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

数值计算分册

中国工程热物理学会
2023· 北京

中国工程热物理学会 多相流
学术会议论文 编号：233021

实验工况对 $CaCO_3$ 垢在光管内生长的影响

康文盛[1] 张宁[1] 胡海妮[1] 李刚[1] 王良璧[2,3] 王良成[1,3]
（1. 兰州交通大学化学化工学院，兰州 730070；
2. 兰州交通大学机电工程学院，兰州 730070；
3. 兰州交通大学铁道车辆热工教育部重点实验室，兰州 730070）

摘要：本文通过数值模拟计算方法研究了溶液入口温度、壁面温度、溶液流速和溶液浓度对 $CaCO_3$ 垢在光管内生长的影响。研究结果表明溶液入口温度、壁面温度和溶液浓度越高，污垢热阻越大；在流速为 0.72～1.26 m/s，雷诺数为 9094～15914 情况下，流速对污垢沉积率影响很小，而流速越大，污垢剥蚀率越大、污垢热阻越小；污垢热阻随时间增长呈渐进型生长趋势。

关键词：污垢生长；换热器；碳酸钙；数值模拟
中图分类号：TK124 **文献标识码**：A

0 引言

工业循环水系统的污垢一般是指溶液中析出的无机盐晶体与溶液中的其他杂质沉积在换热面上形成的固态或软泥类物质[1]。随着水冷器的运行工作，污垢沉积在换热面上，由于污垢是热的不良导体，污垢在换热面处的沉积会增大换热面的热阻，减小换热器内液体流通面积使流体流动阻力增大，严重降低换热器的换热效率造成巨大的能源浪费[2]。综上所述，污垢广泛存在于换热设备中且危害巨大，因此通过研究实验工况对换热面上污垢形成的影响来提出抑制污垢生长和消除换热面污垢的方法具有重要的理论意义和实用价值。

1 物理模型

本文物理模型选用直径 0.007 m，长 0.97 m 的光管，满足尼古拉兹试验[3]紊流要求的进口段长度为 25~40 倍直径的要求。污垢均匀分布在换热面上且具有各向同性。圆管局部网格如图 1 所示，其中长轴 a 与短轴 b 之比为 1，即 a/b=1。

图 1 圆管局部网格图
Fig.1 Partial grid view of a round tube

2 污垢模型

2.1 污垢沉积模型

当主体溶液和换热面处存在浓度差时，浓度梯度作为结垢驱动力，此时污垢沉积率为：

收稿日期：2023-06-13
基金项目：国家自然科学基金（No.52176074）
作者简介：康文盛(1998--)，男，硕士研究生，主要从事污垢生长规律方面的研究。**通信作者**：王良成，教授，lcwang1967@163.com

$$m_{\mathrm{d}}^{\prime}=h_{\mathrm{m}}\left(c_{\mathrm{f}}-c_{\mathrm{F}}\right)\text{（1）}$$

Bott[4]研究表明污垢沉积还取决于化学反应速率，此时污垢沉积率为：

$$m_{\mathrm{d}}^{\prime\prime}=k_{\mathrm{R}}\left(c_{\mathrm{F}}-c_{\mathrm{s}}\right)^{2}\text{（2）}$$

由于实验过程的连续性 $m_{\mathrm{d}}'=m_{\mathrm{d}}''$，将公式（1）（2）联立可得：

$$m_{\mathrm{d}}=h_{\mathrm{m}}\left(\frac{1}{2}\frac{h_{\mathrm{m}}}{k_{\mathrm{R}}}+\Delta c-\sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{h_{\mathrm{m}}}{k_{\mathrm{R}}}\right)^{2}+\frac{h_{\mathrm{m}}}{k_{\mathrm{R}}}\Delta c}\right)\text{（3）}$$

对流传质系数：

$$h_{\mathrm{m}}=\frac{h}{\rho c_{p}}L\mathrm{e}^{\frac{2}{3}}\text{（4）}$$

对流换热系数：

$$h=0.023\frac{\lambda}{d}Re^{0.8}Pr^{0.4}\text{（5）}$$

雷诺数：

$$Re=\frac{\rho dv}{\mu}\text{（6）}$$

普朗特数：

$$Pr=\frac{c_{p}\mu}{\lambda}\text{（7）}$$

路易斯数：

$$L\mathrm{e}=\frac{\alpha}{D}\text{（8）}$$

热扩散系数：

$$\alpha=\frac{\lambda}{\rho c_{p}}\text{（9）}$$

质量扩散系数：

$$D=\mathrm{D}_{0}\left(\frac{T}{\mathrm{T}_{0}}\right)\mathrm{e}\left[380\left(\frac{1}{\mathrm{T}_{0}}-\frac{1}{T}\right)\right]\text{（10）}$$

化学反应速率[5]：

$$K_{\mathrm{R}}=\mathrm{K}_{\mathrm{R}0}\mathrm{e}^{\left(-\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{R}T_{\mathrm{f}}}\right)}\text{（11）}$$

$CaCO_3$ 溶解度拟合曲线公式[6]：

$$c_{\mathrm{s}}=98.85714-1.71071T_{\mathrm{f}}+0.00982T_{\mathrm{f}}^{2}\text{（12）}$$

其中λ为实验溶液热导率，单位是 W/(m·K)；μ为实验溶液粘度，单位是 Pa·s；D_0=1.15×10-9 m^2/s，T_0=336 K[7]，T 为溶液温度，单位是 K；活化能 E=37143 J/mol；指数前因子 K_{R0}=7.07 $m^4/(kg·s)$；摩尔气体常数 R=8.314 J/(mol·K)；T_f为污垢层表面温度，单位是℃[8]；浓度梯度$\Delta c=c_f-c_s$；c_f为实验溶液浓度，单位是 mg/L。

2.2 污垢剥蚀模型

Silva[9]在 Yiantsios，bohnet，brahim 研究的基础上提出了污垢剥蚀预测模型，通过分析污垢层的温度分布来研究热应力对污垢剥蚀的影响且考虑不同 $CaCO_3$ 晶体类型对污垢强度和导热系数等基本性能的影响；总结出污垢热应力、壁面剪切应力、污垢层厚度、晶体结构和污垢剥蚀率的关系。

污垢剥蚀率：

$$m_r=\frac{K_v}{P}\rho_f\left(1+\alpha t\left(T_w-T_f\right)\right)d_p\left(\rho^2\mu g\right)^{\frac{1}{3}}x_f v^2 \quad (13)$$

K_v为污垢层中的缺陷点数；P 为晶体间黏附力；根据 Krause[8]的测量结果可知：

$$\frac{P}{K_v}=83.2v^{0.54} \quad (14)$$

ρ_f为污垢层的平均密度；x_f为污垢层的厚度：

$$\rho_f=\frac{M_f}{x_f} \quad (15)$$

$(1+\delta(T_W-T_f))$表示污垢层中的热应力；αt 为污垢线性膨胀系数；dp 为污垢晶体粒径；M_f为污垢层质量。联立公式(13)、(14)和(15)可得污垢剥蚀率：

$$m_r=0.012v^{1.46}M_f\left(1+\alpha t\left(T_w-T_f\right)\right)d_p\left(\rho^2\mu g\right)^{\frac{1}{3}} \quad (16)$$

2.3 污垢热阻模型

污垢在换热面上形成过程中，一方面污垢会不断沉积在换热面上，污垢热阻增大；另一方面由于污垢的沉积阻碍了流体流动和传热，污垢受壁面剪切力作用和热应力影响，沉积在换热面上的污垢更易被剥蚀，使污垢热阻减小；污垢净沉积速率是由这两方面共同决定的，污垢净沉积率为：

$$m_f=\frac{\mathrm{d}M_f}{\mathrm{d}t}=m_d-m_r \quad (17)$$

污垢热阻：

$$R_f=\frac{M_f}{\rho_f\lambda_f} \quad (18)$$

对公式微分的：

$$\mathrm{d}M_f=\rho_f\lambda_f\mathrm{d}R_f \quad (19)$$

将公式代入公式得：

$$\frac{\mathrm{d}R_f}{\mathrm{d}t}=\frac{m_d-m_r}{\rho_f\lambda_f} \quad (20)$$

3 结果和讨论

3.1 入口温度的影响

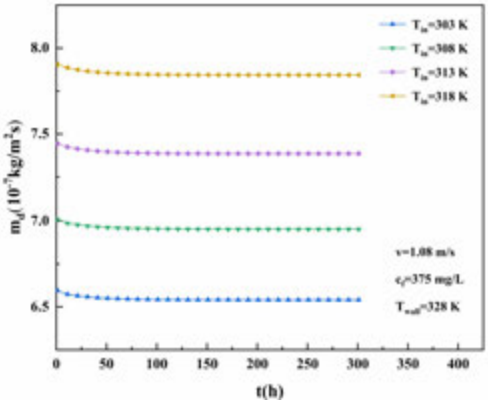


图 2 不同入口温度下 $CaCO_3$ 污垢沉积率随时间变化关系

Fig.2 Relationship between $CaCO_3$ fouling deposition rate and time at different inlet temperatures

从图 2 可以看出在换热器运行周期相同时入口温度越高，污垢沉积率越大。这是因为在壁面温度、溶液流速和溶液浓度一定的情况下，溶液入口温度越高，被加热后溶液温度越高，$CaCO_3$ 在水中溶解度越小，溶液过饱和度越大，$CaCO_3$ 晶体成核速度越快，$CaCO_3$ 污垢生长速度越快，污垢沉积率越大。不同入口温度下污垢沉积率均随时间增加呈递减趋势，这是由于沉积开始后，污垢附着在换热面上且污垢层逐渐变厚，使换热器换热性能降低，污垢-溶液相界面处温度降低，$CaCO_3$ 在水中溶解度增大，溶液过饱和度降低，污垢生长速度减小，污垢沉积率变小[10]。

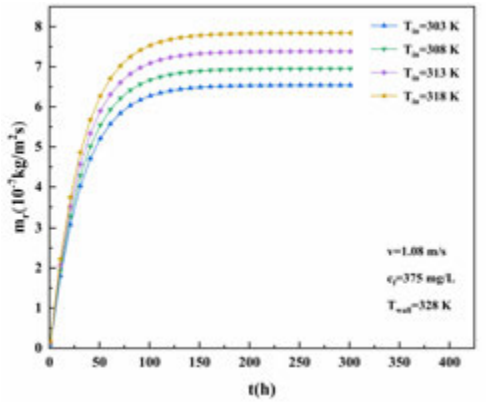


图 3 不同入口温度下 $CaCO_3$ 污垢剥蚀率随时间变化关系

Fig.3 Relationship between $CaCO_3$ fouling rate and time at different inlet temperatures

从图 3 可以看出在换热器运行周期相同时入口温度越高，污垢剥蚀率越大。这是因为沉积刚开始时，换热器上污垢沉积量很少，此时污垢剥蚀率很小，污垢沉积量由污垢沉积率所控制，而入口温度越高污垢沉积率越大，即在沉积刚开始阶段，相同运行周期下，溶液入口温度越高，沉积在换热面上的污垢越多污垢层越厚，而污垢层越厚其所受到的壁面剪切应力和热应力越大，污垢更易受流体冲刷而脱离换热面使污垢剥蚀率变大。污垢生长达到动态平衡时，入口温度越高，污垢剥蚀率越大。这是因为污垢生长最终会达到动态平衡，即达到平衡时污垢沉积率和污垢剥蚀率数值相等，而入口温度越高，达到平衡时污垢沉积率越大，即达到平衡时污垢剥蚀率越大。不同入口温度下污垢剥蚀

率均随时间增加呈递增趋势是因为在污垢沉积和剥蚀过程达到动态平衡前，污垢沉积率始终大于污垢剥蚀率，即随着时间流逝，沉积在换热面上的污垢越来越多，污垢层逐渐变厚。一方面，污垢层变厚使流体流通面积减小，在质量流量不变的情况下，溶液实际流速增大，污垢层所受到的壁面剪切应力增大，污垢层更容易被从换热面上剥离使污垢剥蚀率增大；另一方面，污垢层变厚使污垢层径向温度梯度变大，污垢层所受热应力增强，污垢层强度减弱，污垢更容易被剥离换热面使污垢剥蚀率增大。

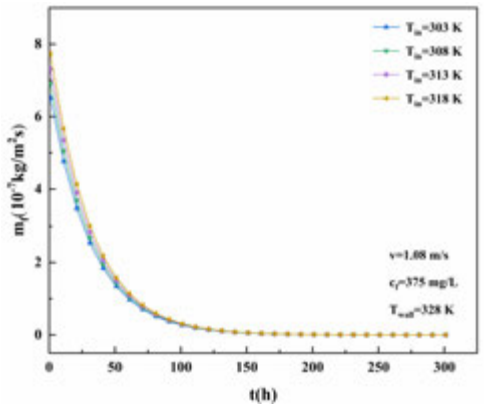


图 4 不同入口温度下 $CaCO_3$ 污垢净沉积率随时间变化关系

Fig.4 The relationship between the net deposition rate of $CaCO_3$ fouling and time at different inlet temperatures

从图 4 可以看出在换热器运行周期相同时入口温度越高，污垢净沉积率越大。这是因为，虽然 $CaCO_3$ 污垢沉积率和污垢剥蚀率均随溶液入口温度的升高而升高，但是由入口温度升高导致的污垢沉积率增长幅度大于污垢剥蚀率增长幅度，即入口温度越高，污垢净沉积率越大。入口温度由 303 K 升高至 318 K，在 11 h 时，污垢沉积率增长幅度为 1.31×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 0.42×10^{-7} kg/(m^2·s)；在 111 h 时，污垢沉积率增长幅度为 1.30×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 1.27×10^{-7} kg/(m^2·s)；在 211 h 时，污垢沉积率增长幅度为 1.30×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 1.30×10^{-7} kg/(m^2·s)。不同入口温度下污垢净沉积率均随时间增加而减小，且污垢净沉积率最终趋于 0。这是因为随着时间增加，污垢剥蚀率逐渐变大，而污垢沉积率随时间增加逐渐变小，污垢净沉积率为污垢沉积率与污垢剥蚀率之差，即污垢净沉积率随时间增加而减小，随着时间变长，污垢净沉积率趋于 0。

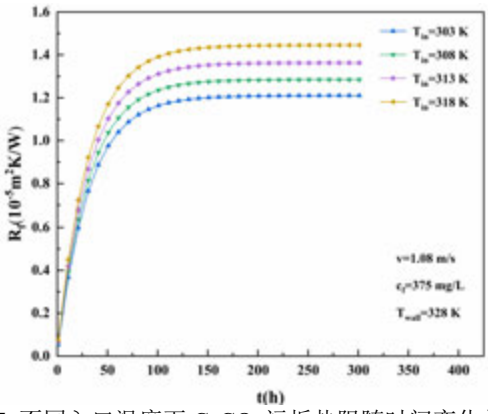


图 5 不同入口温度下 $CaCO_3$ 污垢热阻随时间变化关系

Fig.5 Time dependent relationship of $CaCO_3$ fouling thermal resistance at different inlet temperatures

从图 5 可以看出在换热器运行周期相同时入口温度越高，污垢热阻越大。这是因为入口温度越高，污垢净沉积率越大，相同时间内在换热面上生成的污垢越多，污垢热阻越大。不同入口温度下污垢热阻均随时间增加呈渐进型增长趋势[11]。这是因为沉积刚开始污垢净沉积率最大，即单位时间内污垢生成量最大，污垢热阻增长速度较快；随着时间流逝，污垢净沉积率逐渐变小，单位时间内污垢生成量变小，污垢热阻增长速度逐渐变慢；最终污垢净沉积率为 0，即污垢沉积与剥蚀达到动态平衡，污垢停止生长。

3.2 壁面温度得影响

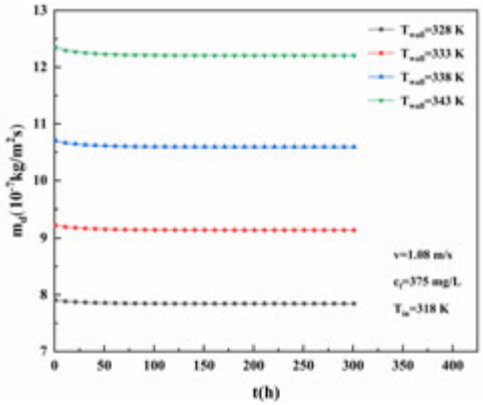


图 6 不同壁面温度下 $CaCO_3$ 污垢沉积率随时间变化关系

Fig.6 Relationship between $CaCO_3$ fouling deposition rate and time under different wall temperatures

从图 6 可以看出在换热器运行周期相同时污垢沉积率随壁面温度的升高而增大。这是因为一方面在测试管中恒温加热壁面处温度最高，$CaCO_3$ 首先在恒温壁面处析出，且壁面温度越高，$CaCO_3$ 溶液在壁面处的溶解度越低，过饱和度越大，析出量越大，污垢生长越快，污垢沉积率越大；另一方面壁面温度越高，化学反应速率越快，即壁面处 Ca^{2+}和 CO_3^{2-}反应生成 $CaCO_3$ 速度越快，污垢沉积率越大[12]。

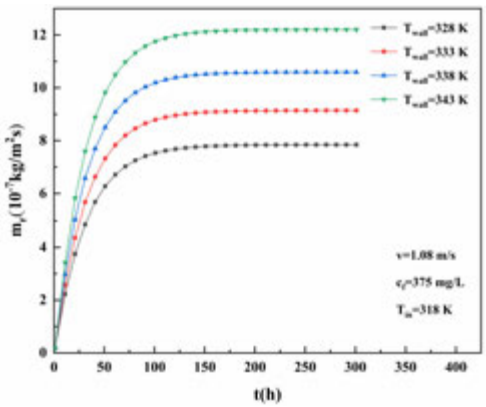


图 7 不同壁面温度下 $CaCO_3$ 污垢剥蚀率随时间变化关系

Fig.7 Relationship between $CaCO_3$ fouling rate and time under different wall temperatures

从图 7 可以看出在换热器运行周期相同时污垢剥蚀率随壁面温度的升高而增大。这是因为在入口温度、溶液流速和溶液浓度一定的情况下，壁面温度越高，污垢层径向温度梯度越大，污垢层所受热应力越大，污垢强度降低，污垢更容易液被剥离换热面，即壁面温度越高污垢剥蚀率越大。

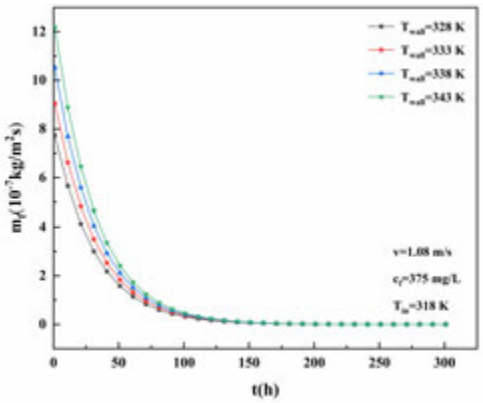


图 8 不同壁面温度下 $CaCO_3$ 污垢净沉积率随时间变化关系

Fig.8 The relationship between the net deposition rate of $CaCO_3$ fouling and time under different wall temperatures

从图 8 可以看出在换热器运行周期相同时壁面温度越高，污垢净沉积率越大。这是因为，虽然 $CaCO_3$ 污垢沉积率和剥蚀率均随壁面温度的升高而升高，但是由壁面温度升高导致的污垢沉积率增长幅度大于污垢剥蚀率增长幅度，即壁面温度越高，污垢净沉积率越大。壁面温度由 328 K 升高至 343 K，在 11 h 时，污垢沉积率增长幅度为 4.41×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 1.19×10^{-7} kg/(m^2·s)；在 111 h 时，污垢沉积率增长幅度为 4.36×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 4.26×10^{-7} kg/(m^2·s)；在 211 h 时，污垢沉积率幅度为 4.36×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 4.36×10^{-7} kg/(m^2·s)。

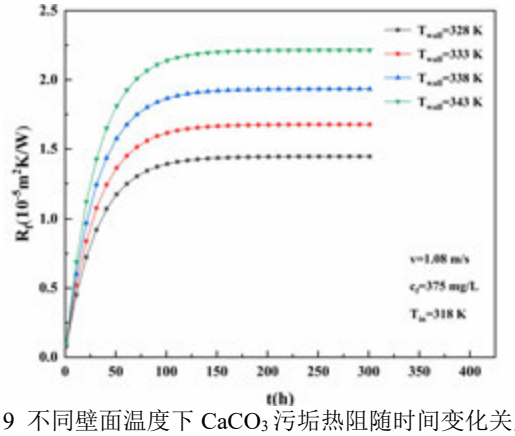


图 9 不同壁面温度下 $CaCO_3$ 污垢热阻随时间变化关系

Fig.9 The relationship between the thermal resistance of $CaCO_3$ fouling and time at different wall temperatures

从图 9 可以看出在换热器运行周期相同时壁面温度越高，污垢热阻越大[13]。这是因为壁面温度越高，污垢净沉积率越大，相同时间内沉积在换热面上的污垢越多，污垢热阻越大。

3.3 溶液流速得影响

从图 10 可以看出在溶液流速变化范围为 0.72~1.26 m/s，雷诺数变化范围为 9094~15914 时，$CaCO_3$ 污垢沉积率变化幅度为 0.06×10^{-7} kg·m^{-2}·s^{-1}，污垢沉积率变化率为 0.78%，污垢沉积率几乎不受流速所影响。这是因为在湍流条件下，污垢沉积由化学反应速率控制，流速变化对污垢沉积的影响非常小[14]。

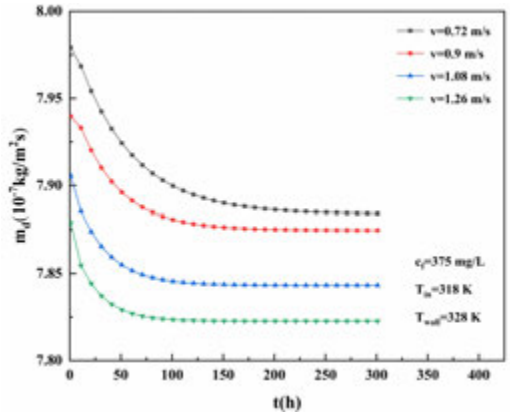


图 10 不同流速下 $CaCO_3$ 污垢沉积率随时间变化关系

Fig.10 Relationship between $CaCO_3$ fouling deposition rate and time under different flow rates

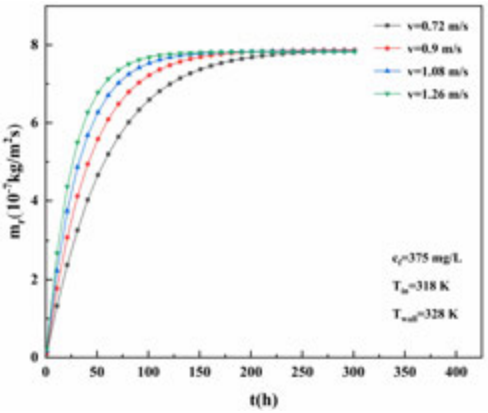


图 11 不同流速下 $CaCO_3$ 污垢剥蚀率随时间变化关系

Fig.11 Relationship between $CaCO_3$ fouling rate and time under different flow rates

从图 11 可以看出污垢生长达到平衡之前，流速越大污垢剥蚀率增长速度越快。这是因为壁面剪切应力与流速的平方成正比，随着流速的增大，污垢层所受壁面剪切应力迅速增大，污垢更容易被剥蚀，污垢剥蚀率变大。污垢生长达到平衡状态时，不同流速下污垢剥蚀率几乎相等。这是因为污垢生长达到平衡时，污垢沉积率与污垢剥蚀率相等，而达到平衡时不同流速下污垢沉积率几乎相等，即达到平衡时污垢剥蚀率也几乎相等。

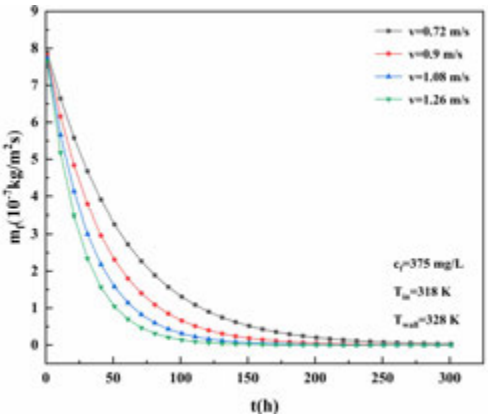


图 12 不同流速下 $CaCO_3$ 污垢净沉积率随时间变化关系

Fig.12 The relationship between the net deposition rate of $CaCO_3$ fouling and time under different flow rates

从图 12 可以看出溶液流速越小污垢净沉积率越大。这是由于湍流条件下污垢沉积率受流速影响很小，此时污垢净沉积率主要取决于污垢剥蚀率，污垢剥蚀率越大，污垢净沉积率越小。在溶液入口温度、壁面温度和溶液浓度一定时，溶液流速越大，污垢剥蚀率越大，污垢净沉积率越小。

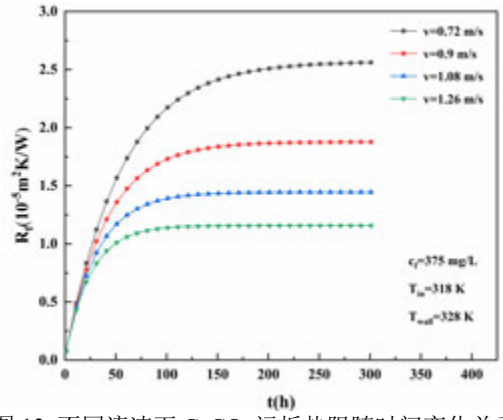


图 13 不同流速下 $CaCO_3$ 污垢热阻随时间变化关系

Fig.13 The relationship between the thermal resistance of $CaCO_3$ fouling and time under different flow rates

从图 13 可以看出在换热器运行周期相同时流速越小，污垢热阻越大。这是因为流速越小，污垢净沉积率越大，单位时间污垢生成量越大，累计在换热面上的污垢生成量越多，污垢热阻越大。

3.4 溶液浓度得影响

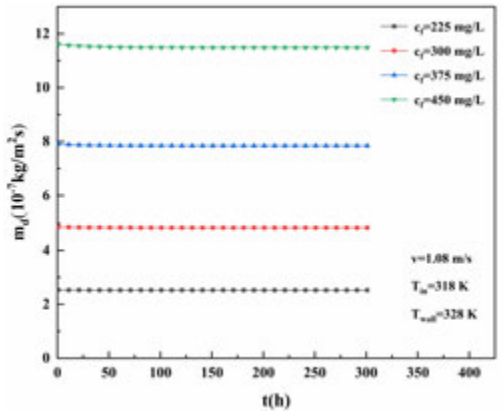


图 14 不同浓度下 $CaCO_3$ 污垢沉积率随时间变化关系

Fig.14 Relationship between $CaCO_3$ fouling deposition rate and time at different concentrations

从图 14 可以看出 $CaCO_3$ 污垢沉积率随浓度的增大而增大。这是因为浓度越大，$CaCO_3$ 溶液过饱和度越大，污垢生长速度越快，污垢沉积率越大。且随着浓度的增大污垢沉积率增长速度变快，这是因为入口温度、壁面温度和入口速度一定时 $CaCO_3$ 在换热面处饱和浓度相同，溶液浓度越高与换热面处溶液饱和浓度的浓度差越大，离子越容易向换热面处扩散，$CaCO_3$ 污垢沉积率越大[15]。

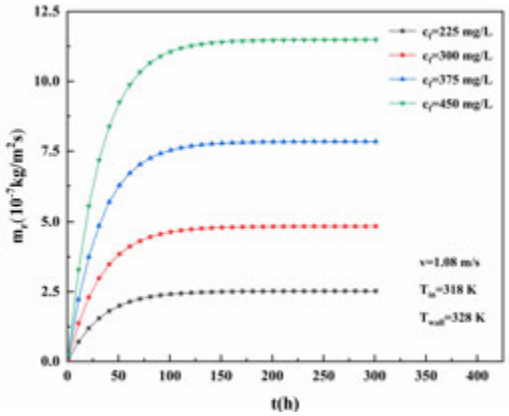


图 15 不同浓度下 $CaCO_3$ 污垢的剥蚀率随时间变化规律

Fig.15 The variation of $CaCO_3$ fouling rate with time under different concentrations

从图 15 可以看出 $CaCO_3$ 污垢剥蚀率随浓度的增大呈递增趋势。这是因为一方面浓度越高，污垢沉积率越大，沉积在换热面上的污垢越多污垢层越厚，使流体流通面积减小，流速增大，污垢所受壁面剪切应力越大，污垢剥蚀率越大；另一方面，随着污垢层变厚使污垢层温差增大，污垢所受到的热应力增大，污垢层强度变小容易被剥蚀，污垢剥蚀率变大。

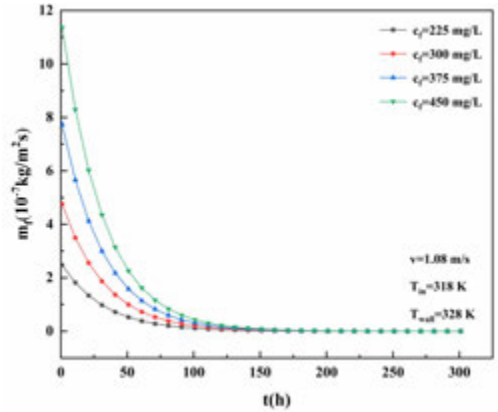


图 16 不同浓度下 $CaCO_3$ 污垢净沉积率随时间变化规律

Fig.16 The variation of $CaCO_3$ fouling net deposition rate with time under different concentrations

从图 16 可以看出在相同运行周期下，溶液中 $CaCO_3$ 浓度越高，$CaCO_3$ 污垢净沉积率越大。这是因为 $CaCO_3$ 污垢沉积率和剥蚀率均随溶液浓度升高而增大，但是由浓度增长引起的污垢沉积率增长幅度大于污垢剥蚀率增长幅度，即溶液浓度越高，污垢净沉积率越大。浓度由 225 mg/L 增长至 450 mg/L，在 11 h 时，污垢沉积率增长幅度为 9.05×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 2.57×10^{-7} kg/(m^2·s)；在 111 h 时，污垢沉积率增长幅度为 8.97×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 8.74×10^{-7} kg/(m^2·s)；在 211 h 时，污垢沉积率增长幅度为 8.97×10^{-7} kg/(m^2·s)，污垢剥蚀率增长幅度为 8.96×10^{-7} kg/(m^2·s)。

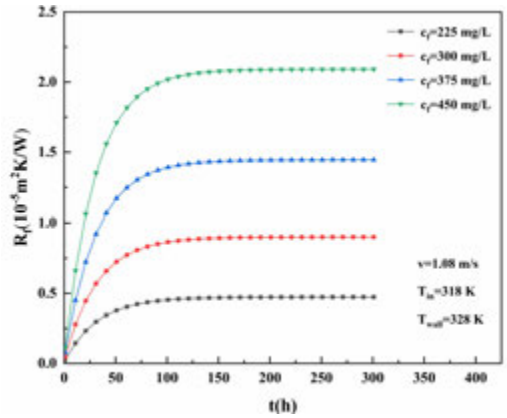


图 17 不同浓度下 $CaCO_3$ 污垢热阻随时间变化规律

Fig.17 Changes in Thermal Resistance of CaCO3 Fouling with Time at Different Concentrations

从图 17 可以看出 $CaCO_3$ 污垢热阻随溶液浓度的增大而增大。这是因为污垢净沉积率随溶液浓度增大而增大，即溶液浓度越大，随时间增加累积在换热面上生成的污垢越多，污垢层越厚，污垢热阻越大。

4 结论

在壁面温度 328 K，溶液流速为 1.08 m/s，溶液浓度 375 mg/L 时，$CaCO_3$ 污垢沉积率、剥蚀率、净沉积率和污垢热阻均随溶液入口温度的升高而增大。

在溶液入口温度 318 K，溶液流速为 1.08 m/s，溶液浓度 375 mg/L 时，$CaCO_3$ 污垢沉积率、剥蚀率、净沉积率和污垢热阻均随壁面温度的升高而增大。

在溶液入口温度 318 K，壁面温度 328 K，溶液浓度 375 mg/L 情况下，流速由 0.72 m/s 增大至 1.26 m/s，雷诺数从 9094 增大至 15914 时，$CaCO_3$ 污垢沉积率变化率为 0.78%，流速变化对污垢沉积率影响较小；污垢剥蚀率随流速的增大而增大，污垢净沉积率随流速的增大而减小，污垢热阻随流速的增大而减小。

溶液入口温度 318 K、壁面温度 328 K、溶液速度 1.08 m/s 时，$CaCO_3$ 污垢沉积率、剥蚀率、净沉积率和污垢热阻均随溶液浓度的升高而增大。

参考文献

[1] 杨善让, 徐志明, 孙灵芳. 换热设备污垢与对策 [M]. 第二版, 北京:科学出版社, 2004.
Yang Shangrang, Xu Zhiming, Sun Lingfang. Fouling of Heat Transfer Equipment and Countermeasures [M]. The Second Edition, Beijing Science Press, 2004.

[2] Bornhorst A, Mueller-Steinhagen H, Zhao Q. Reduction of Scale Formation by Ion Implantation and Magnetron Sputtering on Heat Transfer Surfaces. Heat Transfer Engineering [J]. Heat Transfer Engineering, 2009, 20(2): 6-14.

[3] Nikurades J. Laws of flow in rough pipes [M]. Washington: National Asvisory Committee for Aerona utics, 1950.

[4] Bott T R. Fouling of heat exchangers [M]. Elsevier, 1995.

[5] Müller-Steinhagen H, Malayeri M R, Watkinson A P. Fouling of heat exchangers-new approaches to solve an old problem [J]. Heat transfer engineering, 2005, 26(1): 1-4.

[6] 徐志明, 张仲彬, 程浩明. 管内 $CaCO_3$ 污垢形成过程的数值模拟 [J]. 工程热物理学报, 2009, 30(12):2099-2101.
Xu Zhiming, Zhang Zhongbin, Cheng Haoming. Numerical simulation of $CaCO_3$ fouling formation process in pipes [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2009, 30(12):2009-2101.

[7] Lei C, Peng Z, Day T, et al. Experimental observation of surface morphology effect on crystallization fouling in plate heat exchangers [J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2011, 38(1): 25-30.

[8] Brahim F, Augustin W, Bohnet M. Numerical simulation of the fouling process [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2003, 42(3): 323-334.

[9] Babuška I, Silva R S, Actor J. Break-off model for $CaCO_3$ fouling in heat exchangers [J]. International

Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 116: 104-114.
[10] Rahimi S, Peyghambarzadeh S M, Esfeh H K, et al. Air rumbling for online fouling mitigation of calcium carbonate aqueous solution under subcooled flow boiling heat transfer [J]. Applied Thermal Engineering, 2023, 225: 120159.
[11] Middis J, Paul S T, Müller-Steinhagen H M, et al. Reduction of heat transfer fouling by the addition of wood pulp fibers [J]. Heat transfer engineering, 1998, 19(2): 36-44.
[12] Maddahi M H, Hatamipour M S, Jamialahmadi M. Experimental study of calcium sulfate fouling in a heat exchanger during liquid-solid fluidized bed with cylindrical particles [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2018, 125: 11-22.
[13] Teng K H, Amiri A, Kazi S N, et al. Fouling mitigation on heat exchanger surfaces by EDTA-treated MWCNT-based water nanofluids [J]. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 2016, 60: 445-452.
[14] Andritsos N, Yiantsios S G, Karabelas A J. Modeling calcium carbonate scaling in pipe flow [C] // Proceedings of IDA World Congress on Desalination and Water Reuse, Madrid. 1997, 3: 549-559.
[15] Gao R, Shen C, Wang X, et al. Experimental study on long-term fouling of enhanced tubes: Effect of water quality [J]. Science and Technology for the Built Environment, 2020, 26(9): 1191-1203.

中国工程热物理学会 传热传质
学术会议论文 编号：233041

纳米流体强化下封头 CHF 的数值模拟研究

冯敏娜[1]，张雷[1,2]，杨雨馨[1]，毕胜山[1]
1 西安交通大学热流科学与工程教育部重点实验室，能源与动力工程学院，陕西 西安，710049)
2 中广核研究院有限公司 广东深圳 518031
（电话：029-82668143 E-mail：bss@mail.xjtu.edu.cn）

摘要：本文在考虑气泡滑移对壁面沸腾热流密度影响的基础上，引入了纳米流体热物性和纳米颗粒沉积对汽化核心密度和气泡脱离直径的影响，改进了壁面沸腾模型，开展了纳米流体强化下封头 CHF 的数值模拟研究。计算了不同工况下的 CHF，与实验数据相比偏差不超过±16.9%，验证了本文建立的模型可以合理计算纳米流体对 CHF 的影响。纳米流体沸腾时表面接触角和壁面粗糙度的改变，对整个流动沸腾时的传热性能有着重要的影响，也是纳米流体强化 CHF 的关键因素。

关键词：纳米流体、临界热流密度、IVR-ERVC

0 前言

压力容器外部冷却技术（External Reactor Vessel Cooling, ERVC）是实现熔融物堆内滞留(In-Vessel Retention, IVR)，进而防止堆内放射性物质外泄至外部环境的关键措施。近年来，随着核电机组的装机容量不断增大，IVR-ERVC 策略面临着安全裕度不足的问题。根据 Theofanous[1]等人定义的压力容器热失效准则：在 IVR ERVC 过程中，只要能够保证压力容器表面的实际热流密度值不超过此点的临界热流密度（CHF），即可认为 ERVC 能充分冷却下封头，实现熔融物堆内滞留，从而保证压力容器的完整性。因此如何提升下封头 CHF，进而提高 IVR-ERVC 策略的安全裕度，成为现阶段反应堆严重事故缓解策略的研究热点之一。

纳米流体是 Choi[2]首次提出的，它是在基液中添加一定比例的纳米颗粒（通常粒径为 1~100nm）形成的一种新型传热冷却工质。研究表明，纳米流体对 CHF 有一定的提升作用，其强化 CHF 的作用机理主要从纳米流体热物性和纳米颗粒沉积对壁面的影响等方面分析。S.J. Kim[4]研究了氧化铝、氧化锆和二氧化硅水基纳米流体的池沸腾特性，结果表明适度的纳米颗粒浓度（<0.1vol%）可以提高 CHF，并且发现沸腾时加热器表面形成多孔的纳米颗粒层显著改善了表面润湿性，认为这是纳米流体中 CHF 增强的可能原因。Hyungdae Kim[5]通过池沸腾和液滴沸腾实验，研究发现 CHF 增强的主要原因是表面上的颗粒沉积而不是分散在液体中的纳米颗粒。Hu Y[6]研究了热通量和不同质量分数的 GNs 纳米流体对乙二醇水溶液沸腾传热的影响，结果表明：在质量分数小于 0.02%的低浓度下，CHF 随着纳米颗粒浓度的增加而迅速增加，而当浓度超过此临界浓度时，纳米流体的 CHF 几乎不变。根据 Kwark 等人[7]的结果，CHF 可以通过在表面涂覆纳米颗粒来增强。在这种情况下，气泡产生时，壁面附近的纳米流体吸收热量并蒸发基本流体，有助于气泡的生长。由于下封头的特殊性，关于纳米流体对下封头下朝向加热面强化换热的研究主要机理性的实验。Seong Dae Park[8]研究了 0.0001vol%的氧化石墨烯纳米流体对下封头 CHF 的影响，试验段的设计根据 1/25 的比例模拟了 APR-1400 核电站，结果表明：纳米流体的 CHF 与蒸馏水相比提高了 20%， CHF 增强主要是由氧化石墨烯纳米颗粒涂覆在加热表面上引起的。Wang S[9]制备了五种浓度的石墨烯纳米流体，研究了颗粒浓度对下朝向加热面沸腾传热的影响，测量了加热表面的润湿性和粗糙度，结果表明：沉积纳米材料后的表面润湿性增强，表面粗糙度降低，并且随着纳米颗粒质量浓度的增加，CHF 先增加后减少，然后再次增加。

鉴于目前关于纳米流体对下封头下朝向加热面沸腾传热的影响效果和规律的研究较少，并且受实验条件限制，实验结果通常仅适用于特定工况或特定流体。而采用 CFD 模拟，不仅经济成本低、机理性强，且仅通过调整参数就可以灵活计算不同工况。Zhang L 等[10]基于下朝向加热面沸腾过程中存在的气泡滑移现象，对 RPI 壁面沸腾模型进行了改进，与实验数据对比误差不超过 20%，优于原 RPI 模型。本文工作将在该模型基础上，考虑纳米流体热物性和纳米颗粒沉积对壁面的影响，开展纳米流体强化下封头 CHF 的数值模拟研究。首先考虑了纳米流体流动和传热时对壁面产生的影响以及作用机理，建立了适合纳米流体的壁面沸腾模型。然后以 ULPU-V 为研究对象，基于该二维模型进行数值模拟，并与实验数据对比，验证改进模型的合理性和有效性。最后对纳米流体在下封头内部的流动和传热过程进行综合分析。

1 理论模型

1.1 纳米流体热物理性质

下封头 CHF 实验以水作为工质，选用水基纳米流体的密度、比热、黏度和导热系数的计算公式如式 1-4 所示，其中 nf 代表纳米流体，np 代表纳米颗粒，l 代表基液，φ为纳米颗粒的体积分数。

密度[11]：

$$\rho_{\mathrm{nf}} = (1-\varphi)\rho_{\mathrm{l}} + \varphi\rho_{\mathrm{np}} \tag{1}$$

其中：ρ_{nf}为纳米流体的密度，ρ_{l}为基液的密度，ρ_{np}为纳米颗粒的密度。

定压比热容[11]：

$$C_{\mathrm{p,nf}} = \frac{(1-\varphi)(\rho c_{\mathrm{p}})_{\mathrm{l}} + \varphi(\rho c_{\mathrm{p}})_{\mathrm{np}}}{(1-\varphi)\rho_{\mathrm{l}} + \varphi\rho_{\mathrm{np}}} \tag{2}$$

其中：$C_{\mathrm{p,nf}}$为纳米流体的比热容，$C_{\mathrm{p,l}}$为基液的比热容，$C_{\mathrm{p,np}}$为纳米颗粒的比热容。

黏度[11]：

$$\mu_{\mathrm{nf}} = (123\varphi^2 + 7.3\varphi + 1) * \mu_{\mathrm{l}} \tag{3}$$

其中：μ_{nf}为纳米流体的黏度，μ_{l}为基液的黏度。

导热系数[12]：

$$\frac{\lambda_{\mathrm{nf}}}{\lambda_{\mathrm{l}}} = \frac{(1-\varphi)(\lambda_{\mathrm{np}} + 2\lambda_{\mathrm{l}}) + 3\varphi\lambda_{\mathrm{np}}}{(1-\varphi)(\lambda_{\mathrm{np}} + 2\lambda_{\mathrm{l}}) + 3\varphi\lambda_{\mathrm{l}}} \tag{4}$$

其中：λ_{nf}为纳米流体的导热系数，λ_{l}为基液的导热系数，λ_{np}为纳米颗粒的导热系数。

1.2 改进壁面沸腾模型

1.2.1 壁面沸腾模型

针对下朝向加热面的流动沸腾过程，Zhang L[10]基于 RPI 模型提出了改进壁面沸腾模型，将气泡滑动过程纳入考虑范围。改进的壁面沸腾模型将气泡生长周期分为四个阶段：产生、生长、滑移及浮升。

$$q_{\mathrm{w}} = q_{\mathrm{c}} + q_{\mathrm{q}} + q_{\mathrm{e}} + q_{\mathrm{s}} \tag{5}$$

其中：q_{w}为壁面的总热通量，q_{c}为对流热通量，q_{q}为淬火热通量，q_{s}为滑移热通量，q_{e}为蒸发热通量。

淬火热通量 q_{q}：

$$q_{\mathrm{q}}=\rho_{\mathrm{s}}C_{\mathrm{p,s}}\Delta T_{\mathrm{s}}\frac{2}{3}\pi\left(\frac{D_{\mathrm{d}}}{2}\right)^{3}fN_{\mathrm{w}} \tag{6}$$

其中：ρ_{s} 和 $C_{\mathrm{p,s}}$ 分别为固体加热壁的密度和比热容，f 为气泡脱离频率，N_{w} 为汽化核心密度，D_{d} 为气泡脱离直径。

对流热通量 q_{c}：

$$q_{\mathrm{c}}=h_{\mathrm{fc}}(T_{\mathrm{w}}-T_{\mathrm{l}})\{[1-a_{\mathrm{sl}}N_{\mathrm{w}}]+[a_{\mathrm{sl}}N_{\mathrm{w}}\cdot(1-\tau^{*}f)]\} \tag{7}$$

其中：a_{sl} 表示气泡滑移影响面积，τ*是当瞬态传导的传热系数等于强制对流的传热系数时的时间，T_{w} 为壁面温度，T_{l} 为首层网格的液体温度。

蒸发热通量 q_{e}：

$$q_{\mathrm{e}}=\rho_{\mathrm{v}}h_{\mathrm{fg}}\frac{\pi D_{\mathrm{l}}^{3}}{6}fN_{\mathrm{w}} \tag{8}$$

其中：ρ_{v} 是气体的密度，h_{fg} 是气化潜热，D_{l} 为气泡浮升直径。

滑移热通量 q_{s}：

$$q_{\mathrm{s}}=\int_{\tau=0}^{\tau^{*}}q_{\mathrm{w}}d\tau\cdot(a_{\mathrm{sl}}fN_{\mathrm{w}})=\frac{2k_{\mathrm{l}}(T_{\mathrm{w}}-T_{\mathrm{l}})}{\sqrt{\pi\eta_{\mathrm{l}}\tau^{*}}}\tau^{*}[a_{\mathrm{sl}}fN_{\mathrm{w}}] \tag{9}$$

其中：η_{l} 为液相的热扩散率，k_{l} 为液相的热导率。

1.2.2 汽化核心密度

目前通用的 Lemmert-Chawla[13]提出的汽化核心密度仅取决于流体的壁温和饱和温度，不能较好的模拟纳米流体的性质。在本文中，采用 Paz 等人[14]提出的模型如下所示：

$$N_{\mathrm{w}}=4.72\times10^{5}[1-\exp(-\frac{\theta^{2}}{4.17})]\times(\exp(2.5\times10^{-6}f(\rho^{+})f(1/R_{\mathrm{c}}))-1)F_{\mathrm{v}}F_{\mathrm{sub}} \tag{10}$$

流动速度修正系数 F_{v}：

$$F_{\mathrm{v}}=\{[5042(\mathrm{Re}^{*}\mathrm{Pr})^{-0.8}]^{3}+1\}^{1/3} \tag{11}$$

其中：Re 为雷诺数，Pr 为普朗特数。

过冷度修正系数 F_{sub}：

$$F_{\mathrm{sub}}=172.3\left[\frac{C_{\mathrm{p,f}}}{h_{\mathrm{fg}}}(T_{\mathrm{sat}}-T_{\mathrm{f}})\right]^{-1.36} \tag{12}$$

对数无量纲质量密度：

$$\rho^{+}=\log\left(\frac{\rho_{\mathrm{l}}-\rho_{\mathrm{v}}}{\rho_{\mathrm{v}}}\right) \tag{13}$$

$$f(\rho^{+})=-0.01064+0.48246(\rho^{+})-0.22712(\rho^{+})^{2}+0.05468(\rho^{+})^{3} \tag{14}$$

$f(1/R_{\mathrm{c}})$与表面和流体性质有关：

$$f\left(\frac{1}{R_{\mathrm{c}}}\right)=\begin{cases}\dfrac{0.176}{R_{\mathrm{c}}}[S_{\mathrm{a}}\tan(S_{\beta})]^{-0.119} & R_{\mathrm{c}}>R_{\mathrm{c|TP}}\\[2ex] 1\times10^{-13}\left(\dfrac{1}{R_{\mathrm{c}}}\right)^{8503\frac{S_{\mathrm{a}}}{S_{\mathrm{AR}}}+3.135} & R_{\mathrm{c}}\le R_{\mathrm{c|TP}}\end{cases} \tag{15}$$

$$R_{c|TP}=0.116\left(\frac{S_{AR}}{S_a}\right)^{0.168} \tag{16}$$

$$S_a=\frac{1}{A}\iint_A|z(x,y)|dxdy \tag{17}$$

其中：S_a是算术平均表面高度，S_{AR}是表面的实际投影面积比，S_β是表面的特征平均斜率和表面相对于垂直轴的平均半角度：

$$\tan S_\beta=\frac{1}{\sqrt{S_{AR}^2-1}} \tag{18}$$

R_c为临界空腔尺寸，它是空腔成为成核位点的最小尺寸：

$$R_c=\frac{2\sigma\{1+\rho_f/\rho_g\}/P_f}{\exp\{h_{fg}(T_g-T_{sat})/RT_gT_{sat}\}-1} \tag{19}$$

其中：P_f为液体压力，R为基于分子量的气体常数。

1.2.3 气泡脱离与浮升直径

Phan 等人[15]将液体接触角的影响纳入经典的 Fritz 相关性，建立了新的气泡脱离直径的关联式：

$$D_d=0.626977\times\frac{(2+3\cos\theta-\cos^3\theta)}{4}\left(\frac{\sigma}{g(\rho_l-\rho_v)}\right)^{1/2} \tag{20}$$

Li[16]在此基础上考虑了液体温度的影响，修改后的表达式为：

$$D_d=0.626977\times\frac{(2+3\cos\theta-\cos^3\theta)}{4}\left(\frac{\sigma}{g(\rho_l-\rho_v)}\right)^{1/2}\exp(-\frac{\Delta T_{sub}}{45}) \tag{21}$$

其中：θ为液体接触角，σ为表面张力，g为重力加速度，ρ_l为液相的密度，ρ_v为气相的密度，ΔT_{sub}为液体过冷度。

气泡浮升直径采用 Tolubinski-Kosanchuk 模型[17]，其表达式为：

$$D_l=0.0006\exp(-(T_w-T_l)/45) \tag{22}$$

1.2.4 气泡滑移距离

Lindsey Anne Gilman[18]提出了一种预测气泡滑动距离的新方法，认为气泡在滑动过程中的生长可以分为两部分：蒸发和吸收。首先，气泡生长是滑动时蒸发的原因。其次，气泡吸收其它气泡生长。

$$\frac{D_{m+1}^2-D_m^2}{t_s\eta_l Ja_{sub}}=\frac{1}{15(0.015+0.0023\,\mathrm{Re}_b^{0.5})(0.04+0.023Ja_{sub}^{0.5})} \tag{23}$$

其中，D_{m+1}和D_m是气泡蒸发后和蒸发前的直径，t_s是生长时间，η_l是液体的热扩散率，Ja_{sub}是过冷雅各布数，Re_b是气泡雷诺数。

为了考虑吸收的影响，Basu 等人[19]假设表面上的成核位点是均匀分布的，此时，两个成核位点之间的距离为

$$s=\frac{1}{\sqrt{N_w}} \tag{24}$$

滑过成核位置的气泡将与完全生长的局部气泡（直径为D_d）合并，合并后的气泡直径

为

$$D_{\text{total}}^3 = D_{\text{sl}}^2 + D_{\text{d}}^2 \tag{25}$$

其中：D_{sl}是合并之前的原始气泡直径，D_{total}为合并之后的气泡直径

假设气泡滑动距离 s，并在下一个成核位置与气泡合并，直径增加到 D_{N}，那么，从最后一个位置开始的滑动距离为

$$l_{D_{\text{N}}-D_{\text{l}}} = \tau_{\text{s}} \cdot v_{\text{b}} \tag{26}$$

总滑动距离为

$$l = N_{\text{merg}} \cdot s + l_{D_{\text{N}}-D_{\text{l}}} \tag{27}$$

其中：N_{merg}是该气泡滑动经过的成核位点的数量，也就是合并的气泡数量。

2 数值模拟

2.1 几何模型

本文所采用的几何模型是基于麻省理工学院的 ULPU-V 实验台架[20]建立的，考虑到几何对称性，为简化计算，二维几何模型如图 1 所示，其中加热面半径为 2000mm，流道间隙和入口宽度为 152mm，加热角度从 0 到 90°，加热面的材料为 SS316L。

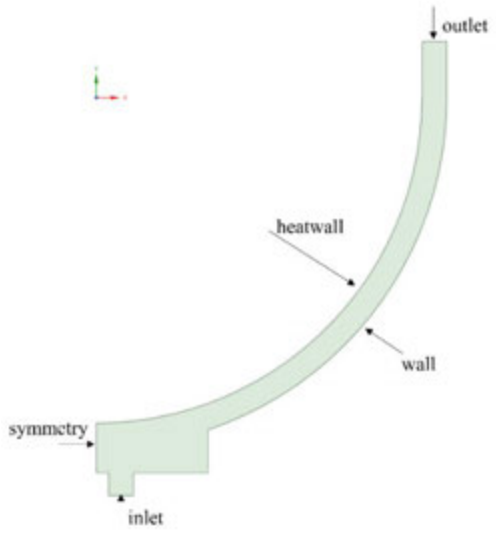


图 1 几何模型

2.2 边界条件

模型的入口设置为速度入口，出口为压力出口，加热壁面为变热流密度，热流密度分布为：

$$q_0(\theta) = \begin{cases} -2303.18 + 5585.291\theta^{0.5} - 6026.18\theta^{1} + 4210\theta^{1.5} - 2040.52\theta^{2} \\ +679.33\theta^{2.5} - 151.517\theta^{3} + 21.96\theta^{3.5} - 1.97\theta^{4} + 0.099\theta^{4.5} - 0.002\theta^{5} \quad \left(0^\circ \le \theta \le 85^{\circ\circ}\right) \\ 1375 \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \left(\theta > 85^{\circ}\right) \end{cases} \tag{28}$$

在计算某一角度ϕ处的 CHF 时，为保证临界热流密度出现在该角度ϕ，需要将大于该角度ϕ的热流密度设置为 0，此时壁面的实际热流密度分布为：

$$q(\phi)=\begin{cases}q_0(\phi)(0^\circ\le\phi\le\theta)\\0(\phi>\theta)\end{cases} \tag{29}$$

为计算特定角度的临界热流密度，加热壁面采用 $q(\theta)\cdot a$ 的形式进行调节，其中 a 为功率因子。通过逐步增加功率因子 a 的值，使壁面热流密度达到临界状态，那么此时的热流密度即为 CHF。本文参考 Zhang 等人[10]的结论，认为当含气率达到 0.8 时即为临界状态。

2.3 模拟流程

本文使用 FLUENT 结合 UDF 功能实现了考虑纳米流体的改进壁面沸腾模型，求解流程如下：

首先从主程序读取壁面温度和近壁面流场信息，之后求解纳米流体的热物理性质及模型中所需的汽化核心密度、气泡脱离和浮升直径、气泡滑移距离等参数。求解完模型所需的全部参数后，通过壁面热流密度分布公式获取当地壁面热流，然后通过公式（5）求解各个热流密度，并与壁面热流进行比较。若误差不符合精度，则重复上述步骤，反之计算结束，返回主程序。

3 结果与讨论

3.1 网格无关性验证

本文使用了 46000、79000、110000、170000 和 300000 等五种不同数量的网格进行计算，以分析网格尺寸对结果的影响。以 45° 工况为例，当进口流速为 1m/s 时，对加热面上的平均气相体积分数进行计算，结果如图 2 所示。可以看出，随着网格数量的增加，平均气相体积分数的变化不大，当网格数超过 110000 时，含气率的变化不超过 2%。因此，综合考虑网格无关性和计算效率，选择 110000 个网格进行后续计算。

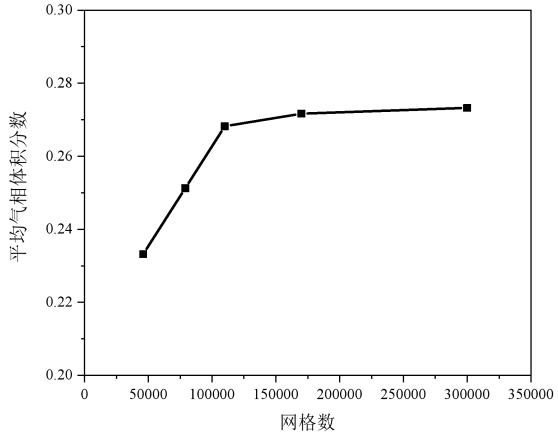


图 2 平均气相体积分数随网格数的变化

3.2 汽化核心密度对比

将本文提出的模型和 Basu[21]提出的模型分别与 Gerardi 等人[22]的汽化核心密度实验数据进行比较，结果如图 3 所示。

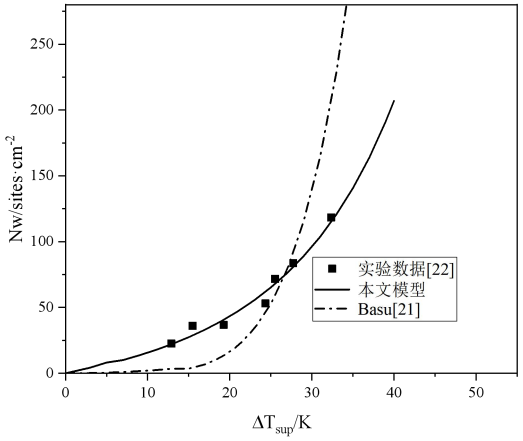


图 3 汽化核心密度各模型与实验数据对比

可以看出，本文使用的汽化核心密度模型的预测结果与实验数据偏差不大，最大误差不超过 7.80%，而其他三种方法的偏差非常大。这是因为它们都是基于纯水的实验数据的经验公式，而本文因为考虑了纳米颗粒沉积导致的接触角和壁面粗糙度的影响，更能准确预测纳米流体的性质。

3.3 气泡脱离直径对比

将本文的气泡脱离直径模型与实验数据进行对比，由图 4 所示，可以看出本文模型与实验结果相一致，最大误差不超过 9.81%，说明该模型能较好的反映纳米流体的接触角对壁面沸腾的影响。同时也可以看出，随着接触角的增大，即表面润湿性的减小，气泡脱离直径是逐渐减小的，这与实验结果也是相符合的。

3.4 流场分析

为了研究以纳米流体为冷却工质时，下封头外壁面与保温层之间形成的环形间隙流场状态，下面以 45° 临界工况为例，计算得到了速度分布云图和含气率分布云图如图 5 和图 6 所示。

由图 5 可以看出，纳米流体从入口流进下封头底部的时候，流速较为平缓，当开始进入下封头外壁面与保温层间隙时，流速有所增加，并且在靠近热壁面处流速始终保持相对较高。这是因为刚进入流道时，流道间距变窄，此时流速略有增加。而热壁面附近的含气率较大，气体在浮力的作用下，运动速度高于液相，在滑动过程中也会引起边界层和壁面附近主流的扰动，从而导致该处流速相较于主流区域流速较高。图 6 表明在热壁面附近的含气率较大，气相占比高，而主流附近的含气率基本为 0，仍为过冷液体。

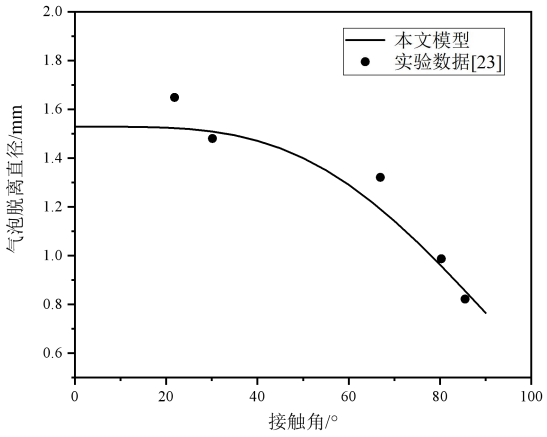


图 4 气泡脱离直径随接触角的变化

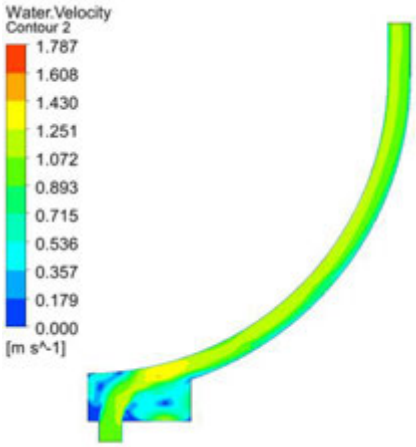


图 5 速度分布云图

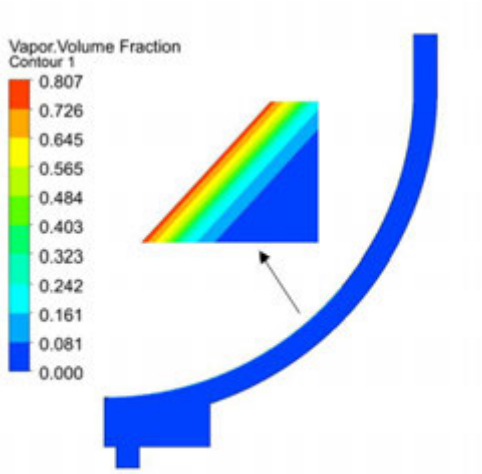


图 6 含气率分布云图

3.5 CHF 结果对比

将不同浓度、不同进口流速、不同方位角的 Al_2O_3-H_2O 纳米流体的 CHF 模拟结果与实验数据[20]进行了对比，结果表 1 所示。可以看出，本文模拟结果与实验结果的误差不超过±16.9%，证明本文模型可信度较好，可以用于纳米流体强化下封头 CHF 的理论计算。

表 1 纳米流体的 CHF 模拟结果与实验结果对比

工质	流速/(m/s)	方位角/°	CHF/(MW/m^2)		
			实验数据	模拟数据	误差/%
0.001vol% Al_2O_3-H_2O	0.5	45	1.38	1.61	16.9
		60	1.69	1.78	5.04
		90	1.77	1.93	8.75
	1	45	2.53	2.50	-1.04
		90	2.75	2.61	-5.09
	1.5	45	2.84	2.67	-5.97
		90	3.13	2.75	-12.14

0.01vol% Al_2O_3-H_2O	1	45	2.61	2.50	-4.21

4 结论

本文考虑纳米流体的影响，对壁面沸腾模型中的汽化核心密度和气泡脱离直径等进行了修正，同时考虑了气泡滑移的影响。将本文考虑纳米流体的汽化核心密度模型和气泡脱离直径模型与实验数据进行对比，汽化核心密度的偏差不超过 7.80%，气泡脱离直径的偏差不超过 9.81%，发现在模型中考虑接触角和表面粗糙度等的影响更符合实际，更适合纳米流体的流动沸腾传热。

将 CHF 模拟结果与实验数据进行对比，最大误差不超过±16.9%，说明本文模型与实验结果的一致性较好。可以认为，纳米流体沸腾时表面接触角和壁面粗糙度的存在，对整个流动沸腾时的传热性能有着非常重要的影响，也是改变整个沸腾换热过程的关键因素。

尽管目前相关的实验和数值模拟已经表明了纳米流体的强化换热特性，但是仍面临诸多挑战。

（1）研究证实，纳米颗粒在加热表面会不可避免的形成沉积，目前应用在反应堆外流道冷却的纳米流体的体积浓度处于 0.01 至 0.001vol%，浓度非常低，但其对 CHF 的影响效果不容小觑，而且基本不可能对反应堆外流道引起堵塞。但是考虑到长期性能可靠性和系统安全性的问题，需要对纳米流体的稳定性和安全性进行综合优化，更快实现工业化应用。

（2）纳米颗粒的尺寸大小、沉积对表面形貌的改变以及表面的亲疏水特性等对换热性能产生了关键影响，尽管目前的研究尚不深入，但是这也为更高效的纳米流体研发以及换热表面形貌的设计提供了重要思路。

（3）纳米流体可能会对环境造成一定的潜在危害，因此在使用时也需要考虑其是否会造成环境成本的增加。

参考文献

[1] HERIS S Z, ESFAHANY M N, ETEMAD S G. Experimental investigation of convective heat transfer of Al2O3/water nanofluid in circular tube[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2007, 28(2): 203-210.

[2] Choi, S U.S., and Eastman, J A. Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles. United States: N. p., 1995. Web.

[3] J. Buongiorno, L.W. Hu. Nanofluid heat transfer enhancement for nuclear reactor applications, in: Proceedings of the ASME Micro/Nanoscale Heat and Mass Transfer International Conference, vol. 3, 2010, 517–522.

[4] Kim, S.J., et al. Surface wettability change during pool boiling of nanofluids and its effect on critical heat flux. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2007. 50(19): p. 4105-4116.

[5] Kim, H., H.S. Ahn, and M.H. Kim. On the Mechanism of Pool Boiling Critical Heat Flux Enhancement in Nanofluids. Journal of Heat Transfer, 2010. 132(6).

[6] Hu, Y., et al. Role of nanoparticles on boiling heat transfer performance of ethylene glycol aqueous solution based graphene nanosheets nanofluid. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016. 96: p. 565-572.

[7] Kwark, S.M., et al. Pool boiling characteristics of low concentration nanofluids. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010. 53(5): p. 972-981.

[8] Park, S.D. and I.C. Bang. Flow boiling CHF enhancement in an external reactor vessel cooling (ERVC) channel using graphene oxide nanofluid. Nuclear Engineering and Design, 2013. 265: p. 310-318.

[9] Wang, S., et al. The investigation of heat transfer enhancement by using different mixture conditions of graphene nanofluids on a downward facing surface. Kerntechnik, 2022. 87(4): p. 484-494.

[10] Zhang, L., et al. Numerical simulation on critical heat flux of downward-facing surface with modified wall boiling model. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 2022: p. 1-24.

[11] Maïga, S.E.B., et al. Heat transfer behaviours of nanofluids in a uniformly heated tube. Superlattices and Microstructures, 2004. 35(3): p. 543-557.

[12] Yu, W. and S.U.S. Choi. The Role of Interfacial Layers in the Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids: A Renovated Maxwell Model. Journal of Nanoparticle Research, 2003. 5(1): p. 167-171.

[13] Lemmert M, Chawla J M. Influence of flow velocity on surface boiling heat transfer coefficient de la vitesse decoulement sur le coefficient de transfer de chaleur avec ebullition superficielle[M]. France: Inist-CNRS, 1972.

[14] Paz C, Conde M, Porteiro J, Concheiro M. Effect of heating surface morphology on active site density in subcooled flow nucleated boiling. Exp Therm Fluid Sci. 2017;82:147–59.

[15] Phan, H., et al. How does surface wettability influence nucleate boiling. Comptes Rendus Mecanique, 2009. 337: p. 251-259.

[16] Li, K., et al. A mathematic model considering the effect of Brownian motion for subcooled nucleate pool boiling of dilute nanofluids. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015. 84: p. 46-53.

[17] Tolubinsky V I, Kostanchuk D M. Vapor bubbles growth rate and heat transfer intensity at subcool water boiling[C]. France: International Heat Transfer Conference 4, 1970.

[18] Lindsey Anne Gilman. Development of a General Purpose Subgrid Wall Boiling Model from Improved Physical Understanding for Use in Computational Fluid Dynamics, Institute of Technology, USA: Massachusetts, 2014.

[19] Basu, N., G.R. Warrier, and V.K. Dhir. Onset of Nucleate Boiling and Active Nucleation Site Density During Subcooled Flow Boiling. Journal of Heat Transfer, 2002. 124(4): p. 717-728.

[20] G. L. DeWitt. “Investigation of Downward Facing CriticalHeat Flux with Water-Based Nanofluids for In-VesselRetention Applications”, [Ph.D. Thesis], Nuclear Scienceand Engineering Department, MIT, September 2011

[21] Basu, N., G.R. Warrier, and V.K. Dhir. Wall Heat Flux Partitioning During Subcooled Flow Boiling: Part 1—Model Development. Journal of Heat Transfer, 2005. 127(2): p. 131-140.

[22] Gerardi, C., et al. Infrared thermometry study of nanofluid pool boiling phenomena. Nanoscale Research Letters, 2011. 6: p. 232 - 232.

[23] Phan, H.T., et al. Surface wettability control by nanocoating: The effects on pool boiling heat transfer and nucleation mechanism. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2009. 52: p. 5459-5471.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233043

喷管跨音速可压缩流场的数值计算

吴天宇[1]，朱微[1]，林婉玉[1]，曹涛锋[2]，凌 空[3]，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，陕西省西安市碑林区咸宁西路 28 号
2 西安航天动力技术研究所
3 西安数峰信息科技有限责任公司
*wqtao@mail.xjtu.edu.cn

摘要：本文介绍了基于 Delaunay 三角形网格的稳态可压缩流动 IDEAL 算法的求解流程，并在 MHT 软件框架中编写了相应的程序模块。借助 MHT 的圆柱轴对称坐标系转换模块，使用 SIMPLE 和 IDEAL 算法对喷管中的二维轴对称跨音速流动进行了求解，通过两个算例对两种算法程序模块的可靠性进行验证，并对它们的计算效率及健壮性进行比较。总体上，可压缩流动的 IDEAL 算法的健壮性及计算效率均优于 SIMPLE 算法。

关键词：可压缩流动，IDEAL 算法，Delaunay 网格生成。

0 前言

对喷管中燃气的跨音速流动进行数值求解是 CFD 中的一个挑战性问题。流场是通过求解 Navier-Stokes（N-S）方程来获得的，求解 N-S 方程的方法可分为基于密度的方法和基于压力的方法两大类。基于压力的方法解决了基于密度的方法在计算不可压缩问题和低马赫数流动时的不足，它的一个重要优点是其能够在不进行任何人工处理的情况下求解流动问题。此外，由于压力梯度对流体流动具有重要的驱动作用，因此在马赫数不太高（如小于 4）的情况下，基于压力的方法是求解流动问题的首选，此类方法也是目前大多数商业软件所采用的计算方法[1]。

各领域研究中应用较为广泛的基于压力的方法是 SIMPLE 算法，它最初是由 Patankar 和 Spalding[2]针对不可压缩问题提出的。SIMPLE 算法有两个假设：

（1）分别假设初始速度场和压力场，忽略两者之间的关系，因此初始假定的压力场和速度场相互间是不协调的；

（2）忽略相邻单元的速度修正值对计算单元的影响，以简化求解过程。

SIMPLE 算法中的两个假设虽然仍可能获得收敛解，但削弱了压力与速度之间的关联性，导致该算法的收敛速度较慢且健壮性较差。随着工业的发展，数值计算所面临的待求解问题日益复杂，为了适应实际求解需求，算法的收敛性和健壮性也要不断提高。Patankar 提出的 SIMPLER 算法[3]根据初始速度场计算初始的压力分布，增强了初始速度

本文得到国家自然科学基金创新群体基金（No.51721004）及西安市科技局基金的资助(2019218714SYS002CG024)

场和压力场的联系，从而消除了第一个假设。随后 Van Doormaal 和 Raithby 提出的 SIMPLEC 算法[4]可以部分消除第二个假设的影响。为了同时消除这两个假设，Tao 等人在 2004 年提出了 CLEAR 算法[5]，该算法直接求解压力方程以更新压力，并且在压力方程的推导过程中充分考虑了相邻单元速度值的影响，从而使计算效率大大提升。Sun 等人在 2008 年提出了 IDEAL 算法[6]，该算法在推导压力方程时也充分考虑了相邻单元速度值的影响，并通过引入两次内迭代，保证了速度和压力之间的充分耦合：第一次内迭代过程旨在使压力分布尽可能接近当前迭代层次的最终压力场；第二次内迭代是为了使速度场尽可能同时满足动量方程和连续性方程。因此，在求解不可压缩问题时 IDEAL 算法的收敛速度和健壮性优于所有现有的压力校正算法[6,7]。然而，IDEAL 算法的两个内迭代过程的迭代次数（分别表示为 N1 和 N2）需要通过尝试和对比来确定。

虽然基于压力的算法最初是为求解不可压缩流动设计的，但在数值模拟的发展中，它们也被扩展到处理可压缩问题[8,9]。当采用基于压力的方法求解可压缩流动时，以压力作为主要因变量，使得压力修正直接与质量流量的变化相关，从而不需要分开求解由密度和速度的变化所引起的质量流量的改变量。

此外，在模拟喷管这种几何形状较为复杂的不规则区域中的流动时，非结构化网格以其对复杂几何区域适应能力较高的优势被广泛应用。SIMPLE 家族已经被推广到非结构化网格上计算可压缩流动[10,11]，但目前被证明最优的 IDEAL 算法却少见相关工作的实施，只有 Wang 等人展开了一些研究，并且提出了 N1 和 N2 自动取值的方法[12]。

本文将详细介绍基于非结构化同位网格的稳态可压缩流动 IDEAL 算法的求解流程，并在 MHT 软件框架的基础上[13,14]编写相应的程序模块。MHT 是由西安数峰信息科技有限责任公司开发的一款软件框架。借助 MHT 的圆柱轴对称坐标系转换模块，将算法拓展至应用于喷管内二维轴对称流动的研究，并通过 2 个算例对可压缩 SIMPLE 和 IDEAL 算法的健壮性及计算效率进行对比。本文数值计算所使用的网格均采用 Delaunay 方法通过 C++自编程生成。

1 Delaunay 网格生成

进行数值计算的第一步是将空间上连续的计算区域划分成互不重叠的有限个子区域并确定它们的节点，即网格生成。喷管的形状较为复杂，需采用对复杂几何区域适应能力较高的非结构化网格。本文选用已成为生成三角形网格的主流算法之一的 Delaunay 方法生成三角形网格[15]。采用 C++语言对 Yu 等人[16]提出的二维 Delaunay 三角形网格生成方法进行编程。实施过程如下：

（1）按逆时针顺序依次给出计算边界上所有节点的坐标及能够包含计算区域的辅助矩形的四个顶点的坐标；

（2）使用 Bowyer-Watson 算法生成一组初始三角形，其顶点由第一步输入的节点组成；

（3）去除重心在计算域外的三角形以实现匹配边界；

至此便完成了以给定边界节点为顶点的初始 Delaunay 三角形化。接下来，需要插入内部节点。

（4）计算现有三角形的无量纲半径，并按照无量纲半径由大到小的顺序对三角形

进行排序，无量纲半径的计算方式详见文献[16]，本文将不再赘述；

（5）按第四步的顺序，依次在三角形外接圆的圆心处生成并插入内部点。

每插入一个内部点后都要重新计算现有三角形的无量纲半径，以保证下一个内部点在最合适的位置插入。内部点的生成和插入是循环进行的过程，直至插点数等于预设点数，至此网格生成完毕。若此时无量纲半径的最大值仍大于 1，则需要增加插入的内部点数并重复上述过程以生成满足条件的网格。

针对本文所研究的喷管[17,18]，按 Delaunay 方法生成的网格的示意图如图 1 和图 2 所示（图中展示了较为稀疏的网格）。

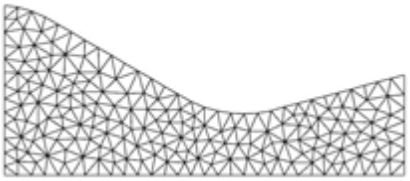


图 1 模型 1 网格示意图

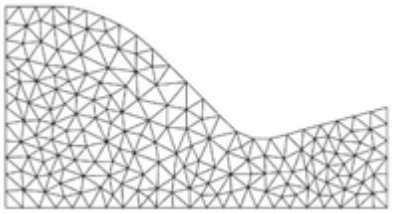


图 2 模型 2 网格示意图

2 可压缩流动的求解方法

2.1 控制方程

由于喷管中的流动一般在几十毫秒内即可达到稳定状态，与喷管的实际工作时间相比可忽略不计[19]，因此本文的算例均为稳态流动。在圆柱轴对称坐标系中，喷管中的稳态问题的通用控制方程为：

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(r\rho_\phi u\phi\right)+\frac{\partial}{\partial r}\left(r\rho_\phi v\phi\right)=\frac{\partial}{\partial z}\left(r\Gamma_\phi\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_\phi\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)+rS_\phi \tag{1}$$

式中：ϕ 为通用变量，可以为标量或矢量；ρ_ϕ 为广义密度，Γ_ϕ 为广义扩散系数，S_ϕ 为广义源项。

求解可压缩流动时还需要补充状态方程：

$$p=\rho RT \tag{2}$$

2.2 压力修正方程的推导

由于可压缩流动需要考虑密度的变化，压力修正方程与求解不可压缩问题时有所不同。可压缩问题中的压力修正方程基于连续方程推导而来。若不考虑瞬态项，则离散的连续方程为：

$$\int_\Omega\nabla\cdot\left(\rho\boldsymbol{u}\right)\mathrm{d}V=\oint_\Omega\rho\boldsymbol{u}\mathrm{d}A\ ;\ \sum_{\text{faces}}\rho_\mathrm{f}\boldsymbol{u}_\mathrm{f}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{f}=0 \tag{3}$$

压力、速度和密度都由它们的初始值和修正值组成：

$$p=p^0+p' \tag{4}$$

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}^0+\boldsymbol{u}' \tag{5}$$

$$\rho=\rho^0+\rho' \tag{6}$$

式中：上标 0 表示初始值；上标′表示修正值。

经推导[11]，可得压力修正方程的离散结果为：

$$\sum_{\text{faces}}\rho_\mathrm{f}^0\boldsymbol{u}_\mathrm{f}^0\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{f}+\sum_{\text{faces}}\frac{p_\mathrm{f}'}{\left(RT\right)_\mathrm{f}}\boldsymbol{u}_\mathrm{f}^0\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{f}-\sum_{\text{faces}}\rho_\mathrm{f}^0\left(\frac{\Delta V}{a_\mathrm{P}}\right)_\mathrm{f}\left(\nabla p'\right)_\mathrm{f}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{f}=0 \tag{7}$$

相应的压力修正方程为：

$$\nabla\cdot\left(\frac{1}{RT}\boldsymbol{u}^0 p'\right)=\nabla\cdot\left(\rho^0\frac{\Delta V}{a_{\mathrm{P}}}\nabla p'\right)-\nabla\cdot\left(\rho^0\boldsymbol{u}^0\right) \tag{8}$$

式（8）中的各项从左到右依次称为压力修正方程的对流项、扩散项及源项。值得指出，对于不可压缩流动，压力修正方程是一个椭圆型方程；但是对于可压缩流动式（8）成为双曲型方程[11]。

2.3 可压缩流动 IDEAL 算法

可压缩 IDEAL 算法的详细推导过程可参见文献[20]，这里仅给出一个迭代步的实施过程：

（1）假定初始的压力场、密度场、速度场及温度场或者由上次外迭代获得；

（2）进行第一次内迭代，改进压力场并更新速度场和密度场，得到本次外迭代的最终压力场及中间密度场；

（3）求解隐式动量方程，并得到中间速度场，其中动量方程的系数采用本次外迭代的初始值计算，源项由第一次内迭代获得的参数计算；

（4）进行第二次内迭代，改进速度场使其更好地满足连续性方程，并得到本次外迭代的最终速度场；

（5）修正单元面处的质量流量；

（6）求解能量方程并得到本次外迭代的最终温度场；

（7）根据状态方程重新计算密度，并采用一阶迎风格式计算单元面上的密度；

进入下一次外迭代，重复上述步骤直到获得收敛解。

3 喷管内二维轴对称可压缩流动的求解

3.1 算例验证

3.1.1 算例 1

第一个算例所采用的模型为 Back 等人实验中的喷管[17]，几何模型如图 3 所示。流动方向由左向右，平行轴线进入。介质为空气，由于空气没有辐射能力，因此计算时无需考虑辐射传热。物性参数取总温 840K、总压 0.518MPa 条件下的值。判断收敛的准则为：动量方程和能量方程的残差值降至 1×10^{-5}。

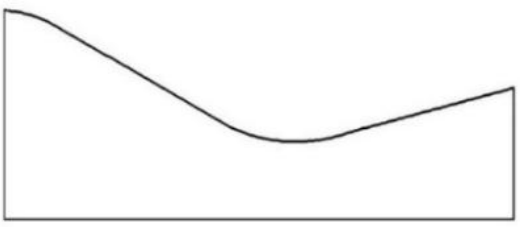
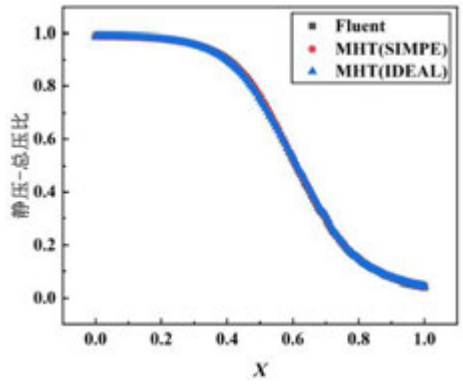
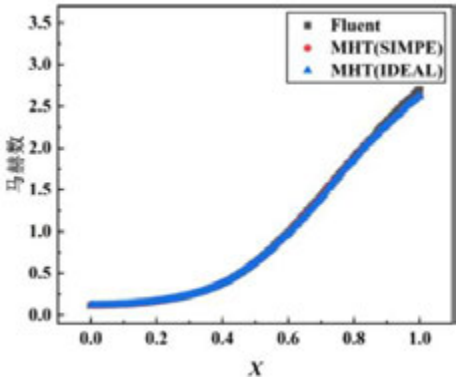


图 3 算例 1 喷管几何模型

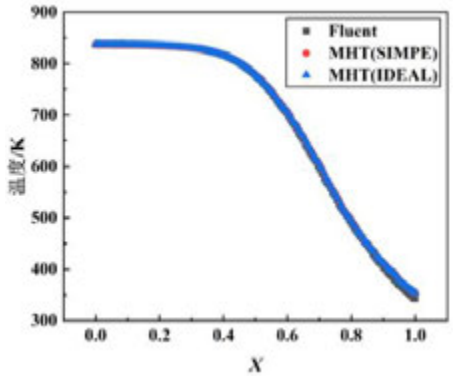
计算后输出轴线上的静压-总压比、马赫数及温度，并与使用 Fluent 计算的结果进行对比，如图 4（a）-（c）所示，图 4 中横坐标表示该点到入口的垂直距离与喷管总长的比值，所输出的参数为轴线边界上各单元面中心的值。MHT 的计算结果与 Fluent 计算结果的最大相对误差如表 1 所示，计算结果较为一致。



（a）静压-总压比



（b）马赫数



（c）温度

图 4 算例 1 轴线处计算结果对比

表 1 MHT 与 Fluent 计算算例 1 时结果的最大相对误差

	SIMPLE	IDEAL
静压-总压比	7.51%	7.89%
马赫数	2.94%	2.88%
温度	3.53%	3.52%

3.1.2 算例 2

第二个算例所采用的模型为 Cuffel 等人实验中的喷管[18]，几何模型如图 5 所示。流动方向由左向右，平行轴线进入。介质为空气，物性参数取总温 555K、总压 1.0342MPa 条件下的值。MHT 与 Fluent 计算结果的轴线参数对比如图 6 所示。MHT 的计算结果与 Fluent 计算结果的最大相对误差如表 2 所示，计算结果较为一致。

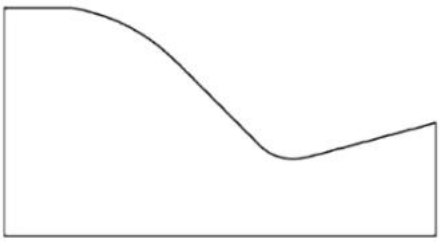
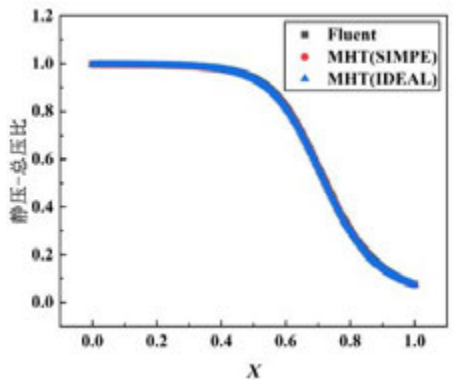
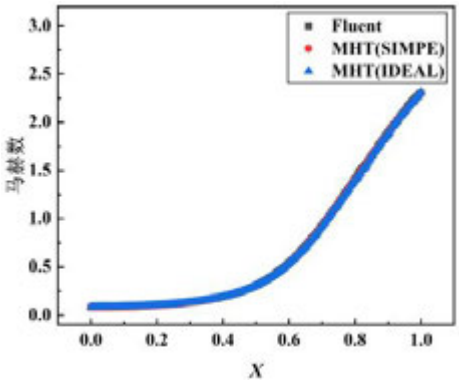


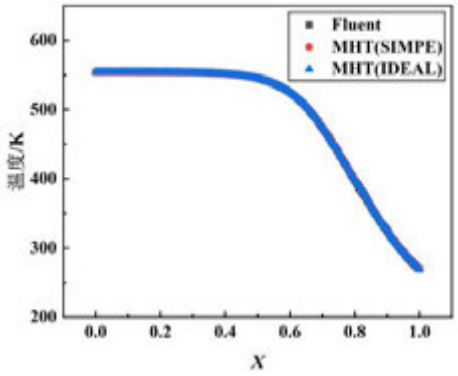
图 5 算例 2 喷管几何模型



（a）静压-总压比



（b）马赫数



（c）温度

图 6 算例 2 轴线计算结果对比

表 2 MHT 与 Fluent 计算算例 2 时结果的最大相对误差

	SIMPLE	IDEAL
静压-总压比	4.04%	3.80%
马赫数	2.36%	2.40%
温度	1.50%	1.61%

3.2 可压缩流动 SIMPLE 与 IDEAL 算法的对比

使用 SIMPLE 算法和 IDEAL 算法在不同的亚松弛因子下对算例 1 和算例 2 进行求解，并将两种算法的迭代次数和计算时间进行比较。两种算法计算不同算例直至残差达到收敛准则所消耗的时间如图 7 所示。

对于算例 1，SIMPLE 算法在亚松弛因子为 0.1～0.6 时收敛，而 IDEAL 算法的收敛范围为 0.1～0.7；对于算例 2，SIMPLE 算法在亚松弛因子为 0.1～0.6 时收敛，而 IDEAL 算法的收敛范围为 0.1～0.8，因此在二维轴对称流动中 IDEAL 算法相比于 SIMPLE 算法具有更好的健壮性。

SIMPLE 算法和 IDEAL 算法的计算效率和迭代次数通过两个比值来评估：

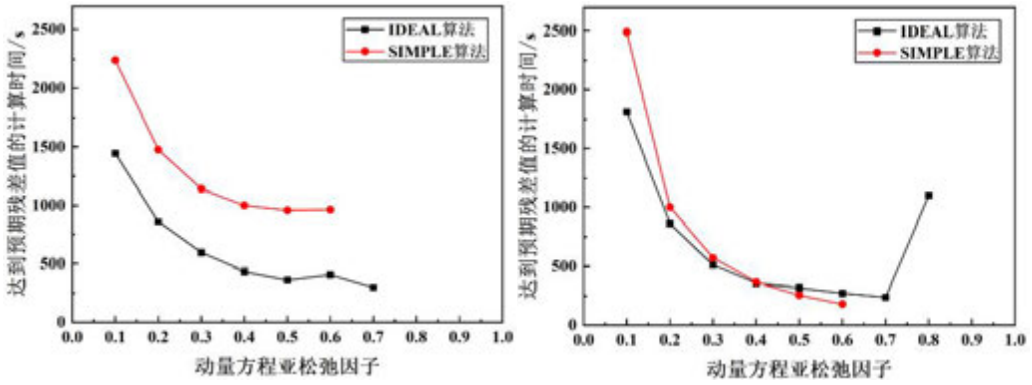
（1）t_{SIMPLE}/t_{IDEAL}：SIMPLE 算法达到预期残差值的计算时间除以 IDEAL 算法达到预期残差值的计算时间；

（2）i_{SIMPLE}/i_{IDEAL}：在获得第一个比值的计算时间下，SIMPLE 算法的迭代次数除

以 IDEAL 算法的外迭代次数。

计算算例 1 时，在两种算法均能得到收敛解的亚松弛因子下，IDEAL 算法所用的迭代次数和计算时间均低于 SIMPLE 算法。在动量方程的亚松弛因子为 0.5 时，两种算法的计算时间相差最大，此时 SIMPLE 算法的计算时间是 IDEAL 算法的 2.63 倍。

计算算例 2 时，使用 IDEAL 算法所用的计算时间在亚松弛因子为 0.1～0.4 时少于 SIMPLE 算法，且两种算法的时间差随亚松弛因子的增大而减小，亚松弛因子为 0.5～0.6 时 IDEAL 算法所用时间超过 SIMPLE 算法。



（a） 算例 1　　（b） 算例 2

图 7 使用 SIMPLE 算法和 IDEAL 算法所消耗的时间的比较

表 3 SIMPLE 算法和 IDEAL 算法计算时间与迭代次数的比较

比值	算例	α_u=0.1	α_u=0.2	α_u=0.3	α_u=0.4	α_u=0.5	α_u=0.6
$\frac{t_{SIMPLE}}{t_{IDEAL}}$	算例 1	1.55	1.72	1.92	2.3	2.63	2.35
	算例 2	1.37	1.15	1.12	1.02	0.79	0.66
$\frac{i_{SIMPLE}}{i_{IDEAL}}$	算例 1	3.27	3.29	3.75	4.35	5.07	4.43
	算例 2	2.78	2.67	2.53	2.11	1.58	1.25

4 结　论

本文在 MHT 软件框架的基础上，基于非结构化网格对喷管内的可压缩流动进行了求解。介绍了 Delaunay 三角形网格的生成方法以及可压缩流动 SIMPLE 算法和 IDEAL 算法的详细求解过程。通过 2 个喷管内的二维轴对称流动评估了两种算法的计算效率和健壮性。可以总结出以下两个结论：

（1）IDEAL 算法具有明显的健壮性。在本章所采用的算例中，IDEAL 算法能够获得收敛解的亚松弛因子范围均大于 SIMPLE 算法。

（2）除算例 2 在亚松弛因子为 0.5 和 0.6 的情况下，IDEAL 算法的计算效率均高于 SIMPLE 算法，两个算例中 IDEAL 算法相比于 SIMPLE 算法的计算效率分别最大提高 62%和 27%。因此总体来说 IDEAL 算法的计算效率高于 SIMPLE 算法。

致　谢

本文得到国家自然科学基金创新群体基金（No.51721004）及西安市科技局基金的资助(20192187 14SYS002CG024)

参考文献

[1] Shin J R, Kim T W. Enhanced pressure based coupled algorithm to combine with pressure–velocity-enthalpy for all Mach number flow. International Journal of Aeronautical and Space Sciences, 2021, 22(3):489-501.

[2] Patankar S V, Spalding D B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1972, 15(10):1787-1806.

[3] Patankar S V. A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 1981, 4(4):409-425.

[4] Van Doormaal J P, Raithby G D. Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 1984, 7(2):147-163.

[5] Tao WQ, Qu ZG, He YL. A novel segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems—CLEAR (coupled and linked equations algorithm Revised) part I: mathematical formulation and solution procedure. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 2004, 45(1):1-17.

[6] Sun DL, Qu ZG, He YL, et al. An efficient segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems—IDEAL (inner doubly iterative efficient algorithm for linked equations) part I: mathematical formulation and solution procedure. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 2008, 53(1):1-17.

[7] Sun DL, Qu ZG, He YL, et al. An efficient segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems-IDEAL (inner doubly iterative efficient algorithm for linked equation) part II: application examples. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 2008, 53(1):18-38.

[8] Karki K C, Patankar S V. Pressure based calculation procedure for viscous flows at all speeds in arbitrary configurations. AIAA Journal, 1989, 27(9):1167-1174.

[9] 严红，何洪庆．一种模拟喷管二维流场的新方法. 推进技术, 1995, 4(02): 21-25．
YAN Hong, HE Hong-Qing. A new method to simulate the two-dimensional flow in nozzles. Journal of Propulsion Technology, 1995, 4(02): 21-25.

[10] Lien F S. A pressure-based unstructured grid method for all-speed flows. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2000, 33(3):355-374.

[11] Tsui Y Y, Wu T C. A pressure-based unstructured-grid algorithm using high-resolution schemes for all-speed flows. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 2008, 53(1):75-96.

[12] Wang JP, Zhang JF, Qu ZG, et al. Adaptive inner iteration processes in pressure-based method for viscous compressible flows. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 2018, 74(3):603-622.

[13] Zhang S, Ling K, Sun N et al. 2-D numerical study of ferrofluid droplet formation from microfluidic T-junction using VOSET method. Numerical Heat Transfer, Part A, 2021, 79(9):611-630.

[14] 张帅. 基于非结构化网格的计算流体力学框架设计及其应用: [博士论文]. 西安：西安交通大学，2022．
ZHANG Shuai. Design and application of computational fluid dynamics framework based on unstructured grid: [Ph.D. Thesis]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2022.

[15] 郑耀, 陈建军. 非结构网格生成. 北京: 科学出版社, 2016: 22-55.
ZHENG Yao, CHEN Jian-jun. Unstructured Mesh Generation. Beijing: Science Press, 2016: 22-55.

[16] Yu B, Lin M J, Tao W Q. Automatic generation of unstructured grids with Delaunay triangulation and its application. Heat & Mass Transfer, 1999, 35(5):361-370.

[17] Back L H, Massier P F, Gier H L. Convective heat transfer in a convergent-divergent nozzle. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1964, 7(5): 549-568.

[18] Cuffel R F, Back L H, Massier PF. Transonic flow field in a supersonic nozzle with small throat radius of curvature. AIAA Journal, 1969, 7(7):1364−1366.

[19] 孙林. 考虑结构间隙的喷管一体化仿真优化设计及故障分析研究: [博士论文]. 西安：西北工业大学, 2018.
SUN Lin. Research on integrated simulation and optimal design and fault analysis based on gap design for nozzle: [Ph.D. Thesis]. Xi’an: Northwestern Polytechnical University, 2018.

[20] 吴天宇. 基于 MHT 软件框架的喷管内跨音速流动及传热仿真程序开发: [硕士学位论文].西安：西安交通大学，2023.
WU Tian-yu. Development of simulation program for transonic flow and heat transfer in nnozzle based on the framework of MHT: [Master Thesis]. Xi’an: Xi’an Jiaotong University, 2023.

中国工程热物理学会 学科类别：传热传质学
学术会议论文 编号：233051

考虑蒸发弯月面区域微观传热的热管径向传热系数研究

丁圣洁，马莎莎，赵长颖，龚帅*
（上海交通大学机械与动力工程学院，上海 200240）
(Tel：021-34206807， 通讯作者 Email：shuaigong@sjtu.edu.cn)

摘要：汽液界面温度、曲率及蒸发弯月面附近的微观传热机制对热管传热性能的准确预测存在重要影响。本文采用将蒸发弯月面区域的微观传热与宏观区域传热耦合的方法，对梯形沟槽式铜热管蒸发端的传热进行了模拟，研究了汽液界面温度、曲率以及蒸发弯月面区域的微观传热对热管蒸发端径向传热系数的影响。结果表明：蒸发弯月面附近微观区域的汽液界面的曲率和固液分子吸附力(分离压力效应)对界面温度的影响不可忽略；微观区域的传热传质对宏观区域的表观接触角以及热管壁面内的宏观温度分布存在显著影响；若假设汽液界面温度 T_{iv} 等于蒸汽的饱和温度 T_{sat}，会大幅高估径向传热系数。

关键词：热管，蒸发弯月面，接触线传热模型，微观区域，传热系数。

0 前言

热管结构简单，主要依靠内部工质的蒸发冷凝相变循环进行热量的传递，运行温度通常在 200 K 到 500 K 之间，工质主要为有机工质或水[1-4]，广泛应用于航空航天和军事技术等领域[5-8]。其中，沟槽式热管由于易于制造而具有很高的实用价值[9-12]。因此，如何准确预测径向传热系数十分关键[13-15]。径向传热系数取决于壁面和汽液界面的几何形状以及边界条件(见图 1(a))。通常假设热管内的蒸汽压 P_v 以及热管外部的温度 T_f 在横截面上是恒定的，将沟槽之间的对称面设置为绝热面，对于沟槽顶部没有发生蒸发的干燥区域，若忽略相比于相变传热影响较小的蒸汽对流传热，则可以假定该区域是绝热的。q''_{in} 为热管外表面的平均热流密度，径向换热系数定义为

$$h_{rad}=\frac{q''_{in}}{T_f-T_{sat}} \tag{1}$$

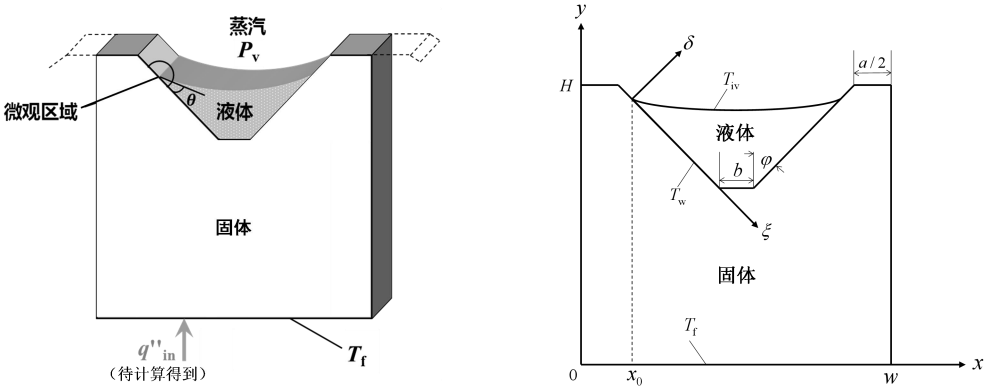
式中 T_{sat} 为对应于蒸汽压 P_v 的饱和温度。

基于二维热传导计算热管径向传热系数的难点在于汽液界面的温度 T_{iv} 和汽液界面的形状均不明确。为此，现有研究[16-20]常基于如下的简化假设：1，界面温度 $T_{iv}=T_{sat}$；2，汽液界面具有恒定的曲率 K，再用一维或二维热传导模型计算径向传热系数。在这些模型中，未知的接触角θ是可输入的自由参数。Schneider 等人[17]与 Shekriladze 和 Rusishvili[18]都推导了径向传热系数的关联式。然而，与实验结果相比，他们的关联式的预测结果显著偏高[17]。

Wayner 等人[16, 21]提出的三相接触线区域传热理论表明，在蒸发弯月面附近一个非常小(~ 1 μm)的“微观区域”(见图 1(a))内，$T_{iv}=T_{sat}$ 和界面曲率 K 为常数的假设是不成立的。这主要是由于将微观区域内的液体输送到蒸发表面所必需的横向压力梯度导致该区域的液面曲率变化非常剧烈，液面的大曲率导致液体的挥发性显著降低，使界面温度升高到 T_{sat} 以上。为了对微观区域进行进一步准确的模拟，必须考虑蒸发弯月面附近液体分子与固体壁面之间的吸引力(即分离压力效应)。当液体完全润湿固体壁面时，可将蒸发弯月面区域分为吸附液

基金项目：国家自然科学基金(52376067)；未来能源计划联合科研基金-先进固态热管堆关键分析软件研发及试验研究；上海交通大学深蓝计划(SL2022MS005)

层区、薄液膜区和本征弯月面区：吸附液层的厚度小于 10 nm，固体壁面对液体的强吸附力使得液体分子不能蒸发；薄液膜区的厚度为 nm - μm 量级，液膜厚度使得导热热阻和相变热阻均较小，局部热流密度很高，该区域的界面温度和曲率发生剧烈变化，毛细压力和分离压力的共同作用使得薄液膜区的液体压力下降，由此产生的横向压力梯度将液体从宏观区域输送到薄液膜区；本征弯月面区的厚度为μm - mm 量级，主要为宏观的导热或对流传热。Wang[22]等采用接触线模型对微通道中的蒸发弯月面进行研究，结果发现本征弯月面区域热传导量对于微通道尺寸依赖度很高，而薄膜区域则依赖度较低，且薄膜区域传热量占总传热量的 50%以上。基于接触线传热模型，可以准确地求解三相接触线附近的微观流动传热特性，如：薄液膜的厚度、接触角、压力、热流密度、汽液界面温度变化等[23-26] 。Kamotani[27]将 Wayner[21]的模型应用于铝/氨热管研究，并计算了微观区域的传热量和表观接触角θ。Holm 和 Goplen[28]则将 Wayner[21]的模型进行了简化，并对铝/氨梯形沟槽热管的径向传热进行了分析。



(a) 梯形沟槽式热管计算单元　　(b) 坐标、温度和沟槽尺寸

图 1　梯形沟槽示意图

本文将定量分析 $T_{iv} = T_{sat}$和 K 为常数的简化假设对沟槽式热管径向传热系数预测的影响。为此，我们通过结合接触线传热模型对微观区域液相的处理与图 1 所示横截面中二维热传导模型，实现微观区域与宏观区域传热的耦合，从而准确求解热管蒸发端的传热问题。最后，将该模型应用于铜热管径向传热系数的计算，并将本文的计算结果与简化模型的预测结果进行比较。

1 计算模型与方法

1.1 微观区域

接触线传热模型最早由 Wayner 等人[16]提出，假设液体的热传导是垂直于槽壁的一维问题，由于微观区域液膜厚度极小，因此还需要考虑界面蒸发热阻，q"可以写为

$$q'' = \left(T_w - T_{iv}\right) \Bigg/ \left(\frac{\delta}{\lambda_l} + \frac{2-f}{2f} \cdot \frac{T_{sat}\sqrt{2\pi R_g T_{sat}}}{h_{lv}^2 \rho_v} \right) \tag{2}$$

式中，δ为局部液膜厚度(见图 1(b))，由于槽壁温度 T_w 取决于通过槽壁的传热量，因此可以认为其是ξ坐标的函数(见图 1(b))。

液-汽界面蒸汽侧温度 T_{iv} 与饱和温度 T_{sat} 的关系由式给出

$$T_{iv} = T_{sat}\left(1 + \frac{P_c}{h_{lv}\rho_l}\right) \tag{3}$$

汽相与液相之间的总压差 P_c 可表示为

$$P_c = \sigma K + \frac{A}{\delta^3} - \frac{q^2}{h_{lv}^2}\left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l}\right) \tag{4}$$

第一项描述了汽液界面曲率 K 的影响，第二项为分离压力，该概念最早由 Deryaguin 等人[29]提出，第三项为蒸汽反冲压力，在低过热度区，蒸汽反冲压力的影响可忽略[30]。A 是色散常数，曲率 K 与液膜厚度δ的关系式为

$$K = \frac{\mathrm{d}^2\delta}{\mathrm{d}\xi^2} \Bigg/ \left[1 + \left(\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}\xi}\right)^2\right]^{3/2} \tag{5}$$

在微观区域采用一维层流边界层的假设近似模拟液体的横向流动。根据质量守恒和动量守恒方程，蒸发速率可以表示为

$$\dot{m} = \frac{q''}{h_{lv}} = -\frac{1}{3\nu_l} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\delta^3 \frac{\mathrm{d}P_c}{\mathrm{d}\xi}\right) \tag{6}$$

结合式(2)和式(6)可以得到膜厚$\delta(\xi)$的四阶微分方程为

$$\left(T_w - T_{iv}\right) \Bigg/ \left(\frac{\delta}{\lambda_l} + \frac{2-f}{2f} \cdot \frac{T_{sat}\sqrt{2\pi R_g T_{sat}}}{h_{lv}^2 \rho_v}\right) = -\frac{h_{lv}}{3\nu_l} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\delta^3 \frac{\mathrm{d}P_c}{\mathrm{d}\xi}\right) \tag{7}$$

T_{iv} 和 P_c 由式(3)-(5)表示为δ的函数，而 $T_w(\xi)$必须作为宏观区域热传导问题中的输入参数。

1.2 宏观区域

采用二维热传导方程描述热管壁与槽内液体之间的传热过程：

$$\nabla \cdot \left[\lambda \nabla (T)\right] = 0 \tag{8}$$

其中λ分别是液相和固相的导热系数，边界条件分别为(图 1(b)):

$$y = 0: \quad T = T_f$$

$$x = 0 \text{ 与 } x = w/2: \quad \partial T / \partial x = 0$$

$$x_0 \leqslant x \leqslant w/2: \quad T = T_{iv}$$

$$0 \leqslant x \leqslant x_0: \quad \partial T / \partial n = 0$$

1.3 数值处理

微观区域的汽液界面形状和传热的计算与宏观区域的热传导问题的求解需要的数值方法不同，由于两个区域的计算都需要另一个区域问题的解作为输入，因此需要将它们放在迭代过程中求解。

1.3.1 微观区域

对于微观区域来说，必须在薄液膜区与吸附液层连接的地方$\xi = 0$ 处指定δ及其对于ξ的一阶二阶及三阶导数的初始值。当温度 T_{sat} 和 T_w 给定时，$\xi = 0$ 处的 P_c 可由式(2)和(3) 中 $q'' = 0$ 的条件推导得出。在$\xi = 0$ 处，将斜率 $\mathrm{d}\delta/\mathrm{d}\xi$设为零，并设置 K 为一个非常小的值($\sigma K \approx 10^{-7} P_c$)，可通过式(4)计算得出$\delta$的初始值。由于 P_c 对界面温度 T_{iv} 的影响以及曲率 K 随ξ的变化在$\xi < 0$ 的区域可以忽略不计，我们只考虑$\xi > 0$ 的区域。数值模拟表明，对于给定的 T_{sat} 与 T_w，在不同固体物性参数及结构表面参数的情况下，微观区域的汽液界面形状几乎不变。因此，在一般情况下，我们并不需要对微观区域的气液界面形状进行精确的迭代，仅需要计算一个微观区域的汽液界面形状，然后用该汽液界面的斜率得到用于宏观区域计算的表观接

触角θ，这样会极大节省工作量。

1.3.2 宏观区域

求解数值求解式(8)中的热传导问题时，在期望的精度内生成合适的网格对于后续计算的速度与准确性至关重要。在网格生成中主要有两个问题需要考虑：1，微观区域中的网格尺寸极小；2，两个区域相邻网格的尺寸大小差异不能太大。为了避免发散必须解决这两个问题，否则会导致节点和网格的数量的增多。在微观区域附近，最小网格尺寸为 0.5 μm，而宏观区域最小网格尺寸则为 0.1 mm，总网格数目约两万。

宏观区域的汽液界面曲率由给定的毛细压力 P_{cap} 决定，汽液界面处的边界温度条件 T_{iv} 由微观区域计算得出。

1.3.3 微观区域与宏观区域的耦合

迭代过程如图 2 所示。在给定的边界条件下，假设微观区域壁面温度为恒定值 $T_{w,mic}$，从微观区域开始计算，得出宏观区域汽液界面形状、接触角θ以及汽液界面温度分布。可计算得出微观区域传热总量为：

$$Q_{mic} = \int_{mic} q''\,\mathrm{d}\,\xi \tag{9}$$

根据表观接触角θ和毛细压力 P_{cap} 得出沟槽中的汽液界面形状。将微观区域中计算得到的界面温度 T_{iv} 和液膜厚度δ代入宏观区域中计算，得到固液界面中固体侧和液体侧不同的热流密度和温度分布，在不同的恒定壁温 $T_{w,mic}$ 下重复微观区域和宏观区域的计算，当计算出的通过壁面传递到微观区域的热量等于 Q_{mic} 时，迭代结束。

将计算得到的微观区域壁面温度 $T_w(\xi)$代替常数值重新开始迭代过程，当微观区域与宏观区域的计算结果不再改变时迭代停止。

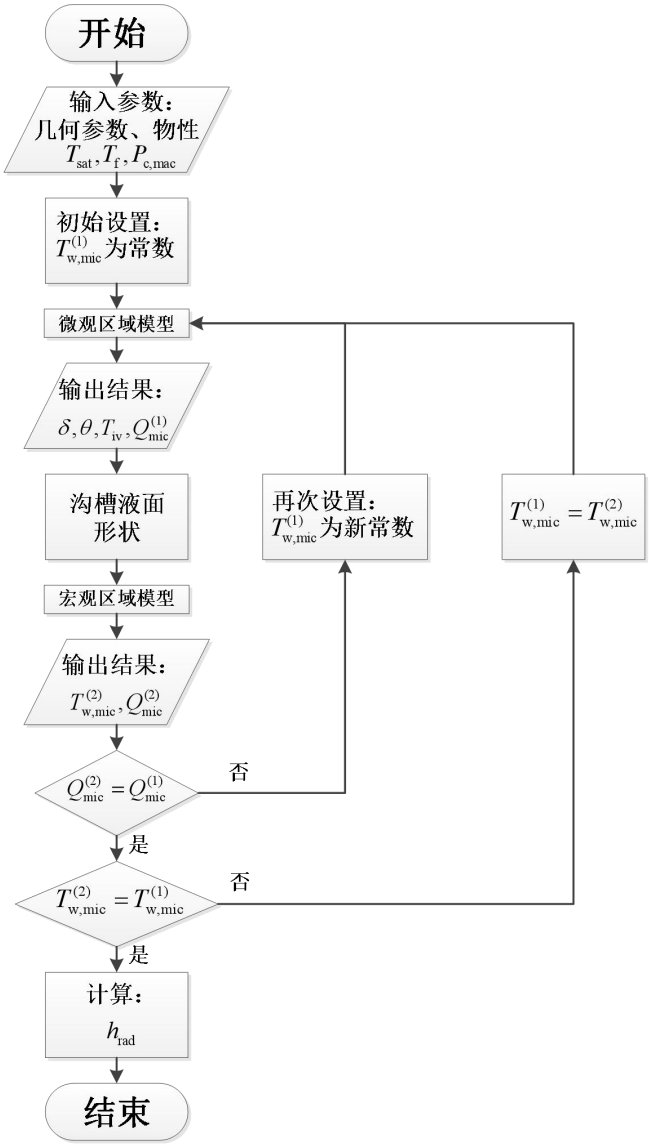


图 2　径向换热系数的迭代计算方法

2 模型验证

现采用 Schneider[17]提到的铝氨沟槽热管模型进行网格无关化验证，并与文中提到的实验数据进行参数对比。验证所使用的热管沟槽形状为三角形，沟槽宽度 w、沟槽高度 H、沟槽顶部宽度 a、沟槽底部宽度 b 分别为 1.0×10^{-3} m、1.5×10^{-3} m、0 m 和 0 m，沟槽斜坡角度φ = 45°，固体工质为铝，液体工质为氨。验证结果如表 1 所示。

表 1　网格无关性验证及实验参数对比

	h_{rad} [W·cm^{-2}·K^{-1}]
网格数 134970	2.36
网格数 534624	2.32
实验数据	2.54

由表 1 可知，在网格数相差 4 倍左右的条件下计算出的换热系数差距小于 2%，可认为模拟结果与网格大小无关。模拟数据与实验数据对比换热系数差距小于 10%，可认为模型在换热系数预测方面具有可信度。

3 结果与讨论

以 T_{sat} = 373.15 K，T_f = 374.98 K 的铜热管为例进行了研究。计算中采用的铜的密度、比热容和热导率分别为 8960 kg·m^{-3}、386 J·kg^{-1}·K^{-1} 和 401 W·m^{-1}·K^{-1}。本文模拟计算所使用的热管沟槽形状为三角形，沟槽宽度 w、沟槽高度 H、沟槽顶部宽度 a、沟槽底部宽度 b 分别为 1.0×10^{-3} m、1.5×10^{-3} m、0 m 和 0 m，沟槽斜坡角度φ = 45°。模拟中采用的工质的物性参数见表 2。模拟采用的边界条件为沟槽底部温度 T_f = 374.98 K，毛细压力 P_{cap} = 24.0 N·m^{-2}。

表 2　本文模拟计算所用参数

	数值
色散常数 A	1.0×10^{-21} J
蒸发系数 f	1.00
表面张力σ	0.05891 N·m^{-1}
蒸发潜热 h_{lv}	2251200.0 J·kg^{-1}
液体密度ρ_l	958.77 kg·m^{-3}
汽相密度ρ_v	0.5974 kg·m^{-3}
液体热导率λ_l	0.68 W·m^{-1}·K^{-1}
汽相热导率λ_v	0.0248 W·m^{-1}·K^{-1}
液体动力粘度η_l	2.79×10^{-4} N·s·m^{-2}
汽相动力粘度η_v	1.21×10^{-5} N·s·m^{-2}
液体比热容 cp_l	4216.0 J·kg^{-1}·K^{-1}
汽相比热容 cp_v	2034.0 J·kg^{-1}·K^{-1}

本文使用的色散常数 A 的值是根据参考资料估计的[31-32]，该值通常在 10^{-21} J 量级。然而，数值模拟表明，色散常数对汽液界面形状和热流密度的影响很小。在本文数值模拟中，采用色散常数 A = 2×10^{-21} J 代替 A = 1×10^{-21} J 后，径向换热系数的差别小于 4%。

图 3 给出了液膜厚度δ小于 10^{-6} m 的区域的数值结果。由图 3 可以看出，汽液界面以几乎恒定的斜率接近槽壁，该斜率决定了宏观区域的表观接触角θ。在这部分，汽液界面的曲率与宏观区域的曲率基本相同，热流密度 q"几乎不受液层厚度δ变化的影响，汽液界面温度 T_{iv} 接近 T_{sat}。当δ接近 10^{-8} m 时，T_{iv} 迅速上升到ξ = 0 时的温度 T_w，即 374.4 K，q"则从最大值 24.8×10^6 W·m^{-2} 迅速降为 0。

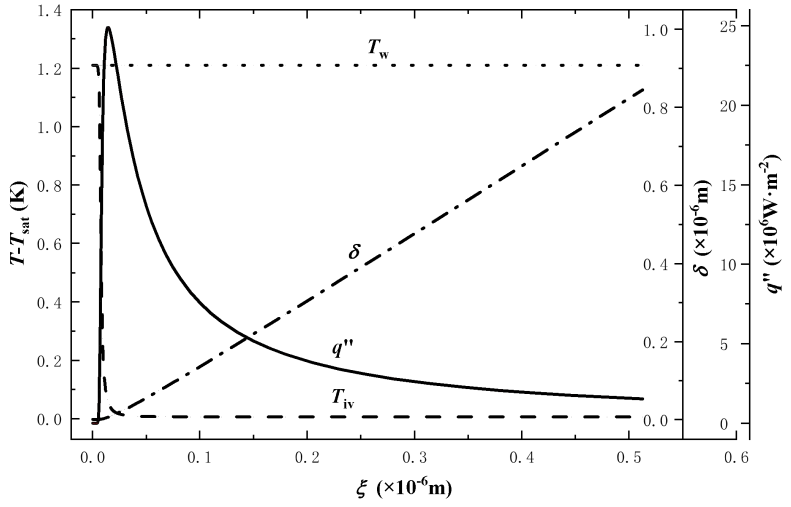


图 3　微观区域液膜厚度、热流密度和界面温度

驱动液体横向流动的汽相与液相之间的总压差 P_c (见式(3))的增加导致汽液界面温度 T_{iv}

的上升。在 T_{iv} 开始上升的位置，汽液界面离固体壁面较远，粘附力不足以使得 P_c 上升。当汽液界面曲率开始急剧增加($R_{min} = 1/K_{max} \approx 10^{-7}$ m)，导致 P_c 的上升与汽液界面的迅速弯曲并产生了$\theta = 59.86°$的表观接触角。在接近沟槽壁面的区域，T_{iv} 上升，分离压力项δ^{-3} 的增大产生了较高的压力差，此时曲率趋向于零，微观区域慢慢转变为吸附液层。计算表明，在$\xi = 0.5\times10^{-6}$ m 范围内平均热流密度 q''_{in} 为 3.3 W·cm^{-2}。

图 4 是 T_f、T_w 和 T_{iv} 的半对数图。结果表明，T_w 在微观区域几乎是恒定的，因此没有必要考虑 $T_w(\xi)$在微观区域的确切分布。计算表明，微观区域 $T_{w,mic}$ 的校正与否对结果几乎没有影响(见图 2 外环)。

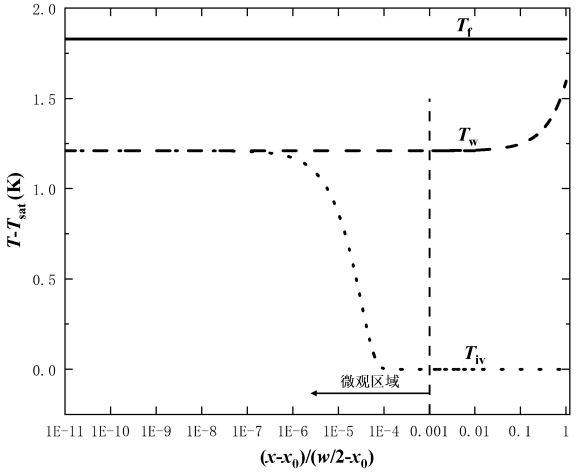
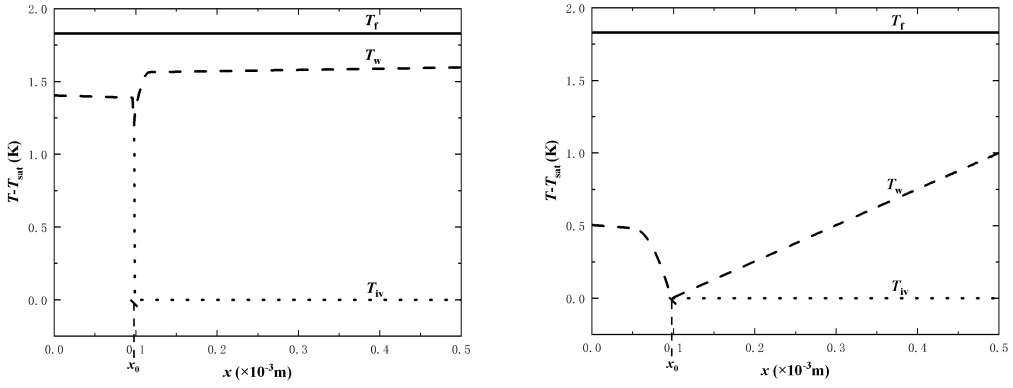


图 4　T_f、T_w 和 T_{iv} 在无量纲长度坐标下的的半对数图

图 5 显示了蒸发弯月面附近温度的变化。我们对比了 1)考虑接触线区域的微观传热机理和 2)假设 $T_{iv} = T_{sat}$，$K =$ 常数这两种情况下得到的数值模拟结果。如图 5 (a)所示，对于本文采用的方法(也即考虑接触线区域的微观传热机理)，通过式(1)计算得到的径向换热系数为 $h_{rad} = 4.2$ W·cm^{-2}·K^{-1}，此时通过微观区域的传热量约占总传热量的 52%。若将汽液界面温度 T_{iv} 设置为 T_{sat}，在相同的 T_f、T_{sat} 及汽液界面几何形状的条件下，模拟得到的 T_w 的分布明显不同，如图 5 (b) 所示。此时，热管壁热流密度较大，达到 $q''_{in} = 14.27$ W·cm^{-2}，径向传热系数较高，达到 $h_{rad} = 7.8$ W·cm^{-2}·K^{-1}，通过微观区域的热量占比为 94%。

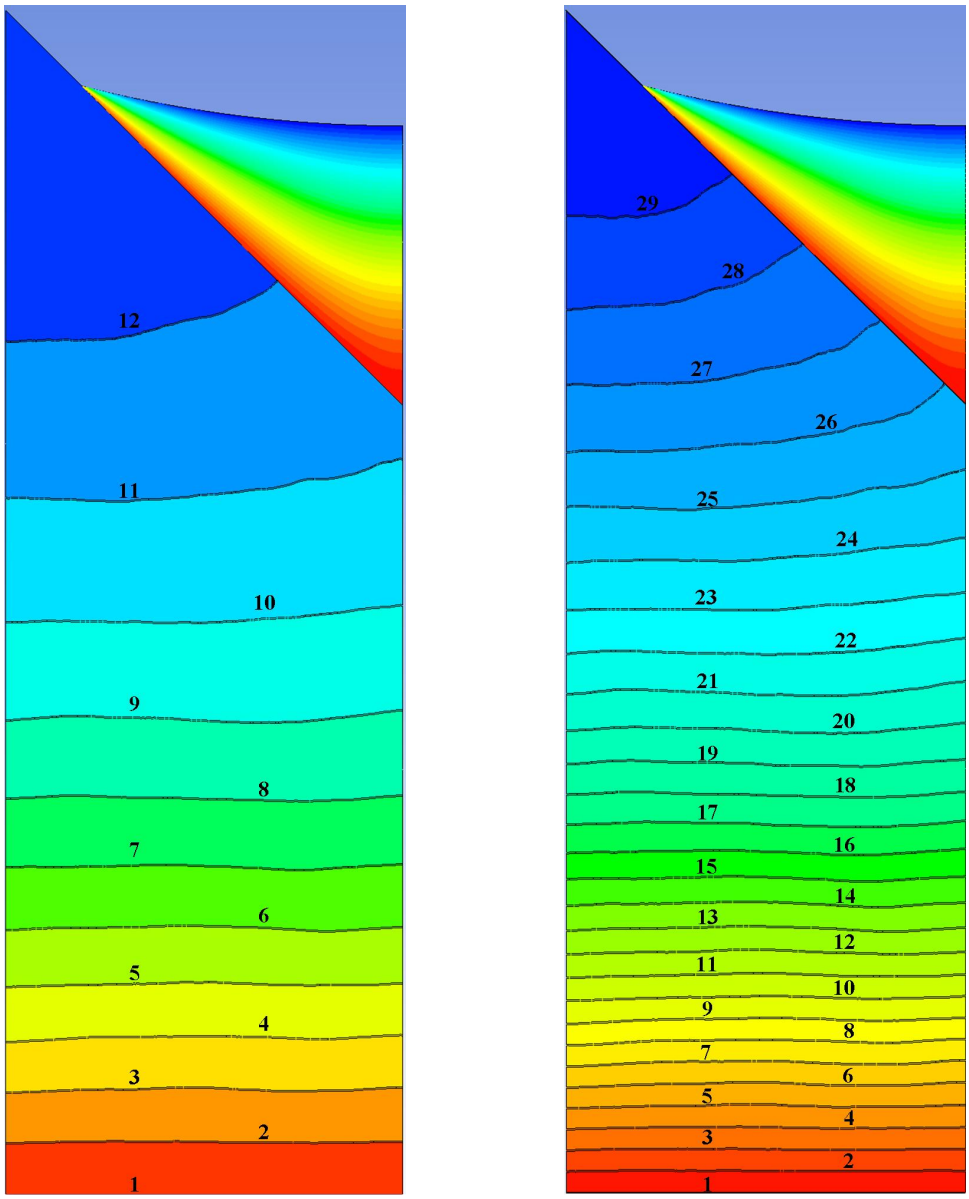


(a) 本文采用的方法　　(b) 假设 $T_{iv} = T_{sat}$，$K =$ 常数

图 5　给定 T_f 和 T_{sat} 时宏观区域的温度分布

图 6 显示了采用本文模型 (即修正界面温度和考虑接触线区域的微观传热，图 6(a))和假设界面曲率固定且界面温度为 T_{sat} (图 6(b))情况下模拟得到的宏观区域的等温线。从数值模拟结果可以看出，在相同的 T_f 下，图 6(a)和图 6(b)中得到的热管壁中的等温线分布有显著区别，壁面处的热流(可基于壁面底部的温度梯度得到)也有明显差别。因此，尽管 T_{iv} 与 T_{sat}

仅在微观区域不同，对整个热管温度分布及径向传热系数的影响是不可忽略的。



(a) 本文所采用的方法　　(b) 假设 $T_{iv} = T_{sat}$，$K =$ 常数

图 6 热管壁和液相的等温线(两条等温线的温差:△T = 0.02 K)

表 3 中总结了主要的数值结果。如表所示，简化模型(即不考虑蒸发弯月面附近的微观传热机理，假设 $T_{iv} = T_{sat}$，$K =$ 常数，对应图 5(b))得到的径向换热系数与 Schneider[17]关系式相比误差不超过 10%，吻合较好。然而，该简化模型会显著高估径向传热系数，其得到的径向换热系数(7.8 $W \cdot cm^{-2} \cdot K^{-1}$)是本文中考虑了蒸发弯月面区域微观传热机理后得到的径向换热系数(4.2 $W \cdot cm^{-2} \cdot K^{-1}$)的 1.86 倍。这解释了 Schneider[17]提到的径向换热系数模拟值(假设 $T_{iv} = T_{sat}$，$K =$ 常数时)与实验值的偏差。另外，用 Shekriladze 和 Rusishvili[18]的关联式计算得到的径向换热系数值是本文的 1.64 倍，也存在很大误差。这些对比表明，考虑蒸发弯月面附近的微观传热机理对于准确预测热管的径向换热系数是至关重要的。而现有文献中常采用的 $T_{iv} = T_{sat}$，$K =$ 常数的假设，可能会给蒸发端径向传热系数的预测带来很大误差。

表 3 主要计算结果与简化模型和经验关联式的比较

						Shekriladze and

	当前模型	简化模型	Schneider[17]	Rusishvili[18]
	$T_{iv}=T(\xi)$	$T_{iv}=T_{sat}$	$T_{iv}=T_{sat}$	$T_{iv}=T_{sat}$
T_f-T_{sat} [K]	1.83	1.83	—	—
q''_{in} [W·cm^{-2}]	7.69	14.27	—	—
Q_{mic}/Q_{in} [%]	52	94	—	—
h_{rad} [W·cm^{-2}·K^{-1}]	4.2	7.8	~7.1	~6.9

4 结论

本文采用将蒸发弯月面区域的微观传热与宏观区域传热耦合的方法，对沟槽式铜热管蒸发端的传热进行了模拟，得到以下结论：

（1）在蒸发弯月面附近的微观区域内，受汽液界面曲率和固液分子吸附力(分离压力效应)的影响，汽液界面温度会偏离 T_{sat}。

（2）蒸发弯月面附近微观区域的传热传质对宏观区域的表观接触角以及热管壁面内的宏观温度分布存在显著影响。

（3）若假设汽液界面温度 T_{iv} 等于蒸汽的饱和温度 T_{sat}，会大幅高估热管蒸发端的径向传热系数。考虑接触线区域的微观传热机理可以显著改善数值模拟结果的精度。

参考文献

[1] Srimuang W, Amatachaya P. A review of the applications of heat pipe heat exchangers for heat recovery[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2012, 16(6): 4303-4315.

[2] Faghri A. Heat pipes: review, opportunities and challenges[J]. Frontiers in Heat Pipes (FHP), 2014, 5(1).

[3] Han X, Wang X, Zheng H, et al. Review of the development of pulsating heat pipe for heat dissipation[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2016, 59: 692-709.

[4] Jouhara H, Chauhan A, Nannou T, et al. Heat pipe based systems-Advances and applications[J]. Energy, 2017, 128: 729-754.

[5] Rao Z, Wang S, Wu M, et al. Experimental investigation on thermal management of electric vehicle battery with heat pipe[J]. Energy Conversion and Management, 2013, 65: 92-97.

[6] Tran T H, Harmand S, Desmet B, et al. Experimental investigation on the feasibility of heat pipe cooling for HEV/EV lithium-ion battery[J]. Applied Thermal Engineering, 2014, 63(2): 551-558.

[7] 田中轩, 王长宏, 郑焕培, 等. LED 平板热管散热系统的性能分析[J]. 化工学报, 2017, 68(S1): 155-161.
Tian Z X, Wang C H, ZHENG H P, et al. Heat transfer characteristic of flat plate heat pipe cooling system for LED[J]. CIESC Journal, 2017, 68(S1): 155-161.

[8] 魏进家, 刘蕾, 杨小平. 面向高热流电子器件散热的环路热管研究进展[J]. 化工学报, 2023, 74(01): 60-73.
Wei J J, Liu L, Yang X P. Research progress of loop heat pipes for heat dissipation of high-heat-flux electronic devices [J]. CIESC Journal, 2023, 74(01): 60-73.

[9] Liu Z H, Li Y Y, Bao R. Thermal performance of inclined grooved heat pipes using nanofluids[J]. International journal of thermal sciences, 2010, 49(9): 1680-1687.

[10] Han W S, Rhi S H. Thermal characteristics of grooved heat pipe with hybrid nanofluids[J]. Thermal Science, 2011, 15(1): 195-206.

[11] Mehrali M, Sadeghinezhad E, Azizian R, et al. Effect of nitrogen-doped graphene nanofluid on the thermal performance of the grooved copper heat pipe[J]. Energy Conversion and Management, 2016, 118: 459-473.

[12] Aly W I A, Elbalshouny M A, Abd El-Hameed H M, et al. Thermal performance evaluation of a helically-micro-grooved heat pipe working with water and aqueous Al2O3 nanofluid at different inclination

angle and filling ratio[J]. Applied thermal engineering, 2017, 110: 1294-1304.

[13] Zhang Y, Faghri A. Heat transfer in a pulsating heat pipe with open end[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2002, 45(4): 755-764.

[14] Nemec P, Čaja A, Malcho M. Mathematical model for heat transfer limitations of heat pipe[J]. Mathematical and Computer Modelling, 2013, 57(1-2): 126-136.

[15] Mameli M, Marengo M, Khandekar S. Local heat transfer measurement and thermo-fluid characterization of a pulsating heat pipe[J]. International journal of thermal sciences, 2014, 75: 140-152.

[16] Wayner Jr P C, Kao Y K, LaCroix L V. The interline heat-transfer coefficient of an evaporating wetting film[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1976, 19(5): 487-492.

[17] Schneider G, Yovanovich M, Wehrle V. Thermal analysis of trapezoidal grooved heat pipe evaporator walls[C]//11th Thermophysics Conference. 1976: 481.

[18] Shekriladze I G, Rusishvili J G. Evaporation and condensation on grooved capillary surfaces[C]//Proc. 6th Int. Heat Pipe Conf. 1987: 234-239.

[19] 田东民，吴延鹏，陈凤君．基于纳米增强相变材料的铜-水热管传热性能分析[J]．化工学报，2020, 71(S1): 220-226.

Tian D M, Wu Y P, Chen F J. Analysis of heat transfer performance of copper-water heat pipes based on nano enhanced-PCM[J]. CIESC Journal, 2020, 71(S1): 220-226.

[20] 张磊，戴叶，陈兴伟等．折弯异型对铜-水热管传热性能影响的实验研究[J]．化工学报，2021, 72(10): 5132-5141.

Zhang L, Dai Y, Chen X W, et al. Experimental research on influence of abnormal shape on heat transfer performance of copper-water heat pipe[J]. CIESC Journal, 2021, 72(10): 5132-5141.

[21] Wayner Jr P C. Adsorption and capillary condensation at the contact line in change of phase heat transfer[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1982, 25(5): 707-713.

[22]Wang H, Garimella S V, Murthy J Y. Characteristics of an evaporating thin film in a microchannel[J]. international journal of heat and mass transfer, 2007, 50(19-20): 3933-3942.

[23] Stephan P C, Busse C A. Analysis of the heat transfer coefficient of grooved heat pipe evaporator walls[J]. International Journal of heat and mass transfer, 1992, 35(2): 383-391.

[24] Lay J H, Dhir V K. Shape of a vapor stem during nucleate boiling of saturated liquids[J]. 1995.

[25] Wang H, Garimella S V, Murthy J Y. Characteristics of an evaporating thin film in a microchannel[J]. international journal of heat and mass transfer, 2007, 50(19-20): 3933-3942.

[26] Raj R, Kunkelmann C, Stephan P, et al. Contact line behavior for a highly wetting fluid under superheated conditions[J]. International journal of heat and mass transfer, 2012, 55(9-10): 2664-2675.

[27] Kamotani Y. Evaporator film coefficients of grooved heat pipes[C]//3rd International Heat Pipe Conference. 1978: 404.

[28] Holm F W, Goplen S P. Heat transfer in the meniscus thin-film transition region[J]. 1979.

[29] Derjaguin B V, Nerpin S V, Churaev N V. Effect of film transfer upon evaporation of liquids from capillaries[J]. Bulletin Rilem, 1965, 29: 93-98.

[30]Raj R, Kunkelmann C, Stephan P, et al. Contact line behavior for a highly wetting fluid under superheated conditions[J]. International journal of heat and mass transfer, 2012, 55(9-10): 2664-2675.

[31] Gonella G, Backus E H G, Nagata Y, et al. Water at charged interfaces[J]. Nature Reviews Chemistry, 2021, 5(7): 466-485.

[32] Groß A, Sakong S. Ab initio simulations of water/metal interfaces[J]. Chemical Reviews, 2022, 122(12): 10746-10776.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233060

大气压低温氦气等离子体射流数值模拟

史经毓，孙贤聘，孙丽，郭碧莹，李增耀*
（*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）
(Tel：029-82665446，Email：lizengy@mail.xjtu.edu.cn)

摘要：大气压低温等离子体射流作为近年来逐渐兴起的低温等离子体发生技术，在许多领域具有重要应用价值。本文建立了二维轴对称大气压氦气等离子体流体模型，采用流体动力学漂移-扩散模型，研究了微尺度下等离子体射流的产生机理及动力学特性，探究了氦气射流核心与空气之间的扩散层、电子碰撞电离与潘宁电离对射流传播及推进结构的影响。研究发现：空气扩散层中电子碰撞电离和潘宁电离形成了射流推进的环状结构，电离速率达到 10^{27} 量级。

关键词：大气压；等离子体射流；动力学特性；数值模拟

0 前言

大气压低温等离子体射流(atmospheric pressure plasma jet, APPJ)是近年来一种新兴的低温等离子体发生技术，在纳米粒子生成、材料表面改性、等离子体医学等领域得到了广泛的应用[1-3]。等离子体射流是在气流和电场的作用下使放电产生的等离子体从管口中喷出，在外界气体环境中向被处理物推进，相比于传统电极板之间产生的等离子体，因其可以在开放空间产生稳定较长的等离子射流，对于被处理物的尺寸和形状方面具有突出的灵活性，而且不用限制在狭长的放电空间之中。同时，冷等离子体含有大量自由基、高能电子、亚稳态离子等基团，能够在室温下与被处理物发生强烈的相互作用，活性氮氧粒子(RONS)被认为是等离子体射流在这些应用中起作用的关键成分，所以在精细材料（例如人体皮肤）处理时具有明显的优势。

最近的实验研究加深了对放电中发生的物理过程的一般理解。现在已经确定，在惰性气体区域内由纳秒脉冲放电产生的冷等离子体射流实际上是一系列快速传播的流光放电，当氦射流扩散到环境空气中时，这些流光放电与氦射流的轴线平行。射流的短曝光成像显示，一个发光区域被限制在流光的头部，以非常高的速度(~ 100 km • s^{-1})移动，导致这些结构通常被描述为“等离子子弹”。Mericam 等人使用增强型电荷耦合器件(intensified charge coupled device ICCD)观察到的等离子体子弹径向截面呈中空环状结构[4]。此外，其他实验表明，根据输入功率的不同，存在三种不同的工作模式:“混沌模式”、“子弹模式”和“连续模式”。迄今为止，已经做了大量理论和数值模型来理解这些实验现象。Sakiyama 等[5]发现环形发光区与某些物质(氮离子和亚稳氦原子)的轮廓相似，从而得出 Penning 反应在这种发光区的形成中起着至关重要的作用。Karakas 等[6]采用 COMSOL 软件求解了层流流体方程与混合气体对流扩散方程，研究了 He 的摩尔分数与等离子体子弹的运动关系。Boeuf 和 Pitchford[7]以及 Naidis[8]建立的二维模型成功地模拟了环形发光区，表明子弹中间空心这一结构是由于等离子体射流周围的空气被卷吸到氦气射流中，电子与空气碰撞电离，辐射出光子，宏观上呈现出中空的发光结构。Breden 等[9]采用二维流体模型对大气压氦气等离子体射流进行了参数化研究，发现光致电离仅可以提高射流的传播速度，但其并不是维持射流传播所必须的条件，而驱动射流传播的关键则是氦原子以及中性分子的电子碰撞电离。由于大气压低温等离子体射流的传输及其与其他界面间的相互作用涉及多尺度（电子平均自由程-离子平均自由

基金项目：本研究得到国家自然科学基金（编号：52176087）资助。

程-中性气体平均自由程）、多物理场（流场、电场、化学反应场）、多碰撞（弹性碰撞、激发、电离、复合）相互耦合的传质过程，因此，建立自洽模型研究冷等离子体射流的传播机理是十分必要的。

本文建立了二维自洽的氦气等离子体射流流体模型，基于 COMSOL 软件对中性气体稳态层流中等离子体射流放电瞬态过程进行了数值模拟，探究了射流传播过程中氦气射流核心与周围空气之间的相互作用、电子碰撞电离、潘宁电离以及部分粒子和活性自由基的空间分布。

1 物理模型

如图 1 所示，氦气等离子体射流在相对介电常数为 5、内半径为 0.6mm 的介质管中产生，在管内传播。该过程可简化为二维轴对称问题，计算域为 20mm×8mm×单位弧度，针状电极半径为 0.25mm，氦气以 1.6slm 的流量通过介质管流出进入空气环境。

等离子体由脉宽为 200ns、电压幅值为 2000V 的脉冲正高压驱动，其上升沿和下降沿为 50ns，仅计算一个放电脉冲时间内的射流推进过程。计算模型由中性气体流动模块和等离子体模块组成，两个模块都是通过 COMSOL Multiphysics 进行求解。由于等离子体在纳秒时刻产生，相对于气体流动的时间尺度是非常小的，因此我们可以先求中性气体的速度和浓度分布，获得中性气体流场，将计算结果作为等离子体放电模块的输入参数进行等离子体流体模块求解。因此在模拟过程中，中性气体动力学模块和等离子体流体模块是独立求解的。

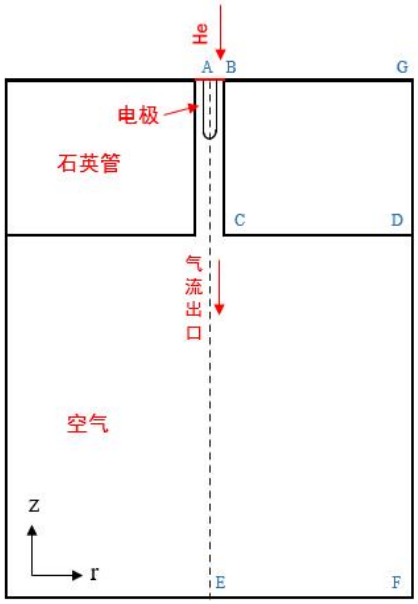


图 1 二维轴对称模型（在实际建模中只绘制一半，即 AEFG 区域）

1.1 中性气体流动模块

根据气体动力学理论，可将射流长度随流速变化分为 3 个模式，即层流、过渡态和湍流。层流与湍流的区分理论上用雷诺数来判断。雷诺数定义为：

$$Re = \rho u d / \mu$$

在本模型中，在管内的气体平均流速为 18m/s，相应的雷诺数 Re=176<2300，所以在离开介质管时流动是层流，湍流的开始将发生在距出口 $50r_0$，其中 r_0 为射流半径[10]。

在层流状态下，中性气体流动（He、O_2、N_2）由质量连续性方程、动量守恒方程和粒子连续性方程来描述。

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \tag{1}$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p - \nabla[\mu(\nabla \cdot \mathbf{u} + (\nabla \cdot \mathbf{u})^T) + F \tag{2}$$

$$D\nabla^2 c - \mathbf{u}\cdot\nabla c = 0 \tag{3}$$

上式中，$\mathbf{u}$ 是气流速度矢量，ρ 是气体密度，p 是气压，μ 是动态粘度，F 是体积力，D 是扩散系数，c 是气体的摩尔分数。中性气体控制方程计算出摩尔分数，作为等离子体初始粒子分数参数输入。在模拟中没有考虑等离子体对于中性气体流动的影响。表 1 列出了中性气体流动模型的边界条件。

表 1 中性气体模型的边界条件

边界	边界条件
AB	入口体积流量 0.75slm；氦气摩尔分数 c_{He}=1
AE	对称轴 u_r=0；$\partial c/\partial r = 0$
EF、FD	压力出口 p=1atm；开放边界 $\mathbf{n}\bullet D\nabla c = 0$
BC、CD	无滑移边界 $\mathbf{u} = 0$

1.2 等离子体动力学模块

等离子体动力学用漂移-扩散近似下的经典流体模型描述，由于本文所涉及的大气压低温等离子体射流的气体温度基本接近室温，因而能量方程在这里不予考虑。

等离子体控制方程如下：

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{\Gamma}_i = R_i \tag{4}$$

$$\mathbf{\Gamma}_i = \mathrm{sgn}(q_i) n_i \mu_i E - D_i \nabla n_i \tag{5}$$

$$\frac{\partial(n_\varepsilon)}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\frac{5}{3}\mu_e \mathbf{E} n_\varepsilon - \frac{5}{3} D_e \nabla n_\varepsilon\right) = -e\mathbf{\Gamma}_e\cdot\mathbf{E} - \sum_j \Delta E_j R_{inel,j} - 3\frac{m_e}{M} k_b n_e \nu_{en}(T_e - T_g) \tag{6}$$

$$\varepsilon_0 \nabla\cdot(\varepsilon_r \nabla\mathbf{\Phi}) = -\sum_j q_i n_i \tag{7}$$

上式中，n_i，$\mathbf{\Gamma}_i$，R_i 分别为粒子数密度、粒子数通量和粒子源项；q 是电荷；μ 和 D 分别为迁移率系数和扩散系数；$\mathbf{E}$ 是电场；$\mathbf{\Phi}$ 为电势；n_ε 是电子能量密度；T_e 为电子温度；T_g 为气体温度；ΔE 和 $R_{inel,j}$ 分别为非弹性碰撞时的能量损失和相应的反应速率；m_e，M，ν_{en} 分别为电子质量、离子质量和弹性碰撞频率；ε_r 为介质的相对介电常数；ε_0 是真空介电常数。

该模块一共考虑了 24 种粒子：e，He，He^+，He_2^+，He^*，N_2，N_2^+，N_2(VIBv1)，N_2(VIB3v1)，N_2(VIB4v1)，N_2(VIB5v1)，N_2(A)，O_2，O_2(VIBv1)，O_2(VIB3v1)，O_2(VIB4v1)，O_2(A1)，O_2(B1)，O_2(EXC)，O，O^-，O_2^+，O_2^-，O(1D)。表 2 种列出了模型中包含的所有反应。电子的输运系数和电子碰撞反应的速率系数通过 BOLSIG+求解得出。实际上，APPJ 是由多个放电脉冲累积形成的稳定放电形式，但是 APPJ 仿真是个非线性计算过程，重复脉冲作用下的放电计算比较困难，因此在模拟中只计算一个放电脉冲。为了减少计算时间，且光电离不是流注传播的必要条件，所以在模型中没有考虑光电离，而是采用均匀的背景预电离代替光电离，且初始电子数密度设置为 $10^{13}m^{-3}$，表示前一次放电脉冲后的剩余电子。初始电势设置为 0。空气环境边界 EF、FG 设置为接地。将介质表面 BC、CD 设置为固体表面通量边界，固体壁上电子、离子和亚稳态粒子流密度及电子能量密度的边界条件如下:

$$\mathbf{\Gamma}_e\cdot\mathbf{n} = \frac{1}{2} n_e \sqrt{\frac{8k_b T_e}{\pi m_e}} - \alpha_s \sum_i \gamma_i(\mathbf{\Gamma}_i\cdot\mathbf{n}) + \alpha_s' \mu_e n_e \mathbf{E} \tag{8}$$

$$\mathbf{\Gamma}_i\cdot\mathbf{n} = \frac{1}{2} n_i \sqrt{\frac{8k_b T_i}{\pi m_i}} + \alpha_s \mu_i n_i \mathbf{E} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_m \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} n_m \sqrt{\frac{8k_b T_g}{\pi m_m}} \tag{10}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_\varepsilon \cdot \mathbf{n} = \frac{5}{6} n_\varepsilon \sqrt{\frac{8k_b T_e}{\pi m_e}} - \alpha_s k_b T_e \sum_i \gamma_i (\boldsymbol{\Gamma}_i \cdot \mathbf{n}) \tag{11}$$

上式中，下标 e， i， m， ε 分别表示电子、离子、亚稳态粒子和电子能量。$\mathbf{n}$ 为指向表面的单位法向量，γ_i 为离子撞击到电介质上的二次电子发射系数。由于处于非平衡放电，所以我们假定离子温度等于气体温度 $T_i = T_g$ =300K， k_b 是玻尔兹曼常数， α_s 和 α_s' 是 E 和 n 的点积变换函数。

$$\alpha_s = \begin{cases} 1(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n} \geq 0) \\ 0(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n} \leq 0) \end{cases}, \quad \alpha_{s'} = \begin{cases} 0(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n} \geq 0) \\ 1(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n} \leq 0) \end{cases}. \tag{12}$$

由介电表面积聚的电荷所产生的场由高斯定律计算:

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1)\cdot\mathbf{n} = \sigma_s \tag{13}$$

式中， $\mathbf{D}_1$ 和 $\mathbf{D}_2$ 分别为边界上下的电位移场， σ_s 为介电表面上的累积电荷密度，由边界上的微分方程可得:

$$\frac{d\sigma_s}{dt} = \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{n} + \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{n} \tag{14}$$

其中 $\mathbf{J}_i$ 和 $\mathbf{J}_e$ 分别是壁上的离子流和电子流密度。(1)-(11)式由 COMSOL Multiphysics 求解。

表 2 模型中相关反应

反应表达式	反应系数	能量损失(eV)	参考文献
$e+He \rightarrow e+He$ (R1)	$Bolsig^+$	0	
$e+He \rightarrow e+He^*$ (R2)	$Bolsig^+$	19.8	
$e+He \rightarrow 2e+He^+$ (R3)	$Bolsig^+$	24.6	
$e+He^* \rightarrow 2e+He^+$ (R4)	$4.661\times10^{-16} Te^{0.6} \exp(-55460/Te)$	4.78	[9]
$e+He_2^* \rightarrow 2e+He_2^+$ (R5)	$1.268\times10^{-18} Te^{0.71} \exp(-3945/Te)$	3.4	[9]
$2He^* \rightarrow e+He+He^+$ (R6)	$8.7\times10^{-16}(T_g/300)^{0.5}$	-15.0	[9]
$e+He_2^+ \rightarrow He^*+He$ (R7)	$5.386\times10^{-13} Te^{-0.5}$	0	[9]
$He^* + 2He \rightarrow He+He_2^*$ (R8)	2.0×10^{-46}	0	[9]
$He^+ + 2He \rightarrow He+He_2^+$ (R9)	$1.4\times10^{-43}(T_g/300)^{-0.6}$	0	[9]
$e+He^+ \rightarrow He^*$ (R10)	$6.76\times10^{-19} Te^{-0.5}$	0	[9]
$2e+He^+ \rightarrow e+He^*$ (R11)	$7.8\times10^{-50}(T_e/T_g)^{-4.4}$	0	[11]
$e+He^+ + He \rightarrow He^*+He$ (R12)	$7.4\times10^{-47}(T_e/T_g)^{-2}$	0	[11]
$2e+He_2^+ \rightarrow e+He_2^*$ (R13)	1.2×10^{-33}	0	[11]
$e+He_2^+ + He \rightarrow 2He + He^*$ (R14)	3.5×10^{-39}	0	[11]
$e+He_2^+ + He \rightarrow He + He_2^*$ (R15)	1.5×10^{-39}	0	[11]
$2e+He_2^+ \rightarrow He + He^*+e$ (R16)	2.8×10^{-32}	0	[11]
$e+N_2 \rightarrow e + N_2$ (R17)	$Bolsig^+$	0	
$e+N_2 \rightarrow e + N_2(VIBv1)$ (R18)	$Bolsig^+$	0.2889	
$e+N_2 \rightarrow e + N_2(VIB3v1)$ (R19)	$Bolsig^+$	0.8559	

$e+N_2 \rightarrow e+N_2(VIB4v1)$ (R20)	$Bolsig^+$	1.134	
$e+N_2 \rightarrow e+N_2(VIB5v1)$ (R21)	$Bolsig^+$	1.409	
$e+N_2 \rightarrow e+N_2(A)$ (R22)	$Bolsig^+$	6.17	
$e+N_2 \rightarrow 2e+N_2^+$ (R23)	$Bolsig^+$	15.6	
$e+O_2 \rightarrow e+O_2(VIB3v1)$ (R24)	$Bolsig^+$	0.57	
$e+O_2 \rightarrow e+O_2(VIB4v1)$ (R25)	$Bolsig^+$	0.772	
$e+O_2 \rightarrow e+O_2(A1)$ (R26)	$Bolsig^+$	0.997	
$e+O_2(A1) \rightarrow e+O_2$ (R27)	$Bolsig^+$	-0.997	
$e+O_2 \rightarrow e+O_2(B1)$ (R28)	$Bolsig^+$	1.627	
$e+O_2(B1) \rightarrow e+O_2$ (R29)	$Bolsig^+$	-1.627	
$e+O_2 \rightarrow e+O_2(EXC)$ (R30)	$Bolsig^+$	4.5	
$e+O_2(EXC) \rightarrow e+O_2$ (R31)	$Bolsig^+$	-4.5	
$e+O_2 \rightarrow O+O^-$ (R32)	$Bolsig^+$	3.6	
$e+O_2 \rightarrow e+2O$ (R33)	$Bolsig^+$	5.58	
$e+O_2 \rightarrow e+O+O(1D)$ (R34)	$Bolsig^+$	8.4	
$e+O_2 \rightarrow 2e+O_2^+$ (R35)	$Bolsig^+$	12.06	
$2e+N_2^+ \rightarrow e+N_2$ (R36)	$7.0\times10^{-32}(T_e/T_g)^{-4.5}$	0	[11]
$e+N_2^+ + N_2 \rightarrow 2N_2$ (R37)	$6.0\times10^{-39}(T_e/T_g)^{-4.5}$	0	[11]
$O^- + O_2^+ \rightarrow O+O_2$ (R38)	$2.0\times10^{-13}(T_g/300)^{-0.5}$	0	[11]
$e+2O_2 \rightarrow O_2+O_2^-$ (R39)	$2.26\times10^{-42}(T_g/300)^{-0.5}$	0	[11]
$O_2^- + O_2^+ \rightarrow 2O_2$ (R40)	$2.0\times10^{-13}(T_g/300)^{-0.5}$	0	[11]
$O_2^- + O_2^+ + M \rightarrow 2O_2 + M$ (R41)	2.0×10^{-37}	0	[11]
$He^* + N_2 \rightarrow e+N_2^+ + He$ (R42)	7.0×10^{-17}	0	[11]
$He_2^* + N_2 \rightarrow e+N_2^+ + 2He$ (R43)	7.0×10^{-17}	0	[11]
$He_2^+ + N_2 \rightarrow N_2^+ + 2He$ (R44)	5.0×10^{-16}	0	[11]
$He_2^+ + O_2^- \rightarrow 2He+O_2$ (R45)	1.0×10^{-13}	0	[11]
$He^* + O2 \rightarrow e+O_2^+ + He$ (R46)	2.6×10^{-16}	0	[12]
$He_2^* + O2 \rightarrow e+O_2^+ + 2He$ (R47)	3.6×10^{-16}	3.6×10^{-16}	[12]

a. $N_2(VIBv1)$，$N_2(VIB3v1)$，$N_2(VIB4v1)$，$N_2(VIB5v1)$，$O_2(VIBv1)$，$O_2(VIB3v1)$， $O_2(VIB4v1)$分别处理为它们对应的基态粒子 N_2、O_2。

b.反应速率单位。两体：m^3/s。三体：m^6/s。

c.有粒子 M 参与的反应表示该反应为三体碰撞反应。

整个模拟区域的大小为 20×8 mm^2，全部采用三角形网格，靠近针尖与管内以及管嘴下游处的网格进行加密处理。为保证网格合理分布，开展网格无关性验证，共构建三种尺寸的网格，网格尺寸见表 3。

表 3 网格尺寸对比

	针尖区域	管内区域	管嘴下游区	未加密区域	网格数量
网格 1	0.012mm	0.028mm	0.03mm	0.2mm	85840
网格 2	0.010mm	0.023mm	0.026mm	0.2mm	117433
网格 3	0.008mm	0.019mm	0.022mm	0.2mm	151219

三种尺寸的网格计算结果见图 2。

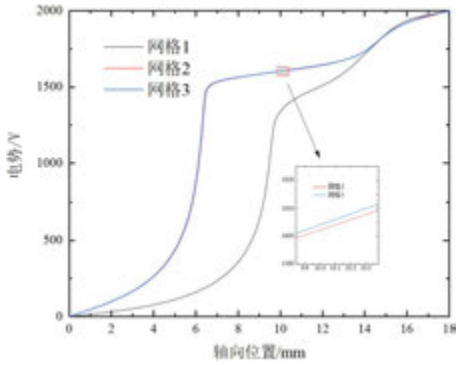
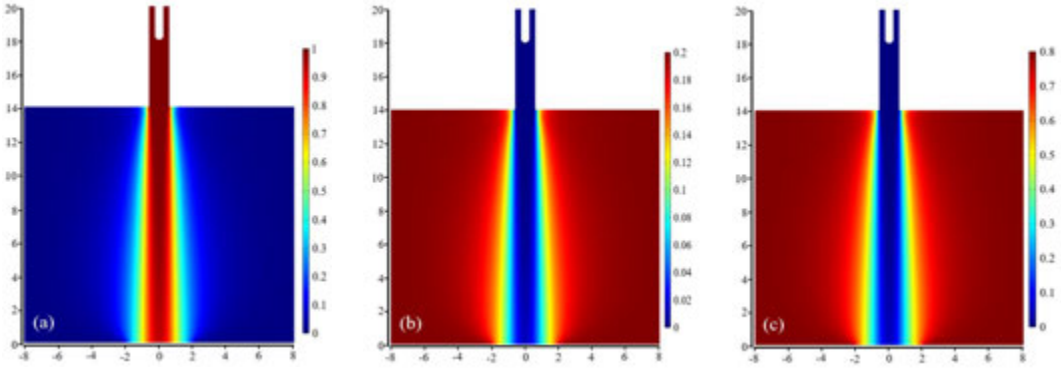


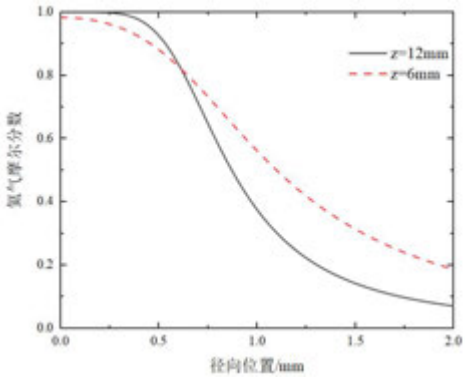
图 2 不同尺寸网格的中心轴电势计算结果对比

2 结果与讨论

图 3(a)(b)(c)为中性气体(He、N_2、O_2)的摩尔分数分布。图 3(d)所示为介质管外氦气等离子体通道内空气含量的径向空间分布。从图中可以看出，对于等离子体射流，在轴向和径向上空气的扩散效应都是比较显著的。



(a)氦气摩尔分数　(b)氧气摩尔分数　(c)氮气摩尔分数

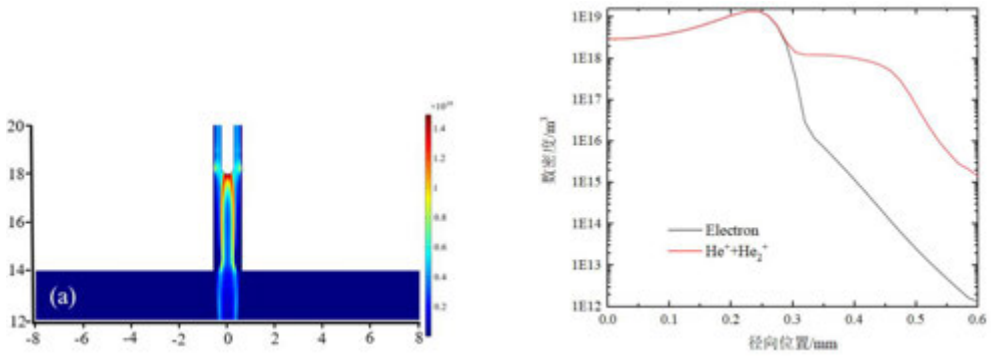


(d) z=6mm 和 z=12mm 处的氦气含量的径向分布

图 3 中性气体摩尔分数分布

当高压针状电极施加 2kV 高压脉冲，He 首先在针尖位置发生放电击穿产生等离子体，并以流注的形式向前传播到环境空气中。如图 4(a)所示的是 90ns 时刻氦气等离子体射流的电子密度分布，由于介质管的影响，呈现出向介质管中间压缩的径向分布。图 4(b)可以看出等离子体导电通道与介质管壁表面之间存在较大的粒子密度差，而且在近壁面正离子的数密度大于电子的数密度，说明在介质管壁表面产生了鞘层。由于电子的迁移率远远大于的离子

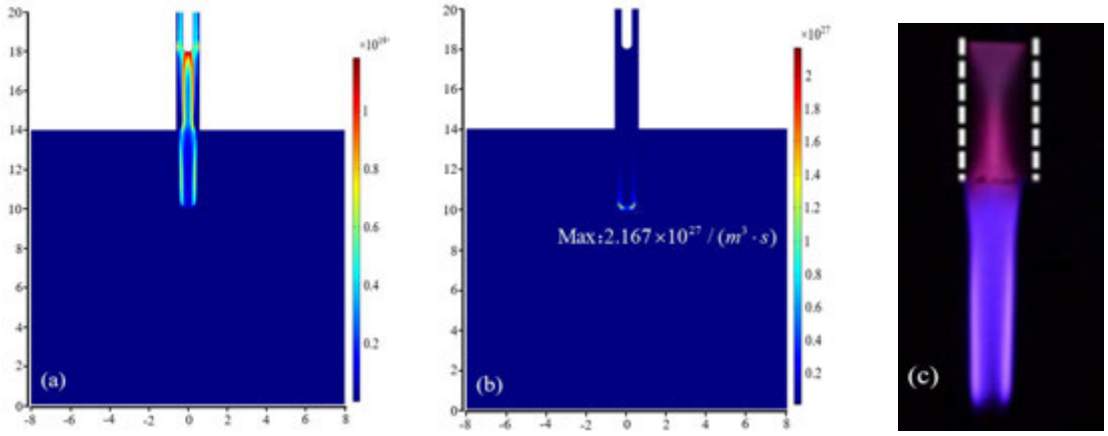
迁移率，电子雪崩产生的电子优先到达管壁，靠近管内壁的电子迅速被吸附，内壁上大量沉积的电子对管内电子产生排斥，阻止它们迁移到管壁附近，因此在管壁和电中性等离子体之间形成一个带正电的区域。



(a)90ns 等离子体射流的电子密度　　(b)z=15mm 电子密度和正离子密度在径向上的分布

图 4 等离子体射流电子和离子密度分布

等离子体射流传播到介质管外继续沿着轴向向前推进，由图 5(a)看出在 120ns 时刻推进到 z=10mm 的位置，并且电子密度的最大值出现在等离子体导电通道的外层，呈现环状分布，根据流注理论，外层粒子碰撞电离更加剧烈，电子雪崩的程度比较大。(b)展示了总电离率在 120ns 时刻的空间分布，总电离率的最大值分布在射流头部，且不在对称轴上，呈现出等离子体子弹的环状结构，这与实验观察到的现象一致，如图 5(c)所示[13]。图 6 揭示了峰值电离率（高能电子电离 He、N_2、O_2 之和）出现在以对称轴为基线的径向 0.38mm 左右的位置，此处的氦气摩尔分数为 0.97，因此混合层中 He、N_2、O_2 的电离主导流注的发展。



(a)电子密度的空间分布　　(b)总电离率的空间分布

图 5 120ns 时刻射流参数的空间分布(a)(b)及实验图像(c)

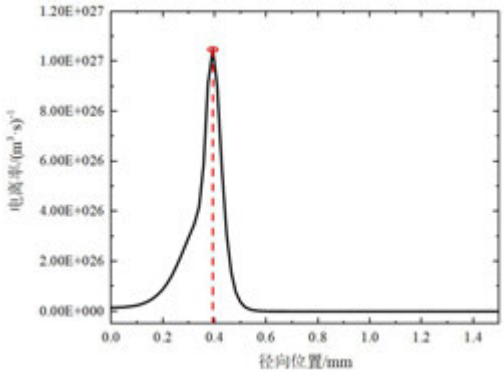
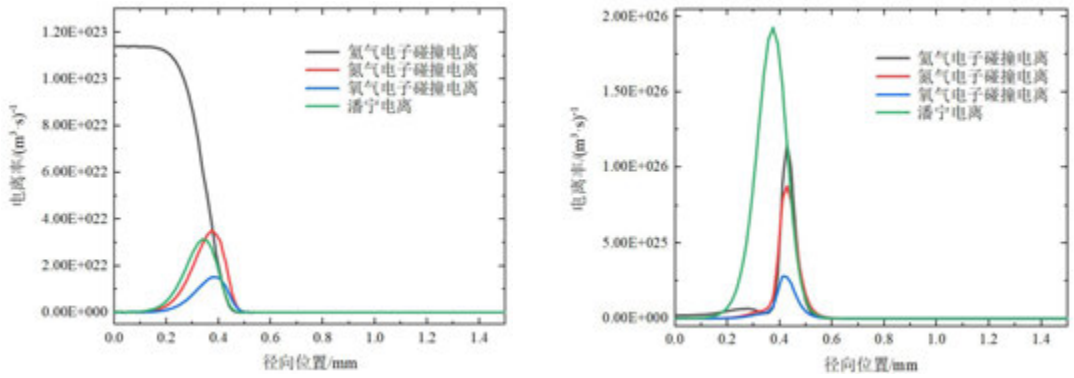


图 6 120ns 时刻总电离率的径向分布

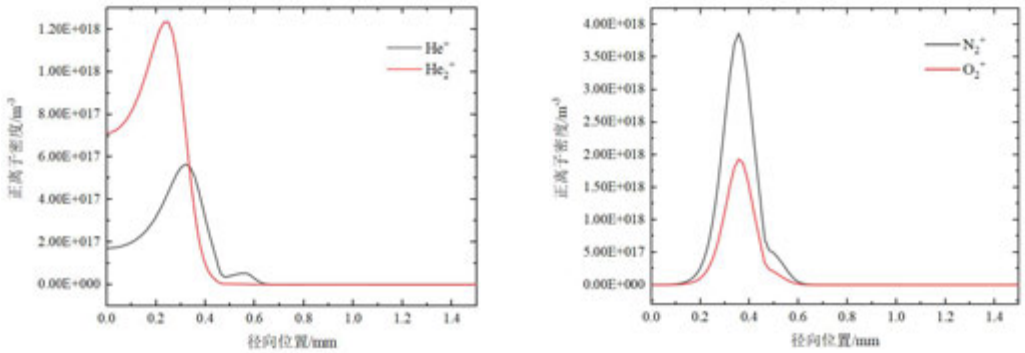
为了进一步明确等离子体子弹径向环状结构的形成机理，图 7(a)和(b)给出了不同时刻各种电离反应的电离速率分布图。77ns 时中心轴位置处的电子产生几乎全部来自于电子与氦气的直接碰撞电离，其他电离几乎为 0。在 r=0.4mm 处，由于空气的扩散作用，此处空气的含量达到了 3%左右，电子与空气的直接碰撞电离率在此位置最大，超过了电子与氦气的直接电离。随着放电的不断发展，在 97ns 时刻 r=0.4mm 处电子直接碰撞电离速率以及潘宁电离速率都增大了几个数量级，此时潘宁电离的速率最大，达到 $1.8\times10^{26}\,m^{-3}\cdot s^{-1}$。但其电离速率小于所有粒子的电子碰撞电离速率之和 $2.2\times10^{26}\,m^{-3}\cdot s^{-1}$。所以，电子密度在径向上出现环形结构是电子和空气分子的碰撞电离与氦激发态原子和空气之间的潘宁电离共同作用的结果。



(a) 77ns 电离率的径向分布　　(b) 97ns 电离率的径向分布

图 7 几种电离率的径向分布

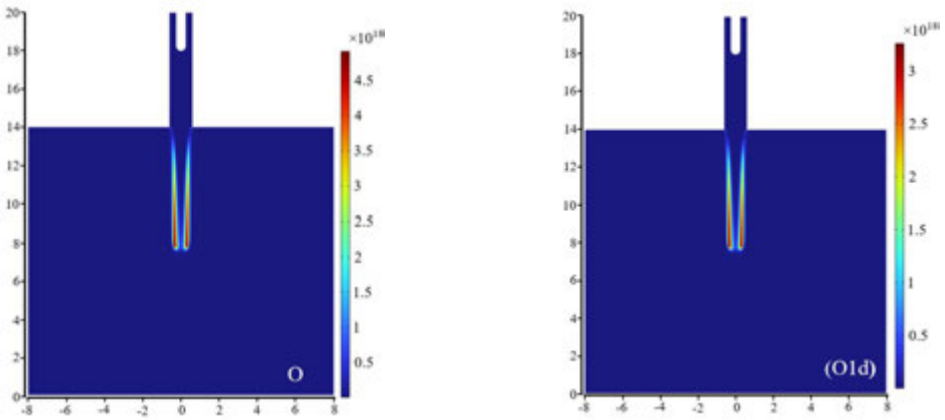
氦气空气混合区域内会发生很多复杂的化学反应，为了揭示射流推进的物理过程，研究不同正离子的空间密度分布就十分有必要。图 8 中给出了 120ns 时刻各种正离子的空间分布情况，图中发现不同的正离子径向分布是不同的，中心轴处的 He^+通过电荷转移反应迅速转化为 He_2^+，所以在中心轴处的氦原子离子密度比较低，而氦分子离子的密度比较高。对于空气分子离子，N_2^+和 O_2^+的径向空间分布相似，而且峰值是比氦离子更高的，峰值达到 10^{18} 量级，是等离子体射流放电中主要的正离子，这与实验光谱测量的结果是一致的。



(a)He^+和 He_2^+的径向分布　　(b)N_2^+和 O_2^+的径向分布

图 8 120ns 时正离子的径向分布

O 和 O(1D)有较高的化学活性，因此分析了这两种粒子的密度分布，O 和 O(1D)的分布基本一致，且密度峰值之和达到 8×10^{18} 比 N_2^+的密度峰值更大，这是等离子体射流拥有高化学活性的主要原因。因此根据 O 和 O(1D)的高密度分布区域可以确定射流处理的最佳区域。



(a)O 密度的空间分布　　(b)O(1D)密度的空间分布

图 9 150ns 自由基密度的空间分布

3 结论

本文对大气压氦气等离子体射流进行了数值模拟，研究表明：

（1）在管内由于鞘层的原因导致射流向中心轴压缩，在管外氦射流核心与周围空气之间的空气扩散层引导流注的传播方向，氦气和空气分子的电子碰撞电离是驱动流注推进的关键。

（2）空气扩散层中的电子碰撞电离和潘宁电离形成了射流推进的环状结构。潘宁电离的速率最大，达到 $1.8\times10^{26}\,m^{-3}\cdot s^{-1}$。但其电离速率小于所有粒子的电子碰撞电离速率之和 $2.2\times10^{26}\,m^{-3}\cdot s^{-1}$。

（3）电化学反应产生高浓度的活性自由基是等离子体射流拥有高化学活性的主要原因。O 和 O(1D)的分布基本一致，且密度峰值之和达到 8×10^{18} 比 N_2^+的密度峰值更大。

参考文献

[1] Koinuma H, Ohkubo H, Hashimoto T, et al. Development and application of a microbeam plasma generator[J]. Applied Physics Letters1992, 60(7):816-817.

[2] Ye R, Zheng W. Temporal-spatial-resolved spectroscopic study on the formation of an atmospheric pressure microplasma jet[J]. Applied Physics Letters, 2008, 93(7)71502.

[3] Cao Z, Walsh JL, Kong M G. Atmospheric plasma jet array in parallel electric and gas flow fields for three-dimensional surface treatment[J]. Applied Physics Letters, 2009, 94(2): 21501.

[4] Mericam-Bourdet N., Laroussi M., Begum A., et al. Experimental investigations of plasma bullets[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2009, 42(5):055207.

[5] Yukinori Sakiyama, David B. Graves, et al. Finite element analysis of ring-shaped emission profile in plasma bullet[J]. Appl. Phys. Lett. 25 January 2010, 96 (4): 041501.

[6] Karakas E, Koklu M, Laroussi M. Correlation between helium mole fraction and plasma bullet propagation in low temperature plasma jets[J]. J.phys.d Appl.phys, 2010, 43(15):155202.

[7] Boeuf J P,Pitchford L C,Two-Dimensional Model of a Capacitive Coupled rf Discharge and Comparisons with Experiments in the Gaseous Electronics Reference Resctor[J].Phy Rev,1995,E51(2):1376-1390.

[8] Naidis G V. FAST TRACK COMMUNICATION: Modelling of streamer propagation in atmospheric-pressure helium plasma jets[J]. J. Phys. D: Appl. Phys, 2010, 43 402001.

[9] Breden D, Miki K, Raja L L. Self-consistent two-dimensional modeling of cold atmospheric-pressure plasma jets/bullets[J]. Plasma Sources Science & Technology, 2012, 21(3).

[10] Bogey C and Bailly C 2010 Direct and large-eddy simulation VII Proceedings of the Seventh International ERCOFTAC Workshop on Direct and Large Scale Eddy Simulation VII (Trieste, Italy) ed V Armenio et al (Berlin: Springer).

[11] Liu D. X, Bruggeman P., Iza F， et al. Global model of low-temperature atmospheric-pressure He + H_2O plasmas. Plasma Sources Science and Technology, 2010,19(2):025018.

[12] Murakami T., Niemi K., Gans T., et al. Chemical kinetics and reactive species in atmospheric pressure helium-oxygen plasmas with humid-air impurities. Plasma Sources Science and Technology, 2013,22(1):015003.

[13] Liu X Y, Pei X K, Lu X P, et al. Numerical and experimental study on a pulsed-dc plasma jet[J]. Plasma Sources Science and Technology, 2014, 23(3): 035007.

