

ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІЧНИХ ЗАДАЧ ПІРОЕЛЕКТРИКИ

В. Стельмашук¹, Г. Шинкаренко^{1,2}

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Університетська, 1, Львів, 79000, e-mail: kis@lnu.edu.ua

²Опольський політехнічний університет,
вул. Прушковська, 76, Ополь, 45-758, e-mail: h.shynkarenko@po.opole.pl

За математичну модель взаємодії механічних, електричних і теплових полів в піроелектричному стрижні, що перебуває під дією імпульсного навантаження, використано початково-крайову задачу піроелектрики в термінах невідомих пружного зміщення, електричного потенціалу та приросту температури. Алгоритм розв'язування цієї задачі вживає формулювання відповідної варіаційної задачі, напівдискретизацію Гальоркіна за просторовою змінною з кусково-лінійними та кусково-квадратичними базисними функціями методу скінченних елементів (МСЕ) та однокрокову рекурентну схему інтегрування в часі.

Ключові слова: піроелектрик, початково-крайова задача, варіаційна задача, рівняння енергетичного балансу, напівдискретизація Гальоркіна, метод скінченних елементів, однокрокова рекурентна схема, кераміка PZT-4.

1. ВСТУП

Піроелектрики та п'єзоелектрики, які належать до так званих розумних матеріалів, все активніше застосовують у різноманітних сучасних приладах і пристроях: сенсорах, актуаторах, датчиках тиску, системах сигналізації, приладах нічного бачення тощо [6, 10, 11]. Це зумовлює актуальність комп'ютерного моделювання процесів, які відбуваються у цих матеріалах.

Основою цієї праці стала лінійна математична модель явища піроелектрики, яку запозичили з [1, 10, 11]. Згідно з [2, 3] сформулювали відповідну початково-крайову задачу для піроелектричного стрижня. Мета нашої праці – побудувати чисельну схему на базі методу скінченних елементів, яка дає змогу розв'язувати початково-крайові задачі піроелектрики, реалізувати схему у вигляді програмного забезпечення, проаналізувати отримані результати моделювання.

В п. 2 ми подаємо формулювання початково-крайової задачі піроелектрики та розглядаємо її варіаційне формулювання. В п. 3 увагу приділили питанню коректності сформульованої варіаційної задачі. В п. 4 описано напівдискретизацію Гальоркіна варіаційної задачі за просторовою змінною. Повна дискретизація задачі досягається шляхом застосування однокрокової рекурентної схеми (ОРС), це показано в п.5. П.6 складається з декількох підпунктів і містить результати числових експериментів, їхній аналіз для випадків прямого й оберненого п'єзо ефектів у піроелектричному стрижні з кераміки PZT-4. В п. 7 зроблено відповідні висновки.

2. ФОРМУЛЮВАННЯ ПОЧАТКОВО-КРАЙОВОЇ ТА ВАРІАЦІЙНОЇ ЗАДАЧІ ПІРОЕЛЕКТРИКИ

Розглянемо піроелектричний стрижень довжини L , один кінець якого жорстко защемлений, заземлений і теплоізолюваний, а інший може бути навантажений змінним у часі $t \in [0, T], 0 < T < +\infty$, тиском $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(t)$, електричним струмом $\bar{J} = \bar{J}(t)$

та тепловим потоком $\bar{h} = \bar{h}(t)$. Далі вважаємо, що процеси, які відбуваються в розглядуваному піроелектрику, цілком задовільно описуються позовжнім пружним зміщенням $u = u(x, t)$, електричним потенціалом $p = p(x, t)$ і приростом температури $\theta = \theta(x, t)$ (стосовно температури T_0 стану, вільного від напружень). Тоді

математичну модель піроелектричного ефекту [2, 3] можна конкретизувати до одновимірної початково-крайової задачі для системи взаємозв'язаних диференціальних рівнянь руху, електродинаміки та теплопровідності

$$\begin{cases} \rho[u_{tt}(x, t) - f(x, t)] - \sigma_x(x, t) = 0, \\ \sigma(x, t) = c(x)[u_x(x, t) - \alpha(x)\theta(x, t)] + \\ \quad + a(x)u_{xt}(x, t) + e(x)p_x(x, t), \quad \forall (x, t) \in (0, L) \times (0, T], \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\begin{cases} D_{xt}(x, t) + J_x(x, t) = 0, \\ D(x, t) = -\varepsilon(x)p_x(x, t) + e(x)u_x(x, t) + \pi(x)\theta(x, t), \\ J(x, t) = -z(x)p_x(x, t) \quad \forall (x, t) \in (0, L) \times (0, T], \end{cases} \quad (2.2)$$

$$\begin{cases} \rho c_\varepsilon(x)\theta_t(x, t) + h_x(x, t) + T_0 d(x, t) = w, \\ d(x, t) = c(x)\alpha(x)u_{xt}(x, t) - \pi(x)p_{xt}(x, t), \\ h(x, t) = -\lambda(x)\theta_x(x, t) \quad \forall (x, t) \in (0, L) \times (0, T], \end{cases} \quad (2.3)$$

з крайовими умовами

$$u(0, t) = 0, \quad \sigma(L, t) = \bar{\sigma}(t), \quad \forall t \in [0, T], \quad (2.4)$$

$$p(0, t) = 0, \quad -[D_t(L, t) + J(L, t)] = \bar{J}(t), \quad \forall t \in [0, T], \quad (2.5)$$

$$\theta(0, t) = 0, \quad h(L, t) = \bar{h}(t) \quad \forall t \in [0, T], \quad (2.6)$$

та початковими умовами

$$\begin{cases} u(x, 0) = u_0(x), \quad u_t(x, 0) = v_0(x), \\ p(x, 0) = p_0(x), \quad \theta(x, 0) = \theta_0(x), \quad \forall x \in [0, L]. \end{cases} \quad (2.7)$$

Тут індексами t і x позначено часткові похідні шуканих функцій, наприклад, $v_t = \partial v / \partial t$, $v_x = \partial v / \partial x$, $\sigma(x, t)$ – розподіл напружень, $D(x, t)$ – електрична індукція, $J(x, t)$ – електричний струм, $h(x, t)$ – тепловий потік, $f = f(x, t)$ та $w = w(x, t)$ – задані розподіли об'ємних сил і теплових джерел, відповідно. Подані нижче коефіцієнти описують фізико-механічні характеристики матеріалу піроелектрика: $\rho = \rho(x)$ – густина, $c = c(x)$ – модуль Юнга, $\alpha = \alpha(x)$ – коефіцієнт лінійного теплового розширення, $a = a(x)$ – коефіцієнт в'язкості, $e = e(x)$ – п'єзомодуль, $c_\varepsilon = c_\varepsilon(x)$ – питома теплоємність, $\pi = \pi(x)$ – піромодуль, $\varepsilon = \varepsilon(x)$ – діелектрична проникливість, $z = z(x)$ – електропровідність. Деталізовану характеристику піроелектричного ефекту та взаємодії фізико-механічних полів в них можна знайти, наприклад, у [10].

