

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.02.035>

УДК 517.58/.5892

В.І. Куш, А.Л. Майстренко, В.С. Чернобай

Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України, Київ

E-mail: volodymyr_mexanik@ukr.net

Модифікований метод Максвела визначення ефективних сталих структурно-неоднорідних матеріалів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України А.Л. Майстренком)

Модифікований метод Максвела визначення ефективних сталих сформульовано в термінах дипольних моментів фрагмента реального композиту і еквівалентного включення. За умови врахування взаємодії між включеннями метод є строгим у сенсі, що одержана шляхом розв'язання модельної задачі оцінка ефективної сталої збігається до точного значення зі збільшенням розміру кластера. На прикладі задачі визначення теплопровідності волокнистого композиту показано, що метод забезпечує обчислення з високою точністю ефективних сталих композитів як періодичної, так і непорядкованої мікроструктури.

Ключові слова: композит, ефективні сталі, метод Максвела, дипольний момент.

Метод Максвела визначення ефективних сталих структурно-неоднорідних матеріалів є ймовірно, історично першим методом мікромеханіки. Його запропоновано Максвелом у 1873 р. [1] для оцінки електропровідності композиту, який складається з матричного матеріалу з провідністю k_0 та сферичних включень з провідністю k_1 . В припущенні, що об'ємний вміст включень c малий настільки, що їх взаємодією можна безпечно знехтувати, Максвел визначив асимптотики збурень, спричинених кластером включень та сферичним еквівалентним включенням того ж розміру невідомою провідністю k_{ef} . Умова рівності вказаних асимптотик визначає ефективну провідність композиту

$$k_{ef} = k_0 \frac{1+(d-1)\Psi}{1-\Psi}, \quad (1)$$

де $\Psi = c(k_1 - k_0) / [k_1 + (d-1)k_0]$ і d – розмірність (2 чи 3) моделі. Формула (1) відома в літературі також як рівняння Максвела–Гарнета, Клаузіуса–Мозотті, Лоренца, Брюгемана і т. д. Ясність і простота схеми Максвела надихнули на розробку аналогічних підходів до визначення інших фізико-механічних властивостей структурно-неоднорідних матеріалів [2].

Насправді формулу (1) одержано з одночасткової моделі композиту, тому її точність складає $O(c)$ [3]. Важливо розуміти, втім, що нехтування взаємодією включень не є обов'язковою рисою даного підходу: цитуючи Максвела, “...when the distance between the spheres is not great compared with their radii ... then other terms enter into the result” [1]. Іншими

словами, коли взаємодія включень впливає на макроскопічну провідність композиту, вона має бути врахована — і це може бути зроблено в рамках даної схеми. Першим кроком в цьому напрямку є робота [4]; у цій та наступних [5–7] публікаціях показано, що врахування взаємодії включень значно підвищує точність прогнозування ефективних сталих композиту, що свідчить про перспективність даного підходу. Разом з тим, дотепер залишаються відкритими питання збіжності методу та вибору форми еквівалентного включення: їх дослідження і є метою даної роботи. Для конкретності ми розглядаємо явище теплопровідності; втім, метод так само можна застосувати і до інших властивостей, обумовлених процесами переносу маси, енергії, заряду чи імпульсу (електропровідність, дифузія, електро- і магнітна проникність, пружність і т. д.).

Схема Максвелла в термінах індукованих дипольних моментів включень. В контексті теплопровідності підхід Максвелла полягає у порівнянні асимптот збурення температурного поля T_{dis} , зумовленого фрагментом реального композиту і еквівалентного однорідного включення з провідністю k_{ef} . Асимптотика збурення має вигляд (наприклад, [8])

$$T_{dis} = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{2(d-1)\pi k_0 r^d} + O(r^{-d}), \quad (2)$$

де \mathbf{x} — радіус-вектор, $r = \|\mathbf{x}\|$ і $\mathbf{p} = p_j \mathbf{i}_j$ — індукований дипольний момент включення. Найбільш загальний спосіб обчислення \mathbf{p} полягає у використанні закону збереження дипольного моменту [9]: для включення V_1 довільної форми та провідності

$$\int_S [T \mathbf{q}_n(\mathbf{x}) - q_n(T) \mathbf{x}] ds = \begin{cases} \mathbf{p} = \text{const}, V_1 \in V, \\ 0, \text{ otherwise,} \end{cases} \quad (3)$$

де V — довільна скінчена область з границею S ; T — температура; $\mathbf{q} = -k \nabla T$ — тепловий потік і $q_n = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ — його нормальна складова.

