MIKROMECHANICKÉ MODELY PRO TEPELNOU VODIVOST V KOMPOZITNÍCH MATERIÁLECH S NEDOKONALÝM SPOJENÍM SLOŽEK

Bakalářská práce Jan Stránský

Vedoucí práce: Doc. Ing. Jan Zeman, Ph.D.



České Vysoké Učení Technické v Praze Fakulta stavební 2009

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně, pouze za odborného vedení vedoucího práce Doc. Ing. Jana Zemana, Ph.D.

Dále prohlašuji, že veškeré podklady, ze kterých jsem čerpal, jsou uvedeny v seznamu literatury.

V Praze dne 4. 6. 2009

Jan Stránský

ABSTRAKT

Podstatou této bakalářské práce je homogenizace materiálu s náhodnou mikrostrukturou z hlediska tepelné vodivosti. Jsou představeny základy dvou analytických homogenizačních metod (metody řídké aproximace a metody Mori-Tanaka), jejichž výsledkem je hodnota efektivní tepelné vodivosti materiálu v závislosti na tepelných vodivostech jednotlivých složek, jejich objemovém zastoupení a tvaru.

Dále je do výpočtu zaveden vliv nedokonalého tepelného rozhraní nehomogenit a matrice (tzv. Kapitzův odpor na ploše kontaktu) a tím i vliv absolutní velikosti nehomogenit. Na analytických i experimentálních výseldcích je ukázán pokles efektivní tepelné vodivosti se zmenšující se velikostí nehomogenit (při konstantním Kapitzově odporu). Dále je představena numerická metoda pro řešení ustáleného vedení tepla založená na diskretizaci Voronoiovým diagramem a její aplikace ve výše zmíněných analytických metodách.

ABSTRACT

This thesis deals with homogenization of thermal properties of materials with random microstructure. Basic principles of two analytical homogenization approaches, namely the dilute approximation and the Mori-Tanaka method, are discussed in detail. The resulting relations for effective thermal conductivity incorporate effects of thermal conductivities of individual components, their volume fractions and shapes.

These method are further extended to address the influence of imperfect interfacial properties between inhomogeneities and matrix (the interfacial Kapitza resistance), which also allows to take into account real size of particles. On the basis of analytical as well as experimental data, it is shown that the effective conductivity decreases with decreasing size of inhomogeneities (for constant values of Kapitza resistance). Finally, a numerical method for the analysis of steady-state heat transfer based on the Voronoi discretization is presented and applied to verify the aforementioned analytical methods.

Obsah

1	SLC	VO ÚVODEM	3				
2	ÚV	ÚVOD DO TERMODYNAMIKY					
	2.1	ZÁKLADNÍ POJMY	. 3				
	2.2	ZÁKLADNÍ ROVNICE VEDENÍ TEPLA	. 5				
		2 2 1 1 termodynamický zákon	6				
		2.2.1 R. termodynamický zakon	. 0				
		2.2.2 Abecná rovnice vedení tepla v prostoru	7				
			. 1				
3	VLI	V OSAMOCENÉ NEHOMOGENITY	9				
	3.1	POTENCIAL TEPLOTNIHO POLE	. 9				
		3.1.1 Jednorozměrný případ	. 9				
		3.1.2 Dvojrozměrný případ	. 10				
		3.1.3 Trojrozměrný případ	. 11				
		3.1.4 Potenciál tělesa tvaru elipsoidu	. 12				
	3.2	METODA EKVIVALENTNÍ INKLUZE	. 13				
	-	3.2.1 Jednorozměrný případ	. 13				
		322 Obecný trojrozměrný případ	15				
	33	ESHELBYHO TENZOB S	. 10				
	0.0	3 3 1 Specialní tvary Eshelbyho tonzoru	. 11				
		3.3.2 Porovnání numerického a analytického výzočtu	. 10				
		5.5.2 Torovnam numerickeno a anarytickeno vypoctu	. 10				
4	UR	ČENÍ EFEKTIVNÍ TEPELNÉ VODIVOSTI	19				
	4.1	METODA ŘÍDKÉ APROXIMACE (DA)	. 21				
		4.1.1 Předpoklady	. 21				
		4.1.2 Koncentrační faktor	. 21				
		4.1.3 Výpočet \mathbf{K}^* pomocí DA	. 22				
	4.2	METODA MORI-TANAKA	23				
	1.2	4.2.1 Předpoklady	· <u>-</u> 0 23				
		4.2.2 Výpočet K [*] pomocí MT	· 20				
	13	4.2.2 Vypocet R pointer with $1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.$. 24 96				
	4.0	4.2.1 Néhodně orientované olingoidu	. 20				
		4.5.1 Nanodne orientovane empsoidy \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots	. 21				
		4.3.2 Nahodne orientovane nehomogenity obecneho tvaru	. 28				
	4.4	NEDOKONALY KONTAKT, VLIV VELIKOSTI	. 29				
		4.4.1 Jednorozměrný případ	. 29				
		4.4.2 Trojrozměrný případ – kulové nehomogenity	. 31				
		4.4.3 Trojrozměrný případ – nekulové nehomogenity	. 32				
5	פות	KRÉTNÍ NUMERICKÉ ŘEŠENÍ	24				
J	5 1	PRINCIP METODY	34 34				
	0.1	$ \begin{array}{c} 1 \text{ Initial METODT} \\ 1 Initial M$. 04				
		$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$. 34				
		0.1.2 vypocet	. 54				
	F 0	5.1.5 Vysledky	. 37				
	5.2	POUZITI NA VYPOCET \mathbf{K}^* a $\mathbf{A}_{num}^{(1)}$. 37				
		5.2.1 Dokonalý tepelný kontakt	. 39				
		5.2.2 Nedokonalý tepelný kontakt	. 42				

5.3 DALSI MOZNOSTI METODY	. 45
APLIKACE 6.1CEMENTO-GUMOVÉ KOMPOZITY6.2Al-Si/SiC KOMPOZITY	47 . 47 . 48
ZÁVĚR	51
PODĚKOVÁNÍ	51
TERATURA	52
DODATKY A.1 NUMERICKÝ VÝPOČET ESHELBYHO TENZORU S	53 53 53 54 55 55 55 55 55 55
,	 APLIKACE 6.1 CEMENTO-GUMOVÉ KOMPOZITY 6.2 Al-Si/SiC KOMPOZITY ZÁVĚR PODĚKOVÁNÍ TERATURA DODATKY A.1 NUMERICKÝ VÝPOČET ESHELBYHO TENZORU S A.1.1 Obecný algoritmus A.1.2 Implementace do Matlabu A.2 TRANSFORMACE TENZORŮ A.2.1 Důkaz rovnice (4.53) A.2.3 Důkaz rovnice (4.57)

1 SLOVO ÚVODEM

Tepelná vodivost materiálů může mít pro stavební konstrukce (zvláště pak pro konstrukce pozemních staveb) značný význam. Málokterý stavební materiál používaný ve stavebnictví je ale čistě homogenní a jednosložkový, naopak většina jsou materiály nehomogenní vícesložkové (například beton), které ale obvykle mají známé složení. Je tedy výhodné mít k dispozici nástroj, kterým by bylo možno předpovědět celkovou (efektivní) tepelnou vodivost materiálů v závislosti na jejich složení. Cílem této práce je právě vytvoření takového modelu pro výpočet efektivní tepelné vodivosti, navíc s uvažováním možnosti nedokonalého spojení složek daného materiálu.

Organizace vlastní práce je zvolena následujícím způsobem. V kapitole 2 jsou definovány základní pojmy a rovnice vedení tepla. V kapitole 3 se vyšetřuje vliv osamocené nehomogenity umístěné v nekonečné matrici na teplotní pole, jehož znalost se následně v kapitole 4 použije pro určení efektivní tepelné vodivosti materiálu v závislosti na jeho známém složení a vlastnostech (objemovém zastoupení a tepelné vodivosti) jednotlivých složek. Pro výpočet jsou představeny dvě metody, metoda řídké aproximace a metoda Mori-Tanaka. Dále je diskutován vliv náhodné orientace a náhodného tvaru nehomogenit na výslednou efektivní vodivost a následně je do výpočtu zaveden vliv nedokonalého tepelného kontaktu mezi nehomogenitami a matricí, čímž se do výpočtu zahrne i vliv absolutní velikost nehomogenit. V kapitole 5 je dále představena numerická metoda pro řešení teplotního pole a její použití ve výše jmenovaných analytických metodách. V závěru práce v kapitole 6 jsou odvozené vztahy a metody ověřeny aplikací na skutečné experimentální hodnoty, převzaté z odborné literatury.

2 ÚVOD DO TERMODYNAMIKY

Dle [14] je termodynamika obor fyziky, který se zabývá teplem a tepelnými jevy, zkoumá vzájemné vztahy mezi veličinami charakterizujícími makroskopický stav systému a změny těchto veličin při fyzikálních dějích. Termodynamiku můžeme rozdělit na tzv. klasickou, která se zabývá systémem z makroskopického hlediska, a statistickou, která studuje chování velkého množství částic za pomoci metod teorie pravděpodobnosti a vychází z kinetické teorie látek (obor molekulové fyziky).

Dále můžeme termodynamiku rozdělit na rovnovážnou (stacionární), zabývající se studiem systémů v rovnovážném stavu (kdy se jednotlivé veličiny nemění s časem), a ne-rovnovážnou (nestacionární), zabývající se systémy ve stavu nerovnovážném, tedy takovými, kde jsou termodynamické veličiny časově proměnné.

2.1 ZÁKLADNÍ POJMY

Základní pojmy jsou převážně převzaty z [13].

Teplota (T)

Jedním ze základních pojmů termodynamiky je teplota. Dle definice z [15] je teplota vnitřní skalarní intenzivní veličina charakterizující tepelný stav hmoty. Jednotkou teploty je Kelvin, značí se K. Kelvin je jednou ze základních jednotek soustavy SI.

Teplo (Q)

Podle 1. věty termodynamiky je teplo systémem přijaté při tepelné výměně rovno zvýšení vnitřní energie systému zvětšenému o systémem vykonanou práci. V případě nulové vykonané práce můžeme teplo popsat jako míru změny vnitřní energie systému při styku s jiným materiálem. Jednotkou tepla je Joule, $J = m^2 \text{ kg s}^{-2}$, rozměrově se tedy jedná o energii.

Tepelná kapacita (C)

Tepelná kapacita vyjadřuje schopnost tělesa přijímat teplo. Císelně se tepelná kapacita rovná teplu potřebnému k ohřátí daného tělesa o jeden Kelvin. V závislosti na podmínkách ohřevu se zavádí pro dva ideální případy (měrná) tepelná kapacita za stálého objemu a za stálého tlaku (viz kapitolu 2.2.1).

$$C = \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}T} \tag{2.1}$$

Kde $C_{\rm }$ je tepelná kapacita v J ${\rm K}^{-1}={\rm m}^2\,{\rm kg\,s^{-2}\,K^{-1}}$

- $\mathrm{d}Q$ dodané teplo
- dT přírůstek teploty způsobený dodaným teplem

Měrná tepelná kapacita (c)

Měrná tepelná kapacita je teplo potřebné k ohřátí jednotky hmotnosti dané látky o jeden K, jedná se o materiálovou konstantu (která ale obvykle bývá závislá na aktuální teplotě).

$$c = \frac{C}{m} = \frac{1}{m} \left(\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}T} \right) \tag{2.2}$$

Kdec je měrná tepelná kapacita v J $\rm kg^{-1}\,K^{-1}=m^2\,s^{-2}\,K^{-1}$

- C tepelná kapacita
- m hmotnost dané látky
- dQ dodané teplo
- dT přírůstek teploty

Tepelný tok (I_Q)

Tepelný tok je teplo dodané za jednotku času.

$$I_Q = \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}\tau} \tag{2.3}$$

Kde $I_Q~$ je tepelný tok v $\rm J\,s^{-1}=W=m^2\,kg\,s^{-3}$

- dQ přivedené teplo
- $d\tau$ za čas τ

Hustota tepelného toku (q)

Hustota tepelného toku je definována podílem tepelného toku a plochy, jíž tento tok kolmo prochází. Někdy se však hustota tepelného toku zkráceně nazývá tepelný tok, a i v této práci tak někdy budeme činit, vždy ale s označením výhradně q či D (respektive \mathbf{q} , \mathbf{D}). Oproti netučně značeným skalarním veličinám tučně značené veličiny vyjadřují vektory či tenzory 2. řádu.

$$q = \frac{\mathrm{d}I_Q}{\mathrm{d}S}, \quad \mathbf{q}^\mathsf{T}\mathbf{n} = \frac{\mathrm{d}I_Q}{\mathrm{d}S} \tag{2.4}$$

Kde ${\bf q}$ je hustota tepelného toku v ${\rm W\,m^{-2}=kg\,s^{-3}}$

- $\mathrm{d}I_Q$ tepelný tok
- dS plocha v m²
- ${f n}$ jednotkový normálový vektor plochy dS

Tepelná vodivost (K)

Tepelná vodivost vyjadřuje schopnost látky vést teplo. Je to materiálová konstanta, která ale opět může být závislá na aktuální teplotě. Číselně je tepelná vodivost (resp. součinitel tepelné vodivosti) rovna záporné hodnotě hustoty tepelného toku při jednotkovém teplotním gradientu. Značí se jako λ nebo K. V obecném případě trojrozměrného vedení tepla je součinitel tepelné vodivosti tenzor druhého řádu rozměru 3×3 . Následující rovnice vyjadřují tzv. Fourierův zákon.

$$q = -K \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x} \tag{2.5}$$

nebo v obecném případě

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla T \tag{2.6}$$

- Kde **K** je součinitel tepelné vodivosti (tenzor 3×3) ve W m⁻¹ K⁻¹ = m kg s⁻³ K⁻¹
 - \mathbf{q} hustota tepelného toku, $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)^T$

 ∇T teplotní gradient

$$\nabla T = (\nabla_x T, \nabla_y T, \nabla_z T)^{\mathsf{T}} = \left(\frac{\partial T}{\partial x}, \frac{\partial T}{\partial y}, \frac{\partial T}{\partial z}\right)^{\mathsf{T}}$$
(2.7)

Tepelná propustnost (h)

Tepelná propustnost tělesa (vrstvy) je číselně rovna záporné hodnotě hustoty tepelného toku při jednotkovém teplotním rozdílu na opačných površích dané vrstvy.

$$q = -h\,\Delta T, \quad \mathbf{q}^{\mathsf{T}}\mathbf{n} = -h\,\Delta T \tag{2.8}$$

Jinou definicí tepelné propustnosti může být, že tato je tepelná vodivost připadající na tloušťku dané vrstvy.

$$h = \frac{K}{t} \tag{2.9}$$

Kdeh je tepelná propustnost ve ${\rm W\,m^{-2}\,K^{-1}=kg\,s^{-3}\,K^{-1}}$

- **q** hustota tepelného toku
- ΔT teplotní rozdíl
- K součinitel tepelné vodivosti
- t tloušťka dané vrstvy
- **n** jednotkový normálový vektor vrstvy

2.2 ZÁKLADNÍ ROVNICE VEDENÍ TEPLA

Základní podmínkou pro šíření tepla prostředím jsou rozdílné teploty v různých místech prostředí. Přirozeně potom teplo z míst s vyšší teplotou postupuje do míst s teplotou nižší. Dle 2. termodynamického zákona tomu ani samovolně nemůže být obráceně. Teplo se může šířit třemi způsoby:

- vedením (kondukcí)
- prouděním (konvekcí)
- sáláním (radiací)

Tato práce se výhradně zabývá šířením tepla vedením (kondukcí).

2.2.1 1. termodynamický zákon

Základní rovnice vedení tepla vychází z již zmíněného 1. termodynamického zákona, který říká, že teplo systémem přijaté při tepelné výměně je rovno zvýšení vnitřní energie systému zvětšenému o systémem vykonanou práci (zákon zachování energie).

$$\Delta Q = \Delta W + \Delta U \tag{2.10}$$

Kde ΔQ je teplo, kladné v případě, že systém teplo přijímá

- ΔW práce systémem vykonaná
- $\Delta U -$ změna vnitřní energie systému, kladná v případě nárůstu

Tato rovnováha musí platit pro libovolný časový interval. Po vydělení celé rovnice časem a limitním přechodu k časové derivaci dle [11] dostáváme:

$$I_Q = \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}\tau} + \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\tau} \tag{2.11}$$

Kde I_Q je tepelný tok

 $dW/d\tau$ časová derivace práce, tedy výkon $dU/d\tau$ časová změna vnitřní energie systému

Jednotky jsou $Js^{-1} = W$. V případě, že jediným výskytem práce soustavy je změna objemu, pak W můžeme vyjádřit jako W = p dV, kde p je tlak. Rovnice (2.11) má dva speciální případy: děj izochorický (za konstantního objemu) a děj izobarický (za konstantního tlaku)

$$I_{Q,v} = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\tau} = mc_v \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\tau}$$
$$I_{Q,p} = \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\tau} = mc_p \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\tau}$$
(2.12)

Kde H je entalpie, H = U + pV

 c_v měrná tepelná kapacita pro stálý objem

 c_p měrná tepelná kapacita pro stálý tlak

V ideálním případě dokonale tuhé (nestlačitelné) látky se obě měrné tepelné kapacity rovnají $c_v = c_p = c$, z čehož plyne výraz pro tepelný tok:

$$I_Q = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\tau} = mc\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\tau} \tag{2.13}$$

2.2.2 Rovnice jednorozměrného vedení tepla

Kombinací rovnic (2.5) a (2.6) Fourierova zákona můžeme postupně vyjádřit základní rovnici vedení tepla, nejdříve pro jednorozměrný případ (pro jednoduchost budeme už na začátku předpokládat nezávislost tepelné vodivosti na poloze v prostoru i na teplotě a absenci vnitřních zdrojů tepla):



Na obrázku je znázorněn výsek materiálu s hustotou ρ , plochou A, tloušťkou δx a hmotností $m = \rho A \delta x$. Další popis daného výseku je realizován pomocí teploty T, která je funkcí polohy x a času τ ($T = T(x, \tau)$), a tepelného toku po obou stranách výseku $I_Q(x)$ a $I_Q(x + \delta x)$.

