Национальная академия наук Беларуси
Труды Института математики НАН Беларуси. 2024. Том 32. № 1. С. 86–96

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

MATHEMATICAL MODELING AND NUMERICAL METHODS

УДК 519.633.6:536.212.2

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДИСПЕРСНО-НАПОЛНЕННЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

А. Н. Авлас

Институт математики НАН Беларуси, Минск, Беларусь
e-mail: aulas@im.bas-net.by

Поступила: 23.05.2024 **Исправлена:** 10.06.2024 **Принята:** 18.06.2024

Ключевые слова: эффективный коэффициент теплопроводности, композит, математическая модель, сеточные методы, вычислительный эксперимент.

Аннотация. Разработан численный метод нахождения эффективных коэффициентов теплопроводности дисперсно-наполненных композиционных материалов с учетом их структуры и зависимости теплофизических свойств от температуры. Произведены вычислительные эксперименты.

NUMERICAL CALCULATION OF THE EFFECTIVE THERMAL CONDUCTIVITY COEFFICIENT OF PARTICLE-FILLED COMPOSITE MATERIALS

A. N. Aulas

Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
email: aulas@im.bas-net.by

Received: 23.05.2024 **Revised:** 10.06.2024 **Accepted:** 18.06.2024

Keywords: effective thermal conductivity coefficient, composite, mathematical model, grid methods, computational experiment.

Abstract. A comprehensive method has been developed for finding the effective thermal conductivity coefficients of dispersed-filled composite materials, taking into account their structure and depending on the thermophysical properties of temperature. Computational experiments were carried out.

Введение. Развитие современных отраслей промышленности, создание новых технологий во многом связано с применением различных композиционных материалов. Композиционные материалы имеют широкий круг применения, например, при создании покрытий различного типа: упрочняющих, теплозащитных, фрикционных, антифрикционных и др. Поскольку технологии развиваются, на практике часто возникает ситуация, когда известные композиционные материалы не отвечают условиям эксплуатации. Соответственно возникает либо задача улучшения свойств имеющихся композиционных материалов, либо задача разработки принципиально новых композиционных материалов с заданными физическими характеристиками. Значительную долю из них составляют композиционные материалы с периодической структурой [1].

Под композиционным материалом подразумевается материал, состоящий из нескольких компонент с четкими границами раздела, которые могут сильно отличаться по характеристикам, как между собой, так и от характеристик композита. В данной работе будут рассматриваться дисперсно-наполненные композиты. Такие композиты состоят из непрерывной матрицы, в которой распределена дисперсная фаза в виде твердых частиц (порошка, коротких волокон, микросфер), называемых наполнителем. Использованием различных добавок (включений, фаз) можно изменить теплофизические и деформационно-прочностные эксплуатационные характеристики базового материала.

Общая формулировка задачи компьютерного конструирования материалов [2] сводится к следующему: подобрать фазовый состав материала, подобрать распределение фаз в нем («внутреннюю геометрию»), выяснить характер взаимодействия между фазами, чтобы эффективные характеристики материала получили требуемые значения, т. е. найти управляющие параметры, которые влияют на свойства материала.

Сложность определения свойств композиционного материала заключается в его структуре: на свойства композита влияют не только свойства составляющих включений, но также их размер, расположение, форма, распределение относительно друг друга. В более сложных случаях на свойства композита могут оказать существенное влияние межфазный слой, химические взаимодействия компонент с основным материалом, приводящие к возникновению новых включений и др.

Работа посвящена нахождению одного из основных теплофизических свойств материала – коэффициента теплопроводности. В силу сложности структуры композиционного материала основным способом определения коэффициента теплопроводности являются испытания над опытными образцами. Получение значений коэффициента теплопроводности экспериментальными методами является трудоемким способом и требует больших материальных и временных затрат. Отметим, что экспериментальные методы исследования структурно сложных материалов дают информацию лишь о так называемых интегральных характеристиках, которые обычно называют эффективными. В то же время теоретические методы исследования подразумевают разработку математических моделей и методов исследования материалов, в том числе с использованием математического моделирования.

Как показала практика, для нахождения эффективного коэффициента теплопроводности теория смесей непригодна. Существует ряд формул, позволяющих вычислить значение коэффициента теплопроводности композита в зависимости от значений коэффициентов составляющих компонент и их объемной или массовой долей в композите [3]. Расчетные формулы получены, как правило, либо обработкой экспериментальных данных применительно к конкретным материалам, либо априорным заданием распределения температуры и теплового потока в моделях структуры гетерогенных тел. В качестве примеров можно привести модель Максвелла, статистическую и матричную модели [4] и др. Существенным недостатком подобного рода моделей является их низкая точность.

В работе используется метод исследования композита, основанный на прямом численном математическом моделировании тепловых процессов при нагреве, в котором структура компонент учитывается явным образом. Это приводит к решению задачи распространения тепла по неоднородной области с учетом конкретных теплофизических свойств матрицы и включений. Найденное распределение температуры в расчетной области позволяет оценить количество теплоты, накопленное в композиционном материале. Проводя процедуру осреднения, и сопоставляя осредненные по неоднородной расчетной области параметры с аналогичными результатами, полученными для условно однородной среды, устанавливаются эффективные характеристики.

Математическая модель. Математическое моделирование для исследования тепловых процессов в композиционном материале имеет свои особенности. При анализе расчетной области нужно принимать во внимание наличие различных по геометрии границ раздела разных материалов, которые имеют нелинейные свойства, условия на контактных границах и др.

Общий подход к постановке и решению задачи численного моделирования заключается в выборе области расчета, формулировке краевой задачи нелинейной теории теплопроводности в рассматриваемой области, разработке численного метода, проведении вычислительных экспериментов.

