



**VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ**

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

**FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ**

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

**ÚSTAV MATEMATIKY**

INSTITUTE OF MATHEMATICS

**POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE PŘI  
ZMĚNĚ SKUPENSTVÍ**

COMPUTER MODELLING OF PHASE CHANGE HYSTERESIS

**DIPLOMOVÁ PRÁCE**

MASTER'S THESIS

**AUTOR PRÁCE**

AUTHOR

**Bc. Anna Petrášová**

**VEDOUCÍ PRÁCE**

SUPERVISOR

**doc. Ing. Lubomír Klimeš, Ph.D.**

**BRNO 2021**



# Zadání diplomové práce

Ústav:	Ústav matematiky
Studentka:	<b>Bc. Anna Petrášová</b>
Studijní program:	Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Vedoucí práce:	<b>doc. Ing. Lubomír Klimeš, Ph.D.</b>
Akademický rok:	2020/21

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

## Počítačové modelování teplotní hystereze při změně skupenství

### Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Materiály se změnou skupenství představují způsob, kterým lze efektivně využívat energii z obnovitelných zdrojů prostřednictvím ukládání tepla a chladu. Nezbytnou součástí vývoje takovýchto zařízení jsou počítačové modely a simulace. Většina modelů dostupných v literatuře ale ignoruje hysterezní chování, což může být jedním z důvodů pro rozdíly mezi experimentem a simulací. Model teplotní hystereze tedy představuje způsob, kterým lze zvýšit přesnost simulace ve srovnání se skutečným systémem.

### Cíle diplomové práce:

- 1) Provést rešerši způsobů modelování teplotní hystereze.
- 2) Navrhnout (popř. modifikovat stávající) a ve vhodném programovacím prostředí implementovat počítačový model, který bude umožňovat tepelnou simulaci materiálu podléhajícího teplotní hysterezi.
- 3) Provést simulační studii a zhodnotit chování modelu hysterezního chování.

### Seznam doporučené literatury:

INCROPERA, Frank P., David P. DEWITT, Theodore L. BERGMAN a Adrienne S. LAVINE. Principles of heat and mass transfer. Sedmé vydání. Singapore: John Wiley, 2013. ISBN 978-0-470-64615-1.

HAHN, David W. a M. Necati ÖZİŞİK. Heat conduction. Třetí vydání. Hoboken: Wiley, 2012. ISBN 978-0470902936.

KLIMEŠ, Lubomír, Pavel CHARVÁT, Mahmood MASTANI JOYBARI, Martin ZÁLEŠÁK, Fariborz HAGHIGHAT, Karthik PANCHABIKESAN, Mohamed EL MANKIBI a Yanping YUAN. Computer modelling and experimental investigation of phase change hysteresis of PCMs: The state-of-the-art review. Applied Energy. 2020, 263(1), 1-29. Dostupné z: doi:10.1016/j.apenergy.2020.114572

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2020/21

V Brně, dne

L. S.

---

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.  
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.  
děkan fakulty

## Abstrakt

Tato práce se zabývá počítačovým modelováním teplotní hystereze při změně skupenství, a to během úplných fázových přeměn i částečných. Je zde provedena rešerše způsobů modelování teplotní hystereze vycházejících z metody entalpie a metody efektivní tepelné kapacity. V případě úplných fázových přeměn je uvedeno několik způsobů, které využívají metodu efektivní tepelné kapacity, a také metoda tepelného zdroje, která je naopak jistou analogií metody entalpie. Dále jsou uvedeny práce zabývající se modelováním částečné fázové přeměny, z nichž nejzajímavější je z důvodu validace metoda statické hystereze a metoda navržená autory Bonym a Citherletem. Druhá část této práce se zabývá hysterezním chováním materiálu s fázovou přeměnou, kterým je organický parafín s označením RT 27. Vstupní data získaná pomocí diferenciální skenovací kalorimetrie byla převedena na závislost entalpie na teplotě. Tyto křivky byly vymodelovány pomocí po částech lineární funkce. V případě částečných fázových přeměn byl navrhnout způsob modelování vycházející z metody navržené autory Bonym a Citherletem. V prostředí softwaru MATLAB byl implementován jednodimenzionální model umožňující tepelnou simulaci materiálu. Výsledky získané pomocí této simulace jsou na závěr porovnány s modelem, který teplotní hysterezi neuvažuje.

## Summary

This thesis deals with computer modeling of temperature hysteresis during phase change, namely complete and partial phase change. There is performed a review of methods for modeling temperature hysteresis based on the enthalpy method and the effective heat capacity method. In the case of complete phase change, there are several methods that use the effective heat capacity method, as well as the heat source method, which, on the contrary, is a certain analogy of the enthalpy method. The following are works dealing with modelling of partial phase change, the most interesting of which is due to the validation method of static hysteresis and the method designed by Bony and Citherlet. The second part of this thesis deals with the hysteresis behavior of the material with phase change, which is organic paraffin RT 27. The input data obtained by differential scanning calorimetry was converted to the dependence of the enthalpy on temperature. These curves was represented by piecewise linear function. In the case of partial phase transformations, a modeling method based on the methods proposed by Bonym and Citherlet was designed. An one-dimensional model enabling thermal simulation of the material was implemented in the MATLAB software environment. The results obtained with this simulation are finally compared with a model that does not consider thermal hysteresis.

## Klíčová slova

Modelování fázové přeměny, teplotní hystereze fázových změn, částečná fázová přeměna, ukládání latentní tepelné energie

## Keywords

Phase change modelling, phase change hysteresis, partial phase change, latent heat thermal energy storage

PETRÁŠOVÁ, A. *Počítačové modelování teplotní hystereze při změně skupenství* [online]. Brno, 2021 [cit. 2021-05-21]. Dostupné z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/132643>. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Ústav matematiky. 59 s. Vedoucí práce Lubomír Klimeš



Prohlašuji, že jsem diplomovou práci *Počítačové modelování teplotní hystereze při změně skupenství* vypracovala samostatně pod vedením doc. Ing. Lubomíra Klimeše, Ph.D. s použitím odborné literatury a pramenů, které jsou uvedeny v seznamu použité literatury.

Anna Petrášová





Chtěla bych poděkovat svému vedoucímu práce doc. Ing. Lubomíru Klimešovi, Ph.D. za odborné vedení práce a veškerou pomoc. Dále bych ráda poděkovala mé rodině a přátelům za podporu.

Anna Petrášová



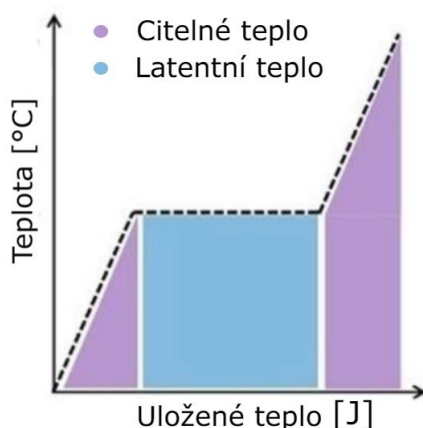
# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>Základy přenosu tepla</b>	<b>14</b>
2.1	Přenos tepla vedením . . . . .	14
2.1.1	Fourierův zákon . . . . .	14
2.1.2	Tepelná bilance . . . . .	15
2.1.3	Odvození diferenciální rovnice . . . . .	16
2.2	Přenos tepla prouděním . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Modelování fázové přeměny</b>	<b>19</b>
3.1	Metoda entalpie . . . . .	20
3.2	Metoda efektivní tepelné kapacity . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Teplotní hystereze</b>	<b>22</b>
<b>5</b>	<b>Způsoby modelování teplotní hystereze</b>	<b>25</b>
5.1	Modelování teplotní hystereze při úplné fázové přeměně . . . . .	25
5.1.1	Přístupy využívající metodu efektivní tepelné kapacity . . . . .	25
5.1.2	Metoda tepelného zdroje . . . . .	28
5.2	Modelování teplotní hystereze při částečné fázové přeměně . . . . .	30
5.2.1	Metoda přechodu navržená Bonym a Citherletem . . . . .	30
5.2.2	Metoda statické hystereze . . . . .	32
5.2.3	Další způsoby modelování částečné teplotní hystereze . . . . .	35
<b>6</b>	<b>Počítačový model pro řešení teplotní hystereze</b>	<b>38</b>
6.1	Experimentální data . . . . .	38
6.2	Modelování úplné fázové přeměny . . . . .	40
6.3	Modelování částečné fázové přeměny . . . . .	42
6.4	Numerické řešení jednodimenzionální úlohy . . . . .	44
6.4.1	Diskretizace tělesa . . . . .	44
6.4.2	Aproximace pomocí konečných diferencí . . . . .	45
<b>7</b>	<b>Výsledky získané pomocí modelu</b>	<b>47</b>
7.1	Ohřev materiálu . . . . .	47
7.2	Chlazení materiálu . . . . .	50
7.3	Porovnání s modelem zanedbávající teplotní hysterezi . . . . .	51
<b>8</b>	<b>Závěr</b>	<b>53</b>
<b>9</b>	<b>Seznam použitých veličin, zkratk a symbolů</b>	<b>58</b>
<b>10</b>	<b>Seznam příloh</b>	<b>59</b>

# 1 Úvod

Snaha o efektivní hospodaření s energií i zvyšující se důraz na ochranu životního prostředí zvýšil zájem o využívání obnovitelných zdrojů, zejména solární energie. Kvůli rozporu mezi poptávkou a dodávkou energie získané pomocí solárních systémů je nutné použít zařízení pro akumulaci tepelné energie.

Existují dva základní typy technik akumulace tepelné energie, a to akumulace citelného nebo latentního tepla. Znázornění obou typů je na obrázku 1.1. V prvním případě se teplota akumulčního materiálu mění s množstvím ukládané energie. V druhém případě se teplo uvolňuje, nebo spotřebovává při fázové přeměně, a proto při akumulaci latentního tepla je teplota materiálu téměř konstantní a odpovídá teplotě fázové změny materiálu.



Obrázek 1.1: Citelné a latentní teplo, převzato a upraveno z [5]

Výhody použití metody ukládání energie ve formě latentního tepla, tedy využití materiálů s fázovou přeměnou (dále také PCM), jsou zřejmé při porovnání objemů, či hmotností materiálů pro uskladnění stejného množství energie, které jsou v případě ukládání citelného tepla mnohonásobně vyšší. PCM jsou tedy schopny velmi efektivně ukládat tepelnou energii v malých teplotních intervalech díky vysokému obsahu latentního tepla. Využití PCM jako materiálů pro akumulaci tepelné energie nabývá na důležitosti zejména ve stavebním průmyslu. Nejpoužívanější PCM, který přechází z pevné do kapalné fáze a naopak, ukládá teplo nebo chlad v procesech tavení a tuhnutí. Tyto materiály poskytují vysokou hustotu skladování v úzkých teplotních rozsazích. Typické aplikace v systémech obnovitelné energie se vyznačují malými teplotními rozdíly při nabíjení a vybíjení zásobníků. Vhodný PCM má tedy teplotu fázové přeměny blízkou cílové teplotě zamýšlené aplikace.

Mnoho PCM však vykazuje neideální chování fázového přechodu kdy k tavení a tuhnutí dochází spíše v určitém teplotním rozsahu, než při jedinečné teplotě. Jevy, které toto obvykle nežádoucí chování PCM zvyšují, jsou teplotní hystereze fázových změn a podchlazení. Přestože tyto jevy významně ovlivňují tepelné chování materiálu, modelovány jsou jen zřídka a ve studiích se zanedbávají. Předmětem této diplomové práce je proto vytvořit přehled způsobů, jakými lze zejména teplotní hysterezi modelovat, a také vytvořit počítačový model, který bude simulovat chování materiálu podléhající teplotní hysterezi.

Struktura této diplomové práce je následující. V druhé kapitole jsou uvedeny základní poznatky z teorie přenosu tepla. Jak je výše řečeno, nejpoužívanějším PCM jsou materiály, ve kterých probíhá přeměna mezi pevným stavem a kapalným. Z tohoto důvodu je tato kapitola soustředěna zejména na přenos tepla vedením, jelikož tato forma přenosu je

u pevných látek a kapalin bez proudění dominantní. Odvozena je rovnice vedení tepla v tělese, která je doplněna o počáteční a okrajové podmínky.

K jevu zvanému teplotní hystereze dochází při fázové přeměně materiálu. Proto další část této práce obsahuje způsoby modelování fázové přeměny materiálu. Uvedeny jsou dva nejznámější způsoby, kterými jsou metoda entalpie a metoda efektivní tepelné kapacity. Tyto metody jsou dále využívány v simulaci teplotní hystereze.

Čtvrtá kapitola je věnována hlavnímu předmětu práce, tedy teplotní hysterezi. Je uvedena její definice a jakým způsobem probíhá u úplných i částečných fázových přeměn. Uvedeno je také v jakých materiálech se tento jev nejčastěji objevuje a jakými prostředky můžeme teplotní hysterezi eliminovat.

Pátá část je pak zaměřena na způsoby modelování teplotní hystereze. Kapitola obsahuje přehled způsobů simulace teplotní hystereze, a to jak pro úplné fázové změny tak i pro částečné. V případě úplných fázových přeměn je uvedeno několik metod založených na metodě efektivní tepelné kapacity a metoda založená na semi-empirickém způsobu modelování označená jako metoda tepelného zdroje. U modelování materiálu s částečnou fázovou přeměnou jsou nejdříve uvedeny dvě metody modelování teplotní hystereze, které byly ověřeny na základě experimentálních údajů. Dále je následuje přehled dalších navržených metod, jakým lze k tomuto problému přistupovat. Tyto způsoby však nejsou ověřeny, a mnohdy také dochází k nadhodnocení či podhodnocení výsledků.

Šestá kapitola je věnována návrhu počítačového modelu. Nejdříve jsou popsány experimentální data, ze kterých se při tvorbě modelu vychází. Tyto data jsou dále zobrazena z hlediska entalpie a modelována pomocí po částech lineárních funkcí. Na základě křivek získaných dynamickou metodou diferenciální skenovací kalorimetrie je navrhnut způsob přechodu v případě částečné fázové přeměny.

V poslední části je vytvořen jednodimenzionální model simulující chování materiálu s fázovou přeměnou. Následně je porovnán s modelem, který teplotní hysterezi neuvažuje.

Závěrečná kapitola obsahuje celkovému shrnutí diplomové práce. Jako stručná rekapitulace všech způsobů modelování teplotní hystereze slouží jednoduchá tabulka. Nakonec je také uvedeno zdůraznění hlavních výsledků a zhodnocení chování vytvořeného modelu teplotní hystereze.

## 2 Základy přenosu tepla

Při modelování fázové přeměny materiálu a následné simulaci teplotní hystereze se vychází z rovnic přenosu tepla. Pro lepší porozumění je proto vhodné se nejdříve zaměřit na základní poznatky z termomechaniky, které nám poskytnou teoretický základ pro další části této práce. Při tvorbě této kapitoly bylo čerpáno zejména z [9] a [21].

Přenos tepla může být obecně realizován třemi způsoby: vedením, prouděním a zářením. V prvním případě přenos tepla probíhá mezi molekulami, které si mezi sebou během jejich neuspořádaného pohybu předávají kinetickou energii. Tento způsob přenosu tepla je také označován jako konduktce. Při přenosu tepla prouděním (známém také pod pojmem konvekce) se tepelná energie přenáší společně s přemístováním molekul materiálu. V poslední uvedené formě přenosu tepla jsou nositeli tepelné energie fotony a přenos tepelné energie je při záření proveden pomocí elektromagnetického vlnění.

V praxi přenos obvykle probíhá jako kombinace všech třech typů. V tomto případě je však vhodné se zaměřit pouze na přenos tepla v tepelných výměnících obsahující PCM, kde obvykle přenos tepla probíhá vedením, případně prouděním (např. vzduch proudící v tepelném výměníku).

### 2.1 Přenos tepla vedením

Vedení tepla lze charakterizovat jako přenos energie od více energetických částic k méně energetickým. Pokud budeme vycházet z druhého termodynamického zákona, potom existuje-li v látce teplotní gradient, tedy v tělese jsou v různých místech různé teploty, začne teplo přecházet z míst s vyšší teplotou do míst s nižší teplotou. Toto můžeme znázornit pomocí teplotního pole, které je dáno funkcí  $T(\mathbf{x}, t)$ .

Úlohou vedení tepla rozumíme nejčastěji určení teplotního rozložení v tělese, přes jehož hranici přechází tepelný tok, z něhož pak lze stanovit teplotní gradienty v daném tělese.

Celkový tepelný tok se značí  $\dot{Q}$  [W=J/s] a označuje množství tepla transportované za jednotku času danou plochou  $S$ . Hustota tepelného toku  $\dot{q}$  [W m<sup>-2</sup>] značí plošnou hustotu tepelného toku, neboli tepelný tok procházející plochou o jednotkové velikosti, která je kolmá ke směru toku (viz [11]). Tyto dva pojmy jsou ve vzájemném vztahu, který je dán rovnicí

$$d\dot{Q} = \dot{q} dS. \quad (2.1)$$

#### 2.1.1 Fourierův zákon

Vztah tepelného toku a teploty vyjadřuje Fourierův zákon pro vedení tepla, který říká, že hustota tepelného toku přenášeného vedením je přímo úměrná velikosti teplotního gradientu a má opačné znaménko než tento gradient

$$\dot{q} = -k \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (2.2)$$

kde  $T$  značí teplotu tělesa.

Uvedená rovnice (2.2) je jednorozměrný tvar Fourierova zákona. V obecném případě, tedy při vedení tepla v trojrozměrném tělese, dostáváme vztah po složkách

$$\dot{q}_i = - \sum_j k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.3)$$

kde  $k_{ij}$  jsou prvky matice součinitele tepelné vodivosti. V případě izotropního materiálu se vztah díky tomu, že součinitel tepelné vodivosti je ve všech směrech stejný, zjednoduší na vztah

$$\dot{q}_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.4)$$

Součinitel tepelné vodivosti  $k$  [ $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ] je fyzikální vlastností látky. Čím větší tepelnou vodivost těleso má, tím menší klade odpor při přenosu tepla. Obvykle je funkcí teploty a polohy v tělese. V případě homogenních těles závisí pouze na teplotě.

### 2.1.2 Tepelná bilance

Při modelování vedení tepla v trojrozměrném tělese o objemu  $\Omega$  uvažujme nejprve libovolný malý objem tělesa  $V \subset \Omega$  a libovolný časový interval  $I = (t_\alpha, t_\beta)$ . Zanedbáme-li ztráty do okolí, dostáváme zákon zachování energie ve tvaru

$$\Delta E = Q_f - Q_s, \quad (2.5)$$

tedy vnitřní energie v objemu  $V$  během časového intervalu  $I$  vzroste o teplo  $Q_f$  dodané do objemu  $V$  vnitřními zdroji s hustotou  $f$ , které je zmenšené o teplo  $Q_s$  odvedené během časového intervalu  $I$  přes povrch  $S = \delta V$ .