Kombinací rovnic (2.4) a (2.5) dostáváme:

$$I_Q = Aq = -AK \frac{\partial T}{\partial x} \tag{2.14}$$

Změnu tepelného toku na obou stranách výseku vyjádříme takto:

$$I_{Q,net} = I_Q(x + \delta x) - I_Q(x) = -KA \frac{\frac{\partial T}{\partial x}|_{x+\delta x} - \frac{\partial T}{\partial x}|_x}{\delta x} \delta x = -KA \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \delta x$$
(2.15)

Ztráta tepelného toku odpovídá dle rovnic (2.11) a (2.13) změně vnitřní energie uzavřeného izochorického systému:

$$-I_{Q,net} = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\tau} = mc\frac{\partial T}{\partial\tau} = \rho cA\frac{\partial T}{\partial\tau}\delta x \qquad (2.16)$$

Porovnáním rovnic (2.15) a (2.16) po úpravě dostáváme:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\rho c}{K} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial \tau}$$
(2.17)

Kde $\alpha = K/\rho c$ je součinitel teplotní (nikoliv tepelné) vodivosti. Rovnice jednorozměrného vedení tepla (2.17) neobsahuje veličinu I_Q , je to parciální diferenciální rovnice pouze pro neznámou funkci teploty T. Pro stacionární případ, kdy časová změna teploty (pravá strana rovnice) je nulová, dostaneme:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \tag{2.18}$$

2.2.3 Obecná rovnice vedení tepla v prostoru

Pro obecný případ se opět vychází z rovnice (2.13). Představme si těleso o objemu V a povrchu S. Těleso má v každém bodě $\mathbf{x} = (x, y, z)^{\mathsf{T}}$ svého povrchu normálový vektor

 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)^{\mathsf{T}}$. Dle rovnic (2.6), (2.4) se tepelný tok přes element plochy dS (ven z tělesa) spočte takto:

$$dI_{Q,out} = \mathbf{q}^{\mathsf{T}}(\mathbf{n} \, \mathrm{d}S) = (-\mathbf{K}\nabla T)^{\mathsf{T}}(\mathbf{n} \, \mathrm{d}S)$$
(2.19)

Dále uvažujme v tělese rozložený objemový zdroj tepla $\overline{Q}(\mathbf{x})$ s jednotkou W m⁻³. Tento může být například způsoben chemickými či jadernými procesy v tělese, elektrickým odporem při průchodu proudu, vnějšími podněty apod. Výraz pro celkový tepelný tok produkovaný tělesem potom bude (součet výkonu zdroje a tepelného toku *do* tělesa):

$$I_Q = -\int_S (-\mathbf{K}\nabla T)^{\mathsf{T}} (\mathbf{n} \,\mathrm{d}S) + \int_V \overline{Q} \,\mathrm{d}V$$
(2.20)

Časová změna vnitřní energie tělesa V dle rovnice (2.13):

$$I_Q = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\tau} = \int_V \rho c \frac{\partial T}{\partial \tau} \,\mathrm{d}V \tag{2.21}$$

Kombinací rovnic (2.20) a (2.21) a úpravou dostáváme:

$$\int_{S} (\mathbf{K} \nabla T)^{\mathsf{T}} \mathbf{n} \, \mathrm{d}S = \int_{V} \left(\rho c \frac{\partial T}{\partial \tau} - \overline{Q} \right) \, \mathrm{d}V \tag{2.22}$$

Užitím Gaussova teorému pro konverzi plošného integrálu na integrál objemový

$$\int_{S} \mathbf{v}^{\mathsf{T}} \, \mathbf{n} \, \mathrm{d}S = \int_{V} \nabla \cdot \mathbf{v} \, \mathrm{d}V \tag{2.23}$$

a substitucí $\mathbf{v} = \mathbf{K} \nabla T$ dostaneme:

$$\int_{V} \left(\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla T - \rho c \frac{\partial T}{\partial \tau} + \overline{Q} \right) \, \mathrm{d}V = 0 \tag{2.24}$$

Rovnice (2.24) musí platit pro libovolnou (integrační) oblast, výslednou rovnici tedy zapíšeme bez integrálu:

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla T + \overline{Q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial \tau}$$
(2.25)

Toto je obecná rovnice pro trojrozměrné vedení tepla. Pokud bychom uvažovali součinitel tepelné vodivosti izotropní (stejný ve všech směrech a nezávislý na volbě souřadného systému) a nezávislý na teplotě, můžeme rovnici (2.25) upravit na tvar:

$$\nabla^2 T + \frac{\overline{Q}}{K} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial \tau}$$
(2.26)

Pro stacionární případ dostaneme formu:

$$\nabla^2 T = -\frac{\overline{Q}}{K} \tag{2.27}$$

Nyní zopakujeme předpoklady, pro které jsme odvodili rovnici (2.25):

Materiál je dokonale tuhý (nestlačitelný), při působení tlaku není konána žádná práce

• Při přenosu tepla se neuplatňuje proudění (konvekce) ani sálání (radiace)

a rovnici (2.27):

- Prostředí je izotropní
- Součinitel tepelné vodivosti K je nezávislý na teplotě
- Vedení tepla je stacionární (ustáleně, časově neměnné)

3 VLIV OSAMOCENÉ NEHOMOGENITY

Mnoho homogenizačních metod je odvozeno od chování jediné nehomogenity umístěné v nekonečné základní hmotě (matrici). Náplní této kapitoly je určení vlivu osamocené cizorodé částice na teplotní pole uvnitř této částice a v jejím okolí.

3.1 POTENCIÁL TEPLOTNÍHO POLE

Jako potenciál teplotního pole budeme chápat skalarní veličinu, pomocí níž můžeme vyjádřit některé fyzikální veličiny (například teplotu). V této kapitole budeme definovat několik typů potenciálů, jejich značení a význam jsou následující: písmenem φ vyjádříme potenciál bodového (nekonečně malého) zdroje, ϕ pak bude značit potenciál tělesa Ω konečných rozměrů. Horním indexem T vyjádříme teplotní potenciál závislý na poloze, vlastnostech prostředí (tepelné vodivosti) a případně na tvaru a rozměrech tělesa, jehož potenciál zkoumáme. Potenciál bez horního indexu značí geometrický potenciál závislý pouze na poloze, tvaru a rozměrech tělesa. Dolní index 1D vyjadřuje jednorozměrný případ, 2D dvojrozměrný případ, výrazy bez dolního indexu vyjadřují obecný (trojrozměrný) případ. Například φ_{1D}^T vyjadřuje jednorozměrný teplotní potenciál bodového

3.1.1 Jednorozměrný případ

Představme si nekonečný drát o ploše průřezu A a vodivosti K a v něm v počátku soustavy souřadnic zdroj tepla \overline{Q} zaujímající celý průřez drátu v oblasti Ω .



Bereme-li v úvahu ustálený stav a předpokládáme-li, že se teplo v drátu bude šířit symetricky od zdroje tepla, bude podle zákona zachování energie platit:

$$\overline{Q}\,\delta t\,A = I_Q = q\,2A\tag{3.1}$$

z čehož plyne:

$$\overline{Q}\,\delta t = -2K\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}\tag{3.2}$$

Kde r je vzdálenost od zdroje tepla \overline{Q} . Úpravou dostaneme:

$$dT = -\frac{\overline{Q}\delta t}{2K} dr$$

$$\int dT = -\int \frac{\overline{Q}\delta t}{2K} dr$$

$$T = -\frac{\overline{Q}\delta t}{2K}r + C_1$$
(3.3)

Kde C_1 je integrační konstanta. Po předepsání teploty T_0 v místě zdroje tepla a substituci r = |x| dostaneme:

$$T = T_0 - \frac{\overline{Q}\delta t}{2K}|x| \tag{3.4}$$

K obdobnému výsledku bychom dospěli i po umístění počátku soustavy souřadnic do jiného bodu. Potom pro zdroj v bodě x' a teplotu zjišťovanou v bodě x platí:

$$T = T_0 - \frac{\overline{Q}\delta t}{2K}|x - x'| = T_0 + \overline{Q}\,\varphi_{1D}^T \tag{3.5}$$

Kde

$$\varphi_{1D}^T = -\frac{\delta t}{2K} |x - x'| \tag{3.6}$$

je jednorozměrný teplotní potenciál bodového zdroje tepla. Dle zákona superpozice získáme jednorozměrný potenciál tělesa konečné délky ϕ_{1D}^T součtem (integrací) všech bodových zdrojů v oblasti Ω , tedy:

$$\phi_{1D}^{T} = -\int_{\Omega} \frac{1}{2K} |x - x'| \, \mathrm{d}t = -\frac{1}{2K} \int_{\Omega} |x - x'| \, \mathrm{d}t = -\frac{1}{2K} \phi_{1D} \tag{3.7}$$

 $\phi_{1D} = \int_{\Omega} |x - x'| dt$ je jednorozměrný geometrický potenciál tělesa. Při umístění počátku do středu tělesa dostaneme integrací v mezích $-t_0$ až $+t_0$ výsledný potenciál:

$$\phi_{1D} = \int_{-t_0}^{t_0} |x - x'| \, \mathrm{d}x' = \begin{cases} x^2 + t_0^2 & \text{v }\Omega\\ 2|x|t_0 & \text{mimo }\Omega \end{cases}$$
(3.8)

První a druhé derivace geometrického potenciálu vypadají následovně:

$$\frac{\mathrm{d}\phi_{1D}}{\mathrm{d}x} = \phi_{1D}' = \begin{cases} 2x & \mathrm{v}\ \Omega\\ \pm 2t_0 & \mathrm{mimo}\ \Omega \end{cases}$$
(3.9)

$$\frac{\mathrm{d}^2 \phi_{1D}}{\mathrm{d}x^2} = \phi_{1D}'' = \begin{cases} 2 & \mathrm{v} \ \Omega \\ 0 & \mathrm{mimo} \ \Omega \end{cases}$$
(3.10)

Všimneme si několika vlastností potenciálu. Za prvé je potenciál v celé délce spojitý, jako funkce x se chová v oblasti Ω kvadraticky, mimo Ω lineárně, z čehož plynou i vlastnosti jeho derivací: první derivace je v Ω lineární, mimo Ω konstantní, druhá derivace je v Ω konstantní, mimo Ω je rovna nule.

3.1.2 Dvojrozměrný případ

Podobnou posloupností a úvahou vyjádříme i potenciál pro 2D (kde q(r) značí hustotu tepelného toku ve vzdálenosti r od tepelného zdroje a o(r) je obvod kruhu o poloměru r, tedy délka hranice, přes kterou příslušný tepelný tok protéká):

$$r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2}$$
(3.11)

$$t \,\mathrm{d}S \,\overline{Q} = I_Q = q(r) \,o(r) = -K \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \,2\pi r \tag{3.12}$$

$$dT = -\frac{\overline{Q} \, dS}{2\pi K r} \, dr$$

$$T = T_0 - \frac{\overline{Q} \, dS}{2\pi K} \ln r = T_0 + \overline{Q} \, \varphi_{2D}^T$$

$$\varphi_{2D}^T = -\frac{dS}{2\pi K} \ln r$$

$$\phi_{2D} = \int_{\Omega} \ln r \, dS \qquad (3.13)$$

$$(3.13)$$

3.1.3 Trojrozměrný případ

A konečně i pro případ trojrozměrný, kde q(r) je opět hustota tepelného toku ve vzdálenosti r a S(r) je povrch koule o poloměru r, tedy plocha hranice, přes kterou příslušný tepelný tok protéká):

$$r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}$$
(3.14)

$$dV \overline{Q} = I_Q = q(r) S(r) = -K \frac{dT}{dr} 4\pi r^2$$
(3.15)

$$\mathrm{d}T = -\frac{Q\,\mathrm{d}V}{4\pi K r^2}\,\mathrm{d}r$$

V předchozích dvou případech jsme předepisovali teplotu T_0 v počátku soustavy souřadnic. V tomto případě ale teplota v počátku není vůbec definována, proto teplotu předepíšeme v jiném bodě, a to v nekonečnu. Pokračováním integrací a podmínkou $T(r \to \infty) = T_0$ dostaneme

$$T = T_0 + \frac{Q \, dV}{4\pi Kr} = T_0 + \overline{Q} \, \varphi^T$$
$$\varphi^T = \frac{dV}{4\pi Kr} = \frac{1}{4\pi K} \varphi$$
$$\phi = \int_{\Omega} \frac{1}{r} \, dV = \int_{\Omega} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \, dV$$
(3.16)

3.1.4 Potenciál tělesa tvaru elipsoidu

Je-li tělesem elipsoid s poloosamia,b,ca s rovnicí

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1, (3.17)$$

pak se dle odvození například v [4] nebo [10] geometrický potenciál redukuje na:

$$\phi = \pi abc \int_{\lambda}^{\infty} \frac{U(s)}{\Delta(s)} ds$$

$$U(s) = 1 - \left(\frac{x^2}{a^2 + s} + \frac{y^2}{b^2 + s} + \frac{z^2}{c^2 + s}\right)$$

$$\Delta(s) = \sqrt{(a^2 + s)(b^2 + s)(c^2 + s)}$$
(3.18)

kde $\lambda = 0$ pro vnitřní body elipsoidu ($x \in \Omega$) a je největším kořenem rovnice U(s) = 0 pro body mimo elipsoid ($x \notin \Omega$). První a druhé derivace potenciálu uvnitř elipsoidu vypadají následovně:

$$\phi = \pi abc \int_0^\infty \left(1 - \frac{x^2}{a^2 + s} - \frac{y^2}{b^2 + s} - \frac{z^2}{c^2 + s} \right) \frac{\mathrm{d}s}{\Delta(s)}$$
(3.19)
$$\phi'_x = -2\pi abc \int_0^\infty \frac{x}{(2s+s)} \frac{\mathrm{d}s}{\Delta(s)}$$

$$\phi'_{x} = -2\pi abc \int_{0}^{\infty} \frac{y}{(b^{2}+s)} \frac{\mathrm{d}s}{\Delta(s)}$$

$$(3.20)$$

$$\phi'_{z} = -2\pi abc \int_{0}^{\infty} \frac{z}{(c^{2}+s)} \frac{\mathrm{d}s}{\Delta(s)}$$

$$\phi''_{xx} = -2\pi abc \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}s}{(a^{2}+s)\Delta(s)}$$

$$\phi''_{yy} = -2\pi abc \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}s}{(b^{2}+s)\Delta(s)}$$

$$\phi''_{zz} = -2\pi abc \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}s}{(c^{2}+s)\Delta(s)}$$
(3.21)

$$\phi_{xy}'' = \phi_{yx}'' = \phi_{xz}'' = \phi_{zx}'' = \phi_{yz}'' = \phi_{zy}'' = 0$$
(3.22)

Všimneme si, že druhé derivace potenciálu jsou v celé oblasti elipsoidu konstantní. Pokud se druhé derivace elipsoidu poskládají do matice, dostaneme:

$$\mathbf{\Phi}'' = \begin{pmatrix} \phi_{xx}'' & \phi_{xy}'' & \phi_{xz}'' \\ \phi_{yx}'' & \phi_{yy}'' & \phi_{yz}'' \\ \phi_{zx}'' & \phi_{zy}'' & \phi_{zz}'' \end{pmatrix}$$
(3.23)

Dle [8] se druhá derivace potenciálu na ploše elipsoidu skokově mění podle vztahu

$$(\mathbf{\Phi}'')_{s+} - (\mathbf{\Phi}'')_{s-} = 4\pi \mathbf{n} \, \mathbf{n}^{\mathsf{T}}$$
(3.24)

kde $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)^{\mathsf{T}}$ je jednotkový normálový vektor plochy elipsoidu. Index s+ značí limitu funkce, kdy se k ploše přibližujeme z vnějšku, s- potom limitu zevnitř. Jednoduchým roznásobením a úvahou $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$ dostaneme pro libovolný vektor \mathbf{v} vztah

$$(\mathbf{n}\,\mathbf{n}^{\mathsf{T}}\,\mathbf{v})^{\mathsf{T}}\mathbf{n} = \mathbf{v}^{\mathsf{T}}\mathbf{n},\tag{3.25}$$

čehož využijeme v následujících kapitolách.

3.2 METODA EKVIVALENTNÍ INKLUZE



Obrázek 1: Převedení nehomogenity s
 $\mathbf{K}^{(I)}$ (a) na ekvivalentní inkluzi s $\mathbf{K}^{(m)}$
 (b) dle [8]

Představme si nekonečné izotropní prostředí s tepelnou vodivostí $\mathbf{K}^{(m)} = K^{(m)}\mathbf{I}$ (kde **I** je jednotková matice) obsahující osamocenou nehomogenitu s vodivostí $\mathbf{K}^{(I)}$. Dále na okrajích nekonečného prostředí předepíšeme konstantní tepelný tok \mathbf{q}^0 (tzv. vzdálený tok, rovnoměrný tok). Principem metody ekvivalentní inkluze (equivalent inclusion method v anglicky psané literatuře) je nahrazení nehomogenity s vodivostí $\mathbf{K}^{(I)}$ ekvivalentní inkluzí s vodivostí $\mathbf{K}^{(m)}$ okolního prostředí, doplněnou o rovnoměrný předepsaný "inkluzivní" tok \mathbf{D} v oblasti nehomogenity (inkluze).

