文章编号：1000-5773(2003)01-0035-10

热动力学问题的数值计算*

林华令，黄风雷

（北京理工大学，北京 100081）

摘要：对含热传导的流体动力学方程组，用有限元方法进行数值求解。采用傅里叶热传导计算热流、用热流连续条件计算单元间接触面的温度、用三角形传热法计算体单元表面的热流，考虑各向同性弹塑性流体材料模型、三项式物态方程和导热系数与状态的相关性，给出了傅里叶热传导、接触传热、热应力应变效应、以及混合物冲击压缩特性等算例。对混合物冲击温度的数值模拟表明，小颗粒混合物在冲击压缩过程中，颗粒间的温度有差别、稍有波动，并随时间趋向于一致，以至热平衡。

关键词：热动力学；有限元法；数值模拟；热效应；混合物

中图分类号：O521；O241.82 **文献标识码**：A

1 引 言

由受热或受冲击引起的热动力过程涉及物质的运动变形、热传导和状态变化等，数值模拟中通常根据问题所侧重的方面，将物质输运和热输运分离进行数值分析，因而研制的计算程序可能需要两套[1]，一套用于数值模拟动力学过程，另一套用于数值模拟热传导过程，两套程序通过外部数据文件交换初始现场和计算结果，其复杂性和近似性显而易见，当然也限定了其适用性和通用性。也有含热传导的动力学计算程序，但计算方法中往往在某些问题方面进行了简化，通常采用近似的能量与温度关系、不考虑温度对热力学状态的影响[2,3]，当然对数值模拟的能力也就有了一定的限制。

对于物质运动变形与传热时间尺度相差悬殊的问题，采用物质输运和热输运分离的方法是可取的；但在一些特定的问题中，热传导可能对物质的运动变形、以至状态变化有较大的影响，分离的数值模拟方法对结果的准确性影响就不可小视，得到的结果甚至可能不真实。在航天飞行器受气流冲击、炸药起爆[4]、强激光对物质热冲击[3,5]、混合物的冲击压缩[6]、冲击压缩后的热传导和热辐射[7,8]等研究方面，可能涉及高温高压、而又需要考虑物质间传热的问题。研制一个含热传导、适用于高温高压、可处理流体弹塑性及失效、处理模型能力较强的计算程序是很有必要的。

2 计算方法

2.1 坐标描述

在固定的直角坐标系中，质点的初始（$t=0$）构形为X_j（$j=1,2,3$），在t时刻的现时构形为x_i（$i=1,2,3$），表示成[9]

$$x_i = x_i(X_j, t) \tag{1}$$

初始条件

$$x_i(X_j, 0) = X_j \tag{2}$$

* **收稿日期**：2002-04-18；**修回日期**：2002-06-30

作者简介：林华令（1963—），男，硕士，高级工程师.

$$\dot{x}_i(X_j,0)=v_i(X_j) \tag{3}$$

其中 $v_i(X_j)$ 为初速，上标 · 号表示对拉格朗日时间 t 的导数，$\dot{x}_i$ 表示为坐标 i 方向的质点速度。

2.2 控制方程

运动方程为[9]

$$\rho\ddot{x}_i=\partial\sigma_{ij}/\partial x_j+\rho f_i \tag{4}$$

式中：σ_{ij}、ρ、f 和 $\ddot{x}$ 分别为柯西(Cauchy)应力、当前密度、单位质量体积力和质点加速度。(4)式中出现的重复下标按“约定求和法则”对其指标从 1 到 3 求和，下同。求解的运动方程还要满足边界应力条件、位移条件和接触间断条件。

质量守恒方程为[9]

$$\rho v=\rho_0 \tag{5}$$

其中：v 为相对初始体积的比容，ρ_0 为常态(常温、常压)密度。材料的初始密度记为 ρ_{00}，则初始相对比容 $v_0=\rho_0/\rho_{00}$，v_0 可以不为 1。当 $v_0>1$ 时，为疏松材料；当 $v_0<1$ 时，为密实材料。

能量守恒采用内能守恒方程形式给出[9,10]

$$\dot{e}=vs_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}-(p+q)\dot{v}+v\partial\boldsymbol{\varphi}_i/\partial x_i+\rho_0 h \tag{6}$$

式中：e 为相对初始体积的比内能，s_{ij} 为偏应力，p 为压强，q 为人为体粘性

$$q=\begin{cases}\rho l(C_0 l\dot{\varepsilon}_{kk}^2-C_1 a\dot{\varepsilon}_{kk}) & \dot{\varepsilon}_{kk}<0\\ 0 & \dot{\varepsilon}_{kk}\geqslant 0\end{cases} \tag{7}$$

式中：C_0 和 C_1 为无量纲常数(在 DYNA[9] 程序中缺省值分别为 1.5 和 0.06)，l 为长度特征量(在二维计算中取 $l=\sqrt{A}$，A 为二维单元的面积；在三维中取 $l=\sqrt[3]{\nabla}$，∇ 为三维单元的体积)，a 为当地声速。(6)式中的 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 为应变率张量

$$\dot{\varepsilon}_{ij}=(1/2)(\partial\dot{x}_i/\partial x_j+\partial\dot{x}_j/\partial x_i) \tag{8}$$

