

УДК 539.3

ЭФФЕКТИВНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИТА С ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

В. С. Зарубин, Г. Н. Кувыркин

Московский государственный технический университет
им. Н.Э. Баумана, Москва (e-mail: Fn2@bmstu.ru)

Разработана математическая модель переноса теплоты в композите с включениями эллипсоидальной формы, имеющими одинаковую ориентацию главных осей эллипсоидов. Получены оценки эффективных коэффициентов теплопроводности композита, в том числе с применением двойственной формулировки вариационной задачи стационарной теплопроводности, которые могут быть использованы для прогноза эффективных коэффициентов теплопроводности композита, модифицированного наноструктурными элементами, включая нанотрубки.

Ключевые слова: композит, эффективный коэффициент теплопроводности, наноструктурные элементы.

EFFECTIVE COEFFICIENTS OF THERMAL CONDUCTIVITY OF A COMPOSITE WITH ELLIPSOIDAL INCLUSIONS

V. S. Zarubin, G. N. Kuvyrkin

Bauman Moscow State Technical University, Moscow,
Russia (e-mail: Fn2@bmstu.ru)

A mathematical model of heat transfer in a composite with inclusions of ellipsoidal shape, which have the identical orientation of primary axes of ellipsoids, is developed. The estimates of effective coefficients of composite's thermal conductivity are obtained; among them are those derived by using the dual formulation of variational problem of stationary heat conduction, which can be utilized for prediction of effective coefficients of thermal conductivity of the composite modified by nanostructural elements including nanotubes.

Keywords: composite, effective coefficient of thermal conductivity, nanostructural elements.

Перспектива модификации композитов наноструктурными элементами (в том числе углеродными нанотрубками [1]), имеющими высокие механические характеристики, связана с повышением макроскопических характеристик композитов в целом как конструкционных материалов. Для конструкций, подверженных как механическим, так и тепловым воздействиям, помимо информации о механических характеристиках композита важно располагать данными и о его теплофизических свойствах, в частности о коэффициенте теплопроводности. Эффективное значение коэффициента теплопроводности композита, модифицированного наноструктурными элементами, зависит от

их объемной концентрации C_V и от соотношения между коэффициентами теплопроводности матрицы и применяемых при модификации элементов. В данной работе рассмотрен композит, модифицированный элементами в виде эллипсоидов, которые можно считать приемлемым приближением к геометрической форме включений различной природы в матричную среду материала (в том числе образующихся и в поликристаллических материалах при их термической обработке [2, 3]).

Математическую модель переноса тепловой энергии в композите построим в предположении, что эллипсоидальные включения не контактируют между собой, т.е. отделены друг от друга слоем материала матрицы. Это предположение соответствует условию $C_V \ll 1$, что, видимо, отвечает возможной объемной концентрации нанотрубок при модификации композитов или включений, возникающих при термической обработке поликристаллических материалов. Композит считаем состоящим из множества изотропных эллипсоидальных частиц с коэффициентом теплопроводности λ_0 , каждая из которых окружена слоем изотропного материала матрицы с коэффициентом теплопроводности λ_m . Значения λ_0 и λ_m считаем известными.

Рассмотрим тепловое взаимодействие отдельно взятого эллипсоидального включения с неограниченным объемом окружающей его матрицы. Начало прямоугольной декартовой системы координат $O\xi_1\xi_2\xi_3$ выберем в центре эллипсоида, а направления координатных осей совместим с главными осями эллипсоида, уравнение поверхности которого имеет вид $\xi_1^2/b_1^2 + \xi_2^2/b_2^2 + \xi_3^2/b_3^2 = 1$, где b_k , $k = 1, 2, 3$, — полуоси эллипсоида.