3.2.1 Jednorozměrný případ

Úvod příkladu je analogický k odvození jednorozměrného potenciálu v kapitole 3.1.1, vektorové veličiny z prostorového případu mají jen jednu složku, značíme je tedy netučným

písmem. Stejně tak gradient přejde v obyčejnou derivaci podle x. Počátek souřadného systému umístíme do středu inkluze délky $2t_0$. Dále rozdělíme celkovou teplotu $T^{(I)}$ (index I znamená, že se jedná o teplotní pole vzniklé působením nehomogenity označené jako I - z anglického "inhomogeneity") na rovnoměrnou teplotu T^0 závislou na předepsaném rovnoměrném toku q^0 a teplotu fluktuační $\tilde{T}^{(I)}$ závislou na předepsaném inkluzivním toku D.

$$T^{(I)} = T^0 + \tilde{T}^{(I)} \tag{3.26}$$

$$T^0 = T_r + \nabla T^0 x \tag{3.27}$$

$$q^{0} = -K^{(m)} \nabla T^{0} \rightarrow \nabla T^{0} = -\frac{q^{0}}{K^{(m)}}$$
 (3.28)

kde T_r je referenční teplota v počátku souřadného systému, ∇T^0 je konstantní teplotní gradient definovaný rovnicí (3.28). V případě, že druhá derivace potenciálu je v oblasti nehomogenity konstantní (u jednorozměrného případu splněno identicky), fluktuační teplota $\tilde{T}^{(I)}$ se určí podle vztahu (viz [8]):

$$\tilde{T}^{(I)}(x) = D\phi_{1D}^{T}{}' = D\frac{\mathrm{d}\phi_{1D}^{T}}{\mathrm{d}x}$$
(3.29)

kde ϕ_{1D}^T je teplotní potenciál. Kombinací rovnic (3.7), (3.9), a (3.10) můžeme zapsat:

$$\tilde{T}^{(I)} = -\frac{D}{K^{(m)}} x \qquad \qquad \mathbf{v} \ \Omega \tag{3.30}$$

$$\tilde{T}^{(I)} = -\frac{D}{K^{(m)}} t_0 \qquad \text{mimo } \Omega \tag{3.31}$$

$$\nabla \tilde{T}^{(I)} = \frac{\mathrm{d}\tilde{T}^{(I)}}{\mathrm{d}x} = -\frac{D}{K^{(m)}} \qquad \mathrm{v} \ \Omega \tag{3.32}$$

$$\nabla \tilde{T}^{(I)} = \frac{\mathrm{d}\tilde{T}^{(I)}}{\mathrm{d}x} = 0 \qquad \text{mimo }\Omega \qquad (3.33)$$

Další derivací je ukázáno, že fluktuační teplota $\tilde{T}^{(I)}$ splňuje rovnici (2.18)

$$\nabla^2 \tilde{T}^{(I)} = \frac{\mathrm{d}^2 \tilde{T}^{(I)}}{\mathrm{d}x^2} = 0 \tag{3.34}$$

ve všech bodech jednorozměrného prostoru. Podle rovnic (3.32) a (3.33) je zřejmé, že teplotní gradient se skokově mění na hranicích inkluze:

$$(\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s+} - (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-} = D/K^{(m)}$$
(3.35)

Jak již bylo řečeno dříve, s+ značí limitu hranice zvnějšku, s- limitu hranice zevnitř. I když se mění teplotní gradient, tepelný tok musí zůstat spojitý:

$$(q^{(I)})_{s+} = (q^{(I)})_{s-} (3.36)$$

$$K^{(m)}(\nabla T^{(I)})_{s+} = K^{(I)}(\nabla T^{(I)})_{s-}$$
(3.37)

$$K^{(m)}[(\nabla T^0)_{s+} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s+}] = K^{(I)}[(\nabla T^0)_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}]$$
(3.38)

$$K^{(m)}[(\nabla T^{0})_{s+} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s+} - (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}] = K^{(I)}[(\nabla T^{0})_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}]$$
(3.39)

$$K^{(m)}[(\nabla T^{0})_{s+} + D/K^{(m)} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}] = K^{(I)}[(\nabla T^{0})_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}]$$
(3.40)

Uvážíme-li fakt, že teplotní gradient rovnoměrné teplot
y ∇T^0 je všude konstantní a definicí

$$\nabla T^D = \frac{D}{K^{(m)}} \tag{3.41}$$

stanovíme vztah mezi skutečnou nehomogenitou (pravá strana) a ekvivalentní inkluzí (strana levá)

$$K^{(m)}(\nabla T^{0} + \nabla \tilde{T}^{(I)} + \nabla T^{D}) = K^{(I)}(\nabla T^{0} + \nabla \tilde{T}^{(I)}), \qquad (3.42)$$

z čehož dosazením a úpravou vyjádříme vztah mezi gradientem rovnoměrné teploty ∇T^0 a gradientem souhrnné teploty v inkluzi $\nabla T^{(I)}$ jako

$$K^{(m)}(\nabla T^{(I)} + \nabla T^D) = K^{(I)} \nabla T^{(I)}$$
(3.43)

$$\nabla T^{D} = \frac{K^{(I)} - K^{(m)}}{K^{(m)}} \nabla T^{(I)}$$
(3.44)

$$\nabla \tilde{T}^{(I)} = -\frac{D}{K^{(m)}} = -\nabla T^D \tag{3.45}$$

$$\nabla T^{(I)} = \nabla T^0 + \nabla \tilde{T}^{(I)} = \nabla T^0 - \nabla T^D = \nabla T^0 - \frac{K^{(I)} - K^{(m)}}{K^{(m)}} \nabla T^{(I)}$$
(3.46)

$$\nabla T^{(I)} = \left(1 - \frac{K^{(m)} - K^{(I)}}{K^{(m)}}\right)^{-1} \nabla T^0 = \frac{K^{(m)}}{K^{(I)}} \nabla T^0$$
(3.47)

3.2.2 Obecný trojrozměrný případ

V obecném trojrozměrném případě se postupuje analogicky k případu jednorozměrnému, jen některé veličiny nejsou skalarní, ale tenzorové. Zopakujeme v úvodu kapitoly zavedené veličiny $\mathbf{K}^{(m)} = K^{(m)}\mathbf{I}, \mathbf{K}^{(I)}, \mathbf{q}^0, \mathbf{D}$, dále souřadnicový vektor $\mathbf{x} = (x, y, z)$. Stejně jako v jednorozměrném případě zavedeme rozdělení teploty

$$T^{(I)} = T^0 + \tilde{T}^{(I)} \tag{3.48}$$

$$T^0 = T_r + (\nabla T^0)^\mathsf{T} \mathbf{x} \tag{3.49}$$

$$\mathbf{q}^0 = -\nabla T^0 K^{(m)} \quad \to \quad \nabla T^0 = -\frac{\mathbf{q}^0}{K^{(m)}} \tag{3.50}$$

V případě, že nehomogenita má tvar elipsoidu, jsou druhé derivace v oblasti inkluze konstantní. Analogicky k jednorozměrnému případu a rovnici (3.29) můžeme zapsat (viz [8])

$$\tilde{T}^{(I)}(\mathbf{x}) = (\boldsymbol{\Phi}^{T'})^{\mathsf{T}} \mathbf{D} = \frac{1}{4\pi K^{(m)}} (\boldsymbol{\Phi}')^{\mathsf{T}} \mathbf{D}$$
(3.51)

kde $\mathbf{\Phi}' = (\Phi'_x, \Phi'_y, \Phi'_z)$ je gradient (geometrického) potenciálu ($\mathbf{\Phi}^{T'}$ je gradient potenciálu teplotního). V případě neelipsoidální nehomogenity by bylo nutné fluktuační teplotu $\tilde{T}^{(I)}$ (případně přímo vztah mezi teplotou rovnoměrnou T^0 a teplotou souhrnnou $T^{(I)}$) vyšetřit numericky.

Opět se dá dokázat, že fluktuační teplota splňuje rovnici (2.27)

$$\nabla^2 \tilde{T}^{(I)} = \frac{\overline{Q}}{\overline{K}} = 0 \tag{3.52}$$

Pokračováním z rovnice (3.51) dostane gradient fluktuační teploty (elipsoidu) tvar

$$\nabla \tilde{T}^{(I)} = \frac{1}{4\pi K^{(m)}} \, \mathbf{\Phi}'' \, \mathbf{D},\tag{3.53}$$

kde Φ'' je dán rovnicí (3.23). Ze znalosti rovnice (3.24) můžeme skok v teplotním gradientu přes plochu inkluze zapsat následovně:

$$(\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s+} - (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-} = \frac{1}{4\pi K^{(m)}} [(\Phi'')_{s+} - (\Phi'')_{s-}] \mathbf{D} = \frac{1}{K^{(m)}} \mathbf{n} \mathbf{n}^{\mathsf{T}} \mathbf{D}$$
(3.54)

Zároveň však musí platit, že tok přes plochu inkluze je spojitý, analogicky k jedno-rozměrnému případu můžeme odvodit (kde $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}^{\mathsf{T}} \mathbf{n}$):

$$[(\mathbf{q}^{(I)})_{s+}] \cdot \mathbf{n} = [(\mathbf{q}^{(I)})_{s-}] \cdot \mathbf{n}$$
(3.55)

$$[\mathbf{K}^{(m)}(\nabla T^{(I)})_{s+}] \cdot \mathbf{n} = [\mathbf{K}^{(I)}(\nabla T^{(I)})_{s-}] \cdot \mathbf{n}$$
(3.56)

$$K^{(m)}[(\nabla T^{0})_{s+} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s+}] \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{K}^{(I)}[(\nabla T^{0})_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}]) \cdot \mathbf{n}$$
(3.57)

$$[(\nabla T^{0})_{s+} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s+} - (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}] \cdot \mathbf{n} = \left(\frac{\mathbf{K}^{(I)}}{K^{(m)}} [(\nabla T^{0})_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}]\right) \cdot \mathbf{n}$$
(3.58)

$$[(\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s+} - (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}] \cdot \mathbf{n} = \left(\frac{\mathbf{K}^{(I)}}{K^{(m)}}[(\nabla T^{0})_{s-} + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}] - [(\nabla T^{0})_{s+}) + (\nabla \tilde{T}^{(I)})_{s-}]\right) \cdot \mathbf{n}$$
(3.59)

Vzhledem k faktu, že rovnoměrný teplotní gradient ∇T^0 je všude konstantní a dosazením rovnice (3.54) pokračujeme

$$[\mathbf{n} \mathbf{n}^{\mathsf{T}} \mathbf{D} / K^{(m)}] \cdot \mathbf{n} = [(\mathbf{K}^{(I)} / K^{(m)} - \mathbf{I})(\nabla T^{0} + \nabla \tilde{T}^{(I)})] \cdot \mathbf{n}$$
(3.60)

Využitím znalosti vzorce (3.25) dostaneme:

$$[\mathbf{D}/K^{(m)}] \cdot \mathbf{n} = [(\mathbf{K}^{(I)}/K^{(m)} - \mathbf{I})(\nabla T^0 + \nabla \tilde{T}^{(I)})] \cdot \mathbf{n}$$
(3.61)

Je zřejmé, že pokud se sobě budou rovnat výrazy v hranatých závorkách, rovnice bude splněna.

$$\mathbf{D}/K^{(m)} = (\mathbf{K}^{(I)}/K^{(m)} - \mathbf{I})(\nabla T^{0} + \nabla \tilde{T}^{(I)})$$
(3.62)

Substitucí

$$\nabla T^D = \frac{\mathbf{D}}{K^{(m)}} \tag{3.63}$$

a další úpravou dostaneme

$$K^{(m)}(\nabla T^0 + \nabla \tilde{T}^{(I)} + \nabla T^D) = \mathbf{K}^{(I)}(\nabla T^0 + \nabla \tilde{T}^{(I)}), \qquad (3.64)$$

což je opět vztah mezi skutečnou nehomogenitou (pravá strana) a ekvivalentní inkluzí (strana levá), který dále můžeme upravovat

$$K^{(m)}(\nabla T^{(I)} + \nabla T^D) = \mathbf{K}^{(I)} \nabla T^{(I)}$$
(3.65)

$$\nabla T^{D} = (\mathbf{K}^{(m)})^{-1} (\mathbf{K}^{(I)} - \mathbf{K}^{(m)}) \nabla T^{(I)}$$
(3.66)

Definicí

$$\nabla \tilde{T}^{(I)} = \frac{1}{4\pi K^{(m)}} \, \mathbf{\Phi}'' \, \mathbf{D} = \frac{\mathbf{\Phi}''}{4\pi} \frac{\mathbf{D}}{K^{(m)}} = \frac{\mathbf{\Phi}''}{4\pi} \nabla T^D \tag{3.67}$$

a dosazením rovnice (3.66) můžeme rovnici (3.48) rozepsat jako

$$\nabla T^{(I)} = \nabla T^{0} + \nabla \tilde{T}^{(I)} = \nabla T^{0} + \frac{\Phi''}{4\pi} \nabla T^{D} = \nabla T^{0} + \frac{\Phi''}{4\pi} (\mathbf{K}^{(m)})^{-1} (\mathbf{K}^{(I)} - \mathbf{K}^{(m)}) \nabla T^{(I)}$$
(3.68)

$$\nabla T^{0} = [\mathbf{I} - \frac{\mathbf{\Phi}''}{4\pi} (\mathbf{K}^{(m)})^{-1} (\mathbf{K}^{(I)} - \mathbf{K}^{(m)})] \nabla T^{(I)}$$
(3.69)

$$\nabla T^{(I)} = \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{\Phi}''}{4\pi} (\mathbf{K}^{(m)})^{-1} (\mathbf{K}^{(I)} - \mathbf{K}^{(m)})\right]^{-1} \nabla T^{0}$$
(3.70)

Dále definujeme Eshelbyho tenzor

$$\mathbf{S} = -\frac{\mathbf{\Phi}''}{4\pi} \tag{3.71}$$

pomocí nějž zapíšeme veličiny

$$\nabla \tilde{T}^{(I)} = -\mathbf{S} \, \nabla T^D \tag{3.72}$$

$$\nabla T^{(I)} = [\mathbf{I} - \mathbf{S}(\mathbf{K}^{(m)})^{-1}(\mathbf{K}^{(m)} - \mathbf{K}^{(I)})]^{-1}\nabla T^{0}$$
(3.73)

Z výše uvedených rovnic plyne fakt, že teplotní gradient v oblasti inkluze tvaru elipsoidu je v celém objemu inkluze konstantní.

3.3 ESHELBYHO TENZOR S

Eshelbyho tenzor

$$\mathbf{S} = -\frac{\mathbf{\Phi}''}{4\pi} = S_{ij} \tag{3.74}$$

určíme z rovnic (3.21) a (3.22). Je zřejmé, že

$$S_{ij} = 0 \quad \text{pro } i \neq j. \tag{3.75}$$

Z výrazů pro druhou derivaci potenciálu (3.21) odvodíme pro diagonální prvky tenzoru tvar

$$\phi_{ii}^{\prime\prime} = -2\pi abc \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}s}{(a_i^2 + s)\,\Delta(s)} \tag{3.76}$$

$$S_{ii} = -\frac{\phi_{ii}''}{4\pi} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}s}{(a_i^2 + s)\,\Delta(s)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}s}{(a_i^2 + s)[(a^2 + s)(b^2 + s)(c^2 + s)]^{1/2}}$$
(3.77)

kde *i* nabývá ve výrazu S_{ii} hodnot od 1 do 3, v ϕ_{ii}'' značí příslušnou souřadnici (x, y nebo z) a v a_i značí příslušnou poloosu elipsoidu (a, b nebo c). Konkrétně tedy:

$$S_{11} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty [(b^2 + s)(c^2 + s)]^{-1/2} (a^2 + s)^{-3/2} \,\mathrm{d}s \tag{3.78}$$

$$S_{22} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty [(a^2 + s)(c^2 + s)]^{-1/2} (b^2 + s)^{-3/2} \,\mathrm{d}s \tag{3.79}$$

$$S_{33} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty [(a^2 + s)(b^2 + s)]^{-1/2} (c^2 + s)^{-3/2} \,\mathrm{d}s \tag{3.80}$$

3.3.1 Speciální tvary Eshelbyho tenzoru

Pro některé speciální tvary je možno Eshelbyho tenzor vyjádřit analyticky [8]:

• Koule (a = b = c)

$$S_{11} = S_{22} = S_{33} = \frac{1}{3} \tag{3.81}$$

• Eliptický válec $(c \to \infty)$

$$S_{11} = \frac{b}{a+b}, \quad S_{22} = \frac{a}{a+b}, \quad S_{33} = 0$$
 (3.82)

• Stěna $(b \to \infty, \ c \to \infty)$

$$S_{11} = 1, \quad S_{22} = S_{33} = 0 \tag{3.83}$$

• Tenká čočka (penny-shape) $(a=b\gg c)$

$$S_{11} = S_{22} = \frac{\pi c}{4a}, \quad S_{33} = 1 - \frac{\pi c}{2a}$$
 (3.84)

• Zploštělý (diskovitý) sféroid (=rotační elipsoid [16]) (oblate spheroid) (a = b > c)

$$S_{11} = S_{22} = \frac{a^2 c}{2(a^2 - c^2)^{3/2}} \left[\arccos\left(\frac{c}{a}\right) - \frac{c}{a} \left(1 - \frac{c^2}{a^2}\right)^{1/2} \right]$$
(3.85)

$$S_{33} = 1 - 2S_{11} \tag{3.86}$$

- Protáhlý (doutníkovitý) sféroid (prolate spheroid) (a=b< c)

$$S_{11} = S_{22} = \frac{a^2 c}{2(c^2 - a^2)^{3/2}} \left[\frac{c}{a} \left(1 - \frac{c^2}{a^2} \right)^{1/2} - \operatorname{arccosh}\left(\frac{c}{a}\right) \right]$$
(3.87)

$$S_{33} = 1 - 2S_{11} \tag{3.88}$$

K určení Eshelbyho tenzoru pro obecný elipsoid je v dodatku A.1 představen algoritmus dle [5].

3.3.2 Porovnání numerického a analytického výpočtu

Pro porovnání využijeme konkrétní hodnoty výše zmíněných obecných výrazů. Pro každý příklad jsou nejdříve vypsány vstupní hodnoty, na prvním řádku následuje výsledek analytického výpočtu a poté výsledek numerického algoritmu z dodatku dodatku A.1. Dle očekávání se sobě jednotlivé hodnoty rovnají.

• Koule: a = 2, b = 2, c = 2

$$S_{11} = S_{22} = S_{33} = 1/3 = 0,3333 \tag{3.89}$$

$$S_{11} = S_{22} = S_{33} = 0,3333 \tag{3.90}$$

• Eliptický válec: $a = 1, b = 3, c \rightarrow \infty (c = 9999)$

$$S_{11} = 3/4 = 0.75$$
 $S_{22} = 1/4 = 0.25$ $S_{33} = 0$ (3.91)

$$S_{11} = 0,7500$$
 $S_{22} = 0,2500$ $S_{33} = 0,0000$ (3.92)

• Tenká čočka: a=3,b=3,c=0,01

$$S_{11} = 0,0026 \quad S_{22} = 0,0026 \quad S_{33} = 0,9948$$

$$(3.93)$$

$$S_{11} = 0,0026 \quad S_{22} = 0,0026 \quad S_{33} = 0,9948$$

$$(3.94)$$

• Zploštělý sféroid: a = 5, b = 5, c = 3

$$S_{11} = 0.2621 \quad S_{22} = 0.2621 \quad S_{33} = 0.4758$$

$$(3.95)$$

$$S_{11} = 0,2621 \quad S_{22} = 0,2621 \quad S_{33} = 0,4758$$

$$(3.96)$$

• Protáhlý sféroid: a = 5, b = 5, c = 9

$$S_{11} = 0,4030 \quad S_{22} = 0,4030 \quad S_{33} = 0,1941$$
 (3.97)

$$S_{11} = 0,4030 \quad S_{22} = 0,4030 \quad S_{33} = 0,1941 \tag{3.98}$$

4 URČENÍ EFEKTIVNÍ TEPELNÉ VODIVOSTI



Obrázek 2: Princip homogenizace

Ve své podstatě každý reálný materiál má strukturu (byť na mikroúrovni), kterou můžeme označit jako nehomogenní. Na druhou stranu se u praktického řešení inženýrských úloh považuje většina materiálů z makroskopického hlediska za homogenní. Úkolem homogenizace je nalézt takové makroskopické vlastnosti (modul pružnosti, tepelnou vodivost atd.), jež by nahradily složité vlastnosti mikroskopické a pomocí nichž by bylo možno materiál modelovat jako homogenní. Tyto makroskopické vlastnosti se označují jako makroskopické, průměrné, ekvivalentní, efektivní atd.

Představme si reprezentativní (dostatečně velký) výsek materiálu o objemu V a povrchu S. Průměrný (ekvivalentní) teplotní gradient a tepelný tok se spočtou následovně:

$$\mathbf{q}^* = \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{q}(\mathbf{x}) \,\mathrm{d}V \tag{4.1}$$

$$\nabla T^* = \frac{1}{|V|} \int_V \nabla T(\mathbf{x}) \,\mathrm{d}V \tag{4.2}$$

Kde index * značí průměrné hodnoty.

Pro další postup homogenizace v následujících kapitolách předepíšeme na povrchu dané oblasti homogenní okrajové podmínky

$$T(S) = (\nabla T^0)^{\mathsf{T}} \mathbf{x}, \quad \mathbf{q}_n(S) = (\mathbf{q}^0)^{\mathsf{T}} \mathbf{n}$$
(4.3)

kde T(S) je teplota na povrchu S, \mathbf{x} je souřadnicový vektor bodů povrchu, $\mathbf{q}_n(S)$ je normálová složka tepelného toku, \mathbf{n} je vnější jednotkový normálový vektor plochy $S \ge \nabla T^0$ a \mathbf{q}^0 jsou rovnoměrný teplotní gradient a rovnoměrný tepelný tok.

