

基于 OpenFOAM 的超临界 CO₂ 流动与传热求解器的开发与验证

曾剑锐¹, 张尧立^{1,2*}, 徐宏¹, 叶楷¹, 许松¹, 洪钢^{1,2}

(1. 厦门大学能源学院, 福建 厦门 361102; 2. 福建省核能工程技术研究中心, 福建 厦门 361102)

摘要: 超临界二氧化碳 (sCO₂) 可作为能量转换工质用于四代堆, 使用 sCO₂ 不但能提高能量转换的效率, 而且能够大幅减小设备尺寸。不过, 由于 sCO₂ 的物性很特殊, 目前尚没有成熟的工具来模拟 sCO₂ 的流动与传热。本文使用开源计算流体力学工具 OpenFOAM, 经热物理模型的改写与编译, 开发了适用于 sCO₂ 流动与换热的专用求解器 sCO₂Foam。并以 sCO₂ 在进口雷诺数约为 9 000 的条件下, 向上流过和水平流过直径为 2 mm 的加热圆管为案例, 研究管内换热与沿程摩擦压降, 将计算结果分别与实验数据以及摩擦阻力系数经验关联式对比, 验证 sCO₂Foam 的适用性。结果表明, sCO₂Foam 采用 $k-\omega$ 湍流模型模拟出的壁温分布与实验值十分吻合; 计算得到的摩擦压降与经验关联式的相对误差很小。sCO₂Foam 具备良好的准确性、可移植性和可拓展性, 可用于 sCO₂ 流动与换热问题的研究。

关键词: 超临界二氧化碳; 对流换热; OpenFOAM; 软件开发; 数值模拟

中图分类号: TK 124

超临界二氧化碳 (sCO₂) 具备良好的传热特性、较易达到的临界温度与压力、无毒、容易获得等特点, 可作为良好的循环工质应用于 sCO₂ 布雷顿循环系统, 可降低压缩机功率, 提高系统循环效率, 并大大减小设备的体积^[1], 在未来有望应用于第 4 代先进核能系统。

由于 sCO₂ 在临界点附近物性变化非常剧烈, 这对其流动和传热影响很大, sCO₂ 的对流传热问题在理论和应用上存在许多问题有待解决。姜培学课题组^[2-3]对 sCO₂ 流过竖直加热圆管的对流换热问题进行了系列实验研究, 并用 ANSYS Fluent 商业软件进行了数值模拟, 分析了热流密度和浮升力等因素对流动换热的影响。雷贤良等^[4]利用 Fluent 软件对低质量流量下 sCO₂ 的竖直流动进行了数值模拟, 研究流动参数和热物性参数的规律, 探索传热机理。

