



Математическое моделирование и численные методы

Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Зубарев К.М.
Моделирование нелинейных диэлектрических свойств
композитов на основе метода асимптотической гомогенизации.
Математическое моделирование и численные методы. 2020. №
2. с. 26–45

Источник: <https://mmcm.bmstu.ru/articles/220/>

Моделирование нелинейных диэлектрических свойств композитов на основе метода асимптотической гомогенизации

© Ю.И. Димитриенко, Е.А. Губарева, К.М. Зубарев

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Статья посвящена разработке метода расчета нелинейных диэлектрических свойств композитов с периодической структурой. Методы прогнозирования нелинейных диэлектрических свойств композитов играют важную роль для проектирования диэлектрических материалов с заданными свойствами, в частности для гетерогенных сегнетоэлектриков, широко применяющихся для создания различных приборов и электротехнических устройств, например, для создания накопителей памяти компьютеров. Рассмотрена квазистатическая задача о распределении электрического заряда в неоднородной поляризующейся среде с периодической структурой и нелинейно диэлектрическими свойствами. Для решения этой нелинейной задачи применен метод асимптотической гомогенизации, предложенный Н.С. Бахваловым, Э. Санчес-Паленсией, Б.Е. Победрей. В результате сформулированы локальные нелинейные задачи электростатики на ячейке периодичности, предложен алгоритм вычисления эффективных нелинейных определяющих соотношений для диэлектрических свойств, и осредненная задача для композита с эффективными свойствами. Для случая композита со слоистой структурой получено решение локальных задач и построены эффективные определяющие соотношения для нелинейных диэлектрических свойств композита. Показано, слоистый композит является трансверсально изотропным нелинейно диэлектрическим материалом, если его слои являются изотропными материалами. Рассмотрен численный пример расчета нелинейных свойств 2-х слойного композита на основе титаната бария и сегнето-керамического вариконда ВК4. Предложена модель, описывающая нелинейную зависимость диэлектрической проницаемости этих материалов от вектора напряженности электрического поля. Показано, что нелинейная зависимость тензора диэлектрической проницаемости композита от вектора напряженности существенно отличается при направлении поля в плоскости слоев и в поперечном направлении. Показано, что разработанная методика может служить основой для проектирования нелинейно диэлектрических композиционных материалов с анизотропными свойствами.

Ключевые слова: *резиноподобные материалы, пластина, конечные деформации, напряжения, перемещения, градиент перемещения, пространственные и материальные координаты, краевая задача*

Введение. Материалы с нелинейными диэлектрическими свойствами, в частности сегнетоэлектрики, пирозэлектрики и др., представляют собой перспективный класс материалов для создания различных приборов и электротехнических устройств [1-3]. В частности, данные материалы используются для различных типов нелинейных конденсаторов-варикондов, которые применяются «для умножения и деления частоты; для детектирования сигналов; для создания частоты

модуляции в схемах реле времени; в ячейках памяти; для создания диэлектрических усилителей и других устройств» [4]. Одним из перспективных направлений является создание элементов памяти компьютеров для записи и хранения информации [3, 5]. В этой связи весьма актуальной является задача создания методов прогнозирования свойств композиционных материалов с нелинейно диэлектрическими свойствами, которые позволили бы проектировать материалы с наперед заданными диэлектрическими свойствами. Проектирование нелинейно диэлектрических гетерогенных структур и материалов в настоящее время активно осуществляется, в том числе с использованием доменной структуры на наноструктурном уровне [5]. Однако, как правило, при этом используются приближенные методы расчета, которые не всегда учитывают анизотропию свойств композита в нелинейной области.

Целью настоящей работы является применение для композитов с нелинейно диэлектрическими свойствами метода асимптотического осреднения [6 – 9], который был ранее применен для большого числа различных задач [10 – 13], в том числе для линейных задач электродинамики и пьезоупругости [14, 15].

Постановка квазистатической задачи нелинейной электростатики для поляризующихся композитов. Рассмотрим в трехмерном пространстве композит (неоднородную среду V с периодической структурой, состоящую из N изотропных фаз V_α , $\alpha = 1, \dots, N$), которая находится под воздействием переменного электрического поля. Все фазы V_α композита будем полагать поляризованными диэлектриками [16] с нелинейными диэлектрическими диаграммами напряженности, а распределение в композите полей электрической напряженности и электрической индукции будем полагать подчиняющимся квазистатическим уравнениям Максвелла [16].

Тогда, в указанных допущениях, в декартовой системе координат x^i постановка задачи нелинейной электростатики для указанного типа композита примет вид [16,17]:

$$\nabla_i d_i = 0, \quad x^i \in V, \quad (1)$$

$$d_i = f_i(e_j, x^k), \quad x^k \in V \cup \Sigma, \quad (2)$$

$$e_i = \nabla_i \varphi, \quad x^k \in V \cup \Sigma, \quad (3)$$

$$[\varphi] = 0, \quad [d_i] n_i = 0, \quad x^k \in \Sigma_{\alpha\beta}, \quad (4)$$

$$\varphi|_{\Sigma_1} = \varphi_e, \quad d_i n_i|_{\Sigma_2} = d_e, \quad (5)$$

где обозначены: d_i — компоненты вектора индукции электрического поля; e_i — компоненты вектора напряженности электрического поля;

∇_i — оператор набла; f_i — компоненты нелинейной векторной функции, описывающей соотношения между e_i и d_i для композита; φ — электрический потенциал; n_i — компоненты вектора нормали; $[\varphi]$ — скачок функций на границе $\Sigma_{\alpha\beta}$ раздела фаз композита с номерами α и β , $\alpha, \beta = 1, \dots, N$, φ_e — заданный потенциал на части поверхности Σ_1 композита, d_e — заданная нормальная составляющая вектора индукции электрического поля на части поверхности Σ_2 . Уравнение (1) представляет собой локальное уравнение Гаусса [16].

Модель нелинейно-диэлектрических свойств фаз композита. Все фазы композита будем полагать изотропными, тогда векторные функции (2), описывающие нелинейные диэлектрические соотношения для фаз могут быть представлены с помощью скалярных нелинейных функций [18]

$$f_i(e_j, x^k) = \varepsilon(|\mathbf{e}|, x^k) e_i, \quad (6)$$

где $\varepsilon(|\mathbf{e}|)$ — нелинейная диэлектрическая проницаемость фаз, зависящая от модуля $|\mathbf{e}| = \sqrt{\delta_{ij} e^i e^j}$ — вектора напряженности \mathbf{e} электрического поля и от координаты x^k , δ_{ij} — символ Кронекера. Зависимость (6) от координаты является кусочно-гладкой: при переходе от одной фазы композита к другой меняется нелинейная диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon(|\mathbf{e}|, x^k) = \varepsilon_\alpha(|\mathbf{e}|), \quad x^k \in V_\alpha. \quad (7)$$

Тогда соотношения (2) примут вид

$$d^i = \varepsilon(|\mathbf{e}|, x^k) e^i. \quad (8)$$

В качестве конкретных функций $\varepsilon_\alpha(|\mathbf{e}|)$ нелинейной диэлектрической проницаемости фаз примем следующие зависимости:

$$\varepsilon_\alpha(|\mathbf{e}|) = \begin{cases} \varepsilon_{\alpha 0}, & 0 \leq |\mathbf{e}| \leq e_{\alpha s}, \\ \varepsilon_{\alpha 0} + A_\alpha (1 - \exp(-B_\alpha (|\mathbf{e}| - e_{\alpha s}))), & |\mathbf{e}| > e_{\alpha s}, \end{cases} \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (9)$$

где $\varepsilon_{\alpha 0}$, A_α , B_α , $e_{\alpha s}$ — константы характеризующие материал каждой фазы композита.

