УДК 536.248

Н. Яворський, І. Фармага, У. Марікуца
Національний університет ”Львівська політехніка”,
кафедра систем автоматизованого проектування.

РОЗРОБЛЕННЯ ДИСКРЕТНОЇ МОДЕЛІ ЗНАХОДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНИХ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ ЗІ СКЛАДНОЮ СТРУКТУРОЮ

Описано спосіб розрахунку теплофізичних характеристик композитних матеріалів зі складною внутрішньою структурою на основі дискретної моделі, що будується за методом теплоелектричних аналогій.

Ключові слова: МСК, задача теплопровідності, композит, дискретна модель, теплоелектричні аналогії, побудова сітки, тріангуляція Делоне.

This paper consider the method of calculation the thermophysical characteristics of composite materials with complex internal structure based on the discrete model that is constructed by the method of thermal-electric analogies.

Key words: FEM, thermal analysis, composite, discrete model, thermal-electric analogies, mesh constructing, Delaunay triangulation.

Вступ

Вимогами до сучасних матеріалів є низька вартість і водночас унікальні фізико-хімічні властивості, тому зараз активно використовуються композитні матеріали. Теплофізичні характеристики композитів отримують експериментальним шляхом. Однак, важливе місце тут займають і модельні експерименти з використанням аналітичних, чисельних та чисельно-аналітичних методів [1].

Задачу розрахунку теплофізичних характеристик композитних матеріалів можна розглядати як обернену задачу теплопровідності, що є складовою частиною процесу теплового проектування технічних об'єктів, зокрема радіоелектронної апаратури [2].

Для розрахунку коефіцієнтів теплопровідності більшості композитних матеріалів різної структури виведено ряд емпіричних та напівемпіричних формул [3]. З іншого боку, ефективний коефіцієнт теплопровідності для композитів з регулярною структурою можна визначити на основі аналізу перенесення тепла в елементарній комірці. Для отримання простих наближених залежностей для $\lambda_{еф}$ часто проводять штучне дроблення комірки, в результаті чого вона набуває вигляду сукупності ділянок з паралельним і послідовним з’єднанням теплових опорів [1], [4]. Так можна уникнути необхідності проведення реальних експериментів та емпіричних розрахунків, а обмежитись лише процесами моделювання за допомогою ЕОМ.

Для синтезу ефективних теплофізичних параметрів композитних матеріалів складної структури ми пропонуємо використати аналогічну дискретну модель.

Постановка задачі, аналіз способів рішення

Стаціонарну задачу теплопровідності (закон Фур'є), за умови відсутності внутрішніх джерел тепла можна записати як (1).

$$-q = \lambda \nabla T = \lambda_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \lambda_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \tag{1}$$

де q – густина теплового потоку; λ – коефіцієнт теплопровідності середовища; ∇T – градієнт утвореного температурного поля [5].

Крім самого рівняння, для коректності постановки задачі теплопровідності необхідно вказати крайові умови (постановка крайової задачі).

Ефективний коефіцієнт теплопровідності $\lambda_{еф}$, який відображає здатність матеріалу проводити тепло, можна визначити як (2).

$$\lambda_{eff} = \frac{d_m}{R_T}, \tag{2}$$

$$R_T = \frac{\Delta T}{q}, \tag{3}$$

де d_m – товщина матеріалу; R_T – термічний опір; ΔT – стала різниця температур між сторонами тіла [6].

Метод скінченних елементів дає змогу моделювати складні задачі математичної фізики, ідея методу полягає в побудові дискретної моделі що апроксимує складну невідому функцію за допомогою скінченної множини простіших [6].

Математично метод скінченних елементів полягає в наближеному розв’язанні відповідно варіаційної задачі [7]. З погляду варіаційного аналізу складну диференціальну функцію (1), що описує фізичний процес, що проходить у деякій області, можна замінити певним функціоналом (4).

$$I[T] = \iiint_V \frac{1}{2}\left[\lambda_x\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \lambda_y\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2 + \lambda_z\left(\frac{\partial T}{\partial zf}\right)^2\right]dV + \iint_S q_S T dS\ . \tag{4}$$

Розбиваючи область на множину скінченних підобластей, функціонал подається сукупністю простих, переважно інтегральних функцій (5), кожну з яких визначено тільки в одній обмеженій підобласті, тобто функціонал, це так би мовити, функція від функції області.

$$I[T] = \sum_n I^{(n)}[T]\,. \tag{5}$$

Функцію області в загальному випадку можна подати в матричному вигляді (6)

$$\varphi^{(n)} = [N][\Phi], \tag{6}$$

де $[N]$ – це коефіцієнти впливу кожного з визначених вузлів підобласті, $[\Phi]$ – це шукані вузлові значення.

