

# НАУКА и ОБРАЗОВАНИЕ

Эл № ФС77 - 48211. Государственная регистрация №0421200025. ISSN 1994-0408

ЭЛЕКТРОННЫЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

## Сравнительный анализ оценок эффективного коэффициента теплопроводности поликристаллического материала

# 03, март 2013

DOI: 10.7463/0313.0541029

Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н.

УДК 536.2

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

[fn2@bmstu.ru](mailto:fn2@bmstu.ru)

### Введение

Существует несколько подходов к построению математической модели поликристаллического материала (поликристалла), предназначеннной для оценок его эффективного коэффициента теплопроводности. В силу электротепловой аналогии [1] такую модель можно использовать и для получения оценок электропроводности поликристалла. Проведем сравнительный количественный анализ оценок эффективного коэффициента теплопроводности применительно к поликристаллу, состоящему из хаотически ориентированных анизотропных кристаллических зерен с одинаковой кристаллической решеткой и главными значениями  $\lambda_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) тензора теплопроводности.

В первом приближении каждое зерно в поликристалле можно рассматривать как монокристалл, т.е. в его объеме ориентацию кристаллографических осей допустимо считать неизменной. Для монокристаллов с кубической кристаллической решеткой (объемноцентрированной или гранецентрированной) главные значения тензора теплопроводности равны между собой [1], т.е. такие зерна и состоящий из них поликристалл изотропны по отношению к свойству теплопроводности. Для всех остальных типов кристаллических решеток это равенство в общем случае не имеет места и поэтому зерна с такой кристаллической структурой анизотропны по отношению к этому свойству. Однако поликристалл, состоящий из хаотически ориентированных анизотропных зерен, будет макроскопически изотропным с эффективным коэффициентом теплопроводности  $\lambda$ , зависящим от значений  $\lambda_k$ .

## 1. Процедуры осреднения

В отдельно взятом кристаллическом зерне связь между составляющими  $q_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) вектора плотности теплового потока и составляющими  $G_i = \partial T / \partial x_i$  градиента температурного поля во внешней ортогональной системе координат  $Ox_1x_2x_3$  (в «макроосиях»  $Ox_i$ ) устанавливают соотношения (здесь и далее использовано правило суммирования по повторяющимся латинским индексам)

$$q_i = \lambda_{ij} G_j \quad \text{или} \quad G_i = \rho_{ij} q_j, \quad j = 1, 2, 3, \quad (1)$$

где  $\lambda_{ij}$  и  $\rho_{ij}$  — компоненты тензоров теплопроводности и термического сопротивления зерна в этой системе координат. Эти тензоры являются взаимно обратными и для их компонентов справедливо равенство  $\lambda_{ik}\rho_{kj} = \delta_{ij}$ , где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера ( $\delta_{ij} = 1$  при  $i = j$  и  $\delta_{ij} = 0$  при  $i \neq j$ ). Главные значения тензора термического сопротивления имеют вид  $\rho_k = 1/\lambda_k$ .

Аналогичную равенствам (1) связь между постоянными в некотором содержащем достаточно большое число зерен представительном объеме поликристалла «макроскопическими» значениями  $q_i^*$  и  $G_i^* = \partial T^* / \partial x_i$  определяют формулы

$$q_i^* = \lambda G_i^* \quad \text{или} \quad G_i^* = \rho q_i^*, \quad (2)$$

где  $\rho = 1/\lambda$  — эффективный коэффициент термического сопротивления этого материала.

При хаотической ориентации кристаллических зерен локальные значения  $q_i$  и  $G_i$  в каждом зерне случайны и, вообще говоря, различны, но их средние по объему поликристалла значения  $\langle q_i \rangle$  и  $\langle G_i \rangle$  должны совпадать соответственно со значениями  $q_i^*$  и  $G_i^*$ , т.е. с учетом равенств (1)

$$\langle q_i \rangle = \langle \lambda_{ij} G_j \rangle = q_i^* \quad \text{и} \quad \langle G_i \rangle = \langle \rho_{ij} q_j \rangle = G_i^*. \quad (3)$$

Если ввести локальные отклонения (флуктуации)  $q'_i = q_i - q_i^*$ ,  $G'_i = G_i - G_i^*$ ,  $\lambda'_{ij} = \lambda_{ij} - \lambda\delta_{ij}$  и  $\rho'_{ij} = \rho_{ij} - \rho\delta_{ij}$ , то, учитывая, что  $\langle q'_i \rangle = \langle G'_i \rangle = 0$ , равенства (3) можно представить в виде

$$q_i^* = \langle \lambda_{ij} \rangle G_j^* + \langle \lambda'_{ij} G'_j \rangle \quad \text{и} \quad G_i^* = \langle \rho_{ij} \rangle q_j^* + \langle \rho'_{ij} q'_j \rangle. \quad (4)$$

Из сравнения соотношений (2) и (4) следует, что эффективные коэффициенты теплопроводности  $\lambda$  и термического сопротивления  $\rho$  поликристалла, вообще говоря, не совпадают со средними значениями соответственно  $\langle \lambda_{ij} \rangle$  и  $\langle \rho_{ij} \rangle$  этих коэффициентов. Различие вызвано тем, осреднение компонентов тензоров теплопроводности и термического сопротивления происходит без учета взаимного влияния соседних кристаллических зерен на локальные распределения температуры и плотности теплового потока. В связи с этим можно считать, что вторые слагаемые в правых частях соотношений (4) являются поправками, интегрально учитывающими такое влияние [2].