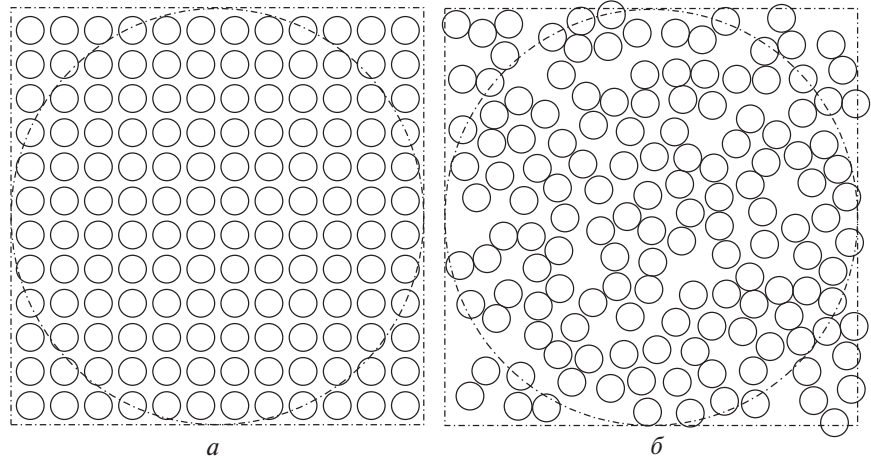
З (2) очевидно, що умову рівності асимптот збурень від кластера включень і еквівалентного включення об'ємом V_{eq} можна замінити умовою рівності їх дипольних моментів. Крім того, з (3) випливає що дипольний момент кластера включень дорівнює сумі дипольних моментів окремих включень. Сказане дозволяє записати найбільш загальний формальний вираз схеми Максвелла:

$$\sum_{q=1}^N \mathbf{p}^{(q)} (k_1/k_0) = \mathbf{p} (k_{ef}/k_0); \quad \sum_{q=1}^N V_q = c V_{eq}. \quad (4)$$

По суті, (4) є визначенням (дефініцією) ефективної провідності k_{ef} композиту (тензора, в загальному випадку) за Максвеллом. Рівняння (4) зводять задачу визначення ефективних сталих до знаходження дипольних моментів включень. Зокрема, у випадку одночасткової моделі (4) зводиться до (1). У загальному випадку визначення дипольних моментів вимагає розв'язання багаточасткової модельної задачі.

Модель композиту. У якості моделі волокнистого композиту виберемо ізотропну площину з провідністю k_0 , яка містить кластер з N однакових круглих включень радіуса R провідністю k_1 з центрами в точках O_q , $q = 1, 2, \dots, N$. Форма кластера — кругла (радіусом R_{eq}) та квадратна (розміром $2R_{eq}$), включення розташовані періодичним (рис., а) або випадковим (рис., б) чином. Вважаємо, що включення належить кластеру, якщо його центр лежить в позначених на рисунку штрих-пунктирною лінією межах кластера.

Геометрія багаточасткової моделі волокнистого композита



У випадку стаціонарного теплопереносу, зумовленого заданим на нескінченності постійним тепловим потоком $\mathbf{q}_{far} = -k_0 \mathbf{G}$, де $\mathbf{G} = G_j \mathbf{i}_j$ – температурний градієнт, температура в матриці $T = T^{(0)}$ і включеннях $T = T^{(q)}$ задовільняє рівняння Лапласа. Умова ідеального теплового контакту фаз

$$[[T]]_{L_q} = 0; \quad [[q_n]]_{L_q} = 0, \quad (5)$$

де $[[f]]_L$ означає стрибок величини f на границі L_q . Відповідне q_{far} температурне поле $T_{far} = G_1 x_1 + G_2 x_2$, сумарне поле в матриці $T^{(0)} = T_{far} + T_{dis}$.

