УДК 004.9

М. Лобур, І. Фармага, П. Шмігельський
Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра систем автоматизованого проектування

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕПЛООБМІНУ В НАНОКОМПОЗИТАХ

Описано способи аналізу теплопровідності у нанокомпозитах методом скінченних елементів.

Ключові слова: МСЕ, теплопровідність, композит, нанокомпозит.

The paper describes some approaches for thermal analysis of nano-composites by finite element method.

Keywords: FEM, thermal analysis, composite, nano-composite.

Вступ

Сьогодні розробляються різного роду композитні матеріали, зокрема зі вкрапленнями структур різної форми: ламінованих композитів, нанотрубок і кулькоподібних вкраплень.

Вміння моделювати такі матеріали дасть змогу значно спростити процес їхнього розроблення і пришвидшити використання у промисловості.

У зв’язку з великою затратою ресурсів ми часто не можемо на звичайному комп’ютері змоделювати ціле тіло з композитного матеріалу. В таких випадках попередньому аналізу підлягає зразок матеріалу для визначення ефективного коефіцієнта теплопровідності [1].

Постановка задачі

Матеріали з вкрапленнями мають неоднорідну структуру. Моделювати такі матеріали за допомогою аналітичних методів дуже складно, оскільки потрібно брати до уваги кожне окремо взяте вкраплення. Для таких цілей найкраще підійде метод скінченних елементів, за яким можна описувати тіла складної форми, які складаються з різних матеріалів і мають змішані граничні умови. Для аналізу методом скінченних елементів геометрію досліджуваного тіла потрібно описати сіткою скінченних елементів. Беручи до уваги те, що кількість вкраплень може бути дуже великою і вони можуть бути дуже малого розміру, складність задачі тоді буде настільки великою, що обчислювальних спроможностей персонального комп’ютера буде недостатньо. В цьому випадку задачу потрібно спростити так, щоб ми могли отримати достатню точність за мінімальних затрат ресурсів.

Теплопровідність досліджуваних матеріалів може змінюватися залежно від температури. Для деяких матеріалів ця зміна може бути доволі істотною і впливає на точність розв’язку. Тому для аналізу таких матеріалів потрібно розв’язувати нелінійну задачу. При використанні МСЕ вона розв’язується ітераційно, доки розв’язок не досягне бажаної точності.

У композитах із вкрапленнями нанотрубок потрібно розв’язувати анізотропну задачу, адже теплопровідність таких структур значно змінюється у різних напрямах.

Генерації сітки для тіла з кульковими вкрапленнями

Під час розв’язання задачі методом скінченних елементів найвідповідальнішим етапом є створення сітки скінченних елементів, яка описує геометрію тіла. Від її конфігурації залежить точність розв’язку, а від кількості вузлів найбільше залежить складність задачі.

Покажемо моделювання тіла з кулькоподібними вкрапленнями. Коли сумарний об’єм вкраплень перевищує половину об’єму тіла, і вкраплення починають перетинатися, така модель імітує пористу (губчату) структуру, де вкраплення вже відіграють роль пор.

Для створення моделі такого тіла використовується спеціальний генератор вкраплень. У ньому задається тип матеріалу вкраплення, концентрація вкраплень відносно повного об'єму тіла, а також межі діаметра вкраплень. Можна задавати декілька видів вкраплень в одному тілі. В результаті генератор розмісить необхідну кількість вкраплень у тілі відповідно до заданих параметрів.

Методи генерації сіток, які є універсальними і дають змогу будувати сітку для тіл різної форми, є достатньо ресурсомісткими. Ми моделюватимемо переважно зразки матеріалів, які представляються паралелепіпедом. Для такого тіла розроблено спеціальний алгоритм генерації сітки, яка описує кулькові вкраплення. Він потребує малих затрат часу і ресурсів, а сітка має високу регулярність, що дає змогу моделювати тіла з різною комбінацією вкраплень, майже без затрат на створення сітки.

Змоделюємо алюмінієве тіло із вкрапленнями з міді та заліза. Концентрація мідних вкраплень 30 %, залізних 20 % (рис. 1). Зверху тіла діє конвекція у навколишнє середовище, знизу тепловий потік. Результат моделювання представлений у вигляді теплового поля на рис. 2. Оскільки теплопровідність заліза нижча від теплопровідності алюмінію, то такі вкраплення гірше пропускають тепло, тому нагріваються, що видно біля нижньої грані тіла. А мідь проводить тепло краще ніж алюміній, тому температурне поле на мідних вкрапленнях є рівнішим, і температура там нижча, ніж на сусідніх регіонах, з такими самими умовами.

