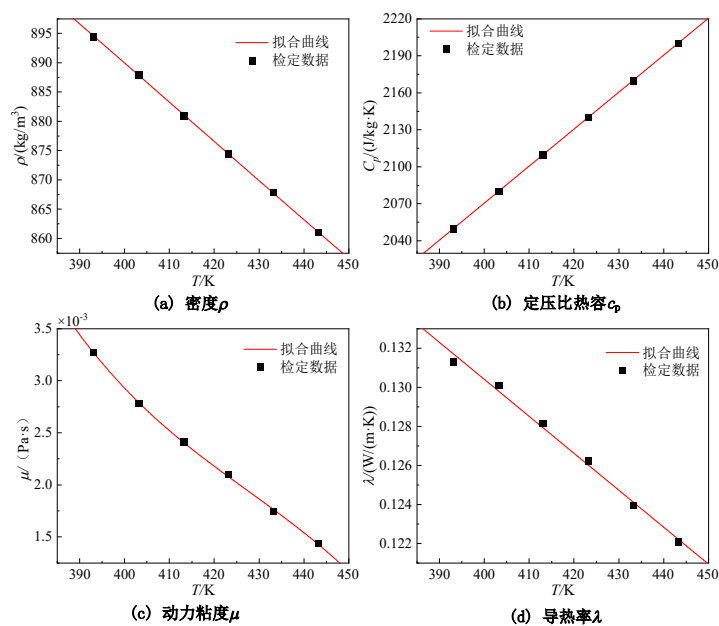


图 3 检定航空润滑油 4050 物性拟合结果

1.2 条件假设及控制方程

本文所研究的流动来说，微通道换热器通道当量直径约 0.38 mm，流动工质满足连续介质假设^[6]，流动换热过程仍满足 N-S 方程、导热方程适用范围，可以用来描述本研究的流动与传热过程，为了在不影响精度的前提下简化计算，做出如下假设：

- (1) 通道内的流体为单相且流体为不可压缩流体；
- (2) 取航空燃油 RP-3、航空润滑油 4050 作为工质流体，基本热物性参数如密度、定压比热容、粘度、导热率为温度的单值函数，换热器整体固体材质为不锈钢，流动工质不发生突变，热物性通过通道内平均温度描述；
- (3) 忽略通道内流动换热过程中受到的重力和辐射传热因素；
- (4) 通道内流动与传热过程均为稳态过程；
- (5) 通道内固液耦合壁面处不存在速度滑移和温度跳跃。

此外，研究过程中控制方程为如下所示^[7]：

连续性方程：

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

动量方程：

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial \tau} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ \rho \left(\frac{\partial v}{\partial \tau} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ \rho \left(\frac{\partial w}{\partial \tau} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

能量方程：

$$\rho c_p \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \left(\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (3)$$

式中： μ 为流体的动力粘度 $\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$ ； u 、 v 、 w 表示沿 x 、 y 、 z 三个不同方向的速度， m/s ； c_p 表示流体的等压比热容， $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ 。 ρ 表示流体密度， kg/m^3 ； λ 为流体的导热系数， $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 。

2 微通道换热器数值仿真模型

2.1 几何结构与边界条件

本研究微通道换热器如所示，由换热器结构爆炸图可清晰展示 Z 型 PCHE 的整体结构及组成部分，换热器整体由 Z 型换热热板、直通道换热冷板、换热器冷热侧出入口处作用于航空润滑油 4050 和航空煤油 RP-3 汇流及分配并与换热器相焊接的四个封头以及作用于管道与换热器的连接设备法兰所组成。

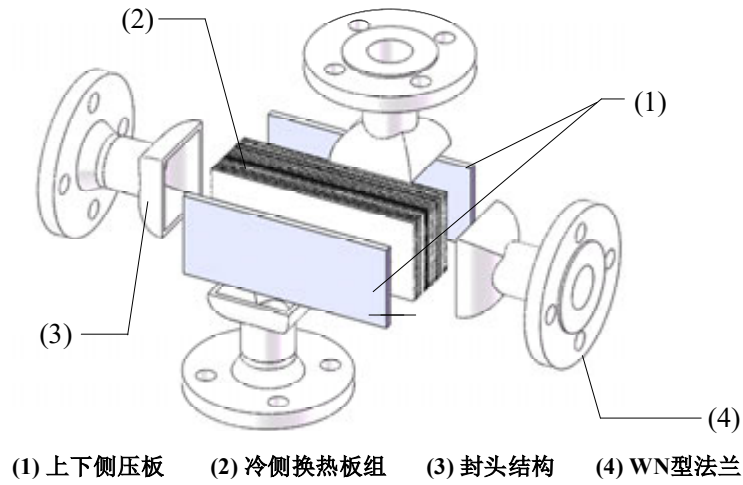


图 4 Z 型微通道换热器爆炸图

微通道换热器由多层交替布置的冷热板构成，单个换热器通道数可达数千，若进行全尺寸的数值仿真研究会导致网格数过大，计算成本难以接受。本文研究单个微通道换热单元，包含一个冷侧换热板和一个热侧换热板，每层换热板上刻有 50 个长径 0.8 mm，短径 0.6 mm 的半椭圆型微通道，换热器可划分为完全逆流段以及两个垂直交错流段。微通道换热器换热核芯结构如图 5 所示。

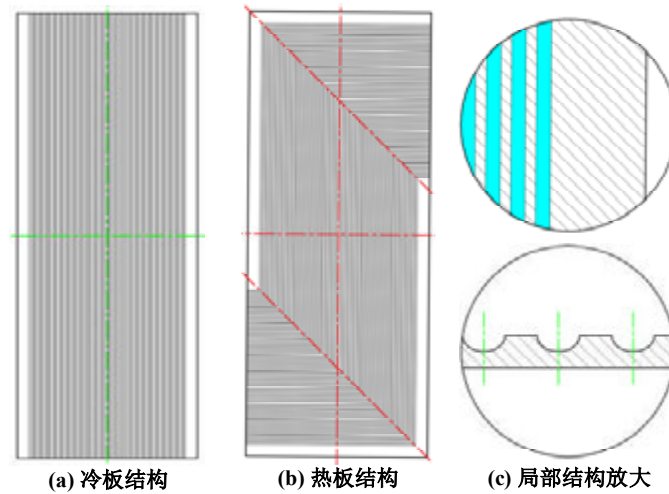
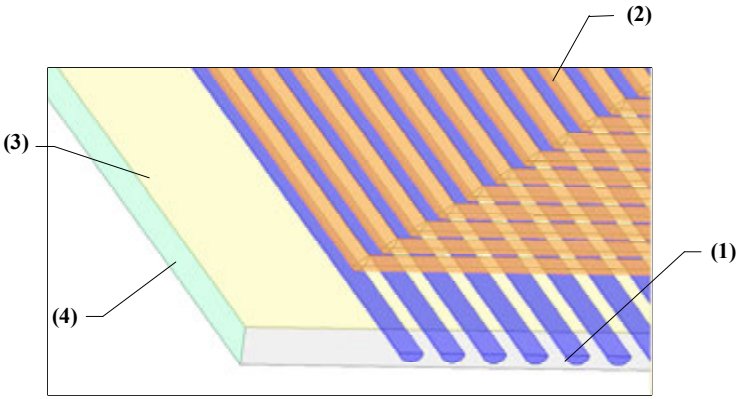


图 5 微通道换热器换热单板结构示意图

将换热器分为多个换热单元复合而成，除去上下两层与环境直接接触外，其余换热单元的换热边界条件都相同，所以在进行数值仿真研究时可以通过设置换热单元的上下两面设置为周期边界条件以对数值仿真进行合理的简化，可以在保证仿真计算精度的同时，节省大量的时间。航空煤油 RP-3 在 200℃ 以上时会氧化结焦，一般要求燃油温度小于 160℃^[14]，因此本文选择航空燃油入口温度为 160℃，表 1 和图 6 为换热单元的换热边界条件设置。

表 1 边界条件

工况	工况类型					
	$q_{v,c} / (\text{m}^3/\text{h})$	$v_{c,\text{in}} / (\text{m/s})$	$q_{v,h} / (\text{m}^3/\text{h})$	$v_{h,\text{in}} / (\text{m/s})$	$T_{c,\text{in}} / (\text{K})$	$T_{h,\text{in}} / (\text{K})$
1	1.5	0.8506				
2	2	1.1342				
3	2.5	1.4177			293.15	
4	3	1.7012	2	1.1564	~	433.15
5	3.5	1.9848			365.15	
6	4	2.2683				



(1) 冷侧速度入口 (2) 热侧速度入口 (3) 周期边界 (4) 自然对流

图 6 微通道换热器换热单元及边界类型

2.2 网格无关性及算例验证

根据设定的入口流量进行计算，所有工况的 Re 均小于 2300，选择层流求解模型，选择二阶迎风的 $Couple$ 算法，控制残差在 1×10^{-6} 以内，设置迭代步数为 1000 步，以防止局部收敛。图 7 为网格无关性验证结果，可以看出在网格数量超过 2200 万后，网格数量对计算结果影响可忽略不计，选择网格数量为 2370 万的网格模型展开数值仿真研究。

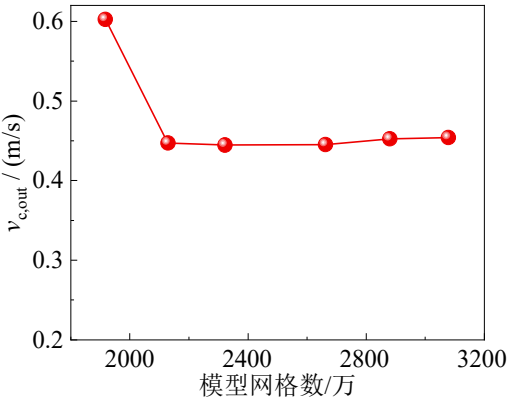


图 7 网格无关性验证

为了验证本研究数值仿真模型,采用与本文同样的研究方法对 Chen^[18]等研究结果进行比较,模型同样为微通道换热器,采用去离子水为流动工质,入口温度为 20℃,入口速度 3 m/s,底部热流 30 W/cm²K,残差设置为 10⁻⁶,迭代步数 4000 步。根据数值仿真研究结果可看出,数值仿真的 Nusselt 数与文献数据结果趋势相同且吻合良好,证明本文的模型研究方法准确且具备可靠性。

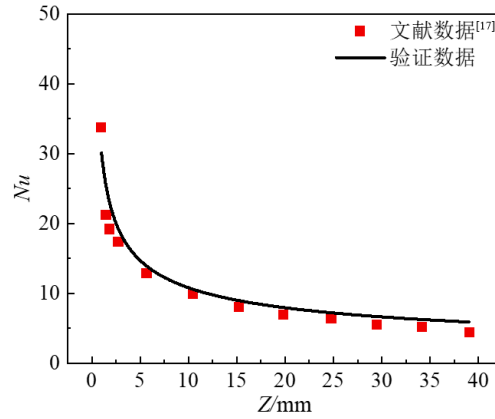


图 8 算例验证对比结果

2.3 性能评价指标

换热器的评价指标主要有流动特性与传热特性两个方面^[19],两者为拮抗关系^[20],优化流动特性指标的过程中会对传热特性指标产生恶化效果,如何在流动特性与传热特性之间找到平衡以实现微通道换热器在尽可能小的压降下表现最大的换热效率是研究的重点。

最直观的流动指标为通道进出口的直接测量压力值,通过计算微通道换热器的进出口压力差值,可以得到流经换热器后流动工质的压力损失。

$$\Delta p = p_{in} - p_{out} \quad (4)$$

Re^[23]雷诺数用于微通道换热器内流动状态的评判标准,其表示通道内流动工质的惯性力和粘性力的比值,是微通道换热器流动与换热的重要影响因素。

$$Re = \frac{\rho d_h v}{\mu} \quad (5)$$

$$d_h = \frac{4A_c}{P} \quad (6)$$

式中: ρ 表示流体密度, kg/m³; μ 为流体的动力粘度 kg/(m·s); d 表示微通道换热器的当量直径, P 表示 PCHE 通道的湿周, m; A_c 表示 PCHE 通道截面积, m²。

范宁摩擦因数^[23]用来衡量流道粗糙度对 PCHE 内流动特性与传热特性的影响程度,范宁摩擦系数 f 和达西摩擦系数都被广泛用于流动传热领域。

$$f = \frac{(\Delta P/L)D_h}{2\rho V^2} \quad (7)$$

式中: f 表示范宁摩擦系数; L 表示通道长度, m。

微通道换热器的换热量是评价换热器换热性能的重要指标，他代表着微通道换热器的换热能力，换热过程的换热量可通过能量守恒计算：

$$Q = \dot{m}_c C_{p,c} (T_{c,out} - T_{c,in}) = \dot{m}_h C_{p,h} (T_{h,in} - T_{h,out}) \quad (8)$$

式中： C_p 为流体的定压比热容， $J/(kg \cdot K)$ 。

努塞尔数 Nu ^[24]通常用于表示对流换热的强度，其物理意义是流体在壁面上的无量纲温度梯度：

$$Nu = \frac{hd_h}{k_f} \quad (9)$$

式中： k_f 表示流体的导热系数， $W/(m \cdot K)$ 。

3 微通道换热器流动与换热数值研究

3.1 微通道换热器流动特性

图 9 (a)所示为换热单元数值仿真的对于航空燃油 RP-3 不同雷诺数 Re 和不同入口温度下的压力损失分布，可以分析得出，随着航空燃油 RP-3 的雷诺数 Re 增大，会显著增大冷侧压力损失。一方面由于摩擦阻力与速度呈现平方关系，流量的变化会导致速度的变化，进而导致压降急剧变化；另一方面，随着航空燃油 RP-3 的入口流量的增加，航空燃油 RP-3 的出口温度下降，导致航空燃油 RP-3 粘度的增加，进一步提高压力损失。

此外还可以看出，随着航空 RP-3 入口温度的上升，流经换热器的压力损失逐渐降低，这是因为随着入口温度的增加，微通道换热器的冷侧通道平均温度不断上升，致使航空燃油的粘度不断下降。冷侧的压力在流量下降的情况下，压力损失变化趋势逐渐变缓，当通道内流量下降时，航空燃油 RP-3 出口温度上升，通道内的平均温度逐渐增大，而航空燃油 RP-3 的粘度随着温度增加逐渐降低，且粘度随温度的变化速率越来越小，导致压力损失随温度的增大下降趋势变缓，说明高入口温度更有利于减小压力损失。

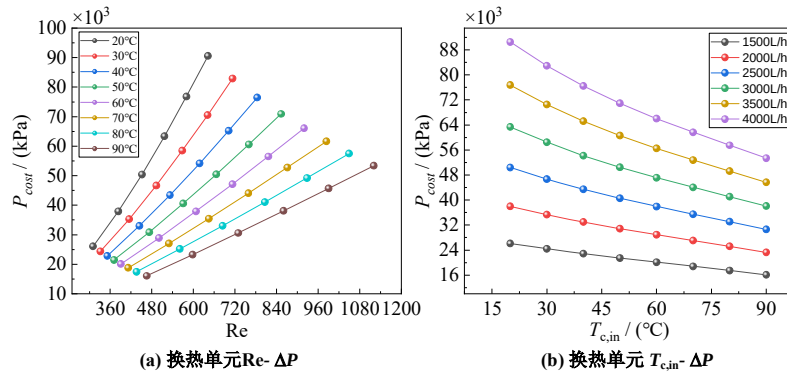


图 9 冷侧换热工质压降

由图 10 所示为不同航空燃油 RP-3 入口流量和不同入口温度下的范宁摩擦因子的变化曲线。可看出，增大航空燃油 RP-3 的入口流量，摩擦因子呈现下降趋势，这是因为虽然压力损失随着航空燃油 RP-3 的入口流量的增大而增加，但通道内速度的增大幅度更加剧烈，使得范宁摩擦因子随入口流量的增大而下降，同时可以看出，随着航空燃

油 RP-3 的入口温度不断增高, 摩擦因子 f 呈现下降趋势, 这是因为在控制通道入口流量恒定的情况下, 入口速度 $v = q_v/A_c$ 并不随温度发生变化, 而燃油的动力粘度随着温度上升而下降, 所以摩擦因子 f 也呈现下降趋势。根据 Re 对范宁摩擦因子进行拟合, 计算出 $R^2 = 0.99707$, 说明 Re 对范宁摩擦因子的拟合结果十分良好, 关系式如下式:

$$f = 0.165 - 7.77 \times 10^{-4} \cdot Re + 1.85 \times 10^{-6} \cdot Re^2 - 2.35 \times 10^{-9} \cdot Re^3 + 1.53 \times 10^{-12} \cdot Re^4 - 4.03 \times 10^{-16} \cdot Re^5 \quad (10)$$

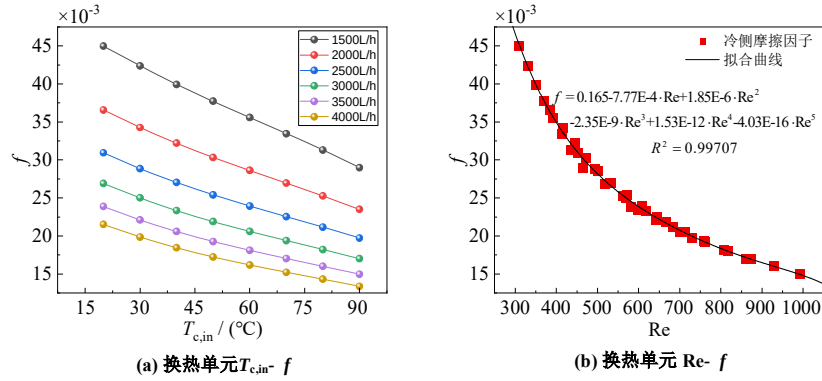


图 10 换热工质流动摩擦系数

3.2 微通道换热器传热特性

换热单元冷热侧出口温度数值仿真结果如图 11 所示, 随着航空燃油 RP-3 的入口温度不断增大, 冷热侧出口温度都呈现逐渐增大趋势。随着航空燃油 RP-3 的入口温度的增大, 冷侧通道的平均温度上升, 使航空燃油的密度下降, 同时冷热侧的温差逐渐减小, 虽然定压比热在工况内呈现随温度上升而增大, 但当三者同时作用时, 整体表现则为换热强度下降, 致使航空润滑油的出口温度升高呈现上升趋势。

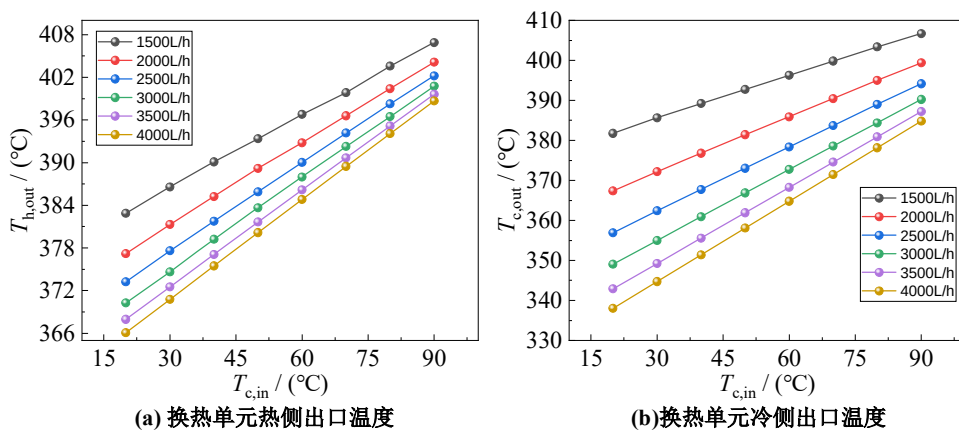


图 11 换热单元冷热侧出口温度数值仿真结果

同时也能看出, 当固定入口温度时, 随着航空润滑油 RP-3 的入口流量增大, 冷热侧的入口温度都呈现下降趋势, 这是因为, 随着航空燃油 RP-3 的入口流量增大, 换热

器换热强度增大，对于航空润滑油侧由于其入口流量未发生改变，会被冷侧航空燃油带着更多热量，使其出口温度下降，而对于航空燃油，虽然换热强度增大，但由于其入口质量流量增大，冷侧航空燃油的热容增大幅度更大，单位质量流量获得的热量减小，即冷侧出口温度呈现下降趋势，而冷侧换热强度增强也会导致热侧换热量更大，使得热侧出口温度也同样呈现下降趋势。

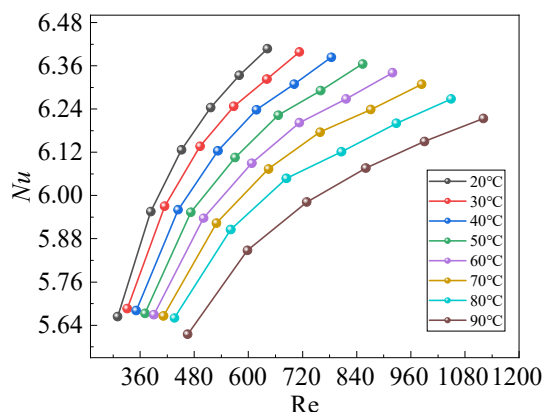


图 12 换热单元 Nu 分布

换热单元 Nu 分布如图 12 所示，努塞尔数 Nu 随着 Re 的增大而逐渐增大，因此增大 Re 可以增强换热的强度，但还发现 Nu 随 Re 的增长幅度会随着入口温度的增加而逐渐变缓，这是由于入口温度的增加，使得冷热流体的换热温度差下降，从而削弱了因 Re 的增加而导致的换热强度的增加。此外，Nu 随着温度呈现先增后减的趋势，在 30°C 附近处出现了 Nu 拐点，由于在低温工况(20°C ~ 30°C)时 Nu 随着温度的变化趋势慢于随 Re 的变化趋势，使得在低温时 Nu 随着 Re 的先呈现增大趋势，但之后 Nu 随温度的变化趋势超越 Re 所影响的变化趋势，换热量逐渐下降，导致出现了 Nu 的下降趋势。

换热单元的换热量数值仿真结果如图 13 所示，由图可知，随航空燃油 RP-3 的入口温度增大，由于航空燃油 RP-3 与航空润滑油 4050 的温差不断下降，同时随着航空燃油 RP-3 的入口温度增大，冷热两侧的出口温度也都逐渐增大，使两者密度也呈现下降趋势，削弱了换热过程强度，使换热量逐渐下降。

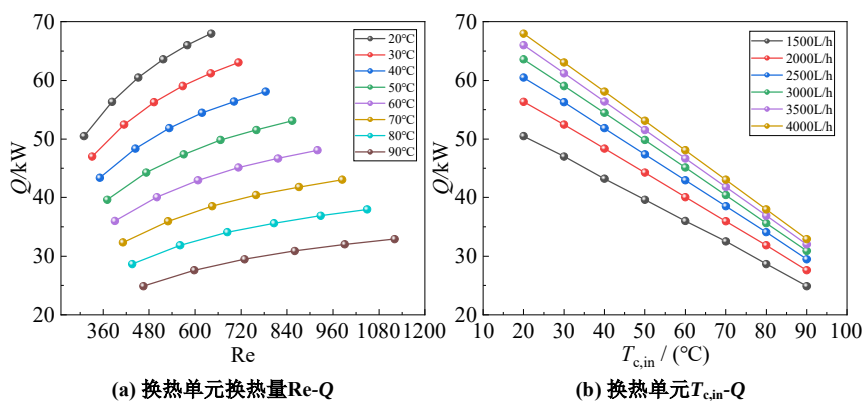


图 13 换热单元无量纲热参数分布

将航空燃油 RP-3 的入口温度固定，也可以看出随着航空燃油的 Re 增加，换热量呈现增长趋势，但随着入口温度的上升，冷热两侧换热温差开始下降，使换热量的增长率逐渐平坦，平衡了换热量受 Re 的影响因素，但总体趋势还是呈现上升。根据分析，增大了航空燃油的 Re 即增大了 PCHE 内航空燃油 RP-3 的速度，也就增大了航空燃油 RP-3 在通道内流动过程的扰动程度，导致换热量显著增大，说明更低的入口温度和更快的入口速度即更高的入口流量有利于换热核芯的换热过程，但流动特性与传热特性相互制衡，更低的入口温度会因为增大冷热侧流动工质的温差增强传热特性，但也会使冷热侧流动工质的出口温度下降，增大了冷热侧流动工质的粘度，使微通道换热器的流动特性恶化。

3.3 振动强化换热研究

在高超飞行器飞行过程中，由于发动机、气流对机体的冲击等因素，势必会导致微通道换热器工作在复杂的振动运动状态下。振动会不断对流动过程中形成的边界层造成破坏，边界层在不断被破坏和流动的过程不断增厚稳定的循环中，使之无法形成稳定的较厚的边界层，从而强化换热器实际应用过程中的传热效果。

徐孝诚^[25]等人针对飞行器的随机振动现象的响应展开实验与预测研究，根据其实验研究所施加的随机振动的工况得到图 14 所示的加速度功率谱密度。发现功率谱密度图中的峰值集中出现在 300 ~ 800 Hz 的振动工况，因此本文选择这一频率范围作为研究对象。则位移幅值设定为 3 mm ~ 5.5 mm，加速度幅值均为 10 个重力加速度，位移方向沿 z 方向与流动方向垂直，并以入口温度 60℃、入口流量 2 m³/h 的工况为无振动对照工况，利用 Fluent UDF 功能对其施加 z 方向的速度，使其以式 (11) 的运动规律进行震动运动，具体工况边界条件设定如表 2 所示。

$$Z = A \sin(2\pi ft) \tag{11}$$

表 2 振动工况边界条件分布

工况	工况类型			
	$T_{in,c} / (^{\circ}\text{C})$	$q_{v,c} / (\text{m}^3/\text{h})$	频率/Hz	幅值/mm
频率特性 研究	1	60.0	2.0	300.0
	2			400.0
	3			500.0
	4			600.0
	5			700.0
	6			800.0
振幅特性 研究	1	60.0	2.0	300.0
	2			300.0
	3			300.0
	4			300.0
	5			300.0
	6			300.0

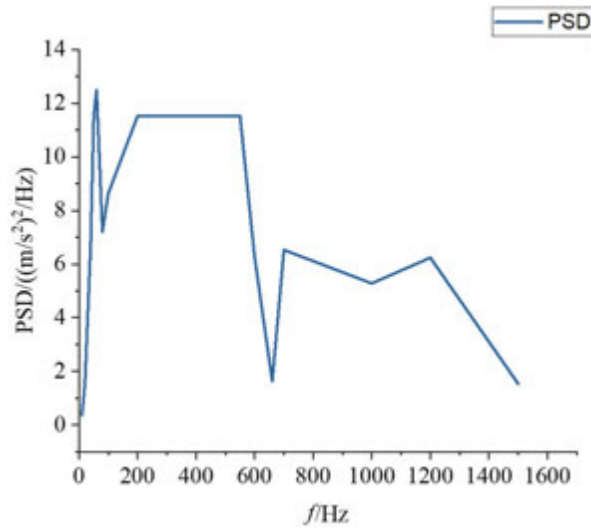


图 14 随机振动试验时实际加在飞行器的加速度功率谱

图 15 (a)给出了在给定振动位移振幅为 3 mm 时不同频率的换热效果,从图中发现当振动频率不断增大时, $T_{c,out}$ 也逐渐上升,同时 PCHE 内的对流换热系数也逐渐增大,在 300 Hz 时对流换热系数升高了 3.2%,在 800 Hz 时对流换热系数增强了约 37.4%,说明振动能够有效强化对流换热,且频率对强化效果有着重要影响。

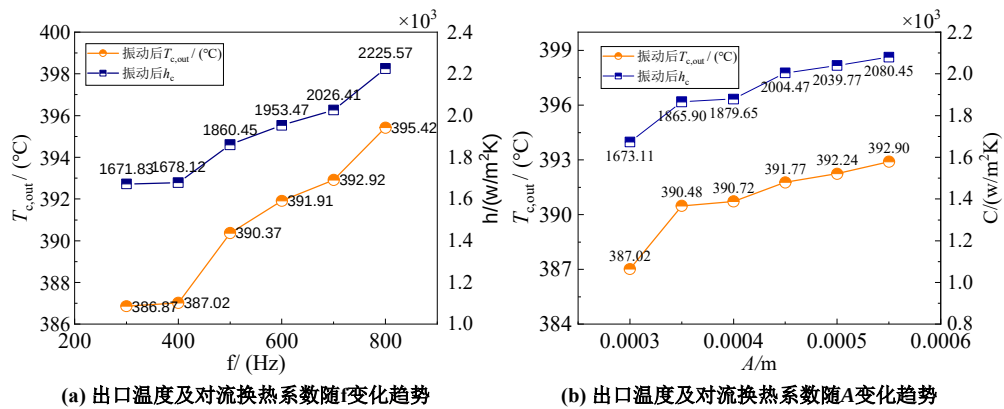


图 15 频率、振幅对换热影响趋势

图 15 (b)表示了固定频率 400 Hz 时不同振动位移振幅时的换热效果,当保持频率不变,逐渐增大振动位移振幅, $T_{c,out}$ 和对流换热系数随之增大,当振动位移幅值为 5.5 mm 时强化换热效果最强,其对流换热系数提高了约 23.7%,在位移幅值为 3 mm 时强化换热效果最差,对流换热系数仅提高了约 1.5%。

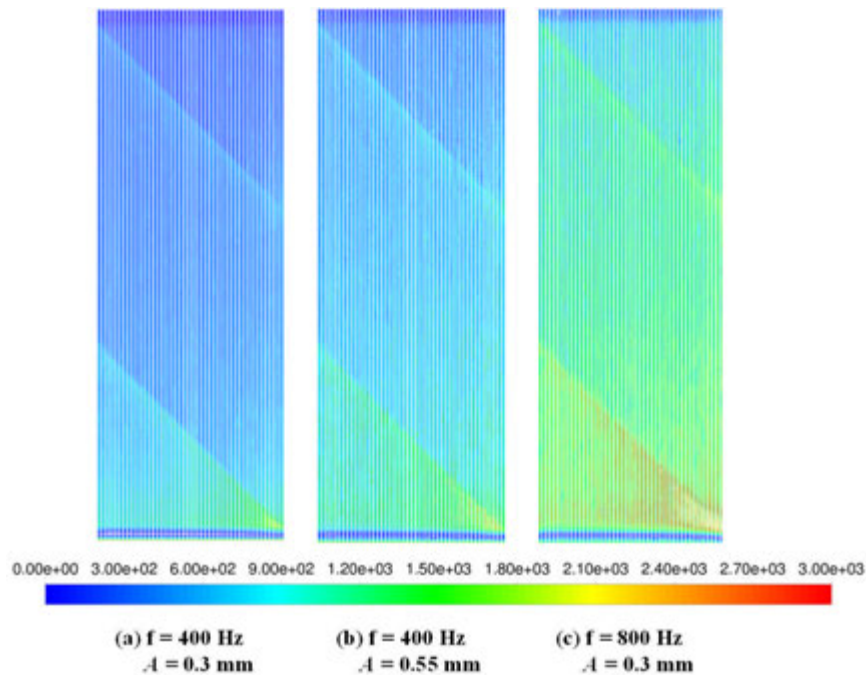


图 16 频率、振幅对对换热系数影响云图

从图 16 可以看出，在高频率、以及高振动位移振幅时，流体在通道内的对流换热系数明显增大，且在通道转角以及逆流温差大的位置，也会出现对流换热系数有小幅增大的现象，这是由于通道的转角增强了流动扰动，而在温度差大的位置也会存在强化传热的效果。综上所述，振动工况可以有效增强通道内的换热效果，提高通道内的对流换热系数，振动的频率和振动幅度都对强化换热有明显的作用。

4 结 论

随着高超速飞行器性能的提升，飞行器热浸泡带来的问题和弊端逐渐显现，为保障飞行器的安全稳定运行，针对飞行器的热管理需求展开研究，航空燃油作为飞行器热管理热沉的中流砥柱，改善燃滑油换热器的综合性能尤为重要，本文以飞行器热管理为研究背景，针对飞行器的热管理系统，尤其是实际应用过程中处于复杂振动环境下的燃/滑油换热器展开数值仿真研究，探究振动作用下微通道换热器流动、传热特性，得出以下结论：

(1) 基于测定的航空燃油 RP-3 以及航空润滑油 4050 物性参数，建立了航空燃油 RP-3 和航空润滑油 4050 的物性模型；

(2) 提出一套针对微通道换热器流动换热过程的数值仿真方法，根据换热器性能评价指标对微通道换热器数值仿真研究的流动特性、传热特性进行评估分析，对性能指标随工况、物性的变化产生的影响规律进行详细分析，对出现流动换热特性规律现象展开讨论，做出合理解释，揭示了通道内冷热工质在 PCHE 内的流动特性、换热特性；

(3) 开展微通道换热器振动强化换热研究，分析了飞行器随机振动加速度功率谱密度，建立了一套微通道换热器振动强化换热数值模拟模型，开展了多频率、多幅值的振

动强化换热模拟研究, 得到了振动的频率以及振动幅值对微通道换热器的影响规律, 实现了最高 37.4% 的对流换热系数提升。

参考文献

- [1] Van Heerden A S J, Judt D M, Jafari S, et al. Aircraft thermal management: Practices, technology, system architectures, future challenges, and opportunities. *Progress in Aerospace Sciences*, 2022, 128: 100767.
- [2] Lv Y G, Zhang G P, Wang Q W, et al. Thermal Management Technologies Used for High Heat Flux Automobiles and Aircraft: A Review. *Energies*, 2022, 15(21): 8316.
- [3] Dong Y W, Wang E T, You Y C, et al. Thermal Protection System and Thermal Management for Combined-Cycle Engine: Review and Prospects. *Energies*, 2019, 12(2): 240.
- [4] Koeln J P, Pangborn H C, Williams M A, et al. Hierarchical Control of Aircraft Electro-Thermal Systems. *Ieee Transactions on Control Systems Technology*, 2020, 28(4): 1218-32.
- [5] Zhuang L, Xu G, Dong B, et al. Study on performance and mechanisms of a novel integrated model with Power & Thermal Management system and turbofan engine. *Applied Thermal Engineering*, 2023, 219: 119481.
- [6] Li D, Dong S, Wang J, et al. Thermal dynamics and thermal management strategy for a civil aircraft hydraulic system. *Thermal Science*, 2020, 24(4): 2311-8.
- [7] Guo L, Pang L P, Zhao J Q, et al. Optimization of Power and Thermal Management System of Hypersonic Vehicle with Finite Heat Sink of Fuel. *Energies*, 2022, 15(15): 5332.
- [8] Garcia-Hernando N, Acosta-Iborra A, Ruiz-Rivas U, et al. Experimental investigation of fluid flow and heat transfer in a single-phase liquid flow micro-heat exchanger. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2009, 52(23-24): 5433-46.
- [9] Kandlikar S G. A Roadmap for Implementing Minichannels in Refrigeration and Air-Conditioning Systems—Current Status and Future Directions. *Heat Transfer Engineering*, 2010, 28(12): 973-85.
- [10] Peng Y, Li Z B, Li S B, et al. The experimental study of the heat transfer performance of a zigzag-serpentine microchannel heat sink. *International Journal of Thermal Sciences*, 2021, 163: 106831.
- [11] Cui H C, Lai X T, Wu J F, et al. Overall numerical simulation and experimental study of a hybrid oblique-rib and submerged jet impingement/microchannel heat sink. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 167: 120839.
- [12] Zhai Y L, Xia G D, Li Z H, et al. Experimental investigation and empirical correlations of single and laminar convective heat transfer in microchannel heat sinks. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2017, 83: 207-14.
- [13] Tan H, Wu L W, Wang M Y, et al. Heat transfer improvement in microchannel heat sink by topology design and optimization for high heat flux chip cooling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 129: 681-9.
- [14] 李波, 张东辉, 洪黎. 航空发动机燃油热管理系统仿真及试验验证. *燃气涡轮试验与研究*, 2019, 32(05): 29-34.
- [15] 于维铭. 航空煤油替代燃料火焰传播速度与反应动力学机理研究. 清华大学, 2014.

- [16] Beskok A, Karniadakis G E. Simulation of Heat and Momentum Transfer in Complex Microgeometries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1994, 8: 647-55.
- [17] 陶文铨. 数值传热学. 西安: 西安交通大学出版社, 2001, 8-10.
- [18] Chen Y P, Zhang C B, Shi M H, et al. Three-dimensional numerical simulation of heat and fluid flow in noncircular microchannel heat sinks. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2009, 36(9): 917-20.
- [19] 史美中, 王中铮. 热交换器原理与设计. 南京: 东南大学出版社, 2014.
- [20] Rogiers F, Baelmans M. Towards maximal heat transfer rate densities for small-scale high effectiveness parallel-plate heat exchangers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2010, 53(4): 605-14.
- [21] Ismail M, Fartaj A, Karimi M. Numerical Investigation on Heat Transfer and Fluid Flow Behaviors of Viscous Fluids in a Minichannel Heat Exchanger. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2013, 64(1): 1-29.
- [22] Dixit T, Ghosh I. Review of micro- and mini-channel heat sinks and heat exchangers for single phase fluids. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2015, 41: 1298-311.
- [23] 陈卓如, 王洪杰, 刘全忠, 等. 工程流体力学. 北京: 高等教育出版社, 2013.
- [24] 杨世铭, 陶文铨. 传热学. 北京: 高等教育出版社, 2006.
- [25] 徐孝诚, 王成华, 韩增尧. 再入飞行器复杂结构随机振动响应分析研究. *强度与环境*, 2002, (03): 1-4.

T91 钢在 sCO₂ 含杂质环境下的腐蚀行为

刘亚飞, 肖刚, 王明选

(浙江大学, 杭州 310027)

(Tel: 13588287091, Email: 12027088@zju.edu.cn)

摘要: 本文研究了 T91 在 550 °C 和 15 MPa 下, 含 100 ppm O₂、SO₂ 或 H₂S 的超临界二氧化碳 (sCO₂) 中的腐蚀行为。结果表明, 在 sCO₂ 和含 O₂ 杂质的 sCO₂ 中的腐蚀动力学曲线均遵循抛物线规律。O₂ 略微增加了 T91 的腐蚀增重, 且由于氧分压增加, 在腐蚀外层形成了 Fe₂O₃。SO₂、H₂S 均显著加剧了 T91 的腐蚀。在含 SO₂ 杂质的 sCO₂ 中, 外层腐蚀产物为 Fe₃O₄, 内层由 Fe-Cr 尖晶石和 FeS 组成。H₂S 的存在导致外部形成 FeS 层, 内部为 Fe-Cr 尖晶石。三种杂质的存在均减少了合金基底中的渗碳。

关键词: 超临界二氧化碳, 高温腐蚀, 杂质, 渗碳腐蚀

0 前言

超临界二氧化碳 (sCO₂) 布雷顿循环系统采用高温高压 sCO₂ 作为循环工质, 具有能量转化效率高、布局简单、结构紧凑等优点, 可应用于燃煤发电、舰船发电、核能发电以及太阳能热发电等领域。作为一种先进的能量转换系统, 具有巨大的商业化潜力, 其技术可行性已经得到了世界各地许多机构的论证, 如美国桑迪亚国家实验室, 柏克德船舶推进公司, 中国核动力研究所等。

sCO₂ 布雷顿循环系统中, 回热器、涡轮等关键部件的工作温度和压力分别在 400-800 °C 和 8-30 MPa^[1]。在高温、高压 sCO₂ 环境中, 金属材料的稳定性对于 sCO₂ 发电系统的长周期安全稳定运行至关重要。许多机构开展了在 sCO₂ 环境下不同类型合金的腐蚀特性研究, 如, 韩国先进科学技术研究院、美国橡树岭国家实验室、西安交通大学、华北电力大学等。结果表明, 合金在高温 sCO₂ 环境下会发生氧化和碳化腐蚀。一般来说, Cr 含量可以有效地增强合金的耐腐蚀性, 在金属表面形成保护性的 Cr₂O₃ 层; Cr 含量较低的铁基合金更容易形成 Fe₃O₄ 腐蚀外层和 Fe-Cr 尖晶石内层^[2], 这可以用空位诱导双氧化物生长模型^[3] 或可用空间模型^[4] 来解释。Liang 等人^[5-7] 进行了一系列实验, 研究不同合金 (T91、VM12、Super 304H、Sanicro 25 和 Inconel 617) 在高温、高压 sCO₂ 环境中的氧化和渗碳行为。Gheno 等人^[8] 基于平衡计算提出了一个有效的热力学模型来描述 Fe-9%Cr 合金的渗碳行为。Young 等人^[9] 提出了一个用来描述马氏体 9-12% Cr 钢在 550 °C 富 CO₂ 氛围中的非稳态渗碳动力学模型。

需要指出的是, CO₂ 工质在生产过程中或动力系统长期运行后, 不可避免的会混入一种或多种杂质气体, 如 CO、O₂、SO₂、H₂S、NO₂ 和 H₂O 等, 这些杂质气体可能会严重影响高温、高压环境下金属管道或关键部件的腐蚀速率, 影响设备和管道的使用寿命, 进而对动力循环系统的长周期安全运行产生严重威胁。相关研究表明, SO₂ 的存在降低了 Fe-9%Cr 钢的渗碳程度, 但并未显著影响氧化速率^[10], 而 H₂O 的存在亦会降低氧化

层中的碳活性 [11]。Oleksak 等人 [12-14]对铁基合金在含杂质的 CO₂ 中的氧化和渗碳行为进行了系统的实验研究。研究发现, 在 550-600 °C 范围内, 当在含有 SO₂ 的 sCO₂ 中加入 H₂O 和 O₂ 杂质后对氧化几乎没有影响。目前, 关于杂质对合金在高温、高压 sCO₂ 中腐蚀影响的研究还很有限, 特别是含硫杂质的影响, 如, SO₂ 和 H₂S 等。因此, 亟需开展相关研究, 以更好地了解杂质对金属材料腐蚀的影响, 有利于制定相应的材料选择策略和杂质控制标准。本文研究了耐热钢 T91 在 550 °C 和 15 MPa 下暴露于含 O₂、H₂S 或 SO₂ 杂质的 sCO₂ 环境下的腐蚀行为。

1 实验方法

1.1 试样

T91 是 sCO₂ 循环系统的潜在候选材料, 由于其良好的热强度、优良的可加工性和优越的经济性, 已广泛应用于燃煤电厂的过热器、再热器和主蒸汽管道。T91 的化学成分如表 1 所示。

表 1 T91 合金的化学成分 (质量分数, %)

材料	C	Mn	P	S	Cr	Mo	Nb	Ni	Fe	Others
T91	0.047	0.052	0.016	0.007	8.223	0.908	0.075	0.029	余量	Si:0.304 V: 0.210 N: 0.050 Al: 0.010

试样由棒状基材通过线切割方法制成, 其尺寸为 20 mm×10 mm×2 mm, 中间上部有一个直径为 4 mm 的孔。实验前依次采用 240 目、400 目、600 目、800 目、1000 目的水磨砂纸研磨试样表面。研磨后分别用去离子水、乙醇和丙酮超声清洗 5 min, 以除去试样表面杂质。然后在干燥箱中进行干燥。使用千分尺和高精度电子天平分别测量并记录腐蚀实验前试样的尺寸和质量。

1.2 腐蚀环境

为了确定 O₂、SO₂ 和 H₂S 杂质对 sCO₂ 环境下材料腐蚀的影响, 进行了四组实验: (1) 在 sCO₂ 中的腐蚀; (2) 在含有 100 ppm O₂ 杂质的 sCO₂ 中的腐蚀; (3) 在含有 100 ppm SO₂ 杂质的 sCO₂ 中的腐蚀; (4) 在含有 100 ppm H₂S 杂质的 sCO₂ 中的腐蚀。

在高纯 CO₂ (99.999%) 中并分别添加一定量的高纯度 O₂ (99.9%)、H₂S (99%) 和 SO₂ (99.5%) 来制备含有 100 ppm O₂、H₂S 或 SO₂ 的 CO₂ 混合气体。首先将容积为 40 L 的气体钢瓶抽真空; 然后, 根据环境温度和对应到的气体饱和蒸汽压制备混合气体; 最后, 使用气体分析仪 (WOST-T1800) 测定杂质的浓度。当检测到杂质浓度在 80-120 ppm 的范围时, 认为制备的 CO₂ 混合气体可用于腐蚀实验。另外, 采用电伴热的方式改善气体钢瓶内混气的均匀性。

1.3 实验装置及过程

腐蚀实验装置如图 1 所示, 该装置主要包括 CO₂ 供给系统、增压泵、反应釜、加热器、冷却水系统等。加压系统由增压泵、空气压缩机和电磁阀组成, 当压力低于一定值时, 可以实现气体自动补给。实验温度为 550±1 °C, 实验压力为 15±0.2 MPa, 平均补

气间隔约为 40 min，反应釜中的气体约每 30 h 更新一次。实验前交替使用实验工质吹扫和抽真空的方式排净釜内空气,预充压 4 MPa,以 6K/min 的加热速度将温度升高至 550℃,并将压力增加到实验压力,实验结束后采用水冷方式进行降温,气体降至室温后排出,打开反应釜取出试样进行检测。

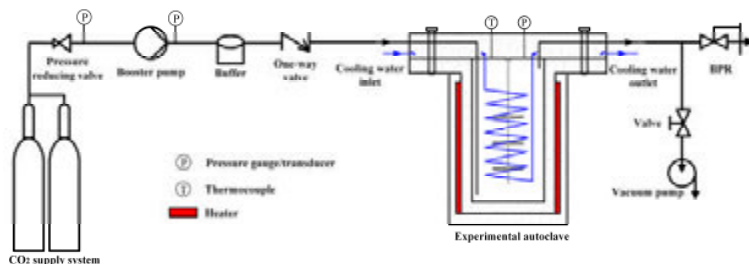


图 1 sCO₂ 腐蚀实验装置示意图

1.4 分析方法

采用腐蚀增重的方式量化腐蚀速率，取样周期为 50、125、250、500 h，并设置两组重复试样。在每个腐蚀阶段，使用分辨率为 10⁻⁴ g 电子天平测量试样增重 (JJ224BC)；然后，计算获得试样的单位面积增重数据。选择增重最接近平均增重的试样进行进一步表征。使用 X 射线衍射仪 (X-pert powder) 检测材料表面形成的腐蚀产物。使用场发射扫描电子显微镜 (SU8010) 和能谱仪 (Oxford X-max80) 进行腐蚀试样的表面和横截面形貌和元素分布分析。

2 实验结果分析

2.1 腐蚀增重和反应动力学

高温下，金属的腐蚀增重可以用式 (1) 进行拟合。

$$\Delta m/A = kt^n \quad (1)$$

其中， $\Delta m/A$ 为单位面积腐蚀增重， k 为氧化速率常数， n 为反应指数。

在 550℃ 和 15 MPa 下，四种不同的 sCO₂ 环境中进行腐蚀实验后，T91 的腐蚀增重和动力学曲线如图 2 所示。添加 100 ppm H₂S 杂质明显加速了试样的腐蚀速率。与在 sCO₂ 环境中相比，SO₂ 和 H₂S 杂质的存在使得试样腐蚀 500 h 后的增重分别增加 2.5 和 4.9 倍左右。相比之下，O₂ 杂质对腐蚀增重的影响较小。

在 sCO₂ 和含有 O₂ 杂质的 sCO₂ 环境下，T91 腐蚀增重曲线均接近抛物线 ($n \approx 0.5$)，表明氧化过程受离子扩散控制 [15]。而 SO₂ ($n \approx 0.17$) 和 H₂S ($n \approx 0.38$) 杂质存在时，腐蚀增重曲线的 k 值显著增加，而反应指数降低，说明 SO₂ 或 H₂S 杂质可能改变了 T91 的腐蚀过程，后续将进一步通过 XRD、SEM 和 EDS 进行表征分析。

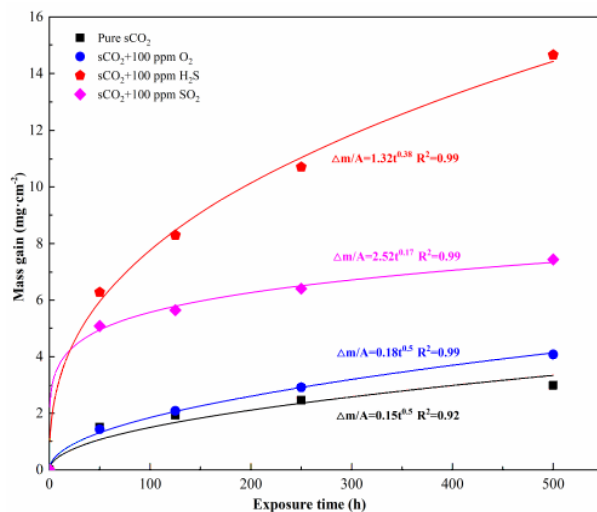


图 2 T91 在 550 °C/15 MPa 含不同杂质的 sCO₂ 中的腐蚀增重曲线

2.2 腐蚀产物表征

采用 XRD 对经过 50 h 和 500 h 腐蚀实验的腐蚀产物进行表面成分分析,结果如图 3 所示。腐蚀 500 h 后,在 sCO₂ 环境下,T91 表面腐蚀层由 Fe₃O₄ 和 Fe_{3-x}Cr_xO₄ 尖晶石组成。而在含 O₂ 的 sCO₂ 和含 H₂S 的 sCO₂ 中,腐蚀表面产物中分别检测到 Fe₂O₃ 和 FeS。有趣的是,T91 在含 SO₂ 杂质的 sCO₂ 中的腐蚀产物与在 sCO₂ 中的相同,其反应过程在后文进行分析说明。

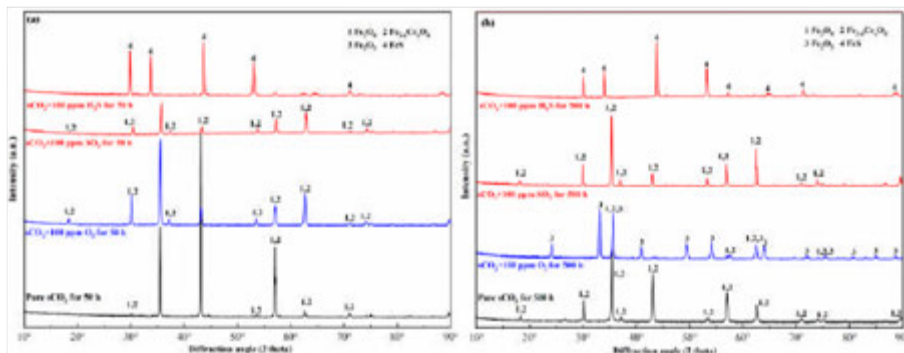


图 3 T91 在 550 °C/15 MPa 下腐蚀时长 50 h 和 500 h 的 XRD 分析结果

图 4 给出了在 sCO₂ 和含 O₂ 杂质环境中 50 h 和 500 h 实验后 T91 表面的腐蚀形貌。对于在 sCO₂ 中的腐蚀实验,如图 4 (a) 和 (b) 所示,在表面氧化膜上观察到大量孔隙;随着腐蚀时长的增加,由于氧化物的生长或/和新氧化物的形成,孔隙逐渐消失;最终,在 sCO₂ 中暴露 500 h 后,形成了一些氧化物结核。T91 在 sCO₂ 中的腐蚀机理如式 (2) - (4) 所示。如图 4 (c) 和 (d) 所示,在含有 O₂ 杂质的 sCO₂ 环境下,T91 表面形成的腐蚀产物与 sCO₂ 中略有不同,表明腐蚀过程可能由于 O₂ 杂质的存在而改变。在 50 h 腐蚀实验后发现不规则、松散的 Fe₃O₄ 相,且在 500 h 腐蚀实验后,T91 表面腐蚀产物由 Fe₂O₃ 和 Fe₃O₄ 组成。



基金项目: 浙江省杰出青年基金资助项目 (LR20E060001)

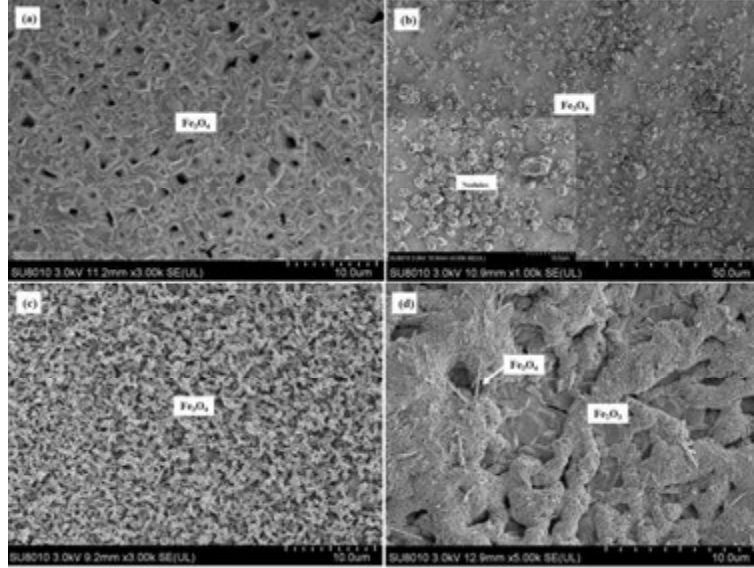
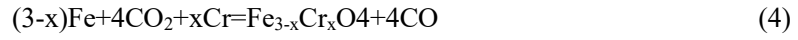


图 4 T91 暴露于 sCO₂ 中 (a) 50 h, (b) 500 h 和暴露于含 O₂ 杂质的 sCO₂ 中 (c) 50 h 和 (d) 500 h 的表面形貌图

为了说明 O₂ 杂质对 T91 腐蚀的影响, 使用商业软件 HSC 计算了 550 °C 下可能发生的化学反应的吉布斯自由能 ΔG^0 , 如式 (5) - (7) 所示, 其对应的平衡氧分压分别为 0.19×10^{-27} MPa、 0.3×10^{-26} MPa 和 0.12×10^{-16} MPa。含有 100 ppm O₂ 杂质的腐蚀环境中的氧分压远高于相应的平衡氧分压。因此, 反应 (5) 和 (6) 均可能发生, 并且随着腐蚀时间的增加, 生成的 Fe₃O₄ 会被进一步氧化成 Fe₂O₃。

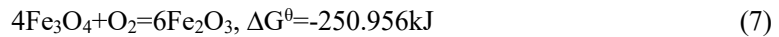
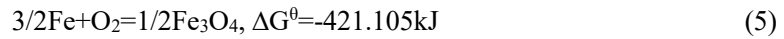


图 5 展示的是 T91 在 550 °C 和 15 MPa 的 sCO₂ 以及含有 O₂ 杂质的 sCO₂ 中腐蚀 500 h 后截面形貌及元素分布。如图 5 (a) 和 (c) 所示, 在 sCO₂ 和含 O₂ 杂质的腐蚀环境下, 腐蚀厚度分别约为 21 μm 和 30 μm, 且均形成了典型的双层氧化膜结构。不同的是, O₂ 杂质的存在对 Fe₂O₃ 的形成具有积极作用, 导致外部氧化层由 Fe₃O₄ 和 Fe₂O₃ 组成, 这一结果可从图 5 (d) 中的 EDS 线扫描结果中得知。此外, O₂ 促进了氧化物的形成, 导致氧化层变得更厚, 这与图 2 中的腐蚀增重结果一致。尽管引入 O₂ 杂质增加了腐蚀环境的氧分压, 但 T91 中较低的 Cr 含量仍无法形成保护性的 Cr₂O₃ 层, 从而加速了 T91 的腐蚀速率。

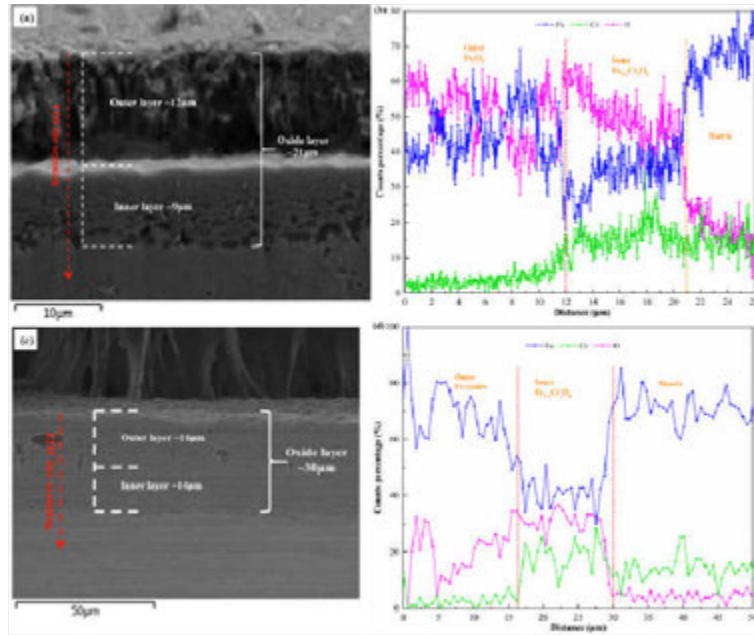
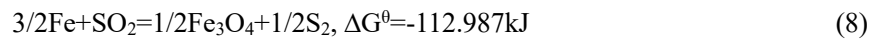


图 5 T91 在 (a), (b) sCO₂ 和 (c), (d) 含 O₂ 杂质的 sCO₂ 中, 腐蚀 500 h 后截面形貌及元素分布

图 6 给出了 T91 暴露于含 SO₂ 和 H₂S 杂质的 sCO₂ 中腐蚀 50 h 和 500 h 后的表面形貌图。如图 6 (a) 所示, 在含 SO₂ 杂质的 sCO₂ 中, 在 T91 表面观察到裂纹, 这可能归因于氧化物的快速生长 (见图 2) 和内部硫化。已有研究表明, 内部硫化会严重影响金属材料的机械强度 [16-18]。此外, 在实验冷却或加热过程中, 氧化层热膨胀系数之间的差异常常会形成额外的应力而导致裂纹的形成。结合图 3 中的 XRD 分析结果, 含 SO₂ 杂质的 sCO₂ 环境中, 表面腐蚀产物为 Fe₃O₄。从图 7 (b) 中截面元素分布可知, 在含有 SO₂ 杂质的 sCO₂ 中, T91 的内部层腐蚀产物由 Fe-Cr 尖晶石和 FeS 组成。如图 7 (a) 所示, 腐蚀层的总厚度约为 70 μm, 内层厚度约为 40 μm。基于表征结果和相关热力学计算, 有 SO₂ 参与的 sCO₂ 腐蚀机理可能为:



在初始腐蚀阶段, 类似于 CO₂ 的 SO₂ 分子与 Fe 原子反应形成 Fe₃O₄ (式 (8)), 同时反应 (2) 也会同时发生。CO₂/CO 和 S₂/SO₂ 将扩散到金属-氧化物界面, 生生 Fe_{3-x}Cr_xO₄ (式 (4)) 和 FeS (式 (9)) [19]。

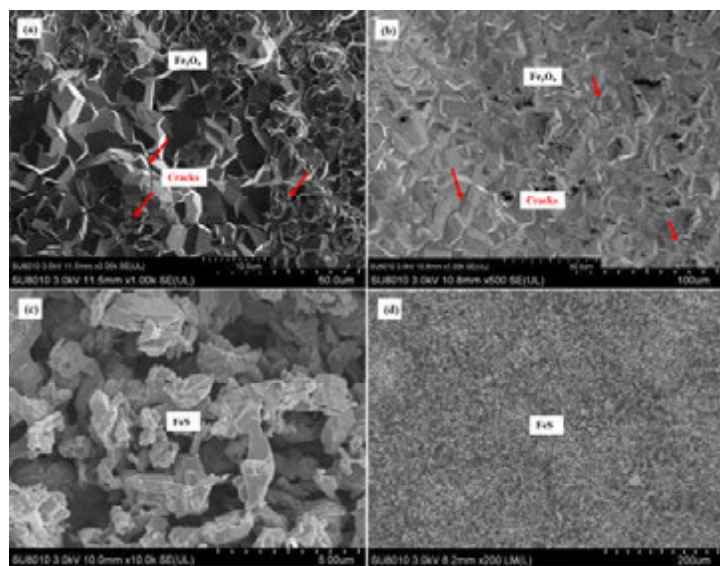


图 6 T91 暴露于含 SO_2 杂质的 sCO_2 中 (a) 50 h, (b) 500 h 和暴露于含 H_2S 杂质的 sCO_2 中 (c) 50 h 和 (d) 500 h 的表面形貌图

在 sCO_2 中加入 100 ppm H_2S 的腐蚀测试中, 如图 6 (c), (d) 和图 7 (c), (d) 所示, 在含有 H_2S 的 sCO_2 环境下, T91 表面外部腐蚀层主要是 FeS 相, 厚度约为 $80\ \mu\text{m}$, 相关反应如式 (10) 所示。此外, CO_2 分子可通过松散的硫化物参与反应, 形成内部 Fe-Cr 尖晶石。考虑到热力学上的稳定性, 使用热力学软件计算得到 $550\ ^\circ\text{C}$ 和 $15\ \text{MPa}$ 下, 100 ppm H_2S 的平衡分压 p_{O_2} 为 $1.8 \times 10^{-20}\ \text{MPa}$, p_{S_2} 为 $7.2 \times 10^{-4}\ \text{MPa}$ 。如图 8 所示, 平衡气体组成浓度位于铁硫化物和铁氧化物界面附近。因此, 实验观察到的双层硫化物/氧化物满足热力学稳定性要求。

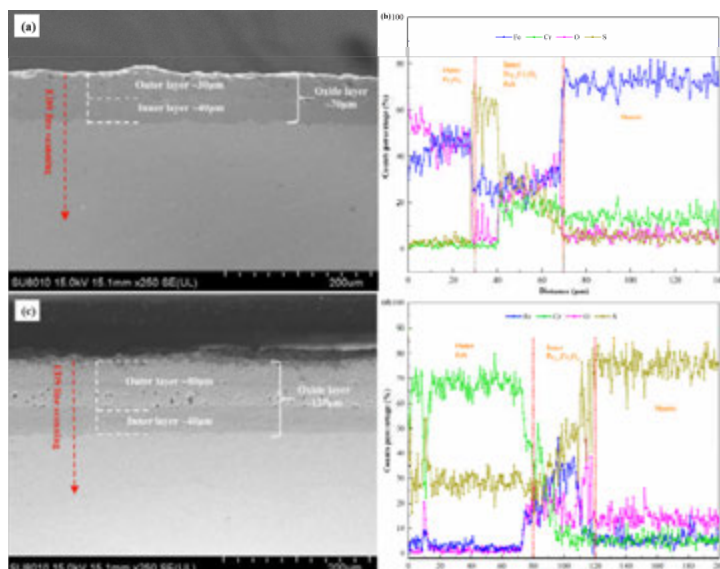


图 7 T91 在 (a), (b) 含 SO_2 杂质的 sCO_2 和 (c), (d) 含 H_2S 杂质的 sCO_2 中, 腐蚀 500 h 后截面形貌及元素分布

基金项目: 浙江省杰出青年基金资助项目 (LR20E060001)

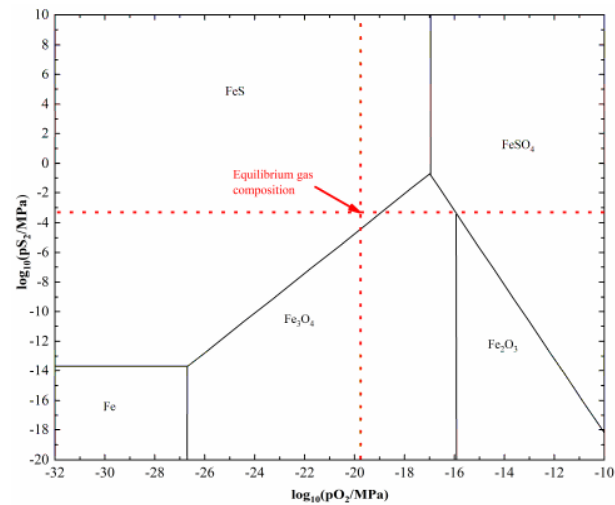
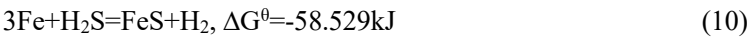


图 8 在 550℃和 15 MPa 下，使用 HSC 软件计算的 Fe-S-O 体系的平衡相图

为了确定杂质对 T91 在 sCO₂ 环境中渗碳行为的影响，使用 Murakami 试剂蚀刻样品截面以揭示碳化物。蚀剂制备和蚀刻过程与文献 [14] 中的方法一致，样品在加热的蚀剂中浸泡的时间为 60-90 s。使用 ImageJ 软件测量了金属碳化物的面积，结果如图 9 所示。结果表明，O₂、SO₂ 或 H₂S 存使得 T91 发生渗碳腐蚀的程度均有减小。如图 9（b）所示，在腐蚀 250 h 的含有 O₂ 杂质的 sCO₂ 中，几乎没有渗碳发生。这可能是因为在较高的氧分压下，CO/CO₂ 向合金基体的扩散受到抑制，降低气氛中的碳活性。根据图 9（c）和（d）的结果可知，SO₂ 和 H₂S 都提高了合金的抗渗碳性能，因为 sCO₂ 中的硫化物杂质通过竞争性吸附过程抑制碳化物到达合金表面，这与前人的研究结果 [12, 14]一致。

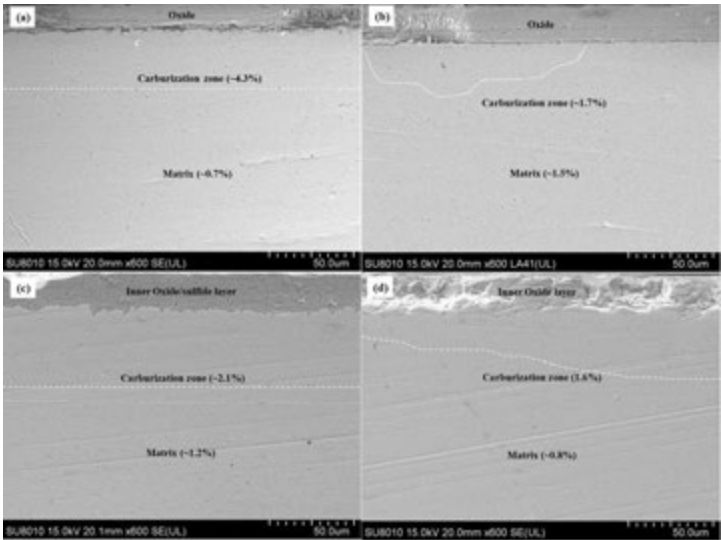


图 9 不同腐蚀环境下，腐蚀 250 h 的 T91 试样蚀刻后的截面形貌图，百分比代表使用 ImageJ 软件测量得到的碳化物面积占比

基金项目：浙江省杰出青年基金资助项目（LR20E060001）

3 结论

- 1) 在 550 °C 和 15 MPa 下, 耐热钢 T91 在 sCO₂ 环境和含有 100 ppm O₂ 杂质的 sCO₂ 环境中的腐蚀动力学曲线近似抛物线, 这表明氧化过程受离子扩散控制。添加 SO₂ 和 H₂S 杂质显著增加了腐蚀增重, 而 O₂ 杂质对腐蚀增重的影响较小。
- 2) 经过 500 h 的腐蚀实验, T91 的表面形成了双层氧化物或硫化物腐蚀层。在 sCO₂ 环境中, 形成了典型的外层 Fe₃O₄ 和内层 Fe-Cr 尖晶石结构。O₂ 杂质使得腐蚀环境中氧分压升高, 导致腐蚀外层生成 Fe₂O₃。在 sCO₂ 和含有 O₂ 杂质的环境中腐蚀 500 h 后, 腐蚀层的厚度分别为 21 μm 和 30 μm 左右。
- 3) 在添加 SO₂ 或 H₂S 杂质后, 在 T91 表面观察到了新的腐蚀产物 FeS。在含有 SO₂ 或 H₂S 杂质的 sCO₂ 环境中腐蚀 500 h 后, 腐蚀层厚度分别增加到约 70 μm 和 120 μm。在含有 SO₂ 杂质的腐蚀环境下, 腐蚀速率的加快、内部 FeS 的生成和热应力的产生可能导致材料表面裂纹的形成。与 SO₂ 杂质不同, H₂S 杂质导致外层 FeS 的形成。
- 4) 这三种杂质均在一定程度上降低了合金的渗碳程度, 这是因为气相中的碳活性受限或碳、硫竞争性吸附的结果。

参考文献

- [1] G. Manente, F.M. Fortuna, Supercritical CO₂ power cycles for waste heat recovery: A systematic comparison between traditional and novel layouts with dual expansion, *Energy Conv. Manag.* 2019, 197: 111777
 - [2] B.A. Pint, J.R. Keiser, The effect of temperature and pressure on supercritical CO₂ compatibility of conventional structural alloys, Oak Ridge National Lab, Oak Ridge, United States. Jan. 2016.
 - [3] F. Rouillard, G. Moine, L. Martinelli, J.C. Ruiz, Corrosion of 9Cr steel in CO₂ at intermediate temperature I: mechanism of void-induced duplex oxide formation, *Oxid. Met.* 2012, 77: 27-55
 - [4] D.R. Holmes, D. Mortimer, J. Newell, Discovery and assessment of accelerated corrosion in Fe-9Cr alloys and steels, *Proceedings of the British Nuclear Energy Society International Conference*, United Kingdom, Jan. 1974.
 - [5] Y. Gui, Z. Liang, Q. Zhao, Corrosion and carburization behavior of heat-resistant steels in a high-temperature supercritical carbon dioxide environment, *Oxid. Met.* 2019, 92: 123-136
 - [6] Z. Liang, Y. Gui, Y. Wang, Q. Zhao, Corrosion performance of heat-resisting steels and alloys in supercritical carbon dioxide at 650 °C and 15 MPa, *Energy*. 2019, 175: 345-352
 - [7] Z. Liang, Y. Gui, Y. Wang, Q. Zhao, High-temperature corrosion resistance of nickel-base alloy 617 in supercritical carbon dioxide environment, *Mater. Res. Express*. 2020, 7: 016548
 - [8] T. Gheno, D. Monceau, J. Zhang, D.J. Young, Carburisation of ferritic Fe-Cr alloys by low carbon activity gases, *Corros. Sci.* 2011, 53: 2767-2777
 - [9] D. Young, P. Huczowski, T. Olszewski, T. Hüttel, L. Singheiser, W.J. Quadackers, Non-steady state carburisation of martensitic 9-12% Cr steels in CO₂ rich gases at 550 °C, *Corros. Sci.* 2014, 88: 161-169
- 基金项目: 浙江省杰出青年基金资助项目 (LR20E060001)

- [10] R.P. Oleksak, J.H. Tylczak, G.R. Holcomb, Ö.N. Doğan, High temperature oxidation of steels in CO₂ containing impurities, *Corros. Sci.* 2020, 164: 108316
- [11] T. Gheno, D. Monceau, J. Zhang, D.J. Young, Carburisation of ferritic Fe–Cr alloys by low carbon activity gases, *Corros. Sci.* 2011, 53: 2767-2777
- [12] P. Huczowski, D.J. Young, T. Olszewski, A. Chyrkin, W.J. Quadackers, Effect of sulphur on the oxidation behaviour of possible construction materials for heat exchangers in oxyfuel plants in the temperature range 550-700°C, *Oxid. Met.* 2018, 89: 651-681
- [13] R.P. Oleksak, J.H. Tylczak, C.S. Carney, G.R. Holcomb, Ö.N. Doğan, High-temperature oxidation of commercial alloys in supercritical CO₂ and related power cycle environments, *Jom.* 2018, 70: 1527-1534
- [14] R.P. Oleksak, J.H. Tylczak, Ö.N. Doğan, Temperature-dependence of oxidation and carburization of Grade 91 steel in CO₂ containing impurities, *Corro. Sci.* 2022, 198: 110147
- [15] H. Yang, W. Liu, B. Gong, E. Jiang, Y. Huang, G. Zhang, Y. Zhao, Corrosion behavior of typical structural steels in 500°C, 600°C and high pressure supercritical carbon dioxide conditions. *Corros. Sci.* 2021, 192: 109801
- [16] Q.X. Zhao, Z. Zhang, D. Cheng, Y.G. Wang, X. Deng. High temperature corrosion of water wall materials T23 and T24 in simulated furnace atmospheres, *Chin. J. Chem. Eng.* 2012, 20: 814-822
- [17] S. Mrowec, K. Przybylski, Defect and transport properties of sulfides and sulfidation of metals, *High Temp. Mater. Process.* 1984, 6: 1-80
- [18] S. Mrowec, K. Przybylski, Transport properties of sulfide scales and sulfidation of metals and alloys, *Oxid. Met.* 1985, 23: 107-139
- [19] K. Chandra, A. Kranzmann, R.S. Neumann, F. Rizzo, Comparative study on high temperature oxidation of T92 steel in dry and wet oxyfuel environments, *Oxid. Met.* 2015, 84: 463-490

航天器电路板组件散热仿真与实验研究

王升, 董锋, 张立, 胡凤姣, 梁大鹏, 刘江涛

(中国空间技术研究院西安分院, 西安 710110)
(029-89252304, wangs2461@163.com)

摘要: 针对某航天器电路板组件上发热元器件的封装特点和热耗大小, 本文使用了导热支架、导热片和导热凸台等散热方法, 分析了各种散热方法的特点。通过仿真和实验研究证实使用三种散热方法后电路板组件上的发热元器件均可以满足一级降额的散热要求, 从而为航天器电子设备的热设计工作提供参考指导。

关键词: 航天器 电路板组件 散热 仿真 实验

0 前言

随着卫星功能的增加和通信容量的增大, 航天器电子设备的热耗也急剧增加, 近 5 年, 航天器电路板组件的热耗已由 30W 水平增大到 100W, 这就使航天器电子设备的散热愈加重要。航天器电子设备一般位于航天器内部, 与地面电子设备相比, 航天器电子设备散热具有以下特点: (1) 外太空没有大气, 且卫星舱内各设备表面的温度水平相当, 因而航天器电子设备以热传导为主要的散热方式, 不能选择地面设备常用的强迫风冷等对流散热措施; (2) 航天器发射后, 其内部的电子设备可维修性差, 这要求航天器电子设备散热措施具有高可靠性, 因而航天器电子设备一般多选用可靠性高的被动散热方式; (3) 航天器电子设备需进行最严苛的温度一级降额设计, 而地面设备一般不需要温度降额; (4) 散热方法选择需要兼顾航天器入轨过程中经历的严苛力学环境和航天器的工艺和重量等严格要求。航天器电子设备一般由多个电路板组件拼装固定到航天器舱板上。电子设备内部的热量通过散热措施传递到设备安装面上, 再由航天器热控系统将舱板上的热量传递到辐射散热板, 最后辐射到宇宙深冷空间^[1]。由于航天器电子设备散热方法相对传统, 其更加关注散热措施的可靠性, 因此关于航天器电子设备散热研究的相关文献较少。本文以某航天器的信号处理器电路板组件为例, 通过仿真与实验相结合的方法研究了航天器电子设备中常用的散热方法, 为同类的航天电子设备的散热设计提供参考。

1 电路板组件布局与散热方法

1.1 电路板组件布局

信号处理器的功能是将卫星接收到信号进行解码处理在传递给发射载荷。由于卫星通信容量的增大, 信号处理器的热耗也急剧增大。本文所研究的某航天器信号处理器电路板组件的主要发热元器件布局如图 1 所示, 整个电路板组件的热耗约为 110W, 其中 4 个信号处理器件 (D1~D4) 的最大热耗为 16W/个。

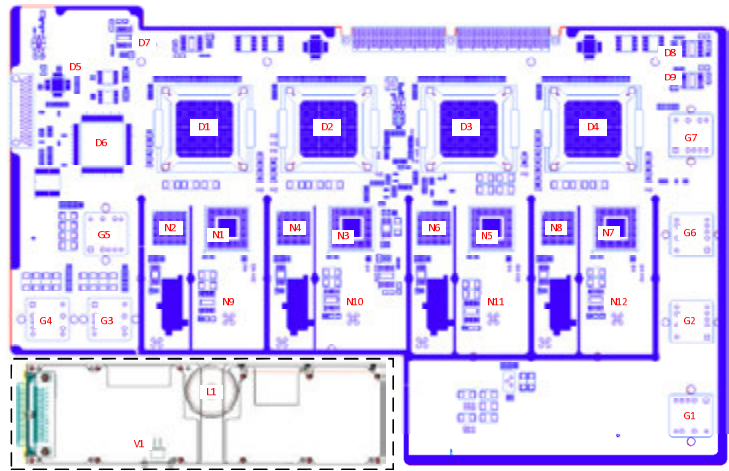


图 1 电路板组件发热器件布局

1.2 散热方法

航天器电子设备的散热方法主要以被动式散热为主，针对信号处理器电路板组件中的发热元器件的热耗及封装特点，主要采用了三种散热方法：（1）导热支架；（2）导热片；（3）导热凸台。

1.2.1 导热支架

导热支架是指将元器件安装于金属支架或设备机壳上的散热方式。如图 2 所示，由于元器件没有直接安装在电路板上，需要通过导线与电路板进行电气互连，因此这种散热方式常见于引脚较少的插装元器件，如 TO254，TO257，TO39，TO-8，自制线圈等。对于引脚较少的表贴元器件如 SMD-0.5，SMD-2 等封装元件器，也可以将器件焊接到高导热陶瓷板覆铜上，再将覆铜板组件安装到导热支架或机壳并通过在覆铜板上焊接导线与电路板互连实现器件高效散热。

信号处理器电路板上的 L1 器件为自制线圈，由于其热耗高达 2W 且器件底面不是平面，如果直接安装到电路板上，会与电路板之间存在很大的接触热阻导致器件温度较高，因此使用高导热灌封胶将器件固定到散热直接进行散热。对于 TO39 封装的器件 V1，虽然其热耗仅为 0.5W，但是如果直接安装到电路板上，器件不能像地面设备一样通过金属保护罩对流散热，只能通过 3 根可伐管腿向电路板导热，器件与电路板之间的传热热阻较大，因此本文通过将器件灌封到导热支架后，将导热支架固定到机壳上散热。

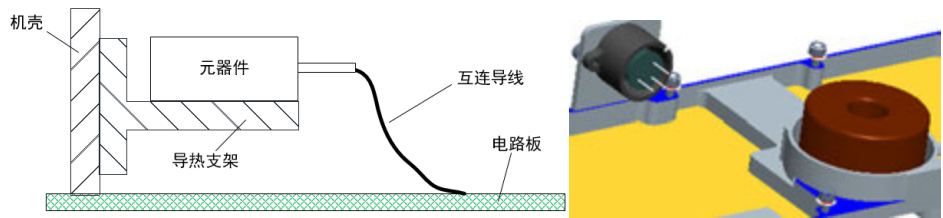


图 2 导热支架示意图

1.2.2 导热片

导热片指使用金属片一端搭接到器件顶部或底部，另一端搭接到机壳的散热方式。如图 3 所示，由于导热片形式多样，散热方法易于实施，因此这种散热方法可适用的元器件较多，如 DIP，SOP，BGA 等封装元器件。根据器件与机壳相对位置，导热片经常被设计成“C”，“L”，“Z”等形式。但是由于导热片搭接到器件时会对器件的力学性能产生较大影响，因此抗力学性能较差的元器件需要谨慎使用这种散热方式且导热片不能太厚。

针对本文电路板组件中的电源模块 G1~G7，其为 DIP9 封装，器件主要通过底部安装面散热，器件顶盖与器件热源间的热阻较大，因此在器件底部设计“L”型导热片增强器件散热。为了增强器件抗力学性能，使用 N 型卡箍对器件和导热片进行加固。

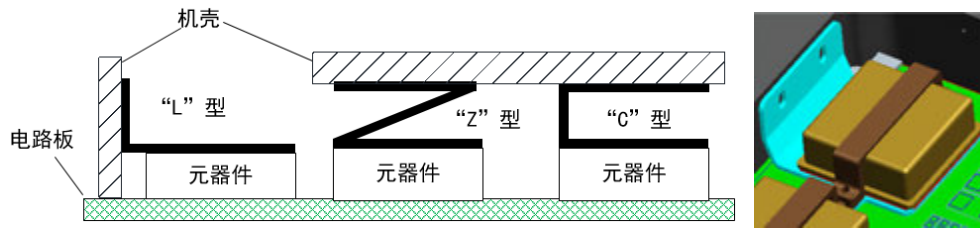


图 3 导热片示意图

1.2.3 导热凸台

导热凸台指直接在机壳或扩热板上设计凸台，并通过导热垫使凸台和器件顶面接触的散热方式。如图 4 所示，为了减小机壳或扩热板的传导热阻，可以使用平板热管、金刚石铝或高导热石墨板作为扩热板使用^[2-4]。为了防止凸台与器件不良接触使散热失效或过度接触使器件受力损伤，在设计导热凸台时需考虑器件高度偏差和导热垫压缩量^[5]。

对于本文电路板组件中热耗较大的表贴元器件 D1~D4 等通过在机壳上设计凸台从器件顶面散热，并在机壳上内嵌铜水热管以减小导热凸台到设备安装面的传导热阻。

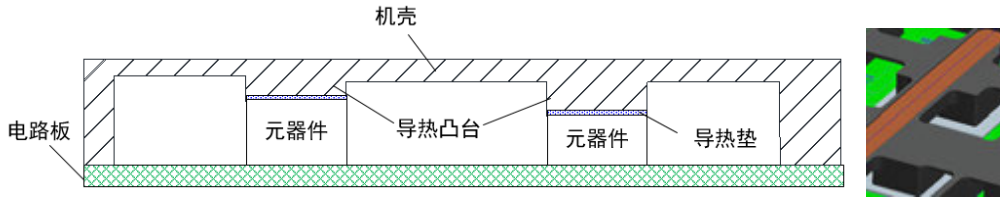


图 4 导热凸台示意图

2 仿真研究

使用 Ansys 软件对电路板组件进行稳态热仿真，确保组件中所有发热元器件均能满足温度一级降额要求。组件安装面温度为 50℃ 定温边界，由于设备为多个相同的电路板组件拼装而成，可忽略各个组件之间的传导和辐射传热，将电路板组件除安装面外的其他边界均置为绝热边界。稳态热仿真模型控制方程和边界条件如式（1）~（3）所示。

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial t}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial t}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial t}{\partial z} \right) + \dot{\Phi} = 0 \quad (1)$$

$$t = t_0 \quad (\text{组件安装面边界上}) \quad (2)$$

$$k_x \frac{\partial t}{\partial x} + k_y \frac{\partial t}{\partial y} + k_z \frac{\partial t}{\partial z} = 0 \quad (\text{其他边界上}) \quad (3)$$

式中, k_x , k_y , k_z 分别为材料在三个方向的热导率, $\dot{\Phi}$ 为单位体积的发热量。

电路板热模型通过将电路板设置为各向异性的导热体实现, 即通过电路板的覆铜层数, 覆铜厚度和覆铜面积比计算电路板的当量水平热导率和垂向热导率。元器件热仿真时对于器件厂商仅提供器件结壳热阻的元器件使用简单热阻模型, 对于厂商提供结壳热阻和结板热阻的元器件使用双热阻模型。简单热阻模型可以通过热仿真得到器件壳温, 再通过式 (4) 计算得到器件结温。双热阻模型通过在仿真模型中求解公式 (5) ~ (7) 直接得到器件壳温, 器件安装局部电路板温度和器件结温^[6]。

$$t_j = t_c + Q \cdot \theta_{JC} \quad (4)$$

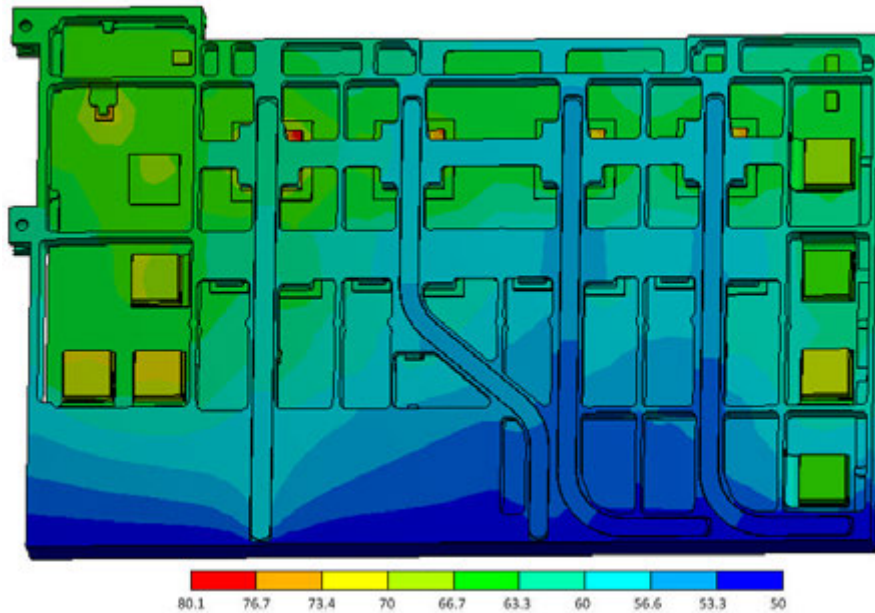
$$Q = Q_{JC} + Q_{JB} \quad (5)$$

$$t_j = t_c + Q_{JC} \cdot \theta_{JC} \quad (6)$$

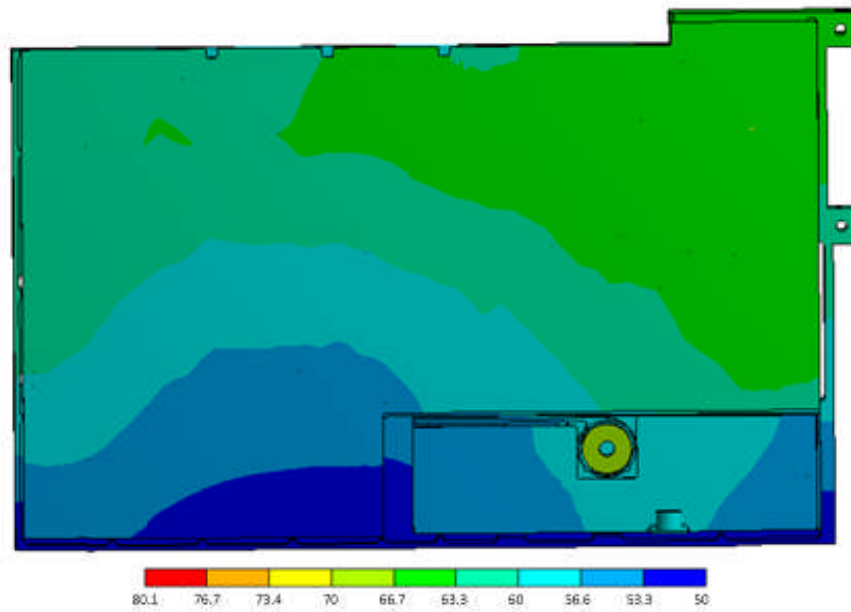
$$t_j = t_B + Q_{JB} \cdot \theta_{JB} \quad (7)$$

式中, t_j 为元器件结温, t_c 为元器件壳温, Q 为元器件热耗, Q_{JC} 为从元器件顶部散出的热量, Q_{JB} 为从元器件底部散出的热量, θ_{JC} 为器件的结壳热阻, θ_{JB} 为器件的结板热阻。

通过热仿真得到电路板组件中元器件的壳温及结温如表 1 所示, 温度分布如图 5 所示, 所有元器件温度均低于一级降额要求, 满足设计条件。电路板组件中 D5 的结温最高为 83.6℃, 距离 85℃ 一级降额要求具有 1.4℃ 的温度余量。虽然 D5 的总热耗只有 1W, 但是由于其脚印面积仅为 0.86 cm², 器件脚印热流密度较大 (约 1.2W/cm²), 且器件的结壳热阻为 10℃/W, 器件内部结壳温升较大, 最终导致器件具有较大的结温。



(a) 电路板 CS 面温度分布



(b)电路板 SS 面温度分布

图 5 电路板组件温度仿真云图

表 1 元器件热耗及温度仿真结果

位号	封装	热耗 W	热阻 $^{\circ}\text{C}/\text{W}$	壳/板温 $^{\circ}\text{C}$	结温 $^{\circ}\text{C}$
D1,D2,D3,D4	CGA1284	16*4	$\theta_{\text{JC}}=0.1$	$T_{\text{C}}=69.6$	71.6
			$\theta_{\text{JB}}=1.8$	$T_{\text{B}}=69.2$	
N1,N3,N5,N7	CGA376	3.6*4	$\theta_{\text{JC}}=0.5$	$T_{\text{C}}=64.6$	66.4
N2,N4,N6,N8	CGA255	1.4*4	$\theta_{\text{JC}}=20$	$T_{\text{C}}=63.5$	75.6
			$\theta_{\text{JB}}=14$	$T_{\text{B}}=64.2$	
N9,N10,N11,N12	FP16	1.2*4	$\theta_{\text{JC}}=1.02$	$T_{\text{C}}=64.8$	66.0
G1,G2,G3,G4	DIP9	3*4	$\theta_{\text{JC}}=3.5$	$T_{\text{C}}=71.9$	82.4
G5,G6,G7	DIP9	1.5*4	$\theta_{\text{JC}}=3.5$	$T_{\text{C}}=67.4$	72.7
D5	CFP36	1	$\theta_{\text{JC}}=10$	$T_{\text{C}}=73.6$	83.6
D6	CQFP208	0.5	$\theta_{\text{JC}}=5$	$T_{\text{C}}=67.2$	69.7
D7,D8,D9	FP16	0.3*3	$\theta_{\text{JC}}=7.8$	$T_{\text{C}}=68.1$	68.5
			$\theta_{\text{JB}}=1.4$	$T_{\text{B}}=65.8$	
L1	线圈	2	$+5^{\circ}\text{C}$	$T_{\text{C}}=68.0$	73.0
V1	TO39	0.5	$\theta_{\text{JC}}=30$	$T_{\text{C}}=65.2$	80.2

*对于热耗相同的元器件只在表中列出其最高温度

3 实验研究

热平衡实验是验证航天器热控设计的有效手段^[7]。航天器电子设备热平衡试验是模拟电子设备在外太空工作时的热环境和热载荷，通过测试电子设备主要发热元器件和散热路径的温度，验证航天器电子设备热控措施的有效性和热仿真模型的准确性。本文设计的热平衡实验测量系统如图 6 所示，由于电路板组件中使用热管，为了模拟热管在外太空微重力状态，热平衡实验时调整组件方位，使热管保持水平，避免重力增强或减弱热管的传热能力。为保证电路板组件的实验热边界和与仿真热边界状态一致，在组件两侧包裹聚酯镀铝膜，减小电路板组件向真空罐壁的辐射散热。

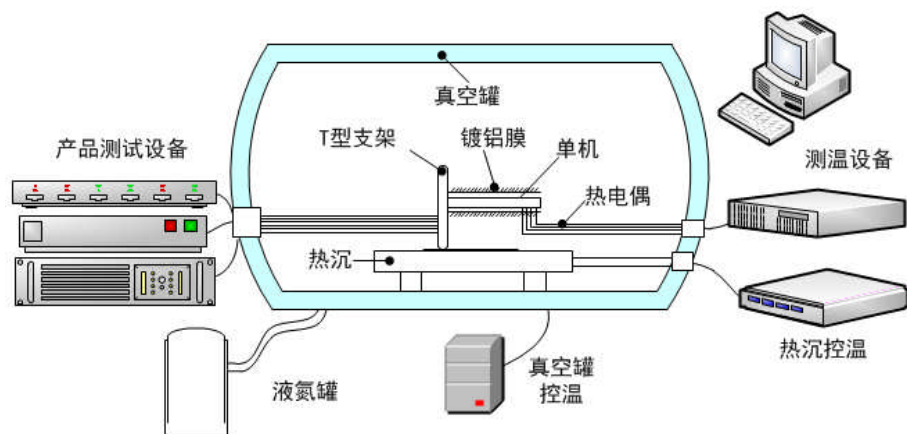
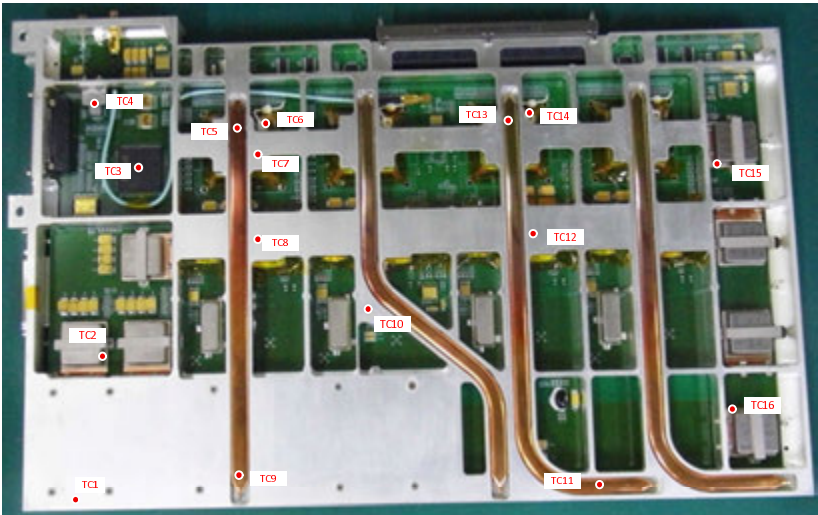
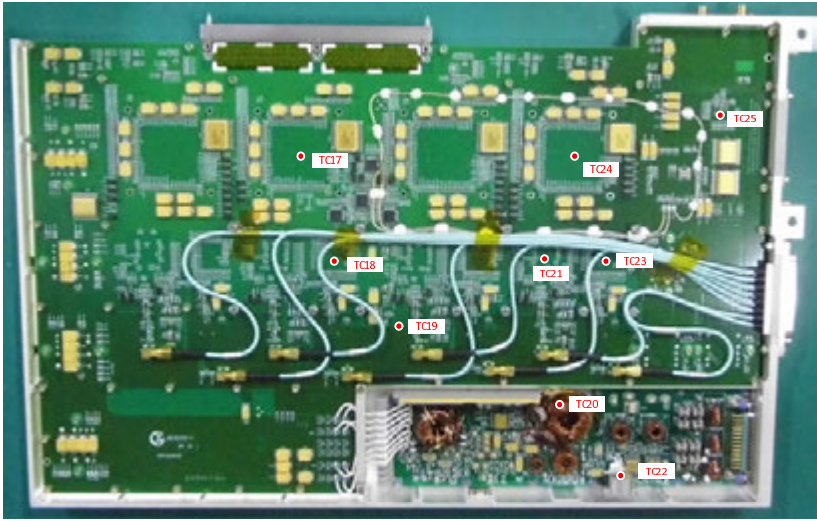


图 6 热平衡实验系统图

实验一共测试了 25 个温度点，各个温度测点的位置如图 7 所示，温度测量结果如表 2 所示。使用温度测量结果修正热仿真模型并对比相同位置的仿真温度，仿真温度与测量温度的最大偏差为 2.9°C ，平均偏差绝对值为 0.4°C ，标准偏差为 1.6°C ，说明热仿真模型的准确性，且进一步证实所有电路板组件中所有元器件均满足温度一级降额要求。



(a)电路板组件 CS 面温度测点



(b) 电路板组件 SS 面温度测点

图 7 热平衡实验温度测点布局

表 2 测量温度与仿真温度对比

测点序号	测量温度 °C	仿真温度 °C	偏差 °C
TC1	50.2	50.4	0.2
TC2	71.3	70.8	-0.5
TC3	68.4	67.2	-1.2
TC4	63.1	65.7	2.6
TC5	58.3	61.2	2.9
TC6	67.8	78.5	10.7
TC7	63.7	62.2	-1.5
TC8	61.2	60.9	-0.3
TC9	56.9	56.8	-0.1
TC10	57.9	56.7	-1.2
TC11	52.4	51.6	-0.8
TC12	57.4	56.1	-1.3
TC13	53.2	55.9	2.7
TC14	64.7	74.3	9.6
TC15	66.8	66.6	-0.2
TC16	66.5	65.4	-1.1
TC17	65.4	62.8	-2.6

TC18	61.3	59.8	-1.5
TC19	58.4	57.5	-0.9
TC20	70.7	68.1	-2.6
TC21	63.4	62.0	-1.4
TC22	63.7	64.9	1.2
TC23	65.4	64.6	-0.8
TC24	66.9	66.4	-0.5
TC25	67.1	66.7	-0.4

4 结果与讨论

航天器电子设备的热设计流程是根据电设计工程师估算的元器件热耗选择合适的器件布局和散热方法进行前期仿真和设计，在电子设备制造、组装和调试完成后实测设备热耗并通过热平衡实验测量关键部位的温度，修正热仿真模型，获取所有发热元器件的温度并总结经验为后续设备的热设计提供参考。本文的电路板组件热仿真模型已经过热平衡实验结果修正，因此对与热平衡实验结果一致性很高。

由表 2 可以看出，TC6 和 TC14 两个测点的测量温度与对应仿真温度偏差较大。这是因为 TC6 和 TC14 布置在信号处理元器件（D1，D3）的角部，而此元器件的面积较大（35mm×35mm），导致元器件热模型与实际器件物理模型在器件边缘处差异较大。一般真实元器件只有器件中心的局部发热，但是在仿真建模时不知道器件的具体发热部位大小，一般会对整个器件上均匀分布热耗，从而导致器件角部测量的温度比仿真温度低。

由于铜水热管在航天器上使用的可靠性一直得到质疑，因此铜水热管在航天电子设备中使用较少。目前仅有的报道是 NASA 在国际空间站中搭载了铜水热管，并通过实验证实了铜水热管在近地轨道运行时的热性能与地面实验相当，且铜水热管工质在轨多次凝结与解冻对铜水热管的性能没有明显影响^[8]。本文使用铜水热管增强航天器信号处理器的散热，铜水热管已经随信号处理器通过了各项地面鉴定试验。如果铜水热管的在空间应用的长期可靠性能能够在轨得到验证，那将极大的促进航天器电子设备的热控技术。

5 结 论

针对在轨长期工作的信号处理器电路板组件的散热难题，本文使用“L 型”纯铜导热片，灌封导热支架，机壳设计导热凸台并内嵌铜水热管等散热技术。通过仿真研究了电路板组件的温度分布，获取了主要发热元器件的结温。设计热平衡实验验证了仿真模型的正确性和散热方法的有效性。信号处理器电路板组件所有元器件均满足温度一级降额要求，其中元器件最高结温为 83.6℃。仿真和实验结果表明，本文针对不同的发热元器件所采用不同的散热措施是有效地，能够为同类型航天器大热耗电路板组件的散热方法提供参考。

参考文献

- [1] 童叶龙, 陶则超, 李一凡, 等. 碳基高导热材料及其在航天器上的应用. 中国空间科学技术, 2021, 42(1): 131—138
- [2] 薛志虎, 谢铭慧, 曲伟. 面向高功率电子散热的平板型环路热管研究. 工程热物理学报, 2019, 40(2):
- [3] 崔冠宇, 王宇, 郭益, 等. 基于石墨板的电子设备大功率器件散热方法研究. 遥测遥控, 2021, 42(4): 89—94
- [4] Jiao Zengkai, Kang Huiyuan, Zhou Bo, et al. Research Progress of Diamond/aluminum Composite Interface Design. Functional Diamond, 2022, 2(1):25—39.
- [5] 谢超, 田凤桢, 王朋, 等. 电子设备中导热衬垫的选型及散热凸台的设计. 电子机械工程, 2021, 37(5):52--56
- [6] JEDEC solid state technology association. Two-Resistor Compact Thermal Model Guideline. 2008, JESD 15-3.
- [7] 宁献文, 蒋凡, 陈阳, 等. 嫦娥五号探测器热平衡试验方案设计与实现. 中国空间科学技术, 2021, 41(6): 132--137
- [8] Mohammed, T. A. Copper-Water and Hybrid Aluminum-Ammonia Heat pipes for Spacecraft Thermal Control Applications. 19th IHPC and 13th IHPS. 2018.

海洋晃荡条件下板式换热器流动冷凝实验研究

樊成成¹, 张文浩¹, 张程宾¹, 陈永平^{1,2*}

(1 东南大学能源与环境学院, 江苏南京, 210096;

2 苏州科技大学环境科学与工程学院, 江苏苏州, 215009)

(Tel: 025-83792483, Email: ypchen@seu.edu.cn)

摘要: 本文设计并搭建了板式换热器流动冷凝传热特性可视化实验系统, 采用三自由度运动平台模拟海洋条件, 开展了海洋温差能温度水平下板式换热器在竖直、倾斜和晃荡姿态下流动冷凝传热特性的实验研究, 得到了倾斜和晃荡条件对板式换热器流动及冷凝传热特性影响特性。结果表明, 相比于竖直姿态, 垂直负倾角和水平正倾角条件下板式换热器冷凝传热性能弱, 而垂直正倾角和水平负倾角条件均可改善冷凝传热效果; 晃荡振幅提高能改善工质均流性, 使得板式换热器的冷凝传热性能提升, 但冷凝性能对晃荡频率影响不敏感。

关键词: 板式换热器, 海洋晃荡, 气液两相流, 冷凝传热

0 前言

板式换热器因具有高效换热、结构紧凑与高可靠性的特点成为浮式温差发电系统的核心部件^[1]。浮式温差能发电系统受海面风浪、潮汐及洋流的影响, 存在倾斜、摇摆在内的不同工作姿态^[2]。由于浮体处于晃荡条件下工作, 板式换热器交叉波纹通道间的两相流受到重力场强变化干扰, 进而影响板式换热器的流动冷凝传热性能。尤其在在温差能转化利用过程中, 小温差驱动的动力循环发电对换热特性变化的敏感性更为突出^[3,4]。因此, 海洋温差能温度水平下姿态变化对板式换热器的流动和传热特性的影响亟需进一步探究。

Cheng 等^[5]通过实验研究倾斜圆管中管径、流速和倾角变化过程中, 管内气团的形成和演变规律。Hsu 等^[6]搭建了闭式两相回路研究倾角对小通道内两相传热特性的影响。Ren 等^[7]通过数值方法分析了晃荡对螺旋缠绕式换热器壳程流动和传热特性的影响。Sun 等^[8]利用六自由度运动平台实验分析了不同晃荡角度、周期和振幅对螺旋缠绕式换热器压降特性的影响。截至目前, 国内外研究者针对倾角和晃荡工况下换热器流动和传热特性的研究只集中在具有圆管和矩形通道的管壳式换热器, 尚未涉及到具有复杂几何通道的板式换热器。尤其海洋温差能温度水平下板式换热器的流动冷凝传热特性尚未被揭示。

为此, 本文设计搭建了板式换热器流动冷凝特性的可视化系统, 实验观测板式换热器的流型演变并研究重力场强变化对板式换热器内工质流动和冷凝传热的影响特性, 阐释海洋晃荡条件下板式换热器流动冷凝传热行为, 重点研究倾斜和晃荡姿态的影响特性。

1 试验系统与方法

* 国家重点研发计划 (No. 2019YFB1504303)

为研究海洋晃荡工况下板式换热器的流动冷凝传热特性所搭建的实验系统如图 1 所示，主要包括热水回路、冷水回路、工质回路和数据采集系统四部分组成。其中，工质回路由工质泵、蒸发器、减压阀、冷凝器与储液罐组成。本文中采用人字波纹角为 60° 的不锈钢换热板片作为基本传热元件。冷凝器的整体结构包括 1 块可视化端板、2 块换热板片与 1 块固定端板，尺寸为 480 mm （长） $\times 180\text{ mm}$ （宽） $\times 41\text{ mm}$ （高）。可视化端板由亚克力材料加工制成，并在其表面蚀刻了与波纹板片相同的槽道，通过可视化端板可直接观测到工质在冷凝器中的流动情况。固定端板为厚度 10 mm 铝板。冷凝器的结构及详细几何参数如图 2 所示。将冷凝器安装于三自由度运动平台上以模拟海洋晃荡环境，配合安装在冷凝器工质侧和冷水侧的温度、压力传感器，以及用于识别冷凝器内流动状态的高速 CCD 构成了本实验系统的测试段。温度、压力传感器用于测量工质流经冷凝器前后的热力状态变化。储液罐中的液态工质经工质泵增压输送至蒸发器，受热水加热形成湿蒸汽或过热蒸汽，再经减压阀节流降压进入冷凝测试段，在冷凝器中工质被冷凝再次进去储液罐，完成一次工质循环。工质泵和减压阀的协同调节可以改变冷凝器的实验压力和流通流量。

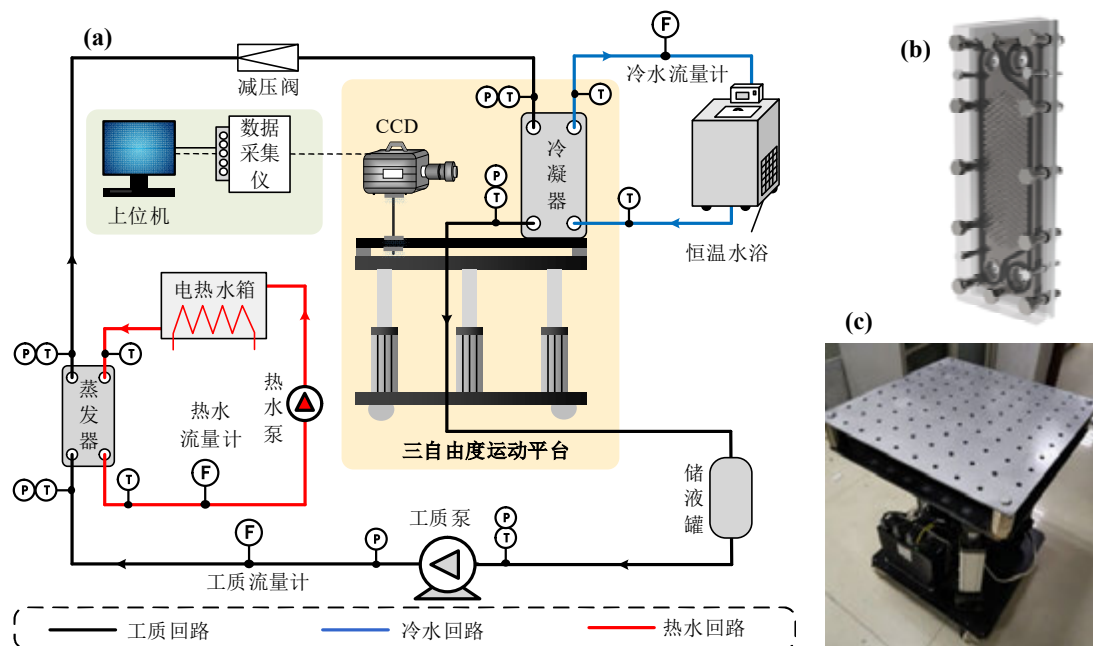


图 1 海洋晃荡工况下板式换热器流动冷凝传热的可视化试验系统：(a) 实验原理；(b) 冷凝器；(c) 三自由度运动平台

热水回路由配置两根电加热棒的热水箱、热水泵、可控直流电源以及温度、流量传感器构成。其中，热水箱的容积为 50 L ，单根加热棒的最大功率为 2.5 kW 。通过安装在蒸发器入口的温度传感器反馈调节可控直流电源的输出电压，以改变电加热棒的加热功率，实现热水回路的温度控制。通过调节热水泵频率可实现热水流量调节。冷水回路由恒温水浴（型号：DTY-15A）以及必要的温度、压力传感器构成。恒温水浴在 $6\text{ }^\circ\text{C}$ 下最大制冷量为 1.5 kW ，为冷凝器提供恒温冷却水。

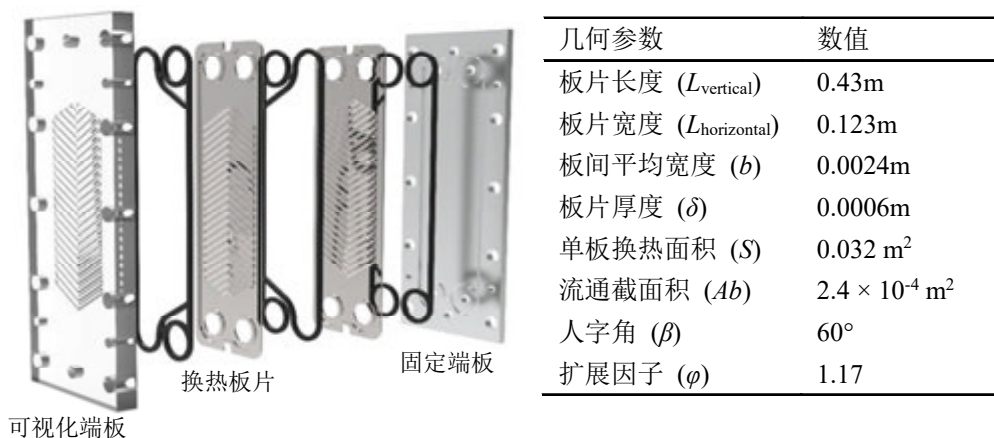


图2 实验用冷凝器的结构及其几何参数

数据采集系统采用 CCD 高速相机（型号：Photron FASTCAM SA4）配合高频无闪灯对不同工况下冷凝器内的流形进行监测记录，图像采集频率根据冷凝的实际情况设置为 500 帧/秒，采集时刻为一个实验工况达到稳态时。为了观测冷凝器内流动的沿程变化，沿工质流动方向等分为三处拍摄。三个流量计分别被安装在工质回路、热水回路和冷水回路，用于测量三个回路的流量变化。为了全面监测冷凝测试段的热力变化，在冷凝器的各进出口安装了 T 型铠装热电偶，并在冷凝器工质侧的进出口安装有压力传感器。图 1 中所示各个温度测点的信号使用 T 型热电偶采集模块（型号：DAM-3134）采集，压力和流量测点的信号使用模拟量采集模块（型号：MT2003）采集，并通过 MODBUS 协议与上位机实时通讯，在上位机上实现数据在线显示、记录和保存。

2 结果分析与讨论

为了探究海洋温差能温度水平下海洋晃荡条件对板式换热器流动冷凝传热特性的影响，本文选用 R134a 为循环工质，以冷凝对流传热系数 (h) 和流动压降 (ΔP) 作为量化指标，展开研究垂直、水平倾斜角以及周期晃荡幅度和频率对板式换热器流动冷凝传热特性的影响。此外，为了更加深入理解海洋晃荡工况对流动冷凝传热过程的影响，还通过可视化手段研究了不同质量通量下工质在冷凝器中的流型演变。

2.1 竖直姿态

竖直姿态是板式换热器工作的基本姿态，所以本文首先研究了竖直姿态下板式换热器中的流动冷凝传热特性。在质量通量从 30 到 37kg/(m²·s) 的范围内，工质具有较高流速且工质的气液相密度差大，所以气液界面剪切力对流动冷凝的影响较大。随着质量通量增加而增加的气液相速度差强化了气液界面的剪切效果，增强了气液相间的扰动情况以及冷凝传热效果。所以在该范围内，板式换热器内发生标准的强制对流冷凝，质量通量的增加会提高冷凝传热系数，如图 3（b）所示。此时冷凝传热系数处于 2~3 kW/(m²·K) 范围内，与文献中的数据相吻合。为了研究过热度对冷凝传热系数的影响，将冷凝器的质量通量以及入口压力分别维持在 29.3 kg/(m²·s) 和 520kPa，不同冷水温度下的冷凝传热系数随过热度的变化曲线被呈现在图 3（c）中。在进入冷凝器后，当过热蒸汽直接接触低温换热板片时，工质在过热区中释放的

热量包括显热与潜热两部分，一部分过热工质在降温过程中释放显热，而另一部分过热蒸汽遇冷会在换热板片壁面处发生直接冷凝释放潜热，并在该换热区中占有主导地位。此时，进口过热度的增加会提升换热板片壁面温差，有效强化过热蒸汽在过热区的直接冷凝传热。所以在一定过热度范围内，过热度的提高会增强板式换热器的整体传热效果。

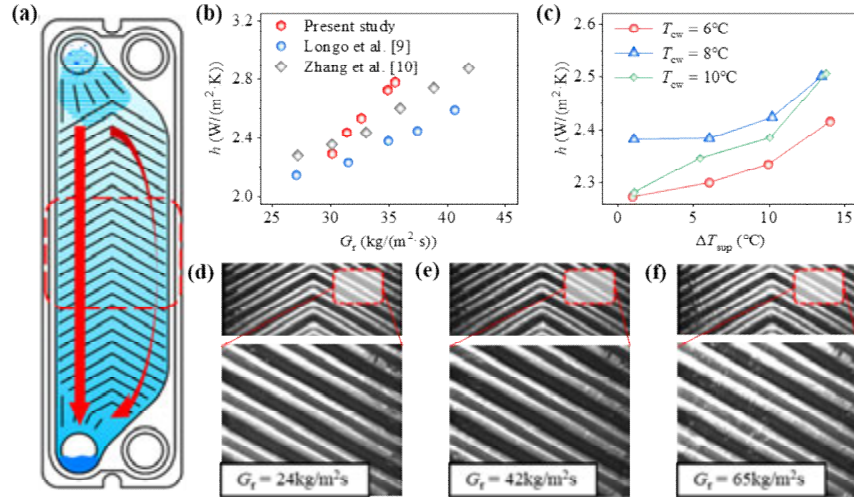


图3 竖直姿态下板式换热器的传热特性: (a) 板式冷凝器内工质流动示意图; (b) 质量通量对冷凝换热系数的影响, 冷凝压力和入口过热度分别为 520kPa 和 10°C; (c) 不同冷却水温度下入口过热度对冷凝传热系数的影响, 冷凝压力和质量通量分别为 520kPa 和 29.3kg/m²s; (d) 质量通量为 24 kg/m²s 时冷凝器中部典型流型; (e) 质量通量为 42 kg/m²s 时冷凝器中部典型流型; (f) 质量通量为 65 kg/m²s 时冷凝器中部典型流型

选取最具流动特征代表性的中部换热区的流型比较不同质量通量下板式换热器中流动的变化情况。从图 3 (d ~ f) 中可发现, 由于实验用换热器的工质侧进出口均设于左侧, 因此在换热器的左侧区域会形成工质优先流通过程, 并会较右侧区域分配更多的工质流量, 所以板式换热器中部换热区中左侧扰动更为剧烈, 而右侧流动则相对平缓。此外, 虽然随着工质质量通量的增加会导致更厚的冷凝液膜厚度, 但是右侧区域的非优先流通过程在这一过程中的工质流量分配也会得到同步增加, 均流性得到了有效改善。

2.2 倾斜姿态

由于海平面的波动, 倾斜姿态海洋浮式发电平台中的常见姿态, 不同的倾斜姿态及倾斜角度会改变工质沿流动方向和垂直方向上的重力分量, 进而影响工质在板式换热器中的流动及传热特性。本文考察了冷凝器入口为饱和态时, 垂直和水平倾角对冷凝传热系数、热流密度以及沿程压降的影响。

图 4 展示了垂直倾角对板式换热器中流动及传热特性的影响。从图中可以看出在 -20°到 20°范围内, 倾角的增加可以提高板式换热器的传热效果, 即冷凝传热系数 (图 4 (a)) 和热流密度 (图 4 (b))。当倾角从 0°增至 -20°时, 垂直于工质流向的重力分量始终指向可视化端板, 且工质与换热板片的接触被逐渐减弱。另一方面, 平行于工质流向的重力分量在此过程中减小, 重力对流速的增强作用逐渐被减弱, 也减小了工质与换热板片间的剪切力, 冷凝传热被弱化。所以, 在该范围内, 冷凝传热系数和热流密度随着倾角的增大而减小。而在倾角

由 0° 增至 20° 的过程中，垂直于工质流向的重力分量指向换热板片且逐渐增加，此时冷凝液膜更多分布于换热板片侧，并在倾角增加的过程中被逐渐拉长，这有效减小了冷凝液膜的热阻，使冷凝传热特性得到增强。在该范围内，冷凝传热系数和热流密度随着倾角的增大而增大，并且增强现象较负角度的削弱现象更明显。在当前各工况中，板式换热器中的全膜冷凝和部分膜冷凝均为分离流，此时冷凝摩擦压降受气液相界面剪切力及工质与换热板片间剪切力共同作用。由图 4 (d) 可知，当板式换热器垂直倾斜由 -20° 增至 20° 时，沿程压降会随着倾角变化而略有增加，并且增幅随质量通量的增大而趋于明显。

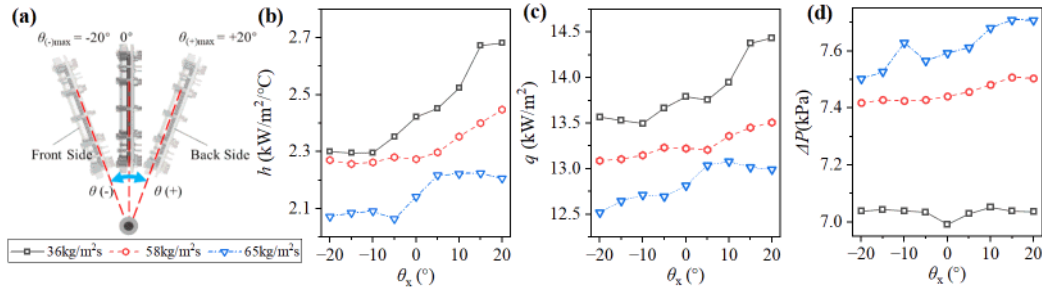


图 4 垂直倾角对冷凝传热特性的影响，冷凝器入口为饱和液态，入口压力为 520kPa: (a) 冷凝传热系数; (b) 热流密度; (c) 压降

图 5 展示了水平倾角对板式换热器中流动及传热特性的影响。当倾角小于 0° 时，液膜受重力影响分布在板式换热器工质进出口侧，此时工质气相覆盖了大部分换热区域，较竖直姿态增加了冷凝换热面积，因此冷凝效果随着负倾角的增加而得到改善。而当倾角大于 0° 时，液膜在重力作用下聚集在板式换热器非进出口侧的底部区域，出现工质在板式换热器中的积存现象并且导致流动死区，增加了液膜导热热阻的同时也减小了冷凝换热面积，此时较竖直姿态具有更差的冷凝传热效果，如图 5 (b) 和 (c) 所示。从图中可以看出，质量通量的减小会弱化工质堆积和流动死区对冷凝传热的影响，较质量通量 $65 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 时，正倾角增加 20° 导致冷凝传热系数减小了 5.1%，质量通量 $36 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 时，冷凝传热系数只减小了 0.49%。从图 5 (d) 中可以看出，不同质量通量下沿程压降均随负倾角的增加而增加，随正倾角的增加而减小或不变。因为负倾角会导致液体积聚在板式换热器的进出口侧而阻碍气相工质的流动，随着负倾角的减小，液膜在板式换热器中分布趋于均匀，减弱了剪切力的影响，降低了冷凝过程中的沿程阻力。值得注意的是，随着质量流量的升高，冷凝状态从部分膜冷凝逐步转化为全膜冷凝，负倾角对压降影响的转折点随之向小倾角转移，如 $65 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 的转折点为 -5° ， $58 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 的转折点为 -15° 。当质量通量较小，为部分膜冷凝时，由于板式换热器工质进出口不是对称布置，小正角度倾斜有助于均匀化换热器内的气液分布以降低沿程阻力，过大的倾角导致换热器进出口侧以气相工质为主，流动阻力较小，倾角改变对阻力的影响不明显。当质量通量较大为全膜冷凝时，正倾角会增大沿程阻力，但是随着倾角的增加，影响程度下降。

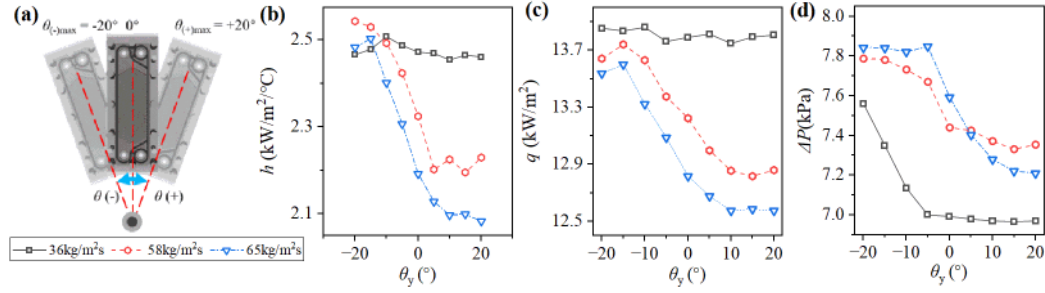


图 5 水平倾角对冷凝传热特性的影响，冷凝器入口为饱和液态，入口压力为 520kPa: (a) 冷凝传热系数; (b) 热流密度; (c) 压降

2.3 晃荡姿态

包含横摇和纵摇在内的晃荡姿态是海洋浮式发电平台的基本运动姿态，该姿态不仅会影响板式换热器内的重力分布，还会产生附加惯性力。通过三自由度运动平台分别模拟频率 0.05Hz、0.1Hz、0.2Hz 下不同倾角的垂直晃荡和水平晃荡，以研究晃荡频率和振幅对板式换热器中工质流动和冷凝传热特性的影响。

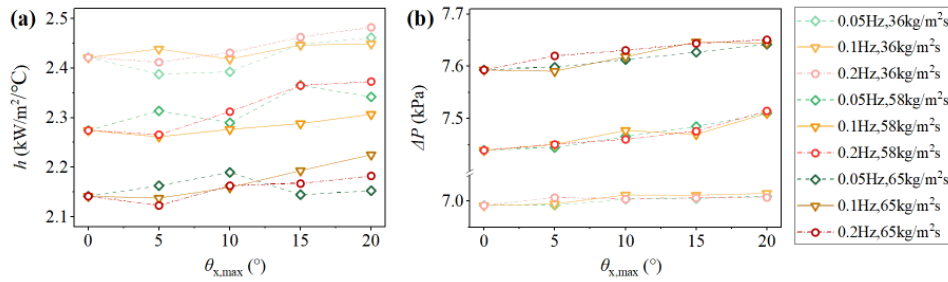


图 6 垂直晃荡频率对流动和冷凝传热特性的影响，冷凝器入口为饱和液态，入口压力为 520kPa: (a) 冷凝传热系数; (b) 压降

垂直晃荡条件下（见图 4 (a)），质量通量的增加会导致更小的冷凝传热系数和更大的沿程压降，但是频率影响板式换热器流动和冷凝传热特性的规律性较弱，如图 6 所示。晃荡姿态所产生的周期性切向惯性力和离心惯性力有效强化了板式换热器流道间气液相工质间的扰动，促进了板式换热器中冷凝液膜的湍流发展和液膜中液滴的分离。此外，冷凝液膜在板式换热器中的周期性运动可有效提升工质在板式换热器中的流动均匀性。所以，振幅的增加会提高板式换热器的冷凝传热系数，当质量通量和频率分别为 58 kg/(m²·s)和 0.2Hz 时，相比于竖直状态，振幅为 20°的周期晃荡提高了冷凝传热系数 4.4%。从图 6 (b) 中可以看出振幅的增加会导致更大的压降，但是由于垂直晃荡仅会影响工质沿垂直到流动方向上的运动，但是板间距 2.4mm 的小空间限制了工质波动的发展，所以振幅影响压降的幅度较小，在实验测试范围内，压降变化率仅为 0.8%。

水平晃荡条件下（见图 5 (a)），质量通量的增加会弱化冷凝传热效果并增大流动阻力，如图 7 所示。板式换热器的流动和冷凝传热特性对水平晃荡频率的敏感性较弱，但是对水平振幅的敏感性较强，尤其在大质量通量的条件下，因为周期晃荡产生的切向/离心惯性力会强化流动间的工质流动，破坏冷凝液膜的形成和增厚。从图 7 (a) 中可以看出，当质量通量大

于 $58 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 时, 振幅的增大会提高板式换热器的冷凝传热系数。当振幅为 2Hz 时, 58 和 $65 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 质量流量下, 相比于竖直状态, 具有 20° 振幅的板式换热器的冷凝传热系数分别提高了 3.5% 和 6.4% 。就流动压降而言, 在小质量流量条件下, 随着振幅变化压降基本保持稳定, 但是当质量流量大于 $58 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ 时, 振幅的增加会显著提高板式换热器的流动压降, 如图 7 (b) 所示。

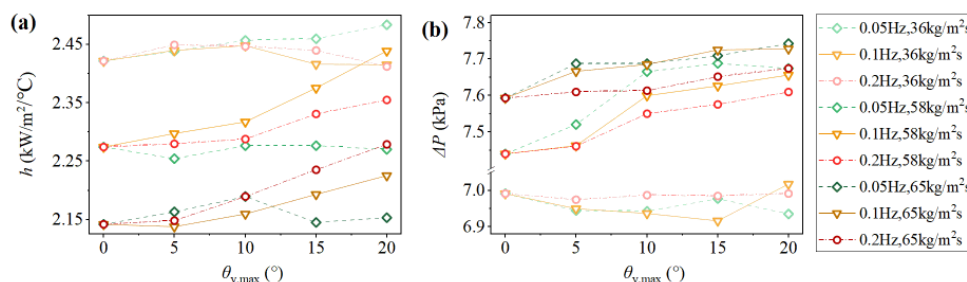


图 7 水平晃荡频率对流动和冷凝传热特性的影响, 冷凝器入口为饱和液态, 入口压力为 520kPa : (a) 冷凝传热系数; (b) 压降

3 结论

本文设计搭建了板式换热器流动冷凝传热的可视化实验系统, 采用三自由度运动平台模拟海洋晃荡条件, 开展了海洋温差能转化利用涉及的板式换热器在竖直、倾斜和晃荡姿态下的流动冷凝传热特性实验, 得到了倾斜和晃荡条件对板式换热器流动冷凝传热的影响特性。研究结果表明:

- (1) 垂直负倾角角度的增加会弱化重力对冷凝液回流作用, 导致板式换热器的冷凝传热系数变小。垂直正倾角会拉长换热板片侧的冷凝液膜, 减小传热热阻而增强冷凝传热性能。
- (2) 相较于竖直工况, 水平负倾角有利于排液, 可以扩大蒸汽区域, 改善冷凝传热性能; 水平正倾角会导致冷凝液积存并存在流动死区, 所以板式换热器内冷凝传热性能受到削弱。
- (3) 质量流量和晃荡行为是影响板式换热器流动冷凝性能的重要因素。在垂直/水平晃荡条件下, 质量流量的增加在改进冷凝传热性能的同时也导致更大的沿程压降。晃荡幅度的增加干扰冷凝液膜流动, 改善冷凝液均流作用, 提高板式换热器冷凝传热系数, 在大流量和高频率下的改善效果更为突出。但是, 板式换热器的流动冷凝传热特性对晃荡频率影响的不敏感。

参考文献

- [1] Dijoux A, Sinama F, Marc O, et al. Modelling and experimentation of heat exchangers for Ocean Thermal Energy Conversion during transient operation[J]. Procedia Manufacturing, 2019, 35: 298-303.
- [2] Sun C, Li Y, Han H, et al. Effect of compound sloshing conditions on pressure drop and heat transfer characteristics for FLNG spiral wound heat exchanger[J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 159: 113791.
- [3] Li D, Fan C, Zhang C, et al. Control strategy of load following for ocean thermal energy conversion[J]. Renewable Energy, 2022, 193: 595-607.
- [4] Liu W, Xu X, Chen F, et al. A review of research on the closed thermodynamic cycles of ocean thermal energy

conversion[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2020, 119: 109581.

- [5] Cheng T W, Lin T L. Characteristics of gas–liquid two-phase flow in small diameter inclined tubes[J]. Chemical Engineering Science, 2001, 56(21-22): 6393-6398.
- [6] Hsu L C, Cion S W, Lin K W, et al. An experimental study of inclination on the boiling heat transfer characteristics of a micro-channel heat sink using HFE-7100[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2015, 62: 13-17.
- [7] Ren Y, Cai W, Jiang Y. Numerical study on shell-side flow and heat transfer of spiral-wound heat exchanger under sloshing working conditions[J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 134: 287-297.
- [8] Sun C, Li Y, Zhu J, et al. Experimental tube-side pressure drop characteristics of FLNG spiral wound heat exchanger under sloshing conditions[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2017, 88: 194-201.
- [9] Zhang J, Elmegaard B, Haglind F. Condensation heat transfer and pressure drop correlations in plate heat exchangers for heat pump and organic Rankine cycle systems[J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 183: 116231.
- [10] Longo G A. Refrigerant R134a condensation heat transfer and pressure drop inside a small brazed plate heat exchanger[J]. International journal of refrigeration, 2008, 31(5): 780-789.

电弧增材制造堆积成形机理研究

云泽¹, 张悟童¹, 龙迅¹, 李岩^{*1,2}, 朱建军^{1,2}

1. 中国石油大学(北京)机械与储运工程学院, 北京, 102249
2. 中国石油大学(北京)过程流体过滤与分离技术北京市重点实验室, 北京, 102249
(*Email: heartonelee@cup.edu.cn)

摘要 针对电弧熔丝增材制造过程, 建立了考虑熔滴撞击、重力、传热和传质等因素的三维瞬态 CFD 数值模型, 将三种焊接位置下的单道单层焊道模拟结果与实验结果进行对比, 验证了模型的准确性。基于三维瞬态数值模型, 探究了焊接方向、熔滴过渡频率、熔滴初始温度三种焊接工艺参数对多层熔覆成形过程的影响, 为电弧增材制造技术的工艺优化和过程控制提供理论指导, 有助于解释多层熔覆过程的成形机理, 改善焊道成形形貌。

关键字 电弧增材制造; 数值模拟; 焊接工艺参数; 多层熔覆; 焊道成形

1 前言

增材制造技术是基于离散-堆积原理直接制造零件的技术, 不同于传统的切削加工技术, 其加工工序较少, 并且在复杂结构成形方面具有显著的效率提升。从微观尺度到中观和宏观尺度, 增材制造技术为具有不同功能的复杂结构的设计和制造带来了重大机遇[1]。增材制造技术如今被广泛应用于航空航天、石油化工等领域, 目前已经开发了许多金属增材制造的相关技术, 根据热源的不同可以将金属增材制造技术分为激光增材制造、电子束增材制造、电弧增材制造^[1]。其中电弧增材制造(WAAM)基于熔化极气体保护焊(GMAW)、钨极气体保护焊(TIG)、等离子弧焊(PAW)、冷金属过渡焊(CMT)等焊接技术发展而来, 可在现有的焊接行业进行改造, 投资成本低, 适合大规模工业化应用, 而且具有沉积效率高、材料利用率高、对零件尺寸限制少、零件易于修复等优点。但电弧增材制造过程中电弧和高温熔滴携带着大量热量, 随着熔覆层数的增多, 零件中存在大量热积累, 部分凝固金属经历了重熔, 熔覆层的形貌难以控制, 这些问题直接影响着成形零件的强度、尺寸控制、表面质量。因此, 降低熔覆过程中的热积累, 更精确的控制零件成形形貌是电弧增材制造技术所面临的一大挑战^[2]。

电弧增材制造过程涉及焊丝熔化、熔滴过渡、高温液态金属在熔池内的对流流动、熔池自由表面变形、液态金属凝固等多种复杂物理现象^[3]。这些复杂的物理过程综合决定了熔覆层的形状和尺寸^[4]、微观结构^[5]、力学性能^[6]、残余应力和组件的变形^[7]。不同焊接工艺参数对电弧增材制造过程中的物理现象有着显著影响, 众多学者为确定最佳工艺参数, 控制熔覆层形貌和尺寸进行了深入研究。Gomez Ortega 等^[8]研究发现了焊接工艺参数对 WAAM Al5Si 合金单层和多层熔覆几何特征的影响。研究发现, 为了熔覆多层焊道, 需要逐渐增加焊接速度以保持恒定的焊道层宽, 这是由于逐层堆叠产生的热积累造成的。Xiong 等^[9]发现通过对送丝速度的控制, 可以实现 WAAM 中熔覆高度的良好控制。Xu 等^[10]基于脉冲等离子弧熔覆技术, 对比分析了有无层间冷却对 Inconel 625 合金熔覆层微观结构和力学性能的影响, 发现进行层间冷却的熔覆方式相较于连续熔覆方式显著提高了熔覆层的熔覆精度和力学性能。Lu 等^[11]通过在母材底部预埋水管冷却铜板的强制冷却方法, 降低了多层熔覆中的

热积累，得到了满意的金属部件。

为理解 WAAM 的内部物理机理，指导工艺优化，开发具有物理和实际焊接模型的数值方法使得通过计算流体动力学（CFD）模拟预测熔池特性和焊道几何形状成为可能。刘东帅等^[12]借助 ANSYS 有限元仿真对 WAAM 的成形过程进行了数值模拟，在单道多层熔覆的模拟中发现，随着熔覆层数的增多，前四层每层焊道的峰值温度升高，由于焊道中上部的热量只能向下传递，因此焊道中的热积累逐渐加剧。张天雷等^[13]利用商业 CFD 软件 FLUENT 对基于 MIG 的 WAAM 熔池特性进行了模拟，采用流体体积法和焓-孔隙度法进行熔池自由表面和固液界面的追踪，对曲面上熔池的形貌变化、流动方式进行了分析。Bai 等^[14]建立了基于等离子弧焊（PAW）的电弧熔丝增材制造（WAAM）多层熔覆过程中流体流动和传热行为的三维数值模型，对第 1、2、21 层熔覆进行了瞬态模拟。预测了熔覆焊道和熔池的形状和尺寸，并与实验结果进行了比较。Wu 等^[15-16]使用 FLOW-3D 进行数值模拟，探索了在平坦基底上高速气体保护金属电弧焊过程中驼峰的形成和抑制机制。Ogino 等^[17]提出了一个 3 维简化模型来模拟 WAAM 过程，同时忽略了熔滴的形成、长大和脱落，研究了不同熔覆条件（包括层间温度、焊接方向）对熔覆层形貌的影响。

当前 WAAM 定量研究仍十分缺乏，因此本文建立了考虑熔滴撞击、重力、传热传质等多因素的三维瞬态 CFD 数值模型，探究了单道单层焊道的熔池特性和形貌特征，并与实验结果相对比验证了数值模型的准确性；利用验证模型对不同工艺参数下的单道多层、多道多层焊道进行数值模拟，掌握了多种焊接工艺参数对焊道成形的影响规律，为电弧增材制造技术提供了定量指导。

2 数学模型

2.1 模型假设

为研究在不同焊接工艺参数下 GMAW 增材制造的熔池特性和成形形貌，本文建立了三维瞬态计算流体动力学模型，图 1 是 GMAW 增材制造示意图。该过程是一个涉及传热传质的复杂过程，为了简化数学模型，采用了以下假设：

- （1）流体流动为层流，液态金属为牛顿不可压缩流体。
- （2）焊丝和基板的物理特性被视为相同且一致。
- （3）在焊丝熔化一端的熔滴过渡被视为熔滴以一定的直径、频率、初始速度、初始温度冲击基板。
- （4）忽略了液态金属蒸发所引起的热量和质量损失。

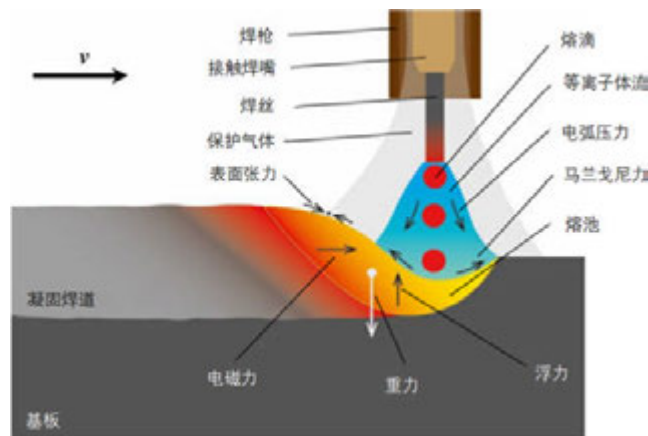


图 1 GMAW 增材制造示意图

2.2 控制方程

GMAW 的熔池在三维笛卡尔坐标系中建模，流体流动和传热遵循质量、动量和能量守恒的控制方程，如方程（2.1）、（2.2）和（2.3）所示。流体体积函数（VOF）方法用于跟踪熔池的自由表面，如方程（2.4）所示。

质量守恒方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = S_c \quad (2.1)$$

式中： ρ 为密度； V 为速度矢量。

动量守恒方程：

$$\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V V) = -\nabla p + \nabla(\mu \nabla V) + F_{ms} + F_g + F_{jb} + F_{st} + F_{ap} + F_{ma} + F_{as} \quad (2.2)$$

能量守恒方程：

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V h) = \nabla \cdot (k \nabla T) + q_{arc} + q_{drop} + q_{con} + q_{rad} \quad (2.3)$$

VOF 方程：

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (V \cdot \nabla) F = F_s \quad (2.4)$$

VOF 方法利用网格体积函数 $F(x, y, z, t)$ 与网格单元中流体之间的关系分析两相界面。网格体积函数 $F(x, y, z, t)$ 代表其中某相流体的体积分数，其值在 0 和 1 之间。如果 $F=0$ ，表示此单元格中不含有该相流体；如果 $F=1$ ，表示此单元格中只含有该相流体；如果 $0 < F < 1$ ，表示此单元格中同时含有该相流体和其它流体，流体相界面位于此单元格内。

此外，采用焓-孔隙度法^[18]来模拟金属材料的熔化和凝固。液-固混合区被视为孔隙度等于液体分数 f 的多孔区，可用于追踪固液界面。材料的焓可计算如下：

$$h = h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T c_p dT + fL \quad (2.5)$$

其中液体分数 f 可由随温度线性变化的方程（2.6）确定。

$$f = \begin{cases} 0 & (T \leq T_s) \\ \frac{T - T_s}{T_L - T_s} & (T_s < T \leq T_L) \\ 1 & (T > T_L) \end{cases} \quad (2.6)$$

2.3 熔滴过渡模型

在 GMAW 工艺中，填充焊丝熔化并以熔滴的形式携带着质量、动量和能量转移到熔池中。在这项研究中，传热传质过程被建模为熔滴直径 $d_d=1.4\text{mm}$ 大小的球形区域中的源项，这是通过高速摄像机获得的。熔滴的初始速度 v_d 为 -0.3m/s （-Z），熔滴的初始温度 T_d 为 2800K ^[19]。熔滴过渡频率可通过方程（2.7）计算，该方程基于焊丝和熔滴的质量守恒，其中忽略了金属蒸发和焊接飞溅。

$$f_d = \frac{3v_w d_w^2 \rho_s}{2d_d^3 \rho_L} \quad (2.7)$$

2.4 表面力

施加在熔池自由表面上的电弧压力近似用高斯密度分布^[20]表示，方程如下所示：

$$P_{arc} = \frac{P}{2\pi\sigma_p^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_p^2}\right) \quad (2.8)$$

其中 P 和 σ_p 可以通过以下经验公式确定：

$$P = -0.04307 + 0.0001981 \cdot I(N)$$

$$\sigma_p = 1.4043 + 0.00174 \cdot I(mm) \quad (2.9)$$

此外，熔池的表面张力对焊缝外观有着显著影响，并且随着温度的升高而降低，这将导致 Marangoni 流动^[21]，方程如下所示：

$$\gamma = \gamma_0 - \frac{d\gamma}{dT}(T - T_{ref}) \quad (2.10)$$

2.5 体积力

在焊接过程中熔滴过渡和熔池流体流动考虑了重力、浮力和电磁力。Boussinesq 近似^[22]用于描述密度变化对浮力的影响，如流动方程：

$$S_{buoyancy} = (\rho - \rho_L)g = -\rho_L \beta_m (T - T_L)g \quad (2.11)$$

根据满足麦克斯韦方程的焊接电流和磁场计算焊接熔池中非空隙单元的电磁力，并以 x 、 y 和 z 方向的三个分量表示如下^[23]：

$$\begin{aligned} (J \times B)_x &= -\frac{\mu_0 I^2}{4\pi^2 \sigma_j^2 r} \times \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_j^2}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_j^2}\right)\right] \left(1 - \frac{z}{L_m}\right)^2 \frac{x}{r} \\ (J \times B)_y &= -\frac{\mu_0 I^2}{4\pi^2 \sigma_j^2 r} \times \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_j^2}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_j^2}\right)\right] \left(1 - \frac{z}{L_m}\right)^2 \frac{y}{r} \\ (J \times B)_z &= -\frac{\mu_0 I^2}{4\pi^2 L_m r^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_j^2}\right)\right]^2 \left(1 - \frac{z}{L_m}\right)^2 \\ \sigma_j &= 0.5342 I^{0.2684} (mm) \end{aligned} \quad (2.12)$$

2.6 边界条件

气体保护金属电弧焊是一个复杂的物理过程，包括传热和传质。该区域的热输入包括熔滴热和电弧热，而热损失包括对外部环境的热对流和辐射。因此，能量条件描述如下：

$$\begin{aligned} k \frac{\partial T}{\partial n} &= Q_{arc} + Q_{drop} - Q_{con} - Q_{rad} \\ Q_{con} &= h_c (T - T_0) \\ Q_{rad} &= \sigma \varepsilon (T^4 - T_0^4) \end{aligned} \quad (2.13)$$

为了促进马兰戈尼流动，作为自由表面上边界条件的剪切应力平衡描述如下：

$$\mu \frac{\partial v_t}{\partial n} = -\frac{\partial \gamma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (2.14)$$

作为自由表面上边界条件的压力平衡描述为：

$$-p + 2\mu \frac{\partial v_n}{\partial n} = -P_{arc} + \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.15)$$

2.7 热源模型

传递到熔池的热量由两部分组成，一部分是高温熔滴携带的熔滴热量 Q_{drop} ；另一个是作用在自由表面上的电弧热 Q_{arc} 。熔滴热可通过以下公式计算：

$$Q_{drop} = c_L m_d \Delta T = \frac{\pi c_p f_d d_d \sigma_L (T_d - T_0)}{6} \quad (2.16)$$

电弧热可按如下方式确定：

$$Q_{arc} = \eta UI - Q_{drop} \quad (2.17)$$

对于电弧焊接过程的热结构模拟，双椭球热源模型^[24]被广泛用于模拟电弧热，但对于具有动态自由表面的熔池模拟，由于弧柱下的小孔效应^[19]，这将导致明显的偏差。因此，高斯电弧热源模型^[25]被用于模拟作用于熔池自由表面的热通量，如下式所述：

$$q(r) = \frac{Q_{arc}}{2\pi\sigma_a^2} \exp\left(\frac{-r^2}{2\sigma_a^2}\right), r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (2.18)$$

其中 σ_a 可由以下经验公式^[25]确定：

$$\sigma_a = 0.533I^{0.2941} (\text{mm}) \quad (2.19)$$

2.8 数值模型

利用商业 CFD 软件 FLOW-3D 求解控制方程和相关物理模型，该模型使用的 Tru-VOF 方法对自由表面的追踪问题具有很高的精度以及出色的计算效率，计算区域与网格划分如图 2 所示。本模型不考虑电弧部分，只考虑熔滴下落成形计算，计算区域分为基板材料区和上部空气域，高温的熔池向周围空气传递热量，并且也在该区域形成了焊道，环境温度设定为 300K；下部分为基板，基板的初始温度为 300K。

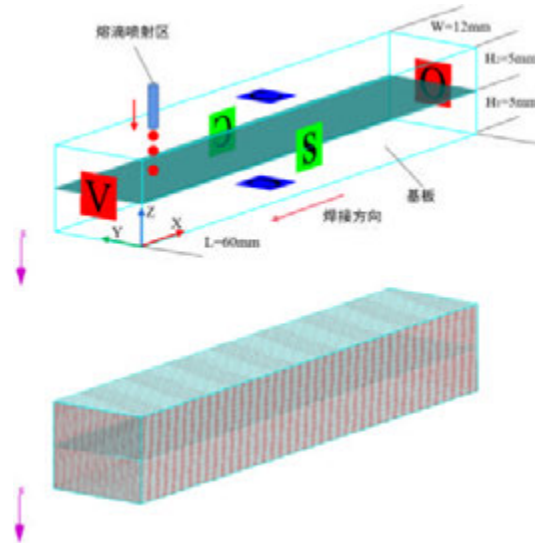


图 2 数值模型计算区域和网格划分

网格的尺寸设置为 0.2mm，网格类型为 Non-conforming，此时的模型精度已经足以描述熔池的自由表面。采用 GMRES 解算器求解压力-速度耦合方程，使用拉格朗日分裂方法追

踪尖锐界面，初始时间步长设置为 $2.5 \times 10^{-5} \text{s}$ 。

本文电弧熔丝增材制造使用的填充焊丝材料为 AWS ER70S-6，属于镀铜低合金钢气体保护焊丝，该焊丝材料具有优良的焊接工艺性能，成形焊道形貌美观，焊接过程中产生的飞溅较小，焊缝具有较高的抗拉伸性能及低温冲击性能。上述低合金钢材料的热物性参数如表 1 所示。

表 1 低合金钢热物性参数

物理量	符号	值
液相密度 (kg/m^3)	ρ_L	6900
液相比热容 (J/kg/K)	c_L	732
液相热导率 (W/m/K)	k_L	26.9
表面张力系数 (kg/s^2)	γ	1.2
粘度系数 (kg/m/s)	μ	0.0059
液相线温度 (K)	T_L	1798
固相线温度 (K)	T_S	1768
熔化潜热 (J/kg)	h_{sf}	2.77×10^5
固相密度 (kg/m^3)	ρ_S	7500
固相比热容 (J/kg/K)	c_S	726
固相热导率 (W/m/K)	k_S	32.3
初始温度 (K)	T_0	300
对流换热系数 ($\text{W/m}^2/\text{K}$)	h_c	100
Stefan Boltzmann 常数 ($\text{W/m}^2/\text{K}^4$)	σ	5.67×10^{-8}
表面张力梯度系数 ($\text{kg/s}^2/\text{K}$)	$d\sigma/dt$	-0.0003

3 模型验证

本文参照 Hu 等^[26]设计的电弧焊接实验进行了数值模拟研究，实验系统如图 3 所示。

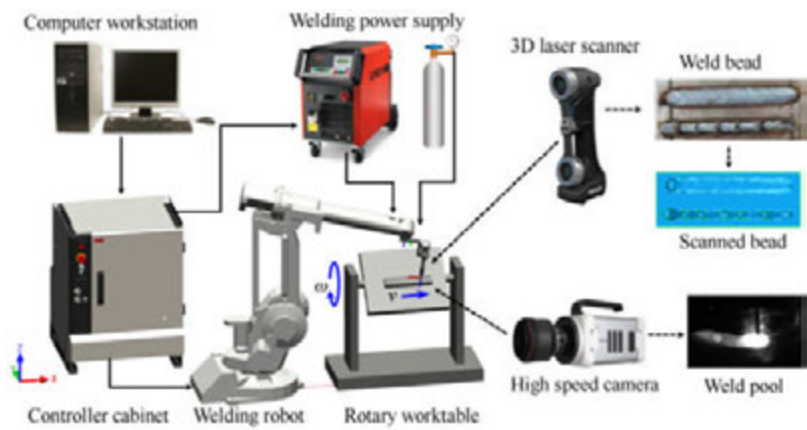


图 3 机器人焊接系统^[26]

熔覆实验在厚度为 10mm 的低碳钢基板上进行，该基板被夹在可调节倾斜角度的工作台上，以满足各种焊接位置下的使用工况。使用直径为 1.2mm 牌号为 AWS ER70S-6 的实心线作为焊丝材料。使用 18% CO_2 和 82% Ar 的混合物作为保护气体，其流速为 15L/min。

为了研究焊接位置和焊接电流对熔池和焊道成形形貌的影响，采用了三种焊接位置，如图 4 所示。在平焊位置下，重力垂直于基板表面和焊枪行进方向；在横焊位置下，重力平行于基板表面且垂直于焊枪行进方向；在向下立焊方式下，重力平行于基板表面并与焊枪行进

方向相同。焊接速度保持为 8mm/s，同时调节送丝速度和电弧电压以获得所需的焊接电流，焊接参数如表 2 所示。每例实验进行三次，通过高速摄像机拍摄图像分析熔池特性，随后通过三维激光扫描仪测量焊道横截面轮廓。在每个焊道的三个不同位置测量焊道几何变量，并计算平均值。

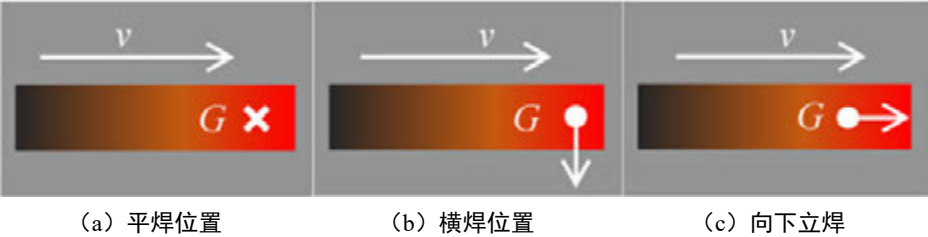


图 4 焊接位置示意图^[26]

表 2 不同焊接电流下的焊接参数

NO.	1	2	3
焊接电流 (A)	140	180	220
送丝速度 (m/min)	3.4	5.0	6.5
焊接电压 (V)	19.5	22.0	22.8
焊接速度 (mm/s)	8	8	8
焊道长度 (mm)	50	50	50

三种焊接位置下 CFD 模拟和实际焊接实验的单道单层焊道几何形状对比如图 5 所示，二者形貌表现相似。在选取的焊道横截面中测量其几何数据，平焊位置焊接电流 180A 下模拟得到的焊道平均宽度为 7.43mm，焊道平均高度为 2.14mm；实验得到的焊道宽度为 7.62mm，焊道高度为 2.12mm^[26]。

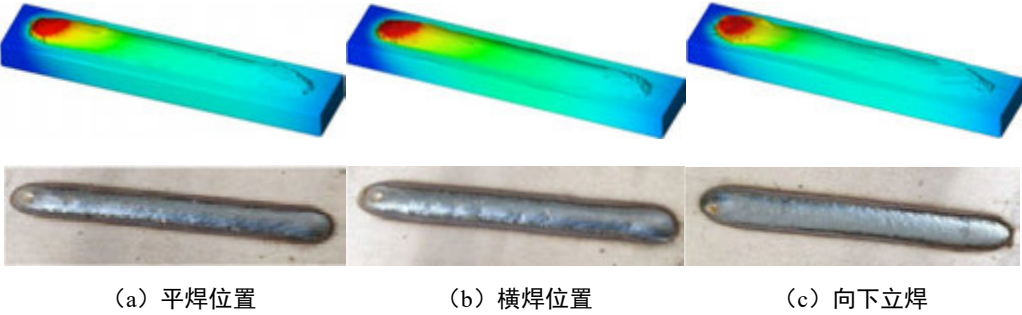
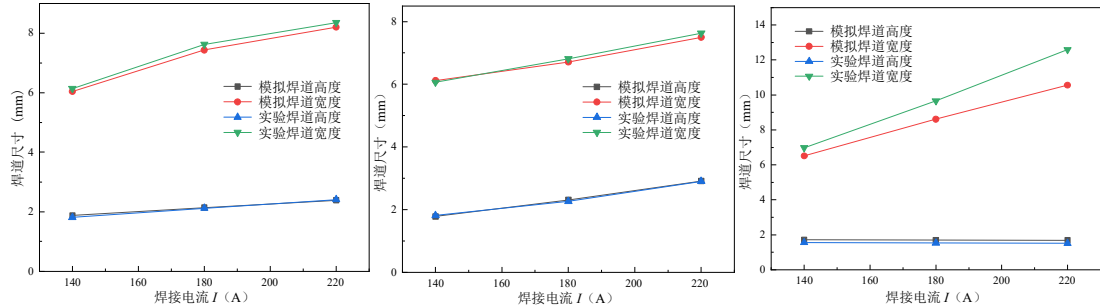


图 5 数值模拟和实验焊道几何形状对比

图 6 中展示了三种焊接位置下模拟与实验得到的焊道尺寸对比，模拟和实验结果对比显示焊道高度和宽度随焊接电流的变化趋势一致，模拟与实验的测量结果基本吻合，误差在合理范围之内，验证了数值模型的准确性。



(a) 平焊位置

(b) 横焊位置

(c) 向下立焊

图 6 数值模拟和实验焊道几何尺寸对比

4 计算结果与分析

在电弧熔丝增材制造中,对成形构件的形貌和尺寸把控至关重要,焊道的形貌和尺寸直接决定了成形构件的质量,而掌握焊接工艺参数对焊道成形过程和成形形貌的影响就是提高成形质量的根本,因此需要对多种工艺参数下的成形规律进行分析和总结。在本节的模拟研究中,焊接位置均为平焊位置。

4.1 焊接方向对焊道成形的影响

4.1.1 单道多层熔覆

在本节中考虑了两种焊接方向,如图 7 所示。第一种焊接方向为每一层焊道的起始引弧位置和结束灭弧位置都在同一竖直线上,每一层的焊接方向都是相同的从左向右焊接,如图 7(a)所示。第二种焊接方向为从第二层焊道开始,每一层的焊接方向与前一层都是相反的,如图 7(b)所示。总熔覆层数为 10 层,焊接长度为 50mm,模拟中使用的焊接参数为表 2 中焊接电流 180A 下所示。

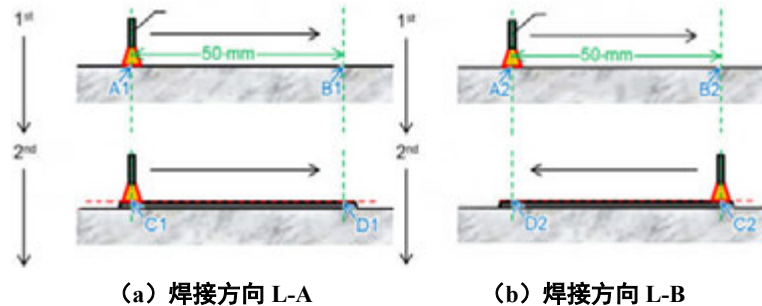


图 7 模拟中两种焊接方向热源运动示意图

图 8 显示了熔覆层主视图及其在焊道中心的横截面的数值结果。如该图所示,在焊接方向 L-A 方式下,进行 10 层熔覆后的焊道起始位置与结束位置的高度差较大,焊接起始位置的高度显著高于结束位置,整体形状呈现为倾斜状;而在焊接方向 L-B 方式下,焊道的起始位置与结束位置的高度差较小,整体形状更为均匀平整。

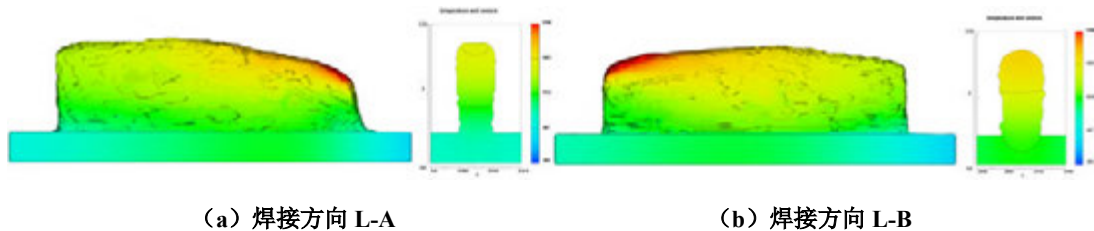


图 8 不同焊接方向对多层熔覆形貌的影响

焊接方向 L-A 方式下的焊道 Y-Z 横截面相较于 L-B 方式下的焊道横截面,呈现出的形貌表现为宽度较窄、高度较高,焊道总高度右侧低于左侧从两种焊接方向下的焊道横截面来看,熔覆层的竖直度均良好,此外都呈现出熔覆的前几层相较于焊道中上部宽度较窄的形貌。这是由于在前期的熔覆过程中,基板处于室温 300K 下,熔覆时电弧和熔滴的热量有一部分传递给了基板,并且沿着基板向周围环境进行热传导,因此前几层焊道冷却速率较高、宽度较窄;而随着熔覆的继续进行,焊道上方的热输入只能向下传导,并且低合金钢的导热性能较差,所以焊道中存在大量的热积累,熔池的流动更剧烈,熔融金属的铺展性增强,导致焊道中上部的宽度较宽。当以 L-A 方式进行焊接时,随着热源运动,起弧位置处由于热传导而逐渐降温发生相变,熄弧位置处由于热源的影响而保持高温、低剪切粘度、低表面张力、

强铺展性而导致累积高度低于起弧位置，形成高度差；以 L-B 方式进行焊接时，则因左右两端位置循环作为起弧位置开始熔覆，两端热积累程度较高，使焊层成形为两侧低中间高的形态。焊道横截面的两侧有一些部位呈凸起状，这是由于熔覆过程是逐层进行的，每一层的交界处无法完全平滑的过渡。焊道顶部由于最后一层熔覆过程中，在熔池的表面张力影响下表现为弧状。

图 9 展示了两两种焊接方向下熔覆高度演变。如图 9 (a) 所示，在两种焊接方向下，第二层焊道高度低于第一层的高度，随后每一层的平均高度总体上逐渐下降。这是由于从第二层开始的每一层熔覆都是在上一层焊道曲面上进行，熔融金属受重力和电磁力的影响更多的向两侧流动，因此焊道平均高度减小，而焊道平均宽度略有增加。

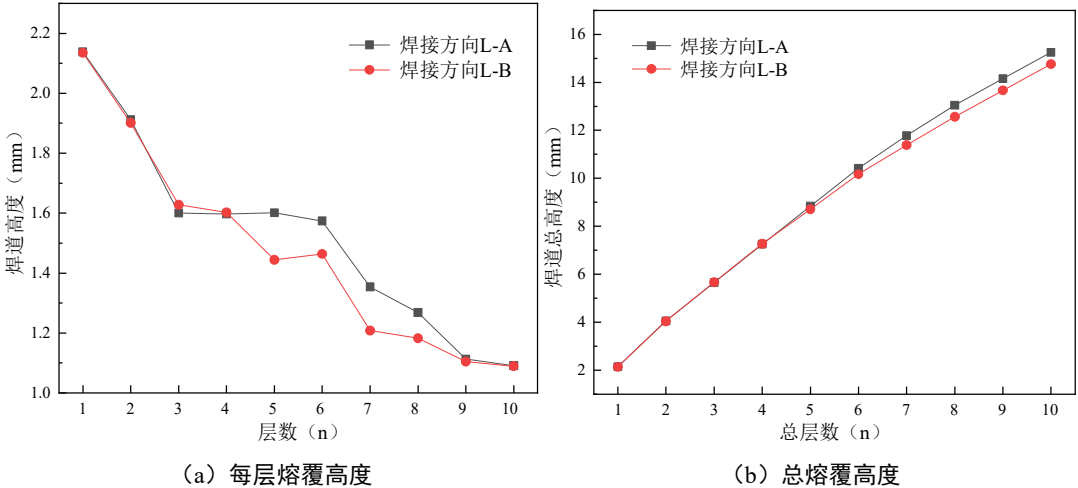


图 9 两种焊接方向下单道多层熔覆高度演变

两种焊接方向下的每层焊道高度在前四层基本吻合，随后焊接方向 L-B 下的焊道平均高度明显小于焊接方向 L-A 方式，直至第九层后焊道高度又保持吻合。如图 9 (b) 所示，从第 5 层至第 10 层熔覆结束，焊接方向 L-A 方式的焊道总高度逐渐大于 L-B 方式。这是由于熔覆前四层的过程中，焊道的热量有一部分通过基板传递到周围环境，此时焊道中的热积累较小，因此焊接方向的改变对焊道高度变化的影响较小。而熔覆焊道中上部分的过程中，焊道中的热量只能向下方焊道传递，焊道中有着大量的热积累，焊接方向的改变使焊道起始位置和结束位置的热量分布较为均匀，熔池的铺展性更好，所以相比之下焊接方向 L-B 下的焊道更平整，中上部的每层熔覆高度较小、宽度较大。

4.1.2 方形多层熔覆

在本节中通过模拟讨论了焊接方向对 5 层方形熔覆的影响，与单道多层熔覆的情况不同的是，焊道的起始位置和其结束位置在每一层中重叠。对两种不同焊接方向的模拟进行了对比分析，模拟中热源的运动方式如图 10 所示。在第一种情况下，每一层焊道的起始位置相同，焊枪的运动方向也都为逆时针，如图 10 (a) 所示；而在第二种情况下，每一层焊道的起始位置相同，但从第二层开始每一层焊枪的运动方向都与上一层相反，如图 10 (b) 所示。

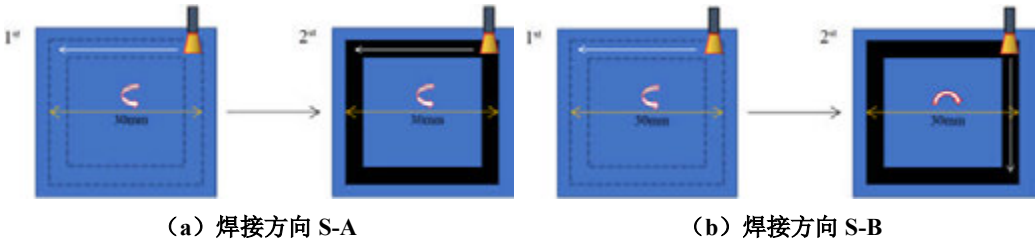


图 10 模拟中两种焊接方向热源运动示意图

图 11 显示了两种焊接方向下方形堆积熔覆 5 层的形貌模拟结果。如图 11 (b) 所示，当每一层的焊接方向都与上一层相反时，抑制了熔覆高度的变化，四条封闭焊道的形貌相比之下更为平整一致，焊接方向的选择对获得方形均匀熔覆的焊道非常重要。在方形焊道熔覆的过程中，由于四条焊道首尾相连，四条焊道的起始位置和结束位置相互重合，在四个边角处的熔覆量会多于焊道的其他部分，因此在焊接方向 S-A 下，四个边角的焊道高度会高于焊道的其余部分。在焊接方向 S-B 下，由于每一层焊接方向相反，四个边角处熔池的热输入增加，熔融金属的铺展性增加，因此有效抑制了焊道高度变化，使得焊道整体形貌更平整。

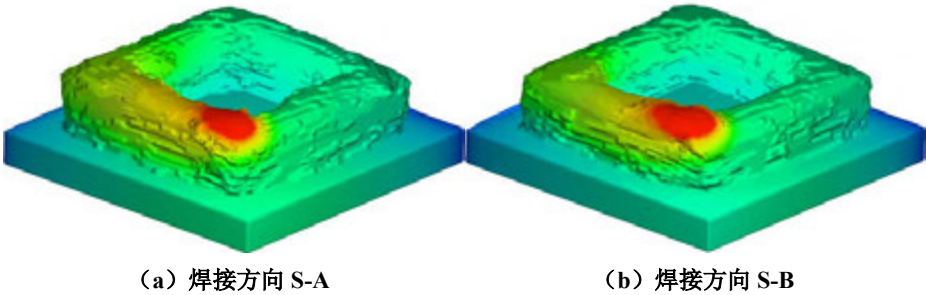


图 11 两种焊接方向下方形多层熔覆形貌

以焊道四个边角处及四条焊道中间位置的焊道高度平均值为标准，测量了两种焊接方向下每层焊道平均高度与焊道总高度随熔覆层数的演变，如图 12 所示。两种焊接方向下第一层熔覆均以逆时针方向进行焊接，因此第一层焊道高度并未有明显差异。从熔覆第二层开始焊接方向 S-A 的焊道平均高度均大于焊接方向 S-B 的焊道平均高度，焊接方向 S-B 的焊接方式成功抑制了焊道总高度。两种焊接方向下的焊道平均高度均随着层数的增加而变小，第一层到第三层的熔覆中，焊接方向 S-A 和 S-B 下焊道高度分别降低了 26.8%和 33%，而第三层到第五层的熔覆过程中焊接高度分别降低了 2.8%和 0.7%，熔覆层的高度在前三层变化较大，随后高度变化变小，与单道多层熔覆过程中焊道高度的变化相似。

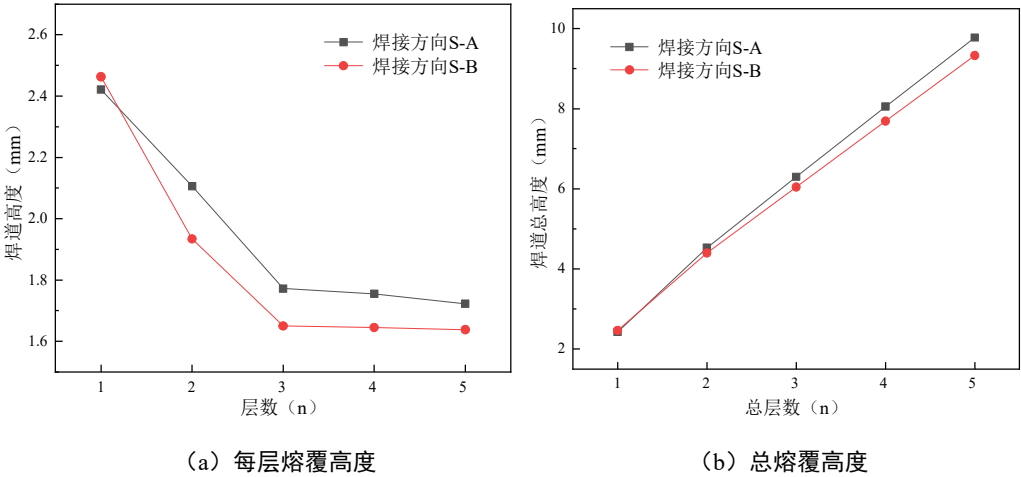


图 12 两种焊接方向下方形多层熔覆高度演变

4.2 熔滴初始温度对焊道成形的影响

在焊接过程中，熔滴的初始温度受电极材料、电源极性、焊接方法等因素影响，适当的熔滴初始温度为更好的控制焊道的成形形貌提供了基础。

图 13 展示了三种熔滴初始温度下的 5 层熔覆焊道形貌及焊道截面温度分布，随着熔滴初始温度的升高，焊道的总高度变小、宽度变大。熔滴初始温度从 2600K 升高到 3000K，熔池的尺寸也随之增大。熔滴初始温度 2600K 下的焊道起始位置和结束位置的高度差较小，

整体形貌更平整。熔滴初始温度的增加使得焊道形貌愈为倾斜，因此适当的熔滴初始温度对控制焊道成形形貌非常必要。

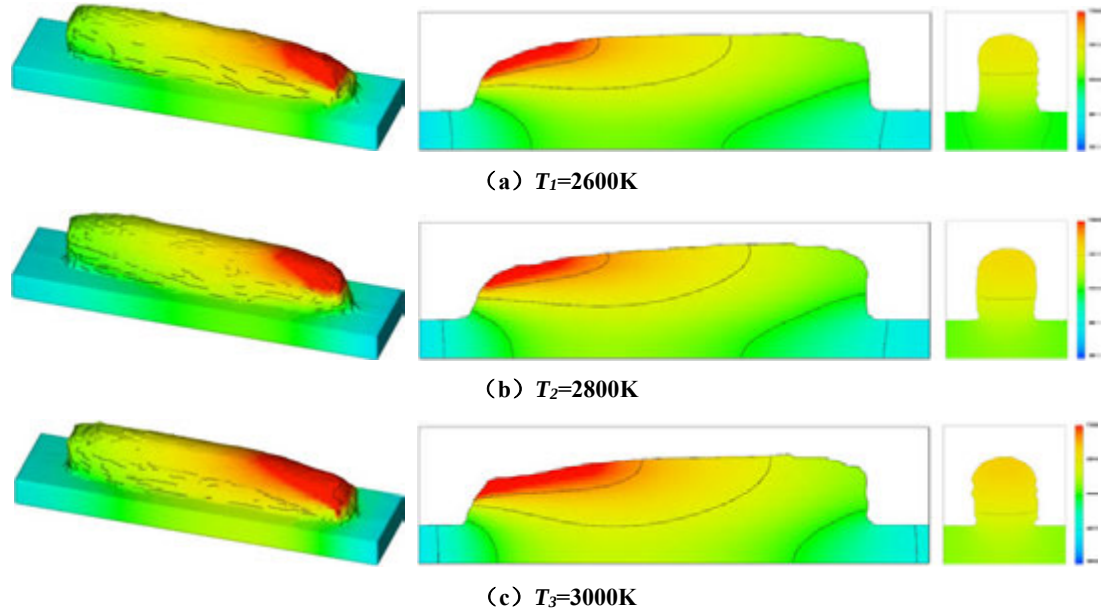


图 13 三种熔滴初始温度下焊道形貌及截面温度分布

三种熔滴初始温度下的焊道横纵截面图中可以发现三种熔滴初始温度下的焊道竖直度都较好，随着熔覆层数的增多，焊道宽度逐渐增大，焊道顶部呈现光滑的圆弧状。熔滴初始温度的增加最直观的改变为熔池长度的增加，这是熔池内热输入增加所引起的。热输入的增加使得熔池的铺展性增强，熔滴初始温度从 2600K 升高到 3000K 后焊道形貌逐渐“坍塌”，具体表现为焊道高度的降低及焊道宽度的增加。

在进行多层熔覆时，每层都会因为后层的热输入而导致已经凝固的焊道再次经历多次热循环。取基板表面的中点为温度监测点，测量其 5 层熔覆过程中的温度变化，结果如图 14 所示。从图中可以看出，在每一层的熔覆中，温度很快上升，在达到峰值温度后立即冷却，随着熔覆层数的增多，每层冷却时的最低温度也呈阶梯式上升，这是由于焊道中过量的热积累导致焊道的冷却速率降低。

随着熔滴初始温度的升高，基板中心点每层熔覆的峰值温度在前四层都持续升高，基板中心点的峰值温度出现在第四层熔覆结束时刻，此时熔滴初始温度 2600K 下基板中心点的峰值温度为 1183K，熔滴初始温度为 2800K 下为 1226K，熔滴初始温度为 3000K 时为 1326K。熔滴初始温度从 2600K 升为 2800K 后基板中心点的峰值温度升高了 3.6%，而熔滴温度从 2800K 提高到 3000K 后基板中心点的峰值温度增加了 8.2%。熔滴初始温度 2600K 和 2800K 下的基板表面中点热循环曲线较为接近，当熔滴初始温度上升到 3000K，热循环曲线中的每层熔覆的峰值温度和最低冷却温度均明显升高，并且随着熔覆层数的增多温度差进一步增大。

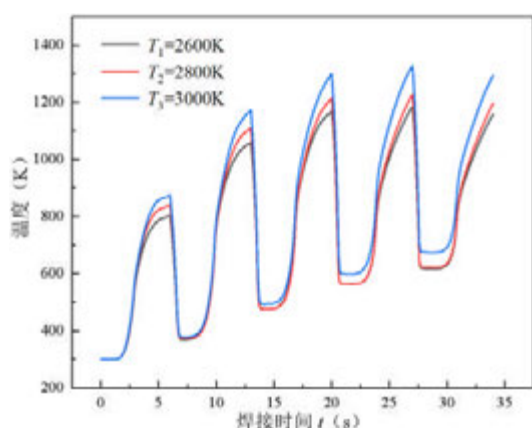


图 14 基板表面中点热循环曲线

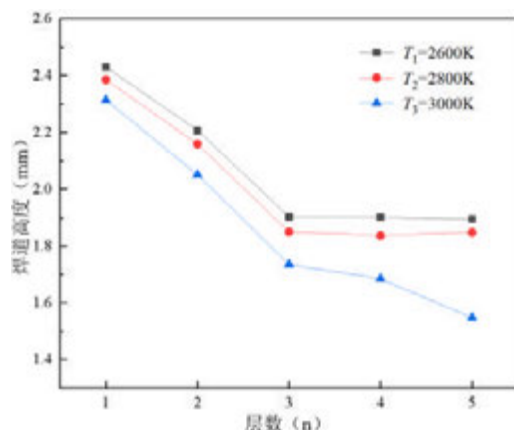


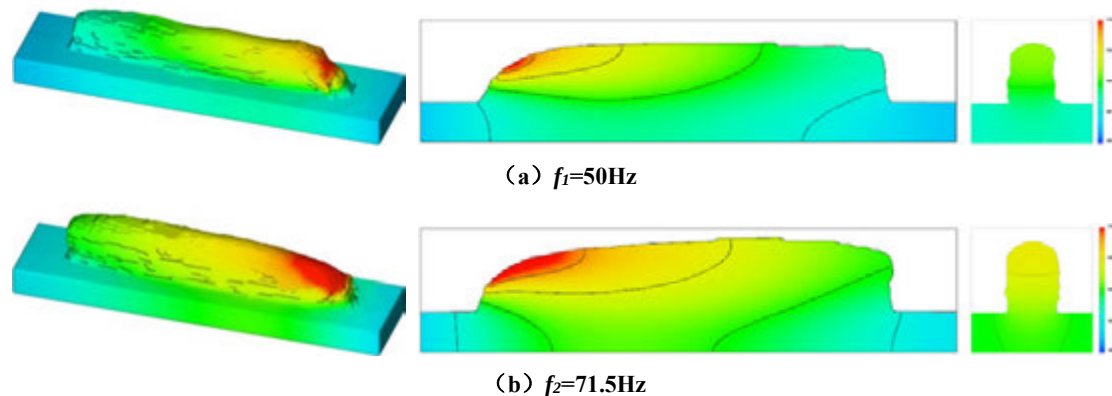
图 15 三种熔滴初始温度下焊道高度演变

图 15 展示了三种熔滴初始温度下的焊道高度演变，在前三层熔覆中，熔覆高度逐渐减小，并且随着熔滴初始温度的升高，每层熔覆高度都明显减小。从第三层熔覆开始，熔滴初始温度 2600K 和 2800K 下的焊道高度变化较小，基本保持恒定；而熔滴初始温度 3000K 下的焊道高度依然保持持续减小的趋势。这与图 14 三种熔滴初始温度的热循环曲线特征对应，2600K 和 2800K 的熔滴初始温度下的焊道热循环表现相似，其焊道几何尺寸的变化也保持相同趋势，而熔滴初始温度 3000K 时在热循环曲线中明显更高的峰值温度和冷却温度与其焊道的几何尺寸变化相符。由于更高的熔滴初始温度使得熔覆焊道中上部时热积累严重，熔池的冷却速率降低，铺展性增强，因此焊道高度持续减小。

4.3 熔滴过渡频率对焊道成形的影响

熔滴过渡频率（送丝速度）是 GMAW 增材制造过程中非常重要的参数，因为其决定了单位时间内送入熔池中的熔滴量，影响了成形尺寸的大小。模拟选定 3 个不同的熔滴过渡频率，根据表 3 和方程 (2.7) 可计算出不同送丝速度下的熔滴过渡频率，分别为 50Hz、71.5Hz 和 92.5Hz，焊接速度设定为 8mm/s，熔滴初始温度为 2800K。

三种熔滴过渡频率下模拟得到的焊道形貌如图 16 所示。熔滴过渡频率的不同对焊道形貌产生了显著影响，成形焊道的高度和宽度均随着熔滴过渡频率的增加而增大。这是因为熔滴过渡频率的增加是送丝速度增加导致的，在相同的焊接速度下，单位时间内送入熔池的熔融金属量增加，因此焊道的几何尺寸不断增加。图中可以看出，熔池尺寸在不同熔滴过渡频率下有较大差异，由于送丝速度的增加引起了焊接电流的增加，熔滴和电弧对熔池的热输入增加，熔滴过渡频率为 92.5Hz 时其熔池的尺寸最大。



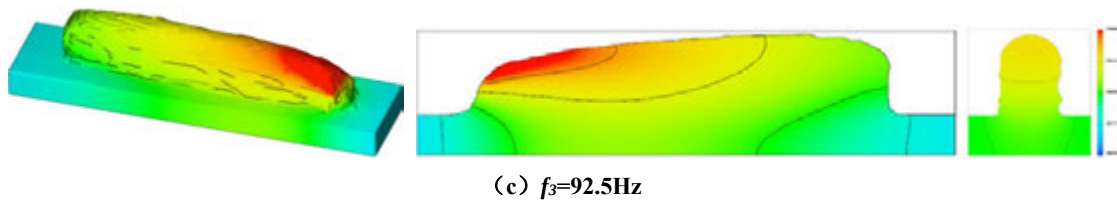


图 16 三种熔滴过渡频率下焊道形貌及截面温度分布

通过焊道纵截面图不难看出，随着熔滴过渡频率的增加，焊道起始位置向结束位置的倾斜程度加重，熔池的尺寸变大，焊道内部热量积累更为严重。焊道的横截面图显示了焊道的几何尺寸变化，熔滴过渡频率的增加显著增加了成形焊道的高度和宽度，但三种熔滴过渡频率下的焊道横截面表现出相似的多层熔覆形貌特征。

图 17 为三种熔滴过渡频率下基板表面中点的热循环曲线，曲线的五个峰值点温度代表每层熔覆中基板表面中点的最高温度。显然熔滴过渡频率的增加使得峰值温度显著提高，并在前四层熔覆中，每层熔覆的峰值温度不断升高，第四层之后的峰值温度略为降低。三种熔滴过渡频率在整个熔覆过程中的峰值温度由低到高分别为 963K、1165K、1226K。可以看出 71.5Hz 和 92.5Hz 下的峰值温度较为接近，随着熔覆层数的增加，71.5Hz 和 92.5Hz 下的热循环曲线愈为相似，且其每层熔覆中的冷却温度也逐渐明显高于 50Hz 下的最低冷却温度。三种熔滴过渡频率中，71.5Hz 和 92.5Hz 下的焊道热积累显著高于 50Hz，这是由于单位时间内熔覆量的差异所引起的。

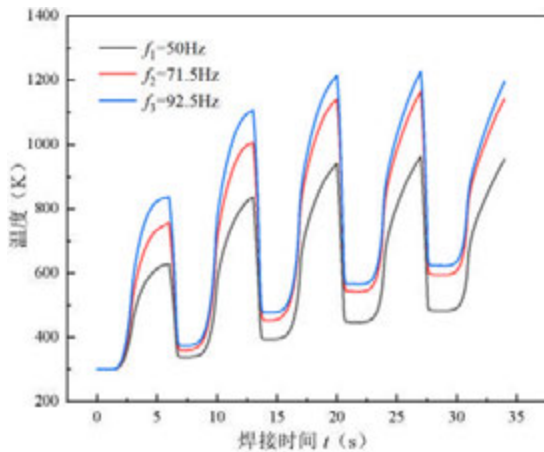


图 17 基板表面中点热循环曲线

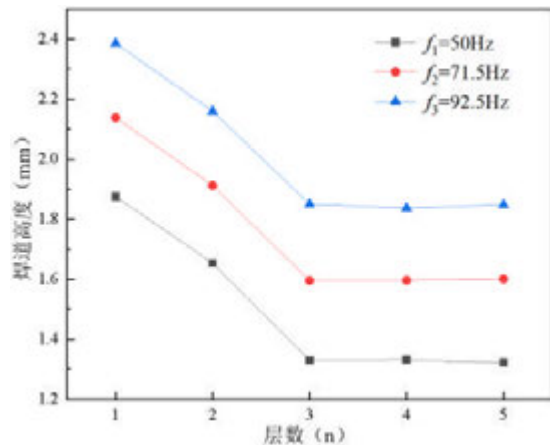


图 18 三种熔滴过渡频率下单层焊道高度演变

图 18 为三种熔滴过渡频率下熔覆过程中每层焊道高度的演变，焊道高度受熔滴过渡频率的影响变化明显。在 50Hz 的熔滴过渡频率下焊道首层的高度为 1.88mm、末层的高度为 1.32mm；71.5Hz 下焊道首层高度为 2.14mm、末层高度为 1.6mm；92.5Hz 下焊道首层高度为 2.39mm、末层高度为 1.85mm。可以发现熔滴过渡频率的增加使每层熔覆后的焊道高度线性增长，这是因为熔滴过渡频率从 50Hz 到 92.5Hz 的两次增长过程中，单位时间内增加的熔覆量相近。前三层的熔覆过程中，每层焊道的高度不断降低，随后焊道高度的变化保持稳定，这与热循环曲线中前三层熔覆热积累不断增加随后保持稳定的趋势一致，因此焊道热积累的程度显著影响着焊道高度的大小。

5 结论

本文针对 GMAW 增材制造过程，通过建立三维瞬态 CFD 数值模型，研究了不同工艺参数下多层熔覆得到的焊道形貌，并通过与实验结果对比，验证了模型的正确性。主要结论总结如下：

(1) 通过对焊接方向的控制，在单位时间熔覆量以及熔池热输入不变的情况下，发现

每层焊接方向相反的方式对单道多层熔覆和方形熔覆焊道的高度变化进行了有效的抑制,获得了更均匀平整的焊道形貌。

(2) 在单位时间内熔覆量不变的情况下,熔滴初始温度的增加使熔池的热输入显著增加,因此焊道热积累加重,焊道形貌的倾斜程度加剧,焊道每层熔覆的高度持续降低。

(3) 通过控制熔滴过渡频率的大小,探寻了单位时间内熔覆量大小对焊道热积累和成形形貌的影响。熔滴过渡频率的增加使得单位时间内送入熔池的熔滴数量线性增加,因此熔覆量增加,熔池的热输入加大,熔池的铺展性增强,最终随熔滴过渡频率增加焊道每层熔覆的高度呈现出线性增长的趋势。

参考文献

- [1] 卢静, 李勇, 欧阳航, 等. 我国堆焊复合技术的应用与发展[J]. 世界有色金属, 2018(10): 195-197.
- [2] 熊俊, 薛永刚, 陈辉, 等. 电弧增材制造成形控制技术的研究现状与展望[J]. 电焊机, 2015, 45(09): 45-50.
- [3] Debroy T, et al. Physical processes in fusion welding[J]. Reviews of Modern Physics, 1995, 67(01): 85-112.
- [4] Ou W, Wei Y, Liu R, et al. Determination of the control points for circle and triangle route in wire arc additive manufacturing (WAAM) [J]. Journal of Manufacturing Processes, 2020, 53: 84-98.
- [5] Su C, Chen X, et al. Effect of heat input on microstructure and mechanical properties of Al-Mg alloys fabricated by WAAM[J]. Applied Surface Science, 2019, 486: 431-440.
- [6] Gierth M, Henckell P, Ali Y, et al. Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM) of Aluminum Alloy AlMg5Mn with Energy-Reduced Gas Metal Arc Welding (GMAW) [J]. Materials, 2020, 13(12): 2671.
- [7] Oyama K, Diplas S, M'Hamdi M, et al. Heat Source Management in Wire-Arc Additive Manufacturing Process for Al-Mg and Al-Si Alloys[J]. Additive Manufacturing, 2019, 26: 180-192.
- [8] Gomez Ortega A, Corona Galvan L, Deschaux-Beaume F, et al. Effect of process parameters on the quality of aluminium alloy Al5Si deposits in wire and arc additive manufacturing using a cold metal transfer process[J]. Science and Technology of Welding and Joining, 2017, 4: 316-332.
- [9] Xiong J, Zhang Y, Pi Y. Control of deposition height in WAAM using visual inspection of previous and current layers[J]. Journal of Intelligent Manufacturing, 2020, 32(08): 2209-2217.
- [10] Xu F J, Lv Y H, Xu B S, et al. Effect of deposition strategy on the microstructure and mechanical properties of Inconel 625 superalloy fabricated by pulsed plasma arc deposition[J]. Materials & Design, 2013, 45: 446-455.
- [11] Lu X, Zhou Y F, Xing X L, et al. Open-source wire and arc additive manufacturing system: formability microstructures and mechanical properties[J]. International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2017, 93(5-8): 2145-2154.
- [12] 刘东帅, 吕彦明, 周文军, 等. 基于 ANSYS 的 TIG 电弧增材制造温度场数值模拟分析[J]. 激光与光电子学进展, 2019, 56(24): 181-187.
- [13] 张天雷, 徐刚, 沈艳涛, 等. 基于 MIG 的电弧增材制造熔池行为的数值模拟[J]. 智能计算机与应用, 2020, 10(05): 251-256.
- [14] Bai, Xing W, Colegrove, et al. Numerical analysis of heat transfer and fluid flow in multilayer deposition of PAW-based wire and arc additive manufacturing[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2018, 124: 504-516.
- [15] Wu D, Hua X, et al. Understanding of humping formation and suppression mechanisms using the numerical simulation[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2017, 104: 634-643.

- [16] Wu D, Hua X, Ye D, et al. Understanding of the weld pool convection in twin-wire GMAW process[J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2017, 88(1-4): 219-227.
- [17] Ogino Y, Asai S, Hirata Y. Numerical simulation of WAAM process by a GMAW weld pool model[J]. Welding in the World, 2018, 62(02): 393-401.
- [18] Voller V R, Brent A D, Prakash C. The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1989, 32(09): 1719-1731.
- [19] Soderstrom E J, Scott K M, et al. Calorimetric Measurement of Droplet Temperature in GMAW[J]. Welding Journal, 2011, 90(04): 77-84.
- [20] Zhang W, Kim C H, Debroy T. Heat and fluid flow in complex joints during gas metal arc welding-Part II: Application to fillet welding of mild steel[J]. Journal of Applied Physics, 2004, 95(09): 5220-5229.
- [21] Zhao C X, Kwakernaak C, Pan Y, et al. The effect of oxygen on transitional Marangoni flow in laser spot welding-ScienceDirect[J]. Acta Materialia, 2010, 58(19): 6345-6357.
- [22] Gu H, Li L. Computational fluid dynamic simulation of gravity and pressure effects in laser metal deposition for potential additive manufacturing in space[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2019, 140(09): 51-65.
- [23] Wu C S, Tsao K C. Modelling the three-dimensional fluid flow and heat transfer in a moving weld pool[J]. Engineering Computations, 1993, 7(03): 241-248.
- [24] Goladk J, Chakravariti A, et al. A new finite element model for welding heat sources[J]. Metall Trans B, 1984, 15(02): 299-305.
- [25] Min H C, Farson D F. Understanding Bead Hump Formation in Gas Metal Arc Welding Using a Numerical Simulation[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2007, 38(02): 305-319.
- [26] Hu Z Q, Lin H, et al. Molten pool behaviors and forming appearance of robotic GMAW on complex surface with various welding positions[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2021, 64: 1359-1376.

基于比拟思想的回热器热惯性表征及对 S-CO₂ 循环负荷变化速率的影响规律研究

马腾¹, 李明佳^{2*}, 蒋睿¹, 倪经纬¹

(1 西安交通大学 能源与动力工程学院, 热流科学与工程教育部重点实验室, 陕西 西安, 710049

2 北京理工大学 机械与车辆学院, 北京, 100081)

(Tel: 029-82665930, E-mail: mili@bit.edu.cn)

摘要: 本文构建了考虑回热器热惯性的 S-CO₂ 循环动态模型, 使用流体通道总体积和体积流量表征流动惯性, 使用换热量和热导表征传热惯性, 对比了流量和温度控制下循环的动态性能, 分析了循环实时效率和负荷变化速率随回热器设计参数的变化规律, 绘制了负荷变化速率云图, 拟合了负荷变化速率与流体通道体积和热导的数学表达式。结果表明, 流量控制更有效, 效率损失为 0.72%, 循环负荷变化速率为 10%/min; 当 $V=1.5V_{\text{设计}}$, $kA=0.5kA_{\text{设计}}$ 时, 循环负荷变化速率最高, 为 11.32%/min。

关键词: 比拟思想; S-CO₂ 循环; 回热器; 热惯性; 负荷变化速率

0 前言

超临界二氧化碳(S-CO₂)动力循环是一种以 S-CO₂ 为工质在封闭的布雷顿热力循环中进行热功转换的动力循环, 具有热效率较高、设备紧凑、投资和运维成本少、环境影响小、变工况响应灵活等优势。国内外主流研究机构都将 S-CO₂ 循环视为“一种基于新原理的革新性、颠覆性(动力)转换技术”。Guo 和 Li 等人^[1]总结了 S-CO₂ 循环发电技术的关键问题和潜在前景, 特别阐述了 S-CO₂ 循环在高温太阳能热发电、第四代核反应堆发电以及燃煤发电中的应用。在太阳能领域, He 等人^[2-5]开展了太阳能热发电与 S-CO₂ 布雷顿循环一体化集成系统的热力学性能综合分析, 揭示了太阳能热发电和 S-CO₂ 循环的交互影响特性。在核能领域, Li 等人^[6-7]分析了小型铅基堆 S-CO₂ 循环发电系统的热力学特性及经济成本, 并提出了铅基堆 S-CO₂ 循环发电系统的一体化概念设计。在燃煤发电领域, Xu 等人^[8-11]基于能量复叠利用思想构建顶底复合循环实现锅炉尾部烟气的余热利用, 在 630°C/35MPa 的温压水平下使循环热效率提升至 54.59%。在“双碳战略”下, 随着新能源发电比例的提高及并网需求, 常规发电机组需要具有快速深度调峰的能力, 以减缓间歇性新能源对电网的冲击。因此, 有必要针对 S-CO₂ 循环的动态特性展开研究。

S-CO₂ 在布雷顿循环中一直工作在超临界状态, 使得 S-CO₂ 循环的典型特点之一是透平出口压力和温度较高, 为了达到可观的热效率, 必须增加回热过程对大量余热加以利用。计算表明, 针对 S-CO₂ 简单回热循环, 回热量是发电量的 2 倍左右, 高回热导致回热器的尺寸较大, 流动惯性、传热惯性较高。在动态条件下, S-CO₂ 回热器热惯性会

* 基金项目: 本文得到国家重点研发计划(No.2021YFB2400701)和国家自然科学基金面上项目(52076161)的资助。

产生时滞效应,严重影响 S-CO₂ 循环的动态性能。Jiang 等人^[12]和 Deng 人^[13]的数值模拟研究表明,在动态条件下 S-CO₂ 回热器参数变化会有明显的延迟。美国桑迪亚国家实验室^[14]、西安热工院^[15]等的实验研究也证明了 S-CO₂ 循环的负荷跟随特性受热惯性制约。尽管诸多研究已经证明了热惯性不可忽略,但热惯性的具体内涵仍不清晰,对强变物性、大延迟、高回热的 S-CO₂ 循环动态性能的作用机制鲜有报道,回热器热导、体积等关键参数对 S-CO₂ 循环实时效率、负荷变化速率等动态参数的影响规律亟需进一步研究。

鉴于此,本文首先基于比拟思想阐述了回热器的热惯性内涵,使用回热器流体通道总体积和体积流量表征流动惯性,使用换热量和热导表征回热器的传热惯性,构建了考虑回热器热惯性的 S-CO₂ 循环动态响应模型;基于此,对比了流量控制和温度控制下, S-CO₂ 循环的变负荷动态性能;进一步,分析了 S-CO₂ 循环实时效率、负荷变化速率等动态性能参数随回热器热导、长度和通道数量等设计参数的变化规律,阐述了回热器热惯性对 S-CO₂ 循环动态性能的影响机制;最后,绘制了 S-CO₂ 循环负荷变化速率云图,通过多元回归分析方法拟合了 S-CO₂ 循环负荷变化速率与流体通道体积 V 和热导 kA 的数学表达式。

1 模型建立

本节基于比拟思想阐述了回热器的流动惯性与传热惯性,建立了考虑回热器热惯性的 S-CO₂ 动力循环动态响应模型。

1.1 循环构型及设计工况

选取 S-CO₂ 简单回热循环为研究对象,应用场景为燃煤火力发电,发电功率 1000MWe,温度/压力参数设置为 630°C/35MPa。S-CO₂ 简单回热循环构型及设计工况参数如图 1 所示。计算表明, S-CO₂ 简单回热循环的设计效率为 45.70%。

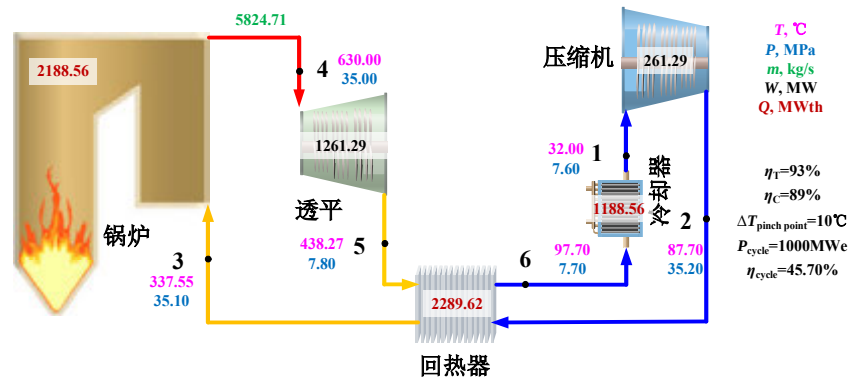


图 1 S-CO₂ 简单回热循环及设计工况参数

1.2 考虑热惯性的回热器动态模型

为兼顾传热特性与阻力特性,选取半圆通道的 Zigzag 印刷电路板换热器^[12]作为 S-CO₂ 循环回热器的形式,物理模型如图 2 所示,通道直径 D_c 为 2mm,通道间厚度 t_2 为 0.63mm,通道间宽度 t_3 为 0.76mm,波纹角 α 为 30°。使用“比拟表征-离散设计-集总响应”的方法提取了回热器热惯性关键参数,建立了回热器的设计模型和动态模型,详细介绍如下。

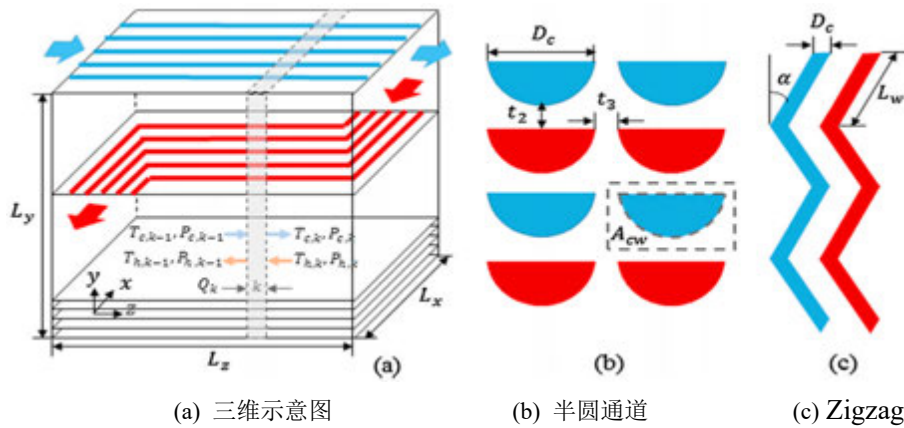


图 2 Zigzag 印刷电路板换热器物理模型^[12]

比拟表征：回热器作为 S-CO₂ 循环的关键换热部件，建模涉及温度、压力、流量等热力学参数和长度、体积等尺寸参数，动态条件下参数传递机制复杂，影响热惯性的关键特征参数不明晰。鉴于此，将流动传热过程与牛顿第二定律进行比拟，提取表征回热器热惯性的关键参数，如表 1 所示。其中， τ 是时间，在力学特性表征中， s 是位移， v 是速度， a 是加速度；在流动特性表征中， V 是体积， q_v 是体积流量；在传热特性表征中， Φ 是热流量， k 是传热系数， A 是传热面积， kA 定义为换热器的热导^[2]。比拟于力学惯性，流动惯性的推动力是流体压力，“加速度”为体积流量对时间的导数；传热惯性的推动力是冷、热侧流体的温度差，“加速度”是换热器热导对时间的导数，若换热面积不变，则“加速度”是传热系数对时间的导数。不难发现，除热力学参数温度和压力外，回热器的体积流量变化和热导变化是影响其热惯性的关键因素。它们对时间的一阶积分、二阶积分分别是体积流量、体积以及热导、换热量。因此，可以用回热器流体通道总体积 V 和体积流量 q_v 表征流动惯性，回热器换热量 Q 和热导 kA 表征传热惯性，它们共同影响回热器的热惯性，从而影响 S-CO₂ 循环的动态性能。

表 1 流动惯性、传热惯性与力学惯性的比拟

参数	推动力（强度量）	做功/传热	惯性表征
力学特性	外力 F	做功 $W = \int F ds = Fv\tau$	力学惯性 $m = F/a$
流动特性	压力 p	耗功 $W = \int p dV = pq_v\tau$	流动惯性 p/q_v'
传热特性	温差 ΔT	传热 $Q = \Phi\tau = kA\Delta T \times \tau$	传热惯性 $\Delta T/(kA)'$

离散设计：考虑到 S-CO₂ 的物性随温度、压力变化剧烈，因此采用等热量离散将回热器沿长度方向分成若干个子换热器，针对每个子换热器进行集总参数处理，如图 2 所示。鉴于热导 kA 是回热器热惯性的关键特征参数之一，使用热导-对数平均温差法（ kA -LMTD）对回热器进行分段设计，之后再集成，数学模型见表 2。

集总响应：考虑到计算效率与计算时间，使用集总参数法针对回热器进行动态建模，能量平衡关系由式(11)和式(12)表达^[13]。

表 2 回热器设计模型

公式	编号	公式	编号
长度 $L_z = L_c \cos(\alpha)$	(1)	换热量 $Q_k = \frac{q_m(h_{out} - h_{in})}{N} = q_m(h_{k+1} - h_k) $	(2)
热导 $(kA)_k = \frac{Q_k}{LMTD_k}$	(3)	传热系数 $\frac{1}{k_k} = \frac{1}{h_{c,k}} + \frac{t_2}{k_{w,k}} + \frac{1}{h_{h,k}}$	(4)
当量直径 $D_e = \frac{4\pi D_c^2}{8\left(\pi \frac{D_c}{2} + D_c\right)}$	(5)	换热面积 $A_k = \frac{1}{2} N_c N_p \left(1 + \frac{\pi}{2}\right) D_c L_{c,k}$	(6)
压降 $ p_{k+1} - p_k = \frac{1}{2} \rho_k v_k^2 f_k \frac{L_{c,k}}{D_e}$	(7)	壁面导热系数 $k_w = 13.189 + 0.0153 T_w$	(8)
$f = 0.3905 Re^{-0.0355} (3000 < Re < 20600)$	(9)	$Nu = 0.0176 Re^{0.809} Pr^{1/3} (3000 < Re < 20600)$	(10)

$$\text{热侧: } \frac{\Delta T_{h,out}}{\Delta \tau} = \frac{q_{V,h} \rho_h c_{p,h} (T_{h,in} - T_{h,out}) - kA \times LMTD - \frac{1}{2} V_h \rho_h c_{p,h} \frac{\Delta T_{h,in}}{\Delta \tau}}{\frac{1}{2} V_h \rho_h c_{p,h}} \quad (11)$$

$$\text{冷侧: } \frac{\Delta T_{c,out}}{\Delta \tau} = \frac{q_{V,c} \rho_c c_{p,c} (T_{c,in} - T_{c,out}) + kA \times LMTD - \frac{1}{2} V_c \rho_c c_{p,c} \frac{\Delta T_{c,in}}{\Delta \tau}}{\frac{1}{2} V_c \rho_c c_{p,c}} \quad (12)$$

可见，回热器的体积流量 q_V 、流体通道总体积 V 、热导 kA 为、换热量 Q 等关键特征参数均涵盖在回热器的动态模型中。

1.3 S-CO₂ 循环动态模型

除关键换热部件外，透平、压缩机等热功转换部件也是 S-CO₂ 循环的重要组成部分。在动态条件下，S-CO₂ 循环的温度、压力、流量变化导致 S-CO₂ 透平和压缩机的等熵效率剧烈变化，使用式(13)~式(16)所示的控制方程进行修正。进一步，在 Matlab Simulink 中使用 S 函数自编程透平、压缩机、回热器等关键部件的动态模型，之后按照循环构型将部件逐级连接，即可建立 S-CO₂ 简单回热循环的动态响应模型。

$$\text{效率 } \frac{\eta}{\eta_{design}} = \left[1 - 0.3(1 - \dot{N})^2\right] \left(\frac{\dot{N}}{\dot{m}}\right) \left(2 - \frac{\dot{N}}{\dot{m}}\right) \quad (13)$$

$$\text{质量流量 } \frac{m}{m_{design}} = \sqrt{1.4 - 0.4 \frac{N}{N_{design}}} \sqrt{\frac{T_{in,design}}{T_{in}}} \sqrt{\frac{(\pi^2 - 1)}{(\pi_{design}^2 - 1)}} \quad (14)$$

$$\text{质量流量系数 } \dot{m} = \frac{q_m}{q_{m,design}} \frac{p_{in,design}}{p_{in}} \sqrt{\frac{T_{in}}{T_{in,design}}} \quad (15)$$

$$\text{转速系数 } \dot{N} = \frac{N}{N_{\text{design}}} \sqrt{\frac{T_{\text{in,design}}}{T_{\text{in}}}} \quad (16)$$

1.4 模型验证

与文献[12]的模拟结果对比进行回热器模型验证。文献[12]中同样使用等热量离散的方法对 10 MWe 的 S-CO₂ 布雷顿循环回热器进行了设计，同时，文献中的动态模型是在分段离散的基础上建立的。针对回热器的设计模型，选取回热器长度、冷热流体压降和换热系数（热阻的倒数）作为验证参数，结果如表 3 所示。结果表明，参数误差均在 2% 以内，设计模型的可靠性得以验证。针对回热器的动态模型，选取热流体进口温度阶跃升高工况作为验证工况，冷流体出口温度在 $t=0$ s 和 $t=250$ s 两个时刻的值以及时间常数作为验证参数，其中时间常数的定义为温度 T 满足式(17)时对应的时间， T_0 和 T_∞ 分别是初始和稳定时的温度。从表 4 可以看出验证参数的误差均在 3% 以内，证明了集总参数法建立回热器动态模型的可靠性。

表 3 换热器设计模型验证结果

参数	计算值	文献值	误差	参数	计算值	文献值	误差
L_z/m	0.85	0.86	1.2%	$\Delta p_h/\text{kPa}$	1.08	1.08	0.0%
$k/(\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1})$	1431	1437	0.4%	$\Delta p_c/\text{kPa}$	1.39	1.40	0.7%

$$\frac{T - T_0}{T_\infty - T_0} = (1 - e^{-1}) \quad (17)$$

表 4 回热器动态模型验证结果

参数	计算值	文献值	误差
$T_{\text{cout}}, \tau=0\text{s}$	537.0 °C	532.1 °C	0.9%
$T_{\text{cout}}, \tau=250\text{s}$	565.5 °C	559.6 °C	1.1%
时间常数 τ_c	6.8 s	7 s	2.9%

2 流量控制与温度控制下 S-CO₂ 循环的动态性能

一般地，S-CO₂ 动力循环中透平通过同轴连接带动同步发电机发电，发电频率受同步发电机和透平的转速影响。发电频率稳定通常要求透平转速不变，根据透平的控制方程，可以推导出温度、流量和压力需满足一定约束关系，如式(18)所示。

$$\frac{q_m}{q_{m,\text{design}}} = \sqrt{\frac{T_{\text{in,design}}}{T_{\text{in}}}} \sqrt{\frac{(\pi_T^2 - 1)}{(\pi_{T,\text{design}}^2 - 1)}} \quad (18)$$

可见，选取 S-CO₂ 循环的最高温度、质量流量以及透平膨胀比其中两个为自变量，第三个变量也就随之确定。以选取质量流量和最高温度为自变量为例，对应了流量控制和温度控制两种控制方法，分别通过 CO₂ 储罐出入阀和加热器旁通阀实现 S-CO₂ 循环质量流量和最高温度的控制，同时，使用减压阀对透平入口 S-CO₂ 压力实时控制，使得 S-CO₂ 循环的最高温度、质量流量以及最高压力满足式(18)。两种控制方法均是使用 PID 控制器控制阀门开度，在流量控制下，当 S-CO₂ 循环功率降低时，CO₂ 储罐的入口控制阀打开，部分 S-CO₂ 流体流出循环，S-CO₂ 质量流量降低，反之，CO₂ 储罐的出口控制

阀打开, S-CO₂ 质量流量升高; 在温度控制下, 当 S-CO₂ 循环功率降低时, 加热器旁通阀打开, 部分 S-CO₂ 流体不经过加热器加热而与经过加热的另一部分 S-CO₂ 流体混合, 从而降低透平入口 S-CO₂ 的温度, 反之, 关闭加热器旁通阀, 使得更多的 S-CO₂ 流体被加热,透平入口 S-CO₂ 温度提高。

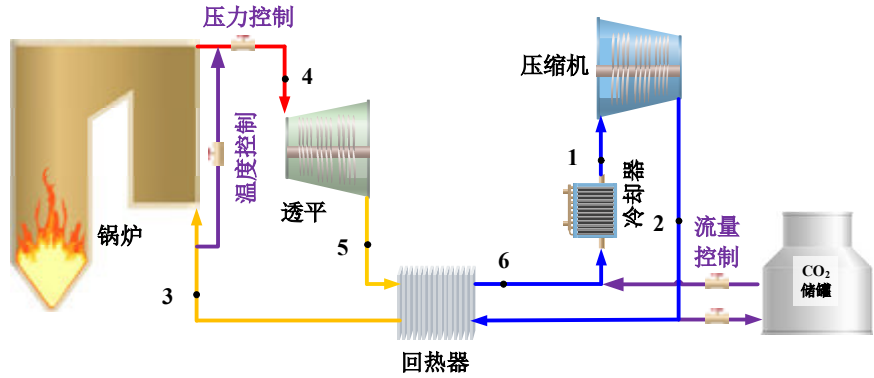


图 3 温度控制和流量控制示意图

图 4 展示了流量控制和温度控制下, S-CO₂ 循环功率和效率随时间的变化规律。当 S-CO₂ 循环功率在 20s 从 1000MW 调整至 900MW 时, 流量控制使用了 60s 达到了稳定状态, 负荷变化速率为 10%/min, S-CO₂ 循环效率从 45.70%降低至 44.98%, 效率损失 0.72%; 温度控制使用了 75s 达到了稳定状态, 负荷变化速率为 8%/min, S-CO₂ 循环效率从 45.70%降低至 42.98%, 效率损失 2.72%。可见, 流量控制具有更快的负荷变化速率和更低的效率损失, 是较为有效的 S-CO₂ 循环控制方法。

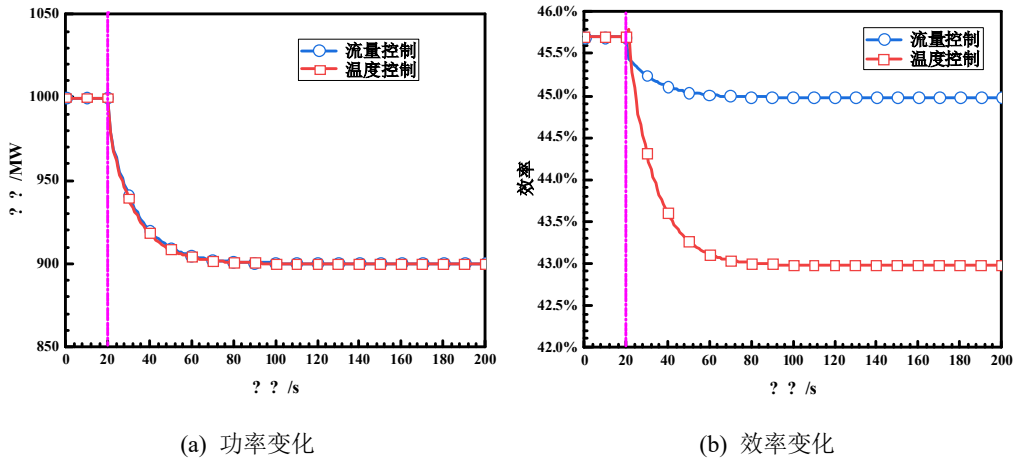


图 4 流量控制与温度控制下 S-CO₂ 循环的动态性能

3 回热器参数对 S-CO₂ 循环动态性能的影响

本节选取流量控制下, S-CO₂ 循环功率从 100%降低至 90%作为基础工况, 分析了回热器热导、长度和通道数量等关键设计参数对 S-CO₂ 循环实时效率、负荷变化速率等动态性能参数的影响规律。

3.1 回热器长度

S-CO₂ 循环动态性能随回热器长度的变化规律如图 5 所示。可以发现, 当回热器长

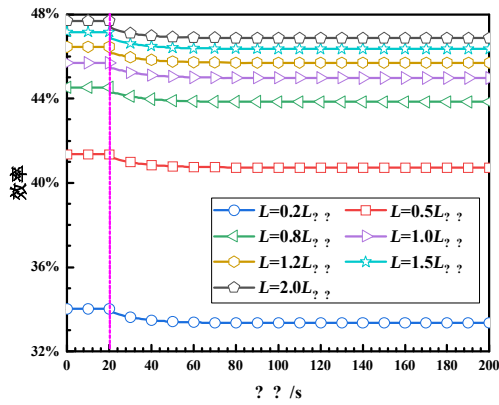
度增大到设计长度的 2 倍时, S-CO₂ 循环的实时效率约提高 2.0%; 而当回热器长度缩短到设计长度的 0.2 倍时, S-CO₂ 循环的实时效率约降低 11.5%。这是由于回热器的长度增加提高了流体在回热器内的流动时间, 降低了冷/热侧的温差, 使得回热量提高; 反之亦然。当回热器长度在 $0.5L_{\text{设计}} \sim 1.5L_{\text{设计}}$ 之间时, S-CO₂ 循环的变负荷调节时间与回热器长度并无正相关关系, 在 56s~68s 之间, 对应的负荷变化速率在 8.82%/min~10.71%/min 之间, 而当回热器长度过长或过短时, 均会使变负荷调节时间延长, 负荷变化速率降低。当回热器长度为设计长度的 2 倍时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率降低至 7.89%/min, 当回热器长度为设计长度的 0.2 倍时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率降低至 7.59%/min。这是因为回热器的长度变化会同时影响流动惯性和传热惯性。当长度增加时, 回热器换热面积增加, 在换热系数不变时, 回热器热导增加, 回热器换热量增加, 换热量与热导的比值降低, 即传热惯性降低; 同时, 在回热器通道截面积不变时, 回热器的通道总体积增加, 使得通道内冷/热流体的总质量增加, 通道内流体总质量与质量流量的比值增加, 即流动惯性增加。当回热器长度过长时, 流动惯性对 S-CO₂ 的动态性能起主要制约作用, 当回热器长度过短时, 传热惯性对 S-CO₂ 的动态性能起主要制约作用。

3.2 对流换热系数

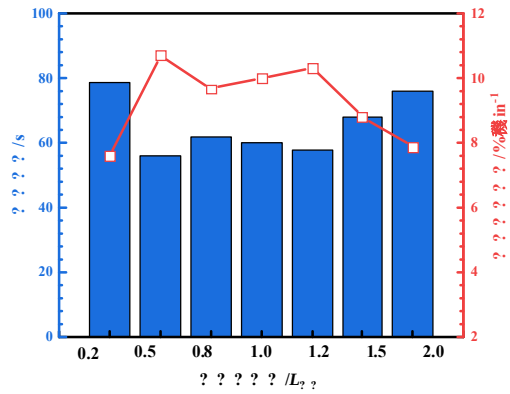
S-CO₂ 循环动态性能随对流换热系数的变化规律如图 6 所示。可以发现, 当回热器对流换热系数增加到设计值的 1.5 倍时, S-CO₂ 循环的实时效率约提高 1.5%; 而当回热器对流换热系数减小到设计值的 0.1 倍时, S-CO₂ 循环的实时效率约降低 16.3%。这是由于回热器的对流换热系数增加提高了 S-CO₂ 的回热量; 反之亦然。当对流换热系数在从 $0.1h_{\text{设计}}$ 提高至 $1.5h_{\text{设计}}$ 时, S-CO₂ 循环的变负荷调节时间从 53s 提高至 70s 之间, 对应的负荷变化速率从 11.32%/min 降低至 8.57%/min。回热器的对流换热系数变化仅影响传热惯性, 当对流换热系数增加时, 回热器换热面积不变, 回热器热导增加, 回热器换热量增加, 传热惯性增加。

3.3 回热器通道数量

S-CO₂ 循环动态性能随回热器通道数量的变化规律如图 7 所示。可以发现, 当回热器通道数量增大到设计值的 2 倍时, S-CO₂ 循环的实时效率约提高 0.6%; 而当回热器通道数量减小到设计值的 0.3 倍时, S-CO₂ 循环的实时效率约降低 1.2%。可见, 回热器通道数量对 S-CO₂ 循环效率的影响较小。当回热器通道数量在 $0.3N_{\text{cp,设计}} \sim 1.5N_{\text{cp,设计}}$ 之间时, S-CO₂ 循环的变负荷调节时间与回热器通道数量并无正相关关系, 在 60s~73s 之间, 对应的负荷变化速率在 8.22%/min~10.00%/min 之间。当回热器通道数量过多, 为设计值的 2 倍时, 变负荷调节时间大幅延长至 92s, 负荷变化速率大幅降低至 6.52%/min。这是因为回热器的通道数量变化对流动惯性和传热惯性的影响较为复杂。当通道数量增加时, 回热器流体流速下降, 雷诺数下降, 换热系数下降, 而换热面积增加, 由式(10)可知努塞尔数和雷诺数的经验关联式是指数关系, 幂次为 0.809, 回热器热导增加, 而回热器换热量几乎不变, 换热量与热导的比值降低, 即传热惯性降低; 同时, 在回热器通道截面积和通道长度不变时, 回热器的通道总体积增加, 使得通道内冷/热流体的总质量增加, 通道内流体总质量与质量流量的比值增加, 即流动惯性增加。因此, 当回热器通道数量增加时, 流动惯性增加而传热惯性下降; 反之亦然。

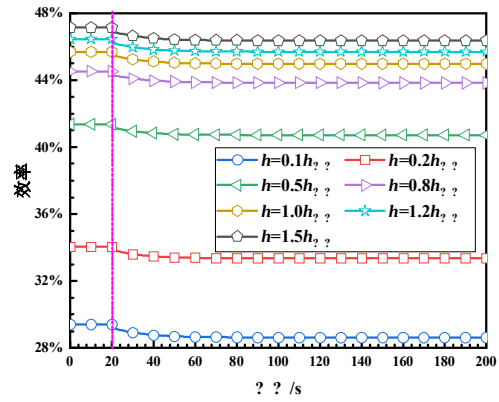


(a) 实时效率变化

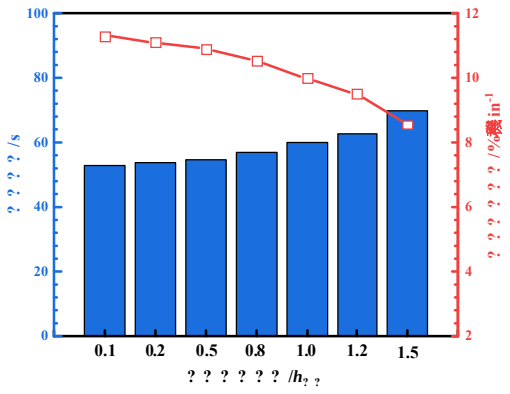


(b) 调节时间变化

图 5 S-CO₂ 循环动态性能随回热器长度的变化规律

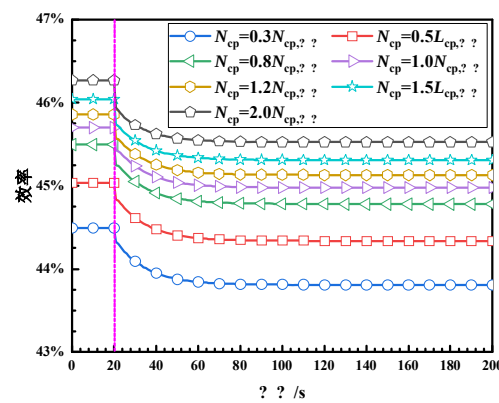


(a) 实时效率变化

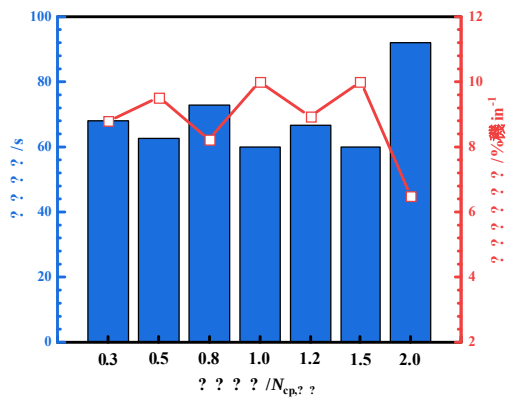


(b) 调节时间变化

图 6 S-CO₂ 循环动态性能随对流换热系数的变化规律



(a) 实时效率变化



(b) 调节时间变化

图 7 S-CO₂ 循环动态性能随回热器通道数量的变化规律

3.4 S-CO₂ 循环负荷变化速率云图

由 3.1~3.3 的分析可知，回热器长度和回热器通道数量对回热器热惯性的影响是非

常复杂的, 定量的数学关系难以获得。在式(11)和式(12)的回热器能量方程中, 除温度、压力、流量等运行参数外, 回热器关键设计参数为流体通道体积 V 和热导 kA 。同时, 回热器长度、对流换热系数、通道数量等的变化可以归纳为 V 和 kA 的变化。鉴于此, 提取流体通道体积 V 和热导 kA 为特征参数, 绘制 S-CO₂ 循环负荷变化速率云图, 如图 8 所示。S-CO₂ 循环的负荷变化速率随回热器流体通道体积 V 的提高而提高, 当 V 从 $0.5V_{\text{设计}}$ 提高至 $1.5V_{\text{设计}}$ 时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率从 $9.68\%/min$ 降低至 $10.17\%/min$; S-CO₂ 循环的负荷变化速率随回热器热导 kA 的提高而降低, 当 kA 从 $0.5kA_{\text{设计}}$ 提高至 $1.5kA_{\text{设计}}$ 时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率从 $10.91\%/min$ 降低至 $8.57\%/min$ 。当 $V=1.5V_{\text{设计}}$, $kA=0.5kA_{\text{设计}}$ 时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率最高, 为 $11.32\%/min$ 。进一步, 通过多元回归分析方法拟合了 S-CO₂ 循环负荷变化速率与流体通道体积 V 和热导 kA 的数学表达式, 如式(19)所示, 有助于不同回热器设计参数下 S-CO₂ 循环负荷变化速率的快速评估与计算。

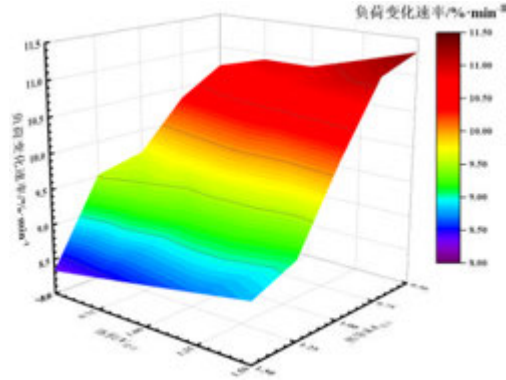


图 8 S-CO₂ 循环负荷变化速率曲线图

$$R = 12.0344 - 2.5067 \frac{kA}{kA_{\text{设计}}} + 0.3755 \frac{V}{V_{\text{设计}}} \left(0.5 \leq \frac{kA}{kA_{\text{设计}}} \leq 1.5, 0.5 \leq \frac{V}{V_{\text{设计}}} \leq 1.5 \right) \quad (19)$$

4 结论

本文对比了流量控制和温度控制下 S-CO₂ 循环的变负荷动态性能, 分析了 S-CO₂ 循环实时效率、负荷变化速率等动态性能参数随回热器热导、长度和通道数量等关键设计参数的变化规律。主要结论如下: (1) 通过与牛顿第二定律的比拟, 使用回热器流体通道总体积和体积流量表征流动惯性, 回热器换热量和热导表征传热惯性。(2) 当 S-CO₂ 循环负荷指令从 100%降低至 90%时, 流量控制下, S-CO₂ 循环效率损失为 0.72%, 负荷变化速率为 $10\%/min$; 温度控制下, S-CO₂ 循环效率损失为 2.72%, 负荷变化速率为 $8\%/min$, 流量控制更为有效。(3) S-CO₂ 循环的负荷变化速率随回热器流体通道体积 V 的提高而提高, 当 V 从 $0.5V_{\text{设计}}$ 提高至 $1.5V_{\text{设计}}$ 时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率从 $9.68\%/min$ 降低至 $10.17\%/min$; S-CO₂ 循环的负荷变化速率随回热器热导 kA 的提高而降低, 当 kA 从 $0.5kA_{\text{设计}}$ 提高至 $1.5kA_{\text{设计}}$ 时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率从 $10.91\%/min$ 降低至 $8.57\%/min$ 。当 $V=1.5V_{\text{设计}}$, $kA=0.5kA_{\text{设计}}$ 时, S-CO₂ 循环的负荷变化速率最高, 为 $11.32\%/min$ 。(4) 绘制了 S-CO₂ 循环负荷变化速率云图, 通过多元回归分析方法拟合了 S-CO₂ 循环负荷变化速率与流体通道体积 V 和热导 kA 的数学表达式。

参考文献

- [1] Guo JQ, Li MJ, He YL, et al. A systematic review of supercritical carbon dioxide (S-CO₂) power cycle for energy industries: Technologies, key issues, and potential prospects[J]. Energy Conversion and Management, 2022, 258: 115437.
- [2] Wang K, He YL, Zhu HH. Integration between supercritical CO₂ Brayton cycles and molten salt solar power towers: A review and a comprehensive comparison of different cycle layouts[J]. Applied Energy, 2017, 195:819-836.
- [3] Zhu HH, Wang K, He YL. Thermodynamic analysis and comparison for different direct-heated supercritical CO₂ Brayton cycles integrated into a solar thermal power tower system[J]. Energy, 2017, 140(1):144-157.
- [4] Wang K, He YL. Thermodynamic analysis and optimization of a molten salt solar power tower integrated with a recompression supercritical CO₂ Brayton cycle based on integrated modeling[J]. Energy Conversion and Management, 2017, 135: 336-350.
- [5] He YL, Qiu Y, Wang K, et al. Perspective of concentrating solar power[J]. Energy, 2020, 198: 117373.
- [6] Li MJ, Yan JJ, Zhu HH, et al. The thermodynamic and cost-benefit-analysis of miniaturized lead-cooled fast reactor with supercritical CO₂ power cycle in the commercial market[J]. Progress in Nuclear Energy, 2018, 103: 135-150.
- [7] Li MJ, Xu JL, Cao F, et al. The investigation of thermo-economic performance and conceptual design for the miniaturized lead-cooled fast reactor composing supercritical CO₂ power cycle[J]. Energy, 2019, 173: 174-195.
- [8] Xu JL, Sun EH, Li MJ, et al. Key issues and solution strategies for supercritical carbon dioxide coal fired power plant[J]. Energy, 2018, 157:227-246.
- [9] Sun EH, Xu JL, Li MJ, et al. Connected-top-bottom-cycle to cascade utilize flue gas heat for supercritical carbon dioxide coal fired power plant[J]. Energy Conversion and Management, 2018, 172:138-154.
- [10] Sun EH, Xu JL, Hu H, et al. Overlap energy utilization reaches maximum efficiency for S-CO₂ coal fired power plant: A new principle[J]. Energy Conversion and Management, 2019, 195:99-113.
- [11] Sun EH, Xu JL, Li MJ, et al. Synergetics: the cooperative phenomenon in multi-compressions S-CO₂ power cycles[J]. Energy Conversion and Management: X, 2020, 7:100042.
- [12] Jiang Y, Liese E, Zitney SE, et al. Design and dynamic modeling of printed circuit heat exchangers for supercritical carbon dioxide Brayton power cycles. Applied Energy 2018, 231:1019-1032.
- [13] Deng T, Li X, Wang Q, et al. Dynamic modelling and transient characteristics of supercritical CO₂ recompression Brayton cycle[J]. Energy, 2019, 180: 292-302.
- [14] Iverson BD, Conboy TM, Pasch JJ, et al. Supercritical CO₂ Brayton cycles for solar-thermal energy[J]. Applied Energy, 2013, 111: 957-970.
- [15] Li H, Zhang Y, Bai W, et al. Control strategies and dynamic experimental tests on the wide-range and rapid load regulation of a first pilot multi-megawatts fossil-fired supercritical CO₂ power system[J]. Energy Conversion and Management, 2023, 279: 116748.

热管式相变储热结构同时充放热特性研究

梁林 1*, 赵耀华 2, 刁彦华 2, 李顺 1

(1 燕山大学, 河北省低碳清洁供热技术创新中心, 秦皇岛 066000)

(2 北京工业大学, 城市建设学部, 北京 100124)

(Tel:13126666803, Email: lianglin@ysu.edu.cn)

摘要: 相变储热装置同时充放热模式可保障能源系统的热功率稳定性, 但相较于单独的融化、凝固过程, 关注较少。本文以长直平板热管作为核心热桥, 构成了三段式相变储能装置, 并对其同时充放热模式下的传热特性进行实验研究。结果表明, 根据载热流体温度流量不同, 初期相变材料会出现吸热或者放热两种情况, 但最终都会达到一个稳态工况, 即只进行冷、热流体的直接换热, 且相变材料温度及功率恒定。冷流体温度越低, 达到稳态的时间越短。

关键词: 相变储热; 同时充放热; 热管; 多孔扁管

0 前言

随着人口的迅速增长和气候变化风险的不断增加, 清洁可持续能源的需求在过去几十年中显著增加。相变蓄热作为一种节能减排新技术, 对可再生能源的合理利用具有重大意义, 其可以解决能源供给和需求在时间和空间上的不匹配性, 克服可再生能源的波动性和不稳定性^[1]。该技术可广泛应用于工业余热回收、电网调峰、太阳能储存、民用建筑空调等诸多领域^[2]。

相变蓄热技术是一种发展潜力巨大的节能减排手段, 但目前相变蓄热装置的整体性能难以保证。作为潜热储能系统的重要组成部分, 相变储能材料应具备相变潜热高、相变温度适宜、相变体积变化率小、导热系数高、无腐蚀性、价格合理易获得和过冷度低等特点^[3]。目前绝大多数相变材料中, 有机相变材料普遍热导率低, 无机相变材料存在过冷现象, 为克服相变材料的缺点, 研究人员做了多方面的研究, 主要包括相变热特性强化以及蓄热装置结构的优化设计等方面。

相变材料热特性强化方面, 主要以添加高导热系数材料, 提升相变材料热物性为主。泡沫铜由于具备导热性好、密度小以及孔隙率高等优点, 泡沫铜作为强化相变材料热特性简单有效的材料, 已成为研究的重点。将铜泡沫和石蜡相结合, 不仅可以提升相变材料的导热系数, 还可以增加相变材料侧的换热面积。朱孟帅等^[4]就铜泡沫对相变材料的融化过程影响进行了研究, 发现铜泡沫的填充大大增强了相变材料的导热性, 并改善了相变材料内部的温度分布。Prasanth 等^[5]使用泡沫铜和铜/铝丝编织泡沫结构来强化储能装置中相变材料的导热性, 发现通过金属泡沫的使用, 明显减少了相变材料充放热的时间。Esapour 等^[6]对多管换热器中嵌入铜金属泡沫的相变材料的融化和凝固特性进行研究, 结果表明, 添加铜泡沫可以显著提升相变材料的导热率。

结构优化设计方面, 以管壳结构为主, 管壳结构的换热装置作为相变蓄热装置最常

见的结构被广泛研究。Raut 等^[7]通过 FLUENT 对填充 RT35 的矩形管壳式潜热储能装置分别在串联和并联两种连接方式下进行充放热模拟,结果表明,充放热循环的所有条件下,串联布置优于并联布置。Zhu 等^[8]从充放热角度研究了不等长翅片排列对管壳式相变蓄热系统热性能的影响,保证翅片体积不变的情况下,优化翅片的排列情况,研究发现,随着翅片的排列变化,相变材料融化和凝固时间也具有明显变化。虽然管壳式装置受的关注较多,但需要注意的是若要实现同时充放热,必须在装置内添加换热流体通道,这将减少装置内相变材料的填充体积,导致储能密度降低。

热管由于具有高导热性和良好的等温性,在工程上的多种领域有着广泛的应用^[9]。热管可以把发热物质的热能快速传导到热源外面,其导热能力远高于所有已知的金属材料^[10]。目前很多研究人员将热管应用在相变蓄热中以进一步提升相变蓄热装置的整体性能。近年来,人们对热管技术在太阳能、热交换器、建筑物冷却和电子元件领域的应用进行了越来越多的研究^[11]。Robak 等^[12]研究了热管和翅片对储热系统性能(吸热和放热率)的影响,结果显示,热管的应用对储热装置的充放热性能有很大提升。Sharifi 等^[13]比较了热管、实心棒和空心管对潜热装置相变材料融化的影响,结果显示,热管由于热阻很小且温度均匀性好具有最好的传热性能。Maldonado 等^[14]对热管在相变蓄热装置中的应用进行了系统回顾分析,并详细讨论了相变蓄热装置集成热管的实验研究和数值建模的最新进展。Shabgard 等^[15]将热管应用在高温太阳能蓄热系统中,并进行了数值模拟研究,结果表明,随着热管用量的增加,系统充放热速率显著增加。Shailesh 等^[16]将一种用于电子热管理的翅片散热器与热管耦合进行实验传热分析,结果表明带热管的翅片散热器提高了换热性能,有利于电子元件的有效热管理。卢小辉等^[17]采用脉动热管对相变材料蓄热进行强化,研究发现,换热流体流量和相变材料温度对相变蓄热影响显著。王增义等^[18]设计了一种热管式换热器,实验研究了充放热过程。实验结果表明,热管可以有效增强相变蓄热装置的性能。热管由于其出色的热传导机理和内部相变介质的快速热传导特性,能够更容易实现相变蓄热装置的同时充放热。同时充放热过程中,热管蓄热段作为蒸发端,放热段作为冷凝端,不需要添加新的换热通道就可以直接实现热量从加热段到取热段的传递。

平板微热管阵列是一种传热特性很高的器件,它能够在无附加外力的条件下通过有限截面积,远距离传输大量热量。相较于其他传热技术,具有温度可控、体积小、效率高、损失小以及安全性高等优势^[18]。刁彦华等^[19]基于平板热管技术设计了一套相变蓄热装置,实验结果表明平板微热管阵列传热性能稳定,蓄热装置充放热效果良好。李凤飞等^[20]通过平板微热管阵列的低温相变蓄热装置对充放热过程中平板微热管阵列的均温性、蓄热器内部的温度变化情况进行了实验研究。结果显示,在充放热过程中平板微热管阵列温度均匀性良好,蓄热装置换热性能好。梁林等^[21]设计了以平板微热管阵列-泡沫铜复合结构为基础的相变蓄热装置,对不同换热流体体积流量和温度下的充放热功率进行了实验研究,结果表明,换热流体体积流量增加以及增大与相变材料的温差都可以提高充放热功率。

综上所述,相变蓄热技术具有巨大的应用潜力,针对充放热性能低的问题,研究人员做了多方面的研究,其中热管的使用显著提高了相变蓄热装置的换热性能。但目前研

究主要集中在单独充放热条件下的换热性能，实际应用中，由于可再生清洁能源供应的不稳定性和波动性以及能源需求端的不可预测性，需要相变蓄热装置能够满足在同时充放热模式下的稳定运行。相较于单独充放热，同时充放热模式所具有的特性尚不明晰，本文基于平板微热管阵列式相变蓄热装置，对其同时充放热模式进行了实验研究。研究分析了同时充放热的基本性能表现，以及换热流体温度、体积流量对换热特性的影响。

1 实验材料和方法

1.1 相变蓄热装置结构介绍

本文采用平板微热管阵列—泡沫铜复合结构相变蓄热装置进行实验研究，该蓄热装置采用多孔扁管对换热流体进行强化换热，相变材料侧换热由泡沫铜强化，以平板微热管阵列作为核心传热元件提升整体性能。装置主要包括：平板微热管阵列-泡沫铜复合结构、载热流体通路（多孔扁管）、相变材料（石蜡）以及蓄热箱体。装置结构如图 1 所示。

根据工作原理，平板微热管阵列分为三部分，从上到下分为加热段、蓄热段、取热段。加热段和取热段都与多孔扁管相接触，蓄热段和泡沫铜及相变材料接触。热管总长 1025 mm，宽 96 mm，厚 3 mm。其中加热段长 285 mm，蓄热段长 455 mm，取热段长 285 mm。矩形泡沫铜尺寸为 450 mm × 96 mm × 25 mm。蓄热箱体尺寸为 516 mm × 60 mm × 455 mm（长×宽×高），箱体钢板厚度为 3mm。

蓄热装置包括 5 根平板微热管阵列、8 根多孔扁管、10 块泡沫铜以及一个蓄热箱体。并在蓄热装置外表面包裹保温材料。每个平板微热管阵列的中间两侧都粘有两个泡沫铜，被包裹在储热箱内，石蜡作为 PCM 填充在铜泡沫中。加热流体通道和取热流体通道分别包含 4 根多孔扁管，冷流体通道连接在平板微热管阵列的顶部，平板微热管阵列两侧的两根多孔扁管串联，并与另外两根多孔扁管并联，使得冷流体在同一侧流入和流出。热流体通道连接到平板微热管阵列底部，配置与冷流体通道相同。载热流体为水。装置中采用的石蜡、水和泡沫铜的具体物性参数详见表 1、表 2。

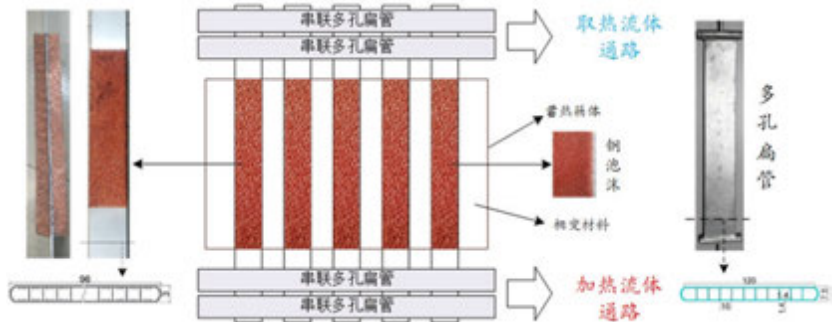


图 1 平板微热管阵列-泡沫铜复合结构相变蓄热装置结构图

Fig. 1 Structure diagram of latent heat thermal storage device based on flat plate micro heat pipe array and copper foam composite structure

表 1 石蜡、水物性参数表

Table 1 Paraffin property parameters

物质	密度 g/cm ³	熔点 °C	潜热 kJ/kg	比热 kJ/(°C·kg)	导热系数 W·m ⁻² ·k ⁻¹
石蜡	1.25 (固), 0.8 (液)	47-52	153.4	2.83	0.11
水	1.0	—	—	4.182	0.6

表 2 泡沫铜物性参数表

Table 2 Foam copper property parameter

物质	PPI	孔隙率	密度 g/cm ³	比热 KJ/(°C·kg)	导热系数 W·m ⁻² ·k ⁻¹
泡沫铜	10	96%	8.9	0.39	360

1.2 相变蓄热装置工作原理

平板微热管阵列的每个小孔通道都是一个热管，内部填充有传热工质。蓄热过程中，热流体流经加热通路，在多孔扁管内通过对流换热将热量传递给管路内壁，热量再通过导热传到热管加热段，热管工质吸热升温蒸发，将热量传递到蓄热段，蓄热段热管工质冷凝放热，将热量传递给热管外部的金属泡沫铜和相变材料，热量通过泡沫铜可以实现快速均匀的传递。这个过程中热管加热段为蒸发端，蓄热段为冷凝端；热管内冷凝后的液态工质在重力作用下回流到热管的加热段。至此实现了一个循环。放热过程和蓄热类似，此时热管蓄热段作为蒸发端，取热段为冷凝端，相变材料将储存的热量传递给取热流体。

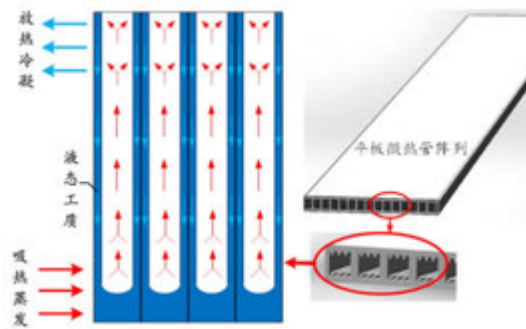


图 2 平板微热管阵列热管工作原理图

Fig. 2 Working principle diagram of flat micro heat pipe array heat pipe

本文探究的是同时充放热模式下相变蓄热装置的特性，在这种模式下，冷热流体同时流经冷流体通道和热流体通道，可能出现以下三种工况：热流体和相变材料一起向冷流体的传热；热流体向相变材料和冷流体的传热；只发生热流体和冷流体之间的热传递。

1.3 实验过程

1.3.1 实验系统介绍

实验系统主要分为相变蓄热装置、冷热水循环系统和数据采集系统。冷热水循环系统为实验提供特定温度和体积流量的冷水及热水，由独立热水循环系统和冷水循环系统组成，每个独立的循环系统都包括 1 台恒温水浴，1 个调节阀，1 台电磁流量计和若干连接水管。数据采集系统由 1 台数据采集仪，1 台计算机和若干测温热电偶（阻）组成。实验系统如图 3（左）所示，实验中所用仪器及设备的具体参数见表 3。

实验采用 T 型软线热电偶对蓄热箱体温度分布进行测量，采用热电阻对加热及取热通路进出口水温进行测量。铜泡沫中放置 15 个热电偶，以检测相变材料在垂直和水平方向上的温度，其中 5 个热电偶被放置在平板微热管阵列的表面上。详细位置如图 3（右）所示。

实验中，恒温水浴将水温稳定在某一特定值并由内置水泵驱动水在管路内流动，同时在电磁流量计和调节阀的配合下将流入相变蓄热装置换热的水控制在某一恒定流量。数据采集仪收集热电偶（阻）测量的电信号并将其传送给与之连接的计算机，计算机将接收到的信号转换成温度值后，记录并显示。

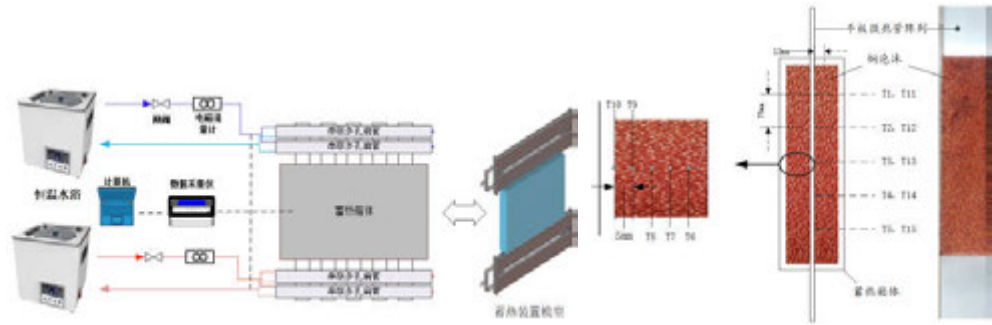


图 3 实验系统图（左）和装置热电偶测温点布置图（右）

Fig. 3 Experimental system diagram (left) and Device thermocouple temperature measurement point layout diagram (right)

表 3 实验设备信息

Table 3 Information of experimental equipment

设备名称	规格	量程	精度
恒温水浴	DTY-20	0℃ – 90℃	±0.1℃
热电阻	Pt100	0℃ – 100℃	±0.25℃
热电偶	T 型	0℃ – 100℃	±0.5℃
电磁流量计	L-MAG511	2 L/min - 5 L/min	0.5%
数据采集装置	Agilent 34970A	——	——

1.3.2 实验数据处理

同时充放热模式中，热流体供热功率和冷流体取热功率可由进出口换热流体的温差来进行计算。

热流体供热功率可表示为：

$$P_{hot} = C_p \rho V_{hot} (T_{in,hot} - T_{out,hot}) \quad (1)$$

冷流体取热功率可表示为：

$$P_{cold} = C_p \rho V_{cold} (T_{in,cold} - T_{out,cold}) \quad (2)$$

其中： P — 功率，kW；

C_p — 水的比热，kJ/(K·kg)；

V — 水的体积流量，m³/s；

ρ — 水的密度，kg/m³；

T — 换热流体进出口温度，℃。

1.3.3 误差分析

实验测试中，由于实验仪器精度问题，数据处理结果会不可避免的存在系统误差。定义实验结果 y 是互相独立的测量变量 $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ 的函数，

$$y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \quad (3)$$

那么 y 的标准误差 Δy 可以按下式计算

$$\Delta y = \left[\left(\frac{\partial y}{\partial x_1} \Delta x_1 \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial x_2} \Delta x_2 \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial x_3} \Delta x_3 \right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial y}{\partial x_n} \Delta x_n \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

上式中的 $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3, \dots, \Delta x_n$ 为对应测量仪器的测量误差。本试验中用到的实验仪器精度已在表 3 中列出。根据公式计算得出 W 的最大误差为 2.3%。

2 结果与讨论

2.1 换热流体温度的影响

在不同的实验工况下，即冷、热流体体积流量 4 L/min，热流体温度 80℃，相变材料初始温度为 35℃，冷流体温度分别取 30℃、20℃、15℃ 时冷、热流体的取、供热功率以及石蜡平均温度的变化情况如图 4 所示。

如图 4（左）所示，此时的冷流体温度为 30℃。随着时间的推移，供热功率逐渐减小，取热功率逐渐增大，最终都趋于平稳。可以看出同时充放热过程明显分为两个阶段，在第一阶段，供热功率明显大于取热功率，石蜡的平均温度迅速上升。这表明热流体是唯一热源，热流体将热量同时传递给石蜡和冷流体。在这种情况下，石蜡从热流体中吸收热量，平均温度从 35.1℃ 升高到 45.6℃。在石蜡不断吸收热量，平均温度逐渐升高的

同时，与热流体之间的温差逐渐减小，使得热流体向石蜡传递的热量不断减少，向冷流体传递的热量逐渐增加。随后的一段时间里，同时充放热达到了一个近似稳态的状态，在此状态下，供热和取热功率趋于稳定并接近相等，石蜡的平均温度不再变化，热量直接从热流体传递给冷流体。

当冷流体温度变为20 °C时，如图4（中），供热功率、取热功率和石蜡的平均温度的变化曲线与冷流体温度为30 °C时的变化趋势相似。前期石蜡平均温度逐渐升高，供热功率不断减小，取热功率逐渐增大。中后期石蜡温度基本保持不变，供、取热功率趋于相等。可知，前期热流体同时向石蜡和冷流体传递热量，而中后期热流体的热量基本上全部传递给冷流体。

当冷流体温度变为15 °C时，如图4（右），石蜡平均温度的变化与上述实验情况有明显的不同，此时石蜡温度趋于下降。这一结果表明，由于冷流体温度足够低，在早期吸收了石蜡和热流体的热量，取热功率大于供热功率。在中后期供、取热功率相等且恒定的情况下，石蜡的平均温度最终保持恒定。纵观整个过程，石蜡释放热量至冷流体，平均温度从33.8 °C降至31.6 °C。

从冷流温度由30 °C逐渐降低至15 °C的三种工况中可以看出，无论热流体和冷流体的温度如何，在同时充放热模式下，都将达到近似的稳态。在这种状态下，热量几乎直接从热流体传递到冷流体。此外，根据初始时石蜡、热流体和冷流体的温度，在达到近似稳定状态之前会发生两种情况：一种是热流体将热量传递给石蜡和冷流体，另一种是冷流体从热流体和石蜡中吸取热量。

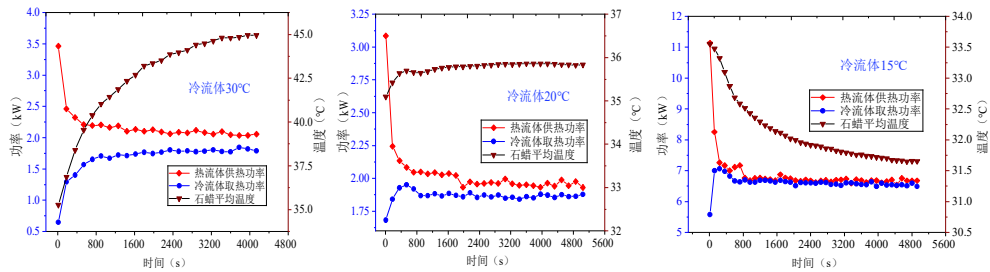


图4 流量4 L/min，热流体80 °C，不同冷流体温度下供、取热功率变化及石蜡平均温度变化情况

左：冷流体30 °C，中：冷流体20 °C，右：冷流体15 °C

Fig. 4 Volume flow 4L/min, hot water 80 °C, The changes of heat supply and extraction power and the average temperature of paraffin at different cold fluid temperatures were analyzed, left: cold water 30 °C, midst: cold water 20 °C, right: cold water 15 °C

虽然不同冷流体温度工况下，同时充放热模式都会达到稳态，但是达到稳态的时间并不一样。为直观地表示不同冷流体温度下石蜡平均温度到稳态温度的影响，引入无量纲温度参数 ϕ ，定义如式（5），式中， T 表示石蜡平均温度， T_{in} 表示石蜡初始温度， T_f 表示石蜡稳态温度。引入时间常数 α ，定义为石蜡从初始温度到最终稳态温度63.2%的时间，如式（6），用于表示同时充放热模式中不同冷流体温度下石蜡温度变化的响应时间。

$$\varphi = (T - T_{in}) / (T_{fi} - T_{in}) \quad (5)$$

$$\alpha = \tau \Big|_{\varphi=0.632} \quad (6)$$

图5显示了不同冷流体温度下的时间常数。从图中可以看出，在冷流体温度为20℃时，时间常数最短。结合图6可以看出，该工况下，石蜡初始温度与石蜡稳态温度最接近，因此最快达到稳态。当冷流体温度为25℃和30℃时，时间常数分别为451 s和605 s，可以看出，石蜡吸热工况中，冷流体温度越低达到稳态的时间越快。而当冷流体温度为15℃时，由上文分析可知石蜡向冷流体释放热量，响应时间为955 s。

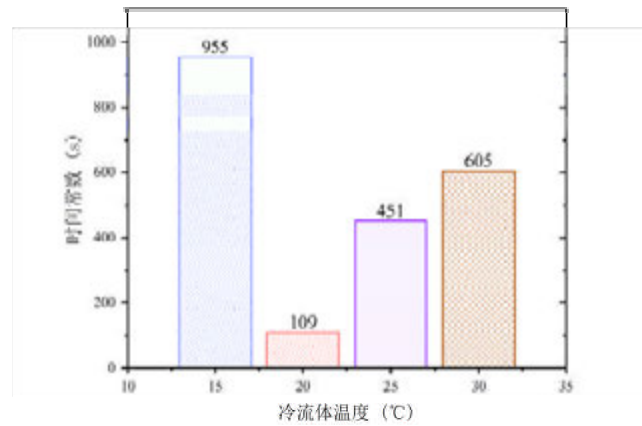


图 5 流量 4L/min，热流体 80℃，不同冷流体温度下时间常数情况

Fig. 5 Volume flow 4L/min, hot water 80 °C, time constant diagram at different cold fluid temperatures

2.2 体积流量的影响

相较于图 7 所示工况，图 9 中冷流体的流量从 4 L/min 减小到 2 L/min，温度依然为 15℃。可以明显看出，流量减小后初期的换热过程发生了变化，相较于图 7，石蜡温度呈现上升趋势，流量的减小增大了冷流体侧的换热热阻，导致石蜡不再是向冷流体放热，而是从热流体吸热。初始时，体积流量为 4 L/min 时的取热功率大于体积流量为 2 L/min 时的取热功率，随后两种体积流量下的取热功率趋于平稳且相等。体积流量为 4 L/min 时的石蜡平均温度显著低于体积流量为 2 L/min 时的石蜡平均温度，这说明冷流体体积流量对同时充放热稳态下的取热功率没有影响，但小体积流量会导致相变材料稳态温度较高。当体积流量由 4 L/min 减少到 2 L/min 时，石蜡稳态温度提高了 12%左右。

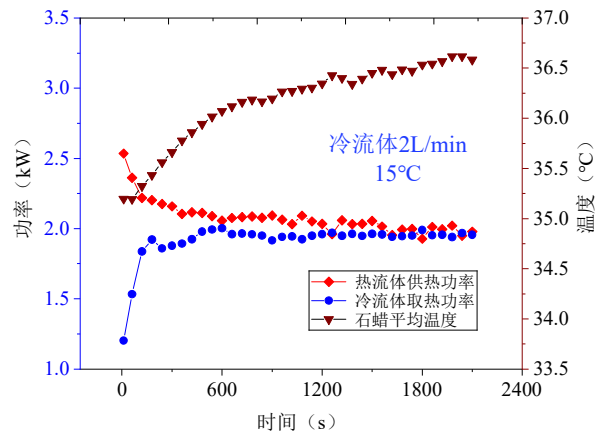


图6 热流体 4 L/min、80 °C，冷流体 2 L/min、15 °C，供、取热功率变化及石蜡平均温度变化情况

Fig. 6 Hot water 4L/min, 80 °C, cold water 2 L/min, 15 °C, charging power, discharging power and the average temperature of paraffin

4 结 论

本文以平板微热管阵列为核心热桥，对热管式相变储热装置的同时充放热模式进行了实验研究。研究过程中，同时充放热模式相较于传统的单充、单放模式展示出了不同的特性表现。研究结果如下：

(1) 在同时充放热模式中，存在一个稳态模式，此时当相变材料温度达到某一值时，相变材料温度保持稳定且功率恒定，相变蓄热装置只发生热流体和冷流体间的换热。达到稳态时相变材料的温度随着冷流体温度的升高而升高，随冷流体流量的减小而增大。

(2) 在同时充放热模式的初始阶段，由于冷、热流体和相变材料温度的不同，存在两种换热模式，即冷流体同时从热流体和相变材料中吸收热量、热流体同时加热相变材料和冷流体。

(3) 在相变材料温度增加的工况中，冷流体温度越低，同时充放热模式到达稳态模式的时间越短，稳态时对应的相变材料温度越低。

总之，热管式相变储热装置可实现同时充放热功能，且可通过载热流体温度和流量的变化灵活调节初期功率及启动时间，这有助于太阳能热利用、余热利用系统的优化设计。

参考文献

- [1] M. Rogowski, R. Andrzejczyk, Recent advances of selected passive heat transfer intensification methods for phase change material-based latent heat energy storage units: A review, *International Communications in Heat and Mass Transfer* 144 (2023).
- [2] 王梅杰,胡良博.相变蓄热技术的研究现状及发展趋势[J].*能源研究与利用*,2021(05):28-32+47.
- [3] 田玮俊,刘何清,吴世先.相变储能材料的应用述评[J].*广东化工*,2023,50(04):108-109+101.

- [4] 朱孟帅,闫勤学,王子龙,孙向昕,宋瀚文.铜金属泡沫填充率对相变材料融化过程强化传热的机理研究[J].中国电机工程学报,2022,42(13):4915-4924.
- [5] N. Prasanth, M. Sharma, R.N. Yadav, P. Jain, Designing of latent heat thermal energy storage systems using metal porous structures for storing solar energy, *Journal of Energy Storage* 32 (2020).
- [6] M. Esapour, A. Hamzehnezhad, A.A. Rabienataj Darzi, M. Jourabian, Melting and solidification of PCM embedded in porous metal foam in horizontal multi-tube heat storage system, *Energy Conversion and Management* 171 (2018) 398-410.
- [7] D. Raut, S. Londhe, V.R. Kalamkar, Performance investigation of latent heat energy storage in series and parallel arrangement: A numerical study, *Journal of Energy Storage* 55 (2022).
- [8] Y. Zhu, Y. Yu, Y. Qiu, Effect of fins with unequal length on the performance of cylindrical latent heat storage system, *Journal of Energy Storage* 35 (2021).
- [9] L.-l. Jiang, Y. Tang, W. Zhou, L.-z. Jiang, T. Xiao, Y. Li, J.-w. Gao, Design and fabrication of sintered wick for miniature cylindrical heat pipe, *Transactions of Nonferrous Metals Society of China* 24(1) (2014) 292-301.
- [10] 陈其昌.热管技术及性能分析程序研究[J].原子能科学技术,2020,54(07):1176-1184.
- [11] A. Jaisatia Varthani, S. Shasthri, S. Baljit, V. Kausalyah, A systematic review of metal foam and heat pipe enhancement in Latent Heat Thermal Energy Storage system, *Journal of Energy Storage* 56 (2022).
- [12] C.W. Robak, T.L. Bergman, A. Faghri, Enhancement of latent heat energy storage using embedded heat pipes, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 54(15-16) (2011) 3476-3484.
- [13] N. Sharifi, S. Wang, T.L. Bergman, A. Faghri, Heat pipe-assisted melting of a phase change material, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 55(13-14) (2012) 3458-3469.
- [14] J.M. Maldonado, D. Verez, A. de Gracia, L.F. Cabeza, Comparative study between heat pipe and shell-and-tube thermal energy storage, *Applied Thermal Engineering* 192 (2021).
- [15] H. Shabgard, T.L. Bergman, N. Sharifi, A. Faghri, High temperature latent heat thermal energy storage using heat pipes, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 53(15-16) (2010) 2979-2988.
- [16] K. Shailesh, Y. Naresh, J. Banerjee, Heat transfer performance of a novel PCM based heat sink coupled with heat pipe: An experimental study, *Applied Thermal Engineering* 229 (2023).
- [17] 卢小辉,罗孝学,曹士博,邹长贞,侯显斌,艾志强.甲醇脉动热管相变蓄热器蓄热实验分析[J].低温与超导,2022,50(01):88-94.
- [18] 王增义,刘中良,马重芳.热管式相变蓄热换热器储/放能过程中传热特性的实验研究[J].工程热物理学报,2005(06):91-93.
- [19] 刁彦华,汪顺,赵耀华,李诚展,朱婷婷,康亚盟.平板微热管阵列相变蓄热装置蓄/放热性能[J].北京工业大学学报,2016,42(10):1552-1559.
- [20] 李凤飞,刁彦华,赵耀华,朱婷婷,刘婧.平板微热管式相变蓄热装置蓄放热特性研究[J].工程热物理学报,2016,37(06):1253-1260.
- [21] 梁林,刁彦华,康亚盟,赵耀华,魏向前,陈传奇.平板微热管阵列-泡沫铜复合结构相变蓄热装置蓄放热特性[J].化工学报,2018,69(S1):34-42.