内能守恒方程(6)中考虑了热流和热源的影响，其中的 $\boldsymbol{\varphi}_i$ 为热流密度向量，h 为单位质量介质在单位时间内热源的供热率。按傅里叶(Fourier)传热定律[10]，热流密度向量 $\boldsymbol{\varphi}_i$ 表示为

$$\boldsymbol{\varphi}_i=-k(\partial T/\partial x_i) \tag{9}$$

式中：T 为绝对温度，k 为导热系数。我们仅考虑傅里叶热传导，并且假定传热是各向同性的，但考虑 k 与物质状态的相关性。

2.3 材料模型和物态方程

材料模型用以确定应力、应变关系，可采用多种材料模型。我们以各向同性弹塑性流体模型为例，考虑了屈服的硬化效应[11]

$$\sigma_y=\sigma_0+E_{\mathrm{p}}\varepsilon^{\mathrm{p}}+(a_1+a_2 p)\max(0,p) \tag{10}$$

式中：σ_y 和 σ_0 分别为当前屈服强度和初始屈服强度，E_{p} 为塑性硬化模量，ε^{p} 为有效塑性应变，a_1 和 a_2 为压力硬化参数。弹塑性流体即在流体背景上加上弹塑性

$$\sigma_{ij}=s_{ij}-(p+q)\delta_{ij} \tag{11}$$

式中：δ_{ij} 为克罗内克符号(Kronecker Delta：当 $i=j$ 时，$\delta_{ij}=1$；否则 $\delta_{ij}=0$)。流体压强 p 由当前比容 v、能量守恒方程(6)以及物态方程计算得到。

弹性区的本构关系用虎克(Hooke)定律的增量形式

$$\dot{s}_{ij}=2G(\dot{\varepsilon}_{ij}-\dot{\varepsilon}_{kk}\delta_{ij}/3)+s_{ik}\boldsymbol{\Omega}_{kj}+s_{jk}\boldsymbol{\Omega}_{ki} \tag{12}$$

式中：G 为剪切模量，$\boldsymbol{\Omega}_{ij}$ 为旋率张量

$$\boldsymbol{\Omega}_{ij}=(1/2)(\partial\dot{x}_i/\partial x_j-\partial\dot{x}_j/\partial x_i) \tag{13}$$

塑性区采用屈服条件判别[9]

$$f=s_{ij}s_{ij}/2-\sigma_y^2/3\leqslant 0 \tag{14}$$

由(12)式得到的 s_{ij} 如果满足 $f\leqslant 0$,说明材料处于弹性变形状态;如果出现 $f>0$,则说明材料超出弹性状态,产生了塑性变形,此时要对应力作修正,使应力松弛回到屈服面,以确定实际应力和弹塑性状态,具体如下:由(12)式得到的称为偏应力试探值 $\tilde{s}_{ij}$,引入修正因子 m

$$m=\sigma_y/\sqrt{(2/3)\tilde{s}_{ij}\tilde{s}_{ij}} \tag{15}$$

实际偏应力 s_{ij} 通过修正因子 m 与偏应力试探值 $\tilde{s}_{ij}$ 相乘得到

$$s_{ij}=m\,\tilde{s}_{ij} \tag{16}$$

由实际偏应力 s_{ij} 得到的实际偏应力率 $\dot{s}_{ij}=\mathrm{d}s_{ij}/\mathrm{d}t$,可得弹性应变率偏量 $\dot{\varepsilon}^{\mathrm{e}}_{ij}$

$$\dot{\varepsilon}^{\mathrm{e}}_{ij}=(1/2G)(\dot{s}_{ij}-s_{ik}\boldsymbol{\Omega}_{kj}-s_{jk}\boldsymbol{\Omega}_{ki}) \tag{17}$$

而塑性应变率 $\dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij}$ 可由偏应变率 $\dot{\varepsilon}'_{ij}$ 与其弹性分应变率偏量 $\dot{\varepsilon}^{\mathrm{e}}_{ij}$ 相减得到

$$\dot{\varepsilon}'_{ij}=\dot{\epsilon}_{ij}-\dot{\varepsilon}_{kk}\delta_{ij}/3 \tag{18}$$

$$\dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij}=\dot{\epsilon}'_{ij}-\dot{\varepsilon}^{\mathrm{e}}_{ij} \tag{19}$$

有效塑性应变 ε^{p} 为

$$\varepsilon^{\mathrm{p}}=\int_0^t\left(\frac{2}{3}\dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij}\dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij}\right)^{1/2}\mathrm{d}t \tag{20}$$

可以采用各种形式的物态方程,本文中以含温度的三项式物态方程为例[6,12]

$$\begin{cases}p=p_{\mathrm{c}}(\rho)+\dfrac{\rho RT}{\mu}\,\dfrac{3\gamma(\rho)+\tau}{1+\tau}+\dfrac{1}{4}\rho_0\beta_0\sigma^{1/2}T^2\\ e=\rho_0 e_{\mathrm{c}}(\rho)+\dfrac{3\rho_0 RT}{2\mu}\,\dfrac{2+\tau}{1+\tau}+\dfrac{1}{2}\rho_0\beta_0\sigma^{-1/2}T^2\end{cases} \tag{21}$$

其中 R 为摩尔气体常数,μ 为摩尔质量,ρ_0 为常态密度,β_0 为常态电子热容系数,$p_{\mathrm{c}}(\rho)$为冷压,$e_{\mathrm{c}}(\rho)$为单位质量的冷能,$\gamma(\rho)$为 Grüneisen 参数,$\sigma=\rho/\rho_0$,$\tau=\alpha[T/T_{\mathrm{m}}(\rho)]^{\eta}$ 为晶格的热贡献,$T_{\mathrm{m}}(\rho)$为熔化温度,α 和 η 为常数(可近似取 $\alpha=0.0409$,$\eta=1.606$)。根据冷压 p_{c}、冷能 e_{c}、Grüneisen 参数 γ 和熔化温度 T_{m} 等与密度 ρ 的关系,可用三项式物态方程(21)描述压强和温度变化较宽的固、液状态,材料物态参数的确定可参考有关资料。冷能、冷压和 Grüneisen 参数采用