Введемо простір (інтегрованих з квадратом за Лебегом) функцій $H = L^2(0, L)$ зі скалярним добутком $(u, v) = \int_0^L uv dx$ і нормою $|u|_0 = (u, u)^{\frac{1}{2}}$, а також простори функцій V (простір допустимих пружних змішень), Q (простір допустимих

електричних потенціалів) та Z (простір допустимих приростів температури), які у випадку крайових умов (2.4)-(2.6) визначають тим самим способом

$$V \equiv Q \equiv Z := \{v \in H^1([0, L]) : v(0) = 0\}. \quad (2.8)$$

Тоді початково-крайовій задачі піроелектрики (2.1)-(2.7) можна надати варіаційного формулювання вигляду

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти } u = u(t) \in V, p = p(t) \in Q, \theta = \theta(t) \in Z \text{ такі, що} \\ m(u''(t), v) + a(u'(t), v) + c(u(t), v) \\ \quad - e(p(t), v) - \gamma(\theta(t), v) = \langle l(t), v \rangle, \\ \exists (p'(t), q) + e(q, u'(t)) + z(p(t), q) \\ \quad + \pi(\theta'(t), q) = \langle r(t), q \rangle, \\ s(\theta'(t), \zeta) + k(\theta(t), \zeta) + \gamma(\zeta, u'(t)) \\ \quad + \pi(\zeta, p'(t)) = \langle \mu(t), \zeta \rangle, \quad \forall t \in (0, T], \\ m(u'(0) - v_0, v) = 0, c(u(0) - u_0, v) = 0, \quad \forall v \in V, \\ \exists (p(0) - p_0, q) = 0, \quad \forall q \in Q, \\ s(\theta(0) - \theta_0, \zeta) = 0, \quad \forall \zeta \in Z. \end{array} \right. \quad (2.9)$$

Тут введено білінійні форми

$$\begin{aligned} m(u, v) &= (\rho u, v), & c(u, v) &= (cu_x, v_x), \\ a(u, v) &= (au_x, v_x), & \gamma(\zeta, v) &= (\alpha c \zeta, v_x), \quad \forall u, v \in V, \\ e(q, v) &= -(eq_x, v_x), & \exists (p, q) &= (\exists p_x, q_x), \\ z(p, q) &= (zp_x, q_x), & \pi(\zeta, q) &= -(\pi \zeta, q_x), \quad \forall p, q \in Q, \\ s(\theta, \zeta) &= (\rho c_e T_0^{-1} \theta, \zeta), & k(\theta, \zeta) &= (\lambda T_0^{-1} \theta_x, \zeta_x), \quad \forall \theta, \zeta \in Z, \end{aligned} \quad (2.10)$$

та лінійні функціонали

$$\begin{aligned} \langle l, v \rangle &= \int_0^L \rho f v dx + \bar{\sigma} v(L), \quad \forall v \in V, \\ \langle r, q \rangle &= \bar{J} q(L), \quad \forall q \in Q, \\ \langle \mu, \zeta \rangle &= T_0^{-1} \left\{ \int_0^L w \zeta dx - \bar{h} \zeta(L) \right\}, \quad \forall \zeta \in Z. \end{aligned} \quad (2.11)$$

3. КОРЕКТНІСТЬ ФОРМУЛЮВАННЯ ВАРІАЦІЙНОЇ ЗАДАЧІ ПІРОЕЛЕКТРИКИ

Підставимо до рівнянь варіаційної задачі (2.9) $v = u'(t)$, $q = p(t)$, $\zeta = \theta(t)$ додамо їх; у підсумку одержимо енергетичне рівняння

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{d}{dt} [m(u'(t), u'(t)) \\ & \quad + c(u(t), u(t)) + \exists (p(t), p(t)) + s(\theta(t), \theta(t)) + 2\pi(\theta(t), p(t))] \\ & \quad + a(u'(t), u'(t)) + z(p(t), p(t)) + k(\theta(t), \theta(t)) \\ & = \langle l(t), u'(t) \rangle + \langle r(t), p(t) \rangle + \langle \mu(t), \theta(t) \rangle, \quad \forall t \in (0, T], \end{aligned} \quad (3.1)$$

або після інтегрування на довільному інтервалі часу $(0, t) \subset [0, T]$ та врахування початкових умов варіаційної задачі (2.9)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}[m(u'(t), u'(t)) + c(u(t), u(t)) + \varepsilon(p(t), p(t)) + s(\theta(t), \theta(t)) + 2\pi(\theta(t), p(t))] + \\ & + \int_0^t [a(u'(\tau), u'(\tau)) + z(p(\tau), p(\tau)) + k(\theta(\tau), \theta(\tau))] d\tau = \\ & = \frac{1}{2}[m(v_0, v_0) + c(u_0, u_0) + \varepsilon(p_0, p_0) + s(\theta_0, \theta_0) + 2\pi(\theta_0, p_0)] \\ & = \int_0^t \langle l(\tau), u'(\tau) \rangle + \langle r(\tau), p(\tau) \rangle + \langle \mu(\tau), \theta(\tau) \rangle d\tau, \quad \forall t \in (0, T]. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Тут варто відзначити, що $\frac{1}{2}m(u'(t), u'(t)) = \frac{1}{2}|\rho^{\frac{1}{2}}u'(t)|_0^2 \geq 0$ визначає кінетичну енергію піроелектрика, $\frac{1}{2}c(u(t), u(t)) \geq 0$ становить потенціальну енергію механічного поля, $\frac{1}{2}\varepsilon(p(t), p(t)) \geq 0$ – електрична енергія, $\frac{1}{2}s(\theta(t), \theta(t)) \geq 0$ – теплова енергія. $\int_0^t a(u'(\tau), u'(\tau))d\tau \geq 0$, $\int_0^t z(p(\tau), p(\tau))d\tau \geq 0$ і $\int_0^t k(\theta(\tau), \theta(\tau))d\tau \geq 0$ визначають втрати механічної, електричної та теплової енергії, відповідно, що накопичилися до моменту $t \in (0, T]$.

Неперервна залежність розв'язку від даних задачі. Позначимо через $\Psi = (u, p, \theta) \in \Phi$ і введемо такі норми:

$$\begin{aligned} \|\Psi(t)\|^2 &= c(u(t), u(t)) + \varepsilon(p(t), p(t)) + s(\theta(t), \theta(t)), \\ \|\|\Psi(t)\|\|^2 &= a(u'(t), u'(t)) + z(p(t), p(t)) + k(\theta(t), \theta(t)). \end{aligned} \tag{3.3}$$

Тоді рівняння енергетичного балансу можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}m(u'(t), u'(t)) + \frac{1}{2}\|\|\Psi(t)\|\|^2 + 2\pi(\theta(t), p(t)) + \int_0^t \|\|\Psi(\tau)\|\|^2 d\tau = \\ & = \frac{1}{2}m(v_0, v_0) + \frac{1}{2}\|\|\Psi_0\|\|^2 + 2\pi(\theta_0, p_0) + \\ & + \int_0^t \langle l(\tau), u'(\tau) \rangle + \langle r(\tau), p(\tau) \rangle + \langle \mu(\tau), \theta(\tau) \rangle d\tau, \quad \forall t \in (0, T]. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Теорема 3.1. Про обмеженість розв'язку задачі піроелектрики.

Нехай дані задачі задовольняють умови:

$$\begin{aligned} f &\in L^2(0, T; H^1([0, L])), \quad w \in L^2(0, T; L^2([0, L])), \\ \bar{\sigma} &\in L^2(0, T), \quad \bar{h} \in L^2(0, T), \quad \bar{J} \in L^\infty(0, T), \\ \Psi_0 &= (u_0, p_0, \theta_0) \in [H^1([0, L])]^3, \quad v_0 \in L^2([0, L]). \end{aligned} \tag{3.5}$$

Тоді знайдеться стала $c > 0$ така, що для довільного $t \in [0, T]$ справджуватиметься нерівність

$$\|u'(t)\|_H^2 + \|\Psi(t)\|^2 + \int_0^t \|\|\Psi(\tau)\|\|^2 d\tau \leq c\{\|v_0\|_H^2 + \|\Psi_0\|^2 + \int_0^t \|L(\tau)\|_*^2 d\tau\}, \tag{3.6}$$

де функціонал $L := (l, r, \mu)$ та $\|\|\cdot\|\|_*$ – норма в спряженому просторі Φ' .