基于模糊—PID 的船用二回路系统 除氧器压力控制研究

于承民, 张国磊, 姚俊伟, 管理

(1. 哈尔滨工程大学, 黑龙江 150001)

(联系电话: 15776223169, E-mail: 15331944921@163.com)

摘要: 本文建立一种基于遗传算法优化的自适应模糊控制器, 通过 GSE 仿真平台建立船舶核动力系统仿真模型, 研究了负荷变化时除氧器动态响应特性。通过对所搭建的系统仿真分析, 验证了建模方法的可行准确性。仿真结果表明, 经过遗传算法优化的模糊 PID 控制器具有自适应性强、超调量小、调节时间短的控制效果。相比传统压力 PID 控制, 机组的调节过程震荡次数明显减少, 压力的稳定时间缩短 6.4%, 压力的超调量降低 5.77%, 优化了船用除氧器压力控制。

关键词: 模糊控制; 船舶二回路动力系统; 除氧器; 压力控制; 遗传算法

0 引言

在二回路动力系统中, 除氧系统是二回路的重要组成部分, 其功能是除去水中的氧气, 提高设备的使用寿命。考虑到船舶航行的稳定性及机动性需求, 因此对除氧器压力控制的研究是十分必要的^[1]。国内外学者对除氧器做了大量研究, 从日学^[2]描述了除氧器分段结构, 研究了快速甩负荷变化时除氧器变化特征; 吴立强等^[3]描述了负荷变化时除氧器压力变化的动态特性, 对整体除氧器压力控制提供参考; 程刚等^[4]从船用定压除氧设备的稳态及动态工作特性进行了仿真分析, 给出扰动变化时除氧器动态响应。

通过对除氧器动态特性研究, 得到除氧器压力的变化具有大非线性、负荷扰动、不确定时滞等特点, 为达到更好的压力控制效果, 张小娟^[5]在单级 PI 控制器引入模糊自整定策略, 提高了除氧系统性能指标; 张好^[6]将粗糙集理论与模糊神经网络结合起来, 利用粗糙集从观测数据中提取规则, 并寻求最小规则集, 解决模糊神经网络“规则爆炸”问题, 有利于模糊规则库的设立; Bartosz Puchalski^[7]提出多区域模糊逻辑控制器, 证明了具有 PID 控制器的多区域模糊逻辑控制器相对于传统控制器的优势, 提供系统内模糊控制器配合的可行性; 罗玉浩^[8]模拟操作人员的逻辑特点, 设计了 PID 和模糊控制相结合的仿人逻辑控制策略, 该控制方法适合于非线性及时变系统的控制。考虑到模糊 PID 控制器的隶属度函数位置选取与模糊规则库等设计参数和 PID 控制器初始参数的选取都依赖于操作经验和专家经验, 所以为避免设计不合理带来的控制不足, 汪洋^[9]基于动态神经模糊模型训练调整模糊规则库, 结合 PD 控制器构造自适应控制器, 通过仿真结果验证了方法的有效性; 王宏涛^[10]采用基于特征参数的混合编码遗传算法优化模糊 PID 控制器的主要设计参数的方法。

上述研究主要集中在电站除氧器水位压力控制, 与传统电厂蒸汽动力系统相比, 船

用二回路系统按照船舶运行工况的要求需频繁改变负荷，负荷对除氧器压力的干扰具有不确定性，因此本文设计一种结合遗传算法优化的船用除氧器压力模糊控制器。

1 除氧器仿真模型建立

船用核动力系统中凝给水子系统主要设备包括冷凝器和除氧器组成^[11]。除氧器如图 2 所示，其在子系统的主要功能是降低蒸汽发生器给水中的含氧量，使其达到标准要求，以此保证蒸汽发生器、汽轮机组及整个系统的金属部件在高温下不发生过度的氧化腐蚀。

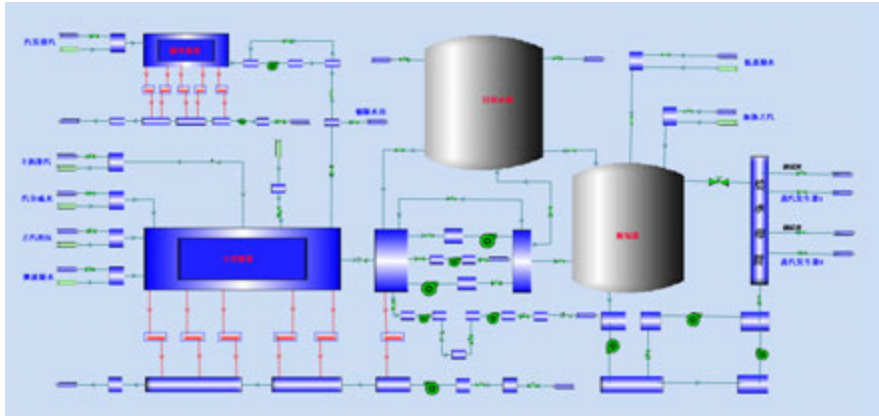


图 1 凝给水子系统仿真图

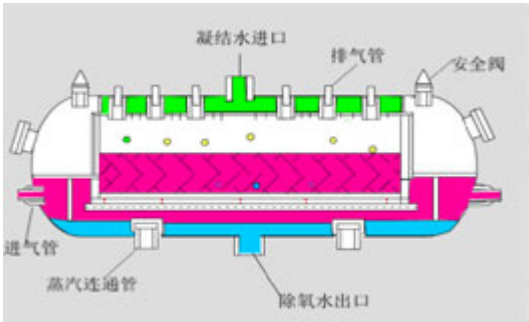


图 2 除氧器装置图

本文以凝给水子系统中除氧器作为主要研究对象，对除氧器装置在二回路系统变负荷过程中的工作特性进行仿真研究。

除氧器数学模型

除氧器的建模可分气体和液体两部分控制体进行建模，两部分体积和等于除氧器的体积。

- (1) 忽略除氧器向外界环境的散热损失；
- (2) 除氧器内压力和温度处处相同，且汽、液两相处于相平衡状态；
- (3) 内部工质都处于饱和状态。

除氧器内体积可表示为除氧器内液相体积和气相体积之和：

$$V=V_s+V_w \tag{1}$$

除氧器整体质量平衡方程:

$$\sum G_{in} - G_{out} = \frac{d}{dt}(\rho_s V_s + \rho_w V_w) \quad (2)$$

除氧器整体能量平衡方程:

$$\sum (G_{in} h_{in}) - G_{out} h_w = \frac{d}{dt}(\rho_s V_s h_s + \rho_w V_w h_w - kpV) \quad (3)$$

$$-\frac{dV_s}{dt} = \frac{dV_w}{dt} = F \frac{dL}{dt} \quad (4)$$

整理上述公式, 得到推导公式:

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\sum (G_{in} h_{in}) - G_{out} h_w - \frac{h_w \rho_w - h_s \rho_s}{\rho_w - \rho_s} (\sum G_{in} - G_{out})}{V_s \left(\frac{h_s - h_w}{\rho_w - \rho_s} \rho_w \frac{d\rho_s}{dp} + \rho_s \frac{dh_s}{dp} \right) + V_w \left(\frac{h_s - h_w}{\rho_w - \rho_s} \rho_s \frac{d\rho_w}{dp} + \rho_w \frac{dh_w}{dp} \right) - kV} \quad (5)$$

$$\frac{dV_w}{dt} = \frac{\sum G_{in} - G_{out} - (V_s \frac{d\rho_s}{dp} + V_w \frac{d\rho_w}{dp}) \frac{dp}{dt}}{\rho_w - \rho_s} \quad (6)$$

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\sum G_{in} - G_{out} - (V_s \frac{d\rho_s}{dp} + V_w \frac{d\rho_w}{dp}) \frac{dp}{dt}}{(\rho_w - \rho_s)F} \quad (7)$$

式中: k —单位转换系数; V —除氧器总体积, m^3 ; V_s —除氧器中气体体积, m^3 ; V_w —除氧器中液体体积, m^3 ; P —除氧器内部压力, Pa ; L —除氧器的水位, m ; F —除氧器的横截面积, m^2 ; ρ_s —除氧器内饱和蒸汽密度, kg/m^3 ; ρ_w —除氧器内饱和水密度, kg/m^3 ; h_s —除氧器内饱和蒸汽比焓, kJ/kg ; h_w —除氧器内饱和水比焓, kJ/kg ; G_{in} —除氧器各支路进口汽水流量, kg/s ; h_{in} —除氧器各支路进口汽水比焓, kJ/kg ; G_{out} —流出除氧器的未饱和水流量, kg/s ;

2 基于自适应模糊 PID 控制设计

2.1 仿真模型验证

自适应模糊控制器在常规 PID 控制器基础上加入模糊逻辑和模糊推理, 通过语言变量实现对 k_p , k_i , k_d 参数的实时调整, 从而优化整体系统的稳定时间、超调量等动态响应。

本文使用的是二维模糊控制器, 模糊控制器的输入信号是偏差 $e(t)$ 和偏差变化率 $e'(t)$ 。输入信号经由模糊化处理, 模糊规则判别, 模糊推理和解模糊化后输出信号, 对 k_p , k_i , k_d 参数进行自适应调整, 如图 2 所示。

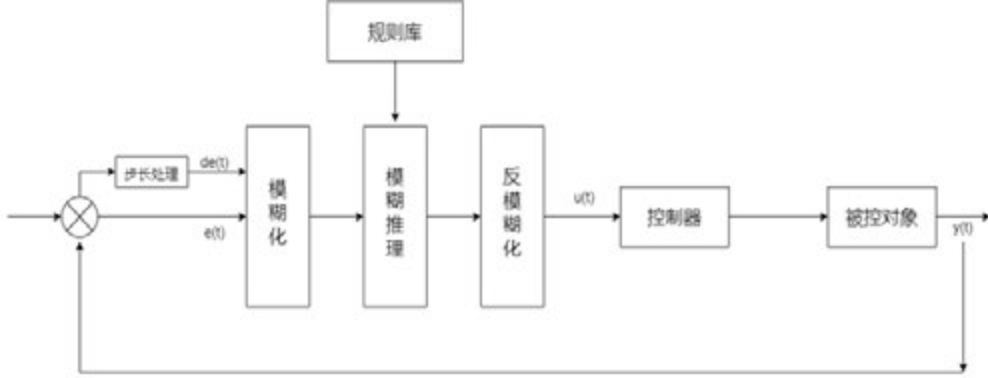


图2 模糊控制器结构图

根据试验压力控制需求，确定压力变化及变化率信号，进行尺度变化和量化处理，转化论域为 $E, EC, Z = \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$ ，对应模糊子集为 $\{NB, NM, NS, ZE, PS, PM, PB\}$ ，其中元素分别代表负大、负中、负小、零、正小、正中、正大。选择输入、输出信号的隶属度函数为相对灵敏的式(13)三角形函数。

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x \leq a, x \geq d \\ \frac{x-a}{b-a} & a < x < b \\ 1 & b \leq x < c \\ \frac{d-x}{d-c} & c \leq x < d \end{cases} \quad (8)$$

模糊控制规则库由一系列的 IF-THEN 语句规则构成，以单个 $k_i = k_{i0} + z_i$ 参数为例，存在以下 49 条规则的规则库：

$$R_i: \text{if } e(t) \text{ is } E_i \text{ and } e'(t) \text{ is } EC_i, \text{ then } z \text{ is } Z_i, i = 1, 2, \dots, 49$$

在模糊控制中，模糊推理常用模糊蕴含最小运算和模糊蕴含积运算的运算方法，经过近似推理得到对应规则的输出为：

$$Z'_i = (E'_i \text{ and } EC'_i) \circ (E'_i \text{ and } EC'_i \rightarrow Z_i) \quad (9)$$

式中：and 采用最小算子； $\circ$ 采用最大-最小合成；模糊蕴含关系 $\rightarrow$ 采用模糊蕴含最小运算。

$$\begin{aligned} \mu_{Z'_i}(z) &= \bigvee_{\substack{e \in E \\ ec \in EC}} [\mu_{E_i}(e) \wedge \mu_{EC_i}(ec)] \wedge \\ &[(\mu_{E_i}(e) \wedge \mu_{EC_i}(ec)) \wedge \mu_{Z_i}(z)] = \omega_i \wedge \mu_{Z_i}(z) \end{aligned} \quad (10)$$

式中： ω_i 为规则 R_i 的激励强度。

由于实际控制器参数为准确定值，因此需要将模糊推理输出 $\mu_{Z'_i}(z)$ 转化为准确定值，本文解模糊化采用加权平均法：

$$z_i = \frac{\int_z z \mu_{Z'_i}(z) dz}{\int_z \mu_{Z'_i}(z) dz} \quad (11)$$

2.2 模糊规则库优化

本文中所使用的模糊规则库，通过结合操作人员经验与遗传算法优化得到。首先对构建的除氧器模型引入阶跃信号，得到反馈曲线并结合操作经验建立参考点，得到 k_p ， k_i 参数规则表如表 1、2 所示。

表 1 k_p 模糊规则表

k_P		e_c						
		PB	PM	PS	ZE	NS	NM	NB
e	PB	PB	PB	PM	PM	PS	ZE	ZE
	PM	PB	PB	PM	PS	PS	ZE	NS
	PS	PM	PM	PM	PS	ZE	NS	NS
	ZE	PM	PM	PS	ZE	NS	NM	NM
	NS	PS	PS	ZE	NS	NS	NM	NM
	NM	PS	ZE	NS	NM	NM	NM	NB
	NB	ZE	ZE	NM	NM	NB	NB	NB

表 2 k_i 模糊规则表

k_i		e_c						
		PB	PM	PS	ZE	NS	NM	NB
e	PB	NB	NB	NM	NM	NS	ZE	ZE
	PM	NB	NB	NM	NS	NS	ZE	ZE
	PS	NB	NM	NS	NS	ZE	PS	PS
	ZE	NM	NM	NS	ZE	PS	PM	PM
	NS	NM	NS	ZE	PS	PS	PM	PB
	NM	ZE	ZE	PS	PS	PM	PB	PB
	NB	ZE	ZE	PS	PM	PM	PB	PB

考虑到模糊规则表的选取依赖于经验与专家知识的支持，存在难以辨识具体控制对象的设计不足，所以采用遗传算法优化模糊规则表来解决这个问题，主要优化步骤有：

1) 根据模糊规则表有 49 条规则组成，隶属度区间由 21 个值划分，随机建立 N 个序列长度为 140 位的染色体，染色体编码位为 $[a_1, a_2, \dots, a_{140}]$ ， $a_1 \sim a_{49}$ 、 $a_{50} \sim a_{98}$ 、 $a_{99} \sim a_{119}$ $a_{119} \sim a_{140}$ 是分别是 k_p 、 k_i 规则的 49 位数字以及 k_p 、 k_i 隶属度函数区间，取值范围为 $[-3, 3]$ ，作为当前生成种群；

2) 更新当前种群为父代，读取当前种群各个染色体编码位，根据编码 $a_1 \sim a_{140}$ 生成 k_p 、 k_i 参数新的模糊规则以及新的隶属度函数划分，更新模糊规则表以及隶属度区间；

3) 将更新后的模糊规则表载入模糊控制器中，运行模糊 PID 控制器完成负荷突变时除氧器压力控制仿真，获得 t 时刻除氧器压力与期望压力的误差信号 $e(t)$ ，计算目标函数 $J(\text{ITAE})$ ：

$$J(\text{ITAE}) = \int_0^{T_n} t \|e(t)\| dt \quad (17)$$

式中： T_n 一为当前第 n 次迭代时运行模糊 PID 控制器完成一次负荷突变时压力控制仿真总时间。

考虑后续的轮盘选择原则来筛选子代配对，引入适应度函数 $F(\text{pred})$ 满足种群的进化筛选：

$$F(\text{pred}) = \frac{1}{J(\text{ITAE}) + 1} \quad (18)$$

4) 排序当前种群个体染色体对应的适应度函数值，参照对当前种群进行选择、复制、变异、交叉配对等遗传操作，生成下一代迭代的子群；

完成除氧器压力控制模糊 PID 控制器的遗传算法优化，具体遗传算法设置参数如下：种群数 $N=100$ ，选择算子采用赌轮选择法，两点交叉配对比例为 0.5，变异概率为

0.1，循环迭代为 100。运行遗传算法优化模糊 PID 控制器的模糊规则表，得到如图 3 所示的遗传迭代图，从图中分析可知遗传算法在 53 代后最大适应度函数值基本不变化，寻优结果接近当前最优解。

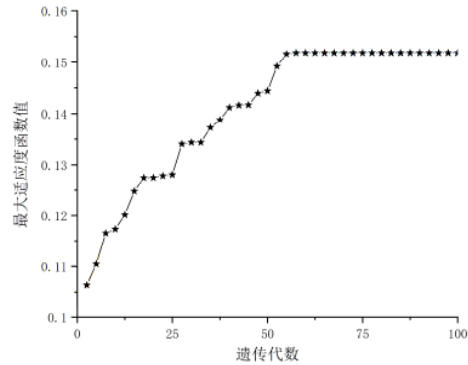


图 3 遗传迭代图

3 除氧器仿真结果及分析

3.1 仿真模型验证

建立二回路动力系统仿真模型，基于该模型，高速工况和低速工况主要稳态参数与设计值对比如表 1 所示，以下所有参数均以高工况为基准进行归一化处理。

表 4 系统仿真值与相对误差

参数	高工况			低工况		
	仿真值	设计值	相对误差/%	仿真值	设计值	相对误差/%
除氧器压力/MPa	1.0003	1	0.0003	0.9999	1	-0.0001
除氧器水位/℃	1.000	1.000	0.0000	0.9999	1	-0.0001
冷凝水流量/kg/s	1.0011	1.000	0.0011	0.4663	0.4326	3.37

通过对比结果可知，系统的主要性能参数仿真稳态值误差在 5%以内，说明建立的系统较为准确，能较好模拟变负荷工况下的机组响应。

3.2 负荷变化下控制反馈

3.2.1 负荷扰动变化

为研究模糊控制器稳态工况的控制性能，进一步验证三种控制器控制算法在系统内的可行性。在 $t=190s$ 时引入瞬态微小扰动变化信号，将压力目标值设为 0.115，从图 4 可以看出，在微小扰动下，模糊控制器相比于 PID 控制器，曲线波动更为平稳，波动较小，但调整到目标值能力较弱，而优化后的模糊控制器相比 PID 控制器具有更好的快速响应能力，面对微小扰动调节到达设定目标能力更强。同时，除氧器压力变化趋势证明了模糊控制器在二回路系统内的实际可行性。

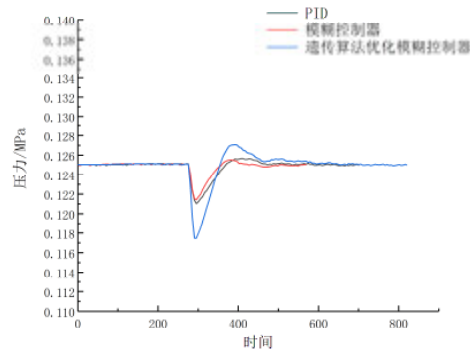


图 4 稳定状况扰动时压力变化

3.2.2 负荷切换变化

根据船舶实际运行工况的要求，海上航行情况多变，相应航行工况变化频繁，参考实际航行过程中高工况切换到低工况的工作情况，模拟负荷大阶跃变化下二回路动力系统响应。

从系统的安全性和稳定性分析，如图 5 所示，在第 280 秒时引入负荷突变信号，模拟工况“高一低”的变化。当二回路动力系统切换工况时，会对除氧器压力产生很大的扰动，对比 PID 控制器，采用自适应模糊控制器后，除氧器压力超调量由原来的 10.84% 降低至 7.41%，震荡幅度更小；而经过遗传算法优化后的模糊控制器的超调量相比于模糊控制器降低了 2.34%，上下浮动变化范围更小，压力波动首次进入 $\pm 5\%$ 的稳定速度提高了 6.4%，整体变工况过渡过程超调更小，压力波动更为平滑。

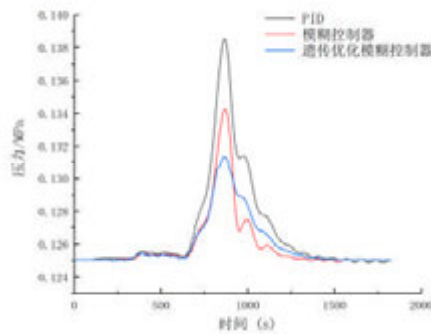


图 5 负荷突变时压力变化

对比观察除氧器产出给水、除氧器进气以及冷凝器冷凝水流量对压力变化进行分析，除氧器除氧水流量、给水流量流量差以及除氧器进气量如图 6、图 7 所示

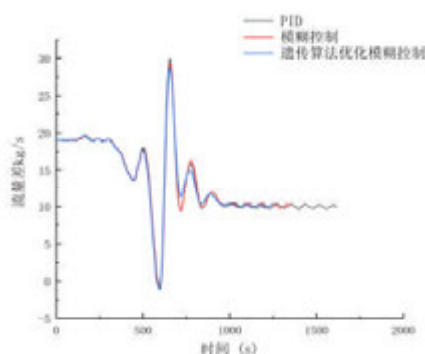


图6 流量差

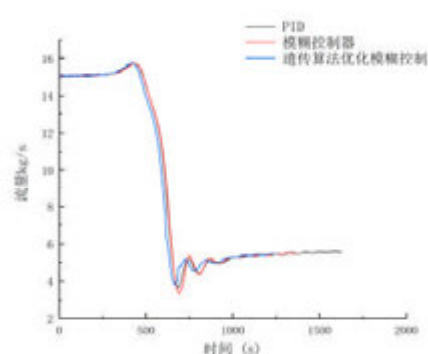


图7 乏汽进汽量

通过对汽水流量的观察，可以看出，优化后的模糊控制器，抑制乏汽进气量超调能力提升，除氧器汽水波动幅值变小，更有利于除氧器压力控制。

采用不同控制方法对船舶从高工况至低工况的动态仿真结果表明，系统整体工况切换是除氧器压力的扰动来源，因此除氧器扰动最终稳定时间基本不变，而经过遗传算法优化后的模糊控制器响应时间变化不大，因此主要优化目标函数选择为误差累计值，整体评价模糊控制器控制效果更佳。

以遗传算法优化后的模糊控制器为例，对负荷突变时系统鲁棒性提高的原因进行分析，在负荷由高工况突变到低工况时， k_p 、 k_i 参数依据模糊规则做自适应调整，结果如图6所示，在负荷突变时二维输入信号变化，根据模糊规则 k_p 参数值向上突变， k_i 参数值向下迅速变小，相应控制参数的变化使负荷突变初期以及后续二次波动可快速响应，并且保持调节过程的稳定性；随着后续误差信号与误差变化率逐渐变小后， k_p 、 k_i 参数逐渐向初始参数回落。

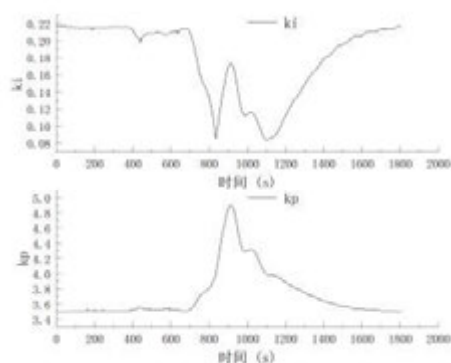


图6 负荷突变时系数变化

4 结论

针对除氧器在变负荷过程中的压力控制优化需要，建立了一种除氧器压力自适应模糊控制器，通过和串级PID控制器的比较，可以得到以下结论：

- (1) 模糊控制器与串级PID控制器相比，前者控制参数实现自适应调整功能，能在

负荷改变初期快速反应，降低响应时间的同时保持控制过程的稳定性；

(2) 模糊控制器在压力调节能力上，相比于常规 PID 调节更具优势，压力超调量减少 3.43%，调节速度更快，并且整体震荡次数减少；

(3) 经过遗传算法优化模糊规则后的模糊 PID 控制器具有更好的控制性能，压力超调减少 2.34%，整体震荡次数减少，稳定时间缩短 6.4%，表明了基于遗传算法优化的模糊 PID 控制器在除氧器压力控制中具有良好的效果；

参考文献

- [1] 江正悦. 核动力二回路凝给水系统控制策略优化研究[D]. 哈尔滨工程大学, 2019.
- [2] 丛日学, 于晓辉, 孟祥玉, 王迪, 陈立军. 火电机组快速甩负荷过程除氧器动态特性研究[J]. 东北电力大学学报, 2018, 38(02): 46-51.
- [3] 吴立强, 谭文, 王艳红. 基于 Modelica 和 Dymola 的除氧器建模与仿真[J]. 现代电力, 2008, No. 96(05): 57-62. DOI: 10.19725/j.cnki.1007-2322.2008.05.013.
- [4] 朱国情, 程刚, 倪何等. 某型船用除氧装置动态数学模型和仿真[J]. 计算机仿真, 2009, 26(07): 104-108.
- [5] 张小娟. 模糊 PID 控制在除氧系统中的应用[J]. 机械与电子, 2009, No. 203(09): 66-68.
- [6] 张伟, 边信黔, 夏国清等. 基于规则的冷凝器压力系统协调控制研究[J]. 热能动力工程, 2009, 24(02): 188-191+265.
- [7] 张好, 朱齐丹, 戴天虹, 穆丽新. 船舶动力系统智能控制[J]. 吉林大学学报(工学版), 2011, 41(01): 221-225. 2011.01.024.
- [8] 顾挺, 涂鸿焱, 赵传啸. 基于模糊神经网络的水轮发电机组甩负荷过程调速器开度模式控制[J/OL]. 水力发电: 1-7[2023-03-20].
<http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.1845.TV.20230214.1453.003.html>.
- [9] 王怀康, 赵立业. 改进预估模糊 PID 控制在气动阀门定位系统中的应用[J]. 组合机床与自动化加工技术, 2023, No. 587(01): 142-146. DOI: 10.13462/j.cnki.mmtamt.2023.01.032.
- [10] 王宏涛, 蒋清泽, 张强, 戴宁. 轨迹跟踪的混合编码遗传优化模糊 PID 控制策略[J]. 哈尔滨工程大学学报, 2021, 42(7): 1076-1082.

基于分液冷凝的热泵热水器性能优化

杨铭, 陈健勇, 陈颖, 罗向龙, 梁颖宗, 何嘉诚, 杨智

(广东工业大学 材料与能源学院, 广东 广州 510006)

(Tel: 020-39322570, Email: jianyong@gdut.edu.cn)

摘要: 为进一步提高热泵热水器的性能系数, 缩短加热时间, 将模块化建模与准稳态计算方法结合, 建立动态的热泵热水器模型。利用分液冷凝技术对制冷剂的状态进行调控, 以最大性能系数为优化目标, 以冷凝器管程布置和分液效率为设计变量, 探索热泵热水器的性能优化潜力。结果表明, 与 BLS 相比, PEELS 的性能系数提高了 7.47%, 加热时间减少了 12.15%。此外, 研究发现系统性能最优不代表换热器的传热性能最优, 且性能优化在加热过程的前期效果最佳。

关键词: 热泵热水器; 分液冷凝; 管程布置; 性能优化

0 前言

热水是现代生活的重要组成部分, 超过 90% 的中国家庭使用热水器制取生活热水^[1]。在碳达峰、碳中和的背景下, 亟需发展绿色环保、低碳高效的水热水器产品。空气源热泵热水器以环境空气为热能, 能源效率是传统化石燃料热水器的 4-5 倍。提高热泵热水器性能系数 (Coefficient of Performance, COP), 有助于减少能源消耗, 提高产品竞争力。因此, 热泵热水器的性能提升是目前研究的重点^[2]。

国内外的专家学者主要从系统循环类型、部件结构、运行策略等方面提高热泵热水器的系统性能。Wu 等人^[3]提出了一种新型两级加热热泵热水器, 采用两股温度不同的制冷剂来加热水, 以缩小制冷剂和水之间的温度差距, 从而提高系统效率。研究发现, COP 提高了 17.43%。刘恒等人^[4]开发了一个外绕式热泵热水器的耦合模型, 设计了一种变外盘管螺距的热泵热水器, 相比于定盘管螺距, 该系统的传热系数和 COP 分别提高了 21.91% 和 10.75%。Wang 等人^[5]针对跨临界 CO₂ 热泵热水器的运行策略进行优化。采用模型预测控制方法, 依据控制模型和目标函数进行优化, 使系统 COP 最大。虽然这些方法能够在一定程度上提高系统性能, 但对于流体的换热过程, 传热恶化区域仍然存在^[6], 如何缩短甚至消除传热恶化区域, 维持制冷剂高效传热是性能提升关注的重点。

冷凝器作为热泵热水器的重要部件, 其传热特性对热泵热水器的性能有重要影响。常用的强化传热技术虽然能够改善换热器的传热性能, 但同时会造成更大的压降, 导致耗功增加, 系统性能系数降低^[7]。而分液冷凝技术通过及时分离冷凝液体, 维持高效传热, 同时降低了流动阻力。Chen 等人^[8]将分液冷凝器应用于热泵热水器, 综合讨论热泵热水器系统性能。结果显示, 冷凝器流量不均的情况得到改善, 传热系数提高了 25.6%。

基金项目: 2021 年佛山市促进高校科技成果服务产业发展扶持项目: 基于气液调配强化传热和储热的高效热泵研发及产业化

但以上研究忽略了分液效率在动态过程中的变化^[9]，无法准确反映分液效率对系统性能的影响，因此有必要考虑分液效率的动态变化，探究热泵热水器性能优化的潜力。

本文通过优化分液冷凝器的管程布置和分液效率，改善冷凝器内部的换热过程，探究动态变化的热泵热水器性能提升。通过对比优化前后热泵热水器系统随时间变化的性能参数，分析分液冷凝对系统传热特性的影响，为进一步提高系统能效提供理论依据。

1 物理模型

1.1 分液冷凝水箱

外盘管微通道冷凝器在水箱外侧，包括平行的微通道换热管及位于两端的联箱。在联箱内设置挡板，能够改变冷凝器内部制冷剂原有的流动路径，通过改变挡板的位置，可实现不同的管程布置。如图 1(a)所示，外盘管微通道冷凝器有六个管程，其换热管数依次为 7 根、6 根、4 根、4 根、4 根和 2 根，此管程布置命名为 7-6-4-4-4-2。对于普通的冷凝器，挡板为盲板，联箱内的制冷剂全部进入下一管程进行换热，如图 1(b)所示。而分液冷凝器的挡板包括盲板和分液隔板，分液隔板设置了若干个小孔，利用重力、毛细力以及隔板两端的压差^[9]，将分液隔板上方的液相制冷剂直接排入下部联箱，同时液相制冷剂在隔板表面形成液膜，可阻止气相制冷剂通过小孔，而气相制冷剂进入下一管程继续冷凝，如图 1(c)所示。

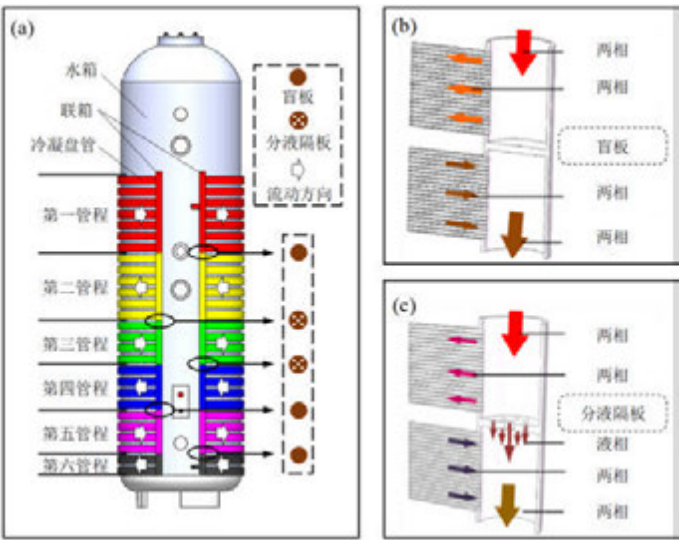


图 1 (a) 外盘管微通道冷凝水箱；(b) 制冷剂流经盲板；(c) 制冷剂流经分液隔板

1.2 其他部件

节流装置选用毛细管，其结构为直径较小的等截面光管。冷凝器出口过冷状态的液相制冷剂进入毛细管，在等焓节流的过程中，制冷剂的压力和温度迅速降低，焓值保持不变，最后两相状态的制冷剂从毛细管出口排出，进入蒸发器的进口。

蒸发器的类型为管翅式蒸发器，由若干根平行的铜管以及纵向布置的翅片构成，相邻铜管之间采用 U 形弯管连接，换热翅片沿铜管的轴向均匀排布，蒸发器整体呈 L 形。两相状态的制冷剂从蒸发器的进口输入，经过蒸发过程吸收热量，以过热状态的气相制冷剂从蒸发器出口排出，进入压缩机的进口。

压缩机采用变频转子压缩机，其主要作用是将低压的气相制冷剂进行压缩，使压力和温度升高，将高压的过热气相制冷剂输入冷凝器。具体参数如表 1 所示。

表 1 热泵热水器系统部件具体参数

部件		参数	部件		参数
冷凝器 (外盘管 微通道)	换热管数	27	蒸发器(管 翅式)	换热管数	20
	扁管宽度	25 mm		管间距	22 mm
	扁管长度	1032 mm		铜管长度	836 mm
	微通道数	18		铜管内径	8.92 mm
	通道内径	1.3 mm		翅片间距	1.2 mm
水箱	箱体内径	370 mm	毛细管	翅片厚度	0.105 mm
	箱体高度	1450 mm		长度	750 mm
	绝缘厚度	50 mm		内径	1.4 mm
	箱体容积	140 L		分液隔板数	2
压缩机	变频转子压缩机		隔板	盲板数	3

2 数学模型

2.1 冷凝水箱

水箱温度在加热过程中逐渐升高，导致冷凝器的运行工况发生改变，热泵热水器的加热过程属于动态过程。本文采用准稳态计算方法求解，将动态的加热过程看作是极短时间内稳态加热的总和。在一个时间单元内，冷凝水箱的传热特征通过计算单元的方式进行，将冷凝水箱分为三个层面：单元-换热管-管程，再按照时间维度进行运算，就可以计算得到冷凝水箱随时间变化的参数变化^[10]。由于冷凝水箱内部的换热过程较为复杂，为简化模型的计算过程，做出以下假设：

- 在一个时间间隔内，换热单元内制冷剂是稳态传热过程，制冷剂物理性质保持不变；
- 制冷剂在联箱的作用下，充分混合并均匀分配，即进入各换热管的微通道内的制冷剂物理性质相同；
- 忽略壁面热传导和冷凝器向环境的散热^[4]；
- 水箱内的水温均匀分布。

对于每个换热单元制冷剂侧和水侧的换热计算如下^[11]：

$$Q_R = h_R \times A_R \times (T_R - T_{\text{wall}}) \quad (1)$$

$$Q_W = h_W \times A_W \times (T_{\text{wall}} - T_W) \quad (2)$$

$$h = \frac{Nu \times k}{d} \quad (3)$$

式中： Q 为换热量（W）； h 为传热系数（W·m⁻²·K⁻¹）； A 为传热面积（m²）。

对于单相制冷剂侧的 Nusselt 数计算^[12]：

$$Nu_R = 0.023 Re_R^{0.8} Pr_R^{0.3}, \quad Re_R < 1.2 \times 10^5 \quad (4)$$

$$Nu_R = 1.86 \left(\frac{Re_R \times Pr_R}{l/d} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu_R}{\mu_{\text{wall}}} \right)^{0.14}, \quad Re_R > 1.2 \times 10^5 \quad (5)$$

式中： Nu 为努塞尔数； Re 为雷诺数； Pr 为普朗特数； μ 为动力粘度（Pa·s）。

对于两相制冷剂侧的 Nusselt 数计算^[13]:

$$Nu_R = \sqrt{Nu_F^2 + Nu_B^2} \quad (6)$$

$$Nu_F = 0.0152(1 + 0.6Pr_{SL}^{0.8}) \times \frac{\phi_{SV}}{X_{tt}} \times Re_{SL}^{0.77} \quad (7)$$

$$Nu_B = 0.725H(\zeta) \times \left(\frac{Ga \times Pr_{SL}}{Ph} \right)^{0.25} \quad (8)$$

式中: Φ_{SV} 为两相数乘; X_{tt} 为 Lockhart-Martinelli 变量; $H(\zeta)$ 为空隙率函数; Ga 为伽利略数。

对于水侧的 Nusselt 数计算:

$$Nu_W = 0.59(Gr_W \times Pr_W)^{1/4}, \quad Gr_W < 3 \times 10^9 \quad (9)$$

$$Nu_W = 0.1(Gr_W \times Pr_W)^{1/3}, \quad Gr_W > 3 \times 10^9 \quad (10)$$

式中: Gr 为格拉晓夫数。

分液效率 (η) 是分液隔板气液分离程度的指标, 定义为被排出的液相制冷剂流量占总液相制冷剂流量的比值, 可根据工况需要进行设计。

$$\eta = \frac{\dot{m}_{l, drained}}{\dot{m}_{l, tot}} \quad (11)$$

2.2 毛细管

本文采用经验关联式对毛细管建模, 采用了 Yang and Zhang 提出的广义关联式^[14]:

$$-dP = G^2 dv + \frac{f \times G^2 \times v}{2 \times D} dl \quad (12)$$

$$P_{in} - P_{out} = G^2 \times (v_{out} - v_{in}) + \frac{f_{ave} \times G^2 \times v_{ave} \times l}{2 \times D} \quad (13)$$

$$\frac{G^2 \times v_{in}}{P_{in}} = \frac{1 - \frac{P_{out}}{P_{in}}}{\frac{v_{out}}{v_{in}} - 1 + \frac{f \times l}{2 \times D} \times \frac{v_{ave}}{v_{in}}} \quad (14)$$

式中: G 为质量流速 ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$); f 为摩擦系数; v 为运动粘度 ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)。

2.3 蒸发器

蒸发器的建模方法与冷凝器类似, 采用分段法对蒸发器的性能进行研究, 将铜管和翅片沿流程方向进行划分, 计算换热单元的传热特性。计算单元的出口状态作为下一计算单元的进口状态, 考虑时间维度对蒸发器内部换热特性的影响。为简化模型的计算过程, 做出以下假设:

- 在一个时间间隔内, 换热单元内制冷剂是稳态传热过程, 制冷剂物理性质保持不变;
- 制冷剂充分混合并均匀分配, 即分流后得到的流体的物理性质相同;
- 空气垂直流向计算单元且速度分布均匀。

利用效率-传热单元数法 (ϵ -NTU) 计算换热单元的换热量:

$$Q = \epsilon \times C_{rate} \times (T_{hot} - T_{cold}) \quad (15)$$

$$\epsilon = 1 - \exp \left[\left(\frac{1}{C_{ratio}} \right) \times NTU^{0.22} \times (\exp[-C_{ratio} \times NTU^{0.78}] - 1) \right] \quad (\text{单相制冷剂}) \quad (16)$$

$$\varepsilon=1-\exp(-NTU) \quad (\text{两相制冷剂}) \quad (17)$$

传热单元数 NTU 的计算公式为^[15]:

$$NTU=\frac{UA}{C_{rate,min}} \quad (18)$$

$$\frac{1}{UA}=\frac{1}{\varepsilon_{fin} \times h_{air} \times A_{air}}+\frac{\delta_{wall}}{k_{wall} \times A_r}+\frac{1}{h_r \times A_r} \quad (19)$$

式中: U 为总传热系数 ($W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$); ε_{fin} 为翅片效率; δ 为厚度 (m)。

当制冷剂为单相状态时, 传热系数的计算公式^[16]:

$$h_R=\frac{Nu \times k}{d} \quad (20)$$

$$\frac{Nu}{(Re-1000) \times Pr}=\frac{0.5f}{1.07+12.7\sqrt{0.5f \times (Pr^{2/3}-1)}} \quad (21)$$

当制冷剂为两相状态时, 传热系数的计算公式^[17]:

$$h_{TP}=(h_{nb}^n+h_{cb}^n)^{\frac{1}{n}} \quad (22)$$

$$h_{nb}=55q^{0.67} \times M^{0.5} \times \left(\frac{P}{P_{critical}}\right)^{0.12} \times \left[-\log_{10}\left(\frac{P}{P_{critical}}\right)\right]^{-0.55} \quad (23)$$

$$h_{cb}=(1+1.925X_{tt}^{0.83}) \times h \times R \quad (24)$$

式中: q 为热流密度 (W); M 为摩尔质量 ($g \cdot mol^{-1}$); $P_{critical}$ 为临界压力 (Pa)。

2.4 压缩机

压缩机对系统性能有显著影响, 采用效率模型对压缩机性能进行模拟。压缩机模型关键参数 (质量流量、排气焓值和功率) 的计算公式如下所示^[18]:

$$\dot{m}=\frac{n \times \rho \times V_d \times \eta_{vol}}{60} \quad (25)$$

$$h_{out}=\frac{1}{\eta_{ise}} \times [h_{out,ise}-h_{in} \times (1-\eta_{ise})] \quad (26)$$

$$W=\frac{\dot{m} \times (h_{out}-h_{in})}{\eta_{ele}} \quad (27)$$

式中: ρ 为密度 ($kg \cdot m^{-3}$); η_{vol} 为容积效率; η_{ise} 为等熵效率; η_{ele} 为电效率。

2.5 热泵热水器系统

图 2 为热泵热水器的计算流程图。每个部件模型都是通过输入进口温度、压力和流量, 计算输出出口温度、压力和流量。首先, 输入冷凝器的初始运行参数, 该数据为真实的实验数据。按顺序依次计算冷凝水箱模型、毛细管模型、蒸发器模型和压缩机模型, 通过调整排气压力, 使流经毛细管和压缩机的流量差值在较小的范围内。通过程序迭代运行, 计算热泵热水器加热过程的热力参数变化, 直到完成加热过程。

3 实验验证

3.1 实验介绍

系统部件和测量仪器与 Chen 等人^[8]搭建的实验台一致。设备采集压力、温度、流量

和功率的精确度分别为 $\pm 0.5\%$ 、 $\pm 0.5^\circ\text{C}$ 、 $\pm 0.2\%$ 和 $\pm 0.5\%$ 。实验验证采用的微通道冷凝器管程布置为7-6-4-4-2，共有27根换热管。在冷凝器联箱中的第二和第三管程进口处设置分液隔板，分别命名为隔板I和隔板II，其余管程进口处设置盲板。根据国家标准GB-T 23137-2020《家用和类似用途热泵热水器》确定本实验的运行工况，控制干球温度为 20°C 、湿球温度为 15°C ，将水侧温度从 15°C 加热至 55°C 。将整个加热过程分为四个加热段（ $15\text{--}25^\circ\text{C}$ 、 $25\text{--}35^\circ\text{C}$ 、 $35\text{--}45^\circ\text{C}$ 、 $45\text{--}55^\circ\text{C}$ ），分别设置独立的分液效率。

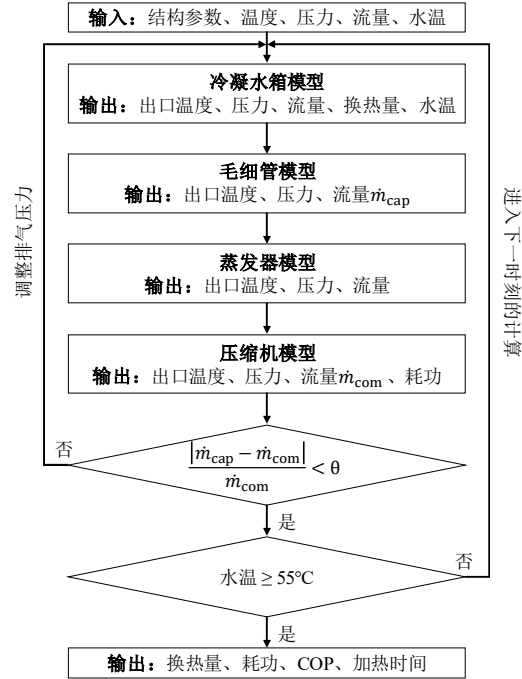


图2 热泵热水器的计算流程图

3.2 模型验证

图3对比了热泵热水器节流前后和压缩前后的温度和压力，预测温度与实验结果的平均误差为6.18%，预测压力与实验结果的平均误差为5.33%，具体数据见表2。通过对模拟值与实验值的对比，验证了热泵热水器仿真模型的准确性。

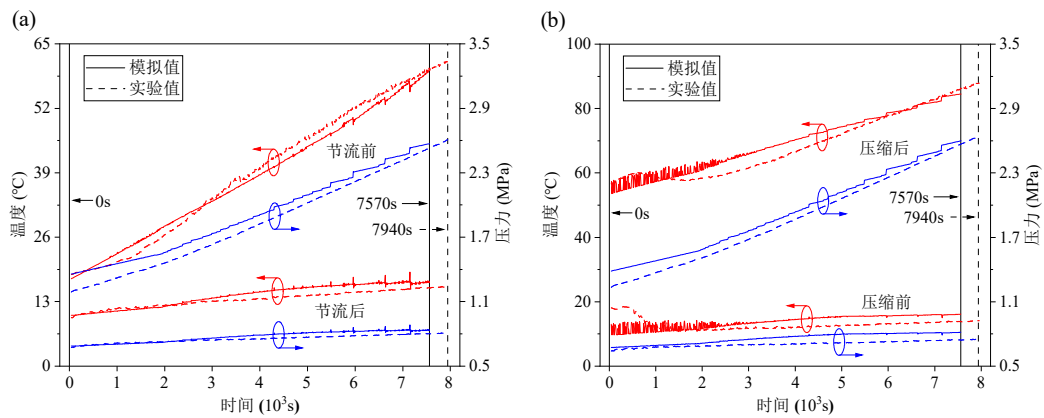


图3 分液冷凝热泵热水器验证结果 (a) 节流前和节流后；(b) 压缩前和压缩后

表 2 计算误差

参数	节流前	节流后	压缩前	压缩后
温度（℃）	4.18%	7.07%	9.72%	3.77%
压力（MPa）	5.86%	3.24%	7.57%	4.66%

4 计算结果与讨论

由于分液冷凝技术改变了换热管程中制冷剂的质量流量和干度，原有的管程布置与制冷剂的流动特性不能匹配，需要通过管程布置的优化设计，调整管程的流通截面积，实现高效传热。为了探究热泵热水器的性能提升潜力，以 COP 为优化指标，改变冷凝器的管程布置和分液效率。结构参数改变存在以下限定条件：

- 微通道冷凝器的换热管数量为 27 根，结构优化不改变换热面积；
- 下一管程所含换热管数不得大于上一管程所含换热管数，且各管程换热管数不得少于 2 根；
- 分液效率范围为 10%-90%，以 10 个百分点为变化单位。

对于热泵热水器在整个加热过程的分液效率，分别对四个加热段进行设置，由于冷凝器中存在两处分液，即隔板I和隔板II，同样需要对其分液效率进行设置：对于第一加热段（15-25℃），隔板I和隔板II的分液效率分别为 90%和 70%；第二加热段（25-35℃），隔板I和隔板II的分液效率分别为 20%和 40%；第三加热段（35-45℃），隔板I和隔板II的分液效率分别为 50%和 30%；第四加热段（45-55℃），隔板I和隔板II的分液效率分别为 40%和 70%；此分液效率命名为 90%/70%-20%/40%-50%/30%-40%/70%。而该分液效率是通过多次仿真模拟得到的最接近于实验数据的结果，因此认为是实验过程热泵热水器采用的分液效率。而在仿真过程中发现，分液效率的改变对系统性能的影响较大，因此有必要对系统分液效率进行优化。

将管程布置（7-6-4-4-4-2）和分液效率（90%/70%-20%/40%-50%/30%-40%/70%）的热泵热水器命名为 BLS。基于 BLS 分别优化管程布置和分液效率，都能改善系统性能，但只有两个参数协同优化才能够达到最优 COP。通过不断迭代优化，获得最佳的管程布置和分液效率，确定了性能最优的热泵热水器。将管程布置（6-5-5-5-4-2）和分液效率（70%/40%-90%/10%-90%/10%-20%/90%）的热泵热水器命名为 PELS，具体情况如表 3 所示。PELS 与 BLS 相比，COP 提高了 7.47%，尽管平均功率增大了 6.04%，但同时平均制热量也提高了 13.96%，加热时间减少了 12.15%，系统性能显著提高。

表 3 系统性能参数

系统名称	布置方式	分液效率	平均制热量 (W)	平均功率 (W)	COP	加热时间 (s)
BLS	7-6-4-4-4-2	隔板 I：90%-20%-50%-40% 隔板 II：70%-40%-30%-70%	3112.5	750.0	4.15	7570
PELS	6-5-5-5-4-2	隔板 I：70%-90%-90%-20% 隔板 II：40%-10%-10%-90%	3547.0	795.3	4.46	6650

为了探究系统性能提升的原因，从部件层面分析，对比冷凝器内部各管程传热系数的变化，如图 4 所示。在第一管程内，制冷剂的状态从过热气相转变为两相，传热系数迅速增长到最大值，随后随干度减小而下降。由于分液冷凝导致管程干度变化不连续，因此上一管程出口与下一管程进口的传热系数存在突变，高干度意味着高传热系数。随着加热过程的进行，制冷剂的两相范围扩大，该时刻冷凝器的传热系数随之增大。对比两个系统的内部管程传热系数，发现第一至第四管程的平均传热系数都是 BLS 较大，而第五、第六管程的平均传热系数则是 PELS 较大。BLS 的整体平均传热系数为 $2759.4\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ ，而 PELS 的整体平均传热系数为 $2594.2\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ ，传热系数降低了 5.99%。虽然平均传热系数降低了，但 PELS 系统分液冷凝器的换热均匀性得到改善，且由于换热温差的增大，平均制热量显著提高。同时侧面说明了换热器传热性能最优，不一定能获得最优的系统性能。

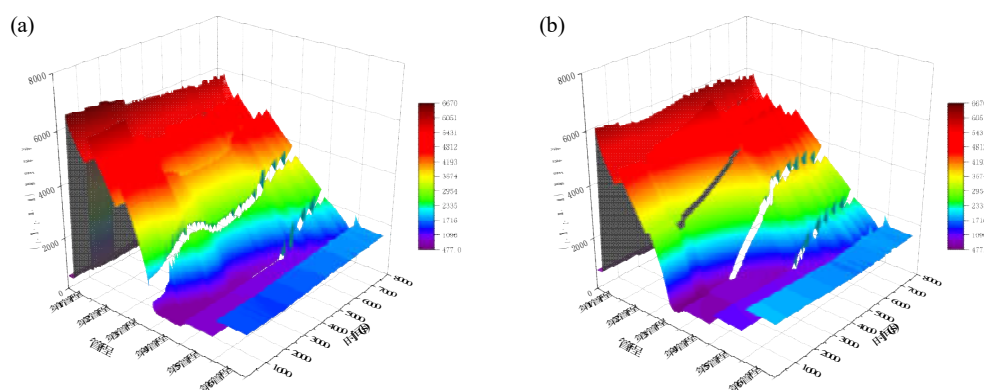


图 4 各管程传热系数情况 (a) BLS; (b) PELS

从系统层面分析，探究系统性能参数（COP、功率和流量）随时间的变化，如图 5 所示。在加热过程中，系统的质量流量保持在一定范围内。PELS 的质量流量相较于 BLS，平均提高了 12.39%。PELS 的质量流量呈减少的变化趋势，范围约为 21.80-16.15g/s，BLS 的质量流量变化波动不大，范围约为 17.65-15.48g/s。随着加热过程的进行，质量流量提高的差距越来越小，流量变化说明 PELS 的优势在于加热过程的前期；由于质量流量和水箱温度的影响，功率呈增大的变化趋势。PELS 的功率始终大于 BLS，提高了 6.04%。随着加热过程的进行，两个系统功率之间的差距先增大后减少，最大差距和最小差距分别为 15.57%和 1.46%；性能系数 COP 是衡量系统能效的重要指标，在加热过程中，系统 COP 呈下降趋势，原因在于冷凝压力的不断提高，压缩机压比持续增大，压缩机耗功随之增加，系统 COP 降低。在 2840s 前，PELS 的 COP 高于 BLS，最大差距达到 27.09%；在 2840s 后，PELS 的 COP 低于 BLS，最大差距达到 12.17%。虽然 PELS 的功率大于 BLS，但制热量的提升效果更为显著，PELS 的加热时间大大缩短，总消耗电量相比 BLS 少了 388.8kJ，PELS 的 COP 更高。

从热力循环层面分析，对比循环在加热过程中的压焓图，探究循环的动态变化规律，如图 6 所示。从图中能够清楚地看出，系统的冷凝压力在加热过程中持续增加，且在加热过程前期，PELS 的冷凝压力明显高于 BLS，直到加热过程后期（水温大于 35℃后），

两个系统的冷凝压力近似相等；PELS 冷凝器出口的过冷度随着加热过程逐渐降低，从 25.7℃一直降低至 3.1℃，BLS 冷凝器出口过冷度则从 17.5℃一直降低至 2.7℃，导致蒸发器进口制冷剂的干度不断增大。结合图 5 分析可知，在加热过程前期，PELS 的性能表现要好于 BLS；在加热过程的后期，PELS 的表现稍逊于 BLS。但综合来看，PELS 能够缩短热水器加热所需时间，减少压缩机耗功，提高系统性能系数。

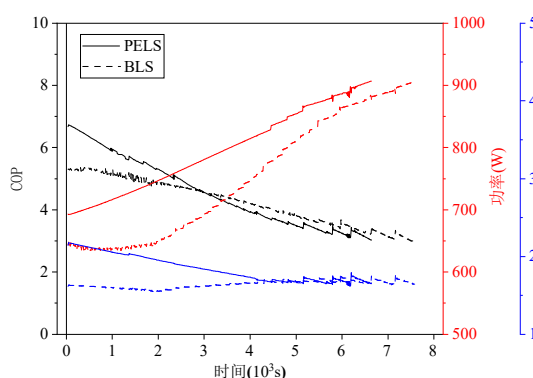


图 5 系统性能参数比较

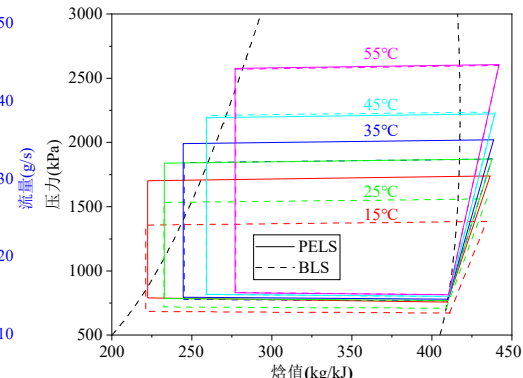


图 6 系统压焓图对比

5 结 论

建立了外盘管微通道分液冷凝热泵热水器系统模型。通过管程布置和分液效率优化，得到最优的结构参数。深入研究了热泵热水器系统优化前后的热力学参数变化，探究性能提升的影响因素，主要的结论有：

(1) 在换热面积固定的情况下，优化管程布置和分液效率能够有效提高系统性能系数，缩短加热时间。与 BLS 相比，PELS 系统的平均功率增大了 6.04%，制热量提高了 13.96%，COP 提高了 7.47%，加热时间减少了 12.15%。

(2) PELS 系统的冷凝器传热系数较 BLS 略有下降，但换热温差的提高使系统换热量明显增大。

(3) PELS 系统性能优化在加热过程的前期效果最佳，冷凝压力的提高给制热量增大带来的积极因素大于系统耗功增大的消极因素。

参考文献

- [1] 王荣. 中国家用热水设备典型用水模式研究: [硕士论文]. 北京建筑大学, 2013.
WANG Rong. The Typical Water Model Research of China's Domestic Hot Water Equipment: [Master's Thesis]. Beijing University of Civil Engineering and Architecture, 2013.
- [2] H. Willem, Y. Lin, A. Lekov. Review of Energy Efficiency and System Performance of Residential Heat Pump Water Heaters. *Energy and Buildings*, 2017, 143: 191-201.
- [3] Jianhua Wu, Jie Lin. Thermodynamic Analysis of a Novel Heat Pump Water Heater with Two-Stage Heating for a Great Rise of Water Temperature. *Energy and Buildings*, 2015, 91: 97-104.
- [4] 刘恒, 谭建明, 李舒宏, 等. 不同外绕盘管结构热泵热水器蓄能与用能性能分析. *化工进展*, 2021, 40(10): 5459-5467.

- LIU Heng, TAN Jian-Ming, LI Shu-Hong, et al. Performance Analysis of Heat Pump Water Heater with Different Wrap-Around Condenser Coil Structure on the Charging and Discharging. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2021, 40(10): 5459-5467.
- [5] Wenyi Wang, Zhongfan Zhao, Qun Zhou, et al. Model Predictive Control for the Operation of a Transcritical CO₂ Air Source Heat Pump Water Heater. *Applied Energy*, 2021, 300: 117339.
- [6] 陈健勇, 李俊杰, 陈颖. 分液冷凝器及其空调/热泵系统的研究进展. *制冷与空调*, 2020, 20(06): 58-67+89.
- CHEN Jian-Yong, LI Jun-Jie, CHEN Ying. Research Status of Liquid-Separation Condenser and Its Implementations in Air-Conditioning/Heat Pump System. *Refrigeration and Air-Conditioning*, 2020, 20(06): 58-67+89.
- [7] 张生朝. 纵向波纹管翅式换热器流动与传热数值研究: [硕士论文]. 兰州交通大学, 2022.
- ZHANG Sheng-Zhao. Numerical Study on Flow and Heat Transfer of Longitudinal Corrugated Tube Fin Heat Exchanger: [Master's Thesis]. Lanzhou Jiaotong University, 2022.
- [8] Jianyong Chen, Liuxing Chen, Xu Lin, et al. Performance of Heat Pump Water Heater (HPWH) with and Without Liquid-Separation: Detailed Experimental Comparisons. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 179: 115713.
- [9] Yifan Li, Xianglong Luo, Zhibin Wang, et al. Numerical Simulation on the Header-Orifice Structure-Based Liquid-Vapor Separator Used in Liquid-Separation Condenser. *Chemical Engineering Science*, 2021, 235: 116475.
- [10] Jianyong Chen, Liuxing Chen, Junjie Li, et al. Potentials of Implementing Liquid-Separation to a Transient Wrap-Around Microchannel Condenser Coil within Heat Pump Water Heater. *Energy*, 2022, 254:124261.
- [11] 陶文铨. 传热学. 北京: 高等教育出版社, 2019. 5-226.
- TAO Wen-Quan. Heat Transfer. Beijing: Higher Education Press, 2019. 5-226.
- [12] Dittus F W, Boelter L M K. Heat Transfer in Automobile Radiators of the Tubular Type. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 1985, 12(1): 3-22.
- [13] Shigeru Koyama, Ken Kuwahara, Kouichi Nakashita, et al. An Experimental Study on Condensation of Refrigerant R134a in a Multi-Port Extruded Tube. *International Journal of Refrigeration*, 2003, 26(4): 425-432.
- [14] Liang Yang, Chunlu Zhang. A Generalized Dimensionless Local Power-Law Correlation for Refrigerant Flow Through Adiabatic Capillary Tubes and Short Tube Orifices. *International Journal of Refrigeration*, 2014, 46.
- [15] Wang C C, Chen P Y, Jang J Y. Heat Transfer and Friction Characteristics of Convex-Louver Fin-And-Tube Heat Exchangers. *Experimental Heat Transfer*, 1996, 9(1): 61-78.
- [16] Rohsenow W M, Hartnett J P, Cho Y I. Handbook of Heat Transfer. New York: McGraw-Hill, 1998.
- [17] Wattelet J P. Heat Transfer Flow Regimes of Refrigerants in a Horizontal-Tube Evaporator. University of Illinois at Urbana-Champaign, 1994.
- [18] Y.W. Li, R.Z. Wang, J.Y. Wu, et al. Experimental Performance Analysis and Optimization of a Direct Expansion Solar-Assisted Heat Pump Water Heater. *Energy*, 2007, 32(8): 1361-1374.

高纯石英玻璃冷却工艺研究

尹素萍, 李婕, 马千里, 方海生^{1*}

(华中科技大学能源与动力工程学院, 湖北 武汉 430074)

(Tel: 13437275182 Email: hafang@hust.edu.cn)

摘要: 两步 CVD 工艺是制备高纯石英玻璃锭的重要方法。该工艺主要包括沉积、烧结及冷却, 冷却过程产生的热应力会影响产品质量。为研究冷却过程的热应力, 本文建立了石英玻璃从高温冷却至室温过程的数值模型, 结果表明石英玻璃在冷却中产生的热应力受到冷却工艺参数和自身形状的影响, 为控制石英玻璃产生的过程热应力, 先以适当功率进行一定时长的保温, 并调整样品本身高径比, 使过程中产生的热应力值较小, 内部应力更均匀。

关键词: 石英玻璃; 冷却工艺; 热应力; 有限元分析

0 前言

石英玻璃具有高光学透过性、高热稳定性、化学和机械稳定性, 在生物化学^[1]和光学^[2]等领域都有广泛应用, 可制备光刻掩模基底^[3]、机械谐振器^[4], 是飞秒激光器^[5]和 NIF 光学激光系统^[6]的核心材料。残余应力影响器件性能和使用寿命, 非对称内应力会干扰光学表面的精密加工^[7], 应力双折射率可能导致激光输出时产生畸变^[8]、抗激光损伤性能下降^[9], 不当的残余应力还会降低材料的强度^[10]。石英玻璃在烧结及冷却的过程中会产生热应力, 需要研究冷却工艺以降低热应力水平。

为研究应力对玻璃的影响, 张范斌、佟连杰等^[11, 12]介绍了玻璃的假想温度, 采用数值模拟探讨退火窑的工艺参数对浮法平板玻璃退火过程的应力影响。Wang 等^[13, 14]采用有限元方法模拟了窗户玻璃在火灾中受到热冲击后的温度及应力分布。Aronen 等^[12, 15]模拟了钢化玻璃在淬火过程中, 表面产生的残余应力。Xiao 等^[16]研究了玻璃的激光键合过程中产生的残余应力。目前对于传统硅酸盐玻璃的应力研究比较丰富, 硅酸盐玻璃的加工是在一定温度范围内对玻璃进行塑性成型, 例如浮法玻璃在约 600-1050 °C 的浮槽中成型^[17]。石英玻璃的应变点高, 难以成型^[18], 制备工艺及处理加工过程困难。李润强等^[7]建立了用 CO₂ 激光修复石英玻璃表面裂纹的热力耦合有限元模型, 研究了激光的工艺参数对修复裂纹处表面粗糙度和残余应力的影响, 并提出了激光修复后可采用低温加热去应力的工艺。孙劭伟等^[19]研究了熔融石英玻璃受到 CO₂ 激光损伤后的损伤形貌, 建立了三维应力场分布的数值模型。

本文采用有限元数值模拟方法, 建立了石英玻璃在高温烧结炉中冷却的物理模型, 研究冷却过程的工艺参数, 探究保温功率、保温时间及样品高径比对热应力的影响。

1 模型和方法

1.1 模型介绍

由传统化学气相沉积法（CVD）制备的石英玻璃锭羟基含量高，光谱透过率降低。为减少羟基含量，近年来发展了两步 CVD 法^[20]。在两步 CVD 法中， SiCl_4 在低温下进行水解反应，沉积得到 SiO_2 疏松体， SiO_2 疏松体高温烧结后可得低羟基的石英玻璃。此前的工作对 SiO_2 疏松体的烧结过程进行了深入研究^[21]，根据烧结升温曲线^[22]，烧结末，加热器温度为 $1500\text{ }^\circ\text{C}$ ，本文研究石英玻璃锭在烧结炉内的冷却过程。炉内材料的主要参数如表 1 和图 1 所示。烧结炉保温层的隔热效果良好，炉壳散热性能优良，可以根据需要通入冷却水进行降温，因此设置炉壳温度为 $25\text{ }^\circ\text{C}$ 。

表 1 炉体主要结构参数

炉体结构	物料	加热器	坩埚	辐射屏	保温层	炉壳
导热系数 k ($\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$)	$k(T)$	150	2.5	175	3	44.5
恒压热容 c_p ($\text{J}/\text{kg}\cdot\text{K}$)	$C_p(T)$	710	500	132	200	475
密度 ρ (kg/m^3)	2203	1950	5850	17800	120	7850
表面发射率 ε	0.8	0.9	0.6	0.2	0.75	-

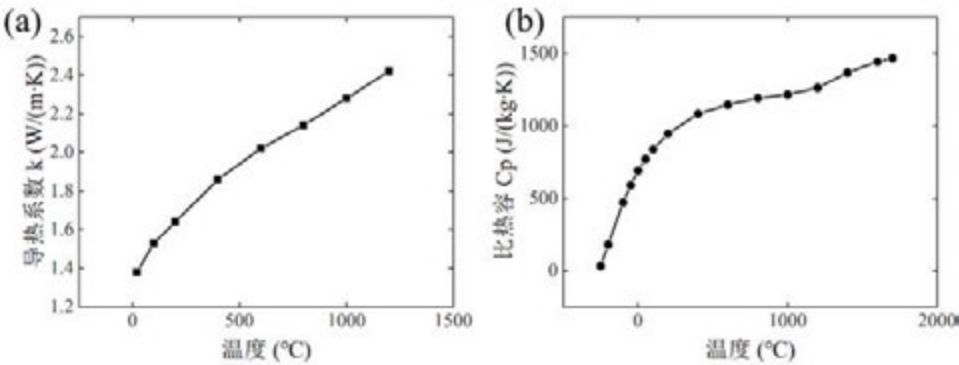


图 1 石英玻璃物性参数：(a)导热系数 $k(T)$ (来源于王玉芬等^[23])，(b)比热容 $C_p(T)$ (来源于 Fanderlik ^[24])

石英玻璃锭与烧结炉在结构上具有对称性，建立如图 2 所示的二维轴对称模型，炉体的主要结构包括外层炉壳、保温层、辐射屏、加热器、坩埚盖板、坩埚（尺寸： $D \times H = 600 \times 600\text{ mm}$ ）及支撑底座。石英玻璃烧结的线性收缩率可达 86% ^[22]，烧结后的石英玻璃与坩埚的相对体积小，放置样品尺寸： $d \times h = 277.5 \times 171.13\text{ mm}$ 。

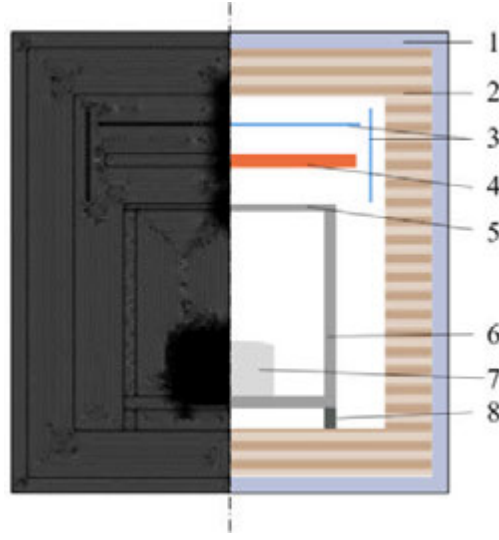


图2 石英玻璃烧结炉二维轴对称模型及网格划分

（图中部件：1-炉壳；2-保温层；3-辐射屏；4-加热器；5-盖板；6-坩埚；7-石英玻璃；8-底座）

1.2 数学模型

在模拟计算过程中，假设炉膛内部材料均为灰体，炉内保护气体为氮气。在冷却过程中，石英玻璃锭从高温迅速冷却至 1000 °C 以下，假设冷却过程中石英玻璃为完全弹性体。冷却过程中炉内仅发生自然对流，由于烧结炉零部件之间的间隙小，炉内空气流动受阻，自然对流带来的散热效果弱，计算中忽略自然对流，认为空气速度为 0。冷却中的控制方程包括能量守恒方程和本构方程，内部传热主要考虑热传导和热辐射：

$$\rho_i C_{p,i} \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot q = Q + Q_r \quad (1)$$

式中 $C_{p,i}$ 为部件的比热容，热传导 q 满足傅里叶定律： $q = -k_i \nabla T$ ， k_i 为部件的导热系数， Q 为系统内热源，来自加热器， Q_r 为内部辐射源项。在冷却初始阶段，炉膛内部温度较高，此时热辐射占主导地位，炉内部件均为不透明固体表面，参与辐射的界面视为漫反射灰体表面，不同材料的表面发射率如上表 1 所示，净辐射通量 q_{rad} 为：

$$q_{\text{rad}} = \varepsilon_i \chi (T_t^4 - T_0^4) \quad (2)$$

式中 ε_i 为灰体材料的表面发射率， χ 为斯蒂芬-玻尔兹曼常数。烧结后的石英玻璃具有一定的透明度，热辐射能够在石英玻璃内传递，但传递路程短，辐射传递特性近似于固体导热，热量传递只取决于邻近区域的状态，认为石英玻璃具有光学厚度 τ ，由吸收系数 a 沿典型光路积分进行定义：

$$\tau = \int_0^s a ds \quad (3)$$

石英玻璃的光学厚度 $\tau \gg 1$ ，因此本文计算中采用 Rosseland 近似进行简化计算，Rosseland 近似方法没有给热方程加入额外的自由度，仅增加了导热系数的非线性贡献，对于灰体介质，介质内的辐射通量表示为：

$$q_r = -\frac{4\chi}{3\beta_R} \nabla(n_r^2 T^4) = -\frac{16n_r^2 \chi T^3}{3a + \sigma_s} \nabla T \quad (4)$$

式中 n_r 为介质折射率, σ_s 为散射系数, 石英玻璃的吸收系数 $a = 10$, 散射系数 $\sigma_s = 0$ 。

晶体热应力计算多采用基于位移的热弹性应力-应变理论, 石英玻璃在冷却中的应变由本征应力和温度共同作用形成, 由广义胡克定律, 总应变可表示为:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{ij} - \frac{\nu}{E} I_1 \delta_{ij} + \alpha(T - T_0) \delta_{ij} \quad (5)$$

上式中 α 为各向同性材料的线膨胀系数, ν 为泊松比, E 为杨氏弹性模量, I_1 为应力张量的第一不变量, $I_1 = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} = \sigma_{ii}$, 在二维轴对称模型中, 总应变 ε_{ij} 可以表示为轴向分量 ε_z 、径向分量 ε_r 和剪切变形 γ_{zr} 。将式 (5) 改成应力分量的形式:

$$\sigma_r = \frac{E}{(1-2\nu)(1+\nu)} [(1-\nu)\varepsilon_r + \nu\varepsilon_z] - \frac{E\alpha}{1-2\nu} (T - T_0) \quad (6)$$

$$\sigma_z = \frac{E}{(1-2\nu)(1+\nu)} [(1-\nu)\varepsilon_z + \nu\varepsilon_r] - \frac{E\alpha}{1-2\nu} (T - T_0) \quad (7)$$

$$\tau_{zr} = \frac{E}{2(1+\nu)} \gamma_{zr} \quad (8)$$

2 模拟结果与讨论

2.1 参考工况结果分析

直接关闭加热器进行冷却的过程作为参考工况, 图 3(a) 为石英玻璃的平均温度变化, 冷却开始前石英玻璃的平均温度为 1290.2 °C, 在 150 min 前, 平均温度高于 500 °C, 热辐射效应明显, 降温速率大, 此后石英玻璃的降温速率逐渐下降, 冷却至 600 min 后平均温度低于 100 °C, 降温缓慢, 冷却至约 1980 min 时平均温度为 32.5 °C。图 3(b) 为石英玻璃内的最大应力变化情况, 关闭加热器后石英玻璃表面温度迅速下降, 内部温差有所降低, 最大热应力在前 5 min 下降。随着冷却进行, 石英玻璃内部温差不断增大, 最大热应力也开始增大, 至 40 min 左右达到峰值, 继续冷却时由于降温速率下降, 内部温差开始减小, 此后最大应力缓慢下降直至冷却结束, 冷却结束时最大热应力约 0.03 MPa。

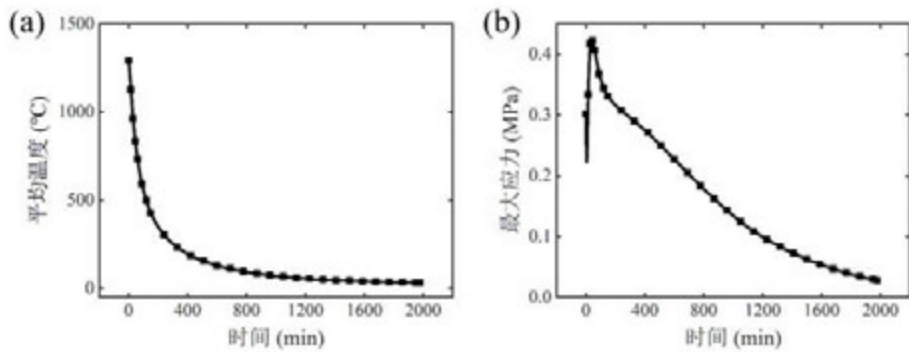


图 3 自然冷却过程: (a) 平均温度变化, (b) 最大应力变化

图 4 直观展示了参考工况在冷却过程中的温度和应力变化，选取了冷却至 0 min、40 min、180 min、1980 min 的温度和应力分布云图。由于加热器在顶部，0 min 时石英玻璃的温度从顶部向下呈层状分布。石英玻璃与坩埚的接触边缘温度梯度最大，形成了高热应力区。关闭加热器后石英玻璃表面温度迅速下降，高温区域向中下部迁移，自表面向内的温度梯度变大，表面应力增大，高热应力区从右下边缘扩大到整个表面，并向内部延伸，内部的应力集中区域从中部转移至底部。冷却至 180 min 后，石英玻璃温度梯度减小，整体应力水平下降，均匀的低应力区自中心向表面扩散。至 1980 min，石英玻璃温度接近室温，温度均匀，此时热应力水平低，分布均匀。

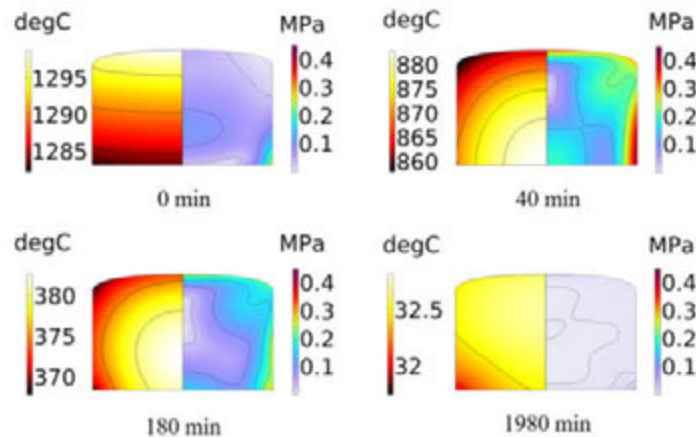


图 4 自然冷却至不同时刻的温度和应力的云图及等值线分布图

2.2 加热器保温功率对热应力的影响

本节讨论保温功率在冷却过程中对石英玻璃温度和应力的影响，通过调节加热器的功率控制保温温度，设置加热器功率为 50 kW、10 kW、1 kW，设置保温时间为 60 min。图 5(a)为前 200 min 内不同保温功率下石英玻璃的平均温度变化曲线，保温功率越高，石英玻璃的平均温度越高，但降温速率没有明显变化。图 5(b)为前 200 min 内石英玻璃的最大应力变化曲线。保温功率为 1 kW，应力与参考工况几乎相同。保温功率为 10 kW 的最大应力在 40 min 附近达到峰值，峰值从参考工况的 0.42 MPa 降到 0.35 MPa。保温功率增大至 50 kW，保温过程的最大热应力始终维持较低的水平。当保温功率为 80 kW 在冷却至 100 min 时，最大应力反而高于 10 kW 工况。

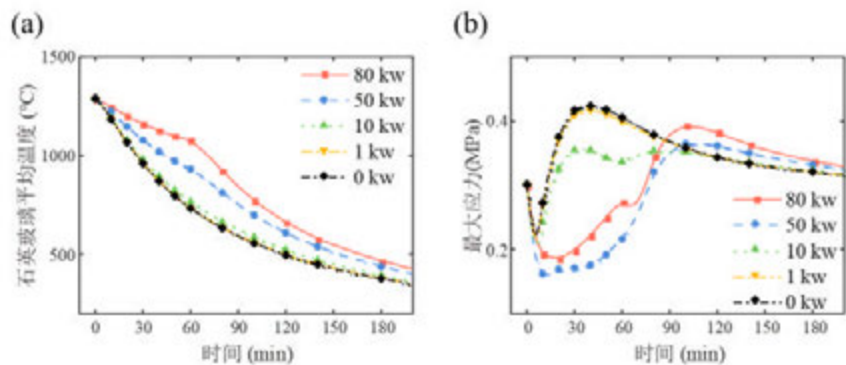


图 5 不同加热器保温功率下：(a)石英玻璃平均温度变化，(b)最大应力变化

保温功率为 10 kW 和 50 kW 时保温效果较好，图 6 选取两种功率分别冷却至 40 min、

60 min、100 min 时的温度和应力分布云图。保温功率为 10 kW，冷却至 40 min 时，高温区域已经从顶部迁移至底部中心，随着冷却继续进行，应力自中心向表面减小，至第 100 min 时低应力区体积增加，分布更均匀。对比图 4 的参考工况，当保温功率为 50 kW 时，高温区域先由顶部向中部迁移，然后回到顶部，这个阶段内部应力低，分布均匀，关闭加热器后高温区迅速向底部迁移，内部温差增大，应力从表面向中心延伸，至第 100 min 时表面应力达到最大值，中心的应力分布不均，底面出现应力集中，应力分布形态与保温功率 10 kW 冷却至 40 min 相似。

一定的保温功率能够在保温时间内使内部应力均匀，但过大的保温功率在关闭加热器后应力水平上升明显，保温效果被削弱，同时高功率增加了能耗，不利于实际生产。

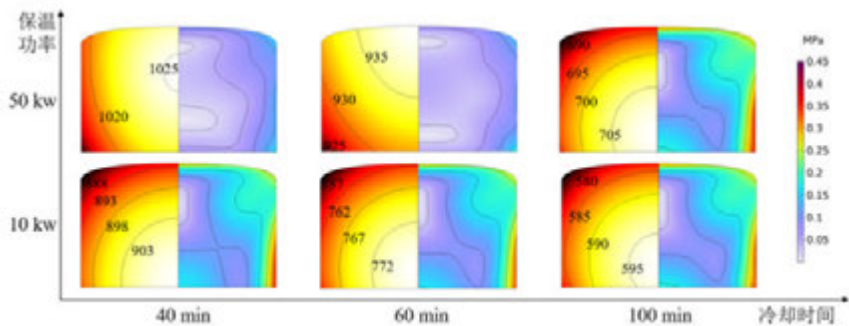


图 6 不同保温功率下 10 kW 和 50 kW 下冷却过程中温度、应力的云图和等值线分布

2.3 加热器保温时间对热应力的影响

本节讨论保温时长对冷却过程的影响，由 2.2 节可得，保温功率 10 kW 效果较好。设置保温功率为 10 kW，图 7 展示了保温时长分别为 60 min、120 min、180 min、240 min、300 min 的 5 组案例。由图 7(a)的最大应力变化曲线可以发现，冷却开始后，最大应力先减小后增大。当保温时长为 60 min 时，最大应力在 80 min 达到第二个峰值，与第一个峰值大小相近，在第 120 min 达到最小值，随后曲线上升，直至关闭加热器。若保温超过 240 min，最大应力的第二个峰值大于第一个峰值。当保温时长大于 240 min，对比图 3(b)发现最大应力峰值大于参考工况。由图 7(b)的应力标准差变化曲线可以看出，冷却初期应力标准差增大，应力均匀性下降。当保温时间为 60 min，应力标准差在关闭加热器后略微下降，随后增大。若保温时长继续增加，保温效应增强，应力标准差持续减小，内部应力更加均匀。

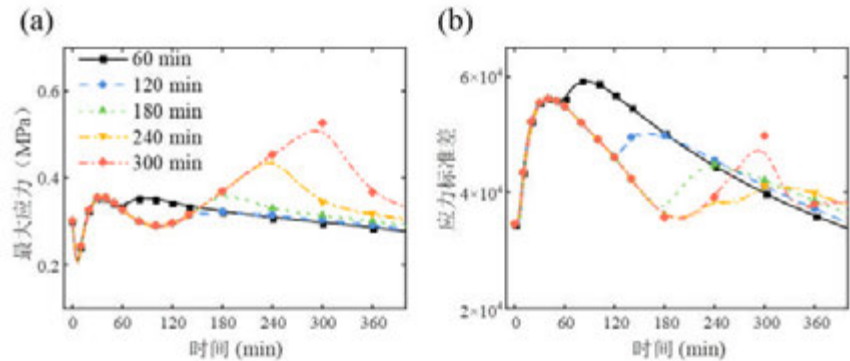


图 7 保温功率为 10 kW 的不同保温时长：(a)石英玻璃最大应力变化，(b)应力标准差变化

可以发现随着保温时间增加,应力的均匀性增加。若保温时间超过 300 min,最大应力的峰值过大,应力标准差降低,内部应力均匀性下降。根据实际情况选择保温时间在 180-240 min 之间能够实现较好的保温效果。

2.4 样品高径比对热应力的影响

石英玻璃的高径比会对冷却过程的应力产生较大影响,参考工况的石英玻璃在烧结前能较好适应坩埚尺寸,因此保持石英玻璃的直径 $d=277.5\text{ mm}$ 不变,通过减小高度,改变高径比 $b(b=h/d)$ 。设置表 2 所示不同高径比的石英玻璃锭。

表 2 样品高径比

高 h/mm	174.13	123.68	98.45	60.70
高径比 b	0.63	0.45	0.35	0.22

图 8 为自然冷却下不同高径比石英玻璃锭的温度应力变化。图 8(a)为石英玻璃锭的平均温度变化,可以看出在冷却前,不同高径比 b 的石英玻璃平均温度相同,关闭加热器后随炉冷却,石英玻璃的降温速率随 b 减小有所增大。观察图 8(b)发现,冷却过程中温度极差随着 b 减小而越小,温度分布随着 b 减小而更加均匀。由图 8(c)可得最大应力的增长速率随 b 减小而下降,不同高径比的石英玻璃均在 40 min 左右达到峰值,峰值大小随 b 减小而减小。图 8(d)展示了不同高径比的石英玻璃的应力标准差,冷却开始后,应力标准差增大,小高径比石英玻璃的应力标准差增加的速度更慢,峰值更小,但 $b=0.45$ 的应力标准差在 10-100 min 内大于 $b=0.65$ 的工况,说明高径比 b 需要控制在一定范围内才能使得内部应力更加均匀。

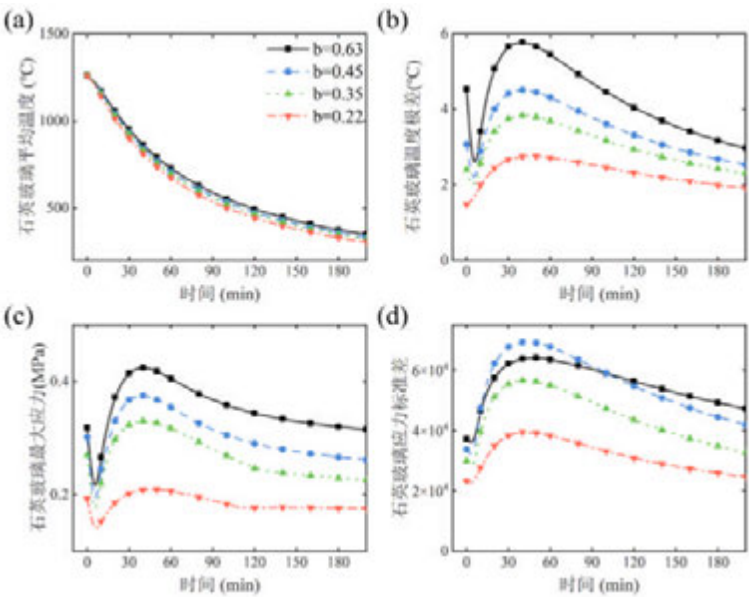


图 8 不同高径比的石英玻璃: (a)平均温度变化, (b)温度极差, (c)最大应力变化, (d)应力标准差

图 9 选取了不同高径比下样品在冷却 0 min、40 min 和 180 min 时的温度和应力分布,不同高径比的石英玻璃,其温度和热应力变化规律相同。冷却过程中高应力区向表面和中间发展。随炉冷却至第 40 min,表面应力达到峰值,然后应力自中心向表面逐渐消退。对比图 4 和图 9 可以发现,随着 b 减小,表面应力减小,向内发展的应力集中区的面积减小,中心应力降低,分布更加均匀。当 $b=0.22$,底部中心出现新的应力集中。

为获得更好的石英玻璃质量，需要尽可能保证内部应力均匀，控制高径比在一定范围内，高径比过大，冷却过程产生的应力大，中心应力分布不均匀。高径比过小，冷却中在底部形成较大的应力集中区。高径比在较小的范围内能够降低应力，使应力更均匀。

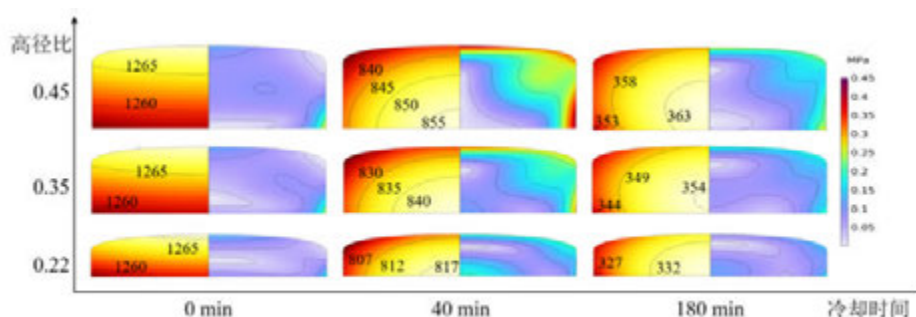


图9 高径比为0.22、0.35、0.45时，冷却过程中温度、应力的云图和等值线分布

3 结论

本文针对两步 CVD 法制备高纯石英玻璃锭的冷却过程进行了数值模拟研究。在本研究中，首先对石英玻璃锭在参考工况下进行冷却，其温度及应力的分布和演化进行了分析，发现石英玻璃的最大应力先下降后升高，冷却至约 40 min 达到最大值，随后下降直至冷却结束。在冷却初始时刻，高应力区集中在石英玻璃与坩埚接触的边缘，随着冷却进行，石英玻璃表面应力增大，应力自表面向中心区域延伸，中心区域均匀性减小，在冷却至约 90 min 时中心应力减小，均匀性提高。

接着探究了不同操作参数对冷却效果的影响，结果表明加热器的保温功率过小对减小降温速率的效果不明显，保温功率过大会使得保温结束后再次经历一个比较剧烈的降温过程。在本例中，加热器功率为 10 kW 时能有较好的保温效果；保温时间过短会使内部热应力均匀化程度不够，保温时间过长会使得高应力区的最大应力持续增长，保温时间在 180-240 min 内可以达到较好的均匀内部应力的效果；在制备烧结石英玻璃基体时，降低样品本身的高径比能够降低冷却过程的内部温差，降低热应力水平。

参考文献

- [1] Kotz F, Risch P, Helmer D, et al. High-Performance Materials for 3D Printing in Chemical Synthesis Applications. *Adv Mater*, 2019, 31(26): e1805982
- [2] Zhou Beiyang, Chen Dong, Ye Jiayi. Spectroscopic and luminescent properties of Nd³⁺-Al³⁺ co-doped silica glass prepared by spark plasma sintering. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2021, 571:
- [3] French Roger H., Tran Hoang V. Immersion Lithography: Photomask and Wafer-Level Materials. *Annual Review of Materials Research*, 2009, 39(1): 93-126
- [4] Lunin Boris S, Tokmakov Kirill V. Reduction in internal friction in silica glass with high OH content. *Journal of the American Ceramic Society*, 2018, 102(6): 3329-3340
- [5] Schwarz S, Rung S, Esen C, et al. Fabrication of a high-quality axicon by femtosecond laser ablation and CO(2) laser polishing for quasi-Bessel beam generation. *Opt Express*, 2018, 26(18): 23287-23294
- [6] Lane Monya A, Campbell John H, Wuest Craig R, et al. NIF optical materials and fabrication technologies: an overview. *Optical Engineering at the Lawrence Livermore National Laboratory II: The*

National Ignition Facility. 2004

- [7] 李润强. 石英玻璃表面的磨削裂纹激光修复和去应力工艺技术研究: [硕士学位论文]. 济南: 山东大学, 2017
- [8] Solmeyer N, Zhu K, Weiss D. S. Note: mounting ultra-high vacuum windows with low stress-induced birefringence. *Rev Sci Instrum*, 2011, 82(6): 066105
- [9] Gallais Laurent, Cormont Philippe, Rullier Jean-Luc. Investigation of stress induced by CO₂ laser processing of fused silica optics for laser damage growth mitigation. *Optics Express*, 2009, 17(26): 23488-23501
- [10] Aben H, Anton J, Errapart A. Modern Photoelasticity for Residual Stress Measurement in Glass. *Strain*, 2008, 44(1): 40-48
- [11] 佟连杰. 浮法工艺生产超薄 TFT-LCD 基板玻璃退火过程的数值模拟: [硕士学位论文]. 秦皇岛: 燕山大学, 2019
- [12] 张范斌, 温治, 苏福永, 等. 浮法玻璃退火过程中应力变化的数值模拟. *硅酸盐通报*, 2012, 31(05): 1057-1061
- [13] Qing-Song Wang, Yi Zhang, Jin-Hua S. U. N, et al. Temperature and Thermal Stress Simulation of Window Glass Exposed to Fire. *Procedia Engineering*, 2011, 11: 452-460
- [14] Wang Qingsong, Chen Haodong, Wang Yu, et al. Thermal Shock Effect on the Glass Thermal Stress Response and Crack Propagation. *Procedia Engineering*, 2013, 62: 717-724
- [15] Aronen Antti, Karvinen Reijo. Effect of glass temperature before cooling and cooling rate on residual stresses in tempering. *Glass Structures & Engineering*, 2017, 3(1): 3-15
- [16] Xiao Yanyi, Wang Wen, Wu Xingyang, et al. Process design based on temperature field control for reducing the thermal residual stress in glass/glass laser bonding. *Optics & Laser Technology*, 2017, 91: 85-91
- [17] Wiederhorn Sheldon M., Clarke David R. Architectural Glass. *Annual Review of Materials Research*, 2022, 52(1): 561-592
- [18] Kotz F, Arnold K, Bauer W, et al. Three-dimensional printing of transparent fused silica glass. *Nature*, 2017, 544(7650): 337-339
- [19] 孙劭伟, 齐乃杰, 孔艳, 等. 熔石英玻璃激光损伤的三维应力场研究. *中国激光*, 2021, 48(01): 31-41
- [20] Groh Raymond D, Harper Brian Lee, Maxon John Edward. Method for forming fused silica glass using multiple burners. *Google Patents*. 2012
- [21] Ma Qianli, Li Chengshuai, Shang Chunli, et al. Effects of thermal environment on dehydroxylation of porous silica preform in two - step CVD synthesis. *Journal of the American Ceramic Society*, 2021, 104(7): 3105-3118
- [22] Ma Qianli, Zheng Lili, Zhang Guojun, et al. Numerical modeling of sintering and dehydroxylation of porous silica preform for low-hydroxyl silica glass fabrication. *Ceramics International*, 2020, 46(14): 23067-23083
- [23] 王玉芬, 刘连城. 石英玻璃. 北京: 化学工业出版社, 2007
- [24] Fanderlik I. *Silica Glass and Its Application*. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V., 1991

镍修饰蜂窝铜诱导气泡析出用于催化制氢

胡孟良^{1,2}, 莫冬传^{1,2,*}, 吕树申^{1,2}

(1 中山大学, 材料学院, 深圳 518107)

(2 广东省先进热控材料与系统集成工程技术研究中心, 深圳 518107)

(Email: modongch@mail.sysu.edu.cn),

摘要: 制备成本低、效率高的电极是实现高效电催化制氢的迫切需求, 同时气体的逃逸过程对催化性能产生关键影响。本文采用两步电沉积在铜片表面生长镍层修饰的蜂窝铜结构 (Ni@Cu), 探索电解液对蜂窝铜结构的影响规律, 分析镍层修饰后的电催化析氢性能。结果表明, 蜂窝铜制备过程中产生的气泡模板对析氢过程的气泡析出有显著的诱导作用, 可显著提高析氢性能。其中, Ni@Cu-3 在酸性条件下, 仅需 227.5 mV 就达到 10 mA·cm⁻² 的电流密度, 主要是因为较高浓度的电解液沉积形成的蜂窝结构使得气泡以较小的半径逃逸。综上所述, 该研究为蜂窝状多孔铜诱导气泡析出在电催化析氢领域提供新思路。

关键词: 析氢反应; 电沉积; 蜂窝结构; 镍基催化剂; 电催化; 气泡

0 前言

随着全球能源的过渡消耗造成的能源短缺和化石能源燃烧带来的环境污染问题日益加剧, 寻找绿色、环保的替代能源已经成为迫在眉睫的问题^[1-3]。氢能作为一种能量密度高、零碳排放的清洁能源已经成为最理想的替代者^[4-6]。然而, 目前的制氢技术(甲烷蒸汽重整和煤气化)仍然需要消耗化石燃料, 并在产生温室气体的同时产生氢气, 这与最初的目标背道而驰^[7]。庆幸的是, 电化学水分解技术以其高性能、节能无污染的特点, 已成为氢能生产的有效策略。但为了提高水裂解制氢效率, 迫切需要合理、高性能、低成本的电催化剂来提高析氢反应效率^[8-12]。目前 Pt 基复合材料具有超高的电催化活性, 在 HER 领域具有广阔的应用前景^[13]。然而, 由于 Pt 基催化剂的稀缺性和高成本, 开发具有高活性的低 Pt 或非 Pt 催化剂已成为一种必要的选择^[14-15]。因此, 大量的研究人员致力于开发非贵金属、高效率的材料。

传统的催化剂大多数是粉末材料, 实际应用需要借助导电粘结剂涂抹在圆盘电极上使用。然而, 粉末催化剂在实际应用中不可避免的出现一下缺点: 1) 均匀涂抹在圆盘电极上不可避免造成活性位点的相互掩盖, 从而降低催化性能; 2) 气泡在表面析出, 逃逸过程中不可避免的导致催化剂的脱落, 从而影响催化剂的寿命; 3) 导电粘结剂的使用增加了催化剂和基体之间的电子转移电阻, 将对催化析氢性能产生负面影响。因此, 避免使用导电粘结剂是解决问题的关键。为了克服以上缺点, 目前主流思路是将活性催化剂原位负载在多孔导电基体上制备三维自支撑电极, 其主要是因为较大比表面积、良好的导电性、大量的活性位点以及高孔隙率, 可以为催化活性物质提供较多的附着位点、优良的导电性有利于降低电子转移电阻, 目前应用最多的导电基体有泡沫金属、碳布和碳纸等材料^[16-20]。

目前绝大多数研究都旨在提升催化剂的本征催化活性, 然而电极的合理构建对气泡逃逸过程的影响提升性能也至关重要。电解水析氢过程涉及气泡在表面的逃逸, 从而固(电极)-液(电解质)-气(氢气)三相界面的合理设计能够显著提升整个催化过程的性能。随着电解水产氢的持续进行, 气泡半径在表面不断的增大, 在达到最大的临界脱离半径时逃逸。然而, 如果电极表面对气泡具有较大的粘附力, 造成气泡半径持续增大将造成以下缺点: 1) 不可避免的造成催化活性位点被掩盖; 2) 气泡持续增大和气泡数持续增多将在电极表面形成气泡, 将造成整个催化过程断路; 3) 较大半径的气泡逃逸过程对电极表面的相互作用力大, 将对电极的使用寿命提出更高的要求。因此, 构建表面利于气泡快速逃逸的电极是解决上述问题的关键。

我们在前期工作中, 采用了气泡模板法制备了蜂窝铜结构, 其主要是基于蜂窝状结构表现出微/纳梯度结构有利于气泡脱离的特点, 在强化沸腾应用领域表现出优异的性能^[21-22]。而受到蜂窝结构形成主要是利用软模板氢气泡法的启发, 以及前期工作中该结构对利于气泡逃离的理论支撑; 对蜂窝铜结构进行功能化修饰, 将其应用在涉及析气的反应过程, 将通过有效增强气体的传质效率来提升性能。基于以上的分析, 我们相信此种方法制得的蜂窝铜在电解水制氢方面也应该利于气泡的快速逃逸, 对优化催化效率起到积极的影响。

为了进一步提高催化效率，拟在蜂窝铜表面再镀上一层催化活性高的材料。金属镍作为一种本征催化活性很高的金属一直是该领域研究的热点，其硫化物和氢氧化物等持续被研究。本研究则首先是通过一步简单的沉积反应，在铜片表面构建具有蜂窝结构的铜结构，然后第二次电沉积过程将镍均匀的修饰在多孔铜的表面。通过研究发现，沉积的蜂窝铜结构为镍提供丰富的附着位点，为电催化析氢性能的提升起到决定性作用；同时镍层的修饰几乎没有改变蜂窝铜结构的微观形貌，表征发现蜂窝铜结构明显使得气泡以较小的半径逃逸，对催化性能的提升显著。因此，本研究为蜂窝状多孔铜和镍层耦合应用在电催化析氢领域提供新思路。

1 实验内容

1.1 电极的制备

如图 1 展示了三维自支撑镍层修饰蜂窝铜电极的制备流程，首先对于清洗后的铜片，大电流密度条件下在表面均匀沉积蜂窝铜结构，紧接着在小电流密度下在蜂窝铜结构表面“涂抹”一层镍。

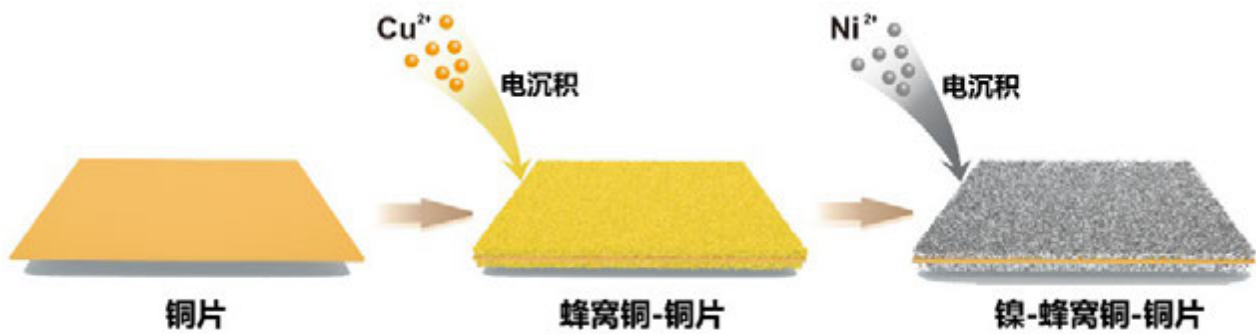


图 1. 电极制备示意图

1.1.1 蜂窝铜结构的制备

如图 2 蜂窝铜结构原位沉积的过程原理图，剪取大小为 3.0 cm×2.0 cm×1.0 mm 的铜片，清洗干净后放入真空烘箱里干燥、备用。在去离子水中，配置硫酸（H₂SO₄）和硫酸铜（CuSO₄·5H₂O）的混合溶液为电解液，以剪裁铜片（3.0 cm×2.0 cm×1.0 mm）为阴极，另外的铜片为阳极，电流密度为 1 A/cm² 沉积 200 s，得到具有蜂窝结构的电极基体，不同金属摩尔比制备的电极材料用不同的方式命名，记为 Cu-x(x=1, 2, 3)。

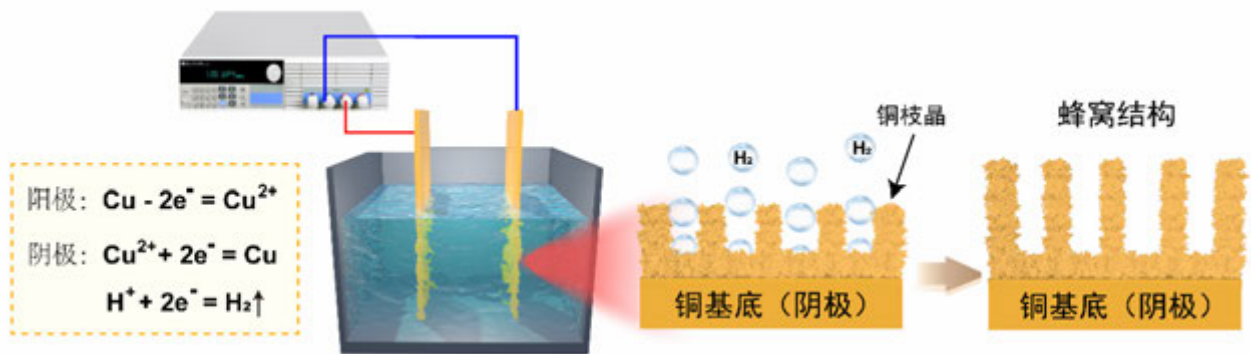


图 2. 蜂窝铜结构生成的过程原理图

1.1.2 镍层修饰蜂窝铜结构的制备

在去离子水中，配置 0.1 M 氯化镍（NiCl₂）溶液，以上不得到的 Cu-x 电极作为阴极，电流密度为 25 mA/cm² 沉积 900 s，得到镍层修饰的蜂窝铜电极，不同的电极命名为 Ni@Cu-x (x=1, 2, 3)。如表 1 为不同样

品的制备信息。作为对比，光滑铜片，光滑镍片，泡沫铜，泡沫镍作为对比样品被测试。

表 1 不同样品的反应条件与编号

编号	基底	电解液	电流密度	反应时间
Cu-1	光滑铜片	0.4 M Cu ₂ SO ₄ + 1.6 M H ₂ SO ₄	1 A cm ⁻²	200 s
Cu-2	光滑铜片	0.4 M Cu ₂ SO ₄ + 1.8 M H ₂ SO ₄	1 A cm ⁻²	200 s
Cu-3	光滑铜片	0.4 M Cu ₂ SO ₄ + 2.0 M H ₂ SO ₄	1 A cm ⁻²	200 s
Ni@Cu-1	Cu-1	0.1 M NiCl ₂	25 mA cm ⁻²	900 s
Ni@Cu-2	Cu-2	0.1 M NiCl ₂	25 mA cm ⁻²	900 s
Ni@Cu-3	Cu-3	0.1 M NiCl ₂	25 mA cm ⁻²	900 s

1.2 表征分析方法

本实验显微镜采用的仪器为 Nikon ECLIPSE E200。场发射 SEM 采用的仪器为 SU5000 型号，用来观察样品的表面形貌。

1.3 电化学分析方法

本实验电化学测试实验使用的是电化学工作站（上海辰华仪器有限公司的 CHI660E 电化学分析仪），主要测试样品的线性扫描伏安曲线、电子转移阻抗谱和 Tafel 斜率。线性扫描曲线（LSV）扫描速率是 5 mV s⁻¹，每次均进行电压补偿；Tafel 斜率主要是通过线性扫描曲线转化而来，电子转移阻抗谱（EIS）在振幅为 5 mV、电压为-0.3 V、频率范围为 0.01 Hz~100 kHz 的条件下测试。文中如果没有特殊说明，其涉及的过电位均是通过能斯特方程（ $E_{(vs.RHE)} = E_{(vs.SCE)} + 0.244\text{ V} + 0.059\text{ pH}$ ）进行转换的。

2 实验结果分析

2.1 表面形貌及元素分析

如图 3 所示，扫描电子显微镜、体视显微镜以及光学照片清晰显示不同样品（Cu-x）的宏观结构和微观结构。图 3（a₁）-（a₃）所示电极为 0.4 M 硫酸铜和 1.6 M 硫酸电解液下得到的 Cu-1 样品，图 3（a₂）图显示整个电极表面的光学照片，可以清晰看出表面均匀的多孔结构。图 3（a₁）是在体视显微镜下拍到的表面微观形貌，其表面主要呈现出蜂窝多孔结构，并且蜂窝结构主要是由许多枝晶堆积生长，同时在蜂窝结构表面有许多类树叶状的结构生长。图 3（a₃）的 SEM 进一步显示了该样品的微观结构，印证了体视显微镜下的结构。图 3（b₁）-（b₃）所示电极为 0.4 M 硫酸铜和 1.8 M 硫酸电解液下得到的 Cu-2 样品，图 3（b₂）显示整个电极的光学照片，和 Cu-2 类似表面呈现均匀的多孔结构，图（b₁）在体视显微镜下拍到的电极表面同样的微观形貌。不一样的是，图 3（b₃）显示了不一样的蜂窝结构，主要是在较大的硫酸浓度下，蜂窝结构的壁厚加大。图 3（c₁）-（c₃）所示电极为 0.4 M 硫酸铜和 2.0 M 硫酸电解液下得到的 Cu-3 样品，同 Cu-1 和 Cu-2 类似，图 3（c₂）中体视显微镜显示表面结构均匀，通过图 3（c₁）金相显微镜观察表面的晶枝有变小的趋势。同时图 2（c₃）的 SEM 显示蜂窝多孔结构的壁厚继续变大。综上所述，随着硫酸浓度的升高，表面的枝晶结构变多，同时多孔蜂窝结构的壁厚变厚，可以预见的是其比表面积在逐渐变大。因此，可以预测 Cu-3 样品作为基体继续进行镍层修饰，将会是催化性能最优的样品。

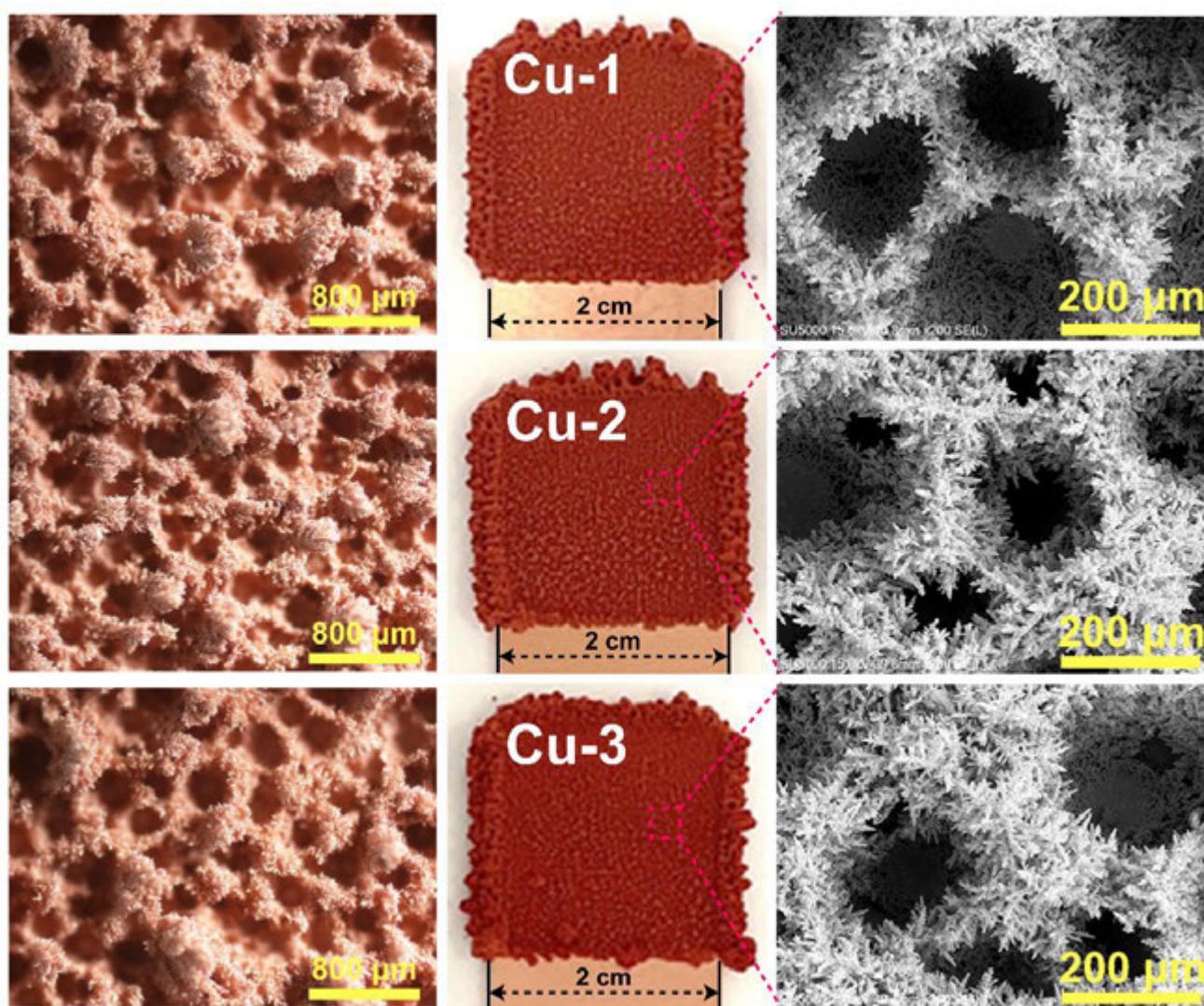


图 3. Cu-x ($x=1,2,3$) 的金相(左列)、光学照片(中列)和 SEM 图像(右列)

在制备的 Cu-x 样品表面进一步电沉积修饰镍层, 如图 4 所示, 扫描电子显微镜、体视显微镜以及光学照片清晰显示不同样品 (Ni@Cu-x) 的宏观结构和微观结构。图 4 (a₁) - (a₃) 所示电极为 Ni@Cu-1 电极, 首先观察光学照片图 4 (a₂) 可知, 表面颜色变暗, 这主要是因为镍层在表面的均匀负载, 图 4 (a₁) 可知表面的微观结构并没有被改变。而明显不一样的是图 (a₃), 相比图 3 中的蜂窝结构, 其表面的枝晶明显变粗大, 这主要是镍在表面均匀沉积造成的, 但整体的微观结构并没有发生改变。图 4 (b₁) - (b₃) 所示电极为 Ni@Cu-2 电极, 其整体变化特点和 Ni@Cu-1 相似, 其整体微观结构并没有发生较大的改变; 由于镍均匀的沉积在蜂窝结构的表面, 形成蜂窝结构的枝晶明显变得粗大。同时, 图 4 (c₁) - (c₃) 所示电极的 Ni@Cu-3 电极也出现类似的特点, 随着镍层的沉积, 其表面的微观结构并没有发生改变, 而镍层的沉积也并没有破坏微观结构。同时, 相比图 (a₃) 和 (b₃), 图 (c₃) 的蜂窝结构壁厚仍然是最后的。从材料的结构决定性能来看, 其较厚的壁厚是许多枝晶堆积而成, 其较高的比表面积使得镍充分暴露。可以预测的是, Ni@Cu-3 电极的电催化析氢性能是最佳的。

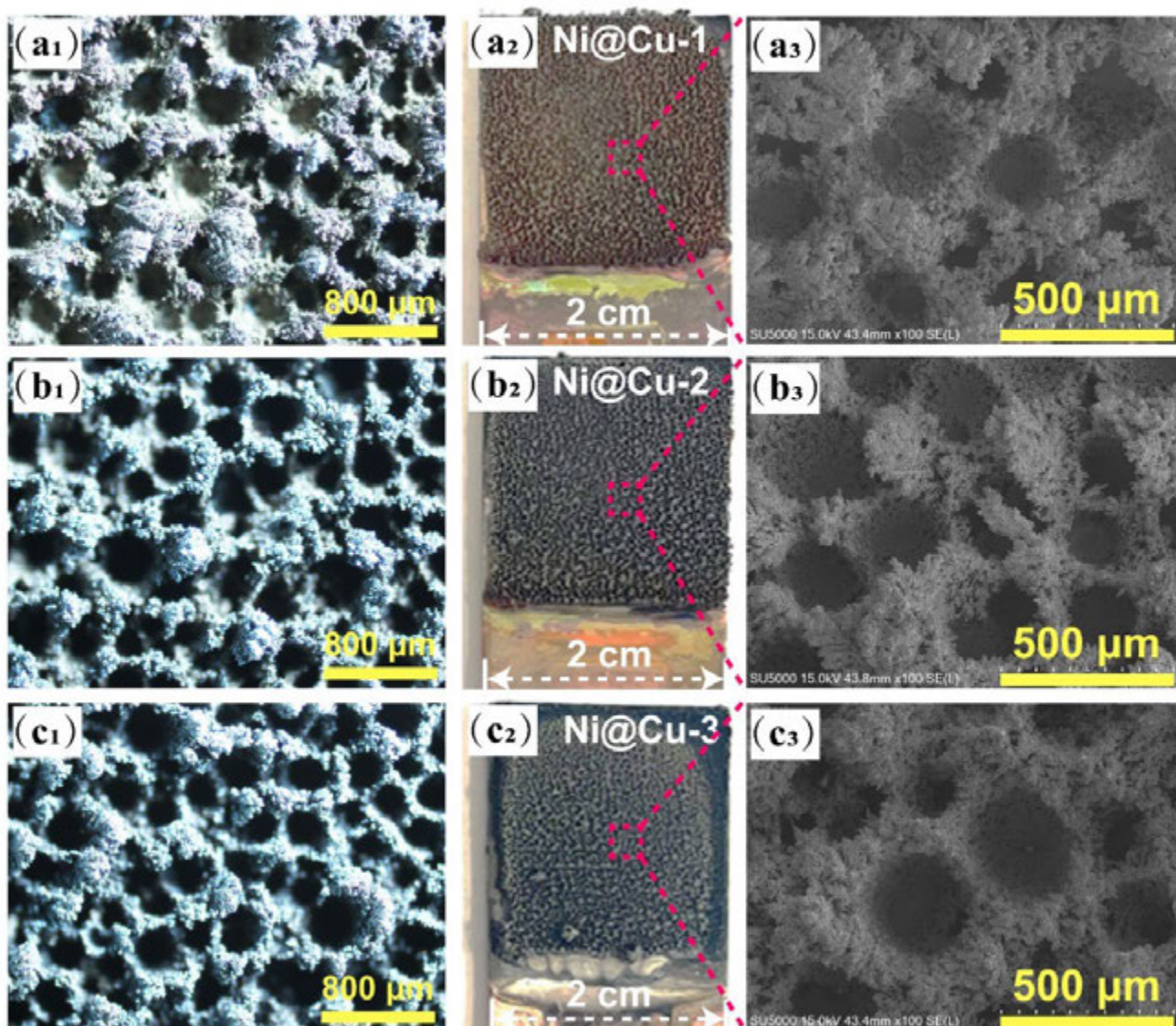


图 4. Ni@Cu-x ($x=1,2,3$) 的金相(左列)、光学照片(中列)和 SEM 图像(右列)

为了进一步证实镍层在表面的均匀负载，通过 SEM-EDX 分析技术进行详细的论证。首先，图 5 (a₁) - (a₃) Cu-3 电极，其中 5 (a₁) 为蜂窝结构的进一步放大图，而图 (a₂) 和 (a₃) 分别对应 Cu 和 Ni 元素的分布图，从图中可以看出 Cu 元素主要是按照蜂窝结构上枝晶的轮廓均匀分布，因此明确证实 Cu 元素组成蜂窝结构。图 5 (a₁) - (a₃) Ni@Cu-3 电极，图 5 (b₁) 为 Ni@Cu-3 电极的蜂窝孔壁，图 (b₂) 和 (b₃) 分别对应 Cu 和 Ni 元素的分布图，与 Cu-3 电极不同的是，Cu 元素在整个结构上几乎没有显示，取而代之的是 Ni 元素沿着蜂窝孔壁均匀的分布。通过以上分析可知，通过第二步沉积反应使得 Ni 层在表面均匀的涂抹，明确证实 Ni@Cu-3 电极的成功合成。

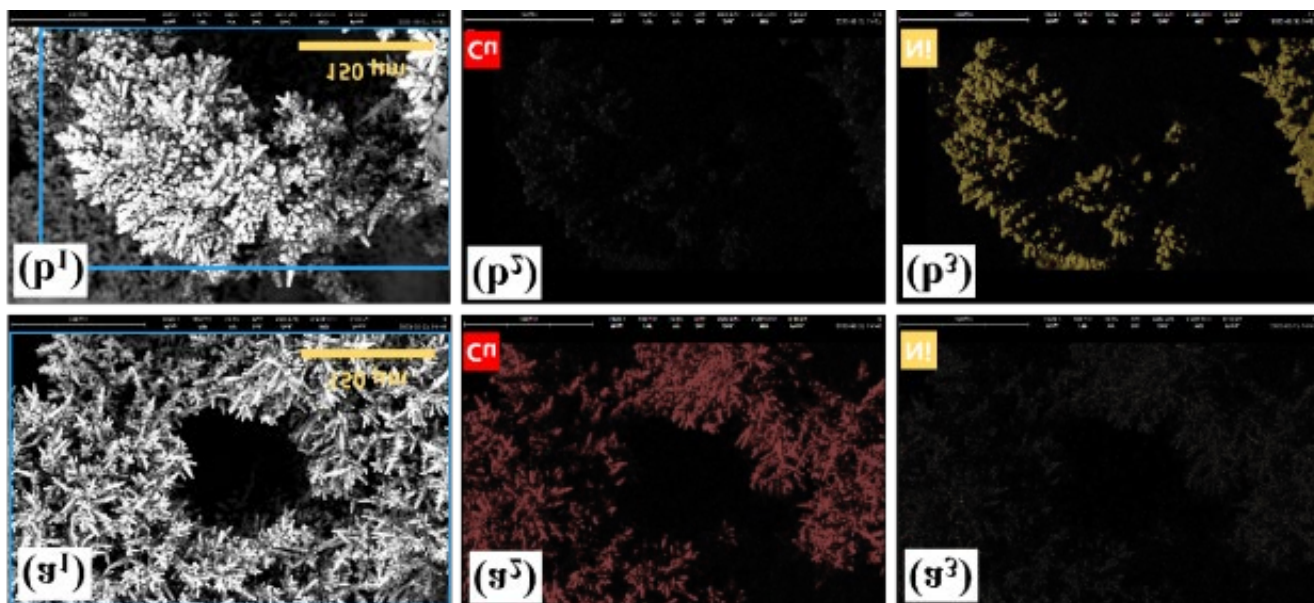


图 5. (a1-a3) Cu-3 的元素分布图, (b1-b3) Ni@Cu-3 的元素分布图

2.2 电极的电化学性能测试

为了进一步表征电极的电催化析氢性能, 图 6 (a) - (b) 展示了 Cu-x 电极和 Ni@Cu-x 电极的线性扫描伏安特性曲线, 该测试主要是在 0.5 M H₂SO₄ 电解液中利用三电极 (饱和甘汞电极为参比电极, 石墨棒为对电极和制备的样品为工作电极) 系统, 扫速为 5 mV/s。结合图 6 (a) 和 6 (b) 可以看出, 电极 Cu-x 的催化性能明显低于电极 Ni@Cu-x。而对于 Ni@Cu-3 电极达到 10 mA cm⁻² 的电流密度仅需要 227.5 mV, 明显优于 Ni@Cu-2 (255.5 mV)、Ni@Cu-1 (298.5 mV)、Cu-3 (349.5 mV)、Cu-2 (371.5 mV) 和 Cu-1 (374.5 mV)。同时, Ni@Cu-3 电极达到 100 mA cm⁻² 和 200 mA cm⁻² 的电流密度时需要 328.5 mV 364.5 mV, 同样明显优于 Ni@Cu-2 (360.5 mV 和 392.5 mV)、Ni@Cu-1 (405.5 mV 和 434.5 mV)、Cu-3 (411.5 mV 和 444.5 mV)、Cu-2 (431.5 mV 和 452.5 mV) 和 Cu-1 (442.5 mV 和 460.5 mV)。Ni@Cu-x 电极性能明显优于 Cu-x 主要因为具有丰富附着位点的蜂窝铜结构为活性镍提供丰富的附着位点; 而 Ni@Cu-3 明电极显优于 Ni@Cu-2 和 Ni@Cu-1 电极主要是因为随着硫酸浓度的提升蜂窝铜结构的枝晶数量变多, 蜂窝壁变厚, 从而显著提升活性镍的活性位点, 进而 Ni@Cu-x 电极表现出优异的催化性能。

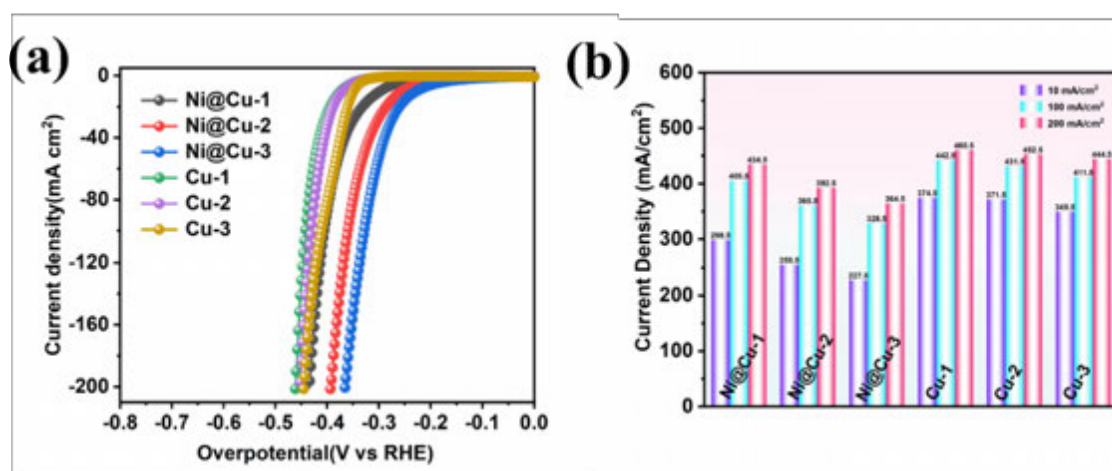


图 6. Cu-1、Cu-2、Cu-3、Ni@Cu-1、Ni@Cu-2 和 Ni@Cu-3 电极的 (a) LSV 图和 (b) 过电位

为了进一步表征电极的析氢过程，图 7 (a) 显示对应于图 6 (a) 的 Tafel 曲线，值得注意的是 Ni@Cu-3 电极的 Tafel 值为 105.8 mV dec⁻¹ 斜率值低于 Ni@Cu-2 和 Ni@Cu-1 电极，这和图 6 (a) - (b) 结论一致。再者，Cu-x 电极的 Tafel 值明显低于 Ni@Cu-x 电极，这可能是因为 Cu 基体具有优良导电性的原因，这也侧面证实了以高比表面积铜基材料作为三维自支撑电极基体是一个正确的选择。

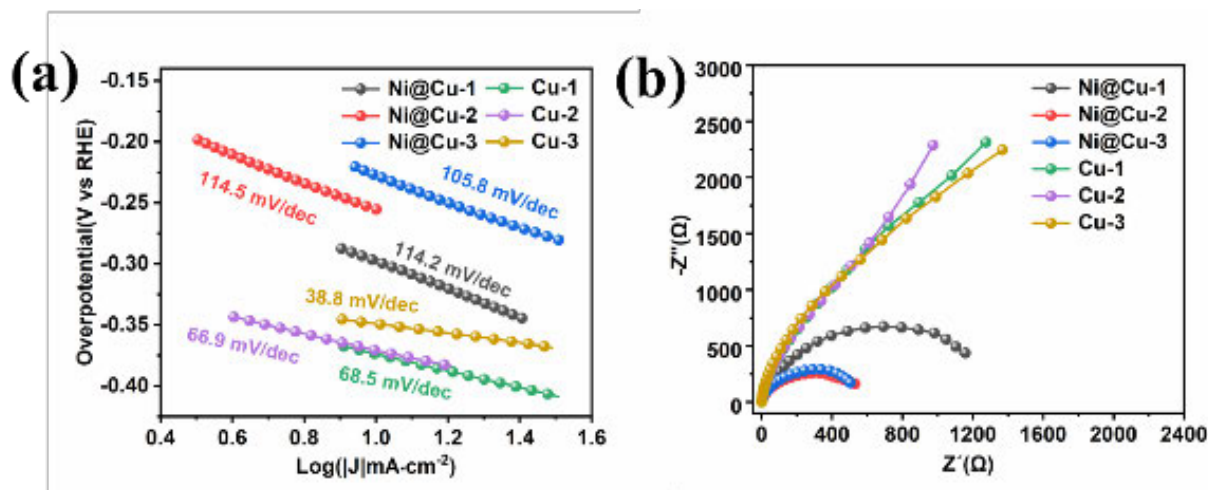


图 7. Cu-1、Cu-2、Cu-3、Ni@Cu-1、Ni@Cu-2 和 Ni@Cu-3 电极的 (a) Tafel 斜率图和 (b) 电化学阻抗图

图 7 (b) 通过电化学阻抗图进一步表征了析氢过程的动力学过程，从图中可以看出 Ni@Cu-3 电极的电子转移阻抗明显优于 Ni@Cu-2 和 Ni@Cu-1 电极，这和图 6 (a) 和 7 (a) 结论一致，均证实了 Ni@Cu-3 电极优异的电催化性能。同时 Cu-x 电极的电化学转移阻抗图明显较大，也说明了电化学阻抗谱展示了电极的催化活性，这这主要是镍金属的催化活性明显优于铜金属。通过表征也说明了，虽然铜导电性能优异，但在析氢催化方面明显劣于镍金属。因此，将铜金属和镍金属在表面巧妙的耦合是一个理想的研究思路。

2.3 电极表面的气泡脱离过程

为了进一步验证本研究制备样品结构的优越性，分别测试了光滑铜片、泡商业沫铜、光滑镍片、商业泡沫镍和本研究样品在高电流密度下气泡脱离行为，图 8 显示了 Cu 片、CF、Cu-3、Ni 片、NF 和 Ni@Cu-3 电极在电流密度达到 200 mA cm⁻² 时表面气泡的脱离过程。如图 8 (a) 所示，铜片表面气泡在持续不断的增大，这样一来将不可避免的影响析氢的后续过程。如图 8 (b) 为工业泡沫铜，在电流密度达到 200 mA/cm² 时表面气泡其较小的半径逃逸，这样一来将明显推动整个产氢过程，因此也证实丰富的微观结构将影响气泡以较小的半径逃逸。进一步图 8 (c) 为本研究制备的 Cu-3 电极，通过观察电极表面的气泡发现，其以更小的半径逃逸，这主要是因为本研究制备的蜂窝铜结构具有更加丰富的微观结构，再次证实微观结构对气泡逃逸行为的影响。

为了验证镍基电极在高电流密度下对气泡逃逸过程的影响，图 8 (d) 显示 Ni 片表面气泡的析出过程，相比图 8 (a) 的 Cu 片，表面析出的气泡明显变小，这可能是因为镍金属本征催化活性比较高导致的，这也说明了镍基材料在催化析氢方面的优势。图 8 (e) 展示了工业泡沫镍基体作为电极时的析气过程，首先相比镍片气泡逃逸半径明显减小，这说明多孔结构对析氢气泡的优越性；再者，相比泡沫铜表面的气泡半径，泡沫镍表面的气泡套题半径仍然较小，这也是因为镍金属的本征催化活性比较高导致的。最后图 8 (f) 显示了电极 Ni@Cu-3 的表面气泡逃逸行为，令人兴奋的是其表面的气泡进一步较小，并且在产氢过程中气泡以较小的半径持续的析出，这一方面证实了该研究中蜂窝结构的优越性，另一个方面也说明金属镍作为电催化析氢的优越性，并且图 6 (a) 和图 7 (a) 也验证了该电极具有最优异的催化性能。综上所述，该研究制备的蜂窝结构在气泡析出传递过程中有很大的优越性，可以为涉及气泡析出的催化反应提出一个很好的思路，同时也为优化涉及多相流动的反应过程提出新策略。

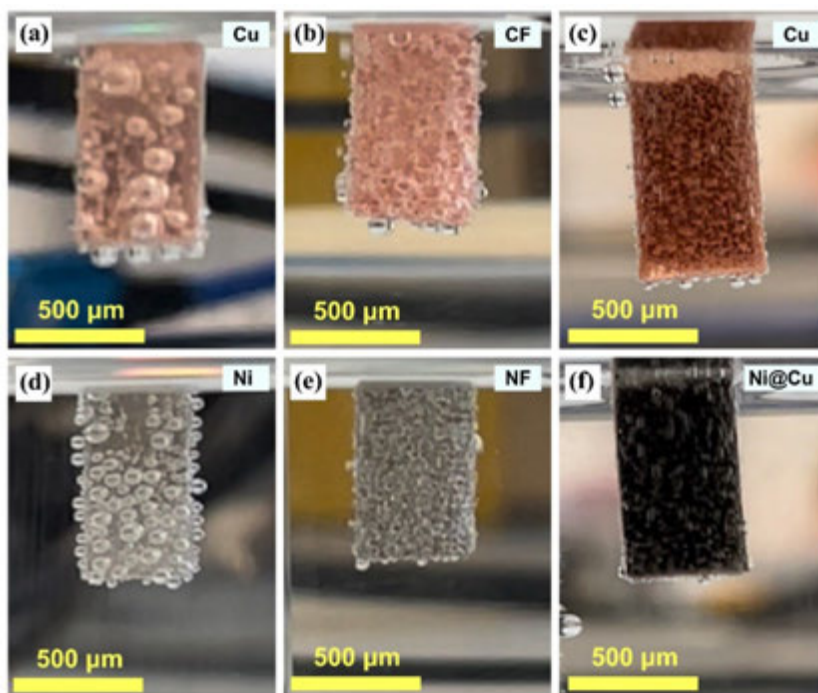


图 8. 气泡在 (a) Cu 片、(b) CF、(c) Cu-3、(d) Ni 片、(e) NF 和 (f) Ni@Cu-3 电极表面的脱离过程

2.4 与文献的对比

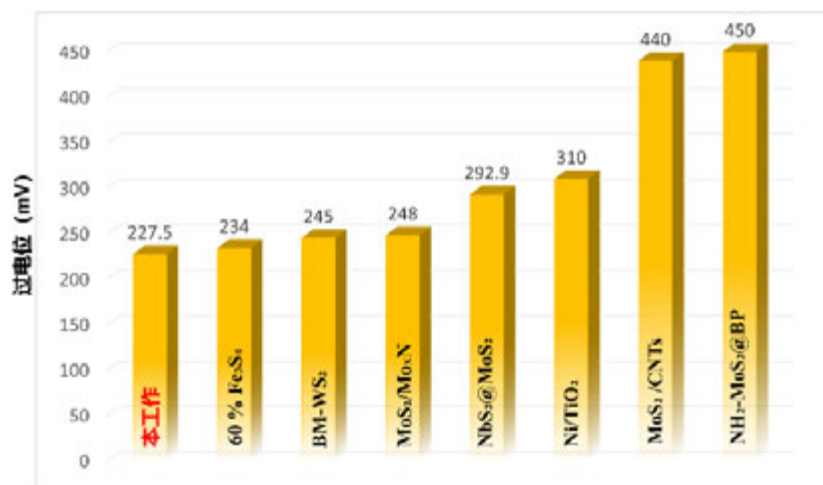


图 9. 不同电极达到 10 mA/cm² 时的过电位

电极在电流密度达到 10 mA/cm² 时的过电位是衡量一个电极催化性能的重要指标，图 9 展示了不同文献中所需的电位^[23-29]。从图中可以得出，相比于大部分电极，本研究中体现的催化性能最佳，特别是对于本征催化性能优异的 MoS₂ 基电催化剂，本研究也可以与之相媲美，可见本研究中电极性能的优异。因此，也进一步说明蜂窝状铜结构和金属镍之间的高效耦合作用。

3 结论

综上所述，本文采用两步电沉积法制备了镍层修饰的蜂窝铜结构 Ni @Cu-3 电极材料，无需粘结剂即可直接用于三维自支撑性能优异的电解水析氢电极。该电极在 10 mA·cm⁻² 时的超低过电位为 227.5 mV，优于基准 Ni @Cu-2、Ni @Cu-1 和 Cu-x 电极，同时 Ni @Cu-3 电极在 100mA·cm⁻² 和 200mA·cm⁻² 的高电流密度下仍然表现出较低的过电位，突出了该材料优异的电化学性能。在研究不同电解液浓度条件下制备的电极催化性

能的差异, Ni@Cu-3 电极的蜂窝结构主要是由枝晶堆积而成, 其蜂窝壁较厚使得更多的枝晶结构, 进而使得催化活性显著提升。另外一方面, 本研究的蜂窝结构使得气泡在表面能够以较小的半径逃逸, 明显提升催化性能, 这也为涉及气泡反应的多相流体系提供新思路。因此, 这项工作为电沉积合成蜂窝状自支撑电极促进水电解析氢开辟了一条新途径, 加速开发低成本、高效、耐用的三维自支撑电极的进程。

参考文献

- [1] Dresselhaus M S, Thomas I L. Alternative energy technologies[J]. *Nature*, 414 (2001) 332-7.
- [2] Rausch B, Symes M D, Chisholm G, Cronin L. Decoupled catalytic hydrogen evolution from a molecular metal oxide redox mediator in water splitting[J]. *Science*, 345 (2014) 1326-1330.
- [3] J.A. Turner. Sustainable hydrogen production[J]. *Science*, 305 (2004) 972-974.
- [4] ZENG Min, LI Yanguang. Recent advances in heterogeneous electrocatalysts for the hydrogen evolution reaction[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 3 (2015) 14942-14962.
- [5] HUANG Xingkai, XU Xiaopei., LI Chao, WU Dengfeng, CHENG Daojian, CAO Dapeng. Vertical CoP nanoarray wrapped by N,P-doped carbon for hydrogen evolution reaction in both acidic and alkaline conditions[J]. *Advanced Energy Materials*, 9 (2019) 1803970.
- [6] ZHONG Wenwu, XIAO Beibei, LIN Zhiping, WANG Zongpeng, HUANG Liangai, SHEN Shijie, ZHANG Qinghua, GU Lin. RhSe₂: A superior 3D electrocatalyst with multiple active facets for hydrogen evolution reaction in both acid and alkaline solutions[J]. *Advanced Materials*, 33 (2021) 2007894.
- [7] YAN Jiajie, HUANG Yunpeng, MIAO Yue E, Tjiu Weng Weei, Liu Tianxi. Polydopamine-coated electrospun poly(vinyl alcohol)/poly(acrylic acid) membranes as efficient dye adsorbent with good recyclability[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 283 (2015) 730-739.
- [8] BAI Song, WANG Chengming, DENG Mingsen, GONG Ming, BAI Yu, JIANG Jun, XIONG Yujie. Surface polarization matters: enhancing the hydrogen-evolution reaction by shrinking Pt shells in Pt-Pd-graphene stack structures[J]. *Angewandte Chemie*, 53 (2014) 12120-12124.
- [9] Subbaraman R, Tripkovic D, Strmcnik D, Chang K, Uchimura M, Paulikas A P, Stamenkovic V, Markovic N M. Enhancing hydrogen evolution activity in water splitting by tailoring Li⁺-Ni(OH)₂-Pt interfaces[J]. *Science*, 334 (2011) 1256-1260.
- [10] Esposito D V, Hunt S T, Kimmel YC, Chen J G. A new class of electrocatalysts for hydrogen production from water electrolysis: metal monolayers supported on low-cost transition metal carbides[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 134 (2012) 3025-3033.
- [11] LV Haifeng, XI Zheng, CHEN Zhengzheng, GUO Shaojun, YU Yongsheng, ZHU Wenlei, LI Qing, ZHANG Xu, PAN Mu, LU Gang, MU Shichun, SUN Shouheng. A new core/shell NiAu/Au nanoparticle catalyst with Pt-like activity for hydrogen evolution reaction[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 137 (2015) 5859-5862.
- [12] Greeley J, Jaramillo T F, Bonde J, Chorkendorff I B, Norskov J K. Computational high-throughput screening of electrocatalytic materials for hydrogen evolution[J]. *Nature Materials*, 5 (2006) 909-913.
- [13] Stamenkovic V R, Mun B S, Arenz M, Mayrhofer K J J, Lucas C A, Wang G, Ross P N, Markovic N M. Trends in electrocatalysis on extended and nanoscale Pt-bimetallic alloy surfaces[J]. *Nature Materials*, 6 (2007) 241-247.
- [14] WANG Tanyuan, XIE Huan, Chen Mengjie, D'Aloia Alyssa, Cho Jaephil, WU Gang, LI Qing. Precious metal-free approach to hydrogen electrocatalysis for energy conversion: From mechanism understanding to catalyst design[J]. *Nano Energy*, 2017, 42, 69-89.
- [15] Petrykin V, Macounova K, Shlyakhtin O A, Krtil P, Tailoring the selectivity for electrocatalytic oxygen evolution on ruthenium oxides by zinc substitution[J]. *Angewandte Chemie*, 2010, 49, 4813-4815.
- [16] Kibsgaard J, Chen Z, Reinecke B N, Jaramillo T F. Engineering the surface structure of MoS₂ to preferentially expose active edge sites for electrocatalysis[J]. *Nature Materials*, 2012;11:963e9.
- [17] WANG Chengzhong, SHAO Xiaodong, PAN Jing, HU Jingguo, XU Xiaoyong. Redox bifunctional activities with optical gain of Ni₃S₂ nanosheets edged with MoS₂ for overall water splitting[J]. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2020;268:118435.
- [18] TIAN Yuanyuan, SONG Ye, LIU Jingjun, JI Jing, WANG Feng. MoS_x coated copper nanowire on copper foam as a highly stable photoelectrode for enhanced photoelectrocatalytic hydrogen evolution reaction via plasmon-induced hot carriers[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2020;398:125554.

- [19] Lu A Y, YANG Xiulin, Tseng C C, MIN Shixiong, Lin S H, Hsu C L, LI Henan, Idriss H, Kuo J L, HUANG KuoWei, Li L J. High-sulfur-vacancy amorphous molybdenum sulfide as a high current electrocatalyst in hydrogen evolution[J]. *Small*, 2016;12:5530e7.
- [20] LIN Jinghuang, WANG Pengcheng, WANG Haohan, LI Chun, SI Xiaoqing, QI Junlei, CAO Jian, ZHONG Zhengxiang, FEI Weidong, FENG Jicai. Defect-rich heterogeneous MoS₂/NiS₂ nanosheets electrocatalysts for efficient overall water splitting[J]. *Advanced Science*, 2019;6:1900246.
- [21] MO Dongchuan, YANG Shuo, LUO Jiali, WANG Yaqiao, LYU Shushen. Enhanced pool boiling performance of a porous honeycomb copper surface with radial diameter gradient[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2020, 157, 119867-119877.
- [22] WANG Yaqiao, LUO Jiali, HENG, Yi, MO Dongchuan, LYU Shushen. Wettability modification to further enhance the pool boiling performance of the micro nano bi-porous copper surface structure[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2018, 119, 333-342.
- [23] 黄誓成,郝炜倩,黄作,张芮嘉,张倍维,周钰龙. MoS₂/Mo_xN 异质结构的制备及其电催化析氢性能研究[J]. *功能材料*, 2023,54(03):3149-3155.
- HUANG Shicheng, HAO Weijing, HUANG Zuo, ZHANG Binnan, ZHANG Beijia, ZHOU Yvlong. Preparation of MoS₂/MoN heterostructures and their electrocatalytic hydrogen evolution performance[J]. *Functional material*, 2023,54(03):3149-3155.
- [24] 段孟言,窦生艳,魏清渤,咎灵兴,张红玲. MoS₂/CNTs 电催化析氢性能探究[J]. *化学工程师*, 2023,37(02):13-16.
- DUAN Mengyan, DOU Shengyan, WEI Qingbo, ZAN Lingxing, ZHANG Hongling. Exploration of electrocatalytic hydrogen evolution performance of MoS₂/CNTs [J]. *Chemical Engineer*, 2023,37(02):13-16.
- [25] 余泓,郭军,张丹.NH₂-MoS₂@BP 的制备及其电催化析氢性能研究[J]. *化工新型材料*, 2023,51(03):209-214.
- YU Hongl GUO Junl, ZHANG Dan. Preparation of NH₂-MoS₂@BP and its electrocatalytic hydrogen evolution performance[J]. *New chemical materials*, 2023,51(03):209-214.
- [26] 方红,王德志,吴壮志. 高能球磨活化二硫化钨的制备及其电催化析氢性能研究[J]. *中国钼业*, 2022,46(02):58-64.
- FANG Hong, WANG Dezhi, WU Zhuangzhi. Preparation and electrocatalytic hydrogen evolution of tungsten disulfide activated by high-energy ball milling[J]. *China molybdenum industry*, 2022,46(02):58-64.
- [27] 石鑫婷,邢乐红,孟凡旭,王宜鑫,郝云贵,史馨,张鑫. 镍基 TiO₂ 复合电极的制备及电催化析氢性能[J]. *电镀与涂饰*, 2023,42(08):34-40.
- SHI Xinting, XING Lehong, MENG Fanxu, WANG Yixin, HAO Yungui, SHI Xin, ZHANG Xin. Preparation of Ni-based TiO₂ composite electrode and its electrocatalytic activity for hydrogen evolution reaction[J]. *Electroplating & Finishing*, 2023,42(08):34-40.
- [28] 张爽,王子鸣,卢雅宁,唐梦,王英财,柳玉辉. 熔盐电解法制备 NbS₂@MoS₂ 复合材料及其电催化析氢性能[J]. *复合材料学报*, 2022,39(08):3882-3890.
- ZHANG Shuang, WANG Ziming, LU Yaning, TANG Meng, WANG Yingcai, LIU Yuhui. Molten salt electrolysis synthesis of NbS₂@MoS₂ and its performance for water splitting into hydrogen[J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2022,39(08):3882-3890.
- [29] 李明霞,熊倪,周欣, 李伟奇. 硫化铁纳米晶的可控制备及其电催化析氢特性[J]. *黑龙江大学工程学报*, 2020,11(01):41-47.
- Controllable fabrication of Fe₃S₄ nanocrystals and electrocatalytic hydrogen evolution properties[J]. *Journal of Engineering of Heilongjiang University*, 2022,39(08):3882-3890.

基于传热模型的高斯型分布激光烧结线路 形貌优化研究

陈翔宇, 朱剑琴, 陶智, 邱璐*

(北京航空航天大学, 能源与动力工程学院/ **国家级重点实验室, 北京 100191)

(Tel:010-82314545, Email:luqiu@buaa.edu.cn)

摘要: 激光的高斯型能量分布是阻碍激光烧结器件电学、力学性能提升的重要因素。本研究基于激光烧结传热模型结合光斑高斯型能量分布推导出了适配于高斯光束的最优线路沉积形貌, 并通过调节喷墨打印线路图案的“占空比”及线路间距实现该最优形貌线路的实际制造, 最后借助 SEM 表征验证了最优沉积形貌线路的烧结均匀性, 并得到了最优沉积线路的激光烧结特性曲线。

关键词: 纳米微粒, 喷墨打印, 激光烧结, 高斯型分布, 形貌优化

0 前言

激光烧结是一种快速致密化微纳米微粒的加工方法。凭借激光的小辐射面积, 高功率密度以及可控扫描路径, 选择性激光烧结已经成为粉末床熔融与柔性电子中的重要加工途径^[1-3]。为实现孔隙率更低的构件和电阻率更小的线路的增材制造, 激光烧结参数(激光功率、扫描速度、扫描策略等)和沉积参数(铺粉厚度、粉末密度等)的作用特性被广泛研究。广泛的研究表明激光烧结特性的优化, 需要保证沉积参数与激光烧结参数的匹配, 且尽可能削弱由激光光强不均匀分布等因素导致的各向异性烧结影响, 进而避免烧蚀^[4]、飞溅^[5]、气孔^[6]等缺陷, 实现低孔隙率构件激光烧结^[7]。

激光光束整形通过聚焦、扩束、遮挡等手段, 减小光斑的高斯光强梯度^[8]或使高斯光束转变为局部均一的光束(如贝塞尔光束^[9]), 进而降低激光烧结的不均匀程度, 是现阶段主要的缓解激光高斯轮廓带来的烧结不均一性优化策略。但是, 必要光路的局部遮挡、透镜衰减等因素导致的能量损失极大限制了烧结能量密度的调控。此外整形光路设计与搭建较为复杂, 对于激光振镜系统的适用性较差, 这导致了光束整形方法难以规模应用于工业生产。

为实现在高斯型分布激光下烧结高均一性线路, 本研究通过激光烧结传热模型结合高斯分布计算得到了均匀烧结线路沉积形貌; 进一步, 借助喷墨打印实现了可控形貌、可控线宽的线路沉积, 并打印出接近最优沉积形貌的铜纳米微粒沉积线路; 最终确定最优沉积线路的激光烧结特性曲线, 在优选的激光参数下, 制造出了电导率高至 7.8×10^6 S/m 的线路, 且借助 SEM 验证了该线路的高烧结均匀度。

1 研究装置及原理

1.1 铜墨水制备

本研究中, 铜纳米微粒(99.9 wt.%, Deke Daojin, 中国, 平均粒径 50 nm)以纳米墨水悬浮液的形式分散在溶剂中(浓度为 200 mg/ml), 墨水的溶剂是乙二醇(纯度 99.9wt.%, Macklin, 中国)和异丙醇(纯度 99.9wt.%, Macklin, 中国)的混合物。为提升墨水的稳定性, 墨水由超声波破碎机(Scientz-IIID, 中国)在 150 W 下机械分散 180 分钟, 分散系统的温度在水浴中保持在 15 °C。然后, 将分散的铜纳米油墨通过孔径为 0.45 μ m 的聚四氟乙烯(PTFE)过滤器, 去除大的颗粒聚集。

1.2 喷墨打印沉积

本研究中,通过喷墨打印机(Jetlab 4xl, MicroFab, 美国)实现纳米颗粒的定向可控沉积(见图 1 a)。在喷墨打印过程中,正压气源通向储气储气瓶,驱动墨水流入喷嘴,喷嘴内的压电陶瓷接收到波形电信号产生形变,进而产生稳定、连续、与波形相匹配的液滴序列。此外,一个铜制的加热模块被置于基底下,实现基底温度的调控,进而提高打印分辨率^[7]。在打印沉积前,依次使用无水乙醇和超纯水清洗氧化铝基底,并在每次清洗后使用热烘机烘干。

1.3 激光烧结

本研究中,使用 1064 nm 波长的单模连续波激光器(MFSC-75, Maxphotonics, 中国)进行烧结。激光器被固定在一个能够在 Z 方向移动的支架上,光束的移动通过振镜系统实现,激光光斑的大小由凸透镜和基片之间的距离控制(见图 1 b)。在本研究中,光斑直径在烧结全过程中均保持不变,且通过光束轮廓仪(SP620U, Ophir Optronics, 以色列)测量为 600 μm 。

1.4 烧结线路表征

本研究中,使用超景深显微镜(DSX 1000, Olympus, 日本)进行光学图片采集与线路形貌及厚度测量;使用场发射扫描电子显微镜(SU8020, Hitachi, 日本)对烧结线路表面及截面进行微观表征;采用直流电阻测试仪(HPS2661, Helpass, 中国)对烧结线路进行电阻测量,为直观分析导电能力变化,本研究中使用单位电阻长度(与电导成正比)来代替电阻值,该参数越大,烧结线路导电能力越强。

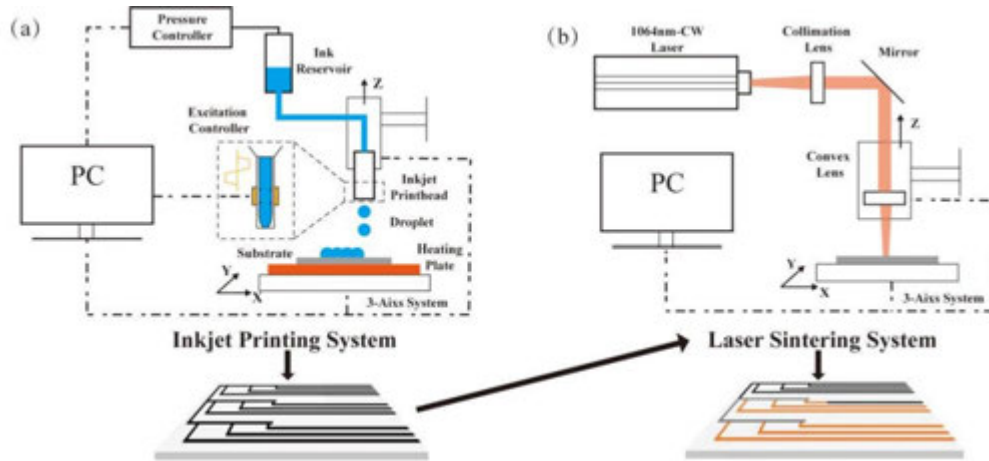


图 1 喷墨打印及激光烧结实验系统示意图

2 研究结果

2.1 最优沉积形貌的理论计算

本节基于激光烧结的传热模型与激光高斯分布,计算得到了不同烧结程度(熔融层占比)下的最优沉积形貌,其中基于陶瓷基底的激光烧结的传热模型的建立在文献^[10]中系统论述,在此做简要介绍。

在激光烧结过程,初始为 E_s 的激光能量穿透厚度为 h 的微粒沉积层时,穿透的能量 E_{sh} 可通过 Bill-Lambert 计算,

$$E_{sh} = E_s \cdot \exp(-\mu h) \quad (1)$$

其中, μ 为衰减系数,因此该过程中沉积层吸收的能量可表示为 $E_s \cdot [1 - \exp(-\mu h)]$ 。此外到达基底的能量 E_{sh} 部分被陶瓷基底反射重新进入纳米微粒层,记作 $(1 - \alpha)E_{sh}$,其中 α 为陶瓷基底对 1064 nm 波长辐射的吸收率。最后,陶瓷基板吸热升温后,通过导热向沉积层传导部分热量,可记作 $\eta \alpha E_s \cdot \exp(-\mu h)$,其中 η 是传导到纳米粒子中的能量与基体吸收的总能量之

比，可通过半无限物体的瞬时热传导理论计算得 $\eta \approx 0.6^{[10]}$ 。依据烧结线路内部熔融层的能量守恒，可得到以下等式关系。

$$\beta E_{ab} + \eta \alpha E_s \cdot \exp(-\mu h) = \Delta H \rho h_m \quad (2)$$

其中 h_m 为内部熔融层厚度， $\beta = h_m/h$ 为熔融层的占比（可被认为烧结程度的度量）， ΔH 为从环境温度状态到融化状态的焓差， ρ 是熔融层的密度， $E_{ab} = E_s[1 - \exp(-\mu h)] + (1 - \alpha)[1 - \exp(-\mu h)]E_{s_h}$ ，为熔融层直接吸收的激光总能量。公式 2 给出了烧结程度 β ，激光能量 E_s ，和沉积厚度 h 的定量关系，经过整理可得，

$$E_s = \frac{\beta \Delta H \rho h}{\eta \alpha \cdot \exp(-\mu h) + \beta[1 + (1 - \alpha)\exp(-\mu h)][1 - \exp(-\mu h)]} \quad (3)$$

此外单模激光光束的高斯型分布可表示通过下式描述，

$$E_s(x) = E_{s_0} \cdot \exp\left(\frac{-2x^2}{r^2}\right) \quad (4)$$

其中 E_{s_0} 为光束中心处的峰值辐照度， x 为离轴的径向距离， r 为激光束的半径。在给定的烧结程度 β 下，以不同 $E_s(x)$ 为输入，通过公式（3）以数值差值方法计算厚度 $h(x)$ ，可获得不同 x 处的沉积厚度，考虑到本研究中的光斑直径为 600 μm ，确定 x 的取值范围为-300 至 300 μm 。以 $\beta = 0.4$ 为例，在此烧结程度下，无量纲化的最优沉积形貌如图 2（a）所示，与光斑的高斯分布相比，最优沉积形貌更具有曲率特性（更小的半峰宽），这对线路的可控沉积提出了挑战。此外，本研究也计算了 $\beta = 0.7$ 和 1 下的最优沉积形貌，如图 2（b）所示。曲线表明，在相同的 $E_s(x)$ 输入下，为获得更高的烧结程度沉积需更小的沉积厚度。此外，值得注意的是，不同 β 数值下的最优沉积形貌相对差异较小，这展示了最优形貌线路对于不同烧结程度的泛用性，拓展了其工程应用的可能性。

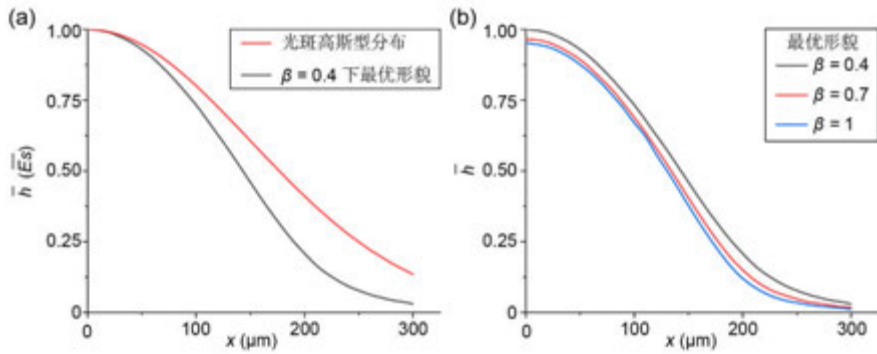


图 2 （a）烧结程度 $\beta = 0.4$ 下量纲化最优沉积形貌曲线与量纲化光斑高斯分布曲线对比，其中沉积曲线具有更小的半峰宽。（b）烧结程度 $\beta = 0.4, 0.7$ 和 1 下的无量纲化最优沉积曲线，三条曲线具有相近的曲率特性。

2.2 最优形貌沉积线路的喷墨打印沉积

上文明确了不同烧结程度下最优的沉积形貌曲线，本节将简述一种未被报道过的通过调控喷墨打印“占空比”实现单次打印制造可控形貌及宽度的喷墨打印策略，以实现最优沉积形貌线路的实际制造。

线路厚度调控的基础是单线沉积的堆叠。当打印的线间距小于线路铺展宽度（60-120 μm ，与打印参数及基板温度等因素相关）时，部分的线路将处于重叠堆积状态，通过调控打印的线路间距和线路铺展宽度可实现沉积线路形貌与沉积宽度的调节。图 3（b）展示了不同打印线间距在相同打印图案（图 3a）下的沉积线路形貌及线路的宽度与最大厚度。在相同的沉积图案下，增加打印线间距可增加沉积线路宽度并减小线路最大厚度，以实现沉积线路形貌的调控，此外通过改变打印图案的“占空比”可以更精确地调节线路形貌线路。考虑到本研究中的光斑直径约为 600 μm ，我们选取了与之吻合程度最高的线间距为 0.02 mm 的沉积线路，

并以此沉积策略为基础，打印了铜纳米微粒沉积并进行了激光烧结实验。

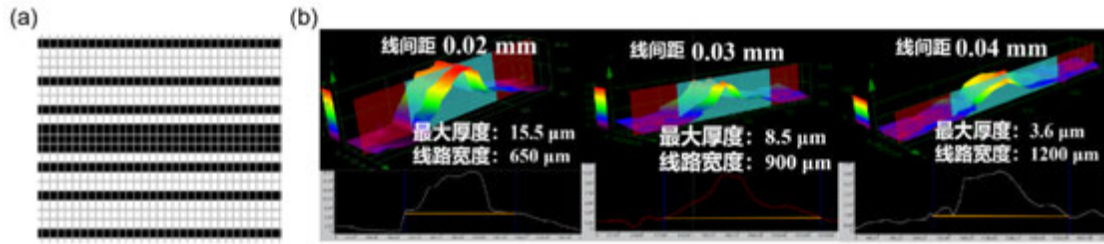


图3 最优形貌沉积线路的喷墨打印策略 (a) 一种可行的通过占空调节实现中间厚边缘薄沉积的打印图案。(b) 线间距分别为 0.02, 0.03 和 0.04 mm 时以 (a) 为打印图案的沉积线路形貌。

2.3 最优形貌沉积线路的激光烧结

为探究烧结参数对铜线路电学性能的影响，本研究在扫描速度固定为 15 mm/s 的基础上，通过改变激光功率实现能量密度 Es 的调控，烧结线路的电导 Lr 随激光功率的变化规律如图 4 (a) 所示。根据电阻随激光功率 P 的变化，可将烧结分为四个阶段。当激光能量密度较小时 (I 阶段)，颗粒间未发生大规模传质，线路不导电。增加激光功率，烧结进入 II 阶段，此时微粒开始颈长，物质发生表面扩散^[11]，线路初步具备导电能量。若进一步增加激光功率，微粒间发生大规模迁移 (体积扩散)^[12]，进入烧结阶段 III，一般认为该阶段烧结线路电学性能最优。值得注意的是，在 III 阶段线路电导与激光功率具有明显的一次函数特征，这是因为该阶段线路电导由熔融层厚度主导，而熔融层厚度随 Es 成正比^[10]。当激光能量密度进一步增加，进入过度烧结区 (IV 区域)。此时线路导电能力迅速衰减，在实际烧结过程中应尽量避免。

为确定最优沉积形貌下的烧结线路熔层特征，我们选取的典型工况 (见图 4a 红圈)，进行了 SEM 表征，结果如图 4 (b) 所示。表征结果表明线路沉积形貌与理论最优沉积形貌相近，证明了 2.2 节中的沉积策略的可行性，此外烧结线路的熔融层边界随沉积厚度不断变化，且与沉积厚度之比 (β) 始终保持在 0.4 附近，这验证了借助理论最优沉积形貌线路，可实现不均匀高斯光斑下的均一程度烧结。

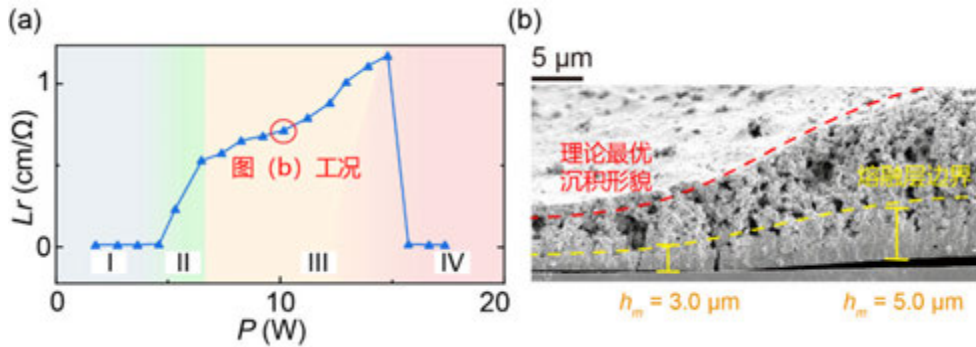


图4 (a) 最优沉积形貌线路的激光烧结特性曲线。(b) 最优沉积形貌的激光烧结线路 SEM 截面图像。该沉积形貌与理论最优沉积形貌高度重合，证实了基于喷墨打印的线路形貌调节策略的可行性；此外，烧结线路内层的熔融区域占比始终保持在 0.4，验证了借助理论最优沉积形貌线路，可实现不均匀高斯光斑的均一程度烧结。

3 结论

本文基于激光烧结传热模型结合光斑高斯型能量分布推导出了理论最优线路沉积形貌，并通过调节喷墨打印线路的“占空比”及线路间距实现该最优形貌线路的制造，最终得到该线路的激光烧结特性曲线，且借助 SEM 表征验证了基于最优沉积形貌的均一烧结线路制造的可行性。具体研究成果总结为以下三点。

(1) 基于激光烧结传热模型及激光光斑高斯型能量分布，从理论上提出了可实现均一激光

烧结的最优沉积形貌。该最优沉积形貌叫高斯分布的半峰宽更小,且不同烧结程度下的最优沉积形貌相对差异较小,这展示了最优形貌线路对于不同烧结程度的泛用性,拓展了其工程应用的可能性。

(2) 通过改变喷墨打印图案“占空比”和打印线间距,调控线路的堆积及其占比,进而实现“中间厚,两边薄”的近似最优沉积形貌线路打印。在相同的沉积图案下,增加打印线间距可增加沉积线路宽度并减小线路最大厚度,以实现沉积线路形貌的调控,此外通过改变打印图案的“占空比”可以更精确地调节线路形貌线路。

(3) 根据烧结线路的电导可将激光烧结最优沉积形貌线路分为四个烧结阶段(未黏结颈长段、黏结颈长段、完全烧结段和过度烧结),其中完全烧结(III)阶段,线路电导最高,为优选工况。借助 SEM 表征确定了 III 阶段下的最优沉积形貌烧结线路微观形貌,结果表明烧结线路的熔融层边界随沉积厚度不断变化,且与沉积厚度之比(β)始终保持在 0.4 附近,这验证了借助理论最优沉积形貌线路,可实现不均匀高斯光斑下的均一程度烧结。

参考文献

- [1] LI W, YANG S, SHAMIM A. Screen printing of silver nanowires: balancing conductivity with transparency while maintaining flexibility and stretchability [J]. *npj Flexible Electronics*, 2019, 3(1).
- [2] YANG Y, RAGNVALDSEN O, BAI Y, et al. 3D non-isothermal phase-field simulation of microstructure evolution during selective laser sintering [J]. *npj Computational Materials*, 2019, 5(1).
- [3] ABOULKHAIR N T, SIMONELLI M, PARRY L, et al. 3D printing of Aluminium alloys: Additive Manufacturing of Aluminium alloys using selective laser melting [J]. *Progress in Materials Science*, 2019, 106.
- [4] RAHIMI R, OCHOA M, ZIAIE B. Direct Laser Writing of Porous-Carbon/Silver Nanocomposite for Flexible Electronics [J]. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2016, 8(26): 16907-13.
- [5] SCIPIONI BERTOLI U, WOLFER A J, MATTHEWS M J, et al. On the limitations of Volumetric Energy Density as a design parameter for Selective Laser Melting [J]. *Materials & Design*, 2017, 113: 331-40.
- [6] FENG B, WANG C, ZHANG Q, et al. Effect of laser hatch spacing on the pore defects, phase transformation and properties of selective laser melting fabricated NiTi shape memory alloys [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2022, 840.
- [7] QIU C, PANWISAWAS C, WARD M, et al. On the role of melt flow into the surface structure and porosity development during selective laser melting [J]. *Acta Materialia*, 2015, 96: 72-9.
- [8] MIN H, LEE B, JEONG S, et al. Fabrication of 10 μm -scale conductive Cu patterns by selective laser sintering of Cu complex ink [J]. *Optics & Laser Technology*, 2017, 88: 128-33.
- [9] BACK S-G K S. Laser filament bottom-up growth sintering for multi-planar diffraction-limit printing and its application to ultra-transparent wearable thermo-electronics [J]. *Journal of Materials Chemistry C*, 2018, 6: 7759.
- [10] CHEN X, ZHANG M, ZHU J, et al. Laser sintering of Cu nanoparticles deposited on ceramic substrates: Experiments and modeling [J]. *Additive Manufacturing*, 2023, 69.
- [11] PAENG D, YEO J, LEE D, et al. Laser wavelength effect on laser-induced photo-thermal sintering of silver nanoparticles [J]. *Applied Physics A*, 2015, 120(4): 1229-40.
- [12] MOSTAFAEI A, ELLIOTT A M, BARNES J E, et al. Binder jet 3D printing—Process parameters, materials, properties, modeling, and challenges [J]. *Progress in Materials Science*, 2021, 119.

具有二次流道及交错出入口散热器性能研究

李霖, 于佳佳, 吴春梅, 李友荣

(重庆大学能源与动力工程学院, 重庆, 400044)

(E-mail: liyourong@cqu.edu.cn)

摘 要 不均匀的温度分布会导致电子器件性能退化和热失效。为了减小温度分布的不均匀性, 本文设计了一种具有二次流道和交错出入口的微通道散热器。采用水作为冷却剂, 在 $102 \leq Re \leq 512$ 范围内, 对出入口间距、二次流道位置和流速等对加热壁面均温性能的影响进行了数值模拟研究。结果表明, 在交错出入口微通道散热器的两侧/中部区域均设置二次流道时具有最佳的壁面温度均匀性, 其底壁温度不均匀温差降低到直通通道散热器的 (12~14)%, 压降降低到直通通道散热器的 (60~85)%。

关键词 交错出入口; 二次流道; 微通道散热器; 温度均匀性; 数值模拟

0 前言

近年来, 由于对便携性和设备性能要求的提高, 电子器件逐渐向集成化和小型化方向发展。随着电子器件尺寸变小和发热功率增大, 设备中的热密度急剧增加、温度升高。表面温度分布不均匀不仅会导致局部热点、从而使电子器件性能退化, 还会引起热应力导致电子器件临界疲劳失效, 对其可靠性和使用寿命产生不利影响^[1, 2], 因此, 热管理对小型电子设备的正常运行至关重要。1981 年, Tuckerman 和 Pease^[3]首次提出了微通道散热器, 该技术因具有体积小、比体积大、换热系数大、冷却液库存量小等优点得到了广泛应用。

考虑在直通道内流体温度沿流动方向升高的特点, 有研究者通过优化流道布置来更好地分配冷却剂, 良好的流体分布有助于提高温度的均匀性。Vasilev 等^[4]研究了微通道纵向/横向布置、微通道数量和顺/逆流形式等对温度均匀性的影响, 共设计出十种单相微通道散热器。Al-Neama 等^[5]研究了直矩形微通道和单通道、双通道、三通道蛇形矩形微通道的综合性能, 结果表明, 单蛇形管具有最佳传热性能和更好的温度均匀性。Liang 等^[6]设计了一种 Y 型分形微通道, 沿流动方向通过 Y 型分岔使流道数量增多, 换热面积增加, 出口区域能保持较低温度。Tan 等^[7]设计了多阶组件 (一阶、二阶、三阶) 的多尺度叶脉型微通道网络, 三阶组件具有更好的温度均匀性, 因为通道的更高阶具有更均匀的流量分布和更好的传输特性。上述优化流道布置的方式虽然实现了更均匀的流体分布, 提高了底壁面温度均匀性, 但也使微通道结构变得相当复杂, 难以进一步与肋、凹腔等传热强化形式结合。

对于常规的并流流动模式, 通过强化微通道整体换热性能, 可以降低底部壁面温差, 提高温度均匀性。研究者们通过调整通道截面形状和侧壁结构、加入肋、凹腔等

微观结构的方式^[8,9], 干扰边界层的生长、促进流体混合以及增加换热面积来提高换热性能。但流体温度沿流动方向不断升高, 加热壁面沿流动方向的温度梯度问题仍未解决。因此, 许多研究者通过梯度变化结构来减小沿流动方向的温度梯度。Shen 等^[10]研究了流道中心垂直分岔开始的最佳位置。Essam 等^[11, 12]提出流道中部宽度阶梯变化和沿流动方向微通道宽度阶梯变化两种阶梯变宽度模型, 垂直分岔布置通过影响局部流动分布和增加换热面积来提高局部换热性能。Feng 等^[13]研究了嵌入式梯度分布针鳍阵列对流动特性和温度均匀性的影响, 结果表明, 等泵送功率时相比于均匀针鳍阵列, 梯度分布针鳍阵列热阻和最大温差分别降低了 34.6% 和 8K。唐等^[14]分析了斜截式、含肋斜截式和混合式结构的微通道散热器均温特性, 结果发现, 混合式结构壁面温度梯度最小, 壁温标准差最低。Lan 等^[15]研究了变密度含肋斜截式结构对温度均匀性的提升效果。

为了解决温度分布不均匀的问题, 许多研究者提出采用逆流模式来减小温差。Leng 等^[16]对双层逆流微通道散热器分别以底壁最大温差和总热阻作为目标函数进行了优化。Shen 等^[17]设计了交错排列逆流波纹双层微通道散热器, 结果发现, 双层微通道交错流动的温度均匀性优于平行流动, 逆流模式优于顺流模式、且波纹通道优于直通道。Tikadar 等^[18, 19]通过实验和数值模拟研究了采用两个连接器实现逆流平行通道的交叉流动, 二次流中断流动和热边界层、并且增强流体混合, 逆流形式中部热点现象得到缓解, 温度均匀性显著提升。Ali 等^[20]提出将收敛-发散微通道散热器与逆流模式结合, 获得了更好的温度均匀性。Khoshvaght-Aliabadi 等^[21]研究发现, 逆流模式下的波浪型微通道散热器比顺流模式具有更好的温度均匀性, 相比于直通道, 波浪形微通道具有更好的换热能力, 从而改善底部壁面温度均匀性。Zhang 等^[22]研究了底部壁面为凹腔(凹腔几何形状分别为锯齿形、方波形和波浪形)结构的壁温特性, 提出温度均匀性和能耗相结合的新的综合评判指标来评价壁面温度特性。

顺流、逆流模式与肋、凹腔、二次流道等换热强化结构结合, 通过强化换热来降低壁面温度, 提高壁面温度均匀性。但考虑到流体温度沿流动方向不断升高, 使得顺流模式仍存在沿微通道流动方向的温度梯度, 逆流模式存在中心热点问题。因此, 本文提出采用交错出入口的方式, 通过实现更均匀的流体分布来改善温度均匀性, 同时在临近峰值位置处设置二次流道, 从而降低底壁最高温度, 减小底壁温差。

1 理论模型

1.1 物理模型

图 1(a)为常规微通道散热器单元。单个微通道宽度 $W_c=0.3\text{ mm}$, 高度 $H_c=0.6\text{ mm}$, 长度 $L=20\text{ mm}$, 流道侧壁宽度 $W_d=0.2\text{ mm}$, 上壁面和底壁面厚度均为 $H_s=0.1\text{ mm}$ 。图 1(b)为具有交错式出入口、两侧与中部区域均设置二次流道的微通道散热器单元, 二次流道宽度为 0.2 mm 。定义中部出入口间距为 S , 两侧二次流道距端部距离为 S_1 , 中部二次流道间距为 S_2 。通道尺寸与常规微通道散热器一致, 为避免回流, 中部出入口设置高度为 1.5 mm 的出口/入口段。

冷却介质为常温下的水, 所有固壁材料都为紫铜。水和紫铜的物性参数如表 1 所示。

表 1 材料的热物理性质[23]

材料	固体: 铜	流体: 水
μ , kg/(m·s)	—	$0.0194-1.065\times 10^{-4}T+1.489\times 10^{-7}T^2$
k , W/(m·K)	387.6	$-0.829+0.0079T-1.04\times 10^{-5}T^2$
c_p , J/(kg·K)	381	$5348-7.42T+1.17\times 10^{-2}T^2$
ρ , kg/m ³	8978	998.2

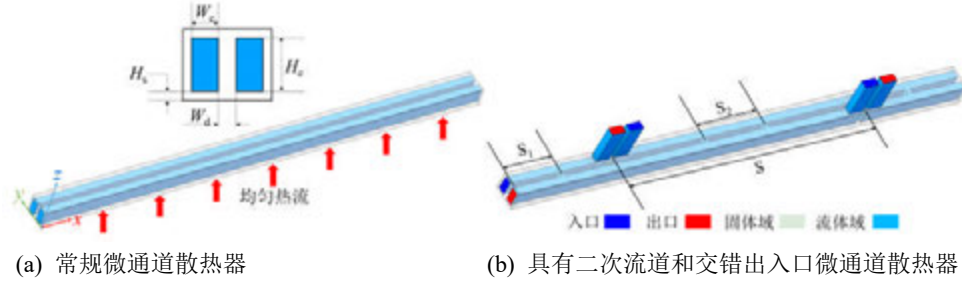


图 1 散热器计算域模型示意图

1.2 数学模型

为简化起见，引入以下假设：(a) 水是单相和不可压缩牛顿流体；(b) 流动是稳态层流；(c) 固体为常物性，流体物性参数与温度有关；(d) 所有固壁满足无滑移边界条件；(e) 忽略自然对流和辐射传热、粘性耗散和振动效应等。

基于上述假设，描述流动和传热过程的控制方程为：

连续性方程：

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_f u_i) = 0 \quad (1)$$

动量方程：

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_f u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i}[\mu_f (\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})] \quad (2)$$

能量方程：

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_f u_i c_{pf} T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_f \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

边界条件设置如下：在微通道入口处，采用速度入口边界，温度恒定为 293.15 K；在出口处施加压力出口，设置为 0 Pa；固液交界面设置为热耦合界面，界面无滑移且固体导热等于流体导热；在微通道底部壁面施加恒定的热流密度，其值为 10^6 W/m^2 ；固体左右壁面为周期性传热边界，左右壁面导热相等；其余壁面均设置为绝热边界。

微通道水力直径为 $D_h = 2W_c H_c / (W_c + H_c)$ ，流动雷诺数为 $Re = \rho u_{in} D_h / \mu_f$ ，平均换热系数 h 和 Nu 数分别按计式计算，

$$h = \frac{q A_{heat}}{A_w (T_w - T_f)}, \quad Nu = \frac{h D_h}{k_f} \quad (4-5)$$

式中， A_{heat} 为底壁面积， A_w 为固液界面面积， T_w 为界面平均温度， T_f 为流体平均温度。

底部壁面温度不均匀性和平均压降分别定义为,

$$\Delta T_{\max} = T_{b,\max} - T_{b,\min}, \quad \Delta P = (\Delta P_1 + \Delta P_2 + \Delta P_3 + \Delta P_4)/4 \quad (6-7)$$

式中, ΔP_i 分别代表四个流道的压降。

1.3 数值方法及网格无关性

采用 SIMPLE 算法处理压力-速度耦合。控制方程的对流项和扩散项分别采用二阶迎风和二阶中心差分格式离散。当连续性方程、动量方程和能量方程的残差分别小于 10^{-4} 、 10^{-5} 和 10^{-9} 时, 认为计算解是收敛的。

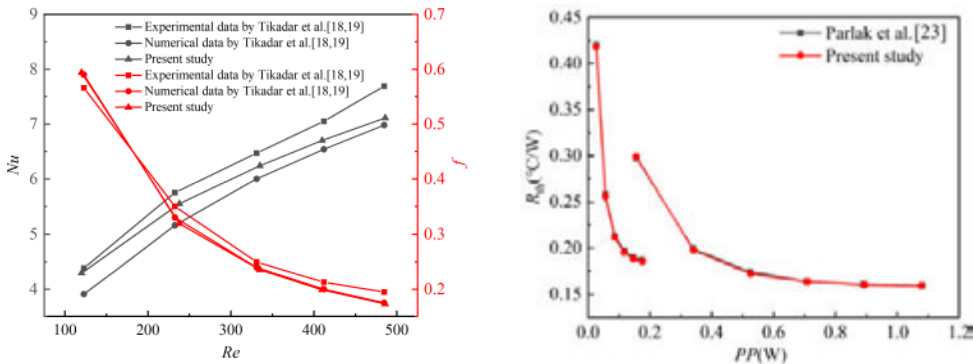
为了确保数值计算结果与网格无关, 进行了网格独立性验证。在 $Re=307$ 条件下, 采用四组网格分别对仅在两侧区域设置二次流道和两侧/中部区域均设置二次流道的微通道散热器进行了计算, 得到的不同网格下微通道底壁平均温度和底壁温度不均匀值如表 2 所示, 显然, 第 3 组网格的底壁平均温度和温度不均匀性与第 4 组网格相比偏差都小于 1%, 因此, 所有微通道散热器都选择第 3 组网格。

表 2 $Re=307$ 时网格无关性验证结果

	网格数	$T_{b,avg}$, K	偏差, %	$\Delta T_{\max}$, K	偏差, %
$S=9$ mm $S_1=2.5$ mm	1160440	319.81	0.047	4.41	0.92
	1854424	319.74	0.025	4.42	1.14
	2813040	319.68	0.0063	4.39	0.46
	4268760	319.66	-	4.37	-
$S=11$ mm $S_1=2.25$ mm $S_2=2.75$ mm	1304716	318.19	0.057	10.66	4.04
	2063308	318.11	0.031	10.69	1.58
	3150000	318.04	0.0094	10.71	0.63
	4806546	318.01	-	10.69	-

1.4 模型验证

为检验理论模型和数值方法的准确性和可靠性, 将 $Re=120-500$ 间共五个入口速度下的数值模拟结果与 Tikadar 等^[18,19]的实验结果和数值结果进行了对比, 如图 2(a)所示, 所有数值结果均在实验误差内。同时, 与 Parlak 等^[24]模拟结果进行了对比, 如图 2(b)可知, 显然, 不同压降下计算结果吻合很好。由此可见, 计算结果是准确可靠的。



(a) 计算 Nu 和 f 与 Tikadar 实验和模拟结果对比

(b) 计算热阻 R_{th} 与 Parlak 模拟结果对比

图 2 计算结果验证结果

2 结果与讨论

2.1 交错出入口微通道散热器

交错出入口微通道的底壁温度分布图 3 所示。低温区域位于中部入口位置，因为在中部入口处流体温度最低，并且冷流体以射流形式冲击固液界面强化局部换热性能；高温区域位于各区域中部。随着出入口间距减小，入口段向中部移动，而且冷流体逐渐向中部汇集，使中部换热性能增强，两侧换热性能减弱。因此，中部温度随出入口间距减小而减小，两侧温度随出入口间距减小而增大，存在使最高温度从中部到两侧区域发生转移的出入口间距；显然，出入口间距从 11 mm 减小至 10 mm 时，最高温度位置从中部转移两侧区域。

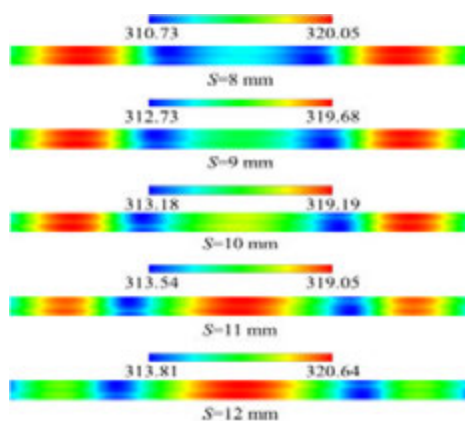


图 3 $Re=409$ 时交错出入口散热器底壁温度分布

底壁中心线温度分布如图 4 所示。交错出入口布置将完整流道分成左右两侧与中部共三个区域，各区域内流动模式均为逆流流动，在各区域内的温度分布仍遵循直通道内逆流模式的特点，即各区域内中部温度高于两侧温度。相比于直通道内流体温度沿流动方向升高的特点，交错出入口的方式可以保证各区域内都有冷流体参与换热，更均匀的流体分布使壁面温差下降。

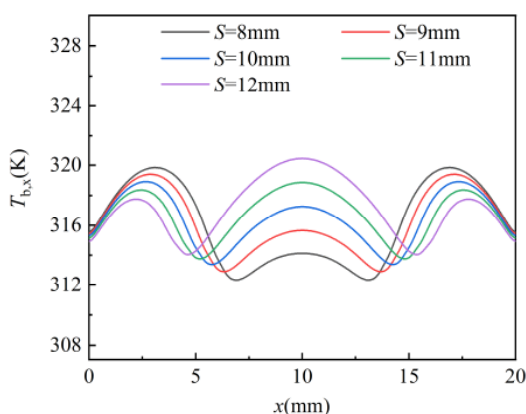


图 4 $Re=409$ 时底壁中心线温度分布

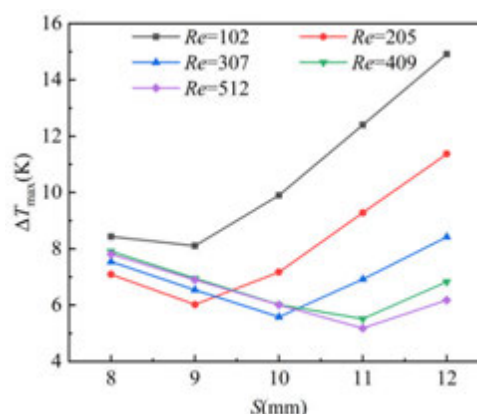


图 5 底壁温差随出入口间距变化

图 5 给出了不同雷诺数下交错出入口微通道底壁温差的变化。最小底壁温差都发生在最高温度从中部区域到两侧区域转移时的出入口间距（看图 3）。出入口交错布置后，两侧和中部都是逆流模式，中部区域长度大于两侧区域长度，因此雷诺数变化对中部温度的影响会高于两侧。以 $S=11$ mm 为例，当 $Re=512$ 时峰值温度在两侧区域，随着雷诺数降低，中部温度升高幅度大于两侧温度升高幅度，在 $Re=409$ 时，中部温度高于两侧温度，峰值温度在中部区域。 $Re=512$ 时，最高温度区域变化对应出入口间距为 $S=12-11$ mm，而 $Re=512$ 时，最高温度区域变化对应出入口间距减小为 $S=11-10$ mm，

即最佳出入口间距随雷诺数减小而减小。通过减小出入口间距使中部最高温度降低，从而减小雷诺数减小带来最高温度升高的不利影响。

不同流速下的 Nu 数和压降变化如图 6 所示。流速增大，更多冷却剂参与换热，更快地将底壁热量带走，因此，微通道散热器的换热性能随流速增加而增强。而流速增加会使沿程阻力损失增大，流道内压降增加。不同流速下，压降随出入口间距的变化规律一致，而相比于出入口间距对压降的影响，流速引起的压降变化更大。

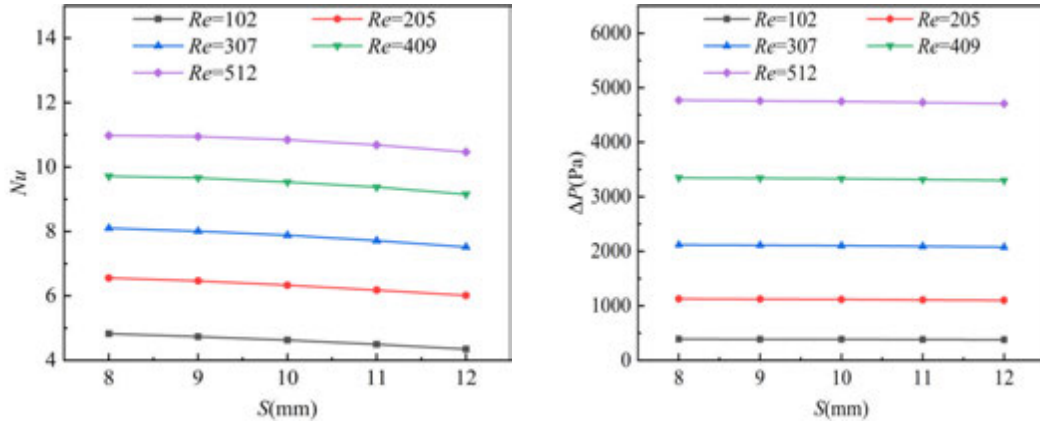


图 6 不同流速下 Nu 数（左）和压降 ΔP （右）随 S 变化

2.2 两侧区域设置二次流道

从底壁中心线温度分布可知，在各区域内温度极大值都处于中部，而相邻流道间流动方向相反，流道间的压差可以为二次流流动提供动力。因此，可以在两侧区域的最高温度附近设置二次流道，以降低温度极大值从而提高底壁温度均匀性。

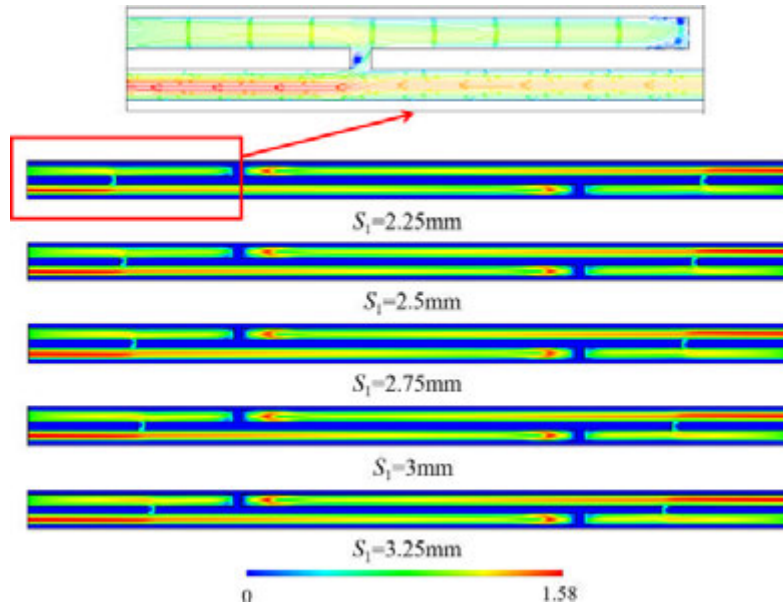


图 7 $Re=307$ 和 $S=9$ mm 时中心截面 ($z=0.4$ mm) 速度和流线分布

图 7 给出了 $Re=307$ 和 $S=9\text{ mm}$ 时中心截面 ($z=0.4\text{ mm}$) 速度和流线分布。由于二次流道所连接的相邻主流道流动方向相反, 二次流道两侧存在显著的压差, 导致冷却剂从高压侧的短流道流入长流道内; 二次流会使短流道下游流速降低, 而长流道下游流速增加。由于二次流道和主流道交界处存在逆压力梯度, 在二次流道前缘形成再循环区, 再循环区占据近半宽度, 使二次流以较高流速冲刷二次流道后缘, 并与低压侧的主流汇流。横向流动的二次流通过中断主流道的流动和热边界层, 促进流体混合, 从而强化该位置的换热性能, 降低两侧区域温度峰值。

图 8 给出了 $Re=307$ 时底壁中心线上温度分布。如图所示, 二次流道降低了两侧区域温度峰值, 短流道下游温度随 S_1 增加而减小, 上游温度随 S_1 增加而增大。因为 S_1 越大, 二次流道离短流道下游极大值区 (B_1 区) 越近, 该区域受二次流道换热强化的影响越大, B_1 区温度降低。而随着 S_1 增大, 二次流量减小 (如图 9(b) 所示), 二次流道换热强化作用减弱, 因此 B_1 区温度下降幅度逐渐减小甚至开始上升。二次流道逐渐远离短流道上游极大值区域 (B_2 区), 并且二次流道换热强化效果逐渐减小, 因此 B_2 区温度不断升高。当 $Re=307$ 和 $S=9\text{ mm}$ 、且 $S_1<2.5\text{ mm}$ 时, 温度最大值都在中部区域, 而最小值在两端, 随着 S_1 增大, 中部最高温度下降, 两端最低温度升高, 底壁温差随之减小, 但 $S_1>2.5\text{ mm}$ 后, 最大值仍在中部, 而最小值从两侧转移至中部, 由于低温区域离二次流道更近, 受二次流道位置变化影响更大, 其温度下降幅度更大, 底壁温差随 S_1 增大而增大, 底壁温差随 S_1 变化规律如图 9(a) 所示, 存在使底壁温差最小的二次流道位置 S_1 。

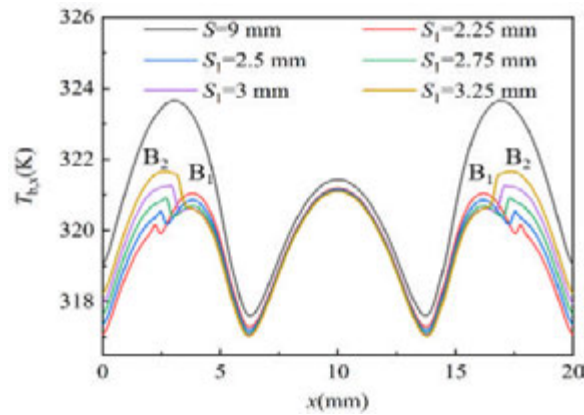


图 8 $Re=307$ 时底壁中心线上温度分布

图 9(c) 展示了换热性能随 S_1 的变化。由图可知, 换热性能随着 S_1 增大呈先增加后减小的趋势。当 S_1 较小时, 二次流道远离高温区域, 且较大的二次流量使短流道中下游流速下降明显; 当 S_1 较大时, 二次流道远离高温区域, 且更小的二次流量使二次流道换热强化作用减弱, 因此 S_1 较小或较大时, 两侧温度峰值都不能有效降低, 在两侧温度峰值附近设置二次流道时, 具有更好的换热性能。图 9(d) 给出了压降随 S_1 的变化。随着 S_1 增大, 二次流道远离长流道的出口, 使得二次流流程增加, 压降增大。而出入口间距 S 增加时, 固液交界面平均温度增加, 粘性减小, 压降减小, 但二次流道两侧压差也随 S 增加而降低, 二次流量减小, 压降增加; S_1 较小时, 固液交界面温度和二次流量变化幅度更小, 因此 S_1 较小时, S 改变对压降的影响较小。

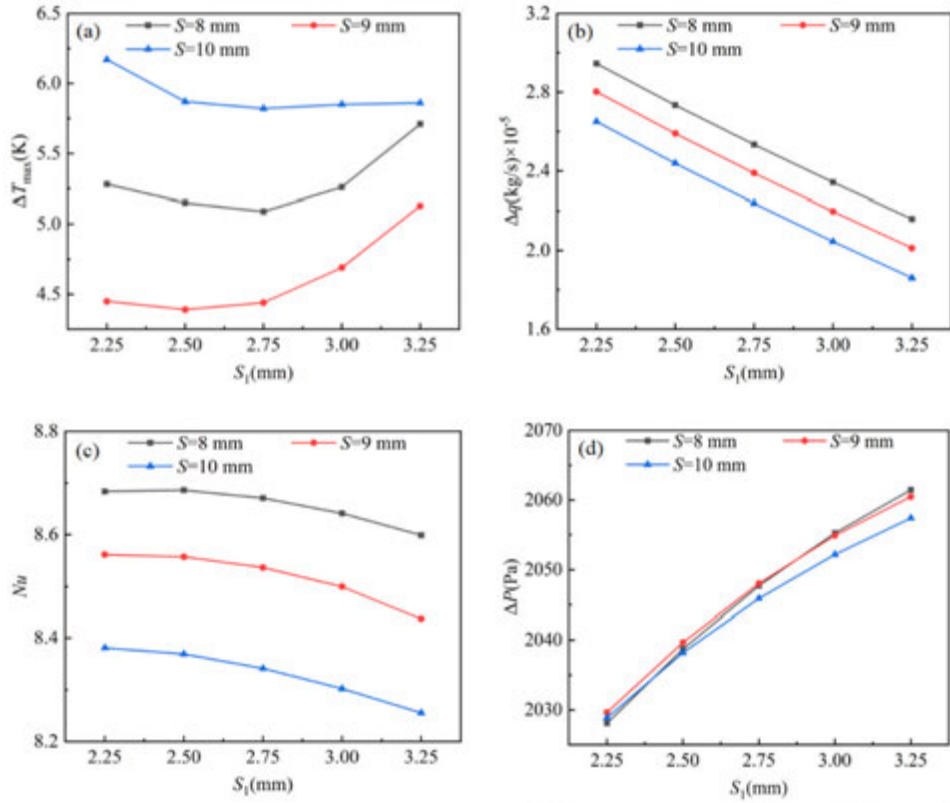


图9 $Re=307$ 时底壁温差(a)、二次流量(b)、 Nu 数(c)和压降(d)随两侧二次流道位置 S_1 的变化

图 10 给出了不同雷诺数下温差随 S_1 的变化。由于最高温度或最低温度位置随 S_1 增加发生转移，使底壁温差随 S_1 的变化趋势发生改变。当 $Re=102$ 和 205 时，最低温度都在两侧，底壁温差转折点在 B_1 区域转移至 B_2 区域时；当 $Re=307$ 和 409 时底壁温差转折点在最低温度从两侧转移至中部时；当 $Re=512$ 时，最低温度一直在中部，底壁温差转折点在最高温度从两侧转移至中部时。

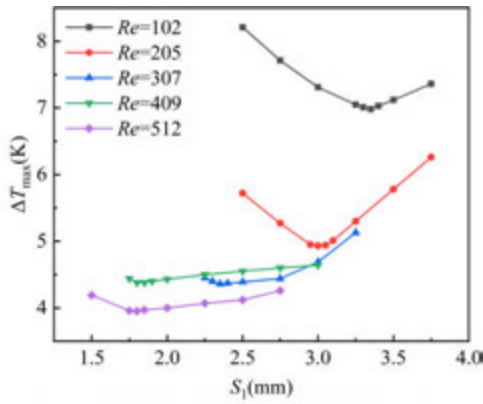


图 10 底壁温差随两侧二次流道位置 S_1 变化

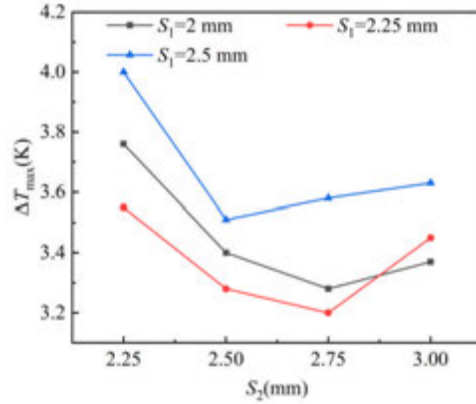


图 11 底壁温差随中部二次流道位置 S_2 变化

2.3 两侧/中部区域均设置二次流道

图 11 给出了 $Re=307$ 时底壁温差随中部二次流道位置变化。中部二次流道间距增大，二次流道两侧压差随之增加，二次流量和二次流速增加，对热边界层中断更显著，二次流道的换热强化作用随间距 S_2 增大而增强，因此 $S_2 < 2.5 \text{ mm}$ 时，整体温度都随 S_2 增加而降低。但由于二次流量增大，中部主流道流速降低，导致中部换热性能减弱，因此 S_2 进一步增加，中部温度开始上升。最低温度处于中部，而最高温度发生从中部到两侧再到中部区域的转移，底壁温差转折点发生在最高温度从中部转移至两侧区域。

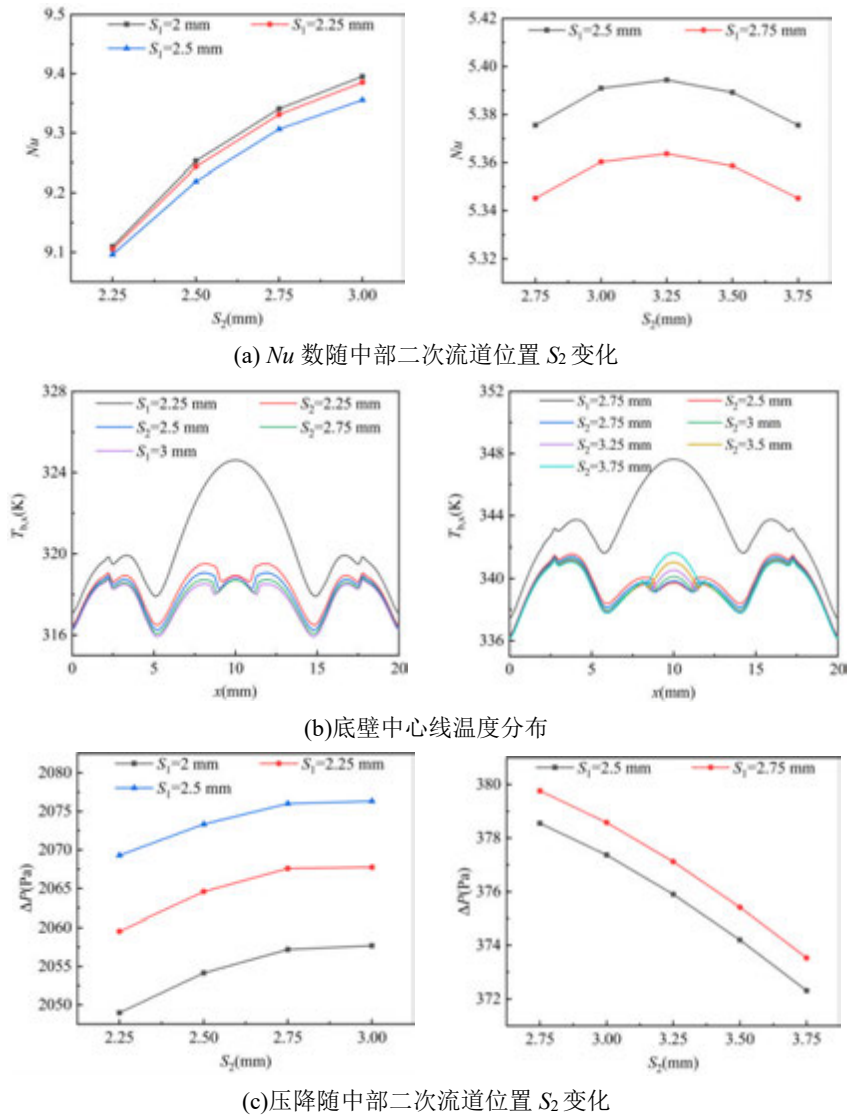


图 12 中部二次流道间距 S_2 的影响。左图： $u=0.75 \text{ m/s}$, $S=11 \text{ mm}$ ；右图： $u=0.25 \text{ m/s}$, $S=10 \text{ mm}$

换热性能随 S_2 的变化如图 12(a)所示。二次流量随着间距增大而增加，二次流对热边界层的中断更显著，强化二次流道附近的换热性能；但二次流量增加会导致两个二次流道之间的主流道流速减小，从而恶化中部换热性能。结合底壁中心线温度分布分析换热性能的变化， S_2 刚开始增加时，二次流道换热强化占主要地位，使整体温度都

呈下降趋势，即换热性能提升；而 S_2 进一步增大，两侧区域温度仍保持下降趋势，对于中部二次流道之间的温度变化，由于主流道流速减少所带来的传热恶化影响更大，使得中部温度不断升高，存在 S_2 使 Nu 数从随 S_2 增大而增加转变为随 S_2 增大而减小。

压降随 S_2 增大也呈先增加后减小的趋势。粘性随温度升高而减小，当换热性能增加时，固液交界面温度减小，粘性增加从而使压降增加，当换热性能减弱会使界面温度升高，压降减小。而中部二次流道间距增加会使二次流流程减小，从而减小压降。

图 13 给出了不同雷诺数下底壁温差随 S_2 的变化。与两侧二次流道位置 S_1 影响相似，中部二次流道 S_2 增加时会使最高/最低温度位置发生改变，底壁温差随 S_2 的变化趋势发生改变。当 $Re=102$ 时，最低温度都在两侧，底壁温差转折点发生在最高温度从两侧转移至中部区域；当 $Re=205$ 时，底壁温差转折点在最低温度从两侧转移至中部区域时；当 $Re \geq 307$ 时，最低温度一直在中部，底壁温差转折点在最高温度从中部转移至两侧时。

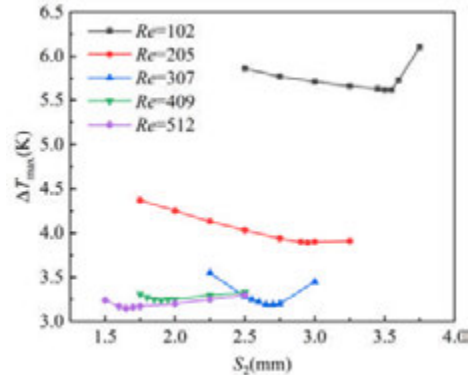
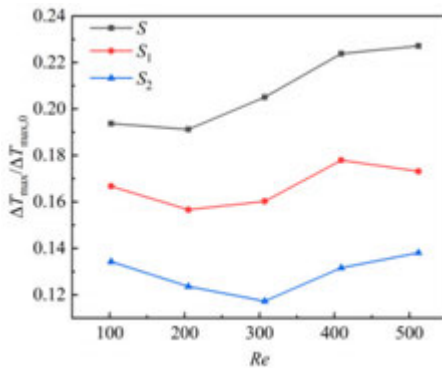
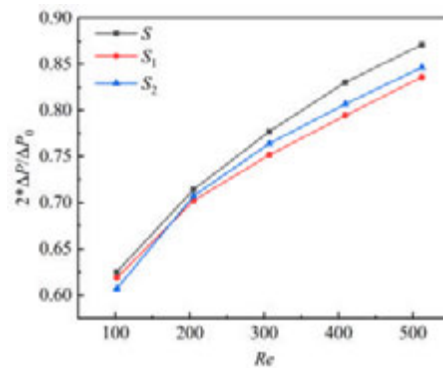


图 13 底壁温差随两侧二次流道位置 S_2 变化

图 14 给出了不同 Re 数下三种微通道换热单元中最佳（最小底壁温差）工况相比于等流量直通道顺流单元的提升效果。相比于直通道的顺逆流模式，交错出入口的方式实现了更均匀的流体分布，使得各区域内都有流体参与换热，可以保证两侧区域温升与中部区域温升相同。在此基础上，分别在两侧和中部设置二次流道，进一步降低了各区域内的温度极大值，从而减小底壁面温差。在两侧和中部区域均设置二次流道具有最有效的均匀性提升效果，不同 Re 数下底壁温度不均匀温差仅有常规直通道的（12~14）%。图 14(b)反映了三种微通道换热单元与常规直通道的压降之比。控制直通道与交错出入口方式的总流量相等，因此采用交错出入口方式时，单个微通道内流量仅为常规直通道的一半，具有更低的压降。二次流道对压降的影响从两个方面分析：一是二次流流程变化对压降的影响，即沿程阻力损失变化；二是二次流通过二次流道会产生局部阻力损失，两个因素综合影响下，设置二次流道具有更低的压降。



(a) 底壁温差比随 Re 数变化



(b) 压降比随 Re 数变化

图 14 不同 Re 数下三种微通道单元的底壁温差比(a)与压降比(b)

3 结论

基于实现更均匀的流体分布和提高底壁面温度均匀性的初衷,设计了交错出入口微通道散热器和设置二次流道的交错出入口微通道散热器。本文考虑了中部出入口间距、两侧二次流道位置、中部二次流道间距和流速对壁面温度均匀性的影响。根据模拟结果,可以得出以下结论:

- (1) 相比于常规直通道散热器,交错出入口的方式可以实现更均匀的流体分布,从而降低底壁温差。
- (2) 二次流道通过中断流动和热边界层、强化流体混合来强化局部换热性能,在临近极大值位置处设置二次流道可以有效降低极值温度,从而提高底壁温度均匀性。
- (3) 相比于仅在两侧设置二次流道,中部、两侧均设置二次流道可以更有效地降低底壁最高温度,进而降低底壁温度不均匀温差,所设计的微通道散热器底壁温度不均匀温差仅为直通道散热器的(12~14)%。
- (4) 控制制冷剂流量相同,相比于直通道散热器,三种微通道换热单元都具有更低的压降。

参考文献

- [1] Tu K.N. Reliability challenges in 3D IC packaging technology. *Microelectronics Reliability*, 2011, 51: 517-523.
- [2] Wu R., Smirnova L., Wang H. Comprehensive Investigation on Current Imbalance among Parallel Chips inside MW-Scale IGBT Power Modules. *International Conference on Power Electronics & Ecce Asia IEEE*, 2015: 850-856.
- [3] Tuckerman D.B., Pease R. High-performance heat sinking for VLSI. *IEEE Electron Device Letters*.2.
- [4] Vasilev M.P., Abiev R.S., Kumar R. Effect of microchannel heat sink configuration on the thermal performance and pumping power. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 141: 845-854.
- [5] Al-Neama A.F., Kapur N., Summers J., et al. An experimental and numerical investigation of the use of liquid flow in serpentine microchannels for microelectronics cooling. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 116: 709-723.
- [6] Liang L., Hou J., Fang X., et al. Flow characteristics and heat transfer performance in a Y-Fractal mini/microchannel heat sink. *Case Studies in Thermal Engineering*, 2019, 15: 100522.
- [7] Tan H., Zong K., Du P. Temperature uniformity in convective leaf vein-shaped fluid microchannels for phased array antenna cooling. *International Journal of Thermal Sciences*, 2020, 150: 106224.
- [8] Kose H.A., Yildizeli A., Cadirci S. Parametric study and optimization of microchannel heat sinks with various shapes. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 211: 118368.
- [9] Wang R.j., Wang J.w., Lijin B.q., et al. Parameterization investigation on the microchannel heat sink with slant rectangular ribs by numerical simulation. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 133: 428-438.
- [10] Shen H., Wang C.C., Xie G. A parametric study on thermal performance of microchannel heat sinks with internally vertical bifurcations in laminar liquid flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 117: 487-497.

- [11] Abo-Zahhad E.M., Ookawara S., Esmail M.F.C., et al. Thermal management of high concentrator solar cell using new designs of stepwise varying width microchannel cooling scheme. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 172: 115124.
- [12] Abo-Zahhad E.M., Ookawara S., Radwan A., et al. Optimization of stepwise varying width microchannel heat sink for high heat flux applications. *Case Studies in Thermal Engineering*, 2020, 18: 100587.
- [13] Feng S., Yan Y., Li H., et al. Temperature Uniformity Enhancement and Flow Characteristics of Embedded Gradient Distribution Micro Pin Fin Arrays Using Dielectric Coolant for Direct Intra-Chip Cooling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 156: 119675.
- [14] 唐清林, 兰欣, 李祥瑞. 三维集成微系统散热微通道均温性研究. *河南科技大学学报 (自然科学版)*, 2020, 41: 27-33.
- [15] Lan X., Xie G., Ji S., et al. Experimental and numerical study on the temperature uniformity of a variable density alternating obliquely truncated microchannel. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 176: 121440.
- [16] Leng C., Wang X.D., Wang T.H., et al. Optimization of thermal resistance and bottom wall temperature uniformity for double-layered microchannel heat sink. *Energy Conversion and Management*, 2015, 93: 141-150.
- [17] Shen H., Zhang Y., Wang C.C., et al. Comparative study for convective heat transfer of counter-flow wavy double-layer microchannel heat sinks in staggered arrangement. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 137: 228-237.
- [18] Tikadar A., Oudah S.K., Paul T.C., et al. Parametric study on thermal and hydraulic characteristics of inter-connected parallel and counter flow mini-channel heat sink. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 153: 15-28.
- [19] Tikadar A., Paul T.C., Oudah S.K., et al. Enhancing thermal-hydraulic performance of counter flow mini-channel heat sinks utilizing secondary flow: Numerical study with experimental validation. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2020, 111: 104447.
- [20] Y.M. Ali A., M. Abo-Zahhad E., Elqady H.I., et al. Thermal analysis of high concentrator photovoltaic module using convergent-divergent microchannel heat sink design. *Applied Thermal Engineering*, 2021, 183: 116201.
- [21] Khoshvaght-Aliabadi M., Abbaszadeh A., Rashidi M.M. Comparison of Co- and counter-current modes of operation for wavy minichannel heat sinks (WMHSs). *International Journal of Thermal Sciences*, 2022, 171: 107189.
- [22] Zhang Q., Feng Z., Zhang J., et al. Design of a mini-channel heat sink for high-heat-flux electronic devices. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 216: 119053.
- [23] Sun L., Li J., Xu H., et al. Numerical study on heat transfer and flow characteristics of novel microchannel heat sinks. *International Journal of Thermal Sciences*, 2022, 176: 107535.
- [24] Parlak M., Özsunar A., Koşar A. High aspect ratio microchannel heat sink optimization under thermally developing flow conditions based on minimum power consumption. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 201: 117700.

油浆锅炉空气预热器结焦特性研究

刘俊成¹, 杜雪平^{1*}, 余波¹, 于广雷²

(¹中国矿业大学 低碳能源与动力工程学院, 徐州 221116

²西安航天动力试验技术研究所, 西安 710100)

(*E-mail: xpdcumt@cumt.edu.cn)

摘要: 油浆锅炉烟气尾气中有机烃类含量较高, 大分子油气在低温受热面凝结, 同时黏附烟灰颗粒与硫酸氢氨(Ammonia bisulfate, ABS), 带来了受热面结焦严重、空气预热器堵塞、系统阻力增大等问题, 严重影响了脱硝效率。本文研究了 ABS 与烟灰颗粒沉积结焦的数学模型, 并编译了实现沉积结焦的 UDF 代码, 通过数值模拟的方法对空预器中 ABS 结焦过程进行分析, 研究了空预器中 ABS 的沉积结焦特性。结果发现随着烟气流速增加, 空预器中的颗粒沉积情况有所缓解; 颗粒沉积率随颗粒直径的增加呈现先增大后减小再增大的趋势。研究结果可为油浆锅炉低温结焦的防治提供参考, 指导空气预热器的强化传热和技术改进。

关键字: 油浆锅炉; 空气预热器; 结焦; 颗粒沉积; 硫酸氢氨

0 前言

随着习近平主席在第七十五届联合国大会上提出“双碳”目标后, 中国为了实现 2030 年碳达峰和 2060 年碳中和两个目标出台了一系列政策。进一步开展绿色、环保、低碳的生活模式, 加快推进新兴绿色能源技术的研究和发展, 改善国家整体能源结构成为了能源行业的重要目标。目前我国的能源结构仍然以煤炭为主, 石油为辅, 太阳能、风能等清洁能源所占份额不足 10%。我国北方大量电厂的燃料选择仍是煤炭和石油^[1], 而近年来煤炭、石油价格不断上涨, 使得电厂的投入成本不断增加, 电厂整体效益下降, 如果使用廉价的催化油浆作为燃油燃气锅炉的燃料, 燃料的投入将减少 75%, 长期下来能极大减少电厂的运行成本^[2]。

空气预热器的堵塞、积灰、结焦、腐蚀等问题一直以来都存在于锅炉运行过程中, Chen 等人^[3]还对某锅炉厂空气预热器底部的沉积物进行了实验测试, 结果发现主要导致腐蚀和沉积的是硫酸盐而不是 ABS, 并且他们进一步发现这些由金属或金属氧化物与硫酸反应形成的硫酸盐对烟气中的灰颗粒有更大的吸附作用, 并且在空气预热器表面形成了一层具有粘性的外壳。Wang 等人^[4]对某回转式空气预热器的沉淀物进行研究, 发现 ABS 不仅会在传热表面与凝结, 在松散的颗粒中同样存在。Yan 等人^[5]搭建了 ABS 在金属壁面上沉积的实验平台, 分析 ABS 与灰分颗粒的粘附机理。他们发现灰分颗粒在金属壁面上粘附时, ABS 主要以液态形式存在, 不同状态下的 ABS 与灰分沉积有不同的灰分沉积层。并且在不同温度下, ABS 与灰分颗粒的团聚形态也不相同, 这对 ABS 与灰分颗粒的粘附机理相关研究提出了新的想法。单鑫晨^[6]等人通过搭建实验平台研究 ABS 的粘附情况, 结果发现烟气温度是空气预热器蓄热版 ABS 堵塞积灰的重要原因。Qing 等人^[7]模拟了空气预热器内的温度场分布, 探究了 ABS 的从形成到沉积的变化过程, 给出了 ABS 的初始沉积温度范围为 202~290℃。

Rames 等人^[8]对液滴沉积模型进行研究并搭建了雷诺数与液体粘度的数学模型, 以研究液滴的生长速率跟随流态温度的变化。Zheng 等人^[9]采用 DSMC(蒙特卡洛法)建立了煤粉炉的灰沉降模型分析粘性颗粒的粒径, 结果与 SEM 测定的灰岩形态相吻合。吴志荣^[10]对光伏组件表面的灰尘沉积现象进行数值模拟分析, 通过颗粒动力学研究空气中的灰尘沉积过程, 建立了灰尘颗粒的沉积准则。他在光伏组件表面的灰尘沉积准则中加入了颗粒-壁面系统的势阱深度, 基于新的积灰准则模拟计算出的光伏组件发电量与实际误差相差在 7%以内。王

凯^[11]研究了 FLUENT 和 EDEM 耦合下的颗粒碰撞壁面模型,探究不同粒径下杨氏模量与粘性力随流速变化的关系。他发现随着杨氏模量的增加,颗粒与壁面的粘附力也呈现增大的趋势。董云山^[12]基于 CFD-EDM 耦合计算方法研究了热管表面的积灰模型和管道磨损模型。考虑磨损工况的计算结果与实验结果更加贴近,通过该模型可以更好的预测颗粒的临界粘附速度。黄文丰^[13]研究了颗粒在二维顺排圆管模型中的流场分布和尾流涡街对颗粒沉积的影响,结果发现颗粒的粒径越大,沉积率越高。

针对不同工况下的颗粒沉积情况,学者们做了大量的模拟研究,根据不同的颗粒沉积条件,构建了不同的沉积模型并对影响颗粒沉积的原因进行了研究,但是关于油浆锅炉中空气预热器的结焦问题存在大量的研究空白。本文通过数值模拟的方法对某油浆锅炉的叉排管式空气预热器进行研究,分析油浆锅炉中的颗粒结焦特性。

1 数值模型

1.1 流动传热与颗粒动力学模型

本文烟气流经空气预热器的运动过程采用欧拉-拉格朗日法描述;烟气的湍流运动采用 RSM 模型描述;颗粒与流体和壁面之间的质量传递采用 ANSYS FLUENT 软件中的离散相模型计算。

1.1.1 湍流模型

雷诺应力模型(RSM)是 ANSYS FLUENT 提供的最精细的 RANS 湍流模型,该模型基于雷诺平均纳维-斯托克斯(RANS)方程来计算围绕单个圆柱体和管束几何形状的流动。RSM 模型放弃各向同性涡粘性假设,通过求解雷诺应力的传输方程以及湍流耗散率方程来封闭雷诺平均 Navier-Stokes 方程。

由于 RSM 模型比单方程和双方程模型更严格的方式考虑了流线曲率、漩涡、旋转和应变率快速变化的影响,因此它在对复杂流动进行准确预测方面具有更大的潜力。因此,本文选用 RSM 模型,并采用标准壁面函数。

1.1.2 离散相模型(Dispersed phase model)

目前多相流的数值计算有两种方法:欧拉-拉格朗日法和欧拉-欧拉法。ANSYS FLUENT 中的拉格朗日离散相模型遵循欧拉-拉格朗日方法,通过求解 Navier-Stokes 方程将流体视为连续体,而通过计算流场跟踪大量颗粒、气泡或液滴来求解分散相。

1.2 颗粒沉积模型

预测颗粒的沉积过程,不仅需要颗粒在流场中的运动轨迹,同样要了解颗粒与沉积表面在碰撞过程中的接触模型。颗粒的沉积可能发生每一次碰撞过程中,因此可以根据颗粒的回弹速度和回弹角度定义了颗粒沉积情况。

1.2.1 法向-切向碰撞模型

颗粒与壁面发生碰撞时会造成能量损失,当能量损失大于颗粒的初始动能时,颗粒就会粘附在碰撞表面上。本文通过恢复系数模型和弹性碰撞模型来描述这一过程。

$$e_n = \frac{v_{2,n}}{v_{1,n}}, e_t = \frac{v_{2,t}}{v_{1,t}} \quad (1)$$

下标 n 表示法向参数,下标 t 表示切向参数。为了简化沉积模型,法向恢复系数和切向恢复系数取相同值,在 ABS 沉积区恢复系数取 0.4,在非 ABS 沉积区恢复系数取 0.9^[16]。

在撞击的接近阶段,由于接触区域变形而产生的排斥力使粒子减速至零速度。在此阶段,入射粒子的动能作为弹性能储存在接触区域。因而在这个阶段,两个物体之间形成了一个接触表面,其能量水平低于两个单独的表面,因此系统中增加了一个表面能项。使用以下能量平衡方程描述接近阶段的过程^[17]:

$$Q_k + Q_{A,a} = Q_e \quad (2)$$

在恢复阶段，储存的弹性能量返回到粒子，粒子开始远离表面。如果接触中存储的弹性能大于粘附能（断开接触所需的能量），则粒子会反弹，否则会粘住。反弹发生在：

$$Q_e > Q_{A,r} \quad (3)$$

1.2.2 沉积模型

颗粒的沉积的判断方式为临界沉积速度和临界沉积角，当颗粒的入射与表面夹角小于临界沉积角且颗粒速度小于临界沉积速度时，认为颗粒发生沉积。

根据经典碰撞理论和 Hertzian 模型^[17]提出了临界速度计算公式：

$$v_{cr} = \left(\frac{2H}{d_p R^2} \right)^{10/7} \quad (4)$$

Konstandopoulos^[18]根据接触力学和牛顿定理计算了临界粘附角，由式(5)给出。

$$\tan \theta_{cr} = \frac{u_{it}}{u_{in}} = \frac{\mu^*}{(32\beta^3)^{1/2}} \sqrt{\frac{E^*}{G^*}} \quad (5)$$

1.2.3 剥离模型

当颗粒沉积在换热表面后，流场中依然不断有来流烟气冲刷换热壁面，积灰颗粒可能会在近壁面流体剪切力的作用下脱离换热表面。根据临界力矩理论^[19]，当壁面剪切速度大于颗粒临界剥离速度时，沉积在换热表面的颗粒将从换热表面移除，壁面剪切速度和颗粒临界剥离速度由下式给出：

$$u_{rc}^2 = \frac{C_u W_A}{\rho d_p} \left(\frac{W_A}{d_p E} \right)^{1/3} \quad (6)$$

2 研究对象及求解方法

本文基于之前所搭建的空气预热器结焦模型，对某 75 t/h 燃油锅炉机组叉排管式空气预热器进行烟气尾气颗粒沉积的数值模拟。通过分析现有空气预热器烟气流场、温度场和颗粒沉积的分布，来探讨叉排管式空气预热器颗粒沉积的特性。

2.1 研究对象

本文的研究对象为某锅炉厂设计的叉排管式空气预热器，换热器截面结构如图 1 所示。空气预热器的换热过程为交叉流，为了简化计算过程、节约计算机资源，选取了烟气流向中两列管道的一半作为研究对象，几何结构如图 2 所示，其中管径为 40 mm，长 40 mm，宽 34 mm，高 1840 mm。

2.2 边界条件

本文的研究对象为某 75 t/h 燃油锅炉，根据实际运行情况以及简化模型，在 ANSYS FLUENT 中启用多组成输运模拟烟气，其中 N₂ 为 76%，CO₂ 为 13%，H₂O 为 11%。入口压力设置为-800Pa，出口压力设置-2000Pa。烟气在空气预热器中一共流过 42 排管道，根据简化模型降 42 排管道分为 6 组，每组 7 排，分别命名 pipe1、pipe2、pipe3、pipe4、pipe5、pipe6(下文图中 p1~p6)，如图 2 所示。6 组管道均为定壁温，温度依次为 420K、410K、400K、390K、380K、370K，DPM 边界均采用 UDF 边界。

2.3 网格划分与模型验证

2.3.1 网格划分

针对选取的几何结构，使用 SpaceClaim 软件建立了几何模型，并用 Meshing 软件进行网格划分。网格划分结果如图 3 所示。

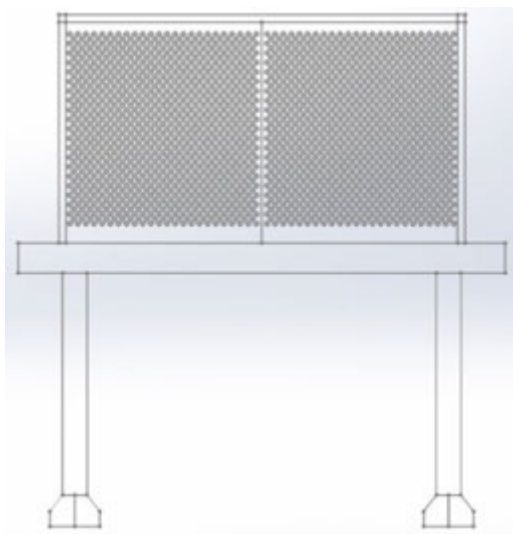


图 1 管式空气预热器截面图

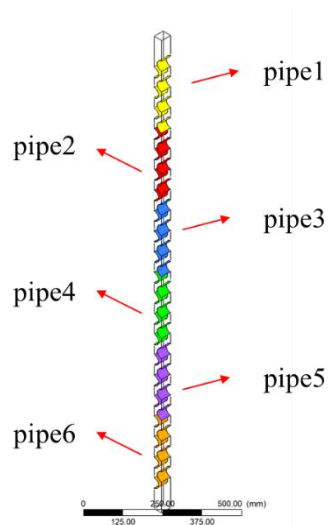
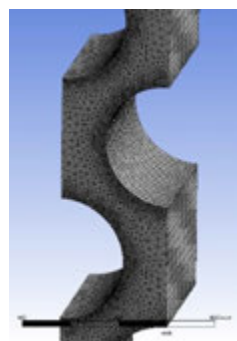


图 2 空气预热器几何结构



(a)正面网格



(b)立体结构网格

图 3 空气预热器局部网格示意图

2.3.2 网格无关性验证

2 本文在烟气流动方向设置单元网格长度分别为 1 mm、2 mm、5 mm、8 mm、10 mm。对管道壁面划分边界层为 5 层，以设定分区数量的方式加密边界层网格，分区数量为 100 进行计算，结果发现 Nu 数偏差很小。因此进一步对边界层网格疏密进行研究，对单元网格长度为 2 mm 和 10 mm 改变分区数量，分别为 50、80、100、120、150 重新划分网格，不同单元网格长度计算得出结果如图 4 所示， Nu 数的偏差仅有 0.1876%，压降的偏差仅有 0.6865%。综上所述，本文选定单元网格尺寸为 2 mm，网格数量为 15533250。

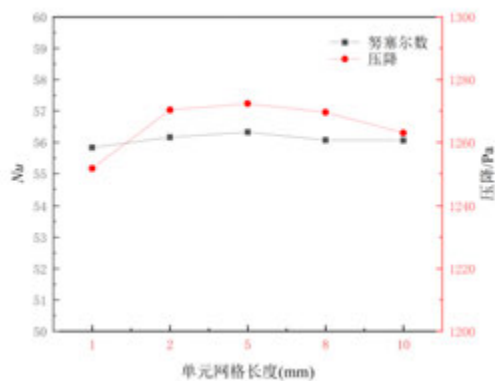


图 4 网格无关性

2.3.3 传热模型验证

为了验证数值模拟中传热模型的准确性,本文选取了标准 $k-\varepsilon$ 模型、RNG $k-\varepsilon$ 模型、Realizable $k-\varepsilon$ 模型、SST $k-\omega$ 模型和 RSM 模型,使 FLUENT 软件模拟二维叉排管式空气预热器的温度场,数值计算获得的努塞尔数并与传热学给出的 Zhukauskas 公式进行比较。模拟选取流速为 5~10 m/s,转换为雷诺数为 2617~8724,模拟结果如图 5 所示,误差如图 6 所示。可以看到当雷诺数大于 4000 时,RSM 模型模拟结果较好,平均误差在 5%左右。因此本文采用 RSM 模型。

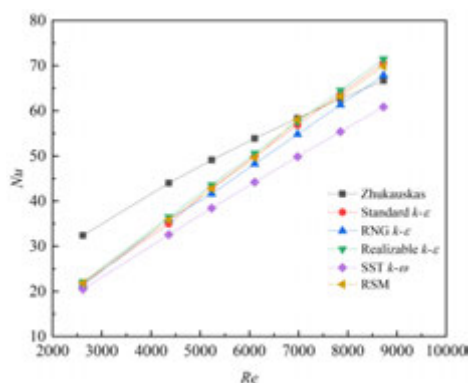


图 5 不同模型 Re 数和 Nu 数的关系

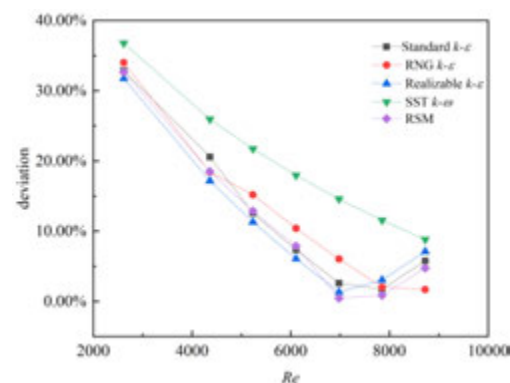


图 6 模拟与公式计算的 Nu 偏差对比

2.3.4 颗粒沉积模型验证

颗粒的沉积率为沉积颗粒总质量与入射颗粒总质量之比,为了验证颗粒碰撞模型的准确性,将采用自编译 UDF 与文献中^[20]采用相同颗粒碰撞模型的颗粒沉积率计算结果进行比较,计算相同通道、相同边界条件下的结果,UDF 验证如图 7 所示,可以看到颗粒沉积的总体趋势与文献中的结果是一致的。因此,本文采取的颗粒碰撞模型是可信的。

为了求解烟气的流场、温度场以及颗粒碰撞、沉积、剥离的控制方程,需要对其进行离散化。本文对控制方程组采用二阶迎风格式进行离散,SIMPLE 算法在计算可压缩流动时具有较好的表现,既能保证计算准确度也有更快的收敛速度。因此本文使用 SIMPLE 算法。

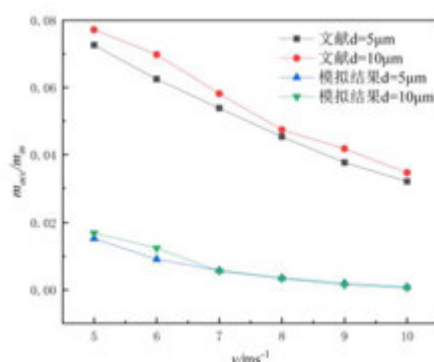


图 7 颗粒沉积率的验证

3 结果与分析

为了了解空气预热器内发生结焦的原因和结焦特性,本文对不同条件下的空气预热器结焦进行了模拟,分别是改变入口烟气速度和颗粒的粒径大小。烟气速度的变化为 5~10 m/s,颗粒的粒径选择分别为 1 μ m、3 μ m、5 μ m、8 μ m、10 μ m、15 μ m、20 μ m。

3.1 流场模拟结果及分析

本小节模拟了稳态工况下,模型的温度场、压力场和速度场的分布情况,流场选取模型中间的平面。烟气通过换热管束后,在烟气流速为 5~10 m/s 的速度分布云图如图 8 所示,局部速度分布云图如图 9 所示。

可以看出，随着烟气流速增加，烟气出口温度在不断升高，压降也在不断增大。由于流体截面变窄和壁面粘附力的作用，使得入口烟气流速较高的工况中，换热管道下方产生了更多涡流，使得湍流动能增加，近壁面处的流动动能损失增大，流速降低，最终导致传热性能下降。不同烟气入口速度下，烟气出口流速、温度以及进出口压差如图 10 所示。

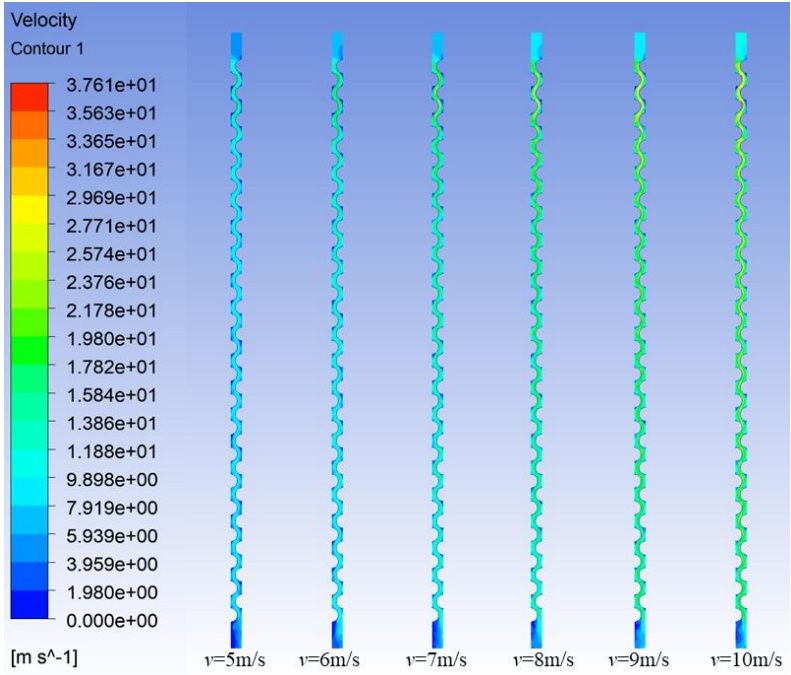


图 8 速度分布云图

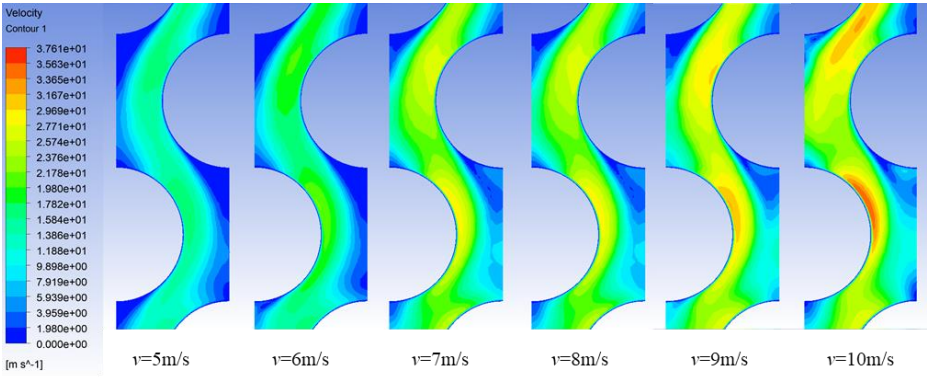


图 9 局部速度分布云图

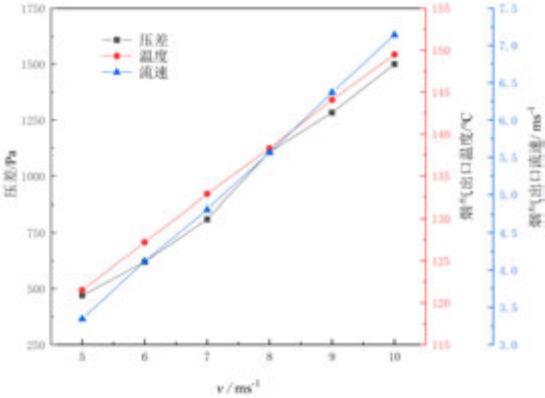


图 10 不同烟气流速下流场数据图

3.2 入口烟气流速对结焦的影响

本小节通过比较不同烟气流速，分析烟气入口流速对颗粒结焦特性的影响。具体边界条件设置如表 1 所示。

表 1 不同入口烟气流速边界条件参数

Case	入口烟气温度(K)	入口烟速(m/s)	颗粒直径(μm)
1	600	5	1, 3, 5, 8, 10, 15, 20
2	600	6	1, 3, 5, 8, 10, 15, 20
3	600	7	1, 3, 5, 8, 10, 15, 20
4	600	8	1, 3, 5, 8, 10, 15, 20
5	600	9	1, 3, 5, 8, 10, 15, 20
6	600	10	1, 3, 5, 8, 10, 15, 20

如图 11 所示，当颗粒的直径为 $1\mu\text{m}$ 时，颗粒的沉积质量在烟气流速为 5m/s 时最大，烟气流速为 9m/s 时最小，当烟气流速增加到 10m/s 时沉积质量又有一定的增加。在 6 组管道区域中，烟气流速为 5m/s 时颗粒在第二组区域中的沉积质量最多，随着管道高度降低，颗粒沉积的质量逐渐减少。随着烟气流速增加，颗粒在不同管道高度沉积的质量逐渐趋于一致。当颗粒直径为 $3\mu\text{m}$ 时，烟气流速增加至 6m/s 和 8m/s 时，颗粒的沉积质量出现明显的下降。烟气流速继续增加，颗粒沉积质量的减少趋于平缓。

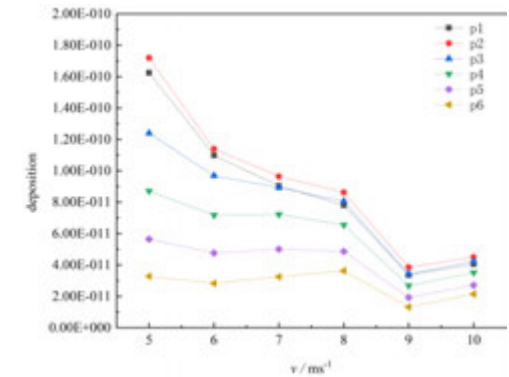


图 11 直径为 $1\mu\text{m}$ 时颗粒不同管组上的沉积质量

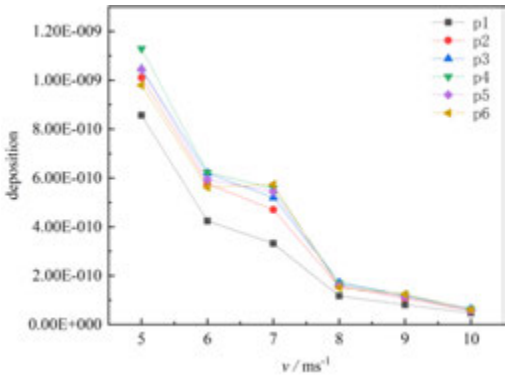


图 12 直径为 $3\mu\text{m}$ 时颗粒不同管组上的沉积质量

从图 12 中我们发现当颗粒的直径为 $3\mu\text{m}$ 时，颗粒在不同管道高度沉积质量随烟气流速的增加变化较小。当烟气流速为 5m/s 时在第四组管道区域沉积的质量最多。从颗粒直径为 $5\mu\text{m}$ 的模拟结果中我们可以看出，当烟气流速增加到 7m/s 时，颗粒沉积的质量几乎不再减少。烟气流速为 5m/s 和 6m/s 的工况下，随着管道高度的降低，颗粒沉积的质量呈现一个上升的趋势，与颗粒直径为 $3\mu\text{m}$ 时相似的是颗粒在第四组管道区域沉积的质量最多。

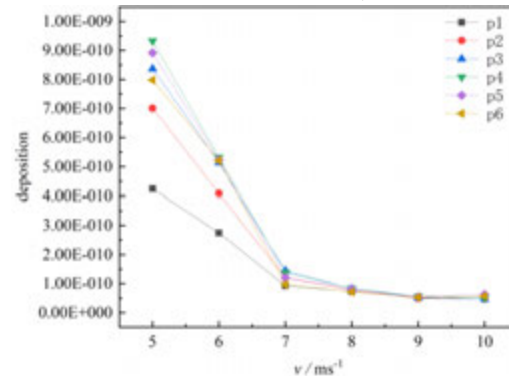


图 13 直径为 $5\mu\text{m}$ 时颗粒不同管组上的沉积质量

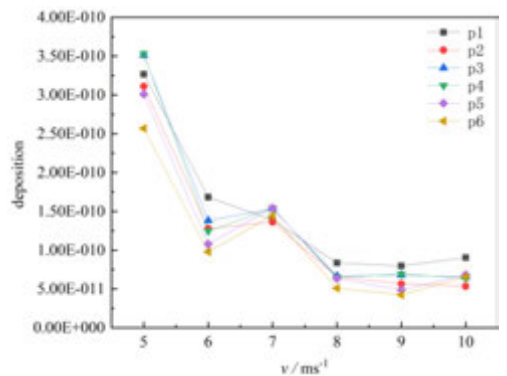


图 14 直径为 $8\mu\text{m}$ 时颗粒不同管组上的沉积质量

当颗粒直径为 $8\mu\text{m}$ 时，烟气流速为 6m/s 时，颗粒沉积质量减少的趋势就开始趋于平缓，

但是在烟气流速为 7m/s 时，颗粒沉积的质量又有一个小的回升。烟气流速为 5m/s 时在第三组和第四组管道区域沉积的质量最多。当颗粒直径增加到 10 μm 时，颗粒沉积的质量随着烟气流速增加而减少的幅度与之前的工况不同，呈现一直指数分布的趋势。但是在该直径下，颗粒在第一组管道区域沉积的质量最多，在第二组管道区域明显减少，随后又伴随管道高度降低而增加。当颗粒直径为 15 μm ，颗粒沉积的质量在 6m/s 时趋于平缓，但是沉积质量从第一组管道区域开始，随着管道高度的降低而减少。当颗粒直径增加到 20 μm 时，我们发现颗粒几乎只在第一组管道区域沉积。当烟气流速增加到 7m/s 时，颗粒在第一组管道区域沉积的质量明显下降，但是当烟气流速增加到 10m/s 时，沉积质量又有一个小的回升。

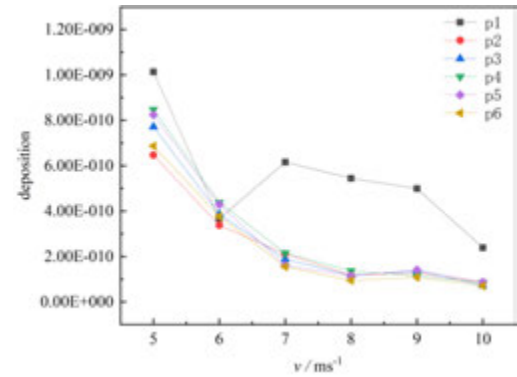


图 15 直径为 10 μm 时颗粒不同管组上的沉积质量

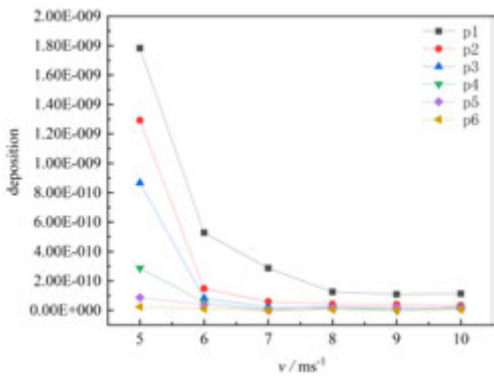


图 16 直径为 15 μm 时颗粒不同管组上的沉积质量

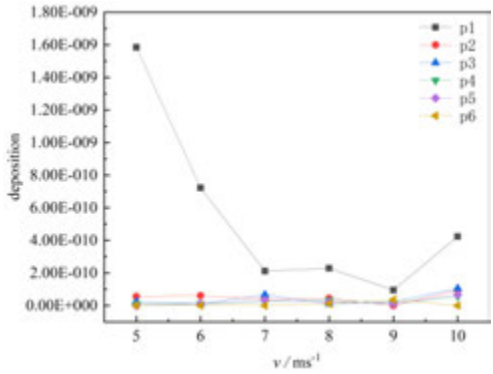


图 17 直径为 20 μm 时颗粒不同管组上的沉积质量

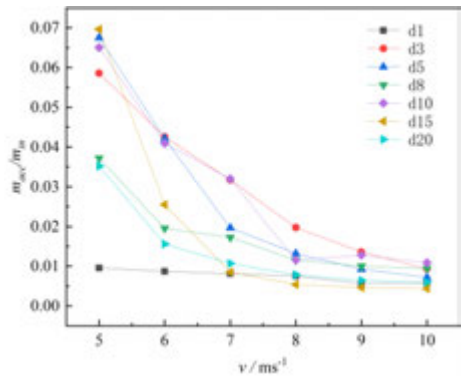


图 18 不同速度和粒径下颗粒沉积趋势

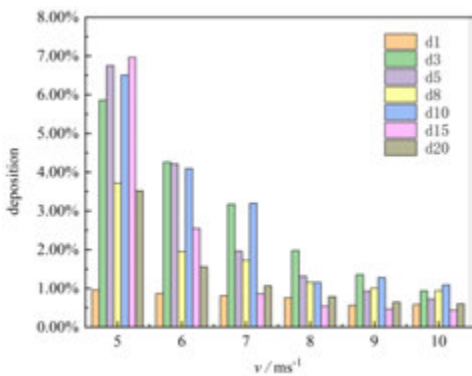


图 19 颗粒沉积率

从图 19 的结果中我们可以看到，随着烟气流速越来越快，相同直径下颗粒的沉积质量显著下降。从图 11 到图 17 颗粒沉积质量与烟气流速的关系中可以看出，在颗粒直径相同的情况下，烟气的流速越低，颗粒越容易沉积，并且随着颗粒粒径的增加，这种趋势越来越明显。从图 12 至错误!未找到引用源。可以看出，当颗粒的粒径增加到一定大小后，可以看到颗粒更容易在第二组、第三组、第四组管道上沉积。颗粒的沉积趋势随着粒径的增大，总体呈现先上升后下降的趋势；随着烟气流速的增加，总体呈现快速下降，而后平稳的趋势。

综上所述，我们认为对于不同直径大小的颗粒，存在一个最大沉积速度，当颗粒周围流体的流速大于这个最大沉积速度时，颗粒沉积的质量开始减少。

3.3 烟气中颗粒直径对结焦的影响

在同样的工况下，我们进一步研究了颗粒直径对于空气预热器结焦特性的影响，并对不同管道高度的管排上颗粒沉积的质量进行分析。

由图 20 可以发现直径为 $1\mu\text{m}$ 的颗粒在第一组管道区域内的沉积质量最少，直径为 $3\mu\text{m}$ 和 $10\mu\text{m}$ 的颗粒在第一组管道区域沉积的质量最多，直径为 $15\mu\text{m}$ 的颗粒只有烟气流速为 5m/s 时沉积的质量最多。由分析第二组管道区域的颗粒沉积情况可以发现，直径为 $5\mu\text{m}$ 的颗粒沉积质量有所提升，直径为 $10\mu\text{m}$ 的颗粒沉积质量有所下降。从图 22 可以观察到颗粒第三管道区域沉积质量的分布随直径的增大呈现类似“M”型的分布。观察图 23 至图 25 我们可以发现，在相同的烟气流速条件下，不同颗粒直径的趁机趋势基本保持一致，说明在第四组、第五组、第六组管道区域，颗粒的沉积特性是一致的。

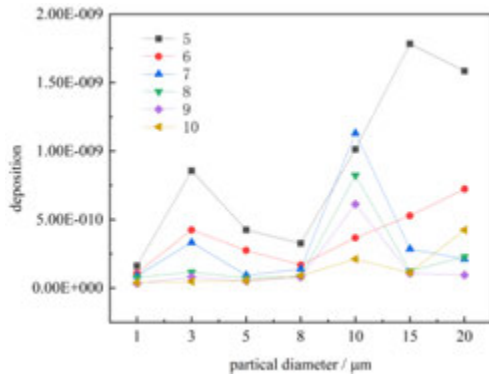


图 20 颗粒在 pipe1 上的沉积质量

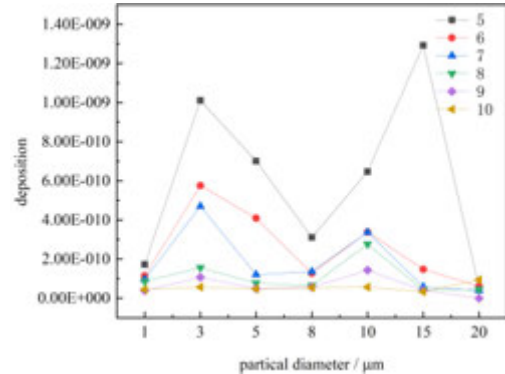


图 21 颗粒在 pipe2 上的沉积质量

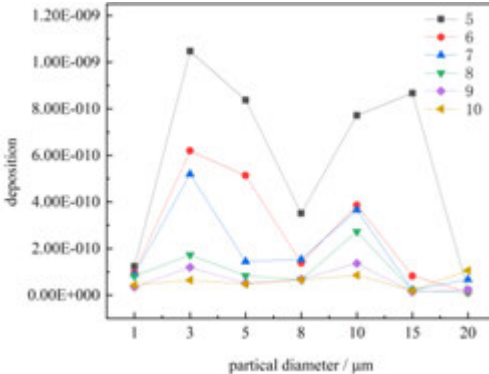


图 22 颗粒在 pipe3 上的沉积质量

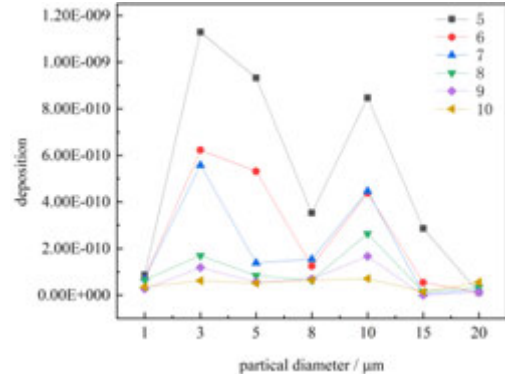


图 23 颗粒在 pipe4 上的沉积质量

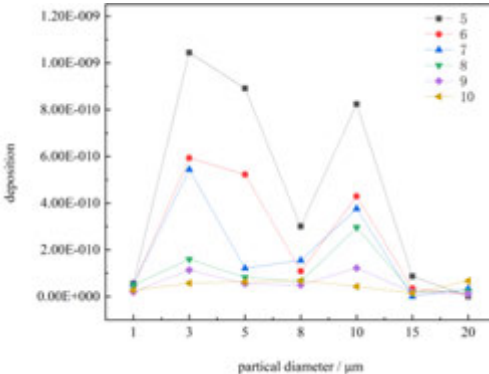


图 24 颗粒在 pipe5 上的沉积质量

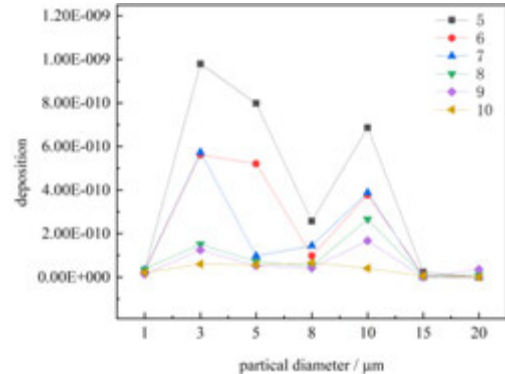


图 25 颗粒在 pipe6 上的沉积质量

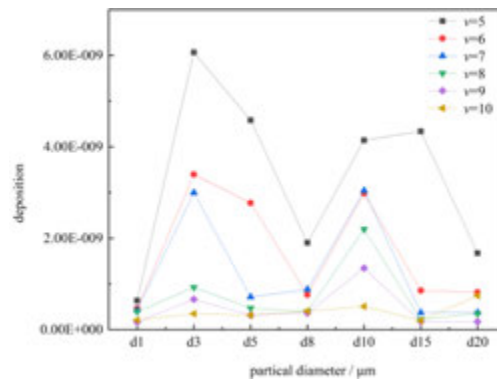


图 26 不同粒径颗粒的总沉积趋势

由图 26 可以看出,在烟气流速相同时,颗粒沉积的质量随着颗粒直径的增大,呈现一种先增大后减小的类似周期性的。当颗粒直径从 $1\mu\text{m}$ 增加到 $5\mu\text{m}$ 时,颗粒的沉积质量明显增加并达到峰值;直径增大到 $5\mu\text{m}$ 时,颗粒的沉积质量开始下降;当颗粒直径为 $8\mu\text{m}$ 时,沉积质量大幅度减少;当颗粒直径为 $10\mu\text{m}$ 时,颗粒的沉积质量又有一定的增加;颗粒直径增加到最大的 $20\mu\text{m}$ 时,沉积质量又有一个明显的下降。影响不同直径颗粒沉积的具体原因尚不明确,导致颗粒沉积质量明显降低的因素还需要进一步研究。

4 结论

本文搭建了 ABS 颗粒结焦数学模型,并通过编写 UDF 程序加载到 FLUENT 软件中模拟了颗粒在空气预热器烟气侧通道中的沉积情况:研究了烟气流速从 5 m/s 增加至 10 m/s 时,流场的变化以及流速对 ABS 颗粒结焦的影响,以及不同直径颗粒在该速度范围内的沉积情况;获得了在不同管道高度下颗粒沉积的趋势。主要结论如下:

(1)叉排管式空气预热器的出口烟气温度随着烟气流速增加而增加,主要是由于流速增大使得流动阻力增加,管道下方产生更多涡流,导致空气预热器换热不充分,传热性能下降。

(2)在颗粒直径相同的情况下,烟气的流速越低,颗粒越容易沉积;当烟气流速增大到某一个临界值时,颗粒沉积的质量会明显下降,我们认为对于给定直径大小的颗粒,存在一个最大沉积速度,当颗粒周围流体的流速大于这个最大沉积速度时,颗粒沉积的质量开始减少。最大沉积速度与周围流体流速的关系还需要进一步研究。

(3)在烟气流速相同时,颗粒的沉积随着颗粒直径的增大,先增大后减小;我们认为颗粒沉积质量与颗粒直径存在一种临界关系,使得沉积质量随着颗粒直径增大呈现周期性的分布,颗粒直径与最大沉积质量的关系还需要进一步研究。

(4)综合所有模拟得出结果,可以发现颗粒更容易在第二组、第三组、第四组管道上沉积,这三组管道区域的温度分布与 ABS 沉积温度范围相符合。这对研究空气预热器的结焦特性提供了一定的参考。

参考文献

- [1] 张庆, 陆啸天. 600MW 燃油锅炉腐蚀问题分析及处理[J]. 锅炉制造, 2022, (02): 10-12.

- [2] 尹彦国, 王晓丽, 梁金禄. 以催化油浆为炼厂锅炉燃料的应用分析[J]. 化工技术与开发, 2018, 47 (06): 55-57.
- [3] Chen H, Pan P, Shao H, et al. Corrosion and viscous ash deposition of a rotary air preheater in a coal-fired power plant[J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 113: 373-385.
- [4] Wang L, Bu Y, Tang C, et al. Study on the formation process of low-temperature ash deposition induced by ammonium bisulfate in pulverized coal-fired boiler[J]. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, 2020, 15 (1).
- [5] Yan L, Sun F, Zheng P. Research on adhesion mechanism of ash particles and ammonium bisulfate on the metal wall in coal-fired boilers[J]. Fuel, 2020, 277.
- [6] 单鑫晨, 雷健康, 赵玲玲. 空气预热器硫酸氢铵积灰特性实验研究[J]. 发电设备, 2022, 36 (06): 382-386.
- [7] Qing M, Zhang X, Lei S, et al. Insights into the deposition and transformation characteristics of ammonium bisulfate on the fly ash as the by-product of SCR in air preheater[J]. Fuel, 2022, 324.
- [8] Panda RC, Zank J, Martin H. Modeling the droplet deposition behavior on a single particle in fluidized bed spray granulation process[J]. Powder Technology, 2001, 115 (1): 51-57.
- [9] Zheng S, Zeng X, Qi C, et al. Modeling of ash deposition in a pulverized-coal boiler by direct simulation Monte Carlo method[J]. Fuel, 2016, 184: 604-612.
- [10] 吴志荣. 光伏组件表面灰尘沉积的三维数值模拟研究[D]: 南昌大学, 2022.
- [11] 王凯. 柴油机排气颗粒物在 DPF 壁面沉积过程研究[D]: 江苏大学, 2021.
- [12] 董云山. 锅炉受热面飞灰磨损-沉积耦合机制研究[D]: 东南大学, 2021.
- [13] 黄文丰. 顺排多圆/方柱绕流及颗粒运动模拟研究[D]: 武汉科技大学, 2021.
- [14] Launder BE, Spalding DB. NUMERICAL COMPUTATION OF TURBULENT FLOWS[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1974, 3 (2): 269-289.
- [15] Gosman AD, Ioannides E. ASPECTS OF COMPUTER SIMULATION OF LIQUID-FUELLED COMBUSTORS[C]. St Louis, MO, USA: AIAA, 1981.
- [16] Israel R, Rosner DE. Use of a Generalized Stokes Number to Determine the Aerodynamic Capture Efficiency of Non-Stokesian Particles from a Compressible Gas Flow[J]. Aerosol Science and Technology, 1982, 2: 45-51.
- [17] Han Z, Xu Z, Sun A, et al. The deposition characteristics of micron particles in heat exchange pipelines[J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 158.
- [18] Konstandopoulos AG. Particle sticking/rebound criteria at oblique impact[J]. Journal of Aerosol Science, 2006, 37 (3): 292-305.
- [19] Ai WG, Kuhlman JM. Simulation of Coal Ash Particle Deposition Experiments[J]. Energy & Fuels, 2011, 25 (2): 708-718.
- [20] Han H, He Y-L, Tao W-Q, et al. A parameter study of tube bundle heat exchangers for fouling rate reduction[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2014, 72: 210-221. [21] AI W G,

KUHLMAN J M. Simulation of coal ash particle deposition experiments [J]. *Energ Fuel*, 2011, 25(2): 708-18.

晶胞结构换热器的抗压、流动与传热实验和模拟研究

职聪聪¹, 吴永佳^{1*}, 明廷臻^{1*}, 李泽昊¹, Yanyu Chen², 王彩霞¹, 陈琼¹, 谭罡风³

1 武汉理工大学土木工程与建筑学院, 武汉, 430070

2 路易斯维尔大学机械工程系, 美国肯塔基州, KY 40292

3 武汉理工大学汽车工程学院, 武汉, 430070

Tel: 18186157207 Email: yjwu2019@whut.edu.cn

摘要: 电动汽车中使用的换热器必须同时具备优异的传热性能和机械性能。受自然界中晶体结构稳定性的启发, 本文建造了三种具有简单立方、体心立方和面心立方结构的晶胞结构换热器。通过实验和数值模拟研究了波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的传热性能和机械强度。结果表明, 体心立方换热器的热工水力性能最好。面心立方和体心立方换热器的屈服强度分别是波纹直板换热器的 3.03 和 2.83 倍。简单立方、体心立方和面心立方换热器的进出口温差分别是波纹直板换热器进出口温差的 1.42-1.95、1.66-2.38 和 2.28-2.89 倍。面心立方和体心立方换热器在保持高传热能力的前提下, 可以提高车辆在碰撞事故中的安全性。

关键词: 换热器; 热工水力性能; 传热; 抗压强度

0 引言

随着电动汽车的发展, 人们对开发具有高效散热能力和超高机械强度的轻质、低成本电池热管理系统的需求越来越大。换热器对电池热管理系统至关重要。不同行业对换热器性能的具体要求不同^[1], 电动汽车中使用的热交换器必须具有良好的传热和机械性能。在保证散热性能的前提下, 提高车辆在碰撞事故中的安全性。

多孔材料具有低密度、高比表面积、高硬度和高能量吸收能力等特性。根据孔隙的分布规律, 可将其分为随机结构和周期结构^[2]。开孔泡沫金属是一种随机多孔材料, 其特征是重量轻、高比表面积、高热导率^[3, 4]和高抗冲击性能^[5]。晶格框架材料是一种具有周期性的流动通道的周期性的多孔材料。晶格框架材料与泡沫金属相比, 前者的流动通道规则有序, 可避免没有贯通的无用通道, 因此, 晶格框架材料换热器中流体的压降显著低于开孔泡沫金属的压降^[6]。此外, 在相同体积分数下, 晶格框架材料结构的屈服强度也要高于泡沫金属^[7, 8]。

泡沫金属和晶格框架材料均可应用于换热器的填充材料, 近年来, 结合开孔泡沫金属和网格框架结构特点的双通道换热结构成为研究热点。超材料^[9, 10]是一类具备特殊热学和机械性能的新材料, 通过结构设计获得光学机械调谐^[9]、高刚度^[11]、损伤容限^[12]和能量吸收^[13, 14]等理想的物理特性, 从而推动能源技术的广泛发展。在一项初步研究中发现, 与传统多孔泡沫相比, 超材料的热导率高出 103%, 刚度高出 488%, 能量吸收能力高出 265%^[15]。

自然界中许多晶体呈简单立方、体心立方和面心立方结构, 具有优异的稳定性。受此启发, 本文构建了三种晶胞结构换热器。并采用选择性激光熔融技术进行制造, 并对这些换热器的传热特性和力学性能进行了实验研究。此外, 使用 SST k- ω 湍流模型对这些换热器的流动和传热性能进行了模拟分析。这项研究可以为设计兼具良好传热性能和机械性能的新型换

热器提供一种新方案。

1 晶胞结构换热器设计

采用选择性激光熔融制造了大小为 $25\times25\times25\text{ mm}^3$ 的简单立方、体心立方和面心立方周期性晶胞换热结构和波纹直板换热结构用于进行抗压测试实验。换热结构模型如图 1（a-d）所示，换热结构的材料为铝合金（ $\text{AlSi}_{10}\text{Mg}$ ）。周期性晶胞换热结构的详细尺寸如表 1 所示。

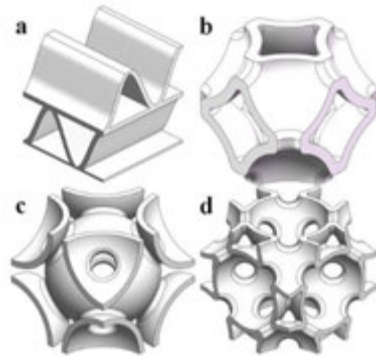


图 1 周期性晶胞结构: (a) 波纹直板、(b) 简单立方、(c) 体心立方、(d) 面心立方

表 1 周期性晶胞结构的详细尺寸

模型	球壳外径 (mm)	球壳壁厚 (mm)	连接孔径* (mm)
简单立方	26	4	6
体心立方	22.5	2.5	5
面心立方	18.5	2	4

* 位于两个相邻球形金属壳之间的颈部位置。

利用所制备的波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器分别进行了不同质量流量率下的传热和流动特性实验和模拟研究。换热器由周期性晶胞结构、热交换器外壳体和玻璃板组成，结构如图 2 所示。周期壳结构由铝合金（ $\text{AlSi}_{10}\text{Mg}$ ）制成，所有换热器的体积分数均为 21.5%。为了观察热交换器内的流体流动，热交换器的顶端用 $150\times150\times2\text{ mm}^3$ 的透明玻璃板封装。

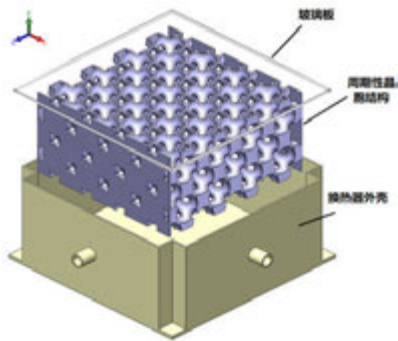


图 2 晶胞结构换热器结构图

2 实验方案及数学模型

2.1 实验方案

图 3 为晶胞结构换热器的流动和传热实验装置的示意图。在冷流体和热流体的入口和出口分别设置两个热电偶，获取两个热电偶温度后取平均值为进出口的温度。在入口和出口分别设置压力传感器，以测量换热器的进出口的压降。采用电磁流量阀调节流量，便于测量不同流量下的进出口温差和压降。体积流量计用于测量流量。为了避免环境对换热实验的影响，对换热器进行了隔热处理。

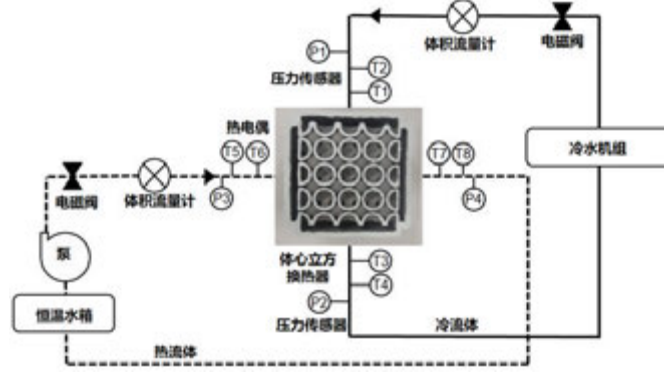


图 3 流动和传热实验装置的示意图

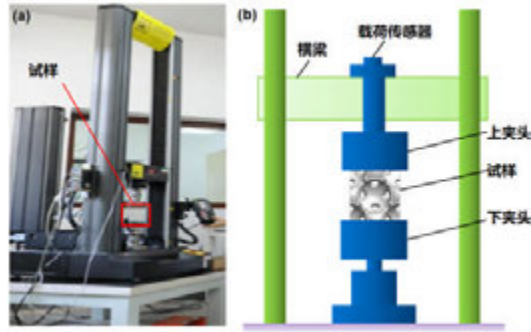


图 4 万能材料测试系统：(a) 实物图；(b) 系统原理图

图 4 为万能材料测试系统（INSTRON 5967），用于测试波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的机械性能，载荷测量误差为 $\pm 5\%$ 。

2.2 数学模型

本章中所有模拟的 Re 均在 198-1136 之间，由于复杂通道的扰流作用，观察发现流动提前进入湍流状态，因此采用 SST $k-\omega$ 湍流模型进行流动和传热模拟。固体区域的主要传热模式是热传导。流体域中连续性、动量和能量的控制方程由方程（1）-（3）给出^[6]：

连续性方程：

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

动量方程：

$$\frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

能量方程：

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c_p u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (3)$$

其中 ρ 、 p 、 μ 和 c_p 分别代表密度、压力、有效粘度和比热容， $-\overline{\rho u_i' u_j'}$ 是由湍流脉动引起的。

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u_i' u_j'} = 2\mu_t S_{ij} \quad (4)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5)$$

其中 τ_{ij} 和 S_{ij} 分别代表粘度引起的热应力和平均应变张量，SST k- ω 模型的控制方程由等式（6）-（7）给出^[17]：

k 方程：

$$\frac{\partial(\rho k u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right)}{\partial x_i} + \left(\tau_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \beta^* \rho k \omega \quad (6)$$

ω 方程：

$$\frac{\partial(\rho \omega u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega,1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right)}{\partial x_i} + \gamma_2 \left(2\rho S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \omega \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \beta_2 \rho \omega^2 + 2 \frac{\rho}{\sigma_{\omega,2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \quad (7)$$

其中 σ_k 、 β^* 、 γ_2 、 β_2 和 $\sigma_{\omega,2}$ 相应值分别为 2.0、0.009、0.083、0.44 和 1.17，是 k- ω 模型中的修正因子， μ_t 和 $\sigma_{\omega,1}$ 与混合函数有关，使方程同时适用于近壁和远流区域^[18]。

3 边界条件和数值方法

3.1 边界条件

本文研究了换热器在 0.02、0.025、0.03、0.035、0.04、0.045、0.05、0.055 和 0.06 L/s 九种不同体积流量下的流动和传热特性。冷热流体入口设置为速度入口，冷热流体出口设置为压力出口。详细的边界条件如表 5 所示。

表 5 详细边界条件

表面	边界条件	等式
热流体入口	速度入口	$u_{in} = V_{hot}$ 和 $T=305.15$ K
冷流体入口	速度入口	$u_{in} = V_{cold}$ 和 $T=285.15$ K
冷热流体出口	压力出口	$P=0$ Pa 和 $T=295.15$ K
流体-固体接触面	耦合边界条件	外表面: $\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) = h(T_f - T_w)$
		内表面: $\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) = h(T_w - T_f)$

3.2 数值方法

在该模拟中，使用 ANSYS WORKBENCH 20.0 进行稳态计算。由于流体的温度变化很小，因此可以忽略辐射传热。换热器材料设置为铝合金（AlSi10Mg）。因为水具有优异的传热性能，所以本文以水作为散热工质。

在该模型中，由于水的温度变化很小（小于 20 K），因此采用 295.15 K（平均流体温度）下的物理参数进行数值模拟。采用二阶迎风格式对对流项进行离散，用 SIMPLE 算法求解流体的控制方程。当动量和连续性方程的残差小于 1.0×10^{-5} ，且能量方程的残差小于 1.0×10^{-8} 时，计算被认为是收敛的。

雷诺数由等式（8）给出：

$$Re = \frac{\rho u_{in} D_h}{\mu_f} \quad (8)$$

其中, u_{in} 、 D_h 和 μ_f 分别代表入口流速、当量直径和动态粘度, 入口流速是根据当量直径估算得到的。

3.3 网格无关性验证

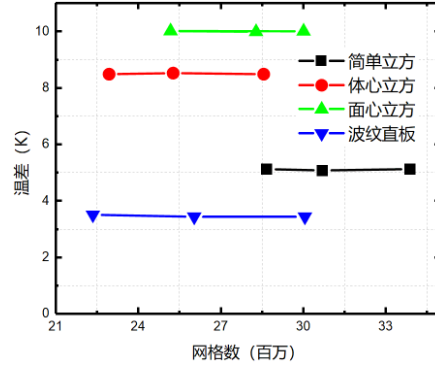


图 5 不同网格系统下进出口温差

在本研究中, 对于流动和传热模拟, 简单立方、体心立方、面心立方和波纹直板换热器分别采用三种网格系统进行模拟, 来验证网格无关性。同一换热器任何两个不同网格系统结果之间的差异都小于 2%, 这意味着结果与网格无关。

4 结果与讨论

4.1 机械性能分析

图 7 显示了简单立方、体心立方、面心立方和波纹直板换热器的压力测试曲线。面心立方和体心立方换热器的耐压性强于波纹直板换热器。简单立方换热器的耐压性低于波纹直板换热器。此外, 我们可以发现体心立方和面心立方换热器的压力-位移曲线的斜率大于波纹直板换热器, 也就是说在相同压力下, 体心立方和面心立方换热器变形较小。

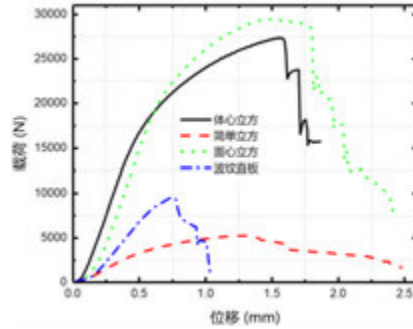


图 7 微通道换热器抗压测试曲线

试验结果表明, 波纹直板换热器的屈服强度为 8.40 MPa。体心立方和面心立方热交换器的屈服强度分别是波纹直板热交换器的 3.03 和 2.83 倍。简单立方换热器的屈服强度为波纹直板换热器屈服强度的 54.72 %。当波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的变形分别达到 0.75 mm、1.32 mm、1.55 mm 和 1.5 mm 时换热器被破坏。因此, 本研究认为, 体心立方和面心立方换热器在车辆电池冷却系统中的应用可有效提高车辆在受到冲击后的安全性。

4.2 流动和传热性能分析

图 8 (a-d) 显示了 $Q=0.06$ L/s 时波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的三维温度分布云图。在相同流量下, 由于换热器内部传热结构的复杂性不同, 对流体流动的

扰动也不同。因此，波纹直板换热器的入口和出口温差最小，但温度均匀性更好。面心立方换热器的入口和出口温差最大，温度均匀性仅次于波纹直板换热器。简单立方换热器的温度均匀性最差，入口和出口之间的温差小于体心立方和面心立方换热器。

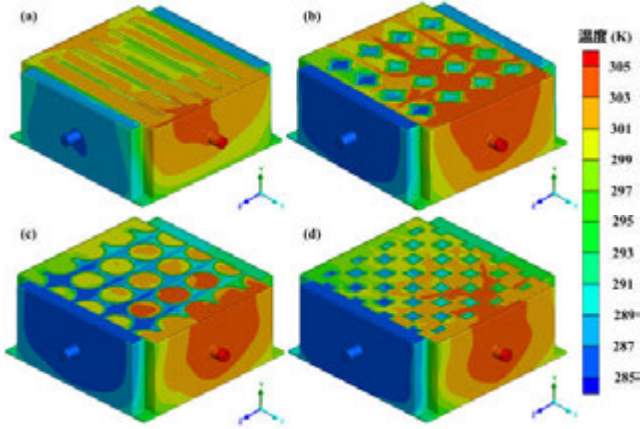


图 8 不同换热器在 $Q=0.06\text{ L/s}$ 的三维温度云图：(a) 波纹直板；(b) 简单立方；(c) 体心立方；(d) 面心立方

图 13 显示了不同流速下换热器的入口和出口温差。简单立方和波纹直板换热器的实验结果与模拟结果非常一致。波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的入口和出口之间的温差随着流量的增加而逐渐减小。随着流量从 0.02 L/s 增加到 0.06 L/s ，波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的入口和出口温差分别降低了 27.79%、22.61%、23.56% 和 20.72%。当流量从 0.02 L/s 增加到 0.06 L/s 时，简单立方、体心立方和面心立方换热器入口和出口之间的温差分别达到波纹直板换热器的 1.47-1.58、2.43-2.58 和 2.86-3.14 倍。

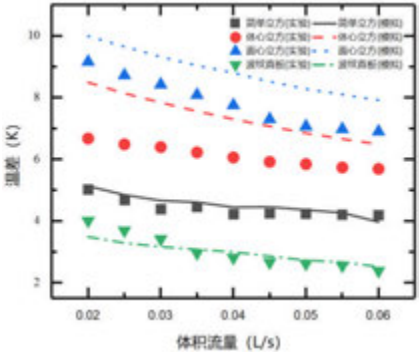


图 13 不同流量下换热器冷热流体进出口温差

图 14 显示了不同流速下换热器的平均对流传热系数。当流速为 0.02 L/s 时，波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的平均对流传热系数分别为 1015.91 、 1964.64 、 2804.29 和 $4192.41\text{ W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ 。总的来说，对流传热系数随流量的增加而增加。随着流量从 0.02 L/s 增加到 0.06 L/s ，波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的平均对流传热系数分别增加了 77.94%、74.23%、56.24% 和 75.73%。在所有换热器中，面心立方换热器的对流传热性能最好，其次是体心立方换热器。当流量从 0.02 L/s 增加到 0.06 L/s ，简单立方、体心立方和面心立方换热器的平均对流传热系数分别达到波纹直板换热器平均对流传热量的 1.81-1.93、2.58-2.76 和 3.49-4.12 倍。

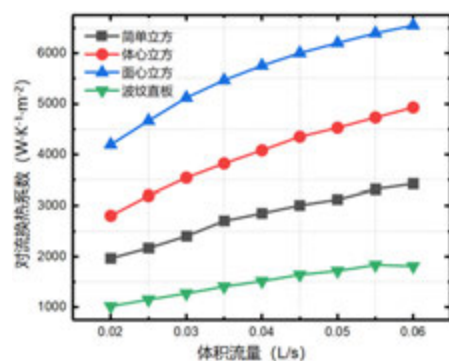


图 14 不同流量下换热器换热表面对流换热系数

图 15 显示了不同流速下换热器的 Nu。换热器的 Nu 随着流速的增加而增加，这是因为随着流速增大换热器内部流体湍流强度增加和流体边界层厚度减小。体心立方换热器的 Nu 最大，其次是简单立方换热器。简单立方和体心立方换热器的 Nu 显著高于波纹直板和面心立方换热器，面心立方换热器的 Nu 略高于波纹直板换热器。当流速为 0.02 L/s 时，波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的 Nu 分别为 13.89、30.63、31.46 和 17.64 $\text{W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ 。随着流量从 0.02 L/s 增加到 0.06 L/s，简单立方、体心立方和面心立方换热器的 Nu 分别达到波纹直板换热器 Nu 的 2.07-2.21、2.12-2.29 和 1.07-1.27 倍。

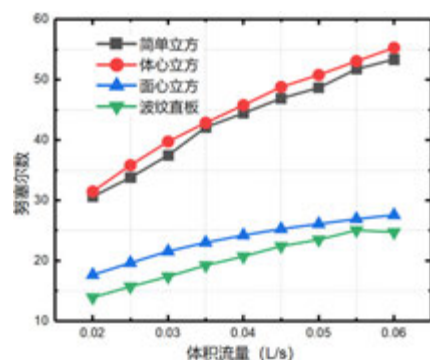
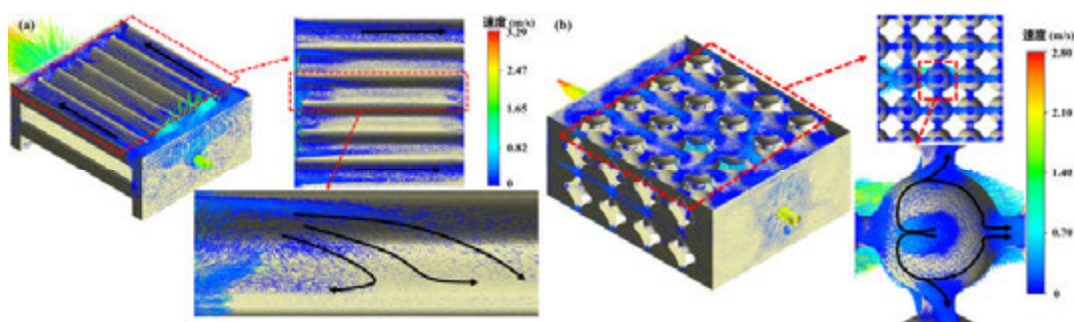


图 15 不同流量下换热器换热表面努塞尔数 (Nu)



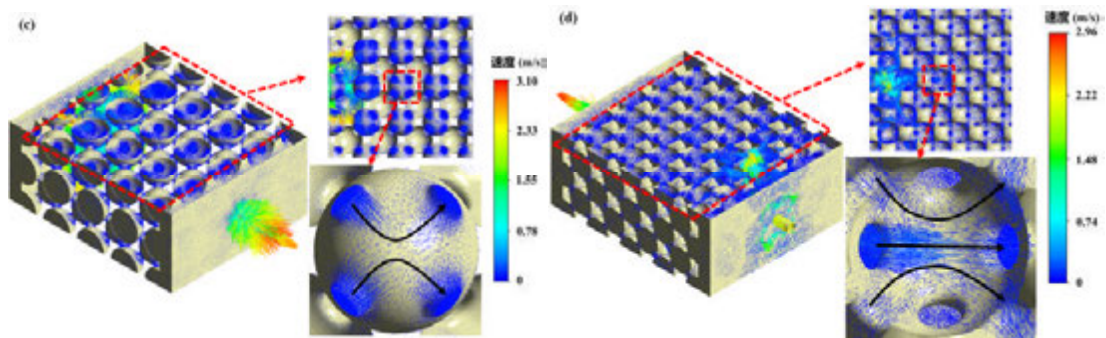


图 16 体积流量为 $Q=0.06$ L/s 换热器的三维速度矢量图: (a) 波纹直板; (b) 简单立方; (c) 体心立方; (d) 面心立方

图 16 (a-d) 显示了 $Q=0.06$ L/s 时波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的三维流速矢量。在简单立方、体心立方和面心立方换热器内部流体流动过程中,球体内产生了不同程度的三维涡流。这些涡流可以有效地破坏边界层,从而改善热交换表面的传热效果。在相同体积下,简单立方、体心立方和面心立方换热器中球壳的数量依次增加。球壳数量越多,内部涡流越多,涡流对边界层的破坏越充分。波纹直板换热器内部的流道是水平的,在流道的入口和出口附近只有少量涡流,这对边界层的损伤有限。这也解释了波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的平均对流传热系数依次增加的原因。同时,更多的旋流也使得波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的入口和出口压力差依次增加。

图 17 显示了不同流速下换热器的入口和出口压力差。换热器的压差随着流量的增加而增加。简单立方换热器的压差最大,远大于其他三个换热器。波纹直板、体心立方和面心立方换热器的压力差相似。换热器入口和出口处的实验和模拟压力差之间存在一定的差距,这可能是由于压力传感器处的局部阻力导致的。

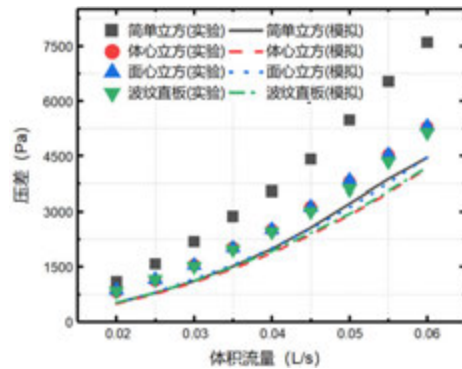


图 17 不同流量下换热器进出口压差

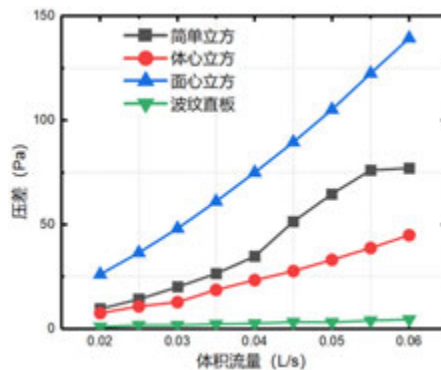


图 20 不同流量下周期性晶胞结构进出口压差

为了消除热交换器壳体对流体流动和传热的影响,截取了周期性晶胞结构前后的压力差、周期性晶胞结构的摩擦阻力系数和热工水力性能系数。图 20 显示了不同流速下换热器结构入口和出口处的压差。随着流量的增加,波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的压差逐渐增大。随着流量从 0.02 L/s 增加到 0.06 L/s,波纹直板、简单立方、体心立方和面心立方换热器的压差分别增加了 3.81、11.54、4.98 和 4.31 倍。

图 22 显示了不同流速下换热器结构的热工水力性能系数。体心立方换热器的热工水力性能系数优于波纹直板换热器。面心立方换热器结构的热工水力性能系数低于波纹直板换热器。在 0.02 L/s 时,简单立方换热器的热工水力性能系数优于波纹直板换热器。随着流量的增加,简单立方换热器的热工水力性能系数逐渐降低至小于波纹直板换热器,在 0.05 L/s 时达到最小值后,热工水力性能系数逐渐增大。

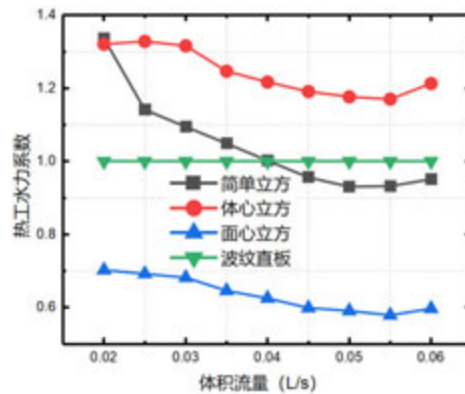


图 22 不同流量下周期性晶胞结构热工水力系数

5 结论

本文通过对简单立方、体心立方、面心立方和波纹直板换热器的抗压、流动和传热试验测试,得到以下结论:

(1) 面心立方和体心立方换热器的屈服压强为波纹直板换热器的 3.03 和 2.83 倍。因此,本研究认为,在汽车电池散热系统中应用体心立方和面心立方换热器可以增强汽车受到冲击后的安全性。

(2) 当流量 0.2-0.6 L/s 时,简单立方、体心立方和面心立方换热器冷热流体的进出口温差分别为波纹直板换热器的 1.42-1.95、1.66-2.38 和 2.28-2.89 倍。此外,随着流量的增加,晶格结构换热器的换热优势越来越大,这可能是因为随着流量的增大,晶格结构换热器内部复杂的流道结构对流体的扰动增强。

(3) 当流量 0.2-0.6 L/s 时,简单立方、体心立方和面心立方换热器冷热流体的平均压降分别为波纹直板换热器的 1.12-1.28、1.11-1.13 和 2.00-2.20 倍。因此在选则换热器时,应当考虑到压降的影响。

(4) 面心立方换热器的换热温差最大,但是其摩擦阻力较大,导致其热工水力性能劣于波纹直板换热器,体心立方换热器的换热效果仅次于面心立方换热器,并且其热工水力性能最好。

参考文献

- [1] Bahiraei M, Rahmani R, Yaghoobi A, et al. Recent research contributions concerning use of nanofluids in heat exchangers: A critical review [J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 133: 137-159.
- [2] Gibson L J. Cellular solids [J]. MRS Bulletin, 2011, 28(4): 270-274.

