

用有限元法计算光学玻璃 退火温度的分布

李 放

(中国科学院长春光学精密机械研究所)

提 要

本文首次把求解温度场的有限元法用于计算玻璃退火时的温度分布,提出了在微机上计算第一类光学不均匀性的方案,并解决了计算问题。

关键词: 光学玻璃退火; 光学玻璃均匀性; 玻璃折射率。

一、引 言

玻璃退火的传热过程的简化数学模型是一个傅里叶微分方程的求解问题,但在实际上只有相当少的部分可以得到解析解,而且这些解往往包含无穷级数、特殊函数和关于特征值的超越方程,计算比较困难。传统的方法是将常见的圆盘形状玻璃的计算、简化成径向和轴向两个问题来独立求解,然而三维中的很多现象被忽略了。

对于工程退火中可能出现的复杂边界条件和物性值随温度变化的非线性问题,以及有复杂外形的情况,解析法是无能为力的。而有限元法却能把它们与简单问题同等对待,而且随着问题越复杂优点越显著。

大尺寸光学玻璃各部分由于热历史不同而产生的折射率的差异,称为第一类光学不均匀性。用有限元法求解玻璃退火的不稳定温度场,可给出各结点的温度历史。显然已知一点的温度历程,通过玻璃结构转化动力学的理论公式,可以计算该点折射率的增值。集合各结点的变化终值,可得第一类光学不均匀性的折射率分布。

二、大尺寸光学玻璃退火时的温度场有限元法预测

1. 定解的数学模型与等价泛函

大尺寸光学玻璃精密退火时的传热过程可以用一个自由(第三类)边界的数学模型描述,而把实际边界上的接触导热、对流和辐射传热按第三类边界处理,那末这个模型就是

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho C_p} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] - k \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha_i (T - T_f)。$$

在边界上第 i 部分 Γ_i $i=1, 2, \dots$

$$T_{t=0} = T_g,$$

$$T_f = \begin{cases} T_g - vt & \text{当 } T_f \geq T_s, \\ T_s - v_1 t & \text{当 } T_f < T_s, \end{cases}$$

式中 α_i 是综合交换系数; T_g 为退火上限温度; T_f 是装置玻璃的铸铁套(包括托盘和盖板)的温度; T_s 是退火下限温度; v 是退火速率; v_1 是冷却速率。显然这个定解问题难于用解析法求精确解。如果此定解问题的求解等价于一特定泛函求极值解, 那末可以用等价泛函求解。

$$J = \iint_V \left\{ \frac{k}{2} \left[\left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right] + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \right\} r dr dz + \oint_{\Gamma} \alpha \left(\frac{T^2}{2} - TT_f \right) r ds,$$

其中 Γ 是整个求解域 V 的外表面。原则上可以选取一个表示温度分布的级数形式试探函数, 代入 J 满足取极值的条件。事实上玻璃退火时, 边界具有几种类型, 物性值在分布上也有变化, 因此在整个求解域 V 内满足这个条件, 是过于苛刻的。

有限元法用离散的办法解决上述困难。把 V 分成若干个子域 e , 并设 V 的外表面上的子域边界为 Γ_e , 则可以定义子域泛函 J^e 为

$$J^e = \iint_e \left\{ \frac{k}{2} \left[\left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right] + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \right\} r dr dz + \int_{\Gamma_e} \alpha \left(\frac{T^2}{2} + TT_f \right) r ds, \quad (1)$$

不难看出 $J = \sum_e J^e$ 。

2. 有限元法计算过程

(1) 单元计算

本文把子域选为三角截面环单元如图 1 所示。单元内一点的温度 T 可用三顶点 1、2、3 的温度 $\{T_1 T_2 T_3\}^e$ 表示

$$T = [N] \begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{Bmatrix}^e = [N_1 N_2 N_3] \begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{Bmatrix}^e, \quad (2)$$

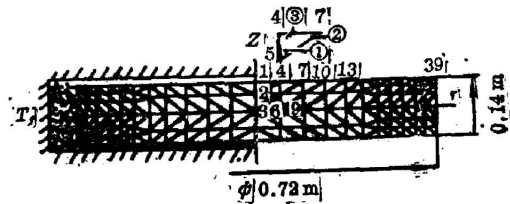


Fig. 1

把(2)式代入(1)式并计算 $\left\{ \frac{\partial J^e}{\partial T_1} \quad \frac{\partial J^e}{\partial T_2} \quad \frac{\partial J^e}{\partial T_3} \right\}$ 中

