

# 管壳式水合盐化学储热反应器内 传热结构拓扑优化

叶豪<sup>1</sup>, 陶于兵<sup>1, 2</sup>, 董镇蛟<sup>1</sup>, 晏文杰<sup>2</sup>, 贾浩洋<sup>2</sup>

(1. 西安交通大学未来技术学院, 710049, 西安;

2. 西安交通大学热流科学与工程教育部重点实验室, 710049, 西安)

**摘要:** 为了克服水合盐热化学储热材料传热能力差的缺点,建立了管壳式水合盐反应器内传热-流动-反应耦合的多物理场模型。首先,通过拓扑优化的方法设计出适用于热化学储热反应器的高性能肋片结构,并分析了肋片体积的影响,确定了合适的高导热材料体积占比为15%。然后,将拓扑优化结构与安装有传统直肋、以及未安装肋片的反应器进行对比,分析了反应器的多项参数对储热效果的影响。研究表明:在储热过程中,相较于不安装肋片和安装具有相同高导热材料体积占比的直肋片,拓扑优化肋片使得反应时间分别缩短了84.5%和53.9%;在不同的反应动力学系数和导热系数下,拓扑优化结构的储热性能均高于直肋式反应器;随着反应动力学系数的增大和导热系数的减小,拓扑优化结构的强化效果显著升高,从而验证了提出的拓扑优化设计方案的优越性,并为热化学储热性能强化提供了有价值的参考。

**关键词:** 水合盐;热化学储热;强化传热;拓扑优化

**中图分类号:** TK513.5 **文献标志码:** A

**DOI:** 10.7652/xjtuxb202411007 **文章编号:** 0253-987X(2024)11-0078-09

## Topology Optimization of Heat Transfer Structure in Shell-and-Tube Hydrated Salt Chemical Thermal Storage Reactors

YE Hao<sup>1</sup>, TAO Yubing<sup>1, 2</sup>, DONG Zhenjiao<sup>1</sup>, YAN Wenjie<sup>2</sup>, JIA Haoyang<sup>2</sup>

(1. School of Future Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 2. Key Laboratory of Thermo-Fluid Science and Engineering, Ministry of Education, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract:** To address the limited heat transfer capacity of hydrated salt thermal chemical storage materials, a multi-physics model coupling heat transfer, flow, and reaction within a shell-and-tube hydrated salt reactor is developed. Through the application of a topology optimization approach, a high-performance fin structure suitable for thermal chemical storage reactors is devised. The impact of fin volume is analyzed, leading to the identification of an optimal high thermal conductivity material volume fraction of 15%. Subsequently, the topology-optimized structure is compared with reactors equipped with traditional straight fins and those without fins installed, analyzing the effects of various parameters on the thermal storage performance of the reactor. The results indicate that during the thermal storage process, compared to reactors without fins and reactors with straight fins having the same high thermal conductivity material

收稿日期: 2024-03-05。 作者简介: 叶豪(1998—),男,博士生;陶于兵(通信作者),男,教授,博士生导师。

基金

项目: 国家自然科学基金资助项目(U22A20212)。

网络出版时间: 2024-06-20

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.T.20240620.1003.002>

volume fraction, the topology-optimized fins reduce reaction times by 84.5% and 53.9%, respectively. In addition, the topology-optimized structure exhibits better thermal storage performance than the reactor with straight fins under different reaction kinetic coefficients and thermal conductivities. With increasing reaction kinetics coefficients and decreasing thermal conductivity coefficients, the enhancing effect of the topology-optimized structure significantly increases, thus demonstrating the superiority of the topology optimization design proposed in this paper and providing valuable references for strengthening the thermal chemical storage performance.

**Keywords:** salt hydrates; thermochemical heat storage; heat transfer enhancement; topology optimization

热化学储热技术作为一种高效的储能技术,具有储热密度大、可长期储热等优点<sup>[1-3]</sup>。然而,热化学材料(TCM)传热能力差的缺点严重影响了储热单元的储-放热性能,因此在应用中通常添加肋片以提升储-放热速率<sup>[4-5]</sup>。Luo 等<sup>[6]</sup>研究了肋片对水合盐热化学储热性能的强化效果,结果表明纵向肋片和 L 型肋片分别使脱水时间缩短了 8.9% 和 8.6%。Ye 和 Tao<sup>[7]</sup>在 MgO-H<sub>2</sub>O 热化学储热反应床中加入了纵向肋片,结果表明相安装肋片显著地缩短了储放热时间。Shi 等<sup>[8]</sup>对管式热化学储热反应器中 CaO 的水合过程开展了研究,发现 TCM 的低导热性是限制反应的重要因素,并且安装纵向肋片可以将反应时间缩短 84.32%。上述研究均说明强化传热对于提升热化学储热性能具有重要意义。

然而,目前肋片结构设计通常采用经验设计的方法,很难获得最优的肋片结构。随着优化理论的发展,拓扑优化方法正被广泛应用于传热领域,其优势在于突破了传统设计思路,设计自由度较高,能够获得最优的肋片拓扑结构<sup>[9-10]</sup>。

近年来,许多学者通过拓扑优化的方法设计肋片结构,用于增强储热单元的储-放热性能。甄华龙等<sup>[11]</sup>对相变储能单元内肋片结构进行了拓扑优化设计,并分析了其传热特性。He 等<sup>[12]</sup>使用拓扑优化的方法设计了相变储热装置中的肋片结构,并将其与传统肋片进行对比研究,结果表明,拓扑肋片将传热效率提高了 22.84%。Shi 等<sup>[13]</sup>对储氢-储热复合反应器中的肋片结构进行了拓扑优化,发现拓扑优化设计的肋片结构显著地提高了储氢速率。游吟等<sup>[14]</sup>基于拓扑优化原理,设计了相变储热单元中的肋片结构,通过与传统肋片模型传热能力对比,验证了拓扑优化的优越性和可靠性。

