



УДК 537.226.33

© 2004 г. **П.И. Кушнарев,**
А.Г. Масловская,
А.А. Согр, канд. физ.-мат. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА В ОКРЕСТНОСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА¹

Проведено моделирование пироотклика пироэлектрика в нелинейном режиме. Исследованы особенности формы пиросигнала, обусловленные наличием температурных зависимостей пироэлектрических и теплофизических характеристик. Для одномерной задачи приведено сопоставление экспериментальных данных, полученных для кристалла триглицинсульфата, с результатами моделирования.

Введение

При рассмотрении пироэффекта в большинстве работ авторы исходят из линейных характеристик изучаемых образцов [1]. Однако это соответствует слабому прогреву – при тепловых потоках большой мощности форма пиросигнала может быть искажена вследствие наличия ярко выраженных температурных аномалий пироэлектрических коэффициентов вблизи температуры фазового перехода. В данной работе представлено моделирование формы пироотклика от воздействия точечного сфокусированного источника тепла на нелинейные кристаллы, прогреваемые выше температуры Кюри, а также приведены оценки влияния особенностей характеристик кристалла на вид пиросигнала. Моделирование формы пироотклика проводилось с учетом решения как трехмерной задачи со сферической симметрией, так и одномерной задачи. Решение задачи в одномерном случае упрощает сравнение с экспериментальными данными.

Постановка задачи и методика решения

Для кристалла триглицинсульфата (ТГС) вблизи сегнетоэлектрического фазового перехода наблюдаются следующие аномалии температурных зависимостей характеристик кристалла: скачок коэффициента тепло-

¹ Статья написана в рамках плана работ по ЕЗН 2004 г. «Исследование взаимодействия электронных пучков с полярными диэлектриками».

вой диффузии, пиковая зависимость пироккоэффициента от температуры и характерный λ -образный пик теплоемкости в точке Кюри, измерения которых проведены в работах [2 – 4].

Кроме того, коэффициент теплопроводности k_T не является независимым параметром, он связан с удельной теплоемкостью кристалла c и коэффициентом тепловой диффузии a^2 соотношением: $k_T = a^2 \rho c$. Расчет по экспериментальным данным, полученным для кристалла ТГС, показывает, что аномалии кривой коэффициента теплопроводности k_T вблизи точки Кюри сравнительно малы, поэтому в нашей модели он полагался постоянным.

В модели не учитывалось влияние электрического поля на поляризованность кристалла, а также наличие электрокалорического эффекта.

Пироток в кристалле определяется скоростью изменения температуры в каждой его точке [5]:

$$I(t) = \frac{1}{d} \iiint_V \gamma(T) \frac{\partial T}{\partial t} dV, \quad (1)$$

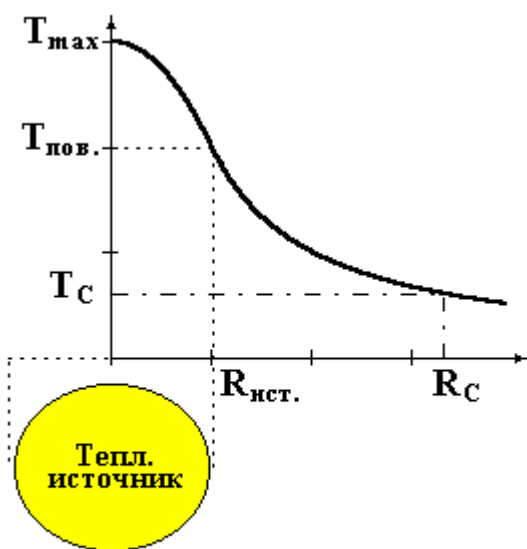


Рис. 1. Стационарное распределение температуры $T(r,t)$.

где $\gamma(T)$ – пироккоэффициент; d – толщина кристалла.

Тепловое поле в образце описывается стандартным дифференциальным уравнением [6]. В нашей задаче источник имел форму сферы с радиусом R и постоянной объемной плотностью мощности f . Для источника тепла (рис. 1), действующего вблизи поверхности кристалла, задача формулируется для полупространства. Дополняя полупространство до безграничного пространства, можно считать, что тепловой зонд действует в полном пространстве, удваивая его мощность.

