

УДК 536.2

Двусторонние оценки эффективной теплопроводности композита с анизотропными пластинчатыми включениями

Зарубин В.С.^{1,*}, Кувыркин Г.Н.¹, Савельева И.Ю.¹

[*fn2@bmstu.ru](mailto:fn2@bmstu.ru)

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

На основе двойственной вариационной формулировки стационарной задачи теплопроводности в неоднородном твердом теле построены двусторонние оценки компонент тензора эффективной теплопроводности композита с анизотропными пластинчатыми включениями. Вариационная формулировка содержит два альтернативных функционала (минимизируемый и максимизируемый), экстремальные значения которых совпадают на истинном распределении температуры в рассматриваемом композите. Благодаря этому между построенными оценками заключены реальные значения компонент тензора эффективной теплопроводности композита, соответствующие истинному распределению температуры, что позволяет прогнозировать наибольшую возможную погрешность используемых расчетных зависимостей. Уточнение допустимых для функционалов распределений температуры и вектора плотности теплового потока в представительном элементе структуры композита дало возможность сблизить двусторонние оценки, что важно применительно к композитам с высокотеплопроводными включениями в виде наноструктурных элементов (в частности, фрагментов графена).

Ключевые слова: композит; анизотропные пластинчатые включения; наноструктурные элементы; графен; эффективная теплопроводность; двусторонние оценки; двойственная вариационная формулировка задачи

Введение

В различных отраслях техники в качестве конструкционных и функциональных материалов находят широкое применение композиты, состоящие из матрицы и включений различной формы. Композиты, используемые в теплонапряженных конструкциях, подверженных совместным интенсивным механическим и тепловым воздействиям, наряду с высокими механическими свойствами должны обладать определенными теплофизическими характеристиками композитов. Среди таких характеристик важную роль играет эффективный коэффициент теплопроводности композита, зависящий в первую очередь от теплопроводности и объемной концентрации включений.

Количественному анализу теплопроводности гетерогенных тел с неоднородной структурой, к которым можно отнести композиты, посвящено значительное число работ, проанализированных, например, в [1, 2, 3]. Расчетные формулы для оценки эффективного коэффициента теплопроводности гетерогенных тел получены в этих работах, как правило, либо обработкой экспериментальных данных применительно к конкретным материалам, либо путем априорного задания распределения температуры и теплового потока в моделях структуры гетерогенных тел с включениями шаровой, кубической или цилиндрической формы.

Включение принято считать пластинчатым [4], если его размер в одном из ортогональных направлений существенно меньше размеров в двух других направлениях. Такие включения возникают, например, в виде новых фаз при термической обработке поликристаллических материалов [5, 6, 7]. Форму, близкую к пластинчатой, могут иметь наноструктурные элементы [8], в том числе, фрагменты графена [9]).

Среди уникальных физических свойств графена следует отметить аномально высокую теплопроводность, превосходящую теплопроводность всех известных материалов [9]. Для однослойного графена в виде двумерной структуры, состоящей из правильных шестиугольников с атомами углерода в их вершинах, экспериментальные измерения [10, 11] и результаты математического моделирования [12, 13, 14] дают оценки коэффициента теплопроводности в его плоскости между 3500 и $5500 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$. Выявлено влияние различных факторов на теплопроводность графена, которая зависит от температуры, возрастает с увеличением размера листа и уменьшается с увеличением числа слоев. Для четырехслойного графена коэффициент теплопроводности лежит в интервале $1300 - 1700 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$ [15].

Наряду с высокой тепло- и электропроводностью графен имеет ряд полезных электронных свойств и высокие упругие характеристики, что позволяет рассматривать графен в качестве составной части перспективных наноматериалов с улучшенными теплофизическими, электрическими и механическими параметрами, а также для создания элементов наноэлектронных устройств [9, 16]. Количественная характеристика термоэлектрического эффекта для графена выше удельной мощности, связанной с выделением джоулевой теплоты при прохождении электрического тока. Поэтому в перспективе с использованием графена принципиально возможно создание элементов наноэлектроники, не требующих охлаждения. Поскольку в наноэлектронных устройствах возникает необходимость в элементах, обладающих повышенной теплопроводностью [9], одно из возможных применений графена связано с его использованием в качестве высокотеплопроводного анизотропного наполнителя в композитах [17].

Сочетание в композите включений и матрицы с большим различием в коэффициентах теплопроводности приводит при использовании известных расчетных зависимостей к значительному разбросу результатов вычислений и неконтролируемой погрешности определения эффективного коэффициента теплопроводности такого композита. Поэтому актуально построение двусторонних оценок, охватывающих реальные значения этого коэффициента и

позволяющих прогнозировать наибольшую возможную погрешность. Такие оценки можно построить при помощи двойственной вариационной формулировки стационарной задачи теплопроводности в неоднородном твердом теле [18, 19, 20, 21, 22].

1. Двойственная вариационная формулировка задачи

Рассмотрим неоднородное твердое тело объемом V , ограниченным поверхностью S . На этой поверхности выделим два участка S_0 и S_1 ($S_0 \cap S_1 = \emptyset$) с заданными значениями температуры T_0 и T_1 соответственно. Остальную часть $S_q = S \setminus (S_0 \cup S_1)$ поверхности примем идеально теплоизолированной. Материал тела в общем случае анизотропен по отношению к свойству теплопроводности, описываемому тензором теплопроводности с компонентами $\lambda_{ij}(M)$, $i, j = 1, 2, 3$, зависящими от положения точки $M \in V$ в области, соответствующей объему тела. Эти компоненты определены в прямоугольной декартовой системе координат $Ox_1x_2x_3$.

