



Gőz–folyadék állapotfüggvény simítása hiszterézissel

Jancskárné A.I., Sári Z., Szakonyi L.

Pécsi Tudományegyetem, Pollack Mihály Műszaki Kar, Műszaki Informatika Tanszék, 7624, Pécs, Rókus u.2.

ÖSSZEFOGLALÁS

A fázisváltással járó technológiai folyamatok műszaki modellezésére, például végeselemes modellezőrendszerekben gyakran alkalmazott módszer a homogén rendszermodell, ún. diffúz határréteg modell. A homogén modellt gyakran négy-egyenletes modellnek is hívják, a teljes térfogatra felírt anyag-, energia- és impulzus-mérlegegyenleteket kiegészítik egy negyedik egyenlettel, amely a fázisváltás leírására szolgál. A negyedik egyenlet határozza meg a fázisjellemző paraméter értékét, például a térfogat vagy a tömegtörtet, a mérleg-egyenletekben szereplő anyagjellemzők pedig a fázisjellemző paraméter segítségével átlagolt jellemzők. A negyedik egyenlet egyszerűbb esetekben lehet egy állapotfüggvény típusú statikus modell, vagy egy differenciálegyenlet: a fázisjellemző paraméter kifejlődését leíró kinetikus modell. A cikk a mérnöki gyakorlatban elterjedt állapotfüggvény típusú fázisváltási modellek áttekintése után bemutat egy hiszterézisen alapuló fázisváltási modellt. A modell átmenet az állapotfüggvény típusú és a kinetikus fázisváltási modellek között: statikus modell, de alkalmas metastabil fázisátmenetek figyelembevételére is. A kidolgozott vízgőz–folyadék fázisváltási modell hőmérsékletfüggő, makroszkopikus megközelítésű, mérnöki számításokat támogató, mérnöki ismeretek alapján paraméterezhető, képes figyelembe venni a tútelitődést/túlhevülést is, az állapotegyenlet típusú modellek továbbfejlesztett változatának tekinthető.

(Kulcsszavak: gőz-folyadék fázisváltási modellek, állapotfüggvények simítása, hiszterézis)

ABSTRACT

Hysteretic Smoothed Equation-of-State Type Vapor-Liquid Phase Transformation Model

I.A. Jancskárné, Z. Sári, L. Szakonyi

University of Pécs, Pollack Mihály Faculty of Engineering, Department of Information Technology, H-7624 Pécs, Rókus u. 2.

Vapor-liquid phase transformation is an important phenomenon in many technological applications, since boiling and condensation are associated with high heat transfer efficiency. Establishing accurate, numerically easy to handle models of this complex process has recently been the focus of many scientific and engineering research projects. Mathematical models for vapor-liquid phase transformations can be divided into two classes: diffuse interface models and sharp interface models. With the diffuse interface method, all governing equations can be solved over the entire computational domain without any priori knowledge of the location of the interfaces, therefore using the diffuse interface is a popular tool for simulations of two-phase flows in engineering applications. Generally the diffuse interface model consists of three conservation equations of mass, momentum and energy, and of an evolution equation of the order parameter that represents the transition between the phases, i.e. the so-called four-equation model. In this work, we focused on the governing

equation of the phase transition. The goal was to increase the equation-of-state type equilibrium models by enabling occurrence of metastable states. The introduced model is similar to the equation-of-state type models since it is a function of an intensive state variable (temperature), but in this case this function is hysteretic. The proposed hysteresis function can be easier parameterized than the kinetic type phase transition models. The model can be very useful in several engineering applications, in which an expert could estimate the assumable degree of supersaturation/superheating. The hysteresis model of the thermally induced phase transformation has been derived from the statistics of the model fluid consists of bistable, constant-mass clusters of molecules. We have used a PDE based hysteresis operator to describe the phase change. To ensure that unstable conditions could be always avoided, we have proposed a saturation temperature dependent upper limit of the allowable supersaturation.

(Keywords: vapor-liquid phase transformation, equation-of-state type models, hysteresis)

BEVEZETÉS

A fázisváltozással járó technológiai folyamatok műszaki modellezése során, homogén rendszermodellt alkalmazva, végeselemes modellrendszerekben komoly numerikus problémákat okozhat a fázisváltozáskor (elsőrendű fázisváltozásról lévén szó) bekövetkező fajhőfüggvény szakadás, a hirtelen, ugrásszerű anyagjellemző-változások (ez pl. víz esetében több nagyságrendű sűrűségváltozást jelent), a fázisváltozáskor felszabaduló/elnyelődő latens hő. A függvényekben fellépő szakadás, ill. ugrás bizonyos mértékű simítása numerikus okokból elkerülhetetlen. A legegyszerűbb és a mérnöki gyakorlatban elterjedten alkalmazott módszer az ún. állapotfüggvény típusú fázisváltozás modell, amelyben a fázisjellemző paraméter, pl. térfogat vagy tömegtört (amely segítségével az átlagolt anyagjellemzők meghatározhatók), valamely állapotjellemző függvénye. A függvényben lévő szakadást, ugrást a telítési állapot körül szimmetrikusan elsimítják. Ezáltal a numerikus probléma ugyan megoldódik, de a szimmetrikus simítás miatt pontatlanságot okozhat az, hogy jelentős mennyiségű másik fázis jelenhet meg már a telítési állapot elérése előtt. Tanszéki kutatási projekt keretében egy olyan nagyméretű gőzhálózat modelljét kellett elkészítenünk, amely az alulterhelés miatt több szakaszon is a telítési állapotban, vagy annak közelében üzemelt. A fázisváltozás modelljeként először egy állapotfüggvény típusú modellel próbálkoztunk, de azt tapasztaltuk, hogy a modell a hálózaton végzett mérési adatokhoz képest jelentősen túlbecsülte a képződött kondenzátum mennyiségét.