$$\begin{cases}p_{\mathrm{c}}=Q\delta^{2/3}[\mathrm{e}^{q(1-\delta^{-1/3})}-\delta^{2/3}]\\ e_{\mathrm{c}}=\dfrac{3Q}{\rho_{0\mathrm{K}}}\left\{\left[\dfrac{1}{q}\mathrm{e}^{q(1-\delta^{-1/3})}-\delta^{1/3}\right]-\left(\dfrac{1}{q}-1\right)\right\}\\ \gamma=\dfrac{g-2}{3}-\dfrac{v}{2}\,\dfrac{\mathrm{d}^2(p_{\mathrm{c}}v^{2t/3})/\mathrm{d}v^2}{\mathrm{d}(p_{\mathrm{c}}v^{2t/3})/\mathrm{d}v}\end{cases} \tag{22}$$

其中 g 为材料参数。

2.4　数值离散方法

对控制方程进行数值离散采用了 DYNA 所给出的有限元方法[9],其中运动方程与质量守恒方程的离散求解方法无需变动,不再重述。对内能守恒方程则要补充热流和热源两项计算,将(6)式对时间作中心差分,可得到内能守恒的差分方程

$$e^{n+1}=e^n+\Delta z^{n+1/2}-\left[\frac{1}{2}(p^{n+1}+p^n)+q^{n+1/2}\right](v^{n+1}-v^n)+\Delta Q^n+\rho_0 h^{n+1/2}\Delta t^n \tag{23}$$

式中:上标 n 表示 t^n 时刻的量,$n+1$ 表示增加一个时间步长 Δt^n 后在 $t^{n+1}=t^n+\Delta t^n$ 时的量,$n+1/2$ 为时间半点 $t^{n+1/2}$时的量,对应的各时刻量定义在同一单元或网格区域内。Δz 和 ΔQ 分别为单位初始体积的畸变能增量和传热增量

$$\Delta z^{n+1/2}=\frac{1}{4}(v^{n+1}+v^n)(s^{n+1}_{ij}+s^n_{ij})(\varepsilon^{n+1}_{ij}-\varepsilon^n_{ij}) \tag{24}$$

$$\Delta Q^n=\frac{\Delta t^n}{\nabla_0}\sum_i(\varphi_n)^n_i S^n_i \tag{25}$$

式中：∇_0 为单元初始体积，S_i^n 为单元第 i 个表面积，$(\varphi_n)_i^n$ 为单元沿第 i 个表面外法向的热流密度。

计算传热增量时，在(22)式中采用了上一时间整点 t^n 的量，传热增量 ΔQ^n 采用了面积分代替差分的方法，而表面外法向的热流密度可表示为

$$(\varphi_n)_i^n = -k^n(T^n - T_i^n)/d_i^n \tag{26}$$

式中：T^n 和 k^n 分别为单元温度和导热系数，d_i^n 为单元中心到第 i 个表面的距离，T_i^n 为单元第 i 个表面的温度。

表面温度应根据单元与其相邻单元或边界特性确定。对有相邻单元的表面温度，假定热量不在相邻单元的表面间累积，则过表面的热流连续，表面温度 T_i^n 为

$$T_i^n = (T^n + \alpha^n T_{i1}^n)/(1+\alpha^n) \tag{27}$$

$$\alpha^n = \sqrt{k_{i1}^n d_i^n/(k^n d_{i1}^n)} \tag{28}$$

式中：T_{i1}^n 和 k_{i1}^n 为与第 i 个面相邻的单元温度和导热系数，d_{i1}^n 为该单元中心到这个表面的距离。

对给定边界条件的情况，根据给定的条件，计算表面温度 T_i^n 或热流密度 $(\varphi_n)_i^n$。对绝热边界，取 $(\varphi_n)_i^n=0$；对处于恒温 T_0 环境中的单元，取 $T_i^n=T_0$；对给定温度边界条件或热流密度边界条件，根据当前时刻的边界温度或热流密度，确定表面温度 T_i^n 或热流密度 $(\varphi_n)_i^n$。

对于接触面上的单元表面温度，应根据相邻单元温度、相邻表面积等，按表面处热流连续条件计算表面温度 T_i^n，热流连续条件为

$$-k^n\frac{T^n - T_i^n}{d_i^n}S_i^n = \sum_{j=1}^{J_i} k_{ij}^n \frac{T_{ij}^n - T_i^n}{d_{ij}^n}S_{ij}^n \tag{29}$$

式中：J_i 为与第 i 个面相邻的单元数，T_{ij}^n 和 k_{ij}^n 为与第 i 个面相邻的第 j 个单元的温度和导热系数，d_{ij}^n 和 S_{ij}^n 为该第 j 个单元中心到这个表面的距离和相邻的面积。从(29)式可得 T_i^n

$$T_i^n = \left(T^n + \sum_{j=1}^{J_i}\alpha_j^n T_{ij}^n\right)\Big/\left(1+\sum_{j=1}^{J_i}\alpha_j^n\right) \tag{30}$$

$$\alpha_j^n = \sqrt{\frac{k_{ij}^n S_{ij}^n d_i^n}{k^n S_i^n d_{ij}^n}} \tag{31}$$

对于三维体单元，采用三角形传热法。如果单元表面是四边形，可能出现四点不在一个平面上的情况，为此，将四边形表面划分成四个三角形，这四个三角形对应的一个边分别取为表面四边形的一个边，它们的对角点取为四边形的中心，中心坐标按四边形的四个角点取平均得到。按(27)式分别计算各个三角形表面的温度和热流密度，累加这四个三角形的传热增量即为通过这四边形表面的传热增量。

