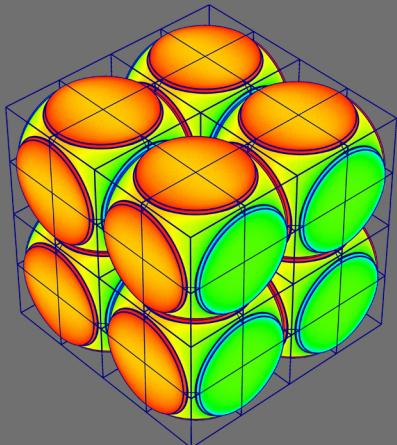


Математическое моделирование и численные методы



Корчагин С. А., Терин Д. В., Клинаев Ю. В. Моделирование фрактального композита и исследование его электрических характеристик. Математическое моделирование и численные методы, 2017, №1 (13), с. 22-31

Источник: <https://mmcm.bmstu.ru/articles/125/>

Моделирование фрактального композита и исследование его электрических характеристик

© С.А. Корчагин, Д.В. Терин, Ю.В. Клинаев

СГТУ имени Гагарина Ю.А., Саратов, 410054, Россия

Рассмотрена модель слоистого иерархически построенного композита, структура которого имеет морфологию, подобную фрактальному образованию. Разработан алгоритм исследования взаимодействия переменного электрического поля с фрактальным композитом, а также программный комплекс, позволяющий осуществлять моделирование фрактальных характеристик исследуемого композита и производить расчеты электрических параметров композитной среды. Исследованы границы применения разработанной модели: максимальные и минимальные размеры композита, при которых проявляются фрактальные свойства. Изучены частотные зависимости диэлектрической проницаемости фрактального композита.

Результаты исследования могут быть использованы при конструировании материалов с заранее заданными электрофизическими параметрами и характеристиками, а также при разработке элементов и устройств, обладающих поглощающими и селективными свойствами.

Ключевые слова: математическое моделирование, компьютерное моделирование, композит, фрактальная структура, программный комплекс, нелинейная динамика

Введение. На сегодняшний день одно из приоритетных направлений исследований наукоемких технологий производства композитов многофункционального назначения — разработка и проектирование материалов с заданными свойствами [1]. Большинство работ в области моделирования композиционных материалов направлено на изучение классических слоистых структур, а также структур с различными формами включений частиц и волокон [2–8]. Исследователями предложен ряд моделей для слоистых дисперсных систем, позволяющих рассчитывать эффективные электродинамические, механические и прочие параметры. Однако, несмотря на значительные достижения в этой области, существующие модели не позволяют решить ряд актуальных теоретических и практических задач, таких как определение качественных свойств слоистых периодических структур сложной морфологии, в частности композита, имеющего иерархически построенную структуру, подобную фрактальному образованию. Такие объекты демонстрируют свойства самоподобия и потому могут рассматриваться как фрактальное образование [9].

Для фрактальных структур характерно многообразие свойств и функциональных связей, указывающих на значительные возможности таких систем по сравнению с традиционными. Элементы на основе таких структур применяют в конструкциях антенн, устройств широкополосной радиолокации, при создании средств трассировки

мобильных объектов, синтезе поглощающих материалов, разработке приложений в области защиты информации и пр. [10], что подтверждает актуальность изучения таких композитных сред и их взаимодействия с электрическим полем. Тем не менее экспериментальное определение электродинамических параметров фрактальных композитов может быть затруднительным, трудоемким, дорогостоящим, а в некоторых случаях и вовсе невозможным. Тогда мощным инструментом исследователя может служить математическое и компьютерное моделирование фрактальных композитов, позволяющее получить в дальнейшем результаты для решения прикладных задач.

Цель настоящего исследования — провести анализ электрических характеристик фрактального композита, находящегося в переменном электрическом поле. Для ее достижения необходимо решить следующие задачи: разработать математическую и компьютерную модели, провести оценку допустимого интервала масштаба фрактального композита, разработать алгоритм исследования и программный комплекс, позволяющий проводить вычисление фрактальных характеристик исследуемого композита и расчеты электрических параметров композитной среды.

