

# 中国工程热物理学会

传热传质学学术会议

论文集（下册）

二〇〇六

南京

中国工程热物理学会编



# 中国工程热物理学会

传热传质学学术会议

论文集（下册）



Chinese Society of Heat and Mass Transfer

2006 年      南京

## 传热传质学学术会议论文集(下册) 目录

### 八. 数值模拟(续)

- 063279 纳米 $\alpha$ 颗粒导热率的 MD 模拟.....向 恒 姜培学 刘其鑫(1221)
- 063285 基于红外测温的试件内部缺陷的识别算法研究.....范春利 孙丰瑞 杨 立(1225)
- 063286 SCSD 格式数值稳定性及计算精度的研究.....袁达忠 马学虎 兰 忠 白 涛(1229)
- 063292 稳态单气泡吸收过程的模型研究.....赵 博 张晓闻 李 彦 佟会玲 糕玉群 陈吕和(1233)
- 063309 振荡流共轭换热格子 Boltzmann 模拟.....孟繁孔 李志信(1238)
- 063320 磁性流体导热系数的数值模拟.....李 强 黄 璐 宣益民(1242)
- 063322 建筑风环境模拟及其舒适度的分析.....张 涛 陈宝明(1246)
- 063331 N-7000-1 型凝汽器数值建模与管束布局优化...柳雄斌 孟继安 朱德华(1250)
- 063333 狭窄通道内不同涡流发生器强化传质的数值模拟.....胡 腾 闵敬春 宋耀祖(1254)
- 063335 电场作用下气泡变形的数值研究.....彭 耀 陈 凤 宋耀祖 陈 民(1259)
- 063340 高功率 LED 的散热分析.....丁新刚 梁新刚(1264)
- 063341 Lateral Epitaxy Overgrown (LEO) GaN 导热系数的数值研究.....梁新刚 丁新刚(1268)
- 063353 波纹板通道内的自维持振荡流动及换热.....李海朋 丰镇平(1273)
- 063372 直接空冷式凝汽器三维流场特性数值分析.....胡汉波 李隆健 张义华 崔文智(1279)
- 063373 地铁火灾 CFD 模拟时边界条件的研究.....赵耀华 胡家鹏 樊洪明 张达明(1284)
- 063374 地铁车站火灾时火源强度及位置对烟气流动的影响.....赵耀华 张达明 樊洪明 胡家鹏(1288)
- 063377 环形空间换热管的布置.....崔晓卫 何树延 丁溯源(1292)
- 063378 发散孔纵向波纹隔热屏冷却特性的数值研究...唐 婵 常海萍 毛军逵(1297)
- 063379 离散孔纵向波纹隔热屏气膜冷却特性研究...唐 婵 常海萍 毛军逵(1303)
- 063384 叉流平板型间接蒸发冷却过程变工况模拟.....殷勇高 张小松 蒋 毅(1307)
- 063385 膜蒸馏装置热容腔流场数值模拟的可行性分析.....齐晓娟 田 瑞 杨晓宏 贾晨霞 徐婷婷 李 嵩(1314)
- 063386 置换通风流场和温度场的数值模拟研究.....廖凯荣 李友荣 吴双应 彭 岚(1321)
- 063387 环形浅液池内热毛细对流的渐近解.....赵新兴 李友荣 彭 岚 吴双应 曾丹苓(1328)
- 063389 二维 Rayleigh-Bénard 对流的插值格子-Boltzmann 方法模拟研究.....王 勇 何雅玲 童长青 刘迎文(1335)
- 063392 顺序输送竖直管道两种油品传质数值研究.....赵会军 张青松 王树立(1340)
- 063398 溴化锂水溶液在倾斜平板上绝热吸收过程的数值模拟.....孙 欢 中 江 马 麟(1345)
- 063399 梯度磁场下流体三维结构的格子-Boltzmann 方法模拟.....宣益民 李 强 张乐莹(1352)
- 063400 冲击角对射流强化换热影响的数值研究.....钱吉裕 平丽洁 徐德好 宣益民 李 强(1357)
- 063403 卫星模型热控材料退化前后的温度场计算.....宋艳生 赵国民(1362)

### 九. 测量及显示技术

- 063003 纳米流体导热系数测量及理论预测...王照亮 唐大伟 布文峰 郑兴华(1367)

- 063004  $3\omega$ 法测量单根碳纤维导热系数和热容.....王照亮 唐大伟 布文峰 张伟刚(1373)
- 063017 利用瞬态平面热源法测定材料的导热系数.....孙亮亮 陈卫翠 方肇洪(1378)
- 063024 红外热成像方法研究受热降膜流动...张 锋 耿 皎 赵贤广 张志炳(1386)
- 063032 层/湍流等离子体射流的稳定性与三维特性的实验观测研究.....潘文霞 孟 显 李 腾 陈 熙 吴承康(1390)
- 063107 基于红外成像的埋地输油管道定位方法研究.....李 栋 王 英 吴国忠 齐晗兵(1394)
- 063138 冲击/发散冷却气膜冷却效率的实验研究.....王 磊 张靖周 杨卫华 李廷斌(1398)
- 063157 冷冻干燥中升华界面移动的微 CT 实验研究.....肖 鑫 陶乐仁 习德成 马 戈 王金锋(1403)
- 063211 污垢热阻动态监测装置及其传热计算方法的研究.....全贞花 陈永昌 王春明 李 兵 马重芳(1408)
- 063225 探针移动速度对等离子体射流热流密度测量结果的影响.....孟 显 潘文霞 吴承康(1414)
- 063238 红外双向反射分布函数的影响因素分析.....谢 鸣 任 虎 李 颖 阮立明 谈和平(1418)
- 063243 扰流柱对涡轮叶片尾缘气膜冷却的影响.....李廷斌 杨卫华 王 磊 张靖周(1424)
- 063246 环形浅液层内热流体波的可视化实验研究.....石万元 李友荣 曾丹苓 今石宣之(1429)
- 063249 脉动热管传热性能的实验研究.....尹大燕 贾 力(1434)
- 063256 HgCdTe 液相外延薄膜组分分布和内波的产生.....黄为民 王亚敏 魏彦锋(1438)
- 063269 倾斜均质表面上非等径液滴聚合对液滴运动的影响.....邢淑敏 廖 强 朱 恂 王 宏(1444)
- 063342 电场对冷态气泡生长过程的研究.....陈 凤 彭 耀 宋耀祖 陈 民(1449)
- 063349 纵向涡强化换热的 M-Z 干涉流动显示技术.....刘 永 宋耀祖(1454)
- 063368 测定干建材 VOC 散发参数的密闭小室法.....王新轲 张寅平 钱 科(1458)
- 063375 微管内层流流动的粘性耗散的研究...赵耀华 侯亚丽 张承武 刘志刚(1463)

