



МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОТОКОВ ТЕПЛА В НОВЫХ ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ: ОТ МИКРОСТРУКТУРЫ ДО МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ

Андреев Павел Николаевич

Профессор кафедры строительного материаловедения, Казанский федеральный университет
г. Казань Россия

Аннотация

Данная статья посвящена анализу и систематизации современных подходов к моделированию процессов теплопереноса в инновационных теплоизоляционных материалах, чья микроструктура лежит в нанометровом или микроразмерном диапазоне. В условиях острой необходимости повышения энергоэффективности строительных конструкций и снижения тепловых потерь, разработка материалов с минимальной теплопроводностью требует глубокого понимания физических механизмов переноса энергии. Традиционные модели теплопроводности становятся неадекватными для описания таких структур, как аэрогели, вакуумные изоляционные панели и композиты на основе нанотрубок. Рассматривается важность учета всех трех механизмов теплообмена — кондукции, конвекции и излучения — и их специфического взаимовлияния в пористых средах. Особое внимание уделяется численным методам, таким как метод конечных элементов и молекулярная динамика, которые позволяют связать свойства наноструктуры с макроскопическим поведением материала. Сделан вывод о том, что точное компьютерное моделирование является незаменимым инструментом для целенаправленного проектирования и оптимизации новых поколений высокоэффективных теплоизоляционных материалов, ускоряя их выход из лаборатории на рынок.

Ключевые слова: Теплоизоляционные материалы, Моделирование теплопереноса, Наноматериалы, Аэрогели, Теплопроводность, Метод конечных элементов, Молекулярная динамика, Пористые среды.

Введение

Энергоэффективность зданий и промышленных систем является одним из ключевых факторов устойчивого развития. Основной путь повышения этой эффективности лежит через снижение тепловых потерь, что стимулирует непрерывный поиск и разработку теплоизоляционных материалов с экстремально низкой теплопроводностью.

Новые материалы, такие как силикатные аэрогели, вакуумные изоляционные панели и различные нанокompозиты, достигают своих уникальных свойств за счет формирования сложной, многоуровневой структуры, часто оперирующей в микро- и нанометровом диапазоне. Теплоперенос в таких средах перестает подчиняться простым классическим законам, поскольку характерные размеры пор или структурных элементов становятся соизмеримы с длиной свободного пробега молекул газа или длиной волны теплового излучения.

Следовательно, традиционные инженерные модели, основанные на феноменологическом законе Фурье, становятся недостаточными для точного прогнозирования теплофизических характеристик. Возникает острая необходимость в разработке и применении комплексных математических моделей и численных методов, способных учесть все три фундаментальных механизма теплопереноса — кондукцию, конвекцию и радиацию — и их взаимосвязь в новых, гетерогенных материалах. Цель данной статьи — рассмотреть теоретические основы и современные вычислительные подходы к моделированию потоков тепла в инновационных изоляционных материалах, подчеркивая их роль в ускорении процесса материаловедческой инженерии и оптимизации конечных продуктов.

Теоретические Основы Моделирования Теплопереноса в Пористых Средах

Теплоизоляционные материалы, за исключением вакуумных панелей, по своей природе являются пористыми средами, где общая эффективная теплопроводность является суммой вкладов от трех основных механизмов, каждый из которых по-разному зависит от микроструктуры и температуры.

Кондуктивный Теплоперенос в Пористом Каркасе и Газе: Общий кондуктивный перенос тепла разбивается на две составляющие: теплопроводность твердого каркаса и теплопроводность газа, заполняющего поры. Эффективная теплопроводность твердого каркаса зависит от его плотности, извилистости и площади контакта между отдельными частицами. В нанопористых материалах, таких как аэрогели, толщина стенок между порами может быть соизмерима с размером атома, что приводит к значительным эффектам на границах раздела. Теплопроводность газа в порах также критически зависит от размера поры. Когда размер поры становится меньше длины свободного пробега молекул газа, теплопроводность газа резко падает. Это явление, известное как **кнудсеновская диффузия** или режим свободного молекулярного течения, является основным механизмом, обеспечивающим сверхнизкую теплопроводность аэрогелей при нормальном атмосферном давлении. Численные модели должны точно учитывать геометрию пор и распределение давления газа для корректного расчета кнудсеновского фактора снижения теплопроводности.

Радиационный Теплоперенос и Его Ограничение: Тепловое излучение является значимым фактором в высокопористых материалах, особенно при повышенных температурах.

Радиационный теплоперенос происходит через поры, и его вклад в общую эффективную теплопроводность может доминировать над кондукцией и конвекцией. Использование **радиационных заглушителей** — мелкодисперсных частиц с высокой оптической плотностью, таких как углеродная сажа или оксиды металлов — является ключевой стратегией в новых изоляционных материалах. Моделирование радиационного теплопереноса требует применения методов теории переноса излучения, таких как метод дискретных ординат, для расчета коэффициентов рассеяния и поглощения, которые, в свою очередь, зависят от размера и концентрации нанодобавок в изоляционном матриксе. Влияние излучения также зависит от макроскопической толщины слоя изоляции, что усложняет интегрированное моделирование.

Нanomатериалы и Мультифизические Модели

Новые теплоизоляционные материалы часто являются гетерогенными, многофазными композитами, что требует использования мультифизических моделей для адекватного описания их поведения.

