



气凝胶纳米多孔材料传热计算模型研究进展

何雅玲*, 谢涛

西安交通大学能源与动力工程学院, 热流科学与工程教育部重点实验室, 西安 710049

* 联系人, E-mail: yalinghe@mail.xjtu.edu.cn

2014-09-09 收稿, 2014-09-22 接受, 2014-12-08 网络版发表

国家自然科学基金重点项目(51436007)和国家重点基础研究发展计划(2013CB228304)资助

摘要 对新型气凝胶纳米多孔隔热材料等效热导率计算模型在近年来的发展进行了研究总结, 介绍了(1) 纳米尺度下气凝胶隔热材料的气相/固相/辐射等不同传热模式的传

热特点; (2) 气凝胶纳米尺度多孔网络中的气相传热、固相传热以及辐射传热的理论计算、数值预测以及经验关联等不同计算模型的特点及建立方法; (3) 气凝胶纳米多孔隔热材料以及气凝胶复合隔热材料的整体等效热导率计算模型的研究进展; (4) 以前期开展的研究工作为例, 具体说明了气凝胶复合隔热材料从纳米尺度到微米尺度的传热模型的建立过程以及整体等效热导率计算模型的建立方法; (5) 对分子动力学方法在气凝胶纳米多孔材料中的应用做了简要介绍。最后指出, 对于气凝胶纳米多孔材料, 其纳米尺度下的气固接触界面等特殊区域的耦合传热机理研究还不完善, 复杂结构的纳米颗粒的固相热导率以及整体热导率计算模型也不够准确。因而采取适用于纳米尺度下的传热计算方法对这些问题进行更细致深入的研究, 可以为进一步阐明气凝胶复合隔热材料内部的热量传递机理, 建立更准确的气凝胶复合隔热材料传热计算模型, 探索不同影响因素对传热性能的影响规律, 以及开展气凝胶复合隔热材料的性能预测及优化等方面的研究, 提供理论指导帮助。

关键词

气凝胶纳米多孔材料
等效热导率

气相传热
固相传热
辐射传热

气凝胶通常指以纳米量级颗粒相互聚集构成纳米多孔网络结构的轻质纳米固态材料, 其骨架颗粒直径约 1~20 nm, 孔隙尺寸约 2~50 nm, 孔隙率可以高达 90%以上^[1]。由于其纳米尺度的多孔网络结构(图 1), 导致气凝胶材料具有热学、光学、声学、电学等一系列特殊的性能, 并可广泛应用于能源、建筑、化工、航空航天等领域。Hrubesh^[2]对于气凝胶材料的特殊性能以及相关的应用做了总结, 见表 1。

气凝胶材料因同时具备轻质和高效隔热两方面的优点, 使其成为一种性能优良的新型纳米多孔隔热材料, 并且已经受到越来越多的关注, 尤其在飞速发展的航空航天科技领域^[3,4]。20世纪90年代, 美国NASA将气凝胶应用在了两个太空探索计划: “火星

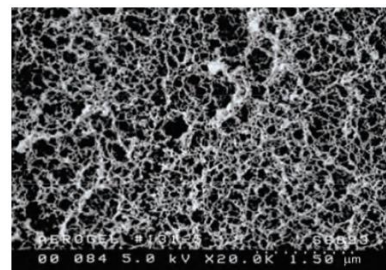


图1 氧化硅气凝胶扫描电子显微镜图^[5]

Figure 1 Scanning electron micrograph of silica aerogel network^[5]

拓荒者(Mars Pathfinder)”和“星尘号(Stardust)”中, 开启了气凝胶应用在空间探索领域的大门^[5]。2003年, NASA“火星探测漫游者(Mars Exploration Rovers)”计划中的“火星探测样本采集(Sample Collection for

引用格式: 何雅玲, 谢涛. 气凝胶纳米多孔材料传热计算模型研究进展. 科学通报, 2015, 60: 137-163

He Y L, Xie T. A review of heat transfer models of nanoporous silica aerogel insulation material (in Chinese). Chin Sci Bull, 2015, 60: 137-163, doi: 10.1360/N972014-00948

表1 气凝胶材料的属性、特点及其应用^[1]
 Table 1 Properties, features and applications of aerogel material^[2]

性质	特点	应用
热学特性	最好的固体隔热材料; 透明; 耐高温; 重量轻	建筑设备隔热材料, 太空飞行器和探测, 铸造模具
低密度/高比表面积/ 高孔隙率	最轻的合成固体材料; 均匀; 高比表面积; 多种组成成分	催化剂, 吸附剂, 传感器, 燃料储存, 离子交换
光学特性	具有低折射指数的固体材料; 透明; 多组分合成材料	透光材料; 光耦合材料, Cerenkov探测器介质材料
声学特性	最低的声速材料	测距仪, 传感器的阻抗匹配器, 扬声器, 建筑吸声材料
机械特性	易伸缩的; 重量轻	极高速粒子陷阱, 能量吸收器
电学特性	最低的介电常数; 高的介电强度/绝缘强度; 高比表面积	真空电极的间隔器, 电容, 集成电路的介电材料

the Investigation of Mars, SCIM)”和“等价理论的卫星测试 (Satellite Test of the Equivalence Principle, STEP)”均使用了气凝胶, 而且气凝胶被视为是决定总计划成功与否的关键因素^[5]. 2005年, NASA开始准备将气凝胶隔热材料应用在金星宇宙飞船的热防护系统中^[6]. 至今为止, NASA对气凝胶的研究报道从未间断. 此外, 气凝胶作为新型隔热材料, 在民用及现代工业等领域同样有着越来越多的应用^[7-10]. Cuce等人^[11]对气凝胶材料的热传递性能进行了分析, 并对气凝胶材料在各类建筑中的应用进行了较为全面的总结回顾, 同时, 他们也气凝胶材料的经济性以及未来的发展进行了分析. 鉴于上述背景, 在传统隔热材料难以满足现代工业、航空航天等提出的高要求情况下, 对新型纳米孔隔热材料——气凝胶, 特别是气凝胶复合隔热材料内部的热量传递方式进行研究并建立气凝胶复合隔热材料传热计算模型, 对于预测气凝胶复合隔热材料的隔热性能具有重大的理论价值. 同时, 分析材料内部的热量传递机理并掌握

材料内各个影响因素对传热性能的影响规律, 也可为进一步优化材料设计以及研制耐高温、轻质、高效隔热材料提供可靠的理论支撑.

近年来, 已有许多学者对气凝胶纳米多孔材料的传热计算开展了研究, 并提出了多种气凝胶纳米多孔材料传热计算模型, 本文对现有的气凝胶材料传热计算模型进行介绍总结, 以便为后续学者的继续研究提供一定的帮助.

1 气凝胶传热机理分析

1.1 气凝胶隔热材料纳米尺度传热特点

热量在多孔材料中的基本传递方式为导热、对流

以及辐射传热3种方式, 具体如下.