В качестве области расчета выберем так называемый представительный объем материала, т. е. такой минимальный объем, по которому можно судить о материале в целом. Для материалов с регулярной структурой в качестве представительного объема принимается ячейка периодичности. Для материалов с хаотическим расположением частиц размер представительного объема зависит от точности, с которой требуется получить эффективные свойства: чем выше требуемая точность, тем больше размеры представительного объема. В данной работе рассматриваются материалы с регулярной структурой.

Рассмотрим двумерный случай представительного объема, который содержит в своем составе N различных материалов, включая материал матрицы. Предполагаем, что исходные свойства составляющих композит материалов, а также их объемная доля, заранее известны.

Введем декартовую систему координат, начало которой поместим в левый верхний угол рассматриваемого объема.

Рассмотрим двумерную задачу теплопроводности для неоднородного композиционного материала в рамках представительного объема, который представим в виде пластины. Обозначим область, занимаемую объемом, как D.

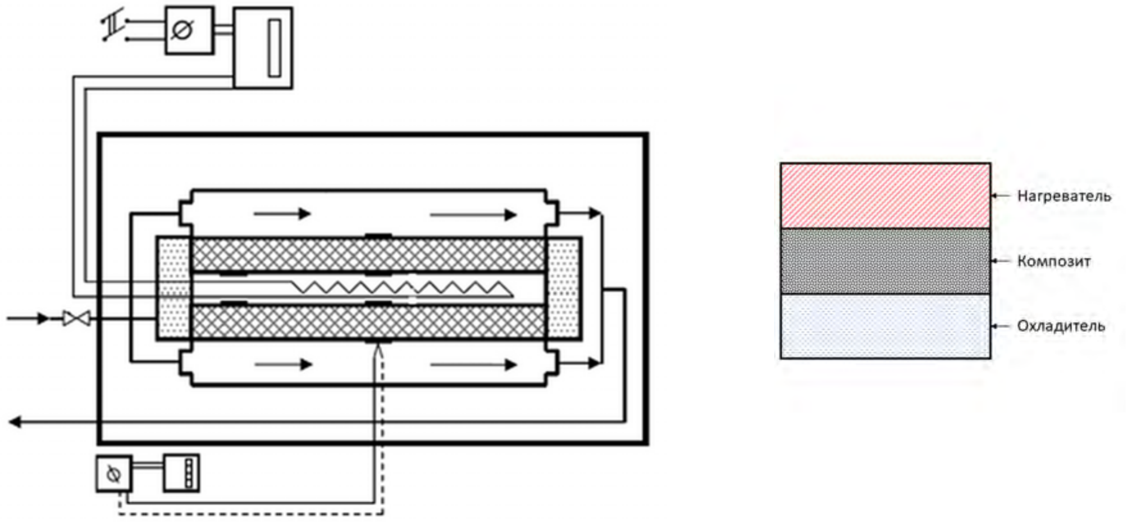
Уравнение теплового баланса в области D будет иметь вид

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \sum_{k=1}^{2} \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\lambda_k \frac{\partial T}{\partial x_k}\right), \quad (x_1, x_2) \in D, \quad t > t_0, \tag{1}$$

где $\rho = \rho(x_1, x_2; T)$ – плотность; $C = C(x_1, x_2; T)$ – теплоемкость; $\lambda_k = \lambda_k(x_1, x_2; T)$ – теплопроводность по соответствующему направлению. В дальнейшем индекс k будет означать направление вдоль одной из направляющих осей координат (соответствующую координату).

Граничные условия определим исходя из условий, заданных на экспериментальной установке для определения коэффициента теплопроводности опытного образца.

Рассмотрим метод пластины, используемый при экспериментальном методе определения коэффициента теплопроводности материалов [5]. Суть метода заключается в размещении образца между нагревателем и охладителем в теплоизолируемой оболочке (рис. 1). Образец представлен пластиной, толщина которой много меньше его ширины. Нагреватель располагается с одной из сторон пластины таким образом, чтобы все тепло, вырабатываемое нагревателем, поглощалось исследуемым образцом. Через нагреватель пропускается электрический ток и в зависимости от его напряжения вычисляется значение теплового потока. С противоположной стороны образца располагается охладитель, поддерживающий постоянную температуру на поверхности пластины.



а *б*

Рис. 1. Экспериментальная установка для метода пластины (*а*) и условная схема установки (*б*)

Определим граничные условия в соответствии с экспериментальным подходом. Со стороны расположения охладителя используем условие с постоянной температурой поверхности материала

$$T\Big|_{\Gamma_1} = T_1 = \text{const}.$$

С противоположной стороны зададим условие с постоянной величиной приходящего потока тепла

$$-\left(\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial \vec{n}}\right)\Bigg|_{\Gamma_3} = q.$$

Поскольку рассматриваемая пластина имеет достаточно большую ширину, предполагаем, что представительный объем заполняет ее периодически, а границы пластины отнесены достаточно далеко, чтобы влиять на распределение теплового потока в исследуемой области. В таком случае, две оставшиеся границы Γ_2 и Γ_4 дополняем условиями периодичности

$$T\Big|_{\Gamma_2} = T\Big|_{\Gamma_4}.$$

На границах раздела разных материалов Γ_{cont} будем рассматривать условия идеального теплового контакта, при котором имеет место равенство температур и тепловых потоков

$$T\Big|_{\Gamma_{\text{cont}}^-} = T\Big|_{\Gamma_{\text{cont}}^+}, \quad -\lambda\frac{\partial T}{\partial \vec{n}}\Big|_{\Gamma_{\text{cont}}^-} = -\lambda\frac{\partial T}{\partial \vec{n}}\Big|_{\Gamma_{\text{cont}}^+},$$

где верхние индексы «$-$» и «$+$» означают расположение «слева» и «справа» от границы соответственно.

