УДК 541.124

В. С. З а р у б и н, Г. Н. К у в ы р к и н,
И. Ю. С а в е л ь е в а

ЭФФЕКТИВНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИТА ПРИ НЕПРЕРЫВНОМ ИЗМЕНЕНИИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПРОМЕЖУТОЧНОГО СЛОЯ МЕЖДУ ШАРОВЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ И МАТРИЦЕЙ

Построена математическая модель переноса тепловой энергии в композите с включениями шаровой формы (в общем случае в виде полых шаров). Между включением и матрицей предполагается наличие промежуточного слоя, в котором коэффициент теплопроводности изменяется непрерывно между его значениями для включения и матрицы. Получены оценки эффективного коэффициента теплопроводности такого композита, в том числе с применением двойственной формулировки вариационной задачи стационарной теплопроводности в неоднородном твердом теле. Проведенный параметрический анализ позволил установить области применения найденных оценок, которые могут быть использованы для прогноза эффективного коэффициента теплопроводности композитов, в частности, модифицированных наноструктурными элементами

E-mail: zarubin@bmstu.ru, gnk1914@mail.ru, inga_fn2@mail.ru

Ключевые слова: *композит, эффективный коэффициент теплопроводности, включение, матрица, промежуточный слой*

Реализация возможности модификации композитов наноструктурными элементами (в том числе фуллеренами), имеющими высокие механические характеристики, позволит улучшить макроскопические характеристики композитов в целом как конструкционных материалов. Для теплонапряженных конструкций, испытывающих одновременно как механические, так и тепловые воздействия, помимо информации о механических характеристиках композита необходимо 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, от соотношения между коэффициентами теплопроводности матрицы и применяемых при модификации элементов, а также от условий теплового контакта между этими элементами и матрицей. Эти условия могут быть связаны с возможным химическим взаимодействием включения и матрицы, приводящим к образованию между ними промежуточного слоя, коэффициент теплопроводности которого будет отличаться от коэффициентов теплопроводности как включения, так и матрицы.

В данной работе ограничимся рассмотрением композита, модифицированного элементами в виде полого шара, который можно считать допустимым приближением к геометрической форме фуллерена [1]. Известно [2], что фуллерены при определенных условиях могут взаимодействовать с материалом полимерной матрицы. В этом случае атомы углерода устанавливают химические связи с атомами и молекулами, входящими в состав матрицы, что приводит к образованию промежуточного слоя между фуллереном и матрицей. Такой слой может возникнуть и при модификации композита включениями иной природы.

Математическую модель переноса тепловой энергии в композите построим в предположении, что шаровые включения в общем случае не контактируют между собой, т.е. отделены друг от друга слоем материала матрицы. Композит считаем состоящим из множества составных шаровых частиц с наружным радиусом R_2, каждая из которых включает полый шар с наружным радиусом R_1, окруженный промежуточным шаровым слоем толщиной $R_* - R_1$, и шарового слоя толщиной $R_2 - R_*$ из материала матрицы. Примем, что такая составная частица является представительным элементом структуры композита и в тепловом отношении взаимодействует с неограниченным массивом однородного материала, коэффициент теплопроводности λ которого подлежит определению как эффективная характеристика композита. Таким образом, модель композита содержит четыре фазы: включение, промежуточный слой, слой матрицы и неограниченный массив однородного материала. При этом отношение R_1^3/R_2^3 будем считать объемной концентрацией C_V включений в композите.

Рассмотрим тепловое взаимодействие отдельно взятой составной частицы и окружающего ее однородного материала, полагая коэффициенты теплопроводности λ_1 и λ_2 материалов соответственно полого шара и матрицы заданными, а коэффициент теплопроводности промежуточного слоя непрерывно изменяющимся между значениями λ_1 и λ_2. Тепловой контакт на каждой из сферической поверхности, разделяющей контактирующие фазы, примем идеальным.

Центр полого шара с внутренним радиусом R_0 поместим в начале сферической системы координат. Примем, что на большом расстоянии $r \gg R_2$ от начала координат задан вектор градиента температурного поля в однородном материале, направленный по оси сферической системы координат, от которой происходит отсчет угловой координаты θ, т.е. при $r \to \infty$ установившееся распределение температуры в этом материале описывает функция $T_\infty(r, \theta) = Gr\cos\theta$, где G — модуль вектора градиента. Эта функция удовлетворяет уравнению Лапласа, которое в сферических координатах имеет вид

$$\frac{1}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\,\frac{\partial T}{\partial r}\Big)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\,\frac{\partial T}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2 T}{\partial\varphi^2}=0. \qquad (1)$$

В данном случае благодаря параллельности заданного вектора градиента температурного поля и оси отсчета угловой координаты θ распределение температуры симметрично относительно этой оси и не зависит от угловой координаты φ, т.е. $\partial^2 T/\partial\varphi^2\equiv 0$.