Для нахождения средних значений  $\langle \lambda_{ij} \rangle$  и  $\langle \rho_{ij} \rangle$  необходимо предварительно задать ориентацию совпадающих между собой главных осей тензоров теплопроводности и термического сопротивления в отдельно взятом кристаллическом зерне («микроосей») относительно «макроосей» системы координат  $Ox_1x_2x_3$ . Этую ориентацию можно задать матрицей направляющих косинусов

$$(a_{ik}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Поскольку элементы  $i$ -й строки этой матрицы задают составляющие в «микросях» единичного вектора (орта)  $x_i$  «макроосей», из условия ортогональности ортов  $x_i$  и  $x_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) при  $i \neq j$  получим равенство  $a_{ik}a_{jk} = \delta_{ij}$ . Отсюда, в частности, следует, что сумма квадратов элементов в строке матрицы (5) равна единице, т.е.  $a_{\alpha l}a_{\alpha l} = 1$ ,  $\alpha = k$ ,  $l = 1, 2, 3$ .

Таким образом, из девяти значений  $a_{ik}$  элементов матрицы (5) независимыми будут лишь три. Это связано, в частности, с тем, что любую ориентацию «микроосей» относительно «макроосей» можно задать тремя угловыми координатами Эйлера:  $\varphi$  — угол собственного вращения,  $\psi$  — угол прецессии и  $\vartheta$  — угол нутации [3]. Углы  $\psi$  и  $\vartheta$  задают направление одной из «микроосей» (на рис. 1 оси  $O'\xi_3$ ) относительно «макроосей», а угол  $\varphi$ , отсчитываемый от положения меридиана с долготой  $\psi$  на сфере единичного радиуса, задает поворот кристаллической решетки вокруг этой «микрооси».

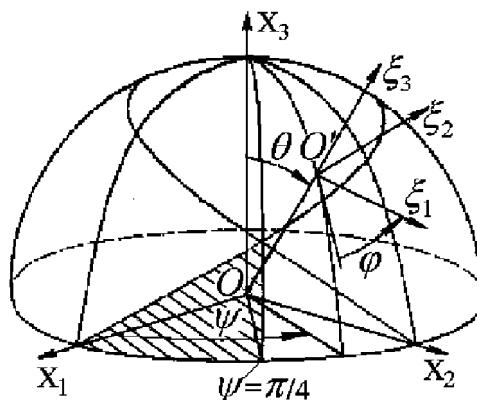


Рис. 1. Ориентация «микроосей» относительно «макроосей»

Элементы матрицы (5) выражают через углы Эйлера следующим образом [4]:

$$\begin{aligned} a_{11} &= \cos \varphi \cos \psi \cos \vartheta - \sin \varphi \sin \psi, \\ a_{12} &= -\cos \varphi \cos \psi \cos \vartheta - \cos \psi \sin \varphi, \\ a_{13} &= \cos \varphi \sin \vartheta, \quad a_{21} = \cos \psi \cos \vartheta \sin \varphi, \\ a_{22} &= -\cos \vartheta \sin \varphi \sin \psi + \cos \varphi \cos \psi, \quad a_{23} = \sin \varphi \sin \vartheta, \\ a_{31} &= -\cos \psi \sin \vartheta, \quad a_{32} = \sin \psi \sin \vartheta, \quad a_{33} = \cos \vartheta. \end{aligned} \quad (6)$$

Выделим в поликристалле объем с достаточно большим числом зерен  $N_\Sigma$ , имеющих случайную (хаотическую) ориентацию «микроосей» относительно «макроосей». Для  $N_\Sigma \rightarrow \infty$  можно считать, что при случайной ориентации любое расположение «микроосей» равновероятно и относительная плотность  $\eta_0$  распределения микрообъемов поликристалла по возможным ориентациям «микроосей» зерен имеет постоянное значение. Это означает, что плотность распределения точек пересечения единичной сферы на рис. 1 «микроосью»  $O'\xi_3$  постоянна по ее поверхности, а совокупность микрообъемов, для которых эта «микроось» расположена в пределах элементарного телесного угла  $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\psi$ , равномерно распределена по углу  $\varphi$ . Тогда в данной совокупности доля объема поликристалла, для которой «микроось»  $O'\xi_1$  находится в секторе с углом  $d\varphi$ , равна  $\eta_0 d\Omega d\varphi$ . После интегрирования по всем возможным ориентациям получим

$$\int_{\Omega} d\Omega \int_0^{2\pi} \eta_0 d\varphi = \eta_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta = 8\pi^2 \eta_0 = 1.$$

Отсюда следует, что  $\eta_0 = 1/(8\pi^2)$ .

Если каждый микрообъем обладает каким–либо свойством, выражаемым скалярной величиной  $F(\varphi, \psi, \vartheta)$ , не зависящей в пределах рассматриваемого объема поликристалла от координат  $x_i$ , то среднее значение этой величины для такого однородного поликристалла со случайной ориентацией зерен будет равно [1]

$$\langle F \rangle = \eta_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} F(\varphi, \psi, \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta. \quad (7)$$

При осреднении характеристик зерен, выражаемых векторной величиной с компонентами  $F'_k(\varphi, \psi, \vartheta)$ , заданными в «микроосях»  $O'\xi_k$ , необходимо предварительно перевести эти компоненты в «макрооси»  $Ox_i$  по формуле

$$F_i(\varphi, \psi, \vartheta) = a_{ik} F'_k(\varphi, \psi, \vartheta),$$

а затем по аналогии с формулой (7) записать

$$\langle F_i \rangle = \eta_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} a_{ik} F'_k(\varphi, \psi, \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta.$$

Соответственно операцию осреднения характеристики, выражаемой тензором второго ранга с компонентами  $F'_{kl}(\varphi, \psi, \vartheta)$ , можно представить в виде

$$\langle F_{ij} \rangle = \eta_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} a_{ik} a_{jl} F'_{kl}(\varphi, \psi, \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta. \quad (8)$$

Отметим, что в случае кристаллических зерен с кубической кристаллической решеткой область интегрирования можно сузить до одного из 48-ми одинаковых сферических треугольников (заштрихован на рис. 1). Это позволяет сократить область задания зависимостей параметров зерен от углов Эйлера [1].

