Эффективные коэффициенты теплопроводности композита с анизотропными эллипсоидальными включениями

04, апрель 2013

DOI: 10.7463/0413.0541050

Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н.

УДК 536.2

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

fn2@bmstu.ru

Введение

Для повышения механических характеристик таких конструкционных материалов, какими являются композиты, представляется перспективным их модификация высокопрочными и высококомодульными включениями, в том числе наноструктурными элементами (например, фуллеренами и углеродными нанотрубками [1]). При использовании модифицированных композитов в теплонапряженных элементах конструкций, работающих в условиях одновременного воздействия как механических, так и тепловых нагрузок, наряду с механическими характеристиками композита важную роль играют и его теплофизические свойства (в частности, коэффициент теплопроводности). Эффективное значение коэффициента теплопроводности композита, модифицированного армирующими элементами, зависит от их объемной концентрации C_V и от соотношения между коэффициентами теплопроводности этих элементов и матрицы. В данной работе рассмотрен композит, армированный анизотропными включениями в виде эллипсоидов. Такие включения могут иметь различную природу (например, образующие новые фазы в поликристаллических материалах при их термической обработке [2, 3] или упомянутые выше наноструктурные элементы).

1. Математическая модель

Математическую модель переноса тепловой энергии в композите построим в предположении, что эллипсоидальные включения в общем случае не контактируют между собой, т.е. отделены друг от друга слоем изотропного материала матрицы. Композит полагаем состоящим из множества одинаково ориентированных анизотропных эллипсоидальных частиц с

тензором теплопроводности, главные оси которого совпадают с осями симметрии эллипсоидов. Главные значения λ_k ($k = 1, 2, 3$) этого тензора и коэффициент теплопроводности λ_m материала матрицы 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, причем направления координатных осей совпадают с осями симметрии эллипсоида, уравнение поверхности которого имеет вид

$$\frac{\xi_1^2}{b_1^2} + \frac{\xi_2^2}{b_2^2} + \frac{\xi_3^2}{b_3^2} = 1,$$

где b_k — полуоси эллипсоида.

Примем, что на весьма большом расстоянии от центра включения по сравнению с длиной наибольшей полуоси эллипсоида, составляющие градиента установившегося распределения температуры равны $T_{,k}^\circ$ (запятая с последующим нижним индексом k у обозначения T температуры означает производную по направлению оси $O\xi_k$). Установившееся распределение температуры в анизотропной среде описывает дифференциальное уравнение $\lambda_\alpha T_{,kk} = 0$ ($\alpha = k$) с частными производными второго порядка (здесь и далее использовано правило суммирования по повторяющемуся латинскому индексу). Этому уравнению удовлетворяет линейное распределение температуры во включении

$$T(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = A_k \xi_k \quad (1)$$

с пока неизвестными составляющими A_k градиента температуры.

Установившееся распределение температуры $T^*(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ в матрице должно удовлетворять уравнению Лапласа $T_{,kk}^* = 0$. Известно [4], что этому уравнению удовлетворяет позволяющая выполнить также и граничные условия идеального теплового контакта на поверхности эллипсоидального включения функция

$$T^* = T_{,k}^\circ \xi_k + B_\alpha D_k \xi_k, \quad (2)$$

где $B_\alpha = \text{const}$,

$$D_\alpha = \frac{b_1 b_2 b_3}{2} \int_\beta^\infty \frac{du}{(b_\alpha^2 + u)f(u)}, \quad (3)$$

β — характеризующий положение точки M с координатами ξ_k положительный корень уравнения

$$\frac{\xi_1^2}{b_1^2 + \beta} + \frac{\xi_2^2}{b_2^2 + \beta} + \frac{\xi_3^2}{b_3^2 + \beta} = 1, \quad (4)$$

а $f(u) = \sqrt{(b_1^2 + u)(b_2^2 + u)(b_3^2 + u)}$.