GŐZ-FOLYADÉK FÁZISVÁLTOZÁSI MODELLEK

A műszaki gyakorlatban alkalmazott kétfázisú áramlási modellek a fázisok közötti határ kezelése szempontjából két csoportba sorolhatók (*Huhn et al.* 1975). Az egyik csoportot az ún. homogén modellek alkotják, amelyekben a fázisok között egy diffúz határrejteget tételeznek fel, és a két fázis közös sebességgel halad, vagy a két fázis sebessége eltérő lehet a határrejtegben (szeparált modell). A másik csoportba a multi(két)-folyadék modellek tartoznak, amelyekben minden fázisra külön mérlegegyenleteket írnak fel, a határfelületnél a termodinamikai jellemzők szakadása miatt szükséges a határfelület követése (*Sun et al.* 2004; 2007). Az utóbbi módszert alkalmazva, amellyel, hogy a megoldandó modellegyenletek száma a homogén modellhez képest megkétszereződik, a fázisok közötti határfelület lokalizálása, mozgásának követése -folyamatos fázisváltozást feltételezve- komoly diszkretizálási, hálógenerálási problémákat okoz. A mérnöki

gyakorlatban egy nagyobb méretű berendezés modellvizsgálata során a mérlegegyenleteket a teljes térfogatra felírva, egy adott végelemben lévő fázisok megoszlására az ún. rendparaméterből következtethetünk. A teljes térfogatban a rendparaméter folyamatos változása mutatja a fázisok közötti átmenetet, ez az ún. diffúz határréteg.

A diffúz határréteg modellek további két nagy csoportba sorolhatók: az állapotfüggvény típusú modellek és a kinetikus modellek. Az állapotfüggvény típusú modellekben a fázisjellemző (rendparaméter) valamely állapotváltozó (rendszerint nyomás vagy hőmérséklet) függvénye, az egyensúlyi állapot elérésekor fellépő függvény szakadást numerikus okból az egyensúlyi állapot körüli szimmetrikus tartományon elsímítják. Az állapotfüggvény típusú modellek fázis egyensúlyi modellek. A metastabil fázisátmeneteket is figyelembe venni képes modellek a kinetikus fázisváltási modellek. A kinetikus modellek alkalmazását megnehezíti, hogy a modellek használatához szükséges paramétereket, szabadenergia függvényeket, időállandókat nehéz definiálni (Landau et al., 1980).

A FÁZISVÁLTOZÁSI MODELLEK TERMODINAMIKAI ALAPJA, A HISZTERÉZIS JELENSÉGE

Egykomponensű, többfázisú rendszerekben a stabil fázis alatt azt a fázist értjük, amelyre a szabadentalpia függvénynek (Gibbs-potenciál) minimuma van (Callen, 1985). Elsőrendű fázisváltáskor a függvénynek két minimuma van, amelyeket egy energia gát választ el (1. ábra). Az elsőrendű fázisátalakulást latens hő és az extenzív állapotjellemzők ugrásszerű változása kíséri (2.a ábra). A fajhőfüggvénynek a $c_p = T (\partial s / \partial T)_p$ definíció szerint telítési hőmérsékleten divergenciája van (2.b ábra).

1. ábra

A p - T fázisdiagram a),
Az A, B, C, D pontoknak megfelelő szabadentalpia függvények. v : fajlagos térfogat b)

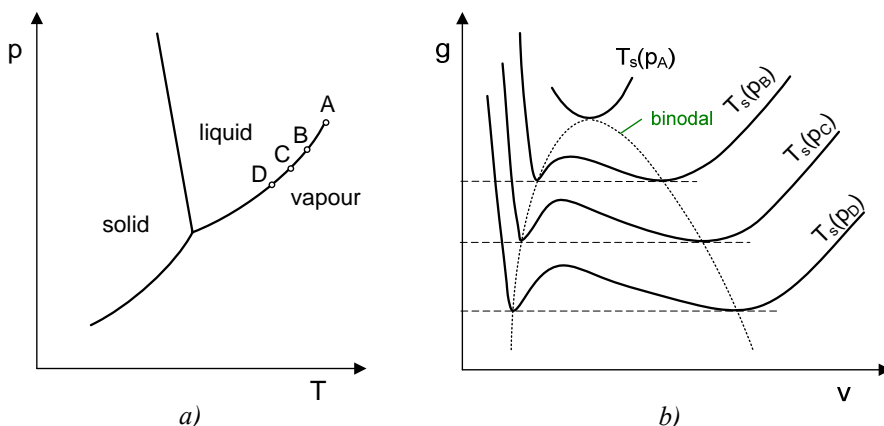


Figure 1: Schematic drawing of the $p - T$ phase diagram. The borderline between the phases are termed as the coexistent curve or binodal (a); Isotherm curves of transition (saturation) temperatures belonging to A, B, C, D points in $g - v$ plane (b)

2. ábra

Izoterm gőz-folyadék fázisváltás a nyomás-fajlagos térfogat síkon a) és a fajhőfüggvény divergenciája b)

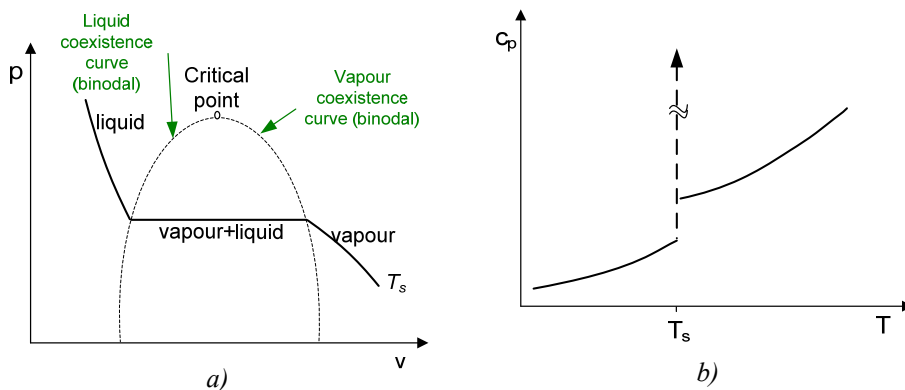


Figure 2: Schematic drawing of an isotherm in the P-v plane (a) and Schematic drawing of discontinuity and divergence of specific heat capacity at coexistence locus T_s (b)

Tekintsünk egy izoterm fázisátalakulást a 3. ábra görbéje szerint, amely a nyomás fajlagos térfogat fázisdiagramon látható (Callen, 1985). A tiszta fázis állapota jellemezhető a Van der Waals-féle állapotfüggvénnyel. Gőzfázisból kiindulva, a nyomás emelkedésével a gőz telítési állapotba kerül. Az egyensúlyi fázisátalakulás állandó hőmérsékleten és nyomáson megy végbe, (3. ábra A és D pont közötti folytonos vonal). A nem-egyensúlyi fázisátmenet során, a rendszer energetikai állapotától függően az energiáját leküzdése több-kevesebb tehetetlenséggel történik, felléphetnek ún. metastabil állapotok (3. ábra, A és D közötti szaggatott vonal, amely a Van der Waals izoterma kiterjesztése). A stabilitás feltétele, a rendszer instabil, ha $(\partial p / \partial v)_T > 0$. A fázistér azon pontjainak helye, ahol $(\partial p / \partial v)_T = 0$ az ún. spinodális dekompozíció görbéje, ezen a ponton mindenképpen megtörténik a fázisátalakulás (Kreith 1999).