由上述文献可以看出,反应床传热性能低下的缺点限制了热化学储热性能。然而,目前的反应床内强化传热的研究主要依赖经验,关于传热结构的设计与

优化尚且较少。因此,本文建立了水合盐管壳式反应器内传热-流动-反应耦合的多物理场模型,通过拓扑优化的方法设计了适用于热化学储热反应器的高性能肋片结构,优选了高导热材料体积占比,并将其与安装有传统直肋和未安装肋片的反应器进行了对比。此外,还分析了反应器的多项参数对优化效果的影响,论证了本文拓扑优化设计方案的优越性。

## 1 模型与验证

### 1.1 物理模型

管壳式反应器结构如图 1(a)所示,储热材料为六水合氯化镁。反应器中心位置为水蒸气通道,其四周布置 4 个均匀排布的换热流体(HTF)管道。储热过程中传热流体(空气)流过流体管道加热六水氯化镁使其脱水,产生的水蒸气从蒸汽通道排出,此过程将热能转化为化学能进行储存。

由于拓扑优化过程计算量较大,因此本研究忽略传热流体及水蒸气温度和压力沿反应器轴向的变化,将三维模型简化为如图 1(b)所示的二维模型。由于简化后的二维模型具有对称性,因此可进一步简化为如图 1(c)所示的 1/4 模型,并以此作为计算域。其中  $d_1$  为 3.2 cm,  $d_2$  为 4.3 cm,  $r_1$  为 1.2 cm,  $r_2$  为 7.5 cm,  $r_3$  为 1.8 cm。

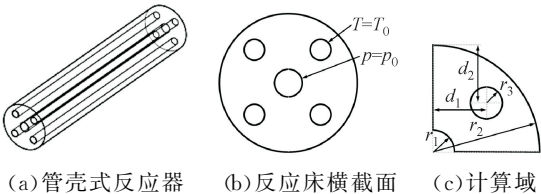


图 1 物理模型示意图

Fig. 1 Schematic of the physical model

### 1.2 数学模型

#### 1.2.1 模型假设

为了简化模型,考虑以下假设条件<sup>[8,15-16]</sup>:①将

水蒸气视为理想气体;②反应过程中颗粒的大小以及床层孔隙率不发生变化;③反应过程中热化学材料的热物性不随温度变化;④忽略辐射传热;⑤采用局部热平衡模型描述多孔介质传热。

1.2.2 热化学储热模型

根据前述假设,计算区域被简化为多孔介质,该区域发生吸热反应伴随水蒸气的流动以及质量变化。因此,本文的质量平衡方程<sup>[6]</sup>如下

$$\epsilon \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}) = S \tag{1}$$

$$S = \chi(1 - \epsilon) \frac{dX}{dt} \frac{\rho_s}{M_s} M_v \tag{2}$$

式中: $\mathbf{u}$  和  $\rho_g$  分别为水蒸气流速和密度; $S$  表示质量源项, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ; $\epsilon$  表示反应床孔隙率; $\chi$  表示化学计量系数; $X$  为反应进度;其他参数见表 1。

表 1 数值模拟中采用的参数<sup>[17,20]</sup>

Table 1 Parameters used in the numerical simulation

| 参数                                                                          | 数值              |
|-----------------------------------------------------------------------------|-----------------|
| 热化学储热材料密度 $\rho_s/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$                          | 1 569           |
| 热化学储热材料定压比热容 $c_p/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$      | 1 779           |
| 热化学储热材料导热系数 $\lambda_s/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$  | 0.77            |
| 热化学储热材料摩尔质量 $M_s/(\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1})$                         | 0.203           |
| 水蒸气摩尔密度 $M_v/(\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1})$                             | 0.018           |
| 指前因子 $A/\text{s}^{-1}$                                                      | $5 \times 10^5$ |
| 活化能 $E/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$                                   | 60.8            |
| 通用气体常数 $R/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$             | 8.314           |
| 反应热 $\Delta H/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$                            | 63.8            |
| 反应熵 $\Delta S/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$         | 158             |
| 孔隙率 $\epsilon$                                                              | 0.5             |
| 热化学储热材料粒径 $d_p/\text{mm}$                                                   | 0.25            |
| 肋片材料密度 $\rho_{fin}/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$                         | 2 700           |
| 肋片材料定压比热容 $c_{p,fin}/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$   | 870             |
| 肋片材料导热系数 $\lambda_{fin}/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ | 202             |
| 参考压力 $p_{ref}/\text{Pa}$                                                    | 101 325         |
| 化学计量系数 $\chi$                                                               | 4               |

采用 Darcy 定律来描述水蒸气在多孔介质中的流动<sup>[6]</sup>

$$\mathbf{u} = -\frac{k}{\mu} \nabla p \tag{3}$$

$$k = \frac{d_p^2 \epsilon^3}{180(1 - \epsilon)^2} \tag{4}$$

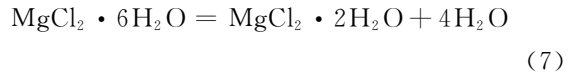
式中: $p$  为水蒸气压力; $k$  表示渗透率; $d_p$  表示 TCM 粒径; $\mu$  为水蒸气黏度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$ ,可参见文献<sup>[17]</sup>。

