



Столыпинский

вестник

Научная статья

Original article

УДК 544.015.4

DOI 10.55186/27131424_2022_4_10_1

**МАТЕРИАЛЫ С ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ И ЧИСЛЕННОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МОДЕЛЯХ
ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ**

**MATERIALS WITH PHASE TRANSITION AND NUMERICAL SIMULATION OF
PHASE TRANSITION PROCESSES IN MODELS OF HEAT-STORAGE
MATERIALS**

Мурзаев Александр Сергеевич, магистрант каф. «Промышленная теплоэнергетика и системы теплоснабжения», Казанский государственный энергетический университет, Россия, г. Казань, erodonov@list.ru

Измайлова Евгения Вячеславовна, науч. руководитель, канд. техн. наук, доцент каф. «Промышленная теплоэнергетика и системы теплоснабжения», Казанский государственный энергетический университет, Россия, г. Казань, pts_kgeu@mail.ru

Alexander S. Murzaev, undergraduate “Industrial heat power engineering and heat supply systems”, Kazan State Power Engineering University, Russia, Kazan, erodonov@list.ru

Evgenia V. Izmailova, researcher head, cand. tech. Sciences, Associate Professor “Industrial heat power engineering and heat supply systems”, Kazan State Power Engineering University, Russia, Kazan, pts_kgeu@mail.ru

Аннотация. Цель данной работы заключается в представлении обзора наиболее перспективных материалов с фазовым переходом (PCM), а также численных моделей процессов фазового перехода. В статье представлено большое количество ссылок на многочисленные работы иностранных авторов, исследующих процессы фазового перехода, а также модели теплоаккумулирующих, теплоизоляционных, строительных систем и конструкций. В результате проделанной работы был сформулирован вывод о необходимости создания более совершенных численных моделей процессов фазового перехода для возможности более рационального и глубокого исследования PCM.

Abstract. The purpose of this paper is to present an overview of the most promising phase change materials (PCM) as well as numerical models of phase change processes. The article presents a large number of references to numerous works of foreign authors studying the processes of phase transition, as well as models of heat storage, heat insulation, building systems and structures. As a result of the work done, a conclusion was formulated about the need to create more advanced numerical models of the phase transition processes in order to be able to more rationally and deeply study PCM.

Ключевые слова: материалы с фазовым переходом; численное моделирование; аккумулялирование энергии.

Key words: materials with phase transition; numerical simulation; energy storage.

Материалы с фазовым переходом (PCM) обладают способностью накапливать/выделять большое количество скрытого тепла в процессе фазового перехода. В последнее время PCM все больше применяются для нужд энергосбережения и аккумулялирования энергии в различных системах и конструкциях: в высокоэффективных теплоизоляционных [1],[2],[3] и строительных [4],[5],[6] материалах, в охлаждающих и изоляционных элементах электроники и техники [7],[8], в отделочных растворах и материалах [9],[10],[11], в накопителях энергии [12], в системах вентиляции [13], стеклопакетах [14],[15], термобоксах [16], упаковках холодного хранения [17], холодильных камерах [18] и др. Парафины являются наиболее перспективными и, потому, часто

применяемыми РСМ, так как их температура фазового перехода (начала плавления/кристаллизации) наиболее близка к температуре окружающей среды, что расширяет границы применения данного материала и способствует исключению разрушения конструкций и систем с РСМ в процессе их эксплуатации. Температура фазового перехода различных парафинов может варьироваться от 30 до 100 °С [19]. Таким образом, в зависимости от области применения, а также условий протекания процессов и работы оборудования, подбирается РСМ с соответствующими тепловыми характеристиками.

При создании композитных материалов с фазовым переходом авторы многочисленных исследований акцентируют внимание на равномерности распределения РСМ в общем объеме композитов с целью повышения эффективности материалов. Например, пористые материалы (изоляционные материалы газового вспенивания [20],[21], высокопористые ячеистые материалы [22],[23],[24]) обладают воздушными пустотами (матрицей), способствующими равномерному распределению РСМ и, как следствие, повышению изотропии и эффективности композитов. Для лучшего распределения РСМ в объеме композитного материала активно используется вакуумирование (пропитка в вакууме) [25].