A homogén, izoterm gőz-folyadék fázisváltási modelleket rendszerint kavitáció modellezésére alkalmazzák (Delannoy et al., 1990; Vortmann et al., 2003; Caupin et al., 2006). A műszaki modellekben gyakori, hogy a hőmérséklet megváltozása az elsődleges előidézője a gőz-folyadék fázisváltásnak, ilyenkor izobár fázisváltási modellekkel dolgozunk. A 4. ábrán a hőmérséklet-fajlagos fázisdiagramban láthatunk egy vízgőz izobár görbét. Az egyensúlyi fázisváltás a tiszta fázisokra felrajzolt IAPWS IF95 (International Association for the Properties of Water and Steam, Pruß et al., 2002) formulának megfelelő görbék közötti egyenes vonalon megy végbe. A nem-egyensúlyi fázisváltást a Van der Waals állapotegyenlettel közelítettük a kétfázisú tartományban. Tétélezzünk fel egy olyan elemi folyadék klasztert, amely elég kicsi ahhoz, hogy teljes térfogatában vagy gőz, vagy folyadék állapotban van, de elég nagy ahhoz, hogy termodinamikai állapotváltozókkal jellemezhető legyen. Gőzfázisból kiindulva, a hőmérséklet csökkenésével elérve a telítési hőmérsékletet, a klaszter tovább hűl, metastabil állapotba kerül, és a gőz a telítési hőmérsékletnél alacsonyabb hőmérsékleten kondenzálódik. Megfordítva, folyadékfázisból kiindulva, a hőmérséklet emelkedésével elérve a telítési hőmérsékletet, a folyadék túlhevül, és a telítési hőmérsékletnél magasabb hőmérsékleten párolog el. A gőz-folyadék és a folyadék-gőz fázisváltás más-más hőmérsékleten mehet végbe, a nem-egyensúlyi fázisváltáskor hiszterézis jelensége lép fel (Brokate et al., 1996).

3. ábra

Egyensúlyi és nem-egyensúlyi izoterm fázisátalakulás szemléltetése, a Van der Waals izoterma kiterjesztése a kétfázisú tartományra

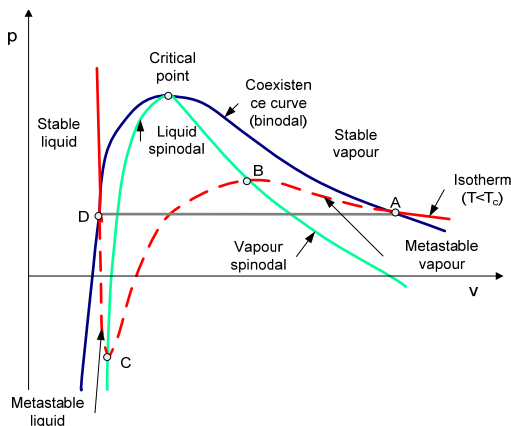


Figure 3: Schematic drawing of a van der Waals isotherm in the $p-v$ plane, equilibrium and non-equilibrium phase transformations

4. ábra

Izobár egyensúlyi és nem-egyensúlyi gőz-folyadék fázisváltozás, fázisdiagram a $T-v$ síkban. A tiszta fázisok görbéi a víz IAPWS IF95 állapotegyenletei szerint, a metastabil tartományra nincs nemzetközi ajánlás, szemléltetésére a van der Waals egyenletet extrapoláltuk a kétfázisú tartományra. A nyilak a nem-egyensúlyi fázisváltozás során fellépő hiszterézis jelenségét szemléltetik

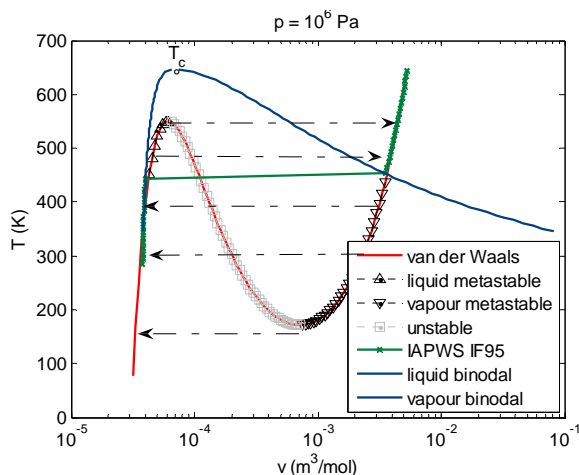


Figure 4: Isobaric curves of water vapour-liquid phase transitions in the $T-v$ plane. The arrows show examples for possible hysteresis observable in non-equilibrium phase transformations

AZ ÁLLAPOTFÜGGVÉNY TÍPUSÚ FÁZISVÁLTOZÁSI MODELLEK

Az állapotfüggvény típusú fázisváltózási modell alapfeltételezése az egyensúlyi fázisátmenetnek megfelelő fázisváltózási folyamat, amelyet vagy hőmérséklet-, vagy nyomásváltózás indukál. A rendparaméter, fázisjellemző paraméter (általában térfogat vagy tömegtört) a megfelelő állapotjellemző függvénye.

Amennyiben a fázisváltózást hőmérsékletváltózás okozza, a ϕ rendparaméter lehet a magasabb hőmérsékleten stabil fázis térfogattörtje, amely elvileg a $\phi=1(T-T_s)$ ugrásfüggvénnyel írható le (5.a ábra). A térfogattört kedvelt rendparaméter, mivel segítségével egyben a fázishatár –a diffúz határreteg- is lokalizálható.