ность.

В работе мы приняли следующую систему нормировки. Коэффициент теплопроводности полагался постоянным и равным единице. Комнатная температура соответствовала нулевому уровню, а температура Кюри – единице. Масштабы длины и времени согласовывались через значение коэффициента тепловой диффузии при комнатной температуре, где его величина устанавливалась равной единице. Значение пироккоэффициента при комнатной температуре также полагалось равным единице. Такая нормировка обеспечивала высокую наглядность численных результатов. Мощность источника удобно характеризовать максимально достижимой темпе-

ратурой в центре либо радиусом, на котором достигается температура Кюри, – «радиусом Кюри». Так, в стационарном случае при объемной плотности мощности $f = 3$ температура Кюри достигалась на границе источника (т.е. при $R = 1$). Толщина кристалла d , как свободный параметр, выбиралась под единственный уровень пиротока.

Очевидно, что через некоторое время после включения источника в ближней зоне устанавливается стационарное температурное распределение, дальних областей тепловой фронт еще не достиг, поэтому существует некоторая «динамическая зона» – зона наиболее быстрого изменения температуры.

Положение этой зоны в линейном случае определяется в соответствии с критерием Фурье: $r^2 = a^2 t$, что в нормированном виде при согласовании масштабов выражается как: $r^2 \approx t$. Именно эта динамическая зона определяет пироток образца.

Моделирование конфигурации теплового поля и формы пиротоклика проводилось в среде Matlab.

Уравнение теплопроводности с учетом симметрии задачи преобразуется к следующему виду:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 2 \frac{a^2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{f}{\rho c}, \quad (2)$$

где a^2 – коэффициент тепловой диффузии; ρ – плотность среды; c – удельная теплоемкость; f – объемная плотность мощности источника.

Применение метода конечных разностей для задач со сферической симметрией [6] и явной разностной схемы к уравнению теплопроводности позволяет перейти к разностным уравнениям, определяющим набор температурных значений в узлах сеточной области и аппроксимирующих температурное распределение в образце:

$$T_{i,j} = T_{i,j-1} + \frac{a^2 \Delta t}{r \Delta r} (iT_{i+1,j-1} - 2(i-1)T_{i,j-1} + (i-2)T_{i-1,j-1}) + \frac{f}{\rho c} \Delta t. \quad (3)$$

В данной работе температурные зависимости теплоемкости и пирокоэффициента аппроксимировались модельными функциями, повторяющими основные особенности экспериментальных данных [3 – 4] (при нормировке были согласованы: начальный уровень, высота и ширина пика вблизи точки Кюри). Значение теплоемкости $c(T_{ij})$ в каждом узле вычислялось с использованием следующей модельной зависимости (рис. 2 а)²:

$$c(T) = \begin{cases} 0.95 + \frac{0.066}{1.33 - T} + \frac{6}{70} T, & \text{при } T < 1 \\ 0.95 + \frac{6}{70} T, & \text{при } T \geq 1. \end{cases} \quad (4)$$

² На рис. 2: сплошная линия – модельные кривые; точки – экспериментальные данные.

