S. May, S. Tokarzewski
A. Zachara, B. Cichocki

EFEKTYWNA PRZEWODNOŚĆ DWUSKŁADNIKOWEGO KOMPOZYTU O REGULARNEJ DWUWYMIAROWEJ STRUKTURZE

24/1992

WARSZAWA 1992

http://rcin.org.pl

ISSN 0208-5658

Praca wpłynęła do Redakcji dnia 28 maja 1992 r.

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
BIBLIOTEKA

56711

IPPT PAN

Na prawach rękopisu

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
Nakład 100 egz. Ark.wyd. 4,0 Ark.druk.5,0
Oddano do drukarni w sierpniu 1992 r.

Wydawnictwo Spółdzielcze sp. z o.o.
Warszawa, ul.Jasna 1

http://rcin.org.pl

Stanisław May, Stanisław Tokarzewski,
Andrzej Zachara, Bogdan Cichocki

Zakład Mechaniki Cieczy i Gazów
IPPT PAN

EFEKTYWNA PRZEWODNOSC DWUSKŁADNIKOWEGO KOMPOZYTU O REGULARNEJ DWUWYMIAROWEJ STRUKTURZE

Streszczenie

W artykule dokonano przeglądu literatury na temat wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa w kompozycie o strukturze periodycznej, w którym wtrącenia w postaci równoległych walców tworzą sieć kwadratową. Podano także obliczenia efektywnego współczynnika przewodnictwa za pomocą nowej wersji metody źródeł indukowanych w oparciu o funkcje bazowe związane z potencjałem Wignera [14]. Ponadto przedstawiono zainspirowany wynikami Bergmana [15] nowy rekurencyjny algorytm do wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa.

1. Wprowadzenie

Przedmiotem naszego artykułu jest analiza efektywnych własności ośrodków dyspersyjnych, złożonych z dwóch różnych materiałów, z których jeden występuje w postaci fazy ciągłej zwanej matrycą, zaś drugi jako faza rozproszona w postaci wtrąceń czyli inkluzji. Ograniczymy się tu do ośrodków stacjonarnych, których struktura i własności nie zależą od czasu. Będziemy też przyjmować, że wtrącenia tworzą regularną strukturę, w której można wyodrębnić jedną komórkę periodycznie powtarzającą się w całym obszarze kompozytu.

Badanie efektywnych własności ośrodków dyspersyjnych jest bardzo ważnym problemem o znaczeniu zarówno podstawowym jak i praktycznym, występującym w różnych działach fizyki i nauk technicznych. Batchelor

http://rcin.org.pl

[1], a później Bonnecaze i Brady [2] oraz Torquato [3] zestawili te zjawiska fizyczne, z którymi wiąże się problem opisu własności ośrodka dyspersyjnego za pomocą efektywnego współczynnika transportu. Z kilkunastu zjawisk wymienionych w pracach [1-3] wyodrębnimy cztery następujące:

1) Przewodnictwo cieplne,
2) Przewodnictwo elektryczne,
3) Przenikalność dielektryczna,
4) Przenikalność magnetyczna.

Każde z nich może być opisane za pomocą równań tej samej postaci:

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_i = \rho(\mathbf{r}) \ , \tag{1.1}$$

$$\mathbf{F}_i = -\lambda_i \cdot \nabla \Phi \ . \tag{1.2}$$

$$i = \begin{cases} \text{c - faza ciągła (matryca)} \ , \\ \text{d - faza rozproszona (wtrącenia)} \ . \end{cases} \tag{1.3}$$

Równania te odnoszą się do każdej z faz, przy czym sposób użycia odpowiedniego indeksu i określony jest alternatywną formułą (1.3). Pierwsze z równań ma charakter prawa zachowania, gdzie $\mathbf{F}$ oznacza natężenie strumienia danej wielkości fizycznej, $\mathbf{r}$ jest wektorem położenia, zaś $\rho(\mathbf{r})$ oznacza dany rozkład źródeł w rozpatrywanym obszarze. Drugie równanie jest związkiem konstytutywnym pomiędzy strumieniem $\mathbf{F}$, a gradientem potencjału Φ, gdzie λ_i oznacza współczynnik transportu w danym składniku kompozytu. Wymienione wyżej zjawiska łączy wspólna cecha - potencjał Φ jest skalarem. Ograniczymy się przy tym do ośrodków izotropowych, dla których współczynnik transportu λ, jest również wielkością skalarną, niezależną od kierunku.

Będziemy zakładać, że charakterystyczny rozmiar struktury fazy rozproszonej l jest w stosunku do charakterystycznego rozmiaru całego

http://rcin.org.pl

kompozytu L na tyle mały ($l << L$), że kompozyt w skali makro można traktować jako jednorodny, a własności jego można określać przez efektywny współczynnik λ_{ef} , zdefiniowany jak następuje:

$$\langle F \rangle = - \lambda_{ef} \cdot \langle \nabla \Phi \rangle . \tag{1.4}$$

We wzorze tym $\langle F \rangle$ i $\langle \nabla \Phi \rangle$ oznaczają średnie natężenie strumienia i średni gradient potencjału, przy czym operację uśrednienia, ze względu na periodyczną strukturę ośrodka, wystarczy przeprowadzić po objętości powtarzającej się komórki, zgodnie ze wzorem (por. [28]):

$$\langle A \rangle = \frac{1}{V} \left[\int_{V_c} A_c \, dV + \int_{V_d} A_d \, dV \right] , \tag{1.5}$$

gdzie A jest dowolną funkcją położenia, V oznacza objętość komórki, zaś V_c i V_d odpowiednio objętość fazy ciągłej i rozproszonej.

Przy opisie własności kompozytów będziemy posługiwać się dwoma podstawowymi bezwymiarowymi parametrami charakterystycznymi φ i h , z których pierwszy oznacza udział objętościowy wtrąceń

$$\varphi = \frac{V_d}{V} , \tag{1.6}$$

zaś drugi jest współczynnikiem transportu wtrąceń odniesionym do odpowiedniego współczynnika matrycy

$$h = \frac{\lambda_d}{\lambda_c} . \tag{1.7}$$

Niniejszy artykuł dotyczy głównie dwuwymiarowych kompozytów o wtrąceniach w kształcie walców kołowych rozmieszczonych w sieci kwadratowej, którym w literaturze poświęcono mniej miejsca niż kompozytom trójwymiarowym o wtrąceniach kulistych. Pierwsza część

http://rcin.org.pl

artykułu obejmująca rozdziały 1 - 4 zawiera przegląd literatury na temat metod obliczania rozkładu potencjału i efektywnego współczynnika transportu. Literatura ta jest bardzo obszerna, a na liście autorów, którzy wnieśli tu swój wkład można znaleźć nazwiska najwybitniejszych twórców fizyki, poczynając od Maxwella [4] i Rayleigha [5]. Przedstawiony tu, z konieczności skrótowy, przegląd zawiera omówienie pracy Rayleigha [5] oraz prac późniejszych autorów, którzy uogólnili metodę Rayleigha na układy periodyczne kul i walców o bardziej zróżnicowanej geometrii pojedynczej komórki i gęstszym upakowaniu wtrąceń [6-10]. Omówiona została także metoda źródeł indukowanych Zuzovsky'ego i Brennera [11] oraz Sanganiego i Acrivosa [12], która pozwoliła usunąć pewne niejednoznaczności występujące w metodzie Rayleigha. Wspomniano także o metodzie kollokacji brzegowej [13]. Rozdział 4 zawiera omówienie dotychczasowych wyników dotyczących efektywnych własności kompozytów w warunkach asymptotycznych, przy gęstym upakowaniu walców o wysokim współczynniku przewodności.

W drugiej części, obejmującej rozdziały 5 - 8, metoda źródeł indukowanych została zastosowana do wyznaczania rozkładu potencjału i efektywnego współczynnika transportu w kompozytach dwuwymiarowych o wtrąceniach walcowych. Wprowadzono tu nową wersję tej metody opartą na funkcjach bazowych związanych z potencjałem Wignera [14]. Efektywny współczynnik przewodnictwa wyrażono w postaci ułamka łańcuchowego. Przedstawiona też została nowa, zainspirowana wynikami Bergmana [15-17], metoda wyznaczania efektywnego współczynnika transportu przy pomocy algorytmu rekurencyjnego. Rozdział 9 zawiera podsumowanie otrzymanych wyników.

http://rcin.org.pl

Część I.

EFEKTYWNA PRZEWODNOSC KOMPOZYTU - PRZEGLĄD LITERATURY

2. Równania przewodnictwa, warunki brzegowe i efektywny współczynnik transportu

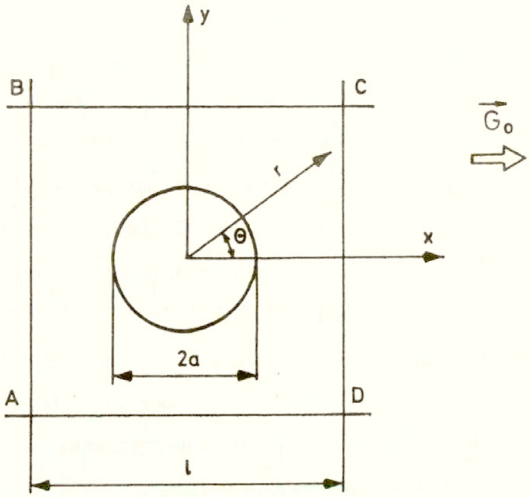
Będziemy rozważać kompozyt składający się z regularnego układu jednakowych, równoległych walców rozmieszczonych w jednorodnym ośrodku. W przekroju poprzecznym osie walców tworzą sieć kwadratową. Przyjmiemy, że walce są nieskończenie długie i układ możemy traktować jako dwuwymiarowy (rys.2.1). Długość boku bazowej komórki sieci wynosi l, zaś bezwymiarowy promień walca odniesiony do długości l oznaczamy przez a. Zjawisko będziemy opisywać w układzie współrzędnych walcowych (r,θ) bądź kartezjańskich (x,y), obierając za początek układu punkt centralny wybranej komórki. Położenia środków pozostałych komórek będziemy określać przy pomocy promienia wektora **r**.

$$\mathbf{r}_n = n_1 \cdot \mathbf{I}_1 + n_2 \cdot \mathbf{I}_2, \qquad n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

gdzie $\mathbf{I}_1$, $\mathbf{I}_2$, oznaczają wektory jednostkowe odpowiednio w kierunku x i y . Używać będziemy współrzędnych bezwymiarowych odniesionych do rozmiaru komórki l. Wielkości odnoszące się do fazy ciągłej (matrycy) i rozproszonej (walce) będziemy oznaczać indeksami c i d (1.3). W przypadku temperatury T matrycy i wtrąceń będą to indeksy górne. Geometrię kompozytu będziemy charakteryzować przez udział objętościowy walców φ , który w przypadku rozpatrywanego kompozytu dwuwymiarowego jest równy

$$\varphi = \pi \cdot a^2 . \qquad (2.1)$$

http://rcin.org.pl



Rys.2.1 Podstawowa komórka kwadratowej sieci walców

http://rcin.org.pl

Przyjmujemy, że przyłożone zewnętrzne pole temperatury ma średni gradient G_0 skierowany zgodnie z osią x. Podstawowe równania konstytutywne (1.2) dla każdej z faz mają w przypadku przewodnictwa cieplnego postać:

$$\mathbf{q}_i = -\lambda_i \cdot \nabla T^i . \tag{2.2}$$

Dla bezźródłowych obszarów matrycy i walców równania zachowania (1.1) przyjmują postać:

$$\nabla^2 T^i = 0 . \tag{2.3}$$

Występujący w wzorach (2.2-3) wskaźnik i przyjmuje wartości c, d zgodnie z wzorem (1.3). Na powierzchni walców powinny być spełnione następujące warunki brzegowe:

1) Równość temperatur obu faz

$$T^c = T^d \qquad \text{dla } r = a, \tag{2.4}$$

2) Równość normalnych składowych strumienia ciepła

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_c = \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_d \qquad \text{dla } r = a , \tag{2.5}$$

gdzie $\mathbf{n}$ oznacza jednostkowy normalny wektor skierowany na zewnątrz walca. Każde z równań (2.3) jest równaniem Laplace'a i rozwiązania ich mają postać:

$$T_c = \sum_{m=1}^{\infty} (A_m \cdot r^{\,m} + B_m \cdot r^{\,-m}) \cdot \cos m\theta \qquad \text{dla } r \geq a, \tag{2.6}$$

$$T_d = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \cdot r^{\,m} \cdot \cos m\theta \qquad \text{dla } r \leq a . \tag{2.7}$$

W rozwiązaniach tych nie występuje funkcja sinus ze względu na symetrię rozwiązania w stosunku do $\theta = 0$, zaś m jest liczbą nieparzystą z uwagi na antysymetrię rozwiązania względem $\theta = \pi/2$. Rozwiązanie (2.7) nie ma członu z ujemnym wykładnikiem, aby uniknąć osobliwości w punkcie $r = 0$. Wyrażenia (2.6) i (2.7) zawierają trzy ciągi stałych dowolnych A_m, B_m i

http://rcin.org.pl

C_m, a zatem rozwiązanie naszego problemu fizycznego wymaga postawienia trzech warunków brzegowych. Do tej pory sformułowane zostały dwa warunki brzegowe (2.4-5) na powierzchni walca. Uwzględnienie trzeciego warunku związanego z oddziaływaniem komórek nieskończonej sieci na rozpatrywaną komórkę centralną będzie przedmiotem rozdziału 3.

Wykorzystując warunki brzegowe (2.4-5) możemy wyrazić współczynniki A_m i C_m za pomocą współczynnika B_m i wyeliminować je z rozwiązań (2.6) i (2.7).

$$A_m = \frac{1 + h}{1 - h} \cdot \frac{B_m}{a^{2m}} = \frac{B_m}{\alpha \cdot a^{2m}}, \tag{2.8}$$

$$C_m = \frac{2}{1 - h} \cdot \frac{B_m}{a^{2m}} = \frac{1 + \alpha}{\alpha} \cdot \frac{B_m}{a^{2m}}, \tag{2.9}$$

gdzie h jest bezwymiarowym współczynnikiem przewodnictwa walców (1.7), zaś α jest wielkością zależną od h :

$$\alpha = \frac{1 - h}{1 + h}. \tag{2.10}$$

Sposoby wyznaczenia współczynników B_m na podstawie dodatkowego warunku zostaną podane w rozdz.3, a w tym miejscu przejdziemy do wyznaczenia efektywnego współczynnika przewodnictwa kompozytu.

Współczynnik ten zdefiniowany jest ogólnym wzorem (1.4). Obecnie podamy szczegółową postać tego wzoru dla przypadku przewodnictwa cieplnego w dwuwymiarowym kompozycie o kwadratowej sieci wtrąceń walcowych. Sredni strumień ciepła występujący we wzorze (1.4): $\langle F \rangle = \langle q \rangle$ wyznaczamy korzystając z definicji (1.5),

http://rcin.org.pl

$$< q > = \frac{A_c}{A} \frac{1}{A_c} \int_{A_c} q_c . dA + \frac{A_d}{A} \frac{1}{A_d} \int_{A_d} q_d \, dA , \qquad (2.11)$$

gdzie A oznacza pole przekroju poprzecznego komórki bazowej, zaś A_i jest częścią przekroju poprzecznego odpowiadającą matrycy (i = c) , bądź wtrąceniom (i = d)

Wykorzystując wzory (2.1) i (2.2), otrzymujemy wzór na średni gradient strumienia ciepła w komórce bazowej

$$< q > = -\left[\lambda_c (1 - \varphi) < \nabla T^c > + \lambda_d \varphi < \nabla T^d > \right] . \qquad (2.12)$$

Postępując analogicznie otrzymujemy wyrażenie dla średniego gradientu temperatury w komórce bazowej

$$< \nabla T > = G_0 = (1 - \varphi) < \nabla T^c > + \varphi < \nabla T^d > . \qquad (2.13)$$

Podstawiając (2.12) i (2.13) do wzoru (1.4) i eliminując przy tym $< \nabla T^c >$ z wzoru (2.12) za pomocą (2.13) otrzymujemy wzór na efektywny współczynnik przewodnictwa

$$\mu = \frac{\lambda_{ef}}{\lambda_c} = 1 - (1 - h) \frac{\varphi < \nabla T^d >}{G_0} , \qquad (2.14)$$

w którym współczynnik h jest określony wzorem (1.7).

Sredni gradient $< \nabla T^d >$ wyznaczamy ze wzoru Gaussa - Ostrogradskiego, zamieniając całkę po powierzchni przekroju walca na całkę po jego obwodzie

$$< \nabla T^d > = \frac{1}{A_d} \int_{A_d} \nabla T^d \, dA = \frac{1}{A_d} \int_{s} T^d \, \mathbf{n} \, ds , \qquad (2.15)$$

gdzie $\mathbf{n}$ jest wektorem jednostkowym normalnym do obwodu walca, zaś s

http://rcin.org.pl

jest współrzędną mierzoną po tym obwodzie.

Wykorzystując rozwiązanie (2.7) oraz zależność (2.9) i wykonując całkowanie przekształcamy wzór (2.15) do postaci

$$\langle \nabla T^d \rangle = \frac{2}{1 - h} \frac{B_1}{a^2} .$$

Podstawiając otrzymane wyrażenie do wzoru (2.14) dostajemy następujący wzór na efektywny współczynnik przewodnictwa:

$$\mu = 1 - 2\pi \cdot \frac{B_1}{G_o} , \qquad (2.16)$$

Wzór ten po raz pierwszy uzyskany przez Rayleigha [5] i powszechnie stosowany w literaturze jest bardzo wygodny w użyciu. Wskutek ortogonalności funkcji trygonometrycznych we wzorze tym nie występują inne współczynniki rozwiązania (2.6) poza współczynnikiem B_1.

Efektywny współczynnik przewodnictwa dla sieci o ustalonej strukturze jest funkcją względnego współczynnika przewodnictwa wtrąceń h oraz koncentracji wtrąceń φ: $\mu = \mu(h,\varphi)$. Jeżeli przewodność wtrąceń i matrycy są sobie równe $\lambda_c = \lambda_d = \lambda$ (h = 1), to $\lambda_{ef} = \lambda$, czyli $\mu(1,\varphi) = 1$, jeżeli natomiast przewodność wtrąceń dąży do nieskończoności h ∞ , to przy maksymalnym upakowaniu $\varphi = \varphi_{max}$, (dla kwadratowej sieci walców $\varphi_{max} = \pi/4$) efektywny współczynnik przewodnictwa też dąży do nieskończoności: $\lim_{h \infty} \mu(h,\varphi_{max}) = \infty$.