A függvény deriváltja, azaz a fázisfrakciók változékonysága a hőmérséklet függvényében a $\delta(T-T_s)$ Dirac-delta függvény (5.d ábra). A szingularitás elkerülésére a Dirac-delta függvény közelíthető egy véges hőmérsékleti intervallum feletti egyenletes eloszlással (5.e ábra):

$$\frac{d\phi}{dT} = \frac{1}{2\Delta T}. \quad (1)$$

Hasonlóképpen, a normális eloszlásfüggvény (5.f ábra) is alkalmazható simított verzióként:

$$\frac{d\phi}{dT} = (\varepsilon\pi^{-1/2})e^{-\varepsilon^2(T-T_s)^2}, \quad (2)$$

ahol ε -t úgy határozzuk meg, hogy $\text{erf}(\varepsilon\Delta T) = 1 - \delta$, ahol ΔT a feltételezett fázisváltózási intervallum félszélessége, δ egy megfelelően kis pozitív szám. A simított függvények integrálja a fázisváltózást leíró, hőmérsékletfüggő állapotfüggvény (5.b és 5.c ábra).

Látszólagos hőkapacitás modell

A látszólagos hőkapacitás modell a fázisváltózással járó hővezetési problémák megoldásának népszerű módszere Civan et al. (1987), pl. a talajban lejátszódó fagyás-olvadás szimulációjában (Hansson et al., 2004). A látens hő hatását a hőkapacitás hőmérséklet-függvényébe illesztik, a 2.b ábrán látható szingularitást egy szimmetrikus hőmérséklet-tartományon elsimítva. A fázisváltózás hatásának ily módon történő megközelítése az előző módszerhez hasonló előnnyel jár: a hőmérséklet az elsődleges függő változó, amely az energia megmaradás mérlegegyenletének megoldásából származtatható. A kétfázisú rendszerben lejátszódó hővezetés modellje:

$$C_p \frac{\partial T}{\partial t} - L\rho_1 \frac{\partial \xi}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = 0, \quad (3)$$

ahol C_p a volumetrikus hőkapacitás, $C_p = c_{p1}\rho_1\xi + c_{p2}\rho_2(1-\xi)$, c_p a fajlagos hőkapacitás, ξ az 1. fázis térfogat-törtje, L a látens hő és λ a keverék hővezetési tényezője. A (3) egyenlet első tagja reprezentálja az energia idő szerinti változását, a második tag a fázisváltózás miatti látens hő felszabadulást, a harmadik tag a hővezetés miatti energiaáramnak felel meg. A látens hő befoglalható a hőkapacitásba és (3) felírható az alábbi alakban

$$\left(C_p - L\rho_1 \frac{\partial \xi}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = C_a \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T), \quad (4)$$

ahol C_a a látszólagos hőkapacitás, $C_a = C_p - L\rho_1 \frac{\partial \xi}{\partial T}$.

A látens hő nem a telítési hőmérséklet pontjában, hanem egy adott hőmérséklettartományon eloszlata kerül a függvénybe, az elosztás, elmosás függ a $d\xi/dT$ függvény közelítésétől. A módszert víz gőz-folyadék fázisátmenetre alkalmazva, konstans gőz ill. folyadékfázis fajhőket és látens hőt feltételezve, normális eloszlásnak megfelelő simítást alkalmazva, a látszólagos hőkapacitás-függvény a 6. ábrán látható.

A látszólagos hőkapacitás modellt a fenti formában szilárd-folyadék fázisváltozás közelítő modelljeként alkalmazzák. Ha a módszert gőz-folyadék fázisváltozás modellezésére akarjuk alkalmazni, a fázisjellemző rendparaméter megválasztásakor gondosan kell eljárunk! A 7. ábrán a térfogattört és a tömegtört simított görbéjét láthatjuk, a tömegtörtet választva rendparaméterként. Gőzfázisból kiindulva, a rendszer hűtése során, a nagy sűrűségkülönbség miatt a tömeg nagy része már lekondenzálódott, mire az a térfogattörtben is érzékelhető változást okoz. A 8. ábrán jól látható a két rendparaméter-választás közötti különbség a vízre vonatkozó effektív hőkapacitás függvényeken. A 8.a ábrán a térfogattört, a 8.b ábrán a tömegtört a rendparaméter. Az első esetben a látens hő leadása megtörténik már a telítési hőmérséklet elérése előtt. Ez az eltolódás megfigyelhető minden olyan fázisváltozási modellben, ahol nagy a különbség a tiszta fázisok sűrűségei között és a fázisjellemző paraméter a térfogattört. A probléma kiküszöbölhető, ha a gőzfázis tömegtörtjét választjuk rendparaméternek. A látens hő ebben az esetben helyesen, a telítési állapot körüli szimmetrikus tartományon adódik a hőkapacitás-függvényhez. A diffúz határreteg lokalizálására továbbra is a térfogattörtet használjuk.

5. ábra

A gőzfázis térfogattört hőmérsékletfüggése. A fázisváltozás az a) és d) esetben egy rögzített hőmérsékleten játszódik le, a b) és e) eset egyenletes eloszlás szerinti simítás, a c) és f) eset normális eloszlásnak megfelelő simítás a $2\Delta T$ hőmérséklet-intervallumon

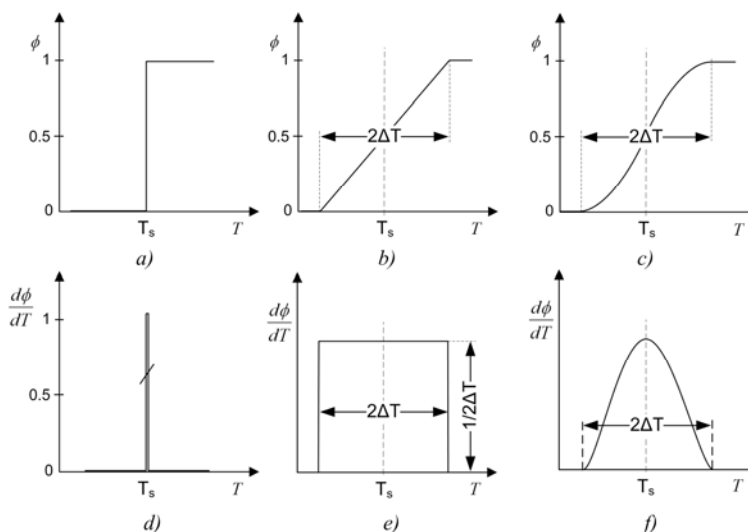


Figure 5: Volumetric fraction of gaseous phase and its variation with temperature, phase change occurs in a) and d) at a fixed temperature; in b) and e) smoothed approximation with uniform distribution; in c) and f) smoothed approximation with normal distribution, over a $2\Delta T$ temperature interval