По мере приближения к составной шаровой частице температурное поле в однородном материале претерпевает возмущение, описываемое также удовлетворяющим уравнению (1) дополнительным слагаемым [3] $\Delta T(r,\theta)=(B/r^2)\cos\theta$, где B — подлежащий определению постоянный коэффициент, зависящий от параметров этой частицы и искомого коэффициента теплопроводности λ. Замена составной шаровой частицы равновеликим шаром радиусом R_2, имеющим коэффициент теплопроводности λ, приведет к исчезновению возмущения температурного поля в окружающем ее однородном материале с тем же значением λ, что равносильно условию $B=0$, позволяющему установить связь искомого коэффициента теплопроводности с заданными параметрами этой частицы.

Для получения зависимости коэффициента B от параметров составной частицы необходимо решить задачу теплового взаимодействия этой частицы и окружающего ее однородного материала. Температурное поле в однородном материале, удовлетворяющее заданному условию при $r\to\infty$ и уравнению (1), описывает функция

$$T(r,\theta)=T_\infty(r,\theta)+\Delta T(r,\theta)=(Gr+B/r^2)\cos\theta. \qquad (2)$$

Аналогичные зависимости описывают распределения температуры в шаровом включении

$$T_1(r,\theta)=(A_1 r+B_1/r^2)\cos\theta, \qquad (3)$$

и в слое материала матрицы

$$T_2(r,\theta)=(A_2 r+B_2/r^2)\cos\theta. \qquad (4)$$

В промежуточном слое с зависящим от радиальной координаты r коэффициентом теплопроводности $\lambda_*(r)$ распределение температуры $T_*(r,\theta)$ должно удовлетворять дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial}{\partial r}\Big(\lambda_* r^2\,\frac{\partial T_*}{\partial r}\Big)+\frac{\lambda_*}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\,\frac{\partial T_*}{\partial\theta}\Big)=0. \qquad (5)$$

Положим $T_*(r,\theta)=f(r)\cos\theta$ и после подстановки в уравнение (5) получим однородное обыкновенное дифференциальное уравнение (ОДУ)

$$f''+(2/r+\lambda'_* r/\lambda_*)f'-(2/r^2)f=0 \qquad (6)$$

второго порядка относительно неизвестной функции $f(r)$ (штрих означает производную по r).

Непрерывное изменение коэффициента теплопроводности промежуточного слоя представим зависимостью $\lambda_*(r) = \lambda^* \exp(ar)$, удовлетворяющую условиям $\lambda_1 = \lambda^* \exp(aR_1)$ и $\lambda_2 = \lambda^* \exp(aR_*)$, из которых следует $aR_1 = -(\ln \bar{\lambda})/(\bar{R}_* - 1)$ и $\lambda^* = \lambda_1 \exp(aR_1)$, где $\bar{\lambda} = \lambda_1/\lambda_2$ и $\bar{R}_* = R_*/R_1$. Тогда ОДУ (6) можно представить в виде $(f' + (a+2/r)f)' = 0$ и после интегрирования получить ОДУ $f' + (a + 2/r)f = A_* = \mathrm{const}$ первого порядка, решением которого будет [4]

$$f(r) = \left(B_* + A_* \int e^{F(r)}\, dr\right) e^{-F(r)}, \quad F(r) = \int (a+2/r)\, dr = ar + 2\ln r,$$

где $B_* = \mathrm{const}$. Если учесть, что

$$\int e^{F(r)}\, dx = \int r^2 e^{ar}\, dr = \left(\frac{r^2}{a} - \frac{2r}{a^2} + \frac{2}{a^3}\right) e^{ar},$$

то в итоге распределение температуры в промежуточном слое примет вид

$$T_*(r,\theta) = (A_*/a)(1 - 2/(ar) + 2/(ar)^2)\cos\theta + (B_*/r^2)e^{-ar}\cos\theta. \quad (7)$$