Обезразмеривание. Все уравнения в системе (1) – (5), а также (8) будем полагать безразмерными. Обезразмеривание осуществим следующим образом. Пусть \tilde{d}_i , \tilde{e}_i , $\tilde{\varphi}$, $\tilde{\varepsilon}$, \tilde{x}^k — размерные величины, соответствующие безразмерным d_i , e_i , φ , ε , x^k . Введем характерные

значения размерных величин: $d_0, e_0, \varphi_0, \varepsilon_0, x_0 = L$, и свяжем безразмерные и размерные величины следующими соотношениями

$$\begin{aligned} d_i &= \tilde{d}_i / d_0, \quad e_i = \tilde{e}_i / e_0, \quad \varphi = \tilde{\varphi} / \varphi_0, \\ \varepsilon &= \tilde{\varepsilon} / \varepsilon_0, \quad x^k = \tilde{x}^k / L. \end{aligned}$$

Из соотношений (3) и (8) следует, что $d_0 = \varepsilon_0 e_0$ и $e_0 = \varphi_0 / L$. Константы $\varepsilon_{\alpha 0}, A_\alpha, B_\alpha, e_{\alpha s}$ в (9) являются безразмерными.

Линеаризация задачи. Применяя метод последовательных приближений для нелинейного соотношения (8), линеаризуем определяющие соотношения

$$d_i^{\{m\}} = \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}}|, x^k) e_i^{\{m\}}, \quad m = 1, 2, \dots, \quad (10)$$

где m — номер приближения.

Тогда постановка задачи (1) – (5), (8) примет вид

$$\begin{aligned} \nabla_i d_i^{\{m\}} &= 0, \quad x^i \in V, \\ d_i^{\{m\}} &= \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}}|, x^k) e_i^{\{m\}}, \\ e_i^{\{m\}} &= \nabla_i \varphi^{\{m\}}, \quad x^i \in V \cup \Sigma, \\ [\varphi^{\{m\}}] &= 0, \quad [d_i^{\{m\}}] n_i = 0, \quad x^i \in \Sigma_{\alpha\beta}, \\ \varphi^{\{m\}}|_{\Sigma_1} &= \varphi_e, \quad d_i^{\{m\}} n_i|_{\Sigma_2} = d_e, \quad m = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (11)$$

Асимптотические разложения системы нелинейных уравнений Максвелла. В силу периодичности структуры композита, следуя общей концепции метода асимптотического осреднения [6 – 9], введем малый параметр κ

$$\kappa = \frac{l}{L} \ll 1, \quad (12)$$

где l – характерный размер ячейки периодичности (ЯП).

Введем следующие безразмерные координаты: x^i — глобальные координаты и ξ^i — локальные координаты $\xi^i = \frac{x^i}{\kappa}$.

Все функции, входящие в систему (11), будем полагать квазипериодическими $h(\tilde{x}^i) = h(x^i, \xi^j)$, т.е. периодическими по ξ^j и зависящими от глобальных координат. В частности, определяющие соотношения (10) примут вид

$$d_i^{\{m\}} = \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}}|, \xi^k) e_i^{\{m\}}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Локальные координаты ξ^j изменяются в пределах области V_ξ — ячейки периодичности. Все уравнения в этой системе (11) считаются безразмерными. Дифференцирование от квазипериодической функции $h(x^i, \xi^j)$ осуществляется по следующему правилу:

$$\nabla_i h = h_{,i} + \kappa^{-1} h_i = \frac{\partial h}{\partial x^i} + \frac{1}{\kappa} \frac{\partial h}{\partial \xi^i}, \quad (14)$$

где обозначены производные $h_{,i} = \frac{\partial h}{\partial x^i}$, $h_i = \frac{\partial h}{\partial \xi^i}$.

Решение задачи (11) ищем в виде асимптотических разложений по малому параметру

$$\varphi^{\{m\}}(x^i, \xi^j) = \varphi^{\{m\}(0)}(x^i) + \sum_{n=1}^{\infty} \kappa^n \varphi^{\{m\}(n)}(x^i, \xi^j), \quad (15)$$

$$\xi^j \in V_\xi, \quad x^j \in V.$$

Подставляя (15) в третье уравнение системы (11), получаем асимптотические разложения для компонент вектора напряженности электрического поля $e_i^{\{m\}}$

$$e_i^{\{m\}} = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n e_i^{\{m\}(n)}, \quad (16)$$

где

$$e_i^{\{m\}(n)} = \varphi_{,i}^{\{m\}(n)} + \varphi_i^{\{m\}(n+1)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (17)$$

Подставляя (16) в (13), и используя формулу Тейлора, получаем асимптотические разложения для диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}}|, \xi^k) = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n \varepsilon^{\{m-1\}(n)}, \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon^{\{m-1\}(0)} &= \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi^k), \\ \varepsilon^{\{m-1\}(1)} &= \frac{\partial \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi^k)}{\partial |\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|} |\mathbf{e}^{\{m-1\}(1)}|, \\ \varepsilon^{\{m-1\}(n)} &= \varepsilon^{\{m-1\}(n)}(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \dots, |\mathbf{e}^{\{m-1\}(n)}|, \xi^k). \end{aligned} \quad (19)$$

Подставляя (16) и (18) в (13), получаем асимптотическое разложение для компонент вектора индукции электрического поля $d_i^{\{m\}}$

$$d_i^{\{m\}} = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n d_i^{\{m\}(n)}, \quad (20)$$

где

$$\begin{aligned} d_i^{\{m\}(n)} &= f_i^{(n)}(e_i^{\{m\}(0)}, \dots, e_i^{\{m\}(n)}, e_i^{\{m-1\}(0)}, \dots, e_i^{\{m-1\}(n)}) \equiv \\ &\equiv \sum_{n'=0}^n \varepsilon^{\{m-1\}(n-n')} e_i^{\{m\}(n')}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (21)$$

В том числе первые члены имеют вид

$$\begin{aligned} d_i^{\{m\}(0)} &= f_i^{(0)}(e_i^{\{m\}(0)}, e_i^{\{m-1\}(0)}) \equiv \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi^k) e_i^{\{m\}(0)}, \\ d_i^{\{m\}(1)} &= f_i^{(1)}(e_i^{\{m\}(0)}, e_i^{\{m\}(1)}, e_i^{\{m-1\}(0)}, e_i^{\{m-1\}(1)}) \equiv \\ &\equiv \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi^k) e_i^{\{m\}(1)} + \varepsilon^{\{m-1\}(1)}(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, |\mathbf{e}^{\{m-1\}(1)}|, \xi^k) e_i^{\{m\}(0)}. \end{aligned} \quad (22)$$