-
- [3] Du Y P, Qu Z G, Zhao C Y, et al. Numerical study of conjugated heat transfer in metal foam filled double-pipe [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2010, 53(21-22): 4899-4907.
- [4] Wang H, Guo L. Experimental investigation on pressure drop and heat transfer in metal foam filled tubes under convective boundary condition [J]. *Chemical Engineering Science*, 2016, 155: 438-448.
- [5] Liu P S, Liang K M. Review functional materials of porous metals made by p/m, electroplating and some other techniques [J]. *Journal of Materials Science*, 2001, 36: 5059–5072.
- [6] Gao L, Sun Y G. Thermal control of composite sandwich structure with lattice truss cores [J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2015, 29(1): 47-54.
- [7] Tian J, Kim T, Lu T J, et al. The effects of topology upon fluid-flow and heat-transfer within cellular copper structures [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004, 47(14-16): 3171-3186.
- [8] Salari-Sharif L, Ryan S M, Pelacci M, et al. Damping of selectively bonded 3d woven lattice materials [J]. *Sci Rep*, 2018, 8(1): 14572.
- [9] Xiao S, Wang T, Liu T, et al. Active metamaterials and metadevices: A review [J]. *Journal of Physics D Applied Physics*, 2020, 53(50): 503002.
- [10] Zheludev N I, Kivshar Y S. From metamaterials to metadevices [J]. *Nat Mater*, 2012, 11(11): 917-924.
- [11] Zheng X, Lee H, Weisgraber T H, et al. Ultralight, ultrastiff mechanical metamaterials [J]. *Science*, 2014, 344(6190): 1373-1377.
- [12] Pham M S, Liu C, Todd I, et al. Damage-tolerant architected materials inspired by crystal microstructure [J]. *Nature*, 2019, 565(7739): 305-311.
- [13] Wen J, Li K, Wang C, et al. Optimization investigation on configuration parameters of sine wavy fin in plate-fin heat exchanger based on fluid structure interaction analysis [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 131: 385-402.
- [14] Shan S, Kang S H, Raney J R, et al. Multistable architected materials for trapping elastic strain energy [J]. *Adv Mater*, 2015, 27(29): 4296-4301.
- [15] Wang F, Jiang H, Chen Y, et al. Predicting thermal and mechanical performance of stochastic and architected foams [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 171.
- [16] Ming T, Wang Z, Liao X, et al. Unsteady rans simulation of fluid dynamic and heat transfer in an oblique self-oscillating fluidic oscillator array [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, 177: 121515.
- [17] Wu Y, Yu S, Zuo L. Large eddy simulation analysis of the heat transfer enhancement using self-oscillating fluidic oscillators [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 131: 463-471.
- [18] Fluent A. Theory guide and user's guide ,USA [J]. Ansys Inc, 2015.
- [19] Moon C, Kim H D, Kim K C. Kelvin-cell-based metal foam heat exchanger with elliptical struts for low energy consumption [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 144: 540-550.

肋片结构强化甲醇水蒸气重整制氢性能研究

邓越尘, 刘舜, 杜小泽*

华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京, 102206

Tel: 010-61773923, Email: duxz@ncepu.edu.cn

摘要: 针对传统管式甲醇水蒸气重整制氢反应器温度分布不均匀、产氢不稳定等不足, 提出在反应器内添加直肋的方法, 提高管内换热效果来提高甲醇转化率和 H_2 产率。在此基础上, 设计了一种树状肋片结构, 建立了数值分析模型和反应动力学模型, 对反应器内的组分分布和温度分布进行优化, 并对直肋和树形肋片的结构特性参数进行比较分析。研究表明: 添加直肋的反应器甲醇转化率和 H_2 产率在同样边界条件下相比常规反应器都更高, 且树状肋片相比直肋提升效果更好, 在合适的肋参数下能比传统反应器 H_2 产率提升 26.42%。

关键词: 甲醇重整制氢, 重整反应器结构设计, 树状肋片, 结构优化

0. 引言

氢能作为一种无污染、热值高且来源广泛的清洁能源, 被认为是可以取代传统化石能源的二次能源之一^[1]。氢气是氢能的能源载体, 化石能源制氢是目前最主流的制氢方式^[2]。甲醇水蒸气重整制氢具有原料丰富且易储存, 可再生, 能量密度高等优势^[3-4], 在工业生产中受到了广泛的关注。

重整制氢反应器是实现甲醇水蒸气重整制氢反应的装置, 主流可分为管式反应器和板式反应器两种。杨玉滢^[5]等依据流化床相较固定床传热传质效率更优的特点, 设计了一种聚光太阳能流化床甲醇重整制氢系统, 研究表明相比固定床, 反应器采用流化床可以提高甲醇重整制氢效率, 在一定条件下甲醇转化率可达 99.6%。朱瑞韩^[6]等研究了双套管式重整制氢反应器的性能强化, 发现带肋片的反应器相较传统反应器甲醇转化率和氢气产率有所提高, 且带波浪肋的反应器性能更佳。SRIVASTAVA^[7]等通过在板式反应器内添加翅片并引入入口扩散段的方法, 提高了混合反应气在反应区域内的停留时间, 使甲醇转化率提高了 12.5%。兰闪闪^[8]等对固定床反应器催化床层进行研究, 分析了其对于 CO_2 和 CO 的效率因子的影响, 结果表明 CO_2 效率因子随催化床层轴径向温差变大而变大, 对 CO 影响不大。

树状结构常见的自然结构, 在能源、网络等领域均有所应用^[9]。树状肋片具有优秀的传热特性, 李杰^[10]等设计了一种树状肋相变储能换热器, 并对其换热效果进行了模拟和实验研究, 结果表明树状肋储能换热器相比传统换热器温度均匀性和释能速率均有所提升。

本文设计了直肋、正装树状肋片和反装树状肋片三种肋片结构的的甲醇水蒸气制氢反应器, 借助数值模拟手段讨论了其结构特性参数对甲醇转化率和氢气产率的影响。

1. 物理、数学及动力学模型

1.1 物理模型

对三种带肋的甲醇水蒸气制氢反应器进行建模, 结构如图 1 所示。反应器为内径 22mm, 外径 24mm, 管长为 60mm 的不锈钢带肋圆管, 重整反应催化剂选用活性高的多孔

铜基催化($\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$)^[11]，填充在管内。直肋由内壁向反应器轴线方向生长，为轴对称结构。

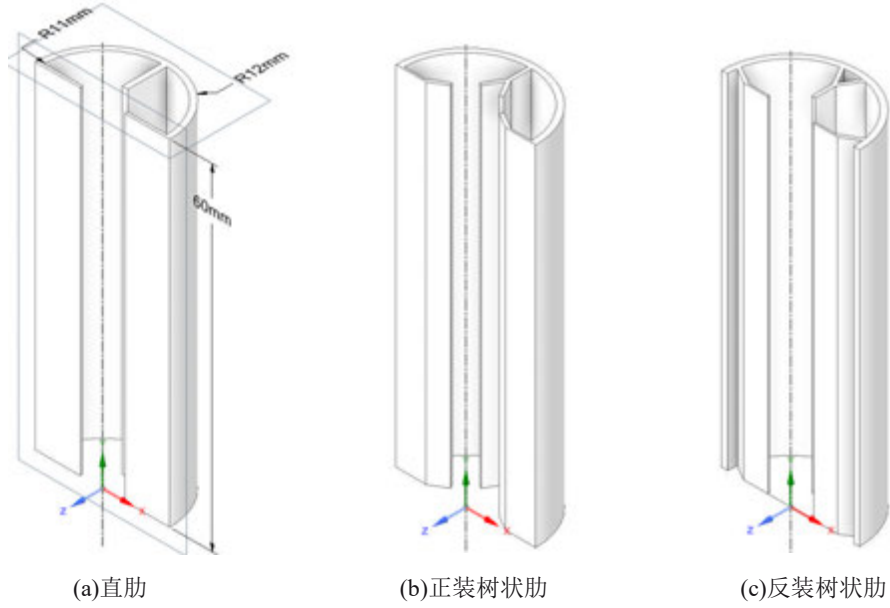


图 1 三种带肋甲醇水蒸气制氢反应器示意图

1.2 数学模型

1.2.1 控制方程

连续性方程

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (1)$$

式中： ∇ 为流体空间坐标； $\vec{V}$ 为速度矢量。

动量方程

$$\varepsilon(\vec{V} \cdot \nabla)\vec{V} = -\frac{\varepsilon}{\rho_f} \nabla p + \frac{\varepsilon \mu}{\rho_f} \nabla^2 \vec{V} + S_m \quad (2)$$

式中： S_m 为多孔催化剂产生的动量源项，可由式(3)计算得到，

$$S_m = -\frac{\mu}{\rho_f K} \vec{V} - \frac{\beta \vec{V}}{2} |\vec{V}| \quad (3)$$

式中： ε 为催化剂孔隙率，即反应区内流体域体积和催化剂总体积之比，本文取 0.36； ρ_f 为流体的密度； K 为渗透性； β 为催化剂多孔材料中方向惯性损失系数； μ 为混合物的动力粘度。

组分输运方程

$$\varepsilon \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \varepsilon(\vec{V} \cdot \nabla)Y_i = D_{eff} \nabla^2 Y_i + \varepsilon \sum_{r=1}^N M_{w,i} R_{i,r} \quad (4)$$

式中： $R_{i,r}$ 为反应 r 中物质 i 的生成或分解的摩尔速率， D_{eff} 是基于 Stefan-Maxwell 方程的有效扩散系数^[12]。

1.2.2 能量方程

能量方程

$$(\rho_f c_p)(\vec{V} \cdot \nabla)T = \lambda_{eff} \nabla^2 T + \varepsilon S_t \quad (5)$$

式中： λ_{eff} 为有效热导率，多孔介质中可有式(6)表示

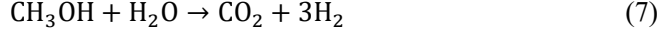
$$\lambda_{eff} = \varepsilon \lambda_f + (1 - \varepsilon) \lambda_s \quad (6)$$

式中： λ_f 和 λ_s 分别为多孔介质中的流体导热系数和固体导热系数。

1.3 反应动力学模型

本文反应动力学模型采用甲醇蒸汽重整-水汽置换逆变换(steam reforming and reverse water gas shift,SR-r WGS)机理,包括甲醇蒸汽重整反应(methanol steam reforming, MSR)和逆水煤气反应(reverse water gasshift, RWGS)两个反应,反应方程为^[13]

甲醇蒸汽重整反应(MSR)



逆水煤气反应(RWGS)



Arrhenius 模型用于计算上述化学反应的速率^[14]。甲醇蒸汽重整反应(MSR)与逆水气变换反应(RWGS)的速率表达式为

$$R_{\text{MSR}} = k_1 C_{\text{CH}_3\text{OH}}^{0.6} C_{\text{H}_2\text{O}}^{0.4} \exp\left(-\frac{E_{a1}}{RT}\right) \quad (9)$$

$$R_{\text{RWGS}} = k_2 C_{\text{CO}_2} C_{\text{H}_2} \exp\left(-\frac{E_{a2}}{RT}\right) \quad (10)$$

式中: k 为指前因子, E_a 为反应活化能。

反应过程中,氢气产率和甲醇转化率课用式(11)和式(12)计算得到

甲醇转化率

$$X_{\text{CH}_3\text{OH}} = \frac{m_{\text{CH}_3\text{OH},\text{in}} - m_{\text{CH}_3\text{OH},\text{out}}}{m_{\text{CH}_3\text{OH},\text{in}}} \times 100\% \quad (11)$$

氢气产率

$$Y_{\text{H}_2} = \frac{F_{\text{H}_2,\text{out}}}{F_{\text{CH}_3\text{OH},\text{in}}} \times 100\% \quad (12)$$

式中: $m_{\text{CH}_3\text{OH},\text{in}}$ 和 $m_{\text{CH}_3\text{OH},\text{out}}$ 分别表示进出口处甲醇的质量分数, $F_{\text{H}_2,\text{out}}$ 为出口处氢气的摩尔流速, $F_{\text{CH}_3\text{OH},\text{in}}$ 为进口处甲醇的摩尔流速, 单位为 mol/s。

1.4 边界条件

在模拟过程中,反应器入口设置为速度入口条件,相应出口设置为出口压力条件,相关计算参数如表 1 所示

表 1 模拟过程计算参数

参数	数值
反应器入口温度K	513
反应器入口速度/(m·s ⁻¹)	0.2
反应器恒定壁温K	513
反应器出口压力MPa	0.1
水与甲醇物质的量之比	1

1.5 网格无关性验证

采用 Fluent Meshing 对模型进行网格划分。为进行网格无关性验证,选择网格数 256805、349253 和 503865 三个工况来比较其甲醇转化率的变化,结果如表 2 所示

表 2 网格无关性验证

网格数	256805	349253	503865
甲醇转化率	88.82%	88.88%	88.88%

由上表可见,当网格数量在 349253 和 503865 时,甲醇转化率均为 88.88%,综合考虑计算准确性和计算量,最终选择网格数量为 349253 进行模拟。

1.6 模型有效性验证

为保证模型有效，将模型仿真结果与马朝^[15]等所做的实验结果进行对比，结果如图 2 所示

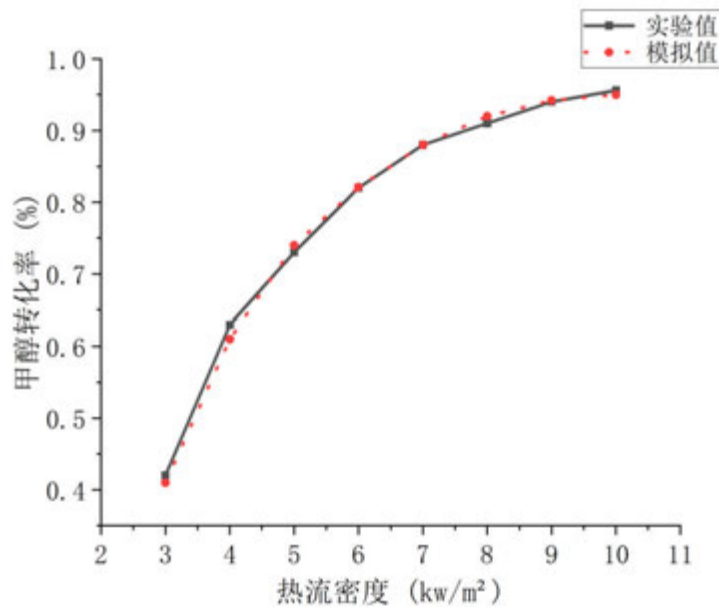


图 2 数值模型验证对比

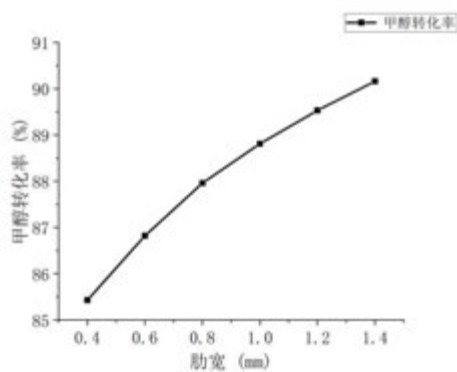
由图 2 可见，本文采用的数值模拟模型与实验值误差在 3.4% 以内，是可以接受的误差范围，证明本文所做的模拟方法是有效的。

2. 分析结果与讨论

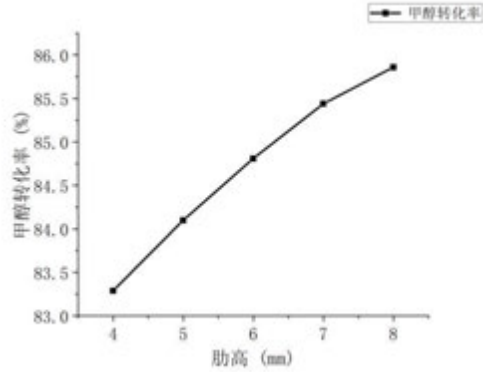
对传统的管式甲醇反应器进行了改良，通过在内部添加直肋和树状肋片的方式提升反应器换热效果，以提高催化床层的温度分布，进而提高反应器氢气产率。本章先对直肋和树状肋的结构特性参数进行优化设计，之后将带三种结构肋片的重整制氢反应器的制氢效果进行对比分析来讨论最优反应器结构。

2.1 带直肋甲醇重整反应器结构参数优化

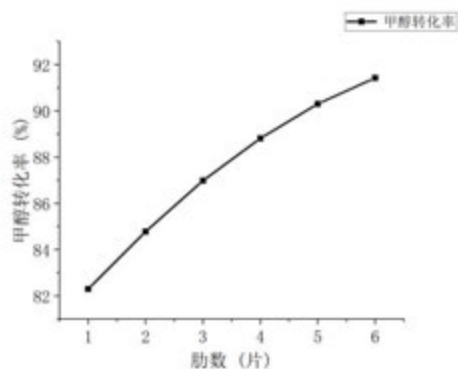
添加直肋可以通过对反应器内部催化床强化传热进而提高重整反应器制氢效果。本节采用数值模拟的方法研究直肋的肋高、肋宽和肋数等结构特性参数对反应器优化效果的影响，并以甲醇转化率和氢气产率为评价指标，旨在寻找最优结构参数。



(a) 肋高对甲醇转化率的影响

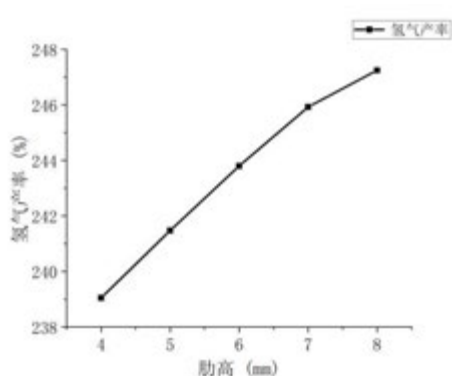


(b) 肋宽对甲醇转化率的影响

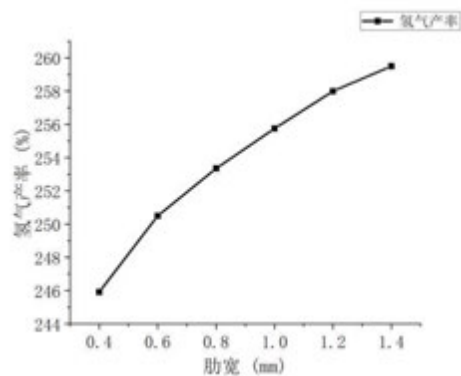


(c)肋数对甲醇转化率的影响

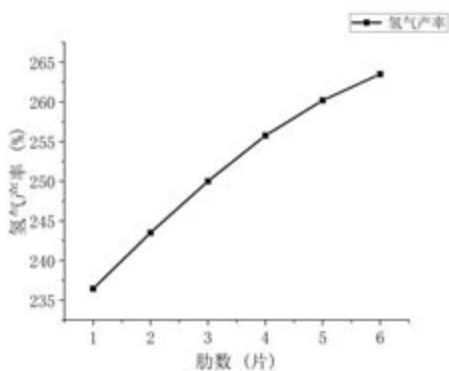
图 3 直肋特性参数对甲醇转化率的影响



(a)肋高对氢气产率的影响



(b)肋宽对氢气产率的影响



(c)肋数对氢气产率的影响

图 4 直肋特性参数对氢气产率的影响

由图 3 和图 4 可见，随着肋高、肋宽和肋数的增加，重整反应器的甲醇转化率和氢气产率都有所提升，这是因为肋片的换热面积因以上参数的提高而提高，对提升通道内的传热有很大的作用，进而提高了催化床的平均温度，使得吸热反应甲醇蒸汽重整反应(MSR)加速进行，从而提高氢气产率；但当以上参数提高到一定程度后，对重整反应器的制氢特性的提升效果有所下降，这是由于当肋片参数提高，其占用反应器通道内的体积也在提高，在催化剂孔隙率不变的情况下，重整反应器内的催化剂量下降，使得对于甲醇重整制氢反应的催化效果变差，最终使得反应器相对制氢效果下降。综上所述，提高肋高、肋宽和肋数可以提升重整反应器的制氢效果，但当其过高其提升效果会变差，考虑到用料等其

他因素，最终直肋特性参数选型为肋高 7mm，肋宽 0.6mm，肋数为 4 片，此时带直肋反应器的氢气产率相较常规反应器提升了 21.25%。

2.2 带树状肋片甲醇重整反应器结构参数优化

根据文献^[10]可知，树状肋片的特性参数可从其长度比和宽度比进行分析，计算方法如式 13 和式 14 所示

树状肋片的 k 级肋片与 $k+1$ 级肋片的长度比

$$L_{k+1} / L_k = \gamma \quad (13)$$

树状肋片的 k 级肋片与 $k+1$ 级肋片的宽度

$$w_{k+1} / w_k = 2^{-1/\Delta} \quad (14)$$

本节通过数值模拟研究讨论树状肋片的长度比和宽度比对甲醇重整反应器的制氢效果的影响，树状肋片的总长和零级肋宽采用上节研究所得的最优结构参数，即总长为 7mm、零级肋宽为 0.6mm，结果如下所示。

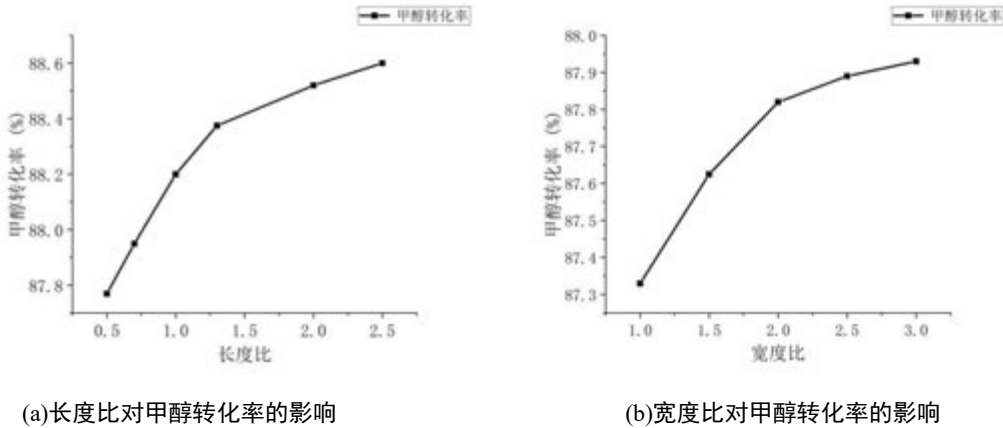


图 5 树状肋片结构特性参数对甲醇转化率的影响

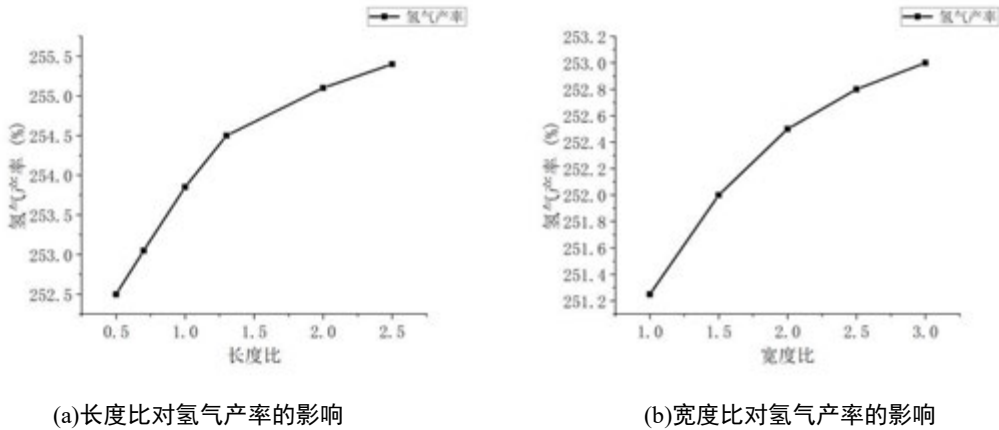


图 6 树状肋片结构特性参数对氢气产率的影响

由以上模拟结果可知，重整反应器的制氢效果随着树状肋片的长度比和宽度比的升高而升高，但是同样的在升高到一定程度后优化效果逐渐变差。这是因为当长度比升高时，第二级肋片长度更长，使得反应器内传热的均匀性变好，对催化剂整体的温度场有优化效果，但是随着长度比升高，树状肋片整体热阻也有所升高，这会阻碍肋片向反应器内部传热，且若长度比过高，肋片会向管壳方向延伸从而降低了对反应器中心部位的加热效果，最终使得优化效果减弱；随着宽度比的提升，第二级肋片宽度增加，能向反应器内传递更

多热量，但同时占用了催化剂更多空间使得催化剂量减少，进而产生了和提升长度比一样的效应。综合考虑优化效果和耗材等因素，最终认为长度比为 1.3、宽度比为 1.5 的树状肋片对重整反应器的优化效果最佳。

2.3 三种肋片结构制氢效果对比

本节将以上模拟结果的数据进行整理分析，对三种结构的重整反应器内部温度分布、组分分布以及出口参数进行对比分析，结果如下所示。

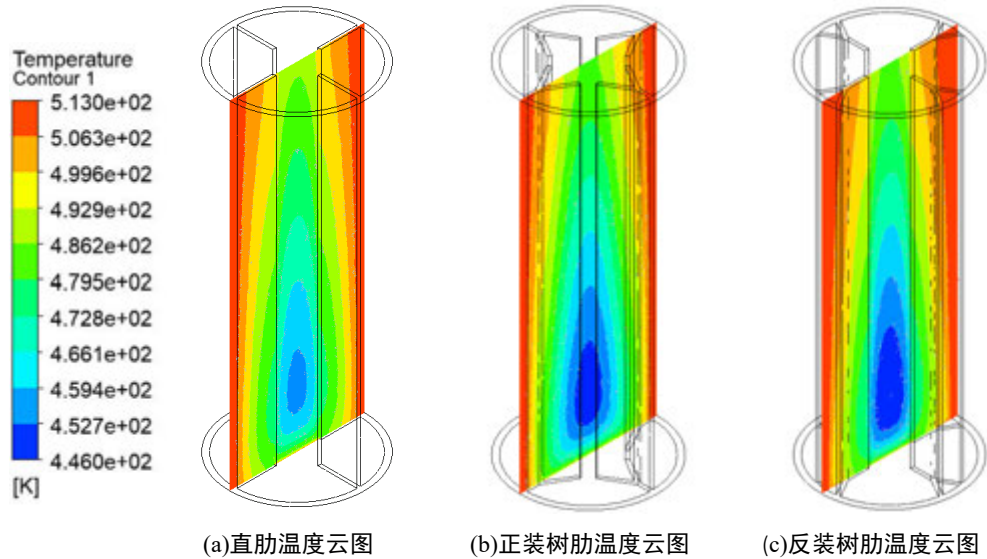


图 7 三种肋片结构反应器温度云图对比

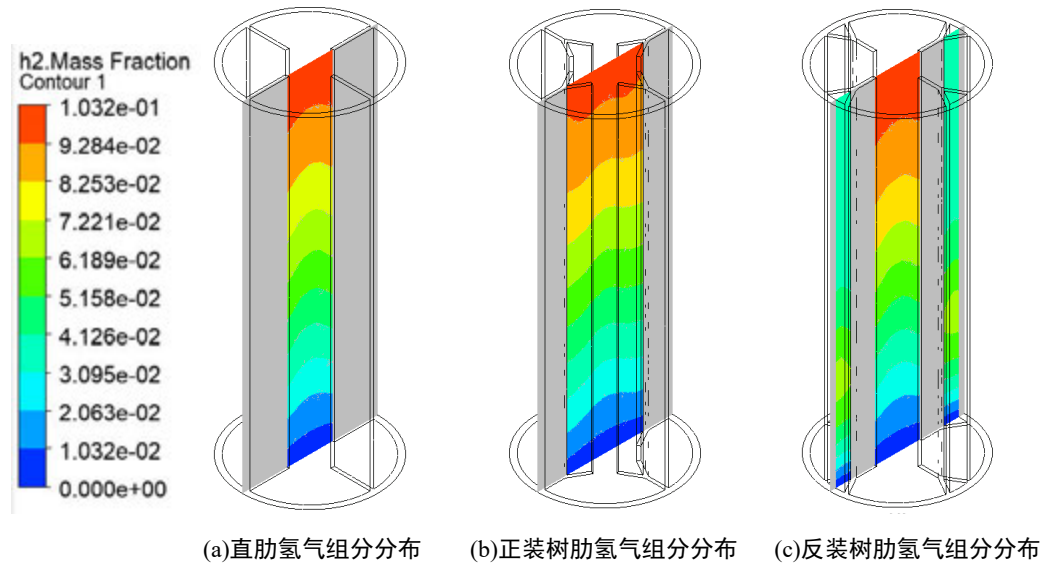


图 8 三种肋片结构反应器氢气组分分布

表 3 三种肋片结构制氢效果对比

	直肋反应器	正装树肋反应器	反装树肋反应器
氢气产率	250%	255.4%	245%
甲醇转化率	86.82%	88.3%	88.64%

由上图表结果可知，添加直肋后反应器传热效果明显提高，有更多热量导入催化床内部，使催化床温度分布相较光管反应器有所改善。直肋反应器在氢气产率和甲醇转化率上比传统光管反应器提升较大，分别提高了 21.02%和 7.02%，这是由于甲醇蒸汽重整反应

(methanol steam reforming, MSR)是吸热反应,添加直肋使反应区域温度升高为反应提供了更多热量,促进正反应进行,使氢气产率提高。

反装树状肋的出口甲醇转化率相比其他两种结构略有提高,但其氢气产率却严重下降,通过氢气组分云图可以发现其在被肋片隔断的区域氢气含量大幅下降,这是由于甲醇蒸汽重整反应(MSR)和逆水气变换反应(RWGS)均为吸热反应,反装树状肋片尤其是被肋片隔断的四个三角区域传热量过大而导致逆水气变换反应(RWGS)向右进行,使一部分生成的氢气转化成一氧化碳;且三角区阻隔了其内部组分的扩散,使该区域内反应生成的氢气继续反应成了一氧化碳,从而降低了总体氢气产率,故采用正装树状肋片对重整反应器制氢优化效果更佳。

正装树状肋的重整反应器在前半段的平均温度不如直肋重整反应器,这是由于相较于树状肋片,直肋的肋效率更高,对靠近肋片附近的催化剂的温度提升帮助更大;而到反应器后半段,带树状肋片的重整反应器的平均温度则明显高于直肋反应器,这是因为树状肋片的比表面积更大,传热效果更好,对反应器内部温度场的优化效果也就更好。采用正装树状肋片反应器相比直肋反应器甲醇转化率和氢气产率都有所提高,这除了是因为树状肋片的换热效果更优以外,还由于肋片材料采用不锈钢,热导率相较铜基催化剂较高,反应器内热量的传递主要在肋片中而不是在催化剂内,此时采用树状肋片可以加快热量从外壳向内部的传递并提高反应器内部温度场的均温性,更有利于甲醇重整制氢反应的进行。

综上所述,三种结构中采用正装树状肋片对甲醇重整反应器的制氢特性优化效果最佳,其氢气产率最高且其对于催化床的传热优化效果也最为合理。

3. 结论

(1) 通过添加直肋的方法可以提高甲醇重整反应器的制氢效果,且提高直肋的肋高、肋宽和肋树对重整反应器的制氢效果更佳,但当以上结构特性参数过高,其对重整反应器的相对优化效果会变差,因此在工程实际中需要选择合适的特性参数。

(2) 带树状肋片的重整制氢反应器树状肋正装比反装更优,这说明提高重整反应器的传热效果不能过量或出现局部过热,否则会使得逆水气变换反应(RWGS)反应过量而降低重整反应器的氢气产率。

(3) 带树状肋片的重整反应器比带直肋的重整反应器制氢效果更好,其反应器内的温度场均匀性也更佳。增加树状肋片的长度比和宽度比对其优化效果有一定提高但不能增加过大,否则会增加耗材的同时优化效果提升变差,使得结构设计性价比变低。

参考文献

- [1] 张伊甸,赵雅文,李文甲,等. 中低温太阳能-甲醇重整互补供能系统动力学提升与系统优化[J]. 工程热物理学报, 2021, 42(2): 269-279.
- [2] 郑励行,赵黛青,漆小玲,等. 基于全生命周期评价的中国制氢路线能效、碳排放及经济性研究[J]. 工程热物理学报, 2022, 43(9): 2305-2317.
- [3] A. Iulianelli, P. Ribeirinha, A. Mendes, et al. Methanol steam reforming for hydrogen generation via conventional and membrane reactors: A review[J]. Elsevier Bv, 2014, 29: 355-368.
- [4] 薛超,李廉枫,牟俊彦,等. 甲醇重整制氢用于轨道机车行业燃料经济性及其碳减排探究[J]. 技术与市场, 2023, 30(4): 98-102.
- [5] 杨玉滢,刘舜,杜小泽. 聚光太阳能流化床重整制氢技术研究[J]. 热力发电, 2022, 51(11): 164-173.
- [6] 朱瑞韩,左敏,贺振宗,等. 双套管式甲醇水蒸气重整制氢反应器性能强化研究[J]. 中南大学学报(自然科学版), 2022, 53(12): 4602-4616.
- [7] Alankrit Srivastava, Parmod Kumar, Atul Dhar. Performance enhancement of methanol reforming reactor through finned surfaces and diffused entry for on-board hydrogen generation[J]. Elsevier Bv, 2022, 47

- (11): 7478-7490.
- [8] 兰闪闪,牛帅,万宇,等. 甲醇水蒸气重整制氢固定床反应器的数学模拟[J]. 化学工程, 2023, 51(2): 68-72.
- [9] 戴俏波. 分形树状换热器中固液相变传热特性研究[D]. 东南大学, 2018
- [10] 李杰. 树状肋储能换热器的固液相变传热特性研究及其结构优化[D]. 东南大学, 2019
- [11] 王勤,赵青,吴荣生,等. Cu 基和 Pd 基甲醇水蒸气重整制氢催化剂研究进展[J]. 现代化工, 2019, 39(6): 50-53.
- [12] Ayman Karim,Jaime Bravo,David Gorm, et al. Comparison of wall-coated and packed-bed reactors for steam reforming of methanol[J]. Elsevier Bv, 2005, 110(1): 86-91.
- [13] 庄晓如,徐心海,夏鑫,等. 甲醇蒸汽重整制氢反应动力学研究进展[J]. 化工进展, 2020, 39(1): 152-165.
- [14] Shun Liu,Yuying Yang,Zhihua Ge, et al. Numerical study on solar-driven methanol steam reforming reactor with multiple phase change materials[J]. Elsevier Bv, 2022, 47(73): 31174-31190.
- [15] 马朝,程泽东,何雅玲. 相变储热型太阳能甲醇重整反应器稳态及动态制氢特性的实验研究[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2021, 61(12): 1371-1378.

板片结构参数对板式换热器流动换热特性影响的实验研究

冀文涛*¹, 张鸿飞¹, 段欣悦², 陶文铨¹

(1. 西安交通大学热流科学与工程教育部重点实验室, 西安, 710049; 2. 中国石油大学(华东)新能源学院能源与动力工程系, 青岛, 266580)

(Tel: 029-82665446, Email: wentaoji@xjtu.edu.cn)

摘要: 本文通过实验的方法研究了板式换热器板片结构参数对换热器流动换热特性的影响。对于总传热系数和单相对流侧的传热系数随雷诺数变化, 板换 2 和板换 3 的换热效果优于板换 4, 其次为板换 1。换热的强化阻力系数也相应增大, 板换 3 和板换 2 的阻力系数大于板换 4 和板换 1。波纹角度增大对换热效果的提升要大于对阻力的增加, 而波纹深度的增加虽然可以强化板式换热器的换热效果, 但是对增加阻力性能的影响更大。

关键词: 板式换热器; 能效评价; 强化传热;

0 前言

板式换热器具有比换热面积大和高传热效率等特点被广泛应用于石化、制冷空调等领域^[1-4]。各种不同结构板片的组合构成了复杂的流道结构, 其结构参数影响着板式换热器内的流动换热性能。研究板片不同结构参数对板式换热器流动换热性能的影响有利于进一步改进和优化换热器结构, 在提高换热性能的同时尽可能减小阻力, 板式换热器流动换热性能主要受波纹结构类型、波纹角度、当量直径、波纹密度、有效长度、有效宽度、进出口孔径等结构参数的影响。为了进一步提高板式换热器性能, 本文开展了波纹角度、波纹深度以及材料对板式换热器性能的影响研究。

1 实验系统及换热器参数介绍

1.1 试验系统介绍

图 1 为板式换热器实验系统示意图, 试验系统包括冷水、热水循环系统以及测试板式换热器。冷水循环系统主要包括, 恒温冷水箱、阀门、测温铂电阻和体积流量计, 恒温冷水箱中有循环泵、电加热器和制冷系统的蒸发器。循环泵主要用于给冷水增压和输送冷水至测试板式换热器, 冷水的最大体积流量为 $5\text{m}^3\cdot\text{h}^{-1}$, 电加热器和蒸发器用来调节水的温度以适应实验工况需要, 冷水箱的可调节温度范围为 $1\sim 40^\circ\text{C}$, 电加热器可提供 15kW 的加热功率, 蒸发器通过铜管连接位于室外的压缩机、冷凝器、储液罐等制冷设备提供制冷量。热水循环系统的工作过程与冷水循环基本一致, 热水箱可调节温度范围为 $1\sim 60^\circ\text{C}$ 。板式换热器冷热流体的进出口安装有温度测量装置以及差压变送器。板式换

基金项目: 本文受到国家科技重大专项 (J2019-III-0007-0050) 的资助。

热器测试前在其外表面包裹一层 40mm 后的保温棉，以此来减少与周围环境的热损失。实验中需要测定的参数主要包括冷热水的进出口温度、板式换热器进出口压差和冷热两侧水流的体积流量。

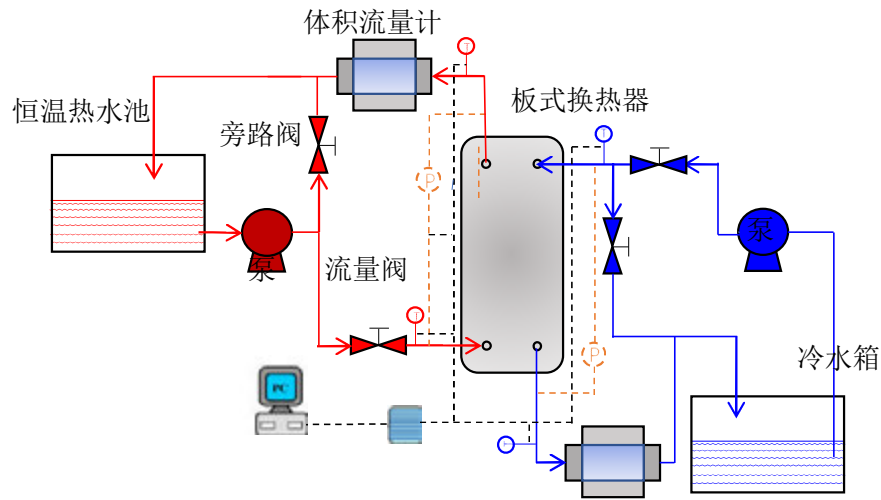


图 1 板式换热器实验测试示意图

1.2 换热器板片结构参数

实验测试板式换热器四个，分别是两个钛和两个 304 不锈钢的板式换热器，由冲压有波纹的金属薄板按一定的间隔叠装而成的。相邻板片的波纹角方向相反，这样更有利于流体在低雷诺数下形成湍流、强化换热，并且可以形成接触抗点，提高耐压性。板片的结构和尺寸参数如图 2 所示。测量板片几何参数如表 1 所示。在 20 摄氏度，钛和 304 不锈钢的导热系数分别为 22.0 和 16.1W/m.K。在保持其它参数不变的情况下主要研究了波纹角度和波纹深度对流动换热的影响。



(a) 板片 1 和板片 2 (钛) (b) 板片 3 和板片 4 (304 不锈钢)

图 2 四个板片实物图

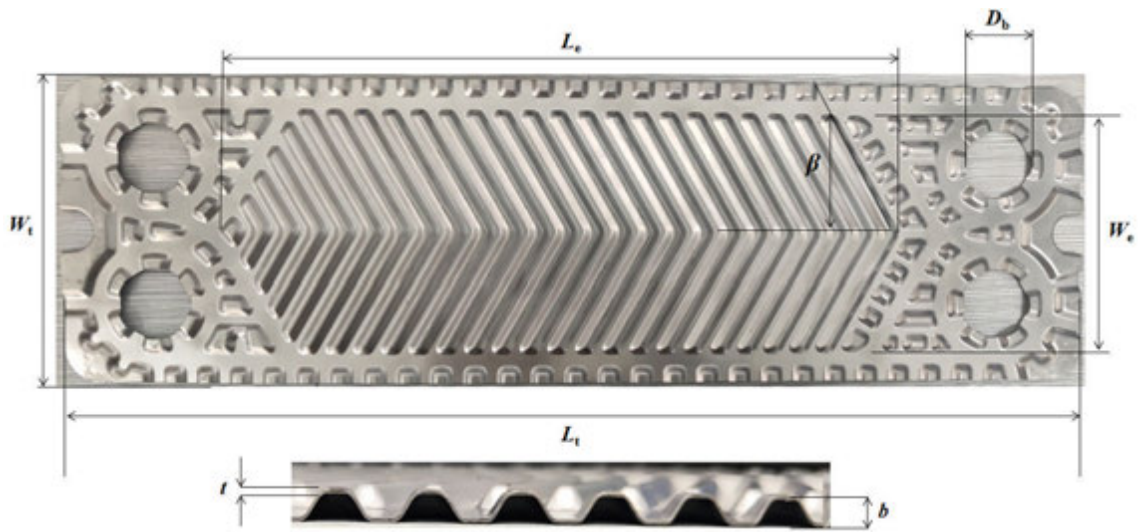


图 3 板片几何参数标注图

表 1 板片几何参数

结构参数	板片 1	板片 2	板片 3	板片 4
波纹角度 $\beta(^{\circ})$	30	60	30	36
外形尺寸 L_t (长) (m)	0.43	0.43	0.747	0.747
外形长度 W_t (宽) (m)	0.125	0.125	0.25	0.25
有效长度 L_e (m)	0.3	0.3	0.6	0.6
有效宽度 W_e (m)	0.1	0.1	0.215	0.215
板片厚度 t (m)	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005
波纹深度 b (m)	0.0025	0.0025	0.003	0.002
进出口孔直径 D_b (m)	0.029	0.029	0.059	0.059
单板基准面积 A_r (m ²)	0.02685	0.02685	0.113225	0.113225
单通道流通面积 A_c (m ²)	0.00025	0.00025	0.000645	0.00043
冷通道数 N_c	4	4	2	2
热通道数 N_h	5	5	3	3

2.实验数据处理

板式换热器冷侧水的换热量 Q_c 和热侧水的换热量 Q_h 由下列两式计算:

$$Q_c = \rho V_c c_p (t_{c,out} - t_{c,in}) \quad (1)$$

$$Q_h = \rho V_h c_p (t_{h,in} - t_{h,out}) \quad (2)$$

式中， V_c 和 V_h 分别代表冷水和热水的体积流量，单位是 ($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)。板式换热器逆流布置，其对数平均温差 Δt_m 为：

$$\Delta t_m = \frac{(t_{h,in} - t_{c,out}) - (t_{h,out} - t_{c,in})}{\ln \left(\frac{t_{h,in} - t_{c,out}}{t_{h,out} - t_{c,in}} \right)} \quad (3)$$

板式换热器的总传热系数 k 为：

$$k = \frac{(Q_c + Q_h)}{2 \Delta t_m A_s} \quad (4)$$

式中， A_s 为测试板式换热器的总基准面积，单位是 (m^2)。

流体在板式换热器通道中的平均流速 u 为：

$$u = \frac{V}{NbW_e} \quad (5)$$

式中， V 是体积流量，单位是 ($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)； N 是对应流体侧的通道数目。

板式换热器中流体的雷诺数 Re 为：

$$Re = \frac{\rho u D_e}{\mu} \quad (6)$$

式中， ρ 是流体的密度，单位是 ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)； μ 是流体的动力粘度，单位是 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)； D_e 是通道的当量直径，单位是 (m)，可由下式确定：

$$D_e = \frac{4A_c}{P} = \frac{4W_e b}{2(W_e + b)} \quad (7)$$

式中， A_c 为单个通道的流通面积，单位是 (m^2)； P 是单个通道的周长，单位是 (m)。由于 $W_e \gg b$ ，故式 (7) 一般可简化为： $D_e = 2b$ 。

换热器的阻力系数 f 为：

$$f = \frac{\Delta P}{4 \left(\frac{L_c}{D_c} \right) \left(\frac{\rho u^2}{2} \right)} \quad (8)$$

换热器冷侧和热侧的努赛尔数 Nu 为：

$$Nu = \frac{h D_c}{\lambda} \quad (9)$$

式中， h 为通道中的对流换热系数，单位是 $(W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1})$ ； λ 为流体介质的导热系数，单位是 $(W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1})$ 。

板式换热器冷热两侧换热性能的计算，可将常见换热关联式无量纲数的组合形式应用到板式换热器中，即假设板式换热器内对流换热系数的关联式为 $Nu = C Re^m Pr^n$ 。对于测试的板式换热器，如果冷热两侧的流道结构和流体介质不同，需要确定的 C 和 m 的值也不同，而本实验中所测试的板式换热器都是由相同的板片对称叠装而成，且实验测试的流体介质都是水，所以可以在一定程度上进行简化。本文采用 Wilson 热阻分离法确定板式换热器的换热性能。以板换 1 为例分析实验结果的不确定度，在实验过程中，板式换热器内流体在冷热两侧的换热量偏差大部分（85%以上实验数据）小于 5%，通过不确定分析努塞尔数的不确定度为 $\pm 16\%$ 。

3 实验结果分析

3.1 流速对总传热系数的影响

图 4 为四个板式换热器的总传热系数随冷热水流速变化的关系图，图中的三条曲线分别代表冷热侧水等流速变化、固定冷侧水流速改变热侧水流速以及固定热侧水流速改变冷侧水流速时总传热系数的变化曲线，横坐标代表水流量变化一侧的流速。从图中可以看出，固定冷侧或固定热侧流速的曲线与冷热侧等流速的曲线在所固定的流速处相交，低于此固定流速时，冷热侧等流速的总传热系数低于固定某侧流速时的总传热系数，这是由于流速降低导致这一侧的对流换热系数下降，从而削弱了整体的传热。固定某侧流速，图中曲线的斜率随另一侧流体流速的增大而减小，这是因为当水流变化侧的流速小于固定侧的流速时，主要热阻在流速小的变化侧，此时流速的增加可以显著增大总传热系数，但是随着变化侧的流速大于固定侧流速时，主要热阻变成流速小的固定侧，此时变化侧流速的增加对整体传热性能的提升有限，所以曲线最终趋于平缓。因此，对于板式换热器，强化换热最有效的方式是增大流速小的一侧的水流量。冷热侧等流速时的总传热系数随流速的增加增大地更快，并且它的曲线斜率大于固定某侧流速的曲线斜率，这是由于两侧流速相等时，它们的对流换热系数基本相等，即它们的对流换热热阻在总热阻中的占比基本相同，对总传热系数的影响相同，同时等量的增加两侧流速可显著增

大总传热系数；冷热侧等流速曲线的斜率随着流速的增大而减小，这是因为冷热两侧的对流换热系数都随着流速的增大而增大，即两侧的对流换热热阻都减小，而板片的导热热阻基本不变，从而导致导热热阻在总热阻中的占比增大，两侧的对流换热系数的增大对提升整体换热的效果减弱，板片导热系数对换热的影响增大。从图中对比结果，板换 2（波纹角度 60° ，波纹深度 2.5mm）和板换 3（波纹角度 30° ，波纹深度 3mm）的总体换热效果优于板换 4（波纹角度 36° ，波纹深度 2mm），最后为板换 1（波纹角度 30° ，波纹深度 2.5mm）。

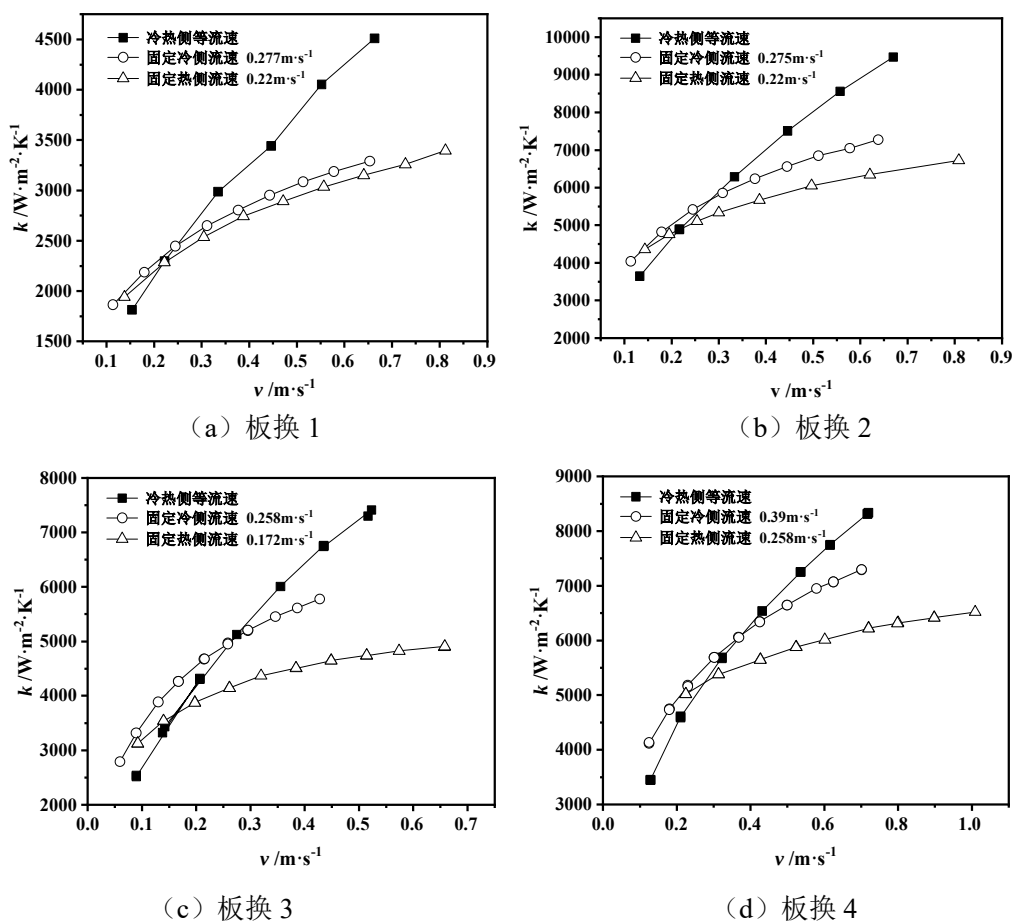


图 4 三种测试工况下总传热系数随流速变化关系

3.2 对流换热系数的对比

如表 1 所示，实验测试的四个板式换热器的部分结构参数存在差异。为了对比不同结构参数对板式换热器换热的影响，图 5 中给出了四个板式换热器中强制对流换热的努塞尔数随雷诺数的变化关系。从图中可以看出，本实验中四个波纹式板式换热器的换热效果远大于两侧均为光滑平板内流的换热。并且，随着雷诺数的增大，波纹式板式换热器强化换热的效果更好。在相同的雷诺数下，波纹式板式换热器的换热效果是平板的 3.5~8 倍，这是由于波纹的存在增加了换热有效面积以及在流体流动过程中的湍流扰动；

对比图中板换 1 和板换 2 努塞尔数的变化规律，可以发现对于相同尺寸大小的板式换热器，波纹角度的增大可以有效提高换热，并且与板换 1 相比，板换 2 的努塞尔数随着雷诺数的增大增加地更快，这是由于波纹角度的增大使板片之间的接触点增多，进一步加强流体在通道中的湍流和二次流动；波纹角度相同，相同雷诺数下有着更大尺寸的板 3（波纹深度稍大）的努塞尔数大于小尺寸的板 1 的努塞尔数，这可能是通道中的流体扰动更大，接触更加均匀，提升了换热效果；板换 3 的努塞尔数稍大于板换 4，这说明板片波纹深度的增加可以在一定程度上提高换热。

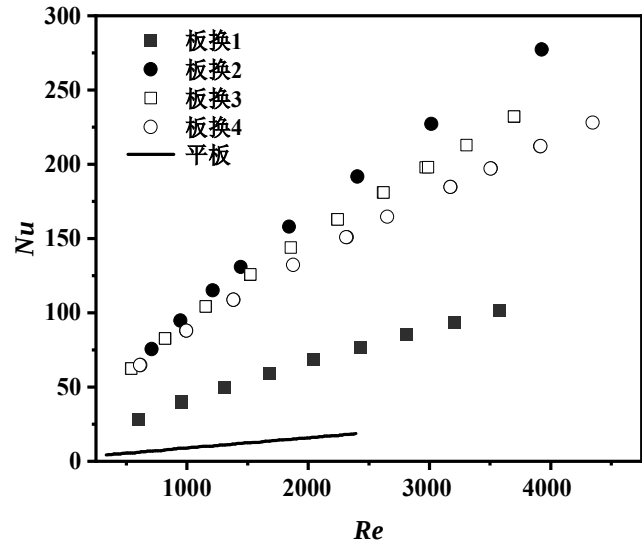


图 5 Nu 与 Re 关系对比

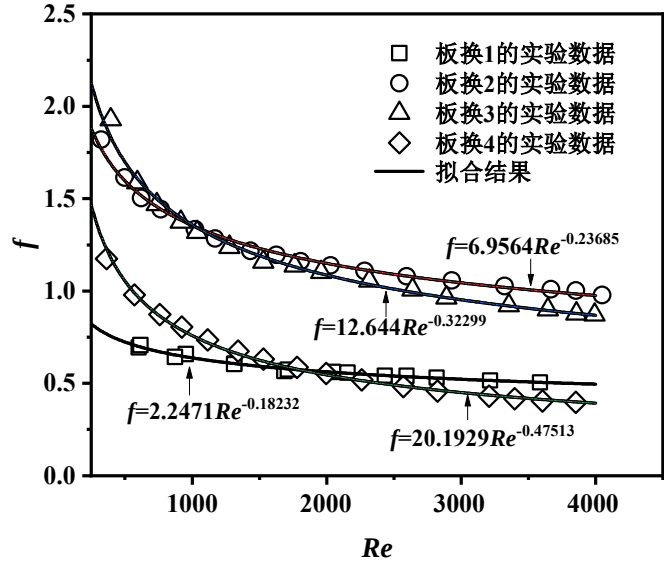


图 6 实验测试板式换热器的阻力系数对比

图 6 为实验测试四个板式换热器的阻力系数随雷诺数变化关系的对比，测试雷诺数

范围是 400~4000。从图中可以看出，阻力系数随着雷诺数的增大而减小，且阻力系数下降的速率随雷诺数增大而减小，最终趋于平缓。板换 2 的阻力系数大于板换 1，这是因为两个板式换热器有着相同的结构参数（有效长度、当量直径），板换 2 的大波纹角度增加强化了板片之间的扰动，从而增大了流体流动的压降。波纹角度对阻力系数的影响相对较小；板换 3 的阻力系数大于板换 4，不过两者阻力系数的差异远大于进出口压降的差异，这是因为虽然两者板片的尺寸大小相同，但是板换 3 的波纹深度和当量直径是板换 4 的 1.5 倍。在相同雷诺数下，对计算公式分析可知，当量直径会影响阻力系数的计算。另外，在低雷诺数范围内，相较于流体体积流量，阻力系数对压降的影响更大，而在高雷诺数范围内，阻力系数对压降的影响效果减弱，体积流量对压降的影响增强。

3.3 换热器流动换热性能评价分析

板式换热器的性能受很多因素的影响^[5-7]，尽管已有很多学者提出了各种评价换热器性能的方法^[8]，但是还没有普遍采用或公认的评价指标，通常可以使用传热系数、阻力系数、压降、承压耐温能力等方面来评价换热器的性能。本文主要根据常用的评价指标 $j/f^{1/3}$ 对实验测试板式换热器的换热和阻力性能进行评价对比。图 7 是四个板式换热器评价指标 $j/f^{1/3}$ 与雷诺数的变化关系对比。

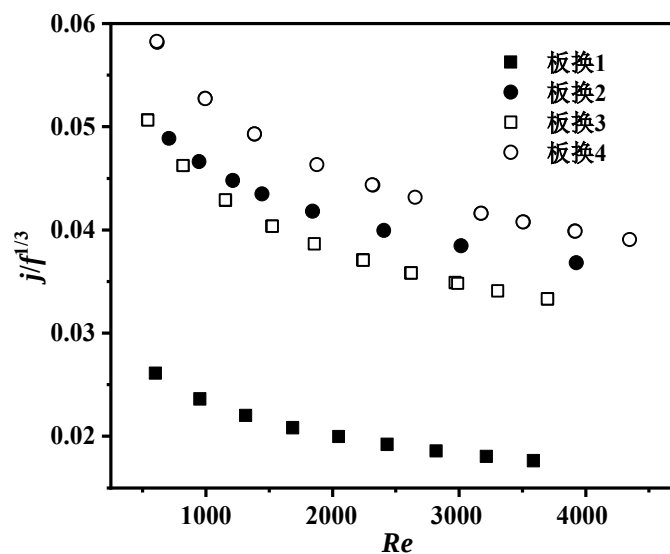


图 7 四个板式换热器的 $j/f^{1/3}$ 与雷诺数的关系对比

从图 7 中可以看出，板换 2 的 $j/f^{1/3}$ 大概是板换 1 的两倍，板换 4 是板换 3 的 1.2 倍，通过与前文所述两个板式换热器换热性能和阻力性能对比分析可知，板换 2 的换热系数和阻力系数都大于板换 1，板换 3 换热系数和阻力系数也都大于板换 4。通过评价指标 $j/f^{1/3}$ 的对比可以得出，波纹角度增大对换热效果的提升要大于对阻力的增加，而波纹深度的增加虽然可以强化板式换热器的换热效果，但是对增加阻力性能的影响更大。

4 结 论

本文通过实验研究了四个不同结构参数板式换热器的流动换热性能,分析了不同结构参数包括波纹角度、波纹深度、板片尺寸和通道数目对板式换热器的换热和阻力特性的影响规律。通过分析实验结果可以得到以下结论:

(1) 波纹角度的增大可以有效提高换热,并且波纹角度越大的板式换热器的努塞尔数随着雷诺数的增大增加得更快,这是由于波纹角度的增大进一步加强流体在通道中的湍流和二次流动;同时,波纹角度的增大也会严重增大换热器的进出口压降和阻力系数。

(2) 不同工况下板式换热器的换热器换热性能随流速的变化关系不同,对于总传热系数和单相对流侧的传热系数随雷诺数变化,板换2和板换3的换热效果优于板换4,最后为板换1。板换3和板换2的阻力系数大于板换4和板换1。

(3) 利用评价指标 $j/f^{1/3}$ 对四个板式换热器的换热和阻力性能进行了分析,发现波纹角度增大对换热性能的强化效果要优于对阻力的增加,而波纹深度的增加虽然可以强化板式换热器的换热效果,但是对增加阻力的影响更大。

参考文献

- [1] Bassiouny M K, Martin H. Flow distribution and pressure drop in plate heat exchangers .1. U-type arrangement[J]. Chemical Engineering Science, 1984, 39(4): 693-700.
- [2] Bassiouny M K, Martin H. Flow distribution and pressure drop in plate heat exchangers .1. Z-type arrangement[J]. Chemical Engineering Science, 1984, 39(4): 701-704.
- [3] 张海泉. 板式换热器热工与阻力性能测试及计算方法研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2006.
- [4] 倪晓华, 夏青, 萧渊. 板式换热器的换热与压降计算[J]. 流体机械, 2002, (03): 22-5+32.
- [5] Wang QW, Zhang DJ, Xie GN. Experimental Study and Genetic-Algorithm-Based Correlation on Pressure Drop and Heat Transfer Performances of a Cross-Corrugated Primary Surface Heat Exchanger[J]. J Heat Trans-T Asme, 2009, 131(6): 061802: 1-8.
- [6] Luan ZJ, Zhang GM, Tian MC, et al. Flow resistance and heat transfer characteristics of a new-type plate heat exchanger[J]. 2008, 20(4): 524-529.
- [7] Focke W W, Zachariades J, Olivier I. The effect of the corrugation inclination angle on the thermohydraulic performance of plate heat exchangers[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 1985, 28(8): 1469-1479.
- [8] Webb R L. Performance evaluation criteria for use of enhanced heat transfer surfaces in heat exchanger design[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1981, 24(4): 715-726.

碱性电解系统的热量流及电堆等效电路建模与性能分析

江一冲², 赵甜¹, 马欢¹, 梁正¹, 陈群^{1*}

(1. 清华大学工程力学系, 热科学与动力工程教育部重点实验室, 北京 100084

2. 辽宁工程技术大学机械工程学院, 阜新 123000)

(Tel: 010-62796332, Email: chenqun@tsinghua.edu.cn)

摘要: 随着氢能的发展和推广, 未来能源系统对氢能有巨大的需求。碱性水电解制氢是目前的主流制氢技术之一, 其性能研究和优化具有重要意义。本文结合碱性水电解制氢系统的部件建模与电堆内物理过程的等效电路建模, 建立了系统的跨尺度热量流模型, 研究了温度、压力等参数对系统性能以及内特性的影响, 并分析了冷却水流量及电解液流量变化时小室电压及电堆进出口温度的变化规律。

关键词: 热量流法, 跨尺度建模, 等效电路, 电阻, 碱性电解

0 前言

氢能作为一种绿色低碳、应用广泛的二次能源, 在辅助可再生能源消纳、实现电网大规模调峰和跨季节、跨地域储能, 推进工业、建筑、交通等领域低碳化中发挥着重要作用^[1]。相比于通过化石燃料化学反应制氢, 电解水制氢不仅没有碳排放^[2], 还可以与可再生能源发电相结合, 为可再生能源消纳提供帮助, 目前受到广泛关注和重视。其中, 碱性电解水技术成熟、工艺简单^[3]、成本低廉, 是目前电解水制氢的主要方式, 其性能预测对应用至关重要。然而, 系统能效受电堆温度等参数影响显著^[4]。此外, 系统运行参数多, 跨越多个时、空间尺度, 其整体、跨尺度建模复杂, 求解难度高。

Ulleberg 等人^[5]首先提出了目前广泛使用的碱性电解系统的电化学和热模型。在此基础上, Sánchez 等人^[6]基于 Aspen Plus 研究了 10kW 碱性电解系统在多种稳态工况下的功耗比、热量和效率变化, 分析了电解系统的性能, 但他们所建电化学模型不能描述电解液浓度及气泡对过电位的影响。Jang 等人^[7]通过数值模拟, 分析了压力对碱性电解系统性能的影响。Sakas 等人^[8]提出了碱水电解装置动态质量和能量平衡仿真模型。Ding 等人^[9]对 250kW 碱性电解系统进行了稳态工况及冷启动过程能量流的实验与建模研究。Qi 等人^[10]建立了动态运行条件下碱性电解系统的零维热模型, 并设计了其控制器。这些模型都较为复杂且方程阶次较高; Ursúa 等人^[11]建立了碱性电解稳态工况下的等效电路模型, 考虑了电解过程中的极化现象, 但简化了热模型的建模, 不能充分考虑系统热特性。Chen^[12]等人提出了热量流法, 建立了换热器以及热系统的整体模型, 描述了系统的热量传输与转换整体特性。Hao^[13]等人采用标准热阻法建立热量流模型, 分析了 SOFC 热电联产系统外置换热器的整体换热性能, 并引入等效电路模型表征内部的电化学反应过程,

本文采用热量流法, 建立了碱性电解水制氢系统的热量流模型, 并与电堆的等效电路模型集成, 研究不同工况下碱性电解系统的传热传质过程。首先, 以等效热阻表示系统部件与外部散热, 以基于进口温差的换热器热阻表述换热器特性, 对系统统一建模, 以等效电路方式描述电堆内部电化学特性及产热, 在此基础上分析碱性电解系统外部热流及质量流, 定量考虑了系统能效以冷热流体流量对电堆进出口温度及小室电压的影响, 并分析了温度压力等参数对电堆内特性及能效的影响。本文建模方法与其他论文对比如表 1 所示。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No. 52125604, No. 51836004)

表 1 本文与文献建模方法对比

Table 1 This paper compares with the literature modeling method

文献	研究状态	热模型建模方式	电化学模型建模方式	热力学方程阶次
Ulleberg 2003 ^[5]	非稳态	集总热容模型	经验模型	一阶
Sakas 2018 ^[8]	非稳态	集总热容模型	半经验模型	二阶
Qi 2023 ^[10]	非稳态	集总热容模型	经验模型	三阶
Ding 2023 ^[9]	稳态	集总热容模型	机理模型	三阶
Ursúa 2012 ^[11]	非稳态	无	半经验模型（等效电路）	/
Jang 2021 ^[7]	稳态	无	机理模型	/
Sánchez 2020 ^[6]	稳态	Aspen plus	经验模型	/
本文	稳态	热量流模型	机理模型（等效电路）	零阶

1 系统模型及控制方程

碱性电解系统主要包括由电堆、氢气/氧气气液分离器、电解液泵以及换热器组成，如图 1 所示^[1]。此外，还包括净化装置以及电气系统等。本文主要对电堆、气液分离器以及换热器、混合器建立稳态热量流模型。结合碱性电解系统的运行方式，电堆电化学模型如式 1-21 所示，系统热模型如式 22-40 所示。

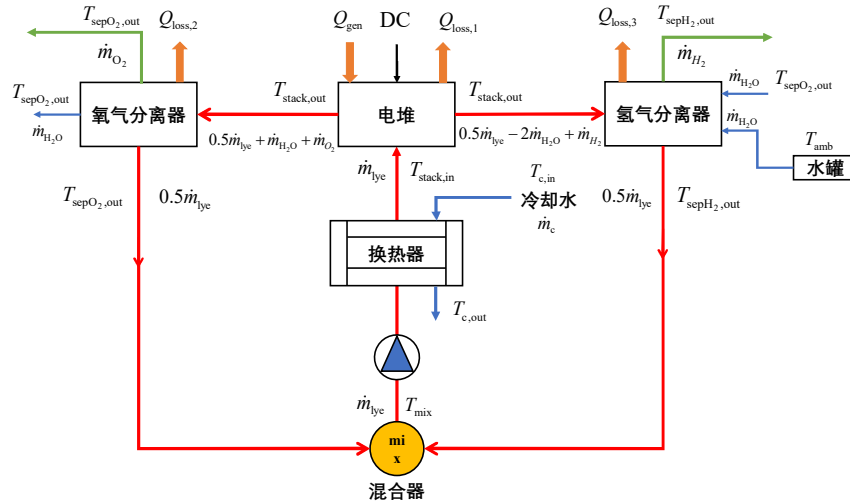
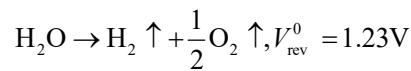
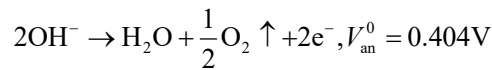
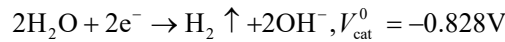


图 1 碱性电解系统流程图

Fig 1 Flow chart of alkaline electrolysis system

1.1 碱性电解基本原理及内部电化学建模

碱性电解质环境中，在直流电的作用下，阴极侧的水得到电子发生析氢还原反应，生成氢气和氢氧根离子，氢氧根离子在电场和氢氧侧浓度差的作用下穿过隔膜，在阳极侧失去电子发生析氧氧化反应，生成氧气和水。其半反应及总反应方程式如下^[1]：



式中 V_{an}^0 、 V_{cat}^0 和 V_{rev}^0 分别代表标准条件下的半反应电位和可逆电压。

电解槽的电压 V_{cell} 是可逆电压 V_{rev} 与过电位之和，其中过电位包括由电解槽内电阻引起的欧姆过电位 V_{ohm} 、由于阳极和阴极反应动力学的限制而产生的活化过电位 V_{act} 、阴极浓度过电位 V_{con} 的总和，浓度过电位通常在较高电流密度下产生，通常可以忽略^[14]。

$$V_{\text{cell}} = V_{\text{rev}} + V_{\text{act,c}} + V_{\text{act,a}} + V_{\text{ohm}} \quad (1)$$

1.1.1 可逆电压

可逆电压是发生化学反应的最小电压，受温度压力以及水活度等影响，在非标准状态下根据能斯特方程表示为^[1]：

$$V_{\text{rev}} = V_{\text{rev}}^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left[\frac{(P - P_{\text{H}_2\text{O}})^{1.5}}{\alpha_{\text{H}_2\text{O}}} \right] \quad (2)$$

式中 V_{rev}^0 为标准可逆电压，可表示为温度 T 的函数， R 为气体状态常数， F 为法拉第常数， P 为系统运行压力。 $P_{\text{H}_2\text{O}}$ 表示水蒸气分压，可由碱液摩尔浓度 m 、电堆平均温度 T 相关的经验公式表示。 $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}$ 表示 0-150°C 范围内的水活度，可由经验公式计算^[1]：

$$V_{\text{rev}}^0 = 1.50342 - 9.956 \times 10^{-4} T + 2.5 \times 10^{-7} T^2 \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \log P_{\text{H}_2\text{O}} = & -0.01508m - 0.0016788m^2 + 2.25887 \times 10^{-5} m^3 + \\ & (1 - 0.0012062m + 5.6024 \times 10^{-4} m^2 - 7.8228 \times 10^{-6} m^3) \\ & \times (35.4462 - 3343.93 / T - 10.9 \log T + 0.004165T) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\log \alpha_{\text{H}_2\text{O}}(\text{KOH}) = -0.02255m + 0.001434m^2 + (1.38m - 0.9254m^2) / T \quad (5)$$

其中摩尔浓度 m 表示为^[7]：

$$m = \frac{\text{wt}\%(183.1221 - 0.56845T + 984.5679 \exp(\text{wt}\% / 115.96277))}{100 \times (56.105)} \quad (6)$$

1.1.2 活化过电压

活化过电压与电化学反应的活化能有关，它是用于打破平衡状态，推动反应向正向进行时所消耗的电压。由于电解过程中产生的气泡会影响电极的有效表面积，因此对交换电流密度进行修正^{[7][15]}，受气泡影响的活化过电压 $V_{\text{act,c}}$ 和 $V_{\text{act,a}}$ 计算式为：

$$V_{\text{act,c}} = \frac{RT}{2\alpha_c F} \ln \left[\frac{J}{J_{0,c}(1-\theta)} \right] \quad (7)$$

$$V_{\text{act,a}} = \frac{RT}{2\alpha_a F} \ln \left[\frac{J}{J_{0,a}(1-\theta)} \right] \quad (8)$$

式中 J 为电流密度； $J_{0,a}$, $J_{0,c}$ 分别表示阳极和阴极的交换电流密度，如式(11)和式(12)所示。其中阳极传递系数和阴极传递系数如下^[16]：

$$\alpha_a = 0.07835 + 0.001T \quad (9)$$

$$\alpha_c = 0.1175 + 0.00095T \quad (10)$$

以镍材料为电极时，其阳极阴极的参考交换电流密度计算式为^[7]：

$$J_{0,a} = 0.9 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{0.1} \exp \left[-\frac{42000}{RT} \left(1 - \frac{T}{T_0} \right) \right] \quad (11)$$

$$J_{0,c} = 1.5 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{0.1} \exp \left[-\frac{23000}{RT} \left(1 - \frac{T}{T_0} \right) \right] \quad (12)$$

$$\theta = 0.023(J)^{0.3} \left(\frac{T}{T_0} \frac{P_0}{P} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (13)$$

式中 P 为运行压力, T_0 和 P_0 为参考温度与参考压力, θ 为电极表面气泡覆盖率。

1.1.3 欧姆过电压

电堆中电阻主要由阳极电阻 R_a 、阴极电阻 R_c 、包含气泡影响的电解液电阻 $R_{\text{KOH-bubble}}$ 以及隔膜电阻 R_{mem} 组成, 总欧姆过电压计算式为^[7]:

$$V_{\text{ohm}} = (R_c + R_a + R_{\text{KOH-bubble}} + R_{\text{mem}}) \times I \quad (14)$$

$$R_a = \frac{1}{\sigma_a} \left(\frac{\delta_a}{S_a} \right), R_c = \frac{1}{\sigma_c} \left(\frac{\delta_c}{S_c} \right) \quad (15)$$

式中 δ_a 、 δ_c 、 S_a 、 S_c 分别为阳极和阴极的厚度和面积; σ_a 、 σ_c 表示阳极和阴极的电导率, 是 T 的函数:

$$\sigma_a = \sigma_c = \sigma_{\text{Ni}} = 60000000 - 279650T + 532T^2 - 0.38057T^3 \quad (16)$$

电解液电阻计算式为:

$$R_{\text{ele}} = \frac{1}{\sigma_{\text{KOH}}} \left(\frac{d_{\text{am}}}{S_a} + \frac{d_{\text{cm}}}{S_c} \right) \quad (17)$$

式中 σ_{KOH} 为电解液电导率, S_a 、 S_c 为阴极与阳极面积, d_{am} 、 d_{cm} 分别为阴阳极到隔膜的距离。其中 σ_{KOH} 与电解液的浓度和温度有关^[17]:

$$\sigma_{\text{KOH}} = -2.041m - 0.0028m^2 + 0.005332mT + 207.2 \frac{m}{T} + 0.001043m^3 - 0.0000003m^2T^2 \quad (18)$$

电解过程中产生的气泡会降低电解液的导电性, 可以通过 Bruggeman 方程修正电导率^[7]:

$$\sigma_{\text{KOH-bubble}} = \left(1 - \frac{2}{3}\theta \right)^{\frac{3}{2}} \sigma_{\text{KOH}} \quad (19)$$

因此修正后的电解液电阻计算式为:

$$R_{\text{KOH-bubble}} = R_{\text{ele}} / \left(1 - \frac{2}{3}\theta \right)^{\frac{3}{2}} \quad (20)$$

隔膜电阻 R_{mem} 主要与其孔隙率、迂曲度和横截面积有关以及电解液电导率有关, 计算式为^[1]:

$$R_{\text{mem}} = \frac{\delta_m \tau_m}{P_m \sigma_{\text{KOH}} S_m} \quad (21)$$

式中 δ_m 为隔膜厚度; P_m 为隔膜孔隙度; τ_m 表示横隔膜弯曲度; S_m 为横隔膜的横截面积。

综上所述, 图 2 给出了碱性电解水的内部等效电路模型, 描述了电解过程内部的电化过程, 其中 R_{act} 和 R_{ohm} 分别为活化极化和欧姆极化的等效电阻。



图 2 电堆内部等效电路图
Fig 2 Equivalent circuit diagram inside the stack

1.2 电堆部件热量流模型

电堆的热量流建模中采用如下假设：(1)电堆出口温度为电堆平均温度；(2)不考虑隔膜的气体交叉及电渗水；(3)补水量为理想状态下化学反应所消耗的水量。

电解过程中，电压超过热中性电压时会产生热量，在热量流法中以一个热动势描述流体的温度变化，产热量与热动势的计算式为^[5]：

$$Q_{\text{gen}} = n(V_{\text{cell}} - V_{\text{th}})I \quad (22)$$

$$\varepsilon_{\text{gen}} = T_{\text{stack},1} - T_{\text{stack},\text{in}} = \frac{Q_{\text{gen}}}{\dot{m}_{\text{lye}} c_{\text{lye}}} \quad (23)$$

式中 $T_{\text{stack},1}$ 为电堆被电解过程中产生的热量加热后的温度； n 为电解小室数量； V_{cell} 为小室电压； V_{th} 为热中性电压，取为 1.48V； I 为电流； $\dot{m}_{\text{lye}}$ 和 c_{lye} 分别是电解液质量流量与比热容。

电堆与环境之间散热过程的热阻和热动势的计算式为：

$$R_{\text{loss}2} = \frac{T_{\text{stack},1} - T_{\text{amb}}}{Q_{\text{loss}2}} = \frac{1}{KA_{\text{stack}}} \quad (24)$$

$$\varepsilon_{\text{loss}2} = T_{\text{stack},1} - T_{\text{stack},\text{out}} = \frac{Q_{\text{loss}2}}{\dot{m}_{\text{lye}} c_{\text{lye}}} \quad (25)$$

式中 KA_{stack} 为电堆与环境散热的换热系数和换热面积的乘积。

电堆的热量流模型如图 3 所示：

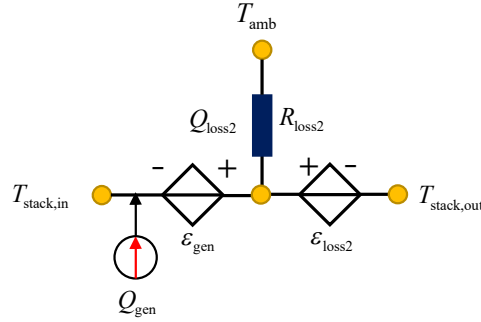


图 3 电堆热量流模型

Fig 3 Stack heat current model

1.3 辅助部件热量流模型

气液分离器及其他部件的建模中采用如下假设：(1)气体均为理想气体；(2)气液分离效率为 1；(3)忽略管道热损失；(4)补充或消耗的水与电解液比热容相等。

1.3.1 氢气气液分离器建模

$\varepsilon_{\text{mix},a}$, $\varepsilon_{\text{mix},b}$, $\varepsilon_{\text{mix},c}$ 分别为三股流入氢气侧气液分离器流体混合过程中对应的热动势，描述了流体混合前后的温度变化。以 $\varepsilon_{\text{mix},a}$ 为例，计算式为：

$$\varepsilon_{\text{mix},a} = T_{\text{sepH}_2,\text{mix}} - T_{\text{amb}} = \frac{\left(\begin{aligned} &(0.5\dot{m}_{\text{lye}} - 2\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}})c_{\text{lye}}T_{\text{stack},\text{out}} \\ &+ \dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}c_{\text{lye}}T_{\text{sepO}_2,\text{out}} + \dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}c_{\text{lye}}T_{\text{amb}} \\ &+ \dot{m}_{\text{H}_2}c_{\text{H}_2}T_{\text{stack},\text{out}} \end{aligned} \right)}{0.5\dot{m}_{\text{lye}}c_{\text{lye}} + \dot{m}_{\text{H}_2}c_{\text{H}_2}} - T_{\text{amb}} \quad (26)$$

式中 $2\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}$ 为氢气侧产生氢气而消耗水的质量流量， $\dot{m}_{\text{H}_2}$ 为生成氢气的质量流量， $\dot{m}_{\text{lye}}$ 为电解液质量流量， c_{lye} ， c_{H_2} 分别为电解液与氢气的比热容。 $T_{\text{sepO}_2,\text{out}}$ ， $T_{\text{stack},\text{out}}$ ， T_{amb} 分别

为氧气分离器出口温度，电堆出口温度与补给水温度，补给水温度与环境温度一致。 $\varepsilon_{\text{mix},b}$, $\varepsilon_{\text{mix},c}$ 计算方法同理。

氢气气液分离器与环境散热的热阻和热动势计算式为：

$$R_{\text{loss}1} = \frac{T_{\text{sepH}_2,\text{mix}} - T_{\text{amb}}}{Q_{\text{loss}1}} = \frac{1}{KA_{\text{sep}}} \quad (27)$$

$$\varepsilon_{\text{loss}1} = T_{\text{sepH}_2,\text{mix}} - T_{\text{sepH}_2,\text{out}} = \frac{Q_{\text{loss}1}}{0.5\dot{m}_{\text{lye}}c_{\text{lye}} + \dot{m}_{\text{H}_2}c_{\text{H}_2}} \quad (28)$$

式中 $R_{\text{loss}1}$ 为氢气气液分离器与环境散热的热阻， $\varepsilon_{\text{loss}1}$ 为氢气分离器的散热热动势； $T_{\text{sepH}_2,\text{mix}}$ 为三股流入氢气分离器的工质混合后的温度； KA_{sep} 为气液分离器与环境散热的换热系数与换热面积乘积。

氢气气液分离器的热量流模型如图 4 所示：

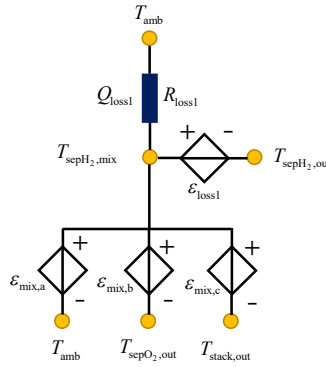


图 4 氢气气液分离器热量流模型

Fig 4 Heat current model of hydrogen gas-liquid separator

氢气在不同温度下的比热容为温度的函数^[1]：

$$c_{\text{H}_2} = \frac{(27.28 + 0.00326T + 50000 / T^2)}{0.002} \quad (29)$$

1.3.2 氧气气液分离器建模

氧气分离器与环境散热的热阻和热动势计算式为：

$$R_{\text{loss}3} = \frac{T_{\text{stack,out}} - T_{\text{amb}}}{Q_{\text{loss}3}} = \frac{1}{KA_{\text{sep}}} \quad (30)$$

$$\varepsilon_{\text{loss}3} = T_{\text{stack,out}} - T_{\text{sepO}_2,\text{out}} = \frac{Q_{\text{loss}3}}{0.5\dot{m}_{\text{lye}}c_{\text{lye}} + \dot{m}_{\text{O}_2}c_{\text{O}_2} + \dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}c_{\text{lye}}} \quad (31)$$

式中 KA_{sep} 为气液分离器与环境散热的换热系数与换热面积乘积。

氧气气液分离器的热量流模型如图 5 所示：

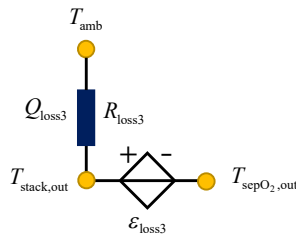


图 5 氧气气液分离器热量流模型

Fig 5 Heat current model of an oxygen gas-liquid separator

氧气在不同温度下的比热容为温度的函数^[1]:

$$c_{O_2} = \frac{(29.96 + 0.00418T - 167000 / T^2)}{0.032} \quad (32)$$

1.3.3 混合器建模

从氢气气液分离器出口的电解液与氧气气液分离器出口的电解液进入混合器中混合成一股电解液, 经过泵之后进入到换热器当中进行换热, 忽略泵对电解液温度的影响。混合过程可以通过两个热势描述, $\varepsilon_{\text{mix}, H_2}$, $\varepsilon_{\text{mix}, O_2}$ 分别为氢气侧和氧气侧的混合热势:

$$\varepsilon_{\text{mix}, H_2} = T_{\text{mix}} - T_{\text{sepH}_2, \text{out}} = \frac{0.5\dot{m}_{\text{lye}} c_{\text{lye}} T_{\text{sepH}_2, \text{out}} + 0.5\dot{m}_{\text{lye}} c_{\text{lye}} T_{\text{sepO}_2, \text{out}}}{\dot{m}_{\text{lye}} c_{\text{lye}}} - T_{\text{sepH}_2, \text{out}} \quad (33)$$

式中 $T_{\text{sepH}_2, \text{out}}$ 、 $T_{\text{sepO}_2, \text{out}}$ 、 T_{mix} 分别为氢气分离器出口温度, 氧气分离器出口温度和两股电解液混合后的温度。

两股电解液混合的热量流模型如图 6 所示:

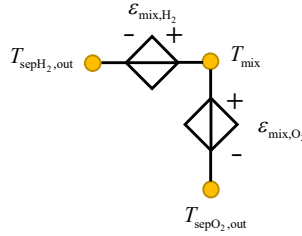


图 6 电解液混合热量流模型

Fig 6 Electrolyte mixed heat current model

$\varepsilon_{\text{mix}, O_2}$ 计算方法与之同理。

1.3.4 换热器建模

混合后的电解液进入换热器中与冷却水换热, 如图 7^[18]所示。

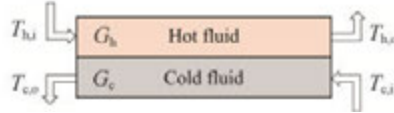


图 7 换热器结构图

Fig 7 Structure diagram of heat exchanger

换热器的热量流模型如图 8 所示, 其中表征热、冷流体温度变化的热势为:

$$\varepsilon_{\text{ex}, h} = T_{\text{mix}} - T_{\text{stack}, \text{in}} = \frac{Q_{\text{ex}}}{\dot{m}_{\text{lye}} c_{\text{lye}}} \quad (34)$$

$$\varepsilon_{\text{ex}, c} = T_{\text{c}, \text{out}} - T_{\text{c}, \text{in}} = \frac{Q_{\text{ex}}}{\dot{m}_c c_c} \quad (35)$$

式中 $T_{\text{stack}, \text{in}}$ 为换热器热流体出口温度, 同时为电堆电解液进口温度; $T_{\text{c}, \text{in}}$, $T_{\text{c}, \text{out}}$ 分别为冷却水进出口温度。

换热器的热阻 R_{ex} 为:

$$R_{\text{ex}} = \frac{G_c e^{\text{NTU}_h} - G_h e^{\text{NTU}_c}}{G_h G_c (e^{\text{NTU}_h} - e^{\text{NTU}_c})} = \frac{T_{\text{mix}} - T_{\text{c}, \text{in}}}{Q_{\text{ex}}} \quad (36)$$

式中 G_c 为冷流体热容量流, G_h 为电解液热容量流:

$$G_c = \dot{m}_c c_c \quad (37)$$

$$G_h = \dot{m}_{\text{lye}} c_{\text{lye}} \quad (38)$$

NTU_h 和 NTU_c 分别为热流体和冷流体的传热单元数，计算式为：

$$NTU_h = \frac{\phi KA_{ex}}{G_h} \quad (39)$$

$$NTU_c = \frac{\phi KA_{ex}}{G_c} \quad (40)$$

式中 $\dot{m}_c$ ， c_c 为冷流体的质量流量与比热容， ϕ 为修正因子，对于逆流换热器修正因子等于 1^[18]； KA_{ex} 为换热器换热系数与换热面积乘积。计算中冷流体温度取环境温度。换热器的热量流模型如图 8 所示：

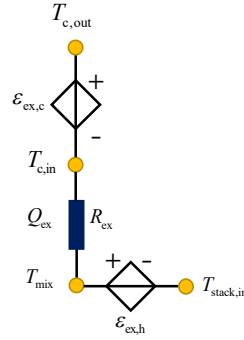


图 8 换热器热量流模型

Fig 8 Heat current model of heat exchanger

1.3.5 系统整体热量流模型

将上述各模型按节点温度连接，构建系统整体的热量流模型，如图 9 所示：

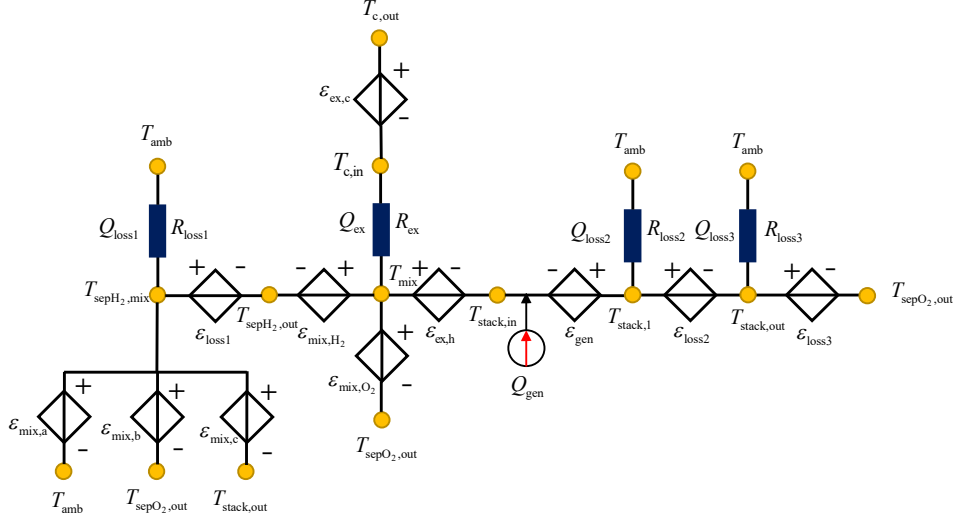


图 9 系统整体热量流模型

Fig 9 Overall heat current model of the system

1.4 系统质量守恒与效率计算

电解过程中，在阴极产生氢气，阳极产生氧气，根据法拉第电解定律，产氢的摩尔速率 $\dot{n}_{H_2}$ 及质量流量 $\dot{m}_{H_2}$ 的计算式为^[5]：

$$\dot{n}_{H_2} = \eta_F \frac{I}{zF} n \quad (41)$$

$$\dot{m}_{H_2} = M_{H_2} \dot{n}_{H_2} \quad (42)$$

式中 M_{H_2} 为氢气摩尔质量， η_F 为法拉第效率，计算式为：

$$\eta_F = \frac{J^2}{f_1 + J^2} f_2 \quad (43)$$

$$f_1 = 2.5T + 50 \quad (44)$$

$$f_2 = 1 - 6.25 \times 10^{-6} T \quad (45)$$

式中 J 为电流密度，根据水电解的化学反应式，各组分的质平衡表示为：

$$\dot{n}_{H_2} = \dot{n}_{H_2O} = 2\dot{n}_{O_2} \quad (46)$$

以电压效率作为系统性能的评价标准，其定义为可逆电压除以小室电压^[1]。

$$\eta_V = \frac{V_{rev}}{V_{cell}} \quad (47)$$

2 模拟结果与分析

2.1 仿真所需参数

碱性电解系统的热量流模型与内部等效电路模型具有相同的数学形式，可将二者跨尺度耦合求解。系统等效电路只有一条支路，其约束条件在系统建模中已完整给出。计算中，参考温度和参考压力为 25°C 和 1bar，换热器的 KA_{ex} 设置为 4000W/K，冷却水流量为 0.3-0.7kg/s，电解液流量 0.62-1.42 kg/s，其余参数如表 2 所示。

表 2 系统结构及运行参数^[1]

Table 2 System structure and operating parameters

相关参数	单位	值
电解液浓度	%	31.7%
电解质比热容 c_{lye}	J/kg/K	3100
环境温度 T_{amb}	K	298
电解小室数 n		70(35 小室串联)
电极厚度 δ_a, δ_c	m	0.2×10^{-3}
电极面积 S_a, S_c	m ²	0.42
隔膜厚度 δ_m	m	0.7×10^{-3}
隔膜面积 S_m	m ²	0.41
电极隔膜间距 d_{am}, d_{cm}	m	1×10^{-3}
隔膜迂曲度 τ_m	1	5.2
隔膜孔隙率 p_m	1	0.59
电堆热阻 R_{loss2}	K/W	0.05
气液分离器热阻 R_{loss1}, R_{loss3}	K/W	0.12

2.2 系统整体分析

电堆在冷却水流量 0.3kg/s，电解液流量 1.42kg/s，电流 3500A，压力 16bar 下运行，求解得到系统中节点温度及工质流量，如图 10 所示：

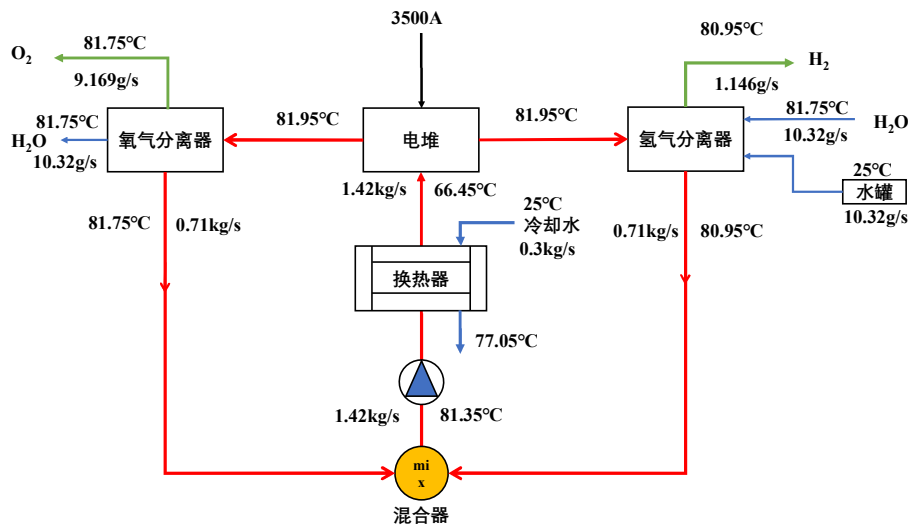


图 10 系统温度及流量分布图

Fig 10 System temperature and flow distribution

由图 10 可知，电解液温度的降低主要来源为换热器中其与冷却水的换热过程。冷却水流量为 0.3-0.7kg/s，压力 16bar，电流 3500A 时，小室电压与电堆进口温度随冷却水流量变化如图 11 所示。随着冷却水流量增加，换热器换热量增大，电堆进口温度（换热器热流体出口温度）逐渐降低。随着电堆温度的降低，小室电压升高。

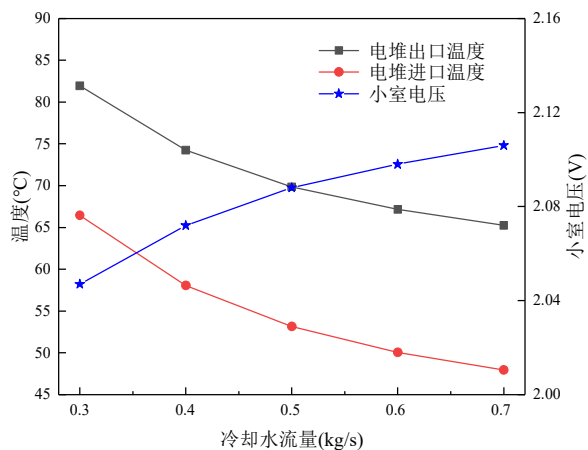


图 11 小室电压与电堆进出口温度随冷却水流量变化曲线

Fig 11 Variation curve of cell voltage and stack inlet and outlet temperature with cooling water flow

图 12 为电堆产热量与换热器以及电压效率随冷却水流量变化曲线，随着冷却水流量的增大，电堆温度的降低导致小室电压升高，电堆产热量增加，同时换热器的换热量也增大。此外，由于电压效率为可逆电压除以小室电压，随着小室电压升高，导致电压效率降低。

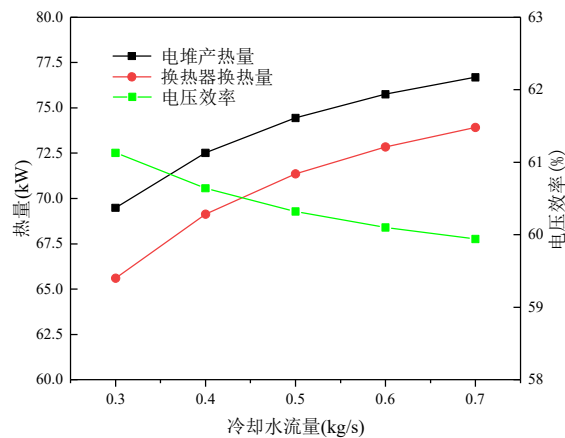


图 12 电堆产热量、换热器换热量及电压效率随冷却水流量变化曲线

Fig 12 Curves of heat production of stack, heat transfer of heat exchanger and voltage efficiency with cooling water flow

冷却水流量 0.3kg/s, 电解液流量为 0.62-1.42kg/s, 压力 16bar, 电流 3500A 时, 电堆进出口温度与小室电压随电解液流量变化如图 13 所示。随着电解液流量的增大, 电堆进口温度显著提高, 电堆出口温度却反而下降, 小室电压略微升高, 这是由于电堆的产热量几乎不变, 但是随着电解液流量的增大, 降低了电堆的进出口温差。

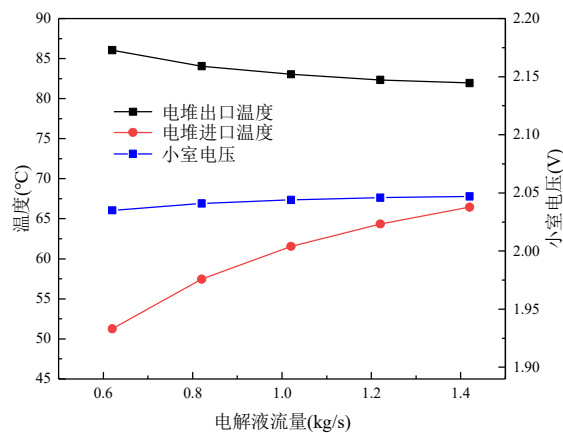


图 13 小室电压与电堆进出口温度随电解液流量变化曲线

Fig 13 Variation curve of cell voltage and stack inlet and outlet temperature with electrolyte flow

2.3 电堆内特性及能效分析

当电堆始终在温度 70°C, 压力 10bar 工况下运行时, 求解电化学等效电路模型, 得到电堆的极化曲线, 如图 14 所示。图中各部分阴影面积分别对应欧姆过电压、阳极活化过电压、阴极活化过电压以及可逆电压。结果表明, 在电流密度增大时, 欧姆过电压的占比逐渐增大。因此, 电堆设计应尽可能减小欧姆电阻, 以提高电压效率。

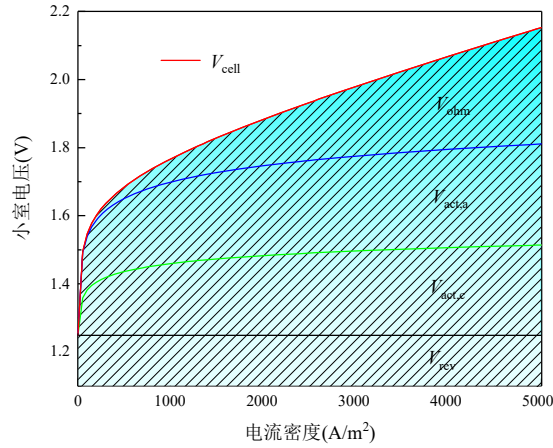


图 14 电堆极化曲线

Fig 14 Stack polarization curve

图 15 为不同温度和压力下电解小室的极化曲线。在压力为 16bar 时，85℃下的小室电压低于 65℃时小室电压；在温度为 85℃时，26bar 的小室电压高于 16bar 及 6bar 时的小室电压，因此提升温度会降低小室电压，而增大压力会增大小室电压。

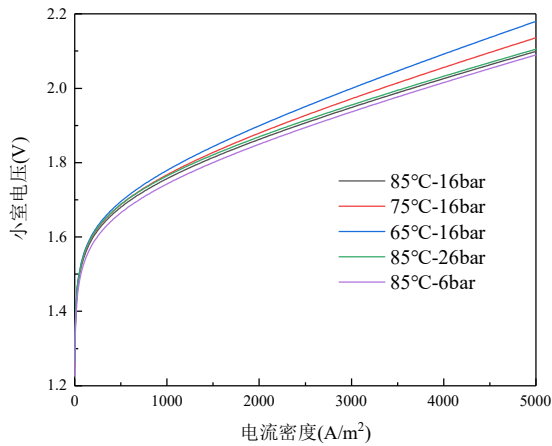


图 15 不同温度压力下极化曲线

Fig 15 Polarization curves at different temperatures and pressures

当电堆在温度分别为 65℃、75℃、85℃，压力为 16bar 下运行时，其产氢速率与电压效率随电流密度的变化曲线如图 16 所示。结果表明提高温度可以增大电压效率，电流密度增加时电压效率逐渐降低，这是由于电流密度增大导致过电位增大。但产氢速率随电流密度增大而增大。这是由于产氢速率与电流密度正相关，但是温度升高会略微降低法拉第效率，因此 65℃时的产氢速率高于 75℃和 85℃。

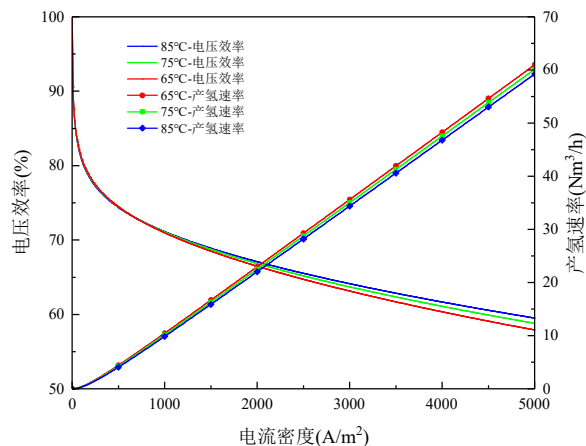


图 16 不同温度下电压效率与产氢速率随电流密度变化

Fig 16 Voltage efficiency and hydrogen production rate vary with current density at different temperatures

3 结 论

碱性电解系统的整体建模与分析对提高其能效十分重要。然而，由于碱性电解系统外部热模型和内部电化学反应的多阶次多参数特点，系统整体分析复杂。本文通过建立外部系统的热量流模型与电堆内部过程的等效电路模型，实现了系统的跨尺度统一建模，并研究了系统性能受不同运行参数的影响规律，主要结论如下：

1. 随着冷却水流量增大，电堆进出口温度降低，小室电压升高，电堆产热量及换热器换热量增大，电压效率降低。
2. 随着电解液流量增大，电堆进出口温差降低，表现为电堆出口温度降低，电堆进口温度升高，小室电压升高。
3. 提高温度会降低小室电压，从而提高电压效率，但会略微降低产氢速率；增大压力会提升小室电压。
4. 在高电流密度下，活化过电位的增量较小；欧姆过电位占比逐渐增大。

参考文献

- [1] Yang M, Hu S, Yang F, Fang C, Deng W, Lu Z, et al. Theoretical analysis on energy saving of cold energy utilization system for a liquid hydrogen heavy-duty truck. Appl. Therm. Eng. 2023;219:119509.
- [2] Balat, M. (2008). "Potential importance of hydrogen as a future solution to environmental and transportation problems." International Journal of Hydrogen Energy 33(15): 4013-4029.
- [3] 李洋洋,邓欣涛,古俊杰,张涛,郭斌,杨福源, 欧阳明高.(2022).碱性水电解制氢系统建模综述及展望. 汽车工程(04),567-582. doi:10.19562/j.chinasae.qcgc.2022.04.012.
Yangyang Li, Xintao Deng, Junjie Gu, Tao Zhang, Bin Guo, Fuyuan Yang & Minggao Ouyang. (2022). Review and prospect of modeling of alkaline water electrolysis hydrogen production system. Automotive Engineering(04),567-582. doi:10.19562/j.chinasae.qcgc.2022.04.012.
- [4] Kojima, Matsuda, Matsumoto, Tsujimura. Development of dynamic simulator of alkaline water

electrolyzer for optimizing renewable energy systems[J]. Journal of International Council on Electrical Engineering,2018,8(1).

- [5] Øystein Ulleberg. Modeling of advanced alkaline electrolyzers: a system simulation approach[J]. International Journal of Hydrogen Energy,2003,28(1).
- [6] Mónica Sánchez, Ernesto Amores, David Abad, Lourdes Rodríguez, Carmen Clemente-Jul. Aspen Plus model of an alkaline electrolysis system for hydrogen production[J]. International Journal of Hydrogen Energy,2020,45(7).
- [7] Jang Dohyung, Cho Hyun-Seok, Kang Sanggyu. Numerical modeling and analysis of the effect of pressure on the performance of an alkaline water electrolysis system[J]. Applied Energy,2021,287.
- [8] Sakas Georgios, Ibáñez-Rioja Alejandro, Ruuskanen Vesa, Kosonen Antti, Ahola Jero, Bergmann Olli. Dynamic energy and mass balance model for an industrial alkaline water electrolyzer plant process[J]. International Journal of Hydrogen Energy,2022,47(7).
- [9] Ding, S., et al. (2023). "Experimental and modeling study on energy flow of 250 kW alkaline water electrolysis system under steady state conditions and cold start process." Fuel 350.
- [10] Qi Ruomei, Li Jiarong, Lin Jin, Song Yonghua, Wang Jiepeng, Cui Qiangqiang, Qiu Yiwei, Tang Ming, Wang Jian. Thermal modeling and controller design of an alkaline electrolysis system under dynamic operating conditions[J]. Applied Energy,2023,332.
- [11] Ursúa, A. and P. Sanchis (2012). "Static–dynamic modelling of the electrical behaviour of a commercial advanced alkaline water electrolyser." International Journal of Hydrogen Energy 37(24): 18598-18614.
- [12] Qun Chen, Jun-Hong Hao, Tian Zhao. An alternative energy flow model for analysis and optimization of heat transfer systems. International Journal of Heat and Mass Transfer,2017,108.
- [13] Hao Junhong, Hao Tong, Lu Zening, Hong Feng, Du Xiaoze, Ge Zhihua. Cross-scale modeling and optimization analysis of the solid oxide fuel cell cogeneration system based on the heat current method[J]. Energy Conversion and Management, 2023,280.
- [14] Pierre Olivier, Cyril Bourasseau, Pr. Belkacem Bouamama. Low-temperature electrolysis system modelling: A review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews,2017,78.
- [15] Song H, Bin G, Shunliang D, et al. A comprehensive review of alkaline water electrolysis mathematical modeling[J]. Applied Energy,2022,327.
- [16] Xintao D, Fuyuan Y, Yangyang L, et al. Quantitative study on gas evolution effects under large current density in zero-gap alkaline water electrolyzers[J]. Journal of Power Sources,2023,555.
- [17] R.J. Gilliam, J.W. Graydon, D.W. Kirk, S.J. Thorpe. A review of specific conductivities of potassium hydroxide solutions for various concentrations and temperatures[J]. International Journal of Hydrogen Energy,2006,32(3).
- [18] Junhong H, Qun C, Xia L, et al. A Correction Factor-Based General Thermal Resistance Formula for Heat Exchanger Design and Performance Analysis[J].Journal of Thermal Science,2021,30(03):892-901.

储能电站模组的风冷散热结构设计及优化

李经宇, 晋磊磊, 席奂^{*1}

西安交通大学 能源与动力工程学院 热流科学与工程教育部重点实验室, 陕西 西安, 710049;

(Email: huanxi@xjtu.edu.cn)

摘要 在储能电站的运行中, 为保证大容量储能电池安全运行, 要对电池模块采取有效、平衡、高经济性的散热措施。本文针对大型储能电站模组, 设计了新型空气进出口方案并进行模拟计算。计算结果表明: 普通 Z 型冷却流道会存在气流死区, 电池最高温度为 58.59°C, 模组内最大温差为 22.96°C, 无法满足热管理需求; 改进方案充分改善了气流组织效果, 模组内最高温度降至 36.38°C, 最大温差由 7.77°C 降为 6.14°C, 降幅达 20.98%, 设备运行安全性与经济性得到增强。基于本文模拟结果分析, 针对大电池间距储能电站模组, 提出了三点优化建议, 为未来储能电站热管理系统的进一步改进提升提供了参考。

关键词 热管理; 储能电站; 风冷散热

0. 前言

自 2020 年双碳目标被提出, 风电、光伏等新能源备受关注, 各类相关设备的装机量不断提高。而诸如此类的新能源发电具有间歇性和不稳定性^[1], 据权威机构统计, 2016 年我国弃风和弃光电量分别达到 497 亿千瓦时和 74 亿千瓦时, 较 2015 年分别增加了 46.6%和 85%^[2]。为加强对新能源的利用, 我国正大力发展抽水蓄能、电化学储能等储能技术^[3,4]。储能电站因其具有模块化、响应快、对地理位置要求低等特点^[5], 成为电化学储能的代表性解决方案。储能电站运行时内部电池充放电会放出热量^[6], 尤其是电池充电阶段。一般来说, 要保证电池的安全运行, 电池模组各部分温度应维持在 25°C至 40°C 之间^[7], 这就需要将电站内热量及时排出, 防止热量聚集造成电池寿命降低甚至热失控。鉴于冷却设备的成熟发展, 不计成本地加装冷却设备来保证储能电池安全运行并不困难。但作为新能源发电的辅助设备, 储能电站的热管理措施必须同时考虑散热性能与建造、运行成本。

储能电站的散热技术主要以风冷散热、液冷散热、热管散热为主^[8,9]。其中风冷散热可直接引入新风作为冷源, 传热环节少, 但散热性能相对较低; 液冷散热效率较高, 但冷板、管道等物料投入高, 且为防止管道结垢堵塞, 通常冷却液体需循环输送, 这就导致冷却系统冷源需要额外耗功制冷^[10], 这也使热管理系统需增加额外的制冷设备成本; 热管散热运行成本较低, 理论上散热系统甚至可以零功耗运行^[11], 因其材料限制, 前期投入巨大, 目前未大量投入使用。综上, 风冷散热系统可以在满足性能要求的前提下适配储能电站高经济性的需求。风冷散热研究主要着力于结构设计, 通过模组内几何优化, 优化气流组织, 力求实现高冷却性能、均匀温度分布、低压力损耗。笔者所在研究团队^[12]研究了 Z 型

¹基金资助项目: 本文得到国家自然科学基金面上项目(52076163)的资助。

BTMS 的性能，并考虑了不同入口和出口位置的影响。研究表明，Z 型气流组织最佳。FAN 等^[13]通过三维瞬态仿真，研究了电池间距及空气流速对冷却效果的影响，找到了满足性能要求的最佳经济性选择。Hailu 等^[14]研究了穿孔板和涡流发生器对湍流产生的影响，发现在电池组下方安放穿孔板可以极大提高电池间隙内空气的紊乱程度，实现约 5.2℃ 的温度降低。近几年有学者发现交替供给流动方向相反的气流相比稳定供给单方向气流有很大优势。刘燕平等^[15]使用正交实验法对往复气流电池热管理系统进行了研究和优化，发现气流入口温度、气流往复周期、冷却空气流量对最高最低温度、最大温差有显著影响，该系统最佳空气流速为 6m/s。笔者所在团队^[16]对 Z 型电池热管理系统的往复式气流控制进行了实验研究，实验表明合理的往复式气流配给可降低 65.5% 的最大温差，并且可节省 10.1% 的风扇耗能。

储能电站对于经济性较敏感，需要在满足安全性的前提下尽可能降低成本。在以往设计热管理方案的研究中，学者们多注重提升散热效果，而较少顾及热管理方案的建造及运行成本。本研究选用风冷散热，由室外直接引入环境新风，节省了制冷设备的能耗及建造成本，并且在设计中避免使用复杂结构，降低了方案的落地难度。对电池模组的风冷散热效果进行了仿真分析，并在此基础上通过改变进风口位置，提出了三个改进方案。其中方案 3 的冷却效果最佳，显著降低了最高温度，提升了温度均匀性。

1. 电池组热模型的建立及基本方案的气流分析

1.1. 热模型建立

本研究首先建立了 Z 型风冷模型，该模型结构基于笔者所在研究团队^[12]验证的最优方案 Z 型 BTMS 结构设计，如图，外壳尺寸及电池规格选自 C&D technologies 的现有方案^[14]，从图 1 中可见模组的基本尺寸，图 2 为模组中各电池序号，电池各项物理参数如表 1。建模中已将电池机架省去，以简化模型几何。

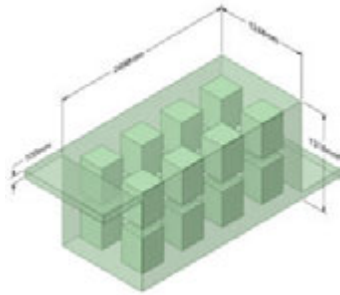


图 1 基本模组几何尺寸

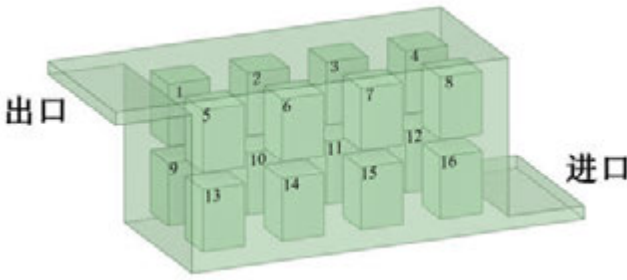


图 2 模组内电池序号

表 1 电池热物理性质

参数	值
导热系数/[W·(m·K) ⁻¹]	250
比热容/[J·(kg·K) ⁻¹]	1000
密度/(kg·m ⁻³)	1000

1.2. 基本方案仿真及气流分析

本文采用 CFD 软件 Fluent 对储能电站模组风冷散热进行模拟研究，使用 Fluent Meshing 模块进行网格划分，体网格划分方法为 Poly-hexcore。如图 2 图 3 所示，当网格数量达到 210089 网格后模组内

最高温度波动不大于 0.1985K，因此选择该网格大小进行后续研究。

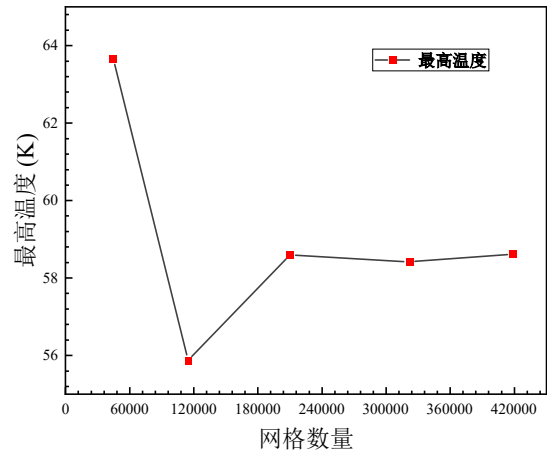


图 3 网格独立性分析

对上述基本模型进行了稳态模拟计算，模拟中每块电池放电倍率为 0.2C，每块电池发热功率为 75W^[14]。此模拟目的是以极限工况考察基本方案的冷却效果，并在此基础上进行改进优化。

输入条件如

参数	值
入口	速度入口
出口	压力出口
入口风速/(m·s ⁻¹)	2
出口压力(表压)/Pa	0
环境温度/°C	20
算法	coupled
单位体积发热量/(W·m ⁻³)	1500

，计算结果如图 4 至图 5 所示：图 4 所示为仿真后模组内气流迹线及电池温度分布，图 5 所示为模组空间内湍流动能大小,图 6 给出了模组内各电池的平均温度。

表 2 稳态仿真输入参数

参数	值
入口	速度入口
出口	压力出口
入口风速/(m·s ⁻¹)	2
出口压力(表压)/Pa	0
环境温度/°C	20
算法	coupled
单位体积发热量/(W·m ⁻³)	1500

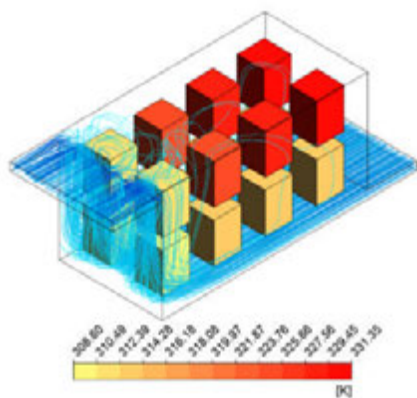


图 4 稳态条件下温度与气流分布

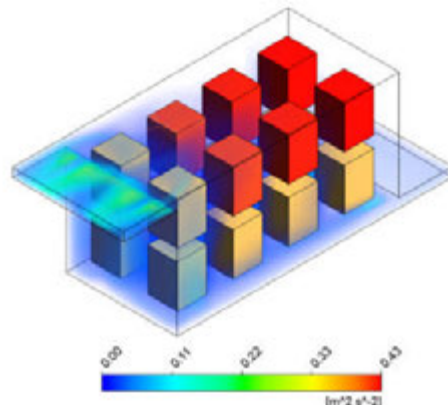


图 5 稳态条件下湍流速度分布

查看图 4 所示的气流迹线图可以发现：气流在模组底部入口进入后直达模组后部，碰到壁面开始上升，期间极少部分气流掠过电池下边缘后上升，参与上层电池冷却。储能电站的设计区别于动力电池，为方便后期的检修维护需要留出相当的操作空间，传统动力电池模组内电池间空隙为 3~6mm^[16,17]，但本文中电池与电池最大空隙达 308mm，电池与壁面间的空隙为 140mm，这就使得动力电池常用的 Z 型流道在储能电站模组中无法强有力地约束气流走向。且由于气流入口被安排在模组的单侧，受此影响在出入口两方向的电池冷却效果有很大的差异，尤以入口端上层的 4、8 号电池温度最高，4 号电池温度最高达到 58.59℃；出口端下层的 9、13 号电池温度最低，13 号电池温度最低为 35.63℃，最大温差为 22.96℃，显然无法满足储能电站的安全运行要求。此外在图 5 中可见气流上升前湍流强度均较低，因此模组整体冷却效果不理想。

考虑如上因素，对此热管理方案的改进应当考虑组织气流流经电池间隙，尽量降低模组前后方向上的不对称因素，并提高电池附近气流的湍流强度。

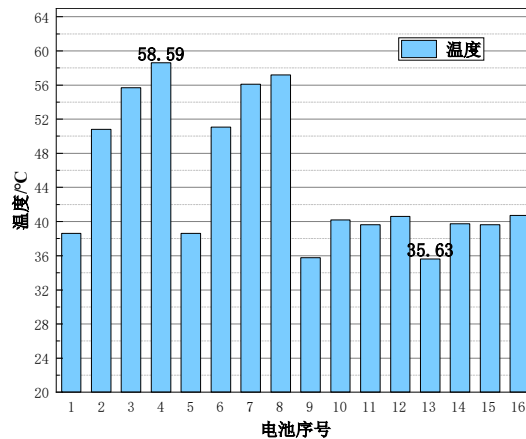


图 6 各电池温度

2. 风冷结构的优化改进及热管理效果分析

针对上述的仿真结果，为电池模组设计了三种结构改进方案。如图 7，方案 1 将原进出口各分一半移至对角位置，气流从下层两口流入，上层两口流出。两股气流进入模组内部会发生部分对向接触，这样在气流交汇位置会形成湍流以加强换热，且有助于气流流入电池间隙使得气体广泛循环。方案 2 将进出口放在模组中心位置，在 Chen 等人的研究中^[18]进出口放在中心可以显著降低整个电池模组的最高

温度。方案 3 将前面两个方案进行结合，保留下方两对角入口和上方的一个中心出口。为具有可比性，以上三个改进方案均保持入口总面积及流体流速流量不变。

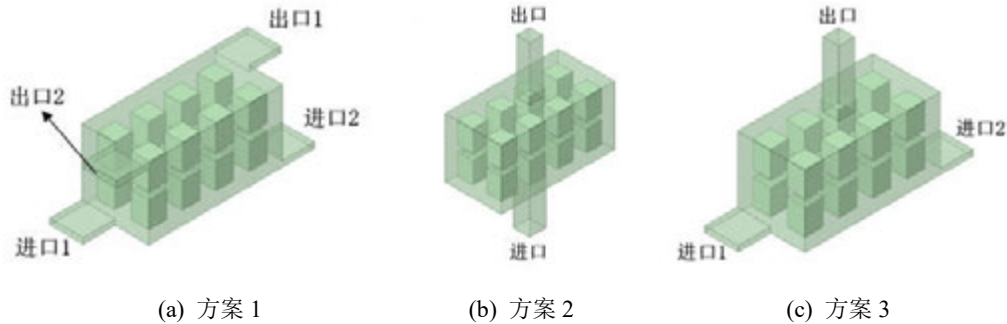


图 7 改进方案示意图

对基本方案及 1 至 3 号改进方案进行了瞬态仿真，输入参数与先前稳态仿真一致，结果如图 8 至图 10 所示。

通过仿真结果可以看出，方案 1 和方案 3 均有不同程度的热管理优化作用，方案 2 外围八块电池温度过高，且在 5h 末仍有持续上升趋势，最高温度达到 43.42°C ，已超过储能电站热管理的温度安全要求。可以认为方案 2 不适用于本模组热管理。

对比基本方案、方案 1 和方案 3，在模组放电结束 5h 末，方案 3 的最高温度为 36.38°C ，平均温度为 33.50°C ，模组内最大温差为 6.14°C ；方案 1 的冷却效果略差，最高温度 37.63°C ，平均温度 34.45°C ，最大温差 6.69°C ；而基本方案的最高温度、平均温度、最大温差分别达到了 40.05°C 、 36.04°C 、 7.77°C 。

方案 1 和方案 3 相比基本方案有优化气流组织的作用，更多的气流能够流经电池间隙。方案 1 相较于方案 3，仍有部分气流以类似基本方案的流动路径，从入口进入到达壁面后直接沿壁面上升到达出口，这部分气流被认为没有带走足够多的热量。在气流分布稀疏的模组上层空间，电池的温度高于下层约 4°C 。而方案三的气流在模组内非常分散，上下层电池的温度已经非常接近。

对比分析各方案，针对具有较大空隙的电池模组，总结有以下规律：

(1) 中心对称式的设计有利于避免出现气流死区，提升温度均匀性。对比基本方案和方案 1，单股气流的流路并没有本质区别，仅仅是将基本方案的出入口一分为二，其中一对旋转 180° 放置，形成了方案 1 的结构。由图 8(a)、(b) 可见，该改进设计使 2、3、4、6、7、8 号电池周边存在气流死区的问题得到弥补，并在两股气流交汇接触时产生分支气流上升，亦有利于气流的均匀分布。

(2) 加长气流从入口流至出口的路径长度，可以使气流更多参与换热。对比方案 3 和方案 1，从入口 1 流入的气流到达壁面上升后，在方案 1 中直接从出口 1 流出，在方案 3 中气流还需折返来到模组顶部中心的出口气流在折返的过程中显然发生了额外一部分换热，由图 8(b)、(d) 可见 2、3、6、7 号电池因此受益，温度有明显下降。需要注意的是，增加气流路径长度的本质在于增加气流与电池的接触面积、延长换热时长，因此单纯加长气流路径，而气流与电池接触没有增加是没有意义的。

(3) 空冷热管理设计需避免入口至出口存在无障碍通路。图 11 为方案 2 中心截面的压力梯度分布及动压分布，由图 11(a) 可见模组内压力梯度从入口直接指向出口，这使得气流进入模组后无法分散，参与换热极少；由图 11(b) 可见在气流动压分布非常集中，电池周边空气流动几近停滞，这与 Chen 等人^[18]的研究存在矛盾之处。这是由于在大间隙电池模组中，气流通过宽，气流通过中心间隙时局部压力没有得到提高，无法迫使气流分散流向其他间隙。这一点使得大小间隙电池模组的流场设计存在

显著区别，需要格外注意。

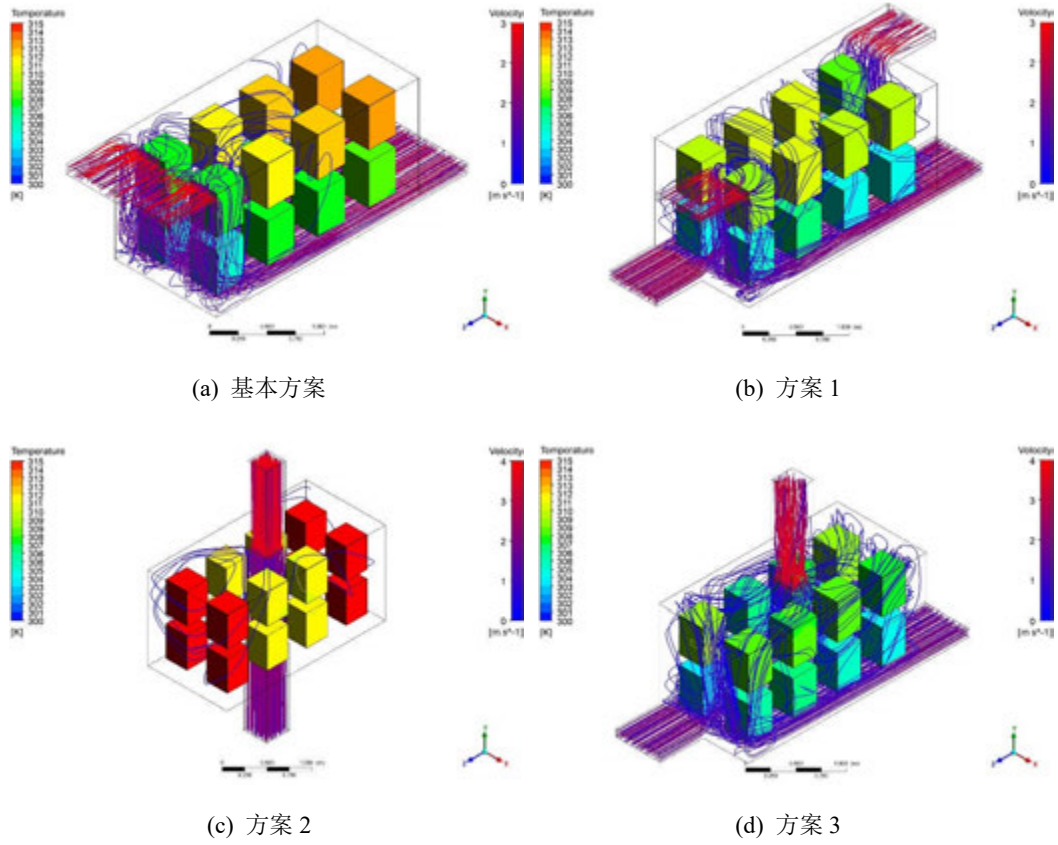


图 8 各方案温度及气流组织对比

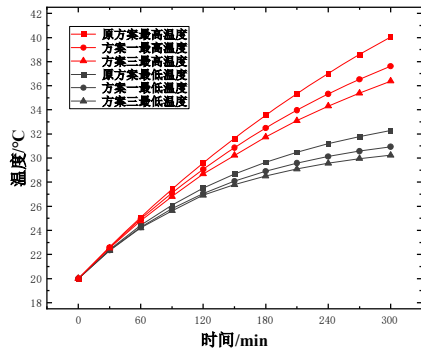


图 9 温度极值对比

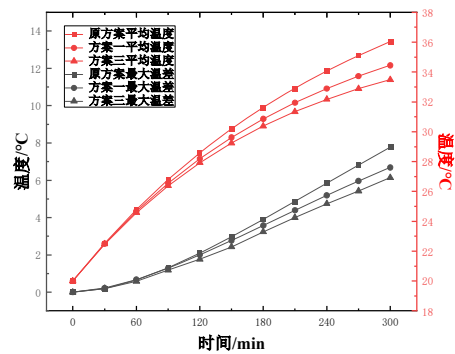


图 10 平均温度及最大温差对比

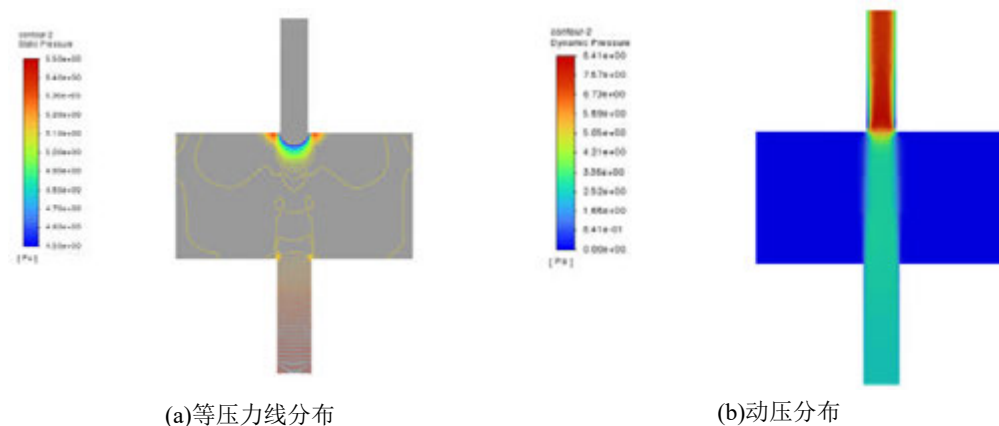


图 11 方案 2 中心截面压力梯度分布及动压分布

3. 结 论

(1) 围绕储能电站模组的散热问题, 首先根据已有文献方案建立了电池模组的热模型, 对此进行了极限工况仿真, 并对仿真结果进行气流分析。认为针对储能电站的大电池间距, Z 型热管理方案不能起到足够好的散热效果。

(2) 设计了三个改进方案, 通过调整进出口的位置大小来优化气流组织, 使气流更多流经电池间隙以加强散热效果。方案 1 和方案 3 相比基本方案均提升了散热效果, 在最高温度、温度均匀性等指标上均有改进, 尤以方案 3 最佳, 最高温度降低了 3.67°C , 最大温差下降了 1.63°C , 降幅达 20.94%。

(3) 针对大间距储能电站模组的几何结构, 对四个方案进行了比较分析。研究表明具有较大电池间距的模组内部气流特性与传统小间距动力电池模组差异明显, 并针对此类储能电站空冷热管理系统的设计提出三点建议: 考虑中心对称式设计、加长气流路径长度、避免出入口间存在无障碍通道。

参考文献

- [1] 杨联民. 通过储能装备“共享化”更好构建新型电力结构[N]. 中华工商时报, 2022: 002.
- [2] 董华佳, 曾智勇, 周厚国. 智慧能源在储能领域的应用[J]. 环境技术, 2018, 36(5): 92-95+109.
- [3] KOOHI-FAYEGH S, ROSEN M A. A review of energy storage types, applications and recent developments[J]. Journal of Energy Storage, 2020, 27: 101047.
- [4] HENKE M, HAILU G. Thermal Management of Stationary Battery Systems: A Literature Review[J]. Energies, 2020, 13(16): 4194.
- [5] LIN Y, CHEN Y-W, YANG J-T. Optimized thermal management of a battery energy-storage system (BESS) inspired by air-cooling inefficiency factor of data centers[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2023, 200: 123388.
- [6] XINLONG Z, HONG S, WENBING X, et al. An improved air supply scheme for battery energy storage systems[J]. Bulletin of the Polish Academy of Sciences-Technical Sciences, 2022, 70(2): e140692.
- [7] YE Y, SAW L H, SHI Y, et al. Numerical analyses on optimizing a heat pipe thermal management system for lithium-ion batteries during fast charging[J]. Applied Thermal Engineering, 2015, 86: 281-291.
- [8] 王雅博, 朱信霖, 李雪强, 等. 电化学储能系统电池柜散热的影响因素分析[J]. 电气工程学报, 2022, 17(1): 225-233.

- [9] 祝德春, 王新春. 储能电池模组的风冷散热优化设计研究[J]. 电源技术, 2022, 46(5): 523-527.
- [10] 刘书琴, 王小燕, 张振东, 等. 锂离子电池组液冷式热管理系统的设计及优化[J]. 储能科学与技术, [日期不详]: 1-14.
- [11] WERAGODA D M, TIAN G, BURKITBAYEV A, et al. A comprehensive review on heat pipe based battery thermal management systems[J]. Applied Thermal Engineering, 2023, 224: 120070.
- [12] WANG M, TENG S, XI H, et al. Cooling performance optimization of air-cooled battery thermal management system[J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 195: 117242.
- [13] FAN L, KHODADADI J M, PESARAN A A. A parametric study on thermal management of an air-cooled lithium-ion battery module for plug-in hybrid electric vehicles[J]. Journal of Power Sources, 2013, 238: 301-312.
- [14] HAILU G, HENKE M, PETERSEN T. Stationary Battery Thermal Management: Analysis of Active Cooling Designs[J]. Batteries, 2022, 8(3): 23.
- [15] YAN-PING L, CHEN-ZHI O, QING-BAI J, et al. Design and parametric optimization of thermal management of lithium-ion battery module with reciprocating air-flow[J]. Journal of Central South University, 2015, 22(10): 3970-3976.
- [16] WANG C, XU J, WANG M, et al. Experimental investigation on reciprocating air-cooling strategy of battery thermal management system[J]. Journal of Energy Storage, 2023, 58: 106406.
- [17] 王雨, 唐豪, 龚振. 扰流板对电池热管理系统冷却性能的影响研究[J]. 电源技术, 2022, 46(12): 1393-1397.
- [18] CHEN K, WU W, YUAN F, et al. Cooling efficiency improvement of air-cooled battery thermal management system through designing the flow pattern[J]. Energy, 2019, 167: 781-790.

N 型 Fe(II-III)热化电池的功率和效率协同优化研究

皇强强, 陈宇驰, 钱鑫*, 杨荣贵*

(华中科技大学, 能源与动力工程学院, 工程热物理系, 武汉, 湖北 430074)

(Tel:18771768745, 18611529877 Email: xinqian21@hust.edu.cn, Ronggui@hust.edu.cn)

摘要: 近年来, 热化电池由于热电势高和连续电流输出的技术优势在低品位热能回收中广受关注。然而, P-N 型集成器件中 N 型单元输出性能受限的问题限制了其实际应用。本文提出了基于 $\text{Fe}^{2+/3+}$ /水-乙腈混合溶剂电解液体系的器件功率和效率协同优化策略, 揭示了混合溶剂体系下的热电势增长机制, 并探究了乙腈质量分数和活性物质浓度对热电势, 电导率和热导率的耦合影响, 最终证明了水-乙腈混合溶剂电解液体系协同优化 N 型器件功率和效率的应用潜力。

关键词: 低品位热能; 热化电池; 溶剂化结构; 分子动力学

0 前言

由于能量转换过程中热力学的不可逆性, 每年全球一次能源消耗中有高达1.2 PWh 的能量以热能的形式被排放到大气环境中, 占能耗总量的72%。其中, 有约63%是温度低于100℃的低品位热能^[1]。因此, 在“双碳”的大背景下, 高效回收利用这些低品位热能就显得尤为重要^[2, 3]。

遗憾的是, 由于低品位热能空间分布分散、可用能低等特点, 如何高效回收低品位热能仍是极具挑战性的问题。目前关于余热回收利用的研究主要集中在卡琳娜循环和有机朗肯循环等热力学循环, 适用于 100℃以上工业余热的规模化回收^[4, 5]。然而卡琳娜循环和有机朗肯循环设备体积较大, 相关维护成本高, 不适用于小规模、分布式的低品位热能回收场景。基于半导体的热电转换器件虽然具备小型化、维护成本低的特点, 但由于热电材料含有稀有元素, 居高不下的成本限制了其在低品位热能回收中的应用^[6]。此外, 半导体热电材料的热电势(塞贝克系数)往往仅为 0.1 mV/K 量级^[7], 难以有效利用低品位热源和环境之间的小温差以提供足够的电压和功率为器件供电。相较于半导体热电材料, 电化学热-电转换器件的热电势往往能高出 1-2 个数量级(1-10 mV/K) ^[8, 9-13], 因此在低品位热能回收中更具应用潜力。电化学热-电转换器件包括热离子电容(thermo-ionic capacitor)^[14, 15]、热化电池(thermogalvanic cell) ^[16, 17] 和热再生电化学循环(thermally regenerative electrochemical cycles, TREC)电池^[18, 19]等。其中, 热化电池由于其能将热能直接转化为电能、能实现连续电流输出以及结构简单的技术优势而受到广泛关注。

热化电池是一种非等温电化学器件，其工作原理是基于氧化还原反应电势 E 对温度的依赖性，将温差转换为冷热电极之间的电动势。等效热电势由温度系数 α 描述，定义为： $\alpha = \Delta E / \Delta T = \Delta S_{\text{Red}} / nF$ 。其中， ΔE 为电极电势随温差 ΔT 的变化量， ΔS_{Red} 为电对发生还原反应的摩尔熵变^[20, 21]， n 为氧化还原反应的转移电子数， F 为法拉第常数。根据温度梯度-电位关系，热化电池器件可分为 P 型（ $\alpha < 0$ ）和 N 型（ $\alpha > 0$ ）。除了决定电压的热力学参数 α 外，溶液的电导率 σ 和热导率 k 也是决定热化电池性能的关键参数。其中输出功率正比于 $\alpha^2 \sigma$ ，即功率因子 PF ，效率正比于 $\alpha^2 \sigma T / k$ ，即热电优值 ZT 。

与半导体热电材料类似，热化电池在实际应用中需要将单个 P 型和 N 型单元进行 P-N 型集成，以获得更高的输出电压而避免热短路。迄今为止， $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}/\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ 氧化还原电对由于其快速且可逆的电极反应动力学以及良好的稳定性，是研究最为广泛的 P 型热化电池体系，其基准热电势为-1.4 mV/K。近几年，关于 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}/\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ 基热化电池电极和电解液材料的改进已经取得了显著的进展。其中，最为突破性的进展由 Jun Zhou 课题组做出^[22]，他们发现在 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}/\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ 中添加盐酸胍 GdmCl 诱导热敏结晶可以显著地将温度系数从-1.4 mV/K 提升至-3.7 mV/K，如此高的热电势使得该体系实现了高达 11% 的卡诺相对效率，且考虑到其具有竞争力的低成本优势，已经表现出商业化的应用前景。然而，目前关于 N 型热化电池器件的研究进展还十分滞后，这严重限制了 P-N 型集成器件的输出性能，成为热化电池实际应用的关键挑战。

目前对于 N 型热化电池氧化还原电对的研究主要集中在 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ^[23-32]体系，这得益于其离子尺寸小、水溶性高、离子电荷密度高的优点，预计其理论 α 值可达 1.76 mV/K^[33]。例如，Kim 等人^[34]报道了一种高性能的 N 型 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ - ClO_4^- 热化电池器件，并且探究了 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 盐中阴离子种类（ ClO_4^- 、 Cl^- 、 SO_4^{2-} 等）对温度系数的影响。结果表明 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 在弱配位阴离子 ClO_4^- 水溶液中形成的水合物 $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+/3+}$ 的水合结构熵差显著大于 $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_5\text{Cl}^{2+/+}$ 和 $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_5\text{SO}_4^{+0}$ ，因此相应的 α 较高，约 1.7 mV/K，这是由于阴离子配位导致了水合离子电荷密度的降低。随后，Moritomo 等人^[35]系统地研究对比了 $\text{FeCl}_2/\text{FeCl}_3$ 在水溶液及其它 8 种质子溶剂和 8 种非质子溶剂中的 α ，结果表明该体系在非质子溶剂中的 α 普遍高于质子溶剂，同时 α 的大小与溶剂的黏度密切相关，其中在丙酮中的 α 最高（约 3.6 mV/K）而在丙三醇中的 α 最低（约 0.14 mV/K）。尽管如此，有机溶剂电解液的低电导率问题限制了器件的功率和效率^[36]。

为此，结合 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 在部分有机溶剂中热电势高，热导率低以及水系 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 电导率高的优势，本文提出了基于水-有机混合溶剂的电解液体系协同优化 N 型器件功率和效率的策略。其中，电解质中采用的氧化还原电对分别为 $\text{Fe}(\text{ClO}_4)_2$ 和 $\text{Fe}(\text{ClO}_4)_3$ ，有机溶剂为乙腈（MeCN）。本文探究了 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂电解液中乙腈质量分数和活性物质浓度对热电势，电导率和热导率的耦合影响，并计算了基于这些耦合热电参数的功率和效率。

1 实验和方法

1.1 电解液和电极制备

为了评估电解液性能，分别制备了浓度为0.1、0.2、0.3、0.4和0.5的 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂电解液，其中氧化还原离子 Fe^{3+} 和 Fe^{2+} 的浓度比均为1:1。对每一个 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 浓度，分别配置乙腈质量分数为0%、20%、40%、60%、80%和100%的水-乙腈混合溶剂电解液，且确保每种含水电解液包含0.1M的HCl。电解液制备中使用的高氯酸铁水合物($\text{Fe}(\text{ClO}_4)_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$)、高氯酸亚铁水合物($\text{Fe}(\text{ClO}_4)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$)、乙腈和盐酸等所有化学试剂均购自上海阿拉丁生化科技有限公司，未经进一步纯化。配置电解液所用水为蒸馏水。

本工作采用的电极材料为碳纸(CP)修饰电极。首先将碳纸分别在丙酮、乙醇和蒸馏水中超声清洗5min以去除表面污染物。为了提高碳纸的亲水性，碳纸在使用前在管式炉(OTF-1200X, 合肥科晶)中空气气氛下烧结12小时，其中烧结温度为500℃，升温速度控制在5℃/min。为了提高电极活性，将活性材料40 wt%的铂碳催化剂(Pt/C)和粘结剂聚偏二氟乙烯(PVDF)以9:1的质量比在n-甲基-2-吡咯烷酮(NMP)中混合，搅拌5小时制备成Pt/C浆料，然后涂覆在碳纸上并在40℃干燥12 h得到CP- Pt/C电极。电极制备过程中使用的碳纸购自日本东丽公司，铂碳催化剂购自苏州晟尔诺科技有限公司，其它化学试剂均购自上海阿拉丁生化科技有限公司。

1.2 热化电池和热电化学测试

本文设计的热化电池装置如图1所示，其中冷热两端的工作电极均为CP- Pt/C电极(面积：1cm²，间距：1cm)，集流体为石墨板。冷热两端电极的温度由PID温控器分别调整加热和制冷负载的输出功率控制，由K型热电偶监测，其中本文实验中采用的冷端和热端温度分别为20和50℃。电解液储液槽为聚四氟乙烯材质，其上方加工出注液孔以便于电解液被注入和排出。为了防止电解液的泄露，在电极和集流体间使用硅胶垫密封，且在集流体外侧通过两块不锈钢板固定。

热化电池的开路电压(V_{oc})、短路电流(I_{sc})和输出功率(P)通过电化学工作站(CS310X, 武汉科思特)的暂态极化方法测量和计算。通过施加阶跃电流持续记录输出电压10分钟，并对5至10分钟内的数据取平均值，以确定稳态电压。热化电池的内阻 R_{in} 和等效电导率 σ_{eff} 通过电压-电流曲线的斜率计算得到。电解液的热导率通过基于瞬态平面热源法的导热系数测试仪(HCDR-S, 南京汇诚)在常温25℃条件下测量，其中测试时间为5秒，目的消除对流对测试结果的影响。

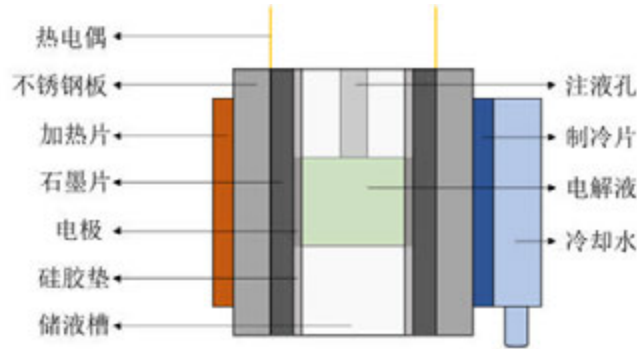


图1 热化电池装置示意图

Figure 1 Schematic diagram of thermogalvanic cell

1.3 溶剂化层结构模拟

为了理解离子溶剂化结构与热电势之间的关系，本文基于Lammps软件利用经典分子动力学模拟对溶液体系下的离子溶剂化结构进行了分析^[37]。本文模拟体系由单个离子（ Fe^{2+} 、 Fe^{3+} ）以及分布在其周围的溶剂分子构成，溶剂分子主要采用水与乙腈，不同溶液体系对应的溶剂分子数量如表1所示。本文的力场形式主要采用Lennard-Jones (LJ)12-6势和库伦势。关于力场参数的选择，对于水分子我们采用了SPC/E刚性势能模型，对于乙腈分子采用了OPLSS-AA全原子刚性势能模型，其原子电荷则采用1.14*CM1A模型计算获得。溶质离子 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 的力场参数主要来源于UFF力场。

表 1 不同体系中溶剂分子的数量

Table 1 Number of solvent molecules in different systems

溶剂	乙腈	水
纯水		1200
20% 乙腈	120	1100
40% 乙腈	230	780
60% 乙腈	330	490
80% 乙腈	420	230
纯乙腈	490	

模拟系综为正则系综（NPT），其中压强控制在1个大气压（1 atm），温度控制在300 K，时间步长设置为1 fs。模拟过程中采用立方周期性边界条件，范德华与库伦相互作用截断半径取为10 Å，静电相互作用的长程部分则采用光滑粒子网格Ewald方法（particle-mesh Ewald），并且基于蛙跳算法求解体系的运动方程，时间步长设置为1 fs。在模拟时，对所有体系均进行了5 ns的弛豫平衡过程，之后再行10 ns模拟并每隔0.5 ps进行一次取样来用于计算 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 与溶剂分子的径向分布函数（RDF）以及溶剂分子取向分布。其中配位数由RDF积分求解获得：

$$N_i(R) = 4\pi \int_0^R \rho_i g_i(r) r^2 dr \quad (1.1)$$

式中 $g_i(r)$ 表示离子与溶剂分子间的径向分布函数， ρ_i 是溶剂分子的平均数密度， R 为第

一溶剂化层半径^[38]。

溶剂分子的取向分布主要由离子第一溶剂化层中溶剂分子偶极矩与中心离子径向间的夹角 θ 描述。根据取向角 θ ，可以引入偶极矩涨落方差 $\sigma_i^2[\theta]$ 来表示溶剂分子取向波动情况^[39]：

$$\sigma_i^2[\theta] = \int (\theta - \bar{\theta})^2 p(\theta) d\theta \quad (1.2)$$

式中 i 是活性离子种类， $\bar{\theta} = \int \theta p(\theta) d\theta$ 是偶极子的平均方位角， $p(\theta)$ 表示取向角的概率分布。对于氧化还原反应 $Fe^{3+} + e^- \rightleftharpoons Fe^{2+}$ ，过程中活性离子溶剂化层的结构差异可通过参数 ζ_{rxn} 定义：

$$\zeta_{rxn} = \sigma_{Fe^{2+}}^2[\theta] - \sigma_{Fe^{3+}}^2[\theta] \quad (1.3)$$

2 结果与讨论

2.1 乙腈对热电势的增强与机制分析

为了验证水-乙腈混合溶剂对于氧化还原电对热电势 α 的改善，我们测量了包含不同乙腈质量分数的混合溶剂，浓度为0.1M电解液的 α 值，结果如图2d所示。结果表明， α 与乙腈质量分数存在两段依赖关系。在乙腈质量分数为0至40%时，乙腈的加入基本没有引起 α 的增强。然而，当乙腈质量分数大于40%， α 显著增加。例如，当乙腈质量分数小于40%时，热电势近乎不变，而当乙腈质量分数从40%增加至100%时， α 可以从1.61 mV/K增加至3.34 mV/K，增加了约2倍。为了分析由乙腈质量分数增加导致的热电势 α 的增长机制，我们研究了混合溶剂体系中 Fe^{2+}/Fe^{3+} 的溶剂化层结构对乙腈质量分数的依赖关系。图2（a）和（b）分别展示了水-乙腈混合溶剂中 Fe^{2+} 和 Fe^{3+} 第一溶剂化层乙腈分子的配位数随乙腈质量分数的变化。结果表明，对于低乙腈质量分数（< 40%）的混合溶剂体系， Fe^{2+} 和 Fe^{3+} 的第一溶剂化层内均包含6个水分子；对于更高乙腈质量分数（≥ 40%）的体系， Fe^{3+} 的第一溶剂化层结构没有改变，仍包含6个水分子，而 Fe^{2+} 的第一溶剂化层内出现了乙腈分子的配位，且随着乙腈质量分数的增加乙腈分子配位数逐渐增加。二者第一溶剂化层的结构差异可以通过分子极性来解释。由于水是一种强极性溶剂，它将受到带电离子的强烈限制，在能量上更倾向于形成第一溶剂化层。对于低电荷密度的 Fe^{2+} 离子，其周围形成的电场强度较弱，因此，其第一溶剂化层更容易被乙腈分子配位。当乙腈质量分数较高时，乙腈分子和 Fe^{2+} 配位的概率更大（图2（c））。这种随着乙腈质量分数变化而导致的 Fe^{2+} 和 Fe^{3+} 第一溶剂化层的结构差异可能是导致热电势 α 增长的关键。为了了解乙腈配位对氧化还原反应过程中活性离子溶剂化层结构变化的影响，我们研究了热电势 α 与活性离子溶剂化层结构差异 ξ_{rxn} 之间的相关性，结果如图2（d）所示。 ξ_{rxn} 与 α 表现出相似的乙腈质量分数依赖性，这表明在高乙腈质量分数的混合溶剂体系中，乙腈分子在 Fe^{2+} 第一溶剂化层中的配位导致了氧化还原反应过程中 Fe^{2+}/Fe^{3+} 溶剂化层结构差异 ξ_{rxn} 的增加，进而导致了氧化还原反应熵变 ΔS_{Red} 和热电势 α 的增加^[39]。

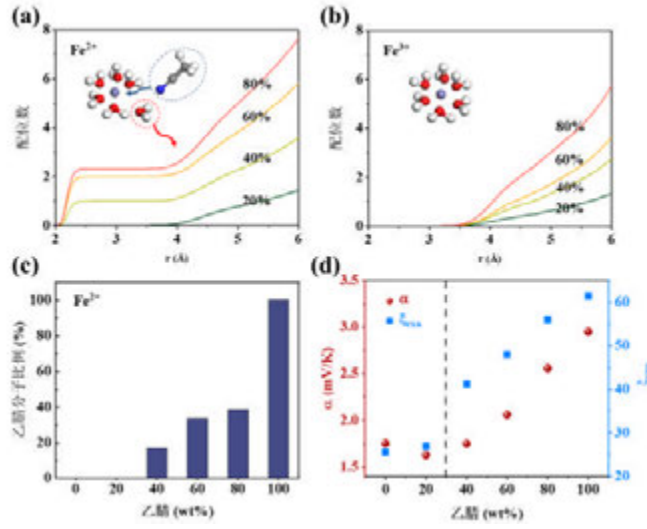


图2 热电势增加机制。水-乙腈混合溶剂中氧化还原离子第一溶剂化层乙腈分子的配位数随乙腈质量分数的变化：(a) Fe^{2+} ；(b) Fe^{3+} ；(c) Fe^{2+} 第一溶剂化层中乙腈分子所占比例随乙腈质量分数的变化；(d) 热电势 α 和 Fe^{2+} 和 Fe^{3+} 溶剂化层结构差异 ξ_{rxn} 随乙腈质量分数的变化

Figure 2 Mechanism of increase in thermopower. Variation of the coordination number of MeCN molecules in the first solvation layer of redox ions in water-MeCN mixture with the mass fraction of MeCN: (a) Fe^{2+} ; (b) Fe^{3+} ; (c) Variation of the proportion of MeCN molecules in the first solvation layer of Fe^{2+} with the mass fraction of MeCN; (d) Variation of the thermopower α and the solvation structure order change ξ_{rxn} of the $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ redox reaction with the mass fraction of MeCN

2.2 乙腈质量分数和活性物质浓度对 α 、 σ_{eff} 和 k_{eff} 的耦合影响

为了验证水-乙腈混合溶剂对于电解质热电性能的改善，我们分别测量了热电参数 α 、 σ_{eff} 和 k_{eff} 对乙腈质量分数和活性物质浓度的依赖关系，结果如图3所示。其中图3(a)结果表明，与乙腈质量分数的增加有利于热电势增强不同，活性物质浓度的增加对热电势 α 产生了负面影响。例如，在相同的乙腈质量分数下，随活性物质浓度的增加， α 随浓度的增加逐渐减小，且随着混合溶剂中乙腈比例的增加下降幅度增大。该负面结果归因于活性物质浓度和乙腈质量分数增加导致的阳离子和阴离子间形成的离子对的增加，这降低了活性离子的电荷密度，根据波恩模型因此将导致反应熵变的减小^[34, 40]。图3(b)展示了乙腈质量分数和活性物质浓度对等效电导率 σ_{eff} 的影响。结果表明活性物质浓度的增加提高了 σ_{eff} ，但乙腈质量分数的增加会导致 σ_{eff} 降低且降低幅度在高浓度时表现得更加明显。例如，对于0.1 M $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ，当乙腈质量分数从0%增加至100%时， σ_{eff} 从39.0 mS/cm降至18.0 mS/cm，下降了约1倍；而对于0.5 M $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ，当乙腈质量分数从0%增加至100%时， σ_{eff} 从107.5 mS/cm降至30.5 mS/cm，下降了约2.5倍。这也归因于乙腈比例增加导致的离子对的增加，使得载流子的数量减少且扩散速率降低。得益于乙腈较低的本征热导率，混合溶剂的热导率 k_{eff} 随乙腈质量分数的增加近似线性下降（图3(c)），这将有利于减少热耗散，进而提高效率。

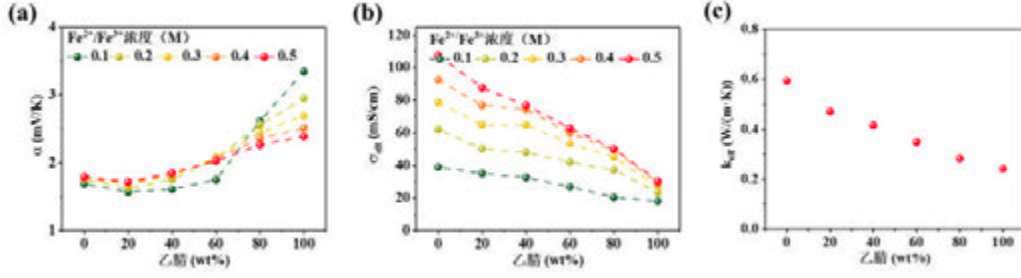


图3 乙腈质量分数和活性物质浓度分别对 α (a)、 σ_{eff} (b)和 k_{eff} (c)的耦合影响

Figure 3 Coupling effects of MeCN mass fraction and redox species concentration on α (a), σ_{eff} (b) and k_{eff} (c)

2.3 热化电池的功率和效率

通过2.2节确定的热电参数 α 、 σ_{eff} 和 k_{eff} 对于乙腈质量分数和活性物质浓度的依赖关系，本节我们计算了与这些耦合热电参数相关的功率和效率，结果如图4 (a) 和 (b) 所示。当 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 的浓度为0.1 M至0.4 M的较低浓度时，乙腈质量分数为80%的 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂体系实现了大于或约等于 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /纯水体系的最大功率 P_{max} 。且得益于乙腈较低的热导率，其对应的卡诺相对效率 η_r 更是显著高于 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /纯水体系，提升范围高达99%至168%。且对于0.1 M $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ，其在纯乙腈体系的 P_{max} 相比于纯水体系提升了79%， η_r 更是提升高达340%。然而，对于0.5 M $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 的较高浓度，80%乙腈质量分数的 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂体系的 P_{max} 相较于 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /纯水体系降低了26%。尽管如此，其卡诺相对效率 η_r 仍相比 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /纯水体系提升了56%。因此， $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂电解液体系被证明具备实现N型热化电池器件功率和效率的协同优化的潜力。

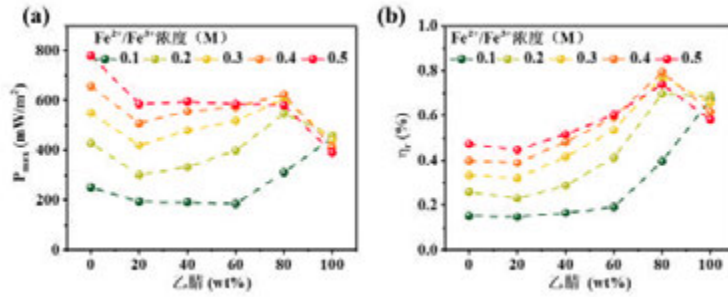


图4 乙腈质量分数和活性物质浓度分别对功率 (a) 和效率 (b) 的影响

Figure 4 The effects of MeCN mass fraction and redox species concentration on power (a) and efficiency (b)

3 结 论

本文针对热化电池P-N型集成应用中存在的N型器件输出性能受限的问题，提出了基于 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂电解液体系协同优化功率和效率的策略。基于分子动力学模拟，我们揭示了基于混合溶剂体系的热电势增长机制，发现水-乙腈混合溶剂中 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 溶剂化层结构差异是增加热电势的物理机制。为了验证水-乙腈混合溶剂对于电

解质热电性能的改善,我们探究了包括热电势,电导率和热导率的热电参数对混合溶剂中乙腈质量分数和活性物质浓度的依赖关系。结果表明,乙腈质量分数的增加能显著提高热电势,尤其在较低活性物质浓度时增加幅度更大。此外,乙腈质量分数的增加也能显著降低热导率,但也导致了电导率的降低且下降幅度在高浓度时表现得更加明显。根据耦合热电参数对乙腈质量分数和活性物质浓度的依赖关系,我们计算了相应的功率和效率。结果表明,当 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 的浓度为0.1 M至0.4 M的较低浓度时,乙腈质量分数为80%的 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂体系实现了大于或等于 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /纯水体系的最大功率,相比于纯水体系,卡诺相对效率提升范围可高达99%至168%。且对于0.1 M $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$,其在纯乙腈体系的最大功率相比于纯水体系提升了79%, η_r 更是提升高达340%,表明 $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ /水-乙腈混合溶剂电解液体系在N型器件功率和效率协同优化中的巨大潜力。

参考文献

- [1] Forman, C., I.K. Muritala, R. Pardemann, B. Meyer, Estimating the global waste heat potential. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2016, 57: 1568-1579.
- [2] 王如竹, 何雅玲. 低品位余热的网络化利用. 科学出版社: 北京, 2021.
Wang Ruzhu, He Yaling Network utilization of low-grade waste heat Science Press: Beijing, 2021.
- [3] 于立东, 朱亚东, 吴元旦. 中低温余热发电技术. 上海交通大学出版社: 上海, 2015.
Yu Lidong, Zhu Yadong, Wu Yuandan Medium and low temperature waste heat power generation technology Shanghai Jiao Tong University Press: Shanghai, 2015.
- [4] 顾伟, 翁一武, 曹广益, 史翁列. 低温热能发电的研究现状和发展趋势. *热能动力工程* 2007, 02: 115-119+222.
Gu Wei, Weng Yiwu, Cao Guangyi, Shi Wengli The research status and development trend of low-temperature thermal power generation *Thermal Power Engineering* 2007, 02: 115-119+222.
- [5] 韩江涛, 魏新利, 马新灵, 孟祥睿, 武潭, 石文琪. 热源温度对 ORC 低温余热发电系统性能的影响. *高校化学工程学报* 2020, 1: 53-61.
Han Jiangtao, Wei Xinli, Ma Xinling, Meng Xiangrui, Wu Tan, Shi Wenqi The effect of heat source temperature on the performance of ORC low-temperature waste heat power generation system *Journal of Chemical Engineering in Universities* 2020, 1:53-61.
- [6] LeBlanc S, Yee SK, Scullin ML, Dames C, Goodson KE. Material and manufacturing cost considerations for thermoelectrics. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2014, 32: 313-327.
- [7] Poudel B, Hao Q, Ma Y, Lan Y, Minnich A, Yu B, et al. High-thermoelectric performance of nanostructured bismuth antimony telluride bulk alloys. *Science*, 2008, 320(5876): 634-638.
- [8] Li T, Zhang X, Lacey S D, et al. Cellulose ionic conductors with high differential thermal voltage for low-grade heat harvesting. *Nature materials*, 2019, 18(6): 608-613.
- [9] Han C-G, Qian X, Li Q, Deng B, Zhu Y, Han Z, et al. Giant thermopower of ionic gelatin near room temperature. *Science*, 2020, 368: 1091-1098.
- [10] Zhao D, Martinelli A, Willfahrt A, Fischer T, Bernin D, Khan ZU, et al. Polymer gels with tunable ionic

- Seebeck coefficient for ultra-sensitive printed thermopiles. *Nature communications* 2019, 10(1): 1093.
- [11] Zhao D, Wang H, Khan ZU, Chen JC, Gabrielsson R, Jonsson MP, et al. Ionic thermoelectric supercapacitors. *Energy & Environmental Science*, 2016, 9(4): 1450-1457.
- [12] Duan J, Feng G, Yu B, Li J, Chen M, Yang P, et al. Aqueous thermogalvanic cells with a high Seebeck coefficient for low-grade heat harvest. *Nature communications*, 2018, 9(1): 5146.
- [13] Yu B, Duan J, Cong H, Xie W, Liu R, Zhuang X, et al. Thermosensitive crystallization-boosted liquid thermocells for low-grade heat harvesting. *Science*, 2020, 370(6514): 342-346.
- [14] Wang H, Zhao D, Khan ZU, Puzinas S, Jonsson MP, Berggren M, et al. Ionic Thermoelectric Figure of Merit for Charging of Supercapacitors. *Advanced Electronic Materials*, 2017, 3(4): 1700013.
- [15] Wang X, Feng S-P. Thermal Capacitive Electrochemical Cycle on Carbon-Based Supercapacitor for Converting Low-grade Heat to Electricity. *Frontiers in Mechanical Engineering*, 2017, 3.
- [16] Yu B, Duan J, Li J, et al. All-day thermogalvanic cells for environmental thermal energy harvesting. *Research*, 2019.
- [17] Hu R, Cola B A, Haram N, et al. Harvesting waste thermal energy using a carbon-nanotube-based thermoelectrochemical cell. *Nano letters*, 2010, 10(3): 838-846.
- [18] Lee SW, Yang Y, Lee HW, Ghasemi H, Kraemer D, Chen G, et al. An electrochemical system for efficiently harvesting low-grade heat energy. *Nature communications*, 2014, 5: 3942.
- [19] Yang Y, Lee S W, Ghasemi H, et al. Charging-free electrochemical system for harvesting low-grade thermal energy. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014, 111(48): 17011-17016.
- [20] Debethune A J, Licht T S, Swendeman N. The temperature coefficients of electrode potentials: the isothermal and thermal coefficients—the standard ionic entropy of electrochemical transport of the hydrogen ion. *Journal of The Electrochemical Society*, 1959, 106(7): 616.
- [21] Bratsch S G. Standard electrode potentials and temperature coefficients in water at 298.15 K. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1989, 18(1): 1-21.
- [22] Yu B, Duan J, Cong H, Xie W, Liu R, Zhuang X, et al. Thermosensitive crystallization-boosted liquid thermocells for low-grade heat harvesting. *Science*, 2020, 370(6514): 342-346.
- [23] Buckingham M A, Marken F, Aldous L. The thermoelectrochemistry of the aqueous iron (ii)/iron (iii) redox couple: significance of the anion and pH in thermogalvanic thermal-to-electrical energy conversion. *Sustainable Energy & Fuels*, 2018, 2(12): 2717-2726.
- [24] Yang P, Liu K, Chen Q, et al. Wearable thermocells based on gel electrolytes for the utilization of body heat. *Angewandte Chemie International Edition*, 2016, 55(39): 12050-12053.
- [25] Liu Y, Zhang S, Zhou Y, et al. Advanced wearable thermocells for body heat harvesting. *Advanced Energy Materials*, 2020, 10(48): 2002539.
- [26] Gao W, Lei Z, Zhang C, et al. Stretchable and Freeze-Tolerant Organohydrogel Thermocells with Enhanced Thermoelectric Performance Continually Working at Subzero Temperatures. *Advanced Functional Materials*, 2021, 31(43): 2104071.

- [27] Zhou Y, Liu Y, Buckingham M A, et al. The significance of supporting electrolyte on poly (vinyl alcohol)–iron (II)/iron (III) solid-state electrolytes for wearable thermo-electrochemical cells. *Electrochemistry Communications*, 2021, 124: 106938.
- [28] Kim K, Hwang S, Lee H. Unravelling ionic speciation and hydration structure of Fe (III/II) redox couples for thermoelectrochemical cells. *Electrochimica Acta*, 2020, 335: 135651.
- [29] Buckingham M A, Laws K, Sengel J T, et al. Using iron sulphate to form both n-type and p-type pseudo-thermoelectrics: non-hazardous and ‘second life’ thermogalvanic cells. *Green Chemistry*, 2020, 22(18): 6062-6074.
- [30] Lee J H, Jung Y, Kim J H, et al. Stacked double-walled carbon nanotube sheet electrodes for electrochemically harvesting thermal energy. *Carbon*, 2019, 147: 559-565.
- [31] Kim J H, Kang T J. Diffusion and current generation in porous electrodes for thermo-electrochemical cells. *ACS applied materials & interfaces*, 2019, 11(32): 28894-28899.
- [32] Li W, Garcia S, Wang S. Thermoelectric ionogel for low-grade heat harvesting//Low-Grade Thermal Energy Harvesting. Woodhead Publishing, 2022: 63-86.
- [33] Sutin N, Weaver M J, Yee E L. Correlations between outer-sphere self-exchange rates and reaction entropies for some simple redox couples. *Inorganic Chemistry*, 1980, 19(4): 1096-1098.
- [34] Kim K, Hwang S, Lee H. Unravelling ionic speciation and hydration structure of Fe (III/II) redox couples for thermoelectrochemical cells. *Electrochimica Acta*, 2020, 335: 135651.
- [35] D. Inoue, H. Niwa, H. Nitani, Y. Moritomo. Scaling relation between electrochemical Seebeck coefficient for $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ in organic solvent and its viscosity. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2021, 90(3): 033602.
- [36] Wake A, Inoue D, Moritomo Y. A liquid thermoelectric device composed of organic solution. *Applied Physics Express*, 2022, 15(5): 054002.
- [37] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, et al. LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 2022, 271: 108171.
- [38] Babu C S, Lim C. Theory of ionic hydration: Insights from molecular dynamics simulations and experiment. *The Journal of Physical Chemistry B*, 1999, 103(37): 7958-7968.
- [39] Chen Y, Huang Q, Liu T H, et al. Effect of solvation shell structure on thermopower of liquid redox pairs. *arXiv preprint arXiv:2301.09284*, 2023.
- [40] Yee E L, Cave R J, Guyer K L, et al. A survey of ligand effects upon the reaction entropies of some transition metal redox couples. *Journal of the American Chemical Society*, 1979, 101(5): 1131-1137.

超薄平板热管内单层丝网吸液芯输运特性研究

侯伟隆, 卢笑天, 陈翀, 钱帮兴, 史波*

(南京航空航天大学, 南京 210016)

(Tel: 13813907356, Email: boshi@nuaa.edu.cn)

摘 要: 平板热管作为一种轻便、高效的传热器件被广泛应用于电子设备散热中, 同时电子设备的小型化进一步推动了超薄平板热管的发展。随着热管厚度的不断减小, 受限空间中吸液芯的输运特性与常规尺度热管存在较大差异。因此, 本文通过数值计算的方法对超薄平板热管内的液体工质输运过程进行了仿真, 分析了液体工质在单层丝网微通道内的流动规律以及壁面因素对弯月面结构和毛细力重构的影响。通过搭建丝网吸液芯毛细力测试平台开展丝网输运特性测试实验。结果表明本文采用的仿真分析方法对不同目数的单层丝网毛细力的预测偏差均控制在较小的范围, 最大偏差仅为 6.09%, 使用该仿真方法可以较为准确的探究单层丝网吸液芯的输运特性。

关键词: 超薄平板热管, 毛细力, 单层丝网吸液芯, 弯月面

0 前言

目前电子元件呈现出微型化、高集成化的趋势^[1], 导致了无法避免的高热流密度问题, 这使得传统的空冷和液冷技术已难以满足当前微小电子设备的散热需求。超薄平板热管作为一种依靠内部工质的相变进行换热的被动封闭装置, 其当量导热系数是一般固体导热材料的数十倍甚至上百倍^[2-4]。并且与常规尺度的热管相比, 超薄平板热管有着体积小、质量轻、柔性好的特点, 因此被广泛应用于微型电子设备领域。因此设计和研发尺度更薄、传热性能更好的超薄平板热管已经成为学术界和工业界共同追求的目标。

吸液芯作为热管的核心组成部件, 其功能是通过毛细作用使冷凝后的工作液体回流到蒸发段^[5]。热管内部的吸液芯结构具有多种形式^[6], 金属丝网因其厚度薄、延展性好、抗挤压和弯曲等特点, 使得金属丝网成为平板热管中最常用的吸液芯结构。热管的传热性能极大程度上是由吸液芯提供的毛细力以及工作液体的回流速率所决定, 因此吸液芯的输运特性一直受到众多专家学者们的强烈讨论与关注。对常规尺度的均温板, 多采用多层丝网作为吸液芯结构, 其吸液芯多被当量为多孔介质, 输运特征如毛细力的评估、液体工质流阻的计算上大多按照多孔结构的处理方式来简化^[7-11]。在这种情况下, 孔隙率是影响毛细输运特性的主导因素。对于超薄平板热管, 由于其总厚度的限制, 往往采用单层金属丝网作为吸液芯结构, 因此液体工质只能在单层丝网和壁面形成的孔隙内进行输运, 丝网毛细力受壁面的影响作用加强。常规尺度均温板中可以忽略的因素(如壁面的粘性力、表面张力等)在微小通道内将会表现得更加明显^[12, 13]。在壁面浸润性下吸液芯内的液体分布会受到影响, 可能会引起丝网内毛细力的重构。如果继续使用多孔结构的处理方式, 通过多层丝网的传统公式来预测单层丝网毛细力可能会产生较大偏差。

因此, 本文采用正弦交错编织的丝网结构建立了三维的单层丝网模型, 并对壁面影响下的单层丝网模型进行了数值仿真。利用仿真结果对不同瞬态时刻下各孔内弯月面形状进行了讨论, 研究了液体工质在单层丝网微通道内的流动规律以及壁面因素对弯月面结构及毛细力重构的影响。同时通过搭建单层丝网毛细输运特性的实验测试平台, 将实验数据与仿真结果进行对比分析, 验证了数值仿真的准确性。获得的结论可为后续单层丝网毛细力计算公式的修正和超薄平板热管的优化设计提供相应的参考依据。

1 单层丝网毛细输运特性数值仿真

1.1 热管毛细作用基本理论

当毛细管插入在液体中时, 若液体能润湿毛细管壁, 液体会沿着毛细管上升。由于表面张力的存在, 整个液体的自由表面呈弯月面, 如图 1 所示。由于液面弯曲, 使得液面两侧产

生一个压力差 ΔP 。对于呈球形的弯曲液面，可以根据 Young-Laplace 方程求得这个压力差：

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{R} = \frac{2\sigma \cos \theta}{r} \quad (1)$$

式中 σ 为液体表面张力， θ 为接触角， r 为毛细管半径， R 为弯曲液面的有效半径。

对于毛细管来说，这个压差力驱动管内液体上升直至平衡，此时可计算得到毛细管内液体的上升高度：

$$h = \frac{2\sigma}{\rho g R} = \frac{2\sigma \cos \theta}{\rho g r} \quad (2)$$

这个高度是由压力差引起的， Δp 又称为毛细压头，它是热管中的基本推动力，冷凝液体的回流依靠此力驱动。

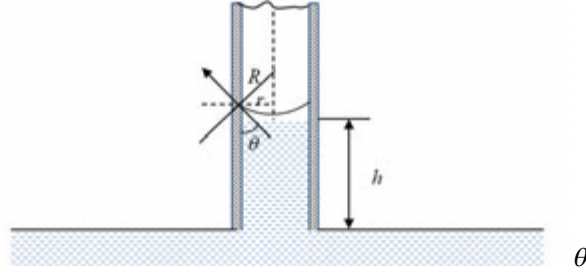


图 1 热管吸液芯内弯月面示意图

不同的吸液芯结构，有其不同的有效毛细半径 R 。对于多层丝网来说，传统的经验公式就是根据 Young-Laplace 的思想，认为工质在每个正方形网孔都有规则的弯月面形态，在任何时刻其弯月面均为标准的球面。具体表达形式为：

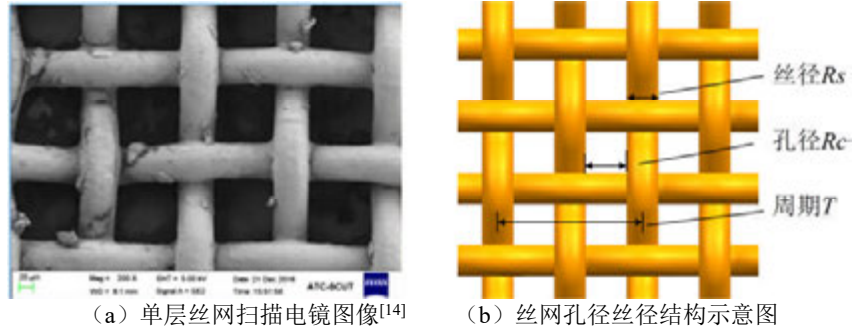
$$R = \frac{W + d}{2} \quad (3)$$

其中 W 为丝网间距， d 为丝网直径。

而对于单层丝网来说，一端壁面的存在引起了孔内毛细力的重构，液膜的流动形态并不符合一维圆柱模型，所以上述公式对单层丝网来讲并不适用。由于工质在网孔内的爬升同时受管壳壁面浸润性和丝网浸润性两种因素的影响，所以弯月面形状是由这两种因素共同来决定的，这导致了其形状的不规则。

1.2 物理模型及数值模拟

在真实的平纹编织丝网结构中，细丝直径、丝网的孔径及其褶皱程度在整个丝网面上并不是相同的，相邻的经线和纬线交错编织形成一个致密的多孔结构。为了方便建模且尽可能使丝网孔隙形状、孔隙率、整体弯曲程度与实际金属丝网接近，采用如图 2 (a) 所示的交错正弦型结构进行金属丝网的建模。丝网模型中的经线和纬线通过圆面沿正弦路径扫掠的方法得到。圆面的直径为丝网的丝径，正弦路径的振幅为丝径的一半，周期为丝网孔径和丝径之和。丝网模型在经线和纬线两个方向上，其结构呈周期性变化。为了简化计算，本文在建模时截取了其中任意一个周期，建立图 3 所示的单层丝网吸液芯毛细力计算模型。



(a) 单层丝网扫描电镜图像^[14]

(b) 丝网孔径丝径结构示意图

图 2 单层丝网结构示意图

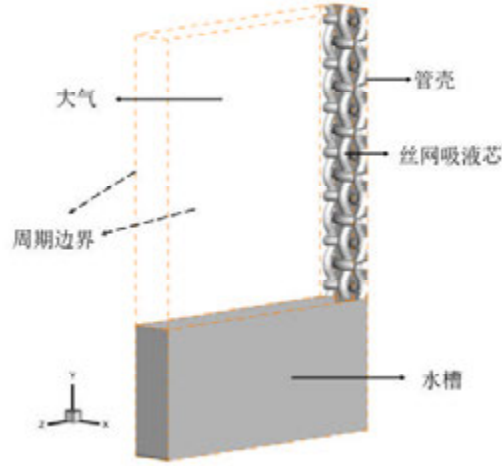


图 3 单层丝网吸液芯毛细力计算模型

工质液体在丝网空隙中的流动尺度为微米量级，是微小尺度范畴的多相流动。本文使用 FLUENT 中的 VOF 模型对丝网中的液体流动进行模拟，VOF 方法中的控制方程分别为连续性方程、动量守恒方程和体积分率方程，如公式（4）至（6）。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial (\rho \bar{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}^2) = -\nabla p + [\mu (\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^T)] + \rho g + F_{st} + F \quad (5)$$

$$\frac{\partial \Omega_G}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla \Omega_G = 0 \quad (6)$$

式中 ρ 是流体的密度， $\bar{v}$ 为流体速度， P 代表压强， F_{st} 表示气液界面处的表面张力， F 为体积力。

采用基于压力的隐式求解器来求解控制方程，与分离的压力-速度耦合方法相比，基于压力的耦合方法获得了更好的稳定性。采用压力隐式分裂算子（PISO）算法，通过使用允许更大时间步长的两步修正方法来更快地收敛。基于最小二乘单元的梯度评估方法用于空间离散化。使用了二阶迎风格式来离散动量方程，采用实数的双精度表示来减少舍入误差。

模型主要由丝网吸液芯、水槽、管壳和空气腔组成，丝网和外流场左右边界设置为周期性边界。使用液态水和空气作为计算工质，具体参数设置如表 1 所示。在数值仿真中不考虑丝网壁面的起伏度和粗糙度，认为丝网壁面是理想光滑和均匀的。接触角在任意时刻保持不变，且为平衡状态下的静态杨氏接触角，不考虑动态的前进和后退接触角，即不存在接触角滞后现象。

表 1 计算参数设置

变量	取值
系统温度 $T_0 / ^\circ\text{C}$	20 $^\circ\text{C}$
水密度 $\rho_1 / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	998.2
水的动力粘度 $\mu_1 / \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	1.003×10^{-3}
空气密度 $\rho_2 / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	1.225
空气动力粘度 $\mu_2 / \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	1.7894×10^{-5}
大气压力/Pa	101325
水的表面张力系数 $\sigma / \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$	0.07275
壁面接触角 $\theta / ^\circ$	60

1.3 模型验证

1.3.1 网格无关性验证

为提高仿真结果的可信度，有必要对网格独立性进行验证。本文研究的是超薄平板热管单层丝网毛细输运能力，主要是通过抽吸液体工质的高度来表征丝网的毛细输运性能，因此

选用丝网内工质最终达到的平均液面高度作为网格无关性检验的评判标准,验证结果如图 4 所示。为平衡仿真精度和计算时间,选取 80 万网格数量的模型进行数值仿真。

1.3.2 放大重力检验

丝网目数直接影响丝网吸液芯的毛细力大小,这使得在毛细力作用下的液面上升高度也存在巨大的差异。但对于液面的上升来说,液面的上升高度远比丝网的尺寸大得多。如果按照实际重力条件下进行仿真计算,计算难度将异常巨大。为减小计算的难度,本研究通过放大重力法控制液面上升的高度,即通过加大重力来减小液面的上升高度。并且,通过增大重力可以缩短液体工质爬升到最高点的时间。

因此,有必要对增大重力模型的毛细力变化情况进行检验,以此来保证仿真结果的可靠性。使用 300 目丝网,选择 300G、400G、500G、700G 和 1000G 五种不同重力条件下的工况进行计算,其毛细力和上升高度随不同重力变化如图 5 所示。可以看出,当重力被放大 700 倍以下时,利用液面最大稳态高度求得的毛细压差相差不大,最大为 3186Pa,最小为 3092Pa,相差浮动不超过 3%。最终,为平衡计算精度和仿真时间,选取 500 倍的重力条件进行数值计算。

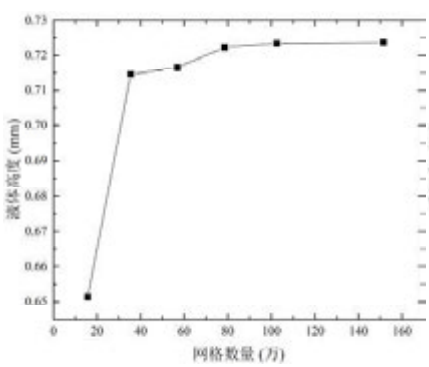


图 4 网格无关性验证结果

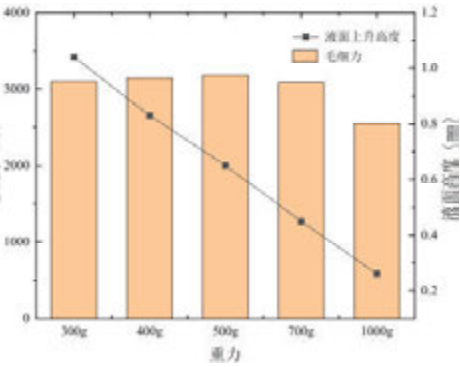


图 5 重力无关性检验结果

1.4 计算结果及分析

1.4.1 壁面处毛细现象分析

通过对单层丝网内部的毛细现象进行瞬态数值仿真,可以观察到液体工质在丝网内部的爬升过程,以 300 目丝网的毛细上升仿真结果作为参考。壁面部分的毛细效应应从两个角度来分析:一个是纯壁面作用的毛细效应,另一个是在挤压作用下丝网与壁面所成孔隙部分的毛细效应。选取图 6 (a) 所示的周期单元体,此区域由丝网孔(纯壁面作用)和丝网与壁面之间的孔组成。现按照图 6 (c) 所示截取参考截面,对丝网与壁面所成孔隙部分的毛细效应进行分析。

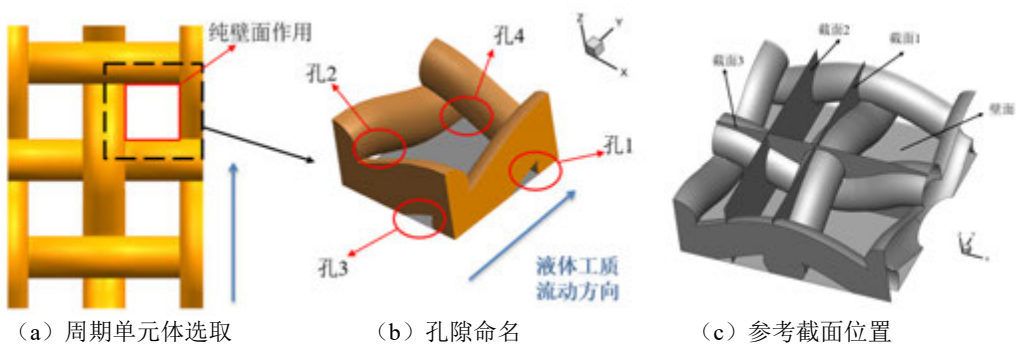


图 6 毛细力分析位置示意图

图 7 为不同时刻下截面 1 的气液两相分布云图,蓝色表示水,红色表示空气。图中的三角形区域即为丝网与壁面所成孔隙部分,其中左边为孔 1,右边为孔 2,液体流动方向沿 y 轴正方向。从图中图 7 (1)~(3) 可以看出,在丝网和固体壁面的共同作用下,液体工质以稳定的弯月面姿态均匀上升,直到将孔隙填满。在此过程中弯月面的有效毛细半径近似线性增大。

当液体到达丝网经纬线相交点所形成的微小夹缝部分时(图 7 (5) 中黑色矩形框表示

的位置), 工质先填满此位置。随后液面迅速调节形成稳定的弯月面图 7 (6), 一直稳定上升将孔 2 填满。在将孔 2 填满的过程中弯月面的有效毛细半径近似线性减小。

当工质上升到中心网孔部分时, 如图 7 孔 1、孔 2 处弯月面变化图 8 所示, 从截面 2 的云图可以看出, 近壁面的液体高度要明显高于远壁面处, 即图中 C 处的液面高于 D 位置。在该截面上的弯月面高度呈圆弧形状下降, 这一形状符合单边亲水下异形毛细管的假定。从壁面位置的云图中可以看出, 由于相邻的正弦型丝径存在半个周期的相位差, 这个相位差导致了工质在上升过程中高度的不对称, 出现了一边高一边低的情况, 即图中 A 处的液面高度高于 B 位置。

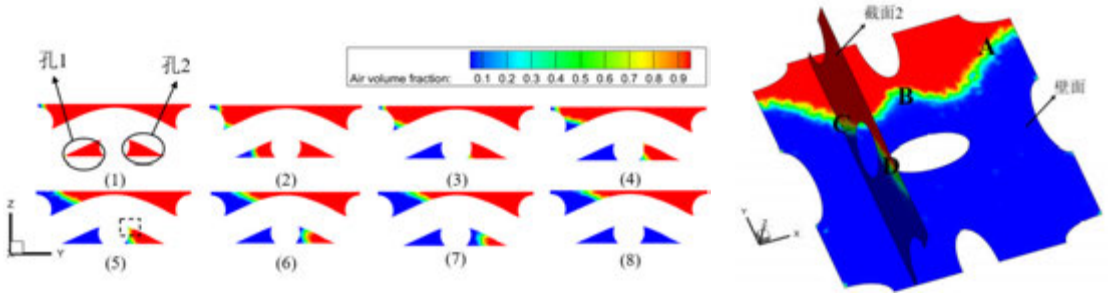


图 7 孔 1、孔 2 处弯月面变化

图 8 中心网孔气液两相云图

当工质继续上升进入孔 3 时 (孔 4 同理), 通过图 9 可以看出, 随着时间的变化孔隙处的弯月面并没有在三个角落同时上升, 实际上液面是紧贴壁面。如果用三角截面来当量的话其只满足了两角, 不符合异形毛细管理论^[15]。



图 9 孔 4、孔 3 处弯月面变化

1.4.2 单层丝网毛细芯输运机制分析

图 10 为水在单层丝网通道内的上升云图, 可以看出水在丝网内的上升可以分为三个阶段, 初始上升阶段、爬升阶段和静止阶段。在初始阶段, 静水压头非常小, 丝网毛细作用大于重力与粘性力之和, 水在紧贴丝网外侧壁面的区域快速爬升, 并完全充满丝网与壁面间的孔隙。进入爬升阶段, 随着液面高度的增加, 重力的影响开始增大, 水的爬升速度逐渐下降。对于远离壁面的区域, 液体工质依靠丝网经纬线交汇或相邻经线间的毛细力获得爬升动力, 其毛细力明显小于靠近壁面的区域。随着水的继续爬升, 流动到达静止阶段, 液体上升速度逐渐减小为 0, 液面到达最高高度。

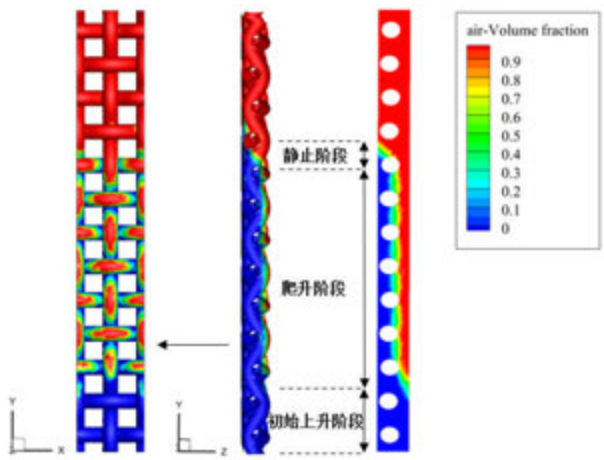


图 10 液体工质爬升过程

由于丝网周期性分布的结构特点, 取图 6 (a) 所示的一个单元体高度, 对其进行毛细芯输运机制的分析。可以将工质在一个单元体内的上升过程分为四个阶段, 每四个阶段为一

个上升周期。

图 11 为第一阶段示意图,此时工质上升到孔 1 中段位置,孔 1 部分的弯月面实现毛细力、重力与粘性力的力学平衡,液面处于稳定状态(图 11 中 A 区域)。工质沿着孔 2 的缝隙不断爬升,孔 2 部分的毛细效应使初始时平缓的弯月面开始折叠变形,整体弯月面的曲率逐渐增大。在此过程中整体单元体弯月面的几何结构由孔 1、孔 2 以及纯壁面三部分共同组成。工质在将孔 2 填满后,又继续紧贴丝网表面流动了一段距离,弯月面趋于平缓,曲率略有减小,最终液面高度处于稳定状态(图 11 中 B 区域)。

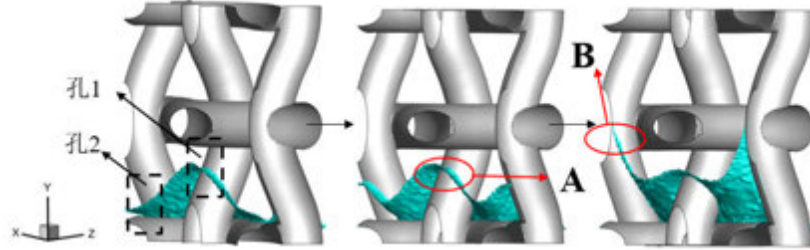


图 11 第一阶段弯月面变化

当 B 区域的液面稳定后, A 区域的液面继续紧贴壁面上升,到达孔 3 区域,如图 12 第二阶段弯月面变化所示。液面到达孔 3 区域时形成了一个微小的高曲率弯月面,这一高曲率弯月面表现出良好的毛细效应,带动了液面在壁面和孔 1 内整体的上升,并逐渐将孔 1 和丝网孔填满。在这一阶段,由于工质已经将孔 2 填满并离开孔 2 进入中心网孔区域,所以单元体内弯月面的几何结构由壁面和孔 1 组成。

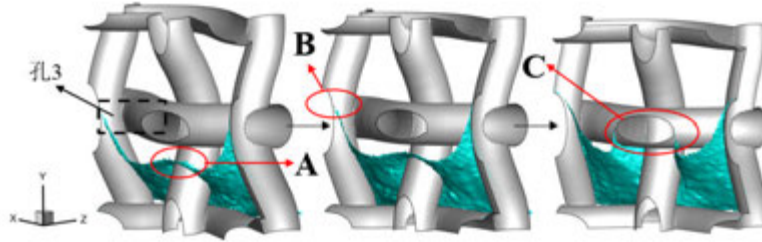


图 12 第二阶段弯月面变化

在第三阶段,液体工质将孔 1 填满后开始进入孔 3 区域。由图 9 所示的孔 3 处的弯月面变化可以看出,液面没有沿着三角形通道的三个顶点上升,弯月面首先出现在靠近壁面的部分,液体的毛细上升过程仍然由壁面作用主导。随后液面最高点进入对称单元的孔 1 区域,在此区域内弯月面曲率很大,表现出良好的毛细性能,同时在壁面毛细力的作用下,带动液面完全穿过孔 3 区域。在这一过程中弯月面的几何结构仍然由孔 1 和壁面组成。

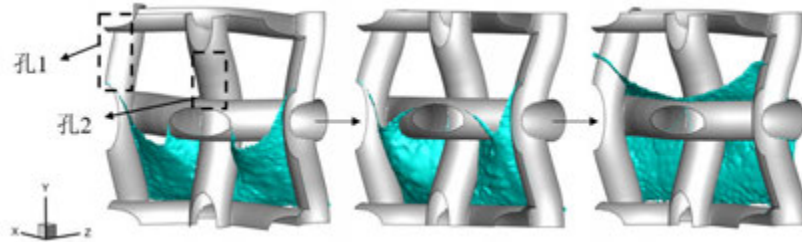


图 13 第三阶段弯月面变化

随后进入第四阶段,液面在相邻单元的孔 2 区域上升,但总体弯月面曲率变化不大,液面上升缓慢,最终液面稳定在初始状态,至此工质在单个丝网孔内的流动实现了一个完整周期。此过程单元体弯月面的几何结构由孔 1、孔 2 以及纯壁面三部分共同组成。

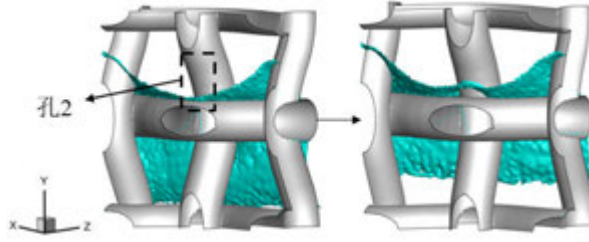


图 14 第四阶段弯月面变化

通过分析不同时刻的液膜形状,可以看出工质液体在丝网孔隙中的爬升过程是有规律的而且呈周期性变化的,无论初始条件如何改变,弯月面最终都会稳定在其中一种形态上。这说明工质在爬升过程中,液膜内部是存在着一定的自我调节能力的,这种自我调节能力会使液面在任何时刻均有向某一稳定形态发展的趋势,最终达到该稳态。

2 单层丝网毛细抽吸特性实验验证

2.1 实验件的处理

本文实验中选择紫铜 C1020 为毛细芯材料,其导热性能好,耐腐蚀性强,是热管普遍运用的毛细芯材料之一。选择无氧紫铜为管壳材料,其导热能力强、化学性质稳定、具有良好的焊接性,并且加工成本比较低廉。在实验前需要对实验件的表面进行亲疏水的改性处理,使水在丝网表面的浸润性发生变化,以改变丝网的毛细输运特性。具体的操作步骤包括实验件的清洗、热压、改性以及接触角的测量。

1. 清洗:使用丙酮、稀硫酸、无水乙醇和离子水对丝网和管壳实验件进行清洗,去除铜表面附着的杂质氧化物、有机油污以及粉尘颗粒。

2. 焊接:使用真空扩散焊接的方式将铜质管壳与金属丝网进行焊接。真空扩散焊对通道畅通性的影响较小,对于使用金属丝网作为吸液芯的平板热管能够较为完整地保持通道结构的完整性。

3. 改性:本文选择对实验样件进行化学方法改性,参考杨茂飞^[16]对紫铜结构的改性处理,在碱性环境下,使铜表面被化学氧化,再高温分解,使紫铜表面生成致密的纳米结构,改变管壳和紫铜丝网对水的浸润性。

4. 测量:使用接触角测量仪对改性后的紫铜样件的接触角进行测量。

根据杨-拉普拉斯方程,在对毛细力求解时需要获得液体的表面张力系数,本文利用座滴法对常温下去离子水的表面张力进行测量,测量结果如表 2 所示。经过计算得到表面张力的平均值为 70.03mN/m,经查表,20℃时水的表面张力系数为 72.75mN/m,百分误差约为 2.8%。

表 2 表面张力测量值

编号	体积 (μL)	温度/℃	σ (mN/m)	形状系数
1	10	20	71.08	0.54
2	10	20	70.86	0.54
3	9.9	20	69.87	0.55
4	10	20	70.00	0.54
5	10.1	20	69.09	0.55
6	10.1	20	69.30	0.55

2.2 实验系统设计

本研究选取的实验方法为静态高度法,即通过观测液体工质在毛细力的作用下上升到稳态状态的高度来表征丝网的毛细性能。其原理同毛细管原理相似,为将丝网毛细芯没入水槽中,在静态水压与毛细力的作用下水会沿着单层丝网上升,Holley 等^[17]研究工质在多孔介质的上升过程,认为在弯月面的上升过程中吸液芯的毛细力必须满足:

$$\Delta P_c > \Delta P_{hl} + \Delta P_f \quad (7)$$

其中 ΔP_{hl} 为静水压力, ΔP_f 为摩擦阻力,展开得到公式

$$\frac{2\sigma}{R_{eff}} = \frac{\mu h dh}{K dt} + \rho g h \quad (8)$$

式中 σ 为液体表面张力, R_{eff} 为吸液芯的有效毛细半径, h 为上升高度, μ 为液体工质

的动力粘度， ρ 液体工质的密度， K 为形状因子， g 为重力加速度。随着抽吸高度的上升，静水压力增大，速度减小，粘性阻力减小，当液面达到最高时，液面即达到稳态平衡，不再上升。此时由于速度梯度为 0，粘性阻力忽略不计，因此吸液芯的毛细性能可以由液面达到的最高稳态高度来表征。实验系统示意图如图 15 所示，实验在环境温度为 $20 \pm 0.1^\circ\text{C}$ 的环境空间进行，为了进一步减小液膜在上升过程中的蒸发损失，选择将实验装置置于由透明有机玻璃材质所组成的密闭空间。虚线部分即表示实验装置通过透明有机玻璃密封住，透明密封装置确保测试空间几乎被水蒸汽所饱和，因此可以忽略毛细管上升过程中水的蒸发。

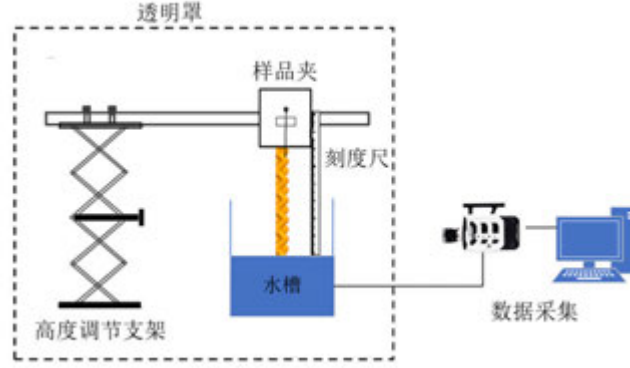


图 15 毛细测试实验示意图

2.3 实验结果及数据分析

2.3.1 不确定度分析

本实验中高度的不确定度由以下几方面组成，首先是精密刻度尺的测量，不确定度为 $\pm 0.1\text{mm}$ 。对于实验件由于焊接精度的影响，存在工质在上升中在某些孔隙内没有填满的情况，对总体高度会有轻微影响，此不确定度在 $\pm 0.8\%$ 。由于温度的变化，去离子水粘度的不确定度为 $\pm 1.5\%$ ，密度的不确定度为 $\pm 0.1\%$ 。给定的表面张力存在误差，利用悬滴法测量表面张力的测量误差为 $\pm 0.5\%$ ，结合表面张力的测量实验结果，表面张力的不确定度为 $2.3\%-3.3\%$ 。

计算参数的不确定度根绝 Moffat R J^[18]的公式进行计算：

$$\delta R = \left[\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial R}{\partial V_i} \delta V_i \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

式中 δR 为参数 R 的不确定度， V_i 为自变量参数， δV_i 为自变量的 V_i 的不确定度。

通过计算可得上升高度 H 的不确定度为 $1.87\%-2.69\%$ ，在误差允许的范围之内。

2.3.2 计算结果验证

本实验的浸润深度取 1mm ，如图 16 所示。对于目数较少的丝网吸液芯实验件，水在丝网的高毛细作用下迅速爬升。当丝网目数较高时，尽管毛细力大，但渗透率低，水在丝网内的流动阻力加剧，平衡则需要更长的时间。

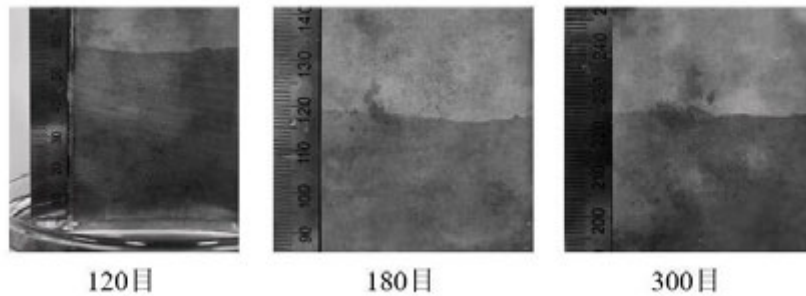


图 16 不同目数丝网液面上升高度

将实验结果分别与仿真结果和多层丝网的毛细力公式计算结果进行对比，如图 17 所示。可以看出使用多层丝网毛细力预测公式获得的结果在丝网目数较小的情况下与实验值之间相差较小，然而，对于高目数丝网毛细力的预测会产生明显的偏差，在 300 目时两者之间的

差距达到 22.3%。结果表明,对于目数较高的单层丝网毛细力的预测,使用多层丝网的传统公式的确会产生较大的偏差。对于 120、150 目的丝网,数值仿真结果略低于实验值,在 180 目及以上的毛细力预测值高于实验结果,但总体偏差均控制在较小的范围,最大偏差为 6.09%,该仿真结果具有较高的准确性,使用该仿真方法可以较为准确的探究单层丝网吸液芯的输运特性。

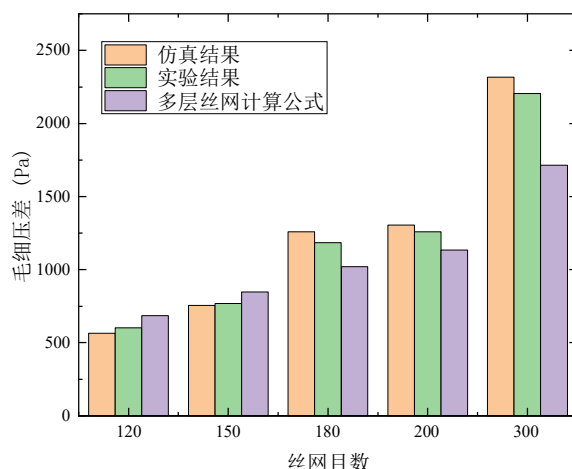


图 17 实验与仿真结果对比

3 结论

本文着眼于超薄平板热管单层丝网吸液芯的输运能力,通过数值计算的方法对超薄平板热管内的液体工质输运过程进行了仿真。讨论了不同时刻丝网孔内的弯月面形状,并针对液体工质在单层丝网微通道内的流动规律以及壁面因素对弯月面结构和毛细力重构的影响进行了分析。同时通过实验的方法验证了仿真方法的准确性,获得的主要结论有:

1. 不同于多层丝网吸液芯,单层丝网吸液芯内壁面的浸润性会使近壁端的毛细力发生重构。壁面与丝网所成孔隙部分的弯月面曲率很大,使得靠近壁面处的毛细力增加,从而提高整个丝网吸液芯的毛细输运能力。

2. 液体工质在丝网孔隙中的爬升过程是有规律的而且呈周期性变化的,液体工质在爬升过程中,液膜内部是存在着一定的自我调节能力的,这种自我调节能力会使液面在任何时刻均有向某一稳定形态发展的趋势,最终达到稳态状态。

3. 在对目数较高的单层丝网吸液芯毛细力的预测时,使用多层丝网的传统公式会产生较大的偏差。本文通过数值仿真获得的毛细力预测结果偏差均控制在较小的范围,最大偏差仅为 6.09%,该仿真结果具有较高的准确性,使用该仿真方法可以准确的探究单层丝网吸液芯的输运特性。

4 参考文献

- [1] LIU T, DUNHAM M T, JUNG K W, et al. Characterization and thermal modeling of a miniature silicon vapor chamber for die-level heat redistribution [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 152(May): 119569.1-15.
- [2] MARCINICHEN J B, OLIVIER J A, LAMAISON N, et al. Advances in Electronics Cooling [J]. Heat Transfer Engineering, 2013, 34(5-6): 434-46.
- [3] PUTRA N, YANUAR, ISKANDAR F N. Application of nanofluids to a heat pipe liquid-block and the thermoelectric cooling of electronic equipment [J]. Experimental Thermal & Fluid Science, 2011, 35(7): 1274-81.
- [4] VASILIEV L L. Heat pipes in modern heat exchangers [J]. Applied Thermal Engineering, 2005, 25(1): 1-19.
- [5] 庄骏, 张红. 热管技术及其工程应用 [M]. 化学工业出版社, 2000.
- [6] ZHUANG J, ZHANG H. Heat Pipe Technology and Engineering Application [M]. Chemical Industry Press, 2000.
- [7] 郑丽, 王爱明, 李菊香. 热管吸液芯的研究进展 [J]. 低温与超导, 2011, 39(4): 5.
- [8] ZHENG L, WANG A, LI J. Research progress of wick in heat pipe [J]. Cryogenics & Superconductivity, 2011, 39(4): 5.
- [9] RAHIMI R, ABBASPOUR D. Determination of pressure drop in wire mesh mist eliminator by CFD [J]. Chemical Engineering & Processing Process Intensification, 2008, 47(9-10): 1504-8.
- [10] CHAN B, KIM S J. Capillary performance of bi-porous sintered metal wicks [J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 2012, 55(15-16): 4096-103.
- [11] LAGO M, ARAUJO M. Capillary Rise in Porous Media [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2001,

234(1): 35-43.

- [10] 马誉高, 张英楠, 余红星, 等. 丝网芯内钠薄液膜蒸发与毛细特性研究 [J]. 原子能科学技术, 2022, (006): 056.
MA Y, ZHANG Y, YU H, et al. Evaporation and capillary characteristics of thin film on screen wick [J]. Atomic Energy Science and Technology, 2022, (006): 056.
- [11] KHRUSTALEV D, FAGHRI A. Enhanced Flat Miniature Axially Grooved Heat Pipe [J]. Journal of Heat Transfer, 1996, 118(1): 261-4.
- [12] KOO J, KLEINSTREUER C. Liquid flow in microchannels: experimental observations and computational analyses of microfluidics effects [J]. Journal of Micromechanics & Microengineering, 2003, 13(5): 568.
- [13] LALEGANI F, SAFFARIAN M R, MORADI A, et al. Effects of different roughness elements on friction and pressure drop of laminar flow in microchannels [J]. International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow, 2018, 28(7): 1664-83.
- [14] KIM K M, BANG I C. Effects of graphene oxide nanofluids on heat pipe performance and capillary limits [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2016, 100: 346-56.
- [15] TANG Y, MIN J, XUAN Z, et al. Meniscus behaviors and capillary pressures in capillary channels having various cross-sectional geometries [J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2018, 26(10): 18-26.
- [16] 杨茂飞, 李金旺, 周刘伟. 亲水改性超薄平板热管传热性能 [J]. 化工进展, 2023, 42(02): 692-8.
YANG M, LI J, ZHOU L. Heat transfer performance of hydrophilic modified ultra-thin flat heat pipe [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2023, 42(02): 692-8.
- [17] HOLLEY B, FAGHRI A. Permeability and effective pore radius measurements for heat pipe and fuel cell applications [J]. Applied Thermal Engineering, 2006, 26(4): 448-62.
- [18] ROBERT, J., MOFFAT. Describing the uncertainties in experimental results [J]. Experimental Thermal & Fluid Science, 1988.

颗粒表面粗糙度对密集颗粒绕流换热管传热特性的影响

李耀鹏, 孙鹏, 官晓辉, 孙晓梅, 张忠良, 郑斌

(山东理工大学交通与车辆工程学院, 山东淄博 255049)

(Tel: 15550342069, Email: 2631531636@qq.com)

摘要: 针对移动床型余热回收换热器, 构建了密集颗粒绕流换热管的 CFD-DEM 耦合计算模型, 研究了颗粒表面粗糙度对颗粒绕流换热管传热特性的影响。结果表明, 随着颗粒间静摩擦系数增大, 换热管平均热流量及换热管平均有效传热系数减小。当颗粒间静摩擦系数由 0.05 增加至 0.3 时, 换热管平均热流量由 142.22 W 减小至 139.03 W, 减少了 2.24%; 换热管平均有效传热系数从 239.99 W/(m²·K) 减小至 234.59 W/(m²·K), 减少了 2.25%。颗粒间滚动摩擦系数对密集颗粒绕流换热管传热的影响并不明显。

关键词: 表面粗糙度, 密集颗粒, 传热特性, CFD-DEM

0 前言

“双碳”目标的提出, 对全国能源行业产生了重大影响。在工业耗能中有至少 50% 的耗能转化为载体不同、温度不同的工业余热, 而我国工业余热的回收利用率仅有 30%^[1]。实际工业过程中每年都会产生大量蕴含丰富余热资源的固体颗粒, 2019 年电力、热力生产和供应业产生的粉煤灰和炉渣有 6.34×10^{11} kg, 产生的黑色金属冶炼废渣有 3.6×10^{11} kg^[2]。这些固体颗粒形状各异、表面粗糙程度不一, 但含有较丰富的余热资源。而移动床换热器在颗粒换热方面不会引起额外的热损失, 且运行成本低^[3], 可以较好回收这部分余热, 已经引起了学者们的广泛关注^[4-6]。

颗粒的物理参数会影响其在换热器内的传热特性。而现有研究主要关注于颗粒粒径、颗粒密度、杨氏模量等颗粒本身的物理属性对颗粒传热特性的影响^[7-10], 对静摩擦系数、滚动摩擦系数等表面特性参数对颗粒传热特性的研究尚处于起步阶段^[11-12]。

根据前人^[13-15]的研究, 颗粒表面粗糙度可以用颗粒间静、动摩擦系数表征, 且给出了颗粒粗糙度与摩擦系数间的计算公式, 方便开展相关模拟计算。针对移动床型余热回收换热器, 基于 CFD-DEM 方法, 建立了密集颗粒绕流换热管的流动传热模型, 研究了颗粒表面粗糙度对密集颗粒传热特性的影响, 以期对固体颗粒余热回收技术提供理论支持, 为减少碳排放、提高余热利用率、解决全球能源问题贡献力量。

1 模型建立与验证

1.1 物理模型

基金项目: 山东省自然科学基金(ZR2020ME176 和 ZR2020ME182)

实际高温固体颗粒绕流换热管的流动换热过程十分复杂，对其进行数值模拟时，综合考虑运算精度和运算时间，对物理模型做了如下简化：

(1)根据前人研究，模型中颗粒简化为直径 d_p 为 3 mm 的均匀球型颗粒；(2)简化颗粒实际接触传热为气膜接触^[16]导热；(3)根据 Christine 等^[16]的研究，在颗粒粒径不大时，忽略气相对流换热，只考虑颗粒内部导热、颗粒与接触面的导热、气膜导热、辐射换热；(4)换热器前后壁面设置为周期性边界条件。建立物理模型示意图如图 1(a)所示。换热器模型尺寸如表 1 所示。

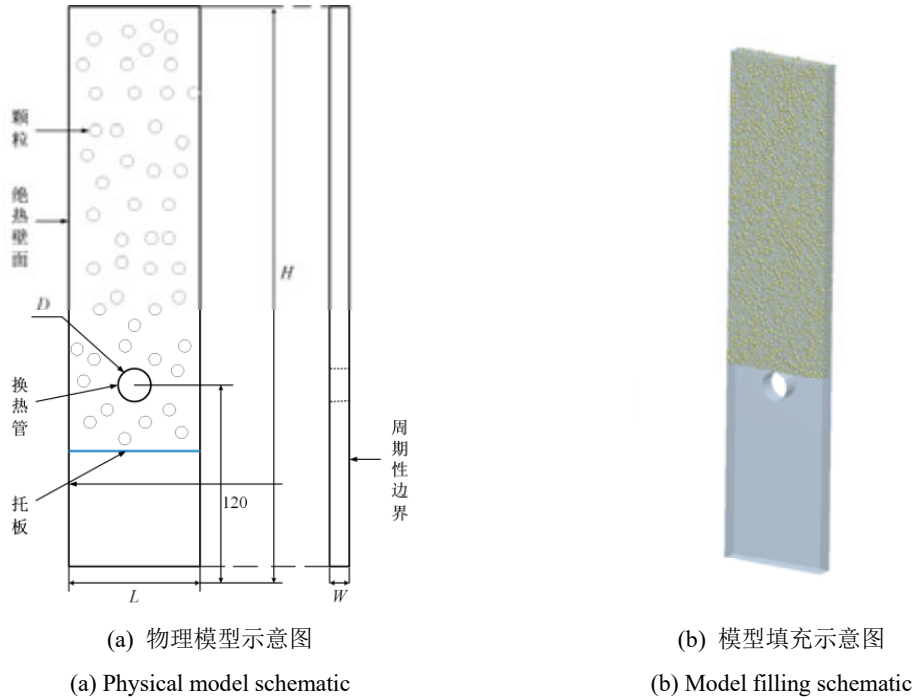


图 1 传热模型示意图

Fig. 1 Heat transfer model schematic

模型长度 L 、宽度 W 、高度 H 分别设置为 80 mm、12 mm、340 mm，换热管直径 D 为 20 mm。颗粒采用先填充再流动的方式。颗粒填充前将托板置于换热管上方，由换热器上方向下填充颗粒，直至颗粒填满上方空间，如图 1(b)所示。颗粒填充完毕后，托板以 20 mm/s 的速度流过换热管，随后以 2 mm/s 的速度匀速移动至换热结束。

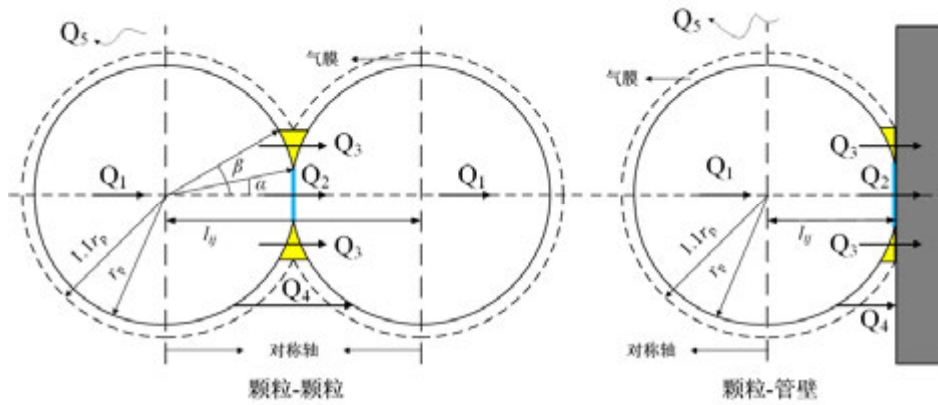
1.2 数学模型

颗粒与颗粒之间、颗粒与换热器之间的实际传热过程很复杂，参考武锦涛^[16]等人的研究，简化实际接触传热为气膜接触传热，基于此，颗粒接触时发生的传热过程如图 2 所示。由于颗粒粒径很小，忽略了颗粒和空气间的对流换热 Q_5 ，只考虑颗粒内部导热 Q_1 、颗粒与接触面的导热 Q_2 、气膜导热 Q_3 、及颗粒与颗粒和换热管的辐射换热 Q_4 。

由傅里叶定律计算颗粒内部导热热阻 R_1 及气膜接触导热热阻 R_3 ，如式(1)、(2)所示。式中， q 为颗粒换热过程热流密度， W/m^2 ； T 为颗粒温度， K ； λ_p 为颗粒导热系数， $W/(m \cdot K)$ ； r_p 为颗粒半径， m ； α 为气膜起始角， β 为气膜终止角； l_{ij} 为颗粒与颗粒球心之间或颗粒球心与换热管之间的距离， m ； λ_a 为气体导热系数， $W/(m \cdot K)$ 。

$$\begin{cases} R_1 = \frac{\int dT}{q} = \frac{\sqrt[3]{2}-1}{2\pi\lambda_p r_p (1-\cos\alpha)} \\ q = \lambda_p \frac{dT}{dr_p} \int_0^\beta 2\pi r_p^2 d\theta \end{cases} \quad (1)$$

$$R_3 = \left(\int_\alpha^\beta \frac{2\pi\lambda_a r_p^2 \sin\theta \cos\theta}{l_{ij} - r_p \sin\theta - \sqrt{r_p^2 - (r_p \sin\theta)^2}} d\theta \right)^{-1} = \left(\pi\lambda_a \int_\alpha^\beta \frac{r_p^2 \sin 2\theta}{l_{ij} - 2r_p \cos\theta} d\theta \right)^{-1} \quad (2)$$



Q_1 颗粒内部导热; Q_2 颗粒接触导热; Q_3 颗粒气膜导热; Q_4 颗粒辐射换热; Q_5 对流换热

图2 颗粒传热方式

Fig. 2 Particle heat transfer method

根据 Vargas 等^[18]的研究, 颗粒接触导热热阻 R_2 如式(3)所示。

$$R_2 = \frac{1}{2\lambda_p} \left(\frac{3F_n r_p}{4E_{eq}} \right)^{-\frac{1}{3}} \quad (3)$$

式中, r_p 为颗粒半径, m; λ_p 为颗粒导热系数, W/(m·K); F_n 为颗粒接触面所受法向力, N; E_{eq} 为颗粒的杨氏模量, Pa。

$$X_{ij} = \begin{cases} (1 - \sqrt{1 - (r_i / l_{ij})^2})(1 - \sqrt{1 - (r_j / l_{ij})^2})(l_{ij} / r_i)^2 & \text{p-p} \\ 0.315 & \text{p-t} \end{cases} \quad (4)$$

$$R_4 = \frac{\frac{1 - \varepsilon_i}{\varepsilon_i A_i} + \frac{1}{A_i X_{ij}} + \frac{1 - \varepsilon_j}{\varepsilon_j A_j}}{\sigma(T_i^4 - T_j^4) / (T_i - T_j)} \quad (5)$$

颗粒与颗粒间和颗粒与换热管间的角系数计算公式如式(4)所示, 颗粒辐射热阻 R_4 计算公式如式(5)所示。

式中, X_{ij} 为颗粒 i 与颗粒 j 的角系数; r_i 为颗粒 i 的半径, m; r_j 为颗粒 j 的半径, m; p-p 表示颗粒与颗粒间, p-t 表示颗粒与换热管之间; ε_i 为颗粒 i 的发射率; ε_j 为颗粒 j 的发射率; T_i 为颗粒 i 的温度, K; T_j 为颗粒 j 的温度, K。

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{R_{\text{sum}}} = \frac{1}{2R_1 + \frac{1}{\frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3}}} + \frac{1}{R_4} (2r_p < l_{ij} < 2.2r_p) \\ \frac{1}{R_{\text{sum}}} = \frac{1}{2R_1 + R_3} + \frac{1}{R_4} (l_{ij} < 2r_p) \end{array} \right. \quad (6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{R_{\text{sum}}} = \frac{1}{R_1 + \frac{1}{\frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3}}} + \frac{1}{R_4} (2r_p < l_{ij} < 2.2r_p) \\ \frac{1}{R_{\text{sum}}} = \frac{1}{R_1 + R_3} + \frac{1}{R_4} (l_{ij} < 2r_p) \end{array} \right. \quad (7)$$

考虑上述传热过程，颗粒与颗粒间的总传热热阻可以由式(6)表示，颗粒与壁面之间的总传热热阻由式(7)表示。

1.3 初始条件与边界条件

模拟所使用的参数如表 1 所示。设置颗粒初始温度为 1073K，换热管初始温度为 298K，模型前后壁面设置为周期性边界，其余壁面设置为绝热壁面。

表 1 模拟使用的参数

Tab. 1 Parameter used in simulation

参数	数值	参数	数值
颗粒密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2848	换热管密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	7850
颗粒泊松比	0.25	换热管泊松比	0.3
颗粒杨氏模量/ Pa	5.5×10^8	换热管杨氏模量/ Pa	1.8×10^{11}
颗粒比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	1210	换热管比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	460
颗粒热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	0.55	换热管热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	15
颗粒间碰撞恢复系数	0.3	颗粒-换热管碰撞恢复系数	0.5
颗粒-换热管静摩擦系数	0.1	颗粒-换热管滚动摩擦系数	0.1

1.4 研究参数

颗粒在下落过程中会产生滑动和滚动运动。静摩擦系数表示材料发生平动运动时受阻程度的参量，为表述明确，本文颗粒间静摩擦系数用 S_f 来表示。研究颗粒间静摩擦系数为 0.05、0.075、0.1、0.2、0.3 时对颗粒流绕流换热管时的换热特性影响。

滚动摩擦系数是表征材料发生滚动相对运动受阻程度的参量。本文用 R_f 来表示滚动摩擦系数。研究颗粒间滚动摩擦系数在 0.1、0.2、0.3、0.4、0.5 时对颗粒流绕流换热管换热特性的影响。

1.5 模型验证

CFD-DEM 模型的准确性需要进行验证。在填有直径为 3 mm 的二氧化硅颗粒的填充床中埋入直径 2 mm 的磷青铜球颗粒，颗粒初始温度为：二氧化硅颗粒 25 °C，磷青铜球颗粒 180 °C，床内的空气温度为 25 °C，速度为 0.43 m/s。同时比较了 Qiu 等^[19]的模拟值和 Collier 等^[19]的实验值结果，磷青铜球的冷却过程如图 3 所示。由图可知，颗粒冷却

模拟的温度变化结果与其他人模拟结果十分相似，CFD-DEM 模型准确性得到了验证。

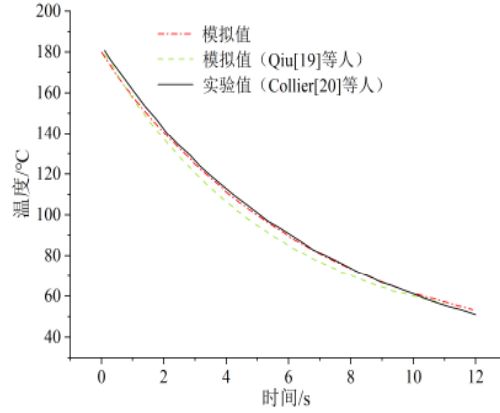


图 3 模型验证

Fig. 3 Model validation

1.6 主要评价指标

(1) 换热管平均热流量

换热管传热能力用换热管平均热流量 Φ_a 来评价。如式(8)所示。

$$\Phi_a = \frac{\sum \Phi_t \cdot \Delta t}{\sum \Delta t} \quad (8)$$

式中， Φ_a 为换热管的平均热流量，W； Φ_t 是第 t 秒的换热管热流量，W； Δt 是一段时间间隔。

(2) 换热管平均有效传热系数

某一时间段内换热管与颗粒流换热情况用换热管平均有效传热系数 $\bar{h}$ 来评价。如式(9)所示。

$$\bar{h} = \frac{\Phi_a}{(T_{in} - T_{tube})S} \quad (9)$$

式中， $\bar{h}$ 为颗粒与换热管的平均有效传热系数，W/(m²·K)； T_{in} 为换热管入口颗粒温度，K； T_{tube} 为换热管表面温度，K； S 为换热管表面换热面积，m²。

2 结果与分析

2.1 颗粒间静摩擦系数对传热特性的影响

颗粒间静摩擦系数对颗粒流温度分布的影响如图 4 所示。由图可知，低温颗粒主要集中于换热管下方区域，且随着颗粒间静摩擦系数增大低温颗粒数量减少。这是因为随颗粒间静摩擦系数增大，换热管两侧的颗粒较难滑动，换热管下方的颗粒塌陷形成空区。而随着颗粒间静摩擦系数大，空区区域也变大，颗粒与换热管相隔，接触变差，颗粒与换热管换热变差，因此较大静摩擦系数下，换热管下方低温颗粒减少。

随着颗粒间静摩擦系数增大，颗粒最高温度由 999.3 K 减小至 995.9 K，减小了 0.34%；最低温度由 951.0 K 减小至 946.8 K，减小了 0.44%；颗粒最大温差由 48.3 K 增大至 49.1 K。颗粒间温差变化并不大。颗粒间静摩擦系数影响了空区区域和颗粒堆积，

导致床层颗粒温度分布不同，但对颗粒最高、最低温度和温差影响较小。

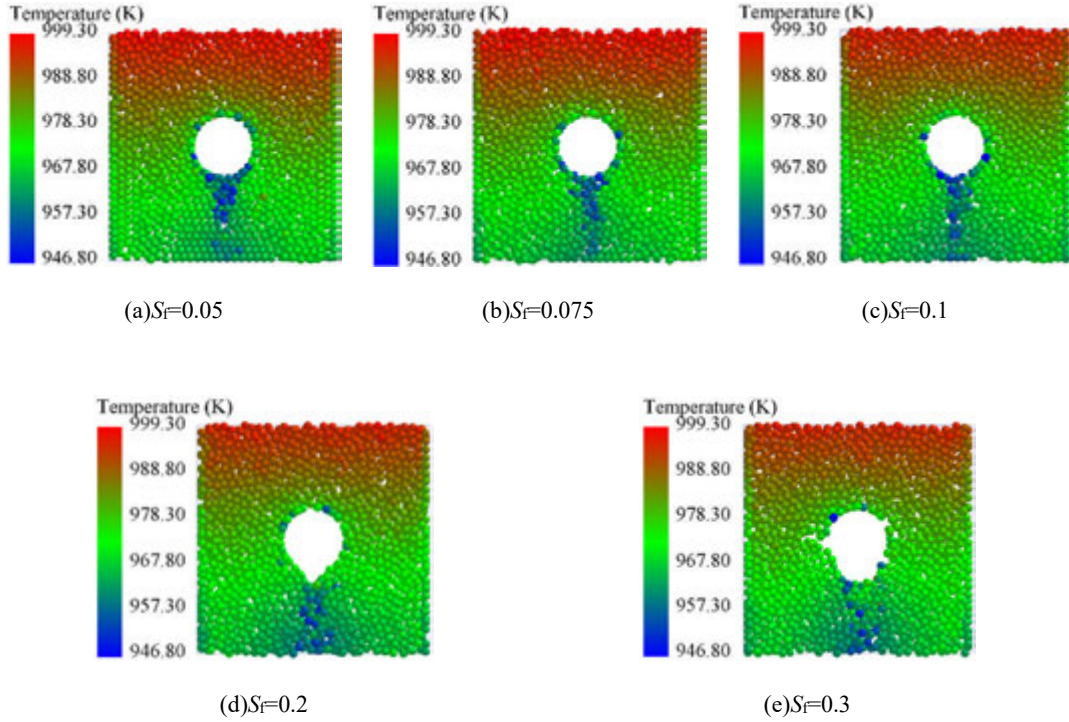
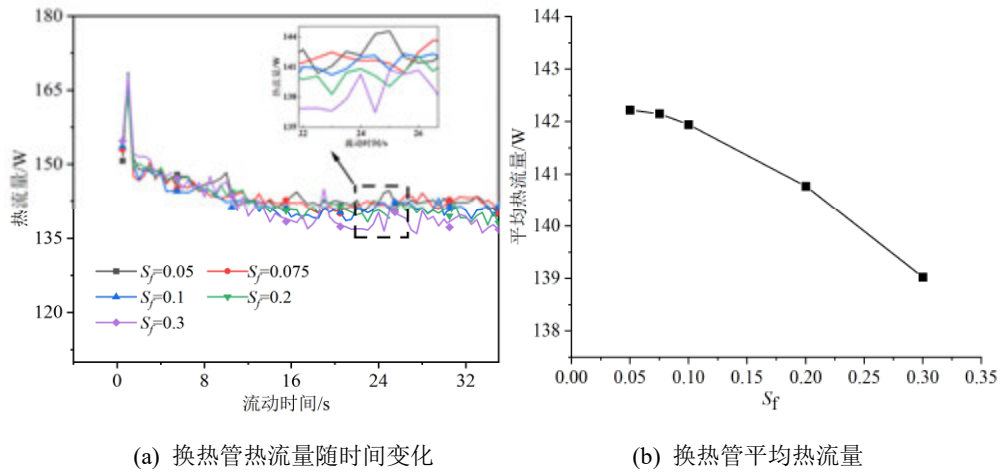


图4 颗粒间静摩擦系数对颗粒流温度场的影响

Fig. 4 Effects of static friction coefficient on particle flow temperature field



(a) Heat flow rate of the heat exchanger tube over time (b) Average heat flow rate of the heat exchanger tube

图5 颗粒间静摩擦系数对换热管热流量的影响

Fig. 5 Effects of particle static friction coefficient on heat exchange tube heat flux

颗粒间静摩擦系数对换热管热流量的影响如图5所示。由图5(a)可知，随时间增加，换热管热流量都表现出先短暂上升再下降最后趋于稳定的波动状态。静摩擦系数 $S_f=0.05$ 的换热管热流量曲线位于所有热流量曲线的最上方，而静摩擦系数 $S_f=0.3$ 的换热管热流

量曲线位于最下方。由图 5(b)可知，随着颗粒间静摩擦系数的增加，换热管平均热流量下降，由 142.22 W 减小至 139.03 W，减小了 2.24%。

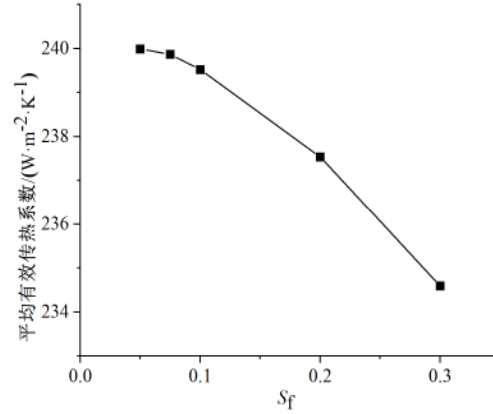


图 6 颗粒间静摩擦系数对平均有效传热系数的影响

Fig. 6 Effects of particle static friction coefficient on average effective heat transfer coefficient

颗粒间静摩擦系数对换热管平均有效传热系数的影响如图 6 所示。由图可知，随颗粒间静摩擦系数的增加，换热管有效传热系数减小，从 239.99 W/(m²·K)减小至 234.59 W/(m²·K)，减小 2.25%。较大的颗粒间静摩擦系数导致颗粒流动性差，颗粒在管周围停留时间较长，且换热管平均热流量减少，因此换热管有效平均传热系数减小。

2.2 颗粒间滚动摩擦系数对传热特性的影响

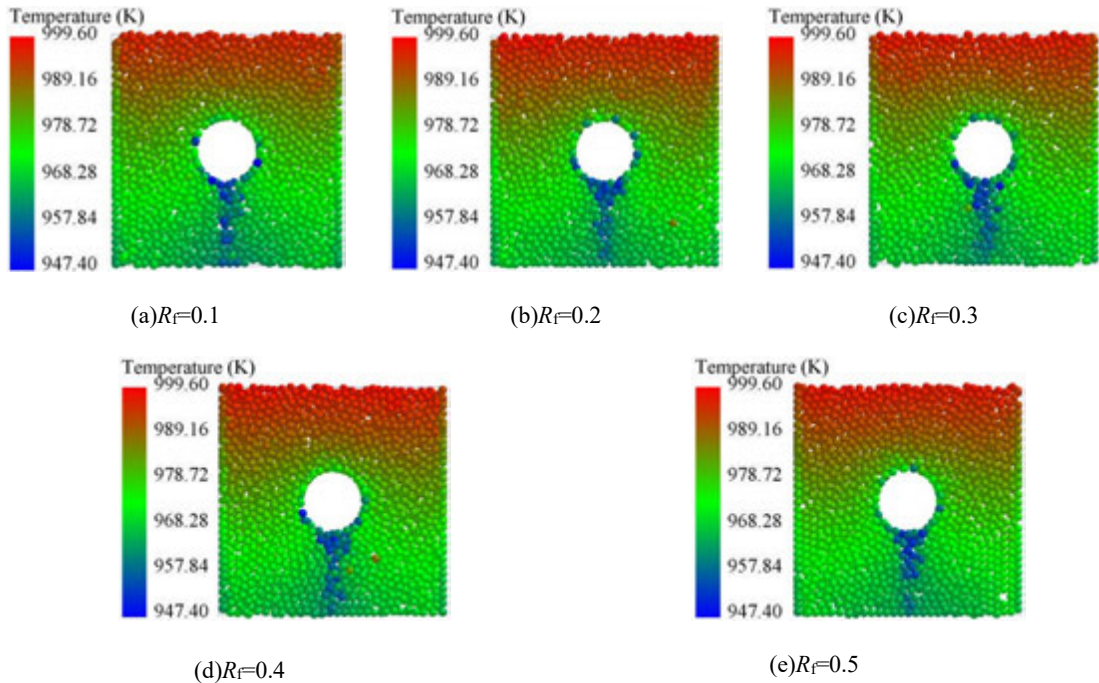
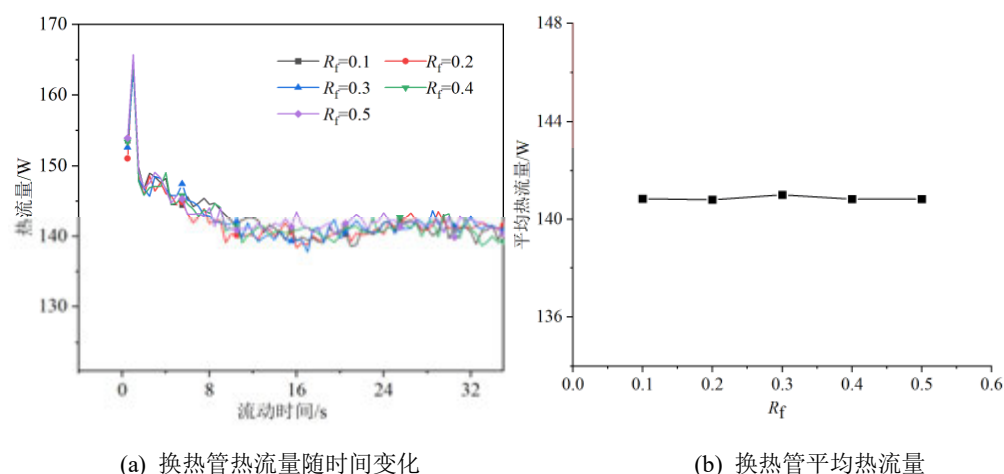


图 7 滚动摩擦系数对颗粒温度场的影响

Fig. 7 Effects of rolling friction coefficient on particle temperature field

颗粒间滚动摩擦系数对颗粒温度场的影响如图 7 所示。由图可知，随着颗粒间滚动摩擦系数增加，换热管下方低温颗粒数量稍有增加。此后随颗粒间滚动摩擦系数的增大，颗粒温度变化不明显，温度分布基本一致。

颗粒间滚动摩擦系数对热流量的影响如图 8 所示。由图 8(a)可知，随时间增加，换热管热流量先大幅增大随后逐渐降低，最后呈现平稳的波动状态。不同滚动摩擦系数的热流量线高度重合，变化情况无明显差别。由图 8(b)可知，随颗粒间滚动摩擦系数增大，换热管平均热流量无明显变化趋势。换热管平均热流量由 140.84 W 减小至 140.83 W。



(a) Heat flow rate of the heat exchanger tube over time (b) Average heat flow rate of the heat exchanger tube

图 8 颗粒间滚动摩擦系数对热流量的影响

Fig. 8 Effects of particle rolling friction coefficient on heat flux

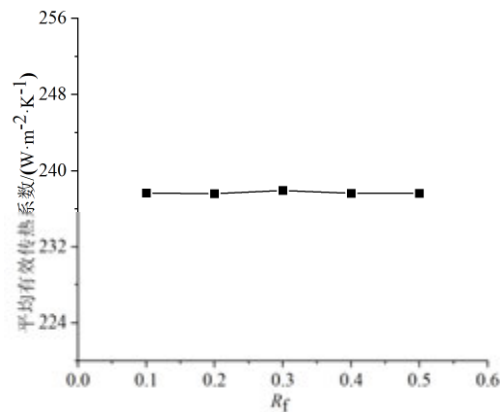


图 9 颗粒间滚动摩擦系数对平均有效传热系数的影响

Fig. 9 Effect of particle rolling friction coefficient on average effective heat transfer coefficient

图 9 为颗粒间滚动摩擦系数对换热管平均有效传热系数的影响，如图所示，随着颗粒间滚动摩擦系数增大，平均有效传热系数未呈现出明显的变化趋势。换热管平均有效传热系数由 237.66 W/(m²·K)减小至 237.64 W/(m²·K)。换热管最大平均有效传热系数与最小平均有效传热系数之间的相对误差小于 0.14%，因此，可认为颗粒间滚动摩擦系数对

换热管的平均有效传热系数无明显影响。

3 结 论

基于 CFD-DEM 方法, 数值模拟研究了颗粒表面粗糙度对高温固体颗粒绕流换热管时传热特性的影响, 结论如下。

(1) 颗粒间静摩擦系数逐渐增大时, 换热管底部空区增大, 颗粒最高温度及最低温度均减小, 颗粒温差增大; 换热管平均热流量不断减小; 换热管平均有效传热系数减小, 余热回收效率降低。颗粒最高温度由 999.3 K 减小至 995.9 K, 最低温度由 951.0 K 减小至 946.8 K, 颗粒最大温差由 48.3 K 增大至 49.1 K; 换热管平均热流量由 142.22 W 减小至 139.03 W, 减小了 2.24%; 换热管平均有效传热系数从 239.99 W/(m²·K) 减小至 234.59 W/(m²·K), 减小了 2.25%。

(2) 随着颗粒间滚动摩擦系数增大, 颗粒的最高温度、最低温度及颗粒温差均未见明显影响; 换热管热流量曲线高度重合, 换热管平均热流量和换热管平均有效传热系数没有明显改变, 余热回收效率未见明显影响。换热管平均热流量由 140.84 W 减小至 140.83 W, 换热管平均有效传热系数由 237.66 W/(m²·K) 减小至 237.64 W/(m²·K)。

参考文献

- [1] 路哲. 我国工业余热回收利用技术现状分析. 装备制造技术, 2019, (12): 204-206.
LU Zhe. Analysis on Current Situation of Industrial Waste Heat Recovery in China. Equipment Manufacturing Technology, 2019, (12): 204-206.
- [2] 王兆龙, 姚沛帆, 张西华, 等. 典型大宗工业固体废物产生现状分析及产生量预测. 环境工程学报, 2022, 16(03): 746-751.
WANG Zhaolong, YAO Peifan, ZHANG Xihua, et al. Current situation analysis and production forecast of typical bulk industrial solid wastes in China. Chinese Journal of Environmental Engineering, 2022, 16(03): 746-751.
- [3] 田兴, 张家悦, 郭志罡, 等. 颗粒外掠含不同掺混单元平板的流动换热特性. 化工学报, 2022, 73(11): 4884-4892.
TIAN Xing, ZHANG Jiayue, GUO Zhigang, et al. Flow and heat transfer characteristics of particles flowing along the plate with different mixing elements. CIESC Journal, 2022, 73(11): 4884-4892.
- [4] Zheng B, Sun P, Liu Y Q, et al. Heat transfer of calcined petroleum coke and heat exchange tube for calcined petroleum coke waste heat recovery. Energy, 2018, 155: 56-65.
- [5] Julian D. Hertel, Stefan Zunft. Experimental validation of a continuum model for local heat transfer in shell-and-tube moving-bed heat exchangers, Applied Thermal Engineering, Volume 206, 2022, 118092.
- [6] Xing Tian, Feng Zhu, Zhigang Guo, et al. Numerical investigation of gravity-driven particle flow along the trapezoidal corrugated plate for a moving packed bed heat exchanger, Powder Technology, Volume 405, 2022, 117526.
- [7] Lin Qiu, Dawei Sang, Yanli Li, et al. Numerical simulation of gas - solid heat transfer characteristics of porous structure composed of high-temperature particles in moving bed, Applied Thermal Engineering, Volume 181, 2020, 115925.

- [8] Sheng Zhang, Liang Zhao, JunSheng Feng, et al. Numerical investigation of the air-particles heat transfer characteristics of moving bed - effect of particle size distribution, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 182, 2022.
- [9] Bin Zheng, Peng Sun, Qiang Zhao, et al. Effects of particle sizes on methanol steam reforming for hydrogen production in a reactor heated by waste heat. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(2019): 5615-5622.
- [10] Panxing Kang, Haizhuan Yuan, Luchang Han, et al. Insight into hydrodynamics and heat transfer characteristics in a gas–solid spout fluidized bed from a multiple zone view, *Applied Thermal Engineering*, Volume 221, 2023, 119800.
- [11] Tal Tsory, Nir Ben-Jacob, Tamir Brosh, et al. Thermal DEM–CFD modeling and simulation of heat transfer through packed bed. *Powder Technology*, 2013, 244.
- [12] Ipsita Mishra, Aaron M. Lattanzi, Casey Q. LaMarche, et al. Experimental validation of indirect conduction theory and effect of particle roughness on wall-to-particle heat transfer. *AIChE Journal*, 2019, 65(10).
- [13] Jens Allard, Sanne Burgers, Miriam Candelaria, et al. Effects of particle roughness on the rheology and structure of capillary suspensions, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Volume 648, 2022, 129224.
- [14] Roger I. Tanner, Computation and experiment in non- colloidal suspension rheology, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Volume 281, 2020, 104282.
- [15] Christopher Hoyle, Shaocong Dai, Roger Tanner, et al. Effect of particle roughness on the rheology of suspensions of hollow glass microsphere particles, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Volume 276, 2020, 104235.
- [16] 武锦涛, 陈纪忠, 阳永荣. 移动床中颗粒接触传热的数学模型. *化工学报*. 2006, 57(4): 719-725.
WU Jintao, CHEN Jizhong, YANG Yongrong. Modeling of contact heat transfer in granular moving bed. *Journal of Chemical Industry Engineering*. 2006, 57(4): 719-725.
- [17] Christine B, David V, Bahman Y, et al. Impact of surface roughness on heat transfer through spherical particle packed beds. *Chemical Engineering Science*, 2021, 231: 116256.
- [18] Vargas W L, McCarthy J J. Stress effects on the conductivity of particulate beds. *Chemical Engineering Science*, 2002, 57(15): 3119–3131.
- [19] Qiu L, Sang D W, Li Y L, et al. Numerical simulation of gas–solid heat transfer characteristics of porous structure composed of high-temperature particles in moving bed. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 181(181): 115925
- [20] A. P. Collier, A. N. Hayhurst, J. L. Richardson, S. A. Scott. The heat transfer coefficient between a particle and a bed (packed or fluidised) of much larger particles. *Chemical Engineering Science* 2004; 59(21): 4613-4620.

有机固废衍生的钙基催化剂用于木质生物 质催化气化制富氢燃气

廖明正, 王超*

(广东工业大学, 材料与能源学院, 广东 广州 510006)

(Tel:18818879086, Email: chaowang@gdut.edu.cn)

摘要 近年来有机固废的增加呈现出惊人的增长趋势。通过利用生物质材料制备多功能钙基催化剂用于木质素类有机固废生产富氢燃气不仅有利于减少污染物排放, 而且有利于生产绿氢, 是一种有效的资源化利用方式。本研究对废蛋壳和废木材进行了工业分析, 元素分析, GC-MS 以及热重分析。本文以废蛋壳为原料制备了 NiCaFeO_x 催化剂, 并将其用于废木材空气、空气-蒸汽气化制氢。采用 x 射线衍射、BET、SEM-EDS、 CO_2 -TPD、 H_2 -TPR 和 TG 对吸附剂和催化剂的性能进行了表征。结果表明, NiCaFeO_x 催化剂上形成了堆叠的双孔径结构。废木材气化后气体产物中 CO_2 含量有效控制在 1.86 ~ 11.29 vol.%, 气体产物中 H_2 含量达到 64.49 %。该项工作通过“以废治废”的绿色化学理念为绿色制氢工艺提供了一种可行的方法。

关键词 木质生物质, 有机固废衍生催化剂, 空气气化, 空气-蒸汽气化, 富氢燃气

0 前言

由于世界人口、城市化和工业化进程, 产生的有机固体废物量迅速增加, 预计到 2050 年将达到每年 34 亿公吨 (MT) [1]。其中, 全球对鸡蛋的大量消费产生了大量蛋壳, 被列为食品加工业十大废弃物之一[2]。废木料也是典型的有机固体废物, 因木屑、锯末、树枝等废木制品在木材工业中常得不到充分利用, 导致在世界范围内年产量极大[3]。事实上, 基于木质素类有机固废通常被认为是更清洁的燃料, 因为它含有比化石燃料低得多的硫含量, 而蛋壳是一种常见的生物材料, 可以生成主要由碳酸钙组成的 CaO (85–95%) 并具有出色的 CO_2 吸收能力。利用生物材料作为能源和化学品的替代资源是实现可持续发展的必经之路[2]。因此, 固体废物管理和适当的技术选择对于有机固体废物的利用至关重要。

氢被认为是最好的能量载体, 是一种很有前景的替代燃料[1]。然而, 目前的制氢原料仍基于煤炭、石油等化石燃料及其衍生物, 这不利于减少温室气体(GHG)排放[3]。从可持续的角度来看, 开发和促进可再生资源的作为氢载体是一个关键问题。生物质制氢的方法有多种, 如热解 (PY)、蒸汽气化(SG)、空气-蒸汽气化 (ASG)、化学链(CL)等[4, 5]。其中, 其中 AG 是一种简单可行的制氢方法。它直接使用空气作为载气, 而不是惰性气体如 N_2 或 Ar 。氧化反应的放热性质作为内部能量补充, 使其比 PY 和 SG 更高效, 更简单。ASG 的价值已被许多模拟研究证实, 其不仅比 AG 产生更多的 H_2 产量, 而且

具有比 AG 更高的碳转化效率[6]。此外, 据报道, ASG 的 H_2 产量与 SG 相当, 同时比后者消耗更少的能源[7, 8]。基赫杜等人。比较了空气-蒸汽和空气-气化的结果, 得出结论, ASG 的碳转化效率 (CCE) 达到 91.5%, 比 AG 高 7.2% [9]。然而, 许多对 ASG 的研究主要集中在非催化 ASG 及其动力学和能量经济分析, 而关于催化 ASG 的报道很少。

在此过程中, 根据勒夏特列原理, 可促进水汽变换(WGS)反应使反应平衡向产氢增大方向转移。CaO 基吸附剂是目前最流行的吸附剂之一, 因为它具有高的 CO_2 容量、丰富的天然资源和相当低的价格。蛋壳的主要成分是碳酸钙(85- 95%), 它具有所有 CaO 吸附剂中优异的 CO_2 吸收能力[10]。这些废蛋壳是制备钙基催化剂环保且经济的原料。有报道称, 经过多次煅烧和碳化循环后, 蛋壳衍生 CaO 吸附剂的 CO_2 吸收能力在稳定性方面优于石灰石和贻贝[10]。Shakirudeen 等人利用废蛋壳作为床层填料捕集蒸汽气化过程中的 CO_2 , 在 650°C 时 CO_2 最小体积浓度降至 3.3%, 最大氢浓度达到 78%[11]。此外, 由于 Ni 等过渡金属具有良好的 C-H 和 C-C 键活化性能, 因此对木质生物质制氢是必需的[6]。

然而, 这些工作主要集中在如何调整吸附剂的性能, 将废蛋壳作为原料制备钙基催化剂生物质非原位气化制氢和 CO_2 固定的多功能催化剂的报道很少。因此, 本研究开发了一种廉价高效的 $NiCaFeO_x$ 催化剂, 用于木质素类有机固废气化制富氢燃气。定量分析了温度和持续气化时间对木材生物质气化重整的影响。建立了实验室规模的有机固废气化制氢装置, 并测试了固废材料衍生的催化剂的性能。

1 实验部分

1.1 实验物料

废蛋壳收集于广东工业大学学生食堂, 废木材样本采集于广东工业大学大学城校区, 被用于生产富氢气体。Mn 和 Ni 的硝酸盐被用作金属源化合物。所有试剂均为分析纯。

1.2 催化剂制备

首先, 以废蛋壳为原料制备 CaO。收集的废蛋壳用去离子水清洗, 在 150 °C 干燥 4 h, 在空气气氛下在 900 °C 下煅烧 3 h, 得到废蛋壳衍生的氧化钙, 记为 E-CaO。

随后通过使用 E-CaO 通过共沉淀法合成 $NiCaFeO_x$ 催化剂。取一定量的 $Ni(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O$ 、 $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ 、聚乙二醇-4000(PEG-4000)、可溶性淀粉和 E-CaO 分别用去离子水溶解。将这些水溶液混合并在室温下剧烈搅拌 10 分钟。然后在剧烈搅拌下将混合物缓慢滴入一定浓度的 NaOH 水溶液中, 然后超声处理 20 分钟。在 90°C 下加热并剧烈搅拌 4 h, 然后当温度降低到 60°C, 停止搅拌并保持 12 h。随后将形成的沉淀物用去离子水洗涤过滤 3 次。将获得的滤饼在 120°C 下干燥 6 小时, 并在空气气氛下在 800 °C 煅烧 3 小时。得到 $NiCaFeO_x$ (30 wt.% NiO, 50 wt.% CaO, and 20 wt.% Fe_2O_3) 催化剂。

1.3 催化剂表征

采用 PARR 6400、GB/T212-2008 和 Elementar vario EL cube 分别测量废木材的热值、元素分析和有机元素分析。结果列于表 1。X 射线粉末衍射光谱 (XRD) 由 XRD Rigaku Ultima IV (日本) 粉末衍射仪仪器实施以确定样品相。在 Thermo Scientific K-Alpha XPS 上进行 X 射线光电子能谱(XPS)分析,以探索催化剂的价态分布。Brunauer-Emmett-Teller (BET) 通过 Mike Tristar II 3flex 设备进行,以获得比表面积和孔结构数据。场发射扫描电子显微镜(FESEM) (Hitachi Regulus 8100) 用于研究样品的表面形貌和元素分布。使用 TGA5500 热重分析仪在空气气氛下研究废木材的气化分解情况。通过 TGA5500 热重 (Air-TG)分析仪在空气气氛中以 10°C/min 的加热速率从 50 °C 至 900 °C 测试废催化剂上的碳沉积。

1.4 实验装置

在 A 炉(加热区域 30 cm)中,将 3g 废木材粉碎,放入定制的石英管中(内径:12mm,总长:50cm)。反应器两端用石英棉覆盖用于保温。将新鲜样品(0.3 g NiCaFeO_x)放入 B 炉,在注入氧化剂 (H₂O, O₂) 之前,在 800°C 下 H₂ 气氛下还原 30 min。用 N₂ 作为吹扫气去除反应器中残留的 H₂。空气流量为 100 ml/min, H₂O 体积流量为 3 ml/min。气样袋收集气相产物在气相色谱仪(GC-2014c 岛津)离线检测。

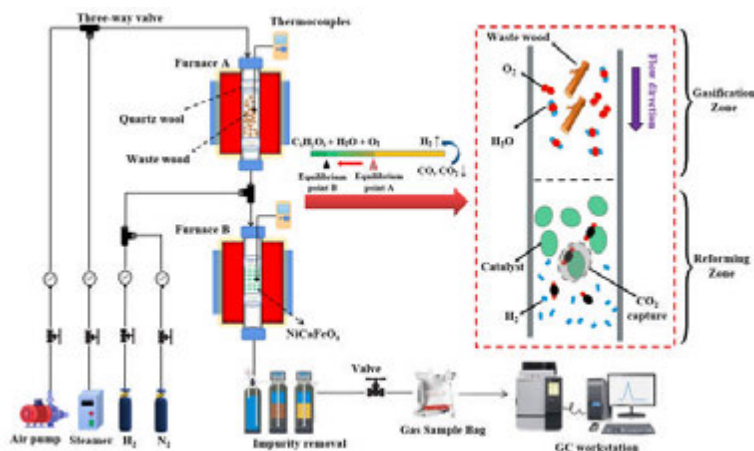


图 1 木质素类物质气化制氢实验装置图.

2 结果与讨论

2.1 催化剂物相分析

对新鲜样品进行 XRD 分析,确定蛋壳衍生 CaO 和 NiCaFeO_x 的物相(图 2(a)). CaO 样品结晶度好,不含杂质。2θ= 32.20°、37.36°、53.86°、64.16°、67.38°和 79.66°处的衍射峰属于 CaO 的(111)、(200)、(220)、(311)、(222)和(400)晶面。在加入 Ni 和 Fe 促进剂后,合成的 NiCaFeO_x 催化剂显示出多种相,部分 CaO 晶相转变为其他形式,仅留下(111)、(200)和(220)晶面。峰强度明显减弱,说明 Ni 和 Fe 物质可能有一定的减小晶粒尺寸的作用。在 2θ = 37.25°(111)、43.29°(200)、62.88°(220)、75.41°(311)和 79.41°(222)时,被识别

为 NiO 相, 是活性金属 Ni 还原前的相, 其中(111)和(200)为主要晶面。其中 Ni(111)晶面被认为是最稳定和催化活性的表面之一[13]。 Fe_2O_3 相分别为 $2\theta=24.15^\circ(012)$ 、 $33.16^\circ(104)$ 和 $62.43^\circ(214)$ 。同时, 检测到 Fe 与 Ni、Ca 相结合形成尖晶石相。 NiFe_2O_4 相在 $2\theta=37.33^\circ(222)$ 、 $43.38^\circ(400)$ 、 $53.83^\circ(422)$ 和 $79.60^\circ(444)$ 处检出。 $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ 相在 $2\theta=22.81^\circ$ 、 24.11° 、 29.22° 、 31.95° 、 33.57° 、 34.23° 、 41.25° 、 43.49° 、 48.29° 、 52.40° 和 57.88° 处的峰分别为(101)、(040)、(131)、(002)、(210)、(022)、(231)、(161)、(222)、(033)和(143)。这些尖晶石相的信号较弱, 大部分被 NiO 和 CaO 主峰淹没, 说明 NiFe_2O_4 和 $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ 是细小颗粒或高度分散在催化剂表面。这些形成的 Fe 物种与氧结合后形成载氧体的对脱氢和积碳气化有一定促进作用。

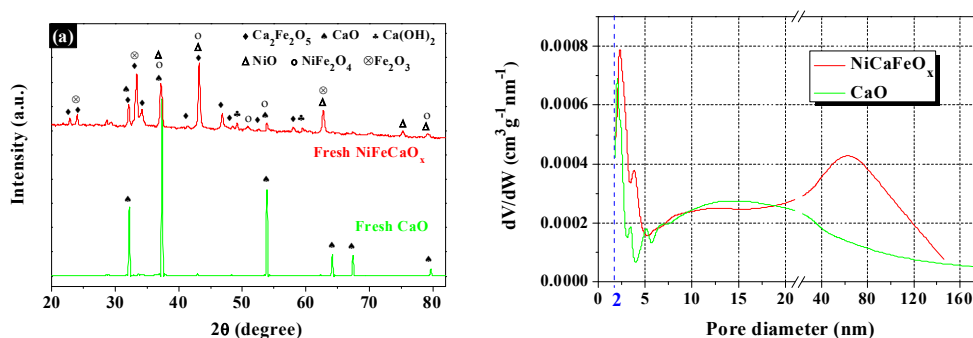


图 2 (a) E-CaO 和 (b) $\text{Ni}_{1.5}\text{Ca}_{4.0}\text{Mn}_{1.0}\text{O}_x$ 催化剂的 XRD 谱图和孔径分布图

2.2 催化剂的孔结构及表面形貌分析

CaO 和 NiCaFeO_x 的孔径分布如图 2(b)所示, 相应的纹理参数汇总如表 2 所示。E-CaO 样品呈现单孔径结构, 而 NiCaFeO_x 在加入 Ni 和 Fe 后, 出现了明显的双孔径分布结构。这种特殊堆叠孔的形成是由于掺杂 Ni 和 Fe 物种后由于颗粒的形状和尺寸的差异所引起的“拱桥效应”。这种双孔径结构结合了介孔(2-50 nm)和大孔(50 nm)的优点, 介孔提供的大的内表面不仅有利于提高 H_2 、CO、 CO_2 、 CH_4 等小分子产物的选择性, 同时大孔有利于废木材分解后所产生体积较大的反应产物(如: 烟气)的扩散。此外, 这些粗大的孔隙可能有助于降低床层压降以及减缓催化剂床由于完全氧化等放热反应产生的局部过热, 确保催化反应稳定进行。因此, 这种催化剂的多功能可能适合于复杂原料下的气化制氢。

新鲜样品和使用后样品的表面形貌如图 3 所示。新鲜废木材呈块状扁平结构, 粒径在 $60 \sim 100 \mu\text{m}$ 左右, 废木材灰分形态多样, 除了块状的形貌, 还存在大量的纳米级粒子。反应后, 这些残余颗粒(图 3(d))由无机矿物组成。除部分碳渣外, 废木材中检测到的元素(图 4(c))分别为 Al、Si、K、Mg 和 Ca。在 900°C 下煅烧获得的 E-CaO 为微米级的块状结构(图 3(b))。在这些大块状颗粒上还形成了一些纳米级颗粒, 这有利于提供更高的比表面积来增强对 CO_2 的吸附。 NiCaFeO_x 表现出均匀的纳米级的颗粒, 同时孔隙较大, 有利于 CO_2 扩散到内部, 提高碳酸化的程度(图 7(c))。各元素均匀分布在催化剂表面(图 3(d))。与图 3(b)和(c)相比, 当 E-CaO 中被 Ni 和 Fe 组分掺入后, 粒径和表面形貌

得到显著改善。这表明掺杂一定量的金属可能是合成高质量 CO_2 吸附剂的可行方法。

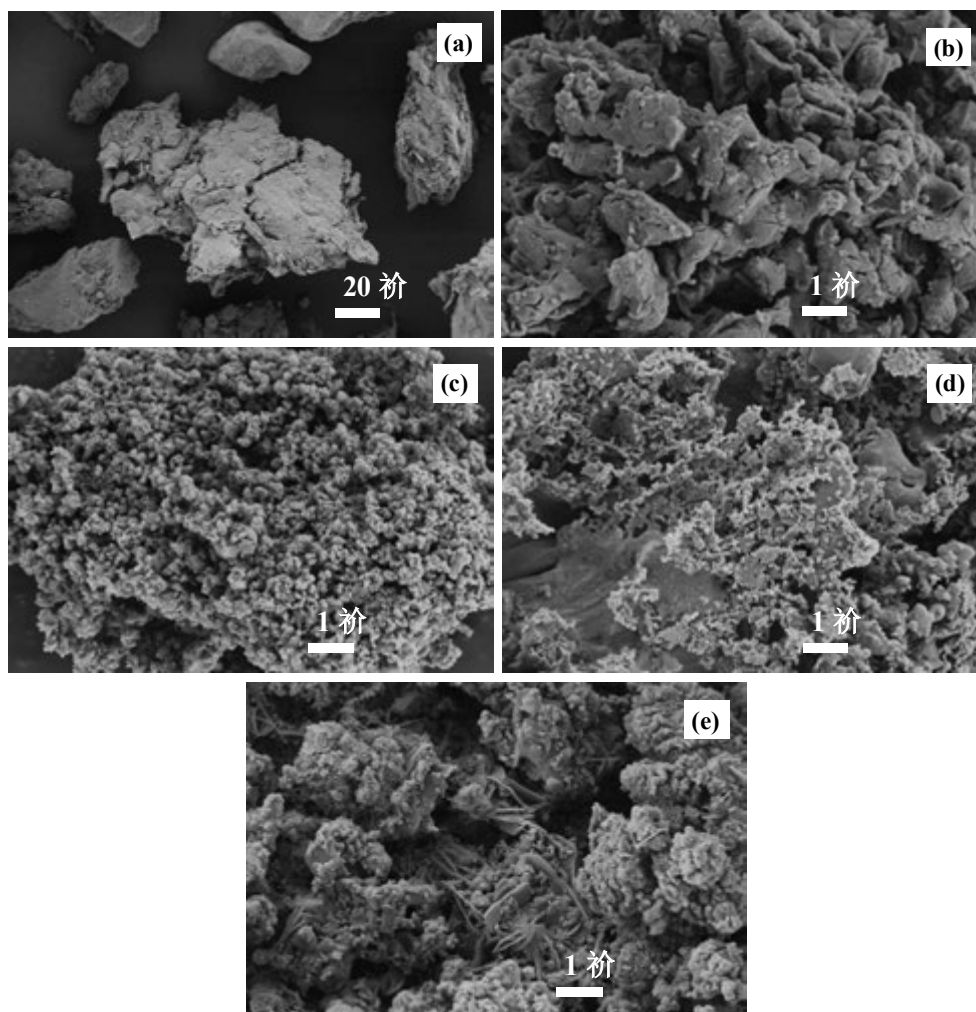
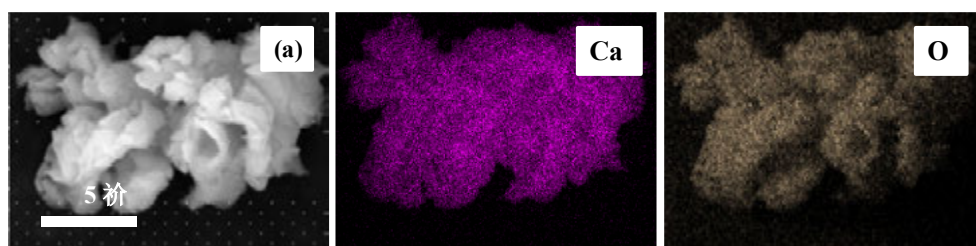
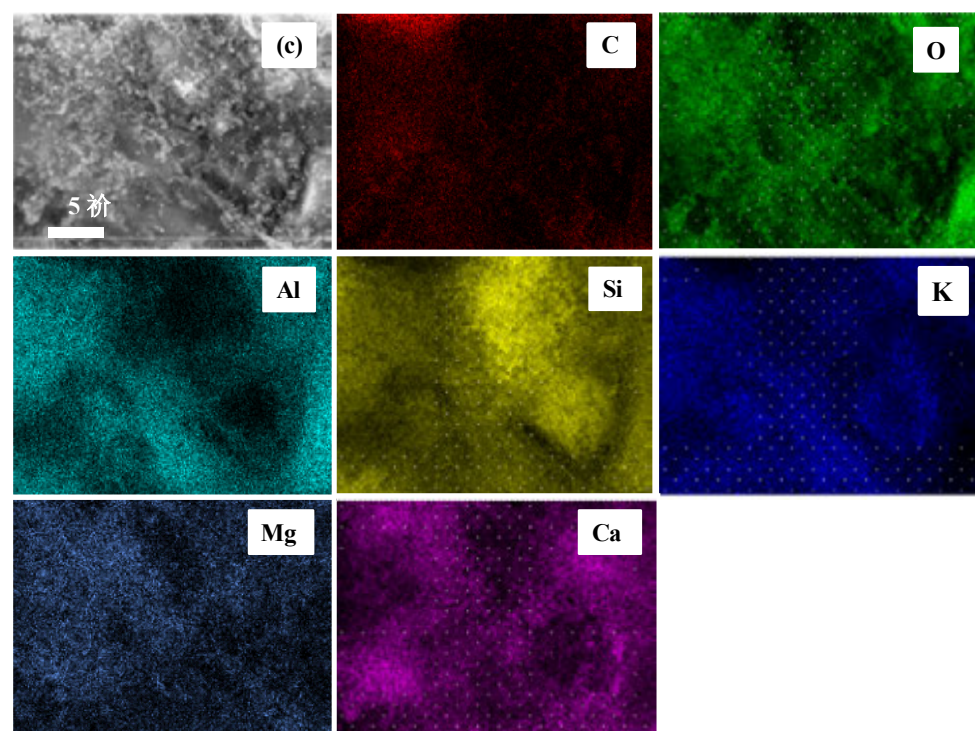
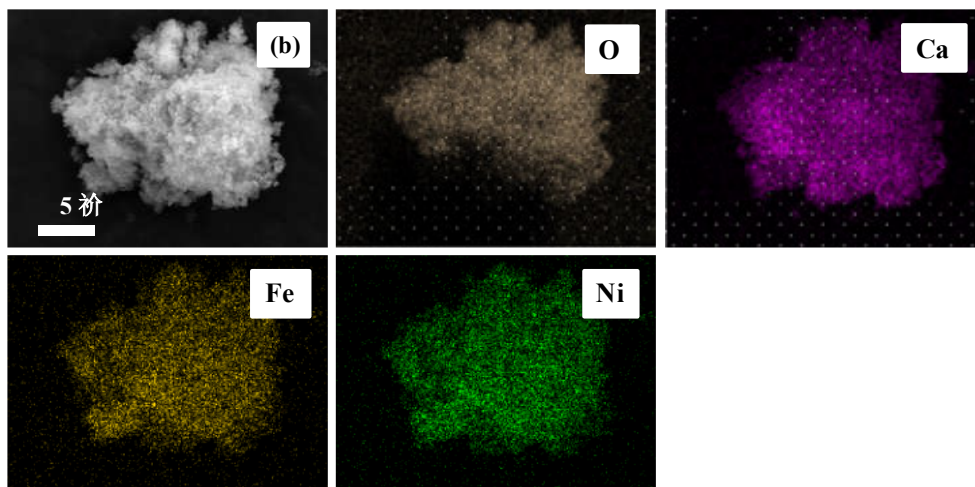


图 3 (a)新鲜防风林; (b)新鲜 CaO ; (c)新鲜 NiCaFeO_x ; (d)防风林灰; (e)花费的 NiCaFeO_x 的 SEM 照片.





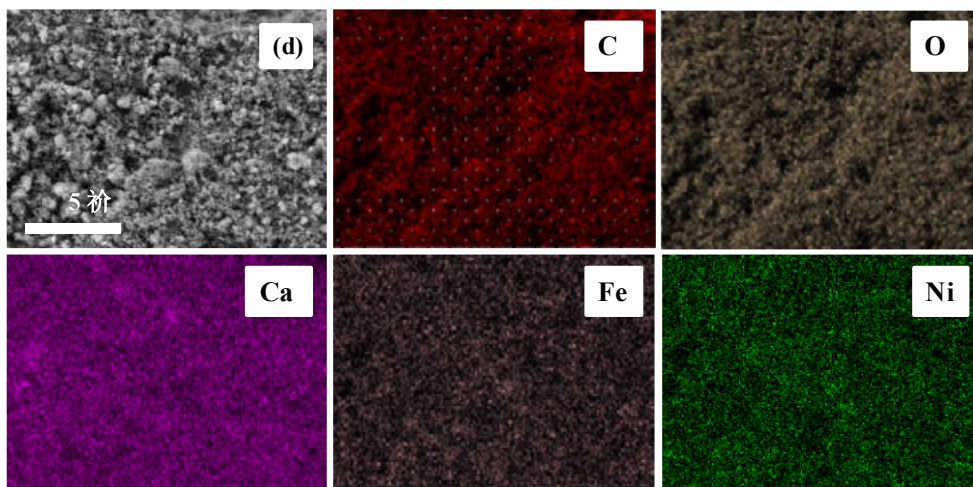


图 4 (a)新鲜蛋壳衍生的 CaO ; (b)新鲜 NiCaFeO_x ; (d)废非木材灰分; (d)废 NiCaFeO_x 的元素分布照片.

2.3 TG 分析

为了研究废木材的气化分解过程，在室温至 1000°C 的空气环境下，在升温速率范围 (10 、 20 和 $50^\circ\text{C}/\text{min}$) 下进行了热重测试，结果如图 5 所示。当升温速率从 10°C 增加到 50°C 时，DTG 峰的位置向更高的温度迁移。在 TG 测试中，每条曲线上检测到四个质量损失峰。缓慢的升温速率为每个阶段的防风林充分分解提供了足够的时间。随着升温速率的增加，在低温阶段分解的物质反应不充分，被迫迁移到更高的温度范围，导致低温和高温的物质在同一温度范围内同时分解。随着升温速率的增加，DTG 峰变平和变宽证实了这一点。然而，所有样品的残留物仍然接近 $20\text{wt.}\%$ ，这反映了加热速率的变化影响了中间过程，但不影响最终产品的数量。

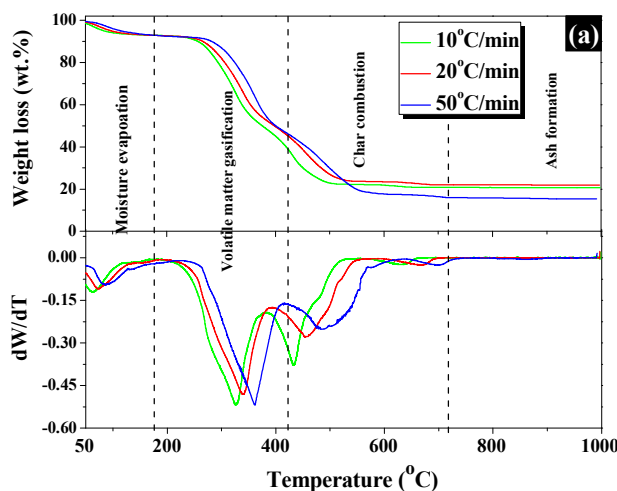


图 5 废木料在空气气氛下分解的热重曲线.