Jednotlivé veličiny lze vyjádřit pomocí integrálů. Teplo dodávané vnitřními zdroji charakterizuje hustota vnitřních zdrojů  $f(x, t)$  vztahem

$$Q_f = \int_I \left( \int_V f(x, t) dx \right) dt. \quad (2.6)$$

Přírůstek vnitřní energie  $\Delta E$  je rozdíl vnitřní energie  $E_{t_\beta}$  v čase  $t_\beta$  a energie  $E_{t_\alpha}$  v čase  $t_\alpha$ , který lze dále vyjádřit pomocí hustoty vnitřní energie  $e(x, t)$

$$\Delta E = E_{t_\beta} - E_{t_\alpha} = \int_V e(x, t_\beta) dx - \int_V e(x, t_\alpha) dx \quad (2.7)$$

Tento vztah můžeme dále za předpokladu, že spojitá veličina  $e(x, t)$  má derivaci na  $V$ , upravit na tvar

$$\Delta E = \int_{t_\alpha}^{t_\beta} \left( \int_V \frac{\partial e}{\partial t} dx \right) dt. \quad (2.8)$$

Poslední člen v tepelné bilanci (2.5), tedy teplo  $Q_s$ , které je odvedeno přes povrch  $S$  objemu  $V$  během doby  $I$ , lze vyjádřit pomocí hustoty tepelného toku  $\dot{q}$  vztahem

$$Q_s = \int_I \left( \int_{\partial V} \dot{q} dS \right) dt. \quad (2.9)$$

Hustota tepelného toku však závisí na směru a orientaci normály  $n$  plochy  $S$ . K určení veličiny  $\dot{q}(n)$  pro libovolný směr plochy však stačí znát hodnoty hustoty toku ve třech souřadnicových směrech

$$\dot{q}(n) = \sum_{i=1}^3 \dot{q}_i n_i = \dot{q} \cdot n. \quad (2.10)$$

## 2.1. PŘENOS TEPLA VEDENÍM

### 2.1.3 Odvození diferenciální rovnice

Dříve než dosadíme jednotlivé veličiny do tepelné bilance (2.5), zaměříme se na vyjádření tepla  $Q_s$ . Výše uvedený vztah (2.9) obsahuje plošný integrál. Ten však lze snadno převést na objemový integrál pomocí Gaussova-Ostrogradského vzorce

$$\int_{\partial V} v n_i dS = \int_V \frac{\partial v}{\partial x_i} dx. \quad (2.11)$$

Dosažením rovnic (2.10) a (2.11) do vztahu (2.9) dostáváme

$$Q_s = \int_I \left( \int_{\partial V} \dot{q} \cdot n dS \right) dt = \int_I \left( \int_V \dot{q} \sum_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial x_i} dx \right) dt. \quad (2.12)$$

Dosadíme-li jednotlivé veličiny do rovnice tepelné bilance (2.5), získáme po převedení všech členů na levou stranu vztah

$$\int_I \left( \int_V \left[ \frac{\partial e}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial x_i} - f \right] dx \right) dt = 0. \quad (2.13)$$

K další úpravě výše uvedeného vztahu použijeme následující lemma [9].

**Lemma 2.1.1.** *Nechť  $f$  je spojitá veličina v okolí bodu  $x^*$ . Potom platí*

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{|B(x^*, r)|} \int_{B(x^*, r)} f(x) dx = f(x^*). \quad (2.14)$$

Protože rovnost (2.13) platí na libovolném intervalu  $I$  a libovolném objemu  $V$ , rovnost vydělíme délkou intervalu  $I$  a velikostí objemu  $V$  a přechodem k limitě pro  $|I| \rightarrow 0$  a  $|V| \rightarrow 0$  dostáváme dvojnásobným použitím lemmatu 2.1.1 rovnici vedení tepla

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial x_i} = f. \quad (2.15)$$

Tuto rovnici můžeme dále upravit pomocí konstitučního vztahu

$$de = \rho c dT, \quad (2.16)$$

který lze odvodit z druhé formy termodynamického zákona při konstantním tlaku, a Fourierova zákona (2.3). Dostáváme rovnici vedení tepla v tělese

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + f. \quad (2.17)$$

Jestliže je materiál homogenní, potom součinitel tepelné vodivosti  $k_{ij}$  nezávisí na  $x$  a rovnici (2.17) lze přepsat do tvaru

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \sum_i \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} + f, \quad (2.18)$$



nebo také zjednodušeně vztahem

$$T_t = \kappa \Delta T + f^*. \quad (2.19)$$

Tuto rovnici je nutné dále doplnit jednou počáteční podmínkou, která určuje teplotu v čase  $t = 0$ , ve kterém model vedení tepla začíná, danou vztahem

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad x \in \Omega. \quad (2.20)$$

V praxi je obvyklé modelovat vedení tepla v omezeném tělese. V tomto případě je nutné doplnit podmínky, které popisují situaci na jeho okraji. Uvádí se tři typy okrajových podmínek:

(i) *Dirichletova podmínka*

V nejjednodušší okrajové podmínce je na povrchu tělesa  $S$  předepsána teplota  $T_S$

$$T(x, t) = T_S(x, t) \quad x \in S, t > 0. \quad (2.21)$$

(ii) *Neumannova podmínka*

Na povrchu  $S$  je předepsána hustota tepelného toku  $\dot{q}(n)$ , přičemž pro izotropní materiál podmínku předepisujeme pomocí hustoty výkonu zdrojů tepla  $g$  ve tvaru

$$\frac{\partial T}{\partial n}(x, t) = \frac{g(x, t)}{k} \quad x \in S, t > 0. \quad (2.22)$$

V případě anizotropního materiálu je situace složitější a dostáváme Neumannovu podmínku ve tvaru

$$\sum_{i,j} k_{ij}(x, t) \frac{\partial T}{\partial x_j}(x, t) n_i = g(x, t) \quad x \in S, t > 0. \quad (2.23)$$

(iii) *Robinova (Newtonova) podmínka*

Tato podmínka popisuje situaci, kdy tepelný tok závisí na rozdílu teploty tělesa  $T$  a okolního prostředí  $T_s$ , vztahem

$$\sum_{i,j} k_{ij}(x, t) \frac{\partial T}{\partial x_j}(x, t) n_i = -k_0 [T(x, t) - T_S(x, t)] \quad x \in S, t > 0. \quad (2.24)$$

Formulace základní počáteční okrajové úlohy potom vypadá následovně. Hledáme funkci  $T(x, t)$  na  $\Omega \times I$  splňující rovnici

$$\rho c T_t = k \Delta T + f \quad \text{pro } (x, t) \in \Omega \times I, \quad (2.25)$$

počáteční podmínku

$$T(x, 0) = T_0(x) \quad \text{pro } x \in \Omega \quad (2.26)$$

a jednu z výše uvedených okrajových podmínek (2.21), (2.23) nebo (2.24). Případně lze také okraj tělesa rozdělit na několik částí s různými podmínkami a získáme úlohu smíšenou.

## 2.2 Přenos tepla prouděním

Při přenosu tepla konvekcí je nejčastěji tepelný tok přenášen mezi povrchem nějakého tělesa a okolní tekutinou. Tento mechanismus je kombinací difuze a dominantní akvekce, což je objemový, makroskopický pohyb tekutiny. Podle charakteru proudění můžeme konvekci rozdělit na nucenou a přirozenou.

Pro popsání hustoty tepelného toku při přenosu tepla mezi povrchem tělesa a tekutinou, který využíváme také v případě tepelného výměníku, je definován vztah

$$\dot{q} = \alpha(T_w - T_\infty) \quad [\text{J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2) = \text{W}/\text{m}^2], \quad (2.27)$$

který je označován jako Newtonův ochlazovací zákon. Člen  $\alpha$  značí lokální součinitel přestupu tepla, který udává množství tepla sdíleného za vteřinu plochou o jednotkové velikosti při teplotním rozdílu 1 K mezi tekutinou a povrchem stěny a mění se spolu s režimem proudění podél obtékaného povrchu. Nejčastěji se určuje experimentálně. Dále  $T_w$  značí teplotu tělesa a  $T_\infty$  teplotu tekutiny.

Celkový tepelný tok, přenášený z celého povrchu o ploše  $S$ , určíme integrací hustoty tepelného toku přes povrch  $S$ :

$$\dot{Q} = \int_S \dot{q} \, dS = (T_w - T_\infty) \int_S \alpha \, dS = \bar{\alpha} S (T_w - T_\infty), \quad (2.28)$$

kde střední součinitel přestupu tepla  $\bar{\alpha}$  je dán vztahem

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{S} \int_S \alpha \, dS. \quad (2.29)$$

### 3 Modelování fázové přeměny

Tato kapitola pojednává o metodách modelování přenosu tepla s fázovou přeměnou. Při změně fáze materiálu se spotřebovává, případně uvolňuje tzv. latentní teplo, které musíme do rovnic přenosu tepla zahrnout. Látka v pevné fázi je charakterizována tím, že její atomy se navzájem udržují na svých pozicích pomocí vnitřních sil, kterými se pohybují pouze kolem rovnovážných stavů. Proto pro překonání těchto vnitřních sil je zapotřebí přijmout při teplotě tání látky  $T_m$  určité množství energie, které nazýváme latentní teplo. Pokud látka tuto energii získá, dochází k přeskokům mezi rovnovážnými pozicemi, což je jev charakteristický právě pro kapalnou fázi. Při tuhnutí látky musíme naopak latentní teplo odebrat.

Jak již bylo zmíněno v úvodu, materiály s fázovou přeměnou (PCM) jsou materiály, využívající latentní teplo pro akumulaci energie. Zpočátku tyto pevné a kapalné PCM fungují jako běžné skladovací materiály, jejich teplota stoupá, když absorbují teplo. Na rozdíl od běžných skladovacích materiálů využívajících pro akumulaci citelné teplo, PCM absorbuje a uvolňuje teplo při téměř konstantní teplotě. Nejzásadnější rozdíl mezi akumulací citelného a latentního tepla je, že PCM skladují 5–14krát více tepla na jednotku objemu než materiály ukládající citelné teplo, kterým je například voda [24].

PCM materiály můžeme rozdělit do tří skupin: organické, anorganické a eutektika. Vlastnosti jednotlivých skupin, které vycházejí z velmi odlišného tepelného i chemického chování, ovlivňují návrh systémů skladování tepelné energie s využitím latentního tepla pomocí PCM. Obecně mají anorganické sloučeniny téměř dvojnásobnou objemovou kapacitu akumulace latentního tepla než organické sloučeniny.

Organické materiály krystalizují s malým nebo žádným podchlazením a jsou obvykle nekorozivní. Lze je dále dělit na parafíny a neparafíny. Parafín je především známý jako bezpečný, nekorozivní, spolehlivý, předvídatelný, netoxický, tepelně stabilní při cyklování a schopný krystalizace se zanedbatelným podchlazovacím účinkem. Proto v mnoha komerčních aplikacích je parafín vždy vybrán jako hlavní úložiště tepla PCM.

Anorganické materiály můžeme dále klasifikovat jako hydráty solí a kovy. Při použití solných hydrátů však dochází především z důvodu špatné nukleace k projevům podchlazení.

Eutektikum je kombinace anorganických a/nebo organických sloučenin. Lze je rozdělit na anorganicko-organické, anorganicko-anorganické a organicko-organické kombinace. Mohou tvořit jediný společný krystal. Eutektické směsi jsou známé jako dobrý kandidát na systém akumulace energie díky výhodě velké tepelné kapacity, zanedbatelného podchlazovacího účinku, dobré chemické a tepelné stability a také širokého rozsahu teplot fázových změn.

Další část této kapitoly pojednává o dvou nejrozšířenějších způsobech modelování fázové přeměny. Tyto dva způsoby spolu úzce souvisí a také lze poměrně snadno převést formulaci problému přenosu tepla s fázovou přeměnou z jedné na druhou. Jednotlivé formulace problému přenosu tepla s fázovou přeměnou se liší způsobem, jakým latentní teplo do problému přenosu tepla lze zařadit.

### 3.1 Metoda entalpie

Jednou z nejčastějších metod modelování přenosu tepla s fázovou přeměnou, při které vycházíme v následné simulaci hysterezního chování materiálu, je založena na použití entalpie. Tato termodynamická veličina umožňuje začlenění latentního tepla fázové změny. Dostáváme tedy formu vnitřní energie, která je rozšířena o latentní teplo. Entalpii lze definovat jako funkci teploty pomocí vztahu

$$h(T) = \int_{T_{\text{ref}}}^T \left( \rho c - \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial \theta} \right) d\theta, \quad (3.1)$$

kde  $T_{\text{ref}}$  značí referenční teplotu,  $c$  tepelnou kapacitu materiálu,  $L_f$  latentní teplo a  $f_s$  pevnou část materiálu. Rovnici můžeme dále zjednodušit například položením  $T_{\text{ref}} = 0$ .

Dále se využije diferenciální rovnice (2.17) odvozené v předchozí kapitole a spolu s vnitřním zdrojem  $f$  se rovnice přepíše do tvaru

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + f, \quad (3.2)$$

kde člen vnitřního zdroje tepla lze vyjádřit jako

$$f = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (3.3)$$

tedy představuje právě latentní teplo fázové přeměny. Kombinací všech tří výše uvedených vztahů (3.1), (3.2) a (5.5) se získá entalpická formulace problému přenosu tepla s fázovou přeměnou

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right), \quad (3.4)$$

což lze v homogenním materiálu zjednodušit na tvar

$$\frac{\partial h}{\partial t} = k \nabla^2 T. \quad (3.5)$$

Snadno si lze povšimnout, že v entalpické formulaci problému (3.5) se objevují 2 neznámé veličiny, kterými jsou teplota a entalpie. Úlohu je tedy nutné řešit ve dvou krocích, což je hlavní nevýhodou metody entalpie.

### 3.2 Metoda efektivní tepelné kapacity

Druhou široce implementovanou metodou modelování problému přenosu tepla s fázovou přeměnou je metoda efektivní tepelné kapacity. Principem této metody je zahrnutí latentního tepla potřebného k přeměně fáze do tepelné kapacity  $c_{\text{eff}}$  materiálu s fázovou přeměnou. Tato veličina je přímo uměrná energii, která je uložena a uvolněna během fázové přeměny, ale je nepřímo úměrná rozsahu intervalu teploty tání a tuhnutí.

Jak již bylo zmíněno, metoda efektivní tepelné kapacity úzce souvisí s metodou entalpie, a to díky tomu že  $c_{\text{eff}}$  lze snadno vyjádřit také pomocí entalpie vztahem

$$c_{\text{eff}}(T) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial h}{\partial T}. \quad (3.6)$$

Po dosazení do rovnice přenosu tepla vedením dostáváme formulaci problému přenosu tepla s fázovou přeměnou pomocí efektivní tepelné kapacity jako

$$\rho c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right). \quad (3.7)$$

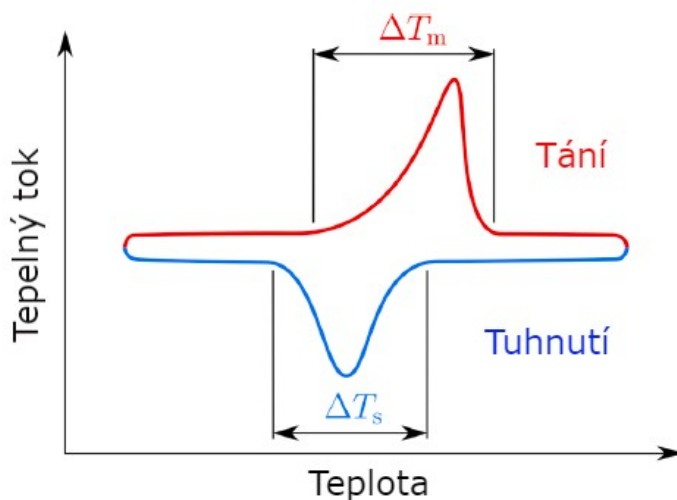
Tento vztah se opět zjednoduší v případě, že součinitel tepelné vodivosti nezávisí na poloze

$$\rho c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T. \quad (3.8)$$

Ve formulaci problému přenosu tepla s fázovou přeměnou pomocí efektivní tepelné kapacity je oproti entalpické formulaci pouze jedna neznámá, kterou je teplota  $T$ . Ve srovnání s metodou entalpie je však tento přístup méně přímočarý a také méně stabilní.

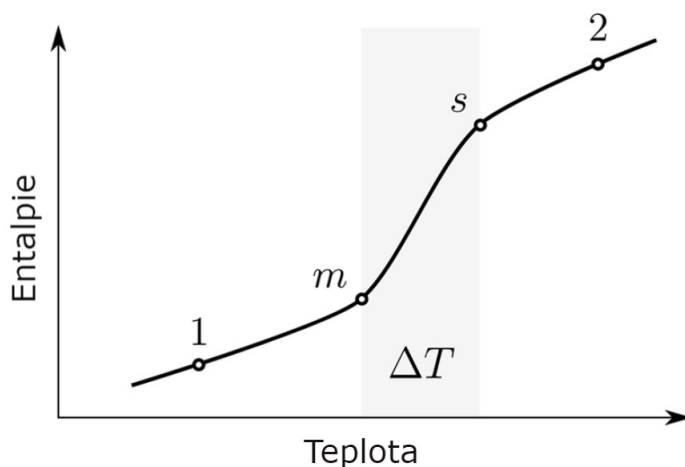
## 4 Teplotní hystereze

Jak bylo uvedeno v úvodní části, cílem této diplomové práce je simulovat jistý jev, který nám významně komplikuje chování materiálů s fázovou přeměnou.



Obrázek 4.1: Proces tání a tuhnutí PCM (převzato a upraveno z [16])

Na obrázku 4.1 je znázorněn proces tání a tuhnutí PCM, a to jako křivka vyjadřující závislost tepelného toku na teplotě materiálu. Lze si snadno povšimnout, že křivky jsou vzhledem k teplotě posunuty. Obvykle však bývá křivka tání a tuhnutí PCM zobrazena pomocí vztahu entalpie-teplota způsobem vykresleným na obrázku 4.2.

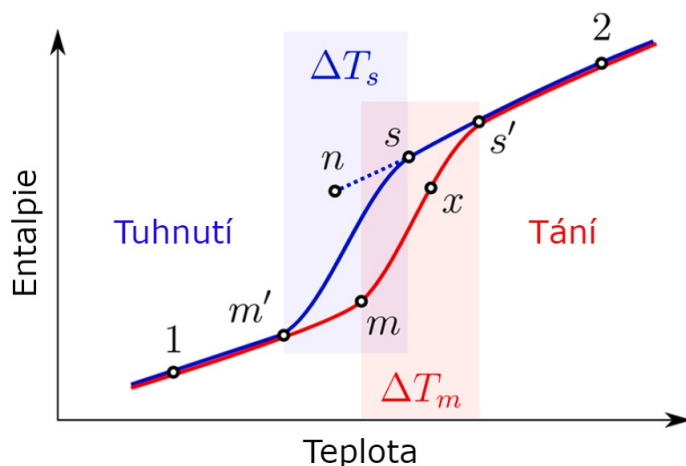


Obrázek 4.2: Symetrický proces tání a tuhnutí PCM (převzato a upraveno z [16])

Vychází se z počátečního stavu 1. Materiál se ohřívá až do bodu  $m$ , kdy při teplotě  $T_m$  začíná proces tání. Po teplotní změně  $\Delta T$ , tedy v bodě  $s$ , dochází k ukončení fázové přeměny a dále se teplo ukládá jako citelné. Zpětný proces, tedy proces tuhnutí, sleduje stejnou křivku. Takového chování materiálu, při kterém proces tuhnutí sleduje stejnou křivku jako proces tání, se označuje jako symetrické.

Hysterezní chování materiálu však v mnoha situacích nelze tak snadno opomenout a musí být do simulací zahrnuto. Tento proces tání a tuhnutí je znázorněn na obrázku 4.3.

Vychází se opět z počátečního stavu 1. Materiál se ohřívá až do bodu  $m$ , kdy dochází k počátku fázové přeměny materiálu. Po teplotní změně  $\Delta T_m$ , tedy v bodě  $s'$  dochází k ukončení fázové přeměny a dále se teplo ukládá jako citelné. Zpětný proces, proces tuhnutí roztaveného PCM, nezačíná v bodě  $s'$ , který odpovídá křivce tání, ale až později v bodě  $s$  za teploty  $T_s < T_{s'}$ . Změna kapalné fáze na pevnou je ukončena v bodě  $m'$ . Dochází tedy k teplotnímu zpoždění křivek  $h(T)$  mezi jednotlivými procesy. Dostáváme potom dvojici křivek, přičemž k obdobnému posunu křivek dochází také v případě úplného tuhnutí materiálu a následného tání ( $T_m > T_{m'}$ ). Chování materiálu popsané v tomto odstavci lze označit jako asymetrické tání a tuhnutí materiálu.



Obrázek 4.3: Asymetrický proces tání a tuhnutí PCM (převzato a upraveno z [16])

Situace se dále komplikuje, jestliže fázová přeměna neproběhne úplně, ale pouze částečně. Na obrázku 4.3 se opět vychází z bodu 1, postupuje se dále do bodu  $m$ , kdy začíná proces tání, avšak ohřev se pozastaví v bodě  $x$ , přičemž  $T_x < T_{s'}$ . Proces tání materiálu tedy ještě není dokončen. Zatímco v případě úplné fázové přeměny materiálu jsou křivky snadno identifikovatelné, pro neúplné přeměny platí tvrzení opačné. Přechod mezi křivkami není jasně definovaný. Existuje však několik technik, které tento problém řeší a je jim věnována kapitola 5.2.

