МО України
Рівненський державний педагогічний інститут

Рівненське відділення АН ВШ України

Рівненська та Волинська регіональні організації
Українського математичного товариства

Волинський математичний вісник

(Матеріали школи-семінару **“Прикладні проблеми математики та інформатики”**,
1-4 лютого 1996 р., м. Рівне)

ВИП. 2

Рівне 1995

"Волинський математичний вісник" публікує результати досліджень в області теоретичної і прикладної математики у вигляді коротких повідомлень, оригінальних статей, оглядів, матеріалів конференцій та семінарів. Розрахований на наукових працівників, викладачів вузів, аспірантів та студентів старших курсів механіко-математичних спеціальностей.

Видається один раз у рік з 1994р. Свідоцтво про державну реєстрацію: серія РВ, N148 від 11.04.95р. Засновники: А. Я. Бомба(голова Рівненського регіонального відділення Українського математичного товариства), В. В. Ковтунець(член правління Українського математичного товариства), В. Ю. Слюсарчук(головний редактор "Волинського математичного вісника").

При виданні матеріалів школи-семінару редакція вирішила не брати на себе право істотнього редагування підготовлених авторами текстів.

Редакція приймає статті лише після оголошення математичним товариством чергового набору вісника. Контактні телефони:
26-04-44, 26-26-97.

Зміст

УДК 541.64:536.6

Є.С.Колупаєв, докт. хім. наук (Рівне, педінститут)
М.А.Бордюк, канд. фіз.-мат. наук (Рівне, педінститут)
С.М.Гусаковський, аспірант (Рівне, педінститут)

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛОВОЇ ЕНЕРГІЇ В ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВІ ЛІНІЙНИХ АМОРФНИХ ПОЛІМЕРІВ.

Аналіз рівняння теплопровідності, з використанням граничних умов та перетворень Лапласа дозволив отримати залежність для обчислення коефіцієнта теплопровідності вздовж довжини структурного елемента полімера. Врахування дисипацій енергії і розв'язок одномірної задачі в циліндричній системі координат дає змогу оцінити величину теплового потоку, що йде через бічну поверхню макромолекули.

Експерементальні дослідження теплофізичних властивостей полімерних систем показують, що енергообмін в них залежить від структури будови молекули і особливостей протікання молекулярно-кінетичних процесів на різних рівнях структурної організації [1,2]. Тому важливим є питання математичного моделювання процесів перенесення теплової енергії в гетерогенних системах [3]. При цьому будемо вважати, що теплоперенос зумовлений перенесенням енергії за ланцюгом головних валентностей макромолекул і обміном енергії між атомами чи групами атомів бокових відгалужень, а також між сусідніми макромолекулами [4]. Для аналізу енергообміну в гетерогенних полімерних системах використовуємо закон збереження енергії, згідно якого кількість теплоти ΔQ введеної в елементарний об'єм полімера за час $d\tau$ в наслідок теплопровідності, рівне зміні внутрішньої енергії ΔQ_I і дисипації енергії ΔQ_i .

Вважатимемо, що поперечний переріз структурної підсистеми полімера є незмінним вздовж всієї довжини. За направляючу вісь довжини системи виберемо вісь Oz і запишемо рівняння теплопровідності:

$$\lambda \nabla^2 T_i = C \frac{\partial T}{\partial z} \quad (1)$$

Накладемо слідуючі граничні умови: в площині xOy тангенціальна складова теплового потоку перетворюється в нуль, а температура підсистеми в усіх точках має певне значення $T(z,0,0)=f(z)$. Нехай в початковий момент часу кінець підсистеми має температуру T_k. Знайдемо розподіл температур за довжиною елемента в будь-який момент часу. Для цього розв'яжемо диференціальне рівняння:

$$\frac{\partial T(z,\tau)}{\partial \tau} = a\frac{\partial^2 T(z,0)}{\partial z^2}; \quad (\tau>0;\ 0<z<\infty) \tag{2}$$

при крайових умовах: $T(z,0,0) = f(z)$; $T(0,0,\tau) = T_k = const$; $\frac{\partial T(+\infty,\tau)}{\partial z} = 0$.