根据多孔介质热平衡模型,能量平衡方程可以表示为<sup>[6]</sup>

$$(\rho c_p)_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla ((\rho c_p)_g T) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = Q \tag{5}$$

$$Q = \chi(1 - \epsilon) \frac{dX}{dt} \frac{\rho_s}{M_s} \Delta H \tag{6}$$

六水合氯化镁热化学储热单元发生的化学反应为气固化学反应,参考文献<sup>[18]</sup>,将六水氯化镁脱水过程看成一步反应,反应式如下



该反应的反应速率取决于温度和水蒸气压力,其动力学模型<sup>[18-19]</sup>如下

$$\frac{dX}{dt} = K(1 - X) =$$

$$A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \left(1 - \frac{p}{p_{\text{eq}}}\right) (1 - X) \tag{8}$$

$$\ln\left(\frac{p_{\text{eq}}}{p_{\text{ref}}}\right) = -\frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R} \tag{9}$$

式中: $K$  表示反应动力学系数, $\text{s}^{-1}$ ; $T$  表示温度。

1.2.3 边界及初始条件

在储热过程中,传热流体的温度为 403 K,水蒸气出口压力为 1 000 Pa,反应器外壳绝热。此外,反应器内部初始温度和压力分别为 325 K 和 1 000 Pa。

1.2.4 拓扑优化模型

本研究旨在提高热化学储热单元的储热速率,因此以计算域在给定时间内时刻下最大化平均反应进度为优化目标。优化目标和约束条件如下

$$\text{Max } F_{\text{obj}} = \frac{\int_{\Omega} X \, d\Omega}{\int_{\Omega} d\Omega}, \quad t = t_{\text{end}} \tag{10}$$

$$\text{s. t. } \begin{cases} 0 \leq \int_{\Omega} \theta \, d\Omega \leq \varphi \\ 0 \leq \theta \leq 1 \\ F = 0 \end{cases} \tag{11}$$

式中: $\theta$  为设计变量,即高导热材料体积占比; $F_{\text{obj}}$  为优化目标; $\varphi$  为设计域中高导热材料平均体积占比; $F$  为前述热化学储热过程的控制方程; $t_{\text{end}}$  表示优化过程中求取目标值的时间,本文取 75 min。

在计算域中,使用变密度插值 SIMP 方法引入惩罚因子  $P$  重新定义材料物性,本文惩罚因子取 4。各计算公式<sup>[21]</sup>如下

$$\lambda_{\theta} = \theta^P (\lambda_{fin} - ((1 - \epsilon)\lambda_s + \epsilon\lambda_g)) + ((1 - \epsilon)\lambda_s + \epsilon\lambda_g) \tag{12}$$

$$\epsilon_{\theta} = (1 - \theta)\epsilon \tag{13}$$

$$k_{\theta} = (1 - \theta) \frac{D_p^2 \epsilon^3}{180(1 - \epsilon)^2} \tag{14}$$

$$(\rho c_p)_{\theta} = (1 - \theta)((1 - \epsilon)(\rho c_p)_s + \epsilon(\rho c_p)_g + \theta(\rho c_p)_{fin}) \tag{15}$$

$$S_{\theta} = \chi(1 - \epsilon) \frac{dX}{dt} \frac{\rho_s}{M_s} M_v (1 - \theta) \tag{16}$$

$$Q_{\theta} = \chi(1 - \epsilon) \frac{dX}{dt} \frac{\rho_s}{M_s} \Delta H (1 - \theta) \tag{17}$$

式中： $\lambda_{\theta}$ 、 $\epsilon_{\theta}$ 、 $k_{\theta}$ 、 $(\rho c_p)_{\theta}$ 、 $S_{\theta}$ 、 $Q_{\theta}$  分别表示用于拓扑优化计算的插值导热率、插值孔隙率、插值渗透率、插值密度、插值定压比热容、插值质量源项以及插值热源。

在拓扑优化过程中，相邻节点之间的设计变量会产生较大的差异，出现棋盘格现象。为解决这一问题，设置过滤半径对优化结果进行过滤，通过求解 Helmholtz 型偏微分方程来实现过滤<sup>[22]</sup>

$$\theta_f = R_{min}^2 \nabla^2 \theta_f + \theta_s \tag{18}$$

式中： $R_{min}$  为过滤半径； $\theta_f$  是过滤后的设计变量。然而，密度过滤这个步骤会导致材料体积占比分布在 0~1 之间，而非聚集在 0 和 1 这两个点上。为了缓解这一问题，引入了双曲正切投影方法，对过滤后的变量进行处理，使其恢复 0-1 分布<sup>[23]</sup>。投影后的设计变量为

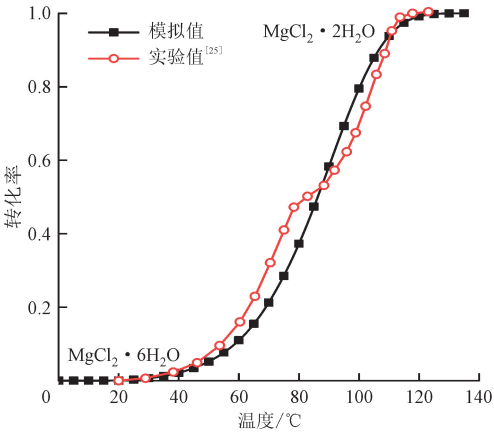
$$\theta_p = \frac{\tanh(\beta\eta) + \tanh(\beta(\theta_f - \eta))}{\tanh(\beta\eta) + \tanh(\beta(1 - \eta))} \tag{19}$$