V minulosti bylo vytvořeno mnoho studií, které se zabývaly různými druhy materiálů, a to z hlediska jeho hysterezního chování. Anorganické PCM (např. solné hydráty) jsou mnohem náchylnější k hystereznímu chování než organické PCM (např. parafínové vosky). Zanedbání těchto jevů v případě anorganického PCM tak mohou vést k vyšším nesrovnalostem, nebo také až k naprostému nesouladu s experimentálními daty, než v případě organických PCM. Další ukázky PCM lze nalézt v [24].

Také tvar a fyzické rozměry PCM integrovaných v systémech mohou ovlivnit úroveň hystereze fázových změn. Hystereze může být významnější v případě velkého množství PCM spíše než v případě tenké vrstvy PCM.

Hysterezní chování materiálu úzce nesouvisí jenom s vlastnostmi materiálu, ale také s aplikovanými rychlostmi přenosu tepla. Hystereze fázových změn je tedy funkcí rychlosti přenosu tepla. Čím vyšší rychlost bude aplikována, tím výraznější projevy teplotní hystereze fázových změn se objeví.

Teplotní hysterezi materiálů s fázovou přeměnou ovlivňuje tedy celá řada faktorů, z nichž některé lze poměrně snadno odstranit. Jako příklad slouží výše uvedená tep-

lotní hystereze způsobená rychlostmi ohřevu materiálu. Teplotní hystereze vycházející z vlastností materiálu již tak snadno eliminovat nelze.



## 5 Způsoby modelování teplotní hystereze

Fázová změna z pevné látky na kapalinu i opačná přeměna z kapaliny na látku pevnou jsou často považovány za izotermické procesy. V tomto případě nám pro určení fázového přechodu stačí znát teplotu, měrné teplo v pevném i kapalném stavu látky a latentní teplo. V praxi však toto platí pouze pro čisté prvky. PCM se taví případně tuhne spíše v teplotním intervalu, a proto je nutná znalost vztahu entalpie a teploty  $h(T)$  nebo závislosti efektivní tepelné kapacity na teplotě  $c_{\text{eff}}(T)$ . K získání těchto vztahů používáme experimentální techniky, kterými jsou například diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC) a metoda T-historie. Více informací o těchto metodách lze nalézt například v [16].

Výzkumné práce zabývající se počítačovým modelováním hystereze fázových změn můžeme rozdělit na 2 skupiny, které se výrazně liší z hlediska obtížnosti modelování.

První z nich pojednává o vyšetřování a modelování teplotní hystereze PCM, které procházejí úplnou fázovou změnou. Teplotní gradient zůstává do ukončení přeměny trvale pozitivní nebo negativní. Při počítačovém modelování používáme dvě křivky  $h(T)$  (nebo  $c_{\text{eff}}(T)$ ) a dostáváme asymetrický model, který přepíná mezi křivkami  $h(T)$  v bodech mimo rozsah fázových změn, kde se křivky shodují.

Druhá skupina prací se zabývá úkolem ve srovnání s modelem úplné fázové změny mnohem náročnějším. Při simulaci teplotní hystereze během částečné fázové změny, kdy je přerušovaný proces tání následován procesem tuhnutí, je nutná přesná specifikace křivky  $h(T)$  pro chladicí část procesu. Přerušené tuhnutí a následné tavení materiálu činí problém z důvodu podchlazení, tedy jevu, který brání zahájení tuhnutí při jmenovité teplotě a pro inicializaci tvorby pevné fáze potřebuje určité podchlazení, ještě náročnější. Tímto jevem se však tato práce nezabývá.

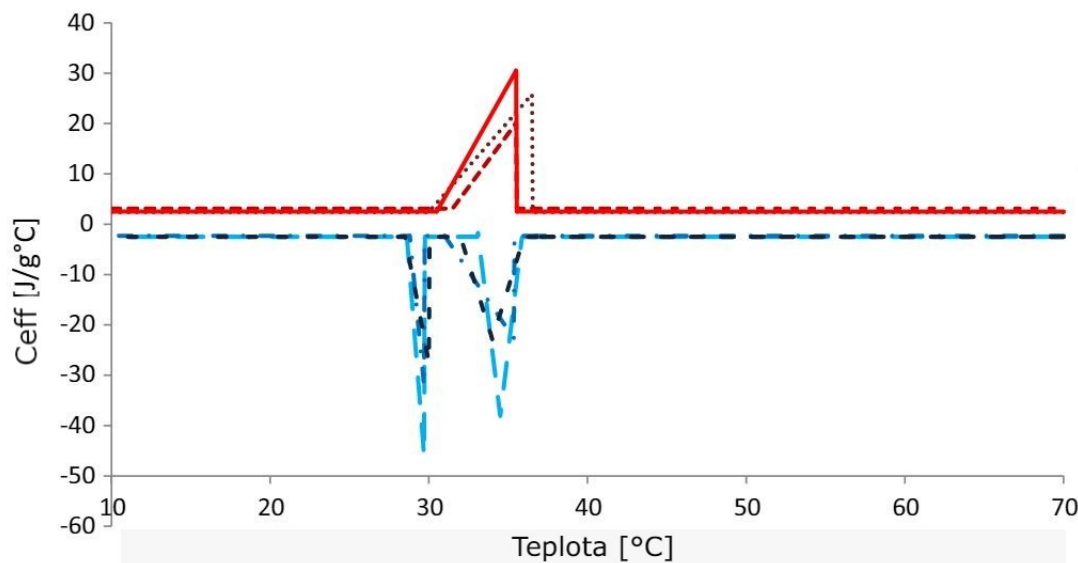
### 5.1 Modelování teplotní hystereze při úplné fázové přeměně

Výzkumných prací, které se zabývaly úplnými cykly fázových změn, můžeme nalézt rovnou několik [16]. Ve většině případů bylo také provedeno experimentální ověření vytvořených modelů. Pro přehlednost jsou níže rozděleny do podskupin, podle toho jaké metody modelování fázové přeměny je využito.

#### 5.1.1 Přístupy využívající metodu efektivní tepelné kapacity

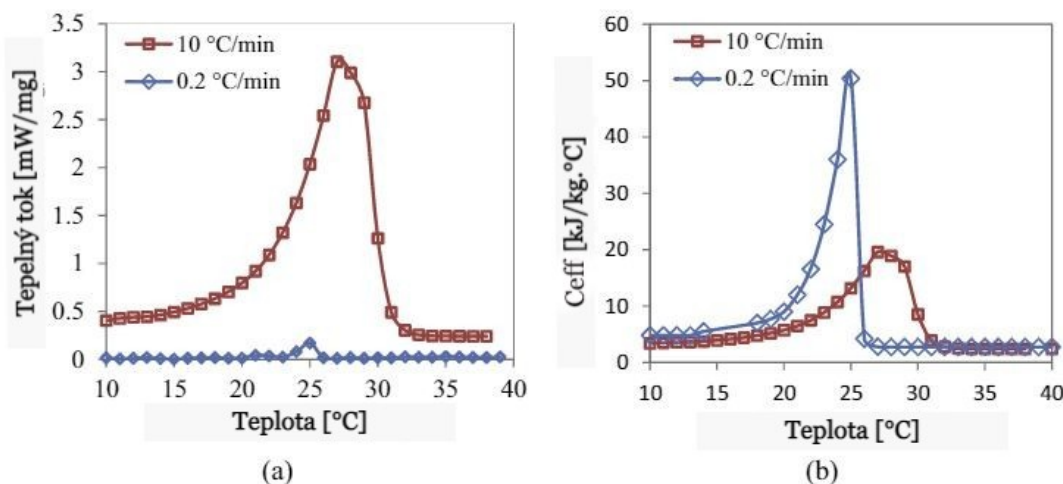
První studií uvedenou v této práci využívající metodu efektivní tepelné kapacity prezentovali Stathopoulos a kol. [25]. Hodnoty vlastností PCM získané od výrobce byly podle teploty a stavu PCM zpracovány pomocí interpolační funkce v prostředí Matlab. Dále byl numericky reprodukován celý cyklus tavení i tuhnutí, aby bylo možné porovnat výsledky s experimentem. Byla prokázána nedostatečnost přímého použití nezpracovaných dat z analýzy DSC a také použití jediné křivky  $c_{\text{eff}}(T)$  integrované do modelu. Z tohoto důvodu byl představen inovativní kalibrační přístup pro přizpůsobení křivek na základě výsledků DSC a také experimentálního pozorování, který je znázorněn na obrázku 5.1. Model tedy obsahoval dvě křivky  $c_{\text{eff}}(T)$ , jednu pro tavení a druhou pro tuhnutí.

## 5.1. MODELOVÁNÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE PŘI ÚPLNÉ FÁZOVÉ PŘEMĚNĚ



Obrázek 5.1: Kalibrované  $c_{\text{eff}}(T)$  křivky vytvořené pomocí modelu autorů Stathopoulos a kol., převzato a upraveno z [25]

Vliv  $c_{\text{eff}}(T)$  křivek PCM na výsledky modelu byl zkoumán autory Iten a kol. [12]. Závislosti  $c_{\text{eff}}(T)$  byly získány z DSC, přičemž byly použity dvě rychlosti ohřevu. Při nižší rychlosti byl pozorován užší rozsah fázové přeměny, ale také docházelo k vyšším špičkovým hodnotám  $c_{\text{eff}}(T)$ . Dopad rychlosti ohřevu lze vyčíst z obrázku 5.2.

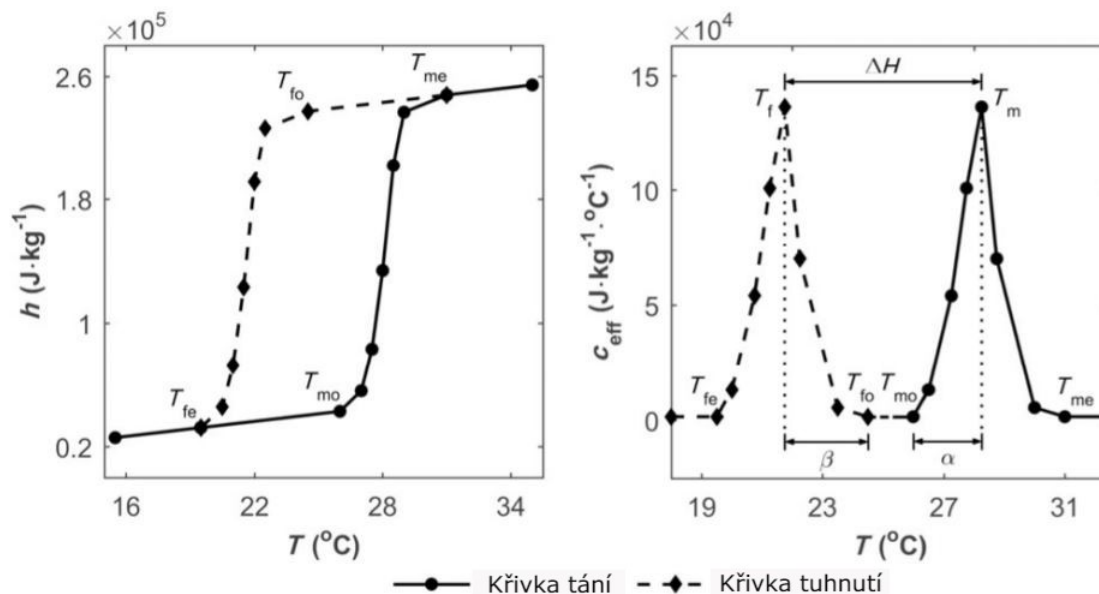


Obrázek 5.2: Dopad rychlosti ohřevu na výsledky modelu, znázorněn pomocí a) tepelného toku, b)  $c_{\text{eff}}$ , převzato a upraveno z [12]

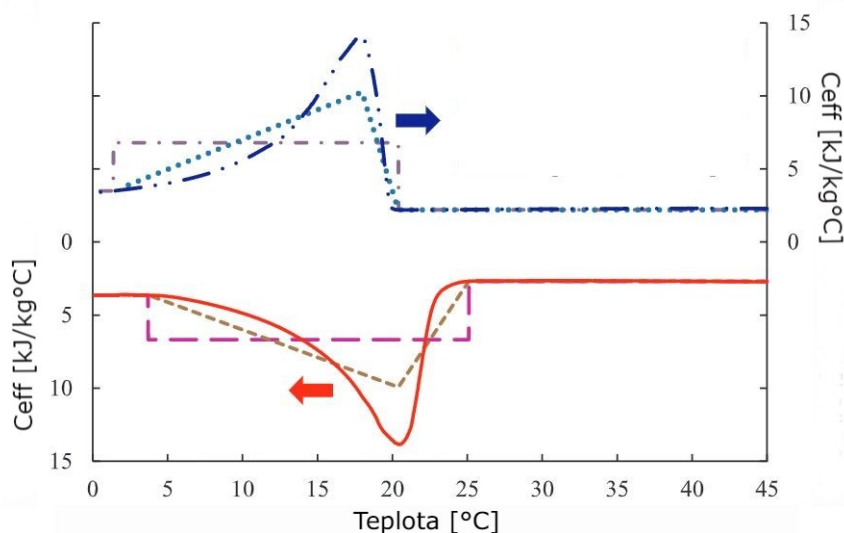
Vztah  $c_{\text{eff}}(T)$  je klíčový prvek k dosažení lepší shody mezi numerickou simulací a výsledky experimentálního testování. Potvrzení simulace experimentálními výsledky ukazuje, že rychlost ohřevu při DSC by měla být prováděna na základě experimentálních rychlostí ohřevu a chlazení. To umožňuje získat správný teplotní rozsah fázové změny PCM. Přesnost simulačního modelu obsahující PCM tedy bude určen přesností charakteristik PCM, které se mění podle různých způsobů ohřevu a chlazení, ale lze je také určit pomocí DSC, pokud využijeme podobných rychlostí. Jakýkoliv model, jehož cílem je předpovědět

skutečný teplotní profil PCM, bude muset vzít v úvahu: praktickou aplikaci, vhodnou simulační metodu a experimentální testování parametrů PCM pomocí DSC.

Další studie zabývající se výzkumem vlivu teplotní hystereze na tepelné chování a výkon systému obsahující PCM byla prezentována autory Moreles a kol. [19]. Pro modelování fázových změn byla opět použita metoda efektivní tepelné kapacity. Křivka tání byla definována pomocí parametrů PCM poskytnutých výrobcem. Křivka tuhnutí byla stanovena jako křivka tání posunutá vzhledem k teplotě (viz obrázek 5.3), přičemž byla zahrnuta posloupnost teplotních posunů v rozmezí 0-30°C. Výsledkem simulace byl pozitivní vliv teplotní hystereze na tepelný výkon systému.



Obrázek 5.3: Model úplné fázové přeměny metodou navrženou autory Morelesem a kol., převzato a upraveno z [19]



Obrázek 5.4: Navržené křivky  $c_{eff}(T)$  v simulacích autorů Ling a kol., převzato a upraveno z [18]

## 5.1. MODELOVÁNÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE PŘI ÚPLNÉ FÁZOVÉ PŘEMĚNĚ

Také Ling a kol. použili pro modelování tepla absorbovaného, případně uvolněného během fázových přechodů přístup efektivní tepelné kapacity. Experimentálně získaná efektivní tepelná kapacita byla aproximována třemi různými způsoby: pomocí konstantní hodnoty, lineárně se měnící hodnoty a hodnoty získané pomocí DSC. Znázornění těchto tří návrhů je vykresleno na obrázku 5.4. Bylo dospěno k závěru, že vztah  $c_{\text{eff}}(T)$  měl významný vliv na přesnost výsledků. V případě, že byla použita pouze jedna křivka  $c_{\text{eff}}(T)$  pro tavení i tuhnutí, výsledky se významně lišily od experimentu.

### 5.1.2 Metoda tepelného zdroje

Omezení výše uvedených dostupných metod při předpovídání teplotní hystereze vedla k vývoji nového semi-empirického způsobu modelování [17]. Model umožňuje flexibilitu měnit křivky závislosti a předpovídat teplotní hysterezi v systémech s fázovou přeměnou. Jak už bylo zmíněno, metoda využívá semi-empirického přístupu, tedy používá křivky  $h(T)$  získané z měření pomocí DSC a začlení je do energetické rovnice jako člen zdroje tepla. Při modelování touto metodou je zřejmá jistá analogie s metodou entalpie, avšak s lehce odlišnými ideami při postupu.

Výchozí model tavení/tuhnutí pro přenos tepla s dominancí vedení lze jako rovnici pro zachování energie napsat následujícím způsobem

$$\rho \frac{\partial h_s}{\partial t} - \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S_E = 0 \quad (5.1)$$

kde  $h_s$  značí entalpii citelného tepla a  $S_E$  značí zdroj.

U problému fázových přeměn závisí zdrojový člen na typu vývoje latentního tepla. Základní myšlenkou je reprezentovat celkovou entalpii  $h$  jako součet specifické citelné entalpie  $h_s$  a entalpie latentního tepla  $h_l$

$$h = \rho(h_s + h_l) \quad (5.2)$$

a jednotlivé členy (citelnou i latentní entalpii) lze vyjádřit pomocí vztahů

$$h_s = h_{sref} + \int_{T_{ref}}^T c(T) dT \quad (5.3)$$

$$h_l = \beta L, \quad (5.4)$$

kde  $\beta$  je objemový zlomek kapaliny dán vztahem

$$\beta = \begin{cases} 0, & \text{pro } T < T_s \\ \frac{T-T_s}{T_l-T_s}, & \text{pro } T_s < T < T_l \\ 1, & \text{pro } T > T_l. \end{cases}$$

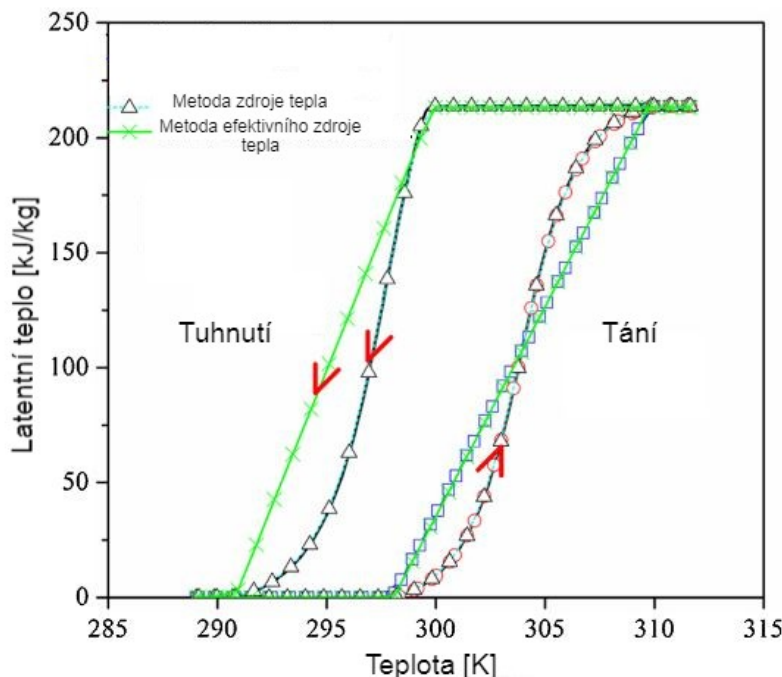
Pomocí výše uvedených vztahů potom je možné rovnici pro zachování energie přepsat jako

$$\rho \frac{\partial h_s}{\partial t} - \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \rho \frac{\partial h_l}{\partial t} = 0 \quad (5.5)$$

a porovnáním rovnic (5.1) (5.5) můžeme definovat člen zdroje tepla jako součinitel změny objemového latentního tepla

$$S_E = \rho \frac{\partial h_l}{\partial t}. \quad (5.6)$$

Tento člen nabývá hodnot kladných nebo záporných podle toho, jakou povahu má fázová přeměna (tání versus tuhnutí).