三个偏导数得

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial J^e}{\partial T_1} \\ \frac{\partial J^e}{\partial T_2} \\ \frac{\partial J^e}{\partial T_3} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{bmatrix}^e \begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{Bmatrix}^e + \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix}^e \begin{Bmatrix} \frac{\partial T_1}{\partial t} \\ \frac{\partial T_2}{\partial t} \\ \frac{\partial T_3}{\partial t} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{Bmatrix}^e, \quad (3)$$

上标为 e 的项或矩阵, 其下标为单元结点的局部编号(1、2、3), 以便与整体编号区别。

(2) 总体合成

按(2)式, 把温度场离散到全部结点上, 泛函 J 成了以全部未知的结点温度为自变量的多元函数, 于是 J 的变分问题转化成 $J(T_1, T_2, \dots, T_n)$ 的极值条件

$$\frac{\partial J}{\partial T_i} = \frac{\partial \sum_e J^e}{\partial T_i} = \sum_e \frac{\partial J^e}{\partial T_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

而 $\sum_e \frac{\partial J^e}{\partial T_i}$ 中只有包含结点 i 的单元 e 的项不为 0, 不为 0 的项 $\frac{\partial J^e}{\partial T_i}$, 若把整体编号改为单元编号, 即可在单元分析中通过 (3) 式求得。对全部结点 i 依次计算 $\frac{\partial J}{\partial T_i}$ 可得

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} \frac{\partial J}{\partial T_1} \\ \frac{\partial J}{\partial T_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial J}{\partial T_n} \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} \sum_e \frac{\partial J^e}{\partial T_1} \\ \sum_e \frac{\partial J^e}{\partial T_2} \\ \vdots \\ \sum_e \frac{\partial J^e}{\partial T_n} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ K_{n1} & K_{n2} & \cdots & K_{nn} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_n \end{Bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & \cdots & S_{nn} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial T_1}{\partial t} \\ \frac{\partial T_2}{\partial t} \\ \vdots \\ \frac{\partial T_n}{\partial t} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_n \end{Bmatrix} = 0, \end{aligned}$$

或者

$$[K] \{T_i\} + [S] \left\{ \frac{\partial T_i}{\partial t} \right\} - \{P_i\} = 0. \tag{4}$$

(3) 对时间离散

两点向右差分 $\left\{ \frac{\partial T_i}{\partial t} \right\} = \frac{\{T_i\}_t - \{T_i\}_{t-\Delta t}}{\Delta t}$ 的时间离散方法虽然精度较低, 但不论时间的步长多大, 它是绝对收敛的, 这是我们选用于退火的原因。于是得到求解 $\{T_i\}_t$ 的方程组

$$\left([K] + \frac{1}{\Delta t} [S] \right) \{T_i\}_t = \frac{1}{\Delta t} [S] \{T_i\}_{t-\Delta t} + \{P_i\}. \tag{5}$$

按时间逐段递推, 可获得各时段末的温度分布 $\{T_i\}_t$ 。

计算温度场选用有限元法的原因之一是该法还可用于计算热应力。事实上在

$$\left| \frac{d}{dt} (\text{grad } T) \right| > 0,$$

而非 $|\text{grad } T| > 0$ 时, 生成玻璃退火的暂时和永久应力。因此在 $\left| \frac{d}{dt} \text{grad } T \right| > 0$ 阶段, 应

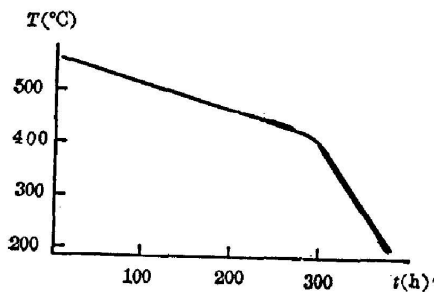


Fig. 2 Time dependent temperature of node 3, 6, 39

缩小步长, 而增加时段, 相当于图 2 中的退火开始降温的 AB 段及开始冷却的 CD 段。在程序中可把步长函数写成 (设时段总数为 57)

$$\Delta t = \begin{cases} t_1: & 1.2(m-1), (m \leq 30) \\ t_2: & (m > 30 \text{ and } m \leq 35) \\ t_3: & (m > 35 \text{ and } m \leq 55) \\ t_4: & (m > 55) \end{cases}$$