式中： $\eta$  为投影阈值，本文取 0.5； $\beta$  为投影斜率，本文取 5。

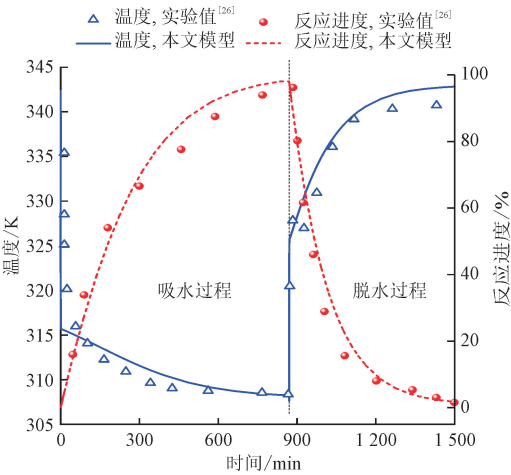
本研究使用商业软件 COMSOL Multiphysics 求解上述控制方程，采用移动渐近线优化方法 (MMA) 求解设计变量。计算过程中，当优化容差小于  $10^{-6}$ ，认为拓扑优化收敛，优化过程结束。

1.3 模型验证与网格无关性验证

本文先参照杨娜等<sup>[24]</sup>的方法，根据 Rammelberg 等<sup>[25]</sup>的实验结果，拟合出  $MgCl_2 \cdot 6H_2O$  的脱水反应动力学参数，具体数值见表 1。在此基础上进行模拟，得到的结果与实验值的对比如图 2(a) 所示。此外，为了进一步验证本文模型的可靠性，将本文数值模型计算得到的结果与 Lahmidi 等<sup>[26]</sup>的闭式水合盐热化学储热实验结果进行对比，如图 2(b) 所示。可以看出，通过本文模型预测的结果与实验结果基本一致，因此可采用上述模型进行后续研究。



(a)  $MgCl_2 \cdot 6H_2O$  反应动力学模型验证



(b) 水合盐热化学储热模型验证

图 2 反应动力学及热化学储热模型验证

Fig. 2 Model validation of reaction kinetics and thermochemical heat storage

由于网格数量对计算运行时间、精度和收敛性有很大影响。因此，本文选取了 4 组网格进行网格无关性验证，4 组网格均由三角形单元构成，数量分别为 4 880、9 982、24 948 和 49 792，结果如图 3 所示。

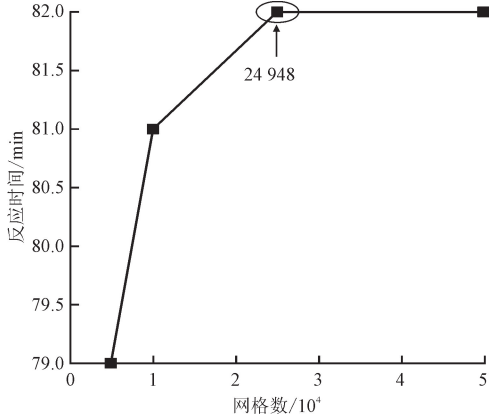


图 3 网格无关性验证

Fig. 3 Grid independence verification

示。从图中可以看出,当网格数量从 24 948 进一步增加到49 792 时,计算结果几乎不变,说明此时网格已经能满足计算精度,因此在后续的研究中将网格数量控制在 24 948 附近进行模拟以节省计算资源。

## 2 结果与讨论

本研究建立了传热-流动-反应耦合的多物理场模型,通过拓扑优化的方法设计出适用于热化学储热反应器的高性能肋片结构,其中肋片采用高导热材料铜制成,优选了合适的高导热材料体积占比,并将其与安装有传统直肋,以及未安装肋片的反应器进行了对比,此外还分析了反应器以及肋片的多项参数对储热效果的影响,论证了本文拓扑优化设计出的肋片的优越性。

### 2.1 拓扑优化结果分析

图 4 展示了拓扑优化过程中肋片结构的设计和优化目标随迭代次数的变化过程。可以看出,在设计过程的初始阶段,HTF 管道周围被肋片材料均匀填充。在进行 15 次计算之后,部分灰色区域消失,此时相对清晰的肋片结构逐渐出现,但许多分支和边缘处于中间密度区,导致肋片边缘较为模糊。在第 25 次优化时,肋片结构完全发展,分支完全展开,中间密度单元显著减少,肋片的边缘已经足够清晰。在 50 次计算之后,获得的肋片几何形状几乎不再发生改变。从图 4 可以看出,肋片主要朝着计算域的左上角和右下角延伸,这是因为,这些区域距离 HTF 管道较远,需要放置较多的高导热材料来强化传热。

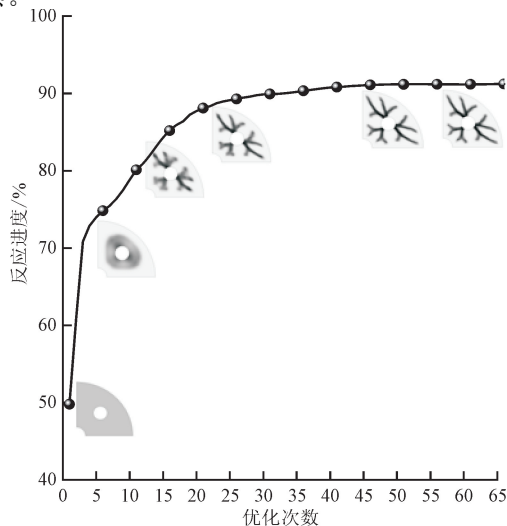


图 4 优化过程中肋片结构和优化目标随迭代次数的演变  
Fig. 4 Evolution of fin structure and optimization objectives with iteration times during the optimization process

