

Нестеров Владимир Николаевич, Нестеров Иван Владимирович, Рыжков Евгений Викторович
**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В
НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ**

Адрес статьи: www.gramota.net/materials/1/2011/1/23.html

Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по рассматриваемому вопросу.

Источник

Альманах современной науки и образования

Тамбов: Грамота, 2011. № 1 (44). С. 69-73. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: www.gramota.net/editions/1.html

Содержание данного номера журнала: www.gramota.net/materials/1/2011/1/

© Издательство "Грамота"

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: www.gramota.net

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: almanac@gramota.net

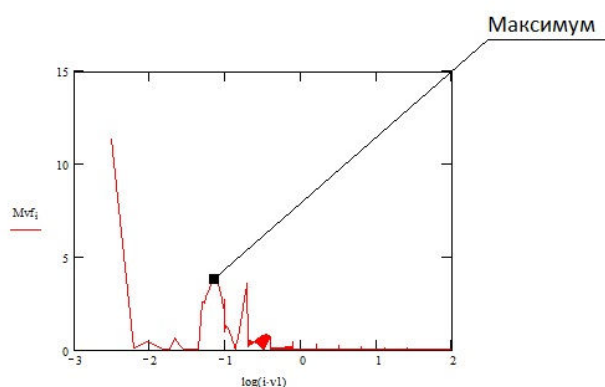


Рис. 12. Положение исследуемого максимума

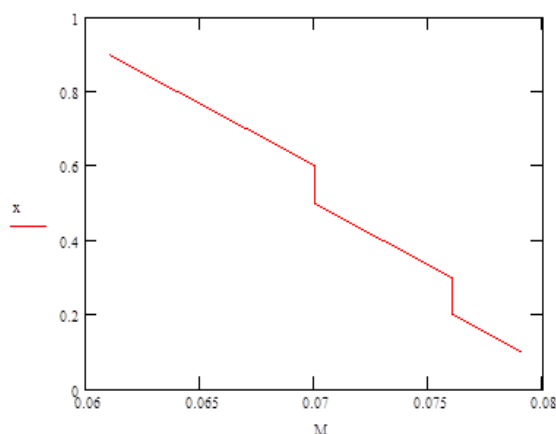


Рис. 13. График изменения величины максимума в зависимости от η

Список литературы

1. Деглаф А. А., Яворский Б. М. Курс физики. М.: Академия, 2003. 512 с.
2. Макаров Е. Г. Инженерные расчеты в MathCAD 14. СПб.: Питер, 2007. 592 с.
3. Трофимова Т. И., Фирсов А. В. Курс физики: колебания и волны: теория, задачи, решения: учебное пособие для студентов технических специальностей вузов. М.: Академия, 2003. 434 с.
4. Харкевич А. А. Автоколебания. 2-е. изд. М.: КД Либроком, 2009. 312 с.

УДК 536.241

*Владимир Николаевич Нестеров, Иван Владимирович Нестеров, Евгений Викторович Рыжков
Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет*

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ[©]

При решении задач теплопроводности речь идет о нахождении зависимости температуры среды от пространственных координат и времени, причем задана теплоемкость и теплопроводность среды. В настоящее время для решения практических задач теплопроводности обычно применяются численные методы. В связи с большим числом итераций, для этого необходимо использовать ЭВМ. Требуемые вычисления можно получить в интегральных системах, либо же в программах на алгоритмических языках.

В настоящей работе с помощью компьютерного моделирования исследованы процессы теплопроводности в однородной и неоднородной среде.

Для реализации моделирования процессов теплопроводности в неоднородных средах выбрана интегральная математическая система MathCAD. Модель системы представляет собой одномерную незамкнутую цепочку из i узлов, связанных друг с другом последовательно.

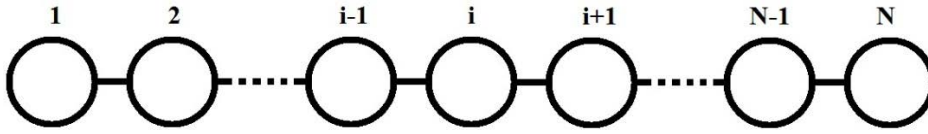


Рис. 1. Схема модели системы ($1, 2, \dots, i-1, i$ - номера узлов, связанных друг с другом последовательно)