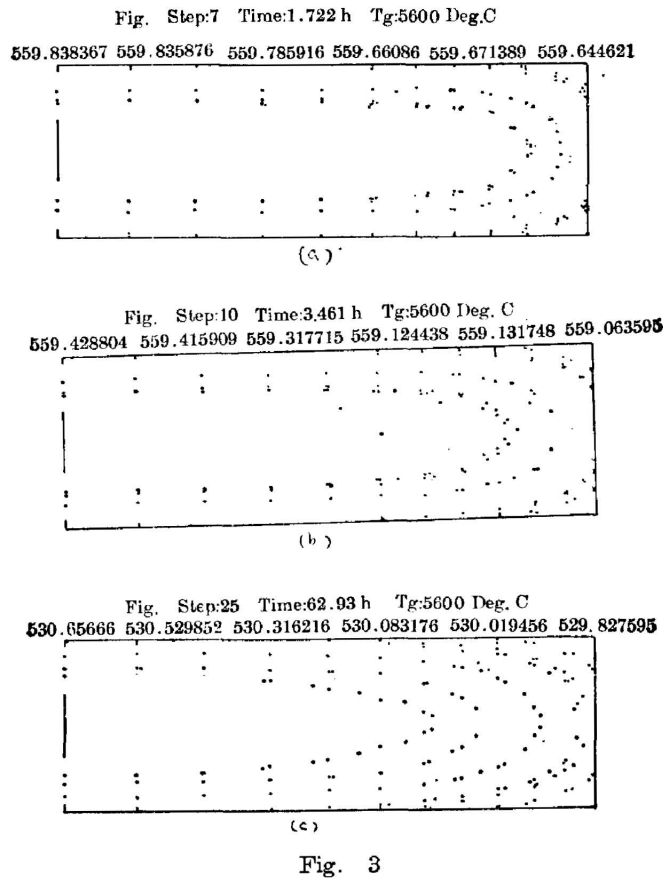
式中应使 t_1 缩小到不发生解为止。30~35 时段, 落在退火稳定 $\left(\frac{d}{dt} \text{grad } T = 0 \right)$ 区。 t_2, t_3 的选取应

使开始冷却时间落在时段为 35~39 之间。 t_4 和 t_2 同数量级, 本文的 t_1, t_2, t_3, t_4 分别为 6000, 360000, 7200, 36000。

(4) 计算结果

矩阵方程(5)的系数是高度稀疏对称的正定矩阵, 适当的结点编号如图 1 所示, 使非零元在对角线附近成带状, 且带宽最小。我们采用半带宽存储和改进平方根法。由于轴对称玻璃使用上常忽视沿 z 轴的不对称, 所以允许把温度场当作沿 z 轴反映称的, 从而减少近一半的计算量。

把每一时段计算所得结点温度值, 及时贮存为磁盘文件, 就得所讨论退火过程温度历史的完备资料。另外设计两个子程序, 通过读磁盘分别绘制结点温度对时间的依从关系如图 2 所示, 以及任意时段末玻璃纵截面上的等温线图象, 如图 3 所示。图中 Time 是时段 F 末的时间, T_g 为退火温度, 图上方六个数字是各条等温线(由点组成)的温度。



三、退火折射率的增值及第一类光学不均匀性的微机预测

一块径过退火的大尺寸光学玻璃, 它的各部分是经过不同的温度历程从相同的上限退火温度 T_g 降至室温的, 由此产生的结果是: 距离中心越近的部分折射率越高。计算的结果,

玻璃各部分经过各自的温度历程,其折射率的增值是以第一类光学均匀性分布的。

1. 计算退火折射增值的数学模型建立

近年来已经提出了几种从实验上得到的玻璃结构转化动力学简化理论模型——结构弛豫模型。对于光学玻璃退火这种连续缓慢的温度变化过程的折射率计算,它们中的任何一种都不会失效。我们采用参数最少的一种等温过程弛豫公式

$$\frac{n_t - n_\infty}{n_0 - n_\infty} = e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^b}, \quad (6)$$