Истинное стационарное распределение температуры $T^*(M)$ ($M \in V$) в теле минимизирует функционал [18, 23]

$$J[T] = \frac{1}{2} \int_V \frac{\partial T(M)}{\partial x_i} \lambda_{ij}(M) \frac{\partial T(M)}{\partial x_j} dV(M) \quad (1)$$

(здесь и далее использовано правило суммирования слагаемых по повторяющимся латинским индексам). Этот функционал допустимо рассматривать на кусочно непрерывно дифференцируемых в области V распределениях $T(M)$ температуры, удовлетворяющих заданным граничным условиям на участках S_0 и S_1 поверхности S .

На истинном распределении в теле вектора $\mathbf{q}^*(M)$ ($M \in V$) плотности теплового потока с проекциями $q_i^*(M) = -\lambda_{ij}(M) \frac{\partial T^*(M)}{\partial x_j}$ на оси выбранной системы координат достигает максимума функционал [18, 23]

$$I[\mathbf{q}] = -\frac{1}{2} \int_V q_i(M) \rho_{ij}(M) q_j(M) dV(M) - \int_{S_T} T(P) q_i(P) n_i(P) dS(P), \quad (2)$$

где ρ_{ij} — компоненты тензора термического сопротивления, обратного тензору теплопроводности материала тела; $n_i(P)$ — направляющие косинусы вектора внешней нормали к участкам поверхности $S_T = S_0 \cup S_1$ в точках $P \in S_T$. Функционал (2) допустимо рассматривать на кусочно непрерывно дифференцируемых распределениях $\mathbf{q}(M)$ вектора плотности теплового потока, удовлетворяющих равенству $\text{div } \mathbf{q}(M) = 0$ и условию идеальной теплоизоляции на участке S_q поверхности тела.

Для функционалов (1) и (2) справедливо равенство $J[T^*] = I[\mathbf{q}^*]$. Поэтому при использовании допустимых распределений в рассматриваемом теле температуры и вектора плотности теплового потока получаем

$$J[T] \geq J[T^*] = I[\mathbf{q}^*] \geq I[\mathbf{q}]. \quad (3)$$

Истинное стационарное распределение $T^*(M)$ ($M \in V$) температуры должно удовлетворять дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{ij}(M) \frac{\partial T(M)}{\partial x_j} \right) = 0.$$

С учетом этого уравнения и первой формулы Грина [24] функционал (1) в данном случае можно преобразовать к виду [18]

$$J[T^*] = \frac{1}{2} \int_{S_T} T(P) \lambda_{ij} \frac{\partial T^*(P)}{\partial x_j} n_i(P) dS(P) = \frac{T_0 Q_0 + T_1 Q_1}{2}, \quad (4)$$

где Q_0 и Q_1 — тепловые потоки, поступающие в данное тело через участки соответственно S_0 и S_1 его поверхности. В силу условия сохранения тепловой энергии при стационарном процессе теплопроводности $Q_0 + Q_1 = 0$. Тогда из равенства (4) получим $Q_1 = -Q_0 = -\frac{2J[T^*]}{T_1 - T_0}$ и затем формулу для термического сопротивления тела $R_* = \frac{T_1 - T_0}{Q_1} = \frac{(T_1 - T_0)^2}{2J[T^*]}$ между изотермическими участками S_1 и S_0 поверхности S . Отсюда с учетом неравенств (3) следует двусторонняя оценка этого термического сопротивления в виде

$$\frac{(T_1 - T_0)^2}{2J[T]} \leq R_* \leq \frac{(T_1 - T_0)^2}{2I[\mathbf{q}]}. \quad (5)$$

2. Построение двусторонних оценок для композита

Сначала рассмотрим вариант одинаковой ориентации пластинчатых включений в композите. Выберем представительный элемент структуры композита в виде пластины толщиной $2H$, длиной $2L$ и шириной $2B$. На рис. 1 изображена восьмая часть этого элемента, помещенная в октант прямоугольной декартовой системы координат $Ox_1x_2x_3$. Включение расположено в этом элементе симметрично относительно координатных осей и имеет толщину $2h$, длину $2l$ и ширину $2b$. Контуры восьмой части включения обведены на рис. 1 сплошными толстыми линиями. Остальной объем представительного элемента заполнен изотропным материалом матрицы с коэффициентом теплопроводности λ_m . Главные оси тензора теплопроводности анизотропного включения с главными значениями λ_i примем совпадающими с координатными осями. Поскольку тензору теплопроводности в главных осях соответствует

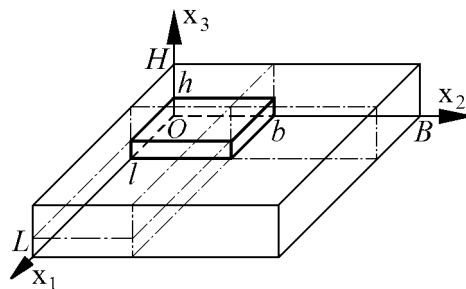


Рис. 1. Восьмая часть представительного элемента структуры композита

диагональная матрица третьего порядка, главным значениям λ_i этого тензора соответствуют главные значения $\rho_i = 1/\lambda_i$ обратному ему тензору термического сопротивления.

Из указанных на рис. 1 размеров следует, что для объемной концентрации включений в композите можно записать равенство $C_V = \frac{hbl}{HLB}$. При изменении C_V будем считать, что $h/H = l/L = b/B = C_0$, т.е. $C_V = C_0^3$.

