

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ MODELING AND OPTIMIZATION

УДК 536.2

В. С. Зарубин, д-р техн. наук, проф., e-mail: Zarubin@bmstu.ru,
Г. Н. Кувыркин, проф., д-р техн. наук, зав. кафедрой, Fn2@bmstu.ru,
И. Ю. Савельева, канд. физ.-мат. наук, доц., Inga.Savelyeva@gmail.com,
Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва, РФ

Иерархическая система математических моделей процесса теплопроводности в композиционном материале

В рамках иерархического подхода построена многоуровневая система математических моделей композиционного материала (композита), описывающих теплоперенос и тепловое взаимодействие между матрицей композита и армирующими включениями. Эта система использована для сравнительного анализа оценок эффективного коэффициента теплопроводности — одного из основных параметров, определяющих сферу применения конкретного композита. На основе двойственной формулировки вариационной задачи стационарной теплопроводности в неоднородном твердом теле получены двусторонние оценки возможных значений этого коэффициента. Система моделей построена применительно к дисперсно упрочненным композитам с шаровыми включениями. Сопоставление результатов количественного анализа таких моделей с двусторонними оценками позволило сделать выводы о степени адекватности построенных моделей.

Ключевые слова: иерархический подход, математическая модель, композит, шаровые включения, эффективный коэффициент теплопроводности

Введение

Иерархический подход к математическому моделированию технических систем и устройств предполагает построение нескольких уровней взаимно связанных между собой математических моделей (ММ) [1]. Один из вариантов классификации иерархических уровней ММ включает модели микро-, макро- и метауровней [2], причем последние отнесены к высшему иерархическому уровню. Построение иерархии ММ связано с различной детализацией свойств моделируемого технического объекта (ТО). Сравнение результатов количественного анализа ММ различных иерархических уровней может существенно расширить и обогатить знания об этом ТО. Кроме того, такое сравнение позволяет оценить степень адекватности построенных моделей и достоверность данных их количественного анализа: если более простая ММ правильно отражает некоторые свойства ТО, то результаты исследования этих свойств должны быть близки к результатам, полученным при использовании более полной и поэтому более сложной ММ [3, 4]. Основные этапы реализации указанного подхода применительно к континуальным системам и, в частности, к моделированию термомеханических процессов в таких системах рассмотрены в работах [5, 6].

Особенности иерархического подхода можно проиллюстрировать на примере построения и количе-

ственного анализа системы ММ, описывающих тепловые процессы в композитах, широко используемых в качестве конструкционных и строительных материалов, а также функциональных материалов в различных приборных устройствах. К композитам можно отнести большинство применяемых в технике материалов с неоднородной структурой, состоящих из включений различной формы и связывающей их между собой матрицы.

Среди характеристик, определяющих область применения конкретного композита, важную роль играет его эффективный коэффициент теплопроводности, зависящий от структуры композита, объемной концентрации включений и их теплового взаимодействия между собой и с материалом матрицы, а также от коэффициентов теплопроводности включений и матрицы. В данной работе ограничимся построением ММ для композитов с включениями шаровой формы, которую можно считать некоторой статистически усредненной по отношению к включениям произвольной формы, но имеющим близкие размеры во всех трех направлениях [7]. Форму, близкую к шаровой, имеют некоторые наноструктурные элементы (в том числе фуллерены), рассматриваемые в последнее время как включения для перспективных композитов различного назначения [8].

Постановка задачи

Выделим в композите некоторый объем V^* , осреднение в пределах которого свойств матрицы и включений дает представление о характеристиках композита в целом. Такой объем принято называть представительным. Точка $M \in V^*$ может быть расположена как в матрице, занимающей объем $V_m^* \subset V^*$, так и в одном из включений, занимающих объем $V_0^* = V^* \setminus V_m^*$. Отношение V_0^*/V^* определяет объемную концентрацию C_0 включений.

Связь между векторами $\mathbf{g}(M)$ и $\mathbf{q}(M)$ соответственно градиента температурного поля и плотности теплового потока устанавливаются соотношения, следующие из гипотезы Био — Фурье [3]:

$$\mathbf{q}(M) = -\Lambda(M)\mathbf{g}(M), \quad \mathbf{g}(M) = -\mathbf{q}(M)/\Lambda(M),$$

где $\Lambda(M) = \lambda_0$ — коэффициент теплопроводности включений, если $M \in V_0^*$, и $\Lambda(M) = \lambda_m$ — коэффициент теплопроводности материала матрицы, если $M \in V_m^*$. После осреднения этих соотношений по объему V^* запишем

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q} \rangle &= \frac{1}{V^*} \int \mathbf{q}(M) dV(M) = -\frac{1}{V^*} \int \Lambda(M)\mathbf{g}(M) dV(M) = -\langle \Lambda \mathbf{g} \rangle; \\ \langle \mathbf{g} \rangle &= \frac{1}{V^*} \int \mathbf{g}(M) dV(M) = -\frac{1}{V^*} \int \frac{\mathbf{q}(M)}{\Lambda(M)} dV(M) = -\langle \mathbf{q} / \Lambda \rangle. \end{aligned} \quad (1)$$

Введем локальные отклонения (флуктуации) от средних значений

$$\mathbf{q}'(M) = \mathbf{q}(M) - \langle \mathbf{q} \rangle \quad \text{и} \quad \mathbf{g}'(M) = \mathbf{g}(M) - \langle \mathbf{g} \rangle, \quad M \in V^*.$$

В линейном приближении примем, что

$$\mathbf{q}'(M) = \hat{Q}(M)\langle \mathbf{q} \rangle \quad \text{и} \quad \mathbf{g}'(M) = \hat{G}(M)\langle \mathbf{g} \rangle, \quad M \in V^*,$$

где $\hat{Q}(M)$ и $\hat{G}(M)$ — тензоры второго ранга, зависящие от положения точки $M \in V^*$. Учитывая, что средние по объему V^* флуктуации равны нулю, равенства (1) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q} \rangle &= (\langle \Lambda \rangle + \langle \Lambda \hat{G} \rangle)\langle \mathbf{g} \rangle = \lambda_1^{\circ} \langle \mathbf{g} \rangle, \\ \langle \mathbf{g} \rangle &= (\langle 1/\Lambda \rangle + \langle \hat{Q}/\Lambda \rangle)\langle \mathbf{q} \rangle = \lambda_2^{\circ} \langle \mathbf{q} \rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\lambda_1^{\circ} = (\langle \Lambda \rangle + \langle \Lambda \hat{G} \rangle)$ и $\lambda_2^{\circ} = 1/(\langle 1/\Lambda \rangle + \langle \hat{Q}/\Lambda \rangle)$ — оценки значения λ^* эффективного коэффициента теплопроводности композита, связывающего осредненные по его представительному объему V^* векторы $\langle \mathbf{q} \rangle$ и $\langle \mathbf{g} \rangle$ плотности теплового потока и градиента температуры соответственно.

