УДК 536.2:621.078

Т.М. Босенко

Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара

МОДЕЛЮВАННЯ ПОЛЯРИЗАЦІЇ ЕЛЕКТРЕТА В УМОВАХ ТЕПЛОВОГО РЕЛАКСУВАННЯ

Досліджено числові розв'язки осцилятора з урахуванням теплової пам'яті для еволюційної моделі поляризації електрета, що описує вимушену релаксацію з врахуванням поляризаційних та термодинамічних ефектів.

Ключові слова: короноелектрет, осцилятор з пам'яттю, метод малого параметру.

Исследованы численные решения осциллятора с памятью для эволюционной модели поляризации электрета, которая описывает вынужденную релаксацию с учётом поляризационных и термодинамических эффектов.

Ключевые слова: короноэлектрет, осциллятор с памятью, метод малого параметра.

The numerical solutions have been studied for oscillator with memory electret polarization evolutionary model that describes an external effects relaxation taking into account polarization and thermodynamic effects.

Key words: coronoelectret, oscillator with memory, method of small parameter.

Вступ. Композиційні короноелектрети займають особливе місце серед полімерних матеріалів, використовуваних у сучасних пристроях і техніці. Саме поєднанню механічних, електричних і оптичних властивостей, які мають композити, обумовлена пильна увага дослідників до цих матеріалів. Численні експерименти призвели до розробки поглибленого теоретичного опису фізичних процесів, що відбуваються при виготовленні електретів, при вільній релаксації в процесі зберігання матеріалів та в процесі поляризації/деполяризації, коли матеріал знаходиться в робочому режимі.

Ряд процесів у механіці, електротехніці та в інших областях характеризуються тим, що праві частини диференціальних рівнянь, які описують їх динаміку, зазнають розриви залежно від поточного стану процесу. У роботі розглянуто періодичні розв'язки з періодом, рівним періоду зовнішньої сили та їх стійкості при малих відхиленнях, що дозволяє уникати нестійких розривів у розв'язках. Для знаходження періодичних розв'язків використовується метод Пуанкаре, який дозволяє асимптотично розв'язати задачу для випадкових коливань. Питання про стійкість знайденого розв'язку при малих відхиленнях розкриває метод Ляпунова [7].

Математична модель поляризації електрета. З теоретичної позиції задача релаксаційного впливу є ієрархічною проблемою, яка об'єднує три аспекти : електростатику поляризаційних багатокомпонентних середовищ, теорію в'язкопружності зразків, що деформуються, та термодинаміку об'єктів реологій. Основою для такого теоретичного опису може служити розширена (причинна) термодинаміка швидкісних процесів. Для опису електричних реологій і теплових явищ в електретах використовують три підсистеми базових рівнянь Максвела[1] :

$$div\left(\vec{E}+\vec{P}\right)=4\pi\rho\,,\qquad rot\vec{E}=0\,, \tag{1}$$

а також рівняння в'язкопружності та рівняння теплопровідності

$$\mu\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=f^{\alpha}+\frac{\partial^2\sigma^{\alpha\beta}}{\partial x^{\beta}},\ c\frac{\partial T}{\partial t}=-div\vec{Q}. \tag{2}$$

Функції джерел – щільність заряду ρ і об'ємна сила f^{α} – вважаються заданими, як і макроскопічні параметри: μ – щільність матеріалу, c – теплоємність. Рівняння цієї підсистеми мають загальний характер, а кожна фізична модель визначається відповідним набором конституційних співвідношень, що зв'язують між собою вектор поляризації $\vec{P}$, вектор електричного поля $\vec{E}$, тензор напруги $\tau^{\alpha\beta}$, температуру T, тепловий потік $\bar{Q}$, тензор деформацій $e^{\alpha\beta}$, виражений через вектор зміщень $\vec{u}_{\alpha}$ таким чином:

$$e^{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_{\alpha}}{\partial u_{\beta}}+\frac{\partial u_{\beta}}{\partial u_{\alpha}}\right). \tag{3}$$

Конституційні рівняння. Відмінна особливість представленого підходу – рівняння, що враховують запізнювання відгуку за допомогою інтегро-диференціальних операторів спеціального типу.