Используем представленную выше двойственную вариационную формулировку стационарной задачи теплопроводности применительно к восьмой части представительного элемента. Пусть на гранях изображенного на рис. 1 прямоугольного параллелепипеда, расположенных в плоскостях $x_1 = 0$ и $x_1 = L$, заданы значения температур соответственно T_0 и T_1 , а все остальные его грани идеально теплоизолированы. В этом случае для минимизируемого функционала (1) одним из простейших допустимых распределений температуры является линейное вдоль координатной оси Ox_1 с постоянной проекцией $G_1 = (T_1 - T_0)/L$ градиента температуры на эту ось. Такому распределению соответствует значение функционала (1)

$$J_1 = G_1^2 \frac{\lambda_m(HB - hbl)L + \lambda hb(L - l) + \lambda_1 hbl}{2} = (T_1 - T_0)^2 HB \frac{\lambda_m(1 - C_0^3) + \lambda_1 C_0^3}{2L}. \quad (6)$$

При заданных граничных условиях одним из простейших допустимых для максимизируемого функционала (2) распределений вектора плотности теплового потока будет постоянное значение q_1 проекции этого вектора на координатную ось Ox_1 . Тогда для функционала (2) получим

$$\begin{aligned} I_1 &= -q_1^2 \frac{(HBL - hbl)/\lambda_m + hbl/\lambda_1}{2} - q_1 HB(T_1 - T_0) = \\ &= -q_1^2 HBL \frac{(1 - C_0^3)/\lambda_m + C_0^3/\lambda_1}{2} - q_1 G_1 HBL. \end{aligned}$$

Из необходимого условия $dI_1/dq_1 = 0$ максимума величины I_1 находим

$$q_1 = -\frac{G_1}{(1 - C_0^3)/\lambda_m + C_0^3/\lambda_1}$$

и затем

$$I_1 = \frac{(T_1 - T_0)^2 HB}{2L((1 - C_0^3)/\lambda_m + C_0^3/\lambda_1)}. \quad (7)$$

Термическое сопротивление в направлении оси Ox_1 изображенной на рис. 1 восьмой части представительного элемента структуры композита можно представить в виде $R_1 = L/(\Lambda_1 HB)$, где Λ_1 — эффективный коэффициент теплопроводности композита в направлении этой оси. Используя для двусторонней оценки величины R_1 неравенства (5) и формулы (6) и (7), представим двустороннюю оценку для Λ_1 в виде

$$\frac{1}{(1 - C_V)/\lambda_m + C_V/\lambda_1} \leq \Lambda_1 \leq \lambda_m(1 - C_V) + \lambda_1 C_V.$$

Аналогичным путем можно получить двусторонние оценки эффективных коэффициентов теплопроводности Λ_2 и Λ_3 композита в направлениях осей Ox_2 и Ox_3 соответственно. Таким

образом, для эффективного коэффициента теплопроводности Λ_i композита в направлении координатной оси Ox_i можно записать

$$\frac{1}{1 - C_V + C_V/\bar{\lambda}_i} = \frac{\Lambda_i^-}{\lambda_m} = \bar{\Lambda}_i^- \leq \bar{\Lambda}_i \leq \bar{\Lambda}_i^+ = \frac{\Lambda_i^+}{\lambda_m} = 1 - C_V + \bar{\lambda}_i C_V, \quad (8)$$

где $\bar{\lambda}_i = \lambda_i/\lambda_m$ и $\bar{\Lambda}_i = \Lambda_i/\lambda_m$.

В случае хаотической пространственной ориентации анизотропных пластинчатых включений композит будет изотропным [25] с эффективным коэффициентом теплопроводности $\Lambda = (\Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3)/3$. При этом в неравенствах (8) $\bar{\lambda}_i$ следует заменить на $\bar{\lambda} = (\bar{\lambda}_1 + \bar{\lambda}_2 + \bar{\lambda}_3)/3$, а у остальных параметров опустить нижний индекс i .

Следует отметить, что левую и правую части соотношения (8) можно получить в рамках теории смесей [26]. При этом знаменатель нижней оценки $\bar{\Lambda}_i^-$ можно трактовать как линейную комбинацию безразмерных сопротивлений переносу тепловой энергии в композите, а верхнюю оценку $\bar{\Lambda}_i^+$ — как линейную комбинацию безразмерных проводимостей, причем коэффициентами в этих линейных комбинациях являются объемные концентрации матрицы $(1 - C_V)$ и включений (C_V) . При $C_V = 0$ и $C_V = 1$ нижняя и верхняя оценки совпадают между собой. Но при промежуточных значениях C_V разность $\Delta\bar{\Lambda}_i = \bar{\Lambda}_i^+ - \bar{\Lambda}_i^-$ оценок возрастает от нуля по мере отклонения параметра $\bar{\lambda}_i$ от единицы. С использованием неравенств (8) можно оценить наибольшую возможную относительную погрешность среднего значения $\bar{\Lambda}_i^\circ = (\bar{\Lambda}_i^- + \bar{\Lambda}_i^+)/2$ при промежуточных значениях C_V , которую представим в виде

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\Delta\bar{\Lambda}_\alpha}{2\bar{\Lambda}_\alpha^\circ} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2}C_V(1 - C_V)(\bar{\lambda}_\alpha + 1/\bar{\lambda}_\alpha - 2)}, \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (9)$$

На рис. 2 приведены зависимости ε_α от C_V при различных значениях $\bar{\lambda}_\alpha$ (кривые для пар значений $\bar{\lambda}_\alpha$ и $1/\bar{\lambda}_\alpha$ совпадают). Наибольших значений

$$\varepsilon_\alpha^* = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{8}(\bar{\lambda}_\alpha + 1/\bar{\lambda}_\alpha - 2)}$$

относительная погрешность достигает при $C_V = 0,5$.

