文章编号：1000-5773(2012)02-0135-06

六面顶压机高压腔体温度场的数值模拟*

刘　芳[1,2]，刘永刚[1]，谢鸿森[1]

（1.中国科学院地球化学研究所，贵州贵阳　550002；
2.中国科学院研究生院，北京　100049）

摘要：以有限元法为分析手段，在模型和边界条件适当简化的条件下，对六面顶压机高压腔体的温度场进行了数值模拟计算，得出了腔体内的温度分布。在此基础上通过调整模型参数，定性讨论了样品组装设计中组装材料、加热器形状以及导电金属环厚度对温度场的影响。数值模拟结果表明：用氧化锆替代叶蜡石作为堵头和保温材料可以提高样品区的温度，降低功率的消耗并减小样品区的温度梯度；与圆筒形加热器组装相比，中间厚两端薄的变圆筒形加热器组装能提供更高的样品中心温度和较小的温度梯度；使用导电金属环的加热组装时，适当增加金属环的厚度有利于获得较理想的温度分布。研究结果对优化高压实验的样品组装设计、改善温度梯度及保护设备具有一定的参考价值。

关键词：六面顶压机；温度场；样品组装设计；数值模拟
中图分类号：O521.3　　**文献标识码**：A

1　引　言

六面顶大腔体高压实验技术是进行高温高压下材料物性测量、材料合成以及地球深部物质研究的重要手段之一。其样品腔的温度分布对实验产生重要的影响，例如材料的合成以及物质的相平衡实验等都要求样品处于均匀的温度环境中，而高压腔体实际存在的温度梯度，对弹性波速、电导率等物性参数测量结果的准确度也会造成影响[1]，因此研究六面顶压机高压腔体的温度分布，对于控制温度条件并获得精确的实验结果有十分重要的意义。

从实验角度来看，热电偶测温是计算温度场最直接的方法[2]，同时利用高温高压下矿物反应与温度的关系也能间接标定高压腔体的温度分布[3]；从理论的角度，确定高压腔体的温度场可以建立在求解稳态热传导方程的基础上[4]，已有的研究结果表明，这种求解方法在解决温度场的问题时是非常方便而有效的[4-6]。本研究运用 COMSOL Multiphysics 多物理场耦合有限元程序，模拟计算六面顶压机高压腔体的稳态温度分布，定性讨论组装材料、加热器形状及导电金属环厚度对温度分布的影响。

2　模型描述

2.1　模型简化

在有限元的数值模拟中，需对实际问题进行适当简化。在高温高压实验过程中，六面顶压机的 6 个顶锤同步挤压位于中心焦点的叶蜡石组装块，组装块将发生大的塑性形变，本研究的数值模拟忽略这种塑性形变[7]。同时，由于模型中对流传热和辐射传热相对热传导来说很小，因而数值计算仅考虑热传导

* **收稿日期**：2010-09-13；**修回日期**：2010-12-13
基金项目：国家自然科学基金(40974052)；中国科学院知识创新工程重要方向项目(KZCX2-YW-Q08-3-4)
作者简介：刘　芳(1986—)，女，硕士研究生，主要从事高压矿物物理研究. E-mail：llff141032@163.com
通讯作者：刘永刚(1972—)，男，副研究员，主要从事高压矿物物理研究. E-mail：liuyg@yahoo.com

一种传热方式[8]。此外，孙宗琦等人[9]的计算表明，将立方传压块模型简化为二维轴对称模型，对稳态温度分布仅产生大约 1%的误差，因此高压腔体中的三维传热可以简化为二维轴对称问题。本研究对六面顶压机实验中常用的圆筒形加热组装(图 1)的温度场进行了数值模拟计算，因其有镜面对称的特点，故取 1/4 的二维轴对称模型进行分析，简化的模型如图 2 所示，$r=0$ 平面为圆柱轴对称面，$z=0$ 平面为镜对称面。在图 2 中，s 表示叶蜡石试样；b 表示叶蜡石堵头；x 表示不锈钢片加热器；p 表示叶蜡石传压介质；c 表示碳化钨顶锤。