## 十. 工业应用、换热器及其它

- 063012 半导体冷却器的串并联计算.....裴念强 刘 杰 郭开华 李廷勋(1467)
- 063014 梯形轴向槽道热管传热特性的实验研究.....曹洪振 程 林 栾 涛 柏 超(1472)
- 063028 微型制冷系统的研制与性能测试.....钟晓晖 张行周 吴玉庭 杜春旭 马重芳(1477)
- 063034 正交试验设计方法在涡流板研究中的应用.....高 超 宋福元 周少伟 张 鹏 王朋涛 陈跃进(1481)
- 063036 蒸汽发生器传热管裂纹的实验研究...薛 静 宋京凯 姚祺峰 姜任秋(1486)
- 063038 挤压—犁削微沟槽热管传热性能的理论研究...汤 勇 王小伍 陈 平(1491)
- 063039 基于特性参数优化预测的水—水热泵仿真模型的研究...杨卫波 施明恒(1497)
- 063045 基于分布参数的板翅式换热器熵产分析.....张丽娜 杨春信(1502)
- 063047 碟式点聚焦器反射面倾斜误差对聚焦器效率的影响.....高 瑶 韩 东(1508)
- 063059 下降液膜孤波分析.....丁四中 段日强 姜胜耀(1513)
- 063068 展柜控湿氮气充注系统的实验研究.....宋磊磊 吴玉庭 康玉梨 赵庆国 马重芳(1521)
- 063069 硅藻土调湿涂料的研制及实验研究...康玉梨 吴玉庭 宋磊磊 马重芳(1525)
- 063081 X43 高超声速飞行器的飞行热走廊研究.....金 玲 王安龄 桂业伟 耿湘人 唐 伟(1529)

- 063085 负载条件下太阳能热气流电站系统的数值模拟.....明廷臻 刘 伟 彭仕文 许国良(1534)
- 063092 弓形折流板换热器动态特性实验研究及神经网络预测.....李丹琳 吴 峰 谢公南 孙 微 唐凌虹 王秋旺(1539)
- 063093 原表面回热器表面传热系数的遗传算法分离确定.....梁红侠 谢公南 曾 敏 王秋旺 丰镇平(1543)
- 063103 溶液蓄能特性的研究.....杜 斌 施明恒(1547)
- 063106 海底输油管道停输传热的实验研究.....吴国忠 杨显志 齐晗兵 李 栋 孙伟栋(1551)
- 063119 圆管内一维热声波的实验研究.....周志杰 刘继平 种道彤 严俊杰(1556)
- 063136 一种亲水/憎水双极膜的全热交换性能测试.....张 炎 张立志 项 辉(1560)
- 063140 反重力条件下 CPL 传热性能的实验研究.....李 强 钱吉裕 宣益民(1564)
- 063143 平板式环路热管运行特性的实验研究.....李 强 周海迎 宣益民(1569)
- 063153 解决换热器内流动组织问题的一种几何方法.....黄为民 童正明 秦桂花 周 微 李 楠 方开明(1574)
- 063155 太阳能喷射式制冷系统的焓分析.....谷宇海 陶乐仁 徐振立 肖 鑫(1579)
- 063159 弧线管微粒污垢特性的实验研究.....徐志明 张仲彬 邵天成(1584)
- 063171 一种研究密闭式冷却塔换热的方法.....梁 浩 项品义 章立新 杨 茉 黄景山(1588)
- 063172 一种多塔型冷却塔的试验装置.....章立新 陈 双 杨 茉 华 琳 李子钧 黄景山(1592)
- 063174 多股流换热器通道排列的结构性能连续性原理及优化.....崔国民 张 勤 陆 贞 高孝忠(1596)
- 063175 换热器动态设计方法研究.....崔国民 郭 佳 王芳芳 张 勤(1600)
- 063176 多股流换热器网络及其衍生约束法综合优化研究.....崔国民 陆 贞 张 勤 高孝忠(1604)
- 063177 换热器网络温差场分析及温差均匀性因子的建立.....崔国民 吕岩岩 张 勤(1608)
- 063178 换热网络综合的蒙特卡罗复合形法.....张 勤 崔国民 关 欣(1612)
- 063179 禁忌搜索方法优化换热网络.....张 勤 崔国民 高孝忠 陆 贞(1616)
- 063181 换热网络模拟及优化中的物性敏感性分析.....高孝忠 崔国民 张 勤 陆 贞(1620)
- 063183 棋盘模型在换热网络优化中的应用.....陆 贞 崔国民 张 勤 高孝忠(1624)
- 063184 换热网络保守分级匹配优化方法.....陆 贞 崔国民 高孝忠 张磊磊(1628)
- 063190 楔形通道中扰流柱的优化分布及其传热和阻力特性的实验研究.....徐 青 黄小新 赵广超 李 军 凌长明(1632)
- 063192 R22 在水平低肋管外凝结换热的参数优化.....张定才 王 凯 何雅玲 陶文铨(1637)
- 063194 阴极不同进气对 PEMFC 性能影响的实验研究.....闵春华 林 鸿 缙志斌 李增耀 何雅玲 陶文铨(1641)
- 063199 弓形折流板换热器中折流板对换热器性能的影响.....黄文江 陶文铨(1645)
- 063202 工作角度对燃料电池性能影响的实验研究.....姜 炜 何雅玲 唐桂华 陶文铨(1649)
- 063208 热管式换热器的动态特性.....林瓦妹 李科群 谢公南(1653)
- 063210 冷却水在强化传热管内结垢的能量损耗研究(四).....李 蔚 胡亚才 严建华 朱 华 倪 煜(1657)
- 063212 高压静电场抗垢性能的实验研究.....王春明 全贞花 陈永昌 李 兵 马重芳(1663)
- 063217 双绕线型螺旋槽管管内单相流体换热及阻力特性研究.....郭 莹 余 敏 杨 茉 李 凌 卢 玫(1668)
- 063218 螺旋升角对凝结换热特性影响的研究.....余 敏 郭 莹 马俊杰 杨 茉 卢 玫(1672)