В равенства (2)...(4) и (7) входят 7 неизвестных коэффициентов B, A_1, B_1, A_2, B_2, A_* и B_*, которые необходимо найти из граничных условий на сферических поверхностях с радиусами R_0, R_1, R_* и R_2. При $r = R_0$ из условия отсутствия теплообмена в полости шарового включения с учетом равенства (3) получим

$$\left.\frac{\partial T_1}{\partial r}\right|_{r=R_0} = (A_1 - 2B_1/R_0^3)\cos\theta = 0,$$

или

$$A_1 = 2B_1/R_0^3. \quad (8)$$

При $r = R_1$ из условий непрерывности плотности теплового потока и распределения температуры следует

$$T_1'\big|_{r=R_1} = T_*'\big|_{r=R_1} \quad \text{и} \quad T_1(R_1,\theta) = T_*(R_1,\theta).$$

Отсюда с использованием равенств (3) и (7) находим

$$\begin{gathered} A_1 - \frac{2B_1}{R_1^3} = A_*\left(\frac{2}{\alpha^2} - \frac{4}{\alpha^3}\right) - B_* \frac{2+\alpha}{R_1^3}\varepsilon, \\ A_1 + \frac{B_1}{R_1^3} = A_*\left(1 - \frac{2}{\alpha} + \frac{2}{\alpha^2}\right) + \frac{B_*\varepsilon}{R_1^3}, \end{gathered} \quad (9)$$

где $\alpha = aR_1$ и $\varepsilon = \exp(-\alpha)$. Из аналогичных условий при $r = R_*$ с учетом формул (4) и (7) следует

$$A_*\left(\frac{2}{\alpha_*^2}-\frac{4}{\alpha_*^3}\right)-B_*\frac{2+\alpha}{R_*^3}\varepsilon_*, \quad A_*\left(1-\frac{2}{\alpha}+\frac{2}{\alpha^2}\right)+\frac{B_*\varepsilon_*}{R_*^3}=A_2+\frac{B_2}{R_*^3}, \qquad (10)$$

где $\alpha_* = \alpha\bar{R}_*$ и $\varepsilon_* = \exp(-\alpha_*)$. Наконец, из подобных условий при $r = R_2$ и соотношений (2) и (4) получим

$$A_2 - 2B_2/R_2^3 = \widetilde{\lambda}(G - 2B/R_2^3) \quad \text{и} \quad A_2 + B_2/R_2^3 = G + B/R_2^3, \qquad (11)$$

где $\widetilde{\lambda} = \lambda/\lambda_2$.

Последовательным исключением из равенств (8)...(11) неизвестных коэффициентов можно получить выражение для коэффициента B, которое является весьма громоздким. Из условия $B = 0$ следует

$$\widetilde{\lambda} = \frac{\lambda}{\lambda_2} = \frac{\alpha_*(P_1\bar{\lambda} - P_2(\alpha_*-1)) + \bar{R}_*^3(2P_1\bar{\lambda}(3+\alpha_*) + P_2P_3)C_V}{\alpha_*(P_1\bar{\lambda} - P_2(\alpha_*-1)) - \bar{R}_*^3(2P_1\bar{\lambda}(3+\alpha_*) + P_2P_3)C_V/2}, \qquad (12)$$

где $P_1 = 4\alpha - \alpha^2 - 6 + (R_0/R_1)^3\alpha(\alpha - 1)$, $P_2 = 6 + 2\alpha + \alpha(R_0/R_1)^3$ и $P_3 = \alpha_*^2 - 4\alpha_* + 6$. Формула (12) сохраняет смысл при условии $C_V \leqslant C_V^* = (R_1/R_*)^3$, поскольку при $C_V = C_V^*$ в составной частице уже отсутствует шаровой слой матрицы. В частном случае отсутствия промежуточного слоя ($\bar{R}_*^3 = 1$) равенство (12) при $R_0 = 0$ путем предельного перехода при $\alpha \to \infty$ можно привести к известной формуле Максвелла [3]

$$\widetilde{\lambda} = \frac{2 + \bar{\lambda} - 2(1 - \bar{\lambda})C_V}{2 + \bar{\lambda} + (1 - \bar{\lambda})C_V},$$

полученной на основе более простой двухфазной модели, состоящей из включения в виде сплошного шара и окружающего его материала матрицы.

