确定复杂多孔材料有效导热系数的新方法*

钱吉裕 李 强** 余 凯 宣益民

(南京理工大学动力工程学院, 南京 210094)

摘要 从 Lattice-Boltzmann(LB)方程出发, 推导了二维 LB 导热模型(D2Q5), 计算了具有复杂结构的多孔材料的有效导热系数, 计算结果与其他文献中的实验结果符合较好. 分析了多孔材料有效导热系数与材料孔隙率、单位面积孔隙数、骨架形状等参数之间的关系并给出了估算公式. 给出的二维 LB 导热模型能方便地计算各种小尺度上具有复杂边界或复合材料中的导热问题, 且二维模型能方便地扩充到三维.

关键词 Lattice-Boltzmann 多孔材料 有效导热系数

多孔材料具有独特的结构和性能,在很多领域(如航空航天、化工等)的应用前景十分广阔¹¹¹.其中,多孔材料的有效导热系数是开展多孔介质流动与传热研究的重要物性参数之一,一般可以用实验来测定,但是对于填充物是流体(如水、空气)而且孔隙率较大(如图 1)的情况,要得到精确的实验数据也比较困难.很多学者从多孔介质的结构出发得到了很多分析模型^[2-5],但是由于分析模型必须依赖于某些特定的几何结构,所以必须人为假设多孔材料具有某种规则结构,这样得到的有效导热系数精度受到很大影响,而且适用范围也有局限.因此,有必要从数值计算的角度来发展一种通用性强、精度高的计算多孔材料有效导热系数的数值模型.另一方面,由于多孔材料几何结构的多样性以及复杂性,要想更好地揭示其内部能量的传递机理,必须从微观角度考察其能量的传递过程,建立一个能量传递模型.

Lattice-Boltzmann(LB)方法是近年来出现的一种新型的数值方法,它从介观层次上来考虑粒子团的迁移和碰撞,通过粒子分布函数的演化来得到宏观问题的解,从微观上揭示了宏观问题的本质,近年来运用该方法已经成功地解决了流

²⁰⁰³⁻⁰⁸⁻²¹ 收稿, 2004-08-31 收修改稿

^{*} 国家自然科学基金资助项目(批准号: 50306007)

^{**} 联系人

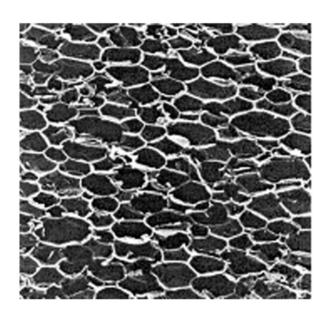


图 1 某种多孔材料电子显微镜照片

体流动中的很多问题, 对于固体导热问题, 我们假设其中也是通过某种粒子团的 迁移和碰撞来实现的(如金属中为自由电子), 那么通过LB方法建立一个能量传递 模型能很好地体现物理问题的本质。另外LB方法还具有高度并行化、几何边界易 处理和算法简单等优点[6].

Lattice-Boltzmann 导热模型

采用BGK碰撞模型、离散的Lattice-Boltzmann方程如下^[7]:

$$f_{i}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t) - f_{i}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\eta} [f_{i}(\mathbf{x}, t) - f_{i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] = -\frac{1}{\tau} [f_{i}(\mathbf{x}, t) - f_{i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \tag{1}$$

式中, f_i 是分布函数, 上标 eq 代表平衡态, η 是松弛时间, τ 是无因次松弛因子.

对于正方形网格的 D2O5 模型,(1) 式可以改写成

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\sigma} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \quad i = 0, 1, \dots, 4,$$
 (2)

$$f_{i}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{i}\Delta t, t + \Delta t) - f_{i}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_{i}(\mathbf{x}, t) - f_{i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \quad i = 0, 1, \dots, 4,$$

$$\begin{cases} \mathbf{e}_{i} = (0, 0)c, & i = 0, \\ \mathbf{e}_{i} = \left(\cos\left(\frac{i - 1}{2}\pi\right), \sin\left(\frac{i - 1}{2}\pi\right)\right)c, & i = 1, 2, 3, 4, \end{cases}$$
(3)

 $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ 表示格子速度的模.