- 063220 螺旋槽管强化换热熵产分析和热力性能评价.....余 敏 马俊杰 郭 莹 卢 玫 李 凌(1676)
- 063228 超结构换热器网络综合优化的遗传/模拟退火算法—I. 改进的换热器网络通用解方法.....温卿云 罗 行 马虎根 杨杉杉 陈德珍(1680)
- 063229 超结构换热器网络综合优化的遗传/模拟退火算法—II. 遗传/模拟退火算法及应用.....温卿云 罗 行 马虎根 杨杉杉 陈德珍(1686)
- 063240 棒材穿浊水冷却优势的探寻.....任吉堂 王翠苹 陈连生 金建国 徐树成(1692)
- 063251 直接空冷凝汽器传热性能实验设计.....苏咸伟 杜小泽 席新铭 杨勇平 杨立军 冯丽丽(1698)
- 063280 双热管式吸附床的设计和传热性能测试.....王 凯 夏再忠 吴静怡 李素玲 王如竹(1703)
- 063281 一种控温热管理器的传热传质分析...李 胜 吴静怡 王如竹 皇甫艺(1708)
- 063282 冷却水在强化管中的结垢实验研究(二) .....李 蔚 吴 杰 胡亚才 严建华(1714)
- 063283 等效参数法在舰载相控阵雷达温度场分析中的应用研究.....胡双喜 谈和平 董士奎 杨 立(1722)
- 063304 节水环保型冷却塔的研究...吴晓敏 姚 奇 戴万田 尹 博 王维城(1726)
- 063308 多股流换热器温差场均匀性因子.....邢 程 梁新刚 李志信(1730)
- 063312 热气动式微泵的热分析和优化设计.....薛 辉 王 玮 李志信(1734)
- 063319 热管电器冷却器性能试验与分析.....赵孝保 李奇贺 杨 翠 恽 超 黄柒辉(1739)
- 063321 复合结构毛细蒸发器传热特性研究.....李 强 周海迎 宣益民(1745)
- 063334 传质势容耗散极值原理及其在室内通风排污过程优化中的应用.....陈 群 任建勋(1750)
- 063337 湿空气处理过程焓差场均匀性原则验证.....吴良柏 李 震 宋耀祖(1755)
- 063343 铜翅片蒸发器的亲水处理及制冷性能评价.....慎利峰 闵敬春 高屹峰 郑永新(1759)
- 063347 二维传热数值计算程序在图形卡上的实现.....杨昆仑 宋耀祖 任建勋(1763)
- 063350 太阳能光伏发电及供热系统的建模与分析.....程雪涛 徐向华 梁新刚(1767)
- 063351 一种降低大功率激光系统中反射镜面热变形的设计方法.....周乐平 唐大伟(1772)
- 063354 高功率脉动热管的流动和传热特性.....曲 伟 周 岩 马同泽(1778)
- 063355 膜分离中热质耦合传递过程分析.....苏 铭 闵敬春(1782)
- 063357 白激振荡流热管内多相流动传热特性实验研究.....商福民 刘登瀛 冼海珍 杨勇平 杜小泽(1787)
- 063358 声空化强化振荡流热管传热实验研究.....冼海珍 刘登瀛 商福民 杨勇平 杜小泽(1793)
- 063359 流速对催化降解污染物甲醛的影响研究.....盛建平 鹿院卫 吕施展 李文采 马重芳(1797)
- 063360 污染物传质作用下的室内光催化空气净化.....鹿院卫 李文采 盛建平 王 玮 马重芳(1802)
- 063383 影响回热器换热的各参数讨论.....陈燕燕 罗二仓 戴 巍(1807)
- 063390 分离式热管型太阳能热水器运行性能的理论分析.....张 洁 李 勇 王如竹 郭俊杰(1813)
- 063395 强化管冷却水污垢热阻计算误差分析(二) .....李 蔚 吴 杰 胡亚才 严建华(1819)
- 063396 内螺纹强化管传热和阻力特性(一) .....李 蔚 胡亚才 严建华 洪荣华 倪 煜(1824)
- 063397 强彻体力场下质子交换膜燃料电池性能的初步研究.....常欧亮 常海萍(1828)

# 纳米氩颗粒热导率的 MD 模拟

向恒 姜培学 刘其鑫

热科学与动力工程教育部重点实验室, 清华大学热能工程系, 北京 100084

联系电话: (010) 62772661, E-mail: Jiangpx@mail.tsinghua.edu.cn

**摘 要:** 为了研究边界对纳米颗粒导热的影响, 本文构造了两种计算模型, 采用非平衡分子动力学模拟方法研究了固定原子壁面边界条件下, 平均温度在 45K、半径为 6.113~8.236nm 的球形纳米氩颗粒的热导率。模拟结果表明, 在固壁边界条件下, 颗粒的热导率均小于相同厚度、相同边界条件的薄膜的热导率; 模型 I 颗粒的热导率要小于模型 II 颗粒的热导率。

**关键词:** 纳米颗粒 热导率 非平衡分子动力学模拟

## 1 引言

近年来, 微/纳米尺度的传热传质现象逐渐成为研究热点<sup>0</sup>。在纳米尺度下已有的研究多以薄膜导热为研究对象, 研究边界和界面在微/纳米尺度下对传热的影响。而事实上, 在微/纳米尺度下除了有薄膜之外, 还有别的很多结构, 比如颗粒结构, 更是广泛存在于纳米科技与纳米材料领域。随着纳米材料和纳米科技的发展, 随着对微/纳米尺度传热传质研究的深入, 弄清楚纳米尺度下颗粒的导热规律显得日益重要。

针对纳米厚度薄膜的导热已有比较多的研究<sup>234</sup>, 可分为分子动力学模拟(MD)、Boltzmann 输运方程(BTE)求解及实验研究等。纳米颗粒导热的研究, 一方面集中在 BTE 的求解, 另一方面集中在纳米流体的相关研究。在纳米颗粒导热研究方面应用 BTE 就是在球形区域里求解 Boltzmann 输运方程。Chen<sup>5</sup>采用辐射方程求解了嵌入在无穷大基体上的颗粒附近的导热, 展示了当颗粒尺寸与声子自由程相当时使用 BTE 和 Fourier 定律求解结果上的明显差异。Zeng 和 Liu<sup>6</sup>在 Chen 的基础上, 在圆柱及球壳区域中求解了 BTE, 得出了颗粒等效热导率更为一般的结论。纳米流体是将纳米颗粒加入到普通流体里形成的, 可以明显改变流体的热物性, 王<sup>7</sup>等对此进行了研究。对于颗粒的 MD 模拟, Yuan 和 Jiang<sup>8</sup>采用非平衡分子动力学(NEMD)方法, 研究了绝热边界条件下立方镍颗粒中由于晶格振动所产生的热导率随颗粒尺寸的变化, 并对电子的导热进行了分析。

本文选择球形氩颗粒, 采用 NEMD 方法, 对纳米氩颗粒的导热性能进行模拟, 研究在固壁边界条件下颗粒的热导率随颗粒尺寸、加热区域大小等因素的变化规律。

## 2 数理模型及模拟方法

对纳米颗粒导热, 本文考虑了两种模型。如图 1 所示, 模型 I 是先构造一个大的球形区域, 在球心处选择一个小的球形区域作为加热区域, 从球形区域外表面往球心方向选择一定厚度的球壳作为冷却区域, 夹在中间的为导热区域。为了防止原子的“蒸发”, 整个球形区域的外面“包裹”着固定不动的原子作为固壁边界条件(对应于绝热边界条件), 固壁最薄处厚

度为两个晶胞长。模型 II 在第一种模型的基础上，在球心处加热区域内“抠”出一个更小的球形区域作为固壁边界条件，如图 2 所示。

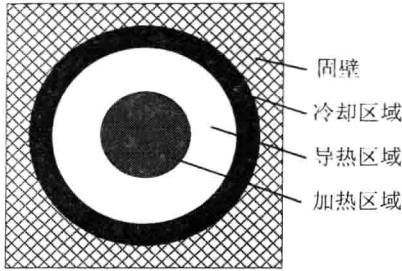


图 1 颗粒模型 I (中心截面)