Рекуррентная последовательных локальных задач. Подставляя разложения (15), (16) и (20) в систему уравнений (11), и собирая члены при одинаковых степенях малого параметра, получим следующую рекуррентную последовательность локальных задач

$$\begin{aligned} d_{i,i}^{\{m\}(n)} + d_{i\bar{i}}^{\{m\}(n+1)} &= b^{\{m\}(n)}, \quad \xi^k \in V_\xi, \\ d_i^{\{m\}(n)} &= f_i^{(n)}(e_i^{\{m\}(0)}, \dots, e_i^{\{m\}(n)}, e_i^{\{m-1\}(0)}, \dots, e_i^{\{m-1\}(n)}, \xi^k), \\ e_i^{\{m\}(n)} &= \varphi_i^{\{m\}(n)} + \varphi_i^{\{m\}(n+1)}, \quad \xi^i \in V_\xi \cup \Sigma_\xi, \\ [\varphi^{\{m\}(n+1)}] &= 0, \quad [d_i^{\{m\}(n)}] n_i = 0, \quad \xi^i \in \Sigma_{\xi\alpha\beta}, \\ \langle \varphi^{\{m\}(n+1)} \rangle &= 0, \quad \left[[\varphi^{\{m\}(n+1)}] \right] = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь обозначены Σ_ξ - граница ЯП, $\Sigma_{\xi\alpha\beta} = \Sigma_{\alpha\beta} \cap V_\xi$ — граница раздела компонентов композита в рамках одной ЯП, $\left[[\varphi^{\{m\}(1)}] \right] = 0$ — условие периодичности на границе ЯП, а

$$\langle \varphi^{\{m\}(n+1)} \rangle = \int_{V_\xi} \varphi^{\{m\}(n+1)} dV_\xi, \quad (24)$$

Функции $b^{\{m\}(n)}$, представляющие собой фиктивные заряды, не зависят от локальных координат ξ^k , они возникают из условия разрешимости задачи (23) в классе периодических функций относительно функций $\varphi^{\{m\}(n+1)}$.

Для нулевого приближения $n = 0$ имеем следующую задачу

$$\begin{aligned}
 d_{i|i}^{\{m\}(0)} &= 0, \quad \xi^k \in V_\xi, \\
 d_i^{\{m\}(0)} &= \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi^k) e_i^{\{m\}(0)}, \\
 e_i^{\{m\}(0)} &= \varphi_i^{\{m\}(0)} + \varphi_i^{\{m\}(1)}, \quad \xi^i \in V_\xi \cup \Sigma_\xi, \\
 [\varphi^{\{m\}(1)}] &= 0, \quad [d_i^{\{m\}(0)}] n_i = 0, \quad \xi^i \in \Sigma_{\xi\alpha\beta}, \\
 \langle \varphi^{\{m\}(1)} \rangle &= 0, \quad [[\varphi^{\{m\}(1)}]] = 0, \quad m = 1, 2, \dots
 \end{aligned} \tag{25}$$

Решение этих задач ищется относительно функций $\varphi^{\{m\}(1)}$. Входными данными этой задачи являются градиенты $\varphi_i^{\{m\}(0)}$, поэтому решение можно представить в формальном виде

$$\varphi^{\{m\}(1)} = N_i^{(10)} \varphi_i^{\{m\}(0)}, \tag{26}$$

где функции $N_i^{(10)}$ зависят от следующих аргументов

$$N_i^{(10)} = N_i^{(1)(0)}(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi^k). \tag{27}$$

Аналогично, используя рекуррентную зависимость (21), формальное решение задач (23) можно представить в виде

$$\varphi^{\{m\}(n)} = \sum_{n'=0}^{n-1} N_i^{(nn')} \varphi_i^{\{m\}(n')}, \tag{28}$$

$$N_i^{(nn')} = N_i^{(nn')} (e_i^{\{m-1\}(0)}, \dots, e_i^{\{m-1\}(n)}, \xi^k). \tag{29}$$

После подстановки функций (29) друг в друга при разных n , это выражение можно записать следующим образом:

$$\varphi^{\{m\}(n)} = \sum_{n'=0}^{n-1} N_{i_1 \dots i_n}^{(nn')} \varphi_{i_1 \dots i_n}^{\{m\}(n')}, \tag{30}$$

где функции $N_{i_1 \dots i_n}^{(nn')}$ имеют те же аргументы, что и $N_i^{(nn')}$ (29).

Подставляя (30) в третье уравнение системы (23), находим общее представление для векторов напряженности электрического поля

$$e_i^{\{m\}(n)} = \sum_{n'=0}^n W_{i i_1 \dots i_n}^{\{m-1\}(n)} \varphi_{i_1 \dots i_n}^{\{m\}(n')}, \tag{31}$$

где функции $W_{i i_1 \dots i_n}^{\{m-1\}(n)}$ выражаются через производные $N_{i_1 \dots i_n, i}^{(nn')}$ и $N_{i_1 \dots i_n, i}^{(n, n'+1)}$, и поэтому также зависят от аргументов $(e_i^{\{m-1\}(0)}, \dots, e_i^{\{m-1\}(n)}, \xi^k)$.

Осредненные задачи. После подстановки асимптотических разложений (20) в первое уравнение (11) – уравнение Гаусса, и приравнивания членов в асимптотическом ряду этого уравнения к некоторым

функциям $b^{\{m\}(n)}$ (первое уравнение в (23)), оно принимает следующий вид

$$\sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n b^{\{m\}(n)} = 0. \quad (32)$$

Функции $b^{\{m\}(n)}$ найдем из условия разрешимости задач (23), которое имеет следующий вид

$$b^{\{m\}(n)} = \langle d_i^{\{m\}(n)} \rangle_i. \quad (33)$$

Подставляя (33) в (32), получаем

$$\sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n \langle d_i^{\{m\}(n)} \rangle_i = 0. \quad (34)$$

Введем обозначение для осредненного асимптотического ряда вектора электрической индукции

$$\bar{d}_i^{\{m\}} = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n \langle d_i^{\{m\}(n)} \rangle_i. \quad (35)$$

Тогда уравнение (33) примет следующий вид

$$\bar{d}_{i,i}^{\{m\}} = 0. \quad (36)$$

Это уравнение представляет собой осредненное уравнение Гаусса для композита.

Подставим функции $d_i^{\{m\}(n)} = f_i^{(n)}$ из (23) в уравнение (35), тогда получим следующее уравнение

$$\bar{d}_i^{\{m\}} = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n \langle f_i^{(n)}(e_i^{\{m\}(0)}, \dots, e_i^{\{m\}(n)}, e_i^{\{m-1\}(0)}, \dots, e_i^{\{m-1\}(n)}) \rangle_i. \quad (37)$$

Поскольку функции $e_i^{\{m\}(n)}$ согласно (31) зависят от производных $\varphi_{i_1 \dots i_n}^{\{m\}(0)}(\bar{x}^k)$, являющихся в свою очередь функциями только глобальных переменных, то каждый член осредненного ряда зависит от $\varphi_{i_1 \dots i_n}^{\{m\}(0)}(\bar{x}^k)$ и $\varphi_{i_1 \dots i_n}^{\{m-1\}(0)}(\bar{x}^k)$

$$\begin{aligned} \langle d_i^{\{m\}(n)} \rangle_i &= \langle f_i^{(n)}(e_i^{\{m\}(0)}, \dots, e_i^{\{m\}(n)}, e_i^{\{m-1\}(0)}, \dots, e_i^{\{m-1\}(n)}) \rangle_i \equiv \\ &\equiv \bar{f}_i^{(n)}(\bar{e}_i^{\{m\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m\}}, \bar{e}_i^{\{m-1\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m-1\}}). \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь обозначены осредненные векторы напряженности

$$\bar{e}_i^{\{m\}} = \langle e_i^{\{m\}} \rangle_i \equiv \varphi_{i,i}^{\{m\}(0)}. \quad (39)$$