Математическое и компьютерное моделирование. Объект исследования — модель слоистого иерархически построенного композита, который находится в переменном электрическом поле напряженностью \vec{E} , частотой ω и обладает комплексной диэлектрической проницаемостью ϵ_{eff} . Иерархически построенный композит состоит из двух видов материалов, тогда ϵ_1 и ϵ_2 — диэлектрическая проницаемость веществ первого и второго материала соответственно, из которых состоит композит. Первым слоем в модели композита является материал, характеризующийся толщиной слоя d_1 (геометрический параметр). Второй слой — материал, представляющий иерархически построенный композит с комплексной диэлектрической проницаемостью ϵ_{eff_n} слоя и толщиной слоя d_2 . Компьютерная модель фрактального композита, выполненного в среде SketchUp, представлена на рис. 1. При увеличении масштаба второго слоя структура демонстрирует свойства самоподобия, что характеризует такую модель как фрактальный объект.

Математическая модель взаимодействия слоистого иерархически построенного композита с переменным электрическим полем основана на теории эффективной среды [11], суть которой заключается в том, что совокупность кластеров, из которых состоит композит, рассматривается как некая новая однородная среда с таким же уровнем поляризации. По отношению к макроскопическому полю, усредненному по объему, система является однородной, поэтому ее можно

охарактеризовать определенным эффективным значением диэлектрической проницаемости. Такой подход реализован с помощью математической модели среды, состоящей из уравнения Пуассона для распределения электростатического поля в непроводящей среде при наличии электрических зарядов, включающего в себя комплексную эффективную диэлектрическую проницаемость:

$$\frac{\partial E(x, \omega)}{\partial x} + \frac{\partial E(y, \omega)}{\partial y} = -\frac{\rho(x, y)}{\epsilon_{eff} \cdot \epsilon_0}, \quad (1)$$

где E — напряженность электрического поля; ρ — плотность заряда.

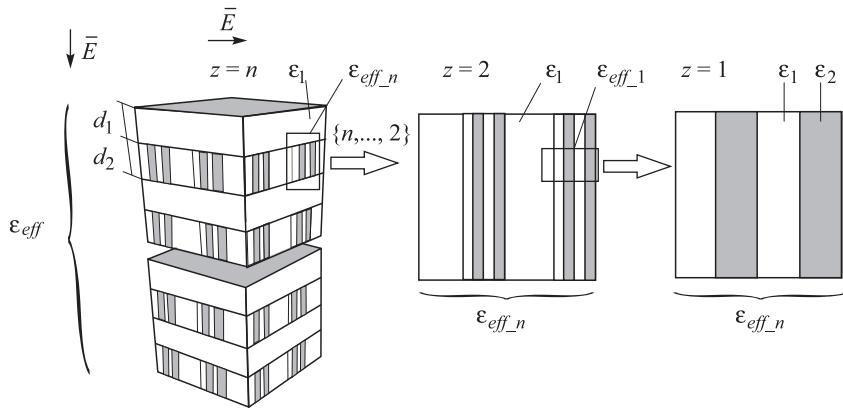


Рис. 1. Модель слоистого иерархически построенного композита: z — уровень фрактальности; стрелки обозначают направление вектора напряженности электрического поля \bar{E}

Среда анизотропна, поэтому диэлектрическая проницаемость ϵ_{eff} (см. рис. 1) зависит от направления распространения поля и является тензором:

$$\epsilon_{eff} = \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

В данной статье рассматриваем двумерный случай, поэтому тензор эффективной диэлектрической проницаемости имеет компоненты:

$$\epsilon_{eff_xx} = \frac{\prod_n n \epsilon_i \epsilon_j}{\sum_1^n (\epsilon_i \epsilon_j + \epsilon_i \epsilon_j)}, \quad \epsilon_{eff_yy} = \frac{1}{n} \sum_1^n \epsilon_n. \quad (3)$$

Число компонент зависит от количества слоев, образующих композит, с различными значениями ϵ . Для физической модели (см. рис. 1),

включающей два материала с диэлектрическими проницаемостями ϵ_1 и ϵ_2 соответственно, комплексную диэлектрическую проницаемость на первом этапе построения будут описывать уравнения теории эффективной среды для слоистых композитных сред в комплексной форме [12].