## 2. Оценки среднего значения эффективного коэффициента теплопроводности

В рассматриваемом случае главные значения тензоров теплопроводности и термического сопротивления не зависят от углов Эйлера, а для реализации в формуле (8) правила суммирования по повторяющимся латинским индексам эти значения следует представить в тензорной записи:  $\lambda_1$  заменить на  $\lambda_{11}$ ,  $\rho_1$  на  $\rho_{11}$ ,  $\lambda_2$  на  $\lambda_{22}$  и т.д. Тогда, согласно этой формуле, после выполнения суммирования получим

$$\langle \lambda_1 \rangle = \eta_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} (\lambda_1 a_{11}^2 + \lambda_2 a_{12}^2 + \lambda_3 a_{13}^2) \sin \vartheta d\vartheta$$

и аналогичные равенства для остальных осредненных значений  $\lambda_k$  и  $\rho_k$ . Таким образом, осреднение в данном случае сведено к вычислению интегралов, подынтегральные функции которых содержат квадраты направляющих косинусов. Например, используя последнее равенство (6), находим

$$\eta_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} a_{33}^2 \sin \vartheta d\vartheta = \eta_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi} \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = \frac{1}{3}.$$

Непосредственными вычислениями можно убедиться, что для всех направляющих косинусов результат интегрирования будет одинаковым. В итоге запишем

$$\langle \lambda_k \rangle = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3}{3} \quad \text{и} \quad \langle \rho_k \rangle = \frac{1/\lambda_1 + 1/\lambda_2 + 1/\lambda_3}{3}.$$

Отсюда, пренебрегая в равенствах (4) вторыми слагаемыми в правых частях, для эффективного коэффициента теплопроводности поликристалла с учетом соотношений (2) получим две оценки

$$\lambda'_u = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3}{3} \quad \text{и} \quad \lambda'_d = \frac{3}{1/\lambda_1 + 1/\lambda_2 + 1/\lambda_3}. \quad (9)$$

Несложно показать, что  $\lambda'_u / \lambda'_d \geq 1$ , но  $\lambda'_u / \lambda'_d = 1$  только в случае  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ , когда кристаллические зерна изотропны. Действительно,

$$\frac{\lambda'_u}{\lambda'_d} = \frac{3 + \lambda_1/\lambda_2 + \lambda_2/\lambda_1 + \lambda_2/\lambda_3 + \lambda_3/\lambda_2 + \lambda_3/\lambda_1 + \lambda_1/\lambda_3}{9} \geq 1,$$

поскольку сумма взаимно обратных положительных чисел, отличных от единицы, больше двух.

Отметим, что соотношения (9) можно получить формальным путем [5], используя равенство первых инвариантов рассматриваемых тензоров для поликристалла и отдельно взятого кристаллического зерна, учитывая, что для тензора второго ранга первый инвариант равен сумме диагональных компонентов [3]. Из равенства вторых инвариантов этих тензоров следует

$$\lambda''_u = \sqrt{\frac{\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1}{3}} \quad \text{и} \quad \lambda''_d = \sqrt{\frac{3\lambda_1\lambda_2\lambda_3}{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3}}, \quad (10)$$

причем  $\lambda''_u/\lambda''_d \geq 1$ . Наконец, равенство третьих инвариантов дает одинаковые значения, равные

$$\lambda''' = \sqrt[3]{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}. \quad (11)$$

Покажем, что

$$\lambda'_u \geq \lambda''_u \geq \lambda''' \geq \lambda''_d \geq \lambda'_d. \quad (12)$$

Действительно, согласно первым равенствам (9) и (10),

$$\left(\frac{\lambda'_u}{\lambda''_u}\right)^2 = \frac{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)^2}{3(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1)} = 1 + \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + (\lambda_2 - \lambda_3)^2 + (\lambda_3 - \lambda_1)^2}{6(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1)} \geq 1,$$

а из первого равенства (10) и формулы (11) следует

$$\left(\frac{\lambda''_u}{\lambda'''}\right)^2 = \frac{2(\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1)}{6(\lambda_1\lambda_2\lambda_3)^{2/3}}.$$

Числитель в правой части этого равенства можно интерпретировать как площадь поверхности прямоугольного параллелепипеда с ребрами, пропорциональными значениям  $\lambda_k$ , а знаменатель — как степенную функцию объема этого параллелепипеда. Условие  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$  соответствует квадрату и при этом  $\lambda''_u/\lambda''' = 1$ . Известно, что при одинаковых объемах квадрат имеет наименьшую площадь поверхности по сравнению с любым параллелепипедом, т.е. при нарушении указанного условия  $\lambda''_u/\lambda''' \geq 1$ . С учетом формулы (11) и второго равенства (10) запишем

$$\left(\frac{\lambda'''}{\lambda''_d}\right)^2 = \frac{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)/3}{\sqrt[3]{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}}.$$