2.4 木质素类生物质气化制氢

根据废木材空气气化的热重结果(图 5), 其分解是在 650°C 附近完成。因此, 选择 $650 \sim 850^{\circ}\text{C}$ 的温度范围, 研究温度对废木材气化的气体产物分布的影响。AG 和 ASG 的产气率及产物分布如图 6 所示。基于元素守恒, AG 的产氢量完全由废木材中的氢元素含量提供。结果显示在 650°C 时产氢效果最好, 产氢量为 $1830.4 \mu\text{mol}/\text{min}$, 产物中氢气占比为 61.83% 。当水蒸汽作为额外氧化剂加入时, 在 WGS 反应促进的作用下, 更多的氢(来源于 H_2O 的解离)参与到 ASG 中, 导致 H_2 产量高于 AG。然而, 值得注意的是, 由于蒸汽重整反应的强吸热特性, ASG 比 AG 需要更高的能量输入。因此, 在中温 ($650\text{--}750^{\circ}\text{C}$) 下, 产氢量较 AG 更低。ASG 的最佳产氢温度为 800°C , 产氢量为 $3085.3 \mu\text{mol}/\text{min}$, H_2 占比为 $53.73 \text{ vol.}\%$, 比 AG 高 $2253.1 \mu\text{mol}/\text{min}$, 含量比 AG 高 13.29% 。因此, 在 750°C 之前, AG 的合成气产量优于 ASG, 而在 750°C 以上, ASG 的合成气产量优于 AG。与早期的生物质气化制氢研究相比, 这些结果具有一定竞争力[14,15]。

此外, 对比了 AG 和 ASG 的气体产物分布随生产时间变化的情况。图 6(d) 中氢气的减少表明, 在 800°C 下, 废木材的分解大约在 15 分钟内完成。因此, 根据废木材分解速率的规律, 废木材进料频率为每 10min/次可实现废木材空气-蒸汽气化的连续制氢。而由元素分析结果可知, 废木材中由于高的含碳量, 从而使得 AG 的 CO 产量一直保持较高且稳定, 但在引入蒸汽 2 min 后, CO 产量得到有效抑制并开始下降。这表明在 WGS 得到有效促进, 导致 H_2 产量增加。

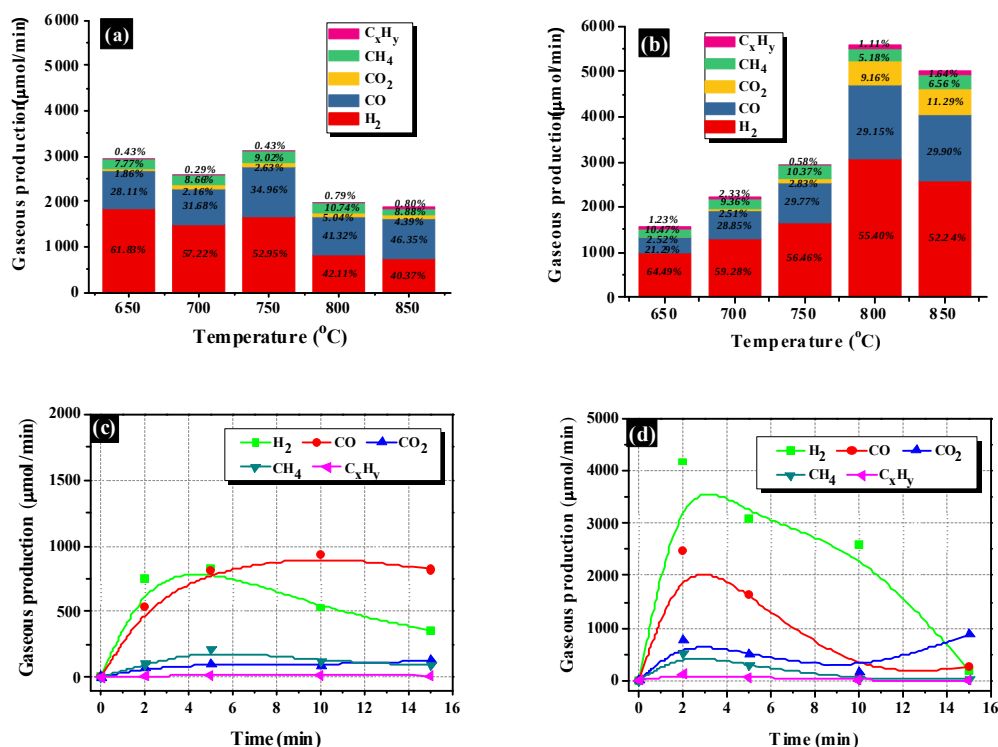


图 6 (a) AG, (b) ASG 的气体生产速率和气体产品分布; (c) AG, (d) ASG 产气分布随时间的变化。

2.5 废催化剂分析

废 NiCaFeO_x 的表面结构和元素分布分别如图 3(e)和图 4(d)所示。没有观察到碳纳米管。结合扫描电镜的结果,这些碳可能以颗粒形式沉积在 NiCaFeO_x 表面。为了进一步研究碳沉积行为,进行了 air-TG 测试。检测出 2.8 wt.%的质量损失,这归因于气化的碳沉积在催化剂上。因此,通过气化每克废旧木材沉积在 NiCaFeO_x 催化剂上的积碳量为 $2.8 \times 10^{-3} \text{ g}_{\text{carbon}}/\text{g}_{\text{wood}}$ 。检测到 3 个 DTG 峰,441 °C 和 650 °C 的质量损失峰分别属于两种碳的气化。TG 程序在升温过程中,碳沉积气化会产生大量的 CO₂,而在 750°C附近的轻微增重,可能是由于 NiCaFeO_x 对分解产生的 CO₂ 的吸附,导致质量增加 0.47 wt.%。

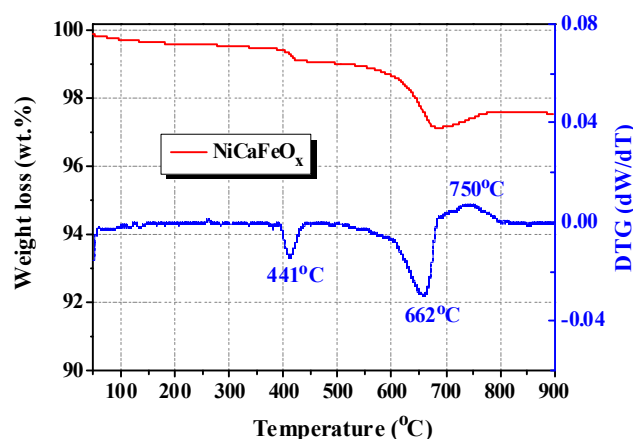


图 7 废 NiCaFeO_x 催化剂氧化脱碳的 TG-DTG 曲线.

3 结 论

本研究验证了利用废蛋壳衍生催化剂进行木质素类有机固废气化制富氢燃气的可行性。废木料空气气化存在四个质量损失阶段,合成的 NiCaFeO_x 出现了堆叠的双孔结构,并在 NiCaFeO_x 表面检测到尖晶石结构 CaFe₂O₅ 和 NiFe₂O₄。WGS 反应、CaO 碳酸化反应和甲烷化逆反应共同作用下显著降低含碳物质的产量并显著提高 H₂ 产量。AG 和 ASG 的 CO₂ 含量都有效地控制在较低的范围内(1.86-11.29 vol.%)。AG 和 ASG 的最高 H₂ 产量分别为 1830.4 μmol/min 和 3085.3 μmol/min。由于热力学特性上的差异,AG 在 750°C 以下产合成气性能优于 ASG,而 ASG 在 750°C 以上的合成气性能优于 AG。在 800°C 条件下,ASG 过程中废木材的分解在 15 min 左右完成,在 10 min 内的平均产氢速率在 3000 μmol/min 以上(产物中 H₂ 含量为 55.4 vol.%)。每克废木材气化后, NiCaFeO_x 催化剂上沉积的碳量为 $2.8 \times 10^{-3} \text{ g}_{\text{carbon}}/\text{g}_{\text{wood}}$ 。本研究为利用废木材和废蛋壳实现高效制氢和碳减排提供了一条可行的途径。

参考文献

- [1]. Ji G, Yao J G, Clough P T, et al. Enhanced hydrogen production from thermochemical processes. *Energy & Environmental Science*, 2018, 11: 2647.
- [2]. Nazim, Muradov. Low to near-zero CO₂ production of hydrogen from fossil fuels: Status and perspectives. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42: 14058.
- [3]. R B Jackson, C Le Quéré, R M Andrew, et al. Global energy growth is outpacing decarbonization. *Environmental Research Letters*, 2018, 13: 120401.
- [4]. Torshizi M R, Miri A, Shahriari A, et al. The effectiveness of a multi-row Tamarix windbreak in reducing aeolian erosion and sediment flux, Niatak area, Iran. *Journal of environmental management*, 2020, 265: 110486.
- [5]. D H MA. Research on the Method of Building Forest Fire Prevention Belt by Burning in Northeast Forest Region. *Forestry Labour Safety*, 2007.
- [6]. W Ngamchompoo, K Triratanasirichai. Experimental investigation of high temperature air and steam biomass gasification in a fixed-bed downdraft gasifier. *Energy Sources Part A Recovery Utilization & Environmental Effects*, 2017, 39: 733.
- [7]. K Y Chiang, C H Lu, K L Chien. Enhanced energy efficiency in gasification of paper-reject sludge by a mineral catalyst. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2011, 36: 14186.
- [8]. Y Tian, X Zhou, S Lin, et al. Syngas production from air-steam gasification of biomass with natural catalysts[J]. *Science of The Total Environment*, 2018, 645: 518.
- [9]. D Sutton, B Kelleher, J Ross. Review of literature on catalysts for biomass gasification. *Fuel Processing Technology*, 2001, 73: 155.
- [10]. Y Tursun, S Xu, A Abulikemu, et al. Biomass gasification for hydrogen rich gas in a decoupled triple bed gasifier with olivine and NiO/olivine. *Bioresource Technology*, 2018, 272: 241.
- [11]. S Zhao, P Yang, X Liu, et al. Synergistic effect of mixing wheat straw and lignite in co-pyrolysis and steam co-gasification. *Bioresource Technology*, 2020, 302: 122876.
- [12]. A S Al-Rahbi, P T Williams. Hydrogen-rich syngas production and tar removal from biomass gasification using sacrificial tyre pyrolysis char. *Applied Energy*, 2017, 190: 501.
- [13]. Y X Ran, Z Y Du, Y P Guo, et al. Density functional theory study of acetic acid steam reforming on Ni(111). *Applied Surface Science*, 2016, 400: 97.
- [14]. H Nam, S Wang, K C Sanjeev, et al. Enriched hydrogen production over air and air-steam fluidized bed gasification in a bubbling fluidized bed reactor with CaO: Effects of biomass and bed material catalyst. *Energy Conversion and Management*, 2020, 225: 113408.
- [15]. S Valizadeh, S L Su, H K Chang, et al. Biohydrogen production from catalytic conversion of food waste via steam and air gasification using eggshell-and homo-type Ni/Al₂O₃ catalysts. *Bioresource Technology*, 2021, 320: 124313.

翼型结构微反应器甲醇重整制氢特性

刘舜, 邓越尘, 杜小泽*

华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京, 102206

Tel: 010-61773923, Email: duxz@ncepu.edu.cn

摘要: 为了强化余热供热的甲醇重整反应过程, 设计了采用翼型结构强化换热的微反应器, 数值模拟了反应器内物理化学耦合驱动的传热传质过程, 探究了反应侧和热空气侧进口参数对制氢过程的影响, 同时对比了不同流型布置下反应器的制氢性能。结果显示, 逆流布置的反应器能获得更高的反应侧温度, 在反应侧进口温度 423 K, 进口流速 0.06 m/s, 水醇比 1.1, 热空气进口温度 593 K, 进口流速 1 m/s 时, 反应器出口甲醇转化率达到 96.2%, 氢气摩尔分数达到 0.674。

关键词: 制氢; 甲醇水蒸气重整; 翼型结构; 微反应器

0 前言

氢能具有高能量密度、清洁无污染^[1], 被认为是未来最具潜力的能量载体之一, 同时也是国家构建清洁低碳、安全高效的能源体系的重要组成部分。甲醇氢碳比含量高, 便于储运, 作为原料制氢时反应温度低^[2]。为了强化传热传质, 提高甲醇转化率, 甲醇重整制氢反应器一直以来都是研究的重点。Zhang 等^[3]使用带有螺旋状鳍片的加热管进行加热, 明显改善了固定床反应器中的冷点问题, 在 523 K 温度下, 甲醇转化率可以提高 8.47%。Lu 等^[4]对比研究了直流型微通道与正弦波型微通道反应器, 结果表明带有凹槽的正弦波微反应器增强了热量和质量输运, 有着出色的氢气生产能力。Peng 等^[5]提出了一个带有入口喷嘴和出口扩散器的板状甲醇重整反应器。由于喷嘴的挤压和出口扩散器的延缓作用, 使更多的反应物通过催化层并停留更长时间, 与常规反应器相比甲醇转化率提高了 21.04%。姚峰^[6]开展了对圆盘形树状微通道甲醇重整反应器的数值模拟, 发现分叉级数增多可以提高微通道面积体积比, 延长反应物与催化剂的接触时间。

甲醇重整为强吸热反应, 利用工业废气、汽车尾气等余热为重整反应器供热, 在热量回收的同时生成氢气, 减少能源浪费^[7-9]。然而目前关于余热加热反应器的研究较少, 需要设计优化反应器结构来提升重整性能。翼型结构被广泛使用于换热器中, 可以在强化换热的同时减小流动阻力^[10,11], 本文设计了一个余热加热的翼型结构微反应器, 并通过数值模拟考察了操作参数变化对其制氢性能的影响。

1 翼型结构反应器模型

1.1 物理模型

翼型结构反应器如图 1 所示。反应器总长 58mm, 宽 32mm, 进出口各有长 8mm, 50° 倾角的分布腔, 使进入反应通道的流速和反应物分布均匀。反应器上层为反应通道,

下层为加热通道，均高 1 mm，之间采用厚 0.5 mm 的隔板隔开。反应通道内部布置有翼型翅片阵列，在翼型翅片表面和底板涂覆有 200 μm 的 Cu/ZnO/Al₂O₃ 催化剂^[12]，其孔隙率为 0.36，导热系数为 1 W/(m •K)。因翼型翅片交错排列相比平行排列流动速度更均匀，传热性能更好^[13]，同时反应仅发生在催化剂区域，翼型通道单元中间的反应物浓度高于翼型壁面催化剂涂层处反应物浓度，交错排列可以重新导向流体流动方向，使上一层通道单元中间反应物流向催化剂层进行反应，故翼型阵列采用交错排列。翅片横向间距 3 mm，纵向交错间距 5 mm，周期间距为 10 mm，共有 8 行 76 个翼型翅片。其中翼型结构采用 NACA 0020 翼型^[14]，弦长 5 mm。甲醇和水的混合气体从一侧通入，进入有催化剂的通道部分时开始反应。热空气从加热通道一侧通入进行换热，为甲醇重整反应提供热量。

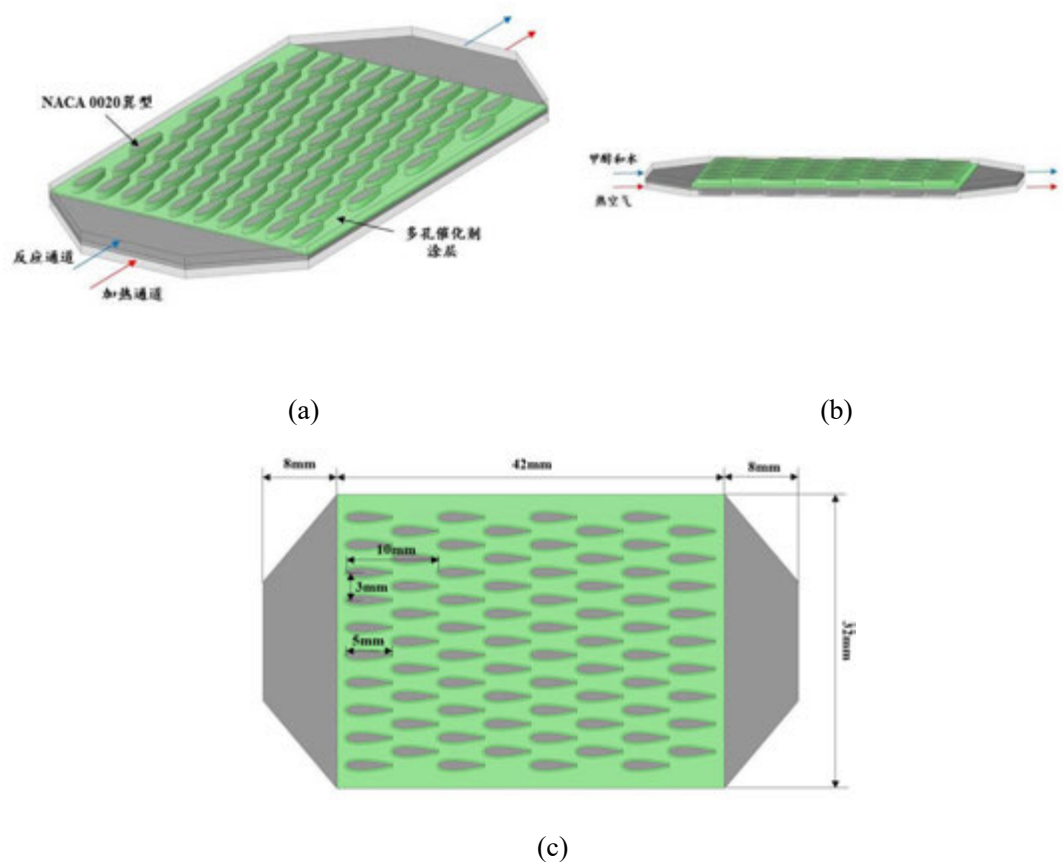


图 1 翼型结构反应器示意图

1.2 数学模型

连续性方程，

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \tag{1}$$

动量方程，

$$\varepsilon(\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} = -\frac{\varepsilon}{\rho} \nabla p + \frac{\varepsilon\mu}{\rho} \nabla^2 \vec{u} + S_i \quad (2)$$

式中, ε 是催化剂的孔隙率, ρ 和 μ 是气体混合物的密度和动力粘度, S_i 是在催化剂多孔介质中产生的动量源项, 在流体区域该项为 0, 在催化层区域, 通过公式(3)计算:

$$S_i = -\left(\frac{\mu}{\rho\kappa} \vec{u} + \frac{\beta\vec{u}}{2} |\vec{u}|\right) \quad (3)$$

式中, κ 是渗透率, β 是惯性阻力系数, 它们通过厄根公式^[15]来求解:

$$\kappa = \frac{D_p^2 \varepsilon^3}{150(1-\varepsilon)^2} \quad \beta = \frac{3.5(1-\varepsilon)}{D_p \varepsilon^3} \quad (4)$$

组分输运方程:

$$\varepsilon \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \varepsilon(\vec{u} \cdot \nabla)Y_i = D_{eff} \nabla^2 C_i + \varepsilon \sum_{r=1}^N M_{w,i} R_{i,r} \quad (5)$$

式中, 最后一项是描述多孔介质内化学反应的源项, 非催化剂区域该项为 0。 C_i 是组分 i 的质量分数, $R_{i,r}$ 是组分 i 在反应 r 中的摩尔产生或消耗速率。 D_{eff} 是有效质量扩散系数, 可以通过 Stefan-Maxwell 方程求解^[16]:

$$D_{eff} = D_k \varepsilon^\tau \quad (6)$$

式中, D_k 是气体混合物的质量扩散系数。

能量方程:

$$(\rho c_p)(\vec{u} \cdot \nabla)T = k \nabla^2 T + \varepsilon S_t \quad (7)$$

式中, c_p 是混合物的比热容, k 是导热系数, 在流体区域中 k 为混合流体的导热率, 在催化剂层 k 为有效导热系数, 通过下式计算:

$$k = \varepsilon k_f + (1-\varepsilon)k_s \quad (8)$$

式中, k_f 和 k_s 分别是多孔催化剂中流体和固体的导热率。

1.3 反应动力学模型

甲醇蒸汽重整制氢反应动力学模型主要分为单速率模型, 双速率模型, 三速率模型。本研究采用 Peppley 等^[17]提出的基于 Langmuir-Hinshelwood 理论的四速率模型, 它包含了以下三个反应, 可以较为全面准确反映甲醇水蒸气重整过程。

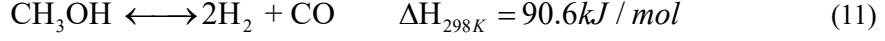
甲醇水蒸气重整(MSR):



水汽置换反应(WGS):



甲醇分解反应(DE):



其对应的化学反应速率如下:

$$R_{\text{MSR}} = \frac{k_{\text{MSR}} K_{\text{CH}_3\text{O}^{(1)}} (p_{\text{CH}_3\text{OH}}/p_{\text{H}_2}^{1/2}) (1 - p_{\text{H}_2}^3 p_{\text{CO}_2} / K_{\text{MSR}} p_{\text{CH}_3\text{OH}} p_{\text{H}_2\text{O}}) C_{\text{S}_1}^{\text{T}} C_{\text{S}_{1a}}^{\text{T}} S_c \rho_c}{(1 + K_{\text{CH}_3\text{O}^{(1)}} (p_{\text{CH}_3\text{OH}}/p_{\text{H}_2}^{1/2}) + K_{\text{HCOO}^{(1)}} p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}^{1/2} + K_{\text{OH}^{(1)}} (p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{H}_2}^{1/2})) (1 + K_{\text{H}^{(1a)}}^{1/2} p_{\text{H}_2}^{1/2})} \quad (12)$$

$$R_{\text{WGS}} = \frac{k_{\text{WGS}} K_{\text{OH}^{(1)}} (p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{H}_2}^{1/2}) (1 - p_{\text{H}_2} p_{\text{CO}_2} / K_{\text{WGS}} p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2\text{O}}) C_{\text{S}_1}^{\text{T}} S_c \rho_c}{(1 + K_{\text{CH}_3\text{O}^{(1)}} (p_{\text{CH}_3\text{OH}}/p_{\text{H}_2}^{1/2}) + K_{\text{HCOO}^{(1)}} p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}^{1/2} + K_{\text{OH}^{(1)}} (p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{H}_2}^{1/2}))^2} \quad (13)$$

$$R_{\text{DE}} = \frac{k_{\text{DE}} K_{\text{CH}_3\text{O}^{(2)}} (p_{\text{CH}_3\text{OH}}/p_{\text{H}_2}^{1/2}) (1 - p_{\text{H}_2}^2 p_{\text{CO}} / K_{\text{DE}} p_{\text{CH}_3\text{OH}}) C_{\text{S}_2}^{\text{T}} C_{\text{S}_{2a}}^{\text{T}} S_c \rho_c}{(1 + K_{\text{CH}_3\text{O}^{(2)}} (p_{\text{CH}_3\text{OH}}/p_{\text{H}_2}^{1/2}) + K_{\text{OH}^{(2)}} (p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{H}_2}^{1/2})) (1 + K_{\text{H}^{(2a)}}^{1/2} p_{\text{H}_2}^{1/2})} \quad (14)$$

式中 k_i 和 K_i 是反应 i 的反应速率常数和反应平衡常数。 p_i 为组分 i 的分压力。

2 数值模型和网络无关性验证

2.1 模型验证

数值模型采用速度入口和压力出口边界条件, 流体与反应器壁面无物质传递, 流体区域与催化剂层交界面物质、温度和热流连续。本文采用 Ansys Fluent 对模型的控制方程进行求解。压力速度耦合采用 COUPLED 算法, 压力梯度采用 PRESTO! 方案, 动量、组分和能量方程中的对流项均使用二阶迎风格式离散。当计算残差小于 10^{-6} 以下且出口各监测量稳定时可认为计算已收敛。

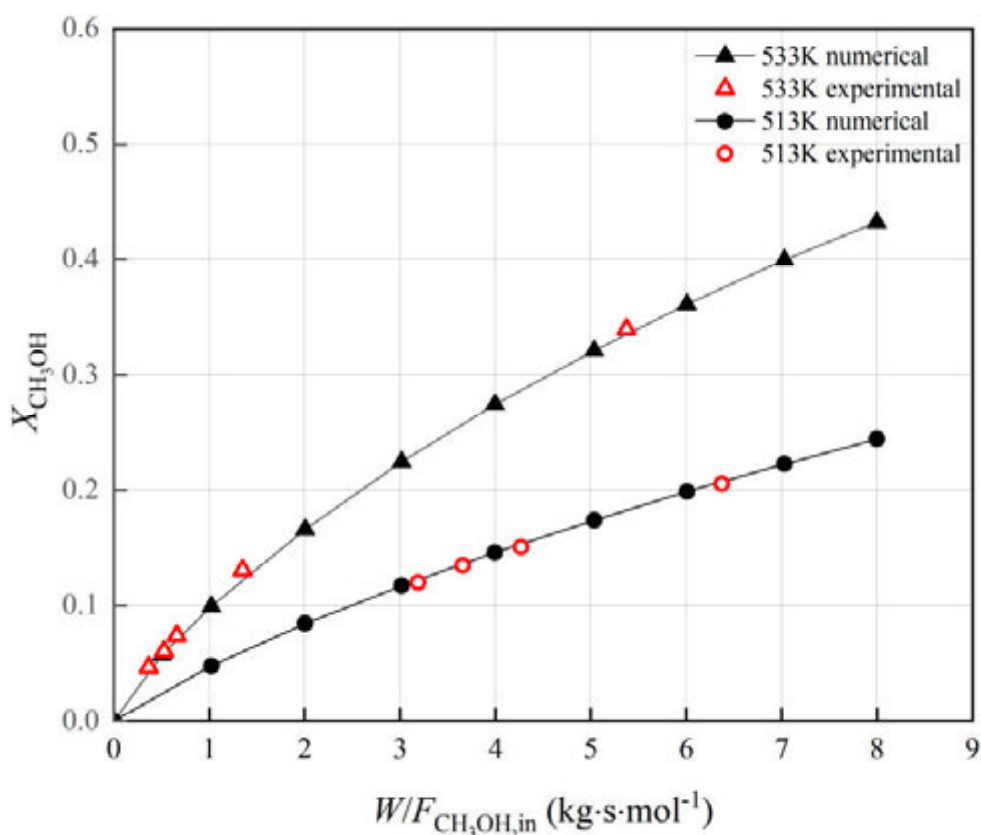


图2 模拟结果与 Peppley 实验结果对比

为了验证建立模型的可行性，本文将模拟结果与 Peppley 等^[17]的实验结果进行了对比。如图 2 所示，本文模拟了在温度为 513 K 和 533 K，操作压力为 1 atm，水醇比为 1 的条件下，不同 $W/F_{CH_3OH,in}$ （催化剂质量/进口甲醇质量流量）对应的甲醇转化率。可以看出，模拟结果和实验结果非常相似，最大的差值小于 1%，在可接受的范围内。证明了数值模型模拟甲醇重整反应过程的准确性和可靠性。

2.2 网格无关性检验

表 1 网格无关性验证

网格数量	1300807	2754009	6422826
反应侧出口平均温度 $T_{R,out}$	532.69	532.04	532.03
甲醇转化率 X_{CH_3OH}	0.9371	0.9334	0.9329
出口甲醇摩尔分数 Y_{CH_3OH}	0.0168	0.0178	0.0179
出口氢气摩尔分数 Y_{H_2}	0.6642	0.6622	0.6626
出口一氧化碳摩尔分数 Y_{CO}	0.0210	0.0204	0.0203

为了避免网格密度对模拟结果的影响，本文进行了网格无关性检验。表 1 说明了在反应物进口温度 423 K，流速 0.05 m/s，水醇比 1.1，热空气进口温度 573 K，流速 1 m/s

的情况下,不同网格数量对反应器甲醇转化率 $X_{\text{CH}_3\text{OH}}$ 、反应侧出口平均温度 $T_{\text{R,out}}$ 以及各组分摩尔分数 Y_m 的影响。可以看出当网格数量为 2754009 和 6422826 时,网格加密对数值模拟结果提升的效果较小。因此为了节省时间以及保证模拟的准确性,本文采用 2754009 的网格数量进行计算。

3 结果与讨论

3.1 反应侧参数的影响

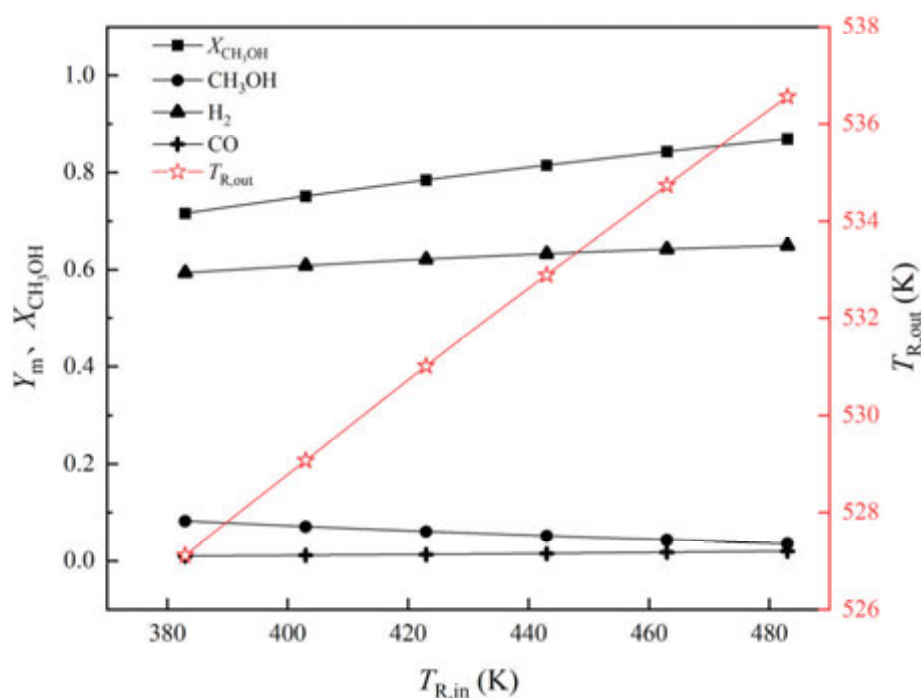


图3 甲醇转化率及出口各组分摩尔分数随反应物进口温度变化

在反应物进口流速 0.06 m/s, 水醇比 1.1, 热空气进口温度 573 K, 流速 1 m/s 时, 考察了反应物进口温度对翼型结构甲醇重整反应器的影响。如图 3 所示为甲醇转化率、反应侧出口温度以及出口各组分摩尔分数随反应物进口温度的变化情况。可以看出, 随着反应物进口温度升高, 出口甲醇摩尔分数减小, 氢气和一氧化碳摩尔分数增大, 说明有更多的甲醇被消耗, 甲醇转化率提高。MSR 和 DE 反应都为强吸热反应, 反应物进口温度越高, 可以为反应提供的热量越多, 促进反应的进行。反应进口温度从 383 K 上升到 483 K 过程中, 进口温度每提升 20 K, 出口温度提升 2 K 左右, 大部分热量被反应所吸收, 同时甲醇转化率虽然有提升, 但转化率仅增加了 3% 左右, 说明提高反应物进口温度对反应器性能的效果较小。

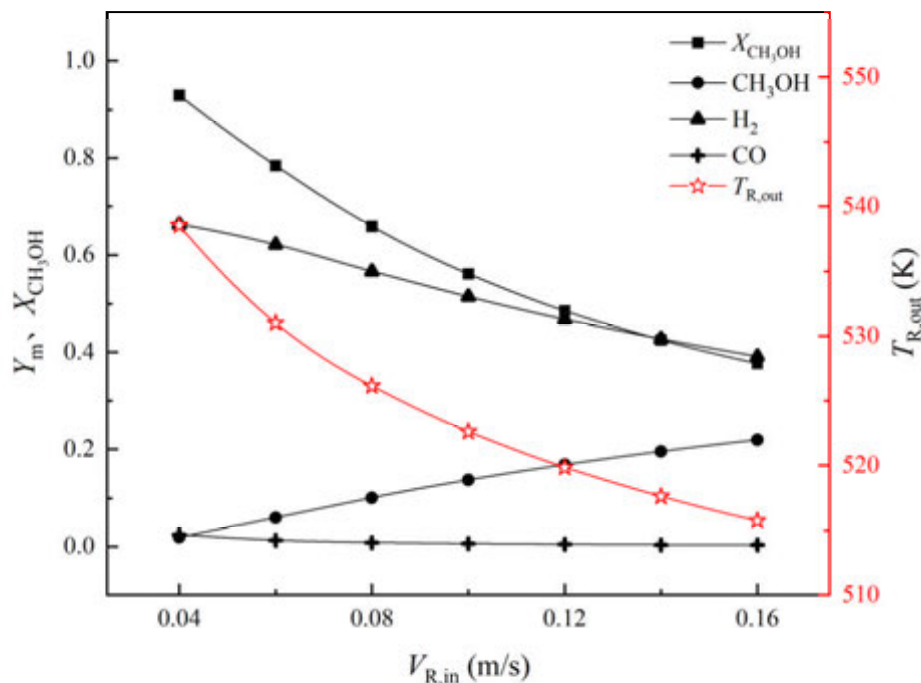


图4 甲醇转化率及出口各组分摩尔分数随反应物进口流速变化

为了探究反应物进口流速对反应器制氢效果的影响,进口流速从 0.04 m/s 到 0.16 m/s 之间变化,反应物进口温度 423 K,水醇比 1.1,热空气进口温度 573 K,流速 1 m/s 固定不变。图 4 所示为甲醇转化率、反应侧出口温度以及出口各组分摩尔分数随反应物进口流速的变化情况,流速增大时,除了甲醇摩尔分数增大,其余参数均不同程度的减小,甲醇转化率下降明显,进口流速为 0.04 m/s 时,甲醇转化率为 92.9%,出口氢气摩尔分数为 0.662,当进口流速为 0.16 m/s 时,甲醇转化率和出口氢气摩尔分数仅为 37.6%和 0.391。进口流速增大,进入反应器的反应物增多,需要吸收的热量增大,而热空气侧进口参数不变,可提供的热量有限,导致反应侧出口温度下降,反应速率减缓。此外进口流速增大也会使反应物在反应通道内的停留时间变短,与热空气的换热量减少,同时反应物也无法与催化剂充分接触,使得甲醇转化率降低。

在反应物进口温度 423 K,流速 0.06 m/s,热空气进口温度 573 K,流速 1 m/s 时,反应物水醇比变化对反应器性能的影响如图 5 所示。可以看出,随着水醇比增大,甲醇转化率逐渐上升,这是因为水的浓度增加可以促进 MSR 反应和 WGS 反应正向进行,更多的甲醇被消耗产生氢气,但由于出口水含量也增加,所以出口的氢气摩尔分数下降。

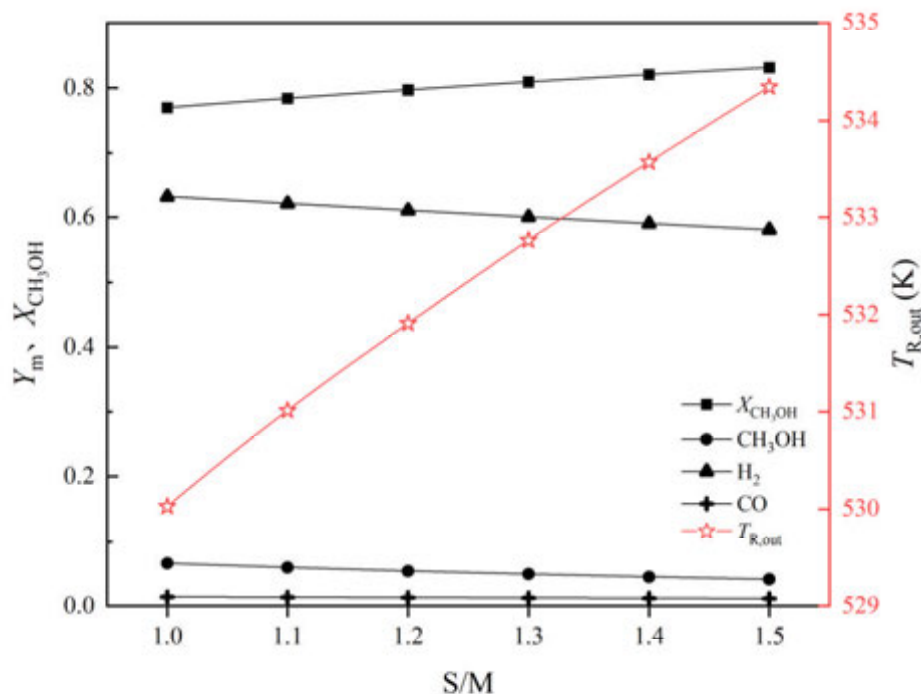


图5 甲醇转化率及出口各组分摩尔分数随反应物进口水醇比变化

3.2 热空气侧参数的影响

为了探究热空气进口温度和流速对反应器制氢效果的影响，固定反应物进口温度为 423 K，进口流速为 0.06 m/s，水醇比为 1.1。图 6 所示为热空气进口流速 1 m/s 时，反应侧出口温度和出口各个组分摩尔分数随热空气进口温度的变化。可见，热空气进口温度上升，促进了 MSR 和 DE 反应，甲醇转化率迅速提高，在热空气进口温度为 633 K 时，甲醇转化率最高可达 99.8%。当进口温度上升到 593 K 之后，继续提高温度，甲醇转化率和出口氢气摩尔分数上升减缓，而反应侧出口温度上升速率明显增加，因为此时大部分甲醇已经反应完全，热空气更多的热量用来提高反应侧的气体温度，而不是被反应所利用。同时，更高的温度和氢气浓度会使得 WGS 逆向速率增大，出口一氧化碳的摩尔分数明显增加。考虑到热量浪费以及一氧化碳不是理想产物，热空气进口温度为 593 K 比较适宜。

由图 7 可见，热空气进口温度为 573 K 时，热空气进口流速和甲醇转化率呈正相关，流速越大热空气可以为反应侧提供热量越多，然而甲醇转化率和反应侧出口温度增速减缓，这是因为反应侧化学反应吸收的热量有限，流速增大使得热空气无法充分换热就排出反应器，大部分热量被浪费。同时热空气流速增大，导致反应侧温度上升，也会促进 DE 反应和逆向 WGS 反应，一氧化碳含量增加。当热空气进口流速从 1 m/s 变化为 2 m/s 时，出口氢气摩尔分数提升很小，仅从 0.621 增大到了 0.661，因此热空气进口流速选取 1 m/s 相对合理。

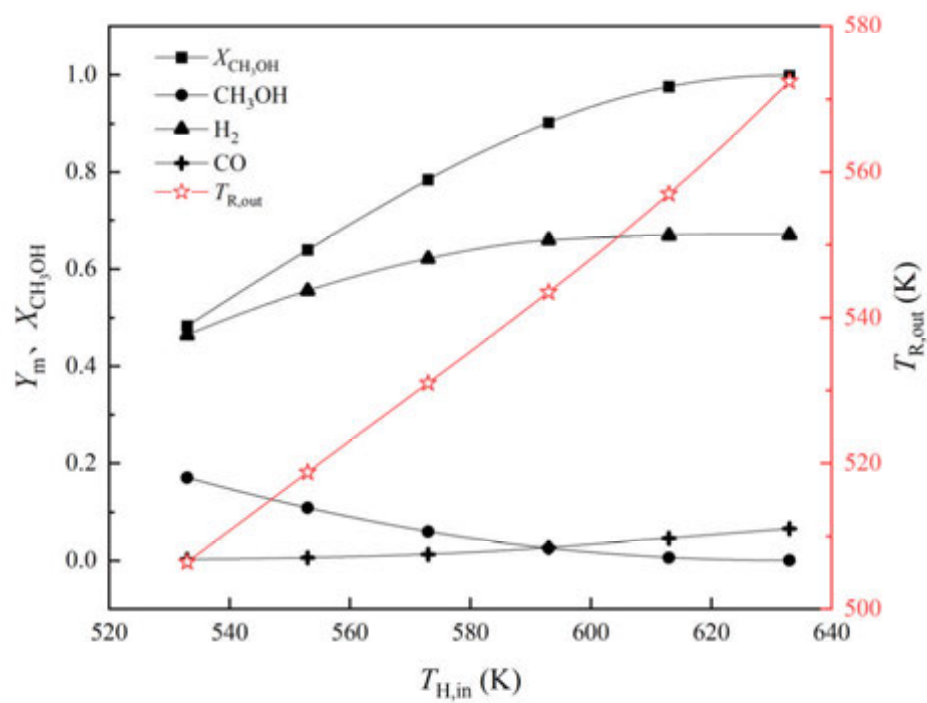


图 6 甲醇转化率及出口各组分摩尔分数随热空气进口温度变化

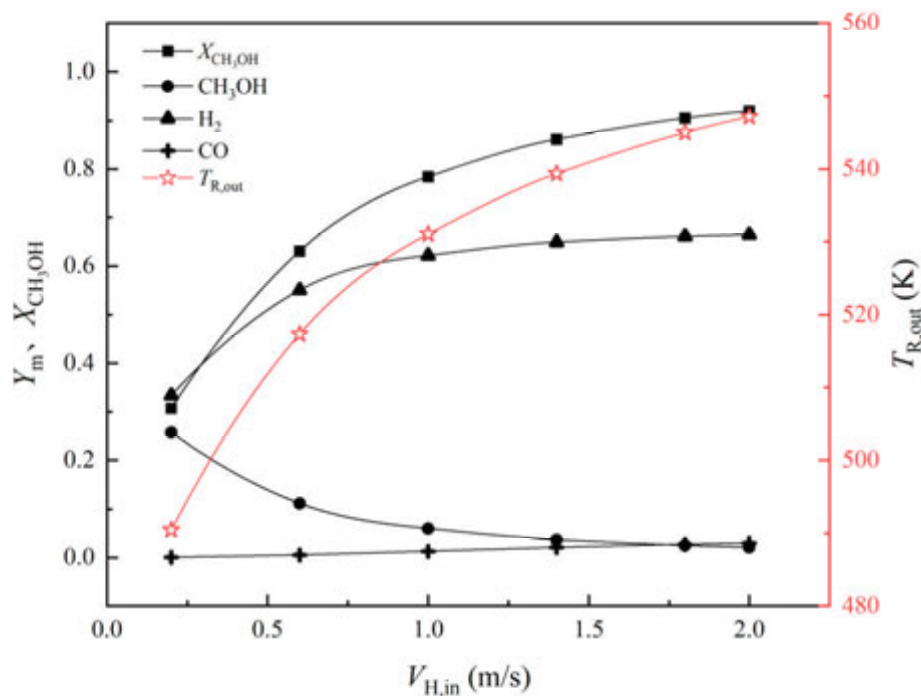


图 7 甲醇转化率及出口各组分摩尔分数随热空气进口流速变化

3.3 流型的影响

在翼型反应器中，反应通道和加热通道的流体可以按顺流或逆流两种流型布置，为了探究流型对反应器性能的影响，本文建立了逆流反应器模型，将逆流反应器加热通道中的翼型结构阵列与反应侧相反布置，反应物和热空气从左右两侧逆向进入反应器。如图 8 和图 9 为反应物进口温度 423 K，进口流速 0.06 m/s，水醇比 1.1，热空气进口温度 573 K，进口流速 1 m/s 时，顺流和逆流布置的反应器内温度分布云图。可以看出，在顺流布置时，反应物在左侧入口进入后迅速升温，流经有催化剂涂层的翼型结构反应通道时，反应物在催化剂作用下开始重整反应，反应侧温度开始下降。热空气侧温度在左侧入口处最大，进入反应器后一直下降，逐渐接近反应侧温度，到右侧出口时，反应侧和加热侧温差最小，仅为 0.1 K。在逆流布置时，反应侧的低温区域与热空气侧的低温区域同在左侧，两者的高温区域同在右侧，反应物进入反应通道后温度持续上升，热空气进入加热通道后温度持续下降，反应侧和热空气侧可以保持较大温差，在反应器右侧仍有 16.6 K 的温差，所以逆流反应器有着更高的换热效率，反应侧温度明显高于顺流反应器。

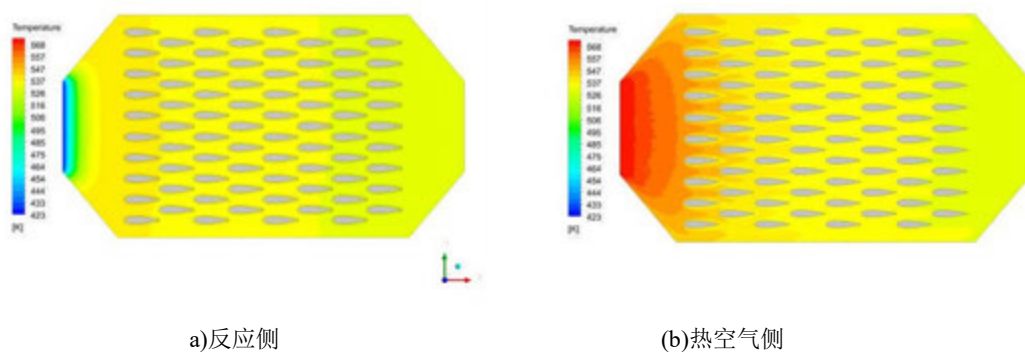


图 8 顺流布置反应器内温度分布

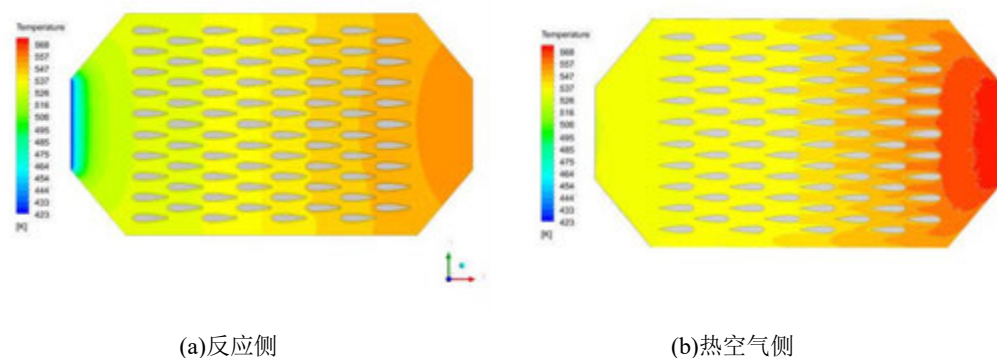
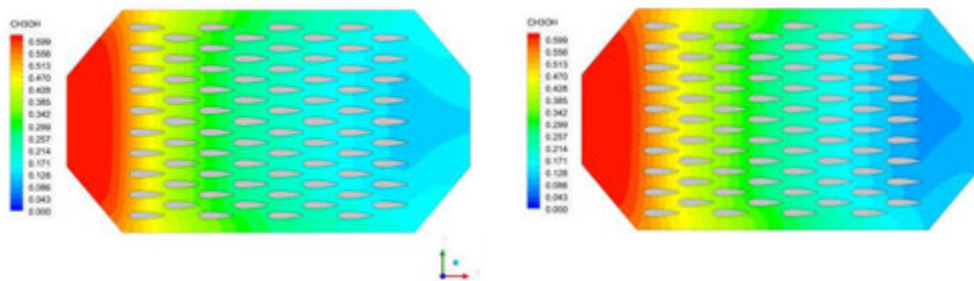


图 9 逆流布置反应器内温度分布

图 10 为顺流和逆流的甲醇质量分数分布云图，甲醇进入翼型结构通道后逐渐减少，逆流反应器在右侧甲醇质量分数比顺流反应器更低，这是因为逆流反应器反应侧后段温度更高，可以进一步促进 MSR 和 DE 反应，更多的甲醇被反应所消耗。

图 11 所示为不同流型反应器甲醇转化率和反应侧出口温度随热空气进口温度的变化情况。逆流反应器反应侧出口温度和甲醇转化率均高于顺流反应器，当热空气进口温度为 573 K 时，甲醇转化率相差最大为 6.3%。在热空气进口温度达到 593 K 以上时，因为逆流反应器中甲醇基本消耗完毕，更多热量用来提升气体温度，与顺流反应器的甲醇转化率相差减小，反应侧出口温度相差增大。综上反应器逆流布置比顺流布置可以获得更好的反应性能。



(a)顺流布置

(b)逆流布置

图 10 逆流和顺流布置反应器内甲醇质量分数分布

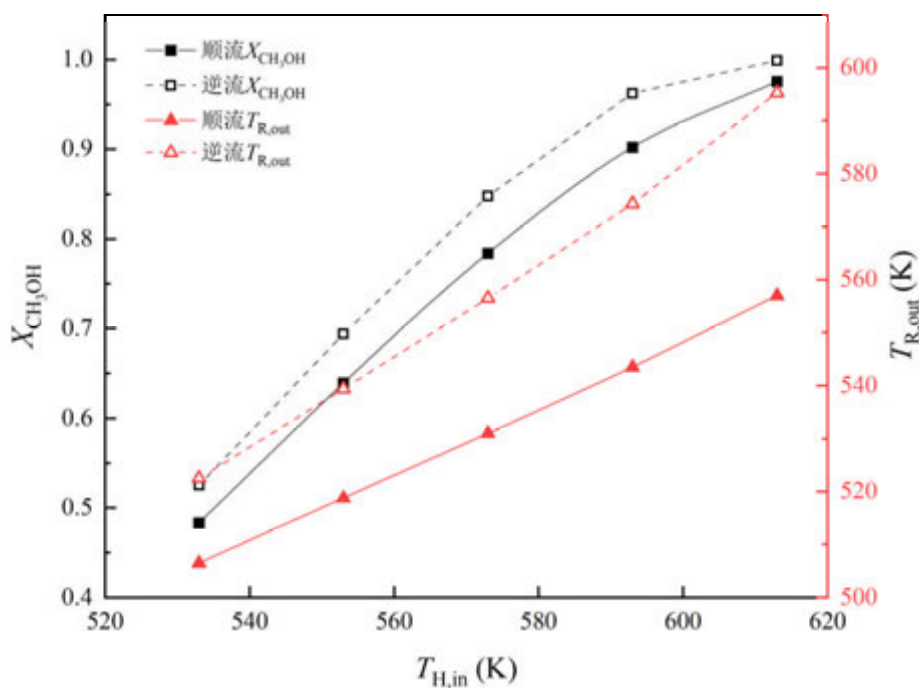


图 11 不同流型甲醇转化率及反应侧出口温度随热空气进口温度变化

4 结 论

(1)本文设计了余热供热的翼型结构甲醇重整微反应器，通过数值模拟探究了反应侧和热空气侧操作参数以及流型布置对反应器性能的影响。

(2)在反应侧提高进口温度对反应器温度和性能影响较小，降低进口流速可以有效提高甲醇转化率和出口氢气摩尔分数。提高水醇比虽然可以使甲醇转化率增大，但出口氢

气含量下降。在热空气侧,提高进口温度和流速可以优化反应器温度,加快反应速率,但若热空气温度和流速过高,反应吸热量有限,会造成热量浪费。

(3)逆流布置相比顺流布置的反应器,反应侧和热空气侧温差大,反应侧后段温度高,反应效果得到更好的提升。在反应侧进口温度 423 K,进口流速 0.06 m/s,水醇比 1.1,热空气进口温度 593 K,进口流速 1 m/s 时,逆流反应器性能最佳,甲醇转化率达到 96.2%,出口氢气摩尔分数达到 0.674。

参考文献

- [1] Mei D, Qiu X, Liu H, et al. Progress on methanol reforming technologies for highly efficient hydrogen production and applications[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(84): 35757-35777.
- [2] 张伊甸, 赵雅文, 李文甲. 中低温太阳能-甲醇重整互补供能系统动力学提升与系统优化[J]. 工程热物理学报, 2021, 42(02): 269-279.
- [3] Zhang H J, Xu C, Yu H Y, et al. Enhancement of methanol steam reforming in a tubular fixed-bed reactor with simultaneous heating inside and outside[J]. Energy, 2022, 254.
- [4] Lu W Q, Zhang R J, Toan S, et al. Microchannel structure design for hydrogen supply from methanol steam reforming[J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 429.
- [5] Perng S W, Wu H W. Influence of inlet-nozzle and outlet-diffuser mounted in the plate-shape reactor on PEMFC net power output and methanol steam reforming performance[J]. Applied Energy, 2022, 323.
- [6] 姚峰. 分形树状通道反应器内甲醇水蒸汽重整反应输运特性的研究[D]. 东南大学, 2016.
- [7] Yao L, Wang F, Wang L, et al. Transport enhancement study on small-scale methanol steam reforming reactor with waste heat recovery for hydrogen production[J]. Energy, 2019, 175: 986-997.
- [8] Srivastava A, Kumar P, Dhar A. A numerical study on methanol steam reforming reactor utilizing engine exhaust heat for hydrogen generation[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(76): 38073-38088.
- [9] Wang G Q, Wang F, Chen B H. Performance Study on Methanol Steam Reforming Rib Micro-Reactor with Waste Heat Recovery[J]. Energies, 2020, 13(7).
- [10] Han Z X, Guo J F, Zhang H Y, et al. Experimental and numerical studies on novel airfoil fins heat exchanger in flue gas heat recovery system[J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 192.
- [11] Wang W, Li B R, Tan Y F, et al. Multi-objective optimal design of NACA airfoil fin PCHE recuperator for micro-gas turbine systems[J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 204.
- [12] Gurau V, Ogunleke A, Strickland F. Design of a methanol reformer for on-board production of hydrogen as fuel for a 3 kW High-Temperature Proton Exchange Membrane Fuel Cell power system[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45(56): 31745-31759.
- [13] 王静文. 翼型印刷电路板式 LNG 气化器流动传热特性数值研究[D]. 西安石油大学, 2021.

- [14] 张冠文. 翼型结构在紧凑型换热装置中的应用研究[D]. 广州大学, 2022.
- [15] Perng S W, Horng R F, Wu H W. Effect of a diffuser on performance enhancement of a cylindrical methanol steam reformer by computational fluid dynamic analysis[J]. *Applied Energy*, 2017, 206: 312-328.
- [16] 李伦. 微通道甲醇重整反应器性能的数值模拟研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2020.
- [17] Peppley B A, Amphlett J C, Kearns L M, et al. Methanol–steam reforming on Cu/ZnO/Al₂O₃ catalysts. Part 2. A comprehensive kinetic model[J]. *Applied Catalysis A: General*, 1999, 179(1-2): 31-49.

含蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统设计 与调度

林小杰¹, 徐家豪¹, 孙鹏¹, 钟崑¹, 胡亚才¹, 从飞云²

(1. 浙江大学 能源工程学院, 杭州 310027;

2. 浙江大学 机械工程学院, 杭州 310027)

(Tel: 18868423738 Email: xiaojie.lin@zju.edu.cn)

摘要: 为研究工业综合能源系统的多能互补新路线, 提出了一种新型蒸汽卡诺电池及工业综合能源系统结构。建立了蒸汽卡诺电池的热力学模型及工业综合能源系统模型。根据案例园区的供需特性设计了蒸汽卡诺电池实例, 其循环效率可达 56.96%, 热泵系数可达 2.55, 供热焓效率可达 68.74%。进一步地, 进行了两种能源系统模型调度分析, 结果表明, 相较于化学电池, 蒸汽卡诺电池可在一天内减少工业综合能源系统 28.57% 的运行成本、43.49% 的碳排放和 16.49% 的购电量。

关键词: 蒸汽卡诺电池; 工业综合能源系统; 热力学建模; 运行调度

0 前言

我国工业综合能源系统以电、蒸汽为主要用能载体。为提升终端电能占比、实现工业碳达峰, 需要解决工业园区级别综合能源系统中电能存储和电能转化为蒸汽的难题^[1]。然而, 常见储能手段难以满足要求, 如抽水蓄能、压缩空气储能受到地理条件制约^[2,3], 锂电池的寿命会随循环衰减^[4-5]。一种基于热力学循环的卡诺电池技术^[6-7]可以通过配置低温热源和高温热源以实现电能与热能之间的转化, 具有应用前景。

目前, 基于布雷顿循环的卡诺电池往返效率可观, 能满足工业园区的综合能源系统中的储能需求, 并且配置方案灵活。Desrués 等^[8]、Howes 等^[9]与 Smallbone 等^[10]设计了采用不同类型压缩机与膨胀机的卡诺电池。杨鹤等^[11]设计了氮气为工质的卡诺电池, 往返效率可达 65%; McTigue 等^[12]设计了氩气为工质的卡诺电池, 采用非支配排序遗传算法优化后实现了 85% 的往返效率。

基于朗肯循环的卡诺电池能在更低的温度下储存能量, 因而更适合余热利用等多能互补场景。如, Kim 等^[13]设计了基于跨临界二氧化碳循环的卡诺电池, 指出了采用同效率设备时基于朗肯循环的卡诺电池往返效率更高; Wang 等^[14]设计了基于跨临界二氧化碳朗肯循环和亚临界 NH₃ 朗肯循环级联的卡诺电池, 可有效回收工业余热; Steinmann^[15]设计了结合朗肯循环与中温储热系统的卡诺电池, 整合了低温热源以补偿不可逆损失。

总体而言, 目前卡诺电池的研究集中于设计与分析, 较少考虑实际生产场景。本文设计了一种以蒸汽为工质的卡诺电池, 通过对部署了蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统

进行建模和调度，评价了蒸汽卡诺电池在工业综合能源系统场景下的应用效果。

1 蒸汽卡诺电池设计

1.1 蒸汽卡诺电池结构与运行原理

本文设计了一种以蒸汽为工质的卡诺电池，其主要组件为低温蓄热器、蒸汽压缩机、高温蓄热器、汽轮机、外部热源，如图 1 所示。其中低温蓄热器包括低温储罐和低温池，高温蓄热器包括高温储罐和高温池。蒸汽卡诺电池能够以稳定的参数对外供应能量，可以满足蒸汽需求，也可以回收品质不一的低温热量^[6]，提升工业综合能源系统能效。

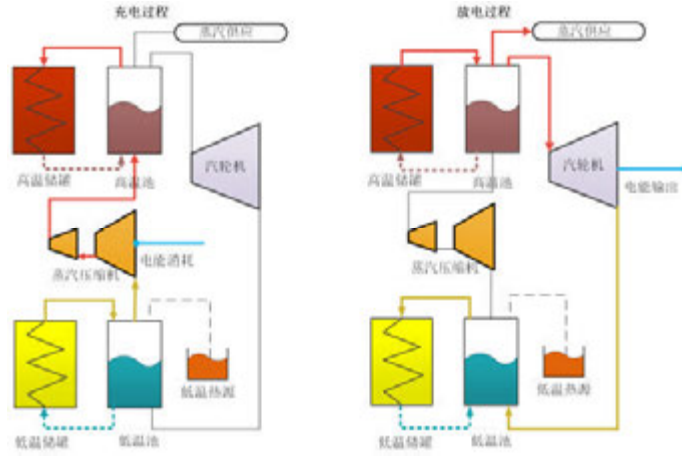


图 1 蒸汽卡诺电池结构及充放电过程

蒸汽卡诺电池的热力学工作过程如图 2 所示，其中“1-2-3-4”构成充电过程，“5-6-7-8”构成放电过程。

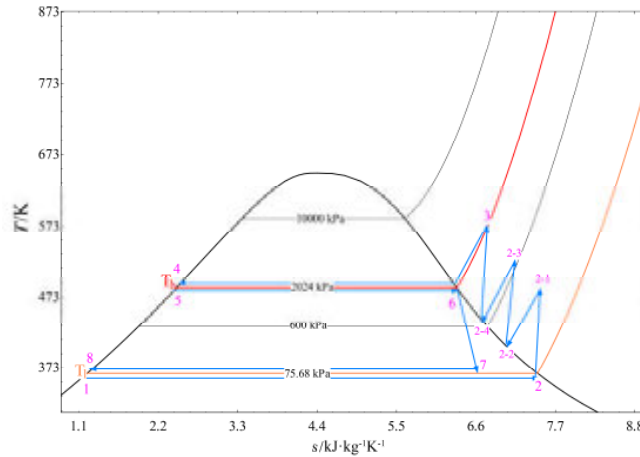


图 2 蒸汽卡诺电池热力循环图

1.2 蒸汽卡诺电池模型

蒸汽压缩机是蒸汽卡诺电池的核心储能组件，蒸汽压缩机消耗电能，将入口低参数的蒸汽压缩为高温高压的蒸汽，比压缩功为

$$w_{\text{CMP}} = \frac{h_{\text{CMP, is, out}} - h_{\text{CMP, in}}}{\eta_{\text{CMP}}} \quad (1)$$

式中： w_{CMP} 为实际过程蒸汽压缩机比功， $h_{\text{CMP, is, out}}$ 为等熵过程压缩机出口工质比焓值， $h_{\text{CMP, in}}$ 为压缩机进口工质比焓值， η_{CMP} 为蒸汽压缩机绝热效率。

汽轮机是蒸汽卡诺电池放电过程中的做功组件，同理，其比膨胀功为

$$w_{\text{EXP}} = (h_{\text{EXP, in}} - h_{\text{EXP, is, out}}) \cdot \eta_{\text{EXP}} \quad (2)$$

式中： w_{EXP} 为实际过程汽轮机比功， $h_{\text{EXP, is, out}}$ 为等熵过程汽轮机出口工质比焓值， $h_{\text{EXP, in}}$ 为汽轮机进口工质比焓值， η_{EXP} 为汽轮机绝热效率。

高温蓄热器和低温蓄热器是蒸汽卡诺电池的储能结构，内部含有换热器和储能罐。对于换热器，其换热性能通常用换热器效能 ε 表示。

$$\varepsilon = Q / Q_{\text{max}} \quad (3)$$

式中： ε 为换热器效能， Q 为换热器实际换热量， Q_{max} 为换热器最大换热量。

蒸汽与蓄热装置换热时，换热量 Q 为

$$Q = |h_{\text{in}} - h_{\text{out}}| \cdot m \cdot \varepsilon \quad (4)$$

式中： m 为工质质量流量， h_{in} 为换热器进口处热流体比焓值， h_{out} 为换热器出口处热流体比焓值。

蓄热器的相变材料与换热器的流体之间在设计温差 δ 下传热，即

$$\begin{cases} T_{\text{HEXh, out}} = T + \delta \\ T_{\text{HEXc, in}} = T - \delta \end{cases} \quad (5)$$

式中： $T_{\text{HEXh, out}}$ 为热侧换热器出口处温度， $T_{\text{HEXc, in}}$ 为冷侧换热器进口处温度， T 为蓄热器平均温度， δ 为蓄热器温差。

在放电过程中，为了保证高温储罐中热量维持平衡，需控制高温蓄热器出口工质流量为

$$m_{\text{dis}} = m_{\text{ch}} \cdot \left(1 + \frac{h_3 - h_4 - (h_2 - h_1)}{h_6 - h_1} \right) \quad (6)$$

式中： m_{dis} 为放电过程的工质质量流量， m_{ch} 为充电过程中的工质质量流量。

1.3 蒸汽卡诺电池评价指标

考虑到蒸汽卡诺电池的储电储热和电热互补特性，采用循环效率 ε_{rt} 、热泵系数 COP_{hp} 和供热焓效率 ε_{ex} 作为其评价指标。

循环效率 ε_{rt} 是蒸汽卡诺电池放电过程中发出的电能 E_{out} 与蒸汽卡诺电池充电过程中蒸汽压缩机系统消耗的电能 E_{in} 之比：

$$\varepsilon_{\text{rt}} = \frac{E_{\text{out}}}{E_{\text{in}}} \quad (7)$$

热泵系数 COP_{hp} 为蒸汽卡诺电池为工业用户提供蒸汽的热量与生产相应蒸汽所消耗的电能之比，表征蒸汽卡诺电池用电能制取蒸汽的效率：

$$COP_{\text{hp}} = \frac{m_{\text{ch}} \cdot (h_3 - h_1)}{E_{\text{in}}} \quad (8)$$

式中： Q_{HT} 为向工业用户提供蒸汽的热量， COP_{hp} 为蒸汽卡诺电池热泵系数。

供热焓效率 ε_{ex} 值为蒸汽卡诺电池为工业热用户供应蒸汽的焓与蒸汽卡诺电池生产相应蒸汽过程中蒸汽压缩机消耗的电能之比，表征蒸汽卡诺电池对电能的利用效率：

$$\varepsilon_{\text{ex}} = \frac{\dot{E}_{\text{USR}}}{E_{\text{hp}}} \quad (9)$$

$$\dot{E}_{\text{USR}} = m \cdot [(h_{\text{USR}} - h_0) - T_0(s_{\text{USR}} - s_0)] \quad (10)$$

式中： $\dot{E}_{\text{USR}}$ 为蒸汽卡诺电池供应给工业用户的蒸汽中的焓， m 为工质质量流量， h_{USR} 为蒸汽卡诺电池为工业用户供应蒸汽的比焓， s_{USR} 为蒸汽卡诺电池为工业用户供应蒸汽的比熵， T_0 为环境温度， h_0 为环境状态蒸汽的比焓， s_0 为环境状态蒸汽的比熵。

2 含蒸汽卡诺电池的综合能源系统设计

2.1 含蒸汽卡诺电池的综合能源系统模型

为分析蒸汽卡诺电池在综合能源系统中的潜力，设计了如图 3 所示的含蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统与如图 4 所示的含化学电池的工业综合能源系统并进行对比。

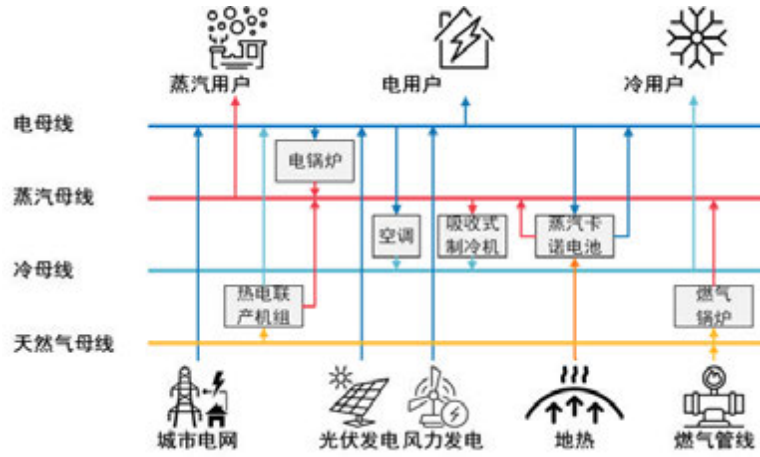


图 3 含蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统结构

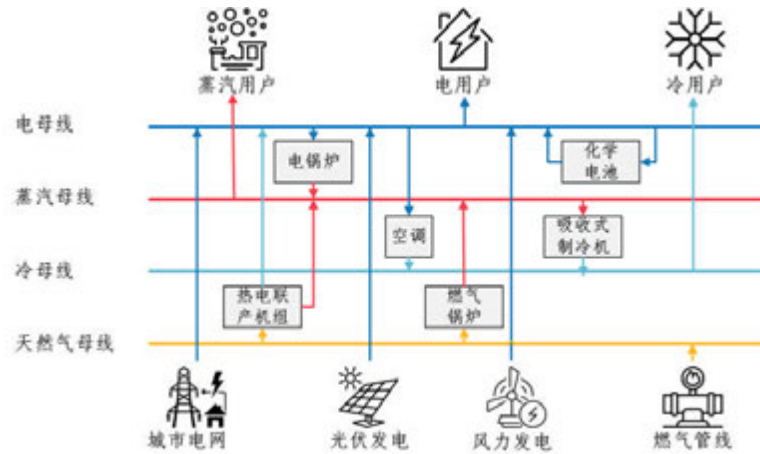


图 4 含化学电池的工业综合能源系统结构

其中，化学电池被用来储存电力，其容量、充电和放电功率之间的关系，如公式(11)所示。

$$S_{ES}^{t+1} = (1 - \sigma_{ES}^e) S_{ES}^t + \eta_{ES}^s P_{ES,s}^t - \frac{P_{ES,r}^t}{\eta_{ES}^r} \quad (12)$$

式中: S_{ES}^t 为化学电池第 t 个时段自身的储电量, $P_{ES,s}^t$ 为第 t 个时段的充电量, $P_{ES,r}^t$ 为第 t 个时段的放电量, σ_{ES}^e 为自损耗系数, η_{ES}^s 为充电效率, η_{ES}^r 为放电效率。

蒸汽卡诺电池的储电量、充电功率和放电功率之间的关系如公式(13)所示。

$$S_{SCB}^{t+1} = (1 - \sigma_{SCB}^e) S_{SCB}^t + \eta_{SCB}^s P_{SCB,s}^t - \frac{P_{SCB,r}^t}{\eta_{SCB}^{re}} - \frac{H_{SCB,r}^t}{\eta_{SCB}^{rh}} \quad (14)$$

式中: S_{SCB}^t 为蒸汽卡诺电池在第 t 个时段内自身的存储电量, $P_{SCB,s}^t$ 为第 t 个时段内的充电量, $P_{SCB,rc}^t$ 为第 t 个时段内的放电量, $P_{SCB,rh}^t$ 为第 t 个时段内的供热量, σ_{SCB}^e 为自损失系数; η_{SCB}^s 为充电效率, η_{SCB}^{re} 为放电效率, η_{SCB}^{rh} 为供热效率。

2.2 综合能源系统运行调度方法

综合能源系统以最小化运行成本 C_{run} 为目标进行调度。运行成本包括从电网买电的成本 C_E 和燃料成本 C_F , 如公式(15)所示。

$$\min C_{run} = C_E + C_F \quad (16)$$

燃料成本 C_E 可以通过公式(17)计算, 燃料成本 C_F 可以通过公式(18)计算。

$$C_E = \sum_t \xi_{grid}^t P_{grid}^t \quad (19)$$

$$C_F = \sum_t (F_{CHP}^t \xi_{gas} + F_{GB}^t \xi_{gas}) \quad (20)$$

式中: ξ_{gas} 为天然气的单价, ξ_{grid}^t 为城市电网的电价。

同时考虑了碳排放 $C_{emission}$ 和电网使用量 C_{grid} , 如公式(21)和(22)所示。

$$C_{emission} = \theta_{gc} \cdot \left(\sum_t F_{CHP}^t + \sum_t F_{GB}^t \right) \quad (23)$$

$$C_{grid} = \sum_t P_{grid}^t \quad (24)$$

式中: θ_{gc} 为单位天然气的碳排放量。

电力平衡约束条件如公式(25)所示。

$$\begin{aligned} P_{grid}^t + P_{PV}^t + P_{WP}^t + P_{CHP}^t + P_{ES,r}^t + P_{SCB,r}^t \\ = P_{load}^t + P_{ES,s}^t + P_{SCB,s}^t + P_{AC,h}^t + P_{EB}^t \end{aligned} \quad (26)$$

式中: P_{grid}^t 为第 t 个时段购入的电能, P_{PV}^t 为第 t 个时段内的光伏发电量, P_{WP}^t 为第 t 个时段内的风电发电量, P_{load}^t 为第 t 个时段内的用户电负荷。

热能平衡和冷能平衡如公式(27)和(28)所示。

$$H_{CHP}^t + H_{GB}^t + H_{SCB}^t = H_{steam}^t + H_{Br,in}^t \quad (29)$$

$$Q_{AR}^t + Q_{AC}^t = Q_{load}^t \quad (30)$$

式中: H_{steam}^t 为第 t 个时段的用户热负荷, Q_{load}^t 为第 t 个时段的用户冷负荷。

除了能量平衡约束, 设备的运行也受到自身额定功率的约束, 如公式(31)和(32)所示。

$$w_{in,i}^{\min} \leq w_{in,i}^t \leq w_{in,i}^{\max} \quad (33)$$

$$w_{out,i}^{\min} \leq w_{out,i}^t \leq w_{out,i}^{\max} \quad (34)$$

式中: $w_i^{\min}$ 为设备 i 在 t 时段内的最小输入/输出能量, $w_i^{\max}$ 为设备 i 在 t 时段内的最大输入/输出能量。

3 案例介绍与结果分析

3.1 案例介绍与系统设计

研究案例为某工业综合能源系统，该园区内有 40 多家企业，涵盖服装制造、化工、造纸等劳动和能源密集型行业，具有丰富的电能、蒸汽与制冷量需求。考虑实际需求，将蒸汽卡诺电池的低温相变温度设定为 367 K，高温相变温度 481 K。为强化换热，选择螺旋翅片式换热器，设计换热温差为 5 K。此外，蒸汽压缩机和蒸汽轮机的等熵效率确定为 0.86^[17]。经计算其各状态点参数与性能指标如表 1 与表 2 所示

表 1 蒸汽卡诺电池各状态点参数

状态点	温度 (K)	压力 (kPa)	比焓 (kJ/kg)	比熵 (kJ/kg-K)	干度 (-)
1	365	75.68	385.39	1.22	0
2	365	75.68	2662.78	7.45	1
2-1	583	227.47	2905.89	7.52	1
2-2	489	227.47	2712.06	7.08	1
2-3	531	681.24	2972.48	7.15	1
2-4	436	681.24	2761.58	6.72	1
3	578	2024.46	3036.07	6.78	1
4	488	2024.46	911.44	2.45	0
5	478	1654.64	865.94	2.36	0
6	478	1654.64	2793.81	6.41	1
7	375	108.87	2401.24	6.59	0.88
8	375	108.87	427.54	1.22	0

表 2 蒸汽卡诺电池性能指标

指标	ε_{rt}	COP_{hp}	ε_{ex}
值	55.6%	3.3	68.2%

3.2 多能互补运行结果分析

对含蒸汽卡诺电池和化学电池的工业综合能源系统模型经过 24 小时的调度运行后，其评价指标如表 3 所示。结果表明，与部署相同容量的化学电池相比，部署蒸汽卡诺电池，可以降低 28.57%的运行成本、43.49%的碳排放和 16.49%的城市电网购电量。

表 3 综合能源系统调度评价指标

能源系统类型	运行成本 (¥)	碳排放 (g)	从城市电网购电量 (kWh)
部署有蒸汽卡诺电池的能源系统	1300.39	190.46	3517.94
部署有化学电池储能的能源系统	1820.54	337.05	4212.72

园区的发电量和耗电量如图 5 与图 6 所示，在可再生发电出力少的夜间时段，电网为主要电力来源，在包含蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统和包含化学电池的综合能源中分别提供 32%和 36%的电力。在白天时段，光伏和风力为主要的电力来源，可再生能源一天提供了约 54%的电力。储能装置和热电联产机组则主要提供了剩余部分的电力。蒸汽卡诺电池一天提供了 5.5%的电力，化学电池则提供 10.2%的电力。热电联产机组在两个能源系统中均提供了约 7%的电力。

两个能源系统在电能的消费上存在明显的差异，主要体现在储能装置和电锅炉的电能消费量上。蒸汽卡诺电池的充电电量为 2555 kWh，化学电池的充电电量为 1455 千瓦时，前者是后者的 1.75 倍。电锅炉也是用电大户，在部署有化学电池的能源系统中消耗了 2215 kWh 的电力。然而在部署有蒸汽热泵储能的能源系统中，电锅炉消耗的电力为 0，这表明包含蒸汽热泵储能的能源系统中存在另一种蒸汽供应方式，该方式的供汽成本比电锅炉低。

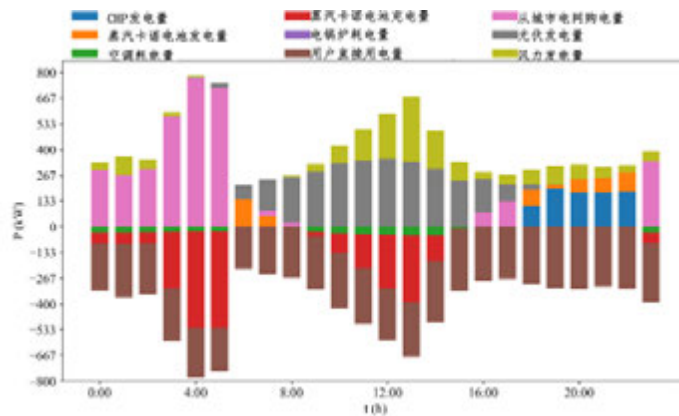


图 5 含蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统电能输入和输出情况

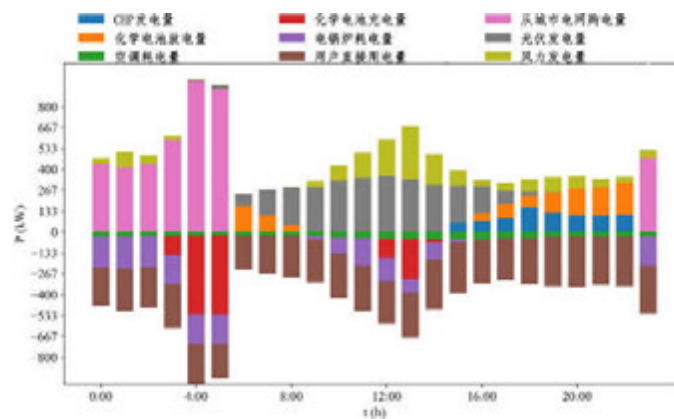


图 6 含化学电池的工业综合能源系统电能输入和输出情况

园区内蒸汽的生产和消耗情况如图 7 和图 8 所示。在蒸汽生产方面，部署有化学电池的能源系统中电锅炉生产了 41%的蒸汽。但在部署蒸汽卡诺电池的能源系统中，蒸汽卡诺电池提供 82%的蒸汽，完全替代了电锅炉和燃气锅炉。在两个能源系统中，热电联产机组 CHP 具有相似的蒸汽生产量，主要也是在夜间时段起到了蒸汽的补充生产作

用。就蒸汽的消费而言，在没有蒸汽卡诺电池的能源系统中，所有的蒸汽都被热用户所消费。而在部署有蒸汽卡诺电池的能源系统中，19%的蒸汽是由吸收式制冷机消耗的。吸收式制冷机出力的增加意味着蒸汽卡诺电池在能源系统中降低了热能的生产成本。

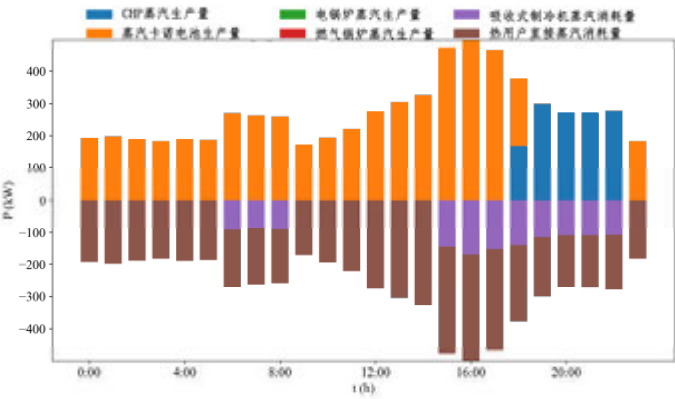


图 7 含蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统蒸汽生产消费情况

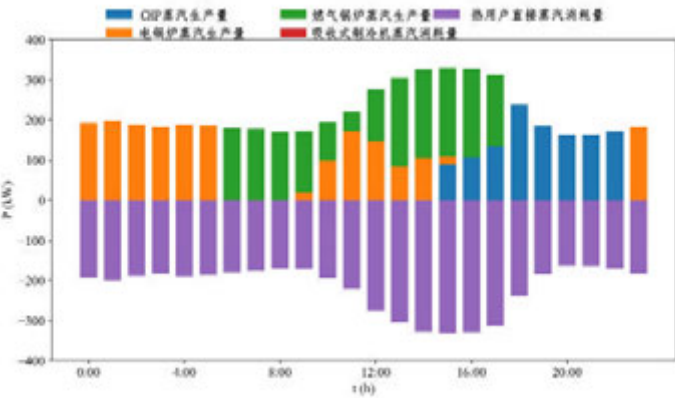


图 8 含化学电池的工业综合能源系统蒸汽生产消费情况

两个能源系统的制冷量平衡图如图 9 和图 10 所示。在含化学电池的工业综合能源系统中，空调提供了所有的制冷量。而在有蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统中，43%的制冷是由吸收式制冷机组提供的，表明蒸汽卡诺电池降低了蒸汽的成本，使吸收式制冷机组在部分高电价时段比空调更经济。

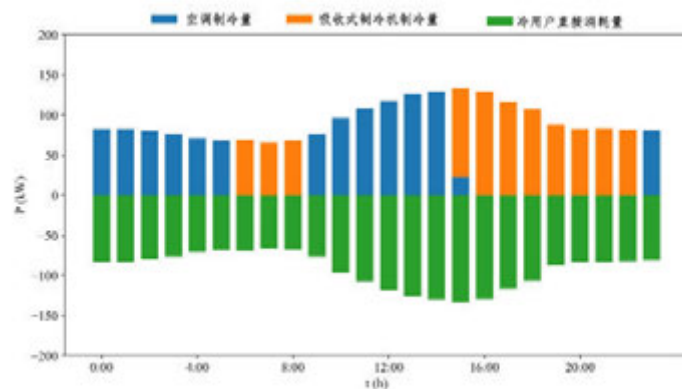


图9 含蒸汽卡诺电池的工业综合能源系统制冷量平衡图

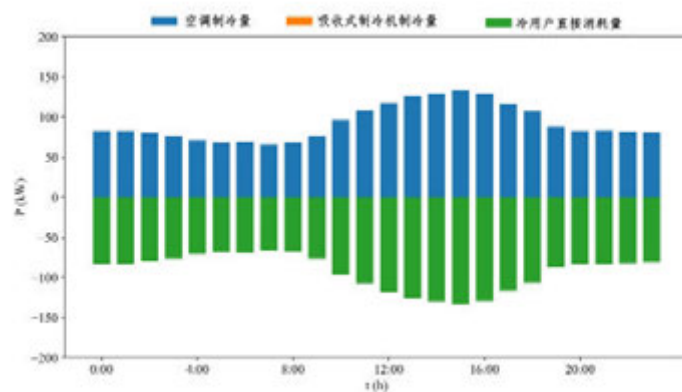


图10 含化学电池的工业综合能源系统制冷量平衡图

通过将化学电池替换为蒸汽卡诺电池，案例园区能源系统的运行成本、碳排放和城市电网购电量分别降低了 28.57%、43.49%和 16.49%。尽管蒸汽卡诺电池的循环效率 58% 低于化学电池的循环效率 78%，但是在 24 小时内蒸汽卡诺电池累计储存了 2555 千瓦时的电量，是化学电池累计储存电量的 1.76 倍。通过蒸汽母线的能量平衡分析可知，蒸汽卡诺电池的经济效益主要体现在其低成本的蒸汽供应上，实现工业园区中的电热互补，减少了燃气锅炉和热电联产机组对天然气的使用，降低了碳排放。蒸汽供应成本的下降同时使电锅炉和电空调的出力减少，降低低了能源系统的购电成本。因此，蒸汽卡诺电池可通过存储谷价电和新能源发电、电和蒸汽高效转换的负荷效应，优化工业综合能源系统用能结构来降低运行成本、碳排放和城市电网购电量。

4 结论

(1) 提出与设计的蒸汽卡诺电池在案例工业园区场景下具有 55.6%的循环效率和 3.3 的 COP，表明蒸汽卡诺电池不仅可以实现储电功能，还可以实现高效的电制蒸汽功能。68.2%的供热焓效率也说明蒸汽卡诺电池可充分利用电能的高品位特性来生产蒸汽。

(2) 在工业综合能源系统场景中评价了蒸汽卡诺电池的储电与电制蒸汽作用，与化学电池相比，蒸汽卡诺电池一天内可以减少园区 28.57%的运行成本、43.49%的碳排放和 16.49%的城市电网购电量。同时蒸汽卡诺电池可利用存储的电能，为园区提供了 82%

的蒸汽。

参考文献

- [1] 谢小荣, 马宁嘉, 刘威, 等. 新型电力系统中储能应用功能的综述与展望[J]. 中国电机工程学报, 2023, 43(01), 158-169.
- [2] SAMEER H, JOHANNES L. A review of large-scale electrical energy storage [J]. International journal of energy research, 2015, 39(9): 1179-1195.
- [3] ARMAN A, BREYER C. Assessment of geological resource potential for compressed air energy storage in global electricity supply [J]. Energy Conversion and Management, 2018, 169:161-173.
- [4] OLIVIER D, FRATE G, PILLAI A, et al. Carnot battery technology: A state-of-the-art review [J]. Journal of Energy Storage, 2020, 32:101756.
- [5] 李中浩, 余娟, 杨知方, 等. 精准计及大规模储能电池寿命的电力系统经济调度 [J/OL]. 中国电机工程学报, 2022 [2023-06-15].
- [6] ABDELRAHMAN H, DONOGHUE L, SANCHEZ C, et al. Thermodynamic analysis of high-temperature pumped thermal energy storage systems: Refrigerant selection, performance and limitations [J]. Energy Reports, 2020, 6:147-159.
- [7] 张琼, 王亮, 徐玉杰, 等. 热泵储电技术研究进展 [J]. 中国电机工程学报, 2018, 38(01): 178-185+354.
- [8] DESRUES T, RUER J, MARTY P, et al. A thermal energy storage process for large scale electric applications [J]. Applied Thermal Engineering, 2010, 30(5): 425-432.
- [9] HOWES J. Concept and development of a pumped heat electricity storage device [J]. Proceedings of the IEEE, 2012, 100(2): 493-503.
- [10] SMALLBONE A, JULCH V, WARDLE R, et al. Levelised cost of storage for pumped heat energy storage in comparison with other energy storage technologies [J]. Energy Conversion and Management, 2017, 152: 221-228.
- [11] 杨鹤, 杜小泽. 布雷顿循环热泵储能的性能分析与多目标优化[J]. 中国电机工程学报, 2022, 42(01): 196-211.
- [12] MCTIGUE J D, WHITE A J, MARKIDES C N. Parametric studies and optimisation of pumped thermal electricity storage [J]. Applied Energy, 2015, 137: 800-811.
- [13] KIM Y, SHIN D, LEE S, et al. Isothermal transcritical CO₂ cycles with TES (Thermal Energy Storage) for electricity storage [J]. Energy, 2013, 49: 484-501.
- [14] WANG G, ZHANG X. Thermodynamic analysis of a novel pumped thermal energy storage system utilizing ambient thermal energy and LNG cold energy [J]. Energy Conversion and Management, 2017, 148: 1248-1264.
- [15] STEINMANN W D. The CHEST (Compressed Heat Energy Storage) concept for facility scale thermo mechanical energy storage[J]. Energy, 2014, 69: 543-552.
- [16] 陶志强, 赵庆, 唐豪杰, 等. 应用于工业余热的超临界二氧化碳布雷顿循环系统的热力学和焓分析 [J]. 中国电机工程学报, 2019, 39(23): 6944-6951.

- [17] Rodríguez C E C, Palacio J C E, Venturini O J, et al. Exergetic and economic comparison of ORC and Kalina cycle for low temperature enhanced geothermal system in Brazil[J]. Applied Thermal Engineering, 2013,52(1):109-119.

公用工程强制均分策略优化换热网络

易智康, 段欢欢, 崔国民, 刘思琪

(上海理工大学能源与动力工程学院 上海市动力工程多相流动与传热重点实验室, 上海 200093)

(Tel: 13917209236, Email: cgm@usst.edu.cn)

摘要: 在换热网络优化中, 通过利用流股之间的换热来减少网络上公用工程的用量, 但由于传统启发式算法的随机性与贪婪性, 导致部分能够形成完全换热状态的流股不可避免地长期存在公用工程, 从而影响了网络结构的优化质量。因此, 本文提出流股公用工程强制均分策略, 通过周期性强制均分这类流股上公用工程的换热量到其换热单元中, 使该流股处于完全换热状态, 进而减少整个网络结构上公用工程的用量。最后采用两个算例对其进行验证, 所获的年综合费用分别为 1,492,449 USD·a⁻¹ 和 5,073,662 USD·a⁻¹, 均优于目前文献的结果, 验证了该策略的有效性。

关键字: 公用工程; 换热网络; 系统工程; 优化; 强制进化随机游走算法

0 前言

换热网络 (HEN) 是系统工程中的重要环节之一, 是通过热回收和工艺流的再利用来实现过程工业中能源和成本节约的重要策略^[1]。换热网络综合 (HENS) 问题中的非凸性和非线性导致其产生了大量局部最优解, 所以想获得最优的网络结构并非易事^[2]。

HEN 优化方法可分为同步优化方法和分布优化方法, 其中分布优化方法将原问题拆分成多个子问题, 但其优化过程中并不能同时权衡这些子问题。同步优化方法可以建立数学模型来同时优化公用工程的数量, 流股间的匹配关系和换热面积等优化变量。同步优化方法又可具体分为启发式方法和确定型方法。传统的启发式方法有遗传算法^[3]、粒子群算法^[4]、模拟退火算法^[5]等, 其受模型所引起非凸性和非线性的影响比较小。Xiao 等^[6]提出了强制进化随机游走算法 (RWCE), 该算法中的个体间不交换信息, 保持了独立进化的能力, 并以一定的概率接受差解使得个体结构产生变异, 从而增强了算法的全局搜索能力。但该算法的贪婪性和随机性, 导致能够形成完全换热的流股长期存在公用工程, 影响了网络结构的优化质量。不同于把公用工程置于流股末端, Pavão^[7]提出了一种新的分级超结构模型 (SWS), 该模型可以在所有级的不同分支中放置公用工程, 扩展了 SWS 模型的求解域。对于节点非结构模型, 韩新宇^[8]新增了一条热公用工程和冷公用工程与常规流股进行换热, 以此来形成内部公用工程, 对节点非结构模型进行了扩展。上述研究可通过增加公用工程布置位置来扩大模型搜索域, 但难以除去无利的公用工程, 减少公用工程的用量。

本文从流股物性参数与公用工程之间的定性关系出发, 以网络结构上的公用工程作为切入点, 通过探究流股上公用工程的存在机制, 发现在优化中部分能够形成完全换热的流股因进化机制等原因, 导致其在优化过程中长期存在公用工程。因此本文提出了公用工程周期强制均分策略, 即对部分流股上的公用工程强制均分到该流股的换热单元上, 使其处于完全换热, 进而减少换热网络中公用工程用量, 达到年综合费用最低的目标。

1 换热网络数学模型

1.1 有分流节点非结构模型

有分流节点非结构模型^[9]可灵活性地生成和消除换热器, 因此该模型的搜索域具有较强的可延展性。如

图 1 为模型的结构图, H 中线条和圆圈分别代表着热流体和热节点, C 中线条和圆圈分别代表着冷流体和冷节点, NG_H 、 NG_C 为热/冷流股的分组编号, 表示分流结构在流股上重复匹配的次數; 每一组包含有若干个分支, 即 NS_H 、 NS_C 表示热/冷流股分支组的分支编

号；每一条分支上设有节点数，即 ND_H 、 ND_C ，表示热/冷流股分支上的节点

编号。每股热、冷流体上分别存在 $NG_H \times NS_H \times ND_H$ 、 $NG_C \times NS_C \times ND_C$ 个节点。图中节点参数设置为 $NG_H=NG_C=3$ ， $NS_H=NS_C=2$ ， $ND_H=ND_C=2$ ，换热单元可以在热、冷流体的节点上随机匹配生成，同时对其所生成的位置随机分配分流比。

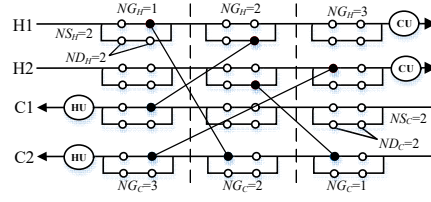


图 1 有分流节点非结构模型的示意图

Fig.1 Schematic of the Nodes-based Non-structural Model with streams split

1.2 目标函数

年综合费用（TAC）作为换热网络的目标函数，由换热单元固定投资费用、面积费用，冷公用工程和热公用工程的固定投资费用、面积费用及运行费所构成，如公式（1）所示。

$$\begin{aligned} \min TAC = & \sum_{i=1}^{N_H} \sum_{j=1}^{NG_H} \sum_{k=1}^{NS_H} \sum_{l=1}^{ND_H} (F_{fix} \times E_{i,j,k,l} + C_A \times A_{i,j,k,l}^a) \\ & + \sum_{i=1}^{N_H} (F_{fix} \times E_i + C_A \times A_{CU,i}^a + C_{CU} \times Q_{CU,i}) \\ & + \sum_{j=1}^{N_C} (F_{fix} \times E_j + C_A \times A_{HU,j}^a + C_{HU} \times Q_{HU,j}) \end{aligned} \quad (1)$$

式中 F_{fix} 和 E 是固定投资费用以及判断换热单元是否存在的 0-1 变量， C_A 为面积费用系数， A 和 α 表示换热面积和面积费用指数， C_{CU} 和 C_{HU} 为冷、热公用工程的运行费用系数， $Q_{CU,i}$ 和 $Q_{HU,j}$ 为冷热公用工程用量， i, j 表示热流体、冷流体， N_H 和 N_C 热冷流体数量。

1.3 约束条件

HEN 中需给予约束条件以符合实际工程的应用场景，这些约束条件如下所示：

(1) 流股热平衡

$$(T_i^{in} - T_i^{out}) \cdot F_{Cp,i} = \sum_{i=1}^{N_H} \sum_{jh=1}^{NG_H} \sum_{kh=1}^{NS_H} \sum_{lh=1}^{ND_H} Q_{i,jh,kh,lh} + Q_{CU,i} \quad (2)$$

$$(T_j^{out} - T_j^{in}) \cdot F_{Cp,j} = \sum_{j=1}^{N_C} \sum_{jc=1}^{NG_C} \sum_{kc=1}^{NS_C} \sum_{lc=1}^{ND_C} Q_{j,jc,kc,lc} + Q_{HU,j} \quad (3)$$

(2) 单个换热器热平衡

$$Q_{i,jh,kh,lh} = (T_{i,jh,kh,lh}^{in} - T_{i,jh,kh,lh}^{out}) \cdot (F_{Cp,i} \times SPH_{i,jh,kh}) \quad (4)$$

$$Q_{j,jc,kc,lc} = (T_{j,jc,kc,lc}^{in} - T_{j,jc,kc,lc}^{out}) \cdot (F_{Cp,j} \times SPC_{j,jc,kc}) \quad (5)$$

(3) 公用工程热平衡

$$(T_i^{out} - T_i^{target}) F_{Cp,i} = Q_{CU,i} \quad (6)$$

$$(T_j^{target} - T_j^{out}) F_{Cp,j} = Q_{HU,j} \quad (7)$$

(4) 分流比约束

$$\sum_{i=1}^{NS_H} SPH_{i,jh,kh} = 1.0 \quad (8)$$

$$\sum_{j=1}^{NS_C} SPC_{j,jc,kc} = 1.0 \quad (9)$$

(5) 温度可行性约束

$$T_{i,jh,kh,lh}^{in} - T_{j,jc,kc,lc}^{out} \geq \Delta T_{\min} \quad (10)$$

$$T_{i,jh,kh,lh}^{out} - T_{j,jc,kc,lc}^{in} \geq \Delta T_{\min} \quad (11)$$

$$T_i^{out} - T_{CU}^{out} \geq \Delta T_{\min} \quad (12)$$

$$T_i^{target} - T_{CU}^{in} \geq \Delta T_{\min} \quad (13)$$

$$T_{HU}^{in} - T_j^{target} \geq \Delta T_{\min} \quad (14)$$

$$T_{HU}^{out} - T_j^{out} \geq \Delta T_{\min} \quad (15)$$

T_i^{in} 和 T_i^{out} 分别表示热流股的进出口温度, T_j^{in} 和 T_j^{out} 分别表示冷流股的进出口温度, $Q_{i,jh,kh,lh}$ 和 $Q_{j,jc,kc,lc}$ 表示热冷流股上换热器换热量, T_i^{target} 和 T_j^{target} 表示热流股和冷流股的目标温度, F_{CP} 为流体热容流率, SPH 和 SPC 表示热流股和冷流股上的分流比。 $T_{j,jc,kc,lc}^{in}$ 和 $T_{j,jc,kc,lc}^{out}$ 分别表示换热器冷流股入口温度和出口温度, $T_{i,jh,kh,lh}^{in}$ 和 $T_{i,jh,kh,lh}^{out}$ 分别表示换热器热流股的入口温度和出口温度, $\Delta T_{\min}$ 为最小传热温差。

1.4 RWCE 算法步骤

RWCE 算法^[6]具有程序简单、控制参数少、随机性强等特点, 其优化步骤包括: 种群初始化、个体随机游走、换热单元生成、个体变异等步骤。

Step 1: 初始化阶段

种群初始化。种群中包含 N 个体($n=1,2,\dots,N$), 个体内无任何节点连接关系, 换热量、分流比为零, 初始化阶段为空结构, 依靠公用工程使流体达到目标温度。

Step 2: 随机游走阶段

对换热网络中已存在的换热单元, 以一定的进化概率 ϕ , 利用进化公式 (16) ~ (18) 对其换热量和分流比进行随机游走进化。更新公式如下:

$$(Q'_{i,jh,kh,lh})_{it+1} = (Q'_{i,jh,kh,lh})_{it} + (1-2\rho) \cdot \Delta L \cdot \omega_1 \quad (16)$$

$$(\vec{SPH}'_{i,jh,kh})_{it+1} = (\vec{SPH}'_{i,jh,kh})_{it} + (1-2\rho) \cdot \Delta L_{SP} \cdot \omega_2 \quad (17)$$

$$(\vec{SPC}'_{j,jc,kc})_{it+1} = (\vec{SPC}'_{j,jc,kc})_{it} + (1-2\rho) \cdot \Delta L_{SP} \cdot \omega_3 \quad (18)$$

其中 $(Q'_{i,jh,kh,lh})_{it}$ 和 $(Q'_{i,jh,kh,lh})_{it+1}$ 为换热单元随机游走前后的换热量, $(\vec{SPH}'_{i,jh,kh})_{it}$ 和 $(\vec{SPH}'_{i,jh,kh})_{it+1}$ 表示随机游走前后的热流股分流比, $(\vec{SPC}'_{j,jc,kc})_{it}$ 和 $(\vec{SPC}'_{j,jc,kc})_{it+1}$ 表示随机游走前后冷流股分流比。 ρ 、 ω_1 、 ω_2 、 ω_3 为 (0,1) 之间的随机数, ΔL 为进化中最大步长, ΔL_{SP} 表示进化中分流比, $(1-2\rho)$ 控制个体进化过程中某一维度的行走方向。

Step 3: 生成阶段

当节点处不存在匹配关系时，以一定概率 θ 生成 Ω 个新的换热单元，同时随机给新的换热单元赋予换热量和分流比。实现方法如下：

$$Q'_{i,kh,lh,mh} = \begin{cases} Q_{\max} \times rand(0,1) & \text{if } (r_2 < \theta) \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (19)$$

式中， $Q_{\max}$ 表示新生成换热器最大换热量。

Step 4: 变异选择阶段

若进化后结构的 TAC 下降，则接受该结构，并将其作为下一步迭代的初始结构。如进化后 TAC 上升，以一定的概率接受费用上升的结构。设置接受差解概率 δ ，当随机数小于 δ 时，接受该差解为下一迭代进化的初始结构，否则，继续选择原迭代结构。如式 (20)

所示，其中 $(f_n)_{it}$ 表示第 it 次迭代的网络结构费用， $(f_n)_{it+1}$ 表示第 $it+1$ 次迭代的网络结构费用， μ_1 为 (0,1) 之间的随机数。

$$(f_n)_{it+1} = \begin{cases} (f_n)_{it+1}, & \text{if } (f_n)_{it+1} < (f_n)_{it} \\ (f_n)_{it+1}, & \text{if } (\mu_1 < \delta) \\ (f_n)_{it} & \text{else} \end{cases} \quad (20)$$

Step 5: 终止迭代

达到最大迭代次数时计算中止，否则返回步骤二。

2 流通股公用工程研究

2.1 流通股上公用工程分析

以 15SP (1) 算例^[10]为例，该算例包含 8 股热流体和 7 股冷流体，算法初始节点优化参数设置如下： $NG_H=NG_C=4$ 、 $NS_H=NS_C=3$ 、 $ND_H=ND_C=2$ ，算法控制参数如表 1 所示。

表 1 15SP (1) 算例中 RWCE 算法控制参数表

Table 1 Parameter set of the 15SP (1) for RWCE algorithm

控制 参数	N	ΔL	ϕ	θ	Ω	$Q_{\max}$	δ
	20	100	0.2	0.2	1	100	0.01

图 2 为 8000 万步迭代中热流体存在公用工程的次数，横坐标为流通股标号 (1-8 号编号分别对应 H1-H8)，纵坐标为流通股存在公用工程的次数。公用工程存在的次数排序为 $H5 < H2 < H3 < H1 < H7 < H6 < H4 = H8$ 。由图 2 可知，H4 和 H8 流通股上进出口温度低于 H1、H2、H3、H5、H6、H7，在自由匹配阶段，处于高温位的热流体其匹配形成的结构容易被保留，易形成完全换热状态。相反处于低温位的热流体在随意匹配阶段更容易形成温度交叉（匹配中冷流体温度高于热流体），形成结构费用高，不易被接受，导致其更容易形成公用工程。

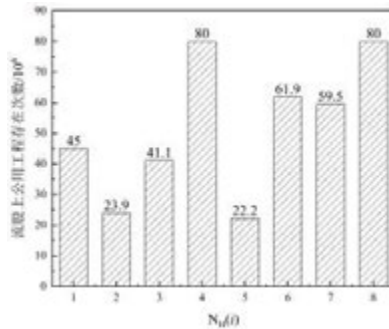


图 2 每股流通股上存在公用工程的次数

Fig.2 The number of public utilities present on each stream

2.2 流股上公用工程对全局搜索的影响

为了分析流股上公用工程对全局搜索的影响,继续以 15SP (1) 算例为例,通过其在不同的迭代步数下 TAC 和其对应结构上的公用工程用量,可以发现公用工程的个数在减少。这说明随着优化过程的进行, RWCE 算法会充分利用流股间的换热来减少公用工程的用量,但与此同时部分能够形成完全换热的流股会产生公用工程,这是由于换热量的增量很难刚好满足流股上的热负荷需求,导致这类流股长期存在公用工程,在优化中存在消去障碍,影响算法的全局搜索能力。为了证实这类流股对算法的影响,图 3 和图 3 分别为 15,011,621 步 (TAC 为 $1,523,779 \text{ USD}\cdot\text{a}^{-1}$) 和 51,439,734 步 (TAC 为 $1,517,654 \text{ USD}\cdot\text{a}^{-1}$) 的网络结构,在 15,011,621 步~51,439,734 步的迭代间隔中 H7 流股长期存在公用工程,但在所得的最优结构中其上并不存在公用工程。这表明 H7 流股在较长的迭代步数内存在公用工程,导致网络中的费用难以下降,影响算法的进一步优化。基于上述分析,可以推断在优化过程中会有部分能够形成完全换热的流股,因网络结构的制约使其长时间存在公用工程,从而导致整个换热网络的优化受到了限制。

通过对流股上公用工程存在机制的分析可知:(1) 网络中存在大量的公用工程时,算法的随机进化,并不能保证形成公用工程流股中所连接的换热单元得到充分的进化,那么这些流股上的公用工程也难以消去,整个网络中换热潜能得不到充分的发挥,费用难以进一步下降。(2) 部分易形成完全换热的流股其因受到网络中的结构制约关系,导致其上长时间都存在公用工程,这将影响算法的优化路径。

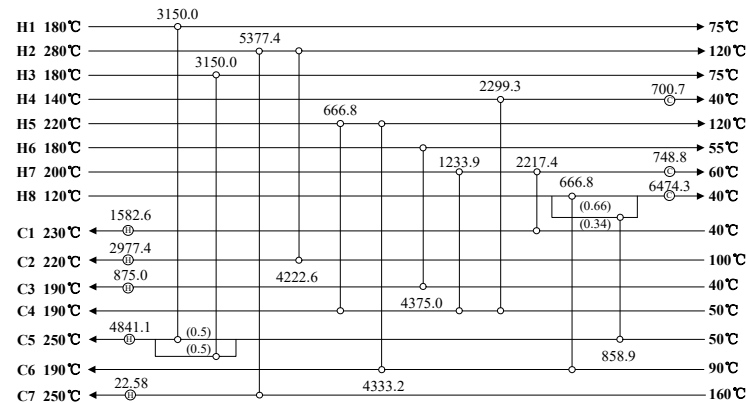


图 3 迭代步数为 15,011,621 步时的结构示意图, TAC 为 $1,523,779 \text{ USD}\cdot\text{a}^{-1}$

Fig.3 Network structure of the 15SP (1) with 15,011,621 iterative steps, TAC= $1,523,779 \text{ USD}\cdot\text{a}^{-1}$

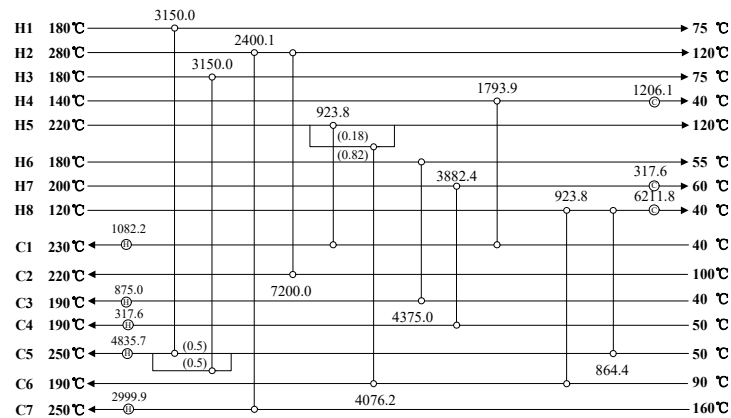


图 4 迭代步数为 51,439,734 步时的结构示意图, TAC 为 $1,517,654 \text{ USD}\cdot\text{a}^{-1}$

Fig.4 Network structure of the 15SP (1) with 51,439,734 iterative steps, TAC= $1,517,654 \text{ USD}\cdot\text{a}^{-1}$

3 周期性公用工程强制分配策略

基于此，本文提出流股公用工程强制均分策略，通过强制分配这类流股上的公用工程到其上的换热单元上，使其处于完全换热状态，提升算法的优化效率与质量。

流股上公用工程周期性地按比例强制分配策略主要优化步骤为：先统计流股上的公用工程存在的次数，然后以其为基准对流股进行分类，第一类为不易形成完全换热流股，这类流股上在整个迭代过程一直都存在公用工程，如 H4、H8 流股；第二类为易形成完全换热的流股，这类流股在迭代中极易形成完全换热状态，如 H2、H5 流股；第三类为能够形成完全换热但存在公用工程次数的较多的流股，如 H6、H7 流股。然后选择第三类流股上某一股流股每隔一定的迭代周期，采取一次强制性的公用工程分配策略，把流股上的公用工程按照流股中换热单元上换热量的比例进行分配。通过周期性地采用公用工程分配策略，既能保证这类流股上达到完全换热状态，又可以避免网络上因过多的流股达到完全换热状态，导致结构过于稳定，使算法陷入早熟。流股公共工程强制分配策略具体操作公式如下：

$$(Q_{i,jh,kh,jh})_{it+1} = \begin{cases} (Q_{i,jh,kh,jh})_{it} + \frac{(Q_{i,jh,kh,jh})_{it}}{(Q_{sum,i})_{it}} \times (Q_U)_{it}, & \text{if } \text{mod}(it) = 1 \\ (Q_{i,jh,kh,jh})_{it} & \text{else} \end{cases} \quad (21)$$

其中， $Q_{sum,i}$ 指被选流股 i 上换热器的换热量总和， Q_U 指流股上公用工程的换热量。

4 算例验证

4.1 算例 1

为了验证策略的有效性，继续采用 15SP (1) 算例进行验证，具体算法参数设置和前文相同，采用周期性公用工程强制均分策略所得结构的 TAC 为 1,492,449 USD·a⁻¹，相比于基础 RWCE 算法费用下降 19,651 USD·a⁻¹，其结构如

图 1 所示，与现有文献的结果对比如表 2 所示。从结构的角度进行分析，将加入策略前后的网络结构进行对比，加入策略后 H7 流股上的公用工程被周期性地强制分配，最后结构中 H7 流股处于完全换热状态，同时，对其使用周期性强制分配策略可以消去不合理的匹配关系，如优化过程中 H7 与 C1 形成的匹配关系（见图 3），促进网络结构的进一步优化。

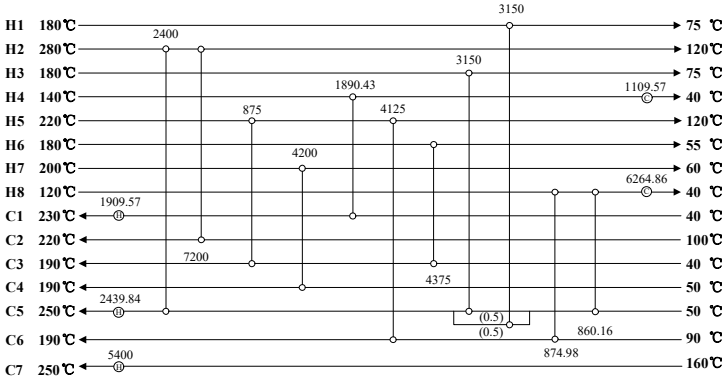


图 5 加入策略后优化 15SP (1) 算例所得结构，TAC 为 1,492,449 USD·a⁻¹

Fig.5 Network structure of the 15SP (1) after adding the strategy, TAC=1,492,449 USD·a⁻¹

表 2 15SP (1) 算例结果对比表

Table 2 Result comparison of 15SP (1)

文献	换热单元	Q_{HU}/MW	Q_{CU}/MW	TAC(USD·a ⁻¹)
Björk ^[11]	-	-	-	1,530,063
Peng ^[5]	19	10.11	7.73	1,527,240

Fieg ^[12]	15	10.61	8.24	1,510,891*
Pavão ^[13]	19	-	-	1,507,290
Pavão ^[14]	17	-	-	1,497,325*
XU ^[15]	16	9.76	7.38	1,494,862*
本文	16	9.75	7.38	1,492,449*

*代表结构中选在有分流的情况

图 为 15SP (1) 算例在 8000 万步迭代过程中每一股热流股上存在公用工程的数量。原算法中 H7 流股上公用工程存在次数为 5.95×10^7 ，周期性公用工程强制分配策略将 H7 流股上公用工程的换热量均分到其上的换热单元中，H7 上共用工程存在次数为 4.56×10^7 ，相比于原算法上的公用工程次数下降了 23.4%，极大的促进了 H7 流股上的公用工程消去，因其局部精度的提升间接影响到其他流股上公用工程，其他流股上公用工程存在的次数也有所下降。因此，通过对流股上的公用工程存在的次数进行比较，表明策略可以有效的减少流股上公用工程的次数，提升算法的局部精度，为算法搜索到更多优势的结构提供了基础。

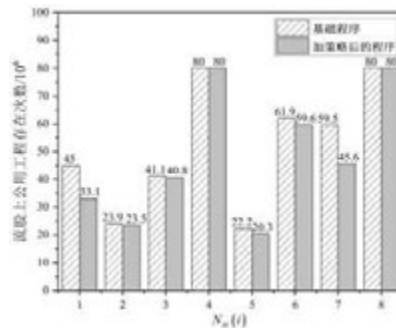


图 6 加策略后每股流体上存在公用工程的次数

Fig.6 The number of public utilities present on each stream after adding the strategy

公用工程周期性强制分配策略能够提升算法的局部精度，减少网络结构上的公用工程用量，分配周期在优化中具有重要的影响，合理的周期设定能够体现出策略的有效性，故采用控制变量法，把均分周期作为变量，分别设置为 1、100 万、200 万步，同时加入基础 RWCE 算法与四种周期进行比较，记录算法的收敛速度和运行结果，如图 所示。

由图 可以看出，策略在不同的迭代步数中展示了不同的优化效果。在优化前期，流股依靠公用工程达到目标温度，可优化空间大，因此均能够迅速地收敛到局部最优，但收敛速度不同。周期设置为 1 时，收敛速度快，此时每一步都强制 H7 流股上达到完全换热状态，导致网络中公用工程用量迅速减少，结构趋于稳定，算法陷入早熟，导致算法的全局搜索能力下降，优化后得到的 TAC 甚至高于基础 RWCE 算法，不能够验证该策略的有效性。当周期为 100 万和 200 万步时，加入该策略后，在优化前期因周期的设定对整个优化方向影响不大，所以年综合费用与基础 RWCE 算法趋于一致，但随着优化进行，加入策略后的算法获得的 TAC 均优于基础 RWCE 算法，充分验证了策略的有效性。当周期设置为 200 万步时，其周期强制均分的频率过长，导致流股上长期存在公用工程，费用难以下降，影响算法的局部搜索精度。因此，为了能够充分地验证策略的有效性，该算例的周期设置为 100 万步较为合适。不同的算例物性参数不同，进化依赖于自身的结构性质，应根据算例的实际情况对周期进行分析、选择。

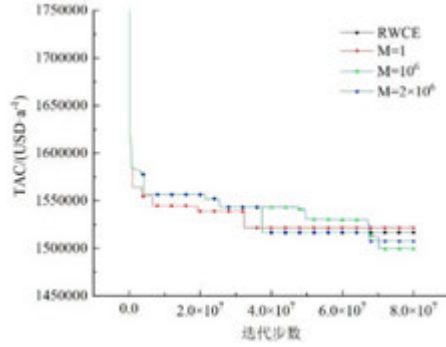


图 7 不同周期下的年综合费用变化曲线

Fig.7 TAC curve under different periods

4.2 算例 2

算例 2 为 15SP (2)，该算例包含 10 股热流体、5 股冷流体，算法的控制参数如表 所示。因 C2 能够形成完全换热，并且与其它流股形成的换热单元耦合度高，因此选择 C2 流股进行周期性地均分其上的公用工程，周期设定为 $IT_2=5\times 10^5$ 。

表 3 15SP (2) 算例中算法控制参数表

Table 3 Parameter set of the 15SP (2) for RWCE algorithm

控制 参数	N	ΔL	ϕ	θ	Ω	$Q_{\max}$	δ
	20	200	0.2	0.2	1	200	0.01

使用该策略优化算例 2 的结构如图 5 所示，其 TAC 为 5,073,662 USD·a⁻¹，比原始算法所优化出的结果降低了 1,095 USD·a⁻¹。从表 4 可以看出本文优化的 TAC 比文献^[16]降低了 7.8‰。该策略通过对 C2 流股上的公用工程进行强制性地消去，减少该流股上存在公用工程的次数，并通过网络结构的耦合关系改变优化路径，使 C4 流股上产生新的匹配关系，降低 C4 流股上的公用工程使用。加入策略后不仅获得更优的局部换热网络结构，而且为全局快速搜索潜在优质结构提供动力。

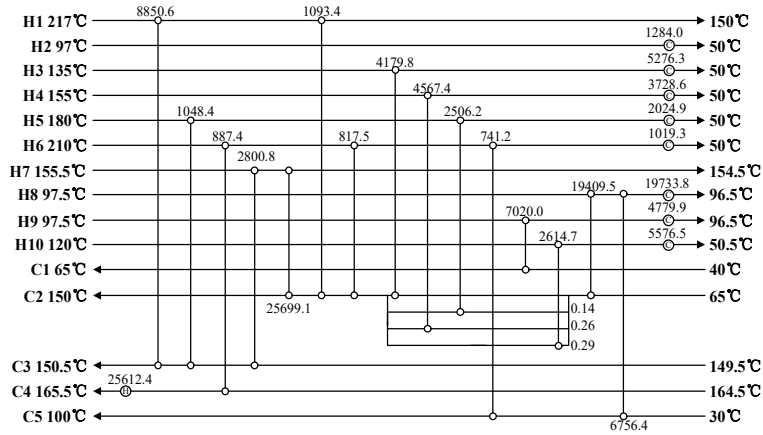


图 8 加入策略后优化 15SP (2) 算例，TAC 为 5,073,662 USD·a⁻¹

Fig.8 Network structure of the 15SP (2) after adding the strategy, TAC=5,073,662 USD·a⁻¹

表 4 15SP (2) 算例结果对比表

Table 4 Result comparison of 15SP (2)

文献	换热单元	Q_{HU} (MW)	Q_{CU} (MW)	TAC (USD·a ⁻¹)
Rev et al. ^[17]	29	43.28	61.15	5,613,283
谢启明 ^[18]	20	38.23	56.10	5,672,424*

曹美等 ^[19]	26	27.38	40.49	5,233,287
张丁太 ^[20]	15	26500	44312	5,115,557
韩正恒 ^[16]	27	26.50	44.31	5,113,717
本文	24	25.61	43.42	5,073,662*

*代表结构中选在有分流的情况

5 结论

本文揭示了流通股物性参数与其公用工程用量之间的定性关系，研究流通股公用工程机制，并基于流通股上的公用工程提出了周期性公用工程强制均分策略。该策略减少了网络中的公用工程用量，充分发挥流通股上的换热潜能，提高局部网络结构的质量，为全局寻优奠定优质的网络结构基础。本文的主要发现如下：

(1) 流通股上因物性参数的差异，流通股可分为易形成完全换热和不易形成完全换热两种，处于高温位的热流通股其匹配形成的结构更容易被保留，更容易形成完全换热状态。处于低温位的热流通股在随性匹配阶段更容易形成温度交叉（匹配中冷流体温度高于热流体），形成的结构费用高，结构不易被接受，导致其上更容易形成公用工程。同理，处于低温位的冷流通股属于易形成完全换热，处于高温位的热流通股属于不易形成完全换热。

(2) 周期性对流通股上的公用工程强制均分策略，通过对部分能形成完全换热但其在优化过程中却长期存在公用工程的流通股，以一定周期强制分配其公用工程的换热量到该流通股上的换热单元，使其形成完全换热状态，提高局部网络结构质量，为全局寻优奠定优质的网络结构基础。

(3) 将该策略运用于优化算例 15SP (1) 和 15SP (2)，所得网络结构的 TAC 与现有文献中的最优结果相比分别下降了 2,413 USD·a⁻¹ 和 40,055 USD·a⁻¹，验证了该策略的有效性。

参考文献:

- [1] XIAO Yuan, CUI Guo-Min, ZHANG Guan-Huan, et al. Parallel optimization route promoted by accepting imperfect solutions for the global optimization of heat exchanger networks[J]. Journal of Cleaner Production, 2022, 336: 130354.
 - [2] WU Xian-Li, XU Jie, HU Yang-Dong, et al. Improved Heat Exchanger Network Synthesis without Stream Splits Based on Comprehensive Learning Particle Swarm Optimizer[J]. ACS Omega, 2021, 6(44): 29459–29470
 - [3] RAVAGNANI M A S S, SILVA A P, ARROYO P A, et al. Heat exchanger network synthesis and optimization using genetic algorithm[J]. Applied Thermal Engineering, 2005, 25(7): 1003–1017.
 - [4] SILVA A P, RAVAGNANI M A S S, BISCAIA E C, et al. Optimal heat exchanger network synthesis using particle swarm optimization[J]. Optimization and Engineering, 2010, 11(3): 459–470.
 - [5] PENG Fu-Yu, Cui Guo-min. Efficient simultaneous synthesis for heat exchanger network with simulated annealing algorithm[J]. Applied Thermal Engineering, 2015, 78: 136–149.
 - [6] Xiao Yuan, Cui Guo-min. A novel Random Walk algorithm with Compulsive Evolution for heat exchanger network synthesis[J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 115: 1118–1127.
 - [7] PAVÃO L V, COSTA C B B, RAVAGNANI M A S S. An Enhanced Stage-wise Superstructure for Heat Exchanger Networks Synthesis with New Options for Heaters and Coolers Placement[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2018, 57(7): 2560–2573.
 - [8] 韩新宇,段欢欢,崔国民,肖媛,杨其国,张冠华.公用工程灵活匹配的节点非结构拓展模型[J].计算物理, 2022, 39(06):707-716.
- HAN Xin-Yu, DUAN Huan-Huan, CUI Guo-Min, XIAO Yuan, YANG Qi-Guo. Node-wise non-structural expansion model for flexible matching of public utilities[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2022, 39(06):707-716.

- [9] XU Yue, HERI A K, XIAO Yuan, et al. A New Nodes-Based Model for Optimization of Heat Exchanger Network Synthesis[J]. Journal of Thermal Science, 2021, 30(2): 451–464.
- [10] BJÖRK K M, PETTERSSON F. Optimization of large-scale heat exchanger network synthesis problems[J]. Modelling and Simulation, 2003, 2003: 313–318.
- [11] BJÖRK K M, NORDMAN R. Solving large-scale retrofit heat exchanger network synthesis problems with mathematical optimization methods[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2005, 44(8): 869–876.
- [12] FIEG G, LUO X, JEŹOWSKI J. A monogenetic algorithm for optimal design of large-scale heat exchanger networks[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2009, 48(11–12): 1506–1516.
- [13] PAVÃO L V, COSTA C B B, RAVAGNANI M A S S, et al. Large-scale heat exchanger networks synthesis using simulated annealing and the novel rocket fireworks optimization[J]. AIChE Journal, 2017, 63(5): 1582–1601.
- [14] PAVÃO L V, COSTA C B B, RAVAGNANI M A S S, et al. Costs and environmental impacts multi-objective heat exchanger networks synthesis using a meta-heuristic approach[J]. Applied Energy, 2017, 203: 304–320.
- [15] XU Yue, KAYANGE H A, CUI Guo-min. A Nodes-Based Non-Structural Model Considering a Series Structure for Heat Exchanger Network Synthesis[J]. Processes, 2020, 8(6): 695.
- [16] 韩正恒, 崔国民, 赵倩倩, 等. RWCE 算法中采用单元重构策略激励换热网络结构优化[J]. 化工学报, 2021, 72(06): 3316–3327.
- HAN Zheng-Heng, CUI Guo-Min, ZHAO Qian-Qian, et al. Impelling structural optimization of heat exchanger network by unit-reconfiguration strategy in RWCE algorithm[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 2021, 72(06): 3316–3327.
- [17] REV E, FONYO Z. Additional pinch phenomena providing improved synthesis of heat-exchange networks[J]. Hungarian Journal of Industrial Chemistry, 1986, 14(2): 181–201.
- [18] 谢启明, 杨东华. 工业规模换热网络的计算机自动合成——双最小换热温差法[J]. 石油化工, 1994(03): 159–165.
- XIE Qi-Ming, YANG Dong-Hua. Automstic Synthesis of Industrial Heat Exchanger Networks on a Microcomputer Using Dual Approach Temperatures[J]. Petrochemical Technology, 1994(03): 159–165.
- [19] 曹美, 崔国民, 陈家星, 等. 换热网络非结构模型中交叉结构的分析[J]. 高校化学工程学报, 2019, 33(04): 911–921.
- CHAO Mei, CUI Guo-Min, CHEN Jia-Xing, et al. Analysis of cross structures in non-structural model for heat exchanger network[J]. Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities, 2019, 33(04): 911–921.
- [20] 张丁太, 崔国民, 张冠华, 等. 一种割裂耦合关系的换热网络优化方法[J]. 热能动力工程, 2021, 36(12): 1–7.
- ZHANG Ding-Tai, CUI Guo-Min, ZHANG Guan-Hua, et al. Optimization Method of Heat Exchanger Network based on Splitting Coupling relationship[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and power, 2021, 36(12): 1–7.

一体化光伏热集热器性能的动态建模分析

邹文隆, 于刚, 杜小泽*

华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京, 102206

Tel: 010-61773923, Email: duxz@ncepu.edu.cn

摘要: 对光伏热 (PV/T) 设备的瞬态二维模型和集总参数模型进行了比较分析, 重点研究了太阳辐射, 以及进水温度和质量流量等调控参数发生瞬态变化时 PV/T 集热器的能量性能响应特性。对两种模型在电热效率和时间常数上的计算结果表明, 考虑到计算效率和简化的过程, 集总参数模型是评估 PV/T 设备性能的有效工具, 出口水温的计算结果的最大相对误差为 3.51%。同时对两种模型在不同工作条件下的计算结果进行对比, 分析工作条件对 PV/T 集热器工作性能产生影响的原因, 研究结果有助于加深对 PV/T 系统的理解和优化, 以提高能量转换和利用率。

关键词: 一体化光伏热, 集中参数模型, 瞬态特性, 能量分析

0 前言

太阳能光伏模块现在被广泛应用于发电, 在世界范围内受到了广泛的欢迎。值得注意的是, 与其他类型的可再生能源相比, 太阳能具有明显的优势, 因为他易于获得、数量巨大且不会耗尽。

光伏系统是一种利用太阳辐射并将其转化为电力的有效方法, 然而, 在光伏电池工作过程中, 只有 10%-20% 的太阳辐射可以直接转化为电能, 剩余的大部分作为热量扩散。一体化光伏热 (PV/T) 模块可以在相同区域输出比单个 PV 模块或单个太阳能集热器更多的能量^[1]。因此, 研究者们进行了大量的数值和实验研究, 以研究不同 PV/T 模块的性能^[2,3]。

大多数太阳能能量系统的运行本质上是瞬态的, 当考虑到外界环境条件的瞬态性质, 尤其是太阳辐射时, 对于一个 PV/T 设备来说并不存在稳态运行的情况^[4]。因此, 准确预测太阳能设备的性能对于确保系统设计正确、性能良好且不会出现故障, 优化设计和操作参数从而实现更高的热电效率是至关重要的。同时, 已有的实验研究指出, 能够再现 PV/T 设备动态行为的数值模型是一种高效的工具, 可以用于执行更多条件下的外部测试, 从而减少实验的时间和成本。为此, 在过去的研究中已经开发了多个数值模型用来描述 PV/T 集热器的动态热行为^[5-9]。

在本文中, 通过对原有应用于太阳能集热器的集中热容模型的发展, 并引入计算制冷流体的零维动态模型, 提出一个新的便于计算集中热容模型的方法, 能够对 PV/T 集热器的相关电热性能进行快速且准确的稳态以及动态计算, 用以将 PV/T 集热器集成到

更广泛的能源系统中去，包括建筑、热泵等综合能源系统当中。为了验证该集中参数模型计算结果的有效性，建立了 PV/T 集热器的二维离散模型，在同一 PV/T 集热器配置的情况下，讨论了运行条件变化时，两种模型对 PV/T 设备的动态响应特性的计算结果，对两种模型在相应电热性能计算结果上的误差作了分析。

1 PV/T 设备配置

本文研究基于单晶光伏模块 MS-M300 和平板太阳能集热器的 PV/T 设备，如图 1 所示。

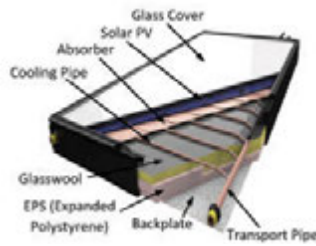


图 1 PV/T 集热器配置

PV/T 集热器的组成及工作过程如下：部分太阳辐射被 PV/T 模块中的光伏电池部分吸收转换为电能，大部分转换为热能，其中部分热能通过辐射和对流损失到周围环境中，剩余的能量被光伏电池背部的制冷流体吸收带走。

2 PV/T 设备的数学模型

在本节中，对 PV/T 设备建立了两种动态响应模型，用以在后面进行数值模拟和性能评估。考虑到每层的厚度和材料物性，为了简化数值模拟过程，进行了以下假设：

- (1) . 不同层材料的热性质和光学性能保持不变，因为其性能在操作条件范围内几乎没有变化^[10]。
- (2) . 在每层中的热传导过程是二维的，每个离散节点的温度是均匀的，并且由节点中心温度表示，在第三个方向被忽略，并且忽略边缘热损失。
- (3) . 冷却水在管道中分布均匀。
- (4) . 为了缩短研究 PV/T 模块的热性能的计算时间，在离散模型中只考虑了 10 根并联管中的一根。
- (5) . 天空被视为一个巨大的黑体。

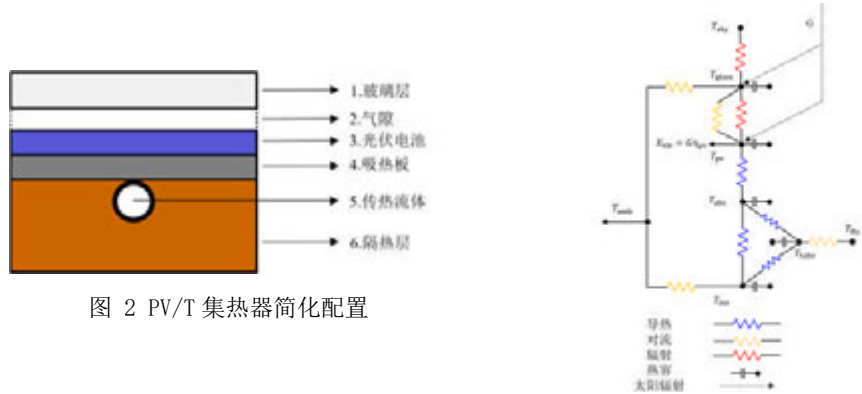


图 2 PV/T 集热器简化配置

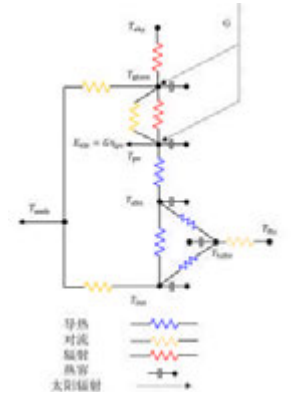


图 3 PV/T 集热器等效热网络

基于上述假设，简化 PV/T 集热器设备，并建立 PV/T 集热器的热阻网络模型，如图 2、图 3 所示。已有研究中对 PV/T 设备广泛使用二维离散方法进行建模，这种模型可以根据平板集热器具体的流道分布情况进行建模，获得集热器中每层温度的详细分布^[11]。这种离散方法由于对设备划分多层，每层中划分网格进行迭代计算，根据网格划分的情况需要占有一定的计算资源，每个迭代步长不宜过短且计算一个完整的动态响应所需时间较长。

本节在以 FVM 建立 PV/T 设备模型的同时，基于集总参数法和有效热容的原理^[7]，对 PV/T 设备中固体层之间的传热过程进行假设，将需要进行的多层迭代计算简化为一层计算，节省计算资源，缩短计算所需时间，并通过简化流道与吸热器传热计算过程，从而可以对不同流道形式的 PV/T 集热器的动态情况进行初步的数值模拟，能够对 PV/T 集热器的相关电热性能进行快速且准确的稳态以及动态计算，以便于集中到不同的能源系统中去。

2.1 集中参数模型

PV/T 设备的不同层和等效热网络示意图如图 1(c)所示。 U_1 、 U_2 和 U_3 表示通过玻璃盖从光伏电池到周围环境的总传热系数，光伏电池到制冷流体的总传热系数，光伏电池层通过背部隔热板到环境的总传热系数。在 PV/T 设备不同模块之间发生的不同传热模式的传热系数（导热、对流和辐射）计算如下式所示：

$$U_1 = \frac{1}{[h_{r,g-a} + h_{v,g-a}]^{-1} + [h_{r,g-p} + h_{v,g-p}]^{-1}}$$

$$U_2 = [R_{c,p-abs} + R_{c,abs-tube} + \frac{1}{h_f}]^{-1}$$

$$U_3 = [R_{c,p-abs} + R_{c,abs-ins} + \frac{1}{h_w}]^{-1}$$

在 PV/T 设备中，光伏电池与吸收层之间通常传热良好，假设光伏电池的组件（光伏电池、玻璃和吸收层）和管道都处于相同的温度，但玻璃罩通常与光伏电池有不同的平均温度，对于玻璃罩和光伏电池组件的能量守恒方程如下所示：

$$(mC)_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = A_g[U_{g-p}(T_p - T_g) + U_{a-g}(T_a - T_g)]$$

$$(mC)_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = A_p[G - E_{ele} + U_{g-p}(T_g - T_p) + (R_{c,p-abs} + R_{c,abs-ins})^{-1}(T_{ins} - T_p) + \frac{A_{abs-tube}}{A_{abs}}U_2(T_f - T_p)]$$

对于这两个方程，假设 $(T_p - T_a)/(T_g - T_a)$ 在其稳态值保持不变，即假设如下关系成立：

$$U_{a-g}(T_g - T_a) = U_1(T_p - T_a)$$

假设 T_a 为常数，可以得到

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{U_1}{U_{a-g}} \frac{dT_p}{dt}$$

将上式代入到光伏层能量方程，可以得到关于光伏电池温度的微分方程：

$$[(mC)_p + \frac{U_1}{U_{a-g}}(mC)_g + \frac{U_3}{U_{a-ins}}(mC)_{ins}] \frac{\partial T_p}{\partial t} = A_p[G - E_{ele} + U_1(T_a - T_p) + U_{a-ins}(T_a - T_p) + \frac{A_{abs-tube}}{A_{abs}}U_2(T_f - T_p)]$$

2.2 有限体积模型

PV/T 设备中的顶层玻璃吸收了一小部分的太阳辐射，导致温度升高，其余部分分布到光伏组件和周围环境当中。顶层玻璃的能量守恒方程为：

$$C_g \delta_g \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = \alpha_g G + h_{v,g-a}(T_a - T_g) + h_{r,g-a}(T_{sky} - T_g) + h_{v,g-p}(T_p - T_g) + h_{r,g-p}(T_p - T_g) + k_g \delta_g (\frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_g}{\partial y^2})$$

为了减少计算的复杂性，将由玻璃、EVA、PV 等组成的光伏组件视为一个整体组件，光伏组件的能量守恒方程为：

$$C_p \delta_p \rho_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = \tau_g G - E_{ele} + h_{v,g-p}(T_g - T_p) + h_{r,g-p}(T_g - T_p) + h_{c,p-abs}(T_{abs} - T_p) + k_p \delta_p (\frac{\partial^2 T_p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_p}{\partial y^2})$$

其中，单位面积光伏电池的电力输出 E_{ele} 由光伏电池效率计算：

$$E_{ele} = \tau_g G \eta_{ref} [1 - \beta(T_p - T_{ref})]$$

对于 PV/T 模块中的吸收层，能量守恒方程为：

$$C_{abs} \delta_{abs} \rho_{abs} \frac{\partial T_{abs}}{\partial t} = h_{c,p-abs}(T_p - T_{abs}) + h_{c,abs-ins}(T_{ins} - T_{abs}) + \frac{A_{abs-tube}}{A_{abs}} h_{c,abs-tube}(T_{tube} - T_{abs}) + k_{abs} \delta_{abs} (\frac{\partial^2 T_{abs}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_{abs}}{\partial y^2})$$

假设 PV/T 模块中每个平行管的热性能相同，只需要一个管子的能量守恒方程：

$$\frac{\pi(D_o^2 - D_i^2)}{4} C_{tube} \rho_{tube} \frac{\partial T_{tube}}{\partial t} = h_{v,tube-f} \pi D_i (T_f - T_{tube}) + h_{c,tube-ins} (1 + \frac{\pi}{2}) D_o (T_{ins} - T_{tube}) + h_{c,abs-tube} D_o (T_{abs} - T_{tube}) + k_{tube} \frac{\pi(D_o^2 - D_i^2)}{4} \frac{\partial^2 T_{tube}}{\partial y^2}$$

PV/T 模块中流体的能量守恒方程由管与管内流体之间的对流换热和沿管方向的热传导组成，方程如下所示：

$$\frac{\pi D_i^2}{4} C_f \rho_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = h_{v,tube-f} \pi D_i (T_{tube} - T_f) + \frac{\pi D_i^2}{4} v_f C_f \rho_f \frac{\partial T_{tube}}{\partial y^2}$$

PV/T 设备背部的隔热层与上面的吸收层、管道和周围环境交换热量，能量守恒方程为：

$$C_{ins} \delta_{ins} \rho_{ins} \frac{\partial T_{ins}}{\partial t} = h_{v,ins-a}(T_a - T_{ins}) + h_{c,abs-ins}(T_{abs} - T_{ins}) + \frac{A_{ins-tube}}{A_{abs}} h_{c,ins-tube}(T_{tube} - T_{ins}) + k_{ins} \delta_{ins} (\frac{\partial^2 T_{ins}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_{ins}}{\partial y^2})$$

2.3 传热系数

PV/T 设备的集中参数模型和动态二维数学模型由一系列传热传导方程建立，这些方程受各种传热系数的影响，包括有导热系数、对流系数和辐射系数。上述方程中的所有系数由以下公式给出。

2.3.1 导热系数

由于假设每个离散节点的温度是均匀的，并且由中心的温度表示，相邻层的导热系数由下式表示：

$$h_{c, i-j} = \frac{1}{\frac{\delta_i}{2k_i} + \frac{\delta_j}{2k_j}}$$

2.3.2 对流传热系数

玻璃盖或隔热层与环境之间的对流传热被视为平板与无限外部空间之间的自然通风。相应地，与风速有关的对流传热系数由下述经验公式导出^[12]：

$$h_{glass-amb} = 2.8 + 3.0 v_{wind}$$

通过玻璃盖下的空气间隙的对流传热系数由以下公式估算：

$$h_{v, \text{glass-pv}} = \frac{N_{ua} \cdot k_a}{\delta_a}$$

其中的努塞尔数由经验公式表示^[12]:

$$N_{ua} = 1 + 1.44 \left[1 - \frac{1708}{Ra \delta_a \cos \beta} \right]^+ \left[1 - \frac{1708 (\sin \beta)^{1.66}}{Ra \delta_a \cos \beta} \right] + \left[\frac{(Ra \cos \beta)^{0.33}}{5830} - 1 \right]^+$$

该参数适用于设备的倾角范围在 0°到 70°之间, +表示仅考虑正值。 Ra 可以表示为:

$$Ra = \frac{g \alpha_v \Delta t \delta_a^3}{a \nu}$$

其中, g 是重力加速度, α_v 表示体积膨胀系数, Δt 表示温差, a 是热扩散率, ν 是运动粘度。

管内流体的对流传热系数由下式计算:

$$h_{v, \text{tube-f}} = \frac{N_{uf} \cdot k_f}{D_i}$$

本研究中管内流体的层流和紊流的努塞尔数由下式估算^[12]:

$$N_{uf} = 4.364, \quad Re < 2300$$

$$N_{uf} = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.4}, \quad Re > 2300$$

2.3.3 辐射传热系数

辐射传热系数, 包括玻璃盖与天空之间的辐射换热系数, 以及玻璃盖与 PV/T 设备中的 PV 模块之间的辐射换热系数。

玻璃罩与天空之间的辐射传热系数由以下方程给出^[12]:

$$h_{r, \text{glass-sky}} = \sigma \varepsilon_g (T_g^2 + T_{sky}^2) (T_g + T_{sky})$$

其中, ε_g 是玻璃盖的发射率, 天空的温度由关系式进行评估:

$$T_{sky} = 0.0552 T_{amb}^{1.5}$$

玻璃盖与光伏组件之间的辐射传热系数由下式给出^[4]:

$$h_{r, \text{glass-pv}} = \frac{\sigma (T_g^2 + T_{sky}^2) (T_g + T_{sky})}{\frac{1}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\varepsilon_{pv}} - 1}$$

2.4 设备性能分析

2.4.1 能量分析

PV/T 设备的电效率, 即光伏电池组件的发电量与总入射太阳辐射的比值, 计算公式如下:

$$\eta_{\text{elc}} = \frac{E_{\text{elc. tot}}}{A_c G}$$

PV/T 集热器中的有用热能, 被管内的水带走, 由下式计算得出:

$$Q_{\text{th}} = \dot{m} C_f (T_{f, \text{out}} - T_{f, \text{in}})$$

相应地, 热效率计算如下:

$$\eta_{\text{th}} = \frac{Q_{\text{th}}}{A_c G} = \frac{\dot{m} C_f (T_{f, \text{out}} - T_{f, \text{in}})}{A_c G}$$

3 模型验证

在 Matlab2022b 上开发了上述的两种模型的数值模拟程序，基于隐式时间格式对两种动态模型进行离散化和求解，直到收敛值低于 10^{-6} ，计算一直持续到模拟时间结束。

在本研究中,对同一组设备参数分别使用有限体积法和集中参数法，分别计算两种模型下的 PV/T 设备效率曲线。此外，为了简化计算，整个光伏组件被视为一个整体组件，其标称效率为 15%，光伏组件的温度系数为-0.45%，标准状态太阳能电池的温度取 25℃。

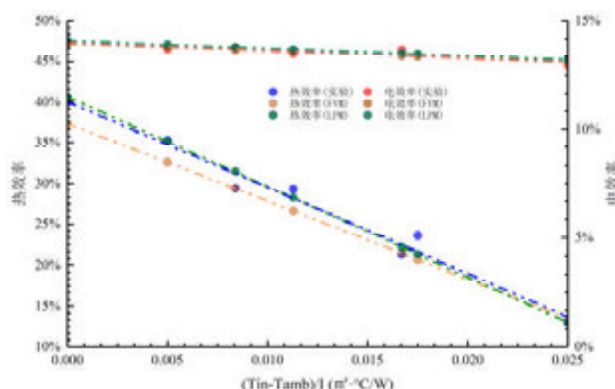


图 4 仿真模型与实验结果对比

陈等人^[3]建立了 PV/T 集热器的综合热电模型，对 PV/T 集热器的二维温度分布和动态响应特性进行了讨论和比较，并为了验证所提出的模型，制作并测试了 PV/T 太阳能集热器。结果表明，数值结算结果与实验数据吻合良好，电效率和热效率的最大相对误差(RE)分别为 8.7%和 9.1%。本文将此作为参考比较数据结果。图 4 显示了在不同工作条件下使用有限体积法和集中参数法计算得到的模拟结果与参考结果的比较。

PV/T 集热器的电效率和热效率比较如图 4 所示。提出的 LPM 模拟结果与文献中的实验值和 FVM 模型模拟结果吻合良好。电效率和热效率与实验值的最大相对误差 (RE) 分别约为 2.2% 和 9.6%。还有一点值得注意的是，使用集中参数法计算的热效率结果相比有限体积法的结果要高，这是由于两个主要原因：（1）集中参数模型中对 PV/T 设备上层玻璃的辐射损失的计算因为使用拟合公式计算而存在误差（2）相比有限体积模型，集中参数模型对 PV/T 设备做了进一步的简化，其中的部分组件的传热行为做了简化处理。

4 结果和讨论

PV/T 设备的性能取决于多种因素，包括天气条件和初始参数。在 PV/T 集热器的实际应用中，太阳辐射是主要的动态变量，进水温度和质量流量是可以进行调控的变量。本节详细分析了太阳辐射、进水温度和质量流量等主要参数对 PV/T 集热器电、热性能的影响。

4.1 动态响应特性

在 PV/T 集热器的实际应用中，环境条件中的太阳辐射随时间变化频繁。设备对时变参数的响应情况是长期运行的重要特征。时间常数通常应用于太阳能集热器的测试，以此表示设备对辐射强度变化的动态响应。下式中所示的时间常数 τ_c 是指从初始状态达

到最终稳定值的 63.2%(1-1/e)所经过的时间 (ΔT) [3]。

$$\tau_c = \frac{T_{f,0}(t) - T_{f,0}(0)}{T_{f,0}(\infty) - T_{f,0}(0)}$$

通过对集热器施加辐射突变，计算出 PV/T 集热器流体出口温度的变化过程，如图 5 所示。边界条件如下：入口水温：25℃，环境温度：25℃，风速：2m/s，质量流量：0.04kg/s，太阳辐射在第 100s 从 0 变化到 1000W/m²并保持 1000s 直到模拟结束。

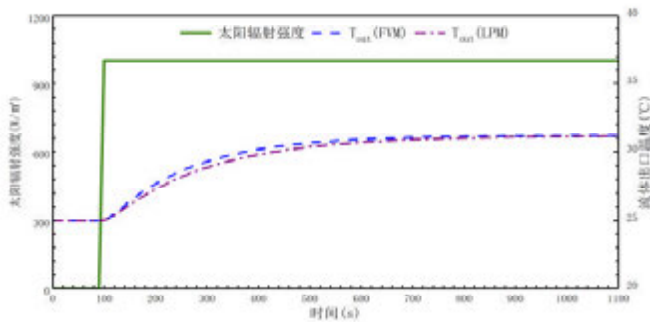


图 5 出口水温随太阳辐射阶跃变化的响应曲线

FVM 模型和 LPM 模型计算得到的 PV/T 集热器时间常数值如表 1 所示。有限体积方法与集中参数方法的计算结果相近，两种模型的时间常数都在 190s 左右，说明 PV/T 集热器的响应时间在使用文中提供的参数设置时是分钟级的。

表 1 动态响应特性

	时间常数(s)	热效率 (%)	电效率(%)	T _{f,0} (°C)
FVM	190	51.18	12.76	31.19
LPM	197	51.66	12.92	31.21

4.2 外界条件的影响

4.2.1 太阳辐射

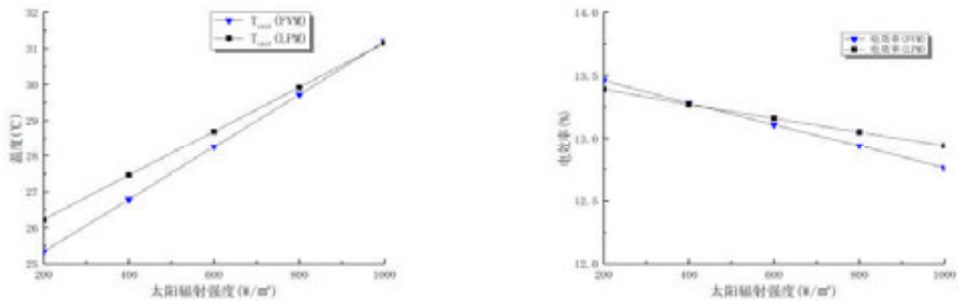


图 6 辐射强度对 PV/T 集热器性能的影响

PV/T 集热器表面接收到的太阳辐射同时影响电效率、热效率和设备的能量输出。图 6 显示了在不同太阳辐射强度下两种模型的流体出口温度和光伏电池电效率的计算结果，其他运行条件保持不变：环境和进水温度均为 25℃，质量流量为 0.04kg/s，风速为 2m/s。

由图 6 可以看出,随着太阳辐射强度的增加,流体出口温度在 PV/T 集热器获得更多热量的同时也逐渐增加,FVM 模型和 LPM 模型拥有相同的趋势。其中在 $200\text{W}/\text{m}^2$ 时两种计算结果的相对误差值最大,为 3.51%,随着太阳辐射强度的增加,两种模型计算结果的误差逐渐减小,在辐射强度 $1000\text{W}/\text{m}^2$ 时达到最小,为 0.13%。

这可以由两个方面来解释:(1)在低辐射强度时,上层玻璃对外界环境的辐射换热损失起主导作用,因为在 LPM 模型中对辐射换热损失采用拟合公式计算,因此在低辐射强度时存在误差。(2)在 LPM 模型中对光伏电池和吸热层及其以下部分做了简化处理,因此对 PV/T 设备的热阻计算值较小,从而导致在低辐射强度下出口水温较高。

4.2.2 质量流量

在影响 PV/T 设备运行性能的外部条件中,质量流量和进水温度属于可以进行调节的变量,因此研究不同质量流量和进水温度对 PV/T 集热器运行性能的影响对于优化 PV/T 设备运行性能是有重要意义的。如图 7 所示,质量流量在 $0.005\text{kg}/\text{s}$ 到 $0.05\text{kg}/\text{s}$ 之间变化,FVM 模型和 LPM 模型的热效率和电效率的最大相对误差分别为 2.36%和 2.58%。

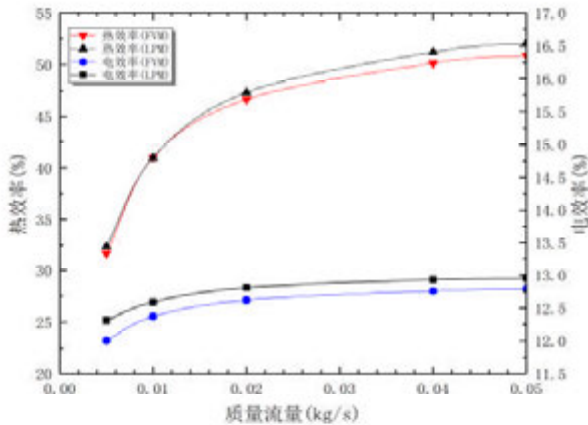


图 7 质量流量对 PV/T 集热器性能的影响

如图 7 所示,在质量流量小于 $0.01\text{kg}/\text{s}$ 时,随着质量流量的增加,PV/T 设备的电效率迅速增加,此时质量流量对 PV/T 设备的传热过程和温度分布起着主要作用,当质量流量达到 $0.04\text{kg}/\text{s}$ 时,PV/T 集热器的电效率的变化趋于平缓。当质量流量低于 $0.02\text{kg}/\text{s}$ 时,PV/T 设备的热效率随着质量流量的增加迅速增加,当质量流量达到 $0.04\text{kg}/\text{s}$ 后,热效率的增加也开始变的趋于平缓。LPM 模型模拟计算的 $0.04\text{kg}/\text{s}$ 的质量流量与太阳能热系统设计中约 $0.02\text{kg}/(\text{s}\cdot\text{m}^2)$ 的经验值一致。

4.2.3 入口水温

图 8 显示了光伏电池温度和电效率在进水温度从 25°C 到 50°C 的分布。当进水温度较高时,PV/T 设备中流体的吸热能力降低,带走的热量较少,换句话说,此时更多的热能被传导到光伏电池当中,这导致光伏电池温度从 34.45°C 升高到 52.86°C ,FVM 模型和 LPM 模型两种计算结果的最大相对误差为 7.39%,电效率从 12.93%降低到 11.81%,降

低了 1.12%，两种模型计算结果的最大相对误差为 1.72%。同时，由于 LPM 模型相较于 FVM 模型对于设备中的热传导过程和非稳态项的计算较为简化，可以从图 8 中看到，LPM 模型的光伏电池温度计算结果一直低于 FVM 模型。

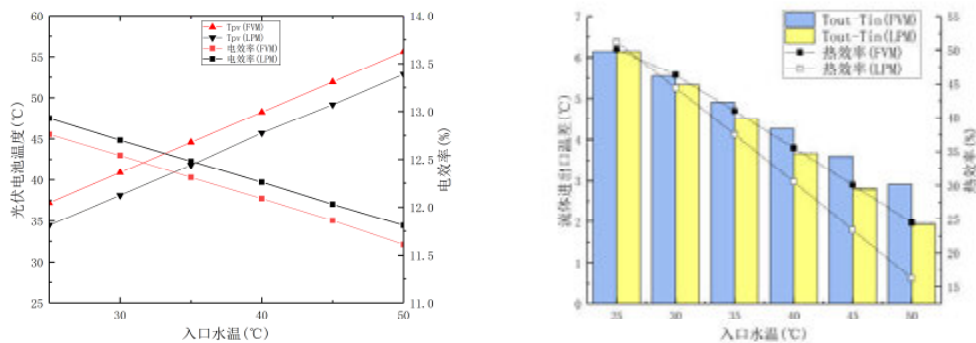


图 8 入口水温对 PV/T 集热器电、热性能的影响

如图 8 所示，随着进水温度升高，进水温度和出水温度之间的温差从进水温度 25°C 时的 6.15°C 下降到进水温度 50°C 时的 1.94°C，流体从 PV/T 集热器中带走热能的能力逐渐减小。进出口水温在偏离设备预定工作的条件后两个模型的计算误差开始增大。热效率从 51.22% 下降到了 16.24%，几乎线性下降了 34.98%。

4 结 论

建立了 PV/T（光伏热）设备的瞬态二维模型和基于 PV/T 有效热容计算的集总参数模型。对两种模型在不同运行条件下光伏组件的能量和火用进行了比较分析。

- (1) 本文开发了 PV/T 设备的二维离散模型和集中参数模型，并比较了它们在工作温度和时间常数方面的差异。结果表明，考虑到计算效率和计算过程的简化，集总参数模型可以作为评估 PV/T 设备性能的有效工具。然而，二维离散模型可以提供更详细和准确的温度分布信息，这对于更深入地理解 PV/T 设备的工作原理和性能优化仍然很重要。
- (2) 在这两种模型中，PV/T 设备在不同辐照条件下出口水温最大相对误差为在 200W/m² 时的 3.51%，并且随着辐照强度增加，这个误差逐渐减小，分析产生这个误差的原因有两个：使用拟合公式计算辐射换热系数以及进一步简化 PV/T 集热器的传热过程。
- (3) 结果表明，随着质量流量的增加，流体和 PV/T 装置之间的对流传热增强，导致 PV 电池的快速冷却，并提高了电效率和热效率。在一定的质量流量（本研究为 0.04kg/s）时，由于更高的流速增强了工作流体与设备之间的传热，光伏电池和流体出口的温度达到了稳定状态，在两个模型中都观察到了相同的趋势。
- (4) 入口水温对 PV/T 集热器性能的影响在两种模型中误差较小，且入口水温接近环境温度（本文为 25°C）时，整个 PV/T 集热器能获得最佳性能。

本文提出了一个简化的集中参数模型计算 PV/T 集热器的运行性能，并为 PV/T 设备的能量性能提供了详细的分析，这些分析有助于理解 PV/T 技术，并为优化其在可再生能源系统中的设计和运行提供指导。

参考文献

- [1] Herrando M, Wang K, Huang G, 等. A review of solar hybrid photovoltaic-thermal (PV-T) collectors and systems[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2023, 97: 101072.
- [2] Guarracino I, Mellor A, Ekins-Daukes N J, 等. Dynamic coupled thermal-and-electrical modelling of sheet-and-tube hybrid photovoltaic/thermal (PV/T) collectors[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2016, 101: 778–795.
- [3] Chen J F, Zhang L, Dai Y J. Performance analysis and multi-objective optimization of a hybrid photovoltaic/thermal collector for domestic hot water application[J]. *Energy*, 2018, 143: 500–516.
- [4] *Solar Engineering of Thermal Processes*, Fourth Edition[J]. .
- [5] Zarrella A, Emmi G, Vivian J, 等. The validation of a novel lumped parameter model for photovoltaic thermal hybrid solar collectors: a new TRNSYS type[J]. *Energy Conversion and Management*, 2019, 188: 414–428.
- [6] Hachicha A A, Abo-Zahhad E M, Said Z, 等. Numerical and experimental investigations of the electrical and thermal performances of a novel PV thermal system[J]. *Renewable Energy*, 2022, 195: 990–1000.
- [7] Guarracino I, Freeman J, Ramos A, 等. Systematic testing of hybrid PV-thermal (PV/T) solar collectors in steady-state and dynamic outdoor conditions[J]. *Applied Energy*, 2019, 240: 1014–1030.
- [8] Zhou J, Ma X, Zhao X, 等. Numerical simulation and experimental validation of a micro-channel PV/T modules based direct-expansion solar heat pump system[J]. *Renewable Energy*, 2020, 145: 1992–2004.
- [9] abbas S, Yuan Y, Hassan A, 等. Experimental and numerical investigation on a solar direct-expansion heat pump system employing PV/T & solar thermal collector as evaporator[J]. *Energy*, 2022, 254: 124312.
- [10] Rejeb O, Dhaou H, Jemni A. Parameters effect analysis of a photovoltaic thermal collector: Case study for climatic conditions of Monastir, Tunisia[J]. *Energy Conversion and Management*, 2015, 89: 409–419.
- [11] Ji J, He H, Chow T, 等. Distributed dynamic modeling and experimental study of PV evaporator in a PV/T solar-assisted heat pump[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2009, 52(5–6): 1365–1373.
- [12] Rejeb O, Dhaou H, Jemni A. A numerical investigation of a photovoltaic thermal (PV/T) collector[J]. *Renewable Energy*, 2015, 77: 43–50.

光合细菌对 MFC 产电性能的影响及种群分析

刘艺峰, 李艳霞*, 马玮琦, 王振强, 刘中良

(北京工业大学, 传热强化与过程节能教育部重点实验室暨传热与能源利用北京市重点实验室, 北京 100124)

(Tel:13671359425, Email:liyanxia@bjut.edu.cn)

摘要: 光合藻类微生物燃料电池(Photosynthetic algal microbial fuel cell, PAMFC)是将光合藻类引入微生物燃料电池(Microbial fuel cell, MFC)阴极室, 通过在 MFC 阴极室引入小球藻构建 PAMFC, 在长时间光照影响下阳极室菌液逐渐呈粉色向红色转变。为探明光照及红色菌液对 MFC 的影响, 本文利用红色菌悬液(Red)和白色菌悬液(Vol)分别构建 MFC, 研究得到 Vol-MFC 和 Red-MFC 的产电性能; 并进行 16S rDNA 扩增子测序, 确定种群分布。结果显示, 以 Vol 构建的 MFC (Vol-MFC) 输出电压达到了 588.9mV, 远高于 Red-MFC 的输出电压 488mV, 同时 Vol-MFC 具有更长的运行时长。与 Red-MFC 相比, 采用菌悬液 Vol 为阳极微生物的 Vol-MFC 具有更高的产电能力。

关键词: 微生物燃料电池; 光合细菌; 微生物; 产电性能; 生物能源

0 前言

伴随着经济的增长, 环境问题和能源问题成为国家关注的焦点。“双碳”目标(即在 2030 年前完成碳达峰, 2060 年前达到碳中和)是党中央在深思熟虑以后做出的重大战略部署, 也是为了应对全球的气候变化做出的庄严承诺。近年来, 我国正在寻求更具可持续性、包容性和韧性的经济增长方式, 已经具备了实现 2030 年前碳排放达峰的客观条件。“双碳”目标的提出将我国的绿色发展、可持续发展之路提升到了新的台阶, “双碳”目标的完成将会成为未来几十年内社会经济发展经济建设的主基调之一。顺利实现“双碳”目标需要国家机关通过政策性的引导, 同时也需要能源技术的不断革新。加强可再生能源和能效方面的新技术开发应用, 探索可持续发展新能源, 通过发展关键负排放技术, 包括自然减排措施, 碳捕获碳封存措施等, 增加减排潜力^[1, 2]。

微生物燃料电池(Microbial fuel cell, MFC)以电化学活性生物膜为催化剂直接将污水中丰富的化学能转化为电能, 具有清洁高效、安全无污染且反应条件温和的特点, 近年来受到了广大学者的关注和研究^[3]。

早在 1910 年, 英国植物学家 Potter 发现在厌氧条件下酵母菌可以产电, 自此拉开了 MFC 研究的序幕^[4]。21 世纪以来, 针对微生物燃料电池的研究越来越多, 并取得了一系列的重要成果^[5-11]。随着 MFC 不同方向研究的不断深入, 生物阴极微生物燃料电池受

基金项目: 国家自然科学基金(52076004)

到了学者的广泛关注^[12]。藻类作为公认的高效的“太阳能转换器”，可以通过光合作用达到固定二氧化碳的效果。将光合藻类引入 MFC 构建光合藻类微生物燃料电池（Photosynthetic algae microbial fuel cell, PAMFC），由于光合藻类通过光合作用产生的 O₂ 可以作为电子受体，所以 PAMFC 阴极不需额外机械供氧的情况下工作。采用光合藻类作为生物阴极，与传统的对阴极进行机械供氧相比，将光合藻类作为 MFC 的阴极时，阴极室的溶解氧浓度最高可达 20mg/L，这要高于机械供氧的溶解氧浓度^[13]。

本课题组在 MFC 阴极室引入小球藻构建 PAMFC，在 1000Lux 光照条件下长期运行，发现阳极室微生物菌液从白色向粉色转变直至变为大红色，原因是阳极室中光合菌群的种群比例增大。微生物在 MFC 阳极通过呼吸作用消耗有机物产生电子，而光合微生物在阳极可以通过自身光合作用或者呼吸作用产生电子直接产电，或者通过光合作用产生氢气作为阳极底物间接产电。微生物是影响 MFC 产电性能的关键因素之一^[14]，阳极室微生物中光合微生物数量的增多对 MFC 性能的影响仍不明确。

为此，本文通过将红色菌悬液 Red 和白色菌悬液 Vol（如图 1 所示）分别构建 MFC（Red-MFC 和 Vol-MFC），研究长期光照驯化的红色光合菌群对 MFC 的产电性能的影响，为构建 PAMFC 做前期准备。



图 1 红色菌悬液 Red 和白色菌悬液 Vol

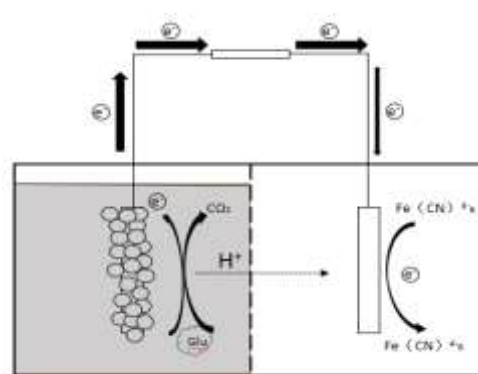


图 2 MFC 结构示意图

1 实验

1.1 材料与方法

构建了双室 MFC，阴极阳极体积均为 50ml，采用 CMI-7000S 阳离子交换膜（购自美国 MI 公司）将两室分隔开（如图 2 所示）。采用 2×2cm 碳毡作为阳极和阴极两个电极，电极在使用前采用丙酮浸泡 3h，去除表面油渍等杂质，去离子水冲洗干净，60℃烘干备用。菌种来源于北京工业大学住宅的化粪池，以葡萄糖为碳源驯化三个月以上，白色菌悬液 Vol 置于黑暗环境培养，红色菌悬液 Red 在培养 PAMFC 时光照下阳极室获得，采集后置于光照 1000Lux，25℃驯化培养。化学试剂为分析纯，均购自北京通广精细化工公司，实验用水均为去离子水。

1.2 MFC 的运行

本文中平行运行两组 MFC 反应器，均以浓度为 1g/L 的葡萄糖（Glu）为底物。在实验开始时，分别将两种菌悬液各接种 10ml 并放入两个 MFC 阳极室，然后将阳极液注入

阳极室，将阴极液加入阴极室，构建形成 Red-MFC 和 Vol-MFC。阴、阳极液成分如表 1 所示。利用钛丝分别将阴极、阳极引出与外接负载电阻（1k Ω ）连接构成电流回路。输出电压使用数据采集仪（34970A, Agilent）以 10min/次的频率自动采集并记录。MFC 运行时置于 25℃恒温箱中保持恒温，其中 Red-MFC 置于 1000Lux 光照下，Vol-MFC 置于黑暗条件下。当 MFC 的输出电压小于 50mV 时更换阴极液、阳极液。

表 1 MFC 阴、阳极液成分^[3]

	药品	浓度 (g/L)
阳极液	Na ₂ HPO ₄ • 12H ₂ O	14.32
	KH ₂ PO ₄	1.36
	NH ₄ Cl	0.5
	NaCl	0.1
	MgSO ₄	0.1
	CaCl ₂ • 2H ₂ O	0.02
	K ₃ [Fe(CN) ₆]	32.9
阴极液	Na ₂ HPO ₄ • 12H ₂ O	14.32
	KH ₂ PO ₄	1.36

1.3 测试方法

循环伏安法（cyclic voltammetry, CV）在电化学工作站（Autolab, 瑞士万通）上完成。CV 最常用的电极表征方法之一，能够对电极表面发生氧化还原反应的容易程度进行表征^[15]。采用原位测量方法，待电池运行稳定后且升到最大电压时将其开路，直至开路电位（open circuit potential, OCV）稳定，再开始测量。在阳极室插入 Ag/AgCl 参比电极，使其位于阳极电极与阳离子交换膜之间且靠近阳极处，阳极为工作电极，阴极为辅助对电极^[3]。

16S rDNA 扩增子测序（16S rDNA Amplicon Sequencing）技术能够分析微生物种群，鉴定优势产电微生物菌种。16S rRNA 位于原核细胞核糖体小亚基上，包括 10 个保守区域（Conserved Regions）和 9 个高变区域（Hypervariable Regions），其中保守区在细菌间差异不大，高变区具有属或种的特异性，随亲缘关系不同而有一定的差异。因此，16S rDNA 作为揭示生物物种的特征核酸序列，被认为是最适于细菌系统发育和分类鉴定的指标。16S rDNA 扩增子测序，通常是选择某个或某几个变异区域，利用保守区设计通用引物进行 PCR 扩增，然后对高变区进行测序分析和菌种鉴定，16S rDNA 扩增子测序技术已成为研究环境样品中微生物群落组成结构的重要手段^[16, 17]。

2 结果与讨论

2.1 微生物种群分析

依据取样的不同，将两个测序样品分别命名为 Vol 和 Red。其中 Vol 取自以葡萄糖为底物黑暗条件下运行的 MFC 的白色阳极液；Red 取自以葡萄糖为底物 1000Lux 光照强度 25℃条件下的 PAMFC 的红色阳极液，两个样品均为 5mL，送检。稀释曲线可以直观的反映测序数据量的合理性，并间接反映样品中物种的丰富程度，当曲线趋向平坦时，说明测序数据量渐进合理，更多的数据量只会产生少量新物种；反之表明不饱和，增加

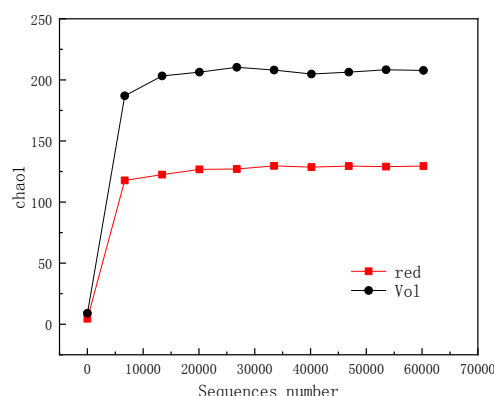


图 3 稀释曲线图

数据量可以发现更多新物种^[18]。如图 3 所示，从图中可以看出，随着取样数量的增加，两个样品所含有的物种数均有一个较大幅度的提升，而后趋于稳定，能够说明后续的实验数据可信度较高。

图 4 展示了 Red 和 Vol 两个样品在门水平上的物种相对丰度柱形图。如图所示，两个样品中的菌种比例不完全一致，但是其中优势菌种归属相同的门，这归结于样品微生物的碳源相同，均为葡萄糖。结果显示，*Proteobacteria* 门的微生物在两个样品中均为含量最高的菌种。图 5 展示了 Red 和 Vol 两个样本在属水平的相对丰度。结果显示，样品 Red 群落中 *Escherichia-Shigella* 为占优菌株，样品 Vol 群落中 *Pseudomonas* 为占优菌株。经过长期光照驯化后，随着电极表面电化学反应的进行，适合在光照条件下生存的产电菌逐渐具有种群优势，不适菌种逐渐淘汰，样品 Red 中 *Arcobacter* 属种群占比约为 29.85%，在样品 Vol 中该属占比不足 0.43%，该属大多数为呈现粉色至红色颜色的光合细菌菌液，正是由于 *Arcobacter* 属种群丰度的提升导致样品 Vol 菌悬液变为红色。在样

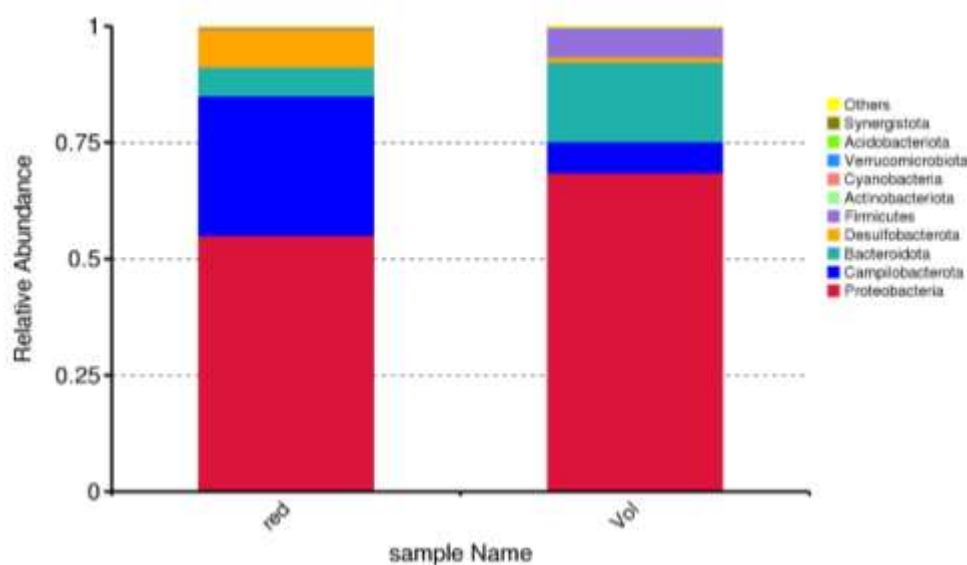


图 4 Red 和 Vol 在门水平上的种群相对丰度柱状图

品 Vol 中各菌株的相对丰度差别不大，具有更广泛的种群多样性。

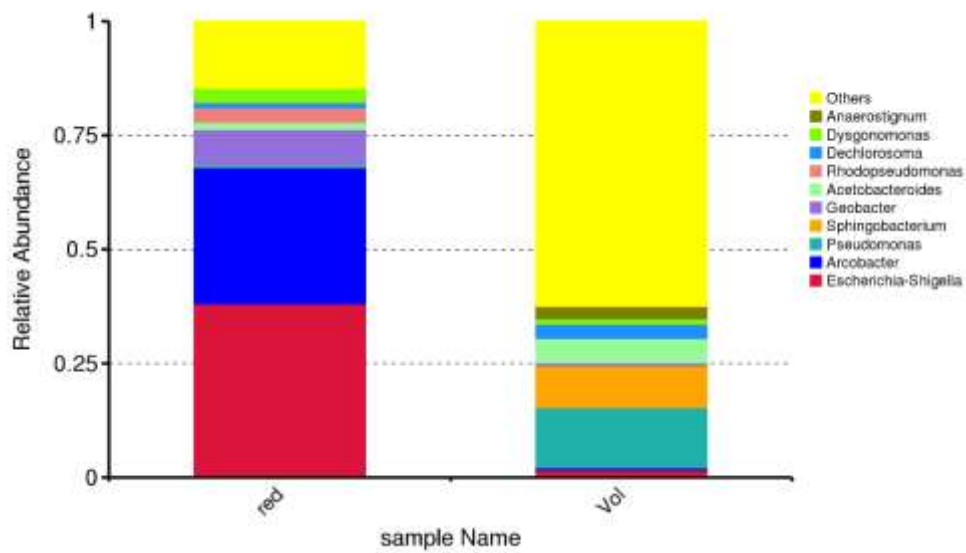


图 5 Red 和 Vol 在属水平上的种群相对丰度柱状图

2.2 MFC 的性能

表 2 所示为本文 MFC 的运行条件。

表 2 MFC 运行条件

	Red-MFC	Vol-MFC
电极	碳毡（2×2cm）	
阳极液、阴极液成分	如表 1	
运行温度	25℃	
阳极微生物	菌悬液 Red	菌悬液 Vol
环境光照	1000Lux	黑暗

2.2.1 MFC 输出电压

图 6 为 Vol-MFC 和 Red-MFC 电压输出曲线，从图中可以看出 Vol-MFC 在接种后的 293h 启动成功，而 Red-MFC 的启动时间超过了 1096h，大约是 Vol-MFC 启动时间的 3.7 倍。Red-MFC 的启动时间明显长于 Vol-MFC。这表明 Vol 中含有的微生物在黑暗条件下生物膜生长更快，微生物的生化反应水平更快，产生电子速度更快。从输出电压上看，在启动后的第三个周期 Vol-MFC 达到了最高的输出电压 588.9mV，而 Red-MFC 的最大输出电压仅为 488.1mV，比 Vol-MFC 的输出电压低了 17.12%。在稳定周期运行时间上看，Vol-MFC 最小周期为第二周期，周期时长为 71h；从第三周期开始周期时间逐

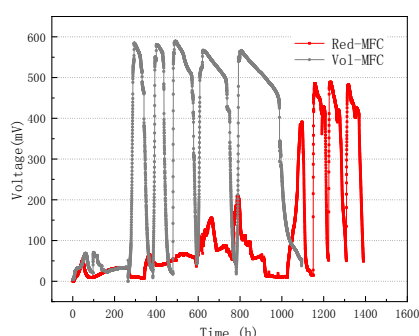


图 6 Red-MFC 和 Vol-MFC 电压输出曲线

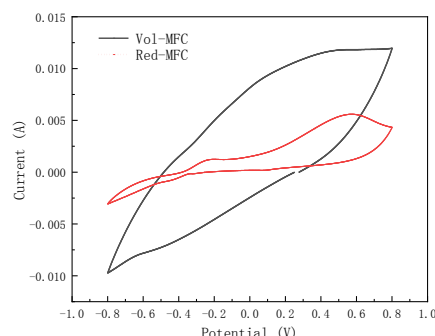


图 7 Red-MFC 和 Vol-MFC 的循环伏安曲线

渐增加，在启动后稳定运行第五周期运行时间达到了 308h，而 Red-MFC 的启动后的周期时长最多仅可以达到 85h（第三周期）。以上结果说明光照诱导后的 Red 菌群的光合细菌比例提高，降低了 MFC 的产电性能。

2.2.2 循环伏安曲线分析

循环伏安法可以用来考察微生物种群的电化活性^[3]。CV 测试前，将 MFC 外接电阻断开，静置至开路电压稳定。图 7 为 Red-MFC 和 Vol-MFC 两个电池的循环伏安曲线。从图 7 可以看出两个 MFC 都显示出一对明显的氧化还原峰，其中 Red-MFC 产生的电流范围更小，产生的电压范围也更窄。这说明与 Red 菌悬液相比，黑暗的阳极环境可以有效帮助建立更多样化和更稳定的阳极微生物群落，会极大的促进阳极中不同菌种的相互协调作用，从而提高阳极生物膜的生物电催化能力。以 Vol 菌悬液构建 MFC 产生的阳极生物膜具有更强的电化活性，即有更强的向外输出电子的能力。

3 结 论

MFC 在光照条件下长期运行，其阳极室微生物菌液从白色向粉色转变直至变为大红色，为探究红色菌悬液 Red 与白色菌悬液 Vol 的种群组成不同和产电性能的优劣，本文分别以白色菌悬液 Vol 和红色菌悬液 Red 为阳极微生物，构建了 Vol-MFC 和 Red-MFC，通过 Red-MFC 和 Vol-MFC 的运行性能的结果对比分析，得到以下结论：

(1) Vol-MFC 的整体性能明显好于 Red-MFC，产电能力更优。Vol-MFC 的输出电压是 588.9mV，高出 Red-MFC 的输出电压 20.65%。

(2) Red-MFC 的启动时间为 1096h，是 Vol-MFC 启动时间（293h）的 3.7 倍，并且输出最高电压仅为 488.1mV，明显低于 Vol-MFC。

(3) Vol-MFC 具有更长的稳定周期，最多高达 308h，远远高于 Red-MFC 的 85h。

(4) 通过 16S rDNA 扩增子测序技术发现光照培养后的阳极红色产电菌群 Red 中红色光合细菌种群比例明显提高，种群多样性降低；在黑暗条件下的白色菌悬液 Vol 具有更到的种群多样性。

(5) 黑暗的阳极环境可以有效帮助建立更多样化和更稳定的阳极微生物群落，会极大的促进阳极中不同菌种的相互协调作用，从而提高阳极生物莫的生物电催化能力。证明阳极微生物在黑暗条件下的混合菌种更有利于 MFC 的运行，为小球藻 PAMFC 阳极构建提供了研究依据。

参考文献

- [1] 徐朝晖. 我国实现“双碳”目标面临的挑战及对策[J]. 租售情报. 2023(05): 135-137.
- [2] 樊星, 李路, 秦圆圆, 等. 主要发达经济体从碳达峰到碳中和的路径及启示[J]. 气候变化研究进展. 2023, 19(01): 102-115.
- [3] 陈稳稳. 微生物燃料电池性能调控及电极界面传质特性研究[D]. 北京工业大学, 2021.
- [4] Logan B E, Hamelers B, Rozendal R, et al. Microbial fuel cells: methodology and technology[J]. Environ Sci Technol. 2006, 40(17): 5181-5192.
- [5] 刘志丹, 连静, 杜竹玮, 等. 利用异化金属还原菌构建含糖微生物燃料电池[J]. 生物工程学报. 2006, 22(1): 131-137.
- [6] 尤世界, 赵庆良, 姜珺秋. 废水同步生物处理与生物燃料电池发电研究[J]. 环境科学. 2006, 27(9): 1786-1790.
- [7] 梁鹏, 范明志, 曹效鑫, 等. 微生物燃料电池表观内阻的构成和测量[J]. 环境科学. 2007, 28(8): 1894-1898.
- [8] 李明, 李俊, 朱恂, 等. 阳极流场对单室微生物燃料电池性能的影响[J]. 工程热物理学报. 2011, 32(05): 855-858.
- [9] Logan B E, Rabaey K. Conversion of wastes into bioelectricity and chemicals by using microbial electrochemical technologies[J]. Science. 2012, 337(6095): 686-690.
- [10] 吴义诚, 王泽杰, 傅海燕, 等. 光合细菌在微生物燃料电池中的应用研究进展[J]. 微生物学通报. 2016, 43(12): 2707-2713.
- [11] Wu X, Song T, Zhu X, et al. Construction and Operation of Microbial Fuel Cell with *Chlorellavulgaris* Biocathode for Electricity Generation [J]. Applied biochemistry and biotechnology. 2013, 171(8): 11.
- [12] 李超, 梁丹丹, 田妍, 等. 微生物隔膜在生物阴极MFC中的应用及效能评价[J]. 中国环境科学. 2021, 41(4): 1655-1662.
- [13] Clauwaert P, Van der Ha D, Boon N, et al. Open air biocathode enables effective electricity generation with microbial fuel cells[J]. Environ sci technol. 2007, 41(21): 7564-7569.
- [14] 唐岳. 污水中光合产电菌在电极表面的富集及群落结构分析[D]. 西北农林科技大学, 2017.
- [15] 周宇. 尿液微生物燃料电池阳极性能的研究[D]. 北京工业大学, 2017.
- [16] Youssef N, Sheik C S, Krumholz L R, et al. Comparison of Species Richness Estimates Obtained Using Nearly Complete Fragments and Simulated Pyrosequencing-Generated Fragments in 16S rRNA Gene-Based Environmental Surveys[J]. Applied and environmental microbiology. 2009, 75(16): 5227-5236.
- [17] Caporaso J G, Lauber C L, Walters W A, et al. Global patterns of 16S rRNA diversity at a depth of millions of sequences per sample[J]. Proceedings of the national academy of sciences of the united states of america. 2011, 108: 7.
- [18] 夏瑜, 何绪文, 文湘华. 微生物群落多样性数学表征方法及其在污水处理系统研究中的

应用[J]. 微生物学通报. 2018, 45(08): 1778-1786.

相同阳离子混合熔盐筛选及热物性研究

王元媛, 鹿院卫*, 何聪, 吴玉庭, 张灿灿

(北京工业大学, 北京 100124)

(Tel:18810787918, Email:luyuanwei@bjut.edu.cn)

摘要: 为研发与第三代太阳能热发电技术相匹配的高温传热蓄热熔盐材料, 选取相同阳离子的 NaNO_3 、 NaOH 和 Na_2CO_3 三种熔盐作为研究对象, 基于相图理论开展 NaNO_3 - NaOH - Na_2CO_3 体系的共晶点理论计算和相图预测。结果表明, 通过 Direct 法计算得到该三元系共存在一个共晶点, 而 Factsage 软件模拟预测该三元系共存在四个共晶点, 选取熔点最低的共晶点(E3)所对应的混合盐作为优选盐, 优选盐熔点为 237.1°C , 分解温度为 642.5°C , 平均比热容为 $1.55\text{ J}/(\text{g}\cdot\text{K})$, 符合作为中高温传热蓄热材料的要求。

关键词: 熔盐; 相图; 相同阳离子; 太阳能热发电

0 前言

能源与环境问题始终是人类社会发展过程中的两大难题, 随着人类生态保护意识的加强以及市场经济的进一步深入发展, 走可持续性发展道路将是人类的必然选择。将熔盐储热技术和聚光式太阳能高温热发电技术相结合, 可以提供连续稳定并且可调节的高品质电能, 在解决供需不匹配以及提高能源系统性能方面发挥着重要作用。为了进一步提高太阳能热发电系统效率, 美国国家可再生能源实验室(NREL)提出了具有更高运行温度的第三代太阳能热发电技术路线图, 需要研发与之相匹配的 $600\sim 800^\circ\text{C}$ 高温传热蓄热熔盐工质^[1-3]。

在此背景下, 熔盐成为太阳能热发电技术的首选工质, 目前太阳盐(NaNO_3 - KNO_3)在商业化太阳能热电站中已经取得了成功的运行经验, 国内外熔盐的研究方向大多集中于相同阴离子体系如混合硝酸盐、碳酸盐等研究, 但混合硝酸盐存在使用温度范围窄的缺点, 混合碳酸盐存在熔点偏高的问题, 均不能满足下一代太阳能热发电技术的需求。

传统的熔盐筛选一般是通过正交实验法等进行试错, 中高温熔盐筛选实验需要在高温并且有惰性气体参与的情况下进行样品测量, 实验测试耗时费力, 大大降低了筛选新型熔盐的效率。相图计算理论(CALPHAD)可以避免传统实验测定的局限性, 引入相图计

基金项目: 国家自然科学基金(52076006)。

算后可以减少中高温熔盐筛选实验的盲目性，缩短实验周期。Mantha 等^[4]通过建立热力学模型预测了 $\text{LiNO}_3\text{-NaNO}_3\text{-KNO}_3$ 体系中的共晶组成及温度。Sergeev 等^[5]利用亚正规溶液模型建立了 $\text{Ca(NO}_3)_2\text{-NaNO}_3$ 体系的热力学数据库，认为组成为 45 mol% $\text{Ca(NO}_3)_2$ -55 mol% NaNO_3 时，体系具有 225 °C 的共晶温度。任楠^[6]基于相图基本原理，通过实验测定了多个二元硝酸盐体系相图，基于混合熔盐热力学模型，借助文献[7]中已有的过剩自由能函数的经验表达式和文献[8]中熔化自由能的经验表达式，对由 LiNO_3 、 NaNO_3 、 KNO_3 和 $\text{Ca(NO}_3)_2$ 所组成的四个三元系和一个四元系的共晶点进行了理论预测，结果证明采用 Direct 法计算得到的混合物共晶点与实验值误差不超过 2%，预测具有较好的准确性。综合上述研究，基于相图计算原理来指导熔盐的配置对于多元混合熔盐的筛选具有很重要的参考意义。

由于相同阴离子体系组分之间的相互作用相对简单，公开报道的大多数熔盐的研究都集中在相同阴离子体系。但近年来，相关学者对相同阳离子熔盐体系的研究层出不穷。Kenisarin 等^[9]综述了上百种高温相变材料，列举了多个相同阳离子熔盐系统的研究。例如， NaCl-NaF-NaNO_3 、 $\text{NaOH-NaNO}_3\text{-NaCl}$ 以及 $\text{NaCl-Na}_2\text{CO}_3\text{-NaOH}$ 体系等，它们熔点大多为 250-300 °C，具有非常可观的潜热值，但作者未对混合熔盐的上限使用温度进行介绍。Na 等^[10]对相同阳离子 $\text{NaNO}_3\text{-Na}_2\text{CO}_3$ 体系进行了实验研究，初步筛选出了工作温度范围为 300-600 °C 的宽温域熔盐体系。相同阳离子混合熔盐可能具有较宽的工作温度范围以及较高的上限使用温度和潜热值，可以作为非常有潜力的储能材料，但相关研究文献较少，需要进一步的探索。

综上，目前公开文献报道的混合硝酸盐分解温度较低，混合碳酸盐熔点较高，且大多为相同阴离子混合盐。本文基于相同阳离子的原则，创新地选取 NaNO_3 、 NaOH 、 Na_2CO_3 三种熔盐作为研究对象，基于相图理论借助 Factsage 软件开展了 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 三元体系的共晶点理论计算和相图预测，并对该体系相图预测共晶点进行了实验验证。完成了对相同阳离子 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 体系共晶点的理论计算、相图预测、共晶点验证以及共晶盐的热物性测试，筛选出与第三代太阳能热发电技术相匹配的高温传热蓄热熔盐材料。

1 相图热力学模型及实验

1.1 三元系相图理论计算热力学模型

本文以溶液热力学模型为基本原理，建立适合混合熔盐的热力学模型，通过纯组元的热力学数据，利用子二元系过剩吉布斯自由能等过剩能数据，完成对 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 熔盐体系共晶点温度及组成的理论预测^[11]。

相图计算的基本原理通常采用的是能量最小化原则，即^[12]：

$$G = G_{\min} \quad (1)$$

根据相平衡原理，在给定压力和温度的条件下，多组分体系中摩尔吉布斯自由能与体系中各组分浓度关系的表达式如下^[12]：

$$G_m = \sum_{i=1}^N x_i G_i^* + RT \sum_{i=1}^N x_i \ln x_i + \Delta G_m^E \quad (2)$$

式中， G_m 、 G_i^* 、 G_m^E 分别为混合物质的摩尔自由能、理想摩尔自由能以及摩尔过剩自由能，J/mol； N 为多元系组分数； x_i 为组分摩尔分数。

在共晶点处，体系中各组元的固相吉布斯能量和液相吉布斯能量相等，根据热力学原理，纯组元的熔化吉布斯自由能为^[13]：

$$\Delta G_{\text{fus}} = \frac{H_m}{T_m} (T_m - T) - \Delta c_p \left(T \ln \frac{T}{T_m} + T_m - T \right) \quad (3)$$

式中， ΔG_{fus} 为物质熔化吉布斯自由能，J/mol； ΔH_m 为熔化焓，J/mol； T_m 为熔化温度，K； Δc_p 为组分相变前后的比热容差值，J/(mol·K)。

由于文献[4]、[6]等通过使用 Direct 法成功实现了混合熔盐体系熔点的理论预测。本文也使用 Direct 法将模拟计算获取的三个子二元系的过剩自由能拟合式直接相加得到三元体系的混合过剩吉布斯自由能，如式(4)所示：

$$\Delta G_m^E = \Delta G_{\text{NaOH-NaNO}_3}^E + \Delta G_{\text{NaOH-Na}_2\text{CO}_3}^E + \Delta G_{\text{NaNO}_3\text{-Na}_2\text{CO}_3}^E \quad (4)$$

三组子二元系摩尔过剩自由能数据可拟合成相关组分组成的函数，如式(5)-(7)所示。

$$\Delta G_{\text{NaOH-NaNO}_3}^E = x_{\text{NaOH}} x_{\text{NaNO}_3} (830.02 - 3879.39 x_{\text{NaNO}_3}) \quad (5)$$

$$\Delta G_{\text{NaOH-Na}_2\text{CO}_3}^E = x_{\text{NaOH}} x_{\text{Na}_2\text{CO}_3} (-4338.01 + 1498.4 x_{\text{NaOH}}) \quad (6)$$

$$\Delta G_{\text{NaNO}_3\text{-Na}_2\text{CO}_3}^E = x_{\text{NaNO}_3} x_{\text{Na}_2\text{CO}_3} (8997.76 - 2936.15 x_{\text{NaNO}_3}) \quad (7)$$

综上，结合联立方程(1)~(7)可确定 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 体系在平衡状态下的共晶点及组成。

1.2 实验设备与实验方案

1.2.1 实验原料与设备

本文选用的 NaNO_3 购买于北京益利精细化学品有限公司， NaOH 、 Na_2CO_3 购买于福晨(天津)化学试剂有限公司，均选择分析纯级的实验试剂，纯度均高于 99.0%。混合熔盐

样品的制备和热物性测试过程中使用的主要实验仪器如表 1 所示。

表 1 实验过程中的主要实验仪器
Table 1 Main experimental apparatus during the experiment

仪器名称	规格型号	生产厂家
鼓风干燥箱	101-3A 型	天津泰斯特仪器有限公司
微波马弗炉	CY-MU1400C-S	长仪微波科技有限公司
同步热分析仪	STA-449F3	德国耐驰公司
差式扫描量热仪	DSC3	梅特勒-托利多有限公司
高精度电子天平	XP504	梅特勒-托利多有限公司

1.2.2 样品制备

将干燥后的单组分盐采用高精度分析天平按照所需比例对样品进行称量并混合搅拌,将配置好的混合盐放入微波马弗炉中,以 5 °C/min 的升温速率将混合盐升温至 500 °C 后恒温 3 h,待程序结束后静置 0.5 h 后将样品取出并冷却。将冷却后的块状样品放入超微粉碎机进行粉碎,粉碎后的样品粉末放置在恒温干燥箱中备用。

1.2.3 样品热物性测试

(1) 熔点测试:

取 5~10 mg 某一混合比例的熔盐试样,置于测试坩埚内,采用差式扫描量热仪测试样品的 DSC 曲线,升温程序设定为 35~450 °C,升温速率为 5 °C/min,使用氮气作为保护气体和吹扫气体,气流速率设置为 50 mL/min。

(2) 分解温度测试:

取 5~15 mg 某一混合比例的熔盐试样,置于测试坩埚内,使用同步热分析仪测试样品的 TG 曲线,升温程序设定为 30~800 °C,升温速率为 5 °C/min,选择氮气作为保护气体,气流速率设置为 50mL/min。

(3) 比热容测试:

采用比热已知的蓝宝石作为标样,置于测试坩埚内,采用差式扫描量热仪设定升温程序为 35~450 °C,升温速率为 5 °C/min,使用氮气作为保护气体和吹扫气体,气流速率设置为 50 mL/min。取 5~10 mg 某一混合比例的熔盐试样,置于测试坩埚内,采用差式扫描量热仪在同一温度程序和实验条件下进行实验,对比热已知的蓝宝石样品与比热未知的熔盐试样的测量结果进行比较分析。

2 结果与讨论

2.1 三元系共晶点理论计算与模拟结果对比

由于相同阳离子体系 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 的研究数据较少, 导致二元混合盐体系的相图数据匮乏, 本文通过 Factsage 软件 Equilib 模块获取过剩能等数据, 通过软件对三个二元系进行热力学模拟, 可获得二元系 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH}$ 、 $\text{NaNO}_3\text{-Na}_2\text{CO}_3$ 和 $\text{NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 的过剩吉布斯能。利用各二元体系的过剩吉布斯能得到三元系的总过剩吉布斯自由能, 经过理论计算初步得到 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 三元系的最低共熔点温度为 $228.0\text{ }^\circ\text{C}$, 共熔点处对应的摩尔分数分别为 $x_{\text{NaNO}_3}=35.0\%$, $x_{\text{NaOH}}=52.0\%$, $x_{\text{Na}_2\text{CO}_3}=13.0\%$ 。

完成对 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 熔盐体系的共晶温度和组成进行初步理论计算后, 为了获取完整的三元相图和共晶点, 借助 Factsage 热力学软件, 通过 Factsage 软件内部 FTsalt 数据库和已优化的模型对 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 三元体系开展热力学模拟计算, 最终获得完整的三元熔盐体系相图, 如图 1 所示。

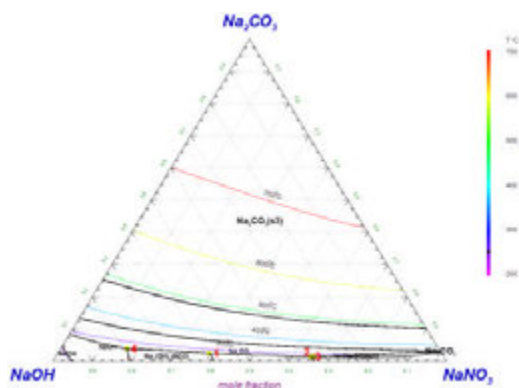


图 1 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 三元相图

Fig. 1 Ternary phase diagram of $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$

如图 1 所示, 通过相图软件预测得到 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 三元体系共存在四个共晶点, 分别是共晶点 E1: $264.4\text{ }^\circ\text{C}$, 共晶组成为 $38.0\text{ mol\%NaNO}_3$, $59.6\text{ mol\%NaOH}$ 和 $2.4\text{ mol\%Na}_2\text{CO}_3$; 共晶点 E2: $257.9\text{ }^\circ\text{C}$, 共晶组成为 $65.6\text{ mol\%NaNO}_3$, $33.1\text{ mol\%NaOH}$ 和 $1.3\text{ mol\%Na}_2\text{CO}_3$; 共晶点 E3: $255.1\text{ }^\circ\text{C}$, 共晶组成为 $58.3\text{ mol\%NaNO}_3$, $40.2\text{ mol\%NaOH}$ 和 $1.5\text{ mol\%Na}_2\text{CO}_3$; 共晶点 E4: $256.1\text{ }^\circ\text{C}$, 共晶组成为 $16.9\text{ mol\%NaNO}_3$, $79.3\text{ mol\%NaOH}$ 和 $3.8\text{ mol\%Na}_2\text{CO}_3$, 将理论计算结果与软件模拟结果整理于表 2。由表 2 可知, 上文中通过建立热力学模型对 $\text{NaNO}_3\text{-NaOH-Na}_2\text{CO}_3$ 体系共晶点组成(摩尔配比)的理论计算结果比较接近相图软件预测的共晶点 E1 的组成结果, 但理论计算出的碳酸钠所占有的摩尔分数相比相图软件预测值较高, 理论计算的共晶点温度为 $228.0\text{ }^\circ\text{C}$ 相对于相图软件预测值 $264.4\text{ }^\circ\text{C}$ (E1)偏低, 误差率约为 13.8% 。说明采用 Direct 法简化了组元间相互作用, 存在一定的误差, 需要结合实验数据进一步对理论计算模型参数进行修正。

表 2 NaNO₃-NaOH-Na₂CO₃ 三元系相图预测共晶点

Table 2 Phase diagram of NaNO₃-NaOH-Na₂CO₃ ternary system predicting eutectic points

NaNO ₃ -NaOH-Na ₂ CO ₃	摩尔配比	预测共晶温度 (°C)
E1	0.380:0.596:0.024	264.4
E2	0.656:0.331:0.013	257.9
E3	0.583:0.402:0.015	255.1
E4	0.169:0.793:0.038	263.1
理论计算	0.350:0.520:0.130	228.0

2.2 熔点实验验证

本节按照 Factsage 软件模拟预测得到的 NaNO₃-NaOH-Na₂CO₃ 体系共晶点 E1、E2、E3、E4 的组成配比分别制备样品 1-4，利用差示扫描量热仪(DSC)对其进行了实验验证。图 2~5 为相图预测共晶点多对应的熔盐样品的 DSC 测量曲线，结果表明，混合熔盐均在 235 °C~270 °C 范围内出现了明显且单一的吸热峰，实现了完全熔融，证明共晶良好。

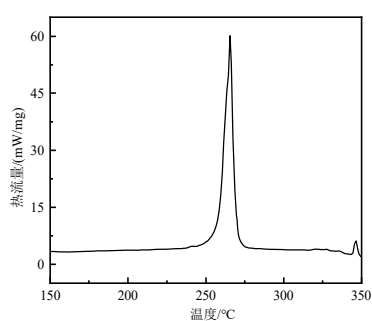


图 2 样品 1 的 DSC 曲线

Fig. 2 DSC curve of sample 1

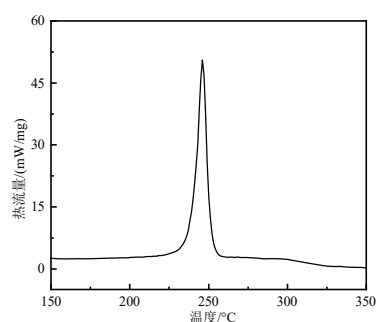


图 3 样品 2 的 DSC 曲线

Fig. 3 DSC curve of sample 2

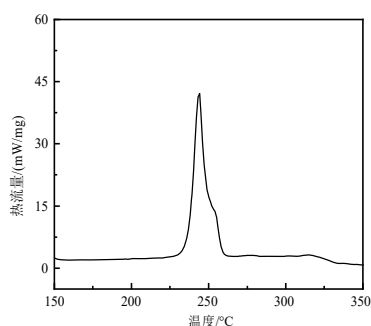


图 4 样品 3 的 DSC 曲线

Fig. 4 DSC curve of sample 3

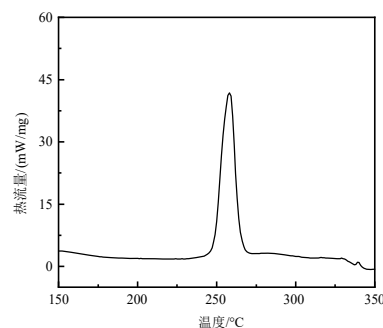


图 5 样品 4 的 DSC 曲线

Fig. 5 DSC curve of sample 4

表 3 总结了共晶点 E1、E2、E3 和 E4 所对应的熔盐样品的实测熔点、峰值点、终止点和潜热值，以及该三元系共晶点温度的预测值与实测值的对比及误差。由表 3 数据可知，四个样品熔点实测值均低于预测值，误差均控制在 20 °C 以内，证明相图软件预测的三元系共晶温度与实验值基本吻合，进一步验证了相图计算方法在开发新型熔盐储热材料中的可靠性。通过对比分析，共晶点 E3 所对应的混合熔盐(样品 3)熔点最低且共晶良好，因此选为本文优选盐。

表 3 实验值与预测值对比
Table 3 Comparison of experimental and predicted values

样品	摩尔配比 NaNO ₃ -NaOH-Na ₂ CO ₃	熔点 (°C)	峰值点 (°C)	终止点 (°C)	潜热 (J/g)	熔点 模拟值 (°C)	误差 (°C)
1	0.380:0.596:0.024	258.5	265.7	268.9	248.0	264.4	5.91
2	0.656:0.331:0.013	239.6	246.1	250.9	235.0	257.9	18.31
3	0.583:0.402:0.015	237.1	244.0	249.7	244.0	255.1	17.96
4	0.169:0.793:0.038	248.8	258.6	264.9	249.6	263.1	14.29

2.3 分解温度测试

熔盐的分解温度是设定最大可用温度的一个重要参数，本节使用同步热分析仪对优选混合熔盐的热重曲线进行测定，基于最大稳定性标准(即热重分析试验期间失去其无水重量 3% 的温度为其分解温度)分析得到样品的分解温度。优选出的混合熔盐样品 3(共晶点 E3 所对应的熔盐样品)的热重曲线如图 6 所示。结果显示，样品的分解温度为 642.5 °C(>600 °C)，符合第三代太阳能热发电技术对工质的高温要求。

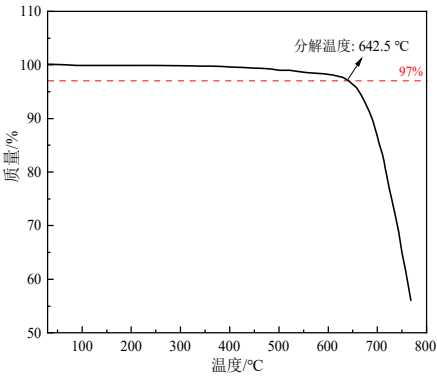


图 6 样品 3 的热重曲线
Fig. 6 Thermogravimetric curve of sample 3

2.4 比热容测试

比热是衡量熔盐传热蓄热性能的重要的物性参数。本节使用差示扫描量热仪对优选混合熔盐的比热容进行测定。优选出的混合熔盐样品 3(共晶点 E3 所对应的混合熔盐)比热容随温度的变化规律如图 7 所示。结果显示, 优选盐的液态比热在 $1.48 \text{ J/(g}\cdot\text{K)}$ ~ $1.62 \text{ J/(g}\cdot\text{K)}$ 范围内变化, 平均比热容为 $1.55 \text{ J/(g}\cdot\text{K)}$, 随着温度的升高, 不同摩尔配比下的液态比热与温度均呈一定的正相关关系, 即随着温度的升高比热会有一定程度的增大。

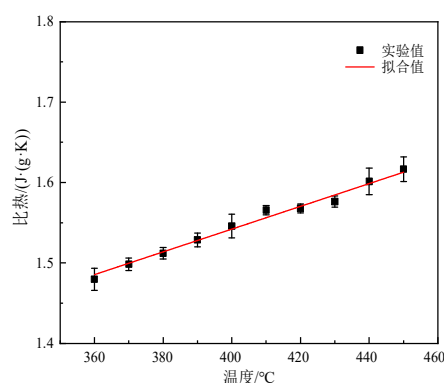


图 7 样品 3 的的比热曲线

Fig. 7 Specific heat curve of sample 3

4 结论

本文采用相同阳离子的原则, 选取 NaNO_3 、 NaOH 、 Na_2CO_3 三种熔盐作为研究对象, 基于相图理论通过 Factsage 软件开展了对 NaNO_3 - NaOH - Na_2CO_3 三元体系的理论计算和相图预测, 对该体系相图预测共晶点进行了实验验证, 对优选出的共晶配比进行分解温度和比热的测试, 完成了对相同阳离子体系 NaNO_3 - NaOH - Na_2CO_3 共晶点的理论计算、相图预测和实验验证以及共晶盐的热物性测试, 结论如下:

(1) 建立了基于热力学原理的混合熔盐热力学模型, 采用 Direct 法经过理论计算初步得到 NaNO_3 - NaOH - Na_2CO_3 三元系的共晶点为 228.0°C , 共晶点处对应的摩尔分数分别为 $x_{\text{NaNO}_3}=35.0\%$, $x_{\text{NaOH}}=52.0\%$, $x_{\text{Na}_2\text{CO}_3}=13.0\%$ 。

(2) 为了更精确的指导熔盐配置, 利用 Factsage 软件对三元体系进行相图预测, 得到 NaNO_3 - NaOH - Na_2CO_3 三元体系的完整相图, 结果显示该三元体系共存在四个共晶点。

(3) 利用差示扫描量热仪(DSC)对相图预测的四个理论共晶点进行了实验验证, DSC 结果显示四个熔盐样品均共晶良好, 模拟预测值和实测值基本一致, 共晶点 E3 所对应的混合熔盐(样品 3)的熔点最低, 为 237.1°C 。

(4) 选用熔点最低且共晶良好的 E3 所对应的共晶盐(样品 3)作为优选盐, 优选盐的

分解温度为 642.5 °C，液态比热在 1.48 J/(g·K)~1.62 J/(g·K)范围内变化，平均比热容为 1.55 J/(g·K)，通过综合分析，该储热材料符合作为太阳能热发电工质的要求，后期将对该盐的进一步测试，比如稳定性，以及腐蚀性测试等。

参考文献

- [1] González-Roubaud Edouard, Pérez-Orsorio David, Prieto Cristina. Review of Commercial Thermal Energy Storage in Concentrated Solar Power Plants: Steam vs. Molten Salts. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, 80: 133-148.
- [2] Mehos Mark, Turchi Craig, Vidal Judith, et al. Concentrating Solar Power Gen3 Demonstration Roadmap. National Renewable Energy Lab (NREL), Golden, 2017.
- [3] Liu Yaping, Wang Ying, Huang Diangui. Supercritical CO₂ Brayton Cycle: A State-of-The-Art Review. *Energy*, 2019, 189: 115900.
- [4] Mantha D, Wang T, Reddy R G. Thermodynamic Modeling of Eutectic Point in The LiNO₃-NaNO₃-KNO₃ Ternary System. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2012, 33: 110-114.
- [5] D. Sergeev, B.H. Reis, I. Dreger, et al. Thermodynamics of the Ca(NO₃)₂-NaNO₃ System, *Calphad*, 2019, 67: 101688.
- [6] 任楠. 混合熔盐传热蓄热介质的制备与热物性研究[博士学位论文]. 北京:北京工业大学,2015.
REN Nan. Study on Preparation and Thermophysical Properties of Mixed Molten Salts for Heat Transfer and Storage [Ph.D. Thesis]. Beijing: Beijing University Of Technology, 2015.
- [7] Dessureault Y, Sangster J, Pelton A D. Critical Evaluation of Thermodynamic Data and Phase Diagrams of The Hydroxide-Halide, Hydroxide-Nitrate, Nitrate-Nitrate, Nitrate-Halide and Hydroxide-Hydroxide Systems (AOH-AX, ANO₃-AX, ANO₃-BNO₃, AOH-BOH) Where A, B= Li, Na, K and X= Cl, F, NO₃, OH. *Journal Chemical Physics*, 1990, 87(3): 407-453.
- [8] 王军涛, 王文磊, 来梦泽,等. 三元系 LiNO₃-NaNO₃-KNO₃ 相图预测及其热性能研究. *功能材料*, 2014, 45(15): 15036-15040.
WANG Juntao, WANG Wenlei, LAI Mengze, et al. Phase Diagram Prediction of The LiNO₃-NaNO₃-KNO₃ Ternary System and Its Thermodynamic Performance. *Journal of Functional Materials*, 2014, 45(15): 15036-15040.
- [9] Murat M. Kenisarin. High-Temperature Phase Change Materials for Thermal Energy Storage. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2010, 14(3): 955-970.
- [10] Heya Na, Cancan Zhang, Yuting Wu, et al. Investigation on Thermal Performance of Eutectic Binary Nitrate-Carbonate Molten Salt under Thermal Shock Condition. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2023, 255: 112314.
- [11] 何聪, 鹿院卫, 宋文兵, 等. 新型相同钠离子混合熔盐相图预测及物性测量. *储能科学与技术*, 2021, 10(5): 1729-1734.
HE Cong, LU Yuanwei, SONG Wenbing, et al. The Phase Diagram Prediction and Experimental Study of Ternary Same Cation Systems. *Energy Storage Science and Technology*, 2021, 10(5): 1729-1734.
- [12] 郝士明, 蒋敏, 李洪晓. 材料热力学. 北京: 化学工业出版社, 2010: 39-65.
HAO Shiming, JIANG Min, LI Hongxiao. *Materials Thermodynamics*. Beijing: Chemical Industry Press, 2010: 39-65.

水力悬浮微型泵空化特性研究及优化设计

韩家成, 薛淞, 左怀宇, 邢冠英, 洪涛, 胡润, 罗小兵*

(华中科技大学能源与动力工程学院, 湖北 武汉 430074)

(Tel: 13971460283, Email: luoxb@hust.edu.cn)

摘要: 本文采用 CFD 数值模拟和正交试验设计对自主研发的水力悬浮微型泵进行空化特性研究与抗空化性能优化。通过数值模拟得到微型泵的空化特性曲线并对不同空化数下的空化流动特性进行分析, 选取叶轮进口直径、叶片厚度、吸水室直径、蜗壳基圆高度四个因素进行了正交试验优化, 结果表明, 吸水室直径对微型泵综合性能影响较为显著。模拟发现吸水室直径增大可使垂直段涡流区显著减少; 实验测得优化后样机扬程提高了 5.20%, 临界空化数减小了 59.6%。

关键词: 空化特性; 抗空化性能; 正交优化; 水力悬浮微型泵

0 前言

微型泵作为主动液冷系统中工质循环的核心驱动部件, 直接决定着整个系统的散热能力和可靠性。在各种微型泵中, 离心泵凭借着扬程大、流量高和工艺成熟的优点成为一个不错的选择^[1]。当离心泵微型化时, 需要提高其转速以获得更高的功率密度。然而传统离心泵采用接触式轴承, 接触式轴承存在磨损失效问题, 且高转速会进一步加剧磨损失效。为了解决这个问题, 我们在前期工作中自主研发了一种采用非接触式轴承的水力悬浮微型泵, 依靠径向滑动轴承和轴向推力轴承共同作用使转子可以稳定地悬浮在流体中而不与其他部件接触, 从而彻底摆脱轴承磨损问题, 微型泵可靠性和寿命大大提升^[2,3]。

然而在实际应用过程中发现, 水力悬浮微型泵会出现离心泵不可避免的空化问题。空化指的是离心泵在运行过程中, 其过流部件的局部压力低于该温度的饱和蒸汽压时, 气泡的产生、发展和溃灭的过程。空化不仅会导致泵性能下降, 引起压力脉动和噪声, 严重时还会剥削叶轮等关键部件, 影响离心泵的运行^[4,5]。对于该水力悬浮微型泵, 由于其超高的旋转速度, 空化问题更为突出。因此, 如何提高水力悬浮微型泵的抗空化性能, 已成为研究设计水力悬浮微型泵的重要内容。

国内外学者对泵的空化流动特性及抗空化性能提升展开了广泛的研究。泵空化流动特性主要指空泡的发展及分布特性。Lu 等^[6]通过数值模拟发现, 在离心泵空化过程中, 空泡首先在叶片吸力面前缘生成, 然后逐渐向下游流道扩展; 而张等^[7]对一轴流泵进行数值模拟发现, 随着空化的发展, 空泡首先出现于叶片背面进口边轮缘处, 然后逐渐向叶片中部扩展, 最终覆盖叶片背面。目前, 离心泵抗空化性能提升主要通过改变叶轮进口几何参数、改善叶片吸力面流动状态或加装辅助装置等方法来实现^[8]。在改善流动状态或加装辅助装置方面, 赵等^[9]提出在叶轮工作面布置凸起结构来减弱叶轮流道内近壁

面湍动能,模拟结果显示离心泵内空泡体积及压力脉动主频幅值均明显减小。Xu 等^[10]采用叶轮前置诱导轮的方案来对离心叶轮进口液体进行加压从而避免空化。由于微型泵的叶轮尺寸在毫米量级,凸起结构的加工和诱导轮的布置难以实现,本文没有选用此类方法。在叶轮进口几何参数优化方面,Pei 等^[11]通过增大叶轮入口直径和叶片进口冲角提高了泵的抗空化性能。但是几何参数还影响到泵的扬程和效率,提高抗空化性能的同时可能引起扬程和效率的下降,且现有的参数优化只针对于叶轮或蜗壳的单因素设计,没有考虑到叶轮和蜗壳的耦合作用,这在小尺寸的微型泵中更加不容忽视,因此需要综合考虑叶轮和蜗壳的耦合作用对多个设计目标进行协同优化。

本研究中,我们首先通过数值模拟研究了水力悬浮微型泵的空化流动特性,分析了空泡在微型泵内的发展及分布规律。基于对水力悬浮微型泵空化流动特性的分析,本文选取了四个几何参数,设置了四参数三水平的正交方案,为了实现泵的扬程和抗空化性能的多目标优化,定义了一个多目标因子 F 为新的优化目标,最终得到四个几何参数的最优组合。最后,通过对优化后的样机进行空化特性实验验证了优化效果。

1 模型建立与数值方法

1.1 模型建立

本文以水力悬浮离心式微型泵为研究对象,具体装配结构如图 1 (a)所示^[12]。图 1 (b)为微型泵空化仿真的计算域模型,为了对模型进行简化,整个计算域只包含蜗壳流道和叶轮两部分。流体从微型泵进口处流入,经过吸水室变向后进入叶轮,接受高速旋转的叶轮做功后进入蜗壳流道,最后从出口流出。

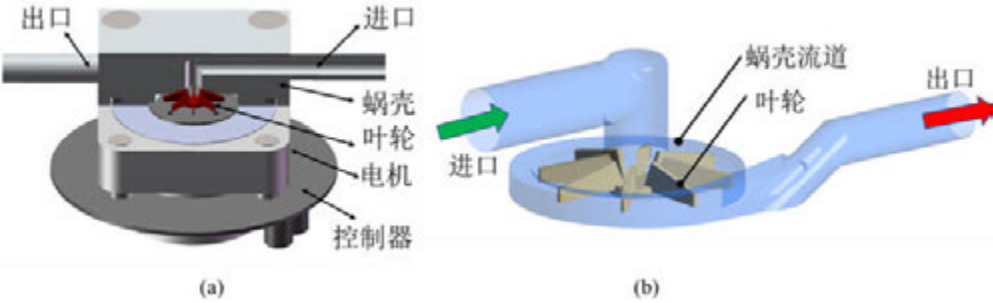


图 1 水力悬浮微型泵结构示意图与流体域模型 (a) 微型泵结构示意图 (b) 流体域模型

合理的网格划分可以保证计算速度和精度,在本研究中,非结构化的四面体网格被用于整个流域,因为它们对复杂的几何形状具有良好的适应性。图 2 为网格无关性验证,分别对流体域进行了 64~440 万等不同数量的网格划分,可以看到,随着网格数量的增加,扬程也不断增加,当网格数量超过 280 万时,扬程波动范围小于 0.2%,满足网格无关性的要求,因此最终选取网格数量为 280 万。

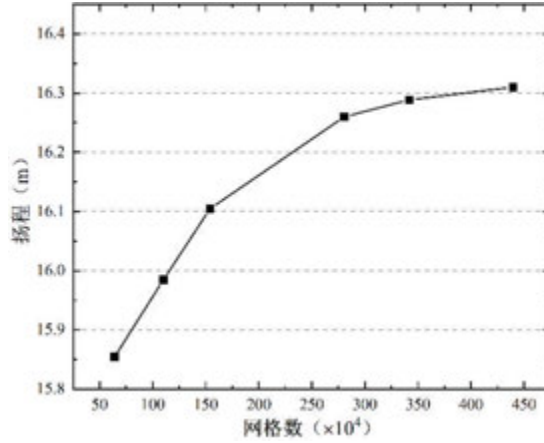


图2 网格无关性验证

1.2 数值方法

数值模拟采用 ANSYS FLUENT, 在本研究中, 将空化流视为均质多相流, 气液两相间的滑移速度忽略不计; 由于水力悬浮微型泵超高的转速, 其重力相对较小, 也可以忽略不计^[13]。

多相流的控制方程, 即各相的质量守恒方程和混合物的动量守恒方程, 可以写成以下形式:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha u_i)}{\partial(x_i)} = \dot{m}_a \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho_m u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_m u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_m \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad (2)$$

其中 r_α , u_i , ρ_α , $\dot{m}_a$ 分别表示 α 相的体积分数、笛卡尔速度分量、密度和质量生成率。 α 可以被 l 和 v 替换, 分别代表液相和气相。 t , x_i 和 P 分别代表时间、空间坐标和压力, ρ_m 和 μ_m 分别代表体积加权的混合物密度和粘度。

本研究中采用 Zwart-Gerber-Belamri (ZGB) 空化模型, 该模型是从 Rayleigh-Plesset 方程推导而来的, 现已被广泛用于捕捉空化特性, 其表达式如下:

$$\dot{m}_v = F_{vap} \frac{3r_{nuc}(1-r_v)\rho_v}{R_B} \sqrt{\frac{2}{3} \frac{P_v - P}{\rho_l}} \quad \text{if } P < P_v \quad (3)$$

$$\dot{m}_l = F_{cond} \frac{3r_v \rho_v}{R_B} \sqrt{\frac{2}{3} \frac{P - P_v}{\rho_l}} \quad \text{if } P > P_v \quad (4)$$

其中 r_{nuc} 是成核部位的体积分, R_B 是成核点的半径, F_{cond} 和 F_{vap} 是经验常数。模型参数值为 $R_B = 10^{-6} m$, $r_{nuc} = 5 \times 10^{-4}$, $F_{vap} = 50$ 和 $F_{cond} = 0.01$ 。蒸发压力 P_v 通常根据测试温度选择为常数, 但是一些研究表明, 局部湍流脉动对空化流动也有很大影响^[14], 因此, P_v 可修正为:

$$P_v = P_{sat} + 0.195 \rho_m k \quad (5)$$

其中 P_{sat} 是测试温度下的饱和压力, k 是湍动能。

1.3 计算设置

考虑到微泵中的强旋转和大流动曲率, 湍流模型选择 Realizable k- ϵ 模型, Realizable k- ϵ 模型已被广泛地用于包括旋转均匀剪切流、管道内流动等各种不同类型的流动模拟^[15]。模拟使用稳态求解器, 对流项采用二阶迎风格式离散, 压力-速度耦合采用 Coupled 算法, 收敛标准为扬程和入口质量流率的变化率同时小于设定值。

进出口的边界条件分别指定为压力入口和质量流率出口, 壁面采用无滑移条件, 壁面函数使用 Scalable 壁面函数。叶轮流域设置为运动坐标系, 转速为 20000 r/min, 蜗壳域采用静止坐标系。在旋转域和静止域之间建立交界面以传输数据。

2 空化流动特性分析

在对流体域建模过程中进行了简化处理, 忽略了从蜗壳流入电机的部分流体, 因此, 需要引入一个扬程修正系数 $C = 0.80$ ^[13]。

$$H = C \times H_{th} \quad (6)$$

其中 H 为修正后的扬程, H_{th} 为数值计算得到的扬程。

在对水力悬浮微型泵进行空化特性分析时, 可以将入口压力和扬程通过以下公式转化为无量纲形式的空化数和扬程系数:

$$\sigma = \frac{P_{tin} - P_{sat}}{0.5 \rho_l u_2^2} \quad (7)$$

$$\psi = \frac{2gH}{u_2^2} \quad (8)$$

其中 P_{tin} 为进口总压, u_2 为叶片出口的切向速度, g 为重力加速度。

图 3 展示了水力悬浮微型泵空化特性曲线的数值仿真结果。从图中可以看到, 随着空化数的减少, 扬程系数整体呈现下降的趋势, 在高空化数附近, 扬程系数保持着基本

不变的趋势，当空化数减小到某一个临界值附近，扬程系数会急剧下降。临界空化数 σ_c 是评价抗空化性能的一个重要参数，它对应于扬程系数下降 3%时的空化数，可以通过空化前后两点线性插值得到，临界空化数越小，其抗空化性能越好，从图中可以看到，初始样机的临界空化数为 0.1359。

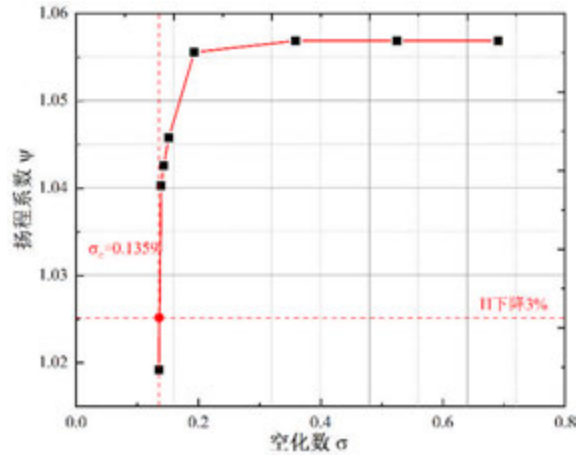


图 3 水力悬浮微型泵空化特性曲线

图 4 (a)为不同空化数时叶轮中的空泡分布，由 10%气体体积分数的等值面来描述，可以看到，随着空化数下降，气泡会首先出现在叶片吸力面前缘附近，不断向叶片出口处延伸，几乎占据叶片间流道的一半，造成流动阻塞。图 4 (b)为不同空化数下叶轮中间截面的压力分布图。从图中可以看出，低压区首先出现在叶片吸力面前缘处，并不断向出口处扩大，且在空化后期的发展速度明显快于空化前期。由于蜗壳几何形状的不对称带来的影响，压力和气泡呈现不均匀的分布趋势。图 5 展示了在临界空化数下流体域中的气泡分布和速度矢量分布。可以看到，整个流体域中气泡主要分布在蜗壳吸水室垂直段前缘和叶轮前缘。叶轮前缘处的气泡主要是由于流动分离产生了涡流区域，涡心的低压诱导叶片吸力面附着空化。本研究所使用的微型泵进出口采用侧进侧出的特殊结构，吸水室分为水平段和垂直段两端，液态工质在吸水室水平段和垂直段交界处流动时，速度方向会发生一个剧烈的扰动，扰动在该位置形成一个高强度涡流区，诱导旋涡空化产生气泡。

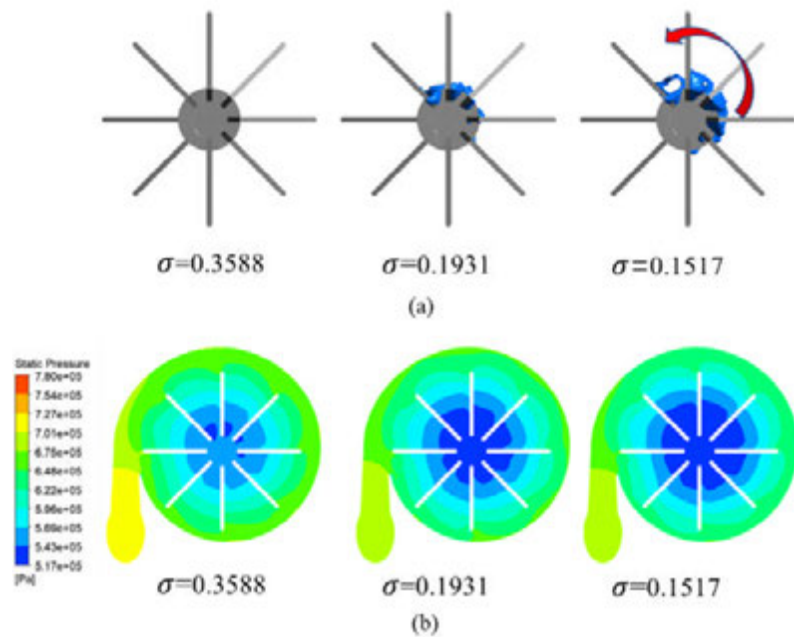


图 4 不同空化数下的气泡分布和静压分布 (a) 气泡分布 (b) 叶轮中截面静压分布

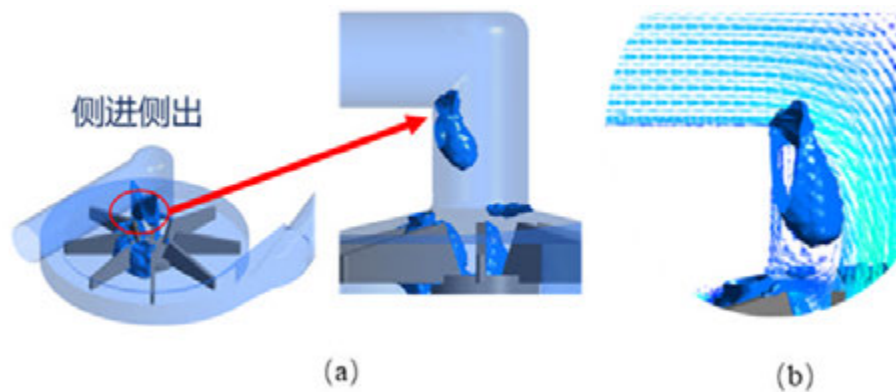


图 5 临界空化点气泡分布与速度矢量分布 (a) 气泡分布 (b) 速度矢量分布

3 水力悬浮微型泵多目标优化设计

3.1 微泵的多目标正交优化

基于对微型泵空化流动特性的仿真分析，选取吸水室直径、蜗壳基圆高度、叶轮进口直径、叶片厚度 4 个结构参数作为试验因素，每个因素设置三个水平（见表 1），建立一个四因素、三水平的正交表（见表 2），命名为 $L9(3^4)$ ，其一共有九个正交试验方案。

表 1 各因素水平取值

水平	因素 (mm)			
	叶轮进口直径 A	吸水室直径 B	蜗壳基圆高度 C	叶片厚度 D
1	4.0	3.4	1.6	0.30
2	4.6	4.0	1.8	0.35
3	5.2	4.6	2.0	0.40

表 2 正交试验方案

试验序号	因素 (mm)			
	A	B	C	D
1	4.0	3.4	1.6	0.30
2	4.0	4.0	1.8	0.35
3	4.0	4.6	2.0	0.40
4	4.6	3.4	1.8	0.40
5	4.6	4.0	2.0	0.30
6	4.6	4.6	1.6	0.35
7	5.2	3.4	2.0	0.35
8	5.2	4.0	1.6	0.40
9	5.2	4.6	1.8	0.30

为了提高泵的整体性能，提升抗空化性能的同时兼顾扬程，因此引入了多目标因子 F ，其公式如下：

$$F_i = \theta_1 \overline{\psi_i} + \theta_2 \overline{\sigma_{ci}} \quad (9)$$

θ_1 、 θ_2 分别代表扬程和汽蚀余量对应的权重系数， $\overline{\psi_i}$ 、 $\overline{\sigma_{ci}}$ 分别代表归一化的扬程系数和临界空化数，其定义如下：

$$\overline{\psi_i} = \frac{\psi_i - \psi_{min}}{\psi_{max} - \psi_{min}} \quad \overline{\sigma_{ci}} = \frac{\sigma_{cmax} - \sigma_{ci}}{\sigma_{cmax} - \sigma_{cmin}} \quad (10)$$

加权系数 θ_1 和 θ_2 在多目标优化中起着重要的作用。在本次优化过程中需要兼顾扬程和抗空化性能， θ_1 和 θ_2 均被选为 0.5。所有试验个体的性能通过计算流体力学软件 Fluent 仿真得到，不同个体的多目标因子 F 在表 3 中给出。

表 3 试验个体数值模拟结果

试验序号	ψ	σ_c	$\overline{\psi}$	$\overline{\sigma_c}$	F
1	1.3425	0.1456	0.5565	0.0000	0.2783
2	1.3572	0.0862	0.7754	0.6651	0.7203
3	1.3585	0.0602	0.7935	0.9555	0.8745
4	1.3304	0.1413	0.3766	0.0482	0.2124
5	1.3418	0.0824	0.5460	0.7078	0.6269
6	1.3723	0.0678	1.0000	0.8711	0.9355
7	1.3051	0.1401	0.0000	0.0612	0.0306
8	1.3466	0.0844	0.6175	0.6846	0.6510
9	1.3418	0.0563	0.5451	1.0000	0.7725

从表 3 的数据中可知，6 号样本的扬程最高，其方案为 A₂B₃C₁D₂，而 9 号样本的抗空化性能最优，其方案为 A₁B₃C₃D₃，说明扬程和抗空化性能的优化存在内在冲突。多目标因子 F 作为兼顾扬程和抗空化性能的一个优化目标，对其进行平均值计算和极差分析，

得到正交试验结果，见表 4。平均数 $\overline{K_i}$ 用来评价特定参数在其水平上对多目标因子 F 的影响，其定义如下：

$$\overline{K_i} = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} F_j \quad (11)$$

其中 i 代表水平， N_i 是第 i 水平对应的个体数， j 为泵的编号。相应参数的最大和最小 $\overline{K_i}$ 之差被定义为极差 R ，极差 R 越大，说明该因素对泵的优化效果越明显。

通过极差分析，确定本试验中各个因素对综合性能的影响顺序由大到小依次是吸水室直径、叶轮进口直径、蜗壳基圆高度、叶片厚度。吸水室直径对综合性能的影响最为重要且水平越高，综合性能越好。基于正交试验结果，在提高扬程系数的同时减小临界空化数采用的最优组合方案为 $A_1B_3C_1D_3$ 即叶轮进口直径 4.0 mm、吸水室直径 4.6 mm、蜗壳基圆高度 1.6 mm、叶片厚度 0.35 mm。

表 4 多目标正交优化结果

	叶轮进口直径	吸水室直径	蜗壳基圆高度	叶片厚度
$\overline{K_1}$	0.6243	0.1738	0.6216	0.5592
$\overline{K_2}$	0.5916	0.6661	0.5684	0.5621
$\overline{K_3}$	0.4847	0.8609	0.5107	0.5793
R	0.1396	0.6871	0.1109	0.0172

3.2 优化效果的数值验证

图 6 为通过模拟得到的优化前后样机的空化特性曲线，可以看到，优化后的样机扬程系数增大的同时临界空化数显著减小，多目标优化的效果得到初步验证，对比模拟数据可得，优化后的样机扬程提升了 4.01%，临界空化数减小了 52.3%。

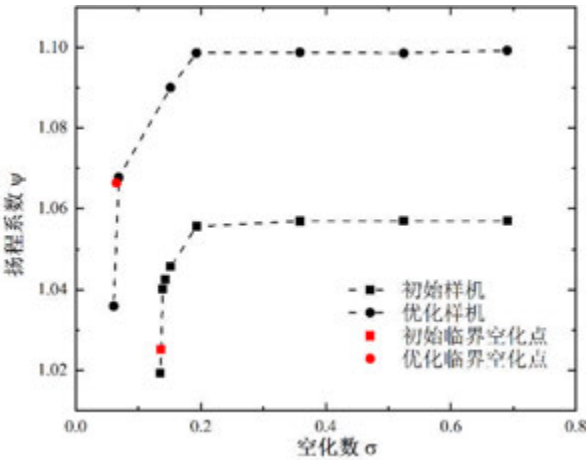


图 6 优化前后样机空化特性曲线

图 7 (a)、(b)是优化前后样机在 $\sigma = 0.1359$ 的压力分布和气泡分布，从图中可以看出，相同的空化数下，优化后样机的低压区范围明显减小，叶轮域的气泡分布区域和体积变小，蜗壳吸水室垂直段的气泡消失。图 7 (c)为蜗壳中截面的流线分布，可以发现，吸水室直径的增大显著改善了吸水室内的流动状态，因此有效抑制了垂直段前缘处旋涡空化的发生。

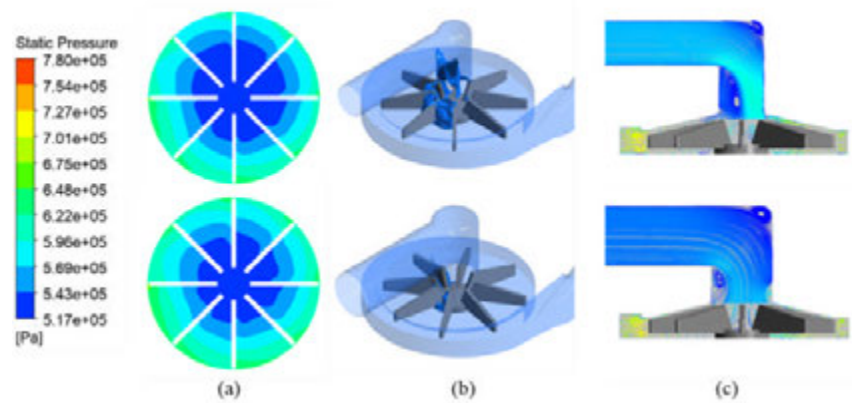


图 7 优化前后样机的压力分布、气泡分布和流线分布 上：初始 下：优化 (a) 压力分布 (b) 气泡分布 (c) 流线分布

3.3 优化效果的实验验证

为了进一步验证优化效果，搭建水力悬浮微型泵空化实验台架，对优化前后的样机完成空化测试。图 8 为空化实验台架原理图，水力悬浮微型泵安装在闭路系统中，储液罐外连齿轮泵，通过调节进口阀门和齿轮泵转速来控制进口压力，通过后阀门开度控制流量变化。回路中工质的温度通过水浴加热装置控制，在微型泵进出口管路设有 PT-100 型热电阻传感器检测温度变化，测量范围为 $-50\text{ }^{\circ}\text{C}\sim 300\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，误差为 $\pm (0.002\text{ }T+0.15\text{ }^{\circ}\text{C})$ ，其中 T 为所测温度的绝对值。微型泵的流量测量采用 LWGY-SIN-DN4-B 型涡轮流量计，测量范围为 $0.04\text{--}0.25\text{ m}^3/\text{h}$ ，精度等级为 0.5 级。压力测量使用 SIN-P3000 型压力变送器，测量范围为 $0\text{--}1\text{ MPa}$ ，精度等级为 0.075 级。

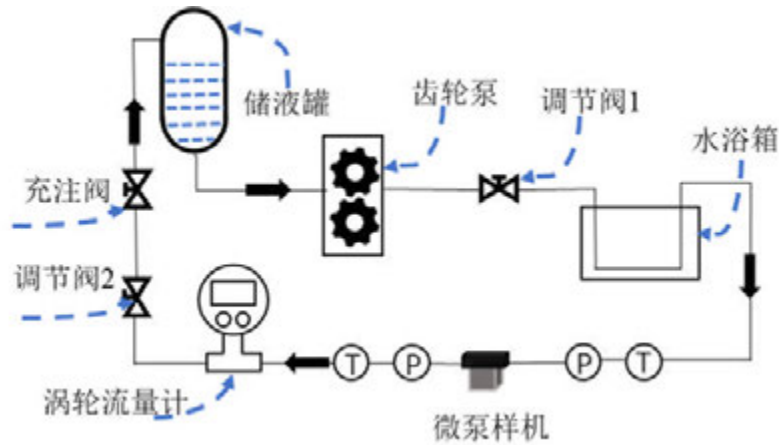


图 8 空化测试台架原理图

图 9 为优化前后样机空化特性曲线实测图。对比优化前后样机的扬程系数和临界空化数发现优化后的样机扬程系数升高，临界空化数显著降低，其综合性能较初始样机得到提升，与模拟所得结论相同。对比仿真和实测的优化效果发现，优化后的样机仿真结果表明扬程系数提升了 4.01%，临界空化数提升了 52.3%；实验结果表明扬程系数提高了 5.20%，临界空化数减小了 59.6%。模拟和实测的扬程系数和临界空化数存在一定的误差，但两者的优化趋势基本一致，该模拟方法用来指导水力悬浮微型泵优化设计的可行性得到了验证。

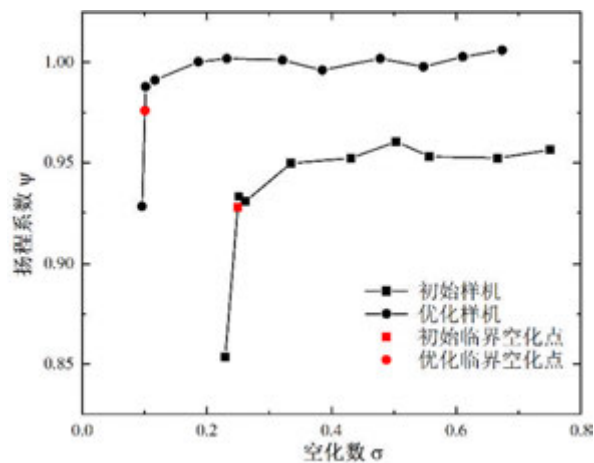


图 9 优化前后样机空化特性曲线实测图

4 结论

本研究中，利用数值模拟手段研究了水力悬浮微型泵中空泡的发展和分布特性，基于对空化流动特性的分析，使用正交试验对微型泵的扬程和抗空化性能进行了多目标优化，并对优化后的微泵进行加工测试，最后通过实验验证了优化效果，得到的主要结论如下：

1) 随着汽蚀余量的下降，气泡首先出现在叶片吸力面前缘附近，之后向叶片出口处延伸，几乎占据叶片间流道的一半，造成流动阻塞。而在吸水室中，由于侧进侧出的特殊结构，在临界空化点附近垂直段前缘会出现涡流区，诱导旋涡空化产生气泡；

2) 通过极差分析，确定各个因素对综合性能的影响顺序由大到小依次是吸水室直径、叶轮进口直径、蜗壳基圆高度、叶片厚度。基于正交试验结果，在提高扬程系数的同时减小临界空化数采用的最优组合方案为 $A_1B_3C_1D_3$ 。

3) 通过数值计算的内部流动分析表明，优化后吸水室垂直段的涡流区减小，流动状态更加良好，旋涡空化产生的气泡消失；在叶轮域中低压区范围显著减小，空化产生的气泡体积也减小，微型泵综合性能改善明显。并通过空化测试台架验证了优化效果，优化方案的扬程系数提高了 4.01%，临界空化数减小了 52.3%。

致谢

感谢湖北省科技创新团队“先进热管理科技创新团队”项目、国家重点研发计划（No. 2022YFA1203100）的经费支持。

参考文献

- [1] Laser D J, Santiago J G. A review of micropumps. *Journal of micromechanics and microengineering*, 2004, 14(6): R35.
- [2] Luo X, Liu F, Duan B, et al. A hydrodynamic levitated mechanical micropump. US 10495093.
- [3] Luo X B, Liu F L, Duan B, et al. A Fluid Hydrodynamic Suspension Mechanical Pump. ZL 201710228549. X, 2017.
- [4] Lu Y, Tan L, Han Y, et al. Cavitation-vibration correlation of a mixed flow pump under steady state and fast start-up conditions by experiment. *Ocean Engineering*, 2022, 251: 111158.
- [5] DONG L, SHANG H, ZHAO Y, et al. Study on Unstable Characteristics of Centrifugal Pump under Different Cavitation Stages. *Journal of Thermal Science*, 2019, 28(4): 608-620.
- [6] LU J, YUAN S, LUO Y, et al. Numerical and experimental investigation on the development of cavitation in a centrifugal pump. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part E-Journal of Process Mechanical Engineering*, 2016, 230(3): 171-182.
- [7] 张德胜, 潘大志, 施卫东, 等. 轴流泵空化流及其诱导压力脉动的数值模拟. *华中科技大学学报(自然科学版)*, 2014, 42(01): 34-38.
D.S. Zhang, D.C. Pan, W.D. Shi, et al. Numerical simulation of cavitation flow and its induced pressure pulsation in axial pump. *Journal of Huazhong University of Science and Technology (Natural Science Edition)*, 2014, 42(01): 34-38.
- [8] 张爱民. 诱导轮入口及几何参数对离心泵空化特性影响规律研究: [博士论文]. 兰州: 兰州理工大学, 2020.
Zhang, A. M.. Study on the influence of induced wheel inlet and geometric parameters on the cavitation characteristics of centrifugal pumps: [Doctoral dissertation]. Lanzhou: Lanzhou University of Science and Technology, 2020.
- [9] 赵伟国, 郭宝, 亢艳东. 离心泵叶片布置凸起抑制空化的数值模拟. *华中科技大学学报(自然科学版)*, 2021, 49(05): 122-126.
ZHAO Weiguo, GUO Bao, HUANG Yandong. Numerical simulation of centrifugal pump vane arrangement with bumps to suppress cavitation. *Journal of Huazhong University of Science and Technology (Natural Science Edition)*, 2021, 49(05): 122-126.
- [10] XU Z, KONG F, ZHANG H, et al. Research on Visualization of Inducer Cavitation of High-Speed Centrifugal Pump in Low Flow Conditions. *Journal of Marine Science and Engineering*, 2021, 9(11): 1240.
- [11] PEI J, YIN T Y, YUAN S Q, et al. Cavitation optimization for a centrifugal pump impeller by using orthogonal design of experiment. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 2017, 30(1): 103-109.
- [12] GUANYING X, SONG X, TAO H, et al. A novel hydrodynamic suspension micropump using centrifugal pressurization and the wedge effect [J]. *SCIENCE CHINA Technological Sciences*, 2023. DOI: 10.1007/s11431-022-2306-9
- [13] XUE S, XING G Y, HONG T, et al. Numerical Investigation of Cavitation Flow Characteristics in a Hydrodynamic Levitated Micropump with Eccentric Rotation. *International Journal of Applied Mechanics*, 2023, 15(02): 2350010

- [14] SINGHAL A K, ATHAVALE M M, LI H Y, et al. Mathematical basis and validation of the full cavitation model. *Journal of Fluids Engineering-Transactions of the Asme*, 2002, 124(3): 617-624.
- [15] SHIH T-H, LIOU W W, SHABBIR A, et al. A new k - ϵ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers & Fluids*, 1995, 24(3): 227-238.

金属元素对 CaO 热化学放热的影响机制

郭思佳, 田希坤, 闫君, 赵长颖

(上海交通大学工程热物理研究所, 上海 200240)

(Tel: 021-34204541, Email: changying.zhao@sjtu.edu.cn)

摘要: 针对钙基储热体系的改性机理尚不明晰的问题, 系统研究了 18 种金属原子掺杂的 CaO 的表面性能。从原子半径、键长、电荷分布方面对比了不同元素对 CaO 表面的改性规律, 进一步研究发现 Ti、V、Cr、Mn、Fe 元素能够在提高表面稳定性的同时不影响对 CO₂ 的吸附活性, 且掺杂 Al、Ti 等元素的 CaO 表面对 Ca₄O₄ 具有强键合力, 抗烧结作用显著。本研究提出的表面稳定程度、对 CO₂ 的吸附能、对 Ca₄O₄ 的键合力 3 个定量衡量指标, 为进一步促进 CaO 放热过程提供了重要参考。

关键词: 热化学储热; 密度泛函理论; CO₂ 吸附; 钙循环; 金属掺杂

0 前言

受能源危机不断加剧和生态环境持续恶化的影响, 全球能源格局正发生由依赖传统化石能源向追求清洁高效可再生能源的深刻转变。但太阳能、风能、水能等清洁能源存在波动性、不确定性、时空分布不均衡的共性问题, 再加上当前电力系统灵活性不足、调节能力不够的短板, 使得清洁能源难以规模化取代传统化石能源。储能, 作为一项能源转换与缓冲的关键技术, 可有效应对上述挑战, 实现能源收集和能源利用在时间和空间上的解耦, 解决清洁能源的间歇性和波动性瓶颈。

当前储能技术处于多路线并存的发展模式, 包括机械储能、电化学储能、热储能等。在众多的储能技术中, 热化学储热可实现几乎无损且长期的热量存储, 且其储能密度高、工作温度范围广、用于长期储能的经济优势显著, 在第三代聚光太阳能高温利用系统中备受关注^[1]。其中, 钙基热化学储热体系由于其储热材料 CaCO₃/CaO 成本低廉、工作温度可高于 700°C、理论储能密度高达 1783 kJ/kg, 是最有前景用于大规模工业热化学储热的体系^[2]。其储放热化学原理如式 (1) 所示: 储热过程中, CaCO₃ 在高温下 (可由聚光太阳能提供), 吸收热量分解为 CaO 和 CO₂, 将热量储存在化学键中; 在放热过程中, CaO 和 CO₂ 发生合成反应, 放出大量热量用于发电或其他工业应用, 同时生成 CaCO₃, 以此实现储放热循环。



然而, 该钙循环体系在多次储放热反应中转化率会剧烈下降, 限制了热化学储热的实际应用。研究表明 CaO 粒子在碳酸化过程中的熔化、烧结和产物层孔堵塞现象阻

通讯作者: 赵长颖, 教授, E-mail: changying.zhao@sjtu.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金重大项目 (No.52090063)

碍了 CO_2 的扩散, 导致循环稳定性差^[3]。这一问题不仅出现在热化学储热中, 在碳捕集领域同样是研究重点。目前研究者们主要从调控反应温度和气氛、改进材料合成方法、以及对反应粒子本身进行形貌或组分改性来强化 CaCO_3/CaO 在脱/吸附 CO_2 化学反应中的传热传质效果。其中大量的研究集中在对 CaCO_3/CaO 进行金属氧化物掺杂改性, 如 Mg 、 Al 、 Ti 等元素^[4-6]掺杂均被实验证实能够有效阻止 CaCO_3/CaO 粒子烧结, 并阻碍反应过早进入扩散控制的慢速反应阶段。然而, 虽然多种元素都被报道有一定提升循环稳定性的效果, 掺杂元素的选择却具有随机性、经验性, 其作用的内在机理和规律仍不明晰。

材料由原子组成, 微观水平上原子之间的相互作用决定了材料在宏观尺度上的行为^[7], 即热化学储热关注的性能, 包括循环稳定性、反应速率、导热性能等。随着算力的发展, 从原子、分子角度等对材料进行理论建模和设计的方法也得到了推广和应用。在钙循环领域, Ma 等人基于密度泛函理论, 发现 $\text{Ca}_x\text{Al}_y\text{O}_z$ 改性的 CaO 对 CaO 的吸附能大幅降低, 从而直接提高了材料的热稳定性^[8]。Kong 等人应用第一性原理, 提出 Fe 掺杂的 CaO 表面上, Fe 被 O^{2-} 氧化形成惰性结构, 从而为 CaO 提供足够的机械支撑, 提升了抗烧结能力^[9]。Choi 结合实验和密度泛函计算, 揭示了共晶氯化碱盐通过为 O^{2-} 提供新的扩散通道, 强化了 CaO 的碳酸化^[10]。

上述内容表明, 金属元素改性的 CaCO_3/CaO 在热化学储热领域有着广泛应用前景。然而, 目前金属元素对循环稳定性的改性机理尚不清晰, 且元素选择缺乏统一的理论指导。此外, 现有文献也未能对不同元素作用的内在规律进行深入探究。由于钙基热化学储热体系循环稳定性下降主要发生在 CaO 碳酸化过程中, 因此明确金属元素对 CaO 放热过程的影响机制非常重要。本文结合已有实验研究, 利用密度泛函理论计算方法, 系统地研究了 18 种金属原子 (包括碱金属、碱土金属、镧系元素、过渡金属、贫金属) 嵌入下 CaO 的反应性能。通过计算体系能量、几何结构和电荷分布等参数, 分析和总结了金属元素掺杂 CaO 表面特性、对 CO_2 吸附性能以及对 CaO 吸附性能等方面的影响, 并从原子、电子角度阐明了改性效果与改性元素之间的关系。本研究结果可为热化学储热中 CaO 的主动设计和放热性能提高提供理论指导。

1 研究方法

本研究基于密度泛函理论, 交换关联泛函选择广义梯度近似下的 PBE 泛函。计算采用三维周期性的边界条件, 所有的结构都考虑自旋极化。在块体结构优化中所有的原子全部放开, 在表面和吸附模型中, 仅固定最下方两层原子。计算的收敛标准为 $1 \times 10^{-4} \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$, 此时当每个原子的受力均小于 $0.3 \text{ eV} \cdot \text{nm}^{-1}$ 时, 认为计算达到收敛。经过截断能无关性和 K 点无关性测试后, 在后续的所有计算中, 平面波截断能统一为 520 eV, 采用 Monkhorst-Pack 方法生成 K 点, 间距为 $2\pi \times 0.4 \text{ nm}^{-1}$ 。在以上设置下, 本文对 CaO 单胞块体结构优化后得到的晶格常数为 0.480310 nm, 对 CO_2 进行结构优化后得到的碳氧键长为 0.117668 nm, 分别与实验值 0.48 nm^[18]和 0.116 nm^[13]吻合良好。

1.1 表面优化

大量文献表明, $\text{CaO}(100)$ 的表面最稳定^[14], 因此选择 (100) 表面进行研究, 设置

厚度为 5 层原子。在无关性测试之后选择 1.5 nm 的真空层消除周期性边界的影响，弛豫上方 3 层原子，固定下方 2 层原子，以分别模拟表面和体相。

纯 CaO 表面能的计算公式为：

$$\Gamma_{\text{pure}} = \frac{E_{\text{unrelax}} - E_{\text{Bulk}}}{2A} + \frac{E_{\text{relax}} - E_{\text{unrelax}}}{A} \quad (2)$$

其中， E_{Bulk} 为 CaO 单胞体相结构平均每个原子的能量， E_{unrelax} 为弛豫优化前表面的能量， E_{relax} 为弛豫优化后表面的能量， A 为表面的面积。在此基础上，对纯 CaO 表面嵌入改性金属原子后，表面能的计算公式为：

$$\Gamma_{\text{doped}} = \Gamma_{\text{pure}} + \frac{E_{\text{relax-doped}} - E_{\text{unrelax-doped}}}{A} \quad (3)$$

其中等号右边第二项为掺入原子引起的能量变化， $E_{\text{unrelax-doped}}$ 和 $E_{\text{relax-doped}}$ 分别为掺杂型 CaO 表面弛豫前后的能量。

1.2 吸附计算

在优化后的表面上，分别研究表面对 CO_2 和 CaO 的吸附情况。吸附能的计算公式为：

$$E_{\text{ads}} = -(E_{\text{system}} - (E_{\text{substrate}} + E_{\text{adsorbate}})) \quad (4)$$

其中， $E_{\text{adsorbate}}$ 为被吸附物的能量，即孤立的 CO_2 分子或 Ca_4O_4 结构的能量； $E_{\text{substrate}}$ 为吸附基体的能量，即纯 CaO 表面或掺杂型 CaO 表面的能量； E_{system} 为表面吸附了 CO_2 或 Ca_4O_4 后总体系的能量。按照此公式计算得到的吸附能越高，说明吸附后的结构越稳定，吸附越容易发生。

2 结果与讨论

2.1 改性金属元素的选择

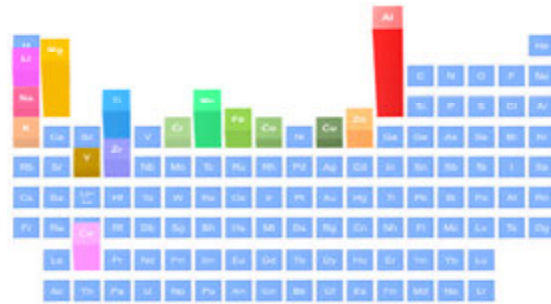


图 1 已有实验研究的 CaO 掺杂金属在元素周期表的分布，其中色块的高度代表文献的数目。^[15]

通过文献调研，已确定了一些金属元素对 CaO 具有稳定性提升效果，如图 1 所示，其中色块的高度代表研究文献的数量。这些研究中的掺杂配比、合成方法、测试条件等各有不同，无法归纳出一般规律，且依次进行控制变量的实验测试耗时成本高。本文在这些元素的基础上，加上 Sc、V 和 Ni 元素，共对 18 个元素进行了密度泛函理论研究，以提供元素选择的参考原则。这 18 个元素包括碱金属元素（Li、Na、K）、碱土金属元素（Mg）、贫金属元素（Al）、镧系金属元素（Ce）、第 4 周期过渡金属元素和第 5 周期过渡金属元素（Y、Zr）。

2.2 金属元素改性对 CaO 表面性质的影响

表 1 不同金属的原子半径, 及相应改性表面的表面能、M-Oa 键长以及 Bader 电荷分布

掺杂元素 M	M 原子半径 ^[16]	表面能	M-O _a 键长	Bader 电荷		
	R/nm	$\Gamma/\text{eV}\cdot\text{nm}^{-2}$	L/nm	Q(M)/e	Q(O _a)/e	Q(O _b)/e
无掺杂	0.194	5.678	0.240	1.487	-1.482	-1.482
Li	0.167	9.995	0.248	0.892	-1.393	-1.419
Na	0.190	10.686	0.250	0.835	-1.372	-1.425
Mg	0.145	7.626	0.228	1.619	-1.498	-1.466
Al	0.118	6.631	0.201	2.349	-1.550	-1.509
K	0.243	11.164	0.266	0.804	-1.370	-1.445
Sc	0.184	1.327	0.218	1.881	-1.454	-1.525
Ti	0.176	1.901	0.242	1.681	-1.438	-1.494
V	0.171	1.674	0.228	1.370	-1.438	-1.466
Cr	0.166	1.258	0.221	1.324	-1.437	-1.464
Mn	0.161	1.886	0.233	1.251	-1.423	-1.466
Fe	0.156	4.177	0.230	1.160	-1.410	-1.465
Co	0.152	6.179	0.245	1.050	-1.402	-1.465
Ni	0.149	7.979	0.231	0.917	-1.368	-1.464
Cu	0.145	10.215	0.225	0.859	-1.339	-1.464
Zn	0.142	10.520	0.233	1.102	-1.397	-1.465
Y	0.212	0.894	0.232	1.819	-1.515	-1.484
Zr	0.206	0.943	0.216	2.109	-1.477	-1.507
Ce	NaN	1.849	0.237	1.671	-1.461	-1.487

从图 3 可得, 本研究中碱金属(Li, Na, K)、碱土金属(Mg)、贫金属(Al)、以及 9-12 族过渡金属(Co、Ni、Cu、Zn)改性的 CaO 表面能显著升高。图 4 显示, 这些掺杂原子对表面结构产生了显著影响, 导致表面缺陷的形成。表面结构变化越大, 表面能越高, 其中 K 原子改性的表面变化最大, 表面能最高。相比之下, 3-8 族过渡金属改性的表面能均低于未改性的 CaO 表面, 结构变化也较小。这些结果表明, 金属元素改性后的 CaO 表面具有良好的稳定性, 对材料的结构稳定性有益。下面将从原子半径、键长和电荷分布的角度详细分析不同金属改性效果之间的内在联系和变化规律。

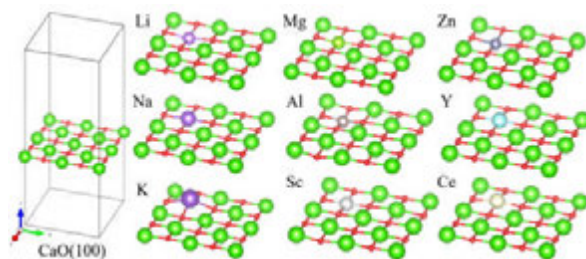


图 4 纯 CaO(100)表面（最左图）和部分改性表面（右图）优化后的的表面模型最上层原子结构

2.2.2 非过渡金属元素对表面的改性规律

从图 3 中可以发现，对于第一族的碱元素 Li、Na、K，随着其原子半径的增加，表面能也呈现增加的趋势。对于第三周期的 Na、Mg、Al 元素，其表面能的变化趋势也与其原子半径变化趋势正相关。因此本文以文献^[16]中由计算得到的原子半径相对大小为具体数值，将上述 5 个非过渡金属改性表面的表面能、键长、Bader 电荷数值同原子半径的变化绘制于图 5 中。对于图 5(a)(b)，非金属原子改性表面的表面能仍和原子半径变化呈正比，且键长也同原子半径呈正比。对于图 5(c)，M 原子的 Bader 电荷为正值，意味着其失去电子；O_a 位点的氧原子电荷为负值，意味着其得到电子。二者的 Bader 电荷变化趋势相反，而绝对值变化趋势相同，表明二者之间存在电荷交换，且电荷交换量的大小与半径变化呈反比。

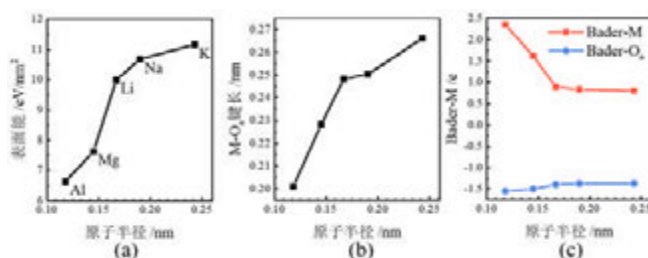


图 5 非过渡金属改性表面的表面能、键长、Bader 电荷数值同原子半径的变化

再综合上文图 4 的结构分析和图 5 的趋势分析，本文研究的非过渡金属元素对表面的改性规律可以理解并总结如下：改性元素 M 的原子半径越大，其与相邻 O 原子的键长 M-O_a 就越大，此时 M 和 O 之间的电子交换将变弱，则原子之间的相互作用就越弱，即此时表面越不稳定，表现为表面能的升高。而表面能越高，表面的活性越强，则越容易吸附其他物质发生化学反应。

2.2.3 过渡金属元素对表面的改性规律

对于过渡金属元素，上述的规律不再成立，并表现出相反的趋势。如图 6 所示，此时原子半径与 M-O_a 键长之间不再有明显的关联关系，总体上表现出原子半径越大，电荷交换越多，表面越稳定（表现为表面能降低）的趋势。分析其原因，认为对于本研究中的过渡金属，此时原子半径虽然在第四、第五周期内呈现规律变小趋势，但不同于上述 Li、Na、K 或 Na、Mg、Al 之间的原子半径的大幅变化，过渡金属之间的原子半径变化差值很小，因而此时原子半径对键长不再有明显影响。而过渡金属自身就具有优异

的电子转移能力，对比图 6(c)(a)可以看出，随着电荷转移量的增加，原子之间的相互作用越强，从而使表面更加稳定，表现为表面能的下降。

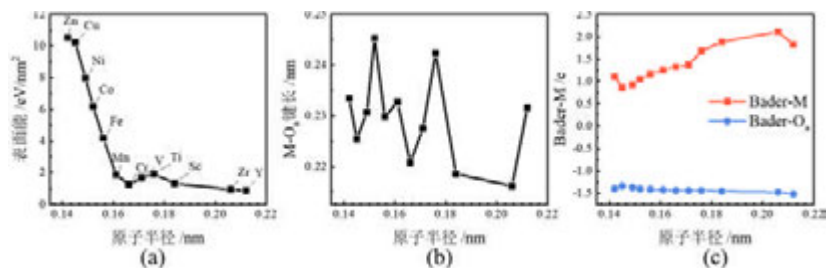


图 6 过渡金属改性表面的表面能、键长、Bader 电荷数值同原子半径的变化

2.3 金属元素改性对吸附 CO₂ 的影响

2.3.1 CO₂ 在纯 CaO 表面上的吸附

在 CaO(100)表面，有 O 位点、Ca 位点、桥位点、中空位点 4 种位点，前期计算数据表明 CO₂ 更倾向于吸附在 O 位点。本文在此位点上，首先研究了初始吸附角度对吸附能的影响，结果如图 7 所示，其中，绿球、红球和银球分别代表 Ca 原子、O 原子和 C 原子。初始 30°吸附的结构最终会优化成和初始 45°吸附一致的结构，且其吸附能高于 0°和 30°初始吸附。四种初始角度中，最高吸附能为 1.5231 eV，与文献^[17]的 1.55 eV 吻合良好，说明了本计算的合理性。图 7(f)说明 CO₂ 更容易以 45°在 CaO 表面发生吸附，后续的吸附将以此角度为初始角度。

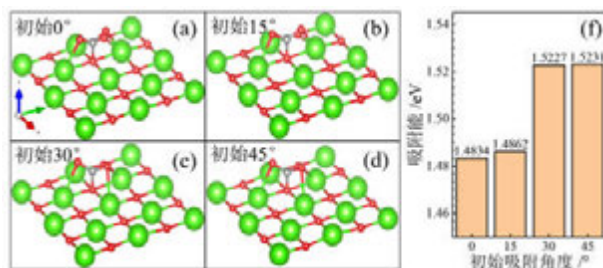


图 7 初始吸附角度对结构和吸附能的影响。(a)初始吸附角度 0°，(b)初始吸附角度 15°，(c)初始吸附角度 30°，(d)初始吸附角度 45°，(f)不同初始角度得到的吸附能。

图 7 的吸附结构显示，CO₂ 分子通过其 C 原子与 CaO 的 O 原子形成 C-O 键、其 O 原子与 CaO 的 Ca 原子形成 Ca-O 键实现吸附，形成一种类碳酸根吸附物种。图 8 中的 Bader 电荷和差分电荷密度计算结果揭示了 CaO 在吸附 CO₂ 过程中的电荷转移情况。如图 8(a)所示，CO₂ 的 O 的电荷从-1.054 下降到-1.211，CaO 的 O 的电荷从-1.482 上升到-1.288，CO₂ 的 C 原子在吸附前后的电荷量变化相对较小。说明电子从 CaO 的 O 原子经由 CO₂ 的 C 原子传递给了 CO₂ 的 O 原子，传递给 CO₂ 的总电子数为 0.4 e。为了补偿电荷转移，其他原子中也会发生微小的电子转移。图 8(b)直观展示了这种电荷转移情况，其中蓝色区域表示失去电子，黄色区域表示得到电子。

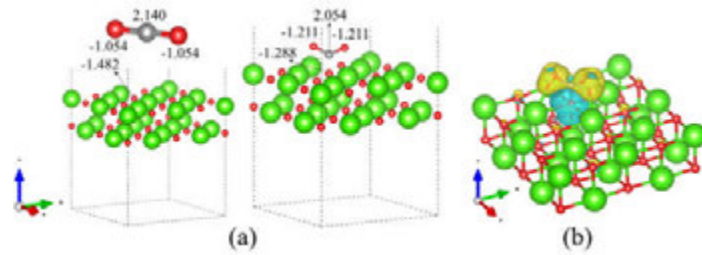


图 8 电荷转移情况。(a) 吸附前(左)和吸附后(右)的 Bader 电荷, (b)吸附后结构的差分电荷分布。

2.3.2 CO₂ 在改性 CaO 表面上的吸附

如图 2(b)所示, 在金属元素改性之后的表面上存在 O_a 和 O_b 两种 O 位点。不同的金属改性表面在两种位点上吸附 CO₂ 后的 C(CO₂)-O(CaO)键长和吸附能如图 9 所示。Zr 元素 O_a 位点吸附 CO₂ 的吸附能最大 (2.911 eV), 显著高于上文计算的纯 CaO 表面的吸附能, 表明其改性的表面对 CO₂ 有更强的亲和力, 将更有利于碳酸化反应。Valverde^[18]指出, 碳酸化程度的加深将有助于循环稳定性。Liu^[17]的实验数据显示, Zr 改性后的 CaO 材料的对 CO₂ 的吸附能力显著增强、在循环反应中的稳定性显著提高, 与本文计算得到的结论相吻合。但本文计算还揭示了 Zr 改性可能存在的缺陷。虽然 Zr 改性表面在 O_a 位点的吸附能大, 但此时其 C-O 键长却显著高于 CO₂ 在其他改性 CaO 表面的吸附成键距离 (图 9(a)); 而对于 O_b 位点吸附, 虽然吸附能变小, 但 C-O_b 键长却符合常规键长。这说明 O_a 位点吸附时, CO₂ 并未和 CaO 发生反应, 而可能同 Zr 原子发生了其他反应。O_a 和 O_b 位点吸附能、键长的较大差异说明 Zr 改性原子和原 CaO 之间存在着对 CO₂ 的竞争关系, 这将不利于式(1)化学反应中热量的释放, 即对宏观上热化学储热密度不利。同样, 在键长和吸附能上表现同 Zr 类似的镧系 Ce 元素也可能有以上特性。以上分析表明, 密度泛函计算不仅可以合理解释实验现象, 还可以预测实验上难以观察到的特性, 对储热材料的设计和优化具有指导意义。

对于 Zr、Ce 之外的元素, 首先从图 9(b)可以观察到由 Mg、Fe、Co、Zn 改性的表面, 其 E_{ads}(O_a)和 E_{ads}(O_b)差值小于 0.05 eV, 说明此时 CO₂ 分子在相应表面不同 O 位点上具有良好的可迁移性。此外还可以观察到, 除以上四种元素外, 非过渡金属元素和过渡金属元素之间的最优吸附位点有着明显区别: 前者在 O_a 位点的吸附能高, 后者在 O_b 位点的吸附能高。说明对于非过渡金属元素, CO₂ 更倾向于吸附在的 O_a 位点, 而对于过渡金属改性表面, CO₂ 更倾向于吸附在 O_b 位点。结合表 1 过渡金属元素的 O_a 和 O_b 位点的 Bader 电荷和上文对 CO₂ 吸附过程中的电子转移路径的分析, 可以推测这是因为过渡金属改性表面 O_b 位点由于可提供更多电子, 所以更有利于吸附 CO₂。

2.3.3 元素改性对 CO₂ 吸附能的影响

综合考虑键长和吸附能, 对于图 9 中键长符合 C-O 常规成键距离的改性表面, 取其吸附能高的位点为最优 CaO 碳酸化位点; 对于 Zr 和 Ce, 依据键长取 O_b 位点为最优 CaO 碳酸化位点。纯 CaO 的吸附能和改性表面最优位点的吸附能如图 10 所示。对于 Li、Na、K、Mg、Al 元素, 其改性表面对 CO₂ 的吸附能显著高于纯表面, 且变化趋势与图 3 中的表面能相近, 说明了其对增强 CaO 表面反应活性、促进碳酸化过程的良好改性作用。

该计算结果不仅与图 1 已有报道的实验现象相符，还揭示出这种改性效果与掺杂原子半径的正相关关系，有益于指导材料后续的优化设计。对于第四周期过渡金属元素，Sc、Ni 的吸附能低于纯表面，说明其不利于 CO_2 吸附，也的确少有实验报道过其对 CaO 吸附 CO_2 的改性效果；Co、Cu、Zn 改性将吸附能提升了 12.5% 以上，说明其表面反应活性强，与表面能计算的结论相吻合；而对于 Ti、V、Cr、Mn、Fe 元素，其改性表面 CO_2 吸附能均高于纯表面，以 Ti 提升幅度最小，以 Fe 提升幅度最大。结合表面能数据，这说明该五种元素可以在提高表面稳定性的同时不影响其对 CO_2 的吸附活性，是潜在的良好改性元素。对于第五周期的 Y、Zr 和镧系元素 Ce，其吸附能均低于纯表面，且 Zr 和 Ce 还可能与 Ca 原子竞争 CO_2 进行碳酸化，说明其难以促进 CaO 与 CO_2 的合成放热过程。

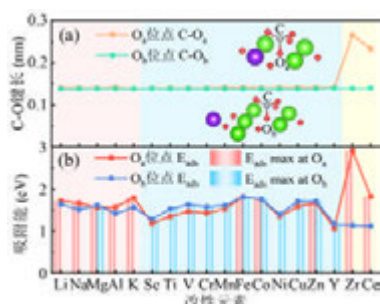


图 9 不同改性表面在两种位点上吸附 CO_2 后，
(a) $\text{C}(\text{CO}_2)\text{-O}(\text{CaO})$ 键长，(b) 吸附能。

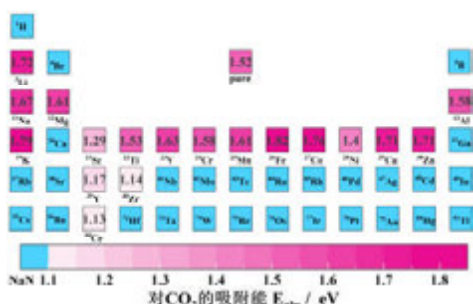


图 10 不同表面的最佳位点对 CO_2 的吸附能

2.4 金属元素改性对吸附 Ca_4O_4 的影响

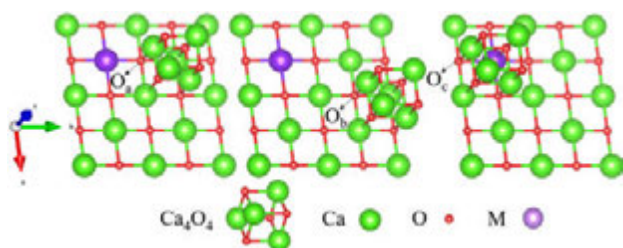


图 11 Ca_4O_4 吸附位点示意图

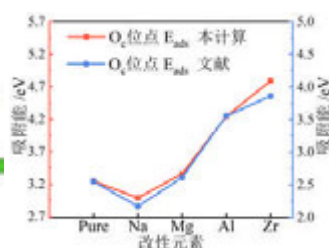


图 12 Ca_4O_4 吸附能本计算与文献^[17]对比

上文通过分析金属改性表面的表面能来说明表面自身的稳定性和反应活性。根据颗粒烧结机理，纳米颗粒的迁移导致了颗粒靠近时的融合烧结^[19]，因此本部分通过计算表面对 Ca_4O_4 团簇的吸附过程，进一步研究金属改性对材料的稳定性影响。对于 Ca_4O_4 ，在改性表面上有三个不同的 O 位点可供吸附，如图 11 所示，分别命名为 O_a ， O_b ， O_c 。本计算与文献中已有的数据对比如图 12，可以看到二者趋势相符，而本计算吸附能比文献中大约 0.7 eV，这是由截断能、泛函、K 点和收敛标准等设置不同而引起的误差，该误差不影响对结果的定性分析，因此本计算仍具有合理性。

不同位点对 Ca_4O_4 的吸附能如图 13 所示，其中最佳位点的吸附能总结于图 14。随着体系总原子数目的增多，原子间的相互作用变得复杂，不同的金属元素改性表面对 Ca_4O_4 吸附的影响规律不再清晰。总的来看，纯表面对 Ca_4O_4 的吸附能为 3.25 eV，而改性表面对 Ca_4O_4 的吸附能均高于纯表面。更高的吸附能意味着改性 CaO 表面对 Ca_4O_4 的

结合作用更强， Ca_4O_4 被更紧密的束缚在改性表面上。即改性表面限制了纳米颗粒的迁移能力，从而可以抑制储热材料的烧结，提高热化学储热的循环稳定性，其中以 Al、Ti、Zr 的抗烧结作用最显著，与文献^[17,20]中的实验现象相符。

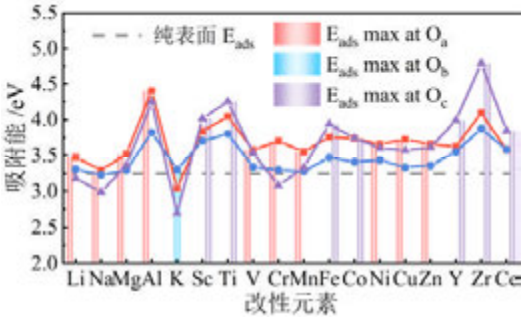


图 13 不同位点对 Ca_4O_4 的吸附能

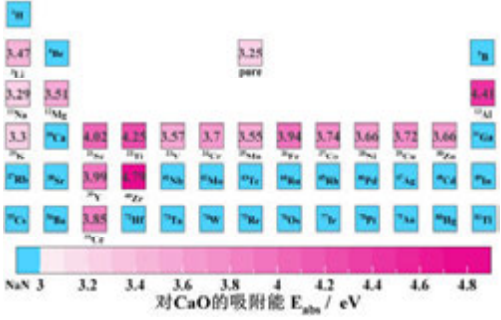


图 14 不同表面的最佳位点对 Ca_4O_4 吸附能

3 结论

本研究基于密度泛函理论计算，结合实验研究，对 18 种金属原子改性的 CaO 的反应性能进行了系统研究，阐明了改性效果与改性元素之间的关系。研究表明：

对于本文研究的碱金属、碱土金属和贫金属：改性金属原子的半径越大，表面能越高，表面活性越强，对 CO_2 吸附能力越高。与此同时，改性表面对 CaO 的吸附能力也增强，其中 Al 元素的提升效果最显著，有助于提高抗烧结能力。

对于本文研究的过渡金属改性：金属原子的半径越大，表面能越低，表面越稳定。其中 Ti、V、Cr、Mn、Fe 元素提高表面稳定性的同时不影响 CO_2 吸附活性，是潜在的良好改性元素。Sc、Ni 改性表面的 CO_2 吸附能力较差，使用 Zr 元素改性可能与 Ca 元素竞争碳酸化，应谨慎使用。

对于本文研究的镧系金属：镧系金属改性结构具有良好的稳定性，但可能与 Ca 原子争夺 CO_2 进行碳酸化，增加额外的 CO_2 消耗，不利于 CaO 的放热反应。镧系金属在实验中表现出的循环稳定性促进作用更可能是通过限制 CaO 纳米颗粒迁移来实现的抗烧结性能的提高。

参考文献

- [1] CARRILLO A J, GONZÁLEZ-AGUILAR J, ROMERO M, et al. Solar Energy on Demand: A Review on High Temperature Thermochemical Heat Storage Systems and Materials[J]. Chemical Reviews, 2019, 119(7): 4777-4816.
- [2] 徐铤昕, 田希坤, 闫君, 等. TiO_2 改性的 CaCO_3 热化学储热的反应性能[J]. 储能科学与技术, 2022, 11(1): 1-8.
- [3] TIAN X K, LIN S C, YAN J, et al. Sintering mechanism of calcium oxide/calcium carbonate during thermochemical heat storage process[J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 428: 131229.
- [4] KIM S M, LIAO W C, KIERZKOWSKA A M, et al. *In Situ* XRD and Dynamic Nuclear Polarization Surface Enhanced NMR Spectroscopy Unravel the Deactivation Mechanism of CaO -Based, $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ -Stabilized CO_2 Sorbents[J]. Chemistry of Materials, 2018, 30(4): 1344-1352.