Под влиянием повышенных температур РСМ плавится (переходит в жидкую фазу), и существует проблема вытекания РСМ из материала или конструкции. Эта проблема часто может быть решена путем использования герметичного корпуса [26],[27], нанесением слоя клея или эпоксидной смолы на поверхность композита [28], а также спеканием смеси [29]. Материал герметичного корпуса, в зависимости от области применения композитов с РСМ, должен обладать конкретными характеристиками, среди которых можно выделить: высокая теплопроводность, прочность, гибкость, нетоксичность, устойчивость к воздействию солнечных лучей, огнестойкость и др. [30]. Однако, интегрирование в систему с РСМ дополнительного материала (из которого состоит корпус, оболочка) может существенно снизить ее эффективность. Некоторые элементы и комплектующие различного оборудования должны удовлетворять конструктивным требованиям (габариты, допустимые диаметры арматуры и т.д.),

что также говорит о невозможности применения герметичного корпуса. Наконец, использование герметичной оболочки может усложнить процесс монтажа конструкции и привести новые требования (рекомендации) к эксплуатации конструкции с РСМ.

Если использование корпуса нецелесообразно или невозможно, для исключения возможности вытекания жидкого РСМ активно применяется внедрение инкапсулированных РСМ в композитные материалы. В отличие от микроинкапсулированных РСМ [31],[32],[33], процесс производства которых характеризуется значительными трудностями, макроинкапсулированные РСМ [34],[35] более просты в изготовлении и не требуют применения трудоемких технологических решений. Макроинкапсуляция представляет собой процесс внедрения материала с фазовым переходом в оболочки размером более 5 мм, причем форма оболочки может быть любой (трубки, цилиндры, пакеты, кубы, шары) [36], а в качестве материала оболочки могут применяться различные металлы [37],[38] и полиэтилены [39]. Макроинкапсулирование способствует увеличению скорости теплопередачи за счет увеличения площади поверхности (РСМ+оболочка), и как следствие, увеличивает теплопроводность систем с РСМ.

В последнее время, с развитием пакетов прикладных программ, исследователи разных стран все чаще используют методы численного моделирования в процессе изучения свойств материалов с фазовым переходом. На сегодняшний день доступны различные численные методы, описывающие характеристики систем накопления тепловой энергии с РСМ, которые, условно, можно разделить на две группы: однофазные и двухфазные модели.

Допущение однофазной модели, заключающееся в том, что мгновенная температура РСМ и НТФ (теплоносителя) одинакова, делает применение данной модели непопулярным при описании уплотненного слоя РСМ и справедливо лишь при использовании твердых частиц РСМ с очень высокой теплопроводностью. Однако, была предложена однофазная модель, в которой рассматривался одномерный поток, и даже температура воздуха и РСМ в каждой точке считалась одинаковой. В этом случае использование однофазной модели было оправдано из-за малого размера твердых частиц РСМ [40].

К двухфазным моделям относятся: модель концентрической дисперсии, модель непрерывной твердой фазы и модель Шумана. В модели концентрической дисперсии (МКД) уплотненный слой РСМ рассматривается как изотропная пористая среда, состоящая из независимых сферических частиц. Преимуществом данной модели является возможность описания теплового распределения внутри твердых частиц. Достоверность разработанной МКД проверялась с использованием экспериментальных данных и решалась методом конечных разностей и методом подвижной сетки [40]. В последующем, были опубликованы другие версии МКД со следующими особенностями:

- учет осевой теплопроводности для пласта и жидкости, тепловые потери в окружающую среду не учитываются, а фазовый переход происходит при определенной температуре [41];
- использование соотношения Gr/Re^2 (Число Грасгофа/Число Рейнольдса²) для определения коэффициента теплопередачи между твердыми частицами и НТФ (если $Gr/Re^2 > 1$, то свободная конвекция преобладает над принудительной) [42];
- использование уравнения импульса для описания теплоносителя [43];
- использование метода энтальпии для моделирования фазового перехода [40],[44].

В модели непрерывной твердой фазы (МНТФ) система рассматривается как сплошная среда. МНТФ подразумевает протекание процесса теплопередачи в радиальном направлении и способна фиксировать радиальные температурные градиенты [40]. В одном из исследований рассматривалась эффективная теплопроводность в осевом направлении, с помощью представленной модели стала возможной оценка производительности сразу нескольких гранулированных компонентов с фазовым переходом [45]. Авторами работы [46] рассматривалась эффективная теплопроводность жидкости и для осевого, и для радиального направления теплообмена. Уравнение сохранения энергии для жидкости было преобразовано с помощью метода конечных разностей и решено неявно, а уравнение для твердой фазы (частиц РСМ) — по явной схеме. Необходимость адаптации математической модели в работе [47] обосновывалась

неравномерностью радиального распределения осевой скорости жидкости из-за представленных в работе конструктивных особенностей системы с РСМ.