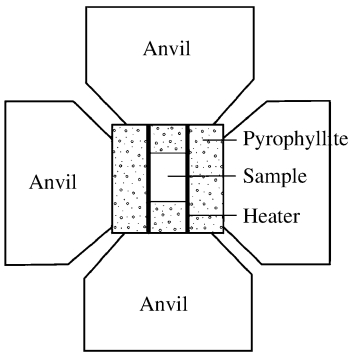


图 1 高压腔体圆筒形组装剖面图

Fig. 1 Cylindrical assembly section in high pressure chamber

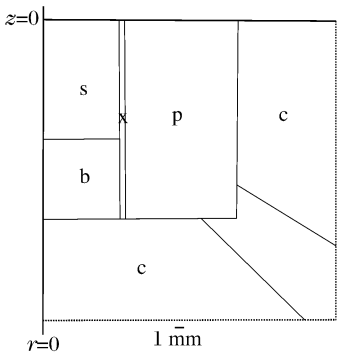


图 2 二维轴对称有限元模型

Fig. 2 2-D axisymmetric finite element model

2.2 材料参数

在热-电耦合模拟稳态温度场的过程中，依据稳态热传导方程，需要定义所用材料的热-电学物理性能参数。由于缺少高温高压下材料的物性参数，我们采用常温常压下的物性参数，见表 1。

表 1 材料的热-电物性参数[4,6]

Table 1 Thermodynamic-electrical property parameters of materials[4,6]

Material	Thermal conductivity κ/[W/(m·K)]	Resistivity ρ/(μΩ·m)
Pyrophyllite	9.04	—
Stainless steel	59	0.097 1
Anvil	160	0.583
Zirconia	1.91	—
Graphite	200	15
Platinum	75	0.103 5

2.3 边界条件

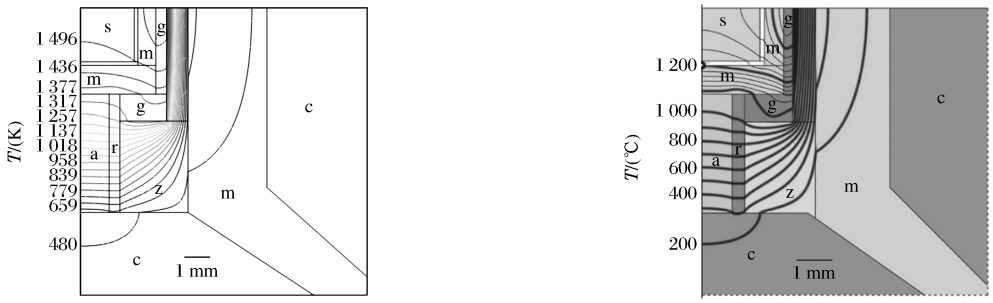
在广义传热模式下，需定义模型外围 4 条热边界条件，其中 $r=0$ 边界位于圆柱中心轴，为轴对称边界；$z=0$ 边界是镜对称面边界，为绝热/对称边界。其余两条虚线边界为热池，由实验经验假定为恒定温度 70 ℃。

同时在传导介质模式下定义热源边界，样品组装设计中加热器的热输出作为热源，加热器上、下边界加载一定的电压，其余边界为电绝缘。

3 求解和验证

为了验证模拟的有效性，对文献[4]的 14/8“G2”组装按照给定的参数和边界条件进行了稳态温度场的数值模拟计算，计算得到的温度场与文献[4]提供的温度场的对比如图 3 所示。由图 3 可知，本研究基于有限元法计算的温度场与文献[4]基于差分方程确定的温度场基本一致。因此，用 COMSOL 热-电耦合计算高压腔体的温度场是可行的，得到的结果也是可靠的，可以极大地方便人们优化各种实验组装设计。