Так, відхилення миттєвого значення поляризації зразка $P^{\alpha}(t)$ від її стаціонарного значення $P_0^{\alpha}(t)$

$$P^{\alpha}(t)=\chi_{\beta}^{\alpha}E^{\beta}+p^{\alpha}(T-T_0)+O(Q^{\alpha\beta})+\ldots$$

представляється у вигляді

$$P^{\alpha}(t)-P_0^{\alpha}(t)=-\tau_{(p)}\frac{\partial P^{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial t}\left(G_{\beta}^{\alpha *}E^{\beta}+G_{\beta}^{\alpha}\frac{\partial E^{\beta}}{\partial t}\right)+$$
$$+\int_0^t B_{\beta}^{\alpha *}(t-\tau)\cdot E^{\beta}(\tau)d\tau+\int_0^t F_{\beta}^{\alpha *}(t-\tau)\cdot\sigma^{\beta}(\tau)d\tau. \tag{4}$$

Аналогічно відхилення миттєвого значення тензора напруги $\sigma^{\alpha\beta}$ від стаціонарної напруги

$$\sigma^{\alpha\beta}(t)-\sigma_0^{\alpha\beta}(t)=-\tau_{(\sigma)}\frac{\partial\sigma^{\alpha\beta}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial t}\left(G_{\lambda\nu}^{\alpha\beta *}e^{\lambda\nu}+G_{\lambda\nu}^{\alpha\beta}\frac{\partial e^{\lambda\nu}}{\partial t}\right)+$$
$$+\int_0^t H_{\gamma\nu}^{\alpha\beta *}(t-\tau)\cdot e^{\gamma\nu}(\tau)d\tau+\int_0^t J_{\gamma\nu}^{\alpha\beta *}(t-\tau)\cdot E^{\gamma\nu}(\tau)d\tau.$$

Для теплового потоку Q^{α} отримаємо співвідношення:

$$Q^{\alpha}(t)-Q_0^{\alpha}(t)=-\tau_{(Q)}\frac{\partial Q^{\alpha}}{\partial t}+O\left(k^{\alpha\beta}\frac{\partial T}{\partial x^{\beta}}\right)\ldots \tag{5}$$

Співвідношення такого типу засновані на ідеях Максвела, Кельвіна, Каттанео. У конституційних рівняннях (1–5) входять параметри двох типів. Це параметри, що визначають стаціонарний стан, такі як електрична проникність χ_{β}^{α} та коефіцієнти

теплопровідності $k^{\alpha\beta}$. Інша група параметрів, що управляють, включає феноменологічні тензорні коефіцієнти, що стоять у формулах (1–5) перед похідними за часом або в інтегралах типу згортки.

Для побудови моделі електрета при вільній і вимушеній релаксації обмежемось випадком теплової релаксації, яка використовує в основі своїй функцію пам'яті для поляризації виду:

$$P^{\alpha}\left(t\right)=P_{0}^{\alpha}\left(t\right)+\int_{0}^{t}\chi_{\beta}\left(t-\tau\right)\cdot E^{\beta}\left(\tau\right)d\tau \tag{6}$$

з різницевим ядром

$$\chi\left(t-\tau\right)=\frac{\beta L}{4\pi\tau^{\beta}}\left(t-\tau\right)^{\beta-L}\cdot\exp\left(-\left[\frac{t-\tau}{\tau^{\beta}}\right]^{\beta}\right). \tag{7}$$

Ця модель відтворює розв’язок з так званими ″розтягнутими″ експонентами, або функціями Кольрауша-Вільямса-Ваттеса (KWW)[8; 9], і в класичному феноменологічному виразі (7) має вигляд:

$$\varphi\left(t\right)=\exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\beta}\right). \tag{8}$$

Вираз (8) має теоретичне обґрунтування в термінах статичної механіки, релаксаційна функція KWW - типу може бути отримана аналітично у рамках самоузгодженої моделі релаксації, в якій поляризаційна щільність заряду і щільність внесених в систему зарядів пов'язані різницевими співвідношеннями. Опис релаксаційних явищ за допомогою ″розтягнутих″ експоненціальних функцій (7) є характеристичною властивістю неврегульованих систем, подібних до полімерів і склоподібних матеріалів, в яких динамічні процеси відбуваються одночасно в багатьох відносних часових шкалах.