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：23xxxx

强热扰动下跨临界热声波动特性探究

王高远，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： 跨临界热声波指超临界压力流体在强热扰动作用下，跨越拟临界温度发生的压力波动过程。本文通过数值计算和分析，对一维跨临界热声波进行了研究。讨论了波动过程中速度场、压力场、温度场、热流密度、内能和熵等各物理场，对物理规律进行了总结和解释。同时，发展了局部能量效率理论，实现了跨临界热声波的理论建模，结果表明与数值计算结果符合的很好。

关键词： 热声波、跨临界、超临界流体、局部能量效率理论

0 前言

流体在温度或压力变化时会发生膨胀或收缩，称为流体的可压缩性。在流动和传热问题中可压缩性在某些情况下会产生重要的影响。例如，当封闭空间内的可压缩流体突然通过容器的刚性壁面加热时，加热壁面附近的流体会具有一个较高的温度和压力，从而膨胀以降低其压力并激发声波场[1]。由于声波是由热诱导引发的，因此将其称为热声波。此前的大量研究表明，热声波的传播和反射可以促进传热过程。这种现象发生在可压缩理想气体中时通常被称作热声对流[2]。Farouk 和 Brown 等通过数值计算研究证实了热声对流对传热的增强作用[3,4]。

除了理想气体外，可压缩性在超临界压力流体传热过程中的重要影响被称作活塞效应[5]，所谓活塞效应指的就是由于热边界层的快速膨胀随后对其余流体进行压缩而导致温度场的改变，而这种压缩是通过热驱动产生声波而实现的。人们进行了一系列的理论和实验研究来证明和解释这种新现象，且发现相较于理想气体，在近临界流体中热声波的产生和反射会带来更好的促进传热效果[6]。Miura 等在 2005 年在1μs时间尺度上捕捉到了的热声波，他们在超临界 CO_2 中使用了一个很弱的连续脉冲加热，获得了在声学时间尺度上的完整的热声波波形变化[7]。

迄今为止的大多数关于超临界流体尤其是近临界状态下热声效应的理论和实验的研究，为了使流体的状态保持在临界点或者拟临界线附近，均考虑弱热扰动，壁面温升较小，热声波也较弱。近几年来也有少数涉及到强热扰动情况下的研究[8]，但对于超临界压力下，流体对高强度的热扰动的响应，特别是流场行为和能量输运行为等，仍缺乏足够清晰的认识。

本文针对强热扰动下跨临界过程中热声波的产生与传播过程进行了数值计算和理论分析，选取超临界 CO_2 为研究对象，对不同初始状态施加相同的恒热流，对物理场的变化规律进行了描述和分析，同时开展了理论分析与建模。

*基金项目：国家自然科学基金项目（52106126）

1 物理模型与计算方法

1.1 物理模型和定解条件

为了探究强热扰动下跨临界热声波动特性，我们选择 CO_2 作为研究对象。所选取的物理模型为如图 1 所示的半无界空间。选取长度 L=0.15mm 的计算区域，在所研究的时间范围内，声波未到达右边界。左边界为无滑移壁面，同时施加恒定热流。

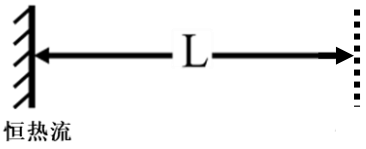


图 1 物理模型

本研究选取了共计 4 组具有代表性的流体初始状态进行计算实验，其初始压力分别是 7.5MPa、8.0MPa、8.5MPa、9.0MPa。各组的初始温度为其拟临界温度低 5K。左边界热流密度为$5 \times 10^6 \mathrm{W/m^2}$，加热持续时间为 1μs。在加热结束时，所有实验组中的左边界的温度升高分别在 10K~12K 之间（具体值见下表第四列），即加热过程边界温度实现了跨临界。

表 1 算例设置

组别	初始压力（MPa）	初始温度（K）	加热结束时左边界温升（K）
1	7.5	299.8580	10.3994
2	8.0	302.8235	10.4840
3	8.5	305.5135	11.1010
4	9.0	308.1609	12.0036

1.2 计算方法

本研究求解的一维可压缩流动控制方程包含连续性方程、动量方程和能量方程，可写作：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}+\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x}=\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x}+\mathbf{S} \tag{1}$$

其中 t 和 x 分别表示时间和空间坐标，列向量 **U** 为主变量，列向量 **F**、**G**、**S** 分别表示对流、扩散和源项的作用，其表达式分别为：

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho v\\ \rho P\end{bmatrix},\ \mathbf{F}=\begin{bmatrix}\rho u\\ \rho v^2+P\\ \rho v(p+\kappa)\end{bmatrix},\ \mathbf{G}=\begin{bmatrix}0\\ \frac{4}{3}\eta\frac{\partial v}{\partial x}\\ \lambda\theta\frac{\partial T}{\partial x}\end{bmatrix},\ \mathbf{S}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ v\frac{\partial \rho\kappa}{\partial x}-\lambda\frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial T}{\partial x}\end{bmatrix} \tag{2}$$

其中，ρ 为密度，v 为速度，P 为绝对压力，T 为温度，η 为动力粘度，λ 为导热系数，θ 和 κ 为引入的辅助物性参数，其完整定义为：

$$\theta = \frac{1}{c_v}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho, \kappa = \rho a^2, \tag{3}$$

其中 c_v 为定容比热，a 为声速。上述控制方程中的连续性方程和动量方程均为常见的可压缩流动控制方程。能量方程采用的是以压力为主变量的形式，在前人关于超临界压力跨临界温差的流动中获得了广泛的应用[9,10]。

在数值方法方面，本文采用五阶精度的 WENO 格式对对流项进行离散[11]，采用 Lax-Friedrichs 通量分裂方法将对流通量分裂为两个迎风形式的数值通量。采用六阶精度的中心差分格式对对流项和粘性项进行离散，时间推进采用三阶精度的 Runge-Kutta 方法[3]。在物性参数的获取方面，选取密度和压力作为热力学主变量，从 NIST 数据库[12]中导出物性参数表，而后通过双线性插值的方法在每一时刻、每一位置更新物性。为了保证计算的精度和稳定性，以 CFL=0.25 作为时间步长的选取准则。

2 计算结果与分析

2.1 压力场与速度场的特征

CO_2 初始状态为 7.5MPa 实验组是最接近临界压力（7.38MPa）的一组，最具代表性且特征最明显，因此选取此状态下的计算结果开展讨论。图 2 做出了初始状态为 7.5MPa 情况下加热中、加热结束瞬间和加热结束后（具体时刻分别为$t = 0.5\mu s$、$t = 1\mu s$ 和$t = 2\mu s$）的压力场和速度场。为了方便起见，在图 2(a)中定义 $p=P-P_{ref}$，其中 P_{ref} 为初始压力，即 p 为相对初始压力的变化量。

从图中观察可知，热声波在空间中的传播体现为右行波。根据右行波的性质，空间压力场、速度场的分布可以看作是热边界层外缘的压力扰动以声速传播出去后的结果，因此主流区（边界层以外的区域）内的任意一点压力满足 $p(x,t)=p_B(t-x/a)$，速度满足 $v(x,t)=v_B(t-x/a)$，其中 p_B 为边界层外缘的压力幅值，v_B 为边界层外缘的速度。因此，空间波形从右向左所呈现的规律，其实就是边界层外缘的值随时间变化的规律。

从图 2(a)可见，观察整个过程可知，在前 1μs 的加热阶段，边界层外缘的压力随时间不断升高，从 8000Pa 左右逐渐升高至 19000Pa 左右，并且存在一段快速升高的区域；在 t=1μs 即加热结束的瞬间骤降至约-13000Pa，而后再逐渐恢复至零。

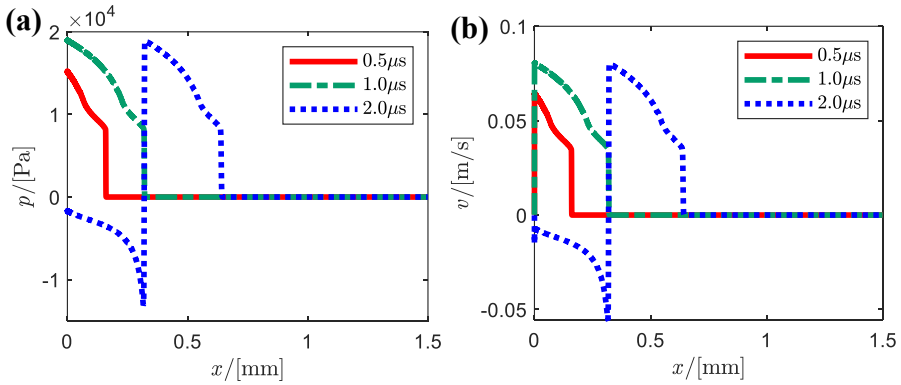


图 2 (a)初始状态为 7.5MPa 的压力场于不同时刻在空间中分布情况 (b) 初始状态为 7.5MPa 时热声波速度场于不同时刻在空间中分布情况

图 2(b)为速度场的分布情况，可以看到速度场的分布和压力场有着完全一样的规律，随着加热的进行，速度不断升高，从 0.035m/s 最终升高到 0.08m/s。加热结束后骤降至约-0.06m/s，再逐渐回复至零。

图 3 对比了 4 组不同初始状态下（7.5MPa、8.0MPa、8.5MPa 和 9.0MPa）的热声波传播到 $L/2$ 处时的压力波形，可以观察到，初始状态离临界点越远，压力波的宽度减小。这是因为热声波是以声速向前传播，而越远离临界点，其声速越小，因此在 1μs 的加热时间范围内扰动传播的距离越短，造成了宽度越小。

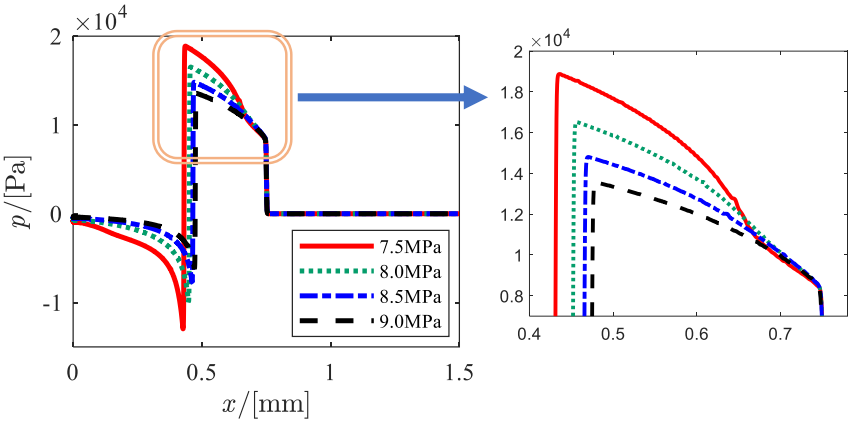


图 3 四组不同初始状态下热声波传播至 0.75mm 处时压力分布（右图为左图框内区域放大图）

进一步分析各组压力波波形可知，距临界压力越近，压力波形的空间分布表现出的非线性也越强。根据 $p(x,t)=p_B(t-x/a)$，反映了边界层外缘压力随时间增长的速度（特别是快速增长阶段）及加热结束后骤降的幅度均发生了增强。

2.2 温度场和热边界层

热边界层是研究整个问题的关键，在进行进一步研究前需要先确定每一时刻热边界层的位置。在对比了温度变化和热流密度分布等多种判断方法后，最终选择通过热流密度来判定热边界层的位置。我们选取热流密度等于$1 \times 10^4 \mathrm{W/m^2}$（即热流边界条件的 0.2%）的位置热为边界层的外缘。

同样以流体初始状态为 7.5MPa 的计算结果为代表，对温度场进行分析。图 4(a)和图 4(b)分别是加热中$t = 0.5\mu\mathrm{s}$、加热结束瞬间$t = 1\mu\mathrm{s}$和加热结束后$t = 2\mu\mathrm{s}$，在$0\sim1 \times 10^{-3}\mathrm{mm}$范围内的温差和热流密度的分布情况。图中圆圈位置为热边界层的外缘。从图 4 (a)可以观察到，在加热过程中壁温不断升高，热边界层内的温度分布呈现典型的左高右低。对应地，在图 4(b)中热流密度从左往右逐渐下降，并且在$\Delta T = 5\mathrm{K}$附近发生迅速降低。在加热结束后，热扩散的作用下热量逐渐从边界层向外传播，壁面温度不断降低。

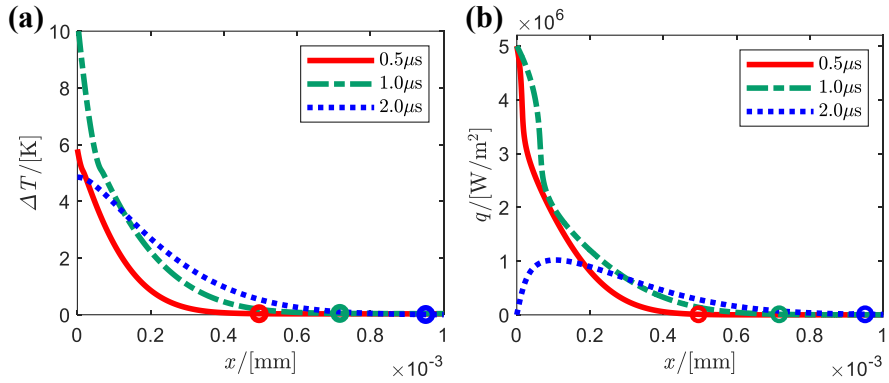


图 4 (a)初始状态为 7.5MPa 的边界层内温度不同时刻的空间分布 (b)初始状态为 7.5MPa 的边界层内热流密度不同时刻的空间分布

下图 5 (a)为不同初始状态下热边界层厚度随时间的发展情况。可见在相同时刻下随着初始状态的压力的升高（距离临界压力越远），同一时刻下边界层的厚度在逐渐变小。热扩散系数α可以反映物体中热扩散的速度，图 5 (b)给出了此四组边界层内的平均热扩散系数随时间的变化情况，不难发现随着流体初始状态离临界点越远，其边界层内的平均热扩散系数也越小，所以边界层的扩展速度越慢。

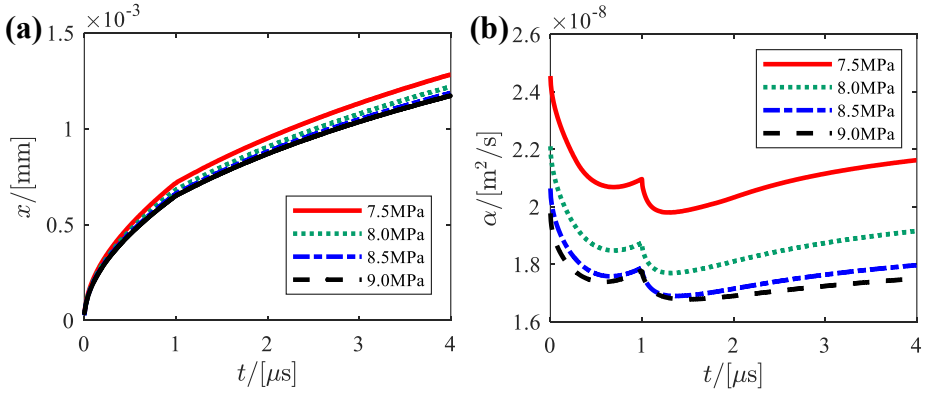


图 5 (a)不同初始状态下边界层厚度随时间变化(b)不同初始状态下边界层内平均热扩散系数随时间变化

在图 5(a)中我们发现边界层厚度随时间变化呈现出两个阶段：在加热结束前边界层的扩张较快，为第一个阶段；而在加热结束后的第二阶段中，边界层的扩张速度较之前有着明显的减缓。为探究此现象的原因，考虑边界层速度场。从图 6 中可以看出：在加热结束前温度升高，热膨胀使得边界层内的速度为正，从而促进边界层扩张；而加热结束后，边界层内速度为负，抵消了部分热扩散的作用，使得边界层的扩张变慢。因此，热边界层的增长有两种机制，热扩散机制和速度场带来的对流机制，一开始是二者相互促进的，后来速度场带来的作用会抵消掉一部分热扩散的作用。因此边界层厚度呈现了上述的两阶段。

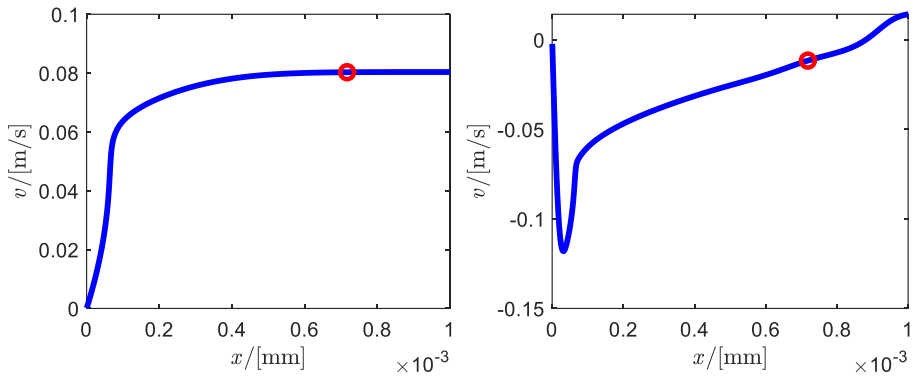


图 6 $t = 0.998\mu s$（加热结束前）和$t = 1.004\mu s$（加热结束后）边界层内速度分布，红圈为此时边界层的边缘位置

2.3 内能和熵

热源的加热量传递到了主流中后以内能和动能两种形式储存，取初始状态为内能的零参考点。我们以边界层为界限，将其分为四个部分，分别是边界层内的动能、边界层外的动能、边界层内的内能和边界层外的内能。图 7 为初始状态为 7.5MPa 时总加热量E_{in}、边界层内的内能变化量E_{bd}和边界层外的内能变化量E_{bulk}以及它们俩之和E_{total}随时间的变化情况。对比加热总量 E_{in} 和边界层内和边界层外的内能增加总量，可以发现在任何时刻下两者的数值都近乎一样，因此在所有的计算中，动能部分可以忽略。

从图 7 中我们还可以看到，在加热结束前，热源的绝大部分热量通过热传导的方式变成了边界层内流体的内能，小部分热量通过热声波的作用使得边界层外流体的内能升高。而在加热结束后，边界层内的内能继续升高，而边界层外的内能则出现了降低的情况，而两者相加所得的总内能变化量则不再变化且等于总加热量（此时加热停止，总加热量是一个定值）。

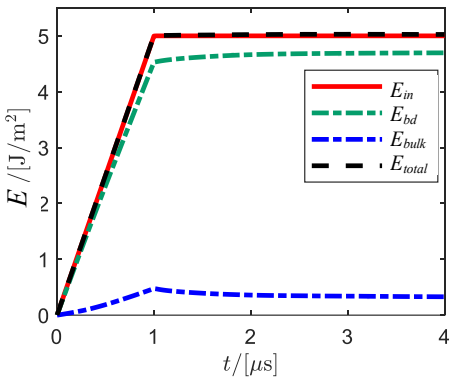


图 7 初始状态为 7.5MPa 时热声波速度场于不同时刻在空间中分布情况

对于加热结束后边界层外内能下降这一现象，可以用边界层的速度来解释。当边界层内的速度大于 0 时，则向外膨胀，对边界层外界流体做功；反之速度小于 0 则对应边界层外（边界层右侧）流体向边界层内做功。从图 6 中可知在加热结束后，边界层内的速度小于 0，此时边界层外的流体向边界层做功，因此内能不断降低。

图 8 反映了 7.5 MPa 中边界层内、外熵相对于参考状态熵的变化量与时间的关系，取初始状态为比熵的零参考点，其具体表达式分别为：

$$S_{bd} = \int_0^{x_{bd}} \rho(x)s(x)\mathrm{d}x, \tag{4}$$

$$S_{bulk} = \int_{x_{bd}}^{x_{buk}} \rho(x)s(x)\mathrm{d}x. \tag{5}$$

从图中可见，在加热结束前，边界层内的熵值随着加热的进行而不断升高，这部分熵的来源是传热带来的熵流。而在加热结束后，边界层内的熵不再上升，处于一个定熵的过程中。对于边界层外的区域，熵变为零，因此可确定热声波的传播过程是一个定熵过程。

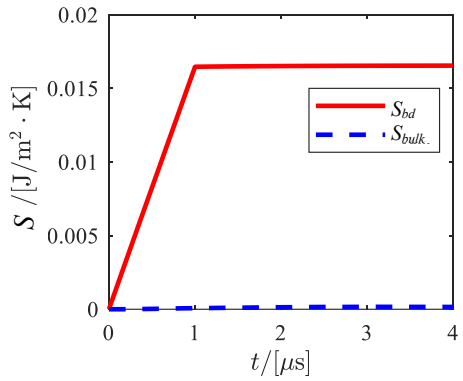


图 8 初始状态为 7.5MPa 时热声波速度场于不同时刻在空间中分布情况

3 理论分析：局部能量效率理论

3.1 理论推导

从能量方程和连续性方程的角度来看，每一时刻传递到边界层外的能量是由两部分组成的：其一是物质流出所带走的能量；其二是边界层整体对外膨胀做功。取初始状态为内能的零参考点，因此每单位面积上传递到边界层外的功率的表达式为：

$$\dot{E}_{out} = [(\rho e)_B + P_B]u_B \tag{6}$$

其中下标 B 代表边界层边缘处的值，P_B 为边缘处的绝对压力。此处由于温度升高很小，比内能e_B的值接近 0，可近似认为$(\rho e)_B \approx 0$。对于边界处处压力P_B，根据前文所述，所产生的热声波的压力幅值最高为 0.019MPa，相对于流体初始状态的数量级（7.5MPa），其变化小到可以忽略不记，因此将此处的压力做近似处理，认为$P_B \approx P_{ref}$，这样表达式化简为：

$$\dot{E}_{out} = P_{ref}u_B \tag{7}$$

考虑边界层为研究对象，在其中取长度为$\mathrm{d}x$的微元控制体，单位为 m。微元控制体由热传导而获得的单位时间的热量积累为：

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{8}$$

而这个热量的积累会引起温度的持续升高，在假定其为等压过程的情况下，此控制体的温度的升高速率如下式：

$$\frac{\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)\mathrm{d}x}{\rho \mathrm{d}x c_p}=\frac{1}{\rho c_p}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right) \tag{9}$$

温度的升高会带来热膨胀，在将上式乘以定压热膨胀系数β后，可以获得其单位长度的膨胀速率。而对于微元控制体dx，则其实际膨胀了：

$$\frac{\beta}{\rho c_p}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{10}$$

将微元控制体的膨胀速度乘上绝对压力，即可代表由膨胀所做的功的功率。再考虑整个边界层对外做功的总功率，也就是对边界层求积分：

$$\dot{E}_{out}=\int_0^{x_{bd}}\frac{P\beta}{\rho c_p}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{11}$$

事实上，$p\beta/\rho c_p$就是每一点的热声能量效率ξ[13]，即可压缩流体受到热扰动后能量通过热膨胀作功传递出去的比例，前人曾在小热扰动的活塞效应的研究中导出过ξ的表达式。上式的物理含义认为边界层内每一个点都遵循能量效率关系，则总能量就是能量效率乘以热边界层内的热传导的瞬时热源后再进行空间积分。因此，我们将式(11)称为局部能量效率理论。

3.2 局部能量效率理论的验证

在利用局部能量效率理论推导得到边界点处每一时刻的理论预测速度u_B^{the}后，根据热声波的定熵性质，通过下式(12)中的相关关系得到对应时刻边界层所产生的热声波的理论压力值。式P_{ref}为初始状态压力、a为初始状态下声速、ρ_{ref}为初始状态参考密度。

$$p_{the}=a\rho_{ref}u_B^{the}=\frac{a\rho_{ref}}{P_{ref}}\int_0^{x_{bd}}\frac{P\beta}{\rho c_p}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{12}$$

热声波以声速向前方传播，假设声速不变且始终为各参考状态下对应的声速。将各个时刻所产生的热声波按照右行波的传播规律在空间上展开，即可得到某一时间点热声波的理论的空间压力分布情况。图 9 中将 4 组不同初始状态的理论预测结果（p_{the}，红色实线）与数值计算的结果（$\mathrm{p_{cal}}$，蓝色虚线）进行了对比，可以发现理论预测的结果和数值计算的结果在各个初始条件下都吻合的很好，由此验证了局部能量效率理论的准确性。

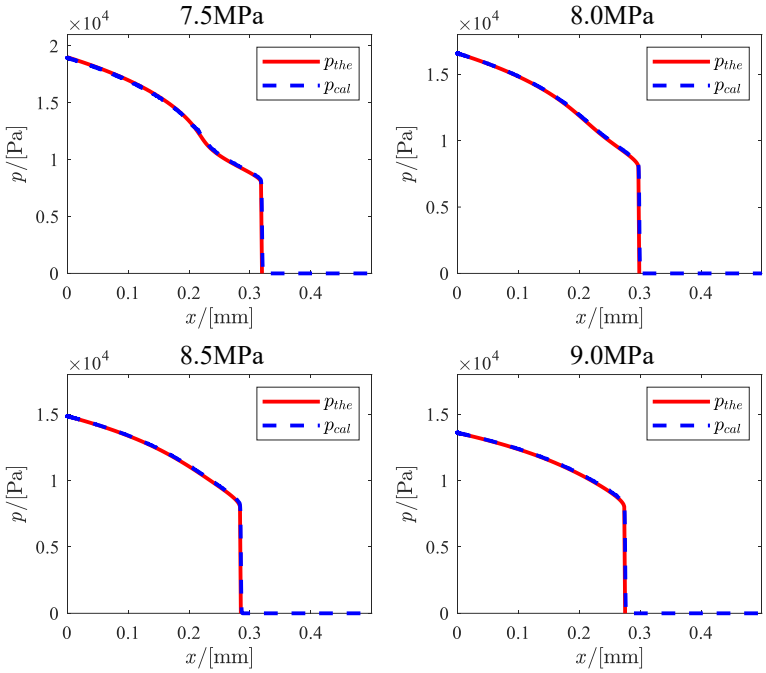


图 9 $t = 2\mu s$（加热结束瞬间）四组不同初始状态的热声波压力分布的理论预测和计算对比

4 总结与讨论

本文通过高精度数值计算和理论分析，对强热扰动下的跨临界热声波动特性进行了研究。对速度场、压力场、温度场、热流密度、内能和熵等各个物理场的演化过程进行了分析，揭示了压力和速度的右行波规律，热边界层演化的两阶段特征，以及热声波的等熵属性，确认了靠近临界压力带来的热声波强度以及波形非线性的增强。通过理论分析，发展了局部能量效率理论，获得了与数值计算一致的结论，为后续跨临界热声波的研究提供了理论模型。

参考文献

[1] Trilling, The Journal of the Acoustical Society of Amer-436, ica 27, 425–431 (1955).

[2] Ozoe H, Sato N, Churchill S W. Numerical analyses of two and three dimensional thermoacoustic convection generated by a transient step in temperature of one wall[J]. Numerical Heat Transfer, 1990, 18(1):1-15.

[3] Brown M A, Churchill S W. Finite-difference computation of the wave motion generated in a gas by a rapid increase in the bounding temperature[J]. Computers & Chemical Engineering, 1999, 23(3):357-376.

[4] Farouk B, Oran E S, Fusegi T. Numerical study of thermoacoustic waves in an enclosure[J]. Physics of Fluids, 2000, 12(5):1052-1061

[5] Zappoli B, Bailly D, Garrabos Y, et al. Anomalous heat transport by the piston effect in supercritical fluids under zero gravity[J]. Physical Review A, 1990, 41(4):2264.

[6] Nakano A, Shiraishi M, Murakami M. Application of laser holography interferometer to heat transport phenomena near the critical point of nitrogen[J]. Cryogenics, 2001, 41(5-6):429-435.

[7] Miura Y, Yoshihara S, Ohnishi M, et al. High-speed observation of the piston effect near the gas-liquid critical

point[J]. Physical Review E Statistical Nonlinear & Soft Matter Physics, 2006, 74(1):010101.

[8] Migliorino M T, Scalo C. Heat-induced planar shock waves in supercritical fluids[J]. Shock Waves, 2020, 30(2).

[9] Kawai S, Terashima H, Negishi H. A robust and accurate numerical method for transcritical turbulent flows at supercritical pressure with an arbitrary equation of state[J]. Journal of Computational Physics, 2015, 300: 116-135.

[10] Migliorino M T, Scalo C. Real-fluid effects on standing-wave thermoacoustic instability[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2020, 883: A23.

[11] Shu C W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes[J]. Journal of computational physics, 1988, 77(2): 439-471.

[12] Lemmon E W, Huber M L, McLinden M O. NIST standard reference database 23[J]. Reference fluid thermodynamic and transport properties (REFPROP), version, 2010, 9.

[13] Hu，Zhan-Chao. Coupled Heat and Mass Transfer in Binary Mixtures at Supercritical Pressures[M/OL]. Singapore: Springer Nature Singapore, 2022[2023-06-04].

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：233078

建筑热羽流影响下空气污染物跨楼层扩散传递特性研究

崔鹏义[1]，赵青霞[1]，杨锋[1]，王佳齐[1]，黄远东[1]，陶文铨[2]
（1 上海理工大学，上海 200093；2 西安交通大学，西安 710049）
(Tel: 15021499241, Email: pycui@usst.edu.cn)

摘要：本文结合风洞实验和数值模拟，探究太阳辐射引起建筑立面热羽流和水平风耦合作用下，室内外不同位置空气污染物在不同楼层间的扩散传递和分布特性。研究表明，当 Ri<1.71 时，水平风作用主导背风侧流动结构，当 $Ri \geq 1.71$ 后，热羽流作用逐渐增强且逐渐占据主导。污染物浓度随层高逐渐降低，但跨楼层扩散的污染程度和影响范围随 Ri 增加先增大后减小，其中污染源位于室内时 Ri=1.71 时扩散风险达最大，而污染源位于背风侧地面 Ri=0.49 时达最大。本研究对于优化建筑通风及预防污染物的跨楼层扩散传播具有重要的意义。

关键词：污染物扩散；建筑热羽流；风洞实验；数值模拟；跨楼层传播

0 前言

研究表明，除了飞沫和接触传播，新冠肺炎病毒（COVID-19）还可以通过空气中气溶胶进行长距离扩散传播，这也给病毒防控带来严峻挑战[1]。携带病毒的有毒有害的气溶胶污染物（粒径一般小于 5μm），可以在空气中长时间悬浮，具有较好的气流跟随性和扩散迁移特性[2]。在人口密集的高层住宅中，发生病毒气溶胶污染物跨楼层传播的案例也时有报道；例如，中国香港某高层建筑爆发的跨楼层传播案例，经调查是通过下水管道在不同楼层之间进行扩散传播[3]。因此，充分掌握高层建筑中气溶胶污染物可能的跨楼层扩散传播路径，对于防止病毒或其他气溶胶污染物扩散传播和增强居民防患呼吸道疾病意识具有重要意义。

研究表明，自然通风是实现建筑室内外空气交换的最经济、绿色的通风方式[4]。室内外压力差及太阳辐射引起的温度差是影响自然通风的主要动力，同时也导致不同楼层以及室内外之间物质和能量的交换[5]。Liu 等[6]和 Niu 等[3] 通过实验和模拟获得了室内外温差较大的板状建筑中下部和相邻上部房间示踪气体的质量分数，发现上层房间的室内污染物浓度比下层房间低 2 个数量级。Cui 等[7]人采用缩尺模型研究了住宅室内底板加热对室内浮力流动和污染物扩散的影响，发现温差大于 240 K 后，浮力主导室内流动结构，从而降低室内污染物积累。Li 等[8]人通过数值模拟建筑周围小范围的无量纲温度分布，探究了单体建筑的墙面与附近空气、地面之间的传热规律。Santamouris 等[9, 10]人回顾了缓解城市热岛效应的方法，分析了屋顶形状、植被、建筑尺度对于提升建筑室内通风能力的影响。Mu 等[11]人以 20 层板式高层建筑为数值模拟

基金项目：国家自然科学基金（NO.52106102，42277477）

研究对象，发现当向阳侧墙与背阴侧墙的温差为 10K 时，上层房间空气再入比可达 25%。由此可见，风和热力条件是影响气溶胶污染物跨楼层扩散路径的重要因素。

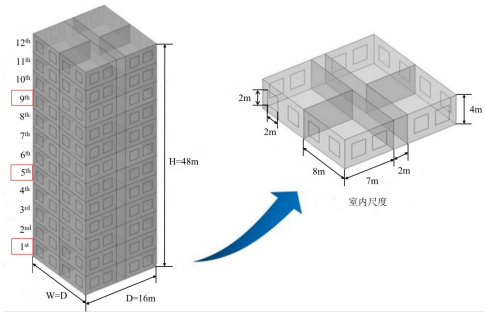
在实际情况下，不同强度、角度太阳辐射作用下产生的不均匀建筑热羽流，耦合水平来风共同作用，对室内外自然通风、建筑立面流动与扩散特性的影响是异常复杂的。因而，来自污染楼层以及建筑尾流区室外空气污染物，可能会沿建筑立面重新进入临近楼层的其他房间[12]，造成污染物跨楼层扩散传播。然而，相关研究并不全面。

本文拟结合风洞实验和数值模拟，进一步探究热羽流和水平风耦合作用下，高层建筑背风侧室内外空气污染物在高层建筑垂直方向上不同楼层间的扩散传递和分布特性。该结果有助于深入理解水平风和太阳辐射引起的热羽流对高层建筑立面气溶胶污染物扩散路径的影响，并为高层建筑通风设计以及实施有效的预防疾病传播措施提供参考。

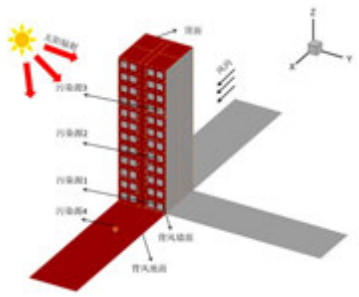
1 实验方法

1.1 物理模型

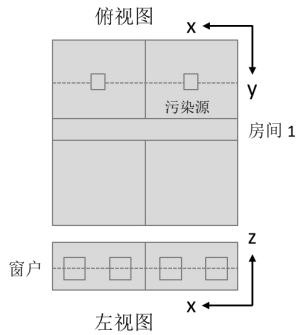
本研究建筑模型及尺寸如图 1（a）所示，为 12 层的高层建筑。物理模型如图 1（b）所示，太阳辐射引起建筑背风面及地面升温产生热浮力作用，污染源位于建筑背风侧低、中、高（1、5、9 层）楼层及背风侧地面位置。数值模型采用缩尺模型，缩尺比为 1:100。如图 1（c），建筑的每一层有 4 个房间，每一面都有 4 个长宽都为 2 cm 的敞开式窗，监测点位置如图 1（b）。采用 SF_6 作为示踪气体模拟室内外空气污染物的排放，SF_6 和空气摩尔体积比为 1:5，以 $5.8\times10^{-5}m^3/s$ 的速率释放。



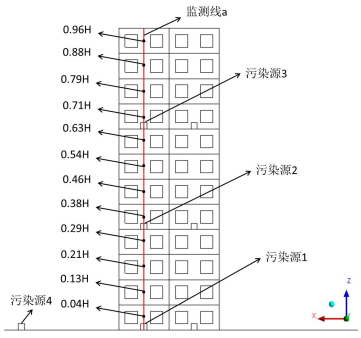
（a）原型尺寸



（b）太阳辐射示意图



（c）侧视及俯视图



（d）测点位置侧视图

图 1 实验模型

采用缩尺模型进行风洞实验和模拟研究，需满足以下相似准则[13]：1）几何相似；2）运动相似；3）边界条件相似；4）热力条件相似。为了满足热力条件相似，需要确保模型和原型理查德森数（Ri）相似，才能实现热浮升力与来流惯性力的作用相似，如下所示：

$$Ri = \frac{Gr}{Re^2} = \frac{g\,a_v(T_W - T_{ref})H}{U_H^2} \tag{1}$$

式中 Gr 代表格拉晓夫数；g代表重力加速度（m/s^2）；α_v代表热膨胀系数（$1/K$）；v代表空气运动粘度（m^2/s）；T_W是壁面温度（K）；T_{ref}是实验的环境温度（K）；H为建筑高度（m）；U_H为H处参考速度（m/s）。

1. 2 数值方法

1.2.1 控制方程

本研究中考虑到辐射墙体的热效应，选用三维 Navier-Stokes 方程来耦合能量及污染物的组分输运方程，描述室内、外气流、传热和污染物扩散，其中，不可压缩连续性方程：

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{2}$$

动量方程：

$$\frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j}\left((\mu + \mu_t)\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} \tag{3}$$

能量方程：

$$\frac{\partial(\rho u_j T)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\frac{\mu}{\mathrm{Pr}} + \frac{\mu_t}{\sigma_t}\right)\frac{\partial T}{\partial x_j}\right) + \mathrm{S}_T \tag{4}$$

以及组分输运方程：

$$\frac{\partial(\rho u_j c_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right)\frac{\partial c_i}{\partial x_j}\right) + S_c \tag{5}$$

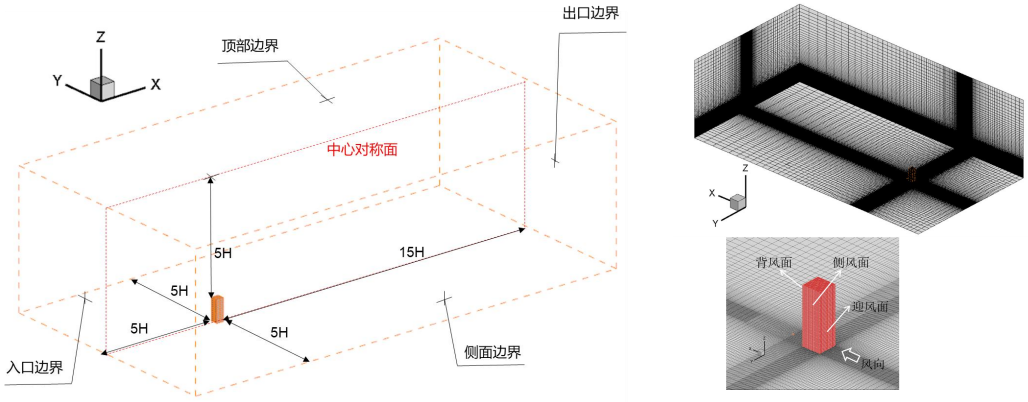
式中，ρ代表密度，kg/m^3；u_j代表速度矢量，m/s；u_i代表待解时间平均速度，m/s；p 代表压力，Pa；μ和μ_t分别为分子粘度和湍流粘度，$Pa\cdot s$；T 代表温度，K；Pr 代表普朗特数；σ_t代表湍流普朗特数（Pr_t= 0.85）；S_T代表热源项，$W/(m^3\cdot s)$；c_i代表污染物质量浓度，kg/m^3；$D_{i,m}$代表污染物的分子扩散系数，m^2/s；S_c代表污染源项，$kg/(m^3\cdot s)$；Sc_t代表湍流施密特数，Sc_t= 0.7[14]。

1.2.2 计算设置

长方体计算区域及尺寸如图 2（a），入口边界采用速度入口，顶部及两个侧面采用对称边界，出口采用充分发展的自由出流边界。建筑壁面及地面为 wall 壁面边界条件。太阳辐射引起壁面及地面升温，相关壁面采用恒定温度边界；污染源尺寸为 0.01 m×0.01m×0.01m，以恒定速率释放污染物。

本文划分了四种（250 万、440 万、650 万、1150 万）不同精度的网格模型分布进行计算，选取高层建筑监测线 a（如图 1（d））上的不同高度处的无量纲浓度进行对比，如图 3 可知，650 万与 250 万、440 万下无量纲浓度的偏差较大，与 1150 万的偏差较小，且随着网格数量的增加，计算结果变化不再明显。在保证计算精确度前提下，同时节

约计算资源，本文采取 650 万网格的数值模型。



（a）计算区域及边界条件　　（b）网格划分

图 2 计算区域及网格划分

本文太阳辐射情况和污染源位置如图 1（b），考虑建筑背风侧及背风侧临近地面热浮升力与建筑背风侧尾流的共同作用，4 种污染源位置及 7 种 *Ri* 工况，参数如表 1 所示。

表 1 孤立建筑模型的工况

通风模式	工况	U_H(m/s)	Re_H	ΔT(℃)	*Gr*	*Ri*
单侧通风	1	4.0	1.36e+05	50	8.79e+08	0.05
	2	3.2	1.08e+05	100	1.63e+09	0.14
	3	2.0	6.78e+04	150	2.27e+09	0.49
	4	1.2	4.07e+04	200	2.83e+09	1.71
	5	0.8	2.71e+04	250	3.32e+09	4.51
	6	0.6	2.03e+04	300	3.75e+09	9.07
	7	0.4	1.36e+04	350	4.14e+09	22.51

1.3 模型验证

用于模型验证的风洞实验模型如图 4 所示，模型缩尺比为 1:30，迎风建筑模型是尺寸为 60cm ×13.3cm×16.7cm（高×宽×长）的 6 层建筑。聚酰亚胺加热膜（最高可达 300 ℃）安置于建筑迎风侧外墙，用来可模拟太阳辐射引起的壁面升温作用。污染源设置于建筑第一层室内地面中心，利用SF_6定量释放系统以恒定速率（5.8×10^{-5} m^3/s）释放SF_6示踪气体。实验中，先采集监测点处气体样本，再用 DB-600T SF_6定量检测仪（精度±1ppm）测量已采样的时均浓度。为了直观对比数值计算结果与风洞实验测量结果，定义无量纲浓度 *K*，其表达式为：

$$K = \frac{c_r u_H H^2}{c_e Q} \tag{6}$$

式中 C_r为各个监测点测得的污染物浓度；C_e为污染源处污染物的排放浓度，为 3.5×10^5ppm；Q为污染物排放速率。

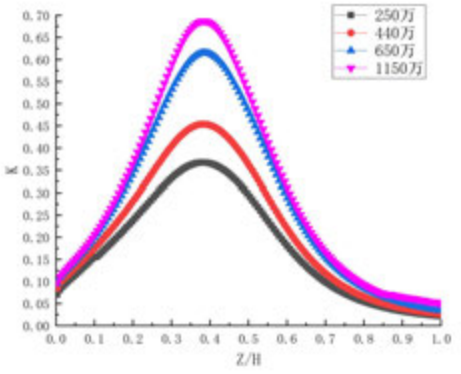


图 3 “网格无关解”验证

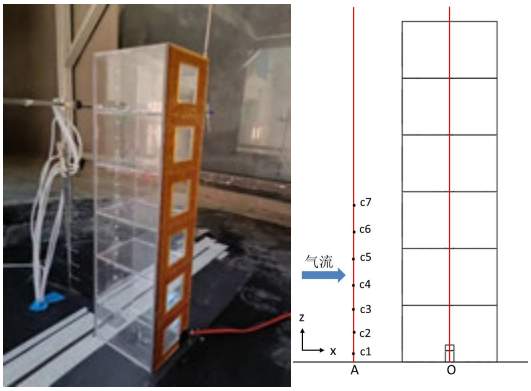


图 4　风洞实验及监测点设置

图 5 比较了三种 k-ε湍流模型计算的$Ri = 0.09$ $(\Delta T = 24.5℃)$，监测点 A 处不同高度的无量纲浓度 K 分布，且与风洞实验结果进行了比较。对比可知：RNG k-ε模型对污染物浓度的模拟结果更为接近风洞实验结果，平均相对偏差小于 8%，符合程度优于其他两种湍流模型。因此，本文采用 RNG k-ε模型来表 1 中工况的模拟研究。

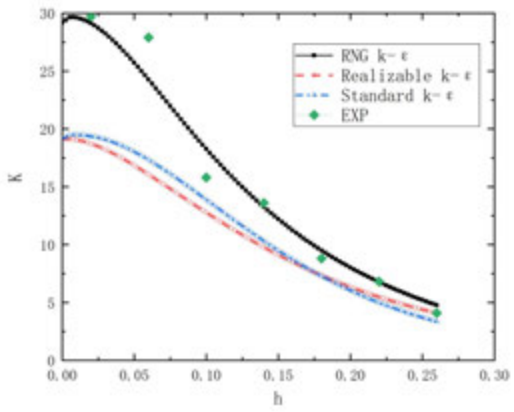
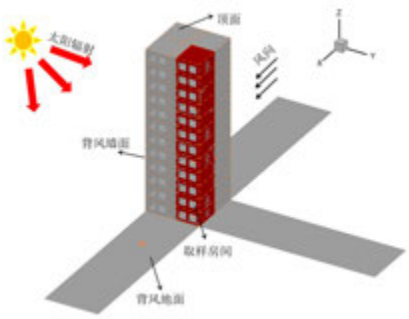


图 5 模型验证（位置 A 处不同高度 K 分布比较）

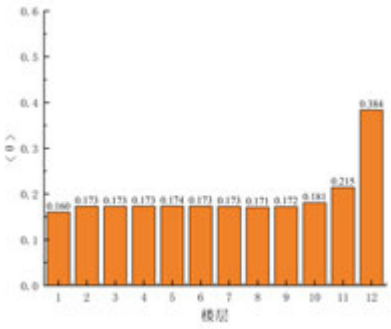
2 结果及讨论

2.1 不同 Ri 下建筑室内外无量纲温度$<\theta>$分布特性

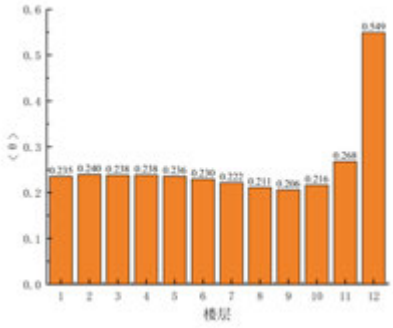
如图 6，总体来看，第 1 层至第 11 层的室内平均无量纲温度相差不大，但是第 12 层室内平均无量纲温度突然增大到接近两倍的数值。这是因为建筑壁面附近气流受热，密度降低，在热浮力作用下沿建筑立面向上移动，流经上层建筑窗口时进入室内，最终在顶楼房间中积聚。根据$<\theta>$数值变化，可以分为两个阶段。第 1 个阶段，当 $Ri < 1.71$ 时，建筑室内平均无量纲温度$<\theta>$数值逐渐增大，维持在 0.2 上下，说明热羽流的影响在逐步增强。第 2 个阶段是$Ri \geq 1.71$ 后，平均无量纲温度$<\theta>$数值在 0.33 左右，没有随着 Ri 增大而发现明显变化。建筑室内外无量纲温度分布不受 Ri 影响的原因是，辐射面处于背风位置，风效应较小，导致室内外空气换热速率不高。



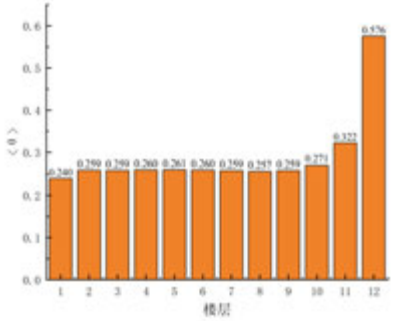
采样房间位置



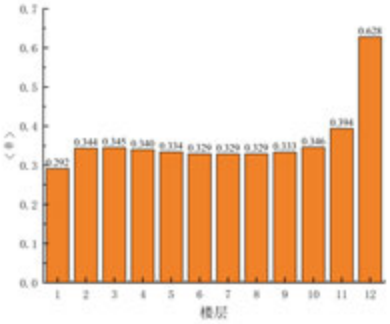
Ri=0.05



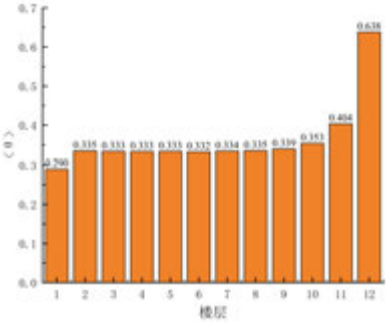
Ri=0.14



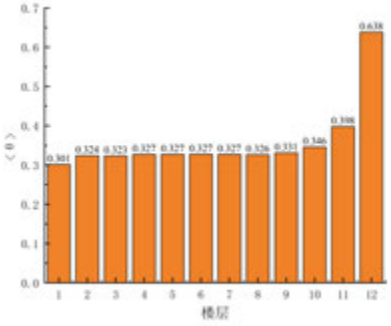
Ri=0.49



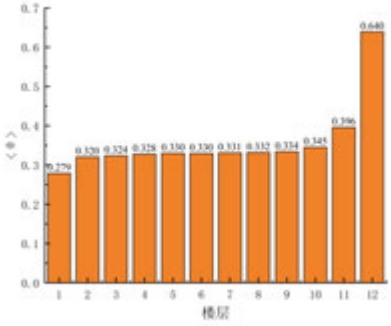
Ri=1.71



Ri=4.51



Ri=9.07

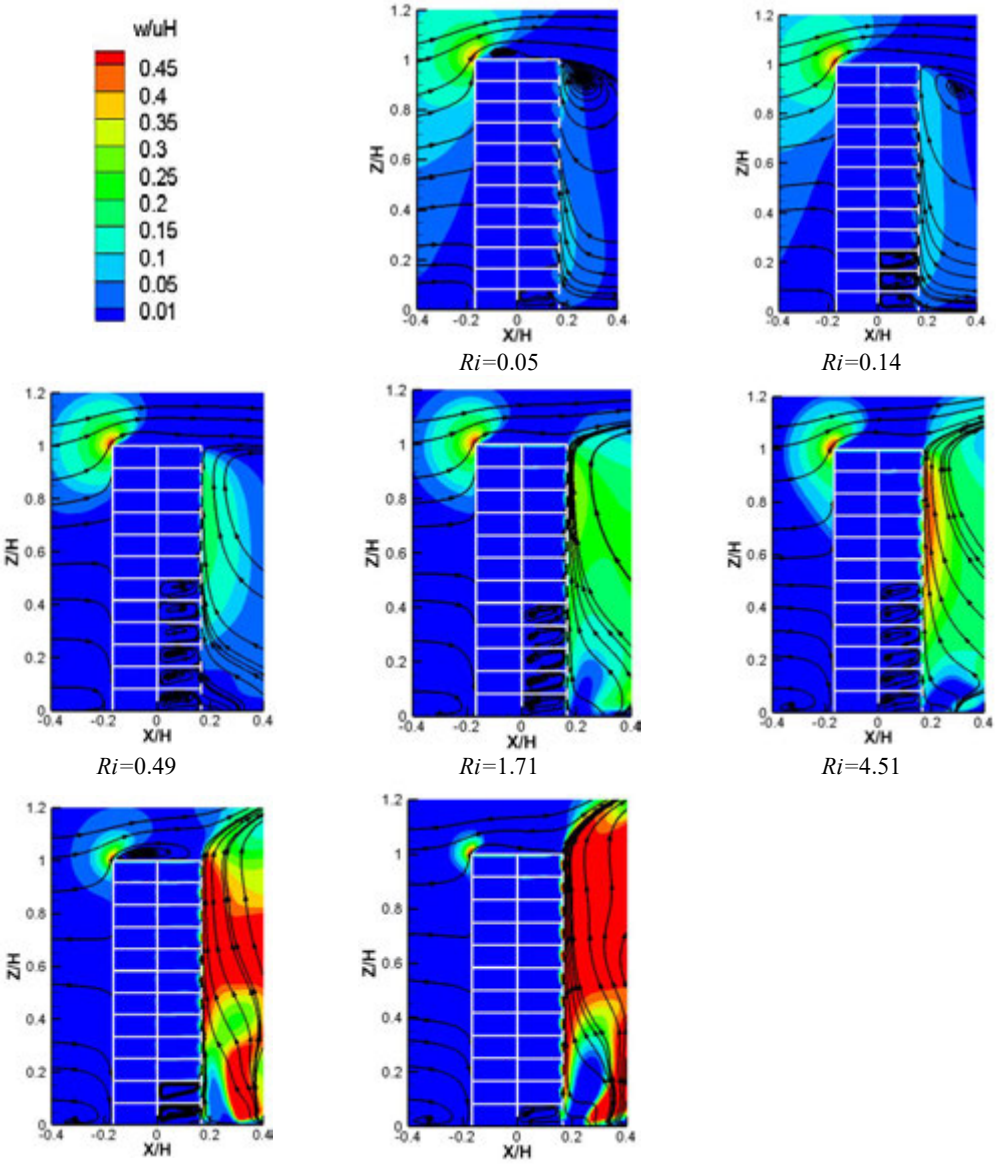


Ri=22.51

图 6 背风工况不同 Ri 下室内平均无量纲温度

2.2 不同 Ri 下建筑室内外流场特性

图 7 为辐射面为背风面时，不同 Ri 下竖直监测面 B 流线图及 z 方向无量纲速度（$W = w/u_H$）云图。对比发现，随 Ri 增大，即来流惯性力相对减小，建筑背风面壁面竖直向上热浮升力作用逐渐增大，对建筑室内、外流线结构的影响可分为 2 个阶段。第 1 个阶段，当$Ri < 1.71$ 时，来流风作用强于热羽流，背风侧上方形成顺时针涡旋，房间内形成逆时针涡旋，背风墙面附近流线方向向上，但是无量纲速度数值低于 0.02。第 2 个阶段是$Ri \geq 1.71$ 时，热羽流对风速场的影响逐渐增强，无量纲速度数值大于 0.02，影响区域主要在紧贴背风墙面且 4 层以上高度。整体来看，随 Ri 增大，背风侧低风速区域面积逐渐扩大，集中在上部空间，无量纲速度数值越来越大，最高超过 0.45。



Ri=0.05　　*Ri*=0.14

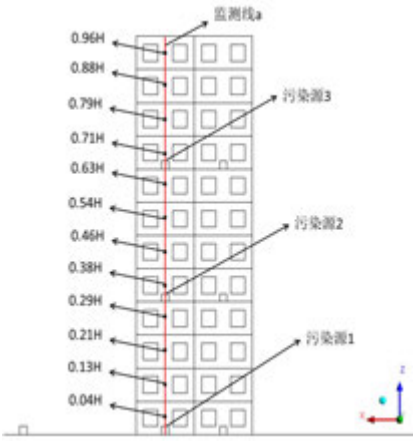
Ri=0.49　　*Ri*=1.71　　*Ri*=4.51

Ri=9.07　　*Ri*=22.51

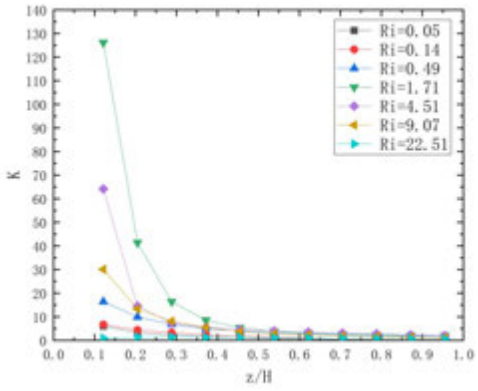
图 7 背风工况下 z 方向速度云图及流线图

2.3 不同 Ri 下建筑室内外无量纲浓度分布特性

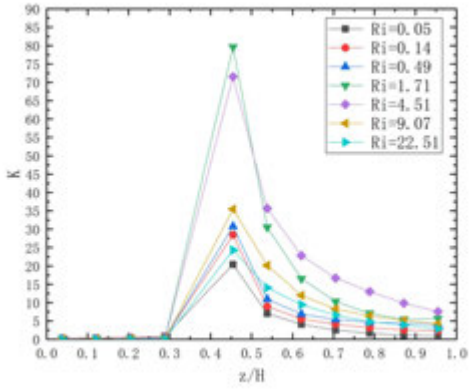
如图 8，在污染源位于第 1 层室内情况下，整体上第 1 层以上楼层的测点位置处室内无量纲浓度值随楼层高度增加而减少，K≥10 覆盖的区域可以达到第 5 层，即污染物有向上扩散的趋势，Ri=1.71 时数值最高。在污染源位于第 5 层室内时，整体上有向上扩散的趋势，不同 Ri 下 6 层及以上无量纲浓度基本高于 5，向下扩散的能力较弱，4 楼及以下无量纲浓度接近零，向上扩散效应更加明显。在污染源位于第 9 层室内情况下，不同 Ri 下第 10~12 层无量纲浓度均高于 10，污染物释放后向上扩散效应明显，对下部楼层几乎无影响。



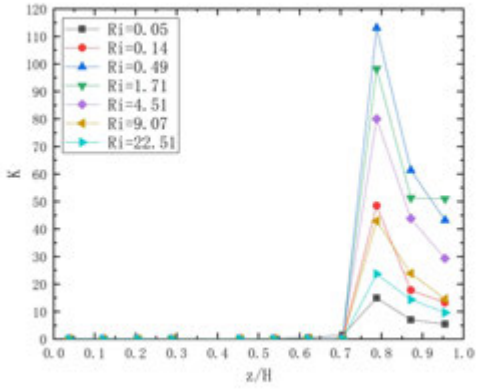
（a）左视图



（b）污染物位于 1 层



（c）污染物位于 5 层



（d）污染物位于 9 层

图 8 背风工况不同 Ri 下无量纲浓度分布

如图 9，当污染源位于建筑室外距离背风墙面$H/3$ 处时，无量纲浓度分布特征可以分为两个阶段。当$Ri < 1.71$ 时，污染源从建筑室外地面释放，向背风墙面靠近主要在背风面近地面聚集，首先占据底层室内空间，随后向上层空间扩散，随着楼层增高污染物浓度逐渐降低，从第 1 层到第 12 层，背风侧室内平均无量纲浓度逐渐从 100

下降到 1。建筑背风侧的热羽流作用效果随着 Ri 提高逐渐增强，污染物垂直方向上的影响程度也不断扩大。当$Ri \geq 1.71$，由图 9 可知，Ri=1.71 时 K=20 覆盖楼层为第 5~8 层，Ri=4.51 时无量纲浓度均低于 20。随着Ri增加，建筑背风面污染物浓度减小，影响范围逐渐向上抬升，直至偏离建筑背风墙面。

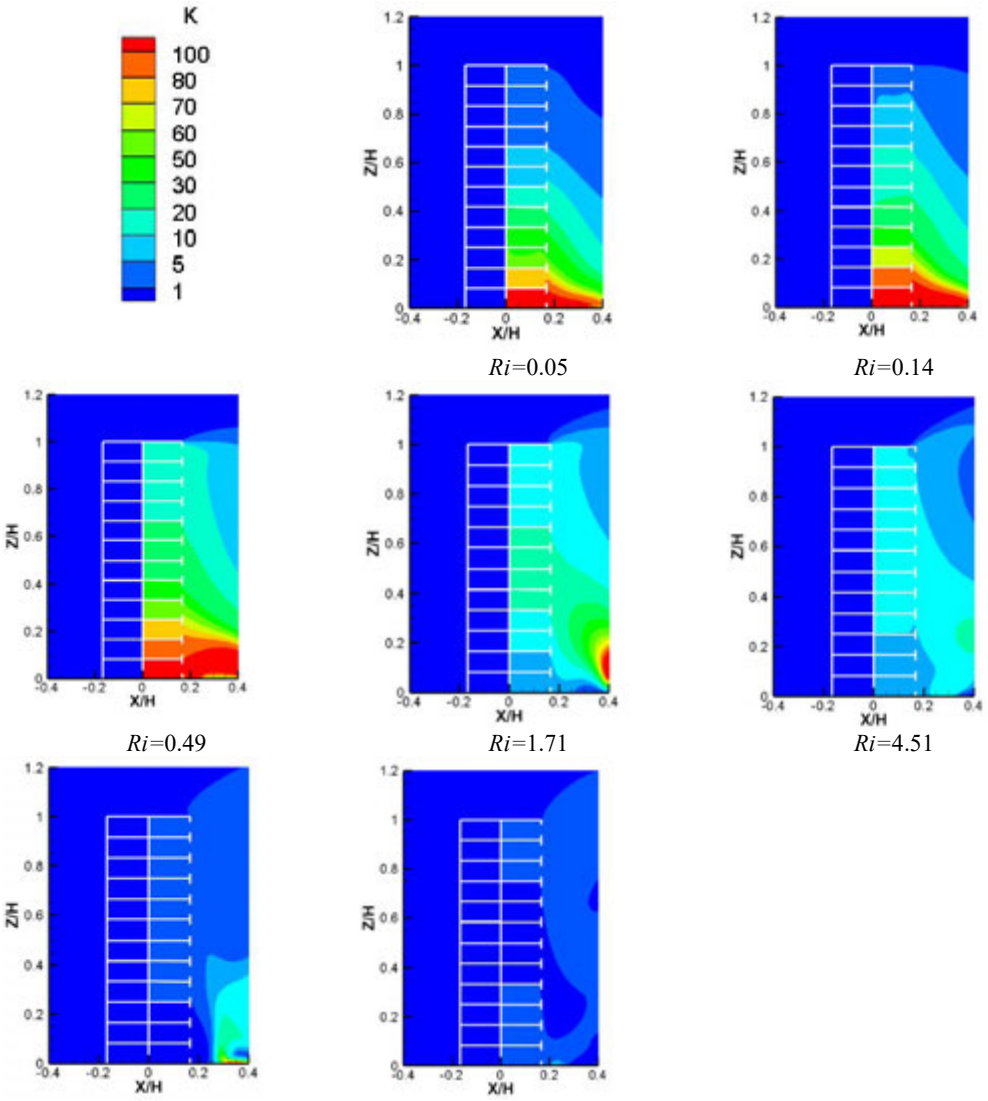


图 9 污染源位于室外无量纲浓度云图

2. 4 空气污染物扩散的风险评价

Riley 等人[15]在 1978 年提出了人体传染性疾病感染概率模型，王建辉[16]在此基础上提出了被动式感染风险评价模型，但是病毒感染人体并致病的机理较为复杂。本文将P定义为空气污染物对不同楼层的扩散风险：

$$P = 1 - exp(-p < c > Nt) \quad (7)$$

$< c >$表示室内平均无量纲浓度；人体单位时间呼吸率p与年龄、活动方式等相关，这里选择成年人轻微活动时数值为 1.0；本文参考了相关国家标准[17]，此处选择 N 为 2

次/小时；人体暴露于污染环境的时间t设定为 2 小时。

表 2 污染源位于背风面第 1 层的空气污染物扩散风险

楼层\Ri	0.05	0.14	0.49	1.71	4.51	9.07	22.51
1	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%
2	71.61%	74.99%	87.56%	100.00%	100.00%	99.76%	96.50%
3	48.97%	59.59%	76.13%	99.99%	95.56%	93.22%	86.67%
4	37.83%	49.12%	65.44%	97.17%	79.04%	80.92%	74.84%
5	29.03%	40.06%	63.77%	84.21%	68.43%	67.24%	63.88%
6	21.32%	32.08%	52.01%	68.27%	62.04%	53.85%	54.93%
7	14.75%	25.17%	20.51%	55.97%	56.71%	43.93%	47.92%
8	9.77%	19.45%	18.35%	47.74%	51.88%	37.31%	42.47%
9	6.44%	15.01%	15.80%	42.24%	47.89%	32.51%	38.23%
10	4.40%	11.82%	13.97%	38.22%	44.04%	28.77%	35.00%
11	3.24%	9.75%	13.02%	35.39%	39.12%	25.23%	32.64%
12	2.62%	8.62%	10.69%	35.22%	34.40%	21.49%	30.90%

表 3 污染源位于背风面第 5 层的空气污染物扩散风险

楼层\Ri	0.05	0.14	0.49	1.71	4.51	9.07	22.51
1	6.25%	4.60%	3.70%	0.76%	0.23%	0.03%	0.00%
2	7.05%	5.13%	4.12%	0.83%	0.24%	0.04%	0.00%
3	8.88%	6.32%	5.09%	0.91%	0.26%	0.04%	0.00%
4	15.62%	10.34%	8.36%	1.05%	0.28%	0.05%	0.00%
5	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%
6	98.73%	99.81%	99.33%	100.00%	100.00%	99.90%	99.22%
7	76.56%	85.14%	78.25%	99.88%	99.93%	98.14%	94.04%
8	56.38%	68.21%	60.02%	97.38%	99.09%	90.89%	85.18%
9	40.08%	56.93%	49.03%	89.48%	96.82%	81.24%	74.06%
10	27.96%	47.88%	40.63%	78.40%	93.26%	72.67%	63.24%
11	20.31%	41.02%	34.45%	68.53%	87.26%	65.10%	56.11%
12	16.27%	37.06%	30.96%	67.97%	78.76%	57.61%	44.76%

表 4 污染源位于背风面第 9 层的空气污染物扩散风险

楼层\Ri	0.05	0.14	0.49	1.71	4.51	9.07	22.51
1	1.40%	0.81%	0.35%	0.31%	0.03%	0.11%	0.00%
2	1.53%	0.85%	0.38%	0.32%	0.03%	0.12%	0.00%
3	1.78%	0.94%	0.45%	0.34%	0.27%	0.12%	0.00%
4	2.23%	1.08%	0.54%	0.35%	0.26%	0.13%	0.00%
5	3.08%	1.31%	0.65%	0.36%	0.26%	0.13%	0.00%
6	4.86%	1.67%	0.80%	0.38%	0.27%	0.13%	0.00%
7	9.04%	2.29%	0.97%	0.40%	0.28%	0.13%	0.00%

8	24.99%	3.82%	1.21%	0.42%	0.29%	0.14%	0.00%
9	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%
10	95.77%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	85.72%
11	77.01%	98.26%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	94.44%
12	66.45%	93.07%	99.98%	100.00%	99.80%	100.00%	99.12%

表 2 给出了辐射面为背风面时，污染源位于第 1 层时，不同 Ri 和不同楼层空气污染物扩散风险。由表可知，当$Ri < 1.71$ 时，第 1 层释放的空气污染物扩散风险主要影响到临近的第 2 层，第 2 层以上楼层风险较低。当$Ri \geq 1.71$ 后，扩散风险超过 80%的楼层为第 1~3 层，第 4 层及以上楼层的扩散风险均超过 20%。根据表 3 可知，当污染源位于第 5 层释放，当$Ri < 1.71$ 时，第 5 层以下楼层的空气污染物扩散风险在 10%左右，第 5 层以上楼层的扩散风险基本超过 20%，超过 80%的高风险区为第 6 层。当 $\mathrm{Ri} \geq 1.71$ 后，第 5 层以下楼层的空气污染物扩散风险基本低于 1%，第 5 层以上的扩散风险基本超过 50%，超过 80%的高风险区为第 6~9 层。当污染源位于第 9 层，如表 4，不同 Ri 下第 10~12 层空气污染物扩散风险均高于 60%，第 9 层及以下楼层扩散风险基本低于 1%。

如表 5，当污染源位于建筑室外距离背风墙面$H/3$ 处时，空气污染物扩散风险可以分为两个阶段。当$Ri < 1.71$ 时，空气污染物扩散风险随着楼层增高逐渐递减。当Ri =0.05 时，扩散风险超过 60%的楼层为 1~4 层；当Ri =0.14 时，扩散风险超过 60%的楼层为 1~5 层；当Ri =0.49 时，扩散风险超过 60%的楼层为 1~7 层。在$Ri \geq 1.71$ 后，扩散风险整体低于 60%，空气污染物扩散风险在建筑中部较高，向建筑底部和上部逐渐递减，随着 Ri 增大扩散风险逐渐减小。

表 5 污染源位于背风面室外的空气污染物扩散风险

楼层\Ri	0.05	0.14	0.49	1.71	4.51	9.07	22.51
1	98.95%	99.64%	98.28%	22.75%	25.81%	2.15%	8.84%
2	95.34%	97.68%	97.64%	30.32%	27.87%	2.19%	7.33%
3	86.71%	91.53%	94.94%	41.66%	29.92%	2.46%	5.46%
4	73.80%	80.92%	89.22%	53.34%	32.96%	4.26%	4.35%
5	58.99%	68.15%	81.05%	59.65%	36.02%	7.79%	3.81%
6	44.29%	55.46%	72.28%	61.00%	38.01%	11.77%	3.49%
7	31.35%	44.09%	64.28%	59.41%	38.64%	14.20%	3.44%
8	21.39%	34.62%	57.55%	56.46%	38.18%	15.03%	3.63%
9	14.58%	27.22%	52.11%	53.13%	37.10%	15.07%	3.82%
10	10.29%	21.83%	47.91%	49.85%	35.77%	14.78%	4.03%
11	7.76%	18.26%	44.82%	47.01%	34.42%	14.26%	4.29%
12	6.34%	16.27%	42.54%	46.25%	33.59%	13.49%	4.59%

3 结　论

本文利用风洞实验和数值模拟，综合考虑风效应和太阳辐射产生的热羽流的耦合作用，研究了不同污染源位置和不同 Ri 下高层建筑立面空气污染物跨楼层扩散分布特

性。可以获得以下结论：

（1）通过对比污染物扩散的可视化实验和数值模拟结果发现：RNG k-ε湍流模型可以较好地再现不同迎风工况、不同污染源位置下，气体污染物在建筑周边的扩散趋势。

（2）太阳辐射引起建筑热羽流强弱对建筑背风侧流场结构、室内外物质和热量交换有重要影响。当 $Ri < 1.71$ 时，太阳辐射产生热浮升力作用可以忽略，建筑背风侧流场结构和扩散特性主要受水平来流形成的顺时针尾涡主导；当$Ri \geq 1.71$ 后，随 Ri 的增加，热浮升力作用越来越明显，并逐渐改变且主导建筑背风侧尾流结构，表现为沿背风侧壁面垂直方向流动和扩散明显增强。

（3）污染源位置耦合不同 Ri 数对污染物垂直方向跨楼层扩散具有重要影响。根据风险评价结果，污染源位于第 1 层（下部）时，上层的空气污染物扩散风险区为第 2 层至第 4 层；污染源位于第 5 层（中部）时，扩散风险区主要为临近的第 4 层和第 6 层；污染源位于第 9 层（上部）时，第 10 层至第 12 层的风险普通较高；Ri = 1.71 时，污染物扩散传播影响及范围最大。当污染源位于背风侧地面时，仅在 $Ri \geqslant 1.71$ 范围对第 1 层至第 4 层有超过 70%的风险。

参考文献

[1] Nancy H. L. Leung. Transmissibility and transmission of respiratory viruses. Nature Reviews Microbiology, 2021, 19:528-545.

[2] Kevin P Fennelly. Particle sizes of infectious aerosols: implications for infection control. Lancet Respir Med 2020, 8:914-924.

[3] Niu J, Tung T C W. On-site quantification of re-entry ratio of ventilation exhausts in multi-family residential buildings and implications. Indoor Air, 2010, 18(1):12-26.

[4] Zhong H, Sun Y, Shang J, et al. Single-sided natural ventilation in buildings: a critical literature review. Building and Environment, 2022, 212:108797.

[5] Tine S. Larsen, Per Heiselberg. Single-sided natural ventilation driven by wind pressure and temperature difference. Energy and Buildings, 2008, 40(6):1031-1040.

[6] Liu X, Niu J, Perino M, et al. Numerical simulation of inter-flat air cross-contamination under the condition of single-sided natural ventilation. Journal of Building Performance Simulation, 2008, 1(2):133-147.

[7] Cui P Y , Wang J Q , Yang F , et al. Effects of Radiant Floor Heating Integrated with Natural Ventilation on Flow and Dispersion in a Newly Decorated Residence. International journal of environmental research and public health, 2022, 19(24):16889.

[8] Li X , Zhen Y , Zhao B , et al. Numerical analysis of outdoor thermal environment around buildings. Building and Environment, 2005, 40(6):853-866.

[9] Santamouris M . Cooling the cities – A review of reflective and green roof mitigation technologies to fight heat island and improve comfort in urban environments. Solar Energy, 2014, 103:682-703.

[10] Aleksandrowicz O, Vuckovic M, Kiesel K, et al. Current trends in urban heat island mitigation research: Observations based on a comprehensive research repository. Urban Climate, 2017,21:1-26.

[11] Mu D, Gao N, Zhu T. CFD investigation on the effects of wind and thermal wall-flow on pollutant

transmission in a high-rise building. Building and Environment, 2018,137:185-197.

[12] Gan G .Simulation of buoyancy-driven natural ventilation of buildings—Impact of computational domain. Energy and Buildings, 2010, 42(8):1290-1300.

[13] Li X X, Britter R, Norford L K. Effect of stable stratification on dispersion within urban street canyons: A large-eddy simulation. Atmospheric Environment, 2016, 144:47-59.

[14] Tominaga Y, Stathopoulos T. Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flow field. Atmospheric Environment, 2007, 41(37):8091-8099.

[15] Riley E C, Murphy G, Riley R L. Airborne spread of measles in a suburban elementary school. American Joumal of Epidemiology, 1978, 107(5): 421-32.

[16] 王建辉. 自然通风条件下高层居住建筑周围空气污染物扩散研究[D]. 重庆大学, 2011.

[17] GB50325-2020. 民用建筑工程室内环境污染控制标准[S]. 北京:中国标准出版社, 2020.

中国工程热物理学会 学科类别:传热传质学
学术会议论文 编号：233079

固体氧化物燃料电池钙钛矿阳极金属纳米颗粒溶出的热力学研究

魏云豪，包成*，林梅洁，侯冰阳，卢星宇
（北京科技大学能源与环境工程学院，北京，100083）
（Tel:86-10-62332741, Email:baocheng@me.ustb.edu.cn）

摘要:本文采用基于密度泛函理论计算，对钙钛矿 B 位掺杂过渡金属元素溶出形成金属纳米颗粒的热力学方面展开研究。首先，利用理论计算钙钛矿 B 位掺杂过渡金属元素溶出的能量描述符：氧空位形成能、金属共分离能和空位形成能，对比分析 B 位掺杂金属元素溶出难易的趋势变化。并通过对比溶出形成金属纳米对燃料气体吸附反应过程中能量变化，初步探究纳米颗粒的促进作用。这项工作对于钙钛矿阳极 B 位掺杂金属元素溶出的热力学研究具有重要意义。

关键词：钙钛矿阳极，溶出热力学，能量描述符，金属纳米颗粒，固体氧化物燃料电池，B 位掺杂

0 前言：

固体氧化物燃料电池(Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)目前被认为是一种很有前景的能量转换技术，具有高效的转换效率，清洁无污染和燃料广泛的特点[1]。在过去的研究中，SOFC 从电极结构到电极材料得到了充分的发展。传统的金属 Ni 和陶瓷 YSZ 组成的复合电极材料作为 SOFC 的阳极应用比较广泛，但是实际的使用中依然存在像碳沉积、硫中毒和烧结热应力失配的问题[2]，电极材料的内部电化学反应活性和物理输运性能受到降低[3]。因此，开发下一代的电极材料，发现低成本、高性能的电催化剂，提高电化学反应位点及活性反应，是当前电极材料研究甚至是器件研究的首要任务。由于晶体和电子结构的灵活性，钙钛矿被认为是作为固体氧化物燃料电极应用中高效电催化剂的替代候选者[4]。然而，大多数钙钛矿本身表现出的催化活性较弱。目前存在的解决策略，如：掺杂，缺陷，应变和异质结构等[5]，都可以用来提高电催化剂的活性[6]。为了进一步提高掺杂钙钛矿催化剂的活性，金属溶出工程被认为是实验操作中比较简单的方法之一。

在高温和还原气氛下，具有催化活性的金属催化剂从氧化物晶格中迁移，并在基体表面分离或聚集成纳米颗粒[7]，这样的过程叫做溶出。原则上，溶出纳米颗粒的类型、尺寸、分布状态、形态和化学组成及其与氧化物载体的界面相互作用对于确定催化活性和稳定性至关重要。到目前为止，各种金属纳米颗粒的溶出已经在各种典型的钙钛矿中实现。众所周知，钙钛矿 B 位的过渡金属阳离子是负责催化活性和电子转移[8]。Song 等人[9]通过在氢气环境中还原 $LaCo_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$，制备出具有金属纳米颗粒的复合材料；在电流密度为 10 mA/cm^2 时，其性能优于市售 IrO_2 催化剂。溶出的金属纳米粒子为 SOC 中的燃料氧化反应以及干重整反应中的 CH_4 转化提供了很好的催化活性位点[10]。因此，有效地促进 B 位掺杂金属的溶出是提高钙钛矿电极性能的重要手段。

最初的研究认为溶出的热力学驱动归因于金属氧化物被还原成金属单质的吉布斯自由能变化，并将两者之间建立映射关系，对比ΔG 的数值大小判断 B 位产生金属元素在还原时作为金属溶出的热力学可行性以及相对难易程度[11][12]。ΔG 为负值，说明离子能够在相应的温度下能够被还原成金属单质溶出到载体表面，否则就只能留在氧化物晶格中。在钙钛矿电极 B 位掺杂元素溶出成金属纳米颗粒过程中，B 位掺杂金属需从钙钛矿体相的晶格向表面晶格进行扩散迁移。因此，研究人员提出把 B 位掺杂金属在钙钛矿体相和表面之间的能量差（记作：共分离能）作为溶出过程中的一种驱动力，从而研究钙钛矿电极掺杂不同的过渡

基金项目：1、国家重点研发计划项目(No.2021YFB2500400)；2、国家自然科学基金面上项目(51976009)

金属元素，溶出倾向的难易程度[13]。Gao[14]等人通过计算钛酸锶不同表面取向的分离能，均小于零，说明 Ni 金属元素能够在所有取向的面上形成溶出现象，并且 Ni 元素在 100 面的能量最低更易于溶出。Sun[15]等人的实验研究中也发现多晶系统中(100)取向表面上溶出形成更多的金属纳米颗粒。钙钛矿阳极 B 位掺杂过渡金属元素在溶出还原过程中，钙钛矿的结构会有氧空位的产生。Hamada[16]等人通过密度泛函计算得到钙钛矿 $LeFeO_3$ 中掺杂的 B 位元素的分离能，由于氧空位的存在使得 B 位掺杂金属元素的分离能降低，促使过渡金属元素向表面扩散迁移。Kwon[17]等人研究了分别掺杂 Co、Ni 和 Fe 元素后层状钙钛矿氧化物中掺杂元素溶出过程，发现在高温还原过程中氧空位和 B 位金属空位会迅速产生，并且导致 B 位掺杂的过渡金属元素溶出生成金属单质纳米颗粒；并且基于共分离能认为钙钛矿掺杂的 B 位过渡金属钴元素更容易形成单质。Liang[18]等人在研究镧锶钴铁掺杂 Ru 元素对合金溶出影响的过程中，对比分析了掺杂前后氧空位形成能和金属原子空位形成能的大小对溶出的影响。因此，基于理论计算对掺杂金属的溶出趋势进行判断是指导钙钛矿材料溶出设计的重要方法。同时，钙钛矿电极的表面溶出形成金属纳米颗粒，能够对燃料气体吸附反应起到催化作用，根据萨巴蒂尔原则，催化剂与燃料气体之间的相互作用应该是刚刚好，也就是说，既不太强也不太弱。密度泛函理论计算可以提供钙钛矿在溶出金属纳米颗粒前后的反应过程中的本质区别，可以针对燃料气体分子的吸附，氧化以及生成物的解离过程中的能量变化问题展开相关的理论计算研究，从而探究钙钛溶出金属纳米颗粒对燃料气体上述反应过程中的促进作用。

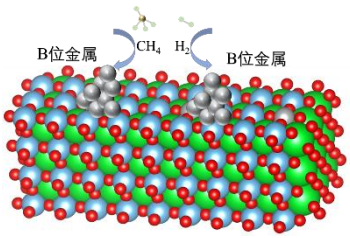


图 1 钙钛矿 B 位掺杂过渡金属元素溶出形成金属纳米颗粒示意图

综上所述，首先介绍了钙钛矿 B 位掺杂金属溶出形成纳米颗粒对电极性能的促进，总结了目前在钙钛矿 B 位掺杂金属溶出热力学研究领域的进展，基于理论计算可以对钙钛矿掺杂金属元素的溶出特性进行研究。因此，进一步综合探究钙钛矿掺杂过渡金属元素溶出的热力学变化趋势以及纳米颗粒对燃料气体反应过程的作用，对深入了解钙钛矿掺杂的溶出特性具有重要作用。本文采用基于密度泛函理论的 Vienna Ab initio Simulation Package(VASP)计算钛酸锶掺杂常用来溶出过渡金属元素的能量描述符的变化趋势，包括氧空位形成能，共分离能和金属空位形成能，以及纳米颗粒的存在对于燃料气体在反应过程中的能量学变化，旨在通过相关能量的变化对比分析掺杂金属溶出的难易程度，以及金属纳米颗粒对固态氧化物燃料电池的性能提升的影响因素。

1、研究内容：

1.1 溶出计算模型建立

密度泛函理论（Density Functional Theory，DFT）在材料科学方面的计算可以研究材料的结构，结构参数表面能量、表面吸附能、表面能、表面重建、缺陷形成能等相关参数[19]。根据前文中对目前钙钛矿 B 位掺杂金属溶出热力学研究的总结，钙钛矿晶格中存在的氧空位会对 B 位掺杂的过渡金属阳离子溶出生成金属纳米颗粒起到促进作用，同时 B 位掺杂金属阳离子从钙钛矿晶格体相扩散到表面的共分离能，以及从晶格中脱离出来的金属空位形成能，都是掺杂金属溶出过程中的关键能量指标。因此，本研究采用氧空位形成能，金属原子空位形成能和共分离能作为对比掺杂原子在钙钛矿电极中溶出倾向和难易程度的参考标准。基本的 ABO_3 型钙钛矿组成上，选用 Sr 作为 A 位宿主原子，Ti 作为 B 位宿主原子。在 B 位

掺杂金属原子的计算上，选取目前常用来产生溶出金属纳米颗粒的元素：Cr、Fe、Co、Ni和 Ru 作为 B 位的掺杂原子，对上述能量描述符的影响及对溶出的作用展开相关探索研究。

所有的理论计算通过 VASP 软件基于考虑自旋极化的密度泛函理论计算得到。采用 Perdew、Burke 和 Ernzerhof (PBE)参数化的广义梯度近似(GGA)和投影增广波(PAW)方法描述离子核。平面波基组使用 400 eV 的截断能，布里渊区积分使用 2×2×1 的 Gamma 中心 k 型格点。力的收敛区间设定为 0.03 eV/Å，结构优化电子自洽能量的收敛标准设定为小于 1×10^{-5} eV。

1.2 溶出能量描述符

根据目前在钙钛矿溶出热力学的研究中，氧空位的存在会促进 B 位掺杂的过渡金属阳离子脱离钙钛矿晶格生成单质。同时氧空位的存在一定程度上影响氧离子的在晶格内部的传递过程，从而对钙钛矿阳极的性能产生影响[20]。钙钛矿 B 位掺杂的过渡金属原子在溶出形成金属单质的过程中，涉及到 B 位掺杂金属阳离子从晶格中脱离。本文考虑采用氧空位形成能，金属原子空位形成能和共分离能作为对比掺杂原子在钙钛矿电极中溶出倾向和难易程度的参考标准。

氧空位形成能($E_{\mathrm{vac_O}}$)的计算公式：

$$E_{\mathrm{vac_O}} = E_{\mathrm{vac}} + \mu_{\mathrm{O}} - E_{\mathrm{b1}} \tag{1}$$

E_{vac}、E_{b1} 分别代表的是钙钛矿结构中存在单位氧空位和没有氧空位时晶胞结构的能量。μ_{O} 代表氧在周期性计算域的能量。

B 位掺杂金属与氧空位的共分离能 $E_{\mathrm{seg_Me}}$ 计算公式：

$$E_{\mathrm{seg_Me}} = E_{\mathrm{surface}} - E_{\mathrm{bulk}} \tag{2}$$

E_{surface} 和 E_{bulk} 分别代表 B 位掺杂原子在钙钛矿结构的体相和晶格表面的能量，用来对不掺杂不同元素迁移到晶格表面的难易度。

金属原子空位形成能($E_{\mathrm{vac_O}}$)的计算公式：

$$E_{\mathrm{vac_Me}} = E_{\mathrm{vac_Me}} + E_{\mathrm{Me}} - E_{\mathrm{b2}} \tag{3}$$

$E_{\mathrm{vac_Me}}$、E_{b2} 分别代表的是钙钛矿结构中存在单位金属原子空位和没有金属原子空位时晶胞结构的能量，同时钙钛矿结构中存在氧空位。E_{Me} 代表单个金属原子的能量。

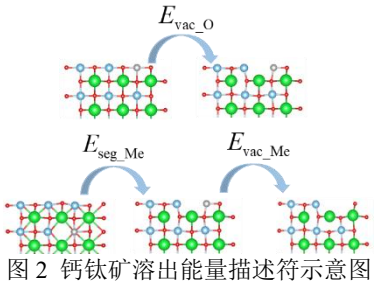


图 2 钙钛矿溶出能量描述符示意图

1.3 气体反应的理论计算模型

钙钛矿基体材料选取钛酸锶($SiTiO_3$)，而 B 位掺杂过渡金属元素选取上述能量描述符的综合评价中表现出易于溶出性质的元素，且需要具有与贵金属相似的电催化性能。探究掺杂的过渡金属元素溶出后形成的金属纳米颗粒对燃料气体反应过程能量变化的影响。采用 VASP 进行平面波 DFT 计算，以确定钙钛矿氧化物表面溶出的纳米颗粒与燃料气体之间反应过程中的相关能量变化。

根据研究中 $SrTiO_3$ 的晶体结构，建立了 $SrTiO_3$(001)表面，采用了 $3^{\times}3^{\times}5$ 超晶胞，构建了相应计算的钛酸锶晶体结构。在 $SrTiO_3$ 结构中将其中一个 Ti 原子替换成一个掺杂金属原子，用以来代表 B 位点存在过渡金属元素的掺杂，这样建立了具有 B 位掺杂过渡金属元素的 STMO 模型，然后在其高度方向上设置真空层，顶部设置为 10 Å，底部设置为 5 Å。基于密度泛函理论的 VASP 计算在钛酸锶 $SrTiO_3$(001)表面与燃料气体之间反应过程的能量学变化。同时在 $SrTiO_3$ 表面构建了金属原子团簇与其复合的结构模型。利用金属原子团簇与钙钛矿基体的复合模型，探究钙钛矿溶出形成金属纳米颗粒后对燃料气体在电极上反应过程的影响。关于 VASP 计算过程中的关键参数均依据前文的设定，在优化过程中，除了最后两层外，所有的原子都被允许松弛。

根据相关研究，通过在钙钛矿表面搭建溶出的金属纳米团簇，利用密度泛函理论和理论计算软件 VASP，对固体氧化物燃料电池常用的燃料气体（氢气和一氧化碳）的吸附反应过程展开计算，探究金属纳米颗粒的溶出对燃料气体在反应过程中的作用。

燃料气体被电极材料吸附的能量变化，可以记作吸附能，为：

$$E_{ads} = E_{com1} - E_{ele} - E_{gas} \quad (4)$$

E_{ads} 代表燃料气体的吸附能，E_{com1} 代表燃料气体分子与电极材料复合结构的理论计算能量，E_{ele} 代表电极材料的理论计算能量，E_{gas} 代表燃料气体分子的理论计算能量。

燃料气体分子被氧化后的能量变化可以被记为：

$$E_{oxi} = E_{com2} - E_{com1} \quad (5)$$

E_{com1} 代表燃料气体分子与电极材料复合结构的理论计算能量，E_{com2} 代表燃料气体分子的生成物与电极材料复合结构的理论计算能量。

燃料气体生成物脱离电极材料的能量变化，可以记作解吸能，为：

$$E_{des} = E_{ele} + E_{pro} - E_{com2} \quad (6)$$

E_{des} 代表燃料气体反应生成物的解吸能，E_{com2} 代表燃料气体分子的生成物与电极材料复合结构的理论计算能量，E_{ele} 代表电极材料的理论计算能量，E_{pro} 代表燃料气体分子反应生成物的理论计算能量。

2、结果与讨论

2.1 溶出的能量描述符

钙钛矿电极中 B 位掺杂金属元素溶出形成金属纳米颗粒，对电极的性能起着至关重要的作用，并且 B 位的过渡金属阳离子负责催化活性和电子转移。氧空位的存在有利于电极材料中氧离子的扩散，同时缺陷的存在也促进其他离子的输运与传递。B 位掺杂的过渡金属原子会在氧原子的促进作用下共同从钙钛矿体相分离到表面结构，这个过程的能量叫做共分离能，作为钙钛矿 B 位掺杂金属元素溶出形成金属纳米颗粒的前提。钙钛矿 B 位掺杂金属原子扩散到结构的表面后，脱离钙钛矿结构的金属空位形成能是溶出过程中重要能量指标。上述三个能量描述符，从不同的角度表现着 B 位掺杂过渡金属元素溶出的难易程度和趋势变化。

图 3 中描述的是钙钛矿 B 位掺杂不同金属元素时，氧空位形成能的变化趋势。基本上可以看到，掺杂的第四周期的过渡金属原子，其氧空位形成能随着原子序数的增大而降低，而第五周期的 Ru 元素的氧空位形成能则相对较大，不利于在钙钛矿结构中形成氧空位。金属空位分离能代表着掺杂的过渡金属原子从钙钛矿体相扩散到表面的难易程度，图 4 中计算

得到的共分离能表明，Fe 和 Co 易于扩散到钙钛矿的表面，Cr 和 Ni 相对次之，而 Ru 元素表现出较难从钙钛矿体相中扩散到钙钛矿结构的表面。根据理论计算，B 位掺杂金属元素的金属空位形成能基本上随着原子序数的增大而降低，能量越低则表明越易形成金属空位缺陷进而形成金属纳米颗粒。

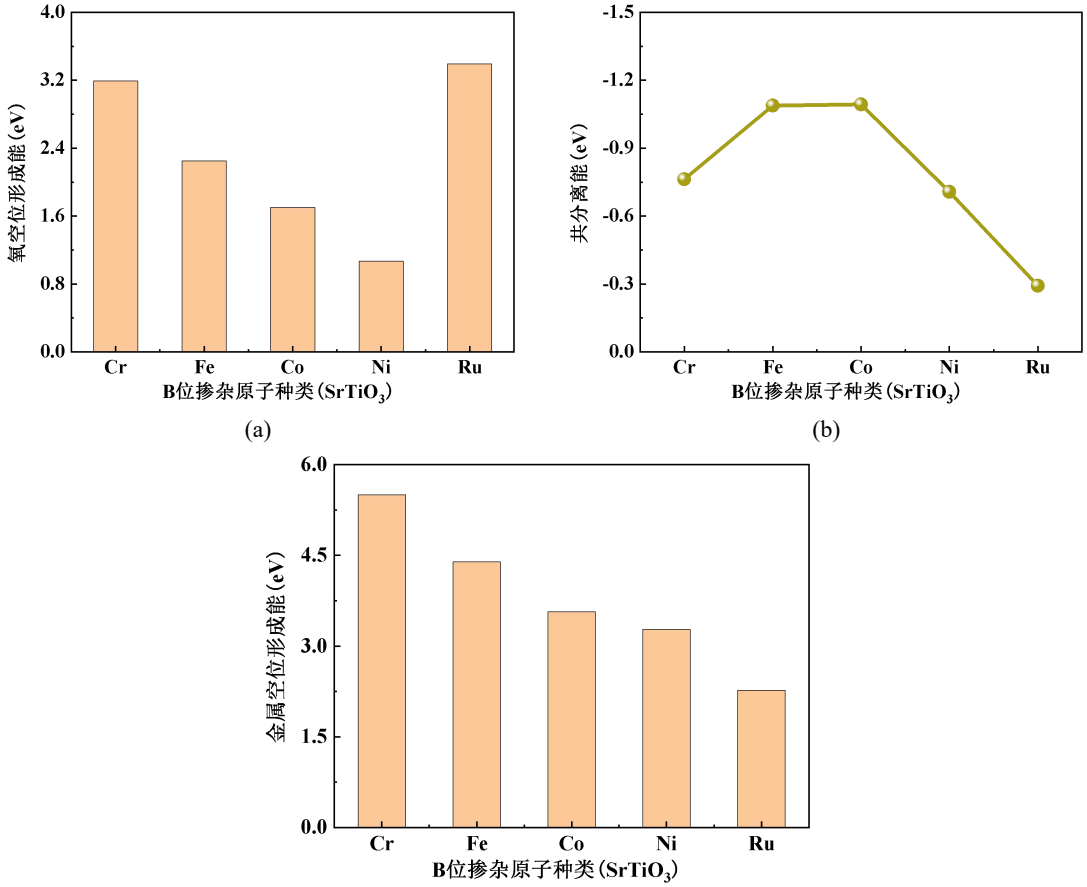


图 3 钙钛矿（钛酸锶 $SrTiO_3$）B 位掺杂不同过渡金属元素时，
(a)氧空位形成能，(b)金属共分离能, (c)金属空位形成能

总得看来，钙钛矿 B 位掺杂过渡金属原子从钙钛矿体相扩散到表面，形成金属空位的过程，综合考虑金属共分离能和空位形成能，其总能量基本上随着原子序数的增大而降低。但是对于实际过程中钙钛矿 B 位掺杂过渡金属元素，氧空位形成能依然是溶出过程中能量考虑的关键。相较之下，选取的 B 位掺杂过渡金属元素中，金属 Ni 表现出较低的溶出能量，易于从钙钛矿结构中溶出，形成金属纳米颗粒。

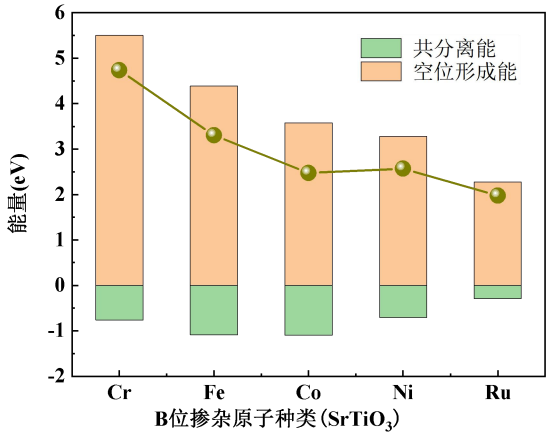


图 4 钙钛矿（钛酸锶 $SrTiO_3$）B 位掺杂不同过渡金属元素时，金属原子溶出过程总能量

2.2 气体反应的理论计算

作为电池阳极的钙钛矿基材料预先在外部经历高温还原过程后，B 位掺杂的过渡金属元素在钙钛矿电极的表面溶出形成金属纳米颗粒，从而提高对燃料气体的催化作用。在钙钛矿结构表面构建溶出金属团簇，基于密度泛函理论和 VASP 计算，通过理论计算对固体氧化物燃料电池常用的燃料气体（氢气和一氧化碳）的吸附，氧化和解吸过程展开计算，探究掺杂金属元素的溶出对燃料气体在反应过程中的作用。

2.2.1 氢气理论计算

氢气是 SOFC 阳极常采用的燃料气体种类，是清洁型燃料，反应生成的产物对环境无污染。因此，首先考虑计算钙钛矿表面有无金属纳米颗粒时，氢气在其表面的吸附，氧化和生成物解吸过程中的能量变化。根据构建的具有 B 位掺杂过渡金属元素的钛酸锶晶体和表面具有 Ni 团簇的钛酸锶复合晶体结构，展开理论计算。

氢气分子的氧化和晶格氧的迁移是需要考虑的关键问题，氢气分子的活化过程主要包括以下三个步骤：氢气的吸附，氧化和水分子的解吸过程。如图 5 和 6 分别描述的是钙钛矿仅有掺杂金属元素(STNO)结构和具有 Ni 团簇的复合结构，电极材料对燃料气体的吸附反应过程中能量变化的计算数值。在掺杂的 STNO 表面的 Ni 位点上，电极材料对氢气分子的吸附能为−0.86 eV；相较之下，钙钛矿 STO 具有溶出金属纳米颗粒 Ni 团簇的复合结构，对氢气分子的吸附能为−2.21 eV。因此，后者对氢气的吸附作用更强。进而通过带有电子转移的氧化反应，吸附后的氢分子被氧化为水分子。对生成物的解吸过程，仅有 Ni 元素掺杂的 STNO 中吸附状态的 H_2O 解吸能为 0.14 eV，具有 Ni 团簇的钙钛矿复合结构的解吸能为 0.17 eV，整体上相差不大。

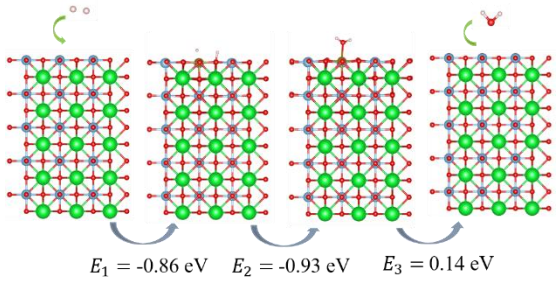


图 5 钛酸锶 B 位掺杂 Ni 元素，氢气反应过程能量变化的理论计算

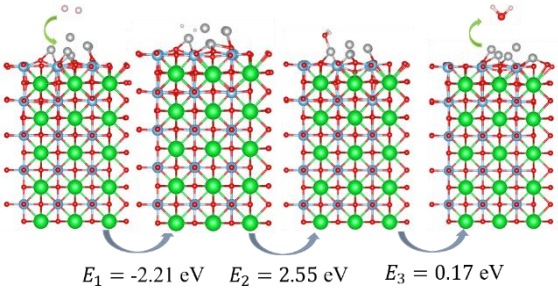


图 6 钛酸锶表面存在 Ni 金属团簇，氢气反应过程能量变化的理论计算

如台阶图 7 所示，钛酸锶中仅掺杂过渡金属 Ni 元素与具有 Ni 团簇的钛酸锶复合结构相比较，具有 Ni 团簇的复合结构对氢气分子的吸附能大大增强，而两者对水分子的解吸能却相差的较小。整体上来看，后者所代表的具有金属纳米颗粒存在的钙钛矿电极，更易于吸附氢气进而促进后续的反应，从而能够有潜力对燃料氢气反应过程表现出有效的催化作用。同时，图 8 中 a 和 b 分别展示了钙钛矿 B 位掺杂过渡金属元素结构和具有 Ni 团簇的钙钛矿复合结构吸附氢气分子时的二维电荷密度差分示意图，黄色代表电荷增加，绿色代表电荷减少，

金属团簇的存在提供了更多的可转移的电子，有利于氢气分子与基体结构之间形成强的吸附作用。

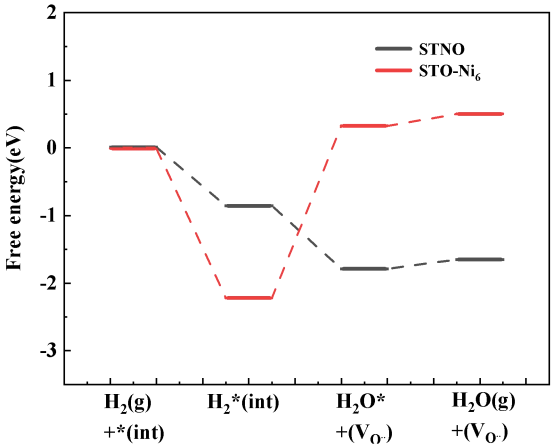


图 7 钛酸锶 B 位掺杂过渡金属有无金属团簇，氢气反应的能量台阶图



(a) (b)

图 8 钛酸锶 B 位掺杂过渡金属有(a)无(b)金属团簇吸附氢气的差分电荷图

2.2.2 一氧化碳理论计算

一氧化碳作为化工产业生产过程中的副产品，从来源角度来讲，比清洁燃料氢气更容易得到，并且制备的成本也相对较低,并且是研究碳氢燃料通性问题时的首选。因此，首先考虑通过理论计算在钙钛矿材料基体表面无金属纳米颗粒和有金属纳米颗粒时，一氧化碳在其表面的吸附，氧化和生成物解吸过程中的能量变化，相关能量计算结果如图 9 和 10 所示。

图 9 描述的钙钛矿仅有掺杂金属元素(STNO)，电极材料对燃料气体的吸附反应过程中能量变化的计算数值，而图 10 描述的是钙钛矿基体表面具有 Ni 团簇的复合结构下，即有金属纳米颗粒存在时，电极材料对燃料气体一氧化碳的吸附反应过程在能量变化。在掺杂的 STNO)表面的 Ni 位点上，对一氧化碳分子的吸附能为−0.77 eV；而具有溶出金属纳米颗粒 Ni 团簇的复合结构，对一氧化碳分子的吸附能为−2.09 eV。金属纳米颗粒的存在同样对一氧化碳的吸附作用能够得到一定程度的增强。仅有 Ni 元素掺杂的 STNO 中吸附状态的二氧化碳解吸能为-0.11 eV，具有金属 Ni 团簇的钙钛矿复合结构的解吸能为 0.76 eV，吸附能相差相对较小。

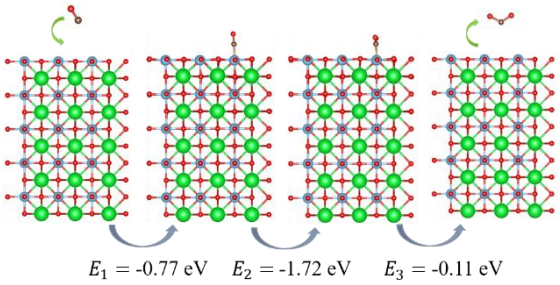


图 9 钛酸锶 B 位掺杂 Ni 元素，一氧化碳反应过程能量变化的理论计算

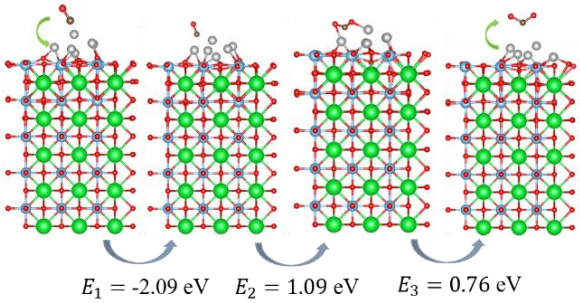


图 10 钛酸锶表面存在 Ni 金属团簇，一氧化碳反应过程能量变化的理论计算

根据理论计算的能量台阶图 11 来看，钛酸锶结构中仅掺杂过渡金属 Ni 元素与具有 Ni 团簇的钛酸锶复合结构相比较，具有 Ni 团簇的复合结构对燃料气体一氧化碳分子的吸附能大大减低，而两者对水分子的解吸能却相差较小。因此从整体上来看，表面具有金属纳米颗粒的钙钛矿电极，在初期对燃料气体一氧化碳分子的吸附过程中吸附能相对较大，能够吸附更多比例的一氧化碳参与反应，相比于无溶出金属纳米颗粒的钙钛矿电极材料更容易吸附一氧化碳，从而能够表现出对一氧化碳气体反应过程更好的催化作用。同时，图 12 中 a 和 b 分别展示了钙钛矿 B 位掺杂过渡金属元素结构和具有 Ni 团簇的钙钛矿复合结构吸附一氧化碳分子时的二维电荷密度差分示意图，同样金属团簇的存在提供了更多的可转移价态电荷，有利于基体结构对一氧化碳分子的吸附。

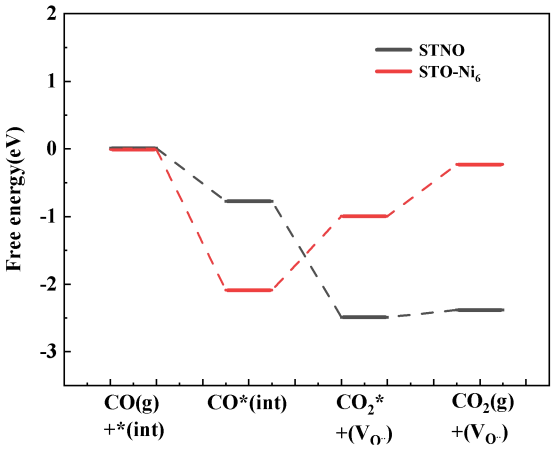


图 11 钛酸锶 B 位掺杂过渡金属有无金属团簇，一氧化碳反应的能量台阶图



(a) (b)

图 12 钛酸锶 B 位掺杂过渡金属有(a)无(b)金属团簇吸附氢气的差分电荷图

3、结论

本文针对钙钛矿 B 位掺杂过渡金属元素溶出形成金属纳米颗粒及燃料气体吸附反应过程展开相应的研究。基于密度泛函理论和 VASP，从空位形成能，金属共分离能和空位形成能，三个溶出能量描述符的角度出发，针对钙钛矿 B 位掺杂不同种类的过渡金属元素，计算上述能量的趋势变化，进而综合分析溶出金属元素的难易程度。同时在钙钛矿结构表面构建金属团簇结构，展开对燃料气体吸附反应过程中的能量计算，进一步探究金属纳米颗粒对燃料反应的促进作用。

钙钛矿以钛酸锶为基体，B 位掺杂 Cr、Fe、Co、Ni 和 Ru 不同的过渡金属元素，氧空位形成能存在周期性变化，掺杂 Ni 金属表现出较低的氧空位形成能；而在金属原子溶出过程的共分离能和空位形成能，金属空位形成能占据主要的影响作用；综合考虑金属原子溶出过程的能量描述符较低，以及氧空位形成能的较小的金属元素，对 B 位进行金属元素掺杂。通过在钙钛矿表面构建金属元素 Ni 团簇来对比有无纳米颗粒的存在，计算燃料气体的吸附反应过程能量变化，发现金属纳米颗粒的存在增强了对燃料气体的吸附，以及团簇的存在改善了电荷分布结构，提供了更多的可转移电子。因此，本研究对钙钛矿电极材料溶出金属元素的掺杂选取以及纳米颗粒对燃料气体吸附反应的研究具有重要的指导意义。

参考文献：

[1] Jiang SP. Nanoscale and nano-structured electrodes of solid oxide fuel cells by infiltration: Advances and challenges. International Journal of Hydrogen Energy. 2012;37:449-70.

[2] 常文博. SOFC 镧掺杂钛酸锶阳极材料制备及电极性能的研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2015. Wenbo Chang, Preparation and Electrode Properties of Lanthanum Doped Strontium Titanate Anode Materials for SOFC[D]. Harbin Institute of Technology, 2015

[3] Miao H, Liu G, Chen T, et al. Behavior of anode-supported SOFCs under simulated syngases[J]. Journal of Solid State Electrochemistry, 2015, 19(3): 639-646.

[4] Hwang J, Rao R R, Giordano L, et al. Perovskites in catalysis and electrocatalysis[M]. 358. 2017: 751-756.

[5] Zhao J-W, Shi Z-X, Li C-F, et al. Regulation of Perovskite Surface Stability on the Electrocatalysis of Oxygen Evolution Reaction[J]. ACS Materials Letters, 2021, 3(6): 721-737.

[6] Dai Y, Yu J, Cheng C, et al. Mini-review of perovskite oxides as oxygen electrocatalysts for rechargeable zinc–air batteries[J]. Chemical Engineering Journal, 2020, 397: 125516.

[7] Druce J, Téllez H, Burriel M, et al. Surface termination and subsurface restructuring of perovskite-based solid oxide electrode materials[J]. Energy & Environmental Science, 2014, 7(11): 3593-3599.

[8] Irvine J T S, Neagu D, Verbraeken M C, et al. Evolution of the electrochemical interface in high-temperature fuel cells and electrolysers[J]. Nature Energy, 2016, 1(1): 15014.

[9] Song S; Zhou J; Su X, et al., Operando X-ray spectroscopic tracking of selfreconstruction for anchored nanoparticles as high-performance electrocatalysts towards oxygen evolution[J]. Energy & Environmental Science 2018, 11 (10), 2945-2953.

[10] Joo S; Kwon O; Kim K, et al., Cation-swapped homogeneous nanoparticles in perovskite oxides for high power density[J]. Nature Communications 2019, 10, 697.

[11] Tsekouras G; Neagu D; Irvine J T S, Step-change in high temperature steam electrolysis performance of perovskite oxide cathodes with exsolution of B-site dopants[J]. Energy & Environmental Science 2013, 6 (1), 256-266.

[12]Tanaka H; Uenishi M; Taniguchi M, et al., Intelligent catalyst having the self-regenerative function of Pd, Rh and Pt for automotive emissions control[J]. Catalysis Today 2006, 117 (1-3), 321-328.

[13] Kim K J; Han H; Defferriere T, et al., Facet-Dependent in Situ Growth of Nanoparticles in Epitaxial Thin Films: The Role of Interfacial Energy[J]. Journal of the American Chemical Society 2019, 141 (18), 7509-7517.

[14] Gao Y; Lu Z; You T L, et al., Energetics of Nanoparticle Exsolution from Perovskite Oxides[J]. Journal of Physical Chemistry Letters 2018, 9 (13), 3772-377

[15] Sun Y, Li J, Zeng Y, Amirkhiz BS, Wang M, Behnamian Y, et al. A-site deficient perovskite: the parent for in situ exsolution of highly active, regenerable nano-particles as SOFC anodes. Journal of Materials Chemistry A. 2015;3:11048-56.
[16] Hamada I, Uozumi A, Morikawa Y, et al. A Density Functional Theory Study of Self-Regenerating Catalysts LaFe1–xMxO3–y (M = Pd, Rh, Pt)[J]. Journal of the American Chemical Society, 2011, 133(46): 18506-18509.
[17] Kwon O, Sengodan S, Kim K, et al. Exsolution trends and co-segregation aspects of self-grown catalyst nanoparticles in perovskites[J]. Nature Communications, 2017, 8(1): 15967.
[18] Liang Y, Cui Y, Chao Y, et al. Exsolution of CoFe(Ru) nanoparticles in Ru-doped $(La_{0.8}Sr_{0.2})_{0.9}Co_{0.1}Fe_{0.8}Ru_{0.1}O_{3-\delta}$ for efficient oxygen evolution reaction[J]. Nano Research, 2022, 15(8): 6977-6986.
[19] Fu W, Liu H, Shi X, et al. Tailoring the Functionality of Organic Spacer Cations for Efficient and Stable Quasi-2D Perovskite Solar Cells[J]. Advanced Functional Materials, 2019, 29: 1900221-1900228.
[20] Li Y, Zhang W, Zheng Y, et al. Controlling cation segregation in perovskite-based electrodes for high electro-catalytic activity and durability[M]. 46. Royal Society of Chemistry, 2017, 46: 6345-6378.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233085

PEMFC 全尺寸蜿蜒、缩扩流道流场板的仿真研究

李泽希[1]，何璞[1]，张卓[1]，王海峰[2]，王进辉[2]，陶文铨[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，西安 710049）
（2：陕西旭强瑞清洁能源有限公司，韩城 715405）
* wqtao@mail.xjtu.edu.cn

摘要：双极板是质子交换膜燃料电池（PEMFC）的重要组件之一，其结构对 PEMFC 的水、热管理和电传输具有重要影响。本文使用经过验证的三维两相非等温模型，对不同流道配置下（蜿蜒流道与缩扩流道）的典型单元和全尺寸质子交换膜燃料电池进行了数值仿真，通过定义整板关键物理量均匀性指数，分析了不同流道结构对燃料电池内部关键物理量分布均匀性的影响。最后，验证了使用典型单元代替全尺寸 PEMFC 进行性能仿真的可行性。

关键词：质子交换膜燃料电池，数值仿真，全尺寸流场板，缩扩流道

0 前言

质子交换膜燃料电池是一种将氢燃料的化学能直接转化为电能的电化学装置，为能量转换提供了一种高效和清洁的机制，它与可再生能源和现代能源载体（即氢）相结合对实现双碳目标核能源转型具有重要意义[1]。质子交换膜燃料电池双极板设计的基本要求是使反应物、温度等在膜电极表面均匀分布，并有效地从燃料电池中去除反应产物水，以在可接受的压降和制造复杂性的前提下减少传质损失，图 1 显示了质子交换膜燃料电池中的部件与工作过程。

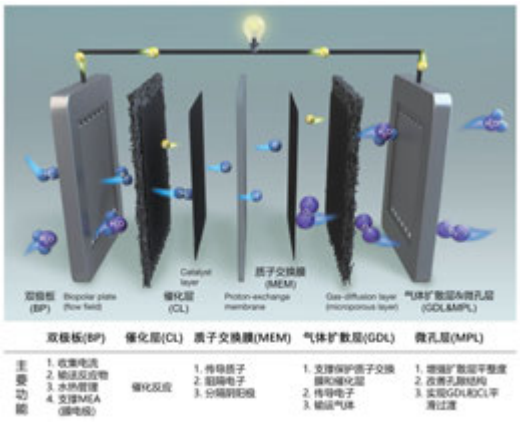


图 1 质子交换膜的部件与工作原理[2]

基金项目：国家自然科学重点基金（51836005），陕西省科技厅基金(Grant number 2019ZDXM3-01)，国家自然科学基金创新群体基金（51721004）。

尽管对 PEMFC 流场板的尺寸和形状的研究已经进行了几十年，但随着对 PEMFC 性能要求的不断提高，高性能流场板的开发对提高电池性能仍然大有裨益[3]。近年来开发了许多三维流道结构，即流道结构不仅在平面方向有变化，在垂直于面内的厚度方向同样有变化，以期能够改进燃料电池的传质性能与驱水性能。最初的三维流道改进是基于在传统流道中增加挡板或阻流块，之后出现了截面积连续变化的流道，有研究表明，在阴极流道沟槽中加入各种形状的挡板或对流道进行三维形式的改进，可以增强氧气的对流传质效应，加速通道内液态水的排出，从而提高燃料电池的输出电流密度[4–6]。

典型单元仿真的方法在 PEMFC 性能的研究中得到广泛的应用，因为这可以大大节省仿真的成本[7]；除了这种方法无法揭示全场物理量的分布均匀性外，所得到的极化曲线与全场仿真的极化曲线符合程度如何，是一个十分值得关注的问题。目前文献中少有这样的对比研究。本文使用经过验证的三维两相非等温模型，对不同流道配置下（蜿蜒流道与缩扩流道）的典型单元和活性面积约为 238cm^2 的全尺寸整板 PEMFC 进行了数值仿真，验证了使用典型单元代替全尺寸 PEMFC 进行性能仿真的可行性。

1 数值模型与实验验证

1.1 模型假设

（1）流动为稳态；（2）反应物为理想气体混合物；（3）忽略重力影响；（4）流动为不可压层流；（5）各种物性参数均为常数；（6）假设流道内的液态水能够被气流迅速吹出，阴、阳极流道区域液态水含量为零。

上述假设广泛应用在燃料电池的数值仿真研究中[8,9]。

1.2 控制方程与边界条件

与上述物理模型相应的控制方程包含质量守恒方程、动量守恒方程、组分守恒方程、液态水守恒方程、膜态水守恒方程、电势守恒方程和能量守恒方程，由表 1 所示。本文中由入口面积与参考电流密度给定阳极、阴极入口质量流量并在燃料电池阴极与阳极的极板端面处施加过电势。

表 1 控制方程

类型	守恒方程	计算域
气体混合物质量守恒	$\nabla\cdot(\rho_{\mathrm{g}}\vec{u}_{\mathrm{g}})=S_{\mathrm{m}}$	流道，GDL，CL
气体混合物动量守恒	$\begin{cases}\nabla\cdot\left(\dfrac{\rho_{\mathrm{g}}\vec{u}_{\mathrm{g}}\vec{u}_{\mathrm{g}}}{\varepsilon^2(1-\mathrm{s_{lq}})^2}\right)=-\nabla p_g\\ +\mu_{\mathrm{g}}\nabla\cdot\left(\nabla\left(\dfrac{\vec{u}_{\mathrm{g}}}{\varepsilon(1-\mathrm{s_{lq}})}\right)+\left(\dfrac{\vec{u}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{T}}}{\varepsilon(1-\mathrm{s_{lq}})}\right)\right)\\ -\dfrac{2}{3}\mu_{\mathrm{g}}\nabla\left(\nabla\cdot\left(\dfrac{\vec{u}_{\mathrm{g}}}{\varepsilon(1-\mathrm{s_{lq}})}\right)\right)+S_{\mathrm{u}}\end{cases}$	流道，GDL，CL
气体组分	$\nabla\cdot(\rho_{\mathrm{g}}\vec{u}_{\mathrm{g}}Y_{\mathrm{i}})=\nabla\cdot(\rho_{\mathrm{g}}D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{eff}}\nabla Y_{\mathrm{i}})+S_{\mathrm{i}}$	流道，GDL，CL
液态水	$\nabla\cdot(\iota\rho_{\mathrm{lq}}\vec{u}_{\mathrm{g}})=\nabla\cdot(\rho_{\mathrm{lq}}D_{\mathrm{lq}}\nabla\mathrm{s_{lq}})+S_{\mathrm{lq}}$	GDL，CL

膜态水	$-\frac{\rho_{\mathrm{mem}}}{EW}\nabla\cdot(D_{\mathrm{mw}}^{\mathrm{eff}}\nabla\lambda_{\mathrm{mw}})=S_{\mathrm{mw}}$	膜, CL
电子势	$0=\nabla\cdot(\kappa_{\mathrm{ele}}^{\mathrm{eff}}\nabla\phi_{\mathrm{ele}})+S_{\mathrm{ele}}$	CL，GDL，BP
离子势	$0=\nabla\cdot(\kappa_{\mathrm{ion}}^{\mathrm{eff}}\nabla\phi_{\mathrm{ion}})+S_{\mathrm{ion}}$	膜，CL
能量	$\nabla\cdot\left((\rho c_{\mathrm{p}}\vec{u})_{\mathrm{fl}}^{\mathrm{eff}}\mathrm{T}\right)=\nabla\cdot(\kappa_{\mathrm{fl,sl}}^{\mathrm{eff}}\nabla\mathrm{T})+S_{\mathrm{E}}$	所有域

1.3 数值计算过程与模型验证

本文使用商业软件 Fluent 作为求解器，结合用户定义函数（UDF）求解源项与控制方程。采用 SIMPLE 算法实现压力、速度的耦合；动量、组分等所有物理量的对流项均采用二阶迎风格式离散。模型验证所使用的蜿蜒流道流场板由陕西省旭强瑞清洁能源有限公司提供，其各部件的尺寸列于表 2 中。

表 2 流场板关键几何参数

参数	单位	值
阴/阳极极板厚度	mm	0.36/0.16
阴/阳极流道高度	mm	0.3/0.2
阴/阳极 GDL 厚度	mm	0.215/0.28
阴/阳 CL 厚度	μm	7/6
膜厚度	μm	12
MEA 长度/宽度	mm	238/117
流道宽度	mm	0.5
肋宽度	mm	0.5
GDL/CL 孔隙度	-	0.84/0.3814

区域离散采用了六面体网格以提升网格质量；PEMFC 阳极采用了原始蜿蜒流道，为了研究阴极流道的改变对燃料电池的影响，使用了两种类型的阴极流道，分别为蜿蜒流道和新型缩扩流道。最终，全尺寸整板 PEMFC 网格数量达到了约 2.4 亿。

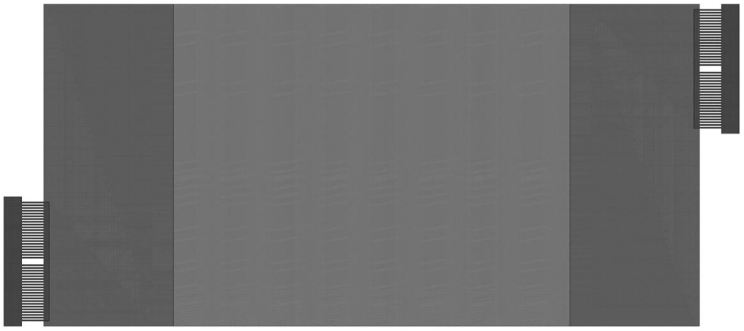


图 2 流场板块结构化网格示意图

模型验证采取三个不同的工况点（三种不同的操作条件）进行与实验数据的对比。三种工况的重要参数如表 3 所示。

表 3 三种工况操作参数

电流密度/ A·cm^{-2}	阴阳极 化学剂量比	阴阳极背压 / kPa	进堆温度 / ℃	阴阳极湿度
0.3	2/1.5	73.3/95.8	73.9	60%/0
1.0	2/1.5	51.6/87.5	73.9	60%/0
1.8	2/1.5	79.0/139.2	73.9	60%/0

使用表 3 所示的操作条件对蜿蜒流道流场板进行数值仿真，将仿真结果与实验数据绘制了 I-V 极化曲线，如图 3 所示。在三种不同的操作条件下，数值模型的误差均小于 8%，符合工程误差要求，开发的模型与 UDF 可保证后续流场研究的可靠性。

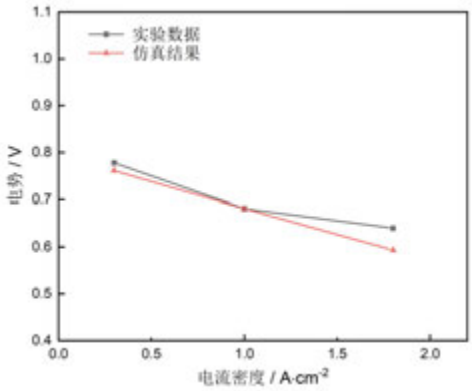


图 3 模型验证极化曲线

2 结果与讨论

2.1 全尺寸整板燃料电池性能仿真对比

在本文的研究中，采用了两种不同缩扩程度的三维渐缩渐扩流道结构。缩扩流道通过对传统的直流道在部分区域替换为渐缩渐扩结构而得到，在直流道上每间隔 12mm 就制造一段在宽度与高度方向产生变化的渐进缩扩段，因此 12mm 为半个缩扩循环。

所采用的渐缩渐扩的流道示意图如图 4 所示。本节的研究采用了两种变化程度的缩扩流道来替换的蜿蜒流道，变化程度体现在变化最窄处的宽度与高度。详细来说，本节采用的缩扩流道的变化程度分别为 25%和 50%，需要说明的是，这两种缩扩程度的流道可能并不是使得性能最佳的比例；变化程度 25%是将变化最窄处的流道截面在高度与宽度方向同时缩小 25%，也就是缩小为原来高度与宽度的 75%；同理，变化程度 50%是将变化最窄处的流道截面在高度与宽度方向同时缩小 50%。

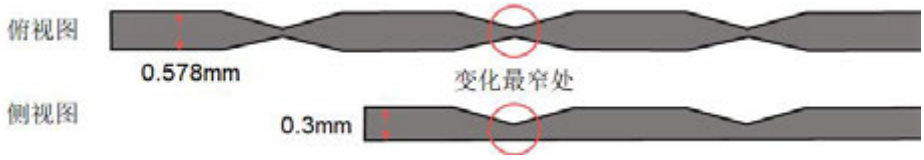


图 4 缩扩流场流道结构示意图

在将这两种流场进行前处理网格绘制后，使用与蜿蜒流道燃料电池模拟中相同的数值模型对两种缩扩流道燃料电池进行仿真。首先对比了三种流场板结构对整板 PEMFC 极化曲线的影响，如图 5 所示。可知，对于三种不同流道形式的燃料电池，在相同的操作条件下的预测极化曲线趋近重合。特别是缩扩 25%流道，在多个工况点下的性能与蜿蜒流道相同，而缩扩流道 50%的燃料电池性能在高电流密度时性能略有下降，但在 2.5A·cm^{-2} 电流密度下与其他两种流道燃料电池的最大性能差距仅约为 0.58%。于是可知，在目前所使用的操作条件下，蜿蜒流道与两种缩扩流道的整板燃料电池性能相当。

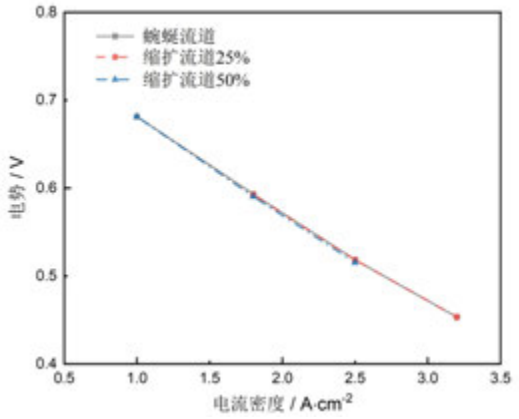


图 5 三种流道形式（蜿蜒流道、缩扩流道 50%、缩扩流道 25%）整板燃料电池极化曲线

2.2 典型单元性能仿真的有效性

2.2.1 典型单元几何结构

作为对比，本节使用三根流道组成的典型单元进行仿真，图 6 展示了蜿蜒流道与缩扩流道典型单元的结构示意图。本节仿真中所使用的三根流道典型单元可视为直接从整板燃料电池的中间流道区域截取的，典型单元燃料电池长度都为 144mm。

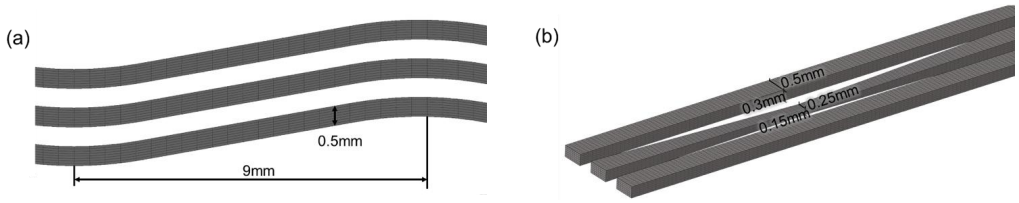


图 6 三流道典型单元的流道结构示意图（a）蜿蜒流道（b）50%缩扩流道

2.2.2 典型单元计算域网格配置

不同结构典型单元的计算域都包含大约 300 万网格，全部由六面体网格组成。典型单元可视为实际中的整个流场板的一部分，因此在典型单元侧壁面使用对称边界条件，其他壁面简化为等温边界条件。使用两个具有 64 线程的节点（AMD（R）EPYC 7452 CPU@2.35 GHz）在集群上进行数值模拟，获得收敛解通常需要 20,000 次迭代。

2.2.3 典型单元与全尺寸整板性能仿真对比

结合 2.1 节中的整板燃料电池与本节中的典型单元仿真结果，对使用相同的 PEMFC 数值模型与操作条件下得到的性能结果进行了对比，得到如图 7 所示的极化曲线。

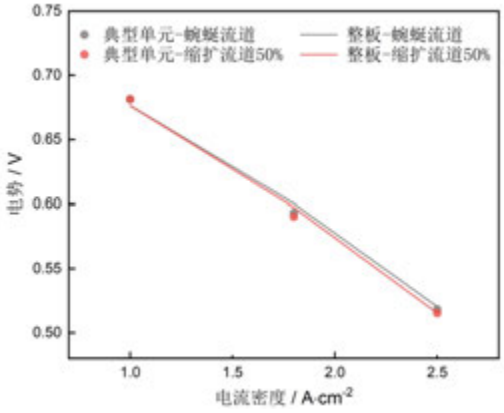


图 7 典型单元与整板燃料电池仿真极化曲线对比

由图 7 可知，不论是蜿蜒流道还是缩扩流道，在使用相同的数值模型和运行条件下的条件下，对典型单元或整板 PEMFC 进行仿真得到的极化曲线没有明显的差异；具体来说，在 1.8A·cm^{-2} 的电流密度时，典型单元和整板燃料电池仿真得到的电势差异最大，但仍小于 1.2%。本节中采用的典型单元结构为三流道典型单元，且典型单元的长度较长，约为整板长度的 60%；在这样的前提条件下，使用典型单元来对燃料电池进行性能仿真是可行的，它能够得到与整板仿真差异极小的性能仿真结果；但就计算区域的网格而言，典型单元计算网格为 300 万，而整场计算为 2.4 亿，这极大地节省了计算资源。因此，在不考虑分析 PEMFC 内部物理量分布均匀性的情况下，使用选择合适的典型单元对燃料电池进行仿真是获得极化曲线的可行方法。

受限于会议论文的篇幅，本文不针对整板 PEMFC 内部的物理量均匀性做对比，关于均匀性对比的内容，可关注本小组未来发表的文章。

3 结　论

本文使用三维数值模型对全尺寸整板 PEMFC 进行了仿真，将仿真结果与实验数据进行了验证，并且对比了蜿蜒流道、缩扩流道 25%和缩扩流道 50%整板燃料电池的性能差异；最后讨论了使用典型单元代替整板结构进行性能仿真的可行性。得出的结论总结如下：

1）在本文所使用的操作条件下，蜿蜒流道与两种缩扩流道的整板 PEMFC 输出特性相当。

2）使用三流道典型单元对燃料电池进行性能仿真是可行的，它能够得到与整板仿真差异极小的极化曲线。在不需要获得整板物理量分布的情况下，是一种可行的工程预测方法。

参考文献

[1] Sharaf O Z, Orhan M F. An overview of fuel cell technology: Fundamentals and applications[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2014, 32: 810-853.

[2] Jiao K, Xuan J, Du Q, et al. Designing the next generation of proton-exchange membrane fuel cells[J]. Nature, 2021, 595(7867): 361-369.

[3] Li Z, Bai F, He P, et al. Three-dimensional performance simulation of PEMFC o

f metal foam flow plate reconstructed with improved full morphology[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2023, 48(71): 27778-27789.
[4] Zhang Y, He S, Jiang X, et al. Three-dimensional multi-phase simulation of proto n exchange membrane fuel cell performance considering constriction straight channel[J]. Energy, 2023, 267: 126544.
[5] Chen X, Yu Z, Yang C, et al. Performance investigation on a novel 3D wave fl ow channel design for PEMFC[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46 (19): 11127-11139.
[6] Zhang Z, Bai F, He P, et al. A novel cathode flow field for PEMFC and its per formance analysis[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2023, 48(63): 24459-2 4480.
[7] Zhang G, Qu Z, Tao W Q, et al. Porous flow field for next-generation proton ex change membrane fuel cells: materials, characterization, design, and challenges[J]. Che mical Reviews, 2023, 123(3): 989-1039.
[8] Zhang G, Bao Z, Xie B, et al. Three-dimensional multi-phase simulation of PEM fuel cell considering the full morphology of metal foam flow field[J]. International Jo urnal of Hydrogen Energy, 2021, 46(3): 2978-2989.
[9] Jiao K, He P, Du Q, et al. Three-dimensional multiphase modeling of alkaline an ion exchange membrane fuel cell[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2014, 39(11): 5981-5995.

中国工程热物理学会　　传热传质学
学术会议论文　　编号：233094

求解流动传热问题的简化离散速度热格子 Boltzmann 通量求解器研究

刘翔，何雅玲*，俞逸斯，汪思成
（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）
（Tel: 029-82665930, Email: yalinghe@mail.xjtu.edu.cn）

摘　要：热格子 Boltzmann 通量求解器（Lattice Boltzmann Flux Solver, LBFS）是求解流动传热问题的重要方法。传统热 LBFS 基于标准离散速度模型，在计算效率方面存在不足。针对该问题，本文建立了求解流动传热问题的简化离散速度热 LBFS。基于包含较少离散速度的二维五速模型，发展了求解热力学能方程的 LB 方法。采用有限容积法离散宏观控制方程，根据发展的 LB 方法计算界面宏观守恒量通量，并显式更新单元变量，实现了流动传热问题的求解。最后，通过两个基准算例对热 LBFS 进行了验证。

关键词：格子 Boltzmann 方法；有限容积法；离散速度模型；界面通量

0 前言

流动传热现象广泛存在于飞行器热防护、电子器件冷却和太阳能热利用等物理过程[1,2]，是工程热物理学科的主要研究内容之一，因此开展流动传热问题研究具有重要的科学与应用价值。随着数值计算理论与计算机技术的发展，数值方法已逐渐成为该领域的重要研究手段。目前主要包括针对宏观控制方程进行离散的传统方法（如有限容积法和有限元法等）、针对 Boltzmann 方程（Boltzmann Equation, BE）进行求解的介观数值方法和直接对分子运动进行统计平均的微观方法（如分子动力方法）等。在介观方法中，格子 Boltzmann（Lattice Boltzmann, LB）方法起源于格子气自动机和 BE，具有清晰的粒子特性和介观动理学背景。该方法可以视为离散速度 BE 沿特征线的特殊差分形式，通过分布函数局部碰撞过程和线性迁移过程实现流动问题的求解，避免了传统数值方法中非局部非线性对流项的处理。由于 LB 方法在数值实施和并行计算等方面具有显著优势，被进一步被推广至复杂流动传热问题的预测[3-5]。

LB 方法已经在流动传热问题方面中取得了诸多进展，然而该方法仍存在着一些需要解决的问题[6, 7]。计算网格方面：传统 LB 方法通常采用均匀网格进行离散，该特性为其引入了易于实施的优势，但也导致该方法难以采用包含几何信息的非均匀网格，影响了复杂几何适用性。边界处理方面：实际边界条件通过宏观变量给出，而 LB 方法基于介观分布函数进行边界处理，两者间的转换为边界处理带来了困难。此外，均匀网格也导致了曲线边界处理的复杂性。计算效率方面：由于其采用的特殊离散方式，LB 方法是一种显式时间推进方法，且时间步长与空间步长相互耦合，不能独立调节。在较细网格的情况下，时间步长也较小，该特性显著影响了计算效率。

为克服 LB 方法存在的问题，将传统宏观方法中广泛采用的有限容积法（Finite Volume Method, FVM）[8]与 LB 方法相结合是重要的研究内容。该类方法可以大致分为：（1）采用 FVM 对离散速度 BE 进行离散的有限容积 LB（FVLB）方法[9]和（2）基于 FVM 对宏观控制方程进行离散，而采用 LB 方法构建界面未知宏观守恒量通量的格子 Boltzmann 通量求解器（Lattice Boltzmann Flux Solver, LBFS）[7, 10, 11]。FVLB 方法采用 FVM 对控制单元分布函数进行积分，在界面处计算介观分布函数通量。该方法消除了 LB 方法均匀网格的限制，但并未完全脱离介观分布函数演化的思想，在求解不同离散速度方向分布函数是需消耗较多的计算资源。而 LBFS 则采用了完全不同的计算方式，基于 LB 方法构建网格面宏观守恒量通量，替代了 FVM 中通量计算方式，能够同时兼顾 LB 方法和 FVM 的优势。

然而，针对流动传热问题的热 LBFS 主要存在以下不足：（1）所采用的热格子 Boltzmann 方法不能恢复至热力学能方程[即式]，因而不能准确获得能量方程通量；（2）离散速度模型是 LB 方法实施的关键，对于传热问题，较为简洁的二维五速（D2Q5）离散速度模型可以准确满足计算精度的需求[12]，而现有方法均使用具有较多离散速度的二维九速（D2Q9）模型[10, 11]，在计算效率方面存在不足，尚缺乏基于 D2Q5 模型的热 LBFS。针对上述问题，本文基于 D2Q5 离散速度模型构建了针对热力学能方程的 LB 方法，发展了求解流动传热问题的简化离散速度热 LBFS。本文具体组织如下：第 2 节给出了流动传热问题的宏观控制方程；在第 3 节中，详细介绍了求解热流动的 LB 方法；第 4 节则给出了所发展的基于简化离散速度热 LBFS 的详细推导过程；第 5 节对全文进行总结。

1 宏观控制方程

针对本文所研究的不可压流动传热问题，主要假设包括：（1）流体压缩性可忽略；（2）满足牛顿流体假设；（3）仅考虑不可压缩层流，忽略流动过程粘性耗散。基于上述假设，连续方程和动量方程可以表示为[8]

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \tag{1}$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}\mathbf{u} + p\mathbf{I}) = \nabla \cdot \left\{ \rho \nu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^{\mathrm{T}} \right] \right\} + \mathbf{f} \tag{2}$$

式中，ρ、$\mathbf{u}$ 和 p 分别为流体、密度速度和压力，$\mathbf{I}$ 为单位张量，ν是粘度∂_t=∂/∂_t。$\mathbf{f}$ 为 Boussinesq 假设下的浮力项，可以表示为

$$\mathbf{f} = \rho\beta (T - T_{\mathrm{ref}})\mathbf{g} \tag{3}$$

式中，$\mathbf{g}$ 为重力加速度，β为热膨胀系数，T 和 T_{ref} 分别为流体温度和参考温度。

对于能量传递过程，流体热力学能方程可以表示为[8]

$$\partial_t (c_p T) + \nabla \cdot (c_p T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T / \rho_{\mathrm{ref}}) \tag{4}$$

式中，c_p 为比定压热容，λ为导热系数，ρ_{ref} 为参考密度。与传统基于温度的能量方程相比，避免了 c_p 为常数的限制。

对于典型的不可压缩流动传热过程，所涉及的计算参数可以转换为无量纲参数 Rayleigh 数（Ra）和 Prandtl 数（Pr）的形式，对应的定义为

$$Ra=\frac{|\mathbf{g}|\beta\left(T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}}\right)L_{\mathrm{c}}^{3}}{\nu\alpha},Pr=\frac{\nu}{\alpha} \tag{5}$$

式中，T_{h}-T_{c}为特征温度，L_{c}为特征长度，热扩散系数$\alpha=\lambda/(\rho c_p)$。

2 格子 Boltzmann 方法

本节给出求解不可压缩流动传热过程的 LB 方法。对于温度场，基于更少离散速度的二维五速（D2Q5）模型发展求解能量方程的 LB 方法。为了描述的完整性，进一步介绍基于二维九速（D2Q9）模型求解速度场的 LB 方法。

2.1 求解传热过程的格子 Boltzmann 方程

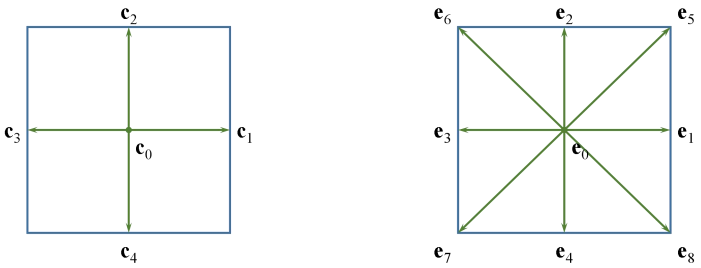
针对本文研究的二维传热过程，采用具有较少离散速度方向的 D2Q5 离散速度模型对能量方程进行求解。温度分布函数 $g_i(\mathbf{x},t)$的单松弛时间 LB 方程可以表示为[3]

$$g_i\left(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i\delta_t,t+\delta_t\right)=g_i\left(\mathbf{x},t\right)-\left[g_i\left(\mathbf{x},t\right)-g_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right)\right]/\tau_g \tag{6}$$

式中，$g_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x},t)$为平衡态分布函数，$\mathbf{x}$ 和 t 为空间与时间坐标，τ_g为无量纲松弛时间。如图1(a)所示为 D2Q5 离散速度模型，离散速度 $\mathbf{c}_i$ 的具体形式为[12]

$$\mathbf{c}_i=\begin{cases}(0,0), & i=0\\ c\left(\cos\left[(i-1)\pi/2\right],\sin\left[(i-1)\pi/2\right]\right), & i=1\sim4\end{cases} \tag{7}$$

式中，c 为格子常数，$c=\delta_x/\delta_t$，δ_x 和δ_t 分别为空间和时间步长。



(a) D2Q5 模型　　(b) D2Q9 模型

图 1 不同离散速度模型

平衡态分布函数 $g_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x},t)$的形式为[13]

$$g_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right)=\begin{cases}c_pT-\left(1-\varpi_i\right)c_{p,\mathrm{ref}}T, & i=0\\ \varpi_i c_pT\left(\dfrac{c_{p,\mathrm{ref}}}{c_p}+\dfrac{\mathbf{c}_i\cdot\mathbf{u}}{c_{sT}^2}\right), & i=1\sim4\end{cases} \tag{8}$$

式中，$c_{p,\mathrm{ref}}$为参考热容，可用于调节松弛时间τ_g的取值。对于 D2Q5 模型，权重$\varpi_0=1-\varpi$，$\varpi_{1\text{-}4}=\varpi/4$，格子声速 $c_{sT}=\sqrt{\varpi/2}c$，其中$\varpi\in(0,1)$。

热力学能 c_pT 可以表示为

$$c_pT=\sum_i g_i\left(\mathbf{x},t\right) \tag{9}$$

松弛因子τ_g的计算式为

$$\lambda/\left(\rho c_p\right)_{\mathrm{ref}}=c_{sT}^2\delta_t\left(\tau_g-0.5\right) \tag{10}$$

2.2 求解流动过程的格子 Boltzmann 方程

对于流动过程，首先引入一个具有单松弛时间碰撞项的演化方程，其表达式为[3]

$$f_i\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta_t,t+\delta_t\right)-f_i\left(\mathbf{x},t\right)=-\left[f_i\left(\mathbf{x},t\right)-f_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right)\right]/\tau_f \tag{11}$$

式中，$\mathbf{e}_i$为离散速度，f_i和f_i^{eq}为 i 方向密度分布函数和相应的平衡态分布函数。如图 1(b)所示，D2Q9 模型对应的离散速度 $\mathbf{e}_i$为[14]

$$\mathbf{e}_i=\begin{cases}(0,0), & i=0\\ c\left(\cos\left[(i-1)\pi/2\right],\sin\left[(i-1)\pi/2\right]\right), & i=1,2,3,4\\ \sqrt{2}c\left(\cos\left[(2i-9)\pi/4\right],\sin\left[(2i-9)\pi/4\right]\right), & i=5,6,7,8\end{cases} \tag{12}$$

平衡态分布函数$f_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x},t)$的形式为

$$f_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right)=\omega_t\rho\left[1+\frac{\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u}}{c_{\mathrm{s}}^2}+\frac{\left(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u}\right)^2}{2c_{\mathrm{s}}^4}-\frac{\mathbf{u}^2}{2c_{\mathrm{s}}^2}\right] \tag{13}$$

式中，ω_i为权重（ω_0=4/9、$\omega_{1\text{-}4}$=1/9 和$\omega_{5\text{-}8}$=1/36），格子声速 $c_{\mathrm{s}}=c/\sqrt{3}$ 。

宏观物理量的表达式为

$$\rho=\sum_i f_i\left(\mathbf{x},t\right),\rho\mathbf{u}=\sum_i\mathbf{e}_i f_i\left(\mathbf{x},t\right) \tag{14}$$

运动粘度ν与无量纲松弛时间τ_f间的关系为

$$\nu=c_{\mathrm{s}}^2\delta_t\left(\tau_f-0.5\right) \tag{15}$$

3 格子 Boltzmann 通量求解器

第 2 节给出了求解流动传热问题的 LB 方法。在其基础上，对 LB 方程和进行多尺度分析[15]，可以将对流通量与粘性通量转化为分布函数的形式为

$$\rho\mathbf{u}=\sum_i f_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right)\mathbf{e}_i \tag{16}$$

$$\rho\mathbf{u}\mathbf{u}+p\mathbf{I}=\sum_i f_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right)\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i \tag{17}$$

$$-\rho\nu\left[\nabla\mathbf{u}+\left(\nabla\mathbf{u}\right)^{\mathrm{T}}\right]=\left(1-0.5/\tau_f\right)\sum_i f_i^{\mathrm{neq}}\left(\mathbf{x},t\right)\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i \tag{18}$$

$$c_pT\mathbf{u}=\sum_i g_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right)\mathbf{c}_i \tag{19}$$

$$-\left(\lambda\nabla T\right)/\rho_{\mathrm{ref}}=\left(1-0.5/\tau_g\right)\sum_i g_i^{\mathrm{neq}}\left(\mathbf{x},t\right)\mathbf{c}_i \tag{20}$$

采用式-的形式可以将宏观控制方程-和转换为

$$\partial_t\rho+\nabla\cdot\left(\sum_i f_i^{\mathrm{eq}}\mathbf{e}_i\right)=0 \tag{21}$$

$$\partial_t\left(\rho\mathbf{u}\right)+\nabla\cdot\left[\sum_i f_i^{\mathrm{eq}}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i+\left(1-0.5/\tau_f\right)\sum_i f_i^{\mathrm{neq}}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i\right]=\mathbf{f} \tag{22}$$

$$\partial_t\left(c_pT\right)+\nabla\cdot\left[\sum_i g_i^{\mathrm{eq}}\mathbf{e}_i+\left(1-0.5/\tau_g\right)\sum_i g_i^{\mathrm{neq}}\mathbf{e}_i\right]=0 \tag{23}$$

式-可以表示为通用形式

$$\partial_t \mathbf{W} + \partial_x \mathbf{F}_x + \partial_y \mathbf{F}_y = \mathbf{Q} \tag{24}$$

式中，守恒量矢量 $\mathbf{W}$、通量矢量 $\mathbf{F}_x$ 和 $\mathbf{F}_y$ 和源项矢量 $\mathbf{Q}$ 可以分别表示为

$$\mathbf{W}=\left[\rho, \rho u, \rho v, c_p T\right]^{\mathrm{T}} \tag{25}$$

$$\mathbf{F}_x = \begin{bmatrix} \sum_i f_i^{\mathrm{eq}} \mathbf{e}_{i,x} \\ \sum_i f_i^{\mathrm{eq}} \mathbf{e}_{i,x} \mathbf{e}_{i,x} + \left(1-0.5/\tau_f\right) \sum_i f_i^{\mathrm{neq}} \mathbf{e}_{i,x} \mathbf{e}_{i,x} \\ \sum_i f_i^{\mathrm{eq}} \mathbf{e}_{i,y} \mathbf{e}_{i,x} + \left(1-0.5/\tau_f\right) \sum_i f_i^{\mathrm{neq}} \mathbf{e}_{i,y} \mathbf{e}_{i,x} \\ \sum_i g_i^{\mathrm{eq}} \mathbf{c}_{i,x} + \left(1-0.5/\tau_g\right) \sum_i g_i^{\mathrm{neq}} \mathbf{c}_{i,x} \end{bmatrix} \tag{26}$$

$$\mathbf{F}_y = \begin{bmatrix} \sum_i f_i \mathbf{e}_{i,y} \\ \sum_i f_i^{\mathrm{eq}} \mathbf{e}_{i,x} \mathbf{e}_{i,y} + \left(1-0.5/\tau_f\right) \sum_i f_i^{\mathrm{neq}} \mathbf{e}_{i,x} \mathbf{e}_{i,y} \\ \sum_i f_i^{\mathrm{eq}} \mathbf{e}_{i,y} \mathbf{e}_{i,y} + \left(1-0.5/\tau_f\right) \sum_i f_i^{\mathrm{neq}} \mathbf{e}_{i,y} \mathbf{e}_{i,y} \\ \sum_i g_i^{\mathrm{eq}} \mathbf{c}_{i,y} + \left(1-0.5/\tau_g\right) \sum_i g_i^{\mathrm{neq}} \mathbf{c}_{i,y} \end{bmatrix} \tag{27}$$

$$\mathbf{Q}=\left[0, \mathbf{f}_x, \mathbf{f}_y, 0\right]^{\mathrm{T}} \tag{28}$$

式中，$\mathbf{u}=(u,v)$，$\mathbf{e}_i=(\mathbf{e}_{i,x},\mathbf{e}_{i,y})$，$\mathbf{c}_i=(\mathbf{c}_{i,x},\mathbf{c}_{i,y})$。

基于 FVM 对式进行离散，可以得到对应的半离散形式[8]

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{W}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{V_i} \sum_{\mathbf{S}_j \in \partial V_i} \mathbf{F}_j \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{Q} \tag{29}$$

式中，V_i 为离散单元 i 的体积，$\mathbf{W}$ 为单元 i 的宏观守恒量，$\mathbf{S}_j$ 表示单元 i 的第 j 个面积矢量，$\mathbf{F}_j$ 为单元面 $\mathbf{S}_j$ 处的通量，$\mathbf{F}_j \cdot \mathbf{S}_j = n_x \mathbf{F}_x + n_y \mathbf{F}_y$，$\mathbf{n}=(n_x,n_y)$为单元面 $\mathbf{S}_j$ 的法向量。

由 FVM 的基本思想可知，只需要计算得到位于界面位置 $\mathbf{x}$ 处的通量 $\mathbf{F}_j$，即可对式进行求解。而 $\mathbf{F}_j(\mathbf{x},t)$的具体形式可以表示为[7]

$$\mathbf{F}_j = \begin{bmatrix} n_x\left(f_1^{\mathrm{eq}} - f_3^{\mathrm{eq}} + f_5^{\mathrm{eq}} - f_6^{\mathrm{eq}} - f_7^{\mathrm{eq}} + f_8^{\mathrm{eq}}\right) + n_y\left(f_2^{\mathrm{eq}} - f_4^{\mathrm{eq}} + f_5^{\mathrm{eq}} + f_6^{\mathrm{eq}} - f_7^{\mathrm{eq}} - f_8^{\mathrm{eq}}\right) \\ n_x\left(f_1^{+} + f_3^{+} + f_5^{+} + f_6^{+} + f_7^{+} + f_8^{+}\right) + n_y\left(f_5^{+} - f_6^{+} + f_7^{+} - f_8^{+}\right) \\ n_x\left(f_5^{+} - f_6^{+} + f_7^{+} - f_8^{+}\right) + n_y\left(f_2^{+} + f_4^{+} + f_5^{+} + f_6^{+} + f_7^{+} + f_8^{+}\right) \\ n_x\left(g_1^{+} - g_3^{+}\right) + n_y\left(g_2^{+} - g_4^{+}\right) \end{bmatrix} \tag{30}$$

为了式的简洁性，在不引起混淆的条件下忽略了式中的$(\mathbf{x},t)$，其中 $f_i^{+}(\mathbf{x},t)$和 $g_i^{+}(\mathbf{x},t)$的形式为

$$f_i^{+}\left(\mathbf{x},t\right) = f_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right) + f_i^{\mathrm{neq}}\left(\mathbf{x},t\right), g_i^{+}\left(\mathbf{x},t\right) = g_i^{\mathrm{eq}}\left(\mathbf{x},t\right) + g_i^{\mathrm{neq}}\left(\mathbf{x},t\right) \tag{31}$$

由式和可知，获得 $\mathbf{F}_j(\mathbf{x},t)$的关键是得到界面处的 $f_i^{\mathrm{neq}}(\mathbf{x},t)$与 $g_i^{\mathrm{neq}}(\mathbf{x},t)$。由多尺度分析可知，其计算式可以表示为[7, 15]

$$f_i^{\mathrm{neq}}(\mathbf{x},t)\approx-\tau_f\delta_t(\partial_t+\mathbf{e}_i\cdot\nabla)f_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x},t)\approx-\tau_f\delta_t\left[f_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x},t)-f_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x}-\mathbf{e}_i\delta_t,t-\delta_t)\right]$$
$$g_i^{\mathrm{neq}}(\mathbf{x},t)\approx-\tau_g\delta_t(\partial_t+\mathbf{c}_i\cdot\nabla)g_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x},t)\approx-\tau_g\delta_t\left[g_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x},t)-g_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x}-\mathbf{c}_i\delta_t,t-\delta_t)\right] \tag{32}$$

根据平衡态分布函数与宏观量之间的关系[即式和]，界面$(\mathbf{x},t)$及邻点$(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}},t)$[=$(\mathbf{x}-\mathbf{e}_i\delta_t,t-\delta_t)$或$(\mathbf{x}-\mathbf{c}_i\delta_t,t-\delta_t)$]处的平衡态分布$f_i^{\mathrm{eq}}$与$g_i^{\mathrm{eq}}$根据宏观密度、速度与温度等$\mathbf{W}_i$得到，因而应分别计算得到界面宏观量$\mathbf{W}(\mathbf{x},t)$及邻点处的宏观量$\mathbf{W}(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}},t-\delta_t)$。如图 2所示，界面邻点处的$\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}},t-\delta_t)$可以通过界面两侧单元值$\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_1)$和$\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_2)$及其梯度$\nabla\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_1)$和$\nabla\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_2)$计算得到，具体形式为

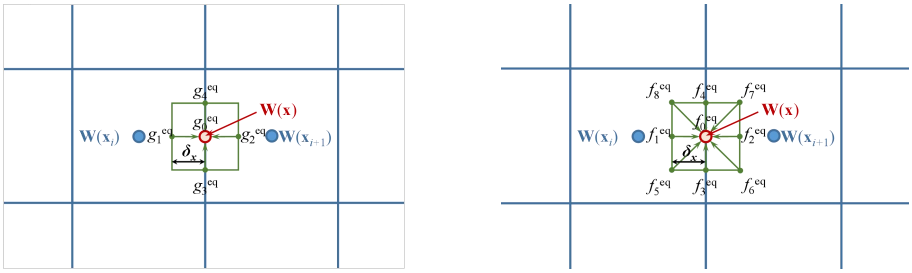
$$\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}})=\begin{cases}\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_1)+(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}}-\mathbf{x}_1)\cdot\nabla\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_1),\mathbf{x}_{\mathrm{nb}}\in\Omega_1\\ \mathbf{W}_i(\mathbf{x}_2)+(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}}-\mathbf{x}_2)\cdot\nabla\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_2),\mathbf{x}_{\mathrm{nb}}\in\Omega_2\end{cases} \tag{33}$$

式中，单元梯度值$\nabla\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_1)$和$\nabla\mathbf{W}_i(\mathbf{x}_2)$采用 Green-Gauss 公式进行计算。而界面宏观量$\mathbf{W}_i(\mathbf{x},t)$可以直接由界面邻点处的平衡态分布函数$f_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}},t-\delta_t)$和$g_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x}_{\mathrm{nb}},t-\delta_t)$得到，计算表达式为[7]

$$\rho(\mathbf{x},t)=\sum_i f_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x}-\mathbf{e}_i\delta_t,t-\delta_t) \tag{34}$$

$$\rho(\mathbf{x},t)\mathbf{u}(\mathbf{x},t)=\sum_i\mathbf{e}_i f_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x}-\mathbf{e}_i\delta_t,t-\delta_t) \tag{35}$$

$$c_p(\mathbf{x},t)T(\mathbf{x},t)=\sum_i g_i^{\mathrm{eq}}(\mathbf{x}-\mathbf{c}_i\delta_t,t-\delta_t) \tag{36}$$



(a) 基于 D2Q5 模型的通量计算　　(b) 基于 D2Q9 模型的通量计算

图 2 界面宏观守恒量通量计算示意图

至此，可以由式计算得到界面处通量$\mathbf{F}_j(\mathbf{x},t)$。在此基础上，采用 Euler 方法或 Runge-Kutta 方法等进行显式时间推进，对流场与温度场进行更新。此外对于稳态问题可以使用非均匀时间步长等对计算过程进行加速。

4 计算结果与讨论

本节采用方腔内部自然对流和同心圆环内部自然对流等两个问题对计算模型进行验证。在后续计算中，若未特殊说明，$\delta_x=\delta_t=0.2|\mathbf{S}_j|$，$c=1$，D2Q5 离散速度模型中的可调参数$\varpi$取为 2/5。由于本节研究的均为稳态问题，采用 Euler 方法进行时间显式时间推进可满足计算精度要求。

4.1 方腔内部自然对流

方腔内部自然对流是计算传热学中的经典算例，具有基准数值解，常用于数值模型的考核[16]。本小节采用该算例对所发展的 LBFS 进行验证，该问题的物理模型如图 3 所示，方腔尺寸为L_c，左右壁面温度分别为T_h和T_c（$T_h>T_c$），上下壁面绝热，且所有壁面

处速度 **u**=(u,v)均为 **0**。方腔内部充满着均匀流体，在浮升力的驱动下运动。分别采用 L_c 和 T_h-T_c 作为特征速度与温度，Pr 取为 0.71，Ra 分别设置为 10^3、10^4、10^5 和 10^6。不同 Ra 下均采用 128×128 的均匀网格进行计算，该网格满足网格无关性要求。

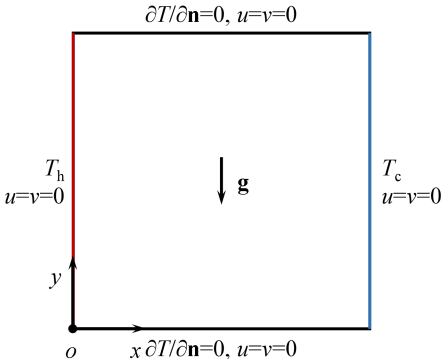
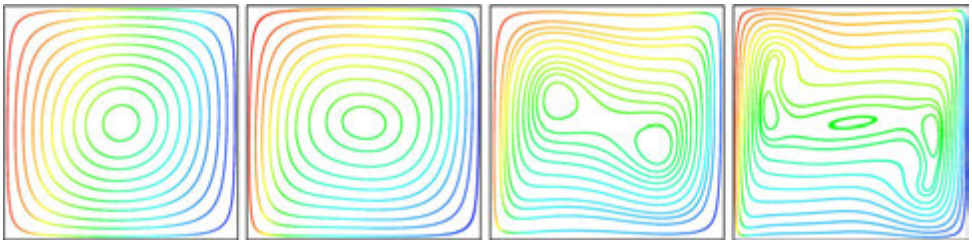


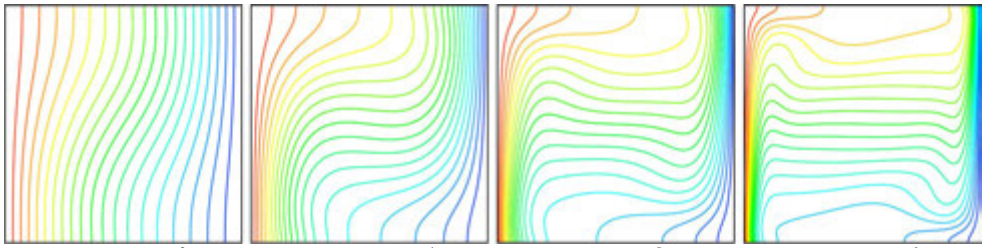
图 3 方腔内部自然对流问题物理模型

图 4 和图 5 展示了不同 Ra 下的方腔内部的流线与等温线分布。由图 4 可以看出，在 Ra 较小时，对流作用较弱，腔体内部出现了一个近圆形的涡。随着 Ra 的不断增加，流动变得更加强烈，涡逐渐变为椭圆形并分裂为左上和右下两个涡，在 Ra=10^6 时出现了第三个涡。在不同 Ra 下流场的作用下，温度场也出现明显差异。如图 5 所示，在 Ra=10^3 时，此时等温线接近平行左右壁面，导热作用占据主要地位。随后，等温线在流动的作用下发生弯曲，对流所发挥的作用越来越显著，换热作用得到增强，直至最后对流效应占据主导地位。不同 Ra 下的流动与传热现象与相关文献中所得结论一致[16]。为定量考核所发展模型的计算精度，表 1 给出了不同 Ra 下的 u_{max}、y、v_{max}、x 和 Nu_{ave}（定义在表 1 中给出）。可以看出，我们得到的计算结果与文献[16]符合较好，验证了本文所发展针对流动传热问题的简化离散速度 LBFS 的计算精度。



(a) Ra = 10^3 (b) Ra = 10^4 (c) Ra = 10^5 (d) Ra = 10^6

图 4 不同 Ra 下方腔内部流线分布



(a) Ra = 10^3 (b) Ra = 10^4 (c) Ra = 10^5 (d) Ra = 10^6

图 5 不同 Ra 下方腔内部等温线分布

表 1 不同 Ra 下方腔内部自然对流计算结果与文献结果对比

Ra	比较	u_{max}	y	v_{max}	x	Nu_{ave}
10^3	计算结果	3.6433	0.8121	3.6912	0.1800	1.1174
	文献[16]	3.6493	0.8125	3.7010	0.1797	1.1169
10^4	计算结果	16.1628	0.8200	19.6152	0.1174	2.2428
	文献[16]	16.1722	0.8229	19.6098	0.1198	2.2452
10^5	计算结果	34.6549	0.8513	68.2645	0.0685	4.5121
	文献[16]	34.7362	0.8555	68.4954	0.0664	4.5219
10^6	计算结果	64.1992	0.8513	218.0437	0.0391	8.7827
	文献[16]	64.8687	0.8516	219.334	0.0391	8.7926

注：u_{max} 和 y 表示方腔中心竖直线最大水平方法速度及其位置，v_{max} 和 x 表示方腔中心水平线最大竖直方法速度及其位置，Nu_{ave} 表示高温壁面平均 Nusselt 数。

4.2 同心圆环内部自然对流

为进一步说明所建立模型在曲线边界下的计算精度，本小节对同心圆环内部自然对流过程进行了研究。如图 6 所示为该问题的示意图，内外圆环半径分别为 r_i 和 r_o，内壁面为高壁温 T_h，外壁面为低壁温 T_c，且壁面处均为无滑移速度边界。在本算例的模拟中，$R=r_o/r_i$ 设置为 2.6，特征长度 $L_c=r_o-r_i$，特征温度为 T_h-T_c，Pr 取为 0.71，而 Ra 分别设置为 10^2、10^3、3×10^3、6×10^3、10^4 和 5×10^4。经过网格无关性验证，径向和周向网格数分别取为 80 和 160，图 7 为对应的计算网格示意图。

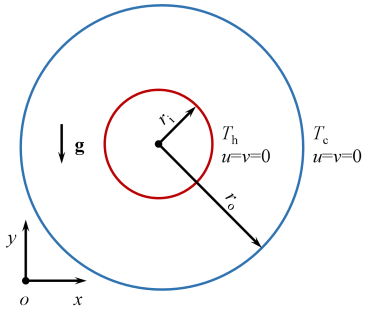


图 6 同心圆环内部自然对流物理模型

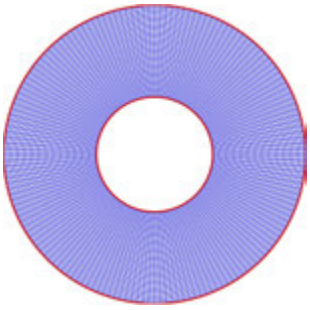


图 7 计算网格示意图

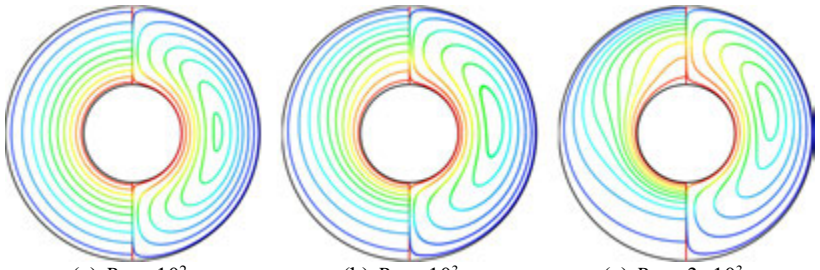
图 8 给出了不同 Ra 下圆环内部的等温线与流线分布。从图中可以看出，在 Ra 较小时，流动较为微弱，由于所研究问题的对称性，左右两侧各出现一个涡，且流场与温度场基本上下对称，等温线呈现同心圆分布，此时导热是传热过程的主导因素。随着 Ra 的增加，在浮升力作用下流体流动作用增强，左右两个对称涡逐渐向上移动，圆环上部等温线出现弯折。当 Ra 进一步增加至 6×10^3 时，部分等温线呈现“S 形”，对流作用进一步增强。直至最后 $Ra=5\times10^4$ 时，由于圆环内壁面的加热作用，壁面附近流体向上运动加强，对流效应导致的传热增强占主导地位，导致温度沿径向出现非单调变化。此时流动区域两个涡移动至圆环顶部，底部的流动较为微弱。所得结果与文献报道的结论相符合。

为反映壁面处的换热性能，分别定义了内外壁面的等效导热系数 $k_{eq,i}$ 和 $k_{eq,o}$，其具体形式为

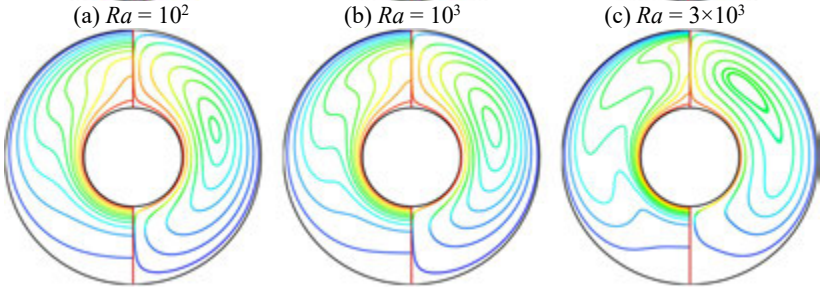
$$\text{内壁面：}k_{eq,i}=\frac{\ln R}{2\pi(R-1)}\int_0^{2\pi}\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=r_i}\mathrm{d}\theta,\quad \text{外壁面：}k_{eq,o}=\frac{R\ln R}{2\pi(R-1)}\int_0^{2\pi}\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=r_o}\mathrm{d}\theta \tag{37}$$

表 2 中给出了不同 Ra 下内外壁面的等效导热系数 $k_{eq,i}$ 和 $k_{eq,o}$，可以看出随 Ra 的增加，

内外壁面的等效导热系数不断增加，此外计算得到的 $k_{eq,i}$ 和 $k_{eq,o}$ 完全相同，也与其定义相一致。由表 2 可以看出，所得计算结果与文献几乎完全一致，证明了本文所发展模型能够有效模拟曲线边界条件下的流动传热问题。



(a) $Ra = 10^2$ (b) $Ra = 10^3$ (c) $Ra = 3\times10^3$



(d) $Ra = 6\times10^3$ (e) $Ra = 10^4$ (f) $Ra = 5\times10^4$

图 8 不同 *Ra* 下同心圆环内部等温线（左）和流线（右）分布

表 2 不同 *Ra* 下同心圆环内部自然对流计算结果与文献结果对比

Ra	内壁面 $k_{eq,i}$		外壁面 $k_{eq,o}$	
	计算结果	文献[17]	计算结果	文献[17]
10^2	1.001	1.001	1.001	1.001
10^3	1.082	1.082	1.082	1.082
3×10^3	1.395	1.397	1.395	1.397
6×10^3	1.714	1.715	1.714	1.715
10^4	1.977	1.979	1.977	1.979
5×10^4	2.948	2.958	2.948	2.958

5 结论

本文建立了一种求解流动传热问题的简化离散速度热格子 Boltzmann 求解器（Lattice Boltzmann Flux Solver, LBFS），通过有限容积法离散宏观控制方程，采用基于简化离散速度的 LB 方法获得界面处能量方程的对流和扩散通量，可以克服传统热 LBFS 在计算效率方面存在的不足。首先，基于二维五速（D2Q5）离散速度模型发展了求解温度场的 LB 方法，可以实现热力学能方程的准确求解，并采用标准 LB 方法求解速度场。在此基础上，由多尺度分析获得界面通量的介观分布函数形式，根据温度与密度分布函数的碰撞迁移过程计算得到界面处宏观守恒变量的通量。最后使用显式时间推进方法更新计算域流场与温度场。采用方腔内部自然对流和同心圆环内部自然对流两个基本算例验证了所发展离散速度热 LBFS 的计算精度，该方法可以应用于其他更为复杂的流动传热问题。

参考文献

[1] Chen Y, Du S, Li D, et al. Numerical investigation of transient phase-change transpiration cooling based

on variable properties of coolant[J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 184: 116204.

[2] Zhang K, Li M J, Wang F L, et al. Experimental and numerical investigation of natural convection heat transfer of W-type fin arrays[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 152: 119315.

[3] Xu Y, Ren Q, Zheng Z J, et al. Evaluation and optimization of melting performance for a latent heat thermal energy storage unit partially filled with porous media[J]. Applied Energy, 2017, 193: 84-95.

[4] 何雅玲, 李庆, 王勇, 等. 格子 Boltzmann 方法的理论及应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 2023.
He Y L, Li Q, Wang Y, et al. Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications[M]. Beijing: Higher Education Press, 2023.

[5] Li Q, Luo K H, Kang Q J, et al. Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2016, 52: 62-105.

[6] He Y L, Liu Q, Li Q, et al. Lattice Boltzmann methods for single-phase and solid-liquid phase-change heat transfer in porous media: A review[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 129: 160-197.

[7] Succi S. Lattice boltzmann 2038[J]. Europhysics Letters, 2015, 109(5): 50001.

[8] Wang Y, Shu C, Teo C J. Development of LBGK and incompressible LBGK-based lattice Boltzmann flux solvers for simulation of incompressible flows[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2014, 75(5): 344-364.

[9] 陶文铨. 数值传热学（第二版）[M]. 西安: 西安交通大学出版社
Tao W Q. Numerical heat transfer, 2nd edition[M]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2001.

[10] Patil D V, Lakshmisha K N. Finite volume TVD formulation of lattice Boltzmann simulation on unstructured mesh[J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228(14): 5262-5279.

[11] Wang Y, Shu C, Teo C J. Thermal lattice Boltzmann flux solver and its application for simulation of incompressible thermal flows[J]. Computers & Fluids, 2014, 94: 98-111.

[12] Yang L M, Shu C, Yang W M, et al. Simulation of conjugate heat transfer problems by lattice Boltzmann flux solver[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 137: 895-907.

[13] Yoshida H, Nagaoka M. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for the convection and anisotropic diffusion equation[J]. Journal of Computational Physics, 2010, 229(20): 7774-7795.

[14] Huang R, Wu H. Phase interface effects in the total enthalpy-based lattice Boltzmann model for solid–liquid phase change[J]. Journal of Computational Physics, 2015, 294: 346-362.

[15] Qian Y H, d'Humières D, Lallemand P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation[J]. Europhysics letters, 1992, 17(6): 479.

[16] Chapman S, Cowling TG. The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases[M]. Cambridge university press, 1990.

[17] Li Q, He Y L, Wang Y, et al. An improved thermal lattice Boltzmann model for flows without viscous heat dissipation and compression work[J]. International Journal of Modern Physics C, 2008, 19(01): 125-150.

[18] Shu C. Application of differential quadrature method to simulate natural convection in a concentric annulus[J]. International journal for numerical methods in fluids, 1999, 30(8): 977-993.

