

А.Ю. Бачурина, А.В. Никитин

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИЦИОННОЙ СИСТЕМЫ

Предложен численный метод расчета эффективной теплопроводности композиционных систем, учитывающий физические свойства матрицы и наполнителя (ЧМ). При построении разностного аналога для дифференциальных операторов, входящих в уравнение теплопроводности, использован интегро-интерполяционный метод. Решение конечно-разностного уравнения теплопроводности выполнено методом прогонки. Исследуется влияние структуры наполнителя композиционного материала на эффективный коэффициент теплопроводности композита. Установлено, что значение эффективного коэффициента теплопроводности композита при различных распределениях наполнителя в матрице для одной и той же концентрации может меняться в широком диапазоне. Выполнено сравнение результатов, полученных с использованием различных расчетных моделей. Результаты расчетов эффективного коэффициента теплопроводности композита сравниваются с экспериментальными данными. Установлено, что наиболее эффективным расчетным методом, максимально учитывающим распределение наполнителя, является ЧМ.

Теплопроводность композиционной системы в общем случае зависит от состава композита, структуры распределения наполнителя в матрице и размеров частиц наполнителя. Расчет теплопроводности композиционных систем чаще всего базируется на принципе обобщенной или эффективной проводимости. Применяются различные модели для расчета эффективного коэффициента теплопроводности композита. Следует отметить, что влияние структуры наполнителя невозможно учесть в рамках какой-либо одной модели. Особенно это касается случаев, когда коэффициенты теплопроводности матрицы и наполнителя отличаются на порядки. Учесть влияние распределения наполнителя в матрице в полном объеме можно только, прибегая к численным методам расчета теплопроводности композита в целом.

Изменение температуры в веществе с течением времени описывает дифференциальное уравнение теплопроводности. Оно имеет следующий вид:

$$c(p)\rho(p)\frac{\partial T}{\partial \tau} = \nabla[\lambda(p)\nabla T], \tau > 0, p \in \Omega, \quad (1)$$

где $p = \{x_1, x_2, x_3\}$ обозначает координаты декартовой системы координат, $c(p)$ – теплоемкость в данной точке пространства, $\rho(p)$ – плотность в данной точке пространства, T – температура, τ – время, $\lambda(p)$ – коэффициент теплопроводности в данной точке пространства, $\Omega = \Omega(x_1, x_2, x_3)$ – конечная пространственная область, ∇ – оператор Гамильтона.

Для корректной постановки задачи уравнение (1) необходимо дополнить начальными и граничными условиями. В качестве начального возьмем однородное распределение температуры в объеме:

$$T(p, 0) = T_0 = \text{const} > 0. \quad (2)$$

Будем рассматривать граничные условия первого рода:

$$T_S = T_1 = \text{const} > 0, \quad (3)$$

где $S = S(x_1, x_2, x_3)$ – поверхность тела.

В работах [1; 2] для расчета эффективного коэффициента теплопроводности решалось стационарное уравнение теплопроводности с использованием метода релаксаций. Этот метод позволяет определить эффективный коэффициент теплопроводности, но не обеспечивает в целом решение нестационарной задачи теплопроводности для композиционного материала. В данной работе для расчета аналогичной задачи решается нестационарное уравнение теплопроводности с применением интегро-интерполяционного метода при построении разностной схемы. Такой подход обеспечивает расчет как эффективного коэффициента теплопроводности, так и других параметров процесса (нестационарное температурное поле, градиенты температуры).

Будем решать краевую задачу (1–3) методом конечных разностей [3; 4; 5]. Суть данного метода состоит в следующем. Заменяем область непрерывного изменения аргументов Ω искомой функции T некоторым конечным множеством точек, лежащих в этой области. Это множество назовем разностной сеткой, сами точки – узлами сетки, а функции, определенные тем или иным способом на этой сетке, – сеточными функциями. Дифференциальный оператор, входящий в уравнение, заменим некоторым разностным оператором, а также сформулируем разностный аналог для краевых условий и начальных данных.