Использованные выше для получения двусторонних оценок достаточно простые допустимые распределения температуры и плотности теплового потока учитывают лишь объемное содержание эллипсоидальных включений. Поэтому для всех трех направлений главных осей тензора теплопроводности включения представленные в формулах (8) и (9) оценки эффективных коэффициентов теплопроводности композита и возможной относительной погрешности среднего значения этих оценок идентичны. Если в этих формулах опустить нижний индекс α , то они будут применимы и в случае хаотической ориентации включений.

Представленные соотношением (8) двусторонние оценки можно сблизить, если несколько усложнить допустимые распределения температуры и плотности теплового потока. Рас-

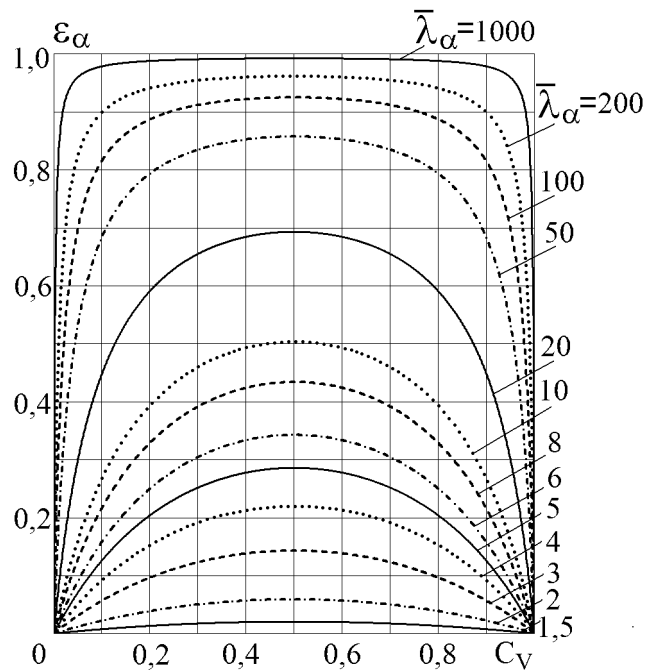


Рис. 2. Зависимости наибольшей возможной погрешности от объемной концентрации включений при различных значениях параметра λ_α

пределение температуры вдоль оси Ox_1 выберем в виде двухзвенной ломаной с изломом при $x_1 = l$ (см. рис. 1):

$$T(x_1) = T_0 + \frac{(T_l - T_0)x_1}{l}, \quad x_1 \in [0, l], \quad \text{и} \quad T(x_1) = T_l + \frac{(T_1 - T_l)(x_1 - l)}{L - l}, \quad x_1 \in [l, L].$$

Используя это распределение в качестве допустимого для функционала (1), получим

$$J_1^* = \frac{(T_l - T_0)^2}{2l} (\lambda_m(HB - bh) + \lambda_1 bh) + \frac{(T_1 - T_l)^2}{2(L - l)} \lambda_m HB.$$

Из необходимого условия $dJ^*/dT_l = 0$ минимума величины J_1^* найдем

$$T_l = \frac{T_0(L - l)(BH - bh + \bar{\lambda}_1 bh) + T_1 l BH}{(L - l)(BH - bh + \bar{\lambda}_1 bh) + l BH}$$

и затем

$$J_1^* = \lambda_m (T_1 - T_0)^2 \frac{HB}{2L} \frac{1 - C_0^2 + \bar{\lambda}_1 C_0^2}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1)C_0^2(1 - C_0)}. \quad (10)$$

Допустимое для функционала (2) распределение вектора плотности теплового потока примем в виде постоянного значения q'_1 проекции этого вектора на ось Ox_1 в пределах прямоугольного параллелепипеда длиной L с площадью bh грани в плоскости $x_1 = 0$, полностью содержащего восьмую часть включения (см. nfigcom1), и также постоянное значение q''_1 проекции на ту же ось в остальной части представительного элемента, изображенной на рис. 1. Тогда с учетом заданных граничных условий получим

$$I_1^* = -(q'_1)^2 \frac{bh}{2\lambda_m} \left(L - l + \frac{l}{\bar{\lambda}_1} \right) - (q''_1)^2 \frac{BH - bh}{2\lambda_m} L - (T_1 - T_0)(q'_1 bh + q''_1 (BH - bh)).$$

Из необходимых условий $dI_1^*/dq_1' = 0$ и $dI_1^*/dq_1'' = 0$ максимума величины I_1^* находим

$$q_1' = -\frac{\lambda_m}{L} \frac{T_1 - T_0}{1 - C_0 + C_0/\bar{\lambda}_1}, \quad q_1'' = -\frac{\lambda_m}{L} (T_1 - T_0)$$

и затем

$$I_1^* = \lambda_m (T_1 - T_0)^2 \frac{HB}{2L} \left(1 - C_0^2 + \frac{C_0^2}{1 - C_0 + C_0/\bar{\lambda}_1} \right). \quad (11)$$

Используя для двусторонней оценки термического сопротивления $R_1^* = L/(\Lambda_1 HB)$ формулы (10) и (11) и неравенства (5), получаем более узкую двустороннюю оценку эффективного коэффициента Λ_1 теплопроводности композита в направлении оси Ox_1 в виде

$$\bar{\Lambda}_1^- + \frac{(1 - C_0^2)C_0^4(\bar{\lambda}_1 - 1)^2}{C_0^4 + (1 + C_0^2 - 2C_0^3)C_0\bar{\lambda}_1 + (1 - C_0)(1 - C_0^3)\bar{\lambda}_1^2} \leq \frac{\Lambda_1}{\lambda_m} \leq \bar{\Lambda}_1^+ - \frac{(1 - C_0)C_0^5(\bar{\lambda}_1 - 1)^2}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1)C_0^2(1 - C_0)}.$$