推导过程中, 取如下形式的平衡分布函数:

SCIENCE IN CHINA Ser. E Engineering & Materials Science

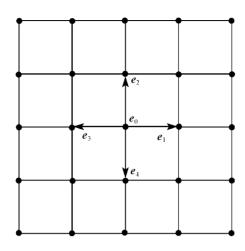


图 2 D2Q5 格子速度示意图

$$f_i^{\text{eq}} = A_i T. \tag{4}$$

f;eq 必须满足能量守恒定律, 即

$$\sum_{i=0}^{b} f_i^{\text{eq}} = T. \tag{5}$$

将(4)式代入(5)式后得

$$A_0 + A_1 + A_2 + A_3 + A_4 = 1. (6)$$

对(2)式左边运用Taylor展开可得[8]

$$f_{i}(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_{i}, t + \Delta t) - f_{i}(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Delta t^{n}}{n!} \left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{e}_{i\alpha} \partial_{\alpha}) \right]^{n} f_{i}(\mathbf{x}, t) - f_{i}(\mathbf{x}, t).$$
 (7)

$$\Delta t D_i f_i + \frac{\Delta t^2}{2} D_i^2 f_i + O(\Delta t^3) = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{\text{eq}}).$$
 (8)

对上式各时间量和空间量进行多尺度展开, 可写成如下形式[9]:

$$f_{i} = f_{i}^{(eq)} + \Delta t f_{i}^{(1)} + \Delta t^{2} f_{i}^{(2)} + \cdots,$$

$$\partial_{t} = \partial_{t0} + \Delta t \partial_{t1} + \Delta t^{2} \partial_{t2} + \cdots,$$

$$\partial_{\alpha} = \partial_{\alpha 0} + \Delta t \partial_{\alpha 1} + \Delta t^{2} \partial_{\alpha 2} + \cdots,$$

$$D_{i} = D_{i}^{(0)} + \Delta t D_{i}^{(1)} + \Delta t^{2} D_{i}^{(2)} + \cdots,$$

$$(9)$$

式中, α 是空间维度, Δt 是小量.

根据关系式(9)及方程(8), 可得到如下关于小量 Δt 的关系式:

$$D_i^{(0)} f_i^{\text{eq}} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}, \tag{10}$$

$$D_i^{(0)} f_i^{(1)} + D_i^{(1)} f_i^{\text{eq}} + \frac{1}{2} D_i^{(0)2} f_i^{\text{eq}} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}.$$
 (11)

联立(10)和(11)式, 消去 $D_i^{(0)^2}$ 项后有

$$D_i^{(1)} f_i^{\text{eq}} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_i^{(0)} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \tag{12}$$

由(10)和(12)式分别对 i 求和, 得

$$\partial_{t0}T + \partial_{\alpha 0} \sum_{i} \mathbf{e}_{i\alpha} \cdot f_{i}^{\text{eq}} = 0, \tag{13}$$

$$\partial_{t1}T + \partial_{\alpha 1} \sum_{\alpha} \sum_{i} (\boldsymbol{e}_{i\alpha} \cdot f_{i}^{\text{eq}}) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_{\alpha 0} \sum_{i} \boldsymbol{e}_{i\alpha} \cdot f_{i}^{(1)} = 0.$$
 (14)

为了得到宏观方程,根据 f_i^{eq} 的定义,方程(13)第 2 项可以改写成

$$\sum_{i} (\mathbf{e}_{i\alpha} \cdot f_{i}^{\text{eq}}) = \mathbf{e}_{0a} \cdot A_{0}T + \mathbf{e}_{1a} \cdot A_{1}T + \mathbf{e}_{2a} \cdot A_{2}T + \mathbf{e}_{3a} \cdot A_{3}T + \mathbf{e}_{4a} \cdot A_{4}T.$$
 (15)

考虑到各向同性材料格点向4个方向迁移能量的概率相同,有 $A_1 = A_2 = A_3 = A_4 = A_4$ 所以有 $\sum_i (e_{i\alpha} \cdot f_i^{\text{eq}}) = 0$,代入(13)和(14)式,得

$$\partial_{t0}T = 0, (16)$$

$$\partial_{t1}T + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\partial_{\alpha 0}\sum_{i} e_{i\alpha} \cdot f_{i}^{(1)} = 0, \tag{17}$$

$$\sum_{i} \mathbf{e}_{i\alpha} \cdot f_{i}^{(1)} = -\tau \sum_{i} \mathbf{e}_{i\alpha} (\partial_{t0} f_{i}^{\text{eq}} + \mathbf{e}_{i\beta} \cdot \partial_{\beta 0} f_{i}^{\text{eq}}) = -\tau \left(0 + \partial_{\beta 0} \left(\sum_{i} \mathbf{e}_{i\alpha} \mathbf{e}_{i\beta} f_{i}^{\text{eq}} \right) \right) \\
= -\tau \partial_{\beta 0} (2c^{2} \delta_{\alpha\beta} AT) = -2\tau c^{2} \delta_{\alpha\beta} A \partial_{\beta 0} T, \tag{18}$$