Efektywny współczynnik przewodnictwa kompozytu dwuwymiarowego odznacza się specyficzną symetrią, którą wykazał Keller [18] korzystając z własności potencjału zespolonego. W szczególnym przypadku sieci kwadratowej , ze względu na izotropowość efektywnego współczynnika przewodnictwa, symetria Kellera wyraża się prostą zależnością:

http://rcin.org.pl

$$\mu(h,\varphi) \cdot \mu(1/h,\varphi) = 1 \ . \qquad (2.17)$$

Oznacza to, że gdy znamy wartość efektywnej przewodności kompozytu, dla którego $\lambda_d/\lambda_c = h$, łatwo możemy obliczyć efektywną przewodność kompozytu, w którym $\lambda_d/\lambda_c = 1/h$, jako odwrotność poprzedniej wartości.

3. Metody rozwiązywania równań przewodnictwa dla regularnej sieci walców

W przedstawionym wyżej rozwiązaniu równań przewodnictwa dla sieci walców (2.6-9) pozostają do wyznaczenia nieznane współczynniki B_m , co wymaga wprowadzenia dodatkowego warunku, którym jest uwzględnienie oddziaływania pozostałych walców na rozpatrywaną komórkę bazową. Istnieje kilka metod formułuwania tego zamykającego warunku, które poniżej omówimy.

3.1 Metoda Rayleigha

Rayleigh [5] był pierwszym autorem, który wykonał systematyczne obliczenia rozkładu potencjału oraz wyznaczył efektywny współczynnik przewodnictwa w kompozycie, w którym wtrącenia tworzą regularną sieć walców. Zastosował on rozwinięcie multipolowe potencjału (2.6) i (2.7) do sieci wypełniającej obszar nieskończony.

Jako zamykający warunek brzegowy przyjęte zostało założenie, że część potencjału w rozpatrywanej komórce bazowej, nieosobliwa w punkcie $r = 0$, a więc

http://rcin.org.pl

$$\sum_{m=1}^{\infty} A_m r^m \cos m\theta \ , \qquad (3.1.1)$$

jest efektem oddziaływania następujących czynników:

1) Pola zewnętrznego o potencjale

$$T^1 = G_0 \cdot x \ ,$$

2) Łącznego oddziaływania źródeł w pozostałych komórkach związanych z tą częścią potencjału, która jest osobliwa w środku każdej z tych komórek, a więc związana z rozwinięciem względem ρ_n o ujemnym wykładniku,

$$T^2 = \sum_{\{n\}} \sum_{m=1}^{\infty} B_m \cdot \rho_n^{-m} \cdot \cos m\vartheta_n \ . \qquad (3.1.2)$$

Przez ρ_n i ϑ_n oznaczamy współrzędne w układzie biegunowym związanym z n-tą komórką, a sumowanie $\sum_{\{n\}}$ jest rozciągnięte w dwóch kierunkach sieci do nieskończoności, z wyłączeniem komórki centralnej,

$$\sum_{\{n\}} = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty}$$

Przechodząc do zapisu w postaci zespolonej można powyższy bilans $T^0 = T^1 + T^2$ przedstawić w postaci:

$$(A_1 - G_0) \cdot z + \sum_{m=2}^{\infty} A_m \cdot z^m = \sum_{\{n\}} \sum_{m=1}^{\infty} B_m \cdot \zeta_n^{-m} \ , \qquad (3.1.3)$$

gdzie $z = x + i \cdot y = r \cdot e^{i \cdot \theta}$ jest współrzędną zespoloną w układzie związanym z komórką centralną, zaś $\zeta_n = \xi_n + i \cdot \eta_n = \rho_n \cdot e^{i \cdot \vartheta_n}$ w układzie związanym z n-tą komórką.

Za pomocą transformacji $\zeta_n = z - z_n$, gdzie $z_n = x_n + i \cdot y_n$, przy czym x_n , y_n są współrzędnymi kartezjańskimi n-tej komórki, wyrażamy równanie (3.1.3) w układzie współrzędnych (x,y) związanym z komórką centralną. Rozwijając prawą stronę tego równania na szereg potęgowy

http://rcin.org.pl

względem z i przyrównując wyrażenia przy tych samych potęgach po lewej i prawej stronie równania otrzymujemy nieskończony układ algebraicznych równań liniowych,

$$G_0 \cdot \delta_{m,1} - m! \cdot A_m = \sum_{j=1,3..}^{\infty} \frac{(m+j-1)!}{(j-1)!} S_{m+j} \cdot B_j \qquad (3.1.4)$$

gdzie j, n przyjmują wartości nieparzyste, $\delta_{m,1}$ jest symbolem Kroneckera, zaś S_{2k} przedstawia sumę w postaci

$$S_{2k} = \sum_{\{n\}} \frac{1}{(x_n + i \cdot y_n)^{2k}} . \qquad (3.1.5)$$

Wykorzystując zależność (2.8) można z równania (3.1.4) wyeliminować współczynniki A_m i przedstawić (3.1.4) w postaci

$$G_0 \cdot \delta_{m,1} - m! \cdot \frac{B_m}{\alpha \cdot a^{2m}} = \sum_{j=1,3..}^{\infty} \frac{(m+j-1)!}{(j-1)!} S_{m+j} \cdot B_j . \qquad (3.1.6)$$

Suma nieskończona (3.1.5) ma zawsze wartość rzeczywistą i w przypadku siatki kwadratowej wynosi 0 dla k nieparzystych , tak więc mamy: $S_6 = S_{10} = S_{14} = \ldots = 0$. Wynik ten nie stosuje się do sumy S_2 odpowiadającej k = 1, która jest rozbieżna (suma S_2 jest zbieżna warunkowo , co oznacza, że w przypadku sumowania po obszarach o podobnym kształcie granica sumy istnieje i zależy od przyjętego kształtu obszaru zajmowanego przez sieć walców). Sam Rayleigh wykonał to sumowanie dla arbitralnie przyjętego kształtu obszaru nieskończenie wydłużonego w kierunku x uzyskując wartość $S_2 = \pi$, pozostawiając sprawę warunkowej zbieżności tego sumowania nie do końca wyjaśnioną. Było to powodem kwestionowania przez niektórych autorów (por.[19]) poprawności formalizmu Rayleigha.

http://rcin.org.pl

Z trudnością tą zetknęli się także McKenzie, McPhedran i in. [8 - 10]. Wyjaśnili oni, że zależność sumy S_2 od kształtu obszaru ma podstawy fizyczne i wiąże się z występowaniem na jego granicy dodatkowego indukowanego pola G_p, które także zależy od kształtu. Wielkość S_2 rozpatrywana była jako suma dwóch składników , z których jeden ma wartość obliczoną przez Rayleigha [5], zaś wartość drugiego zależy od kształtu obszaru. Wyłączając z członu po prawej stronie równania (3.1.6) zawierającego S_2 składnik zależny od kształtu, który ma wartość $-G_p$ i przenosząc go na lewą stronę autorzy pracy [8] otrzymali tam sumaryczne pole $G = G_0 + G_p$, w które włączyli całą występującą w tym problemie zależność od kształtu. Pozwoliło to rozwiązać układ równań (3.1.6) na współczynniki B_n podstawiając za S_2 wartość obliczoną przez Rayleigha $S_2 = \pi$. Zestawienie wartości sum S_{2k} dla kwadratowych i heksagonalnych sieci walców zawiera praca [9].

Z nieskończonego układu równań (3.1.6) dla m = 1, 2... po odpowiednim obcięciu do układu skończonego można wyznaczyć z wymaganą dokładnością współczynniki B_j dla kompozytu o zadanej gęstości upakowania i własnościach fizycznych, uzyskując na podstawie (2.6 - 2.9) rozkład temperatury wewnątrz i na zewnątrz walca

$$T^c = \sum_{m=1,3\ldots}^{\infty} B_m \left(\frac{1}{\alpha} \cdot \frac{r^m}{a^{2m}} + r^{-m} \right) \cos m\theta \,, \qquad (3.1.7a)$$

$$T^d = \frac{1+\alpha}{\alpha} \cdot \sum_{m=1,3\ldots}^{\infty} B_m \cdot \frac{r^m}{a^{2m}} \cdot \cos m\theta \,. \qquad (3.1.7b)$$

Szczególnie ważna jest znajomość współczynnika B_1, od którego zależy wartość efektywnego współczynnika przewodnictwa. W najprostszym przybliżeniu dipolowym wartość B_1 wynika wprost ze wzoru (3.1.4) dla

http://rcin.org.pl

m = j = 1 . Po uwzględnieniu (2.1) i (2.8) mamy bowiem:

$$B_1/G_0 = \frac{\alpha \cdot \varphi}{\pi \cdot (1 + \alpha \cdot \varphi)}. \qquad (3.1.8)$$

Podstawiając (3.1.8) do (2.16) otrzymujemy wzór na efektywny współczynnik przewodnictwa (por.[10])

$$\mu = 1 - \frac{2\alpha \cdot \varphi}{1 + \alpha \cdot \varphi}, \qquad (3.1.9)$$

który w tej formie znany jest w literaturze pod nazwą wzoru Maxwella Garnetta. Wzór (3.1.9), mający charakter pierwszego przybliżenia, lecz obowiązujący w dość szerokim zakresie zmienności parametrów został otrzymany przez Garnetta bez wprowadzania założeń o strukturze sieci i obowiązuje dla sieci makroskopowo jednorodnych o dowolnej strukturze. Przekształcając wzór (3.1.9) możemy go sprowadzić do innej postaci, znanej pod nazwą wzoru Clausiusa-Mosottiego stosowanego do obliczania stałej dielektrycznej [15]:

$$\frac{\mu - 1}{\mu + 1} = \varphi \cdot \frac{h - 1}{h + 1} \qquad (3.1.10)$$

Obszerna dyskusja przybliżenia Clausiusa-Mosottiego (Maxwella Garnetta) wraz z szeregiem interesujących odniesień historycznych zawarta jest w artykule przeglądowym Landauera [23].

Dokładność wzoru (3.1.9) zależy od zakresu wartości argumentów h i φ . Porównując wyniki uzyskane według tego wzoru z wynikami zestawionymi w tabeli 3.1 można stwierdzić, że błąd poniżej 10^{-3} otrzymujemy dla h = 2 w zakresie $\varphi \leq 0.5$, natomiast dla $h \to \infty$, w zakresie znacznie mniejszym $\varphi \leq 0.2$. Dla wyższych wartości φ należy brać większą liczbę równań układu (3.1.6). W.T.Perrins i in. [9] dla

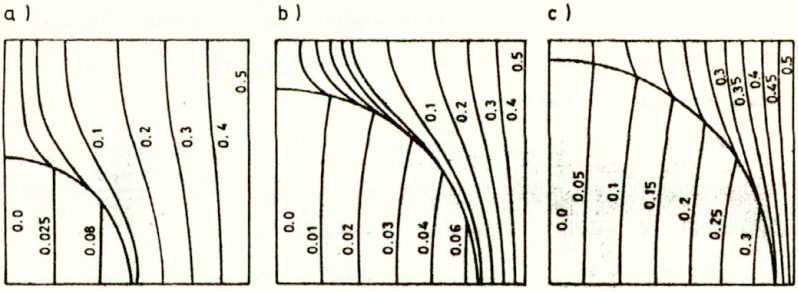
http://rcin.org.pl

układu trzech równań otrzymali analityczne wyrażenie na efektywną przewodność

$$\mu = 1 - \frac{2\alpha\varphi}{1 + \alpha\varphi - \dfrac{0.305827\cdot\varphi^4}{1/\alpha^2 - 1.402958\cdot\varphi^8} - 0.013362\cdot\varphi^8\cdot\alpha^2} \qquad (3.1.11)$$

Dla φ bliskich φ_{max} liczba równań układu (3.1.6), które należy brać pod uwagę gwałtownie rośnie. Perrins, McKenzie i McPhedran [9] rozwiązali układ równań (3.1.6) o rozmiarach 60 × 60 w szerokim zakresie wartości bezwymiarowego współczynnika h oraz φ . Otrzymane wyniki zawiera tabela.3.1. W przypadku $h \to \infty$ nie udało się im uzyskać rozwiązania dla $\varphi > 0.78$ mimo zastosowania w tym ostatnim przypadku układu równań o rozmiarach 100 × 100. Dla wartości φ bliskich φ_{max} i dużych wartości h metoda Rayleigha zawodzi, stąd powstaje potrzeba odrębnego potraktowania problemu przewodnictwa kompozytu w przypadku asymptotycznym $h \to \infty$ i $\varphi \to \pi/4$. Do sprawy tej powrócimy w rozdz.4

Znajomość współczynników B_j pozwala także na wyznaczenie pola temperatury zgodnie z (3.1.7). Na rys.3.1 podano otrzymane w [9] izotermy dla wybranych wartości φ i h .



Rys.3.1 Izotermy dla kwadratowej sieci walców [9]
a) h = 8, φ = 0.2, b) h = 4, φ = 0.5, c) h = 30, φ = 0.65.

http://rcin.org.pl

Tab. 3.1. Wartości efektywnego współczynnika przewodnictwa dla kwadratowej sieci walców dla wybranych wartości h i φ, według W.T.Perrinsa i in.[9].

φ	h						
	2	3.5	5	10	20	50	∞
0.1	1.0690	1.1176	1.1429	1.1782	1.1990	1.2126	1.2222
0.2	1.1429	1.2500	1.3078	1.3915	1.4421	1.4760	1.5003
0.3	1.2223	1.4004	1.5007	1.6520	1.7472	1.8125	1.8602
0.4	1.3080	1.5732	1.7307	1.9806	2.1459	2.2633	2.3510
0.5	1.4010	1.7756	2.0130	2.4155	2.7011	2.9146	3.0802
0.55	1.4507	1.8912	2.1813	2.6948	3.0771	3.3732	3.6094
0.6	1.5028	2.0190	2.3744	3.0372	3.5618	3.9881	4.3418
0.64	1.5464	2.1319	2.5518	3.3764	4.0715	4.6674	5.1844
0.67	1.5803	2.2240	2.7020	3.6854	4.5659	5.3623	6.0875
0.7	1.6154	2.3239	2.8709	4.0617	5.2137	6.3359	7.4327
0.72	1.6394	2.3954	2.9964	4.3655	5.7806	7.2573	8.8063
0.74	1.6641	2.4716	3.1348	4.7303	6.5263	8.5910	11.0062
0.75	1.6767	2.5117	3.2099	4.9443	7.0041	9.5355	12.7511
0.76	1.6894	2.5533	3.2900	5.1867	7.5916	10.8187	15.4412
0.77	1.7023	2.5965	3.3747	5.4674	8.3505	12.7411	20.4334
0.78	1.7154	2.6415	3.4663	5.8037	9.427	16.310	35.934
0.785	1.7220	2.6648	3.5150	6.004	10.23	20.5	-
$\pi/4$	1.7226	2.6667	3.5190	6.022	10.31	21.1	-

3.2 Metoda źródeł indukowanych

Metoda ta została po raz pierwszy zastosowana do wyznaczenia efektywnej przewodności kompozytów o wtrąceniach w postaci periodycznej sieci kul przez Zuzovsky'ego i Brennera [11]. Nawiązuje ona do prac Hasimoto [20] i Saffmana [21], którzy badali opływ kul przy małych liczbach Reynoldsa. Sangani i Acrivos [12] zmodyfikowali metodę Zuzovsky'ego i Brennera wprowadzając znaczne uproszczenia do strony rachunkowej i korygując błędy numeryczne. Dla kompletności przeglądu włączyliśmy wymienione prace do naszego artykułu, choć dotyczą one sieci kul, gdyż w literaturze brak jest analogicznego rozwiązania dotyczącego

http://rcin.org.pl

sieci walców.

Do istoty omawianej metody należy założenie, że szukane rozwiązanie dla nieskończonej regularnej sieci może być rozpatrywane jako suma dwóch składników. Jeden z nich stanowi potencjał makroskopowy T^{m}, który zależy od zewnętrznego pola, zaś drugi składnik T^{p} jest potencjałem okresowym, zależnym od struktury komórki oraz własności fizycznych kompozytu. W pracy [11] rozważano pole makroskopowe o stałym w przestrzeni gradiencie temperatury. W istocie przy umieszczeniu bryły kompozytu o dowolnym kształcie w polu potencjalnym otrzymujemy wewnątrz bryły pole makroskopowe zwane w elektrostatyce polem Maxwella, o gradiencie niejednorodnym, zależnym od kształtu bryły. Pole jednorodne można uzyskać w szczególnym przypadku, umieszczając w polu pierwotnie jednorodnym elipsoidę. Jednakże nawet w przypadku pola niejednorodnego, gdy rozmiar komórki centralnej jest mały w porównaniu z rozmiarem obszaru zajętego przez sieć można z dobrym przybliżeniem, w otoczeniu komórki, traktować gradient pola $\mathbf{G}$ jako stały.

Rozkładając całkowity potencjał na część makroskopową i okresową możemy napisać

$$T = T^{m} + T^{p} , \tag{3.2.1}$$

gdzie

$$T^{m} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{G} , \tag{3.2.2}$$

zaś T^{p} jako funkcja przestrzennie okresowa spełnia warunek

$$T^{p}(\mathbf{r}) = T^{p}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{n}) , \tag{3.2.3}$$

gdzie $\mathbf{r}_{n}$ określa położenie środka kuli

$$\mathbf{r}_{n} = n_{1}\cdot\mathbf{I}_{1} + n_{2}\cdot\mathbf{I}_{2} + n_{3}\cdot\mathbf{I}_{3} . \tag{3.2.4}$$

Symbole $\mathbf{I}_{1},\mathbf{I}_{2},\mathbf{I}_{3}$ oznaczają wektory jednostkowe sieci, zaś n_{1},n_{2},n_{3} są

http://rcin.org.pl

liczbami całkowitymi $0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

Pierwszym krokiem jest tu znalezienie okresowego rozwiązania opisującego rozkład temperatury w materiale matrycy, rozciągniętym na cały obszar kompozytu, włączając w to obszar zajęty przez kule. W tym celu kule w sieci zostają zastąpione przez rozkłady multipoli zlokalizowanych w środkach kul. Podobna metoda , lecz ograniczona do pojedynczych ładunków i dipoli została zastosowana do badania elektrostatycznych oddziaływań w układach periodycznych [22]. Wykorzystując układ równań (1.1-2) i zachowując po prawej stronie równania (1.1) człon źródłowy możemy zapisać równania przewodnictwa dla matrycy w następującej postaci:

$$\nabla^2 T^c = \sum_{\{n\}} \Big[\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \bullet H_1 + \nabla^2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \vdots H_2 + \nabla^3\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \vdots\bullet H_3 \Big] \qquad (3.2.5)$$

gdzie δ jest funkcją Diraca , $\nabla^m = \nabla\nabla\ldots\nabla$ jest m razy zastosowanym operatorem gradientu, pionowe układy kropek oznaczają sukcesywne mnożenie skalarne, a sumowanie $\sum_{\{n\}}$ jest rozciągnięte we wszystkich trzech kierunkach sieci do nieskończoności,

$$\sum_{\{n\}} = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \sum_{n_3=-\infty}^{\infty} .$$

Symbolem H_m oznaczony jest nieznany tensor rzędu m zależny od geometrycznych i fizycznych własności sieci, to znaczy od φ i h . Z warunków symetrii wynika, że tensor H_m dla m parzystych jest równy zeru,

$$H_{2k} = 0, \qquad k = 1,2\ldots . \qquad (3.2.6)$$

Należy zwrócić uwagę, że w omawianej metodzie problem fizyczny jest

http://rcin.org.pl

opisywany przez równanie Poissona (3.2.5), a nie Laplace'a (2.3). W ten sposób oddziaływanie komórek sieci na rozwiązanie w rozpatrywanej komórce bazowej zostało włączone w równanie przewodnictwa, zastępując postulat (3.1.3) w metodzie Rayleigha.