对流是多孔材料内部孔隙的流体的宏观运动, 引起流体各部分之间产生相对位移, 导致冷、热流体相互掺混, 进而所产生的热量传递方式^[12]. 有文献报道, 对于多孔材料, 当材料的孔径小于4 mm时, 由于流体的对流所产生的热量传递基本可以忽略不计^[13,14]. 气凝胶材料内部孔隙基本处于纳米尺度量级^[1,15], 所以, 在考虑气凝胶内部的热量传递规律方面, 可忽略内部孔隙的对流. 导热是材料内部的各部分组分之间没有发生相对位移时, 仅依靠材料内的分子、原子以及自由电子等微观粒子的热运动而产生的热量传递方式^[12]. 由于气凝胶多孔材料中存在固相组分以及气相组分, 所以材料内部的导热传热又可细分为固相导热以及气相导热两种情况.

气相导热是孔隙内气体分子相互碰撞产生的热量传递. 气凝胶的孔径一般在5~100 nm, 平均孔径约在20~40 nm之间^[1], 而空气在标准状态下的分子平均自由程约为69 nm. 由此可见, 气凝胶内部的孔隙孔径小于或接近于气体分子平均自由程, 这种纳米尺度的孔隙会严重限制分子的自由移动, 因而大大降低了孔隙内的气相导热.

固相导热主要依靠固体分子在平衡位置的晶格振动进行. 类比于辐射中光子的概念, 将固体分子做晶格振动所具有的最小能量称之为声子. 以二氧化硅气凝胶为例, 其一次颗粒直径一般在2~5 nm^[15], 而对于非晶二氧化硅材料, 其声子平均自由程约为0.58 nm^[16]. 可见, 对于气凝胶材料, 其骨架特征尺度同样接近于固体的声子平均自由程, 因而在纳米尺度效应作用下, 导致了固体导热的显著降低^[13,17]. 气凝胶固相导热的大大降低, 一方面是由于纳米尺

度的固体骨架颗粒,另一方面还因为气凝胶材料具有极低的密度以及复杂的三维多孔网络结构,这种结构增加了热量传输路线的复杂程度,延长了热量经由固体传输的传热路径,因而导致气凝胶的固体导热比传统多孔隔热材料要低很多。

物体通过发生电磁波来传递能量的方式称为辐射传热^[12]。外部传入的辐射热能或者多孔材料中固相物质发射的辐射热能,穿过多孔材料内的孔隙或骨架,会被固相材料吸收、反射或者散射。需要说明的是,对于氧化硅气凝胶的辐射传热,其在高温下对波长为 3~8 μm 的近红外辐射具有较强的透过性,因而导致氧化硅气凝胶高温阶段遮挡红外辐射能力差,并致使气凝胶热导率随温度的升高显著上升^[18,19]。

气凝胶材料中除了存在以上所述的 3 种基本传热方式,即气相导热、固相导热以及辐射传热外,由于气凝胶的纳米尺度孔隙以及固体骨架,导致在固相颗粒的接触面,气体分子大量富集。气体分子的在狭缝区的大量富集,会有所谓的拟晶格振动现象,增强材料的整体传热^[20],见图 2。同时,由于气凝胶内部存在多种热量传递方式,不同的传热方式之间也会互相产生影响,形成耦合传热效应^[20~22],见图 3。

综上所述,由于纳米孔绝热材料具有极高的孔隙率和极低的密度,材料内部的孔隙的特征尺寸以及固相骨架结构的特征尺寸均在纳米尺度量级,接近或小于对应的能量载子的平均自由程,因此气凝

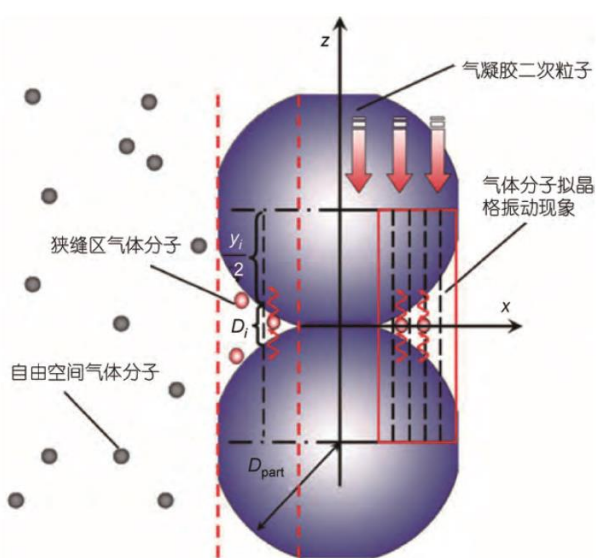


图 2 气凝胶材料内狭缝区的气体分子拟晶格振动现象^[20]
Figure 2 The solid-like quasi lattice vibration phenomenon in the interface of adjacent aerogel particles^[20]

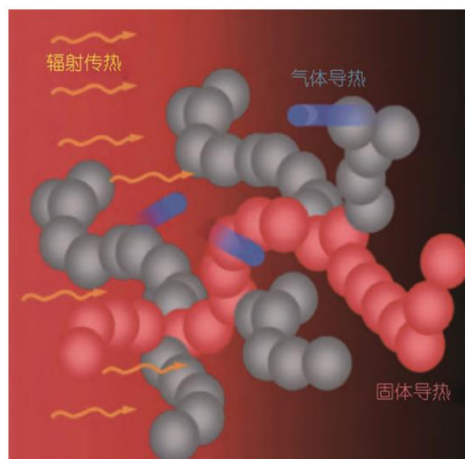


图 3 气凝胶材料内部的气固耦合传热^[1]
Figure 3 The coupled heat transfer inside aerogel material^[1]

胶内部的热量传递规律具有明显的纳米尺度效应。同时,上述在界面处的拟晶格振动现象以及多种热量传递方式的耦合传热,均会对气凝胶材料的热量传递产生影响,因而需要对气凝胶隔热材料在纳米尺度下的不同传热方式进行研究,探讨各个传热方式对材料传热的影响机制,以便进一步提高材料的隔热性能。

1.2 气凝胶复合隔热材料传热

虽然气凝胶作为高效隔热材料已被成功地应用于多个领域^[2,3,5,7,23],但其还存在进一步改进之处。例如,对氧化硅气凝胶,一方面它的低密度、高孔隙率的结构特点,导致其强度低,难以直接作为隔热材料使用,其力学性能有待提高;另一方面,氧化硅气凝胶在高温时对波长为 3~8 μm 的近红外热辐射具有较强的透过性,致使随着温度的升高,辐射传热逐渐成为热传导的主要方式,导致材料的高温隔热效果有待改善。正是以上两个方面的原因限制了氧化硅气凝胶在隔热领域的应用^[24]。

针对气凝胶材料存在的上述两个缺点,大多数研究都集中在通过加入增加力学性能的增强剂和对近红外辐射具有反射、吸收及散射作用的遮光剂的方式来解决。

对气凝胶材料,采用纤维作为增强剂,利用相关工艺可得到力学性能较好的纤维增强气凝胶复合材料,同时纤维的加入可有效地控制气凝胶在干燥过程中的体积收缩,使复合材料具有较好的成型性和使用性能^[24]。常用的纤维增强剂有陶瓷纤维、石英纤