Модель Шумана учитывает одномерный теплообмен и не учитывает теплопроводность в жидкой и твердой фазах. Относительная простота данного метода заключается в использовании подхода сосредоточенной емкости к твердым частицам. Предполагается, что коэффициенты, описывающие конвекцию и связанные с локальной концентрацией материала вблизи стенки, не зависят от пространства и времени. Модель Шумана не способна учитывать тепловую диффузию твердых частиц, поэтому в сферах не учитываются температурные градиенты [40]. Однако, низкая теплопроводность РСМ играет важную роль в реальных процессах охлаждения/нагрева РСМ. Этот факт способствовал активному появлению примеров адаптации модели Шумана различными авторами для возможности более точного и справедливого математического моделирования процессов в РСМ [48],[49]. Тем не менее, использование модели Шумана для характеристики процессов фазового перехода не исключает необходимость принятия упрощающих (оптимизирующих) расчет допущений. Так, например, модели процессов фазового перехода РСМ при геоохлаждении и аккумулировании тепловой энергии имеют практически идентичные допущения [50],[51]:

- нет внутреннего тепловыделения и лучистого теплообмена (теплопроводность и радиационный теплообмен между капсулами не учитываются);
- все свойства жидкости не зависят от температуры (не рассматривается изменение теплофизических свойств РСМ и НТФ);
- нет радиального изменения температуры и характера потока жидкости (не учитываются радиальные изменения температуры РСМ и НТФ),
- нет тепловых потерь резервуаром (тепловые потери на «входе» и «выходе» из бака-аккумулятора тепловой энергии не учитываются);
- фазовый переход происходит в определенном интервале температур.

Многочисленные примеры модификации (адаптации) численных моделей протекания процессов фазового перехода свидетельствуют о том, что на сегодняшний день существует ощутимая необходимость в разработке новых,

более совершенных моделей. Работа с моделями, учитывающими влияние большего количества физико-химических факторов на протекание процессов, будет требовать все больших вычислительных возможностей, и, как следствие, больших финансовых затрат. Тем не менее, разработка новых моделей оправдана из-за большого количества весомых преимуществ в процессе исследования РСМ. Использование численного моделирования при исследовании процессов фазового перехода позволяет рациональнее и подробнее решать задачи повышения эффективности систем с РСМ с различными размерами, конструктивными особенностями и с различным набором комплектующих различного состава. Кроме того, моделирование позволяет прогнозировать поведение систем с РСМ при монтаже и эксплуатации, подвергать материалы и конструкции механическим и температурным нагрузкам, наблюдать результат многократно ускоренного процесса старения материалов в различных климатических условиях и др. Важно отметить, что результаты, полученные с помощью каждой предложенной модели, должны верифицироваться с результатами исследования эталонных систем (с результатами экспериментов) с целью определения коэффициента сходимости (детерминации) результатов. Чем больше коэффициент сходимости, тем лучше модель описывает реальные процессы.

Литература

1. Solgi E. et al. A parametric study of phase change material characteristics when coupled with thermal insulation for different Australian climatic zones //Building and Environment. – 2019. – Т. 163. – С. 106317.
2. Hasan M. I., Basher H. O., Shdhan A. O. Experimental investigation of phase change materials for insulation of residential buildings //Sustainable cities and society. – 2018. – Т. 36. – С. 42-58.
3. Nazi W. I. W. M. et al. Passive cooling using phase change material and insulation for high-rise office building in tropical climate //Energy Procedia. – 2017. – Т. 142. – С. 2295-2302.
4. Fateh A. et al. Summer thermal performances of PCM-integrated insulation layers for light-weight building walls: Effect of orientation and melting point temperature //Thermal Science and Engineering Progress. – 2018. – Т. 6. – С. 361-369.