Постоянные A_k и B_k в соотношениях (1) и (2) найдем в предположении идеального теплового контакта на поверхности эллипсоидального включения из условий непрерывности

температуры $T = T^*$ и плотности теплового потока $\lambda_\alpha T_{,k} n_k = \lambda_m T_{,k}^* n_k$, где n_k — направляющие косинусы вектора внешней нормали к этой поверхности. Из этих условий для произвольной точки поверхности эллипсоида соответственно следует

$$A_k \xi_k = T_{,k}^\circ \xi_k + B_k \xi_k D_\alpha^\circ, \quad \bar{\lambda}_\alpha A_k n_k = T_{,k}^\circ n_k + B_k n_k (D_\alpha \xi_\alpha)_{,\alpha} \Big|_{\beta=0}, \quad (5)$$

где $\bar{\lambda}_\alpha = \lambda_\alpha / \lambda_m$ и

$$D_\alpha^\circ = \frac{b_1 b_2 b_3}{2} \int_0^\infty \frac{du}{(b_\alpha^2 + u) f(u)}, \quad (6)$$

так как для точек этой поверхности, согласно уравнению (4), $\beta = 0$. Отметим, что $D_1^\circ + D_2^\circ + D_3^\circ = 1$ (в частности, для шарового включения $D_\alpha^\circ = 1/3$). Интегралы в формуле (6) можно выразить через эллиптические интегралы [5, 6].

Равенства (5) должны быть выполнены в любой точке поверхности включения. В точке с координатами $\xi_1 = b_1$, $\xi_2 = \xi_3 = 0$ имеем $n_1 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$ и из этих равенств получим

$$A_1 = T_{,1}^\circ + B_1 D_1^\circ, \quad \bar{\lambda}_\alpha A_1 = T_{,1}^\circ + B_1 (D_1 \xi_1)_{,1} \Big|_{\xi_1=b_1, \xi_2=\xi_3=0}. \quad (7)$$

С учетом правил дифференцирования интеграла с переменным пределом и неявно заданной уравнением (4) функции $\beta(\xi_1)$ вычислим в этой точке производную в правой части второго равенства (7):

$$(D_1 \xi_1)_{,1} \Big|_{\beta=0} = D_1^\circ + b_1 D_{1,1} \Big|_{\xi_1=b_1, \xi_2=\xi_3=0} = D_\alpha^\circ - 1.$$

Тогда из равенств (7) получим

$$A_1 = \frac{T_{,1}^\circ}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1) D_1^\circ}, \quad B_1 = \frac{T_{,1}^\circ (1 - \bar{\lambda}_1)}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1) D_1^\circ}.$$

Аналогичным путем, выполнив равенства (5) в точках поверхности эллипсоида с координатами $\xi_2 = b_2$, $\xi_1 = \xi_3 = 0$ и $\xi_3 = b_3$, $\xi_1 = \xi_2 = 0$, найдем соответственно коэффициенты A_2 , B_2 и A_3 , B_3 . Полученные результаты можно представить в виде

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

Таким образом, наличие анизотропного эллипсоидального включения создает в матрице возмущение температурного поля относительно линейного распределения $T_{,k}^\circ \xi_k$ на большом удалении от этого включения, описываемое соотношением

$$\Delta T^* = B_k D_\alpha \xi_k = T_{,k}^\circ \xi_k \frac{(1 - \bar{\lambda}_\alpha) D_\alpha}{1 + (\bar{\lambda}_\alpha - 1) D_\alpha^\circ}. \quad (8)$$

2. Случай одинаковой ориентации включений

Сначала рассмотрим случай, когда $T_{,2}^{\circ} = T_{,3}^{\circ} = 0$. Тогда для возмущения температурного поля из формулы (8) получим

$$\Delta T^* = B_k D_{\alpha} \xi_k = T_{,1}^{\circ} \xi_1 \frac{(1 - \bar{\lambda}_1) D_1}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1) D_1^{\circ}}. \quad (9)$$

Предположим, что все эллипсоидальные включения в композите подобны по форме и одинаково ориентированы относительно выбранной системы координат, но размеры таких включений могут быть различны. Это приведет к различию эффективных коэффициентов теплопроводности композита в направлениях различных координатных осей, т.е. к анизотропии свойств композита по отношению к теплопроводности. Пусть N таких включений находятся в объеме V_N , 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 $B_{\alpha}/b_{\alpha}^{(n)} = C_n = \text{const} \gg 1$ и $b_{\alpha}^{(n)}$ — полуоси эллипсоидального включения с номером $n = \overline{1, N}$. Поскольку объем n -го включения равен $4\pi b_1^{(n)} b_2^{(n)} b_3^{(n)}/3$, объемную концентрацию включений в объеме V_N можно определить величиной