维,此外,还有莫来石纤维、水镁石纤维等。

采用陶瓷纤维(即耐火纤维、硅酸铝纤维)作为增强材料的典型代表,当属NASA的Susan White研制的陶瓷纤维-SiO₂气凝胶复合材料隔热瓦^[24]。同济大学

Wang等人^[18,25]选用陶瓷材料作为增强剂制备出了室

温下热导率小于 0.02 W/(m K), 800 K时小于 0.038 W/(m K)的气凝胶复合隔热材料,同时,力学强度由改性前的 1.8×10^4 Pa增加到 1.2×10^5 Pa。此外,国防科

技大学的冯坚团队^[26]也选用了陶瓷纤维作为增强材

料。美国Aspen Aerogel公司研制的商用SiO₂气凝胶复合材料AX9912和AX9913采用了石英纤维作为增强材料^[27]。此类产品可长时间工作在 650°C以内的温

度条件下,短时间工作在 1200°C条件下,且力学性能也能满足需求。2009年8月和11月,NASA的研究人员Rhine等人^[28]和Paik等人^[29]也相继报道了选用石英纤维作为增强剂的研制成果。此外,还有选用莫来石纤维作为增强剂的研究,如文献^[30]以及用硬硅钙

石作为增强剂的,如文献^[31~33]。

常用的气凝胶遮光剂材料包括碳黑、TiO₂、SiC、ZrO₂等。其中,TiO₂遮光剂可以有效地吸收和散射红外辐射,阻止辐射传热的增加,同时其熔点温度高,

耐高温,所以TiO₂是现今使用较多的遮光剂。Paik等

人^[29]选用TiO₂作为遮光剂制备出了温度为 1073 K时,热导率最低为 0.028 W/(m K)的气凝胶复合材料,并

且通过测量获取了运行温度为 297, 573, 873, 973 和 1073 K时热导率随单位体积内TiO₂的含量的变化曲

线,得出了各温度下使复合材料热导率最小的TiO₂含量均为 100 mg/cm³。哈尔滨工业大学Zhang等人^[34,35]采用TiO₂作为遮光剂,掺杂SiO₂干凝胶材料中,重点考察了TiO₂对干凝胶结构的影响,发现在 600°C热处理前,TiO₂掺杂SiO₂干凝胶的孔结构没有明显的变化,但是当温度大于 600°C后,SiO₂胶体粒子逐渐长大,干凝胶孔径逐渐减小,当温度达到 1200°C后,样品呈致密化状态,孔结构基本消失,在 1000°C前均呈非晶状态。此外,还有很多研究工作^[18,25,36,37]也都是选用的TiO₂作为遮光剂。

不论是用作增强材料力学特性的增强纤维,还是强化材料抑制高温辐射能力的遮光剂颗粒,它们的直径均在微米量级。这些微米量级的功能添加物

质辐射传热^[19,37,38]。

综上,气凝胶材料基本结构为纳米尺度的孔隙以及固体骨架结构,同时,在实际应用中,也会添加多种微米尺度的功能添加物,所以超级隔热材料具有

典型的多尺度组织结构。其结构的纳米化带来了非常复杂的微纳米尺度传热问题,同时各种功能添加物、非均匀结构的引入以及多种传热方式的耦合传热导致气凝胶材料的传热更加复杂。因此,详细研究气

凝胶隔热材料内部的传热方式,揭示热量传递机理,对于进一步降低纳米多孔超级隔热材料的传热性能,具有重要意义。本文对现有的关于气凝胶材料内部

的传热计算模型进行总结,以期能够为后续研究气凝胶材料传热计算模型以及其等效热导率工程快速计算等提供一定的帮助。

2 气凝胶热导率计算模型

对于现有的气凝胶材料热导率计算模型,下文

将分别按照材料内部所包含的3种基本传热方式:气相导热、固相导热以及辐射传热进行介绍;在介绍各个传热模式的热导率计算模型之后,再对气凝胶纳米多孔材料整体热导率以及气凝胶复合材料热导率

的计算模型进行概括。同时,也以前期课题组开展的工作为例,具体说明气凝胶复合隔热材料的整体等

效热导率计算模型建立过程。分子动力学在气凝胶材料的模拟计算中有着重要作用,所以,在文中最后

单独对其在气凝胶材料传热模拟计算中的应用进行介绍。

2.1 气相热导率计算模型

根据分子运动论^[39,40],气体导热是通过气体分子在做热运动时的相互碰撞进行的。气体分子进行无规则的运动,其中速度较高(“高温侧”)的分子与速度较低(“低温侧”)的分子发生碰撞时,能量传递给速度较低的分子,从而引起热量迁移。

气凝胶纳米多孔超级隔热材料与常规隔热材料相比,其孔隙率更高,且具有纳米尺度的孔隙尺寸,因而能够显著降低材料内部的气相导热,从而使气凝胶材料整体的热导率很低。对于气凝胶内部的气相传热计算模型,已有很多学者进行了相关的工作,

的加入,一方面会因为它们本身的高热导率而增强气凝胶材料的导热传热^[19,38],另一方面也会因为它们对辐射热能的吸收、散射作用而减小材料内部的介

力求能够更准确地描述这种纳米尺度特征下的孔隙内气相导热. 一般来讲,建立气凝胶内部的气相热导率计算公式,大致有 3 种方法:一是基于分子运动论

的相关理论, 理论推导纳米尺度下的气相热导率模型; 二是基于实验测量得到的气凝胶材料气相热导率数据, 拟合关联为相关参数的经验公式, 例如关联为气凝胶密度的经验公式; 三是采用分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 或者直接模拟蒙特卡洛法

(Direct Simulation Monte Carlo, DSMC) 等数值模拟方法, 并基于统计热力学相关理论, 得到纳米尺度下的气相传热规律.

2.1.1 理论推导方法

关于气凝胶的气相传热模型, Kistler^[41]在 1935

年从气体分子运动论的角度出发, 推导了气凝胶材

料中气相热导率与分子平均自由程之间的关系. 根据分子运动论, 气相热导率与和分子平均自由程之间存在如下关系式^[41]:

$$\lambda_g = B c_{V,g} \eta_g \quad (1)$$

其中, B 为常数, $c_{V,g}$ 为气体分子的比定容热容, η_g 为气体的黏度, η_g 根据下式计算^[41]:

$$\eta_g = 0.35 \rho_g v_g l_g \quad (2)$$

其中, ρ_g 为气体密度, v_g 是分子的算术平均速度, l_g 是分子的平均自由程. 根据上述关系式, 最终可以推导

得到材料孔隙内气相热导率的计算式为^[41]

$$\lambda_g = \frac{m}{T} \frac{0.058 a}{c_{V,g} l_0} \frac{D^2}{2 l_0 (1-a) + a L} \quad (3)$$