Для оценки возможной погрешности формулы (12) используем двойственную вариационную формулировку задачи стационарной теплопроводности [5, 6], позволяющую получить двусторонние оценки эффективного коэффициента теплопроводности рассматриваемого композита. Область V, содержащую представительный элемент в виде половины составной частицы радиусом R_2, выберем в виде прямого цилиндра с достаточно большой площадью S_0 параллельных оснований, одно из которых соответствует в сферических координатах значению $\theta = \pi/2$, а точки второй имеют координаты $r\cos\theta = H$, т.е. высота цилиндра равна H, причем $H \gg R_2$. Боковую поверхность цилиндра примем идеально теплоизолированной, температуру основания при $\theta = \pi/2$ положим равной нулю, а на втором основании зададим температуру GH. Однородный материал в части области вне составной частицы имеет коэффициент теплопроводности λ. 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 непрерывная функция $\Lambda(M)$ принимает значения λ_1 при $r \leqslant R_1$, λ_2 при $R_* \leqslant r \leqslant R_2$ и λ при $r \geqslant R_2$, а при $r \in (R_1,\, R_*)$ определена зависимостью $\lambda_*(r) = \lambda_1 \exp(a(r - R_1))$.

Примем в качестве допустимого для минимизируемого функционала [5]

$$J[T] = \frac{1}{2} \int\limits_V \Lambda(M) \big(\nabla T(M)\big)^2 \, dV(M), \tag{13}$$

где ∇ — дифференциальный оператор Гамильтона, линейное по высоте цилиндра распределение температуры с постоянной составляющей градиента G. В этом случае из формулы (13) получим

$$J_1[T] = \frac{G^2}{2} \Bigg(\lambda H S_0 - \frac{2\pi R_2^3}{3}\lambda + 2\pi \frac{R_2^3 - R_*^3}{3}\lambda_2 + \\ + 2\pi \int\limits_{R_1}^{R_*} \lambda_*(r) r^2 \, dr \int\limits_0^{\pi/2} \sin\theta \, d\theta + 2\pi \frac{R_1^3 - R_0^3}{3}\lambda_1 \Bigg). \tag{14}$$

Для максимизируемого функционала [5]

$$I[\mathbf{q}] = -\frac{1}{2} \int\limits_V \frac{\big(\mathbf{q}(M)\big)^2}{\Lambda(M)} \, dV(M) - \\ - \int\limits_S T(P)\mathbf{q}(P) \cdot \mathbf{n}(P) \, dS(P), \quad P \in S, \tag{15}$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор внешней нормали к поверхности S, в качестве допустимого распределения вектора плотности теплового потока $\mathbf{q}$ примем постоянное значение $q = -\lambda G$ единственной составляющей этого вектора, перпендикулярной основаниям цилиндра. Тогда формула (15) примет вид

$$I_1[q] = -\frac{(\lambda G)^2}{2} \Bigg(\frac{H S_0 - 2\pi R_2^3/3}{\lambda} + 2\pi \frac{R_2^3 - R_*^3}{3\lambda_2} + \\ + 2\pi \int\limits_{R_1}^{R_*} \frac{r^2 \, dr}{\lambda_*(r)} \int\limits_0^{\pi/2} \sin\theta \, d\theta + 2\pi \frac{R_1^3 - R_0^3}{3\lambda_1} \Bigg) + \lambda G^2 H S_0. \tag{16}$$

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 $J_0 = (\lambda/2)G^2 H S_0$ минимизируемого функционала (12) для однородной области с коэффициентом теплопроводности λ. Тогда при $(R_1/R_2)^3 = C_V$ с учетом формулы (14) из условия $J_1[T] \geqslant J_0$ получим

$$\widetilde{\lambda} \leqslant 1 - \bar{R}_*^3 C_V + \bar{\lambda}(1 - R_0^3/R_1^3)C_V + \\ + \frac{3C_V}{\alpha}\left(\bar{R}_*^2 - \bar{\lambda} + 2\frac{\bar{R}_* - \bar{\lambda}}{\alpha} + 2\frac{1-\bar{\lambda}}{\alpha^2}\right) = \widetilde{\lambda}_+,$$

а при использовании формулы (16) из условия $I_1[q] \leqslant J_0$ найдем

$$\frac{1}{\bar{\bar{\lambda}}} \leqslant 1 - \bar{R}_*^3 C_V + C_V \frac{1 - R_0^3/R_1^3}{\bar{\lambda}} + \frac{3C_V}{\bar{\lambda}\alpha}\left(1 + \frac{2}{\alpha} + \frac{2}{\alpha^2}\right) - \\ - \frac{3C_V}{\alpha}\left(\bar{R}_*^2 + \frac{2\bar{R}_*}{\alpha} + \frac{2}{\alpha^2}\right) = \frac{1}{\widetilde{\lambda}_-}.$$