Застосуємо перетворення Лапласа до диференціального рівняння (1)

$$L\left[\frac{\partial T(z,\tau)}{\partial \tau}\right] = L\left[a\frac{\partial^2 T(z,\tau)}{\partial z^2}\right], \tag{3}$$

де

$$L\left[T(z,\tau)\right] = \int_0^\infty T(z,\tau)e^{-s\tau}d\tau = T_L(z,\tau). \tag{4}$$

Застосувавши перетворення Лапласа до рівняння (2) отримаємо:

$$sT_L(z,s) - f(z) = a\frac{d^2T_L(z,s)}{dz^2}. \tag{5}$$

Врахувавши, що $f(z) = T_0 = const$ будемо мати

$$T_L''(z,s) - \frac{s}{a}\left[T_L(z,s) - \frac{T_0}{s}\right] = 0. \tag{6}$$

Загальний розв'язок диференціального рівняння для зображення запишемо у вигляді:

$$T_L(z,s) - \frac{T_0}{s} = A_1 e^{\sqrt{s/a}\cdot z} + B_1 e^{-\sqrt{s/a}\cdot z}, \tag{7}$$

де A_1 і B_1 - сталі. Для їх визначення використаємо перетворення Лапласа до граничних умов і одержимо що: $A_1 = 0$, а $B_1 = -(T_0 - T_k)/s$. Тоді розв'язок для зображення має вид:

$$\frac{T_0}{s} - T_L(z,s) = \frac{T_0 - T_k}{s}e^{-\sqrt{s/a}\cdot z}. \tag{8}$$

Застосувавши обернене перетворення Лапласа, отримаємо:

$$T_0 - T(z,\tau) = (T_0 - T_k)\cdot erf(z/2\sqrt{a\tau}). \tag{9}$$

Визначимо втрати тепла на кінці елемента:

$$dQ_s = -\lambda\left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{z=0} d\tau = -\lambda(T_0 - T_k)\left\{\frac{\partial}{\partial z}\left[erf\left(z/2\sqrt{a\tau}\right)\right]\right\}_{z=0}, \tag{10}$$

оскільки $\frac{\partial}{\partial z}\left[erf(z/2\sqrt{a\tau})\right] = \frac{1}{\sqrt{\pi a\tau}}e^{-z^2/4a\tau}$.

При z=0; $e^{-z^2/4a\tau} = 1$. Тоді кількість тепла, яка віддається кінцем підсистеми і площа якої s рівне

$$\Delta Q_l = \frac{2\sqrt{\lambda_l C_v \rho}}{\sqrt{\pi}}(T_0 - T_k)S\sqrt{\tau} . \quad (11)$$

З другої сторони:

$$\Delta Q_l = C_v \rho V(\bar{T} - T_0) , \quad (12)$$

де $\bar{T}(\tau) = \frac{1}{V}\int_{(V)} T(z,\tau)d\tau = \frac{1}{Rhl}\int_{-R}^{R}\int_{-h}^{h}\int_{-l}^{l} T(z,\tau)dxdydz = \frac{1}{l}\int_{-l}^{l} T(z,\tau)d\tau$.

Значення ефективного коефіцієнта теплопровідності структурного елементу полімера знайдемо з співвідношення:

$$C_v \rho V = \frac{2\sqrt{\lambda_l C_v \rho}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\tau}\cdot S , \quad (13)$$

звідки

$$\lambda_l = \frac{\pi C_v \rho}{4\tau} l^2 . \quad (14)$$

Врахувавши, що $\frac{l}{\tau} = v_l$ - швидкість поширення поздовжніх фронтів і переходячи від підсистеми до системи, отримаємо:

$$\lambda_l = \frac{\pi}{12} C_v \rho v_l \cdot l . \quad (15)$$

Для визначення ΔQ_l розглянемо підсистему у вигляді циліндра ефективного поперечного перерізу d, що утворюється витягнутими ланцюгами макромолекул. В циліндричній системі координат для одномірної задачі з врахуванням, що $v_r = v_\varphi = 0$ і $v_z \neq 0$, отримаємо

$$\rho v \frac{dH}{dz} = \frac{1}{2}\frac{d}{dr}\left(r \cdot q_r\right) + \frac{dq_z}{dz} , \quad (16)$$

де $q_r = \lambda_l \frac{dT}{dr}$; $q_z = \lambda \frac{dT}{dz}$; $H = CT$.

Вважаючи, що швидкість дисипативного теплового потоку за перерізом (r) підсистеми розподіляється за параболою, тобто $v = v_{max}(1-\xi^2)$, де $\xi = r/d$, рівняння (16) можна записати так:

$$\rho v_{max} C d^2 (1-\xi^2)\frac{dT}{dz} = \frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi}\left(\lambda\xi\frac{dT}{d\xi}\right) + a^2\lambda\frac{d^2T}{dz^2} . \quad (17)$$

Розв'язавши рівняння (17) для двох основних граничних умов, коли $\frac{dT}{dz} = const$ і температура бокової поверхні змінюється стрибкр потрібно $T = Az + q(\xi)$, отримаємо, що

$$B\xi(1-\xi^2) = \frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{dq(\xi)}{d\xi}\right), \quad (18)$$

де $B = A\rho v_{max} C d^2 / \lambda$.