中国工程热物理学会 数值计算
学术会议论文 编号：233112

均/异相反应速率对高焓流动-催化壁能量输运的影响

李芹 1 2，杨肖峰 2*，董威 1*，杜雁霞 2
（上海交通大学 机械与动力工程学院，上海 200240）
（中国空气动力研究与发展中心 空天飞行空气动力科学与技术全国重点实验室，四川 绵阳 621000）
(Tel:15221835276, Email:liqin01@sjtu.edu.cn)

摘要： 飞行器表面承受的气动热与催化壁面和高焓化学非平衡流动之间的热质传输密切相关。为了研究气体均相反应和表面异相催化反应的共同作用对气动热的影响，针对高超声速条件下二维圆柱的氧气/氧原子混合气体绕流问题，采用数值模拟的方法，分析了不同的均相、异相反应速率对圆柱表面总热流、对流热流和扩散热流的影响规律，并基于流场细节分析了两反应速率影响气动热的本质原因。结果表明，在同一表面上，均相复合反应越快，则表面对流热流越高、扩散热流减小；气体反应相同的条件下，表面异相反应速率越高，则扩散热流越高、对流热流变化较小。均相反应速率决定了到达圆柱表面的非平衡气体内能和化学能，异相反应速率则决定了气体化学能在表面的释放能力，两者的共同决定了释放至表面的总能量。相关研究结果可以为飞行器表面气动热的准确预测和热防护系统的设计提供理论支撑。

关键词：高焓流动；气动热；化学非平衡；均相反应；异相催化

0 前言

当前计算流体力学在飞行器设计中的作用日益突出，但气动热的准确预测仍然是一大难题[1]。高焓化学非平衡流动与飞行器表面之间的存在复杂的界面效应，影响界面上的热质传输[2]。化学非平衡是指气体在流场中发生均相反应的特征时间与流动特征时间相当，其反应速率决定了流场的温度和组分浓度[3]。而作为表面效应之一的异相催化反应，其速率依赖于表面催化属性和壁面附近的气体组分环境[4, 5]。因此，均相和异相反应速率对界面传热传质的影响需综合考虑。

由于高超声速流场的化学非平衡效应显著，针对均相化学反应已经建立了许多气体模型，比如Park模型[6]、Gupta模型[7]、Dunn-Kang模型[8]等，但是模型的反应速率参数的取值源于实验数据，至今仍在根据新的实验数据修正反应速率参数[9]，因此使用不同气体模型预测得到的气动热也存在差异[10]。

表面异相催化导致的扩散热流（或称催化反应热流）在特定飞行条件下占据表面总热流的比例高达50%[11, 12]，且异相催化反应速率不同可导致数倍的表面总热流差异[13, 14]。早在上世纪50年代，Fay和Riddel就并用采用相似解方法，比较了不同气相反应速率

基金项目：国家重点研发计划（2019YFA0405202）；国家自然科学基金（No. 12072361）

条件下，催化和非催化表面上的总热流和对流热流[15]，认为边界层内的扩散和对流传热受到均相反应速率和表面催化活性的共同影响。在其基础上，Goulard[16]利用修正的相似解研究了冻结流对壁面的加热这一问题中催化特性的影响，因此并未考虑均相气体反应。基于多步反应异相催化模型[11, 17-19]，Barbato等[20]分析了异相催化反应速率对气动热的影响规律，但未考虑均相反应在其中的作用。国内曾明等[21]分别分析了不同气体模型和不同壁面催化条件对气动热预测的影响，未考虑两者的共同作用。苗文博等[22]研究了来流参数对气动热中扩散热流占比的影响，并将其归因于化学反应进行程度的不同。丁明松等[23]、杨肖峰等[24, 25]分析了异相反应速率对飞行器气动热的影响规律。

由此可见，尽管近年来气体模型和催化模型分别得到了快速的发展，但目前少有综合利用已经建立的气体模型和催化模型进行两者的反应速率对表面热流影响规律的研究，因此在两者的综合作用下，化学非平衡效应对气动热的影响机理尚未清楚。

针对高焓流动中气相化学非平衡和界面异相催化效应影响飞行器表面气动加热热流，而目前该两者的共同作用对热流的影响规律和机理不清晰的问题，基于非平衡流场求解器 CAPTER，对氧气（O_2）/氧原子（O）混合气体绕二维圆柱流动的流场和表面热流进行了计算，从均相反应速率和壁面异相催化速率对边界层内组分浓度、温度分布的影响出发，分析了均/异相反应速率对表面热流和能量输运方式的影响及机理。

1 理论与方法

1.1 高超声速非平衡流场求解方法

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\rho_i\\ \rho\\ \rho u\\ \rho v\\ \rho w\\ E_t\end{pmatrix}+\frac{\partial}{\partial x}\begin{pmatrix}\rho_i u\\ \rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho uv\\ \rho uw\\ u(E_t+p)\end{pmatrix}+\frac{\partial}{\partial y}\begin{pmatrix}\rho_i v\\ \rho v\\ \rho uv\\ \rho v^2+p\\ \rho vw\\ v(E_t+p)\end{pmatrix}+\frac{\partial}{\partial z}\begin{pmatrix}\rho_i w\\ \rho w\\ \rho uw\\ \rho vw\\ \rho w^2+p\\ w(E_t+p)\end{pmatrix}$$
$$=\frac{\partial}{\partial x}\begin{pmatrix}\rho_i D_i\frac{\partial c_i}{\partial x}\\ 0\\ \tau_{yx}\\ \tau_{yy}\\ \tau_{yz}\\ Q_x+q_{\tau,x}\end{pmatrix}+\frac{\partial}{\partial y}\begin{pmatrix}\rho_i D_i\frac{\partial c_i}{\partial y}\\ 0\\ \tau_{zx}\\ \tau_{zy}\\ \tau_{zz}\\ Q_y+q_{\tau,y}\end{pmatrix}+\frac{\partial}{\partial z}\begin{pmatrix}\rho_i D_i\frac{\partial c_i}{\partial z}\\ 0\\ \tau_{xx}\\ \tau_{xy}\\ \tau_{xz}\\ Q_z+qz\end{pmatrix}++\frac{\partial}{\partial y}\begin{pmatrix}S_i\\ 0\\ 0\\ 0\\ 0\\ 0\end{pmatrix} \tag{1}$$

与化学平衡流场相比，化学非平衡流场的控制方程还包含了流场组分的守恒方程，见式（1），其中 ρ_i 为各气体组分的密度，V 为流动速度，ρ 为混合气体密度，D_i 为扩散系数，c_i 为组分 i 的质量分数。相应地，需要给定各组分的边界条件，以构成封闭的方程组。式（1）中源项 S_i 的物理含义是气体化学反应导致的质量通量，需要使用均相化学反应模型获得；而组分的边界条件，通过边界质量平衡方程给出，见式（2），其中 J_{diff} 为组分浓度驱动的扩散通量，J_{hetero} 是壁面异相催化作用导致的质量通量，由异相化学反应模型确定。从式(2)也可以看出，壁面上的组分扩散是由异相催化导致的浓度分布不

均驱动的。

$$J_{diff} = J_{hetero} \tag{2}$$

1.2 均相化学反应模型

针对O_2和O的混合物，均相化学反应模型考虑了表 1所示的4个反应，其中前两个为分子的离解反应，后两个为原子的复合反应，均相反应均有第三体反应物参与。每个反应的速率具有Arrhenius形式，如式(3)，其中T为气体温度。根据文献[7]，相应系数的取值见表 1。

$$r_{\text{homo}} = A \times T^{B} \times e^{-\frac{C}{T}} \tag{3}$$

表 1 均相化学反应表达式及速率

序号	反应表达式	A	B	C
1	$O_2 + O \rightarrow O + O + O$	9×10^{13}	-1	5.95×10^{4}
2	$O_2 + O_2 \rightarrow O + O + O_2$	3.24×10^{13}	-1	5.95×10^{4}
3	$O + O + O \rightarrow O_2 + O$	7.5×10^{4}	-0.5	0
4	$O + O + O_2 \rightarrow O_2 + O_2$	2.7×10^{4}	-0.5	0

表 2 异相化学反应表达式及速率

序号	类型	反应表达式	系数 k
1	吸附	$O + (s) \rightarrow O(s)$	k_{Ad}
2	ER	$O + O(s) \rightarrow O_2 + (s)$	k_{ER}

1.3 异相化学反应模型

催化反应动力学的观点认为，表面上存在有限个数的活性吸附位，原子在催化壁上的异相反应包含多步反应过程，常见的四步催化反应包括原子在表面活性吸附位上的吸附和解附、气相原子与吸附相原子的Eley-Rideal（ER）复合、吸附相原子之间的Langmuir-Hinshelwood（LH）复合。研究表明，LH复合和热解附反应仅在高壁温条件下发生。由于研究对象为冷壁，因此模型仅考虑O原子的吸附和ER复合过程，表达式见表2，其中(s)代表活性吸附位点。取表面上化学吸附位的个数$S_0 = 1\times10^{18}/\text{m}^2$，表面邻近的气相原子温度与壁温$T_W$相同，则单位面积上原子与表面碰撞的频率可以表示为式（4），其中x_{O}为O原子的摩尔浓度，$\overline{v_{\text{O}}}$为O原子的平均热速度，其定义见式（5）。 吸附和ER复合反应的速率为碰撞频率与系数k的乘积。

$$\varphi_{\text{O}} = Av \times x_{\text{O}} \times \overline{v_{\text{O}}} \tag{4}$$

$$\overline{v_{\text{O}}} = \sqrt{\frac{k_B T_w}{2\pi M_A}} \tag{5}$$

1.4 界面能量输运机制

在化学非平衡流动与催化壁的界面上，不考虑辐射作用，从气相流场的角度看，存在两种方式的能量传递：一是由表面附近流体的温度梯度驱动的对流换热，二是由组分浓度梯度驱动的质量扩散所带来的扩散热流。后者也可以从表面的角度看待，即到达表面的原子发生复合反应后释放化学能。在壁面的异相催化作用下，原子复合为分子，流

场边界上的质量扩散包括原子组分向流场外的通量和分子组分向流场内的通量，两者携带的焓值之差与壁面异相催化释放的化学能相等。由于O_2分子的焓值远远低于O原子，因此扩散热流主要取决于O原子扩散。均相和异相反应速率分别影响激波后流场温度和界面上的质量扩散，进而改变两种能量输运方式的功率，决定表面热流的大小。

2 结果与分析

2.1 计算条件

以直径R=9cm的二维圆柱为研究对象，其网格划分如图 1所示，网格沿圆柱表面周向和法向的节点数目分别为100和150，贴近壁面第一层网格的法向高度为1×10^{-5}m，空间网格无关性和附面层网格无关性均已经过验证[27]。此外，图 1还示意给出了用以描述表面位置的角度α。采用无量纲坐标X^*和Y^*来描述空间位置，其与真实空间位置x和y的关系为：

$$X^*=\frac{x}{R},\quad Y^*=\frac{y}{R} \tag{6}$$

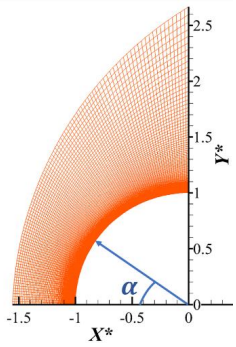


图 1　二维圆柱绕流流场的网格

表 3　来流条件设置

参数	取值
温度 T_∞	270.65K
密度 ρ_∞	$1.02688\times10^{-3}\,\mathrm{kg/m^3}$
马赫数 Ma	15
质量分数	$c_{o_2}=1.0, c_{o_2}=0$

来流Ma数设为15，来流温度、密度条件与海拔50km处的空气相同，组分为100%的O_2，见表 3，其中“∞”代表无穷来流来流。此外，假设圆柱表面为定温冷壁，温度为300K。

表 4　算例设置

算例	G-1	G0	G1	G2
S0	$k_S=0.01$ $g_A=10^{-1}$	$k_S=0.01$ $g_A=1$	$k_S=0.01$ $g_A=10$	$k_S=0.01$ $g_A=10^2$
S1	$k_S=0.1$ $g_A=10^{-1}$	$k_S=0.1$ $g_A=1$	$k_S=0.1$ $g_A=10$	$k_S=0.1$ $g_A=10^2$
S2	$k_S=1$ $g_A=10^{-1}$	$k_S=1$ $g_A=1$	$k_S=1$ $g_A=10$	$k_S=1$ $g_A=10^2$

为分析均相和异相反应速率对表面总热流、对流热流和扩散热流的影响，设置4种不同的均相反应速率（算例G-1、G0、G1、G2）和3种异相反应速率（算例S0、S1、S2）。对于均相反应，保持表 1中反应1、2的速率不变，反应3、4的反应速率中，系数A设置为$g_A\times A$；对于异相反应，则令：

$$k_{Ad}=k_{ER}=k_S \tag{7}$$

各算例的 g_A 和 k_S 设置见表 4。不同的均相、异相反应速率两两组合，构成了12个不同算例，用于分析两者的共同影响。

2.2 流场特征

以算例（G0,S2）的反应速率条件为例，分析当前来流条件下高超声速圆柱绕流的流场特征。绕二维圆柱的无量纲温度（T^*）和压力（P^*）场如图 2所示。其中，温度和压力的无量纲处理方法如式（8）所示，其中 T 和 p 分别为流场当地温度（K）和压力（Pa），U_∞ 为来流速度（m/s）。高速来流在圆柱附近受到强烈的压缩作用，形成弓形激波，气体的温度和压力在激波后陡增，流体的动能转化为内能。压力在驻点区域达到最高，而温度则在弓形激波的位置达到最高之后逐渐下降。这是因为高温之下，氧气分子发生离解，气体的内能部分转化为氧原子的化学能。图 3给出了流场中 O_2 分子和 O 原子的质量分数分布，可以看出激波后分子组分浓度的骤降和原子组分浓度的增加。

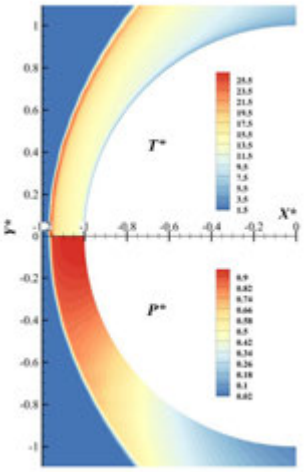


图 2　无量纲温度场和压力场（G0,S2）

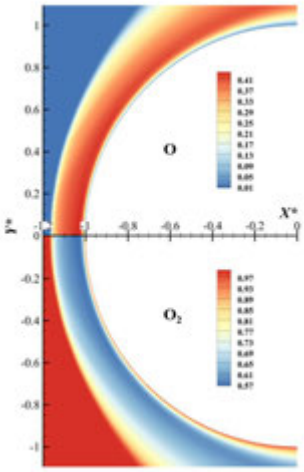


图 3　O 原子和 O_2 分子的质量分数变化

$$T^* = \frac{T}{T_\infty}, P^* = \frac{p}{\rho_\infty U_\infty^2} \tag{8}$$

此外，在冷壁面附近流场温度开始降低，O 原子在壁面附件的低温度条件下又逐渐复合为 O_2 分子。且壁面本身具有催化性，会加速原子的复合，图 3 也展示了组分浓度在壁面邻近的变化：原子组分质量分数的骤减和分子组分质量分数的突增。气相中的 O 原子复合所释放的化学能加热流体，即转化为内能，将影响对流换热量；表面上的 O 原子复合所释放的化学能传递给壁面。因此均相反应速率与表面催化反应将影响表面能量输运方式和气动加热热流。

2.3 均相反应对界面热质传输的影响

采用S0的异相催化速率条件，分析当壁面的催化属性相同时，均相反应速率对流场和壁面热流的影响。均相反应速率条件从G-1至G2变化时，表面总热流 Q 沿 α 的分布如图 4所示。Q 随均相复合反应速率的增大而增加，与G-1条件相比，G2条件下的表面驻点热流增加了近87%。

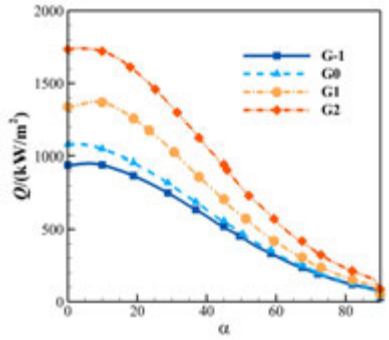


图 4　不同均相反应速率下的表面热流
（$k_S = 0.01$）

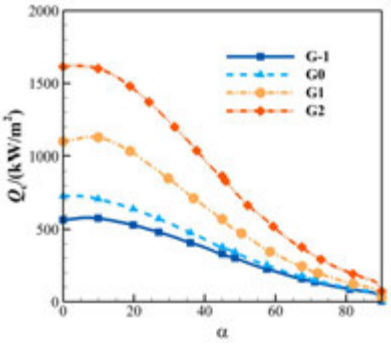


图 5　不同均相反应速率下的对流热流
（$k_S = 0.01$）

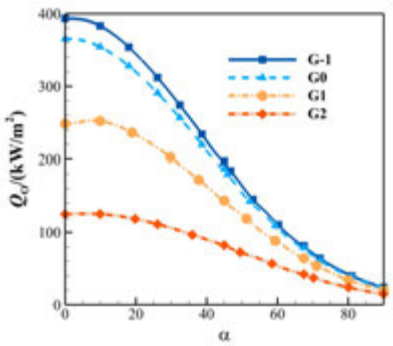


图 6　不同均相反应速率下的扩散热流
（$k_S = 0.01$）

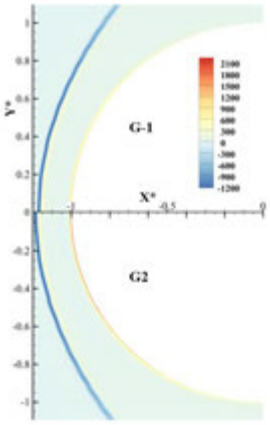


图 7 温度沿壁面法向（向外为正）的梯度值

其中，对流热流和扩散热流随均相反应速率的变化分别见图 5和图 6。由于异相反应速率较低，表面热流主要来自对流换热，扩散热流所占比例较小。对流加热量随均相反应速率的增大而增大，与表面总热流呈现相同的变化趋势；扩散热流却与之相反，随均相反应的加速而减小，但是其减小幅度不足以改变总热流的变化趋势。

对流热流由壁面邻近的流体温度梯度决定，图 7给出了G-1和G2两种均相反应速率条件下激波层内无量纲温度沿壁面法向的梯度。在壁面附近，G2条件下的温度梯度明显高于G-1条件。同时，图 8定量给出了四种均相反应条件下驻点线上的温度分布及驻点附近的无量纲温度场，表明均相反应速率越高，O 原子在气相中的复合及释放化学能的速率也越快，即化学能向内能转化的速度更快，导致壁面邻近的流体温度越高。相应地，对于定温冷壁面，高温流体导致的对流换热热流也越高。

扩散热流由壁面邻近的组分浓度梯度决定，在G-1和G2两种条件下，O 原子的质量分数沿壁面法向的变化梯度见图 9，G2条件下的O 原子复合速率高，因此壁面附近的原子浓度变化速率显著高于G-1条件。图 10定量给出了驻点线上的O 原子浓度，均相复合速率越慢，O 原子的浓度则越高，相应的扩散热流热也越高。但是由于壁面催化活性较弱，由此带来的差异不足以改变对流热流导致的总热流变化趋势。

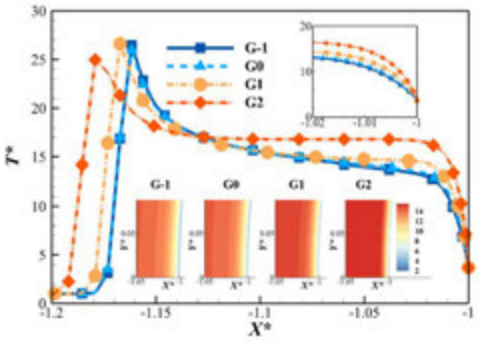


图 8　驻点线上的温度分布

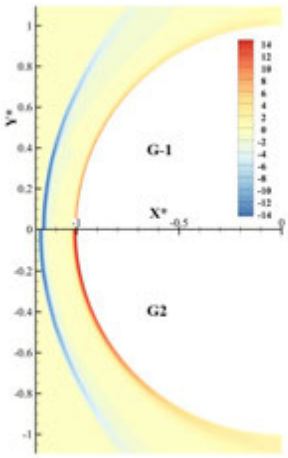


图 9　O原子浓度沿壁面法向（向外为正）的梯度

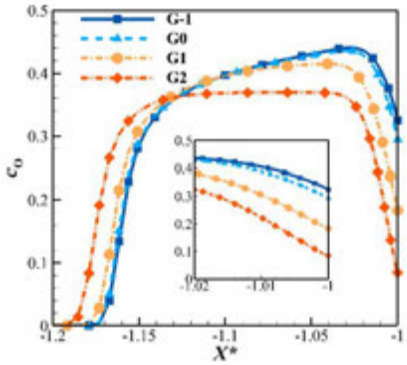
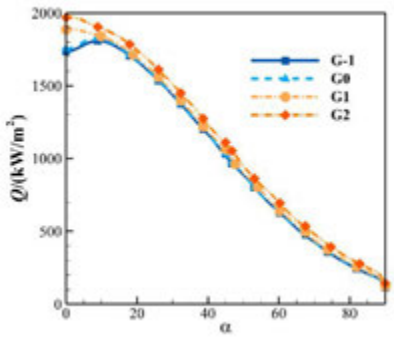
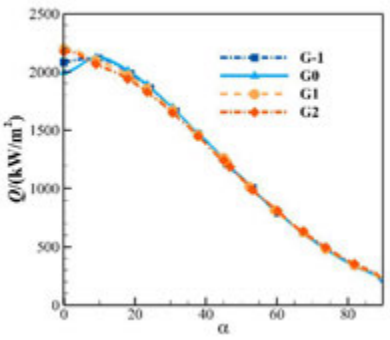


图 10　驻点线上的O原子质量分数



(a) $k_S = 0.1$



(b) $k_S = 1$

图 11　不同条件下的表面总热流

在不同催化活性的壁面上，均相反应速率对表面热流的影响有所不同。当异相反应速率增大时，总热流随均相反应速率的变化幅度显著减小，如图 11所示。这是因为随着异相反应速率的增加，到达表面的O原子复合的速率越快。在完全催化条件下，未在气相环境中复合的O原子，将全部在表面复合，所有能量被壁面吸收。离解O原子所携带

的能量，一种方式是通过均相复合反应加热气体，另一种方式是通过异相复合反应直接释放在表面。异相反应的速率越高，均相反应不同所带来的气体温度或对流热流差异，将被趋势相反的扩散热流差异所弥补。

2.4 异相反应对界面热质传输的影响

在相同的均相反应条件下，异相反应速率对表面热流的影响如图 12所示，表面热流随异相反应速率的增大而显著增加，S2条件下的热流约为S0条件下的2倍。其中，对流热流随异相催化速率的变化很小（图 13），而O原子扩散热流随异相催化速率的变化趋势与总热流的变化相同，S2条件下的扩散热流接近S0条件下的4倍，见图 14。

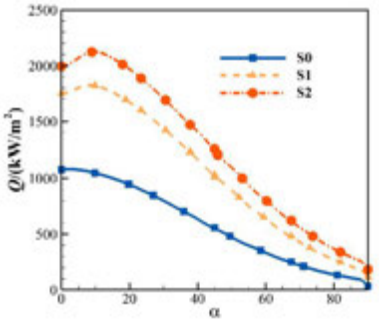


图 12　不同异相反应速率下的表面热流（G0）

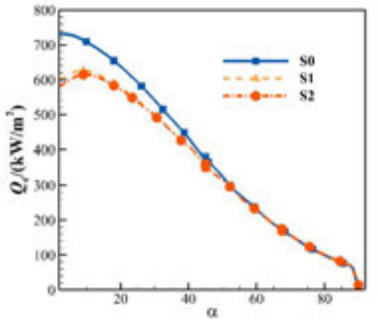


图 13　不同异相反应速率下的对流热流（G0）

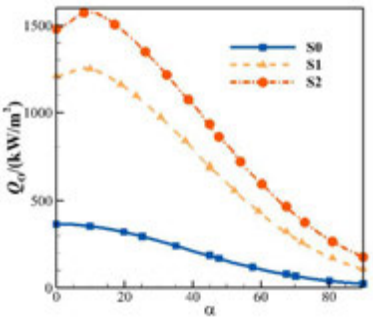


图 14 不同异相反应速率下O原子扩散热流（G0）

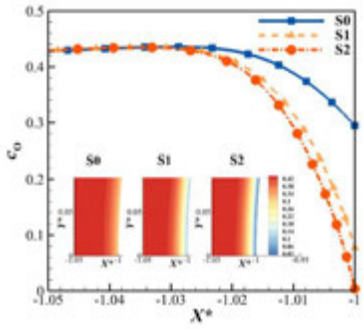


图 15 不同异相反应速率下O原子浓度（G0）

均相反应速率相同使得宏观流场相似，因此壁面附近的温度梯度差异较小，到达壁面前的氧原子浓度也相近。异相反应速率决定了壁面上的O原子消耗速率，进而影响组分浓度的分布。图 15给出了远离壁面处组分浓度的相似性以及壁面邻近组分浓度变化的差异性。O原子质量分数沿壁面法向的变化梯度如图 16所示，说明异相反应速率越高，O原子质量分数的变化梯度越大，因而由此导致的扩散热流也随之增大（图 14）。

不同的均相反应速率条件下，异相反应速率对界面热质传输的影响不同。均相反应速率较慢时（G-1），到达壁面的氧原子高，异相催化反应更为剧烈，因此异相反应速率对扩散热流的影响幅度更大，进而导致了总热流的大幅变化（图 17(a)）；而均相反应事故率较快时（G2），更多的O原子在气相中复合，壁面附近O原子浓度较低，因此扩散热流受异相反应速率的影响较小（图 17(b)）。

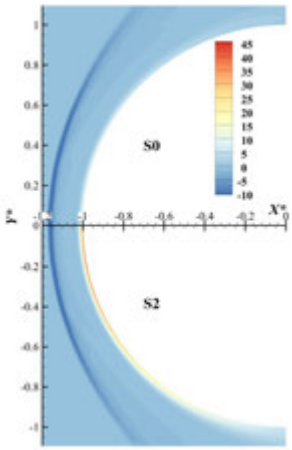
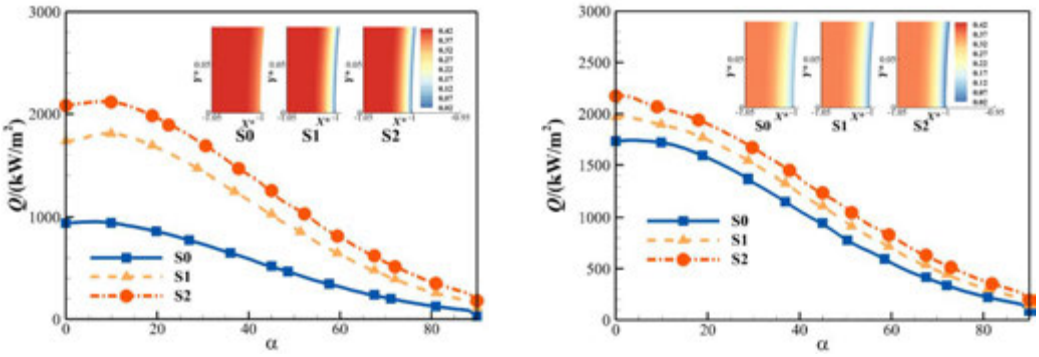


图 16　O原子浓度沿壁面法向的梯度分布（G0）



(a)G-1　　(b)G2

图 17　表面总热流和表面邻近的O原子浓度分布

3 结论与展望

基于四步反应的气体模型和两步反应的催化模型，分析了化学非平衡流场中均相/异相反应速率对表面总热流、对流/扩散热流的影响规律及内在原因，可以得到以下结论：

1）均相反应速率越大，气相流体温度越高，使得表面对流换热越高，但原子组分浓度的降低，导致壁面扩散热流的减小，且异相反应速率越高，减小的幅度越大；

2）异相反应速率越大，扩散热流越高，最高相差4倍，由此导致表面总热流差异可达2倍，但是在均相反应速率越高的条件下，异相反应速率带来的差异越不明显；

3）均相和异相反应速率共同决定表面热流，前者决定了原子携带的化学能在气体中的释放速率，后者决定了原子携带的化学能在表面的释放速率。由于氧原子的总量一定，均相反应速率还改变表面邻近的原子浓度，进而影响异相反应速率，因此两者必须同时予以考虑。

参考文献

[1]　桂业伟. 高超声速飞行器综合热效应问题 [J]. 中国科学:物理学 力学 天文学, 2019, 49(11): 139-53.

[2] YANG X, XIAO G, DU Y, et al. Heat Transfer with Interface Effects in High-Enthalpy and High-Speed Flow: Modelling Review and Recent Progress [J]. Applied Thermal Engineering, 2021.
[3] KIM J G, KANG S H, PARK S H. Thermochemical nonequilibrium modeling of oxygen in hypersonic air flows [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 148: 119059.
[4] 孟松鹤, 金华, 王国林, et al. 热防护材料表面催化特性研究进展 [J]. 航空学报, 2013, 35(2).
[5] SCHAEFER C, JANSEN A P J. Coupling of kinetic Monte Carlo simulations of surface reactions to transport in a fluid for heterogeneous catalytic reactor modeling [J]. Journal of Chemical Physics, 2013, 138(5): 2005.
[6] PARK C, JAFFE R L, PARTRIDGE H. Chemical-Kinetic Parameters of Hyperbolic Earth Entry [J]. Journal of thermophysics and heat transfer, 2001, 15(1): 76-90.
[7] GUPTA R N, YOS J M, THOMPSON R A. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for the 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K [J]. Nasa Sti/recon Technical Report N, 1990.
[8] DUNN M G, KANG S. Theoretical and experimental studies of reentry plasmas [R], 1973.
[9] KIM J G, JO S M. Modification of chemical-kinetic parameters for 11-air species in re-entry flows [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 169(10): 120950.
[10] 董维中, 丁明松, 高铁锁, et al. 热化学非平衡模型和表面温度对气动热计算影响分析 [J]. 空气动力学学报, 2013, 31(006): 692-8.
[11] BARBATO M, REGGIANI S, BRUNO C, et al. Model for Heterogeneous Catalysis on Metal Surfaces with Applications to Hypersonic Flows [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2000, 14(3): 412-20.
[12] 金华. 防热材料表面催化特性测试与评价方法研究 [D]. 哈尔滨; 哈尔滨工业大学, 2014.
[13] HERDRICH G, FERTIG M. Catalysis of Metallic and Ceramic TPS-Materials [J]. Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space ences, Space Technology Japan, 2009, 7(26): 49-58.
[14] 李芹. 飞行器表面多相催化效应的唯象建模与气动热数值模拟研究 [D]. Shanghai; Shanghai Jiao Tong University, 2021.
[15] FAY J A, RIDDELL F R. Theory of Stagnation Point Heat Transfer in Dissociated Air [J]. Journal of the Aeronautical Sciences, 1958, 25(2): 73-85.
[16] R. G. On Catalytic Recombination Rates in Hypersonic Stagnation Heat Transfer [J]. Journal of Jet Propulsion, 1958, 28(11): 737-45.
[17] NASUTI F, BARBATO M, BRUNO C. Material-dependent catalytic recombination modeling for hypersonic flows [Z]. 28th Thermophysics Conference. 1993.10.2514/6.1993-2840
[18] KUROTAKI T. Construction of catalytic model on SiO2-based surface and application to real trajectory [Z]. 34th Thermophysics Conference. 2000.10.2514/6.2000-2366
[19] ARMENISE I, BARBATO M, CAPITELLI M, et al. State-to-State Catalytic Models, Kinetics, and Transport in Hypersonic Boundary Layers [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2006, 20(3): 465-76.
[20] BARBATO M, GIORDANO D, MUYLAERT J, et al. Comparison of catalytic wall conditions for hypersonic flow [J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 1996, 33(5): 620-7.
[21] 曾明, 冯海涛, 瞿章华. 不同热化学模型对表面传热影响的数值分析 [J]. 国防科技大学学报, 2001.
[22] 苗文博, 程晓丽, 艾邦成. 来流条件对热流组分扩散项影响效应分析 [J]. 空气动力学学报, 2011, 29(004): 476-80.
[23] 丁明松, 董维中, 高铁锁, et al. 局部催化特性差异对气动热环境影响的计算分析 [J]. 航空学报, 2018, 39(003): 44-54.
[24] YANG X, GUI Y, TANG W, et al. Surface Chemical Effects on Hypersonic Nonequilibrium Aeroheating in Dissociated Carbon–Oxygen Mixture [J]. Journal of Spacecraft & Rockets, 2018: 1-11.
[25] YANG X, GUI Y, XIAO G, et al. Reacting gas-surface interaction and heat transfer characteristics for high-enthalpy and hypersonic dissociated carbon dioxide flow [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 146(2020): 118869.

中国工程热物理学会 数值计算
学术会议论文 编号：233114

分子太阳热系统光化学反应及组分输运的数值模拟

汪毅[1]，生丽莎[1]，王鑫[1]，施娟[1]，陈振乾*[1,2]
([1]东南大学能源与环境学院，江苏 南京 210096；[2]江苏省太阳能技术重点实验室，江苏 南京 210096)
(Tel:13770838011, Email:zqchen@seu.edu.cn)

摘要：分子太阳能热（MOST）系统是一种收集、转化和储存太阳能的新技术。分子光开关在反应器中的光化学反应和组分输运机制尚不清楚。本文提出了基于分子太阳能热系统的太阳能收集转换装置的能量转换效率和组分输运的模拟理论框架。偶氮苯衍生物作为分子光开关，可以通过分子结构的开关来储能，存储时间取决于所选择的分子体系和温度。我们通过量子力学计算得到了反应物的微观参数，并将其应用于反应过程的宏观能量转换分析。该理论框架可以预测光异构化反应的转化率和储热效率，并观察反应器中组分的输运情况。我们研究了流速、反应物初始浓度和反应器尺寸对光异构化储能过程的影响。理论分析结果与现有实验设备的结果吻合较好。该模拟理论框架为今后分子太阳能热系统的设计提供了指导。

关键词：偶氮苯；分子光开关；光异构化反应；储能；太阳能

0 前言

随着化石燃料的枯竭，可持续能源，特别是太阳能越来越受到人们的重视[1]。然而，供需不匹配导致的能源过剩使得储能技术的发展在太阳能利用领域显得尤为重要[2]。在过去的几十年里，开发了各种各样的太阳能储存方法，包括显热储存、潜热储存、热化学储存等技术[3]。近年来，利用分子光开关收集和储存太阳能的技术被称为分子太阳能热（MOST）技术[4]，得到了广泛的研究。与可燃燃料等化学开放式能量存储系统不同，该系统仅限于与周围环境的能量交换。与显热系统和潜热系统相比，它具有以更紧凑的结构，具有更高的能量密度[5]。理论上，MOST 技术可以实现与当前锂离子电池技术相当的储能密度[6]。该技术依赖于可逆的化学反应，其中母体分子可以在太阳照射下异构化为亚稳态高能异构体，并且它可以在需要释放能量时通过热激发或催化激发转化到母体状态。理想情况下，储存的能量可按需作为热量释放，从而作为一个封闭循环系统运行[7,8]。MOST 已经有许多候选物质，包括降冰片二烯[9-11]、富瓦烯二钌配合物[12,13]和偶氮苯衍生物[14-17]。此外，MOST 体系因其吸收光谱宽、鲁棒性高、半衰期长、能量密度可调、合成成本低等特点而备受关注。然而，大多数系统仍处于化学水平的开发阶段，

基金项目：国家自然科学基金（No.52076040）

因为必须满足反应物和产物的多种分子特性才能满足当前太阳能储能的需求。

对 MOST 系统应用的研究已经扩展到多种形式，包括对蓄热工况、放热工况以及混合系统的研究[18]。Moth-Poulsen 团队[19]在微通道中进行了分子光开关的光异构化实验，成功测量了二氢偶氮烯/乙烯基七氟烯（DHA1/VHF1）的储能密度和能量效率并开发了一种将太阳能热水与分子光开关相结合的混合装置[20]，太阳能综合利用效率可达 80%。Moth-Poulsen[21]还将降冰片二烯衍生物与微机电系统热发生器（MEMS-TEG）结合发电，首次证明了分子光开关储能技术可以直接将太阳能转化为电能。Ghasemi[22]将分子光开关与相变材料耦合，实现了对太阳光谱的完全利用。Liu[23]将分子光开关的光化学和热化学过程结合起来，利用抛物型太阳能集热器将入射太阳光聚焦到含有降冰片二烯衍生物溶液的流体分子光开关器件上，该混合系统的最大太阳能化学效率约为 69%。该团队[24]进一步发展了这一概念，增加了光伏系统，实现了 67%的太阳能利用效率，表明 MOST 储能系统是一种很有前途的可再生能源策略。

然而，以往的 MOST 研究仅在实验室进行[25,26]，研究的器件大多为芯片级和微米级厚度，难以在实际工程中应用。此外，由于缺乏对 MOST 系统中光化学反应过程和组分输运特性的机理研究，限制了对内部反应过程的理解和反应器模型的优化设计。本文以偶氮苯体系为例，提出了一个理论模拟框架，可用于 MOST 体系工作介质的筛选和反应器各参数的优化设计。该模型不仅考虑了 MOST 系统工作介质的微观参数，如量子产率、异构化焓、吉布斯自由能等，还考虑了反应器的宏观参数，如反应器厚度、反应物浓度、流速等。该框架允许在宏观环境下研究分子转化，从而在实际工程和基础化学之间建立联系。

1　数值模型

1.1 物理模型和边界条件

本文建立二维物理模型，描述平板 MOST 储能系统中分子光开关在紫外线照射条件下的光化学反应和组分输运特性，如图 1 所示。物理模型指文献[27]中的微通道反应器。微通道尺寸为 110 × 3 × 0.1 mm，长度和宽度固定，厚度设定在 0.1 ~ 2 mm。入口边界条件采用速度入口条件，速度范围为 $6.50 \times 10^{-4} \sim 1.38 \times 10^{-2}$ m·s^{-1}，以保证从分子光开关接收光的时间为 8 ~ 170 s。出口边界条件采用自由流动。入口反应物浓度范围为 $2 \times 10^{-4} \sim 2 \times 10^{-3}$ mol·L^{-1}。

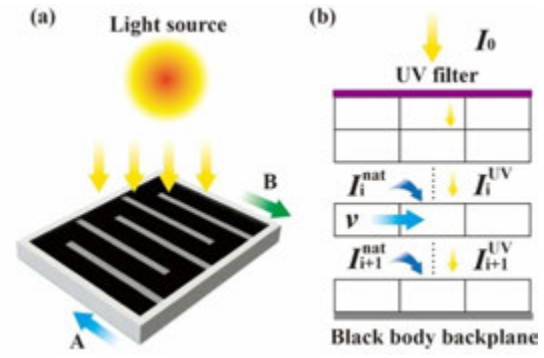


图 1 光化学反应器物理模型：（a）三维物理模型；（b）简化的二维模型和每个体元的流动和辐照

Fig. 1 Physical model of photochemical reactor: (a) three- dimensional Physical model; (b) Simplified two-dimensional models and the flow and illumination of each volume element

1.2 光化学模型

本模型考虑的反应为偶氮苯衍生物（AZO1）的光异构化反应[28]，整体反应如图 2 所示:

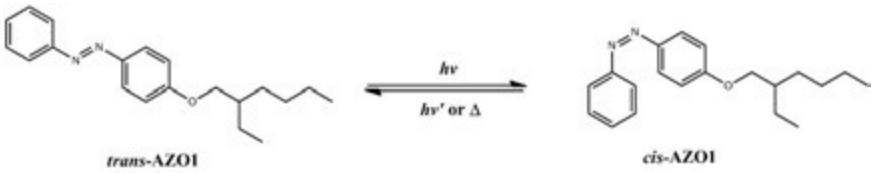


图 2 *trans*-AZO1 和 *cis*-AZO1 的分子结构以及光致异构化过程

Fig. 2 Molecular structure and photoisomerization of *trans*-AZO1 and *cis*-AZO1

MOST 体系的能量转化过程如图 3（a）所示，具体可以描述为：*trans* 态分子被光激发为激发态 *trans**，然后转化为 *cis* 态。能量储存在 *cis* 态分子中。反应速率的数学模型可表示为[29]：

$$-\frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}c_{B}}{\mathrm{d}t}=\frac{\Phi_{\mathrm{TC}}\cdot n_{\mathrm{TC}}}{N_{A}\cdot \mathrm{d}V}-\frac{\Phi_{\mathrm{CT}}\cdot n_{\mathrm{CT}}}{N_{A}\cdot \mathrm{d}V}-k_{TBR}\cdot c_{\mathrm{B}} \tag{1}$$

其中，下标 A 和 B 分别表示反应物（*trans*-AZO1）和生成物（*cis*-AZO1）。第一项为紫外光诱导光异构化的正向反应速率。第二项是可见光引起的光异构化逆反应速率。第三项是热逆异构化速率。第一项中，n_{TC} 为组分 A 吸收的光子数，定义为:

$$n_{\mathrm{TC}}=\int_{\lambda_1}^{\lambda_2}\frac{\varepsilon_{\mathrm{A}}\cdot c_{\mathrm{A}}}{\varepsilon_{\mathrm{A}}\cdot c_{\mathrm{A}}+\varepsilon_{\mathrm{B}}\cdot c_{\mathrm{B}}}\cdot\frac{\eta_{TR}I_0\lambda}{h_{\mathrm{p}}c}\cdot 10^{-\int_0^{h_{\mathrm{t}}}(\varepsilon_A c_{\mathrm{A}}+\varepsilon_{\mathrm{B}}c_{\mathrm{B}})\mathrm{d}h}\cdot(1-10^{-\mathrm{d}Abs})\cdot\mathrm{d}A_d\cdot\mathrm{d}\lambda \tag{2}$$

消光系数采用量子化学方法 PCM-M062X-D3/6-311+G(d)计算，计算结果如图 3（b）所示。λ_1 和λ_2 分别位于积分的上下限，分别设置为 280 nm 和 900 nm[30]。太阳光谱选择

AM1.5 标注，如图 3（c）所示。滤光片透过率随波长的变化如图 3（d）所示。

第二项中，n_{CT} 为 B 组分吸收的光子数，用于引起逆异构化，定义为:

$$n_{CT}=\int_{\lambda_2}^{\lambda_3}\frac{\varepsilon_B\cdot c_B}{\varepsilon_A\cdot c_A+\varepsilon_B\cdot c_B}\cdot\frac{\eta_{nat}I_0\lambda}{h_p c}\cdot 10^{-\int_0^{h_1}(\varepsilon_A c_A+\varepsilon_B c_B)dh}\cdot(1-10^{-dAbs})\cdot dA_d\cdot d\lambda \tag{3}$$

第三项为热异构化反应，反应速率常数 k_{TBR} 由 Eyring 方程定义。$\Delta H^{\neq}$和$\Delta S^{\neq}$分别为 93700 J·mol^{-1} 和-31.7 J·K^{-1}·mol^{-1}。

$$k_{TBR}=\frac{k_B\cdot T}{h_p}\cdot\exp(-\frac{\Delta H^{\neq}-T\cdot\Delta S^{\neq}}{R\cdot T}) \tag{4}$$

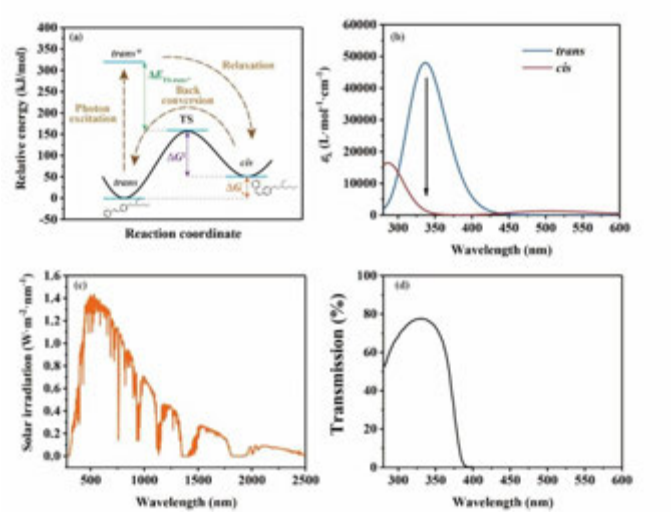


图 3 （a）MOST 体系的能量转换过程：*trans* 态分子被光激发为激发态 *trans**，然后转化为 *cis* 态。能量储存在顺式分子中。顺式会被热异构化成反式；（b）*trans* 和 *cis* 消光系数；（c）太阳光光谱，AM1.5 标准；（d）紫外线滤光片的透过率

Fig. 3 (a) Energy transformation scheme of MOST systems: molecules in the *trans* state are photoexcited into the excited state *trans**, then are relaxed to *cis* state. Energy is stored in *cis* molecules. *cis* will undergo thermal isomerization to *trans*; (b) Extinction coefficients of *trans* and *cis*; (c) Sunlight spectrum, AM1.5 standard; (d) Transmittance of UV filters

1.3 传质模型

在稀溶液体系中，偶氮苯在甲苯溶剂中的传质过程满足式（5）。Wilke-Chang 方程是估计有机分子扩散系数的常用关系[31,32]，在 270 ~ 370 K 范围内，我们通过拟合文献[33]中的推荐数据得到粘度与温度的二次关系。

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}+\nabla\cdot(-D\cdot\nabla c_i)+\mathbf{u}\cdot\nabla c_i=R_i \tag{5}$$

$$D=\frac{a(\phi M_{\mathrm{solv}})^{0.5}T}{\mu_{\mathrm{solv}}V_{\mathrm{solu}}^{0.6}} \tag{6}$$

1.4 传热模型

溶液中的传热关系如下:

$$\rho c_{\mathrm{p}}\frac{\partial T}{\partial t}+\rho c_{\mathrm{p}}\mathbf{u}\cdot\nabla T-\nabla\cdot(k\nabla T)=Q \tag{7}$$

每个体积元净产热量为进入体积元的光功率与储存能量功率的差值，表示为：

$$Q=\frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2}I_{\mathrm{i}}^{\mathrm{UV}}\cdot(1-10^{-(\varepsilon_{\mathrm{A}}\cdot c_{\mathrm{A}}+\varepsilon_{\mathrm{B}}\cdot c_{\mathrm{B}})\cdot dh})\cdot\mathrm{d}A_{\mathrm{d}}\cdot\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}V}-\Delta H_{\mathrm{stor}}\cdot\frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{B}}}{\mathrm{d}t} \tag{8}$$

未被溶液吸收的光子在背板上被吸收并产生热量：

$$Q_{\mathrm{BK}}=\int_{\lambda_1}^{\lambda_2}I_0\mathrm{d}\lambda-\frac{\int Q\mathrm{d}V}{\mathrm{d}A_{\mathrm{d}}} \tag{9}$$

1.5 流体动力学模型

如传质模型所述，浓度分布由扩散和对流决定。流体的运动状态可以通过雷诺数的无量纲参数来评估。本文研究的工况在室温 25 °C 下，入口流速 u 范围为 $6.50\times10^{-4}\sim1.38\times10^{-2}$ m·s^{-1}，d_{h} 为 0.1 ~ 2 mm，溶剂的粘度μ为 5.64×10^{-4} Pa·s，流体密度为 872 kg·m^{-3}.。本文研究的最大雷诺数为 42.67，远小于 1500 的过渡阶段，微通道流动是典型的层流。根据连续性方程(11)和 Navier-Stokes 方程(12)，确定了流体连续运动中的速度分布。

$$\mathrm{Re}=\frac{\rho u d_h}{\mu} \tag{10}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u}=0 \tag{11}$$

$$\rho\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}+(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}\right)=\nabla\cdot\left[-pI+\mu\cdot\left(\nabla\mathbf{u}+(\nabla\mathbf{u})^{\mathrm{T}}\right)\right]+\rho\mathbf{g} \tag{12}$$

2 结果与讨论

2.1 模型验证

模拟用反应器转化率进行验证，实验数据来源于文献[27]。图 4 给出了 2×10^{-4} mol·L^{-1} 浓度的 AZO1 的甲苯溶液在反应器停留 180 s 内的转化率，模拟与实验结果吻合较好。

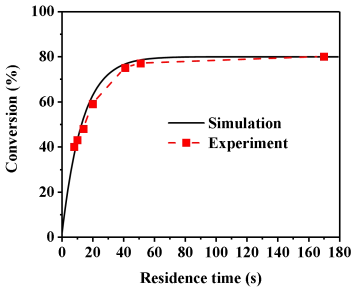


图 4 仿真结果与实验结果对比

Fig. 4 Comparison between simulation results and experimental results

2.2 反应器内的浓度分布

图 5（a）为浓度为 2×10^{-4} mol·L^{-1}、流速为 6.50×10^{-4} m·s^{-1} 的 AZO1 的甲苯溶液在厚度为 0.1 mm 的反应器中的转化分布。可以看出，在厚度方向上，浓度分布比较均匀，反应比较完全，出口转化率达到 80%。图 5（b）为 2 mm 反应器内浓度为 2×10^{-4} mol·L^{-1}、流速为 6.50×10^{-4} m·s^{-1} 时的转化分布。可以看出，反应器的上部优先发生反应。由于光强逐层减弱，下层的转化率较低。此外，由于流体边界层的存在，浓度分布呈现中部传递快、边界附近传递慢的特征。可以看出，在不同厚度的反应器中，浓度分布是不同的。在厚度较小的反应器中，浓度分布均匀。而在厚度较大的反应器中，由于光照，反应器上部的反应物优先反应，而下部的反应物由于光照强度减弱反应较慢。反应器的左下部分由于流体流动，转化率很低。因此，需要优化反应器的厚度设计，使其与浓度和流速相匹配，使反应物充分转化。

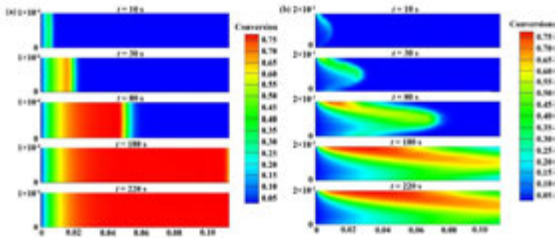


图 5 不同时间浓度为 2×10^{-4} mol·L^{-1} 的转化率：（a）反应器厚度 1×10^{-4} m；（b）反应器厚度为 2×10^{-3} m

Fig. 5 Conversion rate of 2×10^{-4} mol·L^{-1} at different time: (a) the reactor thickness was 1×10^{-4} m; (b) the reactor thickness was 2×10^{-3} m

2.3 反应物浓度和反应器厚度对转化率和太阳能效率的影响

本文用反应物转化率和太阳能效率来评价反应器的储能效率[27]。MOST 系统的效率可以用下式来描述：

$$\eta_{\mathrm{MOST}}=\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}\alpha_{\mathrm{A}}\Delta H_{\mathrm{stor}}}{A\int_{\lambda_1}^{\lambda_2}I_0(\lambda)\mathrm{d}\lambda}\times 100\% \tag{13}$$

不同浓度下的总转化率及相应的太阳能总效率根据式（13）计算得到。如图 6（a）所示，当反应器厚度为 0.1 mm 时，初期转化率随着溶质浓度的增加而降低，最终转化率为 80%。产生这种现象的原因是随着溶质浓度的增加，溶质分子的数量增多，单位时间内吸收的光子数量小于可转换的分子数量。对应的太阳能总储能效率如图 6（b）所示。一方面，随着反应物在反应器中停留时间的增加，太阳能效率逐渐降低，因为随着停留时间的增加，可转化反应物的比例逐渐降低。另一方面，随着反应物浓度的增加，太阳能效率逐渐提高。

图 6（c）显示了不同几何尺寸反应器的总转化率和相应的太阳能总效率。当反应物浓度为 2×10^{-4} mol·L^{-1} 时，初期转化率随着反应器厚度的增加而降低，最终转化率为 80%。产生这种现象的原因是随着反应器厚度的增加，上层溶质完全吸收光子，而下层溶质没有完全吸收光子。随着厚度的逐渐增加，溶质总量增加，单位时间内吸收的光子数小于可转化的分子数，导致一定时间内转化不足，高浓度时更为明显（图 6（e））。从图 6（d）与图 6（f）可以看出，随着厚度的增加，太阳能的能量效率随浓度的增加呈现出类似的特征，这都是由于反应物总量的增加造成的。

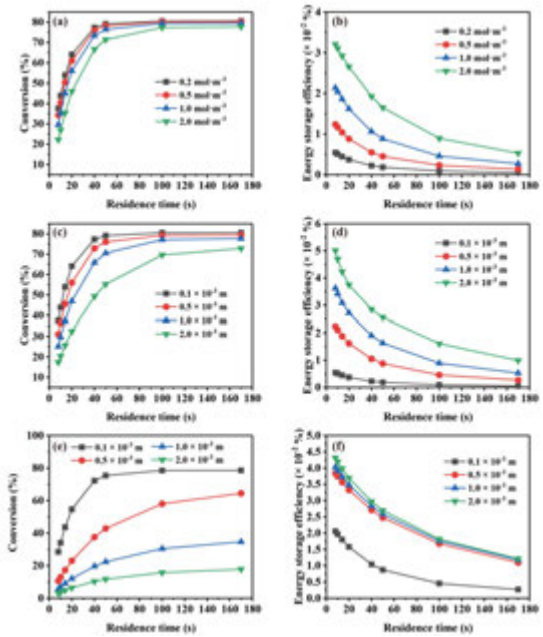


图 5 （a）反应器厚度为 0.1 mm 时浓度对转化率的影响；（a）反应器厚度为 0.1 mm 时，浓度对太阳能效率的影响；（c）浓度为 2×10^{-4} mol·L^{-1} 时反应器厚度对转化率的影响；（d）2×10^{-4} mol·L^{-1} 时反应器厚度对太阳能效率的影响；（e）浓度为 1×10^{-3} mol·L^{-1} 时反应器厚度对转化率的影响；（f）浓度为 1×10^{-3} mol·L^{-1} 时，反应器厚度对太阳能效率的影响

Fig. 5 (a) The influence of concentration on conversion when the reactor thickness is 0.1 mm; (b) The

effect of concentration on solar energy efficiency when the reactor thickness is 0.1 mm; (c) The influence of reactor thickness on the conversion rate when the concentration is 2×10^{-4} mol·L^{-1}; (d) The influence of reactor thickness on solar energy efficiency at 2×10^{-4} mol·L^{-1}; (e) The influence of reactor thickness on the conversion rate when the concentration is 1×10^{-3} mol·L^{-1}; (f) The influence of reactor thickness on solar energy efficiency when concentration is 1×10^{-3} mol·L^{-1}

3 结　论

本文以偶氮苯为例，提出了一种预测分子太阳热（MOST）体系光化学和组分输运的模拟流程。该模型能够预测设备的转换率、太阳能储能效率，并能够确定宏观和微观参数对 MOST 系统的影响。仿真结果与先前得到的实验结果吻合。对模型进行了验证。结果表明，优化反应器厚度和反应物浓度可以提高太阳能的存储效率。仿真框架可以在为特定的 MOST 系统搭建设备之前进行理论评估，或者有效的测试 MOST 系统的潜力。

符号表

c_i	*i*组分浓度	[mol·m^{-3}]	t	时间	[s]
Φ_{TC}	正反应量子产率	[1]	N_A	阿佛加德罗常数	[1]
Φ_{CT}	逆反应量子产率	[1]	dV	体积元	[m^3]
n_{TC}	光子吸收数（*trans*）	[1]	n_{CT}	光子吸收数（*cis*）	[1]
ε_i	*i*组分的消光系数	[m^3·mol^{-1}·m^{-1}]	dh	体积元厚度	[m]
dA_d	体积元面积	[m^2]	λ	波长	[m]
c	光速	[m·s^{-1}]	h_p	普朗克常数	[J·s]
I_0	光强	[W·m^{-2}]	η_{TR}	滤光片的透过率	[1]
h_i	体积元深度	[m]	η_{nat}	自然光有效透射率	[1]
k_B	玻尔兹曼常数	[J·K^{-1}]	T	温度	[K]
$\Delta H^{\neq}$	过渡态的焓	[J·mol^{-1}]	$\Delta S^{\neq}$	过渡态的熵	[J·K^{-1}·mol^{-1}]
R_i	*i* 组分的摩尔生成率	[mol·m^{-3}·s^{-1}]	u	流速	[m·s^{-1}]
D	扩散系数	[m^2·s^{-1}]	M_{solv}	溶剂的分子量	[kg·mol^{-1}]
V_{solu}	溶剂的摩尔体积	[m^3·mol^{-1}]	Φ	缔合参数, 7.4×10^{-15}	[1]
a	常数, 7.4×10^{-15}	[1]	μ_{solv}	溶剂的动力粘度	[Pa·s]
ρ	流体密度	[kg·m^{-3}]	c_p	恒压热容	[J·kg^{-1}·K^{-1}]
k	热导率	[W·m^{-1}·K^{-1}]	Q	热源项	[W·m^{-3}]
Re	雷诺数	[1]	d_h	特征长度	[m]
p	压力	[Pa]	g	重力加速度	[m·s^{-2}]
$\dot{n}_A$	摩尔流量	[mol·s^{-1}]	α_A	反应物的转化率	[1]
A	辐照区域面积	[m^2]	Q_{BK}	边界热源	[W·m^{-2}]
k_{TBR}	热异构化反应速率常数	[s^{-1}]	η_{MOST}	系统效率	[1]

参考文献

[1] Rehman, A., Ma, H., Ozturk, I., et al., “Revealing the dynamic effects of fossil fuel energy, nuclear energy, renewable energy, and carbon emissions on Pakistan’s economic growth,” *Environ. Sci. Pollut. R.*, 29(32), pp. 48784-48794, (2022).

[2] Mahon, H., O'Connor, D., Friedrich, D., et al., “A review of thermal energy storage technologies for seasonal loops,” *Energy.*, 239, pp. 122207, (2022).

[3] Aydin, D., Casey, S.P., Riffat, S., “The latest advancements on thermochemical heat storage systems,” *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 41, pp. 356-367, (2015).

[4] Moth-Poulsen, K., Ćoso, D., Börjesson, K., et al., “Molecular solar thermal (MOST) energy storage and release system,” *Energ. Environ. Sci.*, 5(9), pp. 8534-8537, (2012).

[5] Lewis N.S., Nocera, D.G., “Powering the planet: Chemical challenges in solar energy utilization,” P. Natl Acad. Sci. USA., 103(43), pp. 15729-15735, (2006).

[6] Kucharski, T.J., Tian, Y., Akbulatov, S., et al., “Chemical solutions for the closed-cycle storage of solar energy,” *Energ. Environ. Sci.*, 4(11), pp. 4449-4472, (2011).

[7] Wang, Z., Erhart, P., Li, T., et al., “Storing energy with molecular photoisomers,” *Joule*, 5(12), pp. 3116-3136, (2021).

[8] Gerkman, M.A., Han, G.G.D., “Toward controlled thermal energy storage and release in organic phase change materials,”. *Joule*, 4(8), pp. 1621-1625, (2020).

[9] Dreos, A., Wang, Z., Udmark, J., et al., “Liquid norbornadiene photoswitches for solar energy storage,” Adv. Energy. Mater., 8(18), pp. 1703401, (2018).

[10] Mony, J., Climent, C., Petersen, A.U., et al., “Photoisomerization efficiency of a solar thermal fuel in the strong coupling regime,” *Adv. Funct. Mater.*, 31(21), pp. 2010737, (2021).

[11] Lorenz, P., Luchs, T., Hirsch, A., “Molecular solar thermal batteries through combination of magnetic nanoparticle catalysts and tailored norbornadiene photoswitches,”. *Chem–Eur. J.*, 27(15), pp. 4993-5002, (2021).

[12] Kanai, Y., Srinivasan, V., Meier, S.K., et al., “Mechanism of thermal reversal of the (fulvalene) tetracarbonyldiruthenium photoisomerization: toward molecular solar–thermal energy storage,” *Angew. Chem. Int. Edit.*, 49(47), pp. 8926-8929, (2010).

[13] Lennartson, A., Lundin, A., Börjesson, K., et al., “Tuning the photochemical properties of the fulvalene-tetracarbonyl-diruthenium system,” *Dalton. T.*, 45(21), pp. 8740-8744, (2016).

[14] Le, M., Han, G.G.D., “Stimuli-responsive organic phase change materials: Molecular designs and applications in energy storage,” *Acc. Mater. Res.*, 3(6), pp. 634-643, (2022).

[15] Zhang, B., Feng, Y., Feng, W., “Azobenzene-Based Solar Thermal Fuels: A Review,”. *Nano-Micro. Lett.*, 14(1): pp. 138, (2022).

[16] Xu, X., Wang, G., “Molecular solar thermal systems towards phase change and visible light photon energy storage,” *Small.*, 18(16), pp. 2107473, (2022).

[17] Xu, W.C., Sun, S., Wu, S., “Photoinduzierte, reversible Fest-flüssig-Übergänge unter Verwendung photoschaltbarer Materialien,” *Angew. Chem. Int. Edit.*, 131(29), pp. 9814-9843, (2019).

[18] Wang, Z., Hölzel, H., Moth-Poulsen, K., "Status and challenges for molecular solar thermal energy storage system based devices," *Chem. Soc. Rev.*, 51, pp. 7313-7326, (2022).

[19] Wang, Z., Udmark, J., Börjesson, K., et al., "Evaluating dihydroazulene/vinylheptafulvene photoswitches for solar energy storage applications," *ChemSusChem.*, 10, pp. 3049-3055, (2017).

[20] Dreos, A., Börjesson K., Wang Z., "Exploring the potential of a hybrid device combining solar water heating and molecular solar thermal energy storage," *Energ. Environ. Sci.*, 10, pp. 728-734 (2017).

[21] Wang, Z., Wu, Z., Hu Z., et al., "Chip-scale solar thermal electrical power generation," *Cell. Reports. Physical. Science*., 3, pp. 100789, (2022).

[22] Kashyap, V., Sakunkaewkasem, S., Jafari, P., et al., "Full spectrum solar thermal energy harvesting and storage by a molecular and phase-change hybrid material," *Joule.* 3, pp. 3100-3111, (2019).

[23] Fang, J., Liu, Q., Guo, S., et al., "Spanning solar spectrum: A combined photochemical and thermochemical process for solar energy storage," *Appl. Energ.*, 247, pp. 116-126, (2019).

[24] Fang, J., Wu, H., Liu, T., et al., "Thermodynamic evaluation of a concentrated photochemical-photovoltaic-thermochemical (CP-PV-T) system in the full-spectrum solar energy utilization," *Appl. Energ.*, 279, pp. 115778, (2020).

[25] Wang, Z., Anna, R., Raul, L., et al., "Macroscopic Heat Release in a Molecular Solar Thermal Energy Storage System," *Energ. Environ. Sci.*, 12, pp. 187-193, (2018)

[26] Quant, M., Hamrin, A,, Lennartson, A., et al., "Solvent Effects on the Absorption Profile, Kinetic Stability, and Photoisomerization Process of the Norbornadiene-Quadricyclanes System," *J. Phys. Chem. C.*, 123(12), pp. 7081-7087, (2019).

[27] Wang, Z., Losantos, R., Sampedro, D., et al., "Demonstration of an azobenzene derivative based solar thermal energy storage system,". *J. Mater. Chem. A.*, 7(25), pp. 15042-15047, (2019).

[28] Masutani, K., Morikawa, M., Kimizuka, N., "A liquid azobenzene derivative as a solvent-free solar thermal fuel," Chem. Commun., 50(99), pp. 15803-15806, (2014).

[29] Zimmerman, G., Chow, L.Y., Paik, U.J., "The photochemical isomerization of azobenzene1". *J. Am. Chem. Soc.*, 0(14): 3528-3531, (1958).

[30] Hansen, M.H., Olsen, S.T., Sylvester-Hvid, K.O., et al., "Simulation framework for screening of molecular solar thermal systems in the context of a hybrid device," *Chem. Phys.*, 519, pp. 92-100, (2019).

[31] Su, W.C., Chou, C.H., Wong, D.S.H., et al.. "Diffusion coefficients and conductivities of alkylimidazolium tetrafluoroborates and hexafluorophosphates,". *Fluid. Phase. Equilibr.*, 252(1-2), pp. 74-78, (2007).

[32] Wilke, C.R., Chang, P., "Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions,". *Aiche. J.*, 1(2), pp. 264-270, (1955).

[33] Serra, F., Terentjev, E.M., "Effects of solvent viscosity and polarity on the isomerization of azobenzene," *Macromolecules.*, 41(3), pp. 981-986, (2008).

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：233116

纳米液滴撞击固体表面的作用力特性

冉浩江[1]，胡志锋[2]，许文杰[3]，冯妍卉[1]，褚福强[1]*
（1 北京科技大学 能源与环境工程学院，北京 100083;
2 上海交通大学 机械与动力工程学院，上海 200240；
3 北京科技大学 计算机与通信工程学院，北京 100083;）
(Tel: 15210601597, Email: chufq@ustb.edu.cn)

摘要：纳米液滴撞击固体表面的动力学特性与微纳加工及纳米制造等高新技术密切相关，液滴动力学特性取决于固液间撞击作用力，但液滴撞击作用力特性尚无相关研究。本文利用分子动力学方法模拟了纳米液滴撞击固体表面的动态过程，明确了液滴撞击作用力随时间的演变规律，阐明了液滴与表面各参数对作用力特性的影响，并建立了作用力峰值的理论预测关联式。结果表明，液滴撞击作用力随时间先增后减，呈单峰特性，作用力峰值的变化依韦伯数不同可划分为粘性区间与惯性区间，建立的理论模型可准确预测不同区间内的作用力峰值。

关键词：纳米液滴；液滴撞击；固体表面；作用力演变；作用力峰值

0 前言

液滴撞击固体表面是一种自然界和工程应用中普遍存在的重要现象[1]。液滴撞击固体表面会产生铺展、收缩、粘附、反弹、射流、飞溅等现象[1-5]。目前，液滴撞击在高新技术中有广泛应用，如共晶高熵合金的制备[6]，微纳加工[7]，传感器制备[8]，3D 打印[9]等。以共晶高熵合金材料的制备为例[6]，它的原理是以纳米液滴撞击作为介质的电沉积方法，实现高熵合金材料的化学计量控制和传递金属盐分子到指定区域，能够解决传统热处理制备方法的物理化学缺陷。液滴撞击过程中的行为差异，其本质都是由液滴与固体表面之间的相互作用力决定。因此，探究液滴撞击作用力，揭示纳米液滴撞击动力学行为机理非常关键。

在宏观领域，Chanadra 和 Avedisian 等[10]通过实验和理论研究已经得到，液滴的最大铺展系数β_{max} (最大铺展直径 D_{max}/液滴初始直径 D_0)在粘性区满足标度定律$\beta_{max}\sim Re^{1/5}$(雷诺数$Re=\rho D_0 U_0/\mu$，其中U_0为液滴撞击速度，ρ为液滴密度，μ为液滴粘度)，在惯性区满足标度定律$\beta_{max}\sim We^{1/2}$(韦伯数$We=\rho D_0 U_0^2/\gamma$，其中γ为液滴表面张力)；Richard 等[11]实验研究了宏观水滴的接触时间，发现接触时间τ不依赖于撞击速度，且满足标度定律$\tau\sim(\rho R_0^3/\gamma)^{1/2}$(其中$R_0$为液滴初始半径)；本研究团队[12]研究了毫米液滴撞击超疏水表面的作用力，发现了反直觉的作用力双峰特性：第一个峰值出现在铺展阶段，无量纲作用力峰值满足标度$F^*_{peak}\approx0.85$；第二个峰值出现在回缩阶段，无量纲作用力峰值满足标度定律$F^*_{peak}\approx0.45$($F^*_{peak}=F_{peak}/\rho U_0^2 D_0^2$，其中$F_{peak}$为液滴撞击作用力峰值，$\rho U_0^2 D_0^2$为液滴的惯性力)。

在微观领域，由于尺度效应的影响，液滴撞击固体表面动力学基本规律和机理与宏观领域截然不同。Wang 等[13]采用分子动力学模拟的方法，证明了纳米液滴撞击过程的最大铺展系数与表面接触角和韦伯数有显著关系，建立起考虑了粘性效应影响的通用模型；Xie 等[14]研究了纳米水液滴撞击超疏水固体表面的反弹动力学，提出了纳米液滴的接触时间理论模型$\tau\sim\left(\rho\mu R_0^4/\gamma^2\right)^{1/2}=(R_0/v_0)We^{2/3}Re^{-1/3}$(其中$v_0$为液滴运动粘度)。然而，目前缺乏纳米液滴撞击作用力特性的研究，其作用力变化机理尚不清楚。

本文使用大规模原子/分子大规模并行模拟（LAMMPS）软件包，对纳米液滴撞击固体表面的动态过程进行了模拟，报道了纳米液滴撞击固体表面的作用力演变特性，分析了液滴

基金项目：国家自然科学基金资助项目（No.52206068）

与表面参数对液滴撞击作用力的影响规律，并构建了无量纲作用力峰值的预测关联式，进而推动对液滴撞击固体表面动力学特性的认识，可为微纳加工、纳米材料制备和纳米生物医学等一系列高新技术提供基础理论指导。

1 模拟方法

1.1 初始模型的构建

本文使用 LAMMPS 进行分子动力学模拟。整个系统的初始构型如图 1 所示，其中 Pt 原子(铂原子)作为基底分布在下侧，水分子为球状分布在系统正中间。模拟中液滴直径取为 D_0=6 nm，10 nm，14 nm，对应的水分子数分别为 3771、17441 及 47880。将由 126075 个 Pt 原子组成的六层固体基底放置在模拟盒子的底部，并且采用虚拟弹簧为基底提供足够的刚度和强度防止在液滴撞击过程中基底发生形变，进而防止模拟过程中原子的丢失而影响模拟结果的准确性。计算域空间大小为 40×40×30 nm^3，x 和 y 方向设置为周期性边界条件，z 方向设置为反射边界条件。

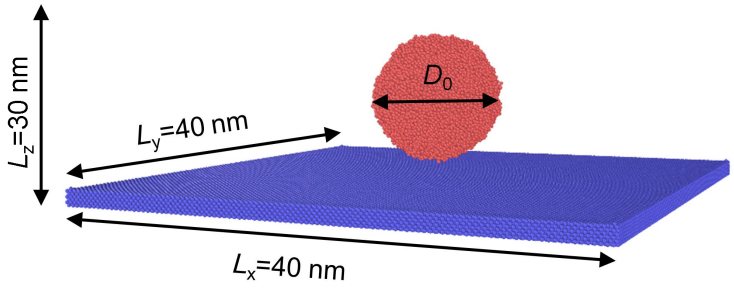


图 1 液滴撞击固体表面模拟系统的初始构型；Pt 原子为蓝色，水分子为红色。

本文使用 mW 模型[15]来模拟水分子， mW 模型不仅可以真实地还原水的动力学和热力学特性，而且不需要计算粒子之间的长程静电作用力来体现氢键作用力，所以计算准确性高且速度快。mW 模型中，水的密度为ρ=997 kg/m^3, 表面张力系数为γ=66 mN/m。由于 mW 模型不包括氢原子的重定向，因此水的黏度比实验值低三倍，为μ=283.7 Pa·s。Pt-Pt 和水-Pt 原子间的撞击作用力使用 L-J 12-6 势函数[16]进行描述，其表达式为：

$$E = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right],\ r < r_c \tag{1}$$

其中ε是势壁的深度，σ是有效的作用距离，r 是两个原子之间的距离，r_c是相互作用的截断距离，其值通常设置为 2.5σ。Pt-Pt 原子之间，ε=0.6938 eV，σ=0.247 nm。水-Pt 原子之间的参数，可以通过在弛豫平衡后，将液滴移动到 Pt 基底表面的方法，测量得到：当ε=0.02 eV，σ=0.247 nm 时，表面接触角为θ=55°；当ε=0.0068 eV，σ=0.247 nm 时，表面接触角为θ=125°；当ε=0.0027 eV，σ = 0.247 nm 时，表面接触角为θ=160°；当ε=0.00184 eV，σ=0.247 nm 时，表面接触角为θ=180°。

每次模拟都可以分为两个阶段——弛豫阶段和相互作用阶段。在弛豫阶段，液滴和 Pt 基底都在 NVT 系综(正则系综)下赋予 300 K 的初始温度，采用 Nose-Hoover 恒温器方法保持系统维持在系统设定温度，并消除液滴的线性和角动量，以减小弛豫过程初始位置的变动，该阶段时间步长为 0.002 ps，共运行 100000 步达到稳定状态。在相互作用阶段，采用 NVE 系综(微正则系综)取代整个模拟的 NVT 系综条件并移除恒温器。对液滴解除线性和角动量限制，即解除对液滴水平和竖直方向的限制，同时赋予 z 方向的速度。第二阶段时间步长为

0.01 ps，持续到完成液滴撞击回弹过程。

1.2 模拟方法的验证

为了验证本文模拟方法的有效性，本文首先对不同韦伯数（*We*）时液滴撞击固体表面进行模拟，将所得铺展半径 *R* 随时间 *t* 的变化曲线与 Li 等结果[17]进行比较，如图 2(a)所示，红点和黑点分别为本文和 Li 等的模拟结果。*We*=88.1 和 *We*=10.8 时的模拟结果均与 Li 等结果符合较好。接着，模拟计算了不同韦伯数下纳米液滴撞击固体表面的最大铺展系数（$\beta_{max}=D_{max}/D_0$），β_{max}随 *We* 的变化如图 2(b)所示，红点和黑点分别为本文和 Wang 等[13]的模拟结果，所得模拟结果在不同区间内都与 Wang 等结果符合得很好。因此，本文模拟方法是准确可靠的。

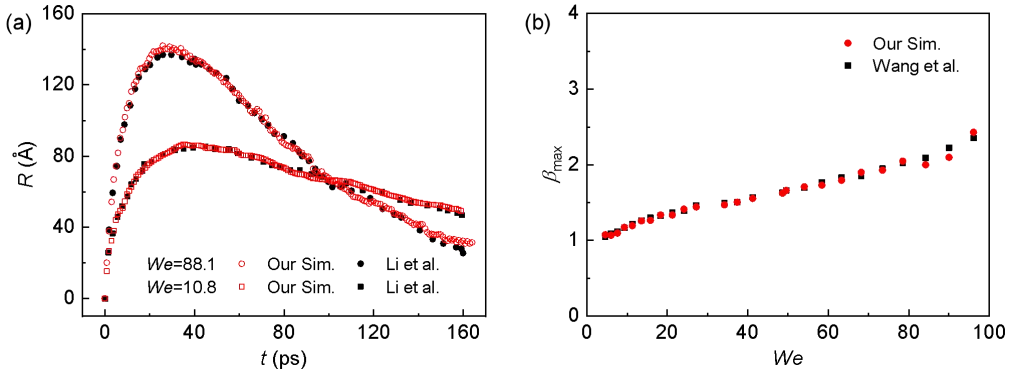


图 2 模拟方法的验证。(a)铺展半径随时间变化曲线对比；(b)最大铺展系数随韦伯数变化对比

2 结果与讨论

2.1 液滴形态及作用力演变

本文对纳米液滴的研究范围为 *We*=5~250。纳米液滴撞击超疏水表面（液滴直径 D_0=10 nm，表面接触角θ=160°）的动态过程如图 3 所示，图中 t^* 为无量纲时间($t^*=tU_0/D_0$，*t* 为时间)。图 3(a)-3(c)分别对应 *We*=10，30，60，液滴处在接触表面、作用力峰值、最大铺展、脱离表面时刻的液滴形态图；图 3(d)为 *We*=200 时，液滴处在接触表面、作用力峰值、飞溅、飞溅回弹时刻的液滴形态图。从图 3(a)-3(a)可以看到，液滴与固体表面接触后，液滴开始铺展，竖直方向动量逐渐转化为水平方向动量，液滴形态趋于扁平；在最大铺展时刻，液滴呈饼状或椭圆状，且在边缘不产生明显的凸起轮廓；在最大铺展之后液滴会进行回缩，液膜外缘逐渐向液滴中心处聚拢，最终发生回弹，脱离表面时呈椭球状；从图 3(d)可以看到，液滴在作用力峰值前的形态图与 *We*=10，30，60 类似，不同的是高 *We* 下，液滴在铺展过程中会发生飞溅现象，随后破碎成大量小液滴发生回弹。

如图 3(a)-3(d)所示，液滴撞击作用力峰值出现在碰撞发生初期，液滴此时还在进行铺展，不论液滴最终是否发生飞溅，其峰值作用力时刻对应的形态相似，呈球冠状，液膜外侧都与固体表面近似垂直，该无量纲作用力峰值时间和形态与毫米液滴类似[18,19]。

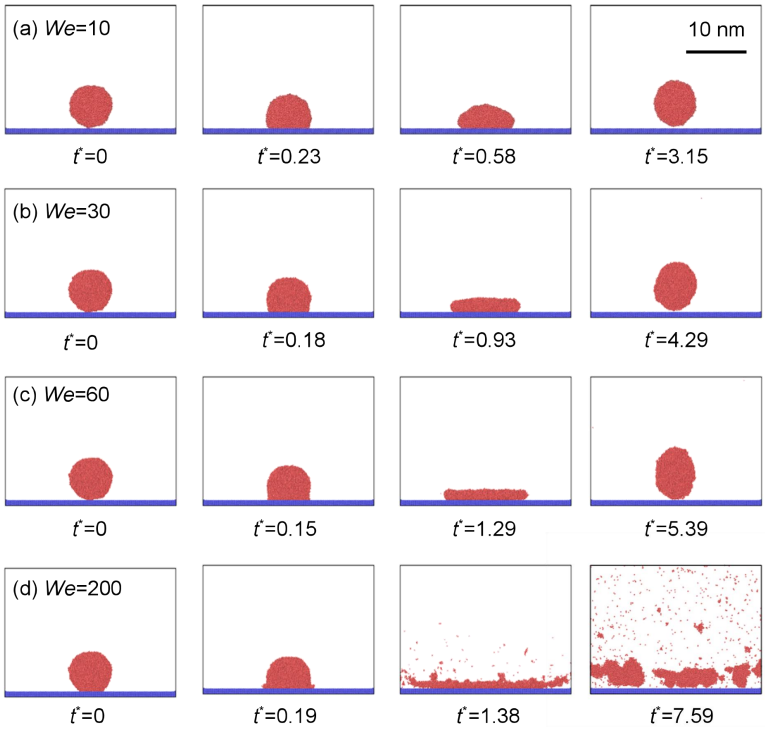


图 3　纳米液滴撞击超疏水表面动态过程，(a)-(c)分别为θ=160°，*We*=10, 30, 60 时，液滴接触表面、作用力峰值、最大铺展及脱离时刻的液滴形态，(d)为θ=160°，*We*=200 时，液滴接触表面、作用力峰值、发生飞溅和脱离表面时刻的液滴形态。

接下来将分析纳米液滴撞击超疏水表面的撞击作用力。图 4(a)展示不同韦伯数 *We* 时纳米液滴撞击作用力 *F* 随时间 *t* 的变化，可见，纳米液滴与超疏水表面接触后 2-9 ps 内，作用力急剧增大并达到峰值。随后，作用力逐渐减小，直至液滴离开表面时作用力减小为 0。当 *We* 增大时，作用力峰值随之增大，而作用力峰值出现的时间基本不变。同时，液滴产生飞溅现象时仍然满足上述规律，这说明液滴的作用力变化不受飞溅现象的影响。

图 4(b)展示不同韦伯数 *We* 时纳米液滴无量纲撞击作用力 F^*随无量纲时间 t^*的变化。由图 4(b)可见，不同 *We* 时纳米液滴撞击超疏水表面后 F^*随 t^*的变化曲线遵循相似的主曲线，无量纲作用力曲线的演变具有自相似性。值得注意的是，纳米液滴撞击作用力曲线始终表现为单峰特性，未出现毫米液滴撞击超疏水表面作用力曲线中的双峰特性[20]，该现象在下文机理阐述中将作进一步分析。

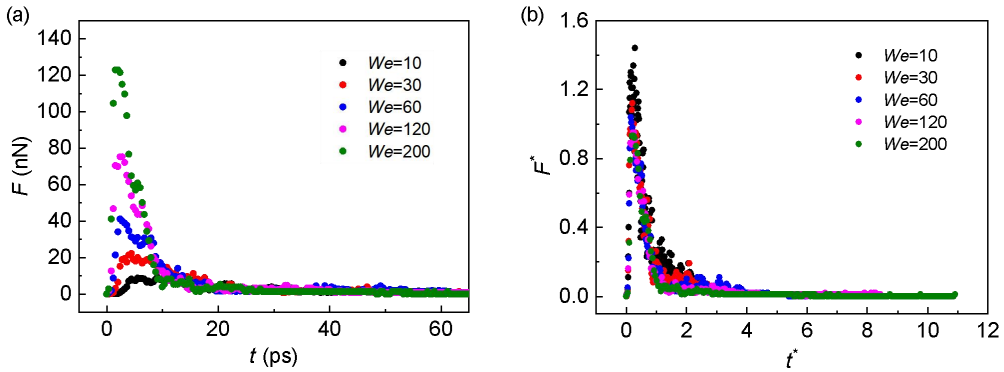


图 4　不同韦伯数下纳米液滴撞击作用力演变曲线。(a)液滴撞击作用力 *F* 随时间 *t* 的变化；(b)无量纲作用力 F^*随无量纲时间 t^*的变化。（*We*=10, 30, 60, 120, 200）。

2.2 纳米液滴撞击作用力的影响因素

2.2.1 液滴尺寸对作用力的影响

图 5 展示不同直径液滴（D_0=6，10，14 nm）撞击超疏水表面(θ=160°)时无量纲作用力F^*随无量纲时间 t^*的变化。图 5(a)和(b)分别为 We=30 和 60 时无量纲作用力演变曲线。可见，在 We 相同的情况下，不同液滴直径 D_0 对应的 F^*-t^*曲线均遵循相似的主曲线。图 5(a)中，无量纲作用力峰值为F^*_{peak}≈1.06~1.16，对应的无量纲时间为t^*_{peak}≈0.2。图 5(b)中，F^*_{peak}≈0.99~1.04，t^*_{peak}≈0.2。因此，无量纲作用力演化曲线 F^*-t^*几乎不受 D_0 的影响，无量纲作用力峰值F^*_{peak}和无量纲作用力峰值时刻t^*_{peak}均与 D_0 无关。

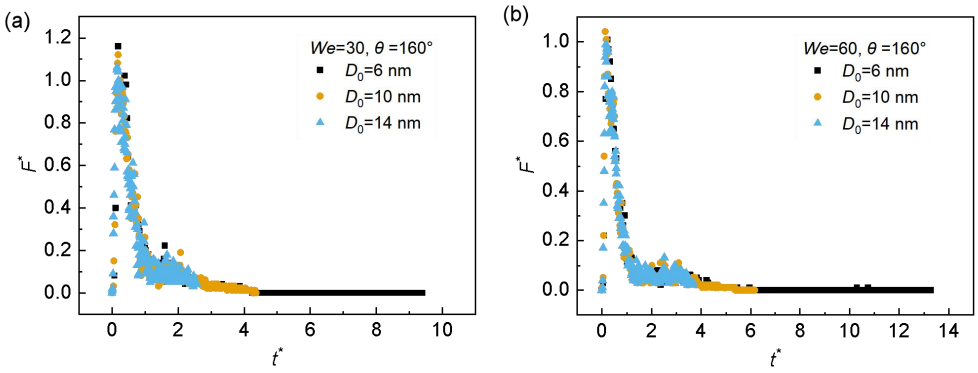


图 5　不同直径液滴（D_0=6，10，14 nm）时的无量纲作用力演变曲线。(a)We=30；(b) We=60。

2.2.2 表面润湿性对作用力的影响

图 6 展示液滴(D_0=10 nm)撞击不同润湿性表面（θ=55°，125°，160°）时无量纲作用力F^*随无量纲时间 t^*的变化。图 6(a)和(b)分别为 We=30 和 60 时无量纲作用力演变曲线，并依据曲线的变化趋势分为上升、下降和稳定阶段。可见，在作用力上升阶段，不同接触角θ对应 F^*-t^*曲线的变化趋势遵循相似的主曲线；在下降阶段，液滴不遵循相似规律，下降的过程不同；在稳定阶段，无量纲作用力稳定值随接触角的增大而减小。图 6(a)中，无量纲作用力峰值为F^*_{peak}≈1.12-1.17，对应的无量纲时间为t^*_{peak}≈0.2。图 6(b)中，F^*_{peak}≈1.00-1.04，t^*_{peak}≈0.2。因此，无量纲作用力上升演化曲线 F^*-t^*几乎不受θ的影响，无量纲作用力峰值F^*_{peak}和无量纲作用力峰值时刻t^*_{peak}与θ无关，这是因为在接触初期，惯性力占主导地位，远大于表面张力或粘性力的作用[12]。但需指出，当表面润湿性变化（亲水、疏水、超疏水）时，纳米液滴撞击固体表面的作用力曲线始终表现为单峰特性。

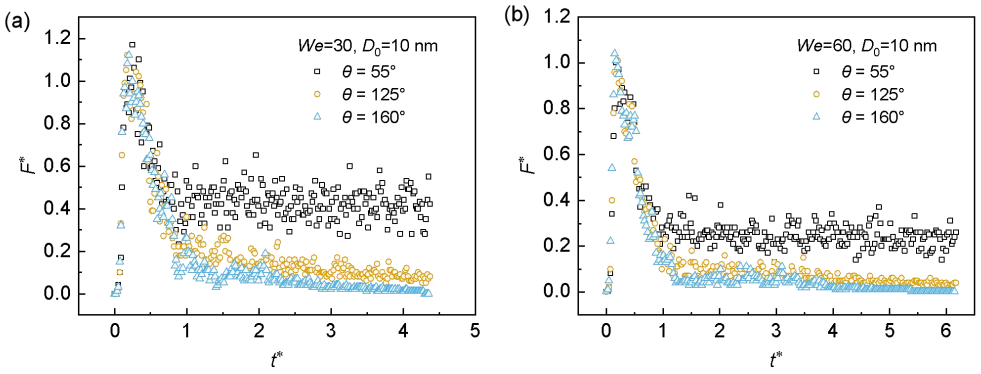


图 6　不同润湿性表面（θ=55°, 125°, 160°）的无量纲作用力演变曲线。(a)We=30；(b) We=60。

2.3 纳米液滴撞击作用力峰值

2.3.1 作用力峰值的理论预测关联式

本节对纳米液滴撞击固体表面的无量纲作用力峰值F^*_{peak}进行定量分析。图 7(a)和(b)分别展示了液滴尺寸和表面接触角不同时F^*_{peak}随 We 的变化。F^*_{peak}的变化满足以下预测式：

$$F^*_{peak}\begin{cases}=2.65We^{-1/4}, We<50\\=1, \qquad We\geq 50\end{cases} \tag{2}$$

当 We<50 时，F^*_{peak}随 We 的增加而减小，满足F^*_{peak}~$We^{-1/4}$。这是因为，当液滴撞击速度较小时，粘性效应不可忽略，故F^*_{peak}的变化处于粘性区间。与毫米液滴撞击作用力变化类似[18]，粘性区间内F^*_{peak}~$Re^{-1/2}$，由于模拟范围内奥内佐格数 Oh(Oh=$ReWe^{-1/2}$)变化很小，因此满足标度律F^*_{peak}~$Re^{-1/2}$~$We^{-1/4}$。当 We≥50 时，F^*_{peak}近似保持不变，满足F^*_{peak}≈1，即纳米液滴撞击作用力与液滴惯性力一致，表明F^*_{peak}的变化进入惯性区间。惯性区间内，液滴撞击作用力与惯性力相近。纳米液滴的惯性区间（We≥50）比毫米液滴惯性区间（We≥30）更大。

需要强调，公式(2)可适用于不同液滴尺寸、表面润湿性、液滴撞击现象（粘附、回弹、飞溅等）时的纳米液滴撞击作用力的预测，具有很好的普适性。

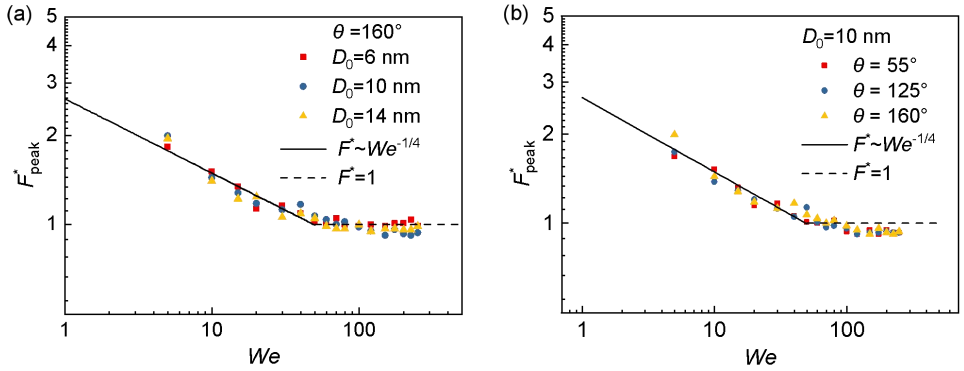


图 7 不同液滴直径 D_0 与表面接触角θ时无量纲作用力峰值随韦伯数的变化。

(a) θ=160°，D_0=6, 10, 14 nm；(b) D_0=10 nm，θ=55°, 125°, 160°。

2.3.2 消失的第二个作用力峰值

纳米液滴撞击不同润湿性表面时作用力曲线均表现为单峰特性，该特征不同于毫米液滴。毫米液滴撞击亲水表面时作用力表现为单峰特性[20]，而撞击超疏水表面时作用力表现为双峰特性[12]。以下将分析对纳米液滴撞击超疏水表面时第二个作用力峰值消失的原因。

Hu 等[12]发现毫米液滴撞击超疏水表面时发现液滴的第二个作用力峰值出现在回缩阶段。第二个作用力峰值出现的主要原因是液滴在最大铺展时将形成中间薄外缘厚的液膜结构，回缩阶段在表面张力主导作用下，外侧液膜向中间聚拢，使内外液膜相撞，中间处液体冲击固体表面，引起了撞击作用力的明显上升。

图 6(a)-6(c)展示了不同 We 时纳米液滴撞击超疏水表面后最大铺展时刻的侧视图和剖面图与回弹时刻的侧视图。可以直观地看到，在最大铺展时刻，液滴呈半椭球状或扁饼状，未出现中间薄边缘厚的结构，因此在回缩阶段，中间处液体难以对表面产生有效的冲击。在回弹阶段，液滴呈球状或椭球状，未发生射流现象。因此，纳米液滴撞击超疏水表面时未产生第二个作用力峰值。

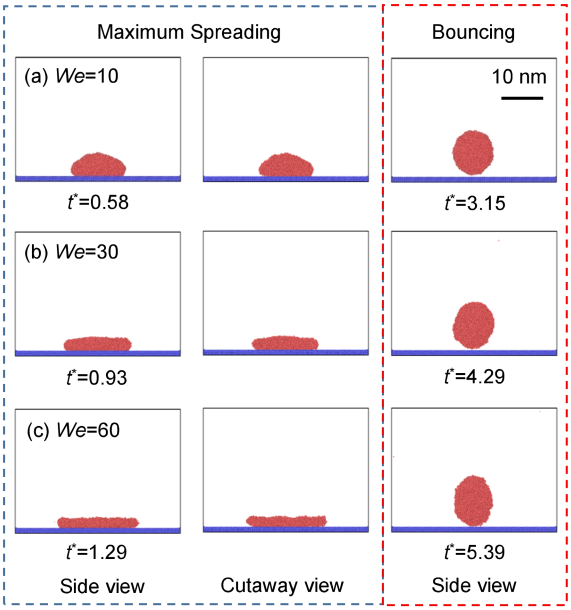


图 8 液滴最大铺展和回弹的形态图。(a) We=10；(b) We=30；(c) We=60。

3 结　论

本文通过分子动力学模拟研究了纳米液滴撞击固体表面过程中作用力的变化特性，讨论了纳米液滴撞击动态过程，分析了影响液滴撞击作用力的因素，并建立了作用力峰值的预测关联式。主要结论如下：

(1)分析了纳米液滴撞击固体表面的动态过程和作用力演变特性。报道了不同韦伯数下纳米液滴形态演变特征，发现撞击过程中 F-t 和 F^*-t^*曲线均呈先增后减的变化趋势，作用力演变不受液滴飞溅影响，F^*-t^*曲线遵循相似的主曲线，且始终表现单峰特性。

(2)讨论了液滴尺寸和表面润湿性对纳米液滴撞击作用力的影响，其结果表明：液滴尺寸对 F^*-t^*曲线几乎没有影响，F^*_{peak}和t^*_{peak}也与液滴尺寸无关；由于撞击初期惯性力占主导作用，表面润湿性对 F^*-t^*曲线上升阶段几乎没有影响，F^*_{peak}和t^*_{peak}也与表面润湿性无关。

(3)构建了作用力峰值的预测关联式并分析了作用力峰值的变化机理。当 We<50 时，为粘性区间，作用力峰值为$F^*_{peak}=2.65We^{-1/4}$；当 We≥50 时，为惯性区间，F^*_{peak}=1。纳米液滴在最大铺展时刻和回弹阶段的形态与毫米液滴不同，超疏水表面上不存在第二个作用力峰值。

参考文献

[1] Josserand, C.; Thoroddsen, S. T. Drop Impact on a Solid Surface. Annual Review of Fluid Mechanics 2016, 48 (1), 365-391.

[2] Zhang, X.; Zhu, Z.; Zhang, C.; et al. Reduced Contact Time of a Droplet Impacting on a Moving Superhydrophobic Surface. Applied Physics Letters 2020, 117 (15).

[3] Lin, S.; Zhao, B.; Zou, S.; et al. Impact of Viscous Droplets on Different Wettable Surfaces: Impact Phenomena, the Maximum Spreading Factor, Spreading Time and Post-impact Oscillation. Journal of Colloid and Interface Science 2018, 516, 86-97.

[4] Rioboo, R.; Tropea, C.; Marengo, M. Outcomes from a DropImpact on Solid Surfaces. Atomization and Sprays 2001, 11, 12.

[5] Antonini, C.; Villa, F.; Marengo, M. Oblique Impacts of Water Drops onto Hydrophobic and Superhydrophobic Surfaces: Outcomes, Timing, and Rebound Maps. Experiments in Fluids 2014, 55 (4),

1713.

[6] Shi, P.; Li, R.; Li, Y.; et al. Hierarchical Crack Buffering Triples Ductility in Eutectic Herringbone High-entropy Alloys. Science 2021, 373 (6557), 912-918.

[7] Zhu, Y.; Piehowski, P. D.; Zhao, R.; et al. Nanodroplet Processing Platform for Deep and Quantitative Proteome Profiling of 10-100 Mammalian Cells. Nat Commun 2018, 9 (1), 882.

[8] Benz, M.; Asperger, A.; Hamester, M.; et al. A Combined High-throughput and High-content Platform for Unified On-chip Synthesis, Characterization and Biological Screening. Nat Commun 2020, 11 (1), 5391.

[9] Dong, Z.; Cui, H.; Zhang, H.; et al. 3D Printing of Inherently Nanoporous Polymers via Polymerization-Induced Phase Separation. Nat Commun 2021, 12 (1), 247.

[10] Chandra, S.; Avedisian, C. T. On the Collision of a Droplet with a Solid Surface. Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences 1991, 432, 13 - 41.

[11] Richard, D.; Quéré, D. Bouncing Water Drops. Europhysics Letters 2000, 50 (6), 769.

[12] Hu, Z.; Chu, F.; Wu, X. Double-peak Characteristic of Droplet Impact Force on Superhydrophobic Surfaces. Extreme Mechanics Letters 2022, 52, 101665.

[13] Wang, Y. B.; Wang, Y. F.; Gao, S. R.; et al. Universal Model for the Maximum Spreading Factor of Impacting Nanodroplets: From Hydrophilic to Hydrophobic Surfaces. Langmuir 2020, 36 (31), 9306-9316.

[14] Xie, F. F.; Lv, S. H.; Yang, Y. R.; et al. Contact Time of a Bouncing Nanodroplet. J Phys Chem Lett 2020, 11 (8), 2818-2823.

[15] Molinero, V.; Moore, E. B. Water Modeled As an Intermediate Element between Carbon and Silicon. The Journal of Physical Chemistry B 2009, 113 (13), 4008-4016.

[16] Johnson, J. K.; Zollweg, J. A.; Gubbins, K. E. The Lennard-Jones Equation of State Revisited. Molecular Physics 1993, 78 (3), 591-618.

[17] Li, X.-H.; Zhang, X.-X.; Chen, M. Estimation of Viscous Dissipation in Nanodroplet Impact and Spreading. Physics of Fluids 2015, 27 (5).

[18] Gordillo, L.; Sun, T.-P.; Cheng, X. Dynamics of Drop Impact on Solid Surfaces: Evolution of Impact Force and Self-similar Spreading. Journal of Fluid Mechanics 2018, 840, 190-214.

[19] Cheng, X.; Sun, T.-P.; Gordillo, L. Drop Impact Dynamics: Impact Force and Stress Distributions. Annual Review of Fluid Mechanics 2022, 54 (1), 57-81.

[20] Li, J.; Zhang, B.; Guo, P.; Lv, Q. Impact Force of a Low Speed Water Droplet Colliding on a Solid Surface. Journal of Applied Physics 2014, 116 (21), 214903.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233152

等离子体电弧通道演化及粒子分散耦合数值模拟

张达，毕岚森，丁瑞鑫，石嵩，何燕*
（（青岛科技大学机电工程学院，山东 青岛 266061）
（Tel:17863928637, Email: qustzd17863928637@163.com）

摘要： 本文建立了电弧-工件耦合模型对放电过程中的电弧通道演化及粒子分散过程进行了数值模拟，结果表明，随着放电时间的增加，电弧不断向工件传递热量并施加压力作用，工件受热压作用产生放电坑，弧柱被拉长变窄，电弧的温度有所下降，受电弧弧柱作用，工件表面的速度和动压增大，从而驱动粒子不断运动，实现分散效果。本研究对于揭示等离子体电弧作用下的粒子分散机理以及优化粒子分散过程具有一定的指导作用。

关键词： 等离子体；电弧；通道演化；粒子分散

0 前言

电弧放电等离子体是一种高度电离气体，由于具有高能流密度、绿色、快速等优势，可以用于材料制备、焊接、切割等领域[1-3]。其基本原理在于，通过在阴阳两电极间施加高压，从而两电极间的介质被击穿产生电弧，形成高温等离子体通道，材料在等离子体热压效应下实现加工和制备[4]。然而，受制于各种因素影响，等离子体对材料加工处理效果往往千差万别，因此，探究电弧放电等离子体产生和演化过程对于阐释材料加工作用机理是至关重要的。

近年来，大量学者试图通过实验和数值模拟的角度来探究等离子体形成和演化规律，以期对电弧放电等离子体有更深层次的认识和理解，Xia 等人[5]通过测量电极的温升和去除量，得到在单次放电过程中分布在阳极和阴极的能量。Yang 等人[6]提出了基于等效热源的放电介质接头热应力场计算方法，建立了电弧的三维磁流体动力学(Magnetohydrodynamics, MHD) 模型，基于 MHD 理论，用质量方程、动量方程、能量守恒方程和电磁方程描述了电弧的流场。Tang 等人[7]采用等离子体和电极相统一的模型，对轴向磁场作用下的大气直流电弧进行了数值模拟。模拟结果表明，在有轴向磁场的情况下，阴极电弧附着体向尖端收缩，随着轴向磁场的增大，阴极尖端附近的等离子体温度升高。Singh [8]利用热传递方程研究了在不同电火花加工参数下能量传递到工件的百分比百分比，并将最佳参数与输入放电能量的最佳利用联系起来，从而有助于提高该工艺的工艺性能。尽管这些研究对于理解和阐释等离子体能量转化与等离子体-工件作用机制

提供了良好的借鉴，但同样存在着一定的局限性，例如，大部分研究都是将等离子体等效为热源，并且假定等离子体热源为盘状或点状，使得加工过程中的热流密度分布为高斯分布或均匀分布，这极大地影响了模型的可行性[9-10]。此外，等离子体电弧放电过程中工件的烧蚀导致的电极间距变化也会影响电弧的演变，这需要进一步去探究。

在之前的研究中[11-12]，我们开发了一套基于等离子体电弧的纳米材料分散设备并实现了碳纳米管、四氧化三铁等纳米材料的分散。其主要过程是将待分散的纳米材料与无毒液体混合后压制成圆柱作为阴极，金属钨棒作为阳极，在两个电极之间施加高压产生等离子体电弧，借助于等离子体电弧热压效应实现纳米材料的分散，如图 1 所示。尽管如此，通过实验的手段很对等离子体电弧演化和纳米材料分散有深入的了解，因此，本研究借助于 FLUENT 软件采用数值模拟的手段探究等离子体电弧的演化过程，建立了电弧-工件耦合模型探究电弧作用下的粒子分散效应，从而阐释等离子体电弧作用下的分散机制。

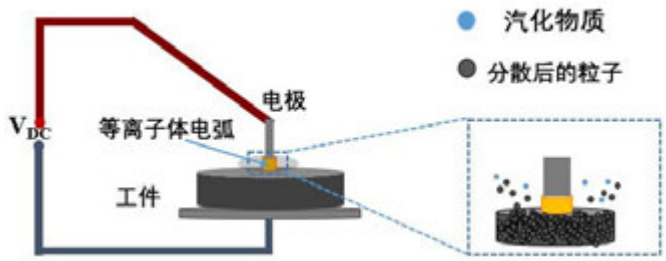


图 1 基于等离子体电弧的纳米材料分散示意图

1 模型的建立

1.1 几何模型

由于研究对象的轴对称特性，其几何模型可简化为二维轴对称，如图 2 所示。黄色虚线为对称轴，模型包括电极区域 ABKJ、空气气氛区域 BCFHGJ 和工件区域 CDEF 三部分。电极与工件之间的放电间隙为 DC, JKB 为电极与电弧等离子体的界面，CF 为工件与电弧等离子体的界面。

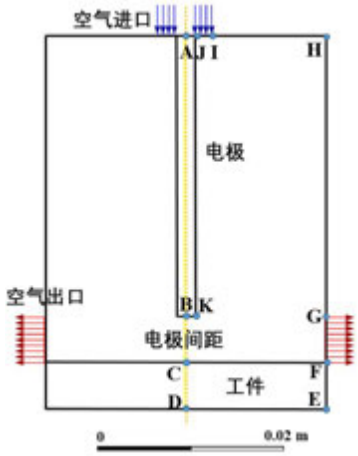


图 2 几何模型示意图

1.2 基本假设

基于相关理论研究和实验研究，在探索等离子弧通道演化和粒子分散过程中，可以做出以下合理假设:

1．等离子体电弧处于局部热力学平衡(LTE)状态[13]。

2．等离子体是不可压缩的(低马赫数)[14]。

3．等离子体是牛顿流体混合物，且局部是中性。

4．忽略能量方程中的粘性耗散和压力功。

5．等离子体电弧处于层流稳态，是对称的连续介质(低雷诺数)。

1.3 控制方程

在前文已提及，本文针对等离子体电弧分散方法提出了一种耦合模型探究等离子体电弧演化与粒子分散过程，通过控制方程之间的数据联系实现耦合。在控制方程方面，本文建立了电弧的 MHD 模型，并基于麦克斯韦方程对电磁场进行了描述。

$$\nabla \boldsymbol{J} = S_j \tag{1}$$

欧姆定律：

$$\boldsymbol{J} = \sigma_e \boldsymbol{E} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{E} = -(\nabla \boldsymbol{\Phi}) \tag{3}$$

磁矢量势:

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} = -\mu_0 \boldsymbol{J} \tag{4}$$

磁通密度:

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{5}$$

$\boldsymbol{J}$和$\boldsymbol{B}$为电流密度和磁感应强度的矢量，$\boldsymbol{E}$为电场强度矢量，$\boldsymbol{A}$为磁矢量势，μ_0为磁导率常数，σ_e为电导率，$\boldsymbol{\Phi}$是电势，S_j为电流源项。

根据所建立的电磁模型，等离子体电弧的控制方程为：

质量守恒方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{V}) = 0 \tag{6}$$

动量守恒方程:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \boldsymbol{V}) + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}) = -\nabla p + \left(\mu \nabla \boldsymbol{V}\right) + \rho g + S_M \tag{7}$$

$$S_M = \boldsymbol{J} \times \boldsymbol{B} \tag{8}$$

能量守恒方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\boldsymbol{V} \rho h) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_p} \nabla h\right) + S_E \tag{9}$$

$$S_E = S_e + S_J + S_{rad} \tag{10}$$

S_E为能量源项，S_e, S_J和S_{rad}分别为电子通量、焦耳加热和辐射热源引起的焓输运。

$$S_e = \frac{5k_b}{2e}\left(\frac{\boldsymbol{J}}{c_p}\cdot\nabla h\right) \tag{11}$$

$$S_J = \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{E} \tag{12}$$

辐射热源S_{rad}根据文献查找结果，可以用总体积发射系数来描述[2]：

$$S_{rad} = \begin{cases} 0, & T<1000K \\ 4\sigma k(T^4 - T_0^4) & T\geq 1000K \end{cases} \tag{13}$$

$$k = 13\frac{1}{m}\frac{p}{p_0}, \quad p_0 = 1\ atm \tag{14}$$

其中σ为斯蒂芬玻尔兹曼常数，k为总体积发射系数，T_0为环境温度。

等离子体电弧的热效应引起工件(阴极)表面的相变，应用 VOF 连续方程来描述。

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \left(\nabla\cdot\boldsymbol{V}F\right) = F_s \tag{15}$$

式中，F和F_s分别为质量源项引起的体积分数和各相体积分数的变化。根据定义，F为 1 表明目标流体充满整个网格单元；当F取值为 0 时，表明目标流体不存在于网格单元。

为了研究等离子体电弧对纳米粒子的分散效果，建立了简化的粒子分散模型，模型基于以下假设条件：粒子为理想球体，内部温度均匀一致；粒子受力为重力、热泳力和拖拽力，并忽略其他力；粒子比热为常数。

通过上述假设，由于电弧热激发的粒子运动可以用下列式子描述：

$$\boldsymbol{F_G} + \boldsymbol{F_T} + \boldsymbol{F_D} = m_p\frac{d\boldsymbol{V_p}}{dt} \tag{16}$$

$$\boldsymbol{F_{T,x}} = -D_{T,P}\frac{1}{m_p T}\frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial x} \tag{17}$$

$$\boldsymbol{F_D} = \frac{18\pi\mu}{\rho_p d_p^2}\frac{C_D Re_p}{24}(\mathbf{V} - \boldsymbol{V_P}) \tag{18}$$

$\boldsymbol{F_G}$、$\boldsymbol{F_T}$、$\boldsymbol{F_D}$分别是粒子所受重力、热泳力和拖拽力, $\boldsymbol{V_P}$为粒子速度矢量，Re_p、C_D、$D_{T,P}$分别为粒子雷诺数，阻力系数和热泳力系数，ρ_{p}为粒子密度，m_p为粒子质量，d_p为粒子直径，μ为等离子体动力粘度，T和$\mathbf{V}$分别是等离子体的温度和速度。

根据等离子体电弧传热过程的能量方程，可以将电弧热诱导粒子的温度变化描述为:

$$dQ_p = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{d_p}{2}\right)^3\rho_p c_p\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{6}\pi d_p^3\rho_p c_p\frac{dT_p}{dt} = Q_c + Q_{rad} \tag{19}$$

$$Q_c = \pi d_p^2 h\left(T - T_p\right) \tag{20}$$

$$Q_{rad} = \pi d_p^2 \varepsilon_p \sigma (T^4 - T_p^4) \tag{21}$$

根据 Ranz-Marshall 准则[15]，可以得到粒子与等离子体之间的传热：

$$N_u = \frac{h d_p}{\lambda} = 2.0 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \tag{22}$$

其中，Q_p为粒子吸热，c_p为粒子比热，T_p为粒子温度，ε_p为粒子发射率，Q_c为对流换热量，Q_{rad}为辐射换热量，N_u为努塞尔数，h为对流换热系数，λ为导热系数，Pr为普朗特数。

本研究用到的四氧化三铁的物理性质参数如表 1 所示。

表 1 四氧化三铁的物理性质

密度 ($kg \cdot m^{-3}$)	比热 ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)	熔点 (K)	熔化焓 ($kJ \cdot mol^{-1}$)	沸点 (K)	蒸发焓 ($kJ \cdot mol^{-1}$)
5240	460	1870	169	3173	345

1.4 边界条件

在仿真模型中，电压和电流同时施加在电极和工件上，作为耦合模型的能量输入。工件边界 ED 的电势设为零，电极边界 AJ 电势通过电极表面的平均电流密度来定义。外部边界条件的详细情况如表 2 所示。JI 作为空气进口速度设置为 0.60 $m \cdot s^{-1}$，GF 边界作为压力出口设置为一个大气压 101325 Pa，等离子体活动区域的外边界为 IHG 表面，传热边界设为开边界。只考虑工件边边界 FE 和底边界 ED 的热传导，工件初始温度设为环境温度 300 K。

表 2 模型的外部边界条件

边界	温度 (K)	压力 (Pa)	速度 ($m \cdot s^{-1}$)	电势 (V)
ABCD	$\frac{\partial T}{\partial n} = 0$	$\frac{\partial P}{\partial n} = 0$	$\frac{\partial V}{\partial n} = 0$	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$
AJ	300	-	-	$\frac{I_{in}}{\pi R_E^2} = -\sigma_e \frac{\partial \varphi}{\partial n}$
JI	300	-	0.60	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$
IH	$k_a \cdot \frac{\partial T}{\partial n}$	-	-	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$
HG	$k_a \cdot \frac{\partial T}{\partial n}$	-	-	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$
GF	300	101325	-	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$
FE	300	-	-	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$
ED	300	-	-	0

2 结果与讨论

2.1 等离子体电弧通道演化过程分析

2.1.1 温度场分布

弧柱区的气体温度高达上万开，是电弧的主要组成部分，直观上就是电弧的绝大部分区域，分析弧柱区温度变化情况，对整个电弧温度场的研究有重要意义。等离子体电弧演化过程的温度场分布如图 3 所示，可以看出在 0.05 s 时形成的电弧作用在工件表面，由于工件-弧柱之间的相互作用，形成工件表面宽、电极表面窄的结构；随着电弧放电时间的增加，等离子体电弧弧柱的热量逐渐向工件传递，工件表面出现熔坑（图 3b），此时，电极和工件之间的距离被拉长，弧柱收缩变窄，并且最大温度较 0.05 s 时刻有所升高；随着电弧放电时间的进一步增加，弧柱的热量进一步向工件传递，弧柱的温度有所下降，熔坑进一步变大，如图 3c 和 3d，这也进一步增大了电极与工件之间的放电间距。这可能会进一步影响电弧的放电特性，在本研究中并未对此做进一步的研究讨论。

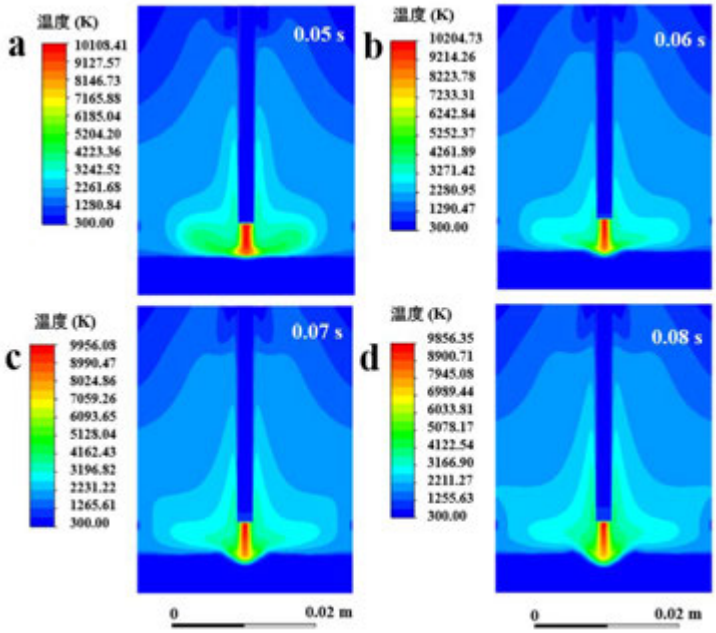


图 3 温度场分布云图

为了数据化电弧放电过程的温度分布数据，我们分别提取了工件表面以及弧柱中心的温度，如图 4 所示。图 4a 显示出了工件表面沿径向的温度分布，可以看出，从电弧作用中心到半径为 R=3 mm 区域，工件表面的温度随半径的增大而快速降低，在距离电弧中心处半径约为 4 mm 时降低到室温，总体呈现出高斯分布。不同放电时间下工件中心的温度分布略有差异，随着电弧放电时间的增加，弧柱作用中心处的工件表面温度逐渐升高，从 0.05 s 到 0.06 s，弧柱作用中心（工件中心）的温度升高尤其明显，当电弧放电时间为 0.07 s 和 0.08 s 时，弧柱作用中心的温度变化不再明显，而弧柱作用中心周围的温度开始升高，表明热量开始从受弧柱影响的工件中心向周围传递。图 4b 显示出了弧柱中心轴向的温度分布，可以看出，随着电弧放电时间的增加，弧柱中心区域的温度逐渐下降，工件受电弧热作用产生熔坑，使得电弧逐渐向工件深处蔓延，弧柱区的长度增

加，电弧整体拉长。此外，越靠近工件，电弧的温度越低，这是由于电弧向工件传递了热量，在电弧和工件之间形成了较大的温度梯度。

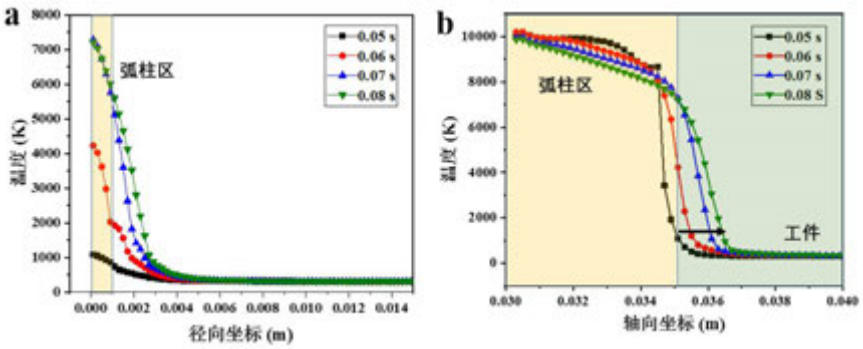


图 4 温度场分布云图

2.1.2 速度场分布

等离子体电弧演化过程的速度场分布如图 5 所示，可以发现，最大速度在电弧中心处，由中心向边缘，速度逐渐减小。在等离子体电弧放电初期（t=0.05s），由于工件-弧柱之间的相互作用，造成受电弧冲击的工件中心的速度较低，并且等离子体电弧弧柱内部和弧柱周围的气流沿径向流动，整体形状呈现出钝形，此时最大的流速为 5.02 $m \cdot s^{-1}$。随着电弧持续放电，在等离子体电弧弧柱作用下，工件发生相变和形变，工件中心的熔坑逐渐改变了气流的方向，由沿径向扩散蔓延逐渐偏向弧柱轴向，并且，随着放电时间从 0.06 s 到 0.07 s 再到 0.08 s，气流的最大速度逐渐增大，从 8.57 $m \cdot s^{-1}$ 到 8.92 $m \cdot s^{-1}$ 再到 9.02 $m \cdot s^{-1}$。气流的增加也会带动工件粒子的运动，粒子分散运动过程会在后文展开讨论分析。

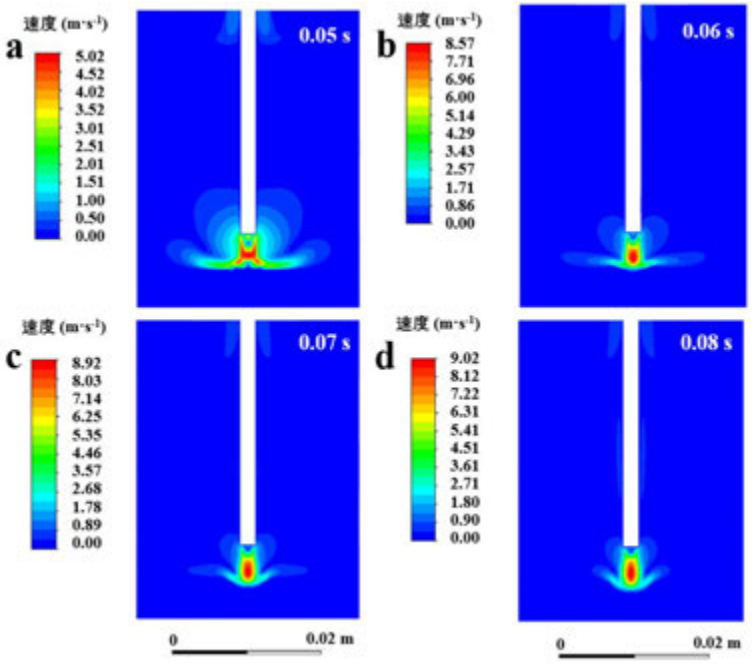


图 5 速度场分布云图

2.1.3 压力场分布

速度场地改变会引起压力场的变化，为下文更好地分析粒子分散运动过程，这里我们以动压为研究对象，图 6 显示了等离子体电弧演化过程的压力（动压）场分布，可以观察到，动压力场的演化规律与速度场的演化规律相似，等离子体电弧刚作用到工件表面时（0.05 s），由于工件-弧柱之间的相互作用，造成受电弧冲击的工件中心的动压最低，此时表明受弧柱冲击的工件并未产生大的形变。与此同时，弧柱受工件的反作用，造成等离子体电弧弧柱内部和弧柱周围的气流沿径向流动，与流动相关的动压同样表现出与之类似的现象，此时最大的动压为 15.46 Pa。随着电弧持续放电，工件中心产生了熔坑逐渐改变了气流的方向，同时也改变了动压分布，动压较大的区域由沿径向扩散蔓延逐渐偏向弧柱轴向，并且，随着放电时间从 0.06 s 到 0.07 s 再到 0.08 s，动压的最大值逐渐增大，从 45.01 Pa 到 48.79 Pa 再到 49.84 Pa。

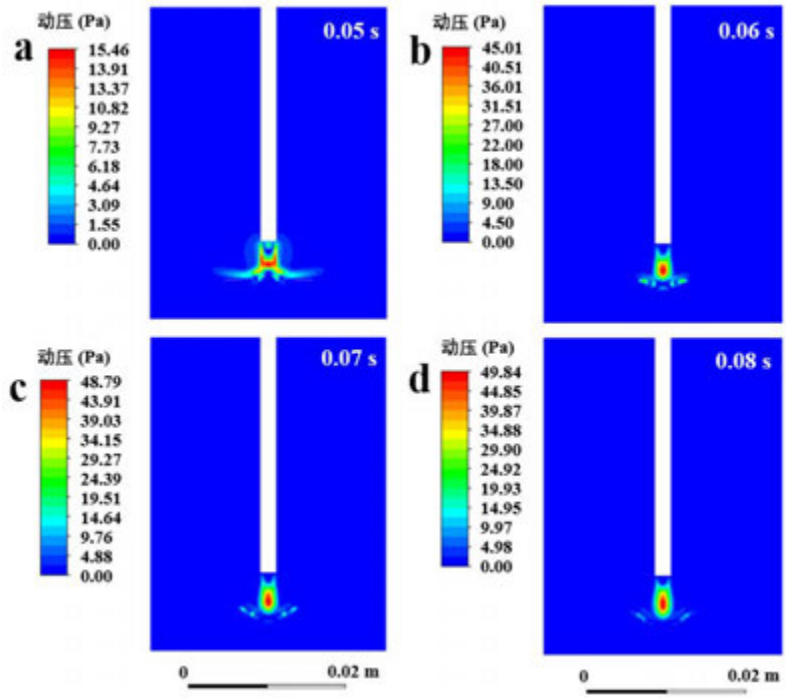


图 6 压力场分布云图

2.2 粒子分散过程分析

为探究等离子体电弧作用下的粒子分散过程，捕捉了等离子体电弧作用下的粒子运动过程，如图 7 所示，可以看出，在放电时间 0.05 s 时工件表面受到电弧弧柱热压作用开始产生形变和温度变化，随着放电时间的增加，粒子开始激发出来，并形成放电坑，随着放电时间的不断增加，放电坑逐渐增大，更多的粒子分散出来，从而可以实现连续化分散。基于前文对温度场的分析，持续放电过程产生的放电坑增加了放电距离，这将会影响等离子体电弧特性，我们将会在未来的研究中做进一步的探讨。

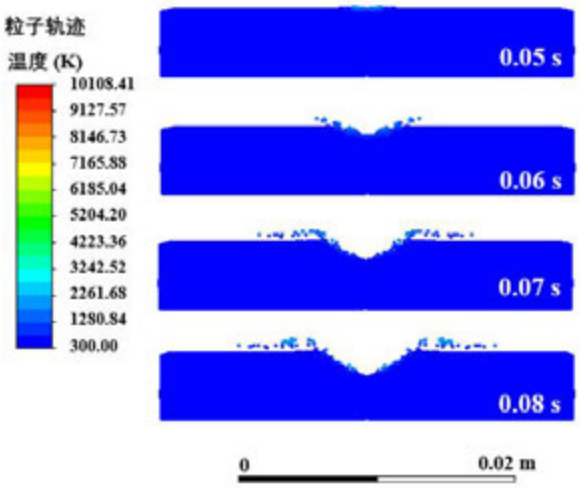


图 7 粒子分散演化过程

4 结　论

本文为探究等离子体电弧放电过程的通道演化以及粒子分散过程，建立了电弧-工件耦合模型进行数值模拟，得到如下结果：

（1）、等离子体电弧放电初期（0.05 s），由于电弧-工件相互作用，近工件区弧柱呈现出扁宽的形状。随着放电时间的增加（0.06 s-0.08 s），电弧不断向工件传递热量并施加压力作用，工件受热压作用产生放电坑，弧柱被拉长变窄，电弧的温度有所下降；

（2）、由于等离子体电弧弧柱对工件的热压作用，工件表面的速度和动压增大，从而驱动工件内的粒子不断运动，达到分散的效果。

参考文献

[1] Tong J.B., Lu X, Liu C.C., Pi Z.Q., Zhang R.J., Qu X.H. Numerical simulation and prediction of radio frequency inductively coupled plasma spheroidization. Applied Thermal Engineering, 2016,100: 1198-1206.

[2] Wu M.L,, Yang F, Rong M.Z., Yi Wu Y., Qi Y., Cui Y.F., Liu Z.R., Guo A.X. Numerical study of turbulence-influence mechanism on arc characteristics in an air direct current circuit breaker. Physics of Plasmas, 2016, 23(4): 42306.

[3] Zhang D.Q., Zheng L.L., Hu X.Y., Zhang H. Numerical studies of arc plasma generation in single cathode and three-cathode plasma torch and its impact on plasma spraying, International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016, 98: 508–522.

[4] Gu L., Zhu Y.M., He G.J., Farhadi A., Zhao W.S. Coupled numerical simulation of arc plasma channel evolution and discharge crater formation in arc discharge machining. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 135: 674–684.

[5] Xia H., Kunieda M., Nishiwaki N. Removal amount difference between anode and cathode in EDM process. International Journal of Electrical Machining, 1996, 1(0): 45–52.

[6] Baeva M. Thermal and chemical nonequilibrium effects in free-burning arcs. Plasma Chemistry and

Plasma Processing, 2016, 36(1): 151-167.

[7] Chen T., Xiaoning Z., Bai B., Xu Z., Wang C., Xia W. Numerical study of DC argon arc with axial magnetic fields. Plasma chemistry and plasma processing, 2015, 35(1): 61-74.

[8] Singh H. Experimental study of distribution of energy during EDM process for utilization in thermal models, International Journal of Heat and Mass Transfer, 2012, 55: 5053-5064.

[9] Giridharan A., Samuel G.L. Modeling and analysis of crater formation during wire electrical discharge turning (WEDT) process, Int. J. Adv. Manuf. Technol., 2015,77 (5-8): 1229–1247.

[10] Tao J., Ni J., Shih A.J. Modeling of the anode crater formation in electrical discharge machining, J. Manuf. Sci. Eng. 2012, 134 (1): 011002.

[11] Li S.L., Zhang C.Q., He Y., Feng M., Ma., Cui Y. Multi-interpolation mixing effects under the action of micro-scale free arc. Journal of Materials Processing Technology, 2019,271:645-650.

[12] Li S.L., He Y., Jing C.W., Gong X.B., Cui L.L, Cheng Z.Y., Zhang C.Q., Nan F. A novel preparation and formation mechanism of carbon nanotubes aerogel. Carbon Letters, 2018, 28: 16-23.

[13] Kojima A., Natsu W., Kunieda M. Spectroscopic measurement of arc plasma diameter in EDM, CIRP Annals-Manuf. Technol. 2008, 57 (1): 203–207.

[14] Rong M., Li M., Wu Y., Yang F., Liu W., Li Y., Chen Z. 3-D MHD modeling of internal fault arc in a closed container. IEEE Transactions on Power Delivery. 2017, 32 (3): 1220–1227.

[15] Ranz W.E., Marshall W.R. Evaporation from drops. Chem. Eng. Prog., 1952, 48: 141-146.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：14xxxx

基于 CFD 的高压过冷流动沸腾壁面热流分配模型研究

杨世豪[1]，杨立新[1,*]，李悦仪[1]
（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）
(Tel:010-51684329, Email:lxyang1@bjtu.edu.cn)

摘要： RPI 模型缺乏对气泡生长阶段过热液体层传热以及气泡等待阶段液相对流换热的数学描述。本文建立了从气泡生长周期和加热面积两个维度对过冷流动沸腾热流分配模型的分析方法，计入了气泡生长阶段过热液体层传热项以及气泡等待阶段的液相对流项；基于加热壁面汽化核心随机分布假设，构建了考虑两个气泡相互影响的气泡影响面积计算方法，并开展了气泡影响面积系数敏感性分析。新模型优化了对壁面温度和换热系数的预测结果。

关键词： 计算流体力学；过冷流动沸腾；热流分配模型；RPI 模型

0 前言

压水堆燃料组件内出现的过冷流动沸腾涉及复杂的气液相变过程，随着计算机技术的快速发展，围绕着两相 CFD 技术的核动力系统高精度热工水力方法成为反应堆设计阶段热工水力特性的重要分析手段[1]。

RPI 模型[2]是两相 CFD 计算中应用最多、较为成熟的热流分配模型，已有学者在 RPI 的框架下成功的预测了竖直圆管[3-9]、内螺纹管[10]、PSBT 子通道[11][12]以及燃料组件[13][14]在过冷流动沸腾中的关键参数。Gilman[15][16]基于 Phillips[17]在池沸腾中观察到的实验现象，考虑了气泡滑移、微液膜蒸发的传热机制，构建了新的热流分配模型；Kommajosyula[18]和 Pham[19]对 Gliman 模型进行了简化，并用 CFD 程序进行了模型验证，逐渐形成了 MITB(MIT Boiling Model)热流分配模型。国内的研究中，西安交通大学李林峰[20]和刘凯[21]针对矩形通道内气泡滑移现象，开发了适用于矩形窄缝通道包含滑移热流的壁面热流分配模型，采用西安交通大学反应堆热工水力研究室(Nuthel)窄缝通道沸腾实验进行了模型验证，结果表明新模型可以较好的预测压力在 1~4 MPa 下窄缝通道流动沸腾的壁面温度。哈尔滨工程大学张蕊[22]在 RPI 的基础上考虑了气泡滑移热流，并用窄缝通道内过冷流动沸腾试验进行了验证。上海交通大学 Wang[23]等建立了包含气泡滑移在内的五分量热流分配模型，基于 DEBORA 实验数据进行了标准题计算，结果表明新模型对空泡份额和壁面温度的预测优于 RPI 模型。

目前研究者针对新的可视化试验结果，提出了多个包含更多沸腾过程传热机制(如滑移热流、微液膜蒸发)的热流分配模型，但是这些新的热流分配模型均是在加热面积维度对沸腾过程传热机制的研究，在气泡生长周期维度考虑更多的气泡行为对沸腾传热机

制的影响的研究较少。此外，在两相 CFD 的流动沸腾分析模型中，对于高热流密度工况下气泡影响区域内面积重叠对壁面热流分配的影响未见报道。

热流分配模型直接影响两相 CFD 计算的准确性和稳定性。本文在 RPI 模型的基础上计入了气泡生长阶段过热液体层传热以及气泡等待阶段的液相对流传热；基于加热壁面汽化核心随机分布假设，建立了考虑两个气泡相互影响的气泡影响面积计算方法；开发了适用于压水堆工况(高压、高热流密度)包含更多传热模式的 CFD 壁面沸腾模型。

1 数学模型

1.1 近壁面传热机理模型

采用壁面热流分配模型描述沸腾现象最早由 Judd 和 Hwang[24]于 1976 年提出。在两相 CFD 计算程序中，应用最多、最成熟的热流分配模型是 Kurul 和 Podowski[2]提出的 RPI 模型，该模型描述的近壁面传热机制如图 1 所示，壁面热流被分为液相对流换热、淬冷热流以及蒸发热流：

$$q_w = q_{fc} + q_q + q_e \tag{1}$$

液相对流换热：

$$q_{fc,RPI} = \left(1 - K_q\right) h_{fc} \left(T_w - T_l\right) \tag{2}$$

淬冷热流：

$$q_{q,RPI} = \frac{1}{t_g + t_w} \int_0^{t_w} h_q \left(T_w - T_l\right) dt \cdot K_q \tag{3}$$

蒸发热流：

$$q_{e,RPI} = \frac{1}{t_g + t_w} \int_0^{t_g} \rho_g h_{\lg} d\left(\frac{\pi}{6} d^3\right) \cdot N = \frac{\pi}{6} \rho_g h_{\lg} N f d_d^3 \tag{4}$$

式中，q_w为壁面总热流，W；$q_{fc,RPI}$为液相对流换热热流，W；$q_{q,RPI}$为淬冷热流，W；$q_{e,RPI}$为蒸发热流，W；K_q为气泡影响面积系数；h_{fc}为液相对流换热系数，W/(m²·K)；h_q为淬冷换热系数，W/(m²·K)；D_d为气泡脱离直径，m；N 为汽化核心密度，1/m²；f为气泡脱离频率，1/s；ρ_g为气相密度，kg/m³；h_{lg}为汽化潜热，J/kg；t_w、t_g分别为气泡等待时间、气泡生长时间，s。

当加热壁面出现沸腾现象时，存在气泡的区域和不存在气泡的区域具有完全不同的换热机制；存在气泡的区域在不同的气泡生长周期内也同样具有完全不同的换热机制。热流分配模型需要同时兼顾加热面积上气泡区和非气泡区、气泡区不同气泡生长周期的换热机制，即所谓的热流分配模型是指的边界热流在加热面积和气泡生长周期两个维度上的分配模型，因此就可以从气泡生长周期和加热面积两个维度构建新的热流分配模型的分析方法。RPI 模型详细的热流分配机制如图 2 所示，注意到式中蒸发热流q_e在计算过程中仅在 N 个汽化核心点上产生，因此该项热流仅占据时间维度上的份额，并不占据面积维度上的份额。RPI 模型并没有对气泡生长引起周围过热液体层的扰动进行建模；

同时在漫长的热边界层重构的气泡等待时间内近壁区域沸腾传热机制仅存在气泡脱离引起非稳态导热的淬冷热流。

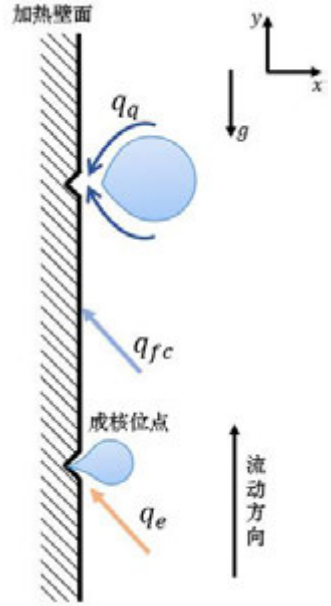


图 1 RPI 模型中沸腾传热机制

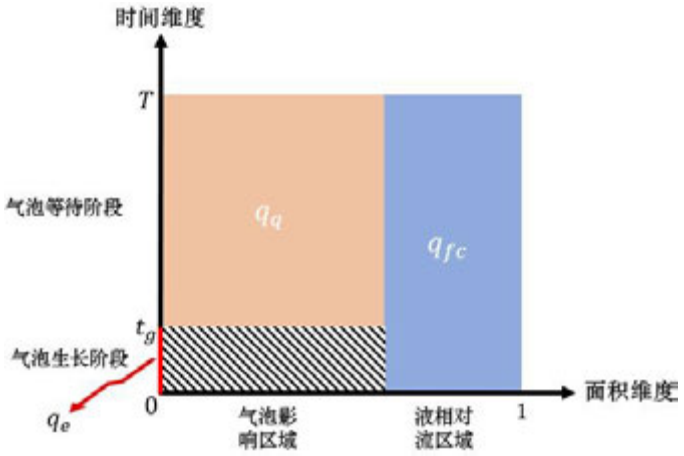


图 2 RPI 模型中壁面热流分配

基于此分析方法，本文建立了如图 3、图 4 所示的新热流分配模型，将壁面热流分为了五项热流：

$$q_w = q_{fc1} + q_{fc2} + q_{tg} + q_{tw} + q_e \tag{5}$$

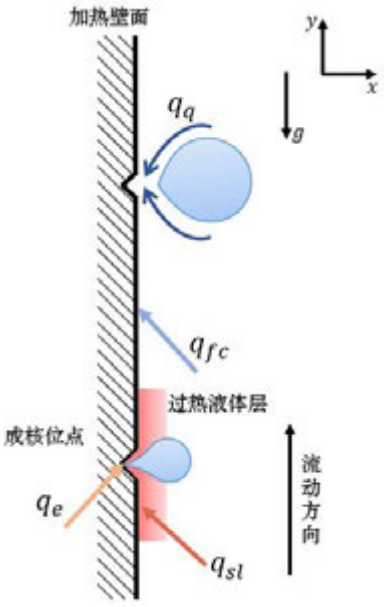


图 3 新模型中沸腾传热机制

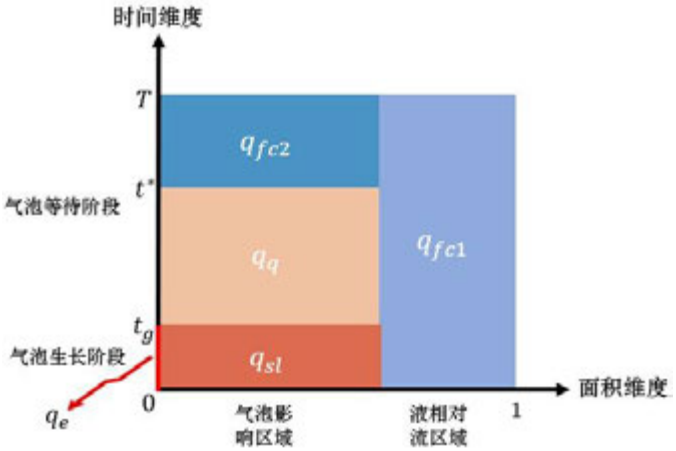


图 4 新模型中壁面热流分配

新模型中的热流分配从机理上可以分为四类：

1） 蒸发热流

蒸发项包括两种传热机制：空穴内气泡生长初期惯性控制生长阶段的汽化潜热以及微液膜蒸发。Guion[25]的研究中提到，微液膜的厚度随压力的增加而减小，且高压下微液膜蒸发对壁面热流分配的贡献可忽略不计。因此新模型中蒸发热流只计入气泡从直径为 0 生长为脱离直径D_d的汽化潜热，计算方法同式。该项热流面积分配份额为 N 个离散点，时间分配份额为气泡生长时间。

2） 过热液体层传热

在 Zeng[26]、Hoang[27]、Yoo[28]、董晓朦[29]建立的基于热平衡的气泡生长模型中，过热液体层传热是重要的传热模式。本文建立的近壁面传热模型如图 3 所示，在气泡生长阶段，气泡影响面积被过热液体层覆盖，因此存在着壁面热流向过热液体层的传热模式。在气泡生长阶段气泡直径快速增加，扰动热边界层产生过热液体层传热：

$$q_{sl}=\frac{1}{t_g+t_w}\int_0^{t_g}\frac{\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t}}b\left(T_w-T_l\right)dt\cdot K_q \tag{6}$$

式中 b 为实验常数，本文取 b=1[26]；该项热流面积分配份额为气泡影响面积份额，时间分配份额为气泡生长时间。

3） 淬冷热流

淬冷热流只发生在气泡影响面积内，是由于气泡脱离引起的热边界层扰动产生的非稳态导热带来的额外强化换热项，该过程换热系数的计算可简化为半无限大平板的导热问题[16]：

$$h_q=\frac{\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t}} \tag{7}$$

式中λ_l为液相导热系数，W/(m·K)；η_l为液相热扩散系数，m²/s。

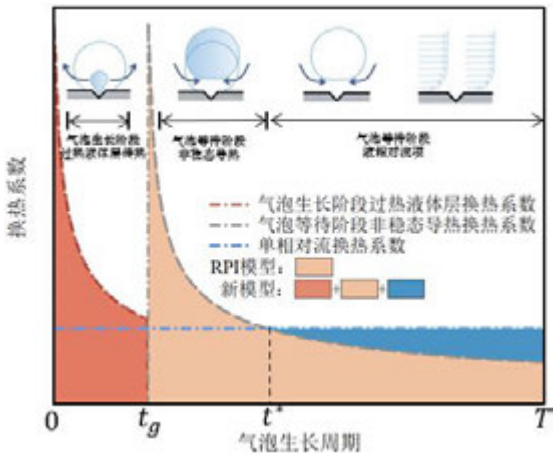


图 5 一个气泡生长周期内非稳态导热换热系数的变化

在一个气泡生长周期内非稳态导热换热系数的变化如图 5 所示。当气泡直径增大到脱离直径后气泡脱离加热壁面，冷流体填充已脱离气泡占据的空间，产生热量传递(q_q)。不同的计算模型采用了不同的方式计算该项热流，主要区别是在时间维度上分配了不同的份额。例如 RPI 模型[2]中对该项热流分配的时间份额是气泡等待时间，即采用式在 0~t_w 上对 h_q 积分计算(图 5 中黄色部分面积)。MIT[15][18][19]、西安交通大学[20][21]、哈尔滨工程大学[22]计算模型中分配的时间份额则是非稳态导热占主导的特征时间(t^*)，即：

$$q_{q,(MIT,XJT,HEU)} = f\int_0^{t^*} \frac{\lambda_l\left(T_w - T_l\right)}{\sqrt{\pi\eta_f t}}dt \cdot K_q = \frac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t^*}} t^* f K_q\left(T_w - T_l\right) \tag{8}$$

当$t = t^*$时，非稳态导热的换热系数与液相对流换热系数相等，即:

$$\frac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t^*}} = h_{fc} \tag{9}$$

由式可得非稳态导热占主导的特征时间：

$$t^* = \left(\frac{\lambda_l}{h_{fc}}\right)^2 \frac{1}{\pi\eta_f} \tag{10}$$

本文认为对 q_q 的处理应当分为两种情况：当非稳态导热占主导的特征时间小于气泡等待时间时($t^* < t_w$)，则对该项热流分配的时间份额是特征时间 t^*；当非稳态导热占主导的特征时间大于气泡等待时间时($\tau^* \geq t_w$)，则对该项热流分配的时间份额是气泡等待时间 t_w：

$$q_q = \begin{cases} f\int_0^{t^*} \dfrac{\lambda_l\left(T_w - T_l\right)}{\sqrt{\pi\eta_f t}}dt \cdot K_q & t^* < t_w \\ f\int_0^{t_w} \dfrac{\lambda_l\left(T_w - T_l\right)}{\sqrt{\pi\eta_f t}}dt \cdot K_q & t^* \geq t_w \end{cases} \tag{11}$$

4） 液相对流换热

非气泡影响区液相对流换热在面积维度分配的份额为(1-K_q)，时间维度分配的份额为 1：

$$q_{fc1} = q_{fc,RPI} = \left(1 - K_q\right) h_{fc}\left(T_w - T_l\right) \tag{12}$$

如图 5 所示，当非稳态导热占主导的特征时间小于气泡等待时间时($t^* < t_w$)，则在热边界层重建的气泡等待时间内除非稳态导热项占主导的时间外，在剩余气泡生长周期内仍然存在液相的单相对流 q_{fc2}。对该项热流分配的面积份额为 K_q，时间份额为$(1 - t_w f - t^* f)$，即：

$$q_{fc2}=\begin{cases}K_q\left(1-t_w f-t^* f\right)h_{fc}\left(T_w-T_l\right) & t^*<t_w\\ 0 & t^*\geq t_w\end{cases} \tag{13}$$

1.2 气泡影响面积计算

在热流分配模型中，气泡影响面积用来表征加热壁面上受沸腾影响的面积份额，即在面积维度对热流的分配，通常定义如下：

$$K_q=K\frac{\pi}{4}d_d^2\cdot N \tag{14}$$

式中 K 为气泡影响面积系数。尽管针对 K 的取值已经开展了大量的研究工作，但是研究人员并没有得到一致的结论，表 1 汇总了各部分研究工作 K 的推荐值。考虑到缺乏仅在面积维度对气泡影响面积系数的高压过冷流动沸腾的实验研究，在后文对 K 的取值开展了敏感性分析。

式仅适用于较低热流密度、汽化核心较少的工况。在压水堆燃料组件的高热流密度的工况下，会出现几个汽化核心的影响面积在一个气泡生长周期内相互重叠的情况，此时采用式计算气泡影响面积会导致其计算值大于 1，即造成热流分配模型中分配给液相对流换热的份额小于 0；因此 RPI 模型[2]、MIT 模型[18]中均对式计算出的最大值进行了限制，这种方法虽然避免了出现非物理解，但是掩盖了热流分配的物理本质。本文尝试在 CFD 计算模型中加入气泡重叠部分面积对热流分配的影响。尽管已有研究表明加热壁面上的汽化核心呈现一定的分布特征[33]，但是考虑到在高压、高热流密度工况下气泡脱离直径变小、汽化核心点增多，因此汽化核心的分布比低压、低热流密度的工况更符合随机分布假设。

表 1 气泡影响面积系数的研究

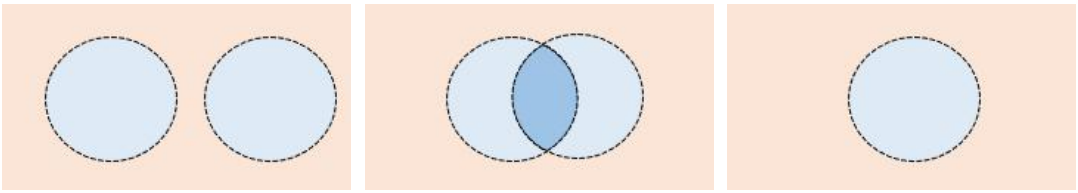
	作者	K 值	备注
数值模拟	Gilman[15][16]	1	流动沸腾
	张蕊[22]	1	流动沸腾
	尚泽敏[8]	2	流动沸腾
	李林峰[20]、刘凯[21]	$4.8\exp\left(-\frac{Ja_{sub}}{80}\right)$	流动沸腾
实验研究	Rohsenow[30]	4	池沸腾
	Kenning[31]	4.84	流动沸腾
	Alade[32]	0.5	流动沸腾

假设发生重叠后气泡影响面积减小为：

$$K_{q,new}=XK_q \tag{15}$$

式中 X 可定义为重叠系数，X 的物理意义如图 6 所示，当仅考虑两个气泡相互作用

时重叠系数的取值范围为(0.5,1]，X=1 表示气泡影响面积中不存在重叠区域。X 可由下式计算[31]：



(a) X=1　　(b) X=0.8　　(c) X=0.5

图 6 两个气泡相互作用时 X 的取值

$$X=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{y_m}{m} \tag{16}$$

式中 y_m 表示在气泡影响面积内受 m 个汽化核心影响的面积份额；其在数值上等于一个汽化核心周围$K\frac{\pi}{4}d_d^2$的面积内存在(m-1)个其它汽化核心的概率，由汽化核心的随机分布假设可得：

$$y_m=P(m-1)=\frac{e^{-K_{q,OLD}}K_{q,OLD}^{m-1}}{(m-1)!} \tag{17}$$

将式带入式，由泰勒公式可得考虑气泡重叠后的气泡影响面积计算方法为：

$$K_{q,new}=XK_q=1-e^{-K\frac{\pi}{4}d_d^2\cdot N} \tag{18}$$

如图 7 所示为式和 RPI 模型计算的气泡影响面积份额与 Kenning[31]试验、Alade[32]中真实沸腾面积的对比。可以看到，式计算得到的气泡影响面积与试验值更接近，证明了随机分布假设的合理性和准确性；而 Alade 模型[32]在 $K_{q,OLD}$ 较大时出现了非物理解。本文仅考虑两个气泡相互重叠的情况，可进一步求得气泡影响面积内不重叠部分的面积系数为：

$$K_{q,withoutoverlap}=y_1K_{q,new}=e^{-K\frac{\pi}{4}d_d^2\cdot N}\left(1-e^{-K\frac{\pi}{4}d_d^2\cdot N}\right) \tag{19}$$

重叠部分的面积系数为：

$$K_{q,overlap}=(1-y_1)K_{q,new}=\left(1-e^{-K\frac{\pi}{4}d_d^2\cdot N}\right)\left(1-e^{-K\frac{\pi}{4}d_d^2\cdot N}\right) \tag{20}$$

在气泡影响面积的重叠区域，由于存在多次淬冷，其瞬态导热热流的换热系数是非重叠区域换热系数的$\frac{4}{3}$倍[31]，即对于气泡影响面积内过热液体层传热以及淬冷热流的计算

为：

$$q_{sl}=\frac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t_g}}t_g f\left(K_{q,withoutoverlap}+\frac{4}{3}K_{q,overlap}\right)b\left(T_w-T_l\right) \tag{21}$$

$$q_q=\begin{cases}\dfrac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t^*}}t^* f\left(K_{q,withoutoverlap}+\dfrac{4}{3}K_{q,overlap}\right)\left(T_w-T_l\right) & t^*<t_w\\ \dfrac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t_w}}t_w f\left(K_{q,withoutoverlap}+\dfrac{4}{3}K_{q,overlap}\right)\left(T_w-T_l\right) & t^*\geq t_w\end{cases} \tag{22}$$

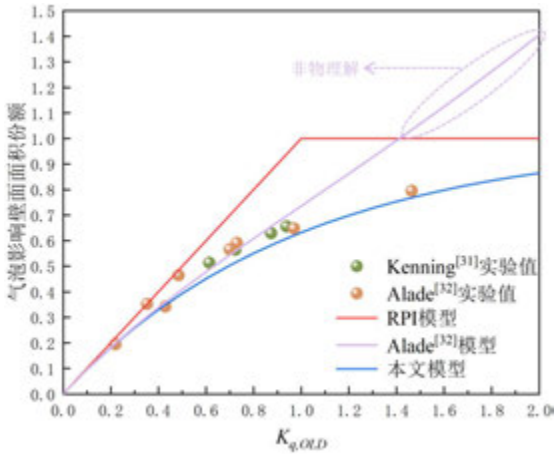


图 7 新模型和 RPI 模型计算的气泡影响壁面面积份额与实验值对比

至此，本文建立了五分量的壁面热流分配模型。如图 5 所示，新模型在 RPI 模型的基础上涵盖了更多的热流项。新模型与 RPI 模型的对比如表 2 所示。

1.3 其它闭合模型

为了使壁面热流分配模型方程组封闭，需要对汽化核心密度、气泡脱离直径等参数进行建模，目前对于高压下过冷流动沸腾相关子模型的精细化建模仍存在较大的困难。如表 3 所示，本文在尚泽敏[8]等进行的敏感性分析工作的基础上选择了所使用的闭合模型。

表 2 新模型与 RPI 模型对比

	RPI 模型	新模型
液相对区	气泡影响面积 ——	$q_{fc2}=\begin{cases}K_{q,new}\left(1-t_w f-t^* f\right)h_{fc}\left(T_w-T_l\right) & t^*<t_w\\ 0 & t^*\geq t_w\end{cases}$

淬冷热流	非气泡影响面积区	$q_{fc,RPI}=\left(1-K_q\right)h_{fc}\left(T_w-T_l\right)$	$q_{fc1}=\left(1-K_{q,new}\right)h_{fc}\left(T_w-T_l\right)$
	气泡生长阶段	——	$q_{sl}=\dfrac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t_g}}t_g f\left(K_{q,withoutoverlap}+\dfrac{4}{3}K_{q,overlap}\right)b\left(T_w-T_l\right)$
	气泡等待阶段	$q_{q,RPI}=\dfrac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t_w}}t_w f K_q\left(T_w-T_l\right)$	$q_q=\begin{cases}\dfrac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t^*}}t^* f\left(K_{q,withoutoverlap}+\dfrac{4}{3}K_{q,overlap}\right)\left(T_w-T_l\right) & t^*<t_w\\ \dfrac{2\lambda_l}{\sqrt{\pi\eta_f t_w}}t_w f\left(K_{q,withoutoverlap}+\dfrac{4}{3}K_{q,overlap}\right)\left(T_w-T_l\right) & t^*\geq t_w\end{cases}$
蒸发热流		$q_{e,RPI}=\dfrac{\pi}{6}\rho_g h_{lg}Nfd_d^3$	$q_{e,NEW}=\dfrac{\pi}{6}\rho_g h_{lg}Nfd_d^3$

表 3 本文所使用的闭合模型

	参数	闭合模型
沸腾子模型	汽化核心密度	Li 模型[34]
	气泡脱离直径	Kocamustafaogullari 模型[35]
	气泡脱离频率	Cole 模型[36]
	气泡等待时间	$t_w=0.8\cdot\dfrac{1}{f}$
相间相互作用力	曳力系数	Tomiyama(已污染)[37]
	升力系数	Tomiyama 模型[38]
	湍流耗散力	Burns 模型[39]
	虚拟质量力	Auton 模型[40]
相间相互作用面积	相互作用长度尺度	S-Gamma 模型[41]
	相互作用面积密度	$a_{lv}=\dfrac{6a_l a_v}{l_{lv}}$
沸腾质量传输	液相 *Nu* 数	Ranz-Marshall 模型[42]
	气相 *Nu* 数	26
湍流模型	壁面处理	全 y+处理
	湍流模型	Realizable k-ε两层模型

2 结果与讨论

2.1 数值模拟方法

1) 计算域几何与网格划分

计算域为直径 8 mm 垂直向上流动圆管，如图 8 所示，采用二维轴对称模型简化几

何；为了计算的稳定性，进口段、出口段各留 0.2 m 不加热段。网格划分方法参照之前的研究工作[8]，如图 9 所示，网格分辨率为 20×140。

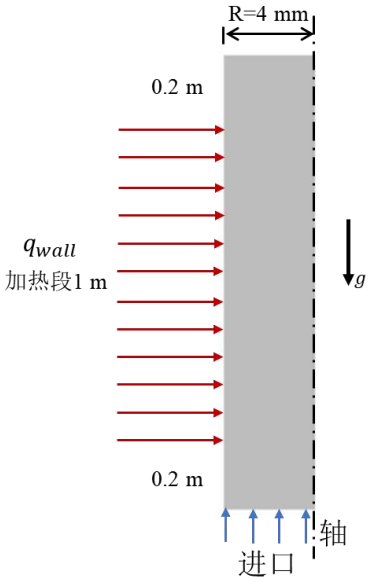


图 8 计算域几何模型



图 9 计算域网格模型(20×140)

2) 边界条件

进口为质量流量进口，给定液相质量流量和温度，气相体积分数为 0；出口为压力出口；进、出口的不加热段为绝热边界，加热段为第二类边界条件；边界热流施加方法如图 10 所示，边界热流先随迭代步线性增加，达到 CHF 值的 50%后进行稳态求解，待计算收敛后再次增加热流；重复上述步骤直至热流密度达到 CHF 的 80%（CHF 值由 2006 CHF 查询表[43]得到）。

3) 模拟工况

选取接近压水堆实际运行工况的数据点开展数值计算，计算工况如表 4 所示。

4) 材料物性

由于进口过冷度较高，参照文献[21]的做法，定性温度选择为进口温度和饱和温度的平均温度，使用 IAPWS-IF97 计算液相物性；气相物性采用饱和状态的水蒸气物性。

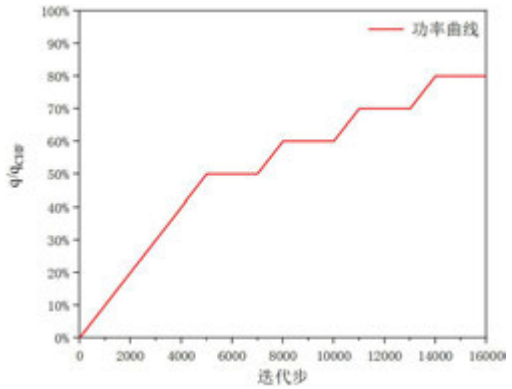


图 10 边界热流施加方法

表 4 计算工况表

算例	压力 P(MPa)	质量流速 G(kg/m^2/s)	出口干度 Xeq	CHFtable (kW/m^2)
Case1	16	2000	0	2250
Case2	16	2500	0	2494
Case3	16	3000	0	2611
Case4	16	3500	0	2653
Case5	16	4000	0	2756
Case6	16	4500	0	2876
Case7	16	5000	0	3017

5) 模型验证

选择 ONB(Onset of nucleate boiling)、OSV(Onset of significant void)点温度以及沸腾充分发展段(Fully Developed Boiling, FDB)的换热 Nu 进行模型验证。如图 11 所示，CFD 计算中 ONB 点判断方法为汽化核心密度达到 1/mm^2 的点；OSV 点判断方法为气泡影响面积分数 $K_{q,new}$ 开始显著升高的点。FDB 段判断方法为气泡影响面积分数 $K_{q,new}$、壁面过热度以及换热 Nu 达到最大值后不再变化或变化不大的阶段。ONB、OSV 点温度与热流密度的经验关联式选择适用于高压工况的 Thom 模型[44]：

$$\Delta T_{ONB} = 22.65\left(\frac{q_{wall}}{10^6}\right)^{0.5} e^{-p/8.7} \tag{23}$$

$$\Delta T_{OSV} = 0.02 h_{sat} \cdot \frac{q_{wall}}{G h_{\mathrm{lg}}} \tag{24}$$

式中ΔT_{ONB}为 ONB 点壁面过热度，K；ΔT_{OSV}为 OSV 点液体过冷度，K；q_{wall}为壁面热流密度，W/m^2；p 为系统压力，MPa。ρ_l为液相密度，kg/m^3；G 为质量流速，kg/(m^2·s)；

$h_{l,sat}$为饱和液相焓，J/kg。

FDB 段换热 *Nu* 数的经验关联式选择 Moles-Shaw 关系式[45]：

$$\frac{Nu}{Nu_l}=78.5\cdot Bo^{0.67}Ja^{-0.5}\left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{-0.02}\mathrm{Pr}_b^{0.45} \tag{25}$$

式中 Nu_l 表征液相单相对流换热系数，可由 Dittus-Boelter 公式计算；沸腾数、雅可比数定义如下：

$$Bo=\frac{q_{wall}}{GH_{\mathrm{lg}}} \tag{26}$$

$$Ja=\frac{c_p\left(T_{sat}-T_b\right)}{H_{\mathrm{lg}}} \tag{27}$$

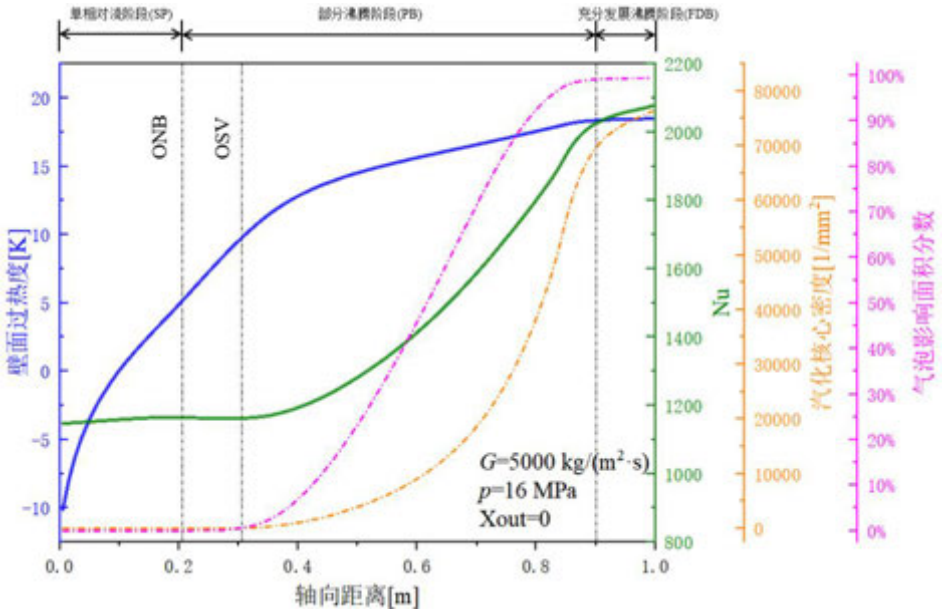


图 11 ONB、OSV 点以及 FDB 段判断方法

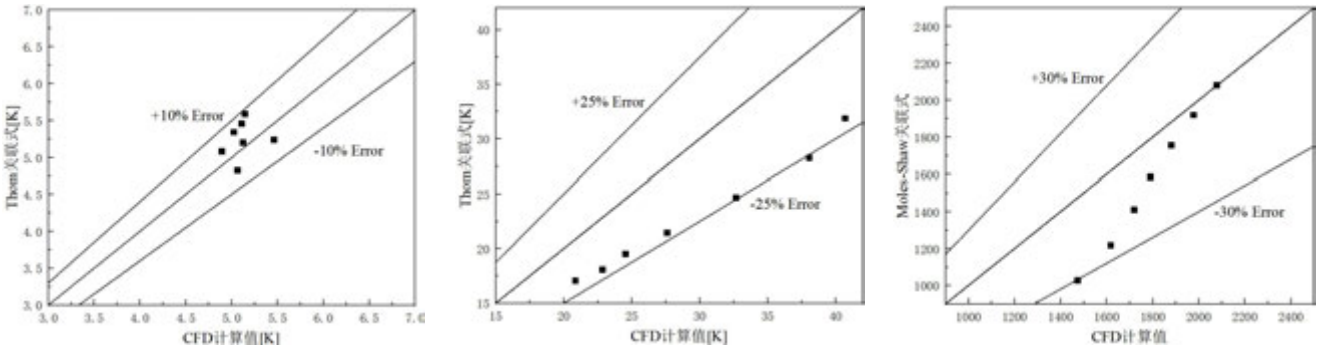
$\mathrm{Pr_b}$ 的定性温度为主流温度 T_b：

$$\mathrm{Pr}_b=\frac{c_p\mu}{\lambda} \tag{28}$$

T_b 可由能量守恒计算：

$$T_b=T_{in}+\frac{4q_{wall}z_{FDB}}{GDc_p} \tag{29}$$

模型验证结果如图 12 所示，证明了本文数值模型的准确性和适用性。

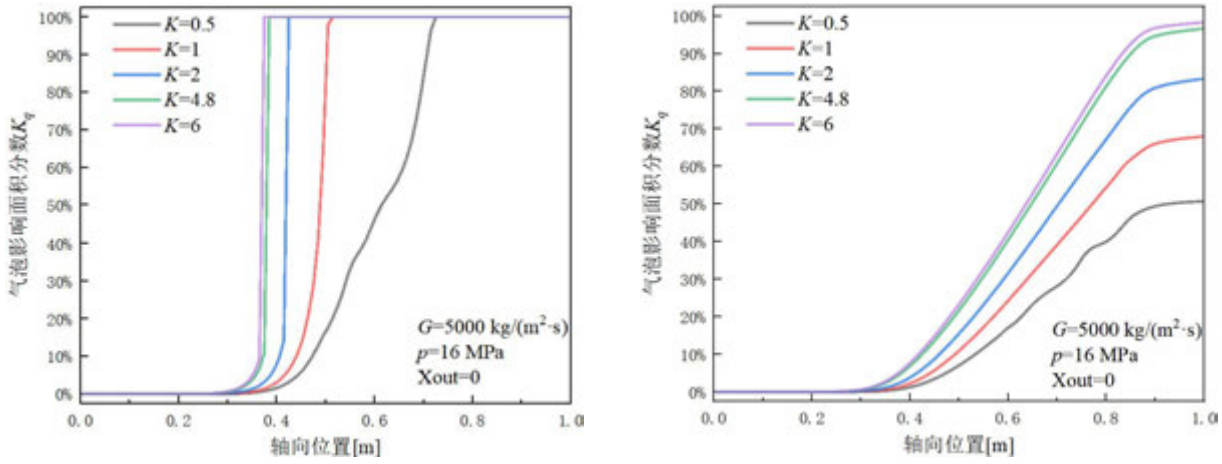


(a) ONB 点过热度　　(b) OSV 点过冷度　　(c) FDB 段换热 *Nu*

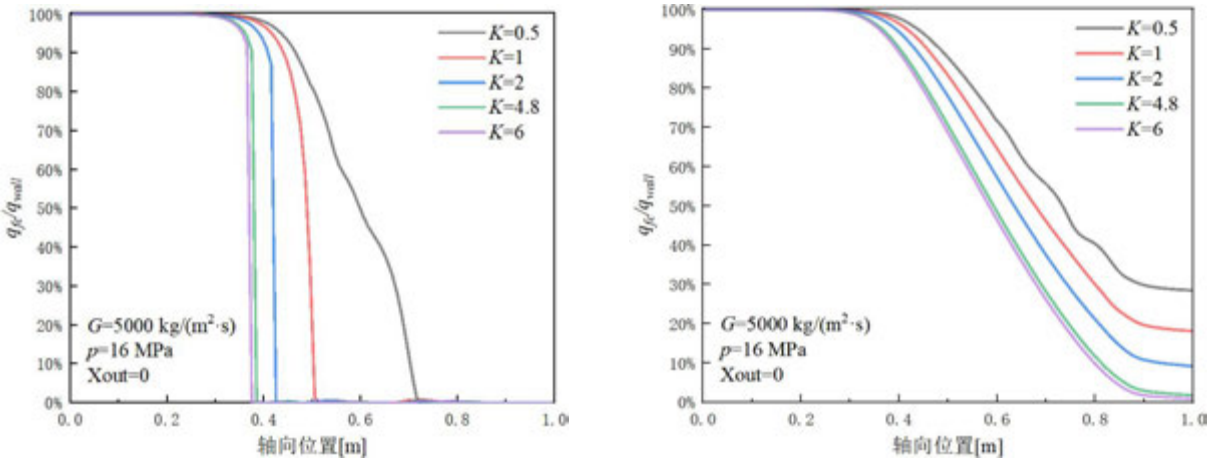
图 12　模型验证

2.2 气泡影响面积系数敏感性分析

结合表 1 汇总的目前针对气泡影响面积系数的试验和数值模拟研究，分别取气泡影响面积系数 *K* 为 0.5、1、2、4.8、6 在 RPI 模型和新热流分配模型的计算框架下开展参数敏感性分析。采用不同的气泡影响面积系数 *K* 所得的计算结果如图 13 所示。新热流分配模型中的 *K* 值与 RPI 模型中的 *K* 值对近壁面的热流分配具有完全不同的影响，按照图 11 所示的对流动沸腾不同阶段的判定方法，在 RPI 计算框架下，*K* 值的增加显著缩短了 OSV 点至 FDB 段的距离，即增加了 FDB 段长度；而在新模型的计算框架下 FDB 段长度并没有显著变化；RPI 模型中 FDB 段气泡影响面积分数 K_q 为 1，此时壁面热流分配中非气泡影响区液相对流换热所占比例为 0；新模型中 FDB 段 K_q 随 *K* 值增加而增加，近壁面非气泡影响区液相对流换热所占比例随 *K* 值增加而减小。因此 RPI 模型中 *K* 值并没有影响 FDB 段流动沸腾的传热模式，仅改变了 OSV 点至 FDB 段的长度，故而在 RPI 模型中修改 *K* 值对参数分布影响很小，这也与之前的研究结论一致[8]；新热流分配模型计算框架下 *K* 值并不影响 OSV 点与 FDB 段相对位置，而是影响 FDB 段热流的分配。试验研究中，Alade[32]在评估了 RPI 模型各组分热流的分配后得到推荐值为 0.5，考虑到新热流分配模型中的 *K* 值与 RPI 模型中的 *K* 值具有完全不同的物理意义，在没有对高压过冷流动沸腾 FDB 段热流分配模型开展更详细的试验研究前，本文暂取气泡影响面积系数 K=4.8[31]。



(a) RPI 模型气泡影响面积分数　　(b) 新模型气泡影响面积分数



(c) RPI 模型非气泡影响区液相对流换热热流分配　　(d) 新模型非气泡影响区液相对流换热热流分配

图 13 不同气泡影响面积系数计算结果对比

2.3 数值计算结果分析

1) RPI 模型中出现的非物理解

根据表 4 计算的七个工况中非稳态导热占主导的特征时间 t^*与气泡生长周期的比以及壁面热流分配至气泡影响区液相对流换热份额如图 14、15 所示，选择典型工况 Case1(t^*f≈97%、q_{fc2}/q_{wall}=0)和 Case7(t^*f≈0.2、q_{fc2}/q_{wall}=33%)与 RPI 模型进行对比分析。

换热 Nu 以及壁面过热度的计算结果如图 16、17 所示。Case1 中非稳态导热占主导的特征时间 t^*大于气泡等待时间，因此其在气泡等待时间内的热流分配情况与 RPI 模型一致，但由于考虑了气泡生长阶段的过热液体层传热，故其计算得到的换热 Nu 数高于 RPI 模型、壁面过热度略低于 RPI 模型，但总体分布趋势与 RPI 模型一致。

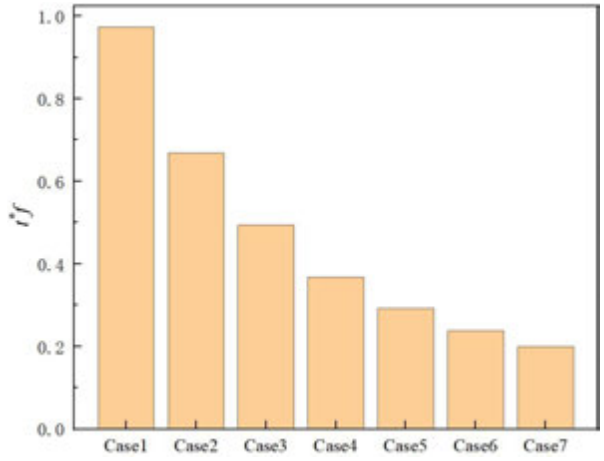


图 14 非稳态导热占主导特征时间与气泡生长周期的比

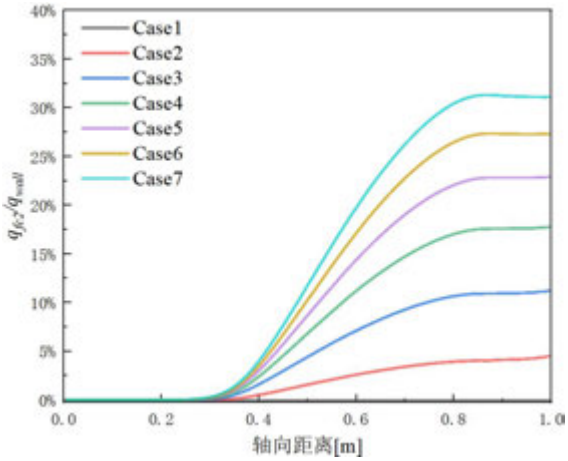
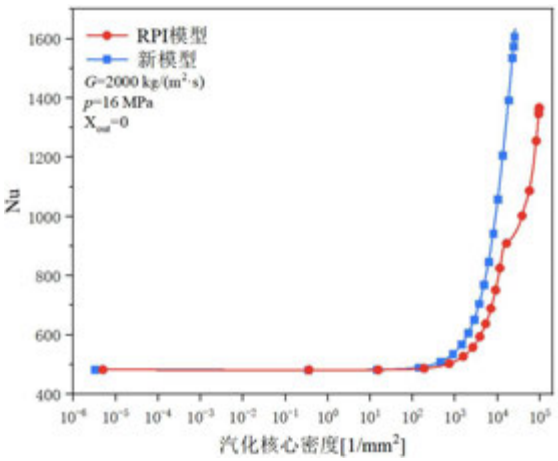
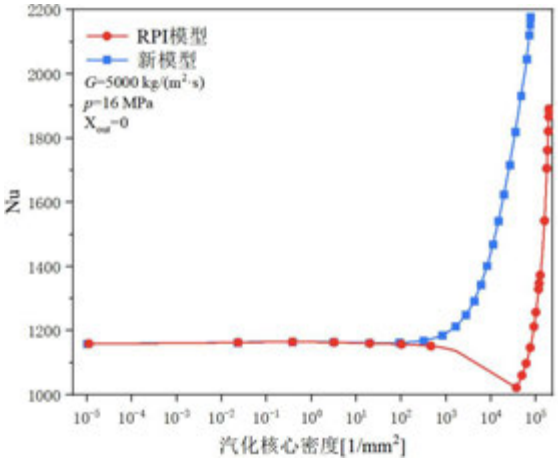


图 15 壁面热流分配至气泡影响区液相对流换热份额

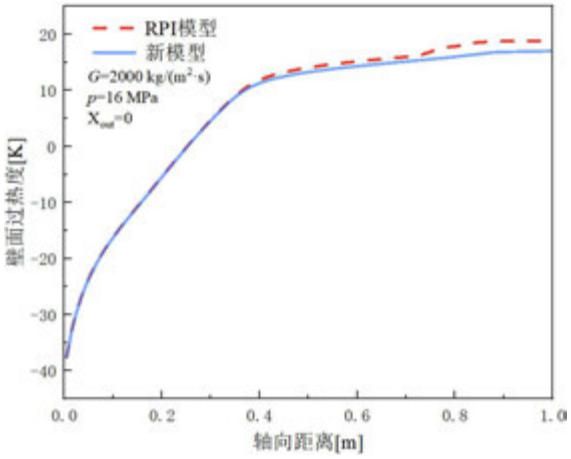


(a) Case1 换热 *Nu*

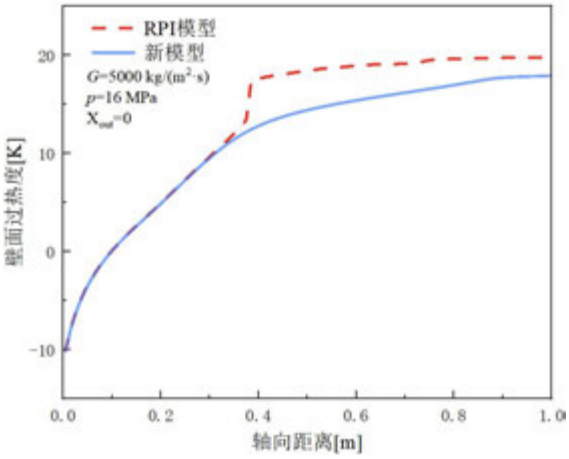


(b) Case7 换热 *Nu*

图 16 换热 Nu 数与汽化核心密度的关系



(a) Case1 壁面过热度



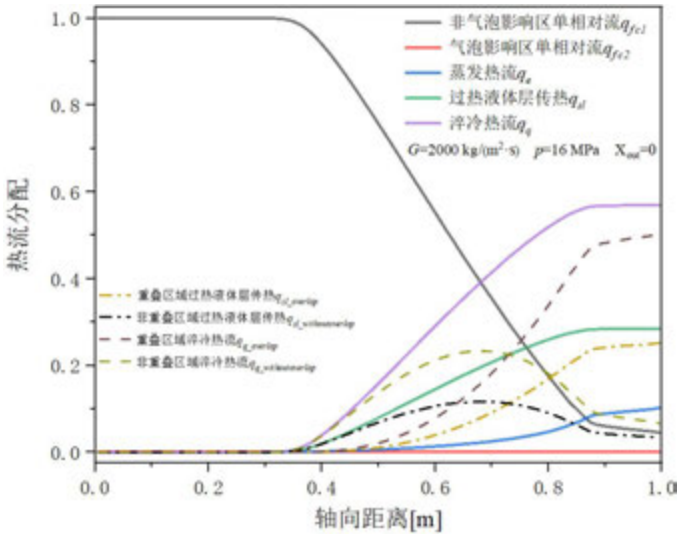
(b) Case7 壁面过热度

图 17 沿程壁面过热度计算结果

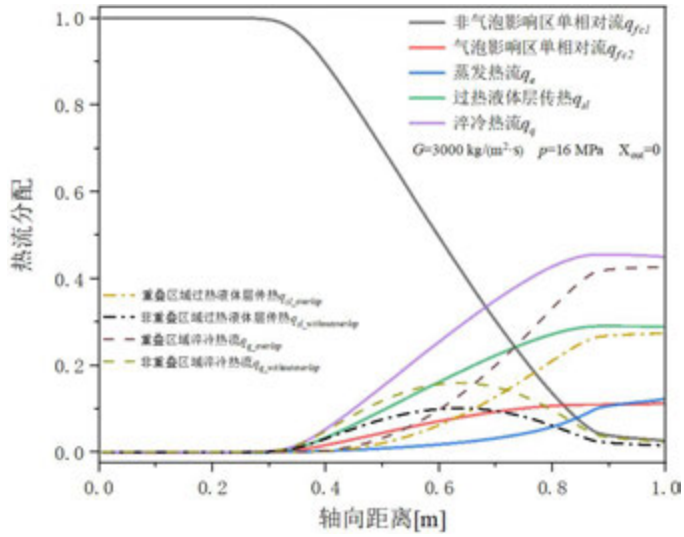
Case7 中非稳态导热占主导的特征时间 t^*远小于气泡等待时间，在单相对流区，新模型与 RPI 模型计算得到的换热 Nu 数、壁面过热度几乎一致，随着沸腾过程的进行，出现 OSV 后汽化核心开始显著增加，如图 16(b)所示，此时 RPI 模型出现了非物理解，其计算得到的换热 *Nu* 数低于单相对流换热 *Nu* 数，因此需要更大的壁面过热度才能带走壁面热流，故图 17(b)中壁面过热度出现一小段飞升。出现该现象的原因是由于 RPI 模型采用了不恰当的气泡影响面积计算方法，过低的预测了 OSV 点至 FDB 段的距离；从 OSV 迅速向 FDB 转换的过程中汽化核心密度并不多，因此蒸发热流占比很小，壁面热流的分配模式迅速由非气泡影响区的液相对流换热转变为气泡影响区的淬冷热流。由于 RPI 模型缺乏对气泡生长阶段过热液体层传热以及气泡影响面积内气泡等待时间的液相对流换热的数学描述，因此出现了图 16(b)、图 17(b)中的非物理解。本文计算的七个工况中，质量流速越大，RPI 模型越趋向于出现非物理解。

2) 热流密度分配

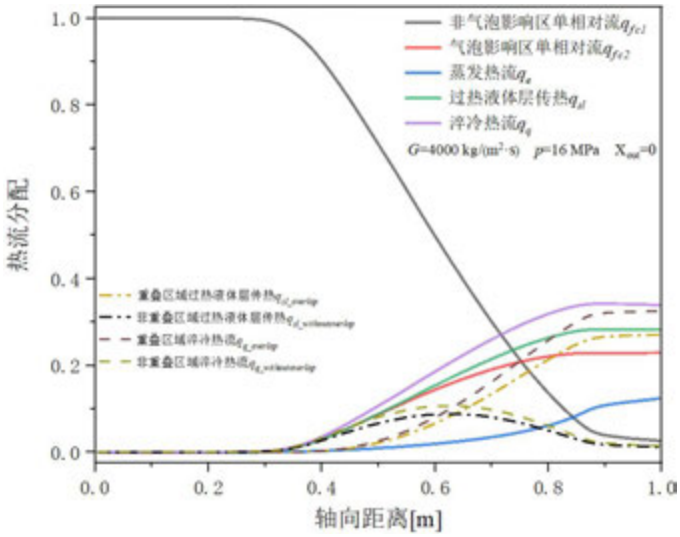
典型工况 Case1、Case3、Case5、Case7 沿程热流分配计算结果如图 18 所示。不同沸腾阶段热流分配模式具有明显的不同。在单相对流阶段，壁面热流全部由非气泡影响区液相对流 q_{fc1} 带走；在气泡影响面积内，部分沸腾段(Partially boiling，PB)的前期气泡影响面积内过热液体层传热以及气泡脱离产生的淬冷热流主要在非气泡重叠区域产生，随着沸腾过程的进行，在 PB 段后期气泡重叠区域的热液体层传热、淬冷热流占比超过非气泡重叠区，直至 FDB 段过热液体层传热以及淬冷热流几乎全部由气泡重叠区域产生；质量流速越大，FDB 段由气泡重叠区域产生的过热液体层传热以及淬冷热流占比就越大。



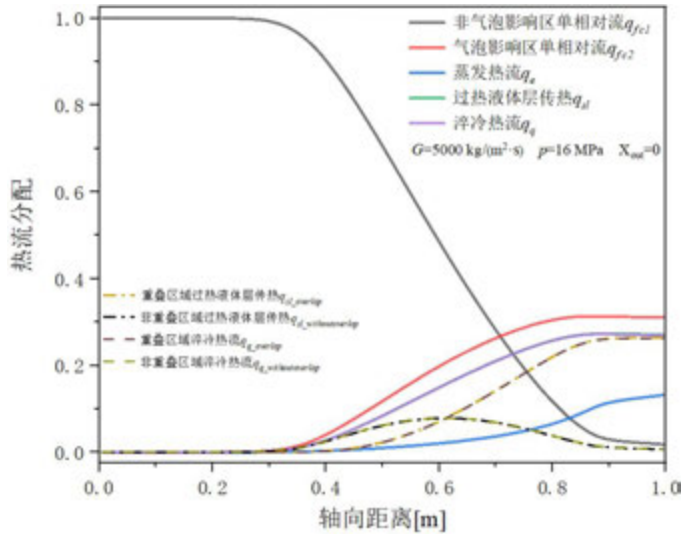
(a) Case1 热流分配



(b) Case3 热流分配



(c) Case5 热流分配



(d) Case7 热流分配

图 18 热流分配计算结果

FDB 段分配至蒸发热流的份额不随质量流速的变化而变化，四个典型工况均为 10%左右；在低质量流速工况下气泡等待阶段产生的淬冷热流 q_q 是 FDB 段主要的传热模式；

随着质量流速的增加，q_q 逐渐减小，越来越接近气泡生长阶段产生的过热液体层传热 q_{sl}，直至 Case7 中几乎完全重合；同时，气泡脱离加热壁面后热边界层重构阶段液相对流换热项 q_{fc2} 则逐渐增加；Case7 的计算结果表明，高质量流速工况下气泡脱离加热壁面后热边界层重构阶段液相对流换热项 q_{fc2} 在流动沸腾换热中占据重要地位，是 FDB 段主要的传热模式之一。

3 结　论

本文建立了从气泡生长周期和加热面积两个维度对过冷流动沸腾热流分配模型的分析方法。在 RPI 模型的基础上计入了气泡生长阶段过热液体层传热以及气泡等待阶段的液相对流项；基于加热壁面汽化核心随机分布假设，构建了考虑两个气泡相互影响的气泡影响面积计算方法；在新的热流分配框架下对气泡影响面积系数进行了参数敏感性分析。新的热流分配模型获得了垂直上升管过冷流动沸腾沿程热流分配情况；主要结论如下：

1） RPI 模型中气泡影响面积系数 K 并不影响 FDB 段的传热模式，仅改变 OSV 点至 FDB 段的长度；新热流分配模型中的 K 值并不影响 FDB 段的长度，而是改变了 FDB 段的热流分配情况；

2） 由于缺乏对气泡生长阶段过热液体层传热和气泡影响面积内气泡等待时间的液相对流换热的数学描述以及采用了不恰当的气泡影响面积计算方法，RPI 模型在高质量流速工况下对壁面温度及换热系数的预测出现了非物理解；

3） 在沸腾充分发展段气泡影响面积内的过热液体层传热以及淬冷热流几乎全部由气泡重叠区域产生，因此对气泡影响面积的建模需要考虑气泡影响面积的重叠；

4） 质量流速对充分发展的流动沸腾段热流分配模式有重要影响，FDB 段主要的传热模式在低质量流速工况下是气泡等待阶段产生的淬冷热流 q_q，高质量流速工况下则是气泡脱离加热壁面后热边界层重构阶段液相对流换热项 q_{fc2}；蒸发热流 q_e 的占比则不随质量流量有明显变化；

参考文献

[1] 田文喜,王明军,秋穗正,苏光辉.基于 CFD 方法的核动力系统热工安全特性研究进展[J].原子能科学技术,2019,53(10):1968-1982.

TIAN Wenxi, WANG Mingjun, QIU Suizheng, SU Guanghui. Review on Safety Characteristic Research Progressof Nuclear Power Plant Thermal-hydraulics Using CFD Method[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2019, 53(10): 1968-1982(in Chinese).

[2] Kurul N, Podowski M Z. On the modeling of multidimensional effects in boiling channels[C]. //Proceedings of the 27th National Heat Transfer Conference, Minneapolis, Minnesota, USA, 1991.

[3] 李权, 焦拥军, 于俊崇. 竖直加热圆管内过冷沸腾及 CHF 数值模拟[J]. 核动力工程, 2015, 36(1): 168-172.

LI Quan, JIAO Yongjun, YU Junchong. Simulation of subcooled boiling and critical heat flux in

uniformly heated tubes[J]. Nuclear Power Engineering, 2015, 36(1): 168-172(in Chinese).

[4] 张蕊,田文喜,丛腾龙,苏光辉,秋穗正.湍流模型对过冷沸腾计算影响分析[J].原子能科学技术,2015,49(08):1366-1373.
ZHANG Rui, TIAN Wenxi, CONG Tenglong. SU Guanghui, QIU Suizheng. Effect of Turbulence Model on Prediction of Subcooled Boiling[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2015,49(08):1366-1373(in Chinese).

[5] Murallidharan J S, Prasad B, Patnaik B S V, et al. CFD investigation and assessment of wall heat flux partitioning model for the prediction of high pressure subcooled flow boiling[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016, 103: 211-230.

[6] 张君毅,闫晓,肖泽军,黄彦平,徐建军.两流体方法相间界面力模型参数敏感性分析研究[J].核动力工程,2016,37(S2):135-141.DOI:10.13832/j.jnpe.2016.S2.0135.
ZHANG Junyi, YAN Xiao, XIAO Zejun, HUANG Yanping, XU Jianjun. Parameter sensitivity aanalysis of interface momentum transfer model in two fluid model[J]. Nuclear Power Engineering, 2016,37(S2):135-141(in Chinese).

[7] 彭伟峭, 郑乐乐, 卢川,等. 泡核沸腾两相 CFD 模拟的参数敏感性分析与模型验证[J]. 核科学与工程, 2018,38(02):194-203.
PENG Weidi, ZHENG Lele, LU Chuan, XIONG Jinbiao, LI Songwei, CHENG Xu. Parameter sensitivity analysis and model verification of two-phase CFD Simulation in nucleate boiling[J]. Nuclear Science and Engineering, 2018,38(02):194-203(in Chinese).

[8] 尚泽敏, 杨立新, 袁小菲, 等. 管内过冷流动沸腾 CFD 模型参数敏感性研究[J]. 原子能科学技术, 2022,56(03):457-466.
SHANG Zemin, YANG Lixin, YUAN Xiaofi, LIU Wei, LIU Yu, JIANG Tinglan. Parameter Sensitivity of CFD Model of Subcooled Flow Boiling in Tube[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2022,56(03):457-466(in Chinese).

[9] Wei L, Pan L, Liu H, et al. Assessment of wall heat flux partitioning model for two-phase CFD[J]. Nuclear Engineering and Design, 2022, 390: 111693.

[10] 谢海燕, 蒋慧卿, 赵云杰,等. 内螺纹管临界热流密度预测与数值计算[J]. 原子能科学技术, 2018,52(11):1968-1976.
XIE Haiyan,, JIANG Huiqing, ZHAO Yunjie,, YANG Dong. Prediction and numerical computation of critical heat flux in rifled tube[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2018,52(11):1968-1976(in Chinese).

[11] Perez-Manes J, Sanchez E, Victor H, et al. Validation of NEPTUNE-CFD two-phase flow models using experimental data[J]. Science and Technology of Nuclear Installations (Print), 2014, 2014: 1-19.

[12] 张君毅, 闫晓, 昝元峰. 基于 CFD 的 PSBT-5× 5 均匀加热全长棒束空泡份额预测[J]. 原子能科学技术, 2021,55(S2):196-202.
ZHANG Junyi, YAN Xiao, ZAN Yuanfeng. Void fraction prediction under subcooled flow boilingin 5×5-PSBT full scale bundle with Uniform-APD[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2021,55(S2):196-202(in Chinese).

[13] 张蕊, 干富军, 左巧林, 等. 压水堆燃料棒束通道内过冷沸腾分析[J]. 原子能科学技术, 2015, 49(9): 1579-1585.
ZHANG Rui, GAN Fujun, ZUO Qiaolin, TIAN Wenxi. Analysis of subcooled boiling in PWR rod bundle channel[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2015, 49(9): 1579-1585(in Chinese).

[14] 冯琳娜, 李权, 黄永忠, 等. 基于流固共轭传热的两相流动数值模拟及燃料子通道 CHF 预测研究[J]. 原子能科学技术, 2020,54(06):1092-1098.
FENG Linna, LI Quan, HUANG Yongzhong, LIU Zhenhai. Subcooled boiling simulation and prediction of critical heat flux in fuel subchannel based on conjugate heat transfer[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2020,54(06):1092-1098(in Chinese).

[15] Gilman L A. Development of a general purpose subgrid wall boiling model from improved physical understanding for use in computational fluid dynamics[D]. Massachusetts Institute of Technology, 2014.

[16] Gilman L, Baglietto E. A self-consistent, physics-based boiling heat transfer modeling framework for use in computational fluid dynamics[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2017, 95: 35-53.

[17] Phillips B A. Experimental investigation of subcooled flow boiling using synchronized high speed video, infrared thermography, and particle image velocimetry[D]. Massachusetts Institute of Technology, 2014.

[18] Kommajosyula R. Development and assessment of a physics-based model for subcooled flow boiling with application to CFD[D]. Massachusetts Institute of Technology, 2020.

[19] Pham M V. Advancing State-of-the-art Multiphase CFD Modeling for PWR Applications[D]. Massachusetts Institute of Technology, 2021.

[20] 李林峰,王明军,刘卢果,张大林,田文喜,秋穗正,苏光辉. 考虑气泡滑移效应的壁面沸腾模型开发及其在窄矩形通道内的应用[C]//.第十六届全国反应堆热工流体学术会议暨中核核反应堆热工水力技术重点实验室 2019 年学术年会论文集.[出版者不详],2019:1322-1330.DOI:10.26914/c.cnkihy.2019.047878.

[21] 刘凯,李林峰,王明军,章静,田文喜,秋穗正,苏光辉.基于 CFD 方法的矩形窄缝通道内过冷流动沸腾模型研究[J/OL]. 原子能科学技术:1-10[2022-10-06].http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2044.TL.20211222.1144.002.html
LIU Kai, LI Linfeng, WANG Mingjun, ZHANG Jing, TIAN Wenxi, QIU Suizheng, SU Guanghui. Model investigation of subcooled flow boilinging narrow rectangular channel using CFD method[J/OL]. Atomic Energy Science and Technology, 1-10[2022-10-06].http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2044.TL.20211222.1144.002.html(in Chinese).

[22] Shi J, Zhang R, Zhu Z, et al. A modified wall boiling model considering sliding bubbles based on the RPI wall boiling model[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 154: 119776.

[23] Wang H, Xiong J, Wang J. Development and assessment of five-component wall boiling heat flux partitioning model[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2023, 158: 104306.

[24] R. L. Judd and K. S. Hwang. A comprehensive model for nucleate pool boiling heat transfer including micro-layer evaporation[J]. Journal of Heat Transfer, 1976, 98(4):623–629.

[25] Guion A , Afkhami S , Zaleski S , et al. Simulations of microlayer formation in nucleate boiling[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 127(PT.B):1271-1284.

[26] Zeng L Z, Klausner J F, Bernhard D M, et al. A unified model for the prediction of bubble detachment diameters in boiling systems—II. Flow boiling[J]. International journal of heat and mass transfer, 1993, 36(9): 2271-2279.

[27] Hoang N H, Chu I C, Euh D J, et al. A mechanistic model for predicting the maximum diameter of vapor bubbles in a subcooled boiling flow[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016, 94: 174-179.

[28] Yoo J, Estrada-Perez C E, Hassan Y A. Development of a mechanistic model for sliding bubbles growth prediction in subcooled boiling flow[J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 138: 657-667.

[29] Dong X, Zhang Z. Mechanism study of bubble maximum diameter in the subcooled boiling flow for low-pressure condition[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 164: 120585.

[30] Mikic B B , Rohsenow W M . A New Correlation of Pool-Boiling Data Including the Effect of Heating Surface Characteristics[J]. Journal of Heat Transfer, 1969, 91(2):245-250.