$$C_V = \sum_{n=1}^N \frac{1}{C_n^3} \leq 1. \quad (10)$$

Отметим, что для подобных по форме эллипсоидальных включений значения D_{α}° не зависят от размера включения. Например, D_1° в соответствии с формулой (6) можно представить как функцию одинаковых для таких включений аргументов $\bar{b}_2 = b_2/b_1$ и $\bar{b}_3 = b_3/b_1$ в виде

$$D_1^{\circ} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{d\bar{u}}{(1 + \bar{u}) \sqrt{(1 + \bar{u})(\bar{b}_2^2 + \bar{u})(\bar{b}_3^2 + \bar{u})}}.$$

Для точки, удаленной от каждого из включений на весьма большое расстояние по сравнению со значением B_1 , примем для всех включений $\xi_1 \gg B_1$. Тогда, согласно формуле (9), N весьма удаленных включений, расположенных в объеме V_N в виде эллипсоида с полуосями B_k , вызовут в этой точке возмущение температуры, равное

$$\Delta T_N^* = \sum_{n=1}^N \Delta T_n^* = T_{,1}^{\circ} \xi_1 \sum_{n=1}^N \frac{(1 - \bar{\lambda}_1) D_1^{(n)}}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1) D_1^{\circ}}. \quad (11)$$

Если считать эллипсоид объемом V_N 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 (8) такое же возмущение температуры

$$\Delta T_N^* = T_{,1}^{\circ} \xi_1 \frac{(1 - \tilde{\lambda}_1) D_1^*}{1 + (\tilde{\lambda}_1 - 1) D_1^{\circ}}, \quad (12)$$

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

$$D_1^* = \frac{B_1 B_2 B_3}{2} \int_{\beta_*}^{\infty} \frac{du}{(B_1^2 + u)F(u)}, \quad (13)$$

причем β_* — положительный корень уравнения

$$\frac{\xi_1^2}{B_1^2 + \beta} + \frac{\xi_2^2}{B_2^2 + \beta} + \frac{\xi_3^2}{B_3^2 + 1} = 1, \quad (14)$$

а

$$F(u) = \sqrt{(B_1^2 + u)(B_2^2 + u)(B_3^2 + u)}.$$

Приравняв правые части формул (11) и (12), запишем

$$\frac{(1 - \tilde{\lambda}_1)}{1 + (\tilde{\lambda}_1 - 1)D_1^\circ} = \frac{(1 - \bar{\lambda}_1)}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1)D_1^\circ} \sum_{n=1}^N \frac{D_1^{(n)}}{D_1^*}. \quad (15)$$

Для весьма удаленной точки $|\xi_1| \rightarrow \infty$, что, согласно уравнениям (4) и (14), равносильно $\beta \rightarrow \infty$, $\beta_* \rightarrow \infty$ и стремлению к нулю интегралов $D_1^{(n)}$ и D_1^* в формуле (15). Для раскрытия неопределенности типа $0/0$ используем правило Лопиталю, продифференцировав каждый из этих интегралов по нижнему переменному пределу. В итоге с учетом формул (3) и (13) получим

$$\lim_{\beta, \beta_* \rightarrow \infty} \frac{D_1^{(n)}}{D_1^*} = \frac{1}{C_n^3} \lim_{\beta, \beta_* \rightarrow \infty} \frac{(B_1^2 + \beta_*)F(\beta)}{((b_1^{(n)})^2 + \beta)f(\beta)} = \frac{1}{C_n^3}.$$

Таким образом, формула (15) с учетом равенства (10) примет вид

$$\tilde{\lambda}_1 = \frac{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1)(D_1^\circ + (1 - D_1^\circ)C_V)}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1)D_1^\circ(1 - C_V)}. \quad (16)$$

Аналогичным путем можно найти формулы для $\tilde{\lambda}_2 = \lambda_2^\circ / \lambda_m$ и $\tilde{\lambda}_3 = \lambda_3^\circ / \lambda_m$, где λ_2° и λ_3° — эффективные коэффициенты теплопроводности композита в направлении осей $O\xi_2$ и $O\xi_3$ соответственно, являющиеся вместе с λ_1° главными значениями тензора эффективной теплопроводности композита. В итоге при $\alpha = 1, 2, 3$ имеем

$$\tilde{\lambda}_\alpha = \frac{1 + (\bar{\lambda}_\alpha - 1)(D_\alpha^\circ + (1 - D_\alpha^\circ)C_V)}{1 + (\bar{\lambda}_\alpha - 1)D_\alpha^\circ(1 - C_V)}, \quad (17)$$

что в частном случае изотропных эллипсоидальных включений ($\lambda_\alpha = \lambda_0$) совпадает с соотношением, полученным в [6].