Obrázek 5.5: Model úplné fázové přeměny metodou tepelného zdroje, převzato a upraveno z [17]

Jak již bylo zmíněno, tento numerický model, který zahrnuje latentní vývoj tepla v energetické rovnici jako člen zdroje  $S_E$ , byl navržen pro řešení omezení výchozích postupů založených na metodě efektivní tepelné kapacity. Hlavní myšlenkou v navrhovaném schématu je tedy využití tepelné kapacity jako funkce teploty a její integrace podle teploty pro výpočet entalpie v každém časovém kroku. Postup je poměrně jednoduchý. Nejprve se křivka získaná experimentálně pomocí DSC, která vyjadřuje vztah mezi teplotou a tepelným tokem, převede na křivky závislosti tepelné kapacity na teplotě. Potom dostáváme zdrojový člen  $S_E$ , který lze reprezentovat v každém časovém kroku pomocí vztahu

$$S_E = -\frac{\rho}{\Delta t} \int_{T_{t-1}}^{T_t} c_p(T)_m dT \quad (5.7)$$

pro tání a pomocí vztahu

$$S_E = -\frac{\rho}{\Delta t} \int_{T_{t-1}}^{T_t} c_p(T)_f dT \quad (5.8)$$

pro tuhnutí.

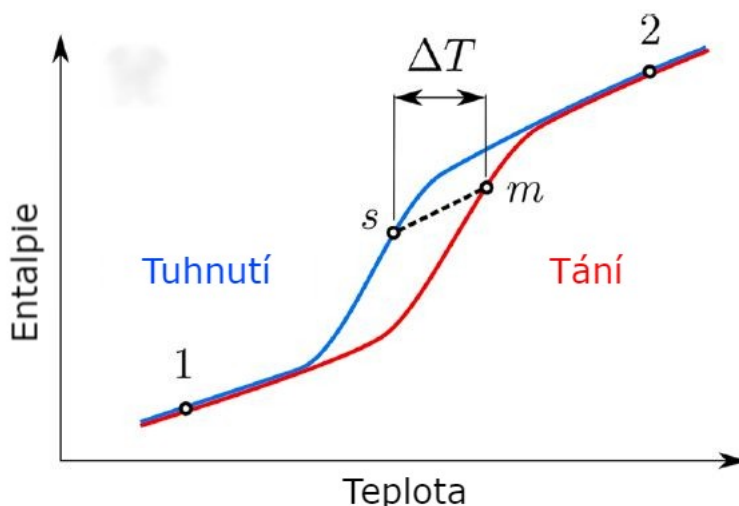
Model úplné fázové přeměny metodou tepelného zdroje a také metody efektivního tepelného zdroje je znázorněn na obrázku 5.5. Tato metoda je rychlá, snadno implementovatelná a vyžaduje poměrně krátký výpočetní čas k předpovědi výkonnosti systémů s fázovou přeměnou [17].

## 5.2 Modelování teplotní hystereze při částečné fázové přeměně

Současná literatura nabízí pouze několik metod pro simulaci částečných fázových změn. Většina prací však neposkytuje přesnou validaci navrhovaných postupů zvládnání přechodu mezi jednotlivými křivkami tání a tuhnutí. Existují pouze dvě metody, které jsou použitelné pro simulaci hystereze a které byly ověřeny na základě experimentálních údajů. Tyto metody jsou popsány v následujících dvou podkapitolách. V závěru této kapitoly je uveden stručný popis dalších metod a také provedeno jejich srovnání.

### 5.2.1 Metoda přechodu navržená Bonym a Citherletem

Tato metoda pro modelování teplotní hystereze materiálů s částečnou fázovou přeměnou využívá metodu entalpie. Jsou definovány dvě křivky  $h(T)$  s teplotním posunem  $T$ . Mimo teplotní rozsah fázové přeměny jsou křivky považovány za identické.

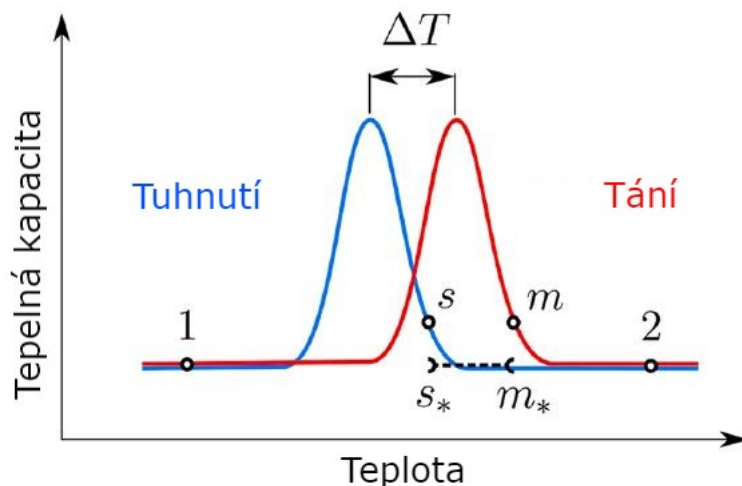


Obrázek 5.6: Model částečné fázové přeměny podle Bonyho a Citherleho, převzato a upraveno z [16]

Na obrázku 5.6 je uveden způsob modelování částečné fázové přeměny navržený autory Bonym a Citherletem [4]. Při postupu z výchozího pevného stavu PCM se materiál začne ohřívat, tedy z bodu 1 se postupuje po křivce tání až do bodu  $m$ , ve kterém je proces pozastaven. Následuje proces reverzní, tedy chlazení materiálu, při kterém se přejde do bodu  $s$ , který leží na křivce tuhnutí. Touto přechodovou cestou je úsečka, která má stejný sklon jako křivky  $h(T)$  mimo rozsah fázové přeměny. Po ukončení přechodu z křivky tání na křivku tuhnutí proces chlazení materiálu sleduje křivku tuhnutí až do bodu 1, kde se PCM vrátí do původního stavu. Obdobně lze postupovat v případě, že výchozím stavem materiálu bude kapalná fáze. Probíhá proces tuhnutí po křivce z bodu 2 až do bodu  $s$ , kde je tento proces pozastaven, a je inicializován proces opačný, kdy nejdříve dochází k přechodu mezi křivkami  $h(T)$  do bodu  $m$ , a to opět po křivce rovnoběžné s křivkou  $h(T)$  mimo rozsah fázové přeměny.

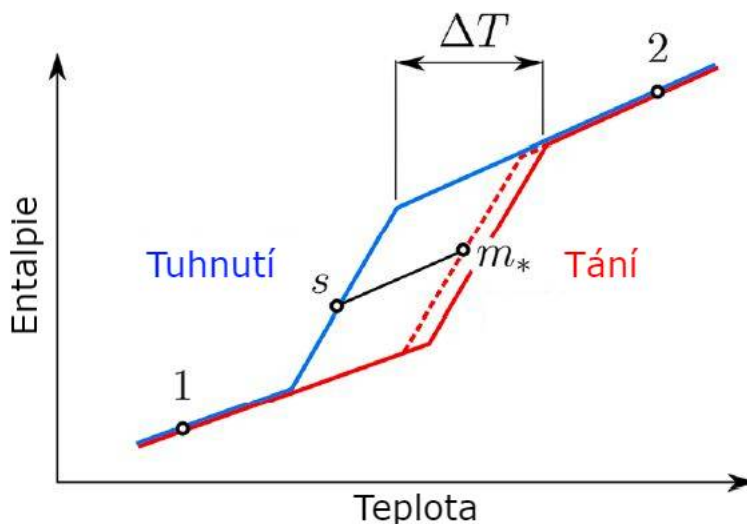
Přestože tato metoda byla formulována z hlediska entalpie, pro hlubší názornost a uplatnění této metody ji lze analyzovat také z hlediska (efektivní) tepelné kapacity (viz obrázek 5.7).

Zaměříme-li se na přechod od tavení k tuhnutí v případě neúplného cyklu, je cesta, po které postupujeme z hlediska entalpie kontinuální. V případě závislosti  $c(T)$  se však, jak je znázorněno na obrázku, objevuje jistá diskontinuita, která má však poměrně jednoduché zdůvodnění. Na grafu znázorňujícím závislost entalpie a teploty si lze povšimnout, že v bodech  $m$  a  $s$  dochází k náhlé změně směrnice křivky  $\partial h/\partial T$ . V předchozí části je uvedeno, že efektivní tepelnou kapacitu lze vyjádřit pomocí entalpie vztahem (3.6). Výsledkem je, že tepelná kapacita v bodě  $m$  okamžitě izotermicky klesá a v bodě  $s$  izotermicky stoupá. V případě přechodu z bodu  $m$  do bodu  $s$  se tepelná kapacita nachází mimo rozsah fázové změny.



Obrázek 5.7: Znázornění modelu podle Bonyho a Citherleho pomocí tepelné kapacity, převzato a upraveno z [16]

Tato metoda byla později dále testována a ověřena, přičemž autoři Decroix a kol. [6] v tomto případě považovali  $h(T)$  křivky za po částech lineární, tedy každá křivka sestávala ze tří lineárních částí pro pevnou fázi, fázový přechod a kapalnou fázi.



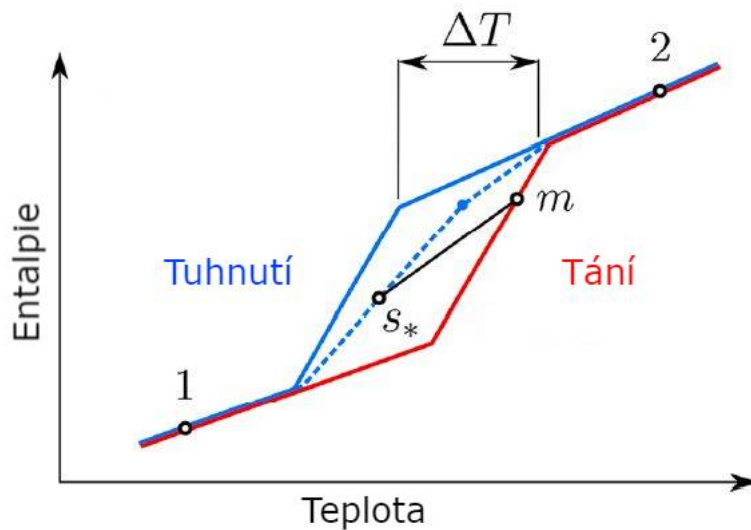
Obrázek 5.8: Úprava a optimalizace modelu pro proces tuhnutí následovaný táním podle Delcroix a kol., převzato a upraveno z [16]



## 5.2. MODELOVÁNÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE PŘI ČÁSTEČNÉ FÁZOVÉ PŘEMĚNĚ

Autoři dospěli k tomu, že pro případ přechodu z tuhnutí na tavení byly výsledky simulace získané použitím této metody v dobré shodě s experimentálními daty (viz obrázek 5.8).

V případě přechodu z tavení na tuhnutí však výsledky neodpovídaly experimentu, a proto byl použit optimalizační postup, který minimalizoval nesoulad mezi simulací a experimentem. V případě přechodu tuhnutí k tavení je tedy křivka  $h(T)$  velmi blízká metodě navržené Bonym a Citherletem. Pro přechod z tavení na tuhnutí však bylo dosaženo nejlepší shody, jestliže křivka  $h(T)$  ležela někde mezi křivkami pro úplné tuhnutí a tavení. Navíc také optimální sklon fázového přechodu v případě přechodu z tavení na tuhnutí nebyl totožný se sklonem odpovídajícím křivkám mimo teplotní rozsah fázové změny. Úpravy modelu pro proces tání následovaný tuhnutím je znázorněn na obrázku 5.9.



Obrázek 5.9: Úprava a optimalizace modelu pro proces tání následovaný tuhnutím podle Delcroix a kol., převzato a upraveno z [16]

### 5.2.2 Metoda statické hystereze

Významně odlišnou metodou modelování teplotní hystereze fázových změn PCM je metoda statické hystereze [2]. Touto změnou oproti předchozím metodám je modelování hystereze implicitně z hlediska rovnic, tedy nedochází k explicitnímu přepínání mezi křivkami pro tání a tuhnutí jak tomu bylo doposud.

Uvažujeme dvoufázový model, který předpokládá, že PCM může být přítomno ve dvou odlišných fázích a chování materiálu bylo formulováno z hlediska obsahu kapalně části materiálu, kterou značíme symbolem  $\xi \in [0, 1]$ , vztahem

$$\xi = \frac{m_l}{m_l + m_s}, \quad (5.9)$$

kde  $m_l$  resp.  $m_s$  značí hmotnost kapalně resp. pevné fáze. Pojem teplotní hystereze tedy v tomto případě značí, že pro jednu hodnotu  $T$  můžeme nalézt různé hodnoty fázového zlomku  $\xi$ .



Označení této metody jako statické potom naznačuje, že tato kapalná frakce je nezávislá na rychlosti přenosu tepla, ale je dána jako funkce teploty a znaménka teplotního gradientu, které vyjadřuje směr procesu, tedy jestli je teplota snižována nebo zvyšována

$$\xi = f(T, \text{sgn}(dT/dt)). \quad (5.10)$$

Model uvažuje o hysterezi vzniklé z kladných (ohřev) a záporných (chlazení) teplotních rychlostí, kde časová derivace  $\xi$  je označena vztahem

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = G(\xi, T, \text{sgn}(dT/dt)) \frac{dT}{dt}. \quad (5.11)$$

Využitím výše uvedeného lze sestavit následující algoritmus. V další části je splněn předpoklad, že v jednotlivých časových intervalech je teplotní gradient nerostoucí nebo neklesající. Vztahy pro fázový zlomek potom lze zavést pro oba případy následovně:

$$\xi(t) = 1 - \frac{1 - \xi(t_i)}{1 - \xi_h(T(t_i))} \cdot (1 - \xi_h(T(t))) \quad \text{jestliže } \text{sgn} \frac{dT}{dt} \geq 0 \text{ na } [t_i, t_{i+1}] \quad (5.12)$$

$$\xi(t) = \frac{\xi(t_i)}{\xi_c(T(t_i))} \cdot \xi_c(T(t)) \quad \text{jestliže } \text{sgn} \frac{dT}{dt} \leq 0 \text{ na } [t_i, t_{i+1}] \quad (5.13)$$

kde  $\xi_c$  a  $\xi_h$  označují přechodové funkce pro ohřev a chlazení, které nazýváme obálky (více viz [2]). Přechodová funkce  $\xi_h$  popisuje úplný přechod z  $\xi = 0$  do  $\xi = 1$ . Tedy pokud proces tání začíná z plně pevného stavu ( $\xi = 0$ ), potom  $\xi(t) = \xi_h(T(t))$  tak dlouho, dokud je zachován nezáporný teplotní gradient. Naopak,  $\xi_c$  označuje úplný přechod z  $\xi = 1$  do  $\xi = 0$  chlazením. To znamená, že pokud proces tuhnutí začíná z plně roztaveného stavu ( $\xi = 1$ ), potom, jestliže je zachován nekladný teplotní gradient, platí  $\xi(t) = \xi_c(T(t))$ . Jestliže se přechodové funkce rovnají, potom materiál nevykazuje žádné hysteretní chování a model se redukuje na tzv. přímé mapování, při kterém je podíl kapaliny pouze funkcí teploty (viz [2]).

Tento systém je nezávislý na rychlosti, a to v tom smyslu, že rychlejší nebo pomalejší změny teploty nezmění graf, ale pouze rychlost přechodu, protože přechodová funkce je závislá pouze na teplotě a nikoli na rychlosti změny teploty  $dT/dt$ .

Dále platí, že jestliže je teplota udržována konstantní na určitém časovém intervalu, potom také fázový zlomek  $\xi$  zůstává konstantní.

Z výše uvedeného vztahu a jeho vlastností vyplývá, že rovnice (5.12) a (5.13) lze přeformulovat z hlediska teploty namísto času. Potom je fázový zlomek  $\xi$  dán vztahem

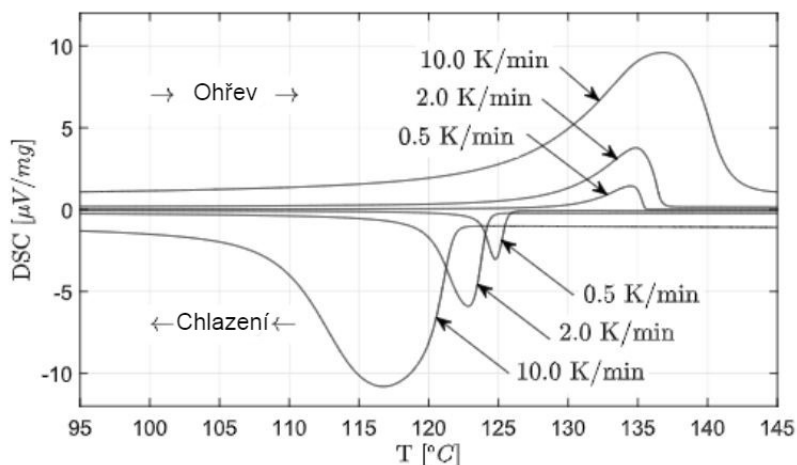
$$\xi(T) = 1 - \frac{1 - \xi(T_0)}{1 - \xi_h(T_0)} \cdot (1 - \xi_h(T)) \quad \text{jestliže } \text{sgn} \frac{dT}{dt} \geq 0 \quad (5.14)$$

$$\xi(T) = \frac{\xi(T_0)}{\xi_c(T_0)} \cdot \xi_c(T) \quad \text{jestliže } \text{sgn} \frac{dT}{dt} \leq 0 \quad (5.15)$$

kde  $\xi(T_0) = \xi_0$  značí počáteční fázový zlomek při teplotě  $T_0$ .

Tento model je zřejmě zcela definován přechodovými funkcemi  $\xi_c(T)$  a  $\xi_h(T)$ . Funkce statického přechodu jsou hladké a monotónní. Pro jejich použití společně s rovnicí energetické bilance je nutné vyhodnotit nejen  $\xi(T)$  ale také  $d\xi(T)/dt$ .

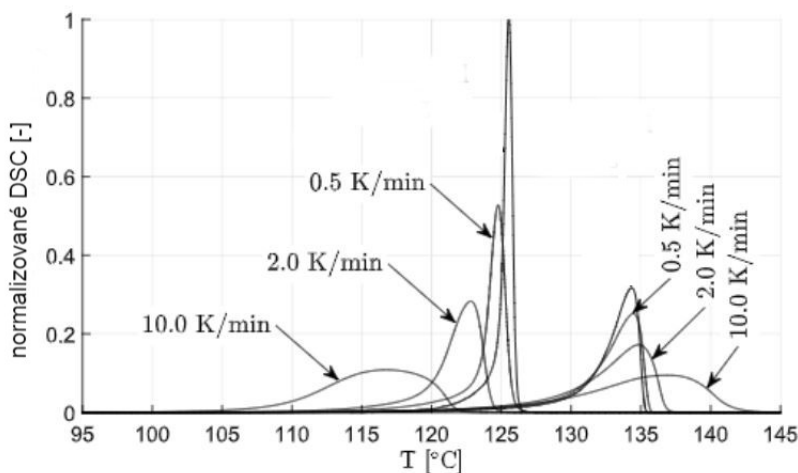
## 5.2. MODELOVÁNÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE PŘI ČÁSTEČNÉ FÁZOVÉ PŘEMĚNĚ



Obrázek 5.10: Data DSC pro konstrukci statických přechodových křivek, převzato a upraveno z [2]

Přechodové funkce lze odvodit přímo z měření pomocí DSC. Pozorovaná data DSC se používají na konstrukci statických informací pro modely nezávislé na rychlosti, konkrétně v tomto případě statických přechodových křivek pro ohřívání a chlazení PCM.

Zaznamenané signály (obrázek 5.10) jsou upraveny a normalizovány (obrázek 5.11). Také je identifikován datový model sloužící pro extrapolaci signálů na hypotetický signál při nulové teplotě.



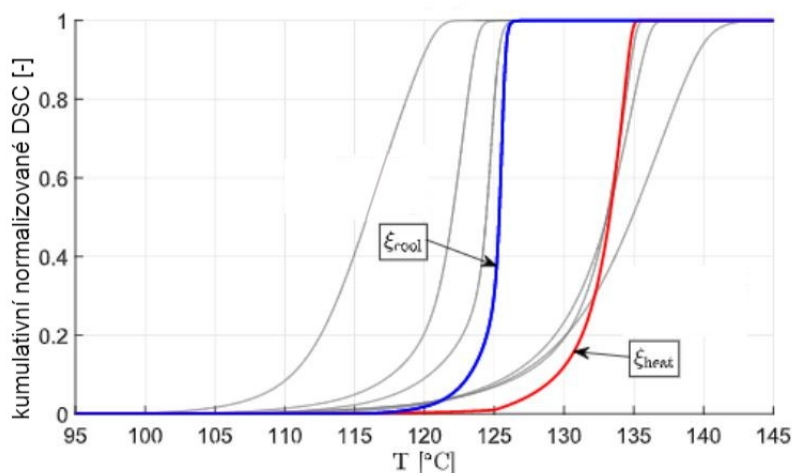
Obrázek 5.11: Normalizované DSC data, převzato a upraveno z [2]

Nakonec tyto kumulativní signály vedou k přechodovým křivkám, které jsou znázorněny na obrázku 5.12.

