

УДК 66.017

С.В. Кондрашов<sup>1</sup>, К.А. Шапкеев<sup>1</sup>, О.В. Попков<sup>1</sup>**СПОСОБ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СРЕДЫ**

DOI: 10.18577/2307-6046-2017-0-6-9-9

*Предложен способ вычисления эффективных электродинамических параметров (тензоров восприимчивостей) частично разупорядоченной периодической среды с прямоугольной ячейкой, размеры которой существенно меньше длины волны. Предложенный итеративный алгоритм имеет вычислительную сложность итерации  $O(N_x N_y N_z \ln N_x \ln N_y \ln N_z)$ , а его потребность в объеме памяти ЭВМ составляет  $\Theta(N_x N_y N_z)$ , где  $N_x$ ,  $N_y$  и  $N_z$  – размер сетки по соответствующим направлениям. Алгоритм может быть расширен на случай кристаллов с произвольной геометрической формой ячейки путем введения дополнительных линейных преобразований.*

**Ключевые слова:** эффективные электромагнитные параметры, диэлектрическая проницаемость, магнитная проницаемость, периодическая среда, разупорядоченная среда, параллельные вычисления.

*This paper describes a method for computing effective electrodynamic parameters (susceptibility tensors) of a partially disordered periodic medium with a rectangular cell; the cell must be considerably smaller than the electromagnetic wave length in the medium. The computational complexity of the suggested iterative algorithm is  $O(N_x N_y N_z \ln N_x \ln N_y \ln N_z)$  per iteration, and the required memory size is  $\Theta(N_x N_y N_z)$ , where  $N_x$ ,  $N_y$  and  $N_z$  stand for the grid size in the respective directions. The algorithm can be extended so that it will also support periodic media with non-rectangular cells, which only requires a few additional linear transforms.*

**Keywords:** effective electromagnetic parameters, permittivity, permeability, periodic medium, disordered medium, parallel computations.

<sup>1</sup>Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации [Federal state unitary enterprise «All-Russian scientific research institute of aviation materials» State research center of the Russian Federation]; e-mail: admin@viam.ru

**Введение**

Уровень современной авиационной техники в большой степени определяется уровнем радиоэлектронного оборудования, а именно – радиоэлектронной части летательного аппарата: систем, отвечающих за интерфейс «человек–машина», пространственное положение и пилотирование, средств телекоммуникации, энергообеспечения, безопасности, управления, контроля и обеспечения жизненного цикла всех агрегатов и систем летательного аппарата и др. В последние десятилетия электроника, в том числе и авиационная, именуемая авионикой, является одной из наиболее динамично развивающихся отраслей человеческой деятельности, в особенности – применительно к созданию авиационных комплексов с беспилотными летательными аппаратами [1, 2].

Расположение большого количества электронных устройств, принимающих и излучающих электромагнитные волны в различных частотных диапазонах, в малом объеме пространства, ограниченном проводящим эквипотенциальным контуром фюзеляжа, остро ставит задачу электромагнитной совместимости бортового радиоэлектронного оборудования (БРЭО). Одно из направлений решения данной задачи – разработка

легких широкополосных радиопоглощающих материалов, которые могут быть использованы как заполнители сотовых конструкций.

Ранее показано [3], что решение задачи получения широкополосного радиопоглощающего диэлектрического материала заданной толщины сводится к разработке способа точного регулирования соотношения между действительной и мнимой частью диэлектрической проницаемости материала.

Одним из наиболее перспективных радиопоглощающих наполнителей для решения поставленной задачи являются углеродные нанотрубки (УНТ) [4–9]. К преимуществам УНТ относятся низкий порог проводимости и возможность достижения равномерного ориентационного распределения нанотрубок внутри тонких слоев композита благодаря их малым размерам.

В ряде работ, например [10–13], определены частотные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости различных нанокompозитов с углеродными нанотрубками. Характерной особенностью всех исследованных композитов является резкое изменение величин действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости ( $\epsilon'$  и  $\epsilon''$ ) при увеличении проводимости после достижения порога перколяции. Так, авторы работы [13] показали, что при изменении концентрации одностенных УНТ с 0,1 до 1% величина  $\epsilon'$  изменяется от 4 до 8. При этом величина тангенса угла диэлектрических потерь ( $\text{tg}\delta$ ) изменяется с 0,1 до 0,24, а проводимость нанокompозита увеличивается с  $10^{-12}$  до  $10^{-9}$  См/см. Увеличение концентрации УНТ до 3% (проводимость нанокompозита составляет  $10^{-3}$  См/см) приводит к возрастанию величины  $\epsilon'$  до 16, а  $\text{tg}\delta$  – до 0,7.