Z Fourierova zákona je efektivní tepelná vodivost \mathbf{K}^* tenzor, který splňuje rovnici

$$\mathbf{q}^* = -\mathbf{K}^* \,\nabla T^* \tag{4.4}$$

Za daných okrajových podmínek se dá ukázat že platí

$$\nabla T^* = \nabla T^0 \tag{4.5}$$

Zároveň ale nemusí obecně platit obdobná rovnice s tepelnými toky, tedy

$$\mathbf{q}^* \neq \mathbf{q}^0 \text{ nebo } \mathbf{q}^* = \mathbf{q}^0$$

$$\tag{4.6}$$

Následuje představení principu metody řídké aproximace a metody Mori-Tanaka pro určení efektivní tepelné vodivosti, vhodné pro materiály s výskytem nehomogenit známého objemového zastoupení, avšak náhodného výskytu (předpokládá se ale z makroskopického hlediska rovnoměrné rozmístění nehomogenit).

Uvažujeme N-fázový kompozitní materiál, kde jednotlivé fáze jsou očíslovány od 1 do N, přičemž číslo 1 je rezervováno pro matrici, která se pro přehlednost též často označuje indexem m.



Obrázek 3: Příklad 4-fázového kompozitu



Obrázek 4: Deformované teplotní pole pro eliptickou nehomogenitu. $K^{(m)}/K^{(I)}=2$

4.1 METODA ŘÍDKÉ APROXIMACE (DA)

4.1.1 Předpoklady

Metoda řídké aproximace (dilute approximation, DA), jak už název napovídá, předpokládá řídkou hustotu nehomogenit, kdy se tyto vzájemně prakticky neovlivňují (nebo jen minimálně) a fluktuační část teplotního pole v relativně malé vzdálenosti od nehomogenity v podstatě vymizí (viz obrázek 4). Také čím více se poměr vodivosti matrice a nehomogenity blíží 1, tím více se výše jmenované předpoklady blíží realitě. Předpokladem metody je tedy vzájemná nulová interakce mezi nehomogenitami, v důsledku čehož můžeme teplotní gradient v každé jednotlivé nehomogenitě *i* rozdělit na část rovnoměrnou a část fluktuační

$$\nabla T^{(i)} = \nabla T^0 + \nabla \tilde{T}^{(i)} \tag{4.7}$$

Pro nehomogenity tvaru elipsoidu dospějeme metodou ekvivalentní inkluze k výrazu

$$K^{(m)}(\nabla T^{0} + \nabla \tilde{T}^{(i)} + \nabla T^{D(i)}) = \mathbf{K}^{(1)}(\nabla T^{0} + \nabla \tilde{T}^{(i)}), \qquad (4.8)$$

a další úpravou

$$\nabla T^{(i)} = [\mathbf{I} - \mathbf{S}^{(i)} (\mathbf{K}^{(m)})^{-1} (\mathbf{K}^{(m)} - \mathbf{K}^{(i)})]^{-1} \nabla T^{0}$$
(4.9)

4.1.2 Koncentrační faktor

Z předchozí rovnice definujeme pro elipsoidální nehomogenity koncentrační faktor $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$

$$\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} = [\mathbf{I} - \mathbf{S}^{(i)} (\mathbf{K}^{(m)})^{-1} (\mathbf{K}^{(m)} - \mathbf{K}^{(i)})]^{-1}$$
(4.10)

pomocí nějž vyjádříme vztah mezi teplotním gradientem v jednotlivých inkluzích $\nabla T^{(i)}$ a vzdáleným (rovnoměrným) teplotním gradientem ∇T^0 :

$$\nabla T^{(i)} = \bar{\mathbf{A}}^{(i)}_{dil} \nabla T^0 \tag{4.11}$$

Pro obecný elipsoid (s hlavními poloosami rovnoběžnými se souřadným systémem) má koncentrační faktor nulové nediagonální členy. Stejně jako Eshelbyho tenzor má i koncentrační faktor $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$ (v závislosti na dosazeném tenzoru **S**) pro některé speciální elipsoidy svůj speciální tvar:

• Koule (a = b = c), všechny diagonální prvky mají tvar:

$$A_{dil}^{(i)} = \frac{3K^{(m)}}{2K^{(m)} + K^{(i)}} \tag{4.12}$$

• Kruhový válec $(a = b, c \to \infty)$, prvek $A_{33} = 1$, zbylé diagonální prvky mají tvar:

$$A_{dil}^{(i)} = \frac{2K^{(m)}}{K^{(m)} + K^{(i)}}$$
(4.13)

• Stěna $(b \to \infty, c \to \infty), A_{22} = A_{33} = 1, A_{11}$ má tvaru (srovnej s (3.47)):

$$A_{dil}^{(i)} = \frac{K^{(m)}}{K^{(i)}} \tag{4.14}$$

Pro případ neelipsoidálních nehomogenit se postupuje obdobně. Představme si osamocenou nehomogenitu obecného tvaru umístěnou v nekonečné matrici (analogie k metodě ekvivalentní inkluze). Po vystavení takovéto soustavy vzdálenému toku můžeme určit průměrný teplotní gradient v nehomogenitě Ω jako

$$\nabla T^{(i)} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla T(\mathbf{x}) \,\mathrm{d}\Omega \tag{4.15}$$

Koncentrační faktor nehomogenity je definován jako svazující tenzor rovnoměrného teplotního gradientu a průměrného teplotního gradientu v nehomogenitě (který už ale na rozdíl od elipsoidálního případu nebude v celém objemu nehomogenity konstantní):

$$\nabla T^{(i)} = \bar{\mathbf{A}}^{(i)}_{dil} \nabla T^* \tag{4.16}$$

Analytické vyjádření koncentračního faktoru by bylo značně složité a v naprosté většině případů nemožné, lze ale použít řešení numerického (viz kapitola 5).

4.1.3 Výpočet K^{*} pomocí DA

Řídká aproximace předpokládá, že (průměrný) teplotní gradient v každé jednotlivé nehomogenitě není ovlivněn jinou nehomogenitou a je závislý na rovnoměrném teplotním gradientu prostředí ∇T^0 dle vztahu (4.11). Vztah (4.2) poté upravíme dle výše zmíněných předpokladů pro N druhů nehomogenit s objemovým zastoupením jednotlivých fází $\xi^{(i)}$

$$\nabla T^* = \frac{1}{|V|} \int_V \nabla T(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}V = \sum_{i=1}^N \frac{1}{|V|} \int_{V^{(i)}} \nabla T^{(i)} \, \mathrm{d}V = \sum_{i=1}^N \frac{\nabla T^{(i)}}{|V|} \int_{V^{(i)}} \mathrm{d}V =$$
$$= \sum_{i=1}^N \nabla T^{(i)} \frac{|V^{(i)}|}{|V|} = \sum_{i=1}^N \xi^{(i)} \nabla T^{(i)}$$
(4.17)

Tento vztah využijeme i při metodě Mori-Tanaka, diskutované dalším oddílu. Pro metodu řídké aproximace dosadíme rovnici (4.11) a (4.5) a rovnici (4.17) můžeme dále rozepsat jako

$$\nabla T^* = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \nabla T^{(i)} = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \,\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \,\nabla T^*, \tag{4.18}$$

což musí platit pro libovolné $\nabla T^*,$ tedy

$$\mathbf{I} = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \,\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \quad \Rightarrow \quad \xi^{(m)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(m)} = \mathbf{I} - \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \,\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$$
(4.19)

Dále zapíšeme rovnici pro (průměrný) tok v nehomogenitě i

$$\mathbf{q}^{(i)} = -\mathbf{K}^{(i)} \,\nabla T^{(i)} \tag{4.20}$$

a analogicky k zápisu průměrného teplotního gradientu zapíšeme výraz pro průměrný tepelný tok v celé oblasti V, který rozšíříme

$$\mathbf{q}^{*} = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{q}^{(i)} = -\sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \nabla T^{(i)} = -\left(\sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right) \nabla T^{*}$$
(4.21)

Porovnáním rovnice (4.21) a (4.4) vyjádříme efektivní tepelnou vodivost jako

$$\mathbf{K}^{*} = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$$
(4.22)

Další úpravou a dosazením rovnice (4.19) dostaneme:

$$\mathbf{K}^{*} = \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} + \mathbf{K}^{(m)} \xi^{(m)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(m)} = \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} + \mathbf{K}^{(m)} \left(\mathbf{I} - \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \right), \quad (4.23)$$

odkud konečně vyjádříme vztah pro určení efektivní tepelné vodivosti metodou řídké aproximace:

$$\mathbf{K}^{*} = \mathbf{K}^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} (\mathbf{K}^{(i)} - \mathbf{K}^{(m)}) \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$$
(4.24)

kde koncentrační faktor $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$ je dán vzorcem (4.10) pro nehomogenitu tvaru elipsoidu, případně vzorcem (4.16) pro nehomogenitu obecného tvaru.

Ještě jednou zopakujeme, že metoda řídké aproximace dává tím přesnější výsledky, čím je hustota nehomogenit řidší a čím víc se poměr vodivostí nehomogenit a matrice blíží k 1.

4.2 METODA MORI-TANAKA

4.2.1 Předpoklady

Metoda Mori-Tanaka je podobná metodě řídké aproximace, vychází však z jiných předpokladů. Na rozdíl od řídké aproximace uvažuje vzájemnou interakci jednotlivých nehomogenit. Jak je uvedeno v [2], průměrný teplotní gradient v matrici $\nabla T^{(m)}$ a v jednotlivých fázích kompozitu $\nabla T^{(i)}$ můžeme rozdělit takto:

$$\nabla T^{(m)} = \nabla T^0 + \nabla \tilde{T}^{(m)} \tag{4.25}$$

$$\nabla T^{(i)} = \nabla T^0 + \nabla \tilde{T}^{(m)} + \nabla \tilde{T}^{(i)}$$
(4.26)

kde $\nabla \tilde{T}^{(m)}$ je průměrný gradient fluktuační teploty v matrici v důsledku přítomnosti nehomogenit a $\nabla \tilde{T}^{(i)}$ je již dříve zmíněný průměrný gradient fluktuační teploty jednotlivých fází kompozitu. Kombinací rovnic (4.25) a (4.26) vyjádříme

$$\nabla T^{(i)} = \nabla T^{(m)} + \nabla \tilde{T}^{(i)} \tag{4.27}$$

a dosazením do úvodních rovnic metody ekvivalentní inkluze (v celém výpočtu pouze nahradíme gradient ∇T^0 gradientem $\nabla T^{(m)})$ dostaneme

$$K^{(m)}(\nabla T^{(m)} + \nabla \tilde{T}^{(i)} + \nabla T^D) = \mathbf{K}^{(i)}(\nabla T^{(m)} + \nabla \tilde{T}^{(I)})$$
(4.28)

$$\nabla T^{(i)} = \bar{\mathbf{A}}^{(i)}_{dil} \nabla T^{(m)} \tag{4.29}$$

V metodě Mori-Tanaka tedy koncentrační faktor $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$ svazuje průměrný teplotní gradient nehomogenity $\nabla T^{(i)}$ s průměrným teplotním gradientem matrice $\nabla T^{(m)}$ (oproti ∇T^0 v DA). Pro názornost předchozí rovnici ještě jednou opíšeme a doplníme k ní vztah mezi teplotními gradienty $\nabla T^{(i)}$ a ∇T^* pomocí nového koncentračního faktoru $\bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i)}$ (kde index MT značí faktor metody Mori-Tanaka).

$$\nabla T^{(i)} = \bar{\mathbf{A}}^{(i)}_{dil} \nabla T^{(m)} \tag{4.30}$$

$$\nabla T^{(i)} = \bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i)} \, \nabla T^* \tag{4.31}$$

Vyjádření $\bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i)}$ se budeme věnovat dále.

4.2.2 Výpočet K* pomocí MT

Všimneme si, že pro i = 1 vyjádříme z rovnice (4.30)

$$\nabla T^{(m)} = \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(m)} \nabla T^{(m)} \rightarrow \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(m)} = \mathbf{I}$$
(4.32)

Z rovnice (4.17) dále odvodíme

$$\nabla T^* = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \nabla T^{(i)} = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \,\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \,\nabla T^{(m)} \tag{4.33}$$

z toho

$$\nabla T^{(m)} = \left(\sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \,\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right)^{-1} \nabla T^* = \left(\xi^{(m)} \,\mathbf{I} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \,\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right)^{-1} \nabla T^* \tag{4.34}$$

Kombinací rovnic (4.30) a (4.34) zapíšeme

$$\nabla T^{(i)} = \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \nabla T^{(m)} = \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \left(\xi^{(m)} \mathbf{I} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \right)^{-1} \nabla T^{*}$$
(4.35)

porovnáním s rovnicí (4.31) můžeme koncentrační faktor pro metodu Mori-Tanaka vyjádřit jako

$$\bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i)} = \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \left(\xi^{(m)} \mathbf{I} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \right)^{-1}$$
(4.36)

kde pro $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$ viz (4.10). Analogickým postupem jako v případě DA od rovnice (4.20) odvodíme vztah pro efektivní tepelnou vodivost pro metodu Mori-Tanaka ve tvaru [3]

$$\mathbf{K}^{*} = \mathbf{K}^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} (\mathbf{K}^{(i)} - \mathbf{K}^{(m)}) \bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i)}$$
(4.37)

nebo ve tvaru [6]

$$\mathbf{K}^{*} = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i)} = \sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \left(\sum_{i=1}^{N} \xi^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right)^{-1}$$
(4.38)

$$\mathbf{K}^* = \left[\sum_{i=1}^N \xi^{(i)} \mathbf{K}^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right] \left[\sum_{i=1}^N \xi^{(i)} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right]^{-1}$$
(4.39)

nebo

$$\mathbf{K}^{*} = \left[\xi^{(m)}\mathbf{K}^{(m)} + \sum_{i=2}^{N}\xi^{(i)}\mathbf{K}^{(i)}\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right] \left[\xi^{(m)}\mathbf{I} + \sum_{i=2}^{N}\xi^{(i)}\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}\right]^{-1}$$
(4.40)

Výsledné rovnice (4.37), (4.39) a (4.40) jsou navzájem ekvivalentní.

Speciální tvary výrazu pro efektivní tepelnou vodivost můžeme vyjádřit kombinací rovnic (4.37), (4.36), (4.12) a (4.13). Následující rovnice vyjadřuje efektivní tepelnou vodivost dvoufázového kompozitu obsahujícího pouze kulové nehomogenity. Dle očekávání je makroskopická vodivost takovéhoto materiálu izotropní (stejná ve všech směrech), výraz je proto zapsán ve skalarní formě.

$$K^* = K^{(m)} \frac{2K^{(m)} + K^{(I)} + 2\xi^I (K^{(I)} - K^{(m)})}{2K^{(m)} + K^{(I)} - \xi^I (K^{(I)} - K^{(m)})}$$
(4.41)

Obdobně se vyřeší i efektivní tepelná vodivost dvoufázového materiálu obsahujícího nehomogenity ve tvaru rovnoběžných rotačních válců. Efektivní vodivost ve směru osy válců je dána prostým váženým průměrem vodivostí jednotlivých fází ve vztahu k jejich objemovému zastoupení (tzv. paralelní model), ve směru kolmém pak vypadá následovně:

$$K^* = K^{(m)} \frac{K^{(m)} + K^{(I)} + \xi^I (K^{(I)} - K^{(m)})}{K^{(m)} + K^{(I)} - \xi^I (K^{(I)} - K^{(m)})}$$
(4.42)

kde horní index ${\cal I}$ značí vlastnosti (tepelnou vodivost a objemové zastoupení) nehomogenit.

Pro úplnost ještě doplníme výraz pro výpočet efektivní tepelné vodivosti dvoufázového vrstevnatého materiálu. Ve směru rovnoběžném s rovinnými vrstvami se efektivní tepelná vodivost spočte opět pomocí paralelního modelu, ve směru kolmém na vrstvy potom vypadá takto (tzv. sériový model):

$$\frac{1}{K^*} = \frac{\xi^{(m)}}{K^{(m)}} + \frac{\xi^{(I)}}{K^{(I)}} \to K^* = K^{(m)} \frac{K^{(I)}}{K^{(I)} - \xi^I (K^{(I)} - K^{(m)})}$$
(4.43)

4.3 NÁHODNÁ ORIENTACE NEHOMOGENIT

V minulé kapitole jsme uvažovali fázi kompozitního materiálu jako skupinu nehomogenit známého objemového zastoupení a vzhledem k použitým metodám i stejného koncentračního faktoru $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$. Tento fakt má za následek, že v případě nekulových nehomogenit bychom každou jinak orientovanou částici uvažovali jako samostatnou fázi (při změně orientace nehomogenity se mění Eshelbyho tenzor **S** a tudíž i koncentrační faktor $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$). Za takovýchto předpokladů je praktická použitelnost výše zmíněných metod značně diskutabilní.

Tento nedostatek ale v této kapitole odstraníme. Postup bude opět obdobný, začínající od vlivu osamocené nehomogenity, pokračující metodou řídké aproximace a končící u metody Mori-Tanaka. Zavedeme nejprve pojem transformace složek tenzoru při změně báze. Uvažujme ortonormální bázi v třírozměrném prostoru (kartézskou soustavu souřadnic)

$$\mathbf{e} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(4.44)

a jinou (čárkovanou) bázi $\mathbf{e}' = (\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3)$. Báze \mathbf{e}' je také ortonormální (všechny bázové vektory jsou navzájem kolmé) a z původní báze \mathbf{e} je vytvořena prostorovým pootočením. Libovolná plocha souřadného systému v prostoru je jednoznačně určena třemi úhly (tzv. Eulerovy úhly [17]) α (otočení kolem osy z), β (otočení kolem osy y), γ (otočení kolem osy z' - již pootočené osy z). Úhly α a γ nabývají hodnot $\langle 0, 2\pi \rangle$, úhel β pak hodnot $\langle 0, \pi \rangle$. Transformační matice jednotlivých pootočení vypadají následovně:

$$\mathbf{R}_{1} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0\\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(4.45)

$$\mathbf{R}_{2} = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & -\sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}$$
(4.46)

$$\mathbf{R}_{3} = \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(4.47)

Výsledná transformační matice má tvar (přičemž záleží na pořadí jednotlivých pootočení):

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_3 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_1 \tag{4.48}$$

Bázové vektory v našem případě jsou vždy normované (jednotkové) a vztah mezi transformační maticí a jednotlivými bázemi můžeme dle [9] vyjádřit jako:

$$\mathbf{R} = \mathbf{e}' \, \mathbf{e} \quad \rightarrow \qquad \mathbf{e}' = \mathbf{R} \tag{4.49}$$

z čehož plyne, že transformační matice \mathbf{R} je zároveň pootočenou bází a dle následujícího vzorce i maticí směrových kosinů (kosinů úhlů mezi bázovými vektory jednotlivých bází) $\mathbf{C} = \cos \phi_{ij}$.

$$\mathbf{C} = \mathbf{e}' \, \mathbf{e} = \mathbf{R} \tag{4.50}$$

Dále uvažujme tenzor druhého řádu T. Transformace složek tenzor
u ${\bf T}$ v maticovém zápisu má tvar:

$$\mathbf{T}' = \mathbf{R} \, \mathbf{T} \, \mathbf{R}^{\mathsf{T}} \tag{4.51}$$

4.3.1 Náhodně orientované elipsoidy

Jak již bylo řečeno, pro každý elipsoid, jehož osy jsou rovnoběžné se souřadným systémem, můžeme definovat diagonální Eshelbyho tenzor **S** a pomocí něj i diagonální koncentrační faktor $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$. Transformace složek tenzoru **S** můžeme zapsat jako

$$\mathbf{S}' = \mathbf{R} \, \mathbf{S} \, \mathbf{R}^{\mathsf{T}} \tag{4.52}$$

a transformovaný koncentrační faktor se vyjádří následovně:

$$\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)\prime} = [\mathbf{I} - \frac{K^{(m)} - K^{(i)}}{K^{(m)}} \mathbf{S}']^{-1} = [\mathbf{I} - \frac{K^{(m)} - K^{(i)}}{K^{(m)}} \mathbf{R} \mathbf{S} \mathbf{R}^{\mathsf{T}}]^{-1} = \mathbf{R} [\mathbf{I} - \frac{K^{(m)} - K^{(i)}}{K^{(m)}} \mathbf{S}]^{-1} \mathbf{R}^{\mathsf{T}}$$
(4.53)

tedy

$$\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)\prime} = \mathbf{R} \, \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \, \mathbf{R}^{\mathsf{T}} \tag{4.54}$$

Matlabovská implementace důkazu poslední úpravy je vypsána v dodatku A.2.1. Důsledkem je, že při transformaci Eshelbyho tenzoru se koncentrační faktor transformuje dle rovnice (4.51).