В качестве начального условия зададим распределение температуры в начальный момент времени $t = 0$:

$$T(x_1, x_2; 0) = T_0(x_1, x_2).$$

Поскольку теплофизические свойства компонент зависят от температуры, то дифференциальное уравнение (1) – нелинейное, поэтому решаем его приближенным сеточным методом.

При численном моделировании реализация проводится методами вычислительной математики с применением вычислительной техники.

Реализация метода состоит из следующих этапов:

– разбиение области расчета сеткой;

– выбор в каждой ячейке одной точки для искомого решения;

– построение вокруг выбранных точек контрольных объемов;

– аппроксимация уравнения баланса в выбранных контрольных объемах;

– решение полученной нелинейной системы алгебраических уравнений.

Произведем схематизацию структуры композиционного порошкового материала в представительном объеме.

Металлографическое изображение реальной структуры (двумерный случай) вводится в компьютер в виде графического файла, который затем редактируется с помощью стандартных графических редакторов, для того, чтобы выделить значимые элементы структуры и убрать мелкие оттенки. Полученная карта образца дискретизируется с заданной степенью подробности и каждому элементу структуры, состоящему из элементов одного цвета, ставятся в соответствие определенные физико-механические свойства.

При использовании сеточных методов представительный объем разбивается на элементарные ячейки, размер которых должен быть меньше минимального размера компонент композита.

Рассматриваем прямоугольный представительный объем D. Построим сетку $\Omega_h = \sum_{i\in I, j\in J} \omega^{\langle i,j\rangle}$, где I, J – пространства индексов: $I = \{0, 1, \ldots, n_1\}$, $J = \{0, 1, \ldots, n_2\}$, а $\omega^{\langle i,j\rangle} = [ih_1; (i+1)h_1] \times \times [jh_2, (j+1)h_2]$, где h_1 и h_2 – сеточные шаги. Заметим, что при построении сетки, каждая ячейка состоит из одного материала.

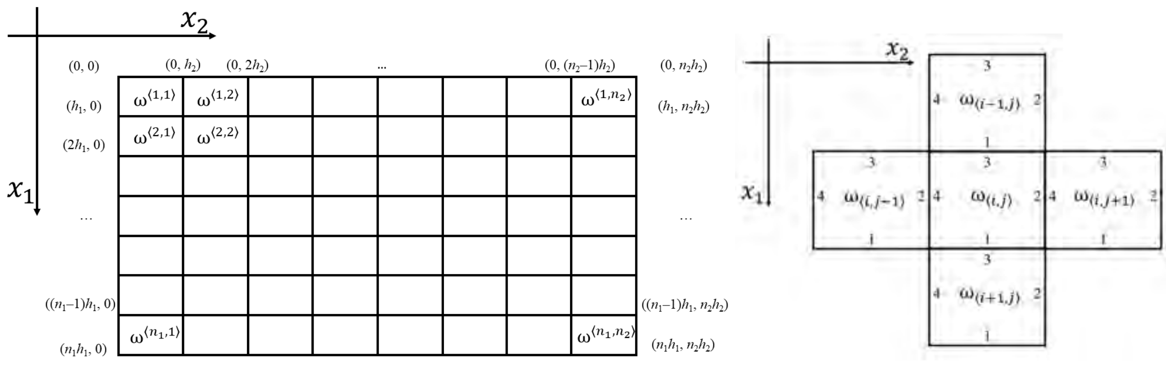
В качестве точки, в которой ищем решение, используем центр масс контрольного объема. Тогда построенный контрольный объем совпадает с сеточной ячейкой. В силу сделанного ранее допущения об однородности материала в каждой сеточной ячейке, координаты центра масс ищем как среднее арифметическое координат вершин контрольного объема.

Вид сеточной области приведен на рис. 2.

Построим систему сеточных уравнений для температуры. Рассмотрим каждую отдельную ячейку $\omega^{\langle i,j\rangle}$. Аппроксимируем уравнение (1) с помощью метода контрольного объема. Температуру каждой ячейки определяем в центре контрольного объема, т. е. сеточная величина температуры в ячейке представляет среднее интегральное значение соответствующей непрерывно распределенной величины:

$$T^{\langle i,j\rangle} \approx \frac{1}{V^{\langle i,j\rangle}} \iint\limits_{\omega^{\langle i,j\rangle}} T\, dx_1 dx_2,$$

где $V^{\langle i,j\rangle}$ – объем ячейки $\omega^{\langle i,j\rangle}$ (в двумерном случае – площадь ячейки).



а *б*

Рис. 2. Общий вид сетки (*а*); нумерация граней в ячейке (*б*)

Проинтегрируем уравнение (1) по контрольному объему $\omega^{\langle i,j\rangle}$. Для удобства, индекс ячейки $\langle i,j\rangle$ временно опустим

$$\frac{1}{V}\iint\limits_{\omega}\rho C\frac{\partial T}{\partial t}dV=\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{2}\iint\limits_{\omega}\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\lambda_k\frac{\partial T}{\partial x_k}\right)dV.$$

Используя формулу Остроградского–Гаусса, получим

$$\frac{1}{V}\iint\limits_{\omega}\rho C\frac{\partial T}{\partial t}dV=\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{2}\oint\limits_{\partial\omega}\lambda_k\frac{\partial T}{\partial x_k}n_k dS, \tag{2}$$

где $\partial\omega$ – граница ячейки ω; $\vec{n}$ – внешняя единичная нормаль к $\partial\omega$. В дальнейшем, для обозначения координаты внешней нормали воспользуемся следующим обозначением: n_k, $k\in\{1,2\}$. Отметим, что при использовании прямоугольной сетки нормали будут параллельны осям координат.