Доведення. Спочатку доведемо, що

$$\frac{1}{2}\varepsilon q^2 + \frac{1}{2}\rho c_\varepsilon T_0^{-1}\zeta^2 - 2\pi q\zeta \geq 0 \quad \forall \zeta, q \in \mathbf{R}. \tag{3.7}$$

Справді, враховуючи, що $2\pi q\zeta \leq 2\pi(\varepsilon q^2 + \frac{1}{4\varepsilon}\zeta^2)$ з довільним $\varepsilon > 0$, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \varepsilon q^2 + \frac{1}{2} \rho c_\varepsilon T_0^{-1} \zeta^2 - 2\pi q \zeta &\geq \frac{1}{2} \varepsilon q^2 + \frac{1}{2} \rho c_\varepsilon T_0^{-1} \zeta^2 - 2\pi(\varepsilon q^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \zeta^2) = \\ &= (\frac{1}{2} \varepsilon - 2\pi\varepsilon) q^2 + (\frac{1}{2} \rho c_\varepsilon T_0^{-1} - \frac{\pi}{2\varepsilon}) \zeta^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Права частина нерівності (3.8) буде невід'ємною за умови

$$\frac{\pi}{\rho c_\varepsilon T_0^{-1}} \leq \varepsilon \leq \frac{\varepsilon}{4\pi}. \quad (3.9)$$

Оскільки густина маси довільного піроелектрика ρ є величиною порядку 10^3 , питома теплоємність $c_\varepsilon - 10^2$, діелектрична проникливість $\varepsilon - 10^{-8}$, а піромодуль $\pi - 10^{-5}$, то верхня границя нерівності (3.9) на 5 порядків більша за ліву.

Зауважимо, що функціонал $L = (l, r, \mu) \in L^2(0, T; \Phi')$ за умов (3.5). Далі, підставивши в нерівність (3.7) $q = p_x$, $\zeta = \theta$ та про інтегрувавши, отримуємо нерівність

$$\frac{1}{2} \varepsilon (p(t), p(t)) + \frac{1}{2} s(\theta(t), \theta(t)) + 2\pi(\theta(t), p(t)) \geq 0, \quad \forall t \in (0, T]. \quad (3.11)$$

Підставивши (3.11) у (3.4) та застосувавши до окремих доданків правої частини рівності (3.4) оцінки зверху, одержуємо нерівність

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|u'(t)\|_H^2 + \frac{1}{4} c(u(t), u(t)) + \frac{1}{4} \|\Psi(t)\|^2 + \frac{1}{2} \int_0^t \|\Psi(\tau)\|^2 d\tau \leq \\ \leq \frac{1}{2} \|v_0\|_H^2 + \frac{1}{2} [\|\Psi_0\|^2 + \|\theta_0\|_0^2 + \|p_0\|_1^2] + \frac{1}{2} \int_0^t \|L(\tau)\|_*^2 d\tau, \quad \forall t \in (0, T]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Далі враховуючи, що $c(u(t), u(t)) \geq 0$, та після виконання перетворень отримуємо, що існує $c > 0$ така, що $\forall t \in (0, T]$ виконується нерівність (3.6).

Єдиність розв'язку. Доводиться від супротивного. Припустимо, що $\Psi_1 = (u_1, p_1, \theta_1)$ та $\Psi_2 = (u_2, p_2, \theta_2)$ – різні розв'язки варіаційної задачі. Позначимо $\Psi = \Psi_1 - \Psi_2$ і віднімемо рівняння варіаційної задачі для Ψ_2 від рівнянь варіаційної задачі для Ψ_1 . Тоді в отриманій варіаційній задачі для Ψ одержимо $u_0 \equiv 0, v_0 \equiv 0, p_0 \equiv 0, \theta_0 \equiv 0, L(t) \equiv 0$. Отже, нерівність (3.6) набуде вигляду

$$\|u'(t)\|_H^2 + \|\Psi(t)\|^2 + \int_0^t \|\Psi(\tau)\|^2 d\tau \leq 0 \quad \forall t \in [0, T], \quad (3.13)$$

що можливо лише при $\Psi \equiv 0$.

4. НАПІВДИСКРЕТИЗАЦІЯ ЗА ПРОСТОРОВОЮ ЗМІННОЮ

Нехай скінченновимірні підпростори апроксимацій $V_h \subset V$, $Q_h \subset Q$ і $Z_h \subset Z$ побудовано методом скінченних елементів так, що $V_h = Q_h = Z_h$, $\dim V_h = N$, і система кусково-визначених функцій $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^N$ становить їхній базис. Тоді апроксимація $\Psi_h = (u_h, p_h, \theta_h)$ розв'язку задачі (2.9) набуде вигляду

$$\Psi_h(x, t) = \left(\sum_{i=1}^N \varphi_i(x) u_i(t), \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) p_i(t), \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) \theta_i(t) \right) \quad (4.1)$$

Підставивши (4.1) в (2.9), отримаємо таку задачу Коші у матричному вигляді:

$$\begin{aligned} \text{задано } \mathbf{u}_0, \mathbf{v}_0, \mathbf{p}_0, \boldsymbol{\theta}_0, \text{ знайти } \{\mathbf{u}(t), \mathbf{p}(t), \boldsymbol{\theta}(t)\} \text{ такі, що} \\ \mathbf{M}\mathbf{u}''(t) + \mathbf{A}\mathbf{u}'(t) + \mathbf{C}\mathbf{u}(t) - \mathbf{E}^T \mathbf{p}(t) - \mathbf{Y}^T \boldsymbol{\theta}(t) = \mathbf{L}(t), \\ \mathbf{G}\mathbf{p}'(t) + \mathbf{E}\mathbf{u}'(t) + \mathbf{Z}\mathbf{p}(t) + \mathbf{\Pi}^T \boldsymbol{\theta}'(t) = \mathbf{R}(t), \\ \mathbf{S}\boldsymbol{\theta}'(t) + \mathbf{K}\boldsymbol{\theta}(t) + \mathbf{\Pi}\mathbf{p}'(t) + \mathbf{Y}\mathbf{u}'(t) = \mathbf{F}(t), \\ \mathbf{M}[\mathbf{u}'(0) - \mathbf{v}_0] = 0, \quad \mathbf{C}[\mathbf{u}(0) - \mathbf{u}_0] = 0, \\ \mathbf{G}[\mathbf{p}(0) - \mathbf{p}_0] = 0, \quad \mathbf{S}[\boldsymbol{\theta}(0) - \boldsymbol{\theta}_0] = 0. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Тут вектори $\mathbf{u}(t) = \{u_i(t)\}_{i=1}^N$, $\mathbf{p}(t) = \{p_i(t)\}_{i=1}^N$ і $\boldsymbol{\theta}(t) = \{\theta_i(t)\}_{i=1}^N$ – невідомі коефіцієнти розвинення (4.1). Матриці $\mathbf{M}, \mathbf{A}, \mathbf{C}, \mathbf{E}, \mathbf{Y}, \mathbf{G}, \mathbf{Z}, \mathbf{\Pi}, \mathbf{S}, \mathbf{K}$ і вектори $\mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{F}$ обчислюють за відповідними білінійними формами та лінійними функціоналами, наприклад, $\mathbf{M} = \{m(\varphi_i, \varphi_j)\}_{i,j=1}^N$.