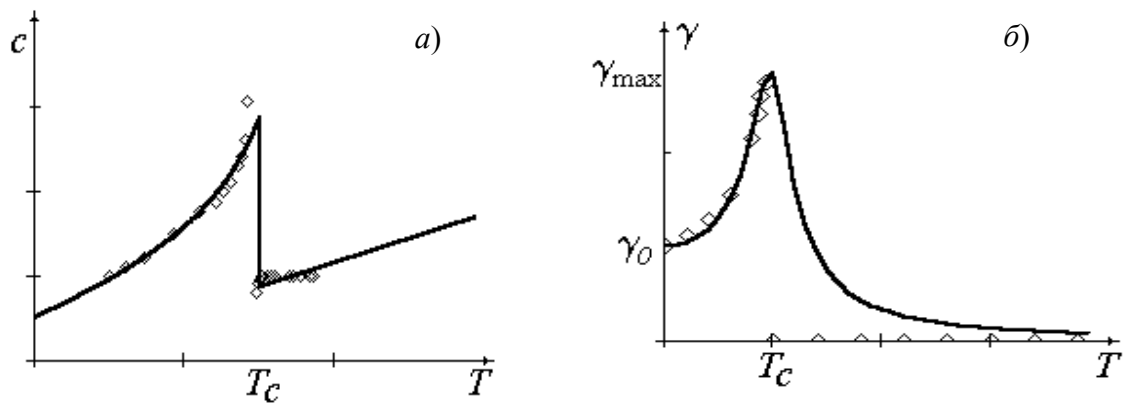


Рис. 2. Характеристика зависимости от температуры теплоемкости (а) и пирокoeffициента (б).

Для значения пирокoeffициента $\gamma(t)$ нами использовалась следующая аналитическая зависимость (рис. 2 б):

$$\gamma(T) = \frac{1}{\sqrt{(T_C^2 - T^2)^2 + \alpha T^2}}. \quad (5)$$

В результате моделирования получено нестационарное температурное распределение в образце нелинейного кристалла, созданное непрерывно действующим точечным источником постоянной интенсивности.

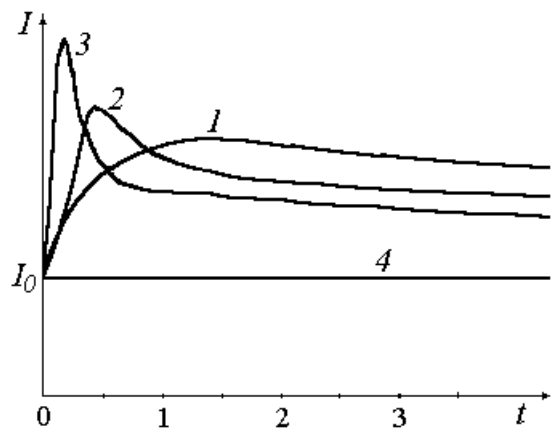


Рис. 3. Форма пироотклика.

Расчет пиротока (1) проводился с учетом конфигурации теплового поля (3), а также с использованием процедур численного дифференцирования и интегрирования. Результат моделирования представлен на рис. 3, где объемная плотность мощности источника $f = 3$ (кривая 1), $f = 5$ (кривая 2), $f = 7$ (кривая 3), $f \ll 1$ (кривая 4). Начальные значения амплитуды I_0 пропорциональны плотности мощности f , но на

рис. 3 масштабы по оси ординат приведены к одному уровню I_0 . При этом за меру остроты пика можно принять отношение уровня максимума I_{\max} к начальному уровню I_0 .

Анализ результатов

В отличие от формы импульса для линейной модели (ступеньки) на пироимпульсе наблюдается характерный пик, проявляющийся на малых временах, и дальнейшее спадание сигнала от максимального уровня к начальному – I_0 . При этом уровень максимума пиротока и соответствующее время зависят от объемной плотности мощности источника f .

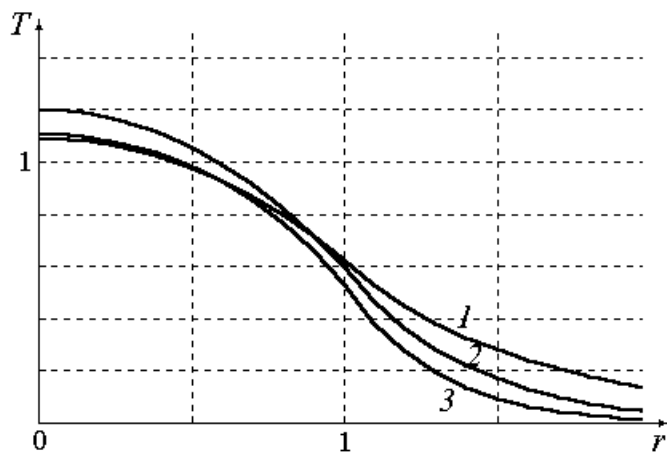


Рис. 4. Профиль температуры во времени, соответствующие максимальному пироотклику.