Примем, что на большом удалении от центра включения составляющие градиента установившегося распределения температуры равны $T_{,k}^\circ$ (запятая с последующим нижним индексом k у обозначения T температуры означает производную по направлению оси $O\xi_k$). Тогда во включении возникнет установившееся распределение температуры с составляющими градиента [4]

$$T_{,k} = \frac{T_{,k}^\circ}{1 - D_\alpha^\circ(1 - \bar{\lambda})}, \quad \alpha = k, \quad (1)$$

где $\bar{\lambda} = \lambda_0/\lambda_m$ и

$$D_\alpha^\circ = \frac{b_1 b_2 b_3}{2} \int_0^\infty \frac{du}{(b_\alpha^2 + u)f(u)}, \quad \alpha = k, \quad (2)$$

причем $f(u) = \sqrt{(b_1^2 + u)(b_2^2 + u)(b_3^2 + u)}$ и $D_1^\circ + D_2^\circ + D_3^\circ = 1$ (в частности, для шара $D_\alpha = 1/3$). Интегралы в формуле (2) можно выразить

через эллиптические интегралы [5]. Например, при $b_1 > b_2 > b_3$

$$D_1^\circ = \frac{\bar{b}_2 \bar{b}_3 (F(\theta, K) - E(\theta, K))}{(1 - \bar{b}_2^2) \sqrt{1 - \bar{b}_3^2}}, \quad D_3^\circ = \frac{\bar{b}_2 \bar{b}_3}{\bar{b}_2^2 - \bar{b}_3^2} \left(\frac{\bar{b}_2}{\bar{b}_3} - \frac{E(\theta, K)}{\sqrt{1 - \bar{b}_3^2}} \right),$$

где $\bar{b}_2 = b_2/b_1$ и $\bar{b}_3 = b_3/b_1$, а $F(\theta, K)$ и $E(\theta, K)$ — эллиптические интегралы соответственно первого и второго рода с амплитудой и модулем

$$\theta = \arcsin \sqrt{1 - \bar{b}_3^2}, \quad K = \sqrt{(1 - \bar{b}_2^2)/(1 - \bar{b}_3^2)}.$$

Выражение для температуры вне включения в точке M с координатами ξ_k примет вид

$$T(M) = T_{,k}^\circ \xi_k - (\bar{\lambda} - 1) \frac{D_\alpha T_{,k}^\circ \xi_k}{1 + D_\alpha^\circ (\bar{\lambda} - 1)}, \quad \alpha = k, \quad (3)$$

где

$$D_\alpha = \frac{b_1 b_2 b_3}{2} \int_\beta^\infty \frac{du}{(b_\alpha^2 + u) f(u)}. \quad (4)$$

В формулах (3) и (4) β — положительный корень уравнения $\xi_1^2/(b_1^2 + \beta) + \xi_2^2/(b_2^2 + \beta) + \xi_3^2/(b_3^2 + \beta) = 1$ — характеризует положение точки M с координатами ξ_k ; в формуле (3) и далее использовано правило суммирования по повторяющемуся латинскому индексу.

Из формулы (3) следует, что наличие включения создает в матрице возмущение температурного поля относительно линейного распределения на большом удалении от этого включения, описываемое соотношением

$$\Delta T^\circ = -(\bar{\lambda} - 1) \frac{D_\alpha T_{,k}^\circ \xi_k}{1 + D_\alpha^\circ (\bar{\lambda} - 1)}, \quad \alpha = k.$$

Далее рассмотрим случай, когда $T_{,2}^\circ = T_{,3}^\circ = 0$; для возмущения температурного поля получим

$$\Delta T^\circ = -(\bar{\lambda} - 1) \frac{D_1 T_{,1}^\circ \xi_1}{1 + D_1^\circ (\bar{\lambda} - 1)}. \quad (5)$$

Предположим, что все эллипсоидальные включения имеют одинаковую форму и размеры и одинаково ориентированы относительно выбранной системы координат. Это приведет к различию эффективных

коэффициентов теплопроводности в направлениях различных координатных осей, т.е. к анизотропии свойств композита по отношению к теплопроводности. Пусть n таких включений находятся в объеме, ограниченном поверхностью эллипсоида с уравнением $\xi_1^2/B_1^2 + \xi_2^2/B_2^2 + \xi_3^2/B_3^2 = 1$ и равном $4\pi B_1 B_2 B_3/3$, где $B_k = C_0 b_k$, $C_0 = \text{const} \gg 1$. Поскольку объем каждого включения равен $4\pi b_1 b_2 b_3/3$, объемную концентрацию включений можно определить величиной $C_V = n/C_0^3$. Для точки с координатами ξ_k , удаленной на весьма большое расстояние от каждого из включений, в силу $(b_\alpha/\xi_\alpha)^2 \ll 1$ ($\alpha = k$) можно принять $\beta = \xi_k \xi_k$. Тогда, согласно формуле (5), в этой точке n весьма удаленных включений, расположенных в объеме большого эллипсоида с полуосями B_k , вызовут возмущение температуры, равное

$$\Delta T = n\Delta T^\circ = -n(\bar{\lambda} - 1) \frac{D_1 T_{,1}^\circ \xi_1}{1 + D_1^\circ (\bar{\lambda} - 1)}. \quad (6)$$