Из равенств (2) следует, что построенные оценки λ_1° и λ_2° в общем случае не совпадают со средними значениями $\langle \Lambda \rangle$ и $1/\langle 1/\Lambda \rangle$, равными соответственно

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \lambda_0 C_0 + \lambda_m (1 - C_0), \\ \lambda_2 &= 1/(C_0/\lambda_0 + (1 - C_0)/\lambda_m). \end{aligned} \quad (3)$$

Значения λ_1 и λ_2 можно рассматривать как оценки первого приближения по отношению к ис-

комому значению λ^* эффективного коэффициента теплопроводности композита, полученные на основе так называемой смесевой модели неоднородной среды [9], не учитывающей тепловое взаимодействие включений и матрицы композита. Для уточнения этих оценок требуется построение ММ, позволяющих учесть такое взаимодействие. Но предварительно установим, что оценки λ_1 и λ_2 являются двусторонними, т. е. оценивают возможные значения λ^* сверху и снизу.

Двусторонние оценки

Сначала, используя равенства (3), покажем, что $\lambda_1 \geq \lambda_2$, или

$$C_0^2 + (1 - C_0)^2 + C_0(1 - C_0)(\lambda_0/\lambda_m + \lambda_m/\lambda_0) \geq 1.$$

Действительно, неравенство справедливо, так как $\lambda_0/\lambda_m + \lambda_m/\lambda_0 \geq 2$.

Расположение возможного значения λ^* между оценками λ_1 и λ_2 можно установить, если воспользоваться двойственной вариационной формой модели процесса стационарной теплопроводности в неоднородном твердом теле [10, 11]. Эта модель включает минимизируемый функционал

$$J[\mathbf{g}] = \frac{1}{2} \int \Lambda(M)(\mathbf{g}(M))^2 dV(M) \quad (4)$$

и максимизируемый функционал

$$\begin{aligned} I[\mathbf{q}] &= -\frac{1}{2} \int \frac{(\mathbf{q}(M))^2}{\Lambda(M)} dV(M) - \\ &- \int_{S_T} f_T(P)\mathbf{q}(P) \cdot \mathbf{n}(P) dS(P), \end{aligned} \quad (5)$$

где $\mathbf{n}(P)$ — единичный вектор внешней нормали в точках $P \in S_T$ участков $S_T \subset S$ поверхности S , ограничивающей объем V^* неоднородного тела (на этих участках задано распределение температуры $f_T(P)$). Функционал (4) допустимо рассматривать на таких распределениях $T(M)$ ($M \in V^*$) температуры в этом теле, которым соответствуют кусочно непрерывные распределения вектора градиента $\mathbf{g}(M) = -\Lambda(M)\nabla T(M)$ (∇ — дифференциальный оператор Гамильтона) и которые удовлетворяют заданному граничному условию $T(P) = f_T(P)$, $P \in S_T$. При этом участки $S \setminus S_T$ поверхности тела должны быть идеально теплоизолированы. Для функционала (5) допустимыми являются непрерывные распределения вектора $\mathbf{q}(M)$, $M \in V$, удовлетворяющие дополнительным условиям $\nabla \cdot \mathbf{q} = 0$ в V^* и $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ на $S \setminus S_T$ [10].

Из экстремальных свойств функционалов (4) и (5) следует цепочка неравенств

$$J[\mathbf{g}] \geq J[\mathbf{g}^*] \geq I[\mathbf{q}], \quad (6)$$

где $\mathbf{g}^*(M)$, $M \in \bar{V}$, — истинное распределение градиента температурного поля в неоднородном теле.

На этом распределении функционал (4) достигает своего наименьшего значения, равного [11]

$$J[\mathbf{g}^*] = -\frac{1}{2} \int_{S_T} f_T(P) \Lambda(P) \mathbf{g}(P) \cdot \mathbf{n}(P) dS(P). \quad (7)$$

Пусть часть S_T поверхности S неоднородного тела объемом V^* состоит из двух не граничащих между собой изотермических участков S'_T и S''_T с заданными значениями температур T' и T'' соответственно. Эти участки отделены друг от друга идеально теплоизолированными участками поверхности S . В этом случае вместо равенства (7) получим

$$2J[\mathbf{g}^*] = T'Q' + T''Q'', \quad (8)$$

где Q' и Q'' — суммарные тепловые потоки, поступающие в область V^* через участки S'_T и S''_T ее поверхности соответственно, причем

$$Q' = - \int_{S'_T} \Lambda(P') \mathbf{g}^*(P') \cdot \mathbf{n}(P') dS(P');$$

$$Q'' = - \int_{S''_T} \Lambda(P'') \mathbf{g}^*(P'') \cdot \mathbf{n}(P'') dS(P'').$$

В силу закона сохранения тепловой энергии при установившемся процессе теплопроводности в неоднородном теле, занимающем область V^* , имеем $Q' + Q'' = 0$. Поэтому, учитывая равенство (8), получаем $Q' = -Q'' = 2J[\mathbf{g}^*]/(T' - T'')$. Отсюда находим термическое сопротивление рассматриваемого тела

$$R_T = (T' - T'')/Q' = (T' - T'')^2/(2J[\mathbf{g}^*]) \quad (9)$$

между изотермическими участками S'_T и S''_T поверхности S . Цепочка неравенств (6) и равенство (9) позволяют построить двусторонние оценки значения термического сопротивления R_T тела в виде

$$(T' - T'')^2/(2J_1[\mathbf{g}]) \leq R_T \leq (T' - T'')^2/(2I_1[\mathbf{q}]), \quad (10)$$

где $J_1[\mathbf{g}]$ и $I_1[\mathbf{q}]$ — значения функционалов (4) и (5) на каких-либо допустимых распределениях векторов соответственно градиента температурного поля и плотности теплового потока.

