doi:10.3969/j.issn.1673-9833.2022.01.004

基于颗粒法的物质热传导建模与可视化仿真

陈晓峰^{1,2},黄刚海³,邱泓杰⁴

(1. 湖南科技大学 岩土工程稳定控制与健康监测湖南省重点实验室,湖南 湘潭 411201;
2. 湖南科技大学 土木工程学院,湖南 湘潭 411201;
3. 中南大学 土木工程学院,湖南 长沙 410075; 4. 中南大学 资源与安全工程学院,湖南 长沙 410075)

摘 要: 核废料深地质处置等问题常需进行热传导分析,而传统的热传导分析基于连续模型,无法描述 热量在两个接触体之间的传递细节。针对这一问题,首先,基于颗粒法将材料离散为一系列的热存储器和热 管道,通过与颗粒相关的热存储器和与接触相关的热管道组成的网络实现温度交换。其次,通过 Qt 搭建程 序架构,利用开放图形程序接口 OpenGL 实现可视化,并通过分析一维薄板、二维对称圆环的热传导特性对 其进行正确性验证,同时研究了颗粒粒径和堆积方式对传热的影响。结果表明,该方法能较好地模拟物质的 传热过程。

关键词:颗粒法;热传导;计算程序;可视化

中图分类号: TK115; TP311 文献标志码: A 文章编号: 1673-9833(2022)01-0026-07 引文格式: 陈晓峰,黄刚海,邱泓杰.基于颗粒法的物质热传导建模与可视化仿真 [J]. 湖南工业大学学报, 2022, 36(1): 26-32.

Modeling and Visual Simulation of Material Heat Conduction Based on Particle Simulation Method

CHEN Xiaofeng^{1, 2}, HUANG Ganghai³, QIU Hongjie⁴

(1. Hunan Provincial Key Laboratory of Geotechnical Engineering for Stability Control and Health Monitoring, School of Civil Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan Hunan 411201, China;

2. School of Civil Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan Hunan 411201, China;

3. School of Civil Engineering, Central South University, Changsha 410075, China;

4. School of Resources and Safety Engineering, Central South University, Changsha 410075, China)

Abstract: A heat conduction analysis is often required for the deep geological disposal of nuclear waste, while the traditional heat conduction analysis, which is based on a continuous model, fails to describe the details of heat transfer between two contacts. In view of this problem, firstly, based on the particle simulation method, the material is discretized into a series of heat storage and heat pipes, thus realizing the temperature exchange through the network composed of heat storage related to particles and heat pipes related to contact. Then, the program architecture is built through Qt, thus achieving the visualization by using the open graphics program interface OpenGL, followed by a verification of its correctness based on an analysis of the heat conduction characteristics of one-dimensional thin plate and two-dimensional symmetrical ring. Meanwhile, a research is to be carried out on the effects of particle

作者简介:陈晓峰(1997-),男,湖南益阳人,湖南科技大学硕士生,主要研究方向为岩土工程热固耦合, E-mail: chenxf0711@163.com

通信作者:黄刚海(1986-),男,广西河池人,中南大学讲师,博士后,硕士生导师,主要研究方向为非连续介质力学数 值模型,自主计算程序及岩土工程数值模拟,E-mail: huangganghai@163.com

收稿日期: 2021-05-31

基金项目:国家自然科学基金资助项目(52178377);湖南省自然科学基金资助项目(2020JJ5175);湖南省研究生科研创新基金资助项目(CX20190801)

size and stacking mode on heat transfer. The results show that this method exhibits an improved performance in the simulation of the heat transfer process of materials.