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \neq \beta. \end{cases}$$

$$\partial_{t1}T + (1 - 2\tau)c^2A\partial_{\alpha 0}{}^2T = 0. \tag{19}$$

将(19)式乘以 Δt 与(16)式相加, 得

$$\partial_t T = \Delta t (2\tau - 1)c^2 A \partial_\alpha^2 T. \tag{20}$$

上式就是宏观热扩散方程. 其中, 热扩散系数 α 表述为

$$\Delta t (2\tau - 1)c^2 A = \alpha. \tag{21}$$

为了得到合理的数值解, 必须有 $\tau > 0.5$, $0 < A_i < 1$. 平衡分布函数中的系数可有下面关系式来确定:

$$A_1 = A_2 = A_3 = A_4 = A = \frac{\alpha}{(2\tau - 1)c^2 \Delta t} = \frac{\alpha \Delta t}{(2\tau - 1)\Delta x^2},$$
 (22)

$$A_0 = 1 - 4 \frac{\alpha \Delta t}{(2\tau - 1)\Delta x^2}.$$
 (23)

(22)和(23)式表明,给定格子尺寸以及松弛时间和松弛因子后,格子上的能量向四周迁移的概率与材料的热扩散系数成正比.由于本文中的计算对象是具有复杂结构的多孔复合材料,可以采用双分布函数,模型中的格子尺度和时间尺度 (Δx 和 Δt)必须相同, τ 也取相同,那么根据(22)和(23)式给出的关系式,可得到各分布函数的系数.

2 多孔材料的生成及边界条件

为了比较不同骨架结构的多孔材料有效导热系数的关系,本文生成了如图 3 所示两种结构的多孔材料. 图 3(a)是采用计算机生成的规则结构的二维多孔材料,图中白色表示固体骨架,黑色是填充物. 在计算区域中的每个格点上,可以用特征函数 $\chi(x,y)$ 来详细描述多孔材料的结构特征[10]:

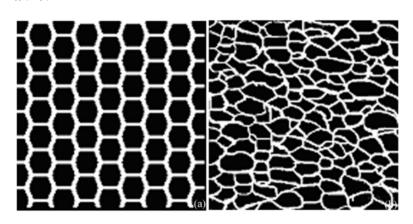


图 3 用两种不同结构多孔材料 (a) 规则结构,(b) 非规则结构

$$\chi(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{ 自 } \text{ \emptyred} (\text{\text{q}} \, \text{\text{π}}), \\ 1, & \text{ \text{$\emptyred}} (\text{\text{q}} \, \text{\text{π}}). \end{cases}$$
 (24)

为了使计算机模拟的多孔材料接近实际多孔材料,可以直接由扫描电子显微镜照片,经过图像处理等方法得到,图像处理过程主要包括灰度拉伸、梯度锐化、噪声去除、阈值变换以及中值滤波等.图 3(b)是由图 1 所示电子显微镜照片经图像处理后得到的某孔隙率的单色位图图像.利用处理后的单色位图各像素点上的灰度值,同样可以用(24)式的特征函数 $\chi(x,y)$ 来描述该多孔材料.

根据 Fourier 定律有

$$q = -K\nabla T. \tag{25}$$

在二维条件下, 如果是各向异性材料, 上式可以写成

$$\begin{bmatrix} q_x \\ q_y \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} \\ k_{yx} & k_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \end{bmatrix}. \tag{26}$$

如果恰当地选择坐标系,一定可以找到一个坐标系(x',y'),在此坐标系下,导热系数张量中 $k_{x'y'}=k_{y'x'}=0$,此坐标系即为导热系数主轴方向,这样就可以根据各坐标方向的热流密度及温度梯度计算主轴方向的导热系数,根据该主轴方向的导热系数计算任何方向的导热系数张量.