- [5] BAI S, SUN J, LIU L, et al. Dolomite-derived composites doped with binary ions for direct solar thermal conversion and stabilized thermochemical energy storage[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2022, 239: 111659.
- [6] BAI S, SUN J, ZHOU Z, et al. Structurally improved, TiO₂-incorporated, CaO-based pellets for thermochemical energy storage in concentrated solar power plants[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2021, 226: 111076.
- [7] 李振山, 蔡宁生. 气固反应原理[M]. 第 1 版. 科学出版社, 2020.
- [8] MA X, HUANG X, ZHANG H, et al. Effect of calcium aluminates on the structure evolution of CaO during the calcium looping process: A DFT study[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2023, 452: 139552.
- [9] KONG D, JI M, CHEN Q, et al. Influence of doping Fe on performance of calcium-based doped materials for thermochemical energy storage: A DFT study[J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2022, 638: 413956.
- [10] CHOI D, ALISSA PARK A H, PARK Y. Effects of eutectic alkali chloride salts on the carbonation reaction of CaO-based composites for potential application to a thermochemical energy storage system[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 437: 135481.
- [11] SHEN C H, LIU R S, LIN J G, et al. Phase stability study of La_{1.2}Ca_{1.8}Mn₂O₇[J]. *Materials Research Bulletin*, 2001, 36(5): 1139-1148.
- [12] PRIMAK W, KAUFMAN H, WARD R. X-Ray Diffraction Studies of Systems Involved in the Preparation of Alkaline Earth Sulfide and Selenide Phosphors ¹[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1948, 70(6): 2043-2046.
- [13] HAYNES W M. CRC Handbook of Chemistry and Physics[M]. 95th ed. Boca Raton: CRC Press, 2014.
- [14] JANG J M, KANG S G. Understanding CO₂ Adsorption on a M₁ (M₂)-Promoted (Doped) MgO–CaO(100) Surface (M₁ = Li, Na, K, and Rb, M₂ = Sr): A DFT Theoretical Study[J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2019, 7(20): 16979-16984.
- [15] TIAN X K, GUO S J, LING S C, et al. Progress in multiscale research on calcium-looping for thermochemical energy storage: from atoms to systems[J]. Submitted to Journal.
- [16] DAYAH M. Periodic Table[EB/OL]//PTable. <https://ptable.com>.
- [17] LIU L, HONG D, GUO X. A study of metals promoted CaO-based CO₂ sorbents for high temperature application by combining experimental and DFT calculations[J]. *Journal of CO₂ Utilization*, 2017, 22: 155-163.
- [18] VALVERDE J M, SANCHEZ-JIMENEZ P E, PEREZ-MAQUEDA L A, et al. Role of crystal structure on CO₂ capture by limestone derived CaO subjected to carbonation/recarbonation/calcination cycles at Ca-looping conditions[J]. *Applied Energy*, 2014, 125: 264-275.
- [19] HANSEN T W, DELARIVA A T, CHALLA S R, et al. Sintering of Catalytic Nanoparticles: Particle Migration or Ostwald Ripening?[J]. *Accounts of Chemical Research*, 2013, 46(8): 1720-1730.
- [20] TIAN X K, LIN S C, YAN J, et al. Improved durability in thermochemical energy storage using Ti/Al/Mg Co-doped Calcium-based composites with hierarchical Meso/Micro pore structures[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 450: 138142.

均热板注液抽真空工艺优化研究

沈禹同^{1,2}, 贾力^{1,2*}, 王宙^{1,2}, 卢红岭^{1,2}

(1. 北京交通大学机械与电子控制工程学院热能工程研究所, 北京 100044;

2. 微细尺度流动与相变传热北京市重点实验室, 北京 100044)

(Tel: 010-51684321, E-mail: ljia@bjtu.edu.cn)

摘要: 本文针对均热板注液抽真空工艺进行优化研究, 通过对抽真空后注液和注液后抽真空工艺综合对比, 分析了两种工艺的难点和材料选取原则。分析不同充液率下工质损失方式, 验证了低温抽真空对工质损失量的优化, 减少工质的汽化损失, 在注液率为 140% 下, 低温方案减少了 14% 的工质损失; 根据不同充液率下工质损失形式和损失量的不同, 使用二次充注方案配合一次注液后抽真空的工质补充, 可以保证高充液率下的工质注入精度。

关键词: 均热板, 充液率, 工质损失量, 低温抽真空, 二次充注

0 前言

随着科技发展, 电子系统级模块朝向微型化、轻量化等需求的方向设计^[1]。近年来, 电子芯片结构中晶体管单位面积上数量可达到一亿以上^[2]。目前芯片中的晶体管密度越来越大, 导致芯片散热问题日益严峻, 温度升高是电子器件失效的重要因素, 传统散热方式难以解决高热流密度下电子器件散热问题, 而相变传热^[3]是当今换热效率最高的换热方式之一, 广泛运用于散热元件的设计之中, 作为高效的相变传热典型元件, 均热板应运而生。均热板利用内部工质的相变蒸发带走芯片表面温度, 消除热点温度, 是目前运用较为广泛的电子散热元件^[4], 国内外对均热板的研究主要集中在吸液芯的结构设计制造^[5]和均热板传热性能^[6]分析方面, 而在均热板的加工工艺上的优化研究较少, 传统抽真空工艺局限性也随着电子器件的微型化、超薄化日益显现。

王宙等^[7]研究发现不同充液率下的均热板性能有很大差异, 注液量和真空度对均热板传热性能有重要影响。Li 等^[8]对沟槽式吸液芯微热管研究表明, 充液率超过 100% 时, 工质会堆积在热管底部, 当启动热管时过量的工质会在冷凝段聚集, 导致冷凝段温度下降, 同时高充液率下, 均热板内部不凝气体含量较高, 当均热板工作时, 不凝气体会聚集在冷凝段阻碍工质蒸汽的冷凝从而导致均热板热阻增大。Mahdavi M 等^[9]探究不同充液率下、倾角对热管传热性能影响, 实验得出充液不足时, 会导致热管毛细极限下降, 而充液量过多时, 会导致工质占据蒸汽通道, 降低热管传热性能。在加工厚度小于等于 3 mm 均热板时, 为避免壳板被内外较大压差破坏表面结构, 通常选用注液抽真空工艺, 而注液抽真空工艺为提高冷凝效率需要进行二次除气来去除腔体内部不凝气体, Randeep 等^[10]研究发现, 环路热管中不凝气体减少时, 有利于工质的流动速度, 并显著提高了热管的启动性能。

事实上, 充液率和真空度对均热板的传热性能影响至关重要, 而在注液抽真空工艺中, 工质充注精度问题上研究较少, 通常对于该工艺的注液损失问题采用补充额外注液量来弥补抽真空过程中造成的工质损失来保证注液精度, 陆龙生等^[11]根据热管结构, 并分析抽真空时传热极端条件对额外注液量进行计算, 并通过实验发现引入额外注液量后, 保证注液精度, 使得热管传热性能提高了 12 倍。但是对于有些注液量较少的沟槽性微型热管, 由于沟槽结构对工质流动阻力较小, 常出现抽真空过程中工质几乎全部损失的情况^[12]。

本文针对注液抽真空工艺造成的工质损失原因进行分析, 将整个工艺过程中工质损失情况分为三部分: (1) 注液时针阀与充液管间形成的狭缝结构, 造成部分工质附着在管壁; (2) 抽真空过程中, 由于工质汽化被抽走造成的损失; (3) 二次除气时工质蒸汽随不凝气体被去除的部分损失 (该部分损失较小, 可忽略)。并针对不同工质损失形式, 提出保证工质精度的优化方案。

1 抽真空工艺对比分析

1.1 抽真空注液工艺

均热板的内部结构和工作原理如图 1 所示。吸液芯内部工质吸收热源的热量发生相变气化，工质蒸汽会充满整个腔体，当蒸汽上升到冷凝侧时迅速冷凝，冷凝液在吸液芯毛细力驱动下回流到蒸发侧，进行下一次的蒸发冷凝回流循环，不同的充液率下，其传热性能有很大差异。

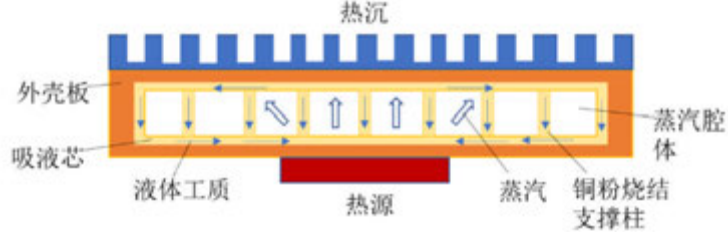


图 1 均热板工作原理

Fig. 1 The working principle of heat equalization plate

抽真空注液工艺是先使均热板内部获得高真空度，然后充注工质，该工艺在微热管加工中运用较为广泛，但是该工艺受到真空系统、板材硬度等影响。

真空系统通常由能够获得高真空机组组成，通常是由分子泵和机械泵组合使用，能够获得 10^{-5} Pa 数量级的真空压力。当均热板内部获得此真空压力时，会带走大量吸附在壳板上的不凝气体，该工艺可以在抽真空阶段去除大量不凝气体，而且在工质充注阶段前，需要对工质进行去除不凝气体操作，或者使用纯度较高的工质进行充注，避免工质中含有大量的不凝气体影响均热板传热性能，工质使用的是去离子水时，使用煮沸法来获取纯度较高的工质，即将去离子水加热至 100°C ，当其高温沸腾后内部的不凝气体会脱离工质，达到工质提纯的效果。

充注工质时，在内部腔体高真空状态下以及充液管口的管径由于厚度原因设计的尺寸较小，文献中提到的均热板或微热管的充液管口尺寸集中在 $\Phi 2\sim 3\text{ mm}$ ，注液针的针头直径通常为 1 mm ，注液的时候针头探入到充液管时，会形成狭缝区域，而狭缝区域毛细作用造成工质吸附在管壁处从而引起工质损失。

由此原因出现的工质损失，通常要计算出由结构问题导致的工质损失量作为额外充液量来保证注液精度。如图 2 针阀注液产生的误差，为了弥补该注液过程中的损失，以假设工质充满该部分为额外工质充注量 M_{etr} 的最大值，可以作为额外充注量的参考。

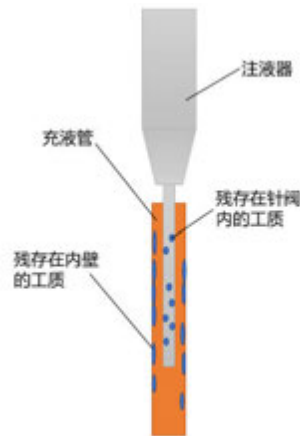


图 2 针阀充液误差分析图

Fig.2 Needle valve filling error analysis chart

$$M_{\text{etr}} = \frac{\pi \rho_l [(D_n^2 - D_{po}^2) L_{in} + D_{pi}^2 (L_p - L_{in})]}{4} \quad (1)$$

式中, D_n 为充液管的内径; D_{po} 为注液针外径; D_{pi} 为注液针内径; L_p 为注液针长; L_{in} 为插入到充液管的注液针深度。

高真空机组保证高真空度并进行了不凝气体的去除,高纯度工质的注入后进行充液管处的冷焊密封,此时获得高真空腔体和精准的注液量,省去了二次除气工艺,降低了工艺复杂性。所以传统微热管、传统均热板(厚度在 5~8 mm)通常选用先抽真空后注液工艺。

抽真空注液工艺需要的高真空机组设备成本较高,不易维护。而且该工艺对于厚度较薄(厚度小于等于 3 mm)或者材料硬度较低的聚合物壳板材料不适用,因为当内部腔体获得 10^{-5} Pa 真空压力时,会使得壳板内外表面具有较大压差,从而造成壳板表面形成明显凹陷,使得烧结在壳板表面的吸液芯结构遭到破坏。

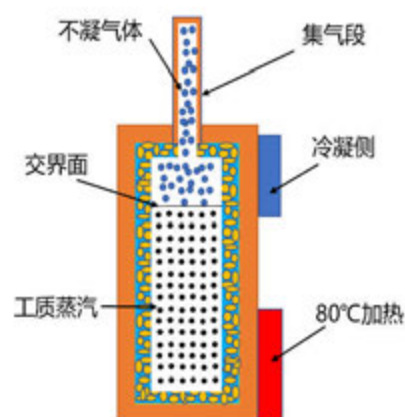
1.2 注液抽真空工艺

对均热板进行工质的充注后进行第一次抽真空,获取到当前饱和蒸汽压真空度后,进行二次除气去除腔体中大量不凝气体。对于厚度较薄的壳板材料通常选用注液后抽真空工艺,工质的充注精度保证是该工艺的难点,因为当进行工质充注之后,抽真空工艺和二次除气工艺都会造成工质的损失,且损失后无法进行补充,而且注液后抽真空只能使得内部真空压力达到工质的饱和蒸汽压,导致吸附在腔体内部材料的不凝气体无法去除,所以通常需要对均热板进行二次除气工艺来完成不凝气体的去除。

该工艺造成的工质损失分为三部分:注液时工质残留至管壁上的损失;抽真空过程中造成的工质损失;二次除气过程中汽化工质随不凝气体一起被去除导致工质部分损失。

二次除气工作原理如图 3,二次除气工艺关系到均热板内部不凝气体对其性能的影响,均热板工作时,蒸发侧工质吸热蒸发在冷凝侧聚集后冷凝回流,但是当均热板内部存在大量不凝性气体时,不凝气体会在冷凝侧聚集阻止蒸汽工质与冷凝侧表面接触增大回流阻力,导致均热板蒸发侧工质无法及时回流造成蒸发侧局部蒸干现象使得均热板失效,其除气原理是将均热板加热到工作温度,使其启动,一定时间内不凝气体会被工质蒸汽挤压至集气管处,此时将集气段进行剪除实现不凝气体的去除。由于集气段主要储存的是不凝气体,所以该部分造成的工质损失可以忽略。

均热板注液抽真空工艺中的传热传质是实现充注精度的重要因素。传热传质涉及热量和物质的传递,理解其基本原理对优化工艺具有重要意义。在抽真空过程中液体部分会发生蒸发,该过程会吸收一定的热量,因此蒸发过程对传热的影响需要考虑;在注液过程中,工质中的物质可能通过传质现象与均热板表面发生质量传递,质量传递可以是气体或液体的



扩散、对流或反应传递,因此质量传递也需要考虑。

图 3 二次除气工艺内部气体分布图

Fig. 3 Internal working fluid distribution diagram of secondary degassing process

2 实验测试与分析

2.1 吸液芯及均热板的设计与制作

均热板加工工艺流程为：外壳板的铣削加工，上下壳板清洗，吸液芯结构烧结（支撑柱结构同时烧结在吸液芯结构上），上下壳板的焊接，充液管焊接，充液抽真空（一次除气），冷焊密封（封口钳冷焊临时封口），蒸汽除气工艺（二次除气），冷焊后切管，临时封口补焊（气焊）。本文工艺流程如图 4。

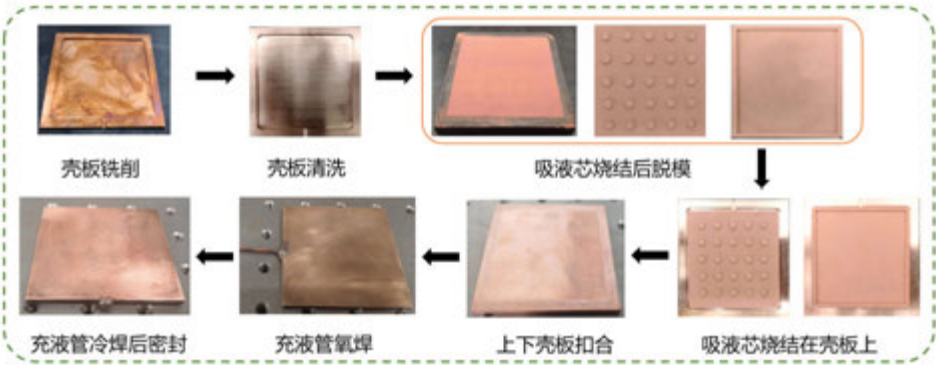


图 4 均热板加工工艺流程图
Fig. 4 Process flow chart of homogeneous heat plate processing

样品为单一铜粉粒径（75 μm ）烧结式吸液芯均热板，样品参数如表 1 所示。

表 1 单一粒径烧结式均热板结构参数
Table 3-1 Structural parameters of single particle size sintered vapor chamber

结构参数	数值
壳板厚度	0.5 mm
吸液芯厚度	0.5 mm
蒸汽腔高度	1 mm
铜粉粒径	75 μm
支撑柱数量	25 个

2.2 性能测试平台

抽真空实验平台示意图如图 3-3 所示，主要包括被测样品：75 μm 粒径铜粉烧结吸液芯均热板；压力监测部分：压力传感器（Omega PX309-050A5V）；抽真空部分：真空泵（Edward RV-8），通过真空泵抽取均热板腔体内真空使其腔体内部获得相应的真空压力，同时压力传感器监测内部压力并通过计算机显示当前腔体内部压力值。

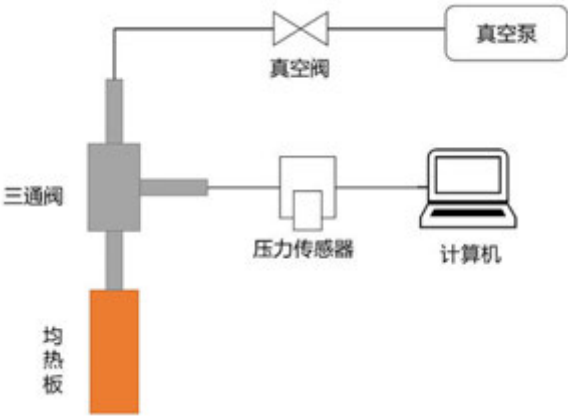


图 5 抽真空实验平台示意图
Fig.5 Schematic diagram of the vacuum experiment platform

吸液芯的孔隙率大小关系到吸液芯的毛细性能，也关系到工质充注量，定义为孔隙体积

与吸液芯总体积的比值，测试孔隙率的通常有密度计算法和工质浸润法两种。

密度算法：先称出铜粉的质量 M_c ，由铜粉的密度 ρ 可以得出铜粉的体积，烧结后的吸液芯体积为 V_r ，所以可以计算得到空腔的体积 V_e ：

$$V_e = V_r - \frac{M_c}{\rho} \quad (2)$$

所以孔隙率为：

$$\varepsilon = \frac{V_e}{V_r} \quad (3)$$

利用密度算法得出的孔隙率通常会比实际测试值要大，因为烧结过程铜粉颗粒无序堆叠可能有些缝隙会形成盲孔，即无法与其他孔隙连通的孔隙，并且其他的孔隙连接起来后也会造成孔隙率计算不准确。

工质浸润法：是通过将烧结完成的吸液芯结构使其完全浸润工质，放置 1 min 待其表面多余工质沥干后，再进行称重，此时浸润前后的吸液芯质量差对应工质填充孔隙的质量，所以该方法的孔隙率用公式表达为：

$$\varepsilon = \frac{(M_{\text{wet}} - M_{\text{dry}}) / \rho}{V_r} \quad (4)$$

式中 M_{wet} 为浸润后吸液芯质量； M_{dry} 为未浸润的吸液芯质量； ρ 为工质密度，用该方法计算得出的孔隙率更加精确，所以本实验中采用工质浸润法，测量得到样品孔隙率为 66.79%。

本实验充液率表示为工质浸润吸液芯的程度，将其定义为工质的体积与孔隙体积之比，即式 (5)

$$fr = \frac{V_i}{V_p} \times 100\% \quad (5)$$

式中， fr 为充液率； V_i 为工质体积； V_p 为孔隙体积。

工质损失量使用称重法计算，通过对比抽真空前后均热板质量变化得到工质损失量，即式 (6)

$$m_{\text{loss}} = m_{\text{org}} - m_{\text{lef}} \quad (6)$$

式中 m_{loss} 为工质损失量； m_{org} 为抽真空前初始质量； m_{lef} 为抽真空后剩余质量。

为了保证数据的准确性和可靠性，需要对实验仪器进行校准，并对其进行误差分析。实验所用仪器的不确定度如表 2 所示。

表 2 实验仪器不确定度
Table 2 Uncertainty of experimental instruments

压力传感器	真空泵	数据采集仪	高精度天平
$\pm 0.25\%$	0.1%	$\pm 0.10\%$	0.03%

2.3 不同充液率下抽真空对工质损失量影响

注液抽真空工艺中，完成工质充注之后，抽真空工序造成的工质损失通常是充液率越高损失量越大，但是不同充液率下工质损失原因有所不同。针对烧结式吸液芯来讲，当注液率小于等于 100% 时，工质浸润在吸液芯内部，工质损失主要以腔体内部压力骤降引起的工质汽化损失；而当注液率大于 100% 时，多余的工质会堆积在吸液芯表面占据部分蒸汽通道，此时暴露在蒸汽腔部分工质损失形式也发生了变化，会随着真空泵的启动瞬间的抽吸力造成暴露在蒸汽腔部分工质携带损失，如图 6 所示，不同充液率下的工质在腔体内分布情况。

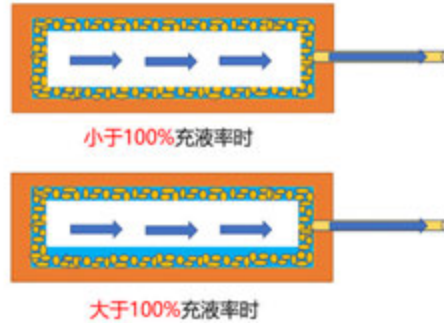


图 6 不同充液率下工质分布状态
Fig.6 Working fluid distribution at different filling rates

为了探究不同充液率下，抽真空对工质损失量的影响，针对相同抽真空时间不同充液率进行实验分析，如图 7 抽真空 30 s 时不同充液率下工质损失量图。

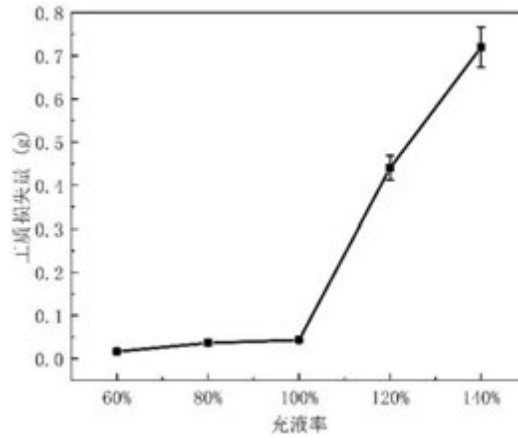


图 7 不同充液率下工质损失量变化
Fig. 7 Changes in working fluid loss under different filling rates

针对不同注液量工质损失做了三次重复性实验并取其平均值，分析上图中的曲线可得，在充液率为 60%、80%和 100%情况下（充液量小于等于 100%），工质损失量在 0.1 g 以下，充液率越低工质损失量越小，60%充液率下几乎没有损失，因为在这种情况下，工质损失量受到吸液芯毛细力的影响，以汽化的方式被抽走，此时工质与均热板之间的传热过程是主要的损失形式，而传质过程相对较弱，因此低充液率抽真空工质损失量较小。

而充液率在 100%以上时，120%和 140%充液率下工质损失量骤增，并且称重计算后发现保存在腔体内部的工质量在 100%附近，这是因为在高充液率情况下，工质与均热板之间的传热和传质过程都会发生。工质在均热板上蒸发时，其蒸发速率取决于其传热速率。当抽真空时，蒸发速率高的工质会在短时间内大量蒸发，产生高温高压蒸汽，这种蒸汽会被抽真空带出均热板，导致损失量增加。以上数据表明高充液率情况下，抽真空时损失形式发生变化，主要损失形式为携带损失。

2.4 不同抽真空时间对工质损失量影响

为了在保证需要的真空压力条件下实现工质的充注，需要通过对不同抽真空时间的实验来分析抽真空工艺的时间对工质损失量的影响。实验控制其充液率不变（100%）的情况下，不同的抽真空时间对其损失量的影响，如图 8 所示。

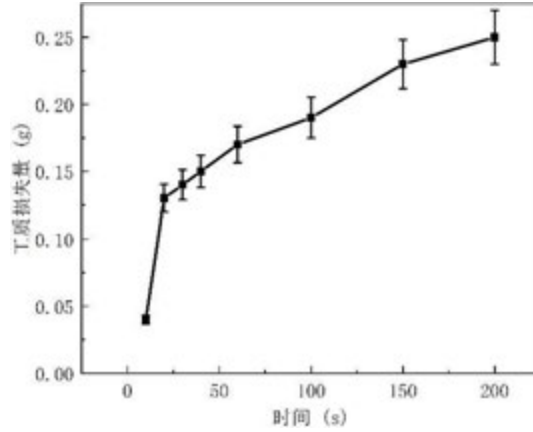


图 8 工质损失量随抽真空时间的变化图
Fig. 8 Variation of working fluid loss with vacuum time

由上图分析可知，工质损失量整体趋势随着抽真空时间的增长而增加，在前 20 s 内腔体内部压强迅速降低，工质损失量较大，这是因为在此期间，真空度较低，工质与均热板之间的传热速率较快，使得工质迅速蒸发并被抽真空带走，前 20 s 的损失量为 0.12 g，20 s 后工质损失速率趋于平缓，是由于在这种情况下，真空度提高，工质与均热板之间的传热速率较慢，使得工质蒸发速率逐渐降低。此外，随着抽真空时间的延长，工质逐渐适应了高真空环境，其携带损失逐渐减小。以上结果说明，延长抽真空时间对工质损失量影响较小，工质损失主要发生在压力骤降的时间内，由于要获得内部真空度要求，该损失是无法避免的，而且通过控制抽真空时间难以确定其充液率精度。

2.5 注液方案优化

根据以上对抽真空工艺工质损失的影响因素分析，需要对抽真空工艺进行改进来保证充液精度。由于工质损失量较大的情况是高充液率时，所以提出的方案是针对充液率大于 100% 的情况。

针对沟槽性吸液芯结构，可以通过冷冻的方式控制充注精度，但是对于多孔介质吸液芯结构无法使用冷冻法，当工质完全浸润吸液芯内部时，对其进行冷冻处理会造成工质体积膨胀破坏吸液芯结构。

低温抽真空：根据水在不同温度下饱和蒸汽压不同，控制抽真空时的温度，来减小工质因为腔体压力的降低而导致的汽化损失。针对 140% 充液率下，不同温度下抽真空 30 s，不同温度对工质损失量的影响如图 9 所示。

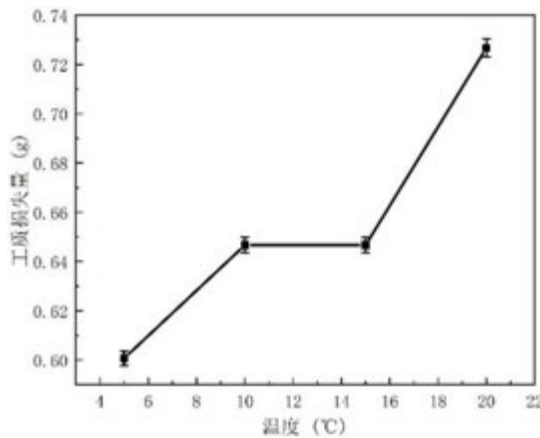


图 9 工质损失量随着不同温度的变化
Fig. 9 The amount of working fluid loss varies with different temperatures

通过上图可以看出，5 °C 相比 20 °C 下抽真空工质损失量减少了 0.14 g，说明降低抽真空时的温度，可以减少工质因为真空压力下汽化损失，对工质损失有一定的优化，但是总损失

量依然有 0.6 g，由上一节高充液率（充液率大于 100%）损失量分析可知，主要是携带损失，损失主体是暴露在蒸汽腔中的部分工质，所以低温抽真空方案对工质精度的控制优化并不大。当工质主要损失为汽化损失时，该优化方案可以提供参考。

二次充注：对此提出另一种二次充注注液方案，抽真空后保证真空度同时对均热板进行工质的补充，因为低充液率下损失量较小可以保证工质充注精度，所以该工艺针对高充液率下，可以通过后序工质补充完成工质的精确注入，二次充注系统示意图如图 10 所示。

当均热板已经进行过第一次工质的充注后达到 100%充液率时，将其接入到该系统中，打开阀 1、阀 3 和阀 4 进行抽真空操作，当到达对应真空度要求时（3~4 kPa），关闭阀 3，打开阀 2 将需要额外充注的工质进行补充注入，注液完成之后关闭阀 2。

高充液率下，工质会占据部分蒸汽腔空间，此时工质损失形式分为低真空压力下工质汽化损失，真空泵的启动瞬间的抽吸力造成暴露在蒸汽腔部分工质携带损失（主要损失）。二次注液工艺首先进行 100%的充液量的工质充注，再进行抽真空，此时由于工质浸润在吸液芯内部，主要损失为低压造成工质汽化损失，该损失量较小，通过重复性实验引入额外注液量来抵消该部分损失，此时腔体内部已获得需要的真空度，保持该真空度下，对额外工质进行补充注入，这样避免了抽真空过程时暴露在蒸汽腔部分工质的大量损失，保证高注液率下的工质精度。

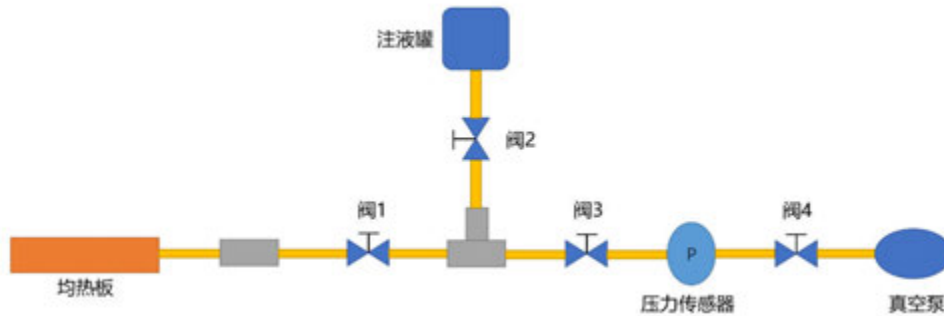


图 10 二次充注系统示意图

Fig.10 Schematic diagram of the secondary charging system

3 结论

本文针对注液抽真空工艺的工质充注精度进行分析优化，分析了该工艺下工质的损失形式，并提出能够控制均热板高充液率充注量的优化方案。得出以下结论：

（1）将注液抽真空工艺与抽真空注液工艺进行对比，抽真空注液工艺由于抽真空后腔体内外压差过大，容易导致壳板塌陷造成壳板表面和吸液芯结构的破坏，不适用于壳板厚度较薄的结构加工，注液抽真空工艺可以保证内外压差高于工质当前温度下的饱和蒸气压更适用于较薄壳板的加工。

（2）针对均热板不同充液率下和不同抽真空时间对工质损失量的影响进行实验研究，分析得出影响高充液率工质损失主要原因是携带损失，损失量主要是暴露在蒸汽通道部分工质，而低充液率下工质主要以汽化形式被抽走。抽真空时间对工质的损失主要在压力骤降的前 20 s 内。

（3）根据水在不同温度下饱和蒸汽压不同，为了减少抽真空时工质汽化量，提出低温抽真空方案，在低温（5℃）下，相比常温（22℃）下抽真空减少了 14%损失量，但针对高充液率下损失量影响较小；根据不同充液率下工质损失形式和损失量的不同，使用二次充注方案配合一次注液后抽真空的工质补充，能够实现高充液率下的工质注入精度。

致谢：本文得到教育部基本科研业务费重点项目资助（No. 2022JBCG002）

参考文献

- [1] Yao F, Miao S, Zhang M, et al. An experimental study of an anti-gravity vapor chamber with a tree-shaped

- evaporator[J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 141: 1000-1008.
- [2] Sohel Murshed S M, Nieto De Castro C A. A critical review of traditional and emerging techniques and fluids for electronics cooling[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2017, 78: 821-833.
- [3] Kang S-W, Tsai S-H, Ko M-H. Metallic micro heat pipe heat spreader fabrication[J]. Applied Thermal Engineering, 2004, 24(2-3): 299-309.
- [4] 李健,杨殷创,许传龙,邱惠和.具有纳米结构吸液芯的超薄平面热管传热特性[J].工程热物理学报, 2020, 41(11): 2762-2766.
- LI Jian, YANG Yin-Chuang, XU Chuan-Long, QIU Hui-He. Thermal Performance of Ultrathin Flat Heat Pipe With Nanostructured Wick[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2020, 41(11): 2762-2766.
- [5] Kim J S, Shin D H, You S M, et al. Thermal performance of aluminum vapor chamber for EV battery thermal management[J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 185: 116337.
- [6] 罗佳利,汪亚桥,吕树申,莫冬传.梯度结构修饰铜网的毛细特性[J].工程热物理学报, 2021, 42(06): 1531-1537.
- LUO Jia-Li, WANG Ya-Qiao, LYU Shu-Shen, MO Dong-Chuan. Capillary Properties of Modified Copper Mesh With Gradient Structure[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2021, 42(06): 1531-1537.
- [7] 王宙,银了飞,丁艺,崔卓,贾力.具有梯度结构吸液芯的均热板传热特性[J].工程热物理学报, 2023, 44(02):532-539.
- WANG Zhou, YIN Liaofei, DING Yi, CUI Zhuo, JIA Li. The Heat Transfer Characteristics of Vapor Chambers With Gradient Structured Wicks[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2023, 44(02):532-539.
- [8] Li Y, He H, Zeng Z. Evaporation and condensation heat transfer in a heat pipe with a sintered-grooved composite wick[J]. Applied Thermal Engineering, 2013, 50(1): 342-351.
- [9] Mahdavi M, Tiari S, De Schampheleire S, et al. Experimental study of the thermal characteristics of a heat pipe[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2018, 93: 292-304.
- [10] Singh R, Akbarzadeh A, Mochizuki M. Operational characteristics of the miniature loop heat pipe with non-condensable gases[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010, 53(17-18): 3471-3482.
- [11] 陆龙生,汤勇,袁冬,蒋乐伦.微热管的灌注抽真空制造技术[J].机械工程学报, 2009, 45(06):122-127.
- LU Longsheng, TANG Yong, YUAN Dong, JIANG Lelun. Micro Heat Pipe Manufacturing Technology of Vacuuming and Filling Work Fluid[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2009, 45(06):122-127.
- [12] 陈伟彬. 微热管抽真空除气技术及其系统研究[D].华南理工大学, 2011.
- Chen Weibin. Research on Vacuum Degassing Technology and System for Micro Heat Pipes[D]. South China University of Technology, 2011.

同轴深孔换热器储热模式的流动传热分析

赖孝天^{1,2}, 陶维昱¹, 颜谢材¹, 郑君^{1,2}, 田红^{1,2}, 窦斌^{1,2*}

¹ 中国地质大学(武汉)工程学院, 湖北武汉, 430074

² 自然资源部深部地热资源重点实验室, 湖北武汉, 430074

Email: doubin@cug.edu.cn

摘要: 本文针对特征温度边界下同轴深孔换热器的地下储热过程, 聚焦工质的流动与传热性能, 推导建立了中心注入条件下流体温度分布的解析表达式, 并基于环形与圆形流道内湍流状态下的经验关系式开展了理论分析。研究指出, 储层的垂向升温特性对工质温度与热流密度的分布影响显著, 提高工质注入初温、增大管径比与流量能够通过改善温度匹配与传热系数的方式提升单位时间内工质向储层的传热量, 其中后两种方式需要以流动功耗的增长作为代价。

关键词: 同轴深孔换热器, 线性升温边界, 流动传热分析, 储层热恢复。

0 前言

地热能, 作为一种清洁稳定的可再生能源, 能够有效服务于发电^[1]、采暖^[2]与制冷^[3]等领域, 从而削减能量供应过程中所造成的碳排放。地下换热器, 是一种应用广泛的地热能采集设备, 根据工作原理与结构的不同, 主要包括: 地埋管换热器^[4], 长距离重力热管^[5], U型管地下换热器^[6]以及同轴深孔换热器^[7]。同轴深孔换热器由两根具有不同管径的圆管组成, 外管作为工质与储层之间的传热通道, 而内管用于组织工质的流动。由于其具有结构简单、运行稳定以及配套技术成熟的优点, 目前已得到了一定的应用^[8]。然而, 伴随采热过程的长时间进行, 地下热储温度逐渐降低, 采热性能逐渐恶化, 该问题成为了制约采热量的主要障碍^[9]。针对该问题, 采取间歇运行的方式给予热储充足的热恢复时间, 能够缓解这一问题, Cai 等人研究发现多种不同时间比例的间歇式运行均能有效缓解温度衰减问题^[10]。除此以外, 针对 Green 等人的地下储热设想^[11], 将太阳能光热等而难以直接利用的热能注入地下, 通过地下储热的方式能够在缓解储层热衰减的同时对太阳能加以稳定, 从而实现不同类型可再生能源的互补使用。Panja 等人研究了储层渗透率非均质性对地下储热性能的影响规律, 并指出渗透率的非均质性易导致非对称温度场的出现^[12]。此外, 由于大地热流的作用, 地下储层沿垂直方向呈现出线性温度分布, 这使得热储与流体之间的瞬态传热过程在空间上具有独特的分布特征。伴随换热器垂直深度的进一步增大, 地层的种类变得多样且复杂, 不同种类地层的传热能力使得热储中的温度梯度发生变化, 进而影响流体向热储的释热能力。因此, 本文针对同轴深孔换热器向地下储层储热的瞬态传热过程, 以过程中的热量传递行为以及载热工质的流动特性为对象开展了相关理论分析。

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(批准号: 162301212689); 自然资源部深部地热资源重点实验室开放基金一般项目(批准号: KLDGR2022G02)。

1 数学模型

在运行过程中，同轴深孔换热器内的工质可经环形与中心流道注入，根据储层与流体温度的匹配特性，环形注入适用于采热模式而中心注入适用于储热模式，工质在中心注入模式下从底部向上流动的过程中对储层释放热量。

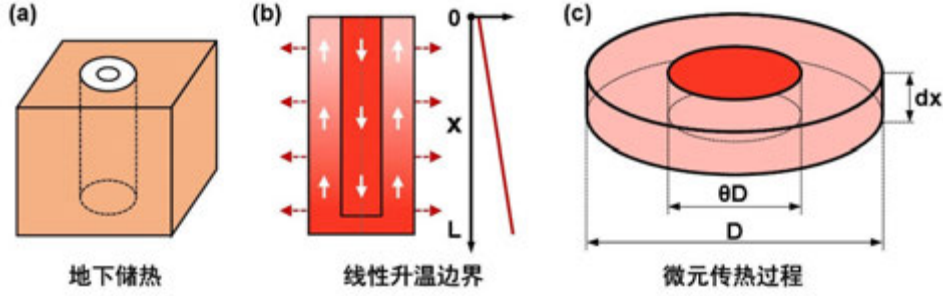


图1 同轴深孔换热器储热模式示意图

以垂直向下为正方向且忽略中心管的漏热，根据能量守恒关系，流体温度的微分方程为式(1)，式中： k 为热储与工质的传热系数， $W/(m^2 \cdot K)$ ； T_S 为储层温度， K ； T_F 为工质温度， K ； π 为圆周率； D 为换热器外管直径， m ； $\dot{m}_F$ 为工质流量， kg/s ； $c_{p,F}$ 为工质定压比热容， $J/(kg \cdot K)$ 。其中，储层温度沿垂直方向线性升高，如式(2)所示，式中： K 为温度梯度， K/m ； x 为换热器内任意竖直位置， m ；角标0表示换热器环形通道的入口。

$$-k(T_S - T_F)\pi D dx = \dot{m}_F c_{p,F} dT_F \quad (1)$$

$$T_S = T_{S,0} + Kx \quad (2)$$

根据式(3)所示边界条件，积分可得工质温度的沿程分布解析表达式(4)。

$$x = L, T_F = T_{F,in} \quad (3)$$

$$T_{F,x} = T_{S,0} + Kx - \frac{\dot{m}_F c_{p,F}}{\pi D k} \left\{ e^{\frac{\pi D k}{\dot{m}_F c_{p,F}}(x-L)} \left[\frac{\pi D h}{\dot{m}_F c_{p,F}} (T_{S,0} - T_{F,in} + KL) + K \right] - K \right\} \quad (4)$$

储层和采热工质之间的传热为导热与对流耦合过程，故传热系数为式(5)，式中： r_c 为导热热阻， $(m^2 \cdot K)/W$ ； h 为对流传热系数， $W/(m^2 \cdot K)$ 。Gnielinski的相关工作指出环形通道内湍流状态下的Nusselt数为式(6)^[13]，式中： Re_a 为雷诺数，式(7)； Pr 为普朗特数，式(8)； $d_{h,a}$ 为流动直径，式(9)； f_a 为摩擦系数，式(10)； Re_a^* 为计算摩擦系数所使用的修正雷诺数，式(11)； F_a 为区分不同传热面的修正系数，式(12)； θ 为内外管径比； ρ_F 为密度， kg/m^3 ； μ_F 为动力粘度， $Pa \cdot s$ ； λ_F 为导热系数， $W/(m \cdot K)$ 。

$$k = \frac{1}{r_c + \frac{1}{h}} \quad (5)$$

$$Nu_a = \frac{(f_a/8)(Re_a - 1000)Pr}{1 + 12.7\sqrt{f_a/8}(Pr^{\frac{2}{3}} - 1)} \left[1 + \left(\frac{d_{h,a}}{L} \right)^{\frac{2}{3}} \right] F_a \left(\frac{Pr}{Pr_w} \right)^{0.11} \quad (6)$$

$$Re_a = \frac{\rho_F u_a d_{h,a}}{\mu_F} = \frac{4\dot{m}_F}{(1 + \theta)\pi\mu_F D} \quad (7)$$

$$\text{Pr} = \frac{\mu_F c_{p,F}}{\lambda_F} \quad (8)$$

$$d_{h,a} = (1 - \theta) D \quad (9)$$

$$f_a = (1.8 \lg \text{Re}_a^* - 1.5)^{-2} \quad (10)$$

$$\text{Re}_a^* = \text{Re}_a \frac{(1 + \theta^2) \ln \theta + (1 - \theta^2)}{(1 - \theta)^2 \ln \theta} \quad (11)$$

$$F_a = 0.9 - 0.15 \theta^{0.6} \quad (12)$$

对于中心圆形流道，阻力系数可根据 Filonenko 公式求解^[14]，式(13)。其中，中心流道内的雷诺数与流动直径分别为式(14)与(15)。

$$f_c = (1.82 \lg \text{Re}_c - 1.64)^{-2} \quad (13)$$

$$\text{Re}_c = \frac{\rho_F u_c d_{h,c}}{\mu_F} = \frac{4 \dot{m}_F}{\pi \theta D \mu_F} \quad (14)$$

$$d_{h,c} = \theta D \quad (15)$$

工质在环形与中心通道中的流动压降分别为式(16)与(17)，相应功耗为式(18)。

$$\Delta P_a = \frac{f_a \rho_F L u_a^2}{2 d_{h,a}} = \frac{8 f_a L \dot{m}_F^2}{\pi^2 \rho_F (1 + \theta)^2 (1 - \theta)^3 D^5} \quad (16)$$

$$\Delta P_c = \frac{f_c \rho_F L u_c^2}{2 d_{h,c}} = \frac{8 f_c L \dot{m}_F^2}{\pi^2 \rho_F \theta^5 D^5} \quad (17)$$

$$P = \frac{\dot{m}_F}{\rho_F} (\Delta P_a + \Delta P_c) \quad (18)$$

储热过程的局部热流密度与单位时间储热量分别为式(19)与(20)。

$$q = k (T_{F,x} - T_{S,x}) \quad (19)$$

$$\dot{Q} = \dot{m}_F c_{p,F} (T_{F,in} - T_{F,out}) \quad (20)$$

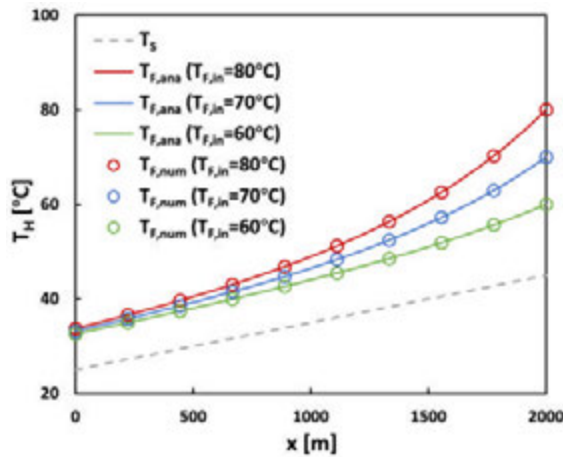


图2 温度分布解析表达式的对比检验

为确保工质温度解析表达式的正确性，利用四阶龙格库塔(RK-4)进行数值积分的方法对式(4)进行了对比验证，如图2所示二者吻合良好。

2 讨论与分析

2.1 算例分析

基于上述理论模型，首先利用表 1 参数所对应算例的流动与传热性能开展了计算与分析。在该工况下，同轴深孔换热器的外管直径为 0.2m，内外管径比为 0.5，纵深为 2000m，选择初始温度为 70℃ 的水作为循环工质，以 10kg/s 的流量由中心管注入地下向储层释放热量。

表 1 初始参数表

变量	取值
D [m]	0.2
L [m]	2000
$T_{F,in}$ [°C]	70
$\dot{m}_F$ [kg/s]	10
θ [-]	0.5

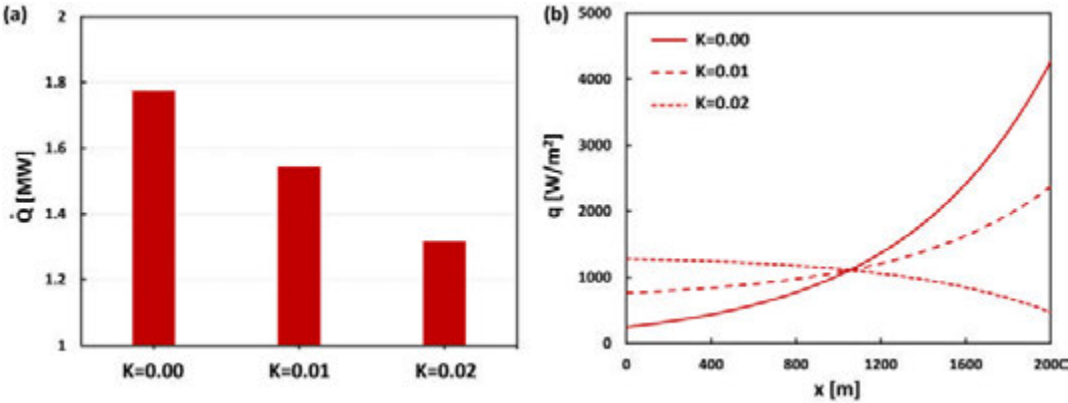


图 3 算例的传热性能: (a) 单位时间储热量, (b) 热流密度分布

长期持续采热后储层温度会出现衰减，即相应地温梯度有所下降。图 3-(a)指出当地温梯度由 0.02 降低至 0 K/m，单位时间内的储热量由 1.32 上升至 1.77 MW。地温梯度的存在使得循环工质与储层间的温度匹配特性发生变化，进而影响热流密度的分布规律与全域的传热性能。由图 3-(b)可知，当储层具有较大的温度梯度时，工质在换热器底部的局部热流密度显著降低，进而大幅度削弱底部储层的储热性能而影响单位时间的整体储热量。因此，在储层具有更低温度梯度下进行储热能够取得更高的单位时间储热量，此时换热器下半段为储热模式的主要功能区。

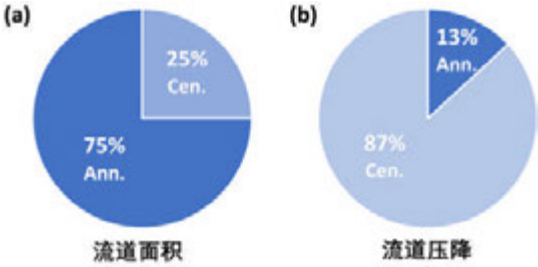


图 4 算例的流动性能: (a) 流道横截面积, (b) 流道内部压降

循环工质在经中心与环形流道流动的过程中，流动阻力的作用将造成相应功耗。在内外管径比为 0.5 的情况下，忽略内外管壁厚度，中心圆管与环形流道的横截面积比为 1: 3，故工质将以更高的流速在内管中流动而产生更为剧烈的压降。图 4-(b)指出，在算例工况下内管压降占据了整体压降的 87%，这意味着总体功耗中的大部分能量被用于泵送工质在中心圆管内的流动。

2.2 参数分析

同轴深孔换热器的结构与运行参数是影响其流动传热性能的重要因素，其中主要涉及内外管径比、注入温度与工质流量，图 5 所示为不同管径比与注入温度下的传热性能。

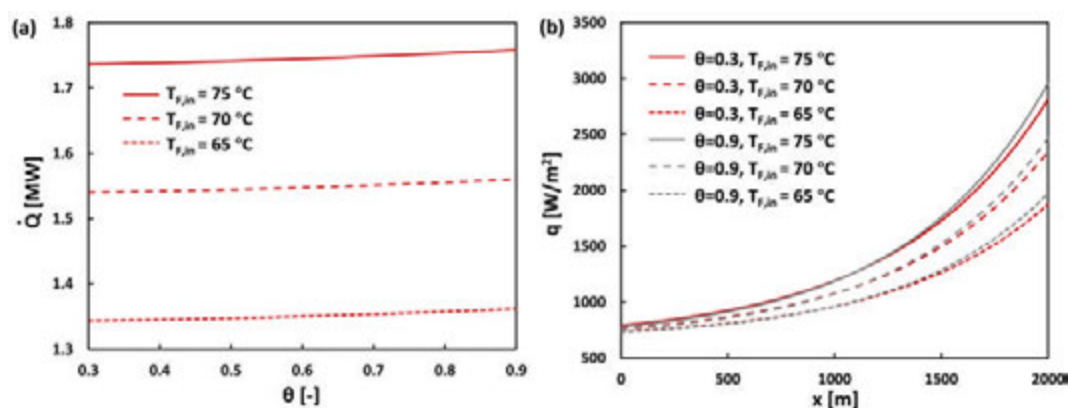


图 5 管径比对传热性能的影响：(a) 单位时间储热量，(b) 热流密度分布

根据图 5-(a)可知，增大内外管径比与提升注入温度均有助于提高单位时间内工质向储层释放的热量。当增大管径比从 0.3 至 0.9，单位时间的储热量约提高 0.02 MW，增长幅度较为微弱。相较之下，提升注入温度能够更为显著地改善传热性能，当提升注入温度由 65 至 75°C ，单位时间采热量约提高 0.40 MW。根据图 5-(b)中不同管径比与注入温度下的热流密度分布可知，提升注入温度能够有效增加储热过程中工质与储层间的平均传热温差而加速驱动热量的传递。当进一步提高内外管径比，内管径的增大将压缩环形流道的横截面积，以加快其中工质的流速而改善对流传热系数。由于在换热器底部工质与储层具有更大的局部传热温差，因而管径比的提高对于该处局部热流的强化更为明显。

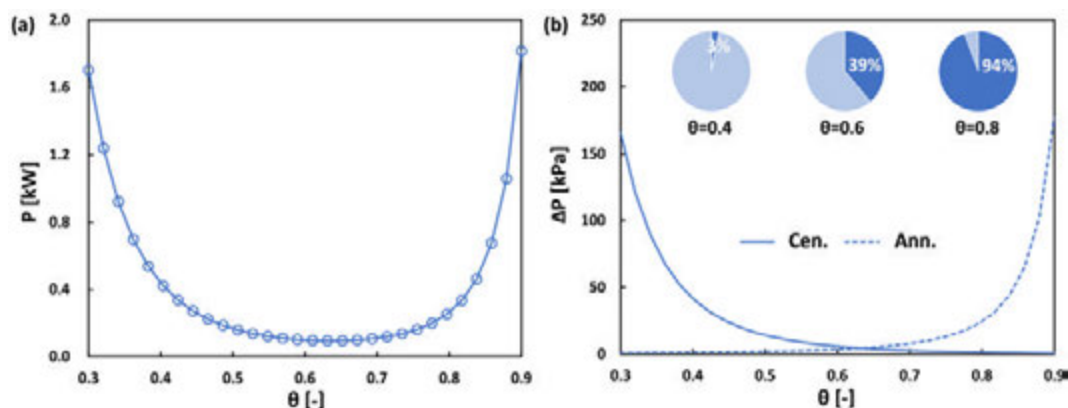


图 6 管径比对流动性能的影响：(a) 流动功耗，(b) 中心与环形流道压降

管径比的改变在根本上决定了环形与中心通道内工质流速的大小，提升流速在强化对流传热系数的同时，也使得工质在通道内的流动性能发生改变。图 6-(a)指出当增加管径比从 0.3 至 0.9，流动功耗呈现出先降低后升高的变化趋势，变化过程中的最小与最大流动功耗分别约为 0.09 kW 与 1.82 kW。在小管径比条件下，工质在中心管内的流速更快而在环形通道内的流速更慢，以管径比为 0.4 的工况为例，中心管内流速与阻力系数的双重提升使得流体在其中的流动压降约为 42 kPa，相较之下环形通道内的压降非常微弱，仅占总压降的 3%。当提高管径比至 0.6，中心与环形流道的横截面积逐渐趋于平衡，内外流速趋于相近且压降和功耗均下降显著。进一步增大管径比至 0.8，环形流道内的流动压降显著升高，约占总体压降的 94%，使得总功耗再一次升高。因此，高低管径比区域中高流动功耗的主要成因是流道面积不平均所导致的中心或环形流道内的流速加剧现象。结合上述管径比对传热性能的影响规律可知，低管径比对于运行过程中的传热与流动性能均不利，因此需要在换热器设计过程中加以避免。理想的管径比位于中间值与较大值区间内，增大管径比能够在一定程度上强化外管内壁的对流传热系数，从而改善热量传递的性能，但显著增长的环形流道功耗将增加系统运行的成本，需要根据实际情况与需求进行折中选择。

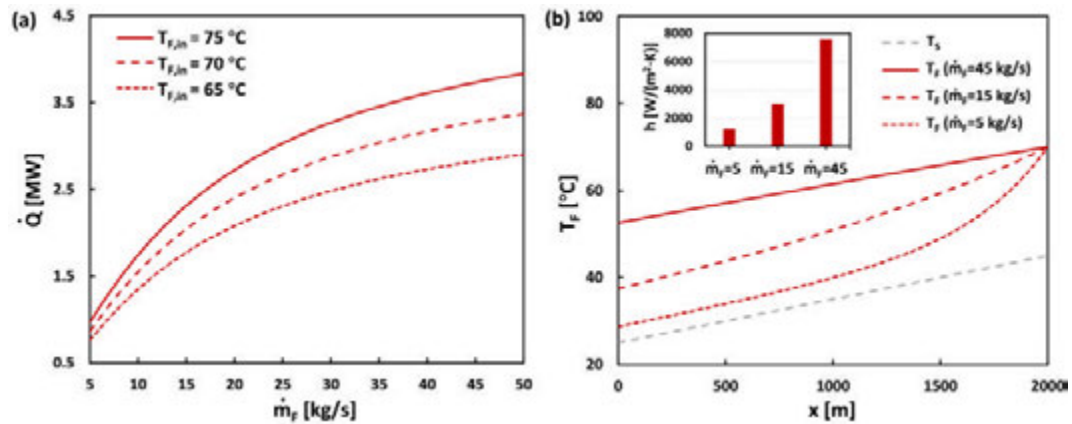


图 7 流量对传热性能的影响: (a) 单位时间储热量, (b) 热流密度分布

对于具有固定几何结构的换热器，运行参数的改变同样对传热与流动性能影响显著。图 7 所示为注入流量对传热性能的影响规律，图 7-(a)指出当提高工质的注入流量，单位时间内向储层释放的热量提升显著。在注入温度为 70°C 的工况下，提升工质流量由 5 至 50 kg/s，单位时间储热量由 0.86 增长至 3.37 MW。增大流量对强化传热性能的作用机制主要在于提升对流传热系数以及改善工质与储层的温度匹配特性。图 7-(b)所示为不同流量下工质温度分布与对流传热系数的对比，首先可见流量的提升将提高环形通道内工质的流速，从而强化外管内壁的对流传热系数，在流量为 5 kg/s 的工况下，对流传热系数为 $1173 \text{ W/(m}^2\cdot\text{K)}$ ，而当流量增长至 50 kg/s，对流传热系数提升至 $7571 \text{ W/(m}^2\cdot\text{K)}$ 。其次，工质流量的提升使得载热工质的热容量增长显著，进而在传热过程中表现出更为迟缓的温度变化特性。对比温度分布可知，低质量流量状态下，循环工质在换热器底部区域的温度下降迅速而快速趋近储层温度。相比之下，高质量流量下的工质温度以更为缓慢的速度下降，而与储层间保持着更大的平均传热温差。因此，提高质量流量能够通

过改善对流传热系数与提高平均传热温差的方式，有效强化单位时间内工质向储层的传热量。

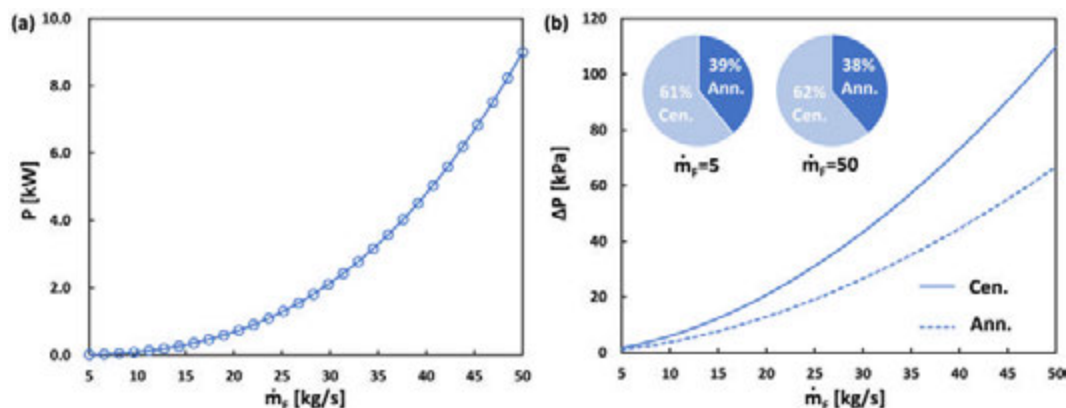


图 8 流量对流动性能的影响：(a) 流动功耗，(b) 中心与环形流道压降

图 8 所示为工质流量对流动性能的影响规律，图 8-(a)指出质量流量的增加将大幅增加泵功的消耗，当流量自 5 增加至 50 kg/s，泵功由 0.01 增长至 66.70 kW。流量改变对泵功的作用机制主要在于流动压降与工质数量两方面，首先根据图 8-(b)中通道内的流动压降可知，由于提升流量所造成的流速升高使得工质在流经中心与环形通过程中的压降增长显著。在管径比为 0.6 的工况下，提升流量自 5 至 50 kg/s，内外管中的流动压降均显著增长至 110 与 67 kPa，但对二者在总压降中的占比影响微弱。由此可见，中心与环形通道内的压降占比主要受到管径比对流通横截面积影响的作用，而流量的提升将同时增加双侧的流动压降。压降的增加将导致单位质量工质流动过程消耗更多的泵功，而流量的增长同时意味着需要泵送的工质数量更多。因此，增大工质流量在强化传热性能的同时将导致泵功的显著增长，且在大管径比与小管径比条件下更为明显。

3 结 论

本文以同轴深孔换热器在线性升温边界下向地下储层释热过程中的流动与传热性能为对象，推导建立了中心注入模式下循环工质温度分布的解析表达式，并基于环形与圆管流道内湍流状态下的经验关系式，针对换热器主要结构与运行参数对工质释热性能的影响规律开展了相关计算与理论分析，具体结论为如下三点：

(1) 选用具有高管径比的换热器能够通过加速环形通道内的工质流速以强化对流传热系数，然而通道内的流动阻力将显著增长以消耗更多泵功维持工质的运输，在结构设计过程中需根据实际运行需求进行折中选择；

(2) 提高注入温度能够有效增大载热工质与储层之间的平均传热温差以提升储热速率，但相应的工质出口温度较高，这意味着地表热量供给端需工作在更高的接口温度下，从而取得更为高效的释热性能。

(3) 提高循环工质的注入流量能够大幅度提高单位时间内载热工质向储层的释热量，其作用机制在于工质流量对其自身流速与热容的显著影响，从而同时改善对流传热系数与平均传热温差，但该方式需要以功耗的显著增长作为代价。

参考文献

- [1] 张富珍, 胥蕊娜, 姜培学. 二氧化碳捕集与地热发电全链能流分析. 天然气工业, 2022, 42(4):130–138.
- ZHANG Fuzhen, XU Ruina, JIANG Peixue. Energy flow analysis on the full-chain system of carbon dioxide capture and geothermal power generation. Natural Gas Industry, 2022, 42(4):130–138.
- [2] 刘俊, 蔡皖龙, 王泮浩, 等. 深层地源热泵系统实验研究及管井结构优化. 工程热物理学报, 2019, 40:2143–2150.
- LIU Jun, CAI Wanlong, WANG Fenghao, et al. Experimental study and tube structure of deep borehole ground source heat pump. Journal of Engineering Thermophysics, 2019, 40:2143–2150.
- [3] Romanov D, Leiss B. Geothermal energy at different depths for district heating and cooling of existing and future building stock. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2022, 167:112727.
- [4] 贺泽群, 于明志, 毛煜东, 等. 基于负荷自适应分配的埋管换热器传热分析. 工程热物理学报, 2020, 41:2044–2051.
- HE Zequn, YU Mingzhi, MAO Yudong, et al. Heat transfer analysis of ground heat exchanger based on self-adaption load distribution method. Journal of Engineering Thermophysics, 2020, 41:2044–2051.
- [5] 李庭樑, 岑继文, 黄文博, 等. 超长重力热管传热性能实验研究. 化工学报, 2020, 71(3):997–1008.
- LI Tingliang, CEN Jiwen, HUANG Wenbo, et al. Experimental study on heat transfer performance of super long gravity heat pipe. CIESC Journal, 2020, 71(3):997–1008.
- [6] Zhang W, Wang J, Zhang F, et al. Heat transfer analysis of U-type deep borehole heat exchangers of geothermal energy. Energy and Buildings, 2021, 237:110794.
- [7] Chen K, Zhang J, Kong X, et al. Study on long-term performance sustainability of medium deep borehole heat exchanger based on simplified one-dimensional well model. Applied Thermal Engineering, 2023, 230:120820.
- [8] Huajun W, Yishuo X, Yukun S, et al. Heat extraction by deep coaxial borehole heat exchanger for clean space heating near Beijing, China: Field test, model comparison and operation pattern evaluation. Renewable Energy, 2022, 199:803–815.
- [9] Ma ZD, Zhang YP, Saw LH, et al. Investigation on local geothermal energy attenuation after long-term operation of ground heat exchanger with considering aquifer effect. Geothermics, 2023, 107:102608.
- [10] Cai W, Wang F, Liu J, et al. Experimental and numerical investigation of heat transfer performance and sustainability of deep borehole heat exchangers coupled with ground source heat pump systems. Applied Thermal Engineering, 2019, 149:975–986.
- [11] Green S, McLennan J, Panja P, et al. Geothermal battery energy storage. Renewable Energy, 2021, 164:777–790.
- [12] Panja P, McLennan J, Green S. Influence of permeability anisotropy and layering on geothermal battery energy storage. Geothermics, 2021, 90:101998.
- [13] Gnielinski V. Turbulent heat transfer in annular spaces-A new comprehensive correlation. Heat Transfer Engineering, 2015, 36:787–789.
- [14] Ji W-T, Zhang D-C, He Y-L, et al. Prediction of fully developed turbulent heat transfer of internal helically

ribbed tubes? An extension of Gnielinski equation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2012, 55:1375–1384.

燃料电池阴极流场设计及性能研究

张志会, 王长宏*, 陈承戴, 郑子俊

(广东工业大学, 广州 510006)

(Tel: 18221677209, Email: wangchgdut@163.com)

摘要: 质子交换膜燃料电池(PEMFC)的阴极流场结构对电池内部气体流动、传热传质和电化学反应起着至关重要的作用。本研究提出了一种新型凸形结构, 同时采用数值模拟的方法探究凸形结构的几何结构参数对燃料电池性能的影响。结果表明, 与传统平行流场(case0)相比, case8 的电流密度提升了 14.4%。另外凸形结构可以有效缩短气体扩散路径长度, 提高肋下区域氧浓度, 同时提高阴极通道内的气流速度, 强化燃料电池的水管理能力。

关键词: 质子交换膜燃料电池; 流场结构设计; 燃料电池性能; 水管理

0 前言

在碳达峰、碳中和背景下, 全球新能源研究正进入高速发展期, 太阳能、生物质能、氢能等领域的技术受到高度关注^[1]。氢能作为一种发展潜力巨大的二次能源之一, 来源丰富, 无污染, 应用范围非常广泛^[2]。其中质子交换膜燃料电池(PEMFC)作为一种氢能开发利用技术受到了各界人士的广泛关注^[3,4]。

PEMFC 因具有不受卡诺循环的限制、能量转换效率高、无污染等优点而被广泛应用于汽车、航天、潜艇以及移动电源等领域。但是要想实现 PEMFC 大规模商业化, 还需要进一步提高 PEMFC 的功率密度、改善其水热管理能力^[5]。作为燃料电池的重要组成部分之一, 双极板会对电池内的反应物分布、水热分布产生极大的影响, 因此对于双极板的优化, 尤其是对双极板上的流场结构进行优化一直是燃料电池性能研究的重点^[6]。在过去的十几年中, 大量学者对双极板上的流场进行了研究。Ramin 等人^[7]发现陷阱结构可以明显提高 PEMFC 的功率密度, 提高氧气向电极的扩散效率, 使反应物更均匀的分布在阴极催化层。但是陷阱结构会降低气流速度, 使得更多液态水滞留在电池内阻碍传质。还有一些研究通过在通道内增设堵块^[8]并优化其高度^[9]、位置^[10]以及形状^[11]来增强传质, 从而达到提升燃料电池性能的目的。例如 Liu 等人^[12]将堵块结构加入到蛇形流场和平行流场中形成新的流场, 通过模拟结果发现新的流场提高了氧分布的均匀性, 增强了局部传质, 使燃料电池的最大功率提高了 26%。但是堵块结构会增大燃料电池系统的附加功率, 而且一些复杂的堵块制作成本高或难以制造。

为了解决上述问题, 本研究首先提出了一种凸形结构, 在缩短氧气扩散路径长度的同时保证较高的气流速度, 然后通过数值模拟的方法探究了凸形结构的几何结构参数对燃料电池性能及其内部组分分布的影响。

1 模型描述

1.1 几何模型

图 1 显示了 PEMFC 的计算域和凸形结构的几何模型。与传统的平行流场不同的是, 凸形结构通过陷阱结构缩短了阴极反应气体扩散路径长度, 使得更多反应气体扩散到阴极催化层参与电化学反应, 同时通过降低截面高度保证较高的气流速度。

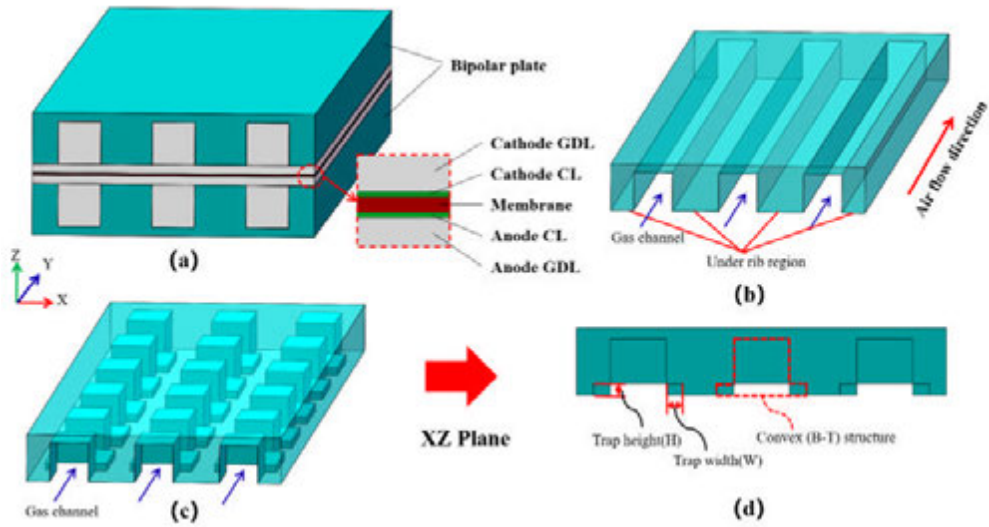


图 1 凸形结构的几何模型

Fig.1. Geometric modeling of convex structure

表 1 中列出了模型详细的几何参数。

表 1 模型几何参数

Table 1. Model geometric parameters

几何参数	数值	单位
集电板长度	50	mm
通道宽/高/长	1/1/50	mm
肋宽/高	1.2/1	mm
气体扩散层厚度	0.2	mm
催化层厚度	0.012	mm
膜厚	0.035	mm

1.2 燃料电池的基本控制方程

燃料电池模型主要的控制方程包括质量、动量、能量和组分守恒方程、电流守恒方程、水饱和度方程以及用来描述电化学反应的 Butler-Volmer 方程。

质量守恒方程：

$$\frac{\partial(\epsilon\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon\rho\vec{u}) = S_m \quad (1)$$

式中， ρ 、 $\vec{u}$ 、 ϵ 分别表示混合气体的平均密度、速度矢量和孔隙率， S_m 表示的是质量源项。

动量守恒方程：

$$\frac{\partial(\epsilon\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon\rho\vec{u}\vec{u}) = -\epsilon\nabla p + \nabla \cdot (\epsilon\mu\nabla\vec{u}) + S_{mom} \quad (2)$$

式中， p 、 μ 分别为流体压力、混合物的平均粘度。 $-\epsilon\nabla p$ 表示压力产生的动量传递， $\nabla \cdot (\epsilon\mu\nabla\vec{u})$ 表示粘度产生的动量传递， S_{mom} 为动量源项。

能量守恒方程：

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho c_p T)}{\partial t} + \rho \varepsilon c_p \vec{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_T \quad (3)$$

式中, c_p 表示定压比热容, T 表示气体的混合温度。 k_{eff} 表示多孔介质区域有效热导率, S_T 为能量源项。

组分守恒方程:

$$\frac{\partial(\varepsilon c_i \vec{u})}{\partial t} + \rho \varepsilon \vec{u} \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot (D_k^{eff} \nabla c_i) + S_i \quad (4)$$

式中, c_i 为气体组分, D_k^{eff} 表示组分有效扩散系数, S_i 表示组分源项。

电流守恒方程:

$$\nabla \cdot (\sigma_s \nabla \phi_s) + S_{sol} = 0 \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_m \nabla \phi_m) + S_{mem} = 0 \quad (6)$$

式中, ϕ_s 和 ϕ_m 分别表示固相电势和膜相电势; σ_s 和 σ_m 分别表示有效电导率和有效质子传导系数, S_{sol} 、 S_{mem} 分别表示电子电流源项和质子电流源项。

多孔介质中水的运输方程

$$\nabla \left[\rho_{H_2O} \frac{K s^3}{\mu_{H_2O}} \frac{dp_c}{ds} \nabla s \right] + S_{H_2O} = 0 \quad (7)$$

$$p_c = \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)^{0.5}} (1.417s - 2.12s^2 + 1.26s^3) \quad (8)$$

多孔介质中水的运输方程由公式(7)来描述, 式中 S_{H_2O} 为水的相变源项, p_c 表示毛细管压力, 由公式(8)计算得出。

Bulter-Volmer 方程:

$$j_a = j_{a,ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{\gamma_a} \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_a} - e^{-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_a} \right) \quad (9)$$

$$j_c = j_{c,ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{\gamma_c} \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_c} - e^{-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_c} \right) \quad (10)$$

式中, 下标 a 表示阳极, 下标 c 表示阴极; η 、 j_{ref} 、 γ 、 α 分别表示过电位、参考交换电流密度、浓度指数、传递系数; C_i 表示 i 组分的摩尔浓度; C_i^{ref} 表示 i 组分的参考摩尔浓度。

2 模型假设及模型验证

2.1 模型假设

由于质子交换膜燃料电池是一个复杂的多相、多尺度、动态的三维系统, 因此在建立模型的过程中, 为了降低系统的复杂性, 在不影响仿真结果的前提下, 本文对模型做出以下假设:

- (1) PEMFC 在稳态、等温的工况下运行, 忽略上述方程中的所有非稳态项;
- (2) 催化层、气体扩散层是多孔介质, 各向同性; 质子交换膜被认为是不可穿透的膜;
- (3) 通道内的气体流动为层流;
- (4) PEMFC 中的反应气体是不可压缩的理想气体;
- (5) 电池为单相模型, 并且忽略重力的影响;
- (6) 忽略燃料电池内部各组件之间的接触电阻和接触热阻。

2.2 网格无关性验证

网格数量会对数值仿真结果产生一定的影响, 所以为了验证网格的独立性, 选用了四组网格数进行计算, 结果如表 2 所示。从表中可以看出, 随着网格数量的增多, 燃料电池的电

流密度之间的差异逐渐缩小，为了在保证计算精度的同时降低计算成本，选用了 257409 个网格数进行计算。

表 2 网格无关性验证

Table 2. Grid independence verification

	网格数量	电流密度 (A/cm^2)	相对误差
Group 1	83261	1.275881	0.42%
Group 2	167774	1.279910	0.16%
Group 3	257409	1.281312	—
Group 4	334239	1.281949	0.05%

2.3 模型验证

为了确保模拟结果的准确性和科学性，将具有传统平行流场的 PEMFC 的极化曲线与 Zhou 等人^[13]的实验结果进行了比较，结果如图 2 所示。可以发现，模拟结果与实验结果比较吻合。

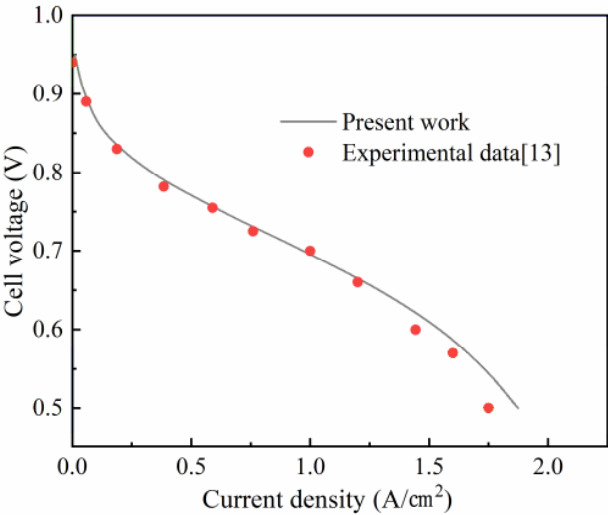


图 2 模型验证

Fig.2. Model validation

2.4 边界条件

在使用仿真软件进行数值仿真的时候，还需要对燃料电池的阴阳极设置一定的边界条件，包括但不限于阴阳极进口流量、温度、出口压力以及各组分浓度占比，从而对控制方程进行求解。具体数值如表 3 所示。

表 3 边界条件及模型参数

Table 3. Boundary conditions and model parameters

参数	符号	值	单位
阳极参考电流密度	$J_{ref,a}$	10000	A/cm^2
阴极参考电流密度	$J_{ref,c}$	10	A/cm^2
开路电压	V_{oc}	1.03	V
电池运行温度	T	343	K

电池运行压力	P	101325	Pa
阳极质量流量	$\dot{m}_a$	3.39E-07	Kg/s
阴极质量流量	$\dot{m}_c$	3.71E-06	Kg/s
阳极相对湿度	RH_a	100	%
阴极相对湿度	RH_c	80	%
阳极参考浓度	$C_{a,ref}$	56.4	mol/m ³
阴极参考浓度	$C_{c,ref}$	3.39	mol/m ³
气体扩散层孔隙率	ε_{gdl}	0.5	—
催化层孔隙率	ε_{cl}	0.5	—
气体扩散层的接触角	θ_{gdl}	130	°
催化层的接触角	θ_{cl}	110	°

3 结果与分析

3.1 正交实验设计

本文研究的关于凸形结构的几何参数包括陷阱长度 (L)、陷阱个数 (n)、陷阱高度 (H) 以及陷阱宽度 (W)，并根据模型几何参数选取了一些典型的参数值来进行优化设计分析。另外选用燃料电池的电流密度来代表燃料电池的性能。根据确定好的实验因素及其水平，选取正交表 $L_9(3^4)$ ，如表 4 所示。

表 4 正交表

Table 4. Orthogonal table

试验方案	L (mm)	n (个)	H (mm)	W (mm)
1	2	1	0.2	0.1
2	2	3	0.6	0.3
3	2	5	0.4	0.5
4	5	1	0.6	0.5
5	5	3	0.4	0.1
6	5	5	0.2	0.3
7	8	1	0.4	0.3
8	8	3	0.2	0.5
9	8	5	0.6	0.1

3.2 燃料电池的极化曲线

极化曲线是衡量 PEMFC 性能的一个重要指标。针对正交表 $L_9(3^4)$ 中的 9 个案例和 case0 (平行流场) 进行建模计算，得到燃料电池的极化曲线，如图 3 所示。从图中可以看出，当电压高于 0.7V 时，这 10 个案例的电流密度没有很大差异，当电压低于 0.7V 时，电流密度开始出现明显的差异，当电压为 0.5V 时差异最大。这是由于当 PEMFC 在低电流密度下运行时，反应速率非常低，流场结构对 PEMFC 性能的影响几乎可以忽略不计。随着电流密度的增加，流场结构对 PEMFC 性能的影响逐渐体现出来，因为流场的结构影响了 PEMFC 内

部传质。当电压为 0.5V 时， case8 具有最高的电流密度，为 1.482A/cm²，与 case0 相比，其电流密度提高了 14.4%。

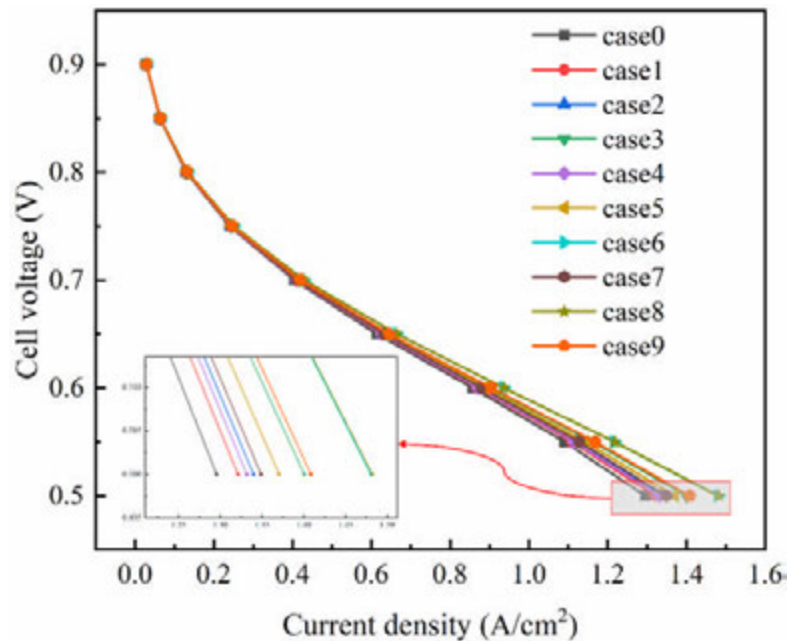


图 3 极化曲线

Fig.3. Polarization curve

3.3 凸形结构对燃料电池性能的影响

根据正交试验的结果，case8 表现出最佳性能。所以下文通过对比 case0 和 case8 在 0.5V 时阴极催化层和气体扩散层界面（CCL/CGDL）的氧浓度分布、液态水饱和度分布以及阴极通道内反应气流速度等因素来分析凸形结构对燃料电池性能的影响。

3.3.1 氧浓度分布

阴极催化层与气体扩散层界面处的氧浓度分布会对电池的性能产生很大影响。图 4 显示了 case0 和 case8 的氧摩尔浓度在 CCL/CGDL 界面处的分布情况。如图所示，case0 和 case8 在 CCL/CGDL 界面的氧摩尔浓度从阴极入口到阴极出口逐渐下降，但是 case8 在此界面上的氧浓度明显高于 case0，尤其是在肋下区域。这是因为凸形结构缩短了氧气扩散路径长度，并为氧气的扩散提供了驱动力，使得更多的氧气可以进入到阴极气体扩散层，从而更容易到达阴极催化层参与电化学反应，最终达到提升电池性能的目的。

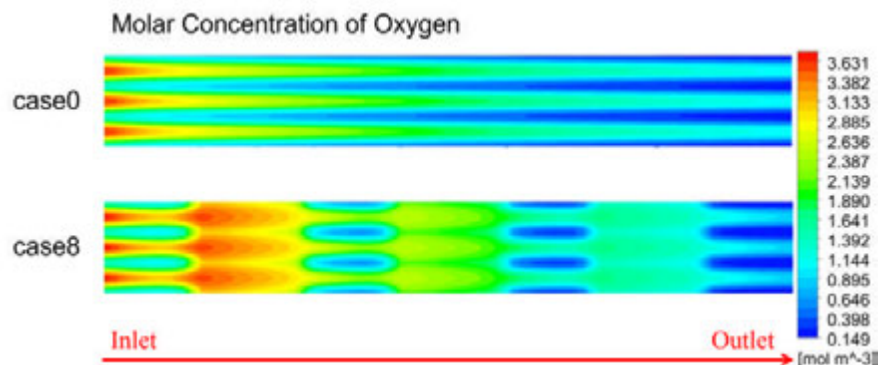


图 4 CCL/CGDL 界面处的氧摩尔浓度分布

Fig.4. Oxygen Molar Concentration Distribution at CCL/CGDL Interface

图 5 显示了肋下区域沿气体流动方向氧气摩尔浓度的变化趋势。从图中可以看出，凸形结构可以明显提高肋下区域的氧摩尔浓度，改善氧气分布的均匀性。以通道中部区域为例，

与 case0 相比, case8 在此区域的氧浓度可以提高 19.6%。这是由于反应物的横向传输主要是靠扩散, 通道内的气体到达催化层的肋下区域需要经过一段较大的扩散长度, 而凸形结构缩短了这一长度, 使得更多氧气扩散至电极处, 从而缩小了局部“饥饿”区域, 有利于燃料电池长期稳定的运行。

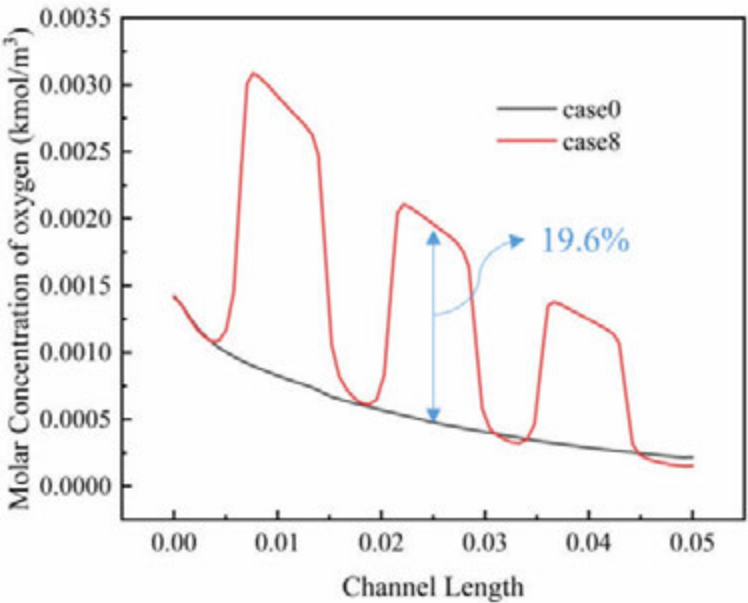


图 5 肋下区域的氧浓度变化趋势

Fig.5. Trends in oxygen concentration changes in the rib area

3.3.2 液态水分布

液态水的存在会阻碍阴极反应气体如氧气的扩散, 去除电池内多余的液态水可以避免水淹, 减少浓度极化。图 6 为不同结构 CCL/CGDL 界面处的液态水饱和度分布。从图中可以看出, 与氧气浓度的分布相反, 水浓度沿着阴极通道逐渐增加。但是凸形结构有利于降低液态水饱和度, 与 case0 相比, case8 的平均水饱和度降低了 27%。由于传统平行流场中肋下区域的氧浓度较低, 导致更多液态水聚集在肋下区域和通道末端, 而凸形结构使更多氧气扩散至肋下区域, 使得肋下区域的液态水可以被反应气流带出电池外, 从而加速液态水的去除, 减少了堆积在通道内和肋下区域的液态水, 降低了水淹的风险。

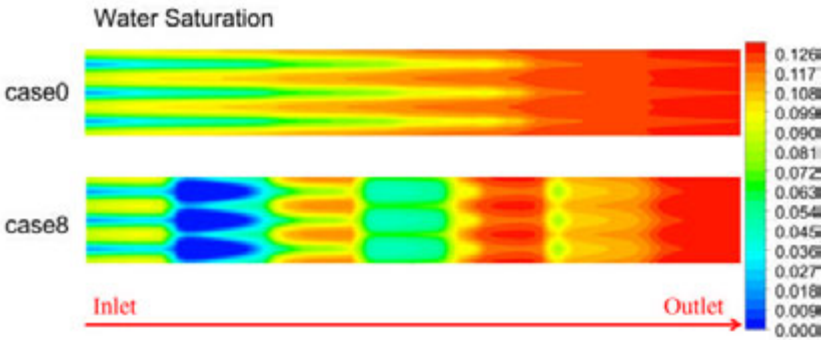


图 6 CCL/CGDL 界面处的水饱和度分布

Fig.6. Water saturation distribution at CCL/CGDL interface

以 CCL/CGDL 界面处的电流密度分布来反映反应速率分布。图 7 显示了 CCL/CGDL 界面处的反应速率。从图中可以看出, 对于 case0, 由于液态水在阴极通道下游积聚, 阻碍了氧气向反应位点扩散, 降低了反应速率, 所以在此处的电流密度值较小。对于 case8, 较好的除水能力提高了氧还原反应速率, 从而增大了电流密度; 由于通道内和肋下区域液态水的

减少，使得更多氧气扩散到催化层参与电化学反应，与 case0 相比，case8 的反应速率明显增强，尤其是在肋下区域。

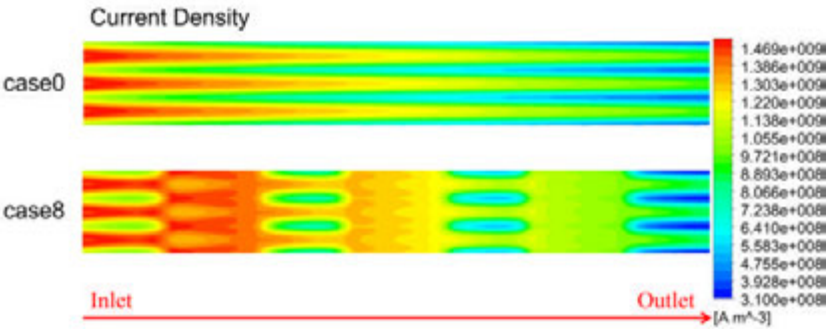


图 7 CCL/CGDL 界面处的反应速率

Fig.7. Reaction rate at the CCL/CGDL interface

3.3.3 流动分析

图 8 和图 9 分别显示了阴极通道在 X-Y 截面和 Y-Z 截面的速度分布。可以看出，凸形结构可以明显增大阴极通道内的气流速度，尤其是在通道截面发生突变的区域，改善了流速分布的均匀性，与 case0 相比，case8 通道内的速度可以达到 7m/s 以上。这是因为沿气体流动方向通道截面突然变小，在流量不变的情况下，气流速度得以提高。流速的增大使得更多的液态水跟随反应气流被带出电池，提高了阴极通道的除水能力，从而降低 CCL/CGDL 界面的水饱和度。液态水的减少降低了氧气的扩散阻力，使更多的氧气扩散到阴极催化层参与电化学反应，最终使 PEMFC 性能得到提高。

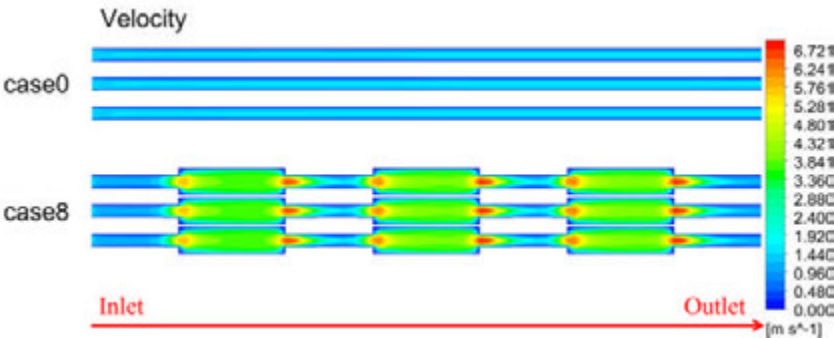


图 8 阴极通道 X-Y 截面速度分布

Fig.8. Velocity distribution of cathode channel X-Y section

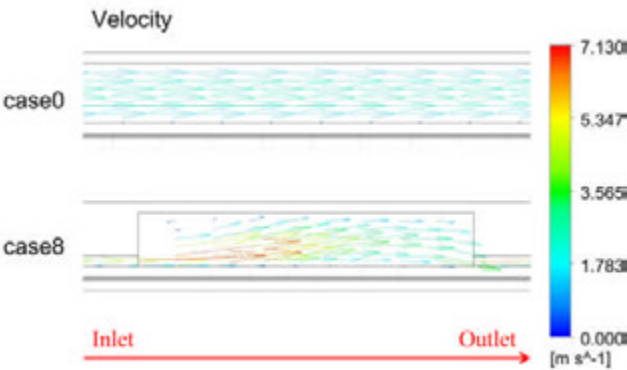


图 9 阴极通道 Y-Z 截面局部速度分布

Fig.9. Local velocity distribution of cathode channel Y-Z section

3.3.4 压降分析

压降是评价流场设计的一个重要标准，压降过高会增大泵送功率。一个设计良好的流场

可以合理地分配反应物和产物，避免过大的压降。图 10 显示了不同结构的阴极气体通道的压力分布。可以看出，case0 的压降为 38.7Pa，case8 的压降为 453.1Pa。与 case0 相比，case8 的压降略有增大，这是因为凸形结构中拐角较多，使得气体在阴极通道内流动阻力增大。但是凸形结构可以将电池的电流密度提升 14.4%，与之相比，略微增高的压降在可接受范围内，总的来说，凸形结构有利于电池性能。

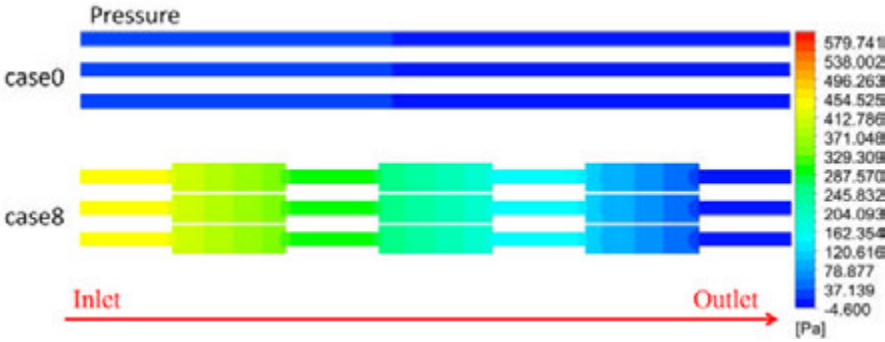


图 10 阴极通道压力分布

Fig.10. Cathode channel pressure distribution

4 结论

本文提出一种新型凸形结构，首先通过正交试验法对此结构的几何参数：陷阱长度（L）、陷阱个数（n）、陷阱高度（H）和陷阱宽度（W）进行设计优化，得到各因素和各水平的最优组合。接着通过对氧浓度分布、液态水分布和气流速度分布等因素的对比分析来探究凸形结构对燃料电池性能的影响。结果如下：

- （1）各因素和各水平的最优组合为 L=8、n=3、H=0.2、W=0.5，对应于 case8，与 case0 相比，其电流密度提高了 14.4%。
- （2）凸形结构可以有效缩短氧气扩散路径长度，从而提高阴极催化层和气体扩散层界面处的氧浓度，与 case0 相比，case8 的氧浓度提高了 19.6%。
- （3）凸形结构可以明显降低阴极催化层和气体扩散层界面处的液态水饱和度，与 case0 相比，case8 的平均液态水饱和度降低了 27%。水含量的减少使得更多氧气扩散到电极参与电化学反应，提高了电化学反应速率。
- （4）凸形结构提高了阴极通道内的气流速度，在合理的压降范围内使得更多的液态水跟随反应气流被带出电池，提高了凸形结构的除水能力。

参考文献

- [1] 袁榴艳, 吴谋远, 段沛一, 等. 新形势下我国新能源行业发展特点与态势[J/OL]. 石油科技论坛:1-8.
Yuan Liuyan, Wu Mouyuan, Duan Peiyi, et al. Characteristics and Trend of China's New Energy Industrial Development under New Situation[J/OL]. Petroleum Science and Technology Forum: 1-8.
- [2] 张锐. 氢能开发利用与产业布局的全球竞速[J]. 上海企业, 2023(05):59-63.
Zhang Rui. Global Competition for Hydrogen Energy Development and Utilization and Industrial Layout[J]. Shanghai Enterprise, 2023(05):59-63.
- [3] 侯明, 邵志刚, 俞红梅, 等. 2019年氢燃料电池研发热点回眸[J]. 科技导报, 2020,38(01):137-150.
Hou Ming, Shao Zhigang, Yu Hongmei, et al. Review of hot topics on hydrogen fuel cell in 2019 [J]. Science & Technology Review, 2020,38(01):137-150.
- [4] 邵志刚, 衣宝廉. 氢能与燃料电池发展现状及展望[J]. 中国科学院院刊, 2019,34(04):469-477.
Shao Zhigang, Yi Baolian. Developing Trend and Present Status of Hydrogen Energy and Fuel Cell Development[J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2019,34(04):469-477.
- [5] 赵萌, 刘世通, 苏东超, 等. 燃料电池水热管理的技术研究[J]. 内燃机与配件, 2021(15):63-64.
Zhao Meng, Liu Shitong, Su Dongchao, et al. Study on fuel cell water and heat management technology[J]. Internal Combustion Engine & Parts, 2021(15):63-64.
- [6] 赵强, 郭航, 叶芳, 等. 质子交换膜燃料电池流场板研究进展[J]. 化工学报, 2020,71(05):1943-1963.
Zhao Qiang, Guo Hang, Ye Fang, et al. State of the art of flow field plates of proton exchange membrane fuel cells[J]. CIESC Journal, 2020,71(05):1943-1963.
- [7] Ramin F, Sadeghifar H, Torkavannejad A. Flow field plates with trap-shape channels to enhance power density of polymer electrolyte membrane fuel cells[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019,129:1151-1160.
- [8] Wang Y, Guan C, Zhang P, et al. Optimal design of a cathode flow field with a new arrangement of baffle plates for a high clean power generation of a polymer electrolyte membrane fuel cell[J]. Journal of Cleaner Production, 2022,375.
- [9] Chen H, Guo H, Ye F, et al. Modification of the two-fluid model and experimental study of proton exchange membrane fuel cells with baffled flow channels[J]. Energy Conversion and Management, 2019,195:972-988.
- [10] Dong P, Xie G, Ni M. The mass transfer characteristics and energy improvement with various partially blocked flow channels in a PEM fuel cell[J]. Energy, 2020,206.
- [11] Huang Y, Song J, Deng X, et al. Numerical investigation of baffle shape effects on performance and mass transfer of proton exchange membrane fuel cell[J]. Energy, 2023,266.
- [12] Liu M, Fan W, Lu G. Study on mass transfer enhancement of locally improved structures and the application in serpentine and parallel flow fields of PEM fuel cells[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2023,48(50):19248-19261.

小通道蒸发器两相环路热虹吸管的 的实验研究

刘洋^{1,2}, 蒋珍华^{1,2}, 闫哲^{1,†}, 李南茜¹, 杨宝玉^{1,2}, 吴亦农^{1,2,†}

(1. 中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083; 2. 中国科学院大学, 北京, 100049)

(Tel: 021-25051183, Email: yanzhe@mail.sitp.ac.cn; wyn@mail.sitp.ac.cn)

摘要: 本文对小通道蒸发器两相环路热虹吸管进行了实验研究, 揭示了加热功率、风扇功率及倾角对两相环路热虹吸管传热性能的影响。结果表明, 随着加热功率的增加, 两相环路热虹吸管的热阻有减小的趋势。随着风扇功率的增加, 两相环路热虹吸管的热阻对风扇功率逐渐变得不敏感。在倾斜条件下, 两相环路热虹吸管的传热性能减弱, 较高加热功率下的失效倾角更小。该热管所具有的节能与优秀传热特性有望为电子设备热管理提供有效的解决方案。

关键词: 两相环路热虹吸管; 小通道蒸发器; 风冷; 热阻; 传热性能

0 前言

电子设备在工业应用和日常生活中无处不在, 高温或不均匀的温度分布可能会缩短电子设备的寿命, 甚至彻底损坏电子设备^[1, 2]。此外, 碳中和策略对节能提出了更高的要求, 因此, 以节能的方式实现电子设备的高效热管理至关重要。

近年来, 两相环路热虹吸管的研究日益受到关注。利用重力作为驱动源, 热虹吸管系统不需要额外的泵功率消耗, 具有明显的节能特性^[3, 4]。众多学者已经做了许多重要的工作来揭示工质类型^[5-7]、热流密度^[8, 9]、充液率^[10, 11]、蒸发器种类和数量^[12, 13]以及倾角^[14]对环路热虹吸管运行状态的影响。通过实验可以直接揭示环路热虹吸管的运行状态和传热性能: Wei 等人^[15]设计了实验系统, 并评估了热虹吸管在 95 %充液率下的传热性能。发现随着热流密度的增加, 出现了加热段周围的自然对流、周期性波动的准稳态流动和连续产生气泡的稳定流动这三种不同的运行模式。该研究还强调了两相环路热虹吸管比单相环路热虹吸管更具有传热优势。Lin 等人^[16]分别用水和乙醇作为工质进行了研究, 发现使用乙醇环路热虹吸管系统性能更好, 其最佳充液率在 35-40 %区间。Liu 等人^[17]关注了两相环路热虹吸管内的间歇沸腾现象, 呈现了间歇沸腾的清晰图像以进行分析阐明。

同时, 一些学者还进行了数值研究以进一步揭示环路热虹吸管的传热特性和物理机制。Wang 等人^[18]利用 VOF 方法对用于太阳能接收器的环路热虹吸管进行了数值模拟, 观察到不同的流动模式, 发现 U 形转弯截面的设置可以改善热管的传热性能。Kuang 等人^[19]研究了用于乏燃料池冷却的大型环路热虹吸管。考虑了三种不同的工质 (水、氨和 R134a)。研

究表明，降液管总是部分充满液体。一般来说，氨和 R134a 热管受热传输距离的影响较小。Tong 等人^[20]对 CO₂ 工质环路热虹吸管进行了模拟，揭示了三种典型的热管运行状态，包括预启动、振荡和稳定运行。研究表明，中等充液率时环路热虹吸管的热阻最低，传热极限可以达到 1150 W。

微/小通道内的流动沸腾传热具有相对较大的比表面积并且可以充分利用汽化潜热，其具有优秀的传热性能^[21, 22]。Chen 等人^[23]数值研究了混合工质在矩形微通道中的流动沸腾，评估了热流密度、质量流量和含气率对流动和传热的影响，揭示了相应的机理。Yin 等人^[24]重点研究了开放式微通道内的过冷流动沸腾传热。实验表明，与传统的封闭微通道相比，开放式微通道内的流体流动和传热更加稳定。此外，研究中发现了两种不同的受限气泡。Drummond 等人^[25]开发了新型两相歧管微通道热沉并进行了详细的测试，使用 HFE-7100 作为工质，该散热器最多可以有效解决 910 W/cm² 的热流密度。上述研究表明，基于微/小通道流动沸腾的传热具有巨大的潜力。

综上所述，可以看出目前对于两相环路热虹吸管的研究主要集中于简单结构的热虹吸管，而对微/小通道内流动沸腾传热的研究则集中于泵驱系统。本工作则专注于小通道蒸发器两相环路热虹吸管，其结合热虹吸管的节能特性和微/小通道内流动沸腾传热能力强的优点。研究中考虑了加热功率、风扇功率和倾角三个关键影响因素。本工作有助于电子设备的高效热管理。

1 小型两相环路热虹吸管的结构与实验装置

1.1 小型两相环路热虹吸管的构造

图 1 展示了小型两相环路热虹吸管的构造和小通道蒸发器的内部结构示意图。小型两相环路热虹吸管主要由小通道蒸发器、翅片管冷凝器、上升管和下降管组成。上升管和下降管的内径均为 4 mm，壁厚 1 mm。蒸发器平面部分（接触面）的尺寸为 75 mm×75 mm，适用于各种主流 CPU。蒸发器中配置了四个安装孔。蒸发器中小通道的直径为 4 mm。蒸发器的入口和出口在同一侧，充装口位于蒸发器的右下角，实验中使用氨作为工质，充液率为 80 %。蒸发器上方的冷凝器为典型的翅片管冷凝器。环路热虹吸管的传热距离为 430 mm。冷凝器由 ADDA 直流风扇进行冷却，其中风扇功率（ Q_f ）被认为是关键影响因素之一，风扇尺寸为 120 mm×120 mm，具体参数如表 1 所示。当小型两相环路热虹吸管工作时，蒸发器内发生相变，单相流体变成气液混合物。然后混合物通过上升管进入冷凝器。在冷凝器内气液混合物变成单相液体，并通过下降管返回蒸发器。

表 1 直流风扇参数

名称	额定电压 (V)	额定电流 (A)	额定功率 (W)	额定转速 (rad/min)	风量 (CFM)
直流风扇	24	0.46	11.04	4100	122.921

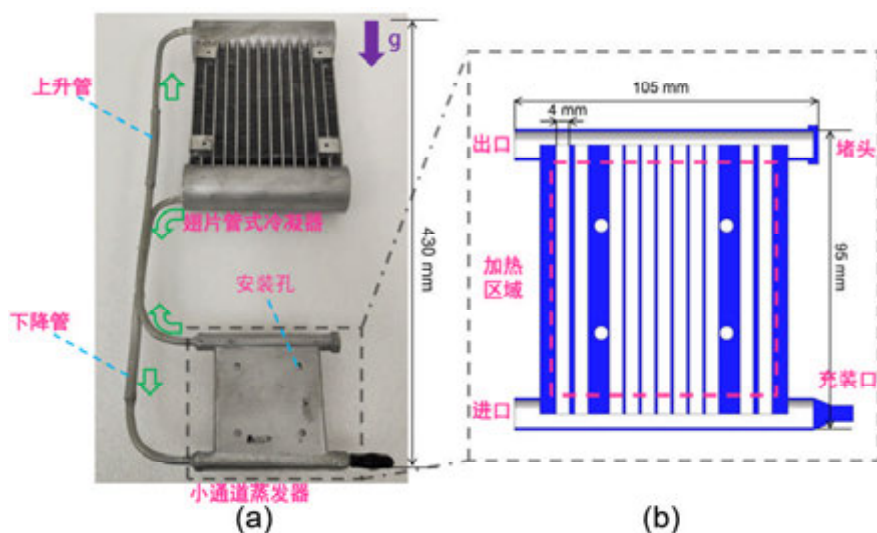


图 1 小型两相环路热虹吸管结构示意图：(a) 整体布局；(b) 蒸发器内部细节

1.2 实验装置

实验装置如图 2 所示。为了提高实验结果的准确性，进行了保温工作。采用铝合金支架结构悬挂两相环路热虹吸管，并用电动升降机固定，进而可以灵活调节环路热虹吸管的倾斜角度。环路热虹吸管由陶瓷加热元件（功率： Q_h ）进行加热。在加热表面的另一侧安装了 9 个热电偶，以评估两相环路热虹吸管的传热性能，此外，在一些关键部位，如蒸发器/冷凝器的入口/出口，也配置了热电偶，热电偶布置如图 3 所示。热电偶的精度为 0.1 K。实验中使用了两个高精度直流电源，一个用于陶瓷加热元件，另一个用于电风扇。热电偶获得的数据分别由数采仪和计算机进行转换和存储。



图 2 实验系统图

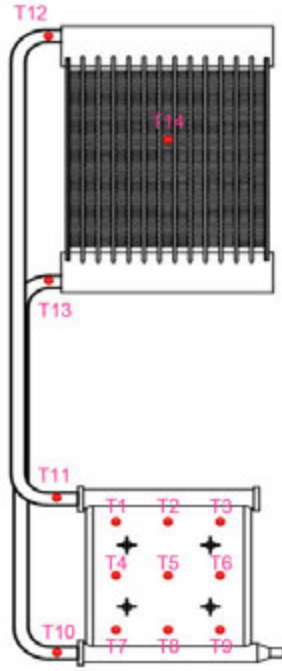


图 3 热电偶示意图

所有的实验均是在 298.15 K (T_{amb}) 的恒温室内进行的。热阻 R 定义为:

$$R = \frac{\overline{T_{\text{eva}}} - T_{\text{amb}}}{Q_h} \quad (1)$$

式中 $\overline{T_{\text{eva}}}$ 表示蒸发器的平均温度。

2 结果及分析

2.1 加热功率对热虹吸管传热性能的影响

首先, 在风扇功率保持 5 W 的情况下, 研究了两相环路热虹吸管在不同加热功率 ($Q_h = 5 \text{ W}$ 、100 W、300 W 和 600 W) 下的传热性能 (见图 4)。可以看出, 加热功率对两相环路热虹吸管的启动和运行特性有很大影响。在 5 W 的加热功率下, 两相环路热虹吸管的启动时间约为 900 s。此外, 可以看到明显的温度过冲现象, 最高温度出现在过冲阶段。上述启动不良的情况可以解释为: 两相环路热虹吸管主要由气泡的浮升力驱动, 在较低加热强度的条件下, 相变不明显, 导致驱动力较弱。因此, 需要相对较长的时间, 以便产生足够的气泡。随着加热功率的增加, 过冲现象仍然会发生, 但逐渐变得非常不明显。此外, 壁温随着加热功率的增加而单调增加。

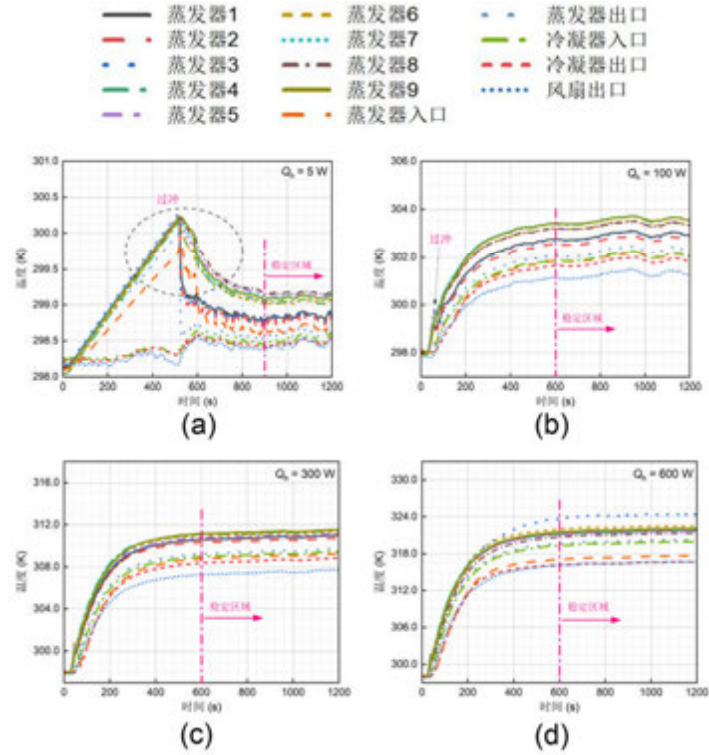


图 4 不同加热功率下两相环路热虹吸管的温度变化：(a) 5 W；(b) 100 W；(c) 300 W (d) 600 W

一个有趣的现象是蒸发器温度分布也随着加热功率的变化而变化。在相对较低和中等加热功率 ($Q_h = 5 \text{ W}$ 、 100 W 和 300 W) 下，蒸发器上部（蒸发器 1、蒸发器 2 和蒸发器 3 位置）的温度低于蒸发器下部（蒸发器 7、蒸发器 8 和蒸发器 9 位置），这归因于沸腾现象的出现。在较低加热功率下，刚刚进入蒸发器内的流体处于单相状态，而相变需要一定的过热度，随着流体进一步流向下游区域（蒸发器的上部），相变现象的发生导致温度降低。在大加热功率 ($Q_h = 600 \text{ W}$) 下，蒸发器 3 位置的温度最高。如图 1 (b) 所示，由于流动路径最长，位于蒸发器 3 位置通道的质量流量最小，此外蒸发器 3 位于下游地区。因此，在蒸发器 3 位置处更容易发生干涸现象，从而导致温度相对较高。

图 5 展示了两相环路热虹吸管的热阻随加热功率变化而变化。加热功率为 5 W 时热阻最大，其值为 0.177 k/W 。当加热功率从 5 W 增加到 400 W 时，热阻单调下降到 0.037 k/W ，期间的下降速率逐步减小。 400 W 所对应的热阻值是目前实验研究中观察到的最小热阻。当加热功率从 400 W 增加到 600 W 时，热阻增加，这种传热恶化是由于干涸现象引起的。可以预料的是，当加热功率大于 600 W 时，热阻将继续增加。

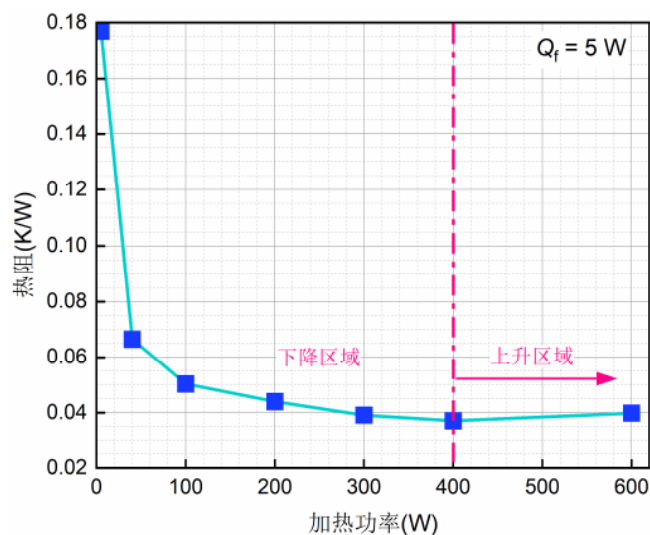


图 5 热阻随加热功率的变化规律

2.2 风扇功率对热虹吸管传热性能的影响

图 6 展示了不同风扇功率下两相环路热虹吸管的温度变化。在实验过程中，加热功率保持为 150 W。两相环路热虹吸管以 0.5 W 的低风扇功率启动，稳定运行状态下的平均壁面过热度约为 15.339 K。当风扇功率从 0.5 W 增加到 6 W 时，壁面过热度显著降低。发现当风扇功率超过 6 W 时，壁面过热度维持恒定在 6.627 K 左右。

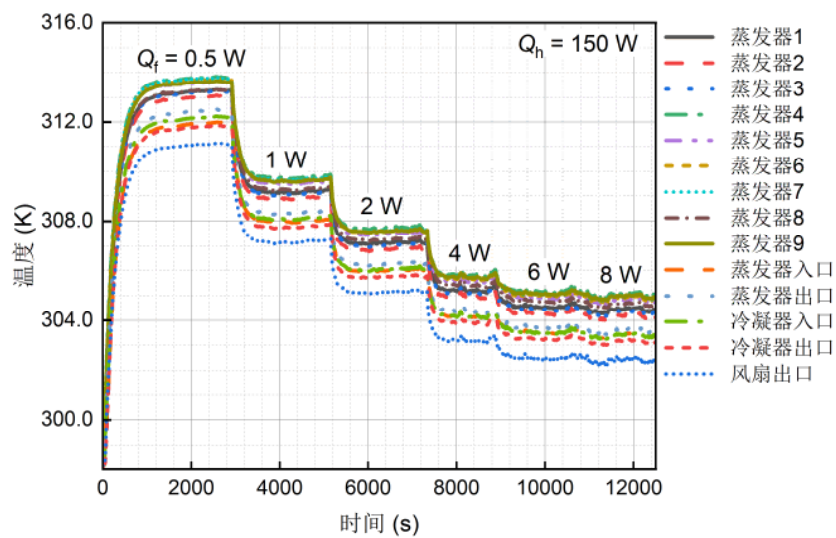


图 6 不同风扇功率下两相环路热虹吸管的温度变化

图 7 展示了风扇功率对传热性能的影响规律。当风扇功率为 0.5 W 时，热阻为 0.104 K/W，风扇功率增大至 6 W 时，热阻急剧下降至 0.046 K/W。当风扇功率从 6 W 进一步增加到 8 W 时，其热阻的变化幅度小于 2 %。也就是说，两相环路热虹吸管的热阻对风扇功率变得不敏感。

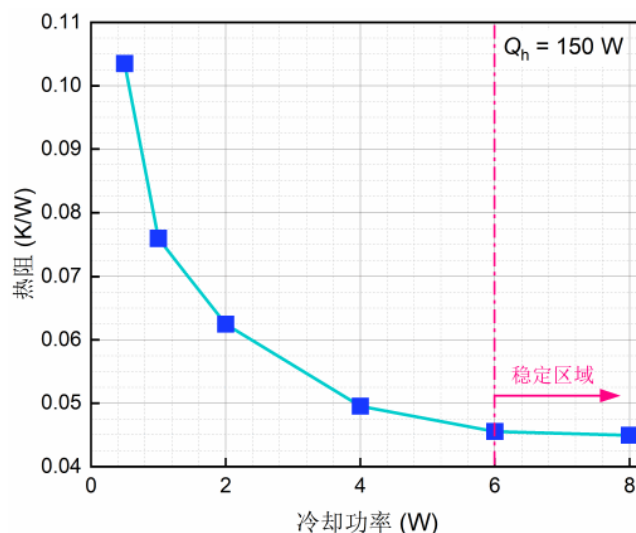


图 7 两相环路热虹吸管热阻随风扇功率的变化规律

2.3 倾斜角对热虹吸管传热性能的影响

倾斜角定义为热虹吸管与桌面法向的夹角。图 8 展示了两相环路热虹吸管在不同倾角下的温度变化，其中加热功率和风扇功率分别为 200 W 和 5 W。可以看出两相环路热虹吸管的温度随着倾角的增大而增大。当倾角增加到 80° 时，两相环路热虹吸管的温度迅速上升，蒸发器的某些区域在 600 s 时已达到 340 K。为了安全起见，实验停止，这种情况被视为两相环路热虹吸管的失效。

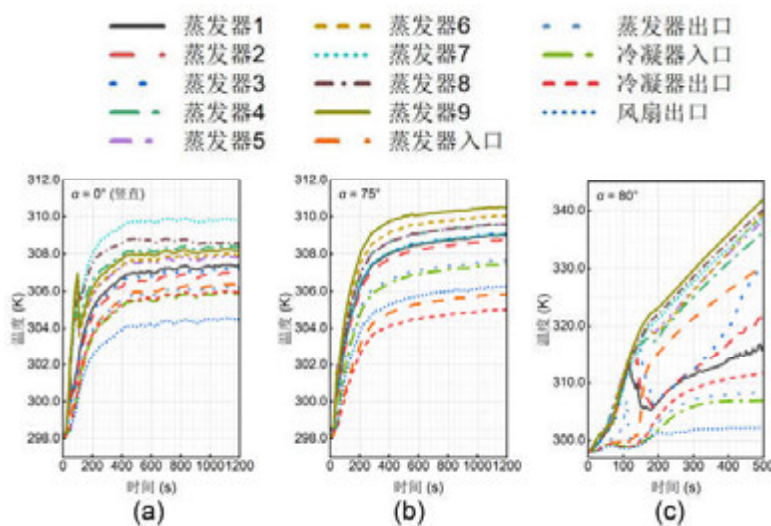


图 8 不同倾角下两相环路热虹吸管的温度变化：(a) 0° ；(b) 75° ；(c) 80°

图 9 展示了倾斜条件下两相环路热虹吸管的热阻变化规律。风扇功率固定在 5 W，考虑了 3 种典型的加热功率 ($Q_h = 50$ W、200 W 和 600 W) 和 5 种倾角 ($\alpha = 30^\circ$ 、 60° 、 75° 、 80° 和 85°)。发现热阻随着倾角的增加而增加。这是因为两相环路热虹吸管的驱动力是重力，倾角越大，高度差越小，从而削弱了驱动力，在 80° 倾角的情况下，高度差

仅为 74 mm，无法耗散 200W 的热量。有趣的是，还发现两相环路热虹吸管在倾斜条件下的运行特性与加热功率有关。在 75° 倾角，加热功率为 600 W 时两相环路热虹吸管无法启动。在倾斜角度为 80° 时，只有加热功率为 50 W 的两相环路热虹吸管才能启动。倾角增加至 85° 时，两相环路热虹吸管在所有加热功率下均无法启动。

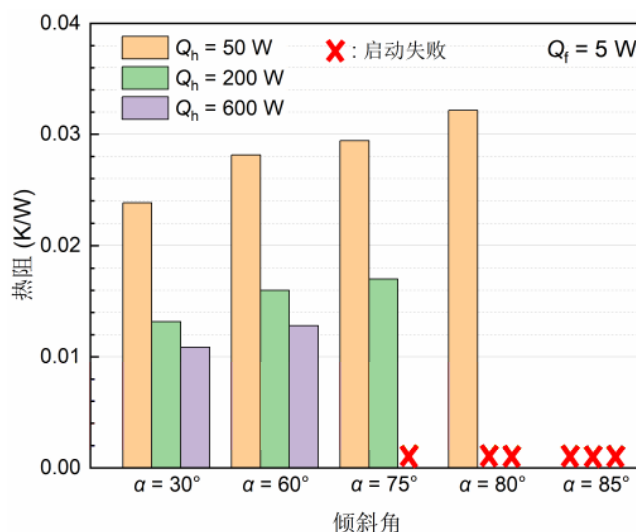


图 9 倾斜条件下两相环路热虹吸管的热阻变化规律

3 结论

为了以较低的能源成本高效实现电子热备冷却，对小通道蒸发器两相环路热虹吸管进行了详细的实验研究，以揭示两相环路热虹吸管的传热性能。主要研究结论如下：

- (1) 小通道蒸发器两相环路热虹吸管具有较强的传热能力，在 5 W 的风扇功率下传输 600 W 热量时的系统温差仅 3.3 K。
- (2) 结果表明，两相环路热虹吸管的热阻随加热功率的增加而减小，但存在最佳运行功率，超过此加热功率后，传热会恶化，热阻也会增加。在较大的加热功率下，由于局部干涸现象的发生，蒸发器温度分布也可能会发生变化。
- (3) 随着风扇功率的增加，两相环路热虹吸管的热阻逐渐减小，对风扇功率不敏感，表明存在最佳风扇功率值。
- (4) 在倾斜条件下，两相环路热虹吸管的传热性能变差。值得指出的是，失效行为更倾向于在较高的加热功率下发生。

参考文献

- [1] 陈建业, 吴文伟. 大功率变流器冷却技术及其进展 [J]. 大功率变流技术, 2010, (01): 15-24+30.
- [2] Yan Z, Huang H, Pan Z. Bubble breakup and boiling heat transfer in Y-shaped bifurcating microchannels [J]. Aiche Journal, 2023, 69(2): e17836.
- [3] Aghel B, Rahmi M, Almasi S. Experimental study on heat transfer characteristics of a modified two-phase closed thermosyphon [J]. Thermal Science, 2017, 21(6): 2481-2489.

- [4] Oliveira de Souza D, Ochoski Machado P L, Chiarello C, et al. Experimental study of hydrodynamic parameters regarding on geyser boiling phenomenon in glass thermosyphon using wire-mesh sensor [J]. *Thermal Science*, 2022, 26(2): 1391-1404.
- [5] He G G, Liu F, Cai D H, et al. Experimental investigation on flow boiling heat transfer performance of a new near azeotropic refrigerant mixture R290/R32 in horizontal tubes [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, 102: 561-573.
- [6] Ding T, Cao H W, He Z G, et al. Experimental study on a loop thermosyphon cooling system in data centers using CO₂ as a working Fluid, especially thermal environment and energy-saving effect [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2020, 175:115359.
- [7] 郭浩, 彭家略, 尤天伢, 等. 工质对重力热管壁温与传热特性的影响 [J]. *工程热物理学报*, 2021, 42(11): 2893-2898.
- [8] Cao H, Ding T, He Z, et al. Research on the refrigerant column height in the downcomer of a two-phase loop thermosyphon [J]. *International Journal of Refrigeration-Revue Internationale Du Froid*, 2018, 94: 40-48.
- [9] He Y, Hu C, Hu X, et al. Assessment of the two-phase thermosyphon loop with high filling ratio under anti-gravity [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023, 206: 123968.
- [10] 禹法文, 吉天成, 刘向东, 等. 充液率对小型重力热管传热特性影响实验研究 [J]. *工程热物理学报*, 2018, 39(12): 2749-2754.
- [11] Zhang T, Qu J, Hua Y. Heat transfer characteristics and operational visualization of two-phase loop thermosyphon [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2023, 228:101345.
- [12] 段炼, 徐永田, 韩吉田, 等. 两相闭式热虹吸管内不同表面蒸发器的沸腾换热实验研究 [J]. *工程热物理学报*, 2018, 39(05): 1032-1038.
- [13] Zhang H, Shao S, Xu H, et al. Experimental investigation on a loop thermosyphon with three evaporators: Unique startup and oscillation phenomena [J]. *International Journal of Refrigeration*, 2019, 99: 363-370.
- [14] Aung N Z, Li S J. Numerical investigation on effect of riser diameter and inclination on system parameters in a two-phase closed loop thermosyphon solar water heater [J]. *Energy Conversion and Management*, 2013, 75: 25-35.
- [15] Wei L, Yuan D, Guo C, et al. Influence of vapor bubbles on the thermal performance of a two-phase closed thermosyphon loop with a liquid heat transfer agent [J]. *Heat Transfer Research*, 2016, 47(12): 1109-1120.
- [16] Lin M C, Chun L J, Lee W S, et al. Thermal performance of a two-phase thermosyphon energy storage system [J]. *Solar Energy*, 2003, 75(4): 295-306.
- [17] Liu Y, Li Z G, Li Y H, et al. Heat transfer and instability characteristics of a loop thermosyphon with wide range of filling ratios [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 151: 262-271.
- [18] Wang Y, Yang L, Wang X, et al. CFD simulation of an intermediate temperature, two-phase loop thermosiphon for use as a linear solar receiver [J]. *Applied Energy*, 2017, 207: 36-44.
- [19] Kuang Y, Yi C, Wang W. Modeling and simulation of large-scale separated heat pipe with low heat flux for spent fuel pool cooling [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 147: 747-755.
- [20] Tong Z, Wu H, Li X, et al. CFD simulation on the operation characteristics of CO₂ two-phase thermosyphon loop [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2023, 224:120103.
- [21] Yan Z, Pan Z. Dynamics and phase change heat transfer of an isolated vapor bubble traveling through a heated T-shaped branching microchannel [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 160: 120186.

- [22]Yue C, Zhang Q, Zhai Z, et al. Numerical study on flow and thermal characteristics of a micro-channel separated heat pipe under various surface wettability [J]. Case Studies in Thermal Engineering, 2021, 28:101345.
- [23]Chen J, Cai W, Li S, et al. Numerical investigation on saturated boiling flow and heat transfer of mixture refrigerant in a vertical rectangular mini-channel [J]. Thermal Science, 2018, 22: S617-S627.
- [24]Yin L, Jiang P, Xu R, et al. Visualization of flow patterns and bubble behavior during flow boiling in open microchannels [J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2017, 85: 131-138.
- [25]Drummond K P, Back D, Sinanis M D, et al. A hierarchical manifold microchannel heat sink array for high-heat-flux two-phase cooling of electronics [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 117: 319-330.

基于微热管阵列的新型空冷质子交换膜 燃料电池堆运行特性分析

杨明光 1, 全贞花 1*, 王林成 1, 刘予初 1, 张茜雯 2, 赵耀华 1,2

(1. 北京工业大学绿色建筑环境与节能技术中心北京市重点实验室, 北京 100124

2. 淄博博一新能源科技发展有限公司, 淄博, 255200)

(Tel: +86 18611003929, Email: quanzh@126.com)

摘要: 基于微热管阵列的新型空冷质子交换膜燃料电池堆 (MHPA-PEMFC) 具有安全高效的热管理系统, 可以提升电堆的热、电性能。本文探究了新型空冷 MHPA-PEMFC 运行过程中, 供气风扇和辅助冷却风扇的不同流量 (对应不同占空比) 对电堆输出性能、负载水平和热性能的影响, 以及低环境温度下风扇运行情况对 MHPA-PEMFC 性能影响。结果表明, 供气风扇的占空比越高, MHPA-PEMFC 电堆的输出性能和热性能表现越好, 当供气风扇占空比从 50% 提升到 100% 时, MHPA-PEMFC 电堆的电流负载水平提升 27.3%。

关键词: MHPA-PEMFC 电堆; 供气风扇; 辅助冷却风扇; 温度; 运行特性

0 前言

随着碳中和、能源转型逐渐成为全球共识, 氢能源作为战略性高效的清洁能源正在成为世界各主要经济体竞相发展的新兴产业, 全球多个国家和地区已经颁布了氢能发展路线图^[1]。质子交换膜燃料电池 (proton exchange membrane fuel cell, 简称 PEMFC) 作为将氢能转化为电能的装置, 是氢能高效利用的重要途径, 其具备高清洁无碳、能量转换效率高、快速启停、运行可靠等优点^[2], 而以空气作为冷却介质的空冷型燃料电池由于其系统简便、体积轻巧, 而备受小型燃料电池的青睐, 在便携式电源、无人机等领域有着长足应用^[3-4]。PEMFC 在运行过程中会产生大量的热量使燃料电池温度升高。如果温度过高、温度分布的不均匀, 会使质子交换膜脱水或穿孔, 严重降低燃料电池的性能^[5]。因此, 为保证 PEMFC 安全高效地运行, 应进行合理的热管理, 控制电池的温度在合理的范围内, 避免局部高温^[6]。

为解决空冷燃料电池在运行过程热管理问题, 许多专家学者展开了大量的研究。Baik^[7]等人通过阴极流道与多孔翅片一体化的设计, 实验结合模拟研究其对 PEMFC 电堆热性能等参数的影响, 研究显示, 新型散热翅片能有效增强电堆散热效果, 增强内部物质均匀分布, 提高电堆性能。Yin^[8]等人以实验为基础, 建立了一个三维多物理空冷型燃料电池模型, 增加阴极板额外的边缘流道, 结果表明, 边缘流道的设计可以降低膜脱水率, 增强温度分布的均匀性, 从而提高燃料电池堆的性能。Song^[9]等人研究了小型空冷 PEMFC 电堆的自调节特, 结果表明, 小型空冷 PEMFC 电池组在固定的空气流量下, 可

以在较大的负载电流范围内稳定高效地运行。以上研究虽然在一定程度上控制 PEMFC 电堆的温度,但总体上电堆都处于较低的输出功率水平下运行,对于千瓦级的开放式空冷电堆而言,这些方式难以使电堆的温度在大功率运行下保持正常范围。而本研究团队提出的基于微热管阵列的新型空冷质子交换膜燃料电池(MHPA-PEMFC,额定功率 1kW)可以不受功率限制地应用于燃料电池堆中,在实现燃料电池堆散热同时,增加电堆内部的温度均匀性,提高可靠性^[10]。区别于传统热管,微热管阵列(MHPA)为平板型、抗压性高、高导热性高均温性等优点^[10],现有热管用于燃料电池电堆散热的相关成果仅限于理论和模拟,尚未有实际实验研究;而均热板应用在燃料电池的报道中^[11],所研究的电堆功率小(200W 左右),均热板铜制造且表面镀金^[11],成本极高^[11],而微热管阵列铝制,成本极低。Wang^[11]等人实验研究了 2 mm 的 MHPA 在空冷条件下的换热性能,并对空冷 PEMFC 的实际应用进行了对比研究。结果表明,当加热功率改变时,MHPA 可在 600~900 s 内达到稳定状态。MHPA 的最小热阻为 0.53 K/W,蒸发区均匀温度分布在 2 °C 内。Wang^[12]等人研究了新型 MHPA-PEMFC 的热管理性能,结果表明,MHPA 有效地改善了 PEMFC 内部的温度分布。MHPA-PEMFC 的平均温度、最大温度差和最大均匀温度指数分别降低 11.58 °C、5.10 °C 和 0.97 °C。当反应气流流量为 160.8 m³/h 时,最大输出功率提高 197.3 W。Yang^[13]等人建立了一个 MHPA-PEMFC 电堆中一个单电池的 CFD 数值模型,分析了 MHPA 对电池内电化学参数的影响,结果显示,MHPA 降低电池温度可以使质子交换膜保持更好的水合度及更高的内部电流密度。由于微热管阵列(MHPA)作为 MHPA-PEMFC 热管理系统的核心元件集成在电堆中,其传热性能及其对电堆热管理的作用,受运行条件影响,特别是输送电堆氧气的供气风扇与辅助冷却风扇的运行情况。因此,风扇的运行参数对于 MHPA-PEMFC 性能的影响极为重要。本研究将探究新型空冷 MHPA-PEMFC 在运行过程中,供气风扇和辅助冷却风扇在不同占空比(对应不同风量)下对电堆输出性能、负载水平和热性能的影响。实验结果可为新型空冷 MHPA-PEMFC 运行控制策略的研究提供重要依据。

1 MHPA-PEMFC 电堆及实验系统

1.1 MHPA-PEMFC 电堆

图 1(a)展示了 MHPA-PEMFC 电堆结构示意图,其基本结构是 50 个 MHPA-PEMFC 单体,一个 MHPA-PEMFC 单体包括阴、阳极板和膜电极,MHPA 伸出极板的部分单侧贴附翅片以增强换热。图 1(b)和(c)展示了阴、阳极板的结构示意图。每个 MHPA-PEMFC 单体的阳极背板后均开槽以嵌入 MHPA 和热电偶,对于一个 MHPA-PEMFC 单体,共放置三个热电偶,其中一个放置在阳极背板槽内靠近空气流动方向入口侧,一个靠近出口侧,剩下一个在 MHPA 冷凝段翅片上;对于整个电堆而言,位于电堆最中间的 3 个单体每个均在对应位置放置热电偶,其余单体每隔两片放置。因此在电堆内部一共放置 38 个热电偶,所有 MHPA 外部放置共 19 个热电偶。这些单体重叠在一起后,进行压实、压紧,最后用螺栓、螺丝杆等紧固件进行紧固。除了 50 个 MHPA-PEMFC 单体装配而成的基本结构外,还包括供气风扇、辅助冷却风扇等附属构件。其中供气风扇用于向阴极流道提供足够的氧化剂和少量冷却空气,辅助冷却风扇与 MHPA 构成 MHPA-PEMFC 电堆的核心冷却系统,用于冷却 MHPA 的冷凝段。氢气的入口与出口位于端板同一侧,空

气由吸气式风扇将空气从外界环境中吸入阴极空气流道和 MHPA 冷凝段，方向如图中红色箭头所示。图 1 (d) 展示了 MHPA-PEMFC 电堆实物图。

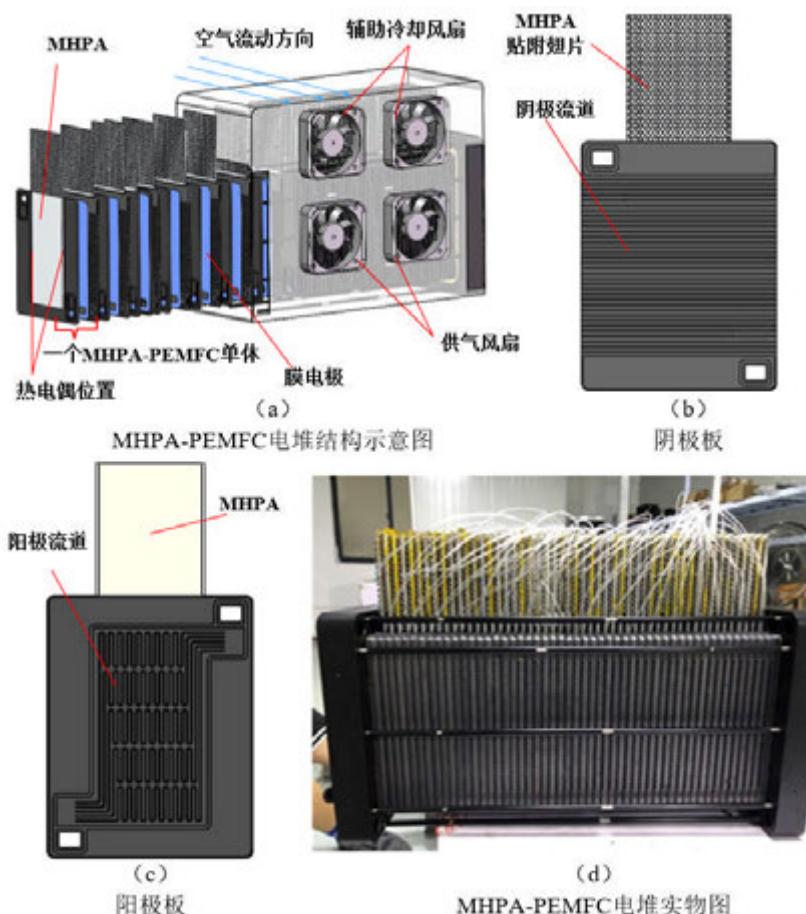


图 1 MHPA-PEMFC 电堆

Fig.1 MHPA-PEMFC stack

1.2 实验系统

实验系统由电堆、氢气供应系统、风扇系统、监控设备和电子负载等装置组成，如图 2 所示。纯氢（99.999%）通过减压阀，压力降到表压为 0.06 Mpa 后进入电堆。氢气管路出口采用半封闭阳极模式，在电堆的氢气出口处安装了一个直通电磁阀，电磁阀连接到一个控制器，通过控制器实现氢气的吹扫操作，也保证电堆内的排水排气。吹扫时间间隔为每 19 秒打开一次，每次打开时间为 0.3 秒。吸气式供气风扇和辅助冷却风扇分别向电堆的阴极流道和 MHPA 冷凝段提供环境空气，风扇通过 PWM 控制器连接直流电源，调节占空比，实现对空气流量的调节，供气风扇和辅助冷却风扇在不同占空比下的性能分别如表 1 和表 2 所示。环境温度和湿度由温湿度记录仪进行实时监测，每 5 秒进行一次自动记录。电堆内部每个热电偶通过数据采集仪（安捷伦）连接电脑进行实时监测。电堆的阳极和阴极连接到直流电子负载相应的电极上，燃料电池堆在恒电流模式下运行，通过电子负载调节负载电流，获得输出电压。实验过程中，调节电子负载的电流，以 3 A 的增量逐渐增加。每个加载步骤保持至少 15 分钟，直到电子负载显示的电压和电

堆内部热电偶所测得的温度达到稳定状态，进行相关数据的采集与记录。



图2 MHPA-PEMFC 电堆性能测试实验系统图
Fig.2 Experimental system

表 1 供气风扇性能

Tab 1 Performance of air supply fans

供气风扇	2 个风扇总风量(m ³ /s)	2 个风扇风量(m ³ /h)	总耗功(W)
50%占空比	0.045	160.871	57.600
75%占空比	0.074	267.399	86.400
100%占空比	0.103	370.523	115.200

表 2 辅助冷却风扇性能

Tab 2 Performance of auxiliary cooling fans

辅助冷却风扇	2 个风扇总风量(m ³ /s)	2 个风扇风量(m ³ /h)	总耗功(W)
50%占空比	0.095	342.5	57.6
60%占空比	0.103	370.5	69.12
80%占空比	0.144	518.9	92.16
100%占空比	0.167	600.7	115.2

2 MHPA-PEMFC 热平衡与评价指标

由能量守恒可知，燃料电池中所有输入能量之和等于输出能量之和：

$$\sum(H_i)_{in} = W_{el} + \sum(H_i)_{out} + Q_{gen} \quad (1)$$

式中， $\sum(H_i)_{in}$ 是所有流入电池的焓，即氢气、氧气和气体中存在的水蒸气的焓，W；

W_{el} 是产生的电功率, W; $\sum(H_i)_{out}$ 是所有流出燃料电池的焓, 即未用的燃料和氧化剂, 加上气体、液态水中的水蒸气的焓; Q_{gen} 是产热量, W。

燃料电池在工作过程中, 由于存在活化损失、欧姆损失及浓差损失, 实际输出电压将低于理论输出电压, 由这些损失引起的功率损失将转化成热量, 通过文献计算^[14]:

$$Q_{gen} = (E_r - V_{cell}) I n_{cell} \quad (2)$$

其中, E_r 为理论可逆电压。由热平衡可知, 产热量与散热量相等, MHPA-PEMFC 电堆运行过程中, 散失的热量包括以下几个部分, 用公式表示为:

$$Q_{dis} = Q_{ca,C} + Q_C + Q_R + Q_{MHPA,C} \quad (3)$$

式中, $Q_{ca,C}$ 是在风扇 1 和风扇 2 所提供的强制对流空气下从电堆阴极流道中排出的热量, W。 Q_C 是通过自然对流从电堆表面散失到环境中的热量, W; Q_R 是通过辐射从电堆表面散失到环境中的热量, W。 $Q_{MHPA,C}$ 是电堆通过 MHPA 的蒸发段传递冷凝段的热量, 最终通过风扇 3 和风扇 4 所提供的强制对流空气带走, W。

一般来说, 对于开放式阴极燃料电池, Q_C 和 Q_R 这两部分热量占总的散热量的比值是非常小的, 因此在分析中可以忽略。

因此, 公式 (3-11) 和公式 (3-12) 可以进一步写为:

$$\begin{aligned} Q_{gen} &= Q_{dis} = Q_{ca,C} + Q_{MHPA,C} \\ &= \dot{m}_{air} c_p (T_{ca,in} - T_{ca,out}) + \dot{m}_{MHPA} c_p (T_{MHPA,in} - T_{MHPA,out}) \end{aligned} \quad (4)$$

其中, $\dot{m}_{air}$ 是风扇 1 和风扇 2 向阴极流道提供空气流量, kg/s; $T_{ca,in}$ 和 $T_{ca,out}$ 分别是阴极流道进出口表面的平均温度, °C; $\dot{m}_{MHPA}$ 是用于冷却 MHPA 的空气流量, kg/s; $T_{MHPA,in}$ 和 $T_{MHPA,out}$ 分别是冷却 MHPA 之前和之后的空气温度, °C; c_p 是环境空气的定压比热容, J/(kg·°C)。

对于 MHPA-PEMFC 电堆, 平均温度计算式如下:

$$\bar{T} = \frac{\sum_{n=1}^N T_n}{N} \quad (5)$$

式中, N 为放置在电堆中热电偶的数量, T 为所测温度值, °C。

均温性指数 TUI 计算如下:

$$TUI = \frac{\sum_{n=1}^N |T_n - \bar{T}|}{N} \quad (6)$$

越小的 TUI 代表越均匀的温度分布。

3 风扇运行对 MHPA-PEMFC 电堆性能的影响

测试期间空气的平均温度为 37 °C, 平均相对湿度为 48%。为了保护质子交换膜的寿命及电堆安全, 设定实验安全温度为 65 °C, 一旦有热电偶的最高温度达到该值, 就不再继续往上加载电流。实验中电堆的负载电流以 3 A 的增量逐渐增加, 直到电堆达到

极限温度。

3.1 供气风扇风量的影响

图 3 展示了辅助冷却风扇以 50% 的占空比恒定运行，而供气风扇在不同占空比运行下，MHPA-PEMFC 电堆的极化曲线与功率变化。图 4 展示了对应工况下 MHPA-PEMFC 电堆的最大温度。如图所示，供气风扇的占空比越高，MHPA-PEMFC 电堆的输出电压和功率越大，主要原因一是冷却风量随着占空比的提高而提高，增强了电堆的散热，二是高占空比的工况下，同一时间内阴极催化层表面的氧气浓度就越高，对催化层表面电化学反应有积极作用。此外，供气风扇的占空比越高，电堆能负载的电流就越高，在安全温度范围内，当供气风扇的占空比为 50% 时，MHPA-PEMFC 电堆可负载 33 A (0.55 A/cm^2) 的电流；当供气风扇的占空比升为 75% 时，MHPA-PEMFC 电堆可负载的电流为 39 A (0.65 A/cm^2) 的电流，而对于同样规格但没有 MHPA 和辅助冷却风扇的普通 PEMFC，仅能在安全温度范围内负载到 30 A (0.50 A/cm^2) [13]；当供气风扇的占空比继续升至 100% 时，电堆可负载的电流达 42 A (0.7 A/cm^2)，此时最大温度仅为 61.3°C ，在安全温度范围内，富裕有继续加载电流的空间。在整个过程中，供气风扇占空比从 50% 提升到 100%，MHPA-PEMFC 电堆的电流负载水平提升了 27.3%。

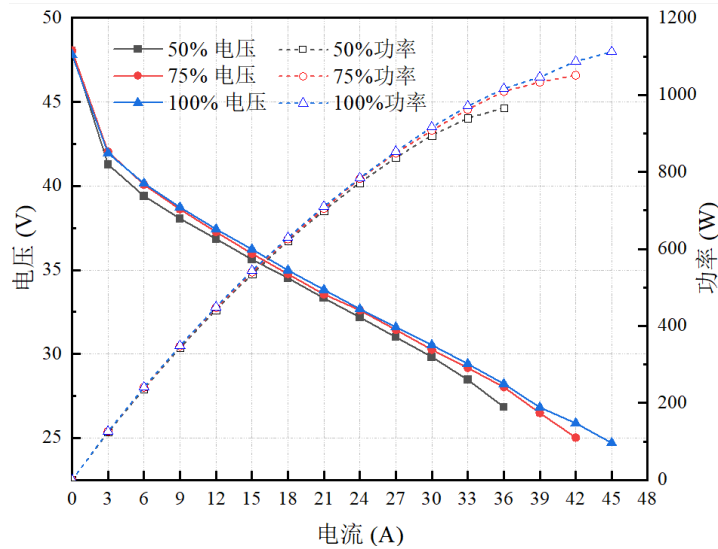


图 3 供气风扇不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆性能

Fig 3 Performance of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of air supply fans

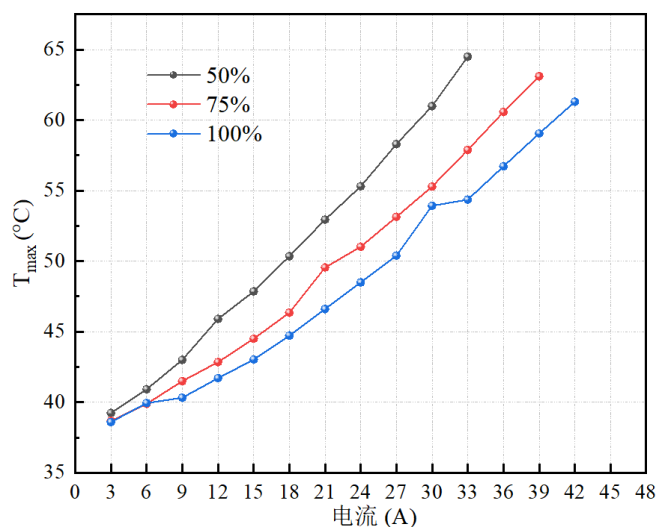
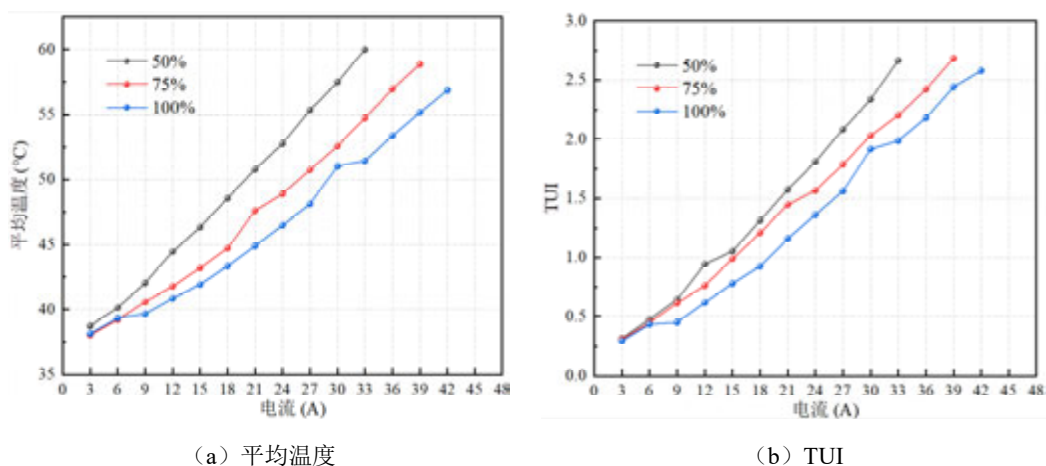


图4 供气风扇不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆内部最大温度

Fig 4 Maximum internal temperature of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of fan

图 5 展示了供气风扇在不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆平均温度和均温性指数 TUI。从图中可以看出,随着电流的加载,电堆产生的热量增多,导致电堆的温度不断升高,温度均匀性恶化,但随着供气风扇占空比的提升,电堆散热增强,平均温度、TUI 均逐渐减小。当电流为 33 A 时,50%、75%和 100%占空比运行下的 MHPA-PEMFC 电堆平均温度分别为 60.0 °C、54.7 °C和 51.4 °C,均温性指数分别为 2.3、2.0 和 1.9。从 50% 占空比到 100%占空比, MHPA-PEMFC 电堆的平均温度和均温性指数分别降低 16.7%和 21%。而对于同样规格但没有 MHPA 和辅助冷却风扇的普通 PEMFC,在供气风扇占空比为 75%时,运行在 33 A 的负载电流下,其热性能更差,平均温度和 TUI 这两个指标分别比 MHPA-PEMFC 电堆高了 8.3 °C和 0.5^[13]。以上结果表明,提高供气风扇的占空比,可以使 MHPA-PEMFC 电堆可以提升 MHPA-PEMFC 的输出性能,增强 MHPA-PEMFC 的热性能,使其可以在高电流负载下安全稳定地运行。



(a) 平均温度

(b) TUI

图5 供气风扇不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆热性能

Fig 5 Average temperature and TUI of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of air supply fans

3.2 辅助冷却风扇风量的影响

虽然 MHPA 可以将热量从电池的产热区传递到冷凝段，但 MHPA 的高效运行需要将冷凝段的热量及时带走，否则聚集的热量会限制 MHPA 的整体传热性能。因此，MHPA 冷凝段的换热条件是影响 MHPA-PEMFC 电堆性能的重要因素。

图 6 展示供气风扇以 75% 的占空比恒定运行，而辅助冷却风扇在不同占空比运行下，MHPA-PEMFC 电堆的极化曲线与功率变化，电流以 30 A 作为起始开始加载。图 7 展示了对应工况下 MHPA-PEMFC 电堆的最大温度，图 8 展示了电堆对应的平均温度与 TUI。从图中可以发现，当辅助冷却风机占空比从 50% 提高到 60% 时，电堆输出电压明显增大，输出功率提升 66 W，继续增加到 80% 时，输出电压和功率回落，持续增加到 100% 时，输出电压和功率继续降低。这是因为在反应风机占空比处于高位运行的情况下，一开始增加辅助冷却风机的占空比可以增强散热水平，从而增强了电堆在对应的负载下的性能，而继续增加辅助冷却风机的占空比到 100%，即使在安全温度范围内负载的电流水平还能提高，但是极化增加，削弱了电堆的性能。对于电堆的热性能表现而言，从图 7 和图 8 中可以看到，随着辅助冷却风扇的占空比逐渐增大，电堆的最高温度、平均温度逐渐减小，温度分布更加均匀，电堆的热性能表现更好。因此，当供气风扇占空比处于高位运行时（超过 75%），MHPA-PEMFC 电堆辅助冷却风扇的占空比建议不超过 60%，以确保电堆同时表现出良好的热性能和输出性能。

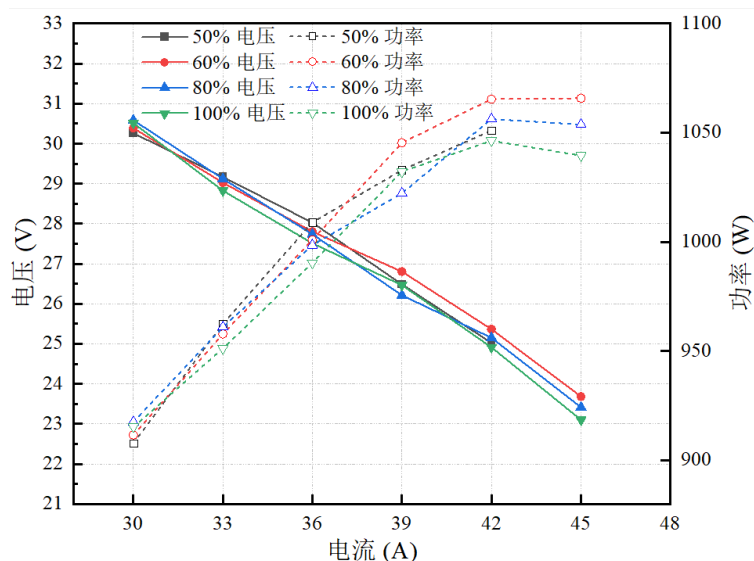


图 6 辅助冷却风扇不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆性能

Fig 6 Performance of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of auxiliary cooling fans

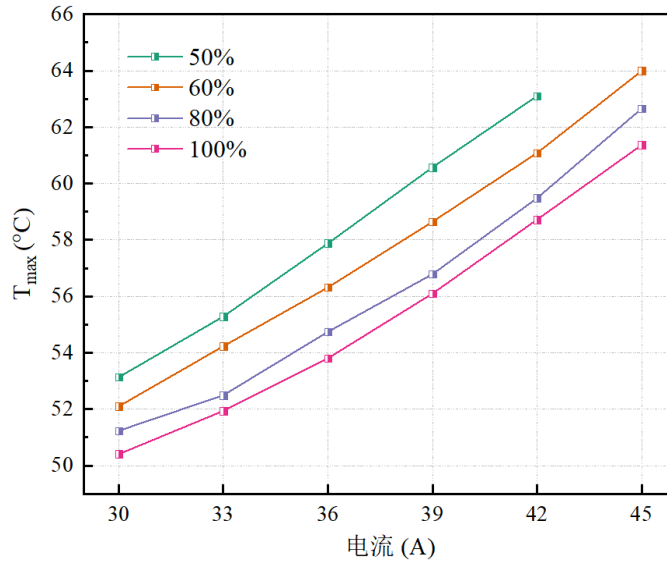


图 7 辅助冷却风扇不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆内部最大温度

Fig 7 Maximum internal temperature of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of auxiliary cooling fan

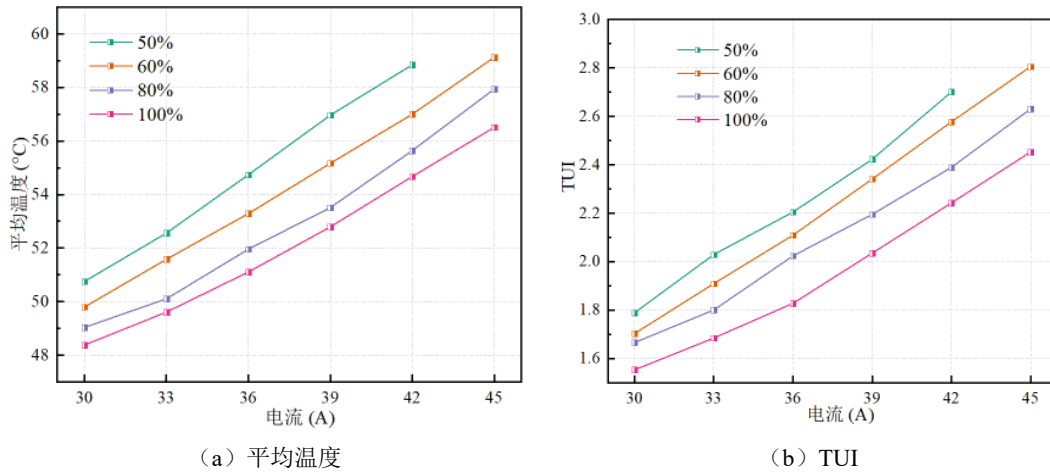


图 8 辅助冷却风扇不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆平均温度和 TUI

Fig 8 Average temperature and TUI of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of auxiliary cooling fans

4 供气风扇和辅助冷却风扇在较低环境温度下联合运行的影响

通过以上实验发现, MHPA-PEMFC 电堆在环境温度较高 (37 °C) 时, 合理的风扇的运行均能提升 MHPA-PEMFC 的输出性能, 同时表现出良好的热性能。而考虑到 MHPA-PEMFC 电堆在实际应用中, 会处于不同的环境下, 因此对 MHPA-PEMFC 电堆在较低环境温度下进行了实验分析。以下实验过程中, 环境温度为 21.5 °C, 负载电流恒定为 36 A, 供气风扇与辅助冷却风扇均在不同占空比运行。

图 9 展示了辅助冷却风扇和供气风扇在不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆输出电压和功率, 图 10 展示了电堆对应的平均温度。从图中可以看出, 在环境温度较低的情况下, 无论是增加供气风扇还是辅助冷却风扇的占空比, 均会导致电堆的输出电压和输出功率

降低,在这种情况下,随着风扇占空比的增大,电堆的温度不断降低,在本身空气进气温度较低的情况下,通过风扇降低电堆的温度反而限制了电化学反应的活跃度。因此,对于 MHPA-PEMFC 电堆而言,在环境温度较低的情况下,仅需确保供气风扇为电堆提供足够氧化剂即可,此时,可以不用开启辅助冷却风机,而当环境温度进一步降低影响电堆性能时,微热管阵列可作为预热元件辅助电堆提升自身温度。

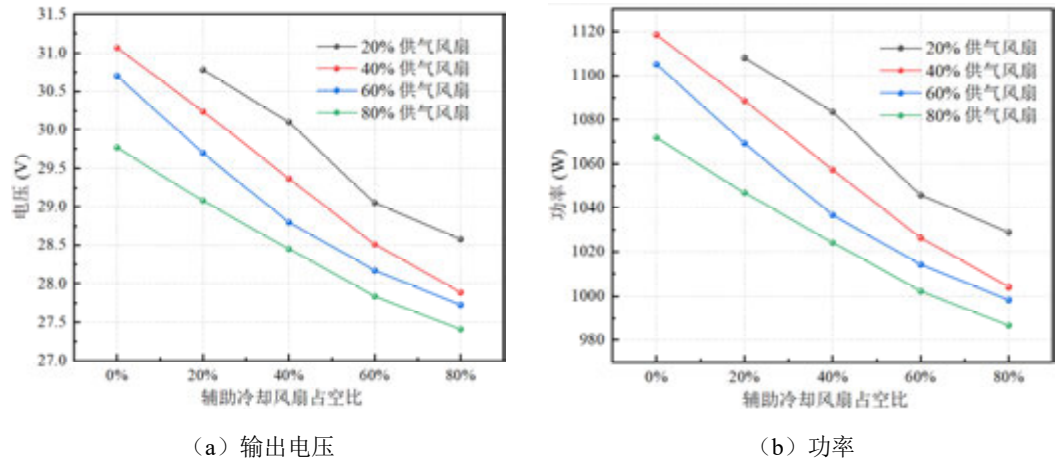


图 9 辅助冷却风扇和供气风扇在不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆性能

Fig 9 Output performance of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of auxiliary cooling fan and air supply fan

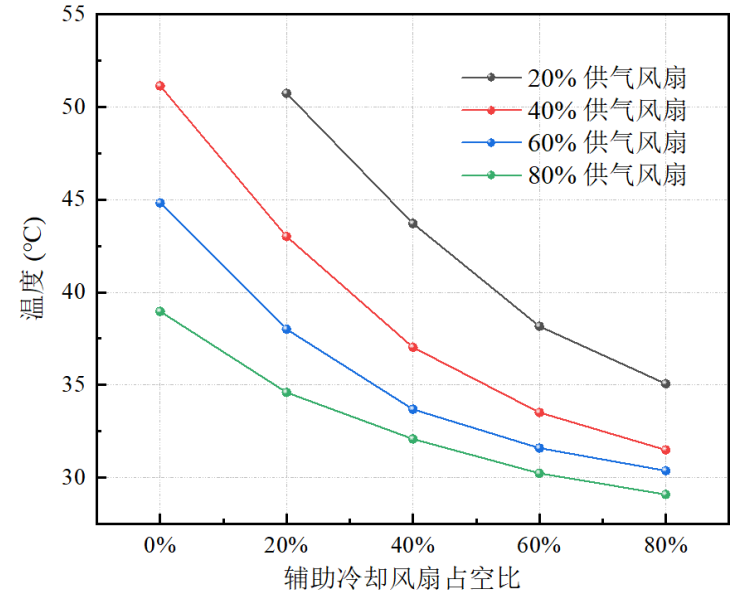


图 10 辅助冷却风扇和供气风扇在不同占空比下 MHPA-PEMFC 电堆平均温度

Fig 10 Average temperature of MHPA-PEMFC stack at different duty ratios of auxiliary cooling fan and air supply fan

5 结 论

本文探究了新型空冷 MHPA-PEMFC 在运行过程中, 供气风扇和辅助冷却风扇在不同占空比下对电堆输出性能、负载水平和热性能的影响, 此外还研究了在低环境温度下风扇运行情况对 MHPA-PEMFC 性能影响。结论如下:

(1) 在 37 °C 环境温度下, 供气风扇的占空比越高, MHPA-PEMFC 电堆的输出电压和功率越大, 当供气风扇占空比从 50% 提升到 100%, MHPA-PEMFC 电堆的电流负载水平提升了 27.3%。随着供气风扇占空比的提升, 电堆散热增强, 平均温度、TUI 均逐渐减小。当电流为 33 A 时, 从 50% 占空比到 100% 占空比, MHPA-PEMFC 电堆的平均温度和均温性指数分别降低 16.7% 和 21%。

(2) 在 37 °C 环境温度下, 当辅助冷却风机占空比从 50% 提高到 100% 的过程中, 电堆输出性能呈现出先增大后降低的趋势, 而随着辅助冷却风扇的占空比逐渐增大, 电堆的最高温度、平均温度逐渐减小, 温度分布更加均匀, 电堆的热性能表现更好。

(3) 在环境温度较低的情况下 (21.5 °C), 供气风扇和辅助冷却风扇联合运行下, 无论是增加供气风扇还是辅助冷却风扇的占空比, 均会限制了电化学反应的活跃度, 导致电堆的输出电压和输出功率降低。

本文研究结果可为新型空冷 MHPA-PEMFC 运行控制策略的研究提供重要依据。在后续研究中, 风扇的占空比及环境温度的范围可以在更小的梯度范围内对 MHPA-PEMFC 进行研究, 同时也应考虑实际应用中, 风扇所效率的功率对电堆系统整体输出的影响。

参考文献

- [1]. Myles R. Allen, Kejun Jiang, Anna Pirani, et al. Global Warming of 1.5 °C. IPCC, 2018.
- [2]. Hydrogen Council. How Hydrogen Empowers the Energy Transition. Hydrogen Council, 2017.
- [3]. WANG Y, CHEN K S, MISHLER J, et al. A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: technology, Applications, and needs on fundamental research. Applied Energy, 2011, 88(4): 981-1007.
- [4]. 杨长幸, 赵润贤, 潘瑞昕, 等. 空冷型质子交换膜燃料电池水热管理的研究现状. 电源技术, 2022, 46(04): 346-350.
Yang Chang-Xing, Zhao Run-Xian, Pan Rui-Xin, et al. Research status of hydrothermal management of air-cooled proton exchange membrane fuel cells. Power Technology, 2022, 46(04): 346-350.
- [5]. Pei H, Liu Z, Zhang H, et al. In situ measurement of temperature distribution in proton exchange membrane fuel cell I a hydrogen-air stack. Journal of Power Sources, 2013, 227: 72-79.
- [6]. Baroutaji A, Arjunan A, Ramadan M, et al. Advancements and prospects of thermal management and waste heat recovery of PEMFC. International Journal of Thermofluids, 2021, 9: 100064.
- [7]. Baik KD, Yang SH. Development of cathode cooling fins with a multi-hole structure for open-cathode polymer electrolyte membrane fuel cells. Applied Energy, 2020; 279: 115851.
- [8]. Yin C, Gao Y, Li K, et al. Design and numerical analysis of air-cooled proton exchange membrane fuel cell stack for performance optimization. Energy Conversion and Management, 2021; 245: 114604.
- [9]. Song YX, Zhang CZ, A Deshpande, et al. Fixed air flow-rate selection by considering the self-regulating

- function of low power air-cooled PEMFC stack. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 158: 119771.
- [10]. 赵耀华, 王林成, 全贞花, 等. 一种安全节能的平板热管风冷式燃料电池堆: CN216084968 U. 2022-03-18.
- Zhao Yao-Hua, Wang Lin-Cheng, Quan Zhen-Hua, et al. A safe and energy-saving flat plate heat pipe air-cooled fuel cell reactor: CN216084968 U. 2022-03-18.
- [11]. Wang LC, Quan ZH, Zhao YH, et al. Heat transfer process analysis and performance research of micro heat pipe array applied for the thermal management of proton exchange membrane fuel cells. *Applied Thermal Engineering*, 2023, 219: 119531.
- [12]. Wang LC, Quan ZH, Zhao YH, et al. Experimental investigation on thermal management of proton exchange membrane fuel cell stack using micro heat pipe array. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 214: 118831.
- [13]. Yang MG, Quan ZH, Zhao YH, et al. Experimental and numerical study on thermal management of air-cooled proton exchange membrane fuel cell stack with micro heat pipe arrays. *Energy Conversion and Management*, 2023, 275: 116478.
- [14]. Frano Barbir. *PEM Fuel Cells: Theory and Practice*, second ed. Elsevier, Waltham, 2013.

高稳定石墨烯骨胶纳米流体光热性能研究

周传辉¹, 王玺朝¹, 何国杜¹, 董岚^{1,2}, 吴子华^{1,2}, 谢华清^{1,2}, 王元元^{1,2,*}

(1. 上海第二工业大学能源与材料学院; 2. 上海先进热功能材料工程技术研究中心, 上海 201209)

(*Tel: 021-50211236, Email: wangyuanyuan@sspu.edu.cn)

摘要: 在能源危机背景下, 能够将太阳能转换成热能的纳米流体光热材料体系脱颖而出。石墨烯纳米流体具有高稳定性的优点, 在光热吸收领域具有良好的应用前景, 但是石墨烯在基液中易团聚, 影响在石墨烯纳米流体中的更广泛应用。本文利用球磨法制备石墨烯骨胶纳米复合材料, 两步法制备分散稳定的水基石墨烯骨胶纳米流体。研究了石墨烯与骨胶之间的质量比对石墨烯骨胶纳米流体稳定性的影响机制, 在此基础上进一步探讨了石墨烯骨胶纳米流体的质量分数对光热吸收性能的规律。结果表明, 石墨烯骨胶质量比为 1:4 时的纳米流体具有高稳定性。浓度为 0.009% 的石墨烯骨胶纳米流体光热转换效率可高达 97.69%, 较去离子水提高了 21.42%。本工作研究发现石墨烯骨胶纳米流体能够达到分散稳定状态且具有良好的光热转换性能。

关键词: 石墨烯骨胶纳米流体 分散稳定性 光吸收效果 光热转换效率

0 引言

随着人口的爆炸性增长和工业化,能源危机变得至关重要。太阳能是地球上最丰富的可再生能源,在各种替代能源中起着越来越重要的作用。太阳能光伏^[1]和光热^[2]是目前收集、转换和利用太阳能的主要方式。其中,太阳能光热转换是使用太阳能^[3,4]最直接、最方便的方式。太阳能集热器作为一种重要的换热装置,通过传热流体^[5]将太阳辐射转化为热能。一般来说,基于表面吸收的集热器由于吸收表面的传导阻和流体内部的界面热阻而产生大量的热损失,从而减少了其对太阳光^[6,7]的利用。为了解决上述问题,在1975年Minardi和Chuang等^[8]提出了直接吸收太阳能集热器(DASC)的概念。这样,DASC系统中的工作介质可以直接吸收太阳辐射,从而大大减少了光热转换过程中的能量损失。然而,这些传统的工作介质(水、乙二醇(EG)、油等)有一个突出的问题,是由于这些介质的光学性能较差,它们表现出较低的吸收率。因此,新工作液体的探索对满足DASC系统未来发展的要求起着至关重要的作用。1995年,Choi和Eastman等^[9]首次提出了纳米流体的概念。纳米流体是通过尺寸小于100 nm的纳米颗粒的单维纳米颗粒在基液中分散得到的纳米流体。纳米流体已被证明在太阳能集热器^[10]、电子冷却^[11]、汽车散热器^[12]、制冷系统^[13]、太阳能蒸馏系统^[14]和热交换器^[15]中具有很强的适用性。

纳米流体是一种纳米颗粒和基液的组合,具有低体积分数和良好的液体分散性,在热管理设备中具有实现高效、节能和降低成本的巨大潜力^[16],同时在DASC中有着良好的应用。研究证明,纳米流体不仅提高了传热效率和导热系数^[17],而且具有更好的光吸收性能^[18,19]。因此,纳米流体在DASC的应用中受到了广泛的关注。Gimeno-Furió等^[20]研究了碳纳米流体的光捕获特性和光热转换行为。与基液相比,碳纳米流体的光谱透过率和太阳对热的效率分别提高了87%和20%。Menbar等^[21]对氧化铜纳米流体进行了数值模拟和实验研究,得出结论,纳米流体在显著提高光热转换能力方面具有重要作用,质量分数从0.002%提高到0.008%,其光热转换效率从18%提高到52%。Huang等^[22]应用羟基化石墨烯(GOH)/乙二醇(EG)-水纳米流体作为DASC的工作流体进行研究。结果表明,当浓度为0.007%时,GOH/W纳米流体的集热效率最高约为73.5%,比EG高42.2%。Zhu等^[23]制备去离子水基墨墨纳米流体,他们发现墨纳米流体达到最大的整体光热效率60.2%,比去离子水高52.0%。到目前为止,多种纳米材料已被用于提高太阳热转换效率,包括金属(Au, Ag)、非金属(碳黑、石墨烯、MXene、碳纳米管)和陶瓷氧化物(氧化铝,二氧化钛,二氧化硅,氧化镁)。

石墨烯纳米颗粒具有低纬度层状结构、超高机械强度、更大的比表面积、超高的热导率等优良品质,而且石墨烯材料体系由于其全光谱吸收特性^[24,25],已成为具有代表性的光热材料。它在太阳能集热器、太阳能驱动水蒸发、光热催化、光热抗菌和光热治疗等领域都具有良好的性能。将石墨烯和石墨烯衍生物制备成纳米流体可以自然地与DASC结合,DASC直接分散工作流体中阳光的吸收介质,从而避免了吸收器和集电器之间的热阻。但石墨烯极易团聚,不仅沉淀于通道中,而且还会影响纳米流体的传热和吸收性能。骨胶是将动物结缔组织、软骨等作为原料,经过提取后加工而成的动物类天然粘合剂。骨胶具有较高粘结性能,主要成分为动物软骨以及结缔组织^[26]。贺一卓等^[27]通过接枝聚合方法利用环氧氯丙烷改性骨胶粘合剂,改性后骨胶粘合剂应用于陶瓷注射成形技术和制备陶瓷成形过程中。实验表明,改性后骨胶粘合剂制备陶瓷仍可保持较高热稳定性;同时骨胶具有水溶性好、环保无毒、原料广泛、成本较低、使用性能良好等优点。本文利用石墨烯和骨胶的特点,以石墨烯和骨胶材料为原料,通过将两种材料混合球磨形成贴附状态的石墨烯骨胶纳米复合材料,再通过实验研究可得石墨烯骨胶纳米复合材料能够在基液去离子水中形成高稳定性的纳米流体及其

优异的光热转换性能。

1 实验方法

图 1 为石墨烯骨胶纳米流体制备流程图。首先，用电子天平（T006-13-302，江苏省科学器材有限公司）称取一定量的石墨烯（深圳市穗衡石墨烯科技有限公司）和骨胶（拓普河北生物科技有限公司）进行备用。本文中石墨烯和骨胶的质量比为 1:2、1:3、1:4、1:5、1:6，将称取好的石墨烯和骨胶材料放入球磨罐中混合，再将球磨罐放在行星式球磨机（KE-2L，启东市宏仪器设备厂）上球磨一定时间，即可得到石墨烯骨胶纳米复合材料；然后，称取一定量制备好的石墨烯骨胶纳米复合材料，放入基液去离子水中，再利用超声波细胞粉碎机（KBS-900，昆山市超声仪器有限公司）超声 1h，即可得到分散稳定的石墨烯骨胶纳米流体；最后，利用扫描电子显微镜（Hitachi S-4800，日本 JEOL 公司）进行样品形貌分析，利用紫外-可见-近红外分光光度计（Agilent Cary 5000，美国 PerkinElmer 公司）测试样品的透光率及光吸收性能，再通过自组装光热转换装置测试其光热转换性能，如图 2 所示。本实验装置使用太阳模拟器（中教金源科技有限公司），光源辐射强度设置为 $2000\text{W}/\text{m}^2$ ，太阳模拟器通过数据线连接数据采集器（Agilent34970A），数据采集器另一端通过 J 型热电偶连接在石英比色皿，测出石英比色皿中纳米流体的温度，再反应到计算机中。石英比色皿（ $1\text{cm}\times 4\text{cm}\times 1\text{cm}$ ）两边透明，其目的使石英比色皿中的纳米流体能够垂直吸收太阳模拟光的太阳辐射。实验中为了减少比色皿中周围热量损失，特在比色皿周围（除上部）覆盖一层隔热棉，只预留一个透明面接收太阳模拟器的太阳辐射。通过以上装置分析纳米流体的光热特性。



图 1 石墨烯骨胶纳米流体的制备流程

Fig. 1 Preparation process of graphene bone gel nanofluid

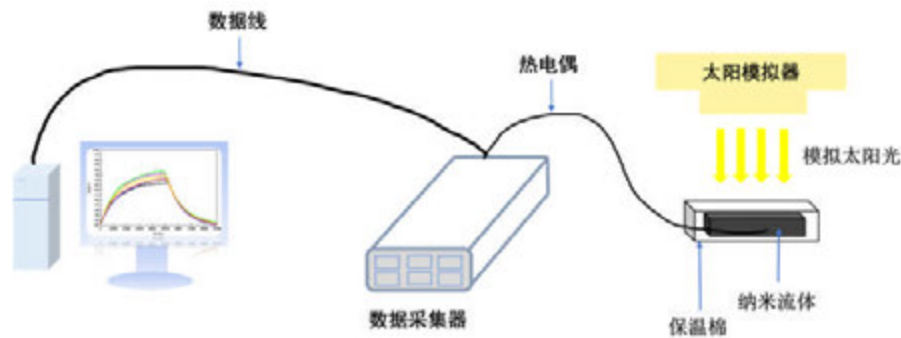


图 2 自制光热性能实验装置示意图

Fig. 2 Diagram of the homemade photothermal performance experimental setup

2 结果与讨论

2.1 纳米复合材料的表征与分析

图 3 所示为石墨烯与石墨烯骨胶纳米复合材料的 SEM 图。图 3 (a)所示的为石墨烯 SEM 图，可以看出石墨烯的外貌结构为片状，大小不一，极易团聚。图 3 (b)为制备的石墨烯骨胶纳米复合材料，很明显看出骨胶覆盖在石墨烯表面，阻止了石墨烯团聚。

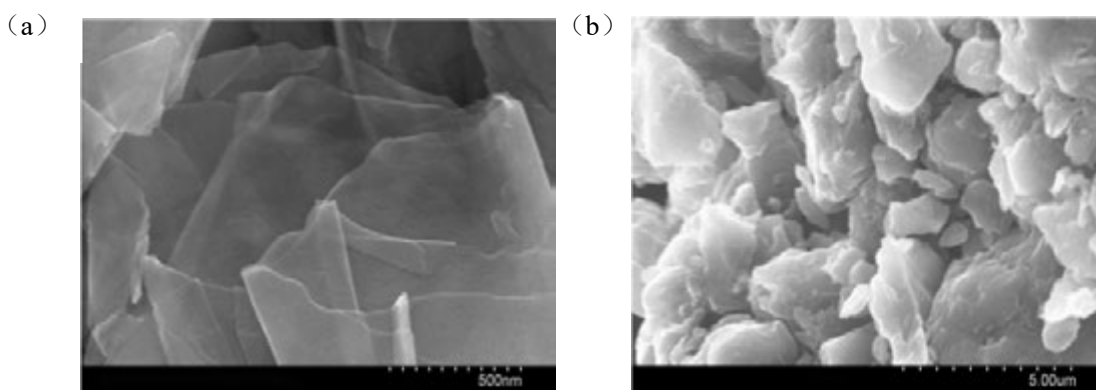


图 3 SEM 图: (a) 石墨烯; (b) 石墨烯骨胶纳米复合材料

Fig. 3 SEM images: (a) graphene; (b) graphene bone gel nanocomposite

2.2 纳米复合材料质量比对纳米流体的分散稳定性的影响

纳米流体的稳定性在纳米流体后续性能研究中起着至关重要的作用。本文通过增减骨胶的量来探究其纳米流体的分散稳定性。图 4(a)是不同石墨烯与骨胶质量比的石墨烯骨胶纳米流体静置图，纳米流体浓度均为 0.01%。从左到右石墨烯与骨胶的质量比分别为 1:2、1:3、1:4、1:5 和 1:6。从图 4(a)中可看出随着骨胶量的增大，纳米流体的黑色程度由浅到深再到浅，此现象说明石墨烯不易分散于水中，但随着骨胶含量的增加，骨胶更好的发挥作用，提高了石墨烯的分散性。不过随着骨胶的量持续增加，其纳米流体的黑色度也发生变化，即石墨烯与骨胶质量比为 1:5 和 1:6 时，其纳米流体黑色度变浅，说明骨胶过量，由此说明骨胶的量存在一个饱和值。图 4(b)为图 4(a)中样品放置 30 天后的照片，石墨烯与骨胶的质量比分别为 1:2、1:3 的纳米流体有少量沉降，而石墨烯和骨胶比例为 1:5 和 1:6 时，黑度依然保持浅色状态。石墨烯与骨胶的质量比为 1:4 的纳米流体黑度仍较高且颜色均匀，无明显沉降，无分层，可说明其分散稳定性较好。图 4(c)为取石墨烯和骨胶纳米流体质量比为 1:4 和 1:5 上中下三部分液体测其透光率，从图 4(c)中可以看出任意石墨烯和骨胶质量比上中下三部分的三条线重合，实验表明其制备的水基石墨烯骨胶纳米流体具有分散稳定性。

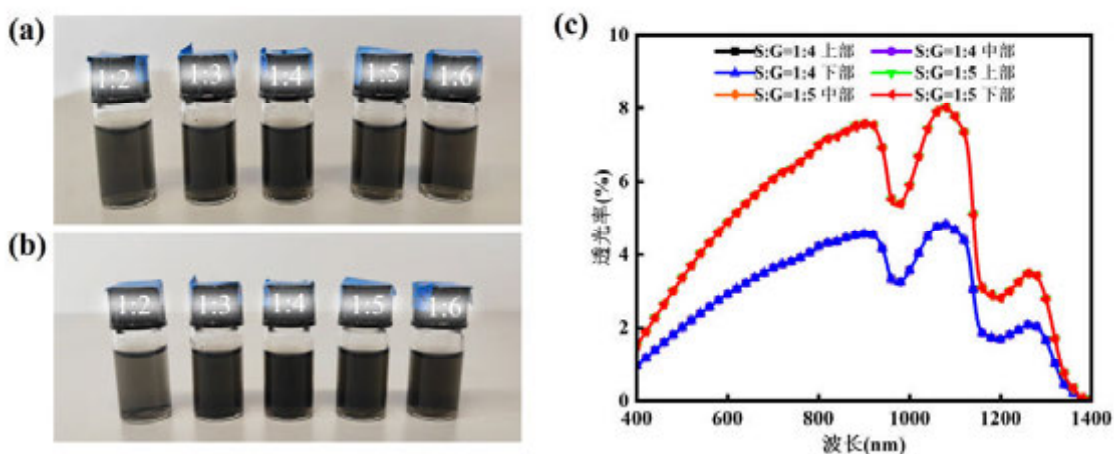


图 4 不同石墨烯与骨胶质量比: (a)水基纳米流体初始状态; (b)为 (a) 静置 30 天后; (c)水基纳米流体分散稳定性测试

Fig. 4 Different graphene to bone gel mass ratios: (a) initial state of water-based nanofluid; (b) for (a) after 30 days of resting; (c) water-based nanofluid dispersion stability test

2.3 不同浓度纳米流体的光热转换性能

根据以上实验可知, 石墨烯与骨胶的质量比为 1:4 的条件下制备的石墨烯骨胶纳米流体分散稳定性最佳。那么本部分在此条件下配置石墨烯骨胶纳米流体, 研究不同纳米流体质量分数对光热性能的影响。图 5(a)为浓度为 0.003%、0.006%、0.009%、0.012%和 0.015%的纳米流体在波长 400nm 到 1400nm 范围内的光透过率。图 5(a)中可明显看出, 添加少量纳米光热转换材料就能使光透过率显著降低。在一定波长范围内, 当纳米光热转换材料添加量为 0.003%时, 与去离子水相比透光率减少了将近一半, 效果非常明显。当添加量逐渐增加时, 其光透过率逐渐减少, 当添加量为 0.015%时光透过率低于 9%。

为了更好地描述这些纳米流体的光学性质, 根据兰伯特-比尔定律^[28]计算其消光系数, 计算公式如下:

$$\alpha(\lambda) = -\frac{\ln [T(\lambda)]}{y} \quad (1)$$

式(1)中: $T(\lambda)$ 透光率, y 是比色皿光程长度 10mm, $\alpha(\lambda)$ 消光系数。图 8(b)为图 8(a)中各样品的消光系数图。从图 5(d)可以看出, 在 400nm 到 1400nm 波长范围内, 五种纳米流体的浓度与去离子水相比, 消光系数提高显著。在一定波长范围内, 水的消光系数几乎为零。当纳米光热转换材料添加量逐渐增加时, 其光吸收性能也逐渐增加, 其纳米流体的消光系数也逐渐增大。其主要原因可能是随着纳米流体浓度的增加, 多重散射起着主导作用, 纳米复合材料的多重散射效应可以增加纳米流体内部光路长度, 这也就意味着更多的入射太阳能被吸收^[29]。例如 0.015%纳米流体的消光系数大约是 0.003%纳米流体的消光系数的四倍。此外, 0.003%纳米流体的平均消光系数为 1.2cm^{-1} , 0.015%纳米流体的平均消光系数为 3.7cm^{-1} 。以上实验表明石墨烯骨胶纳米流体具有良好的光捕获能力。

为了详细解释纳米流体吸收能量, 对石墨烯骨胶纳米流体对光谱辐照度的理论吸收^[30]情况计算公式如下:

$$I_A(\lambda) = (1 - e^{-\alpha(\lambda)y})I_{AM1.5} \quad (2)$$

式(2)中: $I_{AM1.5}$ 表示一定波长范围内的入射太阳照射 (ASTM AM1.5 全球), $I_A(\lambda)$ 辐照度, $\alpha(\lambda)$ 消光系数, y 是比色皿光程长度 10mm。图 4(c)所示为各样品的辐照度及太阳光标准照度。从图 4(c)中可看出在 400nm-900nm 范围内水的辐照度为 $0.1\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\text{nm}^{-1}$ 左右, 距离完全吸收太阳能量还相差甚远。当纳米光热转换材料添加量逐渐增加时, 其纳米流体浓度也在逐步增大, 其辐照度也逐渐增加, 逐步接近太阳标准辐照度。在波长范围在 500nm-900nm 和浓度为 0.015%时, 其太阳辐照度是水的十几倍, 所吸收的太阳光也接近全部的阳光辐射能。实验表明石墨烯骨胶纳米流体表现出更好的吸收性能。

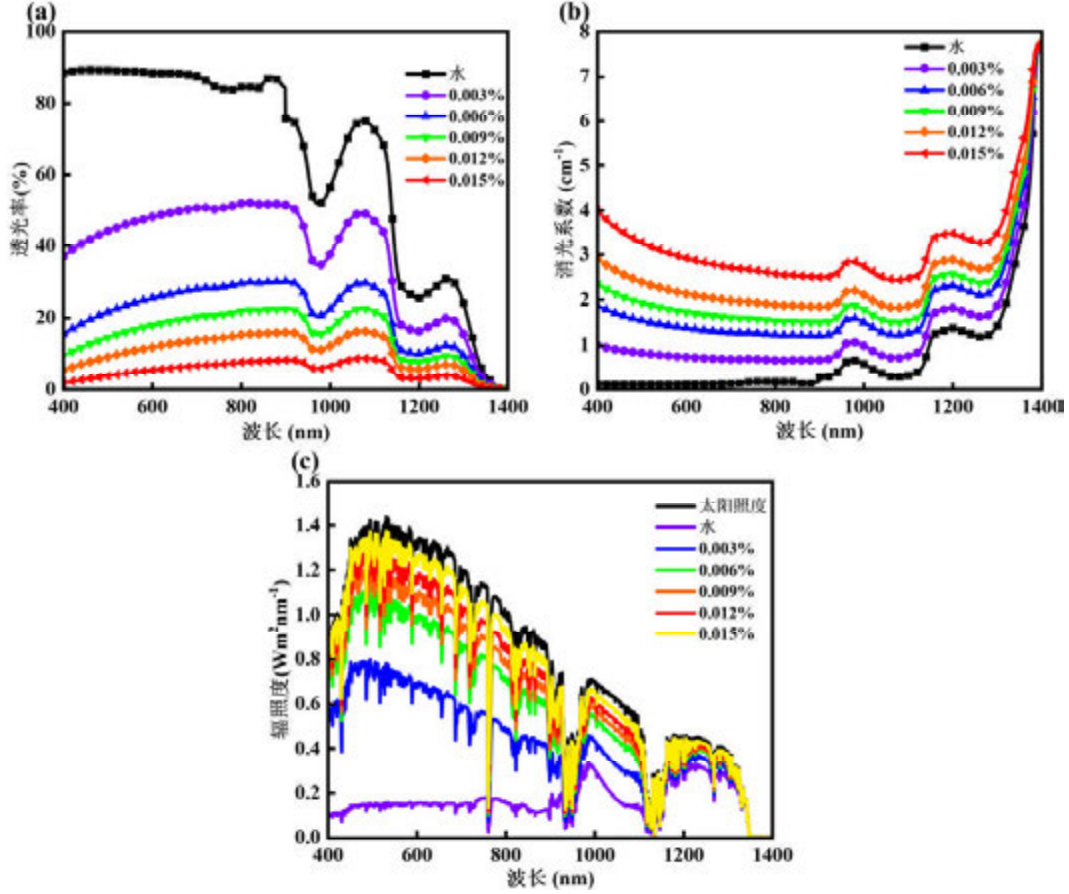


图 5 不同浓度水基纳米流体光性能测试：(a)透光率图；(b)消光系数图；(c)辐照度谱图

Fig. 5 Light performance test of water-based nanofluid with different concentrations (a) transmittance graph; (b) extinction coefficient graph; (c) irradiance spectrum graph

光热转换效率是评估纳米流体光热转换性能的一种重要的指标^[31]。其原理在光热转换系统中，人工模拟太阳光被纳米流体吸收并将其转换成热能，从而使工作流体温度上升。目前，计算光热转换效率的方式有许多种，本研究采用升温动态平衡和降温阶段来评估纳米流体的光热转换效率^[32]，其计算公式如下：

$$\eta = \frac{(T_{eq} - T_{am})m_n C_n B}{A S_m} \quad (3)$$

式(4)中： T_{eq} 表示纳米流体趋于平衡的最大温度， T_{am} 表示环境温度， m_n 表示测试纳米流体质量， C_n 为比热容 4200J/kg/K， B 指常数， A 为纳米流体接收光照面积(4 cm²)， S_m 为太阳模拟器辐照度 (2000W/m²)。常数 B 的取值^[32]计算公式如下：

$$\frac{T(t) - T_{am}}{T_{eq} - T_{am}} = e^{-Bt} \quad (4)$$

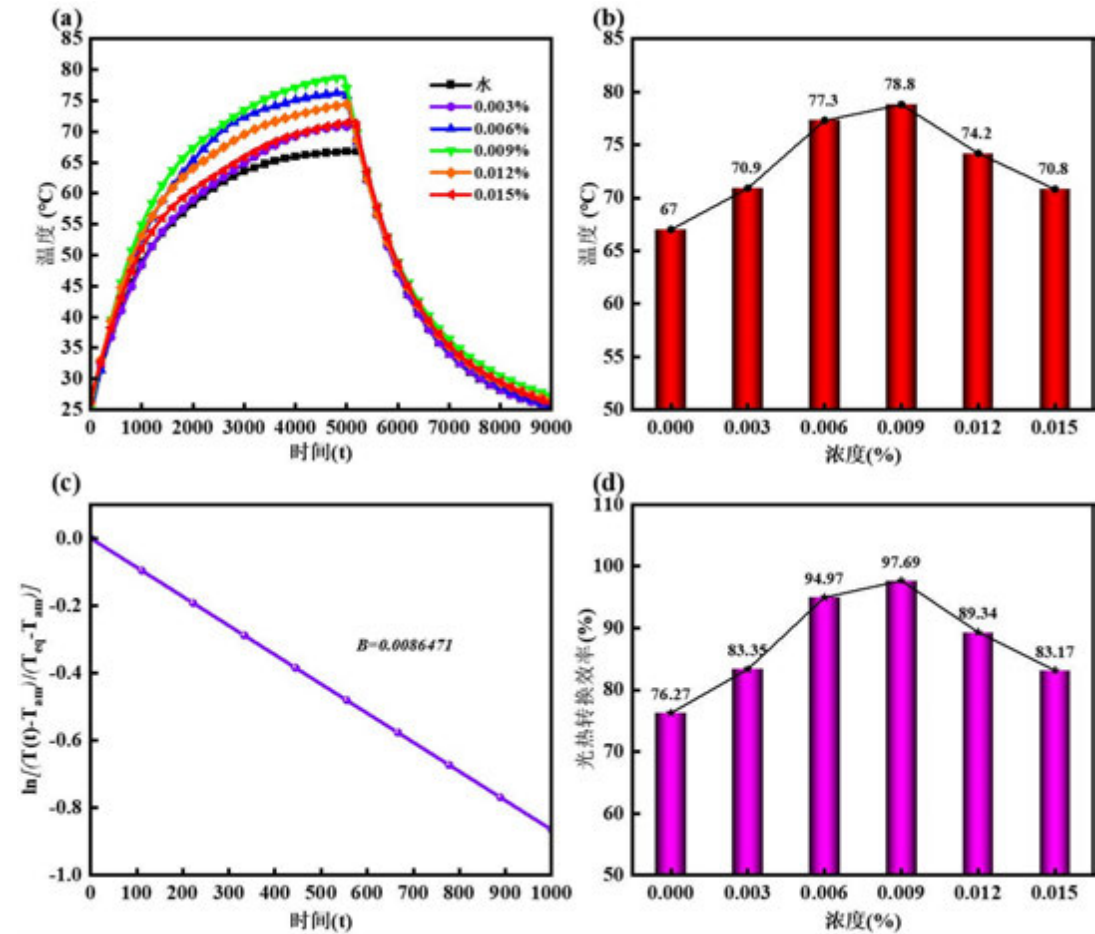
式(4)中：常数 B 是根据降温段的温度由 $\ln[(T(t) - T_{am})/(T_{eq} - T_{am})]$ 与时间 t 的曲线的斜率求得的。本文采用上述方法，分析浓度 0.003%、0.006%、0.009%、0.012%和 0.015%的纳米流体光热转换效率。

图 6(a)所示为在 2000W/m²模拟太阳光照下的纳米流体升温降温曲线图，可看出所有的纳米流体都经历了相同的温度变化趋势，分为加热阶段、平衡阶段和冷却阶段三个过程。在加热阶段，纳米流体的温度和环境温度相差不大，热损失也比较小。在打开氙灯光源后，石墨烯骨胶纳米流体将吸收的太阳能转化为热能，使温度迅速上升。与去离子水相比之下，石墨烯骨胶纳米流体的数据上升速度更快。在平衡阶段，纳米流体的温度

和环境温度相差较大，其热损失较大。纳米流体的温度缓慢上升，直到达到平衡值，此时，发热的速率与散热的速率相一致。在冷却阶段，当光源关闭时，石墨烯骨胶纳米流体不再能将光转化为热能，导致被冷却的纳米流体自然回到室温。纯水的温升温度为 67℃，同时加入不同质量分数的石墨烯骨胶纳米颗粒后，如

图 6(b)最高温度分别上升为 70.9℃、77.3℃、78.8℃、74.2℃和 70.8℃。结果表明，所有石墨烯骨胶纳米流体的温升均明显高于纯水，分别为 3.9℃、10.3℃、11.8℃、7.2℃和 3.8℃。这表明，石墨烯骨胶纳米复合材料的加入提高了纯水的光热辐射吸收。但是，随着纳米颗粒质量分数的增加，其温度呈现上升和下降的趋势。这种情况是因为当浓度较低的情况下，太阳辐射能够从表面完全穿透纳米流体内部直至底部，此时的太阳光吸收是完全吸收。当浓度增加时，太阳光在纳米流体中能够穿透的距离减小，因此太阳光无法穿透整个纳米流体，所以底部的纳米流体无法进行光热转换。此时的底部温度是由表面温度通过纳米颗粒传到底部而获得热量形成。因此，纳米流体的浓度存在一个饱和值。在一定范围内，石墨烯骨胶纳米复合材料的光热转化性能可以随着纳米复合材料质量分数的提高而进一步提高。石墨烯和骨胶之间的补充吸收提高了石墨烯骨胶纳米复合材料的光吸收能力。此外，根据上述计算方法，在模拟太阳照射下（2000W/m²），图 6(d)讨论了纯水和质量分数为 0.003%~0.015%的石墨烯骨胶纳米流体的光热转换效率。从图中可看出随着质量分数从 0.003%变化到 0.015%，纳米流体的效率分别为 83.35%、94.97%、97.69%、89.34%、83.17%，最大值为 97.69%，而纯水的转换效率为 76.27%。很明显，所有的石墨烯骨胶纳米流体的效率都超过了去离子水。证明了石墨烯骨胶纳米流体的光热转化性能进一步提高。

图 6 不同浓度水基纳米流体光热转换性能及光热转换效率图：（a）温升-冷却曲线图；（b）最高升温图；



(c) 降温阶段 $\ln[(T(t) - T_{am})/(T_{eq} - T_{am})]$ 与时间 t 的关系; (d) 光热转换效率图

Fig. 6 Plots of photothermal conversion performance and photothermal conversion efficiency for different concentrations of water-based nanofluids: (a) temperature rise - cooling curve plot; (b) maximum temperature rise plot; (c) $\ln[(T(t) - T_{am})/(T_{eq} - T_{am})]$ versus time t for the cooling phase; (d) photothermal conversion efficiency plot

3 结论

本文用石墨烯和骨胶通过球磨方法制备石墨烯骨胶纳米复合材料,然后将其分散于基液去离子水中,经过超声得到水基石墨烯骨胶纳米流体。通过优化石墨烯与骨胶质量比探寻石墨烯骨胶纳米流体稳定性。实验结果发现,石墨烯与骨胶质量比 1:4 配置的纳米流体有着更好的分散稳定性。又进一步采用最优质量比(1:4)的石墨烯骨胶复合材料,研究质量分数对石墨烯骨胶纳米流体光热性能的影响。实验结果表明,纳米流体浓度为 0.009%时,其光热转换效率高达 97.69%,较去离子水提高了 21.42%。我们的工作提出了一种新型的高稳定性、高光热吸收率水基石墨烯骨胶纳米流体光热吸收体系,将有利于太阳能光热吸收更广泛的应用。

4 参考文献

- [1] Kaufmann R K, Newberry D, Xin C, et al. Feedbacks among electric vehicle adoption, charging, and the cost and installation of rooftop solar photovoltaics[J]. *Nature Energy*, 2021, 6(2):143-149.
- [2] Bellos E, Tzivanidis C. Alternative designs of parabolic trough solar collectors[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2019, 71:81-117.
- [3] Li D, Wu Y, Zhang G, et al. Influence of glazed roof containing phase change material on indoor thermal environment and energy consumption[J]. *Applied Energy*, 2018, 222:343-350.
- [4] Wu X, Chen G Y, Owens G, et al. Photothermal materials: A key platform enabling highly efficient water evaporation driven by solar energy[J]. *Materials Today Energy*, 2019, 12:277-296.
- [5] Balakin B V, Stava M, Kosinska A. Photothermal convection of a magnetic nanofluid in a direct absorption solar collector[J]. *Solar Energy*, 2022, 239:33-39.
- [6] Zeiny A, Jin H, Bai L, et al. A comparative study of direct absorption nanofluids for solar thermal applications[J]. *Solar Energy*, 2018, 161:74-82.
- [7] Mehrali M, Ghatkesar M K, Pecnik R. Full-spectrum volumetric solar thermal conversion via graphene/silver hybrid plasmonic nanofluids[J]. *Applied Energy*, 2018, 224:103-115.
- [8] Minardi J E, Chuang H N. Performance of a "black" liquid flat-plate solar collector[J]. *Solar Energy*, 1975, 17(3):179-183.
- [9] Choi S, Eastman J A. Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles[J]. *Asme Fed*, 1995, 231(1):99-105.
- [10] Akram N, Montazer E, Kazi S N, et al. Experimental investigations of the performance of a flat-plate solar collector using carbon and metal oxides based nanofluids[J]. *Energy*, 2021, 227:120452.
- [11] Wiriyasart S, Suksusron P, Hommalee C, et al. Heat transfer enhancement of thermoelectric cooling module with nanofluid and ferrofluid as base fluids[J]. *Case Studies in Thermal Engineering*, 2021, 24:100877.
- [12] Subhedar D G, Ramani B M, Gupta A. Experimental investigation of heat transfer potential of Al₂O₃/Water-Mono Ethylene Glycol nanofluids as a car radiator coolant[J]. *Case Studies in Thermal Engineering*, 2018, 11:26-34.
- [13] Okonkwo E C, Al-Ansari T. Parametric investigation of a chilled water district cooling unit using mono and hybrid nanofluids[J]. *Scientific Reports*, 2021, 11(1):19227.

- [14] Shoeibi S, Rahbar N, Abedini Esfahlani A, et al. Improving the thermoelectric solar still performance by using nanofluids— Experimental study, thermodynamic modeling and energy matrices analysis[J]. Sustainable Energy Technologies and Assessments, 2021, 47:101339.
- [15] Hassaan A M. Evaluation for the performance of heat transfer process in a double pipe heat exchanger using nanofluids[J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part E: Journal of Process Mechanical Engineering, 2022, 236(5):2139-2146.
- [16] Sajid M U, Ali H M. Recent advances in application of nanofluids in heat transfer devices: A critical review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2019, 103:556-592.
- [17] Wen J, Li X, Chen W, et al. Systematical investigation on the solar-thermal conversion performance of TiN plasmonic nanofluids for the direct absorption solar collectors[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2021, 624:126837.
- [18] Sundar L S, Singh M K, Sousa A C M. Thermal conductivity of ethylene glycol and water mixture based Fe₃O₄ nanofluid[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2013, 49:17-24.
- [19] Zhang H, Chen H-J, Du X, et al. Photothermal conversion characteristics of gold nanoparticle dispersions[J]. Solar Energy, 2014, 100:141-147.
- [20] Gimeno-Furió A, Martínez-Cuenca R, Mondragón R, et al. Optical characterisation and photothermal conversion efficiency of a water-based carbon nanofluid for direct solar absorption applications[J]. Energy, 2020, 212:118763.
- [21] Menbari A, Alemrajabi A A, Rezaei A. Heat transfer analysis and the effect of CuO/Water nanofluid on direct absorption concentrating solar collector[J]. Applied Thermal Engineering, 2016, 104:176-183.
- [22] Huang J, Chen Z, Du Z, et al. A highly stable hydroxylated graphene/ethylene glycol-water nanofluid with excellent extinction property at a low loading for direct absorption solar collectors[J]. Thermochimica Acta, 2020, 684:178487.
- [23] Zhu W, Zuo X, Ding Y, et al. Experimental investigation on the photothermal conversion performance of cuttlefish ink nanofluids for direct absorption solar collectors[J]. Applied Thermal Engineering, 2023, 221:119835.
- [24] Li Z, Lei H, Kan A, et al. Photothermal applications based on graphene and its derivatives: A state-of-the-art review[J]. Energy, 2021, 216:119262.
- [25] Yang J, Jia Y, Bing N, et al. Reduced graphene oxide and zirconium carbide co-modified melamine sponge/paraffin wax composites as new form-stable phase change materials for photothermal energy conversion and storage[J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 163:114412.
- [26] 张天星, 吴智慧, 孙湑. 骨胶在古代大漆家具修复加固中的粘结强度分析[J]. 涂料工业, 2019, 49(6):63-67.
Zhang Tian-Xing, Wu Zhi-Hui, Sun tian. Analysis of bond strength of bone glue in ancient lacquer furniture restoration and reinforcement[J]. Coating Industry, 2019, 49(6):63-67.
- [27] 贺一卓, 刘文伟. 改性骨胶粘合剂在陶瓷成形中的作用机理分析[J]. 化学与黏合, 2020, (004):042.
He Yi-Zhuo, Liu Wen-Wei. Analysis of the mechanism of action of modified bone glue adhesive in ceramic forming[J]. Chemistry and Adhesion, 2020, (004):042.
- [28] Chen L, Xu C, Liu J, et al. Optical absorption property and photo-thermal conversion performance of graphene oxide/water nanofluids with excellent dispersion stability[J]. Solar Energy, 2017, 148:17-24.
- [29] 丁苏莹. ZnO 纳米流体光热特性的研究[D]. 上海第二工业大学, 2022.
Ding Su-Ying. Study on the photothermal properties of ZnO nanofluid [D]. Shanghai Polytechnic University,

2022.

- [30] Wang H, Li X, Luo B, et al. The MXene/water nanofluids with high stability and photo-thermal conversion for direct absorption solar collectors: A comparative study[J]. Energy, 2021, 227:120483.
- [31] Zhao Y, Zhang X, Hua W. Review of preparation technologies of organic composite phase change materials in energy storage[J]. Journal of Molecular Liquids, 2021, 336:115923.
- [32] Meng Z, Li Y, Chen N, et al. Broad-band absorption and photo-thermal conversion properties of zirconium carbide aqueous nanofluids[J]. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 2017, 80:286-292.

条状梯度结构吸液芯柔性平板热管传热性能实验研究

卢红岭, 贾力*, 王宙

(北京交通大学机械与电子控制工程学院, 微细尺度流动与相变传热北京市重点实验

室, 北京 100044)

(Tel: 010-51684321, E-mail: ljia@bjtu.edu.cn)

摘要: 随着可穿戴电子设备的发展, 传统热管已无法满足其散热需求, 因此柔性平板热管的研究得到广泛关注。基于此本文制作了厚度为 1.6 mm 的具有条状梯度结构吸液芯的柔性平板热管, 实验研究了不同蒸汽腔高度、外形尺寸、丝网目数对热管均温性及热阻的影响。同时为了评估不同样式热管传热性能最佳时的充液率范围, 提出了单位体积含液量的概念。结果表明蒸汽腔高度为 0.8 mm、具有 7#200 目+2#350 目条状梯度结构吸液芯的柔性平板热管, 当单位体积含液量位于 0.0003-0.0004 g/mm³ 区间内时传热性能最好, 最小热阻为 0.205 °C/W, 最大加热功率为 10 W。

关键词: 柔性平板热管, 条状梯度结构吸液芯, 蒸汽腔高度, 传热性能

0 前言

第五代通信技术(5G)的快速发展及商业应用引发了微电子器件的新一轮革命化浪潮^[1], 人们对人机交互体验需求的提升, 对便携式大屏带来的操控便利和视觉效果追求使得可折叠和可穿戴电子设备逐渐发展起来, 柔性热管因其自身具有柔性、可弯曲变形的特点, 从而实现与某些外形复杂的元件表面有效贴合并能够适应复杂的狭小安装空间^[2]而成为解决该类柔性电子器件高热流密度散热难题的首要选择^[3-4]。针对柔性热管, 国内外学者着重关注吸液芯结构及充液率对其传热性能的影响。

Ogushi 等人^[5]在 2003 年报道了有两个同轴吸液芯结构的柔性环形热管, 外芯由孔径为 1.2 μm 的聚四氟乙烯制成, 内芯由孔径为 12 μm 的聚乙烯制成, 内芯的作用是充当液体储存器。实验表明该吸液芯结构可以使环路热管具有良好的均温性且具有优异的传热性能。Lewis 等人^[6]通过电镀的方法使两层 200 目的铜丝网结合在一起作为柔性平板热管的吸液芯结构, 同时利用氧等离子体对铜丝网表面进行了亲水处理使其形成亲水表面, 其加热功率最大为 8 W。Lee 等人^[7]制造的新型柔性平板热管, 选用单层铜丝网作为吸液芯结构, 并在表面生成纳米结构来增强吸液芯的亲水性能, 对柔性平板热管的传热性能进行了实验测试, 结果表明: 在垂直方向工作时的热管性能最好, 热导率可以达到 3000 W/m·K。Boo 等人^[40]利用聚丙烯材料作为吸液芯研发了一种环路热管, 聚丙烯吸液芯通过压缩弹簧与轴向凹槽紧密接触, 针对吸液芯孔径为 0.5 μm、1 μm、20 μm、25 μm 的环路热管进行传热性能测试, 测试结果发现: 吸液芯孔径为 0.5 μm 的环路热管可实现 80 W 的热负荷, 热阻值最小为 0.8 K/W。Oshman 等人^[8]设计的聚合物平板热管, 其吸液芯采用的是铜微柱和丝网的混合结构, 结果表明采用该结构可以克服单一吸液芯结构毛细力提供不足、流动阻力大等缺陷。Liu 等人^[9]将三种不同充液率(20%、30%、40%)的工作液体填充到柔性平板热管中, 以研究其对传热性能的影响, 发现当工作液体的量足以浸没毛细管网结构时, 接近最佳充液率, 此时传热性能最好。

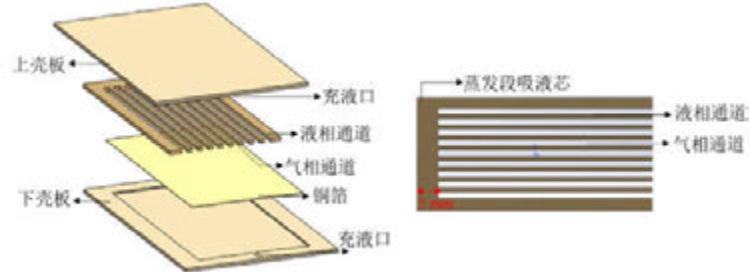
通过上述研究发现目前针对均匀结构吸液芯对柔性平板热管传热性能影响的研究较多, 但其无法平衡毛细压力和渗透率之间相互制约的关系, 且内部气液流动阻力也较大, 基于此本文制作厚度为 1.6 mm 的具有条状梯度结构吸液芯的柔性平板热管, 并探究不同蒸汽腔高度、外观尺寸、梯度组合对其传热性能的影响, 同时提出单位体积含液量的概念, 用于评估不同样式柔性平板热管传热性能最佳时的充液率范围。

1 实验系统及实验件

1.1 柔性平板热管及吸液芯

由于聚酰亚胺具有良好的热稳定性以及优良的机械性能,因此被作为本文中柔性热管的壳板基材, A 型热管的设计示意图如图 1 (a) 所示, 在几何尺寸为 67 (长) *37 (宽) *0.8 (厚) mm³ 的两个聚酰亚胺壳板上, 利用 CNC 加工技术刻蚀出尺寸为 57 (长) *27 (宽) *0.4 (深) mm³ 的吸液芯放置腔, 在上下壳板的一端各刻蚀一个直径为 1 mm 的半圆, 待上下壳板装配后将形成一个直径为 1 mm 的圆孔, 用于安装充液管。本实验中热管的封装采用热压法, 使用极耳胶作为热压粘结剂。封装过程主要由两步操作组成, 首先是吸液芯与下壳板的热压, 其次是上壳板与带有吸液芯的下壳板热压。

在实际操作中发现, 吸液芯与下壳板的热压过程中熔化的极耳胶会被吸液芯吸附, 从而造成吸液芯内孔隙堵塞, 为使吸液芯毛细性能不受热压过程的影响, 本文对热压工艺进行了升级改进, 即先将铜箔与吸液芯进行扩散焊接, 焊接工艺为真空环境, 升温至 850℃ 保温 1 h, 待焊接完成, 冷却至室温后取出, 之后在铜箔与下壳板间铺设极耳胶再进行热压, 热压工艺温度为 300℃ 保温 1 h, 同样在真空扩散焊炉中进行, 至此柔性平板热管封装第一步操作完成, 之后再再将带有吸液芯的下壳板与上壳板进行热压。本文中另一实验段即 B 型热管, 是在几何尺寸为 90 (长) *50 (宽) *0.8 (厚) mm³ 的两个聚酰亚胺壳板上, 利用 CNC 加工技术刻蚀出尺寸为 80 (长) *40 (宽) *0.25 (深) mm³ 的吸液芯放置腔, 其它参数与制作工艺与上述 A 型热管完全相同。



(a) A 型热管装配示意图 (b) 条状梯度结构吸液芯
图 1 A 型热管及吸液芯设计示意图

为提升吸液芯的毛细性能本文共设计加工了两种条状梯度结构吸液芯, 以 A 型热管中条状梯度结构吸液芯加工为例, 其结构示意图如图 1 (b) 所示, 其加工步骤如下: 首先将多层丝网叠放 (7 层 200 目, 2 层 350 目) 构造梯度结构, 放置于石墨模具内置于气氛烧结炉中, 使用氩气作为保护气, 在 850℃ 条件下保温 30 min, 而后开始自然冷却直至室温。取出冷却后的样品通过线切割的方法, 加工出吸液芯条状结构, 其中气相通道宽度为 1.5 mm, 液相通道宽度为 2.5 mm。吸液芯整体外形尺寸为 55 (长) *27 (宽) *0.8 (厚) mm³, 其长度略小于 A 型热管气腔内腔总长度, 目的是为了在冷凝端为蒸汽提供分配通道, 保证冷凝后的工质沿液相通道均匀回流至蒸发端。蒸发末端吸液芯留有长度 5 mm, 用于收集冷凝端回流液体, 再次分配到不同的液体通道中。

本研究中另一实验段 B 型热管内条状梯度吸液芯外形尺寸为 78 (长) *40 (宽) *0.5 (厚) mm³。条状吸液芯的梯度结构由 3 层 250 目丝网和 2 层 350 目丝网构造, 其余设计方法、参数、工艺均与 A 型热管具有的条状吸液芯相同。

表 1 热管类型及参数

柔性平板热管型号	A 型热管	B 型热管
柔性平板热管几何尺寸	67*37*1.6 mm ³	90*50*1.6 mm ³
条状梯度结构吸液芯厚度及蒸汽腔高度	0.8 mm	0.5 mm
构造梯度结构丝网目数	7#200 目+2#350 目	3#250 目+2#350 目

1.2 热管传热性能测试系统

图 2 (a) 所示为热管传热性能测试系统示意图。整个测试系统由加热模块、数据采集模块、抽真空模块和热管样品四部分组成。其中选用陶瓷加热片作为热源, 为了降低热源与热管间的接触热阻, 在两者空隙间涂抹导热系数为 5 W/m · K 的导热硅脂。整个装置为了减少

热损失，除冷凝端外，样品其余部分均包裹保温棉。热电偶的布置方式如图 2 (b) 所示：沿热管上壳板中线位置轴向放置 5 个热电偶，其中 T1、T2 位于陶瓷加热片周围用来测量蒸发端的温度，T3 用来测量绝热段的温度，T4、T5 用来获取冷凝端的温度。为了模拟电子设备的实际运行状态，整个系统的冷却方式选择自然对流冷却。在测试过程中，热管表面温度在 5 min 内变化幅度小于 0.5 °C 时，认为达到稳定状态，此时可以增大输入功率继续实验，当蒸发端温度超过 80 °C 时停止实验。

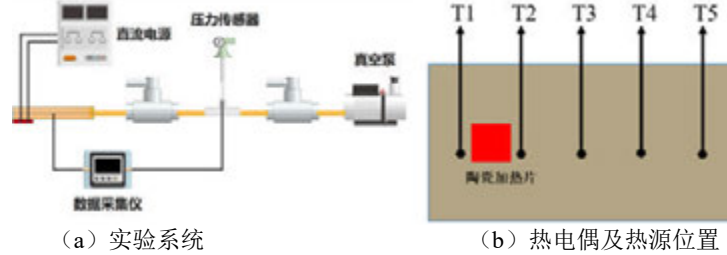


图 2 热管传热性能测试平台及热电偶和热源布置示意图

1.3 数据处理及不确定度分析

热阻是用来衡量热管传热性能优劣的重要指标，其计算公式为：

$$R = \frac{T_e - T_c}{Q} \quad (1)$$

其中：

$$T_e = \frac{1}{2}(T1 + T2) \quad (2)$$

$$T_c = \frac{1}{2}(T4 + T5) \quad (3)$$

Q 为热负荷。为了表征丝网结构对气液流动压降的影响，需要分别计算气相和液相压降。

根据达西定律，液相压降为：

$$\Delta P_l = \frac{\mu_l L_{eff} Q}{K \rho_l A_w h_{fg}} \quad (4)$$

其中， μ_l 为液相工质的动力粘度，K 为吸液芯渗透率， L_{eff} 为热管的有效长度， ρ_l 为液体密度， A_w 为液体流动截面积， h_{fg} 为汽化潜热。

气相压降表示为^[10]：

$$\Delta P_v = \frac{12\mu_v Q}{\rho_v a b D_v^2 h_{fg} (1+s)^2 (1 - \frac{48}{\pi^5} \times 4 \tanh \frac{\pi}{2s})} L_{eff} \quad (5)$$

其中，a、b、s 分别为气相通道的半宽、半高和通道高宽比，通道高宽比由下式定义：

$$s = \frac{b}{a}$$

(6)

D_v 表示气相通道特征直径， μ_v 表示气相动力粘度， ρ_v 表示蒸汽密度。

本文将充液率定义为充液体积与吸液芯孔隙体积的比值，计算公式如下：

$$\phi = \frac{V_l}{V_c} \quad (7)$$

实验测量装置在实验开始前都已进行标定，压力传感器的精度为±0.25%。T 型热电偶精度为±0.10 °C，直流电源的电压和电流读数精度分别为±1%和±0.50%。柔性平板热管热阻的不确定度根据 Moffat^[11]的公式进行计算为 0.5%。

2 实验结果与讨论

2.1 A 型热管传热性能测试

为探究条状梯度结构吸液芯对柔性平板热管传热性能的影响机理,首先对具有 7 层 200 目和 2 层 350 目丝网叠放烧结的条状梯度结构吸液芯的 A 型热管进行传热性能测试。不同充液率下热管的蒸发端最高温度随加热功率变化曲线如图 3 (a) 所示,由图可知当加热功率由 2 W 增大到 5 W 过程中,110%充液率时蒸发端温度最高,而充液率 160%时与充液率 70%时蒸发端温度略低,之后随着加热功率的继续增大,110%充液率时蒸发端温度升高速率逐渐降低,与充液率 160%时及充液率 70%时对应蒸发端温差逐渐减小,且在加热功率大于 7 W 时,110%充液率时蒸发端温度开始低于充液率 160%时与充液率 70%时蒸发端温度,最大温差超过 5 °C。

上述现象主要是由于在热管传热性能测试初期加热功率较小,充液率为 70%时吸液芯内液层最薄,因此启动速度最快,蒸发端温度较低,但是随着加热功率的增大,吸液芯内的工质因不断汽化而减少,会造成蒸发端液体供给量的不足,直至出现局部烧干,到达传热极限,导致了蒸发端温度和如图 3 (b) 所示热阻的快速上升。充液率 160%时蒸发端温度也较低,是由于其吸液芯内工质量较多,因此热容更大,对应蒸发端温度较低,但是随着加热功率的增大,由于其充液量过高,气相通道被液相工质占据,因此增大了气相流动压力损失和液相逆流阻力,因此蒸发端温度及如图 3 (b) 所示热阻较高。随着加热功率的增加,适中充液率 110%时其液层厚度位于 160%和 70%两者之间,因此在初始加热阶段启动性能及传热方式导致其 5 W 前蒸发端温度略高,但是随着加热功率的增加,适中的充液率能保证蒸发与回流持续进行,不会出现局部蒸干现象,且液相工质占据气相通道占比较小,蒸汽流动阻力较小,因此蒸发端温度及如图 3 (b) 所示热阻会逐渐减小,其中热阻最小可低至 0.205 °C/W,因此该充液率为 A 型热管的最佳充液率。

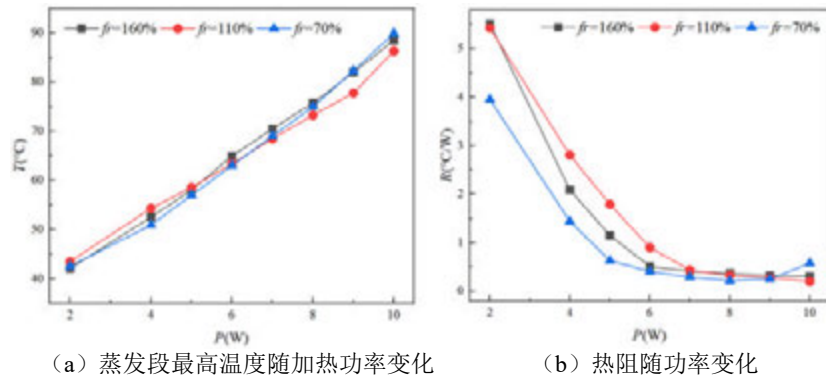


图 3 不同充液率下 A 型热管最高温度及热阻随加热功率变化规律

如图 4 所示为最佳充液率 A 型热管温度分布曲线,由图可知在加热功率较小时蒸发端与冷凝端存在较大温差,这是由于低加热功率时液体蒸发量较小,气体扩散速率相对较低,因此在尚未到达冷凝端之前即发生冷凝。随着加热功率的增加,液相工质蒸发速率提高,气相工质流动速率加快,1.5 mm 宽的气相通道与 2.5 mm 宽的气相通道能够保证两相循环高效进行,因此均温性明显提升。

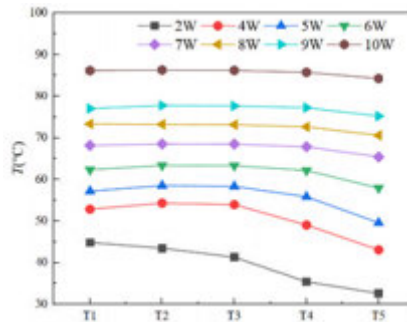


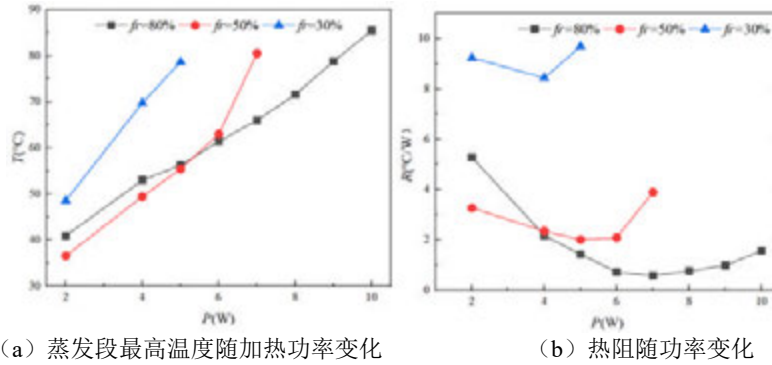
图 4 不同加热功率下 A 型热管温度分布

2.2 不同几何参数热管对传热性能的影响

如图 5 所示为 B 型热管在不同充液率下蒸发端最高温度及热阻随加热功率变化曲线, 由图可知, 在相同加热功率下, 充液率为 30% 时蒸发端温度最高, 这是由于吸液芯内液相工质较少, 启动后很快出现了局部蒸干现象, 达到了传热极限, 因此在 5 W 时蒸发端已接近 80℃。充液率为 30% 时, B 型热管对应热阻也在蒸发端吸液芯完全蒸干前 (4 W 前) 出现短暂下降, 之后相变换热机制基本消失, 转变为依靠热管的导热进行热量传递, 因此热阻开始增大, 此时工质量是影响传热性能的主导因素, 因此吸液芯的梯度设计并不能促进工质的回流, 从而避免局部蒸干现象的产生。

当充液率增大为 50% 时, 由于吸液芯内工质量有所增加, 相变换热能力增强, 因此蒸发端温度最低, 在充液率增加以及梯度结构的共同作用下虽然推迟了局部蒸干现象的出现, 但因充液率增加幅度有限因此并未能彻底消除该现象的出现, 之后随着加热功率的增加, 在 6 W 之后气相通道内气相工质量增加, 吸液芯内液相工质逐渐减少开始出现局部蒸干现象, 此时蒸发端温度及对应热阻均出现急剧增大。

继续增大充液率至 80% 时, 在加热功率为 5 W 前蒸发端温度略高于充液率 50% 时对应的蒸发端温度, 这是由于充液量较大, 吸液芯内液膜较厚, 增大了启动惰性。在 5 W 之后, 该充液率下 B 型热管的蒸发端温度及热阻有小幅增大, 这是由于在热管的装配过程中大目数丝网置于紧贴壳板壁面位置, 因此构成了指向壁面的毛细力, 使工质能够沿壁面回流, 同时减小了气液两相间的流动阻力, 因此能够维持两相循环持续进行, 不会使吸液芯出现完全干涸的现象。



(a) 蒸发段最高温度随加热功率变化

(b) 热阻随功率变化

图 5 不同充液率下 B 型热管蒸发端最高温度及热阻随加热功率变化规律

B 型热管不同加热功率下温度分布如图 6 所示, 由图可知, 在整个加热过程中温度均匀性较差, 在加热初期由于加热功率较小, 热管尚未完全启动, 蒸发量较小, 气体扩散速率相对较低, 因此蒸发端与冷凝端温差较大。之后随着加热功率的增加, 液相工质蒸发速率提高, 热管完全启动, 因此在 6 W-7 W 时冷凝端与蒸发端温差较小。继续增大加热功率, 结合如图 5 (b) 该充液率下加热功率随热阻的变化曲线可知, 热阻开始出现小幅度的增大, 这说明吸液芯内已经开始出现了局部蒸干或供液不足的现象, 因此相变换热能力下降, 冷凝端与蒸发端温差又开始逐渐增大。

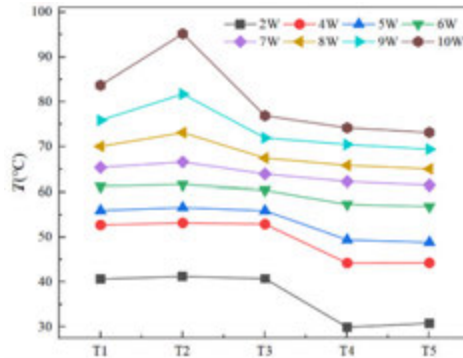


图 6 不同加热功率下 B 型热管温度分布

对于不同几何尺寸的柔性平板热管来说,即使吸液芯结构相同,但在实验过程中依然需要通过多次充液分别测试其不同充液率下的传热性能,从而确定最佳充液率的范围。通过实验发现在实际运行过程中只要单位体积内工质量保持在一定范围内,柔性平板热管即可发挥最佳传热性能,即柔性平板热管的最佳充液率范围随其几何尺寸发生变化,但单位体积最佳含液量范围却始终保持不变,因此在进行最佳传热性能测试实验过程中可通过单位体积最佳含液量计算出最佳充液率。单位体积含液量概念的提出为确定柔性平板热管最佳充液率范围提供了新的依据。其定义为单位蒸汽腔体积内含液量,计算表达式为:

$$F = \frac{m}{V} \quad (8)$$

式中 F 表示单位体积含液量, m 表示工质质量, V 表示蒸汽腔体积。

A 型热管 (160%、110%、70%) 和 B 型热管 (80%、50%、30%) 在六种充液率下单位体积含液量如图 7 所示,当单位体积含液量低于 0.0003 g/mm^3 时,对应热管无论几何参数与充液率如何改变,均会出现供液不足以及局部蒸干现象,均无法获得热管的最佳传热性能。而当单位体积含液量大于 0.0004 g/mm^3 时,过量的液相工质会占据气相通道,且启动性能较差,因此具有较高的蒸发端温度和较大的热阻。只有单位体积含液量位于 $0.0003\text{-}0.0004 \text{ g/mm}^3$ 这一较窄的区间内,对应热管具有较好的传热性能。

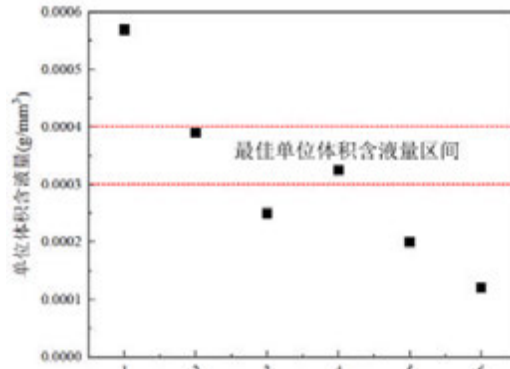


图 7 不同充液率下单位体积含液量

3 结 论

本文研究了几何特征及吸液芯结构特征对柔性平板热管传热性能的影响,通过耦合换热面积、蒸汽腔高度和充液率等参数,提出了单位体积含液量的概念;主要得到以下结论:

1) 具有 7#200 目+2#350 目条状梯度结构吸液芯的柔性平板热管,在低充液率时启动性能较好,高功率时会出现局部烧干。高充液率时液相工质会占据气相通道,从而增大气相流动压力损失和气液相逆流阻力。适中充液率 (110%) 能保证蒸发与回流持续进行,消除局部蒸干现象,且液相工质占据气相通道占比较小,热管传热性能最好。

2) 1.5 mm 宽的气相通道与 2.5 mm 宽的液相通道,在加热功率较大时能够保证两相循环高效进行,提升热管的均温性。但在热管未完全启动或出现供液不足时,由于蒸发速率较低相变换热能力下降,会导致冷凝端与蒸发端温差增大。

3) 提出了单位体积含液量的概念,并得到热管传热性能最佳时的单位体积含液量分布规律:单位体积含液量低于 0.0003 g/mm^3 时,会出现供液不足以及局部蒸干现象;当单位体积含液量大于 0.0004 g/mm^3 时,液相工质会占据气象通道,热管启动性能较差;只有单位体积含液量位于 $0.0003\text{-}0.0004 \text{ g/mm}^3$ 区间内,对应热管具有最佳的传热性能。

致谢: 本文得到教育部基本科研业务费重点项目资助 (No. 2022JBCG002)。

参考文献

- [1] Wang J, Wang Q. Development and Expectation of Heat-Pipe Technology and Wick Research. Chemical Industry and Engineering Progress, 2015, 34(4): 891-902
- [2] Chen X, Ye H, Fan X, et al. A Review of Small Heat Pipes for Electronics. Applied Thermal Engineering, 2016, 96: 1-17

- [3] 王宙,银了飞,丁艺,崔卓,贾力.具有梯度结构吸液芯的均热板传热特性.工程热物理学报, 2023, 44(02): 532-539
WANG Zhou, YIN Liao-Fei, DING Yi, CUI Zhuo, JIA Li. The Heat Transfer Characteristics of Vapor Chambers with Gradient Structured Wicks. Journal of Engineering Thermophysics, 2023, 44(02): 532-539
- [4] 陈恭, 汤勇, 张仕伟, 钟桂生, 孙亚隆, 李杰. 超薄均热板的研究现状及发展趋势. 机械工程学报, 2022, 58(12): 198-207
CHEN Gong, TANG Yong, ZHANG Shi-wei, ZHONG Gui-sheng, SUN Ya-long, LI Jie. Development Status and Perspective Trend of Ultrathin Vapor Chamber. Journal of Mechanical Engineering, 2022, 58(12): 198-207
- [5] Tang H, Tang Y, Yuan W, et al. Fabrication and Capillary Characterization of Axially Micro-Grooved Wicks for Aluminum Flat-Plate Heat Pipes. Applied Thermal Engineering, 2018, 129: 907-915
- [6] 黄豆. 吸液芯毛细性能及均热板传热特性实验研究: [硕士论文]. 北京: 北京交通大学, 2020
HUANG Dou. Experimental Investigation on Capillary Performance of Wick and Heat Transfer Characteristics of Vapor Chamber: [Master's Thesis]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2020
- [7] Cui Z, Jia L, Wang Z, et al. Thermal Performance of an Ultra-thin Flat Heat Pipe with Striped Super-Hydrophilic Wick Structure[J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 208: 118249
- [8] 刘龙飞. 碳纤维毛细芯平板环路热管的性能研究及优化[D]. 济南: 山东大学, 2019
LIU Long-fei. Study and Optimization of Flat Loop Heat Pipe with Carbon Fiber Capillary Wicks [Master's Thesis]. Jinan: Shandong University, 2019
- [9] Lu L, Sun J, Liu Q, et al. Influence of Electrochemical Deposition Parameters on Capillary Performance of a Rectangular Grooved Wick with a Porous Layer. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 109: 737-745
- [10] Aoki H, Ikeda M, Kimura Y. Ultra thin heat pipe and its application. Frontiers in Heat Pipes, 2011, 2: 043003-5
- [11] Moffat Robert J. Describing the Uncertainties in Experimental Results. Experimental Thermal and Fluid Science, 1988, 1(1): 3-17

基于时序卷积神经网络和迁移学习的光伏故障诊断方法

王淳¹, 滕佳音², 商佐港³, 席旻^{1*}

(1 西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710000)

(2 北京京航计算通讯研究所, 北京 100000)

(3 西安交通大学机械学院, 西安 710000)

(Email: huanxi@xjtu.edu.cn)

摘要 为进一步完善光伏阵列的故障诊断方法, 本文提出一种基于时序神经网络 (TCN) 并结合迁移学习的算法来实现考虑时序关系的普适性故障分类。首先利用 Matlab/Simulink 构建六种 3×4 光伏阵列模型, 获取正常工作和五种故障的运行数据共 10000 组, 并提取 6 个故障特征参数。再通过 TCN 建立时序关系下的故障诊断模型, 通过调整超参数和神经网络结构得到最大准确率为 97.3%。最后, 为实现模型泛化, 通过冻结式迁移学习将此模型应用于另一个光伏阵列模型上并进行微调, 仅通过 1200 组数据即可达到 90.9% 的准确率, 相对于直接调用模型提高了 7.1%。本文提出的方法为光伏阵列故障诊断模型的完整性、准确性、普适性的提高提供了新的思路和策略。

关键词 光伏阵列; 故障诊断; 时序卷积神经网络; 迁移学习

0 前言

光伏发电系统是一种新型的可再生能源发电系统, 具有环保、节能、安全等优点, 越来越受到人们的关注。受双碳目标的驱动和国家政策的号召, 寻找和利用稳定、清洁的可再生能源已成为能源行业的首要任务。近年来, 随着我国光伏发电技术的进步和光伏并网发电规模的不断扩大, 在恶劣的自然环境下工作的光伏阵列面积大、分布广, 容易出现组件短路、开路、老化和遮荫等故障, 这些故障可能导致系统效率下降或者完全停止发电^[1]。光伏发电系统的故障检测和状态评估是保障系统高效运行和延长系统寿命的有效手段, 具有重要的现实意义。目前, 主要的光伏故障诊断方法包括以下四种。(1) 基于电参数的故障检测方法: 这种方法通过对光伏系统的电压、电流等参数进行监测和分析, 来检测和诊断故障, 但这种原始的方法由于光伏组件日趋复杂的工作条件而逐渐被淘汰;(2) 基于图像处理的故障检测方法: 这种方法通过对光伏组件的图像数据进行处理和分析, 来检测和诊断故障, 但由于成本较高, 无法大规模应用于实际工程中;(3) 基于物理模型的状态评估方法: 这种方法通过建立光伏系统的物理模型, 来评估系统的

¹ 基金资助项目: 本文得到国家自然科学基金面上项目 (52076163) 的资助。

状态和性能，由于涉及大量复杂的原理和数学物理模型，极少得到深入挖掘；（4）基于机器学习的故障检测方法：这种方法通过对大量的光伏系统数据进行学习和训练，来检测和诊断故障。目前，由于精度高且很少涉及复杂原理，基于机器学习的方法是光伏故障检测和健康状态评估的研究热点。

目前，已经有很多学者对基于机器学习的故障诊断方法展开了相关研究。武文栋^[2]等人在传统 BP 神经网络的基础上利用 Matlab/Simulink 建立光伏故障仿真模型并提出了一种基于改进麻雀搜索算法优化 RBF 神经网络（ISSA-RBF）的光伏故障诊断方法，故障诊断精度达到 94.8%。宋远大^[3]等人提出一种基于完全邻域保持嵌入（Complete Neighborhood Preserving Embedding, CNPE）的热斑故障诊断方法，采用流形学习从光伏组件运行数据中提取非线性特征，在不借助红外图像的前提下，实现组件状态高灵敏检测，并依托国家电网电力科学研究院实验平台进行实验验证，证明方法可行且效果良好。熊昌全^[4]等人采用主成分分析法建立了 PCA（Principal Component Analysis）故障诊断模型，并通过实际的运行数据和故障数据验证了模型的准确性和有效性。陈克松^[5]通过仿真对光伏阵列的一系列故障进行分析，而后引入门控循环单元 GRU（Gate Recurrent Unit）并对一维卷积神经网络进行改进，再通过生成对抗网络 GAN（Generative Adversarial Networks）对数据进行增强，最后引入半监督学习减少了对标签样本的增强。结果表明此方法大大提高了模型对于故障分类的精度。

总的来说，现有研究中引入的故障特征和故障类型存在一定的局限性，诊断模型的复杂程度高，且无法识别多个故障叠加的情况；此外，当光伏阵列模型发生变化，诊断方法往往不能达到在原模型上训练和测试时的效果，说明模型的只能面向某种特定的光伏阵列模型，应用范围受限，普适性较低。基于光伏阵列故障诊断的研究现状，本文基于上述问题增加了两种故障诊断特征，提出了一种基于时序神经网络的光伏故障诊断模型，并利用迁移学习的概念实现模型的推广和泛化，扩大其实际应用范围。

1 模型构建

1.1 光伏阵列仿真模型构建

为便于后续模型泛化能力和普适性的验证，本文通过 Matlab/Simulink 分别搭建出两个的光伏阵列仿真模型 PV-Model A 和 PV-Model B。光伏模块单体的参数如表 1 所示。

表 1 光伏组件电气参数

参数	PV-Model A	PV-Model B
串并联结构	3*4	5*5
光伏板型号	Aavid Solar ASMS-165P	Jinko Solar Co._Ltd JKM400M_72L_V
最大功率点电压 (U_{mppt})/V	35.0	41.7
最大功率点电流 (I_{mppt})/A	4.71	9.6
开路电压 (U_{oc})/V	43.5	49.8
短路电流 (I_{sc})/A	5.25	10.36
最大功率 (P_{mppt})/W	164.85	400.32

光生电流/A	5.28	10.38
串联电阻/ Ω	0.63	0.23

1.2 故障仿真模型设计

本文涉及的光伏阵列故障主要包括五种：遮荫、老化、开路、短路、以及复合故障，通过人工干预的方式模拟上述故障发生时光伏阵列的性能：

- （1）遮荫故障：设置部分光伏阵列的光照强度为正常值的 40%；
- （2）老化故障：在某条串联支路上增加 3.0 Ω 电阻；
- （3）开路故障：减少一列并联支路；
- （4）短路故障：在某一光伏模块两端并联一个 $1\times 10^{-6}\Omega$ 的电阻；
- （5）复合故障：前四种故障同时出现的情况，对应于实际运行中可能同时存在多种故障的场景。

光伏阵列运行的 I - U 、 I - P 曲线分别如图 1 及图 2 所说。由图 1 及图 2 可知，不同故障类型下光伏阵列的最大功率点电压 U_{mppt} 、最大功率点电流 I_{mppt} 、开路电压 U_{oc} 、短路电流 I_{sc} 、最大功率 P_{mppt} 中至少一个参数会发生明显变化，如图 1、图 2 所示。此外，观察 P - I 曲线可知，当发生遮蔽故障时，曲线出现“多峰”现象，因此 P - I 曲线的极值点个数 N 也可以反映光伏阵列的故障类型。而不同气象情况会直接影响各类故障的输出情况，因此实时的气温（ T ）和太阳辐照度（ SSR ）也应当纳入考虑。综上，故障模型的特征参数选择这 8 个变量作为 TCN 故障诊断模型的输入层变量。同时相应定义了诊断模型包括正常运行和五种故障类型的 6 个输出层变量，对应标签如表 2 所示。

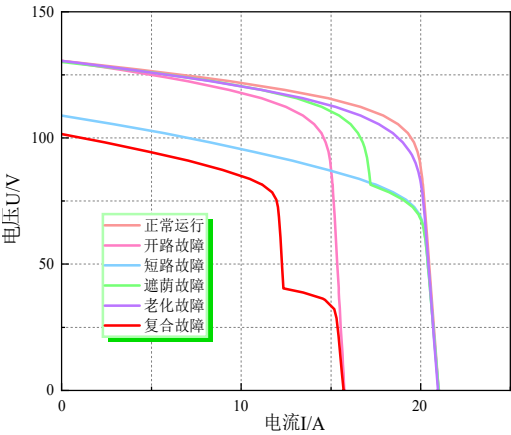


图 1 六类运行工况的 I - U 曲线

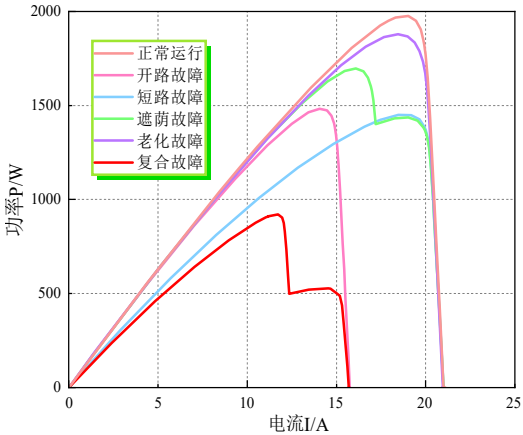


图 2 六类运行工况的 I - P 曲线

表 2 模型输出层变量选取	
变量	分类标签
正常状态	0
开路故障	1
短路故障	2
遮荫故障	3
老化故障	4
复合故障	5

2 算法原理及改进

2.1 时序卷积神经网络

由于光伏阵列的输出和天气情况密切相关，而天气数据具有一定的时序性，因此光伏阵列当前的输出不是独立的，而是与之前的输出之间具有一定的关联。目前用于时序任务的经典算法包括循环神经网络（Recurrent Neural Network, RNN）、长短时记忆网络（Long Short Term Memory Network, LSTM）等。RNN 在处理时序数据时有优越的表现，但由于其训练时需要存储隐藏状态导致消耗大量内存，且随着网络深度的增加会面临梯度消失和梯度爆炸问题。对此，LSTM 等基于 RNN 的改进结构逐渐进入人们的视野。LSTM 算法通过“门”的机制使梯度稳定不会消失，并利用记忆单元实现对长期记忆的控制，弥补了短期记忆覆盖长期记忆的缺陷。但由于网络结构本身的性质，串行计算、消耗内存过大等问题仍未得到解决^[6]。

而时序卷积网络（Temporal Convolutional Network, TCN）的提出为序列预测提供了一种基于卷积的解决方案，其本质上是一种特殊的卷积神经网络（CNN），原始结构主要由残差结构、因果卷积、膨胀卷积构成。TCN 的结构模型如图 3 所示。整体上使用残差结构（Residual Block）能有效避免梯度消失，保证模型的泛化能力。因果卷积（Causal Convolution）是单向结构，层层之间具有因果关系，保证不会错失历史信息或未来数据从而对模型性能产生影响。膨胀卷积（Dilated Convolution）通过强制使每层的感受野指数增长来防止处理较长时序输入数据时出现网络过深的现象，从而解决因果卷积计算消耗过大的问题^[7]；此外，可以由采样膨胀因子 d 控制输入的采样间隔^[8]。为了防止模型过拟合，使用 Dropout 方法随机放弃一些神经元，减小网络对数据微小变化响应的敏感度，提高处理未知数据时的稳定性和泛化能力^[9]。

综上，TCN 在完成序列任务时具有可变长度输入、并行计算、感受野大小灵活可变、梯度稳定、内存消耗小等优势，因此本文选择 TCN 进行光伏故障诊断。

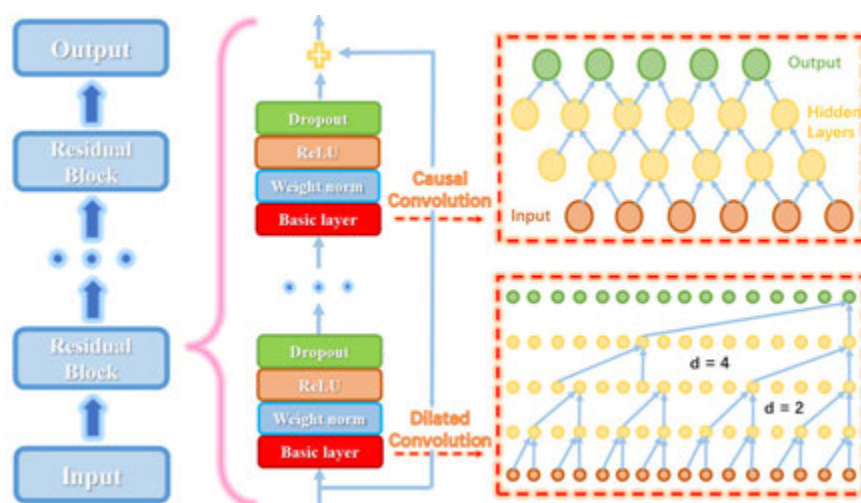


图 3 时序卷积神经网络结构示意图

2.2 迁移学习

由于实际运行中工业场景多变复杂,因此良好的泛化能力是诊断模型的重要评价指标之一。而迁移学习(Transfer Learning, TL)能够跨领域、跨任务地利用旧数据分析新模型,得到了广泛的应用。迁移学习是指将在源域中训练好的模型的部分参数转移到目标域中,然后只需用较小的学习率在目标域上重新设计一个全连接层和输出层即可构成新的模型,也称为微调(Fine tuning)。迁移学习的目的就是充分利用源域的已有知识来学习目标域,通过实现信息共享来高效地完成类似的新任务^[10, 11]。

本文设想的模型应用场景如下:将在拥有大量有标签数据集 A 上训练好的故障诊断模型应用到另一个只有少量数据的数据集 B 上,实现在拥有较大数据量的源域中训练好的模型值进行微调即可在数据量很少的目标域上达到较高准确率的诊断任务。因此,此情景下采用三类迁移学习方法中的模型迁移较为适宜^[12, 13],整体思路如图 4 所示。

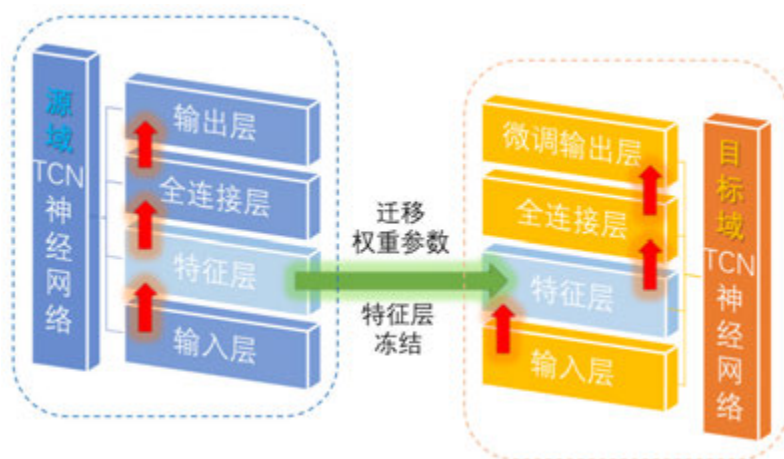


图 4 迁移学习流程示意图

3 仿真实验及数据分析

3.1 数据样本选取及预处理

实验平台:独立工作站的配置为 E5-1650 v4 CPU,32GB RAM, 64 位 Window 10 操作系统,服务器系统型号为 Precision Tower 5810,实验平台基于 Python 计算机语言,实验在算法框架 Pytorch 上实现。

本文采用西安市临潼区 2022 年 5-9 五个月中逐小时的气温(T)和太阳光辐照度(SSR)两类气象数据作为两个光伏阵列仿真模型 PV-Model A、PV-Model B 的输入,采用扰动观测法追踪最大功率点,得到最大功率点电流 I_{mppt} 、最大功率点电压 U_{mppt} 、开路电压 U_{oc} 、短路电流 I_{oc} 、最大功率 P_{mppt} 和 I-P 曲线极值点个数 N 六个输出参数。由于无辐照强度时光伏阵列处于非工作状态,无法判断故障,因此剔除每天辐照强度为零的数据点,整合得到输入数据集。以 PV-Model A 作为产生源域数据集的模型, PV-Model B 的输出数据为目标域数据集。为验证迁移学习在目标域的数据量较少时的学习效果,两个光伏阵列仿真模型的输出数据集大小分别为 10000 和 1200。其中,训练集为随机抽取的 80%数据,其余 20%为测试集,并采用 z-score 标准化进行数据预处理^[14]。其中,实

验所用的一组不同时刻下的输入数据示例如表 3 所示。

表 3 模型输出层变量选取

Time	T/°C	SSR/W·m ⁻²	Label	U_{mppt}/V	I_{mppt}/A	U_{oc}/V	I_{oc}/A	P_{mppt}/W	N
2022.8.1 6: 00	26.96	204.4	0	103.5	3.9	120.2	4.3	397.9	1
			1	105.2	2.9	120.2	3.2	296.7	1
			2	74.1	4.0	89.1	4.3	290.5	2
			3	73.8	4.0	119.0	4.3	287.6	3
			4	101.8	3.9	120.1	4.3	384.6	1
			5	36.6	3.0	85.5	3.2	106.2	3

3.2 实验过程及诊断结果

3.2.1 TCN 故障诊断结果分析及优化

初始训练参数设置：总迭代次数为 epoch=25，初始学习率为 1e-2，学习率动态下降（每十次迭代缩小十倍），利用 Adam 优化策略，激活函数为 ReLU。交叉熵(CrossEntropy Loss)能够衡量同一个随机变量中的两个不同概率分布之间的差异程度大小，因此本文采用交叉熵作为分类任务的损失函数来训练 TCN 模型^[15]。填充 padding 的大小为核函数的尺寸减 1。时序关系通过为特征增加时间通道的方式体现，由于每天光伏板的工作时间约为 9 小时，因此时间通道数设为 9。整体的初始网络结构图如表 4 所示。

表 4 TCN 网络结构示意图

残差模块	层名	卷积核尺寸	卷积核数量	步长
输入层				
Block1	Conv1	5*5@9	25	1
	Pooling	1*1	25	1
	ReLU		\	
	Dropout		\	
	Conv2	5*5@9	25	1
	Pooling	1*1	25	1
	ReLU		\	
	Dropout		\	
	Softmax			
输出层				

为了验证所提出 TCN 模型的性能,将其与同样能完成分类任务的 SVM 模型、LSTM 模型、CNN 模型进行对比，并采用相同数据集分别对 4 种模型通过混淆矩阵的方法综合三种评价指标（准确率 P 、召回率 R 、F1-score）进行训练与评估^[16]，结果如表 5 所示。各模型平均准确率和平均训练时间如图 5 所示。结果表明，虽然所需的训练时间较长，但 TCN 模型的准确率明显高于其他三种模型，在完成此任务时具有显著的优势。

表 5 不同模型性能对比

标签	SVM	LSTM	CNN	TCN
----	-----	------	-----	-----

	P	R	F1	P	R	F1	P	R	F1	P	R	F1
0	0.78	0.73	0.76	0.79	0.92	0.85	0.75	0.83	0.79	0.97	0.95	0.96
1	0.77	0.94	0.84	0.94	0.93	0.93	0.99	0.92	0.95	1.00	1.00	1.00
2	0.99	0.96	0.97	1.00	0.96	0.98	0.98	0.99	0.98	1.00	1.00	1.00
3	0.96	1.00	0.98	0.99	1.00	0.99	0.98	1.00	0.99	1.00	1.00	1.00
4	0.81	0.65	0.72	0.92	0.76	0.83	0.81	0.74	0.77	0.88	0.97	0.96
5	0.95	0.99	0.97	0.96	1.00	0.98	0.99	0.98	0.98	1.00	1.00	1.00

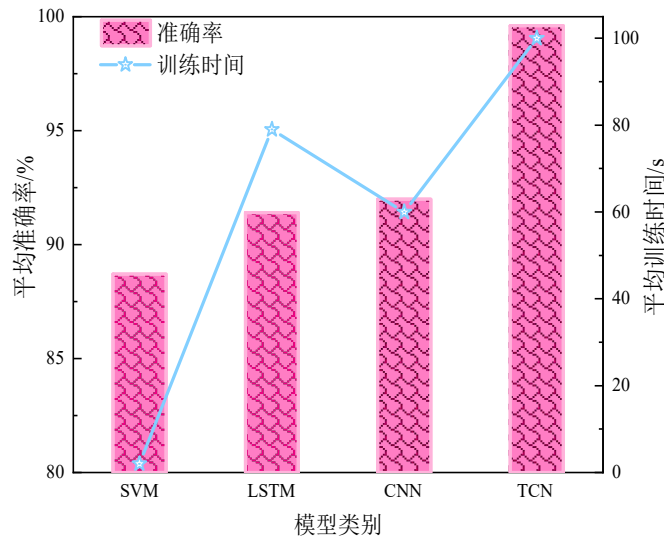


图 5 四种模型平均训练时间、准确率对比

从表 4 中可以看出，不管采用哪种模型，0 和 4 的诊断效果都相对较差。分析两类故障 $I-U$ 、 $I-P$ 曲线可知，正常运行和老化故障的运行特征十分接近，除了最大功率点 P_{mppt} 不同之外其余特征几乎完全一致，尤其是当老化电阻较小时，这两种工况很难区分。基于这种情况，在训练时引入线性特征增强的方法提高 P_{mppt} 特征的权重，使 P_{mppt} 特征更加突出，强化正常运行和老化故障两个标签之间的差异。引入线性增强后，在网络结构不变的前提下，准确率提高了 3%，说明方法的可行性和有效性。

TCN 模型的损失值 Loss 随训练次数 epoch 的变化如图 6 所示，可见模型在 epoch 在 25 左右损失值趋于稳定，因此为节约计算资源，固定 epoch=25 进行超参数调优。为了找到最优参数设置组合，以卷积核大小 k-size、丢弃率 dropout、层数 level、隐藏层个数 nhid 为变量，对比不同参数数值下的模型准确度和每个 epoch 所需时间，可以得出最优参数组合为：k-size=5，dropout=0.03，level=5，nhid=25，batchsize=12，所能达到的最高准确率为 97.3%。

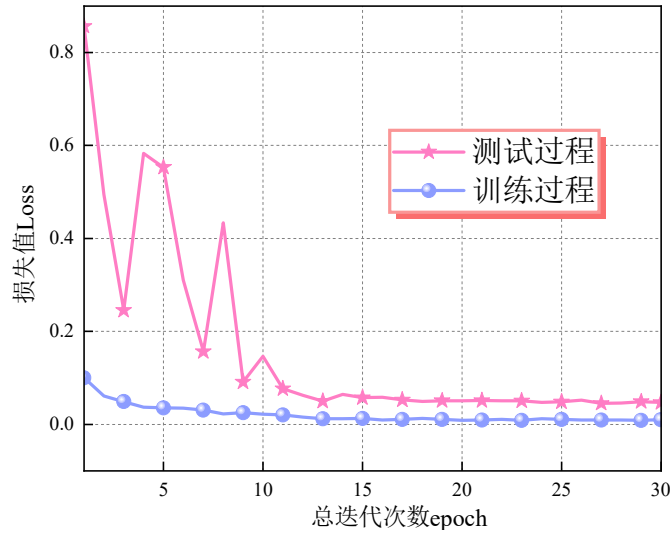


图 6 TCN 模型的损失值随迭代次数变化

3.2.2 TCN-TL 应用于 PV-Model B

建立一个与 PV-Model A 有相同征输出但光伏阵列结构参数不同的 PV-Model B。由于 PV-Model B 的六类运行数据总共数据只有 1200 组，若将在 TCN 故障诊断模型直接应用于 PV-Model B 上，则诊断准确率只有 83.8%。若应用迁移学习中的模型迁移，将训练好的 TCN 故障诊断模型中的特征层冻结，只微调全连接层，则即使仅有 1200 组数据，诊断准确率仍可达到 90.9%，相比于直接在目标域上训练且不进行迁移学习操作准确率提高了 7.1%。应用迁移学习前后 TCN 在新数据集上对各类故障的诊断准确率如表 6 所示。说明迁移学习在故障诊断中的实用性、可行性。

表 6 迁移学习前后诊断准确率对比

标签	迁移学习前	迁移学习后
0	0.85	0.82
1	0.56	0.79
2	1.00	1.00
3	1.00	1.00
4	0.67	0.88
5	1.00	1.00

4 结 论

(1) 本文通过 Matlab/Simulink 建立光伏阵列仿真模型，除 U_{mppt} , I_{mppt} , U_{oc} , I_{sc} 四个经典特征参数外还引入了 I - P 曲线极值点个数 N 和最大功率点功率 P_{mppt} ，通过西安市临潼区逐小时的气温 T 和太阳辐照度 SSR 计算得出六种工况的运行数据共 10000 组，并进行数据标准化处理。在对比 CNN、SVM、LSTM 和 TCN 四种算法结构后选择准确率最高的 TCN，并进行超参数优化和特征增强，最终使诊断准确性达到 97.3%。

(2) 为实现模型的泛化，引入迁移学习中的模型迁移方法，将在 PV-Model A 上训

练后的 TCN 故障诊断模型中的特征层冻结应用于只有 1200 组数据的 PV-Model B, 只对全连接层和输出层进行微调, 准确率仍可达到 90.9%, 相较于不进行迁移学习直接套用模型提高了 7.1%, 说明了迁移学习结合 TCN 在故障诊断领域中的实用意义。

参考文献

- [1] 武文栋, 施保华, 郑传良, 等. 基于 KPCA-ISSA-KELM 的光伏阵列故障诊断方法 [J]. 智慧电力, 2022, 50(11): 69-76.
- [2] 武文栋, 施保华, 郑传良, 等. 基于改进麻雀搜索算法优化 RBF 神经网络的光伏阵列故障诊断 [J]. 智慧电力, 2023, 51(02): 77-83.
- [3] 宋远大, 易辉, 缪小冬, 等. 基于完全邻域保持嵌入的光伏组件热斑故障诊断 [J]. 计算机集成制造系统: 1-16.
- [4] 熊昌全, 温贤茂, 张宇宁, 等. 光伏组件发电故障诊断方法研究 [J]. 科技创新与应用, 2023, 13(09): 77-81+5.
- [5] 陈克松. 基于深度学习的光伏组件故障诊断方法 [D]; 兰州理工大学, 2022.
- [6] 李文武, 张鹏宇, 石强, 等. 基于聚合混合模态分解和时序卷积神经网络的综合能源系统负荷修正预测 [J]. 电网技术, 2022, 46(09): 3345-57.
- [7] Fan J, Zhang K, Huang Y, et al. Parallel spatio-temporal attention-based TCN for multivariate time series prediction [J]. Neural Computing and Applications, 2021, (prepublish).
- [8] 翟剑锋. 基于 TCN 的时序数据研究 [J]. 电子技术与软件工程, 2021, (02): 196-8.
- [9] 姜娜, 严蜜, 李柠. 基于时序上采样卷积神经网络的风机叶片结冰检测 [J]. 控制与决策, 2022, 37(08): 2017-25.
- [10] 吴忠强, 卢雪琴. 基于深度迁移学习和 LSTM 网络的微电网故障诊断 [J]. 计量学报, 2023, (04): 1-9.
- [11] 姜午恺, 周平. 非平衡数据下基于自适应迁移与宽度学习的多工况故障诊断 [J]. 中国科学: 信息科学, 2023, 53(05): 946-71.
- [12] 柴铮, 汪嘉业, 赵春晖, 等. 面向工业监控典型监督任务的深度迁移学习方法: 现状、挑战与展望 [J]. 中国科学: 信息科学, 2023, 53(05): 821-40.
- [13] Ran Z, Hongyang T, Lifeng W, et al. Transfer Learning With Neural Networks for Bearing Fault Diagnosis in Changing Working Conditions [J]. IEEE Access, 2017, 5.
- [14] 张永峰, 陆志强. 基于集成神经网络的剩余寿命预测 [J]. 工程科学学报, 2020, 42(10): 1372-80.
- [15] Farha Y A, Gall J. MS-TCN: Multi-Stage Temporal Convolutional Network for Action Segmentation [J]. CoRR, 2019, abs/1903.01945.
- [16] 董臣臣, 孙大帅, 王景龙. 基于改进的在线迁移学习算法的电池高压故障预警 [J]. 储能科学与技术: 1-12.

基于节点非结构模型的质能交换网络优化

刘思琪 1, 崔国民 2*, 肖媛 3, 段欢欢

(上海理工大学, 上海 200000)

(Tel:13917209236, Email: cgm@usst.edu.cn)

摘要: 质量交换网络 (MEN) 和热交换网络 (HEN) 之间存在着复杂的耦合关系, 由此形成了质能交换网络综合问题。基于此, 本文介绍了一种新的质能交换网络的同步优化方法, 该方法是基于节点非结构模型的数学规划法, 以传质温度和质量流率为优化变量, 实现了质量交换子网络和热交换子网络的同步优化; 并且采用具有强大全局优化能力的强制进化随机游走算法进行求解。通过一个实例表明了该方法的可行性和有效性, 获得了更低的年度总费用。

关键词: 质量交换网络; 热交换网络; 质能交换网络; 节点非结构模型; 强制进化随机游走算法

0 前言

我国能源需求的增长导致煤炭、石油、天然气等化石能源的消耗日渐增大, 开展“节能减排”政策是必行之路。质量交换网络和热交换网络优化作为化工过程系统工程学的重要研究课题, 可以有效推进“节能减排”政策的实施。在质量交换网络优化过程中, 传质推动力的大小和方向遵循相平衡理论, 而传质温度通过影响相平衡关系间接作用于质量交换网络优化, 引入热交换网络优化可以改变传质温度进而达到最优化的目的。因此, 由质量交换子网络和热交换子网络组成的质能交换网络优化是化工过程系统工程学中的研究热点。

在质能交换网络优化中, 主要的难点是处理质量交换子网络和热交换子网络的耦合参数 (传质温度和质量流率), 传质温度决定了热交换子网络规模, 质量流率用以确定热交换子网络流股的热容流率, 这些耦合参数的值共同影响着质能交换网络优化。Srinivas 等人^[1]于 1994 年正式定义了质能交换网络优化问题, 并采用夹点法对公用工程用量和单元个数进行分步优化。随后, Papalexandri 等人^[2]基于多级超结构法解决了质能交换网络优化。近年来, Isafiade 等人^[3]基于夹点法和间隔超结构法分析了质能交换网络优化面临的难题, 采用枚举法处理传质温度, 实现了质能交换网络的分步和同步优化。都健等人^[4]采用超结构法建立了质能交换网络的分步优化数学模型, 先优化质量交换子网络, 再提取优化后的参数信息给热交换子网络进行优化, 得到了质能交换网络的最小年度综合费用。为实现质能交换网络的同步优化, Liu 等人^[5]结合质量夹点法和虚拟温焓图法, 作者考虑了所有潜在流股的可能性, 尽管这增加了优化变量的既定规模。

因此, 本文提出一种适用于质能交换网络同步优化的节点非结构模型, 相比于结构化模型, 该模型更加灵活和自由, 拓宽了算法在全局范围内的求解域。同时, 采用强制

进化随机游走（RWCE）算法进行模型求解，该算法具有较强的全局搜索能力，为质能交换网络的同步优化提供了有效手段。

1 问题描述

本文需解决的质能交换网络优化问题可描述为：一组富流通股、一组贫流通股（包括过程贫流通股和外部贫流通股）及一组冷热公用工程。其中，富流通股的质量流率、进出口温度及温度可行域、组分进口浓度和目标浓度已知；贫流通股质量流率上限、流通股进出口温度及温度可行域、组分进口浓度和出口浓度上限已知；冷、热公用工程的热容流率、进出口温度、传热系数已知。优化目标是实现质能交换网络的同步优化，求得最小的年度总费用，即质量交换子网络和热交换子网络的综合最优年度总费用。

为简化问题，对于低浓度的传质过程作如下假设：

- （1）流通股进出传质单元的质量流率视为常数；
- （2）传质单元绝热；
- （3）传质过程中流通股温度不变；
- （4）热交换过程只发生在传质过程之前或之后；
- （5）质量交换网络为单组分体系；
- （6）不考虑贫流股的再生；
- （7）传质温度仅与贫流通股温度有关，且贫富流通股组分间具有简单的线性相平衡关系，表达式为

$$y_k^* = m_{kl}x_l + b_{kl} \quad (1)$$

其中： b_{kl} 是平衡常数， y_k^* 是温度 T 下贫流通股 l 中浓度为 x_l 的溶质在富流通股 k 中的平衡浓度，相平衡系数 m_{kl} 是传质温度的单调函数， $m_{kl} = f(T)$ 。

2 质能交换网络的优化模型

质能交换网络不仅是质量交换子网络和热交换子网络的简单综合，在质能交换网络中，热交换子网络为质量交换子网络提供最优的传质温度，同时质量交换子网络为热交换子网络提供潜在冷流通股或热流通股（包括进出口温度和热容流率）。为了获得质能网络的最优匹配，超结构模型是目前常用的一种结构化模型，该模型首先按照固定模型预先设定流通股匹配的框架，随后基于既定框架对换热单元或传质单元进行优化，因而所得结构会受到结构限制。事实上，热交换子网络的流通股数目受制于质量交换子网络优化，网络规模无法确定，这给构建超结构模型带来了很大难题。本文采用一种全新的节点非结构模型可以很好地避免这类问题，2.1 节和 2.2 节将详细介绍适用于质能交换网络的节点非结构模型和数学模型。需要注意的是，本文所提出的模型适用于板式塔。

2.1 节点非结构模型

节点非结构模型在换热网络和质量交换网络中的可行性均得到了有效验证。节点非结构（NW-NSS）模型是基于非结构的思想，以节点形式量化换热单元或传质单元位置的一种新型质能网络优化模型。在节点非结构模型中，每股流体上可按需布置若干节点作为换热单元或传质单元的待选位，该模型在初始状态下为空结构，优化时换热单元或传质单元可以随机选择单元位置并与相应流通股进行匹配，单元匹配关系无结构限制。以 2 股富流通股、2 股贫流通股的质量交换子网络 R2S2 和 2 股基础热流通股、2 股基础冷流股的

热交换子网络 H2C2 为例，假设只有一条贫流通股需要换热，其节点布置示意图如图 1 所示。

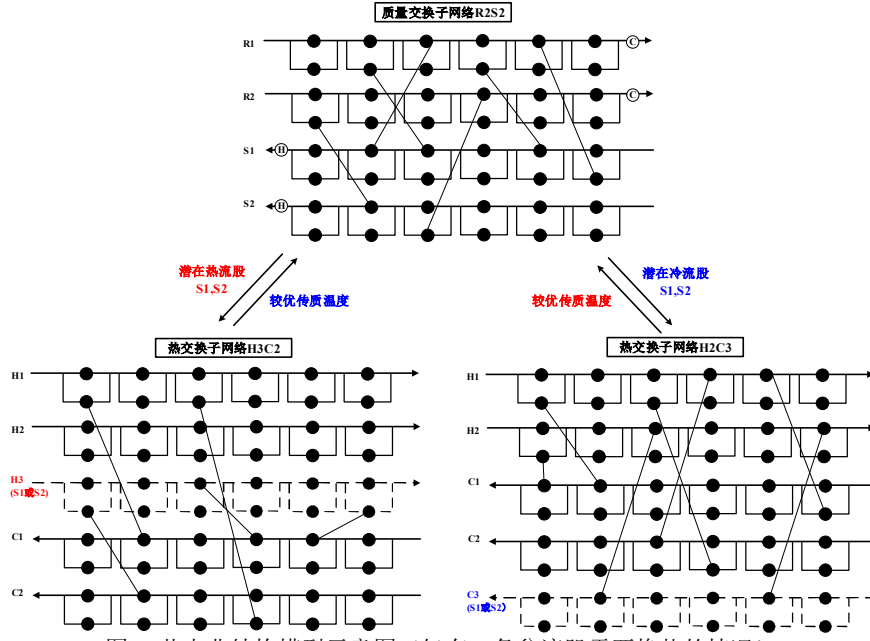


图 1 节点非结构模型示意图（仅有一条贫流通股需要换热的情况）

Fig. 1 Schematic diagram of NW-NSS model (A situation where only one lean stream needs heat transfer).