Подставляя (38) в (37), получаем соотношения между осредненными векторами индукции и напряженности для композита

$$\bar{d}_i^{\{m\}} = \bar{f}_i^{\{m\}}(\bar{e}_i^{\{m\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m\}}, \dots, \bar{e}_i^{\{m-1\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m-1\}}, \dots), \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} & \bar{f}_i^{\{m\}}(\bar{e}_i^{\{m\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m\}}, \dots, \bar{e}_i^{\{m-1\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m-1\}}, \dots) = \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa^n \bar{f}_i^{\{n\}}(\bar{e}_i^{\{m\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m\}}, \bar{e}_i^{\{m-1\}}, \dots, \bar{e}_{i,i_1 \dots i_n}^{\{m-1\}}). \end{aligned} \quad (41)$$

Подставляя асимптотические разложения (15) и (20) в граничные условия задачи (11), после осреднения, получаем

$$\varphi^{\{m\}(0)} \Big|_{\Sigma_1} = \langle \varphi_e \rangle, \quad \bar{d}_i^{\{m\}} n_i \Big|_{\Sigma_2} = \langle d_e \rangle. \quad (42)$$

Здесь учтено, что $\langle \varphi^{\{m\}(0)} \rangle = \varphi^{\{m\}(0)}$ и $\langle \varphi^{\{m\}(n)} \rangle = 0$ при $n > 1$, в силу условий нормировки, наложенных на локальные задачи (23).

Система уравнений (36), (39), (40) и условий (42) образует постановку линеаризованной осредненной задачи электростатики композита. Эта задача рассматривается относительно потенциала нулевого приближения $\varphi^{\{m\}(0)}(x^k)$.

Осредненная задача имеет сложный тип, так как содержит бесконечное число производных от $\varphi^{\{m\}(0)}(x^k)$ в определяющих соотношениях (40), стоящих при различных степенях малого параметра. Для решения этой задачи используем метод малого параметра, согласно которому функцию $\varphi^{\{m\}(0)}(x^k)$ ищем в виде ряда по малому параметру

$$\varphi^{\{m\}(0)} = \sum_{r=0}^{\infty} \kappa^r \psi^{\{m\}(r)}. \quad (43)$$

Подставляя ряд (43) в систему уравнений (36), (39), (40) и (42), для старшего члена этого ряда $\psi^{\{m\}(0)}$ получаем следующую задачу

$$\begin{aligned} & \bar{d}_{i,i}^{\{m\}(0)} = 0, \\ & \bar{d}_i^{\{m\}(0)} = \bar{f}_i^{\{m\}(0)}(\bar{e}_i^{\{m\}(0)}, \bar{e}_i^{\{m-1\}(0)}), \\ & \bar{e}_i^{\{m\}(0)} = \psi_{,i}^{\{m\}(0)}, \\ & \psi^{\{m\}(0)} \Big|_{\Sigma_1} = \langle \varphi_e \rangle, \quad \bar{d}_i^{\{m\}(0)} n_i \Big|_{\Sigma_2} = \langle d_e \rangle. \end{aligned} \quad (44)$$

Определяющие соотношения в этой задаче следуют из (38) и имеют вид

$$\bar{f}_i^{\{m\}(0)}(\bar{e}_i^{\{m\}(0)}, \bar{e}_i^{\{m-1\}(0)}) = \langle f_i^{(0)}(e_i^{\{m\}(0)}, e_i^{\{m-1\}(0)}) \rangle. \quad (45)$$

Для вычисления этой функции необходимо решить локальную задачу нулевого приближения (25), в которой следует осуществить замену $\varphi_{,i}^{\{m\}(0)} \rightarrow \psi_{,i}^{\{m\}(0)}$.

Решение локальной задачи для слоистых композитов. Рассмотрим частный случай, когда композит имеет слоистую структуру, а ЯП композита состоит из N слоев, ортогональных к направлению $O\xi^3$. Обозначим далее эту координату $\xi^3 \equiv \xi$, в рамках ЯП V_ξ она изменяется в интервале $-0,5 < \xi < 0,5$.

Тогда задача (25) является одномерной и содержит производные только по ξ

$$\begin{aligned} d_{33}^{\{m\}(0)} &= 0, \quad \xi \in V_\xi, \\ d_i^{\{m\}(0)} &= \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi) e_i^{\{m\}(0)}, \\ e_i^{\{m\}(0)} &= \varphi_{,i}^{\{m\}(0)} + \delta_{i3} \varphi_{,3}^{\{m\}(1)}, \quad \xi \in V_\xi \cup \Sigma_\xi, \\ [\varphi^{\{m\}(1)}] &= 0 \quad [d_3^{\{m\}(0)}] = 0, \quad \xi \in \Sigma_{\xi\alpha\beta}, \\ [\varphi^{\{m\}(1)}] &= 0 \quad [d_3^{\{m\}(0)}] = 0, \quad \xi \in \Sigma_{\xi\alpha\beta}, \\ \langle \varphi^{\{m\}(1)} \rangle &= 0, \quad [[\varphi^{\{m\}(1)}]] = 0, \quad m = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (46)$$

Для слоистых композитов периодические граничные условия и операция осреднения имеют вид

$$\begin{aligned} \langle \varphi^{\{m\}(1)} \rangle &= \int_{-0.5}^{0.5} \varphi^{\{m\}(1)} d\xi, \\ [[\varphi^{\{m\}(1)}(\xi)]] &= \varphi^{\{m\}(1)}(0,5) - \varphi^{\{m\}(1)}(-0,5). \end{aligned} \quad (47)$$

Интегрируя первое уравнение в (46) и подставляя найденное решение во второе уравнение этой системы, находим

$$d_3^{\{m\}(0)} = C_3 = \text{const}, \quad (48)$$

$$d_3^{\{m\}(0)} = \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi) (\varphi_{,3}^{\{m\}(0)} + \varphi_{,3}^{\{m\}(1)}). \quad (49)$$

Интегрируя уравнение (49), находим общий вид функции $\varphi^{\{m\}(1)}$

$$\varphi^{\{m\}(1)} = C_3 \int_{-0.5}^{\xi} \frac{d\tilde{\xi}}{\varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi})} - \xi \varphi_{,3}^{\{m\}(0)} + C. \quad (50)$$

Подставляя выражение (50) в условия (47), находим константы интегрирования C_3, C , и формула (50), записанная в форме (26), приобретает вид

$$\varphi^{\{m\}(1)} = N_i^{(10)} \varphi_i^{\{m\}(0)}, \quad N_i^{(10)} = N^{(10)} \delta_{i3}, \quad (51)$$

$$N^{(10)} = \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}) \rangle^{-1} \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}) \rangle^{-1} \rangle_{\xi} - \xi, \quad (52)$$

$$N_{i3}^{(10)} = \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}) \rangle^{-1} \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}) \rangle^{-1} - 1. \quad (53)$$

Здесь обозначен оператор интегрирования

$$\langle f \rangle_{\xi} = \int_{-0,5}^{\xi} f(\tilde{\xi}) d\tilde{\xi} - \langle \int_{-0,5}^{\xi} f(\tilde{\xi}) d\tilde{\xi} \rangle \quad (54)$$

С использованием (51) и третьей формулы в (46) вычисляем вектор напряженности $e_i^{\{m\}(0)}$

$$e_i^{\{m\}(0)} = W_{ij}^{\{m-1\}(0)} \varphi_j^{\{m\}(0)}, \quad (55)$$

$$W_{ij}^{\{m-1\}(0)} = \delta_{ij} + N_{i3}^{(10)} \delta_{i3} \delta_{j3}, \quad (56)$$

здесь использованы обозначения (31).