Моделирование Аэрогелей и Нанопористых Композитов: Аэрогели, обладающие чрезвычайно высокой пористостью более 90% и размерами пор менее 100 нанометров, являются эталоном сверхлегкой изоляции. Для моделирования теплопереноса в аэрогелях часто используется **модель фрактальной геометрии** или **случайные сетевые модели**, которые позволяют описать сложную, нерегулярную структуру скелета материала. Эти модели позволяют оценить вклад кондуктивного переноса через твердый каркас, который обычно составляет не более 10% процентов от общей теплопроводности. Однако наиболее важным является точное описание взаимодействия теплопроводности газа и твердого каркаса, а также влияния влажности. Гидрофильность или гидрофобность аэрогелей, контролируемая нанопокрывтиями, существенно влияет на их долгосрочную тепловую стабильность и требует введения связанных моделей тепло- и массопереноса.

Вакуумные Изоляционные Панели и Их Деградация: Вакуумные изоляционные панели достигают рекордно низкой теплопроводности за счет практически полного устранения газовой кондукции. В основе этих панелей лежит микропористый или нанопористый наполнитель, например, силикатная сажа или фибролит, заключенный в герметичную оболочку. Моделирование в данном случае должно фокусироваться не столько на теплопереносе, сколько на **прогнозировании долгосрочной эффективности**. Основной путь деградации — это **постепенное проникновение газа** через оболочку. Мультифизические модели в этом контексте включают уравнения газовой диффузии в оболочке и моделирование кинетики адсорбции газа на внутренней поверхности нанопористого наполнителя, что определяет скорость роста внутреннего давления и, соответственно, рост эффективной теплопроводности панели со временем.

Методы Численного и Компьютерного Моделирования

Для решения сложных дифференциальных уравнений теплопереноса в гетерогенных средах используются мощные численные методы.

Метод Конечных Элементов и Конечных Разностей: Для моделирования макроскопического теплопереноса в сложных геометрических объектах, таких как стеновые панели или композитные конструкции, широко используется метод конечных элементов. Он позволяет точно учесть граничные условия, неоднородность материала и наличие тепловых мостов. Однако для микроуровня, например, для анализа теплового потока в отдельных порах или волокнах, более подходящими являются методы, основанные на геометрии.

Метод Монте-Карло: Используется для моделирования радиационного теплопереноса, где траектории фотонов отслеживаются стохастически в пористой структуре. Это позволяет получить высокоточные данные о коэффициентах излучательной способности и рассеяния, которые затем используются в макроскопических моделях.

Молекулярная Динамика и Мезоскопические Методы: Для материалов с размерами пор в нанометровом диапазоне, где классические законы неприменимы, используются методы, основанные на фундаментальных физических принципах. **Молекулярная динамика** позволяет моделировать движение атомов и фононов в твердом каркасе, обеспечивая понимание механизмов рассеяния тепла и переноса энергии на атомарном уровне. Эти расчеты критически важны для проектирования нанокомпозитов, таких как изоляторы, армированные углеродными нанотрубками, где теплопроводность зависит от качества интерфейса между матрицей и нанонаполнителем. **Мезоскопические методы**, такие как метод Больцмана на решетках, позволяют моделировать конвекцию газа в порах с размерами, превышающими длину свободного пробега, что является идеальным для изучения тонких слоев теплоизоляции и их поведения при наличии микродефектов.

Заключение

Моделирование потоков тепла является незаменимым инструментом в разработке и оптимизации новых теплоизоляционных материалов. Переход к наноструктурированным материалам, таким как аэрогели и вакуумные панели, требует отказа от упрощенных феноменологических моделей и использования комплексных, мультифизических подходов, способных учесть все механизмы теплопереноса. Точное моделирование кнудсеновской диффузии, радиационного заглушения и долгосрочной деградации вакуумных панелей позволяет инженерам целенаправленно проектировать материалы, избегая дорогостоящих итераций экспериментальных образцов. Успешное сочетание методов молекулярной динамики для атомарного уровня, моделей Монте-Карло для радиации и метода конечных элементов для макроскопического анализа открывает путь к созданию теплоизоляционных материалов со следующими поколениями коэффициентов

теплопроводности, что имеет решающее значение для достижения целей глобальной энергоэффективности.

Литература

1. Incropera, F. P., DeWitt, D. P., Bergman, T. L., Lavine, A. S. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Wiley, 2017.
2. Zeng, S., Greif, R., Lee, C. F. *Heat transfer in porous media and its application to thermal insulation*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2011.
3. Pore, V., S. S. *A review on porous materials and their applications in thermal insulation*. Applied Energy, 2015.
4. Jelle, B. P. *Traditional, state-of-the-art, and future thermal building insulation materials and solutions*. Energy and Buildings, 2011.
5. Zhao, B., B. J. *Molecular dynamics simulation of thermal transport in amorphous silica aerogels*. Nano Energy, 2018.
6. Скворцов, О. В., Петров, И. А. *Теплофизика строительных материалов*. Издательство УГТУ, 2023.
7. Григорьев, В. М. *Численное моделирование тепловых процессов в гетерогенных средах*. Вестник Казанского технологического университета, 2024.