收稿日期: 2019-12-24 录用日期: 2020-03-19

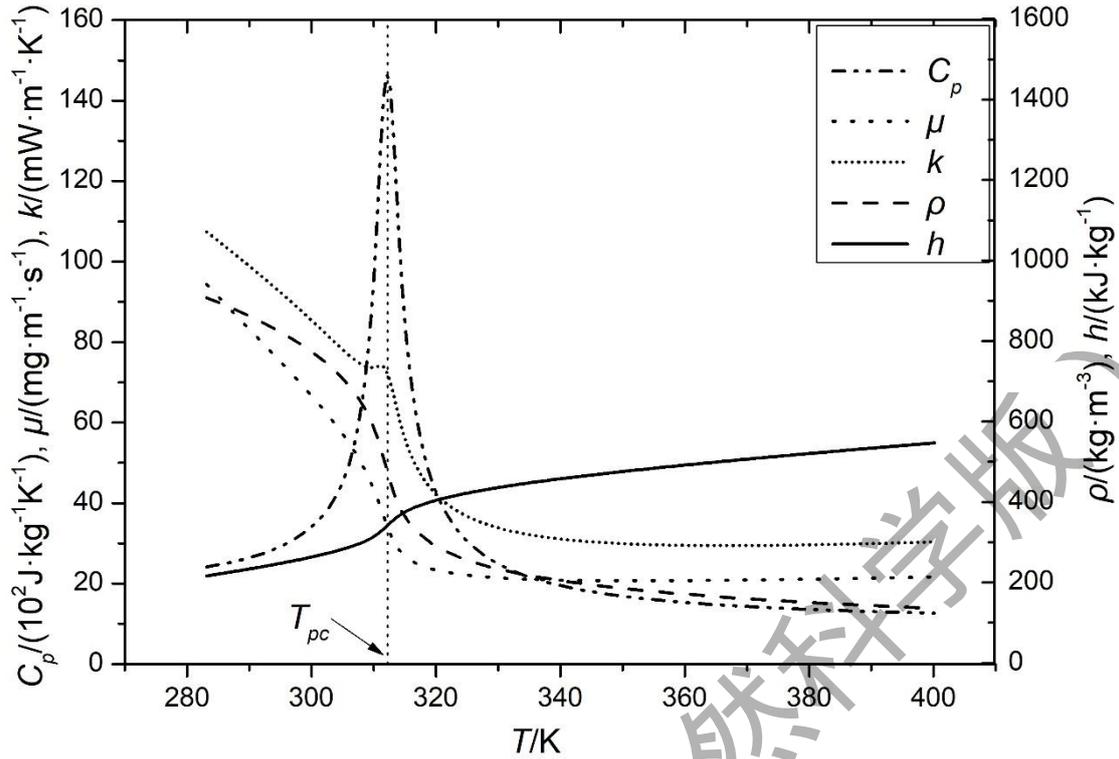
通信作者: zhangyl@xmu.edu.cn

然而，目前 $s\text{CO}_2$ 的数值模拟大多是通过商业软件来进行的^[5-6]，而商业软件不能够准确地模拟 $s\text{CO}_2$ 的对流与换热。在我国大力发展自主知识产权软件的大背景下，OpenFOAM 的开源特性有助于打破软件的版权壁垒，自主地开发研究工具。此外， $s\text{CO}_2$ 有 3 种对流换热模式：正常换热、传热恶化和传热强化。使用 OpenFOAM 可以定制化开发求解器，对于研究 3 种换热模式具有很强的拓展性。研究学者曾利用 OpenFOAM 对 $s\text{CO}_2$ 的对流换热展开模拟研究。Xiong 等^[7]对湍流模型进行修改并植入 OpenFOAM 中，将新模型用于 $s\text{CO}_2$ 流过竖直加热圆管的模拟计算，重点研究新模型对 $s\text{CO}_2$ 流动传热规律的预测表现，但此文章对如何将 $s\text{CO}_2$ 的热物性参数导入 OpenFOAM 中进行计算更新的介绍甚少。由于 $s\text{CO}_2$ 特殊的热物性对计算结果影响很大，因此，本文具体阐述了 $s\text{CO}_2$ 的热物性参数导入 OpenFOAM 5.0 中并实现精准更新的方法，同时对新开发的热物理模型进行严格的验证，确保不会因为对 $s\text{CO}_2$ 热物性处理不当而导致计算结果失准，此部分工作也补齐了适用于 OpenFOAM 5.0 并且以基于密度的基本热力学类为框架进行开发的热物理模型的缺口。此外，本文开发了可应用于 $s\text{CO}_2$ 流动与传热的 $s\text{CO}_2\text{Foam}$ 求解器，并使用该求解器进行模拟，将模拟结果分别与实验数据和经验关联式进行对比，以此验证 $s\text{CO}_2\text{Foam}$ 在 $s\text{CO}_2$ 流动换热以及流动阻力方面的适用性。

1 $s\text{CO}_2\text{Foam}$ 求解器的开发

1.1 新热物理模型的开发

图 1 为 8.8 MPa 下 CO_2 的物性随温度变化的情况，可以看出在拟临界点附近， CO_2 物性变化非常剧烈，需精准获取每个状态点的物性参数，才能保证模拟的准确性。



C_p, μ, k, ρ, h 分别为定压比热容, 动力黏度, 热导率, 密度和焓.

图 1 8.8 MPa 下 CO_2 物性随温度的变化

Fig. 1 Variations of the thermodynamic properties of CO_2 with temperature at $p_0 = 8.8 \text{ MPa}$

OpenFOAM 原有的热物理派生类, 例如: 更新动力黏度的 transport 模型, 更新比热容与焓的 thermo 模型, 更新密度的 equationOfState 模型, 这些子模型均无法满足 sCO_2 的物性变化规律。因此, 开发 OpenFOAM 新的热物理模型来解决这一问题, 开发流程分为物性表的制备、原热物理派生类的改写以及物性库的编译三部分。

1.1.1 物性表的制备与读取方式

sCO_2 的物性库来自于 REFPROP NIST, 改写成 OpenFOAM 可读的物性表。表中的压力为定值 p_0 , 虽然计算过程中压力随着迭代求解会有变动, 但物性参数仍以设定的压力值 p_0 为基础进行查表。

温度表由焓表反向插值得到: $T=T(p_0, h)$, 迭代过程中流体温度由经过计算得到的焓值来查表更新, 温度值更新后, 可以根据物性表查得其他对应的物性参数值。因此, 热物性参数表格形式如下:

$$\rho=\rho(p_0, T); h=h(p_0, T); k=k(p_0, T); \mu=\mu(p_0, T); C_p=C_p(p_0, T); T=T(p_0, h) \quad (1)$$