Podstawiając (3.2.1) do (3.2.5) i wykorzystując (3.2.6) rugujemy z równania (3.2.5) składnik makroskopowy, otrzymując równanie dla składnika okresowego

$$\nabla^2 T^p = \sum_{\{n\}} \left[\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)\bullet\mathbf{H}_1 + \nabla^3\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)\vdots\mathbf{H}_3 + \ldots \right] . \qquad (3.2.7)$$

Autorzy pracy [11] rozwijają składową okresową temperatury na szereg Fouriera

$$T^p = \sum_{\{m\}} T_m \cdot \exp(-2\pi i \cdot \mathbf{k}_m \bullet \mathbf{r}) , \qquad (3.2.8)$$

gdzie

$$\mathbf{k}_m = \frac{1}{\tau_0} \left(m_1 \bullet \mathbf{s}_1 + m_2 \bullet \mathbf{s}_2 + m_3 \bullet \mathbf{s}_3 \right), \quad m_1, m_2, m_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

τ_0 oznacza objętość bazowej komórki, a $\mathbf{s}_k$ są odwrotnymi wektorami bazowej komórki sieci, zdefiniowanymi jako zorientowane powierzchnie boczne komórki podstawowej

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{I}_i \times \mathbf{I}_j .$$

Podstawiając (3.2.8) do (3.2.7) otrzymano w wyniku dalszych operacji rachunkowych, których szczegóły znaleźć można w pracy [11] formalne rozwiązanie równania (3.2.7) w postaci:

$$T^p = T^0 - \frac{1}{4\pi} \left[\nabla T_0 \bullet \mathbf{H}_1 + \nabla^3 T_0 \vdots \mathbf{H}_3 + \ldots \right] , \qquad (3.2.9)$$

gdzie T^0 jest pewną stałą temperaturą odniesienia.

http://rcin.org.pl

Funkcja T_0 zdefiniowana w następujący sposób:

$$T_0 = \frac{1}{\pi\tau_0} \sum_{\substack{\{m\} \\ k_m \neq 0}} k_m^{-2} \cdot \exp(-2\pi i \cdot \mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r}) ,$$

spełnia równanie różniczkowe

$$\nabla^2 T_0 = -4\pi \left[\sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) - \frac{1}{\tau_0} \right],$$

Funkcja T_0 znana jest w literaturze jako potencjał Wignera [22]. Jej postać zależy od struktury geometrycznej sieci i opisujące oddziaływanie innych komórek sieci na rozpatrywaną komórkę bazową.

Autorzy prac [11], [12], [22] rozwijają funkcję T_0 dla sieci trójwymiarowej w szereg wokół punktu $\mathbf{r}_n = 0$:

$$T_0 = \frac{1}{r} + \frac{2\pi r^2}{3} + \sum_{\substack{j>0 \\ m}} \left[\frac{4\pi}{2j+1} \right]^{1/2} \cdot A_{jm} r^j Y_{jm}(\theta,\phi),$$

gdzie funkcje $Y_{lm}(\theta,\phi)$ są harmonikami sferycznymi [24]. Współczynniki A_{lm} muszą być tak dobrane, aby potencjał spełniał warunki symetrii w sieci. Opis metody wyznaczenia współczynników i ich wartości dla pierwszych wyrazów zawiera praca [22].

Wykorzystując własności symetrii tensora H Zuzowsky i Brenner [11] przekształcili wyrażenie (3.2.9) do postaci

$$T^p = D \cdot T_0 , \qquad (3.2.10)$$

gdzie D jest operatorem różniczkowym

$$D = \sum_{m+n+p=1}^{\infty} E_{mnp} \cdot \frac{\partial^{m+n+p}}{\partial x^m \partial y^n \partial z^p} ,$$

zawierającym jako nieznane współczynniki elementy macierzy trzeciego rzędu E_{mnp}. Sangani i Acrivos [12] uprościli to wyrażenie, zastępując

http://rcin.org.pl

między innymi współczynniki E_{mnp} elementami macierzy kwadratowej.

Dalsze postępowanie jest podobne jak w metodzie Rayleigha. Wykorzystując rozwiązanie (3.2.9) dla T^p , zależność (3.2.1) , rozwiązanie ogólne przewodnictwa dla kuli oraz warunki brzegowe (2.4-5) otrzymano nieskończony układ równań algebraicznych na współczynniki rozwiązań. Szczegóły obliczeń oraz wyniki przedstawione zostały w artykułach [11-12] i nie będziemy ich tu przytaczać, zwrócimy jedynie uwagę na ten aspekt wymienionych prac, który wiąże się ze zjawiskiem przewodnictwa w interesującej nas dwuwymiarowej sieci walców.

Sangani i Acrivos [12] podają także ogólną postać operatora różniczkowego D ze wzoru (3.2.10) dla przypadku dwuwymiarowego

$$D = \sum_{m=1,3..}^{\infty} E_m \cdot \frac{\partial^m}{\partial x^m} , \qquad (3.2.11)$$

gdy gradient pola zewnętrznego jest równoległy do kierunku x . Potencjał Wignera T_0 występujący w wyrażeniu (3.2.10) na składową okresową temperatury T^p jest w przypadku dwuwymiarowym określony wzorem (5.3). Wyrażenie na ten potencjał wyprowadzili Cichocki i Felderhof [14], wykorzystując otrzymany wynik do wyznaczenia elektrostatycznych oddziaływań w periodycznych układach dwuwymiarowych. Sangani i Acrivos poprzestali na podaniu wzoru (3.2.11) nie podejmując obliczeń dla sieci walców. Zadanie to zostało wykonane przez autorów niniejszego artykułu i będzie przedstawione w dalszej jego części (rozdział 5 i następne). Obecnie jedynie wykorzystamy wzory (3.2.10-11) oraz (5.3) , aby wykazać związek między metodą źródeł indukowanych a poprzednio omówioną metodą Rayleigha.

Podstawiając (5.3) i (3.2.11) do (3.2.10) przy założeniu q = 1

http://rcin.org.pl

i wykonując kolejne różniczkowania, a następnie porządkując otrzymane wyrażenie względem potęg promienia r i cosinusów otrzymujemy wyrażenie na składową okresową temperatury

$$T^p = \left[(E_1 \pi + 4!E_3A_4 + 8!E_7A_8 + \ldots)\, r - \frac{E_1}{r}\right] \cos\theta +$$

$$+ \left[\frac{1}{3!}(4!E_1A_4 + 8!E_5A_8 + 12!E_9A_{12} + \ldots)\, r^3 - \frac{2!E_3}{r^3}\right] \cos 3\theta$$

$$+ \left[\frac{1}{5!}(8!E_3A_8 + 12!E_7A_{12} + 16!E_{11}A_{10} + \ldots)\, r^5 - \frac{4!E_5}{r^5}\right] \cos 5\theta$$

$$+ \ldots . \qquad (3.2.12)$$

Zapisując to rozwiązanie w sposób skrócony

$$T^p = \sum_{m=1,3..}^{\infty} (P_m r^m + Q_m r^{-m}) \cos m\theta , \qquad (3.2.13)$$

zauważmy, że ma ono strukturę podobną do rozwiązania (2.6). W celu bezpośredniego porównania obu wyrażeń wydzielmy z rozwiązania Rayleigha część okresową. Otrzymamy :

$$P_m = A_m - G_0 \cdot \delta_{m,1} =$$

$$\pi E_m \delta_{m,1} + \frac{1}{m!} \sum_{j=1,3.}^{\infty} (j+m)!\, E_j A_{j+m} , \qquad (3.2.14)$$

$$Q_m = B_m = -(m-1)!\, E_m , \qquad (3.2.15)$$

gdzie

$$A_{j+m} = 0, \quad \text{dla } j+m = 2(2k-1), \qquad k = 1,2,\ldots$$

Eliminując z (3.2.14) E_1 za pomocą (3.2.15) i porównując otrzymane wyrażenie z równaniem (3.1.6) zauważamy, że są one tożsame, a między współczynnikami rozwinięcia Wignera A_m i sumami Rayleigha S_m zachodzi związek

http://rcin.org.pl

związek

$$A_m = \frac{S_m}{m},$$

przy czym $S_2 = \pi$. Widać więc, że metoda Rayleigha i metoda źródeł indukowanych przy swoim odrębnym formalizmie są równoważne.

3.3 Metoda kollokacji brzegowej

Do wyznaczenia współczynników B_m w rozwiązaniach (3.1.6) i (3.1.7) niektórzy autorzy stosowali metodę kollokacji brzegowej. Przy zastosowaniu tej metody zamiast spełnienia warunku brzegowego na całym brzegu komórki, spełnia się ten warunek w pewnej liczbie z góry wybranych punktów brzegu komórki. Metoda ta została zastosowana między innymi w numerycznych obliczeniach Kellera i Sachsa [25] oraz w obliczeniach typu analitycznego innych autorów. Obszerne omówienie metody kollokacji brzegowej na licznych przykładach z różnych dziedzin mechaniki ośrodków ciągłych, ze szczególnym uwzględnieniem materiałów kompozytowych zawiera praca Kołodzieja [13].

Warunki brzegowe wynikające z symetrii sieci to przyjęcie izotermy na brzegu komórki prostopadłym do gradientu pola $x = 1/2$, oraz adiabaty na brzegu do tego pola równoległym $y = 1/2$ (rys.3). Wykorzystując równanie (3.1.6) i obliczając stąd pochodną

$$\frac{\partial T^c}{\partial y} = \frac{\partial T^c}{\partial r}\cdot\sin\theta + \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial T^c}{\partial y}\cdot\cos\theta,$$

możemy warunki brzegowe zapisać w następujący sposób:

$$T^c\Big|_{x=\frac{1}{2}} = \sum_{k=1,3..}^{\infty} B_k\cdot\left[\frac{1}{\alpha}\frac{R^k}{a^{2k}} + R^{-k}\right]\cos k\theta = \frac{1}{2}, \qquad (3.3.1)$$

http://rcin.org.pl

$$\left.\frac{\partial T^c}{\partial y}\right|_{y=\frac{1}{2}} = \sum_{k=1,3..}^{\infty} k \cdot B_k \left[\frac{1}{\alpha} \frac{k-1}{2k} \sin (k-1)\theta + \right. \tag{3.3.2}$$

$$\left. + R^{-(k-1)} \sin (k+1)\theta \right] .$$

Zazwyczaj przyjmuje się układ N równoodległych punktów kollokacji na brzegu x = 1/2 oraz N-1 na brzegu y = 1/2, gdyż w ostatnim punkcie (0,1/2) warunek (3.3.2) jest tożsamościowo spełniony. W obciętych w ten sposób szeregach (3.3.1) i (3.3.2) występuje M = 2N-1 niezależnych współczynników X_m spełniających układ równań

$$\sum_{m=1}^{\infty} P_{im} \cdot X_m = Q_i , \qquad i=1,2,...,2N-1 , \tag{3.3.3}$$

gdzie $X_m = B_k$, $m=(k+1)/2$, i jest wskaźnikiem punktu kollokacji, zaś współczynniki P_{im} oraz Q_i w oczywisty sposób wynikają z (3.3.1) i (3.3.2) .

Równanie (3.3.3) jest więc odpowiednikiem równania (3.1.4) z metody Rayleigha. Choć formalnie oba podejścia można uważać za równoważne, to nie wydaje się , aby metoda kollokacji mogła być uważana za korzystniejszą. Przedstawione w pracy [13] wyniki wskazują, że metoda ta jest mniej stabilna i prowadzi do kryzysu numerycznego, nawet przy niewielkiej liczbie punktów kollokacji. Z tego powodu nie można przyjmować do obliczeń zbyt wysokiej przewodności walców i zbyt gęstego ich upakowania. Z przytoczonych przez Kołodzieja danych widać, że nie udało się tam przekroczyć parametrów h = 20 i φ = 0.77, przez co uzyskane wyniki nie dorównują przytoczonym w punkcie 3.1 wynikom Perrinsa i in [9].

http://rcin.org.pl

Na zakończenie jako ciekawostkę można podać liczbowe porównanie metody kollokacji z metodą Rayleigha w najprostszym dipolowym przybliżeniu. Współczynnik B_1 obliczony z równania (3.3.1), przy uwzględnieniu zależności $\varphi = \pi \cdot a^2$ wynosi

$$B_1 = \frac{1}{4\cos^2\theta + \frac{1}{\alpha \cdot \varphi}} . \qquad (3.3.4)$$

Porównując (3.3.4) i (3.1.8) widzimy, że wzory te są równoważne, gdy $\cos^2\theta = \pi/4$, to jest gdy punkt kollokacji jest wybrany na brzegu $x = 1/2$, dla kąta $\theta \cong 27.6^\circ$.

4. Efektywny współczynnik transportu w asymptotycznych warunkach gęsto upakowanych walców o wysokiej przewodności

Badania efektywnego współczynnika transportu w kompozytach omówione w poprzednich rozdziałach doprowadziły do uzyskania rozkładu potencjału w bazowej komórce oraz wyznaczenia efektywnego współczynnika transportu kompozytu w szerokim zakresie koncentracji wtrąceń φ oraz bezwymiarowego współczynnika przewodnictwa kompozytu h . Jednakże w przypadkach skrajnych, gdy układ dąży do stanu maksymalnego upakowania $\varphi \to \varphi_{max}$, zaś przewodność wtrąceń do nieskończoności powstają trudności z uzyskaniem rozwiązania. Wyniki otrzymane za pomocą rozwinięć multipolowych niskiego rzędu, jak np. wzór Maxwella Garnetta (3.1.9) dają w tych warunkach wyniki niepoprawne, gdyż podstawiwjąc do tego wzoru $\alpha = -1$ odpowiadające nieskończonej wartości h otrzymujemy

http://rcin.org.pl

$$\mu = 1 + \frac{2\varphi}{1 - \varphi}, \qquad (4.1)$$

skąd wynika, że m dąży do nieskończoności, przy $\varphi \to 1$. Jest to wynik błędny, gdyż maksymalna wartość φ prowadząca w tym przypadku do nieskończonej efektywnej przewodności wynosi $\varphi_{max} = \pi/4$. Istnieje zatem konieczność, aby wraz ze wzrostem φ stosować rozwinięcia coraz wyższego rzędu. Napotkać tu jednak można na ograniczenie wynikające z rosnących błędów obliczeń, gdy liczba równań na współczynniki (3.1.4) jest zbyt wysoka [9], w związku z czym powstaje konieczność innego potraktowania problemu.

Keller [26] rozpatrywał przewodność elektryczną kompozytu złożonego z kul lub walców, które są doskonałymi przewodnikami ($h \to \infty$) lub doskonałymi izolatorami ($h = 0$). W pierwszym przypadku zostało przyjęte założenie, że prąd płynie przez wąską szczelinę między wtrąceniami, wskutek czego efektywna przewodność kompozytu jest zdeterminowana przez oporność szczeliny. W ten sposób Keller otrzymał przybliżony wzór na przewodność układu złożonego z dwóch równoległych walców o promieniu a i odległości między osiami l, gdzie $(l - a)/l << 1$. Tak otrzymaną przewodność przyjął za efektywną przewodność kompozytu. Wprowadzając bezwymiarową wielkość geometryczną

$$c = \frac{1}{(l^2 - a^2)^{1/2}} = \frac{1}{(1 - 4\varphi/\pi)^{1/2}} \qquad (4.2)$$

można zapisać wzór Kellera w prostej postaci:

$$\mu_{\infty} \cong \pi \cdot c \,. \qquad (4.3)$$

W tej samej pracy [26] Keller otrzymał wzór na przewodność efektywną kompozytu o zerowej przewodności walców ($h = 0$) :

http://rcin.org.pl

$$\mu_0 \cong \frac{1}{\pi \cdot c} \quad . \qquad (4.4)$$

Należy tu zwrócić uwagę, że wyrażenia (4.3) i (4.4) spełniają zależność Kellera (2.19).