6. ábra

A víz látszólagos hőkapacitás-függvényei, különböző mértékű simítási intervallumokon, $T_S = 373\text{K}$

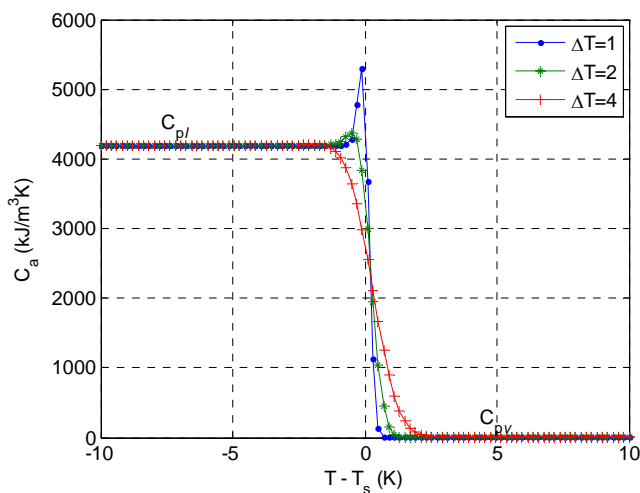


Figure 6: Apparent heat capacity of water at $T_S = 373\text{K}$ with different smoothing intervals

7. ábra

A fázisok közötti nagy sűrűségkülönbség miatt eltérő lefutású a térfogat illetve a tömegtört függvénye

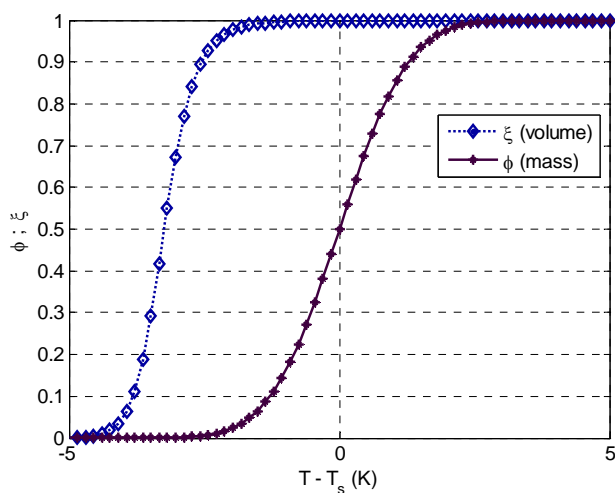


Figure 7: Vapour mass fraction as the order parameter ϕ . Vapour volume fraction ξ has different characteristics

8. ábra

**Fajlagos hőkapacitás függvény víz gőz-folyadék fázisváltásra, $T_S = 373\text{K}$,
a) a térfogattört a fázisjellemző paraméter, b) a tömegtört a fázisjellemző
paraméter**

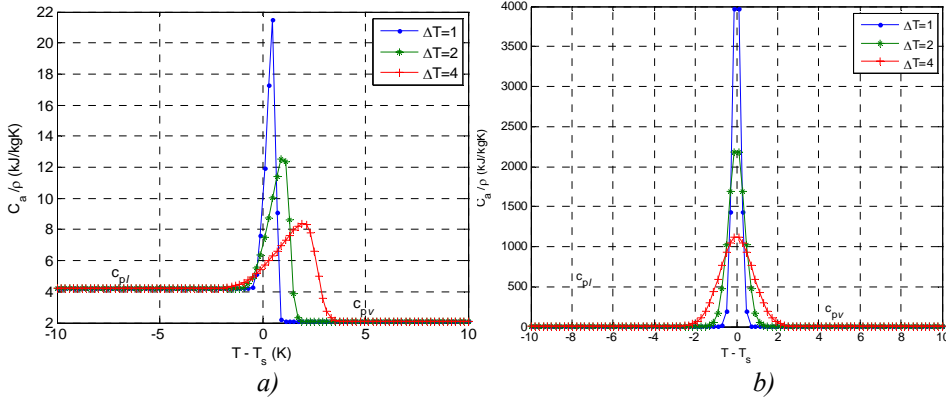


Figure 8: Effective heat capacity functions at vapour-liquid phase transition of water at $T_S = 373\text{K}$, a) vapour volume fraction as the order parameter b) vapour mass fraction as the order parameter

Izoterm egyensúlyi fázisváltási modellek

Delannoy *et al.* (1990) dolgozták ki a $\rho(p)$ sűrűség - statikus nyomás függvényt, amely megadja mind a tiszta fázisok, mind az átmeneti tartomány nyomástól függő sűrűségét. A modellt főként kavitációs áramlási modellekben alkalmazzák:

$$\rho = \begin{cases} \rho_l & \text{if } p \geq p_s + \Delta p \\ \rho_v & \text{if } p \leq p_s - \Delta p \\ \rho(p) & \text{if } p_s - \Delta p < p < p_s + \Delta p \end{cases}, \quad (5)$$

ahol Δp a gőz-folyadék fázisátmenet félszélessége, (9. ábra). A fázisátmenetet tartománya 0 szerint az alábbi függvénnyel közelíthető:

$$\rho = \frac{\rho_l + \rho_v}{2} + \frac{\rho_l - \rho_v}{2} \sin\left(\frac{p - p_s}{c_{min}^2} \frac{2}{\rho_l - \rho_v}\right), \quad (6)$$

ahol a minimális hangsebesség a keverékben, közelíthető: $c_{min} = 2c_v \sqrt{\rho_v / \rho_l}$, ha $\rho_l \gg \rho_v$. Vízre standard körülmények között $c_{min} \approx 25 \text{ m/s}$. A rendparaméter ebben a modellben tehát a sűrűség, a sűrűség változása írja le a két fázis közötti átmeneti tartományt. A modellparaméter a minimális hangsebesség a kétfázisú tartományban, amelyet kísérlettel kell meghatározni (Caupin *et al.* 2006).