5. ОДНОКРОКОВА РЕКУРЕНТНА СХЕМА ІНТЕГРУВАННЯ В ЧАСІ

Для повної дискретизації задачі поділимо часовий інтервал $[0, T]$ на рівні проміжки за допомогою вузлів $t_j = j\Delta t$, $j = 0, \dots, N_T$, де N_T – певне фіксоване натуральне число і $T = N_T \Delta t$. Для апроксимації розв’язку напівдискретизованої задачі (4.2) на кожному проміжку $[t_j, t_{j+1}]$ будемо використовувати такі поліноми:

$$\begin{cases} \mathbf{u}(t) \cong \mathbf{u}_{\Delta}(t) := [1 - w(t)]\mathbf{u}^j + \Delta t [1 - w(t)]w(t)\dot{\mathbf{u}}^j + w^2(t)\mathbf{u}^{j+1} \\ \quad \cong \mathbf{u}^j + \Delta t w(t)\dot{\mathbf{u}}^j + \frac{1}{2} [\Delta t w(t)]^2 \ddot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \\ \mathbf{p}(t) \cong \mathbf{p}_{\Delta}(t) := [1 - w(t)]\mathbf{p}^j + w(t)\mathbf{p}^{j+1} \cong \mathbf{p}^j + \Delta t w(t)\dot{\mathbf{p}}^{j+1/2}, \\ \boldsymbol{\theta}(t) \cong \boldsymbol{\theta}_{\Delta}(t) := [1 - w(t)]\boldsymbol{\theta}^j + w(t)\boldsymbol{\theta}^{j+1} \cong \boldsymbol{\theta}^j + \Delta t w(t)\dot{\boldsymbol{\theta}}^{j+1/2}, \end{cases} \quad (5.1)$$

де $w(t) := (t - t_j) / \Delta t$.

Тут $\mathbf{u}^j, \dot{\mathbf{u}}^j, \mathbf{p}^j, \boldsymbol{\theta}^j$ – вузлові значення пружного зміщення, його швидкості, електричного потенціалу та приросту температури відповідно в момент часу $t_j = j\Delta t$. $\ddot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \dot{\mathbf{p}}^{j+1/2}, \dot{\boldsymbol{\theta}}^{j+1/2}$ – вузлові значення прискорення, швидкості електричного потенціалу та швидкості приросту температури відповідно на часовому проміжку $[t_j, t_{j+1}]$, оскільки вони залишаються сталими вздовж цього інтервалу.

Вектори $\mathbf{u}^0, \dot{\mathbf{u}}^0, \mathbf{p}^0, \boldsymbol{\theta}^0$ отримуємо з початкових умов задачі Коші (4.2). Після підстановки (5.1) у (4.2) та виконання належних перетворень [2,3] отримуємо однокрокову рекурентну схему інтегрування в часі (ОРС) задачі (4.2)

$$\begin{aligned} \text{задано } \Delta t > 0, \gamma \in [0,1], \beta \in [0,1], \mathbf{u}^j, \dot{\mathbf{u}}^j, \mathbf{p}^j, \boldsymbol{\theta}^j; \\ \text{знайти } \ddot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \dot{\mathbf{p}}^{j+1/2}, \dot{\boldsymbol{\theta}}^{j+1/2} \text{ такі, що} \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M} + \Delta t \gamma \mathbf{A} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \beta \mathbf{C} & -\Delta t \gamma \mathbf{E}^T & -\Delta t \gamma \mathbf{Y}^T \\ \Delta t \gamma \mathbf{E} & \mathbf{G} + \Delta t \gamma \mathbf{Z} & \mathbf{\Pi}^T \\ \Delta t \gamma \mathbf{Y} & \mathbf{\Pi} & (\mathbf{S} + \Delta t \gamma \mathbf{K}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \\ \dot{\mathbf{p}}^{j+1/2} \\ \dot{\boldsymbol{\theta}}^{j+1/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{j+1/2} - \mathbf{A}\dot{\mathbf{u}}^j - \mathbf{C}\mathbf{u}^j - \Delta t \gamma \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}}^j + \mathbf{E}^T \mathbf{p}^j + \mathbf{Y}^T \boldsymbol{\theta}^j \\ \mathbf{R}_{j+1/2} - \mathbf{E}\dot{\mathbf{u}}^j - \mathbf{Z}\mathbf{p}^j \\ \mathbf{F}_{j+1/2} - \mathbf{K}\boldsymbol{\theta}^j - \mathbf{Y}\dot{\mathbf{u}}^j \end{bmatrix}, \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{j+1} &= \mathbf{u}^j + \Delta t \dot{\mathbf{u}}^j + \frac{1}{2} \Delta t^2 \ddot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, & \dot{\mathbf{u}}^{j+1} &= \dot{\mathbf{u}}^j + \Delta t \ddot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \\ \mathbf{p}^{j+1} &= \mathbf{p}^j + \Delta t \dot{\mathbf{p}}^{j+1/2}, & \boldsymbol{\theta}^{j+1} &= \boldsymbol{\theta}^j + \Delta t \dot{\boldsymbol{\theta}}^{j+1/2}, \quad j = 0, \dots, N_T - 1. \end{aligned}$$

Питання стійкості та збіжності ОРС розглянуто в [2, 3]. Зокрема, схема є безумовно стійкою при $\frac{1}{2} \leq \gamma \leq \beta$ і найвищий порядок збіжності досягається при $\gamma = \beta = \frac{1}{2}$.

6. ЧИСЛОВІ ЕКСПЕРИМЕНТИ

Розглянемо піроелектричний стрижень з кераміки PZT-4 довжиною $L = 0.01$ м. Припустимо, що напрям його поляризації збігається з напрямом його осі Ox . Коефіцієнти, що характеризують фізико-механічні властивості матеріалу PZT-4, мають такі значення:

$$\rho = 7500 \text{ кг/м}^3, \quad c = 13.9 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2, \quad e = -15.1 \text{ Кл/м}^2, \quad \varepsilon = 6.46 \cdot 10^{-8} \text{ Ф/м}, \quad \text{див. [11];}$$

$$z = 5 \cdot 10^{-12} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}, \quad \text{див. [7];} \quad \pi = 27 \cdot 10^{-5} \text{ Кл} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}, \quad \text{див. [8];}$$

$$\alpha = 2 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}, \quad c_e = 350 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}, \quad \lambda(x) = 1.1 \text{ Дж} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}, \quad \text{див. [10].}$$

Прийmemo коефіцієнт в'язкості $a(x) = 4 \text{ м}^2 / \text{с}$ і

$$f = 0 \text{ м/с}^2, \quad w = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}.$$

Нарешті припустимо, що лівий і правий кінці стрижня є електродами, які можуть бути під'єднаними до електричного кола, і тому електричний струм може проходити вздовж стрижня. Вважаємо, що лівий кінець стрижня жорстко закріплений, заземлений і підтримується з нульовим збуренням температури. До правого кінця будемо подавати механічне навантаження, електричний струм і тепловий потік таким способом, щоб можна було змодельовати особливості прямого та оберненого п'єзоефекту у розглядуваному стрижні за умов, що в початковий момент часу зміщення, швидкість, електричний потенціал і збурення температури мають нульові значення у всіх точках стрижня.