Для поля, направленного вдоль направления слоев, уравнения имеют вид:

$$\epsilon_{eff} = \frac{\epsilon_1 d_1 + \epsilon_2 d_2}{d_1 + d_2}, \quad \epsilon'_{eff} = \frac{\epsilon'_1 d_1 + \epsilon'_2 d_2}{d_1 + d_2}, \quad \epsilon''_{eff} = \frac{\epsilon''_1 d_1 + \epsilon''_2 d_2}{d_1 + d_2}, \quad (4)$$

а для поля, направленного поперек направления слоев

$$\begin{aligned} \epsilon_{eff} &= \frac{\epsilon_1 \epsilon_2 (d_1 + d_2)}{\epsilon_2 d_1 + \epsilon_1 d_2}, \quad \epsilon'_{eff} = \frac{[\epsilon'_1 d_1 (\epsilon'^2_2 + \epsilon''^2_2) + \epsilon''_2 d_2 (\epsilon'^2_1 + \epsilon''^2_1)] (d_1 + d_2)}{(\epsilon'_2 d_1 + \epsilon'_1 d_2)^2 + (\epsilon''_2 d_1 + \epsilon''_1 d_2)^2}, \\ \epsilon''_{eff} &= \frac{[\epsilon''_1 d_1 (\epsilon'^2_2 + \epsilon''^2_2) + \epsilon''_2 d_2 (\epsilon'^2_1 + \epsilon''^2_1)] (d_1 + d_2)}{(\epsilon'_2 d_1 + \epsilon'_1 d_2)^2 + (\epsilon''_2 d_1 + \epsilon''_1 d_2)^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения математической модели (1)–(5) дополним граничными

$$E|_{\Gamma} = E(x, y, \omega): x, y|_{\Gamma} = R_{V-d-V}, \quad \omega|_{\Gamma} = \omega_{max}$$

и начальными условиями

$$E|_0 = E(x, y, \omega): x, y|_0 = Z, \quad \omega|_0 = \omega_{min},$$

где R_{V-d-V} — радиус Ван-дер-Ваальса химических элементов, из которых состоит композит; Z — размер композита; ω_{max} , ω_{min} — максимальная и минимальная частоты воздействия поля соответственно; $|_{\Gamma}$ и $|_0$ — граничные и начальные условия соответственно.

При увеличении уровня фрактальности уравнения математической модели (1)–(5) дополним путем подстановок выражений (4) в (5) или (5) в (4) с использованием разработанных алгоритмов. Диэлектрическая проницаемость таких структур будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \epsilon_{eff_1} &= f(\epsilon_1(\omega), \epsilon_2(\omega), \dots, \alpha d_1, \beta d_2, \dots), \\ \epsilon_{eff_2} &= f(\epsilon_1(\omega), \epsilon_2(\omega), \dots, \alpha d_1, \beta d_2, \dots) : \epsilon_{eff_1} \rightarrow \epsilon_1(\omega), \\ \epsilon_{eff_3} &= f(\epsilon_1(\omega), \epsilon_2(\omega), \dots, \alpha d_1, \beta d_2, \dots) : \epsilon_{eff_2} \rightarrow \epsilon_1(\omega), \\ &\dots, \end{aligned}$$

где α , β — операторы геометрической эволюции компонентов композитной среды.