此外, 物性表的数据点采用非均匀布置, 在拟临界点附近局部加密, 使其在确保精度的

前提下减少了计算成本。

1.1.2 OpenFOAM 新热物理派生类

specie 类是热物性参数类的基类，它所衍生出的派生类可以看作是更新各个热物性参数的子模型，每个子模型具有特定的功能。以新的子模型 tabularEOS 为例，状态方程类 tabularEOS 的构造函数主要定义了从算例配置文件夹 constant 中读取密度表 densityTable 的机制，并通过成员函数定义了密度场的计算方式，即返回密度表中的密度值。同理，新子模型 tabularTransport 定义了动力黏度与热导率的计算方式；新子模型 hTabularThermo 定义了比热容与焓值的计算方式。这些子模型通过联合编译，组合成同时拥有上述子模型功能的新库，供后续使用。

OpenFOAM 中 basicThermo 基类下的热物理派生类通过引用 specie 基类下的热物性参数相关类，并利用 makeThermo 宏函数的调用组合，生成可选的热物理模型。OpenFOAM 热物理类的部分继承派生关系如图 2 所示，其中蓝色实线表示 OpenFOAM 原热物理类继承派生关系，红色虚线框中为修改后的新派生类，红色箭头为新生成的类的继承派生关系。可以看出，heRhoThermo 继承自 heThermo，heThermo 又继承自 rhoThermo。另外，pureMixture 类的模板参数为 constTransport，而输运方程类 constTransport 正好是 specie 类中的派生类（在新的热物理子模型中，输运方程类为 tabularTransport），这样就将两部分的类联系起来。因此，还需对 OpenFOAM 中 basicThermo 基类衍生出的热物理派生类进行改写，并引用 specie 基类下的新热物理子模型，才能联合编译生成另一个新库。

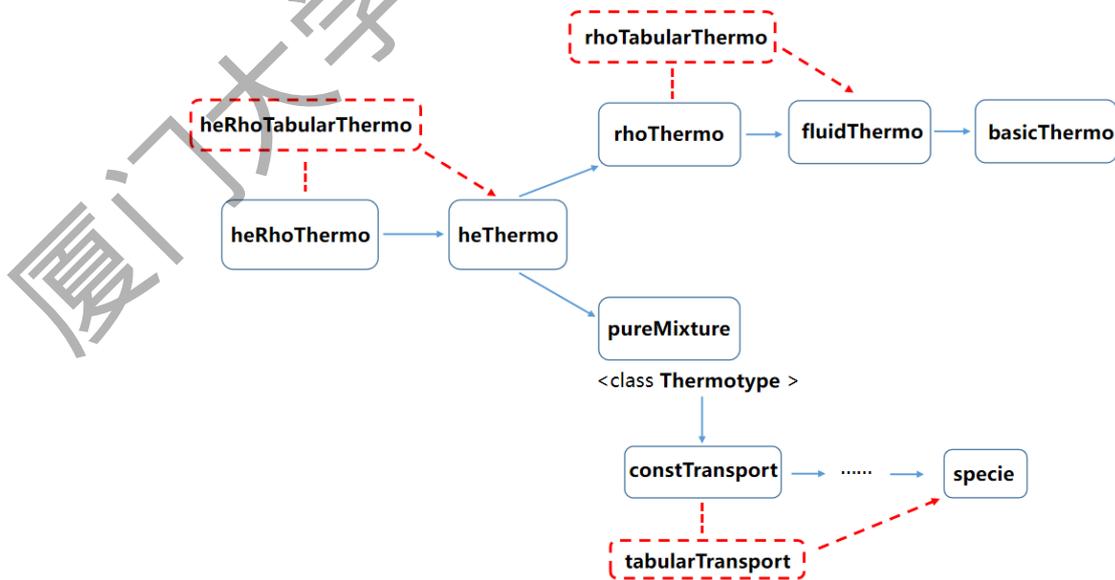


图 2 OpenFOAM 部分原热物理类与修改后的热物理类的继承派生关系

Fig. 2 Inherited derivation relation of the original and modified thermo-physical classes of OpenFOAM

由于本研究所用的求解器的热物理类接口为基于密度的基本热力学类 `rhoThermo`，所以热物理派生类需根据 `rhoThermo` 类的框架进行改写。首先，新派生类 `rhoTabularThermo` 定义了密度、动力黏度和压缩性等量，`rhoTabularThermo` 类中的成员函数根据查表法的机制返回了从物性表中读取的密度值。

接着，基于 `heRhoThermo` 类开发新派生类 `heRhoTabularThermo`，其构造函数中调用了 `calculate` 函数，实现了各热物性参数的更新。温度的更新机制需进一步加以分析，`calculate` 函数中的 `forall` 循环实现了每个网格单元的热物性参数的遍历更新。原本 `heRhoThermo` 类中定义的温度更新是由三参数的 `THE` 函数经过一系列的调用，得到温度和焓值相关的牛顿迭代递推公式，由焓值计算温度。但是 sCO_2 拟临界区附近的焓值发生剧变，容易导致在这附近的温度求解发散。而新派生类中定义了温度直接由焓表的反向插值来更新，避免了上述问题，同时保证了物性更新的准确性。