Релаксаційна функція KWW - типу може бути представлена суперпозицією одноелектронних функцій (8) з урахуванням ваги доданків, де параметр β характеризує ширину розподілу часу релаксації, яка залежить від перебудови сегментів полімерного ланцюга.

Для дослідження моделі електрета при поляризації і деполяризації важливим є початковий час впливу на композитне різницеве ядро (7), яке в загальному випадку визначається з хвилевих рівнянь Максвелла, проте для спрощення моделі було використано рівняння (2).

Після встановлення термодинамічної рівноваги хвильові явища стають несуттєвими. Ця задача ставиться для систем при часах сумірних з істотним впливом хвильової нестабільності, отже необхідно окремо досліджувати різницеве ядро (8) для часів активної релаксації (коли йде безпосередня поляризація і деполяризація електрета).

Поляризація короноелектрета. Розглянемо систему, в якій під впливом зовнішньої сили, відбувається поляризація короноелектрета. Для даного режиму впливу використовується модифіковане рівняння Ван дер Поля [4; 6; 7]:

$$\frac{d^{2}x}{dt^{2}}-\chi\left(1-x^{2}\right)\frac{dx}{dt}+x\chi=0, \tag{9}$$

де χ змінюється за формулою (8).

Початкові умови:

$$\begin{cases} x_i\big|_{t=0} = \sum\limits_{k=1}^{i-1} x_k\left(\Delta t_k\right), \\ \dfrac{\partial x_i}{\partial t}\Bigg|_{t=0} = \sum\limits_{k=1}^{i-1} \dfrac{\partial x_k\left(\Delta t_k\right)}{\partial x}. \end{cases} \tag{10}$$

Початкові умови визначають на кожному і-тому впливі релаксаційну температуру, що є суперпозицією попередніх температур після взаємодії зовнішніх теплових збурень[2; 3; 5].

Крайові функції належать класу функцій: $x(t), \chi(t) \in C^2(\Omega)$. Функція $x(t)$ визначена та рівномірно обмежена в області $\Omega = \{t, \chi : t \in G, \tau_r \le t < 0\}$. Величина $\Delta t_k = \Delta\tau_r = \tau_r \approx 10^{-8} c$ (довжина імпульсу за часом) визначає час впливу і-го імпульсу на матеріал. Для спрощення моделі прийнято, що величина впливу і-го імпульсу стала для релаксаційного процесу, довжина імпульсу за часом однакова, проміжок між попереднім і подальшим імпульсами сталий. Результати чисельного розрахунку поляризації короноелектрета представлені на рис.1. З часом електрет накопичує максимальний заряд та зменшує вплив релаксаційної компоненти на процес поляризації.

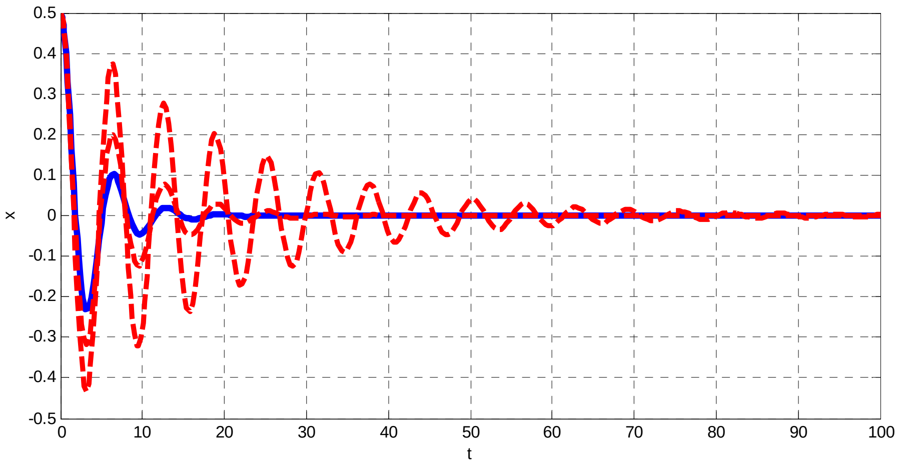

Рис. 1. Поляризація короноелектрета за функцією релаксації KWW-типу в умовах накопичення заряду на поверхні матеріалу