W późniejszym czasie O'Brien [27],[28] uogólnił wyniki Kellera na przypadek kompozytu o dużej, lecz skończonej przewodności walców h otrzymując wzór

$$\mu \cong \frac{2\pi}{2/c + 4 \cdot \ln(h)/h} \quad . \qquad (4.5)$$

Widać, że dla $h \to \infty$ wzór (4.5) przyjmuje postać (4.1). W latach osiemdziesiątych cytowana uprzednio grupa badaczy z Uniwersytetu w Sydney opublikowała serię prac [29-32] dotycząca efektywnego transportu w kompozytach w warunkach asymptotycznych. Podobnie jak Keller przyjęli oni upraszczające założenie, że przy wysokim przewodnictwie walców i ich gęstym upakowaniu przewodność nieskończonej sieci walców może być z wystarczająco dobrym przybliżeniem wyznaczona przez przewodność między dwoma walcami. Zagadnienie to zostało rozwiązane znaną z elektrostatyki metodą obrazów [33]. Nie wchodząc w szczegóły rachunków przytoczymy końcowy wzór na współczynnik multipolowego rozwinięcia przy ujemnym wykładniku w rozwiązaniu (2.9)

$$B_m^* = K \cdot a_\infty^m \cdot \upsilon^s \cdot \frac{\Gamma(m) \cdot \Gamma(S + 1)}{\Gamma(S + m + 1)} \cdot F(S,m; S + m + 1; \upsilon) \, , \qquad (4.6)$$

gdzie K jest dowolnym czynnikiem skalującym, Γ oraz F oznaczają odpowiednio funkcję gamma i funkcję hipergeometryczną, zaś pozostałe wielkości są określone następująco

$$a_\infty = \frac{c - 1}{2c} \, , \qquad \upsilon = \frac{c - 1}{c + 1} \, , \qquad (4.7)$$

http://rcin.org.pl

$$S = \frac{\ln \dfrac{h+1}{h-1}}{\ln \dfrac{c+1}{c-1}} \cong \frac{c}{h} . \qquad (4.8)$$

Jeżeli przyjąć, że współczynnik B^*_m obliczony dla pary walców jest w asymptotycznych warunkach przybliżeniem odpowiedniego współczynnika B_m dla regularnej sieci walców, to można wykorzystać wzór (4.6) do oszacowania wpływu multipoli wyższego rzędu na rozwiązanie układu równań (3.1.6). W tym celu w artykule [31] została wprowadzona liczba R^*_m wyrażająca stosunek danego współczynnika B^*_m do współczynnika dipolowego B_1,

$$R^*_{2m-1} = \frac{B^*_{2m-1}}{B_1} = a_\infty \cdot \frac{\Gamma(2m-1)\cdot\Gamma(S+2)}{\Gamma(S+2m)} \cdot \frac{F(S,2m-1;S+2m;\upsilon)}{F(S,1;S+2;\upsilon)} . \qquad (4.9)$$

Za pomocą (4.9) można równanie (3.1.6) zapisać w postaci

$$G_0 \cdot \delta_{m,1} - (2m-1)! \cdot \frac{B_{2m-1}}{\alpha \cdot a^{4m-2}} = \sum_{j=1}^{J} \frac{(2m+2j-3)!}{(2j-2)!} \cdot S_{2m+2j-2} \cdot B_{2j-1} +$$

$$+ B_1 \cdot \left(S_{2m} + \sum_{j=J+1}^{\infty} \frac{(2m+2j-3)}{(2j-2)!} \cdot S_{2m+2j-2} \cdot R^*_{2j-1} \right) \qquad (4.10)$$

W ten sposób wystarczy rozwiązać układ J równań , gdzie liczba J jest tak dobrana, aby dokładność rozwiązania była wystarczająca, zaś wkład multipoli wyższego rzędu w rozwiązanie (dla j > J) jest uwzględniony przez wyrażenie w nawiasie po prawej stronie równania (4.10), zawierające współczynnik R^*_{21-1} . Występujący tam szereg jest szybko zbieżny, ze względu na czynnik a_∞^{2m-2} obecny w (4.9). Suma szeregu może być łatwo wyznaczona z zadaną dokładnością. W artykule [31] przedstawione zostały wyniki obliczeń współczynnika B_1, przez który

http://rcin.org.pl

wyraża się efektywny współczynnik transportu (2.18), w zależności od parametru geometrycznego c (4.2). Obliczenia zostały doprowadzone do bardzo wysokiej wartości $c = 10^5$ i mogły być dalej kontynuowane. Wartość ta odpowiada upakowaniu walców (por(4.2))

$$\frac{\varphi_{max} - \varphi}{\varphi_{max}} = \frac{1}{c^2} = 10^{-10}.$$

W artykule [31] wyprowadzony został także przybliżony wzór na asymptotyczną wartość współczynnika B_1. Nieokreślona do tej pory stała K we wzorze (4.6) została przy tym wyznaczona z warunku brzegowego $T^c(r,\theta) = 1/2$, dla $r = 1/2$ i $\theta = 0$, podobnie jak w metodzie kollokacji brzegowej. W rezultacie otrzymano wzór

$$B_1 = \frac{-c/2 \cdot (1 - 1/c)}{2S \cdot \ln(c) + 1 - 2S \cdot [\gamma + \psi(1 + S)]}, \qquad (4.11)$$

gdzie ψ oznacza funkcję digamma , zaś $\gamma = 0.5772...$ jest stałą Eulera. Wzór ten w niektórych szczególnych przypadkach można sprowadzić do prostszej postaci. I tak, dla $S << 1$ ($h >> c >> 1$), $\psi(1 + S) \cong -\gamma$, wzór (4.11) przyjmuje postać

$$B_1 \cong \frac{-c/2 \cdot (1 - 1/c)}{1 + 2 \cdot c/h \cdot \ln(c)}. \qquad (4.12)$$

Dla $h \to \infty$ wzór (4.12) ulega dalszemu uproszczeniu

$$B_1 = -c/2 \cdot (1 - 1/c). \qquad (4.13)$$

Podstawiając (4.13) do (2.18) otrzymujemy wzór na efektywny współczynnik transportu

$$\mu \cong 1 + \pi c \cdot (1 - 1/c), \qquad (4.14)$$

który dla bardzo dużych wartości c można zapisać prościej w postaci

http://rcin.org.pl

$$\mu \cong 1 + \pi \cdot c \cong \pi \cdot c, \tag{4.15}$$

uzyskanej przez Kellera [26] (por.(4.3)).

W drugim skrajnym przypadku, gdy $S >> 1$, ($c >> h >> 1$) , mamy zależność asymptotyczną $\psi(1 + S) \cong \ln(S) + 1/2S$. W ten sposób wzór (4.11) przekształca się do postaci

$$B_1 \cong - \frac{h}{4 \cdot (\ln h - \gamma)} , \tag{4.16}$$

a efektywny współczynnik transportu wyraża się wzorem

$$\mu \cong 1 + \frac{\pi}{2} \cdot \frac{h}{\ln h - \gamma} . \tag{4.17}$$

Można też pokazać, że jeśli we wzorze Maxwella Garnetta w postaci asymptotycznej (4.1) wyrazimy φ przy pomocy parametru c z wzoru (4.2) i rozwiniemy otrzymane wyrażenie w szereg potęgowy względem c , w otoczeniu $c = 1$, to dostaniemy wzór

$$\mu \cong 1 + \pi \cdot (c - 1) + \ldots,$$

który z dokładnością do liniowego wyrazu pokrywa się ze wzorem asymptotycznym (4.14).

http://rcin.org.pl

Część II.

ZASTOSOWANIE UŁAMKOW ŁANCUCHOWYCH DO WYZNACZANIA EFEKTYWNEGO WSPOŁCZYNNIKA PRZEWODNICTWA

5. Funkcje bazowe dla regularnej sieci kwadratowej

W metodzie Rayleigha poszukuje się rozwiązań w bazie, której elementami są potencjały pojedyńczych multipoli umieszczonych w środku jednej komórki (w ośrodku nieskończonym). Funkcje te nie spełniają oczywiście warunku na brzegu komórki, narzuconego przez nieskończoną regularną sieć. Dopiero przy poszukiwaniu rozwiązań tak dobieramy współczynniki rozwinięcia w bazie, by spełnić ten warunek. Wygodnie jest jednak obrać taką bazę, której wszystkie elementy spełniają już jednorodne warunki brzegowe na brzegu komórki. Można to zrobić biorąc za punkt wyjścia potencjał Wignera używany w fizyce ciała stałego do opisu tzw. ciała Wignera. W naszym przypadku odpowiednikiem ciała Wignera jest nieskończony układ punktowych źródeł ciepła o wydajności q, umieszczonych w sieci kwadratowej o okresie l, którym towarzyszą źródła rozmyte o równomiernej gęstości $\tau = \frac{q}{l^2}$, tak że źródła dodatnie i ujemne znoszą się wzajemnie. Ze względu na okresowość pola temperatury i kwadratowy układ sieci pochodna normalna temperatury na brzegu komórki znika:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla T = 0 \,. \tag{5.1}$$

W (5.1) $\mathbf{n}$ jest wektorem jednostkowym normalnym do brzegu komórki. Temperatura generowana przez taki układ źródeł spełnia równanie Poissona (5.2) :

http://rcin.org.pl

$$\lambda \cdot \nabla^2 T = -2\pi q \cdot \left(\delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{l^2} \right) \qquad (5.2)$$

z warunkiem brzegowym (5.1) . W (5.2) $\delta(\mathbf{r})$ oznacza δ Diraca. Rozwiązanie równania (5.2) z warunkiem brzegowym (5.1), które w dalszym ciągu będziemy oznaczać przez $T_0(\mathbf{r})$, podali Cichocki i Felderhof [14]:

$$T_0(\mathbf{r}) = q \cdot \left[-\ln r + \frac{1}{2} \pi r^2 + \sum_{m=4}^{\infty} A_m r^m \cos m\theta \right] \qquad (5.3)$$

wyznaczając współczynniki A_m drogą sumowania po nieskończonej sieci (autorzy [14] rozważali nie źródła ciepła, lecz ładunki elektryczne). Ponieważ $T_0(\mathbf{r})$ ma własności niezmiennicze względem obrotu układu współrzędnych o $\frac{\pi}{2}$, przeto wskaźnik sumowania m w (5.3) może przyjmować jedynie wartości równe wielokrotnościom 4 . Pierwszy wyraz w nawiasie po prawej stronie (5.3) wyraża wpływ źródła umieszczonego w środku danej komórki, drugi jest generowany przez tło, zaś suma nieskończona - przez źródła umieszczone w pozostałych komórkach. Funkcja (5.3) , którą autorzy [14] nazywają potencjałem Wignera może posłużyć do konstrukcji nowej bazy funkcyjnej, na której można rozpinać rozwiązanie opisujące temperaturę w komórce na zewnątrz walca i wygodniejszej od klasycznych multipoli.

Multipol k-tego rzędu zawiera 2^k źródeł punktowych i jest określony przez wydajność q_k , będącą skalarem oraz przez k wektorów jednostkowych $\mathbf{n}_s$, s = 1, 2,..., k , określających własności kierunkowe multipola (por. np. [34]). Pole multipola jest proporcjonalne do k-tej pochodnej kierunkowej pola pojedyńczego źródła, odpowiednio w kierunkach $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \ldots, \mathbf{n}_k$:

$$T_k(\mathbf{r}) = q_k \cdot \left[\prod_{s=1}^{k} (-1)^k (\mathbf{n}_s \cdot \nabla) \right] T_0(\mathbf{r}) , \quad k = 1, 2, \ldots \qquad (5.4)$$

http://rcin.org.pl

W klasycznym multipolu $T_0(r)$ jest polem pojedyńczego źródła w obszarze nieskończonym; dla płaszczyzny mamy $T_0(r) = -\ln r$. Można rozważać pole nieskończonego układu identycznych multipoli rzędu k , umieszczonych w węzłach sieci kwadratowej. Aby wyznaczyć takie pole wystarczy podziałać operatorem z prawej strony równości (5.4) na funkcję $T_0(r)$, określoną przez (5.3). Tło pochodzące od równej liczby źródeł dodatnich i ujemnych w multipolu znosi się przy tym wzajemnie.

W operatorze pochodnej kierunkowej $\mathbf{n}_s \cdot \nabla$ można wyróżnić 2 składowe o różnym typie symetrii:

$$\mathbf{n}_s \cdot \nabla = \alpha_s \mathcal{U} + \beta_s \mathcal{V}, \tag{5.5}$$

gdzie

$$\mathcal{U} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} ,$$

$$\mathcal{V} = \sin\theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} .$$

Operator $\mathcal{U}$ działając na funkcję symetryczną lub antysymetryczną daje w wyniku także odpowiednio funkcję symetryczną lub antysymetryczną. Operator $\mathcal{V}$ przeciwnie - zmienia charakter symetrii na przeciwny. Wprowadźmy oznaczenia:

$$T_k^{c,s} = (-1)^k (k-1)! \frac{\cos k\theta}{r^k} + \pi (\delta_{1k} r \cos\theta + \delta_{2k}) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(m+k)!}{m!} r^m A_{k+m} \cos m\theta , \tag{5.6}$$

$$T_k^{c,a} = (-1)^k (k-1)! \frac{\sin k\theta}{r^k} + \pi \delta_{1k} r \sin\theta + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(m+k)!}{m!} r^m A_{k+m} \sin m\theta . \tag{5.7}$$

Operatory różniczkowe $\mathcal{U}$ i $\mathcal{V}$ w działaniu na funkcje $T_k^{c,s}(r)$ i

http://rcin.org.pl

$T_k^{c,a}(r)$ mają następujące właściwości:

$$\mathcal{U}\, T_k^{c,s} = T_{k+1}^{c,s}\,, \qquad \mathcal{U}\, T_k^{c,a} = T_{k+1}^{c,a}\,,$$
$$\mathcal{V}\, T_k^{c,s} = T_{k+1}^{c,a}\,, \qquad \mathcal{V}\, T_k^{c,a} = T_{k+1}^{c,s}\,. \tag{5.8}$$

Po k-krotnym zastosowaniu operatora $(\mathbf{n}_s \cdot \nabla)$ do funkcji $T_0(r)$ otrzymujemy w efekcie sumę wyrazów typu

$$\mathcal{U}^j\, \mathcal{V}^{k-j}\, T_0(r)\,, \qquad j = 0, 1, \ldots, k$$

skąd

$$T_k(r) = C_k\, T_k^{c,s}(r) + D_k\, T_k^{c,a}(r)\,. \tag{5.9}$$

Funkcje $T_k^{c,s}$ i $T_k^{c,a}$ określone przez (5.6) i (5.7) tworzą bazę, w której będziemy rozwijać rozwiązanie w komórce elementarnej na zewnątrz walca. Pole sieci multipoli k-tego rzędu jest zgodnie z (5.9) kombinacją liniową dwu funkcji bazowych k-tego rzędu: symetrycznej i antysymetrycznej.

Funkcje $T_k^{c,s}$ i $T_k^{c,a}$ mają osobliwości na osi walca i nie nadają się do przedstawienia rozwiązania wewnątrz walca. Jako bazę rozwiązań wewnątrz walca przyjmiemy funkcje $T_k^{d,s}$ i $T_k^{d,a}$ bez osobliwosci:

$$T_k^{d,s} = (1)^k\,(k-1)!\,\frac{r^k}{a^{2k}}\cos k\theta + \pi\,(\delta_{1k}\, r\cos\theta + \delta_{2k}) + \sum_{m=1}^{\infty}\frac{(m+k)!}{m!}\, r^m\, A_{k+m}\cos m\theta\,, \tag{5.10}$$

$$T_k^{d,a} = (-1)^k\,(k-1)!\,\frac{r^k}{a^{2k}}\sin k\theta + \pi\,\delta_{1k}\, r\sin\theta + \sum_{m=1}^{\infty}\frac{(m+k)!}{m!}\, r^m\, A_{k+m}\sin m\theta\,. \tag{5.11}$$

http://rcin.org.pl

Łatwo zauważyć, że dla $r = a$ odpowiadające sobie funkcje obu baz są sobie równe:

$$T_k^{c,s}(a, \theta) = T_k^{d,s}(a, \theta), \qquad T_k^{c,a}(a, \theta) = T_k^{d,a}(a, \theta) . \tag{5.12}$$

W dalszym ciągu będziemy korzystać wyłącznie z symetrycznych funkcji bazowych i dla uproszczenia notacji będziemy pomijać wskaźnik s .

6. Wyznaczenie okresowego pola temperatury

W rozdziale 5 wprowadziliśmy funkcje bazowe $T_k^d(r, \theta)$ i $T_k^c(r, \theta)$, w których można rozwijać okresową część pola temperatury odpowiednio wewnątrz i na zewnątrz walca w kwadratowej komórce bazowej. Ze względu na symetrię pola względem $\theta = 0$ wystarczy uwzględnić w rozwinięciu tylko funkcje symetryczne. Oznaczmy przez $T^d(r, \theta)$ i $T^c(r, \theta)$ odpowiednio temperaturę wewnątrz i na zewnątrz walca. Ponieważ funkcje bazowe z osobliwościami i bez osobliwości zostały tak dobrane, by były równe sobie na powierzchni walca dla $r = a$, przeto w rozwinięciu T^d i T^c w odpowiednich bazach występują te same współczynniki:

$$T^d(r, \theta) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k T_k^d(r, \theta) , \qquad T^c(r, \theta) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k T_k^c(r, \theta) . \tag{6.1}$$

Funkcje (6.1) spełniają równanie Laplace'a w odpowiednich obszarach, warunek okresowości na brzegu komórki oraz warunek równości temperatur na powierzchni walca. Pozostaje do spełnienia warunek równości normalnych składowych strumieni ciepła na powierzchni walca. Z tego warunku wyznaczamy współczynniki rozwinięcia rozwiązania.

http://rcin.org.pl

Z pewnych względów, które wyjaśnimy dalej, przyjmijmy jako bazy, w których poszukujemy rozwiązań zamiast funkcji T_k^d i T_k^c pewne ich kombinacje liniowe:

$$S_k^d(r, \theta) = \sum_{j=1}^{k} c_{kj} T_j^d(r, \theta) , \quad S_k^c(r, \theta) = \sum_{j=1}^{k} c_{kj} T_j^c(r, \theta) . \tag{6.2}$$

Sposób wyznaczenia współczynnikow c_{ki} podamy niżej. W bazach S_k^d i S_k^c rozwiązanie ma postać:

$$T^d(r, \theta) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k S_k^d , \qquad T^c(r, \theta) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k S_k^c . \tag{6.3}$$

Współczynniki b_k w (6.3) wyznaczymy z warunku równości normalnych składowych strumieni ciepła po obu stronach powierzchni walca. Wprowadzimy funkcje $U_k(\theta)$ i $V_k(\theta)$, $k = 1, 2, \ldots$

$$U_k(\theta) = \frac{1}{\lambda_c - \lambda_d} \left[\lambda_c \frac{\partial}{\partial r} T_k^c(r,\theta)\Big|_{r=a} - \lambda_d \frac{\partial}{\partial r} T_k^d(r,\theta) \Big|_{r=a} \right]$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} u_{kj} \cos j\theta , \tag{6.4}$$

$$V_k(\theta) = \frac{1}{\lambda_c - \lambda_d} \left[\lambda_c \frac{\partial}{\partial r} S_k^c(r,\theta)\Big|_{r=a} - \lambda_d \frac{\partial}{\partial r} S_k^d(r,\theta) \Big|_{r=a} \right]$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} v_{kj} \cos j\theta , \tag{6.5}$$

gdzie

$$V_k(\theta) = \sum_{j=1}^{k} c_{kj} U_j(\theta) . \tag{6.6}$$

Współczynniki rozwinięcia funkcji $U_k(\theta)$ i $V_k(\theta)$ na szereg $\cos j\theta$ są elementami pewnych macierzy nieskończonych $\hat{U}$ i $\hat{V}$. Ponieważ

http://rcin.org.pl

makroskopowa część pola temperatury T^m wyraża się wzorem:

$$T^m = G\, r \cos\theta \,, \tag{6.7}$$

warunek brzegowy dla całkowitego strumienia ciepła przyjmuje postać:

$$\lambda_d \left[\frac{\partial T^d}{\partial r}\bigg|_{r=a} + G\cos\theta \right] = \lambda_c \left[\frac{\partial T^c}{\partial r}\bigg|_{r=a} + G\cos\theta \right]$$

lub po uwzględnieniu (6.3) i (6.4):

$$\sum_{k=0}^{\infty} b_k V_k(\theta) = -G\cos\theta \,. \tag{6.8}$$

Zatem współczynniki b_k opisujące rozwinięcie T^d w bazie S_k^d oraz T^c w bazie S_k^d są jednocześnie współczynnikami rozwinięcia gradientu pola makroskopowego w bazie V_k. Wprowadźmy układ funkcji:

$$W_m(\theta) = \sum_{j=1}^{\infty} w_{mj} \cos\theta \tag{6.9}$$

ortonormalny do układu $V_k(\theta)$:

$$\int_0^{2\pi} V_k(\theta)\, W_m(\theta)\, d\theta = \delta_{km} \,. \tag{6.10}$$