式中, m_g 是气体分子质量, T 为温度, p 为气体压力, a 为分子与壁面碰撞后, 进入热平衡的气体分子的比

例系数, $(1-a)$ 为分子与壁面碰撞后, 产生镜面反射的分子的比例系数, D 为材料内部的平均孔径, l_0 为给定

温度 (300 K), 1 mm 汞柱压力下的气体分子的标准分

k_B 为波尔兹曼常数, m_g 为气体分子质量, $C_{V,g}$ 为气体的摩尔比热容, N_A 为阿伏伽德罗常数, l_g 为气体分子平均自由程, 计算式为

$$l_g = \frac{1}{\sqrt{2} n_g} = \frac{k T}{\sqrt{2} p} \quad (6)$$

公式(4)又可改写为如下形式:

$$\lambda_g = \frac{\lambda_0}{1 + 2 C K n} \quad (7)$$

其中,

$$C = \frac{2\gamma - \alpha}{3} \frac{1}{\gamma + 1} \frac{1}{Pr} \quad (8)$$

式(7)中, Kn 为 Knudsen 数, 即孔隙的特征尺度与气体分子平均自由程之比. 前面提到, 对于气凝胶超级隔热材料, 其内部的孔隙尺寸在纳米尺度量级上, 约为 5~100 nm^[1], 而对于空气, 其分子平均自由程在常温常压条件下, 约为 69 nm. 从公式(7)可以很明显地看出, 对于气凝胶纳米多孔隔热材料, 其特征尺度与气

体分子平均自由程在一个量级上, 相比较于自由空间分子热导率, 在纳米多孔材料中, 受到纳米尺度孔

隙的影响, 气相导热受到抑制, 气相热导率大大降低. 由于形式的简单以及预测的有效性, Kaganer 模

型被广泛应用于计算气凝胶纳米多孔材料中的气相热导率^[22,32,43~48].

Zeng 等人^[49]在 1995 年从分子平均自由程的角度

出发, 重新推导了气凝胶纳米多孔材料中, 气相分子在纳米多孔结构中的分子平均自由程:

$$l_g = \frac{1}{0.25 S \rho \varphi + 2(p/k T) \pi d} \quad (9)$$

并进而根据分子运动论中, 气体黏度与热导率之间的关系, 得到在纳米多孔结构中, 气凝胶材料的气相

Kaganer和Moscona^[42]在 1969 年, 针对两个平行平板间的气体导热, 提出了如下的气相热导率计算模型:

$$\lambda_g = \lambda_g^0 \left(\frac{1}{2} + \frac{2\gamma - 1}{\gamma + 1} \frac{l_{ch}}{2l} \right) \quad (4)$$

式中, α 为能量调节系数, γ 为气体的绝热比, l_{ch} 为两个热交换平板之间的距离, 即特征尺度, l_g 为气体分子的平均自由程, λ_g^0 为气体在自由空间下的热导率, 可根据下列公式进行计算^[42]:

$$\lambda_g^0 = (2.25\gamma - 1.25)0.461(p/k_B T)(8k_B T/\pi m_g)^{1/2} l_g (C_{V,g}/N_A), \quad (5)$$

热导率计算式^[49]:

$$\lambda_g = 0.461 \frac{9\gamma - 5}{4} \frac{p}{k_B T} \times \frac{8k_B T}{\pi m_g} \frac{1}{0.25S} \frac{1}{\rho_{por} \phi^{-1} + \frac{2(p/k_B T)\pi d}{N_A}} C_{V,g} \quad (10)$$

Zeng模型的推导直接针对的是多孔材料, 并将多孔材料中的密度、孔隙率以及比表面积等结构参数关联入气相热导率的计算模型当中, 因而在多篇关于气凝胶纳米多孔隔热材料的等效热导率计算当中, 得到了应用^[38,49~52].

Kaganer模型用一个平均孔径描述材料内部的孔

隙分布,因此适用于描述孔径分布较集中的多孔材料.为了描述孔径分布更广的,具有多个特征孔径的多孔材料,Reichenauer等人^[21]在2007年提出了一个基于双孔径分布的多孔材料气相热导率计算模型:

$$\lambda = \frac{\lambda_0 \phi_1}{1 + \frac{2Cl}{D_1}} + \frac{\lambda_0 \phi_2}{1 + \frac{2Cl}{D_2}}, \quad (11)$$

其中, D_1, D_2 分别是用于描述多孔材料孔径分布的两个特征孔径. ϕ_1, ϕ_2 分别是两种特征孔径的孔隙在整体孔隙率中所占的比重. Reichenauer等人^[21]研究了6

种不同类型的多孔材料气相热导率,并发现除过玻璃球堆积多孔材料外,其所提出的基于双孔径分布的气相热导率模型均可与实验测量数据吻合良好.

这一模型也被Zhao等人^[20]采用,用以描述气凝胶纳米多孔材料中的气相热导率.

同时,如果将上述的模型进行拓展,考虑更细致的材料内的孔径分布,则可对每一个孔径下的气相

热导率进行加权求和,得到整体的气相热导率计算公式.例如,Reichenauer等人^[21]假设多孔材料中的孔径分布为Gauss分布,则气相热导率可以按照如下模型进行计算:

孔隙分布替换了原有Gauss分布中的 $[D-3\sigma, D-\sigma]$ 和 $[D+\sigma, D+3\sigma]$ 两个区间的孔隙分布,因而相当于增加了大孔隙对气凝胶材料内气相导热的影响.

2.1.2 经验关联式

上述气相热导率模型均基于气体分子运动论的相关知识,在一定假设条件下理论推导得到的.

Fricke等人^[54]在气凝胶热导率实验测量结果的基础上,将气凝胶的气相热导率拟合成为材料密度的函数关系式,并提出在70~300 kg/m³密度之间的气凝胶材料,其气相热导率为密度的幂函数,气相热导率

可写为

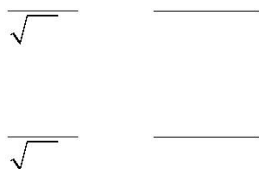
$$\lambda_g \propto \rho^{-0.6} \quad (14)$$

需要说明的是,上述的气相热导率是根据实验数据直接剥离得到的气相对总体热导率的贡献,而非孔隙内部气相热导率.