[31] Kenning D , Victor H . Fully-developed nucleate boiling: Overlap of areas of influence and interference between bubble sites[J]. International Journal of Heat & Mass Transfer, 1981, 24(6):1025-1032.

[32] Alade A M , Satbyoul J , Hyungdae K . Direct experimental measurement for partitioning of wall heat flux during subcooled flow boiling: Effect of bubble areas of influence factor[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 127:515-533.

[33] Richenderfer A J. Experimental study of heat flux partitioning in pressurized subcooled flow boiling[D]. Massachusetts Institute of Technology, 2018.

[34] Li Q, Jiao Y, Avramova M, et al. Development, verification and application of a new model for active nucleation site density in boiling systems[J]. Nuclear Engineering and Design, 2018, 328: 1-9.

[35] Kocamustafaogullari G. Pressure dependence of bubble departure diameter for water[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 1983, 10(6): 501-509.

[36] Cole R. A photographic study of pool boiling in the region of the critical heat flux[J]. AIChE Journal, 1960, 6(4): 533-538.

[37] Tomiyama A, Kataoka I, Zun I, et al. Drag coefficients of single bubbles under normal and micro gravity conditions[J]. JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering, 1998, 41(2): 472-479.

[38] Tomiyama A. Struggle with computational bubble dynamics[J]. Multiphase Science and Technology, 1998, 10(4): 369-405.

[39] Burns A D, Frank T, Hamill I, et al. The Favre averaged drag model for turbulent dispersion in Eulerian multi-phase flows. ICMF. 2004.

[40] Auton T R, Hunt J C R, Prud'homme M. The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotational flow[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1988, 197: 241-257.

[41] Lo S , Zhang D . Modelling of Break-up and Coalescence in Bubbly Two-Phase Flows[J]. The Journal of Computational Multiphase Flows, 2009, 1(1):23-38.

[42] Ranz W E , Marshall W R . Evaporation from drops, part I[J]. Chemical Engineering Progress, 1952,

48(3):141-146.

[43] Groeneveld D C, Shan J Q, Vasić A Z, et al. The 2006 CHF look-up table[J]. Nuclear engineering and design, 2007, 237(15-17): 1909-1922.

[44] Thom J R S, Walker W M, Fallon T A, et al. Boiling in subcooled water during flow up heated tubes or annuli[J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, 1965, 180(3): 226−246. DOI: 10.1243/ PIME_CONF_1965_180_117_02.

[45] Moles F D, Shaw J F G. Boiling heat transfer to subcooled liquids under condition of forced convection [J] Trans. Inst. Chem. Eng. 50 (1972) 76–84.

中国工程热物理学会 数值计算
学术会议论文 编号：233165

开槽对交错肋通道流动换热特性影响的研究[1]

贾奕轩，段敬添，武俊梅*
西安交通大学 航天航空学院，西安 710049
Tel:13572169559， Email: wjmxjtu@xjtu.edu.cn

摘要： 利用数值方法研究了雷诺数(Re)为 49000 的条件下，旋转数（Ro=0-0.5），和开槽位置（仅冲击区开槽、仅转向区开槽和两端开槽）对交错肋冷却通道传热和流动特性的影响。通过分析通道端壁努塞尔数分布、摩擦系数、综合冷却系数以及局部流场结构特征，发现：在冲击区开槽通道换热能力增强，在转向区开槽通道换热能力降低；随着旋转数的增加，交错肋通道吸力面的换热能力增强，压力面换热能力降低，摩擦系数减小，综合冷却系数增大；仅在冲击区开槽通道和两端开槽通道的综合冷效几乎相同，与未开槽交错肋通道相比，二者综合冷却系数均提高了约 47%。

关键词： 涡轮叶片；交错肋冷却；流动传热；数值模拟

0 前言

燃气轮机因其高功率、高效率、在非设计点性能好等优点，被广泛应用于航空推进、舰船推进和发电领域。提高燃气轮机涡轮前燃气温度是提高燃气轮机功率和热效率的有效措施。随着燃气轮机的不断发展，涡轮前燃气温度不断提高。目前金属材料结合热障涂层的耐受温度远低于涡轮进口温度。为保证燃气轮机叶片的工作寿命和安全性，必须采取精细有效的冷却系统降低叶片温度。目前成熟的燃气涡轮叶片内部冷却结构有冲击冷却结构、肋柱冷却结构和肋片冷却结构[1]。

交错肋冷却通道是一种特殊的带肋通道。与普通的带肋通道不同，交错肋冷却通道的肋高为通道高度的二分之一，压力面的肋与吸力面的肋直接接触，两层平行肋以一定的交叉角排布，形成了类似网格的复杂布局，冷却通道被肋划分为大量的子通道。交错肋结构曾被应用于前苏联的 AL-31、GT25000 等燃气轮机的中弦区域和尾缘区域[1]。相比传统的冷却结构，交错肋冷却结构拥有较高的冷却能力，然而，其复杂的结构使得叶片的加工难度及成本提高，阻碍了其进一步的发展。近年来随着金属增材制造技术的发展[2]，交错肋冷却结构的加工制造已经不再是技术瓶颈，所以涡流矩阵冷却技术的优点近年来又引起学者们的重视。

Gorelov 等[3]使用熔锌法测量了一系列交错肋结构的传热系数。Nagoga[4]总结了相关的传热与摩擦系数关联式。Gorelov 等[3]和 Tariq 等[5]研究了肋交叉角对交错肋通道传热系数的影响，认为肋交叉角为 90 度时换热系数最大。Oh 等[6]研究了交错肋结构在旋转

[1] 基金项目：国家科技重大专项（J2019-III-0007-0050)

条件下的性能，随着旋转数的增加，交错肋结构的综合传热性能升高。Tsuru 等[7]使用核磁共振成像的方法揭示了交错肋通道复杂的三维流场，包括冲击流、转向流、螺旋流、旁通流等。其研究表明所有相对的子通道流体间交界面存在显著的交互作用。饶宇等[8]用热电偶研究了带凹坑 U 型子通道的交错肋通道，获得了相比矩形子通道高 30%的传热性能。Du 等[9]用数值模拟的方法探究了不同侧壁角度对交错肋通道换热的影响，认为三角形侧壁综合传热性能最好。从以上公开文献中，可以发现学者们主要研究基本的交错肋结构在矩形通道中的传热特性和流阻特性。他们的结果表明，交错肋冷却通道整体换热较好，但仍会出现局部低换热区。此外，交错肋冷却结构具有较大的阻力损失，易发生堵塞。

因此，本研究将以提高低换热区的换热特性，同时减小通道流动阻力为目标开展研究。应用数值计算的方法，结合旋转条件下的工况，针对交错肋通道中的易发生堵塞的转弯区和冲击区，比较研究不同开槽位置下交错肋结构的传热和流动特性。研究结果可以为交错肋冷却结构的进一步优化提供参考。

1 物理问题描述

如图 1(a)所示，设计了简化形式的矩形交错肋结构冷却通道。为减少进出口效应对计算结果的影响，在模型进出口部分分别建立了长为 L_1、L_3 的光滑通道延伸段。L_2 为交错肋核心段长度，W 为矩形通道总宽度，H 为矩形通道总高度，R 为旋转半径，旋转方向为 x 轴正方向。核心区由流体域和固体域组成，固体域外表面与矩形通道间的间距为 W_C。

如前所述，针对交错肋结构侧壁附近易形成堵塞的低换热区，对交错肋进行开槽。通道核心区由图 1(b)所示，W_s 为子通道宽度，H_s 为子通道高度，W_t 为肋宽度，W_l 为肋中开槽宽度，β为肋交叉角。交错肋将冷却通道分为上下两层，图中红线所示即为其中一个子通道，冷却流体在子通道中沿延肋方向流过通道的其中一层，并在侧壁处改变方向，流入另外一层的子通道。将冷却流体改变方向时离开的一层区域命名为转向区，将冷却流体改变方向后进入的一层区域命名为冲击区。简化的涡流矩阵通道各几何参数如表 1 所示。

表 1　计算模型几何参数（长度单位：㎜）

Table 1 Geometrical sizes of the computational model.

L_1	L_2	L_3	W	H	W_C	W_s	W_t	W_l	H_s	β/°
200	156	80	100	20	5	22	4	2	10	90

如图 2 所示，为了获得在不同开槽位置下交错肋结构的传热和流动特性，共建立了 4 几何模型:case0 为不开槽、case1 为仅在冲击区开槽、case2 为仅在转向区开槽、case3 为同时在冲击区和转向区开槽。

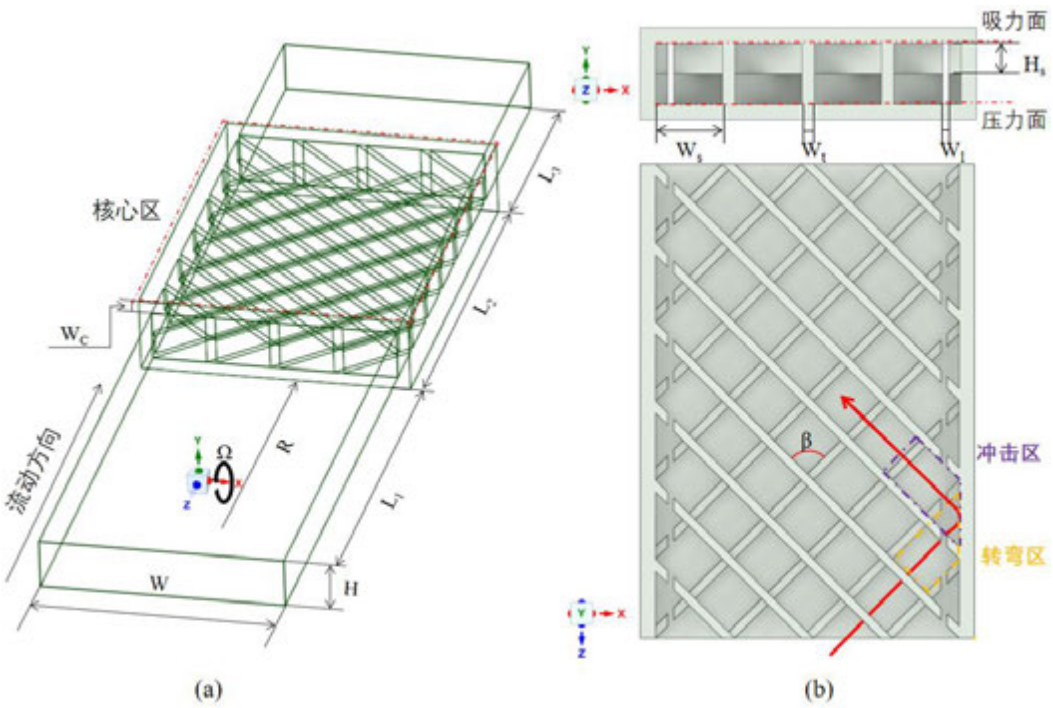


图1 交错肋冷却通道示意图

Fig. 1 Latticework cooling configurations

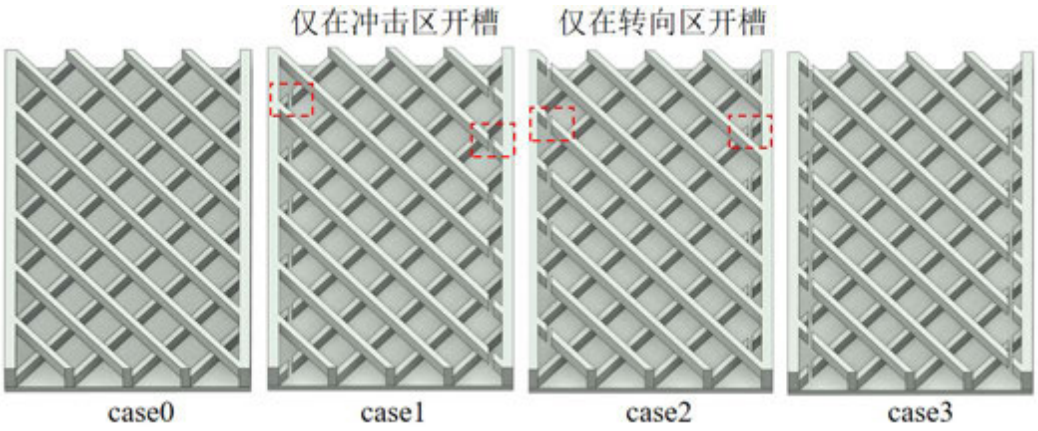


图2 四种结构示意图

Fig. 2 Four latticework cooling structures

2 数值模拟方法

2.1 控制方程

本模拟采用流固耦合方法，在考虑肋壁导热的情况下，模拟流体在不同交错肋子通道模型中的流动换热特性，所用到的控制方程包括牛顿不可压缩定常流体流动的连续性方程（1）、动量方程（2）和、能量方程（3）和固体区的导热方程（4）。

$$\frac{\partial \rho U_{\mathrm{i}}}{\partial x_{\mathrm{i}}}=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho U_{\mathrm{i}} U_{\mathrm{j}}}{\partial x_{\mathrm{i}}}=F_{\mathrm{i}}-\frac{\partial P}{\partial x_{\mathrm{i}}}+\frac{\partial}{\partial x_{\mathrm{i}}}\left(2 \mu \mathrm{s}_{\mathrm{ij}}\right) \tag{2}$$

$$\frac{\partial \rho U_{\mathrm{i}} E_0}{\partial x_{\mathrm{i}}}=\rho U_{\mathrm{i}} F_{\mathrm{i}}-\frac{\partial \mathrm{q}_{\mathrm{i}}}{\partial x_{\mathrm{i}}}+\frac{\partial}{\partial x_{\mathrm{j}}}\left(2 U_{\mathrm{i}} \mathrm{T}_{\mathrm{ij}}\right) \tag{3}$$

式中F_i是可以影响流体运动(如旋转)的附加体积力，s_{ij}为应变率张量，T_{ij}为类似于动量方程中的粘性和压力项的表面力，E_0是总内能。

固体的热传导方程为：

$$\frac{\partial T}{\partial t}=a \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^{\ 2}} \tag{4}$$

式中a为热扩散率。

2.2 边界条件

本模拟是以水作为介质，在通道进口Re为49000的工况下进行的，此条件下通道进口平均速度1.5m/s作为进口边界条件，进口温度T_{in}=293K，进口湍流强度5%，湍流粘度比为10。出口为压力出口。核心段的四个外壁面作为加热壁面，壁面温度为恒定壁温T_w=323K。为了研究旋转条件下涡流矩阵通道的流动换热性能，旋转数Ro选取0-0.5（间隔0.1，共6个工况）。固体区域取为金属铝。模拟使用商业软件Fluent进行，湍流模型采用Realizable k-ε模型，收敛残差为1×10-5。

2.3 参数定义

进口水力直径计算公式为：

$$D_{\mathrm{h}}=\frac{4 \times W \times H}{2(W+H)} \tag{5}$$

式中 W 为矩形通道总宽度，H 为矩形通道总高度。

本文流动介质为液态水，流体雷诺数取冷却通道进口雷诺数，公式为：

$$\mathrm{Re}=\frac{\rho U_{in} D_h}{\mu} \tag{6}$$

式中ρ为进口水流的密度，μ为水流的粘性系数，U_{in}为进口水流速度。

旋转数定义为：

$$Ro=\frac{\Omega R}{U_{in}} \tag{7}$$

式中Ω为旋转速度，旋转半径 $R=5.56D_h$[10]。

壁面换热系数 h 公式为：

$$h = \frac{q}{T_w - T_\infty} \tag{8}$$

式中 q 为热流密度，T_w取冷却通道壁面平均温度，T_∞取局部主流平均温度。

努塞尔数定义为：

$$Nu = \frac{hD_h}{\lambda} \tag{9}$$

式中λ为流体导热系数。

根据Dittus–Boelter公式，具有和矩形通道相同水力直径的光滑圆管充分发展湍流的平均努塞尔数为：

$$Nu_0 = 0.023\,\mathrm{Re}^{0.8}\,\mathrm{Pr}^{0.4} \tag{10}$$

摩擦系数定义为：

$$f = \frac{2\triangle PD_h}{\rho U_{in}^2 L_2} \tag{11}$$

式中ΔP为进、出口平均压力差，L2为核心段长度。

对于充分发展的光滑圆管的摩擦系数，由Blasius公式得：

$$f_0 = \frac{0.3164}{\mathrm{Re}^{0.25}} \tag{12}$$

从整体换热增量的角度引入综合冷却系数TPF：

$$TPF = \frac{Nu/Nu_0}{\left(f/f_0\right)^{1/3}} \tag{13}$$

2.4 网格划分和网格独立性验证

使用ICEM对计算域进行网格划分，图3展示了计算域的部分网格。计算域使用结构化六面体网格，在临近侧壁处的转弯区域采用Y型剖分改善网格质量，第一层网格高度为0.01mm，对应壁面的y+值均小于且接近1。

研究了网格独立性，以保证计算结果的可靠性。分别划分了网格数为570万，820万，1200万的三套结构化网格，均进行了边界层加密。在三套网格下计算并对比了吸力面横向平均努塞尔数，如图4所示。结果表明820万网格数下的计算与1200万网格数下的计算结果非常接近，为节约计算成本，后面的计算都是在820万网格系统下进行的。

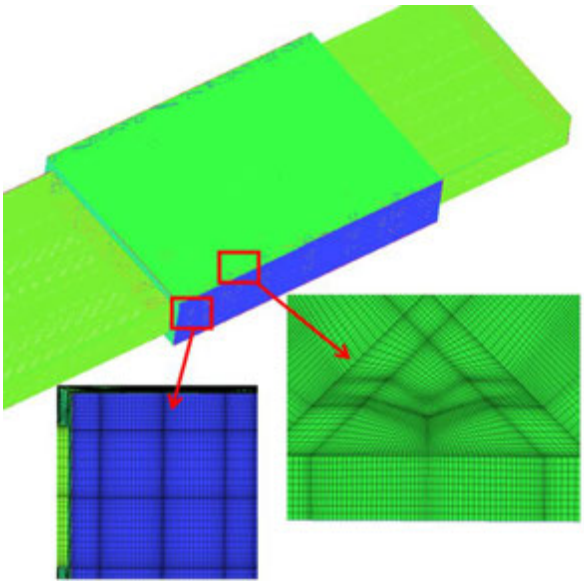


图3 交错肋通道结构化网格划分

Fig. 3 Mesh of the latticework duct

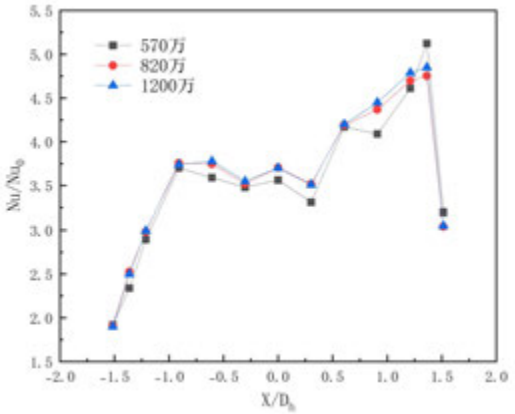


图4 网格无关性验证

Fig. 4 Mesh independence

2.5 湍流模型验证

进行了湍流模型验证，采用Oh等[6]的实验结果进行了数值验证。图5为SST k-ω湍流模型、realizable k-ε湍流模型和实验结果的横向平均努塞尔数对比。可以看到realizable k-ε湍流模型计算的数值结果与实验结果吻合较好。realizable k-ε模型适用于旋转流动、强逆压梯度的边界层流动、流动分离和二次流等。此外，Du等[11]还使用realizable k-ε模型来捕捉旋转通道中的流动结构和传热特性。因此，本文采用realizable k-ε湍流模型来计算旋转工况下交错肋通道的传热特性。

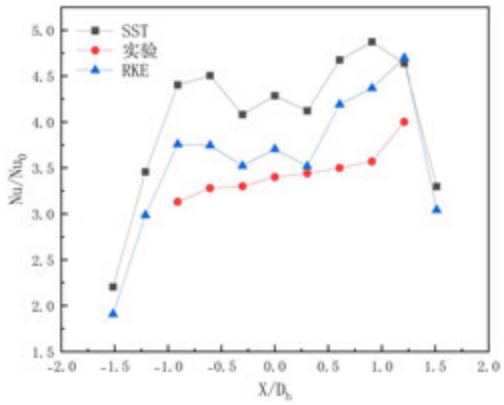


图5 湍流模型验证

Fig. 5 Validation of turbulence model

3 结果与分析

3.1 静止条件下开槽位置对通道的影响

图6给出了静止条件下四种结构吸力面Nu分布。在未开槽的情况下（case0），流体经过转弯后在冲击区端壁形成高换热区，随着流体沿子通道流动，换热能力逐渐减小，在转向区进行减速转向时，在端壁处形成低换热区。仅在冲击区开槽时（case1），由于泄露槽对冲击流的扰动和掺混，冲击区在开槽的前后形成了明显的高换热区，且流体在沿子通道流向转向区时，对吸力面换热更加高效且均匀。仅在转向区开槽时（case2），泄露槽使转向区在吸力面的传热有所下降。当同时在两端区域开槽时（case3），更多的槽虽然增大了流体间的掺混，但是使得流体分流、减速，降低了流体对端壁的冲击效果，对于吸力面端壁而言，高换热区域相较case0和case2多，但较case1换热能力有所降低。

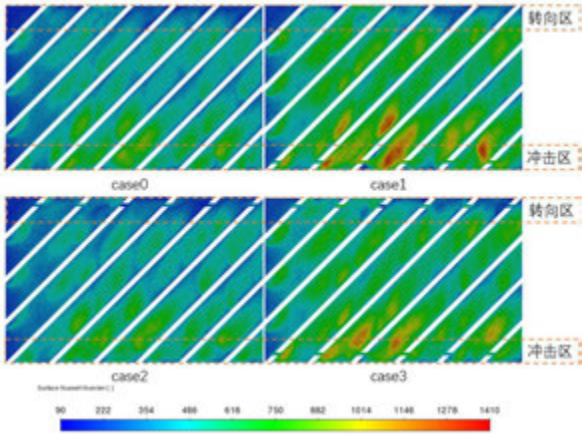


图6 静止条件下吸力面Nu分布

Fig. 6 Local Nusselt number distribution on suction surface

图7为静止条件下四种结构的吸力、压力端壁面横向平均Nu数图，Suc表示吸力面，Pre表示压力面。在吸力面端，流体在拐角处翻转产生冲击和扰动，这种冲击和扰动破坏了附面层，形成二次流，换热急剧上升。流体的换热效果在开槽处的扰动下达到顶峰。随着流体在子通道内前进，换热能力总体逐渐减小。中间区域波动性的换热增强来自于

另一层交错的子通道旁通流，这些旁通流加强扰动并增强换热。随着进入子通道末端，流体即将转弯时减速并出现堵塞，换热能力下降，在转向区开槽会对转向区的换热能力有所改善（case2、case3）。

图8给出了两个开槽截面处的流线图，以速度进行着色。可以看出，子通道内流体从转向区向冲击区拐弯翻转时，加速形成一个高速螺旋流，冲击端壁和侧肋加强换热，同时产生一个低速旋流区，造成堵塞。Case1相比case0，在冲击区开槽可以加强流体的掺混，消除堵塞的低换热区。但同时流体的掺混使得高速的旋流速度有所下降。Case2相比case0，在转向区开槽可能带来更多的低速旋流堵塞区，对传热造成不利影响。Case3继承了在冲击区开槽消除低传热区域的优点，同时大大增加了流体的掺混，使得传热增强。结合图7和图8，可知开槽产生的掺混扰动、流体在侧壁翻转产生的冲击和扰动以及流体在交错子通道间的掺混三方面原因起到了强化换热的作用，同时也带来了相应的流动阻力。

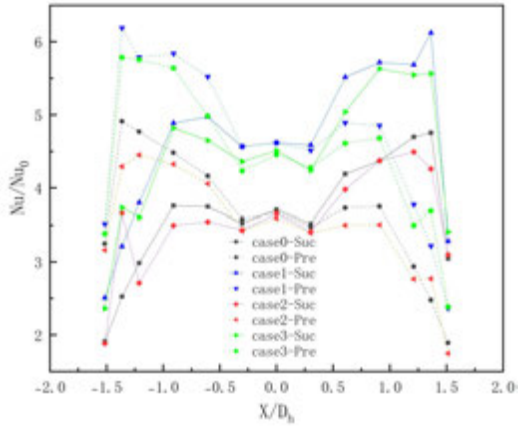


图7 端壁横向平均Nu数

Fig. 7 Laterally averaged Nusselt number on endwalls

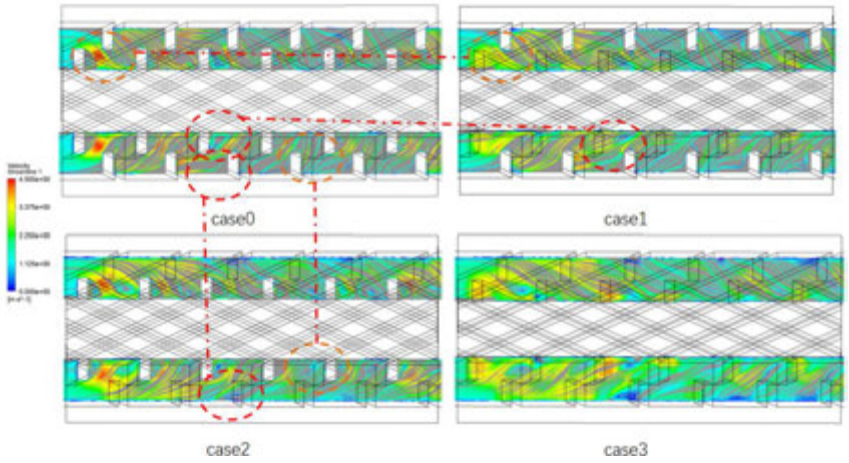


图8 开槽截面处流线图

Fig. 8 The streamlines in rib-broken areas

3.2 旋转条件下开槽位置对通道换热能力的影响

图9给出了在旋转数为0到0.5时吸力面和压力面的平均Nu数。随着旋转数的增加，吸力面的换热能力增强，而压力面的换热能力减弱。在冲击区开槽会大大增强冷却通道的换热能力，而在转向区开槽会略微减弱冷却通道的换热能力。

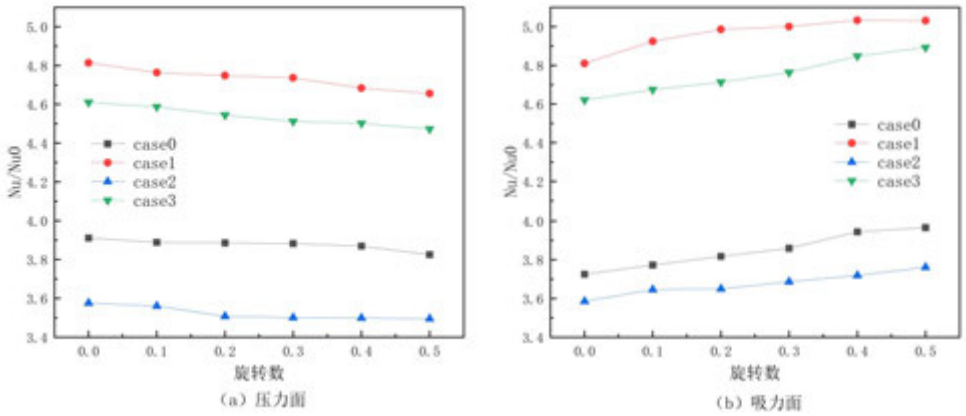


图9 不同旋转数的端壁平均Nu数

Fig. 9 Laterally averaged Nusselt number on endwalls with different Ro numbers

3.3 旋转条件下交错肋通道的综合冷却特性

图10给出了交错肋通道核心区的相对摩擦系数f/f0和综合冷却系数TPF随旋转数变化的曲线。Case3的相对摩擦系数最低，case1和case2相对摩擦系数略有增加。随着旋转数的增加，相对摩擦系数减小。较高旋转数下单侧开槽结构的摩擦系数与不开槽结构的相对摩擦系数几乎相同。

如图10（b）所示，随着旋转数的增加，各个结构的综合冷却系数增大。Case1具有更高的传热能力，case3具有更低的摩擦系数，考虑综合冷却效率，case1和case3相差无几，且在较高旋转数下TPF大于1，具有较好的冷却效果。相比不开槽的交错肋通道结构case0，case2的冷却特性系数略低。Case1和case3的冷却特性系数比case0通道提高了约47%。

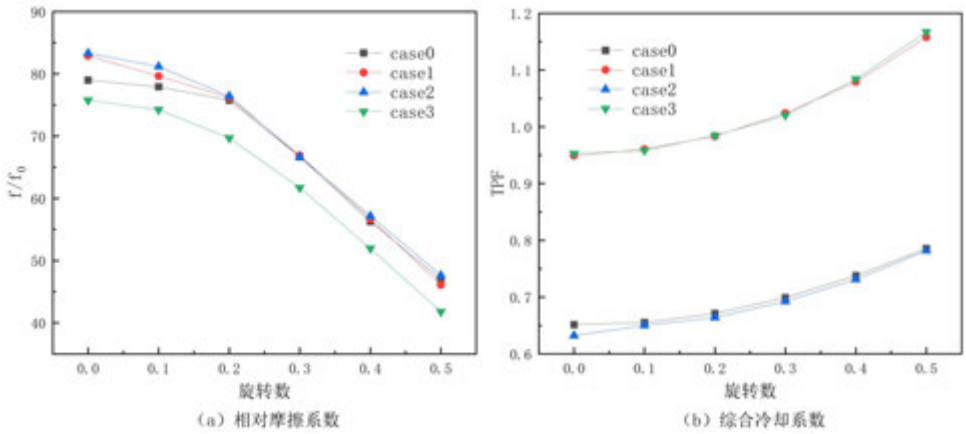


图10 核心区相对摩擦系数和综合冷却系数

Fig. 10 Overall thermal performance in the core region

4 结论

1) 针对交错肋冷却通道结构，在冲击区开槽可以有效增强传热；在转向区开槽会削弱传热。

2) 随着旋转数由0增加到0.5，吸力面传热增强、压力面传热减弱。

3) 随着旋转数由0增加到0.5，各通道结构的摩擦系数减小、综合冷却特性系数增加。同时在转向区和冲击区开槽的交错肋通道（case3）摩擦系数最小。仅在冲击区开槽的交错肋通道（case1）和在2个区域开槽的交错肋通道（case3）综合冷却效率最高且几乎相等，在高旋转数下，综合冷却特性系数超过1.0，是一种提高交错肋通道综合冷却性能的有效措施。故相较其他结构，Case3为传热最好且相对摩擦系数更低的结构。

参考文献

[1] Du W, Luo L, Jiao Y, et al. Heat transfer in the trailing region of gas turbines–A state-of-the-art review[J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 199: 117614.

[2] Panwisawas, C., Tang, Y.T. & Reed, R.C. Metal 3D printing as a disruptive technology for superalloys. Nat Commun 11, 2327 (2020). https://doi.org/10.1038/s41467-020-16188-7

[3] Gorelov V, Goikhenberg M, Malkov V. The investigation of heat transfer in cooled blades of gas turbines[C]//26th Joint Propulsion Conference. 1990: 2144.

[4] Nagoga C P. Effective Methods of Cooling of Blades of High Temperature Gas Turbine［M］.Moscow：Publishing House of Moscow Aerospace Institute Gas Turbine，1996.

[5] Tariq A, Prajapati A N. Heat transfer characteristics within the matrix cooling channels[J]. Journal of Turbomachinery, 2021, 143(5).

[6] Taek Oh, I., Min Kim, K., Hyun Lee, D., Su Park, J., and Hee Cho, H. (October 27, 2011). "Local Heat/Mass Transfer and Friction Loss Measurement in a Rotating Matrix Cooling Channel." ASME. J. Heat Transfer. January 2012; 134(1): 011901. https://doi.org/10.1115/1.4004853

[7] Tsuru T，Ishida K，Fujita J，et al. Three-Dimensional Visualization of Flow Characteristics Using a Magnetic Resonance Imaging in a Lattice Cooling Channel［J］. Journal of Turbomachinery，2019，141(6).

[8] Rao Y, Zang S. Flow and heat transfer characteristics in latticework cooling channels with dimple vortex generators[J]. Journal of Turbomachinery, 2014, 136(2).

[9] Du W, Luo L, Wang S, et al. Heat transfer and flow structure in a latticework duct with different sidewalls[J]. Journal of Heat Transfer, 2019, 141(12).

[10] Du, W., Luo, L., Wang, S., Liu, J., and Sunden, B. (September 13, 2019). "Effect of the Broken Rib Locations on the Heat Transfer and Fluid Flow in a Rotating Latticework Duct." ASME. J. Heat Transfer. October 2019; 141(10): 102102. https://doi.org/10.1115/1.4044247

[11] Du W, Luo L, Wang S, et al. Effect of the dimple location and rotating number on the heat transfer and flow structure in a pin finned channel[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 127: 111-129

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：233171

内置扭带式高温氯化盐塔式吸热器综合性能研究

张杰，张嘉琦，程泽东*，韩旭升
(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)
(Tel：029-82665445，E-mail：zedongcheng@mail.xjtu.edu.cn)

摘 要：针对高温氯化盐塔式吸热器存在热损失加剧和安全性降低的问题，本文提出一种采用内置扭带均化管壁温度、降低热应力的优化调控方案，优选了内置扭带并分析了内置扭带式高温氯化盐吸热器的光-热-力综合性能。结果表明，在典型日正午添加内置扭带可提升吸热器管壁温度分布均匀性和系统运行安全性，提升热效率 2.1~2.3%，降低壁面峰值热应力 42~55 MPa。本研究结果为提升新一代高温氯化盐塔式吸热器的热效率与安全性提供了一定技术参考。

关键词：塔式太阳能电站；高温氯化盐吸热器；内置扭带；正交实验设计；光-热-力性能

0 前言

当前，塔式太阳能光热发电技术是最具前景的太阳能热利用形式之一[1]，不过新一代>700℃高温氯化盐塔式吸热器开发利用中却存在热损失加剧和安全性降低等问题[2-4]。为提升高温氯化盐塔式吸热器的热效率与安全性，或可以通过强化吸热器管内的流动换热能力，并使之与吸热器表面热流分布相匹配的同时均匀化吸热器管壁的温度分布[5]。在众多强化管内流动换热的手段中，吸热器管内添加扭带具有较好的效果[6]。

Smith 等人[7]实验研究了雷诺数 3000~27000 条件下扭带对均匀热流吸热管内水工质流动换热性能的影响。实验结果表明，加入扭带后管内换热效果比光滑管高 27.3~90.5%，而管内加入的扭带在显著提高换热效果的同时也使得其流动损失有较大增加。Liu 等人[6]通过数值模拟方法研究了扭带、外翅片管、双斜肋管和螺旋线插件四种不同结构扰流件对塔式吸热器管内流动换热性能的影响。对比分析发现，其中加入了扭带的吸热器具有最高的流动换热性能。Sundar 等人[8, 9]通过插入不同扭度的扭带，进行了水基纳米流体的吸热器管内流动换热性能的实验。结果表明，所采用扭带可以在不增加任何外力的情况下提高吸热器的热效率，而且研究发现其流动换热性能随着扭带扭度的减小而进一步提高。Yang 等人[10]采用数值模拟方法研究了不同扭带结构对吸热管内氟化铍熔融盐工质流动换热性能的影响。结果表明，加入扭带所产生的旋流作用提高了吸热管的换热效果。然而，目前已有研究较少关注内置扭带的布置方式及其结构参数对高温氯化盐塔式吸热器温度分布和流动换热性能的影响，以及加入内置扭带后对吸热器力学性能等的影响。特别是，需要考虑如何使得内置扭带的强化换热能力与吸热器表面热流分布相匹配的同时均匀化吸热器管壁的温度分布和热应力分布，以综合地提升系统的热效率与安全性。

基金项目：国家重点研发计划（2018YFB1501001）

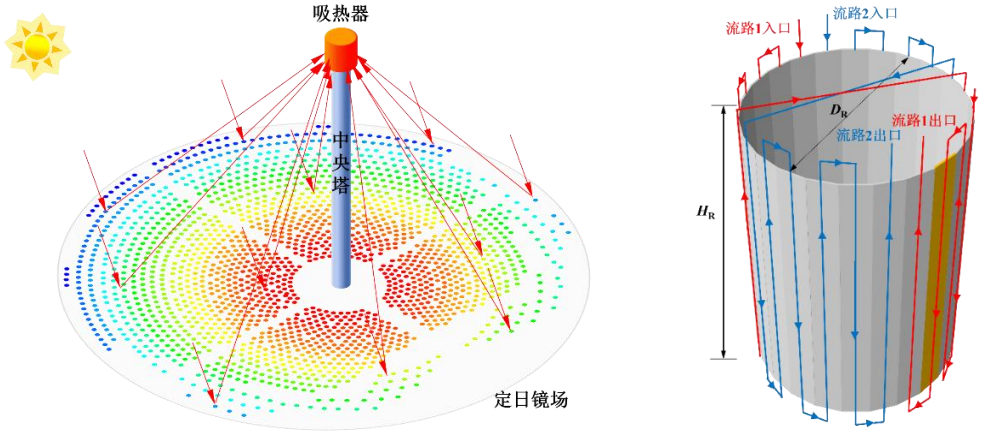
因此，有关内置扭带布置方式和结构参数对高温氯化盐塔式吸热器光-热-力综合性能的优化调控研究还需要进一步开展。

为此，本文基于所构建的高温氯化盐塔式吸热器光-热-力耦合模型、正交实验设计和极差分析，优选得到了一种更适合于高温氯化盐塔式吸热器的内置扭带，分析了内置扭带对高温氯化盐塔式吸热器光-热-力综合性能的影响，以期为提升高温氯化盐塔式吸热器的热效率与安全性提供一定技术参考。

1 物理模型

1.1 塔式聚光集热系统物理模型

本文的研究对象是位于美国加利福尼亚州 Mojave 沙漠的 Solar Two 塔式电站。如图 1 所示，聚光集热系统主要由定日镜场和中央的外露圆柱式吸热器组成，其吸热器有两个流路，每个流路各 12 个管排，每个管排 32 根吸热管，一共有 768 根吸热管，管长 6.2m，内径 18.6mm，Solar Two 电站的定日镜场和吸热管的具体物理模型可参见文献[11]。



（a）塔式电站聚光集热系统　　（b）吸热器

图 1 Solar Two 电站聚光集热系统示意图

1.2 内置扭带吸热管物理模型

为了获得更适合高温氯化盐吸热器的扭带，分别考察了扭带的扭度、长度、宽度以及位置对吸热管换热性能和力学性能的影响。而为了节省数值计算的时间成本和计算资源，采用正交实验法[12, 13]确定了待考察的 9 种扭带结构。本文所研究扭带各影响因素及对应各水平的取值如表 1 扭带各影响因素及取值所示，扭带的几何参数定义如图 2。

表 1 扭带各影响因素及取值

水平	扭带扭度 $y \cdot W^{-1}$	扭带长度 L/ (m)	扭带宽度 W/ (mm)	扭带位置
1	2.5	6.20	18.6	入口
2	3.0	3.10	14.0	中间
3	3.5	1.55	9.3	出口

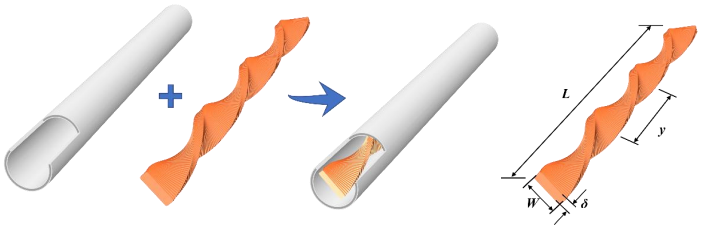


图 2 内置扭带的吸热管及几何参数示意图

2 数学模型

本研究为了对扭带作用下的高温氯化盐塔式吸热器中的光-热转化利用过程以及产生的热应力进行研究，建立了塔式电站聚光集热系统的光-热-力耦合模型，具体计算流程如图 3 所示。其中，光学计算采用蒙特卡罗光学追迹法（Monte Carlo ray tracing, MCRT）[14]，通过自编程模拟塔式电站聚光集热系统中太阳光线的传播过程。

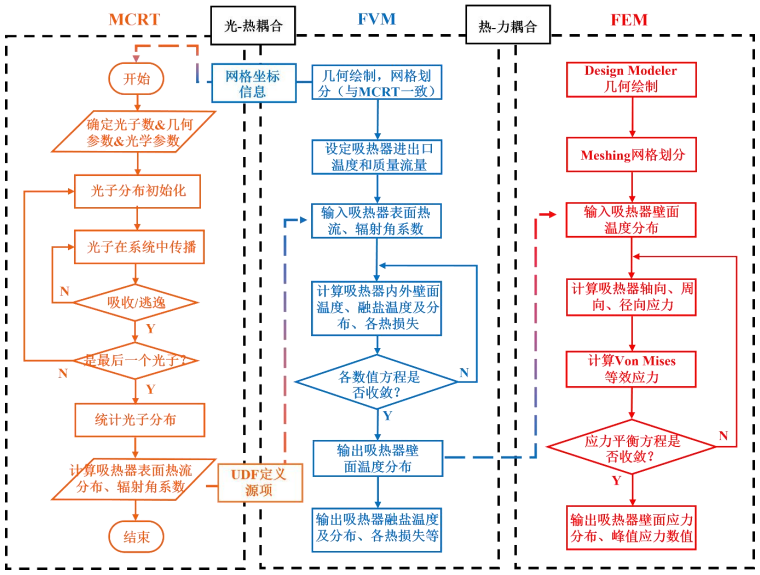


图 3 塔式太阳能聚光集热系统光-热-力耦合计算流程图

针对吸热器内的流动换热过程可建立吸热器内多重导热、对流、辐射传热过程的控制方程，包括连续性方程、动量方程与能量方程，对于管内通常的湍流工况条件还需建立相应湍流模型方程，具体参见文献[15]。其中，关键的光-热耦合过程的实现如图 3 所示，采用自编程 MCRT 计算吸热器管壁表面的热流密度分布，并将其通过 UDF 导入到能量方程源项上。本文所研究工况均为稳态，采用有限体积法（Finite Volume method，FVM）对控制方程进行离散求解，获得吸热器管壁的温度分布。光滑圆管内工质流动湍流模型采用标准 *k-ε*模型，内置扭带管湍流模型采用 RNG *k-ε*模型，均采用加强壁面函数[16]。值得注意的是，由于吸热管数量较多[11]，本文参考以下文献中假设进行简化[17]：1) 忽略吸热管之间的热辐射传热；2) 只选择各管排中间位置的吸热管作为代表管进行计算；3) 投入到代表管迎光面的能量为其所在管排总能量的平均值。本文将可满足吸热器光热性能分析的 24 根代表管模型记为“简化模型”，吸热器简化模型及流动换热模型边界条件如

图 4 所示。

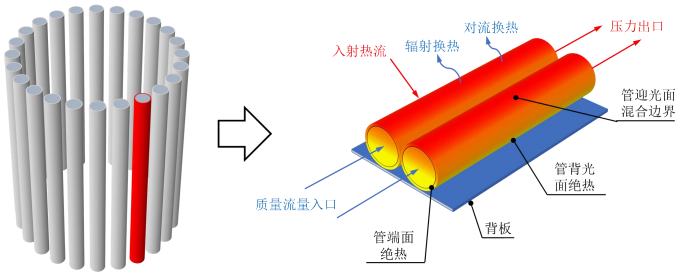


图 4 简化模型及流动换热模型边界条件示意图

为评估吸热器的性能，本文定义了管内对流换热努塞尔数 *Nu*、管内流动阻力系数 *f*、流动换热综合性能指标 *TEF*（Thermal enhancement factor）、吸热器热效率和温度均匀度。其中，*Nu*、*f*、*TEF* 定义参见文献[18]，吸热器热效率是指吸热器内工质所吸收的热量和吸热器表面吸收的能量的比值，由公式(1)计算：

$$\eta_{\mathrm{R,the}}=Q_{\mathrm{flu}}/Q_{\mathrm{R}} \tag{1}$$

式中：Q_{R} 为吸热器表面吸收的能量，单位 kW；定日镜场投射到吸热器表面的截断能量 Q_{inc} 会有一部分被反射，其余被吸热器吸收。

温度均匀度是衡量系统中吸热器表面温度分布均匀性高低的参数，值越大表面温度分布越均匀，由公式(2)和(3)计算：

$$\gamma_{\mathrm{t}}=1-\frac{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{e}}}\left[\left(\left|T_i-T_{\mathrm{ave}}\right|\right)A_i\right]}{2\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{e}}}T_iA_i} \tag{2}$$

$$T_{\mathrm{ave}}=\frac{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{e}}}T_iA_i}{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{e}}}A_i} \tag{3}$$

式中：T_i 为吸热器表面第 i 个网格的温度，单位 K；A_i 为吸热器表面第 i 个网格的面积，单位 m^2；N_{e} 为吸热器表面的网格数。

通过上述模型计算获得温度分布后，采用有限元方法计算吸热器管壁等效应力值。相比于简化模型，吸热器峰值热应力采用非简化的“各管排模型”计算，如图 5 所示。

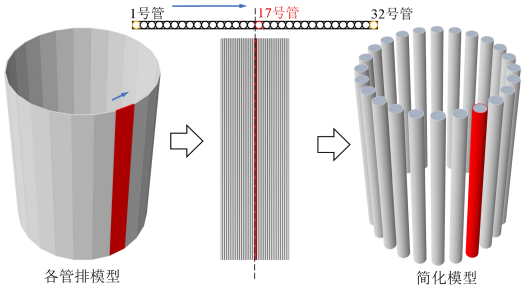


图 5 吸热器简化模型（右）及各管排模型（左）示意图

3 网格独立性考核与模型验证

网格独立性考核是在 Solar Two 典型实验工况[11]下进行的，即吸热器进口温度为 571.15 K，熔融硝酸盐的质量流量为 70 kg·s^{-1}，环境温度为 290.15 K，风速为 2.5 m·s^{-1}，太阳直接辐射强度为 887 W·m^{-2}。如图 6 所示，通过对比计算此工况下稳态运行的吸热器光-热耦合性能发现，当单个吸热管网格数（轴向×周向）大于 62×24 时，吸热器出口温度和热效率基本保持不变，故单个吸热管采用 62×24 的网格进行计算。后续算例同样以此方法完成网格无关性验证，在此不再赘述。

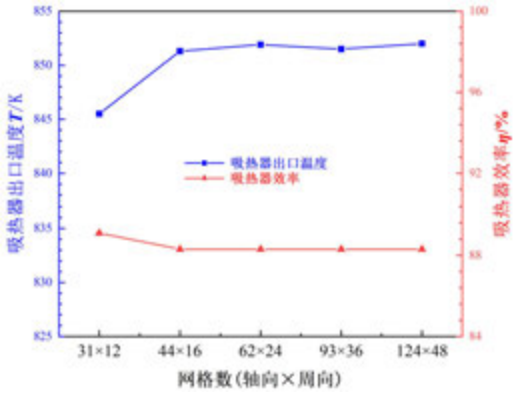
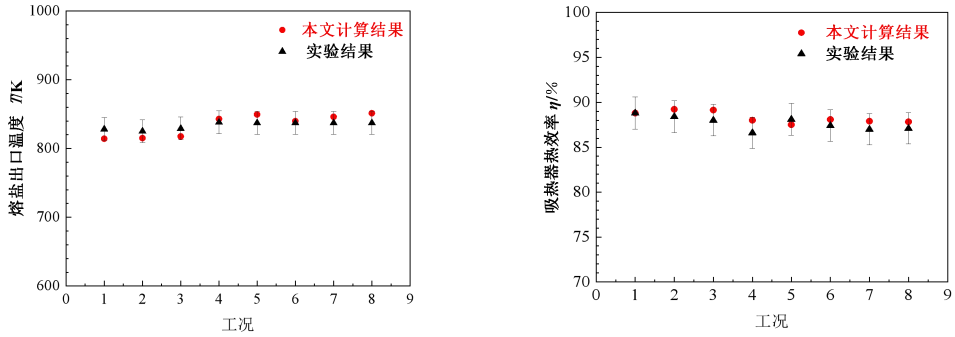


图 6 网格无关性验证

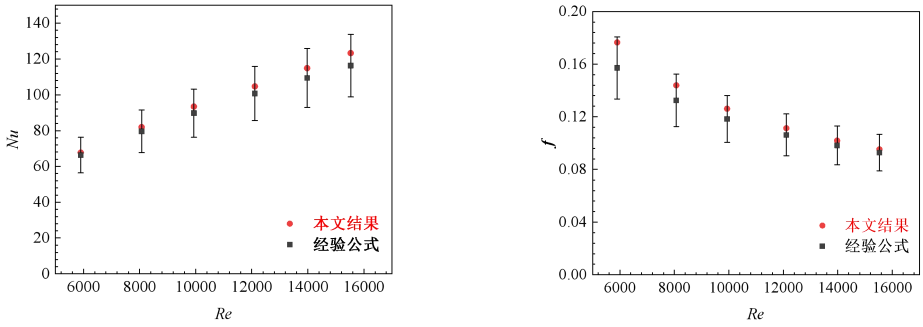
在此吸热管网格基础上，内置有扭带的单根吸热管模型的总网格数约为 220 万。本文所使用的计算及配置如下：4 核 Intel(R) Core(TM) i5-8265U 处理器，单核频率 1.6GHz，安装内存 20GB。本文所研究工况均为稳态，流动传热过程通过 ANASYS FLUENT 模拟计算，在本文使用的计算机上计算每次稳态所需时间约为 57600s。

为验证吸热器光热耦合模型，将本文模型计算结果与 Solar Two 光热电站吸热器效率实验测试结果[11]进行了对比，如图 7 所示，两者吻合较好，各工况下相对误差均在 2.0%以内。在相同的条件下，将内置扭带吸热管的流动换热过程计算结果与 Manglik 等人[19]的经验公式进行对比，结果如图 8 所示，本文计算结果在文献经验公式误差允许范围内。进一步地，将本文的力学计算结果与相同条件下 Jesus 等人[20]计算结果对比，偏差仅为 0.39%。综上，验证了各计算过程模型的可靠性。



（a）吸热器出口温度　　（b）吸热器热效率

图 7 Solar Two 塔式电站计算结果与实验结果对比（2%误差棒）



（a）*Nu* 验证　　（b）*f* 验证

图 8 内置扭带吸热管模型验证（15%误差棒）

4 结果与讨论

本文对吸热器模型进行验证时采用硝酸盐工质，使其与参考文献[11]一致，而对内置扭带高温氯化盐吸热器性能进行研究分析时，采用高温氯化盐工质以研究新一代系统。

4.1 内置扭带优选

表 2 为采用正交实验法所计算的 9 种扭带结构，考察判断了扭带的宽度、长度、扭度以及放置位置对 *TEF* 评估指标的影响强弱。以 *TEF* 为评估指标，通过极差分析法确定了扭带几何参数和空间位置的最优方案为 $A_2B_1C_3D_2$，即结构 3，具体分析数据如表 2 所示。对于 *TEF* 而言，各因素中影响最大的是扭带宽度，影响最小的是扭带扭度。因此，在管内添加扭带时，为了获得更高的综合换热性能，应该选取扭带宽度较大的结构。

表 2 正交表 $L_9(3^4)$ 结果极差分析表（*TEF*）

序号	因素				*TEF*
	扭带扭度 *A*	扭带长度 *B*/ (m)	扭带宽度 *C*/ (mm)	扭带位置 *D*	
1	2.5	6.20	18.6	入口	1.1853
2	3.5	3.10	18.6	出口	1.3528
3	3.0	1.55	18.6	中间	1.4639
4	2.5	3.10	14.0	中间	0.9466
5	3.5	6.20	9.3	中间	0.9126
6	3.0	6.20	14.0	出口	0.8611
7	3.5	1.55	14.0	入口	1.0135
8	2.5	1.55	9.3	出口	0.9955
9	3.0	3.10	9.3	入口	0.9528
I_{1j}	3.1274	3.4728	2.8610	3.1515	
II_{2j}	3.2777	3.2522	2.8212	3.3231	
III_{3j}	3.2790	2.9590	4.0020	3.2095	
极差	0.1515	0.5138	1.1808	0.1715	
因素主次序	*C*→*B*→*D*→*A*				
最优方案	$A_2B_1C_3D_2$				

然后，本文对吸热管分别添加表 2 中基于正交实验法所设计的 9 种扭带结构后的力学性能进行了评估。如图 9 所示，相比于光滑管 104.38 MPa 的峰值热应力，结构 1 对峰值热应力降低效果最好，降幅为 53.27 MPa，结构 3 次之，峰值热应力降幅为 48.65 MPa。最终综合考虑 *TEF* 和热应力为评估指标，选取结构 3 进行后续内置扭带吸热器的分析。

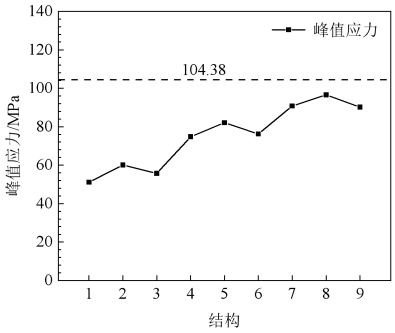


图 9 所研究各结构热应力评估结果

4.2 内置扭带吸热器流动换热性能分析对比

为获得具有代表性的高温氯化盐吸热器流动换热性能并降低计算量，本研究计算确定了典型日正午时刻下高温氯化盐吸热器的流动换热性能。图 10 是典型日正午吸热器各管排迎光面平均温度的变化情况，图中各序号对应管排可参见图 1。可以发现，各管排迎光面平均温度沿流路逐渐上升，且上升速率逐渐减小。吸热器迎光面平均温度在夏至日最低，而在冬至日最高；因此，吸热器热损失在冬至日正午最高，而在夏至日正午最低。加入优选扭带后，吸热器各管排的迎光面平均温度与无扭带情形相比均有下降。

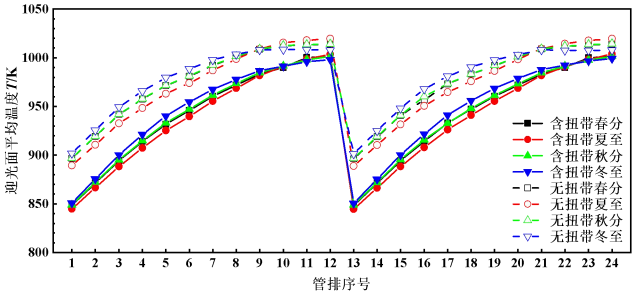


图 10 典型日正午吸热器各管排迎光面平均温度的变化情况

图 11 是典型日正午吸热器各管排迎光面温度均匀度的变化情况。由图可见，吸热器两个流路从入口到出口各管排的迎光面温度均匀度逐步上升。加入优选扭带后，吸热器各管排迎光面的峰值温度下降，在吸热器两流路的前 6 个管排（1~6 号与 13~18 号），吸热器各管排迎光面的温度均匀度与无扭带情形相比明显提高，而由于后续管排迎光面的温度均匀度相对较高，所以与前 6 个管排相比，加入扭带后温度均匀度的提升效果有限。

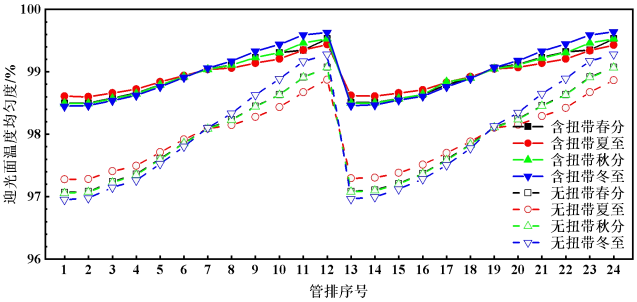


图 11 典型日正午吸热器各管排迎光面温度均匀度的变化情况

图 12 为典型日正午吸热器的整体能量损失情况。由图可知，在高温氯化盐塔式太阳能电站中，系统运行温度较高，因此热辐射热损失是吸热器热损失的主要构成部分。因此为了降低热损失，提高热效率，应把关注点放在降低热辐射热损失上。在典型日正午加入优选扭带后，吸热器壁面峰值温度和平均温度均有所下降，热损失降低，其中热辐射热损失大幅下降，达 1.6~2.2%，从而使得吸热器的热效率提高 2.1~2.3%。

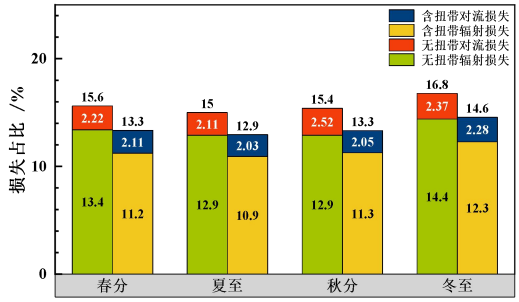
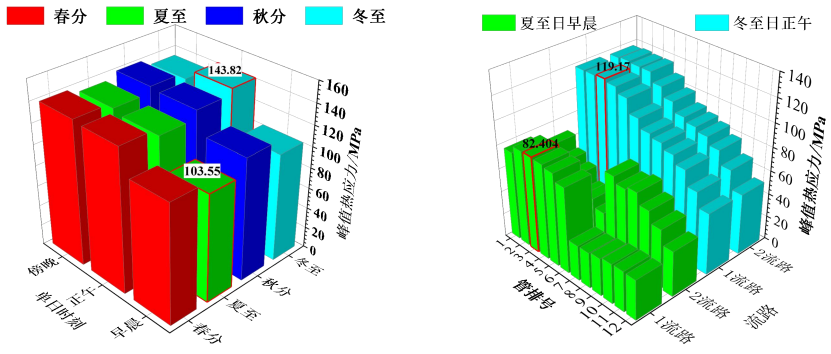


图 12 典型日正午吸热器整体能量损失情况

4.3 内置扭带吸热器力学性能分析对比

为获得具有代表性的高温氯化盐吸热器峰值应力数值并降低计算量，本研究首先采用吸热器简化模型计算确定了典型日、典型时刻下吸热器峰值热应力最值所在的具体时刻，然后采用吸热器各管排模型进一步计算确定了吸热器峰值热应力最值所在的具体空间位置，以此确定了无扭带时吸热器的峰值热应力范围。塔式电站运行时要同时满足太阳高度角≥15°和太阳直接辐射强度(*DNI*)≥150 W/m^2 的条件，每个典型日早晨和傍晚的具体取值由此进行判定，各典型日正午时刻为 12 时。图 13 为吸热器典型日峰值热应力的最值情况。如图 13(a)所示，通过简化模型计算发现，典型日、典型时刻下，无扭带吸热器峰值热应力最小值在夏至日早晨，最大值在冬至日正午。进一步地在夏至日早晨和冬至日正午采用各管排模型计算确定了无扭带吸热器峰值热应力所在的具体空间位置。由图 13(b)可知，吸热器峰值热应力均位于 1 流路的第 3 管排，夏至日早晨峰值热应力为 82.40 MPa，冬至日正午峰值热应力为 119.17 MPa。

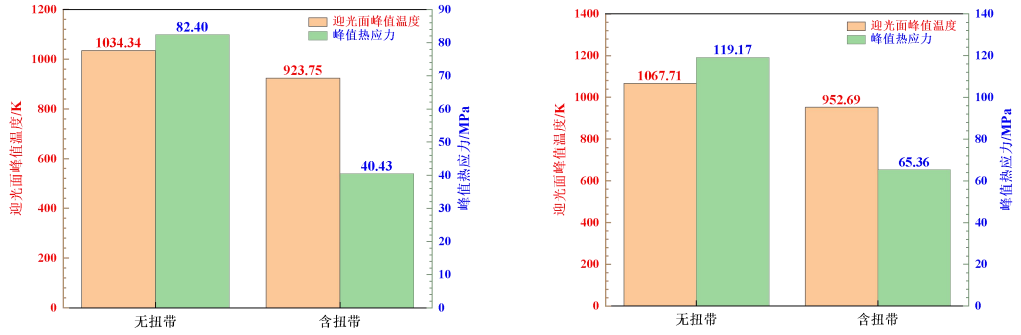


（a）具体时刻确定　　（b）空间位置确定

图 13 典型日、典型时刻无扭带吸热器峰值热应力最值确定

图 14 是在上述分析所确定的夏至日早晨和冬至日正午时刻加入优选扭带前后吸热器峰值应力所在管的峰值温度和热应力的对比情况。可以看出，夏至日早晨时刻，添加

优选扭带后吸热器峰值应力所在管的峰值温度从 1034.34 降低至 923.75 K，管壁峰值热应力从 82.40 MPa 降至 40.43 MPa，降低了近 42 MPa。冬至日正午时刻，添加优选扭带后吸热器峰值应力所在管的峰值温度从 1067.71 K 降低至 952.69 K，管壁峰值热应力从 119.17 MPa 降至 65.36 MPa，降低近 55 MPa。可以看到，使用优选扭带后，吸热器管内流动换热性能增强，管壁面峰值热应力下降，提高了吸热器的安全性。



(a) 夏至日　　(b) 冬至日

图 14 吸热器峰值应力所在管的峰值温度和峰值热应力情况

5 结论

针对高温氯化盐塔式吸热器集热传热过程，本文提出了一种采用内置扭带均化管壁温度与热应力的优化调控方案。本研究首先基于所构建高温氯化盐塔式吸热器光-热-力耦合模型、正交实验设计和极差分析优选了内置扭带，然后分析了添加优选内置扭带对吸热器光-热-力综合性能的影响，结论如下：

（1）扭带宽度是影响内置扭带吸热管流动换热性能的主要因素。综合考虑，扭度 3.0、长度 1.55m、宽度 18.6mm、管内中间位置的扭带结构更适合本文所研究的吸热器。

（2）吸热器管内添加优选的扭带结构后，吸热器管壁的峰值温度和平均温度降低，吸热器管壁的温度更均匀，吸热器热辐射热损失降低，吸热器的热效率提高了 2.1~2.3%。

（3）添加扭带可以有效地均匀化吸热器迎光面的温度分布，本文优选的扭带可使吸热器管壁的温度梯度有效降低，在本文所研究工况下吸热管峰值温度降低了 110 K 以上，吸热器峰值热应力降低了 42~55 MPa，有效地提升了吸热器的应力安全性。

参考文献

[1] Wang WQ, Qiu Y, Li MJ, et al. Optical efficiency improvement of solar power tower by employing and optimizing novel fin-like receivers[J]. Energy Conversion and Management, 2019, 184: 219-234.

[2] Qiu Y, He YL, Li PW, et al. A comprehensive model for analysis of real-time optical performance of a solar power tower with a multi-tube cavity receiver[J]. Applied Energy, 2017, 185: 589-603.

[3] Zhou R, Ling X, Peng H, et al. Thermal characteristics of the combined flat plate heat receiver in solar power tower plant[J]. Energy, 2018, 165: 275-289.

[4] Liu X, Guo J, Han Z, et al. Studies on thermal-hydraulic characteristics of supercritical CO_2 flows with non-uniform heat flux in a tubular solar receiver [J]. Renewable Energy, 2022, 201: 291-304.

[5] He YL, Wang K, Qiu Y, et al. Review of the solar flux distribution in concentrated solar power:

Non-uniform features, challenges, and solutions[J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 149: 448-474.

[6] Liu Y, Ye WJ, Li YH, et al. Numerical analysis of inserts configurations in a cavity receiver tube of a solar power tower plant with non-uniform heat flux[J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 140: 1-12.

[7] Smith EA, Pongjet P. Performance assessment in a heat exchanger tube with alternate clockwise and counter-clockwise twisted-tape inserts[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010, 53: 1364-1372.

[8] Sundar LS, Singh MK, Punnaiah V, et al. Experimental investigation of Al_2O_3/water nanofluids on the effectiveness of solar flat-plate collectors with and without twisted tape inserts[J]. Renewable Energy, 2018, 119: 820-833.

[9] Sundar LS, Misganaw AH, Singh MK, et al. Efficiency, energy and economic analysis of twisted tape inserts in a thermosyphon solar flat plate collector with Cu nanofluids[J]. Renewable Energy Focus, 2020, 35: 10-31.

[10] Yang ZM, Liu XY, Cao XX, et al. Numerical analysis of FLiBe laminar convective heat transfer characteristics in tubes fitted with coaxial cross twisted tape inserts[J]. Frontiers in Energy Research, 2020, 8(178): 432-447.

[11] Pacheco JE, Bradshaw RW, Dawson DB, et al. Final test and evaluation results from the Solar Two project[R]. No. SAND2002-0120. Albuquerque, NM: Sandia National Laboratories, 2002.

[12] 张伟捷，吴金顺，魏一然，等．基于正交实验法的建筑冷负荷影响因素分析［J］．暖通空调，2006，36(11)：77-80．

[13] 刘瑞江，张业旺，闻崇炜，等．正交试验设计和分析方法研究［J］．实验技术与管理，2010，27(09)：52-55．

[14] He YL, Cheng ZD, Cui FQ, et al. Numerical investigations on a pressurized volumetric receiver: Solar concentrating and collecting modelling[J]. Renew. Energy, 2012, 44:368-379.

[15] Wang WQ, Qiu Y, Li MJ, et al. Coupled optical and thermal performance of a fin-like molten salt receiver for the next-generation solar power tower[J]. Applied Energy, 2020, 272: 1-14.

[16] Rahimi M, Shabanian SR, Alsairafi AA. Experimental and CFD studies on heat transfer and friction factor characteristics of a tube equipped with modified twisted tape inserts[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2009, 48(3): 762-770.

[17] Rodríguez-Sánchez MR, Soria-Verdugo A, Almendros-IbánEz JA, et al. Thermal design guidelines of solar power towers[J]. Applied Thermal Engineering, 2014, 63: 428-438.

[18] Antony AL, Shetty SP, Madhwesh N, et al. Influence of stepped cylindrical turbulence generators on the thermal enhancement factor of a flat plate solar air heater[J]. Solar Energy, 2020, 198: 295-310.

[19] Manglik RM, Bergles AE. Heat transfer and pressure drop correlations for twisted-tape inserts in isothermal tubes[J]. Journal of Heat Transfer, 1993, 115(4): 890-896.

[20] Jesus O, Khivsara S, Christian J, et al. Coupled modeling of a directly heated tubular solar receiver for supercritical carbon dioxide Brayton cycle: Structural and creep-fatigue evaluation[J]. Applied Thermal Engineering, 2016, 109: 979-987.

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：233172

基于分解进化算法的斯特林制冷机热经济性分析及多目标优化研究

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：斯特林制冷机在低温领域应用十分广泛，其理想工作过程是由两个等温和两个等容过程组成的斯特林逆循环。然而，由于内部与外部的不可逆因素，斯特林制冷机内的工质与外界换热过程中难以维持等温状态。本文运用有限时间热力学方法构建了一种斯特林制冷机的多变模型以获得更精确的热力性能，主要假设工质的膨胀与压缩过程为多变过程。该模型考虑了工质与外界热源间的有限速率传热、系统的漏热损失及回热器的回热损失。基于该模型，研究了温度比、体积比和传热系数等参数对斯特林制冷机性能的影响并得到了不同参数条件下制冷机的最佳热经济学性能。以输入功率、制冷率和热经济学函数为目标函数，采用了一种基于分解的多目标进化算法来优化斯特林制冷机的性能，并通过与遗传算法和粒子群算法计算结果的比较验证了优化方法的准确性，最后选用 TOPSIS 决策方法在三维帕累托前沿上得到了最优解。

关键词：斯特林制冷机；多变过程；有限时间热力学；热经济学函数；多目标进化算法

0 前言

随着现代科学技术、医疗产业、生物工程和半导体工业的快速发展，对小型低温制冷技术的需求日益迫切，同时对制冷机的结构紧凑性、高效性、便携性和可靠性的要求越来越高。我国低温制冷行业市场广阔，增长迅速，基于环保节能措施的响应，我国对于制冷剂的使用标准提出了越来越严格的要求，这导致传统复叠式制冷系统的应用受到了较大限制。相较于传统制冷机，斯特林制冷机采用斯特林逆循环的工作方式，具有制冷效率高，降温速度快、制冷工质绿色环保、可靠性高、系统简单、寿命长、制冷温区广且灵活易调控等优点，已逐渐成为低温冰箱的新型优势冷源，且在宇宙空间探索、低温超导和红外探测等领域得到一定应用。

斯特林发动机最早于 1816 年由英国人罗伯特·斯特林发明，在理想运行状态下由两个等温过程和两个等容过程构成，斯特林制冷机是利用斯特林逆循环依靠外界输入功率来实现制冷的装置，输入功率、制冷率和制冷系数是评价制冷机性能的重要指标，如何以更小的输入功率为代价获得更高的制冷率成为了提高斯特林制冷机性能的关键。随着斯特林制冷机在各种工程领域的应用日益广泛，对斯特林制冷机循环的热力理论研究也不断发展。Curzon 和 Ahlborn[1]最先提出了有限时间热力学方法并研究得到了内可逆卡诺热机在最大输出功率下的热效率。有限时间热力学考虑了有限时间尺度内的热量传递和交换，对于热力系统的研究能够获得有效的功率输出，是经典热力学的延伸和推广。近年来，利用有限时间热力学方法研究和评价各类热机和制冷系统取得了很大的进展，这为斯特林制冷机的参数设计和优化提供了重要依据。Leff 和 Teeters[2]指出了直接的 Curzon-Ahlborn 测定不包括逆向的卡诺循环。Blanchard[3]运用拉格朗日乘数法得到了在最小输入功率下运行的内可逆卡诺热泵在特定热负荷下的性能系数。

很多学者利用有限时间热力学方法研究了受一系列不可逆因素影响的斯特林制冷循环

* 基金项目：国家自然科学基金重点项目（No.51736004）

的性能，并获得了一些重要结论[4-9]。Chen[5]考虑了斯特林制冷机系统的有限速率传热、回热损失及漏热损失等主要不可逆因素，分析了功率输入和冷却系数随冷却率的变化关系并得到了最大制冷率和制冷系数的表达式。

除了提高性能系数，系统经济收益的提高也是设计制冷机需要考虑的重要因素。为此，很多学者在研究各类制冷机热力性能的同时都考虑了系统的热经济学性能[10-13]。考虑制冷机的尺寸限制和热经济性，Erbay 和 Yavuz[6]根据循环的多变模型得到了斯特林制冷机的最大冷却密度及对应的临界体积压缩比。Tyagi[8]等对一个不可逆斯特林制冷循环进行了热经济学优化分析并研究了各种参数下的制冷机最佳热经济性能，发现回热效率对系统性能的影响大于其他参数。

在实际斯特林发动机的性能研究中，各性能评价指标往往不按照同一趋势变化。因此，如何折衷处理各目标函数关系以获得系统最佳性能成为了斯特林制冷机设计和优化中的难点。针对这一问题，近些年很多学者基于智能优化算法对热力系统的中的重要目标函数进行了多目标优化并获得了一系列最优解的集合，称之为帕累托前沿。帕累托前沿上解的个数与算法参数设置相关且一般数量较多，对于实际问题，必须使用决策方法筛选出最终的最优解。进化算法是一类元启发式算法的统称，包括遗传算法、粒子群算法、蚁群算法等。这类算法借鉴大自然中生物的进化、选择与淘汰机制，通常先产生一个族群，然后不断进化与淘汰，最终产生能够在严酷的自然环境中生存的优异个体。它具有自组织、自适应的特性，常被用来处理传统优化算法难以解决的问题。Ahmadi 等[14]采用 NSGA-II 算法对不可逆斯特林制冷机循环模型开展了多目标优化，并通过三种决策方法得到了最优解。Dai 等[15]使用了一种基于拥挤距离的粒子群算法对斯特林热机循环开展了三目标优化。分解是传统多目标优化的基本策略，Zhang 等[16]提出了一种基于分解的多目标进化算法(MOEA/D)。实验结果表明，该算法使用目标归一化可以处理不同规模的目标，生成一组非常均匀分布的解决方案，且计算复杂度低于非支配遗传算法。

在近年来斯特林制冷机循环的研究中，循环的压缩和膨胀过程主要基于等温假设进行分析。然而，由于系统内部与外部的不可逆因素，斯特林制冷机内的工质与外界换热过程中难以维持等温状态。因此，本文基于有限时间热力学方法提出了一种斯特林制冷机的多变模型，考虑了工质与外界间的有限温差换热、回热器的回热损失以及高温热源流向低温热源的漏热损失。考虑到制冷机的经济性，本文引入了热经济学函数，基于多变模型研究了温度比、传热系数等参数对斯特林制冷机综合性能的影响并获得了各参数条件下的最佳热经济学性能。此外，本文提出了一种基于分解的多目标进化算法，以输入功率、制冷率和热经济学函数为目标对斯特林制冷机模型进行了多目标优化，并分别与经过遗传算法和粒子群算法优化得到的结果进行了比较，验证了优化方法的准确性，最后通过 TOPSIS 决策方法在三维帕累托前沿上得到了最优解。

1 模型概述

斯特林制冷机的原理是利用斯特林循环的逆过程来实现制冷，其结构一般由压缩气缸、膨胀气缸、推移活塞、回热器和冷却器等部件构成，如图 1(c)所示。理想的斯特林循环由两个等温过程和等容过程构成，反映在图 1(a)循环温熵图所示的 1-2-3-4 过程。考虑到工质与外界的有限温差换热及回热器的回热损失等不可逆因素，工质在回热过程结束后无法到达理想状态点 3 和 1，而是状态点 3′和 1′。为了更加准确地模拟工质与外界的换热过程及不完全回热过程，本文假设工质在冷热端的换热为多变过程，其换热满足牛顿冷却定律，并考虑工质为理想气体。因此，如图 1(a)、(b)的斯特林制冷机多变模型所示，1′-2 过程为多变膨胀过程，循环工质被推移活塞进行膨胀，并通过加热器从冷却对象吸收热量，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，温度 T_2 从升高到 $T_{3'}$；3′-4 为多变

压缩过程，通过外界输入功，工质被压缩活塞压缩，压缩热经冷却器释放到外界环境，工质温度从 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，其温度从 T_4 降低到 $T_{1'}$。制冷循环各过程都是在有限时间尺度内进行的，为了分析各过程的不可逆性和能量转换关系，下面对斯特林制冷机的多变模型开展有限时间热力学分析，以获得制冷机热力性能和热经济学性能的数学表达。

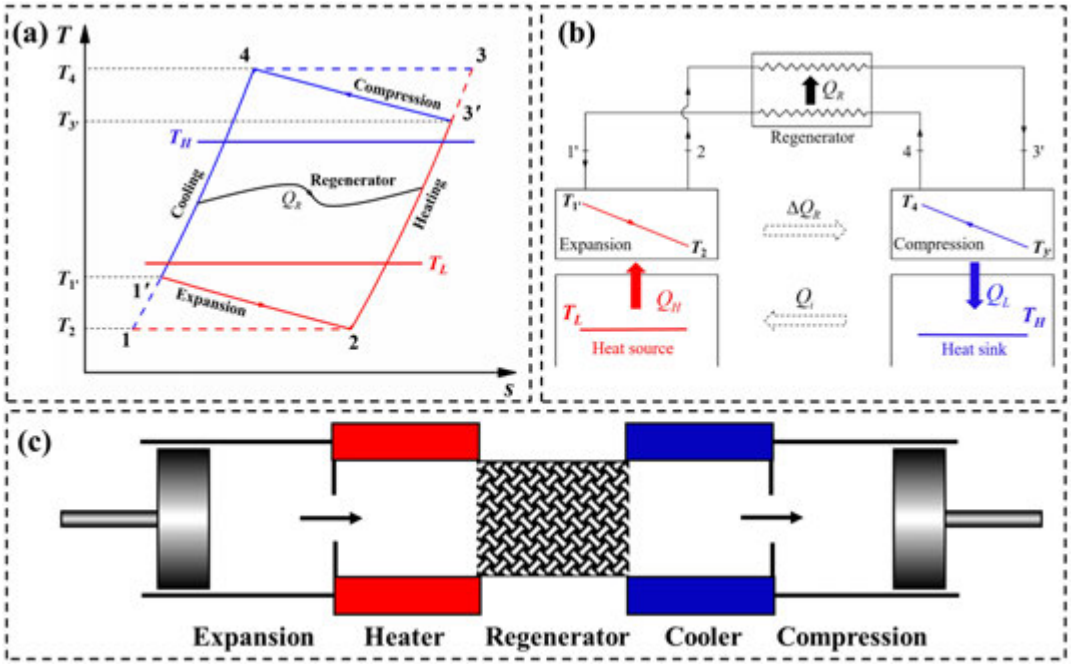


图 1 斯特林制冷机多变模型：(a) 循环模型；(b) 系统能量转换关系；(c) 结构示意图

2 有限时间热力学分析

如图 1 所示，本文假设过程 1′-2 和 3′-4 为多变过程，多变过程的指数必须在极限范围以内，满足 n_1>1 和 n_2>1。假设回热器的效率为ε_R，则ε_R 满足以下关系：

$$\varepsilon_R = \frac{T_{3'} - T_2}{T_4 - T_2} = \frac{T_4 - T_{1'}}{T_4 - T_2} \tag{1}$$

为方便表示循环各点温度，分别定义 τ 、λ 为斯特林制冷循环工质的热端最高温度和冷端最低温度的比值及体积压缩比，表示如下：

$$\tau = \frac{T_4}{T_2} \tag{2}$$

$$\lambda = \frac{V_2}{V_{1'}} = \frac{V_{3'}}{V_4} \tag{3}$$

则循环各节点的温度关系可以表示为：

$$T_{1'} = T_4 - \varepsilon_R \left(T_4 - T_2\right) = T_2 \left[\tau - \varepsilon_R \left(\tau - 1\right)\right] \tag{4}$$

$$T_{3'} = T_2 + \varepsilon_R \left(T_4 - T_2\right) = T_2 \left[1 + \varepsilon_R \left(\tau - 1\right)\right] \tag{5}$$

$$T_4 = \tau T_2 \tag{6}$$

对于 1'-2 的吸热膨胀过程，工质从低温热源吸收热量，其温度从 $T_{1'}$变化到 T_2，其变化过程为多变过程，多变指数为 n_1。低温热源温度为 T_L，该过程的各热力学参数满足以下关系：

$$pv^{n_1} = c_1 \tag{7}$$

$$T_{1'}v_{1'}^{n_1-1} = c_1 / R_g \tag{8}$$

$$T_2 v_2^{n_1-1} = c_1 / R_g \tag{9}$$

联立方程(7) -(9)可得多变指数 n_1 和参数 c_1 的表达如下：

$$n_1 = \frac{\ln\left[\tau - (\tau - 1)\varepsilon_R\right]}{\ln \lambda} + 1 \tag{10}$$

$$c_1 = R_g T_2 v_2^{n_1-1} \tag{11}$$

同理，对于 3'-4 的压缩放热过程，在外界输入功的驱使下，工质向高温热源释放热量，其温度从 $T_{3'}$变化到 T_4，其变化过程为多变过程，多变指数为 n_2。热源温度为 T_H，该过程的各热力学参数满足以下关系：

$$pv^{n_2} = c_2 \tag{12}$$

$$T_{3'}v_{3'}^{n_2-1} = c_2 / R_g \tag{13}$$

$$T_4 v_4^{n_2-1} = c_2 / R_g \tag{14}$$

联立方程(12) -(14)可得多变指数 n_2 和参数 c_2 的表达如下：

$$n_2 = \frac{\ln\left[\tau / (1 - \varepsilon_R + \tau\varepsilon_R)\right]}{\ln \lambda} + 1 \tag{15}$$

$$c_2 = R_g T_4 v_4^{n_2-1} \tag{16}$$

根据功的定义，多变过程过程功的微分形式可以表示为

$$\delta W = pdV = -\frac{mR_g}{n-1}dT \tag{17}$$

根据热力学第一定律，多变过程的热量变化可以表示为

$$\delta Q = \delta W + mc_V dT = \frac{k-n}{1-n} mc_V dT \tag{18}$$

其中 R_g 为工质的气体常数，c_V 为工质的定容比热容，$k = c_p/c_V$, 为工质的热容比。根据多变过程的始末状态，对上式积分可得，工质在多变过程 1'-2 从低温热源吸收的热量和在多变过程 3'-4 向高温热源释放的热量分别为

$$Q_l = \frac{k-n_1}{n_1-1} mc_V \left(1-\varepsilon_R\right)\left(T_4 - T_2\right) \tag{19}$$

$$Q_h = \frac{k-n_2}{n_2-1} mc_V \left(1-\varepsilon_R\right)\left(T_4 - T_2\right) \tag{20}$$

根据牛顿冷却定律，工质吸热和放热的速率和工质与外部热源间的温差成正比。工质在多变过程 1′-2 和 3′-4 中的传热关系式分别可以表示为

$$K_L\left(T_L - T\right)dt_L = m\frac{k-n_1}{1-n_1}c_V dT \tag{21}$$

$$K_H\left(T_H - T\right)dt_H = m\frac{k-n_2}{1-n_2}c_V dT \tag{22}$$

其中 m 为工质质量，$K_H = U_H A_H$、$K_L = U_L A_L$ 分别为工质与高、低温热源间的传热系数，表示工质与加热器和冷却器端对流换热系数和换热面积的乘积，t_H、t_L 分别为多变过程 3′-4 和 1′-2 的持续时间。

对方程(21)、(22)进行积分求解，得到多变过程吸热过程 1′-2 和多变过程放热过程 3′-4 的时间分别为

$$t_L = \frac{m(k-n_1)}{K_L(1-n_1)} c_V \ln\left(\frac{T_{1'} - T_L}{T_2 - T_L}\right) \tag{23}$$

$$t_H = \frac{m(k-n_2)}{K_H(1-n_2)} c_V \ln\left(\frac{T_{3'} - T_H}{T_4 - T_H}\right) \tag{24}$$

由于回热过程也是在有限温差换热下进行的，回热时间不可忽略。假设回热时间与回热过程最初状态和最终状态的温差呈正比，回热过程的总时间可以表示为

$$t_R = t_{RH} + t_{RL} = 2\alpha(T_4 - T_2)\varepsilon_R \tag{25}$$

其中 α 表示回热时间与回热温差间的比例常数，故斯特林制冷机循环时间 t_{cycle} 可以表示为

$$t_{cycle} = t_L + t_H + t_R \tag{26}$$

高、低温热源间存在温差，部分热量会不可避免从高温端流向低温端。为了描述高温热源到低温热源的漏热损失，设每个循环周期内热损失的热量表示为

$$Q_0 = K_0(T_H - T_L)t_{cycle} \tag{27}$$

其中 K_0 代表高、低温热源间的漏热损失系数。因此，考虑各种不可逆损失后，制冷机工质从低温热源吸收和向高温热源释放的净热量分别为

$$Q_L = Q_l - Q_0 \tag{28}$$

$$Q_H = Q_h - Q_0 \tag{29}$$

根据工质与外界换热量的表达式，循环输入功 W 可以表示为

$$W = Q_H - Q_L = Q_h - Q_l \tag{30}$$

功率输入、冷负荷和制冷系数是斯特林制冷机的重要性能指标，联立式(26)-(30)可得：

$$\begin{aligned} P &= \frac{W}{t_{cycle}} = \frac{Q_h - Q_l}{t_H + t_L + t_R} \\ &= \frac{K_H K_L T_2 (y-x)(1-\varepsilon_R)(\tau-1)}{K_L y \ln\left(\frac{\tau T_2 - T_H}{T_2(1+\varphi) - T_H}\right) - K_H x \ln\left(\frac{T_2(\tau-\varphi) - T_L}{T_2 - T_L}\right) + 2\alpha\varphi\phi T_2} \end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned} R_L &= \frac{Q_L}{t_{cycle}} = \frac{Q_l - Q_0}{t_H + t_L + t_R} \\ &= \frac{K_H K_L x T_2 (1-\varepsilon_R)(\tau-1) - K_0(T_H - T_L)\phi t_{cycle}}{K_L y \ln\left(\frac{\tau T_2 - T_H}{T_2(1+\varphi) - T_H}\right) - K_H x \ln\left(\frac{T_2(\tau-\varphi) - T_L}{T_2 - T_L}\right) + 2\alpha\varphi\phi T_2} \end{aligned} \tag{32}$$

$$COP=\frac{R_L}{P}=\frac{Q_l-Q_0}{Q_h-Q_l}=\frac{K_HK_LxT_2\left(1-\varepsilon_R\right)\left(\tau-1\right)-K_0\left(T_H-T_L\right)\phi t_{cycle}}{K_HK_LT_2\left(y-x\right)\left(1-\varepsilon_R\right)\left(\tau-1\right)} \tag{33}$$

其中 $x=\frac{k-n_1}{n_1-1}$， $y=\frac{k-n_2}{n_2-1}$， $\varphi=\varepsilon_R\left(\tau-1\right)$， $\phi=\frac{K_HK_L}{mc_V}$。

建设一个制冷工厂，总是希望少投入、高产出，以获得最佳的经济效益。为此，有研究者提出了热经济学函数来优化制冷机的性能，其定义为每单位成本的制冷率：

$$F=\frac{R_L}{C_i+C_e} \tag{34}$$

式中 C_i 和 C_e 分别表示每单位时间的投资成本和燃料消耗成本。这些费用成本对于不同的工厂是不同的，但对于一个具体的制冷工厂可作为一个确定的参数来处理。一般来说，制冷工厂的投资成本主要取决于热交换器、压缩和膨胀装置的成本。热交换器成本被认为与总传热面积成正比，压缩和膨胀装置的成本与压缩容量即所需的输入功率成正比。燃料消耗成本与输入功率成正比。因此，单位时间投资成本和燃料成本分别表示为

$$C_i=a\left(A_H+A_L+A_R\right)+b_2P \tag{35}$$

$$C_e=b_3P \tag{36}$$

其中 a、b_2、b_3 为比例系数，A_H、A_L、A_R 分别为加热器、冷却器和回热器的传热面积。根据换热器理论，回热效率与回热器的传热单元数，回热单元数和回热器有效传热面积分别有如下关系：

$$\varepsilon_R=\frac{N_R}{1+N_R} \tag{37}$$

$$N_R=\frac{U_RA_R}{C_f} \tag{38}$$

其中 U_R 为工质与回热器间的对流换热系数，C_f 为工质的热容。联立以上两式可得回热器传热面积与回热效率关系如下：

$$A_R=\frac{C_V\varepsilon_R}{U_R\left(1-\varepsilon_R\right)} \tag{39}$$

将式(35)、(36)代入式(34)可得热经济学函数的无量纲表达形式：

$$bF=\frac{R_L}{\xi\left[\frac{K_H}{U_H}+\frac{K_L}{U_L}+\frac{C_V\varepsilon_R}{U_R\left(1-\varepsilon_R\right)}\right]+P} \tag{40}$$

其中 $b=b_2+b_3$， $\xi=a/b$，本文将 bF 作为热经济学目标函数进行分析和优化。

3 结果分析

为了对斯特林制冷机多变模型的性能进行数值模拟分析，本文选取氦气作为制冷机循环工质，将本文模型与经典的等温模型进行了对比，研究了循环温度比、体积压缩比、传热系数等关键热力参数对制冷机性能的影响。斯特林制冷机的主要参数取值如表 1 所示，其中高温端热源温度为 280K，低温端热源温度为 240K。

表 1 斯特林制冷机模型主要参数

模型参数	符号	数值	单位
工质质量	m	4	g
工质等容比热容	c_V	3.123	kJ/(kg·K)
理想气体常数	R_g	2.077	kJ/(kg·K)
高温热源温度	T_H	280	K
低温热源温度	T_L	240	K
循环冷端最低温度	T_2	200	K
高温端传热系数	K_H	500	W/K
低温端传热系数	K_L	500	W/K
温度比	τ	1.6	-
体积比	λ	2.0	-
回热效率	ε_R	0.8	-
热经济学参数	ξ	0.5	-
回热比例系数	α	1×10^{-4}	s/K
热漏损失系数	K_0	12	W/K

3.1 模型对比

根据表 1 的参数经过模拟计算得到了模型的温熵关系曲线和压力-体积关系曲线，分别如图 2 的(a)、(b)所示。如图所示，黑色虚线表示斯特林制冷机的等温模型曲线，黑色实线表示本文构建的多变模型曲线。不同于经典的等温等容循环，在本文的模型中，工质经过膨胀腔从低温热源吸收热量是一个变温过程，其温度按照某个确定的多变指数进行变化。同理，在外界输入功的驱动下，工质经过压缩腔压缩放热的过程也是一个多变过程，其温度也是按某个多变指数变化。

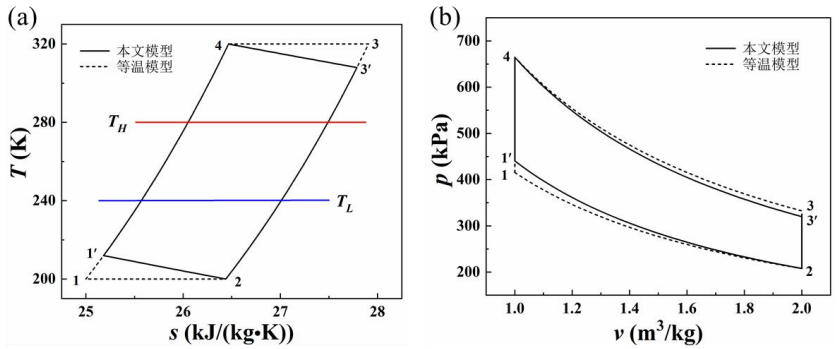


图 2 斯特林制冷机模型对比：(a) *T-s* 图；(b) *p-v* 图

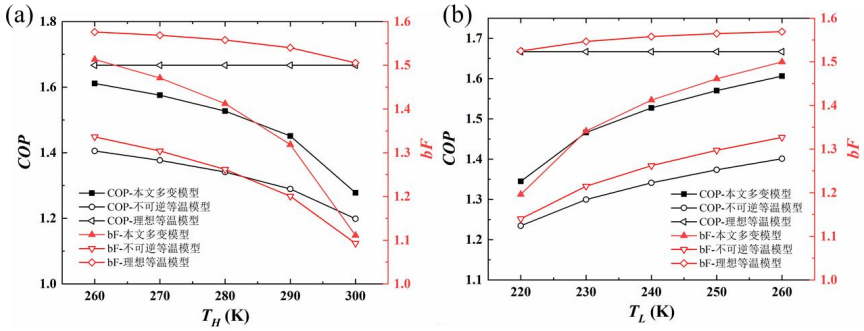


图 3 斯特林制冷机模型性能对比：(a) 高温热源温度变化；(b) 低温热源温度变化

为了评估本文提出的斯特林制冷机多变模型的性能特性，我们计算了相同工况下的不可逆等温模型和理想等温模型的性能系数，在本文研究的热源温度范围内进行了对比，结果如

图 3 所示。从图中可以看出，相同参数条件下，多变模型的制冷系数 *COP* 和热经济学函数 *bF* 高于考虑同样不可逆因素的等温模型，而低于只考虑外部温差的内可逆等温模型。随着热源温度的变化，多变模型和等温模型在较低的高温热源温度和较高的低温热源温度时都具有更好的性能系数，且都低于理想的内可逆循环模型。

3.2 参数分析

下面通过 2-D 和 3-D 响应面图，分析了温度比、体积压缩比、回热效率等重要设计参数对斯特林制冷机性能的交互影响。图 4 显示了循环温度比 τ和回热效率 ε_R 对输入功率 P、制冷率 R_L、制冷系数 *COP* 和热经济学函数 *bF* 的交互影响。由图可知，随着温度比的增加，输入功率接近线性增大，制冷率先增大后接近平稳，制冷系数和热经济学函数均随之减小。图 5 绘制了不同参数条件下循环 *T-s* 图的对比情况，如图 5(a)所示，温度比的增加显著提高了循环高温端的温度水平，而低温端温度水平增大不明显。因此需要更多的外界功率输入维持高、低温端更高的温度水平。由于冷端温度水平的上升，工质从低温侧吸收的热量减少，即循环制冷量减小，而循环周期由于温度水平的提高而被缩短，两种因素互相矛盾，导致了制冷率的变化存在一个峰值。根据制冷系数的表达式，随着温度比的增加，工质制冷量减小、而循环输入功增加，使得制冷系数不断减小。同理，温度比增加导致了因输入功率增加导致的压缩容量成本增大，使得热经济学函数不断减小。

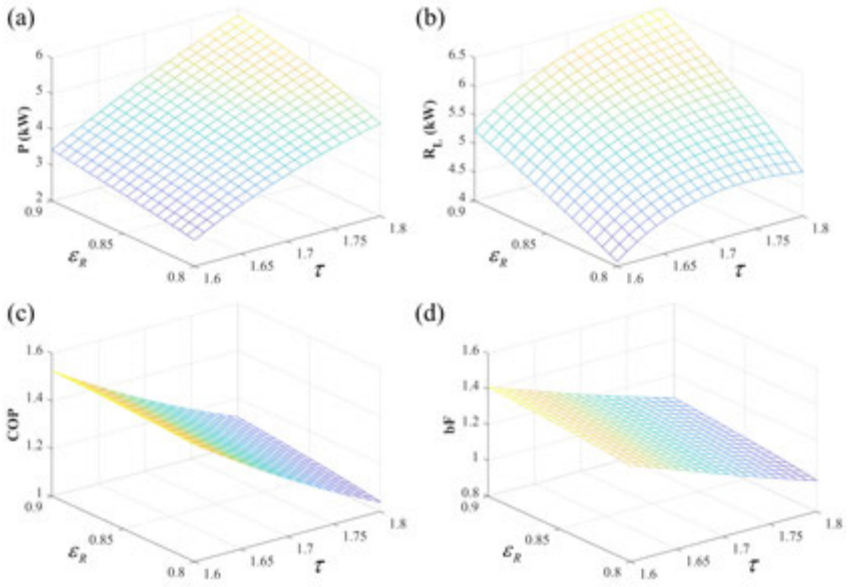


图 4 温度比和回热效率对制冷机性能交互影响：(a)输入功率；(b)制冷率；(c)制冷系数；(d)热经济学函数

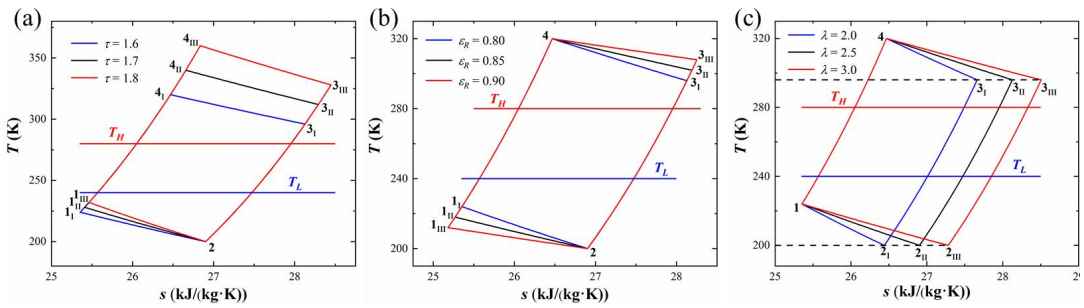


图 5 不同温度比、回热效率、压缩比下循环 *T-s* 图的对比：(a)温度比；(b)回热效率；(c)压缩比

随之回热效率的增加，制冷机的输入功率、制冷率、制冷系数和热经济学函数都呈增大趋势。如图 5(b)所示，随之回热效率的增加，多变指数 n_1、n_2 都不断减小，多变过程越来越

接近等温过程。随之回热损失的减小，工质从低温端吸收的热量和向高温端释放的热量都随之增大，循环周期随着传热温差的增大而减小，这导致了输入功率和制冷率的不断增大。由图 5(a)(b)对比可见，相同温度比的条件下，随之回热效率的增加，制冷率的上升趋势明显大于输入功率的上升趋势，导致了制冷系数和热经济学函数的增加。由图 5(b)所示，回热效率越大，制冷率随着温度比的增大趋势越来越明显，即二者之间的交互作用更强。

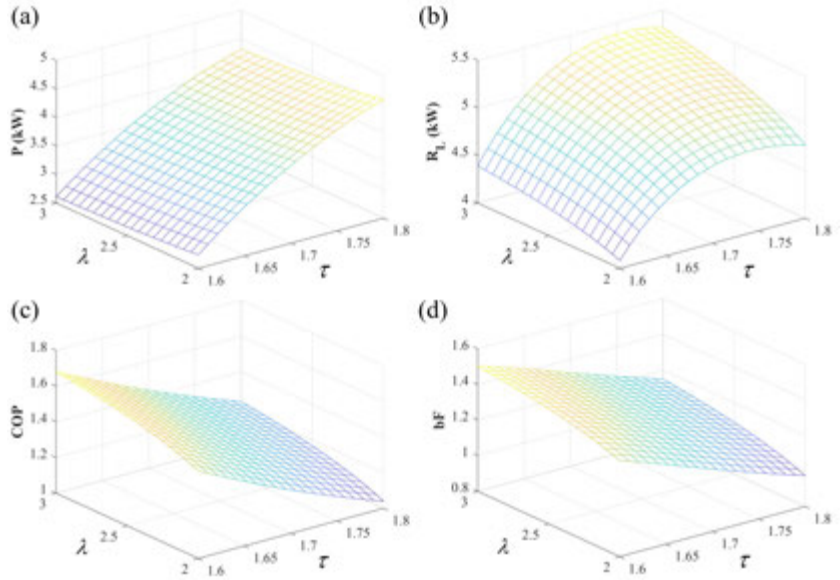


图 6 温度比、压缩比对制冷机性能的交互影响：(a)输入功率；(b)制冷率；(c)制冷系数；(d)热经济学函数

图 6 展示了温度比τ、压缩比λ对输入功率 P、制冷率 R_L、制冷系数 COP 和热经济学函数 bF 的交互影响。当工质的体积压缩比增大时，输入功率随之减小，制冷率、制冷系数增大，其变化趋势均不断减缓。图 5(c)绘制了不同体积比下的循环 T-s 图的对比，由图可见，随着压缩比的增加，多变过程的多变指数减小，循环 T-s 曲线的范围明显增大，导致工质的吸热量和放热量都有较大提升，循环的周期也随之增大。体积压缩比的增大意味着压缩过程需要更多的输入功，也产生了更多的制冷量，但制冷量的增加幅度大于输入功，在循环周期增大的情况下，导致了输入功率呈下降趋势而制冷率呈上升趋势。制冷率的增加和输入功率的下降明显有利于制冷机性能的提升，所以制冷系数和热经济学函数都随着压缩比的增大而增大。对于温度比的变化，制冷机性能变化趋势和图 5 较为一致。

根据图 5 和图 6 的参数交互分析可得，在制冷机条件允许的范围内，适当减小高低温端的温度比、提高回热效率和体积压缩比有利于获得更好的制冷系数和热经济学性能。

图 7 为斯特林制冷机在不同冷、热端传热系数条件下的输入功率和制冷率，从图 7(a)-(c)可以看到，输入功率随着热端传热系数和冷端传热系数的增加具有相同的变化趋势，都是随着传热系数的增加而增加，增长趋势逐渐减慢。由于循环的温度参数保持不变，制冷机的输入功随着传热系数的变化保持稳定。热端传热系数的增加会促进工质与高温热源间的换热，冷端传热系数的增加会促进工质与低温热源间的换热，换热效果的提升有利于缩短循环的周期。循环周期包括工质的换热时间和回热器的回热时间，随着热端或冷端传热系数的不断增大，工质的压缩、膨胀时间缩短到很小之后，循环周期变化很小。因此，输入功率会随着冷、热端传热系数的增加均呈现先增加后逐渐平稳的趋势。同理，如图 7(d)-(f)所示，制冷率也随着冷、热端传热系数的变化呈现先增大后逐渐平稳的变化趋势，但可以看出，传热系数的增加对制冷率的影响效果更为显著。

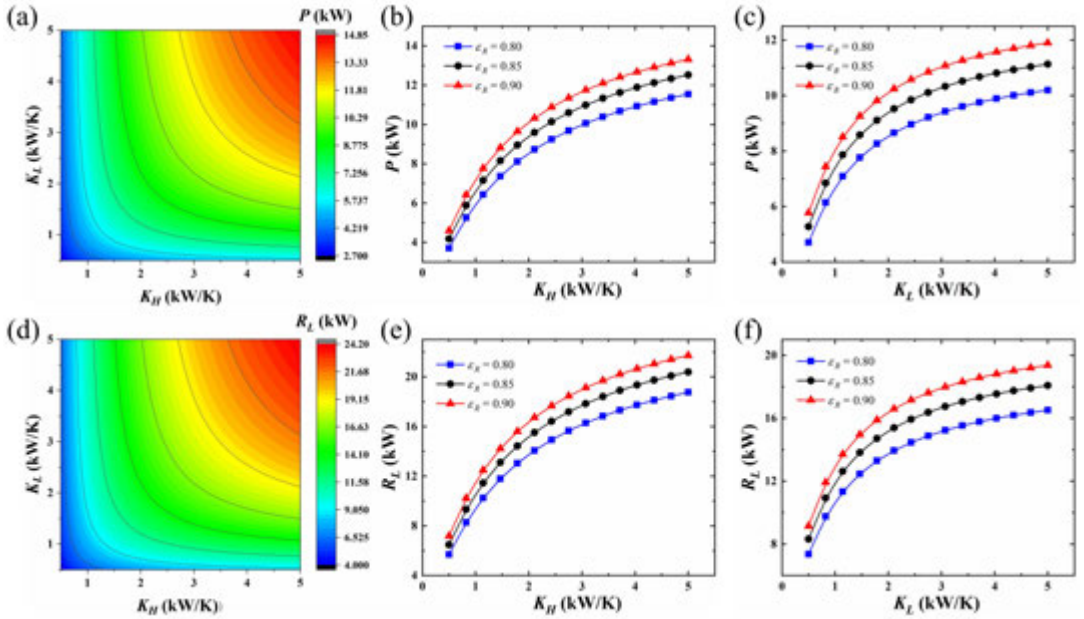


图 7 传热系数对输入功率和制冷率的影响规律：

(a)冷、热端传热系数对输入功率的共同影响；(b)热端传热系数的影响；(c) 冷端传热系数的影响

(d)冷、热端传热系数对制冷率的共同影响；(e)热端传热系数的影响；(f) 冷端传热系数的影响

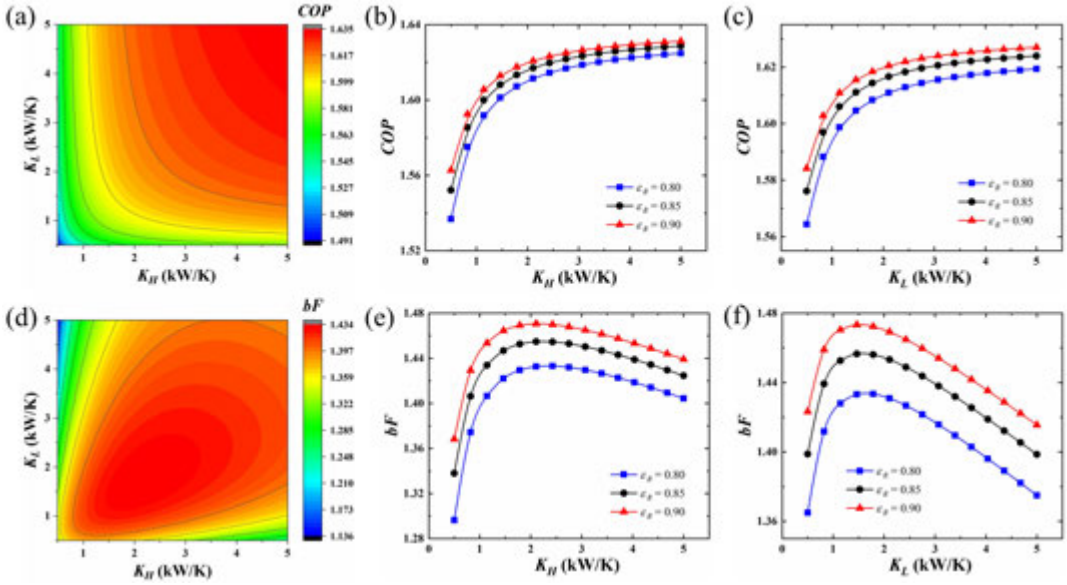


图 8 传热系数对制冷系数和热经济学函数的影响规律：

(a)冷、热端传热系数对制冷系数的共同影响；(b)热端传热系数的影响；(c) 冷端传热系数的影响

(d)冷、热端传热系数对热经济学函数的共同影响；(e)热端传热系数的影响；(f) 冷端传热系数的影响

图 8 为斯特林制冷机在不同冷、热端传热系数条件下的制冷系数和热经济学函数。由图 8(a)-(c)可知，制冷系数随着冷、热端的传热系数的增加均不断增大，增大幅度开始很大，然后逐渐趋于平缓。这是因为当传热系数过大时，循环周期已经减小到接近某个极小值，制冷率和输入功率的变化很小。因此，适当程度增加制冷机膨胀腔和压缩腔的传热系数有利于提升制冷性能。

由图 8(d)-(f)可知，在一定的冷端传热系数下，热经济学函数随着热端传热系数的增加呈现先增长后下降的非线性变化趋势。在一定的热端传热系数下，热经济学函数随着冷端传热系数的增加也呈现先增大后减小的趋势。在系统结构不变的情况下，增大制冷机低温端或

高温端的传热系数是通过增大热交换器的有效换热面积。根据热经济学函数的定义可知，总传热面积的增大增加了制冷机的整体成本，这对制冷机的经济性有不利影响。因此，当传热系数较小时，增大投资成本提高传热系数对制冷性能有较大改善，制冷机的热经济学性能提升。当传热系数增大到某个值之后，继续增大投资成本提升换热系数对制冷机的制冷效果增益不大，反而使系统尺寸过大，热经济性变差。冷、热端的传热系数均存在最优值使制冷机取得较好的制冷效果同时控制投资成本。

3.3 热经济学函数优化

上述分析了温度比、压缩比、回热效率和传热系数对斯特林制冷机性能的影响情况。其中可以发现，随着冷、热端传热系数的变化，热经济学函数均存在一个最大值。因此，需要对循环的冷、热端传热系数进行优化，从而获取系统最优热经济学函数工况并对不同参数下的系统最佳经济学性能进行评估。在优化方法上，本部分采用遗传算法进行全局数值寻优计算，得到不同参数下的热经济学函数优化结果如图 9 所示。

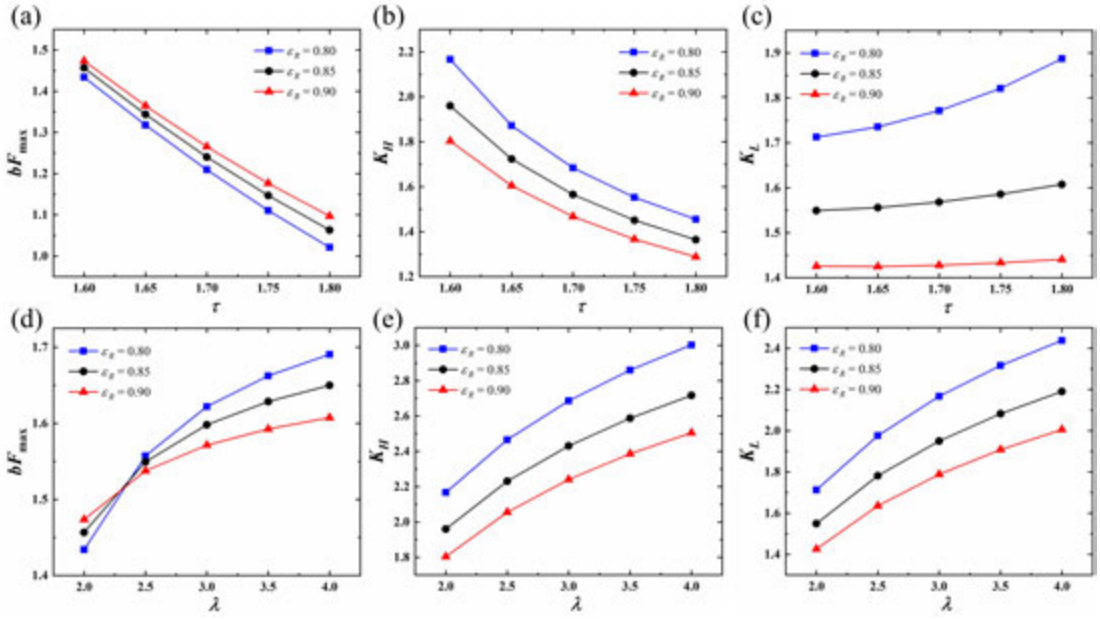


图 9 不同温度比和压缩比下的热经济学函数优化结果：

(a)不同温度比下热经济学函数最优值；(b)对应热端传热系数优化值；(c) 对应冷端传热系数优化值

(d)不同压缩比下热经济学函数最优值；(e)对应热端传热系数优化值；(f) 对应冷端传热系数优化值

图 9(a)、(b)、(c)展示了循环温度比从 1.6 变化到 1.8 时的热经济学函数数值优化结果。从图中可以看到，随着循环热端温度的增加，系统最佳热经济学性能不断下降，其对应的热端传热系数优化值不断减小，冷端传热系数优化值变化不明显。这是因为热端温度的显著增大导致了更多功率输入，提高了制冷机的成本，而制冷率由于冷端温度水平变化很小而基本维持原有水平。为了折衷有因输入功率增加导致燃料成本的上升，热端传热系数的下降有效降低了投资成本，但总体制冷效率的下降导致了最佳热经济学函数的降低。随着回热效率的增加，制冷机的热经济学性能有一定的提升，而对应的冷、热端传热系数优化值不断减小。

图 9(d)、(e)、(f)展示了循环工质压缩比从 2.0 变化到 4.0 时热经济学函数的数值优化结果。由图可得，随着工质压缩比的增加，制冷机最佳热经济学函数值不断增大，对应的传热系数优化解也不断增大。工质压缩比的增加有利于提升系统的制冷率，显著提高了制冷性能。随着工质压缩和膨胀过程换热量的增加，为了改善换热性能、提高经济效率，冷、热端传热系数的优化值不断增加，系统的热经济性不断提升。从图中还可以看出，在压缩比超过 2.5 时，过于增大回热效率会提升制冷机的投资成本，对系统的热经济最佳性能的提升不利。

4 多目标优化

在上述的制冷机的性能分析中，输入功率、制冷率和制冷系数、热经济学函数随着系统参数的变化呈现不同的变化趋势，即目标函数间彼此矛盾。为了解决各目标函数之间的冲突，智能优化算法被用于对系统的多个目标同时进行优化，从而得到最优的解决方案。

智能优化算法中的进化算法是一种成熟的具有高鲁棒性和广泛适用性的全局优化方法，在多目标优化研究中也得到了广泛的应用。Deb[17]提出了带精英策略的非支配排序遗传算法(NSGA-II)，该算法提出了快速非支配的排序算法，引入了精英策略和拥挤度，降低了计算非支配序的复杂度并且保证了种群的多样性，是应用最广泛的多目标进化算法之一。Zhang[16]提出了一种基于分解的多目标进化算法(MOEA/D)。与 NSGA 一类基于支配的方法不同，MOEA/D 基于分解的思路，将一个多目标优化问题分解成若干个标量优化子问题并同时优化它们。由于分解操作的存在，该方法在保持解的分布性方面有着很大优势，而通过分析相邻问题的信息来优化，能避免陷入局部最优，且在每一代的计算复杂度低于 NSGA-II。实验研究表明，采用先进分解方法的 MOEA/D 可以为三目标测试实例生成一组非常均匀分布的解。

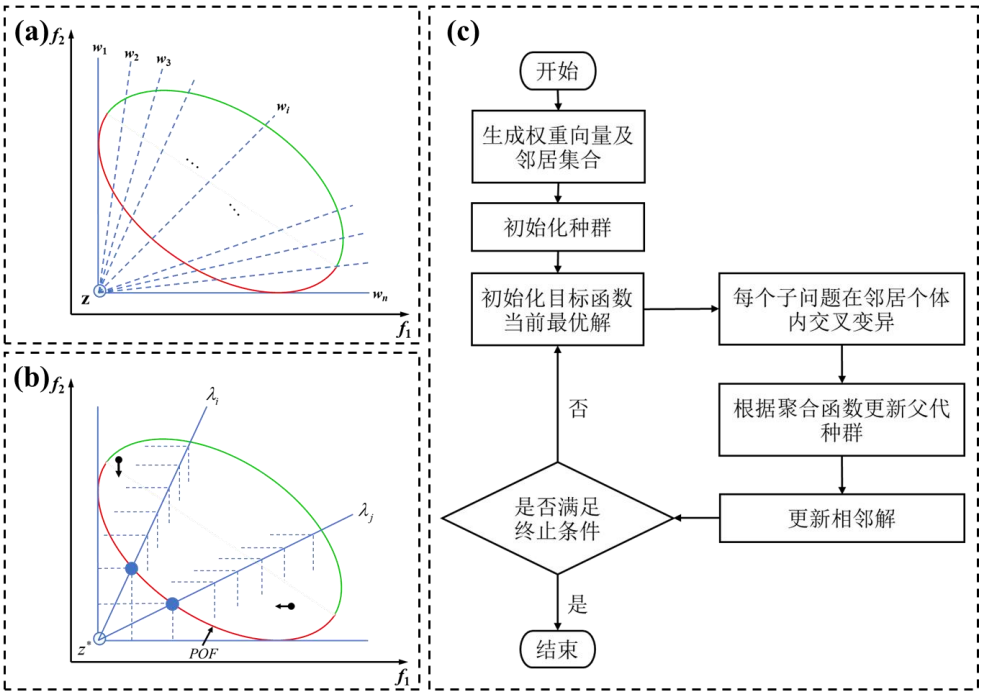


图 10：(a)权重向量分配原理图；(b)切比雪夫分解原理图；(c)基于分解的多目标进化算法流程

为了将多目标优化问题分解为多个单目标优化子问题，如图 10(a)所示，首先需要在目标空间内均匀分配 N 个权重向量。多目标优化常用的分解方法有加权和法、切比雪夫分解法和边界交叉聚合方法，本文选用切比雪夫分解法将多目标问题分解为一系列单目标优化子问题。切比雪夫分解法原理图如图 10(b)所示，其中单目标优化函数的表达形式如式(41)：

$$\min\ g^{te}\left(x\,|\,\lambda,z^*\right)=\max_{1\le i\le m}\left\{\lambda_i\,|\,f_i\left(x\right)-z_i^*\right\},x\in\Omega \tag{41}$$

其中 $z^*=\left(z_1^*,...,z_2^*\right)^T$ 是参考点，由所有目标函数最优值组成的参考向量。x 在变量空间里，f 由 m 个目标函数 $f(x_i)$组成。在图 10(b)中，对于任一个权重变量λ_i，选取离理想点最远的目标函数方向，逐渐改变 x 使得不断靠近理想点，直到到达帕累托前沿上的对应点。对于每一个权重向量λ，都可以在变量空间搜寻到一个满足式(41)的 x*，进而得到帕累托前沿上的相应最优解。通过设置不同的权重向量λ，就可以得到所有的收敛点，共同组成 Pareto 最优解

集。多目标优化问题被分解为多个单目标优化自问题之后，使用遗传算法的原理同时优化求解，MOEA/D 的算法流程如图 10(c)所示。

下面将采用基于分解的多目标进化算法对模型开展多目标优化研究，制冷机的输入功率、制冷率和热经济学函数被作为多目标优化的三个优化目标。选择温度比和压缩比作为多目标优化的决策变量，其约束条件如下：

$$1.6 \le \tau \le 1.8 \tag{42}$$

$$2 \le \lambda \le 4 \tag{43}$$

在寻优计算过程中，制冷率和热经济学函数同时最大化，输入功率最小化。为了对本文优化算法(MOEA/D)的准确性进行验证，本文还同时使用多目标遗传算法(MOGA)和多目标粒子群算法(MOPSO)基于同样的约束条件和优化目标对模型开展了多目标优化计算。三种多目标优化算法的参数设置如表 2 所示。

表 2 三种多目标优化算法参数设置

多目标优化算法	参数设置		
MOEA/D	种群个数	邻居规模	迭代次数
	100	20	100
MOGA	种群个数	最优个体系数	最大迭代次数
	400	0.25	300
MOPSO	种群个数	非支配解种群数量	迭代次数
	200	100	100

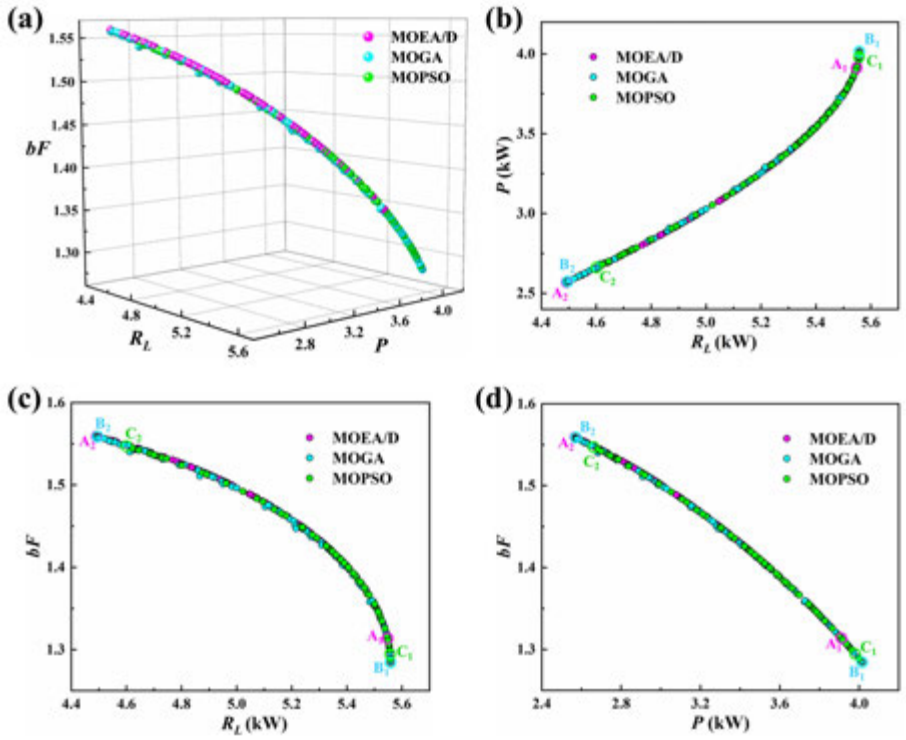


图 11 三种多目标算法得到的帕累托前沿对比：

(a)三维帕累托前沿；(b) P-R_L 帕累托前沿；(c) bF-R_L 帕累托前沿；(d) bF-P 帕累托前沿

通过表 2 的参数设置，将模型基于三种多目标优化方法后得到的帕累托前沿如图 11 所示，其中三个帕累托解数量均为 100。经过三维帕累托前沿和三个平面的投影对比可知，三种多目标优化的帕累托前沿基本吻合，通过 MOGA 得到的帕累托前沿范围较广，通过 MOEA/D 得到的帕累托前沿上最优解的分布更加均匀。经过上述对比可以说明，MOEA/D

对本文模型的多目标优化具有较好的准确性。

为了获得制冷机的最优综合性能，采用 TOPSIS 决策方法对帕累托最优解集进行决策。对帕累托前沿上的粒子进行拟合，拟合曲面如图 12 所示。从图中可以看到制冷机三个性能目标间的矛盾关系，帕累托最优解分布在 2.57 kW ≤ P ≤ 3.87 kW ，4.49 kW ≤ R_L ≤ 5.53 kW ，1.33 ≤ bF ≤ 1.56 。其中绿色球体是经过 TOPSIS 决策得到的最优解。

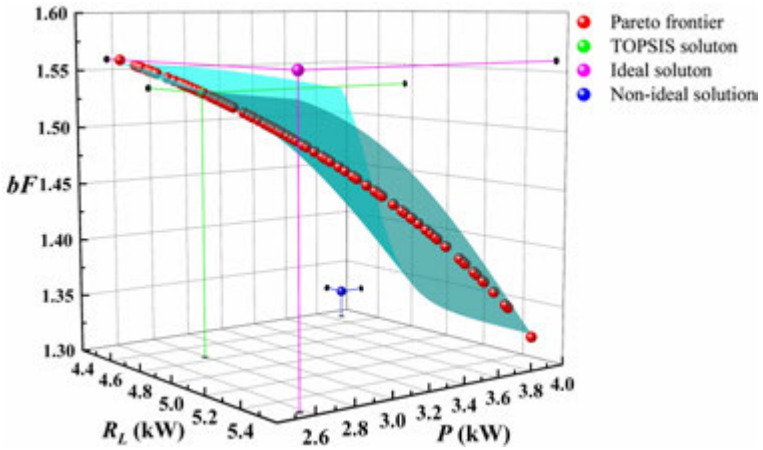


图 12 斯特林制冷机的输入功率、制冷率及热经济学函数指标优化后的拟合图

根据拟合曲面进行计算，帕累托前沿上三个目标的关系为

$$bF = 1.56 + \frac{1}{1+\left(R_L / 4.67\right)^{-45.58}} \times \frac{1}{1+\left(P / 3.88\right)^{-7.34}} \tag{44}$$

由式(44)就可以根据输入功率和制冷率求解出相应的热经济学指标。图 13-15 分别给出了双目标组合优化的帕累托前沿。图 13 是斯特林制冷机输入功率、制冷率的双目标帕累托前沿。由图可知，随着制冷率从 4.5 kW 增大到 5.5 kW，制冷机的输入功率也从 2.6 kW 增大到 3.8 kW。为了在提高制冷效果和增大投入上权衡折衷，采用 TOPSIS 决策方法得到的最优解如下：输入功率为 2.79 kW，制冷率为 4.76 kW。由于制冷系统对输入功率的大小比较敏感，而对制冷率的敏感性较小，优化目标为最小化输入功率和最大化制冷率。由图可见，在相同的权重比例下，TOPSIS 决策解离最小的输入功率更近。因此，制冷机的性能优化方向会更偏向于降低输入成本。

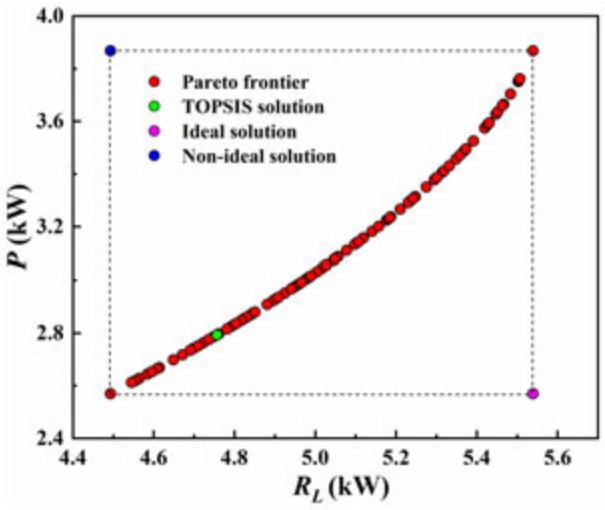


图 13 输入功率、制冷率为目标的帕累托前沿

图 14 是斯特林制冷机热经济学函数、制冷率的双目标帕累托前沿。由图可见，当制冷率从 4.5 kW 增大到 5.5 kW，制冷机的热经济学指标值从 1.56 下降到 1.33。更大的制冷率和最大的热经济学函数值有利于系统性能的提升，故理想最优解在图 15 的右上角。TOPSIS 决策解落在热经济学函数为 1.53，制冷率为 4.76 kW 的点上，说明决策解更偏向于热经济学指标更低的方向。

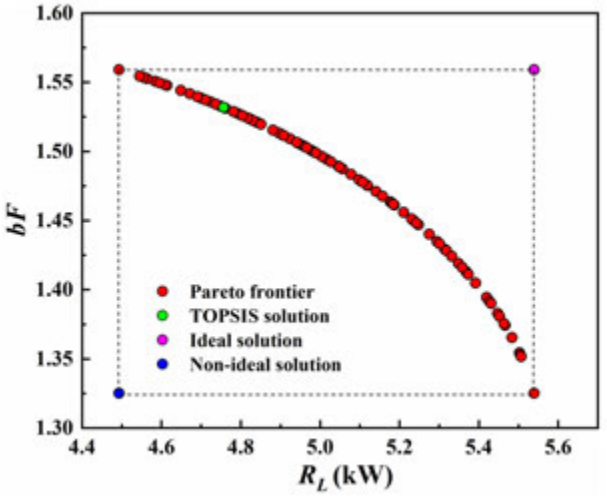


图 14 热经济学函数、制冷率为目标的帕累托前沿

图 15 是斯特林制冷机热经济学函数、输入功率的双目标帕累托前沿。由图可见，随着输入功率从 2.6 kW 增大到 3.8 kW，制冷机的热经济学指标值从 1.56 下降到 1.33。较小的输入功率和较高的热经济学指标导致较好的系统性能，所以理想最优解在帕累托前沿的左上方端点。由于三个目标间的矛盾关系，TOPSIS 决策解无法取到左上方的最优点，而是落到热经济学函数为 1.53，输入功率为 2.79 kW 的点上。

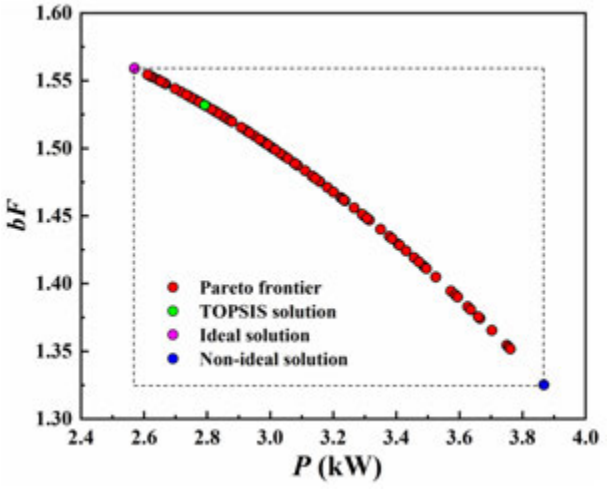


图 15 热经济学函数、输入功率为目标的帕累托前沿

表 3 给出了不同目标函数的单目标优化和多目标优化 TOPSIS 决策的结果。为了评价各个决策解的优劣程度，表 3 最后一列列出了每种决策解与理想解的偏差指数 d。由表 3 可知，当分别以最小输入功率、最大制冷率和最大热经济学函数对模型进行单目标优化时，获得的与理想最优解的偏离指数分别为 0.3758、0.6242 和 0.3758。三目标优化决策解的偏离指数为 0.3612，均小于单目标优化的结果。

图 16 给出了单目标优化与多目标优化结果的柱状对比，其中 $\overline{P} = P / P_{\max}$，$\overline{R}_L = R_L / R_{\max}$。

如图所示，经过 MOEA/D 算法多目标优化和 TOPSIS 决策得到的最优解相比单目标优化结果，以较小的制冷率下降为代价大幅度提升了系统的热经济学性能。同时，决策解也保证了在制冷机功率输入较小的条件下，维持较好的制冷性能。以上说明，基于 MOEA/D 的多目标优化能够均衡各目标的关系，相比单目标优化能够得到更优的结果。

表 3 多目标优化结果分析

优化解	决策方法	决策变量		优化目标			偏离指数
		τ	λ	P (kW)	R_L (kW)	bF	d
多目标优化	TOPSIS	1.62	4.0	2.79	4.76	1.53	0.3612
最小输入功率	-	1.60	4.0	2.57	4.49	1.56	0.3758
最大制冷率	-	1.73	4.0	3.87	5.54	1.33	0.6242
最大热经济学函数		1.60	4.0	2.57	4.49	1.56	0.3758
理想最优解	-	-	-	2.57	5.54	1.56	0

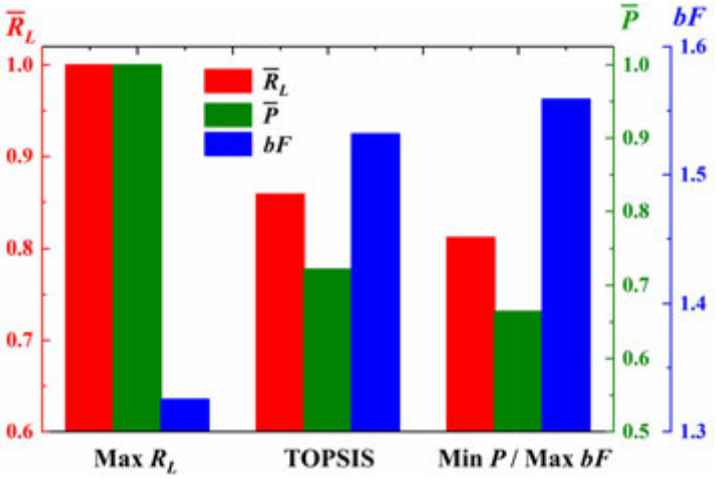


图 16 单目标优化与多目标优化结果对比

图 17 给出了帕累托前沿范围内温度比τ的分布。如图所示，采用 MOEA/D 算法对模型进行多目标优化后，最优的温度比τ分布在 1.60 和 1.73 之间。随着温度比的增加，输入功率和制冷率都不断增加，热经济学函数接近线性减小。

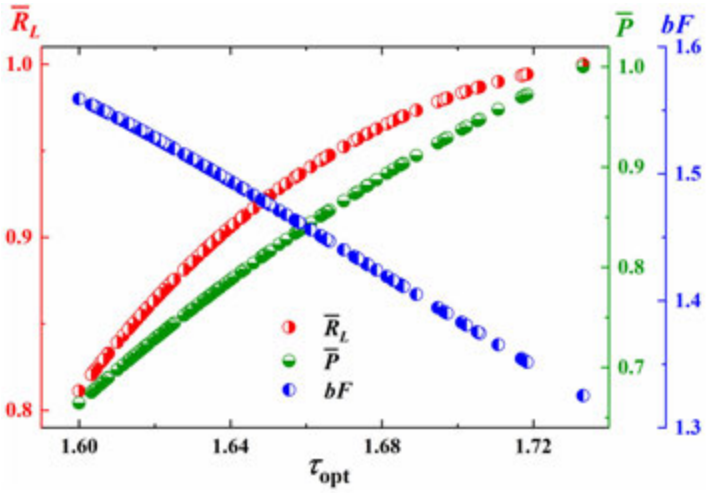


图 17 帕累托最优解随温度比τ的分布

5 结论

本文运用有限时间热力学方法建立了一种更符合实际情况的不可逆斯特林制冷机循环模型。通过多变换热过程模拟工质与外界的换热过程，并考虑了工质与外界间的有限温差换热、回热器的回热损失以及高低温热源间的漏热损失，得到了斯特林制冷机的输入功率、制冷率、制冷系数和热经济学函数。基于提出的多变模型，研究了温度比、体积比等参数对斯特林制冷机性能的影响，通过数值优化得到了系统的最佳热经济学性能。根据分析结果，以输入功率、制冷率和热经济学函数为目标函数，首次将基于分解的多目标进化算法用于斯特林制冷机性能的优化，选用 TOPSIS 决策得到了多目标优化的最优解。本文研究结论如下：

(1) 相同参数条件下，本文提出的多变模型的制冷效率和热经济学函数高于考虑同样不可逆因素的等温模型，低于理想内可逆斯特林制冷机模型。

(2) 适当减小高低温端的温度比、提高回热效率和体积压缩比有利于获得更好的制冷系数和热经济学性能。热经济学函数随着热端、冷端传热系数的变化都存在一个最优值。

(3) 随着循环温度比的增加，系统最佳热经济学性能下降，其对应的热端传热系数优化值不断减小。随着工质压缩比的增加，制冷机最佳热经济学函数值不断增大，对应的传热系数优化解也不断增大。在压缩比超过 2.5 时，过于增大回热效率会提升制冷机的投资成本，对系统的热经济最佳性能的提升不利。

(4) 基于分解的多目标进化算法(MOEA/D)与多目标遗传算法(MOGA)和多目标粒子群算法(MOPSO)三种算法得到的帕累托前沿吻合良好，表明对本文模型的多目标优化具有较好的准确性。经过 MOEA/D 多目标优化并通过 TOPSIS 决策得到的解能够均衡各目标的关系，以较小的制冷率下降为代价大幅度提升了系统的热经济学性能，相比单目标优化能够得到更优的结果，对实际斯特林制冷机的设计和优化具有一定指导意义。

参考文献

[1] Curzon F L, Ahlborn B. Efficiency of a Carnot engine at maximum power output [J]. American Journal of Physics, 1975, 43(1): 22-4.

[2] Leff H S, Teeters W D J A J o P. EER, COP, and the second law efficiency for air conditioners [J]. 1978, 46: 19-22.

[3] Blanchard C H. Coefficient of performance for finite speed heat pump [J]. Journal of Applied Physics, 1980, 51(5): 2471-2.

[4] Jincan C, Zijun Y. The influence of regenerative losses on the maximum cooling rate of a Stirling refrigerator [J]. 1996:

[5] Chen J. Minimum power input of irreversible stirling refrigerator for given cooling rate [J]. Energy Conversion and Management, 1998, 39(12): 1255-63.

[6] Erbay L B, Yavuz H. The maximum cooling density of a realistic Stirling refrigerator [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 1998, 31(3): 291-3.

[7] Tyagi S K, Kaushik S C, Singhal M K. Parametric study of irreversible Stirling and Ericsson cryogenic refrigeration cycles [J]. Energy Conversion and Management, 2002, 43(17): 2297-309.

[8] Tyagi S K, Lin G, Kaushik S C, et al. Thermoeconomic optimization of an irreversible Stirling cryogenic refrigerator cycle [J]. International Journal of Refrigeration, 2004, 27(8): 924-31.

[9] Ozturk M, Erbay L. Performance analysis of the duplex Stirling refrigerator by maximum cooling load density [J]. Energy: production, distribution and conservation - ASME/ATI 2006, Milano, Italy, 2006: 519-28.

[10] Sahin B, Kodal A. Finite time thermoeconomic optimization for endoreversible refrigerators and heat pumps [J]. Energy Conversion and Management, 1999, 40(9): 951-60.

[11] Kodal A, Sahin B, Yilmaz T. Effects of internal irreversibility and heat leakage on the finite time

thermoeconomic performance of refrigerators and heat pumps [J]. Energy Conversion and Management, 2000, 41(6): 607-19.

[12] Antar M A, Zubair S M. Thermoeconomic considerations in the optimum allocation of heat exchanger inventory for a power plant [J]. Energy Conversion and Management, 2001, 42(10): 1169-79.

[13] Bandyopadhyay S, Bera N, Bhattacharyya S J E c, et al. Thermoeconomic optimization of combined cycle power plants [J]. 2001, 42(3): 359-71.

[14] Ahmadi M H, Ahmadi M A, Mohammadi A H, et al. Multi-objective optimization of an irreversible Stirling cryogenic refrigerator cycle [J]. Energy Conversion and Management, 2014, 82: 351-60.

[15] Dai D, Yuan F, Long R, et al. Performance analysis and multi-objective optimization of a Stirling engine based on MOPSOCD [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2018, 124: 399-406.

[16] Zhang Q, Li H. MOEA/D: A Multiobjective Evolutionary Algorithm Based on Decomposition [J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2007, 11(6): 712-31.

[17] Deb K, Pratap A, Agarwal S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II [J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6(2): 182-97.

中国工程热物理学会
学术会议论文

传热传质学
编号：233174

匀速滚动制动盘通道传热特性数值分析[1]

臧元庆[1,2]，王艺博[1,2]，戴子闻[1,2]，王　璐[1,2]，王良璧[1,2]

（1. 兰州交通大学 机电工程学院，甘肃 兰州 730070；2. 铁道车辆热工教育部重点实验室（兰州交通大学），甘肃 兰州 730070）

Tel：0931-4956556， Email：lbwang@mail.lzjtu.cn

摘要：列车制动过程是列车运行过程的重要组成部分，是列车安全的重要保障。车辆在制动过程中通过盘片和垫片之间的滑动摩擦力将动能转化为热能。因此，需要对盘式制动器进行充分的冷却以防止各种因温度过高而产生的制动问题。所以对制动盘散热能力的研究对列车安全非常重要。本文介绍了一种新的制动盘制动盘传热特性仿真方法，通过对制动盘实验中实验装置进行简化，获得了制动盘在滚动壁面上滚动的仿真模型。使用动网格方法对制动盘的滚动过程进行了模拟，获得了针肋型制动盘试件周围流场分布和内部通道对流换热特性。

关键词：制动盘；动网格；传热特性

0 前言

列车的制动过程是将列车的动能转化为其他形式的能并消耗掉。列车运行速度很高，要在尽可能短的时间和距离内将这些巨大的动能转移、消耗，对制动盘的散热能力有很高的要求。列车通过制动盘与制动闸片间的摩擦，使运动车辆减速，直至停止运动。在制动过程中，车辆的动能在摩擦副处转变为热能，使得制动盘的温度快速升高[1-2]。如果制动盘不能有效地散热，制动盘内温度分布不均匀性增大，将产生很大的热应力[3-4]。制动盘温度的升高一方面使摩擦系数减小，制动能力下降，另一方面使制动盘出现热斑、热裂纹、热疲劳[5-6]，会降低制动效果和制动盘的使用年限，影响车辆的行车安全。随着车辆速度的不断提高，制动盘的通风传热技术成为决定车辆运行成本及安全的关键技术之一。从而，研究制动盘通道的传热特性，认识及强化其传热能力对于降低车辆运行成本，提高车辆运行安全具有非常重要的意义。

国内外学者对制动盘传热特性的研究方法主要是实验研究和数值模拟研究。Yan等[7]研究了制动盘静止空气中定轴旋转过程，通过实验和仿真的方法对不同结构的制动盘传热特性进行了研究。Ji等[8]使用滑移网格方法对制动过程中轮装式制动盘的散热进行了仿真研究，过程中同时考虑旋转与平移。Marko等[9]对通风式制动盘轮毂进行优化，通过实验对两种制动盘在静止空气和横流空气中传热特性进行对比研究，获得了相关无量纲关系式。金星等[10]通过设计和搭建实验平台，按一定比例加工了制动盘试件，模拟了制动盘随车轮滚动过程，通过萘升华传热传质比拟原理得到了试件表面的对流换热特性，为准确分析制动盘的传热提供了依据。黄晨等[11]通过萘升华传热传质比拟原理，采用铸萘方法对扇形直肋制动盘内部通道传热特性进行了研究。何梅[12]通过萘升华实验，研究了针肋直径、个数和高度对针肋制动盘试件散热的影响，获得了针肋制动盘内部通道的对流换热特性。Gerlici等[13]讨论了制动盘可能造成的气动损失的大小。对各种通风圆盘设计和实心圆盘的气动阻力进行了评估。通过分析描述的测量和仿真数据，推导了径向叶片、切向叶片、组合式和实心圆盘等不同圆盘设计下气动损失对机车车辆转速和线速度的依赖关系。Wang等[14]对实验数据进行整理，采用不同的数据处理方法来呈现实验结果。报道了锥形径向叶片的努塞尔数、雷诺数与其他几何参数之间的相关性。结果表明，传热系数与科氏加速度有密切关系，可通过这种关系将试验圆盘的结果推广到实际情况。Wang等[15]研究了比实际通风通道小10倍的通风通道的传

[1] 基金项目：国家自然科学基金项目（5206609，5176093），甘肃省高等学校产业支撑引导项目(2019C-06)。

热特性。研究了通道几何参数对其传热性能的影响。结果表明，翅片直径和翅片数量对换热的影响大于翅片高度。在小雷诺数区和大雷诺数区，直叶片形成的通风通道与可用相关预测的结果存在较大差异。左建勇[16]在考虑制动盘周围环境的情况下，建立了列车、轨道、制动盘及其附近空气流场的仿真模型，在Fluent中采用动网格流固耦合方法，研究了列车运行中制动盘泵风特性，分析了泵风效应对于牵引功率的影响。Zhou等[17]为研究高速列车运行过程中换乘架区域的流场特性及对制动盘风阻力矩的影响规律，建立列车空气动力学模型，对高速列车以200~450 km/h速度运行的6种工况进行流场仿真，计算结果表明，制动盘的阻力和力矩与转速的平方成正比，功耗与转速的立方成正比。GarcíaLeón等[18]利用Ansys软件，通过传热学的数学理论和数值方法对常见的五种不同的汽车盘式制动器进行了研究。此外，对公开文献中发现的实验、理论和模拟值进行了直接比较，提出一种在散热方面具有改进几何形状的盘式制动器。李阳杰等通过建立了1:1列车制动试验台，分别使用红外热像仪和热电偶测量制动盘的温度变化情况，同时通过ADINA软件模拟了制动中制动盘温度场的变化。

1 模型描述

1.1 制动盘计算模型

图1中所示为实验装置，在实验中将轨道设计成圆形的，使制动盘随车轮在圆形通道上滚动，实验中使用的制动盘试件尺寸为实际制动盘1/10。在实验中通过控制电机旋转使得旋转壁旋转带动滚动轮在圆形轨道上滚动，从而带动制动盘试件进行运动。

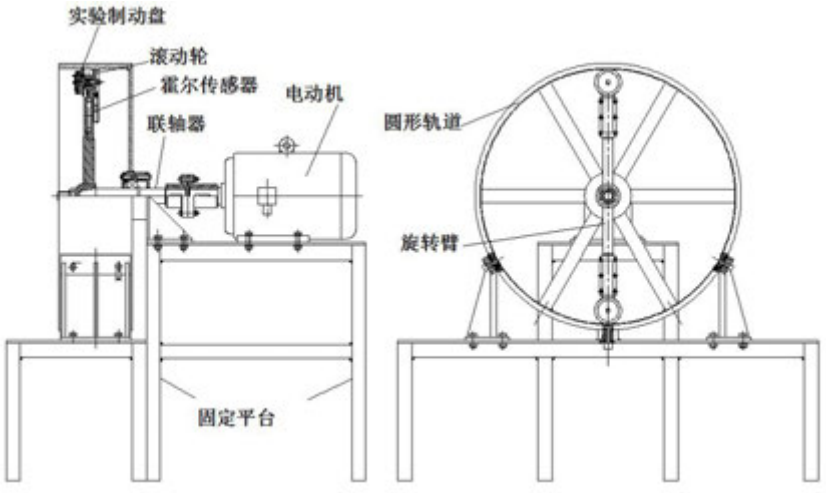


图1 实验装置图

Figure 1 Schematic view of the experimental apparatus.

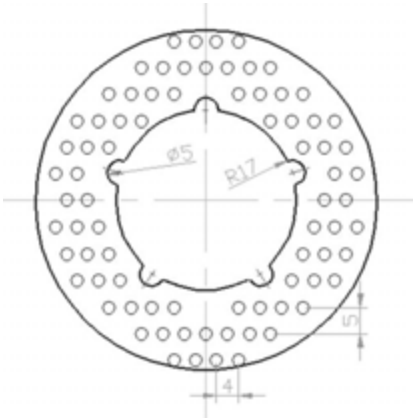


图2 试件中针肋分布图

Figure 2 Detailed configurations of the test disc.

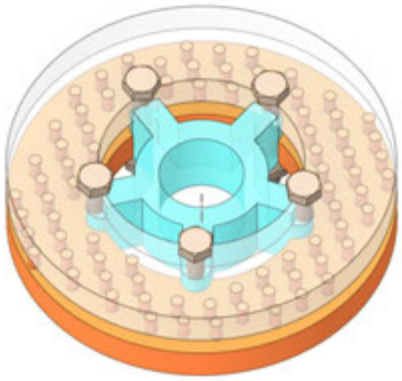


图3 制动盘三维模型

Figure 3 3d model of brake disc

本文要通过仿真实现对在壁面上滚动的制动盘内部通道对流换热特性的计算分析，在建模时去掉实验台上在仿真计算中对制动盘试件没有影响的部件如电机、固定平台、联轴器等。将制动盘、小轮、滚动轮、圆形轨道以及旋转臂作为研究对象进行建模，建立三维模型如图4所示。其模型在的运动过程稍为复杂，动网格计算中网格重构过程中容易形成负体积，计算也容易不收敛。本文的研究内容主要是分析内在不同速度下制动盘通道内的对流换热特性，其中制动盘中的部分结构对流场的计算结果影响较小，但会增加建模和计算的复杂性，为保证计算的顺利进行，也为节省计算资源方便计算，故对模型进行如下简化：(1)忽略制动盘试件上螺栓与螺母等小部件对计算的影响，制动盘试件上螺栓与螺母等小部件会对流场的分布造成一定影响，但对于制动盘通道内部的对流换热计算结果几乎没有影响[19]；(2) 在计算中不考虑转臂对制动盘的影响；(3) 小轮模拟的是车轮，车轮的高速旋转使得车轮附近和制动盘流场产生了复杂的流动状态，而滚轮对制动盘周围影响比较小，故去掉滚轮，保留小轮。对模型进行修补，只对一个制动盘进行研究。简化后的模型如图5所示。

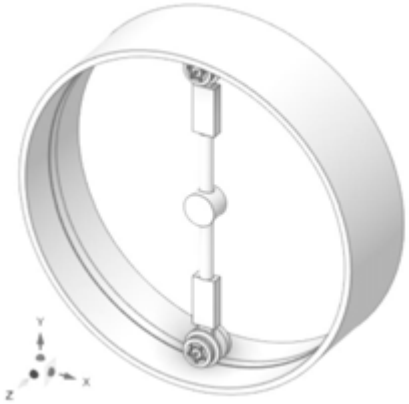


图 4 简化前模型

Figure 4 Pre-simplified model



图 5 简化后模型

Figure 5 Simplified model

为了模拟制动盘及其周围的流场，计算制动盘内部通道的对流换热特性，将简化后的几何模型导入到 SCDM 中，使用体积抽取命令建立制动盘试件与滚动壁面之间的流体计算区域。由于在仿真计算中不需要研究滚动壁面的导热问题，故而在计算域中去掉圆形滚动轨道，通过绝热无滑移壁面的设置来实现滚动轨道壁 面对空气域的影响，所得到的计算域模型如图 6 所示。为了节省计算资源，在仿真计算只截取一部分流体区域进行研究，经过简化最后得到的计算区域模型如图 7 所示。图中流体计算域的相关尺寸见表 1 所示。

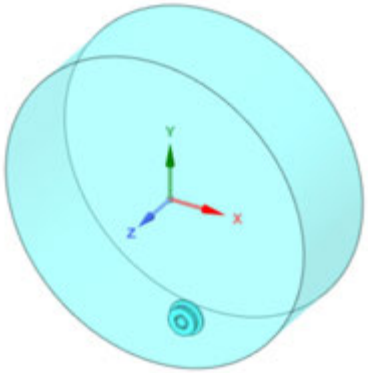


图 6 制动盘计算域模型

Figure 6 Calculation domain model of brake disc

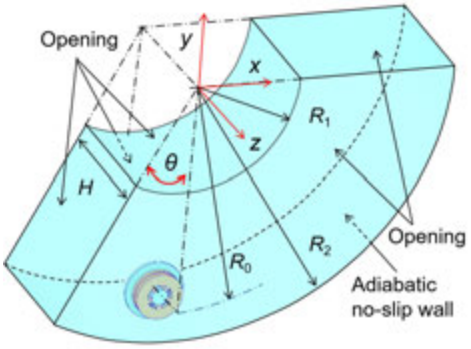


图 7 简化后的计算域模型

Figure 7 Simplified computational domain model

表 1 计算域尺寸参数表

Table 1 Parameters of calculation domain

参数	尺寸
R_0	323mm
R_1	175mm
R_2	366mm
θ	35°
H	185mm

1.2 网格划分与计算方法

由于本文中使用的制动盘试件几何模型形状比较复杂，而且 Fluent 动网格中的网格重构目前只支持四面体网格的计算，所以本文利用 Fluent meshing 来生成四面体计算网格。图 8 中所示为制动盘试件滚动示意图，对试件与轨道接触的部分进行网格加密。图 9 中所示为划分出来的计算模型网格。由于 Fluent 中动网格方法在网格重构时只支持四面体网格，为避免在计算中边界层网格变形后质量太差，故将边界层网格区域单独分离出来作为独立的计算区域。最后制动盘计算模型的网格划分结果是网格单元数为 5992791、节点数为 1485901。

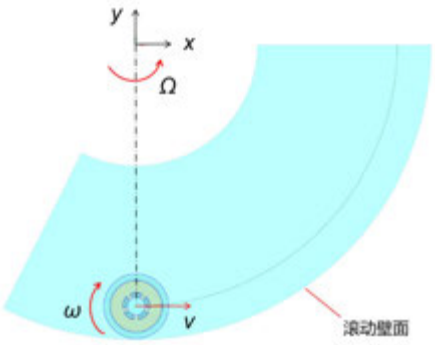


图 8 制动盘试件滚动示意图

Figure 8 Brake disc rolling schematic diagram

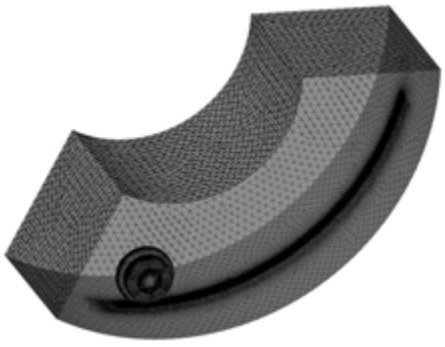


图 9 制动盘计算模型的网格划分

Figure 9 Meshing of the brake disc calculation model

基于Fluent软件对针肋型通风式制动盘的内部通道传热特性仿真研究。将滚动轨道壁面设置为绝热无滑移条件；流固交界面设置为耦合界面条件；其他流体界面设置为开放式边界条件，在fluent中即都设置为表压力为0的压力出口边界条件；对制动盘添加体积热源3320 W/m^3。

由于制动盘运行中既有旋转又有平移，考虑制动盘结构的复杂性，使用非定常计算模型进行模拟。常用于瞬态计算的模型是滑移网格模型与动网格模型，这两种模型可以真正进行动态模拟给出运动边界的实施运动状态下的瞬态分析。由于模型中制动盘试件的运动既涉及自传又设计公转，使用动网格方法进行仿真计算。

当前研究中为了合理地预测与旋转制动盘相关的相当复杂的流场，所使用的湍流模型主要有RNG k-ε和SST k-ω模型，区别主要是[20]：SST k-ω模型主要适用于低雷诺数求解中，在求解低雷诺数和有界壁面流动时，计算性能比较好，RNG k-ε模型对ε方程增加了附加项，进而提高速度梯度较大流场的计算准确性，旋转效应的考虑使得计算精度进一步提高。综合实践和理论计算后，本文中选用RNG k-ε模型。采用 SIMPLE 算法来计算，压力离散方式选

择PRESTO!，Gradient 梯度离散方法选择最小二乘法，湍流动能与湍流动能离散方法选择一阶迎风格式，动量与能量离散方法选择二阶迎风格式。

2 模拟结果分析

2.1 不同车速下制动盘周围速度场

当制动盘以速度 v 在圆形轨道壁面上随滚轮滚动时，其本身既在绕轴心自转，又在绕 z 轴进行公转。制动盘试件在滚动轨道上滚动示意图如图 10 中所示。图中 v 表示制动盘运动速度；ω表示制动盘试件自转角速度，即滚动角速度；Ω表示制动盘试件公转角速度，各个物理量之间的关系如下：

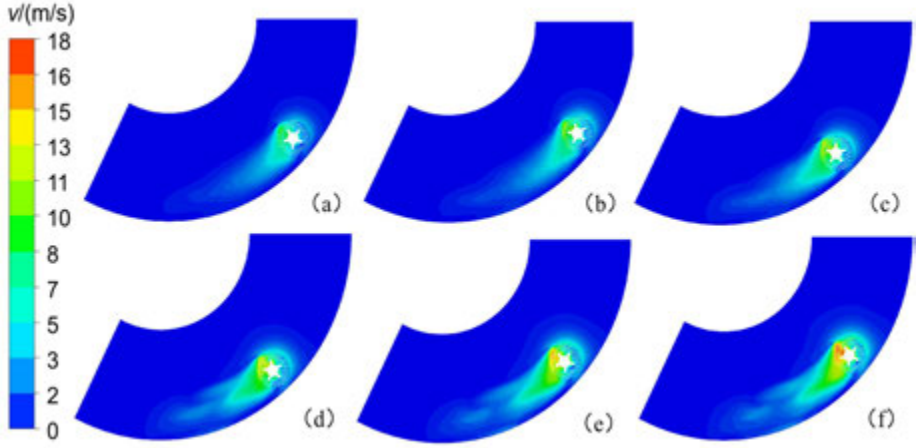
$$v = R_w \cdot \omega \tag{1}$$

$$\Omega = R_0 \cdot v \tag{2}$$

式中 R_W 表示滚轮直径，值为 0.043 m；R_0 表示制动盘轴心的周转半径，值为 0.323 m。

实验中通过改变电机的频率来控制制动盘试件的角速度，设置电机频率分别为2.5HZ、3HZ、3.5HZ、4HZ、4.5HZ、5HZ,分别对应制动盘试件角速度140.3 rad/s、167.3rad/s、187.6 rad/s、209.5 rad/s、238.3 rad/s和266 rad/s。

图10中 (a) – (e) 所示为制动盘试件在6种速度下在滚动轨道上滚动时制动盘内部通道中间截面上速度云图。对比不同滚动工况下的速度云图可以看出，制动盘通道中和周围空气速度虽然大小不同，但其速度的分布情况是相似的。



(a) 140.3 rad/s；(b) 167.3rad/s；(c) 187.6 rad/s；(d) 209.5 rad/s；(e) 238.3 rad/s；(f) 266 rad/s

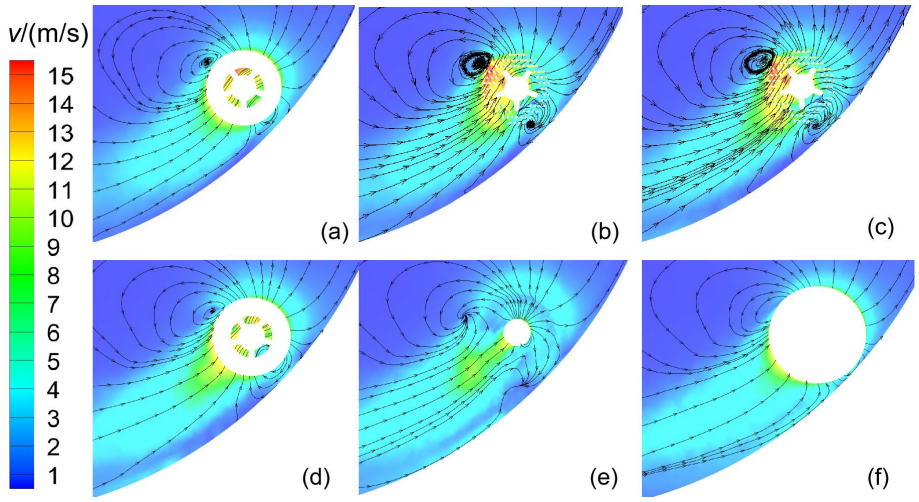
图 10 不同滚动速度下中间截面上速度云图：

Figure 10 The velocity cloud diagram on the middle section at different rolling speeds

图 11 中 (a)-(f) 所示为制动盘以 238.3rad/s 的角速度在圆形壁面上滚动时不同截面上空气的流线分布图。截面位置如图 12 所示，(a)和(d)截面在外盘面和外盘面上，(b)和(c)在通风通道内部，(e)盘面在盘和滚轮的中间面上，(f)截面在滚轮上。

从图 11 中可以看出在外圆周外部区域形成涡结构，在盘和滚动壁面之间由涡产生，内部通道由于散热筋的影响靠近中心区域的涡有所加强。由图中(b)和(c)也可以看出制动盘在壁面上滚动时带动周围空气运动，在制动盘背风侧尾迹区空气流速较大。内部通道中空气在背风区域速度比较大，同时在滚动壁面附近由于避免的影响空气流速较小。由于制动盘本身有向前滚动的速度，在迎风侧空气速度较小背风侧较大，故而如果以制动盘为对象来说，在迎风侧空气进入内部通道，背风侧空气从内部通道流出。图 13 中所示为制动盘轴线与坐标原点所在截面上的流线图，可以看出，随着制动盘在壁面上滚动带动周围空气运动，部分空气从外侧内圆周进入制动盘通道，从制动盘内侧内圆周和外圆周处流出通风道。这主要是由

于此类制动盘在旋转过程中工作将制动盘周围的冷却空气吸入通风通道。由于制动盘内侧摩擦面和小轮上挡板形成了狭窄的通风道，故对于当前而内侧内缘周也是空气出口。



(a) z = -53mm；(b) z =-54mm；(c) z = -56mm；(d) z = -60mm； (e) z = -65mm；(f) z = -69

图11 不同截面上流线分布图

Figure 12 Streamline distribution on different sections

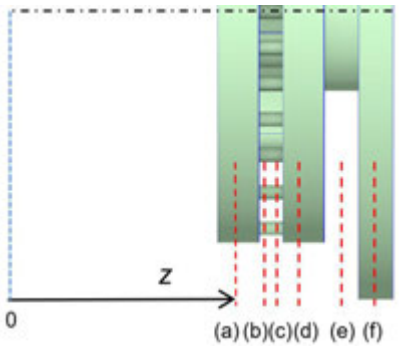


图12 截面位置图图

Figure 13 the position of the cross section

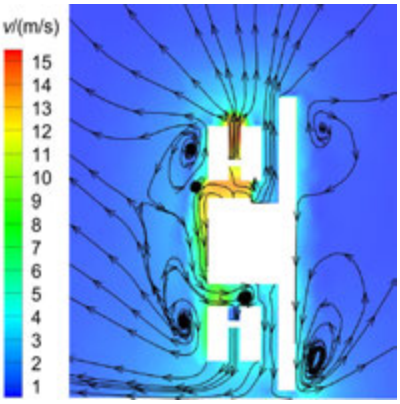


图13旋转轴与圆心所在截面流线图

Figure 14 Flow line diagram of the rotating axis and original core

2. 2 制动盘内部通道对流换热特性分析

2. 2. 1 制动盘内部通道模拟结果验证

通过对比实验所得内部通道表面对流换热系数与数值计算得到的结果可以验证本文计算结果的准确性。当制动盘试件在滚动壁面内随着滚动轮滚动时，其速度与对流换热系数可通过以下方式[15]实现无量纲化。

根据 Limpert [22]的研究中，内部通道中的特征速度可以通过以下方法来计算：

$$v_{\text{in}} = 0.052n\sqrt{D_{\text{out}}^2 - D_{\text{in}}^2} \tag{3}$$

$$v_{\text{out}} = v_{\text{in}} D_{\text{in}} / D_{\text{out}} \tag{4}$$

$$v_{\text{vent-L}} = (v_{\text{in}} + v_{\text{out}}) / 2 \tag{5}$$

其中 D 为盘的直径，n 为旋转速度，v 为流体通过盘通道的速度，下标 in 和 out 分别表示通道流入和流出，$v_{\text{vent-L}}$ 为特征速度。

确定特征速度之后，把所得数据进行处理，利用定义可以得出雷诺数，如式(6)所示：

$$Re = \frac{\rho v_{\text{vent-L}} d_{\text{e-L}}}{\eta} \tag{6}$$

式中 $d_{\text{e-L}}$ 为实验试件特征尺寸，其数值可以通过式 (7) 来表示：

$$d_{\text{e-L}} = \frac{4V}{A} = \frac{4\left(\left(D_{\text{out}}^2 - D_{\text{in}}^2\right)H - {d_0}^2 HN\right)}{2\left(\left(D_{\text{out}}^2 - D_{\text{in}}^2\right) - {d_0}^2 n\right) + d_0 HN} \tag{7}$$

式中 V 表示制动盘内部通道体积，A 表示内部通道面积，d_0 表示肋柱直径，N 表示柱肋个数，H 表示柱肋高度。

图 14 中所示为仿真所得内部通道平均 Nu 数与实验所得内部通道 Nu 数的对比图。当制动盘试件在滚动壁面内随着滚动轮滚动时，其速度与对流换热系数可通过以下方式实现无量纲化，得到了平均努塞尔数、散热筋数量、直径和高度之间的关联式[15]，即通过实验获得的拟合值如式(8)所述:

$$Nu_{\text{L}} = 0.003917 Re_{\text{L}}^{1.14945} \left(\frac{d_0}{0.0025}\right)^{-0.33071} \left(\frac{H}{0.0035}\right)^{0.08853} \left(\frac{N}{116}\right)^{-0.31385} \tag{8}$$

通过计算对比可知内部通道表面平均对流换热系数的误差在 20%以内。故而计算所得结果具有一定的准确性。由图中可看到，当前模型的仿真结果小于实验值，主要是由于在建模时省去了转柄以及制动盘上的螺栓等部件，同时受限于计算资源问题，本文通过简化实验模型得到制动盘试件在圆形壁面上滚动模型，无法完全还原实际的实验过程，会对结果产生一定的影响。同时动网格在网格重构后网格质量较差，对仿真结果有一定影响。

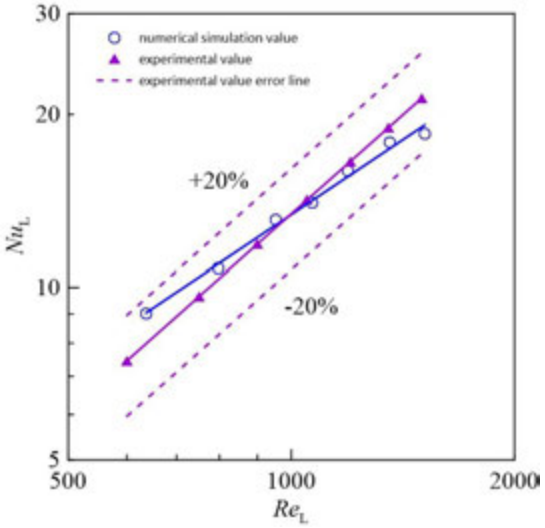


图 14 实验值与仿真值对比

Figure 14 Comparison between experimental values and simulation values

2.2.2 制动盘内部平面对流换热特性分析

将轨道展平放置后制动盘试件以 187.5 rad/s 的角速度在壁面上滚动时内部盘面对流换热系数与压力云图如图 15 与 16 所示。内部通道盘面在迎风侧对流换热系数较大，背风侧换热系数较小。主要是空气的流动是由制动盘的运动所引发的，在迎风侧空气受影响压力变大，空气从静止开始运动。虽然壁面附近空气的绝对速度比较小，但是对于盘面的相对速度则比较大，故对流换热明显。而在背风区域空气在内部盘面及散热筋的影响下速度持续增大，但相对于盘面的相对速度较低故而对流换热比较低。由于散热筋的影响盘面上在筋压力侧周围

型成非常明显的高对流换区域，主要集中在针肋压力侧和两侧。在背风区域可以明显的看出，受滚动避免的影响，靠近滚动壁面处的对流换热系数明显高于远离壁面处。

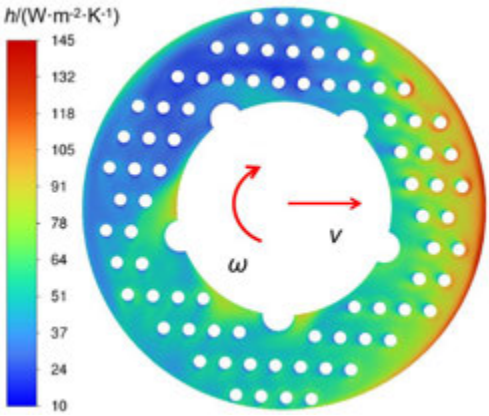


图 15 内部盘面对流换热系数云图

Figure 15 the convection heat transfer coefficient of the internal disk surface

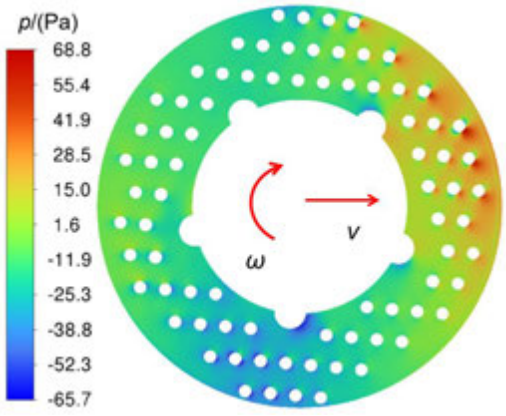


图 16 内部盘面压力云图

Figure 16 Internal disk surface pressure

图 18 和图 19 中所示为制动盘试件以 187.5 rad/s 的角速度在圆形轨道壁面上滚动时散热筋对流换热系数云图和压力云图。由图中可以看出，整体上散热筋在迎风侧对流换热系数比较大背风侧比较小，散热筋压力侧对流换热系数大于背压侧。可以看出散热筋上在靠近内部盘面的区域对流换热系数比较低，主要是由于在靠近内部盘面时空气受盘面影响与肋的相对流速比较低所致。可以明显的看到，轨道壁面的影响背风侧靠近轨道壁面处肋的对流换热系数明显大于远离壁面处的。

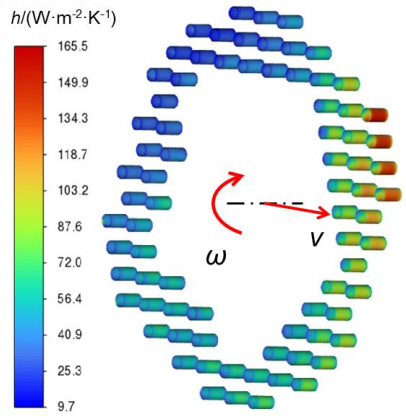


图 17 散热筋对流换热系数

Figure 17 Convective heat transfer coefficient of fins

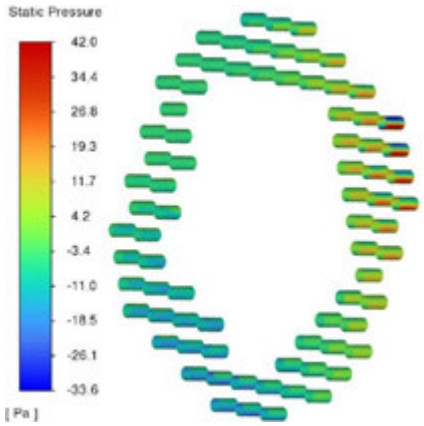


图 18 散热筋压力图

Figure 18 pressure cloud map of fins

通过整理仿真数据可得，当前制动盘试件内部盘面和散热筋对流换热系数与制动盘角速度存在线性对应关系。通过数据拟合以及无量纲化可得仿真中使用的制动盘试件的内部盘面和散热筋的平均努塞尔数 Nu 与制动盘旋转雷诺数 Re 之间的关联式如下：

$$Nu = 0.0232Re^{0.7996} \tag{9}$$

$$Nu = 0.0145Re^{0.9074} \tag{10}$$

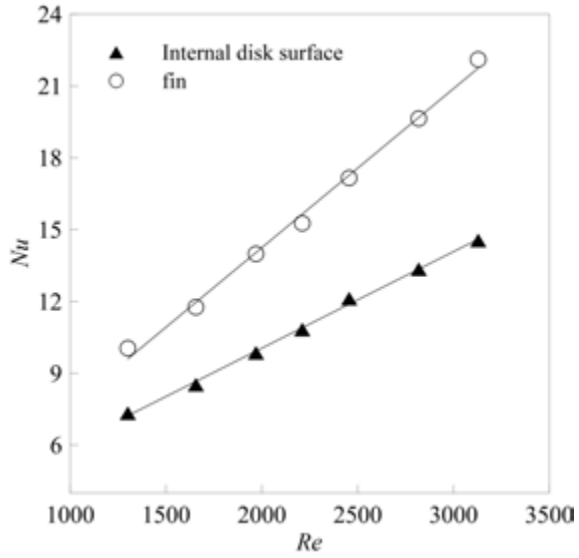


图 19 平均努塞尔数与旋转雷诺数关系

Figure 19Average Nussel number in relation to rotating Reynolds number

:

3 结论

本文利用Fluent软件对针肋型制动盘在几种工况下运行进行仿真研究，对实验装置进行简化得到仿真模型，然后使用动网格方法对针肋制动盘试件在圆形壁面上滚动过程中内部通道传热特性进行了仿真分析。主要结论如下：

(1)制动盘在滚动过程中在制动盘试件和滚动壁面之间和制动盘上部区域形成涡结构，在内外盘面区域比较弱，在内部通道区域由于散热筋的影响我比较强烈。内部通道中空气在背风区域速度比较大，在滚动壁面附近空气流速较小。

(2) 内部通道盘面在迎风侧对流换热系数较大，背风侧换热系数较小。由于散热筋的影响盘面上在筋压力侧周围形成非常明显的高对流换区域，主要集中在针肋压力侧和两侧。

(3) 整体上散热筋在迎风侧对流换热系数比较大背风侧比较小，散热筋压力侧对流换热系数大于非压力侧。可以看出散热筋上在靠近内部盘面的区域对流换热系数降低。

(4) 制动盘试件内部盘面和散热筋平均努塞尔数与旋转雷诺数的关系分别为 $Nu=0.0232Re^{0.7996}$ 和 $Nu=0.0145Re^{0.9074}$。

参考文献

[1] Mustafa G, Mehmet E, Ramazan Ö. An investigation on braking systems used in railway vehicles[J]. Engineering Science and Technology, an International Journal, 2020, 23(2): 421-431.

[2] Vdovin A, Gigan G L, Aerodynamic and thermal modelling of disc brakes—challenges and limitations, Energies 13(2020) 203.

[3] Jian Q F, Yan S. Numerical and experimental analysis of transient temperature field of ventilated disc brake under the condition of hard braking[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2017, 122: 115-123.

[4] Adamowicz A, Grzes P.Analysis of disc brake temperature distribution during single braking under non-axisymmetric load[J].Applied Thermal Engineering, 2011, 31(6-7): 1003-1012.

[5] Goo B C, Lim C H. Thermal fatigue of cast iron brake disk materials[J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2012, 26(6): 1719-1724.