1.1.3 物性库与求解器的编译

完成新热物理类开发后，在 `rhoTabularThermos.C` 中调用 `makeThermo` 宏函数将上述的各个新派生类组合形成的新热物理模型添加到 `hashTable` 中，并编译生成物性库。求解器做相应修改，植入编译好的两个库，最终形成求解器 `sCO2Foam`。同时，在算例的配置文件中写入模型对应的关键字，如图 3 所示。物性库通过 `lookupThermo` 函数将关键字组合起来，从 `hashTable` 中找到相应的元素，在算例运行时就可成功调用物性库。

```
1 thermoType
2 {
3     type          heRhoTabularThermo;
4     mixture       pureMixture;
5     transport     tabular;
6     thermo        hTabular;
7     equationOfState tabularEOS;
8     specie        specie;
9     energy        sensibleEnthalpy;
10 }
```

图 3 配置文件中对应于新开发的热物理模型的关键字

Fig. 3 Keywords in the configuration file that correspond to the newly developed thermos-physical model

若用户需要计算的工质发生改变，只需将 `constant` 文件夹中的物性表替换成新工质的物性表，无需对求解器进行修改，即可调用新工质的物性参数。相比于多项式拟合法，物性库

更加具有便捷性和广泛适用性。

2 sCO₂Foam 求解器的适用性验证

2.1 新模型处理热物性参数的适用性验证

为了验证新开发的热物理模型能够正确地处理 sCO₂ 的热物性参数，现将经 sCO₂Foam 读取、迭代运算和输出得到的热物性参数与 NIST 数据库相应数据进行对比。图 4 为二者的对比情况，可以看出，经 sCO₂Foam 读取、运算并输出的 sCO₂ 热物性参数随温度的变化关系仍与 NIST 库的数据完全吻合。因此，植入新热物理模型的 sCO₂Foam 可以准确读取并正确处理 sCO₂ 的热物性参数，这为后续的模拟计算奠定基础。

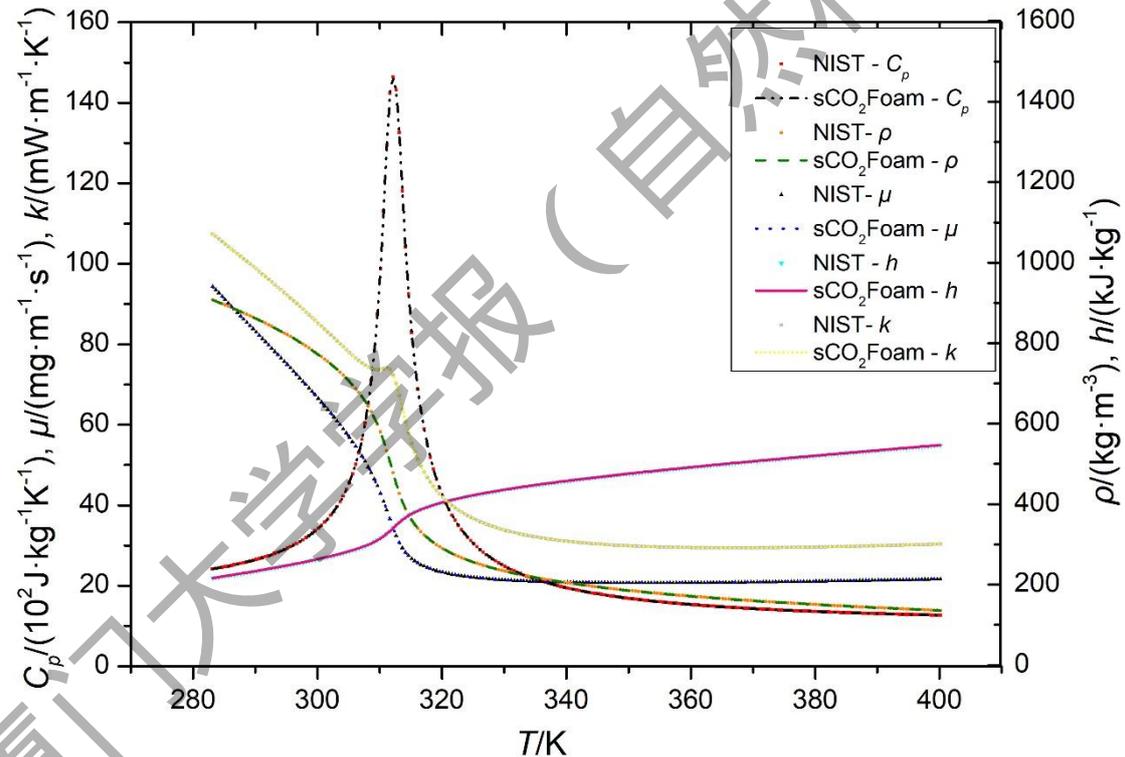


图 4 经 sCO₂Foam 读取、迭代运算和输出得到的 sCO₂ 热物性参数与 NIST 库相应数据的对比； $p_0 = 8.8 \text{ MPa}$

Fig. 4 The comparison of the thermodynamic properties of sCO₂ in NIST database with those obtained after being read, processed and outputted by sCO₂Foam; $p_0 = 8.8 \text{ MPa}$