根据运动方程与质量守恒方程的解，结合各向同性弹塑性流体模型，可以更新应力、应变，具体方法可参阅有关资料[2]。根据内能守恒的差分方程(23)，结合含温度的三项式物态方程，可以采用迭代求解法[6]，计算状态量 e^{n+1}、p^{n+1}、T^{n+1} 等，以更新热力学状态量。

实际导热系数是与状态有关的。对于金属，导热系数与德拜(Debye)温度的关系为[7]

$$k = C\Theta_D^2 \tag{32}$$

式中：Θ_D 为 Debye 特征温度，C 为常数。而 Θ_D 与 Grüneisen 参数存在关系

$$\gamma = -\mathrm{d}\ln\Theta_D/(\mathrm{d}\ln v) \tag{33}$$

结合(32)式和(33)式，可得

$$k = k_0\exp\left[-2\int_1^v \frac{\gamma(v)\mathrm{d}v}{v}\right] \tag{34}$$

式中 k_0 为常态导热系数。在实际计算中采用 Grüneisen 参数与比容的近似关系

$$\gamma = 2/3 + (\gamma_0 - 2/3)v \tag{35}$$

其中 γ_0 为常态 Grüneisen 参数。由此，得到导热系数与比容的关系

$$k=k_0 v^{-4/3}\exp[-2(\gamma_0-2/3)(v-1)] \tag{36}$$

对于非金属,也有导热系数与状态量的关系[13]。因热传导进程比冲击波运动慢,所以时间步长仍可按 DYNA 中的方法[9]确定;对不考虑物质运动的纯热传导问题,为节省计算时间,可适当增大时间步长因子。

3　算　例

基于以上计算方法,分别研制了二维有限元热动力学计算程序和三维有限元热动力学计算程序。程序具有对热动力学耦合问题进行数值模拟的能力,可用于分析热应力效应、冲击压缩过程中的热传导等问题;程序也具有对纯动力学和纯热传导问题进行数值模拟的能力;也可以修改、扩充材料模型和物态方程,以使其具有更强的数值模拟能力。

3.1　数值模拟傅里叶热传导问题

仅考虑材料的傅里叶热传导,不考虑物质的运动和形变,以检验数值模拟热传导的准确性。在数值计算中,可以由跳过运动方程与质量守恒方程的求解实现。不考虑应力、应变时,内能守恒方程(6)转化成傅里叶热传导方程。以二维(x,y)为例,傅里叶热传导方程可表示成

$$c_v\frac{\partial T}{\partial t}-k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)=0 \tag{37}$$

式中:c_v 为定容比热容,k 为导热系数。对金属,按(32)～(36)式,不考虑形变时,k 近似为常数。

作为算例,用边长 $a=1$ cm 的正方形高温铝作二维热传导计算,铝的初始温度 $T_0=2000$ K,边界取恒温 $T_1=293$ K 环境条件。如不考虑晶格和电子热运动对物态方程的贡献,此时 $c_v=(3R/2\mu)\rho$ 和 k 为常数,从(37)式可见,该式为线性热传导方程。对高温铝的二维线性热传导问题,由分离变量法[14]可得解析解

$$T(x,y,t)=T_1+\frac{16(T_0-T_1)}{\pi^2}\sum_{m,n=0}^{+\infty}\frac{\sin\{[(2m+1)/(2a)]\pi x\}\sin\{[(2n+1)/(2a)]\pi y\}}{(2m+1)(2n+1)}\cdot$$
$$\exp\left\{-\left[\left(\frac{2m+1}{2a}\pi\right)^2+\left(\frac{2n+1}{2a}\pi\right)^2\right]Dt\right\} \tag{38}$$

式中 $D=k/c_v$ 为导温系数。

在傅里叶热传导数值模拟计算中,将 α 和 β_0 取为零,初始密度 ρ_{00} 取为常态密度 ρ_0,即 $\rho=\rho_0$、$k=k_0$,其它材料参数见表 1。铝中网格按 20×20 划分,相当于每个网格宽度为 0.05 cm。

图 1 给出了高温铝经历了 20 ms 热传导时的数值模拟温度分布。从图 1 可见,等温线具有较好的对称性,由于环境温度低于铝的温度,故铝边缘的等温线上的温度低于内部温度。

图 2 给出了 $y=0.5$ cm 对称线上的温度分布。从图 2 可见,三种网格划分 10×10、20×20 和 30×30 所得的温度分布,与解析解(38)式所得的结果具有较好的一致性;但相对来说,较粗的网格划分 10×10 所得的结果比细分网格与解析解比较要差些,20×20 的网格划分数值模拟结果已与解析解接近;两端附近,即在边缘处一个单元的范围内,数值模拟的温度与解析解有差别,这种差别来源于数值模拟

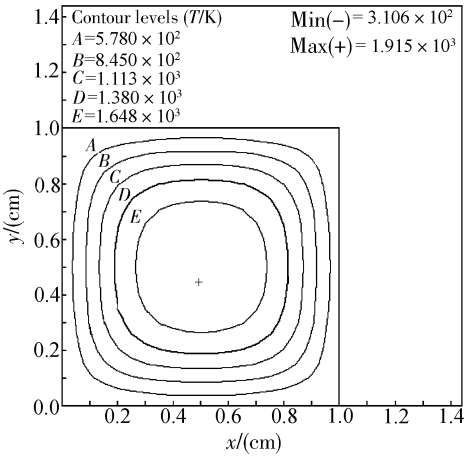


图 1　高温铝热传导等温线

Fig. 1　Contours of temperature in the aluminium (The initial aluminium: 2000 K, the enviornment: 293 K, only considering Fourier heat conduction, $t=20$ ms)