Аналітичний розв'язок сформульованої задачі одержимо методом мультипольних розвинень [10, 11] з використанням техніки комплексних потенціалів. Вираз температури T і комплексного теплового потоку $q = q_1 + iq_2$ через комплексний потенціал $\varphi(z)$ ($z = x_1 + ix_2$) має вигляд

$$T = \text{Re}\varphi(z); \quad q = q_1 + iq_2 = -k\overline{\varphi'(z)}. \quad (6)$$

Згідно з принципом суперпозиції, температура в матриці може бути представлена так:

$$T^{(0)} = \text{Re}\varphi_0; \quad \varphi_0 = \varphi_{far} + \sum_{p=1}^N \varphi^{(p)}, \quad (7)$$

де $T_{far} = \text{Re}\varphi_{far} = \text{Re}(\overline{G}z)$ ($G = G_1 + iG_2$) – потенціал збурення від p -го включення

$$\varphi^{(p)} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n^{(p)} (z - Z_p)^{-n} \quad (1 \leq p \leq N). \quad (8)$$

В (8) $A_n^{(p)}$ – невідомі комплексні сталі; Z_p – комплексна координата центра p -го включення.

Детально процедуру розв'язку викладено в [11]: ми ж зазначимо лише, що вичерпне виконання умов контакту (5) зводить модельну крайову задачу до нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів $A_m^{(q)}$

$$\frac{\tilde{k}+1}{\tilde{k}-1} R^{-2k} \overline{A_m^{(q)}} + (-1)^m \sum_{p \neq q} \sum_{n=1}^{\infty} A_n^{(p)} C_{n+m-1}^m (Z - Z_p)^{-(n+m)} = -\delta_{m1} \overline{G}; \quad q = 1, 2, \dots, N; \quad m = 1, 2, \dots \quad (9)$$

де $\tilde{k} = k_1/k_0$; C_n^m – біноміальний коефіцієнт і δ_{m1} – символ Кронекера.

Дипольні моменти кластера і еквівалентного включення. Для обчислення дипольного моменту кластера включень використаємо формулу (4), записану в комплексних змінних як

$$p = k_0 \int_L \left(\frac{\partial T^{(0)}}{\partial n} z - n T^{(0)} \right) dL, \quad (10)$$

де $p = p_1 + ip_2$ — комплексний дипольний момент; $n = n_1 + in_2$ — комплексний аналог вектора нормалі \mathbf{n} . Підстановка (7) і (8) в (10) дає вираз для сумарного дипольного моменту кластера:

$$p(G, \dots, \tilde{k}) = \sum_{q=1}^N p^{(q)}(G, \tilde{k}) = -2\pi k_0 \sum_{q=1}^N A_1^{(q)}. \quad (11)$$

Вираз для дипольного моменту круглого еквівалентного включення є частинним випадком формули (11). З (9) маємо для одиничного включення $A_1 = \frac{1-\tilde{k}}{1+\tilde{k}} R^2 G$, тому

$$p_{eq}(G, \tilde{k}_{ef}) = -2\pi R_{eq}^2 k_0 \frac{1-\tilde{k}_{ef}}{1+\tilde{k}_{ef}} G \quad (\tilde{k}_{ef} = k_{ef}/k_0). \quad (12)$$

Для дипольного моменту включення квадратної форми аналітичного виразу не існує. В [12] наближену формулу для p_{eq} одержано як Паде-апроксимацію чисельних даних. Уточнений нами варіант формули [12]

$$p_{eq}(G, k) = k_0 R_{eq}^2 (k-1) \frac{2,18844(k^2+1)+4,99543k}{k^3+3,68598(k^2+k)+1} G \quad (13)$$

($k = \tilde{k}_{ef}$) забезпечує обчислення p_{eq} з відносною похибкою менше 10^{-4} .

Чисельний аналіз. Чисельна процедура методу полягає у розв'язанні відносно \tilde{k}_{ef} рівняння (4), яке в наших позначеннях має вигляд

$$p_{eq}(G, \tilde{k}_{ef}) = -2\pi k_0 \sum_{q=1}^N A_1^{(q)}. \quad (14)$$

В (14) $A_1^{(q)}$ визначаються з системи рівнянь (9), а p_{eq} має вигляд (12) для круглого кластера і (13) — для кластера у формі квадрата. Два параметри, які визначають точність розв'язку — це розмір кластера N і кількість гармонік n_{\max} , отриманих в (8) при чисельному аналізі. Для оцінки ступеню впливу вказаних параметрів розглянемо композит з квадратною ґраткою (рис., а) високопровідних ($\tilde{k} = \infty$) включень, маючи на увазі що при тих же N і n_{\max} точність розв'язку для композита зі скінченим значенням контрасту фаз \tilde{k} буде вищою.