Wyznaczenie funkcji $W_m(\theta)$ jest znacznie prostsze, gdy macierz nieskończona określona przez współczynniki v_{kj} jest trójkątna:

$$v_{kj} = 0 \quad \text{dla} \quad j<k \,. \tag{6.11}$$

Macierz $\hat{U}$ sprowadzamy do trójkątnej macierzy $\hat{V}$ za pomocą znanego algorytmu Gaussa. W trakcie triangulizacji macierzy otrzymuje się zarazem współczynniki c_{kj}. Aby znaleść funkcje $W_m(\theta)$ ortogonalne do $V_k(\theta)$ trzeba odwrócić macierz trójkątną, co jest znacznie prostsze. Niech

http://rcin.org.pl

$$W_k(\theta) = \sum_{j=1}^{\infty} w_{kj} \cos j\theta \quad . \tag{6.12}$$

Z warunku ortonormalności (6.10) otrzymujemy układ równań liniowych o macierzy trójkątnej:

$$\sum_{j=k}^{\infty} v_{kj} w_{mj} = \frac{\delta_{km}}{\pi} \qquad \text{dla } k, m = 1, 2, \ldots \tag{6.13}$$

Rozwiązanie układu (6.13) jest dane przez wzory rekurencyjne (6.14):

$$w_{mk} = 0 \qquad \text{dla } k > 1 \ ,$$

$$w_{mm} = -\frac{1}{\pi v_{mm}} \ , \tag{6.14}$$

$$w_{mk} = \frac{1}{v_{kk}} \cdot \sum_{j=k+1}^{\infty} v_{kj} w_{mj} \qquad \text{dla } k = m-1, m-2, \ldots, 1 \ .$$

Do wyznaczenia współczynników b_k na podstawie (6.8) i (6.10) wystarczy znajomość pierwszej kolumny macierzy $\hat{W}$:

$$b_k = \int_0^{2\pi} G\, w_{k1} \cos^2\theta \, d\theta = \pi G\, w_{k1} \tag{6.15}$$

dla $k = 1, 2, \ldots$ Wskutek tego, że w potencjale Wignera (5.3) różne od 0 są tylko te współczynniki A_k , dla których k jest wielokrotnością 4 , współczynniki c_{jk} dla j nieparzystych, a także współczynniki w_{k1} i b_k dla k parzystych znikają.

Dzięki odpowiedniemu wyborowi baz S_k^d i S_k^c , w których poszukujemy rozwiązania, wyznaczanie układu funkcji ortogonalnych $W_k(\theta)$ do danego układu funkcji sprowadziło się do poszukiwania macierzy odwrotnej do macierzy trójkątnej $\hat{V}$. W ogólnym przypadku wyznaczania macierzy odwrotnej do macierzy nieskończonej, co w praktyce wykonujemy obcinając macierz nieskończoną do skończonej, na ogół wszystkie

http://rcin.org.pl

współczynniki macierzy odwrotnej zależą od tego, w którym miejscu macierz została obcięta. Odwracanie macierzy trójkątnej cechuje się tym, że współczynniki macierzy odwrotnej $\hat{V}^{-1}$ o wskaźnikach $\leq k$ zależą wyłącznie od współczynników macierzy $\hat{V}$ o wskaźnikach także $\leq k$. Dzięki temu współczynniki b_k rozwinięcia rozwiązania w odpowiednich bazach S_k^d i S_k^c dają się wyznaczyć dokładnie przy ograniczeniu się do macierzy o k wierszach i k kolumnach. Uwzględnienie dalszych wierszy i kolumn macierzy $\hat{V}$ nie wnosi już do b_k żadnych poprawek. Taki wynik nie jest możliwy w bazach T_k^d i T_k^c, ani w bazach używanych przez Rayleigha: $r^k \cos\theta$ i $r^{-k} \cos\theta$. Kilka pierwszych współczynników b_k można wyznaczyć z (6.15) analitycznie. Niżej podano pierwsze 3 niezerowe współczynniki b_k:

$$b_1 = -\frac{\alpha\,\varphi\,/\pi}{1 + \alpha\,\varphi}\,G\,,$$

$$b_3 = \frac{2\,A_4\,\alpha^2\,\varphi^5\,/\pi}{1 + \alpha\,\varphi - 48\,A_4^2\,\alpha^2\,\varphi^4\,/\pi}\,G\,,$$

$$b_5 = \frac{28\,A_4\,A_8\,\alpha^3\,\varphi^9\,/\pi}{1 + \alpha\,\varphi - 48\,A_4^2\,\alpha^2\,\varphi^4\,/\pi - 47040\,A_8^2\,\alpha^2\,\varphi^8\,(1 + \alpha\,\varphi)\,/\pi}\,G\,,$$

gdzie α jest określone wzorem (2.14), zaś współczynniki A_4 i A_8 wynoszą [14] :

$$A_4 = 0{,}7878030005\,,$$

$$A_8 = 0.5319716294\,.$$

Wyznaczenie dalszych współczynników b_k wymaga obliczeń numerycznych.

http://rcin.org.pl

7. Zastosowanie ułamka łańcuchowego do wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa

7.1. Wprowadzenie

Do wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa ośrodka z regularnie rozmieszczonymi wtrąceniami walcowymi zastosujemy metodę, którą nazwiemy metodą rozwijania na szereg potęgowy i ułamek łańcuchowy w skrócie nazywaną metoda SŁ. W metodzie tej efektywny współczynnik transportu zależny od stosunku współczynników przewodnictwa składników rozwijamy wokół punktu $h=1$. Nowym elementem jest zastosowanie funkcji bazowych wyprowadzonych w rozdziale 5 do wyznaczania współczynników szeregu potęgowego opisującego efektywny współczynnik przewodnictwa, przy jednoczesnym wykorzystaniu ułamka łańcuchowego dla znalezienia sumy tego szeregu. Dzięki temu uzyskuje się wyniki wyłącznie na drodze kolejnych rekurencji, do których jako wartość początkową wprowadza się makroskopowy gradient temperatury równy 1.

Podstawowym rezultatem prezentowanej tu metody określanej w skrócie SŁ są dwa stosunkowo proste algorytmy, prowadzące do wyznaczenia tej samej wielkości fizycznej, jakim jest efektywny współczynnik przewodnictwa dla badanego ośrodka niejednorodnego . Algorytmy SŁ1 i SŁ2 uzyskuje się w warunkach, gdy efektywny współczynnik przewodnictwa odnosi się odpowiednio do współczynnika przewodnictwa matrycy i wtrąceń. Cechą charakterystyczną wyznaczanych algorytmów jest to, że wyniki uzyskiwane na ich podstawie zbliżają się w pierwszym przypadku od dołu, w drugim przypadku od góry do wyniku dokładnego. Drogę dojścia do poszukiwanych algorytmów podzielimy na dwie części. W pierwszej

http://rcin.org.pl

przedstawimy podstawowe wiadomości o szeregach Stieltjesa, aproksymantach Padé oraz ułamkach łańcuchowych w zakresie niezbędnym do wykazania zbieżności otrzymywanych formuł rekurencyjnych. Drugą część poświęcimy wyłącznie na wyprowadzenie algorytmów SŁ1 i SŁ2

7.2. Reprezentacja sum szeregów potęgowych za pomocą ułamka łańcuchowego

a) Szereg Stieltjesa

Możliwości zastosowania ułamka łańcuchowego do opisu efektywnych własności układów dyspersyjnych otworzyła praca Bergmana [15]. Rozważał on dwufazowy kompozyt o udziałach objętościowych faz $1-\varphi$ i φ oraz zespolonych stałych dielektrycznych λ_c i λ_d. Wykazał, że efektywna stała dielektryczna kompozytu λ_{ef}, rozważana jako funkcja argumentu zespolonego h jest analityczna w całej płaszczyźnie zespolonej z wyjątkiem punktów położonych na ujemnej części osi rzeczywistej, w których funkcja ma bieguny pierwszego rzędu. Na tej podstawie udowodnił, że efektywne własności układów dyspersyjnych dają się przedstawić w postaci następującej całki Stieltjesa:

$$1 - m(h) = \int_0^1 \frac{g(u)}{s - u}\, du \,, \tag{7.2a.1}$$

gdzie

$$s = \frac{1}{1 - h} \,, \tag{7.2a.2}$$

$$m(h) = \begin{cases} \lambda_{ef}/\lambda_c \,, & h = \lambda_d/\lambda_c \,, \quad (7.2a.3) \\ \lambda_{ef}/\lambda_d \,, & h = \lambda_c/\lambda_d \,, \quad (7.2a.4) \end{cases}$$

Wzór (7.2a.1) obowiązuje dla każdej pary zależności (7.2a.3) i (7.2a.4)

http://rcin.org.pl

określających efektywny współczynnik przewodnictwa odniesiony, w pierwszym przypadku - do współczynnika przewodnictwa matrycy, w drugim przypadku - do współczynnika przewodnictwa wtrąceń. Występującą we wzorze (7.2a.1) funkcję g(u) nazywamy gęstością spektralną. Funkcja ta przyjmuje zawsze wartości dodatnie

$$g(u) > 0 . \tag{7.2a.5}$$

Określoną przez (7.2a.1) funkcję

$$m(h) = 1-\int_0^1 \frac{g(u)}{s - u}\, du \tag{7.2a.6}$$

rozwińmy na szereg potęgowy względem h=1. Po prostych rachunkach otrzymujemy następujący wzór ogólny:

$$\left.\frac{d\,m^n(h)}{d\,h^n}\right|_{h=1} = (-1)^{n+1} n! \cdot \int_0^1 u^{n-1} g(u)\, du. \tag{7.2a.7}$$

Na tej podstawie (7.2a.1) przyjmuje postać

$$1-m(h) = -(h-1)\cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left[\int_0^1 u^n \cdot g(u)\, du\right] \cdot [-(h-1)]^n. \tag{7.2a.8}$$

Stąd dostajemy

$$-\frac{1}{h - 1}\,[1 - m(h)] = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\,[-(h-1)]^n, \tag{7.2a.9}$$

gdzie

$$c_n = \int_0^1 u^n\, g(u)\, du . \tag{7.2a.10}$$

Szereg potęgowy (7.2a.9) mający współczynniki c_n o postaci (7.2a.10) nazywamy szeregiem Stieltjesa, gdy gęstość spektralna g(u) spełnia nierówność (7.2a.5) [35],[36]. Wprowadzając do (7.2a.9) nowe zmienne

$$z = h - 1 , \tag{7.2a.11}$$

$$Q(z) = \frac{1}{z}\cdot(m(z)-1) \tag{7.2a.12}$$

otrzymujemy następujące rozwinięcie potęgowe

http://rcin.org.pl

$$Q(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (-z)^n, \qquad (7.2a.13)$$

Wzór (7.2a.13) opisuje efektywne własności w postaci szeregu Stieltiesa.

b) Aproksymanty Padé

Niech będzie dana następująca funkcja wymierna

$$[L/M] = \frac{a_0 + a_1 z + \cdots a_L z^L}{b_0 + b_1 z \cdot \cdots b_M z^M} \qquad (7.2b.1)$$

oraz szereg (7.2a.9) zapisany w postaci

$$Q(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot (-z)^n , \qquad (7.2b.2)$$

gdzie

$$z = h - 1 . \qquad (7.2b.3)$$

Funkcję wymierną (7.2b.1) nazwiemy aproksymantą Padé dla szeregu (7.2b.2), jeśli skończona liczba pierwszych współczynników rozwinięcia funkcji (7.2b.1) na szereg potęgowy będzie równa odpowiednim współczynnikom szeregu (7.2b.2) . W teorii aproksymant Padé dowodzi się następujące twierdzenie [35],[36], które stosuje się do efektywnych własności układów dyspersyjnych przedstawionych wzorem (7.2a.13) . Aproksymanty Padé [M/M] i [M-1/M] , gdzie liczby w nawiasach kwadratowych oznaczają odpowiednio stopień licznika i mianownika, dążą do funkcji Q(z) (7.2a.13), gdy M dąży do nieskończoności. Spełniają przy tym dla z rzeczywistego i nieujemnego następujące nierówności:

$$(-1)^{1+J} \{[M+1+J / M+1]-[M+J / M]\} \geq 0 \qquad (7.2b.4)$$

$$(-1)^{1+J} \{[M+J / M] - [M+J+1 / M-1]\} \geq 0 \qquad (7.2b.5)$$

$$[M / M] \geq Q(z) \geq [M-1 / M], \qquad (7.2b.6)$$

gdzie $J \geq -1$. Konsekwencją nierówności (7.2b.4-7.2b.6) jest to, że

http://rcin.org.pl

aproksymanty [M / M] i [M-1 / M] tworzą najlepsze górne i dolne oszacowania uzyskiwane z ograniczonej liczby współczynników szeregu [45-48], przy czym zwiększenie stopnia M poprawia te oszacowania. W dalszej części tego rozdziału przy wyznaczaniu efektywnych własności zawsze jako punkt odniesienia wybierać będziemy składnik ośrodka niejednorodnego z mniejszą przewodnością. W konsekwencji będziemy mieli zawsze do czynienia z przypadkiem h-1 > 0.

c) Ułamek łańcuchowy

Dowodzi się [35],[36], że sumę szeregu Stieltjesa można przedstawić w postaci następującego ułamka łańcuchowego:

$$Q(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(-z)^n = \frac{a_1}{1} + \frac{a_2 z}{1} + \frac{a_3 z}{1} + \ , \qquad (7.2c.1)$$

Ucinając ułamek łańcuchowy (7.2c.1) na kolejnych wyrazach, a następnie zwijając go otrzymujemy, co łatwo sprawdzić, ciągi aproksymant Padé [M/M] i [M-1/M]. Stąd zgodnie z wzorami (7.2b.4-7.2b.6) kolejne aproksymanty ułamka łańcuchowego dążą jednostajnie do sumy szeregu (7.2c.1) stanowiąc na przemian oszacowanie górne i dolne szeregu. Napiszmy związek (7.2a.9) w postaci:

$$F(s) = 1 - m(h) = \frac{1}{s} \sum_{n=0}^{\infty} c_n(1/s)^n \ , \qquad (7.2c.2)$$

gdzie przyjęliśmy

$$h - 1 = -1/s \qquad (7.2c.e)$$

i znajdźmy dla niego reprezentację w postaci ułamka łańcuchowego. W tym celu należy prawą stronę równości pomnożyć przez z, a następnie w miejsce argumentu z wprowadzić zmienną (-1/s). W rezultacie

http://rcin.org.pl

otrzymujemy :

$$S(s) = 1\text{-}m(h) = - \frac{a_1}{s} - \frac{a_2}{1} - \frac{a_3}{s} - \qquad (7.2c.4)$$

Ułamek (7.2c.4) zwany w literaturze ułamkiem typu S może być stosowany do reprezentacji funkcji F(s) danej szeregiem (7.2c.2). Rozważa się także ułamek łańcuchowy typu J o postaci

$$J(s) = \frac{k_1}{l_1 + s} - \frac{k_2}{l_2 + s} - \frac{k_3}{l_3 + s} \qquad (7.2c.5)$$

Związek między ułamkami (7.2c.4) i (7.2c.5) jest taki, że kolejne wyrazy ciągu aproksymant Padé generowanych przez ułamek typu J są równe kolejnym parzystym wyrazom ciągu aproksymant Padé generowanych przez ułamek typu S.

d) Własności ułamka łańcuchowego typu J

Ciąg aproksymant ułamka łańcuchowego typu J, co łatwo sprawdzić, jest równoważny ciągowi aproksymant Padé $[M_s\text{-}1 / M_s]$, gdzie przez M_s oznaczyliśmy stopień wielomianu argumentu s występującego w mianowniku funkcji wymiernej . Aproksymanty Padé $[M_s\text{-}1/M_s]$ powstają z aproksymant Padé [M-1/M] przez pomnożenie ich przez -z i podstawienie w miejsce argumentu z argumentu 1/s. W wyniku tej operacji i w oparciu o nierówności (7.2b.4-7.2b.6) otrzymujemy następujące zależności:

$$\{[M_s / M_s+1]\text{-}[M_s\text{-}1 / M_s]\} < 0 \qquad (7.2d.1)$$

$$1\text{-}m(h) \leq [M_s\text{-}1 / M_s] \qquad (7.2d.2)$$

obowiązujące dla rzeczywistego i ujemnego s. Stąd aproksymanty Padé $[M_s\text{-}1/M_s]$ generowane przez ułamek łańcuchowy typu J dążą jednostajnie do funkcji F(s) danej szeregiem (7.2c.2), gdy M_s dąży do nieskończoności spełniając przy tym nierówności (7.2d.1-7.2d.2). Dowodzi się [35], że

http://rcin.org.pl

nierówność (7.2d.2) tworzy najlepsze dolne oszacowanie, jakie udaje się uzyskać z skończonej liczby wyrazów szeregu Stieltjesa. Zatem ułamek łańcuchowy typu J dobrze opisuje efektywne własności układów dyspersyjnych, gdyż w oparciu o jego aproksymanty dostaje się najlepsze wyniki możliwe do uzyskania z skończonej liczby wyrazów szeregu Stieltjesa.