Keywords: particle simulation method; heat conduction; computation program; visual simulation

1 研究综述

颗粒材料与人们的日常生活密切相关,如土壤、 砂石、粮食等。颗粒材料的热传导研究有着广泛的应 用前景。如在核废料地质处置中,深埋地下核废料中 的核元素衰变会释放大量热,通过热传导使围岩温 度升高,由热应力引起的围岩破裂可能导致核废料泄 漏,污染水资源;地热具有清洁、可循环和安全等优 点,是较好的可再生能源之一。在地热开采中,将冷 水注入热岩,使岩石温度下降,导致岩石发生热破裂, 这一问题也涉及岩石热传导。此外,地壳中矿床的形 成规律研究、矿床勘探、二氧化碳的地质存储和油气 开采等新领域都与颗粒材料热传导联系紧密。因此, 对颗粒的热传导研究有着重要的应用价值。

颗粒系统热传导问题研究分为两类,即连续介 质传热模型和离散颗粒传热模型。连续介质传热模 型将系统的宏观性质及宏观传递过程与微观结构、 微观特性相联系,常用的有由 I. Nozad 等^[1]提出的 有效介质法,用各向同性的有效介质代替颗粒系统, 将材料的微观结构特性简化得到平均温度分布,其 不足之处在于忽略了颗粒系统的高度离散性;相反, 基于微观层次用离散模型研究颗粒材料的传热过程 不存在此类问题。对于离散颗粒传热模型, S. Yagi 等^[2]最先提出了离散颗粒传热的概念,认为颗粒之 间可通过5种途径传热。针对各传热途径之间的差异, 学者们提出了多种模型及相应的计算表达式。如 M. Yovanovich^[3] 指出,接触面间的导热是颗粒系统传热 的主要方式。Sun J. 等^[4]将两颗粒通过接触面的导热 问题近似为两个半无限厚介质间的热传递问题,但 作了过多简化。W. L. Vargas 等^[5-6] 研究发现,在理 想情况下,接触面上传递的热量与颗粒间的法向应 力存在一定的函数关系,在此基础上发展了热颗粒 动力学法(thermal particle dynamics, TPD), 但其 在计算非固定颗粒时具有局限性。B. Chaudhuri^[7]利 用离散单元法(discrete element method, DEM),结 合 TPD,对转鼓中颗粒在转动情况下的传热问题进 行了研究。Shi D. L.^[8] 结合 DEM 与计算流体动力学 (computational fluid dynamics, CFD),模拟了不同 材料、不同颗粒大小情况下回转窑中颗粒的导热问 题。Feng Y. T. 等^[9-10]以两个颗粒间的接触为基本单元,

将颗粒体模型化为传热网络,发展了颗粒材料中热 传导问题的离散温度单元法(discrete thermal element method, DTEM),并对较大规模的二维颗粒系统导 热问题进行了研究,但其计算传热需要引入两个未 知量。颗粒法(particle simulation method, PSM)将 介质材料离散为一系列通过接触连接在一起的颗粒 结合体,可用于求解颗粒材料的热传导问题,已发 展了成熟的颗粒法软件 PFC(particle flow code)^[11], 现已被广泛应用于颗粒材料特性及各类工程问题研 究中。

与此同时,国内也有学者开展了关于颗粒热传导方面的研究。刘安源等^[12]在分析颗粒碰撞传热机 理的基础上建立了一个新的颗粒碰撞传热理论模型, 对流化床内床层与壁面的碰撞传热系数进行颗粒层 次上的模拟。武锦涛等^[13]综合考虑颗粒接触传热的 多个过程,提出了颗粒接触传热模型,并结合 DEM 模拟了移动床中颗粒与加热面间的传热过程。李腊 梅等^[14]提出了一种全新的非连续介质热传导数值计 算方法,并通过自主编制计算程序验证了其正确性。 于庆波等^[15]采用 CFD 软件,对颗粒绕圆管传热现象 进行了建模,并验证了模型的正确性。王擎等^[16]将 离散元方法与颗粒热传导模拟结合,研究了回转干馏 炉内颗粒间的传热过程。姬国钊等^[17]通过离散元方 法分析了回转窑内颗粒的运动和换热过程。