Спостереження будемо проводити протягом періоду часу $T = 75 \cdot 10^{-7} \text{ с}$. Для дискретизації візьмемо рівномірну сітку з $N = 512$ скінченних елементів з кусково-квадратичними апроксимаціями розв'язку і $N_T = 4000$ кроків інтегрування в часі. В такому разі виконується умова Куранта-Фрідріхса $v \Delta t \leq \frac{1}{2} h$, де $v = \sqrt{c\rho^{-1}}$ – швидкість поширення хвилі збурень. Наведені результати одержано зі значеннями параметрів $\beta = \gamma = 0.5$, оскільки, згідно з [3], вони забезпечують другий порядок збіжності ОРС.

6.1. ПРЯМИЙ П'ЄЗОЕФЕКТ

Розглядатимемо випадок, коли імпульс механічного навантаження подається до правого кінця стержня. Значення електричного струму та теплового потоку дорівнюють нулю на цьому кінці стержня. Для конкретного чисельного експерименту нехай крайові умови на правому кінці набудуть вигляду

$$\bar{\sigma}(t) = \begin{cases} 5 \cdot 10^6 \text{ Н/м}^2, & t \leq 5 \cdot 10^{-7} \text{ с}, \\ 0 \text{ Н/м}^2, & t > 5 \cdot 10^{-7} \text{ с}, \end{cases} \quad \bar{J}(t) = 0 \text{ А}, \quad \bar{h}(t) = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (6.1)$$

6.1.1. ПОШИРЕННЯ ХВИЛІ ВЗДОВЖ СТЕРЖНЯ

Найперше покажемо динаміку проходження хвилі вздовж стержня, аналогічно до того, як у нашій попередній праці [5]. З першого рядка на рис. 6.1 видно профілі пружного зміщення $u(x,t)$ та механічного напруження $\sigma(x,t)$ під час руху хвилі до лівого кінця стержня після зняття навантаження. Наступний рядок демонструє перетворення в структурі хвиль, які відбуваються при відбитті від закріпленого кінця стержня. Як видно рис. 6.1, в ці моменти часу значення механічного напруження подвоюється. В третьому рядку показано профілі пружного зміщення та механічного навантаження, коли хвиля рухається вже до правого кінця стержня. Останній рядок зображає профілі хвиль після відбиття від вільного кінця стержня. Варто зауважити, що амплітуди хвиль залишаються такими самими, але змінюють свій знак.

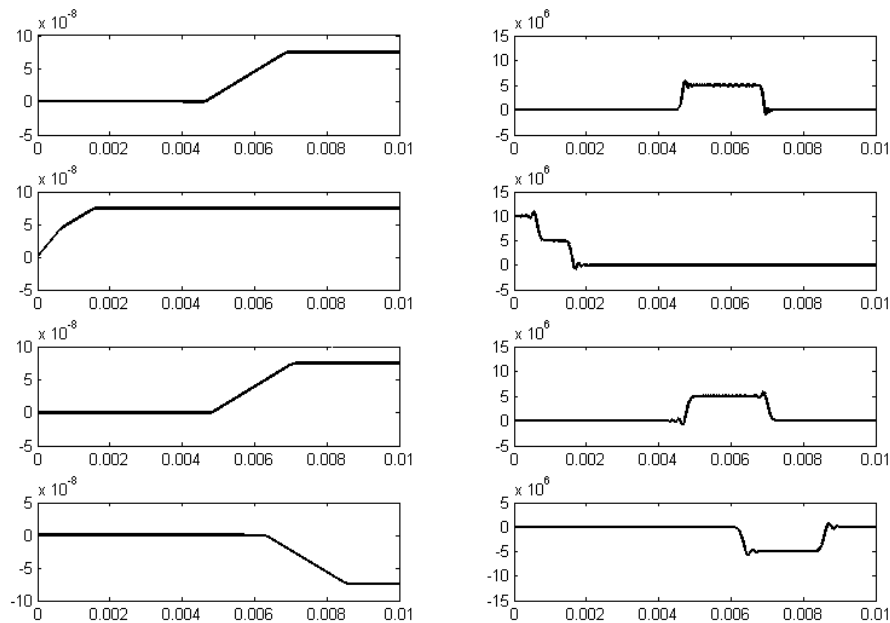


Рис. 6.1. Профілі пружного зміщення (зліва) та механічного напруження (справа) в моменти часу $t = 12 \cdot 10^{-7}$ с; $23.85 \cdot 10^{-7}$ с; $38.1 \cdot 10^{-7}$ с; $52.95 \cdot 10^{-7}$ с

6.1.2. СТРУКТУРА ХВИЛЬОВИХ ПРОФІЛІВ

Оскільки динаміка профілів хвиль інших характеристик схожа до тої, що зображена на рис. 6.1, всі інші графіки розв'язків будемо зображати лише в певні

моменти часу, щоб підкреслити саме структуру профілю, а не його поведінку в часі. Покажемо профілі розв'язків в момент часу $t = 12.9 \cdot 10^{-7}$ с, коли хвиля розташована приблизно посередині стержня.

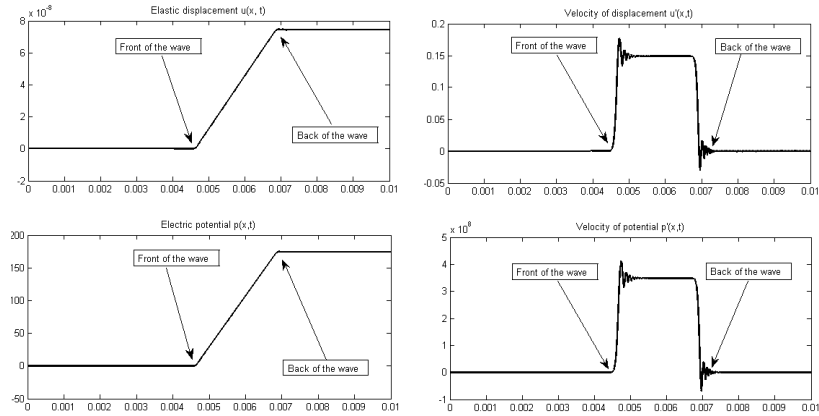


Рис. 6.2. Пружне зміщення, електричний потенціал і їхні швидкості в момент часу $t = 12 \cdot 10^{-7}$ с

Тут ми можемо бачити, що і пружне зміщення, і електричний потенціал – кусково-лінійні функції, а структура їхніх профілів однакова, вони відрізняються тільки значеннями. Те саме можна сказати і про їхні швидкості.

Наступні характеристики зображені на рис. 6.3. Варто зауважити, що профіль приросту температури $\theta(x, t)$ структурно нагадує профіль швидкості пружного зміщення $u'(x, t)$, а його швидкість нагадує механічне прискорення $u''(x, t)$.