Если считать большой эллипсоид представительным элементом композита с рассматриваемыми включениями, то этот элемент с искомым значением λ_1 эффективного коэффициента теплопроводности в направлении оси $O\xi_1$ создаст в той же весьма удаленной точке с координатами ξ_k с учетом формулы (5) такое же возмущение температуры

$$\Delta T = -(\tilde{\lambda}_1 - 1) \frac{D_1^* T_{,1}^\circ \xi_1}{1 + D_1^\circ (\tilde{\lambda}_1 - 1)}, \quad (7)$$

где $\tilde{\lambda}_1 = \lambda_1/\lambda_m$ и

$$D_1^* = \frac{B_1 B_2 B_3}{2} \int_\beta^\infty \frac{du}{(B_1^2 + u)F(u)}, \quad (8)$$

причем $F(u) = \sqrt{(B_1^2 + u)(B_2^2 + u)(B_3^2 + u)}$. Приравняв правые части формул (6) и (7), запишем

$$\tilde{\lambda}_1 = \frac{1 + (\bar{\lambda} - 1)(D_1^\circ + (1 - D_1^\circ)\bar{D}_1 C_V)}{1 + (\bar{\lambda} - 1)D_1^\circ(1 - \bar{D}_1 C_V)}, \quad (9)$$

где \bar{D}_1 равно отношению интеграла при $\alpha = 1$ в формуле (4) к интегралу в формуле (8). Для весьма удаленной точки $|\xi_1| \rightarrow \infty$, что равносильно $\beta \rightarrow \infty$ и стремлению к нулю каждого из этих интегралов. Для раскрытия неопределенности типа $0/0$ используем правило Лопиталья, продифференцировав каждый из интегралов по переменному пределу β . В итоге получим

$$\bar{D}_1 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{(B_1^2 + \beta)F(\beta)}{(b_1^2 + \beta)f(\beta)} = 1.$$

Таким образом, формула (9) принимает вид

$$\tilde{\lambda}_1 = \frac{1 + (\bar{\lambda} - 1)(D_1^\circ + (1 - D_1^\circ)C_V)}{1 + (\bar{\lambda} - 1)D_1^\circ(1 - C_V)}. \quad (10)$$

Отметим, что в частном случае шаровых включений при $D_1^\circ = 1/3$ композит будет изотропным, а формула (10) совпадет с известной формулой Максвелла [4].

Аналогичным путем можно найти формулы для $\tilde{\lambda}_2 = \lambda_2/\lambda_m$ и $\tilde{\lambda}_3 = \lambda_3/\lambda_m$, где λ_2 и λ_3 — эффективные коэффициенты теплопроводности композита в направлении осей $O\xi_2$ и $O\xi_3$ соответственно. В итоге при $\alpha = 1, 2, 3$ имеем

$$\tilde{\lambda}_\alpha = \frac{1 + (\bar{\lambda} - 1)(D_\alpha^\circ + (1 - D_\alpha^\circ)C_V)}{1 + (\bar{\lambda} - 1)D_\alpha^\circ(1 - C_V)}. \quad (11)$$

В случае абсолютно нетеплопроводных включений ($\lambda_0 = 0$) из формулы (11) следует

$$\tilde{\lambda}_\alpha = \frac{(1 - D_\alpha^\circ)(1 - C_V)}{1 - D_\alpha^\circ(1 - C_V)}, \quad (12)$$

Формула (12) применима к материалу с коэффициентом теплопроводности λ_m , содержащему поры с объемной концентрацией C_V . При абсолютно теплопроводных включениях ($\lambda_0 \rightarrow \infty$) формула (11) примет вид

$$\tilde{\lambda}_\alpha = \frac{D_\alpha^\circ + (1 - D_\alpha^\circ)C_V}{D_\alpha^\circ(1 - C_V)}. \quad (13)$$