Stopa matice tenzoru **T** je součet jejích diagonálních členů, značí se tr(**T**). Stopa matice Eshelbyho tenzoru je dle rovnic (2.27), (3.21), (3.23) a (3.71) konstantní a rovna 1. Stopa matice tenzoru je konstantní (invariantní) i při transformaci souřadného systému, pro důkaz viz dodatek A.2.2. Toto tvrzení platí nejen pro Eshelbyho tenzor, ale například i pro koncentrační faktor, čehož využijeme dále.

Nejprve definujeme "průměrný" koncentrační faktor $\bar{\mathbf{A}}_{dil,avg}^{(i)}$, který je pro konkrétní Eshelbyho tenzor výsledkem transformace (otáčení) elipsoidu do všech možných orientací

$$\bar{\mathbf{A}}_{dil,avg}^{(i)} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)\prime} \rightarrow \frac{1}{8\pi^2} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)\prime} \sin(\beta) \,\mathrm{d}\alpha \,\mathrm{d}\beta \,\mathrm{d}\gamma =$$
$$= \frac{1}{8\pi^2} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \mathbf{R} \,\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)} \mathbf{R}^{\mathsf{T}} \sin(\beta) \,\mathrm{d}\alpha \,\mathrm{d}\beta \,\mathrm{d}\gamma \qquad (4.55)$$

kde $\sin(\beta)$ je Jakobián a konstanta $8\pi^2$ je míra množiny transformačních úhlů

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sin(\beta) \,\mathrm{d}\alpha \,\mathrm{d}\beta \,\mathrm{d}\gamma = 8\pi^2 \tag{4.56}$$

Výsledkem rovnice (4.55) je diagonální matice se shodnými diagonálními prvky tvaru (viz dodatek A.2.3)

$$\bar{\mathbf{A}}_{dil,avg}^{(i)} = \frac{\operatorname{tr}(\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)})}{3} \mathbf{I}$$
(4.57)

Důsledkem tohoto faktu je dále dokázaná tepelně-vodivostní makroskopická izotropie materiálu s náhodně orientovanými elipsoidálními nehomogenitami.

Pro řešení opět vyjdeme z metody řídké aproximace (DA). Výše odvozené výrazy dosadíme do rovnice (4.24) a upravíme.

$$\mathbf{K}^{*} = \mathbf{K}^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{n} \xi^{(i)'} (\mathbf{K}^{(i)} - \mathbf{K}^{(m)}) \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)'} = \mathbf{K}^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} (\mathbf{K}^{(i)} - \mathbf{K}^{(m)}) \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{n} \bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)'} = \mathbf{K}^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} (\mathbf{K}^{(i)} - \mathbf{K}^{(m)}) \bar{\mathbf{A}}_{dil,avg}^{(i)}$$
(4.58)

Ve výrazu znamená $\xi^{(i)'}$ objemové zastoupení právě jedné orientace nehomogenity, po sumě přes všechny možné polohy nehomogenity obdržíme objemové zastoupení celé fáze daných nehomogenit stejného tvaru a vodivosti.

Výraz pro metodu Mori-Tanaka získáme obdobnou úvahou z rovnice (4.40).

$$\mathbf{K}^{*} = \left[\xi^{(m)}\mathbf{K}^{(m)} + \sum_{i=2}^{N}\xi^{(i)}\mathbf{K}^{(i)}\bar{\mathbf{A}}^{(i)}_{dil,avg}\right] \left[\xi^{(m)}\mathbf{I} + \sum_{i=2}^{N}\xi^{(i)}\bar{\mathbf{A}}^{(i)}_{dil,avg}\right]^{-1}$$
(4.59)

V této rovnici jsou všechny matice násobky jednotkových matic, tudíž i výsledná matice tenzoru efektivní tepelné vodivosti bude násobkem jednotkové matice. Podáno jinými slovy to znamená již zmíněný fakt, že z makroskopického hlediska se materiál s náhodně orientovanými elipsoidálními nehomogenitami náhodných tvarů chová izotropně, rovnici tedy můžeme zapsat ve skalarní formě:

$$K^* = \frac{\xi^{(m)}K^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)}K^{(i)}\bar{A}^{(i)}_{dil,avg}}{\xi^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)}\bar{A}^{(i)}_{dil,avg}}$$
(4.60)

Co se týče velikosti tepelné vodivosti, dá se ukázat, že čím více se tvary částic blíží tvaru koule a čím více se tepelná vodivost nehomogenit blíží k tepelné vodivosti matrice, tím přesněji se dá efektivní tepelná vodivost modelovat pomocí náhradních kulových nehomogenit stejného objemového zastoupení jako skutečné nekulové nehomogenity. Vzorce pro výpočet efektivní tepelné vodivosti materiálů, které jsou tvořené pouze kulovými nehomogenitami, jsou velmi jednoduché, výše zmíněný fakt je tedy poměrně zásadní pro praktickou použitelnost metod používaných v této práci.

Pro lepší představu následuje příklad: pro hodnoty $K^{(m)} = 1,16 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}, K^{(i)} = 0,19 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}, \xi^{(i)} = 0,5$ (viz kapitolu 6.1) a rozměry nehomogenit 5 : 1 : 1 činí rozdíl mezi spočtenou efektivní tepelnou vodivostí pro eliptické a kulové nehomogenity 1,76%, Pro rozměry elipsoidu 1 : 5 : 5 pak necelé 6,52%.

4.3.2 Náhodně orientované nehomogenity obecného tvaru

Obdobně jako v případě nehomogenit tvaru elipsoidu zavedeme transformaci koncentračního faktoru i pro nehomogenity obecného tvaru (4.54) a stejným způsobem definujeme průměrný koncentrační faktor (4.55) s výsledkem dle rovnice (4.57):

$$\bar{\mathbf{A}}_{dil,avg}^{(i)} = \frac{\operatorname{tr}(\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)})}{3} \mathbf{I}$$
(4.61)

Stejným způsobem jako pro nehomogenity tvaru elipsoidu (rovnice (4.58), (4.59), (4.60)) dospějeme k výrazu pro efektivní tepelnou vodivost metodou Mori-Tanaka:

$$K^* = \frac{\xi^{(m)} K^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} K^{(i)} \bar{A}^{(i)}_{dil,avg}}{\xi^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} \bar{A}^{(i)}_{dil,avg}}$$
(4.62)

Analogicky k případu elipsoidálních nehomogenit má tato rovnice význam takový, že i pro nehomogenity obecného náhodného tvaru a orientace je efektivní tepelná vodivost izotropní. Stejně tak platí i tvrzení, že čím více se tvary jednotlivých nehomogenit blíží tvaru kulovému a čím více se k sobě blíží vodivosti matrice a nehomogenit, tím přesnější je (z hlediska efektivní tepelné vodivosti) modelování materiálu s obecnými nehomogenitami jako materiálu s nehomogenitami kulovými. Pro potvrzení této teorie viz kapitolu 6.1.

4.4 NEDOKONALÝ KONTAKT, VLIV VELIKOSTI

Obě metody (DA a MT) ve své základní podobě předpokládají dokonalý tepelný kontakt mezi jednotlivými složkami kompozitu, z čehož vyplývá například to, že efektivní vodivost závisí pouze na tvaru a objemovém zastoupení nehomogenit, ale nezávisí na jejich velikosti. To znamená, že jedno jest, vezmeme-li například N kulových nehomogenit průměru d nebo 64N kulových nehomogenit průměru d/4, neboť jejich objem je stejný.

Reálné kompozitní materiály však výše zmíněnou podmínku nemusí splňovat (například v betonu mohou mezi cementovou matricí a zrny kameniva vznikat vzduchové bublinky atp.). Zavedení vlivu nedokonalého (imperfektního) tepelného kontaktu (spojení) na rozhraní materiálů a současně i zavedení vlivu velikosti nehomogenit je představeno v této kapitole.

4.4.1 Jednorozměrný případ

Pro názornost je opět úvod kapitoly předveden na jednorozměrném případu, jeho výsledky však přímo využijeme i pro řešení obecné prostorové. Nedokonalý kontakt mezi složkami kompozitu budeme modelovat jako tenkou vrstvu na rozhraní materiálů, která má odlišné vlastnosti než obě sousedící složky. Tloušťku vrstvy budeme uvažovat jako zanedbatelně malou vzhledem k rozměrům nehomogenit a její vlastnosti popíšeme tepelnou propustností h (viz rovnici (2.8)).

$$\mathbf{q}^{\mathsf{T}}\mathbf{n} = -h\Delta T \tag{4.63}$$

což znamená to, že v požitém modelu se teplota na rozhraní materiálů skokově mění. Již tradičně započneme řešení u osamocené nehomogenity v nekonečné matrici, nyní jen pro jednorozměrný případ.

Analogicky k metodě ekvivalentní inkluze předepíšeme rovnoměrný tepelný tok q^0 , z čehož bude rovnoměrný teplotní gradient roven

$$\nabla T^{0} = -\frac{q^{0}}{K^{(m)}} \tag{4.64}$$

Při dokonalém tepelném kontaktu bychom vztah mezi teplotním gradientem v matrici a v nehomogenitě zapsali jako kombinaci rovnic (4.11) a (4.14), tedy:

$$\nabla T^{(I)} = \bar{A}^{(I)}_{dil} \nabla T^0 = \frac{K^{(m)}}{K^{(I)}} \nabla T^0$$
(4.65)



Obrázek 5: Znázornění nedokonalého kontaktu na rozhraní složek a průběh teploty: černě skutečný stav, červeně náhradní teplotní pole

V případě nedokonalého kontaktu přisoudíme rozhraní k oblasti nehomogenity a budeme předpokládat, že pro náhradní (replacement, proto index r) nehomogenitu (spojená základní nehomogenita a nedokonalé rozhraní, na obrázku 5 vyznačeno červeně) bude platit:

$$\nabla T^{(I,r)} = \bar{A}^{(I,r)}_{dil} \nabla T^0 = \frac{K^{(m)}}{K^{(I,r)}} \nabla T^0$$
(4.66)

V jednorozměrném případě je tepelný tok všude stejný (za předpokladu ustáleného vedení tepla a absence vnitřních zdrojů), můžeme tedy jednoduše zapsat změny teploty v jednotlivých částech prostředí, nejprve pro vlastní nehomogenitu délky L:

$$q^{0} = -K^{(I)} \frac{\Delta T^{(I)}}{L} \to \Delta T^{(I)} = -q^{0} \frac{L}{K^{(I)}}$$
 (4.67)

a dále pro vrstvu na rozhraní materiálu:

$$q^{0} = -h\Delta T^{(h)} \quad \to \quad \Delta T^{(h)} = -q^{0}\frac{1}{h} \tag{4.68}$$

Celková změna teploty (popisující celkové chování náhradní nehomogenity) poté bude

$$\Delta T^{(I,r)} = \Delta T^{(I)} + 2\Delta T^{(h)} = -q^0 \left(\frac{L}{K^{(I)}} + \frac{2}{h}\right)$$
(4.69)

Dále definujeme náhradní vodivost $K^{(I,r)}$, což je vodivost splňující následují rovnici:

$$q^{0} = -K^{(I,r)}\frac{\Delta T^{(I,r)}}{L} = -\frac{K^{(I,r)}}{L}\left(-q^{0}\left(\frac{L}{K^{(I)}} + \frac{2}{h}\right)\right)$$
(4.70)

z toho:

$$K^{(I,r)} = \frac{L}{\frac{L}{K^{(I)}} + \frac{2}{h}} = K^{(I)} \frac{Lh}{Lh + 2K^{(I)}}$$
(4.71)

Rovnici (4.70) můžeme rozšířit a vyjádřit tak vztah mezi rovnoměrným teplotním gradientem a náhradním teplotním gradientem nehomogenity

$$q^{0} = -K^{(m)}\nabla T^{0} = -K^{(I,r)}\nabla T^{(I,r)} \to \nabla T^{(I,r)} = \frac{K^{(m)}}{K^{(I,r)}}\nabla T^{0}$$
(4.72)

Porovnáním s rovnicí (4.65) definujeme náhradní koncentrační faktor $\bar{A}_{dil}^{(I,r)}$ jako

$$\nabla T^{(I,r)} = \bar{A}^{(I,r)}_{dil} \nabla T^0 , \quad \text{kde} \quad \bar{A}^{(I,r)}_{dil} = \frac{K^{(m)}}{K^{(I,r)}}$$
(4.73)

čímž jsme potvrdili platnost předpokladu z rovnice (4.66) o náhradním koncentračním faktoru $\bar{A}_{dil}^{(I,r)}$. Odvození efektivní tepelné vodivosti pro náhradní nehomogenity je analogické k odvození původnímu, jen s náhradními veličinami. Celá procedura tedy bude stejná, jediný rozdíl bude v indexu r u náhradních veličin. Konečný výraz pro řídkou aproximaci je

$$K^{(*)} = K^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} (K^{(i,r)} - K^{(m)}) \bar{A}^{(i,r)}_{dil}$$
(4.74)

a pro metodu Mori-Tanaka:

$$K^{*} = \frac{\xi^{(m)}K^{(m)} + \sum_{i=2}^{N}\xi^{(i)}K^{(i,r)}\bar{A}_{dil}^{(i,r)}}{\xi^{(m)} + \sum_{i=2}^{N}\xi^{(i)}\bar{A}_{dil}^{(i,r)}} = \frac{K^{(m)}}{\xi^{(m)} + \sum_{i=2}^{N}\xi^{(i)}K^{(m)}/K^{(i,r)}}$$
(4.75)

4.4.2 Trojrozměrný případ – kulové nehomogenity

Analytické vyjádření provedeme pro kulovou nehomogenitu, již tradičně začínajíce od osamělé nehomogenity umístěné v nekonečné matrici. Řešení vychází z faktu, že teplotní gradient v celé oblasti nehomogenity je konstantní a rovnoběžný s předepsaným rovnoměrným vzdáleným gradientem. V kulové nehomogenitě průměru d zavedeme lokální souřadný systém, kde osa x je rovnoběžná s předepsaným gradientem. Dále zavedeme sférické souřadnice α a β , kde úhel α je odklon od osy x a β je rotace kolem osy x. Nehomogenitu rozdělíme na vlákna rovnoběžná se směrem předepsaného vzdáleného toku (osou x). Každé vlákno má délku $l = d \cos \alpha$. Dále definujeme jednotkový normálový vektor plochy nehomogenity $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha \cos \beta, \sin \alpha \sin \beta)^{\mathsf{T}}$.



Obrázek 6: Schema kulové nehomogenity s nedokonalým kontaktem na rozhraní mezi nehomogenitou a matricí

V každém vláknu definujeme změnu teploty pro jednotlivé části systému (analogicky k jednorozměrnému příkladu). Pro konstantní tok v nehomogenitě $\mathbf{q}^{(I)} = (q^{(I)}, 0, 0)$ definujeme změny teploty v nehomogenitě a ve vrstvě rozhraní jako:

$$q^{(I)} = -K^{(I)} \frac{\Delta T^{(I)}}{l} = -K^{(I)} \frac{\Delta T^{(I)}}{d \cos \alpha} \quad \to \quad \Delta T^{(I)} = -q^{(I)} \frac{d \cos \alpha}{K^{(I)}} \tag{4.76}$$

$$\mathbf{q}^{(I)\mathsf{T}}\mathbf{n} = q^{(I)}\cos\alpha = -h\Delta T^{(h)} \quad \to \quad \Delta T^{(h)} = -q^{(I)}\frac{\cos\alpha}{h} \tag{4.77}$$

Celkovou změnu teploty vlákna vyjádříme jako

$$\Delta T^{(I,r)} = \Delta T^{(I)} + 2\Delta T^{(h)} = -q^{(I)} \left(\frac{d\cos\alpha}{K^{(I)}} + \frac{2\cos\alpha}{h} \right)$$
(4.78)

Náhradní vodivost je opět vodivost splňující podmínku

$$q^{(I)} = -K^{(I,r)} \frac{\Delta T^{(I,r)}}{l} = -K^{(I,r)} \frac{\Delta T^{(I,r)}}{d\cos\alpha} = -q^{(I)} \frac{K^{(I)}}{d\cos\alpha} \left(\frac{d\cos\alpha}{K^{(I)}} + \frac{2\cos\alpha}{h}\right)$$
(4.79)

z toho úpravou získáme náhradní tepelnou vodivost pro každé vlákno

$$K^{(I,r)} = K^{(I)} \frac{dh}{dh + 2K^{(I)}}$$
(4.80)

Náhradní tepelná vodivost je stejná v každém vlákně, je tedy stejná i pro celou kulovou nehomogenitu. Všimneme si několika faktů této rovnice. Pokud se tepelná propustnost hblíží nekonečnu (tepelný odpor rozhraní je nulový), je limitní hodnotou náhradní vodivosti $K^{(I,r)} = K^{(I)}$ a jedná se tedy o případ s dokonalým tepelným rozhraním. Naopak čím je tepelná propustnost h nižší, tím je i náhradní vodivost nižší. Obdobná pravidla platí i pro velikost částic d. S rostoucí velikostí částic vliv nedokonalého rozhraní klesá, naopak blíží-li se velikost částic 0, dle rovnice (4.80) se i náhradní tepelná vodivost blíží 0. Ve skutečnosti bychom ale (pro nenulovou hodnotu h) nulové náhradní vodivosti nikdy nedosáhli. Důvodem je předpoklad, že tloušťka vrstvy rozhraní je mnohem tenčí než velikost nehomogenity. Blíží-li se ale velikost nehomogenity nule, je tento předpoklad porušen a k výpočtu by bylo třeba zvolit jiný přístup.