Учитывая форму ячеек, интеграл по границе контрольного объема вычисляем как сумму произведений значений вектора потока в центрах граней контрольного объема на площади его граней:

$$\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{2}\oint\limits_{\partial\omega}\lambda_k\frac{\partial T}{\partial x_k}\vec{n}dS=\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{2}\sum_{m=1}^{4}S_m\left(\lambda_k\frac{\partial T}{\partial x_k}n_k\right)\Bigg|_{P_m}=\frac{1}{V}\sum_{m=1}^{4}S_m\sum_{k=1}^{2}\lambda_{k;m}n_{k;m}\left(\frac{\partial T}{\partial x_k}\right)\Bigg|_{P_m}, \tag{3}$$

где индекс m соответствует обходу граней ячейки, как указано на рис. 2, *б*; S_m – площадь m-й грани (в двумерном случае – длина грани). Таким образом, получение дискретного аналога балансового уравнения сводится к аппроксимации потоков $\lambda_k\frac{\partial T}{\partial x_k}$ в серединных точках P_m на соответствующих гранях.

Найдем производные $\left.\frac{\partial T}{\partial x_k}\right|_{P_m}$:

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x_k}\right|_{P_m}=\left.\frac{\partial T}{\partial l}\right|_{L_m}\frac{\partial l}{\partial x_k},$$

где L_m – прямая, соединяющая центр ячейки ω и ячейки, примыкающей к m-й грани; l_m – длина прямой L_m. Направление l задается прямой L_m, причем $\frac{\partial l}{\partial x_k}=\cos\alpha_{x_k}$, где косинусы $\cos\alpha_{x_k}$ – направляющие косинусы прямой l.

Найдем выражение для нижней грани – грани, соединяющей ячейку $\omega^{\langle i,j\rangle}$ с ячейкой $\omega^{\langle i+1,j\rangle}$. Относительно ячейки $\omega^{\langle i,j\rangle}$ индекс m будет равен единице (рис. 2, *б*). Используя формулы для определения производной по направлению, мы получим следующее выражение:

$$\frac{S_1}{V^{\langle i,j\rangle}}\sum_{k=1}^{2}\lambda_k^{\langle i+0,5,j\rangle}n_{1;k}\cdot\frac{\left(T^{\langle i,j\rangle}-T^{\langle i+1,j\rangle}\right)\left(O_k^{\langle i+1,j\rangle}-O_k^{\langle i,j\rangle}\right)}{l_1^2},$$

где $O^{\langle i,j\rangle}=\left(O_1^{\langle i,j\rangle};O_2^{\langle i,j\rangle}\right)$ – центральная точка ячейки $\omega^{\langle i,j\rangle}$; $n_{1;k}$ – k-я компонента вектора нормали $\vec{n}_1$. Под индексом $\langle i+0,5,j\rangle$ подразумеваем вычисление значения на границе ячеек $\omega^{\langle i,j\rangle}$ и $\omega^{\langle i+1,j\rangle}$.

Аналогичным образом получаем выражения для тепловых потоков через оставшиеся грани $m = 2,3,4$.

В силу определения сеточной величины для левой части имеем

$$\frac{1}{V^{\langle i,j\rangle}} \iint\limits_{\omega} \rho^{\langle i,j\rangle} C^{\langle i,j\rangle} \frac{\partial T}{\partial t} dV = \rho^{\langle i,j\rangle} C^{\langle i,j\rangle} \frac{T^{\langle i,j\rangle} - \check{T}^{\langle i,j\rangle}}{\Delta t}, \tag{4}$$

где $\check{T}^{\langle i,j\rangle}$ – температура в ячейке $\omega^{\langle i,j\rangle}$ на предыдущем временном слое; $\rho^{\langle i,j\rangle}$ и $C^{\langle i,j\rangle}$ вычисляются в центре ячейки $\omega^{\langle i,j\rangle}$.

Используя аппроксимации (3) для $m = 1,\ldots,4$ и (4), запишем аппроксимацию уравнения (2):

$$\begin{aligned}\rho^{\langle i,j\rangle} C^{\langle i,j\rangle} \frac{T^{\langle i,j\rangle} - \check{T}^{\langle i,j\rangle}}{\Delta t} = \frac{1}{V^{\langle i,j\rangle}} \Bigg(& S_1 \sum_{k=1}^{2} \lambda_k^{\langle i+0,5,\,j\rangle} n_{1;k} \cdot \frac{\left(T^{\langle i,j\rangle} - T^{\langle i+1,j\rangle}\right)\left(O_k^{\langle i+1,j\rangle} - O_k^{\langle i,j\rangle}\right)}{l_1^2} + \\ & + S_2 \sum_{k=1}^{2} \lambda_k^{\langle i,j+0,5\rangle} n_{2;k} \cdot \frac{\left(T^{\langle i,j\rangle} - T^{\langle i,j+1\rangle}\right)\left(O_k^{\langle i,j+1\rangle} - O_k^{\langle i,j\rangle}\right)}{l_2^2} + \\ & + S_3 \sum_{k=1}^{2} \lambda_k^{\langle i-0,5,\,j\rangle} n_{3;k} \cdot \frac{\left(T^{\langle i,j\rangle} - T^{\langle i-1,j\rangle}\right)\left(O_k^{\langle i-1,j\rangle} - O_k^{\langle i,j\rangle}\right)}{l_3^2} + \\ & + S_4 \sum_{k=1}^{2} \lambda_k^{\langle i,j-0,5\rangle} n_{4;k} \cdot \frac{\left(T^{\langle i,j\rangle} - T^{\langle i,j-1\rangle}\right)\left(O_k^{\langle i,j-1\rangle} - O_k^{\langle i,j\rangle}\right)}{l_4^2} \Bigg). \end{aligned} \tag{5}$$