从国内外研究现状看,热传导的研究常采用商业 软件模拟,独立开发自主计算程序甚少。而对热传导 研究方法而言,离散颗粒模型,因考虑了实际颗粒组 成结构,能更好地反映实际过程,受到了更广泛的 关注。鉴于热传导研究现状及离散颗粒模型的优点, 本论文以颗粒法为传热算法,自主编写 C++ 代码, 开发热传导计算程序,对颗粒材料进行热传导建模及 可视化仿真分析。

2 颗粒法基本原理

2.1 热传导基本方程

设颗粒系统中任一颗粒为单元*i*,温度的变化规 律满足连续介质热传导方程:

$$-\frac{\partial q_i}{\partial x} + q_v = \rho_i C_v \frac{\partial T_i}{\partial t}$$
 (1)

式中: ρ_i 为颗粒密度; C_v 为材料比热容; q_i 为热流密度; q_v 为单位体积发热率; T_i 为颗粒温度。

傅里叶热传导定律定义了热流密度与温度梯度 间的关系:

$$q_i = -k \frac{\partial T}{\partial x} , \qquad (2)$$

式中: x 为热流方向; k 为热传导系数。

常用的边界条件分为3类:

1) Dirichlet 边界,指定边界上的温度值。

$$t > 0, T(x, t) = T_{\circ}$$
 (3)

2) Neumann 边界,指定边界上的热流密度值。

$$t > 0, -k \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)(x, t) = q'_{\circ}$$
 (4)

3) Robin 边界,指定边界上的对流换热系数及 边界层温度值。

$$t > 0, -k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) (x, t) = h (T - T_a)_{\circ}$$
 (5)

式(3)~(5)中: \overline{T} 为颗粒单元边界上给定的温度;q'为边界处的热流密度值;h为换热系数; T_a 为外界环境温度或边界层温度。3类温度条件均假设热流方向为x方向。

本研究中将颗粒材料离散为一系列的热存储器 和热管道,热量将通过热存储器之间的激活管道进行 传递。热管道的有效性与接触有关,如果接触过程中 两颗粒单元有重叠则认为连接两颗粒间的热管道有 效,热传导接触模型示意图如图1所示。



图 1 热传导接触模型示意图

Fig. 1 Schematic diagram of heat conduction contact model

从图1所示模型可知,热管道连接两个热存储器, 热流仅在热管中流动,两热存储器转移的热量即为热 管的能量 ΔQ ,热管有固定的热阻 η ,将每个热管看 成单位长度上热阻为 η 的一维物体,则有:

$$\Delta Q = -\Delta T / (\eta L)_{\circ} \tag{6}$$

式中: Δ*T* 为热管道两端热存储器的温度差; *L* 为热 管道的长度。 对颗粒单元 i 进行分析, 可得:

$$\Delta Q_{i-j} = -\left(T_j - T_i\right) / \left(\eta_{i-j} L_{i-j}\right)_{\circ} \tag{7}$$

式中: η_{i-j} 与 L_{i-j} 分别为连接单元 *i* 与单元 *j* 间热管的 热阻与长度。

同理可得:

$$\Delta Q_{j-i} = \Delta Q_{i-j} \circ \tag{8}$$

测量颗粒单元中热传导系数与热管道中的热阻 抗系数有如下理论关系式^[11]:

$$\eta = \frac{1}{2k} \left(\frac{1-p}{\sum V_i} \right) \sum L_{i\circ}$$
(9)

式中: p 为颗粒材料的孔隙率; V 为颗粒的体积。

2.2 热传导数值离散

给定初始条件下的温度,可计算出每个热管的能 量变化量,从而热源的温度将改变,变化公式如下:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{m_i C_{\nu_{(i-j)}}} \left(-\sum_{j=1}^N \Delta Q_{i-j} \right)_{\circ}$$
(10)

对式(10)中时间导数向前差分,可得:

$$T_{t+\Delta t} = T_t + \Delta t \frac{\partial T}{\partial t} = T_t + \frac{\Delta t}{m_i C_{v_{(i-j)}}} \left(-\sum_{j=1}^N \Delta Q_{i-j} \right)_{\circ} \quad (11)$$