V duchu jednorozměrného případu definujeme z rovnice (4.12) náhradní koncentrační faktor pro kulové nehomogenity s tepelně nedokonalým rozhraním jako

$$\bar{A}_{dil}^{(i,r)} = \frac{3K^{(m)}}{2K^{(m)} + K^{(i,r)}}$$
(4.81)

a pomocí něj a rovnic (4.24) a (4.37) výraz pro efektivní tepelnou vodivost metodou řídké aproximace

$$K^* = K^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)} (K^{(i,r)} - K^{(m)}) \bar{A}^{(i,r)}_{dil}$$
(4.82)

a pro metodu Mori-Tanaka

$$K^* = \frac{\xi^{(m)}K^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)}K^{(i,r)}\bar{A}_{dil}^{(i,r)}}{\xi^{(m)} + \sum_{i=2}^{N} \xi^{(i)}\bar{A}_{dil}^{(i,r)}}$$
(4.83)

4.4.3 Trojrozměrný případ – nekulové nehomogenity

Analytické odvození vztahů tak, jak bylo provedeno pro kulové nehomogenity, není prakticky pro nekulové nehomogenity možné. V [3] je zmíněn případ elipsoidálních nehomogenit s konfokálním rozhraním (vnitřní i vnější okraj vrstvy rozhraní má shodná ohniska),



Obrázek 7: Deformované teplotní pole pro kruhovou nehomogenitu a různé propustnosti rozhraní. Všimneme si konstantního gradientu uvnitř nehomogenity a skokové změny teploty na rozhraní

kdy při vystavení osamocené nehomogenity vzdálenému toku je teplotní gradient v celé oblasti nehomogenity opět konstantní.

Pro nehomogenity obecného tvaru je opět nutno sáhnout k numerickým výpočtům (viz kapitola 5) a pomocí nich spočítat požadované veličiny (náhradní vodivost, koncentrační faktor apod.).

Ať se však jedná o kulové či nekulové nehomogenity, veličiny $\mathbf{K}^{(i,r)}$, $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i,r)}$ i $\bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i,r)}$ a tudíž i efektivní tepelná vodivost \mathbf{K}^* jsou závislé na rozměrech nehomogenit, tzn. že do výpočtu je zahrnuta absolutní velikost částic (jako důsledek nedokonalého tepelného kontaktu na rozhraní nehomogenit a matrice).

Bez újmy na obecnosti můžeme říci, že čím více se tvar nehomogenit blíží tvaru kulovému, tím přesnější je modelování materiálu jako materiálu s kulovými nehomogenitami a nedokonalým rozhraním přesnější. Měření propustnosti vrstvy rozhraní nehomogenit velikosti řádu mikrometrů je velmi obtížné, a často se pouze nepřímo zjišťuje, například výše zmíněnými metodami. Většina metod je ale založena na přítomnosti pouze kulových nehomogenit, výsledná spočtená "výpočtová" tepelná propustnost je ale jiná než skutečná tepelná propustnost rozhraní materiálů, nicméně pokud je naší prioritou zjistit makroskopickou efektivní tepelnou vodivost, můžeme tento fakt s klidem přijmout.

Taktéž obecně platí následující tvrzení: čím je částice menší, tím je náhradní tepelná vodivost a tudíž i efektivní tepelná vodivost materiálu také menší. Znamená to, že čím jsou částice menší, tím větší hraje uvažování nedokonalého rozhraní roli. Pro použití představených metod má uvažování nedokonalého rozhraní ten význam, že každá velikost částic je uvažována jako samostatná fáze (každá má svou náhradní tepelnou vodivost i náhradní koncentrační faktor). Takto je metoda použita například v aplikaci v kapitole 6.2.

5 DISKRÉTNÍ NUMERICKÉ ŘEŠENÍ

Jak již bylo naznačeno v předchozích kapitolách, plně analytické řešení efektivní tepelné vodivosti je možné jen pro omezené množství tvarů nehomogenit (tvaru elipsoidu). V této kapitole bude představena numerická metoda pro řešení teplotního pole při ustáleném vedení tepla s okrajovými podmínkami a její aplikace na výpočet koncentračního faktoru nehomogenity (vstupní hodnoty metody řídké aproximace a metody Mori-Tanaka).

Stejný princip metody, avšak bez odvození, je použit pro výpočet transportu vlhkosti v $\cite{[7]}$.

5.1 PRINCIP METODY

Princip metody (jakož i její aplikace) budou pro názornost a jednoduchost ukázány pouze pro dvojrozměrný případ, kde si snadno můžeme teplotu graficky představit jako funkci souřadnic x a y (teplota je potom prostorová plocha nad rovinou xy, pro názornost viz obrázky 11, 14 a 16).

5.1.1 Diskretizace

Diskretizací se myslí rozdělení kontinua (spojitého prostředí) na samostatné nespojité (diskrétní) úseky. První krok diskretizace této metody spočívá v definici bodů, ve kterých budeme zjišťovat teplotu (viz dále). Dále definujeme pojem Voronoiova buňka. Pro každý definovaný bod (dále jen bod) můžeme sestrojit osy spojnic tohoto bodu se všemi ostatními definovanými body. Voronoiova buňka je potom vnitřní obálka těchto os (mnohoúhelník, jehož strany leží na bodu nejbližších osách mezi průsečíky s jinou bodu nejbližší osou). Voronoiův diagram je množina všech Voronoiových buněk (dále jen buněk). Tento způsob diskretizace se používá i v buňkově orientované metodě konečných objemů (cell-centered finite volume method).

Duální operace k Voronoiově diagramu je Delaunayova (někdy nazývána též přirozená) triangulace. Jedná se v podstatě o trojúhelníkovou síť spojnic bodů sousedních buněk. Vznikne tak jakási "příhradová" nebo "prutová" soustava. Vlastnosti Voronoiova diagramu i Delaunayovy triangulace využijeme dále. Schematicky jsou diskretizace a její součásti znázorněny na obrázku 8.

V každém bodě *i* definujeme teplotu T_i . Dvě sousední buňky bodů *i* a *j* mají společnou hranici, jejíž krajní body tvoří s definovanými body čtyřúhelníkovou oblast *ij* (na obrázku 8 vyznačena šedě). Spojité teplotní pole nahradíme v každé takové oblasti novým teplotním polem, jehož gradient je v celé oblasti konstantní a rovnoběžný se spojnicí bodů *i* a *j* (gradient je na obrázku 8 naznačen v šedé oblasti šipkami).

5.1.2 Výpočet

V dalším kroku vysvětlíme princip výpočtu teplotního pole v diskrétní podobě. Jak již bylo zmíněno, v každém bodě i je definována teplota T_i . Mezi dvěma body sousedních buněk i a j má diskrétní teplotní pole konstantní teplotní gradient tvaru

$$\nabla T_{ij}^{\mathsf{T}} \mathbf{n}_{ij} = \frac{\Delta T_{ij}}{L_{ij}} = \frac{T_j - T_i}{L_{ij}}$$
(5.1)



Obrázek 8: Ukázka diskretizace: definice bodů (vlevo nahoře), Voronoiův diagram (vpravo nahoře), Delaunayova triangulace (vlevo dole) a vše dohromady (vpravo dole). Šedě je vyznačena oblastij



kde L_{ij} je vzdálenost bodů *i* a *j* a \mathbf{n}_{ij} je normálový vektor hranice buněk *i* a *j*, čili směrový vektor spojnice *ij* Delaunayovy triangulace.

Zopakujme zákon zachování energie pro stacionární případ (rovnice (2.20))

$$\int_{S} K \nabla T^{\mathsf{T}} \mathbf{n} \, \mathrm{d}S + \int_{V} \overline{Q} \, \mathrm{d}V = 0 \tag{5.2}$$

Pro buňku i a pro případ výše popsané diskretizace (pro každý úsek hranice je normálový vektor i teplotní gradient konstantní) můžeme tuto rovnici přepsat jako

$$Q_i = \sum_j I_{Q,ij} = -\sum_j K \nabla T_{ij}^{\mathsf{T}} \mathbf{n}_{ij} S_{ij}$$
(5.3)

kde Q_i je celkové dodané teplo buňkou *i* (tepelný výkon buňky, výkon tepelného zdroje v buňce), $I_{Q,ij}$ je tepelný tok z buňky *i* do buňky *j* a S_{ij} je délka společné hranice buněk *i* a *j*. Vztah pro tepelný tok mezi buňkami *i* a *j* zapíšeme a dosadíme rovnici (5.1):

$$I_{Q,ij} = -K\nabla T_{ij}^{\mathsf{T}} \mathbf{n}_{ij} S_{ij} = -K S_{ij} \Delta T_{ij} / L_{ij} = -K_{ij} (T_j - T_i) = K_{ij} (T_i - T_j)$$
(5.4)

kde

$$K_{ij} = \frac{KS_{ij}}{L_{ij}} \tag{5.5}$$

je vodivost oblasti A_{ij} [W/K] (analogie k tuhosti prutu [N/m] v mechanice).

Pro každou oblast ij můžeme zapsat rovnice pro tepelný tok z jedné buňky do druhé (schematicky znázorněno na obrázku 9)

$$I_{Q,ij} = K_{ij}(T_i - T_j) I_{Q,ji} = K_{ij}(T_j - T_i)$$
(5.6)

V maticové podobě:

$$\begin{pmatrix} I_{Q,ij} \\ I_{Q,ji} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{ij} & -K_{ij} \\ -K_{ij} & K_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_i \\ T_j \end{pmatrix} = K_{ij} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_i \\ T_j \end{pmatrix}$$
(5.7)

nebo

$$\mathbf{I}_{\mathbf{Q}_{ij}} = \mathbf{K}_{ij} \mathbf{T}_{ij} \tag{5.8}$$

kde

$$\mathbf{K}_{ij} = K_{ij} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$
(5.9)

je matice vodivosti oblasti ij.

Toto jsou rovnice pro jednu oblast. Pro soustavu všech oblastí zapíšeme rovnici jako

$$\mathbf{Q} = \mathbf{K} \mathbf{T} \tag{5.10}$$

kde **T** a **Q** jsou sloupcové matice teplot jednotlivých bodů a tepelných výkonů (zdrojů) odpovídajících buněk. **K** je matice vodivosti celé soustavy oblastí. Matice **K** se získá tzv. lokalizací (každé pole matice soustavy o souřadnicích a, b je součtem všech polí se stejnými souřadnicemi a, b matic jednotlivých oblastí). Rovnice (5.10) je zároveň zápisem soustav rovnic (5.3) pro všechny buňky (zákon zachování energie pro každou jednotlivou buňku). Opět podotkneme analogii k úlohám mechaniky, a sice k řešení příhradových konstrukcí deformační metodou, kde posun styčníku odpovídá teplotě bodu a tepelný výkon buňky odpovídá vnějšímu silovému zatížení styčníku.

Pro vyřešení rovnice (5.10) musí být v každém bodě (resp. oblasti) známa buďto teplota nebo tepelný výkon (zdroje) buňky. Rozdělíme proto body (buňky) na dvě skupiny, první s předepsanou teplotou (označení t) a druhou s předepsaným tepelným výkonem (s označením q). Rovnici (5.10) poté rozdělíme

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}(q) \\ \mathbf{Q}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}(qq) & \mathbf{K}(qt) \\ \mathbf{K}(tq) & \mathbf{K}(tt) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T}(q) \\ \mathbf{T}(t) \end{pmatrix}$$
(5.11)

 $\mathbf{Q}(q)$ a $\mathbf{T}(t)$ jsou známé veličiny, výrazy pro veličiny neznámé můžeme zapsat následovně:

$$\mathbf{T}(q) = [\mathbf{K}(qq)]^{-1} [\mathbf{Q}(q) - \mathbf{K}(qt)\mathbf{T}(t)]$$
(5.12)

$$\mathbf{Q}(t) = \mathbf{K}(tq)\mathbf{T}(q) + \mathbf{K}(tt)\mathbf{T}(t)$$
(5.13)

Rozdělení na předepsanou teplotu a předepsaný tepelný výkon je opět analogické k příhradovým konstrukcím mechaniky (předepsané styčníkové posuny a předepsané styčníkové vnější síly).

5.1.3 Výsledky

Interpretace výsledků je podobná jako v metodě konečných prvků (MKP). Aproximace pole primární neznámé veličiny (teploty) je nejpřesnější v definovaných bodech (analogie k uzlům MKP), naopak nejmenší přesnosti se dosahuje na okrajích oblastí (v rozích buněk), kde při zvolené aproximaci konstantním teplotním gradientem kolmým na hranici buněk (bez uvažování složky gradientu rovnoběžné s hranicí, která ale obecně přítomna je) dochází k nespojitosti teplotního pole.

Aproximace pole sekundární neznámé (teplotního gradientu či tepelného toku, respektive jejich kolmé složky) je naopak nejpřesnější uvnitř oblastí poblíž jejich středu (analogie k prvkům MKP).

Využívajíce skutečnosti o nejpřesnější aproximaci teplotního pole v definovaných bodech zavedeme novou aproximaci teplotního pole. Delaunayova triangulace rozdělí rovinu na trojúhelníkové oblasti, jejichž vrcholy tvoří právě ony definované body (viz obrázek 8). Teplotní pole v každém takovém trojúhelníku (oproti oblasti v původní diskretizaci) je aproximováno polem s konstantním teplotním gradientem (funkci teploty na daném trojúhelníku si můžeme představit jako rovinu, danou souřadnicemi bodů a jejich teplotou - viz obrázky 11, 14 a 16). Teplotní gradient se určí pro každý trojúhelník a pomocí něj se může na každém trojúhelníku určit i hustota tepelného toku (pomocí vodivosti každého trojúhelníku, viz dále)

5.2 POUŽITÍ NA VÝPOČET K^{*} a $\bar{\mathbf{A}}_{num}^{(I)}$

V úvodu kapitoly jsme definovali několik pojmů. Pro přehlednost následuje shrnutí s odkazem na obrázek 8:

• **Bod** - Definovaný bod, primární geometrická diskretizace, výsledkem metody je aproximace teplotního pole právě v těchto bodech. Na obrázku 8 vyznačeny jako černé tečky.

- **Buňka** Voronoiova buňka, geometrie v závislosti na předem definovaných bodech, pro každou buňku se řeší energetická rovnováha. Na obrázku 8 vyznačeno zeleně.
- Oblast Oblast mezi sousedními definovanými body a krajními body hranice, před výpočtem je teplotní pole mezi definovanými body aproximováno na těchto oblastech. Na obrázku 8 vyznačeno šedě.
- **Trojúhelník** Delaunayův trojúhelník, po výpočtu je teplotní pole aproximováno na těchto trojúhelnících. Na obrázku 8 vyznačeno světle modře.

Pro numerické modelování byl použit výhradně program Matlab, pomocí nějž byly vytvořeny všechny obrázky teplotních polí v této práci. Teoretický analytický model je založen na průměrech teplotních gradientů a tepelných toků. Pro modelování byla zvolena čtvercová oblast V s vodivostí matrice $K^{(m)}$, do které je uprostřed (co nejblíže středu) zasazena nehomogenita jako (mnohem) menší oblast Ω s vodivostí $K^{(I)}$.

Takovémuto systému byly pro dva navzájem kolmé směry $(x \ a \ y)$ předepsány homogenní okrajové podmínky, čili předepsaná teplota hraničních bodů je rovna jejich souřadnici (x-ové souřadnici v prvním případě a y-ové souřadnici v případě druhém). Je tedy předepsán jednotkový rovnoměrný teplotní gradient ∇T^0 (v x-ovém a y-ovém směru). Pro každý (Delaunayův) trojúhelník se spočte jeho obsah a teplotní gradienty pro dva výše zmíněné zatěžovací stavy (označení horním indexem (x) nebo (y) v závislosti s kterou osou je předepsaný rovnoměrný gradient rovnoběžný). Průměrné teplotní gradienty a průměrné tepelné toky se spočtou následovně:

$$\nabla T^{*(x)} = \nabla T^{0(x)} = (1,0)^{\mathsf{T}}$$
(5.14)

$$\nabla T^{*(y)} = \nabla T^{0(y)} = (0, 1)^{\mathsf{T}}$$
(5.15)

$$\mathbf{q}^{*(x)} = \frac{1}{|V|} \int_{V} \mathbf{q}^{(x)}(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}V = -\frac{1}{|V|} \int_{V} K(\mathbf{x}) \, \nabla T^{(x)}(\mathbf{x}) = -\frac{\sum_{i} K_{i} \nabla T_{i}^{(x)} V_{i}}{\sum_{i} V_{i}}$$
(5.16)

$$\mathbf{q}^{*(y)} = -\frac{\sum_{i} K_i \nabla T_i^{(y)} V_i}{\sum_{i} V_i} \tag{5.17}$$

index iznamená trojúhelník
a V_i je obsah trojúhelníkui. Suma je přes všechny trojúhelník
y soustavy V.

Efektivní vodivost je tenzor splňující rovnici (4.4). Ze dvou zatěžovacích stavů můžeme zapsat dvě maticové rovnice

$$\mathbf{q}^{*(x)} = -\mathbf{K}^* \nabla T^{*(x)} \tag{5.18}$$

$$\mathbf{q}^{*(y)} = -\mathbf{K}^* \nabla T^{*(y)} \tag{5.19}$$

a z nich jednoznačně čtyři neznámé složky tenzoru efektivní vodivosti vypočítat. Vezmemeli v úvahu, že průměrné teplotní gradienty jsou jednotkové a navzájem kolmé, můžeme efektivní tepelnou vodivost zapsat jako

$$(\mathbf{q}^{*(x)}, \mathbf{q}^{*(y)}) = -(\mathbf{K}^* \nabla T^{*(x)}, \mathbf{K}^* \nabla T^{*(y)}) = \mathbf{K}^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(5.20)

$$\mathbf{K}^* = \left(-\mathbf{q}^{*(x)}, -\mathbf{q}^{*(y)}\right) = \left(\frac{\sum_i K_i \nabla T_i^{(x)} V_i}{\sum_i V_i}, \frac{\sum_i K_i \nabla T_i^{(y)} V_i}{\sum_i V_i}\right)$$
(5.21)

Koncentrační faktor se spočte obdobnou úvahou pomocí průměrných teplotních gradientů v oblasti nehomogenity Ω

$$\nabla T^{(I)(x)} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla T^{(x)}(\mathbf{x}) \,\mathrm{d}\Omega = \frac{\sum_{j} \nabla T_{j}^{(x)} V_{j}}{\sum_{j} V_{j}}$$
(5.22)

$$\nabla T^{(I)(y)} = \frac{\sum_{j} \nabla T_{j}^{(y)} V_{j}}{\sum_{j} V_{j}}$$
(5.23)

$$(\nabla T^{(I)(x)}, \nabla T^{(I)(y)}) = \bar{\mathbf{A}}_{num}^{(I)}(\nabla T^{*(x)}, \nabla T^{*(y)}) = \bar{\mathbf{A}}_{num}^{(I)} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(5.24)

$$\bar{\mathbf{A}}_{num}^{(I)} = (\nabla T^{(I)(x)}, \nabla T^{(I)(y)}) = \left(\frac{\sum_{j} \nabla T_{j}^{(x)} V_{j}}{\sum_{j} V_{j}}, \frac{\sum_{j} \nabla T_{j}^{(y)} V_{j}}{\sum_{j} V_{j}}\right)$$
(5.25)

kde suma přes j znamená součet přes všechny trojúhelníky v nehomogenitě. Dolní index *num* značí koncentrační faktor spočtený numerickou metodou. V grafech na obrázku 12 je tento porovnáván jak s koncentračním faktorem metody řídké aproximace tak metody Mori-Tanaka.