В модели рассматривается изменение температуры на десяти узлах: первоначальная температура в узле 1 повышена, а в остальных одинакова. Для определения функции изменения температуры T на узлах, принимаем значения теплопроводности λ , площади сечения проводника S , расстояние между узлами h , удельной теплоемкости c и массы m условно равными единице. Проследим за изменением температуры по времени с шагом $dt=0,1$. На Рис. 2 представлена реализация модели в MathCAD.

```

dt := 0.1      := 1      S := 1      h := 1      c := 1      m :=
T := | for i ∈ 1..10
    | T1,i ← 200 if i = 1
    | T1,i ← 100 otherwise
    | T
Tmean := mean (T)
T := | for j ∈ 2..106
    | for i ∈ 1..10
    | dQl ← 0 if i = 1
    | dQl ← - .  $\frac{(T_{j-1,i} - T_{j-1,i-1})}{h}$  . S . dt otherwise
    | dQp ← 0 if i = 10
    | dQp ← - .  $\frac{(T_{j-1,i+1} - T_{j-1,i})}{h}$  . S . dt otherwise
    | dQ ← dQl - dQp
    | dT ←  $\frac{dQ}{c \cdot m}$ 
    | Tj,i ← Tj-1,i + dT
    | E ← |Tj,1 - Tj,10|
    | break if E < 0.01
    | T
vr := | for i ∈ 1..10
    | for j ∈ 842..1
    | vr1,i ← j . dt
    | break if |Tj,i - Tmean| > 0.005
    | vr

```

Рис. 2

Строка `ORIGIN:=1` задает первый номер массива, это необходимо для исключения нулевого элемента. Задаем начальные значения температуры T и определяем среднюю температуру T_{mean} , к которой будут стремиться значения температур на узлах. Ниже располагается программный блок (T), вычисляющий изменение температуры на узлах с течением времени. В этом программном блоке, в строке 1 задан цикл-счетчик, ограничивающий число итераций, таким образом, защищая программу от закливания. В строках 2-9 происходит вычисление изменения температуры на узлах i . В строках 3-4 вычисляется количество теплоты, перешедшее влево. В строках 5-6 вычисляется количество теплоты, полученное справа. В строке 7 находим суммарное количество теплоты dQ , полученное узлом i . В строке 8 происходит подсчет изменения температуры dT , после чего в строке 9 вычисляется значение температуры T в узле i на итерации j . После этого в строках 10-11 проверяем, удовлетворяет ли значение заданной точности. В результате изменение температуры можно проследить на Рис. 3.

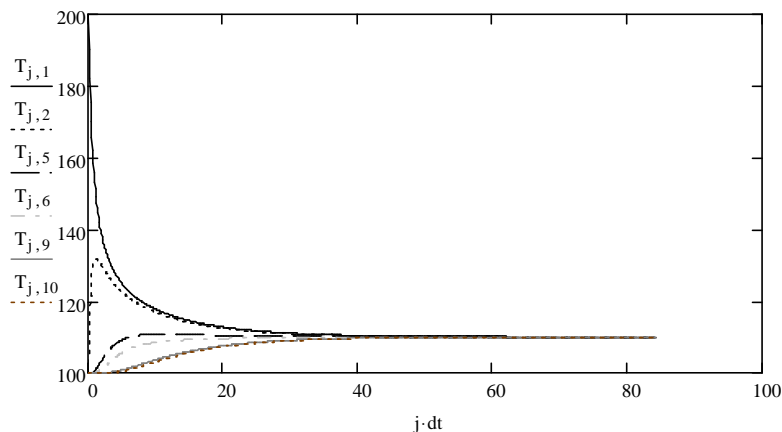


Рис. 3. Изменение значения температуры на узлах с течением времени

В следующем программном поле вычисляем значение времени релаксации. В строках 1-4 организован цикл для вычисления времени релаксации каждого узла. На каждом из узлов происходит цикл по итерациям (строки 2-4), где в строках 3-4 сравнивается температура на заданной итерации со средней температурой i , если она удовлетворяет заданной точности, значению времени релаксации присваивается время от начала до заданной итерации. Время релаксации представлено на графике (Рис. 4).