Таким же способом можно построить двусторонние оценки эффективных коэффициентов теплопроводности Λ_2^* и Λ_3^* композита в направлениях осей Ox_2 и Ox_3 соответственно. В итоге для безразмерного эффективного коэффициента теплопроводности $\tilde{\Lambda}_i^* = \Lambda_i^*/\lambda_m$ композита в направлении координатной оси Ox_i получим неравенства

$$1 - C_0^2 + \frac{1}{1 - C_0 + C_0/\bar{\lambda}_1} = \tilde{\Lambda}_i^- \leq \tilde{\Lambda}_i^* \leq \tilde{\Lambda}_i^+ = \frac{1 - C_0^2 + \bar{\lambda}_1 C_0^2}{1 + (\bar{\lambda}_1 - 1)C_0^2(1 - C_0)}. \quad (12)$$

На рис. 3 для тех же значений $\bar{\lambda}_\alpha$, что и на рис. 2, представлены зависимости от C_V наибольшей возможной относительной погрешности $\varepsilon_\alpha^* = (\tilde{\Lambda}_\alpha^+ - \tilde{\Lambda}_\alpha^-)/(\tilde{\Lambda}_\alpha^+ + \tilde{\Lambda}_\alpha^-)$ среднего значения $(\tilde{\Lambda}_\alpha^+ + \tilde{\Lambda}_\alpha^-)/2$. Аналогичные зависимости для значений $\bar{\lambda}_\alpha < 1$ приведены на рис. 4.

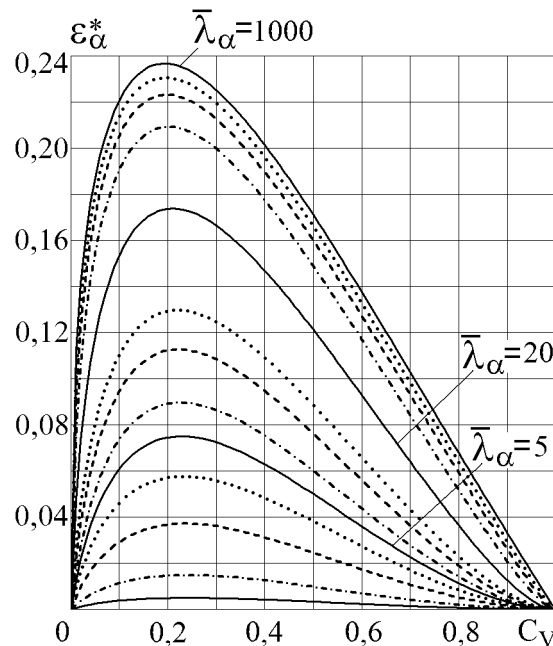


Рис. 3. Зависимости наибольшей возможной погрешности ε_α^* от объемной концентрации C_V включений при различных значениях параметра $\bar{\lambda}_\alpha > 1$ (обозначения кривых идентичны 2)

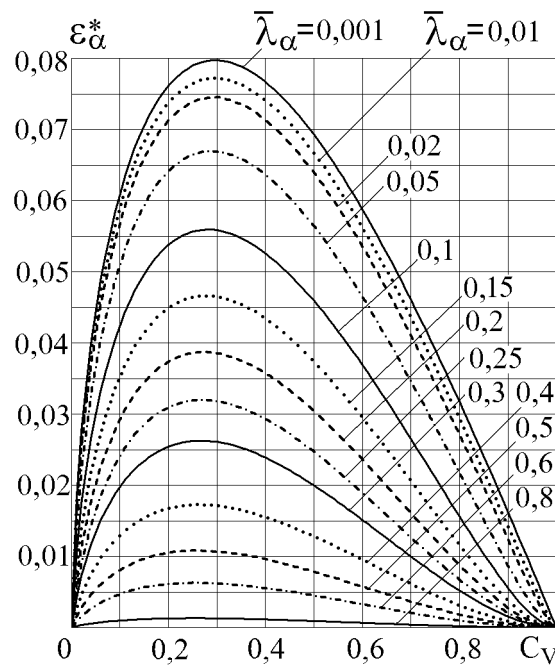


Рис. 4. Зависимости ε_{α}^* от C_V при значениях параметра $\bar{\lambda}_{\alpha} < 1$

Из сравнения для одинаковых значениях $\bar{\lambda}_{\alpha}$ максимальных значений ε_{α} (см. рис. 2) и ε_{α}^* последние при $\bar{\lambda}_{\alpha} > 1$ примерно в 4 раза меньше, а при $\bar{\lambda}_{\alpha} < 1$ меньше на порядок.

Отметим, что неравенствами вида (12) в работе [27] представлена двусторонняя оценка эффективного коэффициента теплопроводности изотропного композита с изотропными кубическими включениями, полученная в работе [3] путем деления кубического представительного элемента структуры такого композита на фрагменты изотермическими и адиабатическими плоскостями с последующим вычислением термического сопротивления каждого из фрагментов. Применительно к восьмой части представительного элемента структуры композита с пластинчатыми включениями, изображенной на рис. 1, при формировании допустимого для функционала (1) распределения температуры изотермической является плоскость $x_1 = l$, а при задании допустимого для функционала (2) распределения вектора плотности теплового потока в качестве адиабатических использованы плоскости $x_2 = b$ и $x_3 = h$. Преимущество использованного выше подхода, опирающегося на двойственную вариационную формулировку стационарной задачи теплопроводности в неоднородном твердом теле, состоит в том, что для любой рассматриваемой структуры композита построенная двусторонняя оценка охватывает значение эффективного коэффициента теплопроводности, соответствующее истинному распределению температуры в представительном элементе этой структуры.

