



Заключение

В работе решена задача моделирования процесса формообразования на станке с параллельной кинематикой.

Приведены зависимости для определения законов изменения длин раздвижных штанг, на основе которых можно решать задачи по оптимизации процесса обработки сложных поверхностей.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Stewart D.* A platform with six degrees of freedom // Proc. Inst. Mech. Eng. 1965/1966. Vol. 180, pt 1, N15/ P. 371-386.
2. *Афонин В.Л., Крайнев А.Ф., Ковалев В.Е. и др.* Обработка нового поколения. Концепция проектирования. М.: Машиностроение, 2001.
3. *Ивахненко А.Г.* Управление станками с параллельной кинематикой при формообразовании. Фундаментальные и прикладные вопросы механики: Сборник докладов международной научной конференции / Под ред. К.А. Чехонина. Хабаровск: Изд-во Хабар. гос. техн. ун-та, 2003. Т.2. С. 140-144.
4. *Решетов Д.Н., Портман В.Т.* Точность металлорежущих станков. М.: Машиностроение, 1986.

Статья представлена к публикации членом редколлегии Е.А. Ереминым.

УДК 621.315

© 2005 г. **И.Е. Еремин**, канд. физ.-мат. наук,
В.В. Еремина, канд. физ.-мат. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ СВОЙСТВ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СРЕД

Рассматриваются методологические аспекты математического моделирования диэлектрических свойств ионных кристаллов и полярных жидкостей. Обосновывается универсальность применения кибернетической модели напряженности эффективного электрического поля, действующего внутри поляризованного образца.

Введение

На современном этапе научно-технического прогресса все большее внимание уделяется вопросам поиска конструктивных диэлектрических

материалов, обладающих заданными поляризационными свойствами. Наиболее перспективные подходы к решению этой проблемы, как правило, требуют проведения аналитического или имитационного моделирования эксплуатационных характеристик виртуально синтезируемых прототипов. Естественно, что эффективность подобных методик, используемых для подбора композиционного состава желаемых диэлектрических сред, а также объективность прогнозируемой картины происходящих в них поляризационных процессов, целиком и полностью зависит от адекватности реализуемых математических моделей.

В настоящее время при анализе и синтезе сложных, т.е. составных систем, широкое применение получил системный подход, который отличается от классического, индуктивного подхода, рассматривающего систему путем перехода от частного к общему и конструирующего систему путем слияния ее компонент, формируемых по отдельности. Системный же подход предполагает последовательный переход от общего к частному, причем в его рамках исследуемый объект мысленно выделяется из окружающей среды.

Поскольку в большинстве случаев оказывается невозможным полностью смоделировать реально функционирующую систему, то чаще всего создается конкретная модель, соответствующая поставленной проблеме. При этом необходимо четкое определение конечной цели моделирования. Для правильно построенной системной модели характерным является то, что она выявляет лишь те закономерности, которые действительно нужны исследователю, и не рассматривает свойства объекта, несущественные для проводимого исследования [1].

Описание поляризационных процессов на микроуровне

Как известно, динамика физического процесса может быть достаточно адекватно отображена в рамках использования трех основных законов механики Ньютона. При этом для формирования математических описаний различных видов электрической поляризации диэлектрика обычно используются статические модели механизмов перераспределения соответствующих заряженных частиц, на основании которых составляются уравнения балансов сил, действующих в изучаемой системе.

В общем случае на поляризуемую частицу массой m , движущуюся с ускорением a , влияют вынуждающая электродвижущая сила $F_{\text{ЭДС}}$, сила упругости $F_{\text{упр}}$, обусловленная электрическим взаимодействием зарядов и стремящаяся вернуть частицу в исходное состояние, и сила сопротивления $F_{\text{сопр}}$, вызванная существованием внутреннего трения:

$$m \cdot a = F_{\text{ЭДС}} - F_{\text{упр}} - F_{\text{сопр}} \quad (1)$$

Представление каждой из сил на базе трактовок [2 – 4], а также переход к дифференциальной форме записи дают следующий результат:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = q \cdot E(t) - k \cdot x(t) - \frac{m}{\tau} \cdot \frac{dx(t)}{dt}, \quad (2)$$

где $x(t)$ – временная функция смещения частицы; q – ее электрический заряд; k – значение коэффициента квазиупругой связи; τ – время релаксации процесса; $E(t)$ – функция напряженности эффективного электрического поля внутри образца.

В случае рассмотрения разновидностей поляризации диэлектрика, вызванной периодически изменяющимся электрическим полем с малой амплитудой, выражения типа (2) заменяются уравнениями вынужденных гармонических колебаний с трением [5]:

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} + 2b \frac{dx(t)}{dt} + \omega_0^2 x(t) = \frac{q}{m} E(t), \quad 2b = \frac{1}{\tau}, \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m}, \quad (3)$$

где b и ω_0 – соответственно коэффициент затухания и частота собственных колебаний частицы. Отметим, что применимость данной записи для математического моделирования динамики перераспределения электрических зарядов, образующих на микроуровне диэлектрический материал, является очевидной и достаточно реализованной в рамках классической физики диэлектриков. В частности, для описания упругой электронной поляризации используются уравнения, в точности аналогичные виду (3).