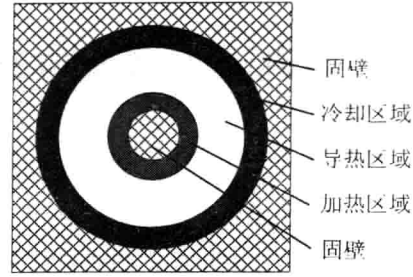


图 2 颗粒模型 II (中心截面)

本文模拟了下列两种情况：1) 模型 I 中，冷却区域的厚度为两个晶格长度，导热区域的厚度为六个晶格长度，冷却和导热区域厚度不变，改变加热区域半径从而改变颗粒尺寸；2) 模型 II 中，加热区域和冷却区域的厚度均为两个晶格长度，导热区域的厚度为六个晶格长度，加热、冷却和导热区域厚度均不变，改变球心处固壁区域的半径从而改变颗粒尺寸。

在模拟中，将固壁边界以内的颗粒区域视为一 NTV 正则系综，以一定周期(本文选择 10 步为周期)通过校正速度以使加热区域和冷却区域的温度保持在设定值附近。

Fourier 定律在微/纳米尺度的适用性被诸多研究者所讨论和置疑，本文关注的焦点不在此，依然用 Fourier 定律来定义和计算热导率。依 Fourier 定律得到的球壳导热公式为：

$$\phi = \frac{4\pi k(T_1 - T_2)}{1/r_1 - 1/r_2}, \quad (1)$$

其中  $\phi$  为热流量， $r_1$ 、 $r_2$  分别为球壳内外半径， $T_1$ 、 $T_2$  分别为球壳内外表面温度。由球壳导热公式可以得到颗粒热导率的计算式为：

$$k = \frac{(\Delta E_{k,in} + \Delta E_{k,out})(1/r_1 - 1/r_2)}{8\Delta t\pi(T_1 - T_2)}, \quad (2)$$

其中  $\Delta E_{k,in}$  为从加热区域流入系统的热量， $\Delta E_{k,out}$  为从冷却区域流出系统的热量， $\Delta t$  为时间长度， $r_1$ 、 $r_2$  分别为冷却区域和加热区域的平均半径， $T_1$ 、 $T_2$  分别为冷却区域和加热区域的平均温度。

模拟采用经改编过的 LAMMPS 程序<sup>9</sup>，程序采用 leapfrog 算法<sup>10</sup>，选用经典的 LJ 双体势能模型描述原子间相互作用，即

$$u(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6], \quad (3)$$

其中  $r$  为原子间距， $\varepsilon$  为势阱常数， $\sigma$  为平衡常数。模拟中的势能截断距离  $r_c$  选取  $2.5\sigma$ 。为了提高精度及简化运算，所有计算过程进行无量纲化处理<sup>10</sup>。无量纲温度的定义为  $T^* = k_B T / \varepsilon$ ，其中  $k_B$  为 Boltzmann 常数。

在氙的相图中选择一个固体状态点进行模拟，本文的选择为：无量纲密度为 1.0547，加热区域温度设置为 55K(无量纲值为 0.4591)，冷却区域设置为 35K(无量纲值为 0.2922)。时间步长  $\Delta t = 0.005\tau_0 \approx 10^{-14}\text{s}$ ，模拟  $5 \times 10^5$  步，总计  $5 \times 10^{-9}$  秒，对后  $4 \times 10^5$  步统计温度及热流。模拟中，颗粒半径方向晶胞数为 12~16 个，对应的颗粒半径为 6.113~8.236nm，对应的原子个数为 87808~186624。

3 模拟结果

将颗粒沿半径方向以晶胞长度进行分层，分出来的每一层均为球壳形状，统计球壳里原子的平均动能可以得到颗粒沿半径方向的温度分布。图 3、图 4 分别为模型 I 和模型 II 中的颗粒沿半径方向的无量纲温度分布。两图中的 4/6/8 指加热区域的外半径分别为 4/6/8 个晶格长度，两图中的曲线是对加热区域半径为 8 个晶格长度的颗粒的“导热区域”采用球壳导热温度分布公式(4)计算得到的结果。

$$T^* = T_2^* + (T_1^* - T_2^*) \frac{1/r - 1/r_2}{1/r_1 - 1/r_2} \tag{4}$$

从图 3、图 4 可以看出，对颗粒的导热区域采用公式(4)计算得到的温度分布与模拟的结果比较接近，因为公式(4)源自 Fourier 定律，这也在一定程度上说明了采用 Fourier 定律来定义和计算颗粒的热导率是可行的。图 3 中颗粒“加热区域”的中心温度超过所设定的 0.4591，这是因为控制的是整个加热区域的平均温度。

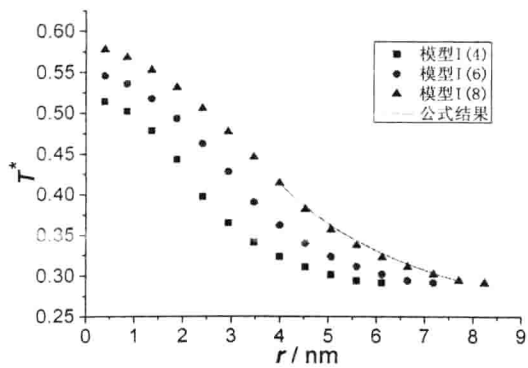


图 3 颗粒的无量纲温度分布

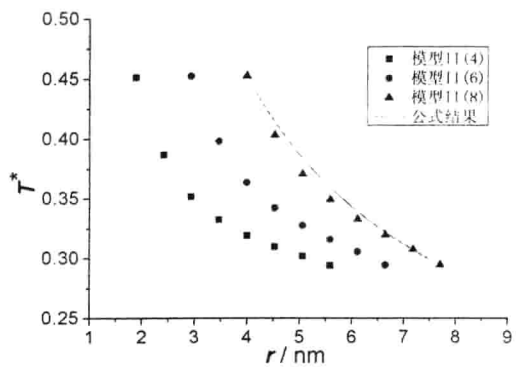


图 4 颗粒的无量纲温度分布

为了直观观察，本文提取了模型 I 的半径为 8.236nm 的颗粒在  $5 \times 10^5$  步时的位型快照，将快照沿两个中心面截开，如图 5 所示。图中原子由亮到暗的亮度变化表示了原子由大到小的相对速度。可以看出，在某一瞬间、单一截面上的原子的速度分布还比较杂乱，需要按前面提到的分层方法进行统计才能获得较为准确的速度分布和温度分布。同时，如果要进一步提高研究的精度和扩大研究范围，系统原子个数需要增大，这就需要借助并行计算的手段。