Числитель правой части этого равенства является средним арифметическим значений  $\lambda_k$ , которое, согласно неравенству Коши [6], не меньше стоящего в знаменателе среднего геометрического этих значений. Поэтому  $\lambda'''/\lambda''_d \geq 1$ . Наконец, из вторых равенств (9) и (10) с

учетом величины суммы взаимно обратных положительных чисел следует

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_d''}{\lambda_d'} &= \left( \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{\lambda_3} \right)^2 \frac{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}{3(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)} = \\ &= \frac{\lambda_1(4 + \lambda_2/\lambda_3 + \lambda_3/\lambda_2) + \lambda_2(4 + \lambda_3/\lambda_1 + \lambda_1/\lambda_3) + \lambda_3(4 + \lambda_1/\lambda_2 + \lambda_2/\lambda_1)}{6(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)} \geqslant 1. \end{aligned}$$

Итак, цепочка неравенств (12) определяет последовательность оценок среднего значения  $\bar{\lambda}$  коэффициента теплопроводности поликристалла. Двойственная вариационная формулировка задачи стационарной теплопроводности [3] позволяет установить, что первое и второе равенства (10) являются соответственно верхней  $\lambda_+$  и нижней  $\lambda_-$  оценками значения  $\bar{\lambda}$ , и получить двусторонние оценки эффективного коэффициента теплопроводности поликристалла.

### 3. Построение двусторонних оценок

Для построения двусторонних оценок ограниченную поверхностью  $S$  область  $V$ , занятую поликристаллом, выберем в виде прямого цилиндра с площадью  $S_0$  каждого из параллельных оснований, одно из которых соответствует плоскости  $x_1 = 0$ , а второе — плоскости  $x_1 = H$ , т. е. высота цилиндра равна  $H$ . Боковую поверхность цилиндра примем идеально теплоизолированной, температуру основания при  $x_1 = 0$  положим равной нулю, а на втором основании зададим температуру  $G_1 H$ . В качестве допустимого для минимизируемого функционала [7]

$$J[T] = \frac{1}{2} \int_V \frac{\partial T}{\partial x_j} \lambda_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} dV$$

примем линейное по высоте цилиндра распределения температуры с постоянной составляющей градиента  $G_1$ . Тогда получим

$$J_1[T] = \frac{G_1^2}{2} \int_V \lambda_{11} dV, \quad (13)$$

где  $\lambda_{11}$  — компонента тензора теплопроводности кристаллических зерен в «макроосиях»  $Ox_i$ . Поскольку пространственная ориентация главных осей тензора теплопроводности в хаотически ориентированных кристаллических зернах равновероятна, интеграл в соотношении (13) принимает значение [8]  $\lambda_{ij} \delta_{ij} V / 3 = (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3) V / 3$ .

Для максимизируемого функционала [7]

$$I[\mathbf{q}] = -\frac{1}{2} \int_V q_i \rho_{ij} q_j dV - \int_S T \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS,$$

где  $\mathbf{n}$  — единичный вектор внешней нормали к поверхности  $S$ , в качестве допустимого распределения вектора плотности теплового потока  $\mathbf{q}$  примем постоянное значение  $q_1 = -\lambda G_1$  единственной составляющей этого вектора, перпендикулярной основаниям цилиндра. В этом случае будем иметь

$$I_1[q] = \lambda \frac{G_1^2}{2} H S_0 \frac{(\lambda G_1)^2}{2} \int_V \rho_{11} dV. \quad (14)$$

где  $\rho_{11}$  — компонента тензора термического сопротивления зерен в «макроосиях»  $Ox_i$ . Интеграл в равенстве (14) в силу равновероятной ориентации главных осей тензора теплопроводности в кристаллических зернах принимает значение [8]  $\rho_{ij}\delta_{ij}V/3 = (1/\lambda_1 + 1/\lambda_2 + 1/\lambda_3)V/3$ .

Принятые допустимые распределения температуры и плотности теплового потока 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  $J_0 = (\lambda/2)G_1^2 H S_0$  минимизируемого функционала  $J[T]$  для однородной области  $V$  с искомым коэффициентом теплопроводности  $\lambda$ . Тогда с учетом формулы (13) из условия  $J_1[T] \geq J_0$  получим верхнюю оценку

$$\lambda_+ = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3}{3} \geq \lambda, \quad (15)$$

а при использовании формулы (14) из условия  $I_1[q] \leq J_0$  найдем нижнюю оценку

$$\lambda_- = \frac{3}{1/\lambda_1 + 1/\lambda_2 + 1/\lambda_3} \leq \lambda \quad (16)$$

значения  $\lambda$ . Действительно, сопоставление соотношений (9), (15) и (16) показывает, что  $\lambda'_u = \lambda_+$  и  $\lambda'_d = \lambda_-$ .