式中 Δt 为时间步长。

2.3 热传导计算流程

基于上述颗粒法基本原理和热传导接触模型,通 过所有接触对热传导的累积,可实现整个颗粒系统 的热传导。计算流程如图 2 所示,其中 *i_step* 为计算 步标识,*i_par* 为颗粒单元标识。每执行一次循环更 新一次颗粒单元温度,当达到时间总长时输出结果, 计算结束。



图 2 热传导计算流程图

Fig. 2 Calculation flow chart

3 可视化模型建立

热传导的程序架构和软件界面如图 3 所示。程序 主要分为计算内核模块和可视化模块两部分。



b)软件界面图 3 热传导程序架构和软件界面

Fig. 3 Program architecture and software interface

计算内核模块将热传导相关数据和操作封装成 一个 C++ 类——CHeatConduction 类,用于执行所有 与圆盘颗粒热传导有关的运算。CHeatConduction 类 的数据结构如图 4 所示。



由图 4 可知,该类用小类对象作为其成员变量, 主要包括 CDisk 类——圆盘类,每个 CDisk 类对象 表示圆盘颗粒系统中的一个圆盘;其成员变量主要包 括圆盘温度和圆盘温度变化量,圆盘中心坐标和半 径;圆盘密度和质量以及与该圆盘接触的相邻圆盘数 据等。pD 为 CheatConduction 类对象数组,存储了圆 盘颗粒系统中所有圆盘的数据。

热传导计算主要包含如下操作。

Step 1 执行 setInitialTemperature()函数,设置 初始温度;

Step 2 执行 searchContactPairs()函数,访问 pD 数组,搜索系统中的所有圆盘 - 圆盘接触对,根 据接触对数据求解出与传热有关的变量(如嵌入量 等);在计算中以上步骤只需执行一遍,这是因为本 论文中颗粒固定不动,因此颗粒间的接触方式及与传 热有关的嵌入量等均保持不变。然后执行单位时步的 计算,每一单位时步内的计算分为两步:

Step 1 执行 implementCalculation()函数,求解 每一组接触对的温度变化量,更新改变后的圆盘温度 值,并将求解结果保存至圆盘数组中;

Step 2 执行 updateModelData()更新颗粒温度。 其中,可视化模块被封装成了另一个 C++ 类——

COpenGL类,该类从 Qt 预定义的 QOpenGLWidget 类和 QOpenGLFunctions 类派生,并重写其内 嵌虚函数,用于渲染程序界面的可视化视窗。 CHeatConduction 类和 COpenGL 类通过指针相互访 问,COpenGL类可读取 CHeatConduction 类的数据(如 颗粒的温度、位置坐标及颗粒大小等)并将模型实时 显示在计算机屏幕上。

4 模型验证与结果分析

通过分析一维薄板、二维对称圆环的热传导特性 对其进行正确性验证。本研究算例所用参数如下:热 传导系数 *k*=1.6 W/(m·℃);比热容 C_{ν} =0.2 J/(kg·℃); 密度 ρ =1 000 kg/m³;初始温度 T_0 =0 ℃。

4.1 一维薄板热传导

一维平面薄板热传导示意图如图 5 所示。由图 5a 可知,平面薄板的长度 *L*=20 m,宽度 *W*=0.2 m。 采用 100 个圆盘搭建一维薄板热传导模型。模型左 右两侧设定不同的常温度边界,分别为 T_1 =100 ℃, T_2 =0 ℃。









该薄板在固定温度边界下逐渐达热平衡状态。根据文献 [18] 在"常温度边界下薄板的瞬态热响应"中的推导,薄板各处的温度 *T*(*Z*, *t*) 为

$$T(Z, t) = T_{1} + \frac{Z}{L} (T_{1} - T_{2}) + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-kn^{2}\pi^{2}t/L^{2}} \left(\frac{T_{2}\cos(n\pi) - T_{1}}{n}\right) \sin\left(\frac{n\pi Z}{L}\right) \circ \quad (12)$$