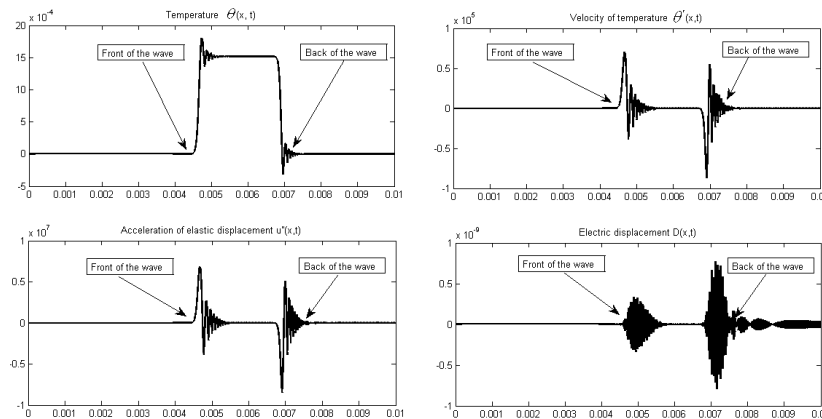


Рис. 6.3. Приріст температури, його швидкість, механічне прискорення та електрична індукція в момент часу $t = 12 \cdot 10^{-7}$ с

Також варто продемонструвати профілі таких характеристик:

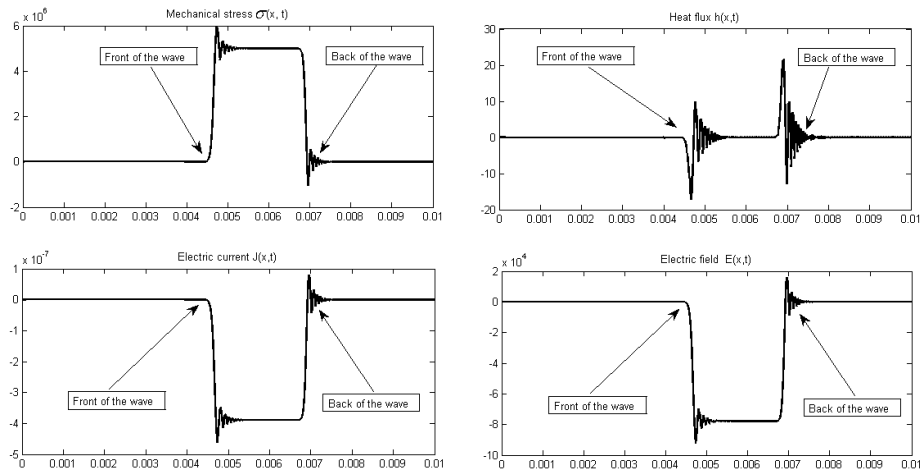


Рис. 6.4. Механічне напруження, тепловий потік, електричний струм і напруженість електричного поля в момент часу $t = 12 \cdot 10^{-7}$ с

Зауважимо, що висота сходинки в профілі механічного напруження становить $5 \cdot 10^6 \text{ Н/м}^2$, тобто величини імпульсу механічного навантаження, яке подається до правого кінця стержня. Структури хвиль електричного струму $J(x,t)$ та напруженості електричного поля $E(x,t)$ є антисиметричними до профілю механічного напруження. Профіль теплового потоку нагадує нам профіль механічного прискорення.

6.1.3. ЕНЕРГЕТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Розглянемо розподіл у часі різних компонентів повної енергії піроелектрика.

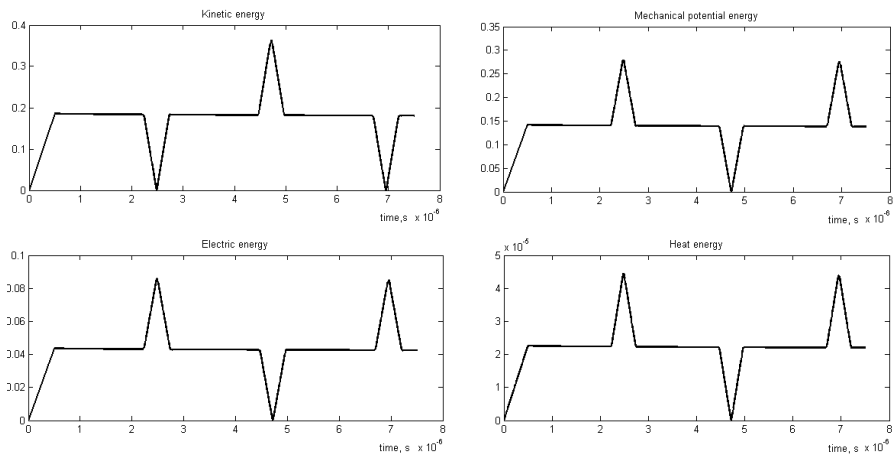


Рис. 6.5. Зміна з часом кінетичної, механічної потенціальної, електричної та теплової складових енергії піроелектрика

Як видно з рис. 6.5, механічна потенціальна, електрична та теплова енергії мають подібну структуру. Це цілком очікувано, оскільки всі вони є частинами повної

потенціальної енергії піроелектрика. Тепер пояснимо детальніше динаміку зміни складових енергії в часі. Всі компоненти повної енергії піроелектрика зростають лінійно поки імпульс механічного напруження все ще подається. Потім, коли хвиля рухається вздовж стержня, всі вони залишаються сталими, аж доки вона досягає закріпленого кінця стержня. В цей момент відбуваються перетворення в структурі хвилі, як ми вже описували раніше. Отже, кінетична енергія тоді починає зменшуватися, аж поки не досягне нуля, коли задній фронт хвилі досягне лівого кінця стержня. Решта 3 компоненти енергії досягають свого максимуму в цей момент часу. Далі перетворення продовжується і кінетична енергія починає зростати, тоді як значення інших складових енергії зменшується. Коли перетворення хвилі завершилося, всі компоненти енергії піроелектрика залишаються константами. Схожа ситуація з перетворенням енергії з одного виду в інший трапляється, коли хвиля досягає правого кінця стержня. Якщо звернути увагу на величини компонент повної енергії піроелектрика, то можна помітити, що теплова енергія значно менша від інших. Максимальне значення кінетичної енергії – близько $0.36 Дж$, максимальне значення електричної енергії – $0.086 Дж$ і максимальне значення теплової енергії – близько $4.42 \cdot 10^{-4} Дж$. Коли кінетична енергія досягає свого максимуму, інші компоненти дорівнюють нулю, отже, можна стверджувати, що приблизно 23.8% механічної енергії може бути перетворено в електричну, і лише приблизно 0.0123% її може бути перетворено в теплову.

Враховавши ще величини втрат енергії, графіки яких тут не подано, отримаємо, що рівняння енергетичного балансу задовольняється в будь-який момент часу $t \in [0, T]$. Отже, можемо стверджувати про коректність отриманих розв'язків.

6.2. ОБЕРНЕНИЙ П'ЄЗОЕФЕКТ

Тепер розглянемо випадок, коли імпульс електричного струму подається на правий кінець стержня, а механічне навантаження та тепловий потік дорівнюють нулю. Нехай крайова умова на правому кінці набуває вигляду

$$\bar{\sigma}(t) = 0 \text{ Н / м}^2, \quad \bar{J}(t) = \begin{cases} 100 \text{ А}, & t \leq 5 \cdot 10^{-7} \text{ с}, \\ 0 \text{ А}, & t > 5 \cdot 10^{-7} \text{ с}, \end{cases} \quad \bar{h}(t) = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (6.2)$$

Знову візьмемо тривалість періоду спостереження $T = 75 \cdot 10^{-7} \text{ с}$. Для дискретизації задачі використаємо рівномірну сітку з $N = 512$ скінченних елементів з кусково-квадратичними апроксимаціями розв'язків і виконаємо $N_T = 4000$ кроків ОРС. Параметри рекурентної схеми приймемо також $\beta = \gamma = 0.5$.

6.2.1. СТРУКТУРА ХВИЛЬОВИХ ПРОФІЛІВ

Як і у випадку прямого п'єзоелектру, будемо демонструвати профілі розв'язків у момент часу $t = 12 \cdot 10^{-7} \text{ с}$, коли хвиля, що рухається, розташована приблизно посередині стержня.