При рассмотрении упругой ионной поляризации простейших кристаллов, как правило [6], применяется несколько упрощенная модель, в которой отсутствуют слагаемые, отражающие затухание колебаний:

$$\begin{cases} \frac{d^2 x_1(t)}{dt^2} + \omega_{01}^2 [x_1(t) + x_2(t)] = \frac{q_1}{m_1} E(t), \\ \frac{d^2 x_2(t)}{dt^2} + \omega_{02}^2 [x_2(t) + x_1(t)] = \frac{q_2}{m_2} E(t), \end{cases} \quad (4)$$

где $x_1(t)$ и $x_2(t)$ – функции смещения ионов противоположных знаков; ω_{01} и ω_{02} – собственных колебаний; q_1, q_2, m_1 и m_2 – заряды и массы ионов. С одной стороны, подобное описание обусловлено наличием объективно существующего условия $b_i \ll \omega_{0i}$, т.е. возможностью использовать приближение $b_i \approx 0$, которое в принципе имеет место и для упругой электронной поляризации, однако не реализуется, с другой стороны, – структурой системы уравнений (3), исключающей потенциал их суммирования, осуществляемого в рамках классического подхода, при наличии первых производных:

$$\begin{cases} \frac{d^2 x_1(t)}{dt^2} + 2b_1 \frac{dx_1(t)}{dt} + \omega_{01}^2 [x_1(t) + x_2(t)] = \frac{q_1}{m_1} E(t); \\ \frac{d^2 x_2(t)}{dt^2} + 2b_2 \frac{dx_2(t)}{dt} + \omega_{02}^2 [x_2(t) + x_1(t)] = \frac{q_2}{m_2} E(t). \end{cases} \quad (5)$$

С точки зрения математического моделирования поляризационных характеристик диэлектрических материалов, практический интерес представляют динамические уравнения индукции дипольных моментов $\mu(t)$. При этом в основе их формирования для случаев упругих электронной и ионной поляризаций лежит переход от функций смещения (3) и (5) к функциям индуцированных электрических моментов, выполняемый путем умножения $x(t)$ на величину надлежащего электрического заряда:

$$\frac{d^2 \mu_{эл}(t)}{dt^2} + 2b_{эл} \frac{d\mu_{эл}(t)}{dt} + \omega_{0эл}^2 \mu_{эл}(t) = \frac{q_{эл}^2}{m_{эл}} E(t), \quad (6)$$

$$\begin{cases} \frac{d^2 \mu_{u1}(t)}{dt^2} + 2b_{u1} \frac{d\mu_{u1}(t)}{dt} + \omega_{0u1}^2 \left[\mu_{u1}(t) - \frac{q_{u1}}{q_{u2}} \mu_{u2}(t) \right] = \frac{q_{u1}^2}{m_{u1}} E(t), \\ \frac{d^2 \mu_{u2}(t)}{dt^2} + 2b_{u2} \frac{d\mu_{u2}(t)}{dt} + \omega_{0u2}^2 \left[\mu_{u2}(t) - \frac{q_{u2}}{q_{u1}} \mu_{u1}(t) \right] = \frac{q_{u2}^2}{m_{u2}} E(t). \end{cases} \quad (7)$$

Кроме того, в работах [7 – 8] была показана возможность использования формы записи (3) в качестве исходной модели для отображения ориентационных разновидностей упругой поляризации вида:

$$\frac{d^2 \mu_{op}(t)}{dt^2} + 2b_{op} \frac{d\mu_{op}(t)}{dt} + \omega_{0op}^2 \mu_{op}(t) = \frac{\mu_0^2}{J} E(t), \quad (8)$$

здесь μ_0 и J – соответственно собственный дипольный момент и момент инерции полярной молекулы или отдельной валентной связи.

Таким образом, применение соотношений (6) – (8), отражающих упругие виды электрической поляризации диэлектрика, вызванной приложением переменного поля малой амплитуды, при моделировании его поляризационных свойств является удобным с точки зрения общности используемых математических описаний.

Макроскопическая модель диэлектрической проницаемости

Наиболее подходящей для расчетов диэлектрической проницаемости ε конденсированных сред общепринято считается ее формула, полученная Клаузиусом и Мосотти еще в середине XIX в. [6, 9]:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_i N_i, \quad (9)$$

где K – общее число разновидностей поляризуемых частиц; α_i и N_i – соответственно их поляризуемости и концентрации; ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. Вывод данного уравнения реализован на базе модели формирования локального поля Лорентца, сущность которой заключается в локализации произвольно выбранной молекулы воображаемой микроскопической сферой, радиус которой должен соответствовать нескольким десяткам межъядерных расстояний. Далее предполагается, что все части-

цы, расположенные внутри сферы, за исключением рассматриваемой, могут быть мысленно изъяты без нарушения общего поляризованного состояния образца. В рамках подобной трактовки выражение напряженности E поля, эффективно действующего внутри поляризованного диэлектрика, представляет собой следующую сумму:

$$E = E_{cp} + E_1 + E_2, \quad (10)$$

где E_{cp} – напряженность среднего макроскопического поля; E_1 – напряженность поля, обусловленного выходами дипольных цепочек на поверхность локализирующей сферы; E_2 – напряженность поля, создаваемого молекулами, находящимися внутри сферы (рис. 1).