Поскольку точка P_m располагается на границе ячейки и может оказаться на границе разделения сред, необходимо получить усредненное значение коэффициента теплопроводности. Выберем значения λ_k, наиболее соответствующие физике тепловых процессов [6]. Например, выражение для $\lambda_1^{\langle i,j\rangle}$ запишем следующим образом:

$$\lambda_1^{\langle i+0,5,\,j\rangle} = \frac{2\lambda_1^{\langle i,j\rangle}\lambda_1^{\langle i+1,j\rangle}}{\lambda_1^{\langle i,j\rangle} + \lambda_1^{\langle i+1,j\rangle}}.$$

Остальные значения λ_k находим аналогичным образом.

Поскольку моделирование производится для сравнительно небольшого представительного объема и до времени установления стационарного режима, а также учитывая мощность современных компьютеров, то для реализации можно использовать явные разностные схемы. Для этого вводим переменный шаг по времени $\Delta t_n, n = 1,\ldots,N$, где t_N – время установления стационарного режима, который на каждом временном слое будет обеспечивать условие устойчивости разностной схемы. В правой части разностной схемы (5), все значения температур возьмем на предыдущем временном слое.

Поскольку теплофизические свойства компонент (λ, ρ, C) зависят от температуры, то проверяем условие Куранта, используя их значения на предыдущем временном слое

$$\Delta t_n \leqslant \frac{\max_{\langle i,j\rangle} \rho(t_{n-1}) C(t_{n-1})}{\min_{\langle i,j\rangle} \lambda(t_{n-1})} \Delta x_1 \Delta x_2. \tag{6}$$

В случае нарушения условия Куранта, уменьшаем значение Δt_n до значения, удовлетворяющего выражению (6).

Завершаем вычислительный процесс при достижении стационарного потока, что означает выполнение условия

$$\left| T_n^{\langle i,j\rangle} - T_{n-1}^{\langle i,j\rangle} \right| \leqslant \varepsilon \left| T_{n-1}^{\langle i,j\rangle} \right|,$$

где ε – некоторая заранее заданная погрешность.

Для определения эффективного коэффициента теплопроводности воспользуемся подходом, описанным в [2]. Гомогенизируем композиционный материал, заменив его на однородный со значением коэффициента теплопроводности, соответствующим значению для рассматриваемого композита. После завершения вычислительного процесса, ищем усредненный коэффициент теплопроводности композита λ_1^{eff} по формуле

$$\lambda_1^{\text{eff}} = \frac{Q_1}{S_1^{\text{п.о.}} \Delta T_1 \Delta t_N},$$

где Q_1 – переданное через композит количество теплоты; $S_1^{\text{п.о.}}$ – площадь поверхности представительного объема (длина грани Γ_3); ΔT_1 – градиент температур между верхней (Γ_3) и нижней (Γ_1) гранями представительного объема. Вычисления производим в направлении теплового потока, т. е., согласно выбору граничных условий, вдоль направления оси Ox_1.

Градиент температур ΔT_1 находим как разность между средним арифметическим температур контрольных объемов, прилегающих к верхней и нижней граням. Количество теплоты Q_1 отыскиваем как сумму количества теплоты $q_1^{\langle i,j \rangle}$, переданной через каждый контрольный объем композита

$$Q_1 = \sum_{<i,j>} q_1^{\langle i,j \rangle}.$$

Поскольку вычисления производятся для заданного шага времени, формула для количества теплоты принимает следующий вид

$$q_1^{\langle i,j \rangle} = C^{\langle i,j \rangle} \rho^{\langle i,j \rangle} V^{\langle i,j \rangle} \Delta T_1 \Delta t_N.$$

В результате, выражение для нахождения коэффициента теплопроводности композита по направлению Ox_1 принимает вид:

$$\lambda_1^{\text{eff}} = \frac{\sum_{<i,j>} C^{\langle i,j \rangle} \rho^{\langle i,j \rangle} V^{\langle i,j \rangle} \Delta T_1^{\langle i,j \rangle}}{S_1^{\text{п.о.}} \Delta T_1}.$$

Для определения λ_2^{eff} по направлению Ox_2 граничные условия необходимо изменить следующим образом: на границах Γ_1 и Γ_3 задать условия периодичности, на границе Γ_2 задать условие с постоянным потоком тепла, на границе Γ_4 – условие с постоянной температурой поверхности материала. Или, что будет тождественным описанной выше смене граничных условий, найти значение λ_1 для повернутой матрицы материала на 90° против часовой стрелки.

Программная реализация. Реализация численного метода выполнялась на языке программирования C++ с использованием объектно-ориентированной парадигмы программирования.

Для оптимальной программной реализации, например, с перспективой использования произвольных четырехугольных ячеек, внесем изменения в описание ближайших соседних ячеек. Для этого рассмотрим алгоритм на уровне отдельной ячейки сетки $\omega^{\langle i,j \rangle}$. Введем обозначение inner для внутренних значений рассматриваемой ячейки и обозначение outer для значений соседних, относительно рассматриваемой, ячеек. В качестве основы для нумерации граней воспользуемся уже выбранной на рис. 2, *б* нумерацией. Для индексов граней используем обозначение $m \in \{1,2,3,4\}$.