В результате такой замены получим систему алгебраических уравнений, называемых еще разностной схемой. Решая полученную алгебраическую систему, найдем приближенное (разностное) решение в узлах сетки.

При переходе от непрерывной среды к некоторой ее дискретной модели естественно требовать, чтобы для описываемого физического процесса выполнялись законы сохранения. Схемы, для которых данное требование выполняется, называются консервативными. При построении разностного аналога для дифференциальных операторов, входящих в уравнение (1), был использован интегро-интерполяционный метод. Суть метода состоит в следующем. Область изменения независимых переменных разбивается на элементарные ячейки. Затем исходное дифференциальное уравнение интегрируют по ячейке и приходят к интегральным соотношениям. Интегралы и производные, входящие в эти соотношения, заменяются разностными отношениями так, чтобы не нарушались законы сохранения. Для одномерного случая получим следующую разностную аппроксимацию:

$$\frac{u_k^{i+1} - u_k^i}{\eta} = \frac{1}{2c_k \rho_k h} \left[\lambda_{k+1/2} \frac{u_{k+1}^{i+1} - u_k^{i+1}}{h} - \lambda_{k-1/2} \frac{u_k^{i+1} - u_{k-1}^{i+1}}{h} \right] + \left[\lambda_{k+1/2} \frac{u_{k+1}^i - u_k^i}{h} - \lambda_{k-1/2} \frac{u_k^i - u_{k-1}^i}{h} \right], \quad (4)$$

$$\lambda_{k+1/2} = \frac{\lambda_k + \lambda_{k+1}}{2},$$

где u_k^i – температура в момент времени t в k -ом узле сетки, u_k^{i+1} – температура в момент времени $t + \eta$, η – временной шаг, h – шаг сетки (расстояние между соседними узлами сетки), λ_k – теплопроводность в k -ом узле сетки. Данная схема называется наилучшей в связи с ее высокой точностью.

Полученная схема содержит в каждом уравнении несколько неизвестных значений функции на новом временном слое; подобные схемы называются неявными. Для получения u_k^{i+1} необходимо решать одновременно всю систему линейных уравнений. Уравнения, которые нужно решать на каждом шагу по времени, будут иметь вид:

$$-\alpha \lambda_{k+1/2} u_{k+1}^{i+1} + (1 + \alpha \lambda_{k+1/2} + \alpha \lambda_{k-1/2}) u_k^{i+1} - \alpha \lambda_{k-1/2} u_{k-1}^{i+1} = \\ = \alpha \lambda_{k+1/2} u_{k+1}^i + (1 - \alpha \lambda_{k+1/2} - \alpha \lambda_{k-1/2}) u_k^i + \alpha \lambda_{k-1/2} u_{k-1}^i,$$

где $\alpha = \frac{\eta}{2(h)^2 c_k \rho_k}, k = 1, 2, \dots,$

где в правой части равенства находятся известные величины. Эти уравнения должны быть решены при граничных условиях, соответствующих, $k = 0$ и $k = N$ (N – число узлов сетки). Мы перепишем эти уравнения в виде:

$$-A_k u_{k+1} + B_k u_k - C_k u_{k-1} = D_k, \tag{5}$$

где A_k, B_k, C_k – сокращенные обозначения коэффициентов, причем верхний индекс $i+1$ опущен.

Для решения системы вида (5) воспользуемся методом прогонки [6]. Запишем граничные условия

$$u_0 = \gamma_0 = const, \tag{6}$$

$$u_N = \gamma_1 = const. \tag{7}$$

Предположим, что имеет место рекуррентное соотношение:

$$u_k = E_k u_{k+1} + F_k \tag{8}$$

с неопределенными коэффициентами E_k и F_k .