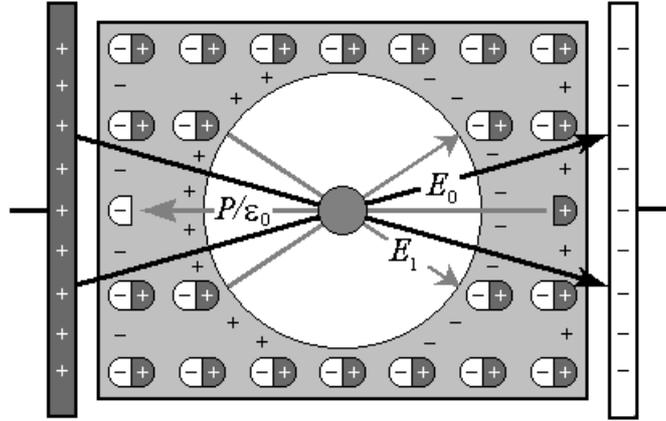


Рис. 1. Схема формирования локального поля Лорентца.

Главным достоинством модели Лорентца является возможность рассматривать базовую составляющую эффективного поля, а именно слагаемые E_{cp} и E_1 , с макроскопической точки зрения, что существенно упрощает расчет его напряженности. При этом для подстановки в уравнение суперпозиции (10), как правило, принято использовать следующее выражение напряженности среднего макроскопического поля

$$E_{cp} = \frac{1}{(\varepsilon - 1)\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \mu_i N_i, \quad (11)$$

которое вытекает из его определения с учетом того, что $E_0 = \varepsilon E_{cp}$:

$$E_{cp} = E_0 - \frac{1}{\varepsilon_0} P, \quad P = \sum_{i=1}^K \mu_i N_i, \quad (12)$$

где P – результирующий электрический момент, наведенный в единице объема поляризованного материала. Величина электрического поля, образованного поляризованной сферой, эквивалентного вкладу усиливающих микрополей, действующих со стороны макроскопической части образца, находится путем интегрирования плотности ее поверхностного заряда:

$$E_1 = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \mu_i N_i. \quad (13)$$

Расчет значения величины напряженности поля, создаваемого частицами внутри сферы, требует точных сведений о расположении поляризованных молекул в ближнем порядке диэлектрика и, как правило, вызывает затруднения. Для упрощения подобной ситуации при рассмотрении сред, молекулярная структура которых обуславливает взаимное подавление соответствующих микрополей, Мосотти предложил полагать:

$$E_2 = 0. \quad (14)$$

Подстановка соотношений (11), (13) и (14) в уравнение (10), учитывая замены $\mu_i \rightarrow \alpha_i E$, в результате и приводит к формуле Клаузиуса-Мосотти.

Применение уравнения (9) для расчетов диэлектрических характеристик показывает, что оно оказывается приемлемым только при рассмотрении ионных кристаллов и неполярных жидкостей, обладающих слабо выраженными поляризационными свойствами, использование же его при вычислении ε активных диэлектриков дает абсурдные результаты, заключающиеся в получении ее отрицательных статических значений. Данный факт носит название «катастрофы Мосотти», поскольку обыкновенно объясняется неадекватностью приближения (14). Причина указанного обстоятельства непосредственно обуславливается структурой формулы, благодаря которой отрицательные значения ε всегда имеют место при условии:

$$P = \sum_{i=1}^K \mu_i N_i > 3\varepsilon_0, \quad (15)$$

что становится наглядным при ее эквивалентном представлении в виде

$$\varepsilon = \frac{1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_i N_i}{1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_i N_i}. \quad (16)$$

Традиционно расширение области применения уравнения Клаузиуса-Мосотти связывается с необходимостью учета напряженности поля E_2 [6]. При этом для активно поляризуемых сред, в частности полярных жидкостей, существуют теории Онзагера и Кирквуда, которые обосновывают ввод в рассмотрение ряда дополнительных микрополей, призванных компенсировать катастрофу Мосотти. Наряду с этим, в работе [9] указывается, что вклад совокупности микрополей, имеющих место внутри локализуемой сферы, теоретически учитывается при расчете напряженности E_1 , поскольку модель Лорентца подразумевает возможность их удаления без изменения общего поляризованного состояния образца. Следовательно, приближение (14) должно оставаться вполне эффективным при рассмотрении диэлектрических сред произвольной структуры и агрегатного состояния.

Кроме того, общепринятая методика расчета спектров поляризационных свойств диэлектрика заключается в раздельном использовании, с одной стороны, наиболее подходящей для него классической макроскопи-

ческой формулы диэлектрической проницаемости, с другой, – дифференциальных уравнений процессов поляризации частиц, общее решение которых в частной области позволяет получить выражения комплексных поляризуемостей частиц $\alpha(j\omega)$. Иными словами, существующий подход к моделированию комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(j\omega)$ осуществляется путем подстановки вещественных и мнимых частотных характеристик $\alpha_i(j\omega)$, рассчитываемых на базе динамических моделей, в статические формулы типа (9). Таким образом, имеет место некоторый методологический разрыв, проявляющийся в совмещении различного рода математических описаний.