图中，R1、R2 代表富流通股，S1、S2 代表贫流通股，H1、H2 代表基础热流通股，C1、C2 代表基础冷流通股，H3、C3 代表潜在热流通股和潜在冷流通股，流通股上的黑色实心圆圈代表节点，⊙、Ⓜ代表冷热公用工程。对潜在流通股进行排列组合，可以得到三种热交换子网络规模，即 H2C2（即独立的热交换网络，本文不加以研究）、H3C2、H3C3。从图中可以看到，节点非结构模型中节点布置的机动性强，只要满足温度可行性约束，换热单元或传质单元允许交叉匹配，扩大了质能交换网络的求解域。

2.2 数学模型

本文基于节点非结构模型以及质能交换网络本质，建立了质能交换网络优化的数学模型，以最小年度费用（TAC）为优化目标，函数表达式如式所示，包含质量交换子网络和热交换子网络的年度费用。对于质量交换子网络，运行费用考虑了外部贫流通股的使用，固定投资费用与质量交换器有关；对于热交换子网络，成本包括换热器及冷热公用工程的运行费用和固定投资费用。

$$\min TAC = f_o^M + f_v^M + f_o^H + f_v^H \quad (2)$$

式中， f_o^M ， f_v^M 分别代表质量交换子网络的运行费用和固定投资费用， f_o^H ， f_v^H 代表热交换子网络的运行费用和固定投资费用。

质量交换子网络的运行费用 f_o^M 可表示为

$$f_o^M = \sum_{l=1}^{N_s} L_l \cdot C_l \quad (3)$$

式中， L_l 代表第 l 条贫流通股的质量流率， C_l 代表第 l 条贫流股的单价。

质量交换子网络的固定投资费用 f_v^M 可表示为

$$f_V^M = \sum_{k=1}^{N_R} \sum_{d_R=1}^{nd_R} \sum_{f_R=1}^{nf_R} N_{k,d_R,f_R} \cdot C_{stage} \quad (4)$$

式中， N_{i,d_R,f_R} 代表第 k 条富流股上第 d_R 个节点第 f_R 个分支上塔板数， C_{stage} 代表塔板单价。

热交换子网络的运行费用 f_O^H 可表示为

$$f_O^H = \sum_{i=1}^{N_H} (C_{cu} \cdot Q_{cu,i}) + \sum_{j=1}^{N_C} (C_{hu} \cdot Q_{hu,j}) \quad (5)$$

式中， C_{cu} 、 C_{hu} 代表冷热公用工程单价， $Q_{cu,i}$ 代表第 i 条热流股上冷公用工程的换热量， $Q_{hu,j}$ 代表第 j 条冷流股上热公用工程的换热量。

热交换子网络的固定投资费用 f_V^H 可表示为

$$f_V^H = \sum_{i=1}^{N_H} \sum_{d_H=1}^{nd_H} \sum_{f_H=1}^{nf_H} C_A \cdot A_{i,d_H,f_H} + \sum_{i=1}^{N_H} (C_A \cdot A_{cu,i}) + \sum_{j=1}^{N_C} (C_A \cdot A_{hu,j}) \quad (6)$$

式中， C_A 代表单位换热面积的价格， A_{i,d_H,f_H} 代表第 i 条热流股上第 d_H 个节点第 f_H 个分支上换热单元的换热面积， $A_{hu,i}$ 代表第 i 条热流股上冷公用工程的换热面积， $A_{cu,j}$ 代表第 j 条冷流股上热公用工程的换热面积。

2.3 模型求解

本文建立的数学模型为混合整数非线性规划（MINLP）模型，由于同时考虑了质量交换子网络和热交换子网络的优化，该模型具有极强的非凸性和非线性，为快速获取最优解，采用 RWCE 算法进行求解，RWCE 算法通过简单的随机游走进化和随机生成实现了连续型变量和整型变量的同步优化，全局搜索能力较强，其算法步骤如图 2 所示。

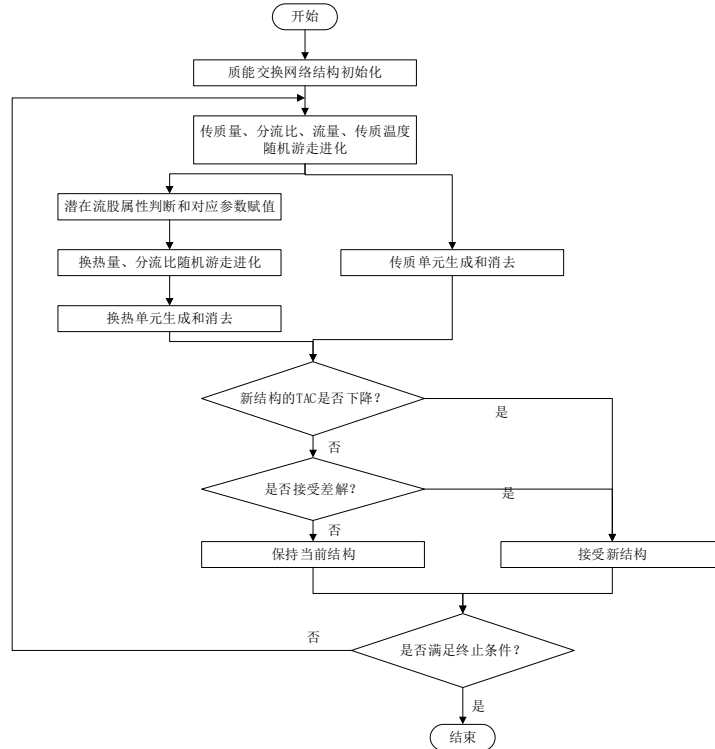


图 2 RWCE 算法流程图

Fig. 2 Flow sheet of RWCE algorithm.

3 实例求解

此算例取自文献^[3], 包含两个富含 H₂S 的富流股 (R1、R2)、一个过程贫流股 S1 和一个外部贫流股 S2。单价、流股和物性参数的数据列于表 1 和表 2, 每条流股对应的目标温度及温区见表 3, 表 4 给出了 4 种外部热流股 (H1、H2) 和冷流股 (C1、C2) 数据。贫流股传质温度 T_l 和 T_2 与相平衡常数的关系分别见方程 (7) 和 (8)。

$$S_1: m_1 = (5.86807 \times 10^{-8}) \times 10^{0.01024T_l} \quad (7)$$

$$S_2: m_2 = (9.386 \times 10^{-10}) \times 10^{0.0215T_2} \quad (8)$$

表 1 算例的费用数据

Table 1 Cost data for example.

项目	数值
运行时长 (h/a)	8600
塔板单价 (\$/tray/a)	4552
塔板效率 (%)	20
换热单元单价 (\$)	30000+750A ^{0.81}
年化系数 (-)	0.2
S2 单价 (\$/kg)	0.001
热公用工程单价 (kW/a)	120
冷公用工程单价 (kW/a)	30

表 2 算例中的贫、富流股数据

Table 2 Streams data for example.

R_l	G_l (kg/s)	y^{in}	y^{out}	S_k	L_l (kg/s)	x^{in}	x^{out}
R1	104	8.83*10 ⁻⁴	5.00*10 ⁻⁶	S1	40	0.07557	<0.115
R2	442	7.00*10 ⁻⁴	5.00*10 ⁻⁶	S2		0.001	<0.01

表 3 流股热力学数据

Table 3 Thermal data for stream.

流股	T^{in} (K)	T^{out} (K)	T^{lo} (K)	T^{up} (K)	c_p (kJ/kg/K)
R1	298	298	288	313	1.00
R2	298	298	288	313	1.00
S1	368	368	279	368	2.54
S2	310		280	330	2.40
HU	453	452			
CU	278	283			

表 4 外部流股热力学数据

Table 4 Thermal data for extra stream.

流股	Fc_p (kW/K)	T^{in} (K)	T^{out} (K)	h (kW/m ² /K)
H1	10.0	448	318	0.2

H2	40.0	398	338	0.2
C1	20.0	293	428	0.2
C2	15.0	313	385	0.2

求解该算例所得结果与文献对比，结果见表 5。从表中可知，本文的同步优化方法求得的最小年度费用最低，为 334.7 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$ ，其中质量交换子网络的年度费用为 165.5 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$ ，热交换子网络的年度费用为 169.2 $\text{\$}\cdot\text{a}^{-1}$ 。相比于文献^[3]，热交换子网络年度费用下降，质量交换子网络的年度费用上升，这是因为未参与传质过程的外部贫流通股 S2 也被利用，传质单元数（5）和塔板数（25）均增加了，质量交换子网络的固定投资费用和运行费用升高；在热交换子网络中，H3 具有更低的换热潜能（119 kW）从而导致年度费用大幅降低。在文献^[6]的优化结果中，质能交换网络的规模相同，均为 R2S2-H3C2，但是网络结构（见图 3）差异较大，热交换子网络的换热单元较文献少了 1 个，换热单元的换热面积增加，故热交换子网络的年度费用较本文上升，尽管其换热潜能仅为 103.7 kW；贫流通股 S2 的质量流率稍稍增加，质量交换子网络的运行费用升高，导致文献所得的质量交换子网络的年度费用低于本文。

表 5 结果对比

Table 5 Results comparison.

项目	T_1 (K)	T_2 (K)	L_1 (kg/s)	$x_{1,out}$	L_2 (kg/s)	$x_{2,out}$	TAC		
							HEN	MEN	HEN&MEN
文献值 ^[3]	286	-	10.1	0.115	0	-	295.4	54.6	350.0
文献值 ^[6]	368	280.8	39.4	0.085	1.48	0.010	178.3	164.2	342.5
本文	368	280.2	36.7	0.086	1.67	0.009	169.2	165.5	334.7

图 3 是本文所得质能交换网络的最优结构，即网络规模 R2S2-H3C2 对应的结构。从图中可以看到，质量交换子网络结构中有 5 个传质单元，热交换子网络结构中有 3 个换热单元、1 个热公用工程和 2 个冷公用工程，质量交换子网络中贫流通股 S2 的最优传质温度为 208.2°C，而目标温度为 310°C，具有 119 kW 的换热潜能，则抽取该流通股作为热交换子网络中的热流股 H3。在该网络结构中出现了传质单元的交叉结构，说明节点非结构模型的求解域较宽，更有利于搜索到最优解。上述结果证实了本文提出的同步优化方法应用于质能交换网络的有效性。

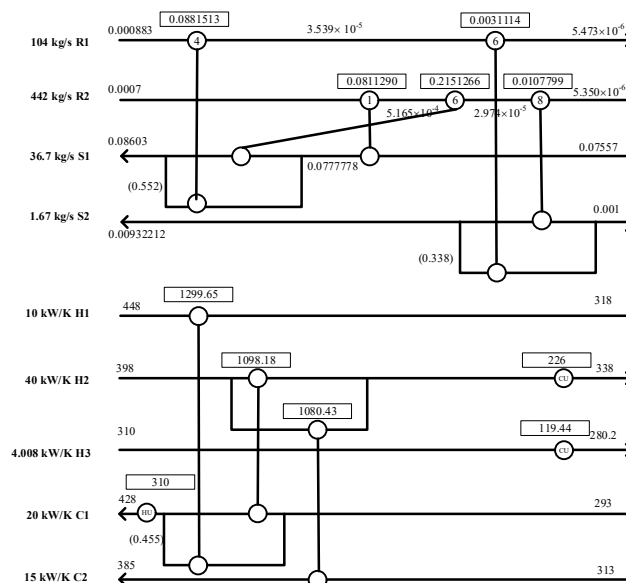


图3 质能交换网络优化的最优结构
Fig. 3 The optimal overall HEN-MEN.

4 结论

为解决质能交换网络的同步优化问题, 本文将节点非结构模型与强制进化随机游走算法相结合, 探究其在质能交换网络优化中的可行性。鉴于质量交换子网络和热交换子网络的耦合关系, 首先根据传质温度确定潜在流股的属性, 随后将传质温度、质量流率等优化参数值分别抽取给质量交换子网络和热交换子网络, 实现质能交换网络的同步优化。最后, 通过一个算例验证了本文所提方法确系可以应用于质能交换网络同步优化中, 并且得到了优于文献的结果。

参考文献

- [1] SRINIVAS B K, EL-HALWAGI M M. Synthesis of combined heat and reactive mass-exchange networks[J], 1994.
- [2] PPALEXANDRI K P, PISTIKOPOULOS E N. Multiperiod MINLP model for the synthesis of flexible heat and mass exchange networks[J]. Computers chem. Engng, 1994, 18 (11/12): 1125-1139.
- [3] ISAFIADE A, FRASER D. Optimization of combined heat and mass exchanger networks using pinch technology[J]. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, 2007, 2 (6): 554-565.
- [4] 都健, 高志辉, 陈理, 姚平经. 超结构法分步综合热集成的质量交换网络[J]. 化工学报, 2010, 61 (10): 2636-2643.
Du J, Gao Z, Chen L, Yao P. Synthesis of heat integrated mass exchanger networks using step wise approach based on superstructure[J]. CIESC Journal, 2010, 61 (10): 2636-2643.
- [5] LIU L, DU J, EL-HALWAGI M M, PONCE-ORTEGA J M, YAO P. A simultaneous synthesis method for combined heat and mass exchange networks[J], 2012, 31: 185-189.
- [6] 刘琳琳, 都健, 陈理, 姚平经. 单组分体系质量交换网络和换热网络同步综合[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2012, 52 (03): 314-319.

基于频域分析的热系统高效动态模拟算法

李航, 滕润航, 赵甜, 陈群*

(清华大学工程力学系, 热科学与动力工程教育部重点实验室, 北京 100084)

(Tel: 010-62796332, Email: chenqun@tsinghua.edu.cn)

摘要: 换热器的高效、准确动态模拟是热系统性能动态分析的关键, 然而基于时、空离散的有限差分/体积法难以兼顾模拟计算的精度与速度, 不利于热系统的动态性能分析。本文提出一种频域热系统动态模拟高效算法, 通过傅里叶变换导出系统内换热器的频域控制方程, 并将其分解为初始-扰动部分, 分别解析和数值求解, 叠加得到系统的动态响应。相比于有限差分法, 本文所提出算法在保证精度(偏差 $<0.3\text{ K}$)的同时可缩短计算时间约一个量级。

关键词: 换热器, 频域分析, 动态模拟, 求解算法, 傅里叶变换

0 前言

热系统在能源系统中占据重要地位, 其高效、准确的动态模拟是提高调节灵活性, 适应新型能源系统的基础[1]。热系统各部件中, 换热器的特征时间较长, 响应速度较慢[2], 在保证求解精度的同时提高其动态模拟计算效率是热系统动态性能分析的关键[3]。

当前换热器的动态模拟首先对其质量、动量、能量守恒方程进行时空离散, 通过有限差分、有限体积等方法数值求解换热器内各点温度及换热器换热量随时间的变化[4]。Bigharian 等人[5]通过全隐式有限体积法, 研究了地源热泵中埋管换热器的动态特性。Fernández-Torrijos 等人[6]应用有限差分法研究了粒子-超临界二氧化碳(sCO_2)换热器的动态行为。Ma[7], Matteo[8], Sui[9]等人基于计算流体动力学软件包, 采用有限体积法研究了 sCO_2 印刷电路板换热器的动态特性。虽然上述方法已非常成熟, 但在需求解的时间段较长、精度较高时仍需大量计算资源与时间投入。对于几种特殊的换热器, 也发展了针对性的计算方法。移动边界法适用于包含相变过程的换热器, 求解不同状态流体界面的位置移动[10]。最近 Ma 等人[11]引入虚拟界面, 将其推广至超临界流体。He 等人[12]基于热量流法, 提出了一种描述换热器动态行为的瞬态 RC 电路模型, 但需将换热器分为小段以保证求解精度。

上述方法均将换热器控制方程在时、空域离散并求解离散方程。如采用时域-频域变换, 将偏微分形式的控制方程变换至常微分方程乃至代数方程, 可以显著降低求解所需计算量。例如 Li 等人[13]提出了一种天然气动态管流的频域响应函数模型, 与有限差分法相比仅需要 1%左右计算时间。Whalley 和 Ebrahimi[14]应用 Laplace 变换建立了套管换热器的动态模型, 可以解析计算换热器换热量的动态响应。Bartecki[15], Yang [16], Chen[17]等人应用 Laplace 变换导出了类似的模型, 并扩展至换热器网络的建模。然而,

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No. 52125604, No. 51836004, No.52106096)

上述基于 Laplace 变换的换热器模型依赖反 Laplace 变换的计算，不能处理较为复杂的情形，如流体流量和物性发生变化等。

本文基于傅里叶变换与时变-时不变分解，结合解析计算与数值离散求解，提出一种适用于各种便捷条件的换热器动态模拟求解算法，实现换热器动态响应的高效、准确求解，在此基础上实现热系统的动态求解，并通过算例验证算法的准确性与效率。

1 换热器动态过程的频域模型

以图 1 所示逆流板式换热器为例，其换热总长度为 L ，热、冷流体的进口温度和热容量流分别为 $T_{h,in}$, $T_{c,in}$, G , G_c 。其中 t 时刻、位置 x 处的热、冷流体和壁面温度分别为 T_h , T_c , T_w 。分析过程中做以下假设：1、流体一维流动；2、流体物性不随压力发生变化；3、换热器对环境的漏热可以忽略；4、壁面的径向导热和流体内部的导热可以忽略。

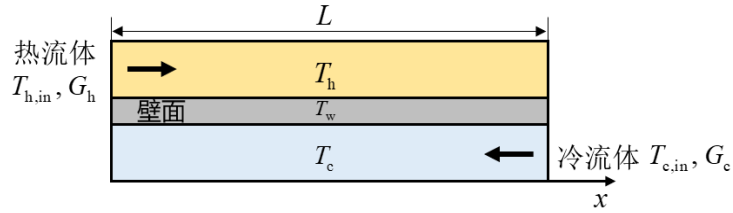


图 1 逆流板式换热器

根据热流体、冷流体和壁面的能量守恒，可以建立换热器的控制方程：

$$\frac{C_h}{L} \frac{\partial T_h}{\partial t} + G_h(t) \frac{\partial T_h}{\partial x} - \frac{(kA)_h}{L} (T_w - T_h) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{C_c}{L} \frac{\partial T_c}{\partial t} - G_c(t) \frac{\partial T_c}{\partial x} - \frac{(kA)_c}{L} (T_w - T_c) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{(Mc_p)_w}{L} \frac{\partial T_w}{\partial t} = \frac{(kA)_h(t)}{L} (T_h - T_w) + \frac{(kA)_c}{L} (T_c - T_w) \quad (3)$$

式中 C_h , C_c 为热、冷流体本地质量流量与定压比热容的乘积， $(kA)_h$, $(kA)_c$ 为换热器热、冷流体侧热导， $(Mc_p)_w$ 为换热器壁面质量与其比热容的乘积。对式 (1)-(3) 关于 t 做傅里叶变换，消去时间偏微分项，可得如下的常微分边值问题：

$$\frac{\tilde{C}_h}{L} * j\omega \tilde{T}_h + \frac{1}{2\pi} \tilde{G}_h * \frac{d\tilde{T}_h}{dx} - \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_h}{L} * (\tilde{T}_w - \tilde{T}_h) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{j\omega C_c}{L} \tilde{T}_c - \frac{1}{2\pi} \tilde{G}_c * \frac{\partial \tilde{T}_c}{\partial x} - \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_c}{L} * (\tilde{T}_w - \tilde{T}_c) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{j\omega (Mc_p)_w}{L} \tilde{T}_w = \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_h}{L} * (\tilde{T}_h - \tilde{T}_w) + \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_c}{L} * (\tilde{T}_c - \tilde{T}_w) \quad (6)$$

其中 j 为虚数单位， ω 为频率分量，含有上波浪线的变量表示原变量的傅里叶变换，“*”

表示卷积，即

$$\tilde{f}(j\omega) * \tilde{h}(j\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(p) \tilde{h}(p - \omega) dp \quad (7)$$

式(4)-(6)中存在系数和变量的卷积项，导致方程呈现强非线性，难以解析求解。本文对待求变量 T_h, T_c, T_w 以及参数 $G_h, G_c, (kA)_h, (kA)_c, C_h, C_c$ 进行分解：

$$G_h = G_h^0 + G_h^*, G_c = G_c^0 + G_c^* \quad (8)$$

$$(kA)_h = (kA)_h^0 + (kA)_h^*, (kA)_c = (kA)_c^0 + (kA)_c^* \quad (9)$$

$$C_h = C_h^0 + C_h^*, C_c = C_c^0 + C_c^* \quad (10)$$

$$T_h = T_h^0 + T_h^*, T_c = T_c^0 + T_c^*, T_w = T_w^0 + T_w^* \quad (11)$$

其中 G_h^0, G_c^0 分别表示 0 时刻的热、冷流体热容量流， G_h^*, G_c^* 表示 t 时刻热容量流相对 0 时刻的变化量； $(kA)_h^0, (kA)_c^0$ 分别表示 0 时刻热、冷流体与壁面间的热导， $(kA)_h^*, (kA)_c^*$ 表示 t 时刻两侧热导相对 0 时刻的变化量， C_h^0, C_c^0 分别表示 0 时刻的热、冷流体热容， C_h^*, C_c^* 表示 t 时刻热容相对 0 时刻的变化量。 T_h^0, T_c^0, T_w^0 定义为满足如下定流量情形换热器控制方程的热、冷流体及壁面温度：

$$\frac{C_h^0}{L} \frac{\partial T_h^0}{\partial t} + G_h^0 \frac{\partial T_h^0}{\partial x} - \frac{(kA)_h^0}{L} (T_w^0 - T_h^0) = 0 \quad (12)$$

$$\frac{C_c^0}{L} \frac{\partial T_c^0}{\partial t} - G_c^0 \frac{\partial T_c^0}{\partial x} - \frac{(kA)_c^0}{L} (T_w^0 - T_c^0) = 0 \quad (13)$$

$$\frac{(Mc_p)_w}{L} \frac{\partial T_w^0}{\partial t} = \frac{(kA)_h^0}{L} (T_h^0 - T_w^0) + \frac{(kA)_c^0}{L} (T_c^0 - T_w^0) \quad (14)$$

T_h^*, T_c^*, T_w^* 即为实际温度与式(12)-(14)所定义温度的差值。由于 T_h^0, T_c^0, T_w^0 是常系数偏微分方程组的解，容易获得。因此，在变量与变系数相乘的非线性项中，忽略 T_h^*, T_c^*, T_w^* 与变系数的乘积（在后续迭代求解过程中通过更新非齐次项计及这一项的影响），将式(1)-(3)变换为

$$\frac{C_h^0}{L} \frac{\partial T_h}{\partial t} + G_h^0 \frac{\partial T_h}{\partial x} - \frac{(kA)_h^0}{L} (T_w - T_h) + G_h^* \frac{\partial T_h^0}{\partial x} - \frac{(kA)_h^*}{L} (T_w^0 - T_h^0) = 0 \quad (15)$$

$$\frac{C_c^0}{L} \frac{\partial T_c}{\partial t} - G_c^0 \frac{\partial T_c}{\partial x} - \frac{(kA)_c^0}{L} (T_w - T_c) - G_c^* \frac{\partial T_c^0}{\partial x} - \frac{(kA)_c^*}{L} (T_w^0 - T_c^0) = 0 \quad (16)$$

$$\frac{(Mc_p)_w}{L} \frac{\partial T_w}{\partial t} = \frac{(kA)_h^0}{L} (T_h - T_w) + \frac{(kA)_c^0}{L} (T_c - T_w) + \frac{(kA)_h^*}{L} (T_h^0 - T_w^0) + \frac{(kA)_c^*}{L} (T_c^0 - T_w^0) \quad (17)$$

对式(15)-(17)做傅里叶变换：

$$\frac{d\tilde{T}_h}{dx} + \frac{j\omega C_h^0}{G_h^0 L} \tilde{T}_h - \frac{(kA)_h^0}{G_h^0 L} (\tilde{T}_w - \tilde{T}_h) + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{C}_h^*}{G_h^0} * j\omega \tilde{T}_h^0 + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_h^*}{G_h^0} * \frac{d\tilde{T}_h^0}{dx} - \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_h^*}{G_h^0 L} * (\tilde{T}_w^0 - \tilde{T}_h^0) = 0 \quad (18)$$

$$\frac{d\tilde{T}_c}{dx} - \frac{j\omega C_c^0}{G_c^0 L} \tilde{T}_c + \frac{(kA)_c^0}{G_c^0 L} (\tilde{T}_w - \tilde{T}_c) - \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{C}_c^*}{G_c^0} * j\omega \tilde{T}_c^0 + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_c^*}{G_c^0} * \frac{d\tilde{T}_c^0}{dx} + \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{k}A)_c^*}{G_c^0 L} * (\tilde{T}_w^0 - \tilde{T}_c^0) = 0 \quad (19)$$

$$\tilde{T}_w = \frac{(kA)_h^0 \tilde{T}_h + (kA)_c^0 \tilde{T}_c}{(kA)_h^0 + (kA)_c^0 + j\omega(Mc_p)_w} + \frac{\frac{1}{2\pi} (\tilde{k}A)_h^* * (\tilde{T}_h^0 - \tilde{T}_w^0) + \frac{1}{2\pi} (\tilde{k}A)_c^* * (\tilde{T}_c^0 - \tilde{T}_w^0)}{(kA)_h^0 + (kA)_c^0 + j\omega(Mc_p)_w} = \mu_h \tilde{T}_h + \mu_c \tilde{T}_c + b_w \quad (20)$$

将式(20)分别代入式(18)-(19)可得

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} \tilde{T}_h \\ \tilde{T}_c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{j\omega C_h + (1-\mu_h)(kA)_h^0}{G_h^0 L} & -\frac{\mu_c (kA)_h^0}{G_h^0 L} \\ -\frac{j\omega C_c + (1-\mu_c)(kA)_c^0}{G_c^0 L} & \frac{\mu_h (kA)_c^0}{G_c^0 L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{T}_h \\ \tilde{T}_c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_h^0(x, \omega) \\ f_c^0(x, \omega) \end{bmatrix} = 0 \quad (21)$$

其中 f_h^0 和 f_c^0 为(18), (19)两式中的非齐次项:

$$\begin{bmatrix} f_h^0(x, \omega) \\ f_c^0(x, \omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{(kA)_h^0 b_w}{G_h^0 L} + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_h^*}{G_h^0} * \frac{d\tilde{T}_h^0}{dx} \\ + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_h^*}{G_h^0} * \frac{d\tilde{T}_h^0}{dx} - \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{k}A)_h^*}{G_h^0 L} * (\tilde{T}_w^0 - \tilde{T}_h^0) \\ \frac{(kA)_c^0 b_w}{G_c^0 L} - \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{C}_c^*}{G_c^0} * j\omega \tilde{T}_c^0 \\ + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_c^*}{G_c^0} * \frac{d\tilde{T}_c^0}{dx} + \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{k}A)_c^*}{G_c^0 L} * (\tilde{T}_w^0 - \tilde{T}_c^0) \end{bmatrix} \quad (22)$$

式(21)为换热器热、冷流体温度的控制方程组, 其非齐次项反映了两侧流体质量流量变化对温度动态响应产生的影响。这一项中只含有 T_h^0 、 T_c^0 、 T_w^0 的温度信息, 容易求得。为简明起见, 定义以下参数

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{j\omega(Mc_p)_w + (kA)_c^0 + (kA)_h^0}{(kA)_c^0 (kA)_h^0} \\ \beta_h &= \frac{j\omega(Mc_p)_w + (kA)_h^0}{(kA)_h^0}, \quad \beta_c = \frac{j\omega(Mc_p)_w + (kA)_c^0}{(kA)_c^0} \\ \gamma_c &= G_c^0 (\alpha j\omega C_h + \beta_c), \quad \gamma_h = G_h^0 (\alpha j\omega C_c + \beta_h) \end{aligned} \quad (23)$$

式(21)中零阶项系数矩阵的两个特征值为

$$r_1, r_2 = \frac{\gamma_h - \gamma_c \pm \sqrt{(\gamma_h + \gamma_c)^2 - 4G_h^0 G_c^0}}{2\alpha G_c^0 G_h^0 L} \quad (24)$$

对零阶项系数矩阵进行特征值分解:

$$\begin{bmatrix} \frac{j\omega C_h + (1-\mu_h)(kA)_h^0}{G_h^0 L} & -\frac{\mu_c(kA)_h^0}{G_h^0 L} \\ -\frac{j\omega C_c + (1-\mu_c)(kA)_c^0}{G_c^0 L} & \frac{\mu_h(kA)_c^0}{G_c^0 L} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \theta_1 e^{-r_1 L} & \theta_2 e^{-r_2 L} \end{bmatrix}}_{\mathbf{Q}} \begin{bmatrix} -r_1 & 0 \\ 0 & -r_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \theta_1 e^{-r_1 L} & \theta_2 e^{-r_2 L} \end{bmatrix}^{-1} \quad (25)$$

其中 $\mathbf{Q}$ 为特征向量矩阵, θ_1 和 θ_2 的表达式为:

$$\begin{aligned} \theta_1 &= [\alpha G_h^0 L r_1 + (\alpha j\omega C_h + \beta_c)] e^{r_1 L} \\ \theta_2 &= [\alpha G_h^0 L r_2 + (\alpha j\omega C_h + \beta_c)] e^{r_2 L} \end{aligned} \quad (26)$$

基于式(25), 可以将式(21)改写为

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} \Phi_h \\ \Phi_c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -r_1 & 0 \\ 0 & -r_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_h \\ \Phi_c \end{bmatrix} + \mathbf{Q}^{-1} \begin{bmatrix} f_h(x, \omega) \\ f_c(x, \omega) \end{bmatrix} = 0, \quad \begin{bmatrix} \Phi_h \\ \Phi_c \end{bmatrix} = \mathbf{Q}^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{T}_h \\ \tilde{T}_c \end{bmatrix} \quad (27)$$

式(27)中的 Φ_h 与 Φ_c 称为换热器在频域下的特征值温度。

换热器热、冷流体的进出口边界条件为:

$$\tilde{T}_h \Big|_{x=0} = \tilde{T}_{h,\text{in}}, \quad \tilde{T}_c \Big|_{x=L} = \tilde{T}_{c,\text{in}} \quad (28)$$

求解对式(27)-(28)组成的常微分方程边值问题, 其通解为

$$\begin{bmatrix} \Phi_h \\ \Phi_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1 e^{r_1 x} \\ C_2 e^{r_2 x} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K_h(x, \omega) \\ K_c(x, \omega) \end{bmatrix} \quad (29)$$

其中 K_h, K_c 为特征值温度对方程非齐次项的特解响应, C_1, C_2 为系数, 由边界条件确定:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} e^{r_1 L} & Q_{22} e^{r_2 L} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{T}_{h,\text{in}} - Q_{11} K_h(0, \omega) - Q_{12} K_c(0, \omega) \\ \tilde{T}_{c,\text{in}} - Q_{21} K_h(L, \omega) - Q_{22} K_c(L, \omega) \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\theta_2 (\tilde{T}_{h,\text{in}} - Q_{11} K_h(0, \omega) - Q_{12} K_c(0, \omega)) - (\tilde{T}_{c,\text{in}} - Q_{21} K_h(L, \omega) - Q_{22} K_c(L, \omega))}{\theta_2 - \theta_1} \\ \frac{-\theta_1 (\tilde{T}_{h,\text{in}} - Q_{11} K_h(0, \omega) - Q_{12} K_c(0, \omega)) + (\tilde{T}_{c,\text{in}} - Q_{21} K_h(L, \omega) - Q_{22} K_c(L, \omega))}{\theta_2 - \theta_1} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (30)$$

其中 Q_{ij} 为矩阵 $\mathbf{Q}$ 的第 i 行第 j 列元素。换热器冷热流体温度在频域下的表达式可以通过式(29)得到, 即

$$\begin{bmatrix} \tilde{T}_h \\ \tilde{T}_c \end{bmatrix} = \mathbf{Q} \begin{bmatrix} C_1 e^{r_1 x} \\ C_2 e^{r_2 x} \end{bmatrix} + \mathbf{Q} \begin{bmatrix} K_h(x, \omega) \\ K_c(x, \omega) \end{bmatrix} \quad (31)$$

当换热器热、冷流体的流量不变时, 式(21)中的非齐次项为 0, K_h 和 K_c 亦为 0, 式(31)给出的 T_h^0, T_c^0 的频域解析解即为热、冷流体的温度。当流量变化时, 由于 f_h 和 f_c 中存在卷积项, 难以得到 K_h 与 K_c 的解析形式, 仍需数值求解。

2 频域模型求解算法

2.1 离散傅里叶变换

上文推导了考虑流量时变情况下频域上冷、热流体进、出口温度间的频域约束关系。实际应用中，还需实现时域初边值条件(入口温度)至频域的转换及频域求解结果至时域的转换。数值计算中，进口冷热流体温度的时域序列可以通过离散傅里叶变换转换为一组频率已知的正弦/余弦信号之和：

$$\tilde{T}_{h,in}(k) = \sum_i^{n_i} T_{h,in}(t_i) [\cos(k\omega_0 t_i) - j \sin(k\omega_0 t_i)] \quad (32)$$

$$\tilde{T}_{c,in}(k) = \sum_i^{n_i} T_{c,in}(t_i) [\cos(k\omega_0 t_i) - j \sin(k\omega_0 t_i)] \quad (33)$$

其中等式左侧分别为 $\tilde{T}_{h,in}$ 和 $\tilde{T}_{c,in}$ 的第 k 个频域分量， t_i 是采样时刻，角频率 $\omega_0 = 2\pi/T$ ， T 是采样周期。 n_i 为采样时刻总数，其中包含了边界条件的一段历史数据来体现 0 时刻系统中各变量初始状态的影响[18]。数值计算中通常采用快速傅里叶变换（FFT）算法计算式(32)和式(33)。

结合频域模型，分别求解的冷、热流体出口温度在角频率 $k\omega_0$ 下的各频域分量 $\tilde{T}_{c,out}(k)$ 和 $\tilde{T}_{h,out}(k)$ 。根据线性系统的叠加定理，采样时刻 t_i 的输出为

$$T_{h,out}(t_i) = \sum_{k=0}^{n_f-1} \left[\operatorname{Re} \left(\tilde{T}_{h,out}(k) \right) \cos(k\omega_0 t_i) - \operatorname{Im} \left(\tilde{T}_{h,out}(k) \right) \sin(k\omega_0 t_i) \right] \quad (34)$$

$$T_{c,out}(t_i) = \sum_{k=0}^{n_f-1} \left[\operatorname{Re} \left(\tilde{T}_{c,out}(k) \right) \cos(k\omega_0 t_i) - \operatorname{Im} \left(\tilde{T}_{c,out}(k) \right) \sin(k\omega_0 t_i) \right] \quad (35)$$

由此得到冷、热流体出口温度在各离散采样时刻的时域值。计算中常通过快速傅里叶反变换（IFFT）计算式(34)和式(35)。

2.2 卷积项的快速计算

上文推导得到的换热器频域控制方程中出现两个变量的卷积，导致解析求解困难，需要数值求解。本文应用卷积定理实现卷积项的快速计算[19]。卷积定理说明：两个函数卷积的傅里叶变换是它们傅里叶变换的乘积；同样，它们乘积的卷积是它们傅里叶变换的卷积，即：一个域中的卷积对应另一个域中的乘积：

$$h(t) * f(t) = \tilde{h}(j\omega) \tilde{f}(j\omega), \quad h(t) f(t) = \tilde{h}(j\omega) * \tilde{f}(j\omega) \quad (36)$$

其中 f 和 h 为表征函数。以式(4)中热流体流量与温度梯度的卷积项为例说明具体计算过程：首先将连续函数 $\tilde{T}_h^0$ 在频域和空间上离散，其次利用 IFFT 将频域两个变量的卷积项变换为时域下两个变量的乘积，再利用 FFT 将时域的计算结果变换回频域，得到卷积项的数值：

$$\tilde{G}_h^* \frac{d\tilde{T}_h^0}{dx} = \mathcal{F}[G_h^* \frac{dT_h^0}{dx}] = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n_f} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n_f} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n_x,1} & a_{n_x,2} & \cdots & a_{n_x,n_f} \end{bmatrix} \quad (37)$$

其中 n_x 为空间离散的分段数, n_f 为频域下的分频数。

2.3 算法流程

上文已将频域控制方程的求解分解为初始定常参数下初边值问题和扰动参数下的零状态响应问题, 并在式(31)中给出了前者的解析解。此处对扰动参数下的零状态响应问题进行空间离散迭代求解, 以得到原问题的完整解。

对上节导出的温度扰动项控制方程进行空间差分可得:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{T}_h^*(x, \omega) - \tilde{T}_h^*(x - \Delta x, \omega)}{\Delta x} + \frac{j\omega C_h + (1 - \mu_h)(kA)_h^0}{G_h^0 L} \tilde{T}_h^*(x, \omega) \\ - \frac{\mu_c (kA)_h^0}{G_h^0 L} \tilde{T}_c^*(x, \omega) + f_h(x, \omega) = 0 \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{T}_c^*(x + \Delta x, \omega) - \tilde{T}_c^*(x, \omega)}{\Delta x} - \frac{j\omega C_c + (1 - \mu_c)(kA)_c^0}{G_c^0 L} \tilde{T}_c^*(x, \omega) \\ + \frac{\mu_h (kA)_c^0}{G_c^0 L} \tilde{T}_h^*(x, \omega) + f_c(x, \omega) = 0 \end{aligned} \quad (39)$$

$$\tilde{T}_w = \mu_h \tilde{T}_h + \mu_c \tilde{T}_c + b_w + - \frac{(kA)_h^0}{G_h^0 L} \frac{1}{2\pi} (\tilde{kA})_h^* (\tilde{T}_h^* - \tilde{T}_w^*) + \frac{1}{2\pi} (\tilde{kA})_c^* (\tilde{T}_c^* - \tilde{T}_w^*) \quad (40)$$

其中 f_h 和 f_c 为式(22)定义的非齐次项, 可通过快速卷积法数值计算, 其完整表达式为:

$$\begin{bmatrix} f_h(x, \omega) \\ f_c(x, \omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{(kA)_h^0 b_w}{G_h^0 L} + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_h^*}{G_h^0} \frac{d\tilde{T}_h^0}{dx} \\ -\frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_h^*}{G_h^0 L} (\tilde{T}_w^0 - \tilde{T}_h^0) + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{C}_h^*}{G_h^0} j\omega \tilde{T}_h^0 \\ \frac{(kA)_c^0 b_w}{G_c^0 L} + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_c^*}{G_c^0} \frac{d\tilde{T}_c^0}{dx} \\ + \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_c^*}{G_c^0 L} (\tilde{T}_w^0 - \tilde{T}_c^0) + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{C}_c^*}{G_c^0} j\omega \tilde{T}_c^0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{(kA)_h^0}{G_h^0 L} \frac{1}{2\pi} (\tilde{kA})_h^* (\tilde{T}_h^* - \tilde{T}_w^*) + \frac{1}{2\pi} (\tilde{kA})_c^* (\tilde{T}_c^* - \tilde{T}_w^*) \\ \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_h^*}{G_h^0} \frac{d\tilde{T}_h^*}{dx} - \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_h^*}{G_h^0 L} (\tilde{T}_w^* - \tilde{T}_h^*) + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{C}_h^*}{G_h^0} j\omega \tilde{T}_h^* \\ \frac{(kA)_c^0}{G_c^0 L} \frac{1}{2\pi} (\tilde{kA})_c^* (\tilde{T}_h^* - \tilde{T}_w^*) + \frac{1}{2\pi} (\tilde{kA})_c^* (\tilde{T}_c^* - \tilde{T}_w^*) \\ + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{G}_c^*}{G_c^0} \frac{d\tilde{T}_c^*}{dx} + \frac{1}{2\pi} \frac{(\tilde{kA})_c^*}{G_c^0 L} (\tilde{T}_w^* - \tilde{T}_c^*) + \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{C}_c^*}{G_c^0} j\omega \tilde{T}_c^* \end{bmatrix} \quad (41)$$

迭代中, T_h^* , T_c^* , T_w^* 的初值设为 0。首次迭代中非齐次项如式(22)所示, 只利用解析求得的 T_h^0 , T_c^0 , T_w^0 。后续迭代中, 每次求得 T_h^* , T_c^* , T_w^* 新值后, 利用式(41)更新非齐次项 f_h 和 f_c , 减少求解误差。此外, 如需考虑物性随温度变化, 可基于最新温度对物性进行更新。计算并更新非齐次项后, 采用高斯-赛德尔(Gauss-Seidel Iteration)迭代法对式

(38)、式(39)和式(40)求解至收敛，即得到扰动方程的解。基于上述求解过程，所提出的换热器动态频域求解算法全流程如图 2 所示：

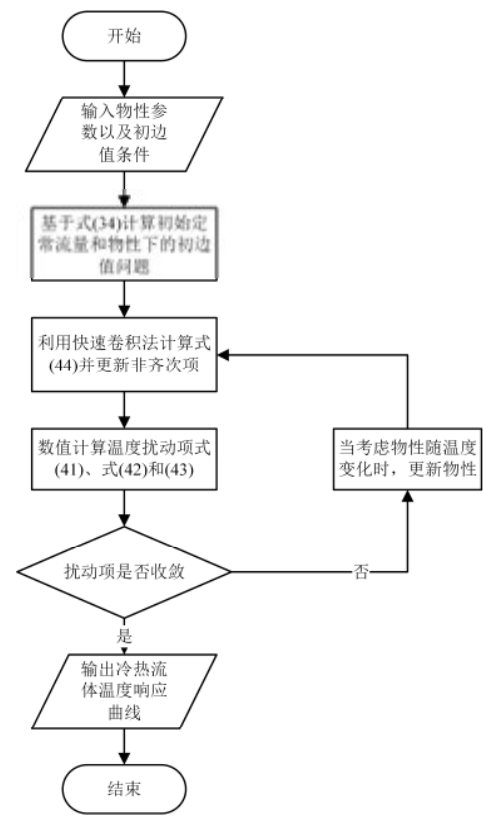


图 2 换热器频域动态求解算法流程

3 算例验证

3.1 算例 1：换热器进口温度与流量变化

以板式逆流换热器为例，两个流道横截面积均为 0.01 m²，壁面材料为铝，厚度、宽度分别为 0.005m、1m，总换热长度为 10m，其中工质均为水，物性参数见表 1。

表 1 换热器及工质物性参数等		
材料	铝	水
密度 $\rho/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	2710	1000
比热 $c_p/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	902	4180

初始时，热流体入口温度 $T_{hin} = 300 \text{ K}$ ，冷流体入口温度 $T_{cin} = 300 \text{ K}$ ，热流体流速 $U_h = 2.0 \text{ m/s}$ ，冷流体流速 $U_c = 3.0 \text{ m/s}$ ，热侧总热导为 $2.33 \times 10^5 \text{ W/K}$ ，冷侧总热导为 $1.61 \times 10^5 \text{ W/K}$ 。 $t = 0$ 时刻热流体入口温度突变为 310K，同时热、冷流体流速如下变化：

$$\begin{aligned} U_h &= 2.0 + 0.02 t \text{ m/s} \\ U_c &= 3.0 + 0.01 t \text{ m/s} \end{aligned} \tag{42}$$

任意时刻的对流换热系数根据幂律计算 [20]：

$$(kA)_h = (kA)_h^0 \left(\frac{U_h}{U_h|_{t=0}} \right)^{0.8}, (kA)_c = (kA)_c^0 \left(\frac{U_c}{U_c|_{t=0}} \right)^{0.8} \quad (43)$$

分别采用有限差分法和频域下动态求解方法计算 0-100s 过程中冷热流体的出口温度。有限差分法采用迎风格式，流向离散为 10000 个单元，时间步长为 0.01 秒。频域求解法分频段数为 500，流向分段数为 10，采样时间 1/1000。

图 3 给出了热、冷流体出口温度响应曲线和误差曲线。结果表明，频域动态模型的计算结果与有限差分法计算结果基本趋于一致，由于热流体出口温度存在响应时间延迟，0-6 s 中出口温度的绝对误差较大，但最大误差在 $\pm 0.3\text{K}$ 以内；6-100 s 中出口温度绝对误差相对较小，在 $\pm 0.02\text{K}$ 以内，验证了模型的有效性。同时，频域算法求解时间为 1.68 s，而有限差分法计算时间为 13.55 s，相差约 8 倍。

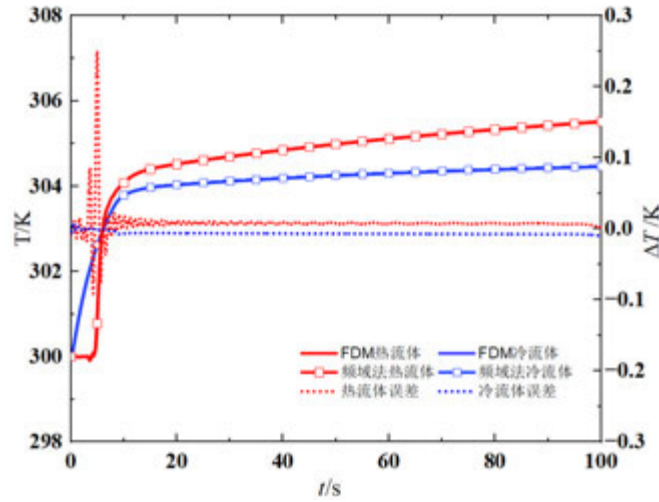


图 3 入口温度突变时出口温度动态响应曲线

3.2 算例 2：换热器流体物性、进口温度与流量均变化

以板式逆流换热器为例，两个流道截面积均为 5 m^2 ，壁面材料为铝，厚度为 0.01m ，总换热长度为 3m ，其中工质为 CO_2 ，物性参数见表 2

表 2 换热器及工质物性参数等

材料	铝	CO_2
密度 $\rho (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	2710	1.7973
比热 $c_p (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	902	见式(45)

CO_2 比热与温度相关，其计算式为：

$$\frac{C_p(T)}{R_g} = 3.259 + 1.356 \times 10^{-3} T + 1.502 \times 10^{-5} T^2 - 2.374 \times 10^{-8} T^3 + 1.056 \times 10^{-11} T^4 \quad (45)$$

其中 T 单位为 K， R_g 为 $188.95\text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ 。

换热器的初始条件和相关参数为：两流体入口压力均为 1 个大气压，热流体入口温度 $T_{h,\text{in}} = 320\text{ K}$ ，冷流体入口温度 $T_{c,\text{in}} = 300\text{ K}$ ，热流体流速 $U_h = 0.05\text{m/s}$ ，冷流体流速

$U_c=0.06$ m/s, 热侧对流换热系数为 280 W/m²/K, 冷侧对流换热系数为 300 W/m²/K。此时稳态出口温度分别为 $T_{h,out}=314.42$ K, $T_{c,out}=304.65$ K, 可见此时换热器中 CO₂ 全程均处于亚临界状态。在 $t=0$ 时刻, 热、冷流体进口速度分别突变为 $U_h=0.08$ m/s, $U_c=0.04$ m/s。由于声速远大于流体流速, 忽略流体速度场的弛豫过程, 认为全场流速突变为新值。新的对流换热系数根据式(43)计算。

分别采用有限差分法和所提出的频域动态求解方法, 计算 0-300s 过程中流体的出口温度。有限差分法采用迎风格式, 流向离散为 1000 个单元, 时间步长为 0.01 s。频域算法分频段数为 300, 流向分段数为 50, 采样时间为 1/600 s。

图 4 给出了计算得到的热、冷流体出口温度响应曲线。可以看出, 频域算法的计算结果与有限差分法计算结果一致, 绝对误差最大不超过 0.07 K, 验证了此时算法同样有效。此外, 频域算法计算时间相比有限差分法快约 5 倍: 频域求解时间为 8.25 s, 而有限差分法计算时间为 42.05 s。此外, 当需计算的时间段更长时, 有限差分法所需时间将随之延长, 而频域算法无需时间离散, 计算时间不发生明显变化。

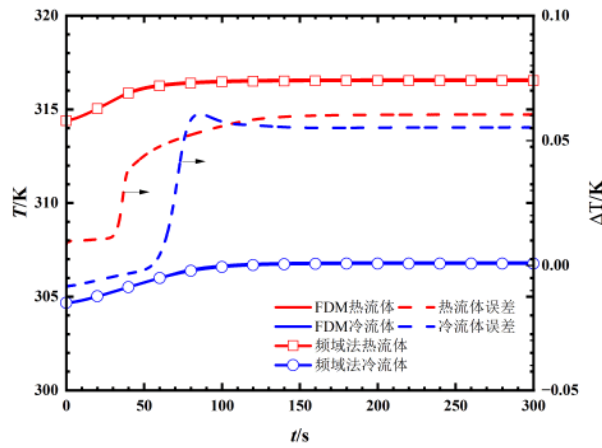


图 4 考虑流量、物性变化下换热器出口温度动态响应曲线

3.3 算例 3: 并联-串联换热器网络

考虑如图 5 所示的并联-串联换热器网络, 流体 1 分为两股后分别在换热器 1、2 中被加热, 随后混合为 6, 在换热器 3 中加热冷流体 12-13。板式换热器 1 长度为 10m, 两个流道高度均为 0.02m, 热侧流速为 0.15 m/s, 突变为 0.3m/s, 冷侧流速为 0.2 m/s, 突变为 0.25m/s, 板式换热器 2 长度为 10m, 两个流道高度均为 0.02m, 热侧流速为 0.25 m/s, 突变为 0.4m/s, 冷侧流速为 0.2 m/s, 突变为 0.25m/s, 板式换热器 3 长度为 5m, 两个流道高度均为 0.04m, 热侧流速为 0.2 m/s, 突变为 0.25m/s, 冷侧流速为 0.3 m/s, 突变为 0.1m/s。

三个换热器的两个流道宽度均为 1 m, 换热壁面厚度均为 0.01m, 材料为铝。各流体均为水, 粘性系数 $\mu=1.31\times10^{-6}$ m²/s, 其他物性参数见表 3。计算中各换热过程的对流换热系数通过相应经验关联式计算[21]。

表 3 物性参数表

参数	铝	水
密度 $\rho/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	2710	1000
热导率 $\lambda/(\text{W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-1})$	236	0.6228
比热 $c_p/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	902	4180

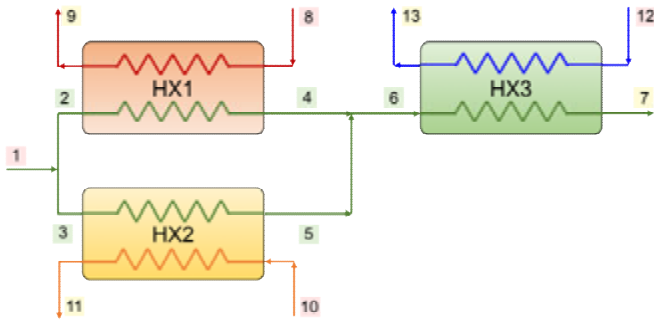


图 5 并联-串联换热器网络

三个换热器中各流体入口温度如表 4 所示。初始时网络处于稳态， $t=0$ 时刻各流体流速发生突变。分别采用有限差分法和频域下动态求解方法计算 0-200 s 中冷、热流体的出口温度。有限差分法采用迎风格式，流向离散为 1000 个单元，时间步长为 0.01s。频域求解法分频段数为 300，流向分段数为 50，采样时间 1/600 s。

表 4 各流体入口温度表

换热器	1	2	5
热侧入口温度	350	340	--
冷测入口温度	310	310	310

图 6(a)、(b)分别给出了求得的换热网络中各换热器出口温度曲线及其误差。结果表明频域动态模型的计算结果与有限差分法计算结果趋于一致，绝对误差最大不超过 0.07K。此时频域动态模型计算时间相比有限差分法快 1 倍左右：频域方法计算耗时 30.49 s，FDM 计算时间为 69.73 s。这是因为本文频域方法计算中未针对换热器网络结构设计求解流程，如针对性优化求解流程还可进一步提高频域方法的计算速度。

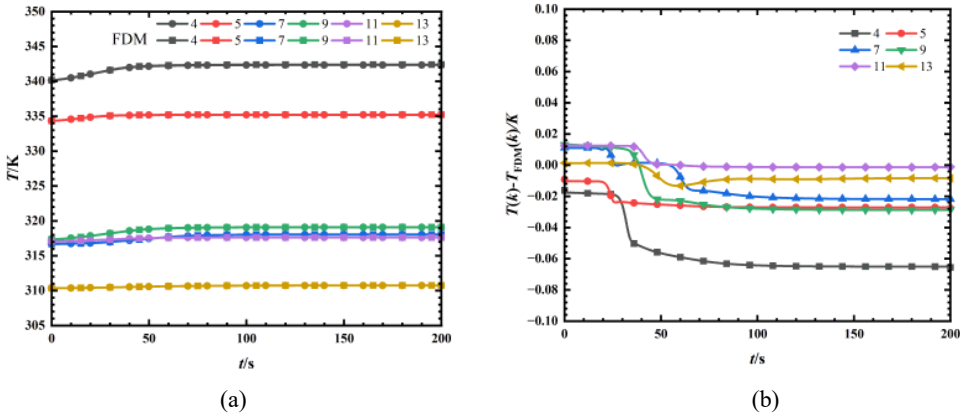


图 6 换热器网络中各流体出口温度的(a)计算结果及(b)两组结果的差

4 结 论

本文基于微分方程的时域-频域转换,提出了一种换热器动态响应的高效频域仿真算法,并通过算例验证了算法性能,得到了以下主要结论:

- (1) 对换热器中冷、热流体及壁面的能量守恒方程进行傅里叶变换,消去时间维度,导出了边值问题形式的换热器频域控制方程;
- (2) 基于温度、流量等变量的初始-扰动分解,将控制方程相应分解为常系数的初始问题和变系数的扰动问题两部分;解析求解初始问题控制方程,并通过空间差分离散、数值迭代求解扰动问题的控制方程,提出了换热器频域控制方程求解算法;
- (3) 考察的算例表明,与时-空同时离散的有限差分法相比,本文提出的分离-迭代求解算法可以在保证求解精度(温度偏差小于 0.3 K)的前提下降低计算时间约 1 个数量级。

总之,本文提出的换热器动态响应求解算法兼顾了求解精度与速度,可望进一步用于复杂热系统的高效、准确动态仿真。

参考文献

- [1] He K-L, Zhao T, Ma H, Chen Q. Optimal operation of integrated power and thermal systems for flexibility improvement based on evaluation and utilization of heat storage in district heating systems. *Energy* 2023;274:127421.
- [2] Luu MT, Milani D, McNaughton R, Abbas A. Analysis for flexible operation of supercritical CO₂ Brayton cycle integrated with solar thermal systems. *Energy* 2017;124:752–71.
- [3] Alobaid F, Mertens N, Starkloff R, Lanz T, Heinze C, Epple B. Progress in dynamic simulation of thermal power plants. *Progress in Energy and Combustion Science* 2017;59:79–162.
- [4] Zhang H, Weng S, Su M. Dynamic Modeling and Simulation of Distributed Parameter Heat Exchanger, *American Society of Mechanical Engineers Digital Collection*; 2008, p. 327–33.
- [5] Biglarian H, Abbaspour M, Saidi MH. Evaluation of a transient borehole heat exchanger model in dynamic simulation of a ground source heat pump system. *Energy* 2018;147:81–93.
- [6] Fernández-Torrijos M, Albrecht KJ, Ho CK. Dynamic modeling of a particle/supercritical CO₂ heat exchanger for transient analysis and control. *Applied Energy* 2018;226:595–606.
- [7] Ma T, Li M-J, Xu J-L, Cao F. Thermodynamic analysis and performance prediction on dynamic response characteristic of PCHE in 1000 MW S-CO₂ coal fired power plant. *Energy* 2019;175:123–38.
- [8] Marchionni M, Chai L, Bianchi G, Tassou SA. Numerical modelling and transient analysis of a printed circuit heat exchanger used as recuperator for supercritical CO₂ heat to power conversion systems. *Applied Thermal Engineering* 2019;161:114190.
- [9] Sui X, Russell H, Gurgenci H, Lee S, Guan Z, Dong P. A one-dimensional modelling methodology of printed circuit heat exchangers for steady, off-design and transient feasibility in a supercritical CO₂ power block. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2022;193:122938.
- [10] Wei D, Lu X, Lu Z, Gu J. Dynamic modeling and simulation of an Organic Rankine Cycle (ORC) system for waste heat recovery. *Applied Thermal Engineering* 2008;28:1216–24.
- [11] Ma X, Jiang P, Zhu Y. Dynamic simulation model with virtual interfaces of supercritical working fluid

- heat exchanger based on moving boundary method. *Energy* 2022;254:124334.
- [12] He K-L, Chen Q, Liu Y-T, Hao J-H, Wang Y-F, Yuan Y. A transient heat current model for dynamic performance analysis and optimal control of heat transfer system. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2019;145:118767.
- [13] Li X, Zhao T, Sun Q-H, Chen Q. Frequency response function method for dynamic gas flow modeling and its application in pipeline system leakage diagnosis. *Applied Energy* 2022;324:119720.
- [14] Whalley R, Ebrahimi KM. Heat exchanger dynamic analysis. *Applied Mathematical Modelling* 2018;62:38–50.
- [15] Bartecki K. Transfer function-based analysis of the frequency-domain properties of a double pipe heat exchanger. *Heat Mass Transfer* 2015;51:277–87.
- [16] Yang R, Tran CT, Zoughaib A. An analytical model to study the dynamic response of heat exchanger network. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2021;176:121461.
- [17] Chen J, Cui G, Xiao Y. An analytical solution to the dynamic behavior of heat exchanger networks. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2018;126:466–78.
- [18] Chen BB, Sun HB, Wu WC, Guo QL, Qiao Z. Energy circuit theory of integrated energy system analysis (iii): steady and dynamic energy flow calculation. *Proceedings of the CSEE* 2020; 40:4820-30.
- [19] Chen KF, Zhang SW. Schemes to approximate continuous convolution by fast convolution. *Journal of China Agricultural University* 1997; 2(2):33-8.
- [20] X Chen, Q Chen, H Chen, YG Xu, T Zhao, K Hu, KL He. Heat current method for analysis and optimization of heat recovery-based power generation systems. *Energy* 2019; 189:116209.
- [21] 杨世铭, 陶文铨. 传热学, 第四版, 高等教育出版社, 2006.

基于 TRNSYS 光伏光热空气预热系统研究

王晞玉, 陈鹏吉, 郝文刚^{*}, 刘畅, 王磊

(烟台大学海洋学院, 山东 烟台 264005)

(Tel:13285360064, Email:wxynnn2001@163.com)

摘要: 本文设计出一种新型的光伏光热空气预热系统。该系统是基于光伏发电系统的基础上, 在光伏板后贴设集热器, 同时在系统后加设空气流道。利用 TRNSYS 软件模拟设定烟台的气象条件和各项参数对该系统进行性能模拟研究。通过模拟数据分析得出: 该系统在一年中, 太阳能综合利用效率最高可达 33%。进一步分析系统一年的发电量, 可知该系统的投资回收期为 3 年, 一年的 CO₂ 减排量为 0.29t。该实验系统具有很好的经济性和生态效益。

关键词: 光伏光热; 空气预热; TRNSYS; 经济性分析; 生态性分析

1 引言

随着世界人口的不断增长和经济的发展, 世界能源需求也随之逐渐增加。然而, 传统能源正在加速枯竭, 依照目前的生产速度, 全球的石油只能用到 2068 年, 天然气只能用到 2075 年。太阳能作为最常见并且丰富的清洁能源之一, 近年来受到广泛关注。根据国际能源机构 (IEA) 的数据, 到 2050 年, 二氧化碳将增加一倍以上的排放量^[1]。

为实现可持续发展, 改善我国能源消费结构, 我国推出“双碳”政策, 大力推广绿色环保的低碳生活。推动能源消费结构转型作为“十四五”阶段中应对“双碳”挑战的重要举措, 对于工业碳减排具有显著意义^[2]。

太阳能作为已知的新型能源, 取之不尽用之不竭, 具有高效无污染的特点, 传统的化石能源日益被新型能源所取代^[3]。

目前, 在实际应用中, 太阳能电池只能够利用 85% 的太阳光能, 其中大多数转化为热量, 这些热量浪费的同时还会造成电池表面的温度升高, 从而降低电池对太阳光能的利用, 甚至可能造成高温损坏。为保证单晶硅太阳能电池对太阳光能的利用效率, 需降低太阳能电池表面的温度。目前可以通过冷流体在电池背面流动吸收热量, 从而提高太阳能电池的效率。

太阳能光伏光热综合一体化系统既可以光电转换又能实现热能的利用, 这种综合系

基金项目: 山东省自然科学基金青年项目 (No. ZR2021QE288); 山东省自然科学基金青年项目 (No. ZR2021QE280); 烟台市科技创新发展计划项目 (No. 2022YT06000662)

作者简介: 王晞玉 (2001-), 男, 山东潍坊人, 在读本科生

^{*}通信作者: 郝文刚 (1990-), 男, 山东烟台人, 讲师, 博士, 研究方向为太阳能高效热利用技术。烟台 烟台大学海洋学院, 264005。

Email: haowengangDL@163.com

统对能源的利用效率更高，并对环境造成污染更少。利用光伏发电系统和光热系统相结合，使系统在发电过程中，既能保证光伏发电的效率，同时很好地利用发电过程中产生的热量，合理使用，不会降低光伏发电效率。而光伏光热空气预热系统作为太阳能综合利用技术的一种重要应用，通过利用光伏板、集热器以及空气预热系统联合运行，将光伏板产生的电能与热能达到同时利用，提高对能源利用效率，从而减少对资源的浪费^[4]。

本文通过对太阳能光伏光热预热系统的实验搭建与实验模拟，并以烟台地区春分日为例，对系统进行实验研究。

2 材料与方法

2.1 太阳能光伏光热预热系统的结构与组成

2.1.1 光伏光热空气预热系统结构形式

PV/T 的主要部件包括：太阳能电池、盖板、气流通道、若干铜管、保温层（由保温棉在外部贴设），边框^[5]，如图 1 所示。

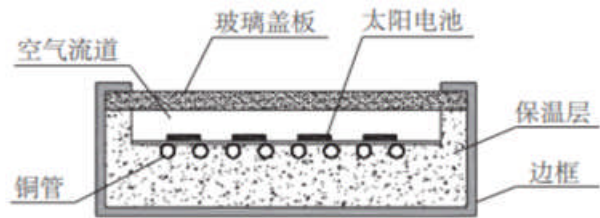


图 1 PV/T 断面结构示意图

光伏光热空气预热系统是利用 PV/T 系统来对空气进行干燥的综合系统，光伏板背面贴设集热器，同时在系统后布设一个空气通道，在系统的外围包裹保温棉，以减少热量的损失。在系统中布置多个温度测点，具体如图 2 所示。

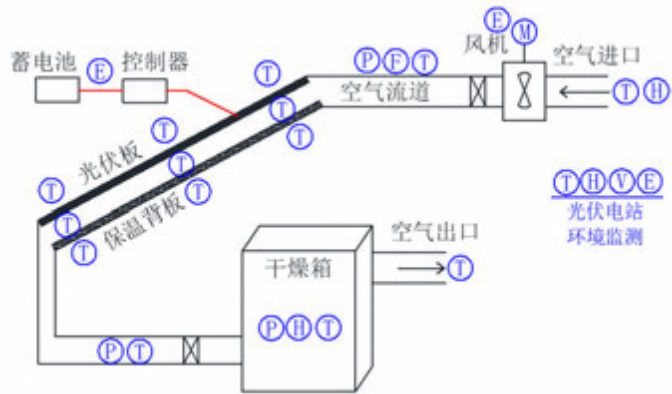


图 2 光伏光热太阳能干燥系统图

2.1.2 光伏光热空气预热系统安装

根据图 2 系统图进行系统安装，如图 3、图 4 所示为光伏板安装实物图。



图 3 空气预热系统正面安装图

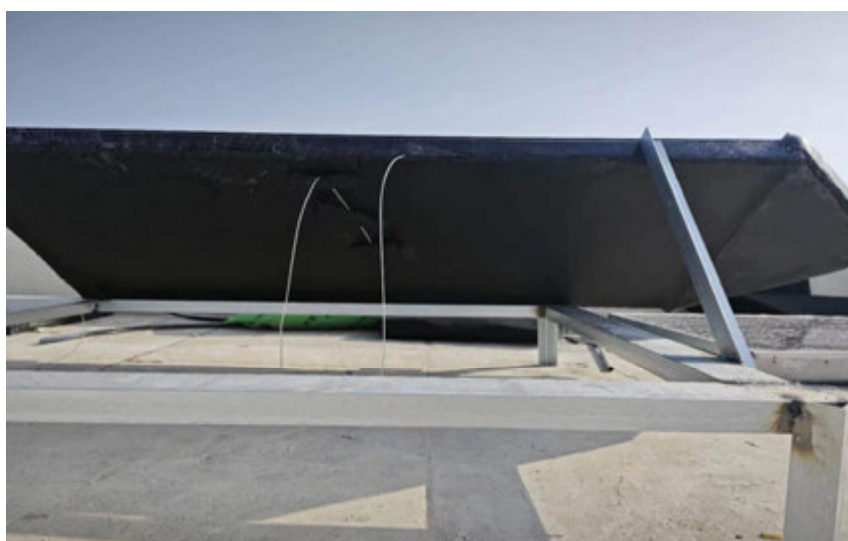


图 4 空气预热系统背面安装图

光伏光热空气预热系统电能的收集是通过太阳能电池光电效应将太阳辐射能中的 20% 左右转换成电能利用，剩下约 80% 的辐射能以热能形式释放。热能损失造成能量的浪费同时使光伏板表面温度升高，使得光伏发电的效率降低，甚至损坏光伏板。因此该部分热能的收集尤为重要。若利用这部分热量加热空气，以实现空气干燥的目的，该系统的能量使用效率会有明显提高。整个太阳能 PV/T 系统中的关键部件是太阳辐射能转换、收集的部件。

光伏光热空气预热系统即是把光伏发电和光热空气系统进行结合，既保证了光伏发电的效率，还将多余且有害的余热进行了有效的利用，是真正意义上的优化创新。

2.2 系统模型建立

为分析光伏光热空气预热系统在烟台地区气象条件下对系统空气出口温度、光伏发电量、太阳能综合利用效率的影响，实验根据系统的特点和结构进行系统设计，并建立相应 TRNSYS 模型。

TRNSYS 作为一个模拟软件，每个模块都可实现其特定功能，用户合理使用各模块，

输入设置参数，并对每个模块设置连接关系，即可进行模拟分析，并输出数据^[6]。

利用 TRNSYS 平台建立光伏光热空气预热系统，仿真模型如下图 5 所示。

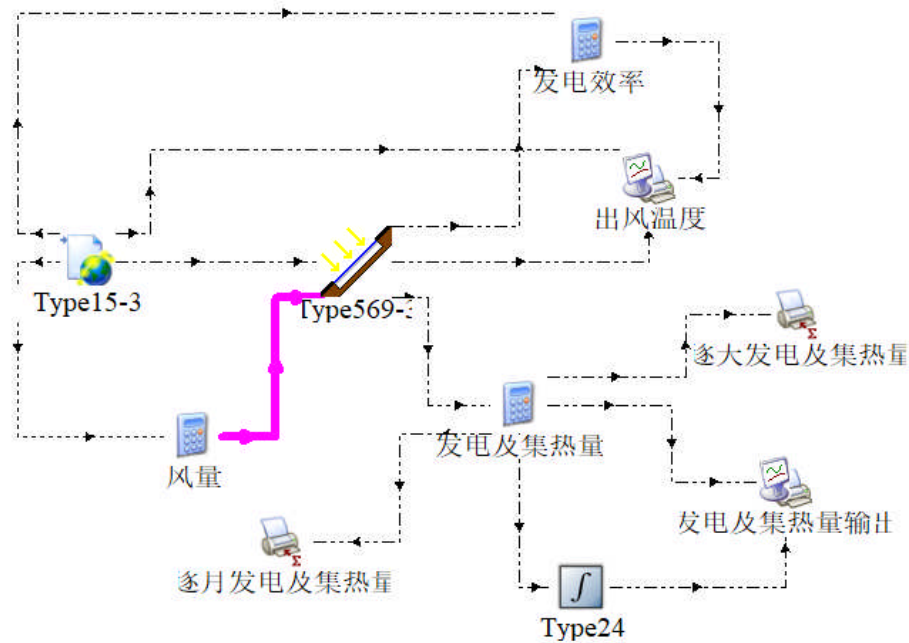


图 5 光伏光热空气预热系统模型

模型的主要部件有 Type15-3，可用于读取典型气象天气数据，根据时间步长对天气数据进行插值。模块 Type569 没有盖板且有 PV 效率修正的光伏效率修改器,Type65 和 Type25 分别为输出结果曲线和 TXT 文件。

模块 Type15-3 中创建烟台气象条件，提供烟台地区的太阳辐射量和每个季节的平均温度，对系统进行模拟。

PV/T 集热板相对地面倾角设置为 37.5°，光伏板长宽尺寸为 1.95m * 0.99m，光伏表面的吸收率和光伏表面发射率均为 0.9，PV 效率设为 0.2。其他参数为默认参数，如倾斜表面辐射模为 5，无雪覆盖时的地面反射率为 0.2，有雪覆盖时的地面反射率为 0.7，表面方位角为 0，基板电阻为 0.01，顶部和底部的通道发射率均为 0.9，通道高度为 0.0508m，参考温度为 25℃。如表 1 所示。

表 1 Type15-3 与 Type569-3 参数

Name	Value	Unit
File Type	3	
Logical unit	30	
Tilted Surface	5	
RadiationMode		
Ground reflectance-no snow	0.2	

Ground reflectance-snow cover	0.7	
Slope of surface	37.5	Degrees
Collector Length	1.95	m
Collector Width	0.99	m
Azimuth of surface	0	Degrees
Channel Height	0.0508	m
Reference Temperature	25.0	°C
Substrate Resistance	0.01	h.m ² K/kJ
Channel Emissivity-Top	0.9	Fraction
Channel Emissivity-Bottom	0.9	Fraction

风机的选取为 HF-100 型号的斜流增压管道风机，电流 0.13A，转速 2600r/min,风量为 220m³/h，噪音 31db(A)，功率 35W，频率 50HZ，电压 220V，静压 150Pa，所以风量设置为 220 m³/h，当室外太阳辐照量大于 0 时才会出现风量。

环境温度设置为 20°C，入口温度为 20°C，区域温度玻璃背板的辐射温度同样和环境温度取 20°C。入射辐射量与表面的辐照量相连线，入射角和光伏板的倾角通过连线给出，具体连线如下图 6 所示。

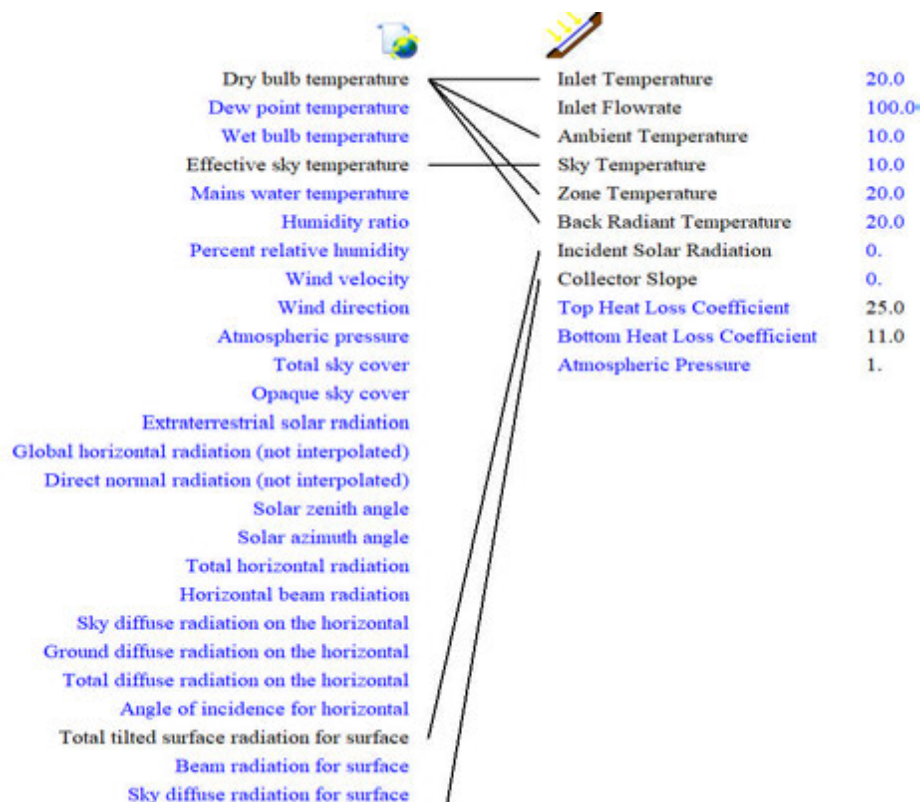


图 6 Type15-3 和 Type569-3 的连线

2.3 系统性能评价指标

2.3.1 系统经济性分析

实验系统经济性评价使用的是投资回收期法。投资回收期也被称为投资回本的年限。即系统运行的总收益超过系统成本总值的年数^[7]。

该系统成本约为 1150 元，其中光伏板型号为 375W，按市场价 1W 约为 2 元，所以光伏板约为 750 元；风机成本约为 200 元；支架等其他材料约为 200 元。

该系统一年的发电量如表 2，可知一年的发电量为 624.6 kW·h。系统配备有风机，风机的功率为 35W，风机一天工作 9 小时，即风机一年的耗电量为 114.98 kW·h，该系统一年的净发电量为 509.62 kW·h。取工业用电每度 0.8 元。最终一年的盈利为 407.7 元。

表 2 系统一年的发电量

月份	发电量/kW·h
一月	47.82
二月	52.82
三月	65.75
四月	59.20
五月	57.40
六月	49.48
七月	47.31
八月	50.62
九月	53.35
十月	53.23
十一月	44.90
十二月	42.72

系统成本约为 1150 元，系统每年的盈利为 407.7 元，利用公式 1^[7]可以算出该系统会在第三年出现整数，即累计净现金流量现值出现正值。最终该系统需三年才能回本。

$$\text{投资回收期} = \frac{\text{原始投资额（元）}}{\text{年净现金流量（元）}} \quad (1)$$

对与目前大部分光伏发电的研究对比，需要 7-8 年才能回本，鉴于本论文研究的系统，只需三年即可回本，体现了该系统的经济性。

本系统是在光伏发电系统上进行的优化，在光伏板后设空气流道，可增加该系统的寿命，更加提升系统的经济性。

2.3.2 系统生态效益分析

目前，由于化石燃料的燃烧，导致碳排放量严重超标，造成了全球变暖以及温室效应等严重影响。本文将对系统进行太阳能节能减排计算方法分析^[8]，分析本系统的研究在致力于经济性的同时，是否可以兼顾对生态环境的效益。

该系统生态效益的评价标准采用一年的减排量。目前碳排放的计算方法主要有投入产出分析法、实测法、碳排放因子法以及混合法^[9]。生态环境部发布：2022 年度全国电网平均排放因子为 0.5703t CO₂/MW·h 本系统一年的净发电量为 509.62 kW·h，由公式 2 可得。

$$\text{二氧化碳排放因子} = \frac{\text{二氧化碳排放量 (kg)}}{\text{能源消耗量 (kw} \cdot \text{h)}} \tag{2}$$

可得出该系统一年的 CO₂ 减排量为 0.29t。因此体现了本研究系统的生态效益。

3 结果与分析

通过对模型进行模拟输出数据，得到室外温度、空气出口温度、发电效率、集热效率的变化情况。由于光伏发电效率和集热效率在一年中的变化曲线过于复杂，无法直观分析结论，因此选择分析春分（3 月 21 日）这一天的变化趋势。同时模拟输出逐日或逐月的发电量或集热量的数值。本模型采用气象条件的太阳辐射量，如图 7 所示。

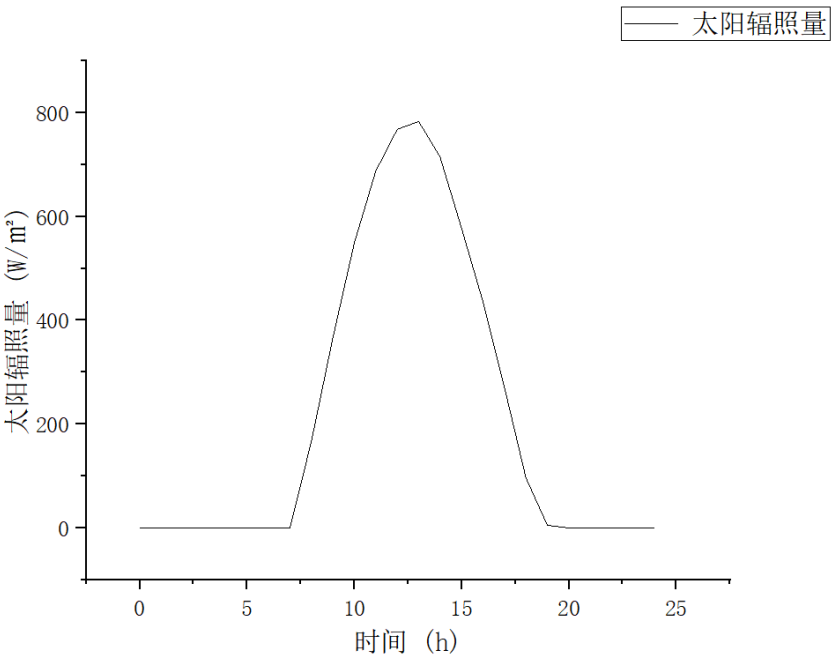


图 7 3 月 21 日一天太阳辐射量的变化

3.1 系统出口温度分析

根据模拟的结果，建立以时间为 X 轴，室外温度和空气出口温度为 Y 轴，做出一年和某一天的变化曲线图。该天选择的是春分（3 月 21 日）这一天作为典型代表，系统模型在模拟过程中得到的模拟值和系统实测值误差基本在允许范围内^[10]，曲线图如下图 8 和图 9 所示。

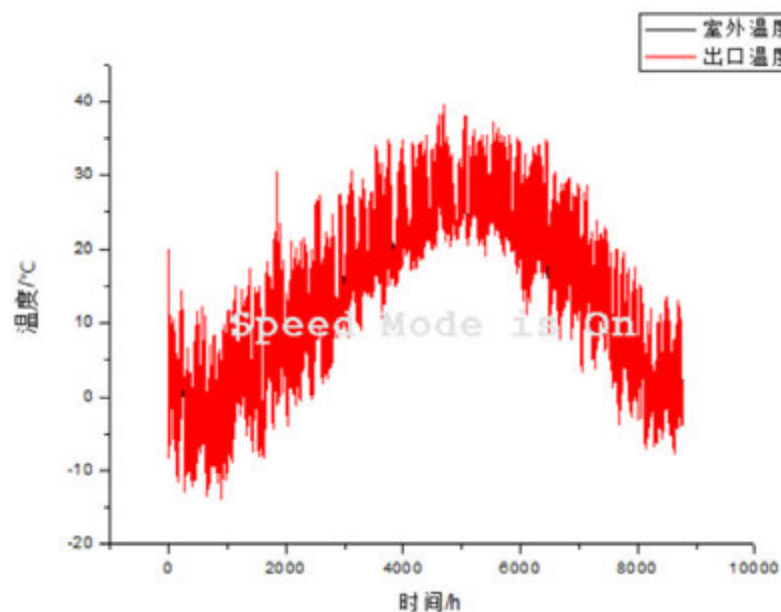


图 8 一年内室外温度和空气出口温度的变化

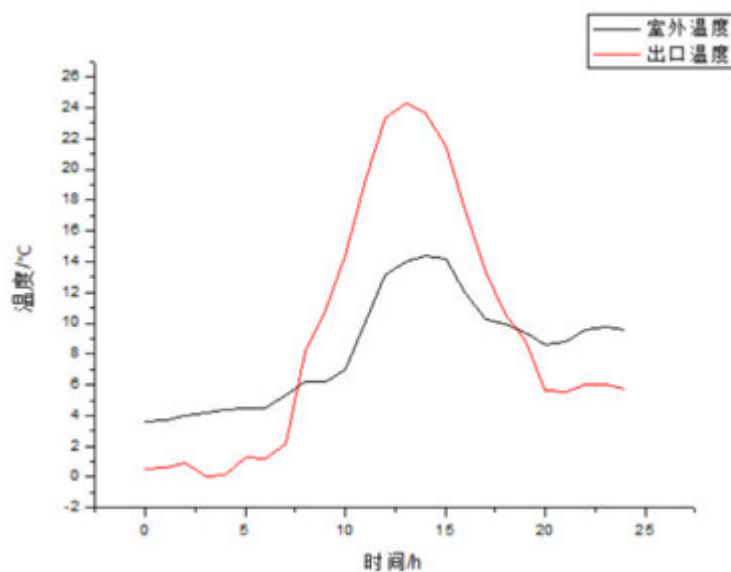


图 9 3 月 21 日室外温度和空气出口温度的变化

通过折线图，我们可以得出结论：空气的出口温度在一年变化中，夏季达到最高点，春季到夏季的变化过程大致为增长，夏季到冬季的变化过程大致为减少。在一天的变化中，在中午 13 点左右达到峰值，0-13 点为增长曲线，13 点-24 点为下降曲线，其中部分时间段略有浮动。

在一天的变化过程中，0 点到 7 点时，室外温度大于空气出口温度；8 点到 18 点时，空气出口温度大于室外温度；19 点到 24 点时，室外温度大于空气出口温度。

3.2 系统光伏发电量分析

根据模拟结果，以时间为 X 轴，光伏发电效率为 Y 轴，绘制春分（3 月 21 日）这一天光伏发电效率的变化的折线图。折线图如下图 10 所示。

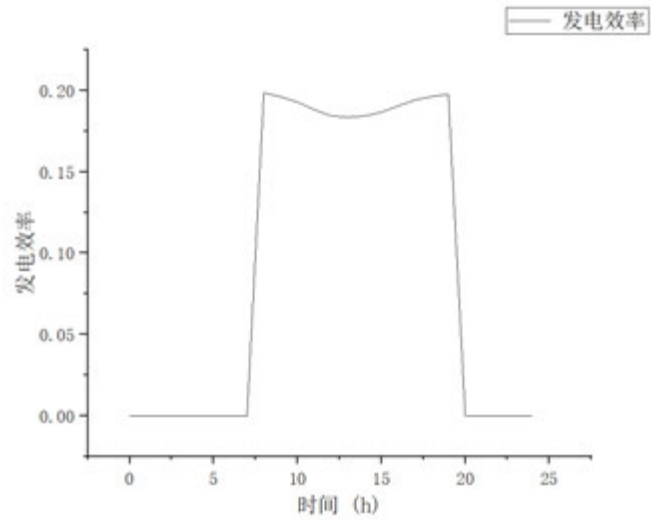


图 10 3 月 21 日光伏发电效率的变化

由该折线图得出：3 月 21 日，由于 0 点到 7 点这一时间段的太阳辐射量为 0，所以一时间段的发电效率均为 0；8 点到 19 点之间，发电效率稳定在 0.18-0.20 之间，12 点到 14 点间发电效率均为 0.18，在 8 点到 19 点的区间内效率最低；20 点到 24 点间的太阳辐射量为 0，所以发电效率均为 0。

3.3 系统太阳能综合利用效率分析

根据模拟结果，以时间为 X 轴，集热效率为 Y 轴，以春分（3 月 21 日）集热效率变化的折线图为例，如下图 11 所示。

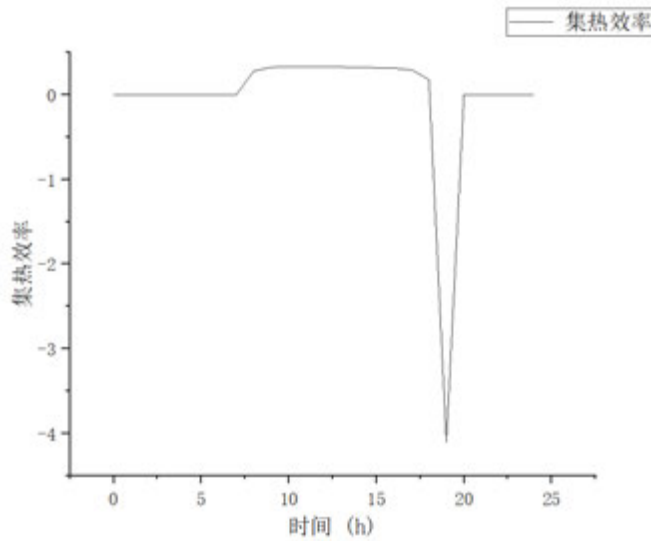


图 11 3 月 21 日下集热效率的变化

由该折线图得出：3月21日0点到7点期间，由于太阳辐射量为0，集热效率均为0；8点到10点，集热效率不断增加，10点集热效率达到峰值，其值为0.33，峰值一直持续到13点；13点到19点期间，集热效率不断下降，由于19点时室外温度大于空气出口温度，集热效率出现了负值；20点到24点期间，由于太阳辐射量为0，所以集热效率均为0。

4 结论

本文通过建立一个光伏光热空气预热系统的模型，并在 TRNSYS 软件中对其进行模拟，给定一个典型建筑气候区：处在寒冷地区，太阳能资源丰富区的山东烟台。利用 TRNSYS 中的模块对模拟结果输出空气出口温度、室外温度、光伏发电效率及集热效率在一年或者某一天下的变化数据，同时输出逐日光伏发电量和集热量的累计数据。通过多组数据，本文选取其中四组数据做了折线图，得到结论如下：

(1) 在空气的出口温度一年变化中，春季到夏季的温度大致保持增长趋势，夏季达到最高，最高值可达到 39.52℃。夏季到冬季的温度大致保持下降趋势。在空气出口温度一天变化中，0-13 点温度大致保持增长趋势，13 点达到最高温度，最高温度为 24.27℃，13 点-24 点大致保持下降趋势，其中部分时间段会略有浮动。

同时在一天的变化过程，0 点至 7 点区间段，室外温度大于空气出口温度；8 点到 18 点区间段，空气出口温度大于室外温度；19 点到 24 点区间段，室外温度大于空气出口温度。

(2) 在光伏发电效率在 3 月 21 日变化中，0 点至 7 点区间段，光伏发电效率均为 0；8 点到 19 点区间段，发电效率稳定在 0.18-0.20 之间，12 点到 14 点间发电效率区内达到最低效率，效率为 0.18；20 点到 24 点区间段，光伏发电效率均为 0。

在 0 点至 7 点和 20 点到 24 点区间，太阳辐射量为 0，所以光伏发电效率也为 0。而在 8 点至 19 点太阳辐射量不为 0 的区间内，12 点至 14 点这段区间温度过高，导致光伏发电效率降低。

(3) 在集热效率在 3 月 21 日变化中，0 点到 7 点区间段，集热效率均为 0；8 点至 10 点，集热效率不断增加，10 点集热效率达到最大值，集热效率为 0.33，最大效率从 10 点持续到 13 点；13 点至 19 点，集热效率不断下降；20 点到 24 点区间段，集热效率均为 0。

在 0 点至 7 点和 20 点到 24 点区间，太阳辐射量为 0，所以集热效率也为 0。而在 8 点到 19 点太阳辐射量不为 0 的区间内，10 点到 13 点太阳辐射量较强，集热效率达到峰值。19 点由于室外温度大于空气出口温度，集热效率出现负值。

(4) 该系统具有良好的经济性，体现在该系统的投资回收期比同类型的少，与此同时寿命更长。该系统也具有很好的生态效益，一年的 CO₂ 减排量可以达到 0.29t。

参考文献

- [1] 董丹, 秦红, 刘重裕, 等. 太阳能光伏/热(PV/T)技术的研究进展[J]. 化工进展, 2013, 32(05): 1020-1024.

- Dong Dan, Qin Hong, Liu Chongyu, et al. Research progress in solar photovoltaic/thermal (PV/T) technology [J] Chemical Progress, 2013, 32 (05): 1020-1024
- [2] 华靖芬, 高俊丽, 陈珂, 等. 能源消费结构转型对工业碳脱钩的溢出效应分析:基于中国 30 个省份的面板数据[J]. 环境科学与技术, 2023, 46(03): 71-80
- Hua Jingfen, Gao Junli, Chen Ke, et al Analysis of the Spillover Effect of Energy Consumption Structure Transformation on Industrial Carbon Decoupling: Based on Panel Data from 30 Provinces in China [J] Environmental Science and Technology, 2023, 46 (03): 71-80
- [3] 曲明璐, 王海洋, 闫楠楠, 等. 太阳能光伏光热热泵系统能量与分析[J]. 暖通空调, 2022, 52(2): 118-123
- Qu Minglu, Wang Haiyang, Yan Nannan, et al Energy and Analysis of Solar Photovoltaic Photothermal Heat Pump Systems [J] HVAC, 2022, 52 (2): 118-123
- [4] 王润泽. 太阳能光伏光热综合利用系统的优化研究[D]. 北京: 华北电力大学(北京), 2021.
- Wang Runze Optimization Research on Solar Photovoltaic Photothermal Comprehensive Utilization System [D] Beijing: North China Electric Power University (Beijing), 2021
- [5] 秦智胜, 张赫男, 林成楷, 等. 新型管板式太阳能 PV/T 集热器光热特性研究与优化[J]. 太阳能学报, 2022, 43(08): 130-136
- Qin Zhisheng, Zhang Henan, Lin Chengkai, et al Research and optimization of photothermal characteristics of a new type of tube sheet solar PV/T collector [J] Journal of Solar Energy, 2022, 43 (08): 130-136
- [6] 张季, 王海涛. 基于 TRNSYS 制冷工况光伏/热土壤源热泵综合性能研究[J]. 安徽建筑, 2023, 30(03): 87-89.
- Zhang Ji, Wang Haitao Research on the Comprehensive Performance of Photovoltaic/Hot Earth Source Heat Pump Based on TRNSYS Refrigeration Conditions [J] Anhui Architecture, 2023, 30 (03): 87-89
- [7] 殷士海, 陈小元, 肖松. 太阳能与冷凝水耦合采暖系统经济性分析[J]. 应用能源技术, 2022, (11): 33-37.
- Yin Shihai, Chen Xiaoyuan, Xiao Song Economic analysis of solar and condensate coupled heating systems [J] Applied Energy Technology, 2022, (11): 33-37
- [8] 薛道荣, 岳建芝, 韩成明. “光热+”清洁能源系统太阳能节能减排量计算方法分析[J]. 中国建筑金属结构, 2022, (09): 29-30
- Xue Daorong, Yue Jianzhi, Han Chengming Analysis of the calculation method for solar energy conservation and emission reduction in the "solar thermal+" clean energy system [J] China Building Metal Structure, 2022, (09): 29-30
- [9] 陈嘉雯, 邱栋, 张新, 等. 基于《绿色建筑评价标准》的绿色建筑减碳技术分析与碳减排量核算研究[J]. 福建建筑, 2023, (02): 39-44
- Chen Jiawen, Qiu Dong, Zhang Xin, et al Research on Carbon Reduction Technology Analysis and Carbon Emission Reduction Accounting of Green Buildings Based on the "Green Building Evaluation Standards" [J] Fujian Architecture, 2023, (02): 39-44
- [10] 陈晨, 孙雅辉, 李以通, 等. 基于 Trnsys 的村镇建筑太阳能和地源热泵复合供热系统仿真优化[J].

节能, 2023, 42(03): 1-6

Chen Chen, Sun Yahui, Li Yitong, et al Simulation and optimization of solar and ground source heat pump composite heating systems in rural buildings based on Trnsys [J] Energy saving, 2023, 42 (03): 1-6

不同焊点枕板式换热器传热性能分析

王婷, 胡红雷, 何爱玲, 侯庆志, 宋克伟

(¹兰州交通大学, 兰州 730070; ²青海民族大学, 西宁 810007)

(Email: songkw@mail.lzjtu.cn)

摘要: 本文数值研究了翅片表面焊点形状对枕板通道内流动与换热特性的影响。在不同焊点形状下, 获得了通道内的速度和温度分布、换热及阻力特性, 并且使用能评估摩擦系数 f 与努塞尔数 Nu 的综合换热因子 JF 对数值分析的结果做直观判断。结果表明: 与圆形焊点相比, 水滴形和翼形焊点后回流区减小, 回流区换热得到改善, 换热通道内的流动阻力明显减小。与圆形焊点通道相比, 水滴形和翼形焊点通道的阻力系数 f 分别降低了28.8%-34.5%和43.7%-56.1%, 通道平均努塞尔数 Nu 仅分别降低了8.0%-11.6%和13.6%-20.3%, JF 分别提升了1.0%-4.2%和1.3%-8.9%。因此, 水滴形和翼形焊点可以大幅降低流动阻力, 并能提高枕板式换热器的综合性能。

关键词: 枕板; 换热器; 焊点; 综合性能; 数值分析

0 前言

枕板式换热器由特定波纹形状的不锈钢金属薄板, 通过真空钎焊组成一组散热单元。与传统板式换热器相比, 枕板式换热器具有稳定性高、结构紧凑、重量轻和成本低廉等优势, 被广泛运用于食品、化工和材料等领域。枕板式换热器的波纹流道能够增加流体换热面积, 增强流体扰动, 破坏热边界层, 进而增强通道的换热。枕板式换热器的通道高度, 入流方向, 焊点间的角度与间距, 焊点形状等都是影响着枕板式换热器性能的重要参数。为了探索枕板式换热器中的流动与传热特性, 众多学者作了许多努力。Shirzad等^[1]通过数值模拟的方法研究探讨了几何参数对枕板式换热器换热性能的影响, 发现低 Re 下提高枕板通道的高度时, 通道的 Nu 增大、 f 减小, 换热得到增强。Eldeeb等^[2]的数值结果表明, 通过改变枕板式换热器的焊点形状和通道高度等几何参数, 换热通道的 Nu 提高3倍时, Δp 降低了30%。过度增加通道高度并不能对枕板通道的换热起到促进作用。Arsenyeva等^[3,4]的仿真结果表明, 增加通道高度时, 枕板式换热器传热系数降低。并根据实验结果, 建立了枕板通道 Nu 和 f 的拟合式, 可用于枕板通道的初步设计。王勇等^[5]利用数值分析了不同入流方向和通道高度对枕板式换热器阻力和换热性能的影响。结果表明, 当入流方向为45度且通道高度为1mm时, 枕板通道具有较好的换热性能。Mitrovic等^[6]的数值结果表明, 与平板通道相比, 焊点交错排列时枕板式换热器传热性能更好。Kumar等^[7,8]数值研究了几何参数对枕板式换热器通道内流动和传热特性的影响, 发现增加焊点纵向、横向间距, 通道的压力损失减少, 换热增强。Yao等^[9]首次提出了椭圆型焊点PPHE, 文章研究椭圆焊点不同在椭圆长宽比的情况, 并且分别对凹通道与凸通道进行热力分析与优化, 结果揭示凸通道在换热中占主要地位。另外椭圆型焊点长宽比为1.4时, 综合性能评价指数最大。一些研究为后面的学习奠定了基础。Piper等^[10-12]通过

数值模拟再现了枕板通道的几何形状，给出了确定换热通道水力直径和横截面积等几何参数的方程，这可用于枕板式换热器的初步设计和数值研究。Tran等^[13,14]实验测量了三种枕板式换热器的传热系数和压降值，通过实验数据获得了换热通道 Nu 和 f 的拟合式，并给出了确定枕板通道几何参数的设计方法。为了进一步增强换热器的性能，Shirzad等^[15]将纳米流体作为传热介质，探究了枕板式换热器的换热和流动特性。结果表明，当纳米颗粒体积浓度从2%增加到5%时，换热器通道的传热系数增加了14%-50%。Mitrovic等^[16]实验研究了枕板式换热器的传热和压降，探讨了分别使用水和油作为换热介质时枕板通道内的单相强制对流，建立了努塞尔数和摩擦系数的拟合式。综上所述，目前国内外对枕板式换热器的研究集中于焊点间的纵向、横向距离和通道高度等对其流动与换热的影响，而关于焊点形状对换热影响的探讨较少。本文通过数值模拟的方法，研究了水滴形和翼形焊点对枕板式换热器通道内流动与换热特性的影响，分析了 Nu 、 f 和 JF 等随 Re 的变化规律，并与等面积圆形焊点对通道内换热的影响进行了对比，获得了综合性能较好的枕板式换热器焊点形状。

1 模型建立与数值计算的方法研究

1.1 物理模型

本文所研究的枕板式换热器物理模型如图1(a)所示，枕板通道的几何参数如图1(b)和1(c)所示。流体域长度 $L_a=373\text{mm}$ ，通道高度 $t_p=3\text{mm}$ ，焊点的横向间距 $S_1=21\text{mm}$ ，纵向间距 $S_2=36\text{mm}$ 。焊点形状为圆形、水滴形和翼形，如图1(d)所示。圆形焊点的半径 $R=5\text{mm}$ ，水滴形焊点和翼形焊点面积与圆形焊点面积相同。

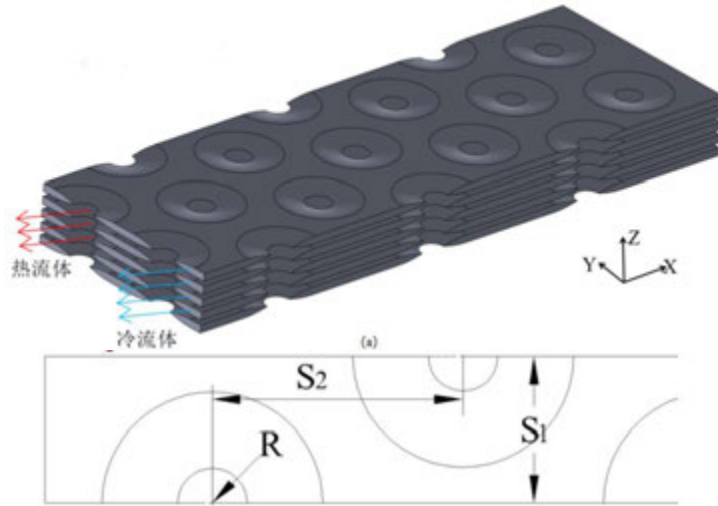


图 1 模型参数，(a)示意图 (b)几何参数

Fig.1 Model parameters, (a)schematic diagram (b) geometrical parameters

1.2 控制方程及边界条件

假设流体为常物性不可压缩，流体流动处于稳态湍流发展区，忽略粘性耗散、重力和辐射。基于以上假设，控制方程如下^[17]:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

式中， ρ 为流体的密度， u 、 v 、 w 表示流体在 x 、 y 、 z 三个坐标方向上的速度分量。

$$\text{div}(\rho u U) = \text{div}[(\mu + \mu_t) \text{grad} u] - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2)$$

$$\text{div}(\rho v U) = \text{div}[(\mu + \mu_t) \text{grad} v] - \frac{\partial p}{\partial y} \quad (3)$$

$$\text{div}(\rho w U) = \text{div}[(\mu + \mu_t) \text{grad} w] - \frac{\partial p}{\partial z} \quad (4)$$

式中， μ 为流体动力粘度， μ_t 为湍流粘度。

$$\text{div}(c_p \rho U T) = \text{div}[(\lambda + \lambda_t) \text{grad} T] \quad (5)$$

式中， c_p 为比热容， T 为温度， λ 为流体的导热系数， λ_t 为湍流导热系数。

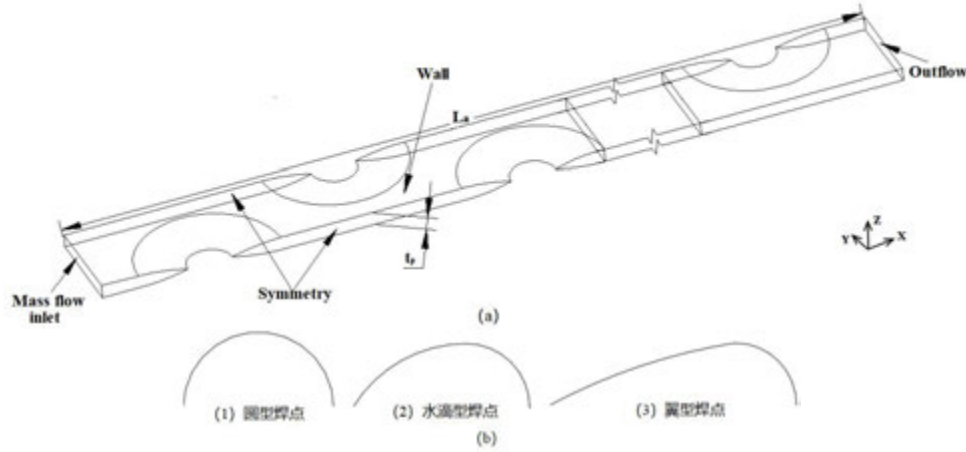


图 2 边界条件(a), 焊点形状(b)

Fig.2 (a)Boundary conditions, (b)Shape of welding point

水力直径 d_h :

$$d_h = \sqrt{2} t_p \quad (6)$$

式中， t_p 为通道高度。

努塞尔数 Nu :

$$Nu = \frac{h d_h}{\lambda} \quad (7)$$

式中， h 为对流换热系数。

阻力系数 f :

$$f = \frac{2 d_h \Delta p}{\rho u^2 L_a} \quad (8)$$

式中， Δp 表示进出口压降， L_a 为换热通道长度。

综合性能评价因子 JF :

$$JF = (Nu / Nu_0) / (f / f_0)^{1/3} \quad (9)$$

Nu_0 和 f_0 表示圆形焊点通道的努塞尔数和阻力系数。

枕板式换热器的边界条件如下：

入口处：

$$u = \frac{\mu Re}{\rho d_h}, m = \rho u A_{cs}, v(x, y, z) = 0, w(x, y, z) = 0, T(x, y, z) = T_{in} \quad (10)$$

式中， m 是换热通道的质量流量， A_{cs} 为换热通道最小截面面积。

出口处：

$$\frac{\partial}{\partial x} u(x, y, z) = 0, \frac{\partial}{\partial x} v(x, y, z) = 0, \frac{\partial}{\partial x} w(x, y, z) = 0, \frac{\partial}{\partial x} T(x, y, z) = 0 \quad (11)$$

上下翅片处：

$$u(x, y, z) = 0, v(x, y, z) = 0, w(x, y, z) = 0, T = T_w \quad (12)$$

延长段固体壁面处：

$$u(x, y, z) = 0, v(x, y, z) = 0, w(x, y, z) = 0, \frac{\partial}{\partial z} T(x, y, z) = 0 \quad (13)$$

对称面上：

$$\frac{\partial}{\partial y} u(x, y, z) = 0, \frac{\partial}{\partial y} w(x, y, z) = 0, \frac{\partial}{\partial y} T(x, y, z) = 0, v(x, y, z) = 0 \quad (14)$$

1.3 网格独立性验证

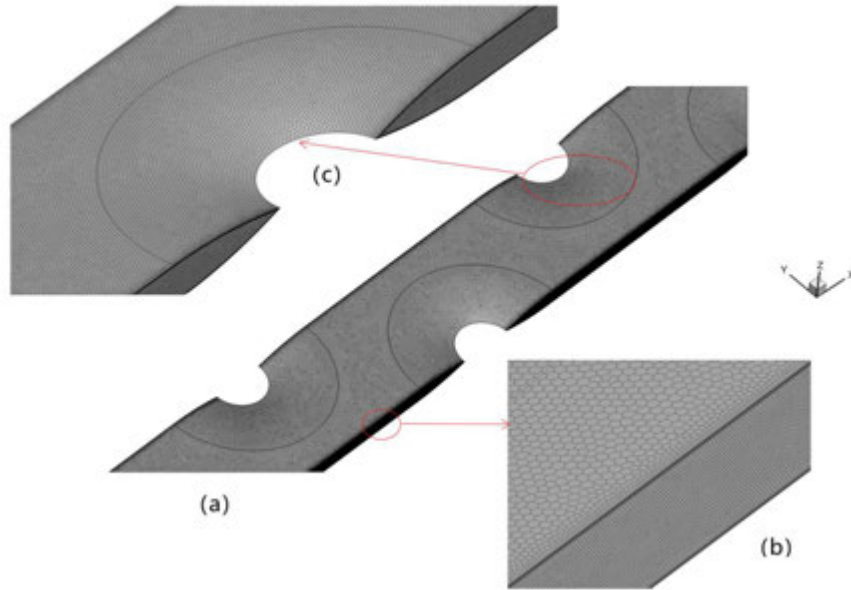


图3 模型网格，(a)整体网格 (b)边界层网格 (c)焊点网格
Fig.3 Model grid, (a) overall grid (b) Boundary layer grid (c) welding point

本文使用Fluent Meshing软件对数值计算模型进行多面体网格划分。在网格划分过程中，对换热通道壁面附近的网格进行加密处理。近壁面边界层的第一层网格高度需满足 $y^+ \approx 1$ ，且近壁面网格以1.2倍的增长率递增。基于压力与速度耦合的Coupled算法进行计

算，动量、湍流动能、湍流耗散率和能量方程的离散均采用二阶迎风格式。选取三套网格数分别为161万、257万和359万的圆形焊点光通道进行网格独立性考核。如表1所示，在 $Re=2000$ 时，不同数量的网格计算得到的 Nu 的误差不超过0.9%， Δp 的误差不超过0.8%。综合考虑计算精度和数值求解效率，本文将采用257万左右的网格数进行数值计算。使用的网格如图3所示。

表 1 网格独立性考核
Table 1 Grid independence assessment

模型	网格数（万）	Nu	误差	$\Delta p(\text{Pa})$	误差
1	161	33.59	-0.7%	1594.89	0.8%
2	257	33.83	0	1581.47	0
3	359	34.15	0.9%	1578.31	-0.2%

1.4 数值方法可靠性验证

在进行数值模拟计算之前，需要对数值模拟方法的适用性和准确性进行验证，本文建立与文献[15]中几何模型相同的数值模型。将四种湍流模型（Standard $k-\omega$ 、SST $k-\omega$ 、Realizable $k-\varepsilon$ 、RNG $k-\varepsilon$ ）得到的数值结果与文献[14]的实验数据相比较，如图4所示。通过对比发现，采用Standard $k-\omega$ 湍流模型时，数值计算结果与实验数据吻合较好， Nu 间的最大误差为6.7%， f 最大误差为5.3%。

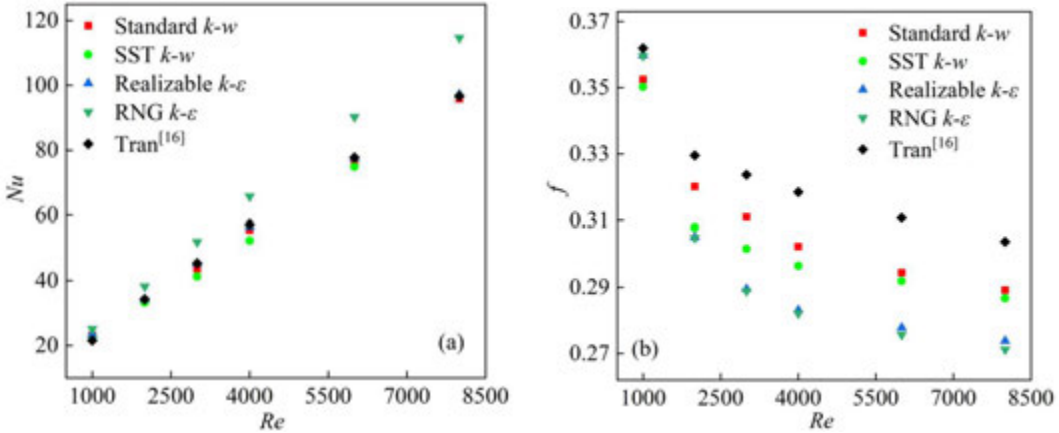


图 4 数值模拟结果与文献实验对比图，(a) Nu (b) f

Fig.4 Comparison of numerical simulation results and literature experiments, (a) Nu (b) f

2 结果与讨论

2.1 焊点形状对速度的影响

$Re=9000$ 时，不同焊点形状的枕板换热通道中间截面 $z=1.5\text{mm}$ 处的速度分布云图如图5所示。焊点形状从圆形变化到水滴形和翼形时，由于水滴形和翼形焊点的流线形设计，使得流体绕流焊点时的分离点明显后移，焊点后回流区也明显减小。圆形焊点后回流区最大，水滴形焊点次之，翼形焊点后的回流区最小。焊点形状不同时，通道内主流速度分布也明显不同。由于水滴形和翼形焊点宽度相比圆形焊点减小，通道内最小流通面积增大，主流最大速度相对圆形焊点减小。在圆形焊点通道内，主流区速度方向变化较大，成“之”字形流动。而在水滴形和翼形焊点通道内，由于流体分离点滞后且流通截面增大，

通道内主流流动相对平缓。

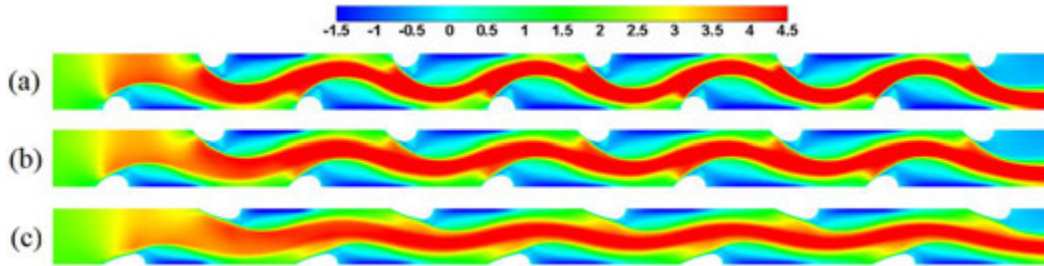


图 5 不同焊点形状换热通道 $z=1.5\text{mm}$ 截面的速度云图, (a)圆形, (b)水滴形, (c)翼形
Fig.5 Velocity on section at $z=1.5\text{ mm}$ for different welding spot shapes, (a) round, (b) droplet, (c) wing.

2.2 焊点形状对温度的影响

$Re=9000$ 时, 换热通道中间截面 $z=1.5\text{mm}$ 处的温度分布云图如图6所示。三种焊点通道内, 焊点后回流区的温度较高, 这是因为回流区流体与主流间流体交换差, 热量难以被流体带走, 回流区温度升高, 导致回流区换热较差。因为圆形焊点后回流区最大, 因此圆形焊点后温度较高的区域也最大, 水滴形焊点后温度较高的区域次之, 而翼形焊点后回流区温度较高的区域则最小。对比不同焊点后回流区的温度, 可以发现, 圆形焊点后回流区的温度最大, 而翼形焊点后回流区的温度则最小。因此, 水滴形和翼形焊点可以有效地提高枕板的温度均匀性, 减小温度应力。在三种焊点通道内, 随着焊点由圆形到翼形变化, 相同截面处主流的温度逐渐降低, 这说明通道内的整体换热能力减弱。

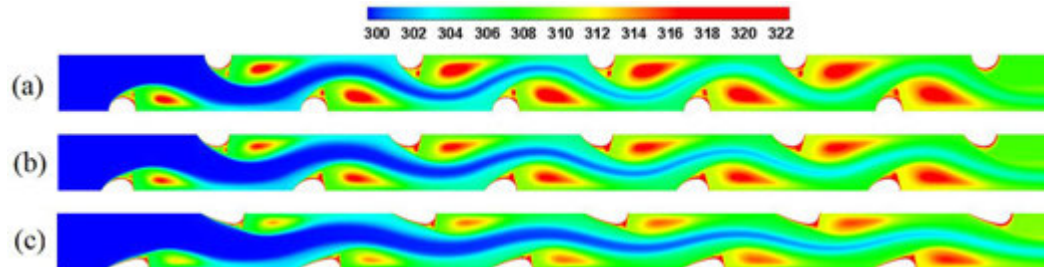


图 6 不同焊点形状换热通道 $z=1.5\text{mm}$ 截面的温度云图, (a)圆形, (b)水滴形, (c)翼形
Fig.6 Temperature on section at $z=1.5\text{ mm}$ for different welding spot shapes, (a) round, (b) droplet, (c) wing.

2.3 焊点形状对局部 Nu 的影响

$Re=9000$ 时, 不同焊点通道上壁面的局部 Nu 分布云图如图7所示。在换热通道入口处, 边界层较薄, 局部 Nu 较大, 随着边界层逐渐发展, 局部 Nu 降低。流体换热主要在换热通道主流区进行, 在枕板式换热器的热交换中起主要作用。从图中还可看出, 在焊点前区域, 流体改变流动方向且速度较大, 局部 Nu 也相对较大, 而在焊点后回流区的换热较差, 局部 Nu 最小。焊点形状从圆形变化到水滴和翼形时, 回流区逐渐减小, 焊点后回流区 Nu 较小的区域也逐渐减小。主流区速度较大, 因而主流区的 Nu 也较大。由于水滴形和翼形通道内主流速度要小于圆形焊点通道, 因此, 水滴形和翼形通道内主流区的 Nu 要小于圆形焊点通道, 且翼形通道内主流区的 Nu 明显最小。

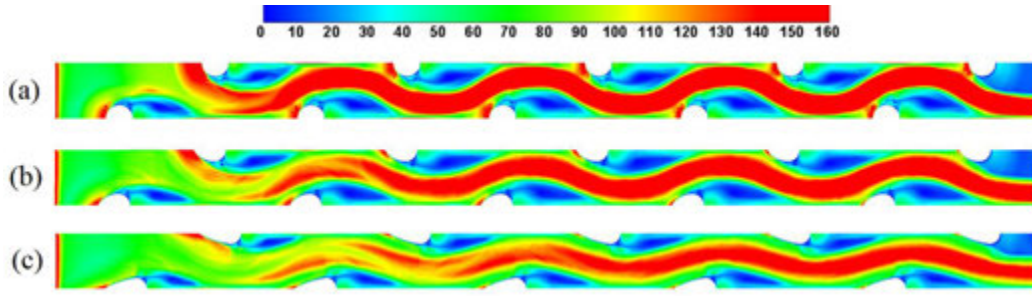


图 7 焊点形状对局部 Nu 的影响, (a)圆形, (b)水滴形, (c)翼形
Fig.7 Influence of the welding spot shape on the local Nu , (a) round, (b) droplet, (c) wing.

2.4 焊点形状对平均 Nu 的影响

不同焊点形状的换热通道的平均 Nu 随 Re 的变化曲线如图 8 所示。随着 Re 的增大, 枕板通道的平均 Nu 不断提高。在总体换热中主流区的换热占主要地位, 即使翼型与水滴型的回流区换热表现比圆形焊点通道更好也不能弥补主流区换热的劣势。与圆形焊点相比, 水滴形和翼形焊点通道内流体与换热壁面的热交换不充分, 使得其换热通道的平均 Nu 较小。从图中还可看出, Re 较小时, 换热通道的平均 Nu 差别较小; 而随着 Re 的增大, 平均 Nu 的差异逐渐增大。在雷诺数 $Re=2000-10000$ 的范围内, 圆形焊点换热通道的平均 Nu 较大, 最大可达到 114.8; 水滴形焊点次之, 平均 Nu 可达到 103.8; 翼形焊点换热通道的平均 Nu 最小, 可达到 94.9。相同 Re 下, 与圆形焊点相比, 水滴形和翼形焊点换热通道的平均 Nu 分别减小了 8.0%-11.6% 和 13.6%-20.3%。其中, 翼形焊点换热通道的平均 Nu 最小, 比水滴形焊点通道的平均 Nu 低 6.1%-9.9%。

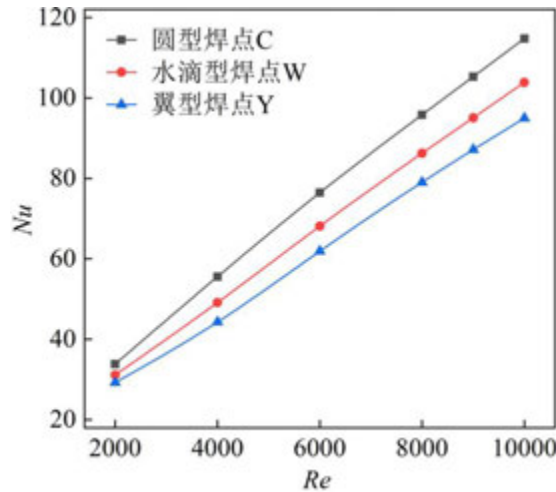


图 8 焊点形状变化对 Nu 的影响图
Fig.8 Effect of shape change of welding spot on Nu

2.5 焊点形状对 f 的影响

换热通道的 f 随 Re 变化曲线如图9所示, 焊点形状变化对通道内流体流动影响明显, 对 f 影响较大。 Re 从2000增加至10000时, 三种焊点通道的 f 均随着 Re 的增加而减小。

低 Re 下, 通道的 f 变化幅度较大, 随着 Re 的提高, f 变化幅度减小。焊点形状不同时, 换热通道的 f 相差较大, 圆形焊点换热通道的 f 最大; 水滴形焊点换热通道的 f 次之, 翼形焊点换热通道的 f 最小。圆形与翼形焊点通道的 f 差异最大。任一 Re 下, 焊点形状由圆形变为水滴形及翼形时, 由于翼形和水滴形焊点的流线形设计能缓解流动冲击, 且焊点附近通道宽, 使得换热通道内流动阻力减小。 $Re=2000-10000$ 时, 与圆形焊点相比, 水滴形焊点通道内 f 降低 28.8%-34.5%。相比于圆形和水滴形焊点, 翼形焊点通道内 f 分别减小 43.7%-56.1% 和 21.0%-32.9%。

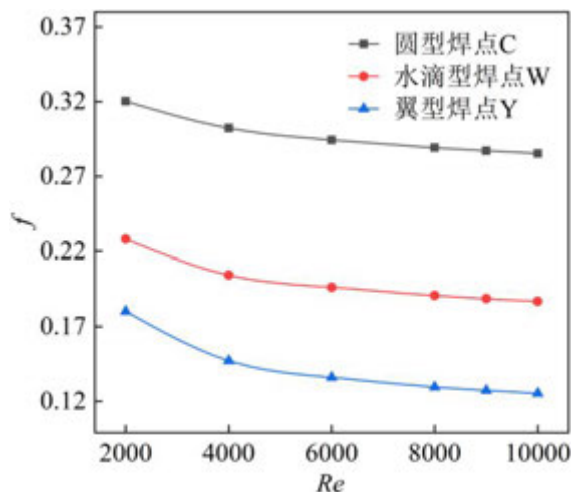


图9 焊点形状变化对 f 的影响图

Fig.9 Effect of shape change of welding spot on f

2.6 焊点形状对 JF 的影响

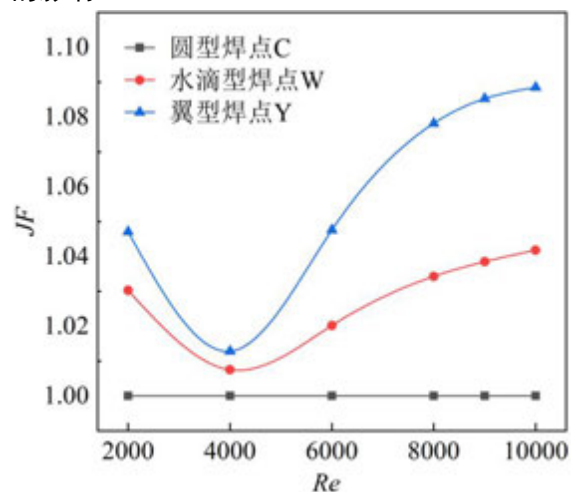


图 10 焊点形状变化对 JF 的影响图

Fig.10 Effect of shape change of welding spot on JF

综合考虑 Nu 和 f 的影响, 本文选取等泵功评价准则作为评价标准, 描述焊点形状对通道的强化传热效果。图10所示为焊点形状不同时, 换热通道 JF 随 Re 变化曲线。与圆形焊点相比, 水滴形和翼形焊点枕板通道的 JF 均大于 1, 这是因为水滴形及翼形焊点枕板通

道的 f 相比圆形焊点减小幅度较大。当 $Re < 4000$ 时, 枕板通道的 JF 随 Re 的增大而降低; 而当 $Re > 4000$ 时, 随着 Re 的增大, JF 不断提高。 $Re=2000-10000$ 范围内, 水滴形和翼形焊点换热通道的 JF 分别增大1.0%-4.2%和1.3%-8.9%。低 Re 下, 各焊点的 JF 差异较小; 随着 Re 的提高, JF 相差较大。翼形焊点换热通道的 JF 大于水滴形焊点, JF 增大约0.5%-4.7%, 翼形焊点枕板通道的综合换热性能较好。

3 结论

本文在 $Re=2000\sim 10000$ 范围内, 数值分析了圆形、水滴形和翼形焊点对枕板式换热器传热和流动特性的影响。主要结论如下:

- (1) 在保持焊点面积一致, 焊点形状从圆形变化到水滴形和翼形时, 由于水滴形和翼形焊点的流线设计, 使得流体绕流焊点时的分离点明显后移, 焊点后回流区减小, 流动阻力大幅下降。与圆形焊点相比, 水滴形和翼形焊点通道内的流动阻力分别减小28.8%-34.5%和43.7%-56.1%。
- (2) 因水滴形和翼形焊点的流线设计, 通道内最小流通面积相比圆形焊点通道增大, 主流速度减小且流动相对平缓, 主流区换热减弱但回流区换热得到改善。水滴形和翼形焊点通道内平均 Nu 与圆形焊点相比, 仅分别减小了8.0%-11.6%和13.6%-20.3%。
- (3) 水滴形和翼形焊点可提高枕板式换热器的综合换热性能。与圆形焊点相比, 综合性能因子 JF 分别增大1.0%-4.2%和1.3%-8.9%。

参考文献:

- [1] Shirzad M, Delavar M A, Ajarostaghi S, & Sedighi K. Evaluation the effects of geometrical parameters on the performance of pillow plate heat exchanger[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2019, 150: 74-83.
- [2] Eldeeb R, Aute V, Radermacher R. Investigation of Thermal-Hydraulic Characteristics of Pillow Plate Heat Exchangers Using CFD[J]. International Refrigeration and Air Conditioning Conference, 2016, 168: 2278-2287.
- [3] Arsenyeva O, Tran J, Kenig E Y. Thermal and hydraulic performance of pillow-plate heat exchangers[J]. Computer Aided Chemical Engineering, 2018, 43: 181-186.
- [4] Arsenyeva O, Piper M, Zibart A, et al. Investigation of heat transfer and hydraulic resistance in small-scale pillow-plate heat exchangers[J]. Energy, 2019, 181: 1213-1224.
- [5] 王勇. 几何参数对枕形板式中冷器换热性能影响研究[D]. 吉林大学, 2019.
- [6] Tran, J.M., Piper, M., Kenig, E.Y. (2018). Single-Phase Flow and Condensation in Pillow-Plate Condensers. In: Bart, H.J., Scholl, S. (eds) Innovative Heat Exchangers. Springer, Cham.
- [7] Kumar S, Premachandran B, Subbarao P. Large eddy simulation of single-phase forced convection in pillow plate channel with periodic boundary conditions[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 149: 1250-1255.
- [8] Kumar S, Premachandran B, Subbarao P. Study on thermo-hydraulics in a Pillow Plate Channel[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2019, 145: 106020.

- [9] Yao Y, Ding J, Zhang Y, et al. Thermal and hydraulic optimization of supercritical CO₂ pillow plate heat exchanger with ellipse weld spots in CSP system[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2023, 143: 106739.
- [10] Piper M, Olenberg A, Tran J M, et al. Bestimmung charakteristischer Geometrieparameter von Thermoblech-Wärmeübertragern[J]. Chemie Ingenieur Technik - CIT, 2014, 86(8).
- [11] Piper M, Wecker C, Olenberg A, et al. An experimental analysis of the topology and dynamics of a falling liquid film over the wavy surface of a vertical pillow plate[J]. Chemical Engineering Science, 2015, 130: 129-134.
- [12] Piper M, Olenberg A, Tran J M, et al. Determination of the geometric design parameters of pillow-plate heat exchangers[J]. Applied Thermal Engineering, 2015, 91:1168-1175.
- [13] Tran J M, Sommerfeld S, Piper M, et al. Investigation of pillow-plate condensers for the application in distillation columns[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2015, 99: 67-74.
- [14] Tran J M, Piper, M. and Kenig, Experimental Investigation of Convective Heat Transfer and Pressure Drop in Pillow Plates under Single-Phase Through-Flow Conditions[J]. Chemie Ingenieur Technik, 2015, 87: 226-234.
- [15] Shirzad M, Ajarostaghi S, Delavar M A, et al. Improve the thermal performance of the pillow plate heat exchanger by using nanofluid: Numerical simulation[J]. Advanced Powder Technology, 2019, 30: 1356-1365.
- [16] Mitrovic J, Peterson R. Study of single-phase convection and condensation in thermoplate heat exchanger[J]. Thermoplate Heat Exchanger, 2007, 30: 907-919.
- [17] 陶文铨. 数值传热学[M]. 西安交通大学出版社, 2019.

电流体喷印锥射流形成及喷射过程模拟研究

沙彦秀, 王孟铎, 何彬, 胡邹伟, 郭玉洁, 关寅*

(华中科技大学 能源与动力工程学院, 武汉 430074)

(Tel:027-87543728, Email:yinguan@hust.edu.cn)

摘要: 电流体喷印是近年来迅速发展的微纳液滴增材制造技术, 在微纳 3D 打印、新能源利用等领域具有广泛应用。然而, 由于较难从实验中对溶液喷射行为开展分析, 溶液喷射机理仍不甚明确。本文使用数值模拟方法, 对电喷印中常见的锥射流形成及喷射过程开展研究, 通过分析施加电压和溶液电导率对带电溶液锥射流形成及喷射行为的影响, 揭示各参数对锥射流模式下电喷印过程及产物的作用规律, 为高精度电喷印技术的进一步发展提供重要理论基础。

关键词: 电流体喷印, 泰勒锥, 锥射流, 施加电压, 溶液电导率

0 前言

电流体喷印^[1-2]是近年来迅速发展的一种基于电流体动力学的高频微纳液滴增材制造技术。该技术利用强电场诱导喷嘴处的带电溶液形成泰勒锥射流并在喷印基板上沉积产生微纳尺度液滴, 具有分辨率高 ($<50\text{ nm}$)、兼容性好 (墨水粘度范围: $1\text{--}10000\text{ cps}$) 等特点, 近年来在微纳 3D 打印、柔性电子制造、新能源利用等领域已显现出独特优势^[3-6] (图 1)。电喷印技术的一种常见应用方法是使用直流连续电压诱导喷嘴处的聚合物溶液形成泰勒锥并产生锥射流, 利用该模式产生微纳尺度液滴或液线, 在基板上精确沉积喷印产物完成三维微纳喷印制造 (图 2)。然而, 锥射流模式稳定喷印工艺窗口较小, 当各参数配合不当或超出一定范围时容易出现杂乱液滴等不稳定喷射现象, 对喷印的精度与准确性有极大影响。

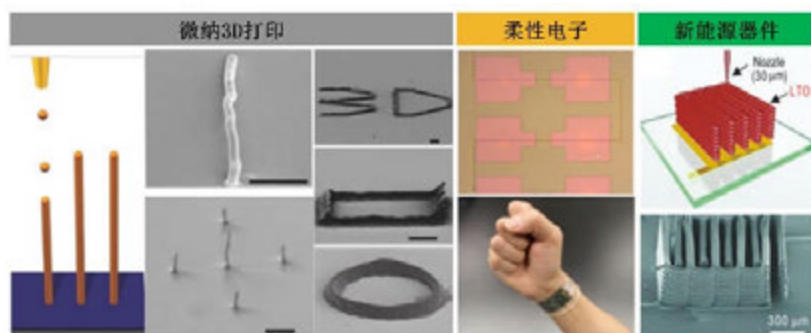


图 1 电流体喷印技术在工程各领域的应用

Fig.1 The applications of electrohydrodynamic printing

基金项目: 高精度电流体喷印原理与异质结构性能调控 (2021YFB3200701)

基于射流稳定喷射与微液面有序振荡的高频电流体按需喷印过程研究 (51906073)

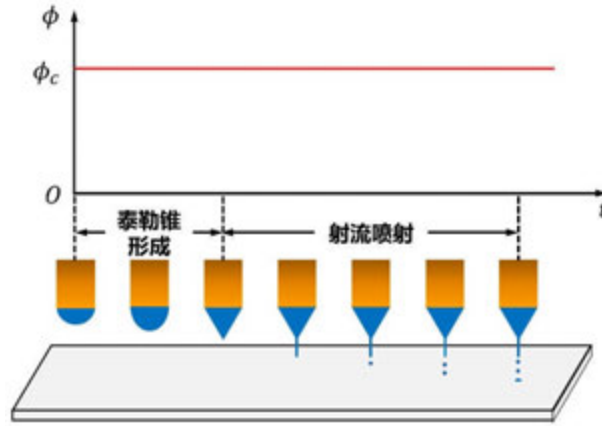


图 2 电流体喷印锥射流形成及喷射过程示意图

Fig.2 The schematics of cone-jet formation and injection process of electrohydrodynamic printing

为了弄清电喷印锥射流模式高频喷射复杂多样性的机理及控制方法，研究者们开展了众多关于喷印工艺参数对锥射流喷印过程与产物作用规律的研究。早期关于锥射流的研究主要使用理论与实验相结合的方法^[7-14]。de la Mora 和 Loscertales^[7]实验研究了较大电导率溶液在电场作用下的喷射过程，获得了溶液喷射时产生电流的大小与供液流量及溶液属性参数间的标度律 $I = f(\epsilon)(\gamma Q K / \epsilon)^{1/2}$ ，并对此标度律进行了理论分析与解释。Gañán-Calvo 等人^[8]对锥射流喷射过程中电流大小及生成液滴体积进行了理论及实验研究，最终获得了电流大小及生成液滴体积与供液流量及溶液属性参数间的标度律。Hartman 等人^[9]考察了锥射流模式下的射流断裂过程，获得了曲张模式及鞭动模式下生成液滴尺寸与供液流量的关系，发现了生成液滴直径与射流直径间 $d_d = 1.89d_j$ 的标度律。杨建军等人^[11]探究了施加电压和喷嘴入口压力对乙醇溶液电喷印过程的影响，获得了包括锥射流和多股射流在内的不同喷印模式转换时的特征电压和特征入口压力。Wang 等人^[12-13]实验研究了锥射流模式下的电喷印过程，揭示了施加电压、供液流量、溶液属性等参数对射流直径、生成液滴尺寸和泰勒锥形态的作用规律。Rubio 等人^[14]对低电导率乙醇溶液的锥射流喷射过程进行了实验研究，精确获得了第一颗生成液滴所带电荷量并对其进行了解释。

随着近年来数值模拟技术在工程各领域的广泛应用，研究者们开始使用模拟仿真方法对电喷印锥射流模式下的溶液喷射过程开展研究^[15-22]。Collins 等人^[15]使用有限元法结合漏电介质模型，对有限导电液体在电场作用下的泰勒锥形成、射流产生与液滴生成过程进行了模拟研究，获得了溶液参数与射流尖端生成液滴尺寸的关系。Wei 等人^[16]使用 OpenFOAM 建立了电喷印流电耦合数值模型，考察了施加电压和供液流量对生成液滴尺寸及溶液喷射时产生电流大小的影响。Gañán-Calvo 等人^[17]对低电导率 1-辛醇溶液在电场作用下的泰勒锥形成、喷射及断裂形成微液滴的过程进行了模拟研究，发现了第一个生成液滴的尺寸与所带电荷的通用标度律。王军锋等人^[18]模拟研究了施加电压、溶液流量等参数对锥射流形成、喷射及断裂行为的影响，并直观展现了泰勒锥内的涡流形态。Dastourani 等人^[20-21]模拟研究了锥射流模式下的电喷印过程，分析了施加电压、溶液流

量和环境压力等因素对喷印过程及产物的作用规律。Guan 等人^[22]对连续电压下的高频脉冲锥射流喷印过程进行了详细的模拟研究，分析并解释了电压大小、喷嘴高度和溶液表面张力对喷印过程和产物的影响。

尽管近年来关于电喷印锥射流模式的研究取得了令人瞩目的进展，但受到电喷印过程微纳尺度、高速变化、影响因素众多等特性的限制，实验研究具有一定局限性，现阶段关于电喷印锥射流模式下射流形成及喷射过程的研究仅揭示了部分参数对电流大小、射流直径、生成液滴体积的影响，缺乏对喷射过程中溶液整体形态变化的分析，对锥射流模式过程及产物的精确控制造成了巨大阻碍。为此，本文使用数值模拟方法，对电喷印锥射流形成及喷射过程开展研究，通过使用模拟结果中溶液喷射关键时刻的整体形态、环境电压分布与表面电荷密度等信息，深入分析施加电压和溶液电导率对带电溶液锥射流形成及喷射行为的影响，最终揭示施加电压和溶液电导率对锥射流模式下喷印过程及生成液滴的作用规律，为高精度电喷印技术的进一步发展提供关键理论基础。

1 数值模拟方法

1.1 控制方程

本文使用开源程序 OpenFOAM 对直流电压下电流体喷印锥射流形成及喷射过程开展模拟研究，该过程的控制方程由以下质量守恒方程和动量守恒方程构成：

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu [\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{st} + \mathbf{F}_{es} \quad (1.2)$$

其中， $\mathbf{U}$ 是溶液速度， ρ 是溶液密度， p 是溶液压力， μ 是溶液运动粘度， $\mathbf{g}$ 是重力加速度， $\mathbf{F}_{st}$ 和 $\mathbf{F}_{es}$ 分别为溶液受到的表面张力和电场力。由于电喷印过程流体处于微纳级别，表面张力对锥射流形成过程至关重要，本研究采用连续表面张力（Continuum Surface Force, CSF）法计算表面张力 $\mathbf{F}_{st}$ ，由下式计算得到^[23]：

$$\mathbf{F}_{st} = \gamma \kappa \mathbf{n} \quad (1.3)$$

其中， γ 是溶液气液界面处的表面张力系数， κ 是气液交界面的平均曲率， $\mathbf{n}$ 是界面处的单位法向量。等式(1.1)、(1.2)采用了欧拉隐式方法进行时间积分，对流项采用线性迎风方法处理，速度与压力的耦合采用 PIMPLE 算法，该算法是 SIMPLE 算法（压力耦合方程的半隐式方法）和 PISO 算法（压力隐式算子分割方法）的结合，常用于处理非稳态过程。动量守恒方程(1.2)中，电场力 $\mathbf{F}_{es}$ 使用漏电介质模型计算麦克斯韦应力张量的散度 $\boldsymbol{\tau}_M$ 得到^[24-25]：

$$\mathbf{F}_{es} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_M = \rho_e \mathbf{E} - \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \nabla \varepsilon \quad (1.4)$$

其中 $\mathbf{E}$ 为电场， ρ_e 为溶液电荷密度， ε 是溶液介电常数。方程右边第一项表示电场与自由电荷间的库仑力，第二项为极化应力，作用于气液界面法线方向。溶液外部的电场分布可由电势 Φ 的梯度计算得到：

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi \quad (1.5)$$

根据高斯定律，溶液气液界面电荷密度 ρ_e 与溶液介电常数 ε 之间的关系可由下式表示：

$$\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = \rho_e \quad (1.6)$$

控制 ρ_e 的电荷守恒方程可以描述为：

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e \mathbf{U}) = \nabla \cdot (K \nabla \Phi) \quad (1.7)$$

其中 K 为溶液电导率，等式（1.7）左边的第二项来自电荷对流引起的与电荷通量垂直的单位面积上的电流，等式右边的项来自电荷传导。

本文采用流体体积（Volume-of-Fluid, VOF）法对电喷印过程中的溶液气液界面进行追踪，定义了一个液体体积分数 $\alpha(x, t)$ 表示网格中液体的相分数，该值在 $[0, 1]$ 之间变化，0表示网格内全为气体，1表示表示网格内全为液体，当该值介于 0-1 之间则表示网格中含有气液界面，因此，该体积分数函数 α 可定义为^[26-27]：

$$\alpha(x, t) = \begin{cases} = 1 & \text{充满液体} \\ 0 < \alpha < 1 & \text{气液界面} \\ = 0 & \text{充满气体} \end{cases} \quad (1.8)$$

式（1.3）中溶液气液界面处的平均曲率和单位法向量可由流体体积函数 α 求得：

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad (1.9)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \quad (1.10)$$

1.2 数值模型验证

为了验证所用数值模型的准确性，本文对文献^[28]中的电喷印锥射流形成及喷射过程进行了数值模拟，并与文献^[28]中的结果进行了对比。该喷印过程使用的喷嘴内径 $D_i=350\mu\text{m}$ ，外径 $D_o=500\mu\text{m}$ ，喷嘴距离基板高度 $H=10\text{mm}$ ，电压大小 $\Phi=4500\text{V}$ ，溶液流量 $Q=5 \times 10^{-9} \text{m}^3/\text{s}$ ，所用溶液为庚烷，其物性参数如表 1 所示。模型所用数值计算域如图 3(a)所示，其宽度为 7mm，高度为 11mm，在流体经过的区域，网格进行了适当加密，最小网格尺寸为 $10\mu\text{m}$ 。电喷印过程如图 3(b)所示，其中上排为文献^[28]中的结果，下排为本研究所得模拟结果。初始状态下，喷印溶液充满喷嘴，并未延伸到喷嘴外部。在喷嘴处施加电压后，喷嘴内溶液会在电场力的作用下在喷嘴处逐渐积累并形成泰勒锥，随着电荷在泰勒锥表面不断积累，电场力最终突破溶液表面张力的作用，诱导泰勒锥尖端形成射流并不断向下延伸。射流喷射过程中，射流尖端因瑞利不稳定现象断裂形成微液滴。射流持续一段时间后开始回缩，微液滴断裂位置也逐渐向上移动，直到射流在电场力作用下重新向下延伸，喷印过程进入下一个周期。由图可知，模拟结果与实验结果取得了较好的一致，展现了数值模型的准确性。

表 1 模型验证算例溶液物性参数

Table 1 Properties used for the model validation case

流体	$\mu(\text{mPa} \cdot \text{s})$	ε_r	$K(\text{S/m})$	$\gamma(\text{N/m})$	$\rho(\text{kg}/\text{m}^3)$
庚烷	0.390	1.9	5×10^{-6}	0.021	685.0
大气	0.012	1.0	1×10^{-15}	--	1.225

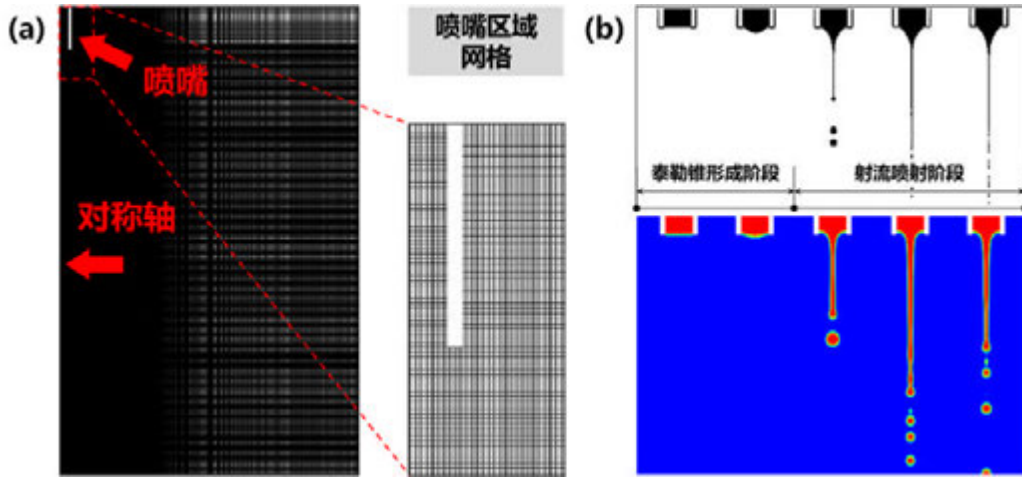


图3 (a) 数值模拟计算域及网格；(b) 电喷印过程对比图：(上排)文献^[28]中的结果；(下排)本研究的模拟结果

Fig.3 (a) The numerical domain for the present study and (b) the comparison of the (top) numerical and (bottom) experimental results^[28]

2 结果与讨论

电喷印锥射流的形成和喷射过程受到众多参数影响，其中包括工艺参数（施加电压、喷嘴高度、供液流量等）、溶液物性参数（粘度、电导率、密度、表面张力系数）等，本研究选取对射流的形成和喷射过程具有关键作用的施加电压及溶液电导率，探究其对射流整体喷射过程及生成液滴尺寸的影响。研究所使用的溶液与模型验证算例保持一致，溶液物性参数如表 1 所示。

2.1 施加电压对射流形成及喷射过程的影响

电喷印锥射流形成及其喷射过程中最重要的工艺参数是施加电压，其主要影响环境中电场的强度与分布，进而影响溶液所受电场力的大小，并最终影响溶液喷射时的形态及生成液滴的体积。

本研究首先考察了施加电压 $\Phi=4000\text{V}\sim 6000\text{V}$ 时的喷射过程。图 4 展示了施加电压 $\Phi=4000\text{V}$ 、 5000V 和 6000V 时一个周期的喷射过程，图 5 展示的是施加电压 $\Phi=4000\text{V}$ 、 5000V 和 6000V 时溶液喷射初始时刻 ($t=0.2\text{ms}$) 时喷嘴附近的电场分布和溶液表面电荷密度。当施加电压为 4000V 时 (图 4a)，由于施加电压较小，喷嘴附近的电场较弱，溶液喷射初始时刻表面电荷密度较小 (图 5a)，导致溶液受到向下拉伸的电场力不足，此时溶液受表面张力的影响较大，射流无法持续形成，喷射过程为微滴落 (Microdripping) 模式，喷印周期约为 $t=5.0\text{ms}$ 。当施加电压增加至 5000V 时 (图 4b)，随着施加电压的增加，喷嘴附近的电场增强，溶液喷射初始时刻 ($t=0.2\text{ms}$) 的表面电荷密度较 4000V 时有所增加 (图 5b)，溶液受到向下拉伸的电场力增加。溶液喷射初始阶段 ($t=0\sim 1.4\text{ms}$)，射流尖端受到溶液初始条件的影响生成一颗较大的液滴及若干颗较小的卫星液滴，但后续过程 ($t=1.7\sim 2.2\text{ms}$) 中的生成微液滴体积较为一致，射流断裂位置也较为一致，射流长

度较 4000V 明显增加，喷射过程变为锥射流（Cone-jet）模式，喷印周期约为 $t=2.6\text{ms}$ 。

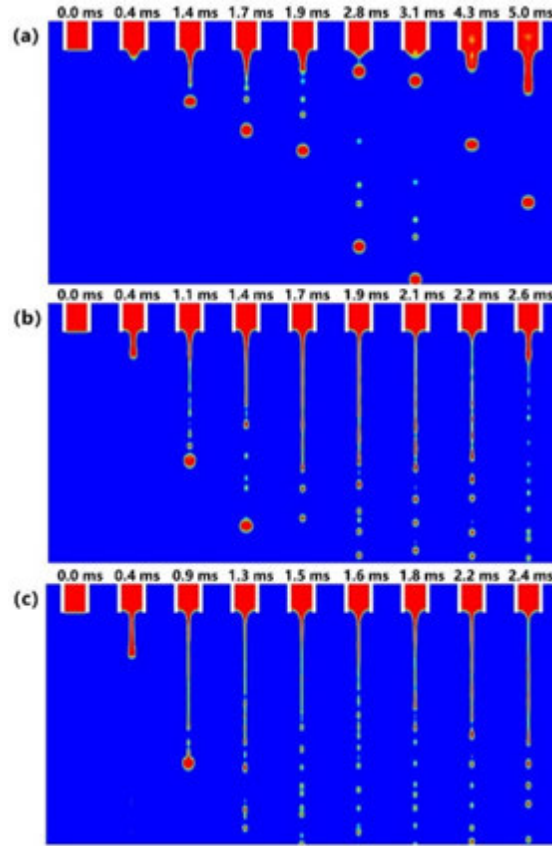


图 4 不同施加电压下的电喷印锥射流形成及喷射过程：（a） $\Phi=4000\text{V}$ ，（b） $\Phi=5000\text{V}$ ，（c） $\Phi=6000\text{V}$

Fig.4 The electrohydrodynamic printing process at different applied voltages:(a) $\Phi=4000\text{V}$, (b) $\Phi=5000\text{V}$, (c) $\Phi=6000\text{V}$

当施加电压进一步增加至 6000V 时（图 4c），随着施加电压的继续升高，喷嘴附近的电场继续增强，溶液喷射初始时刻（ $t=0.2\text{ms}$ ）的表面电荷密度较 5000V 时进一步增加（图 5c），溶液受到向下拉伸的电场力增强。溶液喷射初始阶段（ $t=0\sim 0.9\text{ms}$ ），射流尖端同样生成一颗较大的液滴及若干颗较小的卫星液滴，但受到过大电场力的影响，射流直径较 5000V 时减小，射流稳定性减弱，导致后续过程（ $t=1.3\sim 2.2\text{ms}$ ）中生成液滴体积的一致性降低，射流断裂位置也变化较大，喷射过程为锥射流模式，喷印周期约为 $t=2.4\text{ms}$ 。

研究发现，仅当施加电压 $\Phi=4500\text{V}\sim 5500\text{V}$ 时，喷射过程为较稳定的锥射流模式。图 6 展示了施加电压 $\Phi=4500\text{V}\sim 5500\text{V}$ 时生成液滴直径随生成液滴个数的变化以及生成液滴平均直径随射流平均直径的变化。由图可知，随着施加电压从 4500V 增加到 5500V，生成液滴直径逐渐减小，从 4500V 的 0.160mm 减小到 5500V 的 0.099mm（图 6b）。不仅如此，随着施加电压的增加，射流平均直径逐渐减小，从 4500V 的 0.083mm 减小到 5500V 的 0.052mm。射流直径的减小导致射流不稳定性的增加，生成液滴直径的一致性逐渐降低，证实了射流及液滴生成的稳定性随施加电压的增加而逐渐减弱的特性（图 6a）。值得一提的是，生成液滴的平均直径 d_d 随射流平均直径 d_j 的增加基本呈线性变化，表现

出的标度律 $d_d = 1.96d_j$ (图 6b), 与理论研究中的标度律 $d_d = 1.89d_j$ 较为相符^[9]。

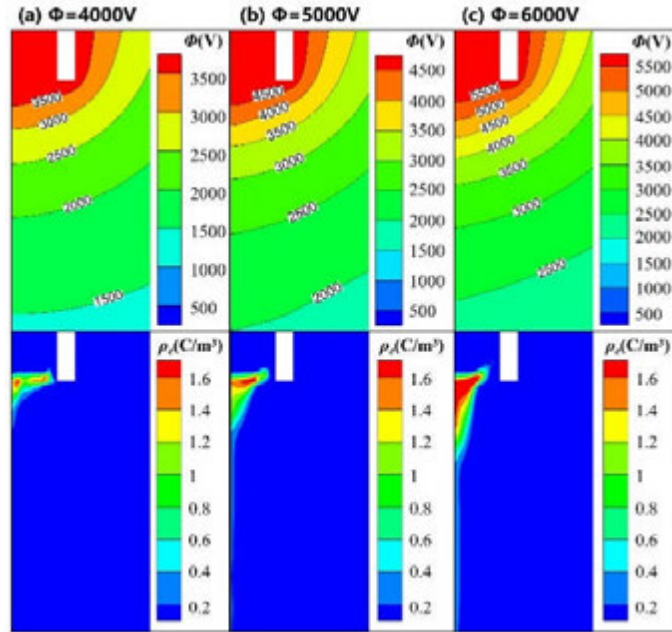


图 5 不同施加电压下 $t=0.2\text{ms}$ 时的电压分布和表面电荷分布: (a) $\Phi=4000\text{V}$, (b) $\Phi=5000\text{V}$, (c) $\Phi=6000\text{V}$

Fig.5 Voltage and surface charge distribution at $t=0.2\text{ms}$ for different applied voltages: (a) $\Phi=4000\text{V}$, (b) $\Phi=5000\text{V}$, (c) $\Phi=6000\text{V}$

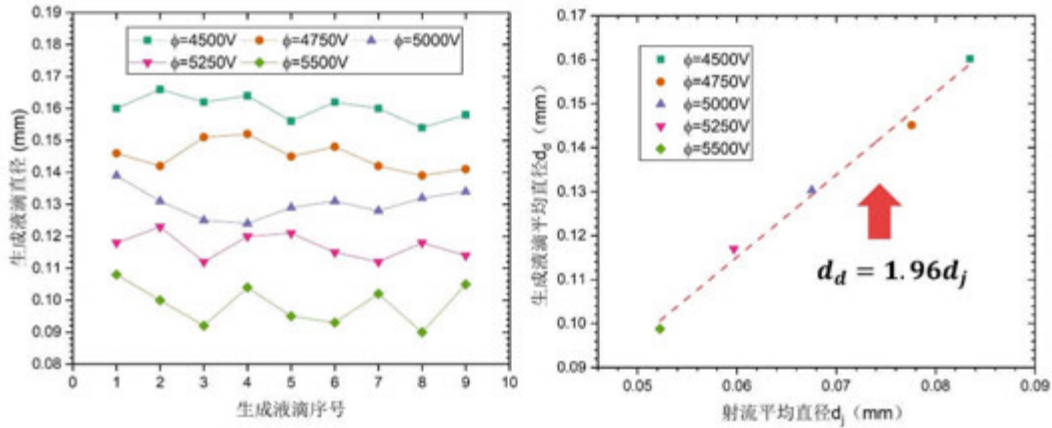


图 6 不同施加电压 ($\Phi=4500\text{V}\sim 5500\text{V}$) 下 (a) 生成液滴直径随生成液滴个数的变化; (b) 生成液滴平均直径随射流平均直径的变化

Fig.6 (a) Variation of generated droplet diameter with the number of generated droplets at different applied voltages ($\Phi=4500\text{V}\sim 5500\text{V}$); (b) Variation of average droplet diameter with the average diameter of the jet

2.2 溶液电导率对射流形成及喷射过程的影响

电喷印锥射流形成及喷射过程中另一个重要参数是溶液电导率, 溶液电导率主要影响施加电压后溶液内部电荷的响应和传导能力, 进而影响溶液喷射时的形态及生成液滴的体积。

本研究考察了溶液电导率 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}\sim 1\times 10^{-4}\text{S/m}$ 时的喷射过程，此部分研究施加电压保持在 4500V。图 7 展示了溶液电导率 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 、 $1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 和 $1\times 10^{-4}\text{S/m}$ 时的喷射过程，图 8 展示的是溶液电导率 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 、 $1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 和 $1\times 10^{-4}\text{S/m}$ 时溶液喷射初始时刻($t=0.2\text{ms}$)时喷嘴附近的电场分布和溶液表面电荷密度。当溶液电导率 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 时（图 7a），由于溶液电导率较小，溶液内部自由电荷的传导能力较弱，电场施加后内部电荷传导速度较慢，导致溶液喷射初始时刻表面电荷密度较小（图 8a），溶液受到电场力的作用较小，溶液射流产生和断裂过程较慢。随着时间的推移，射流逐渐稳定形成，生成液滴直径变得较为一致，喷印呈现出锥射流模式，喷印周期约为 $t=6.0\text{ms}$ 。

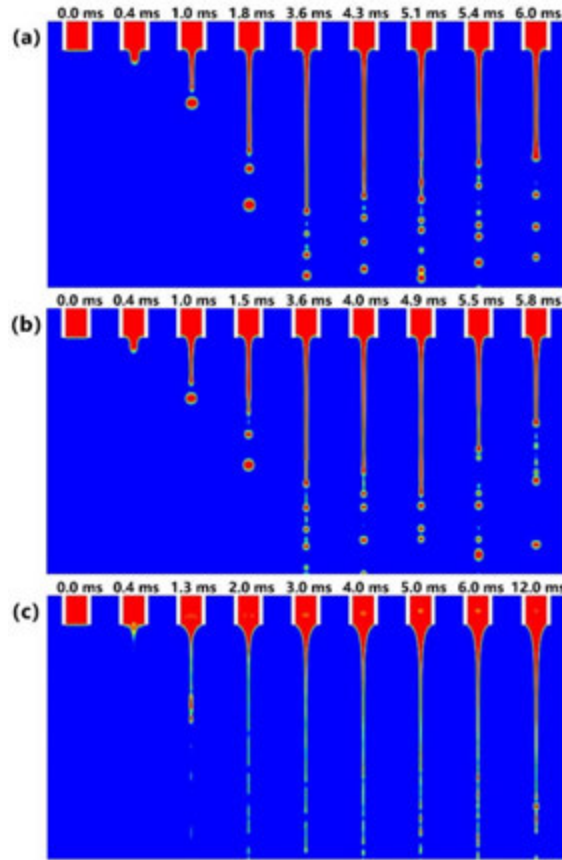


图 7 不同电导率下的电喷印过程图：(a) $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ ，(b) $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$ ，(c) $K=1\times 10^{-4}\text{S/m}$
 Fig.7 The electrohydrodynamic printing process at different conductivities: (a) $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$, (b) $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$, (c) $K=1\times 10^{-4}\text{S/m}$

当 $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 时（图 7b），由于电导率的增加，溶液内部电荷的响应和传导速度加快，溶液喷射初始时刻表面电荷密度较 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 有所增加（图 8b），但两者区别并不大， $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 时的喷射过程与 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 时较为相似，喷印呈现出锥射流模式，喷印周期约为 $t=5.8\text{ms}$ 。当 $K=1\times 10^{-4}\text{S/m}$ 时（图 7c），由于电导率显著增加，溶液内部自由电荷的传导速度急剧加快，自由电荷在喷射初始时刻即可在溶液气液界面处均匀分布（图 8c），导致溶液表面受到的电场力更均匀，射流受到均匀电场力的作用后喷射更加稳定，射流断裂后以液线而非液滴的形式存在，且喷射过程一直持续，并未呈现出

明显的喷射周期。

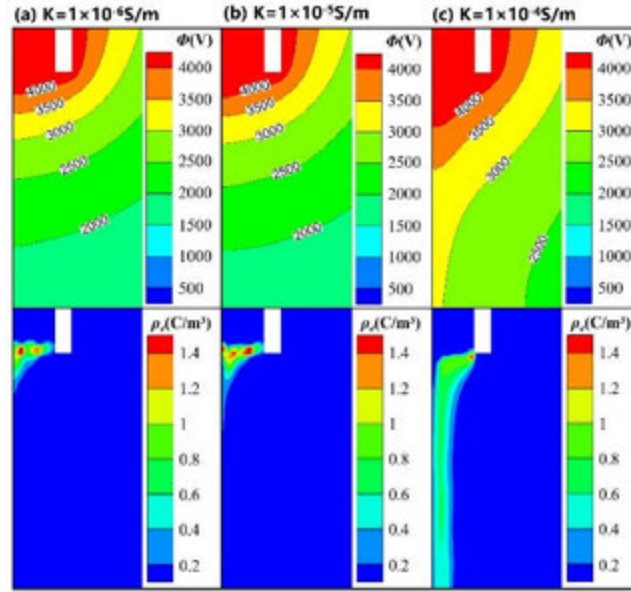


图 8 不同电导率下 $t=0.2\text{ms}$ 时的电压分布和表面电荷分布: (a) $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$, (b) $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$, (c) $K=1\times 10^{-4}\text{S/m}$

Fig.8 Voltage and surface charge distribution at $t=0.2\text{ms}$ for different conductivities: (a) $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$, (b) $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$, (c) $K=1\times 10^{-4}\text{S/m}$

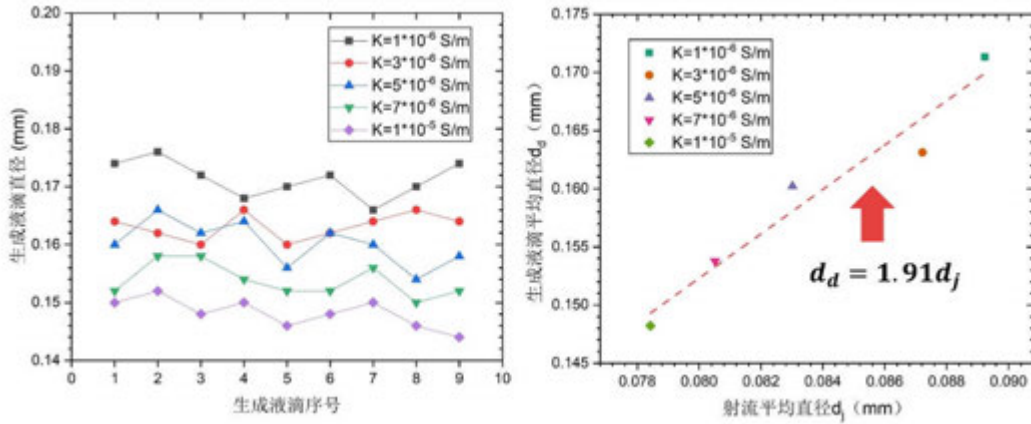


图 9 不同溶液电导率 ($K=1\times 10^{-6}\text{S/m}\sim 1\times 10^{-5}\text{S/m}$) 下 (a) 生成液滴直径随生成液滴个数的变化; (b) 生成液滴平均直径随射流平均直径的变化

Fig.9 (a) Variation of generated droplet diameter with the number of generated droplets at different conductivities ($K=1\times 10^{-6}\text{S/m}\sim 1\times 10^{-5}\text{S/m}$); (b) Variation of average droplet diameter with the average diameter of the jet

研究发现, 仅当溶液电导率 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}\sim 1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 时, 喷射过程为能较稳定产生离散液滴的锥射流模式。图 9 展示了溶液电导率 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}\sim 1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 时生成液滴直径随生成液滴个数的变化以及生成液滴平均直径随射流平均直径的变化。由图可知, 随着溶液电导率从 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 变化为 $1\times 10^{-5}\text{S/m}$, 生成液滴直径略有减小 (图 9b), 从 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 的 0.171mm 减小到 $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 的 0.148mm 。不仅如此, 随着溶液电导率

的增加,射流平均直径也略有减小,从 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 的 0.089mm 减小到 $K=1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 的 0.078mm。但与施加电压增加时射流不稳定性的增加有所不同,溶液电导率的增加使溶液内部自由电荷传导速率增加,反而增强了射流的稳定性,生成液滴直径的一致性逐渐升高(图 9a)。另外,生成液滴的平均直径 d_d 随射流平均直径 d_j 的增加呈线性变化,表现出 $d_d = 1.91d_j$ 的标度律(图 9b),同样与理论研究中 $d_d = 1.89d_j$ 的标度律较为相符^[9]。

3 结 论

本文使用开源程序 OpenFOAM 对不同施加电压及溶液电导率下的电流体喷印锥射流形成及喷射过程开展模拟研究,数值模型使用有限体积法对控制方程进行离散,利用 VOF 算法对溶液气液界面进行追踪,利用 CSF 模型计算溶液气液界面处的表面张力,溶液受到的电场力则由漏电介质模型描述。模型建立后,使用文献^[28]中的结果对模型进行验证,证实了数值模型的准确性。

随后,本文使用该数值模型探究了不同施加电压($\Phi=4000\text{V}\sim 6000\text{V}$)及溶液电导率($K=1\times 10^{-6}\text{S/m}\sim 1\times 10^{-4}\text{S/m}$)对锥射流喷射过程及生成液滴尺寸的作用规律。研究发现:当施加电压从 4000V 增加到 6000V 时,喷嘴附近的电场增强,溶液喷射初始时刻的表面电荷密度增加,溶液喷射模式由微滴落变为锥射流模式,喷印周期缩短。当施加电压 $\Phi=4500\text{V}\sim 5500\text{V}$ 时,喷射过程总体上为较稳定的锥射流模式,随着施加电压的增加,生成液滴直径逐渐减小,射流平均直径逐渐减小,生成液滴直径的一致性逐渐降低,生成液滴的平均直径 d_d 与射流平均直径 d_j 表现出 $d_d = 1.96d_j$ 的标度律。当溶液电导率从 $1\times 10^{-6}\text{S/m}$ 增加到 $1\times 10^{-4}\text{S/m}$ 时,溶液内部自由电荷的传导能力逐渐增强,射流直径变小,溶液从有周期的锥射流模式变为连续喷射的锥射流模式。当溶液电导率 $K=1\times 10^{-6}\text{S/m}\sim 1\times 10^{-5}\text{S/m}$ 时,喷射过程为能较稳定产生离散液滴的锥射流模式,随着溶液电导率的增加,生成液滴直径逐渐减小,射流平均直径逐渐减小,生成液滴直径的一致性逐渐升高,生成液滴的平均直径 d_d 与射流平均直径 d_j 表现出 $d_d = 1.91d_j$ 的标度律。

参考文献

- [1] S. Cai, Y. Sun, Z. Wang, et al, Mechanisms, influencing factors, and applications of electrohydrodynamic jet printing, Nanotechnology Reviews, 10, 2021, 1046-1078.
- [2] 兰红波,李涤尘,卢秉恒.微纳尺度 3D 打印.中国科学:技术科学,2015(9):919-940.
LAN Hong-Bo, LI Di-Chen, LU Bing-Heng. Micro-and nanoscale 3D printing. SCIENTIA SINICA Technologica, 2015, 9: 919-940.
- [3] 尹周平,黄永安,布宁斌,等. 柔性电子喷印制造:材料、工艺和设备[J]. 科学通报. 2010, 55(25): 2487-2509.
YIN Zhou-Ping, HUANG Yong-An, BU Ning-Bing, et al. Inkjet printing for flexible electronics: Materials, processes and equipments. Chinese Science Bulletin, 2010, 55(25): 2487-2509.
- [4] B. W. An, K. Kim, H. Lee, et al. High - resolution printing of 3D structures using an electrohydrodynamic inkjet with multiple functional inks. Advanced materials, 2015, 27(29): 4322-4328.
- [5] P. Galliker, J. Schneider, and H. Eghlidi, et al. Direct printing of nanostructures by electrostatic autofocussing of ink nanodroplets. Nature communications, 2012, 3(1): 1-9.

- [6] 张磊, 朱云龙, 王驰远, 等. 太阳电池超细栅电极喷印控制系统设计与实现[J]. 信息与控制. 2016, 45(03): 377-384.
- ZHANG Lei, ZHU Yun-Long, WANG Chi-Yuan, et al. Design and implementation of ink-jet printed fine line metallization system for crystalline silicon solar cells. *Information and Control*, 2016, 45(3): 377-384.
- [7] F. De La Mora, J. Fernández, and I. G. Loscertales. The current emitted by highly conducting Taylor cones. *Journal of Fluid Mechanics*, 1994, 260: 155-184.
- [8] A. M. Ganan-Calvo, J. Davila, and A. Barrero. Current and droplet size in the electrospraying of liquids. Scaling laws. *Journal of aerosol science*, 1997, 28(2): 249-275.
- [9] R. P. A. Hartman, D. J. Brunner, D. M. A. Camelot, et al. Jet break-up in electrohydrodynamic atomization in the cone-jet mode. *Journal of aerosol science*, 2000, 31(1): 65-95.
- [10] W. J. Scheideler, C. H. Chen. The minimum flow rate scaling of Taylor cone-jets issued from a nozzle. *Applied Physics Letters*, 2014, 104(2): 024103.
- [11] 杨建军, 张志远, 兰红波, 等. 基于EHD微尺度3D打印喷射机理与规律研究. 农业机械学报. 2016, 47(6): 401-407.
- YANG jian-jun, ZHANG zhi-yuan, WANG chi-yuan, et al. Study on the mechanism and laws of EHD-based micro-scale 3D printing injection. *Journal of Agricultural Machinery*. 2016, 47(6): 401-407.
- [12] Z. Wang, Q. Wang, B. Li, et al. An experimental investigation on cone-jet mode in electrohydrodynamic (EHD) atomization. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2020, 114: 110054.
- [13] Q. Wang, Z. Wang, S. Yang, et al. Experimental study on electrohydrodynamic atomization (EHDA) in stable cone-jet with middle viscous and low conductive liquid. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2021, 121: 110260.
- [14] M. Rubio, S. H. Sadek, A. M. Gañán-Calvo, et al. Diameter and charge of the first droplet emitted in electrospray. *Physics of Fluids*, 2021, 33(3): 032002.
- [15] R. T. Collins, J. J. Jones, M. T. Harris, et al. Electrohydrodynamic tip streaming and emission of charged drops from liquid cones. *Nature Physics*, 2008, 4(2): 149-154.
- [16] W. Wei, Z. Gu, S. Wang, et al. Numerical simulation of the cone-jet formation and current generation in electrostatic spray—modeling as regards space charged droplet effect. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 2012, 23(1): 015004.
- [17] A. M. Ganán-Calvo, J. M. López-Herrera, N. Rebollo-Munoz, et al. The onset of electrospray: the universal scaling laws of the first ejection. *Scientific reports*, 2016, 6(1): 32357.
- [18] 王军锋, 左子文, 霍元平. 液滴演化及静电场下锥射流形成的数值模拟[J]. 工程热物理学报. 2013, 34(4): 667-671.
- WANG Jun-Feng, ZUO Zi-Wen, HUO Yuan-Ping, Numerical Simulation of Droplet and EHD Cone Jet Formation Process, *Journal of Engineering Thermophysics*, 2013, 34(4): 667-671.
- [19] M. Gamero-Castaño, M. Magnani. Numerical simulation of electrospraying in the cone-jet mode. *Journal of Fluid Mechanics*, 2019, 859: 247-267.
- [20] H. Dastourani, M. R. Jahannama, and A. Eslami-Majd. A physical insight into electrospray process in cone-jet mode: Role of operating parameters. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2018, 70: 315-335.

- [21] H. Dastourani, M. R. Jahannama, and A. Eslami-Majd. Effects of surrounding pressure on cone - jet formation in electrospray process. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2021, 25(2): 13.
- [22] Y. Guan, S. Wu, M. Wang, et al. Numerical investigation of high-frequency pulsating electrohydrodynamic jet at low electric Bond numbers. *Physics of Fluids*, 2022, 34(1): 012001.
- [23] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 1992, 100(2): 335-354.
- [24] J. R. Melcher, and G. I. Taylor. Electrohydrodynamics: A Review of the Role of Interfacial Shear Stresses. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1969, 1(1): 111-146.
- [25] D. A. Saville. Electrohydrodynamics: The Taylor-Melcher Leaky Dielectric Model. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1997, 29(1): 27-64.
- [26] C. W. Hirt, and B. D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 1981, 39(1): 201-225.
- [27] J. E. Pilliod, and E. G. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *J. Comput. Phys.*, 2004, 199(2): 465-502.
- [28] S. Cândido, and J. C. Páscoa. Numerical Analysis on the Stability Conditions of an Electrohydrodynamic Jet. *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition. American Society of Mechanical Engineers*, 2020, 84584: V010T10A051.

传感器热防护丙酮同心环形热管实验研究

孙家智 1, 杨立新 2, 韩爽 3..

(北京交通大学 机械与电子控制工程学院, 北京 100048)

(Tel:13311181768, Email: lxyang1@bjtu.edu.cn) 小五号宋体

摘要: 针对红外测温传感器因环境温度过高而导致传感器的烧毁问题, 本文设计制备了一种以低沸点丙酮为工质的同心环形热管(CAHP)用于红外传感器的热防护。提出了一种用于预测同心环形热管启动特性的数值模型, 通过实验验证了该模型在时间和温度上的误差为 5.26%和 1.31%。通过实验, 详细研究了加热功率和倾斜角度对于热管温度分布和传热特性的影响。结果表明, 同心热管的传热能力随加热功率增大, 呈现出的趋势为先增后减。加热功率为 13W 时, 热管的轴向温差的最小值为 0.03K, 热阻为 0.62W/K。同心环形热管的传热能力随倾角增大, 呈现出的趋势为先减后增。20°倾角状态下, 同心环形热管的最大轴向温差为 8.53K, 热阻为 0.74W/K。

关键词: 红外传感器; 同心环形热管; 加热功率; 倾斜角度; 热防护

0 前言

涡轮盘作为航空发动机中的一个重要部件, 其工作状态对航空发动机工作运行有着极为重要的影响。温度作为衡量涡轮盘的一项重要参数, 温度测量的准确度高, 测量速度快, 对于判断涡轮盘的状态同样有着极为重要的意义。红外测温技术以其灵敏度高、结构简单、便于安装操作等特点, 近年来已被广泛应用于航空飞机发动重要零部件的温度检测(常见红外测温传感器工作温度为 0~60℃)。由于航空发动机结构复杂, 内部热环境同时存在着辐射、对流、热传导的传热方式(常见的涡轮盘腔内的环境温度约为 500~600 K)。使用红外测温传感器进行温度测量时, 传感器在高温环境下将被烧毁, 因此需要设计对应的热防护结构对传感器进行热防护。现有的对于传感器的热防护方式多为强制对流散热或者流体填充散热, 这些方式存在着操作复杂, 体积较大、散热量低等缺点。

热管作为一种高效的导热元件, 其在电子元器件的散热、防热方面得到了十分广泛的应用。按照热管的形式可将热管分为传统热管、重力热管、平板热管、环路热管、微型热管、分离式热管、环形热管等。同心环形热管(CAHP)作为众多种类热管中的一种, 其工作原理同普通的基本热管基本相同, 但其结构上的改变使得它具有一些新的特点, 如: 等温性良好, 功率传输特性优异, 传热极限较高等。目前, CAHP 已被用于废热回收、太阳能利用^[1,2]、半导体生长和温度标定等方面^[3,5]。红外传感器在工作时需保证其所处的环境温度低于 60℃, 这要求热防护装置可为其提供温度稳定的均温空间, 综合传感器的结构特点及不同类型热管的结构形式, 同心环形热管所独具的圆柱形内腔结构使得传感器的热管型热防护成为可能。

在实验研究方面, Faghri^[6]以铜为热管的管壳材料, 水为热管传热工质, 轴向槽道为吸液芯制备了同心环形热管。他将具有相同结构的传统热管和同心环形热管的热性能进行比较。研究发现同心环形热管单位长度的热容远大于传统热管, 同心环形热管的稳定运行极限为 1300W。而传统热管在 700W 加热功率下就发生了干涸现象。Boo^[7]同样

以铜为热管的管壳材料，水和热管的传热工质制造了同心环形热管。他研究中的吸液芯是不锈钢式的双层丝网结构，吸液芯仅仅烧结在外管道的内表面。Vijra^[8]以 SS304 不锈钢为热管的管壳材料，水为热管的传热工质，单层 60 目的 3302 不锈钢粉末为吸液芯制造了同心环形热管。赵洁等^[9]设计并制造了一种同心环形高温热管（CAHTHP）。同心环形高温热管的管壳材料为不锈钢，工质介质为液态钠。该项研究中热管的吸液芯为三层 400 目的金属丝网，吸液芯同时烧结在小直径管道的外壁面和大直径管道的内壁面。她通过实验研究了同心环形高温热管在-90°~90°倾斜角度下的启动特性和传热特性。Mustar^[10-11]提出了一种用于湿陶瓷浆料的干燥的同心环形热管，这种热管的管壳材料和传热工质分别为不锈钢 SS316 和水。该研究中热管采用的吸液芯结构为双层不锈钢丝网，200 目每英寸。值得注意的是，该项研究中热管的吸液芯仅烧结在大直径管道的内表面。

从上述结果来看，现有的关于同心环形热管的研究主要集中在管壳材料、热管工质和吸液芯种类及形式对于同心环形热管传热性能的影响，对于同心环形热管的启动特性研究相对较少，且未有关于加热功率和倾斜角度对于同心环形热管传热特性的系统性研究。因此，本文提出了基于集总热容法的同心环形热管启动特性分析模型，给出同心环形热管不同部分热容的计算方法，并通过实验验证该模型在时间和温度上准确性。此外，搭建了同心环形热管传热特性实验平台。通过实验，详细研究了加热功率和倾斜角度对于同心环形热管温度分布及传热特性的影响。本研究为电子设备在高温环境下的热防护提供了一种新的思路。

1 实验系统

1.1 同心环形热管设计

该种形式的热管的轴向剖视图如图 1 所示。常见的红外传感器的外径一般为 10mm。因此，同心环形热管的内径也设定为该值。为保证热防护装置的小型化特点并减少对涡轮盘腔内其他部件的影响，设定热管的外径设定为 16mm。同比水及其甲醇等工质，丙酮的沸点更低(常压环境下 56℃)。考虑到工质与管壳材料的相容性及环保性等特点，管壳材料选用 302 不锈钢。

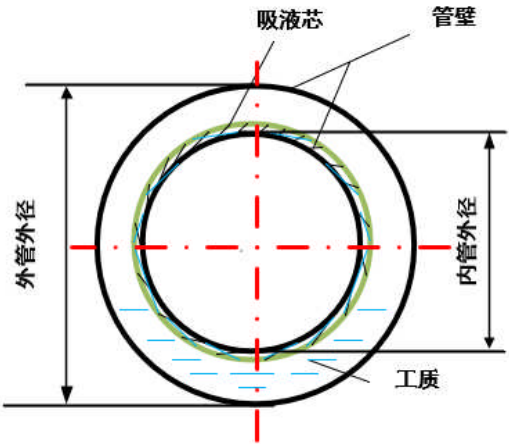


图1 同心环形热管轴向剖视图

Fig.1 Axial Sectional View of Concentric Annular Heat Pipe

热管常见的吸液芯型式主要为丝网型、沟槽型式和金属粉末烧结型。因金属粉末的
 通孔性较高且比面积较大，所以选用该种形式的吸液芯，材料种类为镍。进行烧结时，
 将镍粉烧结在内管道外壁，然后充注丙酮工质（纯度99.8%）。同心环形热管的其他参数
 见表1。

表 1 同心环形热管主要参数表

Table 1. Parameters of concentric annular heat pipe

部件	参数
总长	210mm
翅片长度 / 高度	80mm / 7.7mm
外管外径 / 厚度	16mm / 0.4mm
内管外径 / 厚度	10mm / 0.4mm
管壳材料	S30200
工作介质（纯度）	丙酮（99.8%）
充液率	40%
吸液芯材料 / 厚度	镍粉 / 0.3mm

图 2 为同心环形热管在稳定工作时的流动传热示意图:液体工质在蒸发段相变而汽
 化，气态工质在冷热端压差的作用下向冷凝端移动。工质移动至冷凝端后，其携带的热
 量通过热传导及对流方式转移到环境中，工质从气态转化成液态。转换成液态的工质在
 吸液芯的作用下回流至蒸发端，并在外部热负荷的作用下继续发生相变过程。

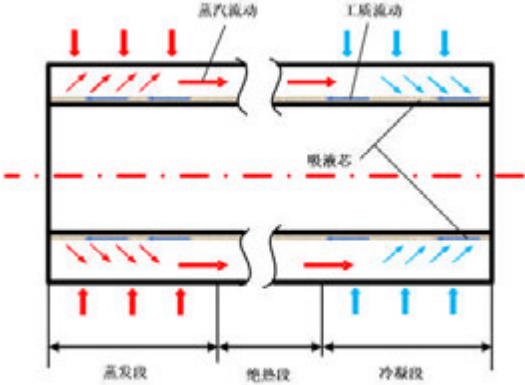


图2 同心环形热管流动传热示意图

Fig.2 Flow and Heat Transfer Diagram of CAHP

1.2 试验系统

图 3 和图 4 分别为设置的同心环形热管传热特性实验系统对应的原理图及实物图。
 同心环形热管传热特性实验平台由加热系统、冷却系统、电压电流控制系统、和数据采
 集系统组成。为提高环形热管冷端部分的散热能力，在其冷端部分安装散热翅片以提升
 其散热能力。翅片同热管之间涂抹导热硅脂以降低传热热阻。

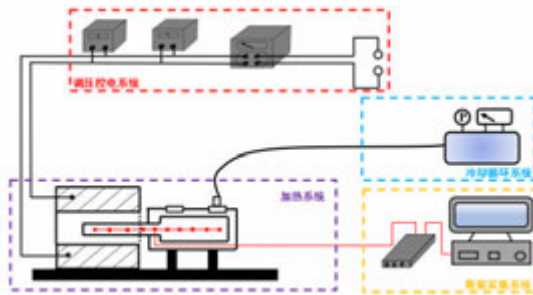


图 3 同心环形热管实验原理图

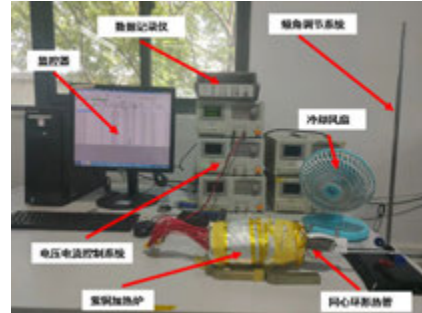


图 4 同心环形热管实验实物图

Fig.3 Schematic diagram of test system Fig.4 Physical diagram of test system

加热系统是一个单侧封堵的圆筒形的金属加热炉，加热率内径 80mm，长度 150mm，壁厚为 10mm。加热炉外层包裹着石棉以防止热量散失，炉内温度通过电压和电流控制设备（QJ6010e）进行调节。丙酮环形热管的工作温度为 0~120℃，为保证实验安全，加热炉腔内温度达到 100℃时便停止加热。环形热管冷端散热翅片的冷却方式为，使用室温气体对翅片进行吹扫，风速 2m/s。在热管运行过程中，始终保持翅片温度同环境温度一致。这可以保证通过热管输送的热量均可以通过对流换热的方式转移到环境中。数据采集系统由数据采集仪器（KEYSIGHT-34970A）和 15 个 T 型热电偶组成，数据采集间隔为 2 秒。热电偶的具体敷贴位置如图 5 所示。沿环形热管的外壁表面施加 9 个 ($T_1 \sim T_9$) 热电偶。在 $X=10\text{mm}$ ，60mm 和 $X=120\text{mm}$ 处沿周向敷贴 3 个热电偶。为保证实验过程中加热功率恒定，在加热炉内壁两端分别敷贴一个热电偶 T_{10} 及 T_{11} 。这两个温度用来检测判断炉内温度的均匀性。翅片根部安装一个热电偶作为冷端温度 T_{12} 。环形热管内腔的三个热电偶 $T_{13} \sim T_{15}$ 安装在热管小直径管道的底部，此位置的温度为红外传感器工作时的环境温度。

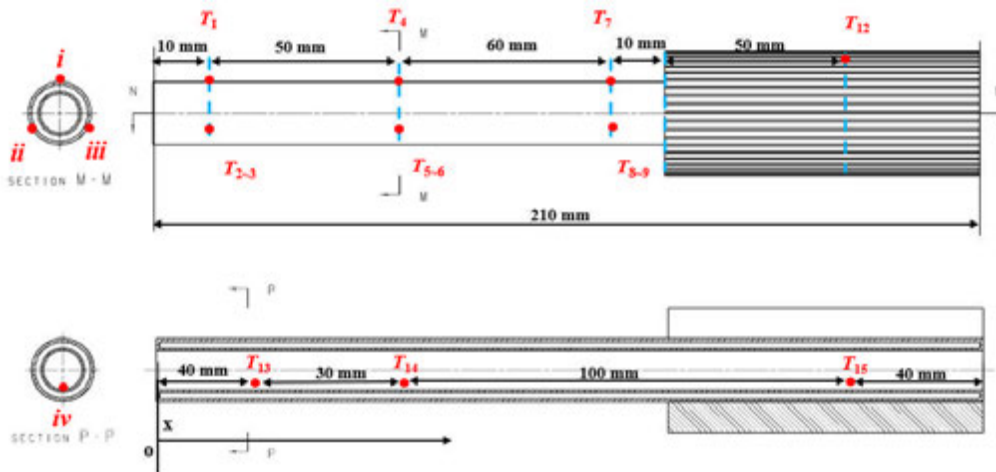


图 5 环形热管热电偶位置敷贴示意图

Fig. 5 Position of thermocouples

1.3 实验过程

将同心环形热管安放在涡轮盘腔内时，需要计算热管所承受的热负荷，以确保热管能够在高温环境下稳定运行。对热管热负荷计算时，进行以下假设：

- 1) 同心环形热管在涡轮盘腔内长时间稳定工作时，涡轮盘腔环境温度不变。
- 2) 同心热管工作正常，热管表面的温度为 333.15K（60℃），传感器工作正常。
- 3) 同心环形热管的外壁与环境之间没有对流和热传导，只有辐射传热。

则热管热负荷计算公式为：

$$Q_{rad} = \varepsilon_s \sigma A (T_{sur}^4 - T_{heat}^4) \quad (1)$$

$$A = \pi r^2 + 2\pi rL \quad (2)$$

式中， ε_s 是不锈钢的发射率、 σ 为玻尔兹曼常数($5.6710^{-8} \text{W/m}^2 \cdot \text{K}^4$)、 A 为热管工作时候承受热负荷的有效面积 (m^2)。 r 是环形热管的半径，为 20mm。 L 为热管在正常运行期间延伸到涡轮盘腔中时的深度，设定深入长度为 120mm。 T_{sur} 是环境温度（573K）， T_{heat} 是热管内腔的温度（333K）。据计算，当环境温度为 450K 时，热管的最大热负荷为 14W。实验过程中设置的加热功率的具体值见表 2。

表 2 加热功率校准值

Table 2. Calibration value of heating power	
加热功率 /W	功率值
Q_1	3
Q_2	5
Q_3	7
Q_4	9
Q_5	13
Q_6	14

从文献中^[12]可知，操作参数的改变通常对热管的传热性能存在一定影响。由于涡轮盘腔内部温度的不均匀且结构复杂，同心环形热管在工作时多处于一定的倾斜状态。因此需探究环形热管在不同倾角时传热特点。实验过程中设计的具体倾角参数见表 3。

表 3 倾斜角度校准值

Table 3. Calibration value of tilt angle	
倾斜角度/°	倾角
α_1	0°
α_2	20°
α_3	45°
α_4	60°

1.4 数据处理及不确定度分析

为简便比较环形热管的传热能力，可通过蒸发热阻 R_e 、冷凝热阻 R_c 和等效热阻 R_{eq} 衡量热管的传热性能，三个热阻的计算公式为^[13]：

$$R_e = \frac{T_e - T_a}{Q_{in}} \quad (3)$$

$$R_c = \frac{T_a - T_c}{Q_{in}} \quad (4)$$

$$R_{eq} = \frac{T_e - T_c}{Q_{in}} \quad (5)$$

式 Q 为输入的热功率 (W)， T_e 是蒸发端的平均温度， T_a 为绝热位置的温度 (°C)， T_c 是冷凝端的温度，实验过程中，翅片处的温度始终与环境温度一致，可认为输入的热量均由热管输送并通过翅片经对流换热过程转移至环境中。三个温度分别为：

$$T_e = T_{13} \quad T_a = T_{14} \quad T_c = T_{15} \quad (6)$$

不确定度分析是一种评估实验数据准确性和可靠性的方法。利用误差传递理论可以得到同心环形热管传热特性测试系统的不确定度。假设独立参数 X_1 、 X_2 和 X_3 由函数 Z 组成，每个独立参数的不确定度为 ΔX_1 、 ΔX_2 、 ΔX_3 ，则可通过公式 7 获得 Z 不确定度：

$$\Delta Z = \pm \sqrt{\left[\left(\frac{\partial Z}{\partial X_1} \right) \Delta X_1 \right]^2 + \left[\left(\frac{\partial Z}{\partial X_2} \right) \Delta X_2 \right]^2 + \left[\left(\frac{\partial Z}{\partial X_3} \right) \Delta X_3 \right]^2 + \dots} \quad (7)$$

同心环形热管整体热阻计算的不确定度计算可通过误差传递原理获得：

$$\Delta R_{eq} = \pm \sqrt{(\Delta T_e / T_e)^2 + (\Delta T_c / T_c)^2 + (\Delta Q / Q)^2} \quad (8)$$

实验系统中用于温度测量的 T 型热电偶的精度为 $\pm 0.25\text{K}$ 。直流电源的精度为 1%。经计算得，同心环形热管的热阻不确定度为 1.4%。可以认为，本研究中同心环形热管的整体热阻计算是可靠的。

表 4 实验系统中主要参数的不确定度

Table 4. Uncertainty analysis of experimental parameters

参数	不确定度
T_e	$\pm 0.25\text{K}$
T_a	$\pm 0.25\text{K}$
T_c	$\pm 0.25\text{K}$
Q_{in}	$\pm 1\%$
R_{eq}	$\pm 1.4\%$

2. CAHP 传热特性实验结果分析

2.1 同心环形热管启动数值模型

同心环形热管的启动过程对于判断同心环形热管的传热能力的有着重要意义。集总热容法^[13-15]作为一种研究热管启动特性的重要方法，其使用的前提研究对象的 Biot 数小于 0.1，这要求研究对象的内部温降低远小于该对象和环境之间的温差。本研究中同心环形热管具有良好的均温性能。同心环形热管的内部温降 T_{10} 和 T_{11} 之间的温差小于同心环形热管和大气环境之间的温差，符合集总热容法的分析前提。图 6 为同心环形热管的集总热容分析示意图。本研究中采用蒸发端恒定热流加热、冷凝器和大气环境自然对流换

热的实验条件。对于恒定体积的同心环形热管来说，在启动的瞬态过程中，同心环形热管的输入热量和输出热量间存在差值，这个差值就是同心环形热管在单位时间内的热容量。

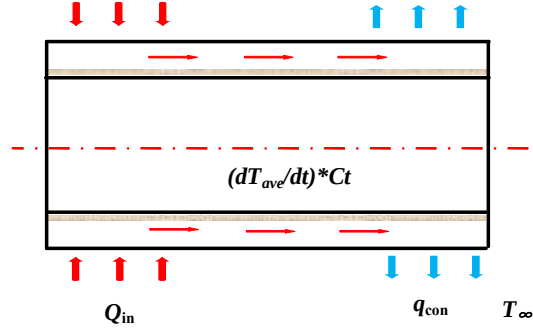


图6 同心环形热管集总热容分析示意图

同心环形热管启动时，热管输入热量和输出热量的热平衡关系为：

$$Q_{in} - q_{con} S_c = \frac{dT_{ave}}{dt} C_t \quad (9)$$

$$q_{con} = h(T_{ave} - T_{\infty}) \quad (10)$$

其中， q_{con} 为同心环形热管和空气对流散热热流密度 (W/m^2)。 S_c 为热管的散热面积 (m^2)，代表翅片的表面积。 T_{ave} 为同心环形热管的平均温度 ($^{\circ}C$)， t 为启动时间 (s)， C_t 为热管的总热容 ($J/kg \cdot K$)。 h 为热管表面和空气的对流换热系数 ($W/m^2 \cdot K$)。 T_{∞} 为环境温度 ($^{\circ}C$)。 C_t 的计算公式为：

$$C_t = C_{t,s} + C_{t,l} + C_{t,w} \quad (11)$$

$$C_{t,s} = V_s \rho_s c_{p,s} \quad (12)$$

$$C_{t,l} = V_l \rho_l c_{p,l} \quad (13)$$

$$C_{t,w} = (1 - \varepsilon) V_w \rho_w c_{p,w} \quad (14)$$

热管的总热容 C_t 可由三部分组成： $C_{t,s}$ ($J/kg \cdot K$) 为管壳材料的热容。 $C_{t,l}$ ($J/kg \cdot K$) 为液体工质的热容。 $C_{t,w}$ ($J/kg \cdot K$) 为灯芯的热容。 V 代表体积 (m^3)， ρ 代表密度 (kg/m^3)， c_p 代表比热容 ($J/kg \cdot K$)。 ε 为同心环形热管的孔隙率。将式 9~15 结合可得：

$$Q_{in} - h(T_{ave} - T_{\infty}) * S_c = \frac{dT_{ave}}{dt} (V_s \rho_s c_{p,s} + V_l \rho_l c_{p,l} + (1-\varepsilon) V_w \rho_w c_{p,w}) \quad (16)$$

通过 Runge-Kutta 法对上式进行数值求解, 可得到热管的平均温度 T_{ave} 和启动时间 t 的关系。假定同心环形热管在启动过程中, 同心环形热管的各项物性参数不随温度的上升而发生明显改变, 通过式 11 可计算的同心环形热管的总热容 $C_t=32 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$ 。 S_c 为同心环形热管冷凝器的散热面积, 为 0.06m^2 。实验过程中环境温度 T_{∞} 始终为 24°C 。同心环形热管启动特性实验过程中采用的冷却方式为空气自然对流散热, $h=5\text{W/m}^2\cdot\text{K}$ 。

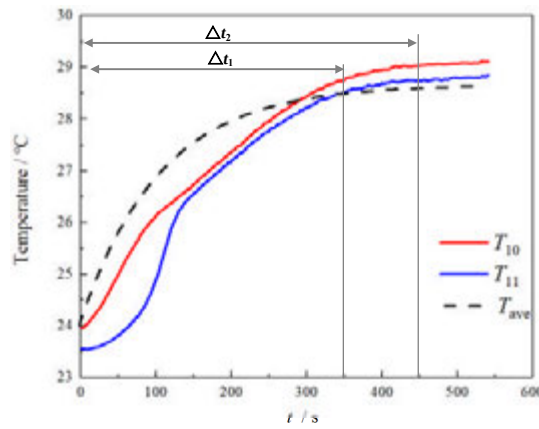


图 7 同心环形热管的集总热容分析结果

图 7 为加热功率为 1W 时, 同心环形热管的实际温度变化曲线和使用集总热容法的分析曲线 T_{ave} 。由集总热容分析结果与同心环形热管启动实验数据的对比可知: (1)集总热容的分析曲线与同心环形热管的启动特征的变化趋势大致相符。在同心环形热管稳定运行时, 同心环形热管的内腔的温度 T_{10} 和 T_{11} 和理论解 T_{ave} 基本一致, 两者之间的温差不超过 1.31% 。说明采用集总热容分析法对同心环形热管启动特性进行分析是可行的。(2)集总热容分析曲线和实验数据均存在明显的拐点。集总热容分析曲线达到稳态的时间为 $\Delta t_1=380\text{s}$, 实验过程中同心环形热管的启动时间 $\Delta t_2=400\text{s}$ 。使用集总热容法对同心环形热管启动特性进行分析时候未考虑同心环形热管端盖处的热容, 因而热容的理论值小于实际的热容值。所以集总热容法达到稳态所需要的时间更短。(3)同心环形热管稳定运行时, T_{ave} 的温度低于 T_{10} 和 T_{11} 。这是因为同心环形热管管内存有的少量不凝性气体影响了管内工质的轴向移动, 因而同心环形热管传热能力受到影响。

2.2 加热功率对同心环形热管温度分布影响

图 8 为同心环形热管在水平放置时, 不同加热功率下的壁面轴向的轴向温度分布。一般来说, 随着加热功率的不断提升, 管内工质移动速率增大及换热强度的增大。热管的轴向温差及热阻应出现下降的趋势。从图 8-a 中可以看出, 加热功率从 3W 上升至 13W 过程中, $T_1(x=10\text{mm})$ 和 $T_4(x=60\text{mm})$ 的轴向温差从 0.8K 下降至 0.1K 。当加热功率增至 14W , T_1 和 T_4 的温差又增至 0.3K 。这是因为过高的功率导致管内工质的沸腾模式从核

态沸腾向过渡沸腾转变。产生的过量气泡抑制了管内蒸汽工质的轴向移动，因而 T_1 和 T_4 的温差有所增大。

为研究环形热管在热负荷过载情况下的温度分布特点，设置一个加热功率为 30W 的实验工况（2 倍于计算加热功率最大值）。从图中可以看出，加热功率上升至 30W 时，出现 T_4 远高于 T_1 的现象。该现象说明了同心环形热管在 30W 的加热功率下，出现了蒸发端的烧干现象。造成该现象的原因为：受限于热管几何结构、吸液芯结构及相变工质等因素影响，热管的输热能力存在一定局限。加热功率过高时，热管蒸发端通过工质相变输送的热量小于输入的热量，因而热管温度大大上升。因此，在实验时应将加热功率控制在一定范围内，以保证热管的正常运行。

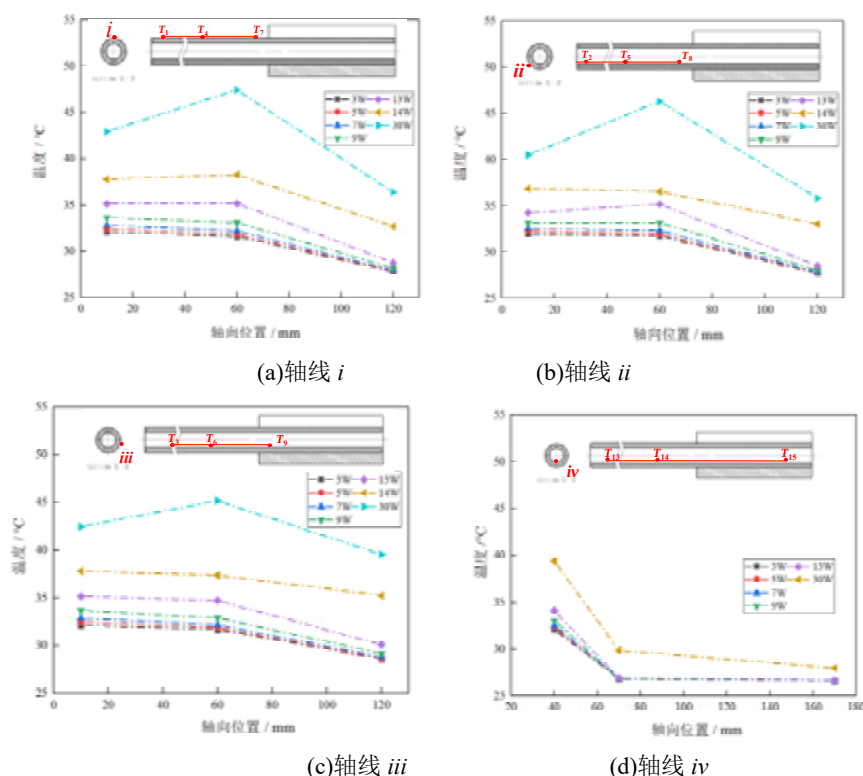


图 8 加热功率对热管轴向温度影响

Fig. 8: Effect of Heating Power on Axial Temperature of Heat Pipe

图 8-(b)和图 8-(c)为环形热管外壁面轴线 ii 、 iii 的轴向温度分布。由于这两条轴线相对于轴线 i 的水平位置更低，其对应位置的热管内部的包含更多的液态工质，因而这两条轴向上的测点温度更低。轴线 i 位于热管顶部，受重力影响，该区域主要以气态为主。

热管内腔作为用以放置红外测温传感器的区域空间，其整体温度的高低对于判断红外传感器的正常工作有着重要影响。从图 8-(d)为热管内腔的轴向温度分布，热管内腔轴向温度在不同加热功率下的趋势基本一致，都存在着 $T_{13} > T_{14} \approx T_{15}$ 的特点。在加热功率从 3W 上升至 13W 过程中，热管内腔的主要等温区间 $T_{14, x=70\text{mm}}$ 和 $T_{15, x=170\text{mm}}$ 之间的温差始终小于 0.5K。加热功率上升至 14W 时，沸腾现象产生的气泡占据了蒸发端用以工质相变的区间，工质的相变速率受到抑制，管内工质的移动速度有所减小，因此 T_{14} 和 T_{15} 之间的温差又增至 2K。这样的温差范围对于常规的传感器来说是可以接受的。

等效热阻反映了热管阻止热量传递的综合量，等效热阻越小，热管输送热量能力越大。图 9 为等效热阻 R_{eq} 随加热功率的变化图曲线。从图中可以看出，等效热阻 R_{eq} 随加

热功率增大呈现出的趋势为先减后增。加热功率为 3W 时，热管的等效热阻 R_{eq} 为 1.83 K/W。由此可推测该状态下管内工质的相变模式主要以蒸发相变为主，因而热阻较大。随着加热功率的不断提升，工质相变模式从蒸发模式转变为沸腾模式。热管内壁面上的汽化核心数目增加，换热强度不断增大，因而热阻减小。13W 加热功率下的等效热阻 R_{eq} 同比 3W 加热功率下的等效热阻降低了 66.12%，该现象说明加热功率的提升明显提升热内的工质移动速率，进而提升热管的换热能力。

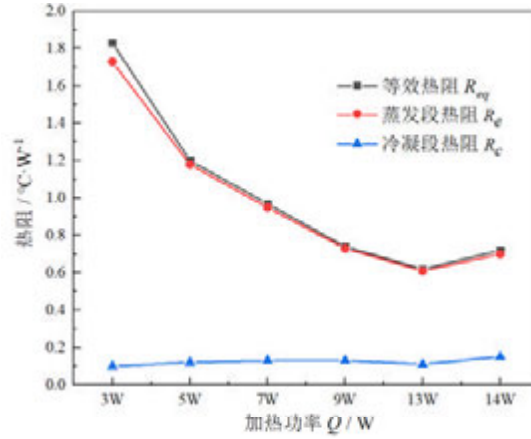


图 9 加热功率对热管等效热阻影响

Fig.9 Effect of Heating Power on Equivalent Thermal Resistance of Heat Pipe

从图 9 中可以看出，14W 加热功率下的等效热阻 R_{eq} 为 0.72 K/W。该热阻值同比 13W 加热功率下的等效热阻同比上升了 12.13%。这是因为较大的加热功率导致了更为剧烈的沸腾现象，蒸发端用以工质相变的空間因气泡的剧烈扰动而有所减小。工质相变及移动过程受阻，因而热管的热阻有所上升。结合图 7 中的热管的轴向温度分布，发现热管并没有出现蒸发端温度突然升高的现象，说明热管在 14W 加热功率下并没有出现烧干的现象。由此可知，热管的最佳传热状态理论上对应一个特定的加热功率。使用热管进行热量输送时，应将加热功率控制在該加热功率附近以保证热管以最大的效率进行热量传输。此外，值得注意的是，由于同心环形热管结构及物性的差异，不同形式的同心环形热管对应的最佳工作功率往往存在一定差异，热管的最佳工作功率往往需要通过实验进行具体测定。

2.3 倾斜角度对同心环形热管性能影响

同心环形热管工作时，热管的轴向温度分布同管内工质的移动速率密切相关。加热功率恒定时，热管的倾角的变化往往导致工质的受力情况和蒸发冷凝端工质的分布情况发生变化。

图 10 为同心环形热管在正倾角状态时的管内工质流动示意图及其受力分析。热管中的相变工质在流动过程中一般受到重力 G 、毛细力 F_c 、阻力 F_f （和液体移动方向相反，主要包括工质流动的摩擦力和蒸汽流动时对液体的携带力等）三种力的作用。假设实验条件相同时，吸液芯对工质提供的毛细力 F_c 不发生改变。在正倾角状态下，液体回流的驱动力 F_d 计算公式为：

$$F_d = F_c + G_x - F_f \quad (17)$$

其中， G_x 为重力沿着x轴的分量，随着倾角的不断增大，重力对冷凝端工质回流的促进作用不断加强，因而液体回流的驱动力也在逐渐提升。这会导致工质在蒸发端积聚，蒸发端积聚的工质可在单位时间内通过相变的方式带走更多的热量，因而热管的传热性能有所提升。但需要注意的是，正倾角的增大同样会导致冷凝端的有效换热面积减小，这将抑制工质在冷凝端的冷凝过程，不利于热管冷凝端的散热。

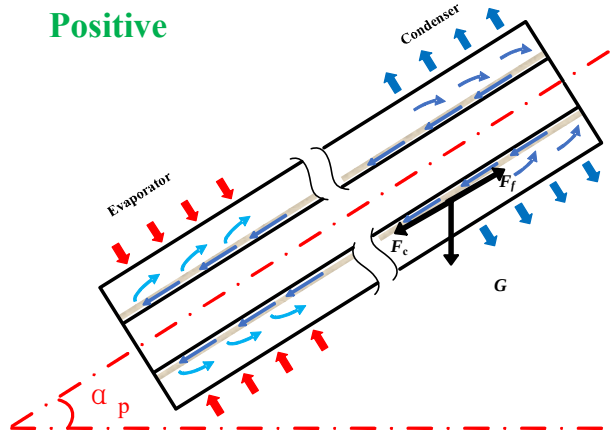
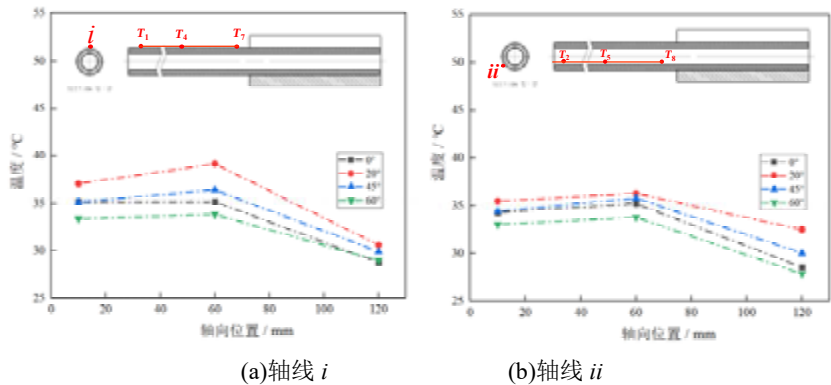


图 10 倾斜状态液体回流受力分析

图 11 为同心环形热管在加热功率为 13W 时，热管不同位置在各个倾角下的轴向温度分布。从图 11 中可以看出，随着倾斜角度的增大，热管不同位置的轴向温度及轴向温差均呈现出明显的先增后减的趋势。从图 11-a 中可以看出，倾角从 0° 上升至 20° 的过程中，出现了 T_4 温度高于 T_1 的现象。这是因为随着倾斜角度的不断增大，从冷凝端回流的液态工质在蒸发端积聚。 T_1 和 T_4 之间的轴向温差从 0K 上升至 2K。随着倾角的进一步增大，管内气态工质在移动过程中受到的摩擦阻力逐渐减小，工质速度加快，热管的轴向均温性得到改善。倾角为 60° 时， T_1 和 T_4 之间的轴向温差为 0.46K，同比 20° 倾角状态下降了 78.1%。

图 11-(d)为同心环形热管内壁的轴线 iv 上的温度分布，轴线 iv 的轴向温差的变化特点同轴线 ii 、 iii 基本一致。0~ 20° 倾角范围内， T_{14} 和 T_{15} 之间的温差因工质的积聚现象从 0.26K 上升至 0.65K。随着倾角的进一步增大，管内气态工质的移动速率不断提升，热管的轴向温度均匀性得到改善。 T_{14} 同 T_{15} 之间的温差又降至 0.33K。



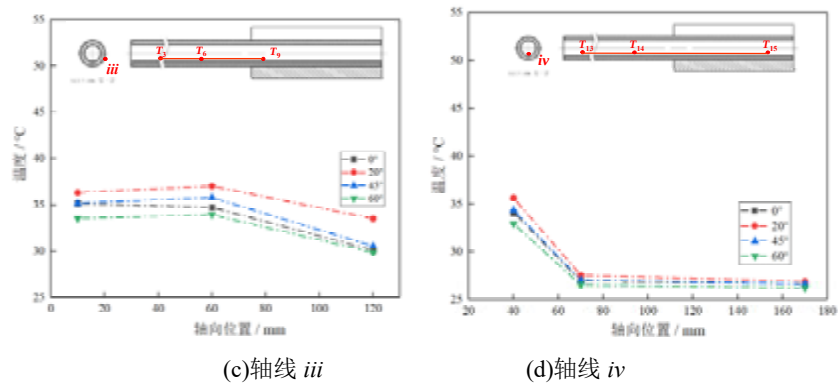


图 11 倾斜角度对热管轴向温度影响

Fig.11 Effect of inclination angle on axial temperature of heat pipe

图 12 为同心环形热管 13W 时，热管在倾角为 0° 、 20° 、 45° 和 60° 时等效热阻 R_{eq} 。从图中可以看出，该种型式热管的热阻在 $0.51\sim 0.62\text{W/K}$ 。热管倾角从 0° 增至 20° 的过程中，重力沿着热管轴向的分量在一定程度上促进了液态工质的回流。但冷凝端的换热方式同样从横向壁面换热转变为竖直壁面换热，这会导致冷凝段的散热面积减小，导致热管换热单位时间的散热量减小。等效热阻 R_{eq} 从 0.62 上升至 0.74W/K 。

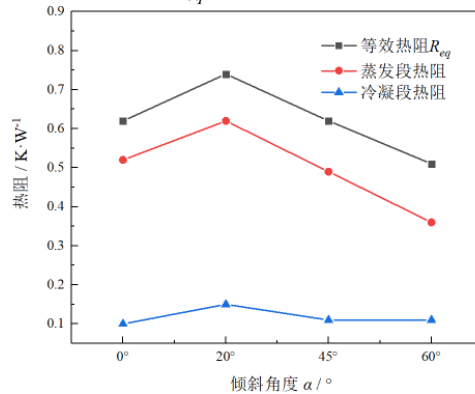


图 12 倾斜角度对热管等效热阻影响

Fig.12 Effect of inclination angle on equivalent thermal resistance of heat pipes

倾角超过 20° 时，冷凝端的换热面积进一步减小。此时重力对液态工质回流的促进作用也在不断增强。倾角增至从 20° 增至 60° 时，等效热阻 R_{eq} 又从 0.74W/K 降至 0.51W/K 。该现象说明倾角大于 20° 时，重力促进工质回流对热管传热产生的积极影响大于冷凝端换热面积减小对热管传热产生的消极影响，因而热管的等效热阻 R_{eq} 有所减小。

恒定加热功率下的变倾角实验说明了在加热功率恒定的前提下，热管在工作时候往往存在一个最不利于热管传热的倾角，在实验过程中因尽量避免此倾斜状态。此外，由于热管结构及工质的差异，不同形式热管的最劣工作倾角是不一样的。在使用过程中往往需通过实验进行具体测定。

3 结论

基于红外传感器的热防护背景，本文设计了一种以丙酮为工质的同心环形热管。通过实验，详细研究了加热功率及倾斜角度对于热管温度分布及等效热阻的影响。主要研究结论如下：

1) 基于集总热容法对 CAHP 的启动特性进行分析, 建立的对应的数值模型, 并通过实验验证了该数值模型的准确性。建立的 CAHP 启动特性分析模型在时间和温度维度上的误差分别为 5.26%、1.31%。因此本研究提出的同心环形热管启动特性预测模型可为器件的实际应用提供有效的指导。

2) 同心环形热管的传热特性随加热功率增大, 呈现出的趋势为先增后减。1~13W 加热功率下, 加热功率上升会导致管内工质换热强度增大及移动速率上升, 热管的轴向温差及热阻因此减小。加热功率超过 13W 时, 因沸腾现象产生的气泡在蒸发端积聚, 工质相变及移动过程受阻, 热管的轴向温差及热阻因而增大。

3) 同心环形热管的传热特性随倾角增大, 呈现出的趋势为先减后增。CAHP 沿着正方向倾斜时, 重力沿 CAHP 的分量可促进冷凝器的介质回流, 但同样会导致冷凝器的有效换热面积减小而影响换热。0°~20°倾角范围会导致蒸发器的介质积聚和冷凝器换热面积减小, 热管的轴向温差及热阻均会增大。20°~60°倾角范围, 较大的倾斜角度提升了管内介质的回流速度, 同心环形热管的轴向温差及热阻有所降低。

参考文献

- [1] Hongzhe Zhang, Ye Fang, Guo Hang, et al. Effects of Heating Temperature on the Isothermal Performance of a Potassium Concentric Annular Heat Pipe[J]. *Energies*, 2022, 15(7): 2367.
- [2] Sanchez, F.S.; Carvajal, I.M.; Morino, A.E.; Diez, P.Q.; Velazquez, M.T. Study of an annular two-phase thermosyphon used as an isothermal source in thermometry. *J. Mech. Eng.* 2015, 61, 273–282.
- [3] Gam, K.S. A stable microcomputer-controlled heat pipe furnace and test of new noble metal thermocouples. *Measurement* 1996, 18, 101–108.
- [4] Yan, X.K.; Duan, Y.N.; Ma, C.F.; Lv, Z.F. Construction of sodium heat-pipe furnaces and the isothermal characteristics of the furnaces. *Int. J. Thermophys.* 2011, 32, 494–504.
- [5] Eui-Hyeok Song, Lee Kye-Bock, Rhi Seok-Ho, et al. Thermal and Flow Characteristics in a Concentric Annular Heat Pipe Heat Sink[J]. *ENERGIES*, 2020, 13(20).
- [6] A Faghri, Thomas S. Performance Characteristics of a Concentric Annular Heat Pipe: Part I-Experimental Prediction and Analysis of the Capillary Limit[J]. *JOURNAL OF HEAT TRANSFER-TRANSACTIONS OF THE ASME*, 1989, 111(1-4): 844-850.
- [7] J-H Boo, Park S-Y, Kim D-H. An experimental study on the thermal performance of a concentric annular heat pipe[J]. *JOURNAL OF MECHANICAL SCIENCE AND TECHNOLOGY*, 2005, 19(4): 1036-1043.
- [8] N. Vijra, T.P. Singh, An experimental study of thermal performance of concentric annular heat pipe, *Am. Int. J. Res. Sci. Technol. Eng. Math.* 9 (2015) 176 – 182.
- [9] 赵洁, 袁达忠, 唐大伟. 径向高温热管中段加热传热特性实验研究[J]. *工程热物理学报*, 2019, 40(03): 672-677.
- Zhao Jie, Yuan Dazhong, Tang Dawei. Experimental Study on the Heat Transfer Characteristics of Radial High Temperature Heat Pipe Middle Section Heating [J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2019, 40 (03): 672-677

- [10] Musta_ar, A.; Phan, A.; Boodhoo, K. Hybrid heat pipe screw dryer: A novel, continuous and highly energy-efficient drying technology. *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 2018, 128, 199–215.
- [11] Musta_ar, A.; Anh, N.P.; Reay, D.; Boodhoo, K. Concentric annular heat pipe characterization analysis for a drying application. *Appl. Therm. Eng.* 2019, 149, 275–286.
- [12]. 陈泽瀚等, 热管熔盐堆堆芯倾角对堆芯熔盐自然对流影响研究. *核动力工程*, 2023: 第1-9页.
Chen Zehan, et al., Research on the effect of core inclination angle of heat pipe Molten salt reactor on Natural convection of molten salt in core *Nuclear Power Engineering*, 2023: Pages 1-9.
- [13]. 沈超等, 并联平板重力热管传热性能实验研究. *工程热物理学报*, 2022. 43(3): 第780-787页.
Shen Chao et al., Experimental Study on Heat Transfer Performance of Parallel Plate Gravity Heat Pipe *Journal of Engineering Thermophysics*, 2022 43 (3): Pages 780-787.
- [14]Ye-Yong Kim, Kim Kui-Soon, Jeong Gi-Ho, et al. An experimental study on the quantitative interpretation of local convective heat transfer for a plate fin and tube heat exchanger using the lumped capacitance method[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2006, 49(1-2): 230-239.
- [15]Q-T Pham. The use of lumped capacitance in the finite-element solution of heat conduction problems with phase change[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1986, 29(2): 285-291.
- [16]Guangyu Guo, Zhu Chao. A modified lumped heat capacity model for droplet flash cooling[J]. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2021, 127105557.

复合相变隔热层对锂电池模组热蔓延抑制的实验研究

孙晓梅, 孙鹏, 李耀鹏, 宫晓辉, 张忠良, 郑斌
(山东理工大学交通与车辆工程学院, 山东淄博 255049)
(Tel: 15615635597, Email: 2539897966@qq.com)

摘要: 为了达到利用隔热层实现模组内锂电池间热失控零蔓延的目标, 搭建了锂电池模组热蔓延抑制实验系统, 研究了纳米纤维+PCM 型复合相变隔热层对锂电池模组热蔓延抑制性能的影响。实验结果表明: 与仅采用纳米纤维隔热层的锂电池模组相比, 采用复合相变隔热层后, 模组内锂电池间的热蔓延被完全抑制, 达到了热失控零蔓延的目标; 模组内热失控电池与相邻电池间的热蔓延间隔时间增加为无限长, 仅热失控电池出现了喷火及冒烟等喷阀现象。

关键词: 热失控零蔓延, 复合相变隔热层, 锂电池, 电动汽车。

0 引言

面对全球能源短缺和环境污染日益严重的问题, 发展新能源汽车, 对我国改善能源消费结构、减少空气污染、推动汽车产业和交通运输行业转型升级具有积极意义。锂离子电池因其能量密度高、循环寿命长和自放电率低等显著优势, 成为新能源汽车的主流选择^[1]。以热失控为特征的锂离子电池系统的安全事故时有发生, 热失控问题制约着电动汽车的普及, 开展锂电池热失控蔓延抑制研究迫在眉睫。

在电池热蔓延抑制方面, 国内外学者已做出许多探索, 常见的热失控蔓延抑制方法可分为主动式抑制方法和被动式抑制方法两大类。主动抑制方法大多数基于传统的热管理系统^[2-5]。例如, Xu 等^[6]设计了带有微流道冷却功能的热管理系统, 成功阻止了热失控蔓延; Wang 等^[7]利用热管对软包电池模组进行热失控蔓延抑制实验, 热管成功抑制了过充触发的热失控蔓延。被动热失控抑制方法是在电池发生热失控以后, 通过吸热、隔热等阻热和保护手段, 减少热失控电池对其相邻的未失控的电池的影响^[8-9]。Yuan 等^[10]研究了圆柱电池填充不同间隙材料对其热蔓延的影响, 发现石墨复合板等作为填充材料可以有效抑制热蔓延。利用相变材料对动力电池进行冷却^[11-13]已经得到了广泛的关注。马瑞鑫等^[14]建立以石蜡/膨胀石墨复合相变材料为电池模组热管理介质的二维数值模型, 相变材料能够有效延缓甚至阻断热失控的传播。Zhao 等^[15]设计了 PCM/HP 耦合的 BTM 模块, 可以明显减小圆柱电池的局部温差。

被动抑制是一种简单有效的热蔓延抑制方法, 在电池之间添加隔热层实现无蔓延有助于在提高比体积能量密度、降低成本。目前, 复合相变隔热层对大容量锂电池模组热蔓延抑制效果的系统对比研究还有待补充。因此, 本文针对复合相变隔热层对锂电池模

组的热蔓延抑制性能开展研究，以期利用隔热层实现模组内锂电池间热失控零蔓延的目标。

1 热蔓延抑制实验系统及实验内容

1.1 实验系统

搭建了锂电池模组热蔓延抑制实验系统，如图 1.1 所示，其由电池模组、数据测量与采集系统和实验安全防护系统组成。

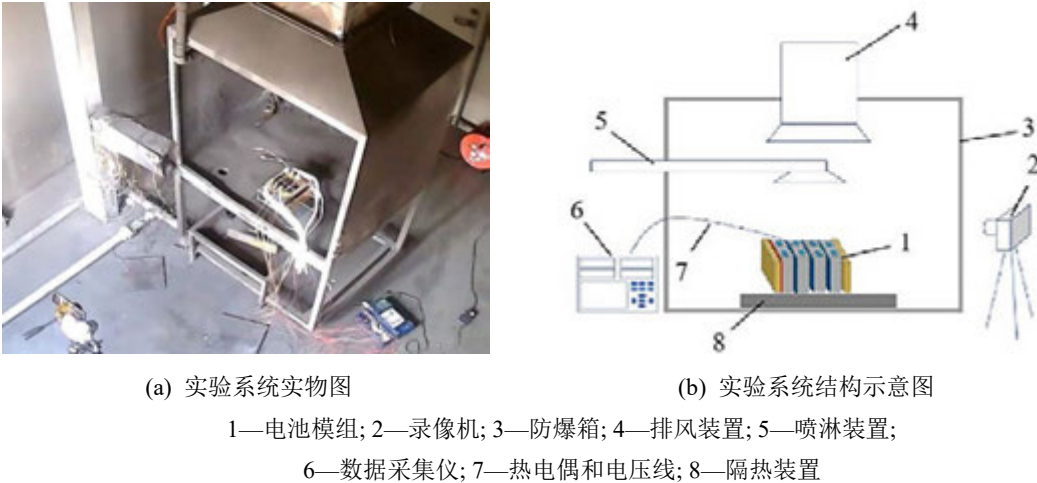


图 1.1 热蔓延抑制实验系统

Fig. 1.1 Thermal spread suppression test system (a) Physical drawing of experimental system
(b) Schematic diagram of experimental system structure

(1) 电池模组

用于实验的电池模组由 4 节方壳电池、3 片隔热片、2 块云母板、1 块加热器以及外部铜质夹具构成，所述带有隔热层的模组的爆炸图如图 1.2(a)所示。

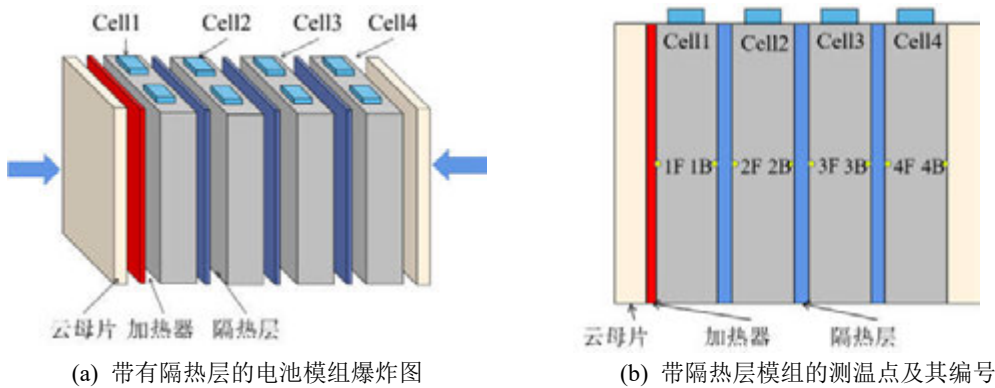


图 1.2 热蔓延电池模组

Fig. 1.2 Experimental scheme for heat spread (a) Explosion diagram of battery module with insulation (b) Temperature measuring point of battery module with insulation layer and its number

模组中电池是正负极配比为 NCM523 的三元锂离子电池，容量 50 Ah，长宽高分别是 150 mm、100 mm、26 mm，实验前将电池电量充至 100%SOC。加热器功率为 440 W，其作用是加热触发电池热失控；云母片厚度为 10 mm，其作用是将电池与铜质夹具隔开，

防止加热器和电池模组热量散失；铜质夹具作用为固定电池模组并为模组提供预紧力，保证电池与隔热层之间紧密贴合，经过压力传感器测试预紧力为 1500 N。

(2) 数据测量与采集系统

数据采集系统包括录像机、数据采集仪、热电偶及电压线，用于记录电池模组热蔓延过程的实验现象和实验过程中热电偶及电压线采集的温度及电压信号。实验用数据采集器型号为 HIOKI_LR8400，温度传感器采样频率设置为 0.1 s。采用了耐高温的 K 型热电偶，并将热电偶头部用聚酰亚胺胶带包裹并黏贴在如图 1.2(b)所示的温度检测点。图 1.2(b)中温度检测点均位于所标注平面的中心位置，是由于侧向加热诱发热失控后各节电池表面的最高温度出现在中心附近。

1.2 实验材料和实验内容

1.2.1 实验材料

实验采用的隔热层为复合相变型隔热层，基底材料选用了纳米纤维类材料。在常见的相变吸热材料中，对海绵陶瓷纤维吸附效率最高和潜热最高的饱和氯化钙溶液被选定作为复合相变隔热层的相变材料，其相变温度为 85~100℃。采用铝塑膜将隔热层密封，100% 吸附的复合相变隔热层中，除去铝塑膜质量后每片复合相变隔热层质量为 37 ± 0.5 g。实验中的两种复合相变隔热层分别是海绵陶瓷+ PCM 和纳米玻璃纤维+ PCM，为对比其隔热效果，还选用了两种未添加 PCM 的纳米纤维隔热层。四种隔热层的材质及参数信息如表 1.1 所示。

表 1.1 隔热层材质及参数

Tab. 1.1 Insulation layer material and parameters

实验编号	材料类型	隔热层材料	厚度/mm	尺寸/mm
1	纳米纤维类	海绵陶瓷（纳米陶瓷纤维）	2	150 × 100
2	纳米纤维类	纳米玻璃纤维	2	150 × 100
3	复合相变材料	海绵陶瓷+ PCM	2	150 × 100
4	复合相变材料	纳米玻璃纤维+ PCM	2	150 × 100

1.2.2 实验内容

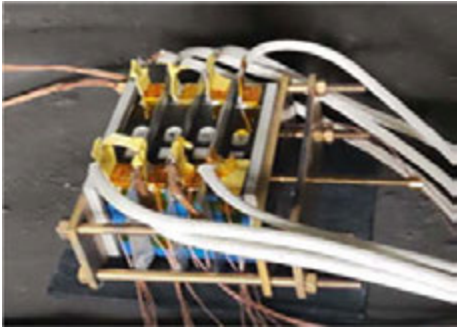


图 1.3 带隔热层的电池模组

Fig. 1.3 Battery module with insulation layer

实验中带有隔热层的电池模组如图 1.3 所示。实验采用控制变量法，仅改变模组中隔热层的材质，其他条件均保持不变，研究复合相变隔热层对模组热蔓延抑制的影响，依次进行海绵陶瓷+ PCM 与纯海绵陶瓷的对比实验和纳米玻璃纤维+ PCM 与纯纳米玻璃纤维的对比

实验。

1.3 实验过程与评价指标

实验开始时，开启加热器加热 Cell1，当 Cell1 发生热失控时迅速关闭加热器。随后，热失控将依次由 Cell1 顺序蔓延至 Cell4，此过程中由数据采集系统采集模组热蔓延过程中的实验数据及实验现象。

实验中，电池触发热失控的判定条件为电池前表面温度监测点温升速率 $dT/dt \geq 1^\circ\text{C/s}$ ，且持续 3 s 以上，模组中 Cell1 ~ Cell4 发生热失控时刻依次由 $t_{\text{on},1} \sim t_{\text{on},4}$ 表示。

进一步的，可以利用式(1.1)来定义实验中热失控蔓延的时间间隔。

$$D_{i,i+1} = t_{\text{on},i+1} - t_{\text{on},i}, i \in \{1, 2, 3\} \quad (1.1)$$

式中： $D_{i,i+1}$ 为第 i 节电池到第 $i+1$ 节电池热失控蔓延的时间间隔，单位为 s。

电池模组完全热蔓延时长 D 用式(1.2)计算，电池模组中各节电池平均蔓延时长 $\bar{D}$ 用式(1.3)计算， k 为模组中包含的电池节数。

$$D = t_{\text{on},4} - t_{\text{on},1} \quad (1.2)$$

$$\bar{D} = \frac{t_{\text{on},4} - t_{\text{on},1}}{k-1} \quad (1.3)$$

2 实验结果与分析

2.1 热蔓延时间特征

热蔓延的时间特征是电池模组热安全性的重要评价标准之一。不同隔热层电池模组的热蔓延时间如图 2.1 所示。

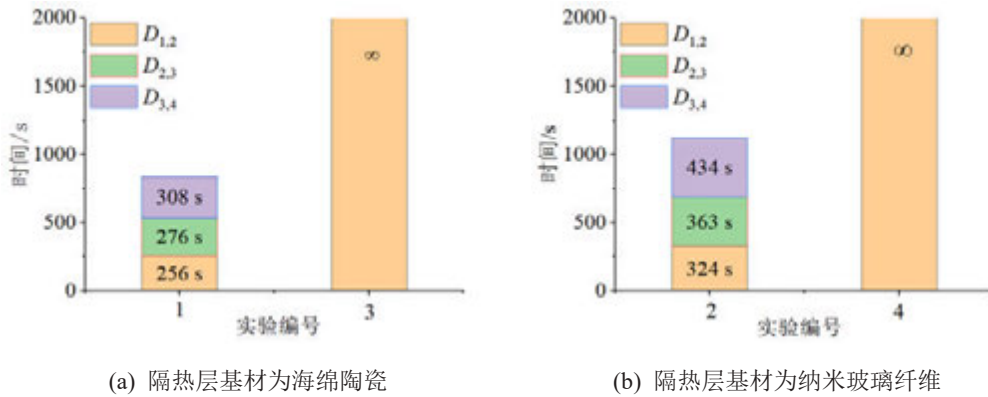


图 2.1 不同隔热层电池模组的热蔓延时间

Fig. 2.1 Thermal spread time of cell modules with different insulation layers (a) Sponge ceramic as insulation layer base material (b) Nano glass fiber as insulation layer base material

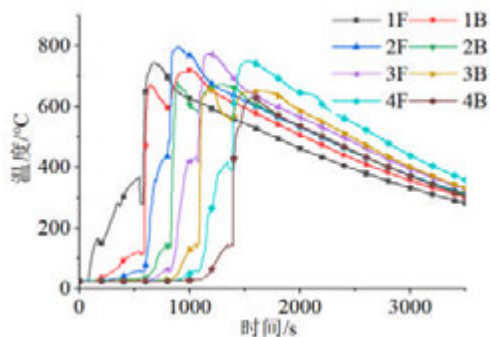
对比使用纳米纤维隔热层（1、2 号实验）与复合相变隔热层（3、4 号实验）电池模组的热蔓延间隔时间可知，仅使用海绵陶瓷或纳米玻璃纤维为隔热层的电池模组中第一、二节电池之间的热蔓延间隔时间 $D_{1,2}$ 分别为 256 s、324 s，即纳米纤维隔热层仅能在一定程度上延长模组的热蔓延时间。采用海绵陶瓷+PCM 或纳米玻璃纤维+PCM 的复合相变隔热层的电池模组中第一、二节电池之间的热蔓延间隔时间 $D_{1,2}$ 延长为无限长，除第一节电池以外其余电池均未发生热失控，即达到了电池模组热失控的零蔓延效果。

这是因为纳米纤维隔热层导热系数低，可以减缓热失控电池向其相邻电池的热量传递速度，但并不能减少两节电池之间传递的热量，电池内部热量无法及时散发，电池内

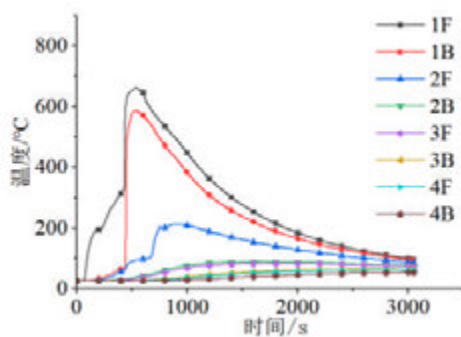
部温度最终达到热失控临界温度，继而发生热失控。复合相变隔热层能够无限延长模组的热蔓延时间，达到热失控零蔓延的效果，是因为复合相变隔热层中的相变材料吸收了电池热失控产生的热量，阻隔了失控电池向其相邻电池的热量传递，使得其相邻电池的温度低于热失控触发温度，从而成功阻隔热失控在模组内的蔓延。

2.2 热蔓延温度特征

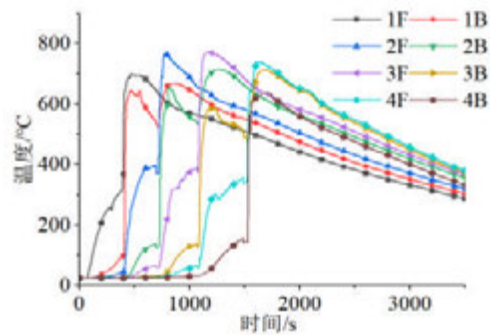
热蔓延的温度特征也是评价电池模组热安全性的重要指标。不同隔热层模组的热蔓延温度特征如图 2.2 所示。由图 2.2 可知，当热失控发生后，采用纳米纤维隔热层（1、2 号实验）与复合相变隔热层（3、4 号实验）模组的热蔓延温度曲线呈现出两种截然不同的趋势。模组采用纳米纤维隔热层时，Cell1 后表面温度上升至 650 °C 左右，Cell2 前表面温度先缓慢上升至 400 °C 左右后骤然升温到 750 °C 左右，Cell3、Cell4 与 Cell2 的温度变化趋势相似，如图 2.2(a)和(c)所示。



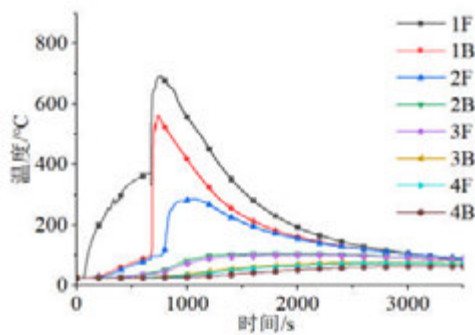
(a) 海绵陶瓷



(b) 海绵陶瓷+ PCM



(c) 纳米玻璃纤维



(d) 纳米玻璃纤维+ PCM

图 2.2 不同隔热层模组的热蔓延温度特征

Fig. 2.2 Thermal propagation temperature characteristics of different insulation layer modules

(a) Sponge ceramic (b) Sponge ceramic + PCM (c) Glass nano-fiber (d) Glass nano-fiber + PCM

模组采用复合相变隔热层时，Cell1 后表面温度上升至 550 °C 左右，Cell2 前表面温度由于复合相变隔热层发生相变的缘故，仍然维持在 100 °C 附近。随着相变结束，Cell2 前表面温度上升至 200 °C 左右，随后其温度缓慢下降至室温；Cell3、Cell4 前表面的温度缓慢上升至 100 °C 左右后逐渐降低至室温，如图 2.2(b)和(d)所示。采用复合相变隔热层成功阻隔了热失控在电池模组内的蔓延，达到了热失控零蔓延的效果。

不同隔热层模組的最高温度如图 2.3 所示。可知在电池之间添加复合相变隔热层与纳米纤维隔热层相比可以有效降低 Cell2、Cell3、Cell4 的最高温度。

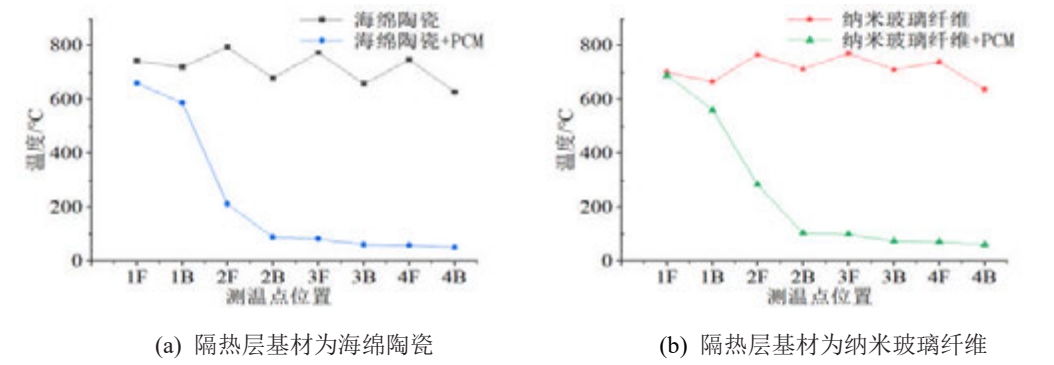


图 2.3 不同隔热层模組的最高温度

Fig. 2.3 Maximum temperature of the modules with different insulation layers (a) Sponge ceramic as the substrate for the thermal insulation layer (b) Insulation layer substrate with glass nano-fiber

2.3 热蔓延电压特征

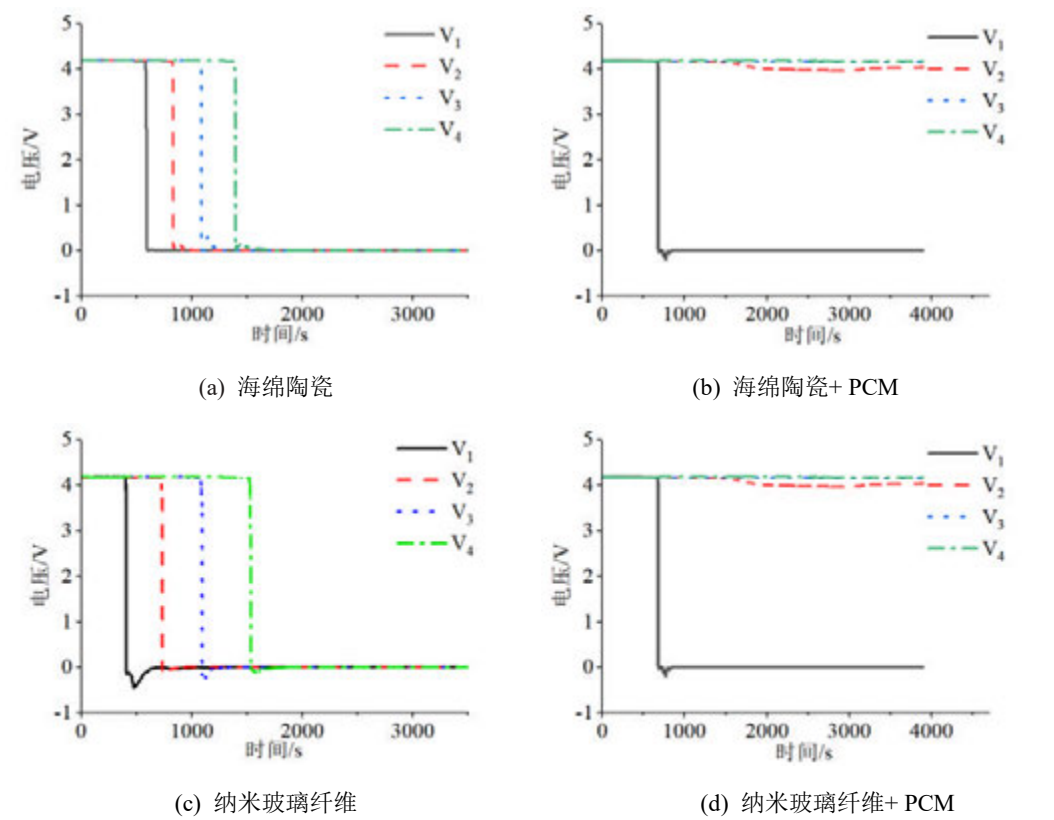


图 2.4 不同隔热层模組热蔓延电压特征

Fig. 2.4 Thermal spread voltage characteristics of different insulation layer modules

(a) Sponge ceramic (b) Sponge ceramic + PCM (c) Glass nano-fiber (d) Glass nano-fiber + PCM

热蔓延的电压特征也是评价电池模组热安全性的重要指标。不同隔热层模組的热蔓延电压特征如图 2.4 所示。当电池发生热失控时其电压会迅速由 4.2 V 降至 0 V。由图 2.4 可

知，采用纳米纤维隔热层的模组中（图 2.4(a)和(c)）各节电池电压依次由 4.2 V 下降至 0 V，但采用复合相变隔热层的模组中（图 2.4(b)和(d)）仅 Cell1 的电压由 4.2 V 降至 0 V，其余电池的电压均未下降。

2.4 热蔓延喷阀特征



图 2.5 不同隔热层模组的热蔓延喷阀特征

Fig. 2.5 Thermal spread spray valve characteristics for different insulation modules

(a) Sponge ceramic (b) Sponge ceramic + PCM (c) Glass nano-fiber (d) Glass nano-fiber + PCM

热蔓延喷阀特征也是评价电池模组热安全性的重要指标。使用不同隔热层模组的热蔓

延喷阀特征如图 2.5 所示。由图 2.5 可知,使用纳米纤维类隔热层的模组各节电池均先喷发出大量的火星,喷发结束后冒出大量白烟或出现短暂的着火现象,并没有出现大规模且剧烈的着火现象。使用复合相变材料隔热层的模组仅有 Cell1 发生热失控并喷发出大量的火星,喷发结束后冒出大量白烟或出现短暂的着火现象,其余电池均未发生喷火或冒烟等现象,即实现了模组热失控零蔓延的目标。

3 结论

本文搭建了锂电池模组的热蔓延抑制实验系统,采用控制变量法,开展热蔓延抑制实验,研究了海绵陶瓷+PCM 和纳米玻璃纤维+PCM 两种复合相变隔热层对模组热蔓延抑制性能的影响。实验结果表明:采用纳米纤维隔热层不能实现热失控在模组内的零蔓延效果,仅能在一定程度上延长模组的热蔓延时间,模组中各节电池的电压依次迅速由 4.2 V 降至 0 V,各节电池均发生喷火或冒烟等喷阀现象。与仅采用纳米纤维隔热层的模组相比,采用复合相变隔热层后,模组内锂电池间的热蔓延被完全抑制,达到了热失控零蔓延的目标,电池模组中第一、二节电池之间的热蔓延间隔时间增加为无限长,模组中 Cell2、Cell3、Cell4 的最高温度显著降低;仅有 Cell1 的电压由 4.2 V 降至 0 V,其余电池电压未下降;仅 Cell1 发生热失控并喷发出大量的火星,其余电池均未发生喷火或冒烟等喷阀现象。

参考文献

- [1] Zhoujian An, Li Jia, Yong Ding, et al. A Review on Lithium-ion Power Battery Thermal Management Technologies and Thermal Safety. *Journal of Thermal Science*, 2017, 26(05): 391-412.
- [2] 时天禄, 安周建, 刘在伦. 基于风冷散热的锂电池热管理数值模拟研究. *电源技术*, 2021, 45(07): 885-889.
SHI Tianlu, AN Zhoujian, LIU Zailun. Numerical Simulation of Lithium battery Thermal Management based on Air cooling heat dissipation. *Power Supply Technology*, 2021, 45(07): 885-889.
- [3] Sihui Hong, Xinqiang Zhang, Kai Chen, et al. Design of flow configuration for parallel air-cooled battery thermal management system with secondary vent. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 116.
- [4] Xiaoling Yu, Zhao Lu, Liyu Zhang, et al. Experimental study on transient thermal characteristics of stagger-arranged lithium-ion battery pack with air cooling strategy. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 143(C).
- [5] 周智程, 魏爱博, 屈健等. 管板结构脉动热管冷却动力电池的传热特性. *化工进展*, 2020, 39(10): 3916-3925.
ZHOU Zhicheng, WEI Aibo, QU Jian, et al. Tube heat transfer characteristics of pulsating heat pipe cooling power battery plate structure. *Chemical engineering progress*, 2020, 33 (10) 6:3916-3925.
- [6] Jian Xu, Chuanjin Lan, Yu Qiao, et al. Prevent thermal runaway of lithium-ion batteries with minichannel cooling. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 110.
- [7] Shuoqi Wang, Languang Lu, Dongsheng Ren, et al. Experimental Investigation on the Feasibility of Heat Pipe-Based Thermal Management System to Prevent Thermal Runaway Propagation. *Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage*, 2019, 16(3).
- [8] 常润泽, 郑斌, 冯旭宁等. 隔热层对锂电池模组热失控蔓延特性影响的实验研究. *汽车工程*, 2021, 43(10): 1448-1456.

- CHANG Runze, ZHENG Bin, FENG Xuning, et al. Insulating layer to the lithium battery module of influencing the thermal runaway spread experimental study. *Journal of automobile engineering*, 2021 lancet (10): 1448-1456.
- [9] Qibo Li, Chuanbo Yang, Santhanagopalan Shriram, et al. Numerical investigation of thermal runaway mitigation through a passive thermal management system. *Journal of Power Sources*, 2019, 429.
- [10] Chengchao Yuan, Qingsong Wang, Yu Wang, et al. Inhibition effect of different interstitial materials on thermal runaway propagation in the cylindrical lithium-ion battery module. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 153.
- [11] S. Al Hallaj, J. R. Selman. A Novel Thermal Management System for Electric Vehicle Batteries Using Phase-Change Material. *Journal of The Electrochemical Society*, 2019, 147(9).
- [12] Fen Liu, Jianfeng Wang, Yiqun Liu, et al. Performance analysis of phase change material in battery thermal management with biomimetic honeycomb fin. *Applied Thermal Engineering*, 2021, 196.
- [13] 王海涛, 李建, 李皖皖. 基于 PA/OBC/EG 复合相变材料的锂离子电池热管理研究. *化工新型材料*, 2022, 50(11): 141-146 + 152.
- WANG Haitao, LI Jian, LI Wanwan. Thermal management of Li-ion batteries based on PA/OBC/EG composite phase change materials. *Chemical new materials*, 2022, 50 (11): 141-146 + 152.
- [14] 马瑞鑫, 李伟, 吴伟雄. 相变材料介质阻断电池热失控传播特性研究. *工程热物理学报*, 2023, 44(05): 1376-1382.
- MA Ruixin, LI Wei, WU Weixiong. Thermal runaway propagation characteristics of PCM dielectric block batteries. *Chinese Journal of Engineering Thermophysics*, 2023, 44(05): 1376-1382.
- [15] Jiateng Zhao, Peizhao Lv, Zhonghao Rao. Experimental study on the thermal management performance of phase change material coupled with heat pipe for cylindrical power battery pack. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2017, 82.

耦合吸附式制冷余热回收的数据中心热管理研究

余雪坤^{1,2}, 许闽¹, 李勋锋^{1,3}, 淮秀兰^{1,3}, 周敬之¹

- (1. 中国科学院工程热物理研究所, 北京 100190;
2. 江苏大学流体机械工程技术研究中心, 镇江 212013;
3. 中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049)
(Tel: 010-62554126, Email: lixunfeng@iet.cn)

摘要: 基于机械式制冷的数据中心热管理存在较大的能耗, 不利于双碳目标实现。本文采用吸附式制冷系统对数据中心余热进行回收, 结合分离式热管系统, 旨在减少数据中心对机械式制冷冷量的需求, 有效降低数据中心 PUE。通过熵和火积理论优化了 CPU 液冷参数, 建立了该数据中心的热力学模型, 综合分析了耦合吸附式制冷与分离式热管后中国五种典型气候城市的数据中心关键指标, 结果表明所有城市的 PUE 都低于 1.098, 可以节省 64%-69% 的冷却系统能耗, 研究结果为未来数据中心节能技术开发提供了参考。

关键词: 数据中心、热管理、吸附式制冷、余热回收

0 前言

一个超大型数据中心每年的耗电量超亿度, 电耗绝大部分最终转化为热量, 为确保数据中心设备的稳定运行, 又需要额外的能量将热量通过冷却系统排放到大气中。《中国数据中心冷却技术年度发展研究报告 2021》指出, 数据中心在近十年间快速发展, 我国数据中心用电量以每年超过 10% 的速度递增, 在 2014 年数据中心用电量占全社会用电量的 1.5%, 2021 年则达到了 2.83%。《重新校准全球数据中心能耗估算》中的数据显示, 目前全球数据中心的平均电源使用效率 (PUE) 在 1.5 左右, 根据工业和信息化部信息通信发展司《全国数据中心应用发展指引》, 我国现有数据中心 PUE 主要处于 1.2-1.5, 鲜有 PUE<1.2 的数据中心, 且仍有 37% 的数据中心 PUE 在 1.5 以上。为达成“双碳”目标, 节能减排、绿色发展已成为全人类共识, 数据中心作为能耗较高的设施之一, 也需要采取低碳冷却系统方案来降低能源消耗和碳排放。数据中心的传统机械式冷却系统主要包括风冷型直接蒸发式空调系统、水冷型直接蒸发式空调系统及冷水型空调系统, 这些传统系统具有较高的可靠性, 同时也使数据中心能耗居高不下, 整体 PUE 有可能达到 2.0, 其中的制冷机组能耗占整个冷却系统能耗的 30%~50%^[1], 因此减少机械式制冷机组的能耗是实现数据中心节能的核心。

利用自然冷源或者余热回收技术能够减少数据中心对机械式制冷机组的依赖程度。目前, 自然冷却被认为是实现数据中心节能最有效的方法之一。自然冷却是指利用自然冷源 (自然界的低温水源或空气) 来实现制冷、降温的技术, 大量实验表明自然冷却能够实现 20% 以上的节能率, 可以将 PUE 降低到 1.2 以下^[2-4], 但是这种冷却方式受到环境条件限制较大, 且存在污染

风险，因此需要根据数据中心所在地实际情况和应用需求来判断是否适合使用。中国已陆续出台相关政策引导数据中心在设计时充分考虑节能要求，余热回收技术也成为数据中心节能的突破方向。数据中心作为热源具有稳定的热量输出，因此非常适合进行余热回收利用，然而由于数据中心产生的余热品位较低，目前数据中心主要依靠热泵提升热能品位后进行区域供暖^[5,6]，这种余热回收手段难以达到数据中心低能耗冷却需求，数据中心仍然需要机械式制冷机组补充冷量，且无法在低纬度地区及炎热季节进行热回收。使用吸附式制冷机组进行热回收将克服这一缺陷，吸附式制冷机组将产生的冷量送回机房，不需要考虑热量传输问题和气候变化，同时由于吸附式制冷依靠吸附和解吸附来实现制冷，因此无需压缩机部件。吸附式制冷系统分为高温、中温及低温回路，其与数据中心的耦合方式一般利用高温冷却液捕获热量，并用于高温回路驱动吸附式制冷机组，中温回路利用冷却塔排出热量，低温回路则为数据中心提供冷量。目前虽然采用吸附式制冷冷却的数据中心很少，但一些文献已经通过理论和实验验证了这种耦合方案的可行性^[7-10]，研究结果表明，利用吸附式制冷余热回收的数据中心拥有更高的冷却效率，并且使用商用的吸附式制冷机组可将数据中心 PUE 降低到 1.15 左右。

综上所述，自然冷却及吸附式制冷余热回收都有较高的节能潜力，但同时耦合自然冷却与余热回收系统的数据中心尚少有研究，本文尝试将分离式热管及吸附式制冷系统同数据中心耦合，使用数值模拟的方法计算系统评价指标并对系统进行优化分析，旨在探索该联合系统的节能潜力。

1 系统模型

1.1 系统描述

如图 1 所示，数据中心冷却系统由三部分组成，即分离式热管系统（SHP），吸附式制冷系统（AR）和机房空调系统（CRAC）。在服务器液冷系统中利用温度高于 60°C 的水对 CPU 进行冷却，而对于其他低发热部件，则使用风冷。稳态运行时，液冷系统可以带走 CPU 的热量，驱动 AR 制冷为风冷系统提供冷量。风冷系统的冷量主要由 SHP 和 AR 提供，当冷却能力不足时，CARC 提供剩余的冷量。

数据中心服务器发热量参考联想 SR570 服务器^[11]，每台服务器产生 610W 的热量，CPU 产热量为 255W。每个服务器机架包含 40 台服务器，数据中心机架数为 100 个，产生的总热量可达 2440kW。为了简化计算，模型约束如下：

- 1) 模型负载均匀；
- 2) 仅考虑模型处于稳态条件下的数值；
- 3) 模型对外部绝热。

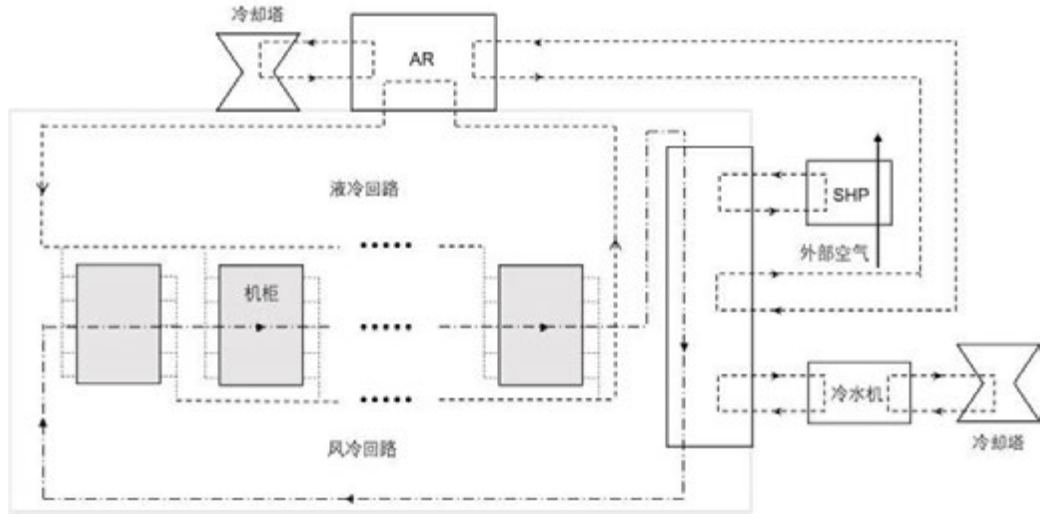


图 1 耦合吸附式制冷系统及分离式热管的数据中心

1.2 评价指标

电源使用效率（PUE）是数据中心的综合评价指标，定义为整个数据中心消耗的电力与其 IT 设备消耗电力的比值。

$$PUE = \frac{W_{IT} + W_{cold}}{W_{IT}} \quad (1)$$

式中， W_{IT} 为 IT 设备能耗，kW； W_{cold} 为制冷系统能耗，kW。

能效比（EER）是评估制冷系统效率的指标，含义为制冷系统的冷却能力与所消耗电力的比值。

$$EER = \frac{Q_{IT}}{W_{cold}} \quad (2)$$

式中， Q_{IT} 为数据中心发热量，kW。

1.3 热量平衡模型及能耗模型

热量平衡如下式：

$$Q_{CRAC} = Q_{IT} - Q_{absorp} - Q_{gen} - Q_{SHP} \quad (3)$$

式中 Q_{absorp} 为吸附式制冷产生的冷量， Q_{gen} 为液冷系统带走的热量， Q_{SHP} 为分离式热管的换热量， Q_{IT} 为设备发热量，一般是 IT 设备功耗（ W_{IT} ）的 98%。

AR 产生的制冷量为：

$$Q_{absorp} = Q_{gen} \cdot COP_{absorp} \quad (4)$$

SHP 的传热量会随着室内外温差的变化而变化：

$$Q_{SHP} = f(\Delta T_{indoor-outdoor}) \quad (5)$$

将热值比（HR）定义为 CPU 发热量占服务器总发热量的百分比：

$$HR = \frac{Q_{CPU}}{Q_{IT}} \quad (6)$$

式中， Q_{CPU} 是 CPU 产生的热量，kW。系统能耗分为冷却系统能耗及 IT 设备能耗。冷却系统能耗通过下式计算：

$$W_{cold} = W_{absorp} + W_{SHP} + W_{CRAC} + W_{pump} + W_{fan} \quad (7)$$

式中, W_{absorp} 为吸附式制冷机组能耗, kW; W_{SHP} 为分离式热管能耗, kW; W_{CRAC} 为机房空调能耗, kW; W_{pump} 为液冷系统泵功, kW; W_{fan} 为风冷系统风机能耗, kW。

基于能量守恒定律, 吸附式制冷机组冷却塔需要释放的热量是高温回路吸收的热量和低温回路释放的冷量之和。冷却塔提供单位释放热量的风扇耗电量为 0.00848kW。因此, 吸附制冷系统冷却塔风机耗电量可以表示为:

$$W_{cooling\ tower} = (Q_{absorp} + Q_{gen}) \cdot 0.00848 \quad (8)$$

根据式 (3) -式 (7), PUE 可展开为:

$$PUE = \frac{\frac{Q_{IT}}{0.98} + 0.00848 \cdot Q_{IT} \cdot HR \cdot (COP_{absorp} + 1) + W_{absorp} + W_{SHP} + \frac{Q_{IT}(1 - HR \cdot COP_{absorp} - HR) - Q_{SHP}}{COP_{CRAC}} + W_{pump} + W_{fan}}{\frac{Q_{IT}}{0.98}} \quad (9)$$

1.3.1 风冷循环系统能耗计算

图 2 为风冷回路示意图, 在数据中心运行期间, 冷空气流经服务器后会被加热, 接着通过 SHP 及 AR 换热器降温, 如果此时仍然无法达到服务器所需的入口温度要求, 将启动 CRAC 提供冷量, 确保空气回到服务器之前保持在先前循环的相同水平。

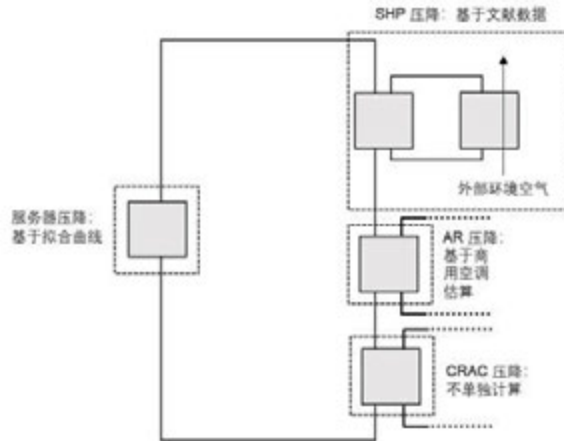


图 2 风冷回路及压降计算方法示意图

刘欢^[12]给出的重力驱动分离式热管蒸发端的最佳风量为 0.833 m³/s。将热管蒸发端安装在机柜背板, 则通过每个服务器的风流量为 0.021m³/s, 服务器进风温度设置为 15°C, 基于能量守恒定律此时服务器出口温度为 31.96°C, 处在可接受范围内。张子轩^[13]对 1U 服务器进行建模, 获得了其阻抗拟合曲线, 拟合曲线 R²=0.995:

$$\Delta P = 20.556u^2 + 12.956u \quad (10)$$

式中 ΔP 为压降, Pa; u 为空气流速, m/s。结合最佳风量可得对应风速的服务器压降为 38.52Pa。分离式热管的蒸发器端使用翅片管, 相应压降在文献中已给出, 为 18.18Pa。若分离式热管提供充足的冷量, 经过分离式热管冷却后, 风温为 25.36°C, 冷却后的空气进入 AR 换热器继续降温。

在空调系统中, 常采用肋片管束冷却热空气, AR 系统将采取同样的方式为机房提供冷量, AR 换热器的空气侧压降取 100Pa, 水侧压降取 60kPa, 经过 AR 换热器后, 机房空气将会被降

温至 15℃，回到服务器入口进行下一循环。CRAC 的泵功包含在其 COP 中，此处不单独计算。设风机效率 η_{fan} 为 0.7，根据公式可计算出数据中心风冷循环风机的耗电量：

$$W_{fan} = \frac{\Delta P_{fan} \cdot q_{fan}}{\eta_{fan}} \quad (11)$$

基于图 2 和式 (12)，机房在不启动 CRAC 时，风机的耗电量为 13.75kW，启动 CRAC 后，可以通过式 (13) 计算 PUE。分离式热管冷凝端风机所需流量为 6000m³/h，压降为 60.08Pa，耗电量为 7.00 kW。

$$PUE = \frac{W_{IT} + W_{absorp} + W_{SHP} + W_{fan} + Q_{CRAC}/COP_{CRAC}}{W_{IT}} \quad (12)$$

1.3.2 余热回收系统能耗计算

图 3 展示了余热回收系统主要压降部分。水冷循环部分的主要压降为冷板压降、机架附近循环管路压降及与吸附床处压降。水冷板压降通过模拟获得，机架管路压降通过经验公式计算。剩余的压降则基于商用机组进行估算。

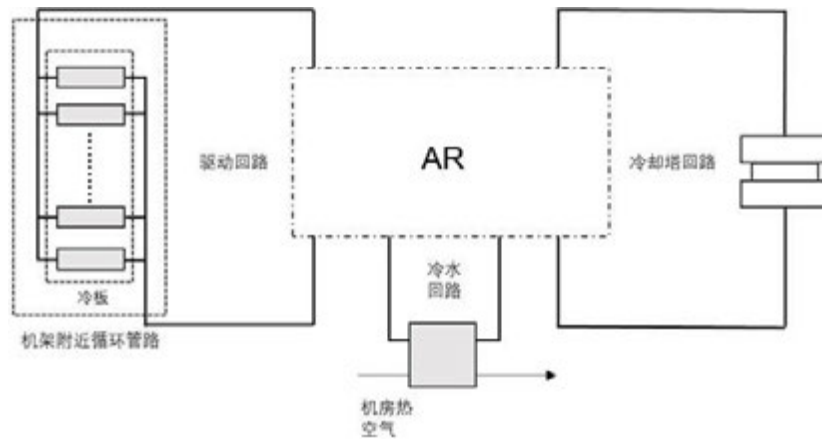


图 3 余热回收系统及关键压降部件示意图

Qu 等人^[14]通过数值模拟研究了通道长宽比对矩形微通道水冷板流动和传热特性的影响。矩形微通道性能最佳的长宽比在 8.904-11.442 之间。本文通过 FLUENT 再现了文献中水冷板的性能曲线，首先经过网格无关性验证，如表 1 所示，选择了 400 万网格数进行了后续计算，并将其与实验结果进行了比较，验证了计算精度，如图 4 所示。

表 1 网格无关性验证

网格数（百万）	努塞尔数
7.0	15.0546
4.0	15.0332
2.1	15.0029
1.6	13.4819
0.9	17.6189

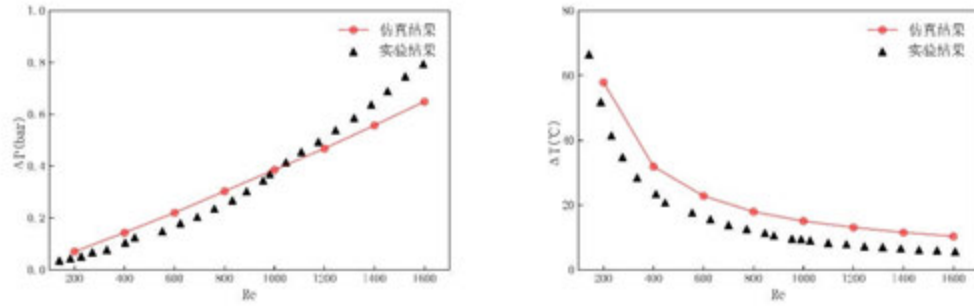


图4 数值模型验证

选择长为 1.373mm，宽为 0.120mm，长宽比为 11.442 的矩形微通道水冷板作为本系统水冷板，CPU 与冷板接触面积为 1000mm²，CPU 发热量 122.5W。计算采用层流模型，CPU 设置恒定热流密度边界条件，为 12.25W/cm²，其他边界绝热。导热硅脂的导热系数设置为 5 W/m·K，入口雷诺数设置为 200 (0.907m/s)，进水温度设置为 63°C。仿真使用 SIMPLEC 算法，其他都使用默认设置。计算结果为：

- 1) 水冷板压降：29.303kPa；
- 2) CPU 的平均温度：68.256°C，满足 CPU 温度控制要求；
- 3) 出水均温：65.102°C。

如图 5 所示，机架附近循环管道由主管道、歧管管道及支路管道组成，图中 a-b₁、c₁-f 为主管道，b₁-c、d-e₁ 为歧管管道，b₁-c₁ 为支路管道。机架附近循环管道中的压降主要由局部损失组成，直角弯头、突阔、突缩、三通和阀门是造成局部损失的主要部件。冷却液流入主管道后，经歧管 b₁-c 及支路管路 b₁-c₁ 进入服务器内部，带走 CPU 热量后依次汇聚到歧管管道 e₁-d，后经主管路将热量带给吸附床。主管道有两个直角弯管、两个阀门、一个突阔、一个突缩，歧管管道与每个分支管道交汇处都有一个三通，每个分支管道内设一个突阔，一个突缩。

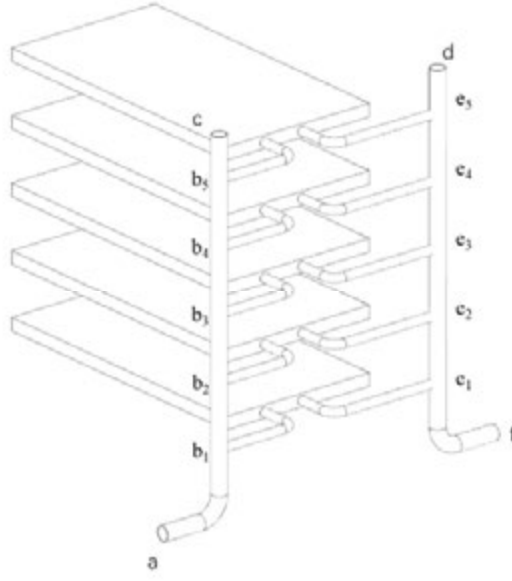


图5 机架附近循环管道示意图

突阔的局部阻力系数可以用经验公式计算：

$$\xi_e = \left(1 - \frac{A_1}{A_2}\right)^2 \quad (13)$$

突缩的局部阻力系数为：

$$\xi_c = 0.5\left(1 - \frac{A_2}{A_1}\right) \quad (14)$$

其中 A_1 表示大截面的横截面积， A_2 表示小截面的横截面积。直角弯头的局部阻力系数为：

$$\xi_{elbow} = 1.31 + 0.13n^{3.5} \quad (15)$$

其中 $n=D/R$ ， D 为管道直径， m ； R 为弯头的弯曲半径， m 。三通阻力系数为定值： $\xi_t = 1.5$ ；阀门采用球阀，阻力系数为： $\xi_f = 2.7$ 。单位水冷板所需的流量为 $0.0000209m^3/s$ ，则主管道流量为 $50.16L/min$ 。总管路、歧管管路和支路管路的流量分别设为 $1m/s$ 、 $0.5m/s$ 和 $0.9m/s$ 。管径尺寸可以使用以下公式计算：

$$R = 1000 \sqrt{\frac{Q}{60000u\pi}} \quad (16)$$

式中， R 为管道半径， mm ； Q 为流量， L/min ； u 为管道流速， m/s 。再通过勃拉修斯光滑区公式计算各管路的沿程阻力损失系数，计算公式为：

$$\lambda = \frac{0.3164}{Re^{0.25}} \quad (17)$$

则管路的总压损可以通过下式计算：

$$\Delta P = \rho g H \quad (18)$$

$$H = H_{ch} + \sum_i \lambda_i \frac{L}{D} \frac{v^2}{2g} + \sum_j \xi_j \frac{v^2}{2g} \quad (19)$$

式中， H 为总压头，由沿程阻力损失及局部阻力损失组成； H_c 为静压头，取 0； L 为管长， m ； v 为流速， m/s ； D 为管径， m 。计算可得，机架附近循环管路压降为 234.425kPa。

水冷回路将作为驱动回路直接为吸附式制冷机组提供热量。吸附式制冷系统内部压降可分为三部分：高温回路压降、中温回路压降及低温回路压降。高温回路即驱动回路，对于吸附式制冷机组，可以根据实际流量调整吸附床换热器的管路设计，使压降保持在一定范围内，在目前的商业产品中，吸附床换热器的压降大多保持在 30-60 kPa 之间，计算时取 45kPa，因此驱动回路总压降为 308.728kPa，流量为 0.0836 m^3/s 。取泵效率为 0.7，高温回路所需的泵功可按以下公式计算，结果为 36.871 kW。

$$W_{pump} = \frac{\Delta P_{pump} \cdot q_{pump}}{\eta_{pump}} \quad (20)$$

中温回路为冷却塔回路，又分为冷却塔风机功耗及循环管路泵功。根据式（8），冷却塔风机耗电量为 16.000kW。标准冷却塔的出入口温差为 5°C，冷却塔所需的流量可以使用以下公式计算：

$$m = \frac{Q}{c_p \Delta T} \quad (21)$$

得所需流量为 325.800 m^3/h (0.0905 m^3/s)。参照对硅胶-水吸附式制冷机制造商 Bry-Air 中数十种产品的分析^[15]，在该流量下，冷却塔回路的压降约为 85kPa，而冷水回路约为冷却塔回路压降的 70%。低温回路为冷水回路，为了计算冷水回路中的流量，可以使用式（21），按一般规律，冷冻水温差为 5°C。计算得出中温回路泵功为 10.989 kW，低温回路中为 7.098 kW。

吸附式制冷系统的总功耗可以通过以下方式获得：

$$W_{absorp} = W_{cooling\ tower} + W_{absorp\ pump} \quad (22)$$

式中， $W_{absorp\ pump}$ 为吸附式制冷机组低温、中温及高温回路的泵功总和，kW。计算可得，吸附式制冷系统的能耗为 70.815kW。

2 系统性能分析

2.1 不同冷却介质熵与火积分析

通过比较相同 CPU 温度下水冷和风冷的熵损失和火积增量，获得最佳冷却方式。由于风冷和水冷在散热能力存在区别的，因此，比较过程仅限于同一组内的高温水和低温空气。例如，系统稳定后，CPU 温度都为 39°C，但需要水冷的入口温度为 35°C，而风冷的入口温度设置为 10°C。从而计算出流体的熵损失及火积增量。

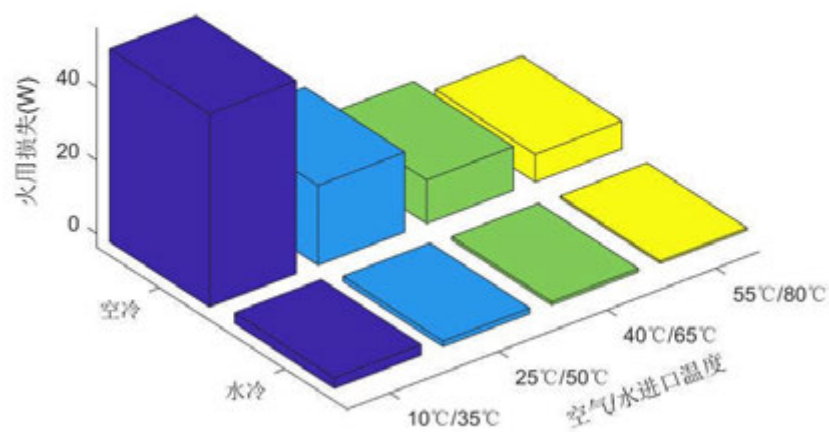
流体的熵损失^[16,17]可通过下式计算：

$$W_L = Q \left(\frac{T_{CPU} - T_{fluid\ outlet}}{T_{CPU} \cdot T_{fluid\ outlet}} \right) T_0 \quad (23)$$

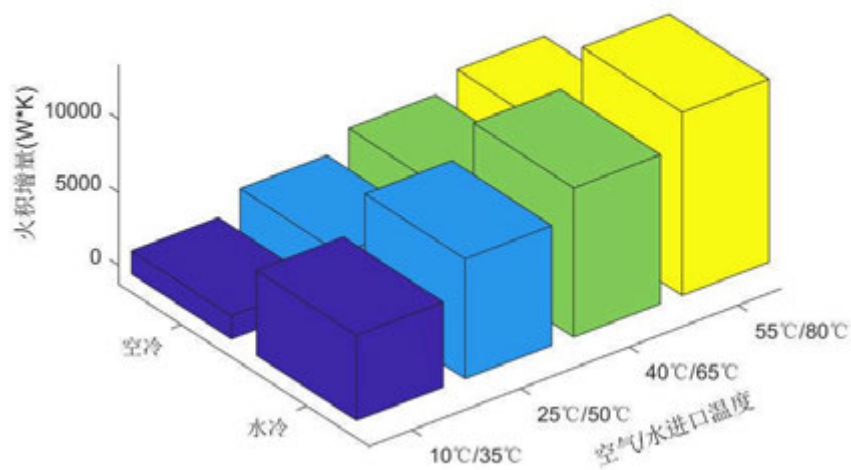
根据火积理论^[18]，流体经过高发热元件后，其火积增量为：

$$\Delta G = \frac{1}{2} m c_p (T_{fluid\ outlet}^2 - T_{fluid\ intlet}^2) \quad (24)$$

计算结果如图 6 所示。相比与风冷，液冷具有较小的熵损失和较高的火积增量。对于不同的冷却介质入口温度，随着冷却介质入口温度的不断升高，熵损失都在逐渐减小，火积增量都在增加，这意味着在热交换过程中应用高温介质可以带来更好的性能。



(a) 焓损失



(b) 火积增量

图 6 相同 CPU 温度下不同流体和流体温度变化对焓损失及火积增量的影响：(a) 焓损失、(b) 火积增量

2.2 数据中心能耗优化分析

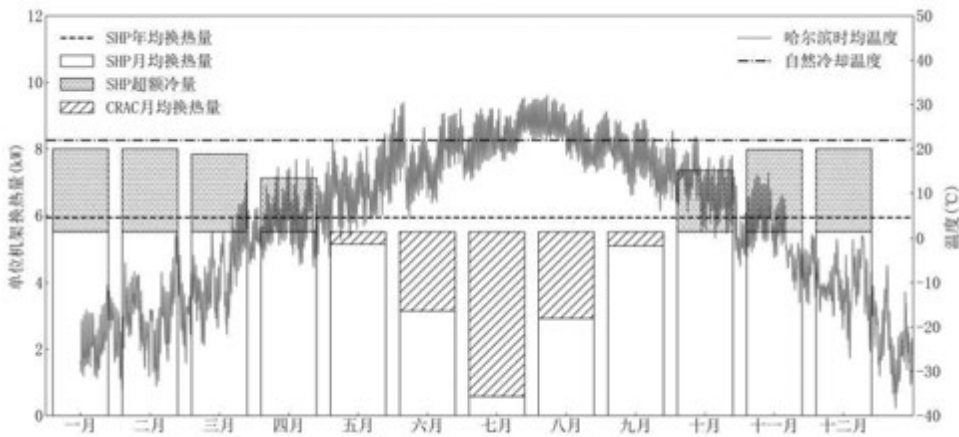
CPU 发热量为 255W，服务器发热量为 610W，HF 为 0.41，CRAC 的 COP 定为 3.5。采用 EMM-8 吸附式制冷机组^[9]，当机组驱动温度为 65°C 时，其 COP 可以达到 0.85。根据文献中描

述^[9]，采用的 SHP 驱动方式为重力驱动，若蒸发端保持 30℃，最高换热量为 8kW，且其值随着室内外温差的变化而变化，当换热量为 8kW 时，蒸发端冷凝端温差为 26.5℃；当换热量为 3.5kW 时，温差为 10℃；若温差低于 10℃，SHP 将被关闭。

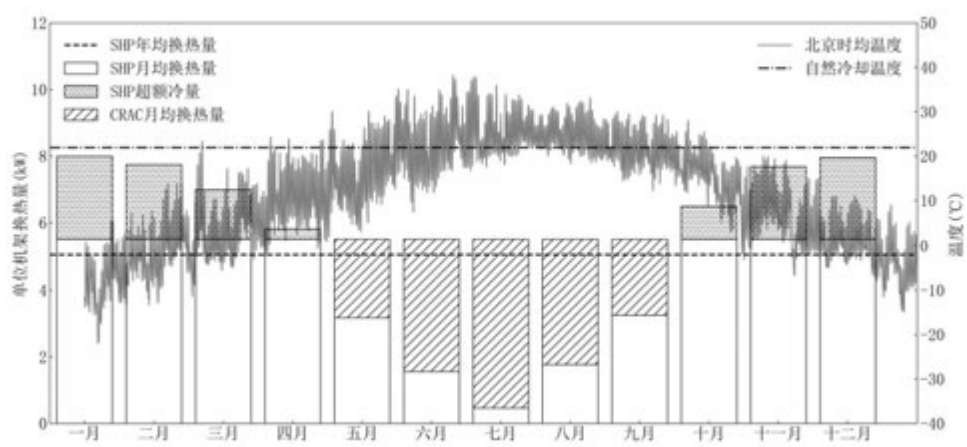
表 2 列出了中国五个典型的气候区域^[20]：哈尔滨、北京、昆明、上海和海口。图 7 通过各地 2021 年每小时的温度数据，获得了各地 SHP 和 CRAC 的月平均热交换量的计算结果，研究所需的气象数据来源于 MERRA-2^[21]提供的共享气象信息。表 3 展示了不同地区数据中心的性能指标和自然冷却效益计算结果，比较了中国五个不同城市的 PUE、EER、自然冷却比、自然冷却小时数和节能量。最低 PUE 出现在哈尔滨，为 1.085，海口的 PUE 最高，为 1.098。数据中心自然冷却比从海口的 27.089%到哈尔滨的 85.479%不等。此外，哈尔滨的冷却时间最长，为 7488 小时，其次是昆明，为 7064 小时。由图 7 及表 3 可知，冷却系统的能耗水平存在地域和季节差异。CRAC 的换热量呈现“夏峰冬谷”的规律，且在高纬度地区波动较大。此外，冷却系统的 EER 随着纬度的降低而降低。因此，在高纬度地区建立大型数据中心可以利用气候优势降低 PUE，从而可能实现降低冷却能源需求。

表 2 中国五大气候区的代表性城市

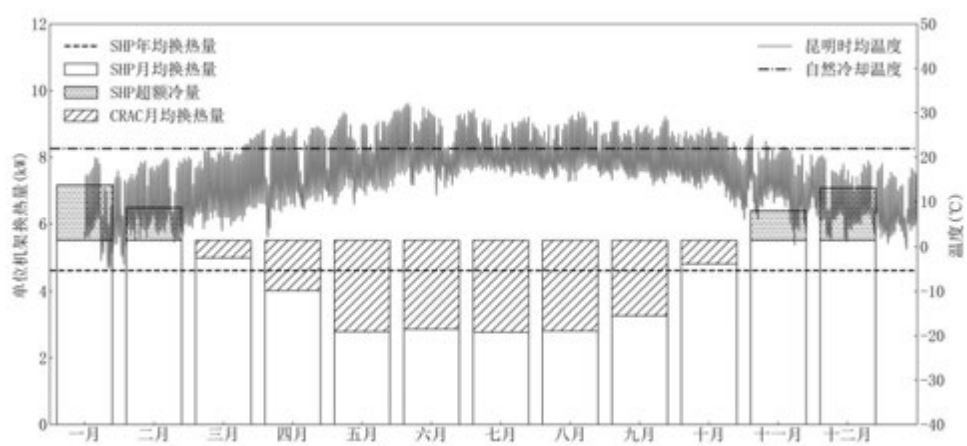
城市	经纬度	气候	年均温/℃
哈尔滨	45.801N 126.529E	严寒地区	3.878
北京	39.902N 116.401E	寒冷地区	11.602
昆明	24.883N 102.831E	温和地区	15.696
上海	31.232N 121.469E	冬冷夏热地区	17.800
海口	20.046N 110.194E	冬暖夏热地区	25.191



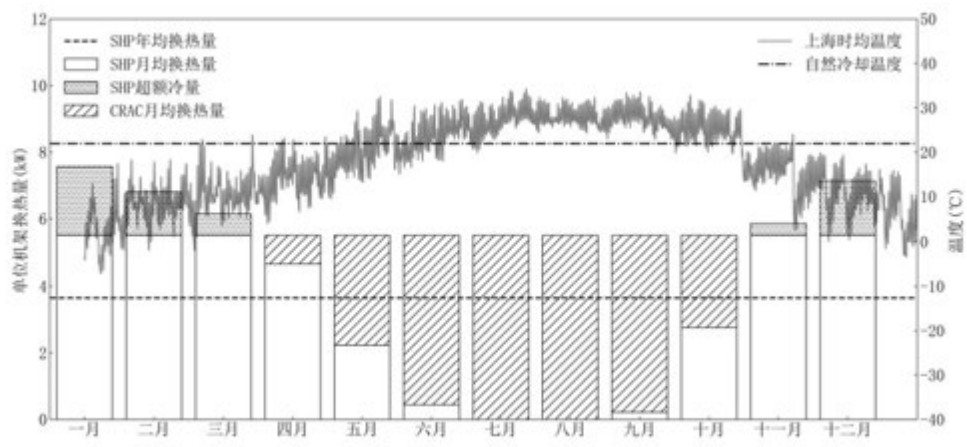
(a)



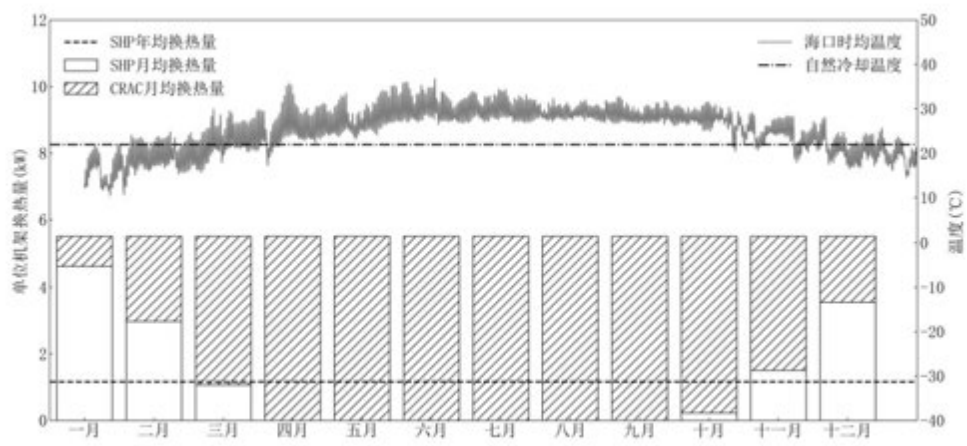
(b)



(c)



(d)



(e)

图 7 五个代表性城市的分离式热管系统和机房空调系统每月热交换量变化：(a) 哈尔滨、(b) 北京、(c) 昆明、(d) 上海和 (e) 海口

表 3 地区能源效益及自然冷却效益分析

城市	PUE	EER	自然冷却比	自然冷却 小时数	节能/MWh
哈尔滨	1.085	11.483	85.479%	7488	4245.720
北京	1.087	11.165	76.586%	6709	4192.685
昆明	1.088	11.041	80.639%	7064	4171.222
上海	1.090	10.802	59.589%	5220	4128.399

海口	1.098	9.951	27.089%	2373	3959.057
----	-------	-------	---------	------	----------

3 结论

耦合吸附式制冷系统的数据中心相比于使用传统的机械制冷冷却的数据中心具有更高的能效，可以作为数据中心冷却手段之一，也可以与自然冷却耦合来进一步降低 PUE。本研究通过结合分离式热管及吸附式制冷来优化数据中心冷却系统，达到节能的目的，同时提供了一种计算混合冷却数据中心 PUE 值的方法。主要结果总结如下：

1) 对于 CPU 风冷和水冷，随着流体入口温度的升高，出口流体的火积增量增加，焓损失减小，水冷板出口的火积增量几乎随进水温度的升高而线性增加，较高的流体入口温度具有更好的系统性能。

2) 采用吸附制冷进行余热回收，并结合分离式热管自然冷却后，在中国大部分地区数据中心 PUE 可控制在 1.085-1.098 之间，与机械制冷系统相比该冷却系统可实现 64%以上的节能率。

参考文献

- [1] Zhang Hainan, Shao Shuangquan, Tian Changqing, et al. A review on thermosiphon and its integrated system with vapor compression for free cooling of data centers. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2018, 81: 789-798
- [2] Huseyin Bostanci, Seifollah Nasrazadani. Use of direct airside economizers in thermal management of data centers: opportunities and challenges. 2019 18th IEEE Intersociety Conference on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems (ITherm)
- [3] Hiroshi Endo, Hiroyoshi Kodama, Hiroyuki Fukuda, et al. Effect of climatic conditions on energy consumption in direct fresh-air container data centers. *Sustainable Computing: Informatics and Systems*. 2015, 6: 17-25
- [4] Bao Lingling, Wang, Jinggang, Kang Ligai. The applied effect analysis of heat exchanger installed in a typical communication base station in Beijing of China. *Energy Procedia*, 2012, 14, 620-625
- [5] Mahdi Deymi-Dashtebayaz, Sajad Valipour-Namanlo. Thermoeconomic and environmental feasibility of waste heat recovery of a data center using air source heat pump. *Journal of Cleaner Production*, 2019, 219: 117-26
- [6] Lin Xinxing, Zuo Lujie, Yin Likun, et al. An idea to efficiently recover the waste heat of Data Centers by constructing an integrated system with carbon dioxide heat pump, mechanical subcooling cycle and lithium bromide-water absorption refrigeration cycle. *Energy Conversion and Management*, 2022, 256: 115398
- [7] Anna Haywood, Jon Sherbeck, Patrick Phelan, et al. A sustainable data center with heat-activated cooling. In: 2010 12th IEEE Intersociety Conference on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems, Las Vegas, 2010. 1-7
- [8] Anna Haywood, Jon Sherbeck, Patrick Phelan, et al. Thermodynamic feasibility of harvesting data center waste heat to drive an absorption chiller. *Energy Conversion and Management*, 2012, 58: 26-34.
- [9] Severin Zimmermann, Ingmar Meijer, Manish K. Tiwari, et al. Aquasar: A hot water cooled data center with direct energy reuse. *Energy*, 2012, 1 (43): 237-245
- [10] Wilde Torsten, Ott Michael, Auweter Axel, et al. CoolMUC-2: A Supercomputing Cluster with Heat Recovery for Adsorption Cooling. In: 2017 33rd Thermal Measurement, Modeling & Management Symposium (SEMI-THERM). San Jose, 2017. 115-121
- [11] Lenovo Co., Ltd. ThinkSystem SR570 Server Recently Published Resources.
<https://lenovopress.lenovo.com/servers/thinksystem/sr570>
- [12] 刘欢. 基于分离式热管的数据中心散热系统设计与能效分析: [硕士学位论文]. 北京: 中国科学院工程热物理研

究所, 2017

Liu Huan. System design and energy efficiency analysis of separate heat pipe in data center: [Master Thesis] Beijing: Institute of Engineering Thermophysics, Chinese Academy of Sciences, 2017

[13] 张子轩. 服务器机柜的共享风扇散热研究: [硕士论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2015

Zhang Zixuan. Share fan for server of equipment cabinet cooling: [Master Thesis] Harbin: Harbin Institute of Technology, 2015

[14] Qu Weilin, Issam Mudawar. Experimental and numerical study of pressure drop and heat transfer in a single-phase micro-channel heat sink. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2002, 12 (45): 2549-2565

[15] Bry-Air Co., Ltd. ADC Series C-FRAME adsorption chiller technical data sheet.
<https://www.bryair.com/wp-content/uploads/2020/09/adc-technical-specs.pdf>

[16] Bejan A. *Entropy Generation through Heat and Fluid Flow*. New York: Wiley Int., 1982

[17] Bejan A. *Entropy Generation Minimization*. Florida: CRC Press Int., 1996

[18] Guo Zengyuan, Zhu Hongye, Liang Xingang. Entransy—A physical quantity describing heat transfer ability. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2007, 13 (50): 2545-2556

[19] Liu Zhangli, Xu, Jiaxing, Xu Min, et al. Ultralow-temperature-driven water-based sorption refrigeration enabled by low-cost zeolite-like porous aluminophosphate. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 193

[20] 朱炳海. 中国气候. 北京: 科学出版社, 1962

Zhu Binghai. *Chinese Climate*. Beijing: Science Int., 1962

[21] Modern-Era Retrospective analysis for Research and Applications, Version 2.