2.1.3 数值模拟方法

气凝胶隔热材料的内部孔隙为纳米尺度孔隙,对于纳米孔隙内部的气相导热可以采用微纳米尺度下的气相流动传热问题的数值研究方法进行研究,

例如格子Boltzmann方法(Lattice Boltzmann Method,



$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} \left[\frac{\lambda_{\text{eff}}}{\lambda_{\text{eff}}} \left(\frac{D}{D_0} \right)^2 + \frac{1}{3} \frac{C_l}{D} \right] \exp \left(- \frac{(D - D_0)^2}{2\sigma^2} \right) dD. \quad (12)$$

对于气凝胶纳米多孔隔热材料，其内部的孔径分布对于气相热导率乃至气凝胶材料整体热导率都有显著影响。由于气凝胶材料中的孔径分布大多是不均匀的，如果直接采用平均孔径去计算气相热导率，则会产生较大的偏差。基于此，Bi等人^[53]提出了一种修正的气相热导率模型，用以考虑气凝胶材料中的孔隙分布的随机性和不均匀性。他们的工作主要依据Reichenauer等人^[21]所提出的基于Gauss孔径分布的气相热导率模型。同时，由于大孔的孔隙对于传热的贡献更多，所以为了加强大孔孔隙对气相热导率的贡献，他们采用了如下的函数来描述气凝胶材料中的孔径分布^[53]：

$$\Phi_i = \begin{cases} \frac{\Delta}{2\pi\sigma} \exp \left(- \frac{(D - D_0)^2}{2\sigma^2} \right), & D \in [D_0 - \sigma, D_0 + \sigma], \\ \frac{\Delta}{2\pi\sigma} \exp \left(- \frac{(D - D_0)^2}{2\sigma^2} \right), & D \in [D_0 + \sigma, D_0 + 3\sigma]. \end{cases} \quad (13)$$

相比较于Reichenauer等人^[21]提出的Gauss分布的孔径分布，公式(13)用 2 倍概率的 $[D_0 + \sigma, D_0 + 3\sigma]$ 区间

LBM)、直接模拟Monte Carlo方法(Direct Simulation Monte Carlo, DSMC)、分子动力学方法(Molecular Dynamics, MD)等。

LBM方法和DSMC方法都是介观层次上的流动传热数值模拟方法，并且均基于Boltzmann输运理论。这个层次上，流体被离散成一系列比分子级别大而又在宏观上无限小的流体粒子，这些粒子质量比宏观方法中的控制容积质量要小得多。通过构造符合一定物理规律的演化机制，对这些流体粒子进行演化计算，从而获得与物理规律相符的数值模拟结果^[55]。

首先，对Boltzmann输运方程进行一个简单介绍。Boltzmann输运方程是用来分析微尺度能量输运现象的强有力的工具^[55,56]，它的一般形式可以表述为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{scat}}, \quad (15)$$

式中， f 为系综粒子的统计分布函数，与时间 t ，位置矢量 \mathbf{r} 以及动量 \mathbf{p} 相关。 \mathbf{F} 为作用在粒子上的力， \mathbf{v} 为粒子速度。式子左边各项被称作漂移项，右边项被称作碰撞项。Boltzmann输运方程对于任何满足某种统计分布的所有系综粒子都是适用的，例如气体分子、声

子、电子、离子等。Boltzmann求解的困难在于其碰撞

项一般而言非常复杂,因而常常需要对此进行适当的简化,碰撞间隙理论(松弛时间近似)是一种非常有效的简化假设:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{r}, \mathbf{p})} \quad (16)$$

式中, f_0 为粒子的平衡态分布函数, $\tau(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ 为粒子的松弛时间. 基于 Boltzmann 输运方程, 可以推导出流体力学、传热学中的质量、动量及能量守恒方程, 这里不再赘述, 具体可参阅文献[40,56].

LBM 方法是直接对 Boltzmann 输运方程进行求解. 求解中, 物理空间被离散成一系列的格子, 时间被离散成一系列的步长. 与宏观以及微观计算流体力学和计算传热学方法相比, 格子 Boltzmann 方法物理意义清晰、边界条件处理简单、程序易于实施等特点, 因而受到众多学者广泛关注.

与 LBM 方法不同, DSMC 是一种通过模拟单个粒子的行为, 并基于大量的随机抽样统计的基础上, 而得到粒子整体表现行为的一种方法[56,57]. DSMC 方法中, 用一定数量的粒子来代替真实的气体分子, 并通

过模拟这些粒子的运动以及粒子之间的碰撞等作用而引起的气体分子之间的能量和能量的输运交换, 最终实现气体宏观的流动和换热的物理过程的模拟. 这种方法最早由 Bird[57] 提出, 并在近年来得到了广泛的应用和发展. 一般而言, 气体分子的运动以及碰撞是相互耦合的, 模拟这样的过程比较困难. 为了解决这个问题, Bird[57] 采用概率判断的方法确定分子之间是否发生碰撞.

LBM 和 DSMC 方法均适用于稀薄流体(高超声速飞行器、微纳米尺度流动换热问题)的流动换热问题. 由于特征尺寸的减小, 气凝胶材料中纳米孔隙下的气相导热处于稀薄流体流动换热范围之内, 因而原则上可采用 LBM 或 DSMC 方法解释纳米孔隙下的气相导热机理以及纳米尺度孔隙对气相导热的影响规律. 然而, 由于气凝胶纳米多孔材料结构的复杂性, 目前还没有见到类似的将 DSMC 方法应用于研究气凝胶材料的纳米孔隙下的气相传热机理的相关研究报道.

综上对气凝胶材料中的气相传热计算模型总结, 可以看出:

(1) 基于分子运动论等理论推导得到的气相热导率计算模型, 考虑了多种因素对气相导热的影响, 目前已经能够与实验测量所得到的气相热导率数据

吻合良好, 但对不同材料不同工况下的气相热导率的准确预测, 还需要结合相关实验数据对理论模型进行一定的修正;

(2) 基于一定实验数据所总结出的经验关联式计算模型, 其形式简单; 但也正是因为它形式过于简

单, 且仅在一定的实验条件下总结提出的, 因而其适用范围窄, 不能反映出纳米孔隙尺寸对气相导热的影响, 也没有体现出温度、压力、气体成分等对气相导热的影响;

(3) 对于气相传热的数值计算模型(LBM/DSMC), 由于其计算复杂, 且气凝胶材料结构的随机复杂性以及界面效应和耦合传热效应的复杂性, 使得目前在文献中还较少看到采用此类方法模拟气凝胶整体传热特性的报道. 但是, 可以采用此类方法对气凝胶材料纳米尺度下的气固接触界面、狭缝区等特殊区域进行详细模拟, 根据模拟数据总结出这些特殊传热行为的传热规律, 进而利用所得到的结果修正理论模型.

2.2 固相热导率计算模型

气凝胶材料是由纳米尺度颗粒互相交联而形成的三维网络骨架结构, 由于材料纳米尺度的多孔结构特点, 导致热量沿固体骨架的传热路径变长, 具有较强的“路径效应”; 同时, 材料固相骨架结构的特征尺寸在纳米尺度量级, 接近或小于对应的能量载子的平均自由程, 因此固相骨架的热量传递也具有明显的纳米尺寸效应(图 4). 这两种效应的共同作用, 导致气凝胶材料的固相传热大大降低[13]. 同样地, 对于气凝胶材料固相传热模型的回顾, 本文仍然分为基于实验数据的经验关联式、基于动力学理论的理论推导模型以及基于求解固体内部热量传递方程的数值计算方法 3 类进行讨论.