Если область V^* , соответствующую представительному объему композита, выбрать в достаточно простой форме, то после замены в этом объеме рассматриваемого композита однородным материалом с искомым значением λ^* эффективного коэффициента теплопроводности можно однозначно выразить через λ^* величину R_T в соотношении (10) и затем получить двусторонние оценки значения λ^* . Выберем представительный объем композита с объемной концентрацией C_0 включений в виде прямого цилиндра высотой H с идеально теплоизолированной боковой поверхностью и площадью S_0 каждого из оснований, т. е. в данном случае $V^* = HS_0$. Примем температуру одного из оснований за нуль отсчета, а температуру другого равной T_0 .

Для функционала (4) простейшим допустимым распределением вектора \mathbf{g} в таком объеме является постоянное значение $g = T_0/H$ единственной составляющей этого вектора, перпендикулярной основаниям цилиндра. Тогда из формулы (4) следует

$$J_1[g] = (T_0^2/2)(S_0/H)(\lambda_0 C_0 + \lambda_m(1 - C_0)). \quad (11)$$

Для максимизируемого функционала (5) в качестве допустимого распределения вектора \mathbf{q} можно принять значение q единственной составляющей этого вектора, также перпендикулярной основаниям цилиндра. В этом случае формула (5) примет вид

$$I_1[q] = -(q^2/2)HS_0(C_0/\lambda_0 + (1 - C_0)/\lambda_m) - qT_0S_0. \quad (12)$$

Значение q найдем из необходимого условия $dI_1(q)/dq = 0$ максимума функционала, что дает $q = -(T_0/H)/(C_0/\lambda_0 + (1 - C_0)/\lambda_m)$. После подстановки этого значения в формулу (12) получим

$$I_1[q] = (T_0^2/2)(S_0/H)/(C_0/\lambda_0 + (1 - C_0)/\lambda_m). \quad (13)$$

При замене композита в представительном объеме однородным материалом с коэффициентом теплопроводности λ^* для термического сопротивления цилиндра находим $R_T = H/(\lambda^*S_0)$ и с учетом неравенств (10) и формул (3), (11) и (13) получаем двусторонние оценки

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \lambda_0 C_0 + \lambda_m(1 - C_0) \geq \lambda^* \geq \\ &\geq 1/(C_0/\lambda_0 + (1 - C_0)/\lambda_m) = \lambda_2. \end{aligned}$$

На рис. 1 представлены построенные по формулам (3) графики зависимостей $\tilde{\lambda}_1 = \lambda_1/\lambda_m$ (штрих-пунктирные линии) и $\tilde{\lambda}_2 = \lambda_2/\lambda_m$ (штриховые линии) от C_0 при различных значениях $\bar{\lambda} = \lambda_0/\lambda_m$. При малом отличии значения $\bar{\lambda}$ от единицы разность $\Delta\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}_1 - \tilde{\lambda}_2$ сравнительно мала во всем промежутке изменения C_0 . По мере отклонения значения $\bar{\lambda}$ от единицы несмотря на совпадение оценок при $C_0 = 0$ и $C_0 = 1$ эта разность для промежуточных значений C_0 становится существенной. При фиксированном значении $\bar{\lambda}$ максимальному значению $(\Delta\tilde{\lambda})_{\max} = (1 - \sqrt{\bar{\lambda}})^2$ соответствует объемная концентрация включений $(C_0)_{\max} = 1/(1 + 1/\sqrt{\bar{\lambda}})$. Если в качестве первого приближения к искомому значению $\tilde{\lambda}^* = \lambda^*/\lambda_m$ принять

$$\tilde{\lambda}^* = (\tilde{\lambda}_1 + \tilde{\lambda}_2)/2, \quad (14)$$

то возможная относительная погрешность при $(C_0)_{\max}$ не превысит значения $\eta(\bar{\lambda}) = (\Delta\tilde{\lambda})_{\max}/(2\tilde{\lambda}^*)$.

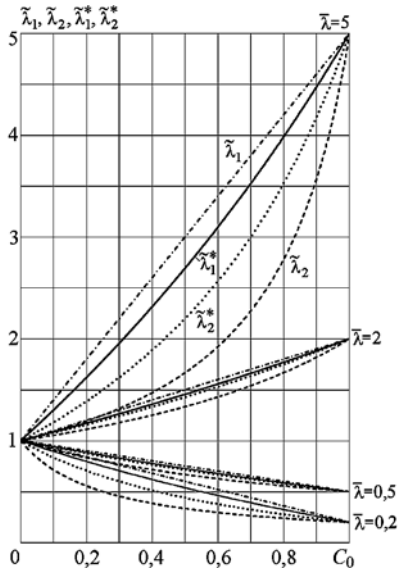


Рис. 1. Графики зависимостей безразмерных двусторонних оценок эффективного коэффициента теплопроводности композита от объемной концентрации включений при различных значениях параметра $\bar{\lambda}$

Двусторонние оценки можно сблизить, если использовать вариационный принцип Хашина — Штрикмана [12]:

при $\bar{\lambda} < 1$

$$\lambda_1^* = \lambda_1 - \frac{C_0(1-C_0)(\lambda_m - \lambda_0)^2}{\lambda_0(1-C_0) + \lambda_m(2+C_0)} \geq \lambda^* \geq \lambda_1 - \frac{C_0(1-C_0)(\lambda_m - \lambda_0)^2}{\lambda_0(3-C_0) + \lambda_m C_0} = \lambda_2^*, \quad (15)$$