经网格划分和求解器求解，计算出了样品中心温度达 1 000 ℃时圆筒形加热组装的温度场(图 4)，相邻温度线间的温度间隔为(50±1)℃。



(a) This study (b) Ref. [4]

s: MgO sample, platinum capsule; m: MgO; a: Al_2O_3; r: Mo; g: graphite; z: ZrO_2; c: WC anvils

图 3 本研究计算结果与文献[4]结果的比较

Fig. 3 Comparison of results in this study and Ref. [4]

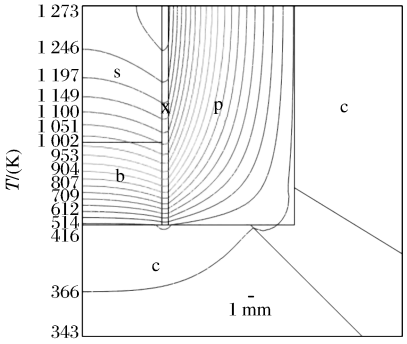


图 4 圆筒形组装温度分布

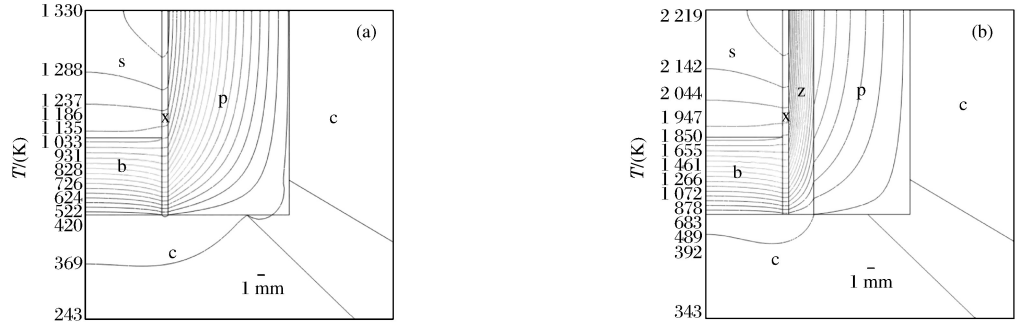
Fig. 4 Contour diagram of the calculated temperature field for the cylindrical assembly

4 高压腔体温度场影响因素讨论

下面通过调节有限元模型中组装材料、加热器及导电环参数,对比高压腔体不同组装结构的温度场,定性讨论样品组装设计中组装材料、加热器形状及导电金属环厚度等因素对高压腔体温度分布的影响。

4.1 组装材料的影响

在研究组装材料对高压腔体温度分布的影响时,保持其它条件不变,仅使用氧化锆代替叶蜡石作为堵头 b,此时的温度分布如图 5(a)所示。从理论上说,氧化锆热导率较小,是人们熟知的具有良好绝热性能的保温材料,用其作为堵头可以使样品室的温度更均匀。对比图 5(a)和图 4 可知:用氧化锆代替叶蜡石作堵头,不仅提高了样品区的温度,还大大降低了样品区的温度梯度。用氧化锆作堵头的同时,将壁厚 2 mm 的氧化锆套管 z 置于加热器 x 外,使 p 为内置氧化锆套管的复合传压块,在其它条件不变的情况下,计算的温度场如图 5(b)所示。对比图 5(b)和图 4 可知,样品中心温度升高了约 945 ℃。模拟结果表明,在加热管外加装氧化锆套管并使用氧化锆作堵头,可以极大地强化绝热保温效果,在达到相同温度的条件下,可以极大地减小功率消耗,减轻高温对碳化钨顶锤的影响,此结论与高压实验中广泛采用氧化锆套管来提高保温效果的实践是一致的。