Подставляя (55) во второе уравнение системы (46), находим вектор индукции электрического поля $d_i^{\{m\}(0)}$ и функцию $f_i^{(0)}(e_i^{\{m\}(0)}, e_i^{\{m-1\}(0)})$

$$d_i^{\{m\}(0)} = f_i^{(0)}(e_i^{\{m\}(0)}, e_i^{\{m-1\}(0)}) = \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi) W_{ij}^{\{m-1\}(0)} \varphi_j^{\{m\}(0)}. \quad (57)$$

Тогда, после подстановки (57) в (45), получаем линеаризованные определяющие соотношения слоистого композита

$$\begin{aligned} \bar{d}_i^{\{m\}(0)} &= \bar{f}_i^{\{m\}(0)}(\bar{e}_i^{\{m\}(0)}, \bar{e}_i^{\{m-1\}(0)}) = \\ &= \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi) W_{ij}^{\{m-1\}(0)} \rangle \bar{e}_j^{\{m\}(0)}. \end{aligned} \quad (58)$$

Обозначим тензор эффективных диэлектрических проницаемостей слоистого композита

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{\{m-1\}} = \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \xi) W_{ij}^{\{m-1\}(0)} \rangle, \quad (59)$$

тогда соотношения (58) примут вид

$$\bar{d}_i^{\{m\}(0)} = \bar{\varepsilon}_{ij}^{\{m-1\}} \bar{e}_j^{\{m\}(0)}. \quad (60)$$

Подставляя (52) и (56) в (59), найдем явное выражение для тензора эффективных диэлектрических проницаемостей слоистого композита в $m-1$ приближении

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{ij}^{\{m-1\}} = & \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}) \rangle (\delta_{ij} - \delta_{i3}\delta_{j3}) + \\ & + \langle (\varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}))^{-1} \rangle^{-1} \delta_{i3}\delta_{j3}. \end{aligned} \quad (61)$$

Из формулы (61) следует, что тензор $\bar{\varepsilon}_{ij}^{\{m-1\}}$ является диагональным и имеет 2 независимые компоненты

$$\bar{\varepsilon}_{11}^{\{m-1\}} = \bar{\varepsilon}_{22}^{\{m-1\}} = \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}) \rangle, \quad (62)$$

$$\bar{\varepsilon}_{33}^{\{m-1\}} = \langle (\varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|, \tilde{\xi}))^{-1} \rangle^{-1}, \quad (63)$$

т.е. нелинейно- диэлектрический композит является трансверсально изотропным [18].

Подставляя (63) в (60), получаем, что определяющие соотношения (60) можно записать в виде 2-х групп соотношений: в плоскости слоев и в поперечном направлении

$$\bar{d}_I^{\{m\}(0)} = \bar{\varepsilon}_{11}^{\{m-1\}} \bar{e}_I^{\{m\}(0)}, \quad I = 1, 2, \quad (64)$$

$$\bar{d}_3^{\{m\}(0)} = \bar{\varepsilon}_{33}^{\{m-1\}} \bar{e}_3^{\{m\}(0)}. \quad (65)$$

Модуль вектора напряженности $|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|$ в формулах (62) – (65) вычисляется с помощью (54)

$$|\mathbf{e}^{\{m-1\}(0)}|^2 = (e_1^{\{m-1\}(0)})^2 + (e_2^{\{m-1\}(0)})^2 + (e_3^{\{m-1\}(0)})^2, \quad (66)$$

где, согласно (55), (56) и (53)

$$e_I^{\{m-1\}(0)} = W_{11}^{\{m-2\}(0)} \bar{e}_I^{\{m-1\}(0)}, \quad e_3^{\{m-1\}(0)} = W_{33}^{\{m-2\}(0)} \bar{e}_3^{\{m-1\}(0)}, \quad (67)$$

$$W_{11j}^{\{m-1\}(0)} = 1, \quad (68)$$

$$W_{33}^{\{m-2\}(0)} = \langle (\varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-2\}(0)}|, \tilde{\xi}))^{-1} \rangle^{-1} \langle \varepsilon(|\mathbf{e}^{\{m-2\}(0)}|, \tilde{\xi}) \rangle^{-1}.$$

Формулы (62) – (68) полностью позволяют вычислить определяющие соотношения для нелинейно диэлектрического КМ со слоистой структурой.

Результаты численного моделирования. В соответствии с разработанной методикой были проведены расчеты определяющих соотношений для двухслойного нелинейно диэлектрического композита, один из слоев которого представлял собой титанат бария BaTiO_3 , а другой — сегнетокерамический материал — вариконд ВК4 [4, 19 – 22]. Диаграммы нелинейно диэлектрических функций $\varepsilon_\alpha(|\mathbf{e}|)$ — зависимостей диэлектрической проницаемостей от напряженности электрического поля $|\mathbf{e}|$ для BaTiO_3 и вариконд ВК4 были взяты из работ [19 – 22]. Были проведены аппроксимации этих экспериментальных функций $\varepsilon_\alpha(|\mathbf{e}|)$ с помощью аналитических функций (9). Значения

безразмерных констант $\varepsilon_{\alpha 0}, A_{\alpha}, B_{\alpha}, e_{\alpha s}$ для BaTiO_3 и ВК4, полученные таким способом, приведены в таблице 1. При обезразмеривании были введены следующие характерные значения величин

$$L = 1 \text{ м}, e_0 = 10^6 \text{ В/м}, \varepsilon_0 = \varepsilon_C \varepsilon_N = 8,854 \cdot 10^{-8} \text{ Кл/(В}\cdot\text{м)},$$

здесь ε_C — диэлектрическая постоянная, ε_N — нормирующий коэффициент, при этом $d_0 = 8,854 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$, $\varphi_0 = 10^6 \text{ В}$.

Таблица 1

Значения констант в модели (9) для титаната бария BaTiO_3 и вариконда ВК4

Материал	$\varepsilon_{\alpha 0}$	A_{α}	B_{α}	$e_{\alpha s}$
$\text{BaTiO}_3 (\alpha = 1)$	0,1	1,0	40	0,25
ВК4 ($\alpha = 2$)	0,2	2,5	40	0,02

Относительные толщины слоев композита (концентрации фаз) обозначались как h_1 и h_2 ($h_1 + h_2 = 1$, $0 \leq h_i \leq 1$).

На рис. 1 и 2 представлены графики функции $\bar{\varepsilon}_{11}(\bar{e}_1^{(0)})$, $\bar{\varepsilon}_{33}(\bar{e}_3^{(0)})$ — зависимостей диэлектрической проницаемости 2-х слойного композита от компонент $\bar{e}_1^{(0)}$ и $\bar{e}_3^{(0)}$ вектора средней напряженности электрического поля, соответственно, вычисленные по формулам (62) и (63). Графики построены для различных значений концентраций фаз h_1 и h_2 . У сегнетоэлектрика ВК4 диэлектрическая проницаемость, увеличивается при возрастании напряженности электрического поля практически сразу. Это увеличение достигает максимальных значений (более, чем в 10 раз) по сравнению с начальным значением $\varepsilon(0)$. У титанана бария существует достаточно большой диапазон значений $|\bar{e}^{(0)}|$, в котором диэлектрическая проницаемость не меняется. У 2-х слойного композита ВК4+ BaTiO_3 с 50% содержанием титанана бария диэлектрическая проницаемость $\bar{\varepsilon}_{11}$ в основном следует характеру изменения диэлектрической проницаемости ВК4: возрастание значений $\bar{\varepsilon}_{11}$ начинается практически сразу при увеличении значений $\bar{e}_1^{(0)}$.