7.3. Współczynniki szeregu potęgowego opisującego efektywny współczynnik przewodnictwa

a) Sformułowanie zadania

Rozważmy nieskończony ośrodek z wtrąceniami walcowymi, których oś symetrii usytuowana jest w węzłach prostokątnej sieci. Niech ośrodek ten będzie poddany działaniu stałego gradientu temperatury generowanego ustalonymi, niezmiennymi w czasie źródłami zewnętrznymi. Następujące układy równań:

$$\nabla\cdot(\theta_1+\theta_2 h)\cdot\nabla T=0 \tag{7.3a.1}$$

$$\frac{1}{V}\int_V \cdot\nabla T\, dv = 1 \tag{7.3a.2}$$

$$\int_S \upsilon\cdot\nabla T\, ds = J' \tag{7.3a.3}$$

oraz

$$\nabla\cdot(\theta_1 h + \theta_2)\cdot\nabla T=0, \tag{7.3a.4}$$

$$\frac{1}{V}\cdot\int_V \nabla T\, dv = 1, \tag{7.3a.5}$$

$$\int_S \upsilon\cdot h\cdot\nabla T\cdot ds = J'' \tag{7.3a.6}$$

definiują efektywny współczynnik przewodnictwa odniesiony do

http://rcin.org.pl

współczynnika przewodnictwa matrycy (7.3a.1-7.3a.3)

$$J' = \lambda_{ef} / \lambda_c, \tag{7.3a.7}$$

i efektywny współczynnik przewodnictwa odniesiony do współczynnika przewodnictwa wtrącenia (7.3a.4-7.3a.6)

$$J'' = \lambda_{ef} / \lambda_d, \tag{7.3a.8}$$

Wielkości θ_1 , θ_2 , h , υ , V występujące w równaniach (7.3a.1-7.3a.6) oznaczają odpowiednio: funkcje charakterystyczne obu faz (równe 1 wewnątrz danej fazy i 0 na zewnątrz), stosunek współczynników przewodnictwa, cosinusy kierunkowe wektora normalnego do powierzchni ścianek komórki elementarnej, objętość komórki elementarnej. Wyznaczymy współczynniki szeregu potęgowego opisującego efektywny współczynnik przewodnictwa reprezentowany przez strumienie J' , J'' .

b) Przyrosty temperatur

Niech będzie dane pole temperatur $T(h,r,\varphi)$ w postaci następującego szeregu potęgowego:

$$T(h,r,\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta T^n, \tag{7.3b.1}$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$\delta T^n = \frac{1}{n!} \cdot \frac{\partial^n T}{\partial h^n} (\delta h)^n \tag{7.3b.2}$$

Składniki sumy (7.3b.1) nazywać będziemy n-tymi przyrostami temperatury. Równania określające n-te przyrosty temperatury uzyskuje się różniczkując po h równanie przewodnictwa. Stąd dostajemy następujące układy równań na przyrosty temperatur δT^n , wynikające kolejno z równań (7.3a.1) i (7.3a.6):

http://rcin.org.pl

$$\nabla^2 \delta T^n = -\nabla \cdot \theta_2 \cdot \delta h \cdot \nabla \delta T^{n-1}, \tag{7.3b.3}$$

$$\delta T^0 = r \cdot \cos\varphi , \tag{7.3b.4}$$

$$\int_S \upsilon \cdot \nabla \delta T^n ds = \delta J'^n \tag{7.3b.5}$$

oraz

$$\nabla^2 \cdot \delta T^n = -\nabla \cdot \theta_1 \cdot \delta h \cdot \nabla \delta T^{n-1}, \tag{7.3b.6}$$

$$\delta T^0 = r \cos \varphi , \tag{7.3b.7}$$

$$\int_S \upsilon \cdot h \cdot \delta T^n ds = \delta J''^n . \tag{7.3b.8}$$

W dalszej części pracy będziemy kolejno rozwiązywać zagadnienia (7.3b.3-7.3b.5) oraz (7.3b.6-7.3b.8), przy czym ograniczymy się wyłącznie do wnętrza walca. Zatem będziemy korzystać z symetrycznych funkcji bazowych wyznaczonych w rozdziale 5, które dla dalszych celów wygodnie jest zapisać w postaci

$$T_k^d = \sum_{m=1}^{\infty} a_{mk} \cdot r^m \cdot \cos m\varphi , \tag{7.3b.9}$$

gdzie

$$a_{mk} = \frac{a^{k+1}}{2k!}\left[\frac{(k-1)!}{a^{2k}} \cdot \delta_{mk} + (-1)^k \cdot \frac{(m+k)!}{m!} \cdot \left(A_{mk} + \frac{1}{2}\pi \cdot \delta_{m+k,2}\right)\right] \tag{7.3b.10}$$

Potencjały bazowe (7.3b.9) powstają we wnętrzu walca w warunkach, gdy na jego powierzchni usytuowane są źródła o następującym rozkładzie kątowym

$$q_k = \cos k\varphi \tag{7.3b.11}$$

Fakt ten ma istotne znaczennie przy wyprowadzaniu algorytmów liczących efektywny współczynnik przewodnictwa.

http://rcin.org.pl

c) Efektywny współczynnik przewodnictwa odniesiony do współczynnika przewodnictwa matrycy

Współczynniki

$$c_n = \delta J'^n/(\delta h)^n \ , \tag{7.3c.1}$$

szeregu potęgowego

$$J' = \lambda_{ef}/\lambda_c = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (h-1)^n \ , \tag{7.3c.2}$$

określającego efektywny współczynnik przewodnictwa ośrodka z wtrąceniami walcowymi, wyznaczymy w oparciu o układ równań (7.3b.3-7.3b.5). Równanie rekurencyjne (7.3b.3) przyjmuje postać

$$\nabla^2 \delta T^n = \delta(r-a)(\partial/\partial r)\delta T^{n-1} \ . \tag{7.3c.3}$$

Rozwijając prawą stronę równania (7.3c.3) na szereg Fouriera dostajemy

$$(1/\delta h)^n \cdot (\nabla^2 \delta T^n) = \delta(r-a) \cdot \sum_{k=1}^{\infty} q_k \cdot \cos k\varphi \ . \tag{7.3c.4}$$

Dzięki funkcjom bazowym (7.3b.9) możemy natychmiast podać rozwiązanie równania (7.3c.4):

$$\frac{\delta T^n}{(\delta h)^n} = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} q_k^{n-1} \cdot a_{mk} \, r^m \cdot \cos m\varphi \tag{7.3c.5}$$

Rozkład źródeł stanowiących podstawę do następnej rekurencji uzyskamy zgodnie z równaniem (7.3c.3) różniczkując wzór (7.3c.5) po r i biorąc jego wartość w punkcie r = a :

$$\frac{1}{(\delta h)^n} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \delta T^n \Big|_{r=a} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} q_k^{n-1} \cdot m \cdot a_{km} \, a^{m-1} \cdot \cos m\varphi \ . \tag{7.3c.6}$$

Jednocześnie prawdziwa jest zależność

$$\frac{1}{(\delta h)^n} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \delta T^n \Big|_{r=a} = \sum_{m=0}^{\infty} q_m^n \cdot \cos m\varphi \tag{7.3c.7}$$

http://rcin.org.pl

Porównując wzory (7.3c.6) i (7.3c.7) dostajemy związek

$$q_m^n = \sum_{m=0}^{\infty} q_k^{n-1} \cdot m \cdot a_{km} \cdot a^{m-1} , \qquad (7.3c.8)$$

określający relacje między intensywnościami źródeł w kolejnych rekurencjach. Do związku (7.3c.8) należy jako wartość początkową dołączyć

$$q_1 = 1 ,$$
$$q_k = 0 , \quad k = 2,3,4,\ldots\ldots \qquad (7.3c.9)$$

Efektywny współczynnik przewodnictwa określa wzór:

$$J' = \lambda_{ef} / \lambda_c = 1 + \varphi\,(h-1) \cdot (1 + \overline{\nabla\delta T^1} + \overline{\nabla\delta T^2} + \cdots), \qquad (7.3c.10)$$

gdzie przez $\overline{\nabla\delta T^n}$ oznaczyliśmy średni gradient n-tego przyrostu temperatury we wnętrzu walca. Gradient ten równa się wartości współczynnika występującego w (7.3c.5) przy czynniku r cosφ . Stąd możemy napisać

$$\frac{\overline{\nabla\delta T^n}}{(\delta h)^n} = \sum_{m=0}^{\infty} q_k^{n-1} \cdot a_{1k} . \qquad (7.3c.11)$$

Otrzymane związki (7.3c.8-7.3c.11) wygodnie jest zapisać w postaci następującej formuły rekurencyjnej:

$$q_1 = 1 , \; q_k = 0 , \quad n = 2,3,\ldots \qquad (7.3c.12)$$

$$c_{j+2} = \sum_{k=1}^{\infty} q_k^j \cdot a_{1k} \cdot \varphi , \qquad (7.3c.13)$$

$$q_k^{j+1} = \sum_{m=1}^{\infty} q_m^j \cdot k \cdot a_{mk} \cdot a^{k-1} , \qquad (7.3c.14)$$

określającej współczynniki szeregu potęgowego dla efektywnego współczynnika przewodnictwa.

http://rcin.org.pl

d) Efektywny współczynnik przewodnictwa odniesiony do współczynnika przewodnictwa wtrąceń

Współczynniki szeregu potęgowego

$$J'' = \lambda_{ef} / \lambda_d = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot (h-1)^n \qquad (7.3d.1)$$

opisującego efektywny współczynnik przewodnictwa odniesiony do współczynnika przewodnictwa wtrąceń zostaną wyznaczone w oparciu o układ równań (7.3b.6-7.3b.8). W celu ich wyznaczenia posłużymy się zależnością

$$\lambda_{ef} = \lambda_c + (\lambda_d - \lambda_c) \cdot \overline{\nabla T} \cdot \varphi \quad , \qquad (7.3d.2)$$

która po podzieleniu przez λ_d przekształca się do postaci

$$J'' = \lambda_{ef} / \lambda_d = 1 + (1-\varphi)(h-1) - (\overline{\nabla \delta T^1} + \overline{\nabla \delta T^2} + \ldots), \qquad (7.3d.3)$$

gdzie $\overline{\nabla \delta T^n}$ są średnimi gradientami n-tych przyrostów temperatur we wnętrzu cylindra. Przyrównując wzory (7.3d.1) i (7.3d.3) dostajemy

$$c_0 = 1 \quad , \quad c_1 = 1 - \varphi \quad ,$$
$$c_n = - \frac{\nabla \delta T^n}{(\delta h)^n} \quad . \quad n = 2 \, , \, 3 \, , \, 4 \qquad (7.3d.4)$$

Zatem określenie współczynników c_n wymaga wyznaczenia średnich gradientów n-tych przyrostów temperatur we wnętrzu cylindra. W tym miejscu umówimy się, że za pomocą znaków + i - będziemy rozróżniać temperatury na zewnątrz cylindra oraz wewnątrz cylindra. Zgodnie z powyższą umową równanie (7.3b.6) zapisane dla ośrodka z wtrąceniami cylindrycznymi przyjmie następującą postać:

$$\nabla \delta T^n = -\delta(r-b) \frac{\partial}{\partial r} \delta_+ T^{n-1} \cdot \delta h \quad . \qquad (7.3d.5)$$

Intensywności źródeł q_{-k}^{n-1} związane są z intensywnościami źródeł q_{+k}^{n-2} za

http://rcin.org.pl

pomocą związku (7.3c.8)

$$q_{-k}^{n-1} = \sum_{m=1}^{\infty} q_{+m}^{n-2} \cdot a_{km}\, a^{m-1} \cdot k \,. \qquad (7.3d.6)$$

W oparciu o funkcje bazowe (7.3b.9) i równanie (7.3d.5) dostajemy związek

$$-q_{+k}^{n-1} - q_{-k}^{n-1} = q_{+k}^{n-2} \,, \qquad (7.3d.7)$$

określający skok intensywności źródeł przy przejściu przez powierzchnię walca. Z (7.3d.6) i (7.3d.7) dostajemy zależność rekurencyjną

$$q_{+k}^{n-1} = - q_{+k}^{n-2} - \sum_{m=1}^{\infty} q_{+k}^{n-2} \cdot a_{mk} \cdot a^{m-1} \cdot k \qquad (7.3d.8)$$

Jest to zależność między intensywnościami źródeł generujących n-te przyrosty temperatury rozwiązujące zagadnienie (7.3b.6-7.3b.8). Wymieniając zależności (7.3c.14) na (7.3d.8) dostajemy następującą formułę rekurencyjną:

$$q_1 = 1 \,, \; q_k = 0 \,, \qquad k = 2,3,4,.... \qquad (7.3d.9)$$

$$c_{j+2} = \sum_{k=0}^{\infty} q_k^j \, a_{1k} \cdot \varphi \,, \qquad (7.3d.10)$$

$$q_k^{j+1} = -q_k^j - \sum_{m=1}^{\infty} q_m^{j-1} \cdot a_{km} \cdot a^{m-1} \cdot k \,, \qquad (7.3d.11)$$

określającą współczynniki rozwinięcia efektywnego współczynnika przewodnictwa na szereg potęgowy.

e) Algorytmy liczące efektywny współczynnik przewodnictwa

Związki rekurencyjne (7.3c.12-7.3c.14) i (7.3d.9-7.3d.11), określają szeregi potęgowe dające górne i dolne oszacowanie efektywnego współczynnika przewodnictwa. Z powodu powolnej zbieżności tych szeregów

http://rcin.org.pl

i nie dość wielkiego promienia zbieżności wygodnie jest wyrazić te oszacowania przez ułamki łańcuchowe (por.[37], [38]). Wzory (7.3c.12-7.3c.14) i (7.3d.9-7.3d.11) uzupełnione o związki określające współczynniki ułamka łańcuchowego na podstawie współczynników szeregu [38] tworzą poszukiwane algorytmy SŁ1 i SŁ2. Algorytmy te na mocy twierdzenia o aproksymantach Padé (7.2d.1-7.2d.2) i na mocy zasady symetrii Kellera [18] dają dla kompozytu o sieci kwadratowej najlepsze oszacowania odpowiednio od dołu i od góry, jakie można, w klasie funkcji wymiernych, uzyskać z ograniczonej liczby współczynników szeregu potęgowego. Postępując analogicznie można wyznaczyć algorytmy SŁ3 i SŁ4, którymi dysponujemy, liczące efektywną podatność cieplną (odwrotność efektywnego współczynnika przewodnictwa). W przypadku kompozytu o sieci kwadratowej algorytmy SŁ3 i SŁ4 dają te same wyniki co algorytmy SŁ1 i SŁ2 i dlatego nie zostały tu przytoczone . Jednak w przypadku ogólniejszym, na przykład sieci prostokątnej, algorytmów tych nie można pominąć, jeśli się chce uzyskać najlepsze wyniki z ograniczonej ilości współczynników szeregu Stieltjesa.

7.4. Zakres stosowalności algorytmów liczących efektywny współczynnik przewodnictwa

Algorytmy wyznaczone w tym paragrafie obowiązują dla kompozytów z wtrąceniami cylindrycznymi o regularnych strukturach periodycznych. Algorytmy te bowiem nie zmienią się, gdy będziemy, nawet w przypadku makroskopowej anizotropii, liczyli wartości główne tensora efektywnego przewodnictwa. W tym przypadku zmienią się jedynie dane wejściowe charakteryzowane współczynnikami potencjału Wignera. Stąd zakres

http://rcin.org.pl

stosowalności algorytmów oznaczonych skrótowo SŁ jest szeroki, obejmuje w zasadzie wszystkie regularne struktury walców, dla których daje się wyodrębnić komórkę elementarną, a następnie wyznaczyć dla tej komórki potencjał Wignera.

8. Wyniki numeryczne

W rozdz.6 podano metodę wyznaczania okresowego pola temperatury w komórce elementarnej. W metodzie tej nieskończoną macierz $\hat{U}$, utworzoną zgodnie z (6.4) z nornalnych pochodnych funkcji bazowych $T_k^d(r, \theta)$ i $T_k^c(r, \theta)$ na obwodzie walca, przekształcono do macierzy trójkątnej $\hat{V}$, a następnie wyznaczono macierz odwrotną $\hat{W} = \hat{V}^{-1}$, przez elementy której wyrażają się w prosty sposób (6.15) współczynniki rozwinięcia dla temperatury. Obliczenia wykonywano w 2 wariantach: gdy elementami macierzy są liczby oraz - alternatywnie - szeregi potęgowe argumentu α. W istocie elementy macierzy $\hat{U}$, jak wynika z (6.4), (5.6), (5.10), (6.16) mają postać:

$$u_{ki} = \frac{u'_{kk}}{\alpha} \delta_{ki} + u''_{ki} , \qquad (8.1)$$

gdzie u'_{kk} i u''_{ki} nie zależą od α. Mnożąc macierz $\hat{U}$ przez α otrzymujemy macierz, której współczynniki zależą liniowo od α. Szeregi nieskończone pojawiają się dopiero w procesie triangulizacji macierzy $\hat{U}$. W rezultacie otrzymuje się współczynniki b_k (a także współczynniki c_{ki}, określające związki między bazami S_k^c, S_k^d a T_k^c, T_k^d) rozwinięcia pola temperatury jako szeregi potęgowe od α o współczynnikach zależnych od φ. Znając pole temperatury można zgodnie

http://rcin.org.pl

z (2.16) wyrazić efektywny współczynnik przewodnictwa przez B_1 - współczynnik przy $\frac{\cos\theta}{r}$ w rozwinięciu T^c na multipole. Przedstawiając za pomocą (6.3) T^c w bazie S_k^c, a następnie wyrażając elementy bazy S_k^c przez multipole z wzorów (6.2) i (5.6), można wyznaczyć B_1, a zatem z (2.16) także μ :

$$\mu = 1 - \frac{2\pi}{G} \sum_{k=1}^{\infty} \left[b_k \sum_{i=1}^{k} c_{ki} (-1)^i (i-1)! \right] . \qquad (8.2)$$

Jednakże w praktyce numerycznej wyznaczanie pola temperatury poprzez operacje na macierzach, których elementami są szeregi jest dość czasochłonne. Znacznie prostszy i wygodniejszy jest algorytm rekurencyjny wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa podany w rozdz. 7. Przy rozwijaniu μ na szereg potęgowy przyjmowano jako argument szeregu α lub $\frac{1}{s}$. Każda z tych wielkości wyraża się w prosty sposób przez stosunek h współczynników przewodnictwa obu ośrodków i nie zależy od czynnika geometrycznego φ, od którego zależą natomiast współczynniki szeregu. Rozwinięcia dokonywano wokół stanu w którym współczynniki przewodnictwa obu faz są jednakowe. W dokładnym sformułowaniu współczynniki szeregu zależą od nieskończonej liczby funkcji bazowych. Liczba funkcji bazowych uwzględnianych w obliczeniach numerycznych zależy od φ. Z powodu, o którym będzie mowa dalej, starano się wyznaczyć współczynniki szeregu z maksymalną dokładnością komputera. Dla małych φ wystarcza do tego celu uwzględnić niewielką liczbę funkcji bazowych. Dla φ bliskich $\pi/4$ uwzględniano 300 wyrazów; wzięcie pod uwagę większej liczby wyrazów nie zmieniało już - w ramach dostępnej dokładności komputera - wartości wyznaczanych współczynników szeregu.