Если выражение (8) выполняется для любых u_k , то из граничного условия (6) получим

$$E_0 = 0, F_0 = \gamma_0. \tag{9}$$

Подставим $E_{k-1} u_k + F_{k-1}$ вместо u_{k-1} в уравнение (5). В результате получим соотношение между u_k и u_{k+1} , которое можно переписать так:

$$u_k = \frac{A_k}{B_k - C_k E_{k-1}} u_{k+1} + \frac{D_k + C_k F_{k-1}}{B_k - C_k E_{k-1}}.$$

Приравняем правый член этого равенства правому члену равенства (8). Для того, чтобы полученное выражение было справедливым для всех значений u_{k+1} , должны выполняться соотношения

$$E_k = \frac{A_k}{B_k - C_k E_{k-1}}, k \geq 1, \tag{10}$$

$$F_k = \frac{D_k + C_k F_{k-1}}{B_k - C_k E_{k-1}}, k \geq 1. \tag{11}$$

С помощью равенств (9)–(11) можно вычислить E_k и F_k по индукции в направлении возрастания k ($k = 0, 1, \dots, N-1$). Так как u_{k+1} для $k = N-1$ дается с помощью правого граничного условия (7), то мы можем теперь с помощью (8) вычислить u_k по индукции в направлении убывания k ($k = N-1, N-2, \dots, 1$). Этим вычисление завершается.

Для построения схемы в трехмерном случае воспользуемся методом расщепления. При построении разностной схемы основную роль играет возможность представления дифференциального оператора и соответствующего ему разностного оператора в виде суммы операторов, каждый из которых включает производные лишь по одной пространственной переменной

$$\Lambda = \Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3,$$

где Λ – разностный оператор, Λ_j ($j = 1, 2, 3$) – его составляющие по различным пространственным направлениям. Разностные операторы должны строиться по образцу наилучшей схемы (4).

Рассмотрим суть метода. Пусть требуется найти решение задачи теплопроводности на интервале времени $[t, t + \eta]$. Предположим, что значения температуры известны в момент времени t и надо определить температуру в момент времени $t + \eta$. Введем три промежуточных временных слоя. В этом случае можно выписать схему расщепления по направлениям:

$$\frac{u^{i+1/3} - u^i}{\eta} + \Lambda_1 \frac{u^i + u^{i+1/3}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{i+2/3} - u^{i+1/3}}{\eta} + \Lambda_2 \frac{u^{i+1/3} + u^{i+2/3}}{2} = 0,$$

$$\frac{u^{i+1} - u^{i+2/3}}{\eta} + \Lambda_3 \frac{u^{i+2/3} + u^{i+1}}{2} = 0.$$

Разностные уравнения – одномерные, так как операторы – одномерны. Поэтому схему называют еще локально-одномерной. Для решения каждого разностного уравнения схемы используется метод прогонки. На промежуточных слоях полученная система разностных уравнений не аппроксимирует

исходную задачу. Погрешности аппроксимации промежуточных слоев суммируются и компенсируются так, что на целом слое аппроксимация есть. Разностное решение следует сравнивать с точным только на целых слоях. Говорят, что имеет место суммарная аппроксимация.

Таким образом, на основании данной математической модели была выполнена компьютерная программа по расчету коэффициента теплопроводности. Рассмотрим алгоритм работы данной программы.

1. Задаются начальные данные: граничные условия, начальное распределение по температурам, концентрация наполнителя в матрице, способ генерации структуры.

2. Запускается процесс протекания тепла в веществе.

3. В каждый момент времени высчитывается коэффициент теплопроводности. Процесс считается установившимся, если значение коэффициента теплопроводности с течением времени не изменяется в пределах заданной погрешности.