式中: t为时间; Z为距离模型左侧距离。

图 5b 展示了自主程序算出的薄板各处温度及对 应的解析解,可看出数值解与理论解高度吻合。

4.2 二维对称圆环热传导

二维对称圆环热传导示意图如图 6 所示。

图 6a 可知,圆环的内径 R_a =2 m,外径 R_b =5 m, 该模型由 6 596 个半径为 0.05 m 的圆盘组成。在模 型内、外侧分别设定 100 ℃,0 ℃的常温度边界。

由图 6a 中的圆环模型,当热流稳定时各处温度 *T*(*r*) 的解析解^[18] 为

$$T(r) = \frac{\ln(R_b/r)}{\ln(R_b/R_a)} T_a + \frac{\ln(R_a/r)}{\ln(R_a/R_b)} T_b \circ$$
(13)

式中r为监测点到圆心的距离。







Fig. 6 Two-dimensional symmetrical ring heat conduction

图 6b 为自主程序计算出的圆环各处温度及对应 的理论解,从中可以看出数值解与理论解高度吻合。

从以上一维薄板及对称圆环两个算例的结果可 以看出:自主程序计算正确,且精度较高。

4.3 影响因素分析

4.3.1 颗粒粒径

图 7 为粒径不同的两个颗粒模型,在模型左右两 侧分别设定 100 ℃和0 ℃常温度边界进行热传导模 拟。对两个模型分别监测,取监测点的位置为距离 模型左侧 4, 8, 16 m 处,所得结果如图 8 所示。从图 8 中的曲线图可以看出:颗粒半径对传热的影响非常 小,大颗粒模型传热略快,但颗粒系统最终的稳定传 热状态不受颗粒粒径的影响。









4.3.2 堆积方式

本研究建立了3种不同的颗粒堆积模型,如图9 所示。在堆积方式不同的3种颗粒模型左右两侧分别 设定100℃和0℃常温度边界,进行热传导模拟。对 3种模型取不同的位置点分别进行监测,所得结果如 图10所示。从图10可以看出:堆积方式对传热的影 响非常小,方形堆积传热略快,但颗粒系统最终的稳 定传热状态不受颗粒堆积方式影响。



Fig. 9 Disks model formed by three stacking methods



Fig. 10 Influence of stacking mode accumulation methods

5 结论

本文讨论了模拟颗粒材料热传导的颗粒法接触 模型、接触热交换计算方法及可视化实现算法的基本 实施步骤。在此基础上,通过分析一维薄板、二维对 称圆环的热传导特性,验证了模型的正确性。然后分 析了颗粒粒径、堆积方式对传热的影响,得出如下结 论:1)在其他参数一致时,颗粒半径对传热的影响 非常小,大颗粒模型传热略快,但颗粒系统最终的稳 定传热状态不受颗粒粒径影响;2)颗粒堆积方式对 传热的影响较小,方形堆积传热略快,但颗粒系统最 终的稳定传热状态不受颗粒堆积方式影响。

以上研究结果表明,所提方法能较好地模拟颗粒 的热传导,但本研究也有一定局限性,仅对一维薄板、 二维圆环进行了研究,对三维立体颗粒物质的传热还 有待进一步研究。

参考文献:

- NOZAD I, CARBONELL R G, WHITAKER S. Heat Conduction in Multiphase Systems—II: Experimental Method and Results for Three-Phase Systems[J]. Chemical Engineering Science, 1985, 40(5): 857–863.
- [2] YAGI S, KUNII D. Studies on Effective Thermal Conductivities in Packed Beds[J]. AIChE Journal, 1957, 3(3): 373-381.
- YOVANOVICH M. Thermal Contact Correlations[C]// 16th Thermophysics Conference. Palo Alto, CA, USA. Reston, Virigina: AIAA, 1981: 83–95.
- [4] SUN J, CHEN M M. A Theoretical Analysis of Heat Transfer Due to Particle Impact[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1988, 31(5): 969–975.