### 2.2 肋片材料体积占比对优化结果的影响

图 5 为高导热材料体积占比为 5% 到 20% 的 4 组优化结构中反应床的平均温度和脱水反应进度的云图。从中可以看出,在同一时刻,随着高导热材料体积占比的增大,肋片能将热量传递到更多区域,反应床的整体温度明显上升,并且反应进度也随之增大。在 50 min 时,高导热材料体积占比为 15% 和 20% 的两组结构几乎完成脱水过程,明显高于另外两组。

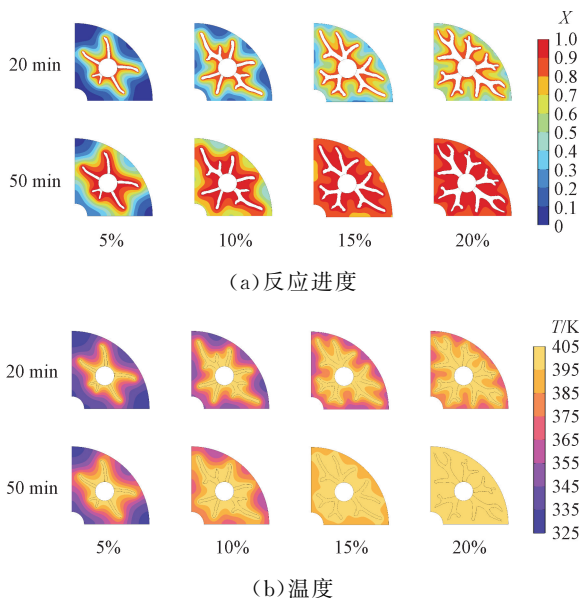


图 5 不同时刻下 4 组结构温度和反应进度的分布  
Fig. 5 Distribution of temperature and reaction conversion in four groups of structures at different time

图 6 展示了 4 组结构整体反应进度和平均温度随时间的变化情况。从图 6(a)可以看出,随着高导热材料体积占比的增大,反应时间逐渐缩短。4 组结构反应完成的时间(由于储热末期的反应速率太慢消耗了太多的时间,因此以反应进度达到 95% 视为反应结束)分别为 194、107、82 和 73 min。当高导热材料体积占比从 10% 增加到 15% 时,储热时间缩短了 23.4%,当其进一步增大到 20% 时,储热时间仅减少了 11.0%。然而,添加过多的肋片会导致储热密度过低,因此为了同时获得较大的储热速率和储热密度,本研究将高导热材料体积占比控制在 15% 较为合理。从图 6(b)可以看出,高导热材料体积占比为 15% 和 20% 的两种结构的平均温度也较为接近,且明显高于另外两组,这说明加入 15% 的高导热材料已经足够,再继续增加肋片体积很难进一步提升传热性能。

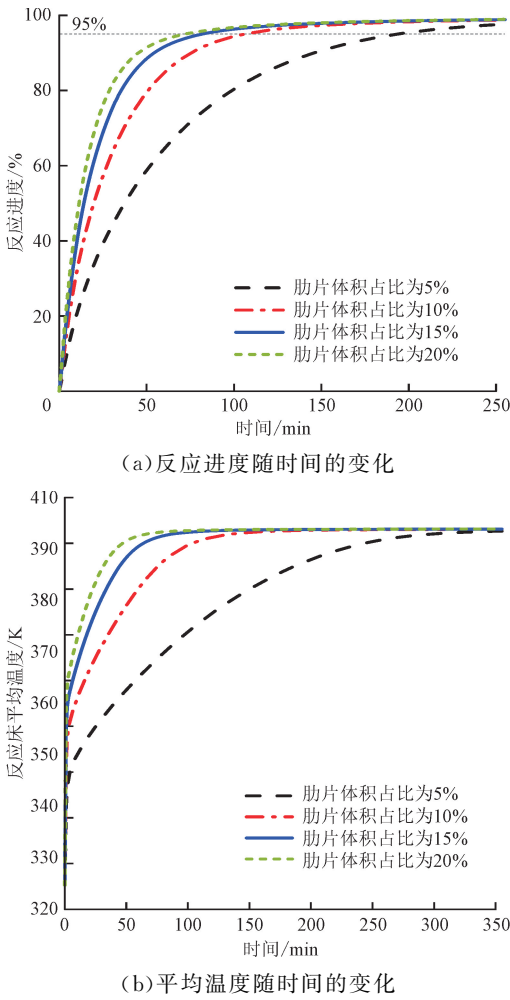


图 6 4 组结构反应进度和平均温度随时间的变化  
Fig. 6 Variation of reaction conversion and average temperature over time for the four groups of structures

2.3 拓扑优化肋片与直肋片对比

为了说明拓扑优化肋片优越的传热性能,本文对 3 种反应器进行了研究,如图 7 所示,包括无肋片的反应器、直肋式反应器和拓扑优化肋片反应器。其中,直肋式反应器中高导热材料体积占比与拓扑优化肋片反应器相同,均为 15%。