На рисунке 1 представлены расчетные зависимости относительного эффективного коэффициента теплопроводности от концентрации наполнителя для различных способов распределения наполнителя в матрице. Коэффициент теплопроводности матрицы принимался равным единице. В расчетах относительный коэффициент теплопроводности наполнителя принимался равным $\lambda' = 2000$. Из графика видно, что при низких концентрациях наполнителя (20–30 %) его структура практически не влияет на эффективный коэффициент теплопроводности композиционной системы. При увеличении концентрации наполнителя (30–50 %) эффективные коэффициенты теплопроводности для различных способов распределения наполнителя в матрице отличаются (максимальное отклонение при этом не превышает 15 %). Разумеется, что при меньших значениях относительного коэффициента теплопроводности наполнителя влияние структуры наполнителя будет еще меньше.

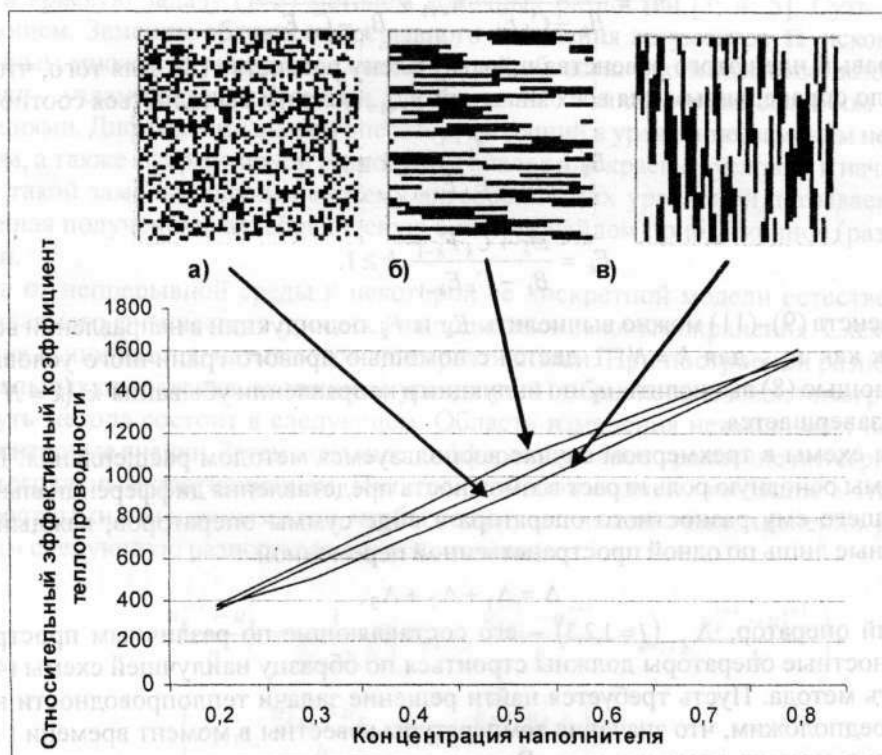


Рисунок 1 – Относительный эффективный коэффициент теплопроводности бинарного композита для трех вариантов структуры наполнителя: а – случайный, б – с продольными волокнами, в – с поперечными волокнами

Имеются отдельные модели (формулы) для вычисления теплопроводности композиций [7]. Модель Максвелла предложена для изотропной среды, в которую вкраплены частицы сферической формы и расстояние между частицами велико по сравнению с размерами частиц. Для этой модели коэффициент композиции определяется по формуле:

$$\lambda_{эфф} = \lambda_1 \left(\frac{\lambda_2 + 2\lambda_1 - 2\rho_2(\lambda_1 - \lambda_2)}{\lambda_2 + 2\lambda_1 + \rho_2(\lambda_1 - \lambda_2)} \right). \quad (12)$$

Модель Оделевского, в которой рассматриваются статистические смеси, когда частицы включений распределены случайным образом, и на форму, и размеры частиц не накладывается никаких предварительных ограничений, имеет следующее математическое представление:

$$\lambda_{эфф} = \left(\frac{(3\rho_1 - 1)\lambda_1 + (3\rho_2 - 1)\lambda_2}{4} \right) + \left[\left(\frac{(3\rho_1 - 1)\lambda_1 + (3\rho_2 - 1)\lambda_2}{4} \right)^2 + \frac{\lambda_1\lambda_2}{2} \right]^{0,5}, \quad (13)$$

где $\lambda_{эфф}$ – эффективный коэффициент теплопроводности композиционной системы, λ_1 – коэффициент теплопроводности матрицы, λ_2 – коэффициент теплопроводности наполнителя, ρ_1 – объемная концентрация матрицы, ρ_2 – объемная концентрация наполнителя.