Варіаційна задача зводиться до мінімізації внутрішньої енергії функціонала (7)

$$\frac{\partial I[T]}{\partial[\Phi]} = \sum_n \frac{\partial I^{(n)}[T]}{\partial[\Phi]_{(n)}} = 0\,. \tag{7}$$

Для розв'язання такої задачі потрібно подати інтеграл (4) через вузлові значення функцій форми (6), для чого вводиться вектор часткових похідних (8)

$$[g^{(n)}] = \begin{Bmatrix} \dfrac{\partial\varphi^{(n)}}{\partial x} \\ \dfrac{\partial\varphi^{(n)}}{\partial y} \\ \dfrac{\partial\varphi^{(n)}}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial N_1^{(n)}}{\partial x} & \dfrac{\partial N_2^{(n)}}{\partial x} & \cdots \dfrac{\partial N_p^{(n)}}{\partial x} \\ \dfrac{\partial N_1^{(n)}}{\partial y} & \dfrac{\partial N_2^{(n)}}{\partial y} & \cdots \dfrac{\partial N_p^{(n)}}{\partial y} \\ \dfrac{\partial N_1^{(n)}}{\partial z} & \dfrac{\partial N_2^{(n)}}{\partial z} & \cdots \dfrac{\partial N_p^{(n)}}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_p \end{Bmatrix} \tag{8}$$

або

$$[g^{(n)}] = [B^{(n)}][\Phi]. \tag{9}$$

Для зручності також введемо матрицю коефіцієнтів теплопровідності (10)

$$[D^{(n)}] = \begin{bmatrix} \lambda_x & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_y & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_z \end{bmatrix}. \tag{10}$$

Використовуючи (5–10), задачу мінімізації функціоналу (4) можна записати у вигляді системи лінійних алгебраїчних рівнянь (11)

$$[B^T][D][B][\Phi] = [F] \tag{11}$$

або

$$[K][\Phi] = [F], \tag{12}$$

де $[K]$ – це коефіцієнти впливу кожного з визначених вузлів підобласті, разом із внеском граничних умов; $[\Phi]$ – це шукані вузлові значення температур; $[F]$ – це коефіцієнти навантажень, що також зумовлені наявністю граничних умов.

Отже, задача математичної фізики (1) зводиться до розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь (12), що є тривіальною задачею, яка легко обчислюється за допомогою комп'ютера.

Іншим, не менш ефективним способом розв’язання задачі теплопровідності, є метод електричних аналогій [4], [5]. Електрична аналогія основана на формальній подібності диференціальних рівнянь теплопровідності, з одного боку, та рівнянь електропровідності – з іншого.

За законом Ома, густина потоку електричного струму пов'язана з напруженістю електричного поля, що, своєю чергою, пов'язана з потенціалом (13)

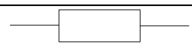
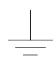
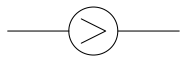
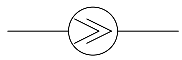
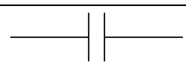
$$-J = -\frac{I}{A} = \sigma\nabla V = \sigma_x \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}, \tag{13}$$

де I – це сила струму;У A – площа поверхні, перпендикулярно якій протікає струм; σ – це коефіцієнт електропровідності; ∇V – це градієнт утвореного електричного поля [8]. Очевидно, що рівняння (1) та (13) є подібними.

Завдяки такому підходу задачу теплопровідності можна розв’язувати на основі аналізу теплового кола, що будується за допомогою аналогій відповідних теплових і електричних елементів (табл. 1) [4].