Использование плоских пластин из композитов с углеродными нанотрубками позволяет получить узкополосный радиопоглощающий материал. Положение максимума поглощения и его ширину можно регулировать путем изменения концентрации УНТ. Например, согласно результатам работы [14], максимум поглощения и ширина пика поглощения по уровню -10 дБ изменяется с 6,4–8,2 (1,8 ГГц) до 7,5–10,1 (2,6 ГГц) и 12,0–15,1 (3,1 ГГц) при изменении концентрации одностенных УНТ в полиуретане. На ширину и положение пика максимума поглощения оказывает влияние тип матрицы [15] нанокompозита, качество диспергирования УНТ [16] и другие факторы, которые влияют на проводимость нанокompозита.

Возможным способом увеличения ширины полосы поглощения нанокompозитов с углеродными нанотрубками является интегрирование наночастиц ферромагнитного металла или оксида внутрь углеродной нанотрубки. Образующийся карбид со структурой «ядро–оболочка» наряду с диэлектрическими потерями обладает высоким уровнем магнитных потерь. Такая комбинация позволяет получать нанокompозиты с шириной полосы поглощения 16 ГГц по уровню -10 дБ [17] или даже 11 ГГц – по уровню -20 дБ [18].

Одна из основных проблем, которую необходимо решить при разработке радиопоглощающего композита, заключается в построении модели, описывающей диэлектрические и магнитные свойства среды с разупорядоченным распределением нанонаполнителя.

Прямое точное моделирование усредненных свойств таких сред невозможно. Один из способов нахождения усредненных параметров подобных разупорядоченных систем состоит в подмене их на периодизованные системы разупорядоченные лишь в пределах элементарной ячейки, вычислении соответствующих параметров данных периодизованных систем и их последующем усреднении. Данный подход требует множественного проведения однотипных расчетов с целью накопления статистики. В случае, когда требуется также найти зависимость усредненных характеристик разупорядоченных систем от различных параметров (например, пористости), необходимое число

процедур расчета существенно возрастает. В связи с этим необходим метод, позволяющий быстро решать задачу для отдельных конфигураций модели материала.

В данной статье предложен итеративный метод, позволяющий быстро находить эффективные параметры среды (тензоры восприимчивостей), которая может быть представлена в виде кристалла с линейным откликом на внешнее электромагнитное поле и произвольной конфигурацией полей восприимчивостей в ячейке. Предложенный алгоритм достаточно хорошо поддается параллелизации, что позволяет эффективно использовать его для проведения расчетов на графических ускорителях.

Работа выполнена в рамках реализации комплексного научного направления 15. «Наноструктурированные, аморфные материалы и покрытия» («Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года») [2].

### Теоретическая часть

В рамках предлагаемого метода моделируемая среда представляет собой трехмерный, бесконечный по всем направлениям «кристалл» с прямоугольной ячейкой, однако метод может быть расширен непосредственно на случай ячеек произвольной формы. Микроскопические свойства среды задаются полями тензоров восприимчивостей поляризации и намагниченности к напряженности электрического поля и магнитной индукции (в линейном приближении). Для этого на базе ячейки «кристалла» строится прямоугольная сетка, узлам которой ставятся в соответствие значения компонент тензоров восприимчивостей, точный смысл которых раскрывается далее, а также рассматривается случай отсутствия остаточных поляризации и намагниченности. Однако метод может быть расширен для более общего случая, когда эти параметры не равны нулю.

Предполагается, что параметры ячейки в моделируемой среде значительно меньше длины волны электромагнитного излучения рассматриваемой частоты. Это требование связано со следующими соображениями:

- в этом случае понятие эффективных параметров среды остается актуальным независимо от строения ячейки;
- распространение электромагнитного излучения от близко расположенных (оказывающих существенное влияние) ячеек к рассматриваемой ячейке можно считать мгновенным (в противном случае в рамках предложенного метода возникают сложности при вычислении);
- это позволяет считать внешнее электромагнитное поле однородным.

Предлагаемая схема расчета основывается на итеративном вычислении полей поляризации и намагниченности периодической среды в заданном внешнем однородном монохроматическом электромагнитном поле. На каждой итерации сначала вычисляются поправки к полям поляризации и намагниченности, а затем – вызванные ими поправки к электрическому и магнитному полям.