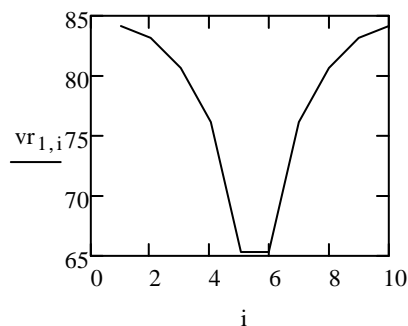


Рис. 4. Время релаксации на узлах

Для исследования неоднородных случаев, возьмем значение коэффициента теплоемкости на узлах c различным. Задаем значение c в первом случае на четных узлах равным 1, на нечетных равным 10. Во втором случае в первых пяти узлах $c=1$, на узлах 5-10 $c=10$. Графики изменения температуры по времени представлены на Рис. 5.

Вывод. Из графика корреляции температур при различных неоднородностях коэффициентов теплопроводности (Рис. 6) видно, что временное поведение температуры в узлах существенно зависит от типа неоднородности. Поэтому при расчетах реальных систем необходимо учитывать не только среднюю величину коэффициента теплопроводности, но и неоднородность распределения в пространстве.

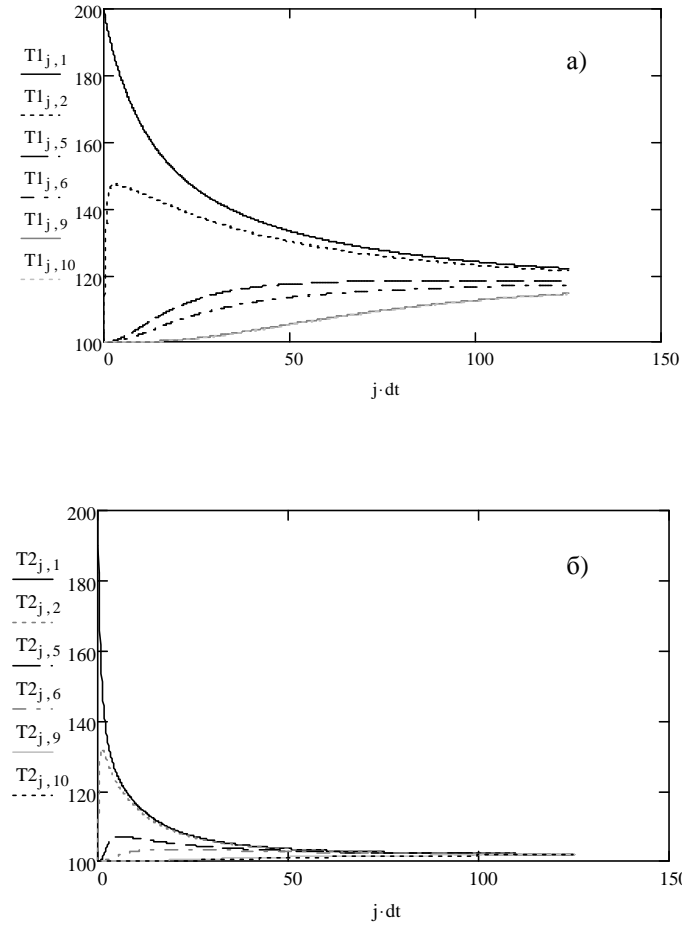


Рис. 5. Изменение значение температуры на узлах с течением времени в неоднородных средах: а) коэффициент теплоемкости c , на четных узлах равный 1, на нечетных равный 10; б) коэффициент теплоемкости c , на первой половине узлов равный 1, на второй половине узлов равный 10

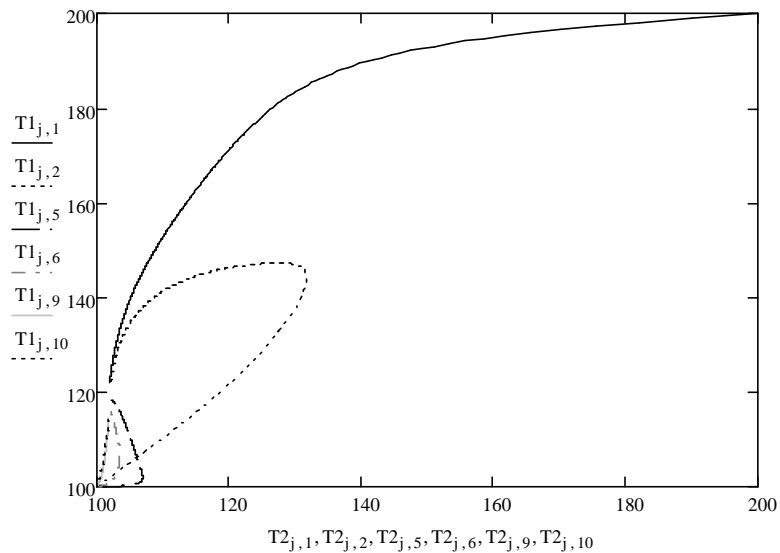


Рис. 6. График корреляции температур при различных неоднородностях коэффициентов теплопроводности

Список литературы

1. **Карташов Э. М.** Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. М.: Высш. шк., 2001. 550 с.
2. **Макаров Е. Г.** Инженерные расчеты в *MathCAD 14*. СПб.: Питер, 2007. 592 с.
3. **Трофимова Т. И.** Курс физики: учебник для студ. вузов. М.: Высш. шк., 1985. 432 с.