5. Kalbasi R., Afrand M. Which one is more effective to add to building envelope: Phase change material, thermal insulation, or their combination to meet zero-carbon-ready buildings? //Journal of Cleaner Production. – 2022. – Т. 367. – С. 133032.
6. Saxena R., Rakshit D., Kaushik S. C. Experimental assessment of Phase Change Material (PCM) embedded bricks for passive conditioning in buildings //Renewable Energy. – 2020. – Т. 149. – С. 587-599.
7. Krishna J., Kishore P. S., Solomon A. B. Heat pipe with nano enhanced-PCM for electronic cooling application //Experimental Thermal and Fluid Science. – 2017. – Т. 81. – С. 84-92.
8. Arshad A. et al. Thermal performance of phase change material (PCM) based pin-finned heat sinks for electronics devices: Effect of pin thickness and PCM volume fraction //Applied Thermal Engineering. – 2017. – Т. 112. – С. 143-155.
9. Baccega E., Bottarelli M. Granular PCM-Enhanced Plaster for Historical Buildings: Experimental Tests and Numerical Studies //Energies. – 2022. – Т. 15. – №. 3. – С. 975.
10. Kusama Y., Ishidoya Y. Thermal effects of a novel phase change material (PCM) plaster under different insulation and heating scenarios //Energy and Buildings. – 2017. – Т. 141. – С. 226-237.
11. Baskar I., Chellapandian M., Jaswanth S. S. H. Development of a novel composite phase change material based paints and mortar for energy storage applications in buildings //Journal of Energy Storage. – 2022. – Т. 55. – С. 105829.
12. Henríquez-Vargas L. et al. Thermoelectric generation in a PCM-based energy accumulator //Heat and Mass Transfer. – 2021. – Т. 57. – №. 8. – С. 1265-1274.
13. Sun W. et al. Numerical simulation on the thermal performance of a PCM-containing ventilation system with a continuous change in inlet air temperature //Renewable Energy. – 2020. – Т. 145. – С. 1608-1619.
14. Zhang S. et al. Energy efficiency optimization of PCM and aerogel-filled multiple glazing windows //Energy. – 2021. – Т. 222. – С. 119916.

15. Li D. et al. Optical and thermal performance of glazing units containing PCM in buildings: A review //Construction and Building Materials. – 2020. – Т. 233. – С. 117327.
16. Leungtongkum T. et al. Insulated box and refrigerated equipment with PCM for food preservation: State of the art //Journal of Food Engineering. – 2022. – Т. 317. – С. 110874.
17. Kozak Y., Farid M., Ziskind G. Experimental and comprehensive theoretical study of cold storage packages containing PCM //Applied Thermal Engineering. – 2017. – Т. 115. – С. 899-912.
18. Xu X., Zhang X., Liu S. Experimental study on cold storage box with nanocomposite phase change material and vacuum insulation panel //International Journal of Energy Research. – 2018. – Т. 42. – №. 14. – С. 4429-4438.
19. Khan Z., Khan Z., Ghafoor A. A review of performance enhancement of PCM based latent heat storage system within the context of materials, thermal stability and compatibility //Energy conversion and management. – 2016. – Т. 115. – С. 132-158.
20. Sarkar S., Mestry S., Mhaske S. T. Developments in phase change material (PCM) doped energy efficient polyurethane (PU) foam for perishable food cold-storage applications: A review //Journal of Energy Storage. – 2022. – Т. 50. – С. 104620.
21. Vatankhah E. et al. Thermal energy storage and mechanical performance of composites of rigid polyurethane foam and phase change material prepared by one-shot synthesis method //Journal of Polymer Research. – 2022. – Т. 29. – №. 3. – С. 1-11.
22. Iasiello M. et al. Metal foam/PCM melting evolution analysis: Orientation and morphology effects //Applied Thermal Engineering. – 2021. – Т. 187. – С. 116572.
23. Zhao C. et al. Phase change behaviour study of PCM tanks partially filled with graphite foam //Applied Thermal Engineering. – 2021. – Т. 196. – С. 117313.
24. Esapour M. et al. Melting and solidification of PCM embedded in porous metal foam in horizontal multi-tube heat storage system //Energy conversion and management. – 2018. – Т. 171. – С. 398-410.

25. Ding J. et al. A promising form-stable phase change material composed of C/SiO₂ aerogel and palmitic acid with large latent heat as short-term thermal insulation //Energy. – 2020. – Т. 210. – С. 118478.
26. Sánchez-Pérez J. F. et al. Study of the application of PCM to thermal insulation of UUV hulls using Network Simulation Method //Alexandria Engineering Journal. – 2021. – Т. 60. – №. 5. – С. 4627-4637.
27. Yu J. et al. Study on thermal insulation characteristics and optimized design of pipe-embedded ventilation roof with outer-layer shape-stabilized PCM in different climate zones //Renewable Energy. – 2020. – Т. 147. – С. 1609-1622.
28. Ren X. et al. Study on the properties of a novel shape-stable epoxy resin sealed expanded graphite/paraffin composite PCM and its application in buildings //Phase Transitions. – 2019. – Т. 92. – №. 6. – С. 581-594.
29. Jiang Z. et al. A review on the fabrication methods for structurally stabilised composite phase change materials and their impacts on the properties of materials //Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2022. – Т. 159. – С. 112134.
30. Rathore P. K. S., Shukla S. K. Potential of macroencapsulated PCM for thermal energy storage in buildings: A comprehensive review //Construction and Building Materials. – 2019. – Т. 225. – С. 723-744.
31. Huang X. et al. Thermal properties and applications of microencapsulated PCM for thermal energy storage: A review //Applied Thermal Engineering. – 2019. – Т. 147. – С. 841-855.
32. Cabeza L. F. et al. Behaviour of a concrete wall containing micro-encapsulated PCM after a decade of its construction //Solar Energy. – 2020. – Т. 200. – С. 108-113.
33. Zhu X. et al. Thermal comfort and energy saving of novel heat-storage coatings with microencapsulated PCM and their application //Energy and Buildings. – 2021. – Т. 251. – С. 111349.
34. Baruah J. S. et al. Melting and energy storage characteristics of macro-encapsulated PCM-metal foam system //International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2022. – Т. 182. – С. 121993.