<https://gmao.gsfc.nasa.gov/reanalysis/MERRA-2/>

低压条件下圆形翅片管换热器换热特性模拟研究

赵沛东, 孙鹏, 王保利, 董袁进, 孟建, 郑斌

(山东理工大学交通与车辆工程学院, 淄博 255000)

(Tel:15936589031, Email:1374809640@qq.com)

摘要: 高空空气稀薄, 设备的散热问题加剧, 研究低压条件下的换热特性, 对于高空工作设备的正常运行至关重要。本文以圆形翅片管为研究对象, 利用数值模拟的方法研究了在海拔 8km 的高空环境下翅高、翅厚、翅间距和总管长对于翅片管换热特性的影响。结果表明: 圆形翅片管的换热能力随翅高的增加翅间距的减小而降低, 在翅厚为 1mm 时换热能力较好。低压条件的翅效率比常压低 18.5%~35.7%, 得到了低压条件下环翅的翅片效率关系式。

关键词: 低压, 圆形翅片管, 强化传热, 数值模拟

0 引言

换热器是用于冷热流体间热量交换的设备, 多年来, 换热器在化工、运输、能源动力、电子产品等领域得到了广泛的应用^[1]。随着科学与工业的发展, 要求换热设备紧凑、轻巧、高效并小型化, 这就促使人们去研究高效换热器^[2]。尤其是在低气压地区, 像小型直升机、无人侦察机等一系列的航空器^[3-4], 以及高海拔地区一些工业设备的散热, 苛刻的换热环境与换热器也提出了更高的要求。为了更好的了解低气压条件对于换热器换热特性的影响, 开展高海拔环境下换热器换热特性的数值模拟研究是至关重要的。

针对高海拔低压环境下的高效换热器众多学者在换热器结构设计、性能优化等方面展开了一定意义的研究工作。张汝行等^[5]搭建压力可调的封闭环境仓, 低压环境下, 管排数和循环热水温度对翅片管冷凝器空气侧对流换热特性的影响。王国文等^[6]计算了距地面 20 公里的平流层, 换热量为 5kW 的换热器的基本结构和参数。张嘉文等^[7]对不同气压环境下空气侧流速和翅片间距对平翅片管换热器空气侧换热特性的影响进行了实验研究。Ghazanfari^[8]对带涡发生器的管式翅片紧凑型换热器的传热强化和压降进行了研究, 研究表明涡发生器的迎角、翼长、安装位置都会影响整体的散热性能。Elsayed^[9]研究了不同海拔下各参数对散热器热阻影响的规律, 给出了有效降低热阻的途径。目前针对换热器的多参数变化以及换热器所占体积大小的研究是有限的, 因此本文将以圆形翅片管换热器为研究对象, 采用数值模拟的方法研究翅高、翅间距、翅厚、换热器管长、

翅效率对于其换热特性的影响。希望通过上述研究来为换热器的应用范围拓展提供依据。

1 物理模型与网格划分

1.1 物理模型

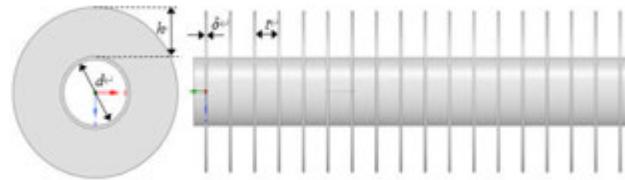


图 1. 圆形翅片管换热器物理模型

Fig. 1 Physical model of circular finned tube heat exchanger

研究的基础模型为空气冷却器中广泛使用的圆形翅片管式换热器，考虑到在低压环境中的高空飞行器，其发动机内部的空间有限^[10-11]，出于减重和整体几何方面的限制，换热器的质量和体积应对此做出调整^[12]。因此，本文采用小口径翅片管换热器，并尽可能还原发动机舱内的换热情况。同时由于全尺寸的翅片管模型建立将会使得模拟计算难度大大增加，为了有效解决翅片薄而翅片管长造成的计算网格多的难题，采用了分段建立模型，接续进出口条件的方法实现，因此本文的设置如下：外部流体区域的尺寸为长：10 d 、宽：4.5 d 、高：4.5 d ，其中 $d=20\text{ mm}$ 为基管的内径，基管壁厚为 1 mm。如图 1 所示为圆形翅片管的物理模型，其中 h 为翅片高度， t 为翅片间距， δ 为翅片厚度。

1.2 初始条件及边界条件

数值模拟所用的圆形翅片管材料为碳素结构钢，所使用的环境为海拔 8 km 的环境，由于所研究的换热器的工作环境为发动机舱内，所以选定环境温度为 80℃，其相关的物性参数如表 1 所示：

图 2 为经过简化的数值模拟模型以及计算边界示意图。简化后的数值模拟模型包括圆形翅片管换热器周围的空气计算域和翅片管部分的计算域。垂直与翅片管方向分别为空气入口和出口，流体域的四周壁面均为定温绝热壁面。

表 1 管内气体物性参数表

Table. 1 Gas physical parameter table in the tube

气体参数	管内参数数值	低压管外参数数值	常压管外参数数值
密度	4.944 kg/m ³	0.526 kg/m ³	1.225 kg/m ³
粘度	1011 J/(kg·K)	1006.43 J/(kg·K)	1006.43 J/(kg·K)
比热容	0.036 W/(m·K)	0.0211 W/(m·K)	0.0242 W/(m·K)
导热系数	0.00011925 kg/(m·s)	0.000015275 kg/(m·s)	0.000017894 kg/(m·s)
入口温度	270 °C	80 °C	80 °C
入口流速	10 m/s	6 m/s	6 m/s

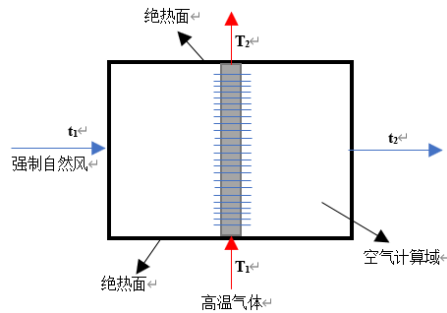


图 2. 简化数值模拟模型示意图

Fig. 2 Simplified numerical simulation model diagram

1.3 网格划分及主要研究参数

图 3 为网格划分模型，网格划分区分为固体域(a)与气体域(b)，均采用非结构化四面体网格，考虑到翅厚及翅根位置尺寸较小，采用局部网格加密的方法来降低网格数量，网格数量为 150 万。本文选取翅高、翅厚、翅间距和总管长作为圆形翅片管换热器传热研究对象，从而探索不同尺寸下圆形翅片管的换热行为。

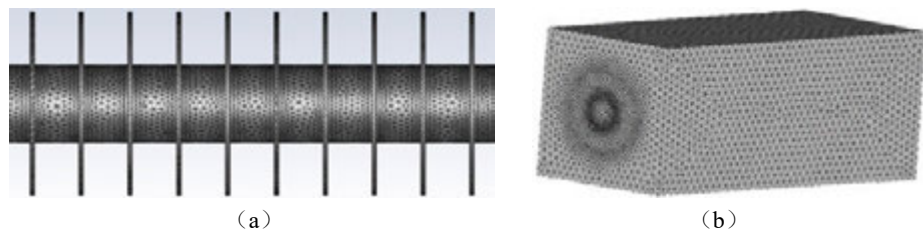


图 3. 网格划分模型

Fig. 3 Meshing model

表 2 为翅片管模型的参数表，本研究将从翅高、翅间距、翅厚的尺寸范围中选取 5 组工况点，以中间参数翅高 15 mm、翅间距 10 mm、翅厚 1 mm 为基准，保证两个参数不变，共建立 13 个模型，据此来研究各个参数变化对于圆形翅片管换热器换热特性的影响。选取中间参数翅高 15 mm、翅间距 10 mm、翅厚 1 mm、管长 198 mm 的模型来进行持续进出口条件的模拟，计算换热所需的总段数，据此来分析总管长对于圆形翅片管换热器换热的影响。通过对比分析常压和低压条件下的圆形翅片管的翅效率和平均热流密度，来判断常压条件下的环翅效率曲线能否用于低压条件，并给出低压条件下环翅效率关系式。

表 2. 圆形翅片管模型参数表

Table. 2 Parameter table of circular finned tube model

参数	单位	工况 1	工况 2	工况 3	工况 4	工况 5
翅片高度	mm	11	13	15	17	19
翅片间距	mm	6	8	10	12	14
翅片厚度	mm	0.4	0.7	1	1.3	1.6

2 结果与分析

2.1 圆形翅片管换热器翅高对平均热流密度的影响

图 4 为圆形翅片管换热器翅高变化后的温度分布云图，由图 4 可以看出，在翅片管换热器翅片厚度与翅片间距不变的前提下，随着翅片高度的增大，靠近翅根位置的高温区域面积在逐步的减小，由于翅片管长度较短，以及低压条件空气压力、空气密度均较低，即使在强制对流的工况下，管内的高温气体温度变化依旧不明显。图 5 所示的是圆形翅片管换热器平均热流密度随翅高变化趋势图，从图中可以看出，翅片以及基管位置的平均热流密度随着翅片高度的升高而逐渐降低，当翅片高度从 11 mm 增加至 19 mm，翅片以及基管位置的平均热流密度从 2597.99 W/m² 降低至 1497.91 W/m²，这与温度云图当中的变化趋势一致。这是由于基管位置的换热面积不变，它的平均热流密度几乎不变，翅高的增加使得翅片的换热面积增加，而翅片位置的平均热流密度低于基管位置从而导致整根翅片管的平均热流密度逐渐降低。

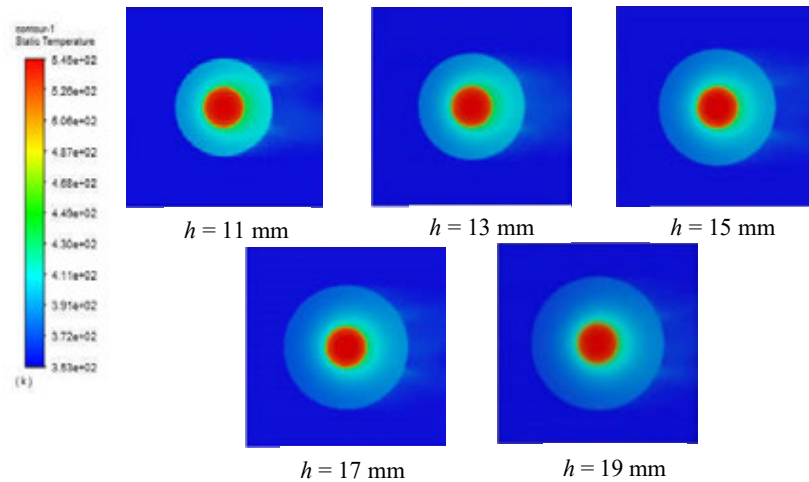


图 4. 圆形翅片管翅高 h 改变的温度分布云图

Fig. 4 Temperature distribution cloud diagram of circular finned tube fin height h change

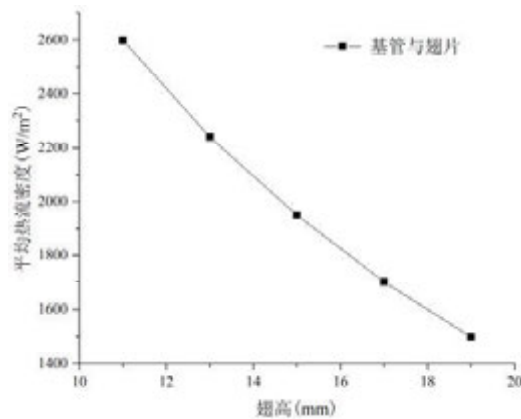


图 5. 翅片管换热器平均热流密度随翅高变化趋势图

Fig. 5 The variation trend of average heat flux density of finned tube heat exchanger with fin height

2.2 圆形翅片管换热器翅间距对平均热流密度的影响

如图 6 所示为圆形翅片管翅间距改变的温度分布云图，从图中可以看出当翅片间距为 6 mm 时，翅片上的高温区域的面积最小，当翅片间距为 14 mm 时，翅片上的高温区域的面积最大，且可以观察出翅片间距的逐步升高使得翅片的高温区域面积逐渐增大。图 7 为圆形翅片管换热器翅片与基管位置平均热流密度随翅间距变化的趋势图，从图中可以看出，当翅片间距从 6 mm 增加至 14 mm，翅片以及基管位置的平均热流密度从 1542.75 W/m² 升高至 2239.34 W/m²，与图 6 的温度云图趋势一致，可以看出在保证翅片高度与翅片厚度不变的情况下，随着翅片间距的增大，圆形翅片管换热器的换热情况逐步增强。由于翅片位置的换热面积不变，它的平均热流密度变化较小，翅间距的增加使得基管的换热面积增加，而基管位置的平均热流密度大于翅片位置，从而导致整根翅片管的平均热流密度逐渐增大。

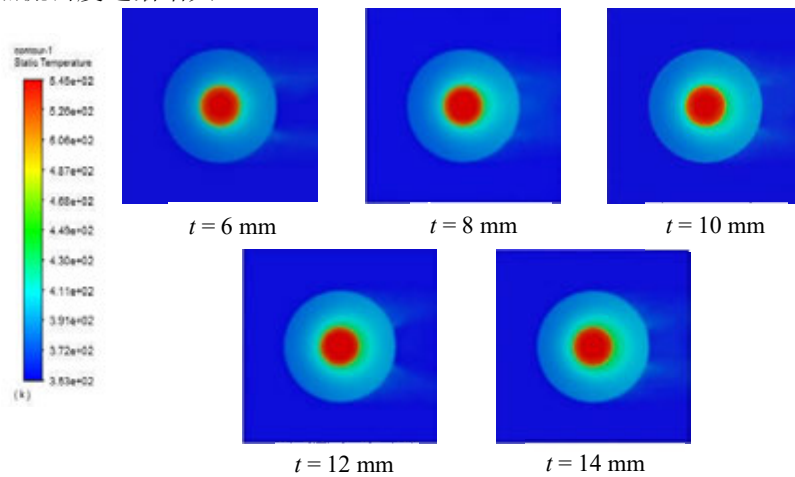


图 6. 圆形翅片管翅间距 t 改变的温度分布云图

Fig. 6 The temperature distribution cloud diagram of the change of the fin spacing t of the circular fin tube

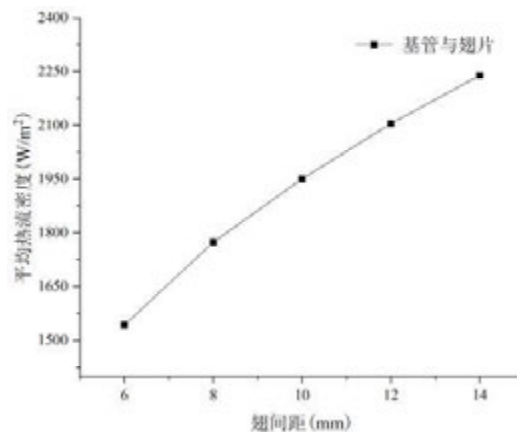


图 7. 翅片管换热器平均热流密度随翅间距变化趋势图

Fig. 7 The variation trend of average heat flux density of finned tube heat exchanger with fin spacing

2.3 圆形翅片管换热器翅厚对平均热流密度的影响

图 8 为圆形翅片管换热器翅片厚度改变的温度分布云图，由图中可以看出，在不改变翅片高度、翅片间距的前提下，当翅片厚度为 1 mm 时，翅片翅根位置的高温面积区域最大，而当翅片厚度为 0.4 mm、0.7 mm、1.3 mm、1.6 mm 时翅根位置的高温面积区域均小于它。通过对比图 9 翅片管换热器平均热流密度随翅厚变化的趋势可以看到，当翅片厚度从 0.4 mm 增加至 1 mm 时，翅片以及基管位置的平均热流密度从 1691.82 W/m² 升高至 2239.34 W/m²，当翅片厚度从 1 mm 增加至 1.6 mm 时，翅片以及基管位置的平均热流密度从 2239.34 W/m² 降低至 1768 W/m²。与图 8 翅片管温度云图趋势进行比较可以发现，当翅片厚度为 1mm 时，圆形翅片管换热器的换热性为最佳。

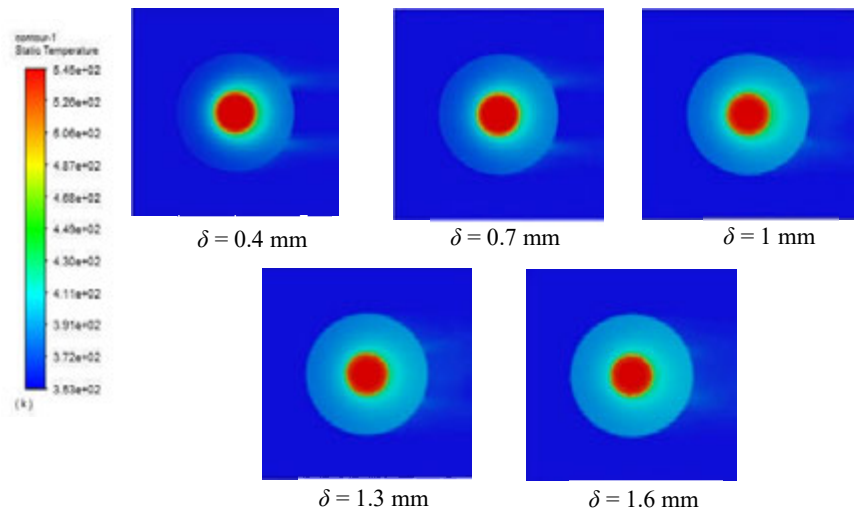


图 8. 圆形翅片管翅厚 δ 改变的温度分布云图

Fig. 8 The temperature distribution cloud diagram of the change of the fin thickness δ of the circular finned tube

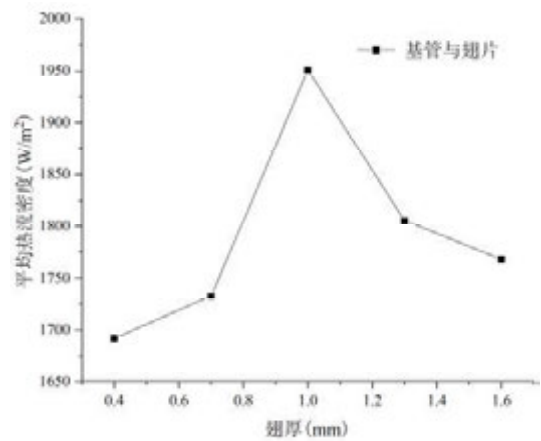


图 9. 翅片管换热器平均热流密度随翅厚变化趋势图

Fig. 9 The variation trend of average heat flux density of finned tube heat exchanger with fin thickness

2.4 圆形翅片管换热器入口温度对平均热流密度的影响及总管长计算

图 10 为各段翅片以及基管位置平均热流密度随着入口温度变化的趋势图，从图中可以观察到，当各段入口温度从 543.15 K 减少到 384.15 K 时，各段的平均热流密度从第一段的 1950.47 W/m² 减少到最后一段的 296 W/m²。通过对比曲线的斜率变化以及曲线各点间的长度可以看出，在接近目标温度的几段循环时，平均热流密度以及温度的变化逐渐减小，这是由于管内的高温气体与环境温度越来越接近导致的，使得换热器换热情况逐渐变差，增加了换热器的管长。由模拟的计算结果可知，进行分段循环将 543.15 K 的高温气体降温至 383.15 K 以下，一共需要循环 36 段，所采用的圆形翅片管的管长为 0.198 m，因此翅片管的总长为 7.198 m。

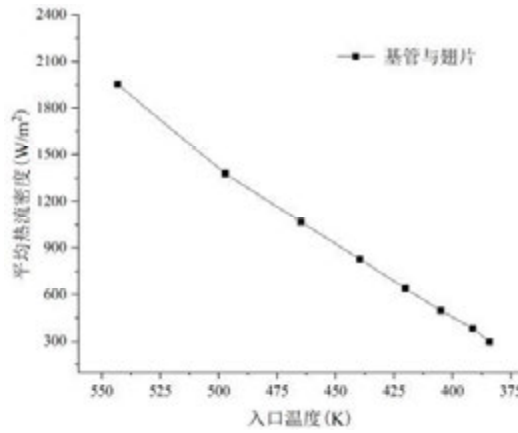


图 10. 翅片管换热器平均热流密度随各段入口温度变化趋势图

Fig. 10 The variation trend of average heat flux density of finned tube heat exchanger with inlet temperature of each section

2.5 低压与常压条件下圆形翅片管翅效率曲线及平均热流密度对比分析

圆形翅片管选择的参数为翅高 15 mm、翅厚 1 mm、翅间距 10 mm，分别对低压与常压工况进行模拟，图 11 为低压与常压圆形翅片管平均热流密度的对比图，从图中可以看出在低压条件下翅片管的平均热流密度为 1955.47 W/m²，在常压条件下翅片管的平均热流密度为 2155.37 W/m²，在常压条件下，圆形翅片管换热器平均热流密度下降约 10%。

采用翅效率来表示翅片散热的有效程度，基于所模拟得到数据来计算圆形翅片各个参数下的翅效率，翅效率的物理意义^[13]：

$$\eta_f = \frac{\text{实际散热量}}{\text{假设整个翅表面处于翅基温度下的散热量}}$$

其中， η_f 为翅效率，结合圆形翅片数据分析得到翅效率计算公式：

$$\eta_f = \frac{qA}{q'A'}$$

其中， q 为基管内壁的平均热流密度，W/m²， A 为基管的内表面积，m²， q' 为基管外表面的平均热流密度，W/m²， A' 为基管和翅片的外表面积，m²。

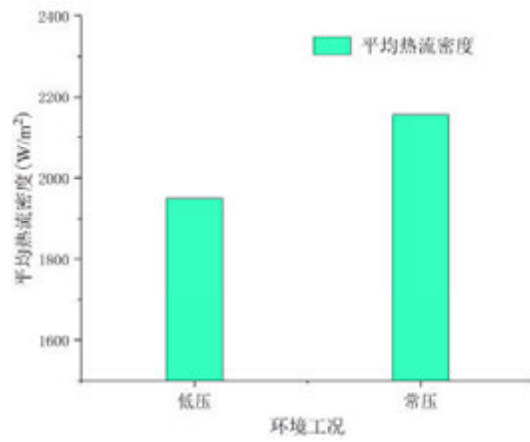


图 11. 低压与常压圆形翅片管平均热流密度对比图

Fig. 11 Comparison of average heat flux density of low pressure and normal pressure circular finned tube

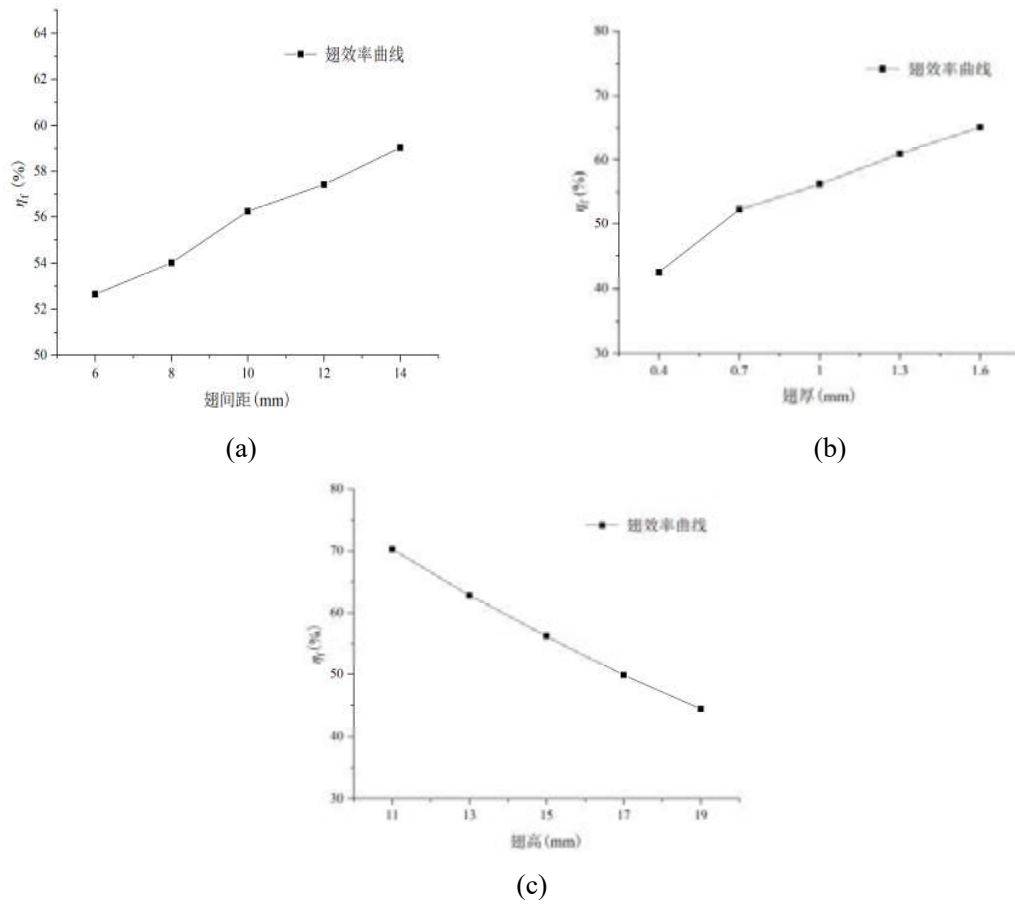


图 12. 圆形翅片管翅效率随结构参数变化趋势图

Fig. 12 The variation trend of fin efficiency of circular finned tube with structural parameters

图 12 为圆形翅片管翅效率随结构参数变化的趋势图，从图中可以看出，随着翅高的

增大,圆形翅片管的翅效率从 70.28%降低至 44.37%,随着翅间距的增大,翅效率从 42.41%增大至 65.10%,随着翅厚的逐渐增大,翅效率从 52.65%增大至 59.03%。

本文所研究的圆形翅片管参数的 r_2'/r_1 值为 2.05~2.77,图 13 为所绘制的圆形翅片管低压与常压翅效率曲线图,从图中可以看出,各个参数下翅效率的点均处于常压下 r_2'/r_1 为 2、3 曲线以下,拟合的低压条件下的效率曲线也是低于常压下的效率曲线,比常压低 18.5%~35.7%。对低压翅效率进行拟合得到其关系式为: $\eta_f = 135.27(1+x)^{-2.09}$,其中 $x = (H')^{3/2}[h/(\lambda A_L)]^{1/2}$,拟合误差值为 5.39。因此可以判断出,目前常压下的环翅效率曲线并不适用与低压条件下翅效率的计算,若要进行低压条件下环翅翅片效率的计算,可参照拟合关系式进行计算。

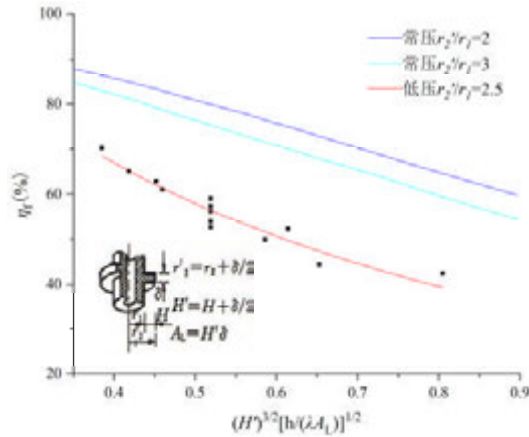


图 13.圆形翅片管低压与常压翅效率曲线图

Fig. 13 Fin efficiency curves of circular finned tube under low pressure and normal pressure

3. 结论

本文以圆形翅片管换热器为研究对象,分析了翅片高度、翅片间距、翅片厚度、总管长、翅效率等因素对翅片管换热特性的影响,建立了各种参数下的圆形翅片管传热模型,对模拟结果分析后得到结论:

(1) 在保证翅高、翅间距、翅厚、其中两个参数不变的情况下,基管与翅片的平均热流密度随着翅高的增加而减少,从 2597.99 W/m²降低至 1497.91 W/m²。平均热流密度随着翅间距的增大而增大,从 1542.75 W/m²升高至 2239.34 W/m²。随着翅片厚度的变化发现,当翅厚为 1 mm 时换热效果最好达到 1950.47 W/m²。

(2) 针对翅高 15 mm、翅间距 10 mm、翅厚 1 mm、管长 198 mm 的模型来进行持续进出口条件的模拟,发现总管长为 7.198 m 时,可将温度 270℃降低至 110℃。翅片管的入口温度随着循环段数的增加而减少,翅片以及基管位置的平均热流密度随着入口温度的减小而减小。

(3) 通过随着翅高的增大,圆形翅片管的翅效率从 70.28%降低至 44.37%,随着翅间距的增大,翅效率从 42.41%增大至 65.1%,随着翅厚的逐渐增大,翅效率从 52.65%增

大至 59.03%。

(4) 通过对比常压和低压条件下圆形翅片管的平均热流密度可以发现：在低压条件下，圆形翅片管换热器平均热流密度下降约 10%。通过对比常压和低压条件下圆形翅片的效率曲线可以发现：常压下的环翅效率曲线并不适用于低压条件下翅效率的计算，常压下的环翅效率比常压低 18.5%~35.7%。通过拟合低压的数据点获得拟合关系式为 $\eta_f = 135.27 (1+x)^{-2.09}$ ，其中 $x = (H')^{3/2} [h/(\lambda A_L)]^{1/2}$ ，拟合误差值为 0.91，为计算低压条件下环翅的翅效率提供参考。

参考文献

- [1] 陈金友, 杨林, 漆波. 翅片管布置方式对管翅式散热器换热性能的影响[J]. 江苏科技信息, 2016, (06): 61-3.
- [2] DING W, ERI Q, KONG B, et al. Numerical investigation of a compact tube heat exchanger for hypersonic pre-cooled aero-engine[J]. Applied Thermal Engineering, 2020, 170: 114977.
- [3] LIU Z, SUN M, HUANG Y, et al. Investigation of heat transfer characteristics of high-altitude intercooler for piston aero-engine based on multi-scale coupling method[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 156: 119898.
- [4] LIU Y, XU G, FU Y, et al. Airside pressure drop characteristics of three analogous serpentine tube heat exchangers considering heat transfer for aero-engine cooling[J]. Chinese Journal of Aeronautics, 2022, 35(12): 32-46.
- [5] 张汝行, 柳建华, 张良. 翅片管冷凝器低压环境下空气侧换热特性研究[J]. 制冷学报, 2021, 42(01): 99-104.
- [6] 王国文, 陈红. 高空风冷换热器的设计与仿真[J]. 制冷与空调, 2016, 16(01): 18-20.
- [7] 张嘉文, 柳建华, 张良, 等. 低气压下翅片管换热器空气侧换热特性的实验研究. 热能动力工程, 2020, 35(05): 87-91.
- [8] GHOLAMI A A, WAHID M A, MOHAMMED H A. Heat transfer enhancement and pressure drop for fin-and-tube compact heat exchangers with wavy rectangular winglet-type vortex generators[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2014, 54: 132-40.
- [9] ELSAYED M L, MESALHY O, KIZITO J P, et al. Performance of a guided plate heat sink at high altitude [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 147: 118926.
- [10] LI H, LIU H, ZOU Z. Experimental study and performance analysis of high-performance micro-channel heat exchanger for hypersonic precooled aero-engine[J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 182: 116108.
- [11] XU Z, NING X, YU Z, et al. Design optimization of a shell-and-tube heat exchanger with disc-and-doughnut baffles for aero-engine using one hybrid method of NSGA II and MOPSO [J]. Case Studies in Thermal Engineering, 2023, 41: 102644.
- [12] LIU Z, SUN M, HUANG Y, et al. Performance of parallel plate-fin heat exchanger for piston aero-engines

with front-placed guide plate at high altitude[J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 214: 118829.

[13] 潘小勇. 流体力学与传热学[M]. 1 ed.: 江西高校出版社.

轨道位置对 AMS 主散热器温度波动的影响

祁建华 1, 杨宸 1, 郑晨 2, 宋继伟 1*

(1 山东大学热科学与工程研究中心, 济南市, 250061; 2 山东高等技术研究院, 济南市, 250100)
(Tel:13606416698, Email:sjw2002@sdu.edu.cn)

摘要: AMS 随 ISS 在近地轨道运行, 其主散热器温度受 β 角、ISS 相关操作的影响, 还与所处轨道位置有关。本文分析了地球绕太阳公转轨道位置和 ISS 绕地轨道位置对主散热器温度的影响。数据显示, 同一地球公转位置, 太阳总辐照度每年趋势一致, 但太阳辐照度数值不恒定, 由此引起相应温度的波动。本文研究工况条件下, 相同轨道位置, 由太阳总辐照引起的测点最大温差 6.06°C ; 单轨道周期内, WAKE 侧主散热器相同测点最大温差 10.2°C 。

关键词: AMS, 地球公转轨道, 太阳总辐照, 近地轨道

0 前言

阿尔法磁谱仪(Alpha Magnetic Spectrometer, AMS)是安装在国际空间站(International Space Station, ISS)上的大型粒子探测装置, 探测宇宙中的暗物质和反物质^[1-3]。AMS 安装在 ISS 主桁架的右侧, 处于高真空、微重力和低温的太空环境中, 如图 1 所示。热控制系统(Thermal Control System, TCS)是保证其在太空安全稳定运行的关键。

AMS 跟随 ISS 在近地轨道绕地球旋转, 同时跟随地球绕太阳旋转。AMS 所处的热环境随时间和空间变化而改变。AMS 在轨运行采集的热数据提供了最直接的信息, 反映了轨道上的热环境特征和 TCS 响应特性。数据分析是了解空间热环境、研究空间装置热控制机理的有效途径。

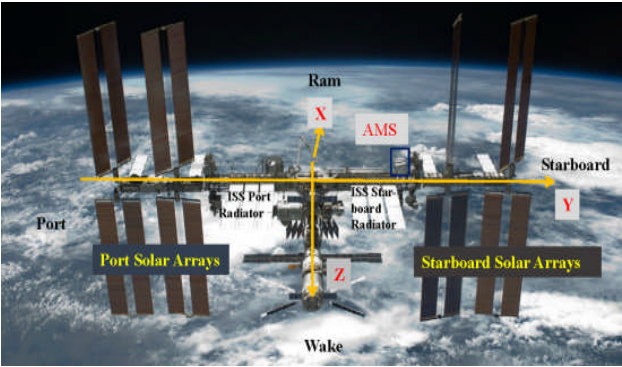


图 1 安装在 ISS 上的 AMS

现有的热数据分析主要集中在长期平均温度变化和极端温度条件预防^[4-8]。事实上, AMS 海量的运行热数据为研究单一因素对热环境的影响提供了高精度数据支撑。

AMS 安装在国际空间站之前的 TCS 研究, 主要集中在热设计和地面测试, 以确保其在低轨轨道上的顺利运行^[9-11]。AMS 安装在 ISS 之后, TCS 经受住了空间热环境的严峻考验, 也面临一些极端条件。为了应对热环境的某些变化, 也采取了相应的措施, 如:

布置热毯或通过打开/关闭加热器,满足相关热控制的要求。海量在轨运行热数据分析为准确描述 AMS 热环境和影响因素、建立相应热控模型及策略提供了必要支持。

AMS 主散热器安装在 AMS 最外层,直接面向轨道热环境,主辐射器状态和响应特性对于了解轨道热环境特征非常重要。Molina et al.^[11]分析了 RAM 侧和 WAKE 侧主散热器的基本设计,包括热管布局和加热器片布置。Wang et al.^[5,12]分析了温度随 β 角变化的趋势,根据遥测数据探讨了 AMS 主散热器的温度波动情况,分析了温度警报情况及 ISS 操纵对 AMS 温度的影响。Cui et al.^[13]总结了由 β 角、ISS 姿态、ISS 太阳能板阵列及其右舷主散热器对 AMS 热环境的影响。Zheng et al.^[4,6]通过遥测数据系统研究了 ISS 典型操作和热毯对 AMS 主要部件的影响。Xie et al.^[14]根据模拟,计算了 AMS 主散热器的外部热通量密度。Zheng et al.^[15]数值研究了不同 ISS 姿态下 RAM 侧和 WAKE 侧主散热器的外部热通量和温度响应特性,总结了高温异常发生情况,数据显示在 ISS 典型操作下的高温异常发生概率可达 42.0%。

实际轨道热环境复杂,许多因素会影响相关热控制模型的准确性。其中,太阳总辐照(Total Solar Irradiance, TSI)和地球红外辐射是关键因素,二者均不是常数。在太阳公转轨道近日点和远日点,TSI 差异很大,一年四季地表温度有很大不同。C.A et al.^[16]评估了太阳常数,研究了它与太阳活动的关系,建立了太阳辐照度模型,提出了修正的太阳常数值。Qi et al.^[17]计算了 ISS 按照+XVV 飞行时 AMS 接收的地球红外辐射,发现地球红外辐射在极端 β 角区域占比较大。以 ISS 运行在 370 公里高度为例, RAM 侧主散热器在 $\beta=-75^\circ$ 时,地球红外辐射在外部热通量占比可达 80.1%, WAKE 侧主散热器在 $\beta=75^\circ$ 时,地球红外辐射可占 68.3%。航天器吸收太阳辐射由 TSI 及其组件遮挡效应决定,而 TSI 随轨道位置不同而有很大差异;实际计算中,地球红外辐射强度也与 TSI 有相关性。

通常情况,ISS 太阳能阵列为自动追踪阳光模式,在轨运行的 AMS 主散热板采用热管被动热控及电加热主动热控等方式参与温度调节,温度传感器每分钟记录一次数据。本文基于海量遥测数据,通过 AMS 主散热器的温度变化特性,研究了轨道位置对主散热器温度波动的影响,为相应热控策略的建立提供了相应参考。

1 AMS 热环境

1.1 β 角

β 角为太阳光照矢量和 ISS 轨道平面之间的夹角,是决定 AMS 上太阳光照方向的关键参数。 β 角的值每年在 $(-75^\circ, +75^\circ)$ 范围周期变化,极值与地球绕太阳公转有关,其中,最小值出现在 1 月份,最大值出现在 6 月份,如图 2 所示。

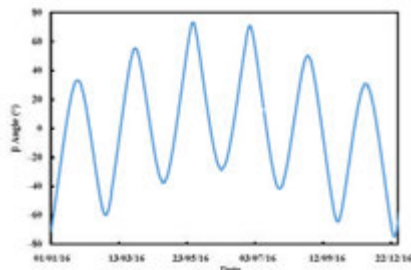


图 2 β 角在一年中的变化情况

1.2 热平衡方程

根据能量守恒定律, AMS 在轨运行的热平衡方程表达如下:

$$Q_{\text{solar}} + Q_{\text{alb}} + Q_{\text{IR(earth)}} + Q_p = Q_{\text{diss}} + Q_{\text{inter}} \quad (1)$$

其中, Q_{solar} 为太阳辐射能, Q_{alb} 为地球反射的太阳辐射能, $Q_{\text{IR(earth)}}$ 是地球红外辐射能, Q_p 是内部热耗率, Q_{diss} 是向空间的散热, Q_{inter} 热增量, 以上单位均为 W。

对于 AMS 主散热器, 每个温度传感器(节点)的热平衡关系可用式(2)表示, 节点示意如图 3 所示。

$$(cm)_j \frac{dT_j}{d\tau} = \sum_{i=1}^l R_{i,j} \sigma (T_i^4 - T_j^4) + \sum_{i=1}^n D_{i,j} (T_j - T_i) + Q_{sj} + Q_{pj} \quad (2)$$

其中, $(cm)_j$ 指节点 j 的热容量, 单位 J/K, l 是与节点 j 相关的辐射换热的节点数, i 是与节点 j 进行辐射换热的最近的节点, σ 是玻尔兹曼常数, $R_{i,j}$ 是辐射传导率, T_i 和 T_j 是节点 i 和节点 j 的温度, n 是与节点 i 进行热量交换的节点数量, $D_{i,j}$ 是节点 i 和节点 j 间的热导率, Q_{sj} 表示节点 j 吸收的外部热通量, 单位 W, Q_{pj} 是节点 j 的热耗散量, 单位 W。

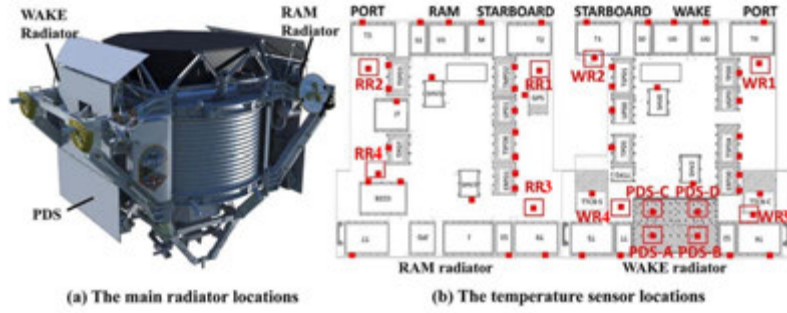


图 3 温度节点示意

外部热通量 Q_{sj} 包括三部分^[18,19]:

$$\begin{cases} Q_{\text{solar}} = \alpha_s S A X_s \\ Q_{\text{alb}} = a \alpha_s S A X_a \\ Q_{\text{IR(earth)}} = \alpha_r E A X_r \end{cases} \quad (3)$$

其中, α_s 是太阳吸收比, a 地球发射率(0.3), S 是太阳辐照, 在 $1304 \text{ W/m}^2 \sim 1398 \text{ W/m}^2$ 范围变化^[20], 如图 4 所示, A 是主散热器的表面积, 单位 m^2 , E 是地球红外辐射强度, 其值在 $228.2 \text{ W/m}^2 \sim 244.7 \text{ W/m}^2$, 可通过公式(4)计算。 X_s 、 X_r 、 X_a 分别是太阳辐射角系数、地球红外辐射角系数、地球反射太阳辐射角系数。

$$E = \frac{1 - \alpha}{4} S \quad (4)$$

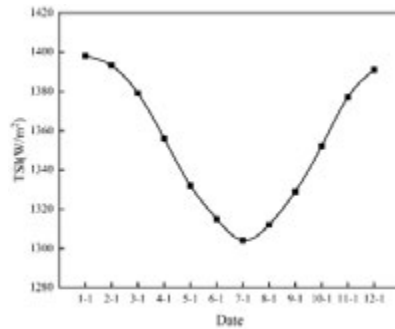


图 4 太阳总辐照在一年中变化

以上热平衡分析，旨在表明 AMS 主散热器温度测点相应位置及主要影响因素。

1.3 ISS 运行轨道

ISS 的轨道倾角为 51.5° ，其绕地运行覆盖的地球纬度范围为 $(-60^\circ, +60^\circ)$ ，如图 5 所示。由于地球不同纬度的地面辐射特性不同，AMS 接收的地球红外辐射易受 ISS 运行纬度变化的影响。分析 AMS 在单个轨道周期内的温度变化情况，可呈现这种特征。

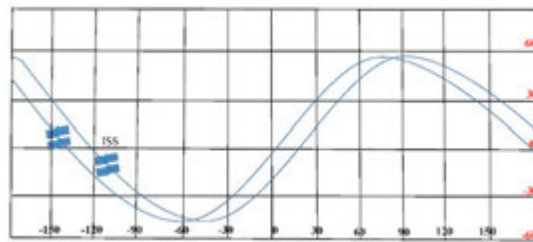


图 5 ISS 近地轨道运行示意

由于主散热器特定结构和材料特性，RAM 侧主散热器和 WAKE 侧主散热器可以看作具有独立等效热容的部件，其值可有以下式计算：

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta T} \quad (5)$$

其中， C 是 AMS 主散热器的等效热容，单位 J/K， ΔQ 指热通量的变化，单位 J， ΔT 指温度变化，单位 K。在 ISS 没有进行特殊操作时， ΔQ 和 ΔT 由太阳总辐照度和地球红外辐射强度决定。

由于地球自转引起的太阳辐照变化也会导致温度异常的发生。AMS 的 RAM 侧主散热器和 WAKE 侧主散热器允许的温度范围汇总在表 1 中。

表 1 AMS 主散热器和 PDS 允许温度

Table 1 The permitted temperature of AMS main radiators and PDS

位置	传感器	警告限值		报警限值	
		低($^\circ\text{C}$)	高($^\circ\text{C}$)	低($^\circ\text{C}$)	高($^\circ\text{C}$)
RAM 主散热器	RR1~RR4	-15	45	-20	50
WAKE 主散热器	WR1~WR4	-15	45	-20	50
配电系统(PDS)	PDS-A~PDS-D	-20	43	-25	48

2 讨论

2.1 轨道位置相同的情况

本节分析了 AMS 主散热器在地球公转轨道相同位置上不同年份的轨道平均温差。选取 2011 年至 2020 年每年 5 月的一天的遥测热数据，选取相同 β 范围进行分析。

通过传感器实测数据，分析地球公转轨道单一因素影响的 AMS 主散热器平均温差逐年变化，如图 6 所示，主散热器的温度每年都有很大波动。选择一定 β 范围(-1.5°, 3.0°)，反映了太阳光照矢量和 ISS 轨道平面近似平行的情况，分析一天平均温度，长时间周期内温度差异巨大。一般情况，随着时间推移，每个温度传感器的温差由太阳辐照引起，客观证明了太阳辐照不是一个常数。此外，不同传感器的温度变化不同，主要原因是与温度传感器位置及电加热片布置有关。2011 年至 2020 年 5 月某一天，RR2、RR4、WR1 和 PDS-B 最大温差分别为 2.0°C、1.2°C、6.06°C 和 4.08°C。

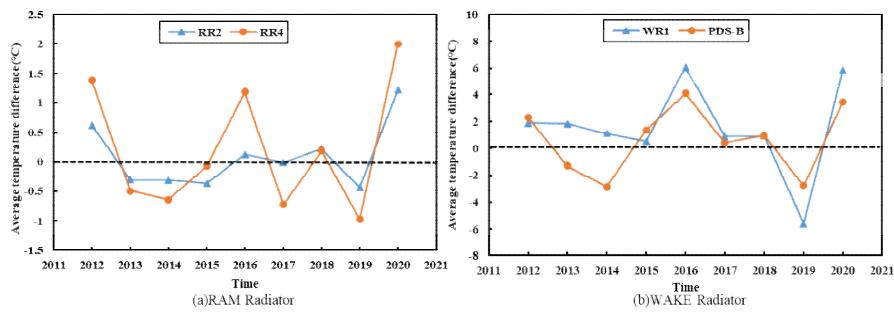


图 6 主散热器测点平均温度逐年变化（给定 β 角范围、地球公转位置）

以上分析显示，RAM 侧和 WAKE 侧主散热器的测点平均温度具有一致的趋势，客观的反映了太阳总辐照在长周期时间的波动特征。

2.2 轨道位置不同的情况

2.2.1 β 角极值的情况

由图 2 所知，当 ISS 绕地球旋转， β 角的极值出现在近日点和远日点。本节通过分析近年来 AMS 主散热器温度随 β 角变化情况，研究 β 角极值对温度的影响，如图 7 所示。可以看出，当 $\beta = -75^\circ$ 时，AMS 温度高于当 $\beta = +75^\circ$ 时的温度，因为 $\beta = -75^\circ$ 时，太阳照射 ISS 右舷， $\beta = +75^\circ$ 时，ISS 太阳能板阵列要锁定一段时间，防止被连续照射。而在 β 角在某个值时呈现的温度波动往往与运行轨道参数的变化有关。

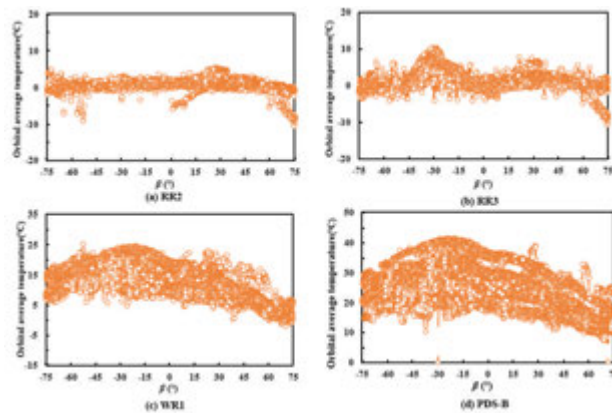


图 7 轨道平均温度随 β 角变化情况

2.2.2 相同的 β 角

取一整年为例(2019 年), AMS 分别在一月和六月到达近日点和远日点。太阳辐照达到相应极值,是一年内的极端工况,此时地球红外辐射差别很大。有必要分析温度波动范围,以便采取有效措施应对可能出现的温度异常。

如图 8 所示, β 角在(-18°C,-24°C)范围时分别取 2019 年 1 月 1 日和 6 月 12 日 RR1 传感器的数据进行分析,温度波动范围分别为(-3.8°C,7.9°C)和(-5.5°C,4.5°C),其平均温差为 2.5°C。对于 RR3 温度传感器,在以上相同工况及时间段测得的温度波动范围分别为(-0.5°C,21.0°C)和(-4.1°C,16.2°C),其平均温差为 4.2°C。可以看出, RAM 侧主散热器的温度变化在运行范围,没有出现温度异常。

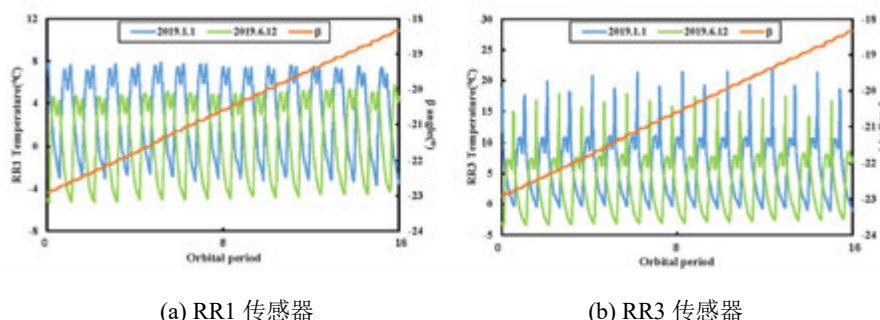


图 8 RAM 侧主散热器测点温度变化

如图 9 所示,取相同工况及时间(2019 年 1 月 1 日、6 月 12 日)分析 WR3 温度数据,波动范围分别为(19.5°C,38.5°C)和(14.2°C,31.6°C)。近日点太阳辐照对主散热器温度影响明显大于远日点。此外,由于 PDS 散热较大,PDS-D 温度超过了 2019 年 1 月高温警戒线,同时太阳辐射和地球红外辐射增加使高温达 45.0°C。此时,建议将 ISS 左舷和右舷太阳能板阵列锁定一段时间,在满足 ISS 相关任务前提下关闭高温报警区域的电加热器并调整配电,以解决高温异常情况。在 6 月 12 日,PDS-D 温度仅在(34.5°C,39.5°C)范围波动,未出现温度异常。

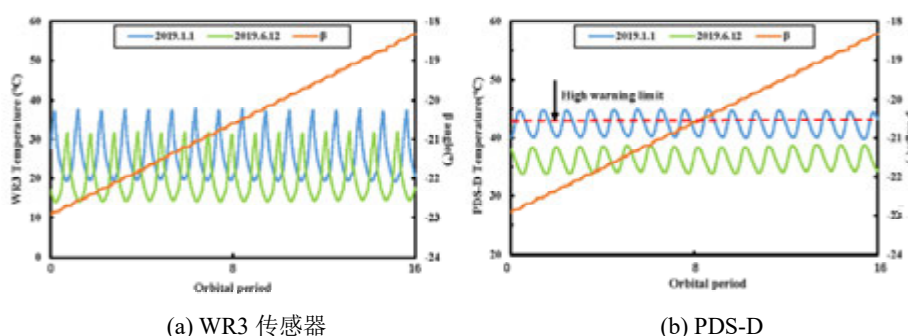


图 9 WAKE 侧主散热器测点温度变化情况

传感器温度波动情况与其位置密切相关。为了解 AMS 主散热器的温度分布,找到温度较高或较低且随季节变化剧烈区域,图 10 和图 11 分别给出了 2019 年 1 月 1 日和 6 月 12 日 AMS 主散热器温度场情况,可得季节变化引起的温度变化和温度梯度情况。温度数据来源于 AMS 实测数据,对应温度测点位置参考图 3(b)所示。

图 10 给出了 AMS 位于近日点时,主散热板温度场情况,其中,太阳常数最大 1398W/m²,地球红外辐射强度最大 244.7W/m²。研究发现,由于存在大功率电子箱 TMPD2, RAM 散热器左侧温度水平低于右侧,如图 10(a)所示。WAKE 侧主散热器除配

电箱 PDS 呈现高温区域，使 WAKE 侧主散热器底部具有较大温度梯度，其他区域温度场更均匀，如图 10(b)所示。

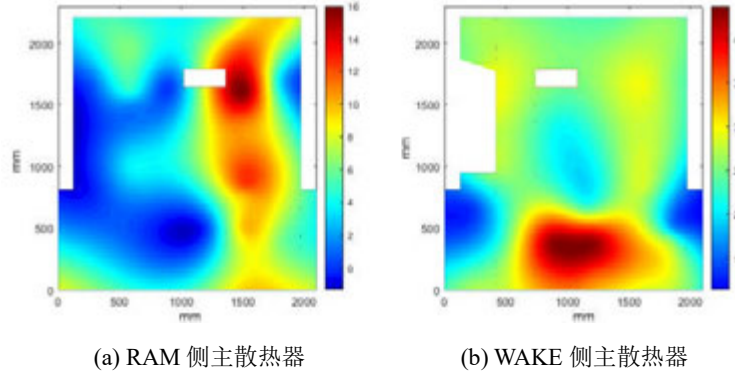


图 10 主散热板温度场（2019 年 1 月 1 日）

图 11 给出了 AMS 位于远日点时主散热器温度场情况。其中，太阳常数最小 1304W/m^2 ，地球红外辐射强度最小 228.2W/m^2 。结果表明，主散热板最高温处为 35.6°C ，并且 6 月 12 日的温度水平明显低于 1 月 1 日温度水平。由于主散热器结构及其传热特性的原因，1 月 1 日与 6 月 12 日两个时间的主散热板温度场分布具有相似性。

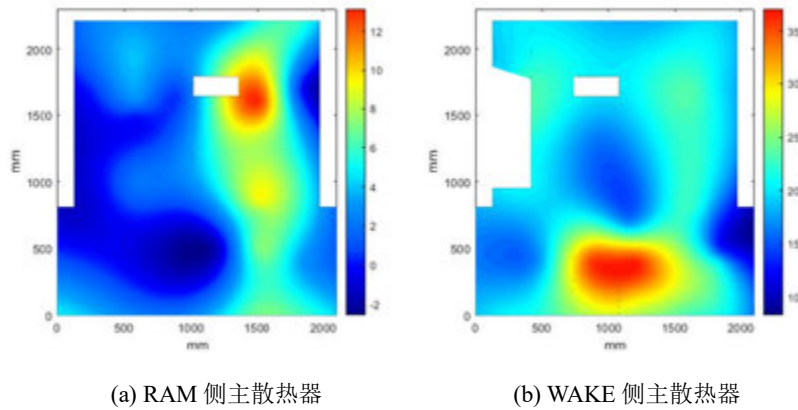


图 11 主散热器温度场（2019 年 6 月 12 日）

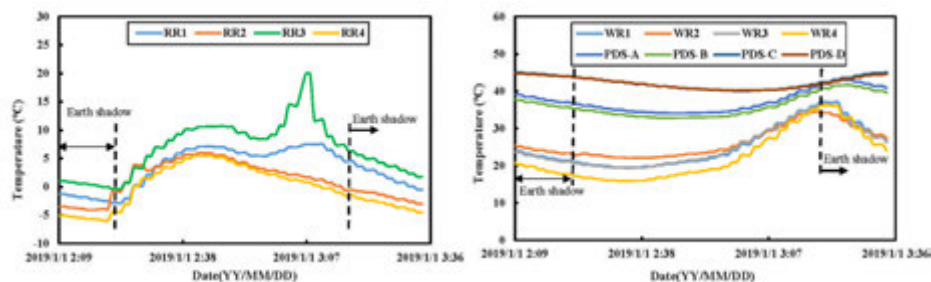
从图 10 和图 11 可以看出，在 1 月 1 日和 6 月 12 日，由于地球公转位置变化，最大的温差出现在 RAM 侧主散热器中上部，为 5.1°C ，以及 WAKE 侧主散热器左上部、右上部和底部，为 10.2°C 。综上，由于太阳辐照随地球公转位置变化，一年内会造成 WAKE 侧主散热器相应位置最大 10.2°C 的温差。

2.3 ISS 运行轨道与地球相对位置的影响

本节分析了 AMS 跟随 ISS 飞行时，RAM 侧和 WAKE 侧主散热器温度随 ISS 与地球相对位置的变化情况。选择 $\beta = -23^\circ$ 且 ISS 没有典型操作下，以 2019 年 1 月 1 日发生的一个单轨道周期的温度数据进行分析。结果表明，RAM 侧散热器和 WAKE 侧主散热器温度数据呈现相似的变化趋势。如图 12 所示，在本文研究范围，RR1-RR4 传感器和 WR1-WR4 传感器的温度呈现先下降，后上升，再下降的趋势。这一现象是由于地球红外辐射随地球纬度变化和地球阴影的存在而产生。RR3 传感器于 2019 年 1 月 1 日 3 时 07 分达到最高温度 20.1°C 。这是因为太阳通过两个太阳能电池阵列之间的缝隙照射到

RR3 传感器所在位置，导致该位置温度急剧上升。随着 ISS 运行，太阳光被太阳能电池阵列阻挡，RR3 的温度再次开始下降。

由于 ISS 轨道倾角的原因，AMS 跟随 ISS 绕地球运行过程，其覆盖的地球纬度范围在 -60° 至 $+60^{\circ}$ 之间，一个轨道周期后半部分的温度下降是由于 ISS 进入地球阴影的原因，如图 12 所示，其中，图 12(a)反映了 RAM 侧主散热器相应测点温度变化情况，图 12(b)反映了 WAKE 侧主散热器相应测点温度变化情况。

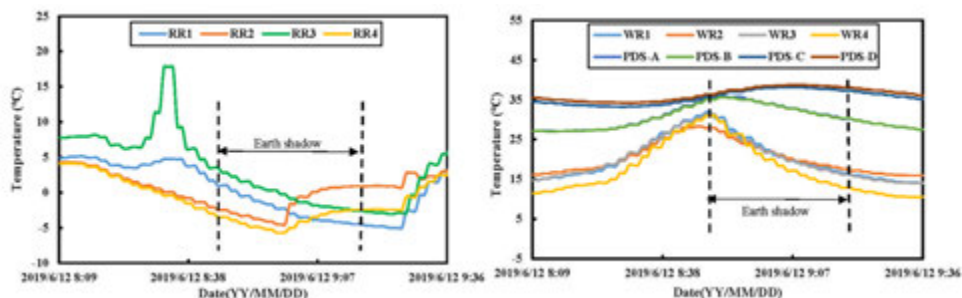


(a) RAM 侧主散热器

(b) WAKE 侧主散热器

图 12 一个轨道周期内温度变化情况（2019 年 1 月 1 日）

与 1 月 1 日 AMS 主散热器温度波动比较，6 月 12 日的温度波动有一定的相位差，如图 13 所示，其中，图 13(a)反映了 RAM 侧主散热器相应测点温度变化情况，图 13(b)反映了 WAKE 侧主散热器相应测点温度变化情况。在一个轨道周期的两个时间点上，温度变化规律相同。当 ISS 处于地球阴影下时，AMS 主散热器的外部热辐射仅来自地球红外辐射。此时，ISS 纬度从 -60° 到 $+60^{\circ}$ 不等，ISS 进入了周期的后半部分，地球红外辐射总体上随着地球纬度增加而减少。



(a) RAM 侧主散热器

(b) WAKE 侧主散热器

图 13 在一个轨道周期内温度变化（2019 年 6 月 12 日）

3 结论

本文基于 AMS 海量遥测热数据研究了轨道位置对 AMS 主散热板温度变化的影响，进一步了解了低地球轨道热环境。此外，针对太阳辐照引起的温度异常进行研究，提出了相应的控制方案，以保证运行温度在允许范围内。结论如下：

(1) 在轨运行的 AMS 海量热数据分析可以说明，太阳总辐照每年都会发生变化，进而对轨道热环境产生影响。本文研究工况条件下，相同轨道位置上由太阳总辐照引起的最大温差为 6.06°C 。

(2) 本文研究范围，以一年为研究周期，远日点处 WAKE 侧主散热器最大温差可达 10.2°C 。不同轨道位置可能导致 PDS 高温异常，当 ISS 位于近日点时，可通过锁定左舷、右舷太阳能阵列和调整电源分配以避免温度异常。分析 ISS 单个轨道周期内 AMS 主散

热器测点温度变化的规律。结果表明，在 ISS 运行过程中，地球红外辐射随地球纬度的增加而减小。

以上研究给出了某些单一因素对 AMS 热环境的影响分析，对 AMS 的安全稳定运行具有重要意义，可为其他空间实验提供参考。

参考文献

- [1] F. Barao, AMS—Alpha Magnetic Spectrometer on the International Space Station, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 535 (2004) 134-138. [https://doi.org/10.1016/s0168-9002\(04\)01588-8](https://doi.org/10.1016/s0168-9002(04)01588-8).
- [2] N. Tomassetti, AMS-02 in space: physics results, overview, and challenges, *Nuclear and Particle Physics Proceedings*, 265-266 (2015) 245-247. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysbps.2015.06.063>.
- [3] R. Battiston, The alpha magnetic spectrometer (AMS), *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 409 (1998) 458-463. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(98\)00126-0](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0168-9002(98)00126-0).
- [4] C. Zheng, Q. Sun, J. Song, L. Cheng, Temperature response characteristics of the thermal control system of alpha magnetic spectrometer under the operations of international space station, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 929 (2019) 66-75. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.03.024>.
- [5] K. Wang, J. Li, Z. Cui, N. Wang, Q. Sun, L. Cheng, Operations of the thermal control system for Alpha Magnetic Spectrometer electronics following the beta angle of the International Space Station, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 767 (2014) 235-244. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2014.08.010>.
- [6] C. Zheng, J. Fu, J. Qi, J. Song, L. Cheng, Investigation on the performance of the thermal blanket on the Transition Radiation Detector gas system of Alpha Magnetic Spectrometer, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 949 (2020) 162912. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.162912>.
- [7] Z. Cui, N. Wang, K. Wang, L. Cheng, Effects of the thermal environment on the thermal control system of AMS, *Science China Technological Sciences*, 58 (2014) 526-533. <https://doi.org/10.1007/s11431-014-5673-3>.
- [8] S.J. Zheng C, Cheng L., Investigations on the thermal condition of the Alpha Magnetic Spectrometer on the International Space Station during the maneuver of locking solar arrays., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 910 (2018) 96-105. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2018.08.097>.
- [9] Z. Zhang, X.H. Sun, G.N. Tong, Z.C. Huang, Z.H. He, A. Pauw, J. van Es, R. Battiston, S. Borsini, E. Laudi, B. Verlaat, C. Gargiulo, Stable and self-adaptive performance of mechanically pumped CO2 two-phase loops for AMS-02 tracker thermal control in vacuum, *Applied Thermal Engineering*, 31 (2011) 3783-3791. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2011.07.015>.
- [10] N. Wang, B. Joseph, L. Cheng, Design and experimental study of thermal control system for AMS cryocoolers, *Chinese Science Bulletin*, 58 (2013) 1200-1204. <https://doi.org/10.1007/s11434-013-5704-7>.
- [11] M. Molina, C. Vettore, M. Cova, Progress in the Alpha Magnetic Spectrometer (AMS-02) Thermal Control System (TCS) Design, Operations Scenarios and Verification Approach, *International Conference*

On Environmental Systems, 2005.

- [12]K. Wang, Q. Sun, L. Song, Z. Cui, N. Wang, L. Cheng, Investigations on the temperature warnings of the Alpha Magnetic Spectrometer on the International Space Station, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 791 (2015) 69-79. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2015.04.021>.
- [13]Z. Cui, F. Luo, N. Wang, L. Cheng, Thermal control system of Alpha Magnetic Spectrometer, Science China Technological Sciences, 56 (2013) 2553-2562. <https://doi.org/10.1007/s11431-013-5350-y>.
- [14]M. Xie, J. Gao, S. Wu, Y. Qin, Thermal conditions on the International Space Station: Heat flux and temperature investigation of main radiators for the Alpha Magnetic Spectrometer, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 830 (2016) 13-21. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.05.048>.
- [15]C. Zheng, J. Qi, J. Fu, J. Song, L. Cheng, Thermal analysis on Alpha Magnetic Spectrometer main radiators under the flight attitude adjustment of International Space Station, Applied Thermal Engineering, 164 (2020) 114457. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2019.114457>.
- [16]C.A. Gueymard, A reevaluation of the solar constant based on a 42-year total solar irradiance time series and a reconciliation of spaceborne observations, Solar Energy, 168 (2018) 2-9. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2018.04.001>.
- [17]J. Qi, C. Zheng, J. Song, Numerical investigation on the impact of locking solar arrays of the International Space Station on the thermal system of Alpha Magnetic Spectrometer, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 978 (2020) 164443. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2020.164443>.
- [18]J.A. Foster, G.S. Aglietti, The thermal environment encountered in space by a multifunctional solar array, Aerospace Science and Technology, 14 (2010) 213-219. <https://doi.org/10.1016/j.ast.2009.12.008>.
- [19]J. Li, S. Yan, R. Cai, Thermal analysis of composite solar array subjected to space heat flux, Aerospace Science and Technology, 27 (2013) 84-94. <https://doi.org/10.1016/j.ast.2012.06.010>.
- [20]T. Liu, Q. Sun, J. Meng, Z. Pan, Y. Tang, Degradation modeling of satellite thermal control coatings in a low earth orbit environment, Solar Energy, 139 (2016) 467-474. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2016.10.031>.

货物分布对风幕冷藏陈列柜的性能影响研究

刘圣春, 张钟垚, 刘欢, 郑洋, 李雪强*

(天津商业大学天津市制冷技术重点实验室, 天津市, 300134)

(Tel: 18902099200, Email: xqli@tjcu.edu.cn)

摘要: 冷藏陈列柜是商超设备中的重要组成之一, 但其开放的货物陈列方式导致能耗较高。现有的研究集中于如何降低陈列柜热负荷, 但忽略了货物数量变化对陈列柜性能的影响。本文通过数值模拟研究了不同货物摆放方式下陈列柜的性能波动, 利用前侧挡风板、均风板、孔隙率、翼型结构优化陈列柜, 优化后的换热量、平均温度和均温性均值和方差分别降低 97W/436W、1.51°C/0.08°C、0.14°C/0.69°C。并对优化方案进行了通用性分析, 其研究成果可应用于其他型号的陈列柜。

关键词: 冷藏陈列柜, 数值模拟, 结构优化, 性能分析。

0 前言

中国冷链物流企业快速健康发展, 相应的终端产品、商业超市、餐饮冷冻冷藏等对冷链物流的需求持续增加^[1]。作为食品冷链物流产业线的终端环节, 商用冷藏设备在冷链物流行业的需求持续增加。

商用冷藏陈列柜位于食品冷链的末端环节^[2], 冷藏陈列柜安置于大型商业超市内, 用于食品销售、陈列环节^[3]。冷藏陈列柜是具有独立制冷系统的展示柜, 内部保存食品需维持在指定温度内, 进行冷冻和冷藏, 同时对其展示性能存在较高的要求。冷藏陈列柜再满足顾客购物需求的同时, 由于其开放的货物陈列方式, 导致冷藏陈列柜始终面对着能耗较高的问题。

通常, 降低冷藏陈列柜能耗的方法是在货架外侧设置风幕, 利用风幕来减少冷热空气的混合, 保持货架内部低温环境的同时阻止外部空气的渗透, 以此降低热负荷并减少能耗。目前的研究集中于通过风幕与柜体结构的优化进而提高冷藏陈列柜性能。Wu 等^[4]通过数值模拟研究发现, 陈列柜后壁开孔孔隙率为 3%时的货物温差比孔隙率为 0%时降低 2°C。Sun 等^[5]发现在冷藏陈列柜中, 冷空气向下流动容易受到周围横向气流的影响, 通过数值模拟方案, 采用导风条对风幕进行保护。结果发现, 导风条对气幕有垂直加速作用, 可以形成更坚固的气幕从而抑制周围环境热空气的侵入, 进而提高陈列柜性能。

通过调研发现, 现有研究通常将货物设为满负载状态进行陈列柜性能分析, 但 Faramarzi 等^[6]的研究指出, 冷藏陈列柜产品货物数量的变化主要影响冷负荷。经过对比

发现，半负荷货物能达到最小风幕冷负荷，其中风幕冷负荷仅为 350W；而当货物为满载时，风幕冷负荷为 500W^[7]。一部分学者基于货物空载时研究内部性能变化。结果发现风幕总体的长宽比、出风口角度和机柜主体的高宽比都会影响风幕的稳定性。较小的风幕长/宽比使风幕夹带率减小，内部温度分布均匀和密封能力得到改善。空气幕向外排放有利于密封的稳定性。当出口角度角在 15-20°范围内时，空气幕的性能最优^[8]。同时，货物的摆放直接影响了后壁开孔流出的冷空气的流动状态，若不进行合理的优化，从货架内横向流出的气流将干扰货架外风幕的质量。

综上所述，有必要对陈列柜内货物的数量及其摆放对陈列柜的性能进行研究分析。本文基于数值模拟方案,分析不同的货物摆放方案对陈列柜风幕结构及整体性能的影响，并在此基础上优化其陈列柜结构参数，以获得在各货物数量及摆放方式下性能变化最小的陈列柜结构参数。

1 建模及分析方法

1.1 几何模型

如图 1（a）所示，陈列柜运行时底部风扇将空气吸入蒸发器内部，经由蒸发器降低温度为冷空气，后分为两部分，一部分冷空气由出口吹出与进口处共同作用形成风幕，保护内部制冷环境；一部分由后背板吹出并与内部货物换热，降低内部货物温度。实验测试环境按照 ISO 23953^[9]进行，同时保持模拟时计算域大小与之相同，如图 1（b）所示。

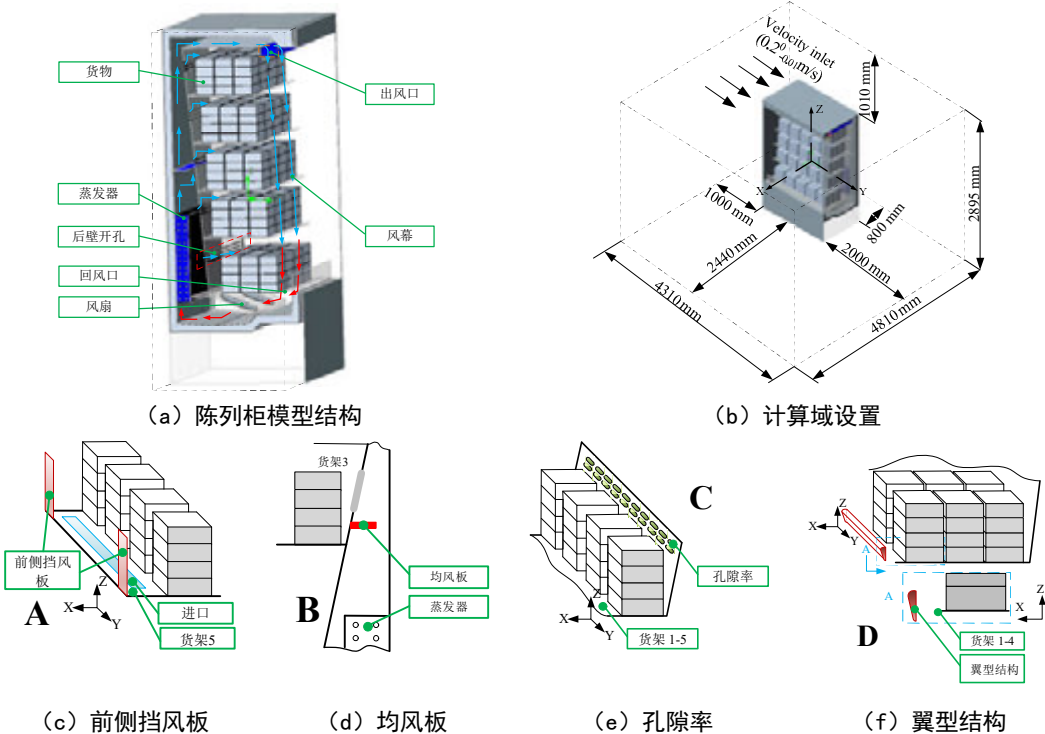


图 1 模拟模型结构

表 1 冷藏陈列柜细节参数

为通过优化陈列柜结构进而降低货物摆放位置对陈列柜性能的影响，增加三种结构并进行优化，如图 1（c-d）所示。前侧挡风板可以防止周围空气的侵入，维持内部制冷环境，降低平均温度和温度均匀性。后背板孔隙率的变化可以调节后背板与出口之间的流量，同时也会影响换热量、平均温度和温度均匀性。均风板会改变五层后背板和出口处冷空气的流量分配。陈列柜的详细参数如表 1 所示。

名称	参数	数值
冷藏陈列柜	W×L×H（mm×mm×mm）	986 × 770 × 2000
	出口（W×L）（mm×mm）	914.6 × 50
	进口（W×L）（mm×mm）	914.6 × 29
	孔隙率（%）	3.47
货物	W×L×H（mm×mm×mm）	75 × 90 × 40
	密度（kg/m ³ ）	1050
	比热（J/kg·K）	3170
	热导率（W/m·K）	0.7
	单层货架内数量（层×列）	2×3
前侧挡风板	W×L（mm×mm）	60-100 × 400-600
均风板	W×L（mm×mm）	5-25 × 60-80
孔隙率	/	0%-3%
翼型结构	H（mm）	80

本文对不同的货物摆放方式与数量进行了模拟研究，对比各模型在不同货物摆放方式下的陈列柜性能参数的均值与方差。并将无前侧挡风板、均风板和后壁开孔的模型作为原始模型，对比获得性能最佳的优化结构。其货物摆放方式如表 2 所示。

表 2 货物排布方案

货物安排	计算公式	数量
单层	$C_3^3 + C_3^2 + C_3^1 + C_3^0$	8
双层且上层有一列	$C_3^1 + C_3^2 \times C_2^1 + C_3^3 \times C_1^1$	12
双层且上层有两列	$C_3^2 \times C_2^2 + C_3^3 \times C_2^2$	6
双层且上层有三列	C_3^3	1
满载	/	1
空载	/	1
共计	/	29

1.2 控制方程

本文使用 Creo 建立几何模型并使用 FloEFD 软件求解传热传质过程，FloEFD 其优越性与特点在于：计算迭代速度快、网格自适应求解，自动划分固体和流体区域网格，并可对模型结构细小位置进行局部网格加密。求解时其内部的连续性方程如下所示：

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

其中， u 、 v 和 w 分别是方向 x 、 y 和 z 的速度。

动量守恒方程^[10]:

$$\rho \left(\frac{D\vec{V}}{Dt} \right) = \rho g - \nabla P + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (2)$$

其中， ρ 、 g 、 P 和 μ 分别是密度、重力加速度、压力和动态粘度。采用 k - ε 湍流模型求解动量方程。

能量守恒方程^[10]:

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v T)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w T)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3)$$

其中， T 、 k 和 c_p 分别是温度、流体的传热系数和比热容。

1.3 边界条件与模型验证

在模拟中，忽略空气湿度和水汽相变化引起的潜热对温度场和速度场的影响；采用有限体积方法求解控制方程，网格在空间区域内采用笛卡尔坐标系进行离散，不考虑辐射效应。详细的边界条件如表 3 所示，并进行了以下假设：

- (1) 蒸发器温度被视为常数，为-6℃；
- (2) 将风扇的结构简化为表面；
- (3) 未考虑辐射传热；

本文的模型验证与网格独立性测试已在之前研究中完成^[10, 11]。

表 3 边界条件

名称	参数	数值
计算域	W×L×H (mm × mm × mm)	4810 × 4310 × 2895
环境参数	速度入口 (m/s)	0.2
	压力出口 (Pa)	101325
	温度 (℃)	25
	湿度 (%)	60
内部风扇	体积流量 (m³/s)	0.08
出口蜂窝网	多孔介质	/
蒸发器	蒸发器温度 (℃)	/
冷藏陈列柜、货物表面	壁面	耦合边界

1.4 评价指标

采用货物的平均温度，均温性，蒸发器换热量对陈列柜性能进行评估，并采用以上指标在不同货物排列方式下的均值与方差评估性能的波动。货架和冷藏陈列柜的平均温度可以通过 FloEFD 软件直接获得。温度均匀性 (T_{un}) 和平均温度 (T_{avg})

冷藏陈列柜的温度均匀性 (T_{un}) 和平均温度 (T_{avg}) 对于货物存储很重要。可以按如下方式计算:

$$T_{un} = \max(T_1, T_2 \dots T_n) - \min(T_1, T_2 \dots T_n) \quad (4)$$

$$T_{avg} = (T_1 + T_2 + \dots + T_n) / n \quad (5)$$

2 结果与讨论

2.1 各优化结构性能

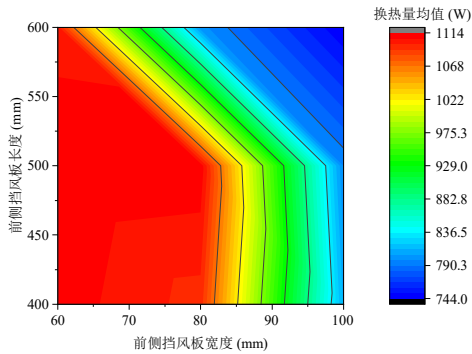
2.1.1 前侧挡风板

如图 2 (a) (b) 所示, 换热量在前侧挡风板宽度较大时, 随着长度的增加, 均值呈现逐渐减小的趋势, 这是由于随着尺寸的增加会减少外部环境空气对于内部制冷环境的破坏。但前侧挡风板宽度较小时无法有效抑制外部环境对内部制冷环境的破坏, 故此时换热量均较大。

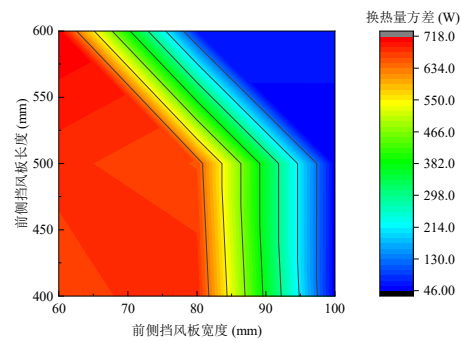
对于平均温度, 如图 2 (c) (d) 所示, 前侧挡风板宽度较小时, 增加长度使均值先减小后增大, 而方差逐渐增大, 这是由于对于货物满载时, 增加长度会使内部平均温度降低, 但对于货物空载来说, 增加长度相当于增加进口处的气流扰动, 外部环境热空气侵入, 造成货架内温度增加, 再此工况下导致方差不断增大; 前侧挡风板宽度较大时趋势与之相反, 这是由于满载时温度较低, 空载时温度先升高后降低, 货物数量不同其内部气流组织泄露处发生改变, 而此时两者的方差也会随之减到最小。

对于均温性, 如图 2 (e) (f) 所示, 当前侧挡风板宽度较小时, 随着长度的增加, 两方案均值呈现先减小后增加的趋势, 而方差则呈现逐渐增加的趋势, 这是由于尺寸的增加会增加内部气流扰动, 导致两方案均值增加; 当前侧挡风板宽度较大时, 随着长度的增加, 两方案均值和最大方差均呈现先增加后减小的趋势, 这说明存在最佳长度使内部均温性方差和均值减少, 处于性能较好的范围; 当前侧挡风板长度较小时, 随着宽度的增加, 两方案均值呈现逐渐增加, 方差存在逐渐减小的趋势。当前侧挡风板长度较大时, 随着宽度的增加, 两方案均值呈现逐渐增加, 方差呈现先增加后减小的趋势。

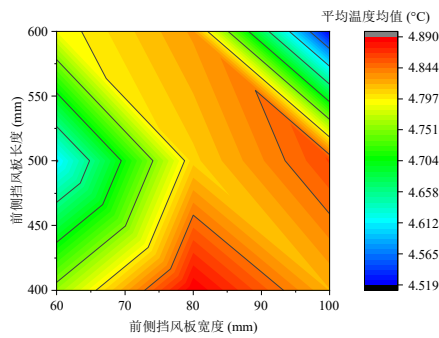
综合三种性能指标, 选取前侧挡风板宽度为 100mm, 高度为 600mm, 此时换热量、平均温度和均温性的均值和方差分别为 744W/68W、4.58°C/0.19°C 和 2.09°C/2.06°C, 进行下一步内部货物数量变化性能分析。



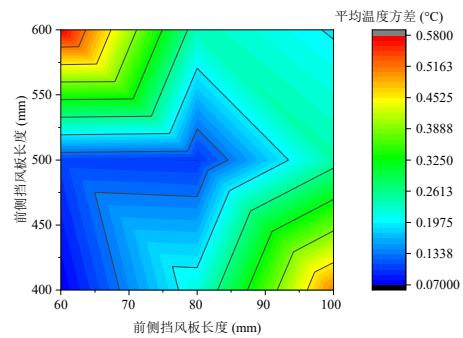
(a) 前侧挡风板尺寸对换热量均值的影响



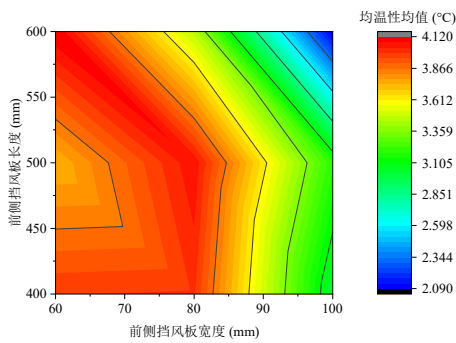
(b) 前侧挡风板尺寸对换热量方差的影响



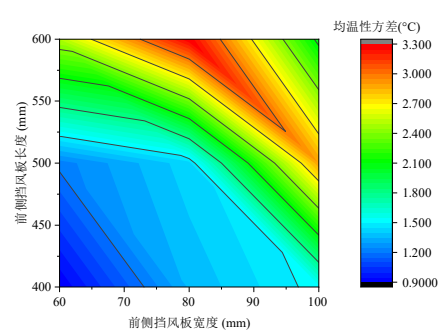
(c) 前侧挡风板尺寸对平均温度均值影响



(d) 前侧挡风板尺寸对平均温度方差影响



(e) 前侧挡风板尺寸对均温性均值的影响

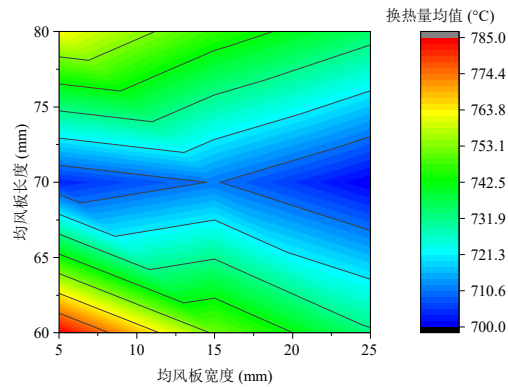


(f) 前侧挡风板尺寸对均温性方差的影响

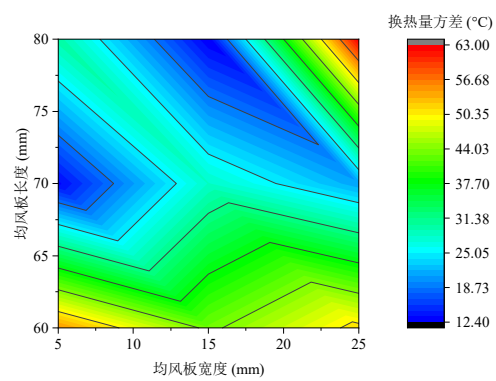
图 2 前侧挡风板性能变化

2.1.2 均风板

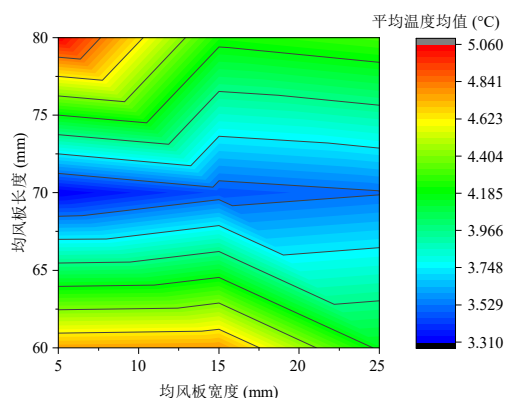
如图 3 所示，均风板宽度不变时，随均风板与第三层货架的距离增加，换热量、平均温度和均温性的均值均呈现先减后增的趋势，这是由于过小的距离将导致流入第三层货架之间内的冷空气减小，使第三层温度整体上升，其均温性也变差，同时由于出风口流量减少导致风幕结构不稳定，进而使换热量增大。而过大的距离将导致出后壁开孔的流量过小，货架内无足够的冷空气对货物降温，同时过大的出风口流量导致风幕冷量流失过多，故换热量、温度、均温性均较高。由于均风板主要影响了陈列柜各位置的流量分布，均风板与第三层货架的距离过大或过小均不同程度的影响了换热量、平均温度和均温性的方差大小。



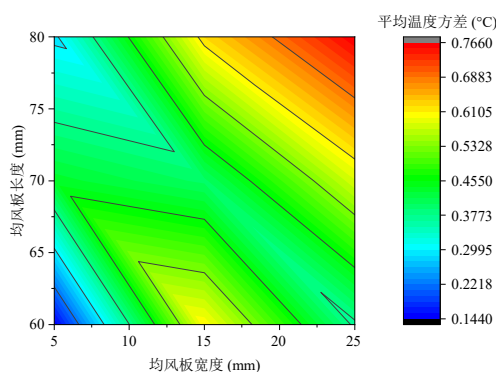
(a) 均风板尺寸变化对换热量均值的影响



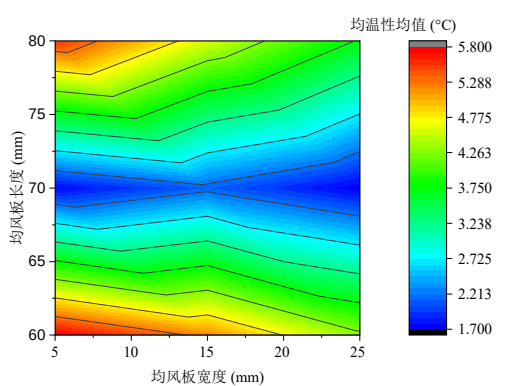
(b) 均风板尺寸变化对换热量方差的影响



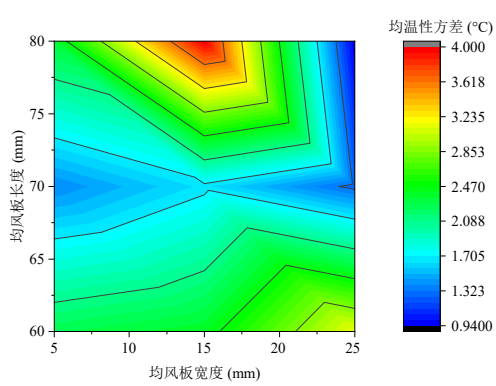
(c) 均风板尺寸变化对平均温度均值的影响



(d) 均风板尺寸变化对平均温度方差的影响



(e) 均风板尺寸变化对均温性均值的影响



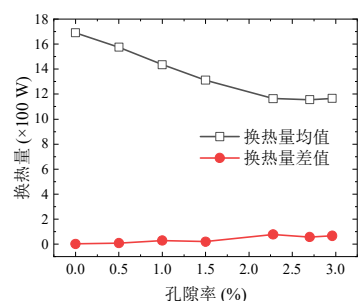
(f) 均风板尺寸变化对均温性方差的影响

图3 均风板性能变化

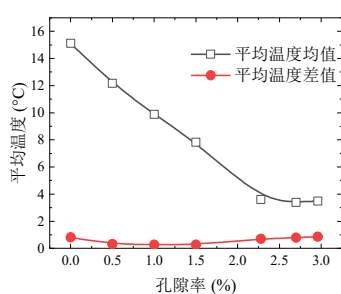
综上所述，结合三种性能指标进行分析，选择均风板长度为 70mm，均风板与第三层货架的距离为 5mm，此时换热量、平均温度和均温性的均值和方差分别为 735W/62.94W、4.318°C/0.77°C 和 3.72°C/0.94°C，进行下一步性能分析。

2.1.3 孔隙率

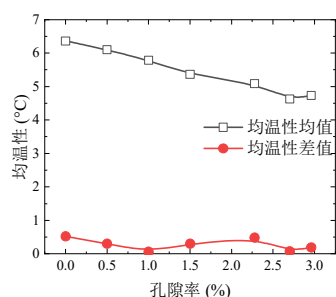
由图 4 可以看出，随着孔隙率的增加，换热量、平均温度和温度均匀性的均值呈现逐渐下降的趋势并且逐渐趋于稳定，而三种性能指标的方差则呈现稳定不变的趋势，经过综合对比选择孔隙率为 2.7%时的方案作为最佳尺寸，此时换热量、平均温度和均温性的均值和方差分别为 1155W/57W、3.39°C/0.79°C 和 4.62°C/0.08°C。



(a) 孔隙率尺寸变化对换热量的影响



(b) 孔隙率变化对平均温度的影响



(c) 孔隙率变化对温度均匀性的影响

图 4 不同孔隙率下性能对比

2.1.4 翼型结构

将翼型结构距离货架长距离与翼型结构高度之间的比值作为变化参数，由下图 5 可以观察到，随着翼型结构比值的增加，换热量、平均温度呈现出相对稳定的趋势，但均温性变化很大，主要是由于翼型结构的使用对气幕只有垂直加速作用，不同翼型结构比值下的冷量泄露与热空气渗透差异较小。但随着翼型结构比值的增大，均温性的均值先减小后增加，且方差先增大后减小，这是由于翼型结构比值增大后风幕流速先增加后减小，增大后的风幕流速将导致风幕中的冷流体不同程度的进入货架内并使温差降低，但由于货物摆放方式的不同，其温差降低差异较大，故方差反而会增大。过大的翼型结构比值对风幕的加速作用迅速减小，故均温性的均值与方差迅速恢复变化至原有状态。为了满足实际应用中的所有不同情况，选择翼型结构比为 0.25，此时换热量、平均温度和均温性的均值和方差分别为 807W/39W、5.03°C/0.013°C 和 3.98°C/1.94°C。

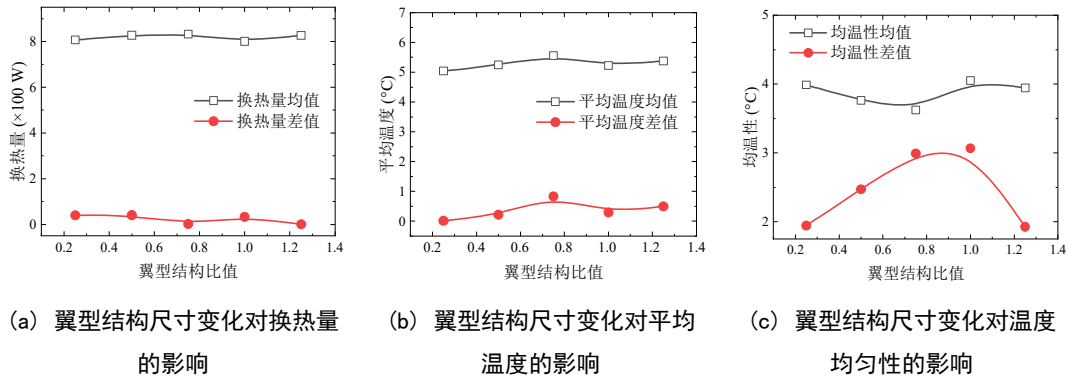


图 5 不同翼型结构比值下性能对比

2.2 不同优化模型性能对比

图 6 为在不同货物摆放方案下，选择以上四种模型与原模型进行对比，可以观察到孔隙率模型较原模型不同货物摆放方案换热量均值急剧增加，但方差减小，这是因为孔隙率模型改变内部气流组织分配的同时损耗了大量冷空气，导致换热量增加。就不同货物摆放方案平均温度柱状图可以观察到，如图 6 (b) 所示孔隙率模型在原模型的基础上降低了内部货物温度。就温度均匀性来说，如图 6 (c) 所示，孔隙率模型与原模型无较大改变。对于前侧挡风板模型，由换热量柱状图可以观察到其均值降低幅度较小，但其模型数据产生极度不稳定的趋势；由平均温度和温度均温性柱状图可以看出，前侧挡风板很好的降低内部货物温度，减少外部环境空气与内部制冷环境中的冷空气混合。对于风道结构模型，不同货物摆放方案换热量的均值和方差均得到了极好的降低。就平均温度和温度均匀性柱状图可以看出，不同货物摆放方案较原模型均呈现降低的效果，这是由于风道结构可以调节后背板与出口之间的流量分配。对于翼型结构模型，不同货物摆放方案则可以观察到换热量、平均温度和温度均匀性无太大变化，甚至不同方案换热量均值超过原方案均值。综合四种改进模型，选择前侧挡风板模型和风道结构模型结合进行下一步分析，对结合后的模型均值和方差较原模型和单一结构模型变化进行探究。

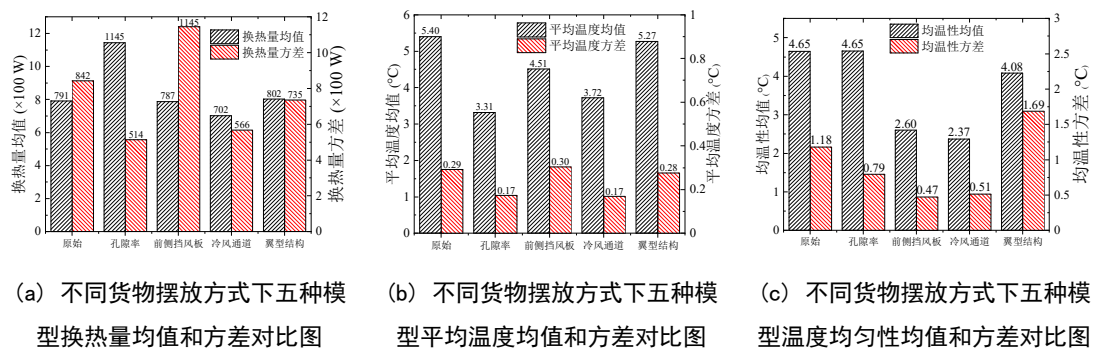


图 6 不同货物摆放方式下五种模型性能对比图

2.3 不同优化模型结合分析

对于结合后的各种模型，由表 4 可得，相较于原模型，在不同结构组合下不同货物摆放方式的方差和均值均呈现不同程度的变化。对两种和三种结构结合后会导致性能指标突增，例如前侧挡风板和风道结构结合后会导致换热量方差从 842 增加到 1291，数据极不稳定。而对于四种模型结合后的均值和方差较原模型均呈现不同程度的降低，换热量、平均温度和均温性均值和方差分别降低 97W/436W、1.51 $^{\circ}\text{C}$ /0.08 $^{\circ}\text{C}$ 、0.14 $^{\circ}\text{C}$ /0.69 $^{\circ}\text{C}$ ，由此可以将四种模型结合后应用于冷藏陈列柜中，降低多种货物摆放方式对性能的影响。

表 4 不同货物摆放方式下模型性能对比

组合结构	均值			方差		
	换热量	平均温度	均温性	换热量	平均温度	均温性
原始模型	791	5.40	4.65	842	0.29	1.18
AB	717	3.65	1.78	1291	0.28	0.11
AC	1170	3.17	3.96	1571	0.16	0.16
AD	817	4.52	2.53	4663	1.30	1.63
BC	1074	2.81	5.64	243	0.24	0.343
BD	728	4.87	4.43	1075	0.32	1.21
CD	785	4.92	5.34	218	0.11	1.36
ABC	1105	2.92	5.290	293	0.20	0.09
ABD	722	4.08	2.81	1785	0.25	0.89
ACD	804	4.70	4.72	719	0.20	2.08
BCD	714	4.45	5.29	612	0.63	1.31
ABCD	694	3.89	4.51	406	0.21	0.49

2.4 通用性分析

为证明该结构的通用性，将结合后的最优结构按比例应用到其他冷藏陈列柜 (SF-250-76-20)，长 $\times$ 宽 $\times$ 高分别为 1800 $\times$ 770 $\times$ 2000。由表 5 所示，优化后的性能指标均呈现不同程度的降低，换热量、平均温度和均温性均值和方差分别降低 203W/1100W、3.32 $^{\circ}\text{C}$ /0.9 $^{\circ}\text{C}$ 、1.56 $^{\circ}\text{C}$ /1.04 $^{\circ}\text{C}$ ，说明该结构可以应用到其他型号的冷藏陈列柜。

表 5 SF-250-76-20 型号冷藏陈列柜性能对比

性能指标	原始均值	原始方差	优化均值	优化方差
换热量 (W)	1389	8593.38	1186.58	7493.47
平均温度 (°C)	10.44	2.59	7.12	1.69
温度均匀性 (°C)	3.17	1.14	1.61	0.11

3 结论

- 本文对不同货物数量及摆放方式对陈列柜性能的影响进行了研究，得出以下结论：
- (1) 不同货物数量及摆放方式对冷藏陈列柜内部性能影响显著，未优化的陈列柜其换热量、平均温度和均温性均值和方差分别为 791W/842W、5.40°C/0.29°C、4.65°C/1.18°C，对前侧挡风板、均风板、后壁开孔孔隙率、翼型结构优化后换热量、平均温度和均温性均值和方差分别降低 97W/436W、1.51°C/0.08°C、0.14°C/0.69°C。
 - (2) 本章研究内容可以证明该结构应用到商业超市冷藏陈列柜，在货物数量动态变化情况下，可以降低相应内部性能变化范围。

参考文献

[1] 许雯, 温佳霖. 浙江省水产品冷链物流需求预测及其影响因素研究. 物流工程与管理, 2023, 45(02): 41-45.

[2] 曾庆辉. 自然冷源食品冷藏陈列柜节能及风幕优化研究: [硕士论文]. 郑州轻工业大学, 2021.

[3] 甄欠, 庞菁男, 杨萍, 等. R290 自携式冷藏陈列柜冷媒泄漏仿真分析. 哈尔滨商业大学学报(自然科学版), 2021, 37(01): 50-59.

[4] X.H. Wu, Z.J. Chang, P. Yuan, et al. The optimization and effect of back panel structure on the performance of refrigerated display cabinet. Food Control, 2014, 40: 2904-2913.

[5] J. Sun, K.M. Tsamos, S.A. Tassou. CFD comparisons of open-type refrigerated display cabinets with/without air guiding strips. Energy Procedia, 2017, 123: 54-61.

[6] R. Faramarzi, B.Coburn, R. Sarhadian. Effects of improper product loading on the performance of an open vertical meat display case. ASHRAE Transactions, 2003, 109: 267-272.

[7] J.T. Cui, S.W. Wang. Application of CFD in evaluation and energy-efficient design of air curtains for horizontal refrigerated display cases. International Journal of Thermal Sciences, 2004, 43: 993-1002.

[8] Y.G. Chen. Parametric evaluation of refrigerated air curtains for thermal insulation. International Journal of Thermal Sciences, 2009, 48: 1988-1996.

[9] GB/T 21001.2-2007. 冷藏陈列柜 第 2 部分: 分类、要求和试验条件.

[10] X.Q. Li, Z.Y. Zhang, H. Liu, X.Z. Hu, S.C. Liu, Q.H. Wang. Performance of an open refrigerated display cabinet with two air curtains. Applied Thermal Engineering, 2022, 212: 118549.

[11] X.Q. Li, H. Liu, Z.Y. Zhang, X.Z. Hu, S.C. Liu, Y.H. Guo. Performance optimization of open refrigerated display cabinet based on response surface method. Applied Thermal Engineering, 2023, 219: 119608.

基于无氟改性剂制备超疏水涂层的油水分离性能研究

刘子龙, 许年, 於欣羽, 杨臣豪, 楚化强*
(安徽工业大学能源与环境学院, 安徽马鞍山, 243002)
(Tel:18055504707, Email: hqchust@163.com)

摘要: 利用无氟改性剂对玻璃和棉织物表面进行改性处理,可赋予表面以超疏水性能。改性剂的存在可以降低材料表面能,提高粘结剂与基底材料之间的结合强度。本研究通过一步喷涂法制备出环境友好型超疏水涂层。选取十二烷基三甲氧基硅烷(DTMS)、十六烷基三甲氧基硅烷(HTMS)、十八烷基三甲氧基硅烷(OTMS)和聚二甲基硅氧烷硅烷(PDMS)四种无氟改性剂,探究所制备出的超疏水涂层的自清洁性能和油水分离性能优劣。通过多次油水分离循环测试,可获得性能最优的超疏水棉织物。为今后的工业污水和石油泄露等领域的处理提供创新思路。

关键词: 无氟改性剂; 一步喷涂法; 环境友好型; 油水分离; 超疏水涂层

0 前言

受荷叶中的自清洁性能的启发,仿生超疏水表面的制备吸引了广大研究学者的兴趣^[1]。当水与固体的接触角大于 150° ,滑动角小于 10° 时,表面被界定为超疏水表面^[2]。超疏水材料由于其特殊的润湿性能,可以使水滴在表面滑落而不黏附在表面上。这归结于超疏水表面独特的粗糙结构和较低的表面能。且超疏水表面具有油水分离^[3],防冰^[4],防雾^[5],耐腐蚀^[6],抗菌^[7],液滴操纵^[8]等多功能化性能,在农业生产^[9],纺织品制造^[10],建筑工程^[11],航天军工^[12],管道运输^[13]和医疗卫生^[14]等领域具有较大的应用潜力。

目前,研究人员已经开发了多种可制备超疏水涂层的方法和技术,如模板法^[15],溶胶-凝胶法^[16],水热法^[17],逐层自组装法^[18],蚀刻法^[19],电化学沉积法^[20],化学气相沉积法^[21],静电纺丝法^[22],激光加工^[23],3D打印技术^[24]等。尽管有如此多的涂层制备方法,但是这些方法通常都需要较为复杂的制造工艺流程,昂贵的设备,或者仅限于某一种基底材料,小面积制备的缺点^[25]。因此在超疏水涂层的实际生产中,开发一种简单、高效和可大规模制备的超疏水表面亟不可待。

喷涂法相对于其它方法来说,具有制备工艺简单和可大规模制备的优点而被广泛使用。例如,Cao等人^[26]利用水性聚氨酯改性后的氨乙基氨基丙基聚二甲基硅氧烷(SiWPU)和疏水的二氧化硅颗粒,制备出超疏水/超亲油网。所制备出的铜网可以分离温度高达 100°C 的热油/水混合物,其中油水分离效率可以达到99.3%。Polizos等人^[27]采用旋涂沉积工艺制备出了一种透明防污的超疏水涂层。利用气相纳米二氧化硅颗粒,对氯三氟甲苯(PCBTF)和氟化硅颗粒在玻璃基底上制备出超疏水透明涂层。对防污涂层进行耐久性测试,在落砂测试仪中将涂层暴露于2.6g的沙子后,涂层的水接触角从 166° 下降到 157° 。尽管制备出了透明防污的超疏水涂层,但是通过旋涂法制备并不能实现涂层的大面积制备。因此为了实现坚固的超疏水涂层的大规模制备,在工业生产中应用的最多的是喷涂法。Daneshmand等人^[28]通过两步喷涂法制备出具有耐磨性的超疏水表面。将含氟树脂溶液喷涂在基材上作为粘合层,再用硬脂酸改性氧化铝的悬浮液喷涂在树脂涂层上制备出水接触角为 160° ,滑动角小于 2° 的超疏水涂层。由于其喷涂的悬浮液中含有颗粒物,涂层的粗糙度增加使得其具有优异的耐磨性^[29]。但是由于其材料中含有氟化物,容易对环境造成一定的污染^[30]。因此在

超疏水材料的制备过程中,不仅需要考虑到其表面的耐磨性和耐腐蚀性指标,还要考虑其制备工艺的环保性。

本文采用一步喷涂法制备了环保型、具有优异的耐久性和耐腐蚀性超疏水涂层。通过在玻璃和棉织物基底上制备出超疏水涂层,能够表现出其多功能化性能。为了践行环保理念,采用四种无氟改性剂来探究其对超疏水涂层性能的影响。为了增强涂层的机械稳定性和耐磨性,本研究将环氧树脂和聚酰胺固化剂作为粘合剂。所制备出的超疏水涂层均具备优异的耐磨性、耐腐蚀性和较高的油水分离效率。

1 实验部分

1.1 材料

平均尺寸为 20 nm 的纳米 SiO₂ 颗粒、聚二甲基硅氧烷 (PDMS)、十二烷基三甲氧基硅烷 (DTMS)、十六烷基三甲氧基硅烷 (HTMS) 和十八烷基三甲氧基硅烷 (OTMS), 环氧树脂 E51、聚酰胺 650、亚甲基蓝试剂和苏丹 III 试剂。

1.2 超疏水涂料制备

将纳米二氧化硅颗粒 (20 nm) 加入到无水乙醇中, 进行磁力搅拌 30 min, 再放入超声清洗机中清洗 30 min 后得到溶液 I。再将环氧树脂 E51 和改性剂加入溶液 I 中, 磁力搅拌 60 min 后得到溶液 II。其中, 改性剂为 PDMS、DTMS、HTMS 和 OTMS。最后将聚酰胺 650 加入到溶液 II 中, 进行磁力搅拌 30 min 后制得超疏水涂料, 即溶液 III。

1.3 超疏水涂层的制备

采用玻璃板作为基底材料, 依次用无水乙醇和去离子水对玻璃板进行清洗, 最后放进干燥箱中烘干待用。在 0.4 MPa 的压力下使用喷枪将制备的超疏水涂料喷涂到玻璃基底上。为使得喷涂均匀, 喷枪与基底之间的距离为 20 cm, 以十字型的喷涂方式对基底进行喷涂。如图 1 所示, 为超疏水涂层的制备工艺流程图。为了便于说明, 将不同改性剂制备的涂层命名为 EP-SiO₂@PDMS, EP-SiO₂@DTMS, EP-SiO₂@HTMS 和 EP-SiO₂@OTMS, 将未使用改性剂的涂层作为对照组, 命名为 EP-SiO₂。为了探究涂层的多功能应用, 添加棉织物作为基底材料来制备超疏水涂层。

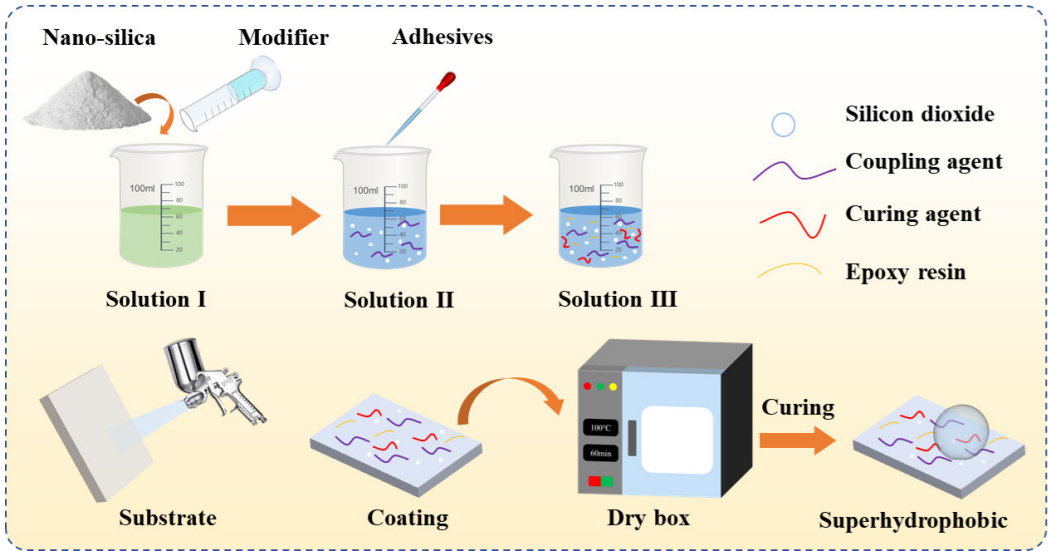


图 1 超疏水涂层的制备工艺流程图

1.4 表征

通过场发射扫描电子显微镜 (NANOSEM 430) 来观测涂层的微观形貌, 并对涂层进行 EDS 光谱分析。水接触角由接触角测量仪测量。为了使测量结果更加精确, 使用 5 μ L 去离子水在表面的不同位置测量三次后取平均值。采用傅里叶变换红外光谱仪 (Nicolet6700) 研

究了涂层的化学成分。

1.5 自清洁性能测试

将红色粉笔研磨成粉状作为污染物，来测试所制备涂层表面的自清洁性能。取普通未处理的玻璃作为空白对照组，未经改性剂修饰后的 EP-SiO₂ 涂层作为实验组。将红色粉笔粉末均匀的放置在玻璃中央位置，玻璃板倾斜放置在培养皿内，倾斜角为 8 °。使用甲基蓝对水溶液进行染色，在玻璃板上滴加甲基蓝溶液，探究两种表面被水带走灰尘的程度。

1.6 油水分离

通过自制的简单油水分离装置来探究超疏水棉织物的油水分离性能。分离装置由铁架台、漏斗、烧杯组成。为了便于区分混合物中的水和食用油，采用甲基蓝染色剂对去离子水进行染色，采用苏丹III对油进行染色。混合物中的油水分离效率 η 可根据下列公式计算：

$$\eta = \frac{V'}{V} \times 100\% \quad (1)$$

其中 V 表示混合液中的油重，V' 表示油水分离后滤液中的油重。

为了探究超疏水棉织物的重复使用性能，对其进行多次油水分离测试。每完成一次分离测试，使用干燥箱来干燥超疏水棉织物。对超疏水棉织物进行多次油水分离循环来研究其重复分离功能。

2 结果与讨论

2.1 润湿性和自清洁性能

为了直观的表达所制备的四种被改性剂修饰后涂层的润湿性，采用可乐、甲基蓝染色后的去离子水、牛奶和橙汁等不同的液体来研究涂层的疏水性能，如图 2(a)-(d)所示。可从图中看出四种涂层表面的液体均呈现球形状态，表明四种涂层都具有较高的拒液性。对涂层表面的水接触角进行测量，如图 2(e)所示，四种涂层水接触角都在 160 ° 以上，滑动角都在 5 ° 以下。其中，未经过改性剂修饰后的对照组 EP-SiO₂，测得的水平均接触角为 153.5 °，滑动角为 6.3 °。在接触角测量的过程中，涂层表面表现出较高的不润湿性能，如图 2(f)所示。

利用红色粉笔灰来探究所制备涂层的自清洁性能，如图 2(g)所示。取普通玻璃作为空白对照组，未被改性剂修饰后的 EP-SiO₂ 涂层作为实验组。为了便于观测，取甲基蓝染色后的水溶液作为清洗剂。可以清晰的看到普通玻璃表面的红色粉笔灰不能被水滴冲洗干净，无论怎样冲洗都无法去除灰尘印记。而 EP-SiO₂ 涂层被水冲洗后留下一条干净的通路，最终粉笔灰尘被水冲洗干净且不留下任何印记。经过改性剂修饰后的四种涂层表面同样具有优异的自清洁性能。

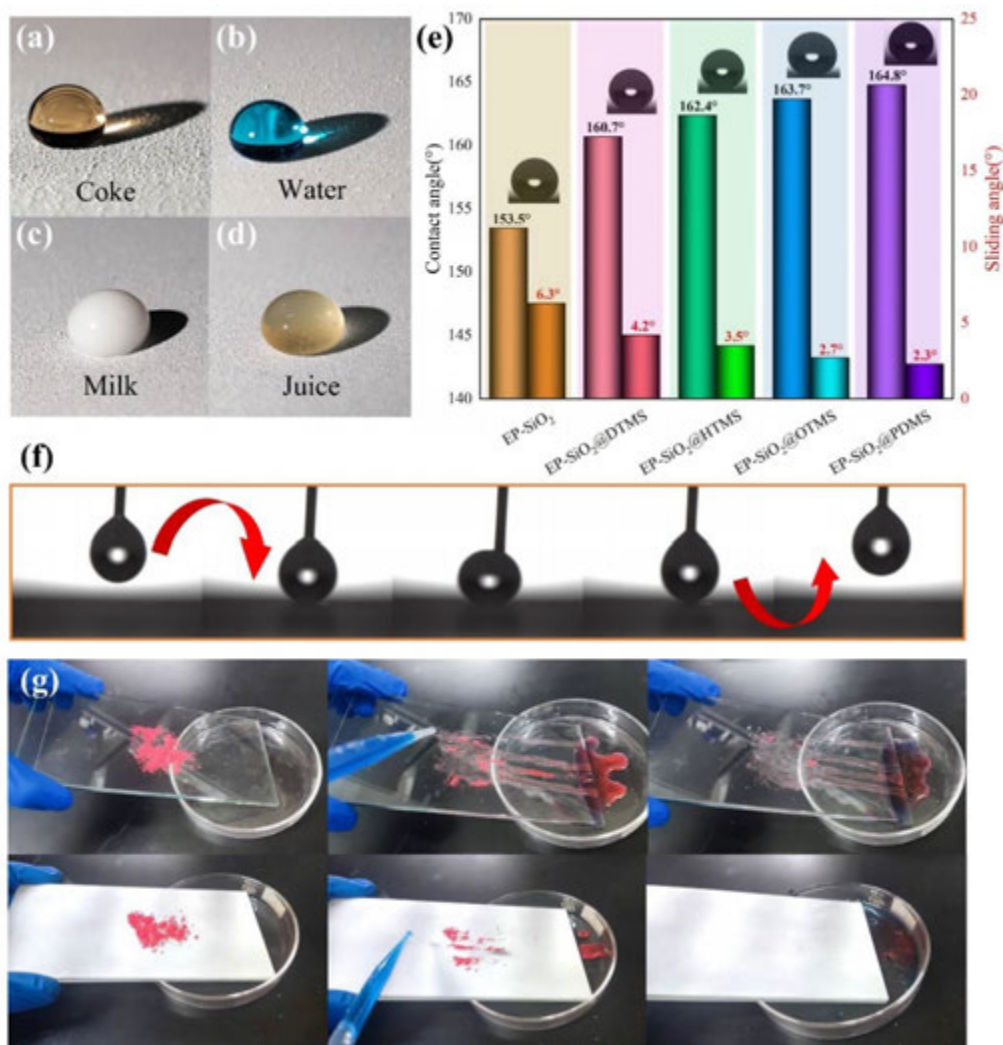


图 2 (a) 可乐在 EP-SiO₂@DTMS 表面的润湿性图像；(b) 甲基蓝染色后的水在 EP-SiO₂@HTMS 表面的润湿性图像；(c) 牛奶后水在 EP-SiO₂@OTMS 表面的润湿性图像；(d) 橙汁在 EP-SiO₂@HTMS 表面的润湿性图像；(e) 不同涂层表面的水接触角和滑动角；(f) 涂层表面的不润湿性；(g) 超疏水表面自清洁测试图。

2.2 微观结构和化学成分分析

对于涂层来说，其超疏水性与表面的微观结构和化学成分密不可分。我们通过扫描电子显微镜（SEM）来观察涂层的微观形貌，用 FTIR/EDS 来分析表面的化学成分。

为了更加清晰的观测涂层表面的微观结构，选用棉织物作为基底材料。不同改性剂修饰的棉织物涂层表面 SEM 图像如图 3 所示。从图 3(a) 表示原始棉织物的 SEM 图像，其单个纤维表面是光滑的。被黏附剂和二氧化硅涂覆后的棉织物表面，如图 3(b) 所示。随着纳米 SiO₂ 颗粒的嵌入，以及环氧树脂固化剂和聚酰胺固化剂的协同作用，棉织物被纳米颗粒形成的团块所覆盖。图 3(c)-(f) 分别表示由 DTMS，HTMS，OTMS 和 PDMS 修饰后的棉织物表面的 SEM 图像，对表面进行改性后没有观察到明显的表面形态变化。上述结果表明，四种不同改性剂修饰得到的表面具有相似的微观形态，微纳粗糙结构为表面超疏水性提供了结构基础。

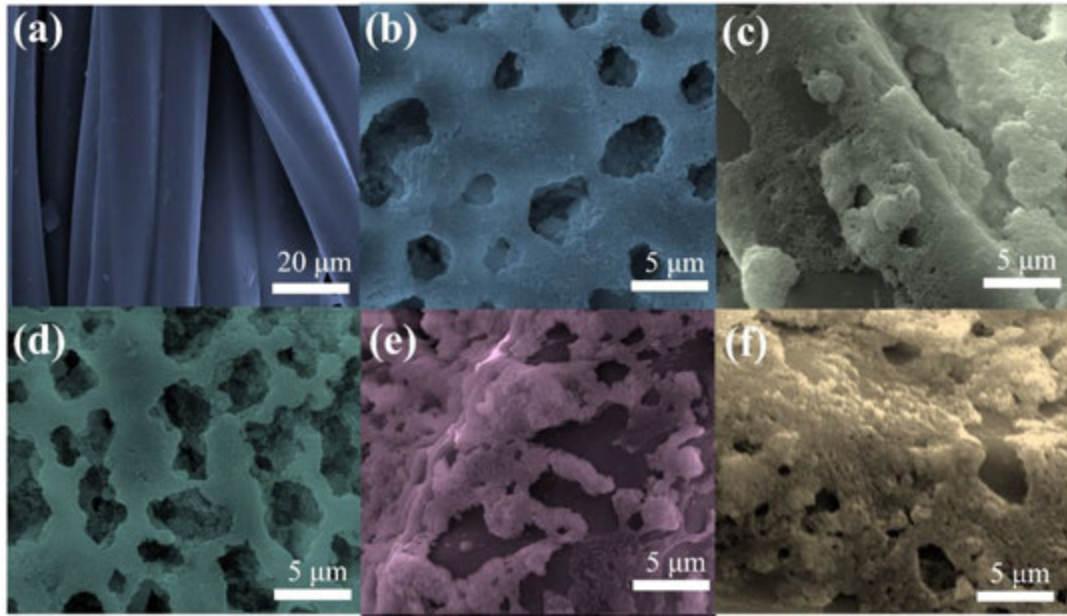


图 3 棉织物表面的 SEM 图像 (a) 原始棉织物, (b) EP-SiO₂ 棉织物, (c-f) EP-SiO₂@DTMS, EP-SiO₂@HTMS, EP-SiO₂@OTMS, EP-SiO₂@PDMS.

超疏水涂层的化学结构与元素组成是通过 FTIR 和 EDS 来探究的。图 4(a)分别表示未添加改性剂的涂层和添加了不同种类改性剂涂层的 FTIR 光谱。图 4(b)-(f)描述了未添加改性剂和采用不同改性剂制备出的超疏水涂层的 EDS 能谱。

涂层表面的 FTIR 光谱如图 4(a)所示。在改性剂修饰前后,涂层的特征吸收峰基本保持一致,仅仅在某些区间内其特征峰值强度有所差异。在 917 cm^{-1} 处的特征吸收峰由涂料中环氧树脂的环氧基团 ($-\text{CH}(\text{O})\text{CH}-$) 提供。在 1095 cm^{-1} 出现了很强的吸收峰,这是涂层中 Si-O-Si 键反对称伸缩振动所致。未经改性剂修饰的涂层 EP-SiO₂ 中 Si-O-Si 由二氧化硅提供,而经改性剂改性后的 Si-O-Si 基团由二氧化硅和偶联剂共同提供。如图 4(g)所示,偶联剂中 Si-OH 之间脱水缩合后与基底材料表面上的 OH 形成氢键,最后通过加热固化过程发生脱水反应并形成共价键 Si-O-Si。在 1647 cm^{-1} 处的特征吸收峰来源于聚酰胺固化剂中的 C=O 基团。饱和的 C-H 伸缩振动出现在 3000 cm^{-1} 以下,取代基对它们影响很小。在 2855 cm^{-1} 处的特征峰来自于亚甲基 ($-\text{CH}_2-$),在 2928 cm^{-1} 处的特征峰来自于甲基 ($-\text{CH}_3$)。将经过改性剂修饰前后光谱图进行对比发现,经过修饰后的涂层中的 Si-O-Si、 $-\text{CH}_3$ 和 $-\text{CH}_2$ 伸缩振动更强,表明涂层中可能含有改性剂 (OTMS、HTMS、DTMS 和 PDMS)。

仅通过 FTIR 对涂层进行化学结构分析并没有足够的说服力,故还采用 EDS 能谱对涂层的元素组分进行分析。如图 4(b)-(f)所示为经改性剂改性前后的 EDS 能谱图。分析结果表明,有无改性剂修饰的涂层主要由 C、O 和 Si 元素组成。尽管涂层中含有环氧树脂和聚酰胺,但由于其含有的 N、H 元素含量较低,并未被 EDS 检测出来。由图 4(b)所示,EP-SiO₂ 中的 Si 原子含量占比为 0.47%。由图 4(c)-(f)所示,EP-SiO₂@DTMS, EP-SiO₂@HTMS, EP-SiO₂@OTMS 和 EP-SiO₂@PDMS 原子百分比分别为 11.02%, 14.96%, 14.64% 和 16.89%。经过改性剂修饰后的涂层中 Si 原子的成分占比有大幅度的提升,可进一步确定涂层被改性剂所修饰。

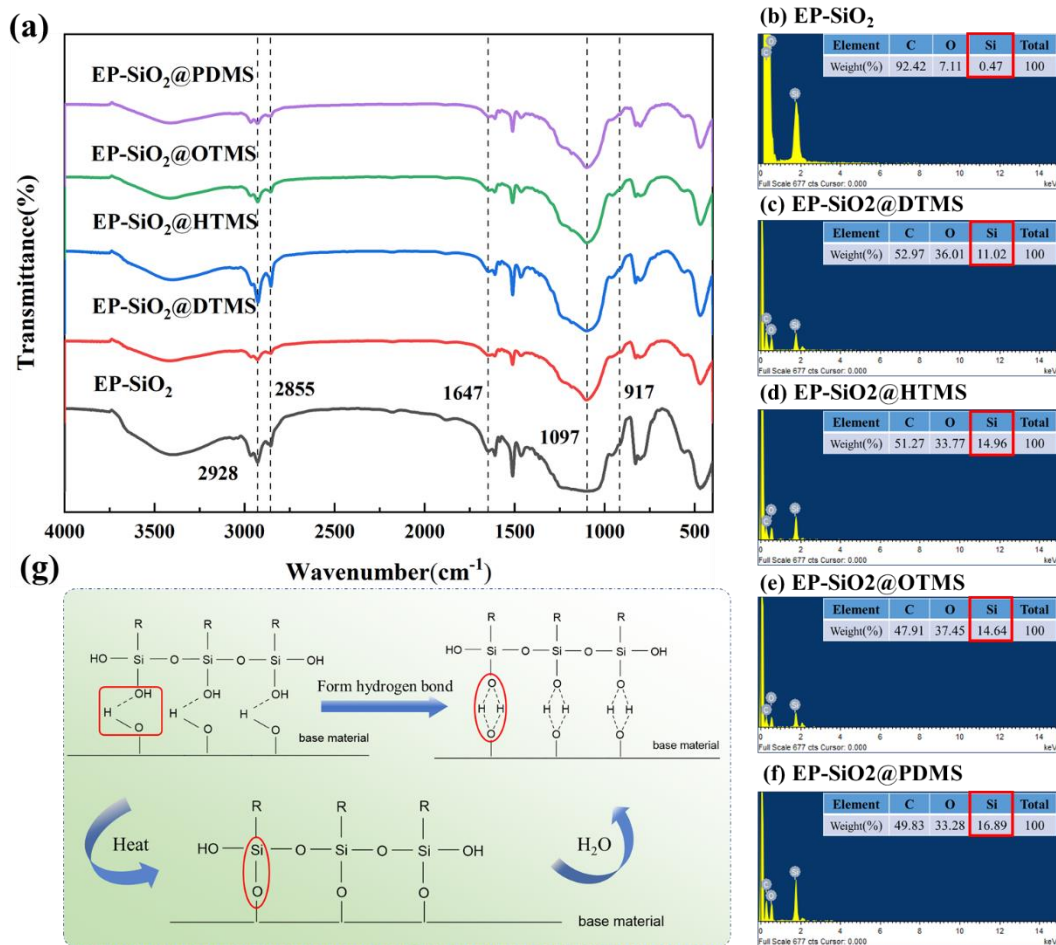


图 4 (a) EP-SiO₂ 涂层和不同改性剂制备出的超疏水涂层的 FTIR 光谱; (b) EP-SiO₂ 能谱; (c) EP-SiO₂@DTMS 能谱; (d) EP-SiO₂@HTMS 能谱; (e) EP-SiO₂@OTMS 能谱; (f) EP-SiO₂@PDMS 能谱; (g) 偶联剂改性后形成共价键化学反应简式。

2.3 油水分离性能

将棉织物作为基底材料来制备出超疏水棉织物，用来研究其油水分离效率。如图 5(a)所示，对于普通的棉织物而言，油和水均可以渗透过去。相比于一般的棉织物，所制备的超疏水棉织物可以做到油相可以通过而水相无法渗透。以制备的 EP-SiO₂ 为例，如图 5(b)所示，可直观的看出其渗透性能。实验装置如图 5(d)所示，看清晰的看出油相透过超疏水棉织物进入底部烧杯，水相停留在漏斗上方。为了探究超疏水棉织物是否可以对油水混合物进行多次分离，对其做了 20 次循环测试，如图 5(c)所示。

所制备的 EP-SiO₂ 棉织物油水分离效率达到 97.71 %，且经过 20 次分离循环后，其效率仍然维持在 96.2 % 左右。相比于 EP-SiO₂ 棉织物而言，EP-SiO₂@DTMS，EP-SiO₂@HTMS 和 EP-SiO₂@OTMS 棉织物的油水分离效率分别是 98.33 %，98.96 % 和 98.28 %。且在 20 次分离循环后，其分离效率也都在 98 % 左右，说明制备出的超疏水棉织物具有较好的重复使用性能。而所制备出的 EP-SiO₂@OTMS 棉织物，其油水分离效率可达到 99.75 %，且经过 20 次分离循环后效率仍可维持在 99 % 以上。

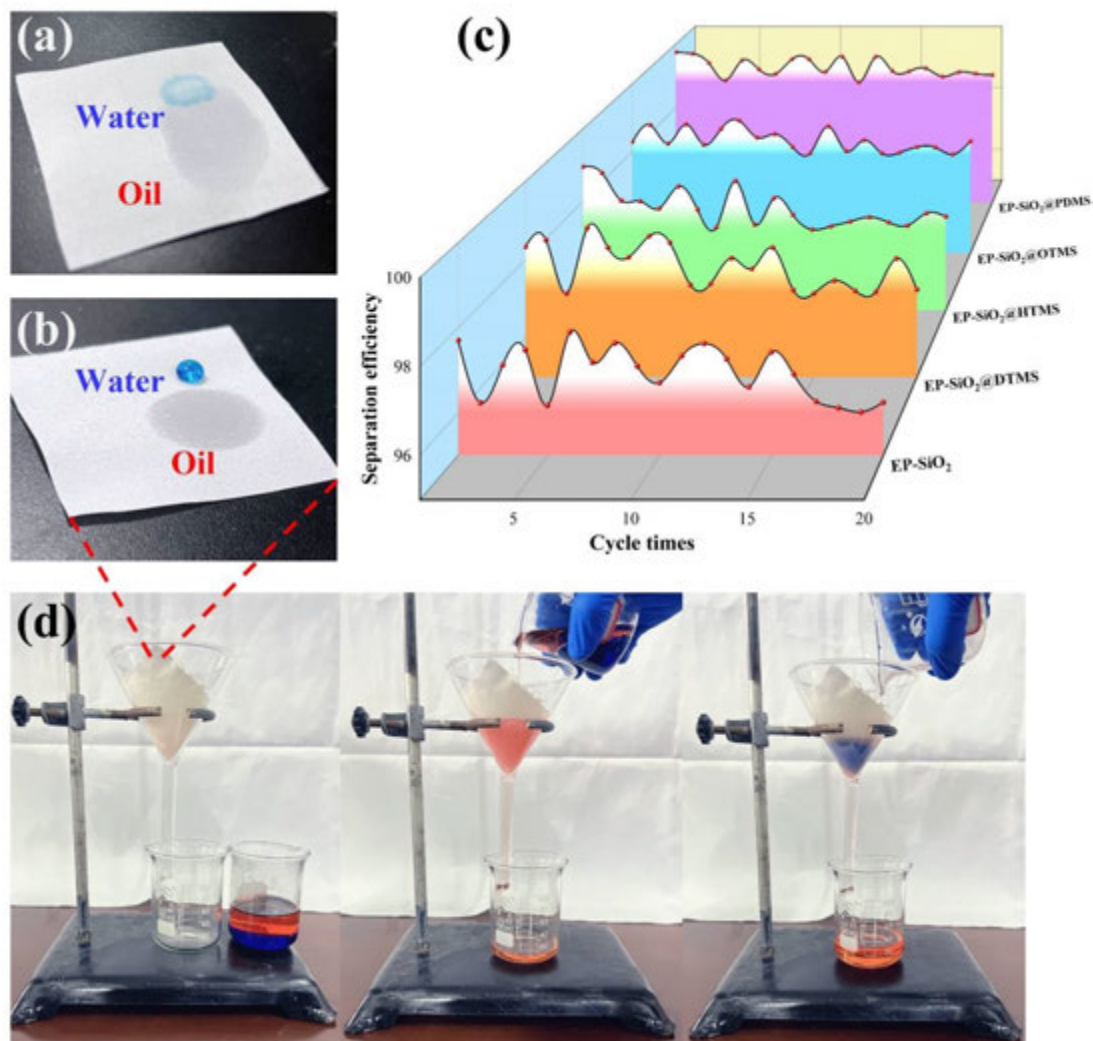


图 5 (a) 原始棉织物的油水分离性能；(b) EP-SiO₂ 棉织物的油水分离性能；(c) 油水分离循环下不同改性剂制备出棉织物的油水分离效率；(d) 油水分离装置及分离过程

3 结论

本文使用 DTMS、HTMS、OTMS 和 PDMS 四种无氟改性剂来制备超疏水涂层。探究四种改性剂制备出的超疏水涂层的自清洁性能,且对比分析了不同改性剂制备出的超疏水棉织物的油水分离效率的差异。实验结果表明:

- (1) 无改性剂制备出的涂层接触角为 153.5 °, 滑动角为 6.3 °。而使用 DTMS、HTMS、OTMS 和 PDMS 制备出的涂层其接触角均在 160 ° 以上, 滑动角均小于 5 °。这表明无氟改性剂可以降低涂层表面能, 强化涂层表面的超疏水性;
- (2) 无改性剂制备出的 EP-SiO₂ 玻璃涂层相对于普通玻璃来说可实现自清洁, 经无氟改性剂改性后的四种涂层也具有优异的自清洁性能;
- (3) 无氟改性剂可与涂层表面形成 Si-O 共价键, 增强涂层和粘合剂之间的结合强度;
- (4) 相比较于无改性剂制备出的 EP-SiO₂ 棉织物来说, 经过改性剂修饰后的超疏水棉织物的油水分离效率可达到 98 % 以上。EP-SiO₂@PDMS 棉织物的分离效率可以达到 99.75 %, 且经过 20 次分离循环后效率仍可维持在 99 % 以上。实验表明经过 PDMS 修饰后的超疏水棉织物具有优异的油水分离性能。

参考文献

- [1] Darmanin T, Guittard F. Superhydrophobic and superoleophobic properties in nature. *Materials Today* 2015; 18(5):273-285.
- [2] Wang D, Sun Q, Hokkanen MJ, Zhang C, Lin F-Y, Liu Q, et al. Design of robust superhydrophobic surfaces. *Nature* 2020; 582(7810):55-59.
- [3] Xue C-H, Ji P-T, Zhang P, Li Y-R, Jia S-T. Fabrication of superhydrophobic and superoleophilic textiles for oil–water separation. *Applied Surface Science* 2013; 284:464-471.
- [4] Farhadi S, Farzaneh M, Kulinich S. Anti-icing performance of superhydrophobic surfaces. *Applied Surface Science* 2011; 257(14):6264-6269.
- [5] Sun Z, Liao T, Liu K, Jiang L, Kim JH, Dou SX. Fly-eye inspired superhydrophobic anti-fogging inorganic nanostructures. *Small* 2014; 10(15):3001-3006.
- [6] Ye Y, Zhang D, Li J, Liu T, Pu J, Zhao H, et al. One-step synthesis of superhydrophobic polyhedral oligomeric silsesquioxane-graphene oxide and its application in anti-corrosion and anti-wear fields. *Corrosion Science* 2019; 147:9-21.
- [7] Chauhan P, Kumar A, Bhushan B. Self-cleaning, stain-resistant and anti-bacterial superhydrophobic cotton fabric prepared by simple immersion technique. *Journal of colloid and interface science* 2019; 535:66-74.
- [8] Yang C, Wu L, Li G. Magnetically responsive superhydrophobic surface: in situ reversible switching of water droplet wettability and adhesion for droplet manipulation. *ACS applied materials & interfaces* 2018; 10(23):20150-20158.
- [9] Weng S, Tang L, Qiu M, Wang J, Wu Y, Zhu R, et al. Surface-enhanced Raman spectroscopy charged probes under inverted superhydrophobic platform for detection of agricultural chemicals residues in rice combined with lightweight deep learning network. *Analytica Chimica Acta* 2023; 1262:341264.
- [10] Mohseni M, Far HS, Hasanzadeh M, Golovin K. Non-fluorinated sprayable fabric finish for durable and comfortable superhydrophobic textiles. *Progress in Organic Coatings* 2021; 157:106319.
- [11] Xu K, Ren S, Song J, Liu J, Liu Z, Sun J, et al. Colorful superhydrophobic concrete coating. *Chemical Engineering Journal* 2021; 403:126348.
- [12] Jagdheesh R, Hauschwitz P, Mužík J, Brajer J, Rostohar D, Jiříček P, et al. Non-fluorinated superhydrophobic Al7075 aerospace alloy by ps laser processing. *Applied Surface Science* 2019; 493:287-293.
- [13] Zang X, Cao X, Zheng W, Zhu T, Lei Y, Huang J, et al. Meniscus inspired flexible superhydrophobic coating with remarkable erosion resistance for pipeline gas transmission. *Chemical Engineering Journal* 2023; 451:138573.
- [14] Cui M, Wu J, Wei J, Wei Z. Near-infrared photodynamic antibacterial enhanced superhydrophobic electrospun membrane surfaces. *Surface and Coatings Technology* 2023; 463:129497.
- [15] Peng P, Ke Q, Zhou G, Tang T. Fabrication of microcavity-array superhydrophobic surfaces using an improved template method. *Journal of colloid and interface science* 2013; 395:326-328.
- [16] Mahadik SA, Mahadik SS. Surface morphological and topographical analysis of multifunctional superhydrophobic sol-gel coatings. *Ceramics International* 2021; 47(20):29475-29482.
- [17] Wan Y, Chen M, Liu W, Shen X, Min Y, Xu Q. The research on preparation of superhydrophobic surfaces of pure copper by hydrothermal method and its corrosion resistance. *Electrochimica Acta* 2018; 270:310-318.
- [18] Shao C, Jiang M, Zhang J, Zhang Q, Han L, Wu Y. Construction of a superhydrophobic wood surface coating by layer-by-layer assembly: Self-adhesive properties of polydopamine. *Applied Surface*

Science 2023; 609:155259.

- [19] Chen Q, Zhang C, Cai Y, Luo X, Wang B, Song Q, et al. Periodically oriented superhydrophobic microstructures prepared by laser ablation-chemical etching process for drag reduction. *Applied Surface Science* 2023; 615:156403.
- [20] Tian J, Bao J, Li L, Sha J, Duan W, Qiao M, et al. Facile fabrication of superhydrophobic coatings with superior corrosion resistance on LA103Z alloy by one-step electrochemical synthesis. *Surface and Coatings Technology* 2023; 452:129090.
- [21] Zhang M, Zhou T, Li H, Liu Q. UV-durable superhydrophobic ZnO/SiO₂ nanorod arrays on an aluminum substrate using catalyst-free chemical vapor deposition and their corrosion performance. *Applied Surface Science* 2023; 623:157085.
- [22] Cui M, Xu C, Shen Y, Tian H, Feng H, Li J. Electrospinning superhydrophobic nanofibrous poly(vinylidene fluoride)/stearic acid coatings with excellent corrosion resistance. *Thin Solid Films* 2018; 657:88-94.
- [23] Liao K, Wang W, Mei X, Zhao W, Yuan H, Wang M, et al. Stable and drag-reducing superhydrophobic silica glass microchannel prepared by femtosecond laser processing: Design, fabrication, and properties. *Materials & Design* 2023; 225:111501.
- [24] Deng W, Liu Y, Rui Y, Lu G, Liu J. Construction of superhydrophobic surfaces via dual-scale modified particles and digital light processing 3D printing techniques. *Progress in Organic Coatings* 2023; 181:107570.
- [25] Xu P, Sui X, Wang S, Liu G, Ge A, Coyle TW, et al. Superhydrophobic ceramic coatings with lotus leaf-like hierarchical surface structures deposited via suspension plasma spray process. *Surfaces and Interfaces* 2023; 38:102780.
- [26] Cao M, Luo X, Ren H, Feng J. Hot water-repellent and mechanically durable superhydrophobic mesh for oil/water separation. *Journal of colloid and interface science* 2018; 512:567-574.
- [27] Polizos G, Jang GG, Smith DB, List F, Lassiter MG, Park J, et al. Transparent superhydrophobic surfaces using a spray coating process. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2018; 176:405-410.
- [28] Daneshmand H, Sazgar A, Araghchi M. Fabrication of robust and versatile superhydrophobic coating by two-step spray method: An experimental and molecular dynamics simulation study. *Applied Surface Science* 2021; 567:150825.
- [29] Li Z, Cao M, Li P, Zhao Y, Bai H, Wu Y, et al. Surface-Embedding of Functional Micro-/Nanoparticles for Achieving Versatile Superhydrophobic Interfaces. *Matter* 2019; 1(3):661-673.
- [30] Silveira C, Shimabuku QL, Fernandes Silva M, Bergamasco R. Iron-oxide nanoparticles by the green synthesis method using *Moringa oleifera* leaf extract for fluoride removal. *Environmental technology* 2018; 39(22):2926-2936.

落料流量对颗粒堆积及传热特性的影响

官晓辉, 孙鹏, 孙晓梅, 李耀鹏, 张忠良, 郑斌

(山东理工大学交通与车辆工程学院, 山东淄博 255049)

(Tel: 19862513365, E-mail: sdut_gxh@163.com)

摘要: 为了明确蓄热颗粒在堆积床内的堆积及传热特性, 基于离散单元法建立了颗粒堆积及传热模型, 数值模拟研究了落料流量对颗粒的堆积及传热性能的影响。结果表明, 随着落料流量增加, 蓄热颗粒填充率线性下降, 平均配位数减少, 初始蓄热量降低, 颗粒堆温度均匀性变差, 传热性能恶化。落料流量由 5 kg/s 增加至 25 kg/s, 颗粒填充率下降了 2%, 平均配位数下降了 4%。蓄热颗粒堆初始蓄热量降低了 1.2 MJ。

关键词: 颗粒堆积床, 落料流量, 堆积特性, 传热特性

0 引言

“双碳”目标的提出, 意味着未来我国必须要进行能源的转型, 而风能、太阳能、水能等可再生清洁能源系统受环境因素影响较大, 能源输出具有明显的间歇性与波动性^[1-2]。而储能技术正是上述能源转化与利用的关键方法。固体颗粒蓄热储能是以固体为主要的载体进行储热, 具有体积相对恒定、成本低、储热能力好等优点, 极具商业潜力和应用前景^[3], 对影响固体颗粒堆积床传热因素的探究一直是科研工作者研究的重点^[4,5]。

对于整个颗粒蓄热系统来说, 颗粒蓄热体是最重要的部分, 蓄热体效果的高低将会直接影响整个储热系统的工作效率, 所以对颗粒蓄热体结构的研究是提高储热技术的关键一步。由于颗粒实现有序堆积结构的困难性, 现实中的蓄热颗粒堆多为堆积方便的随机堆积结构, 因此需要对颗粒堆的随机堆积特性进行深入研究, 了解颗粒堆的随机堆积特性, 并探究其随机堆积特性对蓄热颗粒堆传热特性的影响。

固体颗粒的堆积和传热特性是研究的热点, 模拟的方法是普遍采用的研究方法。而在众多影响因素中填充率是影响最大的, 但填充率的形成需要通过堆积过程来实现, 落料流量就是影响堆积填充率的重要的可操作手段。因此本文研究探讨了蓄热颗粒不同流量对颗粒堆填充率, 近换热壁面填充率、换热壁面接触数、配位数等影响。期待该研究有助优化颗粒储热系统中工艺参数, 提高其换热效率, 为实际工程应用提供指导和帮助。

1 模型的建立

1.1 物理模型的建立

本文研究兼顾近壁面区域和颗粒堆内部颗粒的堆积及传热情况, 因此本文模型的设置如下: 计算区域为长方体区域, x 方向、 y 方向及 z 方向的长度分别为 $15d$ 、 $15d$ 、 $30d$,

其中粒径选择 $d=20\text{ mm}$ 的蓄热颗粒。蓄热颗粒以初速度为零，自由下落堆积。模型如图 1 所示，其中 x 正方向壁面为换热壁面， y 方向壁面为周期性壁面，其余壁面为绝热壁面，颗粒落料位置选择为计算区域上方 500 mm 处。本文颗粒堆积方式为在颗粒的落料位置处建立与模型进料口面积相等的平面作为颗粒工厂，如图 2 所示，颗粒在平面上随机产生并自由下落，当模型计算区域内的颗粒的堆积高度高于进料口且溢出计算区域一段时间后停止落料，封闭进料口，移除高于进料口的颗粒。

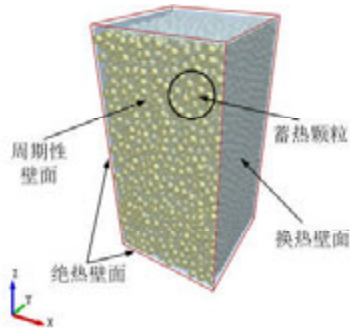


图 1 物理模型

Fig.1 Schematic of the physical model

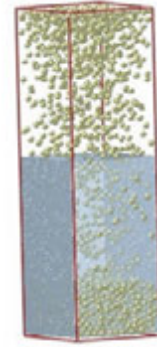


图 2 落料方式随机堆积过程示意图

Fig.2 Blanking method random stacking process diagram

1.2 随机堆积模型建立

运用离散元法模拟颗粒的运动，运动中颗粒主要受到重力和接触力作用，颗粒的运动方式可分为平动和转动。在合力的影响下，颗粒的运动是上述两种运动的叠加。

根据牛顿第二定律，颗粒的运动方程^[6]为：

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j (F_{ij}^n + F_{ij}^t) + m_i g \quad (1)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j (R_i \times F_{ij}^t - \mu_r R_i |F_{ij}^t| \hat{\omega}_i) \quad (2)$$

上式中： m 表示颗粒的质量， kg ； v 表示颗粒的平动速度， m/s ； ω 表示颗粒的角速度， rad/s ； I 表示转动惯量， $\text{kg}\cdot\text{m}^2$ ； R 表示颗粒的半径， m ； F 表示颗粒的接触力， N ； μ_r 表示滚动摩擦系数。上标 n 、 t 分别代表法向方向和切向方向，下标 i 、 j 分别是 i 颗粒和 j 颗粒的名称代号。

1.3 传热模型的建立

蓄热颗粒堆的主要传热方式有颗粒内部导热，颗粒间及颗粒与换热壁面传热，气相导热，气相对流换热，辐射换热，其他传热方式（内热源传热）等。对于本文来说，仅考虑颗粒间及颗粒与换热壁面传热以及气相导热。

(1) 颗粒相传热

颗粒间静态接触热传导模型参考 Chaudhuri^[10,11]等提出的模型。颗粒 i 与颗粒 j 或换热壁面之间的静止接触传热量 Q_{ij} 为：

$$Q_{ij} = h_c \Delta T_{ij} \quad (13)$$

$$h_c = \frac{4\lambda_{pi}\lambda_{pj}}{\lambda_{pi} + \lambda_{pj}} A_c \quad (14)$$

式中： h_c 是接触传热系数，由 i 颗粒和 j 颗粒或 j 换热壁面的导热系数 $\lambda_{p,i}$ 、 $\lambda_{p,j}$ 及两者的接触面积 A_c 共同决定。

在气相和颗粒相及换热壁面的共同热作用下，颗粒 i 的温度不断变化。颗粒 i 的能量控制方程为：

$$m_i c_{pi} \frac{dT_i}{dt} = Q_{fi} + \sum_{j=1}^{n_c} Q_{ij} \quad (15)$$

式中： m_i 是颗粒 i 的质量，kg； c_{pi} 是颗粒 i 比热容，J/(kg·K)， T_i 是颗粒 i 的温度，K， Q_{fi} 表示颗粒 i 向气相传递或吸收的热量，J， n_c 表示与颗粒 i 所有接触的颗粒及换热壁面个数。

(2) 气相传热

参考 Tal^[12]等和 Feng^[13]等的研究，气相能量控制方程为：

$$\frac{\partial(\rho_g h_g)}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T) + S_p + S_w \quad (16)$$

$$h_g = \int_{t^{ef}}^{t_g} c_{pg} dT \quad (17)$$

式中： h_g 是气相流体的焓，J/kg， ρ_g 、 λ_g 、 c_{pg} 是流体的密度、导热系数和比热容。 S_p 和 S_w 分别是流体与颗粒及换热壁面的热交换，W/m³。

1.4 初始条件设置

本文蓄热颗粒选择市面商用高铝质蓄热球。模拟所使用的参数如表 1 所示。

表 1 模拟参数

Tab 1 Simulation parameters

类别	参数	数值	类别	参数	数值
蓄热颗粒	直径/mm	20	换热壁面	导热系数/W·(m·K) ⁻¹	50
	比热容/J·(kg·K) ⁻¹	780		初始温度/°C	25
	密度/kg·m ⁻³	2200	颗粒-颗粒	碰撞恢复系数	0.5
	泊松比	0.23		静摩擦系数	0.1
	杨氏模量/GPa	32	颗粒-壁面	碰撞恢复系数	0.5
换热壁面	导热系数/W·(m·K) ⁻¹	20		静摩擦系数	0.5
	初始温度/°C	400	气相流体	比热容/J·(kg·K) ⁻¹	1006.43
	密度/kg·m ⁻³	7850		密度/kg·m ⁻³	1.225
	泊松比	0.31		导热系数/W·(m·K) ⁻¹	0.0242
	杨氏模量/GPa	210		初始温度/°C	400

1.5 模型验证及修正

CFD-DEM 方法在处理气固两相流问题上已经得到了广泛应用，但由于储热系统中颗粒数量较多，使用 CFD-DEM 方法进行计算会浪费大量计算资源，因此，对 CFD-DEM 方法与 DEM 方法进行堆积传热计算的误差进行了验证。利用 CFD-DEM 方法模拟了 Collier^[14]等颗粒在填充床中的堆积、冷却的实验过程。文中实验所得二氧化硅及磷青铜颗粒的堆积后的高度为 118 mm，填充管的内径为 78 mm，而使用 DEM 方法堆积后颗粒的填充率为 0.618，属于常规实验的随机堆积颗粒堆的填充率范围^[15]，因此验证了 DEM 方法在处理颗粒堆积问题的有效性。而所得磷青铜颗粒温度随时间变化的数据及实验数据与谈周妥等^[16]的模拟数据相比较，验证了 CFD-DEM 方法在处理填充床换热方面的有效性。图 3 为磷青铜颗粒温度随冷却时间增加的变化，其中模拟结果与实验数据的最大温差不超过 8 °C，结果吻合较好，CFD-DEM 方法的准确性得到了验证。

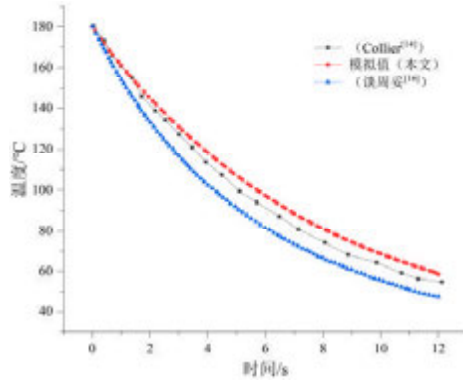


图 3 模型验证

Fig. 3 Model validation

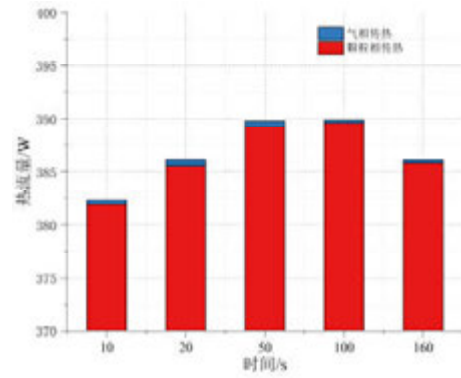


图 4 颗粒相与气相的传热量占比

Fig. 4 Heat transfer proportion of particle phase and gas phase

利用 CFD-DEM 方法建立了前文所给参数下蓄热颗粒堆的耦合模型，其中颗粒相、气相分别与换热壁面之间的热流量如图 4 所示。由图可知，在不同换热时间内，气相与换热壁面之间的传热量极低，颗粒相与换热壁面之间的接触导热是蓄热颗粒堆传热的主要方式，因此可以忽略气相导热，仅对颗粒相导热计算。

1.6 研究参数与评价指标

本文研究料流量 $f_m=5 \text{ kg/s}$ 、 10 kg/s 、 15 kg/s 、 20 kg/s 、 25 kg/s 时对颗粒随机堆积特性及传热特性的影响。

(1) 颗粒填充率

$$\varepsilon_p = \frac{V_p}{V} \quad (18)$$

式中： V_p 是颗粒的总体积； V 是所选填充空间的体积， m^3 。

(2) 单位面积接触数（比接触数）

$$C_s = \frac{n}{s} \quad (19)$$

式中： n 是与换热壁面接触数， s 是换热壁面面积， m^2 。

(3) 配位数(CN)

可以采用配位数来评价颗粒的微观结构特性。

传热特性研究除了采用蓄热量、温度、热流量与热流密度的评价指标外，还采用了如下评价指标：

(4) 温度标准差

标准差是方差的算术平方根，反映数据的离散程度。计算公式如下：

$$\sigma_T = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (T_{di} - \bar{T}_d)^2}{n_d - 1}} \quad (20)$$

式中： T_{di} 是所选区域第 i 个颗粒温度， n_d 是含着选定区域内的颗粒数目。

2 结果与分析

2.1 落料流量对颗粒堆积特性的影响

图 5 为颗粒落料流量对颗粒填充率的影响。颗粒填充率随着落料流量的增加线性下降。当落料流量由 5 kg/s 增加至 25 kg/s 时，颗粒填充率由 0.618 降至 0.606。当落料流量较小时，颗粒堆积结构达到稳定之前，颗粒运动相对“自由”，颗粒有相对较长的时间去达到堆积结构的稳定。随着落料流量增加，大部分颗粒还未能及时调整位置就被后落下的颗粒压住，从而形成接触点较少，填充率较低的稳定颗粒堆。

图 6 反映了距离换热壁面不同位置处颗粒累积填充率的变化情况。由图可知，随着与换热壁面距离增加，颗粒填充率先逐渐增加然后增加趋势逐渐变缓，最后在 $5d$ 之后几乎不再变化。在距离换热壁面相同位置处，随着落料流量增加，近换热壁面区域局部填充率略微减小。由于“壁面效应”的影响，近换热壁面区域堆积情况较差，颗粒填充率处于较低水平。

图 7 为落料流量对比接触数的影响。随着落料流量增加，比接触数的逐渐下降。最大比接触数为 1794 个/ m^2 ，最小比接触数为 1743 个/ m^2 。比接触数的大小直接影响颗粒储热系统的换热性能，为了加快放热速率，比接触数应越大越好。

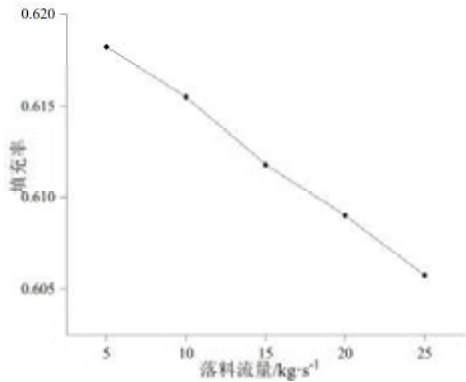


图 5 落料流量对颗粒填充率的影响

Fig. 5 Effect of feed flow rate on particle packing rate

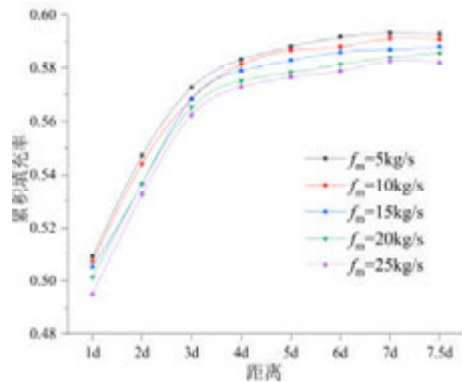


图 6 颗粒累积填充率随位置变化情况

Fig. 6 Variation of cumulative particle packing rate with position

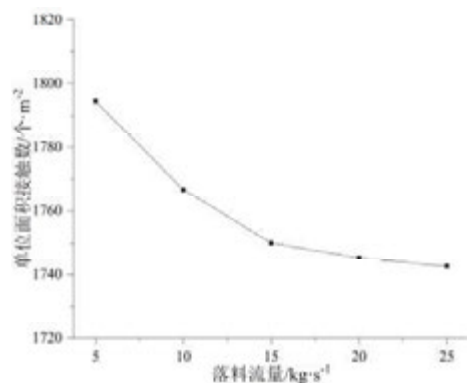


图 7 落料流量对比接触数的影响

Fig. 7 Effect of feed flow rate on the number of contacts per unit area

图 8 为颗粒堆配位数分布情况。不同落料流量下的配位数分布均类似于正态分布。随着落料流量增加，配位数概率曲线略微向左移动，低落料流量配位数曲线相对略“矮、胖”，而高落料流量配位数曲线相对略“高、瘦”。这说明高流量颗粒堆配位数相对较集中，而低流量颗粒堆配位数相对较分散。

图 9 为落料流量对颗粒堆颗粒平均配位数的影响。颗粒平均配位数随着落料流量的增加而减少。最大平均配位数为 4.79，最小平均配位数为 4.61。平均配位数体现了蓄热颗粒堆内部颗粒接触情况，随着落料流量增加，颗粒平均配位数差距较小，可以推测出落料流量对蓄热颗粒堆稳定换热阶段的传热影响较小。

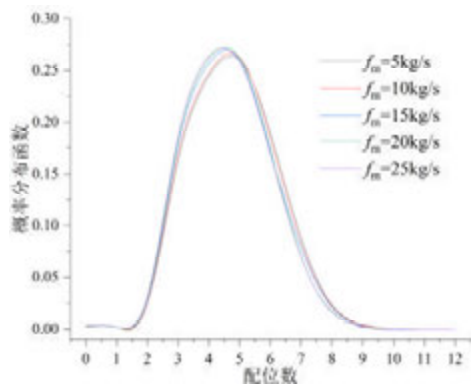


图 8 颗粒堆配位数分布情况

Fig. 8 Distribution of particle coordination number of particle pile

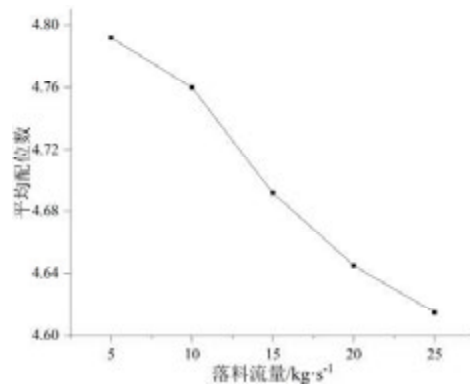


图 9 落料流量对颗粒平均配位数的影响

Fig. 9 Effect of feed flow rate on the average coordination number of particles

2.2 落料流量对颗粒传热特性的影响

图 10 为不同落料流量的蓄热颗粒堆的初始蓄热量。随着落料流量增加，颗粒堆的初始蓄热量逐渐减少。当落料流量的由 5 kg/s 增大至 25 kg/s 时，颗粒堆的初始蓄热量由 38.6 MJ 降低至 37.8 MJ。由于随着落料流量的增加，颗粒填充率逐渐降低，因此颗粒堆的初始蓄热量随落料流量的增加而减少。

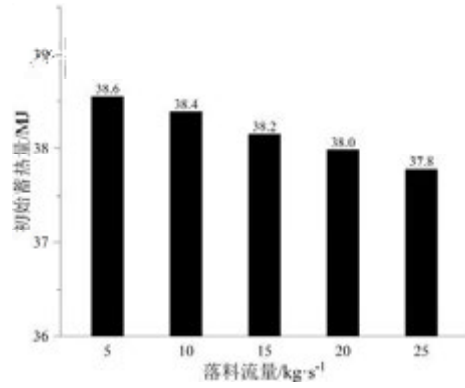


图 10 不同落料流量的蓄热颗粒堆的初始蓄热量

Fig. 10 Initial heat storage of heat storage particle pile with different feed flow rate

图 11 为落料流量为 5 kg/s 的蓄热颗粒堆温度分布情况。低温颗粒最先出现于换热壁面附近，随着换热时间增加，低温颗粒层的厚度逐渐增加，高温颗粒数目不断减少，蓄热颗粒所携带热量逐渐流向低温换热壁面。蓄热颗粒的最低温度由 66.4 °C 降低至 43.9 °C。蓄热颗粒堆的内部同样存在因上方运动颗粒冲击及重力压迫所致的同温层倾斜现象。

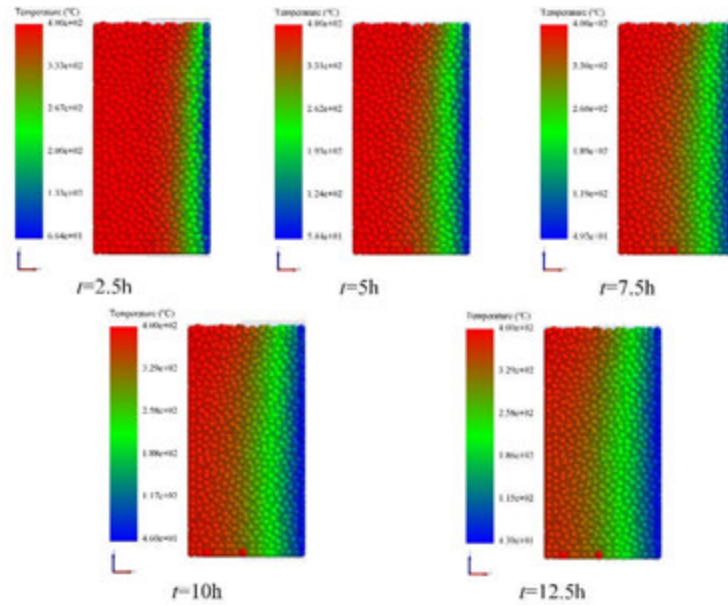


图 11 蓄热颗粒堆 ($f_m = 5 \text{ kg/s}$) 不同换热时间的温度分布

Fig. 11 Temperature distribution of heat storage particle pile ($f_m = 5 \text{ kg/s}$) at different heat exchange times

图 12 为蓄热颗粒堆的热流量随换热时间的变化情况。由图可知，随着换热时间的增加，蓄热颗粒堆的热流量逐渐下降，下降速度逐渐变缓，落料流量 $f_m = 5 \text{ kg/s}$ 的热流量大于 $f_m = 25 \text{ kg/s}$ 的热流量。换热初始时刻近换热壁面附近的蓄热颗粒温度高，与换热壁面之间的温度差大，因此换热动力大，传热迅速，热流量大；随着换热时间持续，近换热壁面附近蓄热颗粒温度逐渐降低，稳定换热通形成，与换热壁面之间温差减小，热

流量减小。

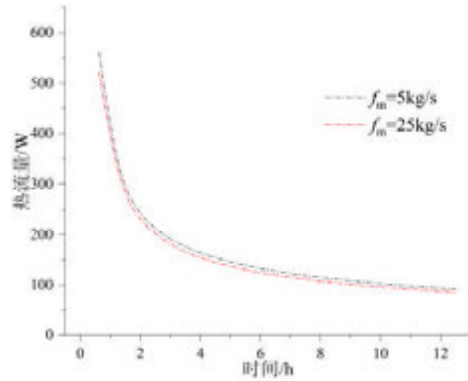


图 12 蓄热颗粒堆的热流量随换热时间的变化

Fig. 12 Variation of heat flow rate with heat exchange time for heat storage particle pile

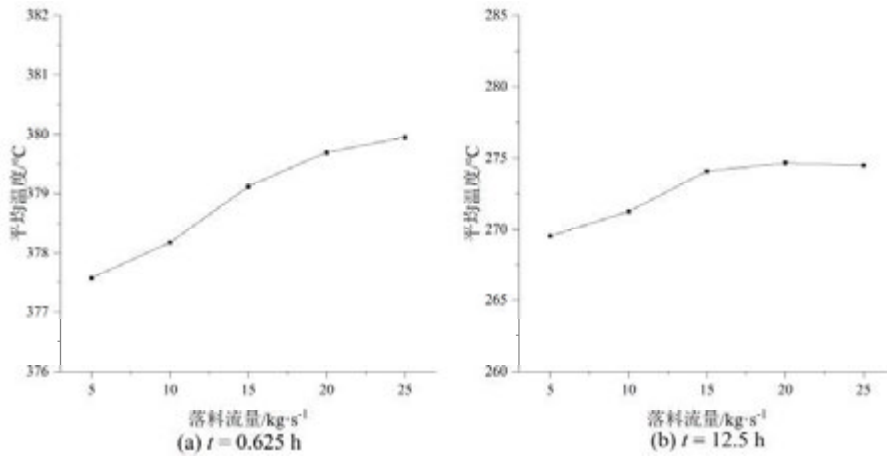


图 13 落料流量对蓄热颗粒堆平均温度的影响

Fig. 13 Effect of feed flow rate on the average temperature of the heat storage pile

图 13 为落料流量对蓄热颗粒堆平均温度的影响。由图(a)、图(b)可知，随着落料流量增加，颗粒的平均温度均略有轻微增加。当换热时间为 0.625 h 时，由于此时为换热初始时刻，传热主要受到比接触数的影响，比接触数大，传热越快。随着落料流量的增加，比接触数逐渐减小，因此颗粒平均温度逐渐上升。当换热时间为 12.5 h 时，此时蓄热颗粒堆的热量传递稳定，传热已进行至蓄热颗粒堆内部，传热主要受到颗粒平均配位数及内部颗粒填充率的影响。随着落料流量增加，平均配位数及填充率逐渐下降，平均温度随着落料流量增加而逐渐上升，但因为平均配位数及填充率下降幅度较小，因此平均温度上升幅度较小。

图 14 为蓄热颗粒堆局部区域颗粒温度标准差的变化。由图(a)可知，低落料流量 ($f_m = 5 \text{ kg/s}$ 、 10 kg/s) 的蓄热颗粒在不同的研究区域内的温度标准差均小于高落料流量 ($f_m = 20 \text{ kg/s}$ 、 25 kg/s) 温度标准差，说明低落料流量的蓄热颗粒堆的在传热过程中不同颗粒堆区域内温度均匀性较好。这主要是因为，随着落料流量的增加，配位数分布越来越分散，因此落料流量越大，蓄热颗粒堆温度均匀性越差。由图(b)可知，随着换热时间增

加,所有工况的温度标准差先增加后略有减少,说明换热后期在该区域已建立稳定的换热通道。

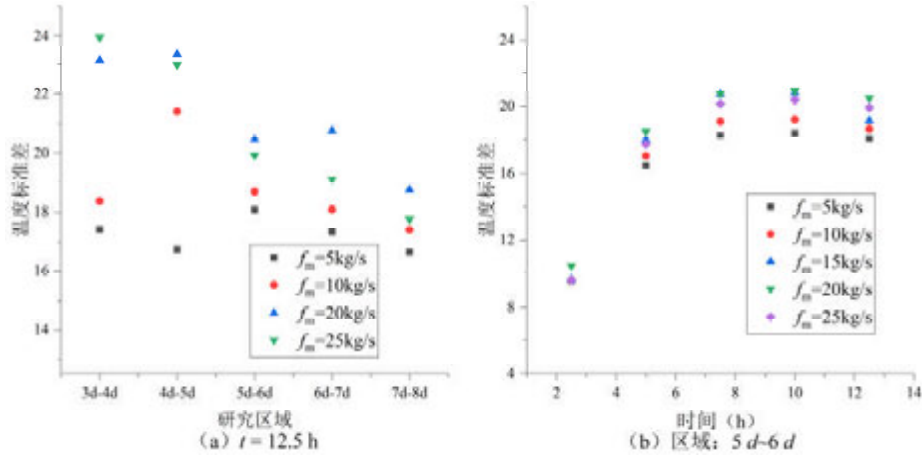


图 14 蓄热颗粒堆颗粒温度标准差

Fig. 14 Standard deviation of particle temperature of heat storage particle pile

3 结论

基于离散单元法,建立了蓄热颗粒随机堆积及传热模型,数值模拟研究了颗粒落料流量对颗粒储热系统中蓄热颗粒堆的随机堆积特性及传热性能的影响。主要结论如下。

随着落料流量的增加,颗粒填充率线性下降,近换热壁面区域局部填充率略有减少,比接触数逐渐下降,平均配位数减少。落料流量由 5 kg/s 增加至 25 kg/s,颗粒填充率由 0.618 下降至 0.606,局部填充率由 0.509 降低至 0.495,比接触数由 1794 个/m² 降低至 1743 个/m²,颗粒堆颗粒平均配位数由 4.79 降低至 4.61。

蓄热颗粒堆初始蓄热量随着落料流量增加而降低,落料流量由 5 kg/s 增大至 25 kg/s 时,颗粒填充率逐渐降低,因此颗粒堆的初始蓄热量随落料流量的增加而减少,初始蓄热量由 38.6 MJ 降低至 37.8 MJ。低落料流量的颗粒堆温度均匀性较好。随着换热时间的增加,蓄热颗粒堆的热流量逐渐下降,下降速度逐渐变缓,落料流量 $f_m = 5 \text{ kg/s}$ 的热流量大于 $f_m = 25 \text{ kg/s}$ 的热流量。随着落料流量的增加,颗粒的平均温度均略有轻微增加。低落料流量 ($f_m = 5 \text{ kg/s}$ 、 10 kg/s) 的蓄热颗粒在不同的研究区域内的温度标准差均小于高落料流量 ($f_m = 20 \text{ kg/s}$ 、 25 kg/s) 温度标准差。

参考文献

- [1] 李嘉宝. 2023, 全球气候治理重在行动[N]. 人民日报海外版, 2023-02-02.
LI Jia-bao. 2023, global climate governance is all about action [N]. People's Daily Overseas Edition, 2023-02-02.
- [2] YAN Y, WANG X, REN F, et al. Wind speed prediction using a hybrid model of EEMD and LSTM considering seasonal features. Energy Reports, 2022,8: 8965-8980.
- [3] 姜竹, 邹博杨, 丛琳, 等. 储热技术研究进展与展望. 储能科学与技术, 2021: 1-26.
Z Jiang, B Zou, L Cong, et al. Recent progress and outlook of thermal energy storage technologies. Energy

Storage Science and Technology, 2021: 1-26.

- [4] 刘冠杰, 韩立鹏, 王永鹏, 等. 固体储热技术研究进展. 应用能源技术, 2018, (03): 1-4.
 - [5] Almendros-Ibáñez J A, Fernández-Torrijos M, Díaz-Heras M, et al. A review of solar thermal energy storage in beds of particles: Packed and fluidized beds. SOLAR ENERGY, 2019, 192:193-237.
 - [6] An X Z, Yang R Y, Dong K J, et al. DEM study of crystallization of monosized spheres under mechanical vibrations. Computer Physics Communications, 2011, 182(9): 1989-1994.
 - [7] Hertz H. Ueber die Berührung fester elastischer Körper. Journal für die reine und angewandte Mathematik, 1882, 1882(92): 156-171.
 - [8] Tsuji Y, Tanaka T, Ishida T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. Powder Technology, 1992, 71(3): 239-250.
 - [9] Mindlin R D, Deresiewicz H. Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces. Journal of Applied Mechanics, 2021, 20(3): 327-344.
 - [10] Chaudhuri B, Muzzio F J, Tomassone M S. Modeling of heat transfer in granular flow in rotating vessels. Chemical Engineering Science, 2006, 61(19): 6348-6360.
 - [11] Chaudhuri B, Muzzio F J, Tomassone M S. Experimentally validated computations of heat transfer in granular materials in rotary calciners. Powder Technology, 2010, 198(1): 6-15.
 - [12] Tsory T, Ben-Jacob N, Brosh T, et al. Thermal DEM-CFD modeling and simulation of heat transfer through packed bed. Powder Technology, 2013, 244: 52-60.
 - [13] Feng Y H, Zhang Z, Qiu L, et al. Heat recovery process modelling of semi-molten blast furnace slag in a moving bed using XDEM[J]. Energy, 2019, 186: 115876.
 - [14] COLLIER A P, HAYHURST A N, RICHARDSON J L, et al. The heat transfer coefficient between a particle and a bed (packed or fluidised) of much larger particles. Chemical Engineering Science, 2004, 59(21): 4613-4620.
 - [15] AN X Z, LI C X, YANG R Y, et al. Experimental study of the packing of mono-sized spheres subjected to one-dimensional vibration. Powder Technology, 2009, 196(1): 50-55.
 - [16] 谈周妥, 郭志罡, 杨剑, 王秋旺. 重力驱动颗粒流横掠倒置滴形管管外流动传热特性的数值研究. 化工学报, 2019, 70(S2): 94-100.
- Zhoutuo T, Zhigang G, Jian Y, et al. Numerical investigation on flow and heat transfer performance of gravity-driven granular flowing across inverted drop-shaped tube. CIESC Journal, 2019.

基于 PCHE 的超临界 CO₂ 热声发动机性能 实验探究

王开心, 胡战超

(中山大学航空航天学院, 深圳 518107)

(Tel: 0755-23260164, Email: huzhch7@mail.sysu.edu.cn)

摘要: 超临界流体中的热声效应及其引发的压力振荡和传热不稳定性获得了较多关注, 然而热声效应的主动应用还很不充分。本文设计搭建了一台基于印制电路板换热器(PCHE)的超临界 CO₂ 热声发动机, 实现了两种通道尺寸的热声叠进行实验探究。实验结果表明, 所搭建的装置具有高压振幅(最高实现了 0.455MPa)、低起振温差(最低实现了 11.2°C)的特点。对比两种通道尺寸的结果显示, 通道尺寸介于 3 至 4 倍的平均热渗透深度时, 装置具有较好的性能。

关键词: 超临界 CO₂; 印制电路板换热器; 热声发动机; 通道尺寸

0 前言

气体在外加温度梯度的作用下, 发生自激压力振荡的现象称为热声效应。利用热声效应制成的热功转换装置称为热声发动机, 可实现热能到机械能的转换。由于其无运动部件、结构简单、工质无毒且环保, 可以避免传统热机带来的缺点, 未来有着很大发展潜力^[1-6]。热声发动机根据结构和声场特性不同可以分为驻波热声发动机和行波热声发动机^[7-14]。驻波热声发动机通常包括一个热声叠、两个热交换器、热腔、谐振器和可能的能量提取组件。

超临界流体指处于临界压力以上的流体状态, 在这样的状态下即使没有发生相变, 流体的密度和其他物理性质会在很小的温度范围发生剧烈的变化^[15]。具体表现为密度的迅速降低、热膨胀系数出现峰值, 流体表现出良好的可压缩性, 因此, 将超临界流体运用到热声发动机, 发展超临界热声发动机成为一个潜力较大的方案。

对于超临界热声发动机的实验研究, 直到最近几年才由普渡大学的研究者开展相关探究, 他们认为, 高热膨胀系数有利于提高能量转换效率^[16 17]。在理论分析的基础上, 他们完成了工质为制冷剂 R218 的超临界驻波原型机测试工作。截至 2019 年, 一种改进的版本也完成了测试, 他们在 150 K 的温差下实现了 0.69 MPa 稳定的压力振幅^[18]。

我们提出二氧化碳(临界温度 $T_c = 31.0^\circ\text{C}$, 临界压力 $p_c = 7.377\text{ MPa}$)由于其异常物理发生在环境温度附近, 用于超临界热声发动机有更大的潜力, 而且和制冷剂 R218 相比有更好的环境友好性。为此, 我们构建一台工质为超临界 CO₂ 的驻波热声发动机。为了满足高压力和微通道的需求, 我们设计并加工了基于印刷电路换热器(PCHE)形式的热声叠。PCHE 是通过在金属平板上化学蚀刻出微通道, 然后将平板堆叠起来经过扩散焊接

而成的微型通道换热器。PCHE 在超临界流体领域获得了广泛关注^[19-24]，但尚未应用于热声发动机。

本文在第 1 节介绍了实验系统和方法，给出了两个 PCHE 的设计参数，第 2 节展示了实验结果，并结合热渗透深度和水力直径对实验结果进行了机理上的解释，最后本文的详细结论放在了第 3 节。

1 实验系统和方法

1.1 实验系统

基于 PCHE 设计的超临界热声发动机如图 1 所示。图 1a 是热声核心部件的示意图，包括热腔、PCHE 模块和冷腔，其中 PCHE 模块由热换热器、热声叠和冷换热器组成。除此之外，如图 1b 所示，热声核心右边为谐振管和气库，在两者上面安装有 6 个压力变送器(Druck ADROIT6200)，从左到右分别为 PT1 到 PT6。整体装置可承受 20MPa 的压力。

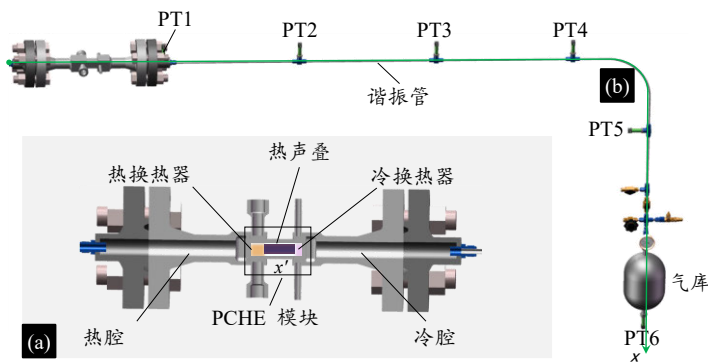


图 1 基于 PCHE 的超临界热声发动机示意图。(a)是热声核心部件的示意图，(b)为系统整体示意图。

热声发动机的流路系统如图 2 所示，高压的 CO_2 由增压泵增压后经减压阀输送至系统内；导热油经过高温循环器泵送到油路中，在实验过程中，其温度可升到至 180°C ；使用水浴槽固定冷却水的温度为 23°C ，并经过水泵将冷却水输送到水路中。此外，为了测量温度分布，五个等间距贴片式 K 型热电偶(RKC ST-50)被粘贴在热声叠上，在导热油和冷却水入口分别安装了一个 T 型热电偶(Omega TC-T-NPT)，从左到右，它们分别被标记为 TC1 到 TC7。

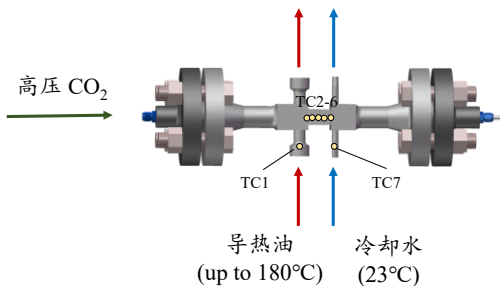


图 2 流路系统示意图

1.2 PCHE 的设计

PCHE 模块的设计如图 3 所示。导热油和冷却水通道分布在同一块板厚为 $500\mu\text{m}$ 的

金属板两侧，总宽度分别为 18.9mm 和 9mm，如图 3d 所示；CO₂ 通道分布在与之相邻的金属板上，如图 3b 所示；两者的板长和板宽均为 82mm 和 40mm；两个板的数量以一定比例叠加在一起，经过扩散焊接的方式加工成一个整体，如图 3a 所示。为了更好的探究超临界热声发动机的性能，本文设计了两种通道尺寸的热声叠，如图 3b 和 c，然后分别开展实验，热声叠通道的具体尺寸见表 1。

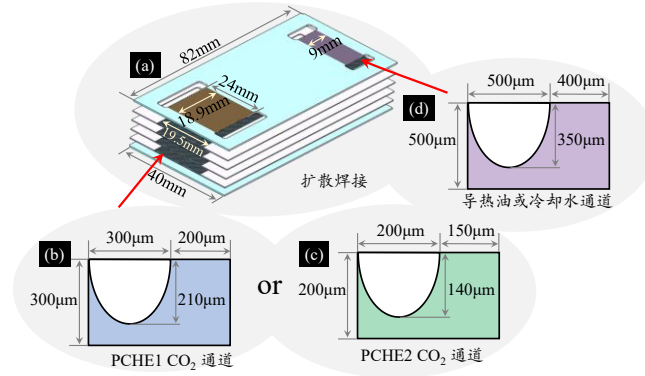


图 3 PCHE 模块示意图。图 a 是金属蚀刻板的组成方式，图 b、c 和 d 分别是 PCHE1 CO₂ 通道、PCHE2 CO₂ 通道和导热油或冷却水通道的具体尺寸。

表 1 热声叠通道的具体尺寸

通道名称	板长/宽/厚 (mm)	通道形状	槽宽/槽深 (μm)	通道间距 (μm)	单板通道 数量(个)
油/水通道	82/40/0.5	半椭圆型	500/350	400	21
PCHE1 CO ₂ 通道	82/40/0.3	半椭圆型	300/210	200	39
PCHE2 CO ₂ 通道	82/40/0.2	半椭圆型	200/140	150	56

我们定义 CO₂ 通道的水力直径作为通道尺寸的描述参数

$$D_h = \frac{4A}{D_p}, \quad (1)$$

其中， A 是管道的浸润横截面积， D_p 是横截面的浸润周长。通过表 1 的数据可以得到 PCHE1 通道的 $D_h=222.1\mu\text{m}$ ，而 PCHE2 通道的 $D_h=148.0\mu\text{m}$ 。

1.3 实验方法

在目前的研究中，固定冷却水的温度为 23℃，装置为定容体系，独立变量为 CO₂ 的充注质量和外加温差。其中，改变导热油的温度以实现不同的温差。充注质量由固定温差下的平均压力进行表征，相同的充注质量为一个测试组。我们在 PCHE1、PCHE2 通道下分别设置 7 组和 6 组实验测试组，为了保证每组实验均处于超临界压力以上的范围，我们选择测试组平均压力均处于 7.377MPa 和 10MPa 之间，各个测试组的简要信息如表 2 所示。

表 2 实验测试组的简要信息

实验阶段	测试组	$\Delta T/(^{\circ}\text{C})$	平均压力/(MPa)
PCHE1 通道	I	24.5	7.438
	II	24.5	7.970
	III	24.8	8.444
	IV	24.8	7.527
	V	24.7	7.700
	VI	24.7	8.250
	VII	24.8	8.595
PCHE2 通道	I	24.9	7.519
	II	24.8	7.980
	III	25.1	8.398
	IV	25.7	7.684
	V	24.7	8.276
	VI	24.9	8.595

1.4 数据处理与精度

为了更好刻画压力振荡，我们使用以下函数来描述在特定谐振器位置的压力变化：

$$p = p_m + \frac{\Delta p}{2} \cos(2\pi ft + \varphi), \quad (2)$$

其中， t 是时间， f 频率， p_m 为平均压力， Δp 是压力振幅， φ 是初相位。上述方程可以适应任意压力变送器的测量结果。图 4 为其中的一个典型的拟合结果，其 R^2 值一般大于 0.99，拟合效果良好。

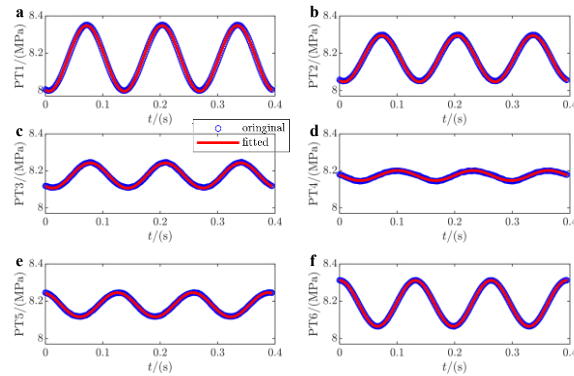


图 4 PCHE1 I 组 PT1 到 PT6 的原始数据(original)和使用公式(1)拟合数据(fitted)的比较结果

关于测量精度，Druck ADROIT6200 型的压力变送器的精度为 $\pm 0.02\%$ ，因此误差范围为 $\pm 0.0024\text{MPa}$ (测量范围为 0~12MPa)。RKC ST-50 型热电偶(图 2 中的 TC2~6)测量温度的精度为 $\pm 1.3^{\circ}\text{C}$ ，Omega TC-T-NPT 型热电偶(TC1 和 TC7) 的精度为 $\pm 1.0^{\circ}\text{C}$ 。考虑到 USB-TEMP 采集卡对热电偶的精度为 0.3°C ，因此，温度测量的精度对于 TC2~6 为 $\pm 1.6^{\circ}\text{C}$ ，对于 TC1 和 TC7 为 $\pm 1.3^{\circ}\text{C}$ 。

2 结果与讨论

2.1 压力振荡的振幅与频率

本节将对两阶段实验中压力振荡的振幅与频率进行讨论。由于最大的压力振幅出现在 PT1 处,可以反映出热声发动机的实际性能,因此我们选择此处的测量数据进行讨论。此外,热声发动机频率在任意测试位置均是相同的,选择 PT1 处的数据不影响频率的普遍性。

图 5 展示了两个实验阶段中压力振幅 Δp 与温差 ΔT 的关系,为了能够区分两组实验数据,虚、实线分别表示 PCHE1、PCHE2 的结果。结果表明, Δp 在每一组中均随 ΔT 增大而增大,同时,随着充注质量的增加, Δp 也在增大。比较两个阶段的结果,可以看出,PCHE2 通道在相似的实验条件下能够达到更高的振幅,最大振幅为 0.455MPa,它出现在第 III 组, ΔT 为 152°C 处,而此时 PCHE1 通道的最大振幅为 0.419MPa。

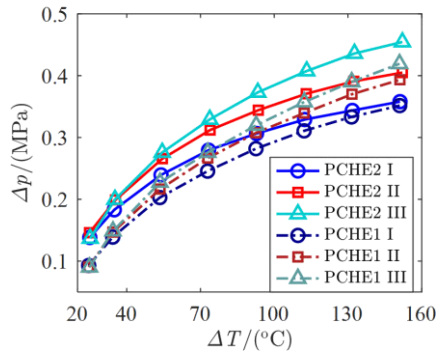


图 5 PT1 处的压力振幅随温差的变化情况,虚、实线分别表示 PCHE1、PCHE2 通道的结果

为了研究 Δp 变化的一般规律,我们探究了无量纲压力振幅 $\Delta p/p_m$ 与 ΔT 的关系,如图 6 所示。结果表明,在 PCHE1 通道中,三条曲线存在一个共同的趋势,我们将这种趋势拟合成下面幂律关系(Power law)的曲线:

$$\Delta p / p_m = a(\Delta T)^b + c \quad (3)$$

其中 a 、 b 和 c 为系数。可以看出,PCHE1 通道拟合效果良好,系数 $a=-0.2633$, $b=-0.1010$, $c=0.2021$,但是在 PCHE2 通道,幂律关系仅适用于 $\Delta T < 75^\circ\text{C}$ 的情况,如图 6 中紫色线所示,我们拟合了 $21 < \Delta T < 75^\circ\text{C}$ 的数据,拟合效果良好,系数 $a=-0.1795$, $b=-0.2041$, $c=0.1108$ 。

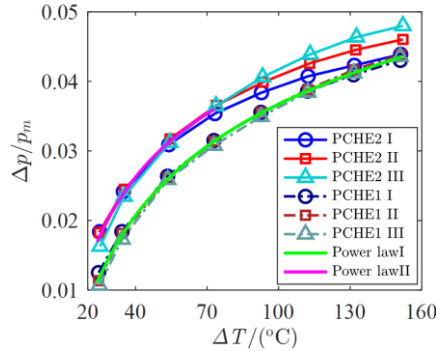


图 6 无量纲压力振幅 $\Delta p/p_m$ 与温差 ΔT 合的幂律关系(Power law),紫色线为 PCHE2 通道的结果,绿色线为 PCHE1 通道的结果

为了定量的测量相对改善程度，使用以下的公式进行计算，结果如图 7 所示。它表明对应三组实验相对改善程度从 50%左右开始，然后随着温差的增大迅速降低。因此，PCHE2 通道对发动机的改善低温差下比较明显，高温差下的效果不是很理想。

$$\text{Relative improvement} = \frac{\Delta p_{\text{PCHE2}} - \Delta p_{\text{PCHE1}}}{\Delta p_{\text{PCHE2}}} \times 100\% \quad (4)$$

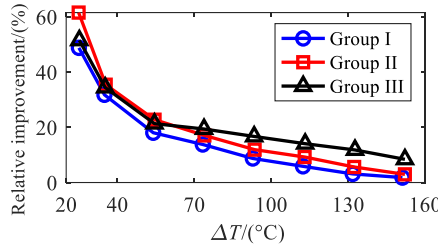


图 7 PCHE2 通道下压力振幅相对于 PCHE1 随着 ΔT 改变时的相对改善(relative improvement)程度，其值由公式(4)求得。Group I、II、III 分别表示 PCHE1、PCHE2 对应组的计算结果。

图 8 中展示的为压力振荡的频率 f 随温差 ΔT 的变化情况，结果表明， f 与 ΔT 和充注质量均呈正相关的关系。除此之外，通过 PCHE1、PCHE2 通道结果的对比， f 在 PCHE2 通道中有更高的值，但是最大处也没有超过 10Hz，因此，我们设计的发动机是一台典型的低频装置。

总之，通过减小 PCHE 热声叠通道尺寸(从 PCHE1 $D_h=222.1\mu\text{m}$ 到 PCHE2 $D_h=148.0\mu\text{m}$)，显著提高了发动机的 Δp 和 f ，但是也导致了在高温差($\Delta T>75^\circ\text{C}$)下幂律关系的发散，如图 6 所示。详细的原因我们将在 2.3 节进行讨论。

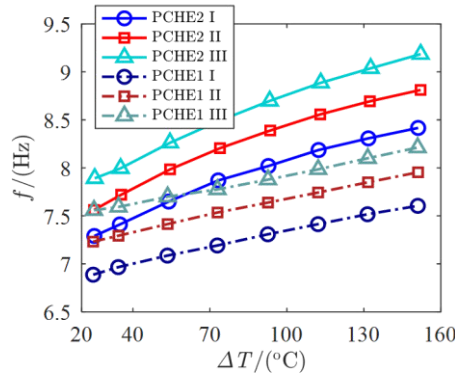


图 8 PT1 处的频率随温差的变化情况，虚、实线分别表示 PCHE1、PCHE2 通道的结果

2.2 起振温差

本节将探究热声发动机的另一个重要的性能参数—起振温差 ΔT_{onset} 。如图 9 所示，在 PCHE1 通道的 IV 到 VII 实验结果中， ΔT_{onset} 分别为 14.8°C 、 15.8°C 、 19.0°C 和 20.1°C ，相应的压力为 7.381、7.500、8.090 和 8.374MPa。在 PCHE2 通道的 IV 到 VI 实验结果中， ΔT_{onset} 分别为 11.2°C 、 13.1°C 和 15.9°C ，相应的压力为 7.388、7.899 和 8.133MPa。使用幂律关系公式(3)可以推出起振温差 ΔT_{onset} 的预测公式：

$$\Delta T_{\text{onset}} = \sqrt[3]{-c/a}. \quad (5)$$

将两个阶段系数 a 、 b 和 c 分别代入公式可以得到 PCHE1、PCHE2 通道条件下预测起振温差分别为 13.7 和 10.7°C。结合 CO₂ 的临界压力为 7.377MPa 可知，实验压力越接近临界压力，起振温差越低。图 9 中的实验与幂律关系的偏差程度的结果也表明越接近临界压力时，实验与幂律关系的偏差越小，而且也越接近预测出的起振温差。除此之外，随着 PCHE 热声叠通道尺寸的减小，发动机的起振温差减小了 3.6°C。造成这种变化的机理我们会 2.3 节进行讨论。

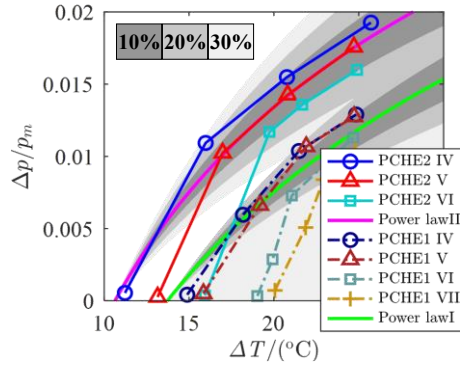


图 9 无量纲压力振幅 $\Delta p/p_m$ 与温差 ΔT 的幂律关系(Power law)和实验数据随温差的变化情况，虚、实线分别表示 PCHE1、PCHE2 通道的实验结果，绿、紫线分别表示 PCHE1、PCHE2 通道的 Power law，阴影区域表示实验对幂律关系的偏差程度。

2.3 结果讨论

为了探究两个 PCHE 热声叠通道尺寸造成压力振幅 Δp 和振荡频率 f 增大以及起振温差 ΔT_{onset} 降低的深层机理，我们引入热渗透深度 δ_κ ，其定义公式为：

$$\delta_\kappa = \sqrt{\frac{2\kappa}{\omega}}, \quad (6)$$

其中， ω 为驻波的角频率， κ 是热扩散系数。 δ_κ 表示在一个振荡周期内，热量可以扩散到流体的距离^[25]。由于当前热声发动机在超临界压力和温度下工作，CO₂ 存在特殊的物理性质， κ 会发生剧烈变化，而且与热声叠上的温度分布 T_{sk} 和平均压力 p_m 都有关系，为了使问题简化，我们定义一个时空平均热渗透深度：

$$\bar{\delta}_\kappa = \frac{\int_0^{l_{sk}} \sqrt{\frac{2\kappa(T_{sk}, p_m)}{\omega}} dx}{l_{sk}}, \quad (7)$$

其中， $l_{sk}=40\text{mm}$ ，它表示图 1 所示的热声叠部分的长度。利用 PCHE1 三个测试组的数据我们可以得出 $\bar{\delta}_\kappa$ 的范围为 28 到 48 μm 。对于热声叠通道尺寸的设计，前人做过很多研究，实际上，通常推荐的热声叠通道尺寸应处于两至四倍的热渗透深度之间，我们将这一观点应用于平均热渗透深度，得到通道尺寸应位于 $2\bar{\delta}_\kappa$ 和 $4\bar{\delta}_\kappa$ 之间。在这种情况下，驻波热声发动机在理论上会有更好的性能^[25,26]。

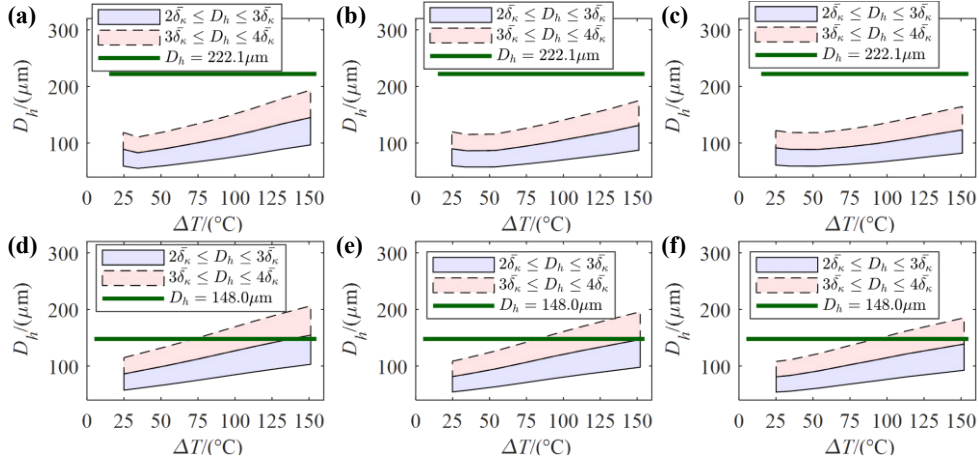


图 10 $2\bar{\delta}_k \leq D_h \leq 3\bar{\delta}_k$ 和 $3\bar{\delta}_k \leq D_h \leq 4\bar{\delta}_k$ 区间面积和两个 PCHE 各三组实验的实际 D_h , PCHE1 通道为图(a)到(c), PCHE2 通道为图(d)到(f)。 $\bar{\delta}_k$ 由公式(7)求出。

图 10 展示了 $2\bar{\delta}_k \leq D_h \leq 3\bar{\delta}_k$ 和 $3\bar{\delta}_k \leq D_h \leq 4\bar{\delta}_k$ 区间面积和两个阶段各三组实验的实际 D_h , PCHE1 通道实验结果如图 11(a)到(c), D_h 一直处于两个区间面积之上。但是在 PCHE2 通道的 I 到 III 组实验中, D_h 会与 $4\bar{\delta}_k$ 分别相交于温差 ΔT 为 72、83 和 93°C。这表明 PCHE2 通道装置中的工质在一个振荡周期内, 会更多地受到热膨胀或收缩的影响, 进而导致产生更高的振幅和频率, 以及更低的起振温差。

D_h 与 $4\bar{\delta}_k$ 的交点提供了非常良好的物理信息。如图 6 所示, 在 PCHE2 通道实验中, 幂律关系拟合线在 $\Delta T=75^\circ\text{C}$ 开始发散, 这个温差点非常接近第 I 组实验中 D_h 与 $4\bar{\delta}_k$ 的交点, 而且第 II、III 组几乎是在第 II 组的 D_h 与 $4\bar{\delta}_k$ 交点 $\Delta T=83^\circ\text{C}$ 处开始发散。这些现象表明 $D_h > 4\bar{\delta}_k$ 是幂律关系存在的必要条件。

另外, D_h 处于 $3\bar{\delta}_k \leq D_h \leq 4\bar{\delta}_k$ 范围之后, Δp 的增长率开始明显的下降(如图 7 所示)。通过图 5 可以看出, PCHE2 阶段第 I 组的右半部分很平缓, 表明了这种情况下, 装置明显达到了饱和状态, 即增加 ΔT 的边际效益没那么显著了。如图 10(d)所示, D_h 最后与 $3\bar{\delta}_k$ 相交于 $\Delta T=138^\circ\text{C}$ 。第 II 组高温差下也表现出了相似的现象, 可见此时 D_h 与 $3\bar{\delta}_k$ 非常接近。第 III 组由于 D_h 与 $3\bar{\delta}_k$ 还有一定距离, 饱和性没那么明显。因此, $3\bar{\delta}_k$ 可以作为热声发动机工作中需要避免的显著饱和的阈值。

综上所述, $3\bar{\delta}_k \leq D_h \leq 4\bar{\delta}_k$ 对热声叠通道尺寸来说是一个有利的区间。超过 $4\bar{\delta}_k$ 时, 发动机的性能不能被充分利用, 但是在 $\Delta p/p_m$ 和 ΔT 之间会存在一个普遍性的幂律关系, 与充注质量无关。在这个区间以下 ($D_h < 3\bar{\delta}_k$) 时, 会使发动机达到饱和状态, Δp 对 ΔT 的增长率会显著减弱。

3 结 论

本文实现了基于 PCHE 的超临界 CO_2 驻波发动机, 实验结果表明, 在平均压力 9.469MPa 温差 152.1°C 时, 最大压力振幅达到了 0.455MPa, 并且在平均压力 7.381MPa 时, 最小的起振温差为 11.2°C 。我们定义 $\bar{\delta}_k$ 为平均热渗透深度, 本文表明跨超临界温差下, $\bar{\delta}_k$ 是一个显著的变量。我们确认了 $3\bar{\delta}_k \leq D_h \leq 4\bar{\delta}_k$ 是 CO_2 通道的有利区间。 $D_h >$

4 $\bar{\delta}_k$ 对应于一个没有完全优化的状态,但是它可以得到无量纲压力振幅与温差的简洁幂律关系。 $D_h < 3 \bar{\delta}_k$ 时,压力振幅达到明显的饱和状态,压力振幅随温差的增长率很低。本文表明将超临界流体和 PCHE 结合在一起的热声发动机是一种很有前景的研究方向,它能带来较高的压力振幅以及显著的低起振温差。

参考文献

- [1] K. T. Feldman, Jr., A study of heat generated pressure oscillations in a closed end pipe, University of Missouri, Columbia, 1966.
- [2] K. Tang, Z. Huang, T. Jin, G. Chen, Influence of acoustic pressure amplifier dimensions on the performance of a standing-wave thermoacoustic system, *Applied Thermal Engineering* 29 (5-6) (2009) 950–956.
- [3] G. Yu, X. Wang, W. Dai, E. Luo, Study on energy conversion characteristics of a high frequency standing-wave thermoacoustic heat engine, *Applied Energy* 111 (2013) 1147–1151.
- [4] G. Chen, L. Tang, B. R. Mace, Theoretical and experimental investigation of the dynamic behaviour of a standing-wave thermoacoustic engine with various boundary conditions, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 123 (2018) 367–381.
- [5] G. Chen, L. Tang, B. R. Mace, Theoretical and experimental investigation of the dynamic behaviour of a standing-wave thermoacoustic engine with various boundary conditions, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 123 (2018) 367–381.
- [6] M. Ja'fari, A. J. Jaworski, On the nonlinear behaviour of oscillatory flow in a high pressure amplitude standing wave thermoacoustic heat engine, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 201 (2023) 123595.
- [7] P. H. Ceperley, A pistonless stirling engine – The traveling wave heat engine, *The Journal of the Acoustical Society of America* 66 (5) (1979) 1508–1513.
- [8] T. Yazaki, A. Iwata, T. Maekawa, A. Tominaga, Traveling wave thermoacoustic engine in a looped tube, *Physical Review Letters* 81 (15) (1998) 3128.
- [9] S. Backhaus, G. Swift, A thermoacoustic stirling heat engine, *Nature* 399 (6734) (1999) 335–338.
- [10] K. de Blok, Novel 4-stage traveling wave thermoacoustic power generator, in: *Fluids Engineering Division Summer Meeting*, Vol. 49491, 2010, pp. 73–79.
- [11] K. Tang, Y. Feng, S. Jin, T. Jin, M. Li, Performance comparison of jet pumps with rectangular and circular tapered channels for a loop-structured traveling-wave thermoacoustic engine, *Applied Energy* 148 (2015) 305493 313.
- [12] M. Senga, S. Hasegawa, Four-stage loop-type cascade traveling-wave thermoacoustic engine, *Applied Thermal Engineering* 104 (2016) 258–262.
- [13] L. Liu, Y. Liu, F. Duan, Effect of the characteristic time on the system performance of a three-stage looped traveling-wave thermoacoustic engine, *Energy Conversion and Management* 224 (2020) 113367.
- [14] T. Bi, Z. Wu, W. Chen, L. Zhang, E. Luo, B. Zhang, Numerical and experimental research on a high-power 4-stage looped travelling-wave thermoacoustic electric generator, *Energy* 239 (2022) 122131.
- [15] P. Carles, A brief review of the thermophysical properties of supercritical fluids, *The Journal of Supercritical*

Fluids 53 (1-3) (2010) 2–11.

- [16] D. Alexander, M. T. Migliorino, S. Heister, C. Scalzo, Numerical and experimental analysis of a transcritical thermoacoustic prototype in: 2018 Fluid Dynamics Conference, 2018, p. 3536.
- [17] M. T. Migliorino, C. Scalzo, Real-fluid effects on standing-wave thermoacoustic instability, *Journal of Fluid Mechanics* 883 (2020) A23.
- [18] A. Martinez, M. T. Migliorino, C. Scalzo, S. D. Heister, Experimental and numerical investigation of standing wave thermoacoustic instability under transcritical temperature conditions, *The Journal of the Acoustical Society of America* 150 (4) (2021) 2900–2911.
- [19] X. Xu, T. Ma, L. Li, M. Zeng, Y. Chen, Y. Huang, Q. Wang, Optimization of fin arrangement and channel configuration in an airfoil fin PCHE for supercritical CO₂ cycle, *Applied Thermal Engineering* 70 (1) (2014) 867–875.
- [20] M. Saeed, M.-H. Kim, Thermal-hydraulic analysis of sinusoidal fin-based printed circuit heat exchangers for supercritical CO₂ Brayton cycle, *Energy Conversion and Management* 193 (2019) 124–139.1.
- [21] Z.-R. Peng, Q.-Y. Zheng, J. Chen, S.-C. Yu, X.-R. Zhang, Numerical investigation on heat transfer and pressure drop characteristics of coupling transcritical flow and two-phase flow in a printed circuit heat exchanger, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 153 (2020) 119557.
- [22] H. Xu, C. Duan, H. Ding, W. Li, Y. Zhang, G. Hong, H. Gong, The optimization for the straight-channel PCHE size for supercritical CO₂ Brayton cycle, *Nuclear Engineering and Technology* 53 (6) (2021) 1786–1795.
- [23] F. Jin, D. Chen, L. Hu, Y. Huang, S. Bu, Optimization of zigzag parameters in printed circuit heat exchanger for supercritical CO₂ Brayton cycle based on multi-objective genetic algorithm, *Energy Conversion and Management* 270 (2022) 116243.
- [24] Y. Yang, H. Li, B. Xie, L. Zhang, Y. Zhang, Experimental study of the flow and heat transfer performance of a PCHE with rhombic fin channels, *Energy Conversion and Management* 254 (2022) 115137.
- [25] G. W. Swift, Thermoacoustic engines and refrigerators, *Physics today* 48 (7) (1995) 22–28.
- [26] A. Piccolo, Numerical computation for parallel plate thermoacoustic heat exchangers in standing wave oscillatory flow, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 54 (21) (2011) 4518–4530.

内嵌管道的测井仪热管理仿真及实验研究

张嗣祺, 彭嘉乐, 邓超, 魏福龙, 丁思淇, 胡润, 罗小兵*

(华中科技大学能源与动力工程学院, 湖北 武汉 430074)

(Tel:13971460283, Email:luoxb@hust.edu.cn)

摘要: 测井仪在井下作业时通常采用被动式热管理系统对电子器件进行热保护, 但系统优异的隔热性能导致测井仪工作完毕后面临冷却困难的问题。为解决散热困难的问题, 提出了内嵌管道的测井仪热管理系统。通过仿真和实验得出, 内嵌管道系统工作过程的热源温度相较于传统系统平均降低 7.82°C , 且工作完毕后通入 1.5 L/s 的空气在 3.5 h 后即可将测井仪冷却至 40°C 以下。所提出的热管理系统能在满足控温需求的基础上, 实现快速冷却, 在石油勘探领域具有应用前景。

关键词: 测井仪; 热管理系统; 内嵌管道; 控温性能; 主动冷却

0 前言

随着人类对石油资源的需求不断增长, 地底深层的油田成为了石油勘探和开发的热点^[1-3]。测井仪是用于勘探地层中各种物理量的仪器, 被誉为石油工业的眼睛^[4]。对于电缆测井仪而言, 其在工作时先通过电缆下放至井下, 在向上拉升的过程中完成对岩层物理量的测量, 一般需要在井下工作 $2\text{--}24\text{ h}$ ^[5]。

随着钻井深度的增加, 井温将随之升高, 在到达一定深度时, 井温甚至会突破 200°C ^[6], 而测井仪内部的标准电子器件最高耐温一般不超过 125°C ^[7]。这也意味着在测井仪作业过程中, 高温环境和电路自发热会使测井仪内的电子元件面临严峻的超温失效问题, 因此需要对内部电子器件进行热管理。

目前主流的测井仪热管理方案中, 按照有无能量输入, 可分为主动式热管理和被动式热管理。主动式热管理系统通过外界能量输入将测井仪电路自发热运送至外界高温环境, 然而, 高温井下的主动制冷技术往往需要增加额外的移动部件和电子设备, 使系统变得更加复杂, 可靠性降低。而被动式热管理系统集成度高, 结构简单, 是目前最为成熟可靠的热管理系统^[8]。被动式热管理系统主要从隔热, 储热和强化换热三个方面控制电子器件的温度。隔热方面, 将测井仪电路骨架部分装载于金属保温瓶中, 有效隔绝高温环境的周向漏热, 并将隔热塞设置在保温瓶开口处用于隔绝轴向漏热量^[9]。储热方面, 采用熔点较低的固液相变材料对电子器件的自发热进行临时存储^[10]。强化换热方面, 通过高导热率的金属骨架构建热源到相变材料的传热通道, 避免电子器件自发热在热源处堆积^[11-12]。通过以上三方面结合, 可使测井仪在 205°C 的高温环境中稳定作业^[13]。

热管理系统具有优异的隔热效果, 既能隔绝高温环境漏热, 延长测井仪工作时长, 也能阻止内部热量向低温环境散失, 从而导致测井仪工作完毕后面临散热困难的问题。

保温瓶内的电路骨架从高温状态冷却至室温需要一周左右，严重影响二次作业的效率。而将电路骨架从保温瓶中抽出冷却也不可取，其原因是在没有保温瓶时，芯片直接裸露在空气中冷却会出现冷却热应力过大^[4]和水蒸气冷凝等问题，造成芯片损坏。因此需要合适的方案对工作完毕后的系统进行快速散热。

为了解决上述问题，提出了内嵌管道的测井仪热管理系统，在测井仪骨架中铺设可供流体流动的管道，并利用内嵌的管道向系统内通入压缩空气实现快速冷却。随后建立系统的传热模型，采用数值仿真的方法，探究内嵌管道后系统控温效果的变化，并定量计算出降温过程的冷却速率。最后加工出内嵌管道的测井仪骨架，通过实验测试进一步验证该方案的可实施性。

1 数值仿真及实验测试

1.1 系统设计

图 1(a)为内嵌管道的热管理系统结构示意图，保温瓶在最外侧用以保护电子器件，两侧开口处布置有隔热塞隔绝高温环境，电路骨架两端连接有相变材料储存电路的自发热。为了使系统工作完毕后快速冷却，在传统骨架结构中布置贯穿整个测井仪结构的管道以供冷却介质流动，让冷却介质与测井仪系统中的各个模块充分换热，将内部热量带走。图 1(b)展示了系统的三维模型，其中储热模块的壳体加工有内部槽道，用以密封熔化后的液态相变材料。冷却管道通过内槽道贯穿整个系统，而不直接与相变材料接触。模型的具体结构尺寸在表 1 中列出。

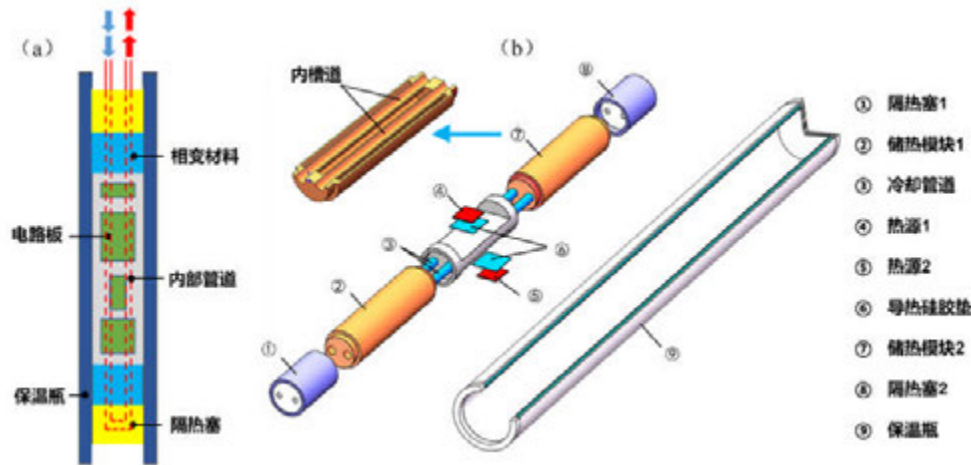


图 1 (a)热管理系统结构示意图 (b)内嵌管道的测井仪热管理系统三维结构

Fig.1 (a) Schematic structure of the thermal management system (b) 3D structure of the thermal management system of the logging instrument with the embedded pipelines

表 1 模型尺寸参数

Table1 Size dimensions of the model

直径	隔热塞 1 长度	储热模块 1 长度	储热模块 2 长度	隔热塞 2 长度
72 mm	110 mm	233 mm	207 mm	50 mm

图2所示为冷却介质在结构中的流动示意，所设计的冷却管道为内径8 mm，外径16 mm的紫铜管。可以看出该方案将流道集成在骨架内部，工作完毕后无需接触保温瓶内部的高温骨架，直接通过预留的接口通入冷却介质，即可实现快速冷却的效果。且该冷却方案通过改变冷却介质的通入量来控制整个系统的降温速率，可满足各种冷却速率的需求，实现高效的散热。

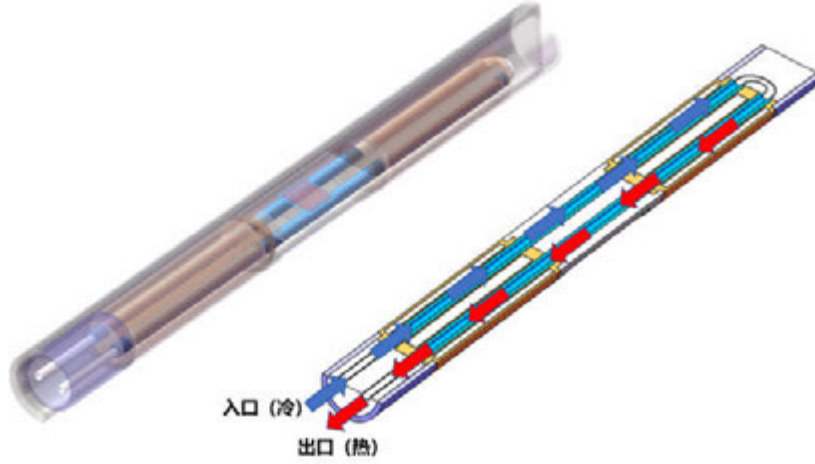


图2 冷却介质在结构中的流动示意

Fig.2 Schematic flow of the coolant in the structure

1.2 数值仿真

为验证内嵌管道的测井仪热管理系统工作时的控温效果和工作完毕后的散热效果，采用有限元方法对该系统的工作升温过程和工作完毕后的散热过程进行数值仿真。在建立传热模型前，做出如下假设：（1）由于保温瓶内空间狭小，空气几乎不流动，忽略测井仪内部空气的对流传热^[15]。（2）由于保温瓶内空气与骨架温差不大，忽略二者之间的辐射换热。（3）不考虑各模块间的接触热阻。（4）保温瓶真空层等效为导热系数很低的固体层^[16]（5）忽略相变材料熔融时的流动^[17]。由此，整个测井仪热管理系统可简化为一个由导热微分方程控制的非稳态传热模型，由公式(1)和(2)控制：

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \vec{q} = Q \quad (1)$$

$$\vec{q} = -k \nabla T \quad (2)$$

其中，式(1)中从左到右的各项依次为：热瞬态项，热对流项，导热项，热源项。由于测井仪热管理系统涉及相变材料的相变过程，该过程在仿真求解时具有高度非线性，因此，采用等效热容法计算相变材料的相变过程^[18]。该方法将相变材料的潜热等效为热容的一部分，并将相变过程假设为一个温度过渡阶段，相变材料的温度从 $T_m - \Delta T / 2$ 过渡到 $T_m + \Delta T / 2$ ，其中 T_m 为相变材料相变温度， ΔT 为过渡温度。过渡区中相变材料的物性通过相1和相2的混合材料特性得出，其控制方程如式(3)——(7)所示。

$$\rho = \theta_1 \rho_1 + \theta_2 \rho_2 \quad (3)$$

$$C_p = \frac{1}{\rho} (\theta_1 \rho_1 c_{p,1} + \theta_2 \rho_2 c_{p,2}) + L_{1 \rightarrow 2} \frac{\partial \alpha_m}{\partial T} \quad (4)$$

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \frac{\theta_2 \rho_2 - \theta_1 \rho_1}{\theta_1 \rho_1 + \theta_2 \rho_2} \quad (5)$$

$$k = \theta_1 k_1 + \theta_2 k_2 \quad (6)$$

$$\theta_1 + \theta_2 = 1 \quad (7)$$

其中 θ_1 , θ_2 分别为固相和液相相变材料的体积分数, $L_{1 \rightarrow 2}$ 为相变材料的潜热, ρ , c_p 和 k 分别是相变材料的密度, 定压热容和导热系数。下标 1 和 2 代表固相和液相。 α_m 是相变材料从固相转为液相时建立的二阶平滑相变函数, 仅与温度相关, $\alpha_m(T)$ 函数如式(8)所示, 并由式(4)将潜热转化为等效热容。将求得的等效热容代入式(1)建立的传热控制方程中, 即可对相变过程中的温度分布进行求解。

$$\alpha_m(T) = 0.5 + 0.9375 \cdot \frac{T - T_m}{0.5 \Delta T} - 0.625 \cdot \left(\frac{T - T_m}{0.5 \Delta T} \right)^3 + 0.1875 \cdot \left(\frac{T - T_m}{0.5 \Delta T} \right)^5 \quad (8)$$

系统的冷却过程涉及到流动和传热的耦合求解, 求解过程中假设流场不随时间变化, 采用雷诺时均 N-S 方程, 并运用标准 $k-\varepsilon$ 模型来求解系统的湍流流场。求解时忽略方程组中的时间相关项进行稳态求解, 流动的控制方程如式(9)–(15)所示:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (9)$$

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-p \vec{I} + \vec{K}] + \vec{F} \quad (10)$$

$$\vec{K} = (\mu + \mu_T)(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) - \frac{2}{3}(\mu + \mu_T)(\nabla \cdot \vec{u})\vec{I} - \frac{2}{3}\rho k \vec{I} \quad (11)$$

$$\rho(\vec{u} \cdot \nabla)k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (12)$$

$$\rho(\vec{u} \cdot \nabla)\varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}, \varepsilon = ep \quad (13)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (14)$$

$$P_k = \mu_T [\nabla \vec{u} : (\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{u})^2] - \frac{2}{3}\rho k \nabla \cdot \vec{u} \quad (15)$$

以上公式中均采用张量表示法的计算规则, 其中(12), (13), (14), (15)代表着两个额外的传递方程和两个因变量, 分别指湍流能 k 的输运方程、湍动能耗散率 ε 的输运方程、湍流粘度计算式和一个生成项。而式(9)–式(11)是连续性方程和雷诺平均形式下的 N-S 方程。上述公式中 $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, C_μ 为取值分别为 1.44, 1.92 以及 0.09, σ_k 和 σ_ε 分别是 k 和 ε 的湍流 Pr 数, 取值分别为 1.0 和 1.3^[19]。通过以上控制方程计算出管道内的稳态流场后, 将稳态流动的流场数据输入至方程(1)的速度场 $\vec{u}$ 中进行降温过程的瞬态计算。

根据以上的数学模型，将建立好的几何结构导入 COMSOL Multiphysics 进行有限元求解。按照表 1 设置系统各部件的物性参数，其中低熔点合金的熔化温度设置为 74.17℃，熔化潜热为 37.1 kJ/kg，凝固时由于存在过冷度的影响，相变温度设置为 69℃，相变潜热为 20.12 kJ/kg。采取物理场控制的网格划分方式进行结构的网格划分，并进行网格无关性验证，如表 2 所示。考虑到计算精度和资源，采用 2083002 网格数进行求解。整个仿真分为两部分求解，首先是系统的工作过程，所有部件的初始温度设置为 30℃，两个热源的发热功率均设为 15 W，保温瓶外壁面与隔热塞开口处温度设为 205℃，以 10 min 的时间步长计算 6 h。随后是系统的主动冷却过程，以工作过程最后时刻的温度场作为冷却过程的初始温度分布，并分别设置不同的空气流量进行探究。冷却过程中空气的入口温度设置为 25℃，保温瓶外壁面与隔热塞开口壁面温度设置为对流换热边界条件，换热系数取 4 W/(m²·K)，外部温度取 25℃，主动冷却的计算时长设置为 6 h，时间步长设置为 5 min。

表 2 各部件材料物性

Table 2 Material properties of each component				
名称	材料	热导率 (W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	密度 (kg·m ⁻³)	比热容 (J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)
保温瓶	Inconel 718	14.7	8240	436
真空绝热层	铝箔+间隔物	0.0004	200	1200
骨架	铝合金 6061	167	2710	896
热源	陶瓷	30	3960	850
导热硅胶片	硅胶	1.2	1810	923
隔热塞外壳	聚四氟乙烯	0.25	2200	1000
隔热塞填充物	硅酸铝棉	0.035	400	794.2
相变材料壳体	304 不锈钢	16.3	7930	500
相变材料	低熔点合金	18.8	9580	146(s) 184(l)
冷却管道	紫铜	400	8960	385

表 3 网格无关性验证

Table 3 Grid-independent verification		
网格数	360 min 后的热源温度	720 min 后的热源温度
2817305	113.10℃	27.444℃
2083002	113.17℃	27.401℃
1386460	113.36℃	27.385℃

1.3 实验测试

加工好的内嵌管道测井仪热管理系统样机如图 3 所示，其中图 3(a)为骨架整体装配结构，内嵌管道装配如图 3(b)所示。实验测试台架的示意图如图 4 所示，分别在两个相

变材料的壳体，两个电源，电路骨架，内部隔热塞，保温瓶外壁和烘箱箱体壁面上固定好 K 型热电偶，并将热电偶线和电源线连接至烘箱外的数据采集器和直流稳压电源。实验前将通气管道与骨架中预留的接口相连，并通过金属卡箍进行压紧密封。空压机的排气通过硅胶软管连接流量计进行空气流量的控制。实验时，通过调节直流稳压电源控制两个热源的发热功率均为 15 W，加热片通过导热硅胶垫与铝合金电路骨架相连。烘箱温度设置为 205℃，持续加热 6 h，加热完毕后关闭热源和烘箱的加热功能，并打开烘箱上的隔热盖使内部温度快速下降，待烘箱内温度接近室温时打开空气压缩机并调节流量至 1.5 L/s，进行通气冷却。整个过程中无纸记录仪每隔 1 s 采集一次温度数据。图 5 展示了实验测试台架的实物图。

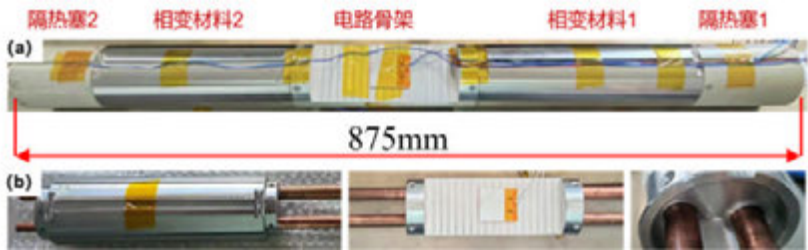


图 3 集成管道测井仪热管理系统样机(a)整体骨架实物图；(b)冷却管道装配图

Fig.3 Prototype of the logging instrument thermal management system with integrated pipelines (a) Physical diagram of the overall skeleton (b) Assembly diagram of the cooling pipeline

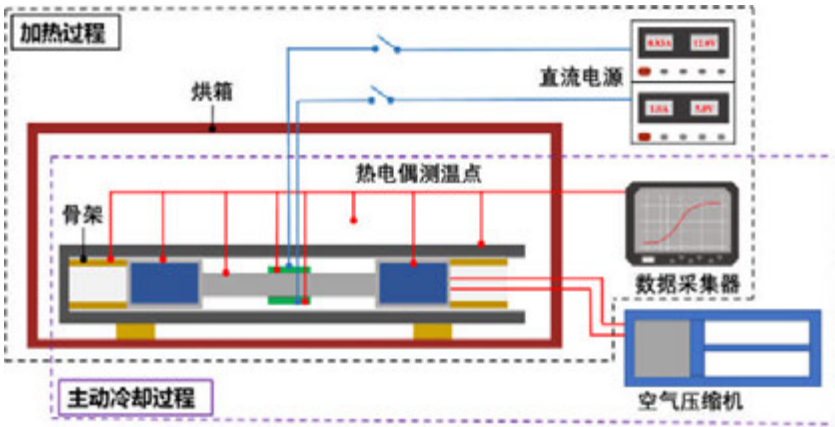


图 4 实验测试台架示意图

Fig.4 Schematic diagram of the experimental testing platform

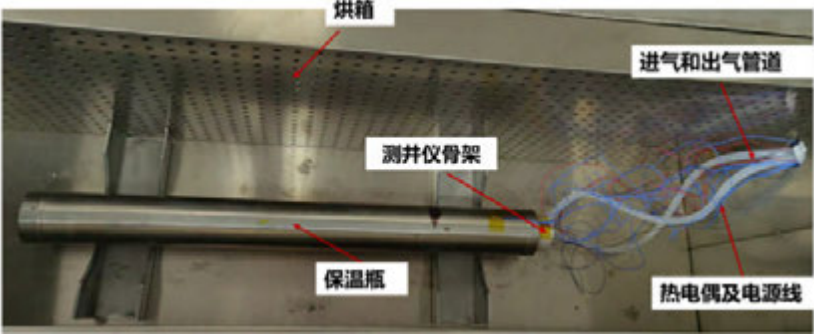


图 5 实验测试台架实物图

Fig.5 Physical diagram of the experimental testing platform

2 结果及分析

2.1 数值仿真结果

对于内嵌管道的热管理系统，管道在贯穿储热模块的同时也会占用相变材料的体积，而相变材料的体积直接关系着系统的储热能力，因此首先需要关注的是加入管道后热管理系统控温效果的变化情况。分别对相同结构长度下的传统热管理系统和内嵌管道热管理系统进行了仿真分析。

图 6(a)所示为传统系统和内嵌管道系统中热源和相变材料的温度变化曲线，图中的近似恒温阶段表示相变材料处于相变阶段。仿真结果表明，360 min 后，内嵌管道结构和传统结构的热源温度分别为 113.17°C 和 116.25°C，最终温差为 3.08°C，整个阶段的内嵌管道结构的热源温度始终低于传统结构，平均温差为 7.82°C。进一步分析可知，内嵌管道系统中相变材料在 360 min 后的温度达到 97.10°C，要高于传统结构的 85.32°C。这是由于高导热铜管路贯穿电路骨架和储热模块，建立了从热源到相变材料的高导热通道，大部分热量从热源传递至相变材料中存储，从而使热源与相变材料的温差仅为 16.07°C。而传统结构中热源与相变材料的温差达到 30.94°C，说明传统结构热量较多的堆积在热源处。

图 6(b)展示了两种系统工作 360 min 后的温度分布情况，从图中可看出，内嵌管道的骨架温度分布比传统骨架温度分布更加均匀，相变材料的储热性能得到了更充分的释放。因此在相变材料少于传统结构的情况下，内嵌管道系统仍能获得更好的控温效果。

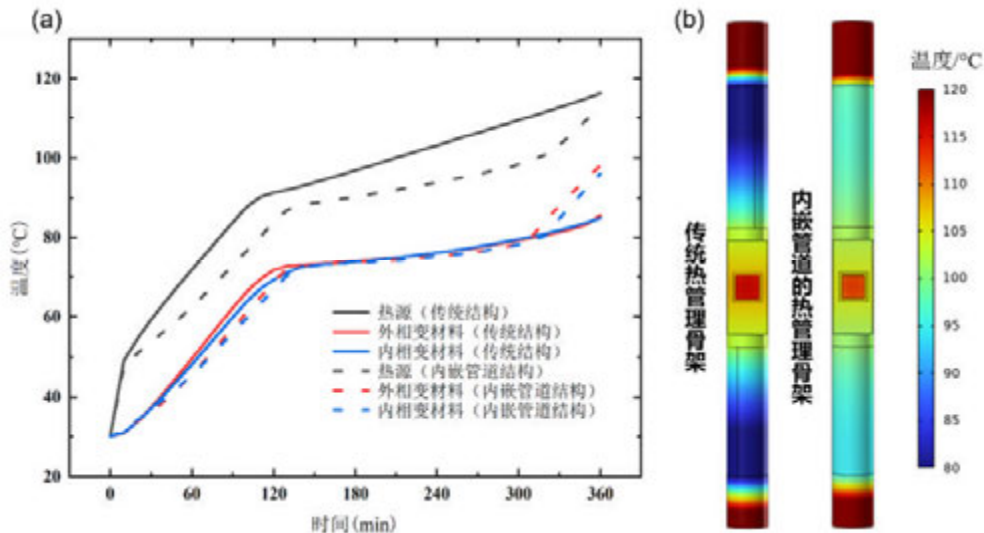


图 6 (a)内嵌管路结构和传统结构的温度变化曲线对比 (b)两种系统工作 360min 后的温度云图

Fig.6 (a) Comparison of temperature variation curves between the embedded pipeline structure and the traditional structure (b) Temperature contours after 360 min of operation for the two systems

探究了内嵌管道热管理系统工作时的控温效果后，对系统工作完毕后的主动冷却速率进行计算。图 7 为测井仪工作完毕后主动冷却过程中通入不同流量的空气时热源温度

的变化曲线，其中流量指的是一个大气压下的气体体积流量。可以看出，流量为 0.1 L/s 时，由于空气流量较小，无法快速带走测井仪工作完毕后储存的热量，720 min 后热源仍处在较高的温度。随着空气流量的增大，冷却速率显著加快，冷却曲线出现了恒温阶段，这表明低熔点合金在释放测井仪工作过程中储存的潜热，流量增大至 1 L/s 后，恒温阶段变得不明显，这表明此流量下测井仪结构的散热速率比相变材料将储热量传至热源的速率更快。从 1.5 L/s 提高流量，热源温度在 720 min 后的温度基本不变，说明 1.5 L/s 的流量已基本能将测井仪内的电子器件冷却至室温。

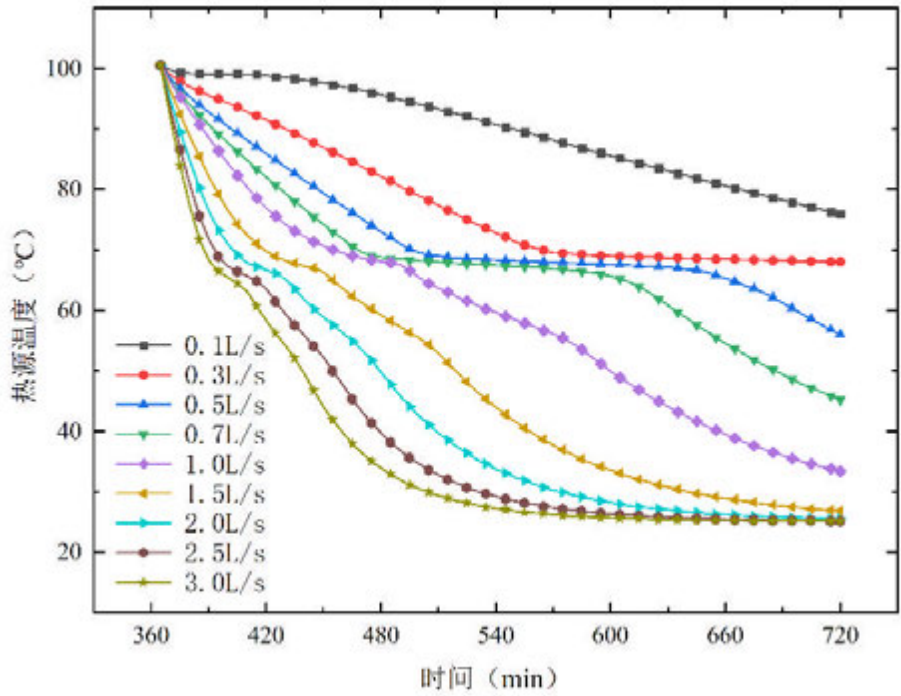


图 7 不同空气流量下的冷却效果

Fig.7 Cooling effect at different air flow rates

图 8 为流量 1.5 L/s 时主动冷却过程中 360 min-660 min 时截面上的温度分布云图变化。从云图中可以看出，由于空气的热容较小，进入骨架后很快被周围仍处在高温下的结构加热到一个较高的温度，导致空气在流经保温瓶内靠近底部的结构时，由于温差较小，无法有效的带走热量，使底部结构降温较慢。同时，由于整个流道的距离较长，空气在流动前半程已吸收了较多的热量，导致返程时并未起到良好的换热效果，这也体现了空气在测井仪主动冷却中的局限性。

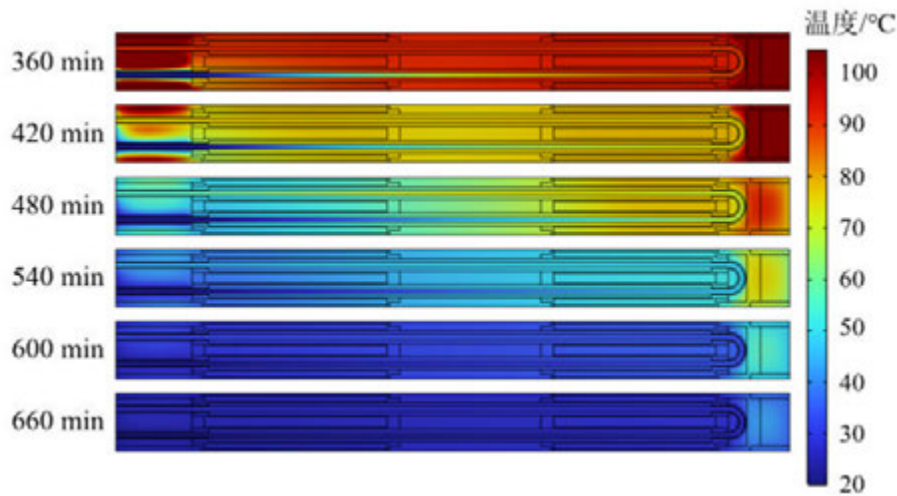


图 8 空气流量 1.5 L/s 时不同时刻的截面温度分布云图变化

Fig.8 Changes in cross-sectional temperature distribution contours at different moments for an air flow rate of 1.5 L/s

2.2 实验测试结果

图 9(a)为实验测试中测井仪热管理系统样机工作过程和冷却过程的全阶段温度曲线图。从图中可以看出，实验开始后烘箱内环境温度迅速上升，在 60 min 后到达 205°C，保温瓶外壁面温度滞后于环境温度，在 120 min 后保持在 205°C。由于保温瓶具有优异的隔热性能，瓶内结构的温度要显著低于烘箱环境。外相变材料壳体由于更靠近保温瓶开口处，漏热更严重，在 140 min 时便开始出现温度恒定阶段，这意味着相变材料开始相变；而内相变材料壳体由于处在保温瓶底部，漏热较少，210 min 时才开始相变。从图中也可以看出，外相变材料壳体温度在相变结束后迅速上升，360 min 时达到了 89.4°C，内相变材料在 360 min 时仍处在平缓期，温度为 78.3°C，说明其内部相变材料还未完全相变。同时，360 min 后两个热源温度分别为 108.9°C 和 114.8°C。在 360 min 后开始降温过程，此时由于烘箱内部与外界连通，烘箱环境温度和保温瓶外壁温度迅速下降并保持在室温。同时泵入 1.5 L/s 的压缩空气，不断将热量带走，使各个测温点的温度都在不断降低。且此时由于加热片不再自发热，热量传递方向转变为从相变材料传递至热源，在图中体现为相变材料壳体温度高于热源的温度。

为了直观说明主动冷却方案的散热效率，通过实验分别测试了测井仪工作完毕后的自然对流冷却过程和主动通气冷却过程，其热源温度变化曲线的对比如图 9(b)所示。可以看到，自然对流冷却在近 2 天时间的冷却后，其内部的电子元件仍处在 58°C，且在冷却期间无法进行二次下井作业。而主动通气冷却则在 3.5 h 后将热源温度降低至 40°C 以下，可进行正常的转井作业，说明所提出的冷却方法是有效的，具有实际应用价值。

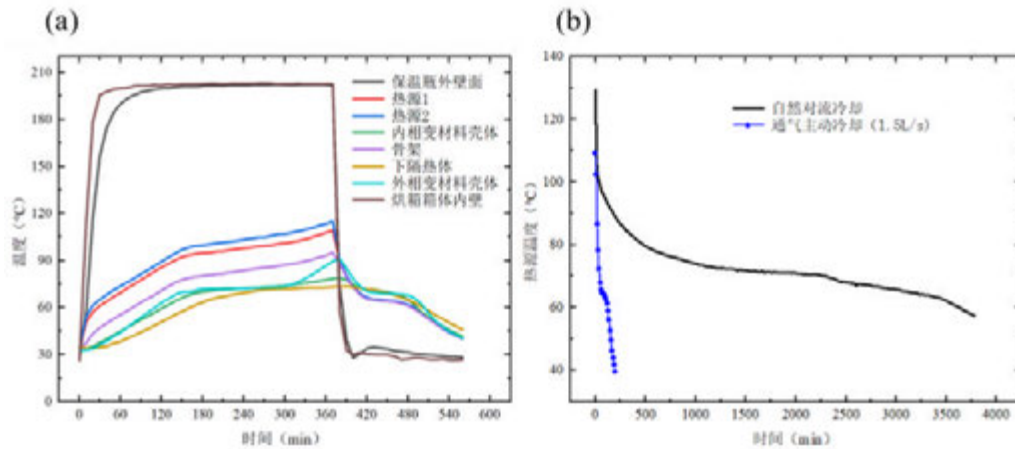


图 9 (a)系统各测温点的全过程温度变化曲线 (b)自然对流冷却和通气主动冷却的热源温度曲线对比
Fig.9 (a) Complete temperature variation curves for various temperature measurement points in the system (b) Comparison of the heat source temperature curves between natural convection cooling and actively ventilated cooling

2.3 实验与仿真结果对比

图 10 对比了实验与仿真中部分测温点温度随时间的变化曲线，可以看出，仿真与实验的温度变化趋势基本一致。系统工作的升温过程中实测温度与仿真温度的最大误差为 13.68°C ，平均误差为 4.74°C ，表明仿真可以较为准确地描述测井仪的工作过程。而对于系统的降温过程，工程应用中更关注仿真能否准确预测降温所需的时间。从图中可以看出，尽管在降温初始阶段各测温点的实验和仿真数据稍有偏差，但随着冷却过程时间的推移，仿真和实验的数据曲线逐渐趋于一致，在 560 min 时实验和仿真的热源温度仅有 0.36°C 的偏差，且整个过程的平均温度误差仅为 0.93°C 。这说明所采用的仿真方法能够较为准确地计算主动冷却所需的时间，且准备地描述仿真冷却过程中系统的温度变化情况。

仿真结果和实验结果间的误差来源有以下几点：第一，热源与骨架、骨架与相变材料间均存在较大的接触热阻，使热量的导热通道受阻，直接导致了实际测试与仿真间的温度误差。从图中可以看出，系统仿真的热源温度在升温过程中要低于实验结果，在冷却过程中则会高于实验结果，且相变材料壳体与热源在冷却过程的仿真中基本没有温差，而实验中则有明显的温差，直观体现出接触热阻对仿真准确性的影响。第二，对于降温过程，由于合金的凝固过程存在过冷度，其相变温度会随着冷却速率的变化而改变，难以确定恒定的相变温度来准确仿真合金的潜热释放过程，导致冷却过程中仿真与实验在相变材料壳体温度上存在一定差异。第三，降温过程中系统外壁面设置的为 $4\text{ W}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$ 的对流换热边界条件，与实际的冷却过程可能存在一定偏差。但由于系统散热主要通过管道内的空气流动带走热量，故不会产生过大的误差。

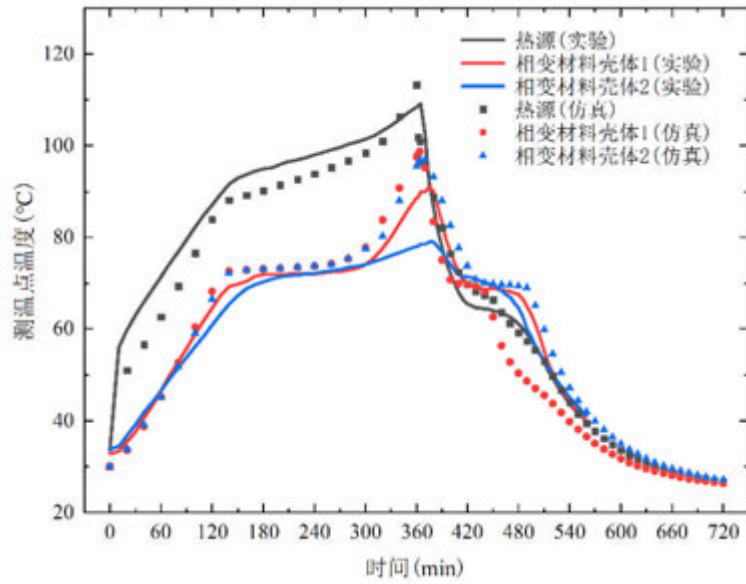


图 10 实验与仿真的温度对比图

Fig.10 Comparison chart of temperature between experiment and simulation

3 结 论

本文提出了内嵌管道的测井仪热管理系统，并设计出相应的测井仪骨架结构，使管道能在保证相变材料壳体密封性的情况下贯穿整个测井仪骨架。随后通过仿真对比分析了内嵌管道系统和传统系统的控温效果差异，并计算了以空气为介质的系统散热速率，最后通过实验验证了仿真结果的准确性。主要结论如下：

- 1) 仿真结果表明，内嵌管道的热管理系统相较于同尺寸下的传统热管理系统在工作过程中热源温度平均降低 7.82°C ，最终热源温度降低 3.08°C 。降温过程中，空气在骨架内的管道中能够进行充分的换热，整个系统的散热效率主要取决于通入空气的流量。
- 2) 加工出实验样机并进行实验测试，测试结果表明，相比需要数天时间才能完全降温的自然对流冷却，所提出的冷却方案能以 1.5 L/s 空气流量使工作完毕后的测井仪骨架在 3.5 h 内冷却到 40°C 以下，从而有效减少了测井仪二次作业的工作间隔。
- 3) 将仿真结果与实验结果进行对比，升温过程热源温度最大误差为 13.68°C ，平均误差为 4.74°C ，降温过程平均误差仅为 0.93°C ，且温度变化趋势基本一致，说明仿真准确度较高，可用于计算测井仪常温主动冷却所需的时间。

致谢

感谢湖北省科技创新团队“先进热管理科技创新团队”项目、国家重点研发计划(No. 2022YFA1203100)的经费支持。

参考文献

- [1] 侯亮, 杨虹, 刘知鑫. 2019 测井技术发展动向与展望[J]. 世界石油工业, 2019.
- [2] Baird T, Fields T, Drummond R, Mathison D, Langseth B, Martin A. High-pressure, high-temperature well logging, perforating and testing[J]. Oilfield review, 1998,10(2):50-67.
- [3] Zhang H, Liu H, Wu S, Sun J, Yang C, Xie Y, Chen C, Gao J, Wang J. Pre-drilling prediction techniques on the high-temperature high-pressure hydrocarbon reservoirs offshore Hainan Island, China[J]. Journal of Ocean University of China, 2018,17:72-82.
- [4] Boyes J. The eyes of the oil industry[J]. Electronics and Power, 1981,27(6):484-488.
- [5] Gooneratne C P, Li B, Zhan G D, et al. Sensors and instrumentation for downhole environments-challenges and opportunities[C]//2019 13th International Conference on Sensing Technology (ICST). IEEE, 2019: 1-6.
- [6] Hyne N J. Nontechnical guide to petroleum geology, exploration, drilling, and production[M]. Penn Well Corporation Tulsa, OK, 2001.
- [7] Buttay C, Planson D, Allard B, Bergogne D, Bevilacqua P, Joubert C, Lazar M, Martin C, Morel H, Tournier D. State of the art of high temperature power electronics[J]. Materials Science and Engineering: B, 2011,176(4):283-288.
- [8] Bennett G A, Sherman G R. Thermal design for protection of downhole electronic packages[R]. Los Alamos National Lab, NM (USA), 1983.
- [9] Shang B, Ma Y, Hu R, et al. Passive thermal management system for downhole electronics in harsh thermal environments[J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 118: 593-599.
- [10] Deng C, Wei F, Lan W, et al. Experimental and Numerical Investigation of Low Melting Point Alloy for Downhole Electronics at High Temperature[C]//2022 IEEE International Power Electronics and Application Conference and Exposition (PEAC). IEEE, 2022: 49-54.
- [11] Peng J, Lan W, Wang Y, et al. Thermal management of the high-power electronics in high temperature downhole environment[C]//2020 IEEE 22nd electronics packaging technology conference (EPTC). IEEE, 2020: 369-375.
- [12] Ma Y, Shang B, Hu R, et al. Thermal management of downhole electronics cooling in oil & gas well logging at high temperature[C]//2016 17th International Conference on Electronic Packaging Technology (ICEPT). IEEE, 2016: 623-627.
- [13] 魏赞庆, 田志宾, 杨庚佳, 等. 高温液压旋转井壁取心仪的研制与应用[J]. 石油钻探技术, 2023, 51: 1-10.
- [14] 梁东成, 陈东东, 张欣, 秦俊虎, 卢红波, 严继康, 易健宏. 温度冲击下多器件组装 PCB 板热应力及寿命分析[J]. 有色金属工程, 2022.
- [15] Peng J, Lan W, Wei F, et al. A numerical model coupling multiple heat transfer modes to develop a passive thermal management system for logging tool[J]. Applied Thermal Engineering, 2023: 120011.
- [16] Peng J, Wang Y, Ding S, et al. Rapid detection of the vacuum failure of logging tools based on the variation in equivalent thermal conductivity[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2023, 188: 108245.
- [17] Zhang J, Lan W, Deng C, et al. Thermal optimization of high-temperature downhole electronic devices[J]. IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology, 2021, 11(11): 1816-1823.

- [18] Lan W, Zhang J, Peng J, et al. Distributed thermal management system for downhole electronics at high temperature[J]. Applied Thermal Engineering, 2020, 180: 115853.
- [19] Launder B E, Spalding D B. Lectures in mathematical models of turbulence[J]. 1972.