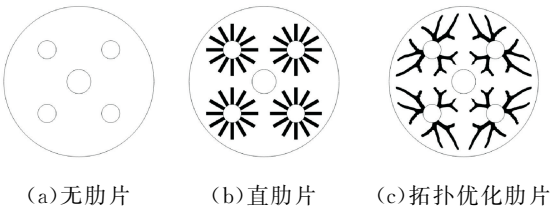


图 7 3 种反应器横截面示意图

Fig. 7 Schematic of the cross-section of three reactors

图 8 为不同时刻反应进度和床层温度的分布情况,可以看出,在初始阶段(20 min),化学反应主

要在 HTF 管道和肋片周围进行。原因在于,这些区域首先被加热,温度迅速升高,从而促使反应进行。在 50 min 时,由于反应物的热导率较低,无肋片的反应器中大部分反应物仍未反应。直肋式反应器中靠近肋片区域的反应物反应迅速,远离肋片区域的反应物仍未反应。相比之下,由于拓扑优化肋片反应器传热性能更好,整体温度更加均匀,反应器内各处的储热材料均快速反应,反应过程此时已基本结束,反应速率远大于其他两种类型的反应器。

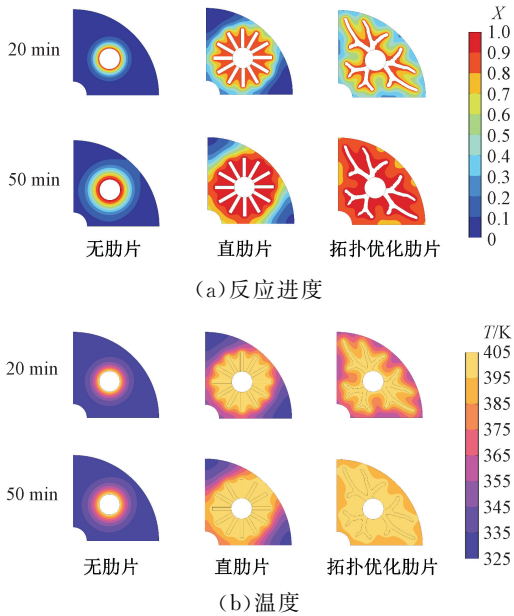
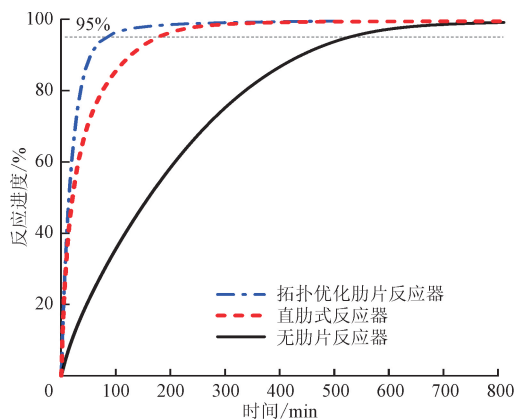


图 8 不同时刻下 3 种反应器中温度和反应进度的分布  
Fig. 8 Distributions of temperature and reaction conversion in the three reactors at different time

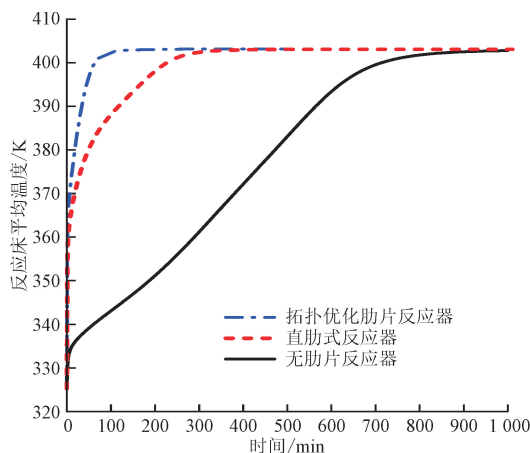
图 9 展示了上述 3 种反应器的反应进度以及床层平均温度随时间变化的对比情况。由图 9(a)可以看出,拓扑优化肋片反应器的反应速率高于直肋式反应器,且远大于无肋片的反应器。拓扑优化肋片反应器反应完成的时间约为 82 min,直肋式反应器约为 178 min,而无肋片的反应器反应时间约为 528 min。因此,相较于不安装肋片和安装直肋片而言,拓扑优化肋片使得反应时间分别缩短了 84.5% 和 53.9%。

图 9(b)展示了 3 种反应器的平均温度随时间的变化情况。从中可以看出,3 种反应器平均温度的变化过程均表现出快速上升、升温放缓、温度不变 3 个阶段。这是因为,HTF 提供的热量会增加反应床的温度,而水合盐的脱水反应伴随着吸热,造成升温速率的下降,最后反应结束达到最高温度后不再

变化。通过对比3条曲线可以看到,拓扑优化肋片反应器相较于另外两者而言,升温放缓的阶段不明显,这说明拓扑优化导入反应床的热量远高于吸热反应所消耗的热量,从而体现出拓扑优化设计出的肋片具有优越的传热性能。



(a) 反应进度随时间的变化



(b) 平均温度随时间的变化

图9 3种反应器中反应进度及平均温度随时间的变化

Fig. 9 Variation of reaction conversion and average temperature over time for the three reactors