35. Liu Z. et al. A review on macro-encapsulated phase change material for building envelope applications //Building and Environment. – 2018. – Т. 144. – С. 281-294.
36. Salunkhe P. B., Shembekar P. S. A review on effect of phase change material encapsulation on the thermal performance of a system //Renewable and sustainable energy reviews. – 2012. – Т. 16. – №. 8. – С. 5603-5616.
37. Raj A. K., Srinivas M., Jayaraj S. A cost-effective method to improve the performance of solar air heaters using discrete macro-encapsulated PCM capsules for drying applications //Applied Thermal Engineering. – 2019. – Т. 146. – С. 910-920.
38. Ahmed F. et al. Thermal analysis of macro-encapsulated phase change material coupled with domestic gas heater for building heating //Sustainable Energy Technologies and Assessments. – 2021. – Т. 47. – С. 101533.
39. Venkitaraj K. P. et al. Experimental heat transfer analysis of macro packed neopentylglycol with CuO nano additives for building cooling applications //Journal of Energy Storage. – 2018. – Т. 17. – С. 1-10.
40. de Gracia A., Cabeza L. F. Numerical simulation of a PCM packed bed system: A review //Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2017. – Т. 69. – С. 1055-1063.
41. Wu M., Xu C., He Y. L. Dynamic thermal performance analysis of a molten-salt packed-bed thermal energy storage system using PCM capsules //Applied Energy. – 2014. – Т. 121. – С. 184-195.
42. Bedecarrats J. P. et al. Study of a phase change energy storage using spherical capsules. Part II: Numerical modelling //Energy Conversion and Management. – 2009. – Т. 50. – №. 10. – С. 2537-2546.
43. Galione P. A. et al. A new thermocline-PCM thermal storage concept for CSP plants. Numerical analysis and perspectives //Energy Procedia. – 2014. – Т. 49. – С. 790-799.
44. Karthikeyan S. et al. Parametric studies on packed bed storage unit filled with PCM encapsulated spherical containers for low temperature solar air heating applications //Energy Conversion and Management. – 2014. – Т. 78. – С. 74-80.

45. Rady M. Thermal performance of packed bed thermal energy storage units using multiple granular phase change composites //Applied energy. – 2009. – Т. 86. – №. 12. – С. 2704-2720.
46. Benmansour A., Hamdan M. A., Bengueldach A. Experimental and numerical investigation of solid particles thermal energy storage unit //Applied Thermal Engineering. – 2006. – Т. 26. – №. 5-6. – С. 513-518.
47. Arkar C., Vidrih B., Medved S. Efficiency of free cooling using latent heat storage integrated into the ventilation system of a low energy building //International journal of Refrigeration. – 2007. – Т. 30. – №. 1. – С. 134-143.
48. Regin A. F., Solanki S. C., Saini J. S. An analysis of a packed bed latent heat thermal energy storage system using PCM capsules: Numerical investigation //Renewable energy. – 2009. – Т. 34. – №. 7. – С. 1765-1773.
49. Tumilowicz E. et al. An enthalpy formulation for thermocline with encapsulated PCM thermal storage and benchmark solution using the method of characteristics //International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2014. – Т. 79. – С. 362-377.
50. McKenna P., Turner W. J. N., Finn D. P. Geocooling with integrated PCM thermal energy storage in a commercial building //Energy. – 2018. – Т. 144. – С. 865-876.
51. Sun B. et al. Thermal energy storage characteristics of packed bed encapsulating spherical capsules with composite phase change materials //Applied Thermal Engineering. – 2022. – Т. 201. – С. 117659.

© Мурзаев А. С., Измайлова Е. В., 2021 Научный сетевой журнал «СтолЫпинский вестник» №10/2022.

Для цитирования: Мурзаев А. С., Измайлова Е. В. МАТЕРИАЛЫ С ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МОДЕЛЯХ ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ// Научный сетевой журнал «СтолЫпинский вестник» №10/2022.