В табл. 1 подано значення \tilde{k}_{ef} для ряду значень об'ємного вмісту c і n_{\max} , обчислені з використанням квадратного кластера розміром $N = l^2 = 100$ (l — кількість включень уздовж сторони кластера).

Як видно з табл. 1 принаймні для $c \leq 0,5$ значення $n_{\max} = 10$ забезпечує повну збіжність розв'язку. Для високонаповненого композиту з $c = 0,7$ ($c_{\max} = \pi/4 \approx 0,78$) при $n_{\max} = 10$ відносна похибка складає лише $3 \cdot 10^{-4}$, тобто (як побачимо нижче) значно менше похибки,

зумовленої скінченим розміром кластера. З огляду на сказане, $n_{\max} = 10$ прийнято для подальших розрахунків.

Табл. 2 демонструє збіжність розв'язку в термінах розміру кластера: $N = l^2$ для квадратного та $N \approx 0,8 l^2$ для круглого кластера. Відповідні дані в табл. 2 позначено номером формули для p_{eq} ((12) для круглого і (13) — для квадратного еквівалентного включення). З метою порівняння в останньому рядку таблиці наведено точні значення \tilde{k}_{ef} , держані в [13] модифікованим методом Релея.

Наведені дані переконливо доводять збіжність \tilde{k}_{ef} по розміру як круглого, так і квадратного кластера, при цьому принаймні для даної геометрії композита швидкість збіжності є більшою у випадку квадратного кластера. Для $c = 0,3$ (13) забезпечує повну збіжність вже при $l = 16$; для $c = 0,7$ і $l = 32$ відносна похибка визначення \tilde{k}_{ef} складає 0,8% для квадратного і 1,5% для круглого кластера. Таким чином, модифікований метод Максвела забезпечує обчислення ефективних сталих з довільною точністю і, отже, має всі підстави розглядатись як строгий метод мікромеханіки.

В табл. 3 наведено значення \tilde{k}_{ef} для композитів періодичної (див. рис., а) і випадкової (рис., б) структури, одержані за класичною схемою Максвела (1) та її модифікаціями (12) і

Таблиця 1. Збіжність \tilde{k}_{ef} зі збільшенням n_{\max}

n_{\max}	$c = 0,1$	$c = 0,3$	$c = 0,5$	$c = 0,7$
1	1,2222	1,8570	2,9989	5,6583
3	1,2222	1,8599	3,0716	6,9764
5	1,2222	1,8599	3,0727	7,1525
10	1,2222	1,8599	3,0729	7,2157
15	1,2222	1,8599	3,0729	7,2180
20	1,2222	1,8599	3,0729	7,2180

Таблиця 2. Збіжність \tilde{k}_{ef} зі збільшенням розміру кластера

l	$c = 0,3$		$c = 0,5$		$c = 0,7$	
	р-ня (12)	р-ня (13)	р-ня (12)	р-ня (13)	р-ня (12)	р-ня (13)
4	1,8642	1,8584	3,1130	3,0525	7,7477	6,8337
8	1,8627	1,8597	3,1013	3,0701	7,6510	7,1548
16	1,8619	1,8601	3,0957	3,0765	7,6122	7,3032
24	1,8616	1,8602	3,0929	3,0781	7,5923	7,3491
32	1,8612	1,8602	3,0892	3,0788	7,5417	7,3710
[13]	1,8602		3,0802		7,4327	

Таблиця 3. Ефективна провідність \tilde{k}_{ef} композитів періодичної і неупорядкованої структур

c	Рівняння (1)	Періодична структура			Випадкова структура		
		р-ня (12)	р-ня (13)	[13]	р-ня (12)	р-ня (13)	[14]
0,1	1,2222	1,2223	1,2222	1,2222	1,231	1,231	1,231
0,2	1,5000	1,5005	1,5003	1,5003	1,543	1,542	1,543
0,3	1,8571	1,8612	1,8602	1,8602	1,976	1,974	1,977
0,4	2,3333	2,3541	2,3509	2,3510	2,605	2,601	2,607
0,5	3,0000	3,0892	3,0788	3,0802	3,565	3,558	3,571
0,6	4,0000	4,3685	4,3336	4,3418	5,143	5,112	5,164
0,7	5,6667	7,5417	7,3710	7,4327	7,672	7,629	7,834