Двусторонние оценки (15) и (16) можно сблизить, если воспользоваться вариационным принципом Хашина — Штрикмана [9]: при условии  $\lambda_3 \geq \lambda_2 \geq \lambda_1$

$$\begin{aligned} \lambda_+ \geq \lambda_+^\circ = \lambda_1 \frac{16\lambda_1^2 + 7\lambda_2\lambda_3 + 8\lambda_1(\lambda_2 + \lambda_3)}{16\lambda_1^2 + \lambda_2\lambda_3 + 5\lambda_1(\lambda_2 + \lambda_3)} \geq \lambda \geq \\ \geq \lambda_3 \frac{4\lambda_3^2 + 8(\lambda_1 + \lambda_2)\lambda_3 + 7\lambda_1\lambda_2}{16\lambda_3^2 + 5(\lambda_1 + \lambda_2)\lambda_3 + \lambda_1\lambda_2} = \lambda_-^\circ \geq \lambda_-. \end{aligned} \quad (17)$$

#### 4. Учет взаимного влияния кристаллических зерен

Взаимное влияние соседних кристаллических зерен на локальные распределения температуры и плотности теплового потока, отражаемое вторыми слагаемыми в правых частях формул (4), можно учесть в рамках корреляционного приближения теории случайных функций [10]. В предположении однородности в поликристалле векторного поля градиента тем-

пературы учет этого влияния приводит для эффективного коэффициента теплопроводности к соотношению [9]

$$\lambda_c = \frac{4\lambda'_u}{3} - \frac{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2}{9\lambda'_u}. \quad (18)$$

Ясно, что в случае изотропных кристаллических зерен ( $\lambda_k = \lambda$ ) отсюда следует  $\lambda_c = \lambda'_u = \lambda$ .

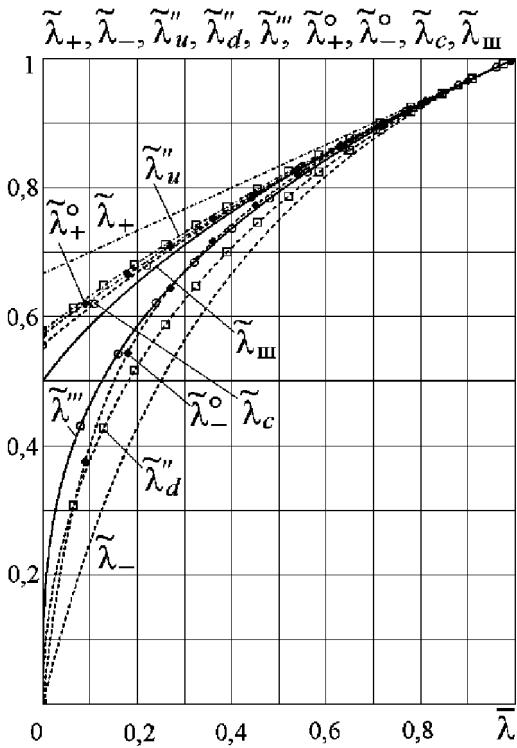
При тепловом взаимодействии кристаллического зерна эллипсоидальной (в частности, шаровой) формы и однородного поликристалла векторное поле градиента температуры в зерне однородно [11]. Это позволяет построить математическую модель, учитывающую это взаимодействие, что дает возможность получить дополнительные оценки эффективного коэффициента теплопроводности [1]. Если в качестве среднестатистической формы зерен принять шар, то такая модель приводит к неполному кубическому уравнению [12]

$$4\lambda^3 - (\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1)\lambda - \lambda_1\lambda_2\lambda_3 = 0. \quad (19)$$

Согласно правилам Штурма и Декарта [13], все корни этого уравнения при  $\lambda_k > 0$  являются действительными, но среди них лишь один положительный, удовлетворяющий физическому смыслу.

Для тригональной, тетрагональной и гексагональной кристаллографических систем два главных значения тензора теплопроводности совпадают [14]. Применимельно к поликристаллу, кристаллические зерна которого принадлежат одной из таких систем, рассмотрим для определенности случай  $\lambda_1 = \lambda_2 \geq \lambda_3$ . На рис. 2 с использованием полученных выше соотношений построены графики зависимостей безразмерных значений оценок  $\tilde{\lambda} = \lambda/\lambda_1$  от безразмерного аргумента  $\bar{\lambda} = \lambda_3/\lambda_1$ . При этом штрихпунктирная и штриховая линии соответствуют верхней  $\tilde{\lambda}_+ = \lambda'_u/\lambda_1 = \lambda_+/ \lambda_1$  и нижней  $\tilde{\lambda}_- = \lambda'_d/\lambda_1 = \lambda_- / \lambda_1$  оценкам, определяемым формулами (9), (15) и (16), а такие же линии со светлыми квадратами являются графиками зависимостей соответственно  $\tilde{\lambda}_u'' = \lambda_u''/\lambda_1$  и  $\tilde{\lambda}_d'' = \lambda_d''/\lambda_1$ , построенными по формулам (10). Сплошная кривая со светлыми кружками построена по формуле (11) и представляет зависимость  $\tilde{\lambda}''' = \lambda'''/\lambda_1$ . Для построения графиков зависимостей  $\tilde{\lambda}_+^\circ = \lambda_+^\circ/\lambda_1$ ,  $\tilde{\lambda}_-^\circ = \lambda_-^\circ/\lambda_1$  и  $\tilde{\lambda}_c = \lambda_c/\lambda_1$  (соответственно штрихпунктирная и штриховая линии с ромбами и штриховая кривая со светлыми кружками) использованы соотношения (17) и (18). Наконец, сплошная кривая определяет зависимость  $\tilde{\lambda}_{\text{ш}} = \lambda_{\text{ш}}/\lambda_1$ , где  $\lambda_{\text{ш}}$  — положительный корень уравнения (19).