Таблиця 1

Елементи аналогій теплового та електричного кіл

Елемент теплової схеми	Електрична аналогія	Графічне позначення
Ізотермічна поверхня чи об'єм	Провідник	
Ідеальний тепловий зв'язок	Резистор	
Зосереджений тепловий опір (провідність)	Земля	
Джерело температурного напору (конвекція)	Джерело напруги	
Джерело теплового потоку (заданий тепловий потік)	Джерело струму	
Теплова ємність	Конденсатор	

Синтез дискретної моделі

Розглядаючи стаціонарну задачу теплопровідності для синтезу ефективного коефіцієнта теплопровідності, нас переважно цікавить тепловий опір. Згідно з [1, 4] тепловий опір вводиться за допомогою розбиття вже відомого температурного поля на сукупність елементарних комірок за допомогою ізотермічних та адіабатичних поверхонь, як це показано на рис. 1.

Такий підхід є актуальним, якщо можна передбачити температурне поле, наприклад, коли структура композиту є простою, багатошаровою з однорідними шарами. Якщо структура є складною, наприклад, із вкрапленнями різної форми та розмірів, то виникають проблеми у побудові теплового кола, оскільки температурне поле буде неоднорідним. У такому випадку в [1] пропонується вдаватись до спрощень структури та усереднень під час обчислень.

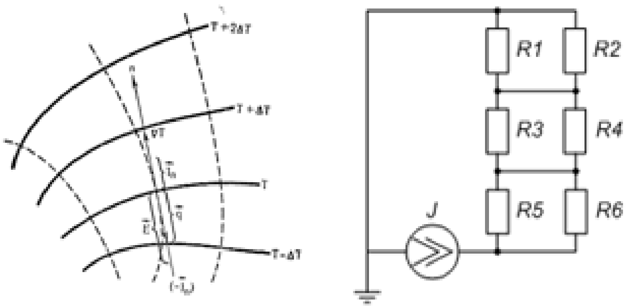


Рис. 1. Температурне поле, розбите на елементарні комірки, та відповідне теплове коло

Для синтезу ефективних теплофізичних параметрів композитних матеріалів складної структури ми пропонуємо використовувати дискретну модель у вигляді розбиття композита на скінченні симплекс-елементи, після чого вже на основі розбиття будувати теплове коло та його аналізувати.

На основі методу електричних аналогій кожен симплекс-елемент можна подати у вигляді набору опорів [9], наприклад, розглянемо двовимірний симплекс-елемент (трикутник) (рис. 2).

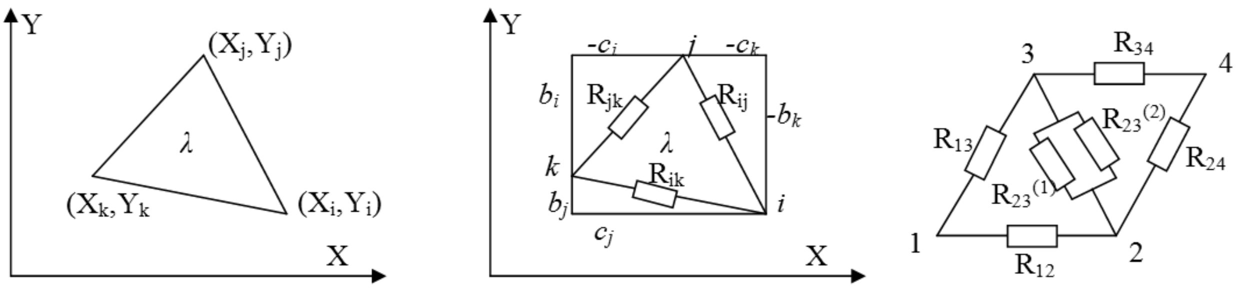


Рис. 2. Схема теплового кола на основі трикутного симплекс-елемента
та приклад з'єднання двох трикутних елементів

Значення опорів на рис. 2 можна подати як:

$$\frac{1}{R_{ij}} = Y_{ij} = \frac{1}{2}\lambda \frac{b_i b_j + c_i c_j}{b_i c_j - c_i b_j}\,; \tag{14}$$

$$\frac{1}{R_{ik}} = Y_{ik} = \frac{1}{2}\lambda \frac{b_i b_k + c_i c_k}{b_i c_k - c_i b_k}\,; \tag{15}$$

$$\frac{1}{R_{jk}} = Y_{jk} = \frac{1}{2}\lambda \frac{b_j b_k + c_j c_k}{b_j c_k - c_j b_k}\,. \tag{16}$$

З іншого боку, функція форми для трикутного елемента має вигляд, як показано на рис. 3.