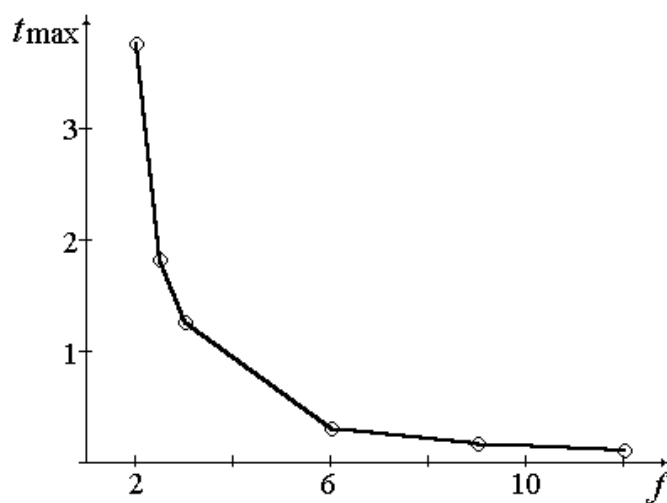


Рис. 5. Зависимость положения времени максимума t_{\max} от объемной плотности мощности источника f .

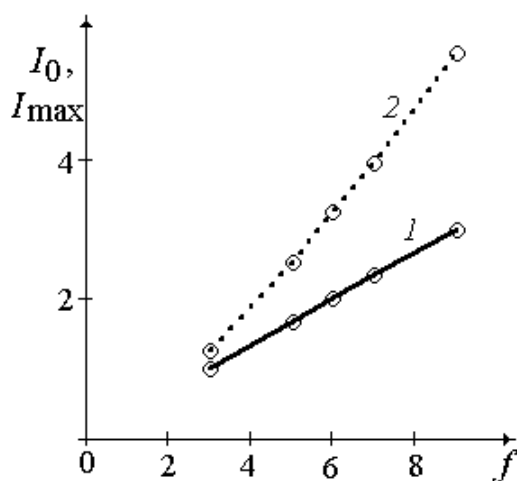


Рис. 6. Зависимость параметров кривой пироотклика от объемной плотности мощности источника f .

В начальные моменты времени кристалл не успевает прогреваться, и начальные уровни пироотклика линейного и нелинейного пироэлектрика практически совпадают. Нарастание и максимум свидетельствуют о достижении температуры Кюри в некоторых областях кристалла при расширении "динамической зоны". Дальнейшее падение объясняется снижением температуры в динамической зоне с течением времени и переходом кристалла в линейный режим.

Оказывается, что максимум пироотклика приходится на такую конфигурацию теплового поля, при которой температура Кюри достигается на расстояниях, примерно равных половине радиуса источника независимо от объемной плотности мощности (рис. 4), где объемная плотность мощности источника $f = 3$ (кривая 1), $f = 5$ (кривая 2), $f = 7$ (кривая 3).

Причем, как видно из рис. 5, с ростом мощности f время достижения положения максимума уменьшается. Величина пироотклика стремится к уровню I_0 , поскольку в динамической зоне нагрев уменьшается и реализуется линейная модель.

Зависимости начальной амплитуды I_0 и уровня максимума I_{\max} от объемной плотности мощности представлены на рис. 6, где кривые 1 – начальная амплитуда I_0 , 2 – максимальный уровень I_{\max} .

I_0 растет пропорционально f , как и следовало ожидать, – в начальные моменты времени модель работает в ли-

нейных условиях, I_{\max} растет быстрее, чем I_0 . Это связано с тем, что с ростом мощности нелинейность характеристик кристалла проявляется быстрее.

Для детального анализа характера поведения кривой пироотклика нами было проведено отдельное исследование: рассмотрена форма пироимпульса при постоянном значении γ и теплоемкости, зависящей от температуры. Как показали расчеты, зависимость теплоемкости от температуры мало изменяет тепловой фронт и оказывает лишь незначительное влияние на уровень характерного пика. Приоритетным является влияние нелинейности пирокоэффициента $\gamma(T)$.