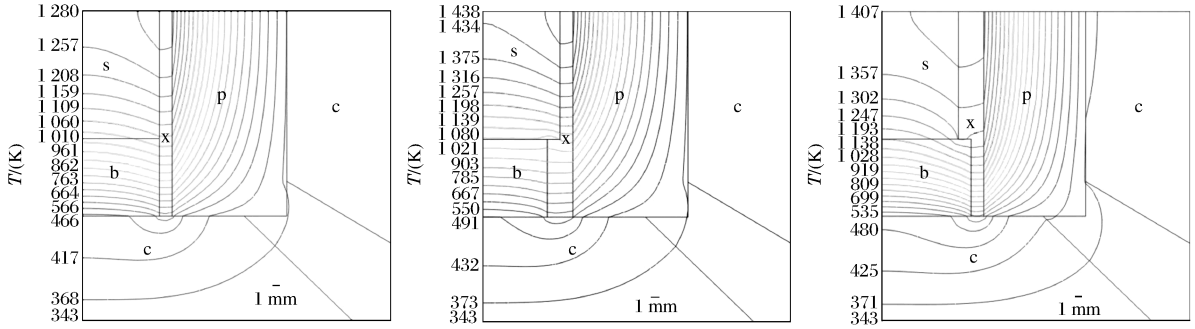
(a) For assembly without zirconia tube (b) For assembly with zirconia tube

图 5 不同组装的温度分布

Fig. 5 Temperature distribution in different assemblies

4.2 加热器形状的影响

为了研究加热器形状对高压腔体温度分布的影响，我们模拟了 3 种不同形状的加热器，即 x 分别为壁厚 1 mm 的圆筒形石墨管、中间薄(1 mm)两端厚(2 mm)和中间厚(2 mm)两端薄(1 mm)的变圆筒形石墨管。在其它参数不变的条件下，求解出的各温度场分布如图 6 所示。对比图 6(a)～图 6(c)可知：在相同的外界条件下，变圆筒形加热器组装比圆筒形加热器组装可提供更高的样品中心温度，中间厚两端薄的变圆筒形加热器组装有助于减小样品区的温度梯度。



(a) For straight graphite heater of uniform wall thickness

(b) For stepped graphite heater of two ends thickened

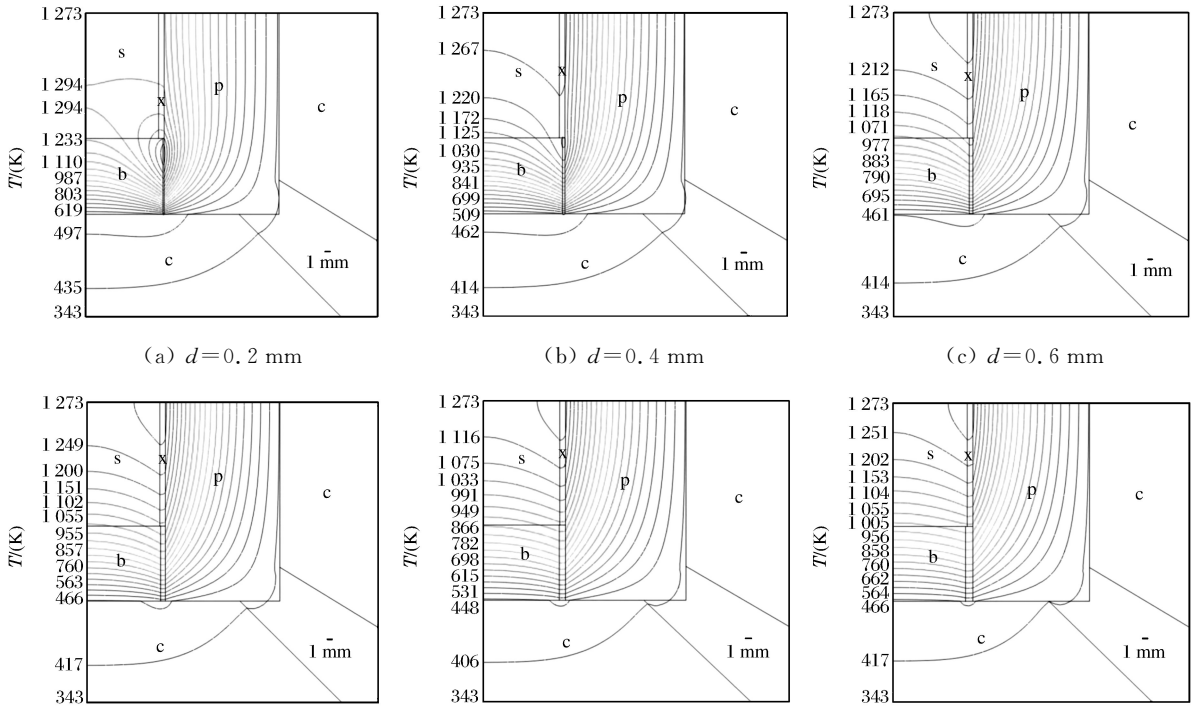
(c) For stepped graphite heater of centre thickened