Кибернетическая модель поляризации диэлектрика

В 90-х гг. прошедшего столетия выделилась новая область знаний, получившая название «кибернетическая физика» [10]. Методология этого научного направления основана на построении описаний динамики физических объектов, рассматриваемых в качестве систем управления. Принципиальное отличие кибернетических моделей состоит в том, что при их построении всегда явно указываются входы и выходы систем.

Покажем, что уточнение причинно-следственных связей, имеющих место в диэлектрической системе, позволяет получить выражения, необходимые для моделирования ее поляризационных свойств, которые отличаются от классических уравнений физики диэлектриков.

Используя описания процессов индукции дипольных моментов, отвечающих разновидностям электрической деформации соответствующих частиц (6)-(8), а также представив функцию напряженности эффективного поля на основании модели Лорентца (10) с учетом выражений (12) – (14), можно сформировать следующую динамическую модель упругой поляризации диэлектрика общего вида:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 \mu_l(t)}{dt^2} + 2b_l \frac{d\mu_l(t)}{dt} + \omega_{0l}^2 \mu_l(t) &= \frac{q_l^2}{m_l} E(t); \\
 \frac{d^2 \mu_{v1}(t)}{dt^2} + 2b_{v1} \frac{d\mu_{v1}(t)}{dt} + \omega_{0v1}^2 \mu_{v1}(t) &= \frac{q_{v1}^2}{m_{v1}} E(t) - \frac{q_{v1}}{q_{v2}} \omega_{0v1}^2 \mu_{v2}(t), \\
 \frac{d^2 \mu_{v2}(t)}{dt^2} + 2b_{v2} \frac{d\mu_{v2}(t)}{dt} + \omega_{0v2}^2 \mu_{v2}(t) &= \frac{q_{v2}^2}{m_{v2}} E(t) - \frac{q_{v2}}{q_{v1}} \omega_{0v2}^2 \mu_{v1}(t); \\
 \frac{d^2 \mu_d(t)}{dt^2} + 2b_d \frac{d\mu_d(t)}{dt} + \omega_{0d}^2 \mu_d(t) &= \frac{\mu_{0d}^2}{J_d} E(t); \\
 l = \overline{1, L}, \quad v = \overline{L+1, V}, \quad d = \overline{V+1, K}; \\
 E(t) = E_0(t) - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \mu_i(t) N_i,
 \end{aligned} \tag{17}$$

где l , ν и d – соответственно индексы электронной, ионной и ориентационной поляризации; L и V – общие числа однообразных элементарных процессов.

Рассматривая представленную систему уравнений, следует заострить внимание на структуре функции $E(t)$, которая отличается от ее традиционной формы, вытекающей из соотношений (10), (11) и (13):

$$E(t) = \frac{1}{(\varepsilon(t) - 1)\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \mu_i(t) N_i + \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \mu_i(t) N_i. \quad (18)$$

А именно: переход от общепринятого описания (11) напряженности среднего макроскопического поля к его исходной трактовке вида (12) обусловлен, с одной стороны, необходимостью явного указания входа системы, требуемого для построения ее кибернетической модели, с другой, – использование соотношения (18) в системе уравнений (17) приводит к наличию излишней переменной $\varepsilon(t)$.

Исследуя уравнения (17), рассматриваемые в качестве описания некоторой замкнутой линейной системы управления с обратными связями, т.е. выполнив ряд последовательных математических преобразований [11, 12], характерных для аппарата технической кибернетики, их можно представить в эквивалентной форме записи через передаточные функции процессов $W(s)$ и передаточную функцию по рассогласованию полей $W_\varepsilon(s)$:

$$\mu_l(s) = W_l(s)E(s); \quad \mu_\nu(s) = W_\nu(s)E(s); \quad \mu_d(s) = W_d(s)E(s); \quad E(s) = W_\varepsilon(s)E_0(s);$$

$$\begin{aligned} W_l(s) &= \frac{\frac{q_l^2}{m_l}}{s^2 + 2b_l s + \omega_{0l}^2}; \\ W_{\nu 1}(s) &= \frac{\frac{q_{\nu 1}^2}{m_{\nu 1}}(s^2 + 2b_{\nu 2} s) + \frac{q_{\nu 1}(q_{\nu 1} - q_{\nu 2})}{m_{\nu 1} + m_{\nu 2}}(\omega_{0\nu 1}^2 + \omega_{0\nu 2}^2)}{s^4 + 2(b_{\nu 1} + b_{\nu 2})s^3 + (\omega_{0\nu 1}^2 + \omega_{0\nu 2}^2 + 4b_{\nu 1}b_{\nu 2})s^2 + 2(b_{\nu 2}\omega_{0\nu 1}^2 + b_{\nu 1}\omega_{0\nu 2}^2)s}, \\ W_{\nu 2}(s) &= \frac{\frac{q_{\nu 2}^2}{m_{\nu 2}}(s^2 + 2b_{\nu 1} s) + \frac{q_{\nu 2}(q_{\nu 2} - q_{\nu 1})}{m_{\nu 1} + m_{\nu 2}}(\omega_{0\nu 1}^2 + \omega_{0\nu 2}^2)}{s^4 + 2(b_{\nu 1} + b_{\nu 2})s^3 + (\omega_{0\nu 1}^2 + \omega_{0\nu 2}^2 + 4b_{\nu 1}b_{\nu 2})s^2 + 2(b_{\nu 2}\omega_{0\nu 1}^2 + b_{\nu 1}\omega_{0\nu 2}^2)s}; \\ W_d(s) &= \frac{\frac{\mu_{0d}^2}{J_d}}{s^2 + 2b_d s + \omega_{0d}^2}; \\ W_\varepsilon(s) &= \frac{1}{1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K W_i(s) N_i}. \end{aligned} \quad (19)$$