а при $\bar{\lambda} > 1$

$$\lambda_1^* = \lambda_1 - \frac{C_0(1-C_0)(\lambda_0 - \lambda_m)^2}{\lambda_0(3-C_0) + \lambda_m C_0} \geq \lambda^* \geq \lambda_1 - \frac{C_0(1-C_0)(\lambda_m - \lambda_0)^2}{\lambda_0(1-C_0) + \lambda_m(2+C_0)} = \lambda_2^*. \quad (16)$$

Эти оценки совпадают с результатами, полученными в рамках обобщенного сингулярного приближения теории случайных функций [12] и учитывающими в формулах (2) влияние флуктуаций в распределениях векторов градиента температурного поля и плотности теплового потока, т. е. $\lambda_k^\circ = \lambda_k^*$, $k = 1, 2$. На рис. 1 по формулам (15) и (16) с учетом равенств (3) построены графики зависимостей $\tilde{\lambda}_1^* = \lambda_1^*/\lambda_m$ (сплошные кривые) и $\tilde{\lambda}_2^* = \lambda_2^*/\lambda_m$ (пунктирные линии) от C_0 при различных значениях $\bar{\lambda}$.

Разность $\Delta \tilde{\lambda}^* = \tilde{\lambda}_1^* - \tilde{\lambda}_2^*$ при промежуточных значениях C_0 также возрастает по мере отклонения

значения $\bar{\lambda}$ от единицы. При фиксированном значении $\bar{\lambda}$ наибольшего значения $(\Delta \tilde{\lambda}^*)_{\max}$ эта разность достигает при объемной концентрации $(C_0^*)_{\max} = (2\bar{\lambda} + \bar{\lambda}^2 - \sqrt{\bar{\lambda}(2+\bar{\lambda})(1+2\bar{\lambda})})/(\bar{\lambda}^2 - 1)$.

Для среднего арифметического значения $\tilde{\lambda}_*^* = (\tilde{\lambda}_1^* + \tilde{\lambda}_2^*)/2$ возможная относительная погрешность при $(C_0^*)_{\max}$ не превысит значения $\eta^*(\bar{\lambda}) = (\Delta \tilde{\lambda}^*)_{\max}/(2\tilde{\lambda}_*^*)$.

Необходимо отметить, что вычисленные по формуле (14) значения $\tilde{\lambda}^*$ выходят за пределы двусторонних оценок $\tilde{\lambda}_1^*$ и $\tilde{\lambda}_2^*$ при $\bar{\lambda} < 1$ по мере приближения C_0 к нулю, а при $\bar{\lambda} > 1$ по мере приближения C_0 к единице.

Модели теплового взаимодействия включения и матрицы

Представленные выше двусторонние оценки определяют границы возможных значений λ^* эффективного коэффициента теплопроводности композита без учета особенностей распределения температуры в матрице в непосредственной близости к включению. Учет влияния таких особенностей возможен в рамках ММ теплового взаимодействия включения и матрицы как в предположении идеального теплового контакта между ними [13], так и при наличии термического сопротивления на контактной поверхности [7]. В работе [15] построена ММ теплового взаимодействия изотропной матрицы с анизотропными шаровыми включениями.

При химическом взаимодействии материалов включения и матрицы между ними возможно образование промежуточного слоя с коэффициентом теплопроводности, отличающимся от коэффициентов теплопроводности как включения, так и матрицы. В работе [7] построены ММ, учитывающие наличие промежуточного слоя с постоянным или непрерывно изменяющимся по его толщине коэффициентом теплопроводности.

Рассмотрим подробнее этапы построения ММ, описывающей тепловое взаимодействие изотропной матрицы и отдельно взятого изотропного шарового включения в предположении, что соседние шаровые включения не контактируют между собой, т. е. отделены друг от друга слоем материала матрицы. Для учета взаимодействия между включениями и матрицей при идеальном тепловом контакте примем в качестве представительного элемента структуры композита составную шаровую частицу, состоящую из шарового включения с коэффициентом теплопроводности λ_0 и радиусом R_0 и окружающего его шарового слоя из материала

матрицы с коэффициентом теплопроводности λ_m и наружным радиусом R_m [14]. Эта частица в тепловом отношении взаимодействует с неограниченным массивом однородного материала, коэффициент теплопроводности λ которого подлежит определению как эффективная характеристика композита. Таким образом, модель композита содержит три фазы: включение; слой матрицы, неограниченный массив однородного материала.

Центр включения поместим в начале сферической системы координат. Примем, что на большом расстоянии $r \gg R_m$ от начала координат задан вектор градиента температурного поля в однородном материале, имеющий модуль g и направленный по оси сферической системы координат, от которой происходит отсчет угловой координаты θ , т. е. при $r \rightarrow \infty$ распределение температуры в этом материале описывает функция $T_\infty(r, \theta) = gr \cos \theta$. Эта функция удовлетворяет уравнению Лапласа, которое в сферических координатах имеет вид

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

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

По мере приближения к составной шаровой частице температурное поле в однородном материале претерпевает возмущение, описываемое также удовлетворяющим уравнению Лапласа дополнительным слагаемым $\Delta T(r, \theta) = (B/r^2) \cos \theta$ [7], где B — подлежащий определению постоянный коэффициент. Таким образом, температурное поле в однородном материале, удовлетворяющее заданному условию при $r \rightarrow \infty$ и уравнению Лапласа, описывает функция

$$T(r, \theta) = T_\infty(r, \theta) + \Delta T(r, \theta) = (gr + B/r^2) \cos \theta. \quad (17)$$

Аналогичные зависимости описывают распределения температуры в шаровом включении

$$T_0(r, \theta) = (A_0 r + B_0/r^2) \cos \theta \quad (18)$$

и в слое материала матрицы

$$T_m(r, \theta) = (A_m r + B_m/r^2) \cos \theta, \quad (19)$$

причем $B_0 = 0$ в силу ограниченности температуры включения при $r = 0$.

