УДК 536.22

Метод расчета времени установления квазиоднородности дисперсных материалов

К.Н. Лещинский

В работе предлагается численная схема расчета теплообмена дисперсного материала на основе решения нестационарной задачи теплообмена в рамках элементарной ячейки. Данный подход позволяет определять время установления квазиоднородности образца, его эффективную теплопроводность, а также устраняет определенную условность, связанную с выбором изотермических поверхностей в традиционном методе.

Рассмотрены особенности численного решения данной задачи: построение схемы конечно-разностной аппроксимации, поправки, позволяющие сохранить консервативность схемы.

Введение. Использование теоретических методов изучения теплофизических характеристик неоднородных материалов сильно затрудняется сложной внутренней структурой исследуемых объектов и нелинейностью протекающих тепловых потоков. Аналитические решения существуют для тел простой конфигурации, например, для слоистых систем, при условии, что теплофизические свойства материалов не зависят от температуры. В более сложных случаях приходится применять различные приближенные методы, моделирующие внутреннюю структуру материала. Одним из распространенных методов изучения дисперсных систем является метод элементарной ячейки [1,2]. Этот метод не рассматривает переходные явления, однако в большинстве случаев требуется исследование именно нестационарных процессов.

При планировании эксперимента требуется знать оптимальное время его проведения. Переход от неоднородной системы к однородной существенно упрощает задачу исследования объекта, однако такой переход возможен только в случае установившегося процесса. Очевидно, в данных случаях требуется решение нестационарных задач теплопереноса. Ранее был предложен метод [3,4] определения времени установления квазиоднородности дисперсной системы. В данной работе рассматривается численный метод решения задачи нестационарной теплопроводности в дисперсной системе.

Математическая постановка задачи. Расчет проводится по следующей схеме (см. рис. 1). Для исследуемой системы в соответствии с рекомендациями, изложенными в [1,2], выбирается тип элементарной ячейки. Предполагается, что с ней соприкасается полуограниченная однородная среда с эффективной теплопроводностью, рассчитанной по методам [1,2], соответствующим выбранному типу элементарной ячейки. Боковые поверхности системы адиабатические, на нижней горизонтальной поверхности элементарной ячейки выделяется однородный постоянный по времени тепловой поток q_0. В начальный момент времени температура системы Т равна нулю. Процесс теплопереноса описывается уравнением

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\nabla^2 T\,, \tag{1}$$

где $a = \dfrac{\lambda}{c\rho}$ - коэффициент температуропроводности.

Начальные и граничные условия:

$$\begin{gathered} T = 0 \quad \text{при} \quad t = 0\,, \\ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} = -q_0\,, \\ \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0} = 0\,, \quad \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x'} = 0\,, \\ \left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{y=0} = 0\,, \quad \left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{y=y'} = 0\,, \\ T \to 0 \quad \text{при} \quad z \to \infty\,, \end{gathered} \tag{1a}$$

Решая численно данную задачу нестационарной теплопроводности, можно определить тепловой поток $q(x, y, z, t)$ и рассчитать $Q_1(z,t) = \int\limits_{S_1} q(x, y, z, t)dxdy$ и $Q_2(z,t) = \int\limits_{S_2} q(x, y, z, t)dxdy$, где S_1 и S_2 - соответственно нижняя и верхняя грани элементарной ячейки.

В некоторый момент времени τ выполнится равенство

$$Q_1 = kQ_2\,, \tag{2}$$

где k - заранее заданная величина, определяющая точность решения задачи. Время τ отождествляется с периодом установления квазистационарного процесса, при $t<\tau$ дисперсный образец не является квазиоднородным.

Изложенный подход, несмотря на большую трудоемкость, имеет определенные преимущества по сравнению с традиционным. В частности, его использование дает принципиально важную информацию о времени установления квазиоднородности материала. Другим преимуществом является отказ от соблюдения достаточно искусственного требования изотермичности торцевых граней элементарной ячейки.