2.2 sCO₂的流动传热

sCO₂流动传热部分适用性验证以姜培学课题组^[8]的部分实验为基准,初始条件同实验工况,入口温度 T_0 为 298.15 K,热力学压力 p_0 为 8.8 MPa,入口雷诺数 $Re_0 \approx 9000$,质量流速为 3.68 kg/h。模拟基于笛卡尔坐标下的 Navier-Stokes 方程,能量方程中忽略了对低速流影响较小的黏性耗散项、重力项和单位质量动能项。对流项采用二阶 linearUpwind 格式,压力速度耦合采用 SIMPLE 算法,湍流模型采用 $k-\omega$ 进行模拟。具体的物理模型如图 5 所示。头尾两管段均为绝热,中间管段施加恒定热流密度,总管长为 500 mm, sCO₂ 向上流过竖直圆管。

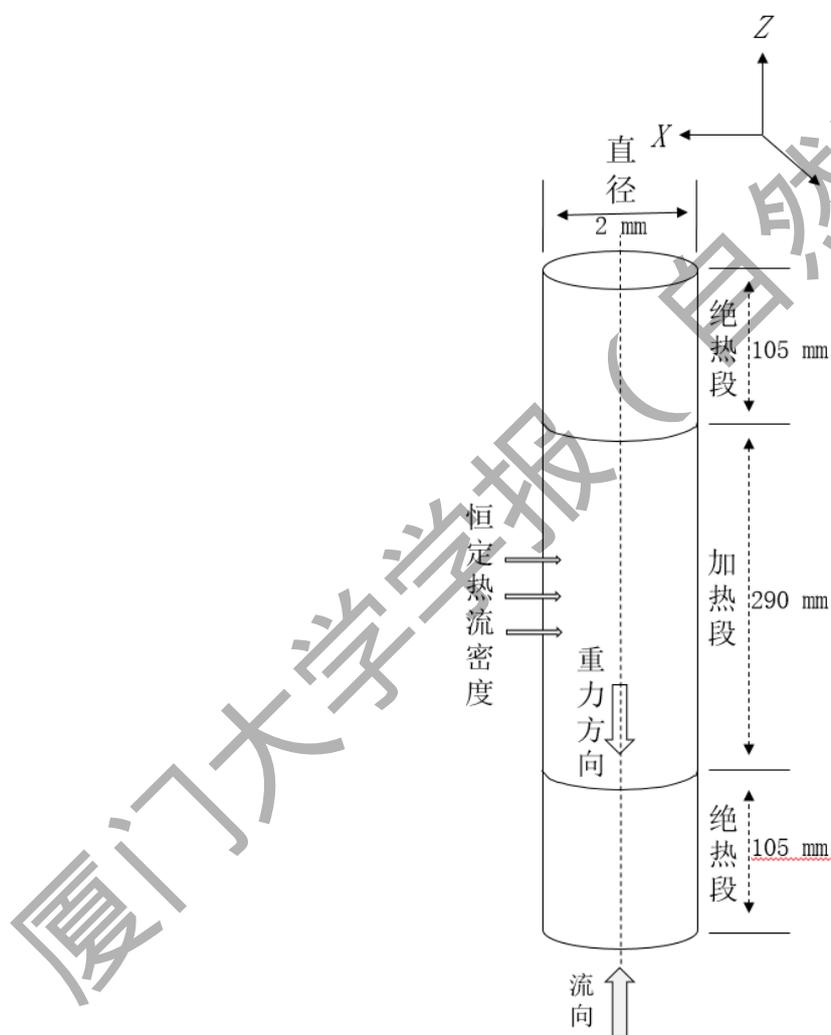


图 5 物理模型与坐标系统

Fig. 5 Physical model and coordinate system

网格无关性分析方面,分别划分 475 万,576 万与 700 万的结构化网格,经比较,壁面温

度相对误差不超过 0.05%，考虑到资源消耗成本，本文选用 475 万网格进行模拟，并在近壁面处划分相对精密的网格，对于所有计算工况，满足 y^+ 在 0.5 左右。

选取三个 $s\text{CO}_2$ 传热经验关联式：Dittus-Boelter^[9]、Gnielinski^[10]和 Jackson^[11]，与本文模拟的沿圆管轴向的壁温结果一同跟实验数据进行对比。图 6 给出了不同热流密度下，三者的数据比较。可以看出，相较于 3 个 $s\text{CO}_2$ 传热经验关联式给出的沿圆管轴向的壁温分布，本文模拟结果与实验值更为贴近。壁温沿轴向不断上升，浮升力和流动加速效应对管内对流换热影响不大，此时处在 $s\text{CO}_2$ 传热正常的区域。在热流密度分别为 6 498 和 13 626 W/m^2 条件下，本文模拟的壁温值与实验值的最大误差分别为 0.13% 和 0.22%。可见对于浮升力和流动加速效应影响不显著的情况下， $s\text{CO}_2\text{Foam}$ 采用 $k-\omega$ 湍流模型能较好地模拟出与实验相近的结果， $s\text{CO}_2\text{Foam}$ 可用于 $s\text{CO}_2$ 流动传热问题的研究。