Olyan rendszerek tanulmányozásában, ahol a munkapont az egyensúlyi állapot közelében található, az állapotfüggvény típusú modellek igen pontatlan eredményt szolgáltatnak, mivel már az egyensúlyi állapot elérése előtt jelentős mennyiségű másik fázis megjelenését feltételezik (Kang *et al.* 1999). A módszer akkor szolgáltat elfogadható pontosságú eredményeket, ha a modell-számítások kiindulási és

vég hőmérséklete a telítési hőmérséklettől távol esik, azaz $2 \Delta T / |T_{initial} - T_{end}| < \varepsilon$, ahol $\varepsilon \ll 1$. (Civan et al. 1987). Emellett a kísérletileg megfigyelhető metastabil állapotok kezelésére ezek a modellek nem alkalmasak.

9. ábra

$\rho(p)$ sűrűség-nyomás állapotfüggvény

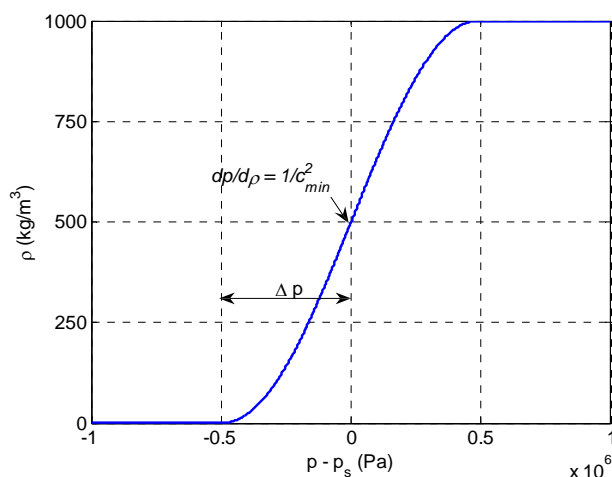


Figure 9: Barotropic state law $\rho(p)$

AZ ÁLLAPOTFÜGGVÉNY TÍPUSÚ FÁZISVÁLTOZÁSI MODELLEK HISZTERÉZIS KITERJESZTÉSE

Tanszéki kutatási projekt keretében (GVOP-3.1.1.-2004-05-0125/3.0) egy olyan nagyméretű gőzhálózat modelljét kellett elkészítenünk, amely az alulterhelés miatt több szakaszon is telítési állapotban, vagy annak közelében üzemelt (Szakonyi et al. 2006). A fázisváltás modelljeként először egy állapotegyenlet típusú modellel próbálkoztunk, de azt tapasztaltuk, hogy a modell a hálózaton végzett mérési adatokhoz képest jelentősen túlbecsülte a képződött kondenzátum mennyiségét. A probléma megoldására dolgoztuk ki az alábbi hőmérsékletfüggő hiszterézis jellegű fázisváltási modellt, amelyben szétválik a kondenzáció és a párolgási fázisátmeneti görbe, megakadályozva a telítési állapot elérése előtt jelentős mennyiségű másik fázis megjelenését (Jancskar et al. 2008a, 2008b, 2008c, Sari et al. 2007, 2008). A modellt a kavitáció modellezésére kidolgozott Vortmann-féle (Vortmann et al. 2003) izoterm, kinetikus fázisváltási modell izobár, statikus változatának tekinthető.

A feltételezés szerint a folyadék felfogható elemi klaszterek halmazaként. Egy klaszter állandó tömegű, elég kicsi, hogy teljes térfogatában vagy folyadék, vagy gőz halmazállapotban legyen, és elég nagy ahhoz, hogy termodinamikai változókkal jellemezhető legyen. Egy klaszter viselkedése (a 4.ábra szerint) hiszterézis karakterisztikus függvénnyel írható le. A függvény értéke a gőzfázisban 1, a folyadékfázisban 0 (10.ábra).

10. ábra

Az elemi folyadék klaszter x egzisztencia függvénye a T_s telítési hőmérséklet környezetében. A tényleges 0-1 ill. 1-0 átváltás a klaszter pillanatnyi energetikai állapotától függően történik a T_s körüli szimmetrikus $2\Delta T$ tartományban

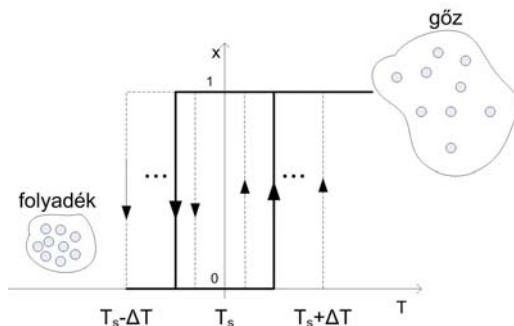


Figure 10: The existence function x of the individual water cluster switching from 0 to 1 and 1 to 0 around the saturation temperature T_s

A fluidum az elemi klaszterek halmaza, a fázisváltozás modellje leírható a klaszterek statisztikájával. Az éles egzisztencia helyett a gőz tömegtörtet vezettük be, mint fázisjellemző paramétert, amely a hőmérséklettől függő hiszterézis operátorral írható le. A hiszterézis numerikus modelljének egy PDE típusú hiszterézis operátort (Iványi 1997, Sari et al., 2006) választottunk:

$$\phi = H\{T\} \text{ és } \frac{\partial \phi}{\partial t} = \gamma \zeta(\psi T) \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (7)$$

ahol $H\{T\}$ jelenti a hőmérsékletfüggő hiszterézis operátort, $\phi \in [0, 1]$ rendparaméter a gőzfázis tömegtört, $\zeta(\cdot)$ a hiszterézis operátornak megfelelő valószínűségi sűrűségfüggvény. A ψ függvény a hőmérsékletváltozás iránya, γ az ún. hiszterézis minor hurkoknak megfelelő súlyozó tényező. A hiszterézis modell a típusa és paraméterei megadásával identifikálható. Normális eloszlást feltételezve, $\zeta \sim N(T_s \pm \Delta T/2, \Delta T/4)$, ahol + vagy – előjel jelzi a felszálló, ill. leszálló görbét (11. ábra). A szórás beállításával szabályozható a hiszterézis görbe meredeksége (12. ábra).