Применим двойственную вариационную формулировку задачи стационарной теплопроводности [6, 7] для получения двусторонних оценок эффективного коэффициента теплопроводности рассматриваемого композита. Воспользуемся трехфазной моделью композита в виде цилиндрической области V , имеющей в направлении координатной оси $O\xi_1$ высоту H и ограниченной параллельными основаниями, каждое из которых имеет достаточно большую площадь S_0 . Эта область содержит половину эллипсоидального включения с полуосями b_1, b_2 и b_3 , покрытого слоем матрицы, ограниченным половиной поверхности эллипсоида с полуосями $b_1^* = C_*b_1, b_2^* = C_*b_2$ и $b_3^* = C_*b_3, C_* > 1$, центр которого совпадает с началом выбранной выше системы координат $O\xi_1\xi_2\xi_3$ (рис. 1). Плоскости симметрии половины включения и слоя матрицы совпадают с основанием цилиндра, лежащим в координатной плоскости $\xi_2O\xi_3$. Остальная часть области содержит однородный материал с искомыми свойствами композита.

Боковую поверхность цилиндра примем идеально теплоизолированной, температуру основания при $\xi_1 = 0$ положим равной нулю, а на втором основании при $\xi_1 = H$ зададим температуру $T_{,1}^\circ H$. Таким образом, в неоднородной цилиндрической области объемом $V_0 = HS_0$, ограниченной поверхностью S , распределение температуры $T(M)$ и коэффициент теплопроводности $\Lambda(M)$ являются функциями координат точки $M \in V$, причем функция $\Lambda(M)$ кусочно постоянна в каждой из подобластей области V (см. рис. 1).

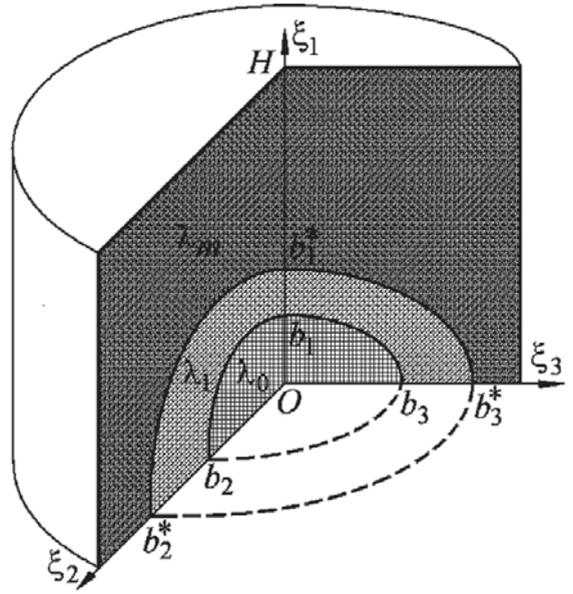


Рис. 1. Модель композита с эллипсоидальными включениями

Примем в качестве допустимого для минимизируемого функционала [7]

$$J[T] = \frac{1}{2} \int_V \Lambda(M) (\nabla T(M))^2 dV(M), \quad M \in V, \quad (14)$$

где ∇ — дифференциальный оператор Гамильтона, линейное по высоте цилиндра распределение температуры с постоянной составляющей градиента $T_{,1}^\circ$. Тогда из формулы (14) получим

$$J_1[T] = \lambda_1 \frac{(T_{,1}^\circ)^2}{2} HS_0 - \frac{2\pi b_1^* b_2^* b_3^*}{3} \lambda_1 \frac{(T_{,1}^\circ)^2}{2} + \\ + 2\pi \frac{b_1^* b_2^* b_3^* - b_1 b_2 b_3}{3} \lambda_m \frac{(T_{,1}^\circ)^2}{2} + 2\pi \frac{b_1 b_2 b_3}{3} \lambda_0 \frac{(T_{,1}^\circ)^2}{2}. \quad (15)$$

Для максимизируемого функционала [7]

$$I[\mathbf{q}] = -\frac{1}{2} \int_V \frac{(\mathbf{q}(M))^2}{\Lambda(M)} dV(M) - \\ - \int_S T(P) \mathbf{q}(P) \cdot \mathbf{n}(P) dS(P), \quad P \in S, \quad (16)$$