В то же время изменение диэлектрической проницаемости $\bar{\varepsilon}_{33}$ 2-х слойного композита ВК4+ BaTiO_3 по характеру ближе к аналогичной зависимости титанана бария: существует достаточно большая область значений $\bar{e}_3^{(0)}$, при которых $\bar{\varepsilon}_{33}$ практически не меняется (рис. 2).

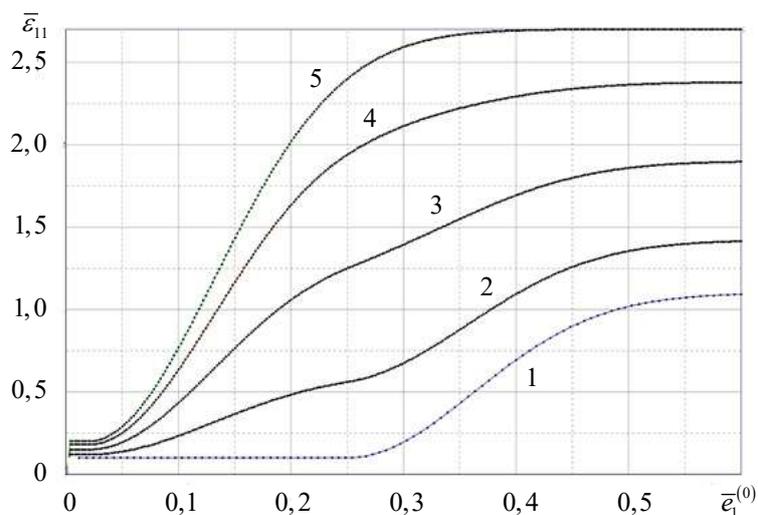


Рис. 1. Зависимость диэлектрической проницаемости $\bar{\epsilon}_{11}$ 2-х слойного композита $\text{BK4} + \text{BaTiO}_3$ от компоненты вектора средней напряженности электрического поля $\bar{\epsilon}_1^{(0)}$ для различных значений концентрации фазы h_1 (BaTiO_3):
 1 — 1,0; 2 — 0,8; 3 — 0,5; 4 — 0,2; 5 — 0 (BK4)

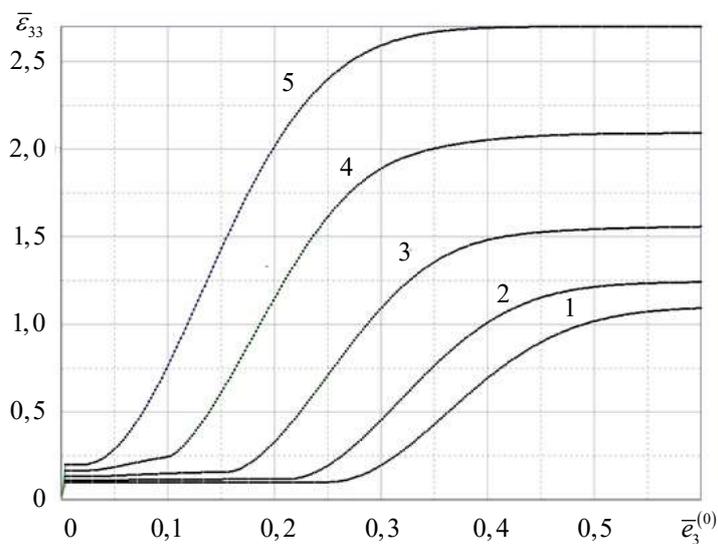


Рис. 2. Зависимость диэлектрической проницаемости $\bar{\epsilon}_{33}$ 2-х слойного композита $\text{BK4} + \text{BaTiO}_3$ от компоненты вектора средней напряженности электрического поля $\bar{\epsilon}_3^{(0)}$ для различных значений концентрации фазы 1 (BaTiO_3):
 1 — 1,0; 2 — 0,8; 3 — 0,5; 4 — 0,2; 5 — 0 (BK4)

На рис. 3 и 4 показаны графики зависимости компонент вектора индукции $\bar{d}_1^{(0)}$ и $\bar{d}_3^{(0)}$ 2-х слойного композита $\text{BK4} + \text{BaTiO}_3$ от

компонент $\bar{e}_1^{(0)}$ и $\bar{e}_3^{(0)}$ вектора средней напряженности электрического поля, соответственно, вычисленные по формулам (64) и (65) для различных значений концентраций фаз h_1 и h_2 . Поскольку диэлектрическая проницаемость рассмотренных материалов значительно выше, чем ϵ_c , то компоненты вектора поляризации $\mathbf{p} = \bar{\mathbf{d}}^{(0)} - \epsilon_c \bar{\mathbf{e}}^{(0)}$ численно близки к $\bar{\mathbf{d}}^{(0)}$. Поэтому графики зависимостей $\bar{p}_1(\bar{e}_1^{(0)})$ и $\bar{p}_3(\bar{e}_3^{(0)})$ фактически совпадают с к аналогичными графиками $\bar{d}_1^{(0)}(\bar{e}_1^{(0)})$ и $\bar{d}_3^{(0)}(\bar{e}_3^{(0)})$. Поляризация $\bar{p}_1(\bar{e}_1^{(0)})$ и индукция $\bar{d}_1^{(0)}(\bar{e}_1^{(0)})$ композита ВК4+ ВаТiО₃ в плоскости слоев, по характеру зависимости от $\bar{e}_1^{(0)}$ близки к аналогичным зависимостям вариконда ВК4, а поляризация $\bar{p}_3(\bar{e}_3^{(0)})$ и индукция $\bar{d}_3^{(0)}(\bar{e}_3^{(0)})$ композита ВК4+ ВаТiО₃ в направлении, перпендикулярном к плоскости слоев, по характеру зависимости от $\bar{e}_3^{(0)}$ близки к аналогичным зависимостям титаната бария.

Разработанный метод позволяет прогнозировать нелинейно диэлектрические свойства композитов с различными содержаниями фаз, и тем самым, проектировать материалы с заданными диэлектрическими свойствами.

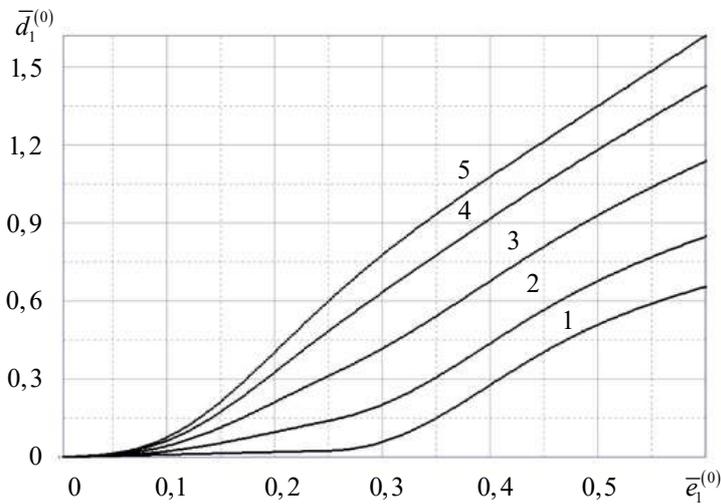


Рис. 3. Зависимость компоненты вектора индукции $\bar{d}_1^{(0)}$ 2-х слойного композита ВК4+ ВаТiО₃ от компоненты вектора средней напряженности электрического поля $\bar{e}_1^{(0)}$ для различных значений концентрации фазы 1 (ВаТiО₃):