[6] Yang Z, Han J, Li W, et al. Analyzing the mechanisms of fatigue crack initiation and propagation in CRH EMU brake discs[J]. Engineering Failure Analysis, 2013, 34: 121-128.
[7] Yan H B, Feng S S, Wu W T, et al. Experimental Study of Convective Heat Transfer in Standard and Cross-Drilled Brake Discs With Radial Vane and X-Lattice Cores[C]//ASME 2018 International Mechanical Engineering Congress and Exposition. 2018.
[8] Ji P, Wu F, Zhang G, et al. A novel numerical approach for investigation of the heat transport in a full 3D brake system of high-speed trains[J]. Numerical Heat Transfer Applications, 2019, 75(12): 824-840.
[9] Tirovic M, Topouris S, Sherwood G . Experimental investigation of the cooling characteristics of a monobloc cast iron brake disc with fingered hub[J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering, 2020, 234(1): 85-97.
[10] 金星. 高速列车制动盘传热特性实验研究[D]. 兰州交通大学, 2015.
[11] 黄晨. 高速列车扇形柱直肋制动盘内部通道传热特性的实验研究[D]. 兰州交通大学, 2018.
[12] 何梅. 高速列车制动盘内部针肋通道对流换热特性实验研究[D]. 兰州交通大学, 2017.
[13] Gerlici J, Fomina Y, Kravchenko K. The dependence of the brake disc aerodynamic drag on the rolling stock motion speed[J]. Transportation Research Procedia, 2021, 55(2): 723-730.
[14] Wang L, Lu X, Li H S, et al. A new experimental method to study the convective heat transfer characteristics of the interior passages of ventilated disc brakes[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2022, 179: 107675.
[15] Wang L, Lu X, He M, et al. Experimental study of convective heat transfer characteristics of ventilated passages formed by uniform diameter circular pin fins of disc brake[J]. Case Studies in Thermal Engineering, 2023, 44: 102862.
[16] 左建勇, 罗卓军. 高速列车制动盘泵风效应分析[J]. 交通运输工程学报, 2014, 14(2): 34-40+74.
[17] Zhou S F, Zuo J Y. Simulation of brake disc resistance torque of high-speed train considering air flow field[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2022, 2383(1): 012083.
[18] García-León R A, Afanador-García N, Gómez-Camperos J A. Numerical study of heat transfer and speed air flow on performance of an auto-ventilated disc brake[J]. Fluids, 2021, 6(4): 160.
[19] 薛梦凡. 基于多场耦合的铝合金制动盘结构设计及试验研究[D].北京交通大学,2022.
[20] 丁欣,硕焦南.Fluent 14.5 流体仿真计算从入门到精通[M]北京:清华大学社出版社 2014:115-117.
[21] 李阳杰, 符蓉, 高飞, 等. 列车制动盘试验测试与数值模拟的温度偏差分析[J]. 润滑与密封, 2019, 44(2): 51-58+71.
[22] Limpert R, Cooling analysis of disc brake rotors, SAE (1975), 751014.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233176

质子交换膜电解槽阳极流场拓扑研究

徐宏亮1，曾庆辉 1，杨晓宏 1,2,3*
（1 内蒙古工业大学 能源与动力工程学院，呼和浩特 010051；
2 风能太阳能利用技术教育部重点实验室，内蒙古工业大学，呼和浩特 010051；
3 内蒙古自治区新能源生产力促进中心, 内蒙古工业大学，呼和浩特 010051；）
(Tel:13848188275, Email: yxh1109@imut.edu.co)

摘要：本文建立了 PEM 电解槽三维全尺寸模型，对现有的平行流场、交指流场、蛇形流场以及双蛇形流场电解槽进行传质分析。结果表明，四种 PEM 电解槽阳极流场中平行流场压降最小，1.65V 电压下压降为 48.9Pa，反应物分布不均匀，流道内氧气难以排出；双蛇形流场压降适中，1.65V 电压下，压降为 893.6Pa，在四种流场中性能表现最优。利用 Comsol 软件设定散热最大化和功耗最小化两个优化目标，对 PEM 电解槽阳极流场进行双目标拓扑优化，对优化后的拓扑流场进行计算分析，结果表明，拓扑流场能够使阳极水分布的更加均匀，增加催化层表面电化学反应的面积。但最终电解槽的整体性能并没有特别明显的提升。本研究结果为 PEM 电解槽阳极流场的设计优化提供了参考。

关键词：PEM 电解槽；流场；拓扑优化；传质研究；模拟计算

0 前言

全球环境问题和对能源日益增长的需求要求可持续发展可再生能源技术，氢作为未来可持续发展的能源载体将发挥重要作用[1,2]。在现有的制氢方法中，电解水制氢过程清洁环保，是氢能发展的方向[3]，电解水制氢主要分为碱性（ALK）电解水制氢、固体氧化物（SOE）电解水制氢、阴离子交换膜（AEM）电解水制氢和质子交换膜（PEM）电解水制氢四种。ALK 电解水制氢技术最成熟，廉价的制氢成本使得 ALK 电解水制氢技术在电解水制氢领域应用十分广泛，在本世纪初就已经有了兆瓦级应用[4]，但碱槽的能耗相对较大，效率低[5]；SOE 电解水制氢技术效率较高，但是高温环境使得 SOE 电解槽具有非常高的制造成本，目前处于研发阶段；AEM 电解槽使用非贵金属催化剂、无钛部件，能够在压差下运行工作，成本低，效率高，但目前 AEM 膜存在化学、机械稳定性的问题，影响寿命曲线；相比较其他三种制氢方法，PEM 电解槽有结构简单、能效高、运行电流密度高、设计紧凑、启动时间短、储氢安全性高等优点[6-8]，适用于工业、航空、汽车以及居民日常生活等多个领域。但 PEM 电解槽目前仍有一些关键问题尚未解决。

阳极流场的设计对于PEM电解槽性能提升尤为重要，流场设计不合理会导致水在催化层界面分布不均，引起质子膜干涸、减小电化学反应面积，影响传热及氧气排出。一些学者利用计算流体动力学(CFD)方法来分析不同流场结构和流道尺寸对PEM电解槽阳

基金项目：内蒙古自治区高等学校创新团队发展计划 (NMGIRT2309); 内蒙古自治区直属高校基本科研业务费 (JY20220040); 内蒙古自然科学基金（2023MS05014）

极传质的影响，Rui Lin[9]建立了三种流场结构的三维模型来模拟电解槽内部的流速和压力分布，结果表明，流场结构对电解槽性能的影响最大，其次是工作温度。平行流场由于通道接触面积大、压力分布均匀，在中、低电流密度下具有较低的接触阻抗和较好的传质效果。Toghyani[10]等人建立了5种不同的PEM电解槽阳极流场模型，研究不同流场模型的电解槽中的产物分布和压力分布。研究发现，流场结构的设计和优化对PEM电解槽的性能至关重要。平行流场中的流体扩散缓慢，产氢率低；蛇形流场通道数越少，产氢率越高，但是同时压降也越大。Mukesh Upadhyay等人[11]选用圆形流场作为PEM电解槽的双极板结构，通过模拟不同尺寸进出通道和6种不同进出口位置的圆形流场，发现进出口尺寸越大，压降越小。进气通道数增加，压降有明显降低。北京工业大学邢晓慧[12]建立了三维、两相的电解槽模型，对比了平行流场、蛇形流场和交指型流场。相比于平行流场和蛇形流场，交指型流场的电解槽具有更好的传质特性，更低且更均匀的温度。Toghyani[13]等人通过对四种流场模型的比较分析，发现金属泡沫流场电解槽内部的电流密度和氢气的质量分数分布比其他三种流场更加均匀，温度梯度更低。平行流场和蛇形流场中的温度梯度较不均匀，会引起热应力的问题，而带有金属泡沫的流场最高温度更低，温度分布更加均匀。Khatib等[14]通过实验和三维模拟对三种不同流道结构（单蛇形、网状和开孔泡沫）电解槽进行分析。实验和模拟结果均表明开孔泡沫流道结构的电解槽性能更优异。

除上述一些对流场的结构和流道尺寸进行改进的方法外，近年来，越来越多的学者利用拓扑优化（topology optimization）的方法来改进流场，与结构、尺寸优化不同，拓扑优化是一种根据给定的负载情况、约束条件和性能指标，在给定的设计区域内对材料分布进行优化的数学方法，关于流道拓扑优化的研究主要集中在冷却剂通道的设计上[15,16]。Fan Chen[17]采用拓扑优化方法设计了用于矩形锂离子电池组冷却的冷板，利用COMSOL软件对拓扑优化冷板(TCP)进行了数值分析，结果表明，冷板流道结构对电池的温度分布有显著影响。Hao Li[18]提出了一种基于拓扑优化的液冷散热器设计方法，建立了全尺寸三维共轭传热数值模型，测试了散热器的流动和热性能。结果表明，优化后的冷却通道比传统的并联通道具有更好的传热效果。目前，拓扑优化的方法在PEM燃料电池的冷却通道优化和双极板力学性能优化中已经有了应用，但在PEM电解槽中的应用较少。

基于以上，本文对目前较常见的四种流场类型的 PEM 电解槽进行数值仿真并分析各流场的传质性能。利用拓扑优化方法，对 PEM 电解槽阳极流场进行双目标优化，设计新型流场，分析拓扑流场在 PEM 电解槽中的传质性能。

1 PEM 电解槽阳极流场数值模拟

1.1 计算模型

如图 1 所示，PEM 电解槽整体呈夹层结构，反应物水通过阳极流道进入阳极扩散层，在催化层表面发生析氧反应，被电解生成氧气（O_2）、电子（e^-）和氢离子（H^+），生成的 O_2 通过阳极扩散层返回流道并从阳极出口排出，e^-通过外电路到达电解槽阴极催化层

参与阴极还原反应，H^+穿过质子交换膜到达阴极催化层表面发生析氢反应，与 e^-结合产生 H_2。

$$H_2O \rightarrow 2H^+ + \frac{1}{2}O_2 + e^-(Anode) \quad (1)$$

$$2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2(Cathode) \quad (2)$$

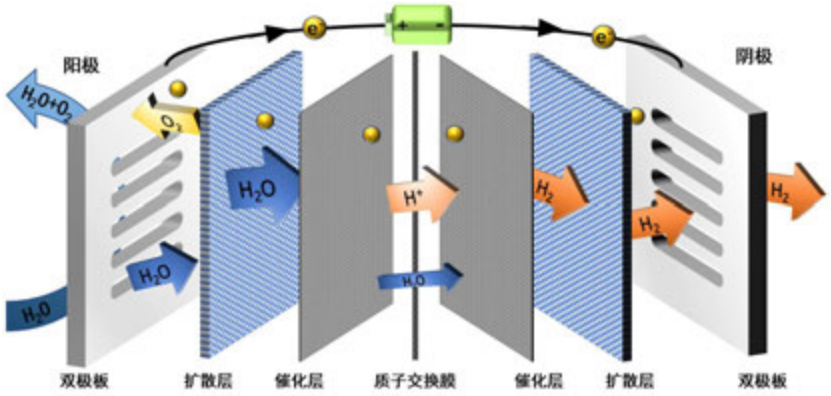


图1 PEM电解槽结构及工作原理图

本文中PEM电解槽采用三维、全尺寸模型，包括阴阳极双极板（C/ABP）、流道（C/ACH）、扩散层(C/AGDL)、催化层（C/ACL）以及质子交换膜（MEM），共9个区域。模型几何尺寸和相关参数如表1所示。

表 1 PEM 电解槽的几何参数和运行参数

物理量	数值	物理量	数值
双极板厚度	2 mm	膜比热容	1090 $J·kg^{-1}·K^{-1}$
催化层厚度	0.012 mm	扩散层比热容	523 $J·kg^{-1}·K^{-1}$
扩散层厚度	0.21 mm	催化层粘性阻力	1e+12 $1/m^2$
膜厚度	0.036 mm	催化层粘性阻力	1e+13 $1/m^2$
流道深×宽	1 mm×1.5 mm	H_2 参考扩散速率	1.10E-04 m^2/s
催化层孔隙率	0.3	O_2 参考扩散速率	7.35E-05 m^2/s
扩散层孔隙率	0.4	H_2O 参考扩散速率	3.20E-05 m^2/s
膜孔隙率	0.5	其他参考扩散速率	3.00E-05 m^2/s
膜热导率	0.29 $W·m^{-1}·K^{-1}$	扩散层渗透率	1.00E+12 m^2/s
扩散层热导率	1.6 $W·m^{-1}·K^{-1}$	催化层渗透率	1.00E+13 m^2/s

PEM电解槽实际工作过程涉及阴阳两极的电化学反应、多相流动和多组分扩散、液态水蒸发以及相变等多种复杂过程。在本工作中对模型进行如下简化：

（1） PEM 电解槽中的水、氧气、氢气均视为不可压缩流体；

（2） 忽略水的相变与蒸发；

（3） 将工质水视为气体，模拟过程为单相流；

（4） 膜的电导率仅为温度的函数；

（5） PEM 电解槽内流体流动状态为层流；

（6） PEM 电解槽中的多孔材料为各向同性。

本研究利用计算流体力学仿真软件 Fluent 2023R1 求解不同流场的 PEM 电解槽守恒方程，采用 SIMPLE 算法对压力和速度进行耦合，采用二阶迎风算法提高计算精度。对所有方程的多网格循环和 f 循环执行 BCGSTAB 方法。

基于上述条件，求解 9 个计算域内的连续性、动量、物质和能量守恒方程。采用单域模型和有限体积法求解控制方程。

连续性方程： $\nabla\cdot(\varepsilon\rho\vec{v})=0$ （3）

动量守恒方程： $\nabla\cdot(\varepsilon\rho\vec{v}\vec{v})=-\varepsilon\nabla p+\nabla(\varepsilon\mu\nabla\vec{v})+Su$ （4）

物质守恒方程： $\nabla\cdot(\varepsilon\vec{v}C_k)=\nabla\cdot(D_k^{eff}\nabla C_k)+S_k$ （5）

能量守恒方程： $\nabla\cdot(\rho\varepsilon C_P\vec{v}T)=\nabla\cdot(k_{eff}\nabla T)+S_e$ （6）

式中 ν 、 ρ 、 ε 、p、C_k、k_{eff}、 μ 和 C_P 分别为速度、密度、孔隙率、压力、第 k 种物质的摩尔浓度、有效导热系数、动力粘度和恒压比热。Su 为多孔区域的动量源项、S_k 为物质 k 的质量源项。S_e 是能量源项。

1.2 模型验证

将本模型的极化曲线与 Yang 等人[19]的实验数据进行比对，如图 2 所示，在低电流密度下曲线吻合较好，但随着电流密度升高，极化曲线吻合度下降，为使计算结果更接近真实情况，计算数据时电压取值不超过 1.65V。通过对不同网格数下电解槽的平均电流密度进行比较，如图 3 所示，在网格数增加至 872738 后模型中电解槽的平均电流密度的变化量逐渐减小，因此在不影响结果精确度的前提下，为了节省计算时间，在之后的计算模型中均选用 870000 左右的网格数。

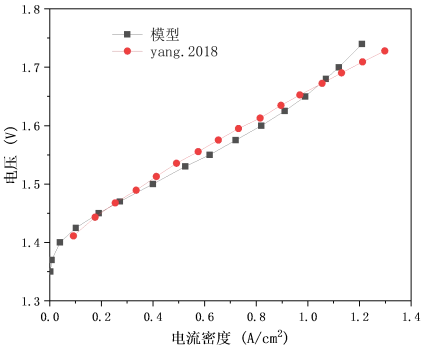


图 2 数值模型与实验数据对比

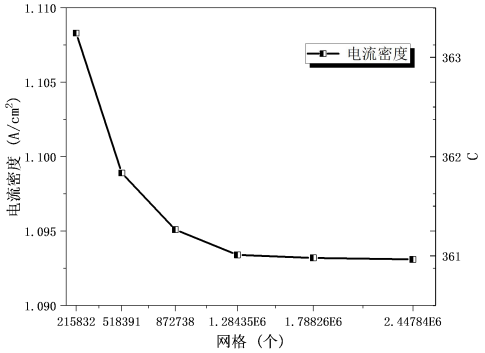


图 3 网格无关性验证

1.3 结果及讨论

1.3.1 PEM 电解槽阳极流场压降分布

图 4 所示为四种 PEM 电解槽阳极流场的几何模型，为后续能够更加清楚的对流场内计算结果进行表述分析，现对四种流场的各个流道进行编号。



(a)平行流场



(b)交指流场



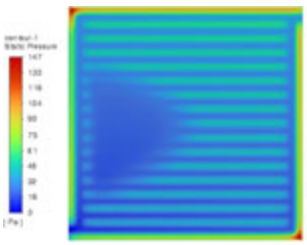
(c)蛇形流场



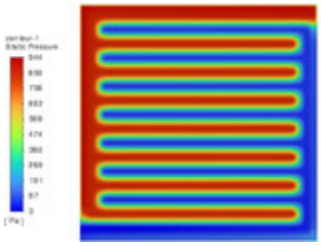
(d)双蛇形流场

图 4 四种 PEM 电解槽阳极流场的几何模型及流道编号

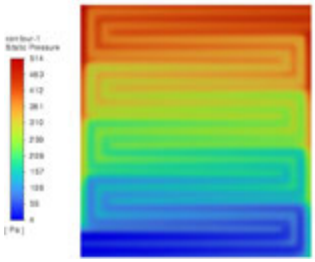
图 5 为 ACL-AGDL 截面压力分布云图，可以发现平行流场的中间区域压力较小，这不利于氧气的排出；交指流场的进口侧与出口侧没有直接相通，反应物只能通过向电解槽阳极多孔层扩散才能够到达出口侧，因而交指流场的进口侧与出口侧具有明显的压力差，流场会迫使反应物改变流向，对阳极扩散层甚至催化层造成不可逆的物理损伤，影响电解槽寿命；蛇形流场中只有一条通道，具有非常明显的压力梯度分布，从进口到出口压力逐渐升高，蛇形流场较其他流场更容易排出反应物以及氧气，但较高的压降，会额外增加槽外供水负担；相对于蛇形流场的一条通道而言，双蛇形流场内含有两条通道，可以优化蛇形流场中高压降的弊端。



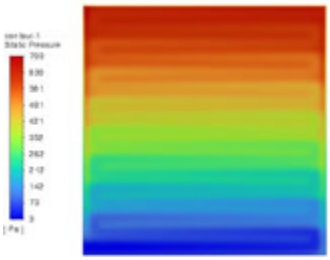
(a)平行流场



(b)交指流场



(c)双蛇形流场



(d)蛇形流场

图 5 四种 PEM 电解槽阳极流场在 ACL-AGDL 面的压力分布

图 6 描述了四种 PEM 电解槽阳极流场流道内部压降随电压的变化，可以发现交指流场的压降最高，其次是蛇形流场，并且随着电压的增加压降有所升高，在 1.65V 电压的条件下压降分别达到了 1240.2Pa 和 893.6Pa；随着电压的增加，双蛇形流场压降略有上升，平行流场几乎无变化，在 1.65V 电压的条件下，压降分别达到了 441.1Pa 和 48.9Pa。

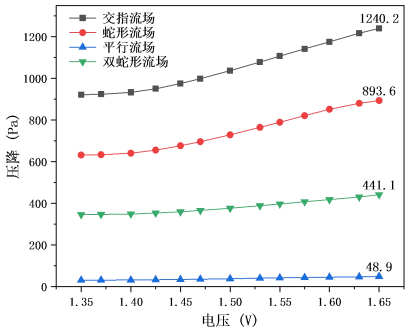
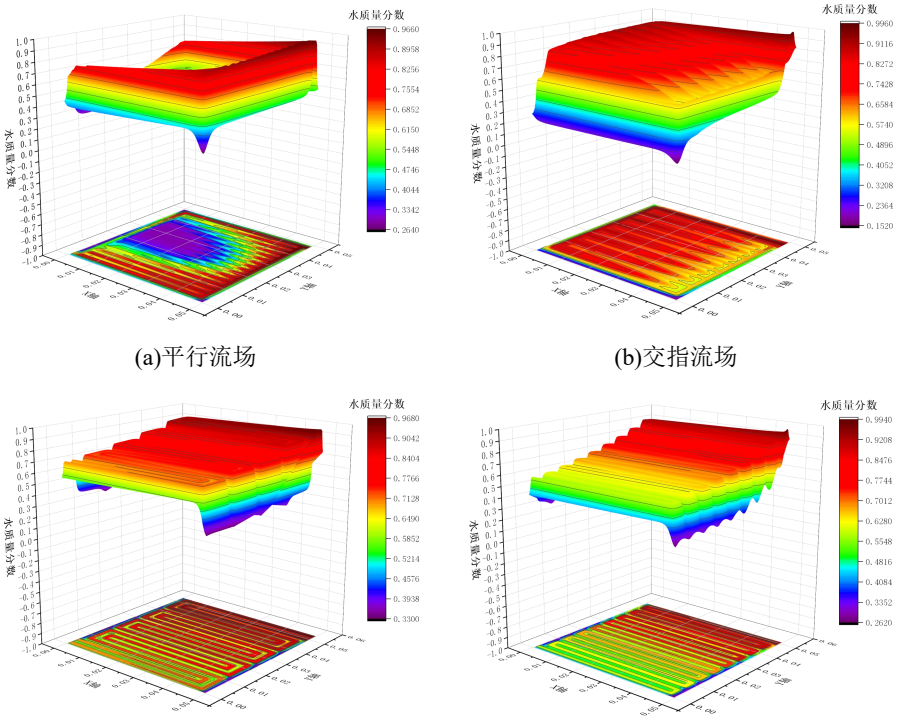


图 6 四种 PEM 电解槽阳极流场内压降随电压的变化

1.3.2 PEM 电解槽阳极流场水分布

图 7 所示为四种 PEM 电解槽阳极流场在 ACL-AGDL 截面的水分布云图，由图可知平行流场在中心区域含水量降低，说明此区域电化学反应剧烈，水被大量消耗，根据析氧反应，水在 ACL 表面被电解生成氧气，而此区域的压力较周围区域低，氧气很难排出流场，阻碍反应物进入电解槽，影响电解槽效率。其余三种流场具有较均匀的水分布，其中蛇形流场与双蛇形流场具有阶梯式分布特征，这有利于阳极水与氧气的排出。



(a)平行流场　(b)交指流场

(c)双蛇形流场　(d)蛇形流场

图 7 四种 PEM 电解槽阳极流场在 ACL-AGDL 面的水分布

图 8 所示为四种 PEM 电解槽阳极流场中各流道的水含量对比，平行流场由于在流场中心处发生了较强烈的电化学反应，水被大量消耗，在流场中间的几条流道内水含量最低，进口和出口处的水含量最高，曲线呈“凹”状；交指流场进口流道与出口流道呈交错排列，进口侧流道的水含量比出口侧流道多，由于电化学反应对水的消耗，从流场进口到出口水含量略有下降；蛇形流场与双蛇形流场流道内的水含量从进口到出口方向也均具有下降的趋势，但由于双蛇形流场的压降较低。流道中水向多孔层扩散的速率小，因此双蛇形流场中流道内的水含量较高。图 9 为流场中各流道的氧含量对比，可以发现流道中水与氧的含量呈“此消彼长“关系，说明在模型假设的基础上，阳极流道内只包含水与氧气两种物质，验证了模型的正确性。

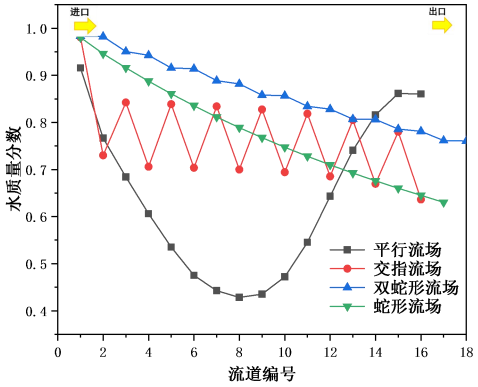


图 8 流场中各流道内水含量比较

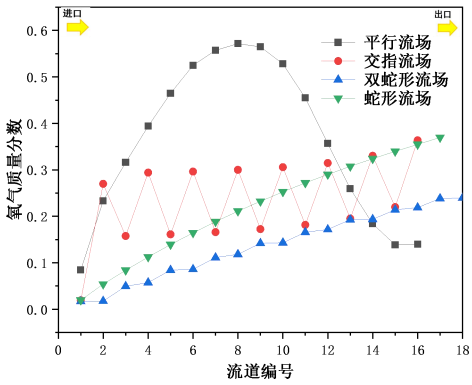


图 9 流场中各流道内氧含量比较

2 拓扑流场传质性能研究

2.1 计算模型

利用多物理场分析软件 COMSOL Multiphasics 6.0 对 PEM 电解槽阳极流场进行二维拓扑计算，图 10 为本研究的几何模型。流场的长度为 5L，宽度为 2.5L，其中 L 为特征长度，将流场的进出口放置流场的左右两侧，除进出口外其余区域均为计算域。

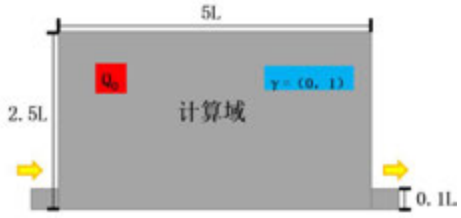


图 10 拓扑优化几何模型示意图

本文拓扑方法基于密度模型，计算域视为理想的多孔介质，将计算域离散为有限个计算单元，并引入设计变量 γ，γ 从 0 到 1 连续变化，γ =0 时计算单元输出为固体域，γ =1 计算单元输出为流体域。模型中将水视为不可压缩流体，流动状态为层流，则有水流动的 Navier-Stokes 方程：

$$\nabla \cdot u = 0 \tag{7}$$

$$\rho(u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \mu \nabla^2 u + F \tag{8}$$

式中 ρ 为密度，u 为速度，p 为压力，μ 为粘度。

拓扑优化采用了布林克曼模型，在动量守恒方程中加入与速度相关的阻尼项，用来模拟流体穿过理想多孔介质时所受的摩擦力，体力项 F 与反渗透率 α 的函数关系为：

$$F = -\alpha u \tag{9}$$

式中 u 为速度矢量，F 为体力项，α 为反渗透率。

当 α =0 时，F=0，则此计算单元为流体区域，α 当为无穷大时，F 接近于无穷大，代表此计算单元内流体无法穿透固体区域。在流体拓扑优化设计中，反渗透率 α 是与设计变量 γ 相关的 Darcy 插值函数[20]，描述如下：

$$\alpha(\gamma) = \alpha_f + (\alpha_s + \alpha_f)\frac{q(1-\gamma)}{q+\gamma} \tag{10}$$

式中 q 为 Darcy 插值模型的惩罚因子，α_s 和 α_f 为固体和流体反渗透速率。

本文中，q 取 0.01，α_s 取 0，α_f 是一个常数通常取值较大：

$$\alpha_s = (1+1/\mathrm{Re})/Da \tag{11}$$

模型中水以恒定功率进入流场，流场出口压力设为 0Pa。雷诺数取为 130，为与前面四种流场的结果进行对比，将流体域/固体域面积比取为上述四种流场的平均值 0.635。为模型添加双目标优化策略，分别为散热最大化和功耗最小化，并为两种优化目标给予相应的权重系数 W1、W2，其中 W1+W2=1。用不同的权重系数比例设定三种优化方案，如表 2 所示，具体的参数选择如表 3 所示。

表 2 三种模拟方案

模拟方案	W1	W2
方案一	0.8	0.2
方案二	0.6	0.4
方案三	0.4	0.6

表 3 拓扑优化相关参数

物理量	取值
Re	130
Pr	6.78
Vf	0.635
投影斜率	8
达西罚函数	0.01

2.2 拓扑优化结果

利用 Comsol 6.0 中自带的镜像功能将计算结果输出为如图 11 所示的三种不同结构的流场。其中白色代表流体域，黑色代表固体域，可以发现，随着功耗最小化目标的权重系数的增加，流道以及墙壁的宽度明显增大，且流道与墙壁分布不均匀，这会使 PEM 电解槽内氧气难以排出，因此本研究中 W2 的最大值限定为 0.6。

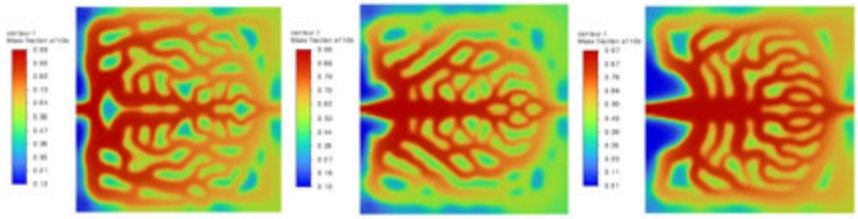


（a）方案一　　（b）方案二　　（c）方案三

图 11 三种权重系数下流道拓扑结果图

2.3 拓扑流场传质性能分析

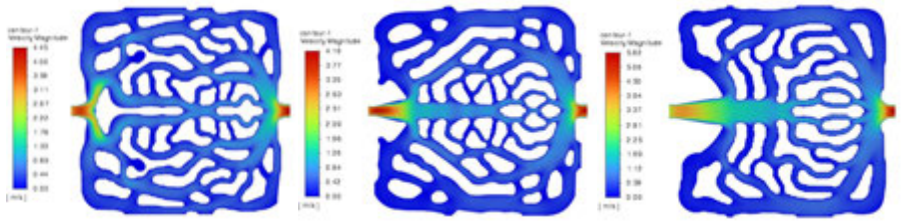
将拓扑流场拉伸成三维，回到 Fluent 2023R1 中研究其在 PEM 电解槽中所表现的性能。由图 12 可以看出，三种拓扑流场中水分布的非常均匀，随着反应的进行，进口端到出口端，水逐渐被消耗。方案三流场进口位置固体区域较多，水的质量分数最小仅为 0.01，这会引起该区域内的膜干涸，缩小催化层表面电化学反应面积，影响电解槽工作效率。



（a）方案一　　（b）方案二　　（c）方案三

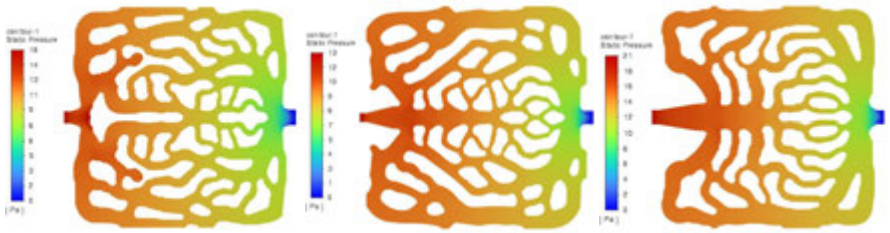
图 12 三种 PEM 电解槽阳极拓扑流场在 ACL-AGDL 面水分布云图

图 13、14 分别为三种拓扑流场内速度和压力分布云图，从速度分布云图可以看出三种流场都呈现进出口速度大，其余区域速度小且速度均匀分布的特征，均匀的流速能够让反应物分布更均匀。从压力云图中可以看出拓扑流场的压降非常小，三种方案流场的流道内压降分别为 16Pa、13Pa 和 21Pa，这并不是预期的结果，随着功耗最小化目标函数的权重系数增加，会使流场内压降降低，而方案三出现了相反的结果。分析其原因，在计算域施加的热源区域为整个计算域，但实际 PEM 电解槽只有确定工质流动状况后才能确定电化学反应的位置以及反应的强烈程度，进而确定热源的位置与大小，而热量会影响在电解槽中反应物的消耗与工质流动，由此造成的误差会直接影响流道内的压力分布。其次，本文采用单相流模型，实际情况下氧气与液态水之间的相互作用也会影响工质的流动状态进而影响压力分布。



（a）方案一　　（b）方案二　　（c）方案三

图 13 三种 PEM 电解槽阳极拓扑流场在流道内速度分布云图



（a）方案一　　（b）方案二　　（c）方案三

图 14 三种 PEM 电解槽阳极拓扑流场在流道内压力分布云图

极化曲线是比较电解槽性能优劣的常用方法，如图 15 所示为方案二流场 PEM 电解槽与前面四种流场类型的 PEM 电解槽极化曲线对比，从图中可以看出，各流场类型的 PEM 电解槽在低电流密度时极化曲线几乎没有差别，随着电流密度的增加，极化曲线逐渐产生差距，在相同电解电压下，平行流场 PEM 电解槽的平均电流密度最小，其次是交指流场、方案二拓扑流场、蛇形流场和双蛇形流场 PEM 电解槽。水分布的均匀性只是影响 PEM 电解槽性能的因素之一，对 PEM 电解槽阳极流场进行拓扑优化并不能有效地提升 PEM 电解槽整体性能。但能够让水更加均匀的分布在催化层表面，提高催化剂利用率，可以为后续流场设计提供参考与借鉴。

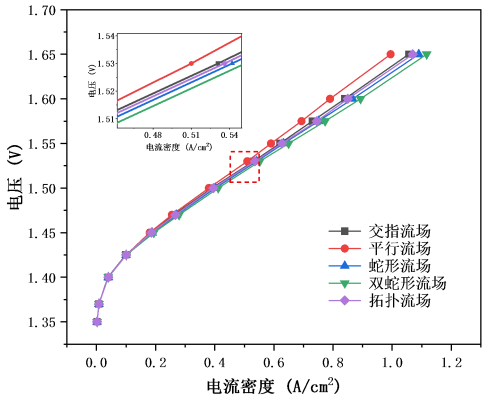


图 15 五种不同阳极流场 PEM 电解槽的极化曲线对比

3 结论

本文建立了 PEM 电解槽三维全尺寸模型，对 PEM 电解槽内不同阳极流场进行了计算模拟研究，分析了不同流场的优劣势。利用拓扑优化技术结合散热最大化和功耗最小化两种目标函数对 PEM 电解槽阳极流场进行双目标优化，对得到的拓扑流场进行了分析对比，结论如下：

（1）平行流场水分布最不均匀，流场中心存在低压力区域，影响阳极氧气排出。双蛇形流场的压降为 893.6Pa，较为适中，流道内含水量分布较均匀，性能最佳。

（2）对 PEM 电解槽阳极流场进行拓扑优化可使水在 ACL-AGDL 截面分布更加均匀，同时拓扑流场具有较低的压降，方案二的流场流道内压降只有 13Pa。

（3）功耗最小化目标函数（W2）的权重系数增加，会增加流场中流道宽度，并会伴随着大面积的陆地区域出现，这不利于 PEM 电解槽工作中氧气的排出。

参考文献

[1] K. Nagasawa, A. Kato, Y. Nishiki, Y. Matsumura, M. Atobe, S. Mitsushima, The effect of flow-field structure in toluene hydrogenation electrolyzer for energy Carrier synthesis system, Electrochim. Acta 246 (2017) 459-465.

[2] D.M. Hall, S.N. Lvov, Modeling a CuCl (aq)/HCl (aq) electrolyzer using thermodynamics and electrochemical kinetics, Electrochim. Acta 190 (2016).

[3] Gong Y, Yao J, Wang P, Li Z, Zhou H, Xu C. Perspective of hydrogen energy and recent progress in electrocatalytic water splitting. Chin J Chem Eng 2022;43:282–96.1167-1174.

[4] Gorre J, Ruoss F, Karjunen H, Schaffert J, Tynjala T. Cost benefits of optimizing hydrogen storage and methanation capacities for Power-to-Gas plants in dynamic operation. Appl Energy. 2020;257:113967.

[5] Zeng K, Zhang D. Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2010, 36(3): 307-326.

[6] Lewandowska-Bernat A, Desideri U. Opportunities of power-to-gas technology in different energy systems architectures. Appl Energy. 2018;228:57–67.

[7] Bhattacharyya R, Misra A, Sandeep KC. Photovoltaic solar energy conversion for hydrogen production by alkaline water electrolysis: conceptual design and analysis. Energy Conv Manag. 2017;133:1–13.

[8] Wang H, Li W, Liu T, Liu X, Hu X. Thermodynamic analysis and optimization of photovoltaic/thermal hybrid hydrogen generation system based on complementary combination of photovoltaic cells and proton exchange membrane electrolyzer. Energy Conv Manag. 2019;183:97–108.

[9] Rui Lin, Investigation on performance of proton exchange membrane electrolyzer with different flow field structures[J].Applied Energy 326 (2022) 120011.

[10] Toghyani S, Afshari E, Baniasadi E, et al. Thermal and electrochemical analysis of different flow field patterns in a PEM electrolyzer [J]. Electrochimica Acta, 2018, 267: 234-245.

[11] Mukesh Upadhyay, Sunggeun Lee, Seokjoo Jung, et al. Systematic assessment of the anode flow field hydrodynamics in a new circular PEM water electrolyser[J]. international journal of hydrogen energy, 2020, 45(21): 20765-20775.

[12] 邢晓慧.质子交换膜电解槽传热传质及流场结构研究[D].北京：北京交通大学，2020.

[13] Toghyani S, Afshari E, Baniasadi E. Metal foams as flow distributors in comparison with serpentine and parallel flow fields in proton exchange membrane electrolyzer cells [J]. Electrochimica Acta, 2018, 290:506-519.

[14] Khatib F N, Wilberforce T, Thompson J, et al. Experimental and analytical study of open pore cellular foam material on the performance of proton exchange membrane electrolysers[J]. International Journal of Thermofluids, 2021,9: 100068.

[15] Liu J, Li RF, Wang K. Net-based topology optimization approach for cooling channels. Int J Therm Sci 2020;156:106494.

[16] Zhang TT, Yang XQ, Wang XL. Level set-based topology optimization for thermal-fluid system based on the radial basis functions. Appl Math Model 2023;113:144-59.

[17] Fan Chen, Jiao Wang, Xinglin Yang，Topology optimization design and numerical analysis on cold plates

for lithium-ion battery thermal management[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer 183 (2022) 122087.

[18] Li, Xiaohong Ding , Fanzhen Meng, Dalei Jing, Min Xiong, Optimal design and thermal modelling for liquid-cooled heat sink based on multi-objective topology optimization: An experimental and umerical study[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer 144 (2019) 118638.

[19] Gaoqiang Yang ， Shule Yu，Jingke Mo. et al. Bipolar plate development with additive manufacturing and protective coating for durable and high-effiffifficiency hydrogen production[J]. Journal of Power Sources, 2018, 396: 590-598.

[20] X. Han, H. Liu, G. Xie, Topology optimization for spider web heat sinks for electronic cooling, Appl. Therm. Eng. 195 (2021), 117154.

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号 14xxxx

高压共轨喷油器典型微通道内高压湍流空化流动特性实验及数值研究

邹子源[1]， 陈黎*[1]， 彭明[1]， 陶文铨[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，西安·710049
Tel: 18966722665 Email:lichennht08@mail.xjtu.edu.cn

摘要： 高压共轨技术能有效提高柴油发动机燃烧效率和动力性。在高压条件下，喷油器微通道内的空化会影响喷油稳定性并降低喷油器可靠性。为研究喷油器内高压湍流空化运动，本文以喷油器内的典型微通道为对象，采用可视化试验和数值计算方法，研究了微通道内空化的形成和发展过程。同时，本文开发了含不可凝结气体的非等温、两相三组分可压空化模型，研究显示：不凝性气体会加速相变速率，并在喷孔低压区内膨胀，从而显著提高汽相体积分数。

关键词： 高压共轨喷油器，空化，可视化试验，数值计算

0 前言

柴油机是民用设备、交通运输和国防军事装备中重要的动力源，具有热效率高、功率大、结构简单与技术成熟等优势。为了提升柴油机的性能，研究人员采用高压共轨技术来提高喷油器喷射压力，从而实现燃油更好的雾化以及更充分的燃烧，实现节能减排等目的[1]。然而，喷射压力的提高却带来了新的问题，即喷油器内部微孔处的空化强度和空蚀风险出现了大幅度的增加。通过对拆解的喷油器的观察，研究人员发现喷嘴、针阀以及球阀处出现了明显的空蚀损伤，严重影响了其稳定性、一致性以及可靠性[2]。因此，为了完全深入解决柴油机高压共轨技术的问题，实现更加优质的动力源，需要着重探究柴油机典型微通道内的空化流动机理，并进一步研究和改进高压共轨技术，从而更好地提升柴油机的性能和可靠性。

空化是一种液体特有的现象，发生在高速流动的液体中，其本质是高速流动的常温液由于局部压力降低，导致气化或液化现象的发生。其中气化过程称为空化产生，是突然而平缓的，其液化过程称作空化溃灭，是突然而又剧烈的[3]。采用高速摄像机可对空化过程进行捕捉[4]，常见的空化形态有泡空化、片状空化、云空化、超空化和线空化[5]。

图 1 展示了某型喷油器的结构图。该结构在柴油机高压共轨系统中起到关键作用，其主要作用是调节高压油管和喷油嘴之间的油压，以达到喷油的目的。当电控系统周期性的电信号传输至控制阀时，球阀会产生磁力，这个磁力可以克服球阀上的弹簧预紧力，从而迫使阀门开启。一旦球阀开启，喷油器内部的高压燃油会通过阀门流向喷嘴，实现燃油的喷射。同时，由于燃油流向喷嘴，高压油管内的油压也会随之降低。当喷射时间达到一定的值后，电信号消失，球阀和控制阀便会在压差和弹簧预紧力的综合作用下回落并关闭流道，使得高压油管内的油压恢复到轨压。因此，掌握喷油器控制阀的结构和工作原理，对于高压共轨系统的设计和优化具有重要的意义。

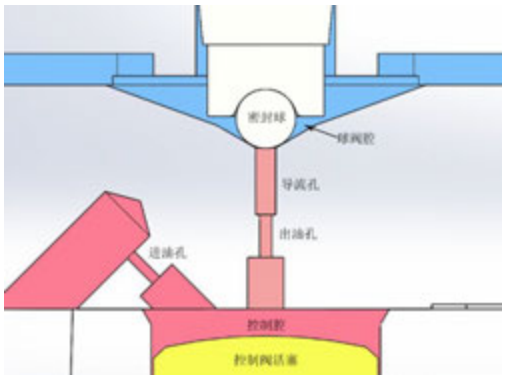


图 1 喷油器控制阀结构示意图

以往对于喷油器内部空化问题的研究主要侧重于喷孔和针阀处，而对于喷油器控制阀内部空化的研究则相对较少。控制阀内部的流场属于淹没式射流，并具有微型、高压差和流通面积变化等特点，因此，本文主要针对这些特点，开展了研究喷油器控制阀内部流场空化的研究。关于内流场空化的研究方式主要是试验研究和数值计算。

Payri 等人[6]参照了柴油机内微通道的实际尺寸，制造了直径为 0.5mm 的石英圆形微通道，并通过四种不同的燃油对喷嘴内部的流动特性进行了研究，实验证明微通道内部的空化现象取决于上下游的压力条件和所使用的流体的粘度。此外，研究还发现当空化发展到一定程度时，质量流量将不再增加，即“chock flow”现象出现。何志霞等人[7]采用高速摄像机观察了喷油器内的空化演变过程，并发现其中存在着空气倒吸、残余气泡、旋涡诱导线状空化等特殊流动现象。研究人员根据不同涡弦空化形态，将其命名为α线空化和β线空化，其中α线空化可以显著改善出口燃油的雾化质量。

Echouchene[8]采用数值方法研究了入口压力和壁面粗糙度对微通道内关键物理量的影响，发现不同的壁粗糙度会使得壁面附近的湍动能分布产生差异，但对空化特性的影响不大；Salvador[9]通过试验测定柴油在不同温度、压力下的物性参数，在此基础上进行仿真模拟，分析了不同入口压力下柴油机微通道内部的温度、密度、流场和空化分布等信息；麻斌[10]在 Singhal 空化模型中引入不凝性气体，对喷嘴孔内空化现象进行数值模拟，并将其结果与传统的 SS 空化模型进行比较。研究发现，液相工质内的不凝性气体含量会对喷孔流量特性造成显著影响，导致流量提前进入“流量塌陷”阶段，总体流量呈下降趋势。

控制阀内流场的空化问题与其控制性能、可靠性密切相关，直接影响着喷油规律。针对前述控制阀内部流动特性及空化现象研究中存在问题，本论文在 Salvador 和麻斌的研究基础上发展了含不凝结气体的两相三组分非等温可压缩空化模型，并进行可视化试验验证。研究控制阀典型微通道内部流场特性和空化的形成与溃灭过程，揭示控制阀内流场各部位对空化的影响规律、喷油器工况与空化强度之间的关系，为制定喷油策略、提高喷油器可靠性和改善喷油器控制性能等问题提供理论依据和工程建议。

1 试验装置及系统介绍

图 2 和图 3 展示了本文设计并搭建的高压燃油空化两相流动可视化试验系统，其包括透明微通道试验件、高压燃油循环供给系统、数据采集系统、高速摄影系统以及试验夹具等设备。在试验中，采用的高速摄像机型号为 5KF 高清千眼狼牌摄像机，拍摄像素为 1080×1920，最高拍摄速度为 2000 帧/秒。透明微通道试验件被固定在可视化实验装

置内，高压燃油循环供给系统向试验件内提供燃油，入口处的压力传感器和质量流量计同时进行数据记录。高速摄影系统则用于拍摄流道内产生的空化现象。通过此可视化试验系统，能够直观地观察、记录和分析微通道内高压湍流空化流动的特性与发展演化过程，从而为研究此类问题提供有力支持。

试验的核心部件透明微通道试验件由亚克力（聚甲基丙烯酸甲酯 PMMA，透射率 1.49，接近柴油）制作，具备透光性较好、折射率接近柴油、易加工和一定的耐压性等特征。微通道流道通过车床铣削制成，厚度 1.5 mm、宽 1.5 mm、长 5.0 mm；流道板两侧被金属夹板夹持固定，另外在微通道的上下段分别设置长度为 4 mm×1.5 mm×25 mm 和 6 mm×1.5 mm×25 mm 的流道以此来保证微通道内部流动不受上下游干扰，试验件的外形详见图 4。

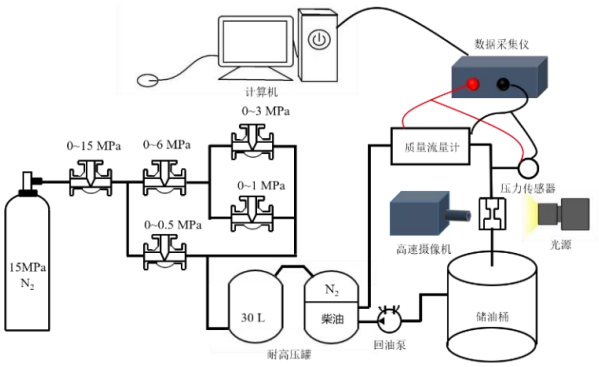


图 2 可视化试验系统示意图



图 3 可视化试验系统实物图

高压燃油循环供给系统由高压氮气源、减压阀、耐高压罐、储油桶、回油泵及连接管道组成。其中高压氮气为 15 MPa，经两级减压阀后可实现 0~3 MPa 的精准调节。在试验过程中，先打开气路开关，高压氮气首先进入耐高压罐中，等待压力稳定后开启油路通道开关，此时液态柴油会在高压氮气的驱动下，流经质量流量计、压力传感器、透明微通道试验件最终喷入储油桶。一次试验完成后，关闭气路开关，打开回油泵，柴油重新从储油桶中流回耐高压罐中，以实现对柴油的重复利用。

如图 5 所示，试验中采用阴影成像法来拍摄空化图像。流道内柴油的流动区域透光性较好，因此呈现出浅颜色的图像。而空化区域则存在大量的空化泡，气液两相交界面处的光线在被折射、散射后会使直射到相机的光强减小，因此该区域在图像上呈现出较深的颜色。当该区域内的空化程度加重、气体体积分数增加时，到达相机的光量越少，图像的颜色也随之加深。

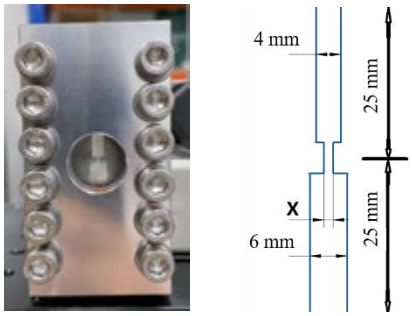


图 4 透明微通道试验件实物及尺寸示意图



图 5 高速摄像机及配套

2 湍流空化流动模型

2.1 多相流模型

本文采用了 Mixture 多相流模型，具体介绍如下：

2.1.1 连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}}\left(\rho_{\mathrm{m}}\right)+\nabla\cdot\left(\rho_{\mathrm{m}}\vec{v}_{\mathrm{m}}\right)=0 \tag{1}$$

$$\vec{v}_{\mathrm{m}}=\frac{\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\rho_k\vec{v}_k}{\rho_{\mathrm{m}}} \tag{2}$$

$$\rho_{\mathrm{m}}=\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\rho_k \tag{3}$$

其中 $\vec{v}_{\mathrm{m}}$ 为质量平均速度/m·s^{-1}； ρ_{m} 为混合相密度/kg·m^{-3}； α_k 为第 k 相的体积分数。

2.1.2 动量方程

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}}\left(\rho_{\mathrm{m}}\vec{v}_{\mathrm{m}}\right)+\nabla\cdot\left(\rho_{\mathrm{m}}\vec{v}_{\mathrm{m}}\vec{v}_{\mathrm{m}}\right)=-\nabla p+\nabla\cdot\left[\mu_{\mathrm{m}}\left(\nabla\vec{v}_{\mathrm{m}}+\nabla\vec{v}_{\mathrm{m}}^{T}\right)\right]-\nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\rho_k\vec{v}_{dr,k}\vec{v}_{dr,k}\right) \tag{4}$$

$$\mu_{\mathrm{m}}=\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\mu_k \tag{5}$$

$$\vec{v}_{dr,k}=\vec{v}_k-\vec{v}_{\mathrm{m}} \tag{6}$$

其中 μ_{m} 为混合相的密度/kg·m^{-3}；$\vec{v}_k$ 为第 k 相速度/m·s^{-1}；$\vec{v}_{dr,k}$ 为第 k 相相对于混合相的滑移速度/m·s^{-1}；

2.1.3 能量方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_k \rho_{\mathrm{m}} E_k\right)+\nabla\left(\alpha_k \overrightarrow{u_k}\left(\rho_{\mathrm{m}} E_k+p\right)\right)=\nabla\left[k_{eff}\nabla T-\sum_k^n\sum_j^n h_{j,k}\vec{J}_{j,k}\right]+\Phi+S_h \quad (7)$$

$$E_k=h_k-\frac{p}{\rho_k}+\frac{v_k^2}{2} \quad (8)$$

$$k_{eff}=\sum_{i=1}^{n}\alpha_k\left(k_k+k_t\right) \quad (9)$$

其中 E_k 为系统总能量/J·kg^{-1}，h_k 为第 k 相的焓/ J·kg^{-1}，k_{eff} 为有效导热率/W·m^{-1}·K^{-1}，k_t 为根据所使用湍流模型定义的湍流热导率/W·m^{-1}·K^{-1}，$h_{j,k}$ 为 k 相中物质 j 的焓/ J·kg^{-1}，$\vec{J}_{j,k}$ 为相 k 中物质 j 的扩散通量/kg m^{-2}·s^{-1}，Φ 为粘性耗散产的热量/W·m^{-3}，S_h 为反应热源项/W·m^{-3}。

2.2 湍流模型

当高压燃油通过微通道时，其流速可以达到每秒几百米，这会导致局部雷诺数高达数万或甚至十万量级，表现出剧烈的湍流流态。为本文使用 Standard k-ε湍流模型，模型中湍动能 k 和耗散率ε的微分方程如下：

$$\frac{\partial k}{\partial t}+\overline{u}_i\frac{\partial k}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(C_k\frac{k^2}{\varepsilon}+\nu\right)\frac{\partial k}{\partial x_i}\right]+P-\varepsilon \quad (10)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\overline{u}_i\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(C_\varepsilon\frac{k^2}{\varepsilon}+\nu\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}\right]+C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}P-C_{2\varepsilon}\rho_m\frac{\varepsilon^2}{k} \quad (11)$$

$$P=\nu_{\mathrm{t}}\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k}+\frac{\partial \overline{u}_k}{\partial x_i}\right)\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k} \quad (12)$$

$$\mu_{\mathrm{t}}=C_\mu\rho\frac{k^2}{\varepsilon} \quad (13)$$

$$k_{\mathrm{t}}=\frac{C_\mu\rho k^2}{\varepsilon} \quad (14)$$

其中 P 为湍动能生成项/J·kg^{-1}，μ_t 为湍流粘度/Pa·s，C_k、C_ε 两个常数分别为 1.0、1.3，系数 C_μ、$C_{1\varepsilon}$、$C_{2\varepsilon}$ 分别为 0.09、1.44、1.92。

2.3 空化模型

因此本文所使用的两相三组分空化模型为

$$R_v=\frac{\rho_v\rho_l}{\rho_m}\left[1+\frac{\alpha_n}{(1-\alpha_v-\alpha_n)}\right](1-\alpha_v-\alpha_n)^{4/3}(\alpha_v+\alpha_n)^{2/3}\times\frac{3}{\left(\frac{3}{4\pi}\frac{1}{n}\right)^{1/3}}\sqrt{\frac{2}{3}\frac{(P_v-P)}{\rho_l}},P_v>P \quad (15)$$

$$R_c=\frac{\rho_v\rho_l}{\rho_m}\left[1+\frac{\alpha_n}{(1-\alpha_v-\alpha_n)}\right](1-\alpha_v-\alpha_n)^{4/3}(\alpha_v+\alpha_n)^{2/3}\times\frac{3}{\left(\frac{3}{4\pi}\frac{1}{n}\right)^{1/3}}\sqrt{\frac{2}{3}\frac{(P-P_v)}{\rho_l}},P>P_v \quad (16)$$

其中 R_v 代表单位时间内由液相转化为气相的质量/kg·m^{-3}·s^{-1}，R_c 代表单位时间内由其相转化为液相的质量/kg·m^{-3}·s^{-1}，α_v 分空化产生的蒸汽相体积分数，α_n 为不可凝结气体的体积分数，P 为局部压力/Pa，P_v 为饱和蒸汽压/Pa，其中蒸汽相体积分数 α_v 及不可凝结气体的体积分数 α_n 控制方程如下

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_v\rho_v)+\nabla\cdot(\alpha_v\rho_v\vec{v}_v)=R_e \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_n\rho_n)+\nabla\cdot(\alpha_n\rho_n\vec{v}_n)=0 \quad (18)$$

$$\alpha_v+\alpha_n+\alpha_l=1 \quad (19)$$

2.4 燃油物性参数

在柴油机典型微通道中，燃油流动压力通常从几千帕变化到几十乃至几百兆帕，同时，粘性耗散作用引起壁面附近引起明显的温度上升，为确保仿真结果的准确性，需要考虑压力和温度对燃油物性（如密度、粘度、导热系数、比热容）的影响。Salvador 等在文献[12]中利用标准比重计和 Cannon-Fenske 毛细管粘度计分别测量欧洲标准冬季柴油在不同温度和压力下的密度和粘度，并拟合出燃油物性随压力和温度变化的数学函数，具体表达式如下所示。

首先是液相燃油的密度 ρ_{liq}、粘度 μ_{liq}、比热容 $c_{p,liq}$ 和导热系数 λ_{liq}：

$$\begin{aligned}\rho_{liq}=&826.5-1.0217(T-298)+1.251\cdot10^{-3}\cdot(T-298)^2+0.6035\cdot(P-0.1)\\&-8.265\cdot10^{-4}\cdot(P-0.1)^2+1.441\cdot10^{-3}\cdot(T-298)(P-0.1)\end{aligned} \quad (20)$$

$$\mu_{\mathrm{liq}}=10^{-3}\cdot\mu_0\cdot10^{\left[\left(-1.48+5.86\cdot\mu_0^{\,0.181}\right)\left(\frac{p-0.1}{1000}\right)\right]} \tag{21}$$

$$\mu_0=3.2158\cdot\mathrm{e}^{\left[-0.0263\cdot(T-298)\right]} \tag{22}$$

$$c_{\mathrm{p,liq}}=-977.16186+14.0251\cdot T-0.01374\cdot T^2 \tag{23}$$

$$\lambda_{\mathrm{liq}}=\sum_{i=1}^{3}\left(\sum_{j=1}^{3}a_{ij}\cdot T^{j-1}\right)(p)^{i-1} \tag{24}$$

$$a_{ij}=\begin{pmatrix}1.3924E-01 & 3.78253E-05 & -2.89732E-07\\ 6.27425E-11 & 6.08052E-13 & 3.64777E-16\\ -1.38756E-19 & -2.57608E-22 & -2.70893E-24\end{pmatrix} \tag{25}$$

气相燃油的比热容 $c_{\mathrm{p,v}}$：

$$c_{\mathrm{p,v}}=59.374+5.33\cdot T+5\mathrm{e}^{-4}\cdot T^2 \tag{26}$$

蒸汽相和不凝结气体相密度计算方法如下：

$$\rho_{\mathrm{v}}=P_{\mathrm{v}}\cdot\left(T\mathrm{R}/M_{\mathrm{R}}\right)^{-1} \tag{27}$$

$$\rho_{\mathrm{n}}=P\cdot\left(T\mathrm{R}/M_{\mathrm{n}}\right)^{-1} \tag{28}$$

其中 T 是局部温度/K，P 为局部绝对压力/Pa，R 为普适气体常数/J·K^{-1}·mol^{-1}，M_{R} 是柴油的分子质量，取 142.8g·mol^{-1}[14]。

上述所有燃油物性拟合表达式的适用范围为: 273 K≤T≤393 K，0.1 MPa≤P≤250 MPa。为了直观说明温度及压力对燃油物性的影响，绘制了如图 6 和图 7 所示的柴油密度、动力粘度随温度以及压力变化的三维曲面图。

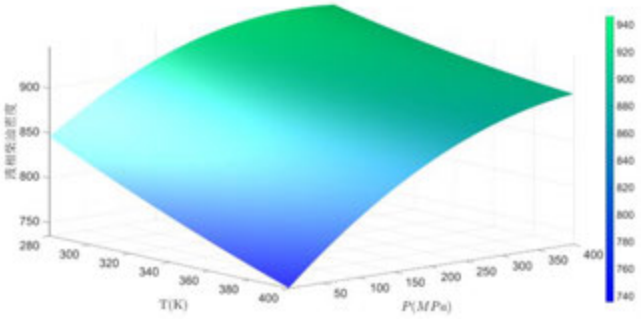


图 6 液相燃油密度随温度、压力变化关系示意图

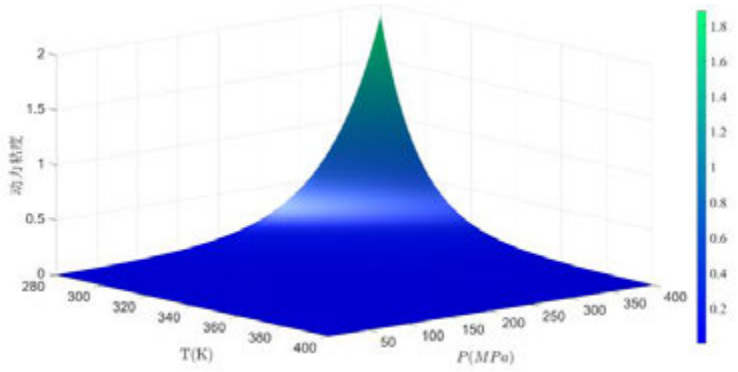


图 7 液相燃油粘度随温度、压力变化关系示意图

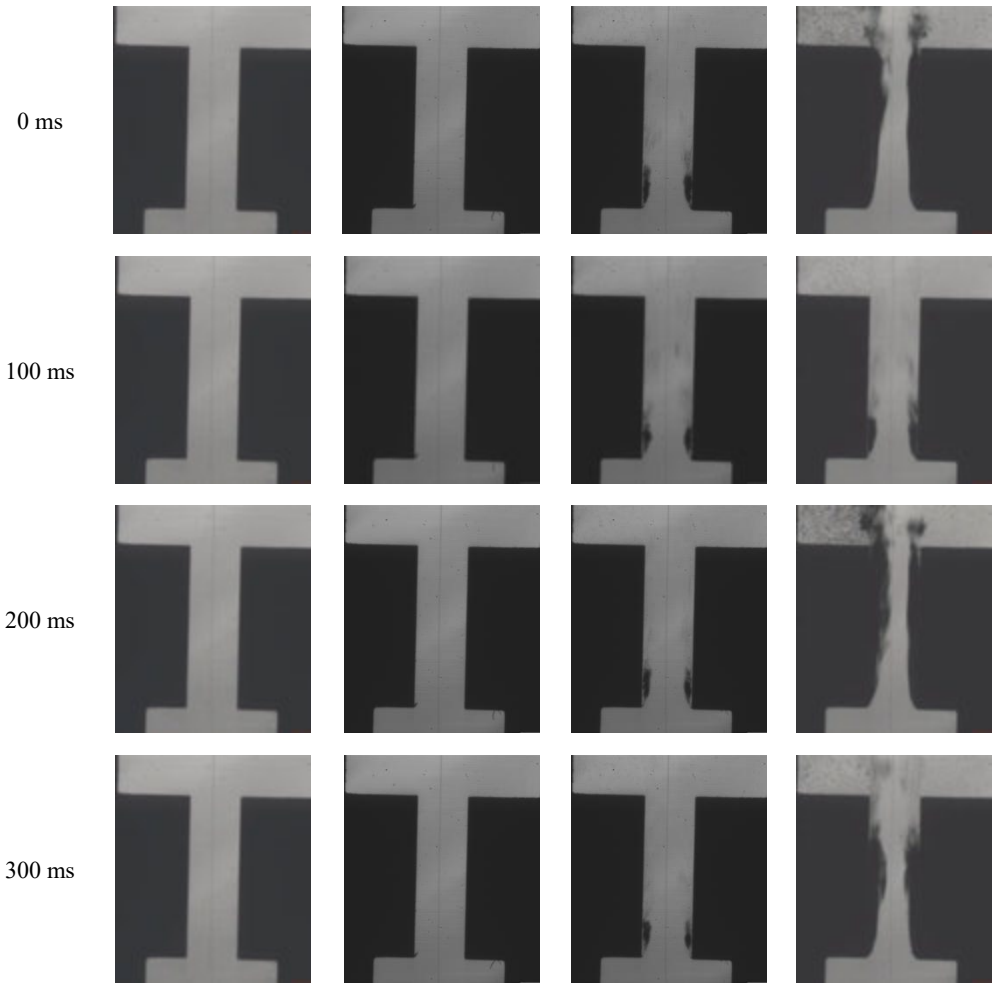
3 结果与分析

3.1 微通道内空化演化过程试验研究

图 8 展示了高速摄像机拍摄的不同压力和不同时刻时的可视化微流道中的连续空化图像。由于湍流空化流动是一种高度不稳定非定常的过程，即使进出口压力恒定，流道中的空化云也会不断经历形成、发展、脱落和再形成过程，因此空化的形状和范围无法保持稳定，不同时间拍摄得到的空化结果不同。为了研究不同压力下的空化分布情况，需要对拍摄到的瞬态空化图像平均化处理，使其具有统计意义。本文在平均化处理中，使用 Matlab 软件将稳定工况下连续拍摄的 1000 张图片处理成灰度值矩阵，再对这 1000 个灰度矩阵进行平均处理，从而得到在该恒定压力条件下较为直观的平均空化范围分布概率情况，结果如图 9 所示。

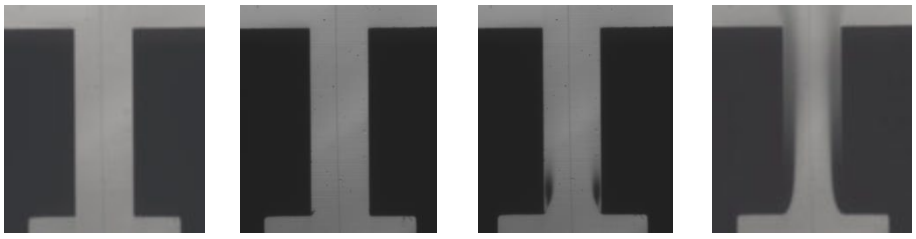
该图显示了在不同进口压力下，1.5 mm×1.5 mm 方形截面微通道中的平均空化概率分布情况，其中(a)-(d)分别对应进口压力 0.05 MPa、0.14 MPa、0.28 MPa、0.47 MPa。图中，流道部分的黑色深色区域代表空化发生可能性较高的区域，而浅色区域则代表较不容易发生空化的液体区域。从图中可见，微通道的空化区域主要位于微通道进口拐角处，并随着进口压力的升高沿流动方向逐渐向内扩展。当进口压力较小，如 0.14 MPa，微通道入口处的空化区域比较稳定，几乎不随时间的变化而变化。但随着进口压力的升高，微通道内的空化区域波动会急剧增大，在图中直观的表示为代表空化发生概率的灰色区域增多，说明在这些位置，空化云会不断产生、脱落、再形成。

图 10 展示了两个相同的微通道结构在不同进口压力下的质量流量测试结果。结果表明，在相同的进口压力下，两个相同结构的微通道的质量流量基本一致，最大相对偏差仅为 2.1%，验证了实验平台的稳定性。进一步地，本图也显示出随着进口压力和空化区域面积的增大，单位时间内微通道内流量增加变缓的趋势。具体来说，空化效应产生的柴油气体会在微通道内占据大量有效流通面积，导致喷孔液相燃料的有效流通面积减小，因此实际流量随着压力增加的趋势会逐渐变缓。在柴油机高压共轨喷油系统中，喷射压力通常在 1100~2000 bar 之间，远高于比例放大试验系统的进口压力范围。这表明喷油器典型微通道内发生了强烈的超空化过程。进一步的研究对于优化柴油机喷油系统的性能至关重要。



(a)进口压力 0.05 MPa　(b)进口压力 0.14 MPa　(c)进口压力 0.28 MPa　(d)进口压力 0.47 MPa

图 8 不同压力、不同时刻下的可视化空化图像



(a)进口压力 0.05 MPa　(b)进口压力 0.14 MPa　(c)进口压力 0.28 MPa　(d)进口压力 0.47 MPa

图 9 不同压力下微通道内空化分布范围概率示意图

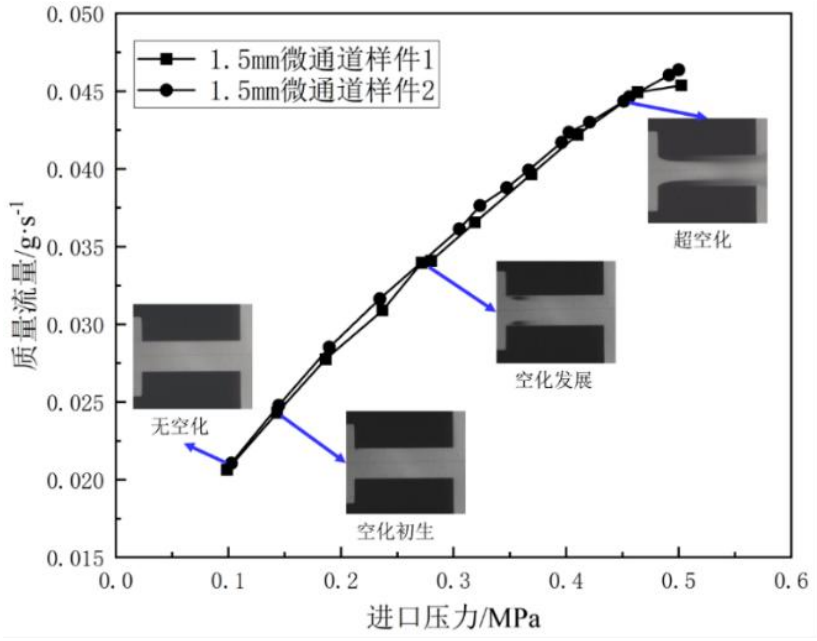


图 10 微通道内出口流量与随压力变化曲线

3.2 微通道内关键物理量分布仿真模拟研究

3.2.1 模型验证

为确保第二部分建立数值模型的准确性及其在微通道空化流动中模拟的适用性，下面首先通过三个实例对计算模型进行了验证。

本文在第 3.1 节中进行了试验，得到了微通道内部的空化分布特征，并定量测得了流量、入口压力等数据，这些试验结果可用于数值模型的验证。图 11 中展示了根据微通道三维流体域模型，微通道入口宽度为 1.5 mm，长度为 5.0 mm，厚度为 1.5 mm。微通道的上游和下游分别设置有 4 mm×15 mm×1.5 mm 和 6 mm×15 mm×1.5 mm 的矩形流道，以避免微通道内部流动受到上下游环境的影响。进出口采用压力边界条件，出口为大气压。

图 12 展示了不含凝结气体（两相两组分）和含不凝结气体（两相三组分）情况下模拟质量流量与两次实验结果的比较。结果表明，四个曲线的变化趋势一致：随着压差的增大，质量流量先增加然后逐渐趋于平缓。同时，相较于两相两组分模型，添加 0.1％的空气，两相三组分模型模拟的结果与实验值更接近。图中还显示了两相三组分模型模拟结果与实验值的偏差，其中最大值为 8.0％，平均值为 3.8％，比两相两组分模型模拟结果的平均偏差小 0.65％。

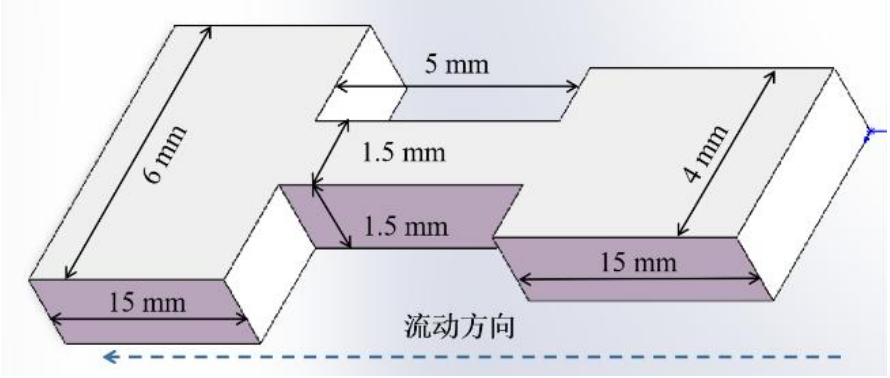


图 11 微通道内三维流体域模型

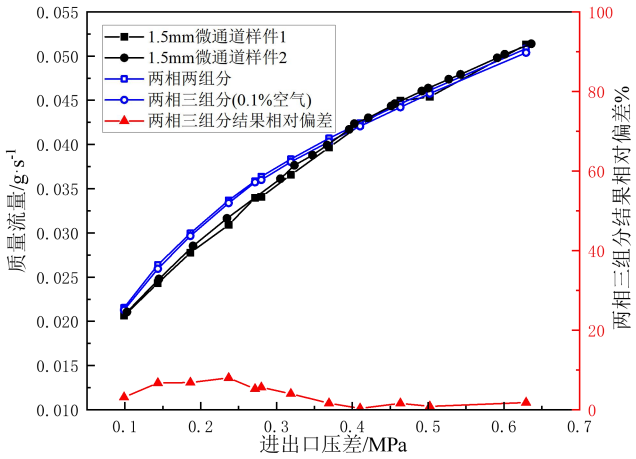
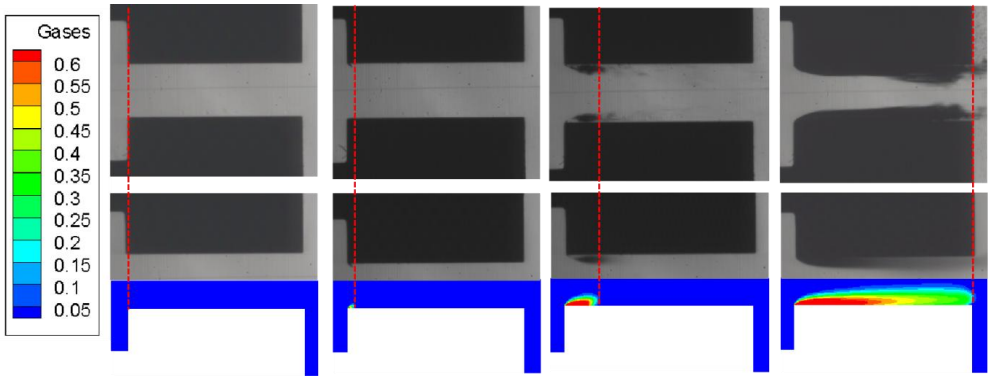


图 12 数值模拟与试验关于质量流量随压力变化的对照结果

图 13 对微通道内部空化进行了可视化实验和数值仿真的对比。第一行图片为某一时刻下的瞬态可视化实验结果，第二行图片则是由 1000 张可视化图片的灰度值平均图像与模拟图像拼接而成的结果。结果表明，在相同压差的条件下，试验和仿真得到的空化长度和位置范围基本相同。空化湍流流动属于高瞬态、非定常过程，入口拐角处空化云在拍摄期间不断产生、生长、脱落和再生长，在脱落过程中，脱落的空化云会沿流动流向出口，因此在平均像素图中就会在空化云尾部观察到介于黑色气相和浅色液相之间的灰色空化尾迹。上述原因导致实验和数值模拟结果间存在微小差异。



(a)进口压力 0.05MPa　(b)进口压力 0.14MPa　(c)进口压力 0.28MPa　(d)进口压力 0.47MPa

图 13 数值模拟与试验关于微通道内空化分布情况对比示意图

最后模拟了博世 CRI2.20 共轨喷油器的 OZ 孔内的空化流动，其几何结构如图 14 所示。入口出压力保持恒定，为 60MPa，出口压力在 0.1~59MPa 范围内变化。图 15 显示了模拟与文献[12]关于出口最大温度和质量流量的对比。结果表明，两相两组分模型模拟的质量流量与试验结果的最大偏差为 5.8%，平均偏差为 1.7%，而两相三组分模型表现更佳，其最大偏差仅为 2.7%，平均偏差为 0.7%。此外，两相三组分模型的出口燃油最大温度模拟结果与文献[12]中的结果吻合良好，最大偏差为 0.33%，平均偏差为 0.20%。该对比说明，本文采用的数值计算方法在准确模拟微通道内流场的同时，能够对温度场进行准确描述。

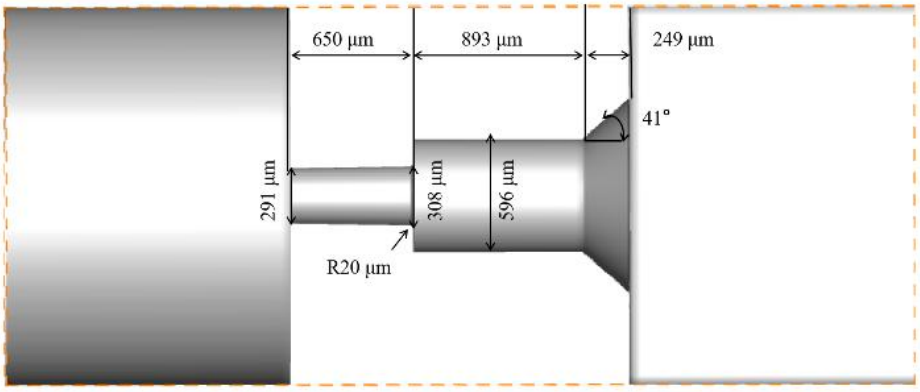
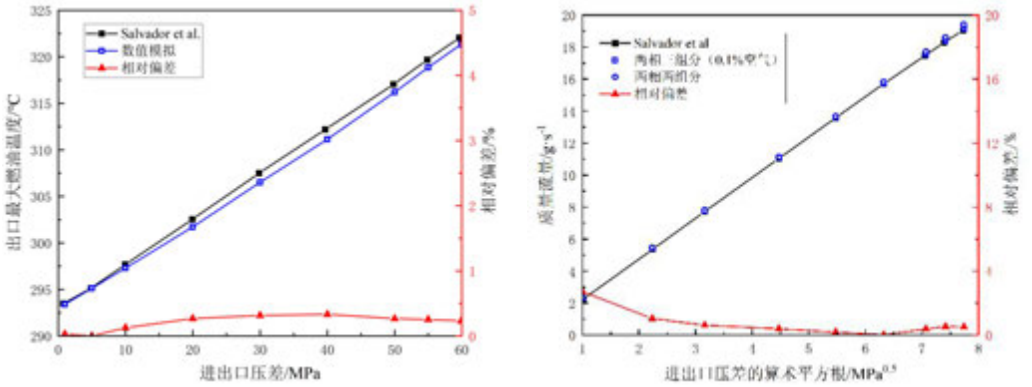


图 14 博世 CRI2.20 共轨喷油器 OZ 孔示意图



(a)出口最大温度对比图　(b)质量流量对比图

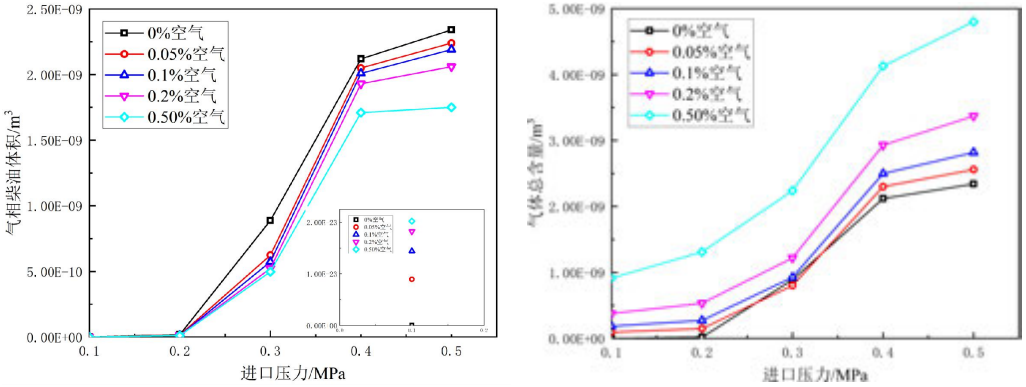
图 15 数值模拟与试验结果对比情况示意图

3.2.2 不凝性气体对微通道内空化的影响

柴油中的不凝性气体主要来源有两个方面。首先，柴油暴露在空气中时会溶解一部分空气，导致不凝性气体的产生。其次，在试验过程中达到低压状态时，环境中的空气会从试验设备中渗漏进入，这部分空气与柴油共存于试验设备中。溶解在液相柴油中的不可凝结气体一方面会作为空化核心促进空化柴油气体的产生，另一方溶解的不可凝结气体会对气-液混合相物理属性产生影响。为了简化不可凝结气体的物性，本文采用单

一成分的空气来表征柴油中的存在的不可凝结气体。为了研究不可凝结气体在微通道内的空化过程中所起的作用，对比了在入口空气体积分数含量为 0%、0.01%、0.05%、0.1%和 0.5%的工况下，入口压力在 0.1~0.5 MPa 范围内的情况，如图 16 和 17 所示。

图 16 呈现了微通道内空化产生的气相柴油体积和气体总体积在不同不凝结气体含量下随压力变化的关系。在进口压力为 0.1 MPa 时，适量的不凝结气体以气核形式促进柴油液相向柴油气相的相变速率，提高气相柴油的体积，表现出随不可凝结气体含量增加而增加的趋势。然而，当进口压力高于 0.1 MPa 时，发现不可凝结气体会对空化产生一定的抑制作用。通过公式（19）得知，当混合相中含有过多的第三组分——即不可凝结气体时，其体积分数的增加会影响其他两组分的生成。由于在柴油气液混合物中，不凝结气体的体积分数主要受局部压力的影响，而不会生成或消失，故而在接近柴油饱和蒸气压的空化区，不凝结气体按照理想气体方程进行膨胀，其体积分数α_n也会显著提高。同时，由于空化区发生在变截面微通道的收缩处，不可凝结气体在微通道中积聚，并进一步抑制空化气体的生成。但需要注意的是，广义的空化定义并不仅限于低压气液相变过程，还包括在低压条件下液相中溶解气体的逸散和膨胀。总体来看，不可凝结气体会显著提高微通道内的空化程度，并促进微通道尽早到达超空化阶段。



(a)不同含气量下气相柴油体积随压力变化　　(a)不同含气量下气体总体积随压力变化

图 16 不同含气量下微通道内气体随压力变化关系

图 17 显示了当进口的液相柴油含 0%、0.1%和 0.2%空气时，在不同压力下微通道内的气相柴油、总气体和空气的体积分数分布情况。首先，三种含气量计算出的气相区域均位于微通道的入口喷孔处，并随着入口压力增加而向下延伸，这与试验结果一致，说明了微通道的几何形状对于气相区域的分布起着很大的影响。其次，结合图 17（a）、（b）、（c）可以发现，含 0.1%空气入口条件计算所得的气相区域明显多于不含空气的工况，在云图中直观地反映为沿流向方向和沿壁面厚度方向上含有更多气体。这是由于在模型中加入第三组分空气后，由于空气收到理想状态气体方程的控制，在高压力的入口边界条件下，在相同的体积分数中，会有更多质量的空气进入到微通道中。因此，当微通道变窄并形成低压区域后，高压力条件下进入的空气就会受到因流道变窄而发生的气体聚集以及压力变低气体膨胀的双重影响，在微通道中形成体积分数约 1%左右的空气，这会严重阻止液相柴油的流动。这一情况可以从图 17（d）中明显观察到。最后，对比图 17（a）、（d）、（e）可知，微通道内空气的体积分数及分布主要受到入口压力的影响，在微通道结构一定的情况下，低压区域形成的局部空气含量及分布差别微小。

但是相比不含空气的图 17（a）计算结果可知微量的空气可以促进微通道内空化云尽早到达微通道出口位置，到达超空化阶段。因此总的来说，液相中的不凝性气体可以促进回流区空化强度，同时在微通道内聚集并严重阻碍柴油液相的流动。

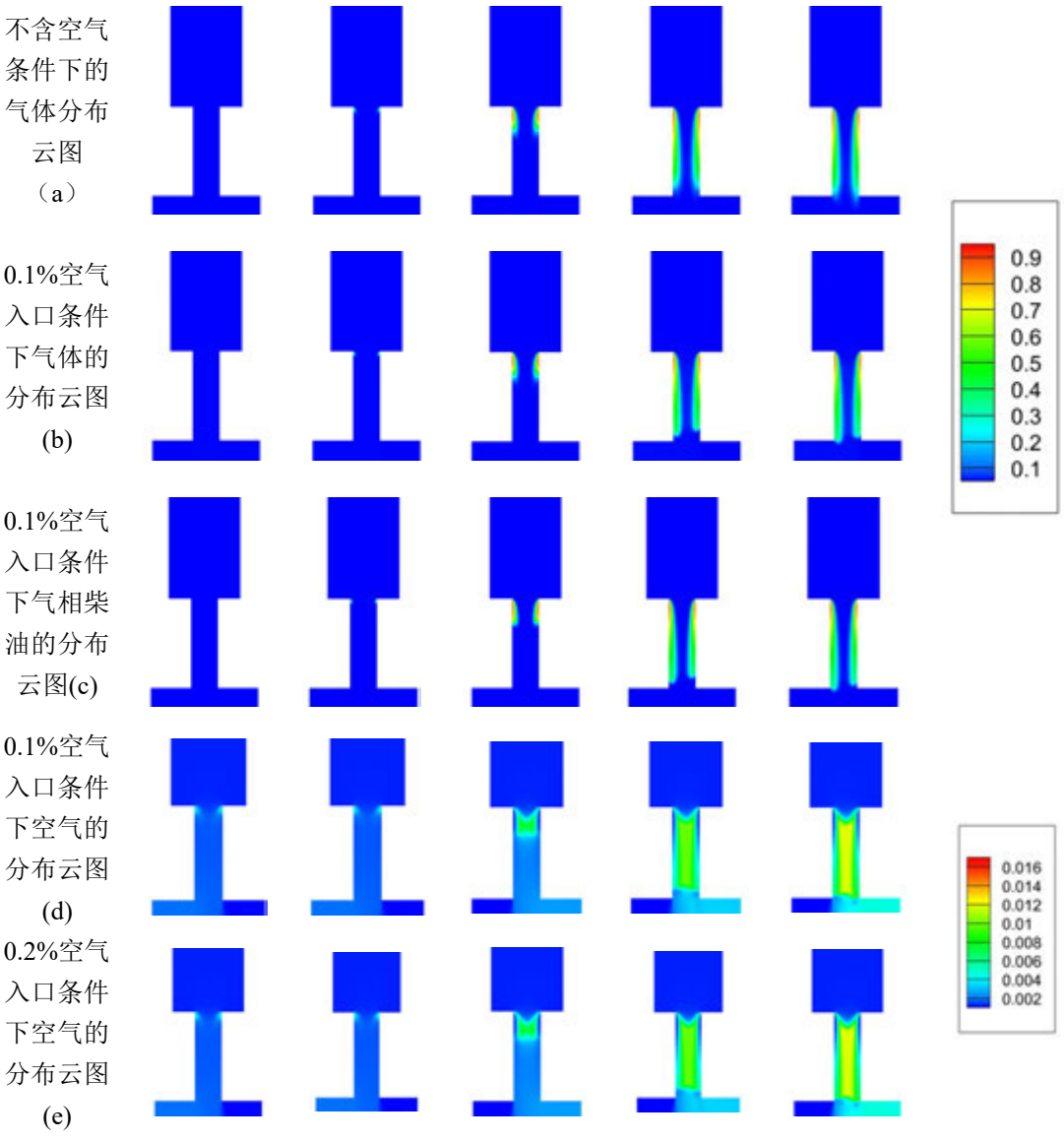


图 17 不同含气量柴油在微通道内的空气、气相柴油分布图

4 结论

为研究控制阀内空化流动特性及空化抑制方法，本文以高压共轨柴油机喷油器控制阀为研究对象，通过可视化试验与数值计算相结合的手段，研究了控制阀典型微通道内空化演化过程，分析了微通道内空化形成机理，研究了微通道操作参数及不可凝结气体对空化的促进作用。

本文主要研究内容及成果总结如下：

1）本研究设计并搭建了一套高压燃油空化两相流动可视化试验系统，其重复性高

于 95%，基于该试验系统实现了毫米级微通道内的准二维空化可视化试验，研究了不同进出口压力条件下的空化分布情况，获得了微通道内空化流动状态随进口压力的演变趋势，并进一步分析了高压湍流空化流动对质量流量的影响机制；

2）本研究采用不凝性气体作为气核，构建了内层为不凝性气体相、外层为蒸汽相的混合气泡两相三组分空化模型。在该模型的基础上，通过应用经验关联式和状态方程进一步考虑了液相及气相燃油的物性变化，相较于不可压两相空化模型改进了模型 1~3%的准确性；

3）通过构建的非等温两相三组分可压空化模型，揭示了不凝性气体对微通道内空化强度的影响。研究结果表明，不凝性气体会通过两种途径影响空化强度：一方面，不凝性气体会以气核的形式加速液相至蒸汽相的相变速率，另一方面，不凝性气体会膨胀形成气相，并与通过相变产生的蒸汽相一起构成喷孔内气液两相流中的气相，从而提高了蒸汽相整体体积分数。

参考文献

[1] 欧阳光耀, 安士杰, 刘振明, 等. 柴油机高压共轨喷射技术[M]. 北京:国防工业出版社, 2012.

Ouyang G.Y., An S. J., Liu Z. M., et al. Diesel engine high-pressure common rail injection technology[M]. Beijing: National Defense Industry Press. 2012.

[2] Liu J, Liu Z, Wu J, et al. Numerical Study on Cavitation Flow Characteristics in Diesel Fuel Injector Control Valve[J]. International Journal of Automotive Technology, 2022, 23(4): 881-897.

[3] Akira Sou,Barış Biçer,Akio Tomiyama. Numerical simulation of incipient cavitation flow in a nozzle of fuel injector[J]. Computers and Fluids,2014,103.

[4] Kurisaki-Arakawa Aiko,Akaike Keisuke,Hara Kieko,Arakawa Atsushi,Takahashi Michiko,Mitani Keiko,Yao Takashi,Saito Tsuyoshi. A case of dedifferentiated solitary fibrous tumor in the pelvis with TP53 mutation.[J]. Virchows Archiv : an international journal of pathology,2014,465(5).

[5] 曹天义. 柴油机喷嘴内空化形态特性及对系统压力波动和喷雾的影响研究[D].江苏大学,2021.

Cao T. Y. Study on the Morphological Characteristics of Cavitation Inside Diesel Engine Nozzle and Its Influence on System Pressure Fluctuation and Spray[D]. Jiangsu University. 2021.

[6] Payri R, Salvador F J, Gimeno J, et al. Study of cavitation phenomenon using different fuels in a transparent nozzle by hydraulic characterization and visualization[J]. Experimental Thermal & Fluid Science, 2013, 44:235-244.

[7] He Z, Zhang Z, Guo G, et al. Visual experiment of transient cavitating flow characteristics in the real-size diesel injector nozzle[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2016, 78: 13-20.

[8] Echouchene F, Belmabrouk H, Le Penven L, et al. Numerical simulation of wall roughness effects in cavitating flow[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2011, 32(5): 1068-1075.

[9] Salvador F J, Carreres M, De la Morena J, et al. Computational assessment of temperature variations through calibrated orifices subjected to high pressure drops: Application to diesel injection nozzles[J]. Energy Conversion and Management, 2018, 171: 438-451.

[10] 麻斌,高莹,刘宇等.不凝性气体及湍流扰动对喷嘴孔内空化现象的影响[J].农业机械学报,2017,48(04):342-348.

Ma B., Gao Y., Liu Y. et al. The Influence of Non-condensable Gas and Turbulent Disturbance on Cavitation Phenomenon in Nozzle Orifice[J]. Journal of Agricultural Machinery. 2017,48(04):342-348.

[11] 史济伟. 船用高压共轨电控喷油器及其喷嘴组件内燃油绝热流动特性的仿真研究[D].西安交通大学,2021.

Shi J. W. Simulation Study on the Adiabatic Flow Characteristics of Marine High-pressure Common Rail Electronic Fuel Injector and Nozzle Assembly [D]. Xi'an Jiaotong University.

2021.
[12] 刘景斌. 喷油器控制阀空化特性及空化抑制方法研究[D]. 海军工程大学,2022.
Liu J. B. Study on Cavitation Characteristics of Fuel Injector Control Valve and Cavitation Suppression Methods [D]. Naval Engineering University, 2022.
[13] Guan W, He Z, Zhang L, et al. Effect of Asymmetric Structural Characteristics of Multi-hole Marine Diesel Injectors on Internal cavitation patterns and flow characteristics: A numerical study[J]. Fuel, 2021, 283(4):119324

工热年会稿件（233195）
中国工程热物理学会 2023 年传热传质学术会议 2023 年 11 月 17-19 日
“微流控芯片内复合液滴变形特性研究”
薛一帆[1]，杨佳旺[1]，何永清[2]，杨薇[3]，朱恒宣[1]，杜鸿贤[1]，王进[1*]
1.河北工业大学，能源与环境工程学院，天津 300401；2.重庆工商大学，微纳系统与智能传感重庆市重点实验室，国家智能制造服务国际科技合作基地，重庆 400067；3.河北工业大学，材料科学与工程学院，天津 300401
Tel：022-60435781，Email：wjwcn00@163.com

回复意见

审稿意见 1：

1、微通道下常规的控制方程还适用吗？除了研究变形特性，流动阻力特性是否也应该值得研究。

回复：感谢您对稿件提出的宝贵意见，微通道下常规的控制方程需要进行改善以适用于此时情况。在特征尺寸很大的宏观系统中，曲面的曲率半径一般很大，所以界面张力很小，可忽略不计；而在一般微流体系统中，流场对界面的影响并不总是可以忽略的，在这种情况下，表面上的力的平衡更加复杂，必须考虑完整的应力张量，所以本文采用两相之间的广义 Laplace 方程。复合液滴的流动阻力特性是一个重要分析方向，目前本文仅针对复合液滴的变形特性进行研究，在未来的研究中流动阻力特性将会被重点考虑。

审稿意见 2：

1、 建议重新梳理摘要，目前摘要对所做研究工作的过程、内容等描述过少，结论偏多，另外不建议摘要出现具体数据。

回复：感谢您的宝贵意见，我对本文摘要部分进行了修改，着重对目前研究过程及内容进行描述。修改如下：

“微流控芯片内复合液滴的形变特性分析对于细胞筛选以及药物输送等方面的研究具有重要参考价值。本文建立了粘性液滴和粘性细胞模型，利用 VOF 方法研究低韦伯数下复合液滴在微通道中挤压通过狭窄通道时的入口压力、剪切力等参数，进而得出复合液滴输运时的动力学特性。结果表明，韦伯数

过高时，复合液滴稳定性降低，不利于其通过狭窄通道后恢复初始状态。而当韦伯数过低时，细胞偏移加剧致使其与载液直接接触，进而导致复合液滴破碎。”

2、 篇幅有些长，建议适当精简“0 前言”的内容，特别是国内外研究现状部分的内容；精简 1.2 和 1.3 节内容；精简 2.1 的分析，篇幅基本控制与后续 2.2-2.5 相差不大即可。

回复：感谢您的宝贵意见，我对本文篇幅较长问题进行了修改，相关修改内容在 0 引言、1.2 部分、1.3 部分以及 2.1 部分的相关位置处。

审稿意见 3：

复合液滴在微流控芯片中的形变特性对于医药领域、生物工程领域具有重要作用，作者采用数值模拟的方法研究了韦伯数下复合液滴通过狭窄通道的动力学特性，具有良好的应用价值与创新性。文章以下方面建议进行进一步的说明：

1、文中研究的是符合液滴通过狭窄通道的微通道过程，因此微通道中的狭窄部分对整个复合液滴的形变行为具有重要的影响，而文章在数模模拟的模型建立过程中对狭窄通道的“高度（rc）为 8 μm，设置的圆角半径（rf）为 5 μm。”这两个参数为什么这样设置，若设置为其他值时，是否对结果具有明显影响？

回复：感谢您的宝贵的意见，设置“高度为 8 μm 以及圆角半径为 4 μm”两个参数的原因在于本文致力于模拟细胞在微流控芯片狭窄通道的流变特性，此参数的选取考虑了细胞大小与细胞输运的典型环境，并参考文献数据，所参考文献如下：

[1] Zhifeng Zhang, Jie Xu, Xiaolin Chen, et al. Compound Droplet Modelling of Circulating Tumor Cell Microfiltration. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, 2015, 57472: V07BT09A008

2、在无量纲数中是否包含以上两个参数，是否能够将以上两个参数在无量

纲数中体现，使得本文的结果更具有普遍性。

回复：本文无量纲数并未包含以上两个参数，本文针对复合液滴通过高度为 8 μm、圆角半径为 5 μm 的狭窄通道的动力学特性进行分析，参数选取考虑细胞尺寸（细胞半径 6 μm）并进一步确定输运通道尺寸，复合液滴的尺度是以特定细胞为基准，分析其在特定结构的输运状况，得出其形变特性。因此，通道尺寸参数并未考虑通过无量纲数体现。

中国工程热物理学会 数值计算
学术会议论文 编号：233195

微流控芯片内复合液滴变形特性研究

薛一帆[1]，杨佳旺[1]，何永清[2]，杨薇[3]，朱恒宣[1]，杜鸿贤[1]，王进[1*]
（1.河北工业大学，能源与环境工程学院，天津 300401；2.重庆工商大学，微纳系统与智能传感重庆市重点实验室，国家智能制造服务国际科技合作基地，重庆 400067；3.河北工业大学，材料科学与工程学院，天津 300401）
(Tel: 022-60435781, Email: wjwcn00@163.com)

摘要：微流控芯片内复合液滴的形变特性分析对于细胞筛选以及药物输送等方面的研究具有重要参考价值。本文建立了粘性液滴和粘性细胞模型，利用 VOF 方法研究低韦伯数下复合液滴在微通道中挤压通过狭窄通道时的入口压力、剪切力等参数，进而得出复合液滴输运时的动力学特性。结果表明，韦伯数过高时，复合液滴稳定性降低，不利于其通过狭窄通道后恢复初始状态；而当韦伯数过低时，细胞偏移加剧致使其与载液直接接触，进而导致复合液滴破碎。

关键字：微通道；复合液滴；韦伯数；细胞形变

0 前言

复合液滴通常由多种不混融的牛顿流体组成，其结构包括外液滴和内液滴。外液滴作为保护层避免内液滴与载液接触，进而保证内液滴顺利达到作用部位。复合液滴外液滴的保护功能使其可应用于细胞的培养及分析[1]、活性物质的输送[2]以及各种生化反应。研究复合液滴的流变行为是应用复合液滴的前提。复合液滴的流变行为与内外液滴的界面张力、剪切力、流动条件等密切相关。并且复合液滴与单液滴在流体动力学的表现上有明显差异，由于复合液滴涉及多相之间相互作用，其形变及破碎特性更为复杂。

目前的研究大多集中于分析单核复合液滴的流体动力学特性。Leong 等人[3]发现乳腺癌细胞进入收缩微通道的时间在很大程度上取决于细胞皮质硬度。在进入时间相同时，硬性细胞核向流动方向移动，而粘性细胞核向逆流方向移动。Stroeve 和 Varanasi[4]研究了悬浮在不混融牛顿流体中的双乳液滴在简单剪切流中的破碎 特性。结果表明，双乳液滴的弹性是造成双乳液滴与均匀牛顿液滴这两种液滴的破碎曲线不同的原因所在。Luo 等人[5]对复合胶囊变形机制进行讨论。结果表明，内胶囊在低应变速率下旋转来促使外胶囊形变，并且内外膜间越近，两膜之间的水动力相互作用变得更显著，这种相互作用抑制了外胶囊的形变，但促进了内胶囊的形变。

微流控芯片结构对复合液滴流态具有重要影响。Hua 等人[6]基于浸没边界法研究了剪切流中复合液滴的形变特性。结果表明，壁面约束作用越大，复合液滴与单液滴的行为差异越大。Chen 等人[5]分析了复合液滴通过不同管径的锥形通道时的流态，确定了复合液滴内部水相释放的流动模式。Mirzaaghaian 等人[8]用水平集方法模拟了正常白细胞和乳腺癌上皮细胞通过锥形通道的过程，发现与正常白细胞相比，乳腺癌上皮细胞通过

基金项目：国家自然科学基金（批准号：52176067）；河北省自然科学基金（批准号 E2022202139）。

锥形通道时，其传递时间与力学性能的函数方面上表现出明显不同的行为。微通道参数对细胞的转运性有显著影响，不同的细胞对微通道参数有不同的反应。Shirai 和 Masuda[8]研究了中性粒细胞通过轴向不对称的收缩通道时的运动状态。结果表明，通过时间主要受喉道水力直径和收缩曲率半径的影响，而喉道宽高比对通过时间的影响较小。Nikfar 等人[10]研究发现当细胞平均速度相同时，需要施加更大的力才能驱动细胞通过更窄的微孔。细胞通过收缩孔时沿来流方向伸长到可以占据整个收缩区域，此时细胞形变更为明显。Chang 等人[11]研究了锥形收缩通道呈现不同孔隙角，肿瘤细胞通过锥形通道时的压力和剪切力的变化。结果表明，由于细胞核的主导作用，临界压力不遵循特定的趋势，而在不同的孔隙角度下保持相对恒定。当细胞通过较小孔隙角通道时，细胞承受的剪切应力增大。Hashem 等人[12]模拟研究循环肿瘤细胞通过过滤通道的形变特性。结果表明，当细胞核的尺寸小于过滤通道的尺寸时，细胞的流变行为与单液滴相似。当具有高硬度和高粘性特性的细胞核的尺寸大于过滤通道尺寸时，细胞内压力分布会受到较大影响。

本文利用所建立的微通道模型模拟研究复合液滴通过狭窄通道的输运行为，分析复合液滴在微通道内的偏移和形变特性，并全面讨论低韦伯数下复合液滴通过狭窄通道时各参数的变化，具体包括微通道内无量纲入口压力、狭窄通道壁面无量纲剪切力、复合液滴形变率和细胞偏移率。

1 微通道物理模型及控制方程

本章节构建了包含狭窄通道的微通道模型，并对模拟细胞的复合液滴模型进行说明；介绍了数值模拟方法中所采用多种控制方程以及一系列无量纲参数；进行了网格独立性验证和模型验证。

1.1 物理模型

图 1 为细胞、液滴和微通道结构图。由于复合液滴通过微通道物理过程的对称性，将模型设置为沿 x 轴的二维轴对称模型。如图 1 所示，通道宽度（r_m）为 25 μm，前后腔室的长度（L_m）均为 50 μm，狭窄通道的长度（L_c）为 20 μm，高度（r_c）为 8 μm，在通道中间处设置的圆角半径（r_f）为 5 μm。整个微通道模型共分为三相，即通道中的载液相、液滴相和模拟细胞相。本文设定液滴半径（r_d）为 16 μm，位于通道前端，距离通道入口的距离为（L_d）为 25 μm；模拟细胞的半径（r_{cell}）为 6 μm，位于液滴中心。

载液、液滴和细胞的物性参数如表 1 所示。载液密度（ρ_o）与细胞密度（ρ_c）相同，液滴粘度（μ_d）在 0.005 Pa·s - 0.06 Pa·s 之间变化。载液由入口侧流入，由载液带动的复合液滴挤压通过狭窄通道，并由出口侧流出。将微通道的入口设置为速度入口，出口则设置为压力出口。设定微通道的壁面边界为固定的非滑移边界，各个多相流体与壁面的接触角为 180°。将环境参考压力设置为零。

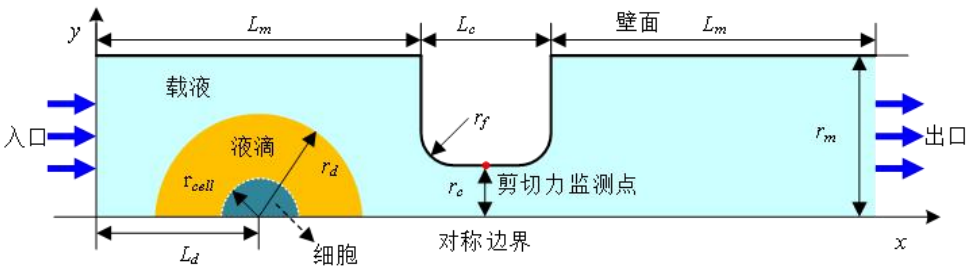


图 1 细胞、液滴和微通道结构示意图

表 1 载液、液滴和细胞的物性参数

参数	数值
载液密度 ρ_o（kg/m^3）	1000
液滴密度 ρ_d（kg/m^3）	920
细胞密度 ρ_c（kg/m^3）	1000
载液粘度μ_o（Pa • s）	0.001
液滴粘度μ_d（Pa • s）	0.005 - 0.06
细胞粘度μ_c（Pa • s）	0.002
载液/液滴界面张力 σ_d（N/m）	0.04
液滴/细胞界面张力 σ_c（N/m）	0.2
载液/液滴接触角 θ_1（° ）	180
模拟细胞/液滴接触角 θ（° ）	180

1.2 控制方程

本文采用 ANSYS Fluent 14.5 作为求解器，对复合液滴通过狭窄通道的行为进行了模拟研究；采用瞬态的基于压力的分离算法求解控制方程，且不考虑重力的作用；采用层流方法模拟微通道中多相流体的流动。设置求解器时，压力-速度耦合计算采用 SIMPLE 算法。体积分数方程采用隐式算法求解，动量方程用二阶迎风格式离散，压力用 Presto！方法离散。控制方程的时间项采用二阶隐式差分格式离散。设置的时间步长为 5×10^{-7} s。整个过程中，保持模型内各网格单元处的库朗特数小于 0.5。

1.2.1 界面张力和 Young-Laplace 方程

从能量角度来说，界面张力σ被定义为在固定压力和温度下的单位面积的吉布斯自由能，如下式所示：

$$\sigma = \left(\frac{\partial G}{\partial A}\right) p,T \tag{1}$$

在特征尺寸很大的宏观系统中，曲面的曲率半径一般很大，所以界面张力很小，可忽略不计。在一般微流体系统中，流场对与界面的影响并不总是可以忽略的。在这种情况下，表面上的力的平衡情况更加复杂，必须考虑完整的应力张量，所以两相之间的广义的 Laplace 为：

$$\left(p_1 - p_2\right) n_i = \sigma\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) n_i + \left(\gamma'^{(1)}_{ik} - \gamma'^{(2)}_{ik}\right) n_k \tag{2}$$

其中 n_i 为单位法向量，γ_{ik}'为应力张量的粘性部分。p1 和 p2 分别为曲面两侧的压力，R1 和 R2 分别为曲面两侧的曲率半径，σ为两相的界面张力系数。

1.2.2 动量方程和连续性方程

连续性方程如下：

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \tag{3}$$

两相界面上做出贡献的力为界面张力，界面张力用连续界面张力方法（CSF）计算。该方法可以精确地计算界面张力而并不会对两相界面的动态变化产生影响。微米尺度下重力的影响忽略不计。将界面张力作为体积力添加到动量方程中：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{V}) + \nabla \cdot \left(\rho\vec{V}\vec{V}\right) = \nabla p + \nabla \cdot \left[\mu\left(\nabla\vec{V} + \nabla\vec{V}^{T}\right)\right] + \vec{F} \tag{4}$$

其中ρ和μ分别是两相体积分数的平均密度和粘度，p 为压力，$\vec{F}$是代表界面张力的源项。

当单元体仅有两相时，界面张力源项的简化如下：

$$\vec{F} = \sigma\frac{2\rho\kappa\nabla\alpha}{\rho_i + \rho_j} \tag{5}$$

其中κ是单元体界面的平均曲率。

1.3 相关参数

液滴在微通道中运动的无量纲时间 t：

$$t = \frac{T \times V}{2r_m} \tag{6}$$

微通道的无量纲入口压力 P_1，监测点处的无量纲壁面剪切力 P_2 和无量纲压力 P 定义如下：

$$P_1 = \frac{P_c r_m}{\sigma_d} \tag{7}$$

$$P_2 = \frac{P_s r_m}{\sigma_d} \tag{8}$$

$$P = \frac{P_{real} r_1}{\sigma_d} \tag{9}$$

其中 P_c 为微通道入口平均压力，单位为 Pa，P_s 为监测点处的壁面剪切力，单位为 Pa，监测点的位置位于狭窄通道的壁面中心，如图 2 所示。P_{real} 为微通道中各处的实际压力，单位为 Pa。

液滴的形变率为ε，定义为变化液滴直径 d_{dt} 与初始液滴直径 d_d 之比，如下式所示：

$$\varepsilon = \frac{d_{dt}}{d_d} \tag{10}$$

细胞偏移率被定义为运动时模拟细胞前端与液滴前端的距离（L_{cellt}）与初始时刻模拟细胞前端与液滴前端的距离（L_{cell}）的比值：

$$\xi = \frac{L_{cellt}}{L_{cell}} \tag{11}$$

1.4 网格无关性验证

本文选取 5 种不同网格数量的二维轴对称模型进行网格独立性验证。5 种网格的单元数分别为 20,939、33,678、75,030、127,097 和 273,656。当入口速度为 0.02 m/s，液滴

粘度为 0.015 Pa·s 时，计算了五种网格数中微通道入口平均压力的最大值。微通道入口平均压力的最大值在网格数为 20,939、33,678 和 75,030 时并不稳定。当网格数增加到 127,097 时，微通道入口的平均压力逐渐稳定，后续继续增大网格数量到 273,656 时微通道入口的平均压力变化不大。其他网格单元下微通道入口的平均压力最大值与网格数为 127,097 时的通道入口压力最大值的误差分别为 2.8%、1.6%、0.8%和 0.35%。所以可知当网格数为 127,097 时，再增加网格数对计算结果影响不大。为了节约计算资源和提高计算效率，最后选用网格数为 127,097 的网格进行模拟研究，如图 2 所示。

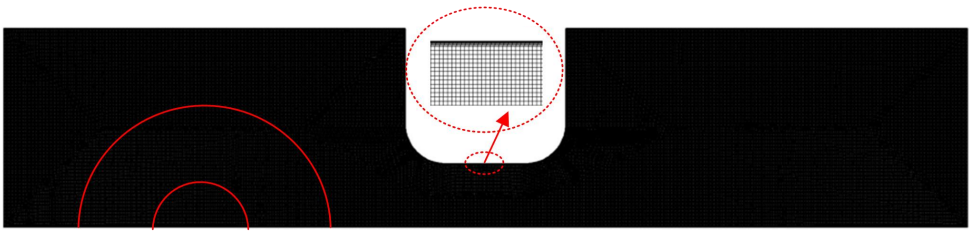


图 2 微通道计算域

1.5 液滴通过狭窄通道模型验证

图 3 为复合液滴通过狭窄通道时的压力特征变化。本文模拟复合液滴通过狭窄通道的输运过程，结果表明本研究微通道的压力随时间分布与 Zhang 等人[13]的结果相似。

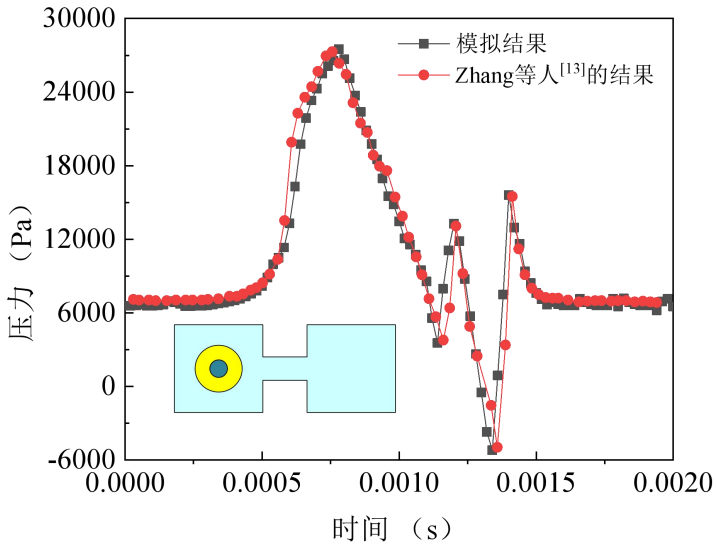


图 3 复合液滴通过狭窄通道的模拟验证

2 数值分析结果

本章讨论低韦伯数下复合液滴通过狭窄通道时各参数的变化，具体包括微通道内无量纲入口压力、狭窄通道壁面无量纲剪切力、复合液滴形变率和细胞偏移率。

2.1 韦伯数对复合液滴通过狭窄通道状态的影响

图 4 为韦伯数为 1.19E-04 时复合液滴输运过程中微通道的压力变化和流线变化。从图 4 中可得，当 t 为 0.51 时，界面张力导致了复合液滴和载液之间的压力差，因此微通道内部的压力分布呈现沿载液、外部液滴和模拟细胞逐次增大的状况，且各处压力均大

于 0。当 t 为 0.754 时，液滴贴近狭窄通道的圆角处，此时前部腔室中出现涡流，微通道内压力显著增大，由 Young-Laplace 方程可知这是因为界面张力导致的压降增大。且在 t 为 1.108 时，界面张力方向改变，将复合液滴拉离狭窄通道。当 t 为 1.176 时，复合液滴离开狭窄通道，细胞与液滴即将发生接触。此时微通道前部腔室中的压力与 t 为 1.108 时相比明显增大。

图 5 显示了韦伯数为 1.07E-03 时复合液滴输运过程中微通道的压力变化和流线变化。当 t 为 0.678 时，复合液滴开始进入狭窄通道。此时前部腔室中的载液、液滴和细胞的压力都逐渐增大，这主要是由界面张力的阻碍作用引起的。当 t 为 0.882 时，复合液滴整体进入狭窄通道，前后腔室中均有涡流产生。此时的前部腔室中的压力相比于 t 为 0.678 时有所减小。当 t 为 1.062 时，复合液滴离开狭窄通道。此时前部腔室中的压力大于后部腔室中的压力，液滴和细胞的压力与 t 为 1.02 时相比变化不明显。

图 6 为韦伯数为 2.97E-03 时复合液滴输运过程中微通道的压力变化和流线变化。与韦伯数为 1.19E-04 和 1.07E-03 时相比，韦伯数为 2.97E-03 时微通道前部腔室中各处的压力明显增大，前部腔室中的涡流区域也增大，这是因为韦伯数增加使得前部腔室内部的流动加快，前部腔室前端壁面对流体的阻碍作用加大，从而形成了较大的回流区。此时液滴通过狭窄通道时头部和尾部扁平程度增加，形变逐渐增大，并且复合液滴与狭窄通道壁面之间存在一层液膜。这是由于随着韦伯数增大，液滴内部的细胞形变更加明显，这是因为韦伯数增加导致的载液对于复合液滴的剪切作用增大。

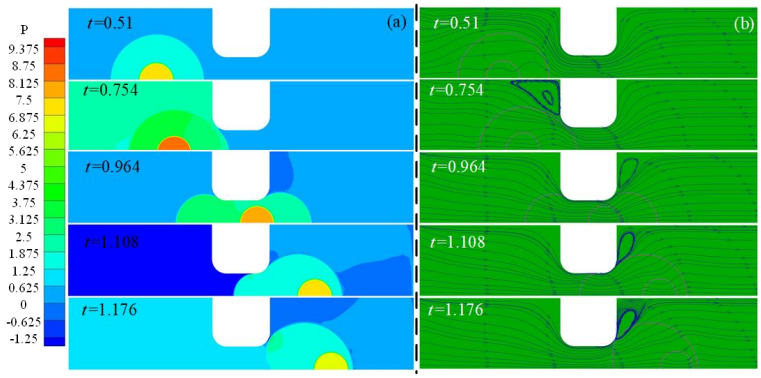


图 4 韦伯数为 1.19E-04 时复合液滴在微通道内运动的不同阶段（a）压力分布云图；（b）流线图

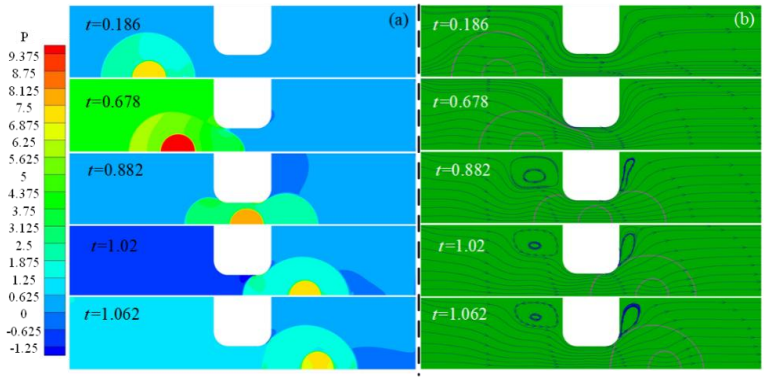


图 5 韦伯数为 1.07E-03 时复合液滴在微通道内运动的不同阶段的（a）压力分布云图；（b）流线图

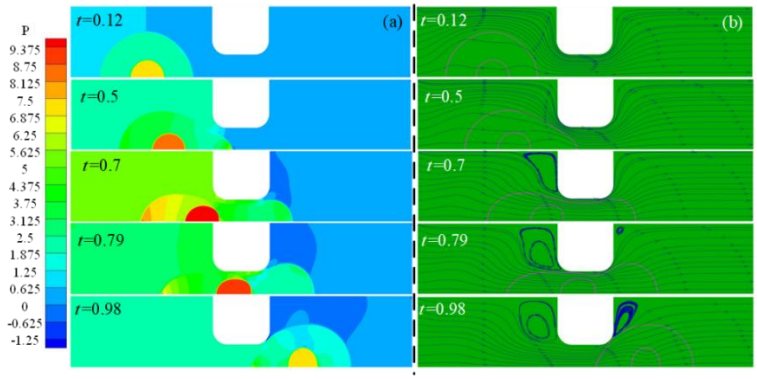


图 6 韦伯数为 2.97E-03 时复合液滴在微通道内运动的不同阶段的（a）压力分布云图；（b）流线图

2.2 韦伯数对微通道无量纲入口压力的影响

图 7 为不同韦伯数下液滴在微通道内运动的压力特性。由图 7（a）可知，随着无量纲时间的增加，各个韦伯数下的微通道无量纲入口压力开始增大，并逐渐到达临界压力。当韦伯数为 1.19E-04、4.75E-04、1.07E-03、1.90E-03 和 2.97E-03 时，无量纲临界压力分别为 1.93、3.34、4.23、4.85 和 5.56。韦伯数为 4.75E-04、1.19E-04、1.07E-03 和 1.90E-03 时，无量纲入口压力受复合液滴界面张力的影响较大。此时复合液滴在微通道中的运动是符合 Young-Laplace 方程的预测的。在抵达临界压力之前，界面张力对液滴通过狭窄通道起阻碍作用，所以导致压力急剧增大。随着韦伯数的增加，复合液滴进入狭窄通道的体积增加。当韦伯数为 2.97E-03 时，无量纲入口压力受惯性力的影响要大于受界面张力的影响，此时取得临界压力时的状态明显不同于其他工况下的复合液滴的状态。

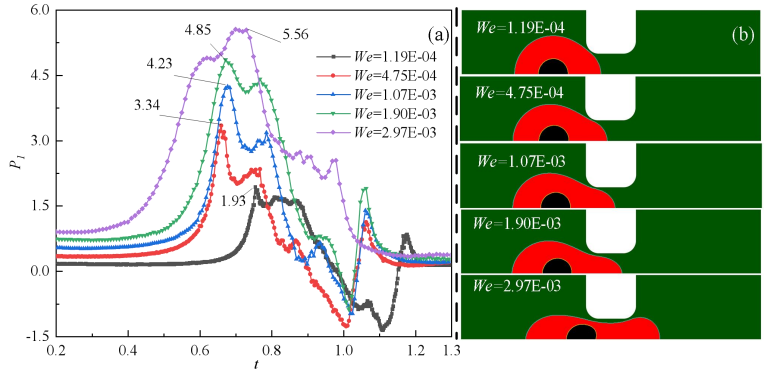


图 7 不同韦伯数下微通道入口压力（a）不同韦伯数下无量纲入口压力随无量纲时间的变化；（b）临界压力下复合液滴的状态

如图 7（b）所示，随着韦伯数增大，液滴形变程度增大，这是由惯性力和界面张力的共同作用引起的。当临界压力取得最大值时，液滴形变和细胞形变更明显，这不利于复合液滴的稳定。当无量纲入口压力抵达临界状态后，复合液滴开始离开狭窄通道。此时液滴前缘的曲率半径增大，而后缘的曲率半径减小，进而使得无量纲压力下降。当前缘的曲率半径等于后缘的曲率半径时，界面张力变为 0。当液滴离开狭窄通道时，界面张力起推动作用。韦伯数为 4.75E-04、1.19E-04、1.07E-03 和 1.90E-03 时的最小无量纲压力均小于 0，而韦伯数为 2.97E-03 时的最小无量纲压力大于 0，这是因为此时的惯性

力抵消了一部分界面张力对液滴离开狭窄通道时产生的拉力。韦伯数为 4.75E-04、1.19E-04、1.07E-03 和 1.90E-03 时，最小无量纲压力会达到另一个峰值，这是由于复合液滴离开狭窄通道时的惯性作用引起的

2.3 韦伯数对无量纲壁面剪切力的影响

在狭窄通道中间设置监测点来监测无量纲剪切力的变化情况，监测点如图 2 中所示。由图 8（a）可知，随着无量纲时间的增大，各个韦伯数下的无量纲剪切力均增大，复合液滴逐渐接近监测点。

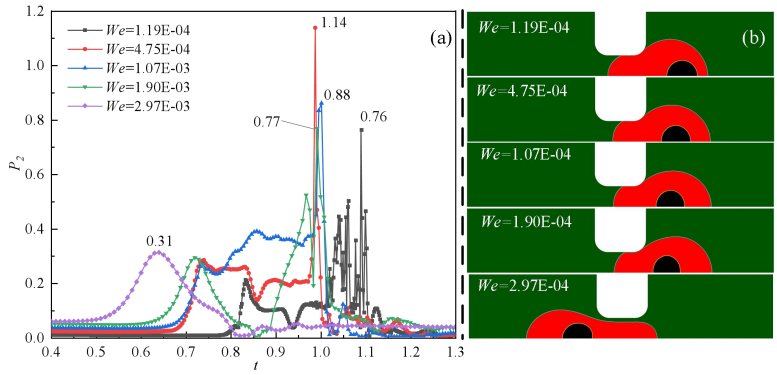


图 8 不同韦伯数下无量纲剪切力（a）不同韦伯数下监测点处无量纲剪切力率随无量纲时间的变化；（b）最大无量纲剪切力下复合液滴的状态

当韦伯数为 1.19E-04、4.75E-04 和 1.07E-03 时，复合液滴抵达监测点，此时无量纲壁面剪切力增加。当复合液滴离开狭窄通道且液滴后界面与监测点接触时，无量纲壁面剪切力取得最大值，这是由于液滴离开监测点时附近的流体扰动增强引起的。当韦伯数为 1.90E-03 时，复合液滴的无量纲壁面剪切力随时间的增加而增加。当无量纲剪切力抵达第一个峰值时，液滴与壁面之间存在一层由载液组成的液膜。由于微通道尺寸收缩的效应，当狭窄通道内的流动速度增大时，会导致无量纲剪切力增大达到最大值。这是因为复合液滴与狭窄通道有所接触导致的。当韦伯数为 1.19E-04、4.75E-04、1.07E-03、1.90E-03 和 2.97E-03 时，最大无量纲壁面剪切力分别为 0.76、1.14、0.88、0.77 和 0.31。如图 8（b）所示，当有液膜存在于复合液滴与壁面间时，这对细胞对无量纲入口压力的影响更小，所以此时的无量纲壁面剪切力远小于液滴与壁面直接接触时的情况。

2.4 韦伯数对液滴形变率的影响

图 9 为不同韦伯数下复合液滴形变率随无量纲时间的变化。由图 9（a）得，随着无量纲时间的增大，复合液滴逐渐通过狭窄通道，在各个韦伯数情况下，复合液滴的形变率均逐渐增大到最大值。这是由于狭窄通道对液滴的挤压作用而导致液滴头部减小，且细胞由圆形逐渐变成扁平状，使复合液滴形变率增大。当液滴离开狭窄通道时，复合液滴的形变率逐渐降低，并且此时外部液滴逐渐恢复成圆形。韦伯数为 1.19E-04、4.75E-04、1.07E-03、1.90E-03 和 2.97E-03 时，复合液滴的最大形变率分别为 1.47、1.48、1.52、1.60 和 1.69。复合液滴处于最大形变时的变形情况以及位置如图 9（b）所示。随着韦伯数的增加，载液的流动速度随之增加，这导致载液对于液滴的剪切作用增强，使得复合液滴通过狭窄通道时液滴尾部变得更扁平。随着韦伯数的增加，液滴内部细胞的形变程度逐步增大。过大的细胞形变程度会影响复合液滴的稳定性，严重时会导致细胞的破碎。

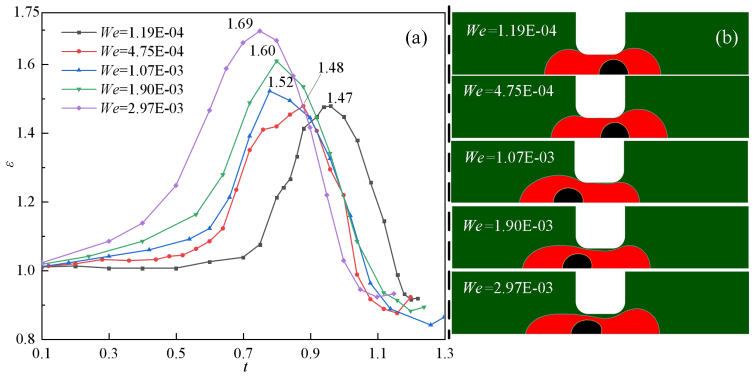


图 9 不同韦伯数下复合液滴形变率（a）不同韦伯数下复合液滴形变率随无量纲时间的变化；（b）最大形变率时复合液滴的状态

2.5 韦伯数对细胞偏移率的影响

图 10 为不同韦伯数下细胞偏移率随无量纲时间的变化。由图 10（a）可知，在不同韦伯数下，细胞的偏移率均随无量纲时间的增加而增大，且当偏移率抵达最大值时，细胞与液滴前端的距离最大。当韦伯数为 1.19E-04、4.75E-04、1.07E-03、1.90E-03 和 2.97E-03 时，最大细胞偏移率分别为 1.97、2.16、2.31、2.40 和 2.60。细胞发生最大偏移率时复合液滴的状态如图 10（b）所示。此后细胞偏移率开始下降，直到最低点，即此时细胞与液滴前端距离最小。这是因为复合液滴在狭窄通道运动时液滴与细胞存在速度差，液滴的速度由于界面张力的阻碍作用而减小，而细胞的运动速度不变，进而导致细胞与液滴前端的距离逐渐减小。当韦伯数为 1.19E-04 时，细胞的偏移率为 0，即细胞和液滴前端发生接触，进一步使得细胞脱离液滴，导致复合液滴破碎。

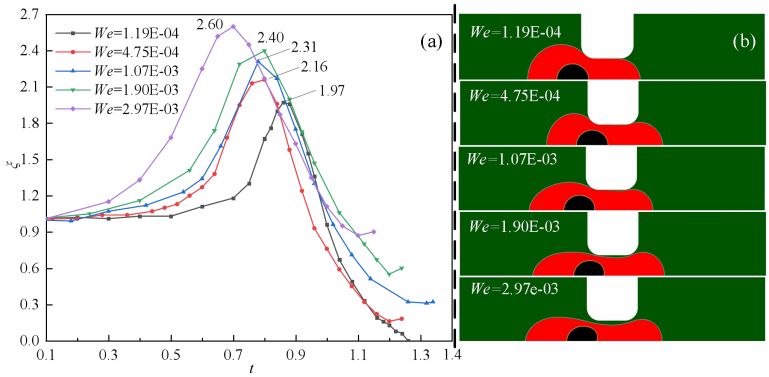


图 10 不同韦伯数下细胞偏移率（a）不同韦伯数下细胞偏移率随无量纲时间的变化；（b）最大偏移率时复合液滴的状态

3 结　论

本文模拟研究复合液滴在带有狭窄通道的微流控芯片中的输运过程，具体讨论韦伯数对复合液滴通过狭窄通道时形变特性的影响，基于对复合液滴形变状态的观察以及对通道内参数变化的分析，最终确定复合液体稳定通过狭窄通道的临界韦伯数范围，主要结论如下：

1）在复合液滴通过狭窄微通道时，为避免形变率过大而导致的复合液体破碎，韦

伯数不应超过 2.97E-03。当韦伯数为 2.97E-03 时，临界压力为 5.56，最大形变率为 1.69。此时，狭窄通道和复合液滴出现了液膜，这会使细胞对无量纲入口压力的影响更小，导致无量纲壁面剪切力远小于液滴与壁面直接接触时的无量纲壁面剪切力，进而使得复合液滴发生严重形变，出现细胞破碎情况。

2）在复合液滴通过狭窄微通道时，为了避免细胞偏移率过小，韦伯数不应低于 1.19E-04。当韦伯数为 1.19E-04 时，细胞的最小偏移率为 0。此时细胞与液滴和载液的界面接触，这是因为复合液滴在狭窄通道运动时液滴的速度由于界面张力的阻碍作用而减小，而细胞的运动速度不变，进而导致细胞与液滴前端的距离逐渐减小。

参考文献

[1] Jiao Zhai, Shuhong Yi, Yanwei Jia, et al. Cell-based Drug Screening on Microfluidics. Trends in Analytical Chemistry, 2019, 117: 231--241

[2] Sébastien Sart, Gustave Ronteix, Shreyansh Jain, et al. Cell Culture in Microfluidic Droplets. Chemical Reviews, 2022, 122(7): 7061--7096

[3] Fong Yew Leong, Qingsen Li, Chwee Teck Lim, et al. Modeling Cell Entry into a Micro-channel. Biomech Model Mechanobiol, 2011, 10(5): 755--766

[4] Stroeve Pieter, Varanasi Padma Prabodh. An Experimental Study on Double Emulsion Drop Breakup in Uniform Shear Flow. Journal of Colloid and Interface Science, 1984, 99(2): 360--373

[5] Zhengyuan Luo, Long He, Bofeng Bai. Deformation of Spherical Compound Capsules in Simple Shear Flow. Journal of Fluid Mechanics, 2015, 775: 77--104

[6] Haobo Hua, Jaemin Shin, Junseok Kim. Dynamics of a Compound Droplet in Shear Flow. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2014, 50: 63--71

[7] Haosheng Chen, Jiang Li, Ho Cheung Shum, et al. Breakup of Double Emulsions in Constrictions. Soft Matter, 2011, 7(6): 2345--2347

[8] Arman Mirzaaghaian, Abas Ramiar, Ali Akbar Ranjbar, et al. Application of Level-set Method in Simulation of Normal and Cancer Cells Deformability within a Microfluidic Device. Journal of Biomechanics, 2020, 112: 110066

[9] Atsushi Shirai, Sunao Masuda. Numerical Simulation of Passage of a Neutrophil through a Rectangular Channel with a Moderate Constriction. PLoS One, 2013, 8(3): e59416

[10] Nikfar Mehdi, Razizadeh Meghdad, Paul Ratul, et al. Numerical Simulation of Intracellular Drug Delivery Via Rapid Squeezing. Biomicrofluidics, 2021, 15(4): 044102

[11] Pengliang Chang, Christopher Landry, Xiaolin Chen, et al. Compound Droplet Dynamics of a Tumor Cell Squeezing through Conical Microfilters. Theoretical and Computational Fluid Dynamics, 2020, 34: 287--300

[12] Mohammad Abul Hashem, Arian Aghilinejad, Xiaolin Chen, et al. Compound Droplet Modeling for Circulating Tumor Cell Microfiltration with Adaptive Meshing Refinement. Journal of Fluids Engineering, 2020, 142(11): 111403

[13] Zhifeng Zhang, Jie Xu, Xiaolin Chen, et al. Compound Droplet Modelling of Circulating Tumor Cell Microfiltration. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, 2015, 57472: V07BT09A008

中国工程热物理学会 多相流
学术会议论文 编号：

液滴斜向撞击具有随机分布粗糙结构的超疏水表面：格子玻尔兹曼研究

章舒圣，张立志*
（华南理工大学化学与化工学院传热强化与过程节能教育部重点实验室，广州 510000）
(Tel：15638286597， Email：441578747@qq.com)

摘要： 理解液滴在超疏水表面上的动态行为对于在许多工业过程中应用超疏水表面非常重要。本研究利用格子玻尔兹曼方法，研究了单个液滴斜向撞击具有随机分布粗糙结构的超疏水表面的动态过程。并分析了液滴的撞击角度，奥内佐格数以及固体表面的粗糙结构参数对于液滴冲击动力学的影响。结果表明，增大粗糙结构的峰值会消耗更多能量，从而减弱液滴的反弹能力。此外随着液滴冲击角度和奥内佐格数的增大，会增大液滴的粘性耗散，使得动能的维持系数降低。

关键词： 超疏水表面；液滴碰撞；格子玻尔兹曼方法；随机粗糙结构

0 前言

液滴撞击固体表面这一现象广泛存在于我们的日常生活及工业生产中，如喷雾冷却[1]、燃油喷射[2]和喷墨打印[3]。研究这一现象对于许多工业过程具有潜在的应用价值，因此液滴撞击固体表面引起了众多研究者的研究兴趣。自从 Worthington[4]首次对液滴冲击的动态行为进行系统研究以来，该领域得到了迅速的发展。根据 Rioboo[5]的研究，液滴冲击固体表面的动态行为可以分为六类，包括沉积、快速飞溅、冠状飞溅、收缩破碎、部分反弹和完全反弹。冲击液滴的动态行为受到固体表面特性和液滴性质的协同影响。在诸多影响因素中，固体表面的润湿性是一个重要的影响因素。近年来，已有研究表明，在液滴撞击固体表面的过程中，可以通过调节固体表面的润湿性来控制液滴的运动[6]。一般而言，对固体表面进行超疏水改性是一种促使液滴快速反弹的有效方法。由于超疏水表面的疏水特性，其被认为在自清洁[7]、防结冰[8]以及防腐蚀[9]等领域具有重要的应用价值。

根据已有的研究，超疏水表面的润湿性收到本征接触角和表面粗糙度的影响[10]。液滴在超疏水表面的动力学行为也由这两个关键因素决定。以往对液滴冲击超疏水表面的研究可以根据超疏水基底的几何特征分为三类，分别是液滴冲击光滑表面[11-13]、液滴冲击规则粗糙表面[14-17]和液滴冲击随机粗糙表面[18]。尽管已有许多研究探索了液滴冲击超疏水表面的动态过程，但这些研究主要关注垂直方向的液滴冲击。然而在实际工业过程中，大多数液滴都是以一定的角度撞击固体表面。与垂直冲击的液滴相比，斜

基金项目：国家自然科学基金重点项目（No. 51936005）

向冲击的液滴在固体表面的切向方向上具有额外的速度，这个切向速度会显著影响液滴的动力行为。迄今为止，大部分的研究聚焦于液滴斜向撞击光滑表面和规则粗糙表面[19, 20]。然而在实际应用中，固体表面的粗糙度通常处于不可控的随机分布状态。因此有必要研究液滴斜向撞击具有随机分布粗糙结构的超疏水表面的动态行为，以更加符合实际应用背景。

近些年高速摄像机被广泛应用于液滴撞击固体表面的研究。然而，实验具有很高的不确定性，特别是对于瞬态反弹的液滴。因此本文拟采用数值模拟的手段对液滴斜向冲击具有随机分布粗糙结构的超疏水表面的动力学行为进行研究。本文采用多相格子玻尔兹曼模型用于模拟液滴动力学。此外还研究了表面随机粗糙参数及液滴性质对冲击动力学的影响。

1 数值方法

1.1 多相格子玻尔兹曼方法

近年来，格子玻尔兹曼方法（LBM）由于在模拟多相流和处理复杂边界的独特优势，在流体力学研究中受到了广泛的关注。在本文中，伪势多相流模型被用于研究液滴在超疏水表面的斜向撞击过程。基于多松弛时间碰撞算子的 LBM 演化方程如下所示[21]：

$$f_\alpha\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_\alpha\delta_t,t+\delta_t\right)=f_\alpha\left(\mathbf{x},t\right)-\left(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{M}\right)_{\alpha\beta}\left(f_\beta-f_\beta^{eq}\right)+\delta_t F'_\alpha \tag{1}$$

其中 f_α 为速度分布函数，x 表示空间位置，δ_t 为时间步长，$\mathbf{e}_\alpha$ 为离散速度，$\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{M}^{-1}$ 分别为正交变换矩阵及其逆矩阵。此外 f_α^{eq} 为平衡态分布函数，F'_α 为速度空间的力源项。通过正交变换矩阵 $\mathbf{M}$，等式(1)可以写成如下形式：

$$f_\alpha\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_\alpha\delta_t,t+\delta_t\right)=\mathbf{M}^{-1}\left[\mathbf{m}-\mathbf{\Lambda}\left(\mathbf{m}-\mathbf{m}^{eq}\right)+\delta_t\left(\mathbf{I}-\frac{\mathbf{\Lambda}}{2}\right)\overline{\mathbf{S}}\right] \tag{2}$$

其中 $\mathbf{m}=\mathbf{M}\mathbf{f}$，$\mathbf{m}^{eq}=\mathbf{M}\mathbf{f}^{eq}$，$\mathbf{I}$ 为一个单位张量。$\overline{\mathbf{S}}$ 为矩空间的力源项可表示为 $\left(\mathbf{I}-\frac{\mathbf{\Lambda}}{2}\right)\overline{\mathbf{S}}=\mathbf{M}\mathbf{F}'$。此外，对角矩阵$\mathbf{\Lambda}$可以表示为

$$\mathbf{\Lambda}=\mathrm{diag}(s_1,\ s_2,\ s_3,\ s_4,\ s_5,\ s_6,\ s_7,\ s_8,\ s_9) \tag{3}$$

其中 s_1至 s_9为松弛时间。在本研究中，松弛时间被设置为：$s_1=s_4=s_6=1.0$，$s_2=s_3=s_5=s_7=1.1$。s_8 和 s_9 与运动粘度 ν 有关，其关联式可表示为：

$$\nu=\frac{\left(s_8-0.5\right)\delta_t}{3} \tag{4}$$

此外，平衡态 $\mathbf{m}^{eq}$ 可表示为：

$$\mathbf{m}^{eq}=\rho(1,-2+3|\mathbf{v}|^2,1-3|\mathbf{v}|^2,v_x,-v_x,v_y,-v_y,v_x^2-v_y^2,v_xv_y)^T \tag{5}$$

其中 ρ和 $\mathbf{v}$ 分别为宏观密度和宏观速度，可由下式计算：

$$\rho=\sum_\alpha f_\alpha,\ \rho\mathbf{v}=\sum_\alpha\mathbf{e}_\alpha f_\alpha+\frac{\delta_t}{2}\mathbf{F} \tag{6}$$

其中 $\mathbf{F}$ 为施加在流体节点上的外力。在本模型中外力由三个部分组成，分别是流体间作用力 $\mathbf{F}_{int}$，流固作用力 $\mathbf{F}_{ads}$ 和重力 $\mathbf{F}_g$，这些力的计算式如下：

$$\mathbf{F}_{int}=-G\psi\left(\mathbf{x},t\right)\sum_\alpha w_\alpha\psi\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_\alpha\delta_t,t\right)\mathbf{e}_\alpha \tag{7}$$

$$\mathbf{F}_{\text{ads}} = -G_{\text{ads}}\psi\left(\mathbf{x},t\right)\sum_{\alpha} w_{\alpha}\psi\left(\mathbf{x},t\right)s\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_{\alpha}\delta_{\text{t}},t\right)\mathbf{e}_{\alpha} \tag{8}$$

$$\mathbf{F}_{\text{g}} = \left(\rho-\rho_{\text{v}}\right)\mathbf{g} \tag{9}$$

其中 G 和 G_{ads} 分别为流体间作用力参数和流固作用力参数。在本研究中采用了 D2Q9 格子构型，此时权重系数 w_{α}选取为 $w_{1\text{-}4}=1/3$，$w_{5\text{-}8}=1/12$。ρ_{v}为蒸气密度, $\mathbf{g}$ 为重力系数。$s\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_{\alpha}\delta_{\text{t}},t\right)$为一个指示函数对于固体节点其值为 1，而对于流体节点其值为 0。ψ 为有效密度，其计算式如下：

$$\psi\left(\mathbf{x},t\right)=\sqrt{\frac{2\left(p_{EOS}-\rho c_{s}^{2}\right)}{Gc^{2}}} \tag{10}$$

其中 c_{s}为格子声速，其值为$c/\sqrt{3}$，其中$c=\delta_{\text{x}}/\delta_{\text{t}}$，在本文中 δ_{x}和 δ_{t}选取为 1。p_{EOS}为非理想状态方程，本研究中采用了经典的 Carnahan-Starling（C-S）状态方程。此外，为了确保热力学一致性力源项$\overline{\mathbf{S}}$ 的计算采用了 Li 等[22]人的改进格式：

$$\overline{\mathbf{S}}=\begin{bmatrix} 0 \\ 6(v_xF_x+v_yF_y)+\dfrac{12\varepsilon\left|\mathbf{F}\right|^{2}}{\psi^{2}\delta_{t}(1/s_{2}-0.5)} \\ -6(v_xF_x+v_yF_y)-\dfrac{12\varepsilon\left|\mathbf{F}\right|^{2}}{\psi^{2}\delta_{t}(1/s_{3}-0.5)} \\ F_x \\ -F_x \\ F_y \\ -F_y \\ 2(v_xF_x-v_yF_y) \\ (v_xF_y+v_yF_x) \end{bmatrix} \tag{11}$$

其中 ε为保证计算稳定性的参数。

1.2 随机粗糙结构重构

在本研究中，随机分布的粗糙结构的粗糙度通过三个统计参数来描述，分别是偏度、峰度和标准偏差。其中偏度用于表征粗糙结构的对称性，峰度描述的是粗糙结构的陡峭程度，而标准偏差是表示粗糙结构高度分布偏离平均值的程度。图 1 中给出了粗糙参数对于粗糙结构形态的影响。当粗糙表面为高斯分布时偏度值为 0 峰度为 3。对于峰较低而谷较深的表面偏度值小于 0，对于峰较高而谷较浅的表面偏度值大于 0。此外当粗糙表面的粗糙结构高度分布比高斯分布更平缓，则其峰度值小于 3。而当粗糙表面的粗糙结构高度分布比高斯分布更尖锐，则其峰度值大于 3。在本研究中，具有特定粗糙参数的随机分布粗糙表面是基于快速傅里叶变换法重构生成的，具体的算法实现细节可在以往的研究中得到[18]。

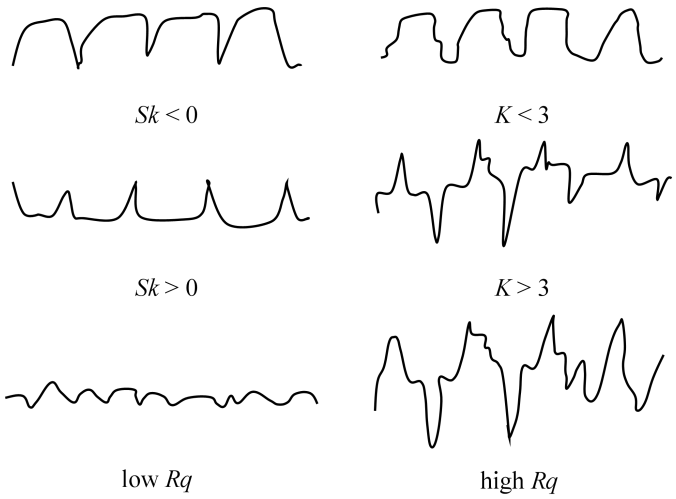


图 1 不同粗糙度参数下粗糙结构的形貌

1.3 模型验证

为了验证模型的准确性，我们首先模拟了一个静止液滴在蒸气中达到稳态的模拟结果是否符合拉普拉斯定律。拉普拉斯定律的表达式如下：

$$\Delta p = p_{\text{in}} - p_{\text{out}} = \frac{\sigma}{r} \tag{12}$$

其中 p_{in} 和 p_{out} 分别为液滴内部和外部的压力。σ和 r 分别为液滴的表面张力和半径。在本验证中，一个被蒸气包围的静止液滴被初始化在一个 200×200 的计算域中。在 50000 个时间步长后，压力分布达到稳定状态。图 2 给出了不同温度下压力差Δp 与 1/r 的关系。可以看出液滴内外压力差与液滴半径的倒数成证明。在温度为 $0.5T_c$、$0.6T_c$、$0.7T_c$ 和 $0.8T_c$ 下的表面张力分别为 0.0068、0.005、0.0034 和 0.002。

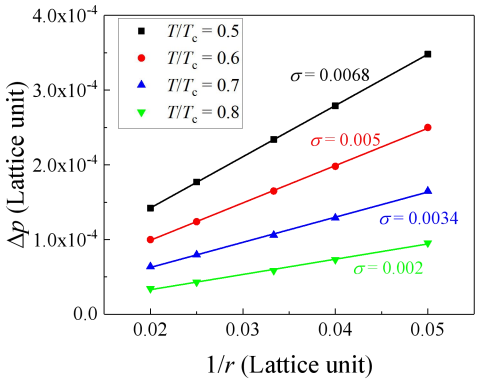


图 2 不同温度下静止液滴的拉普拉斯验证

此外，液滴在表面的不同润湿性特征被用来验证流固界面相互作用力强度的计算。在这个验证中，一个静止液滴被初始化在具有不同流固作用力参数的固体表面上，并计算至稳态，随后测量液滴的接触角。数值模拟的结果如图 3 所示。可以看出，流固作用力参数的正负分别对应着固体基底的疏水和亲水，并且数值结果与先前的研究非常吻合

[23]。通过以上两个验证说明，当前的伪势多相流模型可以用于研究液滴在具有随机粗糙结构的超疏水表面上的冲击过程。

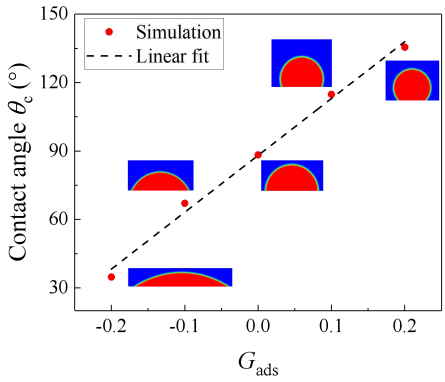


图 3 液滴接触角与流固作用力参数的关系

2 结果与讨论

2.1 问题描述

本研究中所模拟的液滴斜向撞击具有随机粗糙结构的超疏水表面的计算域如图 4 所示。图中蓝色、绿色和红色部分分别代表蒸气、液滴和固体表面。计算域的大小为 $N_x \times N_y = 600 \times 400$（格子单位）。初始半径为 50（格子单位）的液滴以初始速度 U_0 斜向撞击固体表面。α为冲击速度和水平方向的夹角。当冲击角$\alpha = 90°$时液滴垂直撞击固体表面。U_N 和 U_x 分别为冲击速度 U_0 的垂直分量和水平分量。在本模拟中，计算域的侧边都采取了周期性边界条件，底面固体结构与计算域顶部都采用了无滑移边界条件。在本文中，使用了五个无量纲参数来描述液滴的冲击过程，分别是韦伯数($We = \rho R_0 U^2/\sigma$)，雷诺数($Re = R_0 U/\nu$)，奥内佐格数($Oh = We^{0.5}/Re$)，液气密度比($\rho^* = \rho_L/\rho_v$)和液气动力粘度比($\mu^* = \mu_L/\mu_v$)．在本次研究中，模拟条件设置为$\rho^* = 751$ 和$\mu^* = 50$。此外固体表面的本征接触角被恒定设置为 150°。

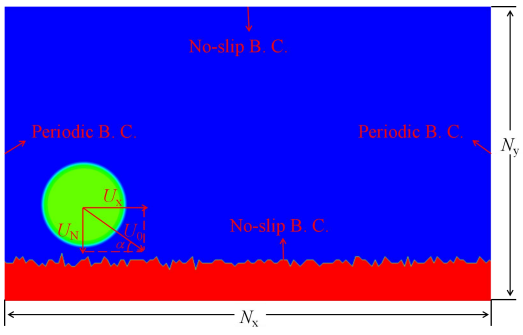


图 4 液滴斜向撞击具有随机粗糙结构超疏水表面的计算域示意图

2.2 斜向撞击液滴的动力学行为

为了研究液滴斜向撞击具有随机分布粗糙结构的超疏水表面的动力学行为，图 5 给出了冲击角度为 45°时的不同时刻的液滴瞬态图像。此时固体表面结构的粗糙度参数设

置为典型的高斯分布粗糙结构（$Sk = 0, K = 3.0$ and Rq = 0.3 μm）。时间尺度通过毛细时间（$t^* = t/\sqrt{\rho_L R_0^3/\sigma}$）进行无量纲化，当液滴刚刚接触固体结构时认为 $t^* = 0$。如图 5 所示，液滴冲击随机粗糙结构超疏水表面的过程可以分为三个阶段，分别是铺展阶段、收缩阶段和反弹阶段。在铺展阶段，液滴的动能部分转化为表面能，液滴的表面积增加。在达到最大铺展直径后，液滴开始进入收缩阶段。在收缩阶段，液滴的表面能转化为动能，促使液滴从表面反弹。在液滴在固体表面运动的过程中，粘性耗散和由于表面钉效应引起的附着力是消耗液滴初始动能的主要因素。

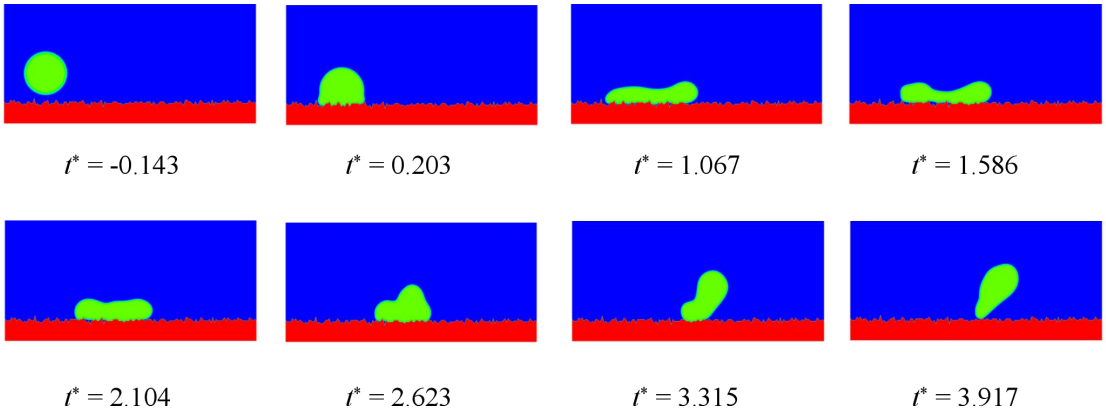
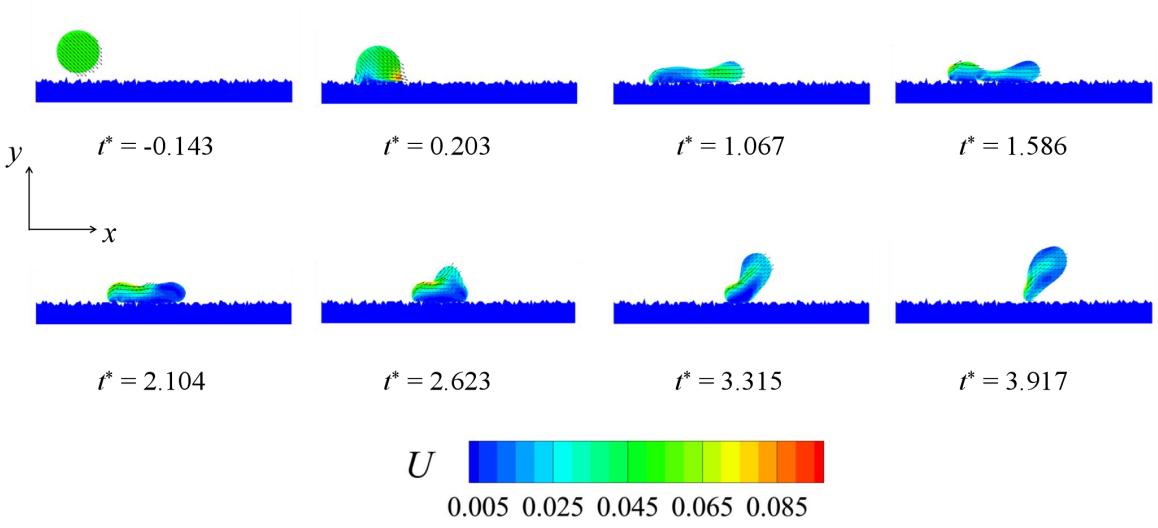
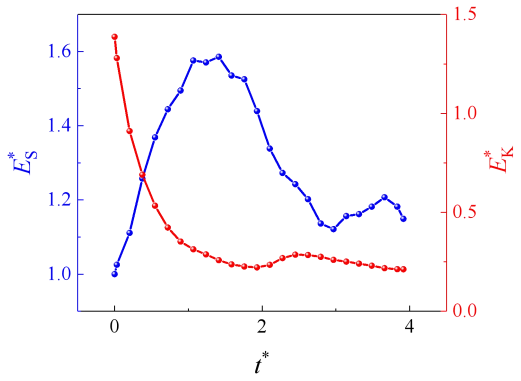


图 5 液滴以 45°斜向撞击具有高斯分布粗糙结构的超疏水表面的动力学瞬态图

随后，为了探索液滴运动过程的能量变化，图 6 给出了液滴动能和表面能的时间演化图。图 6(a)显示了液滴冲击过程中的速度分布。在液滴铺展阶段，液滴的左半部分沿着 x 的负方向铺展，与液滴初始的水平速度方向相反，这导致左半液滴的速度迅速下降。然而，液滴的右半部分的液滴铺展方向与液滴初始的水平速度方向一致，这导致了右半部分的液滴速度较高。在收缩阶段，液滴的左半部分恢复了沿着 x 正方向的速度，而液滴的右半部分由于沿着 x 负方向的回缩而速度减小。此外图 6(b)给出了无量纲表面能（E_s^*）和无量纲动能（E_K^*）的时间演化，无量纲表面能和无量纲动能通过初试液滴的表面能（$E_{S,0}$）进行了无量纲化。如图所示液滴的动能在一开始迅速下降随后略有上升，而液滴的表面能呈现先增大后减小的趋势。



(a)



(b)

图 6 液滴的动能和表面能时间演化：(a) 液滴撞击过程中的速度瞬态分布；(b) 无量纲表面能和无量纲动能的时间演化

2.3 粗糙结构的影响

随后，本文对固体表面粗糙结构对冲击液滴动力学的影响进行探索。如图 7 所示，本文重构了四种具有不同粗糙度参数的粗糙表面，重构的粗糙表面的形貌与粗糙度参数的预测一致。为了进一步评估粗糙结构对液滴动力学的影响，我们研究了动能维持系数 β（定义为当前动能与初始动能的比值）随时间的变化关系。如图 8 所示，表面 S2 最终具有最大的 β值。这是由于 S2 表面具有负的偏度，从而其具备更深的谷和更低的峰。因此在 S2 表面上液滴更易维持 Cassie 润湿状态，这使得钉效应带来的附着力减小。而对于 S4 表面，表面上分布了更多的峰。此时液滴的初始能量很容易被粗糙结构所引起的钉效应所消耗，从而导致液滴的动能维持系数较小。

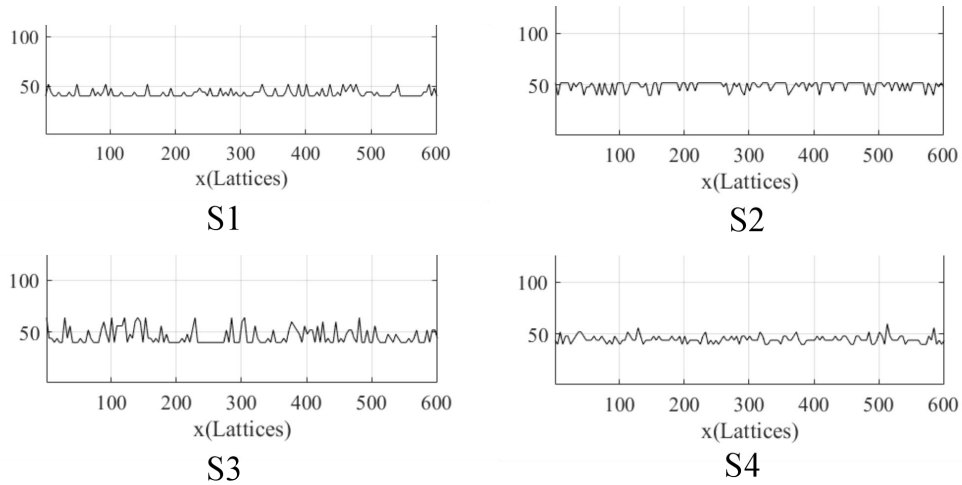


图 7 重构的粗糙表面的形貌：S1: Sk = 1.2, K = 3, Rq = 0.3 μm; S2: Sk = -1.2, K = 3, Rq = 0.3 μm; S3: Sk = 1.2, K = 3, Rq = 0.6 μm; Sk = 1.2, K = 5, Rq = 0.3 μm.

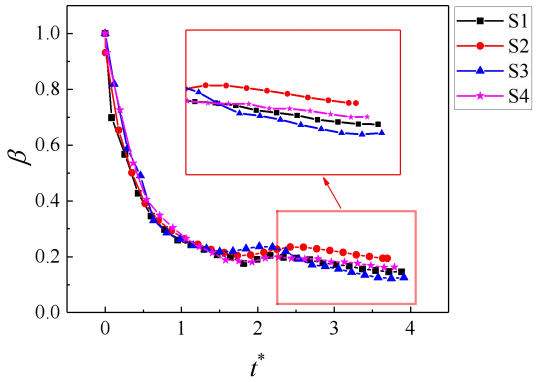


图 8 不同粗糙表面上冲击液滴的动能随时间的演化

2.4 参数分析：撞击角度和奥内佐格数

此外，对于液滴斜向撞击超疏水表面的过程，液滴的冲击角和液滴本身的奥内佐格数也会显著影响液滴动力学，因此本文接下来就继续研究这两个参数的影响。图 9 给出了不同初始冲击角下液滴动能随时间的变化曲线。可以看出，动能维持系数随着液滴冲击角的减小而增加。这是由于液滴的法向速度分量随着冲击角的减小而减小，这导致了液滴最大铺展直径的减小。这说明液滴变形过程中所需要抵抗的粘性力减小，液滴内部的粘性耗散也更小。图 9 中的动力学瞬态图像呈现了冲击角度为 15°和 60°时液滴最大铺展时的形貌，可以看出，冲击角为 60°时液滴的最大铺展直径会显著大于冲击角为 15°时液滴的最大铺展直径。随后，我们探索了液滴奥内佐格数对液滴动力学的影响，图 10 中给出了不同奥内佐格数下液滴动能随时间的演化。可以看出，随着奥内佐格数的增加，液滴的动能维持系数会由于粘性耗散的增加而减小。根据模拟结果，粘性较低的液滴的反弹速度会显著增加。

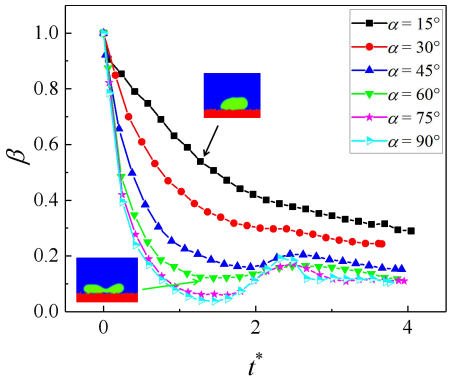


图 9 不同冲击角度的液滴动能随时间的演化

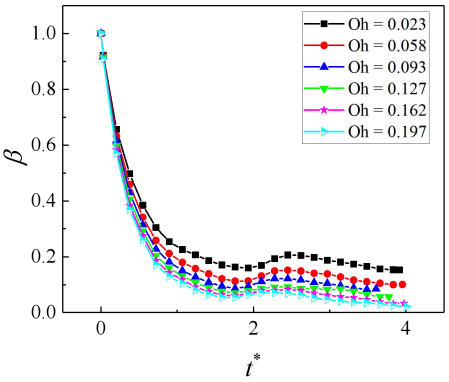


图 10 具有不同奥内佐格数的冲击液滴动能随时间的演化

3 结论

为了研究液滴斜向撞击具有随机分布粗糙结构的超疏水表面的动态过程，本文采用二维伪势多相流模型对具有不同偏度和峰度的随机粗糙表面上的液滴反弹进行模拟。粗糙表面的重构算法基于快速傅里叶变换和 Johnson 转换建立。此外还研究了冲击角度和奥内佐格数对液滴动力学的影响。根据研究结果，可以得到以下结论：

（1）液滴在随机粗糙表面上的运动过程可以分为三个阶段，包括铺展阶段、回缩阶段和反弹阶段。在铺展阶段和回缩阶段，液滴的内部速度的大小取决于其运动方向是否与初始水平速度一致。

（2）粗糙结构对液滴动力学的影响是重要的，粗糙结构的峰值增加会导致液滴消耗更多能量，从而减小了反弹液滴的动能。

（3）撞击液滴的动力学也受到撞击角度和奥内佐格数的显著影响。由于粘性耗散的增加，动能的维持系数随着撞击角度和奥内佐格数的增加而降低。

参考文献

[1] J. Kim. Spray cooling heat transfer: the state of the art. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2007, 28(4): 753--767

[2] A. L. N. Moreira, A. S. Moita, M. R. Panao. Advances and challenges in explaining fuel spray impingement: How much of single droplet impact research is useful?. Progress in Energy and Combustion Science, 2010, 36(5):554--580

[3] B. Derby. Inkjet Printing of Functional and Structural Materials: Fluid Property Requirements, Feature Stability, and Resolution. Annual Review of Materials Research, 2010, 40: 395--414

[4] A. M. Worthington. On impact with a liquid surface. Proceedings of the Royal Society of London, 1883, 34: 217--230

[5] R. Rioboo, C. Tropea, M. Marengo. Outcomes from a drop impact on solid surfaces. Atomization and sprays, 2001, 11(2): 155--165

[6] X. Han, J. Q. Li, X. Tang, W. Li, H. B. Zhao, L. Yang, L. Q. Wang. Droplet Bouncing: Fundamentals, Regulations, and Applications. Small, 2022, 18(22): 2200277

[7] V. S. Ajaev, E. Y. Gatapova, O. A. Kabov. Stability and break-up of thin liquid films on patterned and structured surfaces. Advances in Colloid and Interface Science, 2016, 228: 92--104.

[8] L. L. Cao, A. K. Jones, V. K. Sikka, J. Z. Wu, D. Gao. Anti-Icing Superhydrophobic Coatings. Langmuir, 2009, 25(21): 12444--12448

[9] D. Sebastian, C. W. Yao, I. Lian. Mechanical Durability of Engineered Superhydrophobic Surfaces for Anti-Corrosion. Coating, 2018, 8(5): 162.