В таблице 1 и на рисунках 2–5 представлены результаты значений относительных эффективных коэффициентов теплопроводности различных композиций, полученных разными методами. Кривая 1 соответствует экспериментальным данным по теплопроводности композиций полистирол + MgO, полистирол + тальк, полистирол + древесная мука [8] и нашим экспериментальным данным фторопласт + медь. Кривая 2 соответствует результатам, полученным описанным в работе методом. Кривая 3 построена в соответствии с моделью Оделевского и кривая 4 – по модели Максвелла.

Таблица 1 – Сравнение расчетных и экспериментальных данных по эффективному коэффициенту теплопроводности

ρ_2 (в %)	λ_1 Вт/м·град	λ_2 Вт/м·град	$\lambda_{эксп}$ Вт/м·град	λ_2 (в отн. ед.)	$\lambda_{эксп}$ (в отн. ед.)	$\lambda_{расч}$ (в отн. ед.)		
						ЧМ	по (12)	по (13)
Полистирол + MgO (280 К)								
2	0,175	28,8	0,206	164,6	1,18	1,08	1,06	1,06
6	0,175	28,8	0,340	164,6	1,94	1,28	1,19	1,21
Полистирол + тальк (300 К)								
9	0,177	2,85	0,32	16,1	1,81	1,31	1,24	1,28
12	0,177	2,85	0,332	16,1	1,88	1,45	1,33	1,4
22	0,177	2,85	0,582	16,1	3,29	2,05	1,67	1,99
Полистирол + древесная мука (300 К)								
20	0,177	0,3-0,4	0,177	1,7-2,3	1	1,15	1,16	1,16
40	0,177	0,3-0,4	0,223	1,7-2,3	1,26	1,32	1,33	1,33
60	0,177	0,3-0,4	0,266	1,7-2,3	1,5	1,51	1,53	1,53
Фторопласт + медь (298 К)								
1	0,248	401	0,249	1617	1,004	1,04	1,03	1,03
3	0,248	401	0,298	1617	1,2	1,12	1,09	1,1

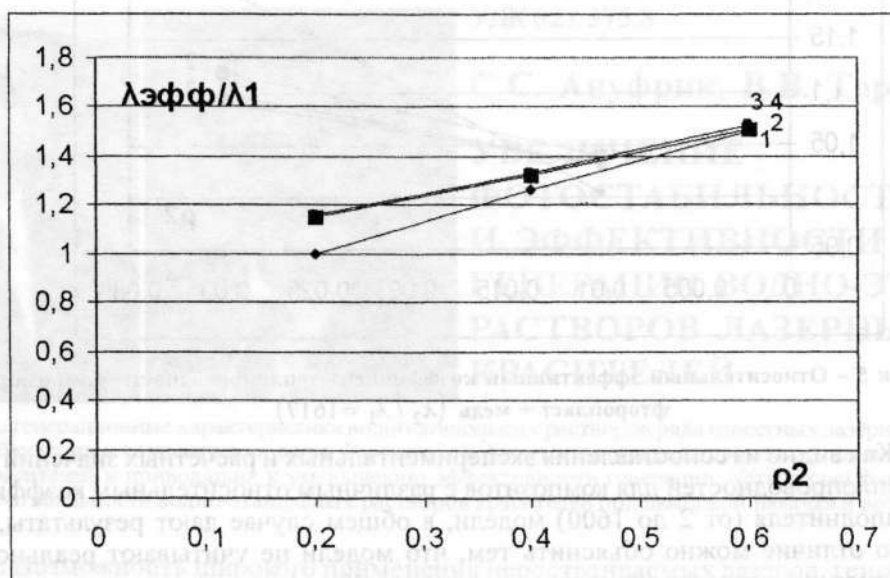


Рисунок 2 – Относительный эффективный коэффициент теплопроводности композиции полистирол+древесная мука ($\lambda_2 / \lambda_1 = 2$)