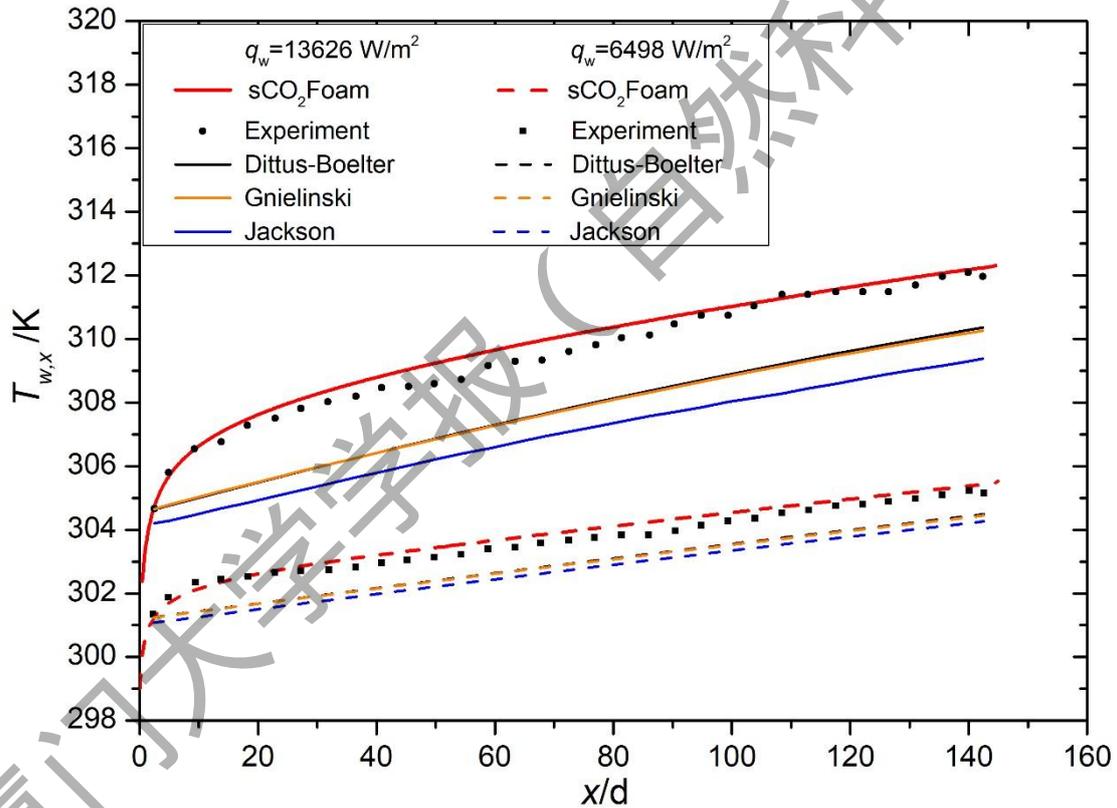


图 6 模拟结果和经验关联式预测的壁温与实验数据的比较

Fig. 6 The comparison between the experimental data and the results gotten both from simulation and from empirical correlations

2.3 sCO₂ 的流动阻力

通常，流体在水平圆管中流动的总压降可以用下式计算^[12]：

$$\Delta p = \sum \Delta p_f + \sum \Delta p_{ac}, \quad (2)$$

$$\Delta p_f = f \frac{L}{D} \frac{\rho u^2}{2} = f \frac{L}{D} \frac{G^2}{2\rho}, \quad (3)$$

$$\Delta p_{ac} = \rho_{out} u_{out}^2 - \rho_{in} u_{in}^2 = G^2 \left(\frac{1}{\rho_{out}} - \frac{1}{\rho_{in}} \right), \quad (4)$$

其中， Δp 是总压降， Δp_f 是摩擦压降， Δp_{ac} 是由流动加速引起的压降， f 是摩擦阻力系数， L 为圆管长度， D 为圆管直径， u 为流速， G 为质量流速， ρ 为密度， ρ_{out} 和 ρ_{in} 分别为出口处的密度和入口处的密度， u_{out} 和 u_{in} 分别为出口处的流速和入口处的流速。因此 $\Delta p_f = \Delta p - \Delta p_{ac}$ ，摩擦阻力系数 f 可从经验关联式中获得。

对水平圆管的加热段进行流动阻力分析，其物理模型和基本工况与上述一致。将模拟计算的摩擦压降与摩擦阻力系数经验关联式进行联合对比，选取的 3 个经验关联式的表达式见表 1。