Проанализировав частотные аналоги введенных в рассмотрение передаточных функций $W(s)$ процессов упругой поляризации частиц, можно ратифицировать, что они по определению являются эквивалентами их комплексных поляризуемостей, иными словами, $W(j\omega) = \alpha(j\omega)$. Зависимость

$W_\varepsilon(s)$ в физике диэлектриков обычно не рассматривается, поскольку используется зависимость $\varepsilon(j\omega) = E_0(j\omega)/E(j\omega)$, т.е. аналог, обратный $W_\varepsilon(j\omega)$. Следовательно, непосредственно на основании динамической модели упругой поляризации образца (17) вытекает «кибернетическая модель» его комплексной диэлектрической проницаемости вида:

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_i(j\omega) N_i. \quad (20)$$

Необходимо отметить, что явный вид выражений комплексных поляризуемостей $\alpha_i(j\omega)$ частиц, необходимых для практического моделирования поляризационных спектров конкретных материалов, зависит от структуры используемых динамических моделей. А именно: если для нахождения решений $\mu_i(t)$ во временной области расположение слагаемых в дифференциальных уравнениях (17) не имеет принципиального значения, то при получении передаточных функций соответствующих элементарных процессов весьма важным является разделение описаний реакций элементов изучаемой системы, а также их вынуждающих воздействий.

Например, в работе [9] анализируется установившееся состояние упругой электронной поляризации диэлектрика, состоящего из N осцилляторов одной разновидности, описываемого уравнением общего вида:

$$\frac{d^2 \mu(t)}{dt^2} + 2b \frac{d\mu(t)}{dt} + \omega_0^2 \mu(t) = \frac{e^2}{m_e} \left(E_0(t) + \frac{R}{3\varepsilon_0} \mu(t) N \right), \quad (21)$$

где e и m_e – соответственно, заряд и масса электрона; R – коэффициент обратной связи, соответствующий используемой модели локального поля. При этом в общепринятых рамках классического подхода выполняется следующая перегруппировка слагаемых

$$\frac{d^2 \mu(t)}{dt^2} + 2b \frac{d\mu(t)}{dt} + \left(\omega_0^2 - \frac{RN_e^2}{3m_e \varepsilon_0} \right) \mu(t) = \frac{e^2}{m_e} E_0(t), \quad (22)$$

на основании которой делается вывод, что общая поляризованность образца изменяет собственную частоту поляризации рассматриваемой частицы:

$$\alpha^*(j\omega) = \frac{\mu(j\omega)}{E_0(j\omega)} = \frac{e^2/m_e}{\Omega_0^2 - \omega^2 + j2b\omega}; \quad \Omega_0^2 = \omega_0^2 - \frac{RN_e^2}{3m_e \varepsilon_0}. \quad (23)$$

Однако, в этом случае функция $\alpha^*(j\omega)$ отражает зависимость изменения наведенного дипольного момента исключительно от величины напряженности приложенного поля.

С другой стороны, реализация подобного подхода к совокупности электронных осцилляторов различных видов

$$\frac{d^2 \mu_1(t)}{dt^2} + 2b_1 \frac{d\mu_1(t)}{dt} + \left(\omega_{01}^2 - \frac{RN_1 e^2}{3m_e \varepsilon_0} \right) \mu_1(t) = \frac{e^2}{m_e} \left(E_0(t) + \frac{R}{3\varepsilon_0} \left[\sum_{i=1}^L \mu_i(t) N_i - \mu_1(t) N_1 \right] \right)$$

....

$$\frac{d^2 \mu_L(t)}{dt^2} + 2b_L \frac{d\mu_L(t)}{dt} + \left(\omega_{0L}^2 - \frac{RN_L e^2}{3m_e \varepsilon_0} \right) \mu_L(t) = \frac{e^2}{m_e} \left(E_0(t) + \frac{R}{3\varepsilon_0} \left[\sum_{i=1}^L \mu_i(t) N_i - \mu_L(t) N_L \right] \right)$$

дает набор следующих зависимостей для $\alpha^*(j\omega)$:

$$\alpha_1^*(j\omega) = \frac{\mu_1(j\omega)}{\left[E_0(j\omega) + \frac{R}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L \mu_i(j\omega) N_i \right] - \frac{R}{3\varepsilon_0} \mu_1(j\omega) N_1};$$

(24)

...

$$\alpha_L^*(j\omega) = \frac{\mu_L(j\omega)}{\left[E_0(j\omega) + \frac{R}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^L \mu_i(j\omega) N_i \right] - \frac{R}{3\varepsilon_0} \mu_L(j\omega) N_L},$$

которые не могут быть использованы в формулах типа (9) или (20), т.к. отражают частотные характеристики реакций частиц на электрические поля различного рода.

Таким образом, явное выделение причинно-следственных связей при построении исходных описаний поляризационных процессов оказывается целесообразным, во-первых, с позиции их последующей математической обработки, во-вторых, с точки зрения адекватности вытекающих в результате вычислительных средств моделирования.