1 — 1,0; 2 — 0,8; 3 — 0,5; 4 — 0,2; 5 — 0 (ВК4)

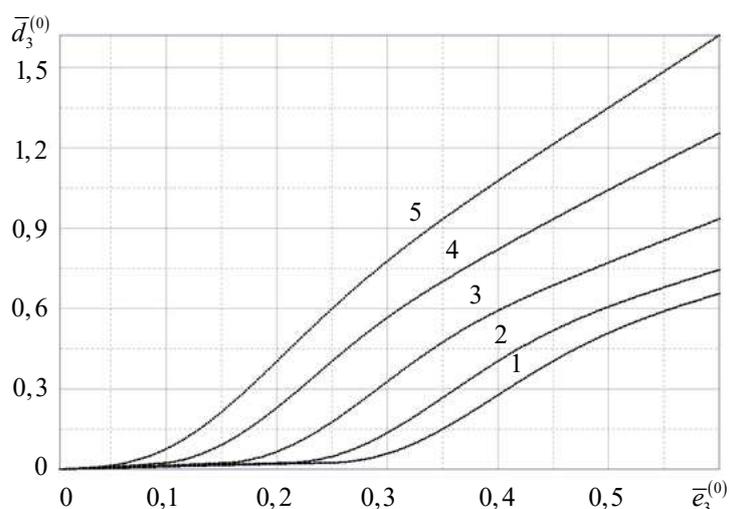


Рис. 4. Зависимость компоненты вектора индукции $\bar{d}_3^{(0)}$ 2-х слойного композита BK4+ BaTiO₃ от компоненты вектора средней напряженности электрического поля $\bar{e}_3^{(0)}$ для различных значений концентрации фазы 1 (BaTiO₃):
1 — 1,0; 2 — 0,8; 3 — 0,5; 4 — 0,2; 5 — 0 (BK4)

Заключение. С помощью метода асимптотического осреднения периодических структур предложен методика расчета эффективных определяющих соотношений для нелинейно диэлектрических композитов. Методика основана на построении асимптотических решений системы квазистационарных уравнений Максвелла для электрического поля.

Сформулированы локальные нелинейные задачи электростатики на ячейке периодичности композита, с помощью которых вычисляются тензоры эффективных нелинейно-диэлектрических свойств композитов, обладающих анизотропией.

Рассмотрен пример решения локальных задач и расчета нелинейно-диэлектрических соотношений для слоистых композитов. Проведены численные расчеты для композита титанат бария — вариконд BK4, которые показали, что разработанная методика расчета нелинейно-диэлектрических соотношений композитов является достаточно эффективной и позволяет прогнозировать диэлектрические свойства композитов при различных концентрациях фаз композита.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Иона Ф., Ширане Д. *Сегнетоэлектрические кристаллы*. Москва, Мир, 1965, 555 с.
- [2] Струков В.А. *Сегнетоэлектричество*. Москва, Наука, 1979, 96 с.

- [3] Берман Л.С. Моделирование гистерезиса структуры металл – сегнетоэлектрик – полупроводник. *Физика и техника полупроводников*, 2001, т. 35, вып. 2, с. 200–202.
- [4] Гаревский В.Н., Новиков И.Л., Дикарева Р.П., Романова Т.С. *Материаловедение. Конструкционные и электротехнические материалы. Материалы и элементы электронной техники. Методические указания к лабораторным работам №1-4 для студентов II курса ЭМФ, РЭФ*. Новосибирск, Изд-во НГТУ, 2009, 74 с.
- [5] Chen Z., Wang X., Ringer S.P., Liao X. Manipulation of nanoscale domain switching using an electron beam with omnidirectional electric field distribution. *Physical Review Letters*, 2016, vol. 117, art. no. 027601. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.027601>
- [6] Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. *Осреднение процессов в периодических средах. Математические задачи механики композиционных материалов*. Москва, Наука, 1984, 352 с.
- [7] Победря Б.Е. *Механика композиционных материалов*. Москва, Изд-во МГУ, 1984, 324 с.
- [8] Санчес-Паленсия Э. *Неоднородные среды и теория колебаний*. Москва, Мир, 1984, 472 с.
- [9] Димитриенко Ю.И. *Механика композиционных материалов при высоких температурах*. Москва, Машиностроение, 1997, 356 с.
- [10] Димитриенко Ю.И. Кашкаров А.И. Расчет эффективных характеристик композитов с периодической структурой методом конечного элемента. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2002, № 2, с. 95–107.
- [11] Dimitrienko Yu.I., Dimitrienko I.D., Sborschikov S.V. Multiscale hierarchical modeling of fiber reinforced composites by asymptotic homogenization method. *Applied Mathematical Sciences*, 2015, vol. 9, no. 145, pp. 7211–7220.
- [12] Димитриенко Ю.И., Федонюк Н.Н., Губарева Е.А., Сборщиков С.В., Прозоровский А.А., Ерасов В.С., Яковлев Н.О. Моделирование и разработка трехслойных композиционных материалов с сотовым наполнителем. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2014, № 5, с. 66–81.
- [13] Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Юрин Ю.В. Асимптотическая теория термоползучести многослойных тонких пластин. *Математическое моделирование и численные методы*, 2014, № 4 (4), с. 18–36.
- [14] Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Маркевич М.Н., Сборщиков С.В. Математическое моделирование диэлектрических свойств наноструктурированных композиционных материалов методом асимптотического осреднения. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2016, № 1, с. 76–89.
- [15] Dimitrienko Yu.I., Zubarev K.M., Yurin Yu.V., Yakovlev V.I. Modeling of the electromagnetic and elastic properties of composite materials. *IOP Conference Series: Material Science and Engineering*, 2020, vol. 934, art. no. 012016. DOI:10.1088/1757-899X/934/1/012016
- [16] Димитриенко Ю.И. *Механика сплошной среды. Т. 4. Основы механики твердых сред*. Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013, 624 с.
- [17] Димитриенко Ю.И. *Механика сплошной среды. Т. 2: Универсальные законы механики и электродинамики сплошных сред*. Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011, 560 с.
- [18] Димитриенко Ю.И. *Тензорное исчисление*. Москва, Высшая школа, 2001, 576 с.
- [19] Булыбенко В.Ю. *Вариконды в электронных импульсных схемах*. Москва, Советское радио, 1971, 271 с.

- [20] Окадзаки К. *Технология керамических диэлектриков*. Москва, Энергия, 1976, 327 с.
- [21] *Вариконды* [Электронный ресурс]. Музей электронных раритетов. 2006. URL: www.1551a3.ru/varikond.htm (дата обращения: 06.01.2020).
- [22] Корицкий Ю.В., Пасынков В.В., Тареев Б.М. Справочник по электротехническим материалам. Том 3. Ленинград, Энергоатомиздат, 1988, 728 с.

Статья поступила в редакцию 10.01.2020

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Зубарев К.М. Моделирование нелинейных диэлектрических свойств композитов на основе метода асимптотической гомогенизации. *Математическое моделирование и численные методы*. 2020. № 2. с. 26–45.