2.2.1 经验关联式

对于气凝胶材料的固相热导率, Fricke 等人[54] 在气凝胶热导率实验测量结果的基础上, 将气凝胶的

固相热导率拟合成为材料密度的幂函数关系式:

$$\lambda \propto \rho^{1.5} \quad (17)$$

这个关系式适用于 70~300 kg/m³ 密度之间的气凝胶

材料. 需要说明的是, 上述的固相热导率是根据实验数据直接剥离得到的固相导热对总体热导率的贡献, 而非纳米尺度固体骨架的热导率,

这两个概念一定

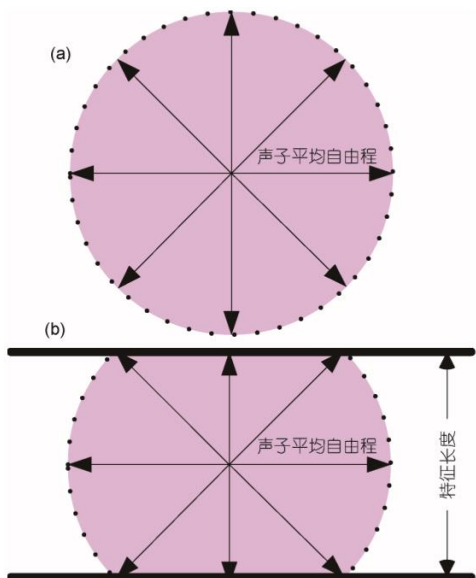


图4 (网络版彩色)尺寸效应示意图. (a) 自由空间; (b) 受限空间
 Figure 4 (Color online) Illustration of size effect of solid heat conduction. (a) Free space; (b) limited space

需要区分清楚.

2.2.2 理论推导方法

对于固体材料来说, 其导热主要由声子、电子、磁激发以及在某些情况下的电磁辐射来进行. 不同于气相或者液相物质分子可以自由移动, 固相物质的分子是不能自由移动的, 而是在周围分子的作用力下, 在其平衡位置附近做振动^[13,40]. 固相分子的振动可以看成是由一系列简谐波组成的振动. 在量子力学中, 固相分子的振动只能按照一定的频率进行, 所以固相分子的振动动能的大小也是一定能量的整数倍. 类似于光学中光子的概念, 固体力学当中, 将振动的最小能量称为声子^[40,56,58].

对气凝胶固体骨架热导率的研究, 可以从最基

本的动力学理论出发, 得到纳米尺度下的固体骨架热导率表达式, 并揭示不同结构参数及尺度效应对固相传热的影响.

模型假设晶体是各向同性的连续弹性介质, 晶格波可以看成是连续介质的弹性波, 基于此, 晶体的比热可以写为^[40]

$$c = 3Nk_B \frac{(\omega/kT)e^{\omega/kT}}{e^{\omega/kT} - 1} \quad (19)$$

式中, N 为原子数, k_B 为玻尔兹曼常数, $\hbar = h/2\pi$, h 为普朗克常数, ω_0 为频率, T 为温度. 声子的群速度 v_a 可以通过平均声速来表示^[40]:

$$\lambda = \frac{\Theta}{V} \left(\frac{6\pi N_b}{v} \right)^{1/3} \quad (20)$$

式中, λ_{bulk} 为块材的热导率, Θ_D 是块材的德拜温度, V_{mol} 是块材的摩尔体积, N_b 是块材中的原子数密度.

声子平均自由程 Λ_{ph} 是声子平均速度 v_a 和松弛时间 τ_{ph} 的乘积, 取决于声子和声子之间的散射、声子和边界的散射、声子和晶格缺陷的散射以及其他各种可能发生的散射. 由此可见, 声子平均自由程或者说声子平均松弛时间是影响固相热导率的关键. 对于固体材料中可能发生的声子的各种散射(质量差异杂质造成的散射、应力场和空位引起的散射、声子和电子引起的散射、边界散射、U散射等), 文献^[13,56]中已总结了不同散射所引起的声子松弛时间的计算公式, 读者可自行查阅.

确定固体材料中可能发生的每一种散射的松弛时间后, 声子散射的平均松弛时间可以根据Matthiessen定律计算^[13,40,56,58]:

$$\frac{1}{\tau_{\text{ph}}} = \frac{1}{\tau_U} + \frac{1}{\tau_M} + \frac{1}{\tau_S} \quad (21)$$

由此, 可以得到声子的平均自由程为

$$\Lambda_{\text{ph}} = \frac{1}{\frac{1}{\Lambda_U} + \frac{1}{\Lambda_M} + \frac{1}{\Lambda_S}} \quad (22)$$

Dames和Chen^[59]认为共有3种散射作用影响了纳米尺度的固体声子传热, 分别为: (1) 声子体积热阻引起的散射(包含氧化硅气凝胶材料本身所具有的

二氧化硅气凝胶是一种半导体材料，通常情况下导热取决于内部声子的导热。根据动力学理论公式，固体的热导率由下式决定^[40,56]：

$$\lambda = \frac{1}{3} \rho c v \Lambda = \frac{1}{3} \rho c v \tau \quad (18)$$

式中， ρc_V 是晶格的体积比热， v_a 是声子的平均速度， Λ_{ph} 是声子的平均自由程， τ_{ph} 是声子的平均松弛时间。 c_V 是温度的函数，并且可以由Debye模型得到。Debye

U散射、质量差异散射、声子和电子引起的散射、应力场和空位引起的散射和光学声子共振)；(2) 固相结构单元的边界引起的声子散射；(3) 由于固相结构单元界面处的相互接触引起的声子散射。对于上述3种散射作用引起的声子平均自由程，可按照

Matthiessen定律计算材料的声子平均自由程：

$$\frac{1}{\Lambda_{ph}} = \frac{1}{\Lambda_V} + \frac{1}{\Lambda_S} + \frac{1}{\Lambda_T} \quad (23)$$

式中, Λ_v 为声子体积热阻引起的散射的声子平均自由程, 根据块体材料热导率、比热以及声子平均声速反推得到:

$$\Lambda = \Lambda_{\text{bulk}} = \frac{3\lambda}{\rho c v_a} \quad (24)$$

Λ_{bulk} 是根据块体材料热导率计算得到的与体积热阻相对应的声子平均自由程, 相当于没有考虑尺度效应与界面效应存在时的材料的声子平均自由程. 这一部分热阻主要是由U散射过程、质量差异(杂质)造成的散射过程等引起的. Λ_T 和 Λ_S 分别为固相结构单元界面处的相互接触引起的声子散射以及由于声子与边界的碰撞引起的边界散射所对应的声子平均自由程.

根据Dames和Chen^[59]的工作, 刘育松^[13]对气凝胶纳米尺度的固体骨架热导率进行了计算. 其中, 界面接触散射声子平均自由程计算式采用^[13]

$$\Lambda = \frac{\sqrt{\tau}}{3LT_d} \quad (25)$$

式中 T_d 是声子界面透射率, 当固相结构单元界面两边是同一种物质时, $T_d=0.5$. L 是固相结构单元的长度, $L = d^2 - a^2$, a 为固相结构单元相互接触的界面的直径, d 为固相结构单元的直径.