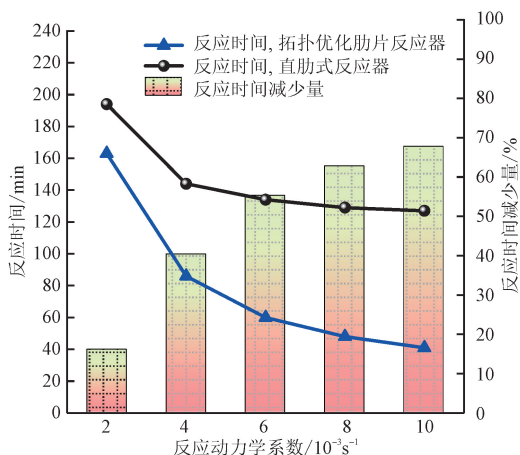
## 2.4 优化肋片性能验证

为了进一步验证拓扑优化肋片在不同条件下的广泛适用性,参考文献[18],本文选取了反应动力学系数(见式(8))以及TCM导热系数进行分析,并在此基础上将前文提到的直肋式反应器与拓扑优化肋片反应器进行对比。

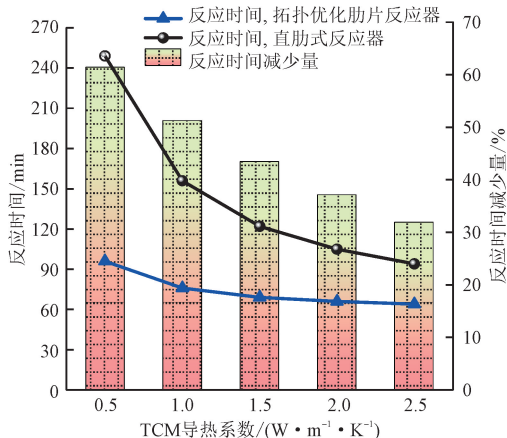
图10(a)展示了反应动力学系数对两种反应器反应时间的影响。动力学系数由温度和压力计算得到,可反映出温度和水蒸气压力对反应速率的综合影响。从图中可以看出,随着动力学系数的增大,两种反应器的反应时间均有所缩短,而拓扑优化反应器的反应时间始终更短,并且相较于直肋式反应器

的时间减少量也逐渐增大。当反应动力学系数从 $0.002\text{ s}^{-1}$ 增大到 $0.01\text{ s}^{-1}$ 时,拓扑优化肋片相对于直肋片的反应时间减少量从15.98%增大到67.71%。这说明在不同的工况条件下,拓扑优化反应器始终保持着更高的储热性能,并且反应速率越大其对于储热性能的提升越大。

图10(b)为TCM导热系数对反应时间的影响。随着TCM导热系数变小,直肋式反应器的储热时间显著增大,而拓扑优化反应器则变化不大。当导热系数为 $2.5\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 时,拓扑优化肋片相对于直肋片的时间减少量为31.91%,然而当导热系数变小为 $0.5\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 时,反应时间减少量增加到了61.44%。这是因为,拓扑优化肋片反应器整体传热性能比直肋式反应器更好,在TCM材料自身的导热能力较差的时仍然具有高效的储热性能。



(a) 反应动力学系数



(b) TCM 导热系数

图10 不同反应动力学系数及TCM导热系数下两种反应器的储热反应时间及时间减少量

Fig. 10 The reaction time and time reduction for the two reactors with different reaction kinetics coefficients and TCM thermal conductivity coefficients

### 3 结 论

为了提升水合盐热化学储热性能,本文建立了传热-流动-反应耦合的多物理场模型。通过拓扑优化的方法,设计出适用于热化学储热反应器的高性能肋片结构,分析了高导热材料体积占比对优化结果的影响,并将拓扑优化得到的结构与直肋片以及无肋片反应器的储热性能作比较,得出了以下结论。

(1)通过对比不同的高导热材料体积占比对优化结果的影响,确定了本文拓扑优化最优的高导热材料体积占比为 15%。

(2)在储热过程中,相较于不安装肋片和安装直肋片而言,拓扑优化肋片使得反应时间分别缩短了 84.5%和 53.9%。

(3)在不同的反应速率系数下,拓扑优化结构始终保持更加优异的储热性能,且随着反应速率系数增大,拓扑优化肋片对于储热性能的提升也越显著。

(4)拓扑优化肋片具有高效的传热性能,在储热材料导热系数较低的条件仍然适用,且相较于直肋片对储热性能的提升效果更好。

### 参考文献:

[1] 郑玉圆,葛志伟,韩翔宇,等. 中高温钙基材料热化学储热的研究进展与展望 [J]. 化工学报, 2023, 74(8): 3171-3192.  
ZHENG Yuyuan, GE Zhiwei, HAN Xiangyu, et al. Progress and prospect of medium and high temperature thermochemical energy storage of calcium-based materials [J]. CIESC Journal, 2023, 74(8): 3171-3192.

[2] 曾光,纪阳,符津铭,等. 热储能技术研究现状、热点趋势与应用进展 [J]. 中国电机工程学报, 2023, 43(S1): 127-142.  
ZENG Guang, JI Yang, FU Jinming, et al. Research status, hot trends and application progress of thermal energy storage technology [J]. Proceedings of the CSEE, 2023, 43(S1): 127-142.

[3] 刘涵,曲明璐,叶振东,等. 钙镁二元盐复合材料的储热性能 [J]. 化工进展, 2024, 43(4): 1764-1773.  
LIU Han, QU Minglu, YE Zhendong, et al. Evaluation of the thermal energy storage performance of calcium-magnesium binary composite salt hydrates [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2024, 43(4): 1764-1773.