http://rcin.org.pl

Szereg potęgowy nie jest wygodną postacią przedstawiania efektywnego współczynnika przewodnictwa. Korzystajac z faktu, że rozwinięcie $\mu(s)$ na szereg potęgowy jest szeregiem Stieltjesa, można zamiast szeregu użyć wygodniejszej reprezentacji w postaci ułamka łańcuchowego np. typu J :

$$\mu(s) = 1 + \frac{k_1}{l_1 + s} - \frac{k_2}{l_2 + s} - \ldots \qquad (8.3)$$

Algorytm pozwalający na wyznaczenie współczynników ułamka łańcuchowego na podstawie współczynników szeregu potęgowego jest opisany w literaturze [37], [38]. W przeciwieństwie do szeregów potęgowych ułamki łańcuchowe są zbieżne w całym fizycznie sensownym zakresie s , przy czym nawet wtedy, gdy szereg jest zbieżny, zbieżność ułamka łańcuchowego jest znacznie szybsza. Znając dla danego φ niewielką liczbę pierwszych współczynników ułamka łańcuchowego otrzymujemy w postaci analitycznej zależność μ od s . Zatem wzór (8.3) w odróżnieniu od wyników wcześniejszych prac pozwala na wyznaczenie efektywnego współczynnika w sposób półanalityczny. Współczynniki pierwszego piętra ułamka łańcuchowego (8.3) wynoszą:

$$k_1 = -\varphi , \qquad l_1 = \frac{\varphi - 1}{2} . \qquad (8.4)$$

Uwzględnienie we wzorze (8.3) tylko pierwszego piętra prowadzi do wzoru Maxwella Garnetta (3.19). Dla i > 1 mamy:

$$l_i = -0.5 . \qquad (8.5)$$

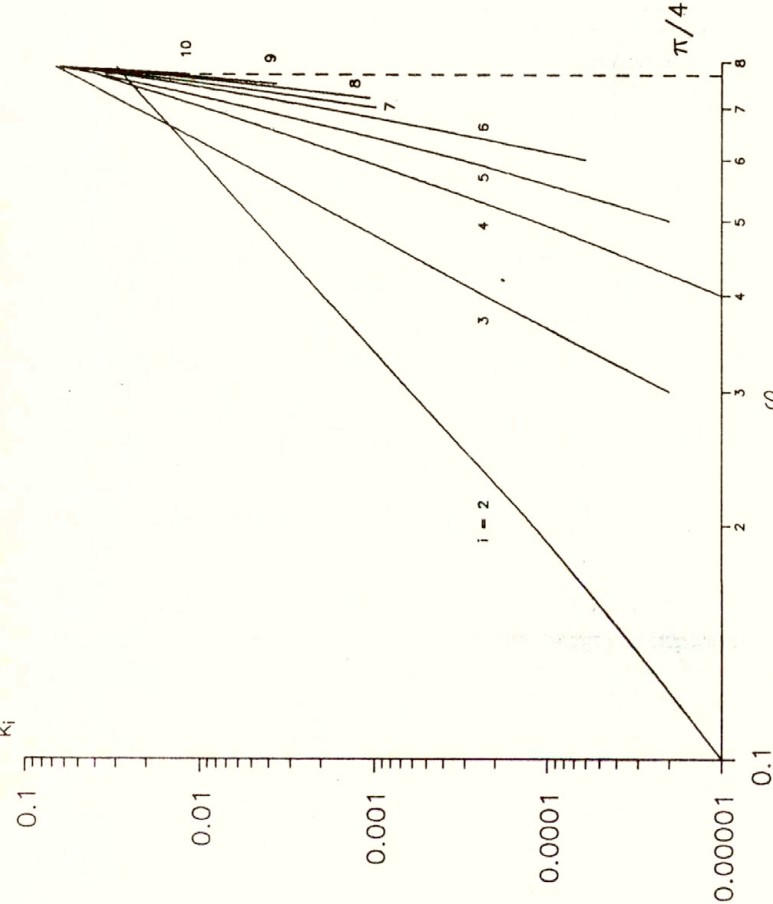
Jest to konsekwencją symetrii Kellera. Wartości współczynników k_i podano w tab.8.1 i na rys.8.1 (dla i większego od 1). Dla dostatecznie małych φ współczynniki k_i maleją szybko i wzór Maxwella

http://rcin.org.pl

Tab. 8.1 Współczynniki k_i ułamka łańcuchowego $\mu(s)$ dla wybranych wartości φ.

φ	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	k_7	k_8	k_9	k_{10}	k_{11}	k_{12}	k_{13}
0.10000	-0.10000	0.00002											
0.20000	-0.20000	0.00012											
0.30000	-0.30000	0.00062	0.00002										
0.40000	-0.40000	0.00196	0.00023	0.00001									
0.50000	-0.50000	0.00479	0.00143	0.00012	0.00002								
0.60000	-0.60000	0.00997	0.00641	0.00122	0.00032	0.00006							
0.65000	-0.65000	0.01396	0.01258	0.00348	0.00133	0.00036							
0.70000	-0.70000	0.01855	0.02380	0.00961	0.00529	0.00207	0.00098						
0.72000	-0.72000	0.02079	0.03045	0.01438	0.00922	0.00426	0.00233	0.00106					
0.74000	-0.74000	0.02323	0.03882	0.02153	0.01624	0.00895	0.00577	0.00311					
0.75000	-0.75000	0.02453	0.04378	0.02638	0.02168	0.01316	0.00928	0.00550	0.00364				
0.76000	-0.76000	0.02588	0.04933	0.03236	0.02910	0.01961	0.01524	0.01005	0.00723				
0.77000	-0.77000	0.02729	0.05556	0.03977	0.03934	0.02972	0.02578	0.01922	0.01569	0.01152			
0.78000	-0.78000	0.02878	0.06253	0.04898	0.05366	0.04606	0.04546	0.03938	0.03710	0.03197	0.02927		
0.78500	-0.78500	0.02952	0.06633	0.05441	0.06292	0.05796	0.06166	0.05850	0.06048	0.05807	0.05917	0.05714	
0.78539	-0.78539	0.02958	0.06633	0.05485	0.06372	0.05902	0.06319	0.06042	0.06297	0.06105	0.06283	0.06139	
$\pi/4$	-0.78539	0.02958	0.06664	0.05486	0.06374	0.05904	0.06322	0.06046	0.06301	0.06111	0.06291	0.06148	0.06283

http://rcin.org.pl



Rys. 8.1 **Współczynniki** k_i ułamka łańcuchowego $\mu(s)$ jako funkcje φ.

http://rcin.org.pl

Garnetta daje wyniki dostatecznie dokładne. Dla większych φ współczynniki maleją wolniej, dalsze piętra ułamka wnoszą wtedy znaczący wkład do wartości ułamka łańcuchowego. Dla φ bliskich wartości granicznej $\pi/4$ współczynniki w pewnym zakresie wskaźnika i oscylują wokół wartości 1/16 , dążąc do 0 przy dalszym wzroście wskaźnika i . Im wartość φ jest bliższa $\pi/4$, tym większy jest zakres zmienności wskaźnika i , w którym wartości k_i są bliskie 1/16 . W granicznym przypadku $\varphi = \pi/4$ współczynniki k_i dla $i \to \infty$ dążą nie do 0 lecz do 1/16 .

Algorytm wyznaczania współczynników ulamka łańcuchowego jest źle uwarunkowany numerycznie, w wyniku czego dokładność kolejnych współczynników ułamka łańcuchowego, odniesiona do dokładności współczynników szeregu potęgowego, szybko maleje (jako kryterium dla określenia tej dokładności mogą służyć np. różnice między wyznaczonymi numerycznie wartościami współczynników l_i a -1/2). Z tego powodu ważne jest możliwie najdokładniejsze wyznaczenie współczynników szeregu potęgowego. Stosując precyzję liczenia typowego koprocesora arytmetycznego (ok. 19 znaków dziesiętnych) można wyznaczyć dla φ bliskich $\pi/4$ ok. 13 pierwszych współczynników k_i . Dalsze współczynniki k_i mają już wartości przypadkowe. Dla mniejszych φ kryzys numeryczny występuje nawet wcześniej, ale nie przeszkadza to w wyznaczeniu wartości μ z dobrą dokładnością, gdyż liczba pięter ułamka koniecznych do uwzględnienia jest wtedy niewielka. Dla φ bliskich $\pi/4$ i umiarkowanych wartości h wyznaczone współczynniki także wystarczają całkowicie dla dokładnego określenia μ . Dla dostatecznie wielkich h (i odpowiadających im s) wzór (8.3) przestaje być przydatny: ułamek łańcuchowy zbiega powoli i zachodzi potrzeba uwzględnienia w ułamku

http://rcin.org.pl

większej liczby pięter niż można wyznaczyć przy danej dokładności rachunków; trudności powstają więc wtedy, gdy jednocześnie $\varphi \to \pi/4$ i $h \to \infty$. W tym przypadku można skorzystać z wzoru asymptotycznego (4.11) .

Tab. 8.2

Szybkość zbieżności ułamka łańcuchowego i szeregu potęgowego wyrażających μ (dla wybranych wartości φ i h).

Numer aproksymanty	φ = 0.7 h		φ = 0.78 h → ∞	φ =0.7853 h → ∞	φ = $\pi/4$ h = 20
	szereg	ułamek			
1	2	3	4	5	6
1	2.4000	5.6667	8.0909	8.32	5.9108
2	3.3800	7.2002	15.8632	17.28	8.3809
3	4.1699	7.4223	24.4291	30.34	9.5863
4	4.7955	7.4325	30.4270	45.52	10.0261
5	5.3020	7.4327	33.8734	64.05	10.2012
6	5.7098	7.4527	35.2817	84.30	10.2661
7	6.0398	7.4327	35.7667	106.77	10.2918
8	6.3064		35.8970	129.78	10.3016
9	6.5220		35.9273	153.26	10.3056
10	6.6963		35.9329	175.62	10.3071
11	6.8373		35.9338	196.58	10.3077
12	6.9512			215.01	10.3079
13	7.0434				11.3080

Dla ilustracji zakresu stosowalności wzoru (8.3) w tab.8.2 podano dla wybranych wartości φ i h szybkość zbieżności kolejnych aproksymant ułamka łańcuchowego. Zbieżność jest oczywiście tym szybsza im h jest bliższe 1 . Z danych w kolumnie 3 widać, że nawet dla dość dużych wartości φ = 0.7 i w najmniej korzystnym przypadku $h \to \infty$ parę pięter ułamka wystarcza do wyznaczenia μ z dokładnością 4 cyfr znaczących. Dla porównania w kolumnie 2 podano wartości kolejnych sum

http://rcin.org.pl

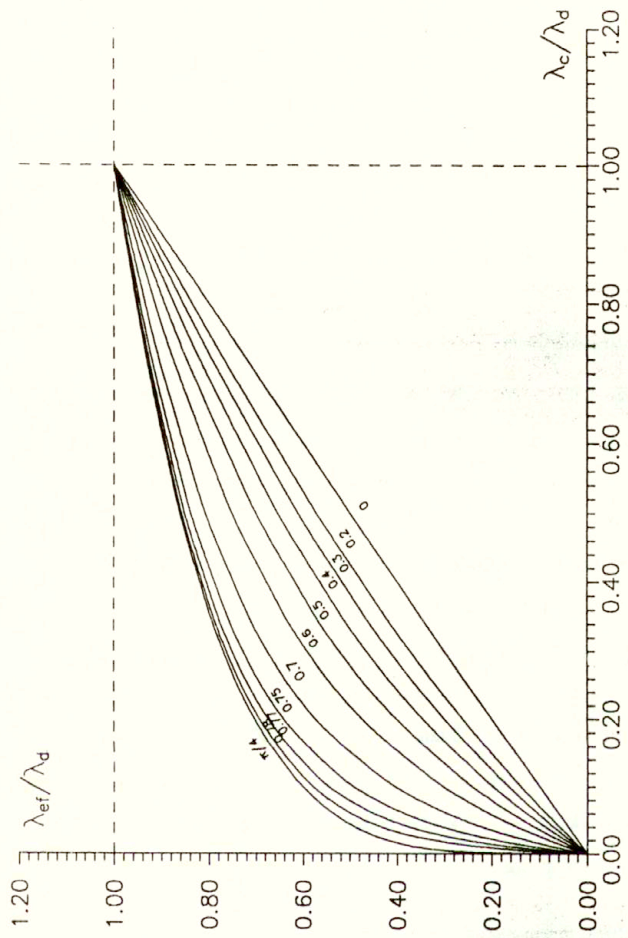
cząstkowych szeregu potęgowego. Zwraca uwagę bardzo powolna zbieżność szeregu. W odróżnieniu od ułamka łańcuchowego za argument szeregu przyjęto α , gdyż szereg potęgowy argumentu s dla dostatecznie wielkich wartości h jest rozbieżny. Z (7.2.2a) i (2.14) wynika związek między s i α :

$$s = \frac{1 + \alpha}{2 \alpha} . \qquad (8.6)$$

Dla wartości $\varphi = 0.78$, znacznie bliższej $\varphi_{max} = \pi/4 = 0.78539...$ i $h \to \infty$ można jeszcze wyznaczyć μ z dobrą dokładnością uwzględniając ok. 10 pięter ułamka (kolumna 4). Dla $\varphi = 0.7853$ (kolumna 5) liczba pięter, konieczna do uwzględnienia, przekracza już liczbę pięter możliwych do wyznaczenia przy dostępnej precyzji komputera. Dwunasta aproksymanta ułamka łańcuchowego daje wartość ok. 215 , podczas gdy ze wzoru asymptotycznego (4.11) wynika wartość $\varphi = 278$. Jednakże dla mniejszych wartości h (np. $h = 20$, por. dane w kolumnie 6) możliwe jest wyznaczenie μ nawet dla maksymalnego upakowania $\varphi = \pi/4$. Wzór (8.3) ze współczynnikami k_i , l_i określonymi przez (8.4), (8.5) i tab.8.1 daje wyniki zgodne z wynikami numerycznymi z [9] (por. tab.3.1) z dokładnością stosowaną przez autorów [9] w całym zakresie zmienności φ i h . Na rys. 8.2 przedstawiono wyznaczoną z ułamka łańcuchowego zależność efektywnego współczynnika przewodnictwa od stosunku współczynników obu faz dla różnych wartości φ.

W dotychczasowych rozważaniach przyjmowano efektywny współczynnik przewodnictwa jako funkcję zależną explicite tylko od jednej zmiennej: s lub α . Współczynniki odpowiedniego ułamka łańcuchowego wyznaczano wykonując obliczenia dla wybranych wartości φ . Jednakże rozważania z rozdz.7 można powtórzyć traktując μ jako funkcję zależną explicite

http://rcin.org.pl



Rys. 8.2 Wykres λ_{ef}/λ_d jako funkcji λ_c/λ_d dla wybranych wartosci φ .

http://rcin.org.pl

od 2 argumentów: s,φ lub α,φ , i otrzymać ułamek łańcuchowy, którego współczynniki są znanymi funkcjami φ . Metodę tę autorzy zastosowali w innej publikacji [49]. W tym miejscu ograniczymy się tylko do zwięzłego przedstawienia wyników. Wygodnie jest wyrazić μ przez nową wielkość β :

$$\mu = 1 - \frac{2\alpha\varphi}{\alpha\varphi + \beta} \tag{8.7}$$

skąd

$$\beta = \alpha\varphi\frac{1+\mu}{1-\mu} \tag{8.8}$$

Reprezentacja μ w postaci (8.7) ma tę zaletę, że pozwala wyodrębnić w formule dla μ te elementy, które nie zależą od struktury sieci, bowiem występują już we wzorze Maxwella Garnetta (3.1.9) - i pozostałe, zależne od struktury sieci, opisane przez β (dla $\beta = 1$ wzór (8.7) odpowiada (3.1.9)). Dzięki temu w sposobie zależności β od α, φ wychodzą na jaw pewne własności symetrii, związane z geometrią sieci, które w formule dla μ występują w postaci niejawnej, są bowiem maskowane przez wyrazy liniowe względem α i φ pochodzące z wzoru Maxwella Garnetta i niezależne od struktury sieci. Dla sieci kwadratowej zgodnie z zasadą symetrii Kellera mamy:

$$\mu(\alpha,\varphi)\cdot\mu(-\alpha,\varphi) = 1 \tag{8.9}$$

Porównanie (8.8) z (8.9) wskazuje, że β nie zależy od znaku α , jest zatem funkcją α^2. Okazuje się także [49], że struktura kwadratowa sieci prowadzi do symetrii, która pozwala przyjąć jako drugi argument funkcji β wielkość φ^4 . Wprowadzając $f = \varphi / \varphi_{max} = 4\varphi / \pi$ można przedstawić β w postaci:

http://rcin.org.pl

$$\beta = 1 - \frac{K_1}{L_1 + 1/\alpha^2} - \frac{K_2}{L_2 + 1/\alpha^2} - \dots \qquad (8.10)$$

gdzie

$$K_n = f^{16(n-1)} \cdot \frac{\sum_{j=1}^{\infty} g_{1nj} f^{4j}}{1 + \sum_{j=1}^{\infty} g_{2nj} f^{4j}}, \qquad (8.11)$$

$$L_n = f^{8(n-1)+m} \cdot \frac{\sum_{j=1}^{\infty} g_{3nj} f^{4j}}{1 + \sum_{j=1}^{\infty} g_{4nj} f^{4j}}, \qquad m = 4\,\delta_{1n} \qquad (8.12)$$

W ułamku łańcuchowym (8.10) współczynniki K_n (w mniejszym stopniu dotyczy to także L_n) mają jako czynnik coraz wyższe i szybko rosnące

Tab. 8.3

Współczynniki ułamka łańcuchowego dla β .