[10] L. M. Shu, Y. D. Liang, F. B. He, H. Z. Zhang. Effects of Chemical Properties and Roughness on Anisotropic Wetting Observed on Machined Surfaces. Materials Transactions, 2015, 56(1): 149--153

[11] X. Gao, R. Li. Spread and recoiling of liquid droplets impacting solid surfaces. AICHE Journal, 2014, 60 (7): 2683--2691

[12] N. Samkhaniani, A. Stroh, M. Holzinger, H. Marschall, B. Frohnapfel, M. Worner. Bouncing drop impingement on heated hydrophobic surfaces. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 180: 121777

[13] D. Zhang, K. Papadikis, S. Gu. Application of a high density ratio lattice-Boltzmann model for the droplet impingement on flat and spherical surfaces. International Journal of Thermal Sciences, 2014, 84: 75--85

[14] A. J. Hu, D. Liu. 3D simulation of micro droplet impact on the structured superhydrophobic surface. International Journal of Multiphase Flow, 2022, 147: 103887

[15] C. F. Guo, L. Liu, J. X. Sun, C. W. Liu, S. Y. Liu. Splashing behavior of impacting droplets on grooved superhydrophobic surfaces. Physics of Fluids, 2022, 34(5): 052105

[16] J. Y. Zhao, S. Chen, K. X. Zhang, D. M. Cao, Y. Liu. Numerical study on the bouncing dynamics of droplets impacting on a macro-textured superhydrophobic surface. Computers & Fluids, 2022, 238: 105383

[17] Y. Y. Quan, L. Z. Zhang. Numerical and analytical study of the impinging and bouncing phenomena of droplets on super-hydrophobic surfaces with microtextured structures. Langmuir, 2014, 30(39): 11640--11649

[18] W. Z. Yuan, L. Z. Zhang. Numerical and analytical study of the impinging and bouncing phenomena of droplets on super-hydrophobic surfaces with microtextured structures. Langmuir, 2017, 33(3): 820--829

[19] C. W. Kang, H. W. Ng. Splat morphology and spreading behavior due to oblique impact of droplets onto substrates in plasma spray coating process. Surface & Coatings Technology, 2006, 200(18-19): 5462--5477

[20] C. C. Yin, T. Y. Wang, Z. Z. Che, M. Jia, K. Sun. Oblique impact of droplets on microstructured superhydrophobic surfaces. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 123: 693--704

[21] K. N. Premnath, J. Abraham. Three-dimensional multi-relaxation time (MRT) lattice-Boltzmann models for multiphase flow. Journal of Computational Physics, 2007, 224(2):539--559

[22] Q. Li, K. H. Luo, X. J. Li. Lattice Boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. Physical Review E, 2013, 87: 053301

[23] L. Chen, Q. J. Kang, Y. T. Mu, Y. L. He, W. Q. Tao. A critical review of the pseudopotential multiphase

lattice Boltzmann model: Methods and applications. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2014, 76: 210--236

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：

粘弹性流体在具有导电板的微通道中的诱导电荷电渗混合性能研究

魏玉琪 1，陈逸 2，李捷

武汉理工大学，湖北武汉 430063

Tel：15007125296，Email：jieli@whut.edu.cn

摘要：在这项研究中，提出了一种基于诱导电荷电渗原理的带有一个可导电板的微通道混合器。研究了导电板安装、聚合物浓度、导电板形状对混合的影响。结果表明，在微混合器内设置导电板，可将粘弹性流体的混合效率从 78.3%提高到 89.8%，证明了诱导电荷电渗可以增强局部流体的混合。100ppm 和 250ppm PAA 溶液流速和涡流都在时间尺度上不稳定，从而提升了混合效率。改变导电板形状可控制涡流生成区域，导电板弯曲度为 360°时混合效率最高。

关键词: 诱导电荷电渗流；非牛顿流体；导电板；微混合器

0 前言

经历多年的发展，微流控技术已经在诸多领域被证实有很大的潜力，包括化学[1]、生物学[2]、细菌检测[3]、DNA 测序[4]、芯片实验室 [5]、药物输送[6]等。根据微尺度流动的特点开发的一种叫做芯片实验室（LOC）的微装置，因其在快速诊断疾病和材料合成等领域具有的创造性的有效解决方案[7]，近十几年来被广泛研究。在 LOC 装置中，试剂的混合十分常见。高效的混合有利于减少混合时间，减小 LOC 系统的占地面积。然而，微小尺寸下的无干预流动的雷诺数很低（Re<1），使得流动始终处于层流状态，无法诱导湍流，流体间的混合主要靠平行层流之间的扩散效应。这就导致混合时间过长、通道过长、效率低下。微通道强化混合的方法可以分为主动式和被动式两种。被动式微混合器通过加入障碍物、设计复杂的通道，增强流体的分子扩散以强化混合。与主动式微混合器相比，被动式微混合器在复杂微流控系统中的实现和制作更加简单。Wang 等[8]研究了 Y 型微混合器中障碍物阵列的不同布局，结果表明，只有在高雷诺数时，障碍物才会扰动液体流动，产生湍流。Alam 等[9]在曲线通道微混合器中用圆柱形障碍物对 $0.1 < Re < 60$ 的乙醇和水混合指数进行了研究，并证明了具有圆形和六角形截面障碍物的混合器具有相同的混合质量。Razavi[10]等人在 $0.1 < Re < 60$ 的 T 型微混合器中优化了四个矩形障碍物的布置。他们使用 Taguchi 方法来评估障碍物几何学的敏感性，发现他们的高度比他们的宽度更有效。主动式微混合器需要复杂的制作方法和结构，利用外部能量增加流体之间的接触面积、干扰流体流动或诱导湍流等方式强化混合过程。常用的外部能量包括磁场、电场、压力场等。Huang 等人[11]研究了一种在主通道底部安装倾斜电极阵列的 Y 型混合器，结果发现在电极上产生了四个涡流，增强了混合。Usefian 等人[12]提出了一种外加交流和直流电场的新型电渗微混合器。结果表明，直流电场产生的涡旋比交流电场产生的涡旋强，混合指数随交直流电场电压的增大而增大。Kim[13]等人提出了一种基于介电泳技术的新型微/纳米混频器。结果表明:随着槽深的减小，混合质量增加，且通道深度必须大于 20 微米。

诱导电荷电渗透（ICEO）通过主动干预流体，使得流动变得不稳定，从而提高混合效率，是一种非常有前景的主动式微混合技术。在胶体科学的背景下，诱导电荷电渗这种现象首先由 Gamayunovet 等人[14]预测。后来 Bazant 和 Squires[15]在微流体学的背景下重新发现

这种现象，并对其进行了一般性的现象描述，称其为诱导电荷电渗。经过近几十年的发展，ICEO 已被广泛应用于微纳米流体的研究中，如微混合器[16-18]、微泵[19,20]、微阀[21,22]、微电机[23,24]、粒子聚焦器[25,26]、粒子分拣器[27-30]、粒子捕获器[31-33]。第一个基于诱导电荷电渗原理(ICEO)的微混合器就是通过在通道中加入导电体制成。Wu 和 Li[34]研究在通道中带有不同形状的导电障碍体的混合效果。研究结果表明，沿导电障碍物表面诱导的不均匀 zeta 电势分布会产生局部的循环流动。Azimi 等人[35]对一种制作简单的微混合器进行了数值研究，导电板一端固定在通道壁面，另一端可以自由移动。结果表明，混合效率与导电板长度以及时变直流电场的幅值有直接关系。通过降低导电板的杨氏模量和增加导电板的长度，混合效率约为 90%。Jain 等[36]人优化了用于微混合的通道壁上导电障碍物的几何形状，用遗传算法找到了在给定工况条件下最大化混合的最佳障碍物形状。不同条件下的各种研究表明，近直角三角形障碍物在 ICEO 流动主导状态下提供了最佳混合性能，而矩形形状在扩散主导状态下是最佳形状。Daghighi 等[37]人提出了一种基于导电体的感应电荷电动运动的新型微混合器。他们模拟在微通道混合器中加入一个导电球体，并施加两个垂直电场利用 ICEO 现象产生的涡流增强混合过程。涡流的强度取决于施加的电场，可以在该系统中实现最佳混合，并且施加更高的电场将缩短混合时间。Kazemir 等人[38]对安有导电板的感应电荷电动微混合器中流体的电渗流进行了数值模拟。研究了挡板安装、挡板位置和电场强度对混合效率的影响。结果表明，由于施加的电场和导电板上感应的表面电荷的相互作用产生涡流，这些涡流显著提高了混合性能。Nazari 等人[39]研究模拟了一种具有柔性导电板的诱导电荷电渗微混合器，导电板在水动力和静电力的作用下会发生变形，通过两种方式对增强混合：(1)通过在导电板的导电表面上诱导涡流；(2)通过振荡导电板，起到搅拌器的作用，提高混合效率。之后他们又对内部安装有导电板的诱导电荷电渗微混合器进行了数值研究，包括导电板的安装、长度、方向、位置、排列和数量以及外部电场强度对混合效率的影响。结果发现导电板周围产生的涡流可以提高微系统的混合效率，且混合效率随着导电板长度的增加而增加，导电板通过一定的布置方法可以实现接近 100％的混合效率[40]。

上述研究都是以牛顿流体为基础。由于微流控设备涉及的领域中包括生物领域，而大多数生物流体都是含有聚合物的非牛顿流体[41-43]。例如血液由红、白细胞和血浆组成，它表现为剪切稀化的非牛顿流体[44-45]。这些含有聚合物的溶液都表现出与牛顿流体溶液完全不同的性质。当在水中加入高分子聚合物(简称高聚物)或某表面活性剂后，此时的流体体系将同时具有粘性和弹性，称为粘弹性流体。在微流体力学的应用中，有很多生物医学与化学方面的流体。这些流体都具有粘弹性流体的特性，它们表现出了粘弹性行为[46]。近年来，国内外关于粘弹性流体在微混合器的应用也已经出现了不少研究，无论是实验还是数值仿真方面。Groisman 等人[47]通过实验证明，含有少量高分子聚合物的粘弹性流体可以在非常低的雷诺数下有效地混合。聚合物的存在导致弹性不稳定性和不规则流动，使得微通道中的浓度分布更加均匀。Gan 等人[48]在非常低的雷诺数下实现了粘弹性流体的有效混合。通过诱导弹性不稳定性流动实现了强化混合，可以在较短的混合长度和较快的流速上实现这种粘弹性混合。Lam 等人[49]研究了粘弹性流体在具有会聚/发散几何结构中的混合。结果表明在微芯片中通过弹性效应诱导的不稳定性流动可以实现高效混合。Cai 等[50]人设计了一种具有粘弹性流体的高效微混合器，通过嵌入几个菱形块来破坏粘弹性流体流动的稳定性。对混合过程进行了实验可视化和直接数值模拟（DNS）以评估混合性能，并讨论了聚合物在粘弹性流体流动中的流动模式和作用。结果表明，当弹性足够强时，粘弹性流体流在通道中不规则地扭曲和摆动，从而通过增加不同浓度流体的相交频率来增强混合。粘弹性流体的诱导电渗混合特性也越来越受国内外研究者的关注，包括诱导电荷电渗在直流电场和交流电场下的研究。Alipanah 等人[51]在 OpenFOAM 中数值研究了带有导电障碍边缘的 T 型微混合器在牛顿和非牛顿流体中的混合效率和混合长度。研究表明通过使用导电边缘，由于其能够产生强大的

涡流，可以实现高混合效率和短混合长度。Chen 等[52] 还提出了一种基于 ICEO 的带导电边缘腔室的 T 型微混合器，在通道中同样使用聚丙烯酰胺(PAA)溶液作为混合工质。结果表明，由于涡流的存在，腔室内具有导电边缘的微混合器具有更好的混合效果。

综上所述，目前专门研究粘弹性流体 ICEO 混合的研究较少，而具有导电板的微通道中的粘弹性流体ICEO混合的研究几乎没有。而导电板和粘弹性流体都可能提升微通道ICEO混合效果。在本研究中，使用由 Oldroyd-B(OB)模型控制的聚丙烯酰胺(polyacrylamide，PAA)水溶液这一典型的粘弹性流体，并选择开源求解器 rheoTool 数值研究了添加导电板、聚合物浓度、导电板形状对混合效率的影响。第二部分介绍数学模型和边界条件。第三节验证了数学方法。最后，对数值模拟结果进行了讨论和总结。

2. 数学模型

2.1 问题描述

本文提出了一种基于诱导电荷电渗的含导电板的粘弹性流体微混合器。这种微混合器的由于结构简单、无活动部件，可以很容易的被制造并集成应用于微流体设备中。图 1 为微混合器的结构示意图，它由直微通道和导电板组成，流体从微通道的左侧进入，并在微通道内混合后流出。选取微通道宽度 W=100 μm 作为该系统的特征长度，微通道长度为 L=10W，导电板长度 l=110 μm，厚度为δ=10 μm，水平放置在距离微通道下壁 0.5W 的位置，导电板的中心与坐标轴原点重合。两个电极被放置在微通道的左端和右端，用以产生电场。入口高电势，出口电极接地。在导电表面的诱导 zeta 电势远大于非导电表面的 zeta 电势。假设非导电通道的恒定ζ电位为 50mV。微混合器的入口和出口处于大气压下，通道中没有压力梯度。通过施加电场，两种不同浓度的流体从入口部分进入微通道，一股溶液中含有浓度为C_0的标量物质，而另一股溶液中则不含该标量物质。模拟中使用的几何参数和物理参数如表 1 所示。

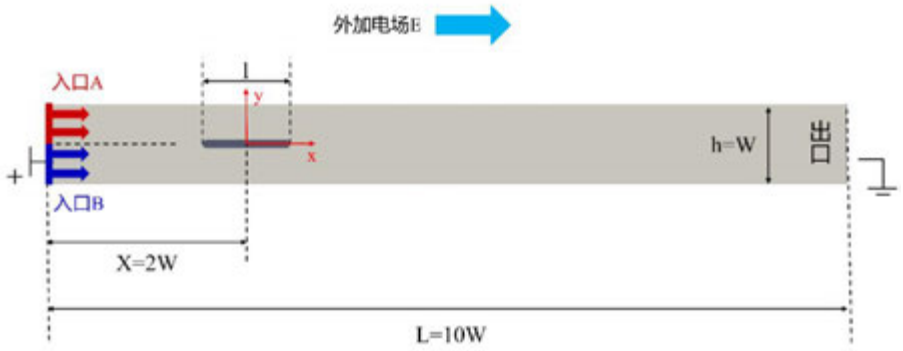


图 1 带有导电板的微混合器结构示意图

表 1 几何参数和物性参数表

参数符号	参数名称	值	单位
ε_R	介电常数	80	-
ε_0	真空介电常数	8.854×10^{-12}	(C/Vm)
η_0	粘度	0.001	(kg/ms)
ρ	密度	1000	(kg/m^3)
ζ_w	通道壁面 zeta 电势	-50	(mV)
W	通道宽度	100	(μm)
L	通道水方向平长度	1000	(μm)
l	导电板弧长	110	(μm)

Δ	导电板厚度	10	(μm)
D	扩散系数	1.52×10-10	(m^2 s^{-1})
C_A	进口 A 处标量浓度	1	-
C_B	进口 B 处标量浓度	0	-

我们首先对不同浓度的 PAA 水溶液的粘弹性聚合物粘度η_p和弛豫时间λ进行描述。Ji 等人[53]在 100 ppm、250 ppm 和 1000 ppm 的 PAA 水溶液的η_p和λ的基础上完成了曲线拟合，拟合结果实验测量值非常吻合。PAA 水溶液中聚合物粘度的计算公式为：$\eta_p = 2.22\times10^{-5}\cdot c_p$，弛豫时间的计算公式为：$\lambda = 3.69\times10^{-3}+3.94222\times10^{-5}\cdot c_p + 9.68889\times10^{-8}\cdot c_p^2$，其中$c_p$是 PAA 溶液的浓度，单位为 ppm(百万分之一)。 计算得出的不同浓度 PAA 溶液的聚合物粘度和弛豫时间如表 2 所示。

表 2 不同浓度 PAA 溶液的粘弹性参数

浓度c_p (ppm)	100	150	250
聚合物粘度η_p (Pa·s)	0.00222	0.00333	0.00555
弛豫时间λ (s)	0.00860	0.01178	0.01960

2.2. 控制方程

对于不可压缩流体，在层流状态下，等温、单相、瞬态流动的连续性方程和动量方程为：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{1}$$

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}\right) = -\nabla p + 2\eta_s\nabla\cdot\mathbf{D} + \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} \tag{2}$$

在上式中，t 是时间， $\mathbf{u}$和 p 分别为速度矢量和压力，ρ为流体密度，η_s是溶剂动态粘度，$\mathbf{D} = 1/2\left[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^{\mathrm{T}}\right]$表示应变率张量，$\mathbf{f}$是任何外部体力，例如电渗流中的电体力。$\boldsymbol{\tau}$是聚合物外应力张量，可以被不同的本构方程来描述，例如 Oldryod-B、FENE-P、PPT 等。本文选用 Oldryod-B 本构方程，可以恰当地反映聚丙烯酰胺(polyacrylamide，PAA)水溶液的流变行为[54]。对于 Oldryod-B 模型，聚合物额外应力张量$\boldsymbol{\tau}$可以写成构象张量$\mathbf{A}$的函数，其中$\mathbf{A}$表示聚合物大分子结构的张量变量，例如：

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\eta_p}{\lambda} f(\mathbf{A}) \tag{3}$$

式中，η_p聚合物应力张量，λ为弛豫时间。

构象张量的演化由一般微分方程控制，该方程可以涵盖大多数粘弹性模型，例如：

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla\cdot\mathbf{A} - \left(\mathbf{A}\cdot\nabla\mathbf{u}^{\mathrm{T}} + \nabla\mathbf{u}\cdot\mathbf{A}\right) = \frac{1}{\lambda} g(\mathbf{A}) \tag{4}$$

等式(3)中的函数$f(\mathbf{A})$和等式(4)中的函数$g(\mathbf{A})$由下式给出：

$$f(\mathbf{A}) = \mathbf{A} - \mathbf{I}, g(\mathbf{A}) = \mathbf{I} - \mathbf{A} \tag{5}$$

Oldroyd-B 模型构象张量$\mathbf{A}$可推到为式(6)：

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla\cdot\mathbf{A} - \left(\mathbf{A}\cdot\nabla\mathbf{u}^{T} + \nabla\mathbf{u}\cdot\mathbf{A}\right) = \frac{1}{\lambda}(\mathbf{I} - \mathbf{A}) \tag{6}$$

最后，聚合物额外应力张量可以从$\mathbf{A}$(等式(6))计算并用于动量方程。

液体中的局部净电荷密度除双电层外为零，只有在双电层(electric double layer, EDL)中才能产生电渗流的驱动力。EDL 的厚度可以用德拜长度(λ_D)来近似：

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_w k_B T}{2n_0(ze)^2}} \tag{7}$$

在没有磁效应的情况下，可以通过高斯定律计算电势(Ψ):

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \Psi) = -\rho_{\mathrm{E}} \tag{8}$$

在静电中电场为$\mathbf{E} = -\nabla\Psi$。根据定义，电荷密度为：

$$\rho_{\mathrm{E}} = F\sum_{i=1}^{N} z_i c_i \tag{9}$$

其中F是法拉第常数，z_i是带电离子的电价，c_i是带电离子i的浓度(mol/m^3)。

求解时 Poisson 一般将电势变量Ψ分离成两个变量：外部施加的电势ϕ_{e}和内部电势ψ，使得$\Psi = \phi_{\mathrm{e}} + \psi$。高斯定律也分解为两个方程：

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi_{\mathrm{e}}) = 0 \tag{10}$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = -\rho_E \tag{11}$$

如果我们假设电解质中离子遵循 Boltzmann 平衡，就可以得到所谓的 Poisson-Boltzmann 模型(以下称为 PB 模型)，高斯定律写作：

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = -F\sum_{i=1}^{N} z_i c_{i,0} \exp\left(-\frac{ez_i}{kT}(\psi - \psi_0)\right) \tag{12}$$

式中$c_{i,0}$是离子的参考浓度，其中ψ_0是内在电势。假设$c_{i,0}$是体积离子浓度，其中固有电势$\psi_0 = 0$。

2.3 边界条件

沿通道壁和导电板板表面，在法向方向上没有观察到电位变化：

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi_{\mathrm{e}} = 0 \tag{13}$$

在混合器入口处：

$$\phi_e = \phi_0 \tag{14}$$

在混合器出口处:

$$\phi_e = 0 \tag{15}$$

为了求解数值仿真的方程，需要考虑以下边界条件：

在微混合器的入口和出口处：

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0 \tag{16}$$

在微混合器的非导电壁面上：

$$\mathbf{u} = -\frac{\varepsilon \zeta_w}{\eta_0}\mathbf{E} \tag{17}$$

在导电板表面上：

$$\mathbf{u} = -\frac{\varepsilon \zeta_i}{\eta_0}\mathbf{E} \tag{18}$$

在这项研究中，没有考虑压力梯度。入口和出口处的压力指定为零：

$$\mathrm{p} = 0 \tag{19}$$

通道壁处的压力梯度设置为零：

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathrm{p} = 0 \tag{20}$$

浓度方程用于求解微混合器内的浓度分布：

$$\frac{\partial C}{\partial \mathrm{t}} + \nabla(\mathbf{u} \cdot C - \mathrm{D}\nabla C) = 0 \tag{21}$$

式中，C为浓度，D 为扩散系数。假设样品浓度不同的两股流体进入微混合器。一股流体中的样品浓度为C_0，另一股流体中的样品浓度为 0。为了模拟两种流体的混合过程，边界条件如下：

在进口 A 处，样品浓度为C_0：

$$C_A = C_0 = 1 \tag{22}$$

在进口 B 处，样品浓度为 0：

$$C_B = 0 \tag{23}$$

沿着微混合器的壁面：

$$\frac{\partial C}{\partial n} = 0 \tag{24}$$

假设微混合器中的初始浓度为 0。

2.5. 混合效率定义

使用混合效率 Me 来评估微混合器的性能，某一截面上的 ME 的计算公式如下：

$$ME(x) = \left(1 - \frac{\int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} |C - C_\infty| \mathrm{d}y}{\int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} |C_0 - C_\infty| \mathrm{d}y}\right) \times 100\% \#(25)$$

其中 h 是微通道的宽度，C_∞是溶液混合均匀时标量物质的浓度值，计算方法如下：

$$C_\infty = \frac{(C_\mathrm{A} + C_\mathrm{B})}{2} \#(26)$$

3. 数值仿真验证

3.1 求解流程

本文中的数值仿真是基于开源 CFD 平台 OpenFOAM 中的 rheoTool，这是一个用于粘弹性流体流动模拟的开源工具箱。本文的数值模型求解可包括以下步骤：

1-初始化物理场(p, $\mathbf{u}$, ϕ_e, $\boldsymbol{\tau}$, C, $\mathbf{A}$)和时间($t = 0$)

2-进入时间步迭代($t = \Delta t$)

2.1-进入内部迭代(i=0)

2.1.1-速度-压力耦合(j=0)

2.1.1.1-计算构象张量$\mathbf{A}_\mathrm{j}$和从属构象张量$\mathbf{A}$

2.1.1.2-求解动量方程得到$\mathbf{u}_\mathrm{j}^*$

2.1.1.3-求解压力方程以获得连续性的压力场$\mathrm{p_j}$

2.1.1.4-使用正确的压力场，修正由步骤 2.1.2.2 产生的面心速度$\mathbf{u}_{\mathrm{f,j}}^*$

2.1.1.5-求解浓度标量的输运方程得到C

2.1.2-递增循环索引($\mathrm{j = j + 1}$)并返回到步骤 2.1.1.1，直到达到预定义的耦合迭代次数

2.1.3-s 设置(p, $\mathbf{u}$, ϕ_e, $\boldsymbol{\tau}$, C, $\mathbf{A}$)=($\mathrm{p_j}$, $\mathbf{u}_\mathrm{j}$, $\phi_{\mathrm{e,j}}$, $\boldsymbol{\tau}_\mathrm{j}$, C_j, $\mathbf{A}_\mathrm{j}$)

2.2-递增时间 $\mathrm{t = t + \Delta t}$ 后回到步骤 2.1 直到达到结束时间

3-结束仿真并退出程序

3.2 网格无关性验证

图 2 为微通道混合器的网格划分示意图，对整个微通道使用了非均匀网格进行建模。在 x 方向上网格节点总数为 250，且在 x 方向上将网格分为的三段，分别为 x1、x2 和 x3。在 y 方向上的网格节点总数为 80，在 y 方向上也将网格分为了 2 段，分别为 y1 和 y2。在表

3 中展示了网格模型不同分段的长度占比、网格数占比以及膨胀率。

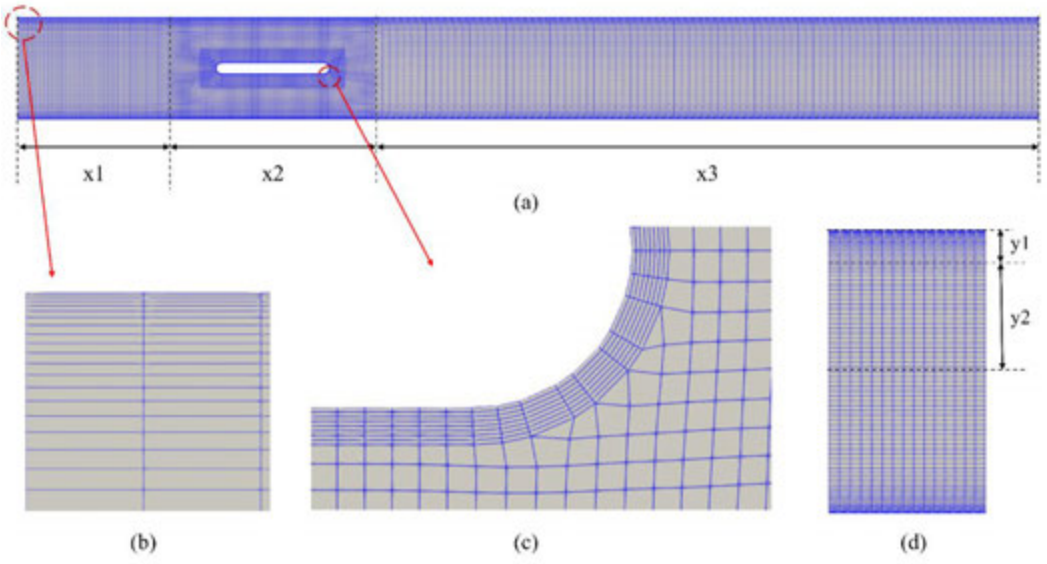


图 2 微通道混合器网格划分示意图：(a)x 方向非均匀膨胀网格；(b) 通道壁面的局部网格；(c)导电板周围边界层网格；(d)y 方向非均匀膨胀网格。

表 3 网格分段的长度占比、网格数占比以及膨胀率

网格分段	x1	x2	x3	y1	y2
长度占比	0.15	0.2	0.65	0.3	0.7
网格数占比	0.2	0.4	0.4	0.5	0.5
膨胀率	0.75	1.0	1.0	5.0	1.0

为了保证计算结果与模型的网格数无关，在验证过程中使用了 3 套不同数量的网格(mesh 1、mesh 2 和 mesh 3)。其中 mesh 1 即为图 2 (a)所示网格，网格总数为 32028。而 mesh 2 则是在 mesh 1 的基础上将两个方向上的网格节点数增加 1.4 倍，分别为 350 和 112，网格总数为 44818。mesh 3 则是增加 1.7 倍，网格总数为 67144。

在电场强度**E**=100 V/cm ，导电板弯曲度 nπ=0°条件下，使用不同数量的网格进行数值仿真，并提取数据进行处理和分析。表 4 记录了使用三套网格计算得到的混合效率以及出口截面平均速度。从表中的数据可以看到，使用三套计算得到的误差非常小，数据吻合的很好，为了节省计算资源，研究过程中选取第一套网格用于仿真计算。

表 4 不同网格计算得到的混合效率及出口截面平均速度

	mesh 1	mesh 2	mesh 3
网格总数(cells)	23208	44818	67144
混合效率(%)	54.00	53.80	54.20
出口截面平均速度(mm/s)	0.34	0.34	0.34

3.3 求解器验证

为了验证本研究中所使用的开源 OpenFOAM 平台中求解器 rheoEFoam 和数值模型的准确性，我们建立了与 Wu 和 Li 研究中相同的模型，使用 rheoEFoam 进行了数值仿真，并与

Wu 和 Li 的结果进行了比较。第一种流体类型是牛顿流体，第二种情况使用 OB 模型控制的非牛顿流体。聚合物浓度系数为 10^{-8} Pa·s，弛豫时间为 10^{-4} s，其他参数与 Wu 和 Li 相同。在我们之前的工作[53]中已经进行了验证，数值结果与 Wu 和 Li 的实验和数值结果非常一致，因此我们直接参考了之前的结果。

4. 结果和讨论

在固定的电场强度 E=100V/cm 的情况下，选择了三种浓度（100ppm、150ppm、250ppm）的 PAA 溶液，并使用经过验证的求解器来计算微混合器中溶液的 ICEO。同样地，使用了四个具有不同曲率的导电板（nπ=0°、120°、240°、360°）。在本章的第一阶段，研究了通道中无导电板、有导电板（不具导电性）、有导电板（具有导电性）三种情况下的混合效果。在第二阶段，对不同工作流体（粘弹性流体）在带有导电阻隔板的微混合器中的混合效果进行了数值模拟。在第三阶段，研究了导电板的形状对混合效率的影响。

4.1 导电板的影响

在本节中，研究了增加导电板对混合效率的影响。使用粘弹性流体（100ppm 的 PAA 溶液）作为工作液在电场的作用下在微通道器中流动。在一定时间后，我们提取了不同时刻通道出口前 50 μm 处截面的浓度值，并通过计算得到三种微混合器在该截面的混合效率随时间的变化，如图 3 所示。在达到稳定后，不安装导电板和微通道安装不导电板的两种微混合器的混合效率差别不大分别为 78.25%、78.31%，但带有导电板的微混合器的混合效率更高达到了 89.81%。

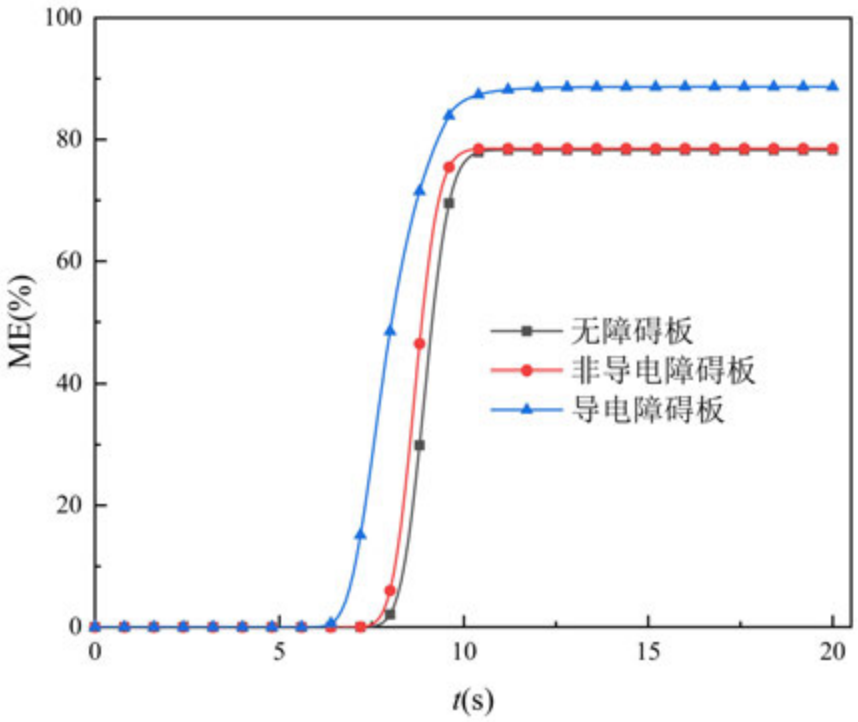


图 3 流体在不同微混合器中的混合效率随时间变化

为了探究导电板对流体混合效率的影响，我们计算了沿通道方向不同截面上的混合效率，如图 4 所示。三条曲线一开始是重合的，但随着导电板的出现，曲线开始出现了不同的趋势。对于不带导电板的微混合器，由于混合一直发生在两股流体的交界面上，物质随着流体的流动沿通道扩散均匀，混合效率也逐渐增加。对于带不导电板的微混合器，由于导电板位于通道中间时，两股流体被导电板隔开没有交界面上的扩散混合，因此混合效率在这一段反而下

降了。带有导电板的微混合器的混合效率曲线变化最大。导电板之前有一段混合效率降低的区域，接着一段是效率提升的区域，这段区域一直到导电板之后，随后在导电板之后一段区域混合效率又发生了下降。

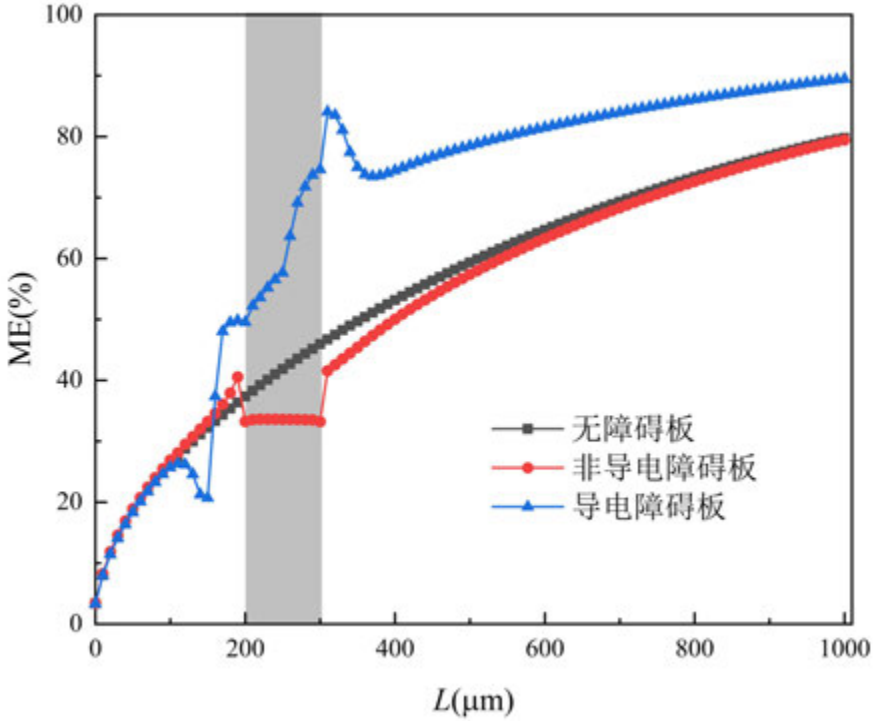


图 4 沿微通道不同截面上的混合效率，灰色区域代表导电板位置

提取微通道内的浓度分布和流线，如图 5 所示。由图 5a 可以看出，流体在没有导电板的情况下进入微通道后，流体沿 x 方向呈直线流动。流动状态为层流，两种流体分层流动。混合主要发生在两种流体的界面，并沿通道长度扩散，变得越来越均匀。图 5(b)中的浓度分布与图 5(a)相似，只是在增加导电板的周围有微小的差异。而导电板后的混合趋势基本没有变化，这与图 4 所示的趋势一致。从图 5(c)可以看出，有导电板的微通道内的浓度分布比前两种情况更加均匀，流线也更加复杂。这正好解释了微通道与导电板在不同截面处混合效率的复杂变化趋势，如图 4 所示。首先，从图 4c 的流线可以看出，导电板上下两个涡旋的挤压作用使均匀混合的面积减小，导致扩散效应引起的混合效果下降，导电板前方的混合效率曲线也相应下降。涡流的产生大大增加了流体混合的面积。此外，涡流内的流体旋转，增加了接触时间。因此，混合效率曲线在导电板的长度上显著上升。接着到达涡流区域以外，相较于涡流区域内的强混合效果，涡流区域外失去了涡流所带来的混合效果的提升，所以混合效率有所下降。随后随着在自由扩散的作用下混合效率逐步提高。图 5(d)为导电板周围流体的速度矢量图，其中箭头方向表示速度方向。外加电场在导电板表面产生相反的 zeta 电位，导致导电板前后产生相反的电渗透流。这在周围区域产生了涡流，干扰了两流界面处的扩散混合，从而使浓度分布更加均匀。

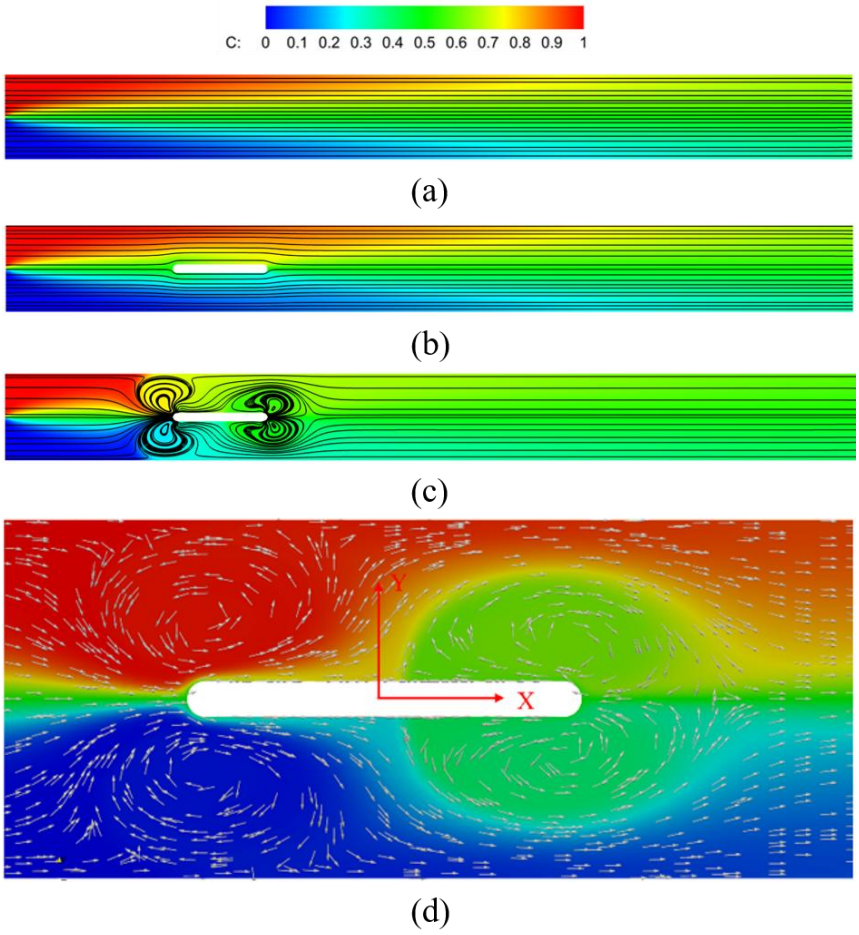


图 5 粘弹性流体在不同微通道混合器中的浓度分布及流线图

(a)微通道不安装导电板；(b)微通道安装不导电板；(c)微通道安装导电板；(d)局部速度矢量图

4.2 粘弹性流体的影响

为了比较混合效果，同样选择出口前 50 μm 的截面计算混合效率，得到不同流体溶液在这一截面的混合效率随时间的变化如图 6。从图中可以发现，牛顿流体的混合效率在 1s 内快速上升，随后略有下降，然后达到稳定。而 PAA 溶液的混合效率随时间逐渐增加到平台值。达到稳定后，牛顿流体的混合效率为 52.9%，而 100ppm、150ppm 和 250ppm 的粘弹性流体的混合效率分别为 88.7%、93.3%和 97.4%。可见， PAA 溶液的混合效率比牛顿流体的混合效率高 20%以上，且 PAA 溶液的浓度越高，混合效率也越高。此外，牛顿流体达到稳定的时间为 5.5s，而 100ppm、150ppm 和 250ppm 的粘弹性流体达到稳定的时间为 6s、8s、10s。聚合物的浓度越高，混合达到稳定所需的时间越长。

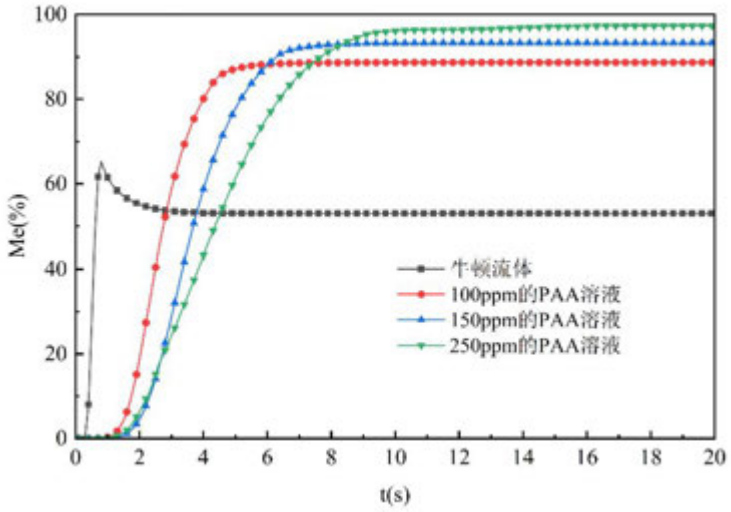


图 6 牛顿流体、100 ppm、150 ppm 和 250 ppm 的 PAA 溶液的混合效率

图 7 为不同浓度 PAA 溶液沿通道流动方向不同截面上的混合效率。可见，不同浓度的 PAA 溶液沿长度的混合效率分布规律相似。但 PAA 浓度从 100 ppm 增加到 250 ppm，沿长度的混合效率也相应增大。

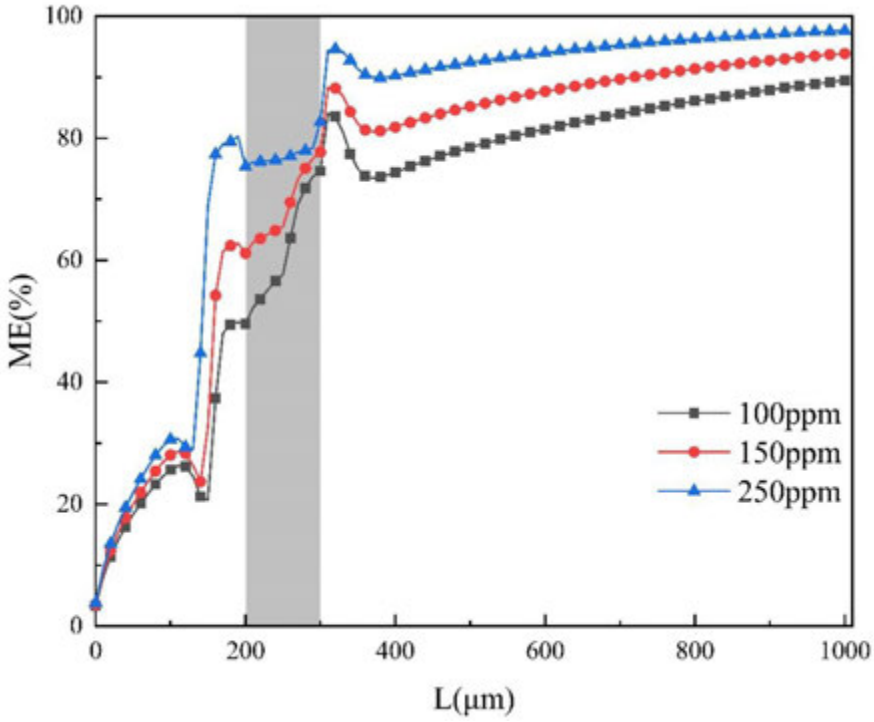


图 7 不同浓度 PAA 溶液沿长度的混合效率的分布

图 8 展示了在不同溶液中导电板周围产生的流线。在牛顿流体中，涡流分布对称、形状规则并且边缘平滑，而在粘弹性流体中，涡流的边缘会有扭曲，且形状也不完全对称。当聚合物浓度达到 250 ppm 时，涡流的数量从 4 个增加到了 6 个。在粘弹性流体中，以涡流中心为参考，涡流的位置较牛顿流体要更远离导电板，且随着浓度的增加越来越远离。这使得涡流的影响区域变大，从而提高了混合效率。

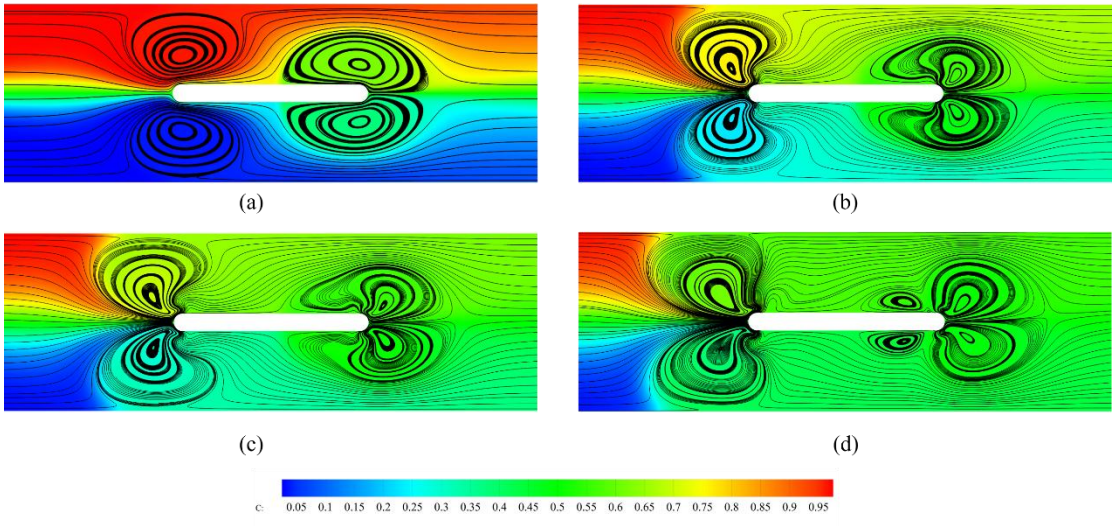


图 8 导电板周围涡流在 t=20s 时刻的流线图(a)牛顿流体；(b)100 ppm 的 PAA 溶液；(c)150 ppm 的 PAA 溶液；(d)250 ppm 的 PAA 溶液

造成 PAA 溶液和牛顿流体的涡流形态差异的原因是粘弹性流体中有额外的聚合物弹性法向应力τ_{xx}。聚合物弹性应力的发展是由溶液中聚合物构象的流动变化引起的，而这种变化是应变相关、各向异性的。当弹性法向应力超过一定量的局部剪切应力时，流动从稳定过渡到不稳定。图 9 给出了不同浓度 PAA 溶液的弹性法向应力τ_{xx}云图和涡流流线。可以观察到，导电板的两端会出现弹性法向应力τ_{xx}集中的区域。随着 PAA 浓度的增加，弹性法向应力的值和作用范围越来越大。与牛顿流体不同，在弹性应力的作用下，PAA 溶液的流线出现弯曲，涡流的形状有明显的凹陷。弹性法向应力改变了涡流的形态，将原本呈现椭圆形状的涡流变成了类似于歪梨形的不规则形状，从图中可以明显看出涡流边缘的凹陷边缘接近应力集中区域。图 9(c)中，在原本右侧两个涡的位置存在较大法向应力，影响了涡流完整循环流动，因此出现了两个独立的小涡。弹性法向应力还影响了涡流的位置。由于弹性应力的阻碍，涡流向两侧偏移。应力越大，偏移的越明显。偏移增加了涡流的影响区域，增强了混合效果。

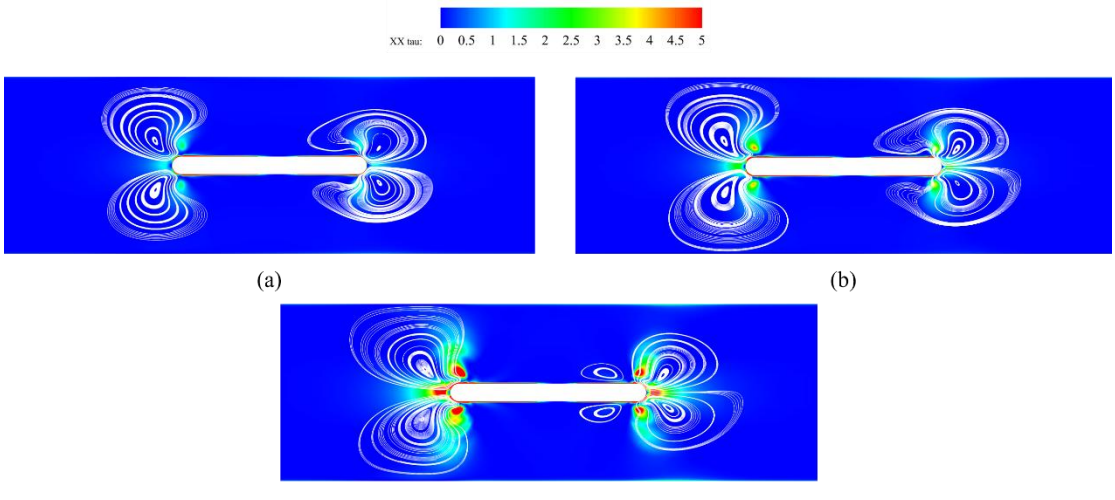


图 9 不同浓度 PAA 溶液的弹性法向应力τ_{xx}在 t=20s 时刻的云图和涡流流线

(a)c_p=100 ppm；(b) c_p=150 ppm；(c) c_p=250 ppm

我们提取了不同流体在 x=-6×10^{-5}μm 截面上的τ_{xx}值和u_{xx}值，结果如图 10 所示。在图 10(a)中，在微通道中心线上的漩涡附近，牛顿流体和粘弹性流体的速度变化曲线都有明显的突起，但粘弹性流体的速度梯度明显高于牛顿流体。随着 PAA 浓度的增加，速度梯度也相应增大。而较大速度梯度会导致聚合物分子的强烈延伸，从而导致显著的弹性法向应力，在微通道的中心附近快速增加，如图 10(b)。弹性法向应力的最大幅值随着 PAA 浓度的增加而增加，这与我们观察到的法向应力云图的结果一致。

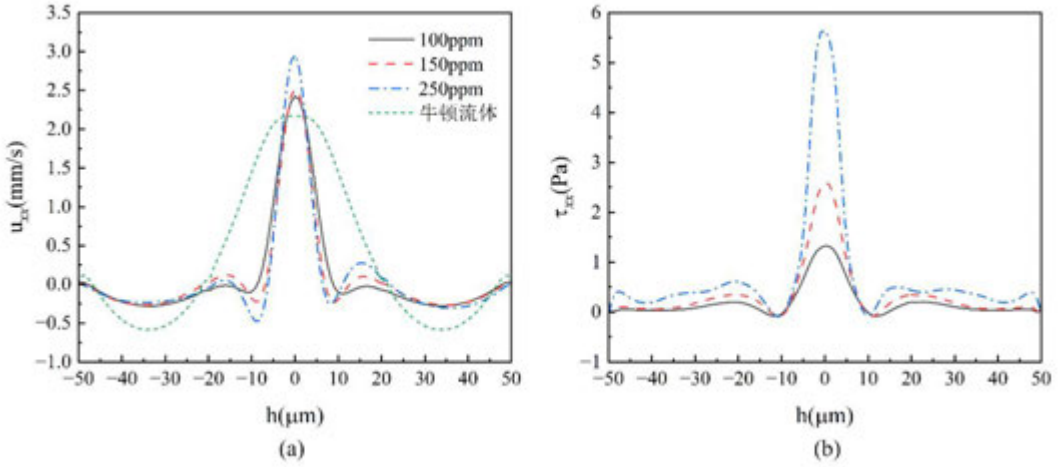


图 10(a)速度u_{xx}和(b)弹性法向应力τ_{xx}在 t=20s 时刻 x=-6×10^{-5}μm 截面的分布

图 11 展示了不同溶液在出口前 50μm 截面的平均速度随时间的变化规律。由于粘弹性流体具有弹性不稳定性，PAA 溶液在微混合器中的流动并不是稳定的，而是随时间波动。截面平均速度的计算公式如下：

$$u_{avg} = \frac{\int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} u(x_0, y)dydt}{h} \tag{27}$$

其中，x_0代表出口前 50 μm 的截面，h 为通道宽度。

从图 11 可以看到，PAA 溶液在微混合器中的平均流速低于牛顿流体。PAA 溶液中存在聚合物，使得其粘度大于牛顿流体。聚合物浓度越高，溶液粘度越大，因此平均速度就越小。除此之外，从图中可以看到牛顿流体的平均速度曲线是一条平滑的直线，说明牛顿流体在微通道中的流动是稳定的，流动状态不随时间变化。但是 PAA 溶液的平均速度曲线却是波动的。从图中可以看出随着 PAA 溶液浓度的增大，脉动强度也在逐渐增大。图中平均速度表现出的时间相关性，这也是由粘弹性流体的弹性不稳定性引起的。

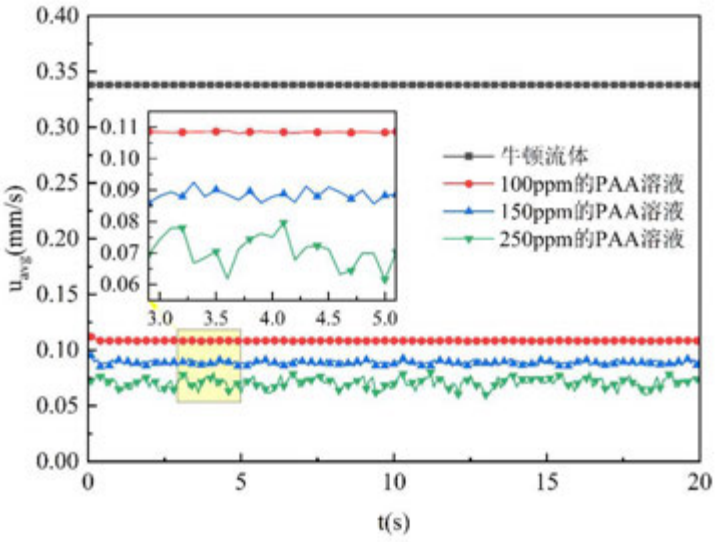


图 11 牛顿流体和粘弹性流体在出口前 50μm 截面平均速度随时间变化

图 12 给出了不同时刻 250 ppm 的 PAA 溶液中导电板周围的流线图。从图中可以看到，在剪切流动中发生盘绕—拉伸转捩，这种转捩是弹性力产生的重要原因。随着时间推移进而诱发弹性不稳定性以及弹性湍流，因此不同时间涡流的流线形状不完全一样。这种不稳定的涡流干扰了流体原本的分层流动，使得上下两股流体的接触面积增大，有效的促进了混合，提高了混合效率。

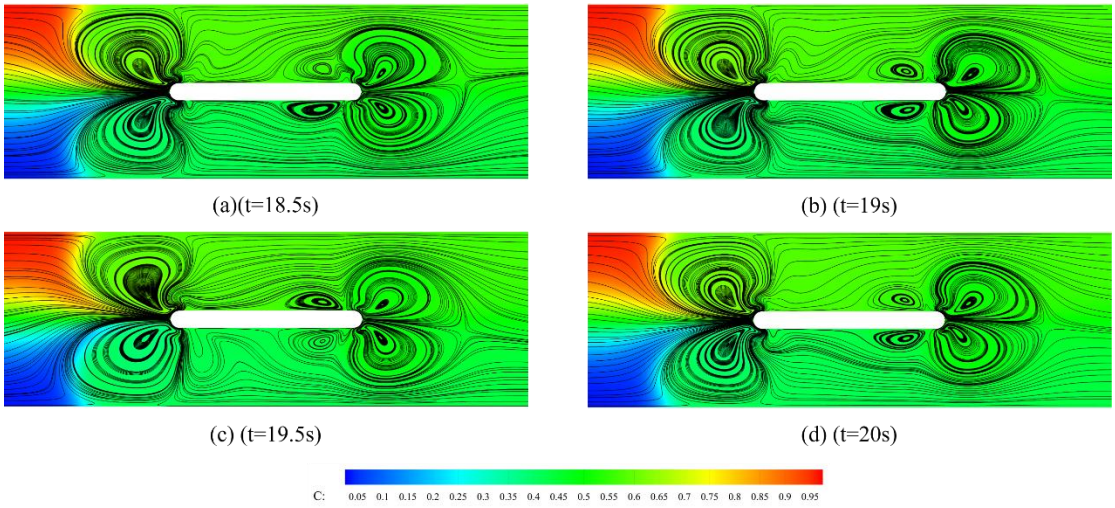


图 12 不同时刻 250 ppm 的 PAA 溶液中导电板周围的流线图

4.3 导电板形状的影响

在上一节中，我们研究了不同种类的流体在微混合器中的混合效果。由于导电板形状为直板，使得涡流产生的位置几乎是对称的。同时两股流体从入口也是上下分层流动，因此同样对称分布的涡流对混合效率的提高是有限的。在本节中，将对导电板的形状进行改变，优化涡流产生的位置，进一步提高微混合器的性能。图 13 给出了不同形状导电板的具体结构和位置信息。如图所示，使用圆弧来描述不同弯曲程度的导电板的结构。将圆弧的弧长l固定为 100 μm，通过使用不同的圆心角可以计算得到不同弯曲程度的圆弧。因此可以使用圆心角与圆周率的乘积 nπ作为描述导电板弯曲度的特征值。nπ的值越大，则表明导电板弯

曲的程度越大。在研究中一共设置了 3 种弯曲度的导电板，其参数如表 5 所示。对应不同弯曲度的微混合器的通道模型如图 13(b)所示。

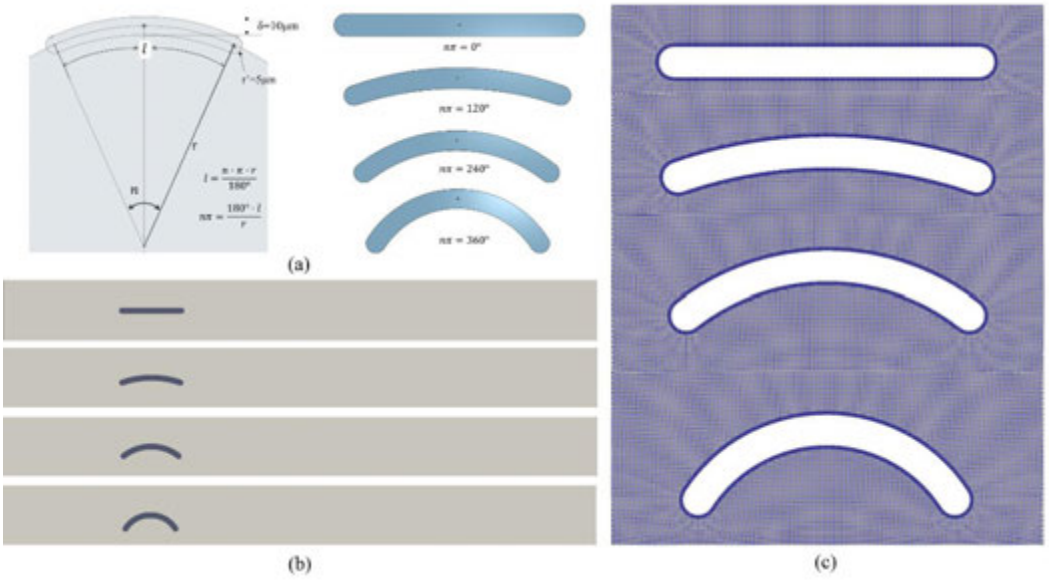


图 13(a)导电板的结构示意图；(b)微通道混合物模型；(c)导电板网格局部细节图

表 5 弯曲导电板的结构参数

弯曲度 nπ (°)	120	240	360
圆弧半径 r (μm)	150	75	50
圆心角n (°)	38.2	76.4	114.6

我们分别对牛顿流体、100 ppm 和 250 ppm 的 PAA 溶液在带有不同弯曲度导电板的微混合器中的混合进行了数值仿真。在t=20s 时，不同溶液的混合都已经达到了稳定。提取该时刻截面的浓度分布计算混合效率并进行对比，结果如图 14 所示。从图中混合效率曲线可以发现，随着导电板弯曲度的增加，混合效率几乎呈线性趋势升高，在各个阶段升高的幅度比较均匀。当导电板弧度从 0°增加到 360°，牛顿流体的混合效率升高了 2.82%，100 ppm 和 250ppm 的 PAA 溶液的混合效率分别升高了 5.31%和 1.97%。这表明使用弯曲的导电板可以有效提高微混合器的性能。

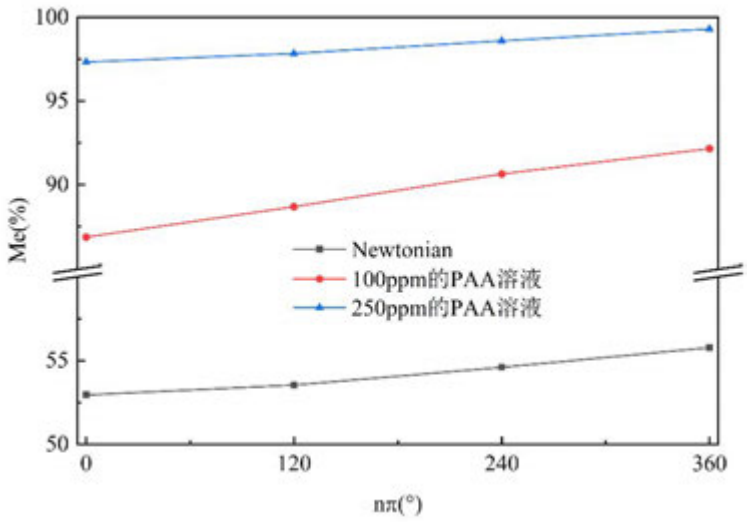


图 14 溶液在带有不同弧度导电板的微混合器中的混合效率

为了分析原因，我们对弯曲导电板周围的涡流特性进行分析。图 15 为 100 ppm 的 PAA 溶液在不同导电板周围的涡流流线图。弯曲度为 120°、240°和 360°时，导电板的形状不对称，因此涡流的形状和位置也不再对称。在对称的情况下，涡流都位于两股流体中，可以增加物质扩散混合的时间，却无法破坏两股流体的分层流体。当我们改变导电板的形状后，生成涡流的位置来越靠近位于通道中轴两股流体的交界混合区域，有效的干扰了两股流体的分层流动，促进了物质之间的扩散混合。同时从图 15 中还可以看出，由于导电板的弯曲，使得上面的涡流有更大的发展空间，因此上面两个涡流的沿纵向发展越来越长。而下面的涡流由于空间变小，受到挤压，开始横向发展变得越来越宽。在这种趋势下，涡流的形状也变得扭曲和不规则，有效的破坏了流体的对称性，增加了物质之间扩散混合的接触面积。这种涡流的特性在 250 ppm 的 PAA 溶液表现得更为明显。

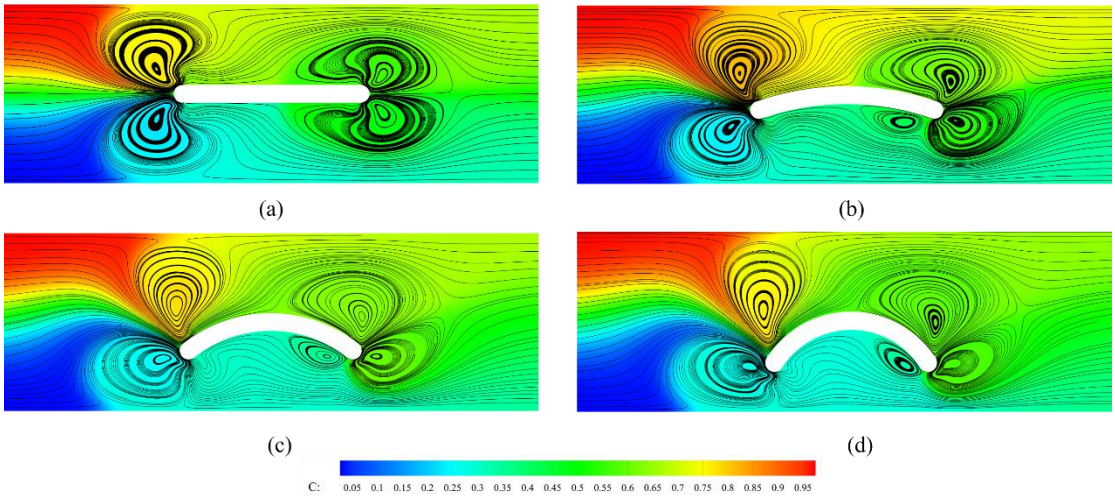


图 15 100 ppm 的 PAA 溶液中 t=20s 时刻不同导电板周围的涡流流线图，(a)nπ=0°；(b)nπ=120°；(c)nπ=240°；(d)nπ=360°

为了更直观的体现出涡流的变化，我们对不同形状的导电板周围产生的第二象限和第三象限的涡流(简称涡 2 和涡 3)进行分析。分别测量了涡 2 的纵向长度L_y和涡 3 的横向长度L_x，长度的测量方法如图 16 所示。涡流的大小分别为涡流的上边界到下边界的距离和左边界到右边界的距离。

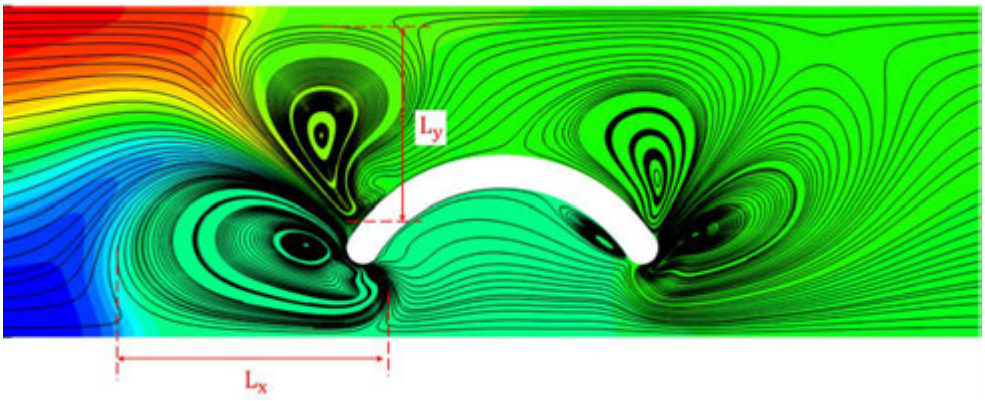


图 16 250 ppm 的 PAA 溶液中涡流的流线及长度测量示意图

溶液中涡流的纵向长度L_y和横向长度L_x随导电板弯曲度的变化如图 17 所示。从图中可以看出，无论在哪种溶液中，随着导电板弯曲度的增加，涡 2 的纵向长度和涡 3 横向长度都在逐渐增加。当导电板的弯曲度增加到 240°，涡 2 的纵向长度已经超过了微混合器的宽度的一半(50 μm)。这样涡流可以同时跨越两股分层的流体，并通过产生局部的微循环流增加了物质之间的扩散混合时间。与涡 2 相比，涡 3 的横向长度随导电板弯曲度增加的幅度更大。涡 3 扩大了流体交界区域的接触面积。随着导电板弯曲度的增加，涡 2 和涡 3 的长度变化有效地破坏了流体的分层流动，增强了流体之间的混合。因此改变导电板形状是一种可行的提高微混合器性能的手段。

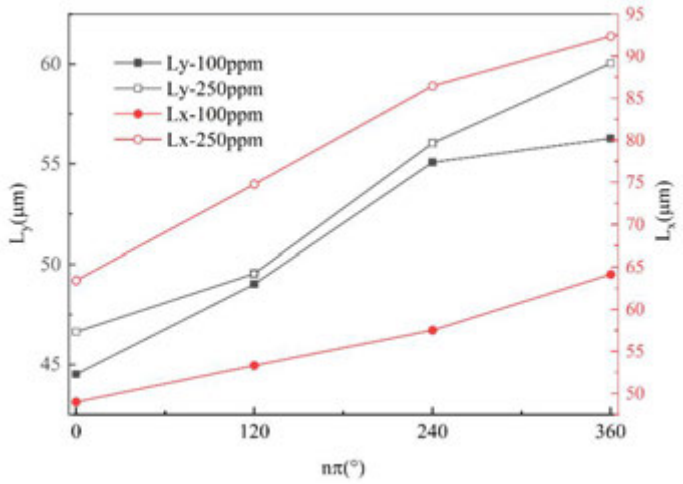


图 17 溶液中涡流的纵向长度L_y和横向长度L_x随导电板弯曲度的变化

5. 结论

本研究对微米尺度下嵌入导电板的微混合器进行数值仿真，讨论了工作液流体性质、导电板形状对混合效率的影响。主要结论如下：

（1）在诱导电荷电渗(ICEO)的作用下，导电板周围产生了涡流，增加了局部流体的混合。对于 100ppm PAA 溶液，无导电板的混合效率为 78.25%，导电板不导电的混合效率为 78.31%，导电板导电的混合效率为 89.81%，证明了在微通道中嵌入导电板是一种有效的增强混合的方法。

（2）同时 PAA 溶液的混合效率最终要比牛顿流体的混合效率高 20%以上。且 PAA 溶液的浓度越高，混合效率也越高。当 PAA 溶液的浓度值达到 250 ppm 时，混合效率达到了 90%以上。由于弹性应力的影响，涡流的形状出现变化并向两侧偏移，扩大了涡流的影响区域，增加了扩散混合的接触面积，提高了混合效率。

（3）改变导电板形状可以控制涡流的生成区域，是一种可行的提高微混合器性能的手

段。100ppm 的 PAA 溶液混合效率升高幅度最大，升高了 5.31%；250ppm 的 PAA 溶液混合效率升高了 1.97%，达到 99.29%。随着导电板弯曲度的增加，涡流的特性变化有效地破坏了流体的分层流动，增强了流体之间的混合。

参考文献

[1] A.J. Demello, Control and detection of chemical reactions in microfluidic systems, Nature 442 (7101) (2006) 394–402.

[2] S.R. Khetani, S.N. Bhatia, Microscale culture of human liver cells for drug development, Nat. Biotechnol. 26 (1) (2008) 120–126.

[3] D.-K. Kang et al., Rapid detection of single bacteria in unprocessed blood using Integrated Comprehensive Droplet Digital Detection, Nat. Commun. 5 (2014) 5427.

[4] J. Tian et al., Accurate multiplex gene synthesis from programmable DNA microchips, Nature 432 (7020) (2004) 1050–1054.

[5] P.S. Dittrich, A. Manz, Lab-on-a-chip: microfluidics in drug discovery, Nat. Rev. Drug Discov. 5 (3) (2006) 210.

[6] Y. Chen, D. Gao, Y.· Wang, S. Lin, Y. Jiang, A novel 3D breast-cancer-on-chip platform for therapeutic evaluation of drug delivery systems, Anal. Chim. Acta (2018).

[7] Ottino, J. M., & Wiggins, S. Introduction: mixing in microfluidics. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 362(1818), 923–935.

[8] Wang H, Iovenitti P, Harvey E, et al. Optimizing layout of obstacles for enhanced mixing in microchannels[J]. Smart materials and structures, 2002, 11(5): 662.

[9] Alam A, Afzal A, Kim K-Y. Mixing performance of a planar micromixer with circular obstructions in a curved microchannel[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2014, 92(3): 423-434.

[10] Razavi Bazaz S, Javid S M, Passandideh-Fard M. Increasing the efficiency of microfluidic micromixer with gaps and baffles using design of experiments based on Taguchi method[C]. Canadian Society for Mechanical Engineering (CSME) International Conference, 2016.

[11] Huang J, Lo Y, Hsieh C, et al. An electro-thermal micro mixer[C]. 2011 6th IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems, 2011: 919-922.

[12] Usefian A, Bayareh M. Numerical and experimental study on mixing performance of a novel electro-osmotic micro-mixer[J]. Meccanica, 2019, 54: 1149-1162.

[13] Kim D, Raj A, Zhu L, et al. Non-equilibrium electrokinetic nanofluidic mixers[C]. 2008 IEEE 21st International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, 2008: 630-632.

[14] Gamayunov N, Murtsovkin V, Dukhin A. Pair interaction of particles in electric field. 1. Features of hydrodynamic interaction of polarized particles[J]. Colloid J. USSR (Engl. Transl.);(United States), 1986, 48(2).

[15] Bazant M Z, Squires T M. Induced-charge electrokinetic phenomena: theory and microfluidic applications[J]. Physical review letters, 2004, 92(6): 066101.

[16]H. Feng, T.N. Wong, Z. Che, Marcos, Chaotic micromixer utilizing electro-osmosis and induced charge electro-osmosis in eccentric annulus, Phys. Fluids 28 (6) (2016), 062003.

[17]K. Zhang, Y. Ren, L. Hou, X. Feng, X. Chen, H. Jiang, An efficient micromixer actuated by induced-charge electroosmosis using asymmetrical floating electrodes, Microfluid. Nanofluid. 22 (11) (2018) 130.

[18]M.M. Tatlısoz, Ç. Canpolat, Pulsatile flow micromixing coupled with ICEO for nonNewtonian fluids, Chem. Eng. Process. - Process Intensif. 131 (2018) 12–19,

[19]J.S. Paustian, A.J. Pascall, N.M. Wilson, T.M. Squires, Induced charge electroosmosis micropumps using arrays of Janus micropillars, Lab Chip 14 (17) (2014) 3300.

[20] Y. Wu, Y. Ren, Y. Tao, H. Jiang, Fluid pumping and cells separation by dc-biased traveling wave electroosmosis and dielectrophoresis, Microfluid. Nanofluid. 21 (3) (2017) 38.

[21] Y. Daghighi, D. Li, Micro-valve using induced-charge electrokinetic motion of Janus particle, Lab Chip 11 (17) (2011) 2929–2940.

[22] C. Wang, Y. Song, X. Pan, D. Li, A novel microfluidic valve controlledby induced charge electro-osmotic flow, J. Micromech. Microeng. 26 (7) (2016), 075002.

[23] A. Boymelgreen, G. Yossifon, S. Park, T. Miloh, Spinning Janus doublets driven in uniform ac electric fields, Phys. Rev. E 89 (1) (2014), 011003.

[24] H. Feng, T.N. Wong, Z. Che, Induced charge electrophoresis of a conducting cylinder in a nonconducting cylindrical pore and its micromotoring application, Phys. Rev. Fluids 1 (4) (2016), 044103.

[25] H. Sugioka, Suppression of a Brownian noise in a hole-type sensor due to inducedcharge electro-osmosis, Phys. Fluids 28 (3) (2016), 032003.

[26] Y. Song, C. Wang, M. Li, X. Pan, D. Li, Focusing particles by induced charge electrokinetic

flow in 7 microchannel, Electrophoresis 37 (4) (2016) 666–675.

[27] Y. Ren, J. Liu, W. Liu, Q. Lang, Y. Tao, Q. Hu, L. Hou, H. Jiang, Scaled particle focusing in a microfluidic device with asymmetric electrodes utilizing inducedcharge electroosmosis, Lab Chip 16 (15) (2016) 2803–2812.

[28] F. Zhang, D. Li, A novel particle separation method based on induced-charge electroosmotic flow and polarizability of dielectric particles, Electrophoresis 35 (20) (2014) 2922–2929.

[29] X. Chen, Y. Ren, L. Hou, X. Feng, T. Jiang, H. Jiang, Induced charge electro-osmotic particle separation, Nanoscale 11 (13) (2019) 6410–6421.

[30] X. Chen, Y. Ren, T. Jiang, L. Hou, H. Jiang, High-throughput and multimodal separation of microbeads using cyclical induced-charge electro-osmotic vortices and its application in size fractionation of crumpled graphene oxide balls, Appl. Mater. Today 19 (2020), 100545.

[31] Y. Ren, W. Liu, Y. Jia, Y. Tao, J. Shao, Y. Ding, H. Jiang, Induced-charge electroosmotic trapping of particles, Lab Chip 15 (10) (2015) 2181–2191.

[32] C. Zhao, C. Yang, Continuous-flow trapping and localized enrichment of micro- and nano-particles using induced-charge electrokinetics, Soft Matter 14 (6) (2018) 1056–1066.

[33] W. Liu, Y. Tao, R. Xue, C. Song, Q. Wu, Y. Ren, Continuous-flow nanoparticle trapping driven by hybrid electrokinetics in microfluidics, Electrophoresis 00 (2020) 1–11.

[34] Wu Z, Li D. Micromixing using induced-charge electrokinetic flow[J]. Electrochimica Acta, 2008, 53(19): 5827-5835.

[35] Azimi S, Nazari M, Daghighi Y. Developing a fast and tunable micro-mixer using induced vortices around a conductive flexible link[J]. Physics of Fluids, 2017, 29(3): 032004.

[36] Jain M, Yeung A, Nandakumar K. Induced charge electro osmotic mixer: Obstacle shape optimization[J]. Biomicrofluidics, 2009, 3(2): 022413.

[37] Daghighi Y, Li D. Numerical study of a novel induced-charge electrokinetic micro-mixer[J]. Analytica chimica acta, 2013, 763: 28-37.

[38] Kazemi Z, Rashidi S, Esfahani J A. Effect of flap installation on improving the homogeneity of the mixture in an induced-charge electrokinetic micro-mixer[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2017, 121: 188-197.

[39] Nazari M, Rashidi S, Esfahani J A. Effects of flexibility of conductive plate on efficiency of an induced-charge electrokinetic micro-mixer under constant and time-varying electric fields-a comprehensive parametric study[J]. Chemical Engineering Science, 2020, 212: 115335.

[40] Nazari M, Chuang P-Y A, Esfahani J A, et al. A comprehensive geometrical study on an induced-charge electrokinetic micromixer equipped with electrically conductive plates[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 146: 118892.

[41] Kolodner P (1998) Oscillatory convection in viscoelastic DNA suspensions. J Non-Newton Fluid Mech 75:167–192.

[42] Devarakonda SB, Han J, Ahn CH, Banerjee RK (2007) Bioparticle separation in non-Newtonian fluid using pulsed flow in microchannels. Microfluid Nanofluid 3:391–401.

[43] Chayer B, Pitts KL, Cloutier G, Fenech M (2012) Velocity measurement accuracy in optical microhemodynamics:experiment and simulation. Physiol Meas 33:1585–1602.

[44] Reinke W, Johnson PC, Gaehtgens P (1986) Effect of shear rate variation on apparent viscosity of human blood in tubes of 24 to 94 lm diameter 59:124–132.

[45] Kikuchi K, Mochizuki O (2011) Micro-PIV(micro particle image velocimetry) visualization of red blood cells (RBCs) sucked by a female mosquito 22:064002-1-9.

[46] Jun Kang Y, Lee S-J. Blood viscoelasticity measurement using steady and transient flow controls of blood in a microfluidic analogue of Wheastone-bridge channel[J]. Biomicrofluidics, 2013, 7(5): 054122.

[47] Groisman A, Steinberg V. Efficient mixing at low Reynolds numbers using polymer additives[J]. Nature, 2001, 410(6831): 905-908.

[48] Gan H Y, Lam Y C, Nguyen N T, et al. Efficient mixing of viscoelastic fluids in a microchannel at low Reynolds number[J]. Microfluidics and Nanofluidics, 2007, 3: 101-108.

[49] Lam Y, Gan H, Nguyen N, et al. Mixing flow of viscoelastic fluids in a microchannel[C]. New Trends in Fluid Mechanics Research: Proceedings of the Fifth International Conference on Fluid Mechanics (Shanghai, 2007), 2009: 658-661.

[50] Cai W-H, Li Y-Y, Zhang H-N, et al. An efficient micro-mixer by elastic instabilities of viscoelastic fluids: Mixing performance and mechanistic analysis[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2018, 74: 130-143.

[51] Alipanah M, Ramiar A. High efficiency micromixing technique using periodic induced

charge electroosmotic flow: a numerical study[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2017, 524: 53-65.

[52] Chen Y, Lv Z, Wei Y, et al. Mixing performance of the induced charge electro-osmosis micromixer with conductive chamber edges for viscoelastic fluid[J]. Physics of Fluids, 2022, 34(8): 083110.

[53] Ji J, Qian S, Liu Z. Electroosmotic flow of viscoelastic fluid through a constriction microchannel[J]. Micromachines, 2021, 12(4): 417.

[54] Sousa P C, Vega E J, Sousa R G, et al. Measurement of relaxation times in extensional flow of weakly viscoelastic polymer solutions[J]. Rheologica Acta, 2017, 56: 11-20.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233221

PEM 电解槽组件两相非等温数值模拟研究

曾庆辉[1]，徐宏亮[1]，刘芷彤[1]，杨晓宏[1,2,3*]
（1 内蒙古工业大学 能源与动力工程学院，呼和浩特 010051；
2 风能太阳能利用技术教育部重点实验室，内蒙古工业大学，呼和浩特 010051；
3 内蒙古自治区新能源生产力促进中心, 内蒙古工业大学，呼和浩特 010051；）
(*Tel:13848188275, Email: yxh1109@imut.edu.com)

摘要：本文建立了 PEM 电解槽组件一维两相非等温模型，研究了组件结构对电解槽内部多物理场耦合传输的影响规律。结果表明：电压、PTL 孔隙率、PTL 厚度和 PEM 厚度均对电解槽组件水-热-电-气分布有显著影响；PTL 渗透率与液体水传输过程密切相关；MPL 孔隙率主要影响气体传输过程；为提高组件性能，可以考虑提高组件内 PTL 孔隙率、渗透率、降低 PTL 和 PEM 厚度、并且使用低孔隙率的 MPL。本研究结果为质子交换膜电解槽组件关键参数设计提供了理论参考依据。

关键词： PEM 电解槽；多孔传输层；微孔层；质子交换膜；传输机制

0 前言

氢能作为来源丰富、高能量密度、零碳排放的二次能源载体，其生产系统可消纳可再生能源剩余电力的优势成为全球能源转型的重要趋势[1]。制氢作为氢能产业链 “制”、“储”、“运”、“加”、“用”首要环节具有重要的发展前景。质子交换膜电解水制氢技术以电解效率高、设备紧凑、启停迅速、更好适配风光等波动性能源发电系统的优点受到国内外各界人士的广泛关注[2]。作为质子交换膜电解水制氢技术的核心设备，质子交换膜（Proton exchange membrane，PEM）电解槽运行过程中存在的低组件耐用性、高制氢成本和电能高的问题严重阻碍该技术的发展[3]。设计稳定运行的高效 PEM 电解槽组件，可大幅度提高电解槽性能，提高使用寿命和降低制氢成本[4]。

近年来，越来越多的研究致力于开发性能更好的 PEM 电解槽组件，包括催化剂层(Catalyst layers，CL)，膜(PEM)和多孔传输层(Porous transport layer, PTL)[5]。PTL 在 PEM 电解槽中负责传导电流、传输反应物水、排出氧气泡和实现水在流场和催化层间的再分配作用[6]。高电流密度和腐蚀条件下， 阳极催化层（Anode catalytic layer, ACL）反应析出的氧气需要及时穿越 PTL 被流道排出。氧泡在 PTLs 孔隙积累会导致较差的热管理和增加浓差损失。及时排出 PTL 中氧气对 PEM 电解槽的性能起着重要的作用[7]。改进 PTL 结构和添加微孔层(Microporous layer, MPL)以适应高电流密度下氧气泡覆盖造成的质量传输损失是提高电解槽性能、效率和耐久性的重要途径[8]。

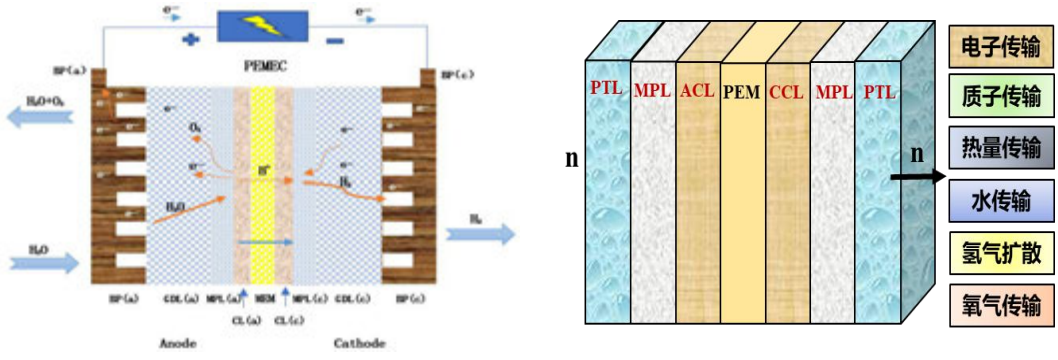
基金项目：内蒙古自治区直属高校基本科研业务费 (ZTY2023035，JY20220040)；内蒙古自然科学基金（2023MS05014）；内蒙古自治区高等学校创新团队发展计划(NMGIRT2309) ；内蒙古科学技术研究院产业技术创新项目（2023JSYD01001）。

数值建模具有成本低、易操作的显著优势，经过验证的电解槽模型可快速预测 PEM 电解槽内部关键物理量分布，查明运行参数、组件结构对 PEM 电解槽组件内水-热-电-气多物理场耦合机制，已经成为当前学者不可或缺的研究手段[9-11]。Wang 等[12]建立了 PEM 电解槽两相非等温模型，研究几何参数和运行参数对组件温度和水分布的影响。结果表明，电解槽性能与几何参数和运行参数密切相关。Lin 等[13, 14]建立了 PEM 电解槽阳极一维动力学模型描述组件中复杂的流体动力学和电化学过程，为 PEM 电解槽水热管理和过程控制提供设计参考。Pablo 等[15]提出 PEM 电解槽一维两相非等温模型用于描述组件质量、电荷和热输运过程。结果表明，PEM 厚度是重要影响因素，PTL 渗透率必须足够高以促进阳极流道中的气液逆流。Han 等[16]建立了一个两相数学模型研究 PTL 内部输运特性。发现极限值电流密度受 PTL 孔隙率、厚度和 PEM 的厚度 DE 显著影响。Olesen 等[18]开发全尺度 PEM 电解槽宏观模型。研究发现，两相流和电流密度不均匀分布导致 PEM 电解槽组件平面内出现明显非均匀性，空间温度变化高达 25℃。

目前研究学者集中在 PEM 电解槽组件性能研究工作。与质子交换膜燃料电池(PEMFC)相近技术相比[19-21]，现存的 PEM 电解槽模型大多侧重于对液相和气相含量的初步估计，涉及不同组件参数对电解槽组件水-热-电-气综合性能影响较少，部分研究结论相互矛盾，对该技术的开发和优化水平仍然不足，需要进一步开发出综合分析组件的两相流输运和电化学、热传输与组件参数联系的数学模型。鉴于此，本研究旨在建立 PEM 电解槽两相非等温模型，研究 PTL、MPL 和 PEM 等参数对电解槽组件水-热-电-气的影响规律，为 PEM 电解槽关键参数提供需要考虑设计指导和参考。

1 数值模型

1.1 几何模型



（a）PEM 电解槽电化学反应　　（b） PEM 电解槽组件及反应

图 1　PEM 电解槽运行原理图

图 1所示PEM电解槽运行原理图。本研究PEM电解槽组件包括质子交换膜（PEM），阴阳极催化剂层（CCL/ACL），微孔层（MPL）和多孔传输层（PTL）。在运行过程中。直流电源提供水电解驱动力，液态水进入阳极流道后通过渗透作用沿 PTL 和 MPL 孔隙渗透，将液态水从通道输送到 ACL 发生析氧反应（OER）产出氧气、质子和电子。质子与水在电渗透拖曳力、浓差扩散和水合作用下从质子交换膜（PEM）迁移至阴极 CCL，在 CCL 发生析氢反应(HER)产生氢气。水电解反应产生氧气和氢气分别从氧阳极流道和阴极通道排出电解槽外。本研究将选取电解槽组件区域，双极板两端水通道建模为 PEM

电解槽组件边界，并对 MPL 进行建模，组件中 PTL、MPL、CL 和 PEM 的相关建模几何参数和物性参数均由表 1 给出。建模中考虑组件 7 个区域内部发生的相关反应，如电子传输、质子传输、气液两相传输和热传输过程。

表 1 PEM 电解槽组件参数

物理量	数值	物理量	数值
组件长度/ m	0.07	阳极参考交换电流密度/ $A·m^{-2}$	100
PTL厚度/ m	$3×10^{-4}$	阴极参考交换电流密度/ $A·m^{-2}$	$1×10^{-4}$
MPL厚度/ m	$2×10^{-5}$	质量/ $kg·mol^{-1}$	0.018
CL厚度/ m	$1×10^{-5}$	PTL渗透率/ m^2	$1.0×10^{-12}$
PEM厚度/ m	$3×10^{-5}$	MPL渗透率/ m^2	$1.0×10^{-12}$
离聚物体积分数	0.3	MPL厚度/ m^2	$1.0×10^{-13}$
CL孔隙率	0.4	CL渗透率/ m^2	$2.36×10^{-12}$
PTL孔隙率	0.4	PEM导热系数/ $W·m^{-1}·K^{-1}$	0.3
PTL电导率/$S·m^{-1}$	350	CL导热系数/ $W·m^{-1}·K^{-1}$	0.27
CL电导率/ $S·m^{-1}$	350	PTL导热系数/ $W·m^{-1}·K^{-1}$	1.6
阳极比表面积/ m^{-1}	$1×10^7$	离聚物电导率活化能/ $J·mol^{-1}$	15000
阴极比表面积/ m^{-1}	$1×10^7$	膜态水扩散活化能/ $J·mol^{-1}$	20000
电解槽组件电压/ V	1.4	氢氧化活化能/ $J·mol^{-1}$	16000
阳极传递系数	0.5	氧还原活化能/ $J·mol^{-1}$	67000
阴极传递系数	1	表面张力系数/ $N·m^{-1}$	0.065
PTL接触角/pi	60	CL接触角/pi	60

1.2 物理模型

本文建立 PEM 电解槽组件两相非等温模型作以下假设：气体为层流和不可压缩流理想气体；PTL 边界处气体压力恒定为 1atm；PTL、MPL 与 CL 用有效孔隙率和渗透率表示；产生的氧气和氢气容易通过流道带走。不考虑相变和气体交叉过程。

基于以上的假设，本文通过多物理场仿真软件COMSOL Multiphasics 6.0商用软件建立仿真模型并进行模拟计算。该模型通过水电解槽模块来模拟电解槽中的电极动力学、电荷和质子传输。通过Maxwell–Stefan扩散描述组件内物种组分传输过程。相传递模块描述组件内PTL、MPL与CL气液两相饱和度分布.

通过稀物质传递模块描述PEM内膜态水传输过程，通过定义该模块中扩散系数、电解质电位、迁移率、吸附解吸及电化学反应源项，模拟膜态水受到的电拖曳作用、浓差扩散和吸附解吸过程等。其机理模型的设置参考文献[13]。

$$\nabla \cdot (n_d \frac{i_{ion}}{F}) = \frac{\rho_m}{E_W} \nabla \cdot (D_{mw}^{eff} \nabla \lambda) + S_{mw} \quad (1)$$

式中，λ 为膜态水含水量；ρ_m 为干膜密度；EW为膜等效质量，kg/mol；n_d 为电拖曳系数；i_{ion} 为离子电流密度，A/m^2；D_{mw}^{eff} 为有效膜态水扩散系数；S_{mw} 为膜态水源项。

在阳极多孔介质区域忽略气液相界面，依据公式（2）的液态水质量守恒方程，通过多孔介质相传递接口来模拟阴极多孔介质内的液相流动及转化过程。

$$0 = \nabla \cdot (\rho_l \frac{K k_l}{\mu_l} \nabla p_l) + S_l \quad (2)$$

$$P_c = P_g - P_1 \quad (3)$$

$$P_c = \sigma \cos\theta \left(\frac{\varepsilon}{K} \right)^{0.5} J(s) \quad (4)$$

式中，ρ_l 为液态水密度；p_l 为液相压力；K 为固有渗透率；k_l 为液态水相对渗透率；P 为毛细压力；σ 为表面张力系数；θ 为壁面接触角。

通过定义其内部毛细压力表达式、气液两相的相对渗透率等参数来描述多孔电极内液态水在毛细力驱使下的流动过程。其中气液密度、动力粘度、以及质量源项均与水电解槽接口耦合。

除此之外，本文依据公式（5）的能量守恒方程，通过固体传热接口来模拟电解槽组件内涉及的所有热量传递过程。

$$\nabla \cdot [\varepsilon s \rho_l C_{p,l} u_l T + s(1-s) \rho_g C_{p,g} u_g T] = \nabla \cdot (k^{eff} \nabla T) + S_T \quad (5)$$

式中，$C_{p,l}$ 为液相比热容；$C_{p,g}$ 为气相比热容；k^{eff} 为有效热传递系数；S_T 为热源。

特别强调的是，本文参数中给定的多孔介质的导热系数为多孔介质钛骨架的固体导热系数，最后添加多物理场接口实现各个物理场间的互相耦合。

1.3 边界条件及模拟工况

模型各区域边界条件如表 2 所示：

表 2 模型边界条件

边界	物理量	数值
入口边界	阳/阴极进水摩尔分数	0.9

	阳/阴极进水温度 T / K	353
	进水饱和度	0.9
	阳/阴极外接面电势 φ / V	1.4-2.1/0
出口边界	阳/阴极出口压力 P_out / atm	1/1

2 模型验证

为验证数值模型准确性，将实验结果与仿真结果进行对比，选取极化曲线作为模型验证的指标，分别与文献[22]仿真数据与文献[23]实验结果进行了验证。如图 2 所示，对比结果表明计算的极化曲线和实验的极化曲线吻合良好，从而基本证明证明了该模型能够研究关键电解槽组件参数的能力。

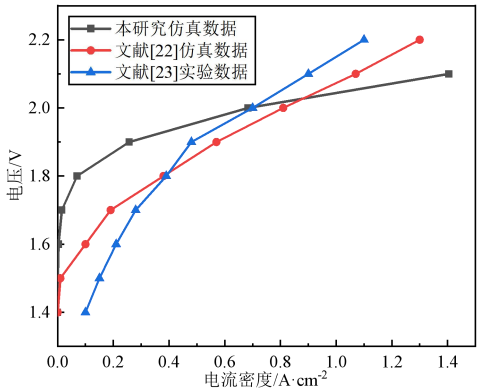


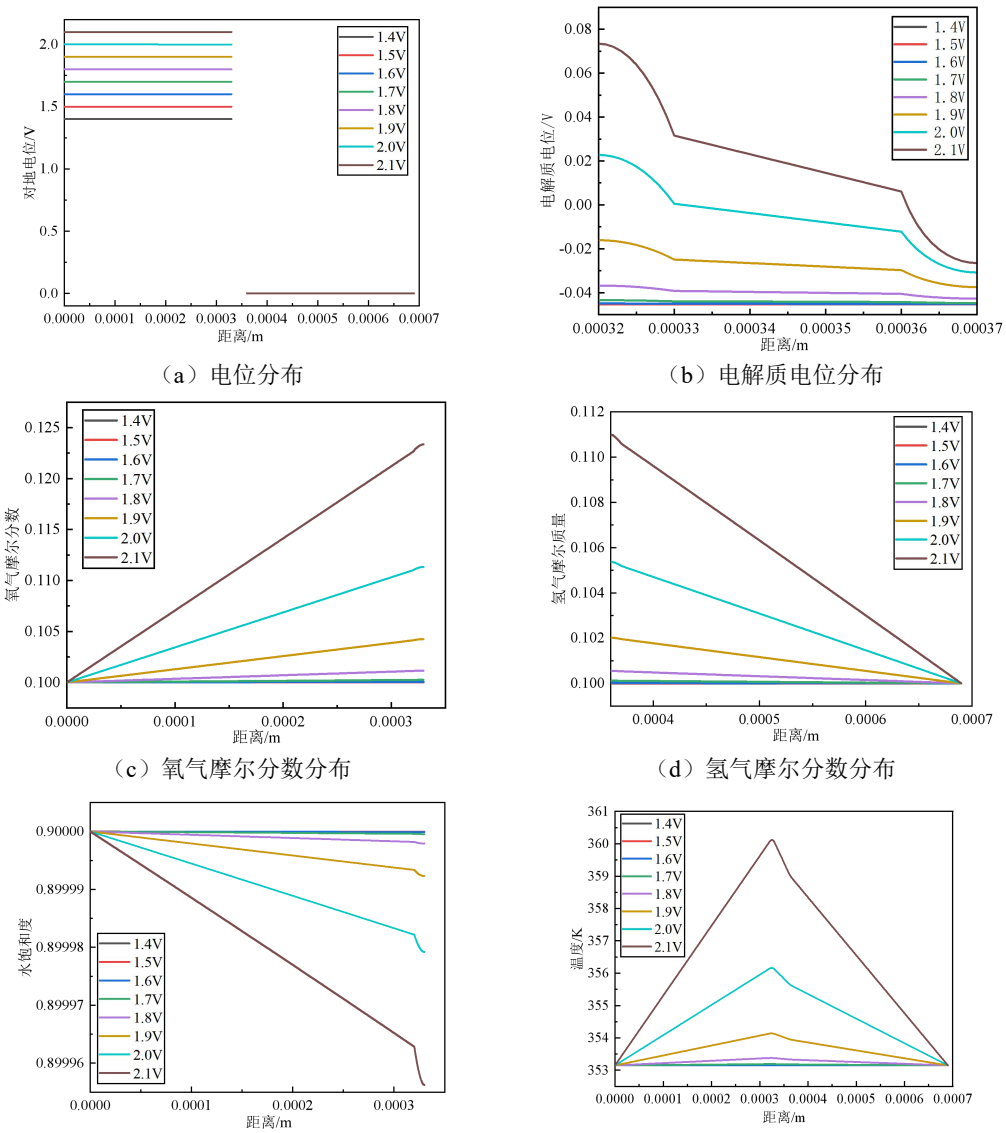
图 2 数值模型与实验数据的极化曲线比较

3 结果及讨论

在 PEM 电解槽运行过程中，操作条件和组件结构对电解槽气液流动、传热、传质和电化学性能产生影响。本研究分析了电压、PTL 孔隙率、PTL 渗透率、PTL 厚度、MPL 孔隙率和 PEM 膜厚度等参数对组件内气体摩尔分数分布、液态水饱和度分布、温度分布和极化性能的影响规律。

3.1 电压的影响

图3给出电解槽运行温度为353 K、运行电压(1.4 V −2.1 V)下组件的水-气-电-热平面分布。对应于Vetter [24]等人研究情况，不同电压下，电解质电位表现出显著的曲率(图3b)，说明质子在PEM膜内跃迁过程电导率出现强烈的空间变化。氢气和氧气摩尔体积分数反映了电化学强度，沿流道至膜中心方向，氢气和氧气摩尔分数逐渐增加，电压从1.4 V增加至2.1 V，阳极催化层（Anode catalytic layer，ACL）处氧气摩尔分数增加2.3 %，阴极催化层（Cathode catalytic layer，CCL）处氢气摩尔分数增加1.1 %，在ACL/PEM界面具有较高的气体摩尔分数：液体饱和度是量化PTL内部的水分布的重要指标。较高的液体饱和度表明反应区域存在更多的液态水利于析氧反应发生，电压增大至2.0 V，ACL/PEM界面水饱和度降低，主要由于ACL/PEM三相界电发生剧烈水电解反应。ACL/PEM界面产生的电化学反应热和焦耳热是组件存在向外传导的热通量，电压从1.4 V增加至2.1 V，温度升高7.3 K，较高的温度梯度出现在ACL处。



（a）电位分布　（b）电解质电位分布

（c）氧气摩尔分数分布　（d）氢气摩尔分数分布

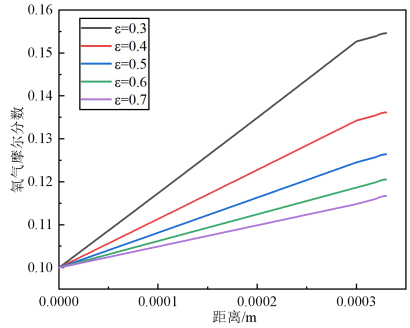
（e）水饱和度分布　（f）温度分布

图 3 组件参数分布随电压变化图

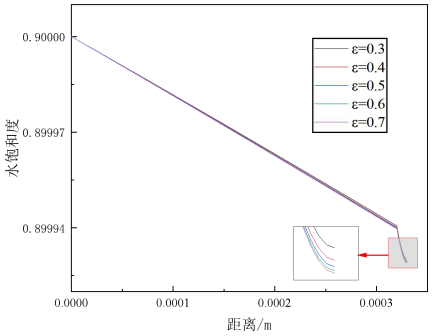
3.2 PTL 孔隙率的影响

孔隙率是PTL的重要参数，对电解槽组件水-热-电-气分布由重要影响。图4显示了电压2.0 V，温度为353 K，孔隙率（ε=0.3-0.7）条件下，组件内物理量分布沿电解槽组件厚度的变化。可以看出，随着孔隙率的增加，ACL/PEM界面处氧气摩尔分数逐渐降低，ε=0.3时，CL附近氧气摩尔分数为0.11；ε=0.7，ACL附近氧气摩尔分数为0.15，摩尔分数下降4.1%。ACL/PEM界面具有较高液体饱和度，表明氧气泡占据孔隙较少，能够更好地向ACL提供水参与电解反应。增加PTL孔隙度提高了组件温度分布（图4c），孔隙率增加至0.7时，组件温度上升0.2 K，这主要归因于高孔隙度下具有较大有效导热系数。高孔隙率下，组件电流密度提高(图4d)，这与文献[22]研究结果一致。值得注意的是，高孔隙率会导致PTL产生较大电阻，将增大组件欧姆损耗。因此，平衡气液输运和欧姆损耗对组件

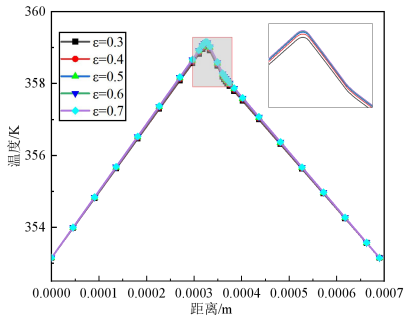
至关重要。



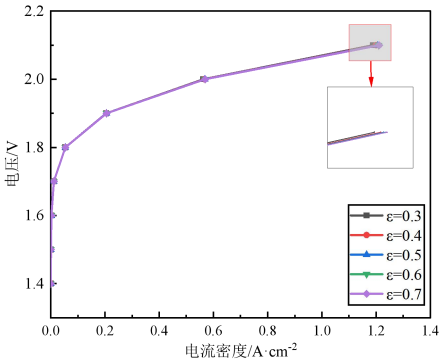
（a）氧气摩尔分数分布



（b）水饱和度分布



（c）温度分布

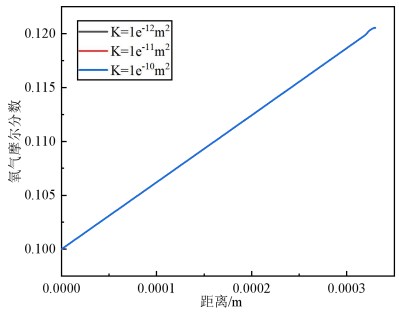


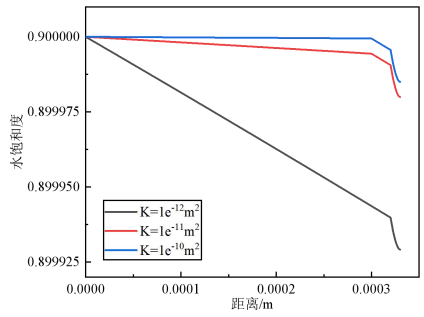
（d）极化曲线

图 4 组件参数分布随 PTL 孔隙率变化图

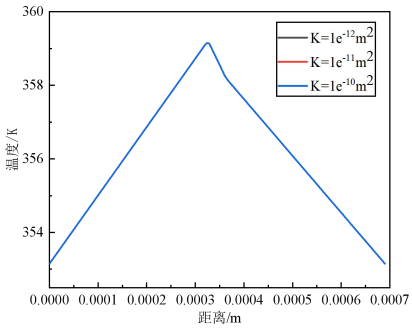
3.3 PTL 渗透率的影响

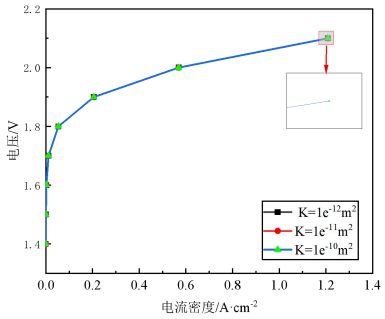
图5所示电压2.0V、温度353K、PTL渗透率（10^{-12} m^2、10^{-11} m^2、10^{-10} m^2）条件下，组件内水-热-质分布。从图中可以看出渗透率不会显著影响组件内气体组分分布、温度分布和电化学性能（图5a、5b、5c），但对两相流性能产生显著的影响（图5 b）。当渗透率由10^{-12} m^{2}增加至10^{-10} m^{2}时，ACL/PEM界面处水饱和度增加59.6 %，组件内水饱和度分布更加均匀，这有效促进组件电流密度、温度等相关物理量的均匀性分布。根据达西定律，较高的渗透率有利于组件内两相流传输。因此，建议PTL材料选择高渗透率的材料，实现组件中良好水传输性能。





（a）氧气摩尔分数分布　　（b）水饱和度分布



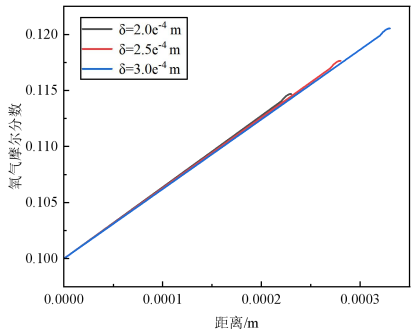


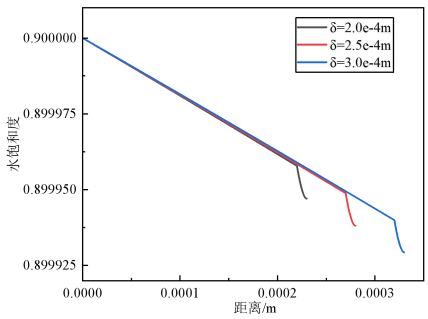
（c）温度分布　　（d）极化曲线

图 5 组件参数分布随 PTL 渗透率变化图

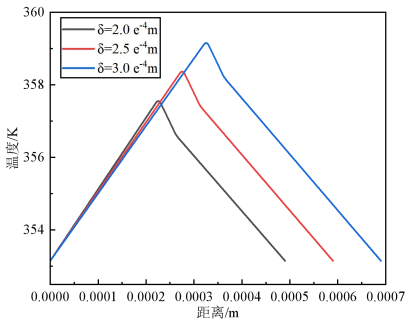
3.4 PTL 厚度的影响

降低PTL厚度可提供更短的水到达反应位点和氧气被抽离路径，防止氧气泡积累，提高电解槽性能[25]。图6所示电压2.0 V、温度353 K、PTL厚度（200 μm、250 μm、300 μm）条件下，组件内水-热-电-气分布沿电解槽组件厚度的变化。可以看出，PTL厚度从200μm增加至300 μm时，ACL/PEM界面处氧气摩尔分数增加4.2%。组件内高氧气含量阻碍水到达ACL参与反应，导致ACL/PEM界面处水饱和降低 (图6b)。水饱和降低将提高浓差极化损失和降低电化学性能，在图6（d）中发现较厚的PTL具有较低的电流密度。此外，增加PTL厚度显著提高组件的温度图6（c），当PTL厚度从200 μm增加至300 μm时，ACL处温度增加2-3K。

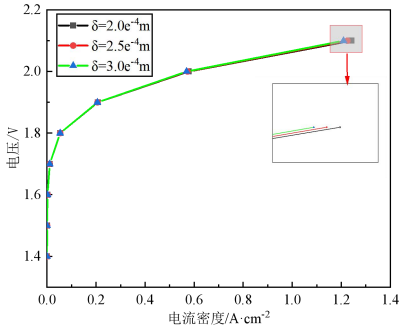




（a）氧气摩尔分数分布　　（b）水饱和度分布



（c）温度分布

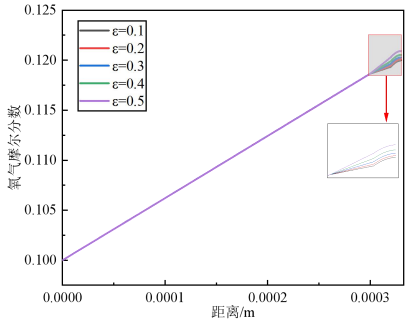


（d）极化曲线

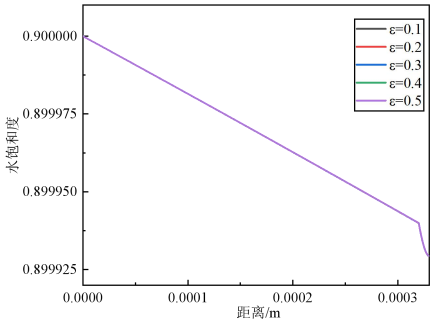
图 6 组件参数分布随 PTL 厚度变化图

3.5 MPL 孔隙率的影响

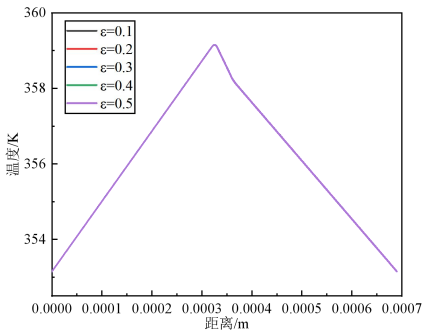
在PTL/CL界面添加MPL孔隙率，通过微-纳米孔隙过渡可以促进催化电极的反应活性位点。图7显示了电压2.0 V，温度353 K，MPL孔隙率（0.1-0.5）时，组件内水-热-电-气分布沿组件厚度的变化。可以看出，MPL孔隙率对组件水饱和度分布、温度分布和电化学性能影响较小，对气体扩散有较大影响，MPL孔隙率从0.1增加至0.5，ACL界面氧气摩尔分数增大0.2%。因此，在组件优化设计中，在PTL/CL界面添加MPL孔隙率，实现考虑将孔隙度沿PTL向ACL逐渐减小的措施在PEM电解槽中是有效的，这与Lee等[26]研究结论相符合。



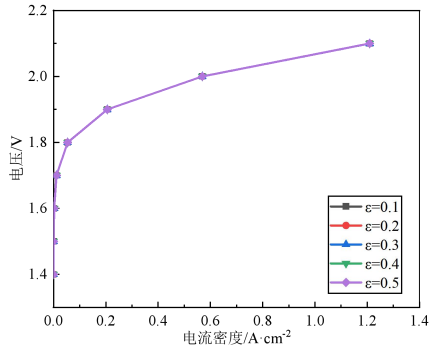
（a）组件氧气摩尔分数分布



（b）组件水饱和度分布



（c）组件温度分布

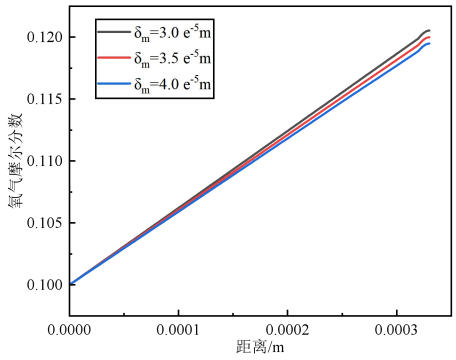


（d）组件极化曲线

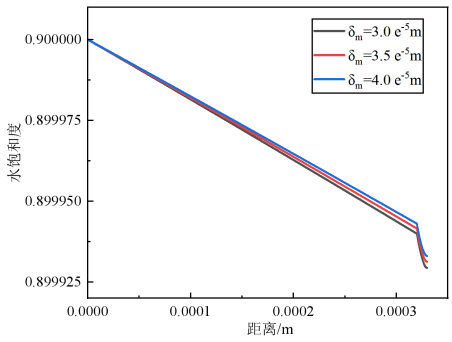
图 7 组件参数分布随 MPL 孔隙率变化图

3.6 质子交换膜厚度的影响

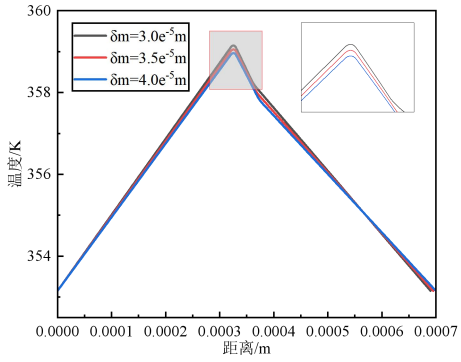
图8所示为电压2.0V，温度353 K，PEM厚度（20μm、25μm、30μm）组件水-热-质分布沿厚度方向的变化。可以看出，降低PEM厚度提高和组件质量传递性能（图8 a、图8 b）。较薄的膜厚度具有高氧气摩尔分数和低液体水饱和度。此外，PEM厚度对组件温度（图8c）和电化学性能（图8d）产生了影响。当PEM厚度从20μm增加至30μm，ACL处氧气摩尔分数降低0.2 %，水饱和度增加0.5 %。主要是较厚的PEM膜增大了膜内质子的迁移距离，降低了电化学反应速率，导致组件出现较高的欧姆损耗，造成较低的电流密度（图8d），。



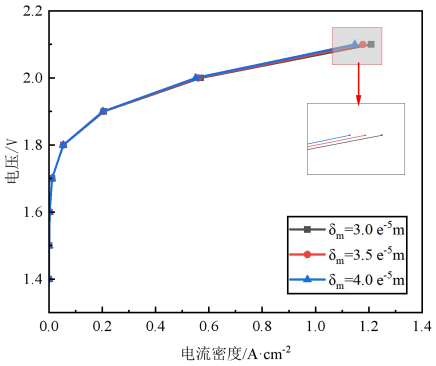
（a）氧气摩尔分数分布



（b）水饱和度分布



（c）温度分布



（d）极化曲线

图 8 组件参数分布随膜厚度变化图

4 结　论

在本研究中，考虑了PEM电解槽组件内部相关水-热-电-气多物理分布特性,在COMSOL Multiphasics 6.0商用软件上建立了PEM电解槽组件一维两相非等温模型。根据实验数据对数值模拟的极化曲线进行了验证，模型预测结果与实验极化曲线基本吻合。随后，研究了影响PEM电解槽极化和物理量分布的部件形态和几何特征。研究结论如下：

（1）电压、PTL孔隙率、PTL厚度和PEM厚度对组件传输性能影响较大，当电压从1.4 V升至2.1 V，ACL/PEM界面氧气摩尔分数增加2.3 %，温度升高7.3 K。

（2）PTL孔隙率从0.3升至0.7，ACL/PEM界面氧气摩尔分数下降4.1 %，组件温度上升0.2 K；PEM厚度从20 μm增加至30 μm，ACL/PEM界面氧气摩尔分数降低0.2 %，温度降低0.21 K。

（3）MPL孔隙率对气体扩散性能影响较大，MPL孔隙率从0.1增加至0.5，ACL/PEM界面氧气摩尔分数增大0.2 %。

参考文献

[1] Jurasz J , Jurasz J , Canales F A , et al. A review on the complementarity of renewable energy sources: Concept, met-rics, application and future research directions[J]. 2020,195:703-724.

[2] 胡兵，徐立军，何山，等. 碳达峰与碳中和目标下 PEM 电解水制氢研究进展[J]. 化工进展，2022,41(09):4595-4604.
Hu Bing, Xu Lijun, He Shan, et al. Researching progress of hydrogen production by PEM water electrolysis under the goal of carbon peak and carbon neutrality [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2022,41(09):4595-4604.

[3] 万年坊. 质子交换膜水电解制氢膜电极研究进展[J]. 化工进展, 2022:1-12.
Wannanfang. Research progress of membrane electrode assembly of proton exchange membrane water electrolysis for hydrogen production [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2022:1-12.

[4] 马晓锋，张舒涵，何勇，等. PEM 电解水制氢技术的研究现状与应用展望[J]. 太阳能学报，2022,43(06):420-427.
Ma Xiaofeng, Zhang Shuhan, He Yong, et al. Research status and application prospect of hydrogen production from water electrolysis with PEM [J]. Acta Energiae Solaris Sinica, 2022,43(06):420-427.

[5] 徐滨，王锐，苏伟，等. 质子交换膜电解水技术关键材料的研究进展与展望[J]. 储能科学与技术，2022:1-10.
Xu Bin, Wang Rui, Su Wei, et al. Research progress and prospect of key materials in proton exchange membrane electrolysis of water [J]. Energy Storage Science and Technology, 2022:1-10.

[6] Wrubel J A, Kang Z, Witteman L, et al. Mathematical model-ing of novel porous transport layer architectures for proton exchange membrane electrolysis cells[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021,05.070.

[7] Teuku H, Alshami I, Goh J, et al. Review on bipolar plates for low-temperature polymer electrolyte membrane water electro-lyzer[J]. International Journal of Energy Research, 2021,45(15):20583-20600.

[8] Lee C, Lee J K, Zhao B, et al. Temperature-dependent gas accumulation in polymer electrolyte membrane electrolyzer porous transport layers[J]. Journal of power sources, 2020,446(Jan.15):227311-227312.

[9] Wang X, Wang Z, Feng Y, et al. Three-dimensional multiphase modeling of a proton exchange membrane electrolysis cell with a new interdigitated-jet hole flow field[J]. Science China Technological Sciences, 2022,65(5):1179-1192.

[10] Falco D S, Pinto A. A review on PEM electrolyzer modelling: Guidelines for beginners - ScienceDirect[J]. Journal of Cleaner Production, 2020,261:121184.

[11] Diaz D F R, Valenzuela E, Wang Y. A component-level model of polymer electrolyte membrane electrolysis cells for hydro-gen production[J]. Applied Energy, 2022,321:119398.

[12] Wang Z M, Chao X U, Wang X Y, et al. Numerical investiga-tion of water and temperature distributions in a proton ex-change membrane electrolysis cell[J]. Science China-Technological Sciences, 2021,64(7):1555-1566.

[13] Lin N, Zausch J. 1D multiphysics modelling of PEM water electrolysis anodes with porous transport layers and the membrane[J]. Chemical Engineering Science, 2022,253:117600.

[14] Lin N, Feng S, Wang J. Multiphysics modelling of proton exchange membrane water electrolysis: from steady to dy-namic behavior[J]. AIChE Journal:17742.

[15] García-Salaberri P A. 1D two-phase, non-isothermal model-ing of a proton exchange membrane water electrolyzer: An optimization perspective[J]. Journal of Power Sources, 2022,521:230915.

[16] Han B, Mo J, Kang Z, et al. Modeling of two-phase transport in proton exchange membrane electrolyzer cells for hydrogen energy[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017,42(7):4478-4489.

[17] Lee C, Lee J K, Zhao B, et al. Temperature-dependent gas accumulation in polymer electrolyte membrane electrolyzer porous transport layers[J]. Journal of power sources, 2020,446(15):227311-227312.

[18] Olesen A C, Frensch S H, Kr S K. Towards uniformly dis-tributed heat, mass and charge: A flow field design study for high pressure and high current density operation of PEM electrolysis cells[J]. Electrochimica Acta, 2019 ,293:476-495.

[19] 刘丽娜, 张瑞元, 郭凌燚, 等. 质子交换膜燃料电池中微纳输运过程的数值研究进展[J]. 科学通报, 2022,67(19):19.

Liu Linan. Zhang Ruiyuan, Guo Lingyi, et al. Advances in numerical studies of micro and nano transport processes in proton exchange membrane fuel cells [J]. Chinese Science Bulletin, 202,67(19):19.

[20] 白鸿玮, 张国宾, 屈治国, 等. 燃料电池开槽流场传热传质过程三维仿真分析[J]. 工程热物理学报, 2023,44(04):1082-1087.

Bai Hongwei, Zhang Guobin, Qu Zhiguo, et al. Three-dimensional simulation of heat and mass transfer in slotted flow field of fuel cell [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2023,44(04):1082-1087.

[21] Yuan X Z, Nayoze-Coynel C, Shaigan N, et al. A review of functions, attributes, properties and measurements for the quality control of proton exchange membrane fuel cell com-ponents[J]. Journal of Power Sources, 2021,491:229540.

[22] Bo H, Mo J, Kang Z, et al. Effects of membrane electrode assembly properties on two-phase transport and performance in proton exchange membrane electrolyzer cells[J]. Electro-chimica Acta, 2016,188(10):317-326.

[23] 邢晓慧. 质子交换膜电解池传热传质及流场结构研究[D]. 北京交通大学, 2020.

Xing Xiaohui. Study on Heat and Mass Transfer and Flow Field Structures of Proton Exchange Membrane Electrolysis Cell[D]. Beijing Jiaotong University, 2020.

[24] Vetter R, Schumacher J O. Free open reference implementa-tion of a two-phase PEM fuel cell model[J]. Computer Phys-ics Communications, 2019,234:223-234.

[25] Doan T L, Han E L, Shah S, et al. A review of the porous transport layer in polymer electrolyte membrane water electrolysis[J]. International Journal of Energy Research, 2021,45(10):14207-14220.

[26] Lee J K, Lee C, Bazylak A. Pore network modelling to en-hance liquid water transport through porous transport layers for polymer electrolyte membrane electrolyzers[J]. Journal of power sources, 2019,437(15):226910-226911.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：14xxxx

半固态全铁氧化还原液流电池浆料电极三维多物理场耦合建模

李鹤遥，张竹茜*
（微细尺度流动与相变传热北京市重点实验室，北京交通大学机械与电子控制工程学院，北京 100044）
(Tel：51684329，E-mail：zhqzhang@bjtu.edu.cn)

摘要：氧化还原液流电池是化学储能中一种新兴的大型高效储能设备，而其中的半固态全铁氧化还原液流电池凭借其高能量密度、环境友好等特点成为了近期的研究热点。本文提出了一套针对半固态全铁氧化还原液流电池浆料电极的三维多物理场耦合模型，综合考虑电池流道内部的固液两相流动、带电离子输运以及电化学反应，计算得到了电池流道内部浆料电极的速度场、浓度场以及电化学场，探究了流动对浆料电极内部传质情况的影响以及电池正负极流道内的电流分布情况。

关键词：半固态全铁氧化还原液流电池；浆料电极；多物理场；流动传质；电流分布

Three-dimensional multiphysical coupling modeling of slurry electrode for semi-solid all-iron redox flow battery

Abstract： Redox flow battery is a new kind of large and efficient energy storage equipment in chemical energy storage, and the semi-solid all-iron redox flow battery has become a research hotspot recently due to its high energy density and environmental friendliness. In this paper, a set of three-dimensional multiphysical coupling model for the slurry electrode of semi-solid all-iron redox flow battery is proposed. The model comprehensively considers the solid-liquid two-phase flow, charged ion transport and electrochemical reaction in the battery channel. The velocity field, concentration field and electrochemical field of slurry electrode in the battery channel are solved, and to explore the influence of flow on the mass transfer inside the slurry electrode and the current distribution in the positive and negative battery channel.

Key words: Semi-solid all-iron redox flow battery; Slurry electrode; Multiphysical; Flow mass transfer; Current distribution

0 前言

在“碳达峰、碳中和”的战略背景之下，面临着能源结构转型的挑战，开发能量效率高且低碳排放的可再生能源发电技术是如今的研究热点。国家能源局《关于 2021 年风电、光伏发电开发建设有关事项的通知》中提到要加强对风电、光伏发电规划落实、项目竞争性配置、电网送出工程建设、项目并网消纳等事项的监管[1]。然而截至目前为止，以风电、光伏发电为代表可再生能源发电仍然存在较多弊端，其弊端之一为存在间歇性与随机性等不稳定特性，例如风电、光伏发电受当地天气状况影响较大，在机组运行发电时受限于当地的太阳光强度或风力强度，无法满足连续性高质量用电需求，存在较高的弃风率和弃光率[2]。故对于可再生能源发电技术的此类弊端，需要大型储能设备对其进行调节。

根据能量转换方式可将储能技术分为化学储能、物理储能与电磁储能[3]。氧化还原液流电池（Redox Flow Battery，简称 RFB）作为化学储能类别中一个重要分支，是由美国科学家由美国科学家 Thaller L.H.（NASA Lewis Research Center）于 1974 年提出的一种电化学储能技术[4]，具有工作规模大，循

2023-06-03 收到初稿，2023-XX-XX 收到修改稿。
联系人：张竹茜。**第一作者**：李鹤遥（2000-），男，山东淄博人，硕士，从事液流电池中流动传质问题研究

环寿命长，电池功率与容量独立等优点。RFB 的工作原理在反应机理上与其他类型的电池相同，均为通过反应活性物质的价态变化实现电能与化学能相互转换与能量存储，在电池内部电解液中，电流以离子迁移的形式存在，而在外层电路则是依靠由电化学反应活性物质所剥离的电子的流动形成电流。RFB 工作原理特点体现在其流动方面，RFB 的电解液储存在电极外的储液罐内，在电池工作时被泵入电极中进行反应，实现了电化学反应场所（电极）与储能活性物质在空间上的分离，由于 RFB 系统的容量取决于外部电解质溶液的储量与浓度而系统输出功率则取决于电堆大小与数量，故 RFB 可实现电池系统容量和系统输出功率的各自独立，这一独特的特性使其成为一种有前景的大规模储能设备[5]。

根据电化学反应的氧化还原对，可将氧化还原液流电池系统分为铁-铬、溴-聚硫、铁-钒、全钒、钒-溴、钒-氧、锌-溴等[6]，目前在以上的研究中较为成熟的是钒类氧化还原液流电池。虽然以上种类液流电池发展较为成熟并具有一定优势，但是仍在电池可用性，环境友好性以及成本方面存在较大弊端[7]，例如钒离子的氧化性会破坏质子交换膜，同时钒具有污染危害性。目前规避以上弊端的一种行之有效的方法为利用铁元素代替钒元素，在电池正负极分别利用 Fe^{3+}/Fe^{2+}、Fe^{2+}/Fe^{0} 两对氧化还原对，构建全铁氧化还原液流电池（All-iron redox flow battery）。相比于全钒氧化还原液流电池，全铁氧化还原液流电池凭借其材料来源广泛造价成本低，以及对环境友好等特点，逐渐成为新的研究热点。

传统的氧化还原液流电池电极多为固定的多孔碳结构材料，但是如果电池在充放电过程中出现析出固体的现象，例如全铁氧化还原液流电池在充电过程中负极会析出铁单质，此时多孔电极不再适用，因为析出的固体将堵塞孔隙，影响电极内部流动传质，进而影响电池效率。为了解决此类问题，可以采用新兴的具有流动性的浆料电极代替多孔电极。

浆料电极是通过将固体导电颗粒悬浮在离子导电电解质中制成并一同被泵入电极流道当中，如果固体颗粒的体积分数足够高，就会形成连续的导电网络，颗粒内部通过电子迁移导电从而取代固态电极，同时氧化还原反应发生在固相颗粒表面[8]，具有比多孔电极更高的比表面积,其工作原理如图 0-1 所示。浆料电极凭借其高比表面积以及高能量密度等优良特性，国内外学者对此进行了许多研究[9-11]。

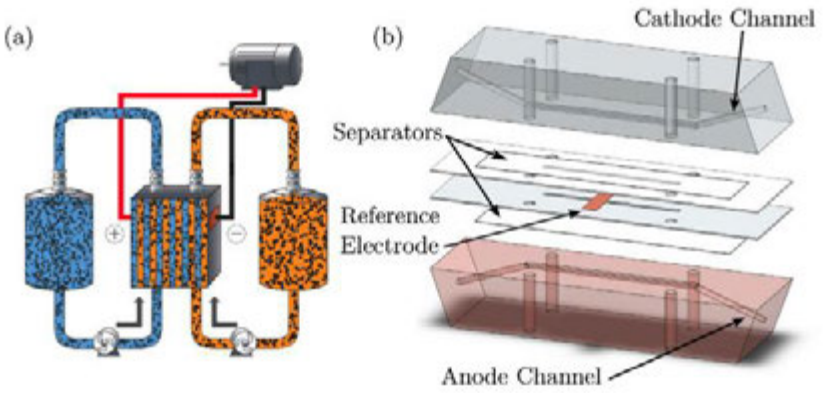


图 0-1 浆料电极工作原理示意图[12]（a）半固态液流电池结构 （b）实验室规模半固态液流电池三维模型

对于浆料电极的研究方兴未艾，但其中基于浆料电极内部物理现象的数学模型的建立的研究却很少。在浆料电极内部电化学反应场需要耦合流体流动方程与质量传递方程，为此从 Fleischmann 等人开始，从适用法拉第电流的流化床电极入手，将标准的一维宏观多、孔电极方程应用于流化床电极[13]。Yang[14]等人提出了一个半固态液流电池的三维多物理场耦合模型，其中包括浆料流动的流体动力学；锂电极反应电化学；固体锂在颗粒中的输运和储罐内质量平衡。Brunini[12]等人同样是基于锂离子电化学，建立了一个包含流体力学和电子电流，离子通量的三维操作的数学模型，适用于高能量密度的半固态液流电池。其中研究人员把固体导电颗粒分为了固体锂离子储存化合物颗粒以及纳米级导电颗粒，同时将锂元素的质量守恒方程分为了电解液中与固体锂离子储存化合物颗粒的夹层中两部分。在 Chayambuka[15]等人的研究中同样把半固态液流电池的浆料电极视为由液体电解质、纯导电颗粒和电荷储存活性颗粒的渗流网络组成，但是，在进行半固态液流电池中固态活性颗粒夹层中物质平衡建模时，推翻了由 Brunini 等人对于此的理论，Brunini 等认为扩散和对流都是发生在活性粒子内部的传输机制，将颗粒的体积运动同化为对流过程。而 Chayambuka 等人认为无论参考框架如何，扩散是唯一的质量传输机制，在固体活性粒子内既没有对流也没有平流，其认为粒子宏观运动是沿着流道的空间坐标进行的，而化学物种的运输同时发生在固相内部。如果一种浆料电极中不含有电荷储存活性颗粒，则其固体导电颗粒只含有纯导电的颗粒，所以不存在固相夹层中的质量守恒方程，Nathaniel[16]等人开发了一种上述浆料电极的数学模型，同时与刚刚介绍的三种模型不同的是该模型的的浆料电极可以同时支持溶液与颗粒界面电化学反应产生的法拉第电流和每个固体导电颗粒在流经电池时的双层电容的充电而产生的非法拉第电流，即在电化学模型中加入了简单双物种电荷转移反应与非法拉第电流方程式。

以上研究思路对不同物性的浆料电极内部的数学模型建立提出了各自的建模思路。基于以上的建模思路，本文旨在对半固态全铁液流电池中的物理现象进行数学建模，形成一套针对于半固态全铁液流电池的数学模型，同时伴随有几何模型的构建，并利用该模型计算浆料电极在流道内的速度场，同时计算电池在放电工况下不同流速下浆料电极内部带电离子的浓度分布，研究浆料电极内部传质情况，最后计算不同浆料流速下电池局部荷电状态（SOC）以及过电位分布情况，探究其电化学性能。

1 半固态全铁氧化还原液流电池模型开发

半固态全铁氧化还原液流电池浆料电极材料参考田[17]在其论文中的设置，负极流道通入 Fe^0、$FeCl_2$、NH_4Cl 混合溶液作为负极电解液，同时有导电性能极强的碳纳米管颗粒（MWCNTs）悬浮其中作为固体导电颗粒，正极流道通入 $FeCl_2$、$FeCl_3$、NH_4Cl 混合溶液作为正极电解液，同样有 MWCNTs 悬浮其中，电解液中加入的 NH_4Cl 的主要作用是降低电解质的电阻率[6]。

本文利用 COMSOL Multiphysics 6.0 对半固态全铁液流电池进行全电池三维模型的建立，全铁氧化还原液流电池电极反应式如下所示。由于 Chayambuka 在其文章中提到多孔电极理论可以正确地模拟非流动的半固态氧化还原液流电池，但未考虑浆料电极的流体动力学效应[15]。故本文在多孔电极理论的基础上增加了流体动力学方程。经过估算，流道内部浆料的流动为层流状态，故我们基于混合流模型(层流)接口求解流体流动域，同时利用三次电流分布（Nernst-Planck）接口求解正负极电位分布、多孔电极电化学反应以及物质传输。

正极：$2Fe^{2+} \rightleftharpoons 2Fe^{3+} + 2e^-$ （1）

负极：$Fe \rightleftharpoons Fe^{2+} + 2e^-$ （2）

总：$3Fe^{2+} \rightleftharpoons Fe^{0} + 2Fe^{3+}$ （3）

1.1 模型假设

在模型建立过程中，我们对其进行了一系列假设，以便对模型进行简化：

（1）在建立流动模型时，假设浆料电极为均相流动，即即固体导电颗粒（分散相）与电解液（连续相）两相之间无速度滑移，同时固液两相的密度为常数，相间无物质传递。

（2）固体导电颗粒中不包括电荷储存活性颗粒，只含有纯导电的颗粒。

（3）不考虑每个固体导电颗粒在流经电池时的双层电容的充电而产生的非法拉第电流。

（4）离子交换膜为阴离子交换膜，只允许电解液中的 Cl^- 通过。

（5）不考虑析氢反应等其他副反应。

1.2 流动模型

基于以上对于模型的假设，流动模型可以运用不可压缩流体的固液两相流 Navier-Stokes 方程来描述。

$$\nabla \cdot \vec{j} = 0 \tag{4}$$

$$\rho \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} + \rho\left(\vec{j} \cdot \nabla\right)\vec{j} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau_{Gm} + \rho\vec{g} \tag{5}$$

$$\tau_{Gm} = \mu\left[\nabla\vec{j} + \left(\nabla\vec{j}\right)^{T}\right] - \frac{2}{3}\mu\left(\nabla \cdot \vec{j}\right)\vec{i} \tag{6}$$

其中 j 是浆料的体积平均混合速度(m/s)，ρ_c 与 ρ_d 分别为分散相密度与连续相，τ_{Gm} 为粘性应力的总和,μ是浆料混合物的动力粘度。

我们认为浆料流体表现为剪切稀化的非牛顿流体，故浆料的有效黏度可表示为剪切速率的函数，其中 C 为黏度系数，n 为黏度指数。

$$\mu = C\dot{\gamma}^{n-1} \tag{7}$$

在流动模型中，设置速度入口边界和压力出口边界，本文设定了不同的浆料电极入口速度，浆料电极出口压力为 0。

1.3 电化学模型

对于流动的浆料电极，其中固体导电颗粒和电解质被认定为相互渗透的均相[18]，我们认为其是一种均质溶液，定义 i_s 为固体导电颗粒中电子运动产生的电流密度，i_e 为电解液中由于电化学反应造成的离子迁移所产生的电流密度，根据基尔霍夫定律，浆料电极中的总电流可表示为。

$$\vec{i}_{total} = \vec{i}_s + \vec{i}_e \tag{8}$$

固体导电颗粒中的电位可由发生在颗粒表面的氧化还原反应生成的电流与欧姆定律共同建模，定义 Φ_s 为固相电位，σ_s 颗粒的电子电导率，α_s 为固相颗粒的比表面积，J_n 为固相颗粒表面的电化学反应体积电流密度。

$$\nabla \cdot (\sigma_s \nabla\phi_s) - \alpha_s J_n = 0 \tag{9}$$

$$i_s = -\sigma_s \nabla\phi_s \tag{10}$$

在电解液相中，假设电解质在其体积中是电中性的，所以系统中没有电荷对流[12]。定义 Φ_e 为液相电位，由于电解液中存在离子的扩散迁移，故电解液相中的电势方程不能同固相一样直接使用欧姆定律进行计算，需要进行相应的修正：

$$\nabla \cdot (\kappa_{eff}\phi_e - \kappa_{D,eff}\nabla\ln c_e) + \alpha_s J_n = 0 \tag{11}$$

$$i_e = -\kappa_{eff}\nabla\phi_e + \kappa_{D,eff}\nabla\ln c_e \tag{12}$$

$$\kappa_{eff} = \kappa\varepsilon^{3/2} \tag{13}$$

其中 c_e 为电解质浓度，κ 为电解液离子电导率，ε 为电解液体积分数，κ_{eff} 为电解液的有效离子电导率，有效离子电导率需结合真实电导率与电解质体积分数利用Bruggeman公式进行修正，$\kappa_{D,eff}$ 为扩散电导率，Gu[19]等人用以下的公式定义，ν 是化学计量系数，ν^+ 是每摩尔电解质中阳离子的摩尔数，t_+^0 是电解液中阳离子的转移数，c_{e0} 是电解液初始浓度。

$$\kappa_{D,eff} = \frac{\nu RT\kappa_{eff}}{F}\left(t_+^0 - 1 + \frac{c_e}{2c_{e0}}\right) \tag{14}$$

由以上固体颗粒相中的电流密度以及电解液中的电流密度可推导出由式（12）表示的结论，即固体颗粒相中的电流密度与电解液相中的电流密度的散度互为相反数且都等于固液交界面由电化学反应而产生的电流，同时电化学反应电流密度 J_n 可利用经典的 Butler–Volmer 方程表达，其中 J_0 是交换电流密度，α_a 是阳极传递系数，α_c 是阴极传递系数，η 为过电位，Φ_{eq} 为平衡电位，即

无外加电流时电极电位，当电池未发生极化处于平衡状态时，过电位为 0。

$$\nabla \cdot \vec{i}_s = -\nabla \cdot \vec{i}_e = -\alpha_s J_n \quad (15)$$

$$J_n = J_0\left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT}\eta\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_c F}{RT}\eta\right)\right] \quad (16)$$

$$\eta = \phi_s - \phi_e - \phi_{eq} \quad (17)$$

在电化学反应模型中电流平衡的边界条件，可以分为在电流收集器以及离子交换膜两个边界进行描述[15]：

正极集流板边界，$i_s = i_{total}$ （18）

离子交换膜边界，$i_e = i_{total}$ （19）

负极集流板边界，$\phi_s = 0$ （20）

1.4 带电粒子运输模型

半固态全铁液流电池的浆料电极可看作为泥浆状的悬浮液，由电解液与固体导电颗粒组成，在整个浆料电极的流动放电过程中，内部存在着带电粒子的迁移与扩散，由于电池工作状态下电极内部存在电化学电势梯度，正是由于电化学电势梯度的存在驱动了浆料内部电解质中带电离子的迁移，我们定义 i 为浆料电极电解液中的阴离子或阳离子，其各自对应的浓度为 c_i，M_i 为阴离子或阳离子的通量，物质通量由扩散迁移与对流所决定[17]。浆料电极电解液中单个化学物质的质量守恒可以仿照多孔电极浓溶液理论进行建模，我们使用电解液的体积分数代替多孔电极的孔隙率，质量守恒方程如式（15）所示，定义 n_i 为固体导电颗粒与电解液界面之间阴、阳离子界面通量，其表达式如式（17）所示，D_{eff} 为电解液的有效扩散系数，与有效离子电导率相同，其仍需要通过结合真实扩散系数与电解液体积分数利用利用 Bruggeman 公式进行修正，$t_{\pm}^0$ 代表 M_i 物质通量中阳离子或阴离子的转移数。

$$\varepsilon \frac{\partial c_i}{\partial t} = \alpha_s n_i - \nabla \cdot \vec{M}_i \quad (21)$$

$$\vec{M}_{\pm} = -\varepsilon D_{eff} \nabla c_{\pm} - \frac{t_{\pm}^0}{F}\vec{i}_e + c_{\pm}\vec{j} \quad (22)$$

$$n_{\pm} = \pm \frac{\nabla \cdot \vec{i}_e}{\alpha_s F} \quad (23)$$

$$D_{eff} = D_e \varepsilon^{3/2} \quad (24)$$

表 1-1 半固态全铁液流电池内部物性参数

物性参数	符号	参数值	单位
温度	T	293.15	K
压力	p	1	atm
电解液体积分数	ε	0.58	--
固体导电颗粒电导率	σ_s	108	S/m
电解液离子电导率	κ	3	S/m
浆料密度	ρ	1300	kg/m^3
浆料动力粘度	μ	15	Pa·s
Fe^{2+}扩散系数	$D_{Fe^{2+}}$	7.2×10^{-10}	m^2/s
Fe^{3+}扩散系数	$D_{Fe^{3+}}$	6.1×10^{-10}	m^2/s
Fe^0扩散系数	D_{Fe^0}	5×10^{-13}	m^2/s
NH_4^+扩散系数	$D_{NH_4^+}$	2.5×10^{-9}	m^2/s
Cl^-扩散系数	D_{Cl^-}	2×10^{-9}	m^2/s
正极标准电势	E_{pos}^0	0.77	V
负极标准电势	E_{neg}^0	-0.44	V
法拉第常数	F	96458	--

表 1-2 半固态全铁液流电池几何参数

几何参数	符号	参数值	单位
流道入口与出口段长度（倾斜段）	$L_{channel\text{-}sla}$	30	mm
流道中间段长度（平直段）	$L_{channel\text{-}hor}$	60	mm
流道深度	$D_{channel}$	4	mm
流道宽度	$W_{channel}$	10	mm
离子交换膜厚度	$L_{membrane}$	0.22	mm

整理以上四式，可得电解液中的质量守恒方程为：

在集流板边界，电解质溶液中的物质的浓度梯度为0：

阳离子：
$$\varepsilon\frac{\partial c_+}{\partial t}=\varepsilon D_{eff}\nabla\cdot(\nabla c_+)+\frac{(1+t_+^0)}{F}\nabla\cdot\vec{i}_e-\vec{j}\nabla c_+ \quad (25)$$

阴离子：
$$\varepsilon\frac{\partial c_-}{\partial t}=\varepsilon D_{eff}\nabla\cdot(\nabla c_-)+\frac{(t_-^0-1)}{F}\nabla\cdot\vec{i}_e-\vec{j}\nabla c_- \quad (26)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial x}=0 \quad (27)$$

半固态全铁液流电池内部的物性参数如表 1-1 所示。

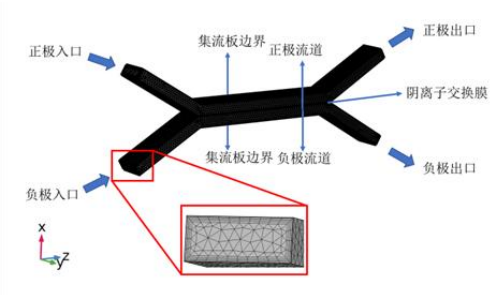


图 1-1 半固态全铁液流电池几何模型与网格划分情况

1.5 几何模型

半固态全铁液流电池的几何模型与网格划分情况如图 1-1 所示，几何模型包括正负极流道以及阴离子交换膜，正负极流道两侧的表面为集流板边界，电池几何尺寸如表 1-2 所示。划分网格时的类型选择流体动力学网格，划分自由四面体网格，同时在流道壁面处划分边界层网格，层数为 5 层。整个网格单元数为 85925，平均单元质量为 0.6701。

2 结果与讨论

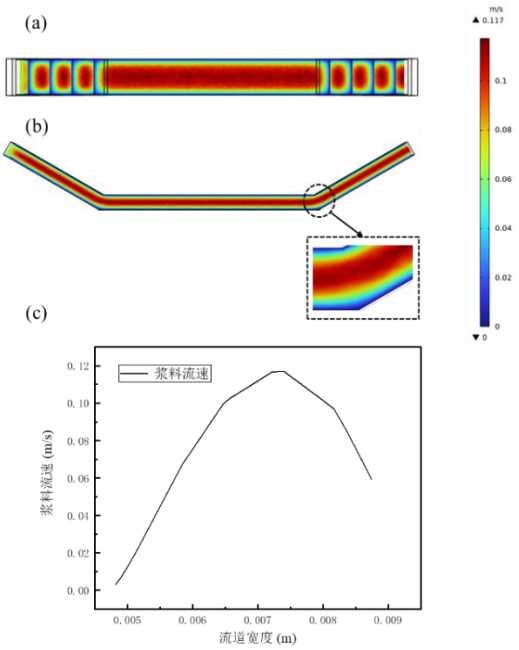


图 2-1 半固态全铁液流电池浆料电极速度场

2.1 浆料电极流场分析

设定浆料入口初始速度为 0.06 m/s，壁面为无滑移边界条件，浆料电极内部速度场如图 2-1 所示，本文选择正极流道内部的浆料流动情况进行分析。图(a)与图(b)分别为两种视图下流道内部浆料混合物的速度截面，其中图(b)同时显示了流道拐角处浆料电极流速的局部放大图，在流道拐角横截面处取一条截线并提取截线上的速度值绘制出图(c)。如图(a)与图(b)所示，浆料电极在经历了非常短暂的入口段流动之后就进入了充分发展阶段。结合图(b)的局部放大图与图

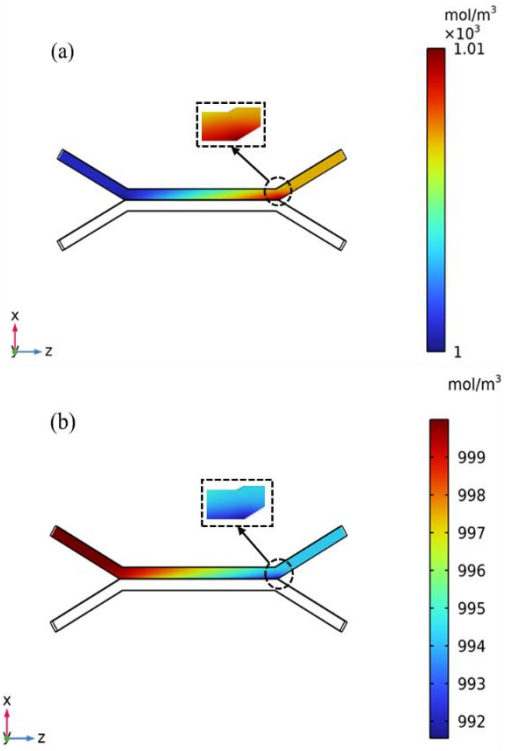
(d)可以直观地看出在流道拐角处，从壁面到流道中线处速度梯度明显较其他流道区域减小，流动边界层变厚，浆料流速整体变慢。这是因为在流道拐角处由于粘性力的作用容易形成浆料的沉积与堵塞，对整个流动过程产生了严重的影响，同时浆料的沉积也会影响到电解液中的传质情况，在下文中会进行分析说明。

2.2 浆料电极电解液浓度场分析

本节探究了放电工况下浆料电极内部带电离子浓度的分布规律，在某一特定入口流速下，选择一对特定的氧化还原对，对放电时从流道进口到出口，氧化还原对中的离子浓度变化进行分析，同时关注流道拐角处由于浆料沉积造成的离子浓度分布的变化。设定三个浆料入口速度，分别为 0.04、0.06、0.08 m/s，探究不同浆料入口流速对于浆料电极内部带电离子浓度场的影响，由于正负极流道内均含有 Fe^{2+},研究具有普遍性，故我们选择 Fe^{2+}离子的浓度场进行研究，同时计算不同入口流速下流道特定横截面上 Fe^{2+}对应的佩克莱数(Pe)，从数学的角度进一步探究不同浆料流速对电极内部离子浓度场的影响，最终得出最佳流速。

设定浆料入口流速为 0.06 m/s，半固态全铁液流电池的平均电流密度为 1250 A/m^2，在电池放电工况下，正极流道内发生还原反应，氧化还原对中的 Fe^{3+}转化为 Fe^{2+}。图 2-2 显示了放电工况下正极氧化还原对 Fe^{2+}/Fe^{3+}从流道进口到流道出口的离子浓度分布以及在流道拐角处的局部离子浓度分布。如图所示，从流道进口到流道出口，在电化学反应的作用下，Fe^{2+}浓度随着流动升高而 Fe^{3+}浓度随着流动降低。从局部放大图中可以看出，在靠近出口的流道拐角处 Fe^{2+}浓度升高而 Fe^{3+}降低，这一现象与上一小节对浆料电极内部流场分析中流道拐角处流速整体变慢相符合，浆料电极在此处发生了沉积与堵塞，造成了两种结果，一是此处电解液浓度上升，导致 Fe^{2+}浓度上升，二是流速减缓，电解液堆积，加剧此处的电化学反应强度，导致更多的 Fe^{3+}转化为 Fe^{2+}。综合以上两点，出现了流道拐角处 Fe^{2+}浓度升高而 Fe^{3+}降低的现象。此类现象对于电池来说是有害的，即便加剧了局部的电化学反应强度，但是局部离子浓度过高，仍然会产生较大的浓差极化，使得电极内部传质恶化，增加了电池内部的阻力。

图 2-2 放电工况下正极氧化还原对 Fe^{2+}/Fe^{3+}流道纵向切面浓度场及留到拐角处局部放大图，(a) Fe^{2+}浓



度场，(b) Fe^{3+}浓度场

如图 2-3 所示，在流道中间段取一个截面，并在截面上取一段二维截线，探究该截线上 Fe^{2+}浓度分布情况，同样设定半固态全铁液流电池的平均电流密度为 1250 A/m^2,Fe^{2+}的进口浓度为 1000 (mol/m^3)，截线上 Fe^{2+}浓度值如图 2-4 所示。从图 2-4 可以看出随着浆料电极入口流速的升高，Fe^{2+}在截线上的浓度梯度逐渐降低，浓度曲线逐渐变平缓，在阴离子交换膜两侧的浓度差也逐渐减小。Fe^{2+}在流道内的传递由对流与扩散与迁移三种方式结合进行，而表征离子传质过程中对流作用与扩散作用的相对大小的无量纲数为佩克莱数(Pe)，Pe 越大，则意味着对流传质的效果越显著，Fe^{2+}浓度变化率更加稳定[20]。Pe 的计算公式如式 28 所示，其中 $j_{z,average}$ 为截面浆料平均流速，d_e 为矩形流道当量直径。图 2-5 显示了不同入口速度的浆料电极在图 2-3 所示的流道截面处的 Pe

值，随着浆料电极入口流速的升高，在该截面处的 Pe 也随之升高，对流传质相对于扩散传质更为显著，截面处的离子浓度变化率更为稳定，这解释了图 2-4 中二维截线上 Fe^{2+}浓度梯度随浆料电极入口流速升高而降低的现象。然而，随着浆料电极入口流速的升高，正负极流道内 Fe^{2+}的浓度会出现整体降低的现象，这是由于流速加快，浆料停留时间较短，电化学反应未充分进行。

$$Pe_z = \frac{j_{z,average} d_e}{D_{eff,Fe^{2+}}} \tag{28}$$

$$j_{z,average} = \frac{\sum_{i=1}^{n} j_i dA}{A} = \frac{\sum_{i=1}^{n} j_i}{n} \tag{29}$$

$$d_e = \frac{4A_c}{P} \tag{30}$$

所以流速增大虽然会减小流道内部 Fe^{2+}的浓度梯度，对流传质的影响显著上升，这有利于减小电极内部的浓差极化，改善电极内部传质情况，使 Fe^{2+}分布更加均匀。但是流速过大同样会导致放电过程中的电化学反应进度，电化学反应不充分会导致电池整体效率降低，故我们认为浆料电极最佳入口流速为 0.06 m/s。

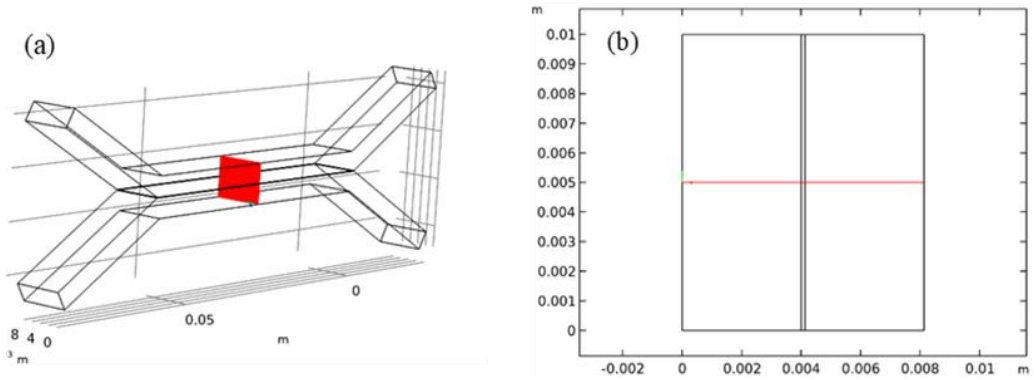


图 2-3 半固态全铁液流电池流道截面与对应的二维截线,(a)截面 (b)二维截线

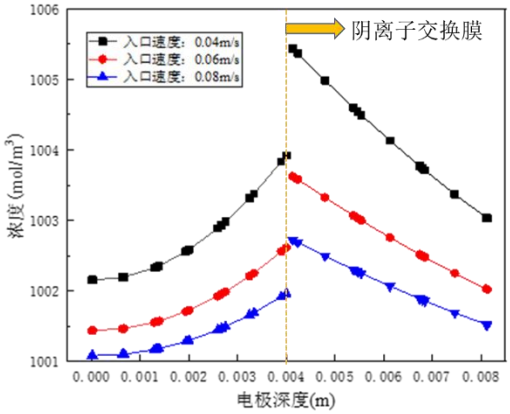


图2-4 不同入口速度下浆料电极电解液中Fe^{2+}的浓度分布情况

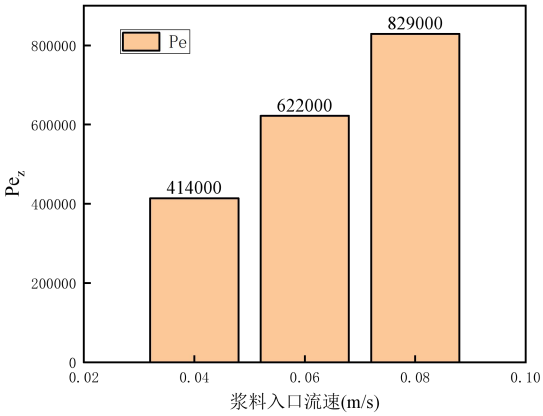


图 2-5 不同入口速度的浆料电极在流道截面处的 Pe 值

2.3 浆料电极电化学场分析

本节将要介绍浆料电极在最佳入口流速的放电工况下的电化学性能分析。通过计算得到正负极浆料中电解质电流密度即 i_e 以及固体导电颗粒电流密度即 i_s，并利用基尔霍夫定律将两种电流密度矢量场进行加和分别得到正负极流道内的总电流密度分布矢量场 i_{total}。

图 2-6 为半固态全铁液流电池的平均电流密度为 1250 A/m² 时，电池正负极流道两个视角下的电解质电流密度及固体导电颗粒电流密度的标量场，如图所示，i_e 与 i_s 在流道入口与出口段几乎为 0，这说明在此段几乎没有氧化还原反应发生。无论负极与正

极，i_e 梯度方向与 i_s 梯度方向相反，如图(a)与图(c)所示 i_e 自阴离子交换膜边界向集流板边界逐渐降低，最大值出现在阴离子交换膜边界的流道拐角处，从图(a)与图(c)的局部放大图可以看出，在流道拐角处的 i_e 值显著高于膜边界其他位置对应的值，这是由于此处流速减缓，电解质堆积，离子浓度上升，加剧了此处的电化学反应强度。如图(b)与图(d)所示，i_s 自集流板边界向阴离子交换膜边界逐渐降低，并且在集流板边界的电流密度相较于于离子交换膜边界的电流密度更为均匀。在图(b)与图(d)的局部放大图中，同样出现了流道拐角处局部电流密度升高的现象，这是由在浆料沉积的过程中，固体导电颗粒局部密度升高以及颗粒与电解液界面上由电化学反应引起的法拉第电流升高共同造成的。

在图 2-6 工况的基础上，将两种电流密度的矢量场进行加和，得到如图 2-7 所示的正负极总电流密度 i_{total}，以上所描述的两种电流密度只是对其数值大小进行分析，并未可考虑电流方向，而的 i_{total} 为半固态全铁液流电池内部电流分布的真实情况，定义从负极集流板边界到正极集流板边界的方向电流密度正方向。从图中可以看出正负极中间段流道内部电流密度分布较为均匀，电流密度值基本集中在 2000-2500 A/m^2。从图(a)与图(b)的局部放大图中可以看出负极电流密度的最大值出现在流道入口拐角处，同时在流道出口拐角处出现负值，这说明在流道入口拐角处 i_s 与 i_e 各自的总体方向均为正方向，而在流道出口拐角处两种电流密度总体方向相反。在正极流道内则与负极流道出现相反的情况，其在流道入口拐角处出现负值而在流道出口拐角处出现最大值。

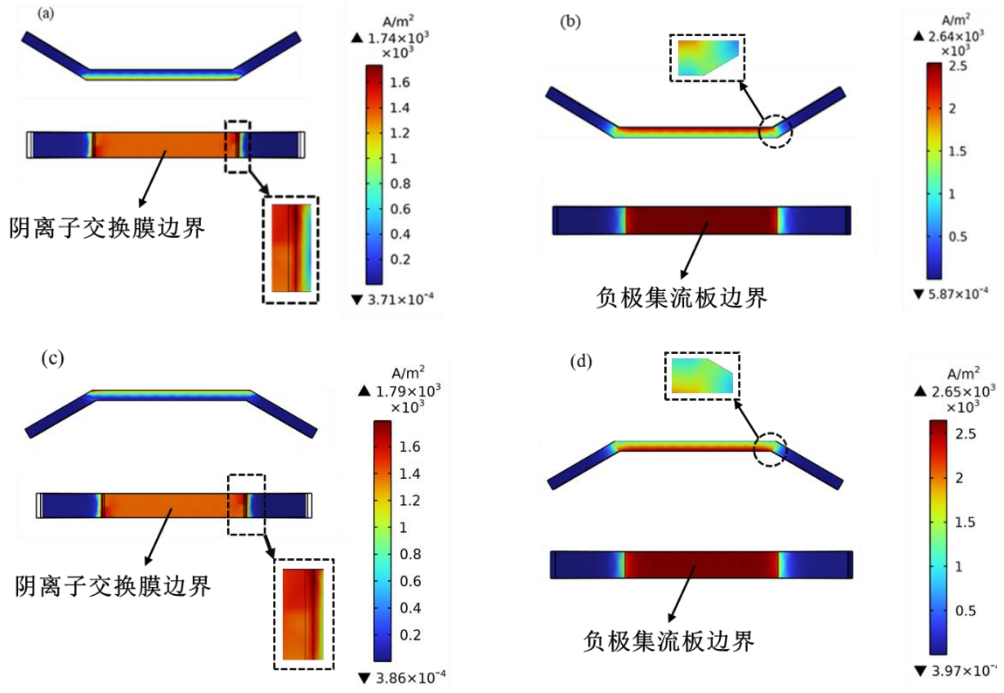


图 2-6 正负极电解质电流密度及固体导电颗粒电流密度（标量场），(a)负极电解质电流密度 (b)负极固体导电颗粒电流密度 (c)正极电解质电流密度 (d)正极固体导电颗粒电流密度

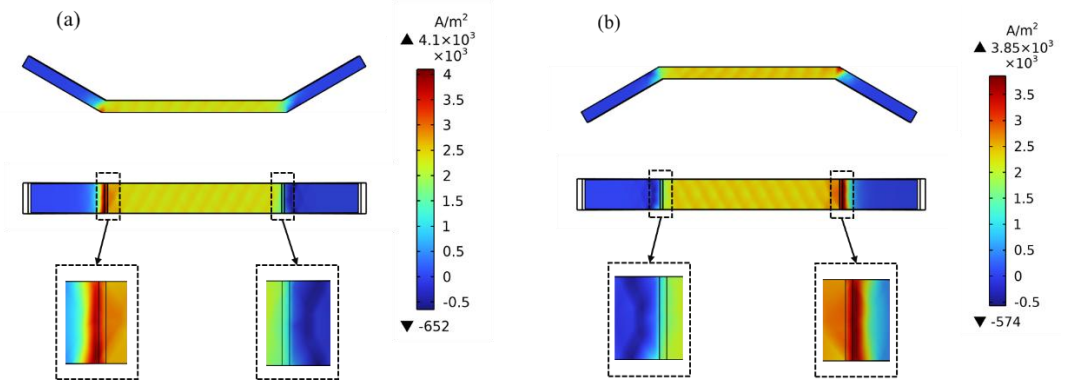


图 2-7 正负极总电流密度（矢量场），(a)负极电流密度 (b)正极电流密度

3 结论

通过建立半固态全铁液流电池三维模型，对由电解液与固体导电颗粒组成的浆料电极的流场、浓度场以及电化学场进行模拟计算并得出以下结论：

（1）在对半固态全铁液流电池浆料电极流场进行模拟分析时，发现浆料电极经历了非常短暂的入口段流动之后就进入了充分发展阶段，同时在流道拐角处，由于粘性力的作用容易形成浆料的沉积与堵塞，故从壁面到流道中线处速度梯度明显较其他流道区域减小，浆料流速整体变慢。

（2）在对浆料电极中电解液浓度场进行模拟分析时，研究了指定流速下氧化还原对 Fe^{2+}/Fe^{3+}在放电工况下在流道内部的浓度变化，模拟结果显示在靠近出口的流道拐角处 Fe^{2+}浓度相较于同一水平位置升高而 Fe^{3+}则降低，这一现象与浆料电极内部流场分析中流道拐角处浆料沉积造成的流速整体变慢的现象相符合。人为设定了三组不同的浆料电极入口流速，探究了不同浆料入口流速对于浆料电极内部带电离子浓度场的影响，选择 Fe^{2+}浓度进行研究，计算不同流速下，流道内部指定二维截线上 Fe^{2+}浓度场，以及该截线对应截面处 Fe^{2+}局部 Pe 值，综合分析流速对于浓差极化与电化学反应强度的影响，最终得出浆料电极最佳入口流速为 0.06 m/s。

（3）在对浆料电极电化学场进行模拟分析时，计算得出了正负极浆料中电解质电流密度以及固体导电颗粒电流密度，并将两种电流密度的矢量场进行加和得到浆料电极电流分布的真实情况。计算结果表明，正负极流道的进出口段电流密度几乎为 0；电解液电流密度与固体导电颗粒电流密度梯度方向相反，但都出现流道拐角处局部电流密度升高的现象；总电流密度矢量场中正负极流道中间段电流密度较为均匀，其中负极电流密度最大值出现在入口流道拐角处，在出口流道拐角处出现反方向电流密度，正极电流密度分布情况则与负极相反。

参考文献：

[1] 中华人民共和国国家能源局，关于 2021 年风电、光伏发电开发建设有关事项的通知[R]，2021.

[2] 中华人民共和国国家能源局，2020 年可再生能源发展情况[R]，2021.

[3] 董舟,王宁,李凯,等.储能技术分类及市场需求分析[J]. 中国金属通报, 2019(11):2.

[4] 王晓丽,李先锋,张宇,马相坤.液流电池：黎明前等待美好明天[N].中国科学报,2014-10-28(006)

[5] Nambafu G S, Delmo E P, Shahid U B, et al. Pyromellitic diimide based bipolar molecule for total organic symmetric redox flow battery[J]. Nano Energy, 2022, 94: 106963.

[6] Dinesh A,Olivera S,Venkatesh K,et al.Iron-based flow batteries to store renewable energies[J]. Environmental Chemistry Letters, 2018.

[7] Viswanathan V , Crawford A , Stephenson D , et al. Cost and performance model for redox flow batteries[J]. Journal of Power Sources, 2014, 247(feb.1):1040-1051.

[8] Petek T J , Hoyt N C , Savinell R F , et al. Slurry electrodes for iron plating in an all-iron flow battery[J]. Journal of Power Sources, 2015, 294(oct.30):620-626.

[9] Chen H,Liu Y,Zhang X,et al. Single-component slurry based lithium-ion flow battery with 3D current collectors[J]. Journal of Power Sources, 2021, 485:229319.

[10] Naeem M .用于锂离子浆料电池的高稳定浆料电极[D]. 中国科学院大学.

[11] Mourshed M,Niya S,Ojha R,et al.Carbon-Based Slurry Electrodes for Energy Storage and Power Supply Systems[J].Energy Storage Materials,2021,40.

[12] Brunini V E,Chiang Y M,Carter W C .Modeling the hydrodynamic and electrochemical efficiency of semi-solid flow batteries[J].Electrochimica Acta,2012,69(none):301-307.

[13] Oldfield M.Fluidised bed electrodes:Part I.Polarisation predicted by simplified models[J]. Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry, 1971.

[14] Yang K,Xiong S,Zhang H.A comprehensive 3D multi-physics coupled simulation model of slurry redox flow batteries[J]. Journal of Power Sources, 2022, 531:231315-.

[15] Chayambuka K,Fransaer J,Dominguez-Benetton X .Modeling and design of semi-solid flow batteries[J]. Journal of power sources, 2019, 434(SEP.15):226740.1-226740.11.

[16] Hoyt N C，Savinell R F，Wainright J S.Modeling of flowable slurry electrodes with combined faradaic and nonfaradaic currents[J]. Chemical Engineering Science, 2016, 144:288-297.

[17] 田韫祎. 电极结构对液流电池传质影响的数值与实验研究[D]. 北京交通大学.

[18] Newman J , Thomas-Alyea K E . Electrochemical systems. Prentice Hall, 2004.

[19] Gu, W, B, et al. Computational Fluid Dynamics Modeling of a Lithium\\/Thionyl Chloride Battery with Electrolyte Flow[J]. Journal of The Electrochemical Society, 2000, 147(2):427-427.

[20] 孙洁. 基于流道结构设计的液流电池多孔电极中离子传质改进研究[D].浙江大学.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233226

射流条件下电子束收集极散热结构优化

韩泽冉[1]，吴平[2]，吴波[3]，华叶[2]，王秋旺[1]，马挺[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. 西北核技术研究所先进高功率微波技术重点实验室，西安 710024；
3.中国航空工业集团公司西安航空计算技术研究所，西安 710119）
（Tel:029-82663222, Email:mating715@mail.xjtu.edu.cn）

摘要：为改善电子束收集极热环境，降低收集极温度和热集中性，在套筒散热结构的基础上，结合冲击射流方法，提出一种新型的收集极冲击射流散热结构，并开展数值模拟研究。研究结果表面，与传统的套筒散热结构相比，射流散热结构换热效果更强，该结构下收集极温度更低，且最大温差比显著降低，达到 7%，能有效改善热集中问题。

关键词：电子束收集极；热分析；冲击射流

0 前言

高功率微波具有高频率、超高功率、光速传播、强穿透能力等特点，可以对微电子器件和电路造成干扰或损害。由于高功率微波器件向着大功率、高频率[1]、小型化[2]的方向发展，导致电子束收集极平均热流密度远超过常规电子器件热流密度，达到甚至超过 100-1000 $W\cdot cm^{-2}$[3]。如果热量不能及时散出，累积在电子束收集极内壁，会产生大量等离子体，导致收集极材料表面发生溶蚀并产生大量的溅射物，严重影响了高功率微波器件的稳定性和安全性[4]。

为了及时散出沉积在电子束收集极内部的热量，需要在收集极外侧布置水冷散热结构。针对传统的套筒散热结构，不同学者提出了优化策略，以提高换热效率。采用数值模拟方法，吴瑶[5]研究了换热翅片对收集极温度的影响，增加翅片后收集极温度显著降低。沈亚萍[6]比较了矩型、针型和螺旋型三种散热肋片，其中螺旋型肋的优势较为明显。Lei 等人[7]和 Xiong 等人[8]都研究了肋片高度和数量对电子束收集极温度的影响，随着肋片高度和数量的增加，散热性能提高，收集极温度逐渐降低。本文结合冲击射流方法，提出一种新型的收集极冲击射流散热结构，重点对冲击射流条件下电子束收集极热特性进行研究，讨论冷却水流量对冲击射流结构散热能力的影响，最后比较冲击射流结构与套筒结构的散热效果。

1 物理模型及数值方法

1.1 物理模型及边界条件

为了提高收集极热管理系统稳定性，改善收集极热集中性，提高散热结构的散热能力，基于收集极热源局部集中的特点，采用环状冲击射流散热结构替代传统套筒散热结

基金项目：国家自然科学基金项目（批准号：52022080）

构对收集极进行散热。套筒散热结构如图 1 所示，为旋转体结构。冲击射流结构如图 2 所示，在收集极高温区域沿周向均匀排布射流阵列 30 组，每组有两个矩形射流入口，射流阵列之间均匀排布矩形肋片，冷却水从射流阵列进入散热通道，直接冲击高温区域，带走沉积在收集极内壁面处的热量，沿着微细通道，冷却水最终从收集极轴向两侧流出。收集极冲击射流模型轴向长度为 100 mm，散热通道轴向长度为 80 mm，矩形射流入口截面长 8 mm，宽 1 mm。

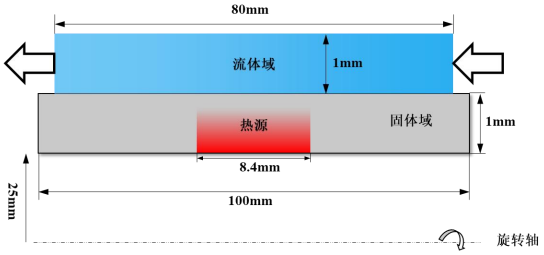


图 1 套筒散热结构示意图

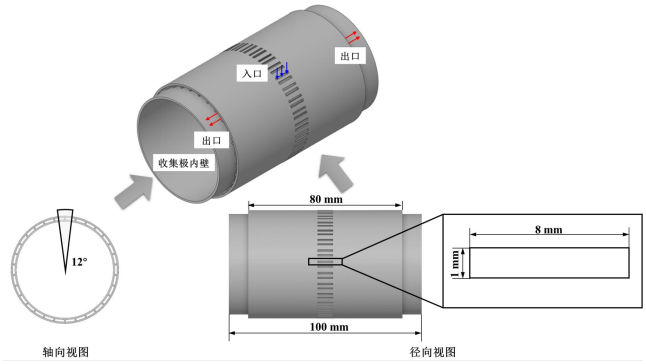


图 2 冲击射流结构示意图

收集极冲击射流散热结构分布具有环状周期性，为简化计算，以 1/30 冲击射流结构作为计算模型，如图 3 所示。其中脉冲热源频率为 50 Hz，脉宽为 38 ns，热源沿周向分布均匀，沿径向逐渐衰减，沿轴向为类高斯分布。冷却通道中运行压力为 0.3 MPa，冷却水入口温度和体积流量分别为 293K 和 10 L·min^{-1}。

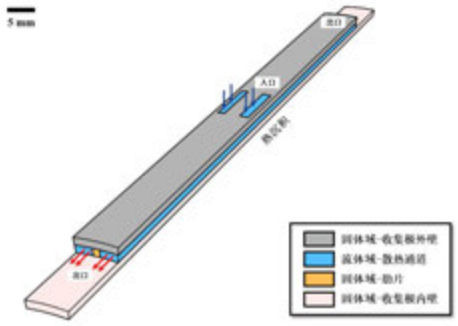


图 3 冲击射流计算模型

1.2 数值方法

以 Ansys Fluent 为数值模拟工具，数值计算过程中压力与速度耦合算法采用 SIMPLE

算法，综合考虑计算资源和模拟精度，采用 RNG *k-ε*湍流模型，所有方程采用二阶迎风格式进行离散，迭代求解过程中结合方程残差曲线和监测温度为判据进行收敛性判断。

2 网格无关性验证和数值模型有效性验证

2.1 网格无关性验证

采用 Space Claim 对冲击射流计算模型进行建模，网格划分工具是 Fluent mesh。网格划分采用基于“马赛克”技术的 Poly-Hexcore 网格生成方法，以减少网格数量，提高计算效率。当网格数从 551000 增加至 921000 时，电子束收集极最高温度相对误差为 2%，满足计算精度。因此，选用网格数量为 551000 的网格开展电子束收集极冲击射流数值模拟研究。

2.2 数值模型有效性验证

为了数值模型的有效性，基于公开文献[9]计算模型进行数值模拟。数值模拟中网格划分方式与湍流模型均与本文设置一致，通过比较金属区域最高温度变化，验证模型的有效性。文献中脉冲热源作用 3 s 后，金属区域温度达到动态平衡，表现为在一定范围内与热作用同频率波动，金属区域最高温度在 802K~1023K 之间动态波动，无热作用后，在 4 s 时恢复初始温度。数值模拟结果为，温度达到动态平衡后，温升达到 1027K，温降至 799K，因此热源作用时，最高温度的相对误差为 0.40%，热源间歇时，最高温度的相对误差为 0.37%，无脉冲热源作用时，金属区域于 4 s 降低至初始温度，与文献结果一致。

3 结果分析和讨论

3.1 入口流量对冲击射流散热结构性能的影响

随着冷却水流量的增加，射流结构中的流动速度也会随之增加，进一步导致速度分布情况发生变化。当流量较小时，射流结构中的速度分布情况比较均匀，距离射流孔较近的区域冷却水流速较低，高速冷却水主要分布在散热通道轴向两侧出口附近。随着流量的增加，射流孔两侧较近区域流速显著升高，导致射流孔入口两侧漩涡强度升高，高速区冷却水的速度也会进一步增加，导致其对流散热能力提高，热边界层厚度变薄，冷却水与收集极高温区域间热阻降低，从而增强传热效率。当冷却水流量为 5 L·min^{-1}、10 L·min^{-1}、15 L·min^{-1} 时，收集极最高温度和最高水温如图 3 所示。

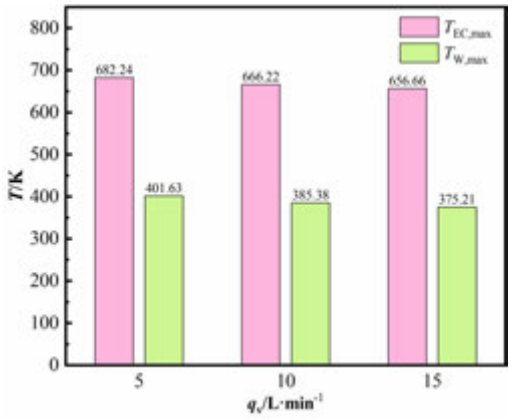


图 3 不同流量下射流结构收集极最高温度和最高水温

由于热源直接作用于收集极壁面，因此收集极最高温度显著高于最高水温。随着冷却水流量的增加，收集极最高温度依次为 682K、666K、656K，收集极最高温度降低 4%，最高水温依次为 401K、385K、375K，最高水温降低 7%，温度与冷却水流量表现为负相关性。比较收集极最高温度和最高水温降低幅度，说明流量对水温的影响大于对收集极温度的影响，主要是由于冷却水流量的增加，导致单位时间经过散热通道的冷却水增加，因此冷却水温降低幅度较大。

3.2 冲击射流散热结构与套筒散热结构对比分析

不同冷却水体积流量（5 L·min^{-1}、10 L·min^{-1}、15 L·min^{-1}）条件下，以最大温差比为指标，比较两种散热结构收集极热集中性。最大温度差比（*MTDR*）为：

$$MTDR = \frac{T_{\max} - T_{\min}}{T_{\max} + T_{\min}} \times 100\% \tag{1}$$

式中：$T_{\max}$ 为最高温度；$T_{\min}$ 为最低温度。

首先对比热源作用阶段结束时两种散热结构最大温差比。冷却水流量增加时，套筒散热结构最大温差比依次为 48%、45%、44%，射流散热结构最大温差比依次为 39%、38%、38%，如图 4 所示。随着流量的增加，两种结构对流冷却能力提高，表现为最大温差比降低。且同工况下，由于射流散热结构针对高温区域存在射流冷却强化换热手段，因此温度分布更加均匀，最大温差比更低。其次对比热源间歇阶段结束时两种散热结构的最大温差比。由于热源间歇阶段收集极高温区域向低温区域传递热量，因此该阶段结束时最大温差比显著低于热源作用阶段结束时。冷却水流量增加时，套筒散热结构最大温差比依次为 21%、12%、10%，射流散热结构最大温差比依次为 12%、10%、9%，如图 5 所示。与热源作用阶段类似，随着流量的增加，收集极温度分布均匀程度提高，最大温差比降低，同工况下，射流散热结构最大温差比仍低于套筒散热结构，达到 7%。

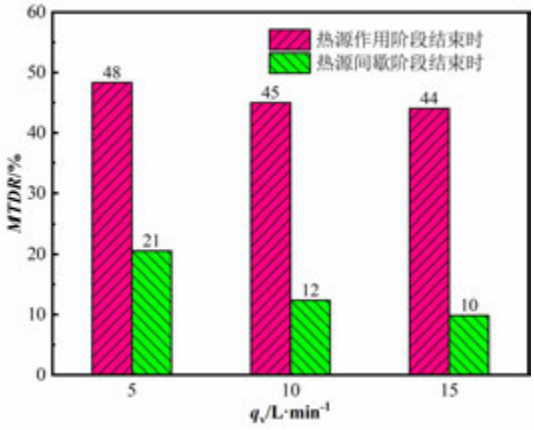


图 4 不同流量下套筒散热结构最大温差比

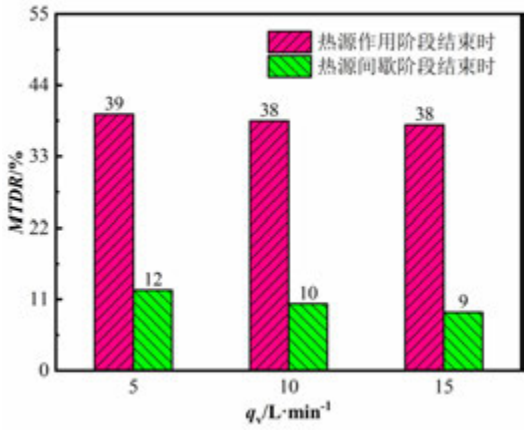


图 5 不同流量下射流散热结构最大温差比

4 结　论

本文提出了电子束收集极射流散热结构，并针对该结构开展了数值模拟，获得如下结论：

1）随着流量的增加，收集极温度和水温都会下降，分别降低 4%和 7%。由于收集极处热量不变，因此流量对水温的影响大于对收集极温度的影响。

2）同工况条件下，由于射流散热强化了收集极高温区域的换热，因此射流散热结构最大温差比较低，温度均匀性提高。比较不同热源作用阶段，由于热源间歇阶段收集极高温区域向低温区域传递热量，因此该阶段结束时最大温差比显著低于热源作用阶段结束时。

参考文献

[1] Qian Baoliang. The Research Status and Developing Tendency of High-Power Microwave Technology in Foreign Countries. Vacuum Electronics, 2015, 2: 2—7

[2] Wang Yuwei, Chen Dongqun, Zhang Jiande, et al. A compact pulsed power driving source for wideband high power microwave radiation. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2016, 14(2): 224—228

[3] Pan Yao, Liu Xin. Heat transfer and flow characteristics of heat sink in high power microwave devices. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2019, 17(4): 661—665

[4] Tan Nongchao, Wu Ping, Sun Jun, et al. Experimental study on the influence of thermal accumulation on breakdown in slow-wave structures. Physics of Plasmas 30, 033106

[5] 吴瑶．相对论速调管收集极的散热技术研究: [硕士论文]. 四川: 电子科技大学, 2016
WU Yao. Research on Heat Dissipation Technology of the Collector of Relativistic Klystron Amplifier: [Ma. Thesis]. Sichuan: University of Electronic Science and Technology of China, 2016

[6] 沈亚萍. 大功率回旋行波管收集极与高频结构热分析: [硕士论文]. 四川: 电子科技大学, 2019
SHEN Yapin. Thermal-hydraulic Analysis and Design of Collector and High Frequency Structure of High-Power Gyro-TWT: [Ma. Thesis]. Sichuan: University of Electronic Science and Technology of China, 2019

[7] Lei Lei, Zhou Yu, Gao Dongpin, et al. Design of high efficiency forced air cooling heat dissipation system for collector of high-power klystron. High Power Laser and Particle Beams, 2022, 34(6): 063001

[8] Xiong Neng, Xu Wangju, Guo Shidou, et al. Design and thermal analysis of the collector for high power gyrotron. Research and Exploration in Laboratory, 2021, 40(3): 129—132

[9] Dong Lining, Wang Jiang, Chen Gang, et al. Thermal analysis of thin-wall metal under high-power short-pulsed heating. High Power Laser and Particle Beams, 2015, 27: 15—20

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233241

基于CFD的烧结点火炉烧嘴参数优化研究

黄正宗，吴霞，刘柳，周萍，闫红杰
（中南大学 能源科学与工程学院，湖南 长沙 410083）
(Tel: 15111249166，Email: l.liu@csu.edu.cn)

摘要： 为了探究铅锌冶炼工艺中烧结点火炉烧嘴参数对点火过程的影响规律，本文以烧结点火炉为研究对象，基于点火烧嘴倾斜角与间距，主烧嘴空气通流面积与排列方式等烧嘴参数进行了优化模拟研究。研究结果表明：扩大点火烧嘴倾斜角可改善点火质量，但倾斜角过大会造成点火段温度分布不均；缩短点火烧嘴间距会导致点火段平均温度下降，但有利于改善其温度均匀性；增大主烧嘴空气通流面积，采用“6+7”或“7+7”的排列方式均可提高点火质量。

关键词： 烧结点火炉；烧嘴；参数优化；数值模拟；温度均匀系数

0 前言

随着全球市场对锌金属需求的不断增加和高品位含锌矿产资源的逐渐枯竭，利用成分复杂的含锌矿产资源来提取高纯度锌金属已成为铅锌冶炼领域的发展趋势[1]。密闭鼓风炉铅锌冶炼ISP工艺(Imperial Smelting Process, ISP)凭借其复杂矿料包容性强、金属回收率大以及锌产品纯度高等优势已成为铅锌冶炼工业中不可或缺的冶炼工艺之一[2-3]。

作为ISP工艺的关键设备，烧结点火炉的主要功能是利用天然气将点火料层点燃，以此保障后续烧结工艺的顺利进行。在点火炉内，烧嘴的火焰射流用于点燃表层物料，继而通过负压抽风来引燃深层物料，点火料层中合格的点火温度与深度是点火质量的保证[4-5]。然而，由于点火炉自身结构的封闭性和炉内气体流动传热行为的复杂性，点火炉的实际生产操作大多依赖于经验方法，往往难以实现预期的点火效果。导致点火炉热利用率低，生产能耗高。因此，针对烧结点火炉的工艺参数进行优化研究，对降低烧结点火能耗、提高烧结产量和质量具有重要实际意义。

随着计算机技术的快速发展，计算流体力学方法(Computational Fluid Dynamics, CFD)已成为研究冶金炉窑内复杂行为的重要技术手段之一[6]。相比于实验手段成本高、周期长和获取信息少的劣势，CFD方法能够获得点火炉内多物理场耦合的三维信息，实现对烧结点火过程的全面模拟与预测[7-8]。目前，烧结点火工艺广泛应用于钢铁冶金领域中[9-11]，在有色金属领域中的相关研究较少。林恩玉与王浩[12]针对红土镍矿烧结点火炉中引入回热风管所带来的燃气燃烧不充分、耗气量大和热利用率低等问题，通过采用多排交叉布置的高性能燃气烧嘴进行炉况优化，有效提高了烧结矿质量并降低了能耗。刘程宏和刘晓青[13-14]等在烧结点火炉的仿真研究过程中，发现将两排烧嘴相互倾斜与交叉布置，并进一步优化烧嘴位置可在点火料层上形成高温火焰带，有效改善了点火质量。曾

基金项目：国家重点研发计划课题(2022YFC3901605)

平生[15]等模拟研究 ISP 工艺中烧结点火炉内天然气的燃烧传热过程，基于所获得的炉内多物理场三维分布信息，指出主烧嘴与点火烧嘴的运行状态是影响点火质量的关键。然而，ISP 工艺中烧结工序的参数优化研究更多集中在烧结产品的质量优化方面[16-17]，关于点火炉的参数优化研究则较少，尤其是主烧嘴与点火烧嘴的工艺参数，获悉二者的相互影响规律与最优参数优化方案是改善点火质量、降低点火能耗的重要挑战。

基于前期关于烧结点火炉的仿真研究成果[15]，本文采用 Fluent 软件，通过构建烧结点火炉的物理数学模型，考虑点火料层多孔介质中气固反应热的影响，进一步针对炉内点火过程进行参数优化研究。基于点火烧嘴的倾斜角与同侧间距，以及主烧嘴的空气出口通流面积与排列方式等烧嘴参数对炉况的影响规律，获得烧嘴参数的最佳优化方案，为 ISP 工艺中烧结点火工序提供理论指导意义和创造实际经济价值。

1 物理模型与网格划分

本文基于某企业带式点火炉按 1:1 构建烧结点火炉的物理模型，如图 1 所示。点火炉由主烧嘴、点火烧嘴、燃烧室以及点火料层等部分组成，燃烧室长 2460 mm，宽 2400 mm，高 920 mm。炉膛顶部布置有东西两排主烧嘴，共 12 只；南北侧墙布置有点火烧嘴，共 4 只。燃烧室中部的台车拦板与炉墙之间存在间隙，为考虑漏风对炉况的影响，在模拟过程中定义为漏风口，漏风口高度为 20 mm。台车自西向东运动，台车上方铺了一层点火物料，料层厚 40 mm。

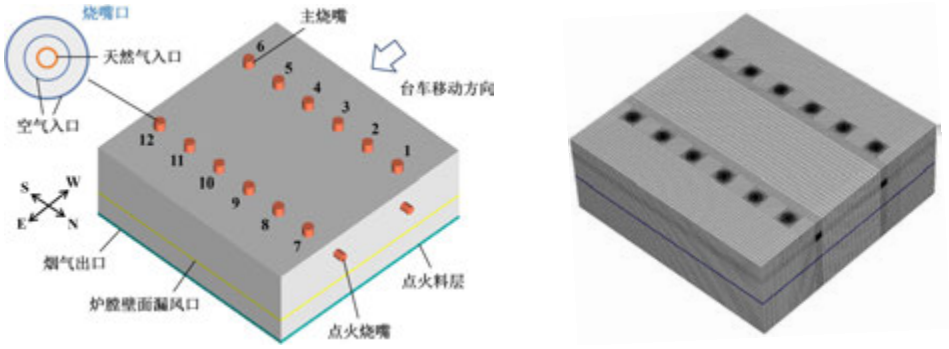


图 1 烧结点火炉几何结构及其网格划分[15]

Fig. 1 Geometric structure and meshing of the sintering ignition furnace [15]

针对所构建的烧结点火炉几何模型进行网格划分，为保证网格质量，采用高比例结构化网格的混合网格，网格模型如图 1 所示。为在不牺牲计算精度的条件下降低网格数量，针对点火炉进行网格无关性检验。图 2 为不同数量网格时点火料层的平均温度对比图，由图可知，基于 143 万网格工况的料层温度，53 万、83 万和 113 万网格时点火料层平均温度的相对误差分别为 9.43%、5.31%和 2.14%。因此，为保证仿真结果准确性，本文选取 113 万网格模型用于后续参数优化研究。

2 数学模型与模型验证

2.1 基本假设与简化

（1）由于烧结点火炉处于连续生产状态，炉况保持稳定，并且台车的移动速度相对于炉内气体流速小了近两个数量级，因此本文假设点火料层静止，并采用稳态计算；

（2）在高温烟气与点火物料复杂的换热行为之中，对流换热占据主导地位，为简

化点火物料区域内的换热行为，本文仅考虑对流换热；

（3）为简化点火过程中点火物料的化学行为，本文忽略点火物料的组分生成、消耗与扩散，仅考虑以下两个主要化学反应所带来反应热的影响，即

$$2ZnS + 3O_2 = 2ZnO + 2SO_2 \quad \triangle H = -455.45\ kJ/mol \tag{1}$$

$$2PbS + 3O_2 = 2PbO + 2SO_2 \quad \triangle H = -388.99\ kJ/mol \tag{2}$$

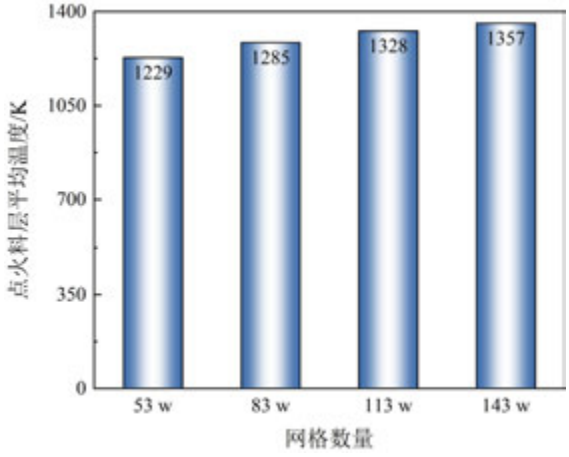


图 2 不同数量网格工况中点火料层的平均温度分布

Fig. 2 Average temperature of the ignition material under different number of grids

2.2 数学模型

2.2.1 基本控制方程

烧结点火炉内天然气燃烧传热过程的基本控制方程为：

（1）连续性方程

$$\nabla \cdot \left(\rho_f \mathbf{u} \right) = 0 \tag{3}$$

式中，ρ_f 为气体的密度，kg/m^3；$\mathbf{u}$ 为气体的速度矢量，m/s。

（2）动量方程

$$\nabla \cdot \left(\rho_f \mathbf{uu} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot \xi + \rho_f \mathbf{g} + \mathbf{S}_s \tag{4}$$

式中，P 为静压，Pa；$\mathbf{g}$ 为重力加速度，m/s^2；$\mathbf{S}_s$ 为考虑多孔介质的附加源项；ξ 为单位应力张量，可由式(5)求解

$$\xi = \mu_{eff} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \bar{I} (\nabla \cdot \mathbf{u})] \tag{5}$$

式中，$\bar{I}$ 为单位应力张量；μ_{eff} 为有效动力粘度，$Pa \cdot s$，由下式计算

$$\mu_{eff} = \mu_L + \mu_T \tag{6}$$

式中，μ_L 为分子粘度，$Pa \cdot s$；μ_T 为湍流粘度，$Pa \cdot s$。

本文将烧结点火炉内的点火料层视为多孔介质，通过添加附加源项 $\mathbf{S}_s$ 来计算混合气

体在多孔介质区域内受到的流动阻力，即

$$\mathbf{S_i} = \frac{\mu_L}{\alpha}\mathbf{u_i} + \frac{1}{2}C_s\rho_f|\mathbf{u}|\mathbf{u_i} \tag{7}$$

式中，等式右侧两项分别为粘性损失项与惯性损失项，多孔介质区域视为层流，不考虑湍流粘度；α 为多孔介质的渗透率；C_s 为惯性阻力系数，由下式计算

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{150}{D_s^2}\frac{(1-\gamma)^2}{\gamma^3} \tag{8}$$

$$C_s = \frac{1.75(1-\gamma)}{D_s\gamma^3} \tag{9}$$

式中，D_s 为多孔介质固体骨架材料的平均粒径，m；γ 为孔隙率。

（4）能量方程

$$\nabla\cdot\left(\mathbf{u}\left(\rho_f E_f + P\right)\right) = \nabla\cdot\left[k_{eff}\nabla T - \left(\sum_i h_i\mathbf{J}_i\right) + \left(\xi\cdot\mathbf{u}\right)\right] + S_{rad}^h + S_s^h \tag{10}$$

式中，T 为流体温度，K；h_i 为组分 i 的焓，J/kg；S_{rad}^h 表示流体辐射换热而产生的能量源项，$\mathrm{W/m^3}$；S_s^h 表示多孔介质区域内额外的能量源项，本文中考虑为点火料层的化学反应热，$\mathrm{W/m^3}$；E_f 为流体总焓，包含了气体燃烧的化学反应热，J/kg，由下式可得

$$E_f = \sum_i Y_i h_i - \frac{P}{\rho_f} + \frac{u^2}{2} \tag{11}$$

式中，Y_i 为混合气体中组分 i 的质量分数。式(10)中，k_{eff} 表示有效热导率，在流体区域仅表示为流体热导率 k_f，由流体导热系数与湍流导热系数组成；在多孔介质区域是流体热导率 k_f 与多孔介质热导率 k_s 的函数，即

$$k_{eff} = \gamma k_f + (1-\gamma)k_s \tag{12}$$

式(10)中 $\mathbf{J}_i$ 表示组分 i 的扩散通量，由式(13)计算

$$\mathbf{J_i} = -\rho_f D_i\nabla Y_i \tag{13}$$

式中，D_i 为组分 i 的扩散系数，$\mathrm{m^2/s}$。

（5）组分输运方程

$$\nabla\cdot\left(\rho_f\mathbf{u}Y_i\right) = -\nabla\cdot\mathbf{J}_i + R_i \tag{14}$$

式中，R_i 为组分 i 的生成或消耗速率，$\mathrm{kg/(m^3\cdot s)}$。

2.2.2 湍流模型

烧结点火炉内气体湍流流动行为采用 Realizable k-ε湍流模型描述[18]，k 方程与ε方程如下所示：

$$\nabla\cdot(\rho_f k\mathbf{u})=\nabla\cdot\left[\left(\mu_L+\frac{\mu_T}{\sigma_k}\right)\nabla k\right]+G_k+G_b-\rho_f\varepsilon \tag{15}$$

$$\nabla\cdot(\rho_f\varepsilon\mathbf{u})=\nabla\cdot\left[\left(\mu_L+\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon}\right)\nabla\varepsilon\right]+\rho_f C_1 S_\varepsilon-\rho_f C_2\frac{\varepsilon^2}{k+\sqrt{v\varepsilon}}+C_3\frac{\varepsilon}{k}G_b+S_\varepsilon \tag{16}$$

式中，k 为湍动能，J/kg；ε为湍流耗散率；G_k 和 G_b 分别表示由平均速度梯度与浮力引起的湍动能，J/kg；S_ε 为源项；C_1，C_2 和 C_3 均为模型常数。

在 Realizable k-ε湍流模型中，湍流粘度 μ_T 可由式(17)得到

$$\mu_T=\rho_f C_\mu\frac{k^2}{\varepsilon} \tag{17}$$

式中，C_μ 不再是模型常数，而是湍动能 k 与湍流耗散率ε的函数

$$C_\mu=\frac{1}{A_0+A_s\cdot k\sqrt{S_{ij}S_{ij}+\overline{\Omega}_{ij}\overline{\Omega}_{ij}}\Big/\varepsilon} \tag{18}$$

式中，A_0 和 A_s 均为模型常数。

2.2.3 化学反应速率模型

针对烧结点火炉内天然气的燃烧行为，本文采用甲烷的两步化学反应机理模型，对应的化学反应方程式为

$$\mathrm{CH_4}+\frac{3}{2}\mathrm{O_2}=\mathrm{CO}+2\mathrm{H_2O} \tag{19}$$

$$\mathrm{CO}+\frac{1}{2}\mathrm{O_2}=\mathrm{CO_2} \tag{20}$$

在天然气的燃烧过程中，各个化学组分 i 的生成或消耗速率可通过涡耗散模型计算，其化学反应速率由天然气与空气的湍流混合程度决定，与温度无关。因此，在化学反应 G 中，反应物 p 的化学反应速率可视为式(21)与式(22)之间的较小值，即

$$R_{p,G}=v'_{p,G}M_{w,p}A\rho\frac{\varepsilon}{k}\min_e\left(\frac{Y_e}{v'_{e,G}M_{w,e}}\right) \tag{21}$$

$$R_{p,G}=v'_{p,G}M_{w,p}AB\rho\frac{\varepsilon}{k}\frac{\sum_q Y_q}{\sum_q^N v''_{q,G}M_{w,q}} \tag{22}$$

式中，$v'_{p,G}$ 与 $v''_{q,G}$ 分别为反应 G 中反应物 p 与生成物 q 的化学计量系数；$M_{w,p}$ 与 $M_{w,q}$ 分别为反应物 p 与生成物 q 的相对分子质量；下标 p 和 q 分别为反应物与生成物组分，下标 e 为生成物中的任意组分；模型常数 $A=4.0$，$B=0.5$。

2.2.4 辐射换热模型

在实际生产过程中，烧结点火炉的炉膛温度高达 1000℃以上，炉内高温烟气的辐射换热占据主导地位，本文采用离散坐标辐射模型(Discrete Ordinates Radiation Model, DO)来描述其辐射换热过程，则高温烟气在位置 **r** 处、沿着 **s** 方向上的辐射传递方程为

$$\nabla\cdot\left[I\left(\mathbf{r},\mathbf{s}\right)\mathbf{s}\right]+\left(a+\sigma_s\right)I\left(\mathbf{r},\mathbf{s}\right)=an^2\frac{\sigma T^4}{\pi}+\frac{\sigma_s}{4\pi}\int_0^{4\pi}I\left(\mathbf{r},\mathbf{s}'\right)\Phi\left(\mathbf{s}',\mathbf{s}\right)d\Omega' \tag{23}$$

式中，**r** 为位置向量；**s** 为方向向量；**s'** 为散射向量；a、n 与 σ_s 分别为吸收系数、折射系数与散射系数；σ 为斯蒂芬-玻尔兹曼常数，取 $\sigma=5.672\times10^{-8}\ \mathrm{W}/\left(\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{K}^4\right)$；$I$ 为辐射强度，W/m^2；Φ 为相位函数；Ω' 为空间立体角，sr。

高温烟气的辐射换热量 S_{rad}^h 可由式(23)中在位置 **r** 处、方向 **s** 上的辐射强度 $I\left(\mathbf{r},\mathbf{s}\right)$ 针对全空间进行积分得到，即

$$S_{rad}^h=-\int_0^{4\pi}\left[\nabla\cdot I\left(\mathbf{r},\mathbf{s}\right)\mathbf{s}\right]d\Omega \tag{24}$$

2.3 边界条件

根据烧结点火炉的实际生产条件，可定义点火炉的边界条件。

（1）入口边界

烧嘴的天然气与空气入口均定义为速度入口，空气总流量为 1200 m^3/h，空气入口温度为 30℃；天然气总流量为 190 m^3/h，天然气入口温度为 20℃。主烧嘴与点火烧嘴的气体入口速度则是根据气体管道系统来统一分配。