[4] RANJHA Q, VAHEDI N, OZTEKIN A. High-temperature thermochemical energy storage-heat transfer enhancements within reaction bed [J]. Applied Ther-

mal Engineering, 2019, 163: 114407.

[5] KANT K, SHUKLA A, SMEULDERS D M J, et al. Performance analysis of a  $K_2CO_3$ -based thermochemical energy storage system using a honeycomb structured heat exchanger [J]. Journal of Energy Storage, 2021, 38: 102563.

[6] LUO Xinyi, LI Wei, ZHANG Lianjie, et al. Effects evaluation of Fin layouts and configurations on discharging performance of double-pipe thermochemical energy storage reactor [J]. Energy, 2023, 282: 128821.

[7] YE H, TAO Y B. A novel three-dimensional cross-arranged fin structure for performance enhancement of thermochemical heat storage [J]. Journal of Energy Storage, 2023, 61: 106828.

[8] SHI Tao, XU Huijin, QI Cong, et al. Multi-physics modeling of thermochemical heat storage with enhance heat transfer [J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 198: 117508.

[9] YAO Q Y, ZHAO C Y, ZHAO Y, et al. Topology optimization for heat transfer enhancement in latent heat storage [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2021, 159: 106578.

[10] TIAN Yang, LIU Xianglei, XU Qiao, et al. Bionic topology optimization of fins for rapid latent heat thermal energy storage [J]. Applied Thermal Engineering, 2021, 194: 117104.

[11] 甄华龙,张胜棋,刘运生,等. 相变储能单元内拓扑翅片优化及其传热特性研究 [J]. 西安交通大学学报, 2024, 58(7): 62-72.  
ZHEN Hualong, ZHANG Shengqi, LIU Yunsheng, et al. Optimization of topological fins in phase change energy storage units and research on heat transfer characteristics [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2024, 58(7): 62-72.

[12] HE Zijian, MA Hongting, LU Shilei. Design and experimental investigation of topology-optimized fin structures for enhanced heat transfer in latent heat thermal energy storage units [J]. Journal of Energy Storage, 2024, 80: 110272.

[13] SHI Tao, XU Huijin. Integration of hydrogen storage and heat storage in thermochemical reactors enhanced with optimized topological structures: charging process [J]. Applied Energy, 2022, 327: 120138.

[14] 游吟,赵耀,赵长颖,等. 相变储热单元内肋片结构的拓扑优化 [J]. 科学通报, 2019, 64(11): 1191-1199.  
YOU Yin, ZHAO Yao, ZHAO Changying, et al. The topology optimization of the fin structure in latent heat storage [J]. Chinese Science Bulletin, 2019, 64(11):

- 1191-1199.
- [15] 葛继翔, 纪明希, 丁玉龙, 等. 水合盐热化学反应器参数优化与供暖应用案例分析 [J]. 储能科学与技术, 2023, 12(12): 3799-3807.
- GE Jixiang, JI Mingxi, DING Yulong, et al. Parameter optimization of a thermochemical reactor using salt hydrates: a case study of heating application [J]. Energy Storage Science and Technology, 2023, 12(12): 3799-3807.
- [16] YE H, TAO Y, CHANG H, et al. Structure optimization of a novel porous tree-shaped fin for improving thermochemical heat storage performance [J]. Applied Thermal Engineering, 2023, 225: 120190.
- [17] COMSOL. 包含 15,000 多种材料的综合材料库 [EB/OL]. [2024-02-20]. <https://cn.comsol.com/material-library>.
- [18] CHEN Wei, LI Wei, ZHANG Yunsong. Analysis of thermal deposition of  $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  hydrated salt in the sieve-plate reactor for heat storage [J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 135: 95-108.
- [19] FOPAH LELE A, KUZNIK F, RAMMELBERG H U, et al. Thermal decomposition kinetic of salt hydrates for heat storage systems [J]. Applied Energy, 2015, 154: 447-458.
- [20] XU Chao, XIE Yunyun, LIAO Zhirong, et al. Numerical study on the desorption process of a thermochemical reactor filled with  $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  for seasonal heat storage [J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 146: 785-794.
- [21] CHEN J T, XIA B Q, ZHAO C Y. Topology optimization for heat transfer enhancement in thermochemical heat storage [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 154: 119785.
- [22] LAZAROV B S, SIGMUND O. Filters in topology optimization based on Helmholtz-type differential equations [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2011, 86(6): 765-781.
- [23] WANG Fengwen, LAZAROV B S, SIGMUND O. On projection methods, convergence and robust formulations in topology optimization [J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2011, 43(6): 767-784.
- [24] 杨娜, 王成成, 杨慧, 等. 基于热化学反应的硅胶非等温动力学计算及储热性能分析 [J]. 储能科学与技术, 2022, 11(5): 1331-1338.
- YANG Na, WANG Chengcheng, YANG Hui, et al. Non-isothermal kinetics calculation and heat storage performance analysis of silica gel based on thermochemical reaction [J]. Energy Storage Science and Technology, 2022, 11(5): 1331-1338.
- [25] RAMMELBERG H U, SCHMIDT T, RUCK W. Hydration and dehydration of salt hydrates and hydroxides for thermal energy storage-kinetics and energy release [J]. Energy Procedia, 2012, 30: 362-369.
- [26] LAHMIDI H, MAURAN S, GOETZ V. Definition, test and simulation of a thermochemical storage process adapted to solar thermal systems [J]. Solar Energy, 2006, 80(7): 883-893.

(编辑 杜秀杰)