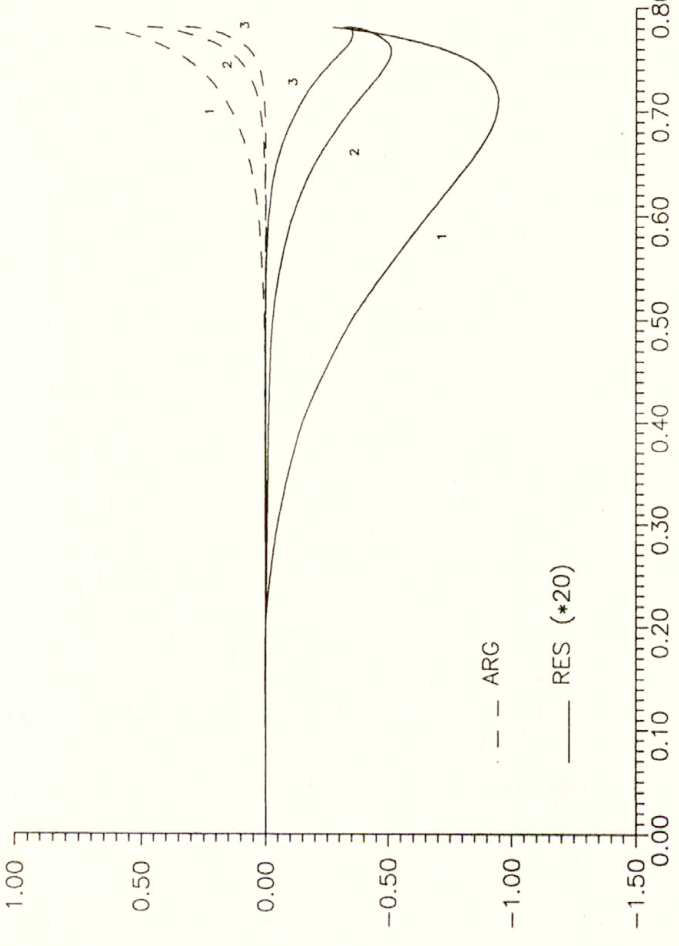
n	j	g_{1nj}	g_{2nj}	g_{3nj}	g_{4nj}
1	1	0.11637	-0.00666	-0.20313	-0.47349
	2	0.00116	0.00001	0.04752	0.07108
	3	0.00000	0.00000	-0.00236	-0.00214
	4	0.00000	0.00000	-0.00082	-0.00035
2	1	0.02046	-1.33165	-0.10072	-1.56126
	2	-0.01181	0.60125	0.03172	0.95059
	3	0.00223	-0.07218	0.01770	-0.28559
	4	-0.00030	-0.02059	-0.01764	0.03875

http://rcin.org.pl

potęgi f . Jeżeli f nie jest bardzo bliskie 1 , to kolejne współczynniki K_n szybko maleją i wpływ dalszych pięter ułamka na wartość β jest pomijalny. Zastępując we wzorach (8.10) - (8.12) sumy nieskończone przez skończone otrzymujemy przybliżoną formułę analityczną dla β , której współczynniki można wyznaczyć numerycznie. W tab.8.3 zamieszczono wartości współczynników g_{inj} dla n = 1, 2 , j = 1,...,4. Błąd formuły (8.10) w szerokim zakresie parametrów $h < 20$, $\varphi < 0.77$ nie przekracza 1% , podczas gdy błąd wzoru (3.1.11) zaczerpniętego z [9] przewyższa w tym samym zakresie 10% . Dokładność wzoru (8.10) szybko maleje, gdy jednocześnie $\alpha^2 \to 1$ i $f \to 1$. W tym przypadku należy korzystać z wzoru asymptotycznego.

Funkcję $\mu(s)$ dla ustalonego φ można także określić przez położenia i residua jej biegunów. Bieguny μ leżą w zakresie ujemnych rzeczywistych wartości h , tzn. w przedziale (0, 1) argumentu s . Symetria Kellera narzuca związek między zerami a biegunami μ : jeżeli $h = h_i$ jest biegunem funkcji $\mu(h)$ to $h = 1/h_i$ jest jej zerem . Związki symetrii nie pozwalają jednak na podanie podobnych prostych zależności między parami odpowiednich biegunów z zakresów odpowiednio $h < -1$ i $h > -1$. Wygodnie jest zamiast biegunów funkcji $\mu(s)$ rozważać bieguny funkcji $\beta(\alpha^2)$, które leżą w zakresie (1, ∞) i z których każdy odpowiada 2 biegunom funkcji $\mu(s)$ dla $s = s_1$ i $s = s_2$, odpowiadającym $\pm\alpha$ lub h i 1/h . Wprawdzie nie istnieje prosty związek między biegunami funkcji $\beta(\alpha^2)$ a $\mu(s)$, który pozwoliłby wyznaczyć jedne na podstawie drugich, niemniej jednak bieguny funkcji $\beta(\alpha^2)$ określają tę funkcję a tym samym na podstawie (8.6) także funkcję $\mu(s)$. Położenia i residua trzech pierwszych biegunów funkcji $\beta(\alpha^2)$ podano na rys. 8.3 , gdzie arg oznacza $1/\alpha^2$, zaś res

http://rcin.org.pl



Rys. 8.3 Argumenty i residua trzech pierwszych biegunow funkcji $\beta(\alpha^2)$.

http://rcin.org.pl

wartość residuum . Należy zauważyć, że reprezentacja efektywnego współczynnika przewodnictwa przez ułamek łańcuchowy ma wyższość nad reprezentacją przez bieguny. Wynika to stąd, że znając pewną liczbę pierwszych współczynników ułamka łańcuchowego możemy wyznaczyć odpowiednią liczbę pierwszych momentów funkcji gęstości widmowej. Nie jest to możliwe na podstawie znajomości odpowiedniej liczby najważniejszych biegunów.

9. Podsumowanie

W pierwszej części artykułu dokonano obszernego przeglądu metod wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa w kompozytach z wtrąceniami cylindrycznymi o regularnej strukturze. Najważniejsze z tych metod to metoda Rayleigha [5] oraz Zuzovsky'ego i Brennera [11]. Ta ostatnia stosowana była w literaturze głównie do kompozytu z wtrąceniami kulistymi. W metodzie tej, w odróżnieniu od metody Rayleigha, rozwijano rozwiązanie w bazie, której elementy spełniają warunek brzegowy na zewnętrznym brzegu elementarnej komórki. W przypadku dwuwymiarowym (walce) idea ta prowadzi do bazy generowanej przez potencjał Wignera. Sposób wykorzystania tej metody przez Zuzowsky'ego i Brennera [11] oraz Sanganiego i Acrivosa [12] nie jest jednak ani zbyt przejrzysty, ani nie daje znaczących korzyści obliczeniowych. Autorzy [12] przyznają wręcz, że otrzymują po żmudnych obliczeniach ten sam układ układ równań co McPhedran i in. [8], stosujący metodę Rayleigha.

Autorzy niniejszej publikacji w drugiej części artykułu podjęli próby wprowadzenia nowych elementów metodologicznych upraszczających znacząco analizę zagadnienia i reprezentację wyników (ułamki

http://rcin.org.pl

łańcuchowe). Próby te przeprowadzono na przykładzie kompozytu z wtrąceniami cylindrycznymi rozmieszczonymi w sieci kwadratowej.

W pierwszym wariancie (rozdz.6) przyjęto punkt wyjścia podobny jak w rozumowaniu Sanganiego i Acrivosa. W dalszym ciągu jednak dzięki odpowiedniemu doborowi funkcji bazowych udało się uniknąć obcinania (truncation) nieskończonego układu równań. Do wyznaczenia n pierwszych współczynników rozwinięcia rozwiązania w bazie otrzymuje się skończony układ n równań z n niewiadomymi. Następne współczynniki można obliczyć na podstawie sukcesywnie dołączanych kolejnych równań co nie wprowadza żadnych poprawek do współczynników policzonych uprzednio.

W rozdz.7 przedstawiono 2 proste algorytmy wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa. Prostota ideowa i numeryczna tych algorytmów wynika stąd, że polegają one na sukcesywnym stosowaniu wzoru rekurencyjnego i nie wymagają rozwiązywania układu równań algebraicznych pracochłonnymi metodami rachunku macierzowego. Wyrażenie dla efektywnego współczynnika przewodnictwa uzyskano w postaci szeregu potęgowego, którego współczynniki są funkcjami udziału objętościowego wtrąceń φ, zaś argument zależy tylko od stosunku odpowiednich współczynników obu faz.

Wykorzystując wyniki Bergmana, dotyczące własności efektywnego współczynnika przewodnictwa jako funkcji stosunku współczynników przewodnictwa obu faz, rozważanej w płaszczyźnie zespolonej, przedstawiono efektywny współczynnik w postaci ułamka łańcuchowego. Znaczenie ułamka łańcuchowego polega na tym, że reprezentuje on nie tylko sumę szeregu potęgowego opisującego efektywny współczynnik przewodnictwa, lecz znacznie więcej: reprezentuje pełne rozwiązanie problemu w obszarze wykraczającym poza zakres zbieżności szeregu. Reprezentacja taka, mimo swoich widocznych korzyści jest jeszcze mało

http://rcin.org.pl

rozpowszechniona w literaturze.

Prosta i szczególnie dogodna metoda wyznaczania efektywnego współczynnika przewodnictwa przedstawiona w rozdz.7 , oparta na wykorzystaniu potencjału Wignera lub jego uogólnień dla odpowiednich struktur geometrycznych, może być stosowana do różnych typów sieci okresowych, w których daje się wyróżnić komórkę elementarną z usytuowanym w jej środku wtrąceniem cylindrycznym. Rozszerzenie tej metody na przypadek wtrąceń sferycznych także nie powinno nastręczać dużych trudności.

http://rcin.org.pl

LITERATURA

1. G.K.Batchelor. Transport properties of two-phase materials with random structure, Ann. Rev. Fluid Mech., 6, 227-254, 1974.
2. R.T.Bonnecaze, J.F.Brady. A method for determining the effective conductivity of dispersion of particles, Proc. R Soc. London, A 430, 285-313, 1990.
3. S.Torquato. Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties, Appl. Mech. Rev., 44, 2, 37-76, 1991.
4. J.C.Maxwell. A treatease on electricity and magnetism, 435-441, Oxford Univ. Press, 1904.
5. J.W.Rayleigh. On the influence of obstacles arranged in rectangular order on the properties of the medium, Phil. Mag., ser.5, 34, 481-502, 1892.
6. J.Runge. On the electric conductivity of metallic aggregates, Z.Tech.Physik, 6, 61-68, 1985.
7. R.E.Meredith, C.W.Tobias. Resistance to potential flow through a cubical array of spheres, J.Appl.Phys. 31, 1270-1273, 1960.
8. R.C.McPhedran, D.R.McKenzie. The conductivity of lattices of spheres, I. The simple cubic lattice, Proc. Roy. Soc. London, A 359, 45-63, 1978.
9. W.T.Perrins, D.R.McKenzie, R.C.McPhedran. Transport properties of regular arrays of cylinders, Proc. R. Soc. London, A 369, 207-225, 1979.
10. R.C.McPhedran, D.R.McKenzie, N.Phan-Tien. Transport properties of two-phase composite materials, Advances in the mechanics and the flow of granular materials, 1, 415-482; ed. M.Shahinpoor, Trans. Tech. Publications, Clausthal, 1983.
11. M.Zuzowsky, H.Brenner. Effective conductivities of composite materials composed of cubic arrangements of spherical particles embedded in an isotropic matrix, ZAMP, 28, 6, 979-992, 1977.
12. A.S.Sangani, A.Acrivos. The effective conductivity of a periodic array of spheres, Proc. R. Soc. London, A 386, 263-275, 1983.

http://rcin.org.pl

13.J.A.Kołodziej. Określenie efektywnych własności ośrodków porowatych i kompozytowych przez symulację numeryczną eksperymentu fizycznego z wykorzystaniem metody kollokacji brzegowej, Politechnika Poznańska, Rozprawy nr 203, 1989.

14.B.Cichocki, B.U.Felderhof. Electrostatic interactions in two-dimensional Coulomb systems with periodic boundary conditions, Physica, A 158, 706-722, 1989.

15.D.J.Bergman. The dielectric constant of a composite material - a problem in classical physics, Physics Reports, C 43, 378-407, 1983.

16.D.J.Bergman. Analytical properties of the complex effective dielectric constant of a composite medium with applications to the derivation of rigorous bounds and to percolation problems; in Electrical transport and optical properties of inhomogeneous media eds.J.C.Garland, D.B.Tanner. American Institute of Physics, New York, 1978.

17.D.J.Bergman. The dielectric constant of a simple cubic array of identical spheres, J. Phys. C 12, 4947-4960, 1979.

18.J.B.Keller. A theorem on the conductivity of a composite medium, J. Math. Phys., 5, 548-549, 1964.

19.D.J.Jeffrey. Conduction through a random suspension of spheres, Proc. R. Soc. London, A 335, 355-367, 1973.

20.H.Hasimoto. On the periodic fundamental solutions of the Stokes equations and their applications to viscous flow past a cubic array of spheres, J.Fluid Mech., 5, 317-328, 1959.

21.P.G.Saffman. On the settling speed of free and fixed suspensions, Studies Appl. Math., 52, 115-127, 1973.

22.B.Cichocki, B.U.Felderhof, K.Hinsen. Electrostatic interactions in periodic Coulomb and dipolar systems, Physical Review A, 39, n.10, 5350-5358, 1989.

23.R.Landauer. Electrical conductivity in inhomogeneous media, in Electrical transport and optical properties of inhomogeneous media, eds. J.C.Garland, D.B.Tanner, American Institute of Physics, New York, 1978.

24.M.Abramovitz, J.A.Stegun. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables, National Bureau of Standards, 1964.

http://rcin.org.pl

25.H.B.Keller, D.Sachs. Calculations of the conductivity of a medium containing cylindrical inclusions, J.Appl.Phys., 35, n.3 (Part 1), 537-538, 1964.

26.J.B.Keller. Conductivity of a medium containing a dense array of perfectly conducting spheres or cylinders or nonconducting cylinders, J.Appl. Phys., 34, 4 (part 1), 991-993, 1963.

27.R.W.O'Brien. Properties of suspensions of interacting particles, Ph. D. Thesis, University of Cambridge, 1977.

28.G.K.Batchelor, R.W.O'Brien. Thermal or electric conduction through a granular material, Proc. R. Soc. London, A 355, 313-333, 1977.

29.R.C.McPhedran. Transport properties of cylinders pairs and of the square array of cylinders, Proc. R. Soc. London, A 408, 31-43, 1986.

30.R.C.McPhedran, G.W.Milton. Transport properties of touching cylinder pairs and of the square array of touching cylinders, Proc. R. Soc. London, A 411, 313-326, 1987.

31.R.C.McPhedran, L.Poladian, G.W.Milton. Asymptotic studies of closely spaced, highly conducting cylinders, Proc. R. Soc. London A 415, 185-196, 1988.

32.L.Poladian. Asymptotic behaviour of the effective dielectric constants of composite materials. Proc. R. Soc. London, A 426, 343-360.

33.K.J.Binns, P.I.Lawrenson. Analysis and computation of electric and magnetic field problems, Pergamon Press, Oxford, 1973.

34.C.J.F.Böttcher. Theory of electrical polarization, 2-nd ed., Amsterdam, 1973.

35.G.A.Baker jr. Essential of Padé approximants, Acad.Press, 1975.

36.G.A.Baker jr., P.Graves-Morris. Encyclopedia of mathematics and its applications, Padé approximants, Part I.Basic theory, Addison-Weseley Publ.Co., 1981.

37.W.B.Jones, W.J.Thron. Continued fractions. Analytic theory and its applications, in Encyclopedia of mathematics and its applications, Vol.11, Addison-Wesley Publ.Co., 1980.

38.H.S.Wall. Analytic theory of continued fractions, New York, 1967.

39.B.Cichocki, B.U.Felderhof. Electrostatic spectrum and dielectric constant of nonpolar hard sphere fluids, J.Chem.Phys., 90, n.9, 1989.

http://rcin.org.pl

40.G.W.Milton. Multicomponent composites, electrical networks and new types of continued fraction, Commun.Math.Phys 111, Part I 281-327, Part II 329-372, 1987.

41.R.C.McPhedran, D.R.McKenzie. Electrostatic and optical resonances of arrays of cylinders, Appl.Phys. 23, 223-235 1980.

42.R.C.McPhedran, G.W.Milton. Bounds and exact theories for the transport properties of inhomogeneous media, Appl.Phys.A 26, 207-220, 1981.

43.A.Dutta,R.A.Mashelkar. Thermal conductivity of structured liquids, Advances in Heat Transfer, 18, 161-239, 1987.

44.O.P.Bruno. The effective conductivity of strongly heterogeneous composites , Proc.R.Soc.Lond., A 433, 353-381, 1991.

45.M.Beran. Use of the variational approach to determine bounds for the effective permittivity in random media, Nuovo Cimento 38,71-782,1965.

46.Z.Hashin, S.Shtrikman. A variational approach to the theory of effective magnetic permeability of multiphase materials, J.Appl.Phys. 33, 3125-3131, 1962.

47.Z.Hashin, S.Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials, J.Mech.Phys.Solids, 11,127-140, 1963.

48.S.Torquato, F.Lado. Evaluation of bounds on the conductivity and bulk modulus of dispersions of impenetrable spheres, Phys.Rev.B, 33, 6428-6434, 1986.

49.S.May, S.Tokarzewski, A.Zachara, B.Cichocki. Continued fraction representation for the effective thermal conductivity coefficient of a periodic two-component composite, 29th Polish Solid Mechanics Conference, Rytro, 1992.

50.G.W.Milton, On characterizing the set of possible effective tensors of composites: the variational method and the translation method, Comm.Pure and Appl.Math. 43, n.1, 63-125, 1990.

51.G.W.Milton, K.Golden. Representations for the conductivity functions of multicomponent composites, Comm.Pure and Appl.Math. 43, n.5, 647-671, 1990.

http://rcin.org.pl

SPIS TRESCI

1. Wprowadzenie 3

Część I. EFEKTYWNA PRZEWODNOSC KOMPOZYTU NA PODSTAWIE LITERATURY

2. Równania przewodnictwa, warunki brzegowe i efektywny współczynnik transportu. 7

3. Metody rozwiązywania równań przewodnictwa

3.1 Metoda Rayleigha 13

3.2 Metoda źródeł indukowanych 19

3.3 Metoda kollokacji brzegowej 26

4. Efektywny współczynnik transportu w asymptotycznych warunkach gęsto upakowanych wtrąceń o wysokiej przewodności 28

Część II. ZASTOSOWANIE UŁAMKOW ŁANCUCHOWYCH DO WYZNACZANIA EFEKTYWNEGO WSPOŁCZYNNIKA PRZEWODNICTWA

5. Funkcje bazowe dla regularnej sieci kwadratowej 34

6. Wyznaczenie okresowego pola temperatury 38

7. Reprezentacja efektywnego współczynnika przewodnictwa przez ułamek łańuchowy 43

7.1 Wprowadzenie 43

7.2 Reprezentacja sum szeregów potęgowych za pomocą ułamka łańcuchowego 44

http://rcin.org.pl

7.3 Współczynniki szeregu potęgowego opisującego efektywny współczynnik przewodnictwa 49
7.4 Zakres stosowalności algorytmów liczących efektywny współczynnik przewodnictwa 56
8. Wyniki numeryczne 57
9. Podsumowanie 70
Literatura 73

56711

http://rcin.org.pl