3 数值结果及讨论

为了验证上述 LB 导热模型的正确性,下面分别计算两个不同导热系数物体并联和串联时的有效导热系数. 在图 4 中,由于坐标方向就是导热系数的主轴方向,所以取如下边界条件:左右边界均取绝热边界,上下边界均取定温边界(温差为 ΔT). 如果不计接触热阻,根据 Fourier 定律可以得到两个物体串并联时 y 方向的有效导热系数分别为

$$k_{\text{eff}}^{s} = \frac{2}{1/\lambda_{1} + 1/\lambda_{2}},$$

$$k_{\text{eff}}^{p} = \frac{\lambda_{1} + \lambda_{2}}{2},$$
(27)

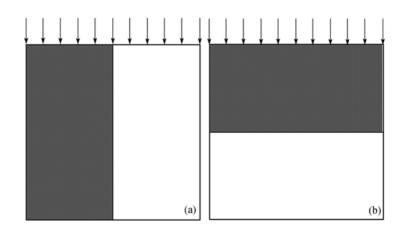


图 4 LB 模型计算有效导热系数 (a) 并联,(b) 串联

算例中取 λ_1 = 236 W/m· K, λ_2 = 0.6 W/m· K, 格子长度 Δx = 4.827×10⁻⁴ m, 格子数均取 200×200,用LB导热模型计算得到y方向的有效导热系数分别为: 117.105 和 1.227 W/m· K, 误差小于5%, 说明用该模型计算的温度场有着相当 高的精度.

在二维空间中,表征多孔材料的特征一般可以用孔隙率 ε ,单位面积上孔隙数N以及骨架结构来表示.下面从数值结果上分析有效导热系数与上述各特征量之间的关系.孔隙率 ε ,单位面积上孔隙数N可以根据计算区域中每个格子上的特征函数统计得到.为了得到具有相同骨架结构和孔隙密度N和不同孔隙率 ε 的多孔材料,可以对图 3(a)和 3(b)进行图像滤波或图像平滑处理.如果把图像进行放大或者缩小就可以得到具有相同孔隙率 ε 不同单位面积上孔隙数N 的多孔材料.

本文算例中骨架是铝,物性参数如下:密度 $\rho_{Al}=2710~kg/m^3$,导热系数 $k_{Al}=236~W/m\cdot~K$,比热 $c_{Al}=902~j/kg\cdot K$,填充物是水,密度 $\rho_{Wa}=998~kg/m^3$,导热系数 $k_{Wa}=0.6~W/m\cdot~K$,比热 $c_{Wa}=4183~j/kg\cdot K$. 图 5 和 6 分别是两种不同结构(如图 3(a)和(b)所示)的多孔材料在不同时刻的温度分布情况,可以看出能量主要沿着固体骨架向下传递,高温的固体骨架再向周围的填充物传递能量,最后达到平衡. 比较两者的等温线可以发现,图 5 比图 6 平直,这是因为前者的结构很规则,坐标轴方向即是其导热系数主轴方向,所以左右两侧没有温差,等温线应该是一系列水平等距线,而图 6 的骨架结构具有随机性,其局部导热系数是各向异性的,但总体来看两侧温差很小。所以当选择的计算区域较大时,其表现为各向同性,所以图 3(b)结构的多孔材料的坐标轴方向也是其导热系数主轴方向.

表 1 是两种不同结构的多孔材料的有效导热系数随 N 的变化情况,可以看出单位面积上孔隙数 N 越大有效导热系数也越大,但是变化比较小,这与文献[3]中

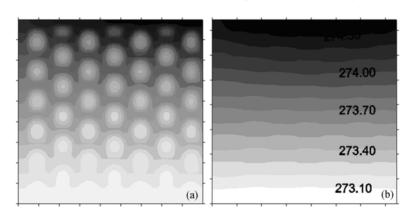


图 5 某规则结构多孔材料温度场 (a) t = 20 s, (b) t = 50 s

www.scichina.com

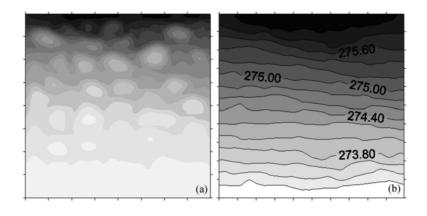


图 6 某不规则结构多孔材料温度场 (a) t = 20 s, (b) t = 50 s

表 1 有效导热系数与 N 的关系

	规则	规则	规则	不规则	不规则	不规则
多孔种类	$\varepsilon = 0.7088$	ε = 0.7088	ε = 0.7088	ε = 0.6966	$\varepsilon = 0.6966$	ε = 0.6966
N/cm^{-1}	1.23	2.46	3.69	2.35	4.7	7.05
$k_{\rm eff}/\mathrm{W} \cdot \mathrm{m}^{-1} \cdot \mathrm{K}^{-1}$	48.32	49.06	49.64	28.35	28.96	29.45