Из рис. 2 видно, что все кривые находятся в пределах полосы, ограниченной безразмерными двусторонними оценками  $\tilde{\lambda}_+$  и  $\tilde{\lambda}_-$ , но за пределы полосы, ограниченной более узкими безразмерными двусторонними оценками  $\tilde{\lambda}_+^\circ$  и  $\tilde{\lambda}_-^\circ$  во всем интервале изменения аргумента  $\bar{\lambda}$  выходит график зависимости  $\tilde{\lambda}_u''$ , при  $\bar{\lambda} \geq 0,07$  — график зависимости  $\tilde{\lambda}_d''$ , а при  $\bar{\lambda} \geq 0,3$  —



**Рис. 2.** Зависимости безразмерных оценок эффективного коэффициента теплопроводности от параметра  $\bar{\lambda}$

*Таблица I*

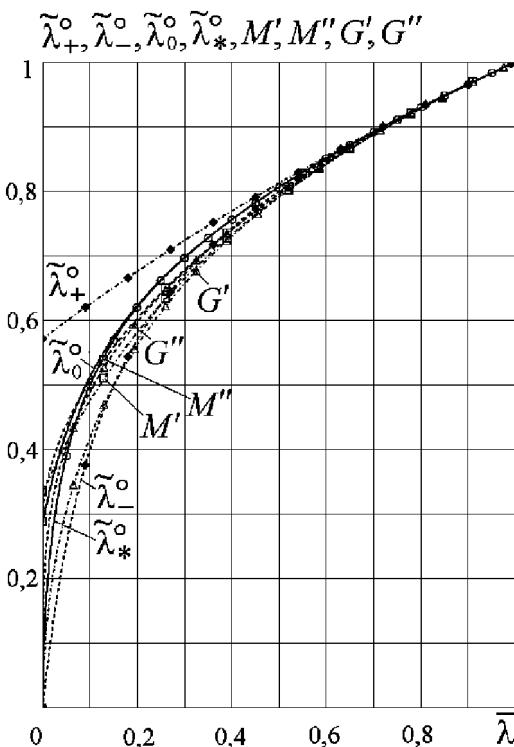
**Сравнение оценок эффективного коэффициента теплопроводности при различных значениях  $\bar{\lambda}$**

$\bar{\lambda}$	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	0,99
$\tilde{\lambda}_+$	0,83333	0,86667	0,90000	0,93333	0,966667	0,99666667
$\tilde{\lambda}^o_+$	0,81250	0,85366	0,89286	0,93023	0,965910	0,99665924
$\tilde{\lambda}''_u$	0,81650	0,85635	0,89443	0,93095	0,966092	0,99666109
$\tilde{\lambda}'''_u$	0,79370	0,84343	0,88790	0,92832	0,965489	0,99665549
$\tilde{\lambda}_c$	0,81111	0,85299	0,89259	0,93016	0,965900	0,99665923
$\tilde{\lambda}_{ш}$	0,80902	0,85208	0,89226	0,93007	0,965891	0,99665923
$\tilde{\lambda}''_d$	0,77460	0,83205	0,88192	0,92582	0,964901	0,99664991
$\tilde{\lambda}^o_-$	0,80000	0,84828	0,89091	0,92973	0,965854	0,99665919
$\tilde{\lambda}_-$	0,75000	0,81818	0,87500	0,92308	0,964286	0,99664430

и график зависимости  $\tilde{\lambda}'''$  от  $\bar{\lambda} = \lambda_3/\lambda_1$ . Масштаб рисунка не позволяет выявить взаимное расположение графиков в окрестности значения  $\bar{\lambda} = 1$ . В табл. 1 представлены значения рассматриваемых оценок при  $\bar{\lambda} \geq 0,5$ . Полученные результаты дают основание в дальнейшем наряду с двусторонними оценками  $\tilde{\lambda}^o_+$  и  $\tilde{\lambda}^o_-$  рассматривать как достоверные лишь оценки  $\tilde{\lambda}_c$  и  $\tilde{\lambda}_{ш}$ .

## 5. Средние арифметические и средние геометрические значения

Вместе с тем при некоторых сочетаниях значений  $\lambda_1 = \lambda_2$  и  $\lambda_3$  близкие к экспериментальным данным значения коэффициента теплопроводности дают средние арифметические и средние геометрические полученных выше оценок средних значений этого коэффициента, в том числе и оценок  $\tilde{\lambda}_u''$  и  $\tilde{\lambda}_d''$  [2]. На рис. 3 приведены графики зависимостей от  $\bar{\lambda}$  более узких безразмерных двусторонних оценок  $\tilde{\lambda}_+^\circ$  и  $\tilde{\lambda}_-^\circ$  (соответственно штрихпунктирная и штриховая кривые с ромбами), их полусуммы  $\tilde{\lambda}_0^\circ$  (сплошная кривая) и их среднего геометрического значения  $\tilde{\lambda}_*^\circ = \sqrt{\tilde{\lambda}_+^\circ \tilde{\lambda}_-^\circ}$  (сплошная кривая со светлыми кружками), а также зависимости средних арифметических  $M' = (\lambda'_u + \lambda'_d)/(2\lambda_1)$ ,  $M'' = (\lambda''_u + \lambda''_d)/(2\lambda_1)$  (соответственно штрихпунктирная и штриховая линии со светлыми квадратами) и средних геометрических  $G' = \sqrt{\lambda'_u \lambda'_d}$ ,  $G'' = \sqrt{\lambda''_u \lambda''_d}$  (соответственно штрихпунктирная и штриховая линии со светлыми треугольниками) значений  $\tilde{\lambda}'_u$ ,  $\tilde{\lambda}'_d$  и  $\tilde{\lambda}''_u$ ,  $\tilde{\lambda}''_d$ .