Tento model přechodu lze přímo zahrnout do rovnic energetické bilance odvozených z metody efektivní tepelné kapacity. Implementace tohoto modelu je přímočará, avšak má jedno velké omezení, kterým je zanedbání účinků rychlosti změny teploty. Proto jestliže je chování fázového přechodu silně závislé na aplikovaných rychlostech změny teploty, je vhodné uvažovat o parametrizaci modelu pro různé rychlosti.

Kromě statických modelů existují také modely dynamické, tedy kapalná frakce není závislá jen na teplotě, ale také na teplotním gradientu jako  $\xi = f(T, dT/dt)$ . Tyto modely vykazují také velmi přesvědčivé výsledky, ale vyžadují vysoké doby výpočtu. Více o těchto dynamických metodách lze nalézt například v [2].

Z praktického hlediska se jeví jako nejzajímavější model statické hystereze, a to zejména díky tomu, že tento model je přímo parametrizován pomocí dat získaných z DSC. Narozdíl od metody přímého mapování nezanedbává hysteretní chování materiálu, a zároveň náročnost na výpočet není tak velká jako v případě modelů dynamické hystereze.

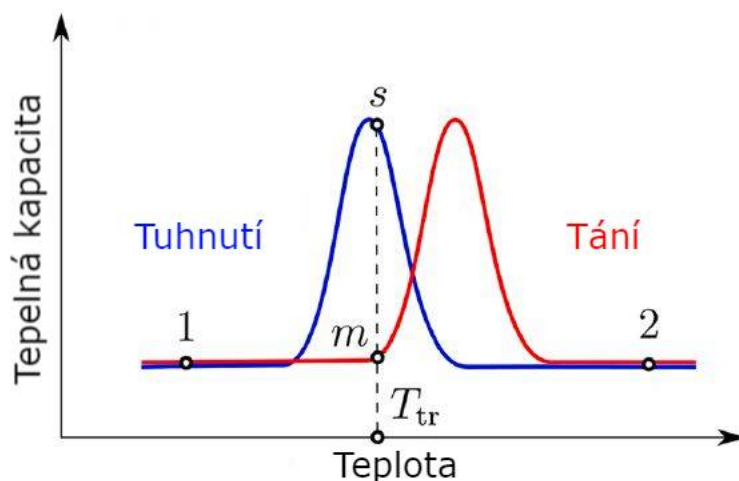


Obrázek 5.12: Identifikace přechodových křivek, převzato a upraveno z [2]

### 5.2.3 Další způsoby modelování částečné teplotní hystereze

V dalších odstavcích je uvedeno několik dalších publikovaných přístupů k simulaci přechodu mezi křivkami tání a tuhnutí v případě neúplného fázového cyklu. Většina těchto metod však je velmi nepřesná a vede k významným odchylkám od experimentu.

Ne příliš vhodný způsob, jakým lze provést přechod mezi křivkami tání a tuhnutí, byl navrhnout autory Dentelem a Stephanem [7] a je znázorněn na obrázku 5.13.



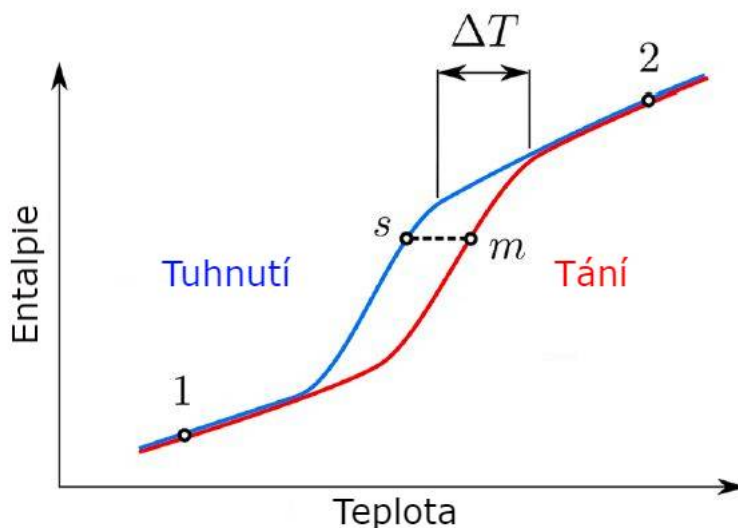
Obrázek 5.13: Modelování částečné fázové přeměny podle Dentela a Stephana, převzato a upraveno z [16]

Přechod mezi křivkami tání a tuhnutí je proveden izotermicky. V případě přepínání mimo teplotní rozsah fázové přeměny nedochází k žádné (nebo zanedbatelně malé) změně tepelné kapacity. V případě přepínání mezi křivkami v teplotních rozmezích změn fáze do-

## 5.2. MODELOVÁNÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE PŘI ČÁSTEČNÉ FÁZOVÉ PŘEMĚNĚ

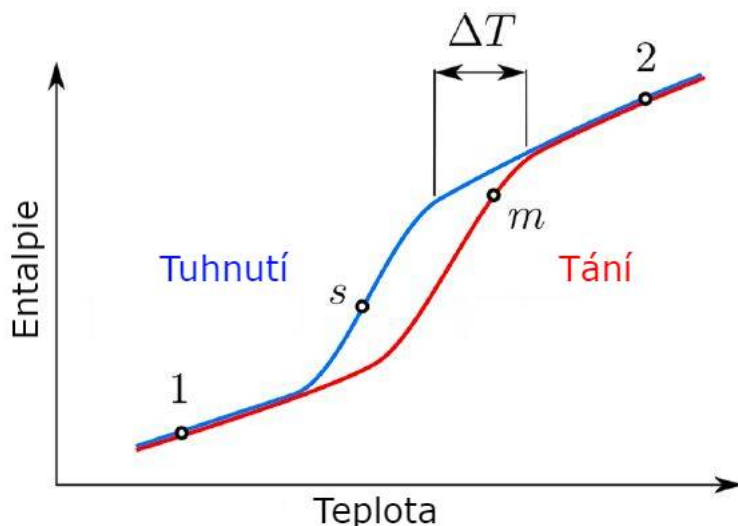
chází k výrazné změně tepelné kapacity. Tento přístup však porušuje zákon zachování energie, což vede k nadhodnocení či podhodnocení latentního tepla absorbovaného nebo uvolněného během fázové přeměny.

Další metodu, tentokrát vymodelovanou z hlediska entalpie, navrhli autoři Rose a kol. [23]. Byly přijaty dvě křivky  $h(T)$  a v případě částečné fázové přeměny byl navrhnut izoentalpický přechod mezi křivkami tání a tuhnutí. Jestliže je proces tání pozastaven v bodě  $m$ , během přechodu do bodu  $s$  platí, že  $\partial h/\partial T = 0$  (viz obrázek 5.14). Izoentalpický přechod však vede obecně k odlišným hodnotám tepelné kapacity v bodech  $s$  a  $m$ .



Obrázek 5.14: Modelování částečné fázové přeměny podle Rose a kol., převzato a upraveno z [16]

Chandrasekharan a kol. [10] navrhli techniku, ve které ve skutečnosti k přechodu vůbec nedochází (viz obrázek 5.15).

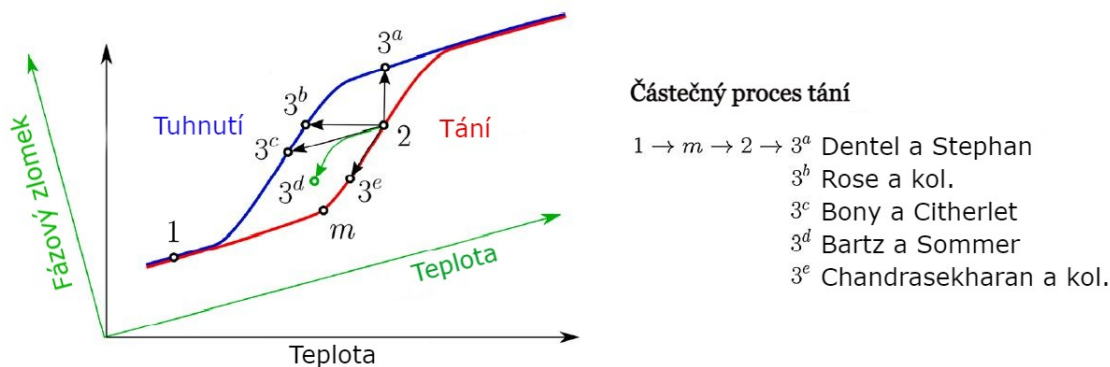


Obrázek 5.15: Modelování částečné fázové přeměny podle Chandrasekharana a kol., převzato a upraveno z [16]

## 5 ZPŮSOBY MODELOVÁNÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE

Pokud dochází k zastavení fázové přeměny v bodě  $m$ , potom opačný proces tuhnutí sleduje identickou křivku tání. Podobně pokud se neúplný proces tuhnutí zastaví v bodě  $s$  a následuje proces tavení, který však probíhá po křivce tuhnutí. Zřejmě, mezi body  $s$  a  $m$  není v tomto případě žádný vztah. K přepínání mezi křivkami tedy dochází pouze v případě, že je fázová přeměna zcela dokončena. K této metodě nebyla doložena žádná validace.

Shrnutí všech metod modelování teplotní hysterese materiálu při částečné fázové přeměně je znázorněno v následujícím grafu 8.1.



Obrázek 5.16: Srovnání způsobů modelování hysterese během částečné fázové přeměny, převzato a upraveno z [16]

# 6 Počítačový model pro řešení teplotní hystereze

Tato část diplomové práce se zabývá chováním materiálu s fázovou přeměnou s označením Rubitherm RT 27.

Studovaný materiál s fázovou přeměnou, ze kterého vycházíme v návrhu modelu, je organický parafín. Tento materiál má hned několik pozitivních vlastností, které usnadňují následnou simulaci, jako je například jeho stabilita, homogennost a minimální projevy podchlazení [8].

Tabulka 6.1: Vlastnosti materiálu Rubitherm RT 27, převzato a upraveno z [8]

Teplotní rozsah fázové změny (tání) [°C]	24,5-28,5
Teplotní rozsah fázové změny (tuhnutí) [°C]	23,9-26,5
$\rho_s$ [kg/m <sup>3</sup> ]	880
$\rho_l$ [kg/m <sup>3</sup> ]	760
$c_s$ [J/(g°C)]	3,25
$c_l$ [J/(g°C)]	2,23
$L_m$ [J/g]	156
$L_s$ [J/g]	162

Některé z vlastností tohoto materiálu byly získány novou metodou měření pomocí diferenciální skenovací kalorimetrie, která je navržena takovým způsobem, že eliminuje vliv rychlosti ohřevu na koncové teploty fázové přeměny materiálu.

Tato data následně převedeme na závislost entalpie na teplotě a pro částečné přeměny materiálu na základě dostupných informací navrhujeme metodu přechodu mezi křivkami tání a tuhnutí.

Volba entalpického přístupu je mimo jiné výhodná z důvodu numerické stability při řešení úloh přenosu tepla, avšak velkou nevýhodou je přítomnost dvou neznámých veličin, entalpie i teploty. Úlohu je tedy nutné řešit ve dvou krocích.

## 6.1 Experimentální data

Zjištění počáteční a koncové teploty přeměny materiálu je jeden z nejdůležitějších parametrů PCM. Rozsah teplot, při kterých dochází k přeměně materiálu, lze obvykle získat pomocí diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC). Tato metoda je však silně závislá na rychlosti ohřevu a se zvyšující se rychlostí ohřevu také dochází k silnějšímu projevu podchlazení. Proto byla navržena nová metoda DSC s dynamickou metodou měření zmírňující tyto nevýhody [15]. Metoda spočívá v posloupnosti cyklů částečného tavení a následného tuhnutí s postupně se zvyšující maximální teplotou dosaženou v cyklech.

Kvůli tepelnému odporu vzorku dochází při dynamické DSC metody měření k nadhodnocení teploty během ohřevu. K zamezení tomuto nadhodnocení je nutné vliv tepelného odporu materiálu eliminovat. Jeden ze způsobů, jakým toto odstranění realizovat, je následující. Nejprve je vzorek udržován po dobu 1 minuty na počáteční teplotě, při které je materiál v pevném stavu. Poté je vzorek ohřán na maximální teplotu ohřevu, na které je

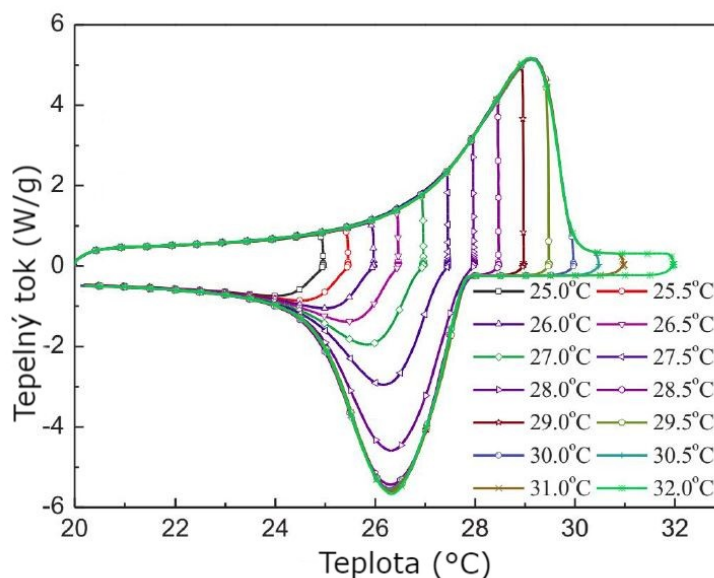
## 6 POČÍTAČOVÝ MODEL PRO ŘEŠENÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE

vzorek udržován pro dosažení tepelné rovnováhy několik minut. Nakonec je vzorek ochlazen zpět na počáteční teplotu. Takto postupujeme pro posloupnost maximálních teplot ohřevu a dostáváme výčet hodnot latentního tepla absorbovaného a uvolněného pro jednotlivé maximální teploty. Hodnoty absorbovaného i uvolněného tepla pro posloupnost maximální teploty ohřevu jsou uvedeny v tabulce 6.2.

Tabulka 6.2: Absorbované a uvolněné teplo PCM pro různé maximální teploty ohřevu s rychlostí ohřevu 5 °C/min [15]

Maximální teplota ohřevu (°C)	Absorbované teplo (J/g)	Uvolněné teplo (J/g)
25,0	7,69	6,99
25,5	11,83	10,81
26,0	17,28	16,43
26,5	24,78	25,27
27,0	37,63	40,18
27,5	57,50	70,70
28,0	90,69	109,45
28,5	130,62	132,93
29,0	128,97	132,93
29,5	131,06	132,71
30,0	131,27	132,80
30,5	130,89	132,92
31,0	130,85	133,02
32,0	130,65	132,91

V tomto případě byla uvažována posloupnost maximálních teplot ohřevu v rozmezí od 25 °C do 32 °C zvyšující se s krokem 0,5 °C.



Obrázek 6.1: DSC křivky PCM pro různé maximální teploty ohřevu, převzato a upraveno z [16]

Jak lze vyčíst z obrázku 6.1, křivky DSC s maximální teplotou nižší než nebo rovnou 28°C sledovaly odlišné křivky tuhnutí, naopak u případů s maximální teplotou rovnou nebo vyšší než 28,5°C, byly cesty tuhnutí identické, což naznačuje, že PCM prošel kom-

## 6.2. MODELOVÁNÍ ÚPLNÉ FÁZOVÉ PŘEMĚNY

pletní fázovou přeměnou. Teplota 28,5°C je proto stanovena jako konečná teplota fázové přeměny. Tuto informaci si lze také ověřit z tabulky 6.2. Počínaje maximální teplotou ohřevu 28,5°C jsou hodnoty absorbovaného i uvolněného tepla téměř neměnné.

Při provedení testu této metody pro různé rychlosti ohřevu, dostáváme již zmíněnou hlavní výhodu této metody, kterou je nezávislost koncové teploty na rychlostech ohřevu.

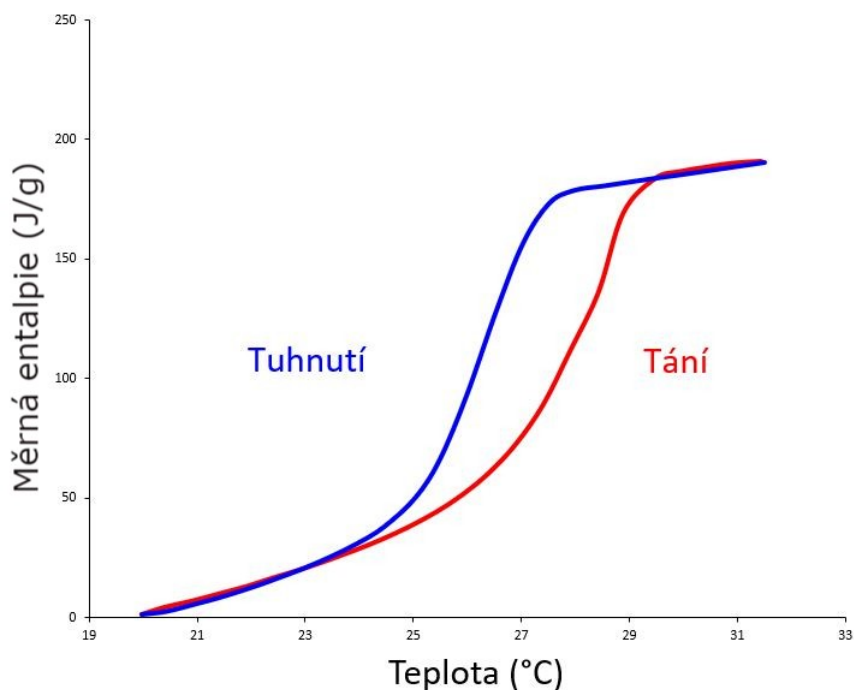
Kromě konečné teploty poskytují experimentální výsledky také informace o tepelném chování PCM během částečné fázové přeměny. Každá z křivek DSC popisuje konkrétní přechod z tání na tuhnutí. Další výhodou této metody je tedy skutečnost, že integrace těchto křivek do počítačového modelu poskytuje přesné a realistické modelování případů s úplnými i částečnými fázovými přeměnami.

## 6.2 Modelování úplné fázové přeměny

Výše uvedená data, získaná pomocí diferenciální skenovací kalorimetrie, vyjadřují závislost tepelného toku, který je vztažen na 1 gram materiálu, na jeho teplotě.

V této části práce nejdříve pro názornost převedeme vstupní data, tedy závislost tepelného toku na teplotě, na obvyklý způsob jakým zobrazujeme proces tání a tuhnutí PCM, kterým je závislost entalpie materiálu na teplotě opět vztaženou na jeden gram materiálu.

Nejdříve pro názornost identifikujeme křivky  $h(T)$  pro úplnou fázovou přeměnu. Pomocí integrace vstupních dat a následném dělení rychlostí ohřevu získáme hledanou závislost měrné entalpie na teplotě.