Устранение катастрофы Мосотти

Полученное выше кибернетическое уравнение диэлектрической проницаемости вида (20) структурно отличается от формулы Клаузиуса-Мосотти, несмотря на использование одних и тех же исходных предпосылок, укладывающихся в модель формирования локального поля Лорентца. Анализ вычислительных особенностей данной модели, рассматриваемой в виде ее статической формулы

$$\varepsilon = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_i N_i, \quad (25)$$

показывает, что она дает положительные значения при любых величинах суммарной поляризуемости образца, т.е. принципиально исключает проявление 4π катастрофы, несмотря на использование приближения Мосотти.

Для проверки эффективности применения уравнения (20) выполним имитационное моделирование поляризационных свойств диэлектрической среды на демонстрационном примере. При этом в исходных уравнениях (17) примем значения динамических параметров элементарных процессов близкими к их реальным значениям [13, 14], а именно равными:

$$\begin{aligned} \omega_{0l} &= 5 \cdot 10^{16} \text{ рад/с}, b_l \ll \omega_{0l}, q_l = 8e, m_l = 8m_e, L = 1; \\ \omega_{0v1} &\cong \omega_{v1} = 10^{15} \text{ рад/с}, b_{v1} \ll \omega_{0v1}, q_{v1} \cong q_{v1} = e, m_{v1} \cong m_{v1} = 1 \text{ аем}, V = 2; \\ \omega_{0d} &= 10^{14} \text{ рад/с}, b_d \cong 0,707 \omega_{0d}, \mu_{0d} = 2 \cdot 10^{-29} \text{ Кл} \cdot \text{м}, J_d = 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2, K = 3; \end{aligned}$$

$$N_l = 2N, N_{v1} = N_{v2} = N, N_d = N, N = 10^{28} \text{ м}^{-3}.$$

Результаты расчетов вещественной частотной характеристики (ВЧХ) суммарной комплексной поляризуемости единицы объема рассматриваемого метафизического образца, вычисленной с помощью соответствующих выражений (19), представлены на рис. 2.

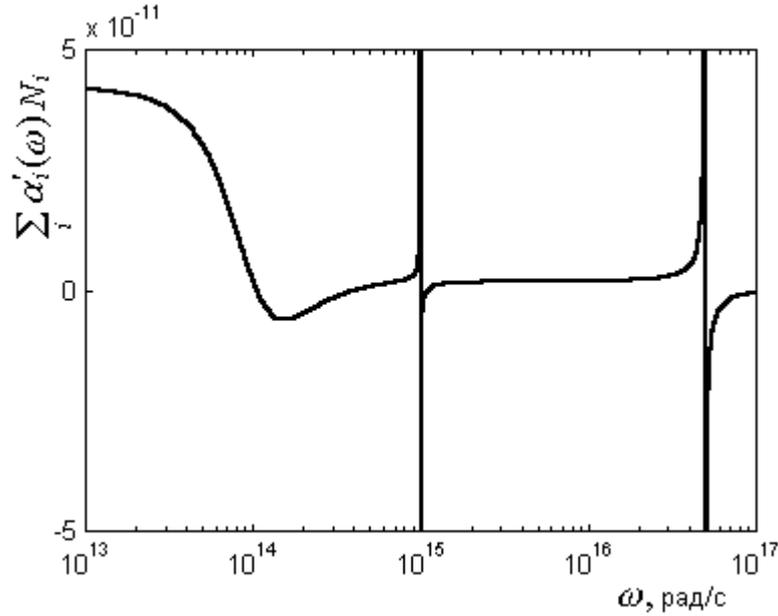


Рис. 2. График ВЧХ объемной поляризуемости образца.

Для моделирования ВЧХ комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon'(\omega)$ используем выражения, вытекающие на основании соответственно уравнения Клаузиуса-Мосотти (9) и кибернетической модели (20):

$$\varepsilon'(\omega) = \frac{\left(1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha'_i(\omega) N_i\right) \left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha'_i(\omega) N_i\right) - 2 \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha''_i(\omega) N_i\right)^2}{\left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha'_i(\omega) N_i\right)^2 + \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha''_i(\omega) N_i\right)^2}, \quad (26)$$

$$\varepsilon'(\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha'_i(\omega) N_i, \quad (27)$$

где $\alpha'_i(\omega)$ и $\alpha''_i(\omega)$ – вещественные и мнимые частотные характеристики поляризуемостей частиц, определяемые соотношениями (19). Полученные спектры приведены на рис. 3, где толстая линия соответствует применению кибернетической модели, а тонкая – уравнению Клаузиуса-Мосотти.

Проведенный вычислительный эксперимент показывает, что характеристика, вычисленная с помощью выражения (26), отражает появление отрицательных значений $\varepsilon'(\omega)$ при повышении величины суммарной поляризуемости единицы объема диэлектрика, напрямую обусловленное структурой применяемой для расчетов модели. Однако следуя трактовкам классической теории поляризации, увеличение поляризованности образца

должно приводить к росту значения его диэлектрической проницаемости. Использование же уравнения (27) дает вполне адекватные результаты.