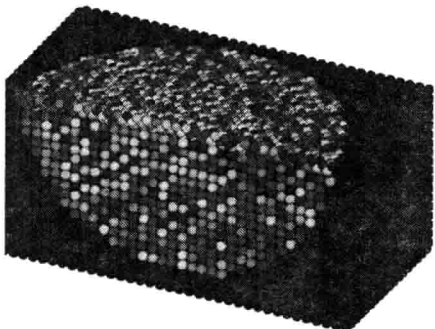


图 5 颗粒的位型快照截面

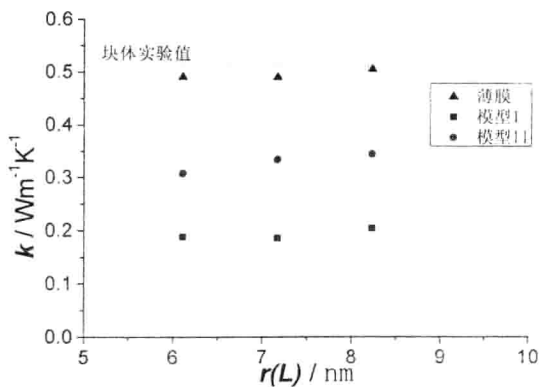


图 6 颗粒热导率随半径的变化

图6为两种模型的颗粒热导率 $k$ 随颗粒半径的变化。同时,块体实验值<sup>11</sup>及厚度与颗粒直径相同且边界条件相同的薄膜导热模拟结果也在图上标出。从图上可以看出,颗粒的 $k$ 值小于厚度与颗粒直径相同的薄膜的 $k$ 值;模型I的值要小于模型II的值。

颗粒的 $k$ 值小于厚度与颗粒直径相同、边界条件相同的薄膜的 $k$ 值,这种结果在Yuan和Jiang<sup>8</sup>的研究中也有体现,这是因为边界对声子的散射所引起的声子平均自由程下降所致。在颗粒中,固壁边界包裹着整个颗粒,所起的散射作用比薄膜里的更强。

模型I的值小于模型II的值,其直接原因是两种模型里的加热区域形状不同导致加热区域外表面的温度不同,由此引起加热区域外表面与导热区域的温差不同,从而使得相同颗粒半径下的两种模型的热流密度不同,并最终使得计算出的 $k$ 值不同。其机理上的原因是两种模型球心处的不同设计造成了对颗粒导热的约束不同,模型I的球心处虽然没有引入固壁边界条件,但球心附近不同方向上原子的互相作用起到了较强的约束作用。

在已有的薄膜导热模拟中, $k$ 值一般会随着薄膜的厚度增大而增大——即“尺寸效应”。本文所模拟的两个系列的情况主要探讨了颗粒导热在两种模型里的表现,虽然颗粒的尺寸有一定变化,但导热区域的厚度并没有变化,所以颗粒的 $k$ 值并无太大变化。颗粒的 $k$ 值随导热区域厚度变化的规律作者将会进一步研究。

## 4 结论

本文通过NEMD模拟了两种模型下的纳米氩颗粒的导热,模拟结果发现:

- (1) 颗粒的热导率小于厚度与颗粒直径相同、边界条件相同的薄膜的热导率;
- (2) 模型I颗粒的热导率要小于模型II颗粒的热导率。

## 参考文献

1. TIEN, C. L. and G. CHEN. Challenges in Microscale Conductive and Radiative Heat-Transfer [J]. J. Heat Transf.-Trans, 1994, 116, no. 4: 799-807.
2. Lukes J R, Li D Y, Liang X G, et al. Molecular dynamics study of solid thin film thermal conductivity [J]. ASME Journal of Heat Transfer, 2000, 122: 536-543.
3. 冯晓利, 李志信, 梁新刚, 等. 纳米薄膜热导率的分子动力学模拟 [J]. 科学通报, 2000, 45: 2113-2117.
4. 杨决宽, 陈云飞, 颜景平. 超薄氩膜热传导的分子动力学模拟 [J]. 东南大学学报, 2003, 33(3): 303-306.
5. CHEN G. Nonlocal and Nonequilibrium Heat Conduction in the vicinity of Nanoparticles [J]. ASME Journal of Heat Transfer, 1996, 118: 539-545.
6. Taofang Zeng, Wei Liu. Phonon heat conduction in micro- and nano-core-shell structures with cylindrical and spherical geometries [J]. Journal of Applied Physics, 2003, 93(7): 4163-4168.
7. 王补宣, 周乐平, 彭晓峰. 纳米颗粒悬浮液热物性及颗粒比热容尺寸效应 [J]. 工程热物理学报, 2004, 25(2): 296-298.
8. YUAN Shiping, JIANG Peixue. Thermal Conductivity of Small Metallic Particles [J]. International Journal of Thermophysics (in press).
9. S J Plimpton. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics [J]. J Comp Phys, 1995, 117: 1-19.
10. Rapaport D C. The art of molecular dynamics simulation [M]. Cambridge: University Press, 1995.
11. YS Touloukian, SC Saxena, PE Liley, et al. Thermal Conductivity-Nonmetallic Liquids and Gases [M]. Vol. 3 of Thermophysical Properties of Matter. New York: IFI/Plenum, 1970.

# 基于红外测温的试件内部缺陷的 识别算法研究

范春利, 孙丰瑞, 杨立

(海军工程大学动力工程系热工教研室, 湖北 武汉, 430033)

Email: chlfan@163.com, Tel: 027-83443367)

**摘要:** 本文对带有内部缺陷的试件建立了二维传热模型, 通过有限元法求解了在一定加热条件下试件表面的温度分布; 并通过共轭梯度法, 提出了根据表面所测温度分布识别零件内部形状、位置的计算方法。并通过数值实验进行了验证。

**关键词:** 导热反问题; 内部缺陷识别; 共轭梯度法

## 1. 引言

在动力设备所发生的各类故障中, 除在长期运行中因化学、电、热或机械等原因逐步引起的设备老化或失效外, 还有不少设备故障是由于所用材料或零件本身存在内部缺陷所致, 因此, 在设备制造过程中就已埋下了故障隐患。一旦条件成熟, 这些零件缺陷带来的故障隐患就会发展扩大甚致酿成重大设备事故<sup>[1]</sup>。如定子线棒内部的砂眼、空洞或裂纹等。近年来, 红外热成像技术作为一种无损检测手段, 由于其非接触、无损伤、适合于大面积检测等独特优势, 在设备零件缺陷的检测方面逐步取得了应用。然而, 目前的检测还处于定性的研究阶段, 因此研究红外缺陷定量识别方法具有重要的意义。

文献[2]通过试件脉冲加热法的一维传热模型, 提出了评估矩形缺陷深度算法, 并分析了缺陷大小及脉冲加热时间对检测结果的影响, 分析表明, 该方法具有较高的检测精度; 文献[3]将遗传算法应用于脉冲加热试件时圆盘状缺陷深度和半径的识别, 模拟实验验证了算法的鲁棒性和可靠性; 文献[4]提出了一种脉冲加热法确定圆盘状缺陷尺寸和深度的方法: 通过表面温差达到最大值时的温度分布曲线提取缺陷的尺寸特征, 根据达到最大温差的时间判断缺陷的深度; 文献[5]提出了电-热模型法通过分步加热试件提取试件内部的缺陷信息。对于稳态缺陷检测, 文献[6]提出了计算内部方形缺陷尺寸的二维数值搜索方法; 文献[7]提出了内部匹配法来确定二维试件内部矩形缺陷的尺寸; 文献[8]根据红外检测试件表面的温度分布确定试件内部的热流分布, 进而确定焊接缺陷的面积特征。