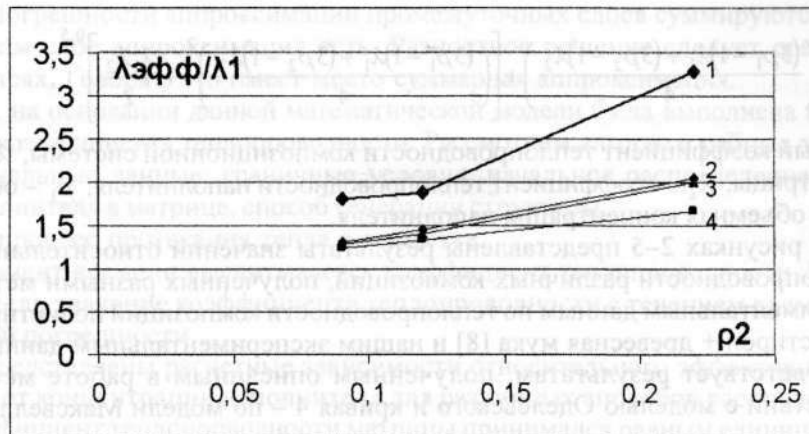


Рисунок 3 – Относительный эффективный коэффициент теплопроводности композиции полистирол+ тальк ($\lambda_2 / \lambda_1 = 16,1$)

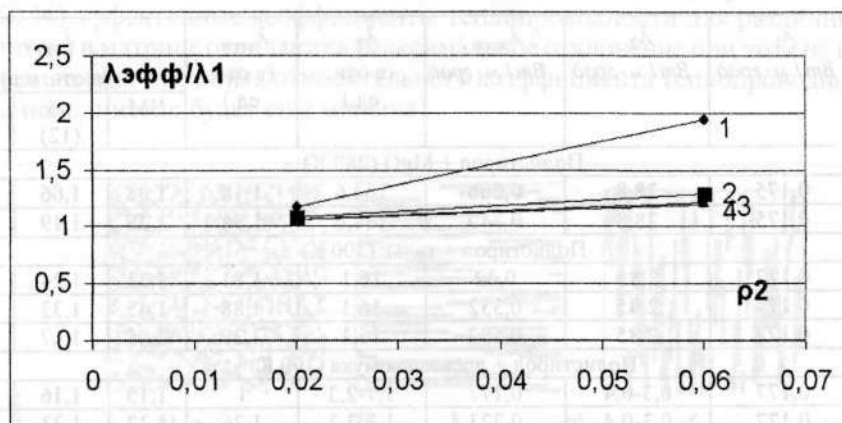


Рисунок 4 – Относительный эффективный коэффициент теплопроводности композиции полистирол+ MgO ($\lambda_2 / \lambda_1 = 164,6$)