Изначально задается однородное внешнее поле  $(\vec{E}, \vec{B})$  с круговой частотой  $\omega$  (где  $\vec{E}$  и  $\vec{B}$  – комплекснозначные векторы напряженности электрического поля и индукции магнитного поля), а также комплекснозначные параметры среды, устанавливающие линейную зависимость между параметрами  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$ ,  $\vec{P}$  и  $\vec{M}$  (где  $\vec{P}$  и  $\vec{M}$  – комплекснозначные векторы поляризации и намагниченности). Дальнейший расчет строится на следующих рекуррентных соотношениях:

$$\vec{E}_j = \vec{E}_{j-1} + \vec{E}'_j; \quad (1)$$

$$\vec{B}_j = \vec{B}_{j-1} + \vec{B}'_j; \quad (2)$$

$$\vec{E}'_j = -\nabla\varphi'_j - ik_0\vec{A}'_j; \quad (3)$$

$$\vec{B}'_j = \nabla \cdot \vec{A}'_j; \tag{4}$$

$$\varphi'_j(\vec{r}) = - \int f(|\vec{r}' - \vec{r}|) \nabla \cdot \vec{P}'_j(\vec{r}') dV'; \tag{5}$$

$$\vec{A}'_j(\vec{r}) = ik_0 \int f(|\vec{r}' - \vec{r}|) \vec{P}'_j(\vec{r}') dV' + \int \vec{M}'_j(\vec{r}') \cdot \vec{g}(\vec{r} - \vec{r}') dV'; \tag{6}$$

$$\vec{P}'_j = \hat{\chi}_{PE} \vec{E}'_{j-1} + \hat{\chi}_{PB} \vec{B}'_{j-1}; \tag{7}$$

$$\vec{M}'_j = \hat{\chi}_{ME} \vec{E}'_{j-1} + \hat{\chi}_{MB} \vec{B}'_{j-1}; \tag{8}$$

$$\vec{E}'_0 = \vec{E}_0; \tag{9}$$

$$\vec{B}'_0 = \vec{B}_0; \tag{10}$$

$$f(r) \equiv \frac{1}{r} e^{-ik_0 r}; \tag{11}$$

$$\vec{g}(\vec{r}) \equiv \frac{\vec{r}}{r^3} e^{-ik_0 r}; \tag{12}$$

где  $\hat{\chi}_{\alpha\beta}$  – комплекснозначный тензор второго ранга, описывающий восприимчивость величины  $\alpha$  к величине  $\beta$  в линейном приближении ( $\alpha$  и  $\beta$  – индексы, указывающие на тип связанных величин – см. выражения (7) и (8));  $\varphi$  – скалярный электрический потенциал;  $\vec{A}$  – векторный потенциал;  $k_0 = \omega/c$ ,  $c$  – скорость света в вакууме;  $i = \sqrt{-1}$ ;  $j$  – номер итерации; векторы со штрихом – найденная на текущей итерации поправка к полю;  $\vec{r}$  и  $\vec{r}'$  – радиус-векторы;  $r$  – абсолютное значение радиус-вектора;  $dV'$  – элемент объема, по которому производится интегрирование.

Решением данной системы уравнений является поле  $(\vec{E}_\infty, \vec{B}_\infty)$ .

Зададим прямое и обратное преобразования Фурье следующим образом:

$$\hat{F}(\vec{k}) \equiv \frac{1}{2\pi} \int F(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} dV; \tag{13}$$

$$F(\vec{r}) \equiv \int \hat{F}(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} dV_k, \tag{14}$$

где  $\hat{F}$  – Фурье-образ некоторой функции  $F$ .

Дискретное преобразование Фурье (ДПФ) зададим в следующем виде:

$$\hat{F}_{\vec{k}_j} = \frac{1}{N} \sum_n F_{\vec{r}_n} e^{i\vec{k}_j \vec{r}_n}, \tag{15}$$

$$F_{\vec{r}_j} = \sum_n \hat{F}_{\vec{k}_n} e^{i\vec{k}_n \vec{r}_j}. \tag{16}$$

Избавимся от «сверток» и дифференцирования в выражениях (1)–(12), переписав их с привлечением операций в обратном пространстве:

$$\hat{\varphi}'_j = -i\vec{k} \cdot \vec{P}'_j \hat{f}'_j; \tag{17}$$

$$\vec{A}'_j = ik_0 \vec{P}'_j \hat{f}'_j + \vec{M}'_j \cdot \vec{g}'_j; \tag{18}$$

$$\vec{E}'_j = -i\vec{k} \hat{\varphi}'_j - ik_0 \vec{A}'_j; \tag{19}$$

$$\vec{B}'_j = i\vec{k} \cdot \vec{A}'_j; \tag{20}$$

$$\hat{f}(k) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F[f r^\varepsilon](k) = \frac{1}{2\pi^2 (k^2 - k_0^2)}; \tag{21}$$

$$\vec{g}(k) = -\frac{i\vec{k}}{2\pi^2 k^3} \left( k + \frac{k_0}{2} \ln \frac{k_0 - k}{k_0 + k} \right). \quad (22)$$