- [5] VARGAS W L, MCCARTHY J J. Heat Conduction in Granular Materials[J]. AIChE Journal, 2001, 47(5): 1052–1059.
- [6] VARGAS W L, MCCARTHY J J. Conductivity of Granular Media with Stagnant Interstitial Fluids via Thermal Particle Dynamics Simulation[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2002, 45(24): 4847–4856.
- [7] CHAUDHURI B, MUZZIO F J, TOMASSONE M S. Modeling of Heat Transfer in Granular Flow in Rotating Vessels[J]. Chemical Engineering Science, 2006, 61(19): 6348-6360.
- [8] SHI D L, VARGAS W L, MCCARTHY J J. Heat Transfer in Rotary Kilns with Interstitial Gases[J]. Chemical Engineering Science, 2008, 63(18): 4506– 4516.
- [9] FENG Y T, HAN K, LI C F, et al. Discrete Thermal Element Modelling of Heat Conduction in Particle Systems: Basic Formulations[J]. Journal of Computational Physics, 2008, 227(10): 5072-5089.
- [10] FENG Y T, HAN K, OWEN D R J. Discrete Thermal Element Modelling of Heat Conduction in Particle Systems: Pipe-Network Model and Transient Analysis[J]. Powder Technology, 2009, 193(3): 248–256.
- [11] Itasca Conswlting Group, Inc. Particle Flow Code in 3 Dimensions (PFC3D) [M]. Minneapolis: Minnesota, 2004: 1-7.
- [12] 刘安源,刘 石.流化床内颗粒碰撞传热的理论研究
 [J].中国电机工程学报,2003,23(3):161-165.
 LIU Anyuan, LIU Shi. Theoretical Study on Impact Heat Transfer Between Particles in Fluidized Bed[J].
 Proceedings of the CSEE, 2003, 23(3):161-165.
- [13] 武锦涛,陈纪忠,阳永荣.移动床中颗粒接触传热的数学模型 [J].化工学报,2006,57(4):719-725.
 WU Jintao, CHEN Jizhong, YANG Yongrong. Model

of Contact Heat Transfer in Granular Moving Bed[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering (China), 2006, 57(4): 719–725.

- [14] 李腊梅,冯 春.一种非连续介质中热传导过程的数 值模拟方法 [J]. 工程力学,2016,33(1):25-31,46.
 LI Lamei, FENG Chun. A Numerical Simulation Method for Heat Conduction in Discontinuous Media[J].
 Engineering Mechanics, 2016, 33(1):25-31,46.
- [15] 于庆波,彭家燕,任慧来,等.颗粒绕流圆管传热的数值模拟研究[J].东北大学学报(自然科学版),2016,37(5):663-667.
 YU Qingbo, PENG Jiayan, REN Huilai, et al. Numerical Simulation Research on Heat Transfer in Particle Flow Round Tubes[J]. Journal of Northeastern University (Natural Science), 2016, 37(5): 663-667.
- [16] 王 擎,李 建,王智超,等.回转干馏炉内颗粒间 传热特性的数值模拟[J].化工学报,2017,68(11): 4137-4146.
 WANG Qing, LI Jian, WANG Zhichao, et al. Numerical Simulation on Characteristics of Heat Transfer Between Particles in Rotary Retorting[J]. CIESC Journal, 2017, 68(11): 4137-4146.
- [17] 姬国钊,张瑜涛,包津维,等.回转窑热解废塑料 过程中固体颗粒的运动与传热模拟[J].科学通报, 2020,65(26):2895-2902.
 JI Guozhao, ZHANG Yutao, BAO Jinwei, et al. The Simulation of Particle Movement and Heat Transfer in Rotary Kiln for Plastic Waste Pyrolysis[J]. Chinese Science Bulletin, 2020, 65(26): 2895-2902.
- [18] CARSLAW H S, JAEGER J C. Conduction of Heat in Solids[M]. 2nd Ed. London: Oxford Press, 1959, 93– 132.

(责任编辑: 姜利民)