Также введем нумерацию ячеек, соседних с рассматриваемой. Пронумеруем их в соответствии с номерами смежных граней с ячейкой $\omega^{\langle i,j \rangle}$. Таким образом можно сопоставить локальную индексацию соседних ячеек с индексацией ячеек в общей структуре сетки:

$$*_m^{\text{outer}} = \begin{cases} m = 1, \text{outer} = \langle i+1,\, j \rangle, \\ m = 2, \text{outer} = \langle i,\, j+1 \rangle, \\ m = 3, \text{outer} = \langle i-1,\, j \rangle, \\ m = 4, \text{outer} = \langle i,\, j-1 \rangle. \end{cases}$$

Такой способ индексации позволяет унифицировать вычисления для каждой грани ячейки, что в свою очередь положительно сказывается на качестве программной реализации.

Используем нововведенные обозначения, чтобы переписать выражение теплового потока для каждой отдельной грани

$$\frac{1}{V} S_m \sum_{k=1}^{2} \lambda_{k;m} n_{k;m} \frac{(T - T_m^{\text{outer}})(O_{k;m}^{\text{outer}} - O_k)}{l_m^2}, \quad m \in \{1,2,3,4\}.$$

Перепишем таким образом уравнение (5) с использованием суммирования

$$\rho^{\langle i,j\rangle}C^{\langle i,j\rangle}\frac{T^{\langle i,j\rangle}-\check{T}^{\langle i,j\rangle}}{\Delta t}=\frac{1}{V^{\langle i,j\rangle}}\sum_{m=1}^{4}S_m^{\langle i,j\rangle}\sum_{k=1}^{2}\lambda_{k;m}^{\langle i,j\rangle}n_{k;m}^{\langle i,j\rangle}\frac{(T^{\langle i,j\rangle}-T_m^{\text{outer}})(O_{k;m}^{\text{outer}}-O_k^{\langle i,j\rangle})}{\left(l_m^{\langle i,j\rangle}\right)^2}. \tag{7}$$

Выражения для определения значений $\lambda_k\Big|_{P_m}$ также примет унифицированный для каждой грани вид

$$\lambda_k\Big|_{P_m}=\frac{2\lambda_k^{\text{inner}}\lambda_k^{\text{outer}}}{\lambda_k^{\text{inner}}+\lambda_k^{\text{outer}}},\quad m\in\{1,2,3,4\}.$$

Преобразуем (7) в следующий вид:

$$\rho^{\langle i,j\rangle}C^{\langle i,j\rangle}\frac{T^{\langle i,j\rangle}-\check{T}^{\langle i,j\rangle}}{\Delta t}=A_0^{\langle i,j\rangle}T^{\langle i,j\rangle}+\sum_{m=1}^{4}A_m^{\langle i,j\rangle}T_m^{\text{outer}},$$

где коэффициенты A вычисляются по следующим формулам:

$$A_0^{\langle i,j\rangle}=\frac{1}{V^{\langle i,j\rangle}}\sum_{m=1}^{4}\frac{S_m^{\langle i,j\rangle}}{\left(l_m^{\langle i,j\rangle}\right)^2}\sum_{k=1}^{2}\lambda_{k;m}^{\langle i,j\rangle}n_{k;m}^{\langle i,j\rangle}\left(O_{k;m}^{\text{outer}}-O_k^{\langle i,j\rangle}\right),$$

$$A_m^{\langle i,j\rangle}=-\frac{S_m^{\langle i,j\rangle}}{V^{\langle i,j\rangle}\left(l_m^{\langle i,j\rangle}\right)^2}\sum_{k=1}^{2}\lambda_{k;m}^{\langle i,j\rangle}n_{k;m}^{\langle i,j\rangle}\left(O_{k;m}^{\text{outer}}-O_k^{\langle i,j\rangle}\right).$$

Вычислительные эксперименты. Проведены численные эксперименты, показывающие эффективность используемого метода. Некоторые из них приведены ниже.

Влияние компоненты включения на значение коэффициента теплопроводности по отношению к тепловому потоку. Для вычислительного эксперимента возьмем образцы композитных материалов с медной матрицей и разместим внутри графитовый компонент, длина которого сильно превышает его толщину. Свойства материалов композита указаны в табл. 1.

Таблица 1. **Свойства материалов**

Свойства	Материал	
	Медь	Графит
Теплопроводность λ, Вт/(м·К)	300	150
Удельная теплоёмкость C, Дж/(кг·К)	400	1000
Плотность ρ, кг/м^3	8920	2100
Цветовое обозначение		

Выберем квадратный представительный объем со стороной ребра $5\cdot10^{-4}$ м. Разобьем этот объем на 50 квадратных ячеек в каждом направлении. Каждая ячейка примет вид квадрата размером $10^{-5}\times10^{-5}$ м. Устанавливаем на нижней границе постоянную температуру в 300 градусов Кельвина. Через верхнюю грань устанавливаем тепловой поток величиной 10^4 Вт/м^2.

Размер компоненты графита составляет $2\cdot10^{-5}\times3\cdot10^{-4}$ метра или 2×30 ячеек, что составляет 2,4 % от представительного объема. Расположение компоненты и полученные значения расчетного коэффициента теплопроводности (λ^{eff}) отображены в табл. 2.

Полученные данные соотносятся с теоретическим представлением о поведении теплового потока. При поперечном расположении компоненты по отношению к распространению тепла он оказывает влияние на итоговое значение коэффициента теплопроводности. Различие полученных коэффициентов теплопроводности относительно максимального значения составило 0,06 %.