Obrázek 6.2: Transformace DSC křivek pro úplnou fázovou přeměnu na závislost entalpie na teplotě



## 6 POČÍTAČOVÝ MODEL PRO ŘEŠENÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZE

V dalším kroku křivky pro úplné tání a následné tuhnutí vymodelujeme pomocí po částech lineární funkce, a to následovně. Pro stanovení hodnot entalpie v klíčových bodech využijeme následujících vztahů [28]:

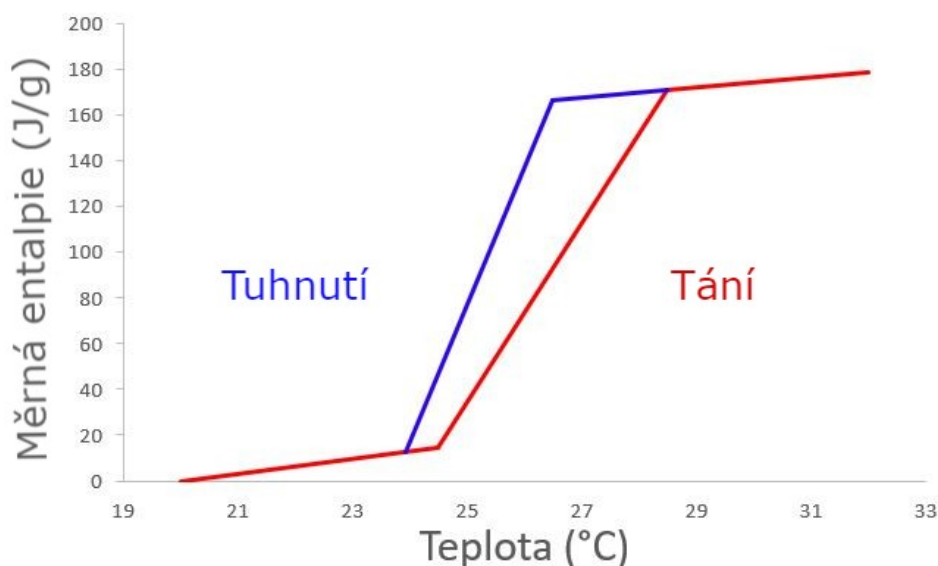
$$h_m(T) = \begin{cases} c_s T & T \leq T_s \\ h(T_s) + L(T - T_s)/(T_l - T_s) & T_s < T < T_l \\ h(T_l) + c_l(T - T_l) & T \geq T_l, \end{cases}$$

kde  $T_s$ ,  $T_l$  jsou teploty při kterých začíná a končí fázová přeměna a  $h(T_s)$ ,  $h(T_l)$  jsou jejich odpovídající entalpie. Z vlastností materiálu víme, že teplota, při níž proces tání materiálu začíná, je 24,5 °C, a díky dynamické metodě DSC je také známo, že úplná přeměna materiálu končí při teplotě 28,5 °C. V tomto případě však počátek simulace začíná při teplotě 20°C. Uvedený vztah tedy pomocí dostupných informací o materiálu transformujeme na funkci modelující proces úplného tání. Po dosazení hodnot z tabulky vlastností materiálu 6.1 dostáváme po částech lineární funkci vyjadřující závislost měrné entalpie na teplotě během procesu tání  $h_{mel}(T)$

$$h_{mel}(T) = \begin{cases} 3,25(T - 20) & T \leq 24,5 \\ 14,625 + 156(T - 24,5)/4 & 24,5 < T < 28,5 \\ 170,625 + 2,23(T - 28,5) & T \geq 28,5. \end{cases}$$

Chování materiálu však není symetrické, a proto musíme identifikovat také křivku tuhnutí. Analogickým postupem, jako v případě modelování úplného procesu tání, dostáváme po částech lineární funkci znázorňující proces tuhnutí materiálu

$$h_{sol}(T) = \begin{cases} 3,25(T - 20) & T \leq 23,9 \\ 12,773 + 162(T - 23,9)/2,571 & 23,9 < T < 26,5 \\ 166,165 + 2,23(T - 26,5) & T \geq 26,5. \end{cases}$$



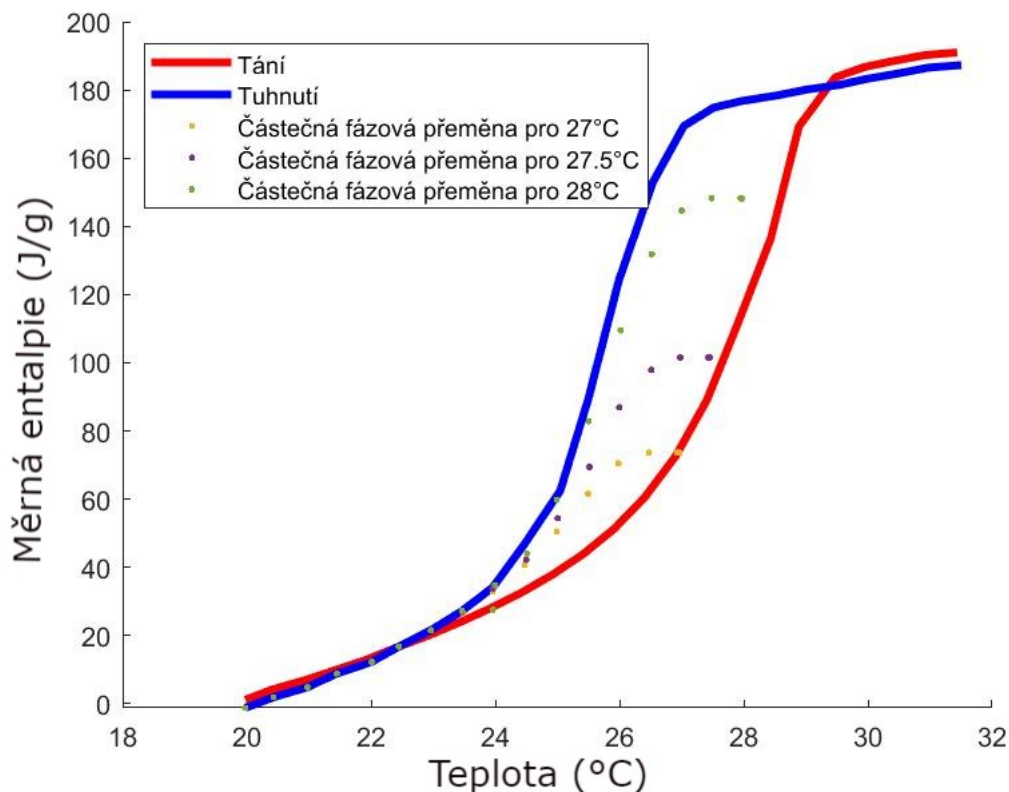
Obrázek 6.3: Model úplné fázové přeměny

### 6.3. MODELOVÁNÍ ČÁSTEČNÉ FÁZOVÉ PŘEMĚNY

Na obrázku 6.3 vidíme znázornění křivky tání i tuhnutí, které tvoří model úplné fázové přeměny. Snadno si povšimneme, že mimo oblast fázové přeměny mají křivky odlišnou směrnici. Toto je způsobeno různými hodnotami měrné tepelné kapacity v pevné a kapalné fázi materiálu. Během fázové přeměny materiálu dochází k výrazné skokové změně směrnice přímk, která je způsobena právě uvolňováním nebo absorbováním latentního tepla během procesu tání a tuhnutí. Tyto křivky nejsou rovnoběžné z důvodu odlišného množství uvolněného a absorbovaného latentního tepla během chlazení a ohřevu materiálu.

## 6.3 Modelování částečné fázové přeměny

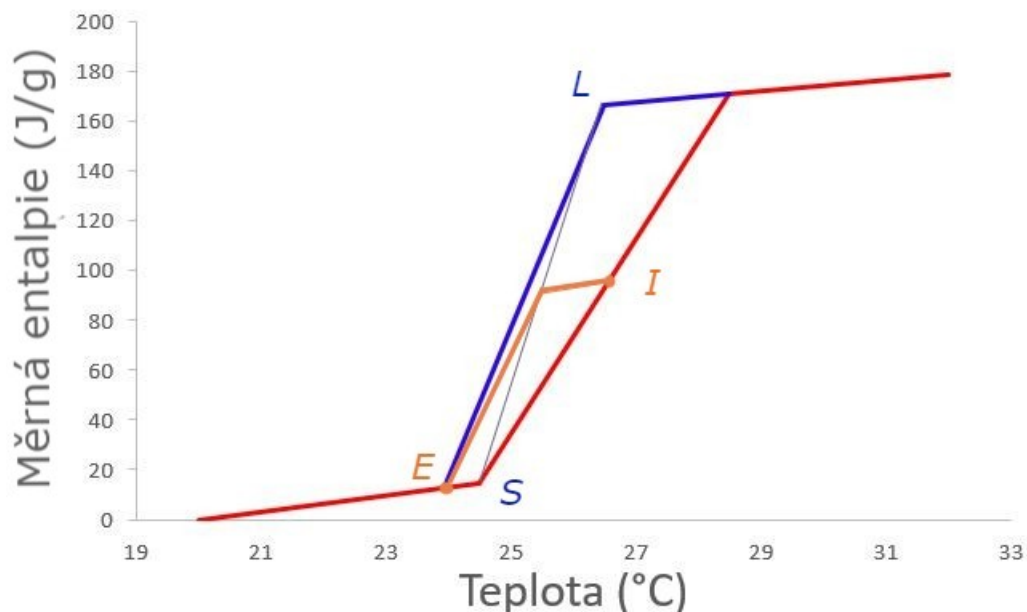
Jak již bylo zmíněno v předchozí kapitole, každá z jednotlivých křivek DSC na obrázku 6.1, které původně sloužily k nalezení koncové teploty přeměny materiálu, představuje konkrétní částečnou fázovou přeměnu během přerušného procesu tání a následného tuhnutí materiálu. Vstupní křivky DSC z obrázku 6.1 si opět převedeme na závislost měrné entalpie na teplotě.



Obrázek 6.4: Závislost entalpie na teplotě během částečné fázové přeměny

Z obrázku 6.4 znázorňujícího proces tání přerušovaný při třech vybraných teplotách, ve kterých je proces přerušen, si lze snadno povšimnout, že v případě tohoto materiálu k přechodu mezi křivkami úplného tání a tuhnutí nedochází. Dále se opět pokusíme tyto křivky, které představují částečnou fázovou přeměnu, nahradit po částech lineární funkcí (viz obrázek 6.5).

Nejprve tedy označme písmenem  $I$  bod, ve kterém je proces tání pozastaven, a  $E$  bod, ve kterém je ukončen proces tuhnutí materiálu. Mezi těmito body chceme modelovat křivku tuhnutí a to pomocí po částech lineární funkce, přesněji dvou lineárních funkcí. V případě první části po částech lineární funkce vyjdeme z metody navržené Bonym a Citherletem popsané v kapitole 5.2.1. Dostáváme tedy lineární funkci rovnoběžnou s křivkou znázorňující závislost entalpie na teplotě plně kapalně fáze. Pro sestavení druhé části funkce je nutné znát bod zlomu. Ten je určen spojnicí dvou bodů. Prvním z nich je tzv. solidus, tedy maximální hodnota při které je PCM během ohřevu ještě stále plně v pevné fázi (značíme  $S$ ). Druhým z těchto klíčových bodů je minimální hodnota, při které je teplota během chlazení ještě stále ve stavu kapalném (značíme  $L$ ).



Obrázek 6.5: Modelování částečné přeměny

Křivku tuhnutí pro částečnou fázovou přeměnu tedy už snadno odvodíme pomocí tabulky vlastností materiálu. Nejdříve vypočteme obecně bod zlomu, který je dán jako průsečík dvou přímek

$$h(T) = h(T_I) + 2,23(T - T_I)$$

$$h(T) = \frac{h(T_S) - h(T_L)}{T_S - T_L}T + H(T_L) - \frac{h(T_S) - h(T_L)}{T_S - T_L}T_L.$$

Dostáváme bod zlomu  $Z$  o souřadnicích  $[T_Z, H(T_Z)]$ .

V případě tuhnutí materiálu během částečné fázové přeměny dostáváme po částech lineární funkci tvaru

$$h_{s,p}(T) = \begin{cases} 3,25(T - 20) & T \leq T_E \\ \frac{h(T_E) - h(T_Z)}{T_E - T_Z}T + H(T_Z) - \frac{h(T_E) - h(T_Z)}{T_E - T_Z}T_Z & T_E < T < T_Z \\ H(T_I) + 2,23(T - T_I) & 26,5 \leq T < T_I \end{cases}$$

pro libovolný bod  $I$  znázorňující částečnou fázovou přeměnu.

## 6.4 Numerické řešení jednodimenzionální úlohy

V této části je uvedeno numerické řešení problému vedení tepla materiálem s fázovou přeměnou zahrnující teplotní hysterezi v případě jednodimenzionální tyče. Spojitou parciální diferenciální rovnici (3.5) nahradíme diskrétní aproximací. Numerické řešení tedy bude známo pouze v několika určitých bodech uvažované oblasti. Se zvyšováním počtu bodů se zvyšuje nejen rozlišení, ale také přesnost numerického řešení. Výsledkem diskrétní aproximace je potom sada algebraických rovnic, jejichž řešením dostáváme hodnoty diskrétních neznámých.

Oblast řešení pokryjeme tzv. sítí, což je množina bodů, ve kterých se diskrétní řešení počítá. Tyto body se nazývají uzly. Každá síť má dva klíčové parametry, kterými je prostorová vzdálenost mezi sousedními body  $\Delta x$  a vzdálenost mezi sousedními časovými kroky  $\Delta t$ . Pro jednoduchost často volíme oba parametry v celé síti uniformní.

Základní myšlenkou metody konečných diferencí je nahradit spojité derivace takzvanými diferencemi, které zahrnují pouze diskrétní hodnoty spojené s pozicemi na síti. Použití metody konečné diference na diferenciální rovnici zahrnuje nahrazení všech derivací diferencními vzorci. V entalpické formulaci problému přenosu tepla se objevuje derivace celkové entalpie vzhledem k času a derivace teploty vzhledem k prostoru. Použití různých kombinací bodů sítě v diferencních vzorcích vede k různým schémátům. Protože jednotlivé kroky v síti ( $\Delta x$  a  $\Delta t$ ) se blíží limitně k nule, numerické řešení získané s jakýmkoli schématem se přiblíží skutečnému řešení původní diferenciální rovnice. Rychlost, jakou se numerické řešení blíží skutečnému řešení, se však v závislosti na schématu liší. Kromě toho existují některá prakticky užitečná schémata, která mohou selhat při řešení špatných kombinací  $\Delta x$  a  $\Delta t$ .

### 6.4.1 Diskretizace tělesa

Prostorová diskretizace jednodimenzionálního tělesa délky  $l$  je provedena rovnoměrně tak, že na intervalu  $0 \leq x \leq l$  je rozmístěno  $N$  uzlů, včetně těch na hranici

$$x_i = (i - 1)\Delta x, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (6.1)$$

Pomocí délky tyče  $l$  a celkového počtu uzlů  $N$  lze vyjádřit vzdálenost jednotlivých uzlů vztahem

$$\Delta x = \frac{l}{N - 1}. \quad (6.2)$$

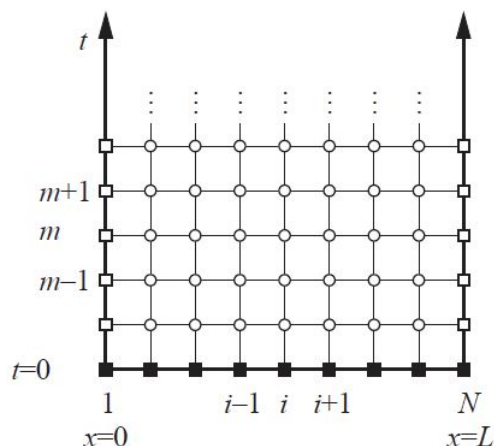
Obdobně je zavedena časová uniformní diskretizace prostoru na intervalu  $0 \leq t \leq t_{max}$

$$t_m = (m - 1)\Delta t, \quad m = 1, 2, \dots, M, \quad (6.3)$$

kde  $M$  je počet časových kroků a  $\Delta t$  je velikost časového kroku dána vztahem

$$\Delta t = \frac{t_{max}}{M - 1}. \quad (6.4)$$

Na obrázku 6.6 máme popsanou síť znázorněnou. Vycházíme z hodnot v čase  $t = 0$  znázorněné plnými čtverci, které označují známé počáteční hodnoty. Po stranách sítě jsou umístěny čtverce prázdné, které značí umístění známých hraničních hodnot. Poloha vnitřních bodů je znázorněna pomocí prázdných kruhů. V těchto bodech probíhá výpočet aproximace pomocí metody konečných diferencí.



Obrázek 6.6: Síť na polonekonečném pásu pro řešení jednorozměrné rovnice přenosu tepla [22]

### 6.4.2 Aproximace pomocí konečných diferencí

Při hledání přibližného řešení entalpické formulace problému přenosu tepla s fázovou přeměnou (3.5) použijeme schéma FTCS (Forward time, Central space), kde derivaci entalpie podle času nahradíme dopřednou diferencí a derivaci teploty podle prostoru aproximujeme centrální diferencí, čímž získáme explicitní schéma [22].

Pomocí Taylorova rozvoje  $h(t)$  v bodě  $t_i$  ve tvaru  $h(t + \Delta t)$  dostáváme vzorec dopředné difference pro  $(\partial h / \partial t)_{t_m}$

$$\left. \frac{\partial h}{\partial t} \right|_{t_m} = \frac{h_{m+1} - h_m}{\Delta t} + \mathbf{O}(\Delta t), \quad (6.5)$$

kde  $\mathbf{O}(\Delta t)$  značí chybu aproximace.

Kombinací Taylorova rozvoje  $h(t + \Delta t)$  a  $h(t - \Delta t)$  dostáváme aproximaci  $(\partial T / \partial x)_{x_i}$  pomocí centrální difference

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x_i} = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2\Delta x} + \mathbf{O}(\Delta x^2). \quad (6.6)$$

V řešené rovnici je však zapotřebí aproximace druhé derivace pomocí centrální difference. Dostáváme

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{x_i} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathbf{O}(\Delta x^2). \quad (6.7)$$

Nahrazením parciálních derivací v rovnici (3.5) výše uvedenými aproximacemi (6.5), (6.7) a zanedbáním prostorové i časové chyby dostáváme FTCS schéma

$$\frac{h_i^{m+1} - h_i^m}{\Delta t} = k \frac{T_{i+1}^m - 2T_i^m + T_{i-1}^m}{\Delta x^2}. \quad (6.8)$$

Schéma FTCS je snadné implementovat, avšak může přinést nestabilní řešení, která oscilují a rostou. Stabilní řešení se schématem FTCS lze získat, pouze pokud

$$r = \frac{k\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}. \quad (6.9)$$

#### 6.4. NUMERICKÉ ŘEŠENÍ JEDNODIMENZIONÁLNÍ ÚLOHY

Po úpravě výše uvedeného schéma (6.8) dostáváme explicitní metodu konečných diferencí reprezentující entalpickou formulaci ve tvaru

$$h_i^{m+1} = h_i^m + \frac{k\Delta t}{\Delta x^2}(T_{i+1}^m - 2T_i^m + T_{i-1}^m) \quad (6.10)$$

pro vnitřní uzel. Pro případ krajního uzlu je explicitní vztah ve tvaru

$$h_1^{m+1} = h_1^m + \frac{k\Delta t}{\Delta x^2}(T_2^m - 2T_1^m + T_2^m + 2\Delta x\dot{q}_l), \quad (6.11)$$

$$h_N^{m+1} = h_N^m + \frac{k\Delta t}{\Delta x^2}(T_{N-1}^m - 2T_N^m + T_{N-1}^m - 2\Delta x\dot{q}_r). \quad (6.12)$$

Jak bylo zmíněno, formulace rovnice vedení tepla s fázovou přeměnou vede na dvoukrokovou metodu. Pomocí výše uvedené rovnice určíme pouze hodnotu entalpie. Druhým krokem je výpočet teplotní historie jednodimenzionální úlohy. Algoritmus tedy musíme doplnit o rovnici

$$T_i^{m+1} = \begin{cases} h_i^{m+1}/(\rho_s c_s) & h_i^{m+1} \leq T_s c_s \rho_s \\ T_s + \frac{T_l - T_s}{L}(h_i^{m+1}/\rho - T_s c_s) & T_s c_s \rho_s < h_i^{m+1} < T_l c_l \rho_l + L\rho_l \\ T_l + \frac{1}{c_l}(h_i^{m+1}/\rho_l - T_l c_l) & h_i^{m+1} \geq T_l c_l \rho_l + L\rho_l, \end{cases}$$

kde hustota materiálu během fázové přeměny  $\rho$  je dána následovně

$$\rho = f_l \rho_l + (1 - f_l) \rho_s.$$

Písmenem  $f_l$  značíme podíl kapalné fáze v materiálu. Můžeme jej vyjádřit pomocí entalpie jako

$$f_l = \frac{\rho_s(h(T_s) - h_i^{m+1})}{h_i^{m+1}(\rho_l - \rho_s) - \rho_l h(T_l) + \rho_s h(T_s)}.$$

Pro správnou formulaci daného problému je potřeba dodat počáteční a okrajovou podmínku. Počáteční podmínku zadáváme v čase  $t = 0$  a je určena rovnoměrnou teplotou v celém tepelném výměníku obsahujícím PCM na počátku simulace. Pro krajní uzly  $i = 0$  a  $i = m$  zadáváme okrajové podmínky Neumannova typu, přičemž tepelné toky na površích PCM mohou být v tepelném výměníku vypočteny například pomocí ochlazovacího zákona (2.27).