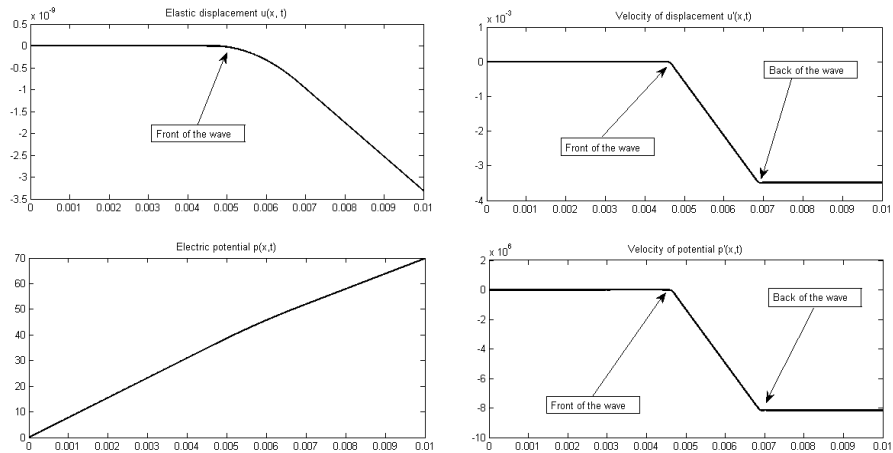


Рис. 6.6. Пружне зміщення, електричний потенціал і їхні швидкості в момент часу $t = 12 \cdot 10^{-7}$ с

Тут можна побачити, що профілі пружного зміщення $u(x,t)$ та електричного потенціалу $p(x,t)$ вже не є кусково-лінійними, як в попередньому випадку. Крім того, вони вже не є структурно подібними, хоча їхні швидкості залишаються такими.

Решта характеристик зображено на рис. 6.7 і 6.8. Зауважимо, що профіль приросту температури $\theta(x,t)$ знову нагадує профіль швидкості пружного зміщення $u'(x,t)$. Так само швидкість приросту температури $\theta'(x,t)$ структурно схожа на профіль механічного прискорення $u''(x,t)$, що спостерігалось і у випадку прямого п'єзоефекту. Однак електрична індукція $D(x,t)$ тепер є ненульовою константою вздовж всього піроелектричного стержня.

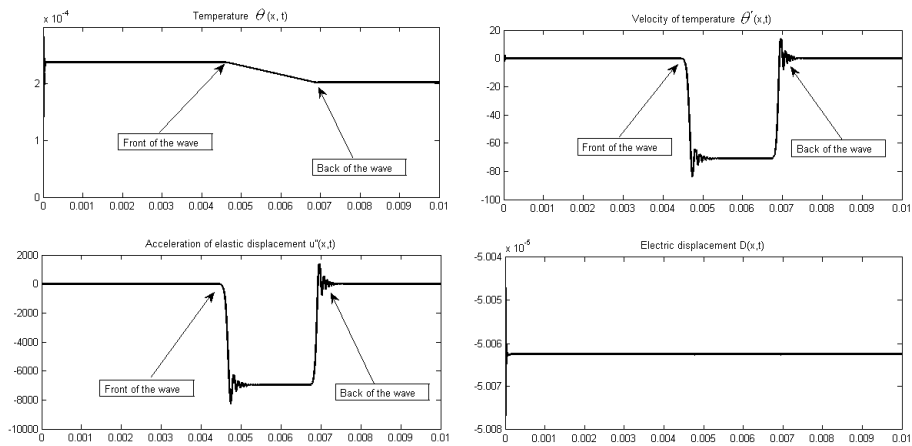


Рис. 6.7. Приріст температури, його швидкість, механічне прискорення та електрична індукція в момент часу $t = 12 \cdot 10^{-7}$ с

Також структури профілів електричного струму $J(x,t)$ та напруженості електричного поля $E(x,t)$, що зображені на рис.6.9, є антисиметричними до профілю механічного напруження $\sigma(x,t)$, як і у випадку прямого п'єзоефекту.

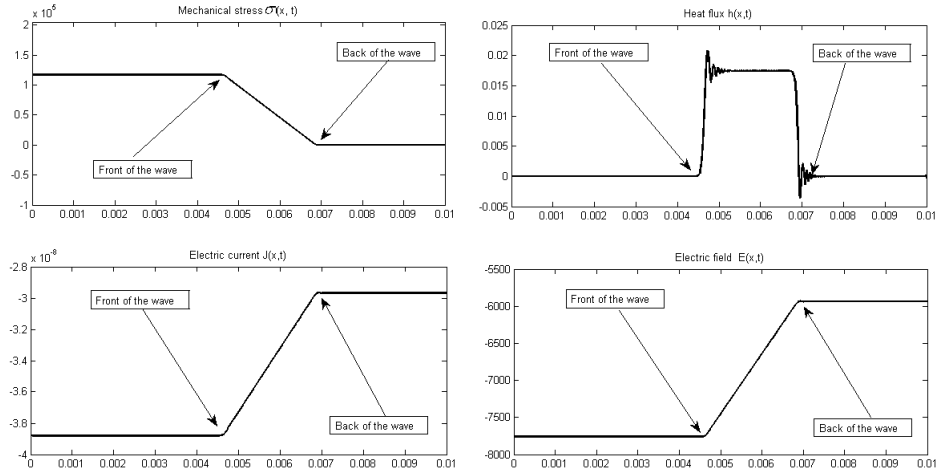


Рис. 6.8. Механічне напруження, тепловий потік, електричний струм і напруженість електричного поля в момент часу $t = 12 \cdot 10^{-7}$ с

6.2.2. ЕНЕРГЕТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Розглянемо тепер розподіл в часі складових повної енергії піроелектрика.

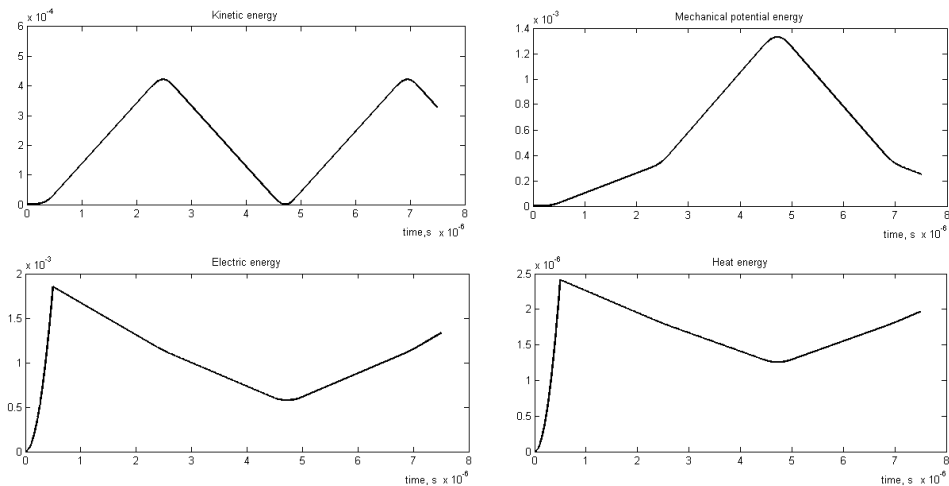


Рис. 6.9. Зміна з часом кінетичної, механічної потенціальної, електричної та теплової складових енергії піроелектрика

Можемо бачити, що графіки електричної та теплової енергій мають подібну структуру. Однак структура графіка механічної потенціальної енергії є іншою. Всі складові повної енергії піроелектрика зростають квадратично, поки струм все ще подається. Потім кінетична та механічна потенціальна енергії зростають лінійно, а

теплова спадає лінійно протягом часу, коли хвиля рухається в напрямі лівого кінця стержня. Коли перетворення проходять на закріпленому кінці, кінетична енергія спочатку квадратично зростає, досягає свого максимуму, а потім квадратично спадає. Всі решта складові повної енергії піроелектрика тільки змінюють швидкість свого зростання (чи спадання). Коли хвиля досягає правого кінця стержня, кінетична енергія спочатку квадратично спадає, досягає нуля, а потім квадратично зростає. При відбитті хвилі від правого кінця механічна потенціальна енергія спочатку квадратично зростає, а потім квадратично спадає. Інші дві компоненти енергії поведуться подібно до кінетичної енергії, але вони не досягають нуля, а лише деякого мінімального значення.