表 1 摩擦阻力系数经验关联式

Tab. 1 Empirical correlations of frictional resistance coefficient

经验关联式	文献
$f_I = \frac{0.314}{0.7 - 1.65 \log Re_b + (\log Re_b)^2}$	[13]
$f_B = \frac{0.3164}{Re^{0.25}}$	[14]
$f_F = (1.821 \lg Re_b - 1.64)^{-2}$	[15]

图 7 为不同入口流速下，sCO₂Foam 计算求得的 sCO₂ 摩擦压降与通过经验关联式推算的摩擦压降的对比。整体上看，模拟计算出的摩擦压降与经验公式估计的摩擦压降均较为接近，其中模拟结果与 Itaya 公式的压降预测最为接近。3 种流速从低到高排列，模拟结果与 3 个经验关联式计算出的摩擦压降的误差范围分别为 4.87%~6.73%，4.84%~6.98% 和

4.99%~7.27%。可见 sCO₂Foam 可用于 sCO₂ 的流动阻力问题的研究。

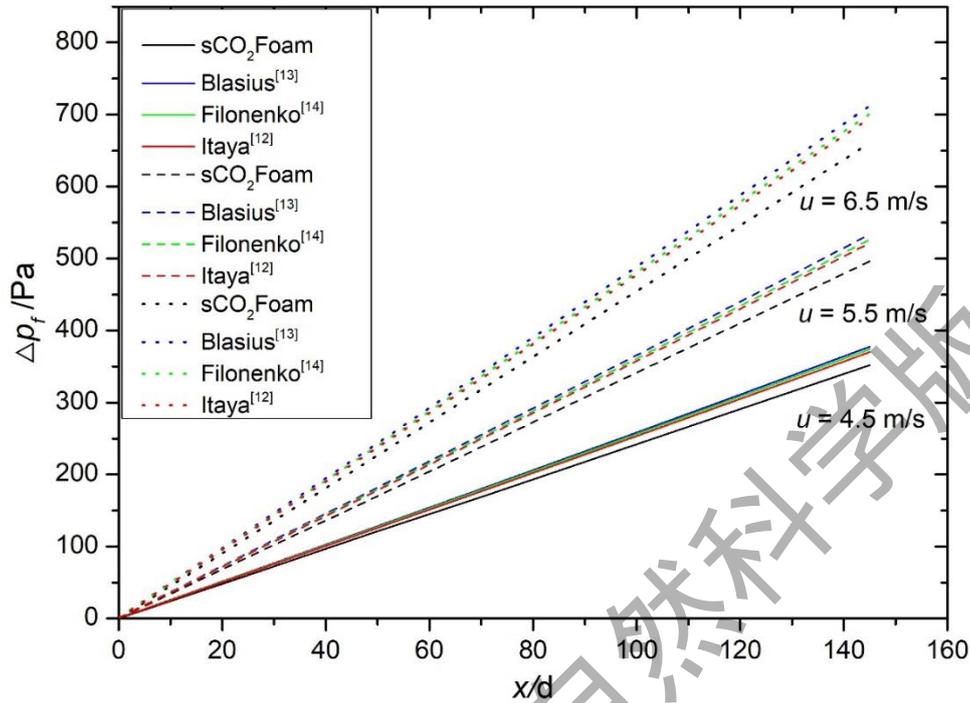


图 7 不同入口流速下, $q_w = 13631 \text{ W/m}^2$, 模拟结果计算的摩擦压降与 3 个经验关联式推算的摩擦压降的对比

Fig. 7 Comparison of the frictional pressure drops obtained by simulation with those by the empirical correlations at different inlet velocities; $q_w = 13631 \text{ W/m}^2$

3 结论

本研究基于 OpenFOAM 5.0 开发 sCO₂ 求解器 sCO₂Foam, 用于 sCO₂ 流动与换热问题的研究, 并将模拟结果跟实验数据与摩擦阻力系数经验关联式进行对比, 从 sCO₂ 流动换热和流动阻力两方面验证求解器的适用性, 研究结果归纳如下:

- 1) sCO₂Foam 建议应用于浮升力和流动加速效应影响不显著的工况。在该工况下, sCO₂Foam 采用 $k-\omega$ 模型模拟出的壁温分布比 sCO₂ 流动传热关系式给出的推测结果更接近于实验数据, sCO₂Foam 对 sCO₂ 流动换热问题的适用性得到验证。
- 2) sCO₂Foam 计算的摩擦压降与 3 个经验关联式 Blasius、Filonenko 以及 Itaya 的推算压降较为接近。sCO₂Foam 对 sCO₂ 流动阻力问题的适用性得到验证。

- 3) $s\text{CO}_2\text{Foam}$ 可以根据 $s\text{CO}_2$ 不同对流换热模式的转变继续进行修改开发, 工具的自主性与可拓展性较强。