A hiszterézis modellnek számos előnye van: egyrészt, mivel lokális memóriával rendelkezik (Sari et al. 2006), a lokális tömegtört és hőmérséklet egyértelműen meghatározza a lokális fluidum-térfogat hiszterézis állapotát. A hőmérsékleti gradiens a hiszterézis operátoron keresztül befolyásolja a lokális gőz-tömegtört változás gradiensét és irányát. Másrészt, a hiszterézis modell differenciálegyenlete könnyedén illeszthető az áramló rendszerek mérlegegyenleteihez, és a teljes rendszer együttesen megoldható valamely (pl. végeselem) modellezőrendszer segítségével (Sari et al. 2007, 2008, Jancsár et al. 2008a).

A modell mérnöki ismeretek birtokában paraméterezhető, az állapotegyenlet típusú modellek továbbfejlesztett változatának tekinthető. Normális eloszlást feltételezve, a modell paramétere tehát a. A ΔT értékét a modellező szakembernek kell beállítania. Fontos korlátozó feltétel, hogy a modellezés során a rendszer egyetlen lokális eleme sem kerülhet instabil tartományba.

11. ábra

A $\zeta(\cdot)$ -valószínűségi sűrűségfüggvények különböző ΔT -k esetén. A középső, szürke színű görbe felel meg egy hagyományos állapotfüggvény modellnek. A várhatóértékek a fázisváltás várható hőmérsékletét jelentik, az összetartozó görbék közül emelkedő hőmérséklet esetén a jobb oldali, csökkenő hőmérséklet esetén a baloldali valószínűségi sűrűségfüggvény érvényes

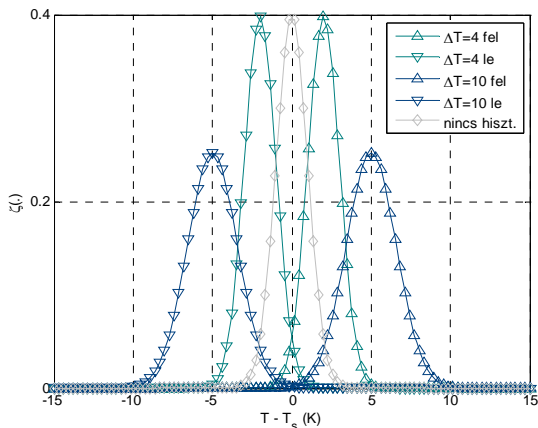


Figure 11: Gaussian PDF-s for non-equilibrium vaporization and condensation with different ΔT . Grey curve corresponds to a simple equation-of-state type model

12. ábra

Hiszterézis főgörbék különböző ΔT -k esetén. A középső, szürke színű görbe felel meg egy hagyományos állapotfüggvény modellnek. Nagyobb ΔT szélesebb hiszterézist jelent a), Hiszterézis minor hurkok szemléltetése b)

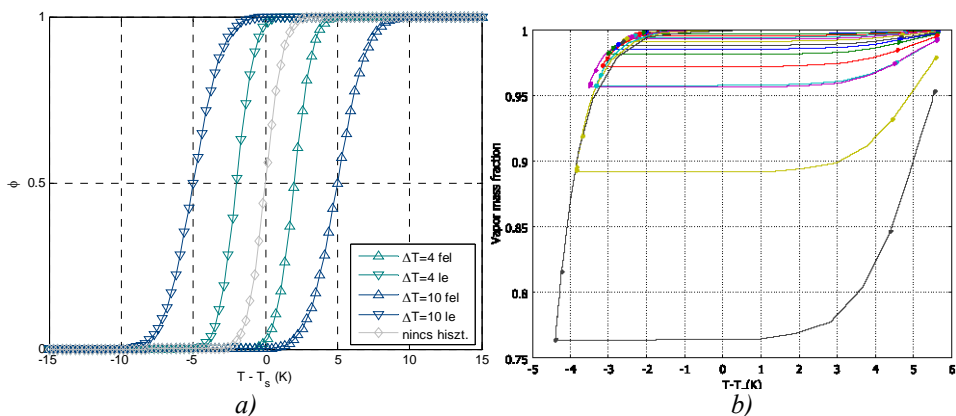


Figure 12: Main hysteresis curves for non-equilibrium vaporization and condensation with different ΔT . Grey curve corresponds to a simple equation-of-state type model a), Illustrations of hysteresis minor loops b)

Ajánlasként, a szakirodalomban található túltelítési értékeket jól közelítő heurisztikus formulát vezetünk be a ΔT felső értékének becslésére: $\Delta T = T_s (T_s - 680.33) / (T_s - 7903)$. Az így meghatározott hiszterézis határ látható a 13. ábrán. A hiszterézis korlát a telítési határhoz közeli lefutású, a kritikus pontban eltűnő. A formula a $300 \text{ K} < T_s < T_c$ tartományban alkalmazható a hivatkozott közelítő spinodális görbe (Kiselev et al. 2001) érvényességi korlátozásának megfelelően.