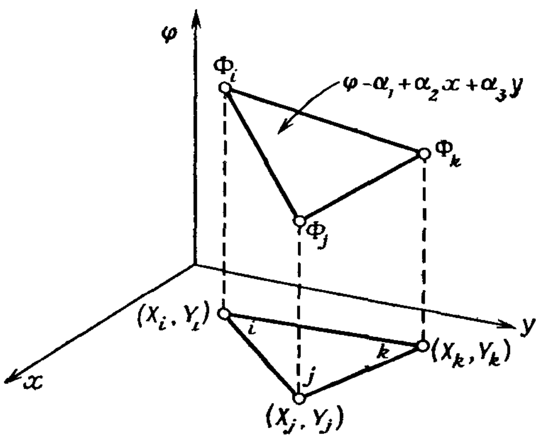


Рис. 3. Двовимірний симплекс-елемент та його функція форми

Або, аналогічно до (6), до функції форми можна записати в матричному вигляді (17).

$$\varphi = N_i\Phi_i + N_j\Phi_j + N_k\Phi_k = [N][\Phi] \tag{17}$$

де

$$N_i = \frac{1}{2A}\left[a_i + b_i x + c_i y\right] \text{ та } \begin{cases} a_i = X_j Y_k - X_k Y_j \\ b_i = Y_j - Y_k \\ c_i = X_k - X_j \end{cases} \tag{18}$$

$$N_j = \frac{1}{2A}\left[a_j + b_j x + c_j y\right] \text{ та } \begin{cases} a_j = X_k Y_i - X_i Y_k \\ b_j = Y_k - Y_i \\ c_j = X_i - X_k \end{cases} \tag{19}$$

$$N_k = \frac{1}{2A}\left[a_k + b_k x + c_k y\right] \text{ та } \begin{cases} a_k = X_i Y_j - X_j Y_i \\ b_k = Y_i - Y_j \\ c_k = X_j - X_i \end{cases} \tag{20}$$

$$2A = \begin{vmatrix} 1 & X_i & Y_i \\ 1 & X_j & Y_j \\ 1 & X_k & Y_k \end{vmatrix} \tag{21}$$

Тобто побудоване теплове коло симплекс-елемента відповідає його функції форми.

Для аналізу побудованого теплового кола розглянемо метод вузлових потенціалів [10]. Метод вузлових потенціалів – це метод розрахунку електричних кіл шляхом запису системи лінійних алгебраїчних рівнянь, в якій невідомими є потенціали у вузлах кола. У результаті застосування методу визначаються потенціали у всіх вузлах ланцюга, а також, за необхідності, струми у всіх контурах.

У матричному вигляді система рівнянь для методу вузлових потенціалів виглядає так (22):

$$[A][Y][A^T][U] = -A(J + YE), \tag{22}$$

де $[A]$ – це матриця з'єднань; $[Y]$ – діагональна матриця провідностей; $[U]$ – шукані вузлові потенціали; $[J]$ – джерела струму; $[E]$ – джерела напруги.

Враховуючи електричні аналогії (табл. 1) та те, що теплове коло, складене з опорів (14–16), відповідає функції форми симплекс-елемента (17–21), рівняння (22) можна записати у вигляді (23):

$$[K][U] = [F], \tag{23}$$

де $[K]$ – це коефіцієнти впливу кожного з визначених вузлів; $[F]$ – це коефіцієнти навантажень, що зумовлені наявністю джерел струму чи напруги (наявністю граничних умов).

Тобто система рівнянь (12) ідентична системі рівнянь (23).

Отже, будь-яку складну структуру композитних матеріалів, де розглядається процес теплопровідності, можна подати у вигляді сітки термічних опорів.