Co se diskretizace týče, její použití závisí na typu úlohy. Jednotlivá konkrétní použití jsou diskutována v následujících kapitolách. Obecně lze říci, že tam, kde předpokládáme nevelké změny v teplotním poli (na okrajích matrice), postačuje řidší síť, naopak v místech, kde předpokládáme větší až náhlé změny teplotního pole (v okolí hranice nehomogenity a matrice), volíme síť jemnější.

Pro homogenní prostředí a výše popsané okrajové podmínky dává popsaná metoda počítačově přesné výsledky pro libovolnou (i zcela náhodnou) diskretizaci.

5.2.1 Dokonalý tepelný kontakt



Obrázek 10: Zvolená diskretizace: zleva celý Voronoiův diagram, detail diagramu v blízkosti hranice a detail triangulace v blízkosti hranice

Pro nehomogenity oblého tvaru (např. tvaru elipsy) je princip diskretizace následující: nejdůležitějším místem pro výslednou přesnost metody je hranice mezi nehomogenitou a matricí. Jako výhodné se ukazuje zvolit základní diskretizační body na hranici, a od nich pak odvodit body následující. Sousední vrstva bodů se volí tak, aby s původními body na hranici tvořily po obou stranách přibližně rovnostranné trojúhelníky. Tím se zajistí, že každý Delaunayův trojúhelník bude celý buď v matrici, nebo v nehomogenitě. Navíc každá oblast se nachází buď celá uvnitř nehomogenity, celá vně nehomogenity, nebo je hranicí nehomogenity a matrice přibližně půlena.

Vodivost oblastí (dosazená do rovnice (5.5)) spojujících body hranice a body vnější (resp. vnitřní) bude $K^{(m)}$ (resp. $K^{(I)}$). Oblasti spojující dva hraniční body leží přibližně jednou polovinou v matrici a jednou polovinou v nehomogenitě. Jejich vodivost se tedy spočte paralelním modelem.

S indexy (m) pro matrici, (I) pro nehomogenitu
a(b) pro hraniční oblasti pak vodivosti zapíšeme jako

$$K^{(m)} = K^{(m)}$$

$$K^{(I)} = K^{(I)}$$

$$K^{(b)} = \frac{K^{(m)} + K^{(I)}}{2}$$
(5.26)

První dva výrazy z rovnic 5.26 platí i pro všechny ostatní oblasti dané následnou diskretizací, která již nemusí být tak přísná a směrem ke krajům se může volit hrubší. Zároveň platí první dva výrazy i pro vodivosti příslušných trojúhelníků (které, dle již zmíněného faktu, leží celým svým objemem buď v matrici nebo v nehomogenitě) dosazovaných do rovnic (5.16), (5.17) a (5.21). Pro názornost výše zmíněných vztahů a tvrzení viz. obrázek 10.



Obrázek 11: Teplotní pole: zleva pro $K^{(m)}=K^{(I)},$ pro $K^{(I)}/K^{(m)}=10$ a pro $K^{(I)}/K^{(m)}=10$ je teplota znázorněna jako prostorový grafT=f(x,y)

Přesnost metody je ovlivněna několika faktory. V grafech na obrázku 12 je ukázán vztah mezi velikostí modelované nehomogenity, hustotou sítě a odchylkou mezi analyticky a numericky spočtenými veličinami (koncentračním faktorem a efektivní tepelnou vodivostí). Pro příklad je tvar i orientace nehomogenity stejná jako v obrázku 10 (známe analytické řešení a materiál je navíc anizotropní). Modelovaným výsekem materiálu je čtverec o velikosti strany 10, vodivost matrice $K^{(m)} = 1$ a nehomogenity $K^{(I)} = 2$. Na vodorovné ose v grafech je vynesena délka delší poloosy elipsy. Ukázka hustoty použitých sítí je znázorněna na obrázku 13. V grafech si všimneme několika skutečností: Přesnost



Obrázek 12: Grafy odchylek [%] numerického a analytického řešení: zleva $\bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(I)}$, $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(I)}$, \mathbf{K}^* , horní řádek znázorňuje rovnoběžnou a spodní kolmou složku. Zeleně jsou vykresleny výsledky pro nejhrubší síť (s označením 1), modře pro středně jemnou síť (2) a červeně pro nejjemnější síť (3)–viz obr. 13.



Obrázek 13: Celé sítě a detaily sítí použitých pro zjišťování přesnosti metody: zleva 1, 2 a 3

výpočtu efektivní tepelné vodivosti (v porovnání s analytickou hodnotou \mathbf{K}_{MT}^*) ve směru předepsaného gradientu je vynikající pro všechny uvažované případy. Složka koncentračních faktorů ve směru ∇T^0 také vychází s vynikající odchylkou (porovnání s $\bar{\mathbf{A}}_{num}^{(i)}$ vychází lépe pro $\bar{\mathbf{A}}_{MT}^{(i)}$ nežli pro $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$). Naopak přesnost výpočtu kolmých složek efektivní tepelné vodivosti a koncentračních faktorů vycházejí s přesností řádově horší (v tomto případě porovnání s $\bar{\mathbf{A}}_{num}^{(i)}$ vychází lépe pro $\bar{\mathbf{A}}_{dil}^{(i)}$). V grafech je ale vidět pokles odchylky (všech veličin) se zmenšující se velikostí nehomogenity, vhodnou volbou rozměrů modelu lze tedy přesnost výpočtu zlepšit. Také čím použijeme jemnější síť, tím více se numericky spočtené hodnoty (dle očekávání) blíží hodnotám analytickým (v grafech odpovídají tři různé čáry třem hustotám sítě, ve všech případech vycházejí pro nejjemnější síť nejpřesnější výsledky a pro nejhrubší síť výsledky s největší odchylkou).

Pro modelování ostrohranných nehomogenit je výhodnější použít diskretizaci popsanou v následující kapitole s vysokou hodnotou tepelné propustnosti vrstvy rozhraní (čili s nízkou hodnotou tepelného odporu vrstvy rozhraní), čímž vlastně modelujeme materiál s dokonalým tepelným kontaktem mezi složkami.

5.2.2 Nedokonalý tepelný kontakt



Obrázek 14: Teplotní pole pro kruhovou nehomogenitu $(K^{(m)} = 1, K^{(I)} = 6, h = 5)$. Zřetelně je vidět skoková změna teploty na hranici nehomogenity matrice.

Stejně jako pro nehomogenity s dokonalým tepelným kontaktem je i pro případ nedokonalého rozhraní kritickým místem pro přesnost výpočtu hranice mezi nehomogenitou a matricí. Diskretizace je podobná jako v případě dokonalého tepelného kontaktu s tím rozdílem, že namísto základního prstence bodů ležících na hranici se jako základ na hranici definuje dvojprstenec tak, že vzdálenost mezi oběma prstenci je mnohem menší než vzdálenost sousedních bodů v daném prstenci a navíc osa odpovídajících si bodů tvoří přibližně tečnu k povrchu nehomogenity. Nedokonalé rozhraní je tedy geometricky modelováno jako tenká vrstva na povrchu nehomogenity (s jinými vlastnostmi než nehomogenita a matrice - viz dále). Každý Delaunayův trojúhelník opět leží buď celý v nehomogenitě, celý v matrici, anebo nově celý ve vrstvě rozhraní. Oblasti spojující body základního (jednoho) prstence leží téměř celé uvnitř (resp. vně) nehomogenity a jejich vodivost je modelována jako vodivost oblastí ležících celým svým objemem uvnitř (resp. vně) nehomogenity, tedy $K^{(I)}$ (resp. $K^{(m)}$). Poloha oblastí spojujících dva body základní dvojvrstvy je naopak taková, že celé leží uvnitř vrstvy rozhraní a jejich střed leží přibližně uprostřed této vrstvy. Jejich vodivost je potom určena sériovým modelem (polovina oblasti má vodivost $K^{(I)}$, polovina $K^{(m)}$ a mezi těmito polovinami je propustnost h - obdoba hranice z obrázku 5). Opět s indexy (m) pro matrici, (I) pro nehomogenitu a (b) pro hraniční oblasti (ležící celé ve vrstvě rozhraní) zapíšeme jednotlivé vodivosti jako

$$K^{(m)} = K^{(m)}$$

$$K^{(I)} = K^{(I)}$$

$$\frac{1}{K^{(b)}} = \frac{L}{2K^{(m)}} + \frac{L}{2K^{(I)}} + \frac{1}{h}$$
(5.27)

kde L je délka oblasti (vzdálenost příslušných bodů i a j) a L/2 v posledním výrazu znamená již zmíněnou polovinu oblasti. V případě trojúhelníků platí tyto vzorce jen pro trojúhelníky ležící celým svým objemem v matrici nebo v nehomogenitě. Pro trojúhelníky hraniční přechodové vrstvy (rozhraní) platí vzorec (dle rovnice (2.9)).

$$K^{(b)} = ht \tag{5.28}$$

kde t je modelová tloušťka vrstvy rozhraní.

Ukázka detailu diskretizace v oblasti hranice nehomogenity a matrice (v ostatních částech je stejná jako pro případ dokonalého kontaktu) je na obrázku 15.



Obrázek 15: Detail sítě pro modelování nedokonalého tepelného kontaktu (Voronoiův diagram a Delaunayova triangulace). Vrstva rozhraní je pro názornost poměrně široká, pro výpočet by se patrně zvolila užší.

Popsaný způsob diskretizace je vhodný i pro modelování ostrohranných nehomogenit, kdy pro nedokonalé rozhraní bychom použili výše zmíněné vzorce beze změny a pro dokonalé rozhraní je jediný rozdíl v tepelné propustnosti vrstvy, kterážto, blížíc se nekonečnu $(h \to \infty)$, určuje vodivost oblastí ležících uvnitř základní dvojvrstvy ve tvaru

$$\frac{1}{K^{(b)}} = \frac{L}{2K^{(m)}} + \frac{L}{2K^{(I)}}$$
(5.29)



Obrázek 16: Výpočet teplotního pole $(K^{(m)} = 1, K^{(I)} = 5, h = 3)$ v blízkosti ostrohranné nehomogenity. Zleva Voronoiův diagram a Delaunayova triangulace, graf izoterem a prostorový graf.

Příklady ostrohranné nehomogenity a její výpočet viz obrázek 16.

Procedura výpočtu hledaných veličin je obdobná s případem dokonalého kontaktu, tedy

$$\nabla T^{*(x)} = \nabla T^{0(x)} = (1,0)^{\mathsf{T}}$$
(5.30)

$$\nabla T^{*(y)} = \nabla T^{0(y)} = (1,0)^{\mathsf{T}}$$
(5.31)

$$\mathbf{q}^{*(x)} = -\frac{\sum_{i} K_i \nabla T_i^{(x)} V_i}{\sum_{i} V_i}$$
(5.32)

$$\mathbf{q}^{*(y)} = -\frac{\sum_{i} K_i \nabla T_i^{(y)} V_i}{\sum_{i} V_i} \tag{5.33}$$

$$\mathbf{K}^* = \left(\frac{\sum_i K_i \nabla T_i^{(x)} V_i}{\sum_i V_i}, \frac{\sum_i K_i \nabla T_i^{(y)} V_i}{\sum_i V_i}\right)$$
(5.34)

suma přes i opět značí součet přes všechny trojúhelníky soustavy V.

Do výpočtu průměrných teplotních gradientů a koncentračního faktoru nehomogenity zahrneme i vrstvu rozhraní. Zápis doplníme (v souladu s analytickým řešením) indexem r, značícím náhradní veličiny pro nehomogenitu včetně vrstvy rozhraní:

$$\nabla T^{(I,r)(x)} = \frac{\sum_{j} \nabla T_{j}^{(x)} V_{j}}{\sum_{j} V_{j}}$$
(5.35)

$$\nabla T^{(I,r)(y)} = \frac{\sum_j \nabla T_j^{(y)} V_j}{\sum_j V_j}$$
(5.36)

$$\bar{\mathbf{A}}_{num}^{(I,r)} = \left(\frac{\sum_{j} \nabla T_{j}^{(x)} V_{j}}{\sum_{j} V_{j}}, \frac{\sum_{j} \nabla T_{j}^{(y)} V_{j}}{\sum_{j} V_{j}}\right)$$
(5.37)

suma přesjznamená součet přes všechny trojúhelníky nehomogenity včetně všech trojúhelníků vrstvy rozhraní.

Nově se u nedokonalého (oproti dokonalému) tepelného kontaktu objevuje pojem náhradní tepelná vodivost nehomogenity. V souladu s [3] definujeme náhradní tepelnou vodivost $\mathbf{K}^{(I,r)}$ jako tenzor splňující rovnici

$$\mathbf{K}^{*} = \mathbf{K}^{(m)} + \xi^{(I)} (\mathbf{K}^{(I,r)} - \mathbf{K}^{(m)}) \bar{\mathbf{A}}_{num}^{(I,r)}$$
(5.38)

Numerická hodnota náhradní tepelné vodivosti je tedy určena z již předem numericky spočtených veličin.



Obrázek 17: Grafy odchylek [%] analytického a numerického řešení. Modře K^* , zeleně $K^{(I,r)}$ a červeně $A_{num}^{(I,r)}$

Přesnost metody pro případ nedokonalého tepelného kontaktu mezi složkami je znázorněna v grafech na obrázku 17. Zde je možno pozorovat (stejně jako pro případ dokonalého tepelného kontaktu) snižování odchylek analytických a numerických výsledků se zjemňováním sítě (ukázky použitých sítí jsou na obrázku 18). Dále je vidět pokles odchylek výsledků se zmenšující se tloušťkou modelové vrstvy rozhraní (se zmenšující se tloušťkou přechodové vrstvy se numerické modelování blíží analytickým předpokladům). Oproti dokonalému kontaktu ale neplatí pravidlo o obecném snižování odchylek výsledků se zmenšující se velikostí nehomogenity. Za konstantní tepelné propustnosti h vrstvy rozhraní a zmenšující se velikosti nehomogenity klesá přesnost výpočtu, zvláště pak výpočtu náhradní tepelné vodivosti a náhradního koncentračního faktoru. To je dáno jednak konstantní tloušťkou vrstvy (jejíž obsah se započítává do celkového obsahu nehomogenity) a jednak tím, jak se náhradní tepelná vodivost nehomogenity blíží k nule a změny v teplotním poli nabývají na razanci. Z toho vyplývá výše zmíněný fakt, že přesnost metody lze obnovit zmenšením modelové tloušťky vrstvy a zjemněním sítě.

5.3 DALŠÍ MOŽNOSTI METODY

Téměř celá tato kapitola byla věnována numerické metodě pro dvojrozměrné ustálené vedení tepla. Celé odvození pro 2D je poměrně jednoduché a průhledné a výsledky teplotního pole jako prostorové funkce nad rovinou xy jsou snadno představitelné a prezentovatelné.

Stejně tak by bylo možné tuto metodu použít i pro 3D případ s několika rozdíly (postup je však analogický s 2D případem). Definice základních bodů je stejná, Voronoiovy buňky (mnohoúhelníky) přejdou na prostorové mnohostěny, hranice buněk (úsečky) na rovinné mnohoúhelníky, čtyřúhelníkové oblasti taktéž na prostorové mnohostěny, Delaunayovy



Obrázek 18: Sítě a detaily sítí pro ověřování přesnosti metody pro nedokonalý tepelný kontakt. Zleva: a, b, c.

trojúhelníky na tetraedry (čtyřstěny). Další postup je v podstatě stejný, prvotní aproximace spočívá v nahrazení teplotního pole každé oblasti novým polem s konstantním teplotním gradientem rovnoběžným se spojnicí příslušných bodů a délka hranice přejde na obsah hraniční oblasti. Výpočet pro 3D řešení je identický s odvozením v kapitole 5.1.2, včetně rozměrů matic oblastí (2×2) . Výsledkem metody je opět aproximace teplotního pole v definovaných bodech. Definitivní numerická aproximace primární neznámé je teplotní pole s konstantním teplotním gradientem na každém Delaunayově tetraedru. Použití na výpočet efektivní tepelné vodivosti a koncentračního faktoru je stejný jako pro 2D případ, jediný rozdíl bude v rozměrech výsledných vektorů a tenzorů. Pro zjevně náročnější tvorbu není numerická metoda pro 3D případ v této práci řešena.

Stejně jako pro případ ustáleného vedení tepla s rovnicí

$$\nabla^2 T = -\frac{Q}{K} \tag{5.39}$$

je metoda použitelná pro všechny fyzikální jevy popsané diferenciální rovnicí

$$\nabla^2 F(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) \tag{5.40}$$

kde F je primární neznámá veličina. Takovou rovnicí jsou popsány například (nejen teplotní) ustálené případy transportních procesů, například transportu vlhkosti.

6 APLIKACE

Dosud odvozené vzorce a metody nyní ověříme a aplikujeme na několik konkrétních experimentálních výsledků.

Rubber particles Fibers Air voids

6.1 CEMENTO-GUMOVÉ KOMPOZITY

Obrázek 19: Opticko-mikroskopická fotografie cementogumového kompozitu [1]

Na následujícím příkladě z literatury [1] ověříme možnost modelování nehomogenit nejrůznějších tvarů jako kulových nehomogenit. Materiál, na kterém byl experiment prováděn, je složen z cementové matrice a odpadní gumy. Guma je vyrobena z odpadu (skládkované automobilové pneumatiky) drcením a řezáním (mechanical shredding), proto mají gumové částice značně nekulové tvary.

Materiál	Cement	Guma	Vzduch
Tepelná vodivost	1,16	$0,\!19$	0,024

Číslo	Objemové zastoupení			Výsledky	
Vzorku	Cement	Guma	Vzduch	Exp.	\mathbf{MT}
1	98	0	2	1,16	1,13
2	85,5	9,5	5	0,86	0,96
3	73,04	18,26	8,7	0,76	0,81
4	61,74	26,46	11,8	0,67	0,68
5	51,6	34,4	14	0,54	$0,\!58$
6	41,5	41,5	17	0,47	0,48

Tabulka 1: Vstupní materiálové údaje a složení jednotlivých vzorků

Zopakujeme poznatek z kapitoly 4.3.1, totiž že při uvažování dvoufázového kompozitu z cementovou matricí a gumovými částicemi jako nehomogenitami a pro příklad nehomogenity s poměrem velikostí 1 : 1 : 5 (kdy se částice tvarem už blíží vláknu a dle obrázku 19 tento tvar můžeme označit za extrémní) je rozdíl mezi efektivní tepelnou vodivostí materiálu složeného s takovýchto nehomogenit a materiálu s kulovými nehomogenitami 1,8%. Naopak u vzduchových bublin (kdy poměr vodivostí matrice a vzduchu je přibližně 50 a tedy předpoklad poměrně podobných vodivostí z kapitoly 4.3.1 není splněn), kdy odchylka od kulového tvaru již má značný vliv na efektivní tepelnou vodivost, můžeme opět na obrázku 19 pozorovat, že vzduchové póry podmínku přibližného kulového tvaru vzorně splňují.