以上识别算法大多数识别方法只适合固定的一种规则形状的缺陷和试件, 为此文献[9, 10]通过 Levenberg-Marquardt 方法分别对二维和三维试件的内部缺陷的识别进行了研究。然而, 研究发现, 本方法在缺陷的描述参数比较少时(如规则缺陷), 精度很高, 但当参数较多时(如复杂不规则缺陷), 识别精度大大下降。为此, 本文在原有工作的基础上, 应用共轭梯度法来对识别算法进行改进, 并通过数值实验来研究其识别效果。

## 2. 缺陷试件的表面温度分布求解 (正问题)

带有内部缺陷的试件示意图见图1。在进行红外检测时,通过在试件一侧加热,通过测量试件表面温度分布来对试件内部的缺陷进行识别和评估。导热方程为:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (1)$$

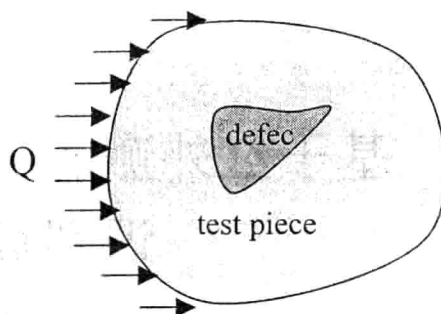


图1 带有内部缺陷的试件示意图

边界条件:

$$\begin{aligned} \xi_1: \quad Q &= -k \frac{\partial T}{\partial \xi_1} \\ \xi_2: \quad \alpha_r (t - t_f) &= -k \frac{\partial T}{\partial \xi_2} \end{aligned} \quad (2)$$

其中,  $\xi_1$  为外表面加热区(可以通过辐射或对流两种方式);  $\xi_2$  为外表面自然对流换热区;  $\alpha_r$  为自然对流系数;  $k$  为试件的导热系数。由于试件和空气的导热系数相差较大,为此忽略缺陷中的热量传递,为此假设缺陷边界绝热。

## 3. 内部缺陷的识别算法(反问题)

在进行反问题求解缺陷形状和位置时,方程(1)和边界(2)中,除了缺陷边界和位置未知(也就是描述缺陷边界和位置的数组  $\mathbf{p}(\theta)$  未知)以外,其余所有参数均为已知。检测表面的温度分布从红外热像图中可以得到,经离散为  $Y(i), i = 1 - m$ 。内部边界求解的反问题可以描述为根据外表面离散的温度值确定缺陷边界及位置  $\mathbf{p}(\theta)$ 。计算结果通过不断的迭代使得方程(3)达到最小。

$$J[\mathbf{p}(\theta)] = \sum_{i=1}^m [T_i - Y_i]^2 \quad (3)$$

其中  $T_i$  是根据  $\mathbf{p}(\theta)$  的估计值  $\hat{\mathbf{p}}(\theta)$  通过正问题求得的表面温度分布;  $m$  为外表面所测得的离散温度点的个数。

## 4. 共轭梯度法

根据共轭梯度法,迭代求解内部边界形状函数  $\mathbf{p}(\theta)$  的公式为:

$$\mathbf{p}^{n+1}(\theta) = \mathbf{p}^n(\theta) - \beta^n \mathbf{P}^n(\theta) \quad (4)$$

其中  $\beta^n$  为从第  $n$  步到第  $n+1$  步的搜索步长;  $\mathbf{P}^n(\theta)$  为共轭搜索方向:

$$\mathbf{P}^n(\theta) = \nabla S(\mathbf{p}^n) + \gamma^n \mathbf{P}^{n-1}(\theta) \quad (5)$$

(6) 式中,  $\nabla S(\mathbf{p}^n)$  为梯度方向。 $\gamma^n$  为共轭系数:

$$\gamma^n = \begin{cases} \frac{\sum_{j=1}^N [\nabla S(\mathbf{p}^n)]_j^2}{\sum_{j=1}^N [\nabla S(\mathbf{p}^{n-1})]_j^2} & n > 0 \\ 0 & n = 0 \end{cases} \quad (6)$$

如果对于任意  $n \geq 0$ ,  $\gamma^n = 0$ , 则 (5) 式搜索方向变为最速下降方向。其中  $N$  为离散的内边界节点的个数。迭代步长为:

$$\beta^n = \frac{\sum_{i=1}^m (T_i - Y_i) (\mathbf{P}^n \frac{\partial T_i}{\partial \mathbf{p}^n(\theta)})}{\sum_{i=1}^m (\mathbf{P}^n \frac{\partial T_i}{\partial \mathbf{p}^n(\theta)})^2} \quad (7)$$

## 5. 收敛条件

$$J[\mathbf{p}^{n+1}(\theta)] < \varepsilon \quad (8)$$

其中  $\varepsilon$  为一个任意小的正数。

## 6. 求解步骤

假设在第  $n$  步的估计值为  $\mathbf{p}^n(\theta)$ , 应用共轭梯度法根据表面温度测量值识别试件内部缺陷形状位置的步骤如下,

- 1) 对试件进行有限元网格划分, 根据公式 (1) 求解试件表面的温度分布  $T(i)$  验证收敛条件 (8), 不满足, 则继续。
- 2) 按式 (7), (6) 分别计算出迭代步长  $\beta^n$ 、共轭系数  $\gamma^n$ , 然后再根据 (5) 式求解迭代方向  $\mathbf{P}^n(\theta)$ 。
- 3) 根据式 (4) 计算出新的内部边界估计值, 然后返回到 1)。

## 7. 算例

本文对一个圆形试件 (外半径:  $R=0.09\text{m}$ ) 的内部缺陷进行识别来验证算法的有效性。通过对流换热加热, 流体温度  $200^\circ\text{C}$ , 对流换热系数为  $5000\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$ , 加热边界为 50%, 其他部分为自然对流换热, 环境温度  $20^\circ\text{C}$ 。为验证算法的有效性, 通过导热方程 (1) 求解带有缺陷的试件表面温度分布来模拟实际温度测量值。方程 1 通过有限元法进行求解, 采用单元为线性三角形单元。然后根据温度分布来识别内部缺陷的位置和形状。图 2 为已知缺陷位置时, 单纯的缺陷形状的识别结果。图中可见初值对识别结果的影响不