图 6 不同形状加热器组装的温度分布

Fig. 6 Temperature distribution in assemblies with heaters of different shapes

4.3 导电金属环厚度的影响

本研究以覆盖不同厚度 Pt 片的导电环为例，研究了导电环组装中金属环厚度对温度分布的影响。调整加在碳化钨上、下顶锤间的电压，使不同厚度导电环组装的样品中心温度均达到 1 000 ℃，图 7 为 Pt 片厚度 d 从 0.2 mm 以 0.2 mm 间隔增至 1.2 mm 的各导电环组装的温度场。



(a) d=0.2 mm

(b) d=0.4 mm

(c) d=0.6 mm

(d) d=0.8 mm

(e) d=1.0 mm

(f) d=1.2 mm

图 7 不同厚度导电金属环组装的温度分布

Fig. 7 Temperature distribution in assemblies with conductive metal rings of different thickness

对比图 7(a)～图 7(f)可知:当 Pt 片很薄(0.2～0.4 mm)时,电阻大,产生的热量大,样品区的温度较均匀,但 Pt 片作为主要的发热体使堵头区域的温度很高,对碳化钨顶锤不利;当 Pt 片较厚(1.2～2.0 mm)时,堵头处温度不高,但样品区的温度梯度很大;当 Pt 片厚度适中(0.6～1.0 mm)时,样品区的温度较均匀,同时堵头处温度也不高。由此可以认为,适当地增加金属导电环的厚度,降低电阻,能够避免因其自身发热而对顶锤温度所产生的影响,尽管金属导电环厚度的增加会导致热传导的增加,但是通过分析认为,这种传热效应可以忽略。因此,使用导电环的加热组装时,适当增加导电金属环的厚度有利于获得较理想的温度分布。

5　结　论

(1) 在模型和边界条件适当简化的条件下,使用 COMSOL Multiphysics 多物理场耦合有限元程序,可以有效地模拟分析六面顶压机高压腔体的温度分布。

(2) 氧化锆代替叶蜡石作为堵头和保温材料可以提高样品区的温度,降低功率的消耗并减小样品区的温度梯度;与圆筒形加热器组装相比,中间厚两端薄的变圆筒形加热器组装能提供更高的样品中心温度和较小的温度梯度;使用导电环的加热组装时,适当增加导电金属环的厚度有利于获得较理想的温度分布。

References:

[1] Liu W, Du J G, Yu Y, et al. Correction of temperature gradient in sample cell of pulse transmission experimental setup on multi-anvil high pressure apparatus [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2003, 17(2): 95-100. (in Chinese)
刘　巍,杜建国,于　泳,等. 六面顶压机高温高压弹性波速测量装置样品室温度梯度的校正 [J]. 高压物理学报, 2003, 17(2): 95-100.