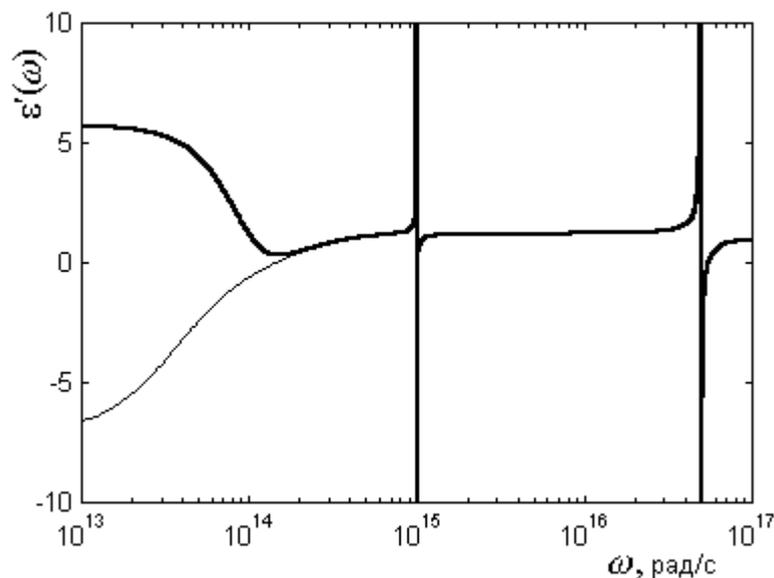


Рис. 3. Графики ВЧХ диэлектрической проницаемости.

Таким образом, можно объективно утверждать, что катастрофа Мосотти вызвана искажением причинно-следственных связей, допущенным в выводе формулы (9), а не ошибочностью приближения (14).

Вещественная частотная характеристика комплексного показателя преломления

При изучении закономерностей влияния химического состава и структуры диэлектрика на его поляризационные свойства важная роль отводится исследованию величины оптического показателя преломления n , демонстрирующего, во сколько раз уменьшается скорость света в рассматриваемом материале по отношению к его скорости в вакууме. Поскольку электрическая составляющая светового потока гораздо весомей магнитной, то его преломление веществом определяется в основном электрической поляризацией частиц и связывается с диэлектрической проницаемостью материала соотношением:

$$n^2 = \varepsilon. \quad (28)$$

При рассмотрении переменных полей уравнения n и ε принимают вид комплексных функций [15]:

$$\begin{aligned} n(j\omega) &= n(\omega) + j\chi(\omega), \\ \varepsilon(j\omega) &= \varepsilon'(\omega) + j\varepsilon''(\omega), \end{aligned} \quad (29)$$

где $n(\omega)$ и $\chi(\omega)$ – соответственно вещественная и комплексная частотные характеристики комплексного показателя преломления; $\varepsilon'(\omega)$ и $\varepsilon''(\omega)$ – соответственно вещественная и мнимая частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости. Подстановка выражений (29) в

соотношение (28) дает комплексную запись:

$$\varepsilon'(\omega) + j\varepsilon''(\omega) = n^2(\omega) - \chi^2(\omega) + j2n(\omega)\chi(\omega). \quad (30)$$

На основании данного описания, разделяя его вещественную и мнимую составляющие, можно получить следующую систему уравнений:

$$\varepsilon' = n^2 - \chi^2; \quad \varepsilon'' = 2n\chi. \quad (31)$$

Исключив переменную χ , систему (31) можно заменить биквадратным уравнением

$$n^4 - \varepsilon'n^2 - 0,25\varepsilon''^2 = 0,$$

обладающим двумя действительными и двумя комплексными корнями:

$$\begin{aligned} n_{1,2} &= \pm \sqrt{\frac{\varepsilon' + \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}}{2}}; \\ n_{3,4} &= \pm \sqrt{\frac{\varepsilon' - \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}}{2}}. \end{aligned} \quad (32)$$

Из всего множества имеющих место решений (32) в первую очередь приходится однозначно отбросить комплексные корни $n_{3,4}$, т.к. искомая зависимость $n(\omega)$ изначально описывает численную функцию вещественной части комплексной характеристики $n(j\omega)$, т.е. представляет собой массив действительных чисел. Разбирая пару вещественных корней $n_{1,2}$, следует принимать во внимание физическую сущность рассматриваемой функции. Поскольку она по определению отражает «число раз», то практической ценностью обладает только положительный корень. Стало быть, для моделирования частотной зависимости оптического показателя преломления можно использовать выражение:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon'(\omega) + \sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)}}{2}}. \quad (33)$$

Однако, анализ структуры соотношения (33) показывает, что оно не совсем адекватно. Действительно, в случаях, когда $\varepsilon''(\omega) \approx 0$, а $\varepsilon'(\omega) < 0$, данная формула дает нулевые значения $n(\omega)$ за счет извлечения положительного корня из квадрата отрицательных величин $\varepsilon'(\omega)$. Следовательно, уравнение (33) необходимо преобразовать к виду:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon'(\omega)| + \sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)}}{2}}. \quad (34)$$

Результаты моделирования зависимости $n(\omega)$ для описанного выше демонстрационного примера, полученной в рамках использования кибернетической модели $\varepsilon(j\omega)$, отражены на рис. 4. Кроме того, на графике приведен детализированный фрагмент характеристики, демонстрирующий различие результатов применения моделей.