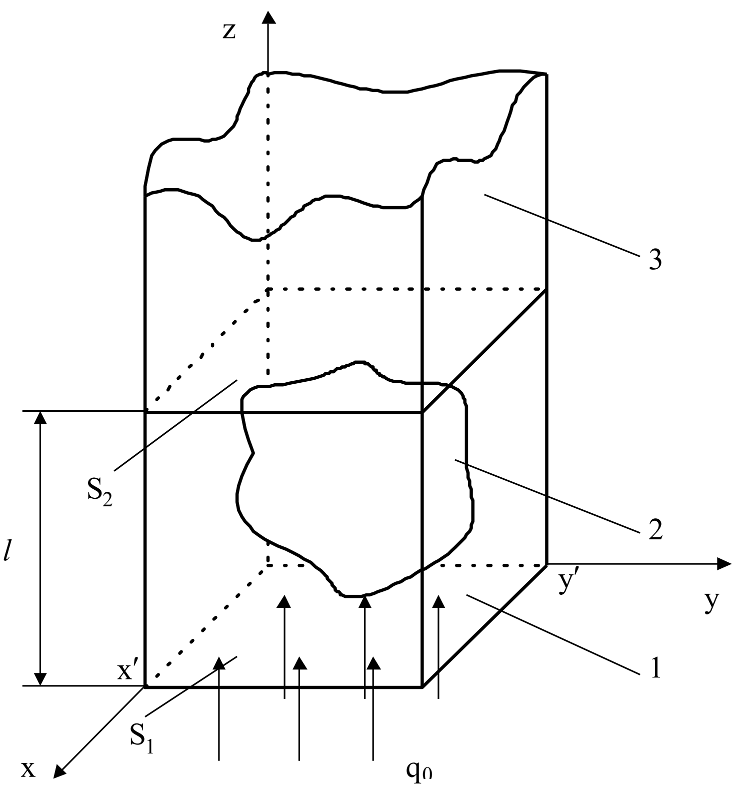


Рис. 1. Модель структуры гетерогенной системы. 1 - материал ячейки, 2 - материал включения, 3 - полуограниченный массив.

S_1 - нижняя грань элементарной ячейки (подвергается нагреву),

S_2 - верхняя грань элементарной ячейки, соприкасающаяся с полуограниченным массивом,

l - длина ребра элементарной ячейки,

q_0 - плотность потока теплоты.

Численное решение. При численном решении дифференциального уравнения возникает вопрос о построении аппроксимирующей сетки и выборе схемы аппроксимации. Как правило, конфигурация сетки определяется структурой области решения. Удобнее всего использовать прямоугольную сетку с равномерным шагом. Однако элементарная ячейка представляет собой объект, состоящий из двух различных сред, разделенных одной или более поверхностями раздела. В этом случае построить указанную простую сетку, как правило, невозможно и требуется также рассмотреть совокупность узлов, аппроксимирующих границу между материалами.

Рассмотрим последовательность аппроксимации трехмерного дифференциального уравнения.

Для аппроксимации (1) предложен ряд схем [5], сочетающих удобство применения и экономичность с точностью получаемого решения. Для применения была выбрана наиболее простая - схема расщепления. В данной схеме на каждом дробном шаге аппроксимируется оператор

$$L_s = a\frac{\partial^2}{\partial x_s^2}, \qquad (3)$$

где s - индекс направления; полная аппроксимация достигается только на полном шаге. Простейшая схема расщепления для трехмерного уравнения имеет вид [5]

$$\frac{T^{n+1/3} - T^n}{\tau} = a\frac{T_{i-1}^{n+1/3} - 2T_i^{n+1/3} + T_{i+1}^{n+1/3}}{h^2}, \qquad (4)$$

$$\frac{T^{n+2/3} - T^{n+1/3}}{\tau} = a\frac{T_{j-1}^{n+2/3} - 2T_j^{n+2/3} + T_{j+1}^{n+2/3}}{h^2}, \qquad (5)$$

$$\frac{T^{n+1} - T^{n+2/3}}{\tau} = a\frac{T_{k-1}^{n+1} - 2T_k^{n+1} + T_{k+1}^{n+1}}{h^2}, \qquad (6)$$

где i, j, k - индексы по пространственным координатам x, y, z соответственно, n - индекс по времени. Данная схема также известна под названием метода дробных шагов.

В [5] доказана аппроксимация и устойчивость схемы (4)-(6).

Далее учтем неоднородность материала. Уравнения (4)-(6) позволяют вместо решения трехмерного дифференциального уравнения рассматривать три одномерных. При наложении сетки на элементарную ячейку возможно несколько вариантов пересечения сетки и границы раздела сред:

- узел сетки попадает точно на границу раздела (рис. 2, *а*);
- граница раздела делит один из отрезков сетки в некотором отношении (рис. 2, *б*);
- граница раздела пересекает два соседних отрезка сетки (рис. 2, *в*).