Димитриенко Юрий Иванович — д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, директор Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: dimit.bmstu@gmail.com

Губарева Елена Александровна — канд. физ.-мат. наук, доцент, заместитель заведующего кафедрой «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: elena.a.gubareva@yandex.ru

Зубарев Кирилл Михайлович — ассистент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: zubarev.bmstu@mail.ru

Modeling nonlinear dielectric properties of composites based on the asymptotic homogenization method

© Yu.I. Dimitrienko, E.A. Gubareva, K.M. Zubarev

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

The paper is devoted to the development of a method for calculating the nonlinear dielectric properties of composites with a periodic structure. Methods for predicting of the nonlinear dielectric properties of composites play an important role in the design of dielectric materials with specified properties, in particular for heterogeneous ferroelectrics, which are widely used to create various devices and electrical devices, for example, to create memory storage devices for computers. A quasi-static problem of the distribution of an electric charge in an inhomogeneous polarizable medium with a periodic structure and nonlinear dielectric properties is considered. To solve this nonlinear problem, the asymptotic homogenization method proposed by N.S. Bakhvalov, E. Sanchez-Palencia, B.E. Pobedria. As a result, local nonlinear problems of electrostatics on the periodicity cell are formulated, an algorithm for calculating effective nonlinear constitutive relations for dielectric properties, and an averaged problem for a composite with effective properties are proposed. For the case of a composite with a layered structure, the solution of local problems is obtained, and effective defining relations for the nonlinear dielectric properties of the composite are constructed. It is shown that a laminated composite is a transversely isotropic nonlinear dielectric material if it is isotropic materials. A numerical example of calculating the nonlinear properties of a 2-layer composite based on barium titanate and

ferroelectric ceramic varicond VK4 is considered. A model is proposed that describes the nonlinear dependence of the dielectric constant of these materials on the vector of the electric field strength. It is shown that the nonlinear dependence of the dielectric constant tensor of the composite on the strength vector differs significantly for the direction of the field in the plane of the layers and in the transverse direction. It is shown that the developed technique can serve as a basis for designing nonlinear dielectric composite materials with anisotropic properties.

Keywords: numerical modeling, finite element method, asymptotic averaging method, textile composites, twill weave, plain weave, unidirectional composites, high temperatures, thermal destruction, polymer phase, pyrolytic phase, amorphous phase, crystalline phase, elastic characteristics, microstresses

REFERENCES

- [1] Iona F., Shirane D. *Segnetoelektricheskie kristally* [Ferroelectric crystals]. Moscow, Mir Publ., 1965, 555 p.
- [2] Strukov V.A. *Segnetoelektrichestvo* [Ferroelectricity]. Moscow, Nauka Publ., 1979, 96 p.
- [3] Berman L.S. Simulation of hysteresis in a metal – ferroelectric – semiconductor structure. *Semiconductors*, 2001, vol. 34, iss. 2, pp. 193–195.
- [4] Garevskij V.N., Novikov I.L., Dikareva R.P., Romanova T.S. *Materialo-vedenie. Konstrukcionnye i elektrotekhnicheskie materialy. Materialy i elementy elektronnoj tekhniki. Metodicheskie ukazaniya k laborator-nym rabotam №1-4 dlya studentov II kursa EMF, REF.* [Material Science. Structural and electrical materials. Materials and elements of electronic equipment. Guidelines for laboratory work No. 1-4 for students of the second year of EMF, REF.] Novosibirsk, NSTU Publ., 2009, 74 p.
- [5] Chen Z., Wang X., Ringer S.P., Liao X. Manipulation of nanoscale domain switching using an electron beam with omnidirectional electric field distribution. *Physical Review Letters*, 2016, vol. 117, art. no. 027601. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.027601>
- [6] Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. *Osrednenie protsessov v periodicheskikh sredakh. Matematicheskie zadachi mekhaniki kompozitsionnykh materialov* [Averaging processes in periodic media. Mathematical problems of the composite material mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1984, 352 p.
- [7] Pobedrya B.E. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of composite materials]. Moscow, Lomonosov Moscow State University Publ., 1984, 324 p.
- [8] Sanchez-Palencia E. *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*. New York, Springer Publ., 1980.
- [9] Dimitrienko Yu.I. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov pri vysokih temperaturah* [Mechanics of composite materials at high temperatures]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1997, 356 p.
- [10] Dimitrienko Yu.I., Kashkarov A.I. Finite element method of calculation of efficient characteristics of composites with periodical structure. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2002, no. 2, pp. 95–107.
- [11] Dimitrienko Yu.I., Dimitrienko I.D., Sborschikov S.V. Multiscale hierarchical modeling of fiber reinforced composites by asymptotic homogenization method. *Applied Mathematical Sciences*, 2015, vol. 9, no. 145, pp. 7211–7220.
- [12] Dimitrienko Yu.I., Fedonyuk N.N., Gubareva E.A., Sborschikov S.V., Prozorovskiy A.A., Erasov V.S., Yakovlev N.O. Modeling and development of three-

- layer sandwich composite materials with honeycomb core. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2014, no. 5, pp. 66–81.
- [13] Dimitrienko Yu. I., Gubareva E. A., Yurin Yu. V. Asymptotic theory of thermal creep of multilayer thin plates. *Mathematical modeling and Computational Methods*, 2014, no. 4 (4), pp. 18–36.
- [14] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Markevich M.N., Sborshchik S.V. Mathematical modelling of dielectric properties of nanostructural composites using asymptotic homogenizing method. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2016, no. 1, pp. 76–89.
- [15] Dimitrienko Yu.I., Zubarev K.M., Yurin Yu.V., Yakovlev V.I. Modeling of the electromagnetic and elastic properties of composite materials. *IOP Conference Series: Material Science and Engineering*, 2020, vol. 934, art. no. 012016. DOI:10.1088/1757-899X/934/1/012016
- [16] Dimitrienko Yu. I. *Mekhanika sploshnoy sredy. Tom 4. Osnovy mekhaniki tverdogo tela* [Continuum Mechanics. Vol. 4. Fundamentals of solid mechanics]. Moscow, BMSTU Publ., 2013, 624 p.
- [17] Dimitrienko Yu.I. *Mekhanika sploshnoy sredy. Tom 2. Universalnye zakony mekhaniki i elektrodinamiki sploshnoy sredy* [Continuum Mechanics. Vol. 2. Universal laws of continuous media mechanics and electrodynamics]. Moscow, BMSTU Publ., 2011, 560 p.
- [18] Dimitrienko Yu.I. *Tenzornoe ischislenie* [Tensor calculus]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 2001, 576 p.
- [19] Bulybenko V.Yu. *Varikondy v elektronnykh impul'snykh skhemakh* [Variconds in electronic pulse circuits]. Moscow, Sovetskoe Radio Publ., 1971, 271 p.
- [20] Okazaki K. *Tekhnologiya keramicheskikh dielektrikov* [Technology of ceramic dielectrics]. Moscow, Energia Publ., 1976, 327 p.
- [21] *Variconds* [Electronic resource]. Museum of Electronic Rarities. 2006. URL: www.155la3.ru/varikond.htm (date accessed: 06.01.2020).
- [22] Koritsky Yu.V., Pasyukov V.V., Tareev B.M. *Spravochnik po elektrotekhnicheskim materialam. Tom 3.* [Handbook of electrotechnical materials. Vol. 3.] Leningrad, Energoatomizdat Publ., 1988, 728 p.

Dimitrienko Yu. I., Dr. Sci. (Phys. — Math.), Professor, Head of Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Director of Research and Education Center Scientific and Educational Centre of Supercomputer Engineering Modeling and Software Packages (Simplex), Bauman Moscow State Technical University. e-mail: dimit.bmtstu@gmail.com

Gubareva E.A., Cand. Sc. (Phys. — Math.), Assoc. Professor, Deputy Head of Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: elena.a.gubareva@yandex.ru

Zubarev K.M., Assistant Prof. of Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: zubarev.bmstu@mail.ru