## 7 Výsledky získané pomocí modelu

Bude uvažována tyč délky  $l = 0,2$  m, s hustotou během pevné fáze  $\rho_s = 880$  kg/m<sup>3</sup> a  $\rho_l = 760$  kg/m<sup>3</sup>. Z důvodu splnění zákona zachování hmoty bez uvažování teplotní roztažnosti je však vhodnější uvažovat hustotu konstantní. Z tohoto důvodu je hustota použitá v modelu určena jako aritmetický průměr hustoty pevné a kapalné fáze

$$\rho_{sl} = \frac{\rho_s + \rho_l}{2} = 820 \text{ kg/m}^3.$$

Součinitelem tepelné vodivosti materiálu RT 27 je pro obě fáze  $k = 0,2$  W m<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>. Měrná tepelná kapacita pro pevnou a kapalnou fázi se opět liší a je dána hodnotou  $c_s = 3,25$  J/(g°C) pro pevnou fázi a  $c_l = 2,23$  J/(g°C) pro kapalnou fázi materiálu.

Dále je také nutné nastavit parametry diskretizační mřížky. S počtem uzlových bodů mřížky se zvyšuje přesnost řešení. V případě explicitního schéma však může dojít se zvyšujícím se počtem uzlových bodů k projevům nestability řešení. V této simulaci je tyč rozdělena na 200 uzlů.

Pro řešení problému vedení tepla je dále nutné algoritmus doplnit o počáteční a okrajové podmínky. Počáteční podmínka, která udává teplotu tyče v čase  $t = 0$  je nastavena na 20 °C. Okrajové podmínky v případě ohřevu materiálu jsou Neumannova typu a předepisují hustotu tepelného toku na krajích tyče  $\dot{q}_l = 5000$  W/m<sup>2</sup>,  $\dot{q}_r = 5000$  W/m<sup>2</sup>. Během následného chlazení je pro nastavení okrajové podmínky využito Newtonova ochlazovacího zákona, kdy teplota okolí byla nastavena na 20 °C.

### 7.1 Ohřev materiálu

Nejdříve je proveden ohřev jednodimenzionální tyče.

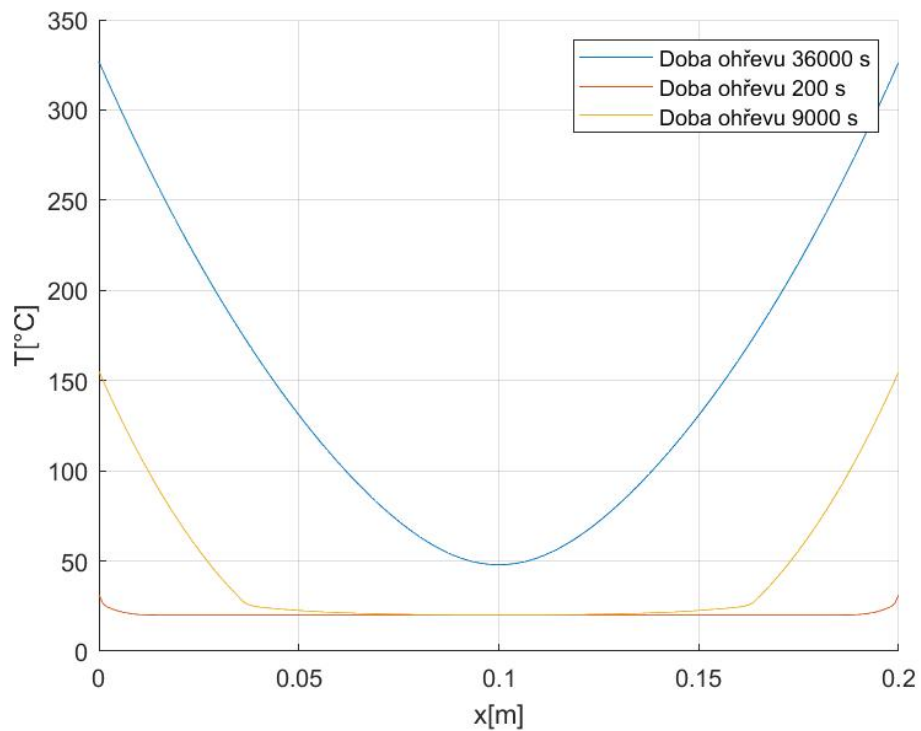
Pro lepší názornost byly aplikovány tři doby ohřevu. Jak si můžeme povšimnout z prvního grafu 7.1, který znázorňuje rozložení teploty na jednodimenzionální tyči délky 0,2 m, v případě doby ohřevu 36000 s je již veškerý materiál v kapalnou fázi. Při době ohřevu 9000 s je v kapalnou fázi bezmála polovina tyče. Jestliže k ohřevu dochází pouze 200 s je tyč na okrajích v kapalnou fázi, avšak většina její vnitřní části není stále roztavena.

Druhý graf 7.2 znázorňuje vývoj teploty různých uzlů tyče v čase  $t = 0$  s až  $t = 9000$  s. V případě levého krajního uzlu téměř okamžitě proběhla fázová přeměna. V případě dalších uzlů se se zvyšováním vzdálenosti od krajního uzlu také zpomaluje proces fázové přeměny.

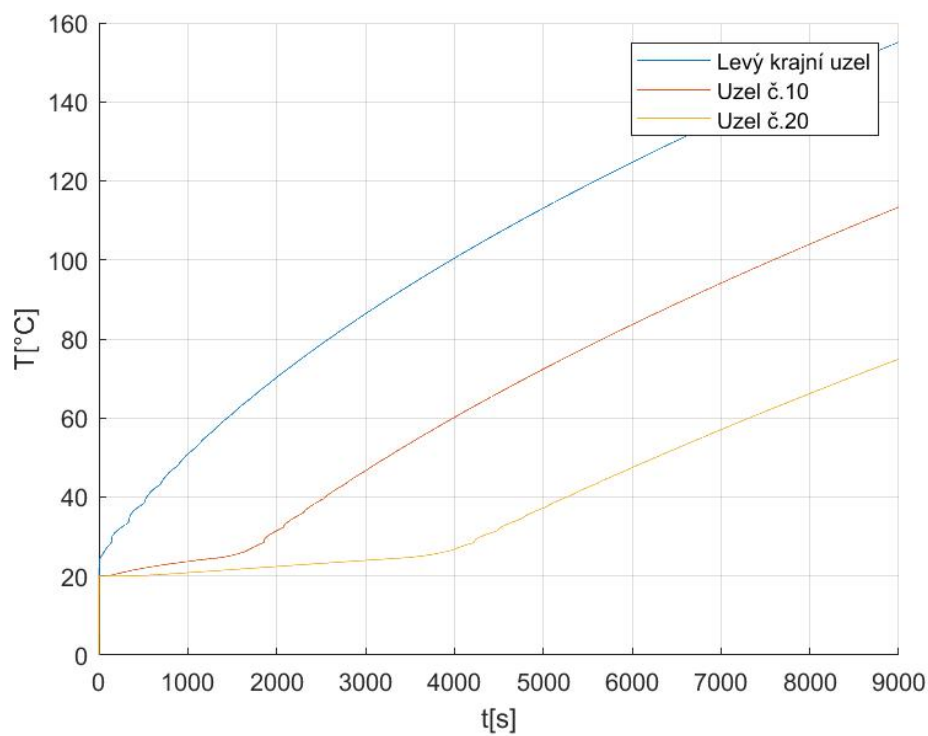
Třetí graf 7.3 znázorňuje opět vývoj teploty různých uzlů tyče, ale nyní v čase  $t = 0$  s až  $t = 200$  s. V případě levého krajního uzlu opět velmi rychle proběhla fázová přeměna. V případě dalších uzlů probíhá proces ohřevu mnohem mírněji.

Na posledním grafu 7.4 je uvedena závislost měrné entalpie na teplotě. V případě, zanedbání teplotní hystereze materiálu s fázovou přeměnou by byl vytvořený model kompletní. Křivka tuhnutí by sledovala totožnou křivku a chování materiálu by bylo uvažováno jako symetrické.

## 7.1. OHŘEV MATERIÁLU

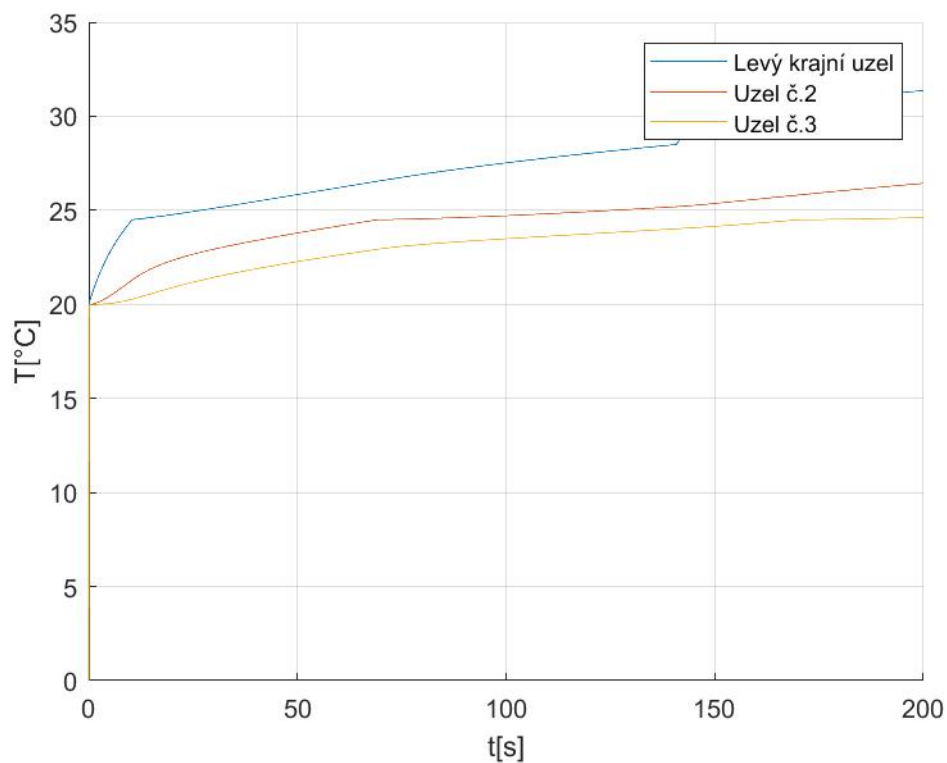


Obrázek 7.1: Teplotní pole jednodimenzionální tyče při různých dobách ohřevu

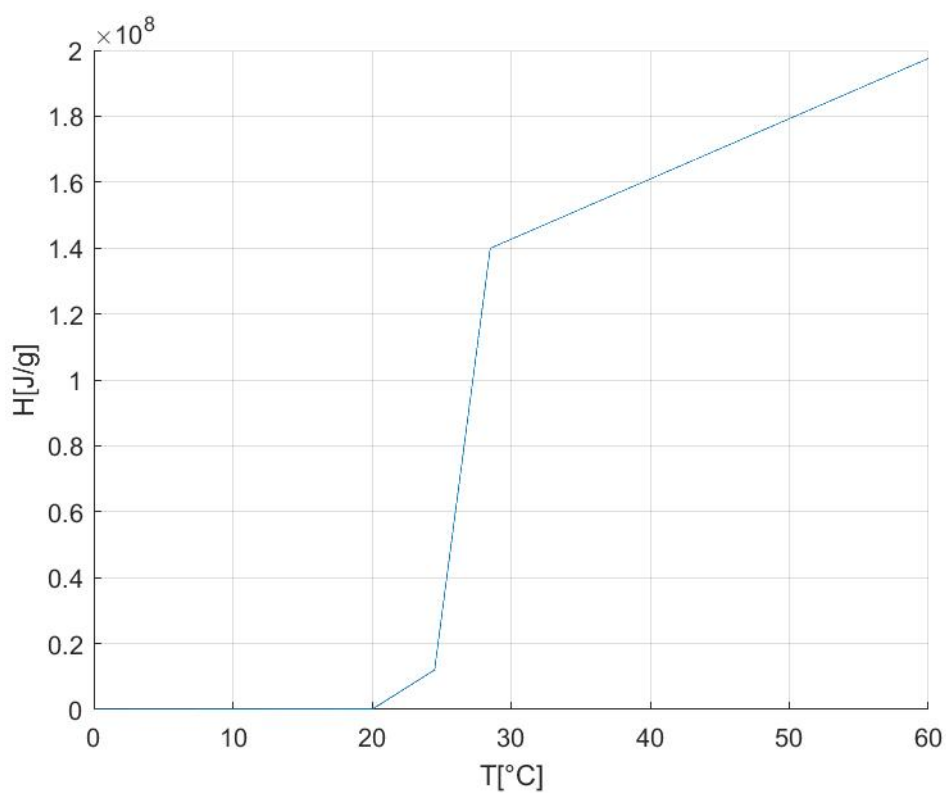


Obrázek 7.2: Závislost teploty různých uzlů tyče při době ohřevu 9000 s





Obrázek 7.3: Závislost teploty různých uzlů tyče při době ohřevu 200 s



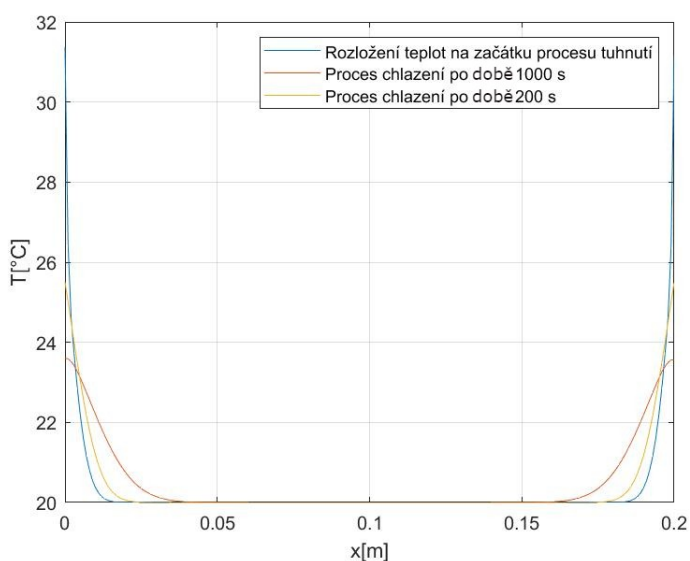
Obrázek 7.4: Znázornění fázové přeměny materiálu pomocí závislosti entalpie na teplotě

## 7.2 Chlazení materiálu

Při následném chlazení materiálu vycházíme tedy z koncového stavu rozložení teplot a entalpií jednodimenzionálního modelu získaného z procesu tání materiálu, čímž dostáváme počáteční podmínku pro úlohu tání materiálu. Chceme, aby materiál na konci procesu tuhnutí měl opět teplotu 20 °C. Zvolíme tedy okrajovou podmínku vypočtenou pomocí ochlazovacího zákona ve tvaru

$$\dot{q} = 6(T - 20).$$

Je zřejmé, že na konci procesu ohřevu materiálu po dobu 200 s jsou okrajové části tyče v kapalně fázi, zatímco vnitřní část je stále ve fázi pevné. Mezi těmito stavy je část tyče, kde probíhá pouze částečná fázová přeměna. Do modelu tedy musíme zahrnout oba způsoby modelování tuhnutí materiálu uvedené výše.

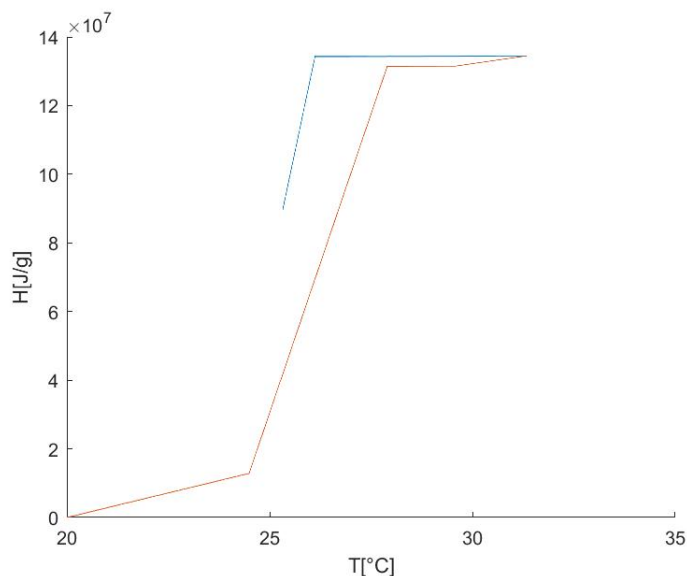


Obrázek 7.5: Teplotní pole jednodimenzionální tyče různých dob chlazení

Jestliže je zvolena doba chlazení opět 200 s, pro zadanou okrajovou podmínku se teplota materiálu ještě nevrátí na původní teplotu, ale výrazně se zmenší (viz obrázek 7.5). V případě, že dobu chlazení výrazně prodloužíme na 1000 s, hodnoty teplot v krajních bodech tyče jsou již viditelně pod 24 °C, a tyč je tedy již v pevné fázi.

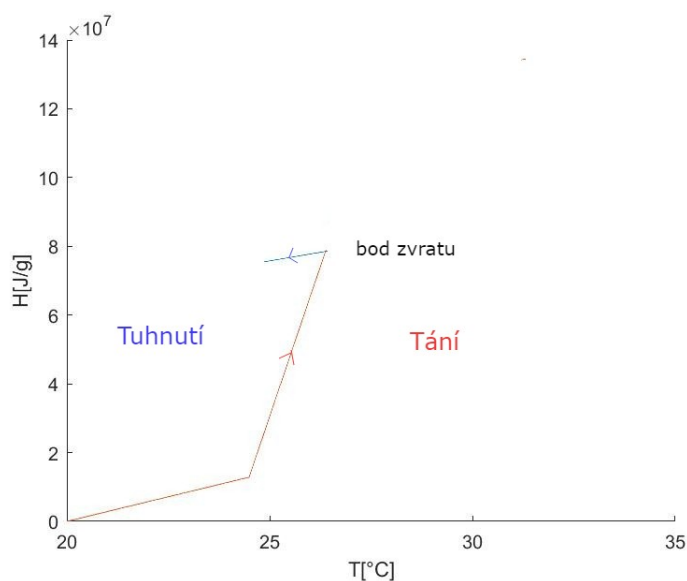
Jak již bylo zmíněno, levý kraj tyče byl na konci ohřevu plně v kapalně fázi. Z tohoto důvodu bude simulace tohoto bodu provedena pomocí úplného fázového přechodu. Tím je tedy získána výsledná simulaci materiálu RT 27 během úplné fázové přeměny (znázorněno na obrázku 7.6). Nejdříve se PCM ohříval na levém i pravém okraji za pomoci tepelného toku po dobu 200 s. Následně bylo provedeno chlazení po stejný časový úsek, avšak s jiným tepelným tokem na okraji.

Zbývá tedy vyšetřit chování navrženého modelu pro simulaci tepelného chování materiálu s fázovou přeměnou v případě částečné fázové přeměny. Z tohoto důvodu je vhodné se zaměřit na uzlový bod diskretizační mřížky číslo 2. V tomto bodě se během ohřevu materiálu nedosáhlo hraniční teploty 28,5 °C. Fázová přeměna tedy nebyla kompletně provedena a proces tuhnutí materiálu začíná z částečně roztaveného stavu (viz obrázek 7.7).



Obrázek 7.6: Model úplného tání a tuhnutí

Pro zhodnocení chování materiálu je vhodné výsledky porovnat s modelem, který teplotní hysterezi fázových změn neuvažuje, což je provedeno v následující podkapitole.