При этом спектру, рассчитанному с помощью выражения (33), соответствует пунктирная линия, а использованию формулы (34) – непрерыв-

ная.

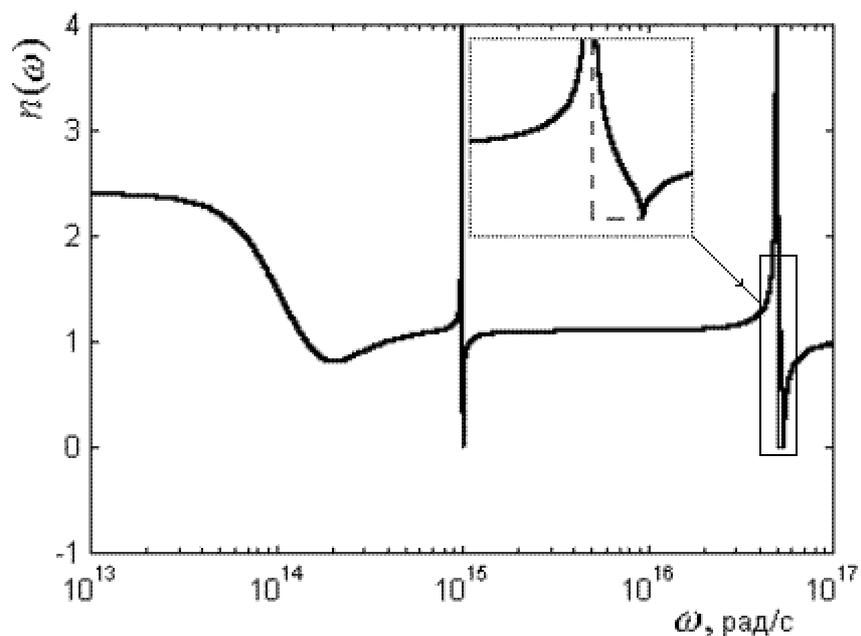


Рис. 4. Графики частотных зависимостей показателя преломления.

Таким образом, введение модуля в общепринятое описание частотной зависимости показателя преломления вида (33) является вполне оправданным с точки зрения повышения эффективности моделирования.

Заключение

Предлагаемые расчетные формулы (19), (20) и (34) являются базовыми структурными моделями, позволяющими описать процесс общей упругой поляризации диэлектрика с макроскопической точки зрения. Для моделирования поляризационных спектров конкретных материалов необходимо определить динамические параметры протекающих в них элементарных процессов, которые могут быть найдены либо с помощью эмпирических способов исследования, либо вычислены аналитически в рамках детализации изучаемых явлений на микроуровне.

Объективное устранение катастрофы Мосотти, реализованное на базе уточнения причинно-следственных связей между полями, действующими в поляризованном образце, позволяет прийти к утверждению об универсальности использования кибернетического уравнения $\varepsilon(j\omega)$, т.е. его применимости к любым диэлектрическим материалам независимо от их структуры и агрегатного состояния.

ЛИТЕРАТУРА

1. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. М: Высшая школа, 2001.
2. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.



3. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теория упругости. М.:Наука,1965.
4. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1965.
5. Суханов А.Д. Фундаментальный курс физики. В 4 т. Т.1. Корпускулярная физика. М.: Изд-во "Агар", 1996.
6. Браун В.Ф. Диэлектрики. М.: Изд-во ИЛ, 1961.
7. Еремина В.В., Костюков Н.С. Тюрина С.Ю. Моделирование оптического спектра воды в области упругих видов поляризации // Информатика и системы управления. 2003. № 2(6). С.9-14.
8. Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю. Моделирование оптического спектра воды в области упругой ионной поляризации // Информатика и системы управления. 2004. № 2(8). С.32-36.
9. Хиппель А.Р. Диэлектрики и волны. М.: Изд-во ИЛ,1960.
10. Фрадков А.Л. Кибернетическая физика: Принципы и примеры. СПб.: Наука, 2003.
11. Еремин И.Е., Костюков Н.С. Построение модели процесса поляризации диэлектриков с помощью обратных связей // Информатика и системы управления. 2001. № 1. С. 45-53.
12. Костюков Н.С., Еремин И.Е. Кибернетическая модель процесса упругой электронной поляризации диэлектрика // Электричество. 2004. № 1. С. 50-54.
13. Сканапи Г.И. Физика диэлектриков. Область слабых полей. М.; Л.: Госэнергоиздат, 1949.
14. Юхневич Г.В. Инфракрасная спектроскопия воды. М.: Наука, 1973.
15. Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. Л.: Химия, 1984.

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

УДК 537.533.7

© 2005 г. **Г.Г. Здоровцев,**
В.И. Иванов, канд. физ.-мат. наук,
Н.В. Марченков

(Дальневосточный государственный университет путей сообщения,
Хабаровск)

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННАЯ ЭДС В СЭНДВИЧНОЙ СТРУКТУРЕ МЕТАЛЛ-НИОБАТ ЛИТИЯ-МЕТАЛЛ

На основе электретной модели проведено численное моделирование экспериментальных зависимостей термостимулированной ЭДС в несимметричной сэндвичной структуре металл-ниобат лития-металл от геометрии кристалла, его температуры, концентрации легирующей примеси.