参考文献:

- [1] 段承杰, 杨小勇, 王捷. 超临界二氧化碳布雷顿循环的参数优化[J]. 原子能科学技术, 2011, 45: 1489-1494.
- [2] JIANG P X, ZHANG Y, XU Y J, et al. Experimental and numerical investigation of convection heat transfer of CO_2 at supercritical pressures in a vertical tube at low Reynolds numbers[J]. *Int J Therm Sci*, 2008, 47: 998-1011.
- [3] JIANG P X, ZHANG Y, ZHAO C R, et al. Convection heat transfer of CO_2 at supercritical pressures in a vertical mini tube at relatively low Reynolds numbers[J]. *Exp Therm Fluid Sci*, 2008, 32: 1628-1637.
- [4] LEI X, ZHANG Q, ZHANG J, et al. Experimental and numerical investigation of convective heat transfer of supercritical carbon dioxide at low mass fluxes[J]. *Applied Sciences-Basel*, 2017, 7: 1-18.
- [5] JIANG P X, ZHANG Y, SHI R. Experimental and numerical investigation of convection heat transfer of CO_2 at super-critical pressures in a vertical mini tube[C]//ASME 4th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels. Ireland: American Society of Mechanical Engineers, 2006: 583-590.
- [6] 李志辉, 姜培学. 超临界压力 CO_2 在垂直管内对流换热数值模拟[J]. 原子能科学技术, 2009, 43: 247-251.
- [7] XIONG J B, CHENG X. Turbulence modelling for supercritical pressure heat transfer in upward tube flow[J]. *Nucl Eng Des*, 2014, 270: 249-258.
- [8] LI Z H, JIANG P X, ZHAO C R, et al. Experimental investigation of convection heat transfer of CO_2 at supercritical pressures in a vertical circular tube[J]. *Exp Therm Fluid Sci*, 2010, 34: 1162-1171.
- [9] DITTUS F W, BOELTER L M K. Heat transfer in automobile radiators of the tubular type[J]. *Int Commun Heat Mass Transf*, 1985, 12: 3-22.
- [10] GNIELINSKI V. New equations for heat and mass transfer in the turbulent flow in pipes and channels[J]. *Forsch Im Ingenieurwes*, 1975, 75: 8-16.
- [11] JACKSON J D. Validation of an extended heat transfer equation for fluids at supercritical pressure[C]//Fourth International Symposium Supercritical Water-Cooled Reactors (ISSCWR-4). Berlin: Generation IV International Forum, 2009: 8-11.
- [12] CHAKRYGIN V J T E. The effect of non-uniform heating on pressure losses at supercritical pressures[J]. *Therm Eng*, 1967, 14: 77-83.
- [13] ITAYAS. New experimental formula of the coefficient of pipe friction[J]. *J Jpn Soc Mech Eng*, 1945, 4848: 84.

[14] BLASIUS, HEINRICH. The law of similarity of friction in fluids, in: communications on research in the field of engineering[M]. German: Springer, 1913, 1-41.

[15] KURGANOV V A, KAPTIL N A, ANKUDINOV V B J T V T. Total flow resistance and fluid friction associated with ascending and descending supercritical fluid-flow in heated pipes[J]. High Temp, 1989, 27: 94-103.

廈門大學學報（自然科學版）

Development and verification of supercritical CO₂ solver for flow and heat transfer based on OpenFOAM

ZENG Jianrui¹, ZHANG Yaoli^{1,2*}, XU Hong¹, YE Kai¹, XU Song¹,

HONG Gang^{1,2}

(1. College of Energy, Xiamen University, Xiamen 361102, China 2. Fujian Research Center for Nuclear Engineering, Xiamen 361102, China)

Abstract: Supercritical carbon dioxide (sCO₂) can be used as an energy conversion working fluid for the fourth-generation nuclear system to greatly improve energy conversion efficiency and reduce the size of the devices. However, there is no mature tool to simulate the flow and heat transfer of sCO₂ due to its special thermo-physical properties. This study used the open-sourced tool of computational fluid dynamics, OpenFOAM, to develop a solver for sCO₂, i.e., sCO₂Foam, through modifying the original thermo-physical models. The numerical simulations in which sCO₂ flows through the vertical/horizontal heated pipe ($d_{in}=2$ mm) at inlet Reynolds number of 9 000 were taken as examples to compare the results with both experimental data and empirical correlations of frictional resistance coefficient as a way to verify the applicability of sCO₂Foam. The results show that sCO₂Foam using $k-\omega$ turbulence model can give a wall temperature distribution that corresponds well with the experiment result. The relative errors between the frictional pressure drop calculated with sCO₂Foam and that from the empirical correlations are relatively small. sCO₂Foam has good accuracy, portability and expansibility and it can be used to study problems of sCO₂ flow and heat transfer.

Keywords: supercritical carbon dioxide; flow heat transfer; OpenFOAM; software development; numerical simulation