Рабочие алгоритмы и программный комплекс. Для исследования указанных на рис. 1 структур были разработаны рабочие алгоритмы и программный комплекс [13]. При повышении уровня фрактальности

возрастает порядок степени параметров — членов нелинейных уравнений в комплексных переменных. Для эффективной реализации решений полученных уравнений и увеличения производительности оптимизирующего компилятора использован метод множителей Лагранжа с заданными условиями Каруша — Куна — Таккера. Для описания качественных свойств исследуемых композитных сред применены методы фрактальной теории. Обосновано применение такого подхода путем выполнения условий критерия Ф. Такенса. Для определения границ применимости и нахождения корреляционного показателя введен критерий, отражающий чувствительность фрактальной размерности структуры изучаемых композитных сред к исследуемым геометрическим и электродинамическим характеристикам. Проведена оценка интервалов масштабов фрактального композита: в качестве примера рассматривается композит Si-Al, $R_{V-d-V}(\text{Si}) = R_{V-d-V}(\text{Al}) = 210$ пм. Для композита морфологии (см. рис. 1) с увеличением уровня фрактальности размер слоя будет изменяться согласно таблице.

Зависимость толщины слоя от уровня фрактальности композита

Уровень фрактальности	Толщина слоя, м
0	10^{-2}
1	$2,5 \cdot 10^{-3}$
2	$6,3 \cdot 10^{-4}$
...	...
12 (max)	$5,9 \cdot 10^{-10}$
13	$1,5 \cdot 10^{-10} < 2,1 \cdot 10^{-10} (R_{V-d-V}(\text{Si, Al}))$

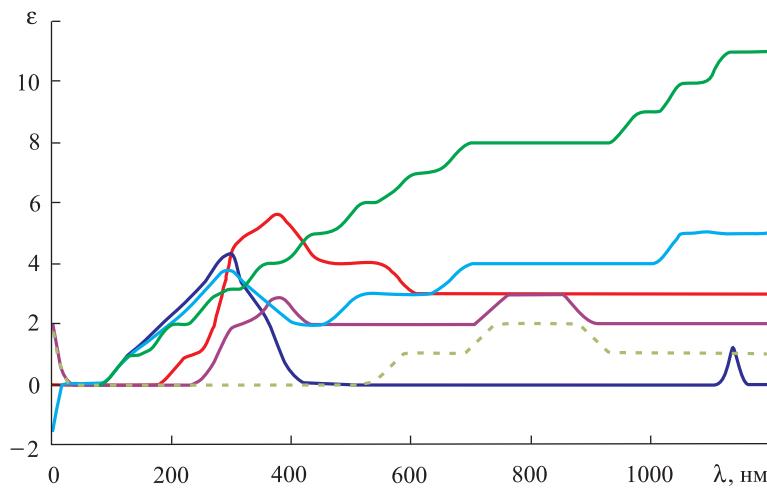


Рис. 2. Исходные значения комплексной диэлектрической проницаемости зависимостей ϵ от длины волны λ :