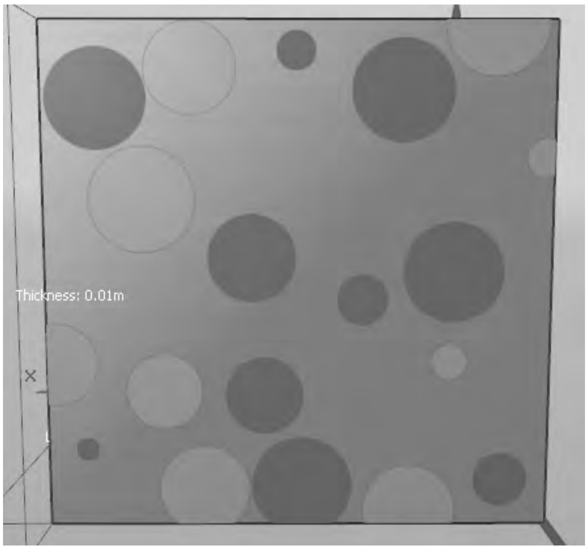


Рис. 1. Тестовий приклад з вкрапленнями
(темні вкраплення – мідь, світлі – залізо)

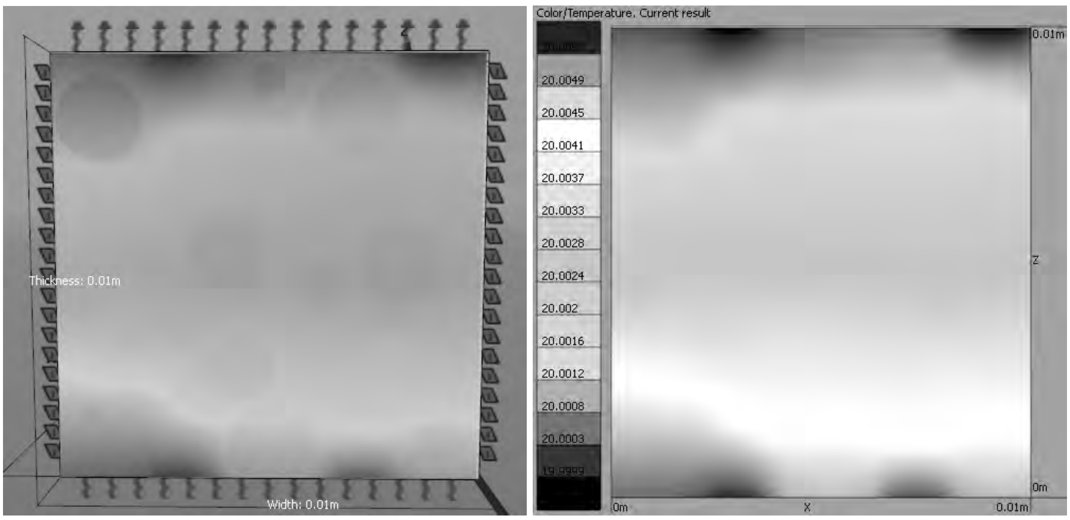


Рис. 2. Теплове поле тіла із вкрапленнями

Спрощення задачі

Під час розв’язання задачі МСЕ основна обчислювальна складність припадає на розв'язання системи рівнянь. У нашій програмі для її розв’язання використано метод Гаусса. Його обчислювальна складність N^3, але оскільки система рівнянь записана у стрічковій матриці, то складність буде NW^2, де N – кількість вузлів, W – ширина стрічкової матриці [2].

Для прикладу покажемо виграш від переходу з тривимірної до двовимірної задачі. Дослідимо тіло кубічної форми, з l вузлами на кожному його ребрі, $N = l^3$, $W \approx l^2$, а складність задачі буде $O_{3D} = l^3 \cdot (l^2)^2 = l^7$. Для двовимірної задачі $N = l^2$, $W = l$, а складність буде $O_{2D} = l^2 \cdot l^2 = l^4$. Отже, двовимірна задача простіша у l^3 разів. І якщо на ребрі буде всього 10 вузлів, то двовимірна задача розв’язуватиметься у 1000 разів швидше. Але з врахуванням того, що сітка повинна описувати багато вкраплень, кількість вузлів буде значно більшою, а отже, вищою буде і складність задачі. Тому розв’язування тривимірної задачі у цьому випадку є занадто затратним. Крім того, щоб дослідити теплові властивості матеріалу і зрозуміти, як тепло поширюється в ньому, достатньо двовимірної моделі. А якщо тіло має витягнуту форму у певному напрямку, тоді двовимірна модель буде цілком адекватною, оскільки ми можемо не брати до уваги поздовжню вісь і вважати її теплоізольованою.