结果后处理方法的不足，因数值模拟保存的温度是单元中心的温度，温度曲线是根据单元中心温度内插或外推得到的，属于正常现象；网格分得越细，数值模拟越接近解析解，细分网格会增大计算机时，所以在数值模拟中要把握网格的划分。

如要考虑铝的晶格和电子热运动对物态方程的贡献，则 c_v 与温度相关，此时，(37)式成为非线性热传导方程。要给出非线性热传导问题的解析解很困难。对高温铝的非线性热传导进行了数值模拟，得到了有关结果，铝的材料参数见表 1，铝中网格按 20×20 划分。

数值模拟结果表明：是否考虑晶格和电子热运动对物态方程的贡献对热传导结果的影响很小。高温铝中心处在 20 ms 时的温度相对偏差为 0.05%，这表明在 2000 K 以内，铝的晶格和电子热对 c_v 的影响较小，因而在一定范围内，线性热传导方程是非线性热传导的一种很好的近似。

实际材料在常压、高温时的密度低于常态密度。按照物态方程(21)式和(22)式，可得 2000 K 的铝在常压($p_0=0$)下的初始相对比容 $v_0=1.11323$，对应的初始密度 $\rho_{00}=2.502\ \mathrm{g/cm^3}$。数值模拟结果表明：修正初始密度后，是否考虑晶格和电子热对物态方程的贡献，对热传导的结果影响很小；但是否考虑修正初始密度，对热传导的结果有一定的影响。

初始密度对热传导的影响可从图 3 中看出。图 3 中的 $v_0=1$ 曲线为未修正初始密度的热传导数值模拟结果，$p_0=0$ 曲线为按常压修正初始密度的热传导数值模拟结果。高温铝中心处在 20 ms 时的温度相差 56 K，修正初始密度的温度要低些，这符合修正初始密度后的定容比热容 $c_v=(3R/2\mu)\rho$ 变小、导温系数 $D=k/c_v$ 变大、使得热传导更快的道理。

综上对傅里叶热传导的计算和比较，说明我们研制的程序可用于纯热传导计算，也具有计算线性和非线性热传导问题的能力。

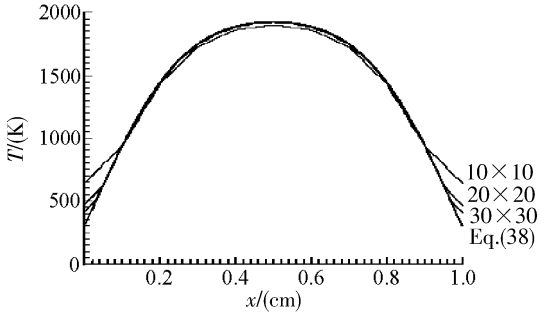


图 2 沿对称线的温度分布

Fig. 2 Distributions of temperature along the symmetrical line $y=0.5$ cm in the aluminium ($t=20$ ms)

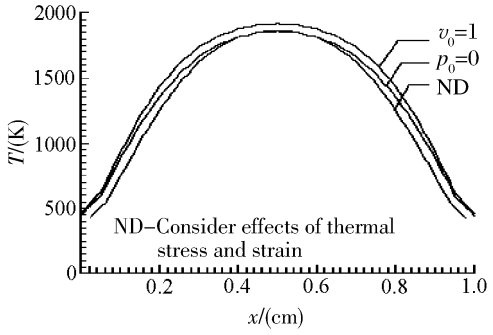


图 3 不同数值模拟方式的比较

Fig. 3 Comparison among the results from the different numerical simulation modes(Along $y=0.5$ cm, $t=20$ ms)

3.2 热效应的数值模拟

计算和分析热的应力应变效应在工程技术方面有重要的应用，解析求解往往变得无能为力，数值模拟方法是可实现的途径。采用弹塑性流体模型的有限元热动力学数值模拟计算方法，可以用来计算热的应力、应变效应。

同样以边长 $a=1$ cm 的正方形 2000 K 高温铝处于 293 K 环境中的二维热传导模型为例，进行热效应的数值模拟。铝中网格按 20×20 划分，铝的有关材料参数见表 1。

表 1 材料参数

Table 1 Parameters of materials

Materials	ρ_0 /(g/cm³)	σ_0 /(GPa)	G /(GPa)	Q /(GPa)	q	ρ_{0K} /(g/cm³)	g	μ /(g/mol)	β_0 /[(μJ/(g·K²)]	T_{0m} /(K)	k /[W/(cm·K)]
Aluminium	2.785	0.3	27.6	42.009	7.9196	2.8353	0.0408	28.75	41.53	933	2.37
Copper	8.90	0.1	47.7	55.896	9.8443	9.0308	0.9594	63.55	14.75	1536	4.01

$y=0.5$ cm 对称线上 20 ms 时的温度分布见图 3 的 ND 曲线。将考虑热效应的温度分布曲线(ND 线)与未考虑热效应的温度分布曲线($p_0=0$ 线)进行比较可见:由于有热效应,使得高温铝在热传导的过程中因冷却而收缩,热效应的温度曲线低于不考虑热效应的温度曲线。

图 4 给出了高温铝经历 20 ms 热传导时的等位移线。从图 4 可见:整体位移方向向中心;四个顶点是位移最大的地方,最大位移为 0.0197 cm。

图 5 和图 6 分别给出了高温铝经历 20 ms 热传导时的等温线和 x 方向主应力等值线。

由数值模拟后处理得到的有关物理、力学量等值线和随时间、空间的分布情况,可用以分析受热和冷却过程物体内部的热效应。

下面给出两物体热接触时的热效应。热接触物体分别为圆柱形的铜和铝,其中∅0.4 cm×0.2 cm 铜的初始温度为1500K,ϕ0.4cm×0.1cm铝的初始温度为293K,铜的下底面与铝的上底面接触,接