其中 n_t 、 n_0 、 n_∞ 分别是折射率在时刻 t 的瞬时值,初始值和平衡值。 b 是玻璃的一个常数,一般 $b=0.5\sim 0.9$ 。 τ 是玻璃的折射率弛豫时间,它随温度 T 变化并服从

$$\tau = \tau_0 e^{\frac{YE}{R(T+273)} + \frac{(1-Y)E}{R(T_f+273)}}, \quad (7)$$

式中结构弛豫活化能 E 分成温度效应的 E_g 和结构效应的 E_s 两部分, $Y = E_g/E$ 。气体常数 $R=8.314\text{J}/(\text{K}\cdot\text{mol})$ 。 τ_0 可以由实验确定,如 T_g 时弛豫时间 τ_g

$$\tau_0 = \tau_g e^{-\frac{E}{R(T_g+273)}}. \quad (8)$$

假设温度 T_f 服从等温过程动力学公式

$$\frac{T_f - T}{T_0 - T} = e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^b}, \quad (9)$$

把式(8)和(9)代入(7)可得温度从 T_0 阶跃到 T 后恒温,以时刻 t 的松弛时间 τ 为未知数的超越方程

$$F(\tau) = \tau_g \exp \left[\frac{E}{R} \left[\frac{-1}{T_g + 273} + \frac{Y}{T + 273} + \frac{(1-Y)}{T + (T_0 - T) \exp \left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^b \right]} \right] \right] - \tau = 0, \quad (10)$$

可用缩小子区间法在计算机上求得误差内 τ 的近似解

式(6)左边的 n_∞ 服从

$$n_\infty = a_s T + n',$$

式中 a_s 为折射率温度系数中结构效应部分,若把 T_g 的折射率平衡值 $n_\infty(T_g) = n_g$ 作为已知参考值,则

$$n_\infty = a_s (T - T_g) + n_g, \quad (11)$$

在计算退火折射率相对 T_g 时的增值时可设 n_g 为任意数如 0。

在完成等温过程式(6)的数据准备后,把退火时温度的连续变化用 m 价温度跌落的模型近似。在第 I 次温度跌落至 $T(I)$ 后的等温过程,折射率初始值 $n_0(I)$ 是前一次 $I-1$ 的等温过程终值 $n_{\Delta t}(I-1)$, Δt 是跌落的时间步长,则式(6)可以改写成

$$n_{\Delta t}(I) = n_\infty(I) + [n_\infty(I-1) - n_\infty(I)] e^{-\left[\frac{\Delta t}{\tau(I)}\right]^b} \quad (12)$$

式中 $\tau(I)$ 和 $n_\infty(I)$ 表示温度为 $T(I)$ 阶段值,并在式(10)和(11)中给出了求解方法。只要依次取值 $I=1, 2, 3, \dots, m$, 并设 $n_{\Delta t}(0) = n_g = 0$, 式(12)就成为计算退火过程玻璃内一点的折射率增值的递推公式。得到玻璃内每一结点的折射率增值结果后,就可以求出表示第一类光学不均匀性的折射率差。

2. 计算实例

在实际计算折射率增值时,为了在每一时段对全部结点求 τ ,总计要调用解超越方程

(10)的子程序共(时段总数 \otimes 结点总数)次,大大增加了机时。我们用迭代方法解(7)和(9)的方程组,把 τ 和 T_i 作未知数,收敛特性很好。

对图1所示K9玻璃,按图2规程退火,玻璃折射率随温度降低而增加如图4所示。表为各结点的折射率增值。

Table Node number and its relative value of refractive index ($\Delta n \times 10^6$)

1	3882.51	12	3883.70	23	3882.37	34	3882.99
2	3883.33	13	3882.52	24	2882.82	35	3882.10
3	3883.86	14	3883.25	25	3883.15	36	3882.43
4	3882.55	15	3883.63	26	2883.34	37	3882.66
5	3883.33	16	3882.51	27	3882.30	38	3882.78
6	3883.80	17	3883.19	28	3882.72	39	3881.96
7	3882.56	18	3883.54	29	3883.02	40	3882.25
8	3883.32	19	3882.41	30	3883.19	41	3882.44
9	3883.75	20	3882.90	31	3882.20	42	3882.53
10	3882.54	21	3883.24	32	3882.58		
11	3883.30	22	3883.44	33	3882.84		

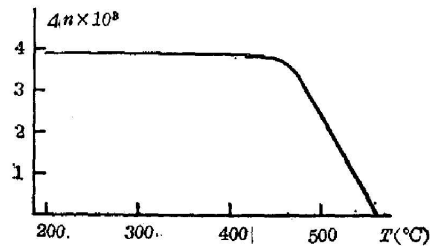


Fig. 4 The temperature dependent relative value of refractive index Table Node number and its relative value of refractive index given by computer