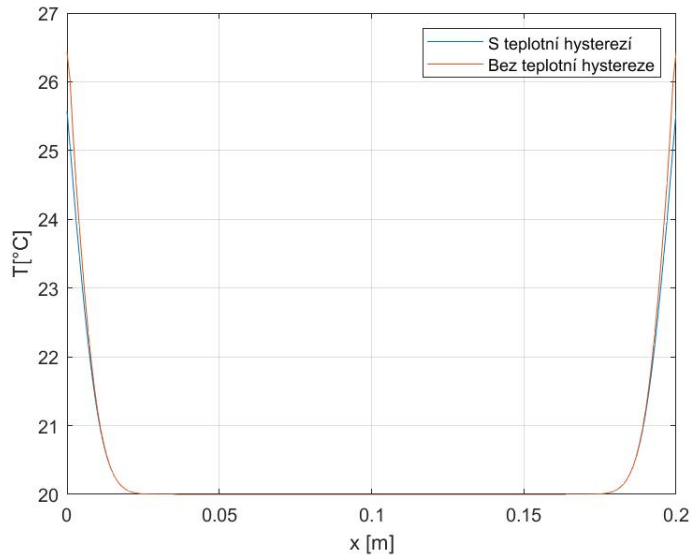
Obrázek 7.7: Model částečného tání a tuhnutí

### 7.3 Porovnání s modelem zanedbávající teplotní hysterezi

Pro vyslovení hodnocení výše znázorněné simulace je nutné výsledky porovnat s jiným vhodným modelem. Tento druhý model se získá zanedbáním teplotní hystereze fázových přeměn. Nejdříve se zaměříme na případ, kdy materiál nejdříve po dobu 200 s ohříváme a následně po stejnou dobu chladíme, avšak s odlišnými okrajovými podmínkami.

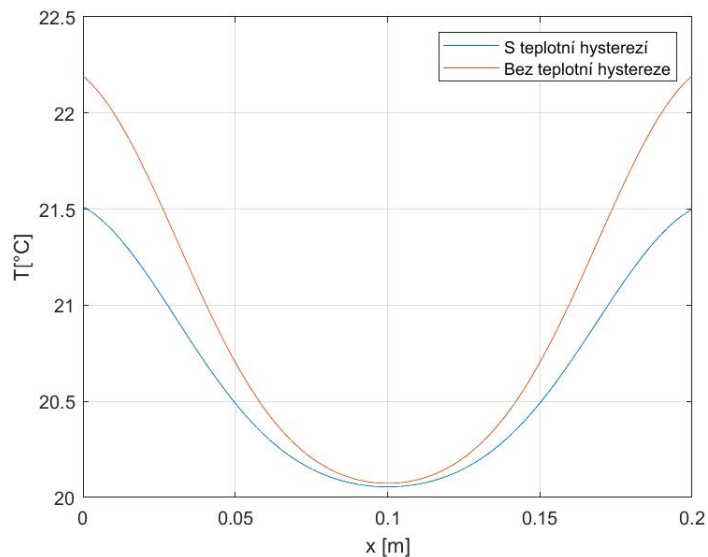
### 7.3. POROVNÁNÍ S MODELEM ZANEDBÁVAJÍCÍ TEPLOTNÍ HYSTEREZI

Z grafu 7.8 lze snadno vyčíst, že již pro krátkou dobu chlazení materiálu (200 s) se jednotlivá teplotní pole v krajních bodech tyče mírně, ale viditelně liší. Z grafu je také zřejmé, že v případě materiálu, na kterém dochází k projevům teplotní hystereze, probíhá proces tuhnutí rychleji.



Obrázek 7.8: Porovnání modelů pro  $t = 200$  s

Pokud dobu simulace tuhnutí materiálu prodloužíme, rozdíly mezi teplotními poli jsou již naprosto zřejmé (viz obrázek 7.9).



Obrázek 7.9: Porovnání modelů pro  $t = 9000$  s

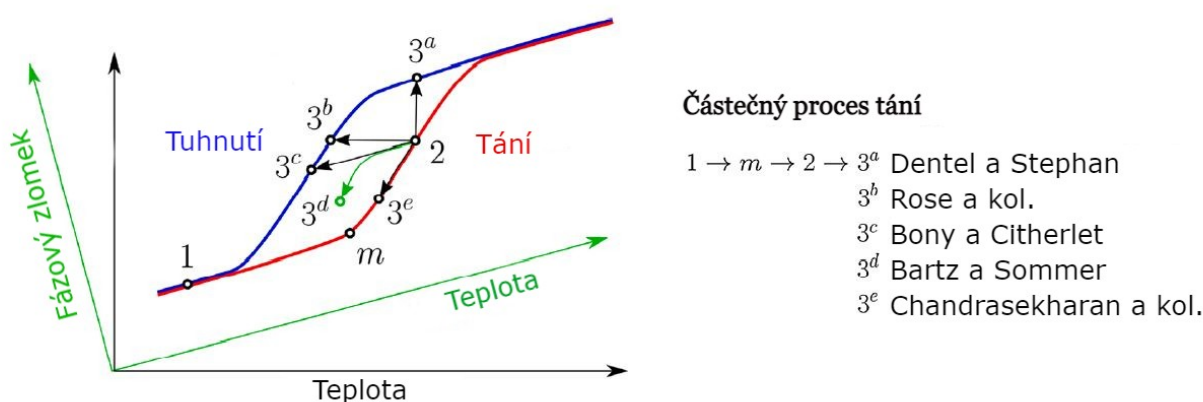
Snadno lze z grafu 7.9 vyčíst, že v případě materiálu, který podléhá teplotní hysterezi, probíhá proces tuhnutí rychleji.

Závěrem tedy lze prohlásit, že hysterezní chování materiálu s fázovou přeměnou nelze v simulaci tepelného chování organického parafínu RT 27 opomenout, a to ani při krátkých dobách ohřevu a následného chlazení. Také lze konstatovat, že teplotní hystereze PCM během fázové přeměny má pozitivní vliv na tepelný výkon systému.

## 8 Závěr

Cílem této diplomové práce bylo provést rešerši způsobů, kterými lze modelovat hysterzi úplných i částečných fázových přeměn materiálů, a dále na základě experimentálních dat navrhnout model, který bude umožňovat simulaci materiálu podléhajícího teplotní hysterzi. Nakonec také provést simulační studii a zhodnotit chování modelu.

V případě modelování teplotní hysterze při úplné fázové přeměně bylo navrženo hned několik způsobů, vycházejících z modelování fázové přeměny materiálu, založených na metodě entalpie, nebo také metodě efektivní tepelné kapacity. Narozdíl od modelování teplotní hysterze během částečné fázové změny, byla většina uvedených prací také ověřena. Nejzajímavější z nich je metoda zdroje tepla, která úzce souvisí s metodou entalpie. Tato metoda založená na semi-empirickém způsobu používá křivky  $h(T)$  získané pomocí DSC a začlení je do energetické rovnice jako zdroj tepla.



Obrázek 8.1: Srovnání způsobů modelování hysterze během částečné fázové přeměny, převzato a upraveno z [16]

Modelování teplotní hysterze je obtížný úkol zejména v případě částečných fázových přeměn. Z tohoto důvodu je množství navržených způsobů modelování tohoto problému poměrně malé a většina z těchto postupů nebyla ověřena. Pouze dvě z těchto metod byly validovány a můžeme z nich vyjít během simulačních studií. Ověřené metody Bonyho a Citherleho a také Bartze a Sommera jsou mimo jiné znázorněny na obrázku 8.1.

Tabulka 8.1: Stručný přehled způsobů modelování teplotní hysterze

Název metody/Autor	Charakterizace metody
Metoda tepelného zdroje [17]	semi-empirický způsob (zahrnutí dat z DSC jako zdroj tepla)
Bony a Citherlet [4]	přechod po křivce rovnoběžné s $h(T)$ mimo rozsah fázové změny
Metoda statické hysterze [2]	kapalná frakce jako funkce teploty a znaménka teplotního gradientu
Dentel a Stephan [7]	izotermický přechod
Rose a kol. [23]	izoentalpický přechod
Chandrasekharan [10]	k přechodu nedochází, reverzní proces sleduje stejnou křivku

Shrnutí vybraných poznatků, kterých jsme docílili v části rešerše, je uvedeno v tabulce 8.1. Do tabulky jsme zahrnuli pouze ty způsoby modelování, které lze považovat za nejreprezentativnější.

Hlavním cílem této diplomové práce bylo pro materiál Rubitherm RT 27 navrhnout způsob modelování jak úplné tak částečné teplotní hystereze. Pro tento účel byla data získaná pomocí dynamické diferenciální kalorimetrie převedena na závislost entalpie na teplotě. Křivky úplné fázové přeměny byly nahrazeny s pomocí klíčových hodnot přeměny materiálu po částech lineárními funkcemi. Při modelování hystereze během částečné fázové přeměny byl modifikován způsob navržený Bonym a Citherletem.

Pro simulační studii jsme navrhli jednoduchý jednodimenzionální model, který znázorňoval matematický model tyče, kterou jsme na obou koncích nejdříve ohřívali a následně chladili. Výsledky simulace jsme porovnali s modelem, který teplotní hysterezi fázových změn neuvažuje. Bylo dospěno k závěru, že v případě organického parafínu s označením RT 27 nelze hysterezní chování materiálu opomenout, protože již při krátkých simulačních časech dochází k viditelným rozdílům mezi jednotlivými teplotními poli. Hysterezní chování materiálu má za důsledek větší tepelný výkon systému.

# Seznam použitých zdrojů

- [1] AL-Saadi, Saleh N. a Zhiqiang (John) ZHAI. Modeling phase change materials embedded in building enclosure: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2013, 21, p.659-673. doi: 10.1016/j.rser.2013.01.024. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032113000555>
- [2] BARZ, Tilman a Andreas SOMMER. Modeling hysteresis in the phase transition of industrial-grade solid/liquid PCM for thermal energy storages. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2018, 127, p.701-713. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.032. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931018316946>
- [3] BISWAS, Kaushik, Yash SHUKLA, Andre DESJARLAIS a Rajan RAWAL. Thermal characterization of full-scale PCM products and numerical simulations, including hysteresis, to evaluate energy impacts in an envelope application. *Applied Thermal Engineering*. 2018, 138, p.501-512. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2018.04.090. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431118306495>
- [4] BONY, Jacques a Stéphane CITHERLET. Numerical model and experimental validation of heat storage with phase change materials. *Energy and Buildings*. 2007, 39, p.1065-1072. doi: 10.1016/j.enbuild.2006.10.017. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037877880600291X>
- [5] DE GRACIA, Alvaro a Luisa F. CABEZA. Phase change materials and thermal energy storage for buildings. *Energy and buildings*. 2015, 103, p.414-419. doi: 10.1016/j.enbuild.2015.06.007. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1876610215023449>
- [6] DELCROIX, Benoit, Michaël KUMMERT a Ahmed DAOUD. Thermal Behavior Mapping of a Phase Change Material Between the Heating and Cooling Enthalpy-temperature Curves. *Energy Procedia*. 2015, 78, p.225-230. doi: 10.1016/j.egypro.2015.11.612. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1876610215023449>
- [7] DENTEL, A. a W. STEPHAN. TRNSYS TYPE 399-Phase change materials in passive and active wall constructions. *Institute for Energy and Building, Georg Simon Ohm University of Applied Sciences: Nürnberg, Germany*. 2013
- [8] DURAKOVIC, Benjamin a Torlak MURIS. Experimental and numerical study of a PCM window model as a thermal energy storage unit. *International Journal of Low-Carbon Technologies*. 2016, 12. doi: 10.1093/ijlct/ctw024
- [9] FRANČŮ, Jan. *Parciální diferenciální rovnice*. 4., dopl. vyd. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2011. ISBN 9788021443990.
- [10] CHANDRASEKHARAN, R., E. s. LEE, D. E. FISHER a P. S. DEOKAR. An enhanced simulation model for building envelopes with phase change materials. *ASHRAE Transactions*. 2013, 119, p.1-10

- [11] INCROPERA, Frank P., a David P. DEWITT. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. New York: J. Wiley, 2002. ISBN ES8-1-119-32042-5.
- [12] ITEN, M., S. LIU, Ashish SHUKLA a P.D. SILVA. Investigating the impact of Cp-T values determined by DSC on the PCM-CFD model. *Applied Thermal Engineering*. 2017, 117, p.65-75. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2017.02.021. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431116325005>
- [13] JIN, Xing, Huoyan HU, Xing SHI, Xin ZHOU, Liu YANG, Yonggao YIN a Xiaosong ZHANG. A new heat transfer model of phase change material based on energy asymmetry. *Applied Energy*. 2018, 212, p.1409-1416. doi: 10.1016/j.apenergy.2017.12.103. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261917318263>
- [14] JIN, Xing, Huoyan HU, Xing SHI a Xiaosong ZHANG. Energy asymmetry in melting and solidifying processes of PCM. *Energy Conversion and Management*. 2015, 106, p.608-614. doi: 10.1016/j.enconman.2015.10.001. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S019689041500922X>
- [15] JIN, Xing, Xiaodong XU, Xiaosong ZHANG a Yonggao Yin. Determination of the PCM melting temperature range using DSC. *Acta*. 2014, 595, p.17-21. doi: 10.1016/j.tca.2014.09.004. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040603114004195>
- [16] KLIMEŠ, Lubomír, Pavel CHARVÁT, Mahmood MASTANI JOYBARI, Martin ZÁLEŠÁK, Fariborz HAGHIGHAT, Karthik PANCHABIKESAN, Mohamed EL MANKIBI a Yanping YUAN. Computer modelling and experimental investigation of phase change hysteresis of PCMs: The state-of-the-art review. *Applied Energy*. 2020, 263, p.114572. doi: 10.1016/j.apenergy.2020.114572. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261920300842>
- [17] KUMARASAMY, Karthikeyan, Jinliang AN, Jinglei YANG a En-Hua YANG. Numerical techniques to model conduction dominant phase change systems: A CFD approach and validation with DSC curve. *Energy and Buildings*. 2016, 118, p.240-248. doi: 10.1016/j.enbuild.2016.02.040. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378778816300962>
- [18] LING, Haoshu, Liang WANG, Chao CHEN, Yifei WANG a Haisheng CHEN. Effect of thermophysical properties correlation of phase change material on numerical modelling of agricultural building. *Applied Thermal Engineering*. 2019, 157, p.113579. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2019.03.150. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431118374684>
- [19] MORELES, Efraín, Guadalupe HUELSZ a Guillermo BARRIOS. Hysteresis effects on the thermal performance of building envelope PCM-walls. *Building Simulation*. 2018, 11, p.519-531. doi: 10.1007/s12273-017-0426-4
- [20] MD NASRUDIN, Farah Suraya a Shafaruniza MAHADI . Enthalpy Method for one dimensional heat conduction. *International Journal of Engineering and Technology(UAE)*. 2018, 7, p.9-12. doi: 10.14419/ijet.v7i2.14.11143



- [21] PAVELEK, Milan. *Termomechanika*. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2011. ISBN 9788021443006.
- [22] RECKTENWALD, Gerald. Finite-Difference Approximations to the Heat Equation. *Mechanical Engineering*. 2004, 10. Dostupné také z: [https://www.researchgate.net/publication/265202152\\_Finite-Difference\\_Approximations\\_to\\_the\\_Heat\\_Equation](https://www.researchgate.net/publication/265202152_Finite-Difference_Approximations_to_the_Heat_Equation)
- [23] ROSE, J., A. LAHME, N. U. CHRISTENSEN, P. HEISELBERG, M. HANSEN a K. Grau. Numerical method for calculating latent heat storage in constructions containing phase change material. *IBPSA 2009 - International Building Performance Simulation Association 2009*. 2009, p.400-407
- [24] SHARMA, Atul, V.V. TYAGI, C.R. CHEN a D. BUDDHI. Review on thermal energy storage with phase change materials and applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2009, 13, p.318-345. doi: 10.1016/j.rser.2007.10.005. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032107001402>
- [25] STATHOPOULOS, N., M. EL MANKIBI a Mattheos SANTAMOURIS. Numerical calibration and experimental validation of a PCM-Air heat exchanger model. *Applied Thermal Engineering*. 2017, 114, p.1064-1072. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2016.12.045. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431116340182>
- [26] SWAMINATHAN, C.R. a V.R. VOLLER. A general enthalpy method for modeling solidification processes. *Metall Mater Trans B*. 1992, 23, p.651-664. doi: 10.1007/BF02649725
- [27] VERMA, Prashant, VARUN a S.K. SINGAL. Review of mathematical modeling on latent heat thermal energy storage systems using phase-change material. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2008, 12, p.999-1031. doi: 10.1016/j.rser.2006.11.002. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032106001651>
- [28] VOLLER, V. a M. CROSS. Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1981, 24, p.545-556. doi: 10.1016/0017-9310(81)90062-4. Dostupné také z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931081900624>

# 9 Seznam použitých veličin, zkratek a symbolů

Symbol	Rozměr	Veličina
$c$	$[\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}]$	měrná tepelná kapacita
$c_{\text{eff}}, c_l, c_s$	$[\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}]$	měrná tepelná kapacita efektivní, kapalná fáze, pevná fáze
$e$	$[\text{J m}^{-3}]$	objemová hustota vnitřní energie
$\Delta E$	$[\text{J}]$	přírůstek vnitřní energie
$f$	$[\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}]$	objemová hustota vnitřních zdrojů
$f_s, f_l$	$[-]$	podíl pevné, kapalná fáze
$h$	$[\text{J m}^{-2}]$	entalpie
$h_s, h_l$	$[\text{J kg}^{-1}]$	měrné entalpie citelného a latentního tepla
$h_m, h_{mel}, h_{sol}, h_s, p$	$[\text{J g}^{-1}]$	měrné entalpie
$Q_f, Q_s$	$[\text{J}]$	teplo
$\dot{q}$	$[\text{W m}^{-2}]$	hustota tepelného toku
$\dot{Q}$	$[\text{W}]$	celkový tepelný tok
$l$	$[\text{m}]$	délka
$L_f, L_m, L_s$	$[\text{J kg}^{-1}]$	latentní teplo
$k$	$[\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}]$	součinitel tepelné vodivosti
$m_l, m_s$	$[\text{kg}]$	hmotnosti kapalná a pevná fáze
$S$	$[\text{m}^2]$	plošný obsah
$t$	$[\text{s}]$	čas
$\Delta t$	$[\text{s}]$	časový diskretizační krok
$T, T_w, T_\infty, T_{\text{ref}}$	$[\text{°C}], [\text{K}]$	teplota
$\Delta T$	$[\text{°C}]$	teplotní přírůstek
$V$	$[\text{m}^3]$	objem
$x$	$[\text{m}]$	souřadnice kartézského souřadného systému
$\Delta x$	$[\text{m}]$	prostorový diskretizační krok
$\alpha$	$[\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}]$	součinitel přestupu tepla
$\beta$	$[-]$	objemový zlomek kapaliny
$\kappa$	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$	součinitel teplotní vodivosti
$\rho, \rho_s, \rho_l$	$[\text{kg m}^{-3}]$	hustota, hustota pevná a kapalná fáze
$\xi$	$[-]$	hmotnostní zlomek kapaliny
$\xi_c, \xi_h$	$[-]$	přechodové funkce pro chlazení a ohřev

PCM materiál s fázovou přeměnou

DSC diferenciální skenovací kalorimetrie

# 10 Seznam příloh

Elektronickou přílohu tvoří skripty vytvořené v prostředí MATLAB v rámci této diplomové práce a také soubory se vstupními daty.

<b>Název</b>	<b>Popis</b>
vstupni_data_27.xls	Zdigitalizovaná data DSC pro maximální teplotu ohřevu 27 °C
vstupni_data_27.5.xls	Zdigitalizovaná data DSC pro maximální teplotu ohřevu 27,5 °C
vstupni_data_28.xls	Zdigitalizovaná data DSC pro maximální teplotu ohřevu 28 °C
vstupni_data_32.xls	Zdigitalizovaná data DSC pro maximální teplotu ohřevu 32 °C
enthalpy_partial.m	Znázornění vstupních dat vzhledem k entalpii pro úplnou a tři částečné fázové přeměny materiálu
enthalpy_function.m	Funkce převádějící DSC křivky na závislost teplota-entalpie
Proces_tani.m	Simulace ohřevu jednodimenzionální tyče
Proces_tuhnuti.m	Simulace ohřevu a následného chlazení jednodimenzionální tyče
porovnani.m	Srovnání chování modelu bez/s teplotní hysterezí