对于声子与边界的碰撞引起的边界散射所对应的声子平均自由程, 刘育松^[13]在计算固体骨架热导率时, 以热流方向的不同分为了两类情况进行考虑, 分别为热流方向沿着骨架方向(纵向热流)以及热流方向垂直于骨架方向(横向热流), 见图 5. 对于纵向热流以及横向热流两类情况, 分别按照公式(26)以及(27)计算其边界散射的声子平均自由程:

$$\Lambda_s = 1 + \frac{p}{a}, \quad (26)$$

$$\Lambda_s = 1 + \frac{p}{d/a} \quad (27)$$

式中, p 为边界的镜面率. 假设固相结构单元的边界

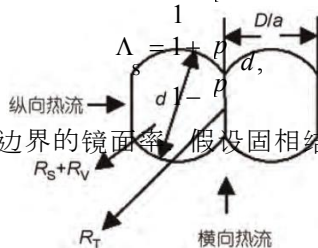


图5 二氧化硅气凝胶固相结构单元模型^[13]
Figure 5 Solid unit structure model of silica aerogel^[13]

和相互接触界面均为全漫散射界面, 则 $p=0$.

根据公式(23)~(27), 可以分别推导得到纵向热流以及横向热流两种情况下的固体骨架的热导率与结构参数之间的变化关系.

纵向热流时,

$$\lambda_{\text{eff,L}} = \frac{\lambda_b}{1 + \frac{\Lambda_{\text{bulk}}}{a} + \frac{\Lambda_{\text{bulk}}}{3LT_d}} \quad (28)$$

横向热流时,

$$\lambda_{\text{eff,T}} = \frac{\lambda_b}{1 + \frac{\Lambda_{\text{bulk}}}{d}} \quad (29)$$

Bi等人^[17]与刘育松^[13]工作类似, 同样按照Dames和Chen^[59]的分类方法, 将气凝胶固体骨架材料中的声子散射过程分为体积热阻引起的散射、边界引起的散射以及固相结构单元界面引起的声子散射, 并考虑了纳米尺度下边界散射和界面散射对固体热导率的影响, 见图 6. 与刘育松^[13]模型不同的地方在于, 他们认为热流在气凝胶中的传递并不严格平行于或者垂直于骨架颗粒, 并且声子的散射既依赖于

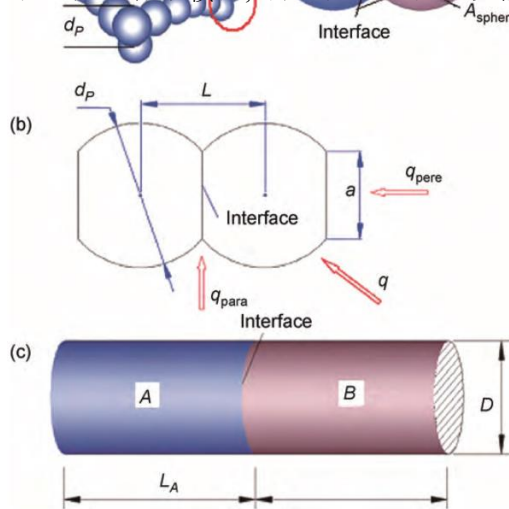


图6 (网络版彩色)气凝胶结构以及超晶格纳米线结构^[17]. (a) 气凝胶骨架结构以及固体颗粒接触界面; (b) 气凝胶固体颗粒结构尺寸定义; (c) 两段超晶格纳米线接触界面

Figure 6 (Color online) Schematic of aerogel and superlattice nanowire^[17]. (a) Aerogel backbone and interface between aerogel particles; (b) definition of geometry size of aerogel backbone; (c) interface between two segments of superlattice nanowire

接触面直径,也依赖于固体颗粒直径,因此对于边界散射,其依据Matthiessen定律,提出了如下的边界散射声子平均自由程计算式:

$$\Lambda = \frac{1}{\frac{1}{\Lambda_{\text{inter}}} + \frac{1}{\Lambda_{\text{sphere}}}} \quad (30)$$

式中, Λ_{inter} 和 Λ_{sphere} 分别是界面面积以及球形颗粒覆盖面积. Λ_{eff} 是气凝胶骨架材料单个颗粒的有效原子散射面积, $\Lambda_{\text{eff}} = \Lambda_{\text{sphere}} + 2\Lambda_{\text{inter}}$.

此外,对于界面散射引起的声子平均自由程,他们采用下式进行计算:

$$\Lambda_T = 3LT_d/2, \quad (31)$$

$$T = \frac{C_{V,B} v_B a^2}{C_{V,B} v_B + C_{V,A} v_A \frac{d}{2}} \quad (32)$$

除上述一些针对气凝胶骨架材料固体热导率的

理论计算模型外, Zhang^[40]在其专著中,探讨了由于

尺寸的纳米结构化所导致的固体热导率的降低作用,表 2 总结了一些考虑尺寸效应的纳米尺度固体材料热导率理论计算模型.

2.2.3 数值模拟方法

对纳米尺度固相材料导热的数值模拟方法大致

可以分为基于求解Boltzmann输运方程的模拟方法以及分子动力学模拟方法. 同样地,在这里首先主要介绍基于Boltzmann输运方程的数值求解方法,而将

分子动力学方法模拟固体传热的方法放在最后统一介绍.

本文之前已经介绍了Boltzmann输运方程,具体

见公式(15). 因为Boltzmann输运方程对于任何满足某种统计分布的所有系综粒子都是适用的,所以通过对声子Boltzmann输运方程的求解,可以得到固体内部的声子热量传递规律.

对公式(15),如果假设声子不受到外部力的作用,

并定义声子强度 I_{ω} 为特定方向上的单位面积、单位频率、单位固体角的能量传输率:

$$I_{\omega}(x, y, z, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_p \omega v \frac{h}{a} fD(\omega) \quad (33)$$

则将公式(33)代入Boltzmann输运方程(公式(15))中,推导可以得到与辐射传递方程类似的声子辐射输运方程:

$$\frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + \eta \frac{\partial I}{\partial y} + \zeta \frac{\partial I}{\partial z} = \frac{I - I^*}{v \tau} \quad (34)$$

式中, μ, η, ζ 分别为某个特定方向在 3 个坐标方向上

的方向余弦. 其中, $\mu = \cos \theta, \eta = \sin \theta \cos \phi, \zeta = \sin \theta \sin \phi$.

θ 为极角, ϕ 为方位角.

公式(15)及(34)分别是固体内部热量传递的基本控制方程——Boltzmann输运方程及其推导得到的声

子辐射输运方程,通过对两个方程的求解即可得到

固体内部热量传递规律,揭示尺寸、颗粒形态、接触形态等多种因素对纳米尺度固体传热的影响.