Таким образом, в равенства (17)—(19) входят четыре неизвестных коэффициента B , A_0 , A_m и B_m , которые необходимо найти из граничных условий на сферических поверхностях с радиусами R_0 и R_m . При $r = R_0$ из условий непрерывности распределе-

ния температуры и радиальной составляющей вектора плотности теплового потока следует

$$T_0(R_0, \theta) = T_m(R_0, \theta) \\ \text{и } \lambda_0 \partial T_0 / \partial r |_{r=R_0} = \lambda_m \partial T_m / \partial r |_{r=R_0}. \quad (20)$$

Отсюда с использованием равенств (18) и (19) при $B_0 = 0$ находим

$$A_0 = A_m + B_m/R_0^3 \text{ и } \bar{\lambda} A_0 = (A_m - 2B_m/R_0^3), \quad (21)$$

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

Из аналогичных условий непрерывности распределения температуры и радиальной составляющей вектора плотности теплового потока на сферической поверхности радиусом R_m с учетом формул (17) и (19) получим

$$A_m + B_m/R_m^3 = g + B/R_m^3 \\ \text{и } A_m - 2B_m/R_m^3 = \tilde{\lambda} (g - 2B/R_m^3), \quad (22)$$

где $\tilde{\lambda} = \lambda/\lambda_m$.

Последовательным исключением неизвестных из равенств (21) и (22) находим

$$\frac{B}{R_m^3} = 3g\tilde{\lambda} \times \\ \times \frac{2 + \bar{\lambda} + (1 - \bar{\lambda})(R_0/R_m)^3}{(2\tilde{\lambda} + 1)(2 + \bar{\lambda}) + (\tilde{\lambda} - 1)(1 - \bar{\lambda})(R_0/R_m)^3} - g. \quad (23)$$

Замена составной шаровой частицы равновеликим шаром радиусом R_m с искомым коэффициентом теплопроводности λ приведет к исчезновению возмущения температурного поля в окружающем частицу однородном материале. Тогда в равенстве (17) следует положить $\Delta T(r, \theta) = 0$, что равносильно условию $B = 0$, которое с учетом формулы (22) и равенства $(R_0/R_m)^3 = C_0$ позволяет записать

$$\tilde{\lambda} = (2 + \bar{\lambda} - 2(1 - \bar{\lambda})C_0)/(2 + \bar{\lambda} + (1 - \bar{\lambda})C_0). \quad (24)$$

Эта формула совпадает с известной формулой Максвелла [7], полученной на основе более простой двухфазной модели, состоящей из включения в виде сплошного шара и окружающего его материала матрицы. Результаты расчета по формуле (24) совпадают со значениями $\tilde{\lambda}_1^*$ при $\bar{\lambda} \leq 1$ и со значениями $\tilde{\lambda}_2^*$ при $\bar{\lambda} \geq 1$, так как в этих случаях равенство для $\tilde{\lambda}_1^*$, вытекающее из соотношения (15), и равенство для $\tilde{\lambda}_2^*$, следующее из соотношения (16), можно преобразовать к виду (24).

При объемной концентрации включений, близкой к единице, использованная при получении формулы (24) модель структуры композита, предполагающая наличие шарового слоя матрицы, окружающего каждое включение, становится неадекватной в силу того, что некоторые включения будут контактировать между собой. В этом случае можно

предположить, что частицы включений и матрицы меняются своими ролями, т. е. модель структуры композита представима в виде шаровых частиц из материала матрицы, окруженных шаровым слоем частиц из материала включений. Тогда после преобразований, аналогичных использованным при получении формулы (24), для эффективного коэффициента теплопроводности λ_* композита с близким к единице значением C_0 получим формулу

$$\tilde{\lambda} = \lambda_*/\lambda_m = \bar{\lambda}(2\bar{\lambda} + 1 - 2(\bar{\lambda} - 1)(1 - C_0))/(2\bar{\lambda} + 1 + (\bar{\lambda} - 1)(1 - C_0)).$$

Результаты расчета по этой формуле совпадают со значениями $\tilde{\lambda}_2^*$ при $\bar{\lambda} \leq 1$ и со значениями $\tilde{\lambda}_1^*$ при $\bar{\lambda} \geq 1$.

Используем еще один подход к построению ММ, которая описывает флуктуации градиента температурного поля во включениях и в частицах матрицы и позволяет получить оценку эффективного коэффициента теплопроводности композита. Если поместить шаровое включение с коэффициентом теплопроводности λ_0 и радиусом R_0 в начало сферической системы координат и окружить неограниченным массивом однородного материала с искомым коэффициентом теплопроводности λ , то при заданном на большом расстоянии $r \geq R_0$ модуле g градиента температурного поля в этом материале вместо равенств (18) и (19) можно записать

$$T^*(r, \theta) = (gr + B^*/r^2)\cos\theta \text{ и } T_0^*(r, \theta) = A_0^*r\cos\theta.$$

С учетом этих равенств из граничных условий вида (20) получим

$$A_0^* = g + B_m^*/R_0^3 \text{ и } \lambda_0 A_0^* = \lambda(g - 2B^*/R_0^3).$$

Отсюда находим модуль $A_0^* = 3g/(2 + \lambda_0/\lambda)$ градиента температурного поля в шаровом включении.

Матрицу композита в этой ММ представим в виде совокупности шаровых частиц различного радиуса, что позволит заполнить любой объем без пустот. Тогда в отдельно взятой частице матрицы при условиях теплового взаимодействия с однородным материалом, аналогичных взаимодействию его с шаровым включением, возникнет распределение температуры с модулем $A_m^* = 3g/(2 + \lambda_m/\lambda)$ градиента.