Заключение

Использование двойственной вариационной формулировки стационарной задачи теплопроводности в неоднородном твердом теле позволило построить двусторонние оценки эф-

эффективного коэффициента теплопроводности композита с анизотропными пластинчатыми включениями. Между нижней и верхней оценками заключено значение этого коэффициента, которое соответствует истинному распределению температуры в представительном элементе структуры композита. Уточнение распределений температуры и вектора плотности теплового потока, допустимых для функционалов, входящих в двойственную вариационную формулировку, дало возможность сблизить двусторонние оценки и уменьшить наибольшую возможную погрешность при вычислении эффективного коэффициента теплопроводности рассматриваемого композита.

Работа выполнена по гранту НШ-1432.2014.8 программы Президента РФ поддержки ведущих научных школ и проекту № 1.2640.2014 в рамках реализации государственного задания.

Список литературы

1. Чудновский А.Ф. Теплофизические характеристики дисперсных материалов. М.: Физматгиз, 1962. 456 с.
2. Миснар А. Теплопроводность твердых тел, жидкостей, газов и их композиций: пер. с франц. М.: Мир, 1968. 464 с.
3. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Л.: Энергия, 1974. 264 с.
4. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Влияние формы пластинчатых включений на эффективную теплопроводность композита // Композиты и наноструктуры. 2014. № 2. С. 95–104.
5. Арзамасов Б.Н., Крашенинников А.И., Пастухова Ж.П., Рахштадт А.Г. Научные основы материаловедения. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1994. 366 с.
6. Ван Флек Л. Теоретическое и прикладное материаловедение: пер. с англ. М.: Атомиздат, 1975. 472 с.
7. Физическое металловедение. В 3 т. Т. 2: пер. с англ. / под ред. Р.У. Кана, П.Т. Хаазена. М.: Мир, 1968. 492 с.
8. Кац Е.А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры. Родословная форм и идей. М.: Изд-во ЛКИ, 2008. 296 с.
9. Елецкий А.В., Искандарова И.М., Книжник А.А., Красиков Д.Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства // Успехи физических наук. 2011. Т. 181, № 3. С. 233–268.
10. Balandin A.A., Ghosh S., Bao W., Calizo I., Teweldebrhan D., Miao F., Lau C.N. Superior thermal conductivity of single-layer graphene // Nano Letters. 2008. Vol. 8. P. 902-907. DOI: [10.1021/nl0731872](https://doi.org/10.1021/nl0731872)
11. Ghosh S., Calizo I., Teweldebrhan D., Pokatilov E.P., Nika D.L., Balandin A.A., Bao W., Miao F., Lau C.N. Externally high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal

- management applications in nanoelectronic circuits // Appl. Phys. Lett. 2008. Vol. 92. Art. no. 151911. DOI: [10.1063/1.2907977](https://doi.org/10.1063/1.2907977)
12. Klemens P.G. Theory of the A-plane thermal conductivity of graphite // Journal of Wide Bandgap Materials. 2000. Vol. 7, no. 4. P. 332–339. DOI: [10.1106/7FP2-QBLN-TJPA-NC66](https://doi.org/10.1106/7FP2-QBLN-TJPA-NC66)
 13. Nika D.L., Ghosh S., Pokatilov E.P., Balandin A.A. Lattice thermal conductivity of graphene flakes: Comparison with bulk graphite // Appl. Phys. Lett. 2009. Vol. 94. Art. no. 203103. DOI: [10.1063/1.3136860](https://doi.org/10.1063/1.3136860)
 14. Nika D.L., Pokatilov E.P., Askerov A.S., Balandin A.A. Phonon thermal conduction in graphene: Role of Umklapp and edge roughness scattering // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79, no. 15. Art. no. 155413. DOI: [10.1103/PhysRevB.79.155413](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.155413)
 15. Ghosh S., Bao W., Nika D.L., Subrina S., Pokatilov E.P., Lau C.N., Balandin A.A. Dimensional crossover of thermal transport in few-layer graphene // Nature Materials. 2010. Vol. 9, no. 7. P. 555–558. DOI: [10.1038/nmat2753](https://doi.org/10.1038/nmat2753)
 16. Chen Zh., Lin Yu.M., Rooks M.J., Avouris Ph. Graphene nano-ribbon electronics // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2007. Vol. 40, no. 2. P. 228–232. DOI: [10.1016/j.physe.2007.06.020](https://doi.org/10.1016/j.physe.2007.06.020)
 17. Stankovich S., Dikin D.A., Dommett G.H.B., Kohlhaas K.M., Zimney E.J., Stach E.A., Piner R.D., Nguyen S.T., Ruoff R.S. Graphene-based composite materials // Nature. 2006. Vol. 442. P. 282–286. DOI: [10.1038/nature04969](https://doi.org/10.1038/nature04969)
 18. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.
 19. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Эффективные коэффициенты теплопроводности композита с эллипсоидальными включениями // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2012, № 3. С. 76–85.
 20. 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.
 21. Кувыркин Г.Н. Оценки эффективного коэффициента теплопроводности композита с графеновыми включениями // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. № 4. Режим доступа: <http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/hidden/671.html> (дата обращения 01.10.2014).
 22. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Эффективные коэффициенты теплопроводности композита с анизотропными эллипсоидальными включениями // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2013, № 4. С. 311–320. DOI: [10.7463/0413.0541050](https://doi.org/10.7463/0413.0541050)
 23. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Сравнительный анализ оценок эффективного коэффициента теплопроводности поликристаллического материала // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2013. № 3. С. 313–328. DOI: [10.7463/0313.0541029](https://doi.org/10.7463/0313.0541029)