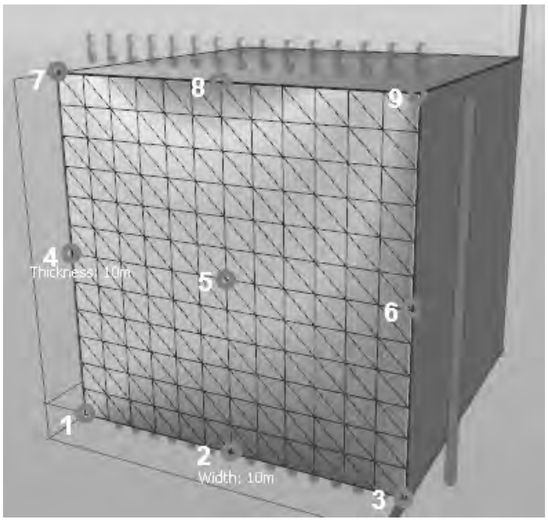


Рис. 3. Контрольні вузли на перерізі тривимірної моделі

Значення у контрольних вузлах двовимірної і тривимірної моделі

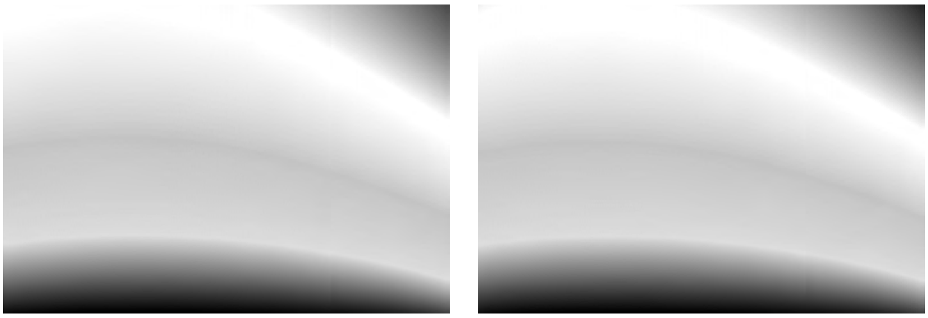
№ з/п	2D, ºC	3D, ºC	Δ, ºC	δ, %
1	17	17	0	0
2	3.13612	3.13577	0.000352661	0.011245
3	6	6	0	0
4	17	17	0	0
5	15.2571	15.265	0.00787982	0.051620
6	6	6	0	0
7	17	17	0	0
8	38.1557	38.2252	0.0694882	0,181786
9	6	6	0	0

Для перевірки адекватності переходу від тривимірної до двовимірної задачі розв’яжемо такий приклад: залізний куб, до якого згори прикладено тепловий потік, знизу – конвекція, а з боків задана температура; спереду і ззаду теплоізоляція, яка також може імітувати велику протяжність тіла у цьому напрямку. В двовимірному аналізі задані ті самі граничні умови, тільки відсутні умови спереду і ззаду. Для порівняння результатів на двовимірному тілі вибрано контрольні вузли, які розміщені по середині кожної з сторін, а також по центру. На тривимірній моделі ці вузли розміщені аналогічно, але на перерізі посередині тіла (рис. 3). Задається однакова щільність сітки для обох моделей. У результаті моделювання отримуємо значення у контрольних вузлах, які наведені у таблиці. Отримані результати свідчать про високу точність і адекватність двовимірної моделі.

Розв’язання нелінійної задачі

Змоделюємо нелінійну задачу теплопровідності. Залежність між теплопровідністю матеріалу та температурою задається поліномом $K = a_0+a_1T+a_2T$. Розв'язання ведеться ітераційно, на кожній ітерації теплопровідність кожного елемента змінюється залежно від його температури і заданого полінома для його матеріалу. Ітерації продовжуються, доки зміна середньої температури кожного елемента не стане меншою ніж задана точність. У програмі задається максимально допустима кількість ітерації – на випадок, якщо задача не збігається.

Проведемо аналіз для тіла з кремнію. Знизу задана конвекція, а на всіх інших сторонах тепловий потік. Після чотирьох ітерацій досягнуто точності 10^{-3}. Результат першої ітерації показано на рис. 4, а, останньої – на рис. 4, б (для наочності на рисунках збільшено контраст). Тут можна помітити, як на другому рисунку теплове поле з високою температурою у правому верхньому куті дещо збільшилося відносно початкового.



а *б*

Рис. 4. Теплове поля нелінійної задачі:
а – перша ітерація; б – четверта ітерація

Висновок

Для аналізу теплопровідності неоднорідних матеріалів добре підходить метод скінченних елементів. За його допомогою можна моделювати тіла складної форми, які складаються з різних матеріалів і мають змішані граничні умови.

Під час аналізу матеріалів з вкрапленнями потрібно використовувати складні сітки скінченних елементів з великою кількістю вузлів. У таких випадках розв’язання тривимірної задачі може потребувати занадто багато ресурсів і часу. Ми аналізуємо зразок матеріалу простої форми (паралелепіпед, циліндр), для якого доцільно використовувати двовимірну модель. Це значно спрощує обчислення, а отримані результати є цілком адекватними і достатніми для розуміння теплових властивостей матеріалу.

1. Kurzydlowski K., Lobur M., Farmaga I., Matviykiv O. Data Processing Method for Determination Thermophysical Parameters of Composite Materials // IEEE MEMSTECH’2010. – Polyana, 2010. – pp. 264–266. 2. I. Farmaga, P. Shmigelskyi, P. Spiewak, L. Ciupinski. Evaluation of Computational Complexity of Finite Element Analysis // CADSM’2011, February, 23–25, Lviv, Polyana, 2011, pp. 213–214. 3. Larry J. Segerlind, “Appliend finite element analysis” Second Edition. John Wiley and Sons, USA, 1984.