Розв'язок рівняння (18), що задовільняє умові $q = 0$ при $\xi = 1$, можна записати у вигляді:

$$\xi\frac{dq(\xi)}{d\xi} = B\left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi^4}{4}\right) . \quad (19)$$

Тоді тепловий потік, що йде через поверхню підсистеми, буде виражатися як

$$q_t = \lambda_t \frac{dT}{dr}\Big|_{r=a} = \frac{\lambda_t}{d}\frac{dT}{d\xi}\Big|_{\xi=1} = \frac{\lambda_t}{d}\frac{dq(\xi)}{d\xi}\Big|_{\xi=1} = \frac{A\rho v C_v d}{8} , \quad (20)$$

де $v = v_t$ - швидкість поширення поперечних фононів в підсистемі.

З співвідношення (20) отримаємо, що

$$\lambda_t = \rho\frac{v_t C_v d}{8} . \quad (21)$$

З співвідношення (15) і (21) для коефіцієнта теплопровідності гетерогенних полімерних систем будемо мати, що

$$\lambda = \rho C_v\left(\frac{\pi}{12}v_l \cdot l + \frac{dv_t}{8}\right) . \quad (22)$$

Аналіз співвідношення (22) показує, що у випадку $v_l = v_t = v$ і $l = d$ (ізотропна періодична структура) отримаємо $\lambda \approx 0{,}38 \cdot C_v \cdot \rho \cdot l$ близьке до співвідношення Дебая для коефіцієнта теплопровідності [5].

Для лінійних аморфних полімерів l - це відстань рівна С-С зв'язку (1,5 $\overset{o}{A}$), а d - міжмолекулярному зв'язку (порядку 1,40 $\overset{o}{A}$). Як показують співвідношення теоретичних значень з експерементальними [6-10] розходження між ними 2-6%. При цьому теоретична залежність адекватно відтворює хід експерементальних залежностей.

Таким чином, використання методів математичного моделювання процесів теплопереносу в гетерогенних полімерних системах дозволяє отримати аналітичні співставлення, використання яких дає можливість прогнозувати їх теплофізичні властивості.

1. B.S.Kolupaev, Yu.S.Lipatov, V.I.Nikitchuk, N.A.Borduyk, O.M.Voloshin. Composite materials with negative Poisson ratio.// Доповіді АН України. №12, 1993, с.130-134.

2. B.S.Kolupaev, N.A.Bordyuk, O.M.Voloshin, Yu.S.Lipatov. The Frequency Spectrum of the Structure Elements of Filled Poly(vynilchloride).// J.Polym.Mater. №12, 1995, p.143-149.

3. Френкель С.Я., Цыгельный И.М., Колупаев Б.С. Молекулярная кибернетика. Львов: Свит, 1990, 168с.

4. Бордюк Н.А., Бестюк Ю.М., Никитчук В.И., Колупаев Б.С. Структурно-механические и теплофизические свойства модифицированного поливинилхлорида.// ИФЖ, т.60, №6, 1991, с.987-994.

5. Дебай П. Избрапые труды. -Л.: Наука, 1987, 559с.

6. Бордюк Н.А., Никитчук В.И., Волошин О.М., Липатов Ю.С., Колупаєв Б.С. Влияние ангармоничных эффектов на структурно-механические и теплофизические свойства наполненых полимерных систем.// ИФЖ, т.68, №1, 1995, с.44-50.

7. Бордюк Н.А., Волошин О.М., Демьянюк Б.П., Липатов Ю.С., Колупаев Б.С. Теплофизические свойства модифицированого поливинилхлорида.// Высокомолек. соед. т.32, №6, 1990, с.1232-1237.

8. Бордюк М.А., Колупаев Б.С., Волошин О.М., Левчук В.В. Акустичні властивості і структурні параметри наповненого полівінілхлориду.// УФЖ, т.41, №1, 1996, с.115-118.

9. Колупаев Б.С., Бордюк Н.А., Исследование теплопроводности межфазного слоя в наполненом поливинилхлориде и поливинилбутирале.// Высокомолек. соед. т23, №7, 1987, с.1499-1504.

10. Колупаев Б.С., Липатов Ю.С., Исследование тепловой энергии в линейных полимерах и композициях на их основе в зависимости от микроскопических свойств тела.// Высокомолек. соед. т.28, №8, 1986, с.1706-1711.