24. Власова Е.А., Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Приближенные методы математической физики. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. 700 с.
25. Шермергор Т.Д. Теория упругости микroneоднородных сред. М.: Наука, 1977. 400 с.
26. Головин Н.Н., Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Смесевые модели механики композитов. Ч. 1. Термомеханика и термоупругость многокомпонентной смеси // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2009. № 3. С. 36–49.
27. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Сравнительный анализ оценок коэффициента теплопроводности композита с шаровыми включениями // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2013. № 7. С. 299–318. DOI: [10.7463/0713.0569319](https://doi.org/10.7463/0713.0569319)

Two-sided Estimates of Effective Thermal Conductivity of the Composite with Anisotropic Lamellar Inclusions

Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savel'eva I. Yu.

^{*}fn2@bmstu.ru

Bauman Moscow State Technical University

Keywords: composite, anisotropic lamellar inclusions, nanostructured elements, graphene, effective thermal conductivity, two-sided estimates, the dual variational formulation of the problem

A scope of composites as engineering and functional materials are largely determined by their mechanical and thermal properties. For composites used in heat-stressed structures exposed to joint intense mechanical and thermal stress, the thermophysical characteristics of the effective thermal conductivity of the composite plays an important role. It depends, primarily, on the thermal conductivity and the volume concentration of inclusions and thermal conductivity of the matrix. The composite combination of high heat conductivity inclusions with low heat conductivity matrix, when using the known computational dependencies, leads to a significant spread of the calculation results and uncontrolled error in determining the effective thermal conductivity of the composite. This error increases in the case of anisotropic inclusions and with their deviation from the spherical shape, including advanced composites with high heat conductivity lamellar inclusions, which have some nanostructured elements (e.g. fragments of graphene which has an abnormally high thermal conductivity exceeding thermal conductivity of all known materials [9], and allows creation of composites used not only in the heat-stressed constructions, but in nanoelectronic devices [17]). Therefore, it is relevant to make a two-sided estimate covering the real values of the effective thermal conductivity of the composite with anisotropic lamellar inclusions and allowing to predict the maximum possible error. The article shows conducting the two-sided estimates based on the dual variational formulation of the stationary heat conductivity problem in a heterogeneous solid [18–22]. This formulation includes two alternative functionals (to be minimized and maximized) extreme values of which coincide at the true temperature distribution in this composite. As a result, between the estimates made there are real values of the tensor components of effective heat conductivity of the composite corresponding to the true distribution of temperature. This allows us to predict the maximum possible error of calculated dependences used to calculate the components of this tensor. Permissible for functionals refinement of distributions of temperature and heat flux

density vector in a representative element of the composite structure made it possible to bring together two-sided estimates. In the end, the greatest possible error in calculating the average value between the amended estimates in the case of high heat conductivity inclusions decreased several times. Results of the quantitative analysis of made two-sided estimates are represented in the article as a plot.

References

1. Chudnovskii A.F. *Teplofizicheskie kharakteristiki dispersnykh materialov* [Thermophysical properties of dispersed materials]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1962. 456 p. (in Russian).
2. Missenard A. *Conductivite thermique des solides, liquides, gaz et de leurs melanges*. Conductivité thermique des solides, liquides, gas et de leurs mélanges. Paris, Editions Eyrolles, 1965. (In French). (Russ ed. Missenard A. *Teploprovodnost' tverdykh tel, zhidkostey, gazov i ikh kompozitsiy*. Moscow, Mir Publ., 1968. 464 p.).
3. Dul'nev G.N., Zarichniak Iu.P. *Teploprovodnost' smesei i kompozitsionnykh materialov* [Thermal conductivity of mixtures and composite materials]. Leningrad, Energiia Publ., 1974. 264 p. (in Russian).
4. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Yu. An effect of the form of lamellar inclusions on the effective thermal conductivity of a composite. *Kompozity i nanostruktury = Composites and Nanostructures*, 2014, no. 2, pp. 95–104. (in Russian).
5. Arzamasov B.N., Krashenninnikov A.I., Pastukhova Zh.P., Rakhshadt A.G. *Nauchnye osnovy materialovedeniya* [Scientific foundations of materials science]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 1994. 366 p. (in Russian).
6. Van Vlack L.H. *Elements of Materials Science and Engineering*. Addison-Wesley Publishing Co., Massachusetts, 1964. 600 p. (Russ. ed.: Van Vlack L.H. *Teoreticheskoe i prikladnoe materialovedenie*. Moscow, Atomizdat Publ., 1975. 472 p.).
7. Cahn R.W., Haasen P.T., eds. *Physical metallurgy. Vol. 2*. Amsterdam, North-Holland publishing company, 1965. (Russ. ed.: Cahn R.W., Haasen P.T., eds. *Fizicheskoe metallovedenie. V 3 t. T. 2*. Moscow, Mir Publ., 1968. 492 p.).
8. Kats E.A. *Fullereny, uglerodnye nanotrubki i nanoklastery. Rodoslovnaya form i idey* [Fullerenes, carbon nanotubes and nanoclusters. Genealogy forms and ideas]. Moscow, LKI Publ., 2008. 296 p. (in Russian).
9. Eletskii A.V., Iskandarova I.M., Knizhnik A.A., Krasikov D.N. Graphene: Fabrication methods and thermophysical properties. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2011, vol. 181, no. 3, pp. 233–268. (English translation: *Physics-Uspekhi*, 2011, vol. 54, no. 3, pp. 227–258. DOI: [10.3367/UFNe.0181.201103a.0233](https://doi.org/10.3367/UFNe.0181.201103a.0233)).