Аналіз методів побудови скінченно-елементних сіток

Слід зауважити, що скінченний елемент дає найкращу апроксимацію шуканої величини, коли значення у його вузлах не відрізняються [7]. Для уникнення зайвих обчислень область потрібно розбивати на скінченні елементи так, щоб їх кількість збільшувалася тільки з наближенням до зон, де шукані вузлові значення починають сильно відрізнятися в межах одного елемента. Такими зонами є границі переходів від одного матеріалу в інший.

Іншим критерієм, що впливає на точність апроксимації шуканої неперервної величини, є форма скінченного елемента. Для уникнення похибок апроксимації скінченний елемент має бути рівностороннім.

Існують два основні класи методів побудови сіток (тріангуляції) – прямі та ітераційні [11]. За прямими методами сітка будується за один етап, причому її топологія (інакше кажучи, граф зв'язків між вузлами) і координати всіх вузлів відомі спочатку. За ітераційними методами сітка будується послідовно, на кожному кроці додається один або кілька елементів, причому спочатку не відомі ні координати вузлів, ні топологія сітки. Крім того, координати вузлів і топологія можуть змінюватися безпосередньо в процесі побудови.

Ітераційні методи на основі критерію Делоне є, мабуть, найпоширенішими методами тріангуляції для методу скінченних елементів, які дозволяють повністю автоматизувати процес побудови скінченно-елементної сітки, що відповідає заданим критеріям.

Кажуть, що тріангуляція задовольняє умову Делоне, якщо всередину кола, описаного навколо будь-якого побудованого трикутника, не потрапляє жодна із заданих точок тріангуляції [12]. Тріангуляція Делоне має низку цікавих властивостей, зокрема відомо, що тріангуляція Делоне на заданій множині точок має максимальну суму мінімальних кутів елементів, тобто є оптимальною.

Проте, алгоритми побудови тріангуляції на основі критерію Делоне не можна використовувати для методу скінченних елементів, без певної модифікації. Такою модифікацією є уточнення Раперта [13], що дає змогу створити такий набір точок, на якому мінімальні кути тріангуляції не були б меншими за заданий поріг, тобто наблизити форми елементів до рівносторонніх (рис. 4).

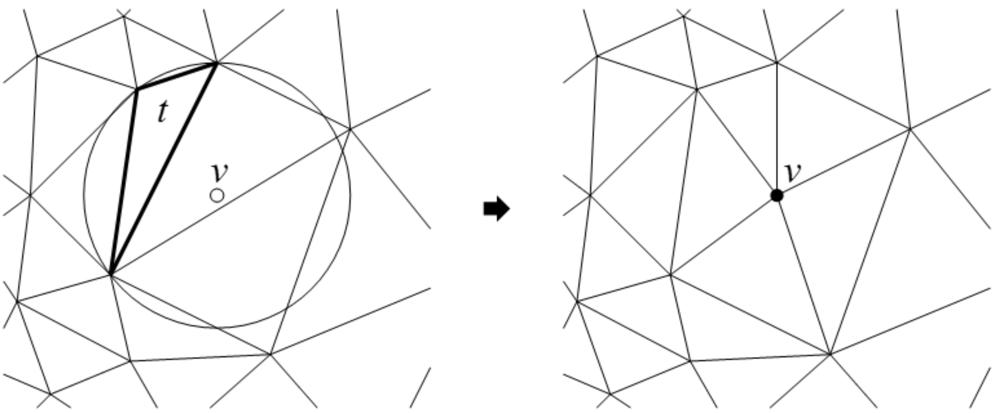


Рис. 4. Приклад роботи алгоритму Раперта:
t – нерівносторонній трикутник; v – центр описаного навколо t кола

Тому для побудови скінченно-елементної сітки ми використовуємо ітераційний алгоритм прямої побудови тріангуляції Делоне (метод прогресивного фронту) з уточненням Раперта [14]. Подібні алгоритми можна застосовувати для задач з будь-якою розмірністю.

Висновки

Зусилля багатьох фізиків, хіміків та технологів напрямлені на розроблення матеріалів з наперед заданими властивостями. Вважають, що достатньо достовірні дані про фізичні властивості переважної більшості речовин може дати тільки досвід, а про властивості нових матеріалів слід судити тільки після того, як їх буде створено та досліджено [1].

Завдяки методу аналогій задачу теплопровідності можна розв’язувати на основі аналізу теплового кола, що будується за допомогою аналогій між тепловими і електричними елементами.

Запропонована дискретна модель дає змогу описувати будь-яку складну внутрішню структуру композитних матеріалів, де розглядається процес теплопровідності, і завдяки цьому знаходити ефективні теплофізичні характеристики (рис. 5) уникаючи необхідності проводити емпіричні дослідження.

Отже, за допомогою описаної дискретної моделі можна:

- Розв'язувати задачу теплопровідності відносно композитних матеріалів зі складною структурою;
- Враховувати нелінійності процесів теплопровідності, неоднорідності середовища;
- Знаходити ефективні усереднені фізичні властивості матеріалів;

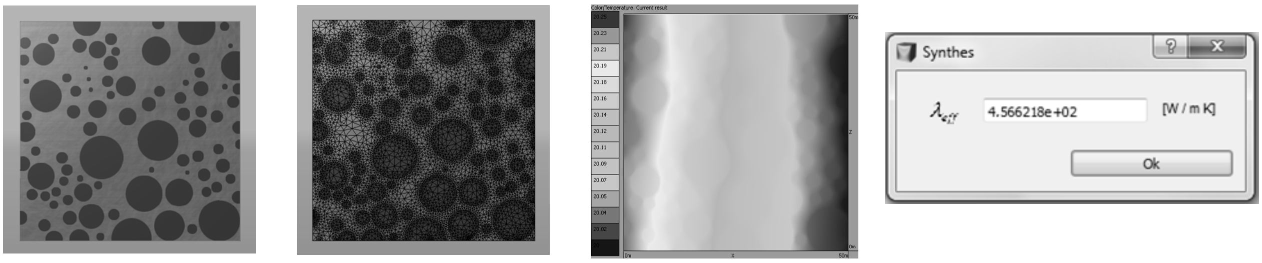


Рис. 5. Приклад розрахунку ефективного коефіцієнта теплопровідності для композита з сферичними вкрапленнями

1. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П., Теплопроводность смесей и композиционных материалов: Справочная книга. – Л.: Энергия, 1976. 2. Lobur M., Farmaga I., Marikutsa U., Matviykiv O., Ciupinski L., Analysis and Problem Statement of the Optimal Thermal Design of Technical Objects // Proc. of the International Conference Microtechnology and Thermal, Lodz, Poland, 2011. 3. Шевченко В.Г., Основы физики полимерных композиционных материалов. – М., 2010. 4. Дульнев Г.Н. Тепло- и массообмен в радиоэлектронной аппаратуре. – М.: Высшая школа, 1984. 5. Лыков А.В., Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. 6. ДСТУ Б В.2.7-105-2000 (ГОСТ 7076-99) Матеріали і вироби будівельні. Метод визначення теплопровідності і термічного опору при стаціонарному тепловому режимі. – К.: Видання офіційне, 2001. 7. Segerlind L., Применение метода конечных элементов, пер. А.А. Шестакова, Б.Е. Победри. – М.: Мир, 1979. 8. Lienhard J.H. IV, Lienhard J.H. V, A Heat transfer textbook – 3rd ed. // Cambridge, Massachusetts, 2001. 9. Komarudin M. – Resistor network analogy of non-obtuse finite element model for electrical impedance tomography // Lampung Indonesia, 2010.10. Нейман Л.Р., Демирчан К.С. Теоретические основы электротехники: Учебник для вузов. В 2-х т. Т. 1, – 3-е изд., перераб. и доп. – Л.: Энергоиздат, Ленингр. отд-ние, 1981. 11. Галанин М.П., Щеглов И.А., Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей: итерационные методы. – М., 2006. 12. Скворцов А.В., Триангуляция Делоне и её применение. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. 13. Shewchuk J.R., Delaunay Refinement Mesh Generation // Pittsburgh, 1997. 14. Farmaga, Lobur M., Shmigelskyi P., Javorskyi N., Śpiewak P. – Regular and Adaptive Meshing Algorithms for Modeling of Spherical Inclusions by Finite Element Method.// TCSET'2012. Lviv–Slavske, 2012.