Рассматривая величины $A_0^* - g$ и $A_m^* - g$ как флуктуации модуля градиента в однородном материале, соответствующем композиту, и проводя осреднение этих флуктуаций по объему композита, получаем равенство $C_0(A_0^* - g) + (1 - C_0)(A_m^* - g) = 0$. Отсюда следует квадратное уравнение относительно обозначенного через λ^* искомого значения эффективного коэффициента теплопроводности

композита с такой моделью структуры. Решение этого уравнения можно представить в виде

$$\tilde{\lambda}^* = \frac{\lambda^*}{\lambda_m} = \frac{2 - \bar{\lambda} - 3(1 - \bar{\lambda})C_0 + \sqrt{(2 - \bar{\lambda} - 3(1 - \bar{\lambda})C_0)^2 + 8\bar{\lambda}}}{4}. \quad (25)$$

Если по объему композита осреднять флуктуации $\lambda_0 A_0^* - \lambda g$ и $\lambda_m A_m^* - \lambda g$ плотности теплового потока соответственно во включениях и частицах матрицы, то эта процедура также приводит к формуле (25).

Модели, учитывающие взаимное расположение включений

В рассмотренных выше подходах к построению ММ процесса теплопроводности в композите учтена лишь объемная концентрация шаровых включений и не принято во внимание их взаимное расположение. Обычно предполагают, что шаровые включения распределены по объему композита равномерно, но их взаимное расположение является случайным (хаотическим). Для изотропного композита матричной структуры [12] ее представительный элемент обычно рассматривают в виде куба, в центр которого помещают шаровое включение [16], а для однонаправленного трансверсально изотропного волокнистого композита представительным элементом структуры служит квадрат с расположенным в нем поперечным сечением волокна [16, 17].

В случае кубического представительного элемента с шаровым включением для получения верхней оценки эффективного коэффициента теплопроводности достаточно принять предположение о равномерном расположении в этом элементе изотермических плоскостей параллельно одной из граней куба. Такое распределение температуры допустимо для минимизируемого функционала (4), но оно отличается от истинного распределения, на котором этот функционал достигает минимума. Следовательно, вычисленная по этому распределению температуры тепловая проводимость представительного элемента будет выше истинной, что и приводит к верхней оценке λ_+ эффективного коэффициента теплопроводности композита, определяемой следующими формулами [12]:

$$\tilde{\lambda}_+ = \frac{\lambda_+}{\lambda_m} = \left(1 - r + \frac{1/(\bar{\lambda} - 1)}{2\pi p} \ln \frac{2p+r}{2p-r}\right)^{-1},$$

$$p = \sqrt{\frac{1}{\pi(\bar{\lambda} - 1)} + \frac{r^2}{4}}, \quad (26)$$

где $r = (6C_0/\pi)^{1/3} \leq 1$ — относительный радиус шарового включения.

Нижняя оценка этого коэффициента соответствует предположению о перпендикулярности линий

тока теплового потока той же грани куба. Такое распределение плотности теплового потока допустимо для максимизируемого функционала (5), но не совпадает с истинным распределением, на котором этот функционал достигает максимума. Поэтому вычисленная по этому распределению плотности теплового потока тепловая проводимость представительного элемента будет ниже истинной, что соответствует нижней оценке λ_- эффективного коэффициента теплопроводности композита, определяемой формулами [12]

$$\tilde{\lambda}_- = \frac{\lambda_-}{\lambda_m} = 1 - \pi \frac{r^2}{4} + \frac{\pi}{2b} \left(r - \frac{\ln(1+br)}{b} \right),$$

$$b = 1/\bar{\lambda} - 1. \quad (27)$$

Наряду с рассмотренной матричной структурой композита, армированного шаровыми включениями, изотропию по отношению к свойству теплопроводности обеспечивают еще два варианта их расположения, которым соответствуют представительные элементы в виде ячеек объемно центрированной (ОЦК) и гранецентрированной (ГЦК) кубических решеток кристаллов [11]. Верхние и нижние оценки эффективного коэффициента теплопроводности для таких структур могут быть получены путем, аналогичным использованному при выводе формул (26) и (27).

Сопоставление результатов расчетов

На рис. 2 для значения параметра $\bar{\lambda} = 100$, значительно отличающегося от единицы, приведены результаты расчетов с использованием формул (3), (15), (16), (25)–(27). Для рационального использования масштаба графика все рассчитанные размерные значения оценок эффективного коэффициента теплопроводности композита, зависящие от объемной концентрации C_0 включений, отнесены к текущим значениям верхней оценки λ_1 , также зависящей от C_0 . В соответствующих обозначениях этих безразмерных отношений применявшийся выше символ "тильда" (волнистая черта) заменен на "крышку" (например, вместо отношения $\tilde{\lambda}^\circ = \lambda^\circ/\lambda_m$, определяемого формулой (25), графики построены для отношения $\hat{\lambda}^\circ = \lambda^\circ/\lambda_1$).

Для сравнения сплошной кривой на рис. 2 представлена зависимость отношения $\hat{\lambda} = \lambda/\lambda_1$, от C_0 при тех же значениях $\bar{\lambda}$, полученная путем численного решения методом конечных элементов задачи стационарной теплопроводности в рассматриваемом кубическом представительном элементе структуры композита. Трехмерная область решения задачи была разбита на 92 743 конечных элемента в виде десятиузловых тетраэдров с квадратичными функциями формы [18] с общим числом 93 236 узлов. На верхней и нижней гранях куба были заданы температуры, равные соответственно единице и

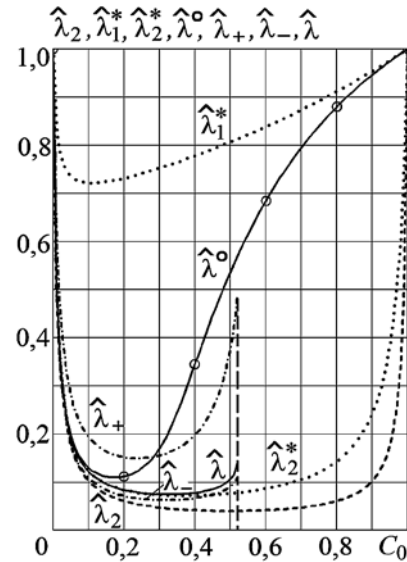


Рис. 2. Графики зависимостей безразмерных оценок эффективного коэффициента теплопроводности композита от объемной концентрации включений при $\bar{\lambda} = 100$

нулю, а боковые грани были приняты идеально теплоизолированными. Погрешность численного решения данной задачи оценивалась интегрально по значению $\Delta \tilde{Q} = |1 - Q_0/Q_1|$, где Q_0 и Q_1 — суммарные тепловые потоки, проходящие соответственно через нижнюю и верхнюю грани кубического представительного элемента. По мере отклонения значения $\bar{\lambda}$ от единицы и увеличения относительного радиуса r включения значения $\Delta \tilde{Q}$ возрастали, но при $\bar{\lambda} = 0,01$ и $\bar{\lambda} = 100$ не превысили 10^{-4} .