$N(1)=3.8825798E-03$ $N(2)=3.88332873E-03$ $N(3)=3.88386496E-03$ $N(4)=3.88255496E-03$
 $N(5)=3.8833345E-03$ $N(6)=3.88379554E-03$ $N(7)=3.88255505E-03$ $N(8)=3.88331908E-03$
 $N(9)=3.8837501E-03$ $N(10)=3.88254416E-03$ $N(11)=3.88328971E-03$ $N(12)=3.88369585E-03$
 $N(13)=3.88252348E-03$ $N(14)=3.88324648E-03$ $N(15)=3.88363042E-03$ $N(16)=3.88250556E-03$
 $N(17)=3.88318767E-03$ $N(18)=3.88354207E-03$ $N(19)=3.88241435E-03$ $N(20)=3.88290362E-03$
 $N(21)=3.88324351E-03$ $N(22)=3.88344339E-03$ $N(23)=3.88237133E-03$ $N(24)=3.88282472E-03$
 $N(25)=3.8831467E-03$ $N(26)=3.88333573E-03$ $N(27)=3.88229975E-03$ $N(28)=3.88271963E-03$
 $N(29)=3.88301605E-03$ $N(30)=3.88318838E-03$ $N(31)=3.8822007E-03$ $N(32)=3.88257779E-03$
 $N(33)=3.88284111E-03$ $N(34)=3.88298903E-03$ $N(35)=3.88209544E-03$ $N(36)=3.88243005E-03$
 $N(37)=3.88266067E-03$ $N(38)=3.88278634E-03$ $N(39)=3.88196175E-03$ $N(40)=3.88224604E-03$
 $N(41)=3.8824398E-03$ $N(42)=3.88253058E-03$

四、讨 论

由于影响光学均匀性的结构效应(第一类不均匀性)与残余应力效应(第二类不均匀性)都是退火中温度场变化所产生的,显然不能通过实验把它们分离,尽管已知它们的效应是相反的。因此,本文给出的第一类光学不均匀性计算结果应与第二类光学不均匀性的有限元法计算结果(待发表)合成后,再用实验数据校核。例如激光全息法^[6]即可提供内部折射率分布的精确测量值。

事实上, 本文的选例, 无论在玻璃的牌号、形状或是退火规程和工艺条件上都不失典型性, 而它的工程退火实验有更多的机会重复进行, 以便校核本文的计算结果。否则计算中的参数——导热系数 k , 热交换系数 α 难于确定, 因为它们受玻璃成份、尺寸、形状、温度等严重影响以致成几倍地变化^[7]。1:1 地测定大尺寸玻璃的这些参数的代价使之实际上没有可能, 但有限元法提供了在工程规模上同时确定物性参数的途径。即以使折射率和应力双折射率和应力双折射的分布的有限元计算结果, 逐点符合实验结果为目标, 反复调整上述参数试算, 可以获得这种条件下的这些参数的实际值。借助有限元法获得难于测定条件下的物性参数是有待完善的课题。

本文是在导师王大珩指导下完成的, 并得到孔祥谦教授的帮助, 在此深表感谢。

参 考 文 献

- [1] 千福熹等;《光学玻璃》, (科学出版社, 下册(第二版), 北京, 1985), 759~814。
- [2] O. C. Zienkiewicz; "The Finite Element Method, Third Edition," McGraw Hill, London, 1977.
- [3] O. V. Mazurin; *Journal of Non-Crystalline Solids*, 1977, **25**, No. 1~3, 130~169.
- [4] Е. Д. Данюшевский; 《光学玻璃线性退火原理》, (国防工业出版社, 北京 1965)。

Application of finite element solution of temperature distribution within glass during annealing for calculation of nonuniformity of refractive index due to the nonhomogeneous structure

LI FANG

(Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica)

(Received 31 July 1986; revised 31 December 1986)

Abstract

In order to predict many important physical phenomena in a large-size glass during annealing the application of the finite element solution of heat transfer problems to the determination of the temperature distribution within axisymmetric glass being annealed (the temperature change is slow) has been suggested for the first time in this paper. According to above result, this paper also suggests the calculation method of the nonuniformity of refractive index due to the nonhomogeneous structure of annealed glass, thus overcoming previous difficulty in the calculation.

Key Words: