

Исследование особенностей теплопроводности структурной единицы твердого тела

А. А. МОЧАЛОВ, К. Д. ЕВФИМКО, Н. А. ШАПОВАЛ

Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова

Описана математическая модель, методика и результаты расчета процесса теплопереноса в кристаллическом твердом теле на основе метода структурных единиц с учетом дискретности микроструктуры вещества.

Описано математичну модель, методику та результати розрахунку процесу теплопереносу в кристалічному твердому тілі на основі методу структурних одиниць з урахуванням дискретності мікроструктури речовини.

The mathematical model, method and calculated results of heat transfer process based on solid structural unit method are presented.

На сегодняшний день, ввиду относительной доступности вычислительных мощностей, в частности параллельных вычислительных систем [1-3], появляется все больше математических моделей твердых тел, а вместе с тем и осознание необходимости учитывать динамические характеристики моделируемых систем. Особое внимание на сегодняшний день уделяется микроструктурным изменениям и процессам, протекающим в объекте. Анализ показывает, что в большинстве математических моделей подразумевается, что термодинамические, механические и деформационные характеристики макрообъекта, полученные в результате моделирования или физического эксперимента, могут быть перенесены на структурную единицу вещества, тем самым применены для нано- и микроструктурного моделирования. Экспериментальное изучение упругих, механических и термодинамических характеристик объектов и систем микромира весьма затруднительно или напрямую невозможно. Многие исследователи отмечают несоответствие между макроскопическими и микроскопическими характеристиками [4-7]. Существуют исследования [8,9], которые показывают, что в случае моделирования трехмерных кристаллов расхождение между значениями характеристик материала на макро и микроуровне еще более существенно, что обусловлено дискретностью микроструктуры. Вышеописанное позволяет сделать вывод, что необходимой сегодня является разработка математических моделей, позволяющих адекватно описать физические процессы, протекающие на микроуровне в кристаллических телах с учетом существенного расхождения макро- и микроскопических параметров вещества и их изменения во времени и по координате.

Согласно классической механики сплошных сред [10], в основе которой лежит условие однородности физических свойств твердого тела (вещества), физические свойства имеют одинаковые значения в любой точке данного вещества. Другими словами - тело однородно. Для таких тел выражение для притока тепла к телу за счет теплопроводности подчиняется закону Фурье:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\lambda}{\rho} \operatorname{divgrad} T = \frac{\lambda}{\rho} \left(\frac{d^2 T}{dx^2} + \frac{d^2 T}{dy^2} + \frac{d^2 T}{dz^2} \right), \quad (1)$$

где dq - приток тепла, отнесенный к единице массы;

λ - коэффициент теплопроводности;

ρ - плотность вещества;

T - температура тела в соответствующей точке.

В это уравнение не входят физические величины, которые описывают физические свойства вещества, такие как теплоемкость, размер структурной единицы, молярная масса вещества. Также не учитывается взаимодействие атомов данного вещества между собой.

Однако, в процессе прогрева твердого тела, его температура будет изменяться, и в каждый момент времени будет иметь место вполне определенный закон распределения температуры по координате. Повышение температуры приведет к неоднородности твердого тела, так как изменятся теплоемкость и плотность в соответствующих точках вещества. Эти величины оказывают существенное влияние на распределение температуры в твердом теле, так как обладают аккумулятивными свойствами. Понятия классической механики сплошной среды, теории упругости, термодинамики, тепло- и массопереноса должны применяться при моделировании микроструктур с учетом изменения их величин, и математические модели процессов деформации и теплопереноса в кристаллических твердых телах должны разрабатываться с учетом этих факторов.

Если исходить из физической сущности явления теплопроводности, рассмотренной в молекулярно-кинетической теории, то количество тепла, передаваемое в единицу времени $\frac{dq}{dt}$, через единицу площади S ,

при градиенте температуры, равном единице $\frac{dT}{dx} = 1$,

можно записать так:

$$\frac{dq}{dt} = -\lambda \frac{dT}{dx} S \quad (2)$$

Из этого соотношения и возникает физический смысл коэффициента теплопроводности.

Перейдем к рассмотрению явления теплопроводности в структурной единице. Любая кристаллическая микроструктура является, по сути, дискретной структурой, поскольку состоит из связанных между собой атомов или молекул вещества, с определенными сосредоточенными массами в узлах кристаллической решетки, или системой дискретных структур, соединенных межатомными связями. Размеры структурной

единицы измеряются в ангстремах, а атомы распределены в пространстве, и находятся в узлах кристаллической решетки, на ее гранях или в центре, в зависимости структурной конфигурации данного вещества. Поскольку структурная единица не является однородной сплошной средой, то можно сказать, что в структурной единице невозможно распространение тепла, описываемое классическим понятием теплопроводности, поскольку между атомами вещества находится вакуум, а атомы вещества тесно связаны силами межатомного взаимодействия. В отличие от молекул газа, атомы кристаллического твердого тела не могут свободно перемещаться в пространстве. Кроме того, согласно принципу запрета, атомы не могут поглощать или излучать непрерывный спектр электромагнитного излучения. Однако, нагретые тела излучают непрерывный спектр электромагнитных волн при любой температуре. Следовательно, необходимо ответить на вопрос, откуда и как возникает электромагнитное излучение данных частот. Предположим, что нам известен потенциал межатомного взаимодействия [11-13], который определяет положение атомов в структурной единице и силу их связи. Во многих источниках указывается, что атомы находятся в постоянном колебательном движении, как целое, обладающее массой m , и атом можно представить как осциллятор. Однако, нигде не описано, за счет чего колеблющаяся масса может поглощать и излучать электромагнитное излучение непрерывного спектра. Остается открытым вопрос, что может заставить колебаться атомы в кристаллической решетке, и какой физический механизм накопления тепловой и электромагнитной энергии в межатомном пространстве структурной единицы.

Анализируя вышеописанное, можно предположить, что тепловая (электромагнитная) энергия аккумулируется в межатомном вакууме. При нагревании он переходит в возбужденное состояние, поглощая весь спектр электромагнитного (теплого) излучения других тел, а при охлаждении, соответственно, переходя в невозбужденное состояние, излучает весь этот же спектр.

Для исследования влияния теплопроводности и теплоемкости на распространение тепловой энергии в структурной единице вещества воспользуемся феноменологической моделью. Для того, чтобы можно было использовать уравнение (2) применительно к дискретной, по сути, структурной единице твердого тела, необходимо привести ее к однородности, распределив массу атомов по объему: разбить объем структурной единицы на ячейки в направлении распространения тепла. Количество ячеек определяется из соотношения $\Delta r = \frac{a_0}{N}$, где

Δr - размер ячейки в направлении распространения тепла, a_0 - размер структурной единицы в начальный момент времени, N - число разбиений (см. рис. 1). К правой грани структурной единицы присоединим термостат с постоянной температурой T_1' , будем считать, что все ячейки структурной единицы находятся в начальный момент времени при температуре $T_0 \leq T_1'$;

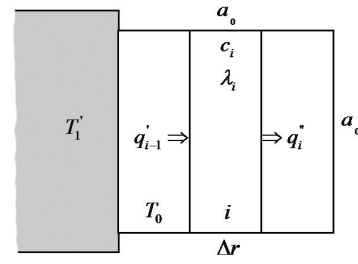


Рис. 1. Схема ячейки структурной единицы твердого тела.

Запишем для i -той ячейки закон сохранения энергии:

$$\frac{d(c_i m T_i'')}{dt} = q_{i-1}' - q_i'' \quad (3)$$

где одним штрихом обозначены соответствующие параметры на входе в ячейку, двумя штрихами – соответствующие параметры на выходе из ячейки, c_i - теплоемкость ячейки при данной температуре, m - масса ячейки.

Распишем это уравнение, перейдя к приращению: $\Delta T_1' = T_1' - T_0$, $\Delta T_i' = \Delta T_{i-1}'$:

$$c_i m \frac{dT_i''}{dt} = -(\lambda a_0^2 \frac{\Delta T_{i-1}''}{\Delta r} - \lambda a_0^2 \frac{\Delta T_i''}{\Delta r}) \quad (4)$$

Решив это уравнение при начальных условиях $t = 0$, $\Delta T_i' = T_{i-1}''$ операционным методом, получим общее решение для произвольного числа разбиений на элементы структурной единицы:

$$\Delta T_i'' = \Delta T_1' \left[1 - \frac{e^{-At}}{i-1} \sum_{m=1}^i \frac{(At)^{i-m}}{\prod_{l=1}^{m-1} (i-l)!} \right] \quad (5)$$

где: $\Delta T'$, $\Delta T''$ изменение приращения температуры на входе и на выходе ячейки соответственно. $A = \frac{\lambda}{c_i \rho \Delta r^2}$ -

постоянная.

λ - коэффициент теплопроводности;

c_i - теплоемкость i -того элемента;

ρ - плотность тела(структурной единицы);

Δr - размер ячейки по направлению градиента температуры

Скорость изменения температуры i -той ячейки на выходе будет:

$$\frac{d\Delta T_i''}{dt} = \Delta T_1' A \frac{e^{-At}}{\prod_{l=1}^{i-1} (i-l)!} \sum_{m=1}^i \frac{(At)^{i-m}}{(i-m)!} \left[At - \frac{i}{2}(i-1) \right] \quad (6)$$

Градиент температуры i -той ячейки на выходе из ячейки в данный момент времени:

$$\frac{d\Delta T_i''}{d\Delta r} = -\frac{\Delta T_1'}{\Delta r} \frac{e^{-At}}{\prod_{l=1}^{i-1} (i-l)!} \sum_{m=1}^i \frac{(At)^{i-m}}{(i-m)!} \left[At - \frac{i}{2}(i-1) \right] \quad (7)$$

В выражениях (4)-(7) в начальный момент времени теплоемкость равна первоначальной, при $\Delta T_i'' = 0$, $c_i = c_0$. В последующие моменты времени она пересчитывается в каждой ячейке, в зависимости от температуры и от количества аккумулируемой каждой ячейкой энергии $q_i(t)$.

Изменение среднеинтегральной температуры в i -той ячейке со временем будет:

$$\bar{T}_i(t) = \frac{\int_{t_1}^{t_2} \Delta T_i'' dt}{\int_{t_1}^{t_2} dt} \quad (8)$$

В общем виде, в выражения (5), (6), (7) входят величины, описывающие физические свойства данного вещества, которые зависят от времени t .

Тогда приращение температуры в i -той ячейке структурной единицы в общем виде для произвольного момента времени t_j на выходе из ячейки, запишется так:

$$\Delta T_{ij}'' = \Delta T_1' f_1(\lambda_{i-1}, c_{i-1}, \rho_{i-1}, a_0, \Delta T_{i-1,j}'') \quad (9)$$

Аналогично, изменение температуры на выходе из i -той ячейки в момент времени t_j :

$$\frac{d\Delta T_{ij}''}{dt} = \Delta T_1' f_2(\lambda_{i-1}, c_{i-1}, \rho_{i-1}, a_0, \Delta T_{i-1,j}'') \quad (10)$$

Градиент температуры в i -той ячейке в момент времени t_j :

$$\frac{d\Delta T_{ij}''}{dr} = \frac{\Delta T_1'}{\Delta r} f_3(\lambda_{i-1}, c_{i-1}, \rho_{i-1}, a_0, \Delta T_{i-1,j}'') \quad (11)$$

В результате решения получим величины $\Delta T_{ij}''$, $\frac{d\Delta T_{ij}''}{dt}$, $\frac{d\Delta T_{ij}''}{d\Delta r}$, $\Delta \bar{T}_{ij}$ для каждой ячейки i . в каждый момент времени j . Поскольку начальные значения $\lambda_i, c_i, \rho_i, a_0, \Delta T_i'$ известны, используя выражения (9)-(11) можно рассчитать количество тепла, аккумулированное в i -той ячейке за время $\Delta t = t_j - t_{j-1}$, и, используя физический смысл теплоемкости, рассчитать приращение теплоемкости в i -той ячейке за данный промежуток времени:

$$\Delta c_{ij} = \frac{dQ_{ij}}{dt} \frac{1}{\bar{T}_{ij}} = - \frac{\lambda_{i,j-1} a_0^2}{\Delta \bar{T}_{ij}} \frac{d\Delta T_{ij}''}{d\Delta r} \quad (12)$$

Результирующую теплоемкость i -той ячейки в произвольный момент времени t_j будет:

$$c_{ij} = c_0 + \sum_1^j \frac{\lambda_{i,j-1} a_0^2}{\Delta \bar{T}_{ij}} \frac{d\Delta T_{ij}''}{d\Delta r} \Delta t \quad (13)$$

Соответственно, результирующая теплоемкость структурной единицы в произвольный момент времени t_j запишется:

$$c_{CEj} = c_0 + \sum_1^i \sum_1^j \frac{\lambda_{i,j-1} a_0^2}{\Delta \bar{T}_{ij}} \frac{d\Delta T_{ij}''}{d\Delta r} \Delta t \quad (14)$$

С помощью представленной модели были получены температурные характеристики для трех распространенных металлов: меди, железа и алюминия. Так, на рис 2-4 показаны графики распределения температуры в структурных единицах данных металлов для различных моментов теплового процесса.

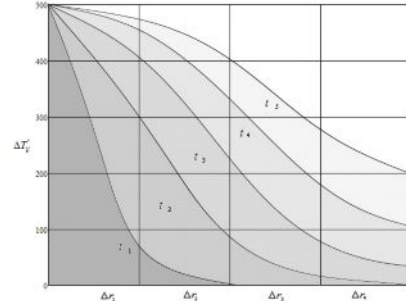


Рис. 2. График распределения температуры в структурных единицах меди для различных моментов теплового процесса

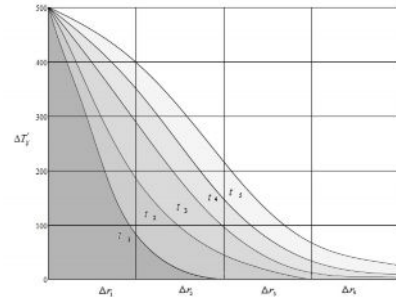


Рис. 3. График распределения температуры в структурных единицах железа для различных моментов теплового процесса

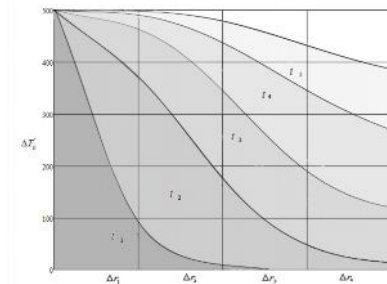


Рис.4. График распределения температуры в структурных единицах алюминия для различных моментов теплового процесса

В заключение, можно сказать, что использование выражений (9)-(14) дает возможность решать обратные задачи, используя экспериментальные данные.

По известным значениям $T_1', T_1'', \frac{d\Delta T_1''}{dt}, \frac{d\Delta T_1''}{dx}$, зная зависимость $\rho = f(t)$, размер структурной единицы a_0 , начальные значения c_0, λ_0 можно исследовать динамику изменения физических величин $c(t) = f(t)$ $\lambda(T) = f(t)$ $\rho(T) = f(t)$ по времени и координате.

нате в образце с помощью всего лишь одного эксперимента, замерив эти величины в центре симметрии, на входе и на выходе из данного образца.

ЛИТЕРАТУРА

1. Воеводин В. В. Математические модели и методы в параллельных процессах. М. : Наука. 1986. 296 с.
2. Воеводин В. В., Воеводин В. В. Параллельные вычисления. — СПб. : БХВ-Петербург. 2002. 608 с.
3. Корнеев В. В. Параллельные вычислительные системы. — М. : Нолидж. 1999. 320 с.
4. Байдаровцев Ю. П., Савенков Г. Н., Тарасенко В. А. Метод определения прочностных характеристик ультратонких слоев // Высокомолекулярные соединения. 1999. Т. 41. №8. С.1302—1307.
5. Быков Д. Л., Коновалов Д. Н. Особенности сопротивления вязкоупругих материалов при потере устойчивости тонкостенных конструкций. Тр. XXXVI Межд. семинара «Актуальные проблемы прочности». Витебск. 2000. С.428—433.
6. Баженов С. Л., Волинский А. Л., Воронина Е. Е., Бакеев Н. Ф. Потеря устойчивости упругого покрытия при динамическом сжатии вязкотекучей подложки // Докл. РАН. 1999. Т. 367. №1. С.75—77.
7. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. — М. : Физматлит. 2007. 304 с.
8. Лобода О. С., Кривцов А. М. Влияние масштабного фактора на модули упругости трехмерного нанокристалла // Изв. РАН. Механика твердого тела. №4. 2005. С.27—41.
9. Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Две причины проявления масштабного фактора при описании механических свойств наноструктур // Сб. ст. к 90-летию со дня рождения А. Ю. Ишлинского / Под ред. Д. М. Климова. М. : Физматлит. 2003. 832 с. С.485—488.
10. Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т1. М. : Наука. 1970. 503 с.
11. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М. : Мир. 1968. 366 с.
12. Голубев В. К., Селезнев А. А. Использование двухчастичных потенциалов взаимодействия для молекулярно-динамического расчета изотермического, адиабатического и ударно-волнового сжатия металлов // Химическая физика. — 2002. Т.21. №10. С. 61.
13. Morse P. M. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics // Physical Review. 1929. №34. P.57

пост.01.10.14