Вертикальная штриховая линия на рис. 2 соответствует предельному значению $\tilde{N}_0^W = \pi/6 \approx 0,5236$ объемной концентрации включений, возможной для выбранного представительного элемента матричной структуры композита при предельном значении $r = 1$ относительного радиуса шарового включения. Двусторонние оценки, рассчитанные по формулам (26) и (27), ограничивают более узкую полосу возможных значений эффективного коэффициента теплопроводности композита по сравнению с уточненными вариационными оценками, определяемыми формулами (15) и (16), и в этой полосе полностью находятся результаты численного решения и одна из уточненных оценок.

Заключение

Проведен сравнительный количественный анализ иерархической системы математических моделей переноса тепловой энергии в композите с шаровыми включениями, используемых для построения оценок эффективного коэффициента теплопроводности такого композита. С применением двойственной формулировки вариационной задачи стационарной теплопроводности в неоднородном твердом теле получены верхняя и нижняя границы возмож-

ных значений этого коэффициента. Для сближения границ использован вариационный принцип Хашина — Штрикмана. Установлена связь между оценками, полученными с применением этого принципа и обобщенного сингулярного приближения теории случайных функций.

С помощью ММ теплового взаимодействия однородного материала как с шаровыми включениями, так и с частицами матрицы выведена расчетная формула, обеспечивающая достоверную оценку искомого коэффициента теплопроводности этого материала во всем диапазоне возможного изменения объемной концентрации включений. Рассмотрены ММ, позволяющие учесть взаимное расположение включений в композите с матричной структурой.

Работа выполнена по гранту НШ-1432.2014.8 программы Президента РФ поддержки ведущих научных школ и гранту МК-6618.2013.8 программы Президента РФ поддержки молодых кандидатов наук.

Список литературы

1. **Норенков И. П.** Основы автоматизированного проектирования. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2000. 360 с.
2. **Норенков И. П.** Системы автоматизированного проектирования. Кн. 1. Принципы построения и структура. М.: Высш. шк., 1986. 124 с.
3. **Зарубин В. С.** Математическое моделирование в технике. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2010. 496 с.
4. **Зарубин В. С.** Моделирование. М.: Академия, 2013. 336 с.
5. **Зарубин В. С.** Математическое моделирование процессов в континуальных системах // Информационные технологии. 1995. № 0 (пилотный номер). С. 11—14.
6. **Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н., Станкевич И. В., Темис Ю. М.** Математическое моделирование термомеханических процессов. // Информационные технологии. 2005. № 9. С. 39—45.
7. **Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н., Савельева И. Ю.** Теплопроводность композитов с шаровыми включениями. Вывод, оценка достоверности и параметрический анализ расчетных формул. Saarbrücken, Deutschland: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2013. 77 с.
8. **Кап Е. А.** Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры. Родословная форм и идей. М.: Изд-во ЛКИ, 2008. 296 с.
9. **Головин Н. Н., Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н.** Смесеые модели механики композитов. Ч. 1. Термомеханика и термоупругость многокомпонентной смеси // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2009. № 3. С. 36—49.
10. **Зарубин В. С.** Инженерные методы решения задач теплопроводности. М.: Энергоатомиздат, 1983. 328 с.
11. **Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н.** Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2008. 512 с.
12. **Шермергор Т. Д.** Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977. 400 с.
13. **Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н., Савельева И. Ю.** Эффективный коэффициент теплопроводности композита с шаровыми включениями // Тепловые процессы в технике. 2012. № 10. С. 470—474.
14. **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—126.
15. **Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н., Савельева И. Ю.** Оценка эффективной теплопроводности композита с шаровыми включениями методом самосогласования // Наука и образование. Электрон. журн. 2013. № 09. URL: <http://technomag.edu.ru/doc/601512.html> (дата обращения 26.05.2014). DOI: 10.7463/0913.0601512.
16. **Coriell S. R., Jackson J. L.** Bounds on transport coefficients of two-phase materials // J. Appl. Phys. 1968. V. 39, N. 10. P. 4733—4736.
17. **Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н., Савельева И. Ю.** Влияние взаимного расположения волокон на теплопроводность однонаправленного волокнистого композита // Изв. вузов. Машиностроение. 2014. № 2. С. 20—28.
18. **Власова Е. А., Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н.** Приближенные методы математической физики. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. 700 с.

V. S. Zarubin, Prof., e-mail: Zarubin@bmstu.ru,
G. N. Kuvyrkin, Head of the department, e-mail: Fn2@bmstu.ru,
I. Yu. Savelyeva, Associated Prof., e-mail: Inga.Savelyeva@gmail.com,
Bauman Moscow State Technical University, Moscow

Hierarchical System of Mathematical Models of Heat Conduction in Composite Materials

Within hierarchical approach the multilevel system of mathematical models of the composite material describing heat transfer and thermal interaction between a matrix of a composite and reinforcing inclusions is constructed. This system is used for the comparative analysis of estimates of effective coefficient of heat conductivity — one of the key parameters defining scope of the concrete composite. On the basis of the dual formulation of a variation problem of stationary heat conductivity in a non-uniform solid body bilateral estimates of possible values of this coefficient are received. These estimates are specified by means of Hashin — Shtrikman's variation principle. The system of models is constructed in relation to dispersion strengthened composites with spherical inclusions. Mathematical models of heat transfer in a composite with the matrix structure, allowing to consider a relative positioning of inclusions, are considered. The bilateral estimates received on the basis of these models, limit narrower strip of possible values of effective coefficient of thermal conductivity of a composite in comparison with the specified bilateral estimates which follow from Hashin-Shtrikman's variation principle. Comparison of results of the quantitative analysis of the constructed merarkhichesky system of mathematical models allowed to draw conclusions on degree of adequacy of the constructed models.