УДК 537.226.4

Владимир Николаевич Нестеров, Иван Владимирович Нестеров, Владислав Зенонович Савицкий
Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет

АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ О МОДЕЛИРОВАНИИ СВОЙСТВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ[©]

Сегнетоэлектрики являются важнейшим классом твердых тел. Изучению свойств сегнетоэлектриков посвящено много научных работ. Наиболее эффективным методом изучения свойств сегнетоэлектриков является компьютерное моделирование.

Настоящая работа посвящена анализу современных представлений о моделировании свойств сегнетоэлектриков.

Усталостные характеристики тонких пленок $Pb_{0.6}Zr_{0.4}O_3$ с ориентацией изучены как функция частоты сигнала напряжений.

Полученные результаты анализируются в рамках модели, основанной на захвате и высвобождении носителей состояниями в запрещенной зоне, расположенными на поверхностях между электродами сегнетоэлектрической пленкой («модель поверхностного состояния»). Постоянные времени захвата и высвобождения носителей, которые управляют изменением остаточной поляризации, определяются в согласии с классическими результатами, полученными при изучении МОП-структур. Несмотря на широкое разнообразие форм кривых зависимости остаточной поляризации от числа циклов, экспериментальные данные хорошо аппроксимируются данной моделью. Полученные результаты подтверждают пригодность модели поверхностного состояния для описания усталости в сегнетоэлектрических тонких пленках.

С помощью молекулярного моделирования на основе метода минимализации энергии исследована природа пьезоэлектричества в β -фазе PVDF. Как показывают результаты моделирования, под действием постоянного напряжения кристалл PVDF может сжиматься или растягиваться в зависимости от ориентации диполей и полярности приложенного напряжения. Моделирование подтверждает, что пьезоэлектричество в полимерах в основном определяется размерным эффектом. Рассчитанный в рамках модели пьезоэлектрических коэффициент хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Рассматриваются два подхода к моделированию размерного эффекта в плоскопараллельном конденсаторе: пространственная корреляция под влиянием граничных условий на электродах конденсатора и модель «мертвого слоя».

Для описания пространственной корреляции используется модель Гинзбурга-Девоншира с параметром корреляции ξ . Феноменологическими характеристиками модели «мертвого слоя» являются толщина и диэлектрическая постоянная слоя. Модель «мертвого слоя» может использоваться для практических целей моделирования. Эта модель должна учитывать, что размерные эффекты и определение параметров мертвого слоя основаны на корреляции динамической сегнетоэлектрической поляризации и соответствующих граничных условий.

Экспериментально и теоретически исследована зависимость ϵ пористых керамик на основе $Ba_{0.6}Sr_{0.4}TiO_3$ от E .

Обсуждается влияние размера пор и их концентрации на ϵ , а также на скорость уменьшения ϵ при росте E . Отмечено хорошее соответствие экспериментальных данных с расчетами, выполненными в рамках простой модели.

С помощью ПЭМ исследовано диффузное рассеивание в керамике $Pb(ZrTi)O$ во всем диапазоне фазовой диаграммы от ромбоэдрической фазы ($x=0.3$) к тетраг. фазе ($x=0.7$). Хотя во всем диапазоне составов наблюдаются полосы одного и того же типа, наиболее сильные и заметные из них располагаются в ромбоэдрической фазе, постепенно ослабляясь и исчезая при приближении к морфотропной фазовой границе. Эти полосы соответствуют диффузным плоскостям рассеивания в трех направлениях (111).

Моделирование методом Монте-Карло позволяет воспроизвести наблюдаемую дифракционную картину в ромбоэдрической фазе. В этой модели смещения ионов Pb в цепочках направлены вдоль цепочек и обладают сильной межъячеечной корреляцией. Отсутствие латеральной корреляции свидетельствует о существенной независимости соседних цепочек.