(\mathbf{n} — единичный вектор внешней нормали к поверхности S) в качестве допустимого распределения вектора плотности теплового потока \mathbf{q} примем постоянное значение $q = -\lambda_1 T_{,1}^\circ$ единственной составляющей этого вектора, перпендикулярной основаниям цилиндра. В этом случае формула (16) примет вид

$$I_1[q] = -\frac{(\lambda_1 T_{,1}^\circ)^2}{2} \left(\frac{HS_0 - 2\pi b_1^* b_2^* b_3^*/3}{\lambda_1} + 2\pi \frac{b_1^* b_2^* b_3^* - b_1 b_2 b_3}{\lambda_m} + 2\pi \frac{b_1 b_2 b_3}{\lambda_0} \right) + \lambda_1 (T_{,1}^\circ)^2 HS_0. \quad (17)$$

Принятые допустимые распределения температуры и плотности теплового потока для неоднородной области отличаются от действительных, и поэтому значения $J_1[T]$ и $I_1[q]$ не будут совпадать, причем $J_1[T] > I_1[q]$. В промежутке между этими значениями должно быть расположено и значение $J_0 = (\lambda_1/2)(T_{,1}^\circ)^2 HS_0$ минимизируемого функционала (14) для однородной области с коэффициентом теплопроводности λ_1 . Тогда при $b_1 b_2 b_3 / (b_1^* b_2^* b_3^*) = C_*^3 = C_V$ с учетом формулы (15) из условия $J_1[T] \geq J_0$ получим верхнюю оценку

$$\tilde{\lambda}_1 \leq 1 - C_V + \bar{\lambda} C_V = \tilde{\lambda}_+, \quad (18)$$

а с учетом формулы (17) из условия $I_1[q] \leq J_0$ найдем нижнюю оценку

$$\tilde{\lambda}_1 \geq 1 / (1 - C_V + C_V / \bar{\lambda}) = \tilde{\lambda}_-. \quad (19)$$

Использованные достаточно простые допустимые распределения температуры и плотности теплового потока учитывают лишь объемное содержание каждой из трех изотропных фаз в принятой трехфазной модели композита. Поэтому для всех трех направлений координатных осей представленные в формулах (18) и (19) оценки эффективного коэффициента теплопроводности композита будут идентичными.

На рис. 2 и 3 при различных значениях $\bar{\lambda}$ приведены построенные по формулам (18) и (19) графики зависимостей от C_V оценок $\tilde{\lambda}_+$ (штрихпунктирные линии) и $\tilde{\lambda}_-$ (штриховые линии). Для эллипсоидального включения со значениями $\bar{b}_2 = \sqrt{3}/2$ и $\bar{b}_3 = 1/2$ получим амплитуду $\theta = \pi/3$ и модуль $K = 1/\sqrt{3}$ эллиптических интегралов со значениями $F(\theta, K) = 1,1049$ и $E(\theta, K) = 0,9945$ [8]. По этим значениям вычислены $D_1^\circ = 0,221$, $D_2^\circ = 0,274$ и $D_3^\circ = 0,506$ и затем по формуле (13) на рис. 2 и 3 для тех же значений $\bar{\lambda}$ построены сплошными кривыми графики зависимостей $\tilde{\lambda}_\alpha$ от C_V , причем гладким кривым соответствуют зависимости для $\tilde{\lambda}_1$, кривым, помеченным квадратами, — для $\tilde{\lambda}_2$ и кривым, помеченным точками, — для $\tilde{\lambda}_3$. Видно, что для фиксированного значения $\bar{\lambda}$ все сплошные кривые расположены между штрихпунктирными и штриховыми линиями, причем в случае малого отклонения значения $\bar{\lambda}$ от единицы для выбранной формы включения различие между значениями $\tilde{\lambda}_\alpha$ невелико, т.е. анизотропия композита оказывается сравнительно слабой. По мере отклонения $\bar{\lambda}$ от единицы несмотря на совпадение оценок и значений $\tilde{\lambda}_\alpha$ при $C_V = 0$ и $C_V = 1$ разность $\tilde{\lambda}_+ - \tilde{\lambda}_-$ для промежуточных

Рис. 2. Графики зависимостей верхней $\tilde{\lambda}_+$ (штрихпунктирные линии) и нижней $\tilde{\lambda}_-$ (штриховые линии) оценок безразмерных эффективных коэффициентов теплопроводности: $\tilde{\lambda}_1$ (сплошные линии), $\tilde{\lambda}_2$ и $\tilde{\lambda}_3$ (сплошные линии с квадратами и с точками соответственно) от объемной концентрации C_V при различных значениях параметра $\bar{\lambda} < 1$