При этом за характерную остроту пика целесообразно было принять величину, равную отношению уровня максимума γ_{\max} к уровню γ_0 – значению γ при комнатной температуре. Все приведенные выше результаты примерно соответствуют остроте пика $\gamma_{\max} = 3$. Для выявления роли нелинейности $\gamma(T)$ в нашей модели острота пика в точке Кюри варьировалась.

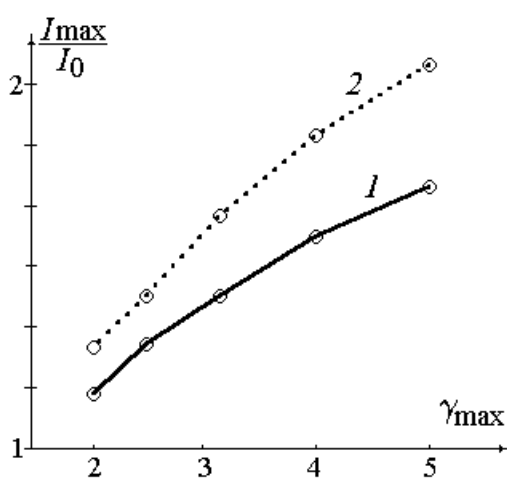


Рис. 7. Зависимость максимума пиротока от остроты пика γ_{\max} .

На рис. 7 представлена зависимость пикового значения пиро сигнала от степени остроты пика $\gamma(T)$, где объемная плотность мощности $f = 6$ (кривая 1), $f = 9$ (кривая 2). При этом при увеличении объемной плотности мощности источника быстрее нарастает и относительный уровень максимума пиротока.

Сравнение с экспериментом

Для сферических источников малого радиуса существует сложность сопоставления результатов моделирования с экспериментальными данными, т.к. радиус теплового источника является трудно контролируемым параметром, а наличие электродов в кристалле несколько искажает тепловое поле на малых расстояниях. Поэтому нами было проведено решение одномерной задачи для представленной выше модели.

В одномерной задаче образец представлял собой тонкую пластину с толщиной $d \ll \sqrt{S}$. В экспериментальной установке пластина ТГС с нанесенными на грани электродами освещалась однородным по площади световым потоком. Сигнал регистрировался с помощью самописца. В этом случае тепловое поле являлось функцией одной координаты x . Уравнения модифицировались с учетом симметрии задачи. Расчет проводился для конечной толщины кристалла, что приводило к спаданию пиротока насыщения на нулевой уровень (рис. 8).

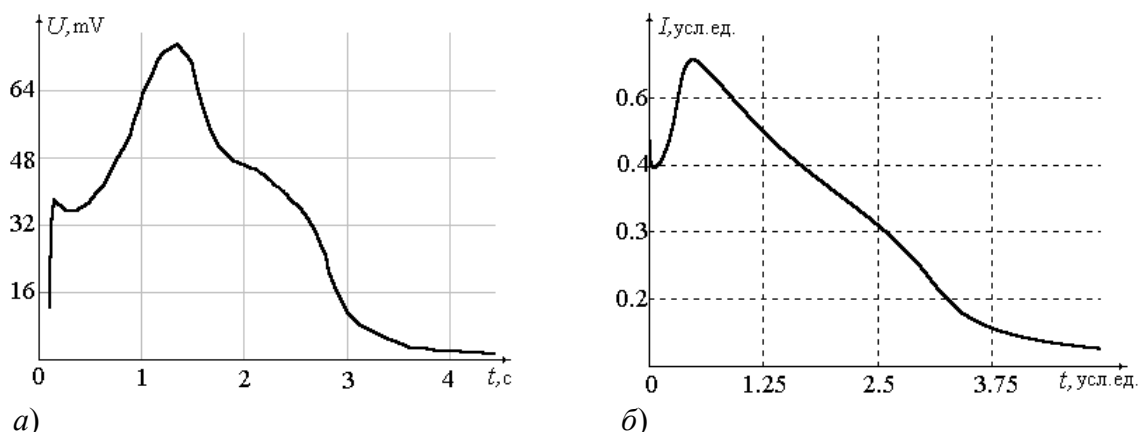


Рис. 8. Пироотклики сегнетоэлектрического кристалла в нелинейном режиме: (а) – экспериментальная кривая; (б) – модельная кривая.