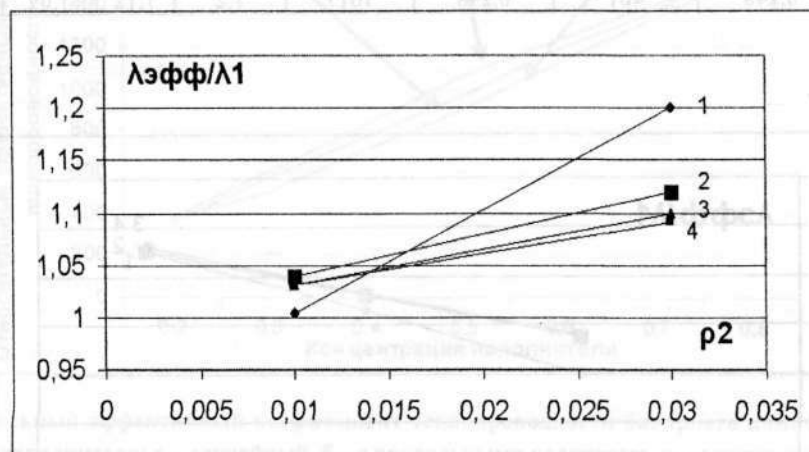


Рисунок 5 – Относительный эффективный коэффициент теплопроводности композиции фторопласт + медь ($\lambda_2 / \lambda_1 = 1617$)

Заключение. Как видно из сопоставления экспериментальных и расчетных значений эффективных коэффициентов теплопроводностей для композитов с различным относительным коэффициентом теплопроводности наполнителя (от 2 до 1600) модели, в общем случае дают результаты, отличные от эксперимента. Это отличие можно объяснить тем, что модели не учитывают реальное контактное сопротивление на границе раздела наполнитель – матрица. Кроме того, как показывают расчеты, значение эффективного коэффициента теплопроводности композита при различных распределениях наполнителя в матрице для одной и той же концентрации может меняться в широком диапазоне. Очевидно, что можно подобрать термическое сопротивление межфазного слоя, чтобы ЧМ достаточно хорошо

согласовывался с экспериментом. Однако такой подход требует более детального обоснования процессов переноса на границе раздела матрица-наполнитель. Необходим анализ большего числа экспериментальных данных по значениям эффективного коэффициента теплопроводности композиции при различных концентрациях и относительных коэффициентах теплопроводности наполнителя, чтобы отдать предпочтение какой-либо модели. На наш взгляд, наиболее надежным и универсальным методом расчета эффективного коэффициента теплопроводности композиционной системы следует считать ЧМ.

Перечень принятых обозначений. $\lambda_{\text{эфф}}$ – эффективный коэффициент теплопроводности композиционной системы; λ_1 – коэффициент теплопроводности матрицы; λ_2 – коэффициент теплопроводности наполнителя; ρ_1 – объемная концентрация матрицы; ρ_2 – объемная концентрация наполнителя; $\lambda_{\text{эксп}}$ – значение коэффициента теплопроводности, полученное экспериментальным путем, $\lambda_{\text{расч}}$ – значение коэффициента теплопроводности, полученное с помощью вычислений.

Литература

1. Никитин, Д.А. Моделирование структуры композиционных систем и расчет их коэффициента теплопроводности / Д.А. Никитин // *Материалы, технологии, инструменты*. – 2004. – Т. 9, № 2. – С. 11–15.
2. Никитин, Д.А. Модели теплопроводности масштабно-значимого элемента / Д.А. Никитин // *Вестник ГрГУ им. Я. Купалы*. Сер. 2. – 2008. – № 1. – С. 67–71.
3. Беляев, Н.М. Методы теории теплопроводности: учеб. пособие для вузов: в 2 ч. / Н.М. Беляев, А.А. Рядно. – М.: Высш. школа, 1982. – Ч. 2. – 304 с.
4. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – 2-е изд. – М.: Наука, 1983. – 616 с.
5. Калиткин, Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин; под ред. А.А. Самарского. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
6. Рихтмайер, Р.Д. Разностные методы решения краевых задач / Р.Д. Рихтмайер; пер. с англ. – М.: Изд. Иностранной литературы, 1960. – 262 с.
7. Харитонов, В.В. Теплофизика полимеров и полимерных композиций / В.В. Харитонов. – Минск: Выш. школа, 1983. – 162 с.
8. Васильев, Л.Л. Теплофизические свойства пористых материалов / Л.Л. Васильев, С.А. Танаева. – Минск: Наука и техника, 1971. – 268 с.