— Re Si; — Im Si; — Re Al; — Im Al;
 — Re Si-Al; — Im Si-Al

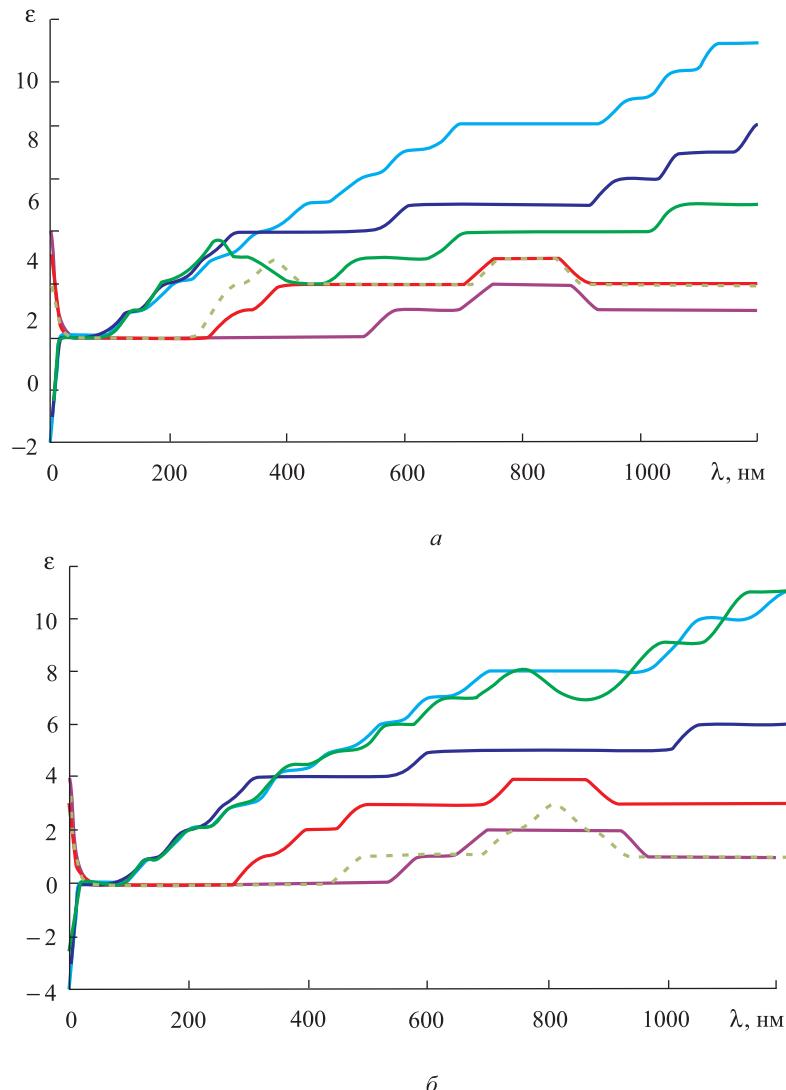


Рис. 3. Зависимости комплексной диэлектрической проницаемости ϵ от длины волны λ на разных уровнях фрактальности; поле направлено поперек (a) и вдоль (б) направления слоев:
 — Re Si-Al, 1, 6, 12 (max) fractal Ivl соответственно;
 — Im Si-Al 1, 6, 12 (max) fractal Ivl соответственно

Таким образом, для фрактальной модели (см. рис. 1) в случае композита Si-Al допустимый интервал масштабов при начальном размере слоя, равном 1 см, ограничен 12-м уровнем фрактальности. Чувствительность фрактальной размерности элементов структуры композитных сред к изменениям их качественных параметров вычисляется по методике Большакова — Дубровина. Результаты моделирования показаны на рис. 2–3. В качестве исходных данных были

взяты табличные значения параметров для веществ, рассмотренных в работе [14].

Заключение. В настоящей статье разработан алгоритм исследования взаимодействия переменного электрического поля с фрактальным композитом и программный комплекс, позволяющий проводить вычисление фрактальных характеристик исследуемого композита и расчеты электрических параметров композитной среды. В результате проведенного исследования было установлено:

- частотные зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости исследуемых композитных сред имеют нелинейный характер;
- в областях электронной и ионной поляризаций наблюдается ряд резонансных всплесков;
- для слоистого фрактального композита (Si-Al) максимальным является 12-й уровень фрактальности;
- уровень фрактальности слоистых структур оказывает существенное влияние на изменение электрических свойств композита.

Исследование фрактального композита теоретическим и расчетным путем, приведенное в работе, позволяет определить условия проявления различных электродинамических эффектов и установить оптимальные требования к подготовке синтеза реальных образцов. Результаты исследования могут быть использованы при конструировании материалов с заранее заданными электрофизическими параметрами и характеристиками, а также для разработки элементов и устройств, обладающих поглощающими и селективными свойствами.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Никитин А.С. Перспективы применения композиционных материалов. *Экономика и жизнь*, 2012, № 4, 6 с.
- [2] Емец Ю.П. Эффективная диэлектрическая проницаемость трехкомпонентных композиционных материалов с анизотропной структурой. *Журнал технической физики*, 2005, т. 75, вып. 2, с. 67–72.
- [3] Романенко И.И., Романенко М.И., Петровнина И.Н. Новые материалы в дорожном строительстве. *Молодой ученый*, 2015, № 7 (87), с. 198–200.
- [4] Корчагин С.А., Терин Д.В., Романчук С.П. Синергетика математических моделей для анализа композиционных материалов. *Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика*, 2015, т. 23, № 3, с. 55–64.
- [5] But'ko L.N., Buchel'nikov V.D., Bychkov I.V. Absorption of electromagnetic waves in a nonmagnetic conductor-ferromagnet structure. *Physics of the Solid State*, 2010, vol. 52, no. 10, pp. 2154–2163.
- [6] Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В. Многомасштабное моделирование упругопластических композитов с учетом повреждаемости. *Математическое моделирование и численные методы*, 2016, № 2 (10), с. 3–23.