В случае, когда узел сетки точно попадает на границу раздела сред, аппроксимируется граничное условие равенства потоков на границе раздела:

$$\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x_s}\bigg|_{x_s = x_s^* - 0} = \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x_s}\bigg|_{x_s = x_s^* + 0}. \tag{7}$$

Данное условие обычно аппроксимируется конечно-разностным выражением [6,7]

$$\lambda_1 \frac{T_s^{n+1} - T_{s-1}^{n+1}}{h_s} = \lambda_2 \frac{T_{s+1}^{n+1} - T_s^{n+1}}{h_s}, \tag{8}$$

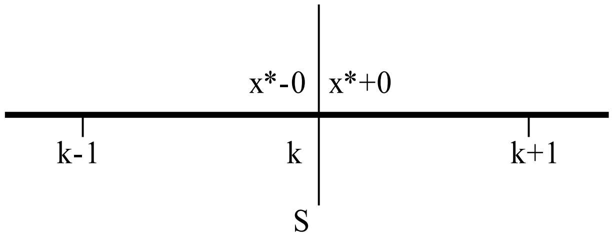
однако его использование приводит к нарушению консервативности вычислительной схемы.

Рассмотрим следующие разложения

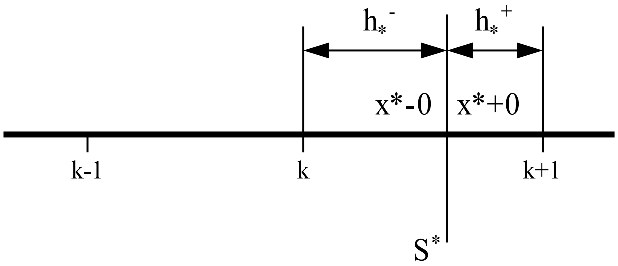
$$T(x-h) = T(x) - \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=x^*} h + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\bigg|_{x=x^*} \frac{h^2}{2} + O(h^3), \tag{9}$$

$$T(x+h) = T(x) + \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=x^*} h + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\bigg|_{x=x^*} \frac{h^2}{2} + O(h^3), \tag{10}$$

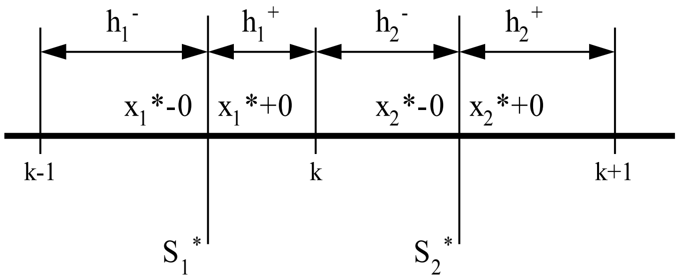
откуда следует



а)



б)



в)

Рис. 2. Различные случаи пересечения аппроксимационной сетки границей раздела сред:

а) граница раздела пересекает сетку в узле k;

б) пересечение происходит между узлами k и k+1;

в) граница раздела пересекает сетку в соседних отрезках.

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x^*} = \frac{T(x)-T(x-h)}{h} + \frac{h}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x^*} + O(h^2), \tag{11}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x^*} = \frac{T(x+h)-T(x)}{h} - \frac{h}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x^*} + O(h^2). \tag{12}$$

Учитывая

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \tag{13}$$

выражения (11), (12) можно записать следующим образом

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x^*} = \frac{T(x)-T(x-h)}{h} + \frac{h}{2a}\frac{\partial T}{\partial t} + O(h^2), \tag{14}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x^*} = \frac{T(x+h)-T(x)}{h} - \frac{h}{2a}\frac{\partial T}{\partial t} + O(h^2), \tag{15}$$

и для аппроксимации (7) вместо (8) можем использовать выражение

$$\lambda_1\left[\frac{T_k^{n+1}-T_{k-1}^{n+1}}{h_1} + \frac{h_1}{2a_1}\frac{T_k^{n+1}-T_k^n}{\Delta t}\right] = \lambda_2\left[\frac{T_{k+1}^{n+1}-T_k^{n+1}}{h_2} - \frac{h_2}{2a_2}\frac{T_k^{n+1}-T_k^n}{\Delta t}\right] \tag{16}$$

Для использования в методе прогонки выражение (16) удобно записать в виде

$$-\frac{\lambda_1}{h_1}T_{k-1}^{n+1} + \left[\left(\frac{\lambda_1}{h_1}+\frac{h_1}{2a_1}\right)+\left(\frac{\lambda_2}{h_2}+\frac{h_2}{2a_2}\right)\right]T_k^{n+1} - \frac{\lambda_2}{h_2}T_{k+1}^{n+1} = \left[\frac{h_1}{2a_1}+\frac{h_2}{2a_2}\right]T_k^n. \tag{17}$$

В случае, изображенном на рис. 2, *б*, рассмотрим узел T_*, который расположим в точке пересечения границы раздела сред и отрезка сетки. Тогда для узла k аппроксимация уравнения (13) запишется следующим образом:

$$\frac{T_k^{n+1}-T_k^n}{\Delta t} = a\frac{1}{h_1}\left(\frac{T_*^{n+1}-T_k^{n+1}}{h_*^-} - \frac{T_k^{n+1}-T_{k-1}^{n+1}}{h_1}\right) \tag{18}$$