Для одномерной задачи мощность источника удобно охарактеризовать не "радиусом Кюри", а "временем Кюри" – временем, в течение которого весь кристалл прогреется до температуры Кюри и фронт перехода достигнет задней грани.

Заключение

Установлено, что в нелинейном режиме форма пироотклика претерпевает изменения. Кривая пироимпульса имеет характерный пик, причем с ростом объемной плотности мощности относительная высота пика растет, а время достижения пика уменьшается.

Расчеты показали, что аномальный вид зависимости теплоемкости от температуры незначительно влияет на форму пироотклика, основным же фактором, определяющим нелинейность пироотклика, является пиковая зависимость пирокоэффициента от температуры. Проведенное моделирование формы пироотклика нелинейного пироэлектрика для одномерной задачи качественно подтверждается полученными экспериментальными данными. Представленная модель позволяет исследовать форму пироотклика нелинейного кристалла, обусловленную наличием температурных зависимостей теплофизических и пироэлектрических характеристик. Подобные исследования актуальны с точки зрения принципиальной возможности экспериментальной оценки характера нелинейности кристалла по форме пиросигнала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Малышкина О.В., Бильдина Н.Б. Метод восстановления распределения поляризованности в поверхностном слое кристаллов группы ТГС по форме пироотклика при прямоугольной модуляции теплового потока. // Ученые записки. Т.1. Тверь: Изд-во ТвГУ, 1996. С.116-117.
2. Пронина А. А., Богомолов А. А., Чернышева Н. Н. Коэффициент тепловой диффузии кристаллов ТГС с различными примесями. // Тез. докл. XVI Всерос. конф. по физике сегнетоэлектриков, 2003. С. 50.



3. Струков Б. А., Рагула Е. П., Архангельская С. В., Шнайштейн И. В. О логарифмической сингулярности теплоемкости вблизи фазовых переходов в одноосных сегнетоэлектриках // Физика твердого тела. 1998. Т. 40. №1. С.106-108.
4. Bogomolov A. A., Malyshkina O. V., Solnyshkin A. V. Effects of temperature gradient on the surface domain structure in DTGS crystals. // Ferroelectrics. 1997. Vol.191. P. 313-317.
5. Рудяк В. М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах. М.: Наука, 1986.
6. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука. 1964.

Статья представлена к публикации членом редколлегии Е.С. Астаповой.

УДК 681.326.7:532

© 2004 г. С.И. Орлов

(Институт автоматизации и процессов управления, Владивосток)

О ПОСТРОЕНИИ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОБЪЕКТА ТЕПЛО-, ВОДОСНАБЖЕНИЯ

На примере одной из задач анализа метрологических погрешностей измерений в теплоэнергетике обосновывается целесообразность применения многопроцессорных вычислительных систем для построения теплоэнергетических моделей.

Введение

В сферу научных исследований в настоящее время вводится все большее число сложных технических систем. Их сложность, кроме многообразия внутренних связей и зависимостей, в основном определяется большим числом измеряемых параметров, многомерностью расчетных и оптимизационных критериев и растущим с течением времени объемом накапливаемой архивной информации, подлежащей аналитической и статистической обработке. Для решения таких задач все чаще приходится применять параллельные и распределенные методы вычислений.

При создании и модернизации распознающих и диагностирующих автоматизированных информационных систем технического мониторинга (контрольно-учетные системы) широко применяются методы регрессионно-статистического анализа для построения численных моделей типа "черный ящик". Если раньше при разработке таких систем доминировал качественный (аналитический) метод анализа, то теперь разработаны много-