- [7] Balakin A.S., Bory Reyes J., Shapiro M. Towards a physics on fractals: differential vector calculus in three-dimensional continuum with fractal metric. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2016, vol. 444, pp. 345–359.
- [8] Димитриенко Ю.И., Юрин Ю.В., Федонюк Н.Н. Численное моделирование деформирования и прочности трехслойных композитных конструкций с дефектами. *Математическое моделирование и численные методы*, 2016, № 3 (11), с. 3–23.
- [9] Mandelbrot B. How long is the coast of Britain? Statistical self-similarity and fractional dimension. *Science. New Series*, 1967, vol. 156, no. 3775, pp. 636–638.
- [10] Потапов А.А. Фрактальные модели и методы на основе скейлинга в фундаментальных и прикладных проблемах современной физики. *Необходимые процессы в природе и технике*. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008, вып. II, с. 5–107.
- [11] Емец Ю.П. Дисперсия диэлектрической проницаемости трех- и четырехкомпонентных матричных сред. *Журнал технической физики*, 2003, т. 73, № 3, с. 42–53.
- [12] Биленко Д.И., Вениг С.Б., Терин Д.В., Белобровая О.Я., Галушка В.В., Галушка И.В. и др. *Многопараметровая диагностика микро- и наноструктур*. Саратов, Изд-во Сарат. ун-та, 2015, с. 98.
- [13] Корчагин С.А., Клинаев Ю.В., Терин Д.В., Романчук С.П. *Программный комплекс для моделирования нелинейных свойств композитных сред “NPC Modeling”*: свид-во о гос. регистр. прогр. для ЭВМ. Свид-во № 2016615354 Российская Федерация, заявка № 2016612851, зарегистр. 20.05.2016, 1 с.
- [14] Palik E.D., ed. *Handbook of optical constants of solids*. San Diego, Academic Press, 1998, 999 p.

Статья поступила в редакцию 15.12.2016

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Корчагин С.А., Терин Д.В., Клинаев Ю.В. Моделирование фрактального композита и исследование его электрических характеристик. *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 1, с. 22–31.

Корчагин Сергей Алексеевич — аспирант кафедры «Естественные и математические науки» СГТУ имени Гагарина Ю.А. Область научных интересов: математическое и компьютерное моделирование, композиционные материалы, нелинейная динамика, информационные технологии. e-mail: korchaginser@gmail.com

Терин Денис Владимирович — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Информационная безопасность автоматизированных систем» СГТУ имени Гагарина Ю.А. Область научных интересов: математическое моделирование микро- и наноэлектромеханических систем на основе композитных сред, свойства широкого класса ультрадисперсных материалов, нелинейная динамика, информационные технологии. e-mail: terinden@mail.ru

Клинаев Юрий Васильевич — д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры «Естественные и математические науки» СГТУ имени Гагарина Ю.А. Область научных интересов: математическое моделирование биофизических и технических систем, алгоритмы цифровой обработки сигналов, нелинейная динамика, информационные технологии. e-mail: klinaev51@mail.ru

Simulating a fractal composite and studying its electrical characteristics

© S.A. Korchagin, D.V. Terin, Yu.V. Klinaev

Yuri Gagarin State Technical University of Saratov, Saratov, 410054, Russia

The study tested a model of a layered hierarchically constructed composite, whose structure has a morphology similar to fractal formation. In our research we developed an algorithm for studying the interaction of an alternating electric field with a fractal composite, as well as a software package that allows simulating fractal characteristics of the composite under study and calculating the electrical parameters of the composite medium. Moreover, we studied the boundaries of the developed model application: the max- and min-dimensions of the composite, at which fractal properties appear. We investigated the frequency dependences of the permittivity of a fractal composite.