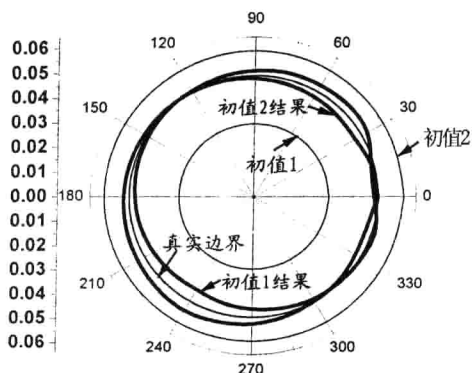


图 2 已知缺陷位置时, 缺陷形状的识别结果  
( $k=3.0\text{W/mK}$ ,  $\varepsilon=5.0$ )

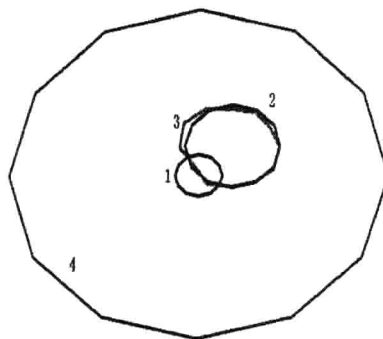


图 3 内部缺陷的位置和形状识别结果 (1. 初始值; 2. 真实缺陷边界; 3 计算结果; 4 试件边界)

大。图 3 为不锈钢试件内部缺陷形状和位置的识别的结果 (通过 Matlab 做图)。从图中可以看出, 本方法可以比较精确的识别试件内部缺陷的位置和形状。

## 8. 结论

本文对带有内部缺陷的试件建立了二维传热模型, 通过有限元法求解了在一定加热条件下的温度分布, 并通过共轭梯度法, 提出了根据表面所测温度分布识别零件内部形状、位置的计算方法。并通过数值实验证明了算法的有效性。进一步的工作为三维内部缺陷的识别。

## 参考文献

- [1] 陈衡, 侯善敬. 电力设备故障红外诊断. 北京: 中国电力出版社, 1999.
- [2] 梅林, 王裕文, 薛锦. 红外热成像无损检测缺陷的一种新方法. 红外与毫米波学报, 2000, 19(6): 457-459.
- [3] 梅林, 吴立德, 王裕文. 一种基于遗传算法的红外无损检测缺陷的新算法. 光学学报, 2002, 22(12): 1452-1456.
- [4] Zong M. Quantitative detection of subsurface defects by pulse-heating infrared thermography. SPIE, 1998, 3558: 402-406.
- [5] Gupta R, Tuli S. Electro-thermal modeling and analysis for estimation of defect parameters by stepped infrared thermography. NDT&E International, 2005, 38: 11 - 19.
- [6] Hsieh C K, Su K U. A methodology of predicting cavity geometry based on scanned surface temperature data-prescribed surface temperature at the cavity side. ASME Journal of Heat Transfer, 1980, 102: 324-329.
- [7] Hsieh C K, Su K U. A methodology of predicting cavity geometry based on the scanned surface temperature data-prescribed heat flux at the cavity side. ASME Journal of Heat Transfer, 1981, 103: 42-46.
- [8] Turler, D. Predicting the geometry and location of defects in adhesive and spot-welded lap joints using steady-state thermographic techniques. SPIE, 1999, 3700: 54-62.
- [9] Chunli Fan, Fengrui Sun, Li Yang. A General Quantitative Identification Algorithm of Subsurface Defect for Infrared Thermography. in the Proceedings of The Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics, 2005. (IRMMW-THz 2005), vol.2, pp341-342, Virginia, USA, 19-23 Sept. 2005. ISBN: 0-7803-9348-1.
- [10] 范春利, 孙丰瑞, 杨立等. 电气设备零件内部三维缺陷的定量红外识别算法研究. 中国电机工程学报, 2006. 26(2): 159-164.

# SCSD 格式数值稳定性及计算精度的研究

大连理工大学 化学工程研究所 大连 116012

袁达忠 马学虎 兰忠 白涛

ydz\_100@163.com xuehuma@dlut.edu.cn taobai@dl.cn

**摘要:** 概述对流项离散格式所引起的假扩散现象及选择不同的离散格式对数值计算过程的影响; 在分析 SCSD 格式的基础上, 提出求解二维对流扩散问题时, 直接采用块修正技术和 PDMA 算法的强隐迭代算法, 并对该格式在近边界节点的离散方程的处理上采用非均匀网格技术。通过典型算例验证, 该方法不仅抑制了假扩散现象, 保证了计算精度, 同时也使稳定性得到增强。因此, 采用 SCSD 格式离散对流项, 应用非均匀网格处理近边界, 并将 TDMA 算法和 PDMA 算法同时纳入求解离散方程的做法是合理的, 整个程序的框架具有很强的通用性。

**关键词:** SCSD 格式 规范变量与空间方法 块修正 交替五对角阵算法

## 1 前言

对流项离散格式的稳定性, 即在数值计算中不会导致振荡的解的特性, 是构造对流项离散格式时需要考虑的一个重要方面。凡是构造界面插值公式时用到下游一个节点值, 而且该值的系数为常数时的所有格式都不具有迁移特性, 因而只能是条件稳定的。绝对稳定的格式, 即不论网格  $P_{\text{elect}}$  数多大, 数值解均不会振荡的格式, 必须采用单侧(迎风侧)插值的方式[1]; 然而一阶迎风、混合格式等对流项差分格式具有较严重假扩散已成为普遍公认的事实[2]。因此, 采用结构化网格计算对流扩散问题, 对流项的离散采用 QUICK 格式或其他高分辨率格式, 已成为一种切合实际的选择, 本文选择采用一种通用格式 SCSD [3] (*stability controllable second-order difference scheme*) 格式, 既减少假扩散现象, 保证计算精度, 又改进了控制方程离散的稳定性; 同时对采用该格式所要注意的边界问题也进行讨论; 并编写了二维离散方程通用的求解形式, 即两次块修正和四次 PDMA 算法的强隐迭代算法。

## 2 SCSD 格式离散及边界条件的处理

### 2.1 SCSD 格式离散

稳定性可控的二阶 SCSD 格式是利用中心差分格式(CD)具有较高的计算准确度和二阶迎风格式(SUD)的绝对稳定性的性质构造出来的一种通用格式, 如图 1 所示。当采用均分网格时, 设  $\beta$  为 [0,1] 之间的一个参数, 则定义 SCSD 格式为式 (1)。

$$\phi_o = \beta \phi_e^{CD} + (1 - \beta) \phi_e^{SUD} = \begin{cases} \frac{\beta - 1}{2} \phi_w + \frac{3 - 2\beta}{2} \phi_p + \frac{\beta}{2} \phi_E & u_e > 0 \\ \frac{\beta - 1}{2} \phi_{EE} + \frac{3 - 2\beta}{2} \phi_E + \frac{\beta}{2} \phi_p & u_e < 0 \end{cases} \quad (1)$$

显然, 当  $\beta=0$  时, 它是二阶迎风格式; 当  $\beta=1$  时为中心差分格式; 而当  $\beta=0.75$  时则为 QUICK 格式。同时根据符号不变原则的分析思想, 可以分析出 SCSD 格式的临界