周期性晶胞结构液冷电池散热器实验研究

职聪聪¹, 吴永佳^{1*}, 明廷臻^{1*}, 李泽昊¹, Yanyu Chen², 王彩霞¹, 陈琼¹, 谭罡风³

1 武汉理工大学土木工程与建筑学院, 武汉, 430070

2 路易斯维尔大学机械工程系, 肯塔基州, 40292

3 武汉理工大学汽车工程学院, 武汉, 430070

Tel: [18186157207](tel:18186157207) Email: yjwu2019@whut.edu.cn

摘要: 随着电芯的能量密度逐渐提高, 电芯稳定性、安全性成为困扰新能源汽车进一步发展的核心难题。为开发新一代新能源汽车动力电池高效热管理系统, 本文构建了一种面心立方周期性晶胞结构液冷散热器, 并对其进行了电池散热试验。研究表明, 当电池在 5~40℃ 的环境温度下进行放电时, 散热器可以有效地将温度的控制在 21.31~33.04℃, 使电池在安全、高效的温度范围内进行工作, 有效地提高了电池的安全性。当放电倍率为 2C, 环境温度为 25℃, 冷却液质量流量为 0.01、0.03 和 0.05 Kg/s 时, 电池的最高温度分别为 30.26、30.06 和 29.98℃, 与没有散热器的电池相比放电过程的温升分别下降了 59.94%、61.46% 和 62.07%。本研究的研究成果提高了电池散热效果, 为解决新一代新能源汽车热管理问题提供一种新方案。

关键词: 电池散热; 晶胞结构; 电池热管理; 强化传热

0 引言

动力电池热管理技术是电动汽车安全高效运行的关键技术, 在电池温度过高时对电池模组进行散热, 防止热失控事故; 在电池进行低温启动时, 对电池进行预热, 保证低温条件下充电效率和放电性能; 提高电池组内温度均匀性, 防止形成局部热区, 提高电池寿命^[1]。

汽车电池散热技术按照传热介质主要分为风冷、液冷、和相变冷却技术^[2]。风冷技术^[3, 4]具有结构简单、质量轻、成本较低等优点, 但该技术换热系数较低、冷却速度慢、效率较差; 液冷方案^[5, 6]的换热系数高、冷却速度快, 但是对密封性要求高、结构较复杂、维修和保养较为困难; 而相变传热^[7, 8]主要用来改善汽车电池内部温度场的均匀性, 但是需进一步降低体积、重量和成本。目前动力电池热管理系统普遍存在系统设备较为笨重、安全性较差等问题, 因此开发具有高效散热能力电池热管理系统依然有待技术突破。

现有的对换热器的研究要么集中于强化传热, 要么集中于增强机械性能。而对于通过合理设计结构来改善微通道换热器的机械性能和传热性能的研究很少。而在电动汽车

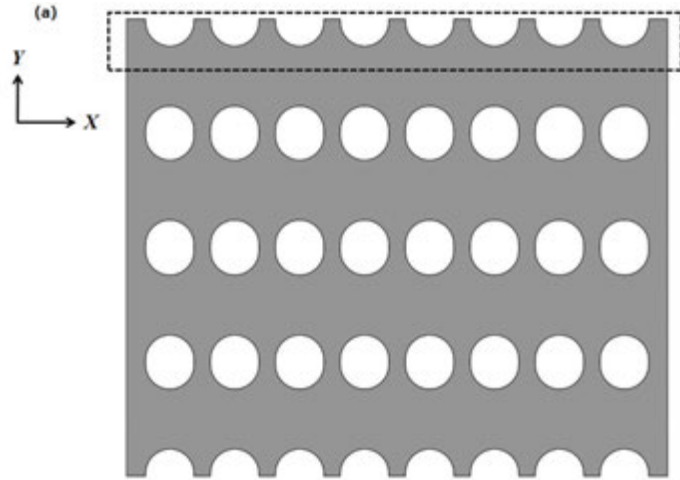
基金项目: 湖北省重点研发项目 (2020BAB129), 国家自然科学基金青年项目 (52208124)

热管理系统中，换热器既需要较高的机械强度同时有需要良好的对流热交换性能。因此，有必要开发一种同时具备这两个优点的换热器新结构。在之前的研究中我们发现周期性晶胞结构与传统波纹直板换热器相比不仅具有更好换热效果同时具备更强的机械性能^[9]。因此，本研究采用换热效果最好的面心立方晶胞结构作为填充材料，构建了一种面心立方周期性晶胞结构液冷散热器，并对其进行电池散热试验。本文采用选择性激光熔融技术制造了面心立方周期性电池散热结构，并对其在不同放电倍率、不同质量流量和不同环境温度条件下对电池的热管理效果进行实验。

2 散热器的设计与制备

2.1 散热器的设计

本文设计了一种适用于 18650 电池的面心立方周期性晶胞结构散热器，图 1（a）为电池散热器模型俯视图，散热器的圆孔为电池安装位置。图 1（b）为图 1（a）中虚线部分的三维剖面图。剖面图的尺寸为 $200 \times 20 \times 40 \text{ mm}$ （ $L \times W \times H$ ），两个电池在 L 和 W 方向上间距分别为 6 和 20 mm，散热器外壳为 2 mm 厚的铝合金板，内部填充面心立方晶胞结构。面心立方晶胞结构在 L 方向为 10 个周期， W 和 H 方向为 2 个周期。通过之前的研究我们发现单个周期晶胞结构的尺寸越小散热效果越好，由于结构过于复杂目前制备技术无法完成制造。因此，综合考虑散热效果和制备成本确定了单个周期晶胞结构的边长为 $l=20 \text{ mm}$ 。



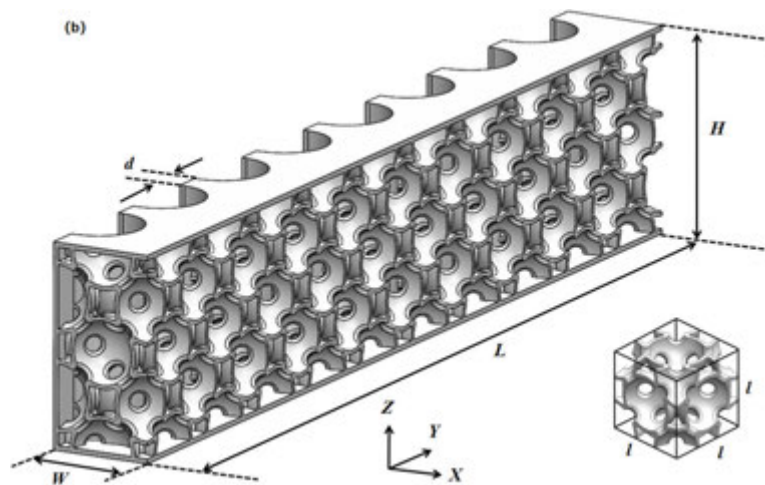


图 1 散热器模型

2.2 散热器的制备

为了便于试验对散热器模型进行了调整设计了如图 2 所示的新模型，模型详细参数如表 1 所示。在原模型前后添加了流体缓冲区域和法兰，缓冲区域长度为 10 mm ，法兰用于和进出口的接头连接，法兰的宽度为 60 mm 。散热器模型采用选择型激光熔融技术制备，制造设备为联泰 380，成形精度为 $\pm 0.1\text{ mm}$ ，材料为铝合金（ $\text{AlSi}_{10}\text{Mg}$ ）。进出口接口同样采用 3D 打印技术制备，制造设备为 Foto 13.3，材料为光敏树脂。

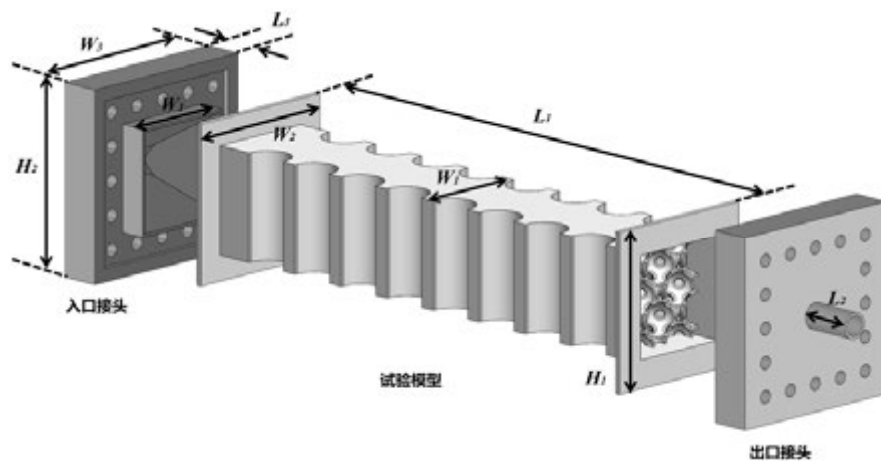


图 2 试验模型

表 1 周期性晶胞结构散热器的详细尺寸

参数	W_1	W_2	W_3	L_1	L_2	L_3	H_1	H_2
值 (mm)	40	60	70	220	20	15	60	70

3 实验方案

3.1 试验平台

实验系统如图 3 所示，散热和进出口接头通过螺栓连接完成后，将 16 块 18650 电池安装在散热器上。为了减少电池与散热器之间的接触热阻，在散热器和电池接触表面涂上导热硅脂。在实验过程中，为了控制环境温度稳定不变，将散热器放置在恒温箱内部。电池测试系统对电池进行充放电测试，并记录电池充放电过程中的电压、电流和充放电量等数据。在每个电池表面粘贴热电偶测量电池在不同条件下充放电过程中的温度，并通过数据采集仪导入电脑中。冷却水供应系统由恒温水箱，水泵和体积流量计构成，为散热器提供冷却水。设备的具体型号参数如表 3 所示。试验平台的组装步骤如下：

- (1) 将 3D 打印的铝合金散热器和树脂进出口接头用螺栓连接起来。
- (2) 在散热器与电池接触表面均匀的涂抹导热硅脂，并将 18650 电池嵌入散热器。
- (3) 将安装好的散热器模块放置在恒温箱内部，
- (4) 使用塑料软管将冷却水系统连接起来，连接顺序依次为恒温水箱出口、增压水泵、电磁调节阀、体积流量计、散热器入口、散热器出口和恒温水箱入口。并且在连接处采用金属卡箍固定，以防止漏水。
- (5) 将 T 型热电偶连接在数据采集仪上，并将热电偶测温贴片分别贴在电池远离散热器一侧中央位置。此外在恒温箱内悬挂一根热电偶用于实时监测恒温箱内部温度。
- (6) 采用电池测试系统的鳄鱼夹连接电池正负极。
- (7) 使用 USB 数据线将电池测试系统和数据采集仪连接在计算机上。

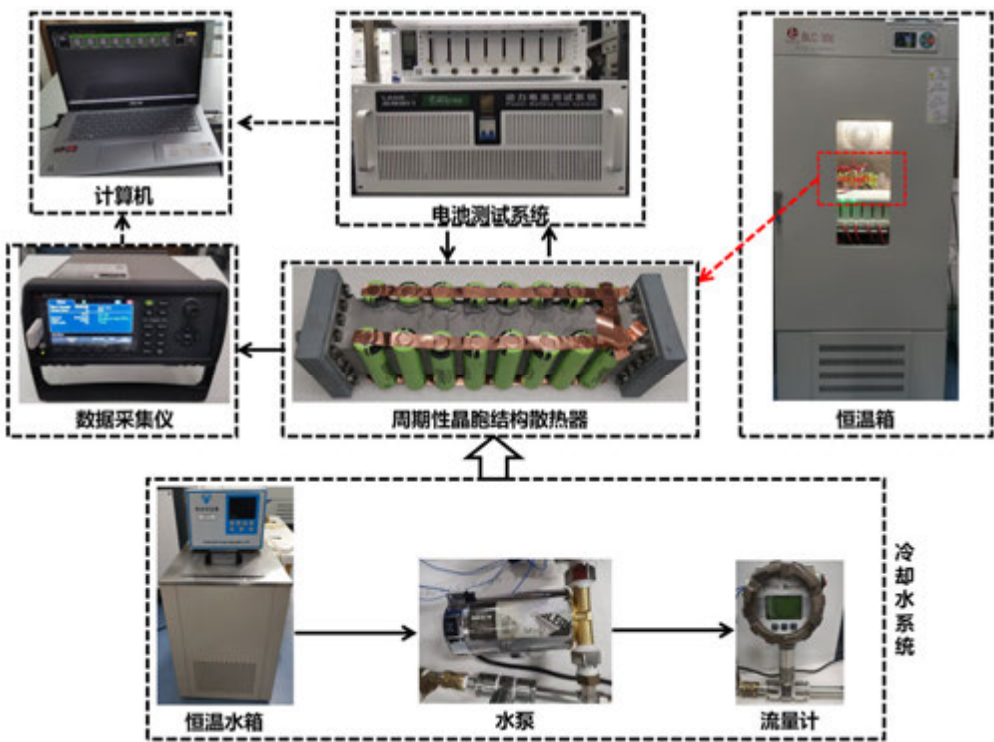


图 3 实验测试系统

表 3 实验设备明细表

序号	设备名称	设备型号	主要性能指标	数量	用途
1	智能恒温槽	舜玛仪器 SDC-6	精度: $\pm 0.05\text{ }^{\circ}\text{C}$	1	提供恒温冷却水
2	增压泵	RGB15-10	量程: $0\sim 10\text{ L/min}$	1	为冷却水提供循环动力
3	涡轮流量计	晟节 C 型 (额定 24V 输入电压)	量程: $0.04\sim 0.25\text{ m}^3/\text{h}$	1	测量流体流量
4	恒温箱	BLC-300	精度: $\pm 0.1\text{ }^{\circ}\text{C}$ 量程: $5\sim 65\text{ }^{\circ}\text{C}$	1	为实验提供恒定的环境温度
5	数据采集仪	KEYSIGHT DAQ970A	基础 DCV 精度: 0.003%	1	自动记录数据
6	热电偶	KPS-BP-TI-T-30-4000-LX	精度: $\pm 0.1\text{ }^{\circ}\text{C}$	17	测量电池表面温度
7	电池测试系统	LANB BT-2018C	量程: $0\sim 5\text{ V}$	1	对电池进行充放电实验
8	电池	松下 18650	容量: 3000 mA	16	-
9	计算机	华硕 laptop	-	1	用于记录和处理测量数据

3.2 实验步骤

3.2.1 不同放电倍率下散热器对电池的影响

电池在不同的放电倍率下产热量不同,而电动汽车在加速行驶和匀速行驶过程中电池的放电倍率也有所不同。因此有必要研究电池在不同放电倍率下散热的散热效果,具体实验步骤如下:

- (1) 按照实验组装步骤组装试验平台。
- (2) 开启恒温箱,设置恒温箱温度为 $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。
- (3) 当恒温箱温度达到预设温度,设置数据采集仪,设置数据采集仪 30 s 读取一次温度数据。
- (4) 依次开启恒温水箱、流量计和增压水泵,设置冷却水温度和流量分别设为 $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 和 0.05 Kg/s ,当恒温水箱温度达到设定温度后,使用温度计检查水温。
- (5) 设置电池测试系统测试程序。充电程序设置为:第一步恒流充电,充电电流为 1500 mA ,当充电电压升至 4.2 V 跳转下一步。第二步恒压充电,恒压充电电压为 4.2 V ,当充电电流小于 50 mA 结束充电。
- (6) 开启数据采集仪和电池测试系统,并记录数据,完成充电测试。
- (7) 充电测试完成后静止一段时间,电池表面温度稳定不变后开始电池放电测试。
- (8) 设置电池测试系统放电测试程序,电池放电程序设置为恒流放电,放电电流为 1500 mA ,当放电电压小于 2.75 V 时结束放电。当电池表面温度稳定不变后关闭数据采集仪,完成电池在环境温度为 $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 、冷却介质流量为 0.003 Kg/s 条件下的 0.5C 充放电试验。

(9) 分别更改充放电程序中的充放电电流为 3000 和 6000 mA ，重复试验步骤 5-8，完成电池在 1C 和 2C 放电倍率条件下的充放电试验。

3.2.2 不同质量流量下散热器对电池的影响

根据前两章的研究发现，冷却介质的流量是影响散热器散热性能的重要因素。为了设计最佳的散热器冷却介质流量，通过对不同流量下散热器对电池性能影响的研究，寻求散热器最佳的流量。具体实验步骤如下：

- (1) 按照实验组装步骤组装试验平台。
- (2) 开启恒温箱，设置恒温箱温度为 25 $^{\circ}C$ 。
- (3) 当恒温箱温度达到预设温度，设置数据采集仪，设置数据采集仪 30 s 读取一次温度数据，并检查电池表面和恒温箱温度是否为环境温度。
- (4) 设置电池测试系统充电测试程序。充电程序设置为：第一步恒流充电，充电电流为 3000 mA ，当充电电压升至 4.2 V 跳转下一步。第二步恒压充电，恒压充电电压为 4.2 V ，当充电电流小于 50 mA 结束充电。
- (5) 开启数据采集仪和电池测试系统，并记录数据，完成充电测试。
- (6) 充电测试完成后静止一段时间，电池表面温度稳定不变后开始电池放电测试。
- (7) 设置电池测试系统放电测试程序，电池放电程序设置为恒流放电，放电电流为 6000 mA ，当放电电压小于 2.75 V 时结束放电。当电池表面温度稳定不变后关闭数据采集仪，完成电池在环境温度为 25 $^{\circ}C$ 、无散热装置条件下的 2C 充放电试验。
- (8) 依次开启恒温水箱、流量计和增压水泵，设置冷却水温度为 25 $^{\circ}C$ ，当恒温水箱温度达到设定温度后，使用温度计检查水温。
- (9) 确认水温无误后分别将冷却水流量设置为 0.001、0.003 和 0.005 Kg/s 。重复试验步骤 4-7，完成电池在不同质量流量冷却介质条件下的充放电试验。

3.2.3 不同环境温度下散热器对电池的影响

环境温度严重影响电池充放电性能，温度过低电池的反应速率会下降，温度过高可能会引发副反应破坏电池内部化学平衡，电池的最佳工作温度为 20~40 $^{\circ}C$ 。因此，测试对不同环境温度下散热器对电池的影响可以有效评估散热器对电池热管理效果。具体实验步骤如下：

- (1) 按照实验组装步骤组装试验平台。
- (2) 开启恒温箱，设置恒温箱温度为 5 $^{\circ}C$ 。
- (3) 当恒温箱温度达到预设温度，设置数据采集仪，设置数据采集仪 30 s 读取一次温度数据。
- (4) 依次开启恒温水箱、流量计和增压水泵，设置冷却水温度和流量分别设为 25 $^{\circ}C$ 和 0.05 Kg/s ，当恒温水箱温度达到设定温度后，使用温度计检查水温。
- (5) 设置电池测试系统测试程序。充电程序设置为：第一步恒流充电，充电电流为 3000 mA ，当充电电压升至 4.2 V 跳转下一步。第二步恒压充电，恒压充电电压为 4.2 V ，当充电电流小于 50 mA 结束充电。

- (6) 开启数据采集仪和电池测试系统，并记录数据，完成充电测试。
- (7) 充电测试完成后静止一段时间，电池表面温度稳定不变后开始电池放电测试。
- (8) 设置电池测试系统放电测试程序，电池放电程序设置为恒流放电，放电电流为 6000 mA ，当放电电压小于 2.75 V 时结束放电。当电池表面温度稳定不变后关闭数据采集仪，完成电池在环境温度为 5°C 、冷却介质流量为 0.05 Kg/s 条件下的 2C 充放电试验。
- (9) 分别将恒温箱内部温度设置为 25°C 和 40°C ，重复试验步骤 5-8，完成电池在不同环境温度条件下的充放电试验。

4 结果与讨论

图 4 为环境温度 25°C ，冷却质量流量为 0.05 Kg/s 时，不同放电倍率条件下电池表面温度的变化。当电池的放电倍率为 0.5 、 1.0 和 2.0 C 时，放电过程中电池表面的最高温度分别为 26.26 、 27.25 和 30.13°C 。当放电倍率为 0.5C 时，电池的发热量较低，温度升高了 1.11°C 。而随着放电倍率的增大，电池的发热量也显著升高，当放电倍率为 1C 和 2C 时，电池的温升分别为 2.1 和 4.98°C ，分别为 0.5C 电池温升的 1.89 和 4.89 倍。表 4-1 为环境温度为 5 、 25 和 40°C 条件下，八个不同电池的放电量。我们发现，随着电池温度的下降

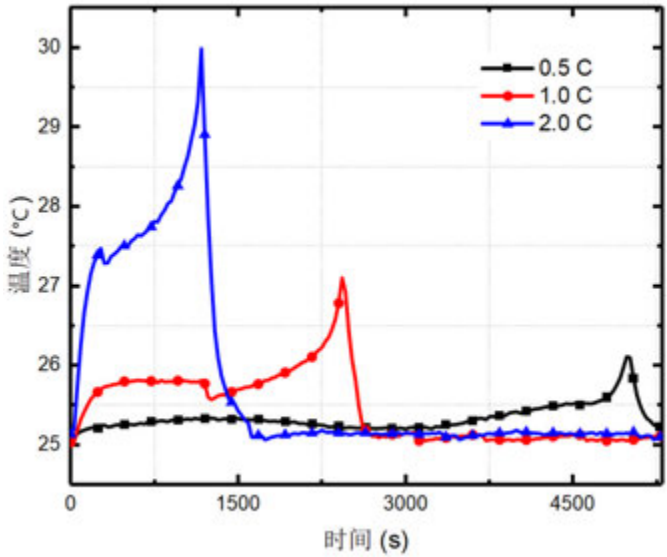


图 4 不同放电倍率条件下放电过程中电池表面温度

图 5 为环境温度 25°C ，放电倍率为 2C ，不同质量流量条件下散热器对电池的散热效果。随着放电的进行，电池表面的温度逐渐增大。由于恒温箱内部温度有波动所以电池表面温度在上升过程中会有短暂的下降。当环境温度为 25°C 时，在没有散热器的情况下，当放电结束后电池的温度升至 38.13°C ，相较于初始温度升高了 13.13°C 。当冷却液质量流量为 0.01 、 0.03 和 0.05 Kg/s 时，电池的最高温度分别为 30.26 、 30.06 和 29.98°C 。与没有散热器的电池相比放电过程的温升分别下降了 59.94% 、 61.46% 和 62.07% 。可以

发现当质量流量从 0.01 Kg/s 升至 0.05 Kg/s 放电过程的温升下降的并不明显，因此在考虑到节能的因素，我们可以使用较低的质量流量来对电池进行降温。

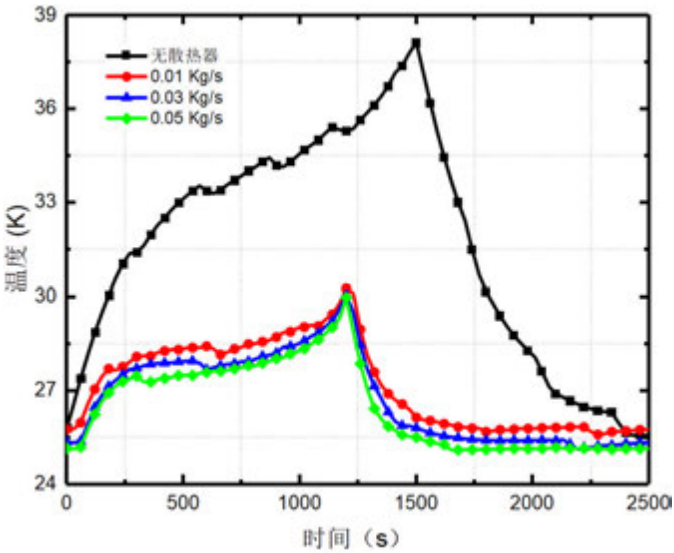


图 5 散热器不同质量流量下电池表面温度

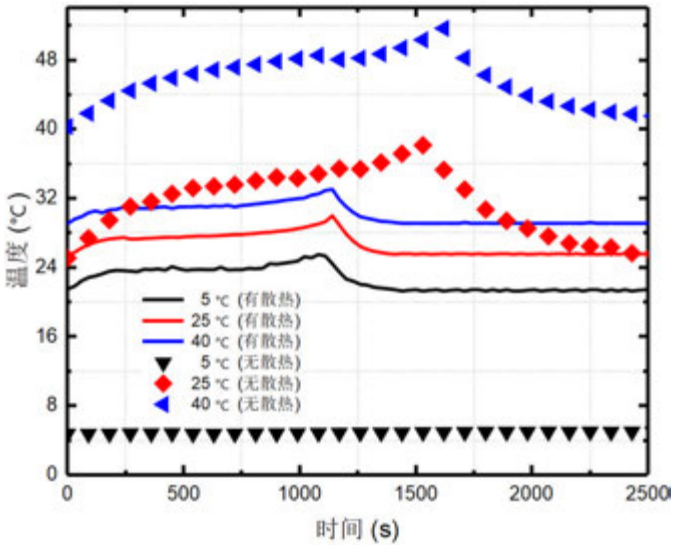


图 6 不同环境温度条件下放电过程中电池表面温度

图 6 为不同环境温度条件下，电池在 2C 放电过程中，使用周期性晶胞结构散热器和不使用散热器电池表面温度的变化。可以发现，电池在 40℃的环境温度下进行 2C 放电时，没有散热器的情况下电池最高温度可以达到 51.64℃，使用散热器后电池在断电状态下表面温度为 29.15℃，在放电过程中电池的最高温度为 33.04℃。相较于不使用散热器，电池的最高温度下降了 18.6℃。当环境温度为 5℃时，使用散热器后电池在断电状态下表面温度可以达到 21.31℃，相较于不使用散热器的情况下表面温度上升了 16.31℃。总的来说，当电池在 5~40℃的环境温度下进行放电时，不使用散热器的情况下电池温度

的波动范围为 0~51.64℃，当使用散热器后温度的波动范围为 21.31~33.04℃。因此，在不同的环境温度下，周期性晶胞结构散热器可以有效的控制电池在安全、高效的温度范围内进行工作，有效的提高了电池的安全性。

5 结论

本文通过对周期性晶胞结构液冷电池散热器在不同放电倍率、不同质量流量和不同环境温度条件下对电池的热管理效果进行实验，得到以下结论：

(1) 当放电倍率为 0.5C 时，温度仅升高了 1.11℃。随着放电倍率的增大，当放电倍率为 1C 和 2C 时，电池的温升分别为 0.5C 的 1.89 和 4.89 倍。

(2) 当放电倍率为 2C，环境温度为 25℃，冷却液质量流量为 0.01、0.03 和 0.05 Kg/s 时，电池的最高温度分别为 30.26、30.06 和 29.98℃。与没有散热器的电池相比放电过程的温升分别下降了 59.94%、61.46%和 62.07%。质量流量增加温升下降并不明显，因此在考虑到节能的因素，我们可以使用较低的质量流量来对电池进行降温。

(3) 当电池在 5~40℃的环境温度下进行放电时，散热器可以有效的将温度的控制在 21.31~33.04℃，使电池在安全、高效的温度范围内进行工作，有效的提高了电池的安全性。

参考文献

- [1] 孙金磊. 应用于高寒地区的电动汽车电池管理关键技术研究 [D]; 哈尔滨工业大学, 2016.
- [2] De Vita A, Maheshwari A, Destro M, et al. Transient thermal analysis of a lithium-ion battery pack comparing different cooling solutions for automotive applications [J]. Applied Energy, 2017, 206(nov.15): 101-112.
- [3] 葛子敬. 电动汽车磷酸铁锂电池组风冷散热系统研究 [D]; 华南理工大学, 2016.
- [4] 杜生鑫金阳. 锂离子电池储能舱风冷散热数值模拟与优化 [J]. 电力工程技术, 2022, 41(6): 58-64.
- [5] 李健, 萧维智, 葛鹰. 液冷冷板散热翅片形状与排布研究 [J]. 流体机械, 2020, 48(08): 6-10.
- [6] Park S, Jung D. Battery cell arrangement and heat transfer fluid effects on the parasitic power consumption and the cell temperature distribution in a hybrid electric vehicle [J]. Journal of Power Sources, 2013, 227(APR.1): 191-198.
- [7] Gils R W V, Danilov D, Notten P H L, et al. Battery thermal management by boiling heat-transfer [J]. Energy Conversion & Management, 2014, 79(mar.): 9-17.
- [8] Wang Y F, Wu J T. Thermal performance predictions for an hfe-7000 direct flow boiling cooled battery thermal management system for electric vehicles [J]. Energy Conversion & Management, 2020, 207(Mar.): 112569.112561-112569.112512.
- [9] Wu Y, Zhi C, Wang Z, et al. Enhanced thermal and mechanical performance of 3d architected

micro-channel heat exchangers [J]. Heliyon, 2023, 9(3).

基于卷积自编码器增压锅炉异常检测方法

刘士龙, 李彦军*

(哈尔滨工程大学, 青岛, 266400)

(Tel: 李彦军, Email: lyjhrb@126.com)

摘要: 本文以小型增压锅炉为对象, 以健康管理体系下的异常检测为研究目标, 开展小型增压锅炉异常检测技术研究。基于小型增压锅炉运行实验数据, 设计和训练去噪卷积自编码器来实现对设备异常状况的监控和检测。研究表明: 基于去噪卷积自编码器建立的小型增压锅炉异常检测模型能够实时输出反映设备异常程度的异常分数, 对于及时发现设备的安全隐患有重要意义。

关键词: 健康管理; 小型增压锅炉; 卷积神经网络; 异常检测

Anomaly Detection Method of Booster Boiler Based on Convolutional Autoencoder

LIU Shi-Long, LI Yan-Jun*

(Harbin Engineering University, Qingdao, 266400)

(Tel: LI Yan-Jun, Email: lyjhrb@126.com)

Abstract: This paper takes the small supercharged boiler as the object, and takes the anomaly detection under the health management system as the research goal to carry out the research on the abnormal detection technology of the small supercharged boiler. Based on the experimental data of a small booster boiler, a denoising convolutional autoencoder is designed and trained to monitor and detect abnormal conditions of the equipment. The research results show that the small booster boiler anomaly detection model based on the denoising convolutional autoencoder can output anomaly scores reflecting the degree of equipment anomaly in

real time, which is of great significance for timely detection of equipment safety hazards.

Key words: health management; small booster boiler; convolutional neural network; abnormal detection

前言

增压锅炉技术成熟、稳定性高,是大型蒸汽动力装置的最佳之选^[1]。然而舰船在执行任务时锅炉工况变化频繁,参数波动较大,导致事故频发,亟需发展高效的健康管理技术。自 20 世纪 70 年代故障预测的概念在航天航空和军事装备领域诞生以来,预测与健康管理的 PHM 逐渐发展成为一个包含数据采集、状态监测、异常检测、故障诊断、故障预测、寿命管理、辅助决策等技术的技术体系。开展 PHM^[2]技术在舰船增压锅炉的应用研究,对于提升大型蒸汽动力装置的可靠性、安全性、经济性和智能化水平具有重要意义。近年来随着深度学习技术的发展,神经网络的特征提取和学习能力得到大幅提升,自编码器作为一种无监督的神经网络,能够从系统全运行参数中提取关键信息,学习并记忆对象正常行为模式^[3],因而被广泛用于动力设备的异常检测。陈鲲^[4]建立深层堆栈式自编码器对柴油发动机振动数据进行深度特征提取和异常检测,作者通过对网络中间层卷积结果的可视化,发现了一维卷积过程具有自适应的信号模态分解能力,具有更加智能化的信号处理功能。李燕^[5]将堆栈式深度自编码器用于 300MW 锅炉异常数据识别,该模型能够正确识别与设备状态无关的异常数据,从而实现数据清洗。

本文以小型增压锅炉及其运行实验产生的数据为研究对象,开展基于深度学习的小型增压锅炉异常检测技术研究。针对小型增压锅炉运行数据特点,设计了小型增压锅炉异常检测建模方案,并基于锅炉真实运行数据和深度学习方法建立小型增压锅炉异常检测模型,在包含丰富信息的测试数据上完成对异常检测模型的性能验证和分析。

1 相关工作

1.1 小型增压锅炉数据采集

基于国内某个小型增压锅炉系统实验台。锅炉型号为 SZS(Z)1.5-1.27/350-Y,是以轻柴油为燃料的自然循环燃油增压锅炉。该小型增压锅炉在正常运行过程中共有 5 个设计工况,其中工况一为点火工况,工况二为暖炉结束后的工况,工况三、工况四和工况五

则分别对应锅炉 50%负荷、75%负荷和 100%负荷。小锅炉运行工况的变化通过调整风机频率和燃油压力调节阀开度来实现，每个设计工况下都对应固定的风油比。本文所使用的小型增压锅炉运行数据集覆盖了从工况二到工况四的三个工况下的运行数据，表 1 给出这三个设计工况下的风机频率和燃油调节阀开度设定值。

表 1 小型增压锅炉设计工况

工况	工况二	工况三	工况四
风机频率	27.7 Hz	39.5 Hz	45.7 Hz
燃油压力调节阀开度	52 %	64 %	76 %

小型增压锅炉系统中测量仪表测量的信号通过可编程逻辑控制器（PLC）系统采集得到，并转化为格式化数据以 CSV 格式存储在终端，数据存储间隔为 1s。

1.2 针对小型增压锅炉运行数据的异常检测研究方案

针对小型增压锅炉运行数据特点，设计了小型增压锅炉的异常检测总体研究方案。对于异常检测模型，使用小型增压锅炉运行数据中升负荷正常运行过程和阀门扰动实验数据作为模型训练和测试数据，通过高斯噪声注入进行数据增强，增强后的数据经过数据归一化和滚动加窗后构成连续特征样本集，使用正常训练集样本训练去噪卷积自编码器，实现锅炉正常行为建模，根据自编码器在训练集上输出的异常分数分布情况设定阈值，得到异常检测模型。最后使用锅炉正常运行过程的测试集样本和阀门扰动过程的测试集样本分别验证模型对正常数据和异常数据的判别能力。

2 去噪卷积自编码器小型增压锅炉异常检测

2.1 卷积神经网络(CNN)

CNN 的设计开始是为了处理高维数组，如多维时间序列，其最早被用于处理图像和语音序列信息，其优势在于克服了全连接网络训练参数过多而导致的效率低下问题^[6]。

一个基本的单层 CNN 整个过程可以被表示为：

$$x_{Conv}^{(j)} = f(X * w_{Conv}^{(j)} + b_{Conv}^{(j)}) \quad (2.1)$$

$$X_{Conv} = [x_{Conv}^{(1)}, x_{Conv}^{(2)}, \dots, x_{Conv}^{(k)}, \dots, x_{Conv}^{(j)}] \quad (2.2)$$

$$x_{fla} = Flatten(X_{Conv}) \quad (2.3)$$

$$y_{t+i} = w^i x_{fla} + b^{(i)} \quad (2.4)$$

式中 $w_{Conv}^{(j)}$ 是第 j 个卷积核的权重向量, $b_{Conv}^{(j)}$ 是对应的偏置; 运算符 $*$ 代表一维卷积运算,

$f(\cdot)$ 为激活函数; w^i 是紧密层第 i 个神经元的权重向量; $b^{(i)}$ 是相应的偏置^[7]。

2.2 基于去噪卷积自编码器异常检测技术

自编码器是一种用于重构输入信号的特殊神经网络^[8]。它包含一个编码器和解码器。编码器将输入信号压缩到低维空间, 解码器使用压缩信号重建输入。给定一个二维张量 X , 其经过自编码器的重构信号 X_{deco} 由下式获得。

$$X_{enco} = Net_e(X) \quad (2.5)$$

$$X_{deco} = Net_d(X_{enco}) \quad (2.6)$$

式中, X_{enco} 为原始信号 X 的编码。 Net_e 和 Net_d 分别为由神经网络权重层构成的编码器和解码器。当新样本来临时, DCAE 输出该样本输入信号的重构版本, 计算输入信号与重构信号的重构误差 (RE), 便得到了进行异常检测的重要指标:

$$RE = \frac{1}{n} \sum_i |x^{(i)} - x_{deco}^{(i)}| \quad (2.7)$$

式中, $x^{(i)}$ 和 $x_{deco}^{(i)}$ 分别为 X 和 x_{deco} 中的元素, n 为 X 中元素个数。当输入样本为异常样本时, DCAE 难以通过其记忆的正常样本数据关系对异常样本进行重构, RE 便会增大。对 RE 设定合理的阈值, 即可将异常样本检测出。

2.3 用于小型增压锅炉异常检测的样本集构建

2.3.1 小型增压锅炉旁通阀扰动实验

本文用于训练和测试小型增压锅炉异常检测模型的数据通过开展旁通阀扰动实验获得，增压锅炉在实验期间的运行过程包括正常运行和旁通阀受扰运行两部分。对旁通阀施加扰动可以模拟锅炉在实际使用过程中由于负载端故障而引起的锅炉负荷异常现象，如汽轮机进气阀故障。

2.3.2 用于异常检测的样本集构建

异常检测模型所需要的特征样本集构建步骤如下：

(1) 训练集和测试集划分

对异常检测模型训练集和测试集划分以第一次旁通阀扰动的时间为间隔，该时间之后的数据划分为测试集 B，用于测试模型对异常工况的检测能力；时间之前的锅炉正常运行数据，前 80%数据作为训练集，用于 DCAE 对锅炉正常行为学习；后 20%数据作为测试集 A，用于测试模型对正常工况的识别能力。将训练集中的后 20%划为验证集，用在模型训练和调试过程中反馈结果。

(2) 数据归一化

数据归一化是提高神经网络模型训练过程中收敛效果的有效途径，本文使用最大最小归一化方法对数据进行归一化，公式如下：

$$x_{norm} = \frac{x - \min(x_{train})}{\max(x_{train}) - \min(x_{train})} \quad (2.8)$$

式中 x_{norm} 是归一化后数值， x 为归一化前数值， x_{train} 为归一化前训练集时间序列。

(3) 噪声注入

在 DCAE 输入中注入噪声，有利于降低模型过拟合风险。这里对输入模型的所有运行数据注入高斯噪声，高斯噪声标准差选择 0.02。

(4) 滚动加窗

使用滚动加窗技术构建训练样本集和测试样本集。对于 DCAE，输入张量窗口长度为 40，目标张量窗口长度为 0。其中，使用被注入噪声数据构建的输入张量作为模型输入，使用不加噪声数据构建的输入张量作为模型预测目标。至此，用于训练和测试 DCAE 的连

续样本集便构建完成，样本集中包含 2906 个训练样本，726 个验证样本，908 个正常测试样本，5472 个异常测试样本。

2.4 基于 DCAE 的小型增压锅炉异常检测模型构建

2.4.1 DCAE 模型结构设计

在 Python 环境中使用 Tensorflow 的 Keras 库搭建和训练 DCAE。根据经验设定初始值，再通过实验对部分参数进行调整，最终确定 DCAE 的结构超参数如表 2 所示。其中，卷积核长度选择为 3，卷积层中卷积核平移步长为 2，开启特征图边缘填充，以实现特种图时间维度的压缩。

2.4.2 DCAE 模型训练

神经网络的训练过程相关的配置设定包括：批次大小、损失函数、优化器配置、初始学习率、训练参数初值、训练停止条件。本节对以上超参数的配置如下：

- （1）批次大小：批次大小设定为 24，每个周期将更新 150 次内部参数；
- （2）损失函数：使用均方根误差作为损失函数；
- （3）优化器配置：自适应矩估计（Adam）方法是目前深度学习最流行的优化器之一，选择 Adam 作为训练 DCAE 的优化器；
- （4）初始学习率：在训练过程中采用 LR 衰减策略，学习率从 0.01 开始，如果模型在验证集上计算出的损失函数在 5 个周期内不下降，则学习率衰减一半。
- （5）训练参数初值：本文重复训练 30 个神经网络，保存其中表现最好的网络作为该组超参数设定下的训练结果^[9]。
- （6）训练停止条件：本文使用早期停止策略^[10]，设定训练耐心为 20 个周期，训练上限设置为 150。

2.5 小型增压锅炉异常检测模型测试与分析

2.5.1 异常检测阈值设定

训练好的 DCAE 用于实时异常检测时，使用滚动窗口构建特征样本，然后将样本中数据归一化后输入 DCAE。DCAE 输出重构样本后，计算得到 RE，训练集样本的 RE 变化分

布曲线如图 1 所示。阈值设定选择重构误差的最大值与 n 倍标准差之和作为阈值，训练集 RE 最大值为 0.0329，标准差为 0.0046，取 $n=3$ ，则阈值为 0.04668。

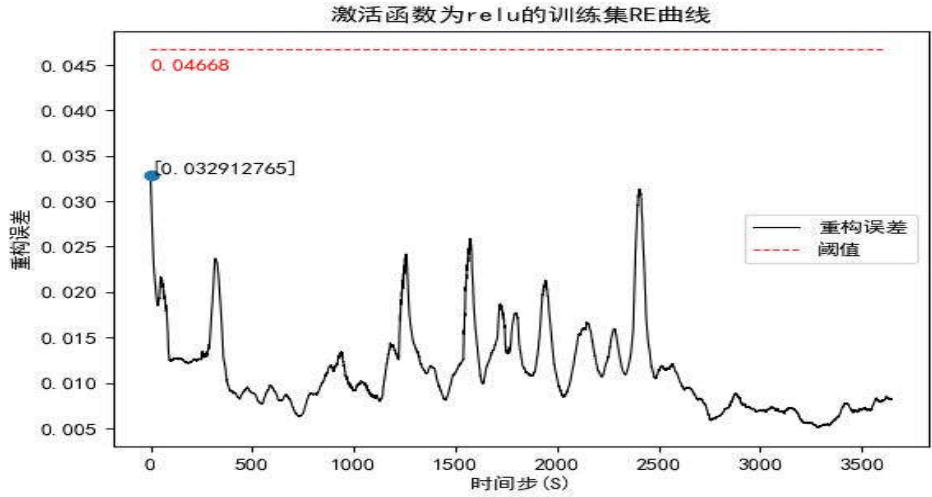


图 1 训练集样本 RE 曲线和分布

2.5.2 测试集的异常分数曲线与异常检测结果

将所有训练集和测试集样本按时序输入小型增压锅炉异常检测模型，模型输出样本集覆盖的运行时段内锅炉在每个时间步的异常分数。图 2 绘制了整个阀门扰动实验过程，包含训练集所属运行过程和测试集所属运行过程在内的增压锅炉异常分数变化曲线^[11]。

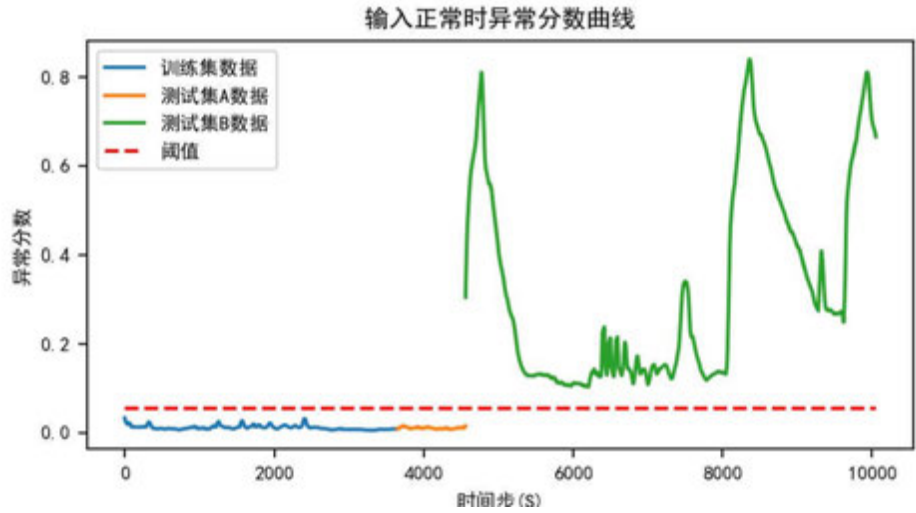


图 2 阀门扰动期间增压锅炉异常分数检测结果

旁通阀第一次受到阶跃扰动时，过热蒸汽流量在极短时间阶跃上升，引起汽包内蒸汽量减少，汽包压力快速下降。汽包水位出现虚假水位，先突增后线性下降。设备的异常分数在虚假水位出现时突增并超过阈值，模型第一时间发出报警。旁通阀再次受到阶跃扰动，为自动调节的时期，旁通阀阀位设定在正常水平，过热蒸汽流量也随之作出快速响应而阶跃降低，汽包压力也迅速开始回升。汽包水位因出现虚假水位现象先突降后缓慢线性上升。因此该时段设备的异常分数已经降低，但仍与设备正常运行时的异常分数有明显差距，并处在阈值之上，故设备异常分数以固定斜率下降但未低于阈值。上述分析表明，本实验所建立的小型增压锅炉异常检测模型不仅能准确区分增压锅炉的正常运行工况和异常运行工况，而且能在异常发生时及时报警，模型输出的异常分数基本能够反映运行参数表现出的异常程度。

2.6 小型增压锅炉异常检测模型对异常输入的鲁棒性分析

考虑所构建的异常检测模型在输入数据存在缺失值时的鲁棒性^[12]。定义腐蚀率 $\alpha\%$ ，将数据集中随机 2% 的数据设为 0 ，将加入异常值前后的所有样本集输入异常检测模型，得到各自异常分数变化曲线如图 3 所示。建立普通自编码器的异常检测模型作为对照组，对比分析实验结果^[13]。结果表明建立的异常检测模型对于腐蚀率 2% 的高斯噪声输入有良好的鲁棒性，同时去噪卷积自编码器比普通卷积自编码器表现出更好的鲁棒性。

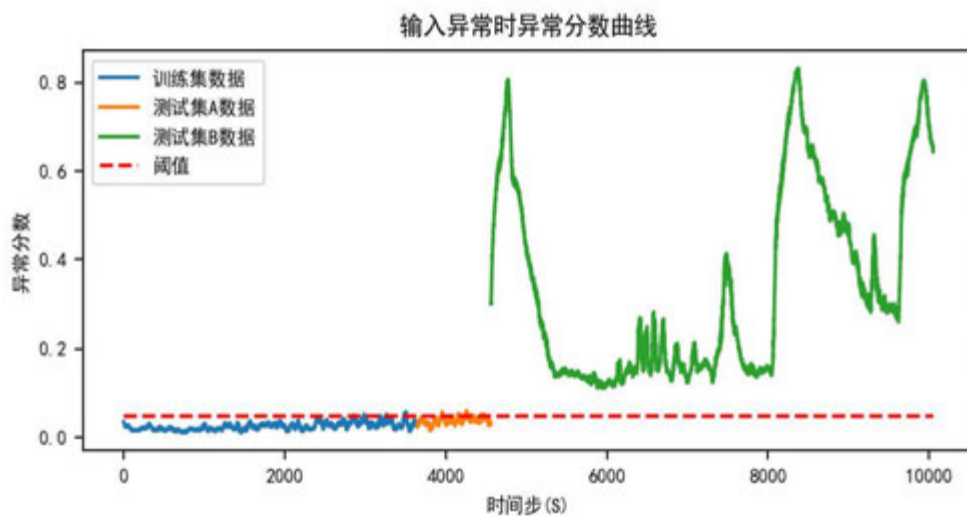


图 3 (a) 加入随机缺失值后去噪卷积模型输出的异常分数曲线

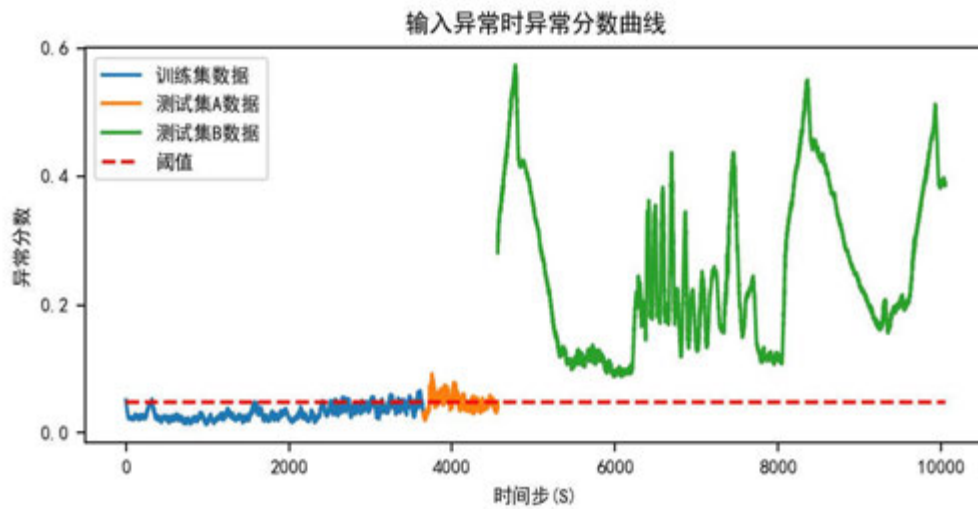


图 3 (b) 加入随机缺失值后普通卷积模型输出的异常分数曲线

2.7 异常检测模型性能对时间窗长度的敏感性分析

为考察窗口长度对异常分数的影响，分别设置时间窗长度为 1， 20， 40, 60 构建样本集，训练新的 DCAE 模型作为对照组。图 4 为不同窗口长度下的模型对测试集 B 的异常分数结果. 随时间窗的缩短，模型对数据变化敏感程度越大，模型能够更及时地检测出异常数据点。但若测量数据中存在噪声或缺失值，模型的鲁棒性则减弱。故本文建立以 40 秒的时间窗内数据作为模型输入的异常检测模型，其对于输入具有更好的鲁棒性。

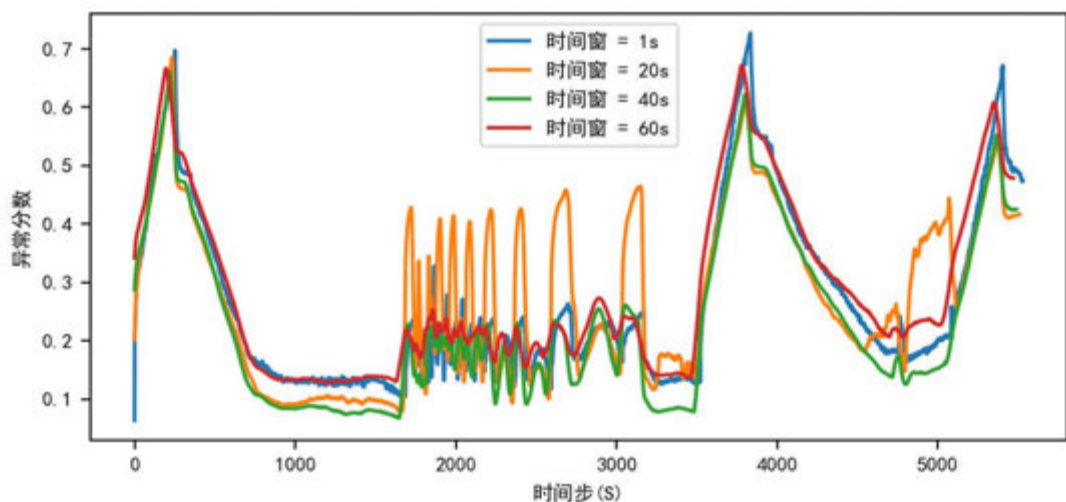


图 4 选择不同时间窗长度的模型在测试集 B 中输出的异常分数曲线

3 结论

本文基于去噪卷积自编码器建立的异常检测模型不仅能准确区分锅炉正常状态和异常状态,对异常状态发出报警,而且能输出反映锅炉异常程度的异常分数曲线。模型计算异常分数和异常检测的耗时不超过 0.3 秒,且对腐蚀率低于 2 %的异常输入具有良好的鲁棒性,表明其可以作为小型增压锅炉健康管理系统的异常检测模型,实现对设备的实时异常监测,并且模型能够在数据采集系统偶尔出现异常时仍正常运作。在实际的工程应用中,为增压锅炉的异常检测方法提供了一定的借鉴意义。

参考文献

- [1] 赵世泉.大型船舶蒸汽动力装置汽/水回路协调最优控制技术研究[D]; 哈尔滨工程大学, 2020:5.
- [2] 赵以顺, 吴飞, 管旭军. 装备健康管理技术研究展望[J]. 科技资讯, 2013, (26):229-229.
- [3] Nikula R P, RUUSUNEN M, LEIVISKÄ K. Data-driven framework for boiler performance monitoring[J]. Applied Energy, 2016, 183: 1374-1388.
- [4] 李燕. 火电厂锅炉设备智能故障预警方法研究[D]; 东北电力大学, 2020:67.
- [5] 陈鲲. 基于自编码器深度特征提取的柴油发动机异常检测与故障诊断技术研究[D]; 北京化工大学, 2020:50.
- [6] 魏晓良, 潮群, 陶建峰, 等. 基于频谱分析和卷积神经网络的高速轴向柱塞泵空化故障诊断[J]. 液压与气动, 2021, 45(7): 7-13.
- [7] 姚越, 刘达. 基于注意力机制的卷积神经网络-长短期记忆网络的短期风电功率预测. 现代电力, 2022, 39(2):212-218.
- [8] 娄建楼, 李燕, 王琦, 等. 基于改进堆栈降噪自编码器的锅炉设备在线监测数据清洗方法[J]. 计算机集成制造系统, 2019, 25(12):3181-3190.
- [9] BENGIO Y, LAMBLIN P, POPOVICI D, et al. Greedy layer-wise training of deepnetworks[C]. Advances in neural information processing systems, 2007:153-160.
- [10] RASKUTTI G, WAINWRIGHT M J, YU Bin. Early stopping and non-parametric regression: an optimal data-dependent stopping rule[J]. The Journal of Machine Learning Research, 2014, 15(1):335-366.
- [11] 李彦军. 增压锅炉热力性能参数变化规律及动态性能研究[D]; 哈尔滨:哈尔滨工程大学, 2006:78.
- [12] FENG Huijun, XIE Zhuojun, CHEN Lingen, et al. Constructal design for supercharged boiler superheater[J]. Energy, 2020, 191:116484.
- [13] SZEGEDY C, VANHOUCKE V, IOFFE S, et al. Rethinking the inception architecture for computer vision[C]. Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition, 2016:2818-2826.

基于光-热-电-环境风耦合的复合抛物面聚光 光伏系统的热电性能

徐世杰², 吴双应^{1,2,*}, 肖兰^{1,2}, 陈志莉³

(¹低品位能源利用技术与系统教育部重点实验室, 重庆 400044; ²重庆大学能源与动力工程学院, 重庆 400044;
³桂林理工大学环境科学与工程学院, 桂林 541006)
(Email: shuangyingwu@126.com)

摘要: 通过建立光-热-电-环境风耦合模型和提出计算电效率的积分方法, 采用蒙特卡罗射线追踪法(MCRT)研究了倾斜角(θ)对复合抛物面聚光光伏(CPC-PV)系统光学性能的影响, 并通过耦合有限体积法(FVM)进一步研究了环境风向角(α)和 θ 对 CPC-PV 系统热性能和电性能的影响。结果表明, 随着 θ 的增加, 光伏板表面的峰值辐照通量急剧增加。当 θ 大于临界角时, 阴影区域出现, 辐照通量分布的均匀性迅速下降。存在环境风时, 相同 θ 下随着 α 增大, 晶硅电池层的平均温度和温度分布的均匀性均表现出非单调的变化趋势, 在相同 α 下随着 θ 增大, 表面温度分布的均匀性急剧下降。从数值和变化趋势来看, 用传统经验公式计算的电效率与事实不符。本研究提出的区域离散积分法考虑了阴影区和非均匀温度对电性能的影响。使用本方法计算的电效率与传统经验公式的最大差异为 11.01%。

关键词: 复合抛物面聚光光伏; 光-热-电-环境风耦合; 倾角; 风向角; 电效率; 热性能

Thermal and electrical performance of compound parabolic concentrating photovoltaic system based on optical-thermal-electrical-environmental wind coupling

Shi-Jie Xu², Shuang-Ying Wu^{1,2,*}, Lan Xiao^{1,2}, Zhi-Li Chen³

(¹Key Laboratory of Low-grade Energy Utilization Technologies and Systems, Ministry of Education, Chongqing University, Chongqing 400044, China

²School of Energy and Power Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China

³College of Environmental Science and Engineering, Guilin University of Technology, Guilin 541006, Guangxi, China)

Abstract: An optical-thermal-electrical-environmental wind coupling model was established and integral method for calculating electrical efficiency was proposed to investigate the effects of tilt angle (θ) on the optical performance of the compound parabolic concentrating photovoltaic (CPC-PV) system by Monte Carlo ray tracing (MCRT), and further numerically the effect of ambient wind direction angle (α) and θ on the thermal and electrical performance of the CPC-PV system by coupling finite volume method (FVM). The results show that with the increase of θ , the peak irradiation flux on the PV panel surface increases sharply. When θ exceeds critical angle, the shadow area appears and the uniformity of irradiation flux distribution decreases rapidly. Under ambient wind condition, at the same θ , as α increases, the average temperature and the uniformity of temperature distribution on the silicon layer show a non-monotonic trend, and the uniformity of temperature distribution decreases sharply with increasing θ , at the same α . From the aspects of values and variation trends, the electrical efficiency calculated by using traditional empirical formula defies the facts. The regional discrete integral method proposed in this study accounts for the effects of shaded areas and non-uniform temperatures on electrical performance. The maximum difference between the electrical efficiency calculated by using the present method and the traditional empirical formula is 11.01%.

Key words: compound parabolic concentrating photovoltaic (CPC-PV); optical-thermal-electrical-environmental wind

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No.51966003); 中央高校基本科研业务经费项目 (2018CDXYDL0001)

0 前言

传统的光伏电池表面辐照密度低,空间利用率小,这阻碍了光伏产业的发展。采用聚光技术可以有效降低成本,提高光伏电池的输出功率,其中复合抛物面聚光器(Compound Parabolic Concentrator, CPC)是一种根据边缘光线原理设计的非成像聚光器,于1974年由Winston首次提出^[1]。其工作原理是将在最大接收角内的光线经过少数几次反射后到达接收器表面,可吸收直接辐射和散射辐射,这使CPC的聚光性能非常接近理想聚光器^[2]。同时,对比一般槽式聚光器和菲涅尔聚光器,CPC可接收更多入射角度的光线,且无需配备昂贵的太阳跟踪装置,便于加工制造,CPC也被认为是太阳能收集的最佳静态聚光器^[3]。缺点在于,当光线入射角度改变,光伏表面会出现非均匀的辐照通量(non-uniform irradiation flux, NUIRF),并且其不均匀性会随入射角度的增大而增加,光伏表面甚至会出现阴影区域,影响光伏的性能^[4, 5]。辐照通量的非均匀分布会降低光伏电池的光电转换效率,甚至产生“热点”损坏设备^[6],由此引起的非均匀温度分布也会对光伏电池产生不利的影响^[7]。同时,复合抛物面聚光光伏(CPC-PV)系统通常安装在室外,环境对系统性能的影响不可忽略,因此研究在实际环境下不同安装角度(θ)和不同环境风向(α)对系统性能的影响有助于改进CPC-PV系统的设计和指导系统的实际运行。

CPC-PV系统的光学特性已被学者们广泛研究^[8-10]。Khalid等^[9]发现,随着入射光线角度的增加,光伏板表面辐照通量分布的均匀性降低。Li等^[10]通过实验评估了CPC-PV系统在不同 θ 下的光学和电性能。实验表明,随着 θ 的增加,系统的光学效率和光伏电池的短路电流减小。此外,光伏板表面的NUIRF分布不仅降低光伏的电性能,还会影响CPC-PV系统的传热性能。在早期的传热性能研究中,CPC内部的热损失是使用等效的规则几何形状(例如平行四边形,矩形空腔和V形槽等)进行评估的,这些等效方法可能会产生不准确的结果^[11]。因此,基于真实的物理模型Antonelli等^[12]和Reddy等^[13]分别通过二维和三维数值模拟研究了对光伏板表面施加均匀温度分布时系统内部的传热特性,研究表明,耦合自然对流和表面辐射的三维模型可以获得准确的速度场。然而,对光伏板表面应用均匀的温度分布会导致较大的误差。

为实现对系统性能的精准预测,将NUIRF分布应用于光伏板表面,Xu等^[14, 15]和Parthiban等^[16]基于光-热-电耦合模型通过数值模拟研究了CPC-PV系统的光热电性能,结果表明,使用非均匀辐照通量时误差较小,未密封的系统具有更好的电性能。进一步地,学者们还研究了光伏系统与周围环境耦合的传热特性^[17-19],Ghabuzyan等^[17]通过模拟和实验研究了光伏板在不同风速和环境温度下的热性能。研究表明,在低风速下,光伏板表面非均匀温度分布更为明显。Wu等^[18]通过三维数值模拟研究了菲涅耳聚光光伏系统与周围环境耦合的性能。仿真结果表明,空间位置和风速的变化导致传热和应力特性的差异,影响了光伏板的电性能。

基于上述参考文献可知,在CPC-PV系统中存在光学过程、传热过程和光电转换过程,在以前的报告中只对这些过程中的几个方面进行了研究。此外,在现有的研究中也发现了一些不足。首先,在参考文献^[14, 16, 20]中,表面对流换热的计算被经验对流换热系数所取代,而没有实现与周围环境的真正耦合。此外,文献^[14, 15, 18, 21]中对电效率的计算采用的是传统经验公式,计算中没有考虑阴影或非均匀温度分布对电性能的影响。最后,基于光-热-电-环境风耦合方法研究在不同风向角 α 和不同 θ 下CPC-PV系统性能的报道还很少。

本文为研究CPC-PV系统在不同 α 和不同 θ 下的性能,提出了一种基于光-热-电-环境风耦合的多物理场模型。利用蒙特卡罗射线追踪法(MCRT)对系统的光学性能(光效率和辐照通量分布的均匀性)进行了研究,并通过耦合有限体积法(FVM)对系统的热性能(温度分布)和电性能(修正的电效率)进行数值研究。具体内容如下:首先,利用MCRT方法跟踪入射太阳光得到的光伏板表面辐照通量分布,然后,为了得到光伏电池板上的温度分布,通过FLUENT用户自定义函数将辐照通量分

布耦合到 FVM 中，此外，使用提出的区域离散积分法计算电效率。最后，基于环境风耦合研究了 α 和 θ 对系统热电性能的影响。

1 物理数学模型

1.1 物理模型

CPC-PV 系统由两个对称的抛物面和一个光伏板组成，如图 1(a)所示。光伏板由沿 X 轴连接的光伏组件组成，光伏板的整体尺寸为 385mm×385mm×4.5mm（长×宽×厚）。光伏组件包括玻璃（Glass）、EVA 胶膜（EVA）、晶硅电池（SC）和 TPT 背板（TPT）。聚光器是一个标准的复合抛物面聚光器，几何聚光比为 2 即 $C=2$ ，通光孔径为 770mm×385mm。环境风垂直于 Y 轴入射，与 Z 轴的夹角 α 即环境风风向角。CPC-PV 系统的结构尺寸和物理参数如表 1 所示。

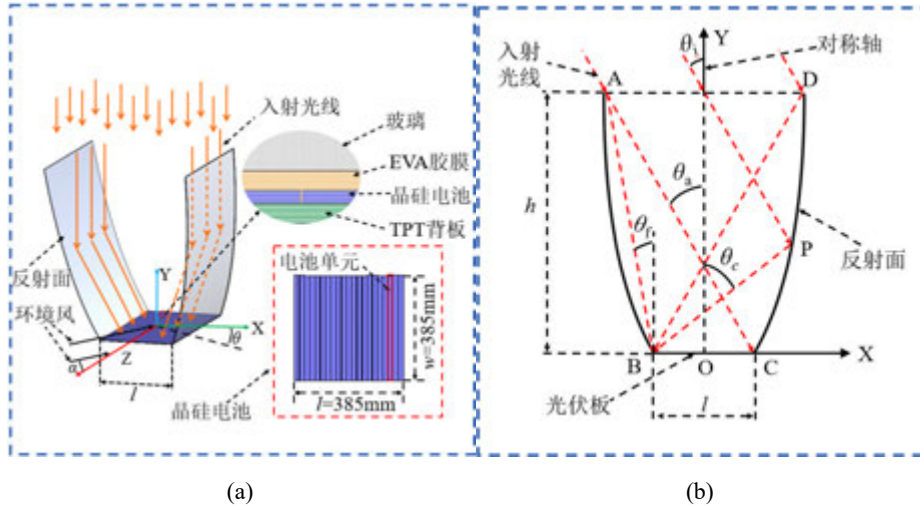


图 1 (a) CPC-PV 系统物理模型；(b) 光学跟踪模型

Fig.1 (a) Physical model of the CPC-PV system; (b) Optical tracking model

表 1 CPC-PV 系统的结构尺寸和物性参数^[13, 15, 22-24]

Table 1 Structural dimensions and physical parameters of the CPC-PV system

	玻璃 (glass)	EVA 胶膜(EVA)	晶硅电池(SC)	TPT 背板(TPT)	反射面
厚度 (mm)	3.2	0.5	0.3	0.5	4
比热容 (J/kg·K)	850	2090	677	1250	1591
密度 (kg/m ³)	2530	960	2328	1200	1050
导热系数 (W/m·K)	0.937	0.35	150	0.20	0.25
吸收率	-	-	0.9	-	-
发射率	0.85	-	-	0.9	0.05
透过率	0.92	1	-	-	-
反射率	-	-	-	-	0.95

图 1(b)中 θ_a 为接收半角； θ_i 为太阳光线入射角； θ_c 为 CPC 反射面上任一点 P 的极角； θ_f 为临界角，当光线的入射角 $\theta_i < \theta_f$ 时，光伏板表面被全部辐照，无阴影区域。当光线入射角度 θ_i 介于 $\pm\theta_a$ 时，光线都会被反射到接收表面，否则，光线将从 AD 处逃逸出聚光装置。如果光伏板的长度为 $l(BC)$ ，CPC-PV 系统的高度为 h ，则以点 O 为中心，X，Y 为坐标轴的笛卡尔坐标系中，抛物面方程为：

$$\begin{cases} x = \frac{l(1 + \sin\theta_a)\sin\theta_c}{1 - \cos(\theta_c + \theta_a)} - 0.5l \\ y = \frac{l(1 + \sin\theta_a)\cos\theta_c}{1 - \cos(\theta_c + \theta_a)} \end{cases} \quad (\theta_a \leq \theta_c \leq 90^\circ) \quad (1)$$

θ_i , h 和 C 可通过下式计算:

$$\tan \theta_f = \frac{0.5l(C-1)}{h} \quad (2)$$

$$h = \frac{0.5l(1+C)}{\tan \theta_a} \quad (3)$$

$$C = \frac{1}{\sin \theta_a} \quad (4)$$

1.2 数学模型

1.2.1 光学模型

与其他传统的反向射线跟踪方法和分布式射线跟踪方法相比, MCRT 方法考虑了物体表面漫反射对跟踪过程的影响, 同时该方法可节省大量的数学计算过程, 简单快捷。因此, 本文利用 TracePro7.3.4 光学跟踪软件, 采用 MCRT 方法对 CPC 内部的光传递过程进行模拟, 文献^[14, 15, 18]均是采用 TracePro 光学软件开展的聚光光学研究。设置太阳辐照强度为 1000W/m², 光线垂直水平面入射, 为了模拟电池表面的实际光分布, 逐渐增加入射光线数量, 当光线数量为 363 万时, 再次增加光线数量对光伏表面的能流分布没有明显影响。

1.2.2 传热模型

为模拟 CPC-PV 系统的热特性, 采用 FLUENT 的用户自定义功能将 NUIRF 分布以内热源的形式加载到能量方程中。此外, 还提出以下假设: ①由于每个晶硅单元之间的间距很小, 晶硅电池层被认为是连续的; ②光伏组件的物性参数不随温度变化; ③忽略光伏组件层间的反射; ④系统最终达到稳定状态; ⑤空气不参与辐射传热, 认为是不可压缩的理想气体, 空气的物性参数只取决于温度。

在有风环境下, 研究 CPC-PV 系统与环境之间的复合传热(对流和辐射), 涉及到流体-固体的耦合。一个足够大的空腔作为系统的流体域(空气), 而固体域(反射器和光伏板)则位于流体域中心。当 CPC-PV 系统周围有环境风时, 其周围空气的流速较大极有可能处于湍流状态, 在此采用具有增强壁处理的 Realizable $k-\varepsilon$ 湍流模型, 并采用 DO 辐射模型进行辐射传热计算。此时的求解控制方程如下^[25]。

连续性方程:

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (5)$$

动量守恒方程:

$$\frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \rho g_i \quad (6)$$

能量守恒方程:

$$\frac{\partial(\rho u_j c_p T_f)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\lambda + \frac{\mu_t c_p}{\xi_T} \right) \frac{\partial T_f}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} \quad (7)$$

κ 方程:

$$\frac{\partial(\rho \kappa u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\lambda + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + G_\kappa + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (8)$$

ε 方程:

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{\kappa + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} C_{3\varepsilon} G_b \quad (9)$$

光伏板与周围环境的 DO 辐射方程:

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a + \varepsilon_s) I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\xi T^4}{\pi} + \frac{\varepsilon_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (10)$$

光伏板内的导热微分方程:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (11)$$

其中, ρ 为流体密度, kg/m^3 ; u_i, u_j, u_k 为 i, j, k 方向的速度, m/s ; p 为压强, Pa ; μ 为流体动力粘度, $\text{kg/(m}\cdot\text{s)}$; δ_{ij} 为克罗内克尔符号; g_i 为重力加速度, m/s^2 ; c_p 为定压比热容, $\text{J/(kg}\cdot\text{K)}$; T_f 为流体温度, K ; λ 为流体的导热系数, $\text{W/(m}\cdot\text{K)}$; I 为辐射通量, W/m^2 ; $\vec{r}$ 为位置矢量; $\vec{s}$ 为方向向量; a 为吸收系数; ε_s 为发射率; n 为折射率; ξ 为斯蒂芬-玻耳兹曼常数, $\text{W/(m}^2\cdot\text{K}^4)$; T 为当地温度, K ; $\vec{s}'$ 为散射矢量; Ω' 为立体角; Φ 为相函数; λ_s 为电池模块各层导热系数, $\text{W/(m}\cdot\text{K)}$; T_s 为电池模块各层的温度, K ; 湍流粘度 $\mu_t = C_\mu \rho \kappa^2 / \varepsilon$, $C_1, C_{1\varepsilon}, C_2, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}, C_\mu$ 为湍流模型中的系数; ξ_T 为温度对应的 Prandtl 数; κ 为湍动能, m^2/s^2 ; σ_κ 为湍动能 κ 对应的 Prandtl 数; G_κ 为平均速度梯度引起的湍动能 κ 的产生项, $\text{kg/(m}^3\cdot\text{s)}$; G_b 为浮升力引起的湍动能 κ 的产生项, $\text{kg/(m}^3\cdot\text{s)}$; ε 为湍流耗散率, m^2/s^3 ; Y_M 可压缩湍流中的脉动扩张项, $\text{kg/(m}^3\cdot\text{s)}$; σ_ε 为湍流耗散率 ε 对应的 Prandtl 数; S 为平均应变率, s^{-1} ; ν 为空气的运动粘度, m^2/s ; 其他参数的物理意义与无风环境下一致。

1.2.3 电模型

学者们^[14-16, 18]广泛采用传统公式 $\eta_{\text{el,ef}} = \eta_{\text{ref}} [1 - \delta(t_{\text{ave,SC}} - t_{\text{ref}})]$ 计算光伏板的平均电效率, 其中 η_{ref} 为在参考温度 $t_{\text{ref}} = 25^\circ\text{C}$ 下的效率; $t_{\text{ave,SC}}$ 为晶硅电池层的平均温度; δ 为温度系数。对于 CPC-PV 来说, 特别是当光伏板表面有非均匀温度分布或有阴影区时, 使用整个晶硅电池层的平均温度来计算电效率是不合理的。因此, 本文提出了一种区域离散积分法, 其原理是将晶硅电池层离散成有限的小单元, 如图 1 所示, 计算每个小单元的电功率, 然后通过对整个晶硅电池层进行积分得到整个光伏板的光电转换效率。公式如下:

$$\eta_{\text{el,total}} = \frac{w \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \eta_{\text{el,ele}} I_{\text{ele}} dx}{CA_{\text{PV}} I_{\text{AD}}} \approx \frac{\sum_{i=1}^m (w \times \eta_{\text{el,ele,i}} \times I_{\text{ele,i}} \times \Delta x)}{CA_{\text{PV}} I_{\text{AD}}} \quad (12)$$

其中, 光伏板的长度和宽度分别为 l 和 w ; $I_{\text{ele,i}}$ 为第 i 个单元吸收的辐照通量; m 为单元数; I_{AD} 为透光孔径处的辐照通量; A_{PV} 为光伏板表面积; $\eta_{\text{el,total}}$ 为采用区域离散积分法计算的总光电转换效率; $\eta_{\text{el,ele,i}}$ 为晶硅电池层上第 i 个单元的光电转换效率:

$$\eta_{\text{el,ele,i}} = \eta_{\text{ref}} [1 - \delta(t_{\text{ave,ele,i}} - t_{\text{ref}})] \quad (13)$$

其中 $t_{\text{ave,ele,i}}$ 是晶硅电池层上第 i 个单元的平均温度; $\eta_{\text{el,ele,i}}$ 与单元表面的太阳辐照通量 $q_{\text{ele,i}}$ 有关, 由以下公式给出:

$$q_{\text{ele,i}} = (1 - \eta_{\text{el,ele,i}}) \times I_{\text{ele,i}} = (1 - \eta_{\text{el,ele,i}}) \times I_{\text{AD}} \times C \times \eta_{\text{op}} \times \tau_{\text{glass}} \times \tau_{\text{EVA}} \times a_{\text{SC}} \quad (14)$$

其中 $q_{\text{ele,i}}$ 是转化为硅单元内部热能的辐照通量; η_{op} 是 CPC-PV 系统在不同 θ 下的光学效率; a_{SC} 是晶硅电池层的吸收率; τ_{glass} 、 τ_{EVA} 分别是玻璃和 EVA 的透射率。

1.3 评价准则

光学效率 η_{op} 被定义为到达光伏板表面的总太阳能 Q_{PV} 与通光孔径接收的总太阳能 Q_{AD} 之比，可表示为^[9, 26]：

$$\eta_{op} = \frac{Q_{PV}}{Q_{AD}} \times 100\% \quad (15)$$

η_{op} 主要取决于聚光器的几何形状、光线的入射角度和材料特性。

根据 IEC 60904-9 国际标准，辐照通量分布均匀性用 ψ_{PV} 表示^[8, 26]。该值越大，均匀性就越好。

$$\psi_{PV} = 1 - \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}} \quad (16)$$

其中 I_{max} 和 I_{min} 分别是光伏板表面辐照通量的最大和最小值。但是在实际测试中，最小的辐照通量一般接近 $0W/m^2$ ，最小值通常由平均值 I_{ave} 代替即^[27]：

$$\psi_{PV} = 1 - \frac{I_{max} - I_{ave}}{I_{max} + I_{ave}} \quad (17)$$

光伏板表面的阴影面积占比被定义为光伏板表面无光区域面积 A_{nif} 与光伏板表面面积 A_{PV} 的比值，可表示为：

$$\varphi = \frac{A_{nif}}{A_{PV}} \quad (18)$$

对于 CPC-PV 系统，NUIRF 分布导致温度分布不均匀，这大大降低了光伏性能。表面温度分布的均匀性，用 ζ 表示^[28]。

$$\zeta = 1 - \frac{t_{max} - t_{min}}{t_{max} + t_{min}} \quad (19)$$

其中晶硅电池层上最低和最高温度分别为 t_{min} 和 t_{max} 。显然，该值越小，温度分布的均匀性就越差。

2 模型验证

模型验证前需设置热模型边界条件：①流体域外部空气设置为速度入口边界条件，当风向角发生变化时通过改变每个速度入口边界沿直角坐标系速度分量的值来达到调整速度入口和出口的目的；②环境温度为 $25^\circ C$ ；③CPC-PV 系统和周围空气为耦合边界；④NUIRF 分布被加载到晶硅电池层单元的内部热源。

在进行基于 FVM 的求解之前，要用 MESH 软件对计算域进行网格划分，CPC-PV 系统的计算域包括流体域和固体域，如图 2 所示。

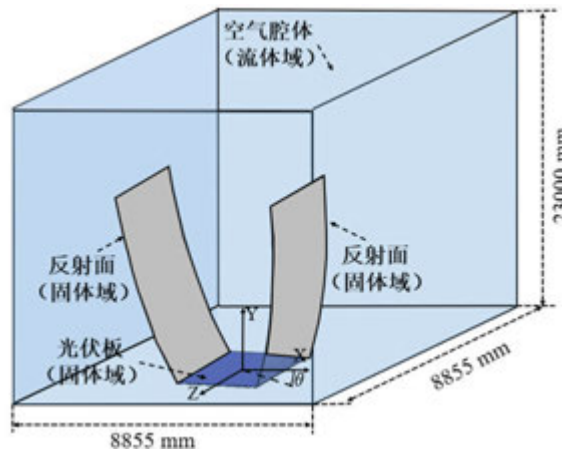


图 2 CPC-PV 系统的计算域

Fig.2 The calculation domain of the CPC-PV system.

为了更准确地模拟 CPC-PV 系统周围的流场，在远离 CPC-PV 系统的流域中使用较粗的网格，在靠近 CPC-PV 系统的流域中使用精密的网格，而实体域的网格则采用扫掠网格划分方法生成。在求解设置中，利用 SIMPLEC 算法计算求解压力-速度耦合。二阶迎风格式用于离散动量和能量方程，辐射方程采用一阶迎风格式进行离散。连续性和动量方程的残差被设定为 10^{-3} ，辐射和能量热交换方程的残差被设定为 10^{-6} 。采用上述求解设置，计算结果表明，当流体域的尺寸增加到 $8855\text{mm} \times 8855\text{mm} \times 23000\text{mm}$ 时，其尺寸不会影响数值结果。同时经过网格无关性验证发现当网格数增加到 4466855 时，继续增加网格数对计算结果的影响可以忽略不计。

2.1 光学模型验证

本文的光学模型与文献[29]中的数值工作进行对比验证。复合抛物面聚光器的截断值为 0.2，截断后，CPC-PV 系统的高度为 649.598mm，几何聚光比为 4。光伏板的宽度为 156 毫米，其它细节见文献[29]。均匀直射光源的辐照通量为 $800\text{W}/\text{m}^2$ ，入射光线条数为 100,000 条。图 3(a)显示了光伏板表面的辐照通量分布。本文的模拟数据与文献结果接近，证明了光学模型的正确性。

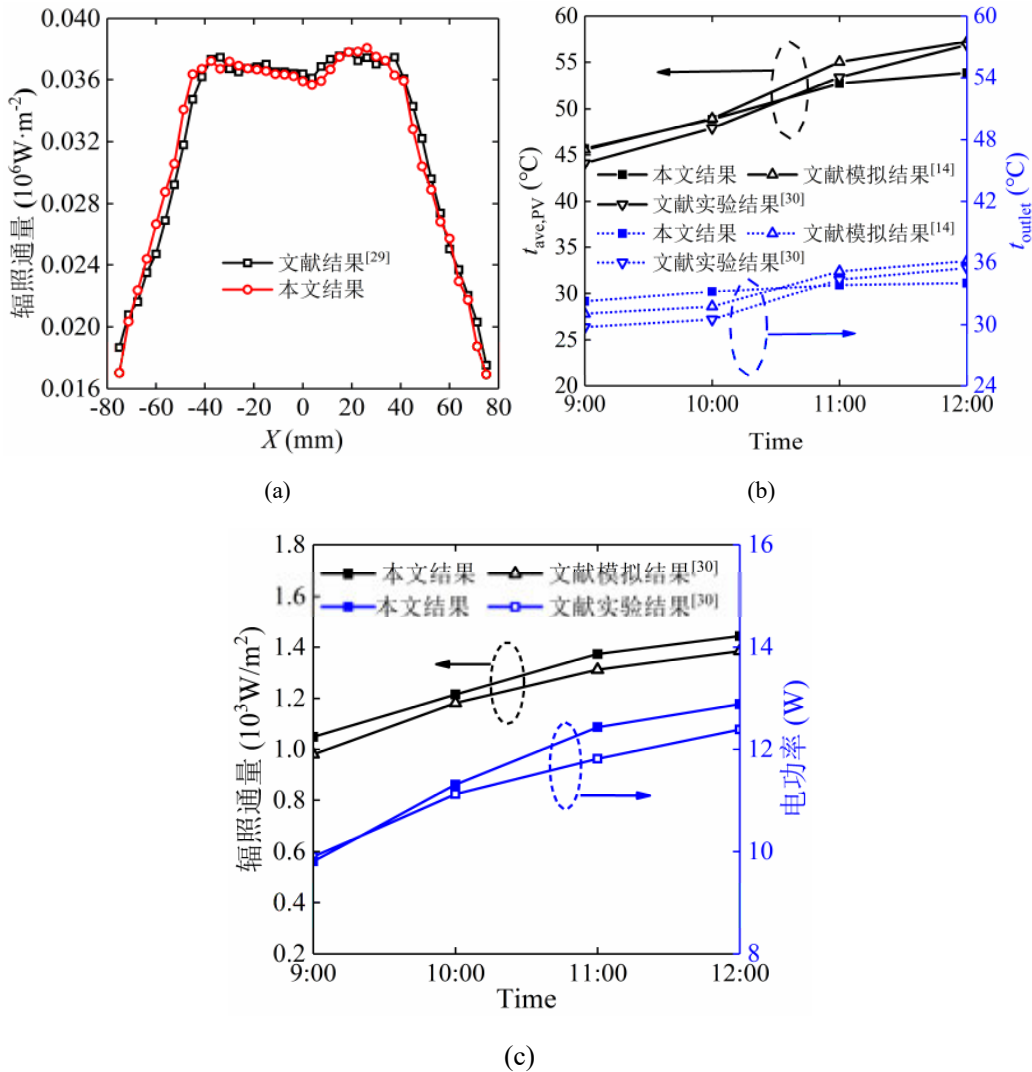


图 3 (a) 本文和文献[29]的辐照通量; (b) 本文和文献[14, 30]中光伏板表面的平均温度($t_{\text{ave,PV}}$)和水的出口温度(t_{outlet}); (c) 本文和文献[30]中 CPC-PV/T 系统吸收的辐照通量和电功率

Fig.3 (a) Irradiation flux comparison between present and Ref.[29]; (b) The average temperature ($t_{\text{ave,PV}}$) on the PV panel surface and the outlet temperature (t_{outlet}) of water in present and Refs.[14, 30]; (c) The absorbed irradiation flux and electrical power of the CPC-PV/T system in present and Ref.[30].

表 2 环境风下热模型验证
Tab.2 The validation of heat transfer model under windy environment

工况	t_1 (°C)			t_{ave} (°C)		
	模拟值	实验值 ^[25]	偏差(%)	模拟值	实验值 ^[25]	偏差(%)
$v=1\text{m/s}, \theta=15^\circ$	63.67	59.48	7.04	60.61	59.35	2.13
$v=3\text{m/s}, \theta=30^\circ$	49.81	48.85	1.97	47.31	47.76	0.95
$v=3\text{m/s}, \theta=60^\circ$	46.93	46.61	0.69	44.07	45.9	3.99
$v=4.2\text{m/s}, \theta=30^\circ$	52.73	48.8	8.05	49.20	47.96	2.59

2.2 热模型验证

文献[25]中报告的实验结果用来验证本文中有风环境下的传热模型的准确性。实验中 600W/m^2 的热通量被施加到平板(模拟光伏板)上, 平板的底部和侧面包围着保温材料, 平板尺寸为 $385\text{mm} \times 385\text{mm}$, 厚度为 3mm 。在环境风下的传热模型与文献[25]的对比结果如表 2 所示, 其中 t_1 为距平板前缘 95mm 处所在位置中点的温度, t_{ave} 为平板表面的平均温度。通过比较不同风速 v 和倾角 θ 下的两个监测点的温度, 可以发现, 本文的模拟结果与文献[25]的实验结果关于 t_1 的最大相对误差为 7.04% , 关于 t_{ave} 的最大相对误差为 3.99% , 总体吻合较好, 故有风环境下的传热模型是可靠的。

2.3 多物理场模型验证

考虑到本研究中模型的特殊性, 目前还没有与之完全匹配的多物理场耦合参考数据。因此, 与文献[14, 30]中的 CPC-PV/T 系统进行了比较, 以验证本研究中多物理场耦合方法的可行性。CPC-PV/T 系统的几何聚光比为 2.4 (截断后); 光伏板的长度为 350mm , 宽度为 245mm ; 通光孔径宽度为 590mm ; 系统的高度为 556.2mm ; 冷却系统和其它细节可参见文献[14, 30]。使用本文的方法进行光学模拟和传热分析和电功率的计算。计算了从上午 $9:00$ 到下午 $12:00$ 水的出口温度 t_{outlet} 和光伏板表面的平均温度 $t_{ave,PV}$, 并与文献[14, 30]进行了比较。从图 3(b)可以看出, 本方法与文献[14, 30]中的实验和模拟方法得到的光伏板表面平均温度的最大差异分别为 5.24% 和 5.83% , 而水的出口温度的最大差异分别为 8.78% 和 5.82% 。从图 3(c)可以看出, CPC-PV/T 系统吸收的辐照通量和电功率与文献[30]的最大差异分别为 7.08% 和 5.27% 。因此, 相对误差是可以接受的。

3 结果分析与讨论

3.1 光学性能分析

对倾斜角(θ)从 0° 到 40° 进行了光学模拟。从图 4(a)看出, 当 $\theta=0^\circ$ 时, 光伏表面显示出对称的辐照通量分布, 在光伏板表面的 $X=\pm 129.34\text{mm}$ 处, 两个相等的最高辐照通量峰值均为 6248W/m^2 。当 $0^\circ < \theta \leq 29^\circ$ 时, 光伏板表面出现一个最高辐照通量峰值。如果 θ 超过 30° , 光伏板表面就没有辐照通量, 这是由于 θ 超过了 CPC-PV 系统的最大接收半角。 $\theta=29^\circ$ 时的最大辐照通量为 50791W/m^2 , 比 $\theta=0^\circ$ 时高出 713% 。在此基础上, 得到了在不同的 θ 下 CPC-PV 系统的光学效率(η_{op}), 光伏板表面阴影面积的占比(φ), 以及光伏板表面的辐照通量分布的均匀性(ψ_{PV}), 如图 4(b)所示。当 θ 从 0° 增加到 29° 时, η_{op} 变化很小, 平均 η_{op} 为 0.92 。然而, 如果 θ 超过临界角 ($\theta_f=10.89^\circ$), 光伏板表面将出现阴影区, 并且 φ 随着 θ 的增加而迅速增加, 导致 ψ_{PV} 急剧下降。当 $\theta=29^\circ$ 时, φ 为 71.67% , ψ_{PV} 为 6.33% , ψ_{PV} 比 $\theta=0^\circ$ 时相对降低了 86.43% 。如果 θ 大于 30° , φ 为 100% , η_{op} 为 0 , 这是由于光伏板表面没有辐照通量。这一现象与文献[9]中全尺寸 CPC-PV 系统的光学模拟结果一致。此外, 当 $\theta=10^\circ$ 时, η_{op} 为 95.23% , 比 $\theta=0^\circ$ 时相对高出了 0.08% , 但 ψ_{PV} 比 $\theta=0^\circ$ 时相对降低了 30.60% 。这表明, 辐照通量分布的均匀性和光学效率不是正相关的, 需要同时进行分析。

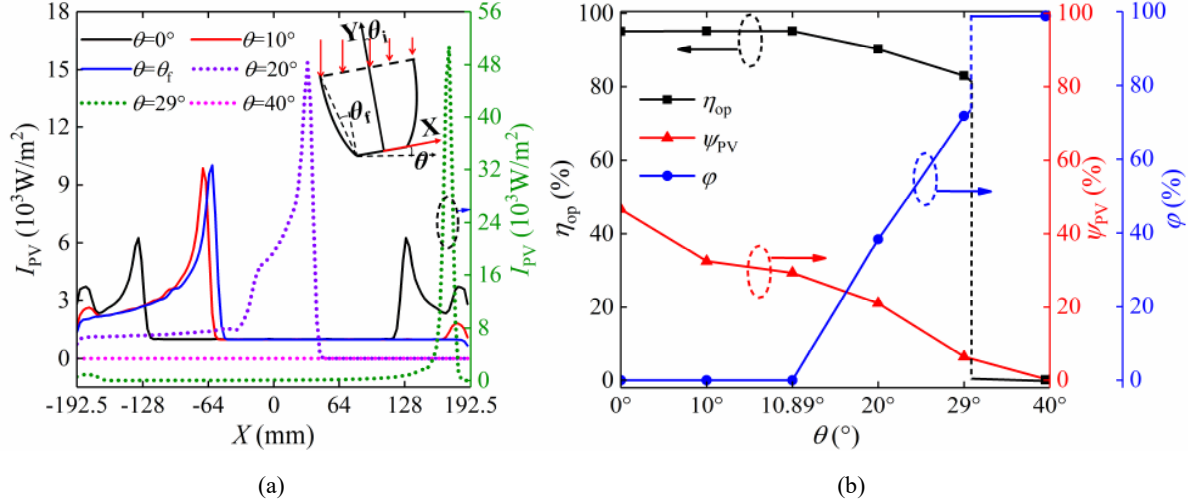


图 4 (a) 在不同的 θ 下, 光伏板表面的辐照通量(I_{PV})分布; (b) 在不同的 θ 下, 系统的光学效率(η_{op})、阴影面积占比(ϕ)和辐照通量分布的均匀性(ψ_{PV})

Fig.4 (a) Irradiation flux (I_{PV}) distribution on the PV panel surface at different θ ; (b) Optical efficiency (η_{op}), the percentage of shadow area (ϕ) and the uniformity of irradiation flux distribution (ψ_{PV}) on the PV panel surface at different θ .

3.2 热性能分析

在风速为 1m/s 和 θ 为 0° 、 10° 、 20° 和 29° 下, 研究了环境风向角 α 从 0° 变化到 90° 时, CPC-PV 系统的热性能。光伏板表面的 NUIRF 分布由上一节提供。从图 5(a)(b)来看, 在相同 θ 下, 随着 α 的增大, 晶硅电池层的平均温度($t_{ave,SC}$)和温度分布的均匀性(ζ_{SC})均表现出非单调的变化趋势, 这归因于随着 α 的增大, 在不同的 θ 下晶硅电池层的温度分布除了与辐照通量分布密切相关外, 还受到系统周围流场的影响, 复杂的流场进一步加剧了温度分布的随机性。不难发现, 在相同的 α 下, 随着 θ 的增大, ζ_{SC} 急剧下降, 与光学模拟中辐照通量分布的均匀性变化趋势一致。总之, 在相同的入射通量下, 由于 θ 和 α 的增加, 晶硅电池层上会出现明显的温差和非均匀的温度分布, 这将影响光伏板的电性能。

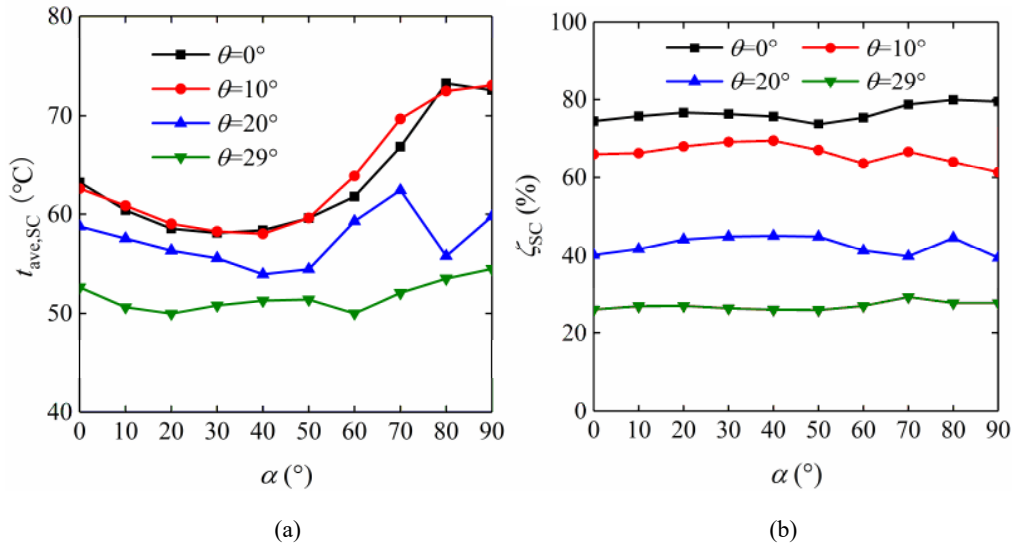


图 5 (a) 在不同 θ 和 α 下, 晶硅电池层的平均温度($t_{ave,SC}$); (b) 在不同 θ 和 α 下, 晶硅电池层温度分布的均匀性(ζ_{SC})

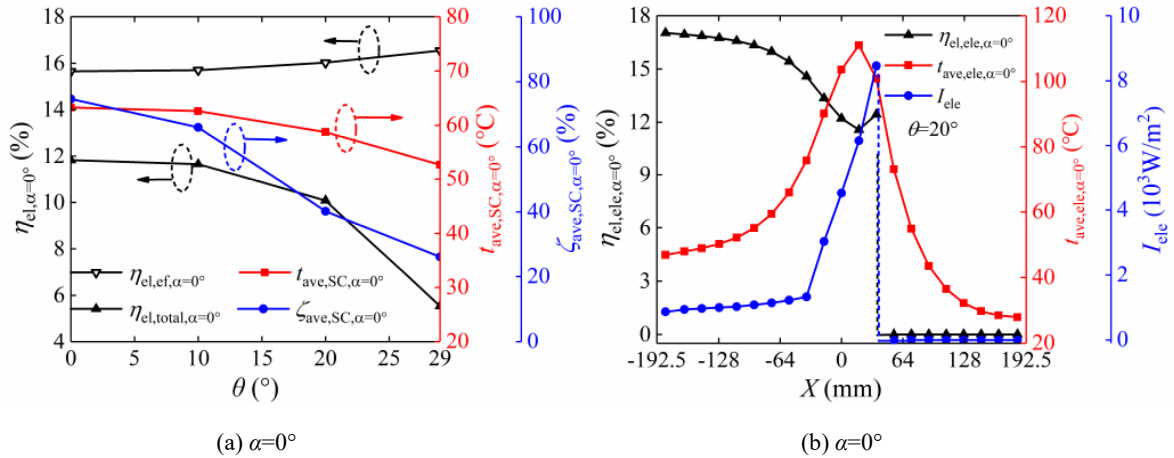
Fig.5 (a) The average temperature ($t_{ave,SC}$) on the SC layer at different θ and α ; (b) The uniformity of temperature distribution (ζ_{SC}) on the SC layer at different θ and α

3.3 电性能分析

对于晶体硅太阳能电池，温度每升高 1°C ，电效率将下降 0.45% 。此外，如果光伏板表面出现阴影区和非均匀温度分布，光伏单元的电性能将下降。因此，为了更好的评估光伏板的电性能，将光伏板沿 X 轴离散成 21 个小单元($m=21$)，如图 1(a)所示。图 6(a)、(c)、(e)、(g)显示了当 θ 为 0° 、 10° 、 20° 和 29° 时随着 α 从 0° 增长到 90° 用传统经验公式计算的电效率 $\eta_{\text{el,ef},\alpha}$ 。可以看出，无论是随着 θ 的增大或随着 α 的增大，晶硅电池层的平均温度($t_{\text{ave,SC},\alpha}$)均呈现出非单调的变化趋势，但相应的用传统经验公式计算的电效率呈现出与温度变化相反的趋势，并在任意 α 下在 $\theta=29^{\circ}$ 时均达到最高电效率，在 $\theta=29^{\circ}$ ， $\alpha=60^{\circ}$ 时 $\eta_{\text{el,ef},\alpha}$ 为 16.77% 。显然这违背了事实，因为在 $\theta=29^{\circ}$ 时，光伏板表面被大面积的阴影区域覆盖，此时光伏的电效率在实际中是最低的。由此看出传统的公式并不适用于计算有 NUIRF 分布的 CPC-PV 系统的电效率。这是由于传统公式只考虑了平均温度，而没有关注辐照通量分布的均匀性和光伏板表面的温度分布，并假设光伏板表面完全被太阳辐照覆盖。在此，本文所提出的通过区域离散积分确定总光电转换效率($\eta_{\text{el,total},\alpha}$)的方法中，考虑了阴影区和非均匀温度分布对光伏电性能的影响。

在 $\theta=20^{\circ}$ ，不同 α 下，由图 6(b)、(d)、(f)、(h)显示，随着晶硅电池单元平均温度($t_{\text{ave,ele},\alpha}$)的增加，晶硅电池层的局部光电转换效率($\eta_{\text{el,ele},\alpha}$)均呈现下降趋势，在不同 α 下，温度峰值位置处的 $\eta_{\text{el,ele},\alpha}$ 分别为 11.58% 、 12.16% 、 11.67% 和 11.74% 。由于在 $X=36.41\text{mm}$ 到 $X=192.5\text{mm}$ 的范围内，晶硅电池层上没有太阳辐照，所以 $\eta_{\text{el,ele},\alpha}$ 为 0。在 $\theta=20^{\circ}$ ， $\alpha=0^{\circ}$ 时， $\eta_{\text{el,total},\alpha=0^{\circ}}$ 为 10.08% ，与经验公式相差 5.94% ，在 $\theta=29^{\circ}$ ， $\alpha=0^{\circ}$ 时相差最大为 11.01% 。此外，在相同的 α 下， $\eta_{\text{el,total},\alpha}$ 的变化趋势与晶硅电池层上温度分布的均匀性变化趋势一致。以 $\alpha=30^{\circ}$ 为例，对于 $\theta=0^{\circ}$ 和 $\theta=10^{\circ}$ ，晶硅电池层上的平均辐照通量分别为 1575.71W/m^2 和 1576.99W/m^2 。 $\theta=10^{\circ}$ 时，晶硅电池层吸收的太阳能较高，但 $\theta=10^{\circ}$ 时晶硅电池层上的温度分布的均匀性($\zeta_{\text{ave,SC},\alpha}$)和 $\eta_{\text{el,total},\alpha}$ 分别比 $\theta=0^{\circ}$ 时相对低 9.45% 和 1.40% 。此外，当 $\alpha=30^{\circ}$ ， $\theta=29^{\circ}$ 时， $\eta_{\text{el,total},\alpha}$ 为 5.82% ，比 $\theta=10^{\circ}$ 时相对降低了 51.82% 。总之，在相同的 α 下，随着 θ 的增加， $\eta_{\text{el,total},\alpha}$ 呈现下降趋势，而在相同的 θ 下，随着 α 的增加， $\eta_{\text{el,total},\alpha}$ 呈现先上升后下降的趋势，并且即使晶硅电池层上有较大的辐照通量但并不意味着有较高的电效率，相反，它取决于辐照通量分布的均匀性和温度分布的均匀性。

文献[10]在无风环境下通过实验研究了不同倾斜角度下 CPC-PV 系统的电性能，CPC-PV 系统的几何聚光比为 2.5。实验表明，随着 θ 的增加，光伏板的短路电流减少，并且当总入射太阳能从 $\theta=0^{\circ}$ 的 528W 增加到 $\theta=10^{\circ}$ 的 539W 时，光伏板的短路电流减少了 4.26% 。分析表明，即使光伏板表面的辐照通量增加，但由于晶硅电池层上存在非均匀的温度分布，也会导致电效率下降，这与本研究的结论一致。



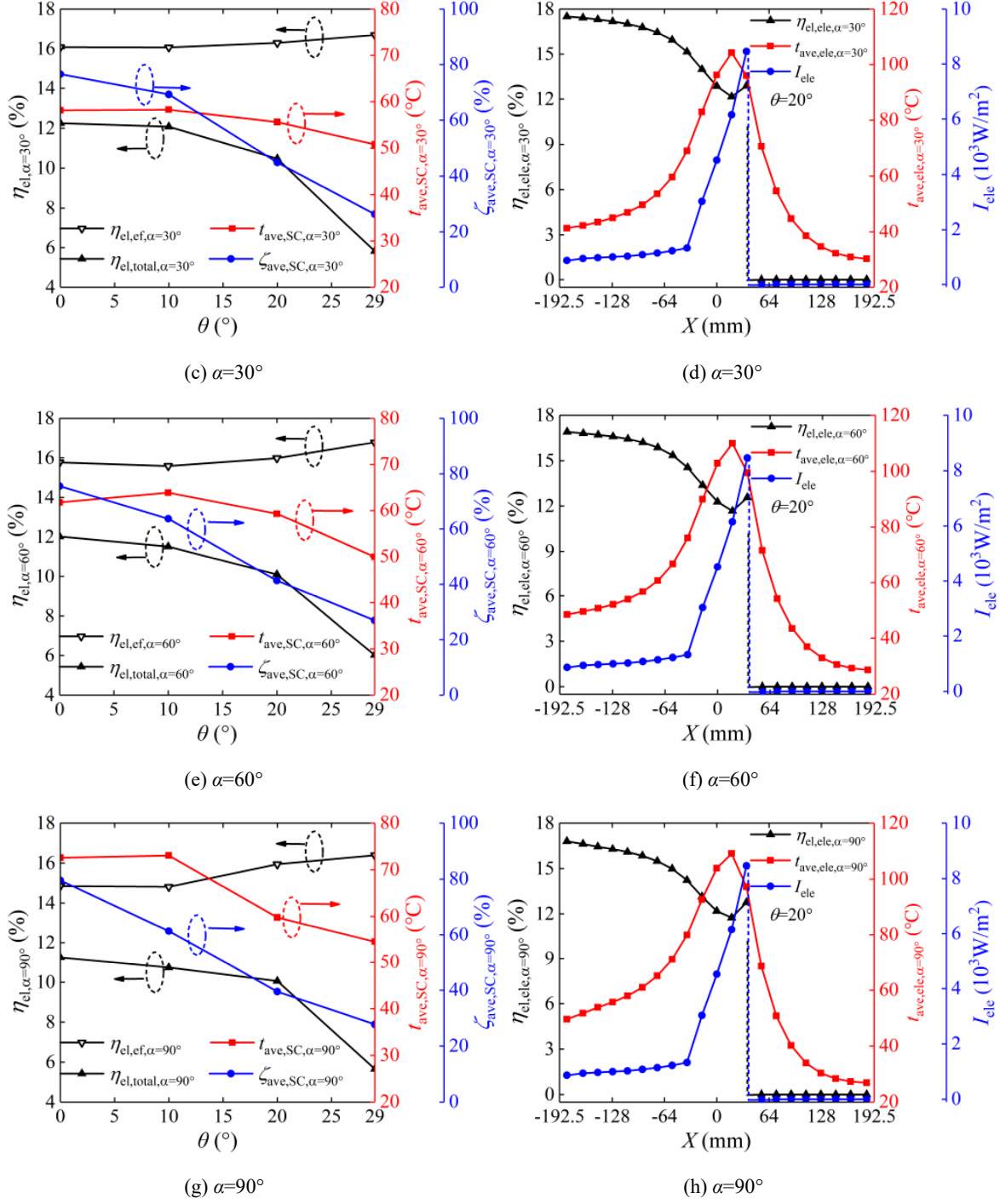


图 6 (a)、(c)、(e)、(g) 分别在 α 为 0°、30°、60° 和 90° 时不同 θ 下，用传统经验公式 ($\eta_{el,ef,\alpha}$) 和本文方法 ($\eta_{el,total,\alpha}$) 计算的电效率，平均温度 ($t_{ave,SC,\alpha}$) 和晶硅电池层上温度分布的均匀性 ($\zeta_{ave,SC,\alpha}$)；(b)、(d)、(f)、(h) 分别为 $\theta=20^\circ$ 和 α 为 0°、30°、60° 和 90° 时晶硅电池层上单元吸收的辐照通量 (I_{ele})，单元的平均温度 ($t_{ave,ele,\alpha}$)，以及单元的光电转换效率 ($\eta_{el,ele,\alpha}$)

Fig.6 (a), (c), (e) and (g) represent the electrical efficiencies calculated by the traditional empirical formula ($\eta_{el,ef,\alpha}$) and present method ($\eta_{el,total,\alpha}$), average temperature ($t_{ave,SC,\alpha}$) and uniformity of temperature distribution ($\zeta_{ave,SC,\alpha}$) on the SC layer at different θ and α as 0°, 30°, 60° and 90°; (b), (d), (f) and (h) represent the irradiation flux absorbed by the element (I_{ele}), the average temperature of the element ($t_{ave,ele,\alpha}$), and the photoelectric conversion efficiency of the element ($\eta_{el,ele,\alpha}$) on the SC layer at $\theta=20^\circ$ and α as 0°, 30°, 60° and 90°.

4 结论

针对 CPC-PV 系统, 结合所提出的计算电效率的积分方法, 建立了一个光-热-电-环境风耦合模型, 通过 MCRT 法分析了倾斜角对光学性能(光学效率和辐照量分布的均匀性)的影响, 并利用耦合的 MCRT 和 FVM 分析了不同环境风向和倾斜角对热性能(温度分布)和电性能(修正的电效率)的影响。得到的结论如下:

(1) 随着 θ 的增加, 光伏板表面的最高辐照通量从双峰变为单峰。如果 θ 超过了临界角, 光伏板表面就会出现阴影区, 导致光伏板表面辐照通量分布的均匀性(ψ_{PV})下降。当 θ 从 0° 增加到 29° 时, 系统的光学效率(η_{op})波动较小, 平均 η_{op} 为 0.92, 但光伏板表面的 ψ_{PV} 从 46.69% 迅速下降到 6.33%。这表明 η_{op} 和 ψ_{PV} 不是正相关的, 需要同时进行分析。

(2) 相同 θ 下随着 α 的增大晶硅电池层的平均温度和温度分布的均匀性均表现出非单调的变化趋势。此外, 在相同 α 下, 随着 θ 的增大, 晶硅电池层温度分布的均匀性均急剧下降, 与光学模拟中辐照通量分布的均匀性变化趋势一致。

(3) 从电性能来看, 用传统经验公式计算的电效率与事实不符。本文提出的区域离散积分法考虑到了阴影区和非均匀温度对电性能的影响。在 α 和 θ 的影响下, 使用本方法计算的电效率与传统经验公式的最大差异为 11.01%。

参考文献:

- [1] WINSTON R. Principles of solar concentrators of a novel design [J] Solar Energy, 1974; 16(2): 89-95.
- [2] MASOOD F, NOR N B M, ELAMVAZUTHI I, SAIDUR R, ALAM M A, AKHTER J, YUSUF M, ALI S M, SATTAR M, BABA M. The compound parabolic concentrators for solar photovoltaic applications: Opportunities and challenges [J] Energy Reports, 2022; 8: 13558-13584.
- [3] RABL A. Optical and thermal properties of compound parabolic concentrators [J] Solar Energy, 1976; 18(6): 497-511.
- [4] PROELL M, KARRER H, BRABEC C J, HAUER A. The influence of CPC reflectors on the electrical incidence angle modifier of c-Si cells in a PVT hybrid collector [J] Solar Energy, 2016; 126: 220-230.
- [5] HATWAAMBO S, HAKANSSON H, NILSSON J, KARLSSON B. Angular characterization of low concentrating PV-CPC using low-cost reflectors [J] Solar Energy Materials and Solar Cells, 2008; 92(11): 1347-1351.
- [6] YANG K, ZUO C. A novel multi-layer manifold microchannel cooling system for concentrating photovoltaic cells [J] Energy Conversion and Management, 2015; 89: 214-221.
- [7] LI G, XUAN Q, PEI G, SU Y, JI J. Effect of non-uniform illumination and temperature distribution on concentrating solar cell - A review [J] Energy, 2018; 144: 1119-1136.
- [8] XIE H, WEI J, WANG Z, YANG G, MA Q. Design and performance research on eliminating multiple reflections of solar radiation within compound parabolic concentrator (CPC) in hybrid CPV/T system [J] Solar Energy, 2016; 129: 126-146.
- [9] KHALID M, WEI J, ZHANG G, XIE H, FANG J, QAISRANI M A, WANG Z, MUJIB UR R. Optical performance of quasi-stationary, low-concentration, and low-profile compound parabolic concentrators [J] Journal of Renewable and Sustainable Energy, 2019; 11(5): 053701.
- [10] LI G, SU Y, PEI G, YU X, JI J, RIFFAT S. Preliminary experimental comparison of the performance of a novel lens-walled compound parabolic concentrator (CPC) with the conventional mirror and solid CPCs [J] International Journal of Green Energy, 2013; 10(8): 848-859.
- [11] SINGH H, EAMES P C. A review of natural convective heat transfer correlations in rectangular cross-section cavities and their potential applications to compound parabolic concentrating (CPC) solar collector cavities [J] Applied Thermal Engineering, 2011; 31(14-15): 2186-2196.

- [12] ANTONELLI M, FRANCESCONI M, DI MARCO P, DESIDERI U. Analysis of heat transfer in different CPC solar collectors: A CFD approach [J] *Applied Thermal Engineering*, 2016; 101: 479-489.
- [13] REDDY K S, PARTHIBAN A, MALLICK T K. Numerical modeling of heat losses in a line focusing solar compound parabolic concentrator with planar absorber [J] *Applied Thermal Engineering*, 2020; 181: 115938.
- [14] EL-SAMIE M M A, JU X, ZHANG Z, ADAM S A, PAN X, XU C. Three-dimensional numerical investigation of a hybrid low concentrated photovoltaic/thermal system [J] *Energy*, 2020; 190: 116436.
- [15] JU X, ABD EL-SAMIE M M, XU C, YU H, PAN X, YANG Y. A fully coupled numerical simulation of a hybrid concentrated photovoltaic/thermal system that employs a therminol VP-1 based nanofluid as a spectral beam filter [J] *Applied Energy*, 2020; 264: 114701.
- [16] PARTHIBAN A, MALLICK T K, REDDY K S. Integrated optical-thermal-electrical modeling of compound parabolic concentrator based photovoltaic-thermal system [J] *Energy Conversion and Management*, 2022; 251: 115009.
- [17] GHABUZYAN L, PAN K, FATAHI A, KUO J, BALDUS-JEURSEN C. Thermal effects on photovoltaic array performance: Experimentation, modeling, and simulation [J] *Applied Sciences*, 2021; 11(4): 1460.
- [18] WU S Y, DUAN S Z, XIAO L. Thermal, electrical and structural characteristics under different concentrator positions for Fresnel concentrating photovoltaic system [J] *Case Studies in Thermal Engineering*, 2023; 41: 102597.
- [19] WU S Y, WU Y Y, XIAO L, YANG Z. Experimental study of natural convection heat transfer from a nonuniformly heated flat plate simulating PV panel [J] *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2018; 32: 423-432.
- [20] GARG A, RAY B, JAIN S. Development of Nusselt number correlation for solar CPC with a tubular receiver [J] *Thermal Science and Engineering Progress*, 2023; 37: 101553.
- [21] SAINI V, TRIPATHI R, TIWARI G N, AL-HELAL I M. Electrical and thermal energy assessment of series connected N partially covered photovoltaic thermal (PVT)-compound parabolic concentrator (CPC) collector for different solar cell materials [J] *Applied Thermal Engineering*, 2018; 128: 1611-1623.
- [22] ZHOU J, YI Q, WANG Y, YE Z. Temperature distribution of photovoltaic module based on finite element simulation [J] *Solar Energy*, 2015; 111: 97-103.
- [23] PARUPUDI R V, SINGH H, KOLOKOTRONI M. Low concentrating photovoltaics (LCPV) for buildings and their performance analyses [J] *Applied Energy*, 2020; 279: 115839.
- [24] CABRAL D, KARLSSON B O. Electrical and thermal performance evaluation of symmetric truncated C-PVT trough solar collectors with vertical bifacial receivers [J] *Solar Energy*, 2018; 174: 683-690.
- [25] 吴莹莹. 太阳能光伏电-热系统散热侧热损失机制和特性研究[博士学位论文]. 重庆: 重庆大学, 2018.
- [26] BAIG H, SELLAMI N, CHEMISANA D, ROSELL J, MALLICK T K. Performance analysis of a dielectric based 3D building integrated concentrating photovoltaic system [J] *Solar Energy*, 2014; 103: 525-540.
- [27] 陈志明. 菲涅尔透镜聚光性能研究[硕士学位论文]. 杭州: 中国计量学院, 2013.
- [28] XU S, ZHU Q, HU Y, ZHANG T. Design and performance research of a new non-tracking low concentrating with lens for photovoltaic systems [J] *Renewable Energy*, 2022; 192: 174-187.
- [29] ZHANG H, CHEN H, HAN Y, LIU H, LI M. Experimental and simulation studies on a novel compound parabolic concentrator [J] *Renewable Energy*, 2017; 113: 784-794.
- [30] YOUSEF M S, ABDEL RAHMAN A K, OOKAWARA S. Performance investigation of low – concentration photovoltaic systems under hot and arid conditions: Experimental and numerical results [J] *Energy Conversion and Management*, 2016; 128: 82-94.

基于智能算法的太阳能碟式斯特林热机 优化性能研究

徐磊, 喻敏杰, 刘志春, 刘伟*

(华中科技大学能源学院, 湖北武汉, 430074)
(Tel: 027-87541998, Email: w_liu@hust.edu.cn)

摘要: 本文建立了一个太阳能驱动碟式斯特林热机的能量耦合模型, 该模型考虑了太阳能集热器的辐射、对流损失和斯特林热机的有限速率传热、回热损失、漏热损失以及热吸收器与斯特林热机高温热源间的能量平衡。考虑工质在换热时的温度变化, 提出了一个新的多变过程模拟工质与高、低温热源间的换热过程。基于约束条件下遗传算法的全局寻优, 确定了系统的最大功率输出及对应的系统综合效率, 并详细分析了聚光比、热源温度等系统参数的影响。结果表明, 在指定的太阳能辐射强度下, 存在系统最大功率输出对应的聚光比和高温热源温度。降低冷源温度, 提高回热效率、工质体积比及工质与冷、热源间换热系数有利于系统综合性能的提升。模型优化结果可以为实际碟式斯特林热机系统的设计和参数优化提供一定的理论参考。

关键词: 碟式集热系统; 斯特林热机; 有限时间热力学; 不可逆过程; 遗传算法

0 前言

随着化石燃料的逐渐枯竭, 不断增长的能源需求和日益严重的环境问题已经成为了世界经济发展和社会发展的重大障碍之一。开发可再生能源、提高能源利用效率, 实现可持续发展已成为了各个国家的重要战略方向。我国在 2020 年提出了“双碳”目标, 旨在推进国家能源结构转型, 引导绿色技术创新。太阳能是目前最有前景的可再生能源之一, 其利用包括光热转换和光电转换两种方式。其中聚光太阳能热发电具有很好的发展前景, 目前已被广泛商业化应用。聚光太阳能热发电技术主要通过聚光集热器将太阳光能转换为热能, 然后通过动力装置将热能转换为电能。目前主要的聚光系统包括抛物面槽式系统、线性菲涅尔式耳系统、塔式系统以及抛物面碟式系统。碟式太阳能热发电系统具有聚光比大、工作温度高等优点, 且适用于分布式能源系统。

斯特林热机具有热源适用性广、理论效率高等优点, 是目前碟式太阳能热发电技术中应用最多的一种热机。碟式斯特林系统发电效率可达 30%^[1], 高于塔式和槽式系统。在过去的二十年里, 美国、德国、俄罗斯和日本生产了八种不同的碟式斯特林系统。我国首座兆瓦级碟式斯特林示范电站于 2016 年落户铜川, 项目建成后可年发电量 126 万度。

近年来, 利用热力学模型研究能源系统的最佳性能成为一种流行的方法。有限时间热力学方法相比经典热力学方法考虑了工质与热机间换热的有限时间尺度, 其对于热机能量系统的研究设计更加接近实际结果。自 Meijer^[2]于 1987 年首次提出了带有碟式聚光器用于发电的斯特林循环热机的系统以来, 很多研究者基于有限时间热力学方法研究了碟式太阳能斯特林系统的性能特征及最佳性能^[3-10]。Blank 等^[3]研究了有限时间、理想回热下的太阳辐射斯特林热机并在一定温度界限下得到了循环最佳功率表达式。Chen 等^[4]基于集热器的线性热损失模型和斯特林热机的不可逆循环模型得到了集热器的最佳工作温度和系统最大效率。Li 等^[7]考虑了吸收器与工质间的对流、辐射传热, 研究了定温度比下的碟式斯特林系统最佳性能。

* 基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (No.51736004)

Lai 等^[10]根据有限转速理论建立了太阳能斯特林热机耦合模型，研究了系统的动态性能。

为了获取碟式斯特林系统的最佳性能，在一定约束条件下，利用智能优化算法进行全局寻优计算相比解析式求解具有很大的优势。很多学者基于智能算法对碟式斯特林系统开展了一系列性能优化研究^[11-16]。Chen 等^[11]考虑了斯特林机的内不可逆性，研究了聚光太阳能集热器和斯特林发动机之间的能量传递并通过遗传算法寻优计算得到了系统最大输出功率。Ahmadi 等^[13, 14]分别研究了变温热源、内不可逆的碟式斯特林系统并对模型开展了多目标优化研究。Jabari 等^[16]耦合太阳能和斯特林热电系统，通过广义数学模型研究了约束条件下的最佳系统性能。

对于斯特林热机内的工质换热过程研究，部分学者认为工质与外界热源、冷源间的换热过程是变温过程而非等温过程^[17-20]。Erbay 和 Yavuz^[17]使用多变模型分析了带有回热损失的斯特林热机，在给定多变指数情况下，得到了最大功率密度和最大功率密度下的效率和压缩比。Babaelahi 等^[18]提出了基于多变膨胀、压缩过程的斯特林发动机二阶数值计算模型并对发动机性能进行了预测。Dai 等^[20]运用有限时间热力学建立了内外不可逆的斯特林机多变模型并以输出功率、热效率为目标进行了多目标优化。

本文运用有限时间热力学方法建立了一种太阳能碟式斯特林热机的能量耦合模型。该模型考虑了热源温度和聚光比对集热效率的影响，吸收器与热机工质间的辐射、对流传热及散热器与工质间的对流传热，斯特林热机的回热损失及冷、热源间的漏热损失。对于斯特林热机循环，采用了一个新的多变模型模拟工质与冷热源的换热过程。根据能量关系耦合了集热系统和斯特林热机，运用遗传算法以热机循环温度为变量进行全局寻优运算得到了碟式斯特林系统的最佳功率及对应的系统效率。根据能量耦合模型详细分析了聚光比、热源温度等参数对系统性能的影响。

1 碟式太阳能斯特林系统概述

碟式太阳能斯特林系统是一种利用旋转抛物面聚光器将太阳能转换为热能进行发电的系统。如图 1(a)所示，系统由碟式聚光系统和斯特林热机耦合而成。聚光器通过抛物盘面将入射太阳光聚集在吸收器上，吸收器作为热源将热能传递给斯特林发动机内的工质。工质在斯特林热机内循环往复运行并向外输出功率。

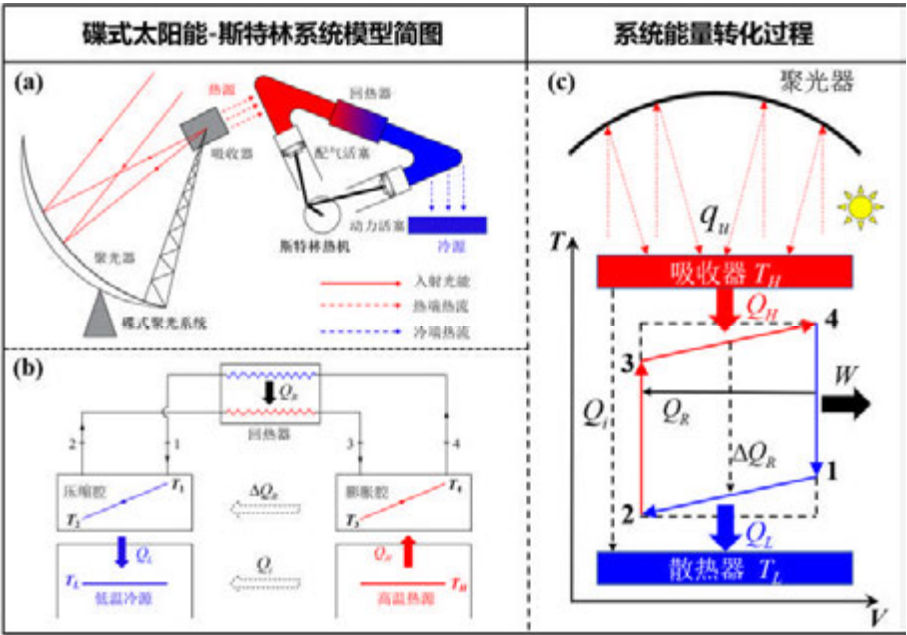


图 1 系统示意图与能量转化过程

如图 1(b)(c)所示, 吸收器吸收太阳光能后作为斯特林发动机的恒温热源加热膨胀腔内的工质, 驱动斯特林发动机向外输出功率。当热机内工质到达压缩腔时, 散热器内的恒温冷源与工质换热进而冷却工质。斯特林发动机的加热器和冷却器间联结着回热器, 作为“热力海绵”, 回热器交替着从工质吸热和向工质放热, 提高了发动机热效率。

2 系统能量效率分析

碟式斯特林系统实现了太阳光能—热能—机械能的转化, 本文以综合能量效率为指标评价系统的综合性能。如图 2 所示, 在集热系统的光热转化过程中, 聚光器一定时间汇聚太阳光能 Q_{solar} 经过聚光损失和吸收器的对流、辐射损失后传输到发动机工质的热能为 Q_H 。在斯特林热机内, 除了工质与冷源换热冷却的热损失, 还包括因回热器不完全回热的回热损失及高低温热源间的漏热损失。

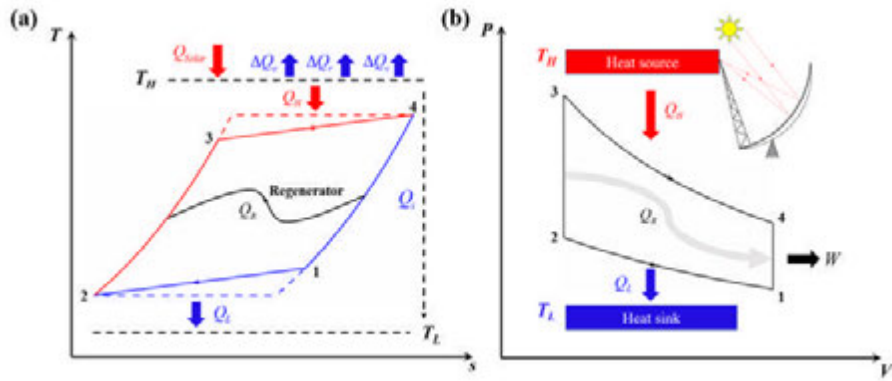


图 2 碟式斯特林系统的能量流动表征: (a) T - s 图; (b) p - V 图

2.1 碟式太阳能集热系统分析

考虑聚光效率以及吸收器的对流、辐射损失, 碟式太阳能集热器实际所收集的热量有如下的表达式^[7, 14]

$$q_u = IA_{app}\eta_0 - hA_{rec}(T_H - T_0) - \varepsilon\delta A_{rec}(T_H^4 - T_0^4) \quad (1)$$

其中 q_u 为太阳能集热器所提供的净热流, I 为太阳的辐射强度, A_{app} 为太阳能集热器的开口面积, η_0 为太阳能集热器的光效率, A_{rec} 为吸收器的孔径面积, h 为太阳能集热器和环境之间的对流换热系数, T_H 为吸收器的温度, T_0 为环境温度, ε 为太阳能集热器的有效辐射率, δ 为斯忒藩-玻尔兹曼常数。上式右边第一项为照射到太阳能集热器的太阳能, 第二项为太阳能集热器和外界环境的对流换热损失, 第三项为太阳能集热器对外界环境的辐射损失。

碟式太阳能集热器的热效率可以定义为太阳能集热器所提供的净热流与接收的太阳辐射能之比, 即

$$\eta_s = \frac{q_u}{IA_{app}} = \eta_0 - \frac{1}{IC} \left[h(T_H - T_0) + \varepsilon\delta(T_H^4 - T_0^4) \right] \quad (2)$$

其中 $C = A_{app} / A_{rec}$, 为聚光比。

2.2 斯特林热机系统分析

斯特林循环是斯特林发动机运行的基本原理,是由两个等温过程和两个等容过程构成的热力循环。在循环等温过程中,工质与外界热源交换的热量全部转化为做功量。可用势是国内学者提出用于评价工质做功能力的物理量^[21],在热力学系统中,工质的可用势可定义为式(3)所示,其中 h 是焓, s 是熵, T_0 是环境温度, e 是称为可用势的热力学函数。

$$e = h - T_0 s \quad (3)$$

在式(3)中,可用势为总热势 h 减去不可用热势 $T_0 s$,表示只有高于环境温度的热能才能在热能转换或传递过程中被利用。在一个热力过程中,若可用势不变,则过程的焓全部转化为机械功,因此等可用势过程主要指流动工质自身做功能力没有损失而保持不变的过程。本文以理想气体为工质进行研究,在等势过程中,可用势函数的微分为零,可以得到理想气体在等势过程下的温熵呈线性关系:

$$\frac{dT}{ds} = \frac{T_0}{c_p} \quad (4)$$

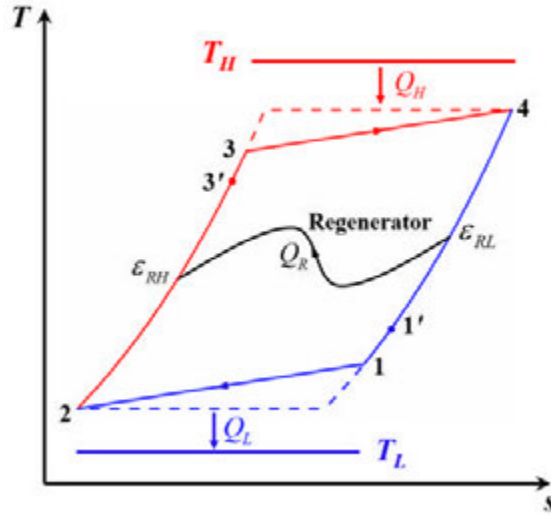


图3 斯特林循环模型 T - s 原理图

本文以温熵呈线性变化的等可用势过程模拟斯特林热机内工质与热源、冷源间的换热过程,其循环模型 T - s 原理图如图3所示。外部的高低温热源分别为温度为 T_H 和 T_L 的恒温热源。1-2 过程为压缩过程,工质向低温冷源释放热量,其温度从 T_1 变化到 T_2 ; 2-3 过程为等容吸热过程,工质从回热器吸收热量; 3-4 过程为膨胀过程,工质从高温热源吸收热量,其温度从 T_3 变化到 T_4 ; 4-1 过程为等容放热过程,工质向回热器释放热量。由于回热器不能完全回热,工质的回热存在回热损失,所以工质经过回热器内部不完全吸、放热后不能到达点 3 和点 1,而是到达点 3' 和 1'。

在回热器中,回热加热和放热过程中的效率一般不相等。假设回热加热和放热过程的回热效率分别为 ε_{RH} 、 ε_{RL} ,根据回热器的热力特征,工质从回热器吸收的热量应等于向回热器释放的热量,则可得

$$Q_R = mc_V \varepsilon_{RH} (T_3 - T_2) = mc_V \varepsilon_{RL} (T_4 - T_1) \quad (5)$$

假设 ΔQ_R 表示每次回热过程的回热损失,则回热吸热端和放热端的回热损失分别可以

表示为

$$\Delta Q_{RH} = mc_V (1 - \varepsilon_{RH}) (T_3 - T_2) \quad (6)$$

$$\Delta Q_{RL} = mc_V (1 - \varepsilon_{RL}) (T_4 - T_1) \quad (7)$$

其中 m 为工质的质量, c_V 为工质每千克的等容比热容。

由于有限速率传热不可逆性的影响, 回热过程的时间与两个等温过程相比不可忽略。为了计算回热过程的时间, 假设回热过程中工作流体的温度随时间均匀变化, 于是回热过程的时间就可以表示为

$$t_{RH} = \frac{T_3 - T_2}{M_1} = \frac{\varepsilon_{RH} (T_3 - T_2)}{M_1} \quad (8)$$

$$t_{RL} = \frac{T_4 - T_1}{M_2} = \frac{\varepsilon_{RL} (T_4 - T_1)}{M_2} \quad (9)$$

其中为 M_1 、 M_2 比例常数, 只与回热材料的性质有关。

在与外界的换热过程中, 工质的温度与熵线性相关, 故选用换热过程始末温度的平均值作为换热过程的平均温度, 分别用 T_h 、 T_l 表示为

$$T_h = \frac{T_3 + T_4}{2} \quad (10)$$

$$T_l = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad (11)$$

过程 3-4 和过程 1-2 为等可用势过程, 循环的膨胀和压缩过程与外界热源换热量分别可以表示为

$$Q_h = m \int_{s_3}^{s_4} T ds = m \int_{T_3}^{T_4} \frac{c_p}{T_0} T dT = \frac{mc_p}{2T_0} (T_4^2 - T_3^2) \quad (12)$$

$$Q_l = -m \int_{s_1}^{s_2} T ds = -m \int_{T_1}^{T_2} \frac{c_p}{T_0} T dT = \frac{mc_p}{2T_0} (T_1^2 - T_2^2) \quad (13)$$

工质从恒温热源吸收热量时, 由于热源温度较高, 考虑吸收器与工质之间的辐射和对流传热方式。设 Q_1 为工质从高温热源吸收的热量, 可以表示为

$$Q_1 = [h_{HC} (T_H - T_h) + h_{HR} (T_H^4 - T_h^4)] t_1 = \frac{mc_p}{2T_0} (T_4^2 - T_3^2) + mc_V (1 - \varepsilon_{RH}) (T_3 - T_2) \quad (14)$$

在工质向恒温的低温冷源释放热量时, 考虑对流传热为工质与冷却器间的主要换热方式。设 Q_2 为工质向低温冷源释放的热量, 可以表示为

$$Q_2 = h_{LC} (T_l - T_L) t_2 = \frac{mc_p}{2T_0} (T_1^2 - T_2^2) + mc_V (1 - \varepsilon_{RL}) (T_4 - T_1) \quad (15)$$

其中为 h_{HC} 高温侧对流传热系数, h_{HR} 为高温侧辐射换热系数, h_{LC} 为低温侧对流传热系数,

λ 为工质的体积压缩比，表示为

$$\lambda = \frac{V_1}{V_2} = \frac{V_4}{V_3} \quad (16)$$

循环周期由工质与外界热源间的换热时间及两个回热时间构成，可以表示为

$$\begin{aligned} t &= t_1 + t_2 + t_3 + t_4 \\ &= \frac{\frac{mc_p}{2T_0}(T_4^2 - T_3^2) + mc_v(1 - \varepsilon_{RH})(T_3 - T_2)}{h_{HC}(T_H - T_h) + h_{HR}(T_H^4 - T_h^4)} \\ &\quad + \frac{\frac{mc_p}{2T_0}(T_1^2 - T_2^2) + mc_v(1 - \varepsilon_{RL})(T_4 - T_1)}{h_{LC}(T_l - T_L)} + \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)(T_3 - T_2)\varepsilon_{RH} \end{aligned} \quad (17)$$

假设从温度为 T_H 的吸收器到温度为 T_L 的冷却器的漏热损失与循环时间成正比，可得：

$$Q_0 = k_0(T_H - T_L)t \quad (18)$$

其中 k_0 代表高温热源与低温冷源间的漏热损失系数。

考虑到上述的主要不可逆性，吸收器释放的净热量和冷却器吸收的净热量分别表示为

$$Q_H = Q_1 + Q_0 \quad (19)$$

$$Q_L = Q_2 + Q_0 \quad (20)$$

每个循环周期内，吸收器传递到斯特林热机的热量应等于工质从高温热源吸收的热量，其约束可表示为：

$$q_u t = Q_H \quad (21)$$

根据式(14)-(20)可得斯特林发动机的输出功率、热效率分别为

$$P = \frac{Q_H - Q_L}{t} = \frac{mc_p(T_2^2 + T_4^2 - T_1^2 - T_3^2) + 2mc_v T_0(T_1 + T_3 - T_2 - T_4)}{2T_0(t_1 + t_2 + t_3 + t_4)} \quad (22)$$

$$\eta_t = \frac{Q_H - Q_L}{Q_H} = \frac{c_p(T_2^2 + T_4^2 - T_1^2 - T_3^2) + 2c_v T_0(T_1 + T_3 - T_2 - T_4)}{c_p(T_4^2 - T_3^2) + 2c_v T_0(T_3 - T_2) + k_0(T_H - T_L)t} \quad (23)$$

3 系统性能优化分析

碟式斯特林系统的综合能量效率为集热系统效率和斯特林发动机热效率的乘积，表示为：

$$\eta_m = \eta_s \eta_t \quad (24)$$

对于系统而言，斯特林机的功率输出即为系统的能量输出。除了外界冷、热源温度、聚光比等系统参数之外，循环温度也影响着系统的功率输出。根据等可用势过程中温熵线性关系的特点，给定循环的最高和最低温度 T_2 、 T_4 即可得到循环另外两个节点温度：

$$c_p(T_2 - T_1) = T_0 \left[c_v \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + R_g \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right) \right] \quad (25)$$

$$c_p(T_4 - T_3) = T_0 \left[c_v \ln \left(\frac{T_4}{T_3} \right) + R_g \ln \left(\frac{V_4}{V_3} \right) \right] \quad (26)$$

由于循环各点温度关系及约束条件均为超越方程，无法显式求解。在本文中，为了得到系统的最大功率输出，我们运用在约束条件的遗传算法进行全局寻优计算。模型数值计算流程图如图 4 所示，以循环最高和最低温度 T_2 、 T_4 为寻优变量，在约束条件下通过遗传算法不断迭代寻优得到最佳的循环节点温度，进而运算得到系统的最大功率输出及对应的系统综合效率。

在寻优计算中，种群数量设定为 100，终止进化代数设定为 200 次，交叉概率设定为 0.8，残差设定为 10^{-6} 。寻优变量的取值范围为：

$$300 \leq T_2 \leq 500 \quad (27)$$

$$800 \leq T_4 \leq 1400 \quad (28)$$

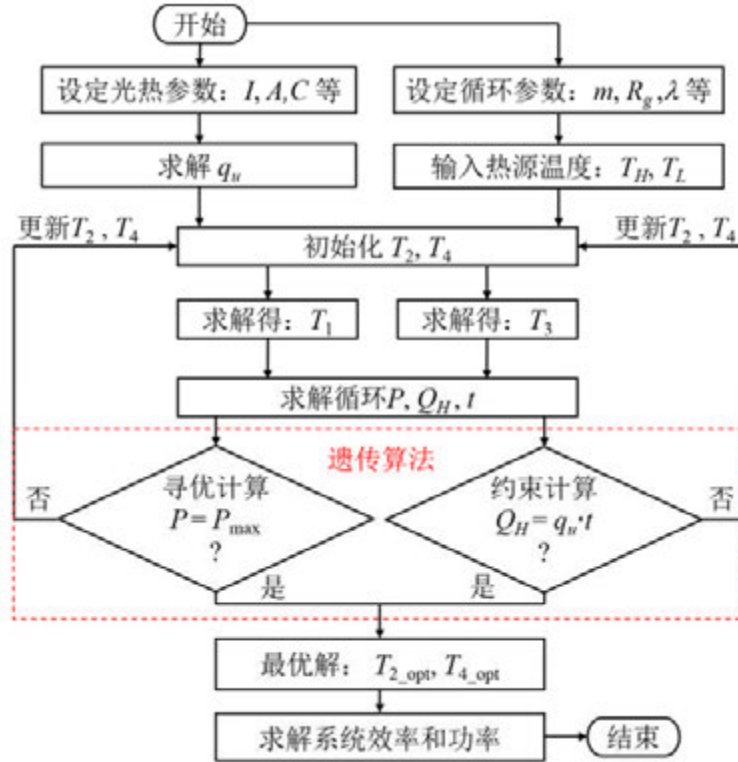


图 4 碟式斯特林系统耦合模型数值计算流程图

4 数值结果分析与讨论

为了研究吸收器温度、聚光比、回热效率、体积比、传热系数等参数对最大功率输出下碟式太阳能斯特林系统的性能影响，表 1 和表 2 分别给出了太阳能集热系统和斯特林热机的主要热力学参数。

表 1 碟式集热系统主要参数

I [W/m ²]	A_{rec} [m ²]	C [-]	T_0 [K]
1000	0.03	1000	300
h [W/(m ² ·K)]	η_0 [-]	ε [-]	δ [W/(m ² ·K)]
20	0.9	0.9	5.67×10^{-8}

表 2 斯特林发动机主要参数

Working fluid	m [g]	R_g [kJ/(kg·K)]	c_v [kJ/(kg·K)]
Helium	4	2.077	3.124
T_H [K]	T_L [K]	h_{HC} [W/K]	h_{HR} [W/K ⁻⁴]
1000	300	200	4×10^{-8}
ε_{RL}	λ [-]	h_{LC} [W/K]	k_0 [W/K]
0.9	2	200	2

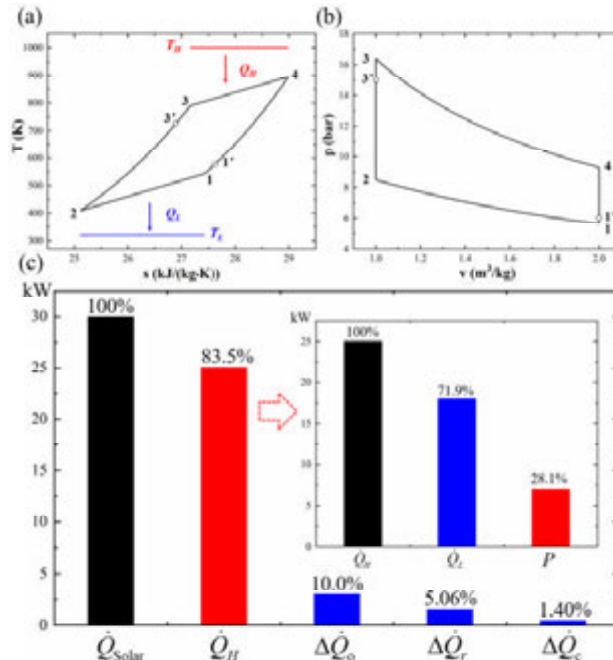
4.1 算例分析

根据表 1 和表 2 所示的系统参数以图 4 的流程进行寻优计算得到的结果如表 3 所示。为进一步分析系统的能量变化关系，图 5 给出了工质在循环过程的温熵及压力、体积变化关系和系统能量转化性能。

表 3 算例计算结果

最佳循环温度	T_1 (K)	T_2 (K)	T_3 (K)	T_4 (K)
	543.01	408.79	789.84	895.53
最大功率性能	P (kW)	η_s (%)	η_t (%)	η_m (%)
	7.05	83.54	28.11	23.49

根据算例计算结果，当系统在辐射强度为 1000 W/m^2 ，吸收器温度为 1000K 的条件下稳定运行时，系统向外稳定输出的最大功率为 7.05KW ，此时系统的综合效率为 23.49% 。太阳能集热系统的效率为 83.54% ，其中 10% 的光能源于聚光器聚光损失，吸收器在环境温度下辐射和对流造成的能量损失分别占比 5.06% 和 1.4% 。斯特林机的热效率为 28.11% ， 71.9% 的热损失源于工质与冷源的散热、回热器的回热损失及高、低温热源间的漏热损失。

图 5 算例结果分析: (a) 算例 T - s 图; (b) 算例 p - v 图; (c) 能量转换性能

由图 5 可知，对于斯特林机内的循环过程，在 1000K 的恒温热源下，工质通过加热器吸收热量膨胀，其温度从 789.84K 增加到 895.53K ，压力从 16.4bar 降低到 9.3bar 。经过回热放热过程后，工质在冷却器内向冷源释放热量并进行压缩，其温度从 543.01K 降低到 408.79K ，

压力从 5.6bar 增加到 8.5bar。

4.2 参数分析

图 6 分别展示了不同辐射强度下聚光比对系统最大输出功率、集热效率、热机效率和综合效率的影响规律。由图可知，随着太阳能集热器的聚光比从 700 增加到 1300 过程中，系统最大输出功率呈现先增大后减小的趋势，存在一个最大值对应着最佳聚光比。太阳能集热器的热效率随着聚光比 C 的升高而升高。而斯特林发动机的热效率和系统总效率都随着聚光比 C 的上升而下降。

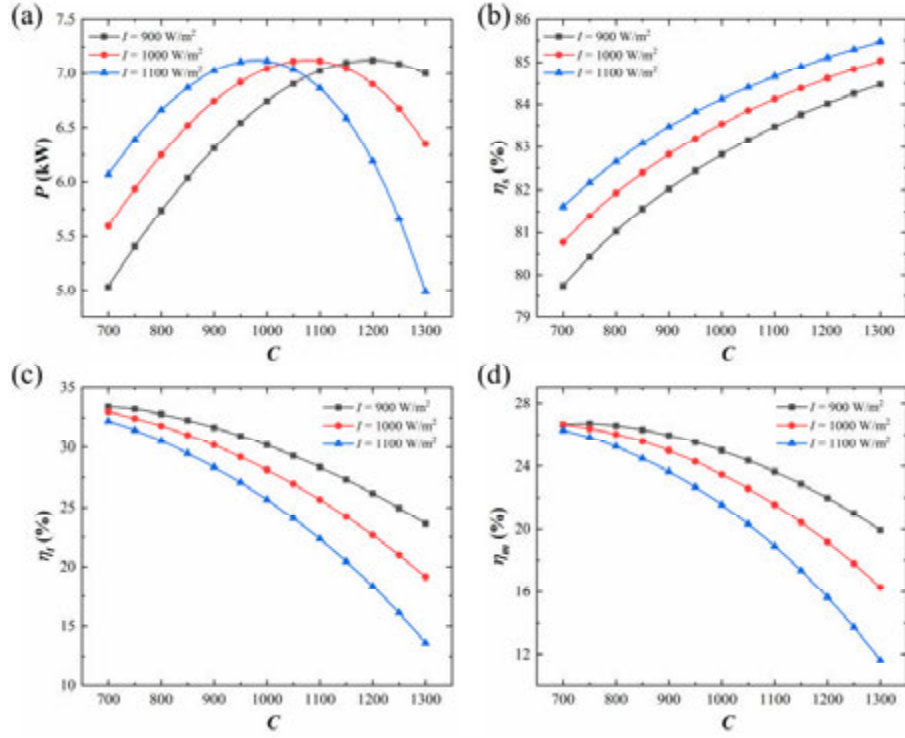


图 6 聚光比、辐射强度对系统性能的影响：(a) 最大功率；(b) 集热效率；(c) 热机效率；(d) 综合效率

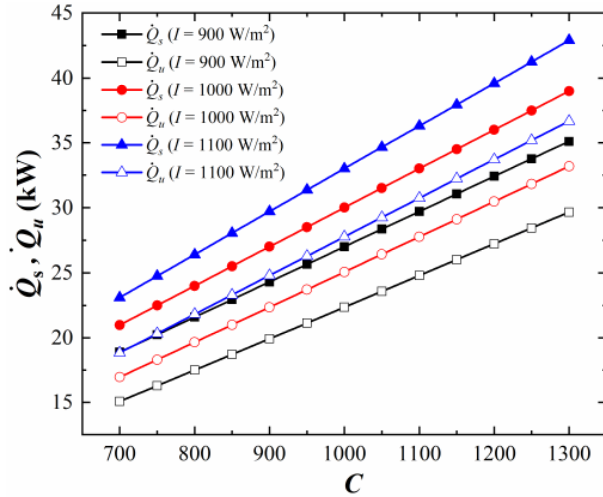


图 7 不同聚光比、辐射强度下太阳能集热系统进出热流对比

根据图 6(a)，系统输出功率最大值所对应的最佳聚光比随着辐射强度增大不断减小，原因在于辐射强度的增大使得单位面积集热器表面吸收的热能更多，更小的集热面积即可使太阳能集热系统更快地供应给定热源温度的热流。

为了分析聚光比对太阳能集热系统效率的影响机制，图 7 展示了不同聚光比、辐射强度下太阳能集热系统进出热流对比情况。聚光比为太阳能集热器开口面积与吸收器面积的比

值，相同吸收器面积下，聚光比越大，更多的光能汇聚到太阳能集热器上。如图 7 所示，集热系统输入热流和输出热流都随着聚光比增大而线性上升，但输入热流的上升趋势更快。由于在相同的热源温度下，吸收器与环境间辐射和对流产生的热损失相等，故太阳能集热系统的热效率随着聚光比的增加而增大，如图 6(b)所示。

由于高低温热源的温度没有变化，随着聚光比 C 的增加，斯特林热机单位时间输入和输出的热量均增加，即热机的损失增加，而输出功的变化率小于热输入的增长变化率，因此斯特林机的热效率随着聚光比 C 的增加而不断下降，如图 6(c)所示。

在给定的吸收器温度下，增大辐射强度，集热器接收的能量有限，而且它通过辐射和对流将热量散失到周围环境中，因此集热系统热效率与辐射强度正相关，而系统综合效率则随辐射强度增加而下降，如图 6(d)所示。

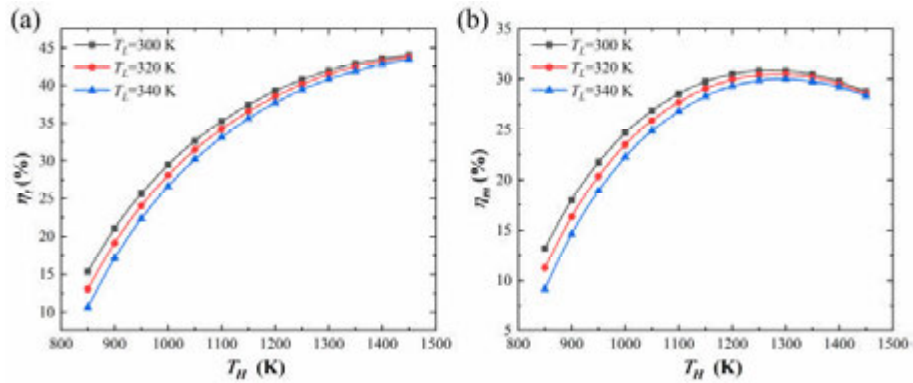


图 8 冷源温度对系统性能的影响：(a) 热机效率；(b) 综合效率

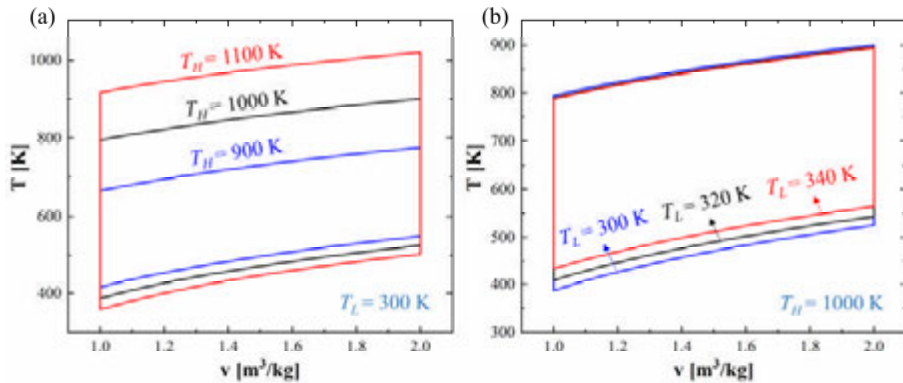


图 9 不同冷、热源温度下热机循环 T - v 图对比：(a) 变热源温度；(b) 变冷源温度

图 8 展示了不同冷源、热源温度下系统性能变化规律。如图 8(a)所示，斯特林热机的效率随着高温热源温度的增加而上升，而当冷源温度从 300K 增大到 340K 时，斯特林发动机热效率在 1000K 的热源温度情况下从 30% 下降到 25% 左右。系统综合效率则随着热源温度增加存在着一个最佳值。

为分析冷、热源温度对系统性能的影响机制，图 9 展示了不同冷热源温度下循环的 T - v 图对比。如图 9(a)所示，高温热源温度的增加会提高斯特林发动机热端的温度水平，而冷端的温度水平会略微降低，循环内部温差水平增大，进而提高了循环热效率。如图 9(b)所示，随着冷源温度的升高，斯特林循环冷端温度水平也会上升，而在相同的热源温度下，热端平均温度基本保持不变，故循环热效率会随着冷源温度的增加而下降。因此适当降低冷源温度有助于提升系统的热力性能。

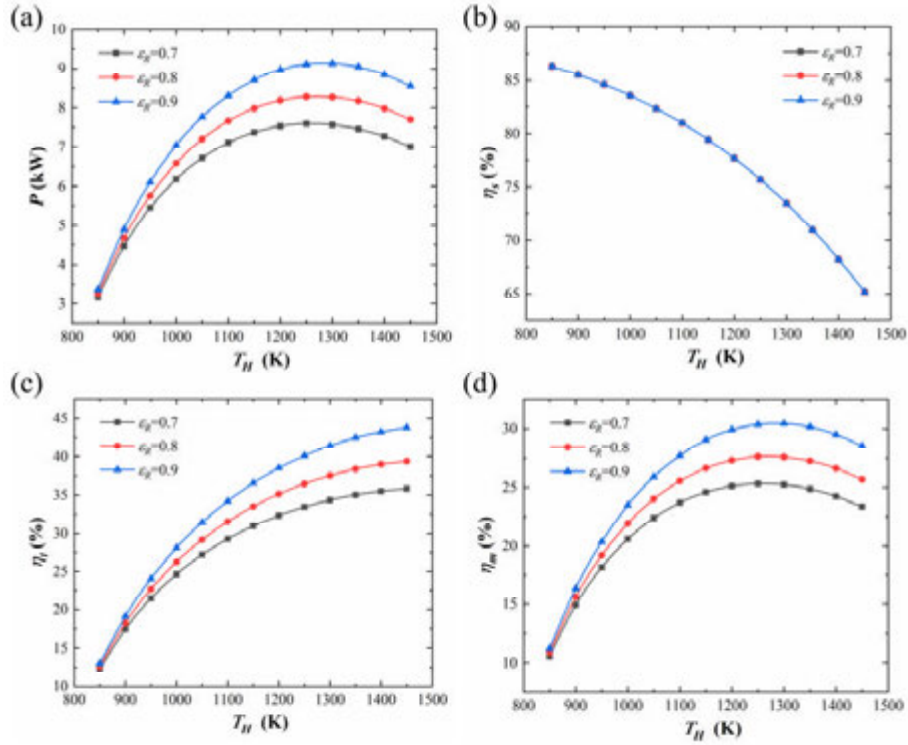


图 10 热源温度、回热效率对系统性能影响：(a) 最大功率；(b) 集热效率；(c) 热机效率；(d) 综合效率

图 10 分别展示了不同回热效率下热源温度对系统最大输出功率、集热效率、热机效率和综合效率的影响规律。由图可见，随着高温热源温度的增加，发动机最大输出功率和系统总体效率都呈现先上升后下降的趋势，且分别在热源温度为 1200K 到 1400K 的变化范围内存在一个最大值。太阳能接收器的效率随着热源温度的增加不断降低，而斯特林发动机的热效率随着热源温度的增加不断升高，增长速度不断放缓。

高温热源温度的增加会显著增加太阳能接收器与环境间的辐射和对流热损失，其中辐射损失与热源温度的四次方正相关。如图 10(b)所示，当热源温度增大到一定值时，太阳能接收器的效率的下降速率会加快。

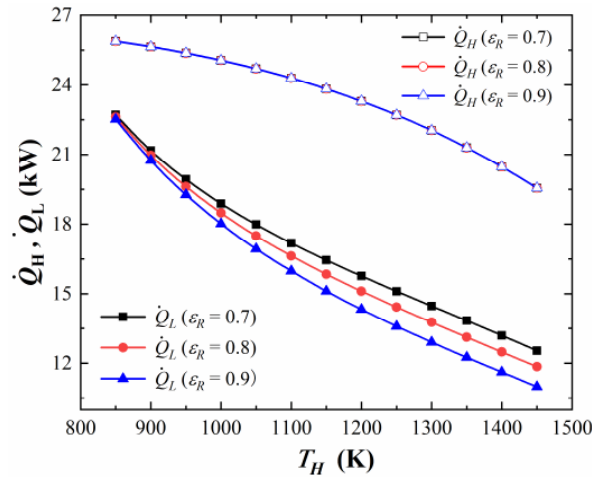


图 11 不同回热效率下的斯特林发动机进出热流对比

回热效率的变化主要通过影响斯特林发动机的热效率来影响系统的热力性能。图 11 展示了不同回热效率下的斯特林发动机进出热流对比。如图 11 所示，随着回热效率的增加，热机回热损失减少，相同热源温度下斯特林发动机输入热流不变，而输出热流逐渐减小。根据热机效率表达式，斯特林发动机的热效率随之上升，系统总体的效率也上升。故增大回热

效率可以改善系统的性能特性，但要求吸收器在高温下工作。

当热源温度低于 1300K 时，随着热源温度的增大，斯特林机热效率的上升速率大于集热系统效率的下降趋势，系统综合效率随之上升。当系统效率到达最大值之后，继续增大热源温度，吸收器热损失会剧烈增大，集热系统效率下降到较低值，系统综合效率随之下降。

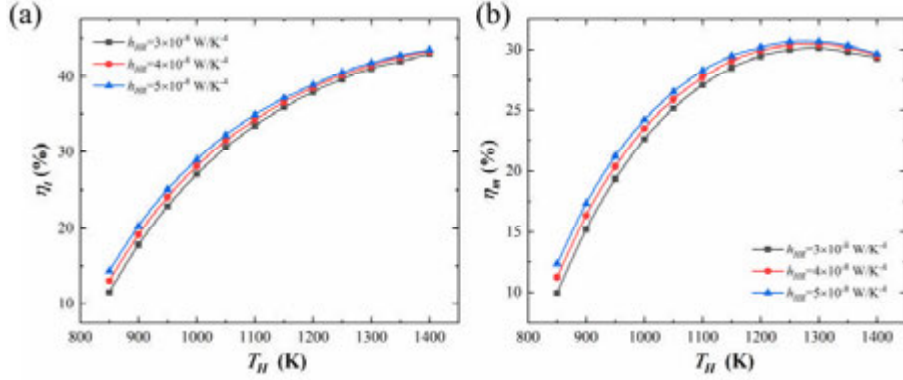


图 12 热端辐射系数对系统性能的影响：(a) 热机效率；(b) 综合效率

图 12 展示了热端辐射系数对斯特林机热效率、系统综合效率的影响规律。如图 12 所示，系统综合效率随着热端辐射系数的增大而升高，而最大综合效率对应的最佳热源温度随着热端辐射系数的增大而减小。

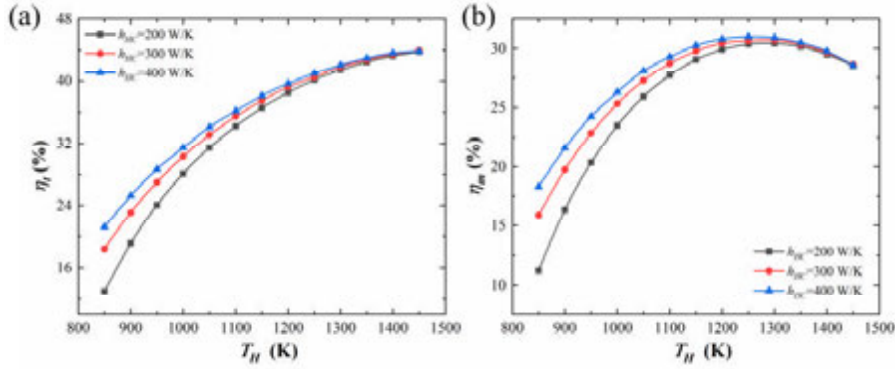


图 13 热端对流换热系数对系统性能的影响：(a) 热机效率；(b) 综合效率

图 13 展示了热端对流换热系数对系统性能的影响规律。如图 13 所示，随着热端对流换热系数从 200W/K 增加到 400W/K，相同热源温度下的系统综合效率不断下降，而最大综合效率对应的最佳热源温度则不断减小。根据工质与热源的换热过程，热端辐射系数和对流换热系数的增大都会加快热端的换热速率，提升换热效果，缩短工质与热源换热的过程，有利于循环热效率和系统综合效率的提升。

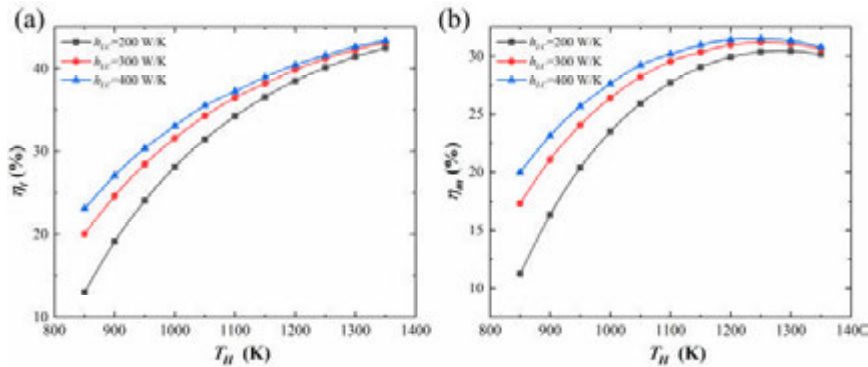


图 14 冷端对流换热系数对系统性能的影响：(a) 热机效率；(b) 综合效率

图 14 展示了冷端对流换热系数对系统性能的影响规律。如图 14(a)所示，冷端对流换热

系数的增加有利于斯特林发动机热效率的提升,进而提升系统的综合效率。冷端传热系数的增加有利于促进工质在冷却器与冷源的换热进程,缩减循环的周期,有利于系统性能的提升。

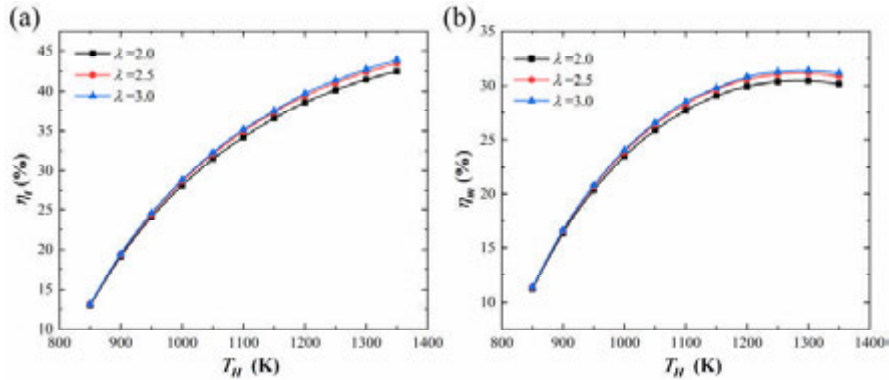


图 15 循环体积比对系统性能的影响: (a) 热机效率; (b) 综合效率

图 15 展示了循环体积比对系统性能的影响规律。如图 15 所示,随着循环体积比从 2 增加到 3 时,斯特林发动机热效率和系统综合效率不断升高,上升幅度逐渐减小。循环体积压缩比越大,单位时间工质对外做功量越大,斯特林发动机的功率和热效率也越大。因此,在密封和承压材料允许的范围内,适当增大工质的体积比有助于提升系统的性能。

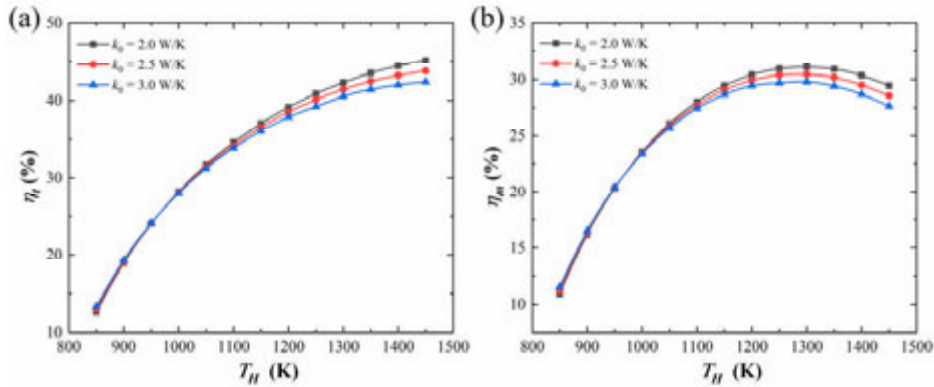


图 16 漏热系数对系统性能的影响: (a) 热机效率; (b) 综合效率

图 16 展示了漏热系数对系统性能的影响规律。如图 16 所示,当热源温度低于 1000K 时,漏热损失对系统性能影响不明显。当热源温度超过 1100K 时,由于热源与冷源温差较大,漏热系数的增加会导致斯特林发动机热效率和系统综合效率有明显的下降。

5 结论

本文考虑了太阳能集热器的辐射、对流损失和斯特林热机的有限速率传热、回热损失、漏热损失以及热吸收器与斯特林热机高温热源间的能量平衡,运用有限时间热力学方法建立了太阳能驱动的斯特林热机能量耦合模型。对于斯特林热机循环,运用等可用势过程模拟工质与冷热源间的换热的变温过程,建立了循环的多变换热模型。运用遗传算法以循环温度为目标,在约束条件下得到了系统最大输出功率及对应的系统综合效率。

结果表明,在系统最大输出功率下存在最佳的热源温度使系统综合效率最大。对于碟式集热系统,当吸收器温度维持一定值时,过高的聚光比和辐射强度会造成过大的热损失进而削减系统综合效率。对于斯特林发动机系统,提高回热效率、循环体积比、冷端对流换热系数、热端辐射系数和热端对流换热系数有利于提升系统最佳性能;而降低冷源温度、漏热系数也能改善系统性能。模型优化结果和参数分析能为实际碟式斯特林系统的设计和性能分析提供一定参考。

参考文献

- [1] Mancini T, Heller P, Butler B, et al. Dish-Stirling Systems: An Overview of Development and Status [J]. *Journal of Solar Energy Engineering*, 2003, 125(2): 135-51.
- [2] R.J. Meijer, Stirling Thermal Motors Inc, assignee, Solar powered Stirling engine, United States patent US 4,707,990, 1987 Nov 24.
- [3] Blank D A, Wu C. Power optimization of an extra-terrestrial, solar-radiant stirling heat engine [J]. *Energy*, 1995, 20(6): 523-30.
- [4] Chen J, Yan Z, Chen L, et al. Efficiency bound of a solar-driven Stirling heat engine system [J]. 1998, 22(9): 805-12.
- [5] Sahin A Z. Finite-time thermodynamic analysis of a solar driven heat engine [J]. *Exergy, An International Journal*, 2001, 1(2): 122-6.
- [6] Sharma A, Rai A, Shukla S. Finite time thermodynamic analysis and optimization of solar-dish Stirling heat engine with regenerative losses [J]. *Thermal Science*, 2011, 15:
- [7] Yaqi L, Yaling H, Weiwei W. Optimization of solar-powered Stirling heat engine with finite-time thermodynamics [J]. *Renewable Energy*, 2011, 36(1): 421-7.
- [8] Liao T, Lin J. Optimum performance characteristics of a solar-driven Stirling heat engine system [J]. *Energy Conversion and Management*, 2015, 97: 20-5.
- [9] Dai D, Liu Z, Yuan F, et al. Finite time thermodynamic analysis of a solar duplex Stirling refrigerator [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 156: 597-605.
- [10] Lai X, Yu M, Long R, et al. Dynamic performance analysis and optimization of dish solar Stirling engine based on a modified theoretical model [J]. *Energy*, 2019, 183: 573-83.
- [11] Chen C-L, Ho C-E, Yau H-T. Performance Analysis and Optimization of a Solar Powered Stirling Engine with Heat Transfer Considerations [J]. *Energies*, 2012, 5(9): 3573-85.
- [12] Ahmadi M H, Mohammadi A H, Dehghani S, et al. Multi-objective thermodynamic-based optimization of output power of Solar Dish-Stirling engine by implementing an evolutionary algorithm [J]. *Energy Conversion and Management*, 2013, 75: 438-45.
- [13] Ahmadi M H, Sayyaadi H, Dehghani S, et al. Designing a solar powered Stirling heat engine based on multiple criteria: Maximized thermal efficiency and power [J]. *Energy Conversion and Management*, 2013, 75: 282-91.
- [14] Ahmadi M H, Sayyaadi H, Mohammadi A H, et al. Thermo-economic multi-objective optimization of solar dish-Stirling engine by implementing evolutionary algorithm [J]. *Energy Conversion and Management*, 2013, 73: 370-80.
- [15] Ahmadi M H, Ahmadi M A, Mellit A, et al. Thermodynamic analysis and multi objective optimization of performance of solar dish Stirling engine by the centrality of entransy and entropy generation [J]. *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 2016, 78: 88-95.
- [16] Jabari F, Nazari-heris M, Mohammadi-ivatloo B, et al. A solar dish Stirling engine combined humidification-dehumidification desalination cycle for cleaner production of cool, pure water, and power in hot and humid regions [J]. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 2020, 37: 100642.
- [17] Erbay L B, Yavuz H. Analysis of the stirling heat engine at maximum power conditions [J]. *Energy*, 1997, 22(7): 645-50.
- [18] Babaelahi M, Sayyaadi H. A new thermal model based on polytropic numerical simulation of Stirling engines [J]. *Applied Energy*, 2015, 141: 143-59.
- [19] Hosseinzade H, Sayyaadi H, Babaelahi M. A new closed-form analytical thermal model for simulating Stirling engines based on polytropic-finite speed thermodynamics [J]. *Energy Conversion and Management*, 2015, 90: 395-408.

- [20] Dai D, Liu Z, Long R, et al. An irreversible Stirling cycle with temperature difference both in non-isothermal and isochoric processes [J]. Energy, 2019, 186:
- [21] Liu W, Liu P, Wang J B, et al. Exergy destruction minimization: A principle to convective heat transfer enhancement [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 122: 11-21.

带有球状阻挡的新型流道结构对 SOFC 性能影响研究

赵薇薇，左敏，蒋新宇，贺振宗*，毛军逵

（南京航空航天大学，能源与动力学院，江苏省，南京，210016）

Tel:18761654116 *Email: hezhonzong@nuaa.edu.cn

摘要：为了改善固体氧化物燃料电池（Solid Oxide Fuel Cell, SOFC）的性能，本文提出了一种具有球状结构的新型流道，并与传统结构进行了对比。结果表明，与基本直流道相比，带有挡板流道的 SOFC 和带有球状结构的 SOFC 电流密度分别增加了 6.42% 和 7.14%，总压降分别增加了 3.62 倍和 2.16 倍。由此可知，具有球状结构的新型流道具有更好的综合性能优势。随后研究了球状结构参数（中心距 d 和高度 R ）、入口参数以及孔隙率对 SOFC 性能的影响。结果表明，随着 d 的减小和 R 的增大，SOFC 的净功率增大；随着气体进气速度、温度、和电极孔隙率增大，电池输出功率在一定范围内呈现增大趋势。

关键词：固体氧化物燃料电池；输出功率；流道结构；电流密度

0 介绍

随着全球非可再生能源的日趋匮乏以及气候变暖对环境造成的不利影响愈演愈烈^[1]，寻求新能源代替原有能源结构解决能源危机已经成为全球持续发展的迫切需求。在众多的新能源类别中，氢能作为一种理想的能源载体，被认为是实现地球可持续发展，解决能源短缺危机的重要方案之一。氢燃料电池作为氢能源利用的核心技术之一，由于不受卡诺循环的限制，可以直接将化学能转化为电能，具有很高的能量转换效率成为能源领域重要研究方向之一。在众多燃料电池中，SOFC 发展迅速，应用广泛。SOFC 按结构主要分为三种：平板式、管式和瓦楞式^[2]。在对 SOFC 的结构参数的众多研究中，有关流道结构的研究备受人们重视^[3]。流道结构直接影响反应气体的利用率以及燃料电池的排水及散热性能，对 SOFC 的综合性能有很大的影响，是 SOFC 的一个重要的研究方向^{错误！未找到引用源。}。

Anderssoon^[4]等人建立了板式 SOFC 有限元模型，对流道进行了优化研究。结果表明，气体流道与阴极电极厚度的比值减小时，可以获得体电流密度显著增大而仅牺牲较小的面电流密度，这是因为更宽、更薄的流道与电极接触面积增大并且增大的幅度远大于体积增加的幅度，有利于气体充分反应。Khazaei^[5]等研究了流道截面几何形状对板式 SOFC 性能的影响。将流道截面由矩形改为三角形和梯形，分析了流道几何形状对三相反应区反应物分布的影响进而影响燃料电池的性能，同时保证每个结构中活化面积和其他操作条件相同。结果表明，矩形流道具有更高的性能。Ilbas^[6]等人以极化曲线和功率曲线的形式表明了支撑体厚度、氧化剂类型、工作温度和压力对板式 SOFC 性能的影响。研究表明，SOFC 的性能随工作温度和工作压力的增加而提升，电池功率与支撑体厚度成反比，一般来说阴极支撑的 SOFC 性能优于电解质支撑

的 SOFC。

美国西门子-西屋电气公司开发了高功率密度扁管式电池，通过在阴极支撑管中加设脊条来缩减电流路径，进一步减小阴极的厚度，降低阴极传质极化和欧姆极化，以提高电池的功率密度^[7]。Park^[8]等发现从进口到出口宽度逐渐增加的扁管式 SOFC 设计，可以显著提高电池的平均电流密度。Feng^[9]等人选择最大输出功率作为优化目标，对管式 SOFC 的结构进行了优化。结果表明，局部输出功率和局部电流密度沿流动方向减小；对于固定的阳极，阴极和电解质体积分数分别存在最佳阳极，阴极和电解质厚度以及相应的最佳燃料电池长度。Wu^[10]等设计了具有半圆形、矩形和梯形扰动的三种新型流动通道的管式 SOFC，发现通过在通道内设置扰动，可以在一定程度上降低温度梯度和最高温度。此外，矩形扰动在减小温度梯度方面优于半圆形扰动和梯形扰动。

Yang^[11]等人利用三维仿真工具计算了不同工况下瓦楞式 SOFC 单体的温度分布和电流密度分布。仿真结果表明并流情况下随着燃料输送速率的提高，电流密度分布不均匀，而随着燃料中氢的质量分数的增加，电流密度分布更均匀。Sciacowelli^[12]等人通过熵产分析确定了最相关的几何量，并以最小熵产为目标函数对 SOFC 几何结构进行优化。结果表明，流道夹角由 107° 改为 117° 后，SOFC 的效率有所提升。相比于国外，国内有关瓦楞式 SOFC 的研究发展较晚。靳遵龙^[13]等研究了肋宽和阴极厚度对瓦楞式 SOFC 性能的影响。模拟计算结果表明：随着肋宽的减小，扩散进入多孔电极的反应气体增多，反应物分布均匀性得到改善，浓差极化减小，电池性能得到提升；增大阴极电极厚度，SOFC 温度升高，从而活化损失降低。因此，综合考虑两者的作用，当肋宽与阴极厚度的比值较小时，可以有效改善 SOFC 的输出性能。

根据上述研究可知，通过合理设计和优化的流道结构可以有效改善 SOFC 的性能。强化流道传质是 SOFC 流道结构优化的一个重要手段。但是，该优化是以流道进出口之间压降增加为代价，从而引起输送气体的泵的功耗的增加。因此，压降也是评估流道性能的一个重要因素。本文提出了一种带有球状结构的流道，研究了该新型流道设计对 SOFC 电流密度和阴极压降的影响，并将计算结果与基本直流道模型和带有挡板流道模型进行了比较。随后研究了球状结构参数（中心距 d 和高度 R ）、入口参数（温度、进气速度）以及孔隙率对 SOFC 性能的影响。

1 SOFC 模型

1.1 几何模型

具有球状结构的单流道平板式 SOFC 的截面示意图如图 1 所示，流道基本几何结构尺寸参数见表 1。SOFC 主要包括阳极/阴极气体通道，阴/阳极气体扩散电极和电解质等几个部分。图 2 为 SOFC 流道三维示意图。从图可以看出，沿着流道的波形为圆弧，圆弧波形由流道两侧向流道中心逐渐增大，两侧为零，流道中心为最大值。沿着流道的相邻阻挡物中心距（ d ）和阻挡物中心高度（ R ）被定义为可变的几何参数。

为了解带有球状结构的流道对 SOFC 整体性能的影响，将其与普通直流道及带有矩形挡板流道进行了比较。由于 SOFC 电堆在结构上呈现周期排列的特点，因此选取一个单流道为计算域，以节省计算资源。图 3 是三种类型流道的示意图。图 3（a）表示的是基本直流道，由规则的长方体组成；图 3（b）表示的是带有矩形挡板流道；图 3（c）表示的是带有球状结构流道。

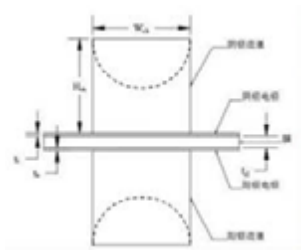


图 1 SOFC 截面图

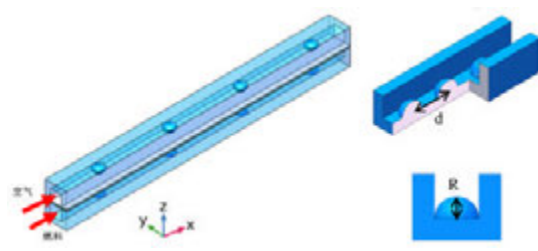
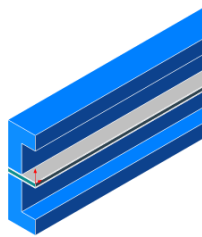
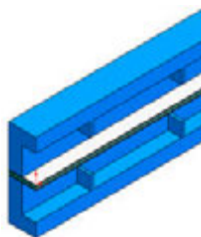


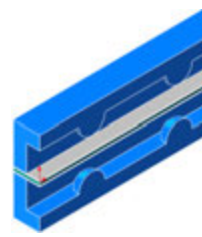
图 2 SOFC 三维示意图



(a) 基本直通道



(b) 挡板通道



(c) 球状结构通道

图 3 三种类型的流道

模型的几何尺寸如表 1 所示：

表 1 SOFC 几何尺寸

参数	符号	数值(mm)
流道长度	L	40
流道宽度	W_{ch}	1.5
流道高度	H_{ch}	1.5
阴极厚度	t_c	0.04
电解质厚度	t_{el}	0.19
阳极厚度	t_a	0.04
挡板高度	H_{db}	0.75
球状结构高度	R	0.75

1.2 数值模型

在本研究中，假定只有氢参与电化学反应，电池中的电化学反应如下：

阳极： $H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^-$

阴极： $\frac{1}{2}O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-}$

总反应： $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$

为了简化计算，做出的假设如下：（1）假设所有气体都是理想气体；（2）通道和多孔电极内部的流动认为是层流；（3）假定化学反应发生在三相边界；（4）假定多孔电极是均匀的各向同性介质；（5）假设忽略重力的影响。

1.2.1 控制方程

数值模型求解控制方程主要包括电荷、动量、质量等方程。

电荷传递方程为：

$$\nabla \cdot \mathbf{i}_k = Q_k \quad (1)$$

$$\mathbf{i}_k = -\sigma_k \nabla \phi_k \quad (2)$$

式中， Q_k 表示源项； k 表示电解质的指数为 l 或电极的指数为 s ； ϕ_k 表示电势； σ_k 表示电导率。

燃料和空气流道中的动量方程为：

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (3)$$

$$\rho_g \cdot (\nabla \cdot \vec{u}) \cdot \vec{u} - \nabla \left[-p + \mu_g \cdot \left\{ \psi - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{u}) \right\} \right] = F \quad (4)$$

式中， ρ 是气体密度； $\vec{u}$ 是速度矢量； p 是压力； μ 是粘度； ψ 是粘性应力张量； F 是体积力矢量。

燃料电池流场和电极中的稳态物质传递可以用下面的质量传递方程表示：

$$\nabla \left(-\rho \cdot \omega_i \sum D_{eff,ij} \cdot \nabla x_j + (x_j - \omega_j) \frac{Vp}{p} \cdot \vec{u} - D_i^T \cdot \frac{\nabla T}{T} \right) + \rho \cdot \vec{u} \cdot \nabla \omega_j = S_i \quad (5)$$

式中， T 表示温度； ω_i 表示各组分的质量分数； x_j 表示各组分的摩尔分数； $D_{eff,ij}$ 表示有效分子扩散系数； D_i^T 表示热扩散系数； S_i 表示源项。

电池的实际电势可以表示为：

$$V_{cell} = E^{OCV} - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{conc} \quad (6)$$

式中， V_{cell} 是实际电势； E^{OCV} 是开路电压； η_{act} 、 η_{ohm} 和 η_{conc} 分别是活化过电位、欧姆过电位和浓差过电位。

Butler-Volmer 方程描述活化损失与电流密度之间的关系：

$$i = i_0 \left(\exp \left(\alpha \frac{n_e F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp \left(-(1 - \alpha) \frac{n_e F}{RT} \eta_{act} \right) \right) \quad (7)$$

式中， i_0 是交换电流密度； α 是传递系数； n_e 是反应中转移的电子数； F 是法拉第常数； R 是通用气体常数； T 是温度。

1.3 边界条件

所建模型的运行条件和输入输出参数如表 2 所示。在阳极的入口边界，电位固定为参考电位零。在阴极的入口边界，电位设为电池电压。所有其他外部边界和接口都是电绝缘的。

表 2 SOFC 模型具体条件设置

参数	符号	数值	单位
操作压力	P	1	atm
操作温度	T	1073.2	K
空气进气速度	$u_{in,c}$	10	m/s
燃料进气速度	$u_{in,a}$	1.7	m/s
入口燃料质量分数	$W_{0,H2,a}$	0.9	-
入口氧气质量分数	$W_{0,O2,c}$	0.2314	-
阳极交换电流密度	$i_{0,a}$	0.11	A/m ²
阴极交换电流密度	$i_{0,c}$	0.031	A/m ²
电极电导率	σ	1000	S/m
电解质电导率	σ_0	5	S/m
电极渗透率	κ	10^{-10}	S/m
孔隙率	ϵ_{por}	0.35	-
阳极传递系数	$\alpha_{a,anode}$	0.46	-
阴极传递系数	$\alpha_{a,cathode}$	3.52	-

1.4 网格无关性验证

图 4 为具有球状结构流道的 SOFC 计算网格示意图。其中，电极和电解质部分是规则的几何形状，采用结构化网格，且电极交界面处采用逐渐加密的边界层；流道部分采用自由四面体网格。如图 5 所示，在 SOFC 工作电压为 1V 时，当网格数量由 30 万继续增加至 60 万和 76 万时，电流密度的变化范围在 1% 以内。因此，在保证结果正确前提下为了节约计算时间，本研究中该模型取 30 万网格。



图 4 计算网格

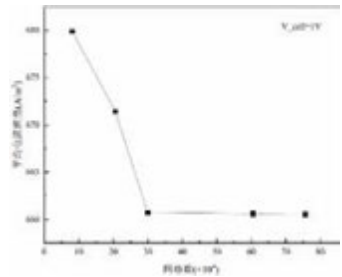


图 5 网格无关性验证

1.5 模型验证

为了保证本研究中仿真模型数值分析的可靠性，将模型与 Timurkutluk Bora^[14]等人的实验中几何尺寸、运行条件及其它重要参数等保持一致，并将本研究模拟求解得到的极化曲线与 Bora 实验得到的极化曲线进行比较。图 6 表示数值模拟得到的极化曲线以及 Bora 实验得到的极化曲线。从图中可以看出，仿真结果与实验数据吻合较好，总体来看，实验数据与模拟结果之间具有总体一致性，该仿真模型适用于模拟 SOFC 的性能。

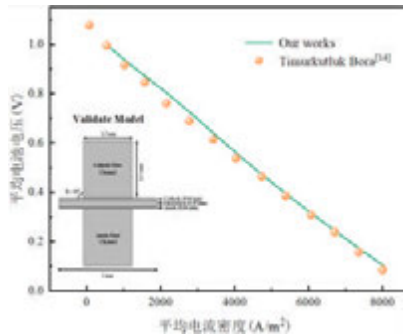


图 6 实验极化曲线与模拟极化曲线对比

2 三种类型流道的比较

在本节中，为了评估球状结构流道对 SOFC 性能的影响，我们根据电流密度和流道压降，对三种不同类型的流道进行了综合比较。图 7 是在电池工作电压为 0.8 V 时，三种不同类型流道的 SOFC 的电流密度对比。从图 7 可以看出，与普通直通道相比，在流道中添加挡板或设置球状阻挡物都可以提高电流密度，且带有挡板流道 SOFC 的电流密度增加约 6.42%，带有球状结构流道 SOFC 的电流密度增加约 7.14%。表 3 是三种类型流道压降对比。从表 3 可以看出，三种类型流道中，普通直通道的压降约为 199.8pa，挡板通道的压降约为 923.6pa，球状结构通道的压降约为 630.5pa，带有挡板流道和球状流道 SOFC 的总压降与普通直流通道相比分别增加了 3.62 倍和 2.16 倍。造成这种现象的主要原因是因为传统挡板或球状阻挡结构的存在对 SOFC 流道中流场结构进行了改变，在挡板位置改变了气体的流动方向，强化了气体与电极之间的相

互作用，更有利于气体扩散进入催化层进行电化学反应。同时挡板的存在也造成了流道中的压力损失，最终导致流道进出口压降增大，必然也会消耗更多的泵功（用于驱动气体在 SOFC 流道中流动）。此外，不难发现，相对带有传统挡板结构的 SOFC 流道，带球状阻挡结构的 SOFC 流道具有较好电流密度，和较低的压降。

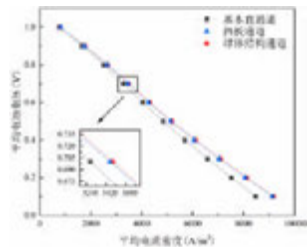


图 7 三种类型流道电流密度对比

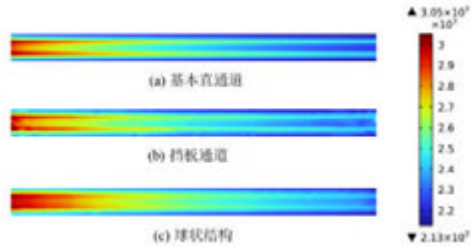


图 8 阴极电解质电流密度分布

表 3 三种类型流道压降对比

流道类型	阴极流道压降 (pa)	阳极流道压降 (pa)	总压降 (pa)
基本直流通道	175.7	24.1	199.8
挡板流道	890.0	33.6	923.6
球状结构流道	597.8	32.7	630.5

图 8 是在电池工作电压为 0.8 V 时，三种不同类型流道的 SOFC 的电流密度分布云图。从图中可以看出入口处电流密度最大，因为在开始时反应物浓度最高。随着反应物沿流动通道逐渐消耗，电流密度从入口到出口逐渐减小。此外，与基本直通道相比，球状结构通道和传统挡板通道的电流密度更高、更均匀。这是由于反应气体受到了扰动、流道内的传质效果增强引起的结果。综上所述，具有球状结构流道的 SOFC 综合性能更好，是一种具有竞争力的结构。

3 球状结构参数对 SOFC 性能的影响

本节进一步研究在流道中球状阻挡物的结构参数对 SOFC 性能的影响。可变的结构参数定义为 L1（流道中第一个阻挡物中心与流道入口的距离）、R（阻挡物中心在流道中的高度）、d（相邻阻挡物的中心距）。

3.1 球状结构中心距（d）对 SOFC 性能的影响

首先研究了相邻阻挡物中心距 d 对 SOFC 性能的影响，分别选取 d 为 14mm、7mm、5mm 的中心距，其他变量保持不变。重点考虑流道压降情况及 SOFC 净功率。图 9 流道中阻挡物中心距 d 分别为 14、7、5mm 时“XZ”平面空气速度流线图。从图中可以看出，阻挡物对气体输运具有周期性扰动作用，在球状结构的下方存在明显的速度梯度。随着中心距的减小，流道中阻挡的数量相应增加，扰动效果也随之增加，气体与电极之间的作用更剧烈。

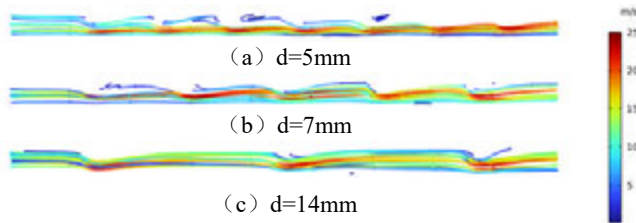


图 9 不同 d 时电池“XZ”平面空气速度分布

图 10 表示 d 的变化对 SOFC 输出功率的影响。结果表明，电池的输出功率随着 d 的减小而增大，这是因为在流道中设置阻挡增强了气流扰动， d 越小扰动越强，迫使更多气体与电极表面相互作用，强化气体扩散效应，从而使更多气体参加电化学反应，使得电池功率密度增加。但同时也要注意，流道入口与出口之间的压力降在不断地增加。结果表明，在流道中设置 7 个阻挡物即相邻阻挡物中心距 $d=5\text{mm}$ 时，电池的平均功率密度取得最大值，此时，沿流道的压降也达到最大。因此，压降也是评估流道性能的一个重要因素。

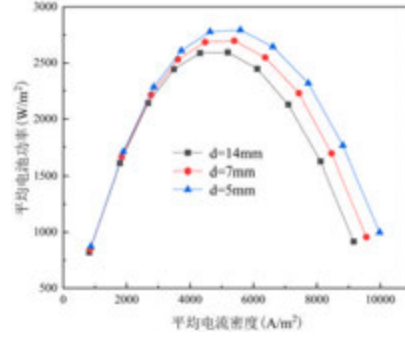


图 10 不同 d 时电池平均功率密度变化

综上所述，增大流道中阻挡物的数量会增加流道入口与出口之间的压力降，这需要更大的额外功耗来驱动气体在流道中运输。图 11 表示了不同 d 条件下阳极流道和阴极流道中的压力降。气体流道进出口之间的压力降为： $\Delta P = P_{inlet} - P_{outlet}$ ，其中， P_{inlet} 是进口的面平均压力， P_{outlet} 是出口的面平均压力。研究结果表明， d 的减小明显增大了流道进出口之间的压降。因此，尽管减小 d 可以增加电池的平均功率密度，但是同时会产生更大的压降，从而消耗更多的额外功使 SOFC 的净输出功率降低，这种影响的程度需要进一步探究。

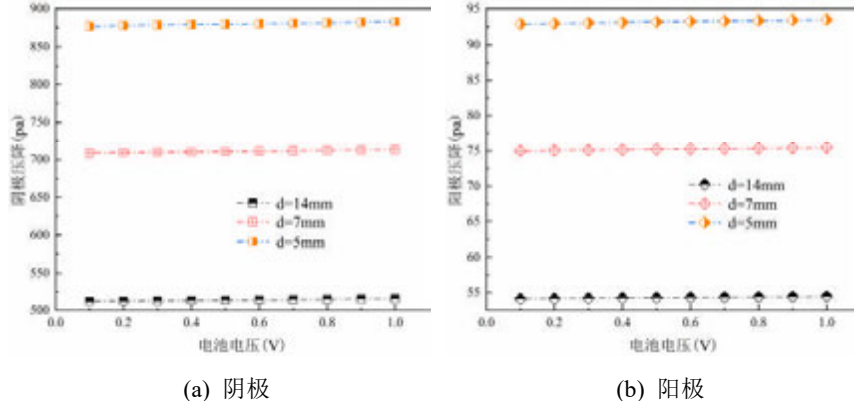


图 11 不同 d 时流道内部压降变化

本文采用的净功率可以通过以下公式计算得到^[15]：

$$W_{net} = W_{FC} - W_p \quad (8)$$

式中， W_{FC} 是 SOFC 输出功率； W_p 是驱动反应气体的辅助系统泵送功率。驱动流体流动的泵送功率可通过下式^[16]：

$$W_p = \frac{\dot{m}\Delta p}{\rho} \quad (9)$$

式中， $\dot{m}$ 是质量流率； ρ 是混合气体的密度； Δp 是流道中的压力损失。图 12 为 SOFC 电池净功

率密度在不同 d 下的性能表现。与无阻挡流道相比，流道中设置阻挡显著增加了 SOFC 的净功率密度，并且随着 d 的减小，电池输出功率相应提高， $d=5\text{mm}$ 时电池输出功率达到最大值为 2973.5W/m^2 。尽管随着 d 的减小，流道进出口之间的压降增大导致辅助功耗增加，但是其幅度低于电池功率的增长，所以本文设计的流道结构 SOFC 净功率仍然随着 d 的减小而增大。本文设计条件下， d 为 5mm 时得到的净功率最大值为 2594.5W/m^2 。

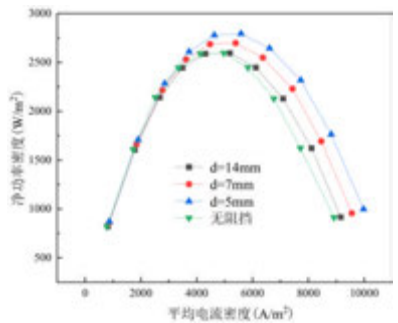


图 12 不同 d 时净功率变化

3.2 球状结构高度 (R) 对 SOFC 性能的影响

本节研究了不同高度 R 对 SOFC 性能的影响，分别选取 R 为 $1/6H=0.25\text{mm}$ 、 $1/3H=0.5\text{mm}$ 、 $1/2H=0.75\text{mm}$ 的阻挡物高度，其他变量保持不变。和上一节相似，重点考虑流道压降情况及 SOFC 净功率。图 13 是其他条件相同下不同 R 时 SOFC 的极化曲线，进一步表示了 R 对 SOFC 性能的影响。从图中可以看出，当阻挡物的高度最大时，SOFC 的平均电流密度最大。这是由于当阻挡物的高度增加时，对气体流动的阻挡作用增强，强化了气体与电极之间的相互作用，有更多气体会扩散进入电极层内参加电化学反应，最终使得电池电流密度增大。此外，从图中还可以看出平均电流密度变化在高电池电压工况下变化比较显著，在低电池电压工况下变化不显著。

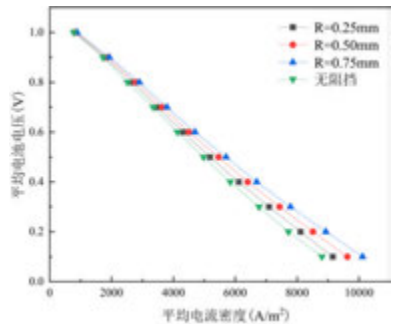


图 13 不同 R 时极化曲线

一般来说，如果阻挡物高度过小，对流道中气流的影响就不显著；但是，如果阻挡物高度过大，阻挡引起的扰动作用将引起明显的流动阻力，造成辅助系统泵送耗功过多，阻挡存在就失去了作用。因此，分析计算考虑通道压降影响下的 SOFC 净功率是有必要的。图 14 表示了不同 R 条件下阳极流道和阴极流道中的压力降。 R 的增加明显增大了流道进出口之间的压降。因此，尽管增大 R 可以增加电池的平均功率密度，但是同时会产生更大的压降，从而消耗更多的额外功使 SOFC 的净输出功率降低。图 15 为 SOFC 电池净功率密度在不同 R 下的性能表现。与无阻挡流道相比，流道中设置阻挡显著增加了 SOFC 的净功率密度，并且随着 R 的增

大，电池输出功率相应提高， $R=0.75\text{mm}$ 时电池输出功率达到最大值为 2851.66W/m^2 。随着 R 的增大，尽管流道进出口之间的压降增大导致辅助功耗增加，但是电池净功率仍伴随 R 增大而增大，在高电流密度区现象更明显。在本文设计工况下， R 为 0.75mm 时得到的净功率最大值为 2776.45W/m^2 。

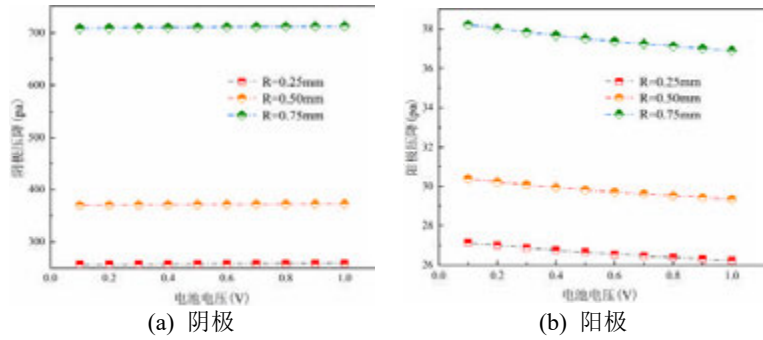


图 14 不同 R 时流道内部压降变化

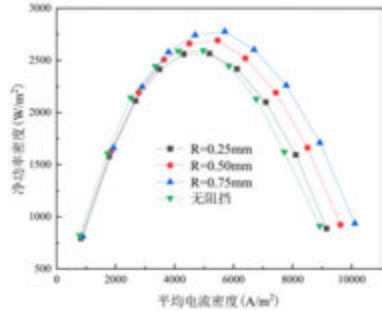


图 15 不同 R 时净功率变化

4 入口参数和电极孔隙率对 SOFC 性能的影响

4.1 入口参数对 SOFC 性能的影响

图 16 表示了在同向流动，燃料气体流速为 1.7m/s ，空气流速为 10m/s 条件下，对操作温度分别为 973.2K 、 1073.2K 和 1173.2K 时的 SOFC 模拟结果。从图中可以看出，随着操作温度的升高，最大输出功率随之增大。首先，操作温度升高能够为反应提供能量，减小电化学反应过程中必须克服的活化能势垒，从而减小了由于活化极化导致的过电位损耗；其次，温度升高增加了氧离子电导率，从而欧姆极化所造成的电压损耗减小，最终 SOFC 的性能得以提升。

图 17 表示燃料气体速度对氢气质量分数分布的影响。从图中可以看出，氢气在电化学反应过程中被不断地消耗，沿着气体流动方向上流道中氢气的质量分数不断降低（因为阳极流道中随着化学反应进行会有水蒸气产生，所以流道中并非纯氢，出现氢气质量分数变化的现象）。随着入口流速的增加，更多的氢气被带动进入电极中，电池后半段电极中参与反应的氢气质量分数逐渐增加，从而使得氢气在高流速下分布得更加均匀。

图 18 表示不同气体进气速率对电池平均功率密度的影响。从图 18 (a) 可以看出，随着流道入口燃料气体流速逐渐增大，电池最大功率密度有不同程度的增加。入口流速的增加使得氢气在流动方向的质量分数梯度下降从而沿着流动方向上的电流密度分布相对更加均匀是功率密度增加的可能原因之一。图 18 (b) 表示不同空气进口速度时对电池功率密度的影响。从

图中可以分析得到不同流速的空气对 SOFC 性能的影响与不同流速的燃料气体对 SOFC 性能的影响有着相似的规律。

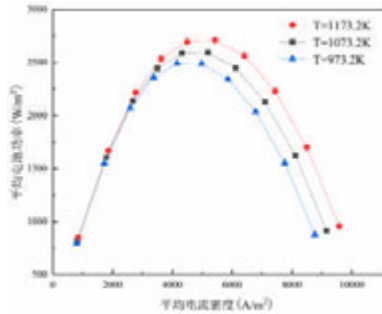


图 16 温度对电池平均功率密度的影响

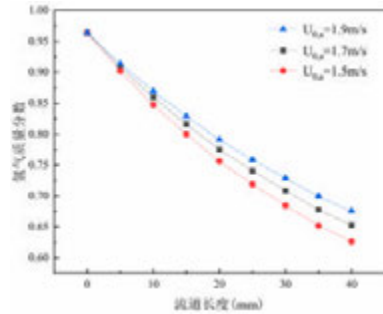
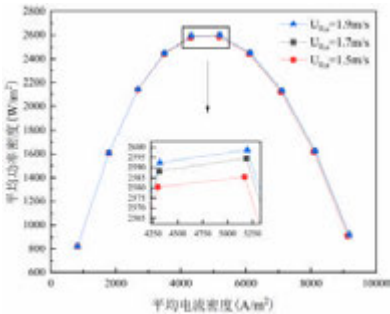
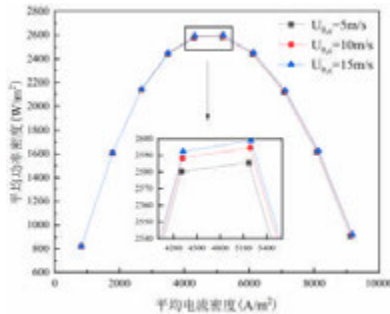


图 17 不同燃料进气速度时氢气质量分数, $V_{cell}=0.1V$



(a) 燃料气体



(b) 空气

图 18 不同气体进气速度时的电池平均功率密度变化

4.2 电极孔隙率对 SOFC 性能的影响

图 19 表示了电极孔隙率对 SOFC 平均功率的影响。从图中可以看出电池平均功率密度随着电极孔隙率的增加而增大。因为孔隙率的增大，增加了燃料电池内部反应物的转移速率，从而促进了电化学反应，引起局部电流密度的增加，最终增加了 SOFC 的平均功率密度，反之功率密度减小。

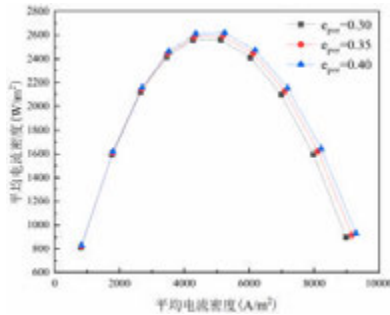


图 19 不同电极孔隙率时的电池平均功率密度变化

4 结论

本文设计了一种具有球状结构的 SOFC 流道，并将该流道结构与直流流道和带传统挡板的流道结构进行了比较，分析了不同流道结构对 SOFC 电池性能（包括电流密度、压降及净输

出功率等)的影响。随后,针对具有球状结构的 SOFC 流道,研究了不同球状结构中心距和阻挡高度对 SOFC 性能影响。最后,本文还分析了在不同入口参数和电极孔隙率对 SOFC 性能的影响。得到的结论如下。

(1) 与普通直流通 SOFC 相比,带有挡板流道 SOFC 的电流密度增加了 6.42%,流道总压降增加 3.62 倍,而带有球状结构流道 SOFC 的电流密度增加了 7.14%,流道总压降增加了 2.16 倍。因此,带有球状结构流道的 SOFC 具有更好的综合性能。

(2) 随着 d 的减小和 R 的增大,流道内部气体扰动增强,传质效果进一步得到强化。尽管此时流道进出口之间的压降随之增大,辅助设备耗功增大,但是由于 SOFC 电流密度增大效果更明显,使得 SOFC 的净功率仍呈现增大趋势。

(3) 流道中工作温度、气体进气速度和电极孔隙率分别增大时,电池输出功率在一定范围内呈现增长趋势。

参考文献

- [1] 廖火生,张霖,张淑兴,等. kW 级 SOFC 系统“Hot-BOP”数值模拟和验证[J].电源技术, 2022,46(11):1313-1317.
- [2] 刘艺辉,李世安,魏荣强,等. 固体氧化物燃料电池流道结构的研究进展[J].化学通报,2021,84(07).
- [3] 杨友晨. 瓦楞式SOFC的多物理场模拟与性能分析[D].郑州大学,2021.
- [4] M. Andersson, J. Yuan, B. Sundén. SOFC Cell Design Optimization Using the Finite Element Method Based CFD Approach[J]. Fuel Cells, 2014, 14(2).
- [5] Khazaei, A. Rava. Numerical simulation of the performance of solid oxide fuel cell with different flow channel geometries[J]. Energy, 2017, 119.
- [6] Mustafa Ilbas, Berre Kumuk. Numerical modelling of a cathode-supported solid oxide fuel cell (SOFC) in comparison with an electrolyte-supported model[J]. Journal of the Energy Institute, 2019, 92(3).
- [7] 宋世栋,韩敏芳,孙再洪. 管式固体氧化物燃料电池堆的研究进展[J].科学通报,2013,58(21):2035-2045.
- [8] Joonguen Park, Joongmyeon Bae, Jae-Yuk Kim. A numerical study on anode thickness and channel diameter of anode-supported flat-tube solid oxide fuel cells[J]. Renewable Energy, 2011, 42.
- [9] Huijun Feng, Lingen Chen, Zhihui Xie, et al. Constructal optimization for a single tubular solid oxide fuel cell[J]. Journal of Power Sources, 2015, 286.
- [10] Wu Zhen, Zhu Pengfei, Yao Jing, et al. Design of novel flow channels of tubular biomass-syngas fueled SOFC towards uniform temperature distribution[J]. Sustainable Energy Technologies and Assessments, 2023, 55.
- [11] Yunzhen Yang, Guilan Wang, Haiou Zhang, et al. Computational analysis of thermo-fluid and electrochemical characteristics of MOLB-type SOFC stacks[J]. Journal of Power Sources, 2007, 173(1).
- [12] Sciacovelli, Adriano, Verda, et al. Entropy generation analysis for the design optimization of solid oxide fuel cells[J]. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 2011, 21(5).
- [13] 靳遵龙,杨友晨,宫本希,等. 瓦楞式固体氧化物燃料电池的数值研究[J].郑州大学学报(工学版), 2021, 42(06):42-48.
- [14] Timurkutluk Bora, Ucar Emre. Development of high performance and low - cost solid oxide fuel cell stacks: Numerical optimization of flow channel geometry[J]. International Journal of Energy Research, 2021, 45(15).
- [15] 闻冉冉. 基于能效分析的 PEMFC 性能优化研究[D].南京航空航天大学, 2021.
- [16] Keke Xu, Bo Ruan, Hua Meng. A thermal performance factor for evaluation of active engine cooling with asymmetric heating[J]. Applied Thermal Engineering, 2014, 73(1).

复合相变隔热层导热系数对锂电池模组热失控蔓延的影响

董袁进, 孟建, 孙晓梅, 赵沛东, 孙鹏, 郑斌

(山东理工大学交通与车辆工程学院, 山东淄博 255049)

(Tel: 15606406069, Email: 1471343231@qq.com)

摘要: 本文构建了锂电池模组热失控蔓延模型, 数值模拟研究了隔热层基体材料和相变材料导热系数变化对热失控蔓延的影响。结果表明: 复合相变隔热层能够有效抑制甚至阻断模组内锂电池间的热蔓延; 当基体材料导热系数不高于 $0.11 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 时, 锂电池间无热蔓延发生; 随着相变材料导热系数增加, 锂电池间均未发生热蔓延, 触发电池的热失控触发时间增加。

关键词: 复合相变隔热层, 导热系数, 锂电池, 热失控蔓延, 基体材料

0 前言

储能研究是缓解能源危机的重要途径^[1-2]。锂离子电池因具有能量密度大、输出功率高、循环寿命长等优点被广泛应用于电动汽车与储能电站上, 并逐渐成为车用动力电池市场的主流^[3-4]。但锂离子电池由于具有高能量比、电解质易燃、隔膜稳定性差等特性, 在滥用条件下不可避免地会出现热失控等安全问题^[5-6]。若单体电池热失控的热量不能够有效的控制和阻断, 那么热失控释放的能量会引起模组乃至系统的热蔓延, 在一定程度上阻碍了电动汽车近一步发展^[7-8]。因此, 以防止热失控蔓延为主要目标的锂离子动力电池系统的安全管理是电动汽车发展应用过程中仍需解决的问题。

在热失控传播方面, 许多学者研究了不同触发条件的热失控传播情况。Wang 等^[9]研究表明, 无论电池的化学性质如何, 当热失控电池有相同的自产热温度、热失控起始温度、最高温度和电池的电化学能量相似时, 热失控的传播行为将相似。Gao 等^[10]发现, 尽管电池与电池之间存在空气间隙, 但触发模块产生的喷射火焰能够点燃相邻的电池模块, 造成热蔓延。Feng 等^[11,12]基于对电池整体内部每种材料的热反应动力学分析, 开发了一个热失控传播模型, 基于模型仿真结果, 提出了许多阻止热失控传播的理论方法, 包括提高热失控触发温度、减少释放的总电能, 增加散热, 增加热阻层。

在热失控蔓延抑制方面, Xu 等^[13]设计了一种具有微流道冷却功能的热管理系统, 阻止了热失控的蔓延。Yuan 等^[14]研究了不同间隙材料对圆柱形电池热扩散的影响, 发现石墨复合板可以有效阻挡热扩散。Berdichevsky 等人^[15]在电池之间增加绝缘和隔热板, 通过减少热传导和辐射能力来阻止热失控的蔓延。Feng 等^[16]选择石棉布作为电池间的隔

热层，成功阻断了热失控的蔓延。但由于石棉布对人体的危害性很高，不能用于热扩散阻挡。

综上，由于动力电池的电化学成分复杂，热失控传播还会受到电池体系、触发方式、周围环境温度、工作状态等因素影响，使得热失控传播试验存在重现性差、操作复杂和危险性大等特点。当前，单体电池热失控和模组内热蔓延机理被广泛研究，但有关复合相变材料隔热层的热蔓延特性仿真研究相对较少。因此，本文建立了锂电池模组热失控传播模型，研究复合相变隔热层中基体材料和相变材料导热系数变化对热失控蔓延特性的影响，探索有效的电池组热失控传播阻隔方案。

1 模型的建立与验证

1.1 三维几何模型

在有限元软件 COMSOL Multiphysics 中建立热失控蔓延三维模型，根据绝热热失控实验数据模拟电池产热，并利用软件自带的网格剖分功能进行网格划分，如图 1(a)所示。图 1(b)为热失控蔓延抑制模型的示意图。电池选用的是容量为 50 Ah 的三元锂离子动力电池，其几何机构简化为只有电池内核、外壳、极柱三个几何元素的整体，具体几何尺寸如表 1 所示，3D 热模型中的热物性参数及数值如表 2 所示。

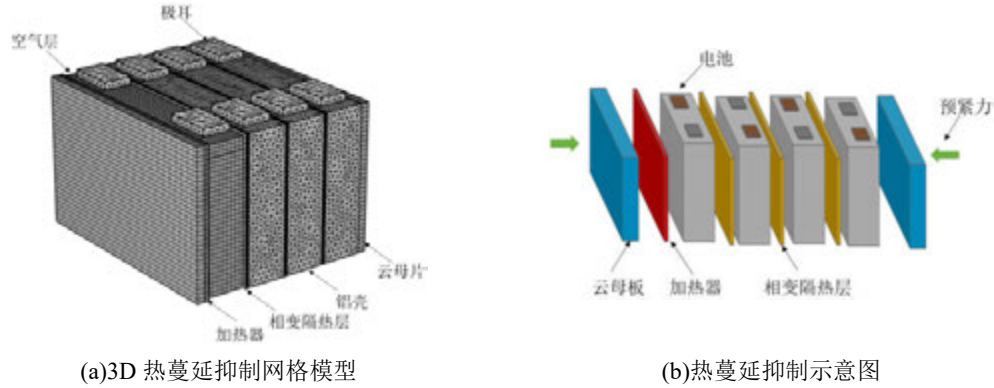


图 1 三维几何模型

(a) 3D heat spread suppression grid model. (b) Heat spread inhibition diagram.

Fig. 1 3D geometric model

1.2 产热功率的设定

由热失控机理分析可知，产热组件的比体积产热功率 q_v 可以通过公式(1)来进行计算，能量释放总量 ΔH 计算如(2)所示。

$$q_v = \begin{cases} q_{\text{heat}} \\ q_{\text{ele}} + q_{\text{chem}} \end{cases} \quad (1)$$

$$q_v = \frac{\Delta H}{V_{\text{bat}}} \cdot \frac{dc_{\text{ele}} + d_{\text{chem}}}{d\tau} \quad (2)$$

$$\Delta H = \Delta H_{\text{ele}} + \Delta H_{\text{chem}} = M \cdot C_p \cdot (T_3 - T_1) \quad (3)$$

式中， q_{heat} 、 q_{ele} 、 q_{chem} 分别是是加热器比体积功率、电能释放的比体积产热功率、化学能释放的比体积产热功率，W； ΔH_{ele} 、 ΔH_{chem} 分别对应着电能和化学能的释放量，J； M 为模型中电池的质量，Kg； C_p 为模型中电池的比热容， $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ； T_1 为电池热失控自产

热起始温度， T_3 为电池热失控过程中的最高温度，K。

电能、化学能能量释放速率随温度变化的规律如公式(3)、(4)所示，电池内核的产热速率可用公式(5)进行拟合。

$$\frac{dc_{ele}}{d\tau} = \begin{cases} C_{ele} (0 \leq c_{ele} \leq 1, T > T_2) \\ 0 & \text{其他情况} \end{cases} \quad (4)$$

$$\frac{d_{chem}}{d\tau} = \begin{cases} \frac{MC_p}{\Delta H_{chem}} \cdot A \cdot \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^b \\ (T_1 < T < T_2, c_{chem} > 0); \\ C_{chem} (T > T_2, c_{chem} > 0) \\ 0(\text{其他情况}) \end{cases} \quad (5)$$

$$\frac{dT}{d\tau} = A \cdot \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^b \quad (6)$$

式中， C_{ele} 、 C_{chem} 根据经验参数设置为 12， T_2 为热失控起始温度，K；反应动力学参数 A 为 0.92 s^{-1} ；指数幂次 b 为 28.4； T_{ref} 为用于将温度归一化处理的开式温度参考值，K。

表 1 电池模型几何参数

Tab. 1 Geometric parameters of battery model			
组件名称	参数符号	参数名称	数值(m)
壳体	L_b	长度	0.148
	B_b	宽度	0.026
	H_b	高度	0.094
内核	L_j	长度	0.146
	B_j	宽度	0.024
	H_j	高度	0.084

表 2 3D 热模型中的物理参数及数值

Tab. 2 Physical parameters and values in 3D thermal model					
参数符号	导热系数 ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	密度 ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	比热容 ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	相变潜热 ($\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$)	相变温度 (K)
电池内核	$\lambda_y=\lambda_z=20.24, \lambda_x=0.8$	2488.89	946		
壳体	238	2700	900		
加热器	44.5	7850	475		
云母片	0.5	2900	880		
相变材料	0.6	2412	870	196	333.15
基体材料	0.08	200	500		

1.3 相变吸热的归一化算法

相变材料比体积吸热功率 q_{pcm} ，使用公式(6)进行计算。 $\frac{dc_{pcm}}{d\tau}$ 为能量浓度变化速率，其计算方式为公式(7)。

$$q_{pcm} = \frac{1}{V_0} \cdot \Delta H_{pcm} \cdot \frac{dc_{pcm}}{d\tau} \quad (7)$$

$$\frac{dc_{pcm}}{d\tau} = \begin{cases} C & (60^\circ\text{C} < T < 65^\circ\text{C}) \\ 0 & \text{其他情况} \end{cases} \quad (8)$$

式中， ΔH_{pcm} 为相变材料吸收的总热量， V_0 为相变材料隔热层体积。 C 为常数，根据相变材料相变潜热不同其大小区间为 0.5 ~ 1。

1.4 传热与边界条件的设定

关注薄层法向上的传热影响，两个组件之间通过接触面上的薄层传热的热流密度可以用式(8)、(9)进行计算。通过对流和辐射与环境进行换热，边界方程为式(10)。

$$\lambda_r \frac{\partial T_f}{\partial n} = \frac{\lambda_c (T_f - T_b)}{\delta_c} \quad (9)$$

$$\lambda_b \frac{\partial T_b}{\partial n} = \frac{\lambda_c (T_b - T_f)}{\delta_c} \quad (10)$$

$$-\lambda_n \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_e) + \varepsilon \sigma (T^4 - T_e^4) \quad (11)$$

式中， λ_f 和 λ_b 为薄层前后两边材料的法向导热系数， T_f 和 T_b 为两边材料在接触面上的温度， λ_c 为薄层的导热系数， δ_c 为薄层的厚度。 λ_n 为材料的法向导热系数， h 为对流换热系数， ε 为辐射换热系数， σ 为玻尔兹曼常数， T_e 为环境温度。

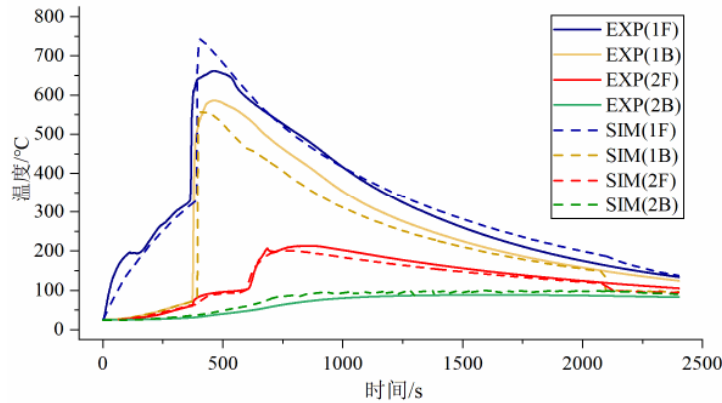


图2 仿真与实验对比图

Fig.2 Comparison of simulation and experiment

1.5 热失控蔓延抑制模型的验证

本文搭建的热失控蔓延抑制模型中单体电池与常等热失控蔓延抑制实验中单体一致，为验证热蔓延抑制模型的准确性，以两节电池为例，将常润泽^[17]实验中的纳米陶瓷

纤维和相变材料组成的相变隔热层带入模型中，仿真结果如图 2 所示，本模型的前后表面仿真结果与实验结果的温度骤升时刻、热失控峰值温度等关键参数基本吻合，热蔓延抑制模型的准确性得到了验证。

2 结果与讨论

2.1 复合相变隔热层对电池模组热失控蔓延影响分析

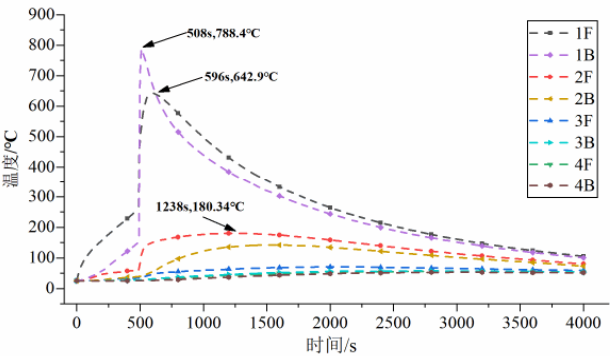


图 3 热蔓延过程中各节电池温度变化情况

Fig. 3 The surface temperature of the front and back of each battery

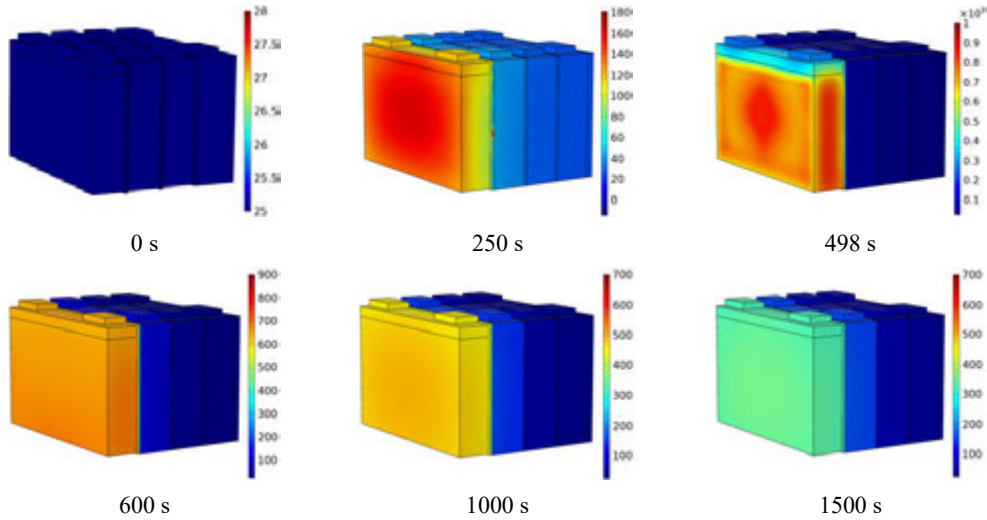


图 4 热蔓延过程中各节电池温度分布模拟结果

Fig. 4 The simulation results of the temperature distribution of each battery during the heat spread process

图 3 为模拟热蔓延过程中各节电池前后表面温度随时间变化曲线，隔热层中相变材料导热系数是 $0.6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ，基体材料导热系数是 $0.08 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。分析可知，在 508 s 时电池 1 后表面温度达到最大值 $788.4 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ，此时隔热层阻挡住电池 1 热失控时的高温冲击，电池 2 前表面中心温度在热平衡过程中，1238 s 时达到最大值 $180.3 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ，未发生热失控的蔓延。图 4 为相应热失控蔓延过程中电池组温度分布图，较好地重现了单体间放置复合相变隔热层时各节电池温度随时间的变化，模拟了相变隔热层抑制电池间热量传递的过程。0 s 对热失控触发电池开始加热，250 s 热量从前壁面向后扩展，局部温度达到 $170 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ，498 s 触发电池 1 热失控。复合相变隔热层有效阻隔热冲击，在热平衡过程中，

电池 2 最高温度始终维持在 190 °C 以下。1500 s 电池组在冷却过程中，整体温度下降到 400 °C 以下。

2.2 隔热层中基体材料导热系数对热失控蔓延影响

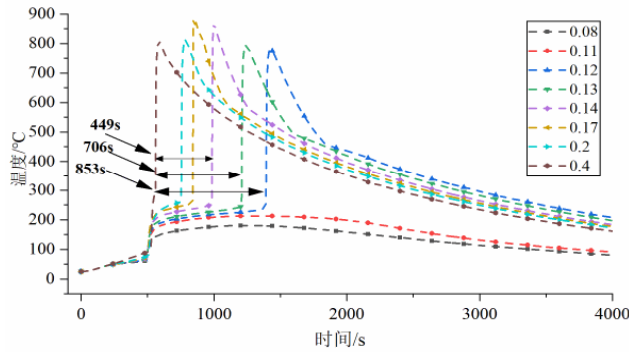


图 5 基体不同导热系数下电池 2 前表面中心温度变化

Fig. 5 The change of center temperature of front of battery 2 under different thermal conductivity of matrix

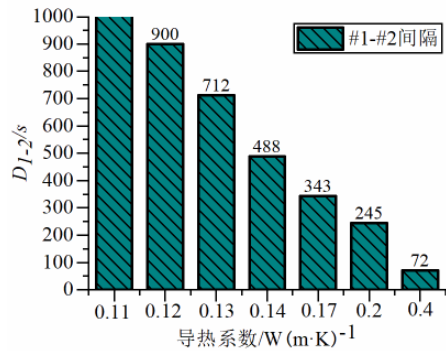


图 6 电池热失控触发时间间隔

Fig. 6 The duration of thermal runaway propagation

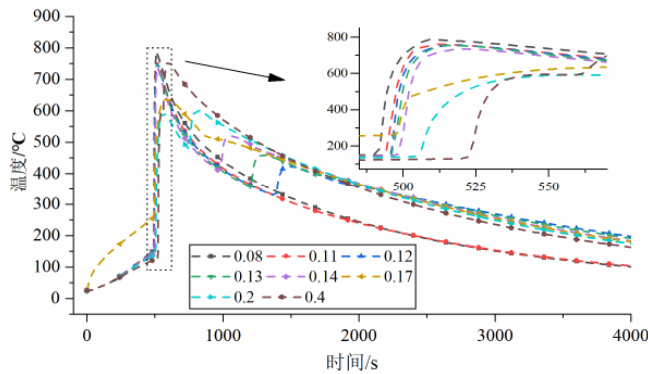


图 7 基体不同导热系数下电池 1 后表面中心温度变化

Fig.7 The temperature change of the center surface of battery 1 under different thermal conductivity of matrix

图 5 为相邻电池 2 前表面中心温度变化曲线，由图可知，当基体材料导热系数不高于 0.11 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 时，成功阻挡了热失控蔓延的发生。当基体导热系数达到 0.12 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

时，在 1387 s 会触发相邻电池发生热失控，未能阻断热失控的蔓延。电池 2 的热失控触发温度 245~267 °C 之间，峰值温度在 800~860 °C 之间。图 6 给出了基体材料导热系数增加时电池热失控触发时间间隔，对于 $0.12\sim0.4\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ，电池 1 到电池 2 的热失控触发时间间隔分别为 900 s、712 s、488 s、343 s、245 s、72 s，随着基体材料导热系数的增加而缩短。这是由于基体材料导热系数的提高，复合相变隔热层无法阻隔电池 1 热失控时的热冲击，造成热失控的蔓延及热失控触发时间间隔缩短。图 7 为基体材料导热系数提高时电池 1 后表面温度随时间变化曲线，由图可知，电池 1 后表面温升随着基体材料导热系数增加依次减小，相应的峰值温度也在不断减小，而达到峰值温度所需时间在延长。

2.3 隔热层中相变材料导热系数对热失控蔓延的影响

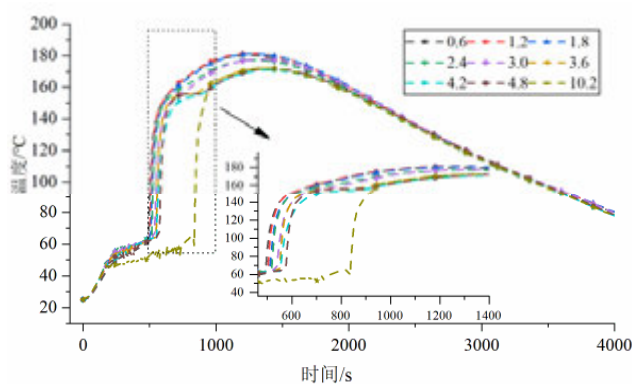


图 8 相变材料不同导热系数下电池 2 前表面中心温度变化

Fig. 8 Temperature change of front surface center of battery 2 under different thermal conductivity of phase change materials

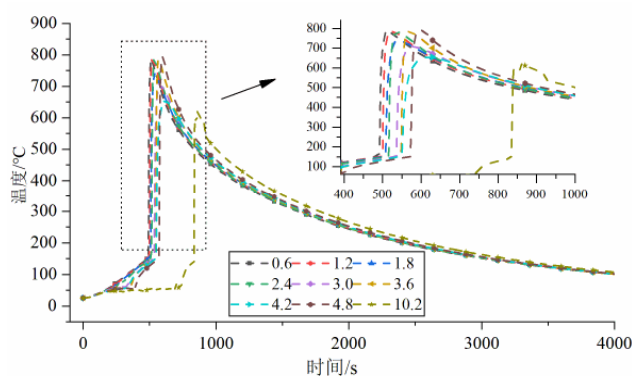


图 9 相变材料不同导热系数下电池 1 后表面中心温度变化

Fig. 9 The temperature change of the rear surface center of battery 1 under different thermal conductivity of phase change materials

图 8、图 9 分别为相变材料导热系数增加时，电池 2 前表面和电池 1 后表面的温度变化曲线。随着相变材料导热系数的增加，各节电池前后表面峰值温度、最高温度对应时间都有所差别，但均未触发相邻电池发生热失控。图 10 为电池 2 前表面峰值温度和对应时间变化曲线，电池 2 前表面峰值温度随相变材料导热系数的增加而减小，温度减小

幅度相对较小, 峰值温度在 $170\sim 182.5\text{ }^{\circ}\text{C}$ 之间, 均未达到电池热失控的触发温度。相变材料导热系数增加未导致热蔓延阻断失效, 提高了热蔓延抑制效果。图 11 为电池 1 后表面峰值温度和对应时间变化曲线, 由图可知, 电池 1 后表面最高温度随着相变材料导热系数的增加而减小, 热失控触发时间得到延长, 达到峰值温度所需时间在增大。当导热系数达到 $10.2\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 时, 峰值温度为 $623\text{ }^{\circ}\text{C}$, 热失控触发时间到 856 s , 延后了触发电池的热失控触发时间, 未触发相邻电池发生热失控。

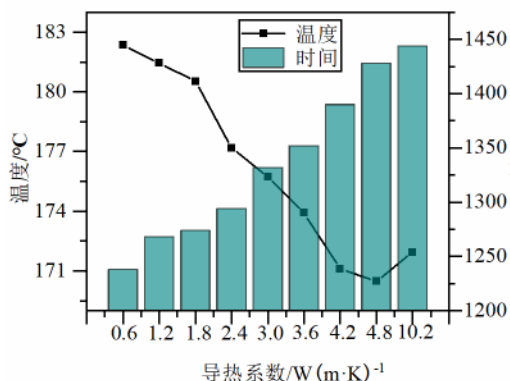


图 10 电池 2 前表面峰值温度和对应时间变化

Fig. 10 The temperature and time change of the

front of battery 2

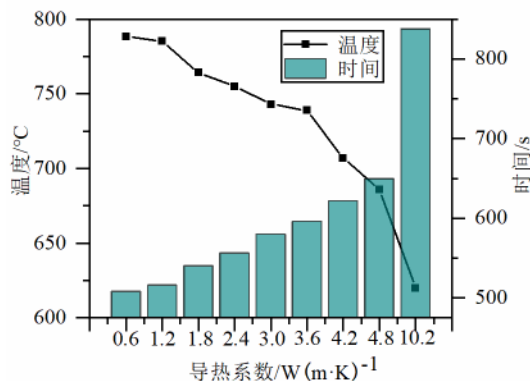


图 11 电池 1 后表面峰值温度和对应时间变化

Fig. 11 The temperature and time change of the rear of

battery 1

3 结论

研究基体材料和相变材料导热系数变化对热失控蔓延的影响, 主要结论如下:

- (1) 复合相变隔热层中相变材料导热系数为 $0.6\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 基体材料导热系数为 $0.08\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 时能有效阻断模组内锂电池间的热蔓延。
- (2) 在不考虑电池外部风冷、水冷等散热情况下, 基体材料导热系数不高于 $0.11\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 2 mm 相变隔热层能有效阻挡热失控蔓延的发生。当基体导热系数达到 $0.12\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 时, 随着基体材料导热系数的增加, 复合相变隔热层热蔓延抑制效果减弱, 热失控蔓延发生, 热失控触发时间间隔缩短。复合相变隔热层中, 基体材料导热系数变化对热蔓延影响显著, 在实际应用过程中应考虑高温、挤压等因素对基体材料导热系数的影响。
- (3) 相变材料导热系数增加未导致热蔓延阻断失效, 延后了触发电池的热失控触发时间, 降低了相邻电池表面的最高温度和温升速率, 有利于降低相邻电池达到热失控触发温度的风险, 提高了热蔓延抑制效果。

参考文献

- [1] Fuqiang Wang, Xinping Zhang, Yan Dong, et al. Progress in radiative transfer in porous medium: a review from macro scale to pore scale with experimental test. Applied Thermal Engineering, 2022, 210: 118331.
- [2] Huaxu Liang, Fuqiang Wang, Dong Zhang, et al. Experimental investigation of cost-effective ZnO nanofluid based spectral splitting CPV/T system. Energy, 2020, 194: 116913.

- [3] 李毓烜, 阚强, 崔海浩. 储能系统用三元锂离子电池热失控火灾特性. 电源技术, 2023, 47(03): 328-331.
LI Yuxuan, KAN Qiang, CUI Haihao. Thermal runaway induced fire characteristics of ternary lithium ion batteries used in energy storage system. Journal of Power Sources, 2023, 47(03): 328-331.
- [4] 戴海燕, 王玉兴. 基于电化学热耦合模型的电动汽车电池模组热特性研究. 汽车工程, 2020, 42(5): 665-671.
DAI Haiyan, WANG Yuxing. Study on Thermal Characteristics of Battery Modules of Electric Vehicle Based on Electrochemical Thermal Coupling Model. Automotive Engineering, 2020, 42(5): 665-671.
- [5] 马瑞鑫, 刘吉臻, 汪双凤, 等. 锂离子电池热失控扩展特征及抑制策略研究进展. 科学通报, 2021, 66: 2991-3004.
MA Ruixin, Liu Jizheng, WANG Shuangfeng, et al. Progress on thermal runaway propagation characteristics and prevention strategies of lithium-ion batteries. Chin Sci Bull, 2021, 66: 2991-3004.
- [6] 贾子润, 王震坡, 王秋诗, 等. 新能源汽车动力电池热失控机理和安全风险管控方法的研究. 汽车工程, 2022, 44(11): 1689-1705.
JIA Zirun, WANG Zhenpo, WANG Qiushi, et al. Research on Thermal Runaway Mechanism and Safety Risk Control Method of Power Battery in New-Energy Vehicles. Automotive Engineering, 2022, 44(11): 1689-1705.
- [7] 纪常伟, 王兵, 汪硕峰, 等. 车用锂离子电池热安全问题研究综述. 北京工业大学学报, 2020, 46(6): 630-644.
JI Chang-wei, WANG Bing, WANG Shuofeng, et al. Review of Thermal Safety Issues for Lithium Ion Battery Used in Electric Vehicles. JOURNAL OF BEIJING UNIVERSITY OF TECHNOLOGY, 2020, 46(6): 630-644.
- [8] Xin Lai, Changyong Jin, Wei Yi, et al. Mechanism, modeling, detection, and prevention of the internal short circuit in lithium-ion batteries: recent advances and perspectives. Energy Storage Mater, 2021, 35: 470-499.
- [9] Huaibin Wang, Zhiming Du, Xinyu Rui, et al. A comparative analysis on thermal runaway behavior of Li (Ni Co Mn) O₂ battery with different nickel contents at cell and module level. J Hazard Mater, 2020, 393: 122361.
- [10] Shang Gao, Languang Lu, Minggao Ouyang, et al. Experimental study on module-to-module thermal runaway propagation in a battery pack. J Electrochem Soc 2019, 166: A2065e73.
- [11] Xunning Feng, Dongsheng Ren, Shunchao Zhang, et al. Influence of aging paths on the thermal runaway features of lithium-ion batteries in accelerating rate calorimetry tests. Int J Electrochem Sci, 2019: 44e58.
- [12] Xuning Feng, Xiangming He, Minggao Ouyang, et al. Thermal runaway propagation model for designing a safer battery pack with 25 Ah LiNi Co MnO₂ large format lithium ion battery. Apply Energy, 2015, 154: 74e91.
- [13] Jian Xu, Chuanjin Lan, Yu Qiao, et al. Prevent thermal runaway of lithium-ion batteries with minichannel cooling. Applied Thermal Engineering, 2017, 110: 883e90.
- [14] Chengchao Yuan, Qingsong Wang, Yu Wang, et al. Inhibition effect of different interstitial materials on thermal runaway propagation in the cylindrical lithium-ion battery module. Applied Thermal Engineering.

2019, 153: 39e50.

- [15]Loraine Torres-Castro, Andrew Kurzawski, John Hewson. et al. Passive mitigation of cascading propagation in multi-cell lithium ion batteries. J Electrochem Soc 2020, 167: 90515.
- [16]Xuning Feng, Languang Lu, Minggao Ouyang, et al. A 3D thermal runaway propagation model for a large format lithium ion battery module. Energy, 2016, 115: 194e208.
- [17]常润泽.基于隔热层的锂离子动力电池热失控蔓延抑制研究.[硕士论文]. 山东: 山东理工大学, 2022.
Chang Runze. Battery Based on Thermal Insulation Layer Study on Thermal Runaway Propagation Prevention of lithium-ion [MA thesis]. Shangdong: Shandong University of Technology, 2022.

异形超薄均热板传热性能实验研究

卢红岭^{1,2}, 银了飞^{*1,2}, 李家晨^{1,2}, 王宙^{1,2}, 贾力^{1,2}

(1. 北京交通大学机械与电子控制工程学院 热能工程研究所, 北京 100044;

2. 微细尺度流动与相变传热北京市重点实验室, 北京 100044)

(Tel: 010-51684321, E-mail: yinliaofei@bjtu.edu.cn)

摘要：均热板作为一种相变传热元件是解决当前高热流密度电子器件散热问题的有效手段之一，本文设计了均匀结构吸液芯和梯度结构吸液芯，制作了厚度为 0.42 mm 的异形超薄均热板，并测试了其在双热源变热流加热工况下，表面温度和热阻的变化规律，并与某型号手机原装均热板进行对比。结果显示，制备的三种均热板传热性能均优于原装均热板，且在最佳充液率（80%）时，具有梯度结构吸液芯的异形超薄均热板热阻仅为 0.1 °C/W，相比原装均热板降低约 82.7%。

关键词：超薄均热板，梯度结构吸液芯，双热源，传热性能

0 前言

随着电子信息技术的快速发展、5G 时代的到来，现代电子设备正逐渐朝着小型化、精密化、高度集成化方向迈进^[1-2]，但高集成度的电子器件在运行过程中势必会产生大量热量，而有效散热空间又不足，因此会带来散热难题。均热板作为一种相变传热元件是解决当前电子器件散热问题的有效手段^[3]，均热板中的吸液芯结构发挥着非常重要的作用，是均热板的核心部件。它不仅驱动工质回流，提供流动通道，也是工质气液相变发生的主要位置，能够将一侧壳体热量传递至另一侧，有助于均热板完成内部气液循环和传热^[4]。因此国内外许多学者开展了吸液芯结构影响均热板传热性能的研究。

Tang 等^[5]通过犁-挤压的方法制造了一种新型微 V 型沟槽吸液芯，在每个沟槽的两侧形成了锯齿状结构，利用化学腐蚀法在表面生成粗糙结构以提高其亲水性，采用毛细管上升测试法探究其毛细管性能，结果该吸液芯结构表现出良好的毛细性能。黄豆^[6]制备 74 种不同种类的烧结铜粉吸液芯，研究了各种铜粉对吸液芯孔隙率、收缩率及渗透率的影响，并通过 SEM 图分析了各种吸液芯的表面微观形态。研究结果显示，具有 1-75 μm 的吸液芯的均热板总热阻最小。崔卓等^[7]将多层丝网作为超薄平板热管的吸液芯，利用热氧化法对其表面进行氧化处理，实验针对不同的网状结构对热管热阻的影响展开，最终结果显示：丝网目数为 200 目时的热管表现出良好的传热性能，最小热阻为 0.26 K/W，极限传热功率为 8 W。刘龙飞^[8]设计并制备出一种平板环路热管，由于碳纤维具有优异的热稳定性、摩擦系数小、密度低、模量高等优点而被选用作为环路热管的吸液芯，并针对碳纤维吸液芯的性能及其对环路热管传热性能的影响进行了实验探究，结果表明，与传统的金属吸液芯相比，碳纤维吸液芯表现出优异的毛细压力、渗透率和柔性，孔隙率可高达 82%，极限功率最高为 55 W。为了解决毛细压力和渗透率之间相互矛盾的关

系，Lu 等^[9]利用刨削、电化学沉积和热处理相结合的方法，在铜板上制造出和多孔沉积层相结合的矩形沟槽复合吸液芯结构，通过毛细上升红外测试法对复合结构的毛细性能进行测量，利用强制液体流动法测量复合吸液芯的渗透率，测试结果表明该复合结构能够提供较大的毛细压力且具有较大的渗透率。

国内外学者在对均热板内部结构优化方面进行了大量理论研究、仿真计算、实验测量，但仍存在一些问题：吸液芯作为均热板的核心部分，其结构优化及制造工艺在不断提升，但对于多层丝网烧结梯度结构研究较少，并且在实际电子元器件热管理的应用中，电子元器件产热不止一个热源，其位置分布、各个部分产热功率也不尽相同，因此均热板在实际应用中应根据产热元件的分布而设计各种形状。基于此，本文设计了厚度为 0.42mm 的具有单一结构吸液芯和梯度结构吸液芯的超薄异形均热板，并模拟手机 CPU 和 GPU 工作，探究在双热源变热流条件下的传热性能，并与某型号手机原装均热板进行对比。

1 实验系统及实验件

1.1 吸液芯及均热板

超薄异形均热板及吸液芯结构示意图如图 1 所示，以磷铜（C5210）为基材利用铣床加工出两个铜板作为超薄异形均热板的外壳。上下壳板的厚度均为 0.1 mm，均热板的表面积为 34.31 cm²。均热板蒸汽腔（气相流动空间）在上壳板铣出，腔体内部深度为 0.2 mm，并且在内部铣出大量支撑柱，支撑柱高度为 0.2 mm，直径为 2 mm。支撑柱能够防止均热板在扩散焊接以及运行过程中因热应力和压差发生变形，并且为降低均热板厚度，在冷凝侧未烧结用于工质回流的吸液芯，因此支撑柱同时能够促进工质的回流以及增强导热。放置吸液芯的腔体（液体流动空间）在下壳板铣出，深度为 0.2 mm，与吸液芯厚度相同。

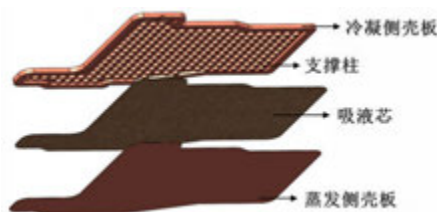


图 1 均热板及吸液芯设计示意图

为研究吸液芯对超薄异形均热板传热性能的影响，本文使用不同目数的丝网共烧结制作三种不同结构吸液芯，包括使用同种丝网烧结的均匀结构吸液芯，以及使用两种不同目数丝网烧结的梯度结构吸液芯。其中均匀结构吸液芯孔隙具有尺寸接近的毛细半径，而复合结构吸液芯孔隙能够更好平衡渗透率和毛细力之间的作用，将吸液芯目数较大的一侧靠近壳板壁面焊接，能够在工质回流过程中提供指向壁面的毛细力，从而避免局部蒸干并减小汽液两相之间的流动阻力。三种吸液芯厚度基本相同，为 0.2 ± 0.02 mm，表面积为 25.00 cm²。吸液芯结构参数如表 1 所示，其中 3#300 目表示，A 型均热板具有均匀结构吸液芯，使用 3 层 300 目丝网烧结。3#350 目表示，B 型均热板具有均匀结构吸液芯，使用 3 层 350 目丝网烧结。2#250 目+1#350 目表示，C 型均热板具有梯度结构吸

液芯，使用 2 层 250 目和 1 层 350 目丝网烧结。

表 1 均热板类型及参数

均热板型号	A 型	B 型	C 型
吸液芯类型	均匀结构吸液芯		梯度吸液芯
丝网目数	3#300 目	3#350 目	2#250 目+1#350 目

1.2 均热板传热性能测试系统

均热板传热性能测试系统如图 2 所示，某手机原装均热板与超薄异形均热板实物如图 3 所示。该系统主要由抽真空模块、加热模块、数据采集模块、实验样品、升降台等部分组成。用于测量均热板在不同加热工况时的热阻和温度分布。抽真空模块主要由真空泵和压力传感器组成。加热模块主要由直流电源、陶瓷加热片组成。为减小空气热阻，各导热接触面缝隙中填充导热硅脂，导热系数大于 $5 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ 。数据采集模块由数据采集器、计算器、热电偶三部分组成。整个测试装置用保温棉包裹，热损失忽略不计。

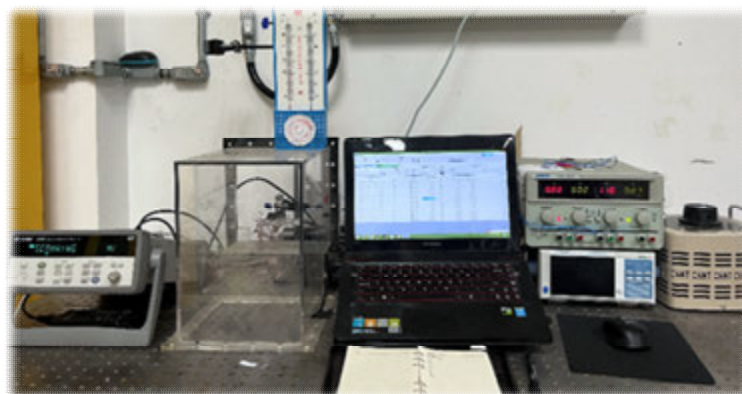


图 2 均热板传热性能测试系统

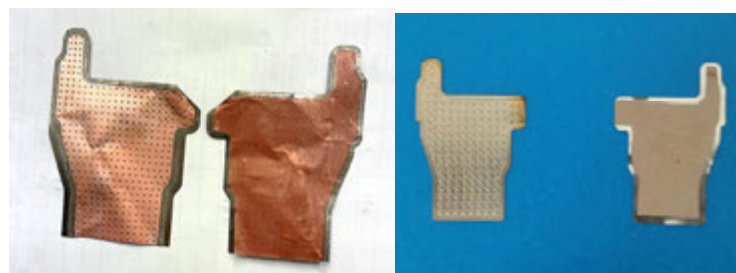
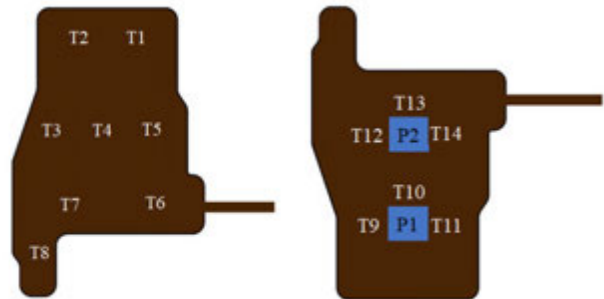


图 3 某手机原装均热板与超薄异形均热板实物图

热电偶 T1-T8 均匀布置在冷凝侧表面用来监测冷凝侧温度分布，热电偶 T9-T14 紧贴在陶瓷加热片周围用来监测蒸发侧底面温度。热源和均热板两侧热电偶的分布图如图 4 (a)、(b)所示。在传热性能测试过程中，待均热板上所有热电偶温度变化在 5 min 内小

于 0.3 °C 时认为达到稳态，随后再增加 5 W 进入下一个工况测试，反复循环上述操作直至蒸发侧温度超过 80 °C 时停止实验。



(a) 冷凝侧热电偶分布示意图 (b) 蒸发侧热源及热电偶分布示意图

图 4 热源与热电偶分布示意图

为模拟电子设备 CPU 和 GPU 的实际运行过程，在超薄异形均热板传热性能测试实验中共设置两种工况，如表 2 所示，P₁、P₂ 分别表示两个热源，工况一为两热源加热功率相同，初始加热功率均为 0.5 W，当均热板达到热平衡后增大 0.5 W 至 1 W，再次等待温度稳定，重复此步骤直至蒸发侧温度超过 80 °C。工况二为热源 P₁、P₂ 初始功率均为 1 W，待达到热平衡后，保持热源 P₂ 加热功率为 1 W 恒定，增大热源 P₁，每次增幅为 1 W，直至蒸发侧温度超过 80 °C。

表 1 实验设置工况

工况	工况一（P ₁ =P ₂ ）		工况二（P ₁ >P ₂ ）	
	P ₁	P ₂	P ₁	P ₂
	0.5	0.5	1	1
	1	1	2	1
功率（W）	1.5	1.5	3	1
	2	2	4	1
	2.5	2.5	5	1
	3	3		

1.3 数据处理及不确定度分析

充液率是指工质体积与吸液芯孔隙体积之比，是影响均热板传热性能的关键因素之一，计算公式为：

$$\eta = \frac{V_l}{V_p} \tag{1}$$

式中， η 是充液率； V_l 是注入液体体积； V_p 是均热板腔体总体积。

因均热板外壳是铜，具有很好的均温性，因此本文中用在热源附近布置的 6 个热电偶温度平均值来代替热源表面温度：

$$T_{eva} = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 T_i \quad (2)$$

另取冷凝侧盖板 8 个热电偶温度平均值作为冷凝侧温度：

$$T_{con} = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 T_i \quad (3)$$

热阻值 R_{vc} 计算公式为：

$$R_{vc} = \frac{T_{eva} - T_{con}}{Q} \quad (4)$$

其中， Q 为加热功率。

实验测量装置在实验开始前都已进行标定，压力传感器的精度为 $\pm 0.25\%$ 。T 型热电偶精度为 $\pm 0.10\text{ }^\circ\text{C}$ ，直流电源的电压和电流读数精度分别为 $\pm 1\%$ 和 $\pm 0.50\%$ 。均热板热阻的不确定度根据 Moffat RJ^[10]的公式进行计算为 1.69%。

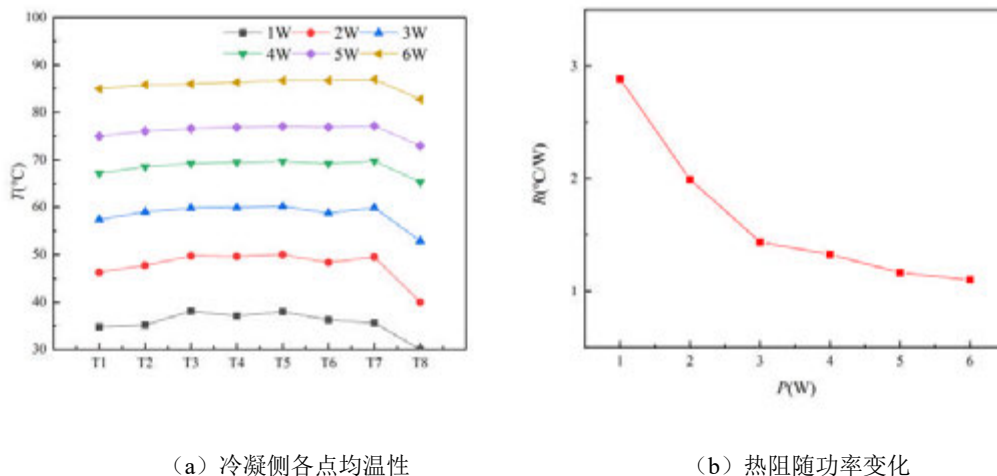
2 实验结果与讨论

2.1 某型号手机原装均热板传热性能测试

为探究本实验设计超薄异形均热板的传热性能，首先对某品牌 2022 年发行的手机原装均热板在表 2 所示工况下进行传热性能测试，原装均热板表面积为 34.31 cm^2 ，厚度为 0.42 mm ，超薄异形均热板按照原装均热板尺寸进行 1:1 还原。本文主要通过测试和计算蒸发侧温度以及热阻和均温性对均热板的传热性能进行研究，由于原装均热板已完全封装，无法改变其充液率，因此在对原装均热板进行传热性能测试时，只以其原装充液率条件来进行实验，并探究该充液率下均热板的传热性能。

在数据处理过程中为便于分析，传热性能图中所示加热功率均为两热源的总功率。通常认为表面具有较小温度梯度（即整个表面温度数据分布比较均匀）的均热板均温性较好。在工况一（热源 P_1 、 P_2 加热功率相同）时对原装均热板进行传热性能测试，其冷凝侧均温性如图 5（a）所示，可以发现，在初始加热功率时（两热源加热功率分别为 0.5 W ，总功率为 1 W ），如图 5（a）中黑色曲线所示，原装均热板均温性较差，这是由于加热功率较小，工质蒸发较弱蒸汽不足以充满整个蒸汽腔，蒸汽无法均匀铺展在整个冷凝侧进行冷凝从而释放潜热导致，之后随着加热功率的增大，工质蒸发逐渐增强，蒸汽逐渐向整个蒸汽腔扩散，在整个冷凝侧进行冷凝放热，因此 T1-T7 点的温度值逐渐接近，但 T8 点温度较低，导致原装均热板整体均温性较差，这主要有两方面原因，一是由于该点距离热源较远且内部蒸汽通道狭窄，在蒸汽尚未扩散到此处时已发生冷凝，二是由于原装均热板壳板材料为不锈钢，其导热系数小。该工况下原装均热板热阻随加热功率的变化如图 5（b）所示，发现在初始加热功率时其最大热阻超过了 $2.8\text{ }^\circ\text{C/W}$ ，随着加热功率增大，热阻呈现逐渐下降的趋势，但始终大于 $1\text{ }^\circ\text{C/W}$ ，这是因为原装均热板启动方式为渐变启动，低功率下工质蒸发和回流速度较慢，热量传递以导热为主，因此热阻较大，随着加热功率增大，蒸发侧温度上升，工质蒸发速度加快，蒸发侧和冷凝侧之间的

两相循环速率加快，相变传热开始占主导，因此热阻快速降低。



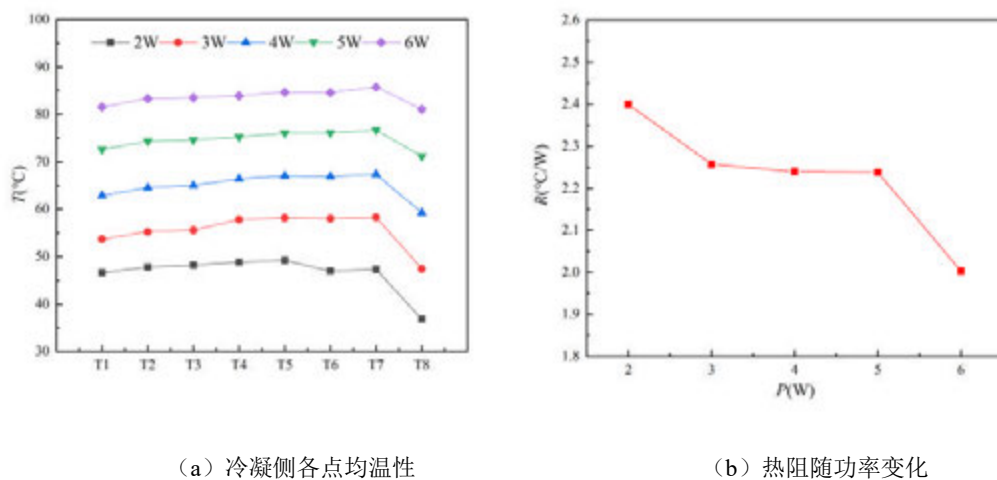
(a) 冷凝侧各点均温性

(b) 热阻随功率变化

图 5 原装均热板在双热源功率相同时传热性能

在工况二 (P_1 、 P_2 两热源加热功率不同，热源 P_2 功率恒定为 1 W) 时对原装均热板进行传热性能测试，其冷凝侧均温性如图 6 (a) 所示，该工况下由于热源 P_2 加热功率恒定为 1 W，热源 P_1 的加热功率在不断增大，导致该处蒸发更为剧烈，对应冷凝侧冷凝速度更快，因此冷凝侧均温性略有下降，靠近热源 P_1 的测点温度略高于靠近热源 P_2 的测点温度。图 6 (b) 为原装均热板在工况二时热阻随加热功率的变化曲线，发现随着加热功率增大，热阻逐渐减小，最大热阻为 2.4°C/W ，最小热阻为 2°C/W ，整个加热过程中热阻下降幅度较小，这是由于两热源蒸发速率不同导致冷凝侧冷凝速率不同，从而造成冷凝热阻增大。

工况一是两个热源同时变化，起始总功率为 1 W ($0.5\text{W}+0.5\text{W}$)；工况二是只有热源 1 发生变化，其起始功率也为 1 W。由于本实验中主要比较发生变化的热源功率，因此两工况在初始加热阶段只保证了发生变化的总加热功率是一致的。



(a) 冷凝侧各点均温性

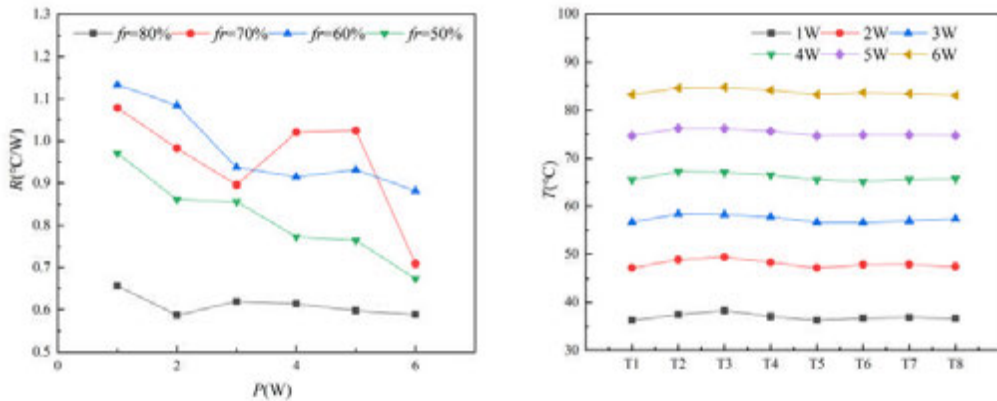
(b) 热阻随功率变化

图 6 原装均热板在双热源功率不同时传热性能

2.2 具有均匀结构吸液芯的均热板传热性能测试

为进一步提升均热板的传热性能，本文设计了两种具有均匀结构吸液芯的均热板，并分别对其在两类工况条件下进行传热性能测试。如图 7（a）所示为 A 型均热板（具有 3#300 均匀结构吸液芯）在工况一时热阻随加热功率的变化曲线，为获得其最佳传热性能，在四种充液率下对其进行测试，发现在 50%、60%、70% 三种充液率时热阻较大，但随加热功率的增大总体呈下降趋势。随着加热功率的增加，由于充液率较低，工质回流量难以满足较大功率下的蒸发需求，因此蒸发侧热量难以传递，导致蒸发侧和冷凝侧温差增大，因此热阻较大，但 3#300 目丝网具有的优异毛细性能并不会使其液层退缩并发生局部蒸干，因此三种充液率下热阻总的变化趋势是随着加热功率的增大而减小。但充液率为 70% 的均热板热阻在加热功率 3-5 W 时出现了明显抬升，这主要是因为本实验段冷凝侧无吸液芯结构，使得工质冷凝后无法快速回流到蒸发侧，从而造成冷凝侧热阻增大，但随着加热功率的持续增加，冷凝侧积累的工质量增多形成珠状冷凝，依靠重力回流到蒸发侧，因此热阻呈下降趋势。当增大充液率为 80% 时，工质量的增加导致蒸发强度增大，消除了工质不足对蒸发传热的限制，因此热阻显著降低，因此充液率 80% 是 A 型均热板的最佳充液率。

在工况一时具有最佳充液率的 A 型均热板冷凝侧温度分布曲线如图 7（b）所示，在整个加热过程中冷凝侧最大温差小于 3 °C，表现出优异的温度均匀性，说明在最佳充液率时 3#300 丝网的孔隙能较好平衡毛细力与渗透率对流体输运的作用，促进液相工质的回流，使两相循环持续进行。



（a）热阻随功率变化

（b）冷凝侧各点均温性

图 7 A 型均热板在双热源功率相同时传热性能

在工况二时具有最佳充液率的 A 型均热板（具有 3#300 均匀结构吸液芯）热阻随加热功率的变化曲线，以及蒸发侧温度分布曲线如图 8（a）和（b）所示，（a）图中充液率为 40% 时，均热板在 2 W 时启动，启动后热阻下降，在 3 W 之后出现局部蒸干现象，热阻骤然增大，直到 4 W 时完全蒸干，此时集中在冷凝侧的工质在重力作用下回流到蒸发侧，因此热阻开始下降。但两图变化趋势与工况一时基本相同，这说明当两热源间功率发生变化时并不会影响其传热性能，因此具有 3#300 目均匀结构吸液芯的 A 型均热板

对不同工况具有良好的适应性。

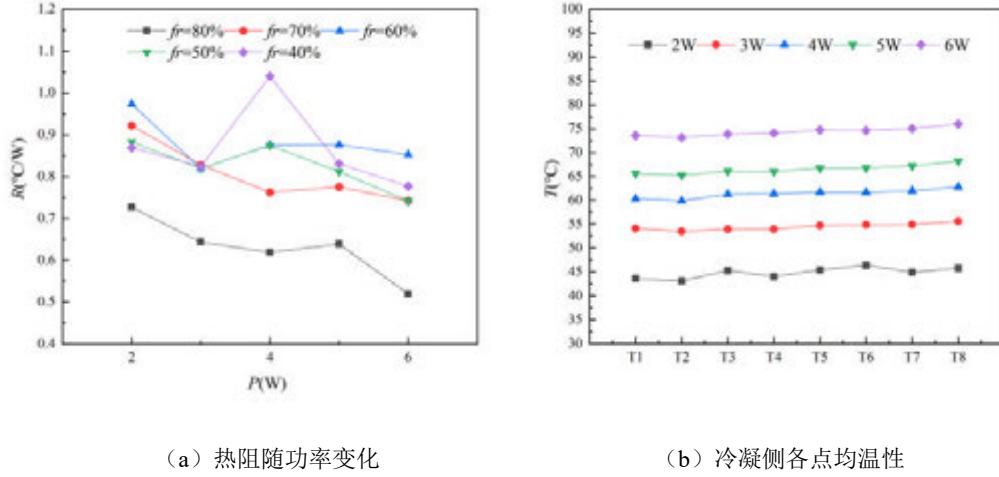
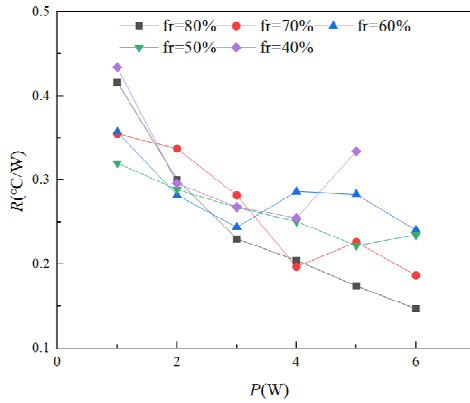


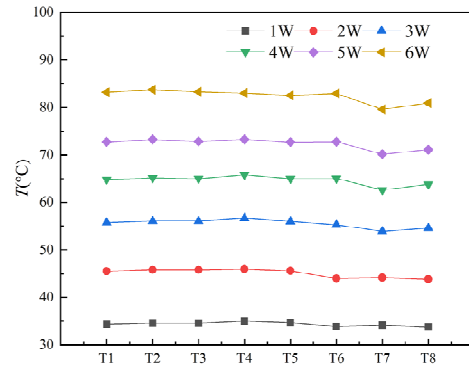
图 8 A 型均热板在双热源功率不同时传热性能

在具有 3#300 目均匀结构吸液芯的 A 型均热板研究基础上, 为进一步提升均热板的传热性能, 增大丝网目数使用 3#350 目丝网烧结均匀结构吸液芯, 并制作 B 型均热板。并分别对其在两种工况下进行传热性能测试。如图 9 (a) 所示为 B 型均热板 (具有 3#350 均匀结构吸液芯) 在工况一时热阻随加热功率的变化曲线, 为获得其最佳传热性能, 在五种充液率下对其进行测试, 发现 B 型均热板在五种充液率下均有良好的启动性能, 但充液率为 40%、50%、60% 时, 由于充液率较低, 吸液芯中液层较薄, 而 3#350 丝网烧结形成的孔隙毛细半径和渗透率下降, 工质回流速度降低, 工质回流阻力增加, 当加热功率增大时, 蒸发速度加快, 部分区域工质蒸发过快而使液层逐渐收缩, 薄液膜区减小, 直至出现局部蒸干。因此增大充液率能有效推迟局部蒸干的出现, 当增大充液率到 80% 时, B 型均热板具有最小热阻 (最佳充液率为 80%)。

在工况一时具有最佳充液率的 B 型均热板冷凝侧温度分布曲线如图 9 (b) 所示, 发现加热功率增大的过程中测点 $T7$ 、 $T8$ 与测点 $T1$ ~ $T6$ 温差逐渐增大, 在总功率为 6 W 时冷凝侧表面温差接近 5°C , 因此认为 B 型均热板的均温性相比 A 型较差 (但优于原装均热板), 这主要是由于冷凝侧无吸液芯结构, 且 3#350 丝网烧结吸液芯孔隙率方面不占优势, 工质回流相较 A 型困难, 随着两相循环的进行, 冷凝侧可能会形成膜状凝结, 因此会造成冷凝侧温度均匀性下降。



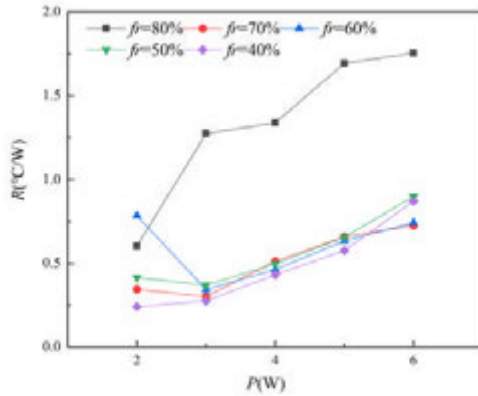
(a) 热阻随功率变化



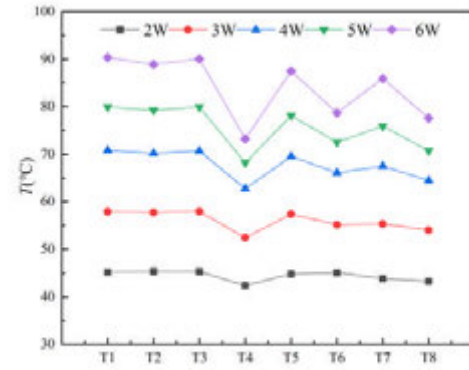
(b) 冷凝侧各点均温性

图 9 B 型均热板在双热源功率相同时传热性能

在工况二时具有最佳充液率的 B 型均热板（具有 3#350 均匀结构吸液芯）热阻随加热功率的变化曲线如图 10（a）所示，由于热源 P1 的加热功率在不断增大，40%、50%、60%、70% 四种充液率下都出现了局部蒸干现象。当增大充液率为 80% 时，随着热源 P1 的加热功率不断增大，位于该热源上方的冷凝侧区域冷凝速度加快，导致膜状凝结加剧，因而冷凝侧温差较大，冷凝热阻增大，总热阻急剧上升。该工况条件时具有最佳充液率的 B 型均热板冷凝侧温度分布曲线如图 10（b）所示，随加热功率的增大膜状凝结加剧，均温性急剧下降。因此认为具有 3#350 目丝网烧结均匀结构吸液芯的 B 型均热板传热性能较差，对工况适应性较差。



(a) 热阻随功率变化



(b) 冷凝侧各点均温性

图 10 B 型均热板在双热源功率不同时传热性能

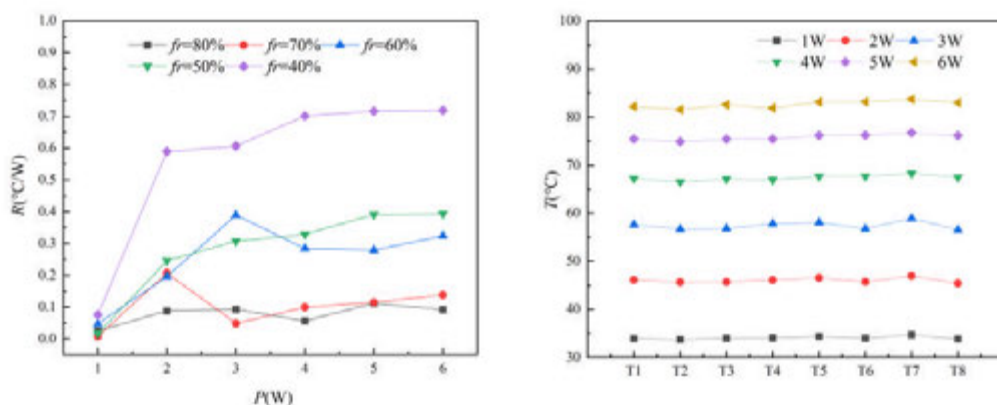
2.4 具有梯度结构吸液芯的均热板传热性能测试

通过上述实验发现具有 3#300 目丝网烧结均匀结构吸液芯的均热板具有良好的传热性能，且通过增大丝网目数（增大到 350 目）并不能进一步提升均热板的传热性能，因此在进一步的实验研究中，设计了由 2 层 250 目丝网和 1 层 350 目丝网烧结的梯度结

构吸液芯（2#250+1#350），并制作 C 型均热板。

如图 11（a）所示为 C 型均热板（具有 2#250+1#350 梯度结构吸液芯）在工况一时热阻随加热功率的变化曲线，为获得其最佳传热性能，在五种充液率下对其进行测试，发现随着功率增大，充液率为 40%、50%、60% 时热阻整体呈上升趋势，这是由于工质量过低时，部分蒸汽在冷凝侧凝结，但由于冷凝侧无吸液芯使其及时回流，而造成整个吸液芯内工质干涸，因此热阻持续增大。增大充液率为 70% 和 80% 时，最小热阻小于 $0.1\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{W}$ ，且整个加热过程较为稳定，并且由于充液率为 80% 时热阻变化更小，认为此时为最佳充液率。充液率较高时，即使在冷凝侧有部分工质不能及时回流，但均热板仍能维持较为稳定的两相循环，并且在两相循环过程中，梯度结构吸液芯中 350 目丝网置于靠近壳板壁面处，能为工质提供指向壁面的毛细力，使工质紧贴壁面回流，避免了携带极限的发生，且紧贴壁面回流的工质能避免局部蒸干现象的出现。此外，底层 350 目丝网更小的孔隙有助于工质的蒸发和气泡的核化，而上层 250 目丝网能为工质提供更大的渗透率，加速工质回流，减小了蒸发阻力，因此 C 型均热板具有最小的热阻。

在工况一时具有最佳充液率的 C 型均热板冷凝侧温度分布曲线如图 11（b）所示，发现在整个加热过程中所有测点温度差不超过 $3\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，且最高温度也较低，因此认为梯度结构吸液芯能更好的平衡毛细力及孔隙率间的作用，从而提升了均热板的传热性能。

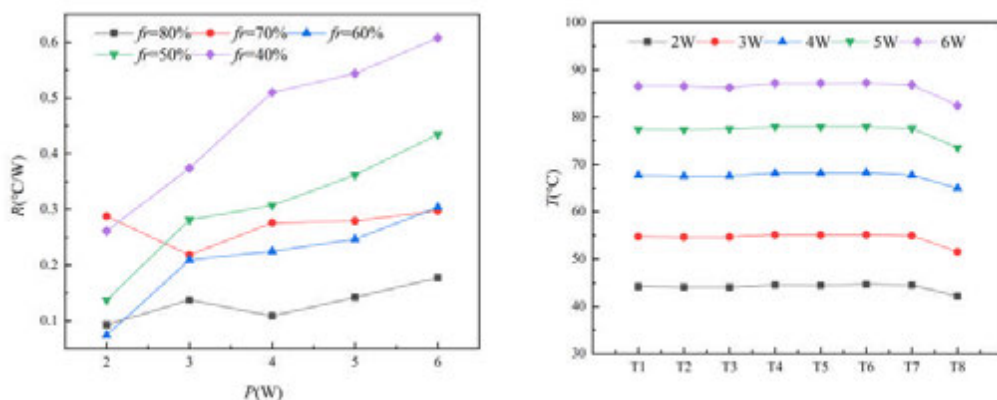


（a）热阻随功率变化

（b）冷凝侧各点均温性

图 11 C 型均热板在双热源功率相同时传热性能

在工况二时具有最佳充液率的 C 型均热板（具有 2#250+1#350 均匀结构吸液芯）热阻随加热功率的变化曲线以及冷凝侧温度分布曲线如图 12（a）和（b）所示，发现具有梯度结构吸液芯的 C 型均热板在两热源加热功率不同时并不能发挥最好的传热性能，这同样是由于热源 P_1 功率持续增大，蒸发和冷凝速率较大，因此其冷凝侧工质积累过多，膜状凝结将造成冷凝侧温差增大，从而降低均热板的传热性能。



(a) 热阻随功率变化

(b) 冷凝侧各点均温性

图 12 C 型均热板在双热源功率不同时传热性能

3 结 论

本文设计并制作了具有均匀结构吸液芯和梯度结构吸液芯的均热板，并开展了不同充液率和不同加热条件下的均热板传热性能测试，通过与某型号手机原装均热板传热性能对比，得出以下主要结论：

1) 3#300 目丝网烧结吸液芯具有优异的毛细性能，能避免吸液芯内液层退缩和局部蒸干，在最佳充液率时，吸液芯孔隙能较好平衡毛细力与渗透率间相互作用，表现为加热功率变化不影响其传热性能，且对不同加热条件具有良好的适应性。

2) 3#350 目丝网烧结吸液芯，由于毛细半径和渗透率较小，工质回流受限，造成吸液芯内液层收缩，薄液膜区减小，容易出现局部蒸干现象，说明单纯增大吸液芯丝网目数并不能进一步提升均热板的传热性能。

3) 2#250+1#350 梯度结构吸液芯能显著提升均热板传热性能。靠近壳板壁面烧结的大目数丝网（350 目）能为工质提供指向壁面的毛细力，避免了携带极限的发生及局部蒸干现象的出现，且小孔隙有助于工质的蒸发和气泡的核化。而上层烧结的小目数丝网（250 目）能为工质提供更大的渗透率，加速工质回流并减小蒸发阻力。相比于 3 层 350 目和 3 层 300 目的均匀结构吸液芯均热板，热阻最大降低了约 40%和 82.7%。

4) 冷凝侧无吸液芯结构时，随着两相循环的进行，冷凝侧壁面会形成膜状凝结，是造成冷凝侧温度均匀性下降的主要原因。

参考文献

- [1] Wang J, Wang Q. Development and Expectation of Heat-Pipe Technology and Wick Research. Chemical Industry and Engineering Progress, 2015, 34(4): 891-902

- [2] Chen X, Ye H, Fan X, et al. A Review of Small Heat Pipes for Electronics. *Applied Thermal Engineering*, 2016, 96: 1-17
- [3] 王宙,银了飞,丁艺,崔卓,贾力.具有梯度结构吸液芯的均热板传热特性. *工程热物理学报*, 2023, 44(02): 532-539
WANG Zhou, YIN Liao-Fei, DING Yi, CUI Zhuo, JIA Li. The Heat Transfer Characteristics of Vapor Chambers with Gradient Structured Wicks. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2023, 44(02): 532-539
- [4] 陈恭, 汤勇, 张仕伟, 钟桂生, 孙亚隆, 李杰. 超薄均热板的研究现状及发展趋势. *机械工程学报*, 2022, 58(12): 198-207
CHEN Gong, TANG Yong, ZHANG Shi-wei, ZHONG Gui-sheng, SUN Ya-long, LI Jie. Development Status and Perspective Trend of Ultrathin Vapor Chamber. *Journal of Mechanical Engineering*, 2022, 58(12): 198-207
- [5] Tang H, Tang Y, Yuan W, et al. Fabrication and Capillary Characterization of Axially Micro-Grooved Wicks for Aluminum Flat-Plate Heat Pipes. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 129: 907-915
- [6] 黄豆. 吸液芯毛细性能及均热板传热特性实验研究: [硕士论文]. 北京: 北京交通大学, 2020
HUANG Dou. Experimental Investigation on Capillary Performance of Wick and Heat Transfer Characteristics of Vapor Chamber: [Master's Thesis]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2020
- [7] Cui Z, Jia L, Wang Z, et al. Thermal Performance of an Ultra-thin Flat Heat Pipe with Striped Super-Hydrophilic Wick Structure[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2022, 208: 118249
- [8] 刘龙飞. 碳纤维毛细芯平板环路热管的性能研究及优化[D]. 济南: 山东大学, 2019
LIU Long-fei. Study and Optimization of Flat Loop Heat Pipe with Carbon Fiber Capillary Wicks [Master's Thesis]. Jinan: Shandong University, 2019
- [9] Lu L, Sun J, Liu Q, et al. Influence of Electrochemical Deposition Parameters on Capillary Performance of a Rectangular Grooved Wick with a Porous Layer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 109: 737-745
- [10] Moffat Robert J. Describing the Uncertainties in Experimental Results. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 1988, 1(1): 3-17