Keywords: hierarchical approach, mathematical model, composite, spherical inclusions, effective coefficient of thermal conductivity

References

1. **Norenkov I. P.** Osnovy avtomatizirovannogo proektirovaniya. M.: Izd-vo MGTU im. N. Je. Baumana, 2000. 360 p.
2. **Norenkov I. P.** Sistemy avtomatizirovannogo proektirovaniya. Kn. 1. Principy postroeniya i struktura. M.: Vyssh. shk., 1986. 124 p.
3. **Zarubin V. S.** Matematicheskoe modelirovanie v tehnikе. M.: Izd-vo MGTU im. N. Je. Baumana, 2010. 496 p.
4. **Zarubin V. S.** Modelirovanie. M.: Izd. centr "Akademija", 2013. 336 p.
5. **Zarubin V. S.** Matematicheskoe modelirovanie processov v kontinual'nyh sistemah // Informacionnye tehnologii. 1995. N. 0. P. 11–14.
6. **Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Stankevich I. V., Temis Ju. M.** Matematicheskoe modelirovanie termomechanicheskikh processov // Informacionnye tehnologii. 2005. N. 9. P. 39–45.
7. **Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savel'eva I. Ju.** Teploprovodnost' kompozitov s sharovymi vkljuchenijami. Vyvod, ocenka dostovernosti i parametricheskij analiz raschetnyh formul. Saarbrücken, Deutschland: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2013. 77 p.
8. **Кас Е. А.** Fullereny, uglerodnye nanotrubki i nanoklastery. Rodoslovnaja form i idej. M.: Izd-vo LKI, 2008. 296 p.
9. **Golovin N. N., Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N.** Smesevye modeli mehaniki kompozitov. Ch. 1. Termomehanika i termouprugost' mnogokomponentnoj smesi // Vestnik MGTU im. N. Je. Baumana. Ser. Estestvennye nauki. 2009. N. 3. P. 36–49.
10. **Zarubin V. S.** Inzhenernye metody reshenija zadach teploprovodnosti. M.: Jenergoatomizdat, 1983. 328 p.
11. **Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N.** Matematicheskie modeli mehaniki i jelektrodinamiki sploshnoj sredy. M.: Izd-vo MGTU im. NJe. Baumana, 2008. 512 p.
12. **Shermergor T. D.** Teorija uprugosti mikroneodnorodnyh sred. M.: Nauka, 1977. 400 p.
13. **Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savel'eva I. Ju.** Jefferektivnyj koeficient teploprovodnosti kompozita s sharovymi vkljuchenijami // Teplovyje processy v tehnikе. 2012. N. 10. P. 470–474.
14. **Zarubin V. S., Kotovich A. V., Kuvyrkin G. N.** Ocenki jefferektivnogo koeficienta teploprovodnosti kompozita s anizotropnymi sharovymi vkljuchenijami // Izv. RAN. Jenergetika. 2012. N. 6. P. 118–126.
15. **Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savel'eva I. Ju.** Ocenka jefferektivnoj teploprovodnosti kompozita s sharovymi vkljuchenijami metodom samosoglasovanija // Nauka i obrazovanie. 2013. 09. URL: <http://technomag.edu.ru/doc/601512.html> (data obrashhenija 26.05.2014). DOI: 10.7463/0913.0601512.
16. **Coriell S. R., Jackson J. L.** Bounds on transport coefficients of two-phase materials // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. N. 10. P. 4733–4736.
17. **Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savel'eva I. Ju.** Vlijanie vzaimnogo raspolozhenija volokon na teploprovodnost' odnonapravlenno go voloknistogo kompozita // Izv. vuzov. Mashinostroenie. 2014. N. 2. P. 20–28.
18. **Vlasova E. A., Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N.** Priblizhennye metody matematicheskoj fiziki. M.: Izd-vo MGTU im. N. Je. Baumana, 2001. 700 p.

УДК 519.6

А. Н. Вдовин, канд. биол. наук, вед. науч. сотр., e-mail: vdovin@tinro-center.ru,
"ТИНРО-Центр", г. Владивосток,

А. Н. Четырбоцкий, д-р физ.-мат. наук, вед. науч. сотр., e-mail: chetyrbotsky@yandex.ru,
ДВГИ ДВО РАН, г. Владивосток,

В. А. Четырбоцкий, студент, e-mail: vel4232@gmail.com, МГУ им. М. В. Ломоносова

Компьютерное моделирование динамики роста рыб (на примере южного одноперого терпуга *Pleurogrammus azonus*). Часть II

На основании результатов анализа выборочного распределения длины и массы рыб разработаны численные модели их динамики, где учитывается ограниченность фазового пространства (конечность времени жизни, предельность длины и массы) и полагается функциональная связь между длиной и массой рыб, этапность их жизненного цикла и влияние сезонных факторов. Для оценки параметров проведена серия вычислительных экспериментов. Показано, что динамика длины определяется 18-месячной гармонической составляющей, а динамика масс — 12-месячной и 18-месячной составляющими. Выполнена предметная интерпретация полученных результатов.

Ключевые слова: выборочное распределение, численная модель, задача поиска минимума, адекватность модели

Введение

Для представления динамики параметров состояния рыб (массы, линейного роста и т. д.) обычно используют положение, согласно которому их отдельный индивид есть система составляющих его элементов (различных органов). Поскольку фиксированные значения параметров характеризуют систему (отдельную рыбу) в конкретном ее состоя-

нии (в том числе и ее возраст), то между ними существует определенная функциональная зависимость. Частный случай этой зависимости состоит в представлении связи между массой и линейным ростом (в дальнейшем просто ростом или длиной) посредством так называемой аллометрической формулы (в ней постулируется близость пропорциональности массы кубу длины). Поскольку длина