Таблица 2. **Моделирование частицы графита в медной матрице**

Изображение	λ^{eff}	Изображение	λ^{eff}
	$293,345$		$296,151$
	$293,260$		$296,151$
	$293,155$		$296,151$

Сравним полученные значения со значениями, получаемыми при использовании модели Максвелла, статистической модели (она же модель Оделевского) и матричной модели в табл. 3.

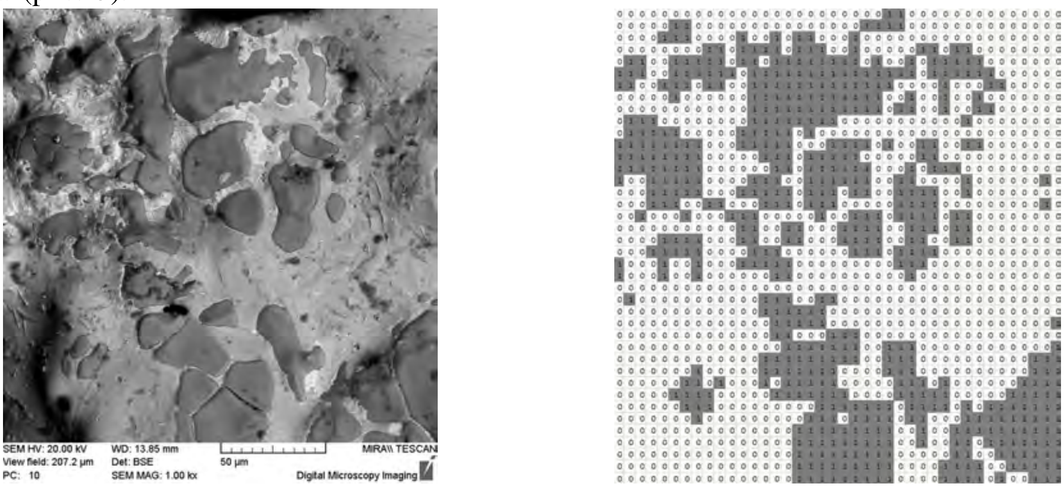
Таблица 3. **Значения коэффициентов теплопроводности для различных моделей**

Расчетные значения теплопроводности	Вертикальная компонента	296,151
	Горизонтальная компонента	293,260
Модельные значения теплопроводности	Модель Максвелла	294,295
	Статистическая модель	293,358
	Матричная модель	295,541

Полученные с помощью моделей значения заметно отличаются друг от друга, что говорит о неоднозначности их применения для разных материалов. Также ни одно из модельных значений не учитывает формы и положения компонент наполнителя в структуре композита, возможную анизотропию материалов наполнителя. В отличии от описанных моделей, численный подход позволяет учесть вышеназванные аспекты материала и получить различные коэффициенты теплопроводности для каждого отдельного случая.

Отдельно отметим, что при замене материала наполнителя на материал матрицы, т. е. при испытании однородного материала, значение λ^{eff} полностью совпадает со значением коэффициента теплопроводности заполняющего материала.

Влияние температуры на эффективный коэффициент теплопроводности композита. Рассмотрим композиционный материал на основе бронзы марки БрО12 с добавлением компонент железа (рис. 3).



а *б*

Рис. 3. Представительный объем бронзы с включениями порошка железа (36,7 %):
а – микроструктура материала; *б* – цифровой вид материала

Для бронзы марки БрО12 имеется постоянное значение коэффициента теплопроводности: $\lambda_{\text{БрО12}} = 48,56$ Вт/(м·К). Для железа имеются таблицы для коэффициента теплопроводности при различных температурах исследуемого материала [7].

Произведем вычисление эффективного коэффициента теплопроводности при различной температуре композиции, получим коэффициенты теплопроводности образца для различных температур (от 300 до 800 K) с шагом в 50°. На рис. 4 приведены рассчитанные значения λ^{eff}. Видно, что при повышении температуры значение коэффициента теплопроводности композита падает, что соответсвует поведению теплофизических свойств железа.

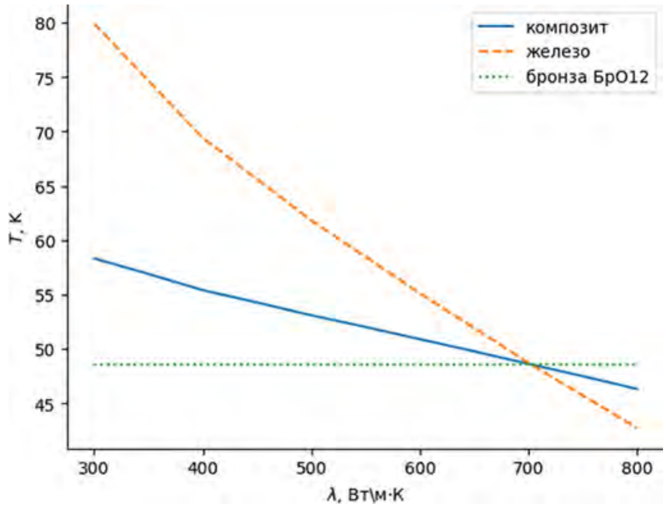
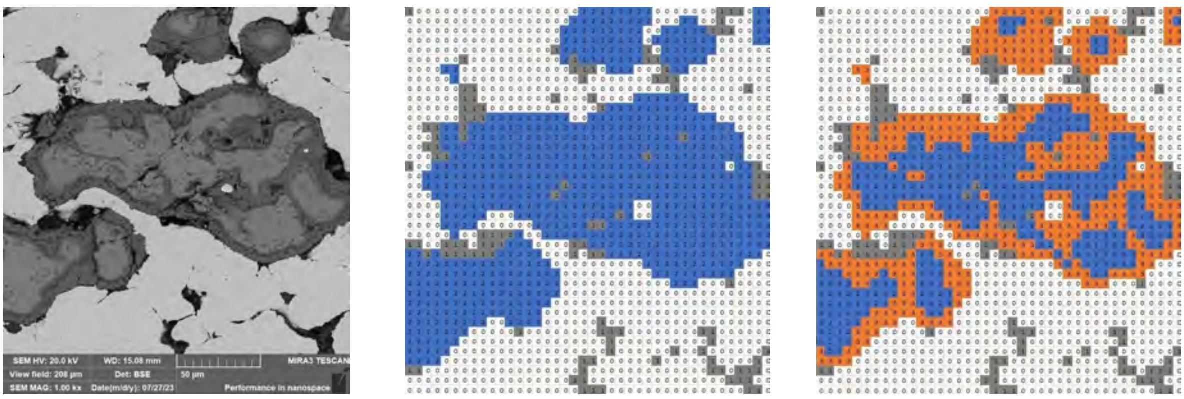