(13). Для порівняння тут наведено точні дані для періодичного [13] і неупорядкованого [14] композитів з високопровідними включеннями. Для розрахунків взято $l = 32$ і $n_{\max} = 10$. Розрахункові дані для неупорядкованого композиту (графи 6 і 7) є півсумою ефективних провідностей в напрямках x_1 та x_2 , усередненою по 100 реалізаціях випадкової структури. Для генерації останньої використано алгоритм, описаний в [14].

Наведені дані свідчать, що на відміну від класичного методу Максвелла (1) (друга графа табл. 3), запропонований нами модифікований метод належно враховує вплив мікроструктури композиту на його макроскопічні властивості. Як і у попередньому прикладі, варіант (13) забезпечує покращену збіжність по N у випадку композиту періодичної структури; для неупорядкованого композиту, навпаки, кластер круглої форми забезпечує краще узгодження з [14]. Втім, обидва варіанти забезпечують достовірне прогнозування ефективних сталих в усьому діапазоні зміни об'ємного вмісту включень. При $c = 0,7$ відносна похибка складає близько 1 % для періодичного і 2 % для неупорядкованого композиту, тоді як для стандартної схеми Максвелла (1) вона дорівнює відповідно 24 і 28 %.

Крім іншого, одержані результати кладуть край довготривалій дискусії (наприклад, [2, 5]) стосовно належної форми еквівалентного включення в методі Максвелла. За умови належного врахування взаємодії включень, об'єм і форма еквівалентного включення мають бути такими ж, як і у фрагмента реального композиту, вибраного у якості структурної моделі. Сказане також визначає важливу у практичному відношенні рису методу, яка полягає в здатності прогнозувати ефективні властивості композита безпосередньо по зображенню його мікроструктури.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Maxwell J.C. A treatise on electricity and magnetism. Vol. 1. Oxford: Clarendon Press, 1892. 506 p.
2. Effective Properties of Heterogeneous Materials. M. Kachanov and I. Sevostianov (Eds.) Berlin: Springer, 2013. 389 p.
3. Milton G.W. The Theory of Composites. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2002. 719 p.
4. Mogilevskaya S.G., Crouch S.L., Stolarski H.K., Benusiglio A. Equivalent inhomogeneity method for evaluating the effective elastic properties of unidirectional multiphase composites with surface/interface effects. *Int. J. Solids and Structures*. 2010. **47**. P. 407–418.
5. Mogilevskaya S.G., Stolarski H.K., Crouch S.L. On Maxwell's concept of equivalent inclusion: When do the interactions matter? *J. of Mech. and Phys. of Solids*. 2012. **60**. P. 391–417.
6. Mogilevskaya S.G., Kushch V.I., Koroteeva O., Crouch S.L. Equivalent inhomogeneity method for evaluating the effective conductivities of isotropic particulate composites. *J. Mech. Mater. and Struct.* 2012. **7**. P. 103–117.
7. Kushch V.I., Sevostianov I. Maxwell homogenization scheme as a rigorous method of micromechanics: Application to effective conductivity of a composite with spheroidal particles. *Int. J. Eng. Sci.* 2016. **98**. P. 36–50.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. Изд. 8-е, стереотипное. Москва: Физматлит, 2001. 534 с.
9. Kushch V.I., Sevostianov I. Dipole moments, property contribution tensors and effective conductivity of anisotropic particulate composites. *Int. J. Eng. Sci.* 2014. **74**. P. 15–34.
10. Головчан В.Т., Гузь А.Н., Коханенко Ю.В., Куц В.И. Механика композитов. В 12 т. Т. 1. Статика матеріалів. Київ: Наук. думка, 1993. 456 с.
11. Kushch V.I. Micromechanics of composites: multipole expansion approach. Amsterdam: Elsevier, 2013. 489 p.
12. Avelin J., Sharma R., Hanninen I., Sihvola A.H. Polarizability analysis of cubical and square-shaped dielectric scatterers. *IEEE Transactions on antennas and propagation*. 2001. **49**. P. 451–457.
13. Perrins W.T., McKenzie D.R., McPhedran R.C. Transport properties of regular arrays of cylinders. *Proc. of the Royal Society of London. Series A*. 1979. **369**. P. 207–225.