基金项目: 国家自然科学基金项目(50376005)

*Pelect* 数为  $2/\beta$ , 即随着  $\beta$  的减小, 临界 *Pelect* 数增加, 文献[4]的计算实例证实了这一分析结果。在实际计算过程中, 常常涉及到非均分网格, 根据上面提到的分析思想, 有必要把其定义拓宽到非均分网格中[5]。应用 *Lagrange* 插值多项式[6], 获得关于  $e$

侧面的值, 如图 2 所示, 其表达式为:  $\phi = \sum_{i=0}^2 l_i(x)\phi_i$ , 同时引入规正空间坐标和规正

变量 [7,8]的定义, 可以得到关于  $e$  侧面的规正值:

$$\bar{\phi}_e = \bar{x}_e + \frac{\bar{x}_e(\bar{x}_e - 1)}{\bar{x}_p(\bar{x}_p - 1)}(\bar{\phi}_p - \bar{x}_c) \tag{2}$$

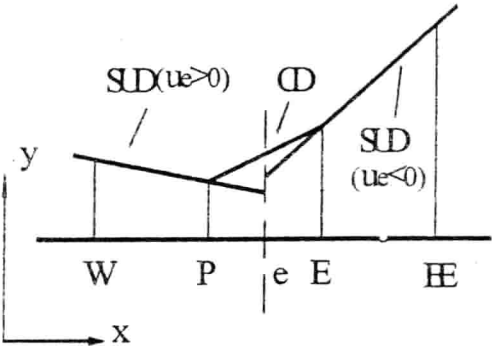


图 1 CD 及 SUD 的定义

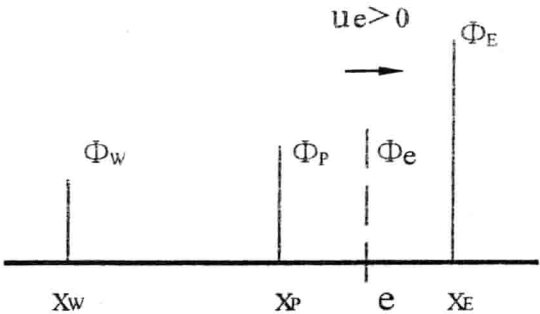


图 2 一维非均分网格

## 2.2 边界条件的处理

在实施高阶格式时需要处理近边界节点, 即建立近边界节点的离散方程。即使对于均分网格, 当采用区域离散方法 *B* 时, 图 3 中与边界相邻的  $P$  控制容积  $w$  侧面和  $e$  侧面也为非均分网格。因此, 对于  $w$  侧面必须采用格式的定义来决定[9], 而对于  $e$  侧面而言, 则需要采用非均分网格的规正变量法来处理, 转换后获得实际节点之间的对应关系。

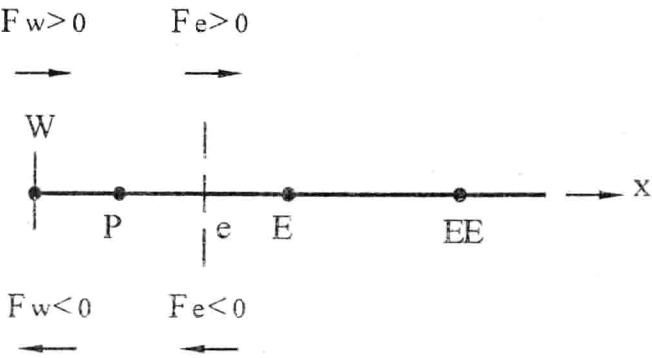


图 3 与边界相邻的内节点实施高阶格式的方法

## 3 控制方程的求解

选择不同的求解方式, 对离散的代数方程进行处理是实施高阶格式的另一个关键问题。二维直角坐标下, 对流扩散问题的通用形式为:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) = \Gamma \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] + S \quad (3)$$

其离散格式在采用高阶格式时，可以写成：

$$a_P \phi_P = a_{EE} \phi_{EE} + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_{WW} \phi_{WW} + a_{NN} \phi_{NN} + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_{SS} \phi_{SS} + b \quad (4)$$

延迟修正是求解由高阶格式形成的离散方程组的一种实施方式，而延迟修正方法是以牺牲代数方程求解的收敛速度为代价而获得可以用 *TDMA* 方法求解的可行性的方法。

为促使收敛速度的加快，选择一个坐标方向的代数方程采用五对角阵算法来增加代数方程求解过程中的直接求解的份量。同时考虑到块修正技术是加速代数方程迭代过程收敛的一种辅助方法，采用两次不同方向的块修正技术和四次交错方向 *PDMA* 算法的迭代求解方法来直接处理的离散方程 (4)，是一种合理的方案。在处理压力修正方程时，其离散方程的形式为：

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (5)$$

仿照前人的通用做法，即采用两次不同方向的块修正技术和四次交错方向 *TDMA* 算法的迭代求解方法来直接处理的离散方程 (5)。这样就将三对角算法和五对角算法同时纳入到程序中，编制了针对性强，结构紧凑，通用性好的求解二维对流扩散问题的框架。

#### 4 分析

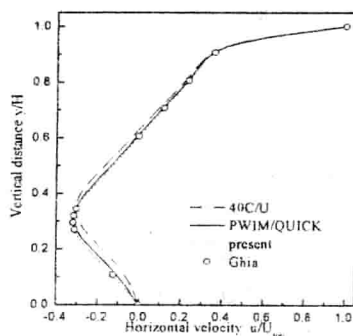


图4 不同计算方法在  $Re=400$  时，水平速度在垂直中截面上分布形式

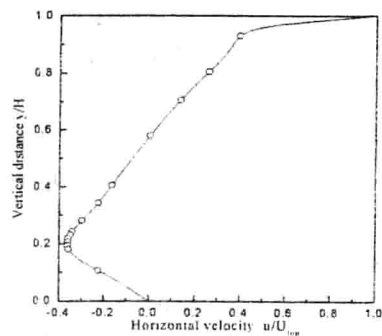


图5 不同计算方法在  $Re=1000$  时，水平速度在垂直中截面上分布形式

对顶盖驱动流进行计算，设流体的物性包括  $\rho$  为常数，在  $Re$  分别取 400 和 1000 (方腔的边长为特征长度) 两种情况下，将计算结果与文献 [10-14] 进行比较。在保证网格无关性的基础上，当  $Re=400$  时，采用 *SCSD* 格式获得的水平速度在垂直中截面上的速度分布，如图 4 所示，网格节点数在少于  $52 \times 52$  的情况就得到网格独立性；图 5 为  $Re=1000$  时，水平速度在垂直中截面上的速度分布，网格数为  $82 \times 82$  时的情况与文献符合的很好，一些文献上称此时应用 *QUICK* 格式能在较少的网格数下就能得到较好的收敛效果；然而从本文的计算来看，在高  $Re$  数下，在保证计算精度的同时，*SCSD* 格