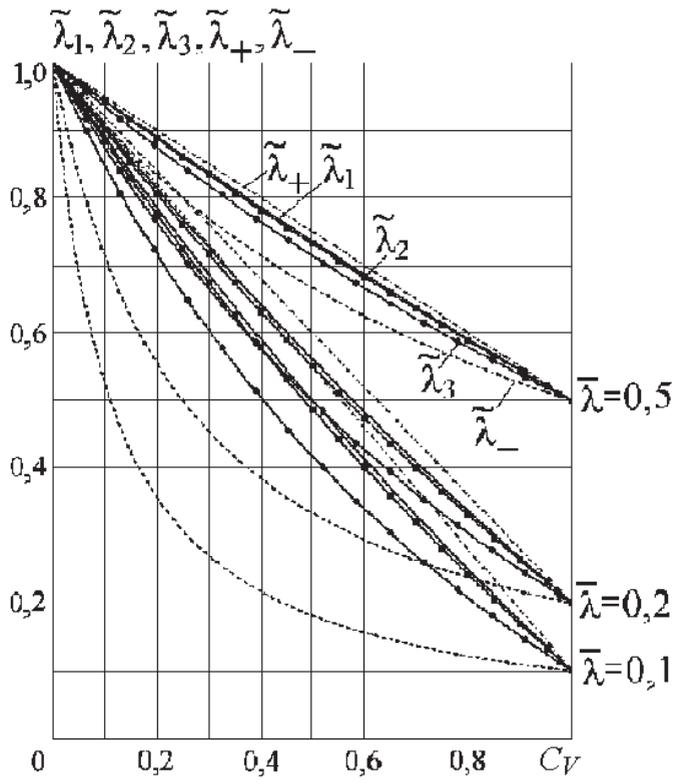
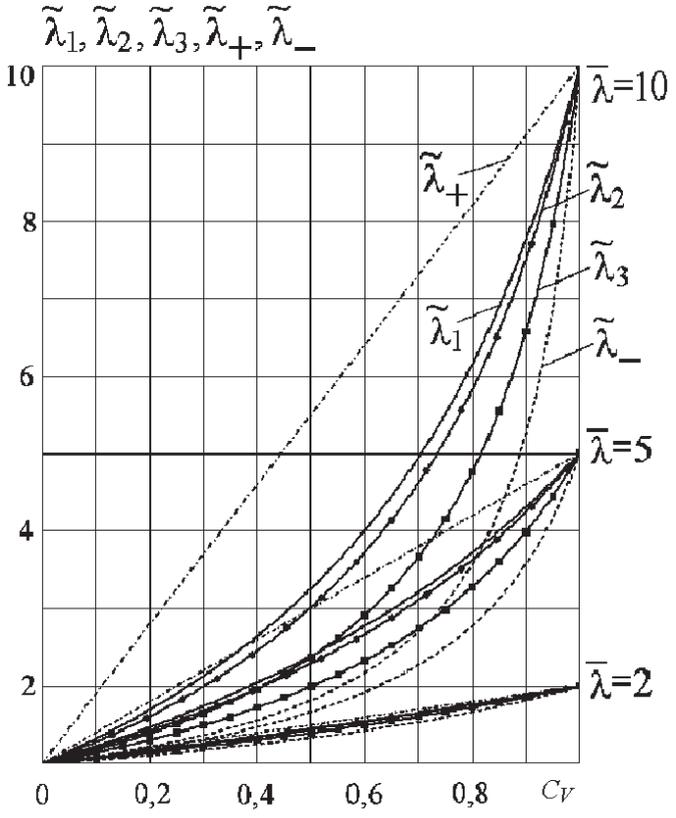


Рис. 3. Графики зависимостей верхней $\tilde{\lambda}_+$ (штрихпунктирные линии) и нижней $\tilde{\lambda}_-$ (штриховые линии) оценок безразмерных эффективных коэффициентов теплопроводности: $\tilde{\lambda}_1$ (сплошные линии), $\tilde{\lambda}_2$ и $\tilde{\lambda}_3$ (сплошные линии с квадратами и с точками соответственно) от объемной концентрации C_V при различных значениях параметра $\bar{\lambda} > 1$