Если включения абсолютно нетеплопроводны ($\lambda_\alpha = 0$), то из формулы (17) следует

$$\tilde{\lambda}_\alpha = \frac{(1 - D_\alpha^\circ)(1 - C_V)}{1 - D_\alpha^\circ(1 - C_V)}. \quad (18)$$

Эта формула применима к материалу с коэффициентом теплопроводности λ_m , содержащему поры с объемной концентрацией C_V . При абсолютно теплопроводных включениях ($\lambda_\alpha \rightarrow \infty$) формула (17) примет вид

$$\tilde{\lambda}_\alpha = \frac{D_\alpha^\circ + (1 - D_\alpha^\circ)C_V}{D_\alpha^\circ(1 - C_V)}. \quad (19)$$

Отметим, что формулы (18) и (19) также совпадают с полученными в [6].

3. Построение двусторонних оценок

Применение двойственной вариационной формулировки задачи стационарной теплопроводности в неоднородном теле [7, 8] при использовании достаточно простых допустимых для альтернативных функционалов распределений температуры и вектора плотности теплового потока позволяет получить двусторонние оценки эффективных коэффициентов теплопроводности рассматриваемого композита в виде

$$\tilde{\lambda}_\alpha^- = \frac{1}{1 - C_V + C_V/\bar{\lambda}_\alpha} \leq \tilde{\lambda}_\alpha \leq 1 - C_V + \bar{\lambda}_\alpha C_V = \tilde{\lambda}_\alpha^+. \quad (20)$$

Нижняя ($\tilde{\lambda}_\alpha^-$) и верхняя ($\tilde{\lambda}_\alpha^+$) оценки совпадают между собой и со значениями, определяемыми формулой (17), при значениях $C_V = 0$ и $C_V = 1$ объемной концентрации включений. Но при промежуточных значениях C_V разность $\Delta\tilde{\lambda}_\alpha = \tilde{\lambda}_\alpha^+ - \tilde{\lambda}_\alpha^-$ возрастает от нуля по мере отклонения параметра $\bar{\lambda}_\alpha$ от единицы, что дает основание предполагать при этом и возрастание возможной погрешности формулы (17). Отметим, что аналогичная тенденция выявлена и в случае композита с изотропными эллипсоидальными включениями [6].

С использованием неравенств (20) оценим наибольшую возможную относительную погрешность среднего значения $\tilde{\lambda}_\alpha^\circ = (\tilde{\lambda}_\alpha^+ + \tilde{\lambda}_\alpha^-)/2$ при промежуточных значениях C_V , которую представим в виде

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\Delta\tilde{\lambda}_\alpha}{2\tilde{\lambda}_\alpha^\circ} = 1 - \frac{1}{1 + C_V(1 - C_V)(\bar{\lambda}_\alpha + 1/\bar{\lambda}_\alpha - 2)/2}. \quad (21)$$

На рис. 1 приведены зависимости ε_α от C_V при различных значениях $\bar{\lambda}_\alpha > 1$ (кривые для пар значений $\bar{\lambda}_\alpha$ и $1/\bar{\lambda}_\alpha$ совпадают). Наибольших значений $\varepsilon_\alpha = 1 - 1/(1 + (\bar{\lambda}_\alpha + 1/\bar{\lambda}_\alpha - 2)/8)$ относительная погрешность достигает при $C^\circ = 0,5$.

Использованные для получения двусторонних оценок достаточно простые допустимые распределения температуры и плотности теплового потока учитывают лишь объемное содержание эллипсоидальных включений. Поэтому для всех трех направлений координатных осей представленные в формулах (20) и (21) оценки эффективных коэффициентов теплопроводности композита и возможной относительной погрешности среднего значения этих оценок идентичны.