基于天然气的气质分析报告，天然气中含有包括 CH_4 在内的多种烷烃成分，为简化仿真计算，将除 CH_4 以外的烷烃成分通过热值等效为 CH_4，则简化后的天然气成分为 99.26%的 CH_4 和 0.74%的 N_2。入炉空气的成分为 21%的 O_2 和 79%的 N_2。此外，点火炉内多种组分构成的混合气体的吸收系数采用灰气体加权平均模型进行求解[19]。

（2）出口边界

燃烧室底面的烟气出口定义为压力出口，出口压力为 -800 Pa。

（3）壁面边界

烧结点火炉燃烧室的壁面均定义为速度无滑移边界与定热流边界，视为均匀散热。

2.4 模型验证

本文针对 Charles[20]实验室尺度的甲烷燃烧器进行仿真计算，通过比较模拟结果与实验测量值的差异性来验证数值模拟的准确性。图 3 为甲烷燃烧器的结构示意图，由图可知，燃烧器入口为双圆柱形结构，入口长度为 200 mm，甲烷与空气在流经入口段后进入燃烧室混合燃烧。内圆为甲烷入口，内径 R_1=31.57 mm，速度 V_1=0.9287 m/s，温度 T_1=300 K；内圆甲烷入口壁厚 0.18 mm，即内圆外径 R_2=31.75 mm；外环为预热空气入口，内径 R_3=46.85 mm，速度 V_2=20.63 m/s，温度 T_2=750 K；燃烧室仍为圆柱形结构，内径 R_4=61.15 mm，长 400 mm，内壁面温度恒定为 500 K。

针对甲烷燃烧器进行网格划分，经网格无关性检验后，网格数量为 32.5 万。结合本文所构建的数学模型以及相关的边界条件，针对甲烷燃烧器内气体燃烧过程进行仿真计

算。以燃烧室入口截面的中心点为坐标原点，定义气流运动方向为 X 方向，提取 X/R_3=4.52 截面中径向气体平均温度的模拟结果，并结合对应的实验测量值绘制成图 4。由图可知，本文的模拟结果与实验测量值的分布趋势基本相同，吻合较好。此外，该模拟结果与实验值的最大相对误差为 16.7%，相比于龙文增[21]的 16.2%以及周瑜[22]的 15.8%，模拟结果较为接近。因此，基本可认为本文所构建的物理数学模型能够较好地预测甲烷的燃烧传热行为，可开展后续的研究工作。

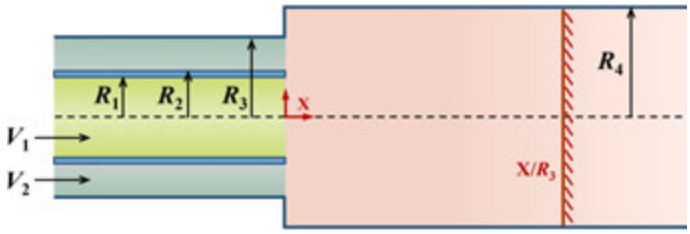


图 3 实验室尺度的甲烷燃烧室结构示意图

Fig. 3 Schematic diagram of the laboratory-scale methane combustion chamber

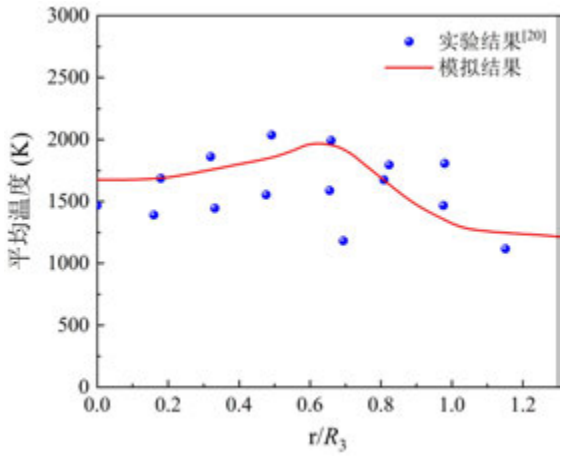


图 4 甲烷燃烧器燃烧室 X/R_3=4.52 截面上径向气体平均温度分布

Fig. 4 The radial average temperature distribution of gas on the section of X/R_3 =4.52 in the combustion chamber of the methane burner

3 特征截面与评价指标

3.1 特征截面

为了便于分析点火炉内混合气体的燃烧与流动情况，定义相关特征截面如图 5 所示。由图可知，沿着台车的运动方向，在 XOY 平面上取 4 个特征截面，即 2 个主烧嘴中心截面：西侧主烧嘴中心截面 l_1 与东侧主烧嘴中心截面 l_2；2 个点火烧嘴中心截面：西侧点火烧嘴中心截面 l_3 与东侧点火烧嘴中心截面 l_4。在 XOZ 平面上取 2 个特征截面，即点火烧嘴中心截面 a_1 与点火物料上表面 a_2。

点火料层上表面的温度分布反映了主烧嘴对物料的点火情况，也与物料内部的着火情况紧密相关。因此，为了进一步分析点火料层上表面的温度分布规律，尤其是与主烧嘴相对应的料面区域，本文针对点火物料上表面(Y=0.04 m)进行不同特征区域的划分，

并定义点火段与主烧嘴料面区域，如图 6 所示。

（1）点火段区域：基于东西排主烧嘴中心点所对应的点火料层上表面的两条基准线，向炉膛中心延伸 0.3 m，向东西侧墙延伸 0.2 m，定义该区域为东西侧主烧嘴所对应的点火段区域，即图 6 中东西两排主烧嘴对应的蓝色带状区域。

（2）主烧嘴料面区域：点火段区域内，沿 X 方向每隔 0.4 m 定义一个主烧嘴料面区域，每个主烧嘴均对应一个料面区域，图 6 中红色区域即为 2 号主烧嘴料面区域。

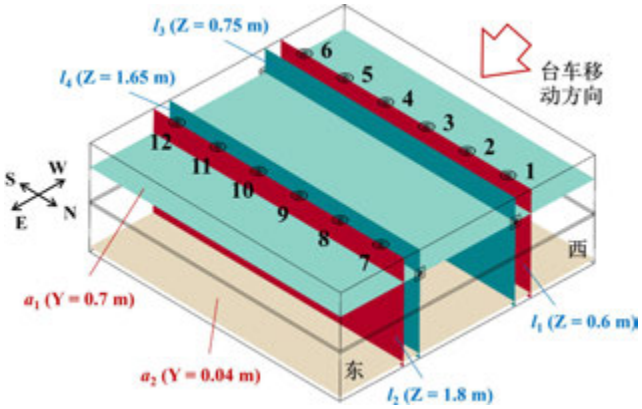


图 5 烧结点火炉特征截面结构示意图

Fig. 5 Schematic diagram of the characteristic sections of the sintering ignition furnace

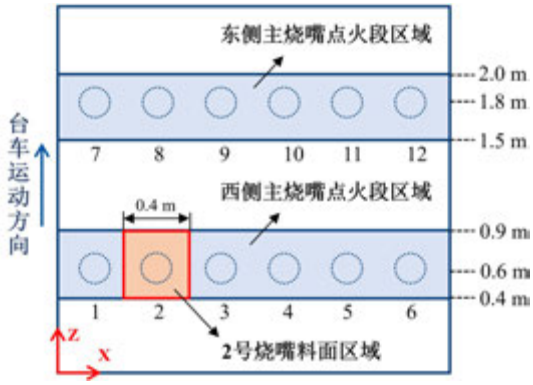


图 6 点火料面特征区域结构划分示意图[15]

Fig. 6 Schematic diagram of the structural division of the characteristic ignition material surface area [15]

3.2 评价指标

在实际烧结点火过程中，点火炉的点火质量与料层的着火息息相关，而料层的着火主要发生在主烧嘴对应的点火段区域。因此，为了评估不同烧嘴参数对点火炉点火质量的影响，本文引入点火段平均温度与点火段温度均匀系数作为评价指标。

（1）点火段平均温度

点火段区域平均温度的高低直接决定了点火物料能否被点燃，对于铅锌烧结点火炉而言，工业要求的点火温度需满足 1223 K ≤ T_d ≤ 1673 K，温度太低将无法点燃物料，温度过高将造成料层熔穿，均对后续烧结工序不利。因此，在该点火温度区间内点火段区域的料面温度越高越有利于表层料的着火。料面的平均温度可由下式计算

$$\overline{T}=\frac{1}{A}\sum_{k=1}^{n}T_kA_k \tag{25}$$

式中，$\overline{T}$ 为点火段区域的料面平均温度，K；A 表示点火段区域的料面总面积，m^2；下标 k 表示点火段区域内第 k 个网格面。

（2）点火段温度均匀系数

温度均匀系数 CV 是温度标准偏差与其平均值的比值，该物理量能够反映单位均值上的离散程度。点火段温度均匀系数即可反映点火段区域的温度分布均匀性，CV 越小，料面温度的分散程度越小，料面着火越均匀；CV 越大，料面的温度分布越不均匀，点火质量越差。针对点火段区域，温度均匀系数由式(26)计算。

$$CV=\frac{\sigma_T}{\overline{T}} \tag{26}$$

$$\sigma_T=\sqrt{\frac{\sum_{n=1}^{n}\left(T_k-\overline{T}\right)^2}{n-1}} \tag{27}$$

式中，CV 与 σ_T 分别为料面点火段区域的温度均匀系数和温度标准偏差。

4 结果与讨论

4.1 点火烧嘴参数优化

4.1.1 倾斜角

点火烧嘴的倾斜角示意图如图 7 所示。由于烧结点火炉结构紧凑，倾斜角过大不仅会提高安装难度，还可能导致气流直接冲刷料面，影响点火效果。因此，本文结合实际生产因素，选取以下四种倾斜角度进行研究：$\theta=10°$、15°、20°和 25°。

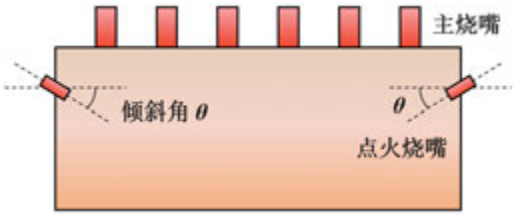


图 7 烧结点火炉点火烧嘴倾斜角结构示意图

Fig. 7 Schematic diagram of the inclination angle for ignition burners in a sintering ignition furnace

图 8 为点火烧嘴不同倾斜角条件下特征截面 l_3 的速度矢量分布图。由图可知，随着倾斜角的增大，点火烧嘴的气流撞击面在竖直方向上下移，并且在气体射流的上方存在明显的回旋区域。随着烧嘴附近区域与回旋区域之间气体强烈的动量交换，回旋区所卷吸的高温烟气能够保证烧嘴出口温度尽快达到着火点，有利于维持燃烧的稳定。当$\theta=25°$时，点火烧嘴的气体射流不再形成撞击面，而是直接冲刷点火料面。

图 9 和图 10 分别为点火烧嘴不同倾斜角条件下特征截面 l_1 与 l_3 的温度分布云图。由图 9 可知，不同倾斜角时主烧嘴的火焰射流基本均能够垂直到达点火料面，并且随着

倾斜角的增大，火焰刚性逐渐增强，火焰倾斜变形的情况得到改善。在图 10 中，点火烧嘴的火焰高温区随着倾斜角的增大逐渐下移，当θ达到 25°时，火焰射流直接冲刷点火料面，极易造成料层热量过剩，导致料层熔穿。此外，主烧嘴与点火烧嘴的火焰射流在点火料面附近相遇并形成了连续高温燃烧带，可为料层的均匀着火提供有利条件。

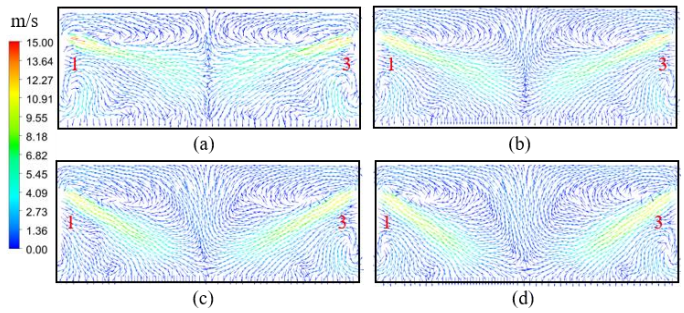


图 8 点火烧嘴不同倾斜角时特征截面 l_3 的速度矢量图

Fig. 8 Velocity vector diagrams of characteristic section l3 under different ignition burner inclination angles

(a) $\theta = 10°$；(b) $\theta = 15°$；(c) $\theta = 20°$；(d) $\theta = 25°$

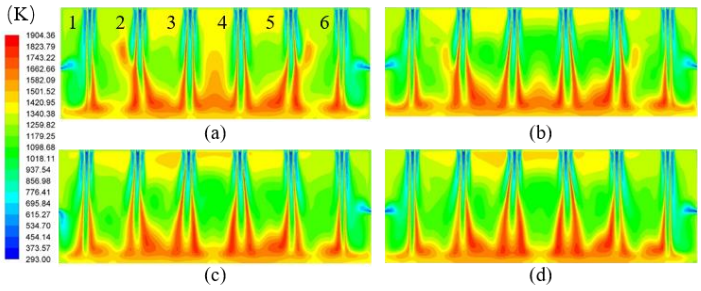


图 9 点火烧嘴不同倾斜角时主烧嘴特征截面 l_1 的温度分布云图

Fig. 9 Temperature distribution maps of the characteristic section l_1 of main burners under different ignition burner inclination angles

(a) $\theta = 10°$；(b) $\theta = 15°$；(c) $\theta = 20°$；(d) $\theta = 25°$

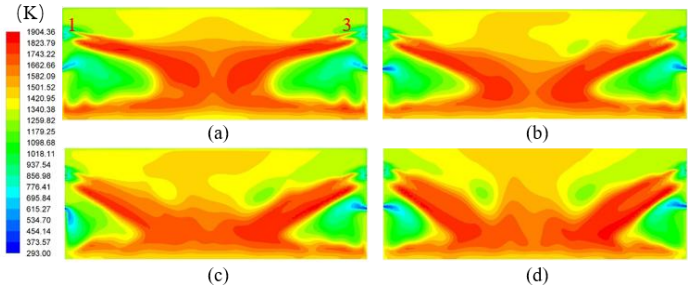


图 10 点火烧嘴不同倾斜角时点火烧嘴特征截面 l_3 的温度分布云图

Fig. 10 Temperature distribution maps of the characteristic section l_3 of ignition burners under different ignition burner inclination angles

(a) $\theta = 10°$；(b) $\theta = 15°$；(c) $\theta = 20°$；(d) $\theta = 25°$

在烧结机点火炉中，高温点火段区域的存在是点火料面着火的重要基础。由图 11

中点火料面上点火段区域的平均温度变化曲线可知，料面点火段的平均温度随点火烧嘴倾斜角的增大而增大，这主要是点火烧嘴火焰射流下移强化了高温烟气与点火料层热交换的缘故。此外，当倾斜角从 20°增加至 25°时，点火段的平均温度相对于其他区间显著提升，这是由于点火烧嘴的火焰射流直接冲刷料面，虽然较高的温度能够促进料层的着火，但过高的温度极易导致料层发生过熔现象，对后续烧结工序不利。

由图 11 中点火段区域的温度均匀系数变化曲线可知，点火段的 *CV* 随着点火烧嘴倾斜角的增大表现出先减小后增大的变化趋势，并且在$\theta = 15°$时达到最小值，这表明随着倾斜角的增大，点火段区域的温度均匀性逐渐提高，但过大的倾斜角又会导致其温度均匀性恶化，这主要归因于过大的倾斜角会导致点火烧嘴的火焰射流直接冲刷料面，造成点火段中部区域的温度快速提高，从而恶化点火段的温度均匀性。此外，由图 10 中$\theta = 0°$时的定性分析可知，倾斜点火烧嘴便可改善料面点火质量。结合上述的定性与定量分析，料面的点火质量在$\theta = 20°$时表现最佳。

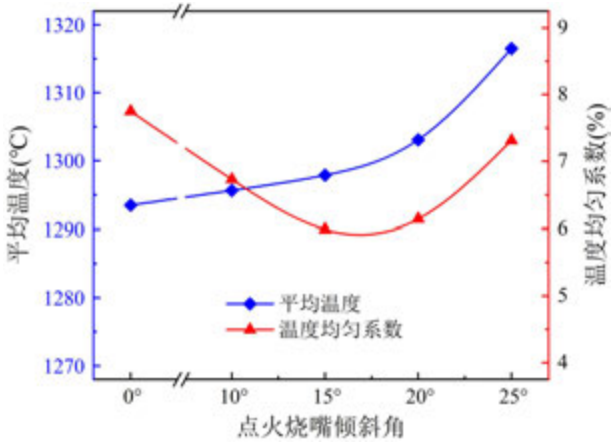


图 11 点火料面上点火段区域的平均温度与温度均匀系数随点火烧嘴倾斜角的变化曲线

Fig. 11 Variation curves of the average temperature and temperature uniformity coefficient of the ignition section on the ignition material surface with the ignition burner inclination angle

4.1.2 间距

图 12 为点火烧嘴间距的结构示意图，同侧主烧嘴与点火烧嘴的水平间距仅有 150 mm，二者的气体射流会互相影响，从而干扰料层点火。因此，本文针对点火烧嘴的间距进行优化研究，选取 $D = 500$ mm、600 mm、700 mm 和 800 mm 四种间距进行研究。

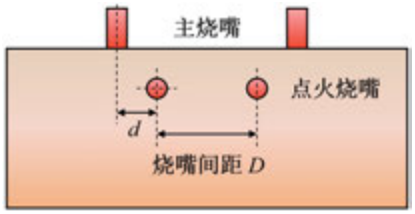


图 12 烧结点火炉点火烧嘴间距结构示意图

Fig. 12 Schematic diagram of the distance between ignition burners for the sintering ignition furnace

由图 12 可知，点火烧嘴的间距 *D* 越大，同侧主烧嘴与点火烧嘴的间距 *d* 越小，二

者的气体射流相互干扰就越强烈。图 13 为点火烧嘴不同间距时主烧嘴特征截面 l_1 的速度矢量分布云图。由图可知，随着间距的减小，主烧嘴与点火烧嘴气体射流之间的相互影响逐渐减弱，气体射流的刚性逐渐增强。当间距减小至 500 mm ~ 600 mm 时，主烧嘴的气体射流可保持垂直向下的运动方向，倾斜偏转的现象基本消失，有利于料层着火。

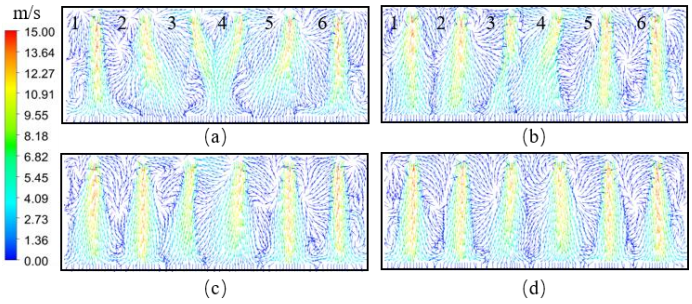


图 13 点火烧嘴不同间距时主烧嘴特征截面 l_1 的速度矢量图

Fig. 13 Velocity vector diagrams of the characteristic section l_1 for main burners at different distances between ignition burners

(a) D = 800 mm；(b) D = 700 mm；(c) D = 600 mm；(d) D = 500 mm

图 14 为点火料面上点火段区域的平均温度与温度均匀系数随点火烧嘴间距的变化曲线。由图可知，缩短点火烧嘴的间距会降低料面点火段的平均温度，这是由于点火烧嘴的射流火焰随着间距的减小而逐渐远离主烧嘴的射流火焰，二者之间的换热效果减弱，点火烧嘴火焰较多的热量用于干燥与加热两条点火段区域之间的料面，这导致原本用于传递给料面点火段的热量减少，从而造成料面点火段的平均温度降低。相对于 900 mm 的间距，500 mm 间距时点火段平均温度下降近 20℃，对料层着火十分不利。

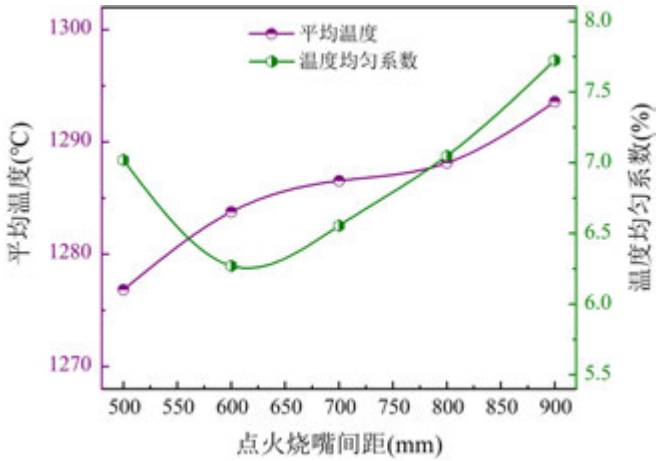


图 14 点火料面上点火段区域的平均温度与温度均匀系数随点火烧嘴间距的变化曲线

Fig. 14 Variation curves of the average temperature and temperature uniformity coefficient of the ignition section on the ignition material surface with distance between ignition burners

此外，由图 14 中点火段的 CV 变化可知，缩短点火烧嘴间距能够提高点火段的温度均匀性，而过小的间距又会导致其温度均匀性下降。当点火烧嘴间距减小时，主烧嘴与

点火烧嘴火焰射流之间的相互作用削弱，主烧嘴的高温火焰能够垂直到达料面，并在点火段形成连续的高温燃烧带，温度均匀性较好。然而，当间距下降至 500 mm 时，点火烧嘴火焰传递给点火段的热量下降，点火段边缘区域的料面供热不足，对点火段的温度均匀性产生了负面影响。结合图 13 与图 14 可知，当 D = 600 mm 时，点火质量最佳。

4.2 主烧嘴参数优化

4.2.1 空气通流面积

主烧嘴的通流面积与其气体出口流速紧密相关，过大的气体流速不仅会导致主烧嘴的气体射流冲刷点火料层，从而干扰料层的均匀着火和烧结返粉，还会造成射流火焰过长，使得高温火焰与点火料层的热量传递效率降低，影响点火质量；而较小的气体流速则会导致射流火焰缩短，使其不能较好地加热料层，甚至还会有回火的风险。因此，有必要针对主烧嘴的气体通流面积进行优化研究。主烧嘴中天然气口与空气口通流面积的研究方法基本一致，本文以空气口的通流面积为例，选取 S = 1540 mm^2、1700 mm^2、1860 mm^2 与 2020 mm^2 四种通流面积。

图 15 为不同空气通流面积时点火炉横截面的平均速度在高度方向上的变化曲线。由图可知，随着空气口通流面积的增大，炉膛横截面处的气体流速逐渐减小，延长了气体在炉内的停留时间，可强化炉内气体的混合燃烧。在炉膛高度 0.6 m 以上的区域中，气体的平均流速相对较小，这是由于点火烧嘴的气体射流提高了 0.7 m 以下区域的气体流速(点火烧嘴中心点高 0.7 m，倾斜角为 10°)。此外，在点火料面附近，多孔介质料层增大了流动阻力，这导致气体流速骤减，最终烟气出口的平均流速约为 0.4 m/s。

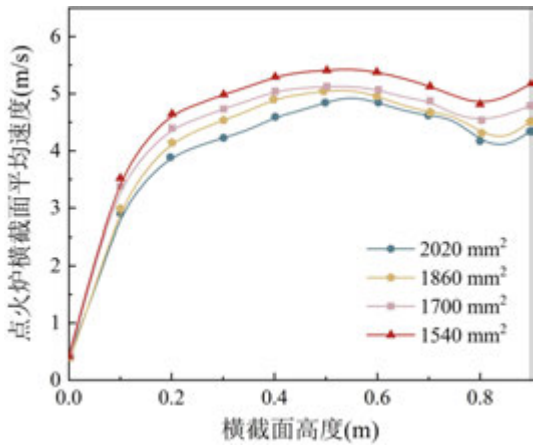


图 15 主烧嘴不同空气通流面积时点火炉横截面的平均速度在高度方向上的变化曲线

Fig. 15 Variation curves for the average velocity of the ignition furnace section in the height direction for different main burner airflow areas

图 16 为不同空气通流面积时特征截面 a_2 的温度分布云图。由图可知，空气出口通流面积对点火段的温度分布影响较大。随着通流面积的增大，炉内气体流速减小，停留时间增大，有利于强化了炉内天然气与空气的混合燃烧，并且主烧嘴的火焰长度得到了有效调节，可进一步提高了高温火焰与点火料层的传热量。因此，可从图 16 中观察到，随着通流面积的增大，点火段区域的高温区面积逐渐增大，有利于料层的着火燃烧。

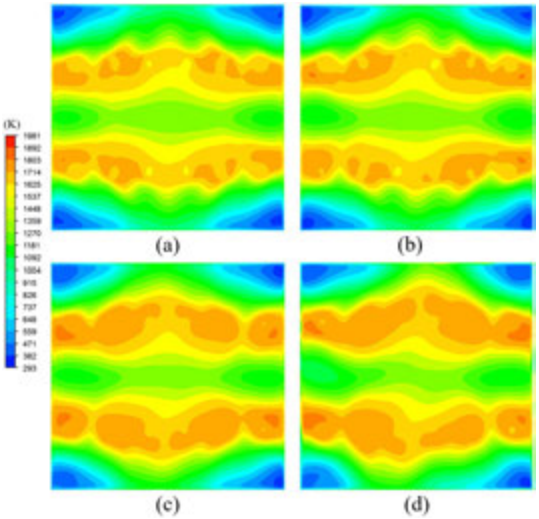


图 16 主烧嘴不同空气通流面积条件下特征截面 a_2 的温度分布云图

Fig. 16 Temperature distribution maps of the characteristic section a_2 for different main burner airflow areas

(a) S = 1540 mm^2; (b) S = 1700 mm^2; (c) S = 1860 mm^2; (d) S = 2020 mm^2

图 17 为点火料面上点火段区域的平均温度与温度均匀系数随主烧嘴空气出口通流面积的变化曲线。观察点火段平均温度的变化曲线可知，该平均温度随着通流面积的增大而增大，但通流面积从 1860 mm^2 增大至 2020 mm^2 时，平均温度稳定在 1305℃左右。由点火段的 CV 变化曲线可知，点火段的 CV 随着通流面积的增大表现出先减小后增大的变化趋势，这表明增大主烧嘴空气出口通流面积有利于提高料面点火段的温度均匀性，这可归功于料面点火段边部区域的温度得到了有效提高，缩小了温差，促进了温度均匀分布。综合点火段的平均温度与 CV 系数可知，S = 1860 mm^2 时，料层着火效果最佳。

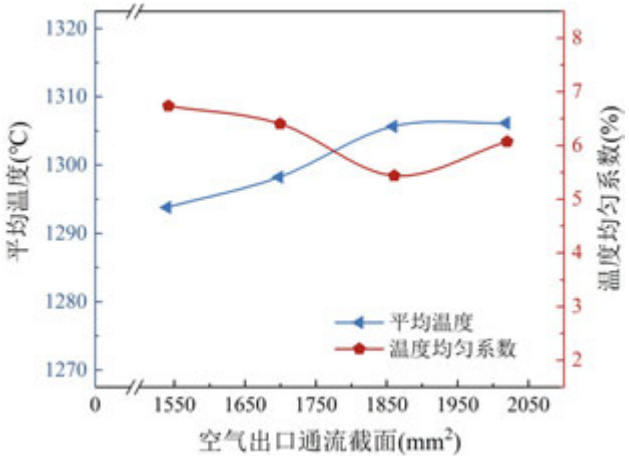


图 17 点火料面上点火段区域的平均温度与温度均匀系数随主烧嘴空气出口通流面积的变化曲线

Fig. 17 Average temperature and temperature uniformity coefficient for the ignition section on the ignition material surface as a function of the main burner air outlet flow area

4.2.2 排列方式

在点火料层点火过程中，主烧嘴料面区域与主烧嘴的排列方式相互对应，主烧嘴的

排列方式对点火段区域的温度分布具有重要影响，主烧嘴排列过密会导致单个烧嘴的流速降低，火焰变短，排列过疏会在点火段区域形成低温区断点，均对料层着火不利。因此，有必要针对主烧嘴的排列方式进行优化研究。

实际生产条件下，点火炉主烧嘴呈现“6+6”的排列方式，间距 400 mm。为了改善点火效果，可采用交错布置方式，即当东排主烧嘴所对应的点火段区域存在低温区断点时，随着台车自西向东移动，交错布置的西排主烧嘴可对该低温区断点进行二次点火，从而加强点火效果。此外，本文采取“7+7”的布置方式来探究主烧嘴间距对点火效果的影响，以增加主烧嘴数量来缩短主烧嘴间距。因此，本文选取的“6+7”的交错布置与“7+7”的均匀布置方式，具体结构如图 18 所示。

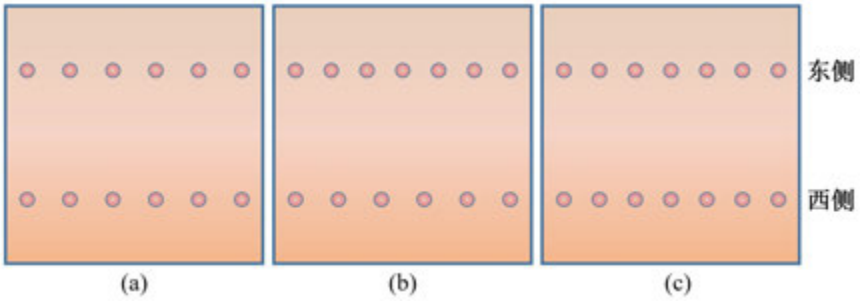


图 18 主烧嘴不同排列方式的结构示意图

Fig. 18 Schematic diagrams of different main burner arrangements

(a) “6+6”均匀排列；(b) “6+7”交错排列；(c) “7+7”均匀排列

(a) “6+6” uniform arrangement; (b) “6+7” staggered arrangement; (c) “7+7” uniform arrangement

图 19 为主烧嘴不同排列方式时特征截面 a_2 的温度分布云图。由图可知，当采用“6+7”交错布置时，东排点火段区域的温度分布得到明显改善，高温区面积增大，而西排点火段的温度分布则有所恶化，高温带变细，并且高温区面积缩小。当主烧嘴采用“7+7”均匀布置时，东西排烧嘴对称，主烧嘴间距减小，点火料面上形成了两条相似的高温点火带，高温区域面积相对于“6+6”均匀排列明显提升，点火段区域中的局部高温点基本消失，表现出更好的温度均匀性，可有效促进料层的均匀着火。

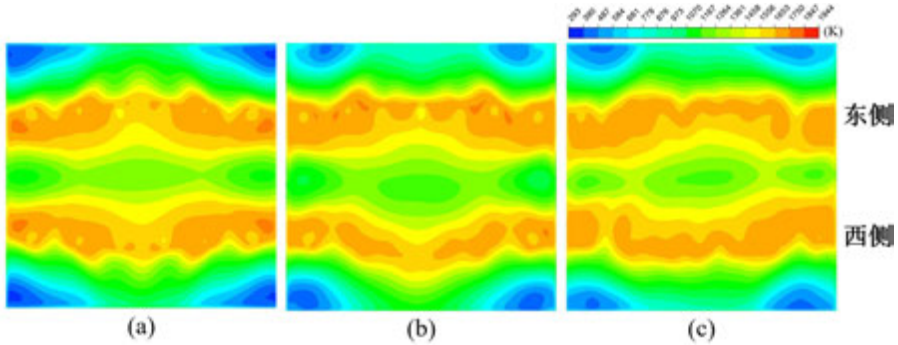


图 19 主烧嘴不同排列方式时特征截面 a_2 的温度分布云图

Fig. 19 Temperature distribution of the characteristic section a_2 when main burners are arranged differently

(a) “6+6”均匀排列；(b) “6+7”交错排列；(c) “7+7”均匀排列

(a) “6+6” uniform arrangement; (b) “6+7” staggered arrangement; (c) “7+7” uniform arrangement

图 20 统计了主烧嘴不同排列方式时点火段区域的平均温度与温度均匀系数模拟值。由图可知，相对于“6+6”的均匀排列，主烧嘴“6+7”交错排列与“7+7”均匀排列不仅能够提升料面点火段区域的平均温度，还可有效改善其温度分布均匀性。除了上述两种主烧嘴排列方式自身的结构优势以外，因主烧嘴个数增加而改变了主烧嘴与点火烧嘴之间的流量分配，减小了两者的速度差，削弱了相互影响程度，并且单个烧嘴流量减小而带来的流速降低，间接调整了火焰长度，也可有效改善料面点火段区域的温度分布。对比“6+7”与“7+7”排列方式，“7+7”的均匀排列表现出更好的点火质量。

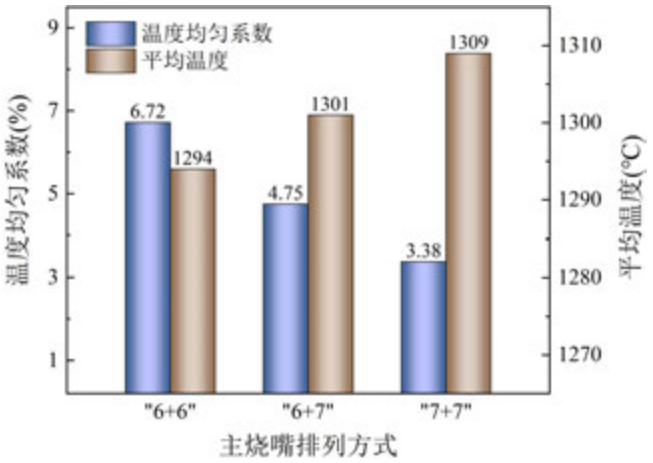


图 20 主烧嘴不同排列方式时料面点火段区域的平均温度与温度均匀系数柱状图

Fig. 20 Histogram of the average temperature and temperature uniformity coefficient of the ignition section of the material surface when main burners are arranged differently

4 结　论

本文以烧结点火炉为研究对象，通过构建数学物理模型，考虑点火料层中气固反应热的影响，针对点火炉点火过程进行了参数优化研究，基于仿真结果获得了点火烧嘴倾斜角与同侧间距、主烧嘴空气出口通流面积与排列方式的优化方案，具体结论如下：

1) 倾斜点火烧嘴可削弱气流撞击面对主烧嘴的影响，加强炉内流场稳定性，改善料层的点火质量。扩大点火烧嘴的倾斜角，可提高点火段区域的平均温度与温度均匀性，但过大的倾斜角会导致温度均匀性恶化，最佳倾斜角为 20°；

2) 缩短点火烧嘴间距可削弱其对主烧嘴射流的影响，有利于改善点火段的温度均匀性，但缩短间距会导致二者火焰传热量降低，使得点火段平均温度下降。过小的间距也会因点火烧嘴对点火段的供热不足而造成温度均匀性恶化。最佳间距为 600 mm；

3) 增大主烧嘴的空气出口通流面积，有利于强化气体在炉内的混合与燃烧，并能够有效调节火焰长度，改善点火段的温度分布，最佳通流面积为 1860 mm^2。主烧嘴“6+7”交错排列与“7+7”均匀排列均可提高点火段的平均温度和改善其温度均匀性，其中“7+7”均匀排列可获得更好的点火质量。

参考文献

[1] CHEN Zhi-Bin, YAN Hong-Jie, ZHOU Ping, et al. Parametric Study of Gas-Liquid Two-Phase Flow

Field in Horizontal Stirred Tank. Trans. Nonferrous. Met. Soc. China, 2021, 31: 1806-1817.

[2] 杜玉晓, 吴　敏, 桂卫华. 面向生产目标的铅锌烧结过程智能集成建模与优化控制技术. 中国有色金属学报, 2004, 14(1): 142-148.
DU Yu-Xiao, WU Min, GUI Wei-Hua. Intelligent Integrated Modelling and Optimization Control Technology of Product-Orient for Lead-Zinc Sintering Process. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2004, 14(1): 142-148.

[3] 曾文波. 烧结点火炉的节能设计及应用. 工业炉, 2017, 39(3): 56-58.
ZENG Wen-Bo. Energy-Saving Design and Application of Sintering Ignition Furnace. Industrial Furnace, 2017, 39(3): 56-58.

[4] 周浩宇, 朱　飞. 低热值燃气烧结点火技术的应用与发展. 工业炉, 2014, 36(1): 9-12.
ZHOU Hao-Yu, ZHU Fei. Application and Development of Sinter Igniting Technology Using Low-Calorific Fuel. Industrial Furnace, 2014, 36(1): 9-12.

[5] 李　谦, 周浩宇, 刘　前. 烧结点火炉工艺参数的寻优与应用. 工业炉, 2019, 41(3): 17-22.
LI Qian, ZHOU Hao-Yu, LIU Qian. Optimization and Application of Technological Parameters of Sintering Ignition Furnace. Industrial Furnace, 2019, 41(3): 17-22.

[6] Mahalle A M, Jajoo B N. An Approach for Modeling and Simulation of Sintered Bronze Foam Sink for High Heat Dissipation. Applied Thermal Engineering, 2013, 51: 899-907.

[7] 李华坤, 刘月建, 郭军伟. 基于烧结杯实验验证烧结矿铁料消耗的实践. 河南冶金, 2017, 25(4): 46-49.
LI Hua-Kun, LIU Yue-Jian, GUO Jun-Wei. Practice of Verifying the Consumption of Sintered Iron Material Based on Sintering Cup Experiment. Henan Metallurgy, 2017, 25(4): 46-49.

[8] XING Jian, SUN Wei-Ming, Rana R S. 3D Modeling and Testing of Transient Temperature in Selective Laser Sintering(SLS) Process. Optik, 2013, 124(4): 301-304.

[9] TAN Peng-Fu, Neuschutz Dieter. Study on Polychlorinated Dibenzo-p-Dioxin/Furan Formation in Iron Ore Sintering Process. Metallurgical and Materials Transactions B. 2004, 35(5): 983-991.

[10] 毛晓明. 微波加热技术在铁矿烧结点火中的应用研究: [博士论文]. 长沙: 中南大学, 2014.
MAO Xiao-Ming. Research on The Application of Microwave Heating Technology in Iron Ore Sintering Ignition: [Ph.D. Thesis]. Changsha: Central South University, 2014.

[11] 周浩宇, 刘　前, 李　谦, 等. 冶金烧结超低负压点火技术及装置的研究与应用. 世界有色金属, 2019(12): 9-11.
ZHOU Hao-Yu, LIU Qian, LI Qian, et al. Research and Application of Ultra-Low Negative Pressure Ignition Technology and Device for Metallurgical Sintering. World Nonferrous Metals, 2019(12): 9-11.

[12] 林恩玉, 王　浩. 双斜式点火炉在红土镍矿烧结机上的应用. 工业加热, 2015, 44(3): 64-65.
LIN En-Yu, WANG Hao. The Application of The Double Inclined Ignition Furnace to the Nickel Ore Sinter Machine. Industrial Heating, 2015, 44(3): 64-65.

[13] 刘程宏, 张军红, 何志军. 烧结点火炉温度场的模拟. 辽宁科技大学学报, 2012, 35(4): 438-441.
LIU Cheng-Hong, ZHANG Jun-Hong, HE Zhi-Jun. Simulation of Temperature Field of Sintering Ignition Furnace. Journal of University of Science and Technology Liaoning, 2012, 35(4): 438-441.

[14] 刘晓青, 刘程宏. 烧结机点火炉点火过程数值模拟与分析. 辽宁科技大学学报, 2019, 42(5): 321-336.
LIU Xiao-Qing, LIU Cheng-Hong. Numerical Simulation and Analysis on Ignition Process in Sintering Ignition Furnace. Journal of University of Science and Technology Liaoning, 2019, 42(5): 321-336.

[15] 曾平生, 黄正宗, 江新辉, 等. 铅锌冶炼烧结点火炉点火过程数值模拟研究. 中国有色金属学报. 2023: 44045.
ZENG Ping-Sheng, HUANG Zheng-Zong, JIANG Xin-Hui, et al. Numerical Simulation on the Ignition Process of Sintering Ignition Furnace in Lead-Zinc Smelting. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2023: 44045.

[16] 王春生, 吴　敏, 徐辰华. 基于综合工况评判模型的铅锌烧结过程操作参数优化方法. 中国有色金属学报, 2007, 17(12): 2065-2073.
WANG Chun-Sheng, WU Min, XU Chen-Hua. Optimization Method of Operating Parameters for Lead-Zinc Sintering Process Based on Comprehensive Status Evaluation Model. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2007, 17(12): 2065-2073.

[17] 丁　雷, 吴　敏, 曹卫华, 等. 基于混合粒子群算法的铅锌烧结过程产量质量优化. 中国有色金属学报, 2008, 18(6): 1152-1158.
DING Lei, WU Min, CAO Wei-Hua, et al. Quantity and Quality Optimization for Lead-Zinc Sintering Process Based on Hybrid PSO Algorithm. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2008, 18(6): 1152-1158.

[18] 闫红杰, 刘方侃, 张振扬, 等. 氧枪布置方式对底吹熔池熔炼过程的影响. 中国有色金属学报, 2012, 22(08): 2393-2400.
YAN Hong-Jie, LIU Fang-Kan, ZHANG Zhen-Yang, et al. Influence of Lance Arrangement on Bottom-Blowing Bath Smelting Process. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2012, 22(08): 2393-2400.

[19] 王　林, 柳朝晖, 李鹏飞, 等. 基于 WSGGM 模型修正的对冲火焰燃烧分区特性研究. 工程热物理学报, 2019, 40(11): 2694-2703.
WANG Lin, LIU Zhao-Hui, LI Peng-Fei. Combustion Regimes With a WSGGM Model Under Counter Flow Condition. Journal of Engineering Thermophysics, 2019, 40(11): 2694-2703.

[20] Charles David Pierce. Progress-Variable Approach for Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion: [Ph.D. Thesis]. California: Stanford University, 2001.

[21] 龙文增. 基于 OpenFOAM 的甲烷湍流燃烧 LES 数值研究: [硕士论文]. 大连: 大连理工大学, 2019.
LONG Wen-Zeng. Numerical Study of LES in Methane Turbulent Combustion Based on OpenFOAM: [MA.Sc Thesis]. Dalian: Dalian University of Technology, 2001.

[22] 周　瑜, 乐嘉陵, 黄　渊. 同轴射流燃烧室非预混湍流燃烧流场特性大涡模拟研究. 推进技术, 2017, 38(07): 1514-1522.
ZHOU Yu, LE Jia-Ling, HUANG Yuan. Large Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Combustion in Combustor with Coaxial Jet Flow. Journal of Propulsion Technology, 2017, 38(07): 1514-1522.

中国工程热物理学会 学科类别
学术会议论文 编号：233252

异种纤维束催化活性对编织材料气动热影响的数值模拟

邢旭雯，杨肖峰*，李芹，余秋君，杜雁霞，桂业伟
（中国空气动力研究与发展中心空天飞行空气动力科学与技术全国重点实验室，绵阳 621000）
(Tel:0816-2463192，Email:yxf.2006@tsinghua.org.cn)

摘要：超高温陶瓷复合材料，如纤维编织型陶瓷基复合材料（CMCs），在未来高超声速飞行器热防护系统中的应用越来越广泛。具有不同化学活性（即催化活性）的编织纤维束对高超声速流场近壁区热化学行为和催化复合效应产生影响，给复合材料表面非平衡气动热精细预测带来挑战。本文根据计算机断层扫描重建的 CMCs 编织形态，在忽略纤维束微观结构几何效应的情况下，采用化学活性/惰性混合粘性壁边界条件模型，并利用计算流体力学方法对这种混合壁面进行高超声速非平衡流场数值模拟，得到了单向催化纤维束催化活性诱导的化学输运行为以及对气动热的影响机理。数值模拟发现：（1）壁面热流受编织纤维束的催化活性影响，在空间上呈低-高-低波型分布；（2）壁面热流主要由对流加热以及 O 原子复合放热组成，且 O 原子复合放热行为与整体气动热呈现较强的正相关关系。复合材料表面气动热形成机理相关研究结论为以复合材料为主体的热防护系统精细设计提供理论支撑。

关键词：高超声速；壁面催化效应；气动热；数值模拟；热流

0 前言

高超声速飞行器在高马赫数（$Ma_\infty \geq 10$）飞行过程中，周围绕流流场产生以强激波压缩为主要特征的高温高压气动环境，气体离解、电离、表面催化等高温真实气体效应显著[1]，使作用于飞行器表面的气动热环境异常复杂。因此，考虑高温真实气体效应（特别是表面催化效应）的气动热精准预测成为制约飞行器热防护系统精细化、低冗余设计的关键[2-3]。

计算流体力学（CFD）方法是预测高超声速飞行器气动热的重要研究手段之一。基于催化反应边界模型的 CFD 预测在高超声速飞行器催化加热模拟研究和应用中发挥了重要作用[4-5]。在对壁面催化效应的数值模拟中，目前有完全非催化壁（non-catalytic wall，NCW）、有限速率催化壁（finite rate catalytic wall，FRCW）和完全催化壁（fully catalytic wall，FCW）等壁面催化模型[6]，对催化特性的认识不足或催化效应建模的差异性可致气动热载荷产生 2~4 倍的偏差[7]。如苗文博等人[8]针对 RAM-CII 的研究表明，在Ma_∞=25.9、H=71 km 的来流条件下，完全催化热流将比完全非催化热流高约 40%。

随着热防护系统对材料轻质化、结构轻量化的要求不断提高，复合材料被广泛应用于飞行器中。而在复合材料中，三维编织型热防护材料具有高比强度、高比刚度、防/隔热效率高和可设计性强等特点，在高超声速飞行器热防护系统中得到了广泛应用[9]。但编织型热防护材料通常由化学活性（即催化活性）各异的纤维束编织而成，如图 1 所示，表面也会存在一定的粗糙度，在高超声速流动中引起的气动热效应较为复杂。所以突破不同材料体系（复合材料）带来的气动热预测偏差成为高超声速空气动力学研究的重点。

针对以上问题，诸多学者开展了理论建模和数值模拟研究，如 Stern[10]通过 X 射线扫描获取了碳纤维真实的微观多向编织结构，并利用直接模拟蒙特卡罗（DSMC）方法模拟了多向编织型碳纤维的氧化烧蚀过程。Wilder 与 Prabhu[11]通过 3D 扫描获得编织型材料的纵向起伏模型，探究该种材料的表面粗糙度对热流的影响。还有研究者[12]通过格子 Boltzmann 方法（LBM）预测编织型复合材料表面传热过程（见图 2），为编制型材料的高超声速气动

热研究提供了较好的思路。当前研究就编织材料导致的复杂气动热效应问题取得了一定的研究进展，但对异种纤维束不同的催化活性引起的气动热偏差问题研究较为不足，亟需开展针对性研究。

本文根据计算机断层扫描重建的 CMCs 编织形态，在忽略纤维微观结构几何效应的情况下，采用化学活性/惰性混合粘性壁边界条件模型，利用计算流体力学方法对这种混合壁面进行高超声速非平衡流场数值模拟，并进行参数化分析，为编织型复合材料的表面气动热预测提供参考。

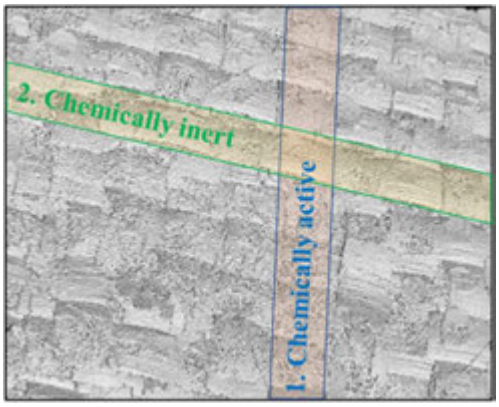


图 1 化学活性差异示意图（1.chemically native；2.chemically inert）

Fig.1 Schematic representation of the chemical activity differences

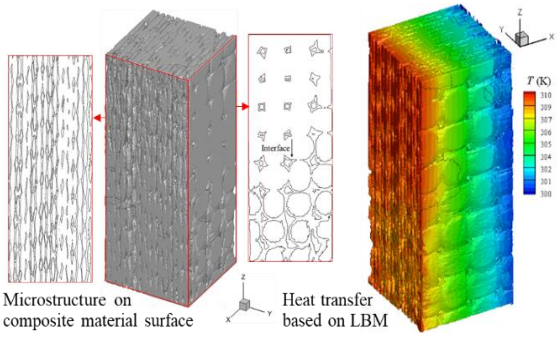


图 2 编织型复合材料表面微结构传热特性的 LBM 预测

Fig.2 LBM prediction of heat transfer characteristics of surface microstructures of woven composites

1 计算方法与算例验证

1.1 控制方程和数值方法

控制方程为考虑化学反应的三维层流可压缩 Navier-Stokes 方程组，其无量纲守恒形式为

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial \tau}+\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \xi}+\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial \eta}+\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial \zeta}=\frac{1}{Re}\left(\frac{\partial \boldsymbol{F}_v}{\partial \xi}+\frac{\partial \boldsymbol{G}_v}{\partial \eta}+\frac{\partial \boldsymbol{H}_v}{\partial \zeta}\right)+\boldsymbol{S} \tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{Q}$ 为守恒型状态向量，$\boldsymbol{F}$、$\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 为三方向的无粘（对流）通量向量，$\boldsymbol{F}_v$、$\boldsymbol{G}_v$ 和 $\boldsymbol{H}_v$ 为粘性（扩散）通量向量，$\boldsymbol{S}$ 为化学反应源项。界面或壁面上热流通量包括热传导项和组分扩散项两部分：

$$q_n=\kappa\frac{\partial T}{\partial n}+\sum_{s=1}^{Ns}J_s h_s \tag{2}$$

式中 Ns 为组分个数，h_s 为组分 s 的绝对焓（显焓+化学生成焓），J_s 为界面上组分 s 的扩散质量通量

$$J_s=-\rho D_s\frac{\partial c_s}{\partial n} \tag{3}$$

式中：c_s 为组分 s 的质量分数，D_s 为等效扩散系数。

模拟方法在课题组研发的具有自主知识产权的 FL-CAPTER 软件平台[13]的基础上发展。使用 TVD 型的有限体积法对控制方程作数值离散。空间无粘通量使用二阶 Van-Leer 方法作矢通量分裂，粘性通量采用中心格式作离散，界面变量通量采用带有 van Albada 限制器的 MUSCL 方法插值求得。时间推进上采用 LUSGS 隐式方法，直至流场达到稳定。

1.2 空气催化模型

飞行器在大气中以高超声速飞行时，激波层内气体在激波压缩的作用下急剧升温，高温

气体通过对流及辐射过程对飞行器进行加热，即所谓的气动加热。而在高温环境下，气体分子会振动激发、离解甚至电离，此时气体特性不再遵循完全气体条件，即高温真实气体效应[1]。在接近飞行器表面附近的气流薄层内，离解的原子、离子成分会受到飞行器表面材料化学特性作用而发生一定程度的复合反应，并释放大量热量，这种壁面效应称之为壁面催化效应，可以改变壁面附近的气体组分及能量分布状态[14]。

界面多相催化是由气固界面上多类型多步骤反应、气相扩散、传热传质等诸多过程共同作用的物理化学现象。包括以下典型过程[15]：（1）扩散，（2）吸附，（3）复合，（4）解附，（5）扩散。如图 3 所示。

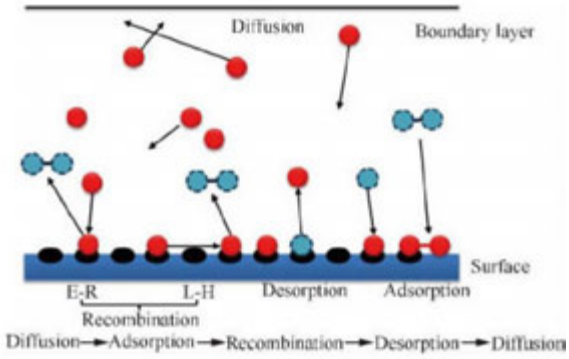


图 3 壁面催化反应过程示意图[15]

Fig.3 Schematic diagram of the wall-side catalytic reaction process[15]

表 1 为多相催化过程的具体化学反应方程。第一步是 O 和 N 原子的化学吸附过程标记为(s)形成吸附粒子 O (s)和 N (s)，而第二步是气体和吸附粒子之间的复合重组过程。表格中催化过程的反应速率可通过参数化给出。

表 1 多相催化过程的化学反应方程

Table 1 Chemical reaction equations for the heterogeneous catalytic process

编号	第一步	第二步
1	$O + (s) \rightarrow O(s)$	$O + O(s) \rightarrow O_2(s)$
2	$N + (s) \rightarrow N(s)$	$N + N(s) \rightarrow N_2(s)$

高温状态下，空气离解为多种气体组分，包括 O、N、O_2、N_2 和 NO，离解过程涉及多种类型化学反应，如 Gupta 等人[16]提出的 17 种反应方程。气体反应方程及其反应速率系数见表 2。

表 2 高温空气解离的化学反应方程及反应速率系数

Table 2 Chemical reaction equations and reaction rate coefficients for high-temperature air dissociation

编号	气体方程	正向反应速率			逆向反应速率		
		A_f	B_f	C_f	A_b	B_b	C_b
1	$O_2 + N \Leftrightarrow O + O + N$	3.60×10^{12}	-1.00	5.95×10^{4}	3.00×10^{3}	-0.50	0
2	$O_2 + NO \Leftrightarrow O + O + NO$	3.60×10^{12}	-1.00	5.95×10^{4}	3.00×10^{3}	-0.50	0
3	$O_2 + O \Leftrightarrow O + O + O$	9.00×10^{13}	-1.00	5.95×10^{4}	7.50×10^{4}	-0.50	0
4	$O_2 + O_2 \Leftrightarrow O + O + O_2$	3.24×10^{13}	-1.00	5.95×10^{4}	2.70×10^{4}	-0.50	0
5	$O_2 + N_2 \Leftrightarrow O + O + N_2$	7.20×10^{12}	-1.00	5.95×10^{4}	6.00×10^{3}	-0.50	0
6	$N_2 + O \Leftrightarrow N + N + O$	1.90×10^{11}	-0.50	1.13×10^{5}	1.10×10^{4}	-0.50	0
7	$N_2 + NO \Leftrightarrow N + N + NO$	1.90×10^{11}	-0.50	1.13×10^{5}	1.10×10^{4}	-0.50	0

编号	气体方程	正向反应速率			逆向反应速率		
		A_f	B_f	C_f	A_b	B_b	C_b
8	$N_2 + O_2 \Leftrightarrow N + N + O_2$	1.90×10^{11}	-0.50	1.13×10^5	1.10×10^4	-0.50	0
9	$N_2 + N \Leftrightarrow N + N + N$	4.09×10^{16}	-1.50	1.13×10^5	2.27×10^9	-1.50	0
10	$N_2 + N_2 \Leftrightarrow N + N + N_2$	4.70×10^{11}	-0.50	1.13×10^5	2.72×10^4	-0.50	0
11	$NO + O_2 \Leftrightarrow N + O + O_2$	3.90×10^{14}	-1.50	7.55×10^4	1.00×10^8	-1.50	0
12	$NO + N_2 \Leftrightarrow N + O + N_2$	3.90×10^{14}	-1.50	7.55×10^4	1.00×10^8	-1.50	0
13	$NO + N \Leftrightarrow N + O + N$	7.80×10^{14}	-1.50	7.55×10^4	2.00×10^8	-1.50	0
14	$NO + O \Leftrightarrow N + O + O$	7.80×10^{14}	-1.50	7.55×10^4	2.00×10^8	-1.50	0
15	$NO + NO \Leftrightarrow N + O + N0$	7.80×10^{14}	-1.50	7.55×10^4	2.00×10^8	-1.50	0
16	$O + NO \Leftrightarrow N + O_2$	3.20×10^3	1.00	1.97×10^4	1.30×10^4	1.00	3.58×10^3
17	$O + N_2 \Leftrightarrow N + NO$	7.00×10^7	0.00	3.80×10^4	1.56×10^7	0.00	0

1.3 算例验证

为了验证数值方法流场求解的有效性，参照文献[17]中的算例 627 进行验证，建立 1/4 圆柱模型，半径为 45mm，模型网格为 140×97×3 的六面体结构化网格，如图 4 所示。研究使用的来流条件为空气，组分中氧气与氮气比值为 0.77：0.23，气体模型为化学非平衡气体，具体来流参数见表 3。

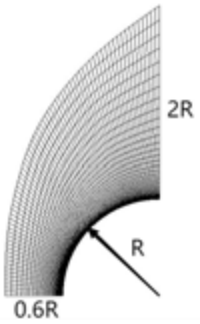


图 4 网格模型示意图

Fig.4 Schematic diagram of the grid model

表 3 来流条件

Table 3 Free stream conditions

变量	Ma_∞	u_∞(m/s)	T_∞(K)	ρ_∞(kg/m^3)	p_∞(Pa)
数值	8.78	4776	694	0.003255	687

定义网格雷诺数：

$$Re_c = \frac{\rho_\infty v_\infty d_w}{\mu} \tag{4}$$

其中，d_w为壁面第一层网格单元的法向距离。

网格无关性验证结果如图 5 所示，$Re_c < 4$ 时能够网格无关地模拟出壁面压力和热流。图 6 为热流分布的实验值与计算值对比，趋势良好。图 7 分别给出了计算所得的无量纲压力、密度和温度云图，其中$p^* = p/\rho_\infty v_\infty^2$，$\rho^* = \rho/\rho_\infty$，$T^* = T/T_\infty$。由图可见，各流动参数分布符合高超声速流动基本规律。由此可见，所选计算方法能够较好地模拟壁面压力和壁面热流。

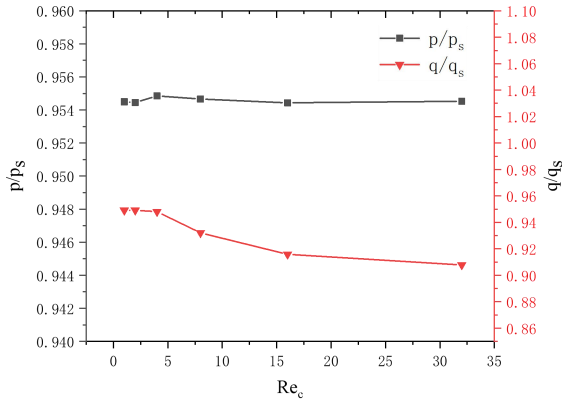


图 5 壁面压力与热流的网格无关性分析

Fig.5 Grid-independent analysis of wall pressure and heat flux

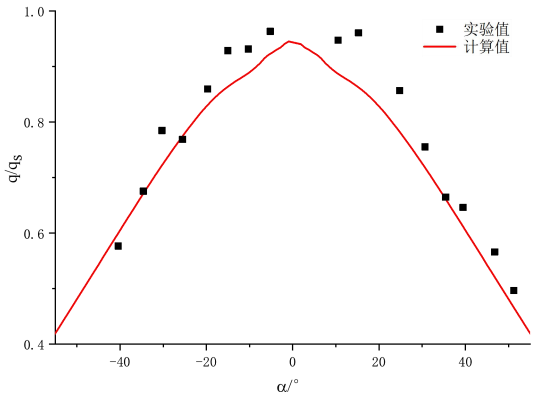


图 6 圆柱壁面热流分布

Fig.6 Heat flux distribution on cylindrical wall

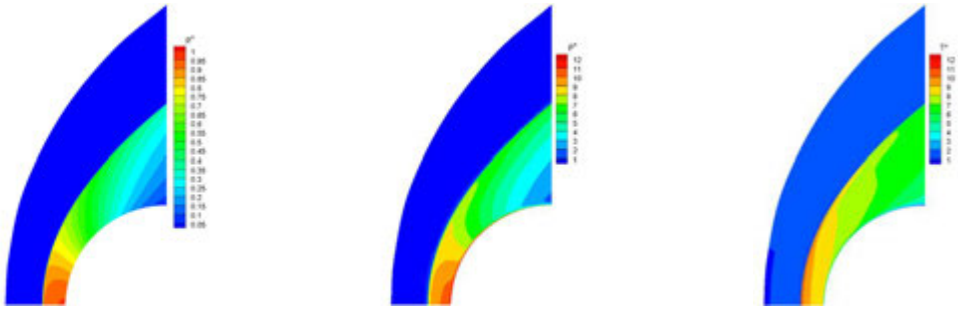


图 7 无量纲压力、密度与温度云图

Fig.7 dimensionless pressure, density and temperature cloud chart

2 模型与计算条件

2.1 网格模型

为了分析异种纤维束催化活性对编织材料气动热的影响规律，在圆柱绕流算例的基础上设置不同的类型和量值的壁面催化条件。通过壁面催化条件的交替分布，实现异种纤维束编织的催化作用，如图 8 所示，黄色壁面为完全催化条件（FCW），紫色壁面为有限速率催化条件（FRCW-γ），其中 γ 为催化反应系数。网格为多块六面体结构网格，壁面法向足够正交且适当加密，保证第一层网格高度雷诺数为$Re_c = 1$，以保证壁面热流计算值具有较高的预测精度和网格无关性。

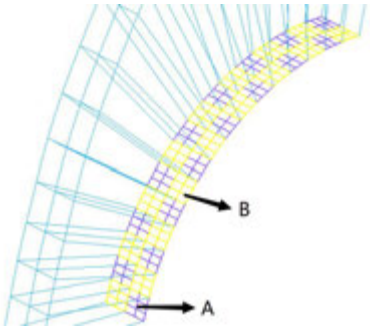


图 8 壁面条件示意图

Fig.8 Schematic diagram of the wall conditions

2.2 计算条件

参照文献[17]的 627 算例进行研究，来流条件见表 3，壁面温度设置为 300 K。攻角和侧滑角为零。自由来流为未离解状态的空气（质量分数为 77%N_2 和 23%O_2），气体穿过激波后则发生大规模离解。出流条件采用超音速外推法，其中边界值由相邻的单元中心值得到。考虑到壁面催化特性对飞行器高超声速气动加热有较大影响，采用 NCW、FRCW 和 FCW 条件开展计算模拟研究，并将有限催化壁面与完全催化壁面交叉排列，进行参数化分析（详细的壁面设置见表 4），分析各催化反应对气动加热的影响规律。

表 4 壁面条件设置

Table 4 Wall Conditions Settings

算例编号	壁面条件		催化反应系数 γ
	A	B	
1	FCW	FCW	-
2	FRCW	FRCW	0.01
3	FRCW	FRCW	0.001
4	NCW	NCW	-
5	FRCW	FCW	0.01
6	FRCW	FCW	0.006
7	FRCW	FCW	0.003
8	FRCW	FCW	0.001

3 结果与讨论

3.1 化学非平衡流动分析

以算例 5 为主要分析对象，高超声速来流收到强烈的压缩作用，在圆柱前部流场形成弓形激波，激波层内温度快速上升，来流穿过激波后 O_2 和 N_2 发生部分离解，生成 O 原子与 N 原子，并置换出部分 NO，之后 NO 又迅速离解，驻点区域 O_2 离解率高达 95%，所以 O 原子的质量分数较大，而由于 N_2 发生离解所需温度较高，在当前来流条件下气相 N 原子含量较少，图 9 给出了各组分质量分数分布云图。

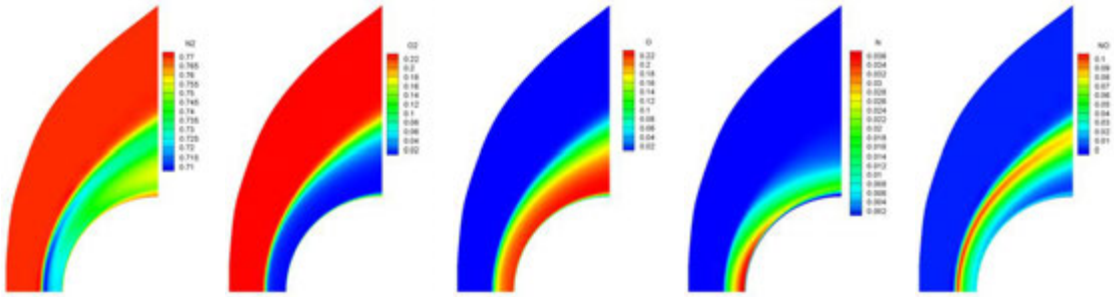


图 9 各组分质量分数分布云图

Fig.9 Distribution cloud chart of mass fraction of each component

在高温环境下，气体特性不再遵循完全气体条件，而是发生高温真实气体效应，气体分子会振动激发、离解。图 10 为圆柱壁面底部，中部以及顶部法向方向的组分分布曲线，高温真实气体效应也会影响激波层内的温度分布，如图 11 所示。沿驻点区域向上从圆柱底部至顶部气体的离解速率逐渐放缓，N_2 的离解率明显下降，可以推断出此现象与温度的减小有关，圆柱底部驻点线上的温度曲线最为陡峭，且峰值最大，说明驻点区域高超声速下真实气体效应最为显著。

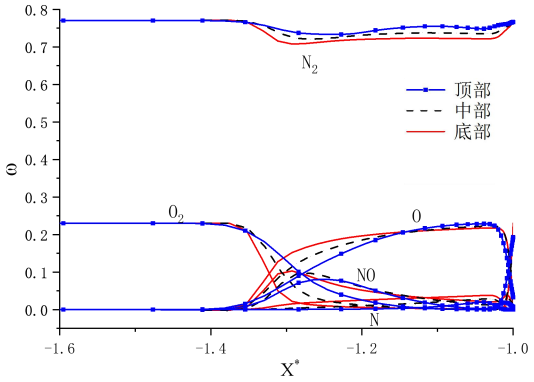


图 10 圆柱壁面典型部位法向方向组分变化曲线

Fig. 10 The variation curve of the normal component of the typical part of the cylindrical wall

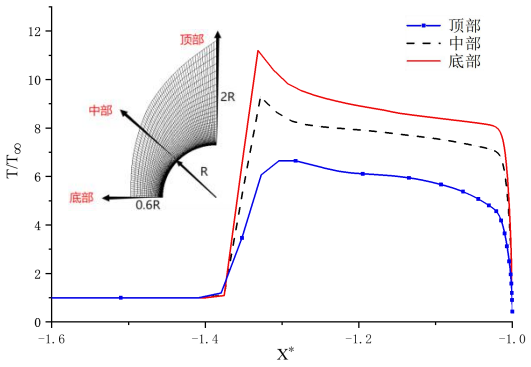


图 11 圆柱壁面典型部位法向温度变化曲线

Fig. 11 Normal temperature variation curve of typical parts of cylindrical wall

3.2 催化加热特性分析

考虑 NCW、FRCW 和 FCW 壁面条件，图 12 给出了算例 1、2、3 和 4 的热流分布曲线，可以看出，对于驻点热流值，不同催化条件下差异较大，其中完全催化驻点热流密度约为 4381kW/m^2，完全非催化约为 3570kW/m^2，有限催化反应机制获得的热流介于完全非催化和完全催化壁条件之间，符合物理规律。

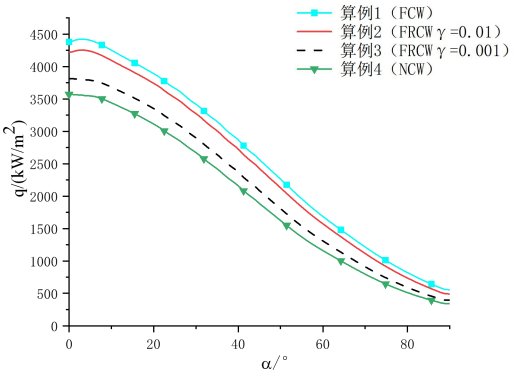


图 12 完全催化、有限催化及完全非催化预测的圆柱表面热流

Fig.12 cylindrical surface heat fluxes predicted by Full-catalytic, finite rate catalytic and non-catalytic model

将完全催化壁面与有限催化壁面交叉排列，并对催化速率进行参数化控制，图 13 给出了算例 5 的热流分布云图，并标出曲线 s，图 14 为算例 1（FCW），算例 2（FRCW）与算例 5（两种壁面交叉排列且 γ =0.01）沿曲线 s 的热流分布对比，可以明显观察到在材料催化系数间断的界面附近存在一个热流跳跃点，热流呈现低-高-低波形分布，完全催化壁面的热流密度比算例 1 大，有限催化壁面的热流密度比算例 2 小，壁面交界处数值差异明显。由此可以推断出化学活性不同的编织型材料会使超高声速气动热环境更加严峻。

表面气动热大部分由对流加热和催化复合放热组成，即公式（2）的第一部分和第二部分，不同催化条件下对流加热变化不大，如图 15 所示。而催化复合放热主要为组分扩散热流，且不同的催化反应模型产生的气动加热量差异明显。图 16 为算例 5 条件下沿曲线 s 各个组分对表面气动热的贡献，N_2 的离解率较低，气相中 N 原子分布较少，且 N 原子的复合放热接近于 0，所以在壁面气动热环境中，O 原子复合放热量对整体热流量有显著影响。

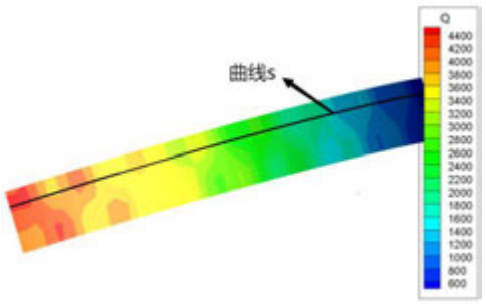


图 13 算例 5（γ=0.01）的热流分布

Fig.13 The heat flux distribution for Exp. 5 (γ =0.01)

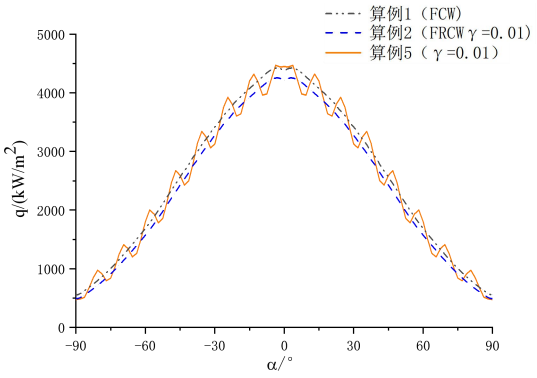


图 14 不同催化条件下沿曲线 s 的热流分布对比

Fig.14 Comparison of heat flux distribution along the curve s under different catalytic conditions

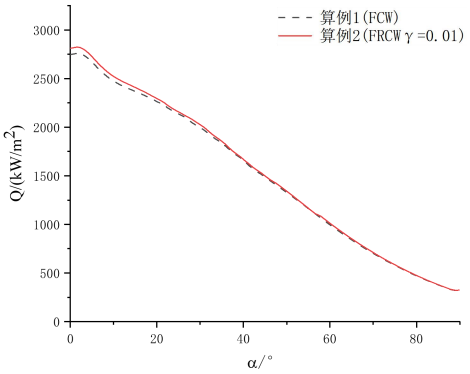


图 15 不同催化条件下对流加热对比图

Fig.15 Comparison of convective heating under different catalytic conditions

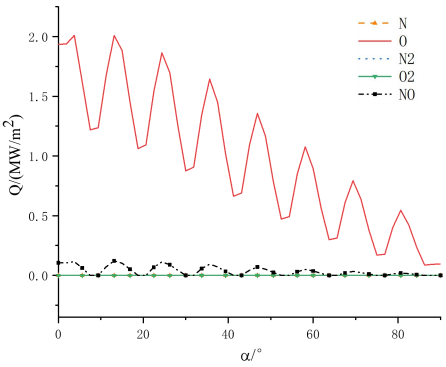
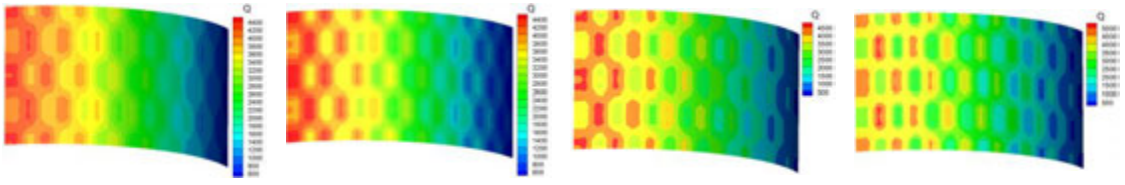


图 16 沿曲线各个组分对表面气动热的贡献

Fig.16 Contribution of the surface aerodynamic heat to the various components along the curve

在算例 5 的基础上改变催化系数 γ 的大小，探究壁面热流随催化反应系数改变的规律性。图 17 为算例 5、6、7、8 的壁面热流云图，可以较为直观的观察到不同的催化反应系数 γ 对壁面热流的影响。图 18 为以上算例沿曲线 s 的热流分布。随着催化系数 γ 的减小，壁面交界处的热流波动幅度逐渐增大，规律性与周期性明显。推断此现象是由于上游催化系数较小，大量未复合的原子可以流到下游完全催化系数区域，并发生催化复合反应。



a.算例 5（ γ =0.01） b.算例 6（ γ =0.006） c.算例 7（ γ =0.003） d.算例 7（ γ =0.001）

图 17 不同条件下的壁面热流分布

Fig.17 Wall heat flux distribution under different condition

图 19 为算例 5 与算例 8 的对流加热量与 O 原子放热量对比图，从图中可以看出混合壁面的设置会使对流加热量在圆柱前半部分发生一定的波动，O 原子的复合放热曲线与整体热流曲线趋势相同，仍然呈现低-高-低波形分布，且催化速率越小，数值波动越显著，规律性明显。

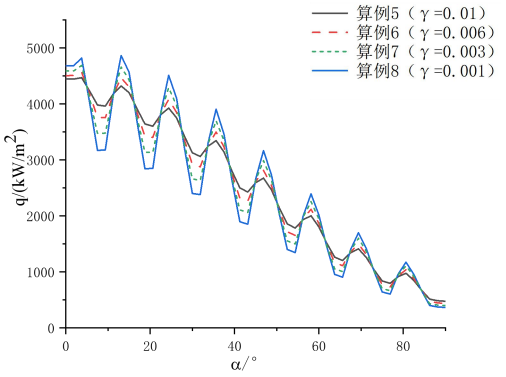


图 18 不同催化反应系数下沿曲线 s 的热流分布

Fig.18 Distribution of heat flux along the curve s under different catalytic reaction coefficients

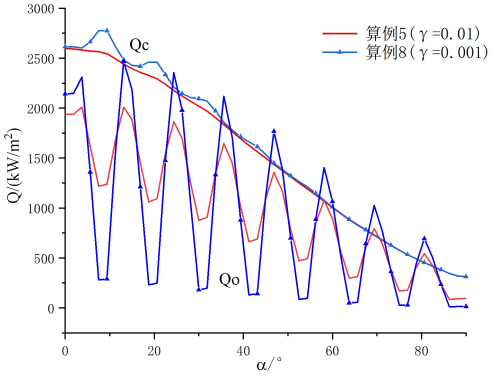


图 19 两种催化反应系数下对流加热量（Qc）与 O 原子放热量（Qo）的对比

Figure 19 Comparison of convective heat (Qc) and O atoms heat release (Qo) under the two catalytic reaction coefficients

4 结 论

本文基于可压缩流动数值方法，采用化学活性/惰性混合粘性壁圆柱模型，通过不同壁面催化模型交叉排布，对具有不同化学活性（即催化活性）的编织型复合材料进行了参数化模拟，探究了不同化学活性的编织纤维束对气动热的影响规律，得到以下结论：

（1）完全催化与有限催化壁面交叉排列所得到的壁面热流曲线呈现低-高-低的波形分布，且不处于单一催化条件下热流曲线的上下边界之中，随着有限催化效率的减小，壁面热流数值波动越发明显。

（2）圆柱表面热流主要由对流加热与 O 原子复合放热组成。在不同混合壁面条件下，对流加热量的差异相对有限，而 O 原子催化复合作用产生了显著的化学加热差异，总体上对壁面热流影响较为显著。

本文获得的复合材料表面气动热形成机理相关研究结论，为以复合材料为主体的飞行器热防护系统精细设计与评估提供理论支撑。

参考文献

[1] Anderson J D. Hypersonic and high temperature gas dynamics[M]. AIAA, 2000: 449-499.

[2] 桂业伟, 唐伟, 杜雁霞. 临近空间高超声速飞行器热安全. 国防工业出版社, 北京, 2019.
Gui Y W, Tang W, Du Y X. Thermal safety issues of near space hypersonic vehicles. National Defense Industry Press, Beijing, 2019.

[3] 桂业伟. 高超声速飞行器综合热效应问题. 中国科学: 力学物理天文学 2019, 49: 135-149.
Gui Y W. Combined thermal phenomena of hypersonic vehicle. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2019, 49: 135-149.

[4] Yang X, Xiao G, Du Y, Liu L, Wei D, Gui Y. Heat transfer with interface effects in high-enthalpy and high-speed flow: modelling review and recent progress. Appl. Therm. Eng. 2021, 195, 116721.

[5] 杨肖峰, 李芹, 杜雁霞, 刘磊, 桂业伟. 高超声速飞行器界面多相催化数值研究进展. 航空学报. 2021, 42, 625908.
Yang X F, Li Q, Du Y X, et al. Progress in numerical research on interface heterogeneous catalysis of hypersonic vehicles . Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2021, 42: 625908.

[6] Barbato L, Muylaert J, Bruno C, Giordano D, et al. Comparison of catalytic wall conditions for hypersonic flow[J]. Journal of spacecraft and rockets, 1996, 33(5): 620-627.

[7] 董维中, 乐嘉陵, 刘伟雄．驻点壁面催化速率常数确定的研究[J]. 流体力学实验与测量, 2000, 14(3): 1-6.
DONG Wiezhong, LE Jialing, LIU Wiexiong. The Determination of Catalytic Rate Constant of Surface Materials of Testing Model in the Shock Tube[J]. Journal of Experiments in Fluid Mechanics, 2000, 14(3): 1-6

[8] 苗文博, 程晓丽, 艾邦成. 来流条件对热流组分扩散项影响效应分析. 空气动力学学报, 2011, 29(4): 476–480.
MIAO Wenbo, CHENG Xiaoli, AI Bangcheng. Flow Configuration Effects on Mass Diffusion Part of Heat-Flux in Thermal-Chemical Flows. Acta Aerodynamica Sinica, 2011, 29(4): 476–480.

[9] 李伟. 三维编织复合材料微细观烧蚀行为及高温力学响应研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2020.
LI Wie. Mesoscopic Ablayion Behavior And High TemperatureE Mechanical Response of 3D Braided Composites[D]. Harbin Institute of Technology, 2020.

[10] Stern E C. Microscale modeling of porous thermal protection system materials. University of Minnesota, 2015.

[11] Wilder M C, D K Prabhu. Rough-Wall Turbulent Heat Transfer Experiments in Hypersonic Free Flight. AIAA, 2019.

[12] 杜雁霞, 杨肖峰, 肖光明, 刘磊, 魏东, 桂业伟. 高超声速飞行器多尺度耦合热效应预测研究进展. 中国科学: 技术科学, 2023, online.
Du Y X, Yang X, Xiao G M, Liu L, Wie D, Gui Y W. Progress on Prediction of Multiscale Coupling Thermal Effects of Hypersonic Vehicles. Sci China Tech Sci, 2023, online.

[13] 桂业伟, 刘磊, 代光月, 等. 高超声速飞行器流-热固耦合研究现状与软件开发[J]. 航空学报, 2017, 38(7): 87-105.
GUI Yewie, LIU Lie, DAI Yueguang, et al. Research Status of Hypersonic Vehicle Fluid-Thermal Solid Couplingand Software Development[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2017, 38(7): 87-105.

[14] Ingeri G R. None quilibrium hypersonic stagnation flow with stagnation heat transfer[J]. Jet Propulsion, 1958, 28 (11) : 737-745.

[15] 孟松鹤, 金华, 王国林, 等．热防护材料表面催化特性研究进展[J]．航空学报, 2014, 35（2）：287-302.
MENG Songhe, JIN Hua, WANG Guolin, et al. Research Advances on Surface Catalytic Properties of Thermal Protection Materials [J]. Acta Aeronautica Et Astronautica Sinica, 2014, 35(2): 287-302.

[16] R N Gupta, J M Yos, R. Thompson, K.-P. Lee, A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K, in, NASA, 1990.

[17] KARL S, SCHRAMM J M, HANNEMANN K. High enthalpy cylinder flow in HEG: A basis for CFD validation [c] //Aiaa Fluid Dynamics Confer-ence. Orlando, Florida, USA: AIAA, 2003:425.

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：233254

脉动流作用下矩形通道内颗粒污垢特性研究

韩志敏，左健，陈则齐，李江，徐志明
(东北电力大学能源与动力工程学院，吉林 吉林 132012)
（Tel：15981162521 Email：han_zm@yeah.net）

摘要：为研究脉动流作用下矩形通道内颗粒污垢特性，根据颗粒污垢的沉积与剥蚀特点，本文基于欧拉-欧拉法构建了脉动流作用下颗粒污垢模型，并与相关实验数据进行对比验证了模型的准确性。根据构建的模型从工况参数和脉动参数两个方面进行模拟研究。结果表明：脉动流相对于稳态流污垢热阻值减小了11.87%，具有一定的抑垢的效果；污垢热阻随入口流速增大而减小，随工质浓度和壁面加热功率的增加而增加，随入口温度的增大而略有增大。此外，脉动振幅越高，脉动流的抑垢效果越好；而随脉动频率的增加抑垢效果却有所减弱。

关键词：颗粒污垢；脉动流；污垢特性；数值模拟

Study on the characteristics of particle fouling in rectangular channels under pulsating flow

HAN Zhi-min，ZUO Jian，CHEN Ze-qi，LI Jiang，XU Zhi-ming
(School of Energy and Power Engineering, Northeast Electric Power University, Jilin 132012, China）

Abstract: To study the characteristics of particle fouling in rectangular channels under pulsating flow, based on the deposition and erosion characteristics of particle fouling, this paper constructs a particle fouling model under pulsating flow using the Euler-Euler method, and verifies the accuracy of the model by comparing it with relevant experimental data. Based on the constructed model, simulation research is conducted from two aspects: operating condition parameters and pulsation parameters. The results show that the asymptotic value of fouling thermal resistance in pulsating flow has decreased by 11.87% compared to steady-state flow, indicating a certain degree of fouling inhibition effect; The thermal resistance of dirt decreases with the increase of inlet flow rate, increases with the increase of working fluid concentration and wall heating power, and slightly increases with the increase of inlet temperature. In addition, the higher the amplitude of pulsation, the better the anti-fouling effect of pulsating flow; however, as the pulsation frequency increases, the anti-fouling effect weakens.

Key words: Particulate fouling; Pulsating flow; Fouling characteristics; Numerical simulation

引言

在现代化工业生产中，换热器的应用相当广泛，是不可或缺的一种设备[1]，如何增加换热器的热交换量是一个经久不衰的话题。现有文献表明，大约超过 90%的换热器存在着污垢问题[2]。其中，颗粒污垢作为换热设备中一种常见的污垢类型，是指悬浮在流体中的固体颗粒在换热面上的积聚。有研究表明，污垢不仅会增大换热面传热热阻，降低换热效率，还会腐蚀破坏壁面，因此抑制颗粒污垢是一个重要课题。

对于颗粒污垢的研究，国内外学者从颗粒污垢沉积机理，影响因素以及模拟方法等方面都做了比较细致的研究。Beal 等[3]通过对颗粒通过对颗粒污垢的分析研究，发现了污垢颗粒

的沉积过程受到的力有布朗力、重力和惯性力等。Seyyedbagheri 等[4]采用欧拉方法对湍流管道中的沥青质沉积过程进行数值模拟，不但考虑了颗粒污垢所受的常规力，比如重力等，还发现了不同粒径下的最有效沉积机制，如涡流扩散，涡流电泳和热泳等。Muhammad 等[5]研究了不同工况对颗粒沉积的影响，结果表明，较高的流速会在传热表面上产生强大的剪切力，从而消除沉积物并降低抗垢性。Balakin[6] 等基于欧拉-欧拉模型，研究了湍流水中氟里昂 R11 水合物的沉积模型，而 Jiang[7]等同样采用欧拉-欧拉法研究了矩形通道内颗粒沉积速率的变化规律。

脉动流是一种入口速度呈现周期性变化的流动，很多研究已表明脉动流对于强化传热有一个积极效果。Guo 等[8]通过实验的方法发现以一个较低的脉动振幅进行实验时，只有某些特定范围的脉动频率可以增强传热，但是如果以一个较高的脉动振幅进行实验，无论什么范围的脉动频率都可以增强传热。钱浩[9]通过实验与数值模拟的方法，将脉动速度下的平均努塞尔数与稳态速度下努塞尔数进行对比，发现强化换热效果最佳的脉动频率为 1.8HZ，当脉动振幅大于 0.1 时可以强化换热。Barid 等[10]研究了脉动流对汽水换热器换热性能的影响，实验结果表明：当雷诺数为 8000 时，总换热系数提高的最大，达到 41%。Zontu[11]等通过粒子图像测速法（PIV）绘制流线图、速度矢量图，以显示脉动流的流动模式，观察到脉动流对增强换热起到了积极作用。Duan[12]等通过实验与模拟相结合的方法研究了涡流发生器产生的脉动流对不同流场中平面弹性管束传热效果的影响，结果表明脉动流增加了振动强度，并增强了传热系数，使得换热效率提高了。

随着脉动流在传热方面的深入研究，相关学者发现脉动流也能够起到抑制污垢的效果。Mojtaba[13]等通过理论研究得到了圆管内脉动流的速度分布，得到了脉动流的“速度环效应”，发现脉动流是一种能够阻垢或除垢的方法。Blel 等[14]对 2009 年 Limlech[16]的系统进行改进中，发现脉动流有一定抑垢效果。Springer[15]等采用数值模拟和实验方法对脉动流下陶瓷膜的不同几何形状进行研究，发现：壁面剪切应力对减少浓差极化和污垢是非常有用的。针对食品行业的换热器，Boxler 等[17]深入研究了流体脉动对其换热和结垢特性的影响，研究发现：间断式脉动比连续脉动除垢效果更好，而且随着脉动振幅的加大，会获得更好的除垢效果。郑小涛[18]通过实验的方法研究了脉动流下圆管内析晶污垢特性，发现脉动流作用下污垢热阻和稳态速度一样都是渐近生长曲线。

综合上述文献发现，目前许多研究已经表明脉动流既能显著增强传热，又能起到抑制污垢的效果。目前许多学者采用欧拉-欧拉法来模拟颗粒的沉积过程，但是多数研究是在稳态流条件下，关于脉动流条件下的颗粒污垢模拟研究还较少，尤其是对一些工况参数和脉动参数下的污垢变化规律研究还不太详细。因此本文首先基于欧拉-欧拉法构建了脉动流作用下的颗粒污垢模型，并从工况参数（入口速度、工质浓度、入口温度和壁面加热功率）和脉动参数（振幅和频率）两个方面，模拟研究了脉动流对矩形通道内颗粒污垢沉积的影响规律。

1 数学模型

1.1 控制方程

在本文中，流体以二氧化硅溶液为工质，根据工质的流动特性可知，流体为无内热源的不可压缩的三维流动，计算区域的连续性、动量、能量以及组分方程通用形式如下：

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}+div\left(\rho\vec{u}\,\phi\right)=div\left(\Gamma_{\varphi}grad\phi\right)+S_{\varphi} \tag{1}$$

式中，Γ_{φ}为广义扩散系数；Φ为通用变量，对于不同的控制方程表示不同的变量；S_{φ}广义源项；ρ为流体密度。$\vec{u}$ 为速度向量。

1.2 颗粒污垢模型

本文采用欧拉-欧拉方法，结合布朗和涡旋扩散沉积、湍流沉积、热泳沉积以及重力沉积构建的水中颗粒污垢的沉积模型[19]，得到沉积率如下：

$$m_{\mathrm{d}} = J = S_p \cdot u_{\mathrm{d}} \cdot C_{\infty} \tag{2}$$

其中，S_p 是粘附的概率；u_{d} 为沉积速度；C_{∞} 是整体颗粒浓度。

沉积到壁面上的颗粒污垢会在水流的冲刷或者其他颗粒的碰撞作用下脱离壁面，剥蚀率的大小与污垢厚度、污垢强度因子、流体剪切力等有关，计算公式为[20]：

$$m_r = K\left(\frac{\tau_w}{\psi}\right)x_f \tag{3}$$

式中，K 为剥蚀常数；ψ 为污垢层的强度因子；τ_w 为壁面剪切力；x_f 为污垢层厚度。

在计算中假设颗粒污垢在各个壁面的分布均匀，而且污垢整体物性参数是相同的，则污垢热阻计算公式[21]如下：

$$R_f = \frac{m_f}{\rho_f \lambda_f} \tag{4}$$

在上述式子中 ρ_f 为污垢层的密度，λ_f 为污垢层的导热率，其中 $\rho_f = \rho_p\left(1-\varepsilon\right)+\rho_l\varepsilon$，

$\lambda_f = \lambda_p(1-\varepsilon)+\lambda_l\varepsilon$，$\varepsilon$为孔隙率，$\varepsilon = \left(1-\dfrac{\rho}{\rho_p}\right)\times 100\%$。

1.3 脉动速度

本研究中脉动速度为工质入口流速与时间呈周期性变化，入口处的脉动流速按以下公式计算：

$$u = u_0 + u_1 \sin\left(2\pi n t\right) \tag{5}$$

其中 n 为电机的转速，r/min；u_1 为活塞运动的最大速度，u_0 为稳态流体速度，m/s，u_1 为脉动振幅，n/60 为脉动的频率。

2 数值方法及验证

2.1 物理模型

本文采用的几何模型是一个矩形通道，其长宽高分别为 1000mm，40mm，20mm，忽略其管壁的厚度，其物理模型示意图如 1 所示。在模拟过程中计算区域内的网格由 ANSYS ICEM 生成，由于计算重点区域在于管壁附近，因此对近壁面处的网格做加密处理。五种不同网格数下的污垢热阻变化如图 2 所示。从图中可以看出，网格数量从 301020 增长至 501202 时，污垢热阻值随网格数量的增加而减少，而在网格数量达到 601200 时，随着网格数量的增加，污垢热阻的变化趋于平稳。综合考虑提高计算精度和减少计算所需时间的因素，这里

取 60 万左右的网格进行后续计算。

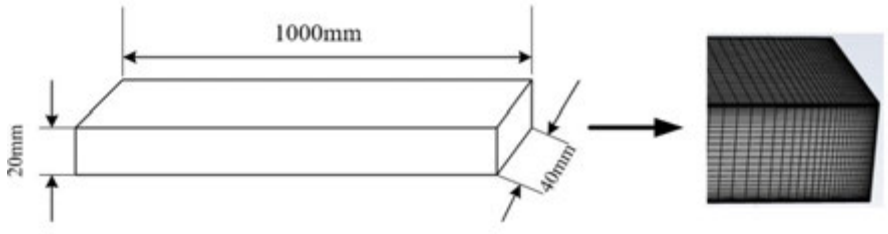


图 1 物理模型与网格划分

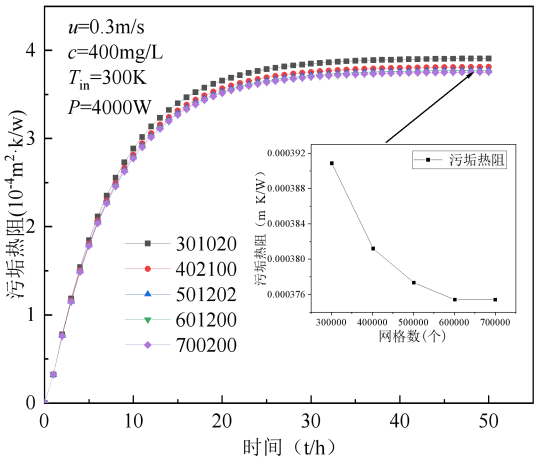


图 2 污垢热阻随网格数量变化图

2.2 数值方法

本文采用商业软件 Fluent2020 进行计算，速度与压力的耦合选用 SIMPLE 算法，选用二阶迎风格式求解连续性方程、动量方程、能量方程以及组分方程，压力的离散化由标准方案完成。连续性方程、动量及能量方程收敛残差为 10^{-6}。边界条件设定为：入口边界为速度入口，出口边界为压力出口，矩形通道底面为加热面，采取恒热流的加热方式，其余壁面设为绝热边界，壁面边界为无滑移边界条件。在入口速度处载入脉动速度 UDF 程序，重力方向沿底面竖直向下，工质入口温度为 298-304K，壁面恒热流加热功率 3000-5000W，溶液浓度 200-600mg/L，脉动平均速度为 0.3-0.7m/s，采用标准的 k-ε湍流模型。颗粒选择粒径 10μm 的二氧化硅颗粒，具体物性如表 1 所示。

表 1 10 微米下二氧化硅颗粒物性参数[22]

物性参数	密度(kg/m²)	导热系数(W/m²K)	孔隙率
数值	1900	1.62	25%

2.3 方法验证

为了验证模型方法的准确性，与 Zhang[22]所做实验进行对比分析，该实验段为内管长 1000mm，管径 25mm 的圆形套管。圆管内流速为 0.2m/s，入口温度为 298K，将外管内冷流体温度近似为内管管壁温度，壁面温度近似为 288K，采用 10 微米的二氧化硅颗粒作为实验颗粒，颗粒流体浓度为 0.4kg/m³，实验与模拟值对比如图 3 所示。从图中可以看到二者变化趋势相一致，最大误差小于 5%，对比结果较好，证明了本文数学模型的可靠性。

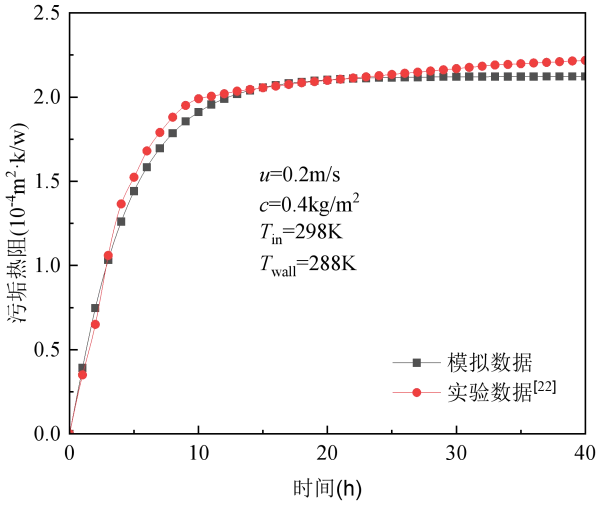


图 3 实验模拟对比图

3.模拟结果与分析

3.1 稳态速度与脉动速度下颗粒污垢特性对比

为了对比两种速度下矩形管道内的颗粒污垢特性，在壁面加热功率 4000W、入口温度 300K 以及 10 微米直径的二氧化硅颗粒下，分别以稳态入口速度 0.3m/s，脉动入口速度 u=0.3+0.2(2×3.14×100t)m/s 进行了模拟对比研究。图 4 所示为脉动速度与稳态速度下污垢热阻对比图。从图中可以看出，稳态速度下的污垢热阻与脉动速度下的污垢热阻都随着时间增加而增加并且最后逐渐达一个渐近值。此外，还可以看出，脉动速度下的污垢热阻渐近值要比稳态速度下的污垢热阻渐近值小，减小了 11.87%，说明脉动流具有一定的抑垢效果。

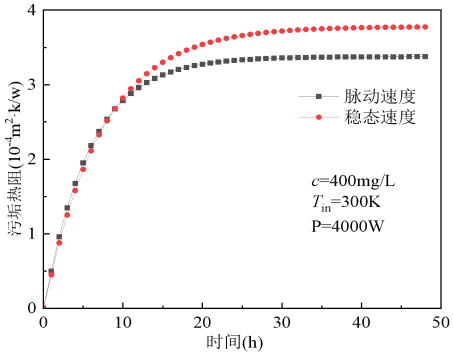


图 4 脉动速度与稳态速度污垢热阻对比图

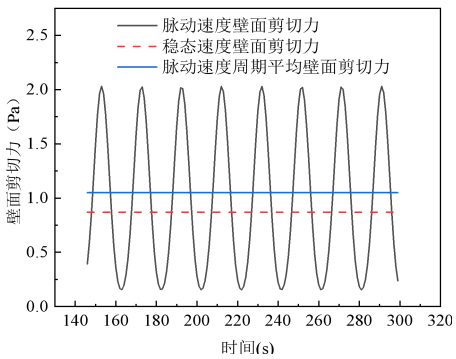
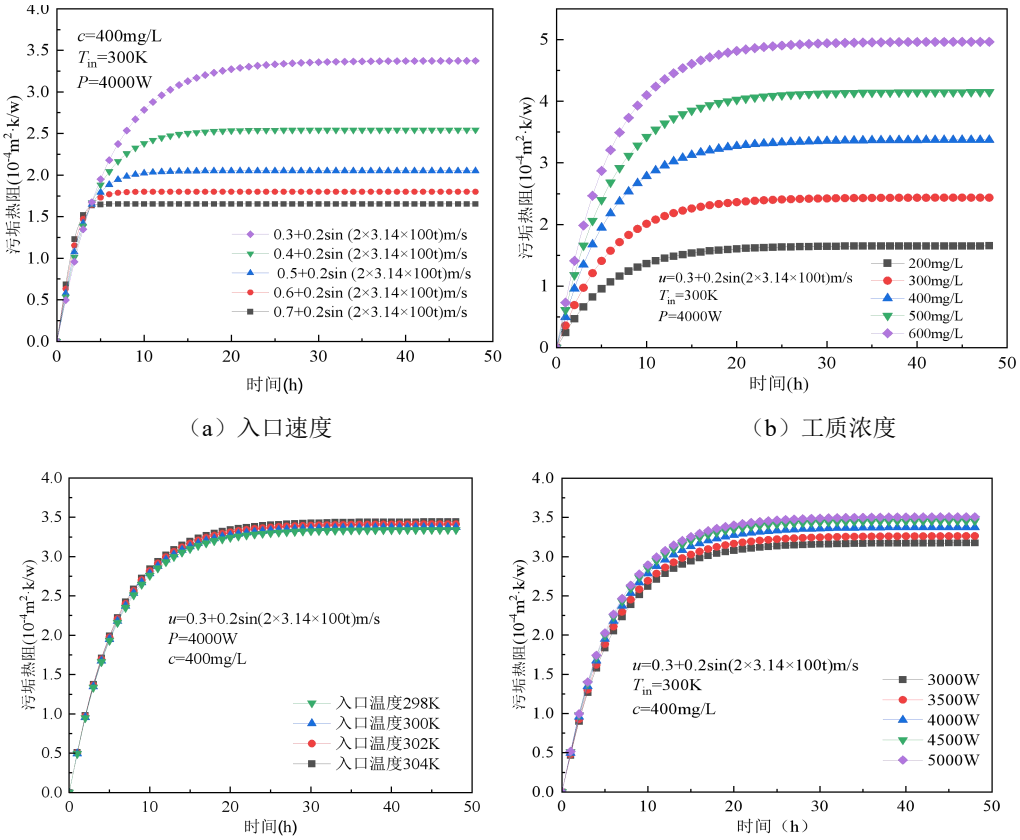


图 5 脉动速度与稳态速度壁面剪切力对比图

图 5 所示为脉动速度与稳态速度下壁面剪切力对比图，可以明显看出脉动速度周期平均壁面剪切力要大于稳态速度下的壁面剪切力数值，在二者沉积率相差不大的情况下，脉动速度下的壁面剪切力更大，这将使得脉动速度下的剥蚀速率更大，这就是脉动流能够抑垢的一个主要原因。

3.2 工况参数对污垢热阻的影响

在脉动流作用下，分析不同入口速度、工质浓度、入口温度以及壁面加热功率对颗粒污垢特性的影响。其中脉动平均速度为 0.3-0.7m/s、工质浓度 200-400mg/L、壁面加热功率 3000-5000W。不同入口速度、工质浓度、入口温度以及壁面加热功率下的污垢热阻曲线如图 6 所示。



（a）入口速度　　（b）工质浓度

（c）入口温度　　（d）壁面加热功率

图 6 不同工况下的污垢热阻曲线

从图(a)中可以看出，在不同的脉动入口速度下，高流速的污垢热阻明显小于低流速下的污垢热阻。这是因为高流速虽然有着更大的沉积率，但由于高流速相比于低流速拥有更强的壁面剪切力，从而有了更大的剥蚀率，最终导致高流速下的污垢热阻要小于低流速下的污垢热阻。图(b)可以看出，在不同的浓度下，高浓度下的污垢热阻明显大于低浓度下的污垢热阻。这是因为高浓度工况相比低浓度拥有更大的沉积率，而此时二者的壁面剪切力却相差不大，从而导致高浓度工况下有着更大的污垢热阻。图(c)可以看出，在不同的入口水温下，高入口水温下污垢热阻要略微大于低入口水温下的污垢热阻，但是差别不大。这是因为工质的粘度会因为入口温度的提高而降低，从公式看将导致涡旋扩散沉积速度，重力沉积速度与湍流沉积速度均会略微升高，从而导致沉积率略微增加，造成污垢热阻略微升高。图(d)可以看出，在不同的壁面加热功率下，高功率下的污垢热阻要略微大于低加热功率下的污垢热阻。因为随着加热功率的提高，工质温度提高，粘度会降低，粘度会影响到沉积率，低粘度将会导致沉积率略微升高，从而使污垢热阻略微升高。

3.3 脉动参数对污垢热阻的影响

为了探究脉动振幅对污垢特性的影响，以平均速度 0.3m/s 的工况进行对比模拟。保持工质脉动平均速度 0.3m/s，入口温度 300K，壁面加热温度 4000W，溶液浓度 400mg/L，脉动振幅在 0.1 到 0.25 之间变化。模拟所得污垢热阻曲线如图 7 所示，从图中可以看出，污垢热阻随着脉动振幅的增大而减小。

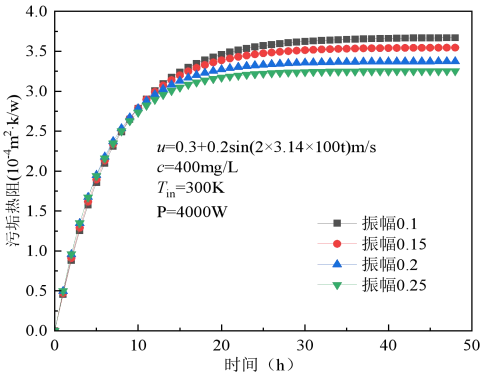


图 7 不同脉动振幅下的污垢热阻对比图

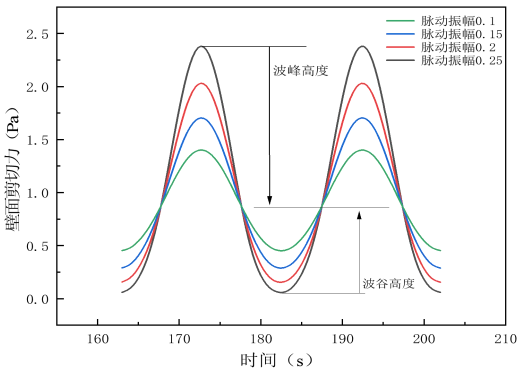


图 8 不同脉动振幅下的壁面剪切力对比图

这是因为如图 8 所示为不同脉动振幅下的壁面剪切力曲线，可以看到不同振幅下壁面剪切力随时间波动的周期相同，但是脉动振幅越大，壁面剪切力极大值和极小值之间的差值就越大。越大的脉动振幅下其剪切力随时间波动的幅度就越大，而不同振幅工况下曲线波峰处的差值要大于波谷处的差值，即高振幅在一个周期内的壁面剪切力平均值要大于低振幅处的壁面剪切力平均值，这就导致高振幅下剥蚀率变大，最终污垢热阻变小。

为了探究脉动频率对污垢特性的影响，以平均速度 0.3m/s 的工况进行对比模拟。保持工质脉动平均速度 0.3m/s，入口温度为 300K，壁面加热温度 4000W，溶液浓度 400mg/L，脉动频率在 0.42 到 1.66 之间变化。模拟所得污垢热阻曲线如下图 9 所示，从图中可以看出，污垢热阻随着脉动频率的增大而增大。

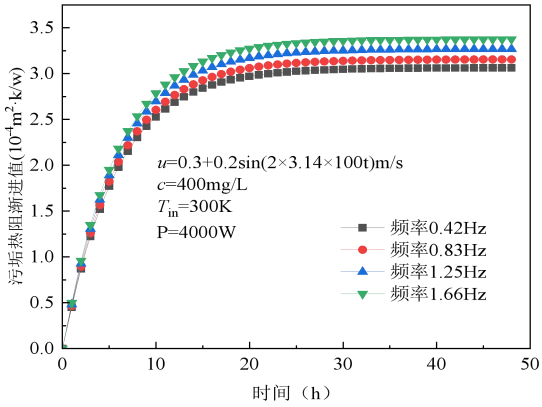


图 9 不同脉动频率下的污垢热阻对比图

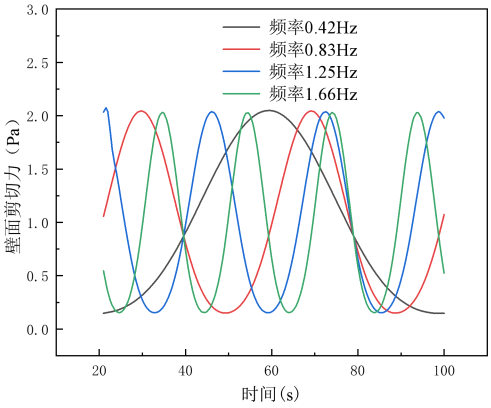


图 10 不同脉动频率下的壁面剪切力对比图

这是因为如图 10 所示为不同脉动频率下的壁面剪切力曲线，虽然可以看出不同脉动频率下，频率越大，一个周期的时间越小，但不同脉动频率下的壁面剪切力极大值与极小值无明显变化，因此不同脉动频率下，一个周期内的壁面剪切力平均值也将无明显变化，那么剪切力将不会影响污垢热阻值，即剥蚀率变化变大。但是如图 11 所示为不同脉动频率下沉积率变化曲线，可以看出脉动频率的变化对沉积率的极大值无影响，但脉动频率的增加会使沉积率的极小值增大，导致一个周期内的沉积率平均值变大，进而使污垢热阻变大。

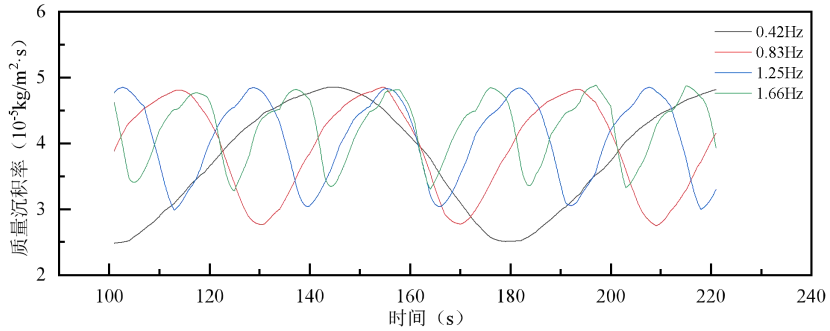


图 11 不同脉动频率下质量沉积率周期图

4 结论

本文采用欧拉-欧拉法构建了脉动流作用下颗粒污垢模型，根据构建的模型从工况参数和脉动参数两个方面对脉动流作用下矩形通道内颗粒污垢特性进行模拟研究，得到以下结论：

(1) 保持脉动速度平均值与稳态速度值相等，脉动速度下的污垢热阻值要小于稳态速度下污垢热阻值，表明脉动流相比于稳态流具有一定的抑垢效果。

(2) 在脉动流作用下，污垢热阻随入口速度的增大而减小；随浓度的增大而增大；随入口温度的增大而略有增大；随壁面加热功率增大而增大。

(3) 在脉动流作用下，污垢热阻随脉动振幅的增大而减小，随脉动频率的增大而增大。

参考文献

[1] 平宗保, 阿达依·谢尔亚孜旦, 阿米娜·卡德尔. 电化学机械光整加工在管束式换热器管件内表面中的应用研究[J]. 机床与液压, 2012, 40(7): 40-42.

[2] Steinhagen R., Steinhagen H. M., Maani K. Problems and costs due to heat exchanger fouling in new zealand industries[J]. Heat Transfer Engineering, 1993, 14(1): 19-30.

[3] Beal S. K. Deposition of particles in turbulent flow on channel or pipe walls[J]. 1970, 40(1): 1-9.

[4] Seyyedbagheri H., Mirzayi B. Eulerian Model to Predict Asphaltene Deposition Process in Turbulent Oil Transport Pipelines [J]. Energy & Fuels, 2017, 31: 8-12.

[5] Awais M., Bhuiyan AA. Bhuiyan, Recent advancements in impedance of fouling resistance and particulate depositions in heat exchangers[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 141: 580-603.

[6] Balakin B. V., Hoffmann A. C., Kosinski P. Experimental Study and Computational Fluid Dynamics Modeling of Deposition of Hydrate Particles in a Pipeline with Turbulent Water Flow[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(4): 755-765.

[7] Jiang H., Lu L., Sun K. Simulation of particle deposition in ventilation duct with a particle–wall impact model[J]. Building and environment, 2010, 45(5): 1184-1191.

[8] Guo Z.X., Sung J.H. Analysis of the Nusselt number in pulsating pipe flow[J]. Heat Mass Transfer, 1997, 40(10): 2486-2489.

[9] 钱浩. 脉动流强化板式换热器换热的实验研究及数值分析[D]. 镇江: 江苏科技大学, 2020.

[10] Baird M., Duncan G.J., Smith J.I., et al. Heat transfer in pulsed turbulent flow[J]. Chemical Engineering Science, 1966, 21: 197-199.

[11] Zontul H., Şahin B. Experimental investigation of convective heat transfer performance and hydrodynamics of pulsating flow through the rectangular grooved channel[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2023, 141: 110769.

[12] Duan D., Cheng Y., Ge M., et al. Experimental and numerical study on heat transfer enhancement by

Flow-induced vibration in pulsating flow[J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 207: 118117.

[13] Mojtaba J., Cathy C., Hassan P. Secondary flow patterns and mixing in laminar pulsating flow through a curved pipe [J]. Experiments in Fluids, 2011,50(6):1539-1558.

[14] Blel W., Legentilhomme P., Benezech T. Application of turbulent pulsating flows to the bacterial removal during a cleaning in place procedure. Part 2: Effects on cleaning efficiency[J]. Journal of Food Engineering, 2009, 90(4): 433-440.

[15] Springer F., Ghidossi R., Carretier E., et al. Study of the Effect of Geometry on Wall Shear Stress and Permeate Flux for Ceramic Membranes: CFD and Experimental Approaches[J]. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, 2010, 4(1):17-28.

[16] Lemlich R. Vibration and pulsation boost heat transfer[J]. Chem. Eng, 1961, 68(10): 171-176.

[17] Boxler C., Augustin W., Scholl S. Composition of milk fouling deposits in a plate heat exchanger under pulsed flow conditions[J]. Journal of Food Engineering, 2014, 11(21): 1-8.

[18] 郑小涛, 徐成, 喻九阳, 等. 脉动流下热交换圆管抑垢实验研究[J]. 石油化工设备, 2013, 42(02): 1-4.

[19] Han Z., Xu Z., Yu X., CFD modeling for prediction of particulate fouling of heat transfer surface in turbulent flow, International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 144: 118428.

[20] Hinze J. O. Turbulence[M]. Mc Graw-Hill: New York, 1975.

[21] Talbot L., Cheng R. K., Schefer R. W., et al. Thermophoresis of particles in a heated boundary layer[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1980, 101: 737-758.

[22] Zhang N., Wei X., Yang Q., et al. Numerical simulation and experimental study of the growth characteristics of particulate fouling on pipe heat transfer surface[J]. Heat & Mass Transfer, 2019, 55: 687-698.

中国工程热物理学会 学科类别：数值计算
学术会议论文 编号：233257

航空发动机燃-滑油热管理系统巡航特性分析

杨世宇，林远方，徐向华，梁新刚
（清华大学航天航空学院热科学与动力工程教育部重点实验室，北京 100084）
(Tel:15811526719, Email: sy-yang20@mails.tsinghua.edu.cn)

摘要：为研究航空发动机燃-滑油热管理系统的巡航特性，基于 Python 语言自主开发了仿真程序并进行了实验验证。建立了燃-滑油系统与飞机参数的耦合分析模型，并通过巡航控制方程得到了不同巡航状态下系统的边界参数。研究了系统的高度特性，结果表明巡航高度的增加会引起燃烧室供油量的增大，使得热回油流量下降，设计参数下当巡航高度达到 12 km 时，热管理阀完全关闭。为保证系统中各温度监测点均不超温，设计参数下巡航高度的允许范围为 2.2~25 km。分析了飞机阻力比对热管理系统巡航性能的影响，结果表明阻力比的增加可以提升系统的散热性能，在整个巡航高度范围内，当阻力比增至 3 时，热管理阀始终处于关闭状态，当阻力比增至 2 时，各监测点的温度均不超过限制值。

关键词：燃-滑油热管理，巡航特性，数值模拟，高度特性，阻力比

0 前言

随着飞行技术的不断发展，飞行器内部的热载荷越来越大[1]，同时结合飞行器隐身性能的苛刻要求，冲压空气的引气面积越来越小，使得用于冷却机载设备的空气流量受限[2]，因此，以燃油为主要热沉的飞行器燃油热管理系统逐渐受到重视[3]。航空发动机燃-滑油热管理系统是飞行器燃油热管理系统的重要组成部分，其性能的优劣直接关系到飞行器的安全，而目前先进飞行器上发动机的燃油进口温度已经接近能够正常使用的极限值[4]，所以研究燃-滑油热管理系统的流动换热特性变得十分重要。

以 Doman 等[5-10]为代表的国外学者偏重于从宏观的角度进行飞行器热管理系统的热-质流分析及控制算法的研究，其中各部件的流动换热模型多采用零维简化的方法进行处理，并且仅将航空发动机视为热载荷边界，未展开分析发动机燃-滑油热管理系统内部的流动换热特性，相关的仿真模型和流路需要进一步完善。

在国内学者的研究中，发动机与飞机相对独立，很少考虑飞机参数对发动机热管理系统性能的影响。苏壮等[4]基于热管理的分析方法对比了三种发动机滑油系统的散热方案，并提出了相关的优化建议；李波等[11]采用商业软件 AMESim 搭建了发动机燃油热管理系统的流路，并通过实验验证了仿真计算的准确性；康思昭等[12]使用商业软件 Flowmaster 建立了某型航空发动机的燃油系统，并研究了向飞机热回油对系统温度的影响；王海鹰等[13]分析了热管理系统中燃油温升和达到热平衡所需的时间与发动机工作状

基金项目：国家科技重大专项(2019-III-0001-0044)

态的关系，结果表明小工作状态下，燃油的温升更大，并且热平衡的时间更长；张东辉[14]通过能量分析明确了影响发动机燃油系统消耗功率的主要因素，并提出了降低燃油系统输入功率的热管理方案。

建立完整的航空发动机燃-滑油热管理系统流路，同时将飞机参数与发动机热管理系统的特性进行耦合分析十分重要。考虑到巡航工况是飞行器任务剖面中持续时间最长的工况[15]，该工况下航空发动机燃-滑油热管理系统的流动换热特性直接决定了飞行器的性能，因此，本文基于 Python 语言自主开发了航空发动机燃-滑油系统稳态仿真程序，并分析了热管理系统的巡航特性以及飞机参数对系统巡航特性的影响，相关内容可为实际工程应用提供一定的技术指导。

1 仿真程序

1.1 部件模型

航空发动机燃-滑油系统可视为一维热流体网络[16]，各部件按功能可划分为驱动部件、阻力部件、换热部件和控制部件，接下来建立各部件的稳态流动换热方程。其中典型的驱动部件包括离心泵和齿轮泵，离心泵可按线性泵进行流量-压升特性的计算[17]：

$$\Delta p_{\mathrm{c}} = a\dot{m}_{\mathrm{c}} + b \tag{1}$$

式中 Δp_{c} 为离心泵进、出口的压升，a 和 b 为与泵转速和工质种类有关的系数，$\dot{m}_{\mathrm{c}}$ 为质量流量。

齿轮泵为容积式泵，其流量-压升特性为[18]：

$$\dot{V}_{\mathrm{g}} = \dot{V}_{\mathrm{g,t}}\left(1 - C_{\mathrm{s}}\frac{\Delta p_{\mathrm{g}}}{\mu n}\right) \tag{2}$$

式中 $\dot{V}_{\mathrm{g}}$ 为齿轮泵的实际体积流量，$\dot{V}_{\mathrm{g,t}}$ 为理论体积流量，C_{s} 为内泄漏系数，Δp_{g} 为进、出口的压升，μ 为流体的动力黏度，n 为泵转速。

由于效率损失，当流体经过泵时，一部分输入功会转化成流体的内能，对流体产生一定的加热作用，相应的计算式为：

$$\dot{Q}_{\mathrm{p}} = \left(\frac{1}{\eta} - 1\right)\dot{V}\Delta p \tag{3}$$

式中 $\dot{Q}_{\mathrm{p}}$ 为泵对流体的加热功率，η 为总效率，$\dot{V}$ 为体积流量，Δp 为进、出口的压升。

阻力部件中圆管的流动阻力特性用 Darcy 公式进行计算，其中摩擦因子按 Filonenko 公式给出[19]：

$$\text{层流：} f = \frac{64}{Re} \tag{4}$$

$$\text{湍流：} f = (1.82\lg Re - 1.64)^{-2} \tag{5}$$

式中 f 为圆管的摩擦因子，Re 为流动雷诺数。

圆管的对流换热特性用 Sieder-Tate 公式和 Gnielinksi 公式进行计算[19]：

$$\text{层流：}Nu = 1.86(\frac{Re \cdot Pr}{l/d})^{1/3} \tag{6}$$

$$\text{湍流：}Nu = \frac{(f/8)(Re-1000)Pr}{1+12.7\sqrt{f/8}(Pr^{2/3}-1)}[1+(\frac{d}{l})^{2/3}] \tag{7}$$

式中 Nu 为对流换热的努塞尔数，Pr 为流体的普朗特数，d 为内径，l 为管长。

阀门的流动阻力特性可用下式进行计算[20]：

$$\Delta p_{\mathrm{v}} = \xi \cdot \frac{1}{2}\rho u^2 \tag{8}$$

式中 Δp_{v} 为阀门引起的压降，ξ 为阻力系数，与阀门的开度和雷诺数有关，ρ 为流体的密度，u 为流速。

当流体经过阻力部件时，由于黏性耗散的作用，部分机械能会转化成内能，起到一定的加热作用，可用下式进行黏性耗散热 $\dot{Q}_{\mathrm{dis}}$ 的计算：

$$\dot{Q}_{\mathrm{dis}} = \dot{V}\Delta p_{\mathrm{r}} \tag{9}$$

式中 Δp_{r} 为阻力部件的压降。

燃-滑油系统中常见的换热器结构有管壳式和管翅式，在仿真程序中均采用通用的换热器模型进行计算，每侧流体的阻力可按式(4)、式(5)以及式(8)进行计算，换热量 $\dot{Q}_{\mathrm{h}}$ 的计算式为[19]：

$$\dot{Q}_{\mathrm{h}} = KA\Delta T_{\mathrm{m}} \tag{10}$$

式中 K 为换热器的总传热系数，A 为换热面积，ΔT_{m} 为对数平均换热温差，相应的计算式为：

$$\Delta T_{\mathrm{m}} = \frac{\Delta T_{\max} - \Delta T_{\min}}{\ln(\frac{\Delta T_{\max}}{\Delta T_{\min}})} \tag{11}$$

式中 $\Delta T_{\max}$ 和 $\Delta T_{\min}$ 分别为换热器两端冷、热流体之间温差中的最大值和最小值。

在液压式燃-滑油系统中，为保证供油的稳定性，常常采用调压活门或压差活门来控制某些部件的压力或压差基本不变[18]，这类控制部件可看作开度与压力或压差有关的阻力部件，同样按式(8)计算其流动阻力特性，按式(9)计算其黏性耗散热，其中阻力系数和系统的压力场进行了耦合。

1.2 系统求解

采用热流体网络的计算思路进行系统求解，首先通过串联简化算法将系统划分成由节点和支路构成热流体网络[21]。当系统的流动换热处于稳态时，对于第 i 个节点，可以建立相应的质量守恒方程：

$$(\sum \dot{m}_{\mathrm{in}} - \sum \dot{m}_{\mathrm{out}})_i = 0 \tag{12}$$

式中 $\dot{m}_{\text{in}}$ 和 $\dot{m}_{\text{out}}$ 分别为流进和流出该节点的某支路的质量流量。

对于第 j 条支路，可以建立相应的动量方程：

$$(p_{\text{up}} - p_{\text{down}})_j = \mathrm{f}_j(\dot{m}, \vec{\boldsymbol{T}}, \tilde{p}_{\text{c}}) \tag{13}$$

式中 p_{up} 和 p_{down} 分别为该支路上、下游节点的压力，f_j 为支路 j 的压降计算函数，$\dot{m}$ 为质量流量，$\vec{\boldsymbol{T}}$ 为支路沿流向的温度分布，$\tilde{p}_{\text{c}}$ 为与压力/压差调控部件(如果存在)有关的控制压力/压差。

对于具有 m 个未知压力的节点和 n 条未知流量的支路的系统而言，其流动的稳态控制方程组为：

$$\begin{cases} \mathrm{F}_1(\vec{\boldsymbol{x}}, \vec{\boldsymbol{y}}) = 0 \\ \mathrm{F}_2(\vec{\boldsymbol{x}}, \vec{\boldsymbol{y}}) = 0 \\ \cdots \\ \mathrm{F}_{m+n}(\vec{\boldsymbol{x}}, \vec{\boldsymbol{y}}) = 0 \end{cases} \tag{14}$$

式中 $\vec{\boldsymbol{x}}$ 为各节点和支路的未知压力与未知流量的解向量，$\vec{\boldsymbol{y}}$ 为各节点和支路的未知混合比焓和未知流出比焓的解向量。

对于系统的换热求解而言，稳态时第 i 个节点的能量守恒方程为：

$$\overline{h}_i = \left(\frac{\sum \dot{m}_{\text{in}} h_{\text{in}}}{\sum \dot{m}_{\text{in}}}\right)_i \tag{15}$$

式中 $\overline{h}_i$ 为第 i 个节点的混合比焓，h_{in} 为流进该节点的某支路的流体比焓。

对于第 j 条支路，其焓变方程为：

$$(h_{\text{in}} - h_{\text{out}})_j = \mathrm{g}_j(\dot{m}, \vec{\boldsymbol{p}}, T_{\text{in}}, T_{\text{c,in}}, \tilde{e}) \tag{16}$$

式中 h_{in} 和 h_{out} 分别为该支路的进、出口比焓，g_j 为支路 j 比焓降计算函数，$\vec{\boldsymbol{p}}$ 为支路沿流向的压力分布，T_{in} 为支路的进口温度，$T_{\text{c,in}}$ 为支路中换热器(如果存在)另一侧流体的进口温度，$\tilde{e}$ 为环境变量。

对于具有 s 个未知混合比焓的节点和 t 条未知流出比焓的支路的系统而言，其换热控制方程组可写作：

$$\begin{cases} \mathrm{H}_1(\vec{\boldsymbol{x}}, \vec{\boldsymbol{y}}) = 0 \\ \mathrm{H}_2(\vec{\boldsymbol{x}}, \vec{\boldsymbol{y}}) = 0 \\ \cdots \\ \mathrm{H}_{s+t}(\vec{\boldsymbol{x}}, \vec{\boldsymbol{y}}) = 0 \end{cases} \tag{17}$$

对方程组(14)和(17)进行流动与换热的解耦计算，具体的流程如图 1 所示。

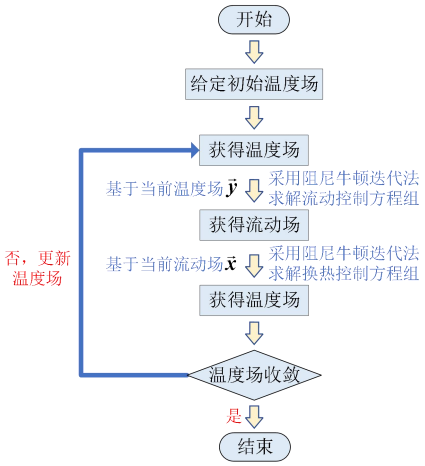


图 1 流动与换热的解耦计算流程图

图 1 所示的解耦计算中的阻尼牛顿迭代法[22]可以提高方程组求解的收敛性，在得到各个节点和支路的稳态流动换热参数后，支路内各部件的进、出口流动换热参数由支路的类方法自动更新。

1.3 仿真程序的实验验证

为验证稳态仿真程序的准确性，课题组搭建了燃-滑油系统模拟实验装置[23]，其中滑油系统的工质为航空 4050 润滑油，燃油系统的工质采用 SF-2 高温导热硅油(热物性与 RP-3 航空煤油相似)。

在设定的三个标准工况下，对比了燃-滑油系统模拟实验装置中各比较点处压力、流量和温度的实验与仿真结果，具体如表 1 所示。

表 1 燃-滑油系统模拟实验装置的仿真与实验结果对比

工况序号	流动的平均误差/%	换热的平均误差/%
1	3.22	3.43
2	3.17	3.75
3	3.66	3.73

从表 1 所示的对比结果可以看出，在三个标准工况下，稳态仿真程序中流动的平均误差和换热的平均误差均不大于 4%，证明了稳态仿真程序的准确性。

2 燃-滑油热管理系统

2.1 工作原理

本文所研究的航空发动机燃-滑油热管理系统流路如图 2 所示，其中包括了简化的飞机燃油系统部分以及热管理系统与大气环境的交互边界。

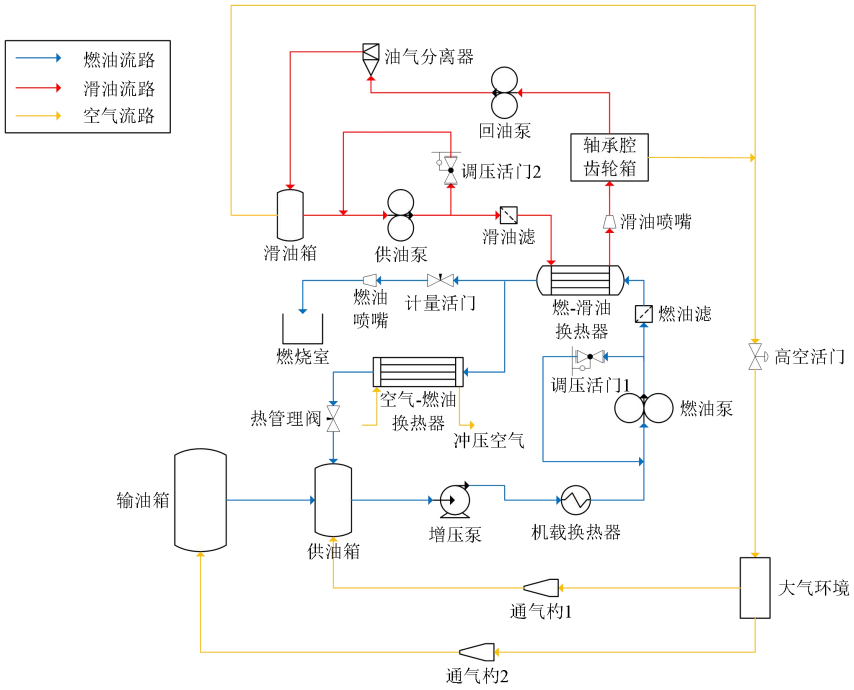


图 2 航空发动机燃-滑油热管理系统流路图

燃油流路中输油箱的作用是补充供油箱中消耗的燃油，使得在输油箱中的燃油耗尽前，供油箱中的燃油始终处于满油状态[24]。来自供油箱的燃油首先由增压泵抽出，随后进入机载换热器冷却全权限数字式发动机控制系统（FADEC）、电子舱系统以及蒸汽循环系统（VCS）等[25]，吸收热量后的燃油进入发动机。发动机进口的燃油被燃油泵进一步增压后，一部分经燃油滤过滤后进入燃-滑油换热器对发动机滑油系统进行冷却，多余的燃油经过调压活门 1 返回燃油泵前。计量活门的作用是调节进入燃烧室的燃油流量为所需值，当燃油喷嘴前温度超过限制值(结焦温度)时，热管理阀打开，增加进入燃-滑油换热器的燃油流量，使得燃油喷嘴前温度保持在限制值附近，这是由 PID 控制器实现的。返回飞机的燃油(被称作热回油)被空气-燃油换热器冷却后进入供油箱，其中供油箱和输油箱分别由通气杓 1 和通气杓 2 保持一定的压力[26]。

滑油流路中的高温滑油首先由供油泵从滑油箱中抽出，其中一部分经过滑油滤过滤后进入燃-滑油换热器，调压活门 2 的作用是保证滑油系统的循环量基本不变。被冷却后的滑油经过滑油喷嘴被供向各个轴承腔和齿轮箱，随后由回油泵抽回滑油箱。在使用过的滑油返回滑油箱前，需要用油气分离器将回油中的空气除去。滑油箱、轴承腔以及齿轮箱通过通风管与外界大气相连，为了保证滑油系统具有一定的压力，在通风管与外界大气之间设置有高空活门[27]。

当发动机燃-滑油热管理系统处于巡航工况时，由于供油箱的容积较小，在边界条件不变的情况下，系统很快可以达到流动换热的稳态，因此，本文主要通过稳态分析的方法研究热管理系统的巡航特性。考虑到滑油从供向轴承腔/齿轮箱到返回滑油箱的过程在稳态分析中可被近似看作一个吸热过程，故在仿真中将发动机滑油系统的回油路省略，

并将轴承腔/齿轮箱看作一个加热器(提供滑油热载荷)。同时在仿真中假设冲压空气的流量足够大，不考虑空气-燃油换热器中空气侧流体的进、出口温度变化[10]。

2.2 系统参数

图 2 所示的燃-滑油热管理系统具有多个部件，其中主要的部件参数以及巡航工况下的工作参数如表 2 所示。

表 2 燃-滑油热管理系统的主要参数

参数/单位	数值	参数/单位	数值
增压泵转速/$\mathrm{r\cdot min^{-1}}$	10000	计量活门阻力系数	$60(1+\frac{1}{S^2})$
机载换热器功率/kW	85	燃油喷嘴阻力系数	$\frac{9000}{Re}+16$
燃油泵转速/$\mathrm{r\cdot min^{-1}}$	12000	燃油侧管径/m	0.014
燃油泵理论排量/$\mathrm{m^3\cdot r^{-1}}$	2×10^{-5}	燃油侧管段长度/m	0.1
燃油泵泄漏系数/r	1×10^{-8}	燃烧室压力/MPa	1.5
调压活门 1 预紧力/N	196	通气杓总压恢复系数	0.8
调压活门 1 面积/$\mathrm{m^2}$	4×10^{-5}	供油泵转速/$\mathrm{r\cdot min^{-1}}$	9000
调压活门 1 阻力系数	$100(1+\frac{1}{S^2})$	供油泵理论排量/$\mathrm{m^3\cdot r^{-1}}$	7.5×10^{-6}
燃油滤阻力系数	5	调压活门 2 预紧力/N	24
燃-滑油换热器面积/$\mathrm{m^2}$	1.2	调压活门 2 面积/$\mathrm{m^2}$	8×10^{-5}
空气-燃油换热器热导/$\mathrm{W\cdot K^{-1}}$	200	调压活门 2 阻力系数	$10(1+\frac{1}{S^2})$
热管理阀阻力系数	$300(1+\frac{1}{S^2})$	滑油滤阻力系数	5
滑油喷嘴阻力系数	$\frac{5000}{Re}+8$	滑油系统加热功率/kW	51
滑油侧管径/m	0.01	滑油侧管段长度/m	0.1
燃油泵总效率	0.7	供油泵泄漏系数/r	1×10^{-8}
供油泵总效率	0.7	增压泵总效率	0.6

注：表 2 中 S 为阀门的开度，0 表示阀门关闭，1 表示阀门全开。

由于工质的使用温度和系统冷却的要求，图 2 中存在多个温度限制点[28]，其中被监测的温度有滑油箱内部温度 T_{c1}、供油箱的出口温度 T_{c2}、燃油喷嘴前温度 T_{c3} 以及供油箱的热回油温度 T_{c4}，具体的温度限制值如表 3 所示。

表 3 燃-滑油热管理系统的温度限制值

位置	符号	限制值/K	位置	符号	限制值/K

滑油箱内部	$\overline{T}_{c1}$	485	供油箱出口	$\overline{T}_{c2}$	333
燃油喷嘴前	$\overline{T}_{c3}$	418	供油箱热回油进口	$\overline{T}_{c4}$	360

2.3 巡航控制方程

当飞行器的巡航状态改变时，航空发动机的推力要求会发生变化，此时燃油系统供向燃烧室的燃油流量也会变化，同时巡航状态的改变还会引起飞行马赫数和大气温度等参数的改变，这都会影响航空发动机燃-滑油热管理系统的工作状态。因此，需要建立热管理系统的巡航控制方程来计算巡航时系统的流动换热特性。

通过流路分析可知，当表 2 中的参数保持不变时，图 2 中的燃-滑油热管理系统处于稳态巡航状态下的流动换热参数由燃烧室供油量、冲压空气温度、高空活门控制压力以及通气构控制压力确定。本文采用 Doman 的分析方法[29]，根据飞机处于巡航状态时的受力平衡方程可以得到燃烧室供油量以及冲压空气温度的计算式：

$$\dot{m}_{e}=\frac{W}{g}\sqrt{\frac{(\lambda+1)^{2}}{\lambda}C_{D_0}K}\left[C_{F_0}+C_{F_M}\left(\frac{2}{\gamma RT_{\infty}\rho_{\infty}}\frac{W}{A_0}\sqrt{\frac{\lambda K}{C_{D_0}}}\right)^{1/2}\right] \tag{18}$$

$$T_{w}=T_{\infty}\left(1+r\frac{\gamma-1}{2}Ma^{2}\right) \tag{19}$$

式中 $\dot{m}_{e}$ 为燃烧室供油量，W 为飞行器重力，g 为重力加速度，取为 $9.80\,\mathrm{m\cdot s^{-2}}$，$\lambda$ 为飞机的摩擦阻力与诱导阻力之比(简称阻力比)，C_{D_0} 为摩擦阻力系数，K 为升致阻力因子，C_{F_0} 和 C_{F_M} 为发动机单位推力耗油率 TSFC 中的系数，γ 为空气的比热比，取为 1.4，R 为气体常数，取为 $287\,\mathrm{J\cdot(kg\cdot K)^{-1}}$，$T_{\infty}$ 为大气温度，ρ_{∞} 为大气密度，A_0 为机翼面积，T_{w} 为冲压空气温度，r 为温度恢复因子，Ma 为飞行马赫数，用下式计算：

$$Ma=\left(\frac{2}{\gamma RT_{\infty}\rho_{\infty}}\frac{W}{A_0}\sqrt{\frac{\lambda K}{C_{D_0}}}\right)^{1/2} \tag{20}$$

在高空活门的作用下，滑油系统中轴承腔压力 p_{ch} 是大气压力 p_{∞} 的函数[27]：

$$p_{ch}=p_{ch}(p_{\infty}) \tag{21}$$

输油箱和供油箱的压力可用下式进行计算[26]：

$$p_{t}=\psi p_{\infty}\left(1+\frac{\gamma-1}{2}Ma^{2}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \tag{22}$$

式中 p_{t} 为燃油箱压力，ψ 为通气构的总压恢复系数。

通过上述分析可知，当飞机的结构参数保持不变时，燃-滑油热管理系统稳态巡航时的流动换热特性由大气参数 T_∞， ρ_∞ 以及 p_∞ 决定。当飞行高度低于 11 km 时，飞行器处于对流层，此时的大气参数可由下式进行计算[29, 30]：

$$T_\infty = T_0 + a_g h \tag{23}$$

$$\rho_\infty = \rho_0 \left(\frac{T_\infty}{T_0}\right)^{-\left(\frac{g}{a_g R}+1\right)} \tag{24}$$

$$p_\infty = p_0 \left(1 - \frac{a_g h}{T_0}\right)^{\frac{g}{a_g R}} \tag{25}$$

式中 $T_0 = 288.16$ K， $\rho_0 = 1.225$ kg·m^{-3}， $p_0 = 101.325$ kPa， a_g 为沿海拔高度的温度变化率，取为 –0.0065 K/m， h 为巡航高度。

当飞行高度处于 11~25 km 时，飞行器处于平流层，此时的大气参数可用下式进行计算：

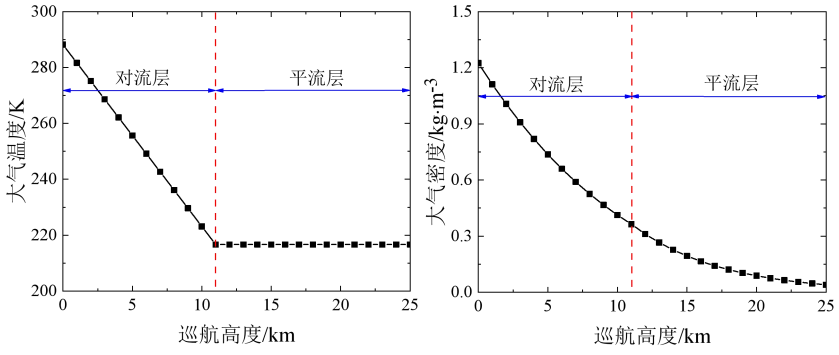
$$T_\infty = T_\Delta \tag{26}$$

$$\rho_\infty = e^{\left[\frac{-g(h-h_\Delta)}{RT_\Delta}\right]} \rho_\Delta \tag{27}$$

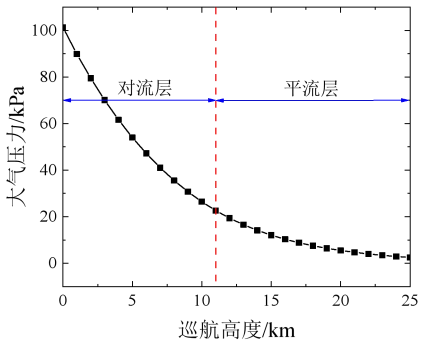
$$p_\infty = e^{\left[\frac{-g(h-h_\Delta)}{RT_\Delta}\right]} p_\Delta \tag{28}$$

式中下标 Δ 表示位于对流层顶部的大气参数。

由式(23)-式(28)可以得到 T_∞、 ρ_∞ 和 p_∞ 随巡航高度的变化，具体如图 3 所示。



(a) (b)



(c)

图 3 大气参数随巡航高度的变化

由图 3 可以看出，大气参数是巡航高度的单值函数，因此，在飞行器的结构参数一定时，燃-滑油热管理系统的稳态巡航特性由巡航高度唯一确定。下面重点分析在对流层和平流层的全巡航高度范围内，不同巡航高度下燃-滑油热管理系统的稳态巡航性能，在仿真计算时，飞行器的主要结构参数如表 4 所示。

表 4 飞行器的主要结构参数

参数/单位	数值
W /N	260800
λ	1
C_{D_0}	0.02
C_{F_0} / s^{-1}	1.9167×10^{-4}
C_{F_M} / s^{-1}	9.5833×10^{-5}
r	0.888
A_0 / m^2	88.26
K	0.08

3 结果分析

3.1 高度特性

首先分析燃-滑油热管理系统的高度特性，在不同的巡航高度下，由于高空活门和通气杓的作用，可以忽略轴承腔和燃油箱的压力变化对热管理系统工作性能的影响。通过式(18)-式(20)可以得到燃烧室供油量、冲压空气温度以及飞行马赫数与巡航高度的关系，具体如图 4 所示。

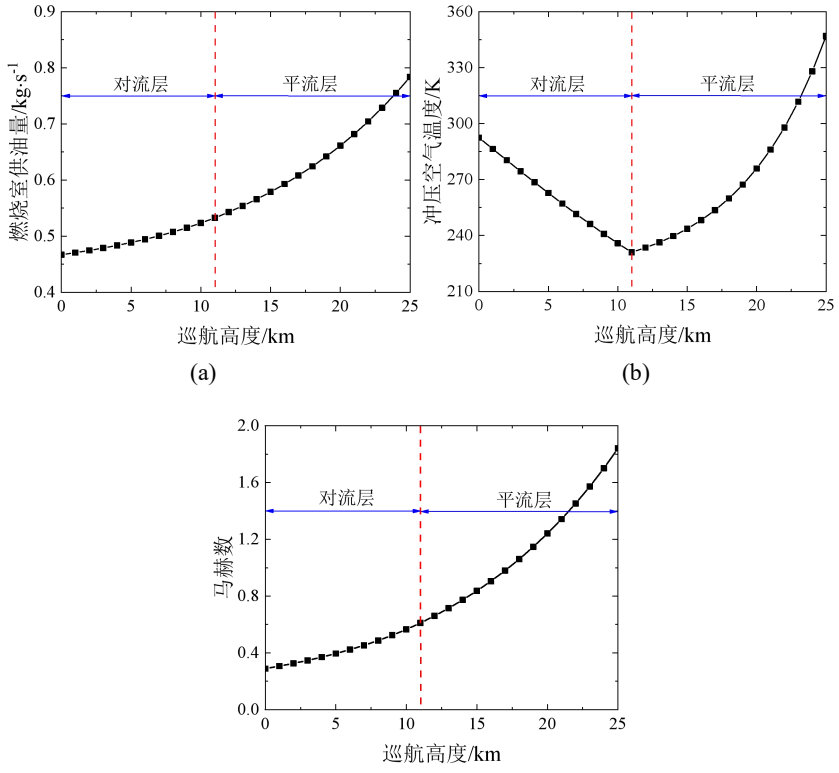


图 4 巡航参数随巡航高度的变化

由图 4-(a)可以看出，随着巡航高度的增加，燃烧室供油量逐渐增加，这是因为在对流层中，随着巡航高度的增加，大气温度 T_∞ 和大气密度 ρ_∞ 都下降，根据式(18)可知，燃烧室供油量随之增加。而在平流层中，虽然 T_∞ 不再变化，但是 ρ_∞ 依旧随着高度的增加而减小，同样会引起燃烧室供油量的增加。根据式(20)，T_∞ 和 ρ_∞ 对飞行马赫数的影响和燃烧室供油量类似，因此飞行马赫数随巡航高度的增加而变大，具体如图 4-(c)所示。从图 4-(b)可以看出，在对流层中随着高度的增加，冲压空气温度逐渐下降，这是因为虽然马赫数随高度的增加而逐渐增加，T_∞ 的下降对式(19)的影响更大。而在平流层中，由于 T_∞ 保持不变且马赫数随高度的增加而变大，导致冲压空气温度随巡航高度的增加而逐渐升高。

设置热管理系统的初始温度为 288.16 K（输油箱温度），根据热管理阀的控制策略，可以得到不同巡航高度下稳态时系统的热回油流量以及各监测点温度随巡航高度的变化，具体如图 5 所示。

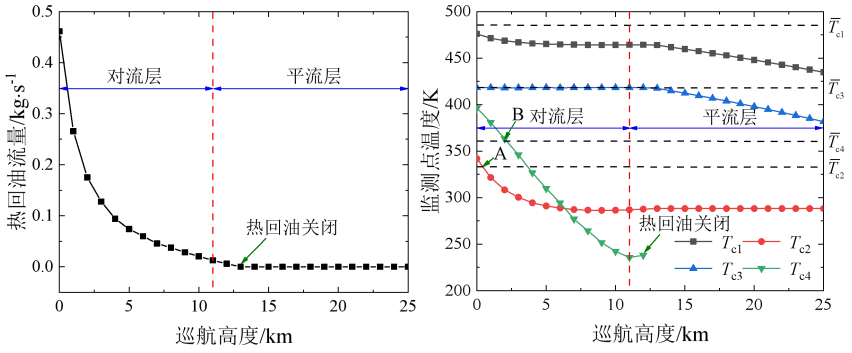


图 5 热回油流量和各监测点温度随巡航高度的变化

从图 5-(a)可以看出，随着巡航高度的增加，由于燃烧室所需燃油流量的增加，通过燃烧带走的系统热载荷增多，此时需要通过热回油排散给冲压空气的热量减少，使得热回油流量逐渐下降，当巡航高度达到 12 km 时，热管理阀完全关闭。

在图 5-(b)所示的对流层段，随着巡航高度的增加，由于热回油流量的下降以及燃烧室供油量的增加，使得返回供油箱的热回油减少并且从输油箱进入供油箱的冷燃油增多，导致供油箱出口温度 T_{c2} 的下降。T_{c2} 的下降会引起进入燃-滑油换热器的燃油温度降低，从而造成滑油箱温度 T_{c1} 的下降。同时随着巡航高度的增加，空气-燃油换热器空气侧的冲压空气温度逐渐下降，而热回油流量也是不断下降的，在二者的综合作用下，返回供油箱的燃油温度 T_{c4} 快速下降。从仿真结果可以看出，当巡航高度低于 2.2 km 时，T_{c4} 超过限制值(见图 5-(b)中 B 点)，这是由于冲压空气温度较高且热回油流量较大所致。当巡航高度低于 0.4 km 时，T_{c2} 超过限制值(见图 5-(b)中 A 点)，这是由于进入供油箱的冷燃油较少且热回油较多所致。在整个对流层高度范围内，T_{c1} 未超过限制值，同时燃油喷嘴前温度 T_{c3} 被热管理阀有效地控制在限制值附近。

在图 5-(b)所示的平流层段，热回油流量随巡航高度的增加变化很小，使得各监测点温度在热管理阀关闭前变化不大，其中 T_{c4} 的回升是由于冲压空气温度的升高所致。当热管理阀完全关闭后，由于没有热回油，T_{c2} 始终保持输油箱中燃油温度的初始值 288.16 K。然而由于燃烧室供油量随巡航高度的增加不断增大，使得 T_{c3} 和 T_{c1} 随巡航高度的增加不断降低。在整个平流层的高度范围内，各监测点温度均在限制值以内。

综合来看，对于具有多个温度限制点的燃-滑油热管理系统而言，为了保证燃油喷嘴前温度 T_{c3} 不超过限制值，热回油流量具有下限，但热回油流量过大也可能会导致其它监测点超温，因此，飞行器存在满足航空发动机燃-滑油热管理系统温度限制约束条件下巡航高度的允许范围，本文所设计的热管理系统巡航高度的允许范围为 2.2~25 km。

3.2 阻力比的影响

摩擦阻力与诱导阻力之比是飞行器稳态巡航过程中的重要参数，直接影响着飞行器的航程和推力要求[31]。下面分析飞行器阻力比对航空发动机燃-滑油热管理系统巡航特性的影响，取阻力比 λ 分别为 1、2、3 进行仿真计算。首先分析不同阻力比下，燃烧室供油量、冲压空气温度、飞行马赫数以及热回油流量随巡航高度的变化，具体如图 6 所示。

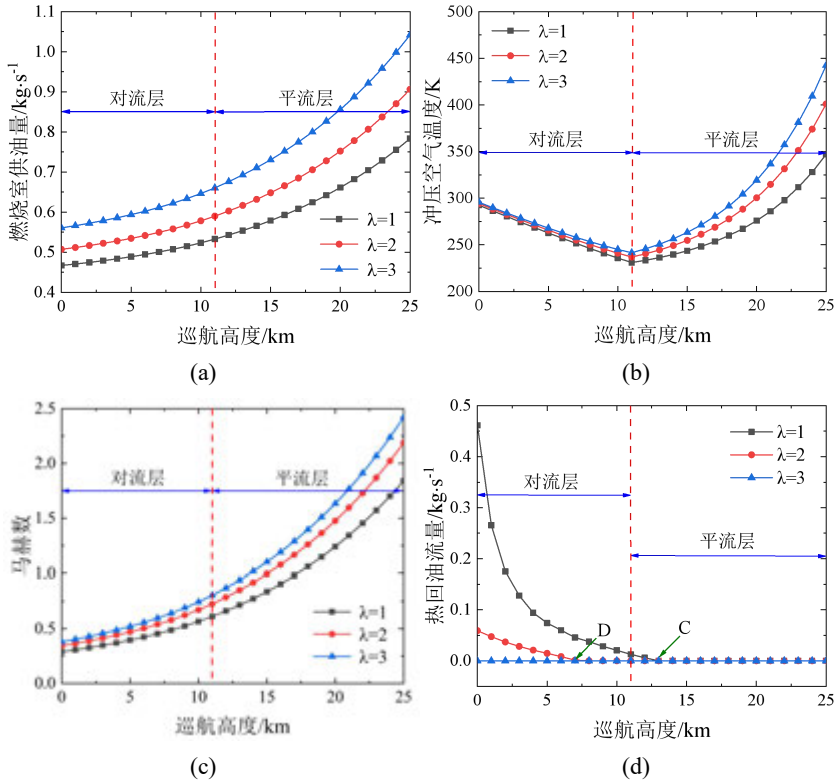
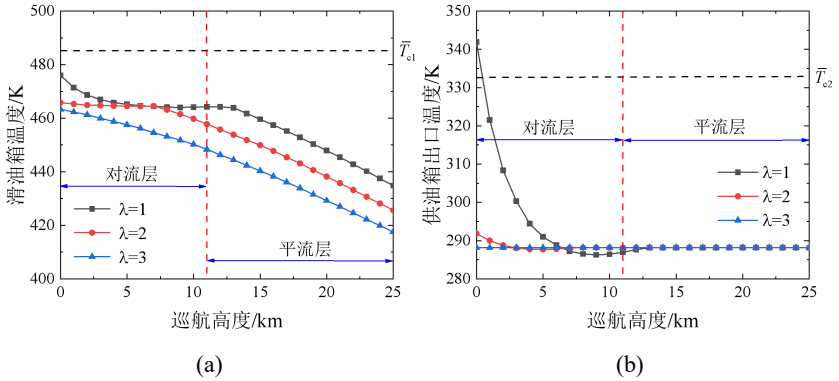
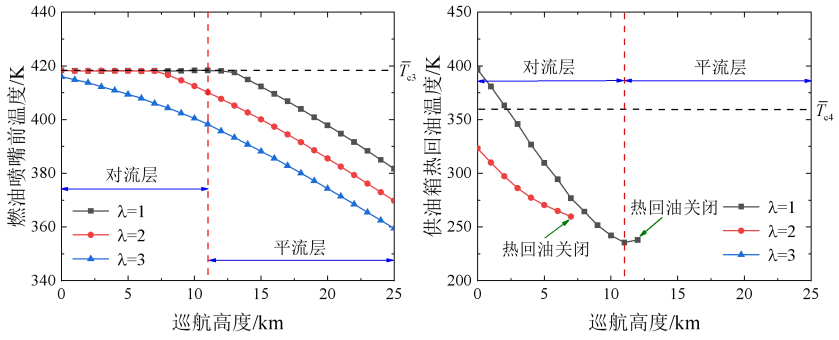


图 6 不同阻力比下系统参数随巡航高度的变化

从图 6-(a)和图 6-(c)可以看出，飞机的阻力比越大，在同一巡航高度下，燃烧室供油量和飞行马赫数越大。由式(19)可知，当巡航高度一定时，阻力比增加所引起的马赫数增大会导致冲压空气温度的升高，具体如图 6-(b)所示。由图 6-(d)可以看出，阻力比越大，热管理阀完全关闭的临界巡航高度越低（见图 6-(d)中的 C 点和 D 点），这是因为阻力比增加所导致的燃烧室供油量的增加大大提升了燃烧燃油所带走的系统热载荷。当 λ 增大到 2 时，系统热管理阀关闭的临界巡航高度降低至 8 km，而当 λ 增大至 3 时，在全巡航高度范围内，热管理阀始终保持关闭状态。

接下来分析不同飞机阻力比下，燃-滑油热管理系统中各监测点温度随巡航高度的变化，具体如图 7 所示。





(c) (d)

图 7 不同阻力比下各监测点温度随巡航高度的变化

由图 7 的结果可以看出，随着阻力比的增大，燃烧室供油量的增加使得各监测点温度随巡航高度变化的曲线整体向左偏移，导致热管理系统的温度呈现下降的趋势。当 λ 增至 2 时，在整个巡航高度范围内，系统中各监测点的温度均未超过限制值。

4 结论

本文通过对热流体网络进行稳态仿真计算，分析了航空发动机燃-滑油热管理系统的巡航特性，得到如下结论：

1）基于 Python 语言自主开发了航空发动机燃-滑油系统稳态仿真程序，采用支路的串联简化算法、流动与换热的解耦算法以及阻尼牛顿迭代法保证了系统求解过程中的收敛性和速度。通过模拟实验装置验证了仿真程序的准确性，结果表明在三个标准工况下，仿真与实验流动的平均误差和换热的平均误差均不大于 4%。

2）建立了发动机燃-滑油热管理系统与飞机参数的耦合分析方法，通过巡航控制方程可以得到不同巡航状态下燃-滑油热管理系统的边界参数，通过分析发现，当飞机的结构参数一定时，发动机燃-滑油热管理系统的流动换热参数由巡航高度唯一确定。

3）分析了燃-滑油热管理系统稳态巡航时的高度特性，结果表明在设计参数下，随着巡航高度的增加，燃烧室供油量的增大提升了系统的散热能力，使得热回油流量逐渐减小，并在巡航高度达到 12 km 时热管理阀关闭。为保证系统中各监测点温度均不超过限制值，飞行器存在巡航高度的允许范围，对本文所研究的热管理系统而言，巡航高度的允许范围为 2.2~25 km。

4）对比了不同飞机阻力比下热管理系统的巡航性能，结果表明阻力比越大，燃烧室供油量越大，而冲压空气温度越高，但通过燃烧带走系统热载荷增多的影响大于冲压空气散热能力下降的影响，使得热管理系统的散热能力得到提升。阻力比越大，热管理阀关闭的临界巡航高度越低，当 λ 增至 3 时，在整个巡航高度范围内，热管理阀始终处于关闭状态。阻力比越大，系统各监测点的温度越低，当 λ 增至 2 时，在整个巡航高度范围内，各监测点温度均未超过限制值。

参考文献

[1] 高峰, 袁修干. 高性能战斗机燃油热管理系统[J]. 北京航空航天大学学报, 2009, 35(11): 1353-1356.

[2] Huang H, Spadaccini L J, Sobel D R. Fuel-Cooled Thermal Management for Advanced Aeroengines[J]. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2004, 126(2): 284–293.

[3] 于磊, 梁兴壮, 李国强. 飞机热管理系统动态仿真[J]. 飞机设计, 2021, 41(3): 9-13.

[4] 苏壮, 毛宏图, 宋冠麟. 基于热管理技术的航空发动机滑油系统热分析方法[J]. 航空发动机, 2016, 42(2): 44-50.

[5] Doman D B. Fuel Flow Topology and Control for Extending Aircraft Thermal Endurance[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2018, 32(1): 35-50.

[6] Doman D B. Rapid Mission Planning for Aircraft Thermal Management[C]//AIAA Guidance, Navigation, and Control Conference. 2015: 1076.

[7] German B J. Tank Heating Model for Aircraft Fuel Thermal Systems with Recirculation[J]. Journal of Propulsion and Power, 2012, 28(1): 204-210.

[8] Huang G P, Doman D B. Thermal Management of Single- and Dual-Tank Fuel-Flow Topologies Using an Optimal Control Strategy[J]. Journal of Thermal Science and Engineering Applications, 2018, 10(4): 041019.

[9] Doman D B. Fuel Flow Control for Extending Aircraft Thermal Endurance Part I: Underlying Principles[C]//AIAA Guidance, Navigation, and Control Conference. 2016: 1621.

[10] Doman D B. Fuel Flow Control for Extending Aircraft Thermal Endurance Part II: Closed Loop Control[C]//AIAA Guidance, Navigation, and Control Conference. 2016: 1622.

[11] 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[J]. 燃气涡轮试验与研究, 2019, 32(5): 29-34.

[12] 康思昭, 奚修智, 李波, 等. 基于 Flowmaster 的航空发动机燃油系统温度仿真及分析[J]. 航空动力学报, 2020, 35(4): 722-731.

[13] 王海鹰, 杨永敏, 单亚杰. 航空发动机燃油系统温升特性研究[J]. 制造业自动化, 2017, 39(7): 92-95+118.

[14] 张东辉. 航空发动机燃油系统功率管理浅析[J]. 燃气涡轮试验与研究, 2014, 27(6): 57-60.

[15] Sigthorsson D, Oppenheimer M W, Doman D B. Aircraft Thermal Endurance Enhancement Using a Dual Tank Configuration and Temperature Regulation[C]//AIAA Guidance, Navigation, and Control Conference. 2018: 0612.

[16] 王翔宇, 周兵, 徐向华, 等. 航空发动机燃油回路流动传热特性模拟研究[J]. 工程热物理学报, 2019, 40(4): 863-869.

[17] 陈乃祥, 吴玉林. 离心泵[M]. 北京: 机械工业出版社, 2003.

[18] 樊思齐. 航空发动机控制(上册)[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 2008.

[19] 杨世铭, 陶文铨. 传热学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006.

[20] Miller D S. Internal Flow Systems (2nd edition) [M]. Cranfield, UK: BHRA, 1990.

[21] Han R, Xu X, Liang X. Simplification Method of Thermal-Fluid Network with Circulation Reflux Based on Matrix Operation[J]. Science China (Technological Sciences), 2020, 63(7): 1202-1211.

[22] 柯艺芬. 非线性方程组迭代解法[M]. 北京: 电子工业出版社, 2021.

[23] 林远方. 航空发动机燃油综合热管理模拟实验台设计与特性研究[D]. 北京: 清华大学, 2023.

[24] Liu Y, Lin G, Guo J, et al. Dynamic Prediction of Fuel Temperature in Aircraft Fuel Tanks Based on Surrogate[J]. Applied Thermal Engineering, 2022, 215: 118926.

[25] Huang G P, Doman D B, Rothenberger M J, et al. Dimensional Analysis, Modeling, and Experimental Validation of an Aircraft Fuel Thermal Management System[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2019, 33(4): 983-993.

[26] Langton R, Clark C, Hewit M, et al. 飞机燃油系统[M]. 上海: 上海交大出版社, 2010.

[27] 谷俊. 航空发动机滑油系统高空通风活门空中特性研究[J]. 航空科学技术, 2013, 139(1): 45-48.

[28] Sigthorsson D, Oppenheimer M W, Doman D B. Flight Endurance Enhancement Via Thermal Management System Control Subject to Multiple Limitations[C]//AIAA Scitech 2020 Forum. 2020: 1825.

[29] Doman D B. Optimal Cruise Altitude for Aircraft Thermal Management[J]. Journal of Guidance, Control, and Dynamics, 2015, 38(11): 2084-2095.

[30] Lente G, Ősz K. Barometric Formulas: Various Derivations and Comparisons to Environmentally Relevant Observations[J]. ChemTexts, 2020, 6: 13.

[31] Anderson J D. Aircraft Performance and Design[M]. Singapore: McGraw-Hill, 1999.

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：368

凝相粒子相变对喷管内两相流动换热的影响研究

卢昱皓，轩梓灏，沈法权，胡成卓，方文振*，陶文铨
（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，西安，710049）
(*Tel:15829026991 *Email:fangwenzhen@xjtu.edu.cn)

摘要：火箭喷管烟气中的氧化铝粒子随着温度降低会发生相变凝固，以往实验发现氧化铝液滴的相变存在过冷现象。本文构建氧化铝颗粒考虑过冷的相变模型，并耦合喷管内一维两相非平衡流动模型，用以研究受氧化铝颗粒相变对喷管中颗粒相与气相的流动和传热的影响规律。结果表明，考虑相变过冷时，喷管内的两相流动换热有显著变化，且随着氧化铝颗粒相变过冷度增大，粒子在喷管内的相变阶段变短、气固两相间换热量增大。

关键词：喷管、两相流动、微观传热、相变、过冷度

0 前言

火箭发动机的推进器常采用含铝推进剂，铝的燃烧产物与燃气混合构成两相流动，由于颗粒相的速度、温度滞后，气相与颗粒相之间存在较大的换热量，产生了一定的不平衡流动损失，同时熔融氧化铝颗粒凝固的过程会释放较大的相变潜热，也会对两相流动传热过程产生较大影响[1]。因此对于此类喷管内两相流动，国内外研究都非常重视。淡林鹏[2]等采用颗粒轨道模型和有限体积的 Jameson 格式计算了长尾喷管两相流流场；刘冰等[3]采用基于遗传算法的直接优化设计方法计算不同型面的喷管损失，对决定喷管内型面的关键参数进行优化；于勇等[4]用可压缩 N-S 方程组求解气相，颗粒轨道模型求解颗粒相，使用显式 Runge-Kutta 时间推进法与高精度 TVD MUSCL-Roe 格式进行计算；I. ShihChang[5]采用多流体模型和时间推进法求解了 TitanIII发动机的斜置喷管的两相流场。以上方法对喷管内的粒子分布都有着较准确的模拟，但发现在常见的工况下，颗粒的出口温度常低于氧化铝的凝固温度，两相流动过程中发生了相变，同时由于氧化铝凝固存在较大的过冷度，相变发生时两相间可能会出现较大的温差，相变因素的详细影响在相关研究的模拟计算中缺乏较精确的数值模型引入。因此本文构建了氧化铝颗粒凝固相变的零维模型，与两相流动模型耦合，并开展考虑相变过程中过冷度影响的研究，揭示过冷度对颗粒相变时长以及喷管内热质传递的影响规律，构建考虑相变过冷度影响的数值模型。

1 传热传质过程分析与模型建立

1.1 火箭喷管内一维两相非平衡流动模型

参考唐金兰等[6, 7]的分析，对喷管内的一维两相流动模型作出以下假设：1.喷管内的流动为一维绝热流动；2.颗粒相为直径一致的球形，单个颗粒内温度均匀一致，且颗粒间不发生相互碰撞；3.计算时将颗粒相视为连续的流体；4.气相的粘性仅表现在两相之间的相互作用上；5.只考虑颗粒相与气相之间的对流、辐射换热以及颗粒相的凝固相变，不考虑蒸发与化学反应等发生的可能性。可整理得到喷管内一维两相非平衡流动的基本控制方程，包括气相状态方程，气相和颗粒相的质量守恒方程、动量方程、能量方程，分别如下：

$$p = \rho_g R_g T_g \tag{1}$$

$$\dot{m}_g = \rho_g u_g A \tag{2}$$

$$\dot{m}_p = \frac{4}{3} n_p \pi r_p^3 \rho_p u_p A \tag{3}$$

$$\dot{m}_g \frac{du_g}{dx} + A\frac{dp}{dx} + An_p F_D = 0 \tag{4}$$

$$\frac{4}{3}\pi r_p^3 \rho_p u_p \frac{du_p}{dx} - F_D = 0 \tag{5}$$

$$\dot{m}_g\left(c_{pg}\frac{dT_g}{dx} + \frac{d}{dx}\left(\frac{u_g^2}{2}\right)\right) + F_D u_p An_p - 4\pi r_p^2 An_p\left[\frac{\lambda Nu}{2}(T_p - T_g) + q_{rad}\right] = 0 \tag{6}$$

$$-\frac{1}{3} r_p^2 \rho_p c_{pp} \frac{dT_g}{dt} = \frac{\lambda Nu}{2}(T_p - T_g) + q_{rad} \tag{7}$$

其中，p 代表颗粒相，g 代表气相。颗粒与环境间的辐射换热量 q_{rad} 可由以下拟合式计算，其中可以由 Mie 散射原理计算颗粒发射率ε= 0.57066，消光系数β= 387.13 m^{-1}，τ 为光学厚度，c_0 = -0.09936，c_1 = -0.87833，c_2 = -1.0505，c_3 = -0.14802：

$$\lg\frac{q_{rad}}{\varepsilon\sigma A_p\left(T_p^4 - T_w^4\right)} = c_0 + c_1\lg\tau + c_2\lg\varepsilon + c_3\left(\lg\varepsilon\right)^2 \tag{8}$$

颗粒受到的粘性阻力 F_D 采用牛顿经验关联式进行计算[8]：

$$F_D = 0.22\pi r_p^2 \frac{\dot{m}_g}{u_g A}\left(u_g - u_p\right)^2 \tag{9}$$

而喷管内颗粒与气相间对流换热的 Nu 数可选择使用 Drake 关联式[9]进行计算：

$$Nu = 2 + 0.459\,\mathrm{Re}^{0.55}\,\mathrm{Pr}^{0.33} \tag{10}$$

联立上述 10 个方程，结合喷管的几何形状并给定合适的边界条件，可以求解出在未发生相变的情况下气相及颗粒相的速度和温度。所求的 4 个因变量分别为气相速度 u_g、颗粒相速度 u_p、气相温度 T_g、颗粒相温度 T_p。将上述方程整合后可得到关于 $\frac{du_g}{dx}$、$\frac{du_p}{dx}$、$\frac{dT_g}{dx}$、$\frac{dT_p}{dx}$ 的四个微分方程，使用 COMSOL 软件进行耦合求解，即可求得不发

生相变情况下的喷管内气相与颗粒相的一维温度场与速度场。

1.2 氧化铝熔滴相变模型

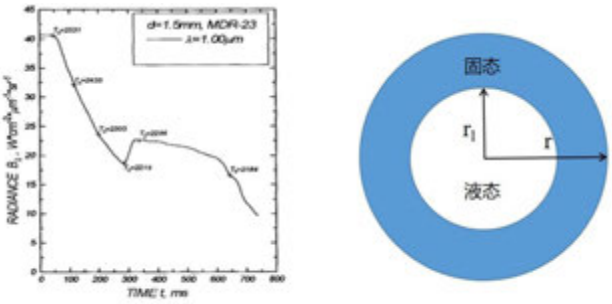
当氧化铝液滴沿喷管轴向运动时，温度沿程不断降低到达凝固温度，完成相变过程后继续下降。因此，颗粒相依次经历了液相冷却阶段、再辉阶段、相变阶段和固相冷却阶段四个阶段，如图 1(a)所示[12]。相变模型最关键的部分就在于在于再辉和相变阶段。

1.2.1 再辉阶段

氧化铝液滴凝固过程中存在较大的过冷度，当液滴温度一直下降到成核温度 T_n 时相变才开始发生，由于相变潜热的大量释放，熔滴温度迅速回升直到达到熔点温度 T_s 为止，这一阶段称为再辉阶段[10]。忽略颗粒内部的温度梯度，氧化铝颗粒在再辉阶段的热平衡方程[11]表示为：

$$c_{pp}\frac{dT_p}{dt}=L_f\frac{df_s}{dt}-\frac{6h}{\rho_p d_p}(T_p-T_g)-\frac{6}{\rho_p d_p}q_{rad} \tag{11}$$

其中，L_f 为氧化铝的相变潜热，颗粒直径 d_p 取为 5μm，f_s 为颗粒中的固体体积分数，也用于表示相变程度。



(a) 相变过程阶段变化[12]　　(b)壳状相变模型

图 1 相变过程阶段及模型示意图

颗粒相变使用如图 1(b)所示的壳状相变模型[13]，固相的生长速率可用该式来计算：

$$\frac{df_s}{dt}=-\frac{4\pi r_l^2}{V}\frac{dr_l}{dt} \tag{12}$$

其中，r_l 为液相半径，V 为熔滴体积，$\frac{dr_l}{dt}$ 为固液界面移动速度，可表示为：

$$v=\frac{dr_l}{dt}=a(T_s-T_p)^{1.8} \tag{13}$$

其中，$T=\frac{T_s+T_n}{2}$，而 a=0.0008981m/(s K$^{1.8}$)。再辉结束后的颗粒为固体和液体的混合物，固相体积分数 $f_{s0}=\frac{c_{pp}(T_s-T_n)}{L_f}$，再辉持续时间 t_r 可由 $t_r=\frac{d_p}{2v}$ 来估算，可发现，t_r 仅为 8*10^{-8}s 左右，f_{s0} 为 41.8%。故在再辉阶段中相变发生的速率极快，式(11)中相变项的数量级远大于对流项和辐射相，可近似认为在再辉阶段中相变程度与温度的变化均为突变。

1.2.2 相变阶段

再辉期间熔滴已部分凝固，剩余液体的冻结由熔滴的热传递速率控制，此阶段为相

变阶段。相变模型采用了 0 维模型，忽略熔滴内部的温度梯度，凝固时整个熔滴处于恒定温度 T_s。热平衡方程可以表示为[11]：

$$L_f \frac{df_s}{dt} = \frac{6h}{\rho_p d_p}(T_p - T_g) + \frac{6}{\rho_p d_p} q_{rad} \tag{14}$$

2 耦合计算

喷管中沿轴向温度变化较大，为了使模拟计算更符合实际情况，对于气相采用按温度发生变化的变物性参数。对于气相，选择使用热空气的物性参数；而颗粒相则采用烟气颗粒主要成分氧化铝的物性参数。

由于再辉阶段持续极短，可将再辉阶段处理为相变程度和颗粒相温度的突变，即 T_p 下降到 T_n 时，在一个网格单元内颗粒相的温度从 T_n 变为 T_s，相变程度从 0 变为 f_{s0}。因此，在考虑过冷现象的情况下，相变阶段的相变程度的初始值为 f_{s0}，颗粒相温度维持在 T_s。为将相变模型与两相流动模型耦合，可由式(15)得到关于 $\frac{df_s}{dx}$ 的微分方程，该式仅在 $T_p=T_s$、$1>f_s>f_{s0}$ 时有值，将其与两相流动模型关于 $\frac{du_g}{dx}$、$\frac{du_p}{dx}$、$\frac{dT_g}{dx}$、$\frac{dT_p}{dx}$ 的四个微分方程联立，并令相变阶段 $1>f_s>f_{s0}$ 时 $\frac{dT_p}{dx}=0$，使用 COMSOL 耦合求解即可。喷管喉部温度通常高于 T_n，相变主要发生在喷管的扩张段，因此本文仅以扩张段为研究计算范围。

3 相变对传热传质过程的影响

颗粒相 T_s 采用氧化铝的相变温度 2273K，分别取两相流喉部温度 T_{cr} 为 2500K 与 3000K，喉部速度 u_{cr} 为 1045m/s，若不考虑过冷现象，简单将相变阶段方程与两相流控制方程耦合计算，可得到相变潜热对两相流动传热的影响。气相、颗粒相的有相变与无相变的无量纲速度场、温度场如图 2 所示。可以发现，温度场分布在相变前基本一致，颗粒相在相变时出现温度平台，气相也呈现出坡度较缓的类似温度平台。喉部温度较高时，相变发生位置相对靠后，发生相变时颗粒速度较快，因而持续更长的距离。同时，考虑相变的气相、颗粒相出口温度显著高于无相变，速度略高于无相变。这一变化的直接原因在于，进入相变阶段后，颗粒相温度维持在 T_s，气相继续降温，两相温差增大，颗粒相对气相的传热量增大，气相内能上升；而沿着喷管流动，部分内能转化为动能。因此考虑相变的两相流动中，气相与颗粒相均出现出口温度、速度高于无相变的情况。

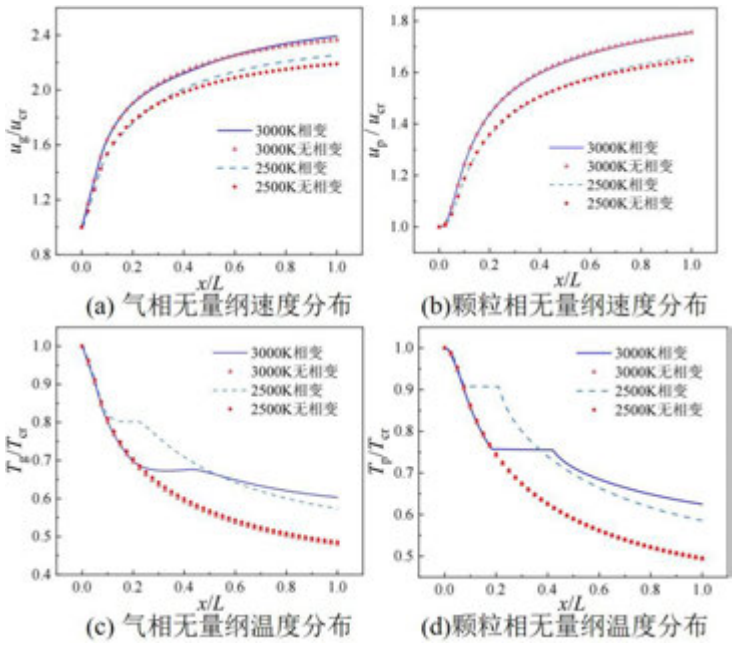


图 2 有相变与无相变两相温度、速度分布对比

4 过冷现象对传热传质过程的影响

4.1 过冷和无过冷的差异

颗粒相过冷度采用氧化铝的相变参数，其成核温度 T_n 为 1900K，过冷度为 373K。选择喉部温度 T_{cr} 为 3000K，喉部速度 u_{cr} 为 1045m/s 时，对喷管的扩张段的两相流进行计算，对比是否考虑过冷现象对模拟结果的影响，结果如图 3 所示。可以发现，相比于不考虑过冷度时的结果，考虑过冷度时的相变阶段持续距离更短，只有不考虑过冷度时的 28.35%。这是由于，从方程(14)可以看出，相变速率与两相温差成正比，对比图 3(c)热流密度的变化，由于图 3(b)中颗粒相温度在再辉阶段从 T_s 急剧上升到 T_n，与气相之间产生了较大的温差，因此两相对流换热的热流密度大幅上升，从而使相变速度增快。此外，不考虑过冷时相变均在相变阶段发生，而考虑过冷时在再辉阶段部分熔融氧化铝已经凝固为了固态，相变阶段起始的相变程度已为 f_{s0}，在相变阶段内发生的固液转变更少。因此考虑过冷度时的相变阶段持续距离更短。除此之外，考虑过冷时得到的颗粒相出口温度、速度基本不变；气相出口速度降低了 0.88%，出口温度升高了 1.06%，变化较小。这是由于考虑与不考虑过冷时，颗粒相完全凝固释放的相变潜热相同，因此喷管出口的总能量是相同但，而考虑过冷时，相变阶段开始更晚，因此，这部分内能沿着喷管转化为动能更少，在速度和温度的计算结果上呈现出了微弱的差异。

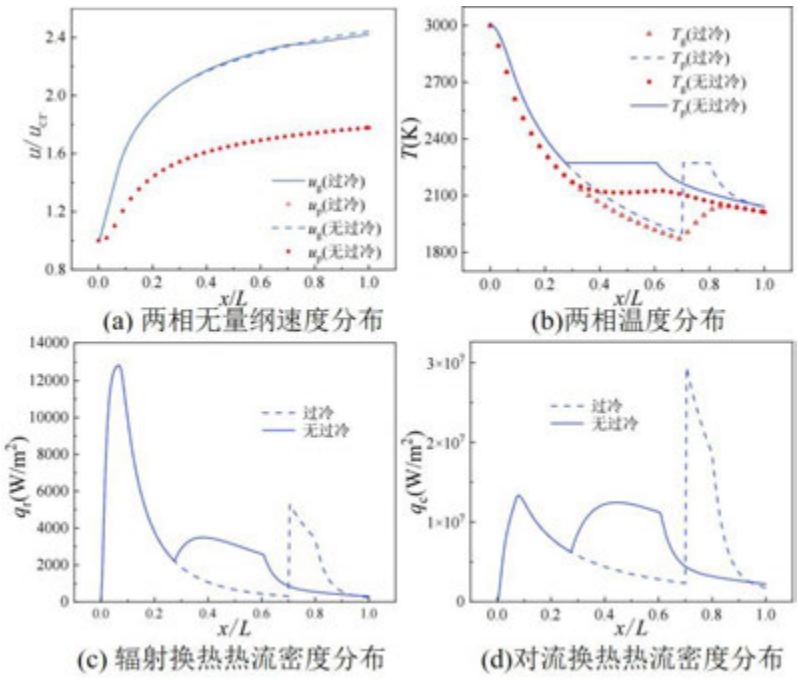


图 3 考虑过冷与不考虑过冷的速度、温度、传热情况

4.2 过冷度的影响

本文所使用的颗粒过冷度近似选择为氧化铝的过冷度，但实际烟气中燃烧得到的凝相颗粒并非纯氧化铝，其实际过冷度容易受到其他成分影响，由含铝推进剂燃烧后得到的具体成分决定。因此选择 T_{cr} 为 3000K，u_{cr} 为 1045m/s，在保持 T_s 不变的情况下通过改变成核温度大小，计算过冷度对两相流动传热的影响。成核温度分别为 1900K、2100K 时的两相温度分布规律如图 4 所示。

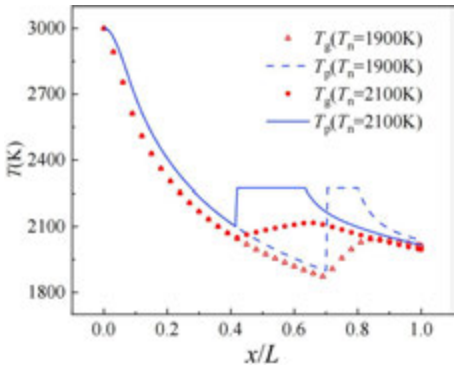


图 4 成核温度 1900K、2100K 下的两相温度分布

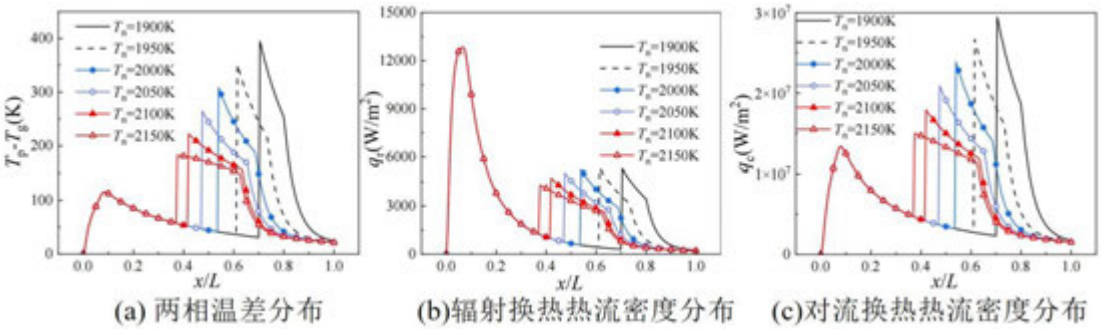


图 5 不同过冷度下的两相温差与传热量

从图 5 中可以发现，随着过冷度的增大，相变阶段持续距离逐渐减短，相变阶段的两相温差逐渐增大、颗粒相与气相之间的辐射换热热流密度和对流换热热流密度逐渐增大。同时从图 6 中可以看出，随着过冷度每升高 50K，两相相出口温度随着过冷度只有 3~5K 左右的小幅上升，变化在 0.2%以内；气相出口速度存在 0.15%以内的轻微下降，颗粒相温度基本不变。这是因为不同过冷度下颗粒相完全相变释放的相变潜热相同，只是相变沿轴向发生的位置不同，过冷度越大，相变发生越迟，这部分内能沿着喷管转化为动能就越少，因而随着过冷度增加，出口温度略有增加，出口速度则有着微弱的下降。

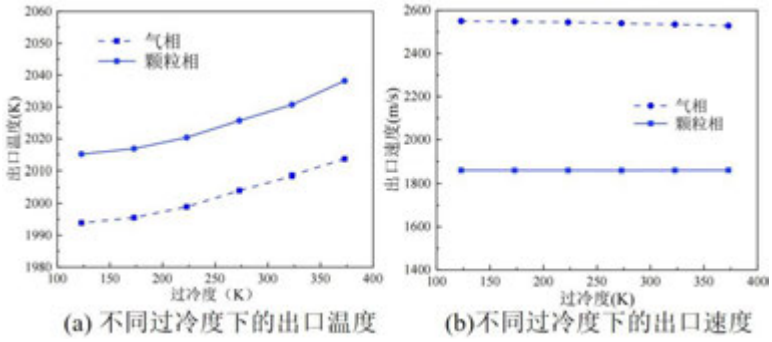


图 6 不同过冷度下的两相出口温度与速度

5 结　论

考虑凝相粒子相变时，对喷管内流动传热规律有显著影响。本文利用 COMSOL 对考虑相变过冷情况的一维喷管内两相流控制方程进行了求解，得到以下结论：

1.对于两相流计算中的颗粒相变，考虑过冷度和不考虑过冷度所得到的结果主要有以下差异：考虑过冷度的相变阶段持续距离更短，只有不考虑过冷的 28.35%，两相温差更大，对流和辐射换热热流密度更大。考虑过冷度的颗粒相出口温度、速度基本不变，气相出口速度下降 0.88%，出口温度升高 1.06%，变化极小。

2.随着颗粒相过冷度的增大，相变阶段持续距离减短，相变阶段的两相温差增大，两相对流换热热流密度随之增大。气相与颗粒相的出口温度存在小幅上升，气相出口速度有轻微下降，颗粒相出口速度基本不变。

参考文献

[1] 李东霞, 徐旭, 蔡国飙, 等. 火箭发动机气体-颗粒两相流双流体模型研究. 固体火箭技术, 2005, 28(4): 238-243

[2] 淡林鹏, 张振鹏, 何大军, 等. 长尾喷管两相流流场计算. 推进技术, 2002, 23(5): 425-427

[3] 刘冰, 方丁酉, 夏智勋, 等. 考虑气体颗粒两相流效应的火箭发动机喷管参数优化设计. 推进技术, 2013, 34(1): 8-14

[4] 于勇, 刘淑艳, 张世军, 等. 固体火箭发动机喷管气固两相流动的数值模拟. 航空动力学报, 2009, 24(4): 931-937

[5] Chang I S, Three-dimensional two-phase transonic canted nozzle flows. AIAA Journal, 1988, 28(5): 790-797

[6] 唐金兰, 固体火箭发动机原理. 北京: 国防工业出版社, 2013. 170-180

[7] 陈林泉, 固体火箭发动机喷管两相流动计算. 固体火箭技术, 1994, 01: 27-33

[8] J Y Wang, Z L Yang. Effect of non-spherical particles on nozzle two-phase flow loss in nano-iron powder metal fuel motor. Aerospace Science and Technology, 2019, 91: 372-381

[9] R M Drake Jr, G H Backer. Heat transfer from spheres to a rarefied gas in supersonic flow. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, 1952, 74(7): 1241-1249.