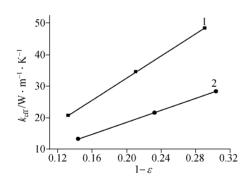


图 7 有效导热系数与孔隙率的关系 1 示规则结构(图 3(a)), 2 示不规则结构(图 3(b))

实验结果比较一致.

图 7 是两中不同结构的多孔材料 在y方向的有效导热系数随孔隙率ε的 变化关系. 在计算的ε范围内,有效导 热系数与 1-ε基本上成线性关系,但 是两种结构的斜率相差较大. 也就是 说,骨架结构对有效导热系数的影响 也很明显,所以构造规则的多孔介质 来分析实际多孔材料的有效导热系数 会有较大的误差. 根据热阻串并联的 关系,可以认为整个多孔材料的热阻

是由部分热阻串联和部分热阻并联组成的, 有效导热系数可以写成如下形式:

$$k_{\rm eff} = \xi(\varepsilon k_{\rm f} + (1-\varepsilon)k_{\rm s}) + (1-\xi) / \left(\frac{\varepsilon}{k_{\rm f}} + \frac{1-\varepsilon}{k_{\rm s}}\right),\tag{28}$$

式中, $k_f n k_s \gamma$ 别是填充物和骨架的导热系数, ξ 是一个与骨架结构有关的系数. 图 4 中 1 和 2 两种结构的多孔材料的 ξ 分别为 0.70 和 0.39. 文献[3]给出了图 1 所示结构多孔铝的实验结果, 与本文数值计算结果非常接近, 这也再一次说明了本

文的LB模型用于计算多孔材料有效导热系数的正确性。

4 结论

本文从Lattice-Boltzmann(LB)方程出发,推导了LB导热模型,该模型可以从 孔隙尺度考察多孔介质中的热传导特性,并且具有较高的数值精度.本文运用该 模型计算了复合多孔多孔材料的有效导热系数,计算结果表明:影响多孔材料有 效导热系数的主要因素是孔隙率和骨架结构,而单位面积孔隙数对导热系数影响不大.该数值模型的计算结果与实验数据较为符合.本文的 LB 模型导热模型 可以很方便地扩充到三维空间,同时该导热模型也可以用于计算一般扩散问题.

参 考 文 献

- Bhattacharya A, Calmidi V V, Mahajan R L. Thermophysical properties of high porosity metal foams. Int J of Heat and Mass Transfer, 2002, 45: 1017~1031[DOI]
- 2 Whitaker S. The Method of Volume Averaging. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1999
- Paek J W, Kang B H, Kim S Y, et al. Effective thermal conductivity and permeability of aluminum foam materials. Int J Thermophys, 2000, 21: 453~464[DOI]
- 4 Calmidi V V, Mahajan R L. The effective thermal conductivity of high porosity metal foams. ASME J Heat Transfer, 1999, 121: 466~471
- 5 Boomsma K, Poulikakos D. On the effective thermal conductivity of a three dimensionally structured fluid-saturated metal foam. Int J Heat and Mass Transfer, 2001, 44: 827~836[DOI]
- 6 郭照立,郑楚光. 流体动力学的格子 Boltzmann 方法. 武汉: 湖北科学技术出版社, 2002
- 7 Palmer B J, Rector D R. Lattice-Boltzmann algorithm for simulating thermal two-phase flow. Physical Review E, 2000, 61(5): R5295[DOI]
- 8 Alexander F J, Chen S, Sterling J D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics. Physical Review E, 1993, 47: R2294
- 9 刘慕仁,陈若航,李华兵,等.二维对流扩散方程的格子 Boltzmann 方法.物理学报,1999,48: 1800~1804
- 10 Manwart C, Aaltosalmi U, Koponen A, et al. Lattice-Boltzmann and finite-difference simulations for the permeability for three-dimensional porous media. Physical Review E, 2002, 66: R016702[DOI]