Проілюстровано симуляцію експериментальної залежності релаксації поверхневої щільності заряду за формулою (8) на основі діоксиду кремнію в рамках феноменологічного підходу, що використовує в узагальненому випадку релаксаційну функцію KWW-типу.

Деполяризація короноелектрета. Розглянемо систему, в якій під впливом зовнішньої сили, відбувається деполяризація короноелектрета. Відповідна постановка задачі має вигляд [4; 6; 7]:

$$\frac{d^2x}{dt^2}-\chi\left(1-x^2\right)\frac{dx}{dt}+x\chi=0, \tag{11}$$

де χ змінюється за формулою (8), тим самим враховується так звана теплова пам'ять короноелектрета. Це дозволяє визначали ефективну деполяризацію електрета при наповненні матеріалу домішками.

Початкові умови:

$$\begin{cases} x_i\big|_{t=0}=\Delta t, \\ \left.\dfrac{\partial x_i}{\partial t}\right|_{t=0}=0. \end{cases} \tag{13}$$

Результати чисельного розрахунку деполяризації короноелектрета представлені на рис. 2.

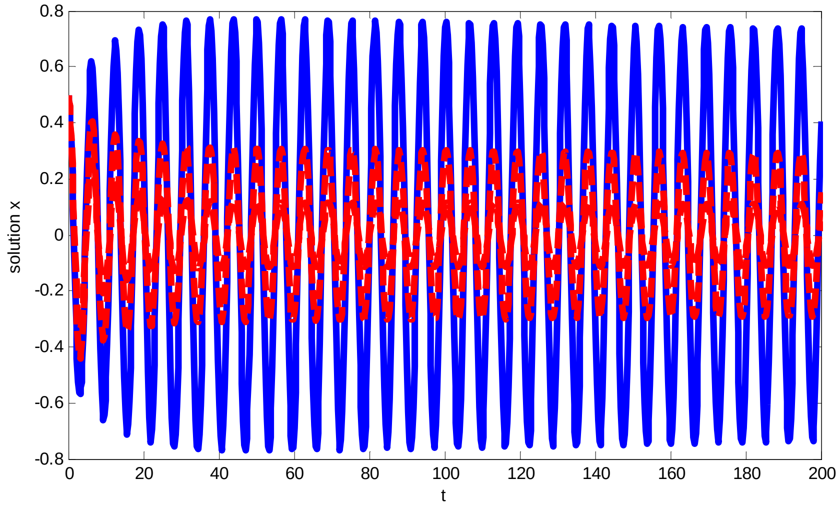

Рис. 2. Деполяризація короноелектрета за функцією релаксації KWW-типу при віддачі заряду з поверхні матеріалу

Початкові умови вибрано згідно роботи короноелектрета на віддачу заряду з поверхні матеріалу та відповідного складу домішок[1]. Встановлення стаціонарного режиму віддачі електронів з поверхні матеріалу дозволяє використовувати електрети неодноразово без втрати необхідних властивостей.