Для узла T^* следует применить выражение (17) при $h_1 = h_*^-$, $h_2 = h_*^+$, а для узла k+1

$$\frac{T_k^{n+1} - T_k^n}{\Delta t} = a\frac{1}{h_1}\left(\frac{T_{k+1}^{n+1} - T_k^{n+1}}{h_2} - \frac{T_k^{n+1} - T_*^{n+1}}{h_*^+}\right). \qquad (19)$$

В случае *в)* поступим аналогичным образом. Для узла k-1

$$\frac{T_{k-1}^{n+1} - T_{k-1}^n}{\Delta t} = a\frac{1}{h_1}\left(\frac{T_{*1}^{n+1} - T_{k-1}^{n+1}}{h_*^-} - \frac{T_{k-1}^{n+1} - T_{k-2}^{n+1}}{h_1}\right), \qquad (20)$$

для узла T_{*1}

$$\lambda_1\left[\frac{T_{*1}^{n+1} - T_{k-1}^{n+1}}{h_1^-} + \frac{h_1^-}{2a_1}\frac{T_{*1}^{n+1} - T_{*1}^n}{\Delta t}\right] = \lambda_2\left[\frac{T_k^{n+1} - T_{*1}^{n+1}}{h_1^+} - \frac{h_1^+}{2a_2}\frac{T_{*1}^{n+1} - T_{*1}^n}{\Delta t}\right], \qquad (21)$$

для узла k

$$\frac{T_k^{n+1} - T_k^n}{\Delta t} = a\frac{1}{h_*}\left(\frac{T_{*2}^{n+1} - T_k^{n+1}}{h_2^-} - \frac{T_k^{n+1} - T_{*1}^{n+1}}{h_1^+}\right), \qquad (22)$$

где $h_* = \max(h_1^+, h_2^-)$,

для узла T_{*2}

$$\lambda_1\left[\frac{T_{*2}^{n+1} - T_k^{n+1}}{h_2^-} + \frac{h_2^-}{2a_1}\frac{T_{*2}^{n+1} - T_{*2}^n}{\Delta t}\right] = \lambda_2\left[\frac{T_{k+1}^{n+1} - T_{*2}^{n+1}}{h_2^+} - \frac{h_2^+}{2a_2}\frac{T_{*2}^{n+1} - T_{*2}^n}{\Delta t}\right], \qquad (23)$$

и, наконец, для узла k+1

$$\frac{T_{k+1}^{n+1} - T_{k+1}^n}{\Delta t} = a\frac{1}{h_1}\left(\frac{T_{k+2}^{n+1} - T_{*2}^{n+1}}{h_1} - \frac{T_{*2}^{n+1} - T_{*2}^{n+1}}{h_2^+}\right). \qquad (24)$$

Значения a, c, ρ и λ соответствуют материалу, которому принадлежит узел. Индексы 1 и 2 соответствуют материалам слева и справа от границы раздела сред, считая направление по возрастанию индекса пространственной переменной.

Выводы. 1. Предложен метод определения такого важного параметра, как время установления квазиоднородности дисперсной системы. Этот параметр может использоваться для оценки времени проведения теплофизического эксперимента, для приближенных оценок в теоретических расчетах теплофизических свойств неоднородных материалов.

2. Предложена конечно-разностная схема численного решения трехмерного уравнения теплопроводности для областей со сложной трехмерной границей.

Список литературы.

1. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Справочная книга. - Л.: Энергия, 1974. - 264 с.
2. Дульнев Г.Н., Новиков В.В. Процессы переноса в неоднородных средах. - Л.: Энергоатомиздат, 1991. - 247 с.
3. Спирин Г.Г., Ненароков Н.Ю., Лещинский К.Н. Теплопроводность и критерий квазиоднородности дисперсных материалов. // Инженерно-физический журнал. - 1998, 71, № 3. - С. 441 - 446.
4. Лещинский К.Н., Ненароков Н.Ю. Расчет теплопроводности и критерий квазиоднородности гетерогенных систем. - Деп. в ВИНИТИ. - 02.12.99, № 3588. - 13 с.
5. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. - Новосибирск: Наука, 1967. - 305 с.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем. - М.: Наука, 1989. - 616 с.
7. Ши Д. Численные методы в задачах теплообмена. - М.: Мир, 1988. - 544 с.

Сведения об авторе.

Лещинский Константин Николаевич,

аспирант кафедры физики Московского Государственного Авиационного института (Технического университета).

Телефон: 196-6601, e-mail: const@bochvar.ru