[2] Chen X F, He D W, Wang F L, et al. Design and temperature calibration for heater cell of split-sphere high pressure apparatus based on the hinge-type cubic-anvil press [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2009, 23(2): 98-104. (in Chinese)
陈晓芳,贺端威,王福龙,等. 基于铰链式六面顶压机的二级 6-8 模超高压大腔体内置加热元件的设计与温度标定 [J]. 高压物理学报, 2009, 23(2): 98-104.

[3] Watson E B, Wark D A, Price J D, et al. Mapping the thermal structure of solid-media pressure assemblies [J]. Contributions to Mineralogy and Petrology, 2002, 142: 640-652.

[4] Hernlund J, Leinenweber K, Locke D, et al. A Numerical model for steady-state temperature distributions in solid-medium high-pressure cell assemblies [J]. Am Mineral, 2006, 91: 295-305.

[5] Schilling F, Wunder B. Temperature distribution in piston-cylinder assemblies: Numerical simulations and laboratory experiments [J]. Eur J Mineral, 2004, 16: 7-14.

[6] Li R, Ma H A, Han Q G, et al. Analysis of temperature field in diamond synthetic chamber basedon ANSYS [J]. Journal of Jilin University (Engineering and Technology Edition), 2008, 38(3): 535-538. (in Chinese)
李　瑞,马红安,韩奇钢,等. 基于 ANSYS 的金刚石合成腔内的温度场分析 [J]. 吉林大学学报(工学版), 2008, 38(3): 535-538.

[7] Li R, Han Q G, Jia X P, et al. Finite element simulation on distribution of temperature in the HPHT synthesis chamber with sideward heater [J]. Diamond & Abrasives Engineering, 2009, 170(2): 9-12. (in Chinese)
李　瑞,韩奇钢,贾晓鹏,等. 旁热式高压合成腔体内温场分布的有限元模拟 [J]. 金刚石与磨料模具工程, 2009, 170(2): 9-12.

[8] Feng J F, Lin F, Li L W, et al. Study on temperature of different assembly structure in cubic hinge apparatus [J]. Superhard Material Engineering, 2009, 21(3): 21-25. (in Chinese)
冯吉福,林　峰,李立惟,等. 六面顶压机上不同组装结构的温度研究 [J]. 超硬材料工程, 2009, 21(3): 21-25.

[9] Sun Z Q, Xu J A, Xie H S. Computer simulation of the thermal flow inside the high pressure cell (Ⅰ)—Equations and methods of solution [J]. Acta Physica Sinica, 1997, 46(10): 1938-1943. (in Chinese)
孙宗琦,徐济安,谢鸿森. 静态超高压大腔体中热流的计算机模拟(Ⅰ)——基本方程和数值求解方法 [J]. 物理学报, 1997, 46(10): 1938-1943.

Numerical Simulation of Temperature Field in Sample Assembly of Cubic Press

LIU Fang[1,2], LIU Yong-Gang[1], XIE Hong-Sen[1]

(1. *Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang* 550002, *China*;
2. *Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100049, *China*)

Abstract: Numerical simulation for the temperature distribution in sample assembly of cubic press was carried out by using the finite-element method with simplified model and boundary conditions. Based on the adjustment of parameters of the models in simulation, the temperature distribution induced by pressure transmission media, shapes of heater and conductive metal ring were discussed in details. The results indicate that the use of zirconia instead of pyrophyllite as the buffer and thermal insulator can elevate the temperature and at the same time lower the thermal gradient in sample area while reducing power consumption. Different shapes of heater will affect on the temperature distribution. In the case of the metal ring being used in assembly, properly increasing the thickness of the ring will be beneficial to obtain desirable temperature distribution. This work could be a useful reference to optimize the design of sample assembly in cubic press for high temperature and high pressure experiments.

Key words: cubic press; temperature distribution; sample assembly; numerical simulation