Висновки. Досліджено числові розв'язки осцилятора з урахуванням теплової пам'яті на прикладі функції KWW-типу для еволюційної моделі поляризації електрета, що описує вимушену релаксацію з врахуванням поляризаційних та термодинамічних ефектів. Запропоновані в даній роботі чисельні розв'язки на основі аналітичної моделі поляризації/деполяризації короноелектретів, дозволяють описати релаксаційні процеси в композиційних матеріалах та розглядати з єдиних позицій поляризаційні і термоефекти в полімерних матеріалах. В якості прикладів представлено чисельні розв'язки вимушеної поляризації/деполяризації короноелектрета, що використовує релаксаційну функцію пам'яті. На підставі отриманих розв'язків можна зробити висновок про те, що при формуванні електретного стану композиційних матеріалів з ростом вмісту домішки збільшується ефект від заряду, сконцентрованого на поверхні матеріалу. В залежності від вибору функції KWW-типу існує можливість проводити розрахунки ефективного процентного вмісту домішок в

умовах теплового релаксування для подовження експлуатаційного періоду композиційних матеріалів.

Бібліографічні посилання

1. **Балакина М. Ю.** Моделирование релаксационных свойств композиционных короноэлектретов [Текст] / М. Ю. Балакина, О. Д. Фоминых, М. Ф. Галиханов // Известия РГПУ им. А.И. Герцена. – 2010. – №122. – С. 32 – 45.

2. **Босенко Т.М.** Нерівноважні процеси теплопровідності в твердих матеріалах / Т.М. Босенко // Технічна теплофізика та промислова теплоенергетика. Збірник наукових праць НМетАУ. – 2010. – Вип. 2. – С. 57 – 66.

3. **Босенко Т.М.** Математичні моделі нерівноважної термодинаміки в умовах теплового релаксування / Т.М. Босенко // Вісник Дніпропетр. ун-ту. Серія «Механіка». – 2012. – Вип. 16, т.1. – С. 114 – 121.

4. **Васильев В.А.** Автоволновые процессы / С.А. Васильев, Ю.М. Романовський. – М., 1987. – 346 с.

5. **Веселовський В.Б.** Про високошвидкісний вплив на матеріали при дослідженні релаксаційних процесів з урахуванням теплової пам'яті / В.Б. Веселовський, Т.М. Босенко // Вісник Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут». Збірник наукових праць. Тематичний випуск «Енергетичні та теплотехнічні процеси й устаткування». НТУ «ХПІ».– 2010. – № 3. – С. 121 – 130.

6. **Галиханов М. Ф.** Электретные свойства сополимера винилхлорида с винилацетатом и его композиций с тальком [Текст] / М. Ф. Галиханов, В. А. Гольдаде, Р. Я. Дебердеев // ВМС. Сер. А. – 2005. – Т. 47, № 2. – С. 264 – 269.

7. **Мищенко Е.Ф.** Дифференциальные уравнения с малым параметром и релаксационные колебания / Е.Ф. Мищенко, Н.Х. Розов. – М., 1975. – 240 с.

8. **Williams G.** Non-symmetrical dielectric relaxation behavior arising from a simple empirical decay function / G. Williams, D. C. Watts // Trans. Faraday Soc. – 1970. – V. 66. – P. 80 – 85.

9. **Montroll E. W.** On Levy (or stable) distributions and the Williams— Watts model of dielectric relaxation / E. W. Montroll, J. T. Bendler // J. Stat. Phys. – 1984. –V. 34. – P. 129 – 162.

Надійшла до редколегії 16.10.13

УДК 519.6:504.3.054

Т. И. Русакова*, Н. Н. Беляев, В. И. Карплюк***

**Днепропетровский национальный университет им. Олеся Гончара*
***Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта им. академика В. Лазаряна*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ НА УЛИЦАХ ГОРОДОВ С УЧЕТОМ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Розглянуто задачу розповсюдження забруднюючих речовин на вулиці для схеми розміщення будівель по типу «вуличний каньйон». В роботі побудовано ефективну чисельну модель для прогнозу якості повітряного середовища на вулицях при викидах від автотранспорту. Модель базується на одночасному розв'язку гідродинамічної задачі на основі методу дискретних вихорів та задачі масопереносу про розсіювання газових викидів при русі автотранспорту. Представлено результати чисельних розрахунків. Перевагою розробленої моделі є можливість оперативного розрахунку розсіювання викидів на вулиці з урахуванням хімічних перетворень забруднюючих речовин (окису азоту та двоокису азоту).