Рис. 1. Графики зависимости ε_α от C_V при различных значениях $\bar{\lambda}_\alpha > 1$

Заключение

Построенная математическая модель переноса тепловой энергии в композите с одинаково ориентированными анизотропными включениями эллипсоидальной формы позволила найти эффективные коэффициенты теплопроводности такого композита. Для оценки возможной погрешности полученных результатов применена двойственная формулировка вариационной задачи стационарной теплопроводности. Эти результаты могут быть использованы для прогноза эффективных коэффициентов теплопроводности композитов, модифицированных наноструктурными элементами (в том числе углеродными нанотрубками).

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

Список литературы

1. Кац Е.А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры. Родословная форм и идей. М.: Изд-во ЛКИ, 2008. 296 с.
2. Научные 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. Ван Флек Л. Теоретическое и прикладное материаловедение: Пер.с англ. М.: Атомиздат, 1975. 472 с.
4. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел: Пер.с англ. М.: Наука, 1964. 488 с.
5. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1963. 248 с.
6. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Эффективные коэффициенты теплопроводности композита с эллипсоидальными включениями // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2012. № 3. С. 76–85.
7. Зарубин В.С. Инженерные методы решения задач теплопроводности. М.: Энергоатомиздат, 1983. 328 с.
8. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.

Effective thermal conductivity coefficient of composite with anisotropic ellipsoidal inclusions

04, April 2013

DOI: 10.7463/0413.0541050

Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N.

Bauman Moscow State Technical University
105005, Moscow, Russian Federation

fn2@bmstu.ru

A mathematical model of heat transfer in a composite material with identically oriented anisotropic ellipsoidal inclusions was created. Formulas for calculating the effective thermal conductivity of composite materials, which are anisotropic with respect to the property of thermal conductivity, were obtained on the basis of developed mathematical model. To estimate the possible error of the results the dual formulation of the variational problem of stationary heat conduction in a heterogeneous solid body was applied. These results can be used to predict the effective thermal conductivity of the composite materials with ellipsoidal inclusions, which are among others nanostructured elements (including carbon nanotubes). Obtained formulas could be used for estimating electric conductivity of composite materials with identically oriented anisotropic ellipsoidal inclusions due to electro thermal analogy .

References

1. Kats E.A. *Fullereny, uglerodnye nanotrubki i nanoklastery. Rodoslovnaia form i idei* [Fullerenes, carbon nanotubes and nanoclusters. Genealogy of forms and ideas]. Moscow, LKI Publ., 2008. 296 p.
2. Arzamasov B.N., Krashennnikov A.I., Pastukhova Zh.P., Rakhshtadt A.G. *Nauchnye osnovy materialovedeniia* [Scientific foundations of Materials Science]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 1994. 366 p.
3. Van Vlack L.H. *Elements of Materials Science and Engineering*. 2nd ed. Addison-Wesley Publishing Co., Massachusetts, 1964. 600 p. (Russ. ed.: Van Flek L. *Teoreticheskoe i prikladnoe materialovedenie*. Moscow, Atomizdat, 1975. 472 p.)

4. Carslaw H.S., Jaeger J.C. *Conduction of Heat in Solids*. 2nd ed. Oxford University Press, 1959. (Russ. ed.: Karslou G., Eger D. *Teploprovodnost' tverdykh tel*. Moscow, Nauka, 1964. 488 p.)
5. Eshelby J.D. *The continuum theory of lattice defects*. In: Seitz F., Turnbull D., eds. *Progress in Solid State Physics*. Vol. 3. New York, Academic Press, 1956, pp. 79–144. (Russ. ed.: Eshelbi Dzh. *Kontinual'naiia teoriia dislokatsii*. Moscow, Izd-vo inostrannoi literatury, 1963. 248 p.)
6. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Effektivnye koeffitsienty teploprovodnosti kompozita s ellipsoidal'nymi vklucheniiami [Effective coefficients of thermal conductivity of a composite with ellipsoidal inclusions]. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki* [Bulletin of the Bauman MSTU. Ser. Natural science], 2012, no. 3, pp. 76–85.
7. Zarubin V.S. *Inzhenernye metody resheniia zadach teploprovodnosti* [Engineering methods for solving problems of thermal conductivity]. Moscow, Energoatomizdat, 1983. 328 p.
8. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Matematicheskie modeli mekhaniki i elektrodinamiki sploshnoi sredy* [Mathematical models of mechanics and electrodynamics of continuous media]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2008. 512 p.