[10] S B Johnson, J P Delplanque, Y Lin, et al, Numerical Simulation And Experimental Characterization Of A Binary Aluminum Alloy Spray-Application To The Spray Rolling Process. 134th Annual Meeting And Exhibition-The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 2005: 02407

[11] D Bergmann, U Fritsching, K Bauckhage. A mathematical model for cooling and rapid solidification of molten metal droplets. Int J Therm Sci, 2000, 39: 53-62

[12] Y. Plastinin, H. Sipatchev, G. Karabadzhak, et al. Experimental investigation of alumina particles' phase transitions and radiation. 36th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, 1998: 1-7

[13] Y Y Xu, B Lu, J Y Li, et al, Effects of phase transformation on the ultraviolet optical properties of alumina clusters in aircraft plumes. Optics Express, 2020, 28(27): 25607-25617

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：233264

基于物理信息神经网络求解传热问题的边界条件准确施加

高永旺[1]，赵军明[1]，刘畅[2]，范小礼[2]
（1. 哈尔滨工业大学 能源科学与工程学院，黑龙江 哈尔滨 150001
2. 散射辐射全国重点实验室，北京 100854）
Tel.: 0451-86412138，Email: jmzhao@hit.edu.cn

摘要：物理信息神经网络（PINN）作为一种有监督学习的神经网络，通过在网络训练过程中施加含有物理信息的约束，有效地减少了训练神经网络时所需要的数据量。与无网格方法类似，PINN 存在着边界条件如何准确施加的问题，这将影响着网络的收敛速度与精度。对于如何对 PINN 施加硬 Dirichlet、Neumann 和 Robin 条件已有学者做了相关研究，而鲜有施加硬辐射边界条件的研究。本文介绍了如何对 PINN 施加准确的“硬”辐射边界条件，并分别将施加了硬边界、软边界条件的 PINN 计算结果与有限体积法（FVM）的进行对比。结果表明准确施加了硬边界条件的 PINN 的计算精度要优于施加软边界条件的。

关键词：深度学习；物理信息神经网络；热传导方程；辐射边界

0 前言

热传导作为自然界中三种基本的传热方式之一，广泛存在于从航空航天到能源存储等与能源转换相关的工程系统领域[1,2]。为了了解系统内的复杂传热问题，许多数值方法，如有限差分、有限元、谱方法等已被广泛的应用于求解传热相关的偏微分方程中。而经典的分析方法通常会受限于：（1）不可避免的引入过高的成本和不确定性；（2）在反传热问题中，高保真数据的需求需要复杂的代码和算法来满足；（3）解决现实生活中边界条件缺失、模糊或有噪声的物理问题目前是不可能的[3]。

随着越来越多传感器在工业生产中的布置与应用，大量的多保真数据的获取使得以数据为驱动的物理问题研究成为可能[4]。机器学习作为具有很强数据泛化能力的工具，是获取这些大量数据中所包含信息的一个有力的工具。而对于纯数据驱动的机器学习模型。一方面，训练模型时需要丰富的训练数据，这在某些场景下的成本是高昂且不可取的；另一方面，纯粹的数据驱动模型可能非常适合观察结果，但模型外推或观察偏差可能导致泛化性能不佳，使得预测结果可能在物理上的不一致或不可信[5]。

最近，Raissi 等[6]提出了一种名为物理信息神经网络（Physics-informed neural network，PINN）的深度学习框架，该方法将 PDE 的残差以正则化的方式编码到神经网络的损失函数中。其能够整合数据信息的同时将所研究物理模型的物理信息通过数学运算符的形式嵌入到神经网络中。这种方法得益于自动微分技术的发展[7]，使 PINN 求解物理问题时的编码和求解过程变得简单且易于实现。PINN 现以被用于解决各种数据有限的科学问题，包括传热问题[8-13]，岩土渗流[14]，流体力学[15-17]，纳米光学[18]，材料学等[19]。PINN 在求解一个 PDE 时，判断解的收敛是以损失函数最小化作为依据的。PDE 中所包含的边界条件通常是通过“软边界”的方式构建一个边界损失项。然后总的损失函数由边界

损失，域内损失这几项的加权求和而成。这种“软边界”施加方式在实施过程中，需要小心地设置各项权重的大小。若损失函数中的各项权重设置不当，会影响 PINN 求解过程的收敛性。此外，PINN 求解 PDE 时存在无法在边界上准确满足 Dirichlet 边界条件的问题。针对损失函数中权重的设置问题，Zobeiry 等[8]就 PINN 损失函数中各损失项的权重如何选择提出了自适应归一化方法。该方法通过定期在训练的过程中比较各损失项的相对大小，自适应地调整各损失项的权重。为了让PINN满足准确的边界条件，Sukumar[20]通过引入符号距离函数构建了几何相关的试函数。通过让所构建的试函数自动满足边界条件，从而让 PINN 准确满足边界条件的同时避免了各损失项权重的设置。对于神经网络在物理问题的应用，如何使神经网络满足初始条件[21]，Dirichlet[21,22]，Neumann[23,24]和 Robin[25]等，不少学者也进行了相关的研究。

总体而言，PINN 已经在许多领域的研究中得到了应用。但 PINN 对 PDE 方程求解时，“软边界”条件的施加会对解的收敛带来一定的影响。而“硬边界”条件的使用可以强制使神经网络构建的代理模型自动满足 PDE 的边界条件。对于实际传热过程中广泛存在的辐射边界条件，目前还鲜有关于如何在 PINN 中施加准确的辐射边界条件的研究。本文参考 Sukumar[20]的研究工作，在该工作的基础上以辐射边界条件的传热问题为研究对象，对如何在 PINN 中施加准确的辐射边界条件进行了研究。首先就 PINN 的基本原理进行了介绍，然后基于符号距离函数构建了准确满足辐射边界条件的试函数，最后通过超限插值的方法对辐射和定温混合边界条件时准确满足边界条件的试函数进行了构建，并将施加“硬边界”条件和“软边界”条件的 PINN 求解结果分别与有限体积法（Finite volume method，FVM）方法求解结果进行了对比。

1 模型与方法

考虑无限大平板的非稳态热传导问题，初始等温，左右边界条件分别为定温和辐射边界条件时，其控制方程可表示如下：

$$\frac{\partial T}{\partial t}=a\frac{\partial^2 T}{\partial x^2},\quad (t,x)\in(0,\tau]\times(0,L) \tag{1a}$$

$$T(x,t)\big|_{t=0}=T_0,\quad x\in(0,L) \tag{1b}$$

$$T(x,t)\big|_{x=0}=T_L \tag{1c}$$

$$-\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=L}=\varepsilon\sigma(T^4-T_a^4) \tag{1d}$$

其中，a 为热扩散系数，λ为导热系数，ε和σ分别为发射率和黑体辐射常数。在具体计算时，取初始温度 $T_0=273.15\mathrm{K}$，左边界温度 $T_L=T_0$，$\varepsilon=1$，环境温度 $T_a=2000\mathrm{K}$，$\lambda=1000\mathrm{W/m\cdot K}$，$a=3.35\times10^{-4}\mathrm{m^2/s}$。

1.1 PINN 基本框架

下面以式-所示热传导方程为例，介绍 PINN 求解 PDE 时的基本流程。其基本流程如图 1 所示。由于一个神经网络可以逼近任意一个连续的函数[26]，首先定义一个输入为(t,x)的神经网络 $\hat{T}(t,x;\theta)$ 作为真实解 T 的近似或称其为代理模型，其中θ为一个网络中所包含的所有待训练参数，包括神经网络的权重和偏差。对于 PINN，在反问题中也可将待识别参数作为训练参数而不加以区分。然后通过-中相关的微分算子约束 $\hat{T}$。具

体来说，分别采样一些初始时刻，边界和求解域内（时空域）的训练点，分别用 $X^0 := \{(t_i^0, x_i^0)\}_{i=1}^{N_0} \subset \{0\} \times (0, L)$ ，$X^r := \{(t_i^r, x_i^r)\}_{i=1}^{N_r} \subset (0, \tau] \times (0, L)$ ，$X^b := \{(t_i^b, x_i^b)\}_{i=1}^{N_b} \subset (0, \tau] \times \partial D$ 来表示。

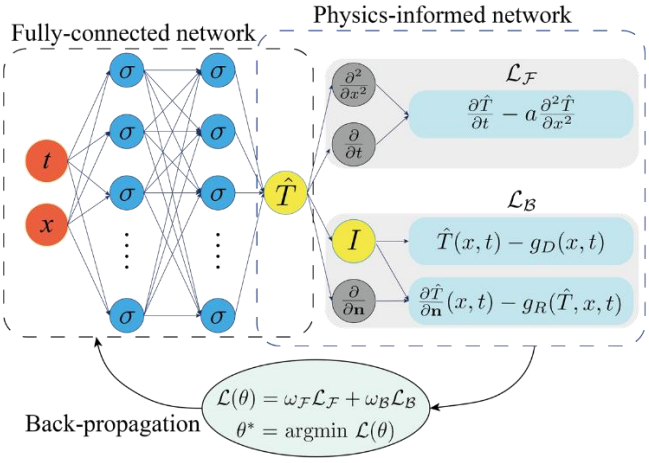


图 1 PINN 求解热传导问题示意图

然后定义损失函数 $\phi_\theta(X)$ 如式所示，等式左边中从左到右分别代表了损失函数的域内损失项，初始损失和边界损失项，λ_i 为各损失项的权重。各损失项的具体形式如式-所示，损失函数的每一子项都是被计算误差项在该误差项被评估点上的均方。当使用优化算法将损失函数 ϕ_θ 最小化时，此时神经网络所对应的 $\hat{T}$ 便可近似等于 T。

$$\phi_\theta(X) := \phi_\theta^r(X^r) + \lambda_0\phi_\theta^0(X^0) + \lambda_1\phi_\theta^{b1}(X^{b1}) + \lambda_2\phi_\theta^{b2}(X^{b2}) \tag{2}$$

$$\phi_\theta^r(X^r) := \frac{1}{N_r}\sum_{i=1}^{N_r}\left|\frac{\partial \hat{T}}{\partial t} - \alpha\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial x^2}\right|^2 \tag{3a}$$

$$\phi_\theta^0(X^0) := \frac{1}{N_0}\sum_{i=1}^{N_0}\left|\hat{T}(t_i^0, x_i^0) - T_0(x_i^0)\right|^2 \tag{3b}$$

$$\phi_\theta^{b1}(X^{b1}) := \frac{1}{N_{b1}}\sum_{i=1}^{Nb1}\left|\hat{T}(t_i^{b1}, x_i^{b1}) - T_L(t_i^{b1})\right|^2 \tag{3c}$$

$$\phi_\theta^{b2}(X^{b2}) := \frac{1}{N_{b2}}\sum_{i=1}^{Nb2}\left|\lambda\frac{\partial \hat{T}}{\partial x} + \varepsilon\sigma(T_a^4 - \hat{T}^4)\right|^2 \tag{3d}$$

注意到，由于判断 $\hat{T}$ 收敛到 T 的依据是损失函数优化到最小（并不一定等于 0），此时会导致边界损失项-不一定严格等于 0，这种边界条件的施加也被叫做“软边界”；由于损失函数中各损失项权重的存在，如何确定各项权重的大小，是一项具有挑战性的任务。

1.2 准确满足边界条件的试函数的构建

介于“软边界”在 PINN 中施加约束存在的不足，Sukumar [20]提出了基于符号距离函数构建准确满足 PDE 边界条件的 PINN 试函数的方法，并在此基础上进一步采用了超限插值对混合边界条件时如何准确施加边界条件进行了研究。对于第一类边界条件，$T=g,x\in\partial D$，则该试函数解的结构可以写为：

$$T=g+\phi\Phi \tag{4}$$

其中，ϕ为边界 ∂D 的符号距离函数，且 $\frac{\partial\phi}{\partial v}=1$,$\boldsymbol{v}$ 为边界的内法向量，Φ 代表任意的近似函数。而对于第三类边界条件，$\partial T/\partial n+cT=h$，$c$ 和 h 分别为边界 ∂D 上已知量，$\boldsymbol{n}$ 为边界 ∂D 上的外法向量。则其准确满足该边界条件的试函数可以写为：

$$T=\left[1+\phi\left(c+D_1^{\phi}\right)\right]\left(\Phi_1\right)-\phi h+\phi^2\Phi_2 \tag{5}$$

上式中，D_1^{ϕ} 表示对于边界 ∂D 外法向量的方向导数，Φ_1 和 Φ_2 分别代表任意的近似函数。对于如何构建一个准确满足辐射边界条件的试函数，Rvachev 等[27]在研究使用 R 函数方法研究辐射传热问题时给出，对于形如 $\left(\partial T/\partial\nu+cT^4\right)\big|_{\partial D}=h$ 的辐射边界条件时，其准确满足该边界条件的试函数可以写为：

$$T=\Phi_1+\phi D_1\Phi_1-\phi c\Phi_1^4+\phi h+\phi^2\Phi_2 \tag{6}$$

此外，对于非均匀边界条件，超限插值[20,28]的使用可以得到一个单一结构的试函数，且解的结构可以写为：

$$T=g(x)+\Phi\prod_{j=1}^{M}\phi_j^{\mu_j} \tag{7a}$$

$$g(x)=\sum_{i=1}^{M}\omega_i(x)g_i(x),\quad \omega_i(x)=\frac{\phi_i^{-\mu_i}}{\sum_{j=1}^{M}\phi_j^{-\mu_j}} \tag{7b}$$

其中，g_i 是在边界 ∂D_i 上的值。对于 $\mu_i=1$，则对函数 g_i 进行插值，对于 $\mu_i=2$，则同时对 ∂D_i 上的 g_i 和 $\partial g_i/\partial n$ 都插值。也即，ϕ_j 的指数项 μ_i 说明在边界 ϕ_j 指定了 μ_i-1 阶微分边界条件。

2 结果与讨论

考虑式-为控制方程的非稳态热传导问题，构建其准确满足边界条件的试函数，记为 $\hat{T}_{bc}$。其左右边界对应的符号距离函数分别记为 $\phi_1=x$，$\phi_2=L-x$。令 $c=\text{ò}\sigma/\lambda$，$h=\text{ò}\sigma T_a^4/\lambda$，然后将其分别代入物理模型的边界条件和式中后进一步带入式-得到：

$$\hat{T}_{bc}=\omega_1 g_1+\omega_2 g_2+\phi_1\phi_2^2\hat{T} \tag{8a}$$

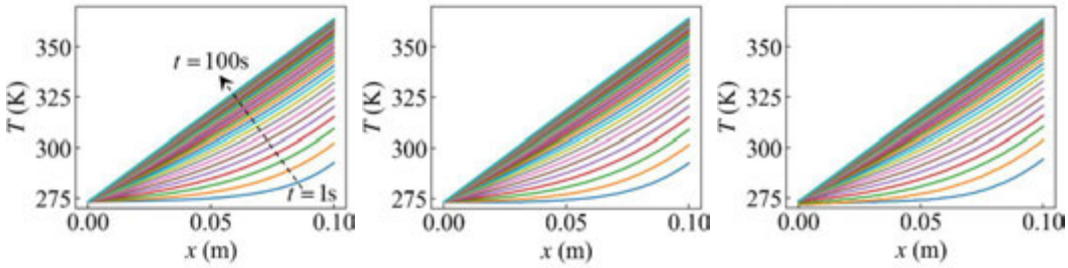
$$g_1=T_L,\quad g_2=\hat{T}+(L-x)\nabla\hat{T}+c(x-L)\hat{T}^4+(L-x)h \tag{8b}$$

注意到，由于所构建 $\hat{T}_{bc}$ 已经自动满足了 PDE 的边界条件，故对于施加了“硬边界”

条件的神经网络所构造的试函数，其损失函数仅需要包含 ϕ_θ^r 和 ϕ_θ^0 即可。

使用一个全连接神经网络，作为真实温度 T 的试函数，采用软边界约束该网络计算出的温度结果，记为 $\hat{T}$。而对相同神经网络结构，在施加了硬边界后构建的试函数式，记该试函数经约束优化后计算出的温度结果为 $\hat{T}_{bc}$。该全连接神经网络，一共包含 4 个隐藏层，每个隐藏层包含 50 和神经元，激活函数为 tanh。

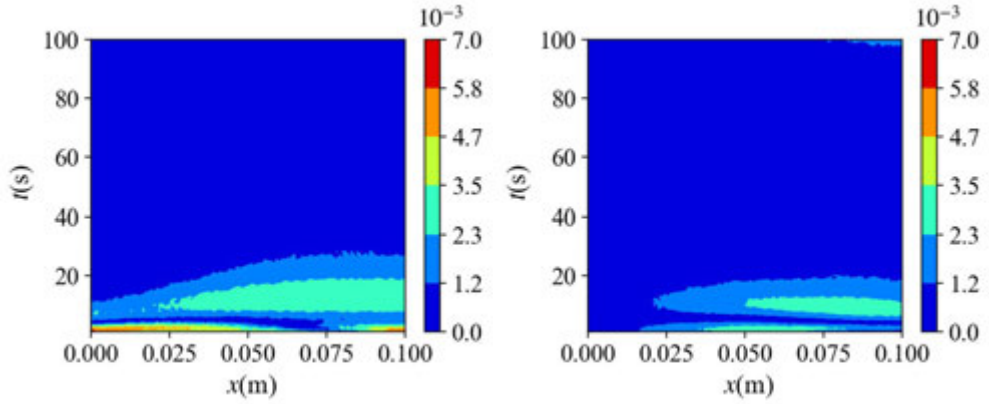
对于施加软边界条件的 PINN，训练样本点使用均匀采样分别在求解域，初始边界，左边界和右边界采样 $N_r = 2000$，$N_0 = 200$，$N_{b1} = N_{b2} = 100$ 个训练点。对于施加硬边界条件的 PINN，训练样本点分布情况与施加软边界的情况相同，唯一区别时不需要边界点。对于各损失项权重的确定，采用了 Zobeiry[8]提出的自适应归一化方法自动确定。使用的环境为 Tensoflow2.5 和 Python3.8.5，优化器使用 Adam。分别得到软边界、硬边界条件下 PINN 计算结果以及使用 FVM 计算出的参考值对比如下图所示。



(a)FVM 计算值　　(b)软边界 PINN　　(c)硬边界 PINN

图 2 施加不同边界条件的 PINN 计算结果与 FVM 计算结果对比

从图中可以看出，施加软边界和硬边界的 PINN 计算结果与 FVM 计算出的结果基本一致，均较好的模拟了 100 秒各点的温度变化。



(a)软边界 PINN　　(c)硬边界 PINN

图 3 施加不同边界条件的 PINN 计算结果与 FVM 计算的参考值的相对偏差

为了进一步分析两者在计算结果上的差异，图 3 展示了训练终了时两种 PINN 的温度预测值与 FVM 计算出结果的相对偏差。从图 3 中可以看出，施加两种边界条件的 PINN 与 FVM 计算值的相对偏差在 10^{-3} 量级，整体上施加了硬边界的 PINN 计算出的结果更接近于 FVM 计算出的结果。具体来说，在左边界附近硬边界条件的情况明显好于

软边界条件，右边界附近求解结果也同样好于。整个求解时空域内，靠近初始时刻时，存在相对较大的误差，这是因为对于两种 PINN 对于初始条件的处理都还是“软边界”的方式。

下面进一步对施加了两种边界条件的 PINN 在收敛性上的差别进行了研究，以两种 PINN 训练过程中的残差 err 随 PINN 训练次数的变化。残差 err 为 PINN 在训练过程中的温度预测值与 FVM 计算的差值的平方平均，其具体定义如下：

$$\mathrm{err}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|T_{\mathrm{PINN}}(t_i,x_i)-T_{\mathrm{FVM}}(t_i,x_i)\right|^2 \tag{9}$$

从两种 PINN 训练过程中残差的变化图中可以看出，施加了硬边界的 PINN 最终的收敛精度要优于施加了软边界的 PINN。虽然施加了软边界条件的也能收敛到一个较低的残差范围内，但是这主要得益于在自适应归一化方法在确定损失项权重中的应用，而这种方法在确定权重时，仍然需要小心的选择各损失项的初始权重以及自适应因子的更新方式来保证模型的收敛性，而施加硬边界的 PINN 则通过构建准确满足边界条件的试函数避免了这一点。

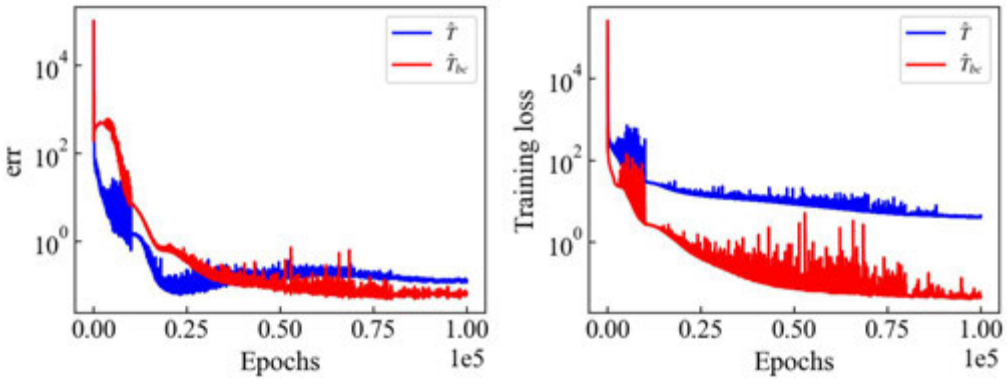


图 4 PINN 训练过程中计算残差和损失函数随训练次数的变化

3 结论

本文使用物理信息神经网络 PINN 计算了定温\辐射混合边界条件下求解域内温度场的温度变化。基于符号距离函数分别构建了满足辐射边界条件和 Dirichlet 边界条件的试函数，然后通过超限插值构建满足定温\辐射混合边界条件的 PINN 试函数。通过简单算例验证，将施加了“软边界”条件和“硬边界”条件的 PINN 计算出的温度与 FVM 计算出结果进行了对比。结果表明，对于施加了硬边界的 PINN 计算出的温度精度和收敛性要高于施加软边界的情况。本文为 PINN 在传热问题中应用时，辐射换热边界条件的处理方式提供了参考。

4 参考文献

[1] Riccio A, Raimondo F, Sellitto A, et al. Optimum design of ablative thermal protection systems for atmospheric entry vehicles [J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 119: 541-552.

[2] Isaza P A, O'Brien A, Warnica W D, et al. Assessing axial heat conduction in moving bed heat exchangers [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2017, 120: 303-313.

[3] Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, et al. Physics-informed machine learning [J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3 (6): 422-440.

[4] Perdikaris P, Venturi D, Karniadakis G E. Multifidelity Information Fusion Algorithms for High-Dimensional Systems and Massive Data sets [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2016, 38 (4): B521-B538.

[5] Reichstein M, Camps-Valls G, Stevens B, et al. Deep learning and process understanding for data-driven Earth system science [J]. Nature, 2019, 566 (7743): 195-204.
[6] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations [J]. Journal of Computational Physics, 2019, 378: 686-707.
[7] Baydin A G, Pearlmutter B A, Radul A A, et al. Automatic differentiation in machine learning: a survey [J]. Journal of Marchine Learning Research, 2018, 18: 1-43.
[8] Zobeiry N, Humfeld K D. A physics-informed machine learning approach for solving heat transfer equation in advanced manufacturing and engineering applications [J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2021, 101: 104232.
[9] Cai S, Wang Z, Wang S, et al. Physics-Informed Neural Networks for Heat Transfer Problems [J]. Journal of Heat Transfer, 2021, 143 (6).
[10] Papadopoulos L, Bakalakos S, Nikolopoulos S, et al. A computational framework for the indirect estimation of interface thermal resistance of composite materials using XPINNs [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2023, 200: 123420.
[11] Zhao J, Zhao W, Ma Z, et al. Finding models of heat conduction via machine learning [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2022, 185.
[12] Wang Y, Ren Q. A versatile inversion approach for space/temperature/time-related thermal conductivity via deep learning [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2022, 186: 122444.
[13] He Z, Ni F, Wang W, et al. A physics-informed deep learning method for solving direct and inverse heat conduction problems of materials [J]. Materials Today Communications, 2021, 28.
[14] Gao Y, Qian L, Yao T, et al. An Improved Physics-Informed Neural Network Algorithm for Predicting the Phreatic Line of Seepage [J]. Advances in Civil Engineering, 2023, 2023: 1-11.
[15] Cai S, Wang Z, Fuest F, et al. Flow over an espresso cup: inferring 3-D velocity and pressure fields from tomographic background oriented Schlieren via physics-informed neural networks [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2021, 915.
[16] Rao C, Sun H, Liu Y. Physics-informed deep learning for incompressible laminar flows [J]. Theoretical and Applied Mechanics Letters, 2020, 10 (3): 207-212.
[17] Mao Z, Jagtap A D, Karniadakis G E. Physics-informed neural networks for high-speed flows [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 360.
[18] Chen Y, Lu L, Karniadakis G E, et al. Physics-informed neural networks for inverse problems in nano-optics and metamaterials [J]. Optics Express, 2020, 28 (8): 11618.
[19] Lu L, Dao M, Kumar P, et al. Extraction of mechanical properties of materials through deep learning from instrumented indentation [J]. Proc Natl Acad Sci U S A, 2020, 117 (13): 7052-7062.
[20] Sukumar N, Srivastava A. Exact imposition of boundary conditions with distance functions in physics-informed deep neural networks [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2022, 389: 114333.
[21] Lagaris I E, Likas A, Fotiadis D I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations [J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 1998, 9 (5): 987-1000.
[22] Sheng H, Yang C. PFNN: A penalty-free neural network method for solving a class of second-order boundary-value problems on complex geometries [J]. Journal of Computational Physics, 2021, 428: 110085.
[23] Mcfall K S, Mahan J R. Artificial Neural Network Method for Solution of Boundary Value Problems With Exact Satisfaction of Arbitrary Boundary Conditions [J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 2009, 20 (8): 1221-1233.
[24] Shekari Beidokhti R, Malek A. Solving initial-boundary value problems for systems of partial differential equations using neural networks and optimization techniques [J]. Journal of the Franklin Institute, 2009, 346 (9): 898-913.
[25] Lagari P L, Tsoukalas L H, Safarkhani S, et al. Systematic construction of neural forms for solving partial differential equations inside rectangular domains, subject to initial, boundary and interface conditions [J]. International Journal on Artificial Intelligence Tools, 2020, 29 (05): 2050009.
[26] Lu L, Jin P, Pang G, et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators [J]. Nature Machine Intelligence, 2021, 3 (3): 218-229.
[27] Rvachev V L, Sheiko T I. R-Functions in Boundary Value Problems in Mechanics [J]. Applied Mechanics Reviews, 1995, 48 (4): 151-188.
[28] Rvachev V L, Sheiko T I, Shapiro V, et al. On completeness of RFM solution structures [J]. Computational Mechanics, 2000, 25 (2-3): 305-317.

中国工程热物理学会 数值计算
学术会议论文 编号：233271

喷镁法脱硫气泡尺寸对铁水飞溅行为研究

杜鸿贤[1*]，纪俊红[2]，杨薇[3]，何永清[4]，王进[1]
（1.河北工业大学，能源与环境工程学院，天津 300401；2.辽宁工程技术大学，安全科学与工程学院，辽宁 葫芦岛 123032；3.河北工业大学，材料科学与工程学院，天津 300401；4. 重庆工商大学，微纳系统与智能传感重庆市重点实验室，国家智能制造服务国际科技合作基地，重庆 400067）
（Tel：022-60435781，Email：HongXian_Du@163.com）

摘要：在喷镁法脱硫中，气泡到达气液界面时，由于气泡破碎导致铁水剧烈飞溅引发安全问题。为了研究气泡射流行为对铁水飞溅的影响，本文建立了二维模型，并采用 VOF 法精确捕捉气液界面的拓扑变化和气泡射流行为，对比不同气泡尺寸和初始气泡速度造成的射流现象、飞溅高度、液面形状来表达铁水飞溅危险性。研究发现直径 2 mm 气泡和 0.5 m/s 的初始气泡速度，飞溅高度和液面波动最低，飞溅危险性最小。

关键词：铁水飞溅；气泡；两相流；数值模拟

0 前言

随着用户对钢材质量要求的不断地提高，钢铁企业都在努力提高钢材的质量，特别是生产低硫钢和超低硫钢是钢企提高竞争优势的有效手段。目前主流的铁水脱硫方法有机械搅拌法（KR 搅拌法）和喷镁法。喷镁法具有投资少、处理时间短、铁水温降小、渣量小和铁损少等优点，近些年来被广泛使用于各大炼钢厂。镁气泡在铁水中上浮时，受载气搅拌并与铁水混合、反应，进而达到脱硫效果。但因为镁颗粒化学性质活泼，通过载气吹出后在铁水中迅速汽化，同时在高温条件下镁气泡蒸汽压较高，若喷吹口处铁水静压难以与较高的镁蒸汽压力平衡，则无法减缓镁蒸汽减压过程的体积膨胀速度，从而造成喷吹脱硫时的铁水剧烈飞溅[1]。

邓丽琴等人[2]利用流体体积法（VOF）建立了钢水—炉渣—氧气三相数学模型，分析了钢渣—金属界面破裂和飞溅液滴形成的机理。由于射流产生金属带破裂导致液滴溅出。指出喷吹时在冲击坑表面形成表面波，表面波向四周飞溅，并在垂直和水平方向振荡。射流产生长条金属带，金属带在冲击坑边缘破碎成液滴产生飞溅，液滴也可能直接从冲击坑边缘飞溅出来。Liow 等人[3]对炼炉内的飞溅产生进行了实验研究，并对飞溅形成的两种机理进行了深入分析。第一种机理是由于气体腔所占据的液体的提升，其影响范围是有限的，第二 种机理是由于注入气体的剪切作用在空腔壁上产生开尔文—赫姆霍茨不稳定性，导致小气泡被抛向远离气体出口区域的自由空间。Pan 等人[4]通过实验和模拟的方法研究了单个气泡和双气泡在熔炉中的运动行为，并得到高度不同、尺寸相同的

基金项目：国家自然科学基金面上项目（52176067）；河北省杰出青年科学基金项目（E2022202139）。

两个气泡由于底部气泡向上方气泡内部形成射流，逐渐聚并成一个大气泡。指出这种聚并形成的气泡破裂时会比单独的大气泡形成更大的飞溅。在聚并过程中上气泡的尾流作用被认为是该过程中的决定性因素[5,6]，Stewart[7]研究了下气泡在运动过程中受上气泡尾流影响下的周期性振荡行为，并认为气泡的尾流效应，特别是两个气泡碰撞时的近距离尾流作用，是气泡发生聚并或破碎的重要原因。

在数值模拟的研究中，倪明玖等人[8]采用 VOF 方法研究了气泡尾流的形成机理，但未研究气泡尾流的脱落过程。Xu 等人[9]采用 VOF 方法模拟了金属溶液中自由上升氩气气泡尾流的运动状态，结果表明气泡尾流开始从尾部脱落，尾流脱落的过程会影响气泡的形状。Antepara 等人[10]采用数值模拟方法研究了不同形状气泡在上升过程中尾流的演变过程，但没有探索气泡长轴与水平线有夹角情况下气泡尾流的运动状态。上述研究都是借助水模型和数值模拟的方法，同样都在水—空气系统下完成。而高温铁水与水的特性不同，在铁水内气泡射流行为和聚并行为是否会发生变化，对铁水飞溅是否存在影响，本文对此进行研究。

本文以铁水包为研究对象，基于计算流体力学进行二维数值模拟，镁颗粒从喷枪喷出气化成镁气泡，随着气泡上浮至气液界面处，气泡破碎导致液面波动进而产生铁水飞溅。不同气泡尺寸和气泡初始速度的参数变化研究气泡在气液界面时的破碎行为造成的飞溅现象，并根据气泡飞溅高度，液面波动程度和毛细柱长度来分析铁水飞溅情况。

1 几何模型及控制方程

1.1 几何模型

数值模拟所用的几何模型如图 1 所示，模型尺寸为 200 mm×270 mm。液位高度为 250 mm。出口设置为压力出口，空气在出口处的体积分数为 1。壁面采用无滑移边界。模拟中气泡初始的直径为 1.8 mm，气泡的初始位置距离几何模型底部 30 mm。模拟采用不同相的物理性质示于表 1。

本文采用 PISO 算法处理速度与压力的耦合问题，动量、湍动能、能量以及耗散率皆采用二阶迎风格式，湍流模型为κ-ε模型，近壁面流动通过标准壁面函数法进行求解。当连续性方程和动量方程的残差均小于 10^{-6} 时达到收敛标准。

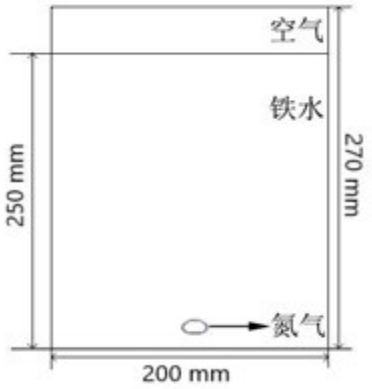


图 1 计算域的初始条件

表 1 初始条件参数

参数	数值
铁水密度	7800 kg / m^3
空气密度	0.23 kg / m^3
氮气密度	0.22 kg / m^3
铁水粘度	0.006 Pa · s
空气粘度	5.3E-05 Pa · s
氮气粘度	5.12E-05 Pa · s
铁水表面张力系数	1.8 N / m
铁水温度	1873 ℃
汽泡初始速度	2 m / s
汽泡温度	1873 ℃
出口压力	101325 Pa

1.2 数值模拟控制方程及边界条件

本研究主要针对喷镁法中气泡对铁水飞溅的影响，考虑气泡之间行为以及气液界面变化。流体体积法（VOF）不仅能够准确模拟出气泡上升过程中的不稳定行为[11-14]，还能够模拟出气泡尾涡，更重要的是能精确捕捉相界面的拓扑变化。本文利用二维模拟对模拟环境进行了简化，并选用尺寸更小、精度更高的网格设置。

质量守恒方程和动量守恒方程：

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial(\rho \boldsymbol{u})}{\partial t} + \rho(\boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \boldsymbol{u} + \nabla \boldsymbol{u}^T)] + \rho \boldsymbol{g} + \boldsymbol{F}_s \tag{2}$$

其中，t 是时间（s），u是速度（m / s），ρ是密度（kg / m^3），P是压强（Pa），μ是黏性系数（Pa · s），F_s是表面张力（N），g 是重力加速度（m / s^2）。

VOF 模型通过求解某相体积分数的连续性来追踪和捕捉互不相融流体间的交界面，对于 q 相（q=0,1,2）分别代表铁水，空气和氮气，VOF 模型的相方程如下所示：

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \alpha_g = 0 \tag{3}$$

铁水相体积分数是基于以下约束条件计算的：

$$\alpha_0 = 1 - \sum_{q=1}^{2} \alpha_q \tag{4}$$

出现混合流体的计算单元中密度与黏度的计算方法：

$$\rho = \sum_{q=0}^{2} \rho_q \alpha_q \tag{5}$$

$$\mu = \sum_{q=0}^{2} \mu_q \alpha_q \tag{6}$$

1.3 模型验证和网格无关性验证

实验以孔径 1 mm 吹出直径为 1.8 mm 的气泡与模拟结果进行对比。图 2 为气泡射流现象模拟与实验对比，图 3 为模拟与实验中形成的两次液滴的飞溅高度。可以看出，模拟和实验结果都存在两次飞溅的液滴。飞溅高度随时间稳定上升，模拟结果与实验结果存在最大差值不足 0.003 m。表明了数值模拟结果的有效性和准确性。

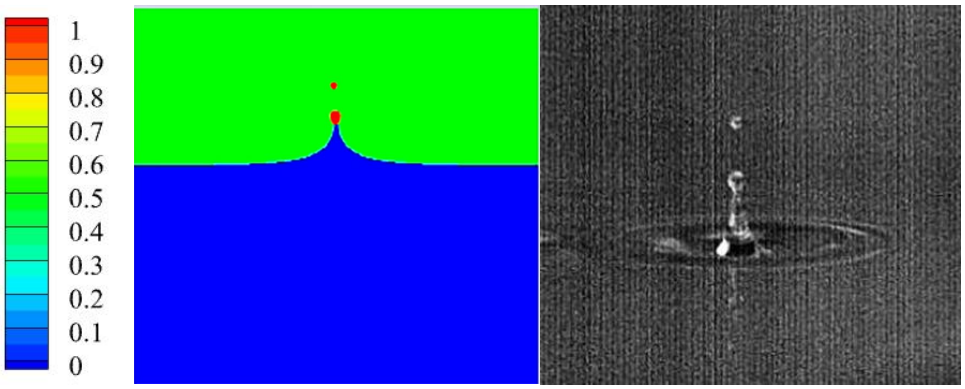
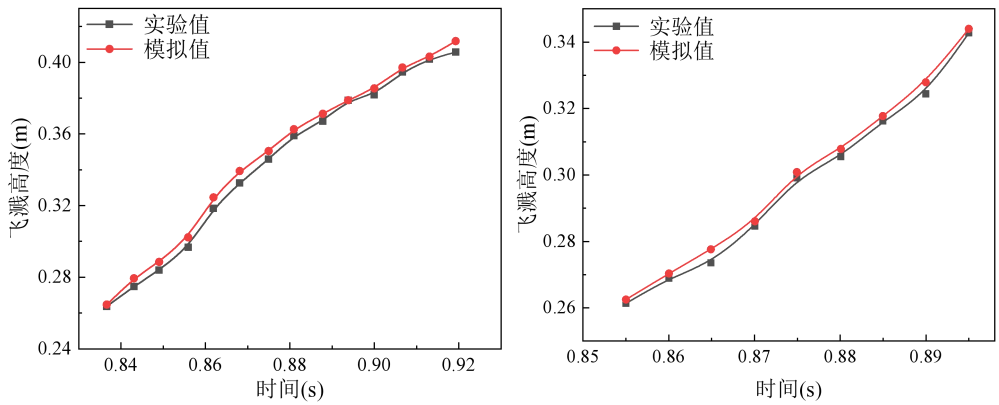


图 2 气泡射流现象模拟与实验对比



（a）第一个形成的液滴　　（b）第二个形成的液滴

图 3 气泡飞溅高度对比

本研究使用 Fluent 软件模拟喷镁法中气泡在铁水中的运动过程。在研究气泡运动过程中存在气泡聚并现象，其研究气泡聚并对网格数量要求很高。本研究采用 ICEM 划分二维网格且网格结构为正四面体，使用软件进行网格划分。Cheng 等人[15]发现当网格区域的水平长度大于气泡初始直径的 4 倍之后，水平区域长度对气泡终端速度和展弦比的变化小于 2 %。因此本研究中单个气泡采用的计算域的水平长度是气泡直径的 20 倍，竖

直长度是气泡直径的 30 倍。经研究前期进行网格无关性测试，合理的网格数量既可以节约计算机资源，提高计算速度，又保证计算精度。测试 15 万、25 万、35 万、45 万、75 万网格数时，单个 4 mm 气泡飞溅高度如图 4 所示，其中从 35 万后气泡飞溅高度近似重合。故 35 万网格为最佳网格数，其中气泡内的网格数约为 1 万个。

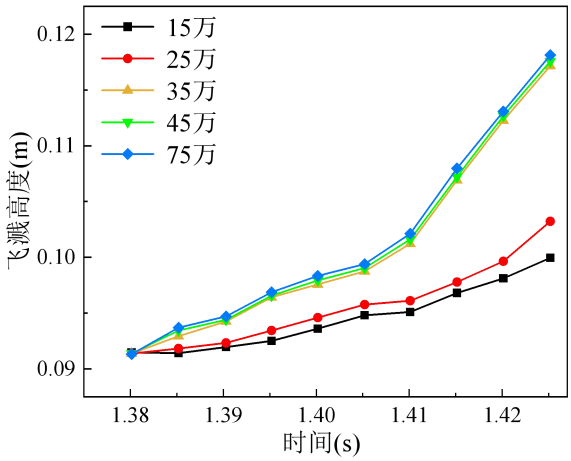


图 4 网格无关性验证

2 数值模拟结果及分析

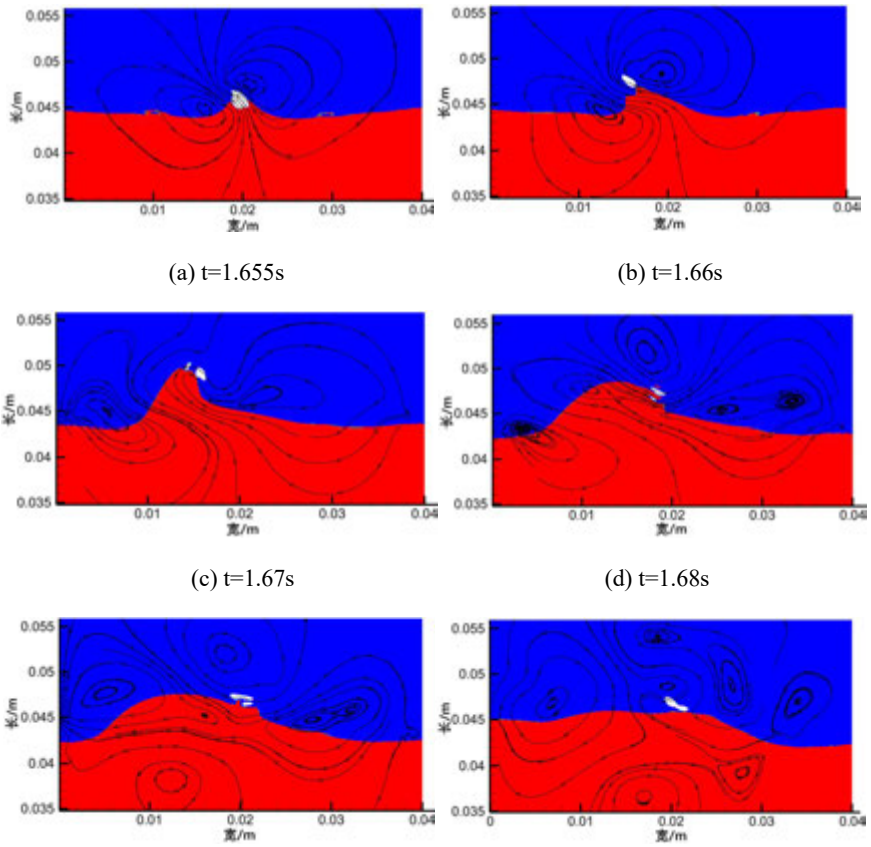
2.1 气泡尺寸对铁水飞溅的影响

前期研究直径范围 0.5~20 mm 的气泡溢出液面后的飞溅现象，为了详细总结不同气泡尺寸对飞溅的影响，每隔 0.1 mm 计算一次仿真。总结模拟结果后发现，直径 0.5~2 mm 气泡溢出液面后现象相同，直径 2.1~14 mm 气泡溢出液面后现象相同，直径 14.1~20 mm 气泡溢出液面后现象相同。在同种现象中，只是飞溅高度、毛细柱长度、液面波动程度存在差异。为了详细分析气液界面处、流场结构和气泡行为对铁水飞溅的影响，在三种现象下选取三个最具特征的气泡尺寸（直径为 2 mm、6 mm 和 20 mm）进行以下研究。

2.1.1 直径 2 mm 气泡尺寸引发的铁水飞溅

图 5 为 2 mm 气泡射流时流场结构和气泡行为，气泡射流会引发液面波动，若液面剧烈波动则会引发铁水飞溅。在气泡射流过程中，液面全程跟随气泡运动相应波动。气泡并不是直射向空气处，而是从左向右呈弧形运动轨迹。当气泡上升至最高点时，液面波动最剧烈。气泡缓缓向下落时，液面也逐渐趋于平缓。在气泡射流过程中，出现两次破裂，一次是在气泡射流最高处，如图 5(c)所示；第二次是气泡下落过程中，由于液面不稳定，导致气泡破碎，如图 5(d)所示。

气泡刚接触液面时流场呈对称漩涡结构，随着时间增加，漩涡顺时针运动并向熔池两侧扩散，图 5(c) 1.67 s 后流场结构逐渐呈不规则变化。新漩涡形成、形成的漩涡再扩散和脱落是该流场结构变化的规律。气泡运动轨迹完全跟随着漩涡扩散而运动。漩涡的形成是由于过小尺寸的气泡射流不稳定，对周围流体存在扰动作用，液面处流场结构出现不规则漩涡，对其接下来气泡运动产生影响。



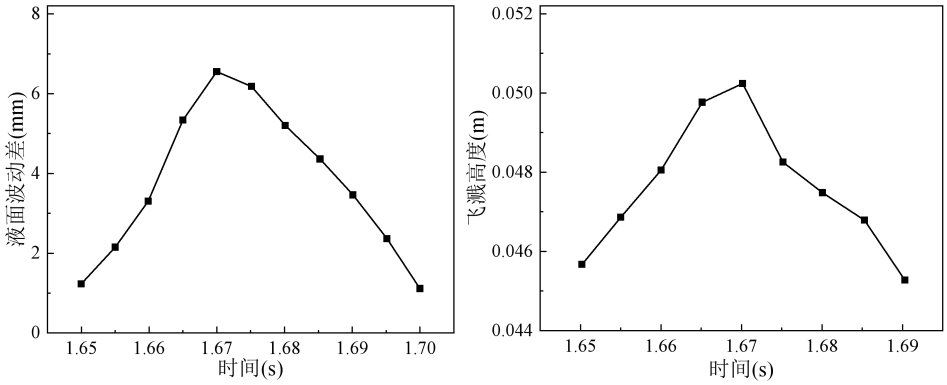
(a) t=1.655s　　(b) t=1.66s

(c) t=1.67s　　(d) t=1.68s

(e)t=1.685s　　(f) t=1.69s

图 5 2 mm 气泡射流时流场结构和气泡行为

图 6 为直径 2 mm 气泡发生射流时液面波动差和气泡飞溅高度的变化情况，本文中液面波动差为液面最高点和最低点的高度差值。在气泡射流过程中，液面波动与气泡飞溅高度均呈先增加再降低的趋势。液面仅出现一次波动，在 1.67 s 时刻液面变化最剧烈，波动差为 6.5 mm，此时气泡飞溅高度最高为 0.051 m，并且此时气泡破碎，但气泡未直接溅向空气处，而是落回液面处。

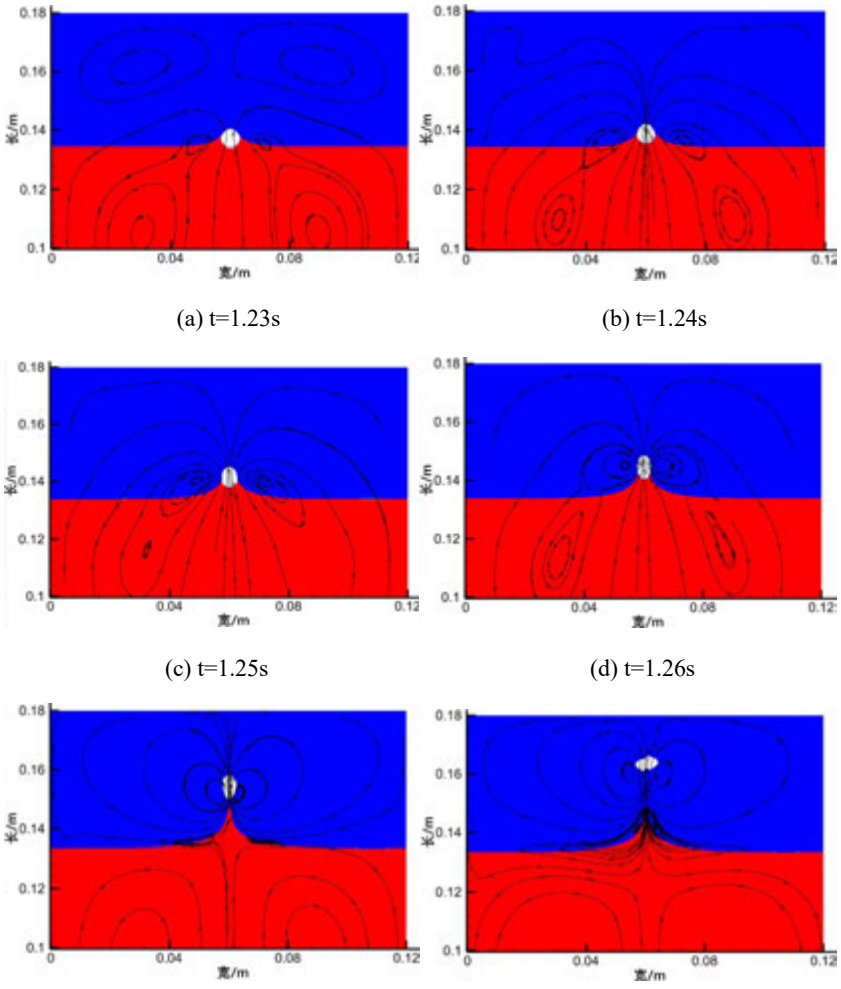


（a）液面波动差　　（b）气泡飞溅高度

图 6 2 mm 气泡射流后铁水飞溅情况

2.1.2 直径 6 mm 气泡引发的铁水飞溅

经前期研究发现直径为 2.1~14 mm 的气泡在铁水中的上升过程相同，均会发生稳定射流现象，形成毛细柱，气泡周围流场变化也相同，仅仅是毛细柱长度以及气泡飞溅高度不同。图 7 为 6 mm 气泡射流时流场结构和气泡行为。当气泡溢出液面后发生高速射流，形成毛细柱。其成因为气泡轴心处毛细波聚集且振幅较大。随即气泡继续向上运动，由毛细力作为主要驱动力使得气泡上升到一定高度时与液面连接处发生颈缩并从中部断开，如图 7(f)所示。在气泡射流过程中流场结构呈对称形态，且随时间变化，对称结构相应变化。气泡在完全溢出液面时，空气处的循环流消失，气泡周围漩涡随时间发生扩散并向下方脱落，与下方循环漩涡相连。当气泡完成射流后，流场结构恢复到空气处和铁水处形成左右对称的四个循环漩涡。当液面处出现两个对称循环流时，此时毛细柱与气泡断裂，气泡完全脱离铁水，径直溅向空气处。气泡溅向空气处后发生破碎，如图 7(e)所示。喷镁法中发生铁水飞溅的主要原因是喷镁法中气泡在空气处破碎，与空气发生反应。



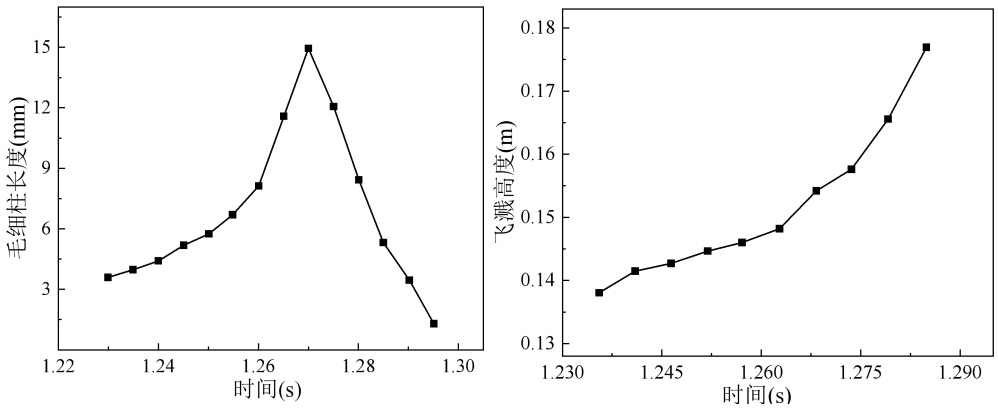
(a) t=1.23s　　(b) t=1.24s

(c) t=1.25s　　(d) t=1.26s

(e) t=1.27s　　(f) t=1.28s

图 7 6 mm 气泡射流时流场结构和气泡行为

图 8 为直径 6 mm 气泡射流时毛细柱长度和气泡飞溅高度的变化情况。产生毛细柱是因为气泡溢出液面过程中，气泡下方铁水向气泡中心聚集，伴随气泡高速射流以及液面波动而形成，故毛细柱长度可以反映出气泡射流速度。若毛细柱长度越长，则气泡射流速度越快，飞溅高度就越高。如图 8(a)，毛细柱长度在 1.27 s 时刻达到峰值过后，就迅速减小。因为此时气泡与毛细柱发生分离，分离后的气泡由于力的驱使，继续向熔池顶部运动。图 8（b）中示出 1.27 s 时刻后气泡飞溅高度继续增加，在 1.28 s 时刻气泡破碎，最终飞溅高度为 0.18 m。



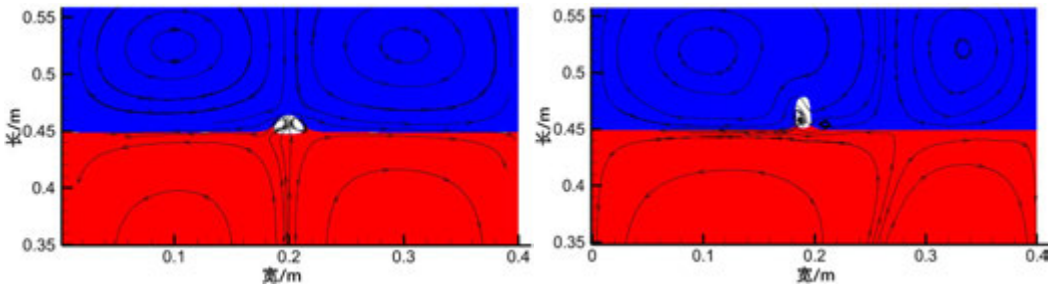
（a）毛细柱长度　　（b）气泡飞溅高度

图 8 6 mm 气泡射流后铁水飞溅情况

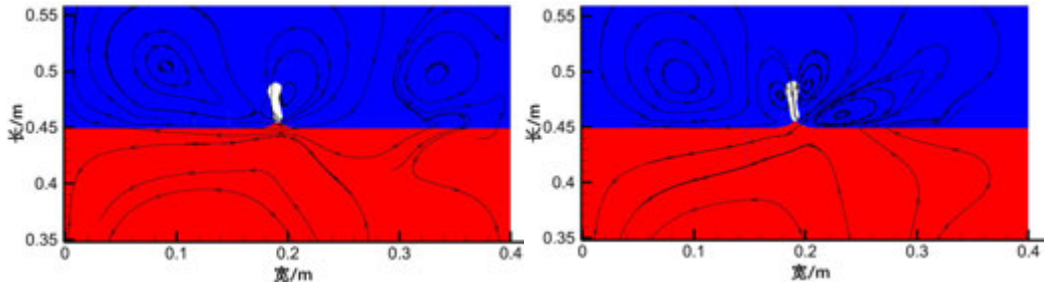
2.1.3 直径 20 mm 气泡引发的铁水飞溅

图 9 和图 10 为 20 mm 的气泡射流时流场结构、气泡行为、毛细柱长度以及飞溅高度的变化情况。气泡射流过程中，液面没有像 2 mm 气泡那样大幅度地波动，仅仅是产生毛细柱，而是随着气泡直径的增大，气泡变形程度增大。气泡接触液面时，气泡呈半椭圆形，并随着气泡射流，气泡被拉长呈长椭圆形状。气泡周围流场结构依旧呈对称形状，但随着射流时间的增加，流场结构发生不规则变化，气泡跟随流场结构相应运动，并且在气泡与毛细柱断裂时，流场结构重新恢复对称形态。

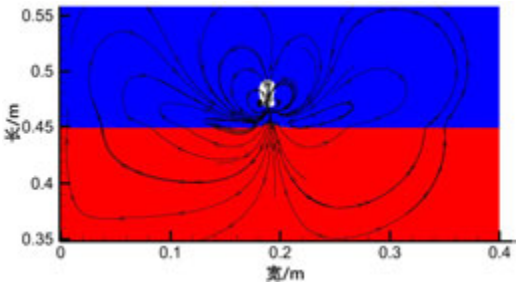
如图 9 所示气泡射流时毛细柱增加十分缓慢，到达峰值时，又迅速落回液面。说明，液面波动十分平稳，气泡射流过程十分稳定。在该尺寸气泡射流过程中发现一个特殊现象，即气泡在液面处移动。



(a) t=2.40s　　(b) t=2.90s



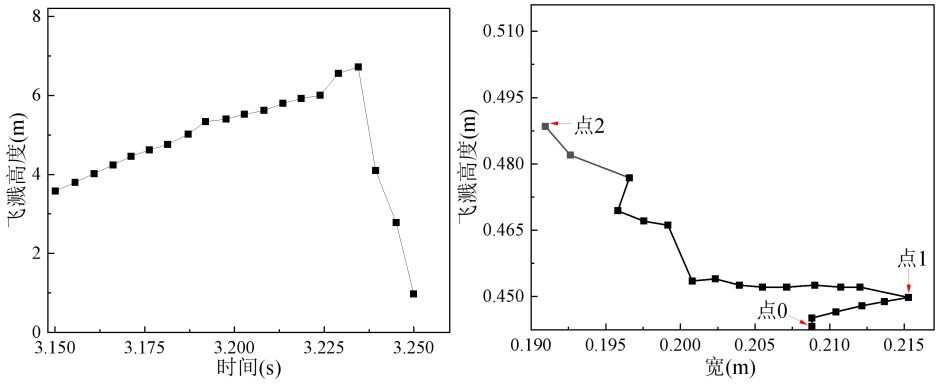
(c) t=3.20s　　(d) t=3.22s



(e) t=3.36s

图 9 20 mm 气泡射流时流场结构和气泡行为

从图 10（b）可明显看出：发生射流初期，气泡中心位于 0.21 m（点 0），随射流时间增加，气泡向熔池右侧偏移约 0.018 m（点 1），随后气泡持续向熔池左侧偏移约 0.025 m（点 2），直至气泡破碎。该过程是由于气泡尺寸过大射流时不稳定，对周围流体存在扰动作用，致使流场结构出现不规则变化。多处漩涡向熔池左侧扩散、脱落，导致气泡向熔池左侧偏移。但气泡在液面处偏移，并未对液面造成波动。

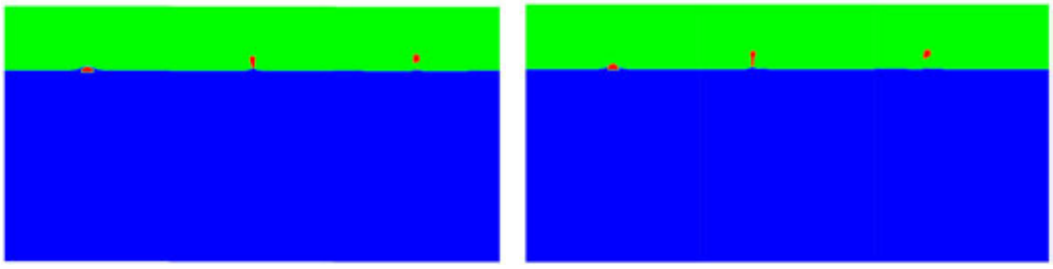


（a）毛细柱长度　　（b）气泡飞溅高度

图 10 20 mm 气泡射流后铁水飞溅情况

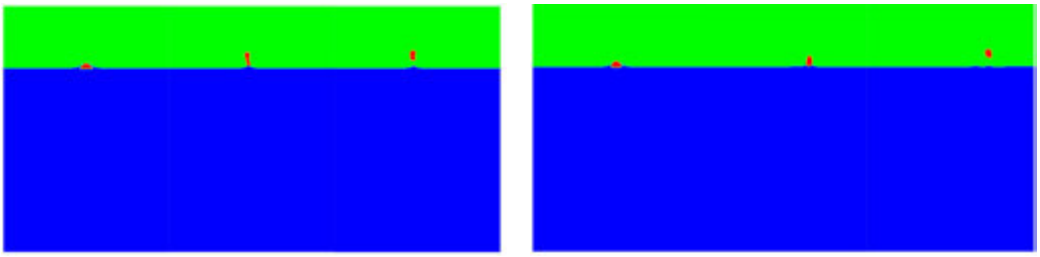
2. 2 气泡初始速度对铁水飞溅的影响

图 11 为四种初始速度下 20 mm 气泡射流过程。随着气泡尺寸的增加，初始速度的改变不会影响气泡运动轨迹。20 mm 气泡在四种初始速度下均出现气泡在液面处偏移的现象，仅是偏移距离和方向不同。0.5 m/s 下气泡偏移不明显，气泡飞溅高度和毛细柱长度变化同样不明显。



t=2.6 s　　t=3.42 s　　t=3.56 s　　t=2.5 s　　t=3.32 s　　t=3.46 s

（a）0.5 m/s　　（b）1 m/s

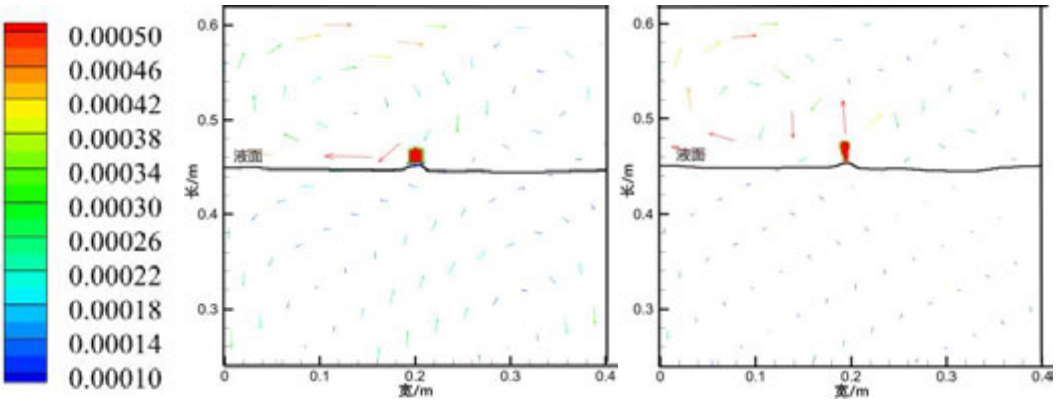


t=2.4 s　　t=3.22 s　　t=3.36 s　　t=2.3 s　　t=3.12 s　　t=3.26 s

（c）2 m/s　　（d）4 m/s

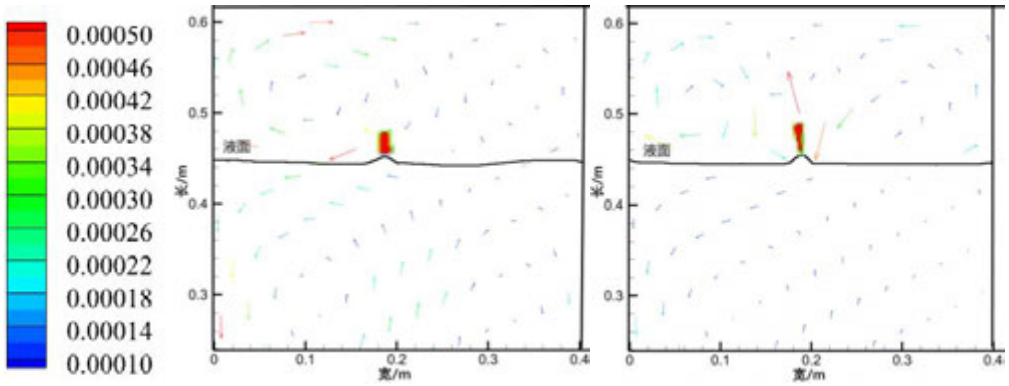
图 11 20 mm 气泡射流过程

图 12 和图 13 分别为四种初始速度下气泡射流时速度场、毛细柱长度以及气泡飞溅高度的变化。由于气泡射流速度过低，导致气泡仅仅在液面处移动，随之初始速度增大，气泡射流速度也增大，但增加幅度较低，当初始速度为 0.5 m/s 时，速度场漩涡呈不规则分布，但气泡偏移不明显，是由于周围流场内速度过小。随着速度增加，气泡偏移距离也增加。



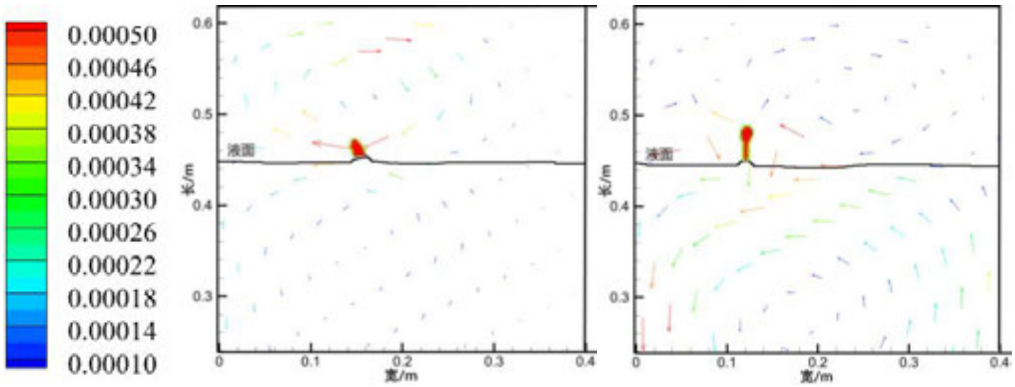
t=3.2 s　　t=3.42 s

（a）0.5 m/s



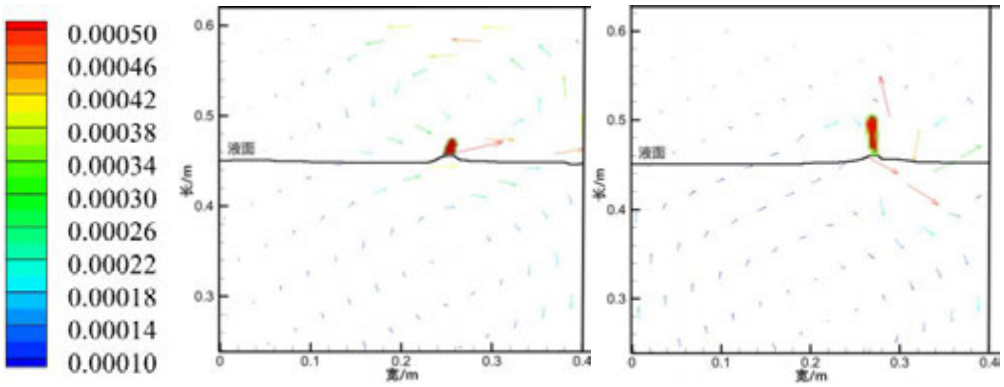
t=3.1 s　　t=3.32 s

（b）1 m/s



t=3.0 s　　t=3.22 s

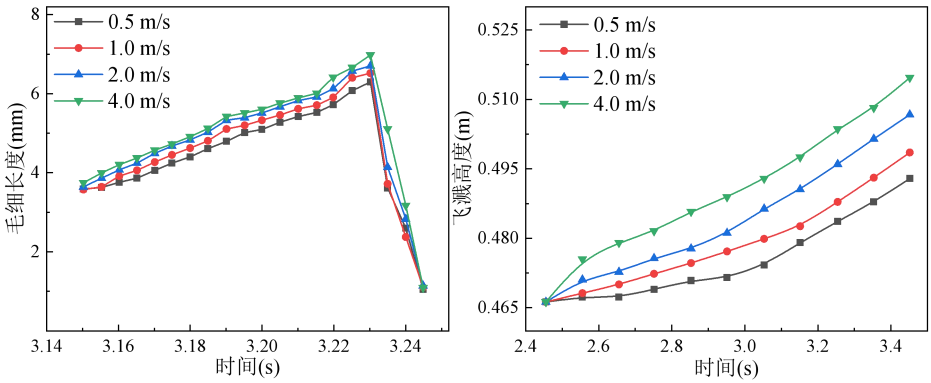
（c）2 m/s



t=2.9 s　　t=3.12 s

（d）4 m/s

图 12 20 mm 气泡射流速度



（a）毛细柱长度　　（b）气泡飞溅高度

图 13 四种初始速度下铁水飞溅情况

3 结　论

本文对喷镁法脱硫中的气泡破碎造成铁水飞溅行为进行了计算分析，得出以下结论：

（1）随着气泡尺寸的增加，气泡飞溅高度、液面波动差均降低。并发现铁水飞溅存在三种形式：

1）液面处的小气泡（0.5~2 mm）射流时未形成毛细柱，液面发生剧烈波动，气泡夹带液滴产生飞溅。

2）中等尺寸气泡（2.1~14 mm）在液面处射流形成稳定毛细柱，此时液面较平稳，毛细柱断裂时气泡夹带铁水产生飞溅。

3）大尺寸气泡（14.1~20 mm）在液面处发生移动，射流未形成完整毛细柱，气泡在液面处破碎并夹带铁水产生飞溅。

（2）气泡初始速度的变化对气泡射流现象没有影响，仅对气泡运动方向、飞溅高度、液面波动差和毛细柱长度产生影响，且随着速度的增加，气泡飞溅高度、液面波动差和毛细柱长度数值均增加。

参考文献

[1] 郭静静, 郭世平, 高波. 金属镁冶炼还原渣脱硫性能. 有色金属(冶炼部分), 2022(06): 68-73

Guo Jing-jing, Guo Shi-ping, Gao Bo. Desulfurization Performance of magnesium reduction slag. Nonferrous Metals(Extractive Metallurgy), 2022(06): 68-73

[2] 邓丽琴, 李明明, 李强, 等. 炼钢转炉喷溅行为的数值模拟. 材料与冶金学报, 2016, 15(01): 25-32

Deng Li-qing, Li Ming-ming, LI qiang. et al. Numerical modeling on splashing behavior of wteelmaking converter. Journal of Materiacls and Metallurgy, 2016, 15(01): 25-32

[3] Jong-Leng L, Gray N B. Experimental study of splash generation in a flash smelting furnace. Metallurgical and Materials Transactions B, 1996, 27: 633-646

[4] Pan Y, Langberg D. Two-dimensional physical and CFD modelling of large gas bubble behaviour in bath smelting furnaces. The Journal of Computational Multiphase Flows, 2010, 2(3): 151-164

[5] Katz J, Meneveau C. Wake-induced relative motion of bubbles rising in line. International journal of

multiphase flow, 1996, 22(2): 239-258
[6] Ruzicka M. On bubbles rising in line. International Journal of Multiphase Flow, 2000, 26(7): 1141-1181.
[7] Stewart C. Bubble interaction in low-viscosity liquids. International journal of multiphase flow, 1995, 21(6): 1037-1046
[8] 倪明玖. 浮力作用下上升气泡的变形和驻涡形成机理研究. 工程热物理学报, 2009, 30(01): 76-80
Ni Ming-jiu. Bubble rising driven by buoyancy with deformation and standing vortex. Journal of Engineering Thermophysics, 2009, 30(01): 76-80
[9] Xu Y, Ersson M, Jönsson P. Numerical simulation of single argon bubble rising in molten metal under a laminar flow. steel research international, 2015, 86(11): 1289-1297
[10] Antepara O, Balcázar N, Rigola J, et al. Numerical study of rising bubbles with path instability using conservative level-set and adaptive mesh refinement. Computers & Fluids, 2019, 187: 83-97
[11] 庞明军, 费洋, 陈小洪, 等. 雷诺数和界面污染程度对气泡水动力学特性的影响. 农业工程学报, 2019, 35(04): 99-105
Pang Ming-jun, Fei Yang, Chen Xiao-hong, et al. Influence of Reynolds number and interfacial contamination degree on hydrodynamic characteristic of bubble. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2019, 35(4): 99－105
[12] 田震, 成有为, 王丽军, 等. 温度与压力对单孔气泡形成过程的影响. 化工学报, 2019, 70(09): 3337-3345
Tian Zhen, Cheng You-wei, Wang Li-jun, et al. Effect of temperature and pressure on formation process of single-hole bubbles. CIESC journal, 2019, 70(09): 3337-3345
[13] 谢潇潇, 及春宁, Williams J. 低雷诺数下不同顶角三棱柱体绕流受力和尾涡脱落机制. 水电能源科学, 2018, 36(06): 73-76
Xie Xiao-xiao, Ji Chun-ning, Williams J. Hydrodynamic forces and vortex-shedding mechanism of low-Re flow around trangular prism with different apex angles. Water Resources and Power, 2018, 36(06): 73-76
[14] 费洋, 庞明军. 球形气泡界面变化对尾涡性质和尺寸的影响. 化工学报, 2017, 68(09): 3409-3419
Fei Yang, Pang Ming-jun. Influence of interface change for spherical bubble on vortex characteristic and size. CIESC journal, 2017, 68(09): 3409-3419
[15] Cheng M, Hua J, Lou J. Simulation of bubble–bubble interaction using a lattice Boltzmann method. Computers & Fluids, 2010, 39(2): 260-270

中国工程热物理学会 传热传质
学术会议论文 编号：233277

外电场强化石墨烯-水界面传热特性的分子动力学模拟研究

齐凯，朱星光，王军，夏国栋
（北京工业大学，强化传热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: 010-67391985-8319，Email: jwang@bjut.edu.cn）

摘要：本文建立了在外电场作用下的石墨烯-水界面传热的分子动力学模型，模拟研究了在均匀和非均匀电场作用下固液界面的传热特性。结果表明，均匀和非均匀电场均能够增强固液界面的耦合，强化固液界面之间的传热。在均匀电场下，随着电场强度的增大，热流密度逐渐升高，当电场强度达到一定值时，系统内水分子产生电冻结现象，继续增大电场强度，热流密度将不再升高；在非均匀电场下，由于液体介电泳力的作用，水分子受到合力而向电场强度较高的区域移动，使得界面耦合进一步增强，热流密度随着电场的增大而增加，且不会受到电冻结的影响。

关键词：分子动力学，电润湿，界面热阻

0 前言

微纳尺度下的热量传递过程一般都具有超高的热流密度，并且需要在不同环境下都具备良好的传热性能。近年来，各种结构的特殊材料及表面被开发出来以强化微纳尺度传热[1]。例如，通过调整纳米结构来提高热流密度[2,3]，以及使用特殊表面来控制热对流[4,5]。这些都是被动控制传热技术的实例，其缺点在于不能根据实际应用场景进行调整。因此，关于主动控制传热技术的研究对于当前而言是具有重要意义的。

在微纳米尺度体系中，固液界面热阻是决定传热性能的主要因素之一[6,7]。目前，已有许多实验和理论计算研究了界面热阻对界面特性的依赖，例如改变表面润湿性[8]、提高或降低表面温度[9]以及改变表面原子密度[10]。其中改变表面的润湿性是较为有效的一种改变界面热阻的方式，许多研究致力于通过对表面改性来改变界面热阻，包括表面的纳米结构[11,12]、表面涂层[13]以及表面自组装薄膜[14]。这些方式都是被动控制界面热阻，无法对界面热阻实现有效的主动控制。

利用电场来操控固液之间的传热，便是一种典型的主动控制传热技术。例如在沸腾换热过程中，较大的过热度会使得加热面表面产生一层蒸汽膜从而影响传热效果，此时则可以通过施加电场将液体拉向加热面，以此来除去表面上的蒸汽膜[15-18]，这种现象则被称为电润湿。Orejon 等人使用 Lippmann-Young 方程从理论上验证了润湿角随外加电场的变化规律[19,20]。在离子液体中，离子受到电场力作用，而在去离子化的极性液体的

情况下，只有在非均匀电场的作用下，其偶极子才能形成合力[21]，这便是介电润湿的应用原理。不同的是，这种极性介电液体可以通过电场控制水分子偶极的朝向。例如，偶极水分子倾向于沿外加电场的方向来定向，水分子的重新定向和位移会产生净拉伸的作用[22-25]。这种由水极化而产生的应力在分子间作用力中占主导作用且与电场强度有关的现象称为电拉伸[23]。水偶极子分布的改变会导致水相态的改变[26]，即使在室温下，电场作用也会使得水分子形成晶体结构，此现象被称为电冻结[27-29]。Teschke 等人采用原子力显微镜在室温下对这种类冰结构进行了成像[30,31]，同时这种结构也被证实对固体和液体热导率的主动控制起到一定的作用[32,33]。

本文基于非平衡态分子动力学模拟方法，建立了在外电场作用下的石墨烯-水界面传热模型，通过在界面传热系统中施加均匀和非均匀电场，研究了电场对水的热导率、水分子密度分布和界面传热特性的影响规律和机制等。

1 分子动力学系统设置

1.1 结构设置

基于 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator(LAMMPS)软件，建立图 1 所示分子动力学模拟系统，其中固体为石墨烯，液体介质为纯水。如图 1(a)所示，在均匀电场中，系统在 *x*、*y* 和 *z* 三个方向上的长度为 3.9 nm, 3.9 nm,和 7.6 nm，其中在 *x*、*y* 方向的边界上采用周期性边界条件，*z* 方向上采用固定边界条件。电场方向和传热方向为 z 方向。系统中上下各有三层石墨烯片，其厚均度为 0.5 nm，同时将最外两侧石墨烯片设定为电极，并对每个碳原子均分电荷，在两个平行的石墨烯之间形成均匀电场。正、负电荷被分配到相反的电极，每个原子所施加的电荷在 0 e ~ 0.12 e 之间[34]。在非均匀电场的模拟中，通过在最外侧的两层石墨烯片上分别创建一个小的针状电极和三个大的板状电极，在系统中形成一个二维非均匀电场，如图 1(b)所示。非均匀电场系统在 *x*、*y* 和 *z* 三个方向上的长度分别为 20 nm，2.5 nm 和 5 nm。边界条件和传热方向与均匀电场相同。

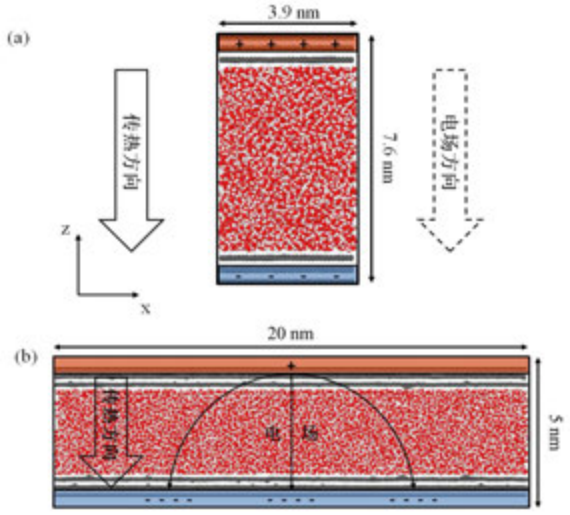


图 1 纳米结构界面传热系统模型图：(a)均匀电场 (b)非均匀电场

1.2 势函数

本系统中，液体均采用的是 The Extended Simple Point Charge Models(SPC/E)水分子模型。该模型采用标准 Lennard-Jones(L-J)势函数与库伦势函数组成的混合势，并采用 SHAKE 算法来固定模型中的键角。根据文献[35]，在电场作用下刚性水模型和柔性水模型产生的界面结构非常相似。其中 L-J 势函数与库伦势函数分别如下

$$U_{\mathrm{LJ}}(r_{\mathrm{ij}})=4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{\mathrm{ij}}}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r_{\mathrm{ij}}}\right)^{6}\right] \tag{1}$$

$$E_{(\mathrm{Coul})}=\frac{Cq_{\mathrm{i}}q_{\mathrm{j}}}{\varepsilon r_{\mathrm{ij}}} \tag{2}$$

式(1)中，参数ε和σ分别代表相互作用势阱深度和势能为零时的距离，r_{ij}为原子 i 和 j 之间的距离。式(2)中，C 为库伦常数，q_{i}、q_{j}代表两个不同原子所携带的电荷量。

为防止建模过程中发生石墨烯层坍塌，层内碳原子间采用 Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order(AIREBO)势，层间采用 L-J 势，石墨烯与水分子之间采用混合势进行计算。系统中所使用的势能参数等如表 1 所示。

表 1 L-J 势函数参数值

Molecule pair	σ (Å)	ε (eV)	q(e)
O-O	3.166	0.006739	-0.8476
H-H	0.00	0.00	+0.4238
C-O	3.19	0.0040627	Varies

1.3 参数计算

为了保证系统的体积不变，两侧最外层原子固定不动（即采用固定边界条件），其余原子皆可自由移动。为了计算周期性系统的长程库伦相互作用，采用了 Particle-Particle-Particle-Mesh(PPPM)求解器。并使用时间步长为 0.001 ps 的 Verlet 算法对原子的运动方程进行积分。系统初始温度为 323 K，所有原子的初始速度分布采用玻尔兹曼分布，在 NVT 系综下弛豫 1 ns，并统计此时水域内的压强及温度，并通过水的相图进行定位，确保此时中间水域内仍为液态水。随后使用 Nose-Hover 热浴进行控温，热源和冷源分别为 363 K 和 283 K，分别作用于上下少层石墨烯最外侧的两层石墨烯上，从而实现由上至下的一维或二维传热。模拟计算 1 ns 后，达到稳态传热，随后模拟计算 3 ns 进行数据输出，得到温度分布、热流量等物理量的统计平均结果。在本文中，仅考虑了热传导此一种传热方式，并未考虑其他传热方式以及由温度造成的液态水物性的变化。通常采用 Irving-Kirkwood(I-K)计算式近似计算系统中的热流量

$$J_{\mathrm{k}}=\frac{1}{Vol}\left\langle\sum\nolimits_{\mathrm{i}}^{\mathrm{N}}V_{\mathrm{k}}^{\mathrm{i}}\left(E^{\mathrm{i}}+\Phi^{\mathrm{i}}\right)+\sum\nolimits_{\mathrm{i,j}}^{\mathrm{N}}\left(r_{\mathrm{k}}^{\mathrm{j}}+r_{\mathrm{k}}^{\mathrm{i}}\right)W^{\mathrm{i,j}}\right\rangle \tag{3}$$

$$E^{\mathrm{i}}=\frac{1}{2}m^{\mathrm{i}}\left(\left(V_x^{\mathrm{i}}\right)^2+\left(V_x^{\mathrm{i}}\right)^2+\left(V_x^{\mathrm{i}}\right)^2\right) \tag{4}$$

$$W^{i,j}=\frac{1}{2}\left(V_x^i f_x^{i,j}+V_y^i f_y^{i,j}+V_z^i f_z^{i,j}\right) \tag{5}$$

其中，V_k^i代表某一粒子在笛卡尔坐标系上任一方向的速度分量，E^i和Φ^i分别代表了动能项和势能项，$(r_k^j+r_k^i)$是两个粒子在某一方向上的相对距离矢量，$f^{i,j}$是两个粒子之间在某一方向上的相互作用力。式(3)右边第一项描述了某一粒子所携带的动能和势能，而第二项表示了通过力与周围粒子相互作用向某一粒子传递的能量。通过考虑水分子中每个原子的贡献，基于式(5)计算水中的总热流。

2 均匀电场

2.1 均匀电场中水分子的密度分布和温度分布

通过对石墨烯-水界面传热系统两侧施加大小相同符号相反的电荷，从而产生均匀电场。图 2a 中计算了不同电极电荷下，沿传热方向上水分子的密度分布。在靠近界面的部分，由于受到表面效应的影响出现了密度分层，这些水分子密度层是由固体表面的范德华力和电场共同作用导致的。当电极电荷增加时，近壁处的水分子密度层逐渐向固体表面靠近，这是由表面润湿性发生变化引起的。图 2b 中呈现了均匀电场在不同电荷时的温度分布。在近壁区域内，由于界面效应，温度分布有一定的波动。在远离壁面的区域内，液体水的温度分布皆呈线性分布，并且温度曲线的斜率随电荷的增加而增大。这也说明，电极电荷的增大，使得固液界面之间的温度跳跃减小，界面热阻减小，传热量增大。当电极电荷值为 0.053 e 时，水域密度发生剧震荡，出现电冻结现象，形成类似固体的结构，因此水域密度的分布形态可作为电冻结现象发生的一种判据以及中间水域为液态水或类固体结构的判据，如图 3 所示。随着电极电荷的增大，水偶极子逐渐转动到朝向电场的方向。当电极电荷达到 0.053 e 及以上时，可以在系统中观察到这种类似晶体冰的六边形平面结构。这是由于外加电场改变了氢键网络结构，迫使水通过电冻结形成类冰结构。值得注意的是，当电极电荷为 0.075 e 时，出现了两种不对称的类冰结构，如图 4 所示。图 4 中(a)和(b)为分别从不同方向观察同一电极电荷下的模拟快照。可以发现，在此类晶体冰结构中，两种不同的晶体冰结构之间形成了晶界。一般而言，晶界的产生会导致额外的界面热阻，反而降低传热性能。

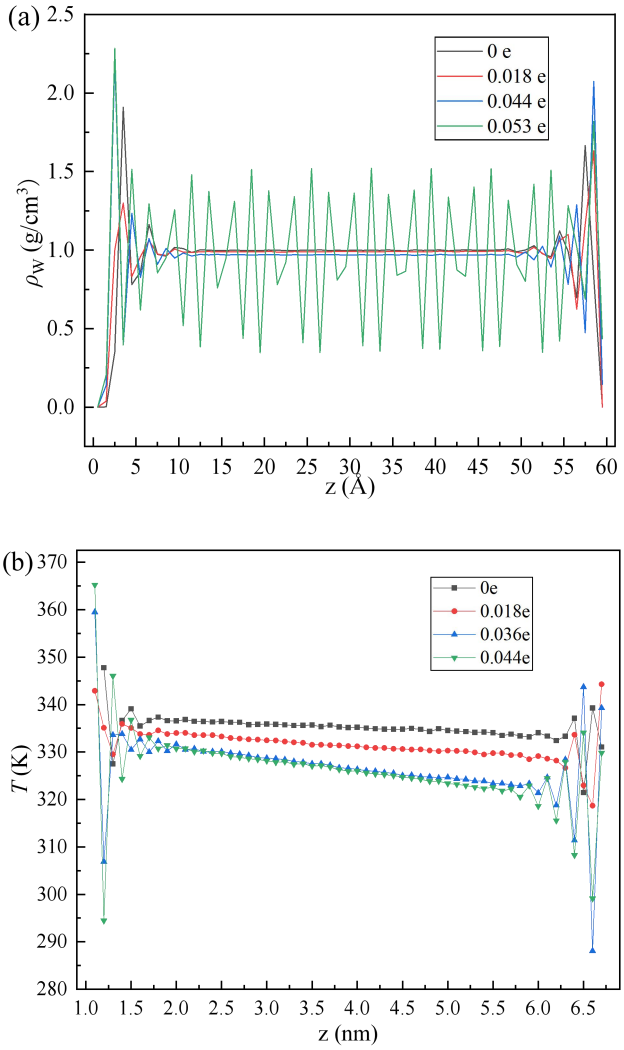


图 2 系统在不同电极电荷下的密度分布和温度分布

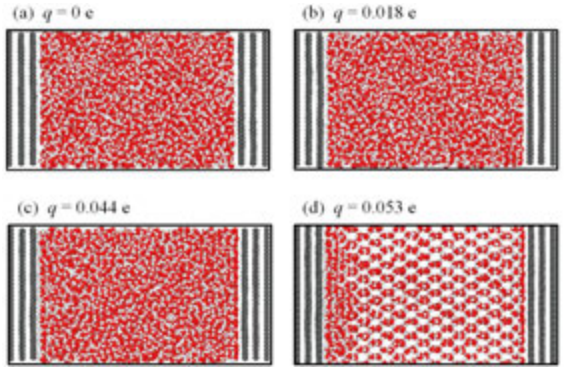


图 3 不同电极电荷下的模型图

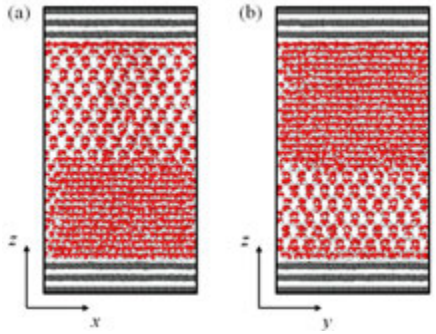


图 4 同一电极电荷下不同方向的模型（q=0.075 e）

2.2 均匀电场中系统的热导率、界面热阻和热流密度

为了判断界面热阻对能量传递的影响，在此引入了界面热阻这一概念，界面热阻通常可以由 Kapitza 热阻长度(L_K)代表，其表征的是在液体内部形成与界面温度跳跃相同的温度差所需的液体层厚度。

$$L_K = \Delta T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{\text{Liquid}} \tag{6}$$

式中，ΔT 是固液界面之间的温度差，$\partial T/\partial z$ 是液体的温度梯度。图 5 为不同电极电荷下 Kapitza 热阻长度 L_K 变化情况。从图中可以发现当没有电场的情况下，低温端与高温端的平均 L_K 在 27 nm 左右，这与 Jiang 等人[36]的研究结果相接近。随着电极电荷的增大，高温端与低温端的 L_K 都出现明显降低。电场作用使得 L_K 下降率达 66%，这是由于电场作用导致的电润湿，降低了固液界面热阻。此外，热端表面的 L_K 值低于冷端表面的 L_K 值。对于本文所选取的参数，在无电场时，对应的接触角在 95°-100°之间，因而固体表面为疏水表面。对于疏水表面，热阻长度随温度升高而降低。一方面，水分子密度层的温度依赖性可以忽略不计，另一方面，当温度较高时，系统压力升高，水分子排列结构较为紧密，固液界面的声子散射较弱，因而高温端的热阻长度 L_K 较低。如图 5 所示，石墨烯在热端表面具有较低的 L_K 值。随着电极电荷的增加，壁面润湿性增强，冷热端表面的热阻长度 L_K 逐渐减小。在较大的电极电荷下，系统达到电冻结状态，界面热阻趋于一个定值。

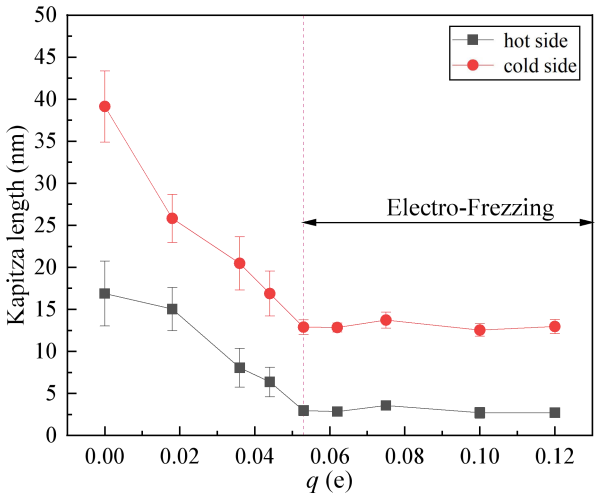


图 5 系统在不同电极电荷下的界面热阻

通过计算系统中的热流密度，并对其进行归一化处理，发现在发生电冻结现象之前，热流密度随电场增大而增大，最终在外加电场作用下，热流增大了 3.5 倍。一方面，这是由于在电场作用下固液界面热阻大幅度低的结果。但随着电冻结的出现，热流密度不再增大，这是由于当系统内形成类晶体冰结构之后，继续增大电场对固液界面热阻产生的影响可以忽略；另一方面，外电场也会对水的热导率产生一定的影响。基于傅里叶定律计算不同电极电荷下水的热导率（见图 6）。在无外电场时，水的热导率为 0.8 W/(m•K)，与 Chen 等人[37]的计算结果较为接近。在电场作用下，水分子的扩散受到抑制，导致在产生电冻结之前热导率略有降低的趋势。而当产生电冻结之后，形成了稳固的氢键网络，使得热导率出现骤增。

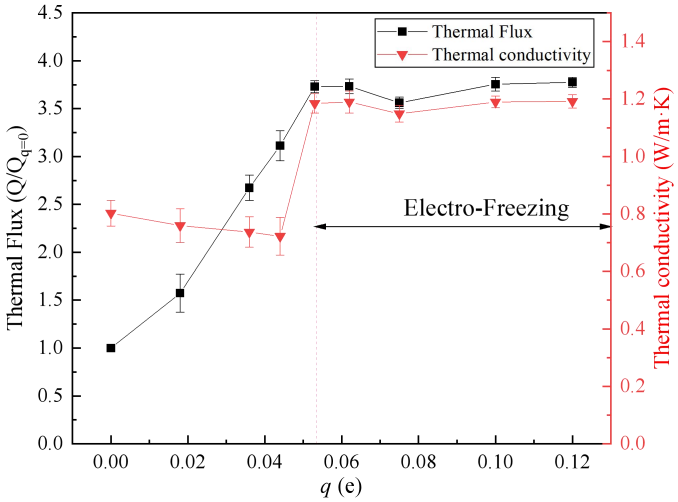


图 6 不同电极电荷下水的热导率以及系统内热流量

3 非均匀电场

3.1 非均匀电场中水分子的密度分布与温度分布

如图 1(b)所示，通过在上下石墨烯层分别布置针状电极与板状电极来模拟非均匀电场。与均匀电场不同的是，在非均匀电场作用下，水分子两侧受到的力将发生变化，水分子会受到指向高电场强度区域的合力。为了与均匀电场形成对照，本节在板状电极施加了与均匀电场相近的电荷值，在针状电极上的电荷与电极尺寸成反比分配。每个原子所携带的电荷量如表 2 所示。

表 2 电极电荷值

Case	q_{pin} (e)	q_{plate} (e)
1	0	0
2	0.225	-0.025
3	0.45	-0.05
4	0.675	-0.075
5	0.9	-0.1
6	1.08	-0.12

针状电极与板状电极上的总电荷相等，以此来保持计算时系统内的净电荷为零。在图 7 中，计算了系统的二维密度分布。在电极电荷为 0 的系统中，水域的密度为 1 g/cm^3，随着电极电荷的增大，在通道内靠近针状电极的区域逐渐出现密度较大的区域。随着电极电荷进一步增大，三块板状的附近也出现了密度高于 1 g/cm^3 的区域。水域密度随着电极电荷的增大而产生的变化进一步说明，这种类电冻结的现象从电极附近区域开始逐渐增大，这是由于液体介电泳力将水分子拉向电极附近的区域，使得高电场强度附近的水分子密度增大。

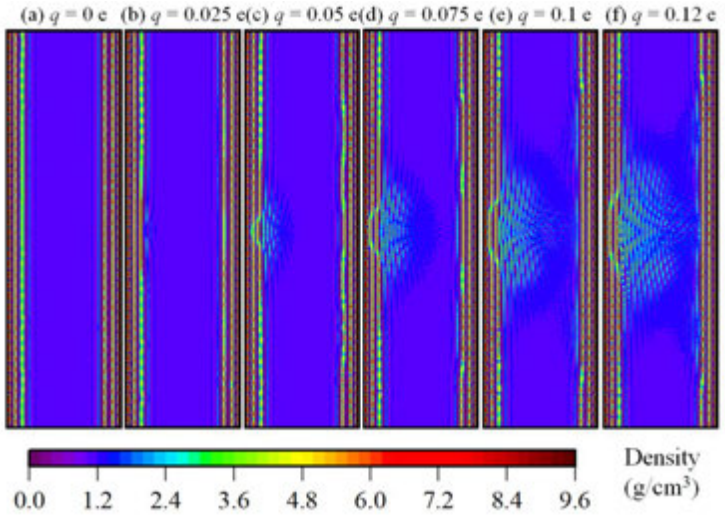


图 7 非均匀电场在不同电极电荷下的密度分布

随后，通过在两侧石墨烯分别施加 363 K 的高温热浴和 283 K 的低温热浴，在系统内形成二维传热。传热方向与电场方向一致，针状电极位于高温热浴侧，板状电极位于

低温热浴侧。如图 8 所示，在电场强度为 0 时，系统内为均匀的一维传热。而在施加电场之后，水温便开始形成二维变化，电极附近区域的温度随电场强度发生变化，在针状电极一侧温度升高，在板状电极一侧温度降低。这是由于外电场增强了界面耦合，石墨烯与水之间的界面热阻降低，温差减小。随着电极电荷的增加，这种不均匀的温度变化愈加明显。由于受到液体介电泳力的影响，在电极附近具有更强的界面耦合，热量传递速度比其他区域更快，这有助于实现某一高热流密度区域的热点冷却以及热流引导。

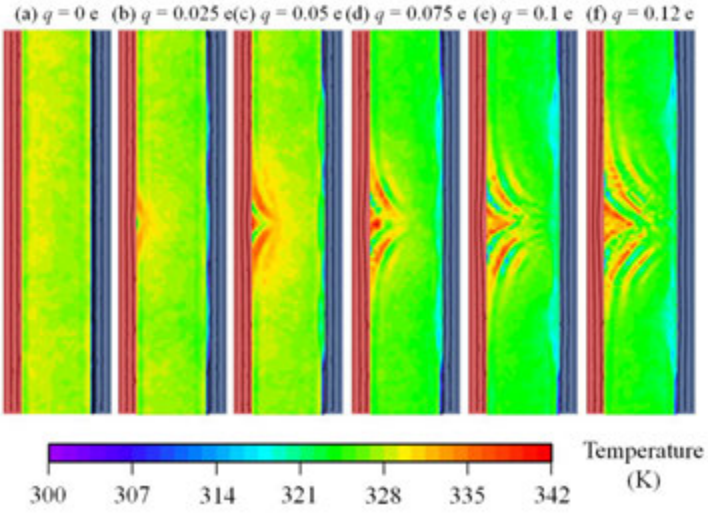


图 8 非均匀电场在不同电极电荷下的温度分布

3.2 非均匀电场中系统的热流量

由上述的计算结果可知，受到非均匀电场的影响，热量在传递方向上也是不均匀的。在本文中，为了更准确的描述出针状电极与板状电极对系统中传热的影响，对系统进行了区域的划分，如图 9 所示，分别计算了三个板状电极沿 z 方向所在区域(J_1、J_2 和 J_3)的归一化热流密度，其中 J_2 为针状电极所在区域。

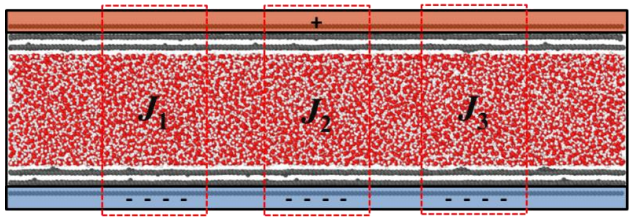


图 9 热流量计算区域划分

接下来利用公式(3)计算了以上三个区域中的热流量，如图 10 所示。通过对比不同区域的热流量可以发现，随着电极电荷量的增加，由于针状电极处热流密度较大，并且 J_2 增大的速率远大于 J_1 与 J_3。在电极电荷为 0.05 e 左右，即发生电冻结之前，非均匀电场与均匀电场的热流量都是无电场时的 4 倍左右。对于均匀电场的情况，当电极电荷大于 0.05 e 时，继续增大电极电荷不会进一步强化传热。但是，对于非均匀电场的情况，由于液体介电泳力的作用，非均匀电场的热流量继续随着电极电荷的增大而增加。当电

极电荷为 0.12 e 时，针状电极所在区域的热流量增加为无电场时的 9 倍左右，且 J_1 与 J_3 也均超过了均匀电场的最高热流量。

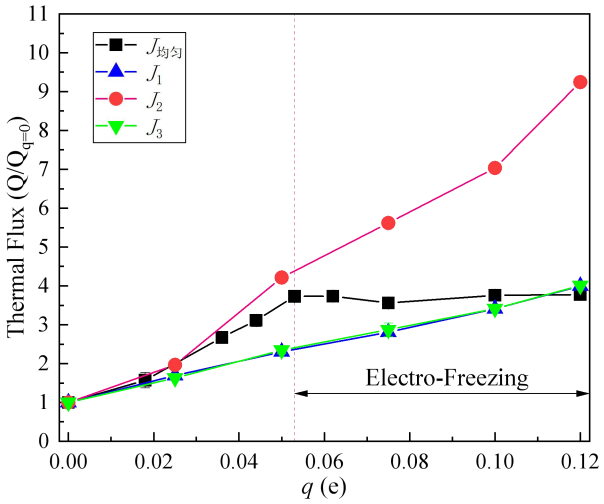


图 10 非均匀电场下不同区域在不同电极电荷下的热流量

4 结论

本文基于分子动力学模拟方法，建立了外电场作用下的石墨烯-水界面传热模型，研究了均匀电场和非均匀电场作用下石墨烯-水界面的传热特性。研究发现，均匀电场和非均匀电场都能够增强固液界面的耦合，并强化固液界面之间的传热。在均匀电场下，随着电场强度的增大，热流密度逐渐升高，当电极电荷为 0.053 e 时，系统内水分子产生电冻结现象，此时增大电场强度，热流密度不再升高。然而在非均匀电场下，由于液体介电泳力的作用，水分子受到合力而向电场梯度较高的区域移动，这使得固液界面耦合进一步增强，系统中的热流密度随着电场的增大而增加，且不会受到电冻结的影响，针状电极区域的局部热流密度可增加到初始热流密度 9 倍左右。

参考文献

[1] Razeeb. K. M, Dalton. E, et al. Present and future thermal interface materials for electronic devices. International Materials Reviews, 2018, 63(1):1-21.

[2] Dai. G. L. Designing nonlinear thermal devices and metamaterials under the Fourier law: A route to nonlinear thermotics. Frontiers of Physics, 2021, 16(5):53301.

[3] Liang. Q, He. L. Y, et al. Manipulating thermal conductivity of silicon nanowires through surrounded fins and Ge dopant. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 176: 121425.

[4] Motezakker . A. R, et al. Optimum ratio of hydrophobic to hydrophilic areas of biphilic surfaces in thermal fluid systems involving boiling. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 135: 164-174.

[5] Betz . A. R, Jenkins. J, Attinger. D. Boiling heat transfer on superhydrophilic, superhydrophobic, and superbiphilic surfaces. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013, 57(2):733-741.

[6] Pollack. G. L. Kapitza resistance. Reviews of Modern Physics, 1969, 41(1):48.

[7] Cheeke. J. D. N. The kapitza resistance and heat transfer at low temperatures. Le Journal de Physique

Colloques, 1970, 31: C3-C129.

[8] Pham. A. T, Barisik. M, et al. Molecular dynamics simulations of Kapitza length for argon-silicon and water-silicon interfaces. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing, 2014, 15(2):323-329.

[9] Wang. X. R, Goncalves. W, et al. Thermal conductivity temperature dependence of water confined in nanoporous silicon. 2022, 34(30):305701.

[10] Li. F, Wang. J, et al. Negative differential thermal resistance through nanoscale solid-fluid-solid sandwiched structures. Nanoscale, 2019, 11: 13051.

[11] Hong. Y, Li. L. Tuning thermal contact conductance at graphene–copper interface via surface nanoengineering. Nanoscale, 2015, 7(14):6286-6294.

[12] 张本熙. 微结构表面湿润转变与传热特性的分子动力学研究: [博士论文]. 北京: 华北电力大学, 2021.

Zhang Benxi. Molecular Dynamics Study on Wetting Transition and Heat Transfer Characteristics of Microstructures [Ph.D. Thesis]. Beijing: North China Electric Power University, 2021

[13] Zhang. J, et al. Molecular dynamics simulation of the interfacial thermal resistance between phosphorene and silicon substrate. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 104: 871-877.

[14] Duda. J. C, Saltonstall. C. B, et al. Assessment and prediction of thermal transport at solid-self-assembled monolayer junctions. Journal of Chemical Physics, 2011, 134(9):094704.

[6] Wang. B. B, Wang. X. D, et al. Enhancement of boiling heat transfer of thin water film on an electrified solid surface. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 109: 410-416.

[7] Zhang. B. X, He. X, et al. Explosive boiling of argon nanofilms in the Wenzel or Cassie state on high-temperature nanopillar-arrayed surfaces. International Journal of Thermal Sciences, 2022, 172: 107282.

[8] Sur. A, Lu. Y, et al. Pool boiling heat transfer enhancement with electrowetting. International Journal of Thermal Sciences, 2018, 120: 202-217.

[9] 郭俊, 李双菲. 非均匀电场强化水的池沸腾传热特性实验研究与分析.工程热物理学报, 2022, 43(03): 788-796.

GUO Jun, Li Shuang-Fei. Experimental Study and Analysis of Heat Transfer Characteristics of Pool Boiling Enhanced by Non-uniform Electric Field. Journal of Engineering Thermophysics, 2022, 43(03):788-796.

[10] Orejon. D, Sefiane. K, Shanahan. M. E. Young-Lippmann equation revisited for nano-suspensions Appled Physics Letters, 2013, 102(20):201601.

[11] Daub. C. D, Bratko. D, et al. Electrowetting at the nanoscale Journal of Physical Chemistry C, 2007, 111(2):505-509.

[12] Edwards. A. M. J, Brown. C, et al. Dielectrowetting: the past, present and future.Cueeent Opinion in Colloid and Interface Science, 2018, 36: 28-36.

[13] Song. F. H, Li. B. Q, Liu. C. Molecular dynamics simulation of nanosized water droplet spreading in an electric field. Langmuir, 2013, 29(13):4266-4274.

[14] Lee. M. W, Latthe. S. S, et al. Dynamic electrowetting-on-dielectric (DEWOD) on unstretched and stretched Teflon. Langmuir, 2013, 29(25):7758-7767.

[15] Zhang. B. X, Wang. S. L, et al. Statics and dynamics of nanodroplet electrowetting on an isothermally heated nanostructured surface. Journal of Molecular Liquids, 2021, 342: 117468.

[16] Luedtke. W. D, Gao. J, Landman. U. Dielectric nanodroplets: structure, stability, thermodynamics, shape transitions and electrocrystallization in applied electric fields. Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115(42):20343-20358.

[17] Zhu. X, Yuan. Q, Zhao. Y. P. Phase transitions of a water overlayer on charged graphene: from electromelting to electrofreezing. Nanoscale, 2014, 6(10):5432-5437.

[18] Sun. W, Xu. X. B, et al. Effects of dipole polarization of water molecules on ice formation under an electrostatic field[J]. Cryobiology, 2008, 56(1):93-99.

[19] Zangi. R, Mark. A. E. Electrofreezing of confined water. The Journal of Chemical Physics, 2004, 120(15):7123-7130.

[20] Yan. J. Y, Patey. G. N. Molecular dynamics simulations of ice nucleation by electric fields. Journal of Physical Chemistry A, 2012, 116(26):7057-7064.

[21] Teschke. O. Imaging ice-like structures formed on HOPG at room temperature. Langmuir, 2010, 26(22):16986-16990.

[22] Jinesh. K. B, Frenken. J. W. M. Experimental evidence for ice formation at room temperature. Physical Review Letters, 2008, 101(3):036101.

[23] Ihlefeld. J. F, et al. Room-temperature voltage tunable phonon thermal conductivity via reconfigurable interfaces in ferroelectric thin films. Nano Letters, 2015, 15(3):1791-1795.

[24] Seijas-Bellido. J.A, Aramberri. H, et al. Electric control of the heat flux through electrophononic effects. Physical Review B, 2018, 97(18):184306.

[25] Evans. W, Fish. J, Keblinski. P. Thermal conductivity of ordered molecular water. The Journal of Chemical Physics, 2007, 126(15):154504.

[26] Pollack. G. L. Kapitza resistance. Reviews of Modern Physics, 1969, 41(1):48.

[27] Cheeke. J. D. N. The kapitza resistance and heat transfer at low temperatures. Le Journal de Physique Colloques, 1970, 31: C3-C129.

[28] Pham. A. T, Barisik. M, et al. Molecular dynamics simulations of Kapitza length for argon-silicon and water-silicon interfaces. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing, 2014, 15(2):323-329.

[29] Wang. X. R, Goncalves. W, et al. Thermal conductivity temperature dependence of water confined in nanoporous silicon. 2022, 34(30):305701.

[30] Li. F, Wang. J, et al. Negative differential thermal resistance through nanoscale solid-fluid-solid sandwiched structures. Nanoscale, 2019, 11: 13051.

[31] Hong. Y, Li. L. Tuning thermal contact conductance at graphene–copper interface via surface nanoengineering. Nanoscale, 2015, 7(14):6286-6294.

[32] Zhang. J, et al. Molecular dynamics simulation of the interfacial thermal resistance between phosphorene

and silicon substrate. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 104: 871-877.

[33] Duda. J. C, Saltonstall. C. B, et al. Assessment and prediction of thermal transport at solid-self-assembled monolayer junctions. Journal of Chemical Physics, 2011, 134(9):094704.

[34] Chen S, Yang M, Liu B, et al. Enhanced thermal conductance at the graphene–water interface based on functionalized alkane chains. RSC Advances, 2019, 9(8): 4563-4570.

[35] Stuart S J, Tutein A B, et al. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. Journal of Chemical Physics, 2000, 112(14): 6472-6486.

[36] Jiang Q G, Ao Z M, et al. Reversible Transition of graphene from hydrophobic to hydrophilic in the presence of an electric field[J]. Journal of Physical Chemistry C, 2012, 116(36): 19321–19326.

[37] Chen B, Hsieh W P, et al. Thermal conductivity of compressed H2O to 22 GPa: A test of the Leibfried-Schlomann equation. Physical Review B, 2011, 83(13): 132301.

中国工程热物理学会 传热传质学
学术会议论文 编号：667

基于风云四号静止卫星的中国太阳能资源时空分布特性研究

黄春林，张跃，余潇潇，刘杰梅，陈奇祥，袁远
（哈尔滨工业大学能源科学与工程学院，哈尔滨，150001）
（Tel:0451-86418194, Email:yuanyuan83@hit.edu.cn）

摘要： 风云四号（FY-4A）可提供覆盖全中国的高时空和光谱分辨率的观测数据，在太阳能资源评估领域具有巨大潜力。本文利用 FY-4A 可见光通道观测数据和半经验模型建立了分辨率为 4 千米和 15 分钟的水平面总辐射（FY-GHI）数据集。结果显示，逐时 FY-GHI 的相关系数（R）、均方根误差（RMSE）、平均偏差 MBE 分别为 0.90、118.8W/m^2 和 2.2W/m^2。太阳能资源空间分布结果表明，青藏高原、中国北部和西北地区具备充沛的太阳能资源，西南地区和东北地区的太阳能资源相对匮乏。
关键词： 风云四号，半经验方法，太阳能分布

0 引言

为了实现碳中和目标以及应对由经济增长导致的能源压力，中国需要调整现有的能源结构。可以预见，在接下来的几十年中，可再生能源发电的比重将逐渐超过化石燃料发电。事实上，作为一种清洁能源，太阳能光伏发电在中国已经得到了广泛的应用，中国目前的光伏装机量和增长量位居世界第一[1-4]。太阳能光伏发电进一步发展的关键在于太阳能资源的高效合理利用，实现的前提之一是对中国太阳能资源时空分布规律信息的精准获取[5-8]。

全球水平辐照度（GHI，~0.3-4.0μm）是太阳能资源评估的关键参数。目前，GHI 可以通过三种常见的方法获得：地面观测、数值模式模拟以及卫星反演[9-11]。地面辐射计通常被认为是获取 GHI 数据的最准确和最可靠的方法。因此，来源于地面辐射监测网络的数据通常被用于各类 GHI 产品的验证标准[12,13]。然而，由于辐射监测网络的空间分布较为稀疏，无法仅仅使用地基站点进行太阳能资源评估。数值天气模式能够给出时空连续的 GHI，主要优势在于时间和空间上的完整性和一致性，不足之处为粗糙的空间分辨率和较大的误差[14]。基于卫星反演太阳辐射的方法，在时间和空间上与数值模式一样具备完整性，同时拥有接近于地面观测结果的准确性。因此，卫星遥感是获取局部/全球 GHI 的更优选择。在过去的三十年中，极轨卫星和地球静止卫星已被应用于 GHI 估算的研究中。其中，地球静止卫星能够对地球连续观测，捕捉 GHI 的日内变化规律，在太阳能资源评估领域具备极大潜力[15]。

风云四号（FY-4A）作为中国新一代静止气象卫星，能够进行覆盖中国的高时空分辨率观测，其搭载的地球同步辐射成像仪（AGRI）能够提供可见光、近中远红外（0.47–13.5 μm）等 14 波段的卫星云图像[15-17]。FY-4A 为覆盖全中国的高时空分辨率 GHI 数据集的开发提供了可能，在太阳能资源时空分布规律研究方面具备极大的潜力。在这项研究中，利用 AGRI 可见光通道观测数据和半经验方法建立了覆盖全中国地区的分辨率为 4 千米和 15 分钟的高时空分辨率 GHI 数据集，并与日本葵花卫星（Himawari-8）辐射产品进行了对比。在此基础上获得了中国地区太阳能资源的时空分布特性。本文研究结果可有效促进我国太阳能资源的发展，助力碳中和目标的实现。

1 数据与方法

1.1 数据

FY-4A 卫星发射于 2016 年 12 月 11 日，定点位于经度为东经 105°的地球同步轨道上空，该卫星提供的数据集的空间分辨率包括 0.5km、1km、2km、4km 和 16km，时间分辨率包括 15min、1h 和 2h[15]。FY-4A 卫星搭载的 AGRI 具有包括可见光、近红外、中红外和远红外在内的 14 个波段。在本项研究中，使用了 2018 年 FY-4A 可见光通道（0.55-0.75 微米）的一级产品，时间分辨率为 15min，空间分辨率为 4km。该数据用于计算云指数（CI）

基金项目：本工作得到国家自然科学基金重点项目（No. 51776051）的资助

以及晴空指数（K_c），在此基础上得到具备相同时间和空间分辨率的 GHI 数据。本文所使用的 FY 数据来源于 http://satellite.nsmc.org.cn/。

Himawari-8 卫星是第三代地球静止气象卫星，由日本气象厅于 2014 年 10 月 7 日发射。其携带的成像仪（AHI）可实现亚太地区(60°S - 60°N, 80°E - 160°W)的多通道观测。本文使用了 AHI L3 辐射产品和 L2 云产品。前者用于 FY-GHI 的准确性对比，后者用于研究云对半经验模型性能的影响。本研究中使用的 Himawari-8 数据来源于 https://www.eorc.jaxa.jp/ptree/index.html。

MERRA-2 再分析是美国宇航局建立的一个全球网格化数据库，该数据集囊括了 1980 年至今的最新的大气和气溶胶数据。本文选取了 2018 年的 地面反照率，气压，总臭氧量，二氧化氮，水汽，气溶胶光学厚度和 Angstrom 指数等数据，时间分辨率为 1 小时，空间分辨率为 0.5° × 0.625°。MERRA-2 数据来源于 https://daac.gsfc.nasa.gov/。以上数据用于驱动晴空辐射模型，得到晴空 GHI 背景值。

本文使用的 2018 年 GHI 地面观测数据来源于 CERN 的 38 个站点，所有地面测量数据都经过 CERN 质量控制。站点的空间分布如图 1 所示，这些站点分布在中国几乎所有典型的生态系统中，包括农业、森林、草原、沙漠、沼泽地、湖泊、海洋和城市生态系统。站点采用的为 KIPP-ZONEN 生产的光谱响应为 0.3–3.0μm 的 CM11 型太阳辐射计，精度为 3%。

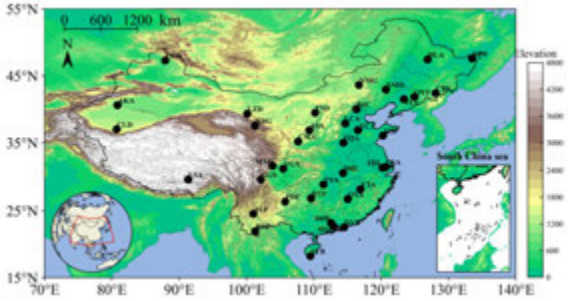


图 1 中国地区 38 个 CERN 站点的地理位置

Fig.1 Spatial distribution of 38 sites of the Chinese Ecosystem Research Network

1.2 研究方法

1.2.1 半经验模型

本文基于半经验模型计算 FY-4A 卫星数据集（FY-GHI），半经验模型由晴空物理模型和经验云天模型构成，包含以下四个步骤：（1）基于晴空物理模型计算晴空个条件下的 GHI 值；（2）基于卫星表观反射率计算 CI；（3）建立 CI 和K_c的函数关系，通过晴空指数表征云对地表太阳辐射的削弱作用；（4）基于K_c和晴空辐射值计算最终到达地表的 GHI。

本文使用 REST2 晴空模型计算晴空条件下的 GHI 值。REST2 模型将短波光谱分成两个波段：290-700 纳米和 700-4000 纳米，并在每个波段内计算垂直直接辐射（DNI）和散射辐射（DHI）。短波 DNI 和 DHI 是两个波段计算结果之和，短波 GHI 是短波 DHI 和短波 DNI 的水平分量之和。REST2 模型需要地面反照率，气压，总臭氧量，二氧化氮，水汽，气溶胶光学厚度和 Angstrom 指数等六类大气参数。上述参数中，将二氧化氮总量设置为常数（0.0002 atm-cm），其余参数来源于 MERRA-2。

CI 的计算公式如下[18]：

$$n^t(i,j)=\frac{\rho^t(i,j)-\rho_g^t(i,j)}{\rho_c^t(i,j)-\rho_g^t(i,j)} \tag{1}$$

式中，$\rho^t(i,j)$ 代表卫星观测到的反射率值，$\rho_c^t(i,j)$ 和 $\rho_g^t(i,j)$ 分别代表云反射率和晴空地表反射率。本研究中，将逐月表观反射率的第 95 百分位数作为 $\rho_c^t(i,j)$。$\rho_g^t(i,j)$ 通过月尺度的迭代过程确定[19]。

在 CI 的基础上，进一步确定K_c。两者的函数关系如下[20]：

$$\begin{cases} n^t(i,j) < -0.2 & K_c = 1.2 \\ -0.2 \le n^t(i,j) < 0.9 & K_c = 1.008 - 0.96 n^t(i,j) \\ 0.9 \le n^t(i,j) < 1.1 & K_c = 2.3499(n^t(i,j))^2 - 5.1699 n^t(i,j) \\ & \quad +2.8935 \\ 1.1 \le n^t(i,j) & K_c = 0.05 \end{cases} \tag{2}$$

基于晴空指数和晴空 GHI 值，计算实际到达地表的 GHI 值。

$$GHI = GHI_{cs} \times K_c \tag{3}$$

式中，*GHIcs* 是晴空模型计算得到的晴空 GHI。K_c是晴空指数。

1.2.3 准确性验证

在模型验证前，需要对卫星估算结果和地表观测数据在时间和空间上进行匹配。时间上，FY-4A、Himawari-8 和 CERN 的瞬时值转换为小时均值。空间上，离每个地面站最近的卫星像素处的 GHI 估算值用于匹配地表观测数据。基于 38 个 CERN 站点数据对 GHI 估算结果进行准确性验证，选用的统计指标包括相关系数（R）、均方根误差（RMSE）、平均偏差（MBE）及其归一化值（nRMSE、nMBE）。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\mathrm{y}_i - x_i)^2} \tag{4}$$

$$nRMSE = \frac{RMSE}{\bar{x}} \times 100\% \tag{5}$$

$$RMB = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i -$$

式中，x 和 y 分别代表地基观测数据和卫星观测数据，i 代表数据序号，n 代表样本总量。

2 计算结果

2.1 准确性验证

通过地基站点观测数据对 FY-GHI 和 Himawari-8 辐射产品(AHI-GHI)的准确性进行验证。图 2 给出了全天空条件下 FY-4GHI、AHI-GHI 的小时均值和日均值的验证结果。基于半经验模型得到的 FY-GHI 小时均值与地面观测具有良好的一致性。其中，R、RMSE（nRMSE）和 MBE（nMBE）的值分别为 0.9、118.8 W/m^2（29.7%）、2.2 W/m^2（0.6%）。当 GHI 实际值较低时，估算模型倾向于高估 GHI 值，相反，当 GHI 实际值较高时，则表现为低估。随后，本文根据小时数据得到 GHI 日均值，日均 FY-GHI 与地面数据的一致性有所改善。RMSE（nRMSE）下降到 30.4 W/m^2（18.4），MBE（nMBE）则上升至−6.2 W/m^2（−3.8%）。AHI-GHI 产品小时均值的表现明显低于 FY-GHI，R 和 RMSE（nRMSE）分别为 0.88、136.3 W/m^2（34.4%），MBE（nMBE）超过 FY-GHI 的十倍，达到了 29.5 W/m^2（7.5%）。另一方面，AHI-GHI 日均值的表现于 FY-GHI 较为接近。R 和 RMSE（nRMSE）分别为 0.91、35.2 W/m^2（21.3%），MBE（nMBE）则是大幅下降至 0.2 W/m^2（0.1%）。

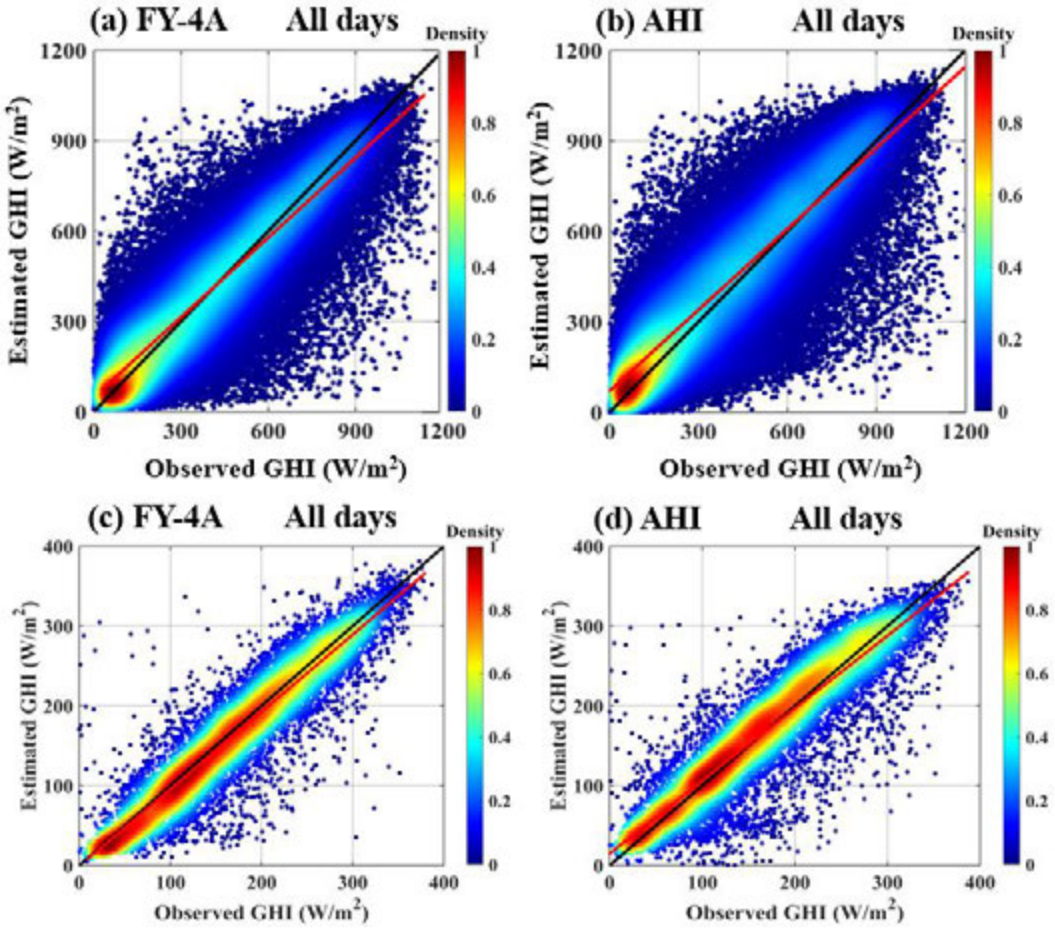


图 2 全天空条件下，2018 年(a-b)逐时和(c-d)逐日 FY-4A GHI 和 Himawari-8 GHI 与 CMA 地表测量值的散点图。红色直线表示线性回归拟合

Fig.2 Density scatterplot of (a-b) hourly and (c-d) daily FY-4A based GHI and Himawari-8 GHI versus surface measurements in 2018. The black line denotes a 1:1 line. The red linear indicates linear regression results.

表 2 FY-GHI 和 AHI-GHI 的验证结果

Table. 2. The validation metrics of FY-GHI and AHI-GHI.

	产品	R	RMSE (%)	MBE (%)	斜率	截距	样本量
Hourly	FY-GHI	0.90	118.8 (29.7)	2.2 (0.6)	0.88	49.5	128340
	AHI -GHI	0.88	136.3 (34.5)	29.5 (7.5)	0.89	71.0	126107
Daily	FY-GHI	0.94	30.4 (18.4)	–6.2 (–3.8)	0.97	–0.7	13640
	AHI -GHI	0.91	35.2 (21.3)	35.2 (21.3)	0.91	15.0	13640

图 3 给出了中国地区 38 个 CERN 站点处每小时的 FY-GHI 和 AHI-GHI 与地面站点测量值之间的验证结果。FY-GHI 在超过 70%（27 个）的站点中具备高 R 值（0.9），将近 80%的站点具有较低的 RMSE 值（<130 W/m²）。与 AHI-GHI 产品的对比，FY-GHI 在各站点的 R 值更高，但二者十分接近，只有 7 个站点的差值大于 0.04。对于 RMSE，FY-GHI 的表现具备显著优势，87%的站点的 RMSE 值低于 AHI-GHI。FY-GHI 没有出现明显的高估或者低估，超过 70%的站点的 MBE 在−25 - 25W/m² 的范围内，相比而言，AHI-GHI 则呈现显著的高估，超过 50%的站点，MBE 值大于 50W/m²。已有研究表明，基于卫星的 GHI 估算容易受到云、冰雪地表的影响，本文开展的站点尺度验证工作也给出了相同的结论。GHI 估算值的准确度一定程度上受云覆盖条件支配。在西南、华南、珠三角、青藏高原、东北平原等云频率较高的区域，各站点的 R 值低于华北、西北以及华中。RMSE 值的空间分布模式与 R 的类似。冬季存在大量的冰雪覆盖地表也是东北地区 GHI 高 RMSE 的贡献因素之一。

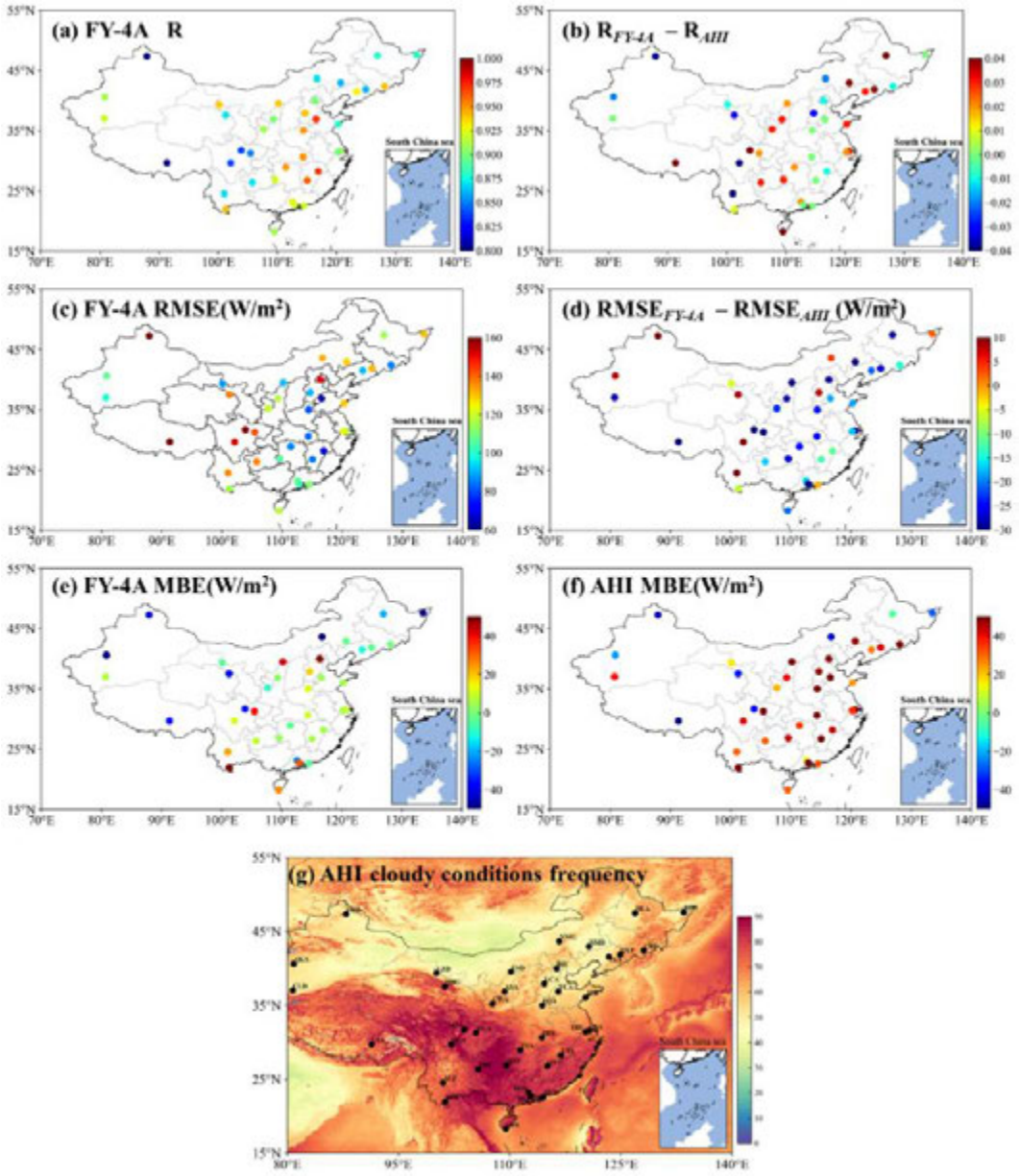


图 3 站点尺度 FY-4A GHI 估算值和 Himawari-8 辐射产品的准确性验证结果，(a-b)代表 R，(c-d)代表 RMSE，(e-f)代表 MBE。（g）代表 2018 年云出现频率的空间分布。

Fig.3 Detail statistics of the evaluation of the FY-4A and AHI retrieved GHI with CERN GHI at each site on all-sky days in 2018 for (a-b) R, (c-d) RMSE, and (e-f) MBE. Spatial distribution of the cloudy conditions frequency (g) in 2018 is shown here.

2.2 太阳能时空分布

本文在年尺度和季节尺度上对 FY-GHI 的时空变化特征进行了分析。图 4 给出的是中国地区 FY-GHI 年均值的空间分布。如图所示，大部分区域的 FY-GHI 年均值高于 150 W/m^2。在云频率较低（如中国北方）和海拔较高（如青藏高原）区域，具备较高的 GHI 年均值。在西南、华南、东北等地区，GHI 年均值较低。由于太阳高度角和日照持续时间的差异，中国地区的 GHI 呈现出显著的季节性变化。最高值出现在夏季，GHI 均值超过 200 W/m^2。随后依次为春季和秋季。最低值出现在冬季，大部分区域的 GHI 均值低于 150 W/m^2。中国西南的四川盆地，全年的 GHI 都普遍偏低，常年的云覆盖是主要原因(图 3-g)，此外，低海拔也可能是原因之一。

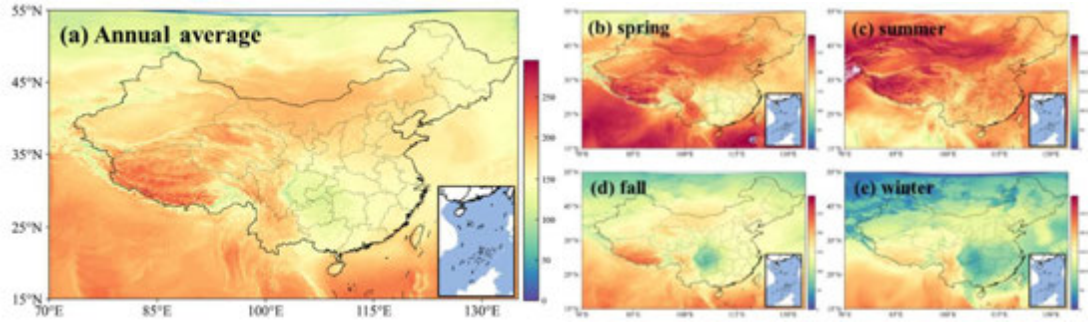


图 4 2018 年中国地区 GHI 年均值和季节均值的空间分布

Fig. 4. Spatial map of annual and seasonal GHI in 2018 over China.

高时空分辨率的太阳能资源空间分布结果对于太阳能资源的高效合理利用和太阳能光伏的进一步发展至关重要，因此，本文在 GHI 结果的基础上，得到了 2018 年中国地区的总太阳辐射（TSR）空间变化特征，如图 5 所示。总体而言，大部分区域的 TSR 超过 1000 kWh/m^2/yr，青藏高原、中国北部和西北等地区的 TSR 值极高，范围从 1600 到 2200 kWh/m^2/yr。相比之下，中国西南地区（特别是四川盆地）和中国东北地区的太阳辐射相对较低。除西南地区外，太阳辐射的基本特征是从西北内陆地区向东南沿海地区逐渐减少。

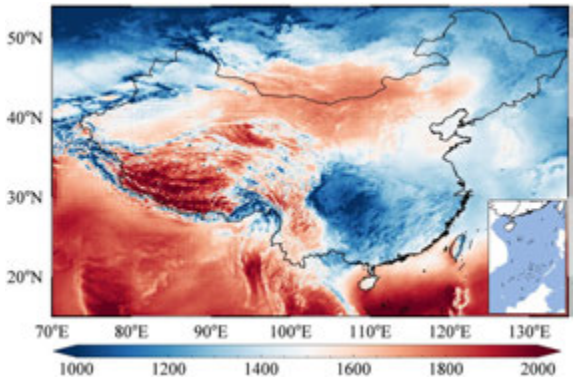


图 5 2018 年中国地区太阳能资源空间分布

Fig.5 Annual mean solar photovoltaic resources (kWh/m^2/yr) over China in 2018.

3 结论

FY-4A 作为中国自主研发的最新一代静止气象卫星，为覆盖全中国的高时空分辨率 GHI 数据集的构建提供了巨大的机遇。本文利用 AGRI 可见光通道观测数据和半经验模型建立了覆盖全中国地区的分辨率为 4 千米和 15 分钟的高时空分辨率 FY-GHI 数据集。FY-GHI 不仅与地面观测数据进行了验证，而且还与成熟的 Himawari-8 GHI 产品进行了对比。结果显示，逐时 FY-GHI 的 R、RMSE（nRMSE）和 MBE（nMBE）分别为 0.90、118.8W/m^2（29.7%）和 2.2W/m^2（0.6%），逐日 FY-GHI 的相应数值分别为 0.94、30.4W/m^2（18.4%）和–6.2W/m^2（–3.8%）。基于 FY-GHI 数据集的太阳能资源空间分布结果表明，中国地区的太阳能资源主要集中在云量较少和海拔较高的地区（如青藏高原、中国北部或西北部），四川盆地是我国太阳能资源最匮乏的地区。

参考文献

[1] BURANDT T, XIONG B, LöFFLER K, et al. Decarbonizing China's energy system – Modeling the transformation of the electricity, transportation, heat, and industrial sectors [J]. Applied Energy, 2019, 255: 113820-36.

[2] PRĂVĂLIE R, PATRICHE C, BANDOC G. Spatial assessment of solar energy potential at global scale. A geographical approach [J]. Journal of Cleaner Production, 2019, 209: 692-721.

[3] LI T, LI A, GUO X. The sustainable development-oriented development and utilization of renewable energy industry-A comprehensive analysis of MCDM methods [J]. Energy, 2020, 212: 118694-710.

[4] IRENA. Renewable capacity statistics 2020 international renewable energy agency (IRENA) [Z]. Abu Dhabi. 2020

[5] STEPHENS G L, LI J, WILD M, et al. An update on Earth's energy balance in light of the latest global observations [J]. Nature Geoscience, 2012, 5(10): 691-6.

[6] DENG, SHUAI, ZHANG, et al. A critical review of the models used to estimate solar radiation [J]. Renewable & sustainable energy reviews, 2017: 314-29.

[7] HUANG G, LI Z, LI X, et al. Estimating surface solar irradiance from satellites: Past, present, and future perspectives [J]. Remote Sensing of Environment, 2019, 233: 111371-86.

[8] YANG D, WANG W, XIA X A. A Concise Overview on Solar Resource Assessment and Forecasting [J]. Advances in Atmospheric Sciences, 2022, 39(8): 1239-51.

[9] XIA X A, WANG P C, CHEN H B, et al. Analysis of downwelling surface solar radiation in China from National Centers for Environmental Prediction reanalysis, satellite estimates, and surface observations [J]. Journal of Geophysical Research, 2006, 111(D9): D09103-D11.

[10] ZHANG X, LIANG S, WILD M, et al. Analysis of surface incident shortwave radiation from four satellite products [J]. Remote Sensing of Environment, 2015, 165: 186-202.

[11] LIANG S, WANG D, HE T, et al. Remote sensing of earth's energy budget: synthesis and review [J]. International journal of digital Earth, 2019, 12(007): 737-80.

[12] SHI H, ZHANG J, ZHAO B, et al. Surface brightening in eastern and central China since the implementation of the clean air action in 2013: causes and implications [J]. Geophysical Research Letters, 2021, 48(3): 0094-8276.

[13] YANG S, WANG X L, WILD M. Homogenization and Trend Analysis of the 1958–2016 In Situ Surface Solar Radiation Records in China [J]. Journal of Climate, 2018, 31(11): 4529-41.

[14] YANG D, GUEYMARD C A. Probabilistic post-processing of gridded atmospheric variables and its application to site adaptation of shortwave solar radiation [J]. Solar Energy, 2021, 225: 427-43.

[15] XIAN D, ZHANG P, GAO L, et al. Fengyun meteorological satellite products for earth system science applications [J]. Advances in Atmospheric Sciences, 2021, 38(8): 1267-84.

[16] YU Y, SHI J, WANG T, et al. All-sky total and direct surface Shortwave Downward Radiation (SWDR) estimation from satellite: Applications to MODIS and Himawari-8 [J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2021, 102: 102380-92.

[17] LETU H, NAKAJIMA T Y, WANG T, et al. A new benchmark for surface radiation products over the East Asia-Pacific region retrieved from the Himawari-8/AHI next-generation

geostationary satellite [J]. Bulletin of the American Meteorological Society, 2021: 1-40.
[18] RIGOLLIER C, LEFèVRE M, WALD L. The method Heliosat-2 for deriving shortwave solar radiation from satellite images [J]. Solar Energy, 2004, 77(2): 159-69.
[19] AMILLO A, HULD T, MüLLER R. A new database of global and direct solar radiation using the eastern meteosat satellite, models and validation [J]. Remote Sensing, 2014, 6(9): 8165-89.
[20] YANG L, GAO X, LI Z C, et al. Nowcasting of surface solar irradiance using Fengyun-4 satellite observations over China [J]. Remote Sensing, 2019, 11(17): 1984-2001.

中国工程热物理学会 传热传质
学术会议论文 编号：233289

基于 CFD-DEM 耦合模型的热化学储能移动床反应器数值研究

陈简一[1,2]，许闽[1,2]，仝仓[3]，黄彩凤[1,2]，淮秀兰*[1,2]
（[1]中国科学院工程热物理研究所，北京 100190;
[2]中国科学院大学，北京 100049;
[3]中科南京未来能源系统研究院，南京 211135）
（Tel: 18939943919；Email: chenjianyi@iet.cn）

摘要：移动床反应器具有可连续储热，反应物不易烧结，换热性能好等优势，可作为经济性良好的 $Ca(OH)_2/CaO$ 体系热化学储能反应器。本文基于 CFD-DEM 模型，并与自编程的化学反应模块耦合，建立水平管式移动床准三维数值模型，对反应器内颗粒的动态及稳态特性进行了研究。结果表明：反应器温度及颗粒反应速率在近入口处数值最大，随颗粒流动方向逐渐下降直至稳定；提升气体进口温度、固体进口温度、气体进口速度对反应转化率均有积极影响，其中，固体进口温度的影响最为显著：在进口温度为 1000K 时，转化率达到了约 14%，为 600 K 条件下的 70 倍。

关键词：热化学储能，氢氧化钙/氧化钙，移动床反应器，CFD-DEM

0 前言

在“双碳”目标的大背景下，我国迫切需要减少化石能源消耗，加快实现可再生能源的转型。然而，以太阳能、风能为主的可再生一次能源具有间歇性、不稳定性等特点，需要与储能技术相配合以解决其时空不匹配问题。在此背景下，热化学储能技术得到了青睐。相比显热储热与潜热储热，热化学储能拥有储能密度大、热损失小、适用温度范围广等优点[1]。其中，氢氧化钙/氧化钙循环体系属于典型的无机氢氧化物体系，通过高温下脱水氢氧化钙，可以实现能量的大量存储。该反应的方程如下：

$$Ca(OH)_2 + 104\,kJ/mol \underset{水合}{\overset{脱水}{\rightleftharpoons}} CaO + H_2O \quad (1)$$

虽然 $Ca(OH)_2/CaO$ 体系有储能密度高、材料无害且易得、无需催化剂、无副产物、常压下即可反应等诸多优点[2]，但 $Ca(OH)_2$ 颗粒材料具有粘性高、导热系数低、循环稳定性低等缺点，限制了其在反应器内的传热、反应速率，限制了它的应用[3]。为此，很多学者在材料改良方面进行了大量研究，取得了积极进展。黄彩凤等在这方面做了大量的工作，如合成了高性能纺锤形 $Ca(OH)_2$[4]、空心多孔结构 CaO/Ca_2SiO_4 纳米颗粒[5]、高孔隙率 CaO/MgO 复合材料等[6]，均能提高材料的循环稳定性。

除了热化学材料的研制，新结构热化学反应器的开发也是相关研究的重点方向。

[项]目基金：国家自然科学基金（No.52106118）

按照反应器内气固两相的流型，可将反应器分为固定床反应器、移动床反应器与流化床反应器[7]。其中，固定床反应器结构简单，但 $Ca(OH)_2$ 颗粒的烧结效应会严重阻碍床层换热及反应，使循环稳定性大幅下降[8]。虽然流化床能达到较高的换热系数，但床内高频的机械相互作用使其不适合作为反应器的选择。许多学者对移动床反应器进行了数值模拟。为了简化描述床体的整体特征，常常将固体颗粒整体作为多孔材料处理[9]，或将离散固相作为连续流体考虑[10]。为了精确追踪每个颗粒，可以采用基于离散元方法（DEM）的欧拉-拉格朗日两相流模型。该模型基于牛顿第二运动定律，根据流场计算每个颗粒的受力，进而得到关于颗粒的所有物理量。目前，已有学者建立过 CFD-DEM 耦合的无反应移动床模型，但将 CFD、DEM 与化学反应结合的案例报道较少。

本文将利用 CFD-DEM 模型，建立准三维 $Ca(OH)_2$ 移动床反应器的物理模型，探究反应进行程度、储能率等评价指标随反应物流动方向的发展规律，并研究不同参数对评价指标的影响，以证实这种移动床反应器的可行性，并提供设计方向。

1 模型建立

1.1 几何模型

为研究移动床内 $Ca(OH)_2$ 反应规律，建立了二维水平管道式移动床反应器模型，示意图如图 2 所示。经过预热的球形 $Ca(OH)_2$ 颗粒以固定速度落入反应器中，与高温空气进行直接对流换热，同时缓慢向固体出口移动。为了辅助颗粒流出，管道以一定倾角朝下放置。为了使得数据具有统计意义，将计算域分为 20 段，记为$\mathrm{H}_i\,(i=1,2,...,20)$，在研究颗粒的参数时，将采用某段内所有颗粒的平均值。

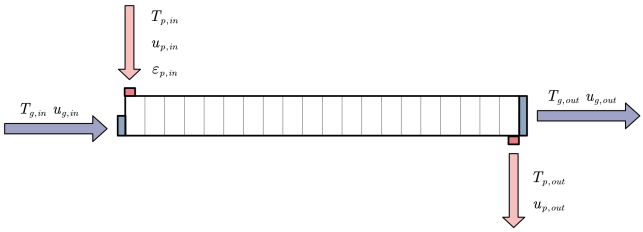


图 1 移动床模型简图

1.2 数学模型

本文模型参照文献[11]，气相与固相的控制方程分别如下。

1.2.1 气相控制方程

对气相，有质量、动量、能量方程如下：

$$\frac{D(\varepsilon_g \rho_g)}{Dt} = \dot{S}_m \tag{2}$$

$$\frac{D}{Dt}(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g) = \nabla \cdot \overline{\overline{S_g}} + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} - \sum_{m=1}^{M} \mathbf{F} \tag{3}$$

$$\frac{D}{Dt}(\varepsilon_g \rho_g c_p T_g) = \nabla \cdot (k_g \varepsilon_g \nabla T_g) + \sum_{m=1}^{M} \dot{S}_Q \tag{4}$$

式中，ε_g为气相体积分数，ρ_g为气相密度，$\dot{S}_m=(1-\varepsilon_g)\dot{R}_{Mg}$为反应产生的气体源项，$\mathbf{v}_g$为气相速度矢量，$\sum_{m=1}^{M}\mathbf{F}$为来自网格内所有固相的合力；$T_g$为气相温度，$c_p$为气相定压比热容，$k_g$为气相导热系数，$\sum_{m=1}^{M}\dot{S}_Q$为来自网格内所有固相的净热源项。

式(2)中的$\overline{\overline{S_g}}$为应力张量，其公式为：

$$\overline{\overline{S_g}}=-p\bar{\bar{I}}+\overline{\overline{\tau_g}} \tag{5}$$

其中，$\bar{\bar{I}}$为单位张量，$\overline{\overline{\tau_g}}$为气相剪切应力张量，其公式为：

$$\overline{\overline{\tau_g}}=2\mu_g\overline{\overline{D_g}}+\lambda_g\nabla\cdot\mathrm{tr}\left(\overline{\overline{D_g}}\right)\bar{\bar{I}} \tag{6}$$

其中，$\overline{\overline{D_g}}=\frac{1}{2}\left[\nabla\mathbf{v}_g+(\nabla\mathbf{v}_g)^T\right]$表示应变速率张量，$\mu_g$和$\lambda_g$分别为气体的动力学粘度、第二粘性系数[11]。

1.2.2 固相控制方程

对固相采用拉格朗日参考系：每个颗粒m都具有其自身的球心位置$\mathbf{X}(t)$、直径D、线速度$\mathbf{V}(t)$、角速度$\boldsymbol{\omega}(t)$、密度$\rho(t)$、温度$T(t)$。每个颗粒受到牛顿运动方程与能量方程的控制：

$$\frac{d\mathbf{X}(t)}{dt}=\mathbf{V}(t) \tag{7}$$

$$m\frac{d\mathbf{V}(t)}{dt}=m\mathbf{g}+\mathbf{F}_d(t)+\mathbf{F}_{\mathrm{c}}(\mathrm{t}) \tag{8}$$

$$I\frac{d\boldsymbol{\omega}(t)}{dt}=\mathbf{T} \tag{9}$$

$$\rho c_p\frac{dT(t)}{dt}=-\dot{S}_Q \tag{10}$$

其中，$\mathbf{F}_d$为颗粒所受气相阻力，$\mathbf{F}_c$为所受颗粒间碰撞力。对于每个颗粒，详细的受力公式如下表[12]所示。其中，E为杨氏模量，ν为泊松比，$\mathbf{n}=\mathbf{R}/r$为颗粒表面法向量，c为碰撞耗散系数、δ为两颗粒碰撞时重叠部分长度，$\mathbf{v}$为相对速度。

表 1 颗粒碰撞模型受力

名称	符号	公式
法向接触力	$\mathbf{F}_{n,c}$	$-\frac{E}{3(1-\nu^2)}\sqrt{D}\,\delta_n^{3/2}\mathbf{n}$
法向耗散力	$\mathbf{F}_{n,d}$	$-c_n\left(\frac{3mE}{\sqrt{2(1-\nu^2)R\delta_n}}\right)^{1/2}\mathbf{v}_n$
切向接触力	$\mathbf{F}_{t,c}$	$-\frac{\mu_s\mathbf{F}_{n,c}}{\lvert\delta_t\rvert}\left[1-\left(1-\frac{\min\{\lvert\delta_t\rvert,\delta_{t,max}\}}{\delta_{t,max}}\right)\right]\delta_t$
切向耗散力	$\mathbf{F}_{t,d}$	$-c_t\left(6m\mu_s\mathbf{F}_{n,c}\frac{\sqrt{1-\delta_t/\delta_{t,max}}}{\delta_{t,max}}\right)^{1/2}\mathbf{v}_t$
碰撞扭矩	$\mathbf{T}_r$	$\mathbf{R}\times(\mathbf{F}_{t,c}+\mathbf{F}_{t,d})$
滚动摩擦扭矩	$\mathbf{T}_f$	$-\mu_r\mathbf{F}_{n,c}\frac{\boldsymbol{\omega}}{\lvert\boldsymbol{\omega}\rvert}$
重力	$\mathbf{G}$	$m\mathbf{g}$
气相黏性阻力	$\mathbf{F}_{vd}$	$\left(0.63+\frac{4.8}{\mathrm{Re}^{0.5}}\right)^2\frac{\rho_f\lvert\mathbf{v}_g-\mathbf{v}\rvert(\mathbf{v}_g-\mathbf{v})}{2}\frac{\pi d^2}{4}(1-\varepsilon_g)^{-\beta}$ 经验系数$\beta=3.7-0.65\exp[-(1.5-\log\mathrm{Re})^2/2]$
气相压力梯度力	$\mathbf{F}_p$	$V\nabla p$

1.2.3 化学反应控制方程

在该模型中，每个 $Ca(OH)_2$ 颗粒都有其独立的摩尔反应速率：

$$\dot{R}=\frac{\rho_{Ca(OH)_2}}{M_{Ca(OH)_2}}\frac{dX}{dt} \tag{11}$$

其中，X 为单个颗粒内 CaO 的质量分数，即脱水反应转化率。根据文献[13]，$Ca(OH)_2$ 脱水反应转化率的速率可用下式描述：

$$\frac{dX}{dt}=(1-X)\cdot A\cdot e^{-\frac{E}{RT}}\cdot\left(\frac{T_s}{T_{eq}}-1\right) \tag{12}$$

其中，T_s 为固体颗粒温度，T_{eq} 为反应平衡温度。平衡温度与水蒸气分压力 p_g 有如下关系：

$$T_{eq}=\frac{12845}{16.508-\ln\left(\frac{p_g}{10^5}\right)} \tag{13}$$

1.3 模型实现

1.3.1 算法实现

模型流程图如图 2 所示。在一个 CFD 时间步长内，使用 SIMPLE 算法求解 N-S 方程，计算气体的速度、压力、温度和组分，然后进入 DEM 循环，使用新时刻的流场计算每个颗粒的参数，直到 DEM 求解器的时间追赶上 CFD 求解器的时间，再开始下一个时间步长。其中，CFD 求解器时间步长 $\Delta t_{\mathrm{fluid}}$ 设置为 DEM 时间步长 $\Delta t_{\mathrm{solid}}$ 的 50 倍。

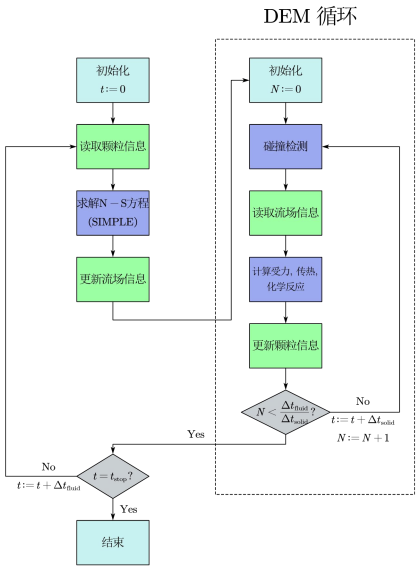


图 2 CFD-DEM 算法流程图

1.3.2 简化假设

为了简化计算，做出以下假设：(1)气相视为理想气体；(2)计算域简化为二维；(3)固体均为直径相同的球形颗粒，且在反应过程中直径始终不变；(4)固体颗粒内部视为均匀的混合物，其物性根据每组分的含量线性插值得到；(5)壁面均视为绝热条件；(6)不考虑辐射的影响。

1.3.3 模型参数

模拟采用 MFIX 开源软件实现 CFD-DEM 耦合计算，并加入自编程的代码实现化学反应。与纯 CFD 模拟不同，CFD-DEM 中网格的大小一般要大于单个颗粒的尺寸（至少保证一个网格能容纳 2~4 个颗粒[14]）。本文采用六面体网格，各方向的网格个数为 $N_x=400$，$N_y=8$，$N_z=1$，已经过网格无关性验证。模型主要参数如表 2 所示

表 2 模型参数表

参数	值
反应床长度L_x	10.0[m]
反应床高度L_y	0.1[m]
反应床宽度L_z	0.05[m]
气体进口面积$A_{g,in}$	0.025[m^2]
气体出口面积$A_{g,out}$	0.050[m^2]
固体进口面积$A_{p,in}$	0.005[m^2]
固体出口面积$A_{p,out}$	0.005[m^2]
管道倾角θ	10°
颗粒直径D	0.003[m]

1.3.3 边界条件

该模型控制条件如表 3 所示。

表 3 边界条件

边界名	边界类型	参数
颗粒进口	速度进口	$q_{m,p}=0.005\,\mathrm{kg/s},\ T_s=T_p=800\,\mathrm{K}$
颗粒出口	速度出口	$u_s=0.5\,\mathrm{m/s},\ v_s=0$
气体进口	速度进口	$u_g=3.0\,\mathrm{m/s},\ q_{m,g}=0.0022\,\mathrm{kg/s},\ T_g=1200\,\mathrm{K}$
气体出口	压力出口	$p=1\,\mathrm{atm}$
壁面	无滑移壁面	$\partial T/\partial \mathbf{n}=0$

2 结果与讨论

2.1 单一工况下储能过程特性

在本工况中，反应器初始温度为$T_0=800\,\mathrm{K}$，进行了共 40 秒的模拟。图 3 分别为流动充分稳定后（$t=40$ s）管内速度、温度及组分云图（为方便观察，Y 轴及颗粒直径被拉伸至原尺寸的 10 倍）。由于气体入口大小为左壁面的一半，因此在近入口处（$x=0.2$ 之前部分）形成气体涡流，使气体与自上方下落的颗粒快速换热。在$x=0.8$ 左右，颗粒温度基本达到 850 K，且开始明显有 H_2O 生成。在$x=0.8$ 之后，由于反应的大量吸热，反应器底部被一层接近 850 K 的低温气体笼罩，没有与上方 1200 K 的高温空气充分对流。并且，反应产物 H_2O 滞留在管道底部，不利于反应进行。在靠近出口段（$x=9.0$ 之后部分），能观察到部分颗粒快速撞击右侧墙壁而弹回，这略微增加了传热与反应速率（见后文图 5、6 ）。

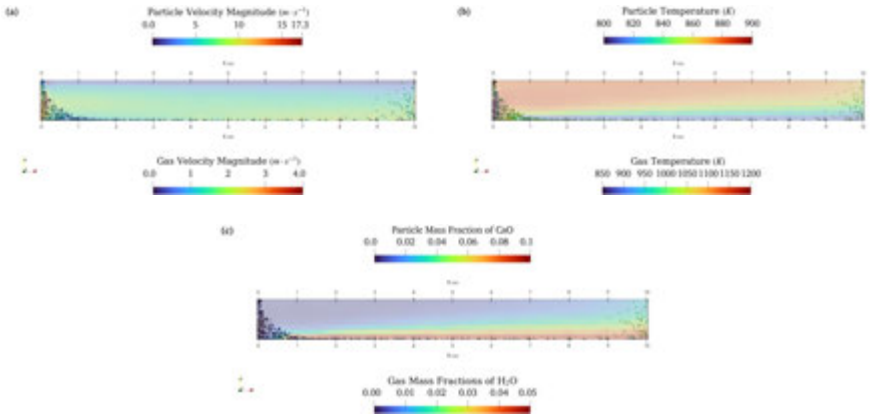


图 3 稳态下(t=40 s)管内气体及颗粒云图：(a)速度，(b)温度，(c)反应产物质量浓度

通过记录每个颗粒在计算域内的滞留时间（图 4），发现单个颗粒完全通过管道需要约平均 4.4 s，如图 4(b)所示。在 15 s 时，大量固体颗粒因碰撞右侧气体出口而反弹，导致了图 4(a)中H_{17}段的滞留时间尖峰。

观察平均颗粒温度随时间的变化图像（图 5），可发现反应器H_2段在 0.2 s 时达到平衡温度（850 K），出口H_{20}段则在 10.0 s 时达到平衡温度。由于 $Ca(OH)_2$的脱水会吸收大量反应热，颗粒的时均温度在H_2、H_3处出现峰值，随后逐渐小幅下降，最后在出口处因弹回效应而略微回升。

观察单个颗粒反应速率随时间的变化图像（图 6），发现反应器前段（图 6(a)）与

后段（图 6(b)）的反应特性有较大区别。位置越靠近出口，起始的反应速率越低。反应器前段的趋势为随时间从较高速率下降直至收敛，而后段的趋势则为从较低值上升。在流动尚未稳定时，近入口处的平均化学反应速率较大，H_3~H_5段的起始反应速率均达到了5.0×10^{-6}以上。在反应速率稳定之后，由于近出口处（如H_{19}段）存在被弹回的颗粒，因此曲线仍有大幅的波动。观察图 6(c)可以得到该工况下单个颗粒的稳态反应速率特性：在近入口处存在速率最大值，随后下降，最后因颗粒弹回而再次回升。

颗粒平均转化率随时间的关系如图 7(a)。反应尚未稳定时，各段的平均转化率偏高，在约 5 s 后全部稳定。其中，H_{17}段在 15 s 时存在异常极大值，其原因与图 4(a)中的滞留时间尖峰一致。由图 7(b) 可知，出口处颗粒的稳态平均转化率为 4.5 %，储能密度为 62 kJ/kg$_{Ca(OH)_2}$，其中颗粒的储能密度通过公式 $\frac{\alpha\cdot\Delta H_{reaction}}{M_{Ca(OH)_2}}$ 计算得到。

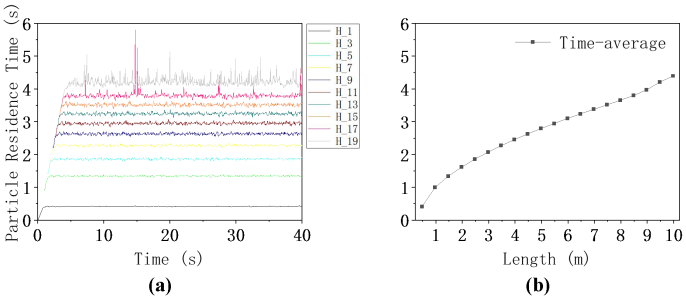


图 4 颗粒在管内的滞留时间：(a)各段区域平均，(b)各段时间平均

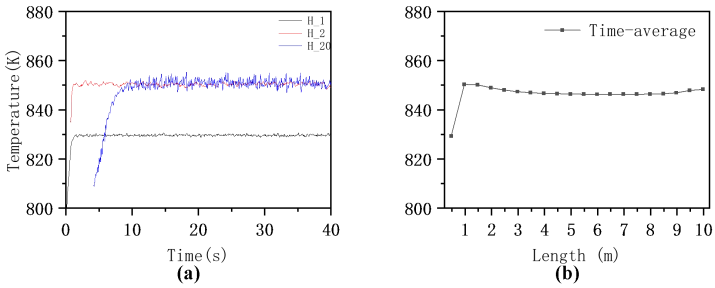


图 5 颗粒温度：(a)各段区域平均，(b)各段时间平均

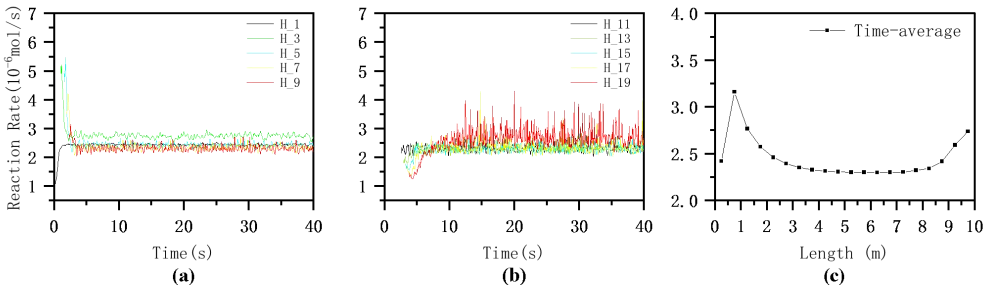


图 6 单个颗粒反应速率：(a)前段区域平均，(b)后段区域平均，(c)各段时间平均

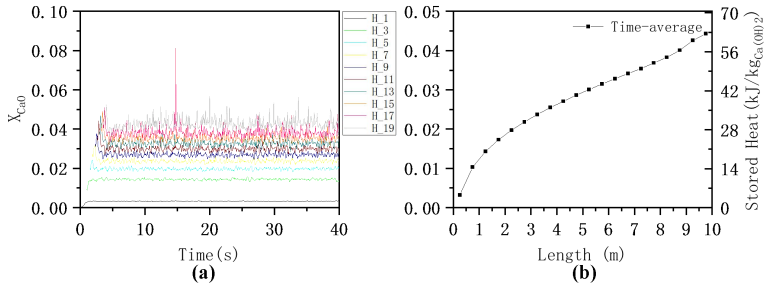


图 7 颗粒转化率：(a)各段区域平均，(b)各段时间平均

2.2 多组工况下各参数对储能过程稳态特性影响

2.2.1 气体进口温度

在前文模型的基础上，改变气体进口温度，分别为T_g＝800 K，900 K，1000 K，1100 K 和 1200 K，模拟结果如图 8 所示。随着气体进口温度的升高，气体可提供的焓降上升，颗粒时均温度、反应速率、反应转化率均相应升高。当T_g＝800K 时，出口处转化率仅为 0.7%。

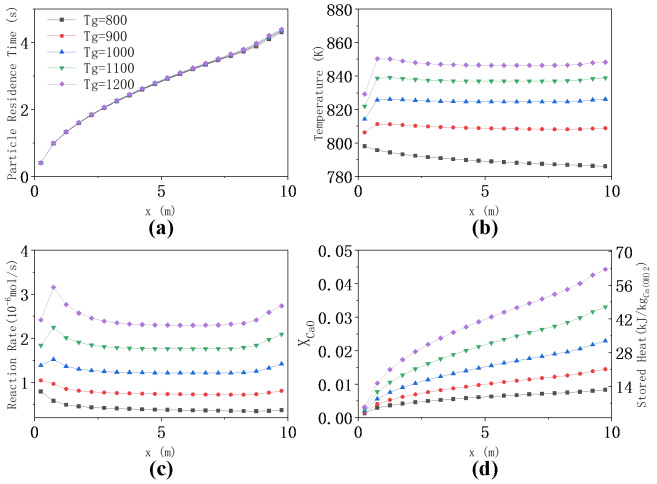


图 8 气体进口温度对时均参数的影响：(a)滞留时间，(b)温度，(c)单个颗粒反应速率，(d)转化率

2.2.2 固体进口温度

改变固体进口温度，分别为T_s＝600 K，700 K，800 K，900 K 和 1000 K，结果如图 9 所示。颗粒时均温度、反应速率、反应转化率均随进口温度的提升而升高。由于本模型中反应速率由颗粒温度决定，所以改变固体进口温度边界条件要比气体进口的更敏感。在T_s＝1000 K 下，出口转化率达到了约 14%，为 600 K 下（约 0.2%）的约 70 倍。

2.2.3 气体进口速度

改变气体进口速度，分别为u_g＝0.5 m/s，1.0 m/s，2.0 m/s，3.0 m/s，5.0 m/s，结果如图 10 所示。由于滚动摩擦力的存在，气体流速的增大并不会显著降低颗粒的平均滞留时间。在进口气体速度较快的情况下，气体流量较大，颗粒与气体交换的热量更多，因此颗粒时均温度、反应速率、反应转化率也较高。

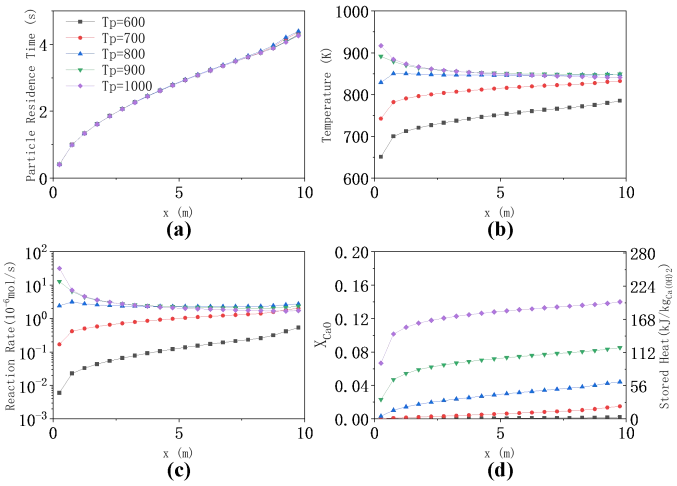


图 9 固体进口温度对时均参数的影响：(a)滞留时间，(b)温度，(c)单个颗粒反应速率，(d)转化率

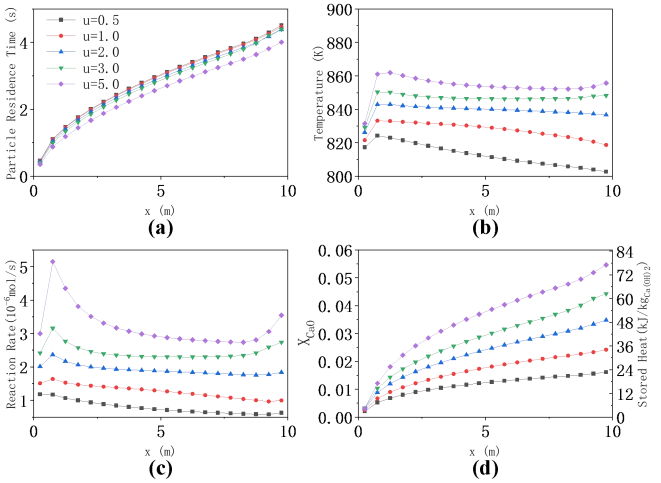


图 10 气体进口速度对时均参数的影响：(a)滞留时间，(b)温度，(c)单个颗粒反应速率，(d)转化率

3 结　论

本文采用 CFD-DEM 与化学反应耦合的模型，建立了二维 $Ca(OH)_2$ 移动床反应器的模型，并对其脱水反应进行了模拟。本文主要有以下结论：

(1) 在颗粒脱水过程中，温度、反应速率随长度方向的变化规律为：在与高温空气的对流换热下，先快速上升至最高值；随后由于反应的大量吸热，下降并稳定至较低值；在末端又由于发生弹回，而小幅上升。

(2) 提高气体进口温度、固体进口温度、气体进口速度，对反应器转化率都有积极的影响。其中，固体进口温度的影响最显著，在进口温度为 1000K 时，转化率达到了约 14%，为 600 K 条件下的 70 倍。

(3) 本文中的水平管道结构具有明显缺点：颗粒集中在管道底部，导致底部存在低温、高 H_2O 浓度气体层，不利于颗粒快速反应。在之后的工作中，我们将设计一种装

有倾斜挡板的立式重力移动床，并进行实验研究，以证实利用移动床储热的可行性。

参考文献

[1] Xu J., Wang R.Z., Li Y. A review of available technologies for seasonal thermal energy storage[J]. Solar Energy, 2014, 103: 610-638.

[2] Pardo P., Deydier A., Anxionnaz-Minvielle Z., et al. A review on high temperature thermochemical heat energy storage[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2014, 32: 591-610.

[3] Cosquillo Mejia A., Afflerbach S., Linder M., et al. Development of a Moving Bed Reactor for Thermochemical Heat Storage Based on Granulated Ca(OH)2[J]. Processes, 2022, 10(9): 1680.

[4] Huang C., Xu M., Huai X. Synthesis and performances evaluation of the spindle-shaped calcium hydroxide nanomaterials for thermochemical energy storage[J]. Journal of Nanoparticle Research, 2019, 21(12): 262.

[5] Huang C., Xu M., Huai X., et al. Template-Free Synthesis of Hollow CaO/Ca_2SiO_4 Nanoparticle as a Cyclically Stable High-Capacity CO_2 Sorbent[J]. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2021, 9(5): 2171-2179.

[6] Huang C., Xu M., Huai X., et al. Hierarchically porous calcium-based composites synthesized by eggshell membrane templating for thermochemical energy storage of concentrated solar power[J]. Journal of Energy Storage, 2022, 52: 104769.

[7] Solé A., Martorell I., Cabeza L.F. State of the art on gas–solid thermochemical energy storage systems and reactors for building applications[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2015, 47: 386-398.

[8] Zondag H.A., van Essen V.M., Schuitema R., et al. ENGINEERING ASSESSMENT OF REACTOR DESIGNS FOR THERMOCHEMICAL STORAGE OF SOLAR HEAT[J].

[9] Al Sahlani A., Randhir K., Ozalp N., et al. A Simplified Numerical Approach to Characterize the Thermal Response of a Moving Bed Solar Reactor[C]//ASME 2021 Heat Transfer Summer Conference. Virtual, Online: American Society of Mechanical Engineers, 2021: V001T07A009[2023-04-16].

[10] Baumann T., Zunft S., Tamme R. Moving Bed Heat Exchangers for Use With Heat Storage in Concentrating Solar Plants: A Multiphase Model[J]. Heat Transfer Engineering, 2014, 35(3): 224-231.

[11] Garg R., Galvin J., Li T., et al. Documentation of open-source MFIX–DEM software for gas-solids flows[EB].

[12] Chu K.W., Wang B., Xu D.L., et al. CFD–DEM simulation of the gas–solid flow in a cyclone separator[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(5): 834-847.

[13] Ranjha Q., Oztekin A. Numerical analyses of three-dimensional fixed reaction bed for thermochemical energy storage[J]. Renewable Energy, 2017, 111: 825-835.

[14] Qiu L., Sang D., Li Y., et al. Numerical simulation of gas–solid heat transfer characteristics of porous structure composed of high-temperature particles in moving bed[J]. Applied Thermal Engineering, 2020, 181: 115925.