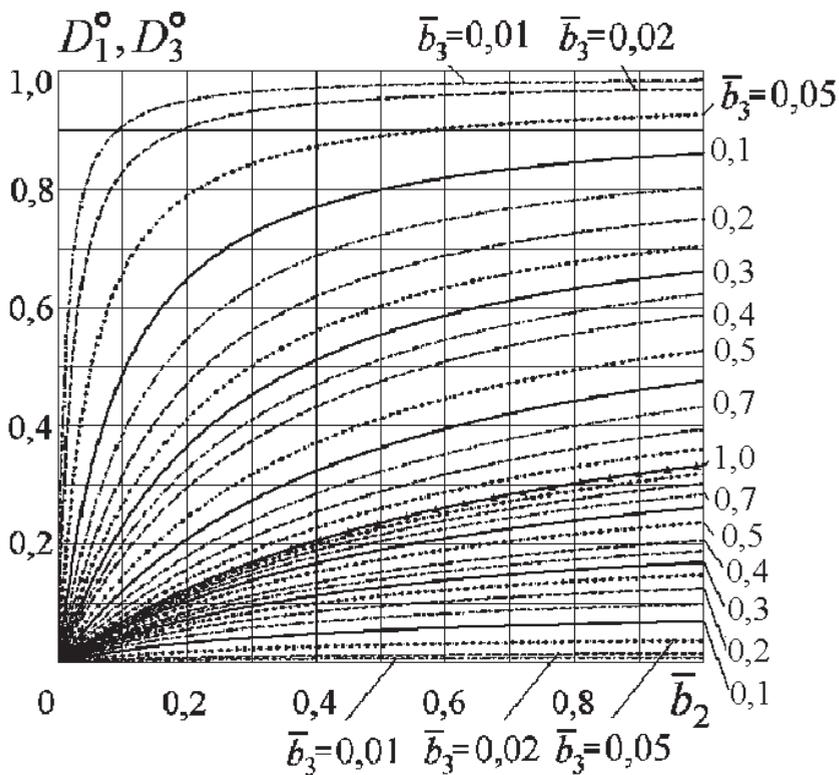


Рис. 4. Графики зависимостей коэффициентов D_1^0 и D_3^0 (соответственно ниже и выше сплошной линии с треугольниками) от параметра \bar{b}_2 при различных значениях параметра \bar{b}_3

значений C_V становится значительной и одновременно увеличивается различие между значениями $\tilde{\lambda}_\alpha$, что приводит к более существенной анизотропии композита.

Отмеченная тенденция сохраняется и для других сочетаний полуосей эллипсоидального включения, причем необходимые для применения формулы (13) значения коэффициентов D_α^0 могут быть определены при помощи графиков зависимостей D_1^0 и D_3^0 от \bar{b}_2 при различных значениях \bar{b}_3 (рис. 4). В случае $\bar{b}_3 = 1$ и $\bar{b}_2 \in (0; 1)$ включение имеет форму сплюсненного эллипсоида вращения (сфероида) и $D_1^0 = D_3^0$, что соответствует на рис. 4 сплошной кривой, помеченной треугольниками. Для $\bar{b}_3 < 1$ ординаты кривых ниже этой кривой равны значениям D_1^0 , а выше этой кривой — значениям D_3^0 , по которым затем можно вычислить $D_2^0 = 1 - D_1^0 - D_3^0$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. К а ц Е. А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры. Родословная форм и идей. — М.: Изд-во ЛКИ, 2008. — 296 с.
2. Н а у ч н ы е основы материаловедения / Б.Н. Арзамасов, А.И. Крашенинников, Ж.П. Пастухова, А.Г. Рахштадт. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1994. — 366 с.
3. В а н Флек Л. Теоретическое и прикладное материаловедение: Пер. с англ. — М.: Атомиздат, 1975. — 472 с.
4. К а р с л о у Г., Е г е р Д. Теплопроводность твердых тел: Пер. с англ. — М.: Наука, 1964. — 488 с.

5. Э ш е л б и Д ж. Континуальная теория дислокаций: Пер. с англ. – М.: Изд-во иностр. лит., 1963. – 248 с.
6. З а р у б и н В. С. Инженерные методы решения задач теплопроводности. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 328 с.
7. З а р у б и н В. С., К у в ы р к и н Г. Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. – 512 с.
8. С п р а в о ч н и к по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган: Пер. с англ. – М.: Наука, 1979. – 832 с.

Статья поступила в редакцию 26.03.2012