Для примера расчета примем $R_*^3 = 2R_1^3$, т.е. $C_V^* = 0{,}5$ и $\bar{R}_* \approx 1{,}260$. На рис. 1 для случая $R_0 = 0$ при различных значениях $\bar{\lambda}$ приведены графики зависимостей от $C_V \in [0,\, C_V^*]$ верхней $\widetilde{\lambda}_+$ (штрихпунктирные линии) и нижней $\widetilde{\lambda}_-$ (штриховые линии) оценок отношения $\widetilde{\lambda} = \lambda/\lambda_2$. Сплошными линиями представлены графики зависимостей $\widetilde{\lambda}$, построенные по формуле (12). Результаты аналогичных расчетов при $C_V^* = 0{,}9$ ($\bar{R}_* \approx 1{,}036$) приведены на рис. 2. Отметим, что во всех случаях $\widetilde{\lambda} = \widetilde{\lambda}_+ = \widetilde{\lambda}_- = 1$ при $\bar{\lambda} = 1$.

Из сопоставления графиков на этих рисунках следует, что при малом отличии значения $\bar{\lambda}$ от единицы формула (12) достаточно хорошо описывает зависимость эффективного коэффициента теплопроводности от объемной концентрации шаровых включений во всем проме-

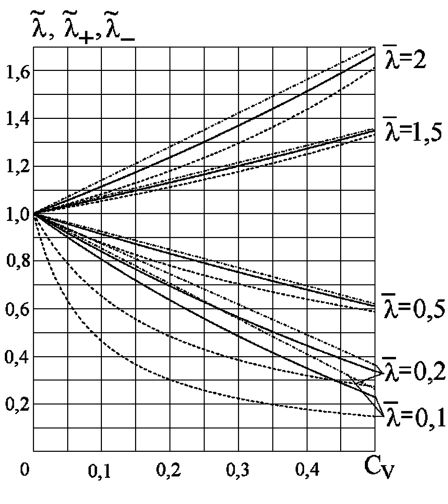

Рис. 1

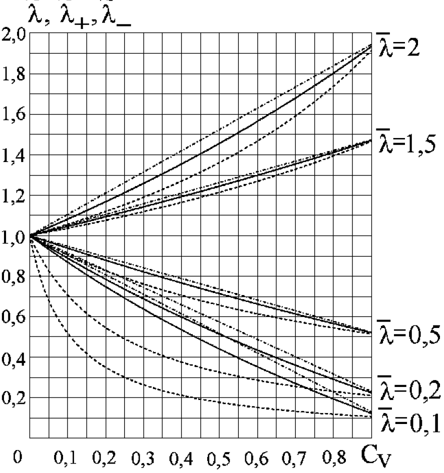

Рис. 2

жутке изменения C_V. По мере отклонения $\bar{\lambda}$ от единицы несмотря на сближение оценок при $C_V = C_V^*$ разность $\widetilde{\lambda}_+ - \widetilde{\lambda}_-$ для промежуточных значений C_V становится значительной. Причиной этого является, видимо, использование достаточно простых допустимых распределений температуры и плотности теплового потока при вычислении функционалов. Отметим, что с уменьшением относительной толщины $\bar{R}_* - 1$ промежуточного слоя разность $\widetilde{\lambda}_+ - \widetilde{\lambda}_-$ также уменьшается.

Работа выполнена по гранту НШ–255.2012.8 программы государственной поддержки ведущих научных школ.

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. П о з д н я к о в В. А. Физическое материаловедение наноструктурных материалов. – М.: МГИУ, 2007. – 424 с.
3. К а р с л о у Г., Е г е р Д. Теплопроводность твердых тел: Пер. с англ. – М.: Наука, 1964. – 488 с.
4. З а й ц е в В. Ф., П о л я н и н А. Д. Справочник по линейным обыкновенным дифференциальным уравнениям. – М.: Факториал, 1997. – 304 с.
5. З а р у б и н В. С. Инженерные методы решения задач теплопроводности. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 328 с.
6. 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.

Статья поступила в редакцию 27.07.2012