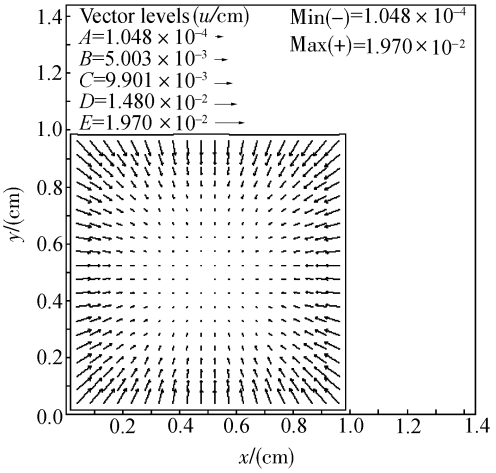


图 4　高温铝热效应等位移线

Fig. 4　Contours of displacement in the aluminium (The initial aluminium:2000 K,the enviornment:293 K,t=20 ms)

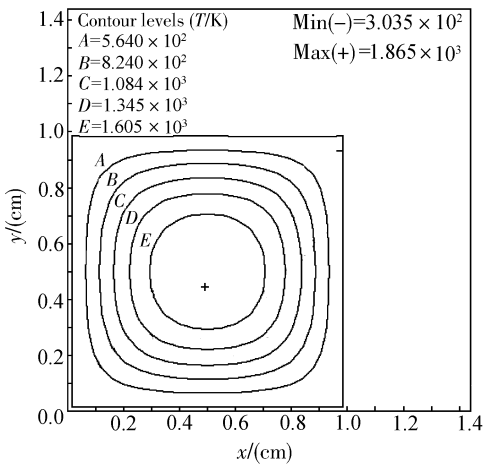


图 5　高温铝热效应等温线

Fig. 5　Contours of temperature in the aluminium (The initial aluminium:2000 K,the enviornment:293 K,t=20 ms)

触面间热流连续、并可自由滑移,铝的下底面为固定不动、绝热边界,其它材料界面取自由边界、恒温 293 K 环境条件。按轴对称进行二维(r,z)热动力学有限元数值模拟,每个网格宽度为 0.01 cm,材料参数见表 1。

图 7 给出了铜和铝接触热传导 6 ms 时的温度分布。从图 7 可见:热从高温的铜通过与铝接触的界面传入铝中,铜的温度下降,铝的温度升高,6 ms 时最高温度已位于原来低温的铝内,从初始温度、接触条件和环境条件等分析,计算结果是合理的,界面间连续的等温线也表明了对接触热传导问题数值模拟有较好的准确性;材料的热效应比较明显,初始温度较高的铜,由于降温,边缘收缩,而初始处于常温的铝,由于升温,则表现了膨胀;材料的收缩与膨胀,使得接触界面滑移,但热流仍存在,也表明了对接触问题的热传导、热效应数值模拟是合理的。

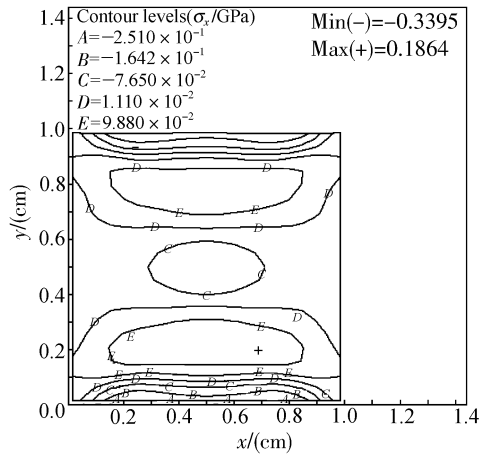


图 6　x 方向主应力等值线

Fig. 6　Contours of principal x-stress in the aluminium (The initial aluminium:2000 K, the enviornment:293 K,t=20 ms)

图 8 给出了这两个柱体侧面上、下 4 个顶点的径向位移随时间的变化曲线，其中 A、B 为铜的上、下顶点，C、D 为铝的上、下顶点。从图 8 可见，各质点位移随时间的变化不一致，并且有起伏，说明材料边界膨胀和收缩不同步，膨胀和收缩量也有差别。铝膨胀到一定程度要停止膨胀，而转为收缩，这符合铝初期因吸热而膨胀、后期因放热而收缩的规律；铜的上端初期因放热，到一定程度转为膨胀，这应该是铜的轴向也要收缩的二维效应(见图 7)引起的；铜的下端在 6 ms 时间内一直收缩，但收缩速率随时间变慢，可以预计下端收缩到一定程度也会停止。

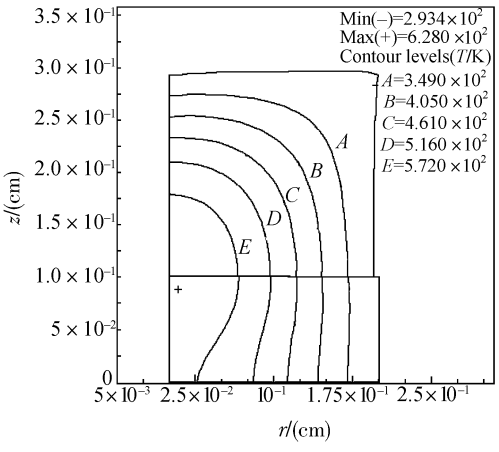


图 7 高温铜与铝接触热传导温度分布

Fig. 7 Contours of temperature in the copper and aluminium (The initial copper: 1500 K, aluminium: 293 K, the enviornment: 293 K, t=6 ms)