Chen^[60]通过求解Boltzmann输运方程发现,当固

体颗粒尺寸远大于固体声子的平均自由程时,固体的传热行为与宏观条件下一致,满足Fourier导热定律;而当颗粒接近或小于声子平均自由程时,颗粒的传热速率则显著减小,导致颗粒的温度上升远高

表 2 考虑尺寸效应的纳米尺度固体材料热导率理论计算模型

Table 2 Theoretical models of solid thermal conductivity which take the size effect into account

模型	使用条件
(1) 纳米薄膜	薄膜厚度尺寸远小于块体材料声子平均自由程, $d \ll \Lambda_b$
(2) 纳米薄膜	薄膜厚度尺寸远小于块体材料声子平均自由程, $d \ll \Lambda_b$ 适用于 $Kn > 5$

- (3) 纳米薄膜
- $$\lambda_{eff} = \lambda_b \left(1 + \frac{\Lambda}{2Kn} \right)^{-1}$$
- 适用于 $Kn < 1$, m 为经验常数, 对于薄膜 $m \approx 3$
对 $1 < Kn < 5$ 的情况, 可通过模型(2)和(3)插值计算纳米薄膜热导率
- (4) 纳米薄膜
- $$\lambda_{eff,z} = \lambda_b \left(1 + \frac{\Lambda}{2Kn} \right)^{-1}$$
- 考虑固体传热的各向异性, 适用于 $Kn > 5$, 对 $Kn < 1$ 的情况, 应采用模型(3), m 取值 3
- (5) 纳米导线
- $$\lambda_{eff,w} = \lambda_b \left[1 + \frac{\Lambda}{\pi Kn} \ln[2Kn(1 + \sin\theta)] + \frac{\theta}{2\pi} \right]^{-1}$$
- 适用于 $Kn > 5$, 对 $Kn < 1$ 的情况, 应采用模型(3), m 取值 4/3

于Fourier导热定律所预测的数值. Chen^[60]认为这种现象是由于纳米尺度下颗粒的传热的非局部和非热平衡特性所引起的. 根据研究结果, Chen提出了一个近似的用来计算纳米颗粒热导率的计算公式. Wang等人^[61]在研究纳米流体的等效热导率中, 采用Chen所提出的公式描述悬浮纳米颗粒的颗粒热导率:

$$\lambda_s = \frac{3r^* / 4}{3r^* / 4 + 1} \lambda_{bulk}, \quad (35)$$

$r^*=r/\Lambda$ 是固体颗粒的无量纲半径, Λ 是固体声子平均自由程, r 为固体颗粒半径. Zhao等人^[46]以及Xie等人^[38]在对气凝胶材料热导率的计算工作中, 均采用公式(35)对纳米尺度固相骨架颗粒的热导率进行了尺寸效应的修正.

Zeng和Liu^[62]应用玻尔兹曼输运方程, 采用求解辐射传热的方法, 求解了微米和纳米圆柱形和球形壳体的有效热导率. 他们的计算结果表明, 对于圆柱壳结构材料, 其等效热导率同时受到薄膜厚度以及内部圆柱直径的影响; 而对于球壳结构材料, 其等效热导率主要受到内部球体尺寸的影响.

氧化硅气凝胶材料中颗粒互相接触, 因此Han等人^[63]建立了一种气凝胶颗粒的三维球形结构模型, 并结合声子热输运的LBM方法对声子Boltzmann输运方程进行了求解. 同时, 基于所建立的模型, 研究了

尺度以及结构参数对纳米颗粒导热特性的影响规律,

以及不同温度下, 氧化硅纳米颗粒导热特性对温度的依赖特性.

综上对气凝胶材料中的固相传热计算模型总结, 可以看出:

(1) 基于一定实验数据所总结出的经验关联式计算模型, 其优点仍然是形式简单、使用方便, 但缺点是经验关联式的适用范围小, 且不能关联纳米尺度下的颗粒尺寸、颗粒形状、颗粒接触形态、颗粒组

成等各种因素对固体传热的影响. 同时, 需要注意的是, 公式(17)计算得到的固相热导率是根据实验数据直接剥离得到的固相导热对总体热导率的贡献, 而非纳米尺度固体骨架的热导率;

(2) 从动力学理论的角度出发所建立的固相热导率的理论计算模型, 考虑了多种效应对声子平均自由程的影响, 并继而将尺寸效应、界面效应等因素对固体热导率的影响囊入到固相热导率计算模型当

计算结构更为复杂的纳米颗粒的固相热导率;

(3) 基于玻尔兹曼输运方程以及声子辐射输运方程的数值求解方法, 可以通过数值求解声子输运方程, 得到固体材料的的热导率. 相比较于前两种方

法, 数值求解方法计算复杂, 但可以反映各因素对热导率的影响, 也可以考虑复杂结构的情况. 但目前文献中的计算仍然集中在一些简单结构的情况, 对于气凝胶堆积结构等复杂结构, 还未见到采用此类方法计算的相关工作.

2.3 辐射传热计算模型

气凝胶材料对辐射传热而言为参与性介质, 材

料内部的辐射传热属于介质辐射. 当辐射光射入材料内部时, 材料会对辐射产生吸收、折射以及反射等作用, 表现出来即材料对辐射存在吸收或者散射等衰减作用. 常温下, 介质内部的辐射传热也许并不显著, 但在高温条件下, 辐射传热不可忽略. 尤其是, 对于常见的氧化硅气凝胶材料, 其在高温下对波长为 3~8 μm 的近红外辐射具有较强的透过性, 因而导致氧化硅气凝胶高温条件下传热显著增强, 材料热导率随温度的升高显著上升^[18,19].

辐射传递方程: 假设在一个发射、吸收、散射的参与性介质内, 在位置 s , 辐射能量传递方向 Ω 上, 根据能量守恒可以推出辐射能在介质中传递的控制方程——辐射传递方程.

吸收、发射—散射性介质内辐射传递方程的表达式为^[64,65]

$$\begin{aligned} \frac{dI_\lambda(s, s)}{ds} = & -(\sigma_{a\lambda} + \sigma_{s\lambda}) I_\lambda(s, s) + \sigma_{a\lambda} I_{b\lambda}(s) \\ & + \int_{\Omega} \int_{\lambda} \sigma_{s\lambda} I_\lambda(s, s) \Phi_\lambda(s_i, s) d\Omega_i d\lambda_i, \end{aligned} \quad (36)$$

其中, $I_\lambda(s, s)$ 为空间位置 s 、传输方向 s 、光谱 λ 对应的辐射强度; $\sigma_{a\lambda}$ 和 $\sigma_{s\lambda}$ 分别为介质内的谱带吸收、谱带散射, 两者之和为谱带衰减系数 $\sigma_{e\lambda}$; $\Phi_\lambda(s_i, s)$ 为散射相函数.

辐射传递方程是一个积分-微分方程, 对于非灰材料的三维辐射传递问题中, 该方程共包括 3 个空间变量、2 个空间方向的角坐标变量以及 1 个波长等合计 6 个自变量. 同时, 辐射传递方程也是一个非线性方程, 除非在某些简单情况下, 否则很难得到方程的

中. 目前来看, 理论模型可以计算结构较为简单的情况, 例如球形颗粒、圆柱形、纳米薄膜等, 但还不能

精确解. 因而需要对微分-积分形式的辐射传递方程进行一定的假设近似, 才能对其进行求解.

以上内容仅为本文档的试下载部分, 为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文, 请访问: <https://d.book118.com/616051231213010240>