The results of the research can be used in designing the materials with predefined electrophysical parameters and characteristics, as well as in developing the elements and devices that possess absorbing and selective properties.

Keywords: mathematical simulation, computer simulation, composite, fractal structure, software complex, nonlinear dynamics

REFERENCES

- [1] Nikitin A.S. *Ekonomika i zhizn — Economy and life*, 2012, no. 4, 6 p.
- [2] Emets Yu.P. *Zhurnal tehnicheskoy fiziki — Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics*, 2005, vol. 75, no. 2, pp. 67–72.
- [3] Romanenko I.I., Romanenko M.I., Petrovnina I.N. *Molodoy uchenyy — Young Scientist*, 2015, no. 7 (87), pp. 198–200.
- [4] Korchagin S.A., Terin D.V., Romanchuk S.P. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Prikladnaya nelineynaya dinamika — Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*, 2015, vol. 23, no. 3, pp. 55–64.
- [5] But'ko L.N., Buchel'nikov V.D., Bychkov I.V. *Physics of the Solid State*, 2010, vol. 52, no. 10, pp. 2154–2163.
- [6] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Sborschikov S.V. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2016, no. 2 (10), pp. 3–23.
- [7] Balakin A.S., Bory Reyes J., Shapiro M. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2016, vol. 444, pp. 345–359.
- [8] Dimitrienko Yu.I., Yurin Yu.V., Fedonyuk N.N. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2016, no. 3 (11), pp. 3–23.
- [9] Mandelbrot B. *Science. New Series*, 1967, vol. 156, no. 3775, pp. 636–638.
- [10] Potapov A.A. *Fraktalnye modeli i metody na osnove skeylinga v fundamentalnykh i prikladnykh problemakh sovremennoy fiziki* [Fractal models and methods based on scaling in fundamental and applied problems of modern physics]. *Neobratimye protsessy v prirode i tekhnike* [Irreversible processes in nature and technology]. Moscow, BMSTU Publ., 2008, no. II, pp. 5–107.
- [11] Emets Yu.P. *Zhurnal tehnicheskoy fiziki — Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics*, 2003, vol. 73, no. 3, pp. 42–53.
- [12] Bilenko D.I., Venig S.B., Terin D.V., Belobrovaya O.Ya., Galushka V.V., Galushka I.V. et al. *Mnogoparametrovaya diagnostika mikro- i nanostruktur*

- [Multiparameter diagnostics of micro- and nanostructures]. Saratov, Yuri Gagarin State Technical University of Saratov Publ., 2015, 98 p.
- [13] Korchagin S.A., Klinaev Yu.V., Terin D.V., Romanchuk S.P. *Programmnyy kompleks dlya modelirovaniya nelineynykh svoystv kompozitnykh sred "NPC Modeling": svid-vo o gos. registr. progr. dlya EVM* [Software package for modeling non-linear properties of composite media “NPC Modeling”: certificate of state registration of computer programs]. Certificate no. 2016615354 Russian Federation, appl. no. 2016612851, regist. May 20, 2016, 1 p.
- [14] Palik E.D., ed. *Handbook of optical constants of solids*. San Diego, Academic Press, 1998, 999 p.

Korchagin S.A., post-graduate student, Department of Natural and Mathematical Sciences, Yuri Gagarin State Technical University of Saratov. Science research interests include: mathematical and computer simulation, composite materials, nonlinear dynamics, information technologies. e-mail: korchaginser@gmail.com

Terin D.V., Cand. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor, Department of Information Security of Automated Systems, Yuri Gagarin State Technical University of Saratov. Science research include: mathematical simulation of micro- and nanoelectromechanical systems based on composite media, properties of a wide class of ultradisperse materials, nonlinear dynamics, information technology. e-mail: terinden@mail.ru

Klinaev Yu.V., Dr. (Phys.-Math.), Professor, Department of Natural and Mathematical Sciences, Yuri Gagarin State Technical University of Saratov. Science research interests include: mathematical simulation of biophysical and technical systems, digital signal processing algorithms, nonlinear dynamics, information technology.
e-mail: klinaev51@mail.ru