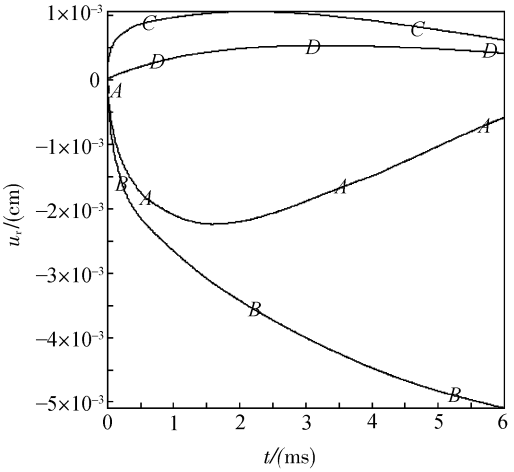


图 8 质点位移随时间的变化

Fig. 8 Curves of node displacement vs. time (A and B: upper and bottom top nodes on the copper side face, C and D: upper and bottom top nodes on the aluminium side face)

3.3 混合物冲击压缩过程的数值模拟

混合物冲击压缩特性的有限元数值模拟属于三维问题。将混合物组元材料颗粒按原定的配比随机分布在预先划定的三维网格中，用三维动力学有限元程序模拟其冲击压缩过程，以研究混合物的冲击压缩特性，可得到混合物的形变过程、组元间相互作用过程、趋于平衡过程和冲击压缩数据等[15]，同时可以验证“叠加原理”。

进一步采用混合物冲击压缩和热传导分离的数值模拟方法研究了混合物的冲击温度，分析了冲击压缩后的热传导对颗粒间温度分布的影响[6]。采用热动力学计算程序数值模拟混合物的冲击压缩特性，其优点是在模拟冲击压缩过程中考虑热传导的影响，对于颗粒度较小的混合物，如合金，尤为合适。

采用铜和铝两种材料组成的混合物，以方形(尺寸为 0.006 cm×0.002 cm×0.002 cm)三维网格单元按 60×20×20 形式划分，各单元随机分布铜和铝两种材料，体积配比为 1∶1，对应的混合物颗粒度为 1 μm。冲击压缩采用速度加载 M(w)+M(0)方法[6,15](加载速度方向后半部质点赋速度 w，前半部质点赋速度 0)，引入质点运动周期性边界条件，以消除边缘稀疏的影响。对周期性边界，考虑了界面传热的周期性，即界面单元的外界面温度按单元温度和对应周期性边界上单元的温度，采用热流连续条件计算。材料模型中不考虑弹塑性效应，采用三项式物态方程，物态参数见表 1。

图 9 给出了 w=4 km/s 时计算的铜/铝混合物靶内沿加载速度方向同一层上不同单元温度随时间的变化曲线。从图 9 可见，在冲击压缩时间内，各个单元温度有一定的差别，并且随时间变化稍有波动，到一定时间趋于一致，以至达到热平衡，经历初始压缩到热平衡的时间大约 3 ns。如果不考虑单元间的热传导，计算结果[6]体现不出单元间趋于热平衡的过程。

图 10 给出了靶内相邻 9 层上各 9 个单元平均温度随时间的变化曲线。从图 10 可见,各层平均温度基本一致,说明对于小颗粒混合物,在冲击压缩过程中颗粒间的热传导使混合物各层之间达到比较一致的温度、趋于热平衡,其平衡温度可以作为混合物的冲击温度。

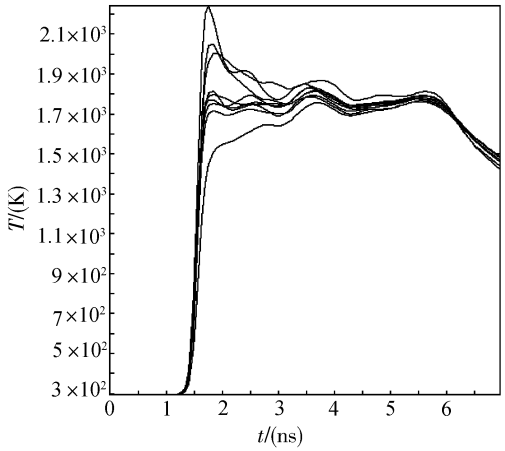


图 9　温度随时间的变化

Fig. 9　Temperature vs. time(Following impact of Cu-Al mixture; w=4 km/s; temperature of nine elements on one layer)

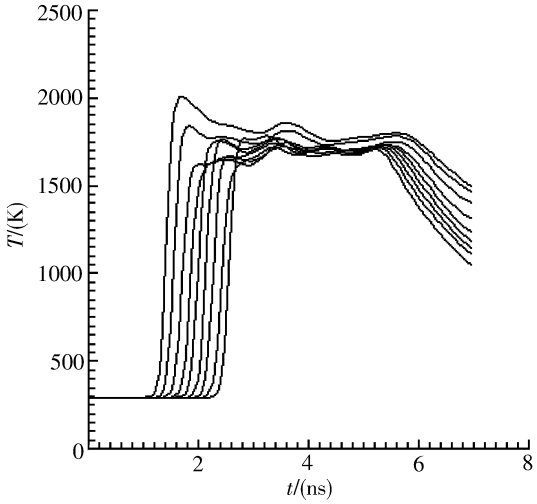


图 10　各层温度随时间的变化

Fig. 10　Temperature of layer vs. time (Following impact of Cu-Al mixture; w=4 km/s)

4　结　论

发展了热动力学问题的数值模拟方法和二维、三维有限元计算程序,可处理滑移接触传热、体单元接触传热、各种热边界条件等问题,有多种导热系数与状态的相关性、多种材料模型和物态方程可供选择利用。程序具有模拟傅里叶热传导、热应力应变效应、冲击压缩过程中的热传导等问题的能力,适用范围宽。对混合物热动力学数值模拟表明,小颗粒混合物在冲击压缩过程中,能在较短时间内达到热平衡。

References:

[1] Wilkins M L, Blum R E, Cronshagen E, et al. A Method for Computer Simulation of Problems in Solid Mechanics and Gas Dynamics in Three Dimensions and Time [R]. UCRL-51574, 1974. 1－7.