Подивимося тепер на величини компонентів повної енергії піроелектрика. Після того, як навантаження у вигляді електричного струму перестає подаватися, повна енергія системи залишається сталою і дорівнює 0.0019 Дж . Максимальне значення суми кінетичної та механічної потенціальної енергії – близько 0.0013 Дж і максимальне значення теплової енергії – $2.5 \cdot 10^{-6} \text{ Дж}$. Отже, ми можемо стверджувати, що близько 68.42 % електричної енергії може перетворитися в механічну, і лише приблизно 0.132 % її може перетворитися в теплову.

Рівняння енергетичного балансу виконується. Отже, можемо стверджувати про коректність отриманих результатів.

7. ВИСНОВКИ

На підставі математичної моделі явища піроелектрики у вигляді початково-крайової задачі було сформульовано відповідну варіаційну задачу. Далі вона була дискретизована за допомогою методу Гальоркіна з базисами МСЕ та однокрокової рекурентної схеми. Отриману чисельну схему реалізували у вигляді спеціально розробленого програмного забезпечення.

Числові експерименти проводили з піроелектричним стержнем з кераміки PZT-4. Показані профілі розв'язків демонструють динаміку поширення хвилі в стержні у випадках прямого та оберненого п'єзоефекту. Також аналіз складових енергій піроелектрика свідчить про те, що у випадку кераміки PZT-4 можна нехтувати впливом теплового поля. Коректність побудованої чисельної схеми підтверджується виконанням рівняння енергетичного балансу в усіх випадках.

Також результати проведених числових експериментів свідчать про те, що в кераміці PZT-4 наявний сильно виражений обернений п'єзоефект (майже 70% електричної енергії може перетворитися в механічну).

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Новацкий В.* Электромагнитные эффекты в твердых телах / В. Новацкий. – М.: Мир, 1986. – 159 с.
2. *Шинкаренко Г. А.* Проекционно-сеточные аппроксимации для вариационных задач пироэлектричества. I. Постановка задач и анализ установившихся вынужденных колебаний / Г. А. Шинкаренко // Дифференциальные уравнения. – 1993. – Т. 29, № 7. – С. 1252-1260.
3. *Шинкаренко Г. А.* Проекционно-сеточные аппроксимации для вариационных задач пироэлектричества. II. Дискретизация и разрешимость нестационарных задач / Г. А. Шинкаренко // Дифференциальные уравнения. – 1994. – Т. 39, № 2. – С. 317-326.

4. *Becker E. B.* Finite Elements. An Introduction / E. B. Becker, G. F. Carey, J. T. Oden. – New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 1981. – Vol. I. – 272 p.
5. *Chaban F.* Numeric modeling of mechanical and electric fields interaction in piezoelectric / F. Chaban, H. Shynkarenko, V. Stelmashchuk, S. Rosinska // Manufacturing processes. Some problems. – Opole: Politechnika Opolska, 2012. – Vol. 1, Ch. 9. – P. 107-118.
6. *Jalili N.* Piezoelectric-Based Vibration Control. From Macro to Micro/Nano Scale Systems / N. Jalili. – New-York: Springer, 2010. – 517 p.
7. *Lam K. S.* Dielectric and pyroelectric properties of lead zirconate titanate/polyurethane composites / K. S. Lam, Y. W. Wong, L. S. Tai, Y. M. Poon, F. G. Shin // Journal of Applied Physics. – 2004. – Vol. 96. – No 7. – P. 3896-3899.
8. *Mark J. E.* Physical Properties of Polymers Handbook. Second Edition / J. E. Mark. – Berlin: Springer, 2007. – 1038 p.
9. *Schwartz M.* Encyclopedia of Smart Materials / M. Schwartz. –New-York: John Wiley & Sons, Inc., 2002. – 1073 p.
10. *Tichy J.* Fundamentals of Piezoelectric Sensorics. Mechanical, Dielectric and Thermodynamical Properties of Piezoelectric Materials / J. Tichy, J. Erhart, E. Kittinger, J. Privratska. – Berlin:Springer, 2010. – 216 p.
11. *Yang J.* The Mechanics of Piezoelectric Structures / J. Yang. – Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2006. – 312 p.

*Стаття: надійшла до редколегії 03.12.2013
доопрацьована 22.01.2014
прийнята до друку 05.02.2014*

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСТВА

В. Стельмашук¹, Г. Шинкаренко^{1,2}

¹*Львовский национальный университет имени Ивана Франко,
ул. Университетская, 1, Львов, 79000, e-mail: kis@lnu.edu.ua*

²*Опольский политехнический университет,
ул. Пружковская, 76, Ополе, 45-758, e-mail: h.shynkarenko@po.opole.pl*

В качестве математической модели взаимодействия механических, электрических и тепловых полей в пирозлектрическом стержне, находящимся под воздействием импульсной нагрузки, использовано начально-краевую задачу пирозлектричества в терминах неизвестных упругого смещения, электрического потенциала и приращения температуры. Алгоритм решения этой задачи использует формулировку соответствующей вариационной задачи, полудискретизацию Галеркина по просторовой переменной с кусочно-линейными и кусочно-квадратическими базисными функциями метода конечных элементов (МКЭ) и одношаговую рекуррентную схему интегрирования по времени.

Ключевые слова: пирозлектрик, начально-краевая задача, вариационная задача, уравнение энергетического баланса, полудискретизация Галеркина, метод конечных элементов, одношаговая рекуррентная схема, керамика PZT-4.

**NUMERICAL MODELING
OF DYNAMICAL PYROELECTRICITY PROBLEMS**

V. Stelmashchuk¹, H. Shynkarenko^{1,2}

¹*Ivan Franko National University of Lviv,
Universytetska Str, 1, Lviv, 79000, e-mail: kis@lnu.edu.ua*

²*Opole University of Technology,
Prószkowska Str., 76, Opole, 45-758, e-mail: h.shynkarenko@po.opole.pl*

Mathematical model of interaction of mechanical, electrical and heat fields in the pyroelectric bar under impulse loading is presented as initial boundary value pyroelectricity problem in terms of unknown elastic displacement, electric potential and temperature increment. Solution algorithm of this problem utilizes the corresponding variational problem formulation, Galerkin semidiscretization by space variable with piecewise-linear and piecewise-quadratic basic functions of finite element method (FEM) and one-step recurrent scheme for time integration.

Key words: pyroelectricity, initial boundary-value problem, variational problem, energy balance equation, Galerkin semidiscretization, finite element method, one-step recurrent scheme, PZT-4 ceramics.