**Рис. 3.** Зависимости безразмерных средних значений эффективного коэффициента теплопроводности от параметра  $\bar{\lambda}$

Построенные на рис. 3 графики и значения их ординат при  $\bar{\lambda} \geq 0,5$  (табл. 2) позволяют рассматривать как достоверные лишь оценки  $\tilde{\lambda}_0^\circ$  и  $\tilde{\lambda}_*^\circ$ , которые практически совпадают при  $\bar{\lambda} \geq 0,2$  (см. рис. 3). Таким образом, двусторонние оценки полученные при достаточно простых допустимых для минимизируемого и максимизируемого функционалов распределениях температуры и плотности теплового потока, дают возможность вычислить значения средних арифметического и геометрического, которые можно считать при-

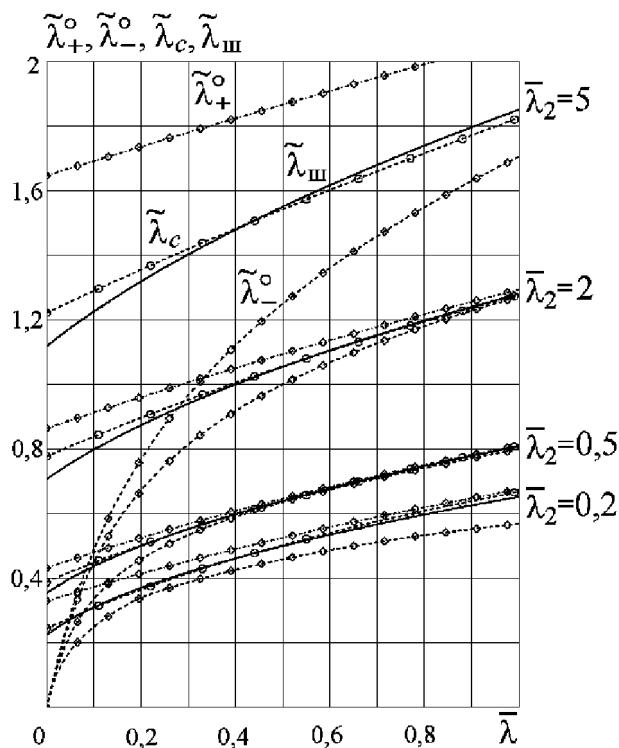
емлемыми оценками эффективного коэффициента теплопроводности поликристаллического материала.

Таблица 2

**Сравнение оценок среднего значения эффективного коэффициента теплопроводности при различных значениях  $\bar{\lambda}$**

$\bar{\lambda}$	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	0,99
$\tilde{\lambda}_+^o$	0,81250	0,85366	0,89286	0,93023	0,965910	0,99665924
$\tilde{\lambda}_0^o$	0,80625	0,85097	0,89188	0,92998	0,965881	0,99665922
$\tilde{\lambda}_*^o$	0,80626	0,85096	0,89188	0,92998	0,965881	0,99665922
$M'$	0,79167	0,84242	0,88750	0,92821	0,965476	0,99665548
$M''$	0,79555	0,84420	0,88817	0,92838	0,965496	0,99665550
$G'$	0,79057	0,84208	0,88741	0,92819	0,965476	0,99665548
$G''$	0,79527	0,84411	0,88815	0,92838	0,965496	0,99665550
$\tilde{\lambda}_-^o$	0,80000	0,84828	0,89091	0,92973	0,965854	0,99665919

Для общего случая не совпадающих между собой главных значений тензора теплопроводности на рис. 4 в предположении  $\lambda_3 \leq \lambda_1$  при нескольких значениях параметра  $\bar{\lambda}_2 = \lambda_2/\lambda_1$  представлены графики зависимостей безразмерных двусторонних оценок  $\tilde{\lambda}_+^o$  и  $\tilde{\lambda}_-^o$  (соответственно штрихпунктирные и штриховые линии со светлыми ромбами), а также зависимости



**Рис. 4.** Зависимости безразмерных оценок эффективного коэффициента теплопроводности от параметра  $\bar{\lambda}$  при различных значениях параметра  $\bar{\lambda}_2$

$\tilde{\lambda}_c$  (штриховые линии со светлыми кружками) и  $\tilde{\lambda}_{\text{ш}}$  (сплошные кривые). Для всех значений  $\bar{\lambda}_2$  графики зависимостей  $\tilde{\lambda}_c$  и  $\tilde{\lambda}_{\text{ш}}$  лежат в пределах полос, ограниченным оценками  $\tilde{\lambda}_+^\circ$  и  $\tilde{\lambda}_-^\circ$ , причем ширина этих полос растет по мере отклонения значения параметра  $\bar{\lambda}_2$  от единицы.

## Заключение

Из проведенного сравнительного количественного анализа подходов к оценке эффективного коэффициента теплопроводности поликристаллического материала следует, что наиболее достоверными являются оценки, полученные в рамках корреляционного приближения теории случайных функций и в предположении среднестатистической формы кристаллических зерен в виде шара. В качестве приемлемых значений этого коэффициента можно рассматривать средние арифметическое и геометрическое значений двусторонних оценок, полученных с использованием двойственной вариационной формулировки задачи стационарной теплопроводности.