[2] Hallquist J O. LS-DYNA Theoretical Manual [R]. Livermore Software Technology Corporation, Copyright 1991－1998. 29. 1－29. 6.

[3] Huang C G, Duan Z P. Numerical Investigation on the Dynamic Responses of Structures Including the Effects of Thermal Conductivity [J]. Explosion and Shock Waves, 2001, 21(4): 253－258. (in Chinese)
黄晨光,段祝平. 含热传导的冲击动力学有限元程序的研究与应用 [J]. 爆炸与冲击, 2001, 21(4): 253－258.

[4] Zhang G R, Chen D N. Shock Initiation of Condensed Explosive [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1991. 100－101. (in Chinese)
章冠人,陈大年. 凝聚炸药起爆动力学 [M]. 北京:国防工业出版社, 1991. 100－101.

[5] Jiang S E, Yang J M, Ding Y N, et al. Investigation on Shock and Heat Waves in Aluminum Irradiated by Laser [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(4): 264－268. (in Chinese)
江少恩,杨家敏,丁耀南, 等. 激光驱动铝靶产生冲击波和热波的实验观测和分析 [J]. 高压物理学报, 2000, 14(4): 264－268.

[6] Lin H L, Huang F L, Yu W R. Numerical Simulation of Shock Temperature of Mixtures During Shock Loading

[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2002, 16(1): 46－56. (in Chinese)
林华令, 黄风雷, 于万瑞. 混合物冲击温度的数值模拟 [J]. 高压物理学报, 2002, 16(1): 46－56.

[7] Zhang G R. Problem of Heat Conduction Behind a Shock Wave Front [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1994, 8(1): 9－13. (in Chinese)
章冠人. 冲击波阵面后温度的热传导问题 [J]. 高压物理学报, 1994, 8(1): 9－13.

[8] Hong Y J, Tan H, Jin X. The Effect of Initial Density on Radiation Characteristics of the Wave Front [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(2): 133－138. (in Chinese)
洪延姬, 谭 华, 金 星. 介质初始密度对波阵面辐射特性的影响 [J]. 高压物理学报, 2000, 14(2): 133－138.

[9] Hallquist J O. Theoretical Manual for DYNA3D [R]. UCID-19401, 1983. 5－44.

[10] Du X. The Elements of Continuum Mechanics [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1985. 87－89; 119. (in Chinese)
杜 珣. 连续介质力学引论 [M]. 北京: 清华大学出版社, 1985. 87－89; 119.

[11] Yun S R, Tu H J, Liang D S, et al. Calculation Method of Detonation Mechanics [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1995. 238－239. (in Chinese)
恽寿榕, 涂侯杰, 梁德寿, 等. 爆炸力学计算方法 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1995. 238－239.

[12] Zhang C B, Li M S, Zhang S Z. A Three Pahse Equation of State for 2024Al [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1989, 3(4): 279－283. (in Chinese)
张春斌, 李茂生, 张世泽. 2024Al 的三相物态方程[J]. 高压物理学报, 1989, 3(4): 279－283.

[13] Tang W H. The Pressure and Temperature Dependence of Thermal Conductivity for Nonmetal Crystals [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1994, 8(2): 125－132. (in Chinese)
汤文辉. 非金属晶体导热系数与压力和温度相关性 [J]. 高压物理学报, 1994, 8(2): 125－132.

[14] Gu C H, Li D Q, Chen S X, et al. Equations of Mathematical Physics [M]. Beijing: Higher Education Press, 1984. 76－79. (in Chinese)
谷超豪, 李大潜, 陈恕行, 等. 数学物理方程 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1984. 76－79.

[15] Lin H L. Simulation of Shock Compression Behavior of Mixture by Using the Finite Element Method [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1998, 12(1): 40－46. (in Chinese)
林华令. 有限元法模拟混合物的冲击压缩特性 [J]. 高压物理学报, 1998, 12(1): 40－46.

Numerical Simulation of Thermodynamics Problem

LIN Hua-Ling, HUANG Feng-Lei

(*Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*)

Abstract: The equations of hydrodynamics including conduction of heat are solved numerically by using the finite element method. The heat flow is calculated according to the Fourier's heat conduction. The temperature on the contact side of elements is calculated by the continuity condition of heat flow. According to triangular partitions divided from a quadrangle side of body element, convection heat flow is calculated. Considering the isotropic-elastic-plastic-hydrodynamic material model, the equation of state with three contributions, and the correlation between thermal conductivity and temperature, some computational examples, including the Fourier's heat conduction, contact heat transfer, deformation effects of heat, and shock compression of mixture, are given by the finite element code. The numerical simulation of shock temperature of mixture indicates that the temperatures among minute grains fluctuate, and tend to reach a thermal equilibrium during the shock propagation.

Key words: thermodynamics; finite element method; numerical simulation; thermal effect; mixture