14. Cheng H., Greengard L. On the numerical evaluation of electrostatic fields in dense random dispersions of cylinders. *J. Computational Physics*. 1997. **136**. P. 629–639.

Надійшло до редакції 23.09.2016

REFERENCES

1. Maxwell, J. C. (1892.). A treatise on electricity and magnetism. Vol. 1. Oxford: Clarendon Press.
2. Kachanov, M. and Sevostianov, I., (Eds.). (2013). Effective Properties of Heterogeneous Materials. Berlin: Springer.
3. Milton, G. W. (2002). The Theory of Composites. Cambridge: Cambridge Univ. Press.
4. Mogilevskaia, S. G., Crouch, S. L., Stolarski, H. K., Benusiglio, A. (2010). *Int. J. Solids and Structures*. 47, pp. 407-418.
5. Mogilevskaia, S. G., Stolarski, H. K., Crouch, S. L. (2012). *J. of Mech. and Phys. of Solids*, 60, pp. 391-417.
6. Mogilevskaia, S. G., Kushch, V. I., Koroteeva, O., Crouch, S. L. (2012). *J. Mech. Mater. and Struct.*, 7, pp. 103-117.
7. Kushch, V. I., Sevostianov, I. (2016). *Int. J. Eng. Sci.*, 98, pp. 36-50.
8. Landau, L. D., Lifshitz, E. M. (2001). Theory of Fields. Izd. 8-e, stereot. Moscow, Fismatlit (in Russian).
9. Kushch, V. I., Sevostianov, I. (2014). *Int. J. Eng. Sci.*, 74, pp. 15-34.
10. Golovchan, V. T., Guz, A. N., Kohanenko, Yu. V., Kushch, V. I. (1993). Mechanics of composites. Vol. 1. Kyiv: Naukova Dumka (in Russian).
11. Kushch, V. I. (2013). Micromechanics of composites: multipole expansion approach. Amsterdam, Elsevier.
12. Avelin, J., Sharma, R., Hanninen, I., Sihvola, A. H. (2001). *IEEE Transactions on antennas and propagation*, 49, pp. 451-457.
13. Perrins, W. T., McKenzie, D. R., McPhedran, R. C. (1979). *Proc. of Royal Society of London. Ser. A*, 369, pp. 207-225.
14. Cheng, H., Greengard, L. (1997). *J. Computational Physics*, 136, pp. 629-639.

Received 23.09.2016

В.И. Кушч, А.Л. Майстренко, В.С. Чернобай

Институт сверхтвердых материалов им. В.Н. Бакуля НАН Украины, Киев

E-mail: volodymyr_mexanik@ukr.net

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД МАКСВЕЛЛА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ ПОСТОЯННЫХ СТРУКТУРНО-НЕОДНОРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Модифицированный метод Максвелла определения эффективных постоянных сформулирован в терминах дипольных моментов фрагмента реального композита и эквивалентного включения. При учете взаимодействия между включениями, метод является строгим в том смысле, что полученная путем решения модельной задачи оценка эффективной постоянной сходится к точному значению при увеличении размера кластера. На примере задачи определения теплопроводности волокнистого композита показано, что метод обеспечивает вычисление с высокой точностью эффективных постоянных композитов как периодической, так и неупорядоченной микроструктуры.

Ключевые слова: композит, эффективные постоянные, метод Максвелла, дипольный момент.

V.I. Kushch, A.L. Maystrenko, V.S. Chernobai

V.N. Bakul Institute for Superhard Materials of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: volodymyr_mexanik@ukr.net

THE MAXWELL MODIFIED METHOD OF DETERMINATION OF EFFECTIVE CONSTANTS OF HETEROGENEOUS MATERIALS

The Maxwell modified method of determination of effective constants is formulated in terms of the dipole moments of a real piece of a composite and the equivalent inclusion. The method is rigorous in the sense that the evaluation of an effective constant converges to the exact value with increasing the cluster size. For example, the problem of determining the thermal conductivity of a fiber composite shows that the method provides the calculation of effective constants with high accuracy for composites with periodic or disordered microstructure.

Keywords: composite, effective constants, Maxwell method, dipole moment.