13. ábra

A megengedhető túltelítés mértéke

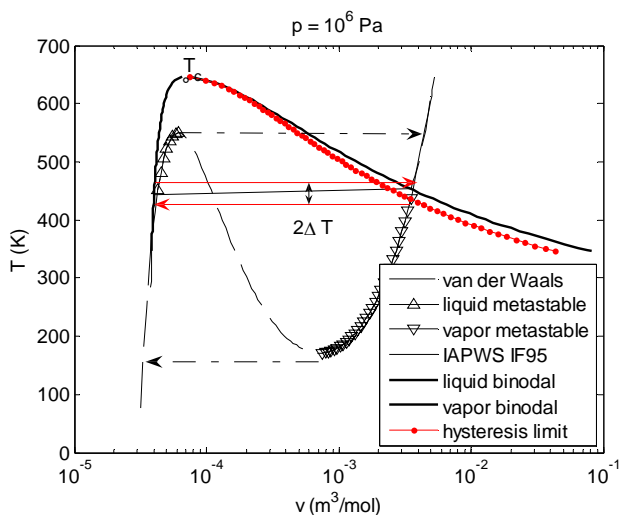


Figure 13: The allowable supersaturation limit

ÖSSZEFOGLALÁS

A statisztikus fázisváltási modellekből ötletet merítve, kidolgoztuk az állapotegyenlet típusú modellek továbbfejlesztett változatának tekinthető vízgőz–folyadék fázisváltási modellt. A modell az extenzív változók függvényének fázisváltás miatti szakadásából erdő numerikus problémák kiküszöbölésére szolgáló simítást hiszterézis függvénnyel oldja meg. A PDE alapú modell műszaki számításokat támogató, mérnöki ismeretek alapján paraméterezhető, a túltelítődést/túlhevülést is képes figyelembe venni és csatolható a homogén kétfázisú áramlási mérleg egyenleteihez. A modell alkalmazható a forrással/kondenzációval járó hatékony hőátadást kihasználó hőcsere folyamatok, gőzvezetékek, hőcserélők, gőzturbinák, kazánok bepárlók, különféle hűtők, stb. modellezésében.

IRODALOM

- Brokate, M., Sprekels, J. (1996) Hysteresis and Phase Transitions. Springer-Verlag : New York.
- Callen, H.B. (1985) Thermodynamics and Introduction to Thermostatistics. Wiley : New York.

- Caupin, F., Herbert, E. (2006) Cavitation in Water: a Review. In: C. R. Physique, 7. 1000-1017. p.
- Civan, F., Sliepcevich, C.M. (1987) Limitation in the Apparent Heat Capacity Formulation for Heat Transfer With Phase Change, In: Proceeding of the Oklahoma Academic Science, 67. 83-88. p.
- Delannoy, Y., Kueny, J.L., (1990) Two Phase Flow Approach in Unsteady Cavitation Modelling, Cavitation and Multiphase Flow Forum. In: ASME-FED 98. 153-158. p.
- Hansson, K., Simunek, J., Mizoguchi, M., Lundin, L., van Genuchten, M.Th. (2004) Water Flow and Heat Transport in Frozen Soil: Numerical Solution and Freeze-Thaw Applications. In: Vadose Zone Journal 3. 693-704. p.
- Huhn, J., Wolf, J. (1975) Zweiphasenströmung - Gasformig/Flüssig, VEB : Leipzig.
- Iványi, A. (1997) Hysteresis Models in Electromagnetic Computation. Akadémiai Kiadó : Budapest.
- Jancskar, I., Ivanyi, A. (2008a) Phenomenological Hysteresis Model for Vapor-Liquid Phase Transitions. In: Pollack Periodica, 3. 1. 5-28. p.
- Jancskar, I., Sari, Z., Ivanyi, A. (2008b) Application of hysteresis in FEM modeling of vapor-liquid phase transitions. In: Journal of Physics: Conference Series 138. 1-18. p. doi:10.1088/1742-6596/138/1/012008, <http://www.iop.org/EJ/toc/1742-6596/138/1>
- Jancskar, I., Sari, Z., Szakonyi, L., Ivanyi, A. (2008c) Diffuse Interface Modeling of Liquid-Vapor Phase Transition with Hysteresis. In: Physica B, 403. 505-508. p.
- Kang, H. C., Kim, M. H. (1999) Characteristics of Film Condensation of Supersaturated Steam-Air Mixture on a Flat Plate, International Journal of Multiphase Flow, 25. 1601-1618. p.
- Kiselev, S.B., Ely, J.F. (2001) Curvature Effect on the Physical Boundary of Metastable States in Liquids. In: Physica A, 299. 357-370. p.
- Kreith, F. (Ed.) (1999) Mechanical Engineering Handbook. CRC Press : Boca Raton.
- Landau, L.D., Lifshitz, E.M. (1980) Statistical Physics. Pergamon Press : New York.
- Pruß, A., Wagner, W. (2002) The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. In: Journal of Physical Chemistry Ref. Data 31. 2. 387-536. p.
- Sári Z., Jancskárné A. I., Sipeky A. (2008) Fázisváltózással Járó Kétfázisú Áramlás Modellezése COMSOL – MATLAB _ .NET Környezetben. In: Informatika a Felsőoktatásban Konferencia kiadvány,2008, szerk.: Pethő A., Herdon M., Debrecen, 2008. aug. 27-29. 1-6. p.
- Sari, Z., Ivanyi, A. (2006) Statistical Approach of Hysteresis. In: Physica B, 372. 45-48. p.
- Sari, Z., Jancskar, I., Szakonyi, L., Ivanyi, A. (2007) Phenomenological Transient FEM Modelling of a Two-phase Flow with Dynamic Phase Change. In: Proceedings of the Eleventh International Conference on Civil, Structural and Environmental Engineering Computing, St. Julians, Malta, 18-21 September 2007. paper: 217.
- Sun, Y., Beckermann, C. (2004) Diffuse Interface Modeling of Two-phase Flows Based on Averaging: Mass and Momentum Equations. In: Physica D, 198. 281-308. p.
- Sun, Y., Beckermann, C. (2007) Sharp Interface Tracking using the Phase-field Equation. In: Journal of Computational Physics, 220. 626-653. p.
- Szakonyi, L., Jancskar, I., Sari, Z. (2006) Energetic Model for an Elementary Unit of a Steam Network. In: Pollack Periodica, 1. 3. 91-102. p.
- Vortmann, C., Schnerr, G.H., Seelecke, S. (2003) Thermodynamic Modeling and Simulation of Cavitating Nozzle Flow. In: International Journal of Heat and Fluid Flow, 24. 774-783. p.

Levelezési cím (*Corresponding author*):

Jancskárné Anweiler Ildikó

Pécsi Tudományegyetem, Műszaki Kar

Műszaki Informatika Tanszék

7624 Pécs, Rókus u. 2.

University of Pécs, Departement of Information Technology

H-7624 Pécs, Rókus u. 2.

Tel./Fax: +36-72-501-534

e-mail: jai@morpheus.pte.hu