Рис. 4. Зависимость коэффициента теплопроводности композита БрО12-Fe от температуры

Влияние межфазного слоя на коэффициент теплопроводности композита. Рассмотрим композит на основе бронзы БрО12 с добавкой порошка титана марки ТПП-7. При спекании материала на поверхности компонент титана формируется слой карбонитрида титана, который, как будет показано далее, оказывает заметное влияние на значение коэффициента теплопроводности. Свойства материалов композита представлены в табл. 4, структура – на рис. 5.

Таблица 4. **Свойства материалов**

Свойства	Материал			
	БрО12	Воздух (поры)	Ti	TiCN
Теплопроводность λ, Вт/(м·K)	48,56	1	21,9	14
Удельная теплоёмкость C, Дж/(кг·K)	368,4	1005	523	530
Плотность ρ, кг/м^3	8800	1,2	4540	5800
Числовое обозначение	0	1	2	3



а *б* *в*

Рис. 5. Представительный объем бронзы с включениями порошка титана: микроструктура материала (*а*); цифровой вид материала (без промежуточного слоя) (*б*); цифровой вид материала (с промежуточным слоем) (*в*)

Полученное значение λ^{eff} для матрицы без промежуточного слоя составило $28{,}763$ Вт/(м·K), с промежуточным слоем – $24{,}395$ Вт/(м·K). Из полученных результатов можно утверждать, что формируемый слой после спекания оказывает заметное влияние на величину коэффициента теплопроводности.

Результаты согласуются с экспериментальными данными. Разработанный метод может быть применен для композитов с включениями произвольной формы и состоящих из нескольких материалов.

Заключение. Сочетание математического моделирования с экспериментальными исследованиями представляется наиболее перспективным для решения подобных задач. Такой подход расширяет инструментарий, который могут использовать разработчики новых материалов, предоставляя возможность увеличить количество рассматриваемых композиций. В этом случае в качестве управляющих параметров выступают такие как степень наполнения композиции, средний размер включений, свойства фаз и др.

Разработанный метод позволяет находить эффективные коэффициенты теплопроводности дисперсно-наполненных композиционных материалов. В математической модели учтены структура композиционного материала (форма, размер и положение компонент наполнителя), зависимость теплофизических свойств материалов от температуры. Математическая модель позволяет определить ортотропию композита и получить значения коэффициента теплопроводности по каждому направлению. Выполнена программная реализация метода, произведены вычислительные эксперименты.

Работа выполнена в Институте математики НАН Беларуси в рамках отдельного проекта «Разработка математических моделей, численных алгоритмов и программ для расчета тепловых и механических свойств композиционных порошковых материалов».

Литература

1. *Дульнев Г. Н., Заричняк Ю. П.* Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Ленинград: Энергия, 1974.

2. *Люкшин Б. А.* [и др.] Дисперсно-наполненные полимерные композиты технического и медицинского назначения. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017.

3. *Зарубин В. С.* Инженерные методы решения задач теплопроводности. М.: Энергоатомиздат, 1983.

4. *Никитин А. В.* [и др.] Модельные представления о теплопереносе в полимерных нанокомпозитах // Научные ведомости БелГУ. Сер. Математика. Физика. 2014. № 5(176), вып. 34. С. 150–160.

5. *Купцов С. М.* Определение коэффициента теплопроводности теплоизоляционных материалов методом пластины. М.: РГУ нефти и газа, 2003.

6. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.

7. *Зиновьев В. Е.* Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989.

References

1. Dulnev G. N., Zarichnyak Y. P. *Thermal conductivity of mixtures and composite materials*. Leningrad, Energiya, 1974 (in Russian).

2. Lyukshin B. A. [et al.]. *Dispersion-filled polymer composites for technical and medical purposes.* Novosibirsk, Izdatelstvo SO RAN, 2017 (in Russian).

3. Zarubin V. S. *Engineering methods for solving thermal conductivity problems*. Moscow, Energoatomizdat, 1983 (in Russian).

4. Nikitin A. V., Liopo V. A. Avdeychik S. V. Struck V. A. Model representations of thermal conductance in polymer nanocomposites. *Scientific reports BSU. Ser. Mathematics. Physics*, 2014, vol. 34, no. 5(176), pp. 150–160 (in Russian).

5. Kuptsov S. M. *Determination of the thermal conductivity coefficient of thermal insulation materials using the plate method*. Moscow, RGU nefti i gaza, 2003 (in Russian).

6. Samarskii A. A. *The theory of difference schemes*. Moscow, Nauka, 1977 (in Russian).

7. Zinoviev V. E. *Thermophysical properties of metals at high temperatures*. Moscow, Metallurgiya, 1989 (in Russian).