10. Balandin A.A., Ghosh S., Bao W., Calizo I., Teweldebrhan D., Miao F., Lau C.N. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Letters*, 2008, vol. 8, pp. 902–907. DOI: [10.1021/nl0731872](https://doi.org/10.1021/nl0731872)
11. Ghosh S., Calizo I., Teweldebrhan D., Pokatilov E.P., Nika D.L., Balandin A.A., Bao W., Miao F., Lau C.N. Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits. *Appl. Phys. Lett.*, 2008, vol. 92, art. no. 151911. DOI: [10.1063/1.2907977](https://doi.org/10.1063/1.2907977)
12. Klemens P.G. Theory of the A-plane thermal conductivity of graphite. *Journal of Wide Bandgap Materials*, 2000, vol. 7, no. 4, pp. 332–339. DOI: [10.1106/7FP2-QBLN-TJPA-NC66](https://doi.org/10.1106/7FP2-QBLN-TJPA-NC66)
13. Nika D.L., Ghosh S., Pokatilov E.P., Balandin A.A. Lattice thermal conductivity of graphene flakes: Comparison with bulk graphite. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, vol. 94, art. no. 203103. DOI: [10.1063/1.3136860](https://doi.org/10.1063/1.3136860)
14. Nika D.L., Pokatilov E.P., Askerov A.S., Balandin A.A. Phonon thermal conduction in graphene: Role of Umklapp and edge roughness scattering. *Phys. Rev. B*, 2009, vol. 79, no. 15, art. no. 155413. DOI: [10.1103/PhysRevB.79.155413](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.155413)
15. Ghosh S., Bao W., Nika D.L., Subrina S., Pokatilov E.P., Lau C.N., Balandin A.A. Dimensional crossover of thermal transport in few-layer graphene. *Nature Materials*, 2010, vol. 9, no. 7, pp. 555–558. DOI: [10.1038/nmat2753](https://doi.org/10.1038/nmat2753)
16. Chen Zh., Lin Yu.M., Rooks M.J., Avouris Ph. Graphene nano-ribbon electronics. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2007, vol. 40, no. 2, pp. 228–232. DOI: [10.1016/j.physe.2007.06.020](https://doi.org/10.1016/j.physe.2007.06.020)
17. Stankovich S., Dikin D.A., Dommett G.H.B., Kohlhaas K.M., Zimney E.J., Stach E.A., Piner R.D., Nguyen S.T., Ruoff R.S. Graphene-based composite materials. *Nature*, 2006, vol. 442, pp. 282–286. DOI: [10.1038/nature04969](https://doi.org/10.1038/nature04969)
18. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Matematicheskie modeli mekhaniki i elektrodinamiki sploshnoi sredy* [Mathematical models of mechanics and electrodynamics of continuous media]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2008. 512 p. (in Russian).
19. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Effective Coefficients of Thermal Conductivity of a Composite with Ellipsoidal Inclusions. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki = Herald of the Bauman MSTU. Ser. Natural science*, 2012, no. 3, pp. 76–85. (in Russian).
20. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Iu. The Effective Coefficients of Thermal Conductivity of Composites with Spherical Inclusions. *Teplovye protsessy v tekhnike = Thermal Processes in Engineering*, 2012, no. 10, pp. 470–474. (in Russian).
21. Kuvyrkin G.N. The Estimates of the Effective Thermal Conductivity of the Composite with 87 Graphene Inclusions. *Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovatsii = Engineering Journal: Science and Innovation*, 2013, no. 4. Available at: <http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/hidden/671.html>, accessed 01.10.2014. (in Russian).

22. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Effective thermal conductivity coefficients of composite with anisotropic ellipsoidal inclusions. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana = Science and Education of the Bauman MSTU*, 2013, no. 4, pp. 311–320. DOI: [10.7463/0413.0541050](https://doi.org/10.7463/0413.0541050) (in Russian)
23. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Comparative analysis of estimations of polycrystalline material's effective thermal conductivity coefficient. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana = Science and Education of the Bauman MSTU*, 2013, no. 3, pp. 313–328. DOI: [10.7463/0313.0541029](https://doi.org/10.7463/0313.0541029) (in Russian).
24. Vlasova E.A., Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Priblizhennyye metody matematicheskoy fiziki* [Approximate methods of mathematical physics]. Moscow, Bauman MSTU Publ, 2001. 700 p. (in Russian).
25. Shermergor T.D. *Teoriya uprugosti mikroneodnorodnykh sred* [Theory of elasticity of microinhomogeneous media]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 400 p. (in Russian).
26. Golovin N.N., Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Mixture Models of Composite Mechanics. P. 1. Thermal Mechanics and Thermoelasticity of Multicomponent Mixture. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennyye nauki = Herald of the Bauman MSTU. Ser. Natural science*, 2009, no. 3, pp. 36–49. (in Russian).
27. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Iu. Comparative analysis of estimations of heat conduction of a composite with ball inclusions. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana = Science and Education of the Bauman MSTU*, 2013, no. 7, pp. 299–318. DOI: [10.7463/0713.0569319](https://doi.org/10.7463/0713.0569319) (in Russian).