Výsledný materiál byl připraven s různým obsahem gumových částic a různou porozitou. Vstupní údaje experimentu a výsledky jak experimentální, tak teoretické jsou uvedeny v tabulce 1, grafické znázornění výsledků pak v grafu na obrázku 20, přičemž plná čára znázorňuje teoretický model a čtverce experimentální výsledky.



Obrázek 20: Závislost efektivní tepelné vodivosti na objemovém zastoupení gumových částic v pevné fázi kompozitu

6.2 Al-Si/SiC KOMPOZITY

Na dalším příkladu z literatury [12] ověříme platnost metod pro určení efektivní tepelné vodivosti materiálů s nedokonalým rozhraním. Ačkoliv je uvažovaný materiálový systém používaný hlavně v elektrotechnickém průmyslu, svým založením přesně vyhovuje zadání této práce. Al-Si/SiC kompozity jsou materiály, jejichž matrice je tvořena slitinou hliníku a křemíku (Al-Si), do níž se přidávají SiC (karbid křemíku) částice. SiC částice chemicky reagují s matricí a vytvářejí tenkou vrstvičku mezi nehomogenitami a matricí, právě ono uvažované tepelně-nedokonalé rozhraní z kapitoly 4.4. V původní literatuře byla tepelná vodivost matrice odvozena nepřímo z její elektrické vodivosti a parametry tepelné vodivosti nehomogenit a tepelné propustnosti rozhraní stanoveny také nepřímo z naměřených hodnot. Autoři pro určení efektivní tepelné vodivosti použili model pánů Hasselmana a Johnsona (který odpovídá metodě Mori-Tanaka s uvažováním všech nehomogenit jako kulových o stejné velikosti) a dosáhli odchylky od experimentu 2%. Nyní si ukážeme, že v případě uvažování rozložení velikostí částic můžeme metodou Mori-Tanaka dosáhnout



Obrázek 21: Fotografie plniva čísla 100 (a) a 400 (b) a řez výsledným kompozitem s plnivem 100 (c) a 400 (d)

přesnosti ještě vyšší (při stejném způsou určování vstupních údajů, totiž minimalizací čtverců odchylek experimentálních a teoretických hodnot).

Označení	D(10)	D(90)	S
100	110	229	0,71
180	46	131	1,02
240	39	75	0,66
320	23	50	0,79
400	14	34	0,86
500	10	24	0,82
800	4,8	14	1,05

Tabulka 2: Vlastnosti jednotlivých použitých frakcí (velikost v $\mu {\rm m})$

Pro každou frakci SiC plniva jsou známy průměry D(10), D(90) a S = [D(90) - D(10)]/D(50) (viz tabulka 2). Dle [3] definujeme

$$\mu = \ln(D(50)) \tag{6.1}$$

$$\sigma = \frac{1}{1,2816} \ln\left(\frac{S + \sqrt{S^2 + 4}}{2}\right) \tag{6.2}$$

a z toho celkové lognormální rozdělení objemového zastoupení jednotlivých velikostí plniva

$$\xi(d) = \frac{\exp\left(-\left[\frac{\ln(d)-\mu}{\sigma\sqrt{2}}\right]^2\right)}{d\sigma\sqrt{2\pi}}$$
(6.3)

Jsou uvažovány velikosti plniva v řádu $10^{-28}-10^{20}$ m, celý interval je logaritmicky rozdělen na 1000 částí, každá část je aproximována lineární funkcí spojující krajní body intervalu a takto spočtené objemové zastoupení je přisouzeno logaritmicky střední velikosti

Č.	ξ^{SiC}	Exp.	MT
100	0,58	219	217,8
180	0,58	210	212,3
240	0,60	208	208,5
320	0,59	198	199,9
400	0,58	195	190,8
500	0,55	184	182,5
800	0,53	160	161,3

Tabulka 3: Vstupní údaje a experimentální i teoretické výsledky

částic plniva. Jako vstupní údaje jsou brány hodnoty z tabulky 3, dále pak $K^{(m)} = 187 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, $K^{(I)} = 252,5 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ a $h = 72,5 \cdot 10^6 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$. Z experimentálních i teoretických výsledků plyne již zmíněný fakt, že se zmenšující se velikostí nehomogenit klesá efektivní tepelná vodivost materiálu (grafické znázornění této závislosti je uvedeno na obrázku 22).

Odchylka od experimentálních výsledků

$$O = \sqrt{\frac{\sum_{i} (K_{exp} - K_{MT})^2}{\sum_{i} K_{MT}^2}} = 1,1\%$$
(6.4)

dokazuje lepší odhad efektivní tepelné vodivosti s uvažováním rozdělení velikosti částic než s uvažováním pouze jedné velikosti, a tím pádem i oprávněné užití mírně složitější metody Mori-Tanaka.



Obrázek 22: Závislost efektivní tepelné vodivosti na střední velikosti částic plniva. Plná čára znázorňuje teoretický model, čtverce potom experimentální data

7 ZÁVĚR

V této práci byl odvozen a aplikován vzorec metody Mori-Tanaka pro určení efektivní tepelné vodivosti kompozitních materiálů. Byla diskutována možnost modelování materiálu s náhodně orientovanými nehomogenitami náhodného tvaru jako materiálu s pouze kulovými nehomogenitami a na konkrétním příkladě (kapitola 6.1) ukázána oprávněnost tohoto zjednodušení.

Také byl do výpočtu zaveden vliv nedokonalého rozhraní mezi plnivem a matricí a tím i vliv absolutní velikosti částic plniva a opět na konkrétním reálném příkladu (kapitola 6.2) ukázán fakt, že při snižující se velikosti nehomogenit se snižuje efektivní tepelná vodivost. Dále byl ověřen fakt, že při uvažování rozdělení velikostí nehomogenit dává metoda Mori-Tanaka přesnější výsledky než při uvažování pouze jediné (střední) velikosti nehomogenit.

Použité analytické vztahy byly ověřeny numerickou metodou založenou na diskretizaci Voronoiovými polygony (kapitola 5).

8 PODĚKOVÁNÍ

Na závěr bych rád poděkoval vedoucímu bakalářské práce Doc. Ing. Janu Zemanovi, Ph.D. za jeho ochotu, podporu, trpělivost a přístup (nejen) při tvorbě této práce, za odbornou pomoc a poskytnuté materiály, že mi při tvorbě ponechal dostatek volnosti, ale zároveň svým vedením a přístupem dovedl výsledek mého snažení k předem vymezenému cíli. Bez něj by tato práce patrně nikdy nevznikla.

Dále bych chtěl poděkovat všem učitelům, kteří svým přístupem prohlubovali můj zájem o mechaniku a spřízněné vědní obory.

A v neposlední řadě děkuji celé své rodině za jejich všestrannou podporu v průběhu celého mého studia.

Tato práce vznikla za podpory projektu GAČR 106/08/1379.

LITERATURA

- BENAZZOUK, A.; DOUZANE, O.; MEZREB, K.; aj.: Thermal conductivity of cement composites containing rubber waste particles: Experimental study and modelling. *Construction and Building Materials*, ročník 22, 2008: s. 573–579.
- [2] BENVENISTE, T.: On the effective thermal conductivity of multiphase composites. Journal of Applied Mathematics and Physics, ročník 37, 1986: s. 696–713.
- [3] BOHM, H. J.; NOGALES, S.: Mori-Tanaka models for the thermal conductivity of composites with interfacial resistance and particle size distribution. *Composites Science and Technology*, ročník 68, 2008: s. 1181–1187.
- [4] CAI, W.: Potential field of uniformly charged ellipsoid, 2007, http://micro.stanford.edu/~caiwei/me340/a_ellipsoid_potential.pdf.
- [5] CARLSON, B. C.: Numerical computation of real or complex elliptic integrals. Numerical algorithms, ročník 10, 1995: s. 13–26.
- [6] ŠEJNOHA, M.; KABELE, P.; ZEMAN, J.; aj.: Elastic and inelastic analysis of heterogeneous material. CTU in Prague (unpublished), 2001.
- [7] GRASSL, P.: On a lattice approach to model flow in cracked concrete. 2008, http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/0809/0809.2758v3.pdf.
- [8] HATTA, H.; TAYA, M.: Equivalent inclusion method for steady state heat conduction in composites. *International Journal of Engineering Science*, ročník 24, 1986: s. 1159– 1170.
- [9] JIRÁSEK, M.: Přednášky z předmětu Univerzální principy mechaniky.
- [10] KELLOGG, O. D.: Foundations of potential theory. Verlag von Julius Springer, Berlin, 1929.
- [11] LIENHARD IV, J. H.; LIENHARD V, J. H.: A heat transfer textbook 3rd edition. Phlogiston press, Cambridge, Massachusetts, 2008.
- [12] MOLINA, J. M.; PRIETO, R.; NARCISO, J.; aj.: The effect of porosity on the thermal conductivity of Al–12 wt.% Si/SiC composites. *Scripta Materialia*, ročník 60, 2008: s. 582–585.
- [13] VAVERKA, J.; CHYBÍK, J.; MRLÍK, F.: Stavební fyzika 2. Vutium, Brno, 2000.
- [14] http://cs.wikipedia.org/wiki/termodynamika.
- [15] http://cs.wikipedia.org/wiki/teplota.
- [16] http://cs.wikipedia.org/wiki/sferoid.
- [17] http://mathworld.wolfram.com/EulerAngles.html.

A DODATKY

A.1 NUMERICKÝ VÝPOČET ESHELBYHO TENZORU S

A.1.1 Obecný algoritmus

Výpočet ukážeme na příkladu prvku tenzoru S_{11} (rovnice 3.78), ostatní prvky se určí analogicky (s jiným pořadím konstant a, b, c v integrálu R_D).

$$S_{11} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty [(b^2 + s)(c^2 + s)]^{-1/2} (a^2 + s)^{-3/2} ds = \frac{abc}{3} R_D(b, c, a)$$
(A.1)

kde

$$R_D(b,c,a) = \frac{3}{2} \int_0^\infty [(b^2 + s)(c^2 + s)]^{-1/2} (a^2 + s)^{-3/2} \,\mathrm{d}s \tag{A.2}$$

je Carlsonův úplný eliptický integrál druhého druhu. Pro jeho výpočet použijeme algoritmus uvedený v [5]. Nejdříve zapíšeme integrál pro obecné konstanty k, l, m.

$$R_D(k,l,m) = \frac{3}{2} \int_0^\infty [(k^2 + s)(l^2 + s)]^{-1/2} (m^2 + s)^{-3/2} \,\mathrm{d}s \tag{A.3}$$

Pro zvolenou toleranci tol definujeme:

$$k_0 = k, \ l_0 = l, \ m_0 = m, \ A_0 = \frac{k+l+3m}{5}$$
 (A.4)

$$Q = (tol/4)^{-1/6} \max\{|A_0 - k|, |A_0 - l|, |A_0 - m|\}$$
(A.5)

Pro $n = 0, 1, 2, \ldots$ definujeme

$$\lambda_n = \sqrt{k_n l_n} + \sqrt{k_n m_n} + \sqrt{l_n m_n}, \quad A_{n+1} = \frac{A_n + \lambda_n}{4}$$
(A.6)

$$k_{n+1} = \frac{k_n + \lambda_n}{4} \quad l_{n+1} = \frac{l_n + \lambda_n}{4} \quad m_{n+1} = \frac{m_n + \lambda_n}{4}$$
(A.7)

Spočítáme A_n pro n = 1, 2, ..., N, kde $4^{-N} Q < |A_N|$. Definujeme

$$K = \frac{A_0 - k}{4^N A_N}, \quad L = \frac{A_0 - l}{4^N A_N}, \quad M = -(K + L)/3$$
 (A.8)

$$E_2 = KL - 6M^2, \qquad E_3 = (3KL - 8M^2)M$$
 (A.9)

$$E_4 = 3(KL - M^2)M^2, \quad E_5 = KLM^3$$
 (A.10)

$$\overline{E} = \left(1 - \frac{3}{14}E_2 + \frac{1}{6}E_3 + \frac{9}{88}E_2^2 - \frac{3}{22}E_4 - \frac{9}{52}E_2E_3 + \frac{3}{26}E_5\right)$$
(A.11)

Poté vyjádříme integrál R_D s odchylkou menší než tol jako

$$R_D(k,l,m) \approx 4^{-N} A_N^{-3/2} \overline{E} + 3 \sum_{n=0}^{N-1} \frac{4^{-n}}{\sqrt{m_n(m_n + \lambda_n)}}$$
 (A.12)

Následuje zdrojový kód pro numerický výpočet v programu Matlab.

A.1.2 Implementace do Matlabu

Pro výpočet použijeme subor Sij.m a Carlson_2nd_kind.m pro vstupní hodnoty a, b, c. • Soubor Sij.m:

```
a = 1;
b = 1;
c = 1;
%a, b, c poloosy elipsoidu, vstupni udaje
S(1,1) = a*b*c/3*Carlson_2nd_kind(b^2,c^2,a^2);
S(2,2) = a*b*c/3*Carlson_2nd_kind(a^2,c^2,b^2);
S(3,3) = a*b*c/3*Carlson_2nd_kind(a^2,b^2,c^2);
S
• Soubor Carlson_2nd_kind.m
function [Rd] = Carlson_2nd_kind(k,1,m)
tol=eps;%tolerance od presneho reseni
ki=k;
li=l;
mi=m;
A0=(k+1+3*m)/5;
Q=(tol/4)^(-1/6)*max([abs(AO-k),abs(AO-l),abs(AO-m)]);
n=0;
A = AO;
mm(1)=m;
while 4^{(-n)*Q>=abs(A)}
    lambda=sqrt(ki*li)+sqrt(li*mi)+sqrt(mi*ki);
    ll(n+1)=lambda;
    A=(A+lambda)/4;
    ki=(ki+lambda)/4;
    li=(li+lambda)/4;
    mi=(mi+lambda)/4;
    n=n+1;
    mm(n+1)=mi;
end
R=0;
for i=1:n
    R=R+4^(-(i-1))/((mm(i)+ll(i))*sqrt(mm(i)));
end
K=(AO-k)/(4^n*A);
L=(AO-1)/(4^n*A);
M = -(K+L)/3;
E2=K*L-6*M^2;
```

```
E3=(3*K*L-8*M<sup>2</sup>)*M;
E4=3*(K*L-M<sup>2</sup>)*M<sup>2</sup>;
E5=K*L*M<sup>3</sup>;
EE=1-3/14*E2+1/6*E3+9/88*E2<sup>2</sup>-3/22*E4-9/52*E2*E3+3/26*E5;
```

 $Rd=4^{(-n)}*A^{(-3/2)}*EE+3*R;$

A.2 TRANSFORMACE TENZORŮ

A.2.1 Důkaz rovnice (4.53)

Následující matlabovský soubor provede důkaz rovnosti (4.53) a to tím, že podíl odpovídajících si prvků matic na obou stranách rovnice je roven 1

```
%Dukaz rovnosti matic Adil a Adil2
syms a b g A B C Km Ki real
ca=cos(a);
sa=sin(a);
cb=cos(b):
sb=sin(b);
cg=cos(g);
sg=sin(g);
R1=[ca -sa 0;sa ca 0;0 0 1];%otoceni kolem osy Z o uhel a
R2=[cb 0 -sb;0 1 0;sb 0 cb];%otoceni kolem osy Y o uhel b
R3=[cg -sg 0;sg cg 0;0 0 1];%otoceni kolem osy Z' o uhel g
R=simplify(R3*R2*R1);
Adil=simplify(inv(eye(3)-R*(Km-Ki)/Km*diag([A B C],0)*R'));
Adil2=simplify(R*inv(eye(3)-(Km-Ki)/Km*diag([A B C],0))*R');
simplify(Adil./Adil2)
%podil jednotlivych clenu roven 1
```

A.2.2 Stopa matice transformovaného tenzoru

Další matlabovský soubor provede důkaz toho, že stopa matice tenzoru je invariantní při transformaci souřadnic rotací (i po rotaci je stopa transformované matice rovna stopě matice výchozí).

```
%Dukaz konstantnosti stopy matice tenzoru pri trasformaci
syms a b g all al2 al3 a2l a22 a23 a3l a32 a33 real
ca=cos(a);
sa=sin(a);
cb=cos(b);
sb=sin(b);
cg=cos(g);
sg=sin(g);
R1=[ca -sa 0;sa ca 0;0 0 1];%otoceni kolem osy Z o uhel a
R2=[cb 0 -sb;0 1 0;sb 0 cb];%otoceni kolem osy Y o uhel b
R3=[cg -sg 0;sg cg 0;0 0 1];%otoceni kolem osy Z' o uhel g
```

```
R=simplify(R3*R2*R1);
T=[a11 a12 a13;a21 a22 a23;a31 a32 a33];
T=R*T*R';
simplify(trace(T))
```

A.2.3 Důkaz rovnice (4.57)

Matlabovský zápis důkazu rovnice (4.57), totiž že "průměrný" tenzor, vyniklý rotací obecného tenzoru \mathbf{T} do všech možných poloh v prostoru, je právě roven identickému tenzoru násobenému třetinou stopy matice tenzoru původního.

$$\mathbf{T}_{avg} = \frac{\mathrm{tr}(\mathbf{T})}{3} \mathbf{I} = \begin{pmatrix} \mathrm{tr}(\mathbf{T})/3 & 0 & 0\\ 0 & \mathrm{tr}(\mathbf{T})/3 & 0\\ 0 & 0 & \mathrm{tr}(\mathbf{T})/3 \end{pmatrix}$$
(A.13)

```
syms a b g all al2 al3 a21 a22 a23 a31 a32 a33 real
ca=cos(a);
sa=sin(a);
cb=cos(b);
sb=sin(b);
cg=cos(g);
sg=sin(g);
R1=[ca -sa 0;sa ca 0;0 0 1];%otoceni kolem osy Z o uhel a
R2=[cb 0 -sb;0 1 0;sb 0 cb];%otoceni kolem osy Y o uhel b
R3=[cg -sg 0;sg cg 0;0 0 1];%otoceni kolem osy Z' o uhel g
T=simplify(R3*R2*R1);
Adil=[a11 a12 a13;a21 a22 a23;a31 a32 a33];
Adil=T*Adil*T';
tr_Adil=simplify(trace(Adil));
Adil_avg=(int((int((int(Adil*sb,a,0,2*pi)/pi),b,0,pi)/8),g,0,2*pi)/pi);
Adil_avg=simplify(Adil_avg);
Adil_avg(find(Adil_avg==tr_Adil/3))='tr(Adil)/3'
```