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

## Список литературы

1. Зарубин В.С. Прикладные задачи термопрочности элементов конструкций. М.: Машиностроение, 1985. 296 с.
2. Адамеску Р.А., Гельд П.В., Митюшов Е.А. Анизотропия физических свойств металлов. М.: Металлургия, 1985. 136 с.
3. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.
4. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров: Пер. с англ. М.: Наука, 1968. 720 с.
5. Александров К.С. Средние значения тензорных величин // Докл. АН СССР. 1965. Т. 164. № 4. С. 800–803.
6. Сивашинский И.Х. Неравенства в задачах. М.: Наука, 1967. 304 с.
7. Зарубин В.С. Инженерные методы решения задач теплопроводности. М.: Энергоатомиздат, 1983. 328 с.
8. Введение в микромеханику: пер. с япон. / Под ред. М. Онами. М.: Металлургия, 1987. 280 с.
9. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977. 400 с.

10. Болотин В.В., Москаленко В.Н. Макроскопические коэффициенты теплопроводности и диффузии в неоднородных твердых телах // Прикладная механика и техническая физика. 1967. № 6. С. 7–13.
11. 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.
12. Зарубин В.С., Котович А.В., Кувыркин Г.Н. Оценки эффективного коэффициента теплопроводности композита с анизотропными шаровыми включениями // Изв. РАН. Энергетика. 2012. № 6. С. 118–127.
13. Математический энциклопедический словарь / Гл. ред. Ю.В. Прохоров. М.: Советская энциклопедия, 1988. 848 с.
14. Сиротин Ю.Н., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 640 с.

## Comparative analysis of estimations of polycrystalline materials effective thermal conductivity coefficient

# 03, March 2013

DOI: 10.7463/0313.0541029

Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N.

Russia, Bauman Moscow State Technical University

[fn2@bmstu.ru](mailto:fn2@bmstu.ru)

The authors carried out a comparative quantitative analysis of mathematical models for estimating effective thermal conductivity coefficient of polycrystalline material which consists of chaotically oriented anisotropic crystal grains with identical crystal grid. Along with well-known methods for generating mathematical models, approaches which allowed to obtain new calculating dependences were also considered. The upper and lower bounds for accepted values of this coefficient were obtained with the use of a dual variational formulation of a stationary thermal conductivity problem for a non-homogeneous solid body. Formulas for calculating best-attested estimations were recommended. These formulas could be used for estimating electric conductivity of polycrystalline materials due to electro thermal analogy.

### References

1. Zarubin V.S. *Prikladnye zadachi termoprochnosti elementov konstruktsii* [Applied problems in thermal strength of structural elements]. Moscow, Mashinostroenie, 1985. 296 p.
2. Adamesku R.A., Gel'd P.V., Mitiushov E.A. *Anizotropiya fizicheskikh svoistv metallov* [Anisotropy of physical properties of metals]. Moscow, Metallurgija, 1985. 136 p.
3. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Matematicheskie modeli mehaniki i elektrodinamiki sploshnoi sredy* [Mathematical models of mechanics and electrodynamics of continuous media]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2008. 512 p.
4. Korn G., Korn T. *Mathematical Handbook for scientists and engineers. Definitions, Theorems and Formulas for Reference and Review*. McGraw-Hill Book Company, Inc., New-York, Toronto, London, 1961. 943 p. (Russ. ed.: Korn G., Korn T. *Spravochnik po matematike dlia nauchnykh rabotnikov i inzhenerov*. Moscow, Nauka, 1968. 720 p.).

5. Aleksandrov K.S. Srednie znacheniiia tenzornykh velichin [The average values of tensor quantities]. *Doklady akademii nauk SSSR*, 1965, vol. 164, no. 4, pp. 800–803.
6. Sivashinskii I.Kh. *Neravenstva v zadachakh* [Inequalities in problems]. Moscow, Nauka, 1967. 304 p.
7. Zarubin V.S. *Inzhenernye metody resheniya zadach teploprovodnosti* [Engineering methods for solving problems of thermal conductivity]. Moscow, Energoatomizdat, 1983. 328 p.
8. Onami M., ed. *Vvedenie v mikromekhaniku* [Introduction to micro-mechanics]. Trans. from Japanese. Moscow, Metallurgiia, 1987. 280 p.
9. Shermergor T.D. *Teoriia uprugosti mikroneodnorodnykh sred* [Theory of elasticity of micro-inhomogeneous media]. Moscow, Nauka, 1977. 400 p.
10. Bolotin V.V., Moskalenko V.N. Makroskopicheskie koeffitsienty teploprovodnosti i diffuzii v neodnorodnykh tverdykh telakh [Macroscopic coefficients of thermal conductivity and diffusion in inhomogeneous solids]. *Prikladnaia mekhanika i tekhnicheskaiia fizika* [Applied Mechanics and Technical Physics], 1967, no. 6, pp. 7–13.
11. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Effektivnye koeffitsienty teploprovodnosti kompozita s ellipsoidal'nymi vkliucheniiami [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.
12. Zarubin V.S., Kotovich A.V., Kuvyrkin G.N. Otsenki effektivnogo koeffitsienta teploprovodnosti kompozita s anizotropnymi sharovymi vkliucheniiami [Evaluation of the effective coefficient of thermal conductivity of a composite with anisotropic spherical inclusions]. *Izv. RAN. Energetika*, 2012, no. 6, pp. 118–127.
13. Prokhorov Iu.V., ed. *Matematicheskii entsiklopedicheskii slovar'* [Mathematical encyclopedic dictionary]. Moscow, Sovetskaia entsiklopediia, 1988. 848 p.
14. Sirotin Iu.N., Shaskol'skaia M.P. *Osnovy kristallofiziki* [Fundamentals of crystal physics]. Moscow, Nauka, 1979. 640 p.