Рассмотрим кристаллическую ячейку, имеющую форму параллелепипеда со сторонами  $a_x, a_y, a_z$ . Введем функцию  $f'$ , которая учитывает вклад от одинаковых элементов всех таких ячеек:

$$f'(\vec{r}) \equiv \sum_j f(|\vec{r} - \vec{r}_j|), \quad (23)$$

где  $\vec{r}_j$  – вектор смещения рассматриваемой ячейки,

тогда

$$\hat{f}'(\vec{k}) = \hat{f}'(k) \sum_j e^{-i\vec{k}\vec{r}_j}. \quad (24)$$

Можно показать, что функция  $\hat{f}'$  отлична от нуля только при  $k_\alpha a_\alpha = 2\pi N$ , где  $\alpha$  – индекс компоненты вектора;  $a_\alpha$  – параметр решетки в направлении  $a$ ,  $N \in Z$ . Переходя к дискретному представлению ряда Фурье, можно записать:

$$\hat{f}'_k = \frac{(2\pi)^3}{V} \hat{f}(\vec{k}), \quad (25)$$

где  $V$  – объем ячейки.

Согласно выражениям (17) и (18), достаточно рассматривать параметры  $\hat{f}'_k$  и  $\vec{g}'_k$  с теми же  $\vec{k}$ , для которых отличаются от нуля коэффициенты Фурье-разложения полей поляризации и намагниченности. Далее будем считать, что поля целиком описываются набором синусоид с пространственными частотами, не превышающими частот Найквиста по соответствующим направлениям ячейки.

Коэффициенты Фурье-разложения  $\vec{P}$  и  $\vec{M}$  для  $k=0$  не влияют на векторы  $\vec{E}$  и  $\vec{B}$  и на любом этапе вычислений могут быть приняты равными нулю, благодаря чему можно также принять  $\hat{f}'_0 = 0$  и  $\vec{g}'_0 = 0$ . В случае  $k_0 \ll k$  выражения (21) и (22) могут быть упрощены:

$$\hat{f}'_k = \frac{4\pi}{Vk^2}, \quad k \neq 0; \quad (26)$$

$$\vec{g}'_k = \frac{4\pi i \vec{k}}{Vk^2}, \quad k \neq 0. \quad (27)$$

При этом условии также упрощаются выражения (17)–(20):

$$\vec{E}'_j = -\frac{4\pi}{Vk^2} \vec{k} (\vec{k} \cdot \vec{P}'_j); \quad (28)$$

$$\vec{B}'_j = \frac{4\pi}{V} \left[ \vec{M}'_j - \frac{1}{k^2} \vec{k} (\vec{k} \cdot \vec{M}'_j) \right]. \quad (29)$$

Перепишем уравнение (29) для напряженности магнитного поля:

$$\vec{H}'_j = -\frac{4\pi}{Vk^2} \vec{k} (\vec{k} \cdot \vec{M}'_j). \quad (30)$$

Таким образом, в случае нулевых параметров  $\chi_{PB}$  и  $\chi_{ME}$  оказывается возможным произвести разделение задачи на независимые подзадачи для электрического и магнитного полей.

Эффективные параметры среды вычисляются на основании сопоставления средних по ячейке значений  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$ ,  $\vec{P}$ ,  $\vec{M}$  в различных комбинациях. Средние значения этих векторов могут быть непосредственно получены из нулевых коэффициентов Фурье-разложения, причем значения  $\vec{E}_0$  и  $\vec{B}_0$  остаются на всех итерациях равными заданному значению внешнего поля.

Как следует из вычислительной сложности быстрого преобразования Фурье (БПФ), предложенный итеративный алгоритм имеет вычислительную сложность итерации  $O(N_x N_y N_z \ln N_x \ln N_y \ln N_z)$ , а его потребность в объеме памяти ЭВМ составляет  $\Theta(N_x N_y N_z)$ , где  $N_x$ ,  $N_y$  и  $N_z$  – размер сетки по соответствующим направлениям. Таким образом, предложенный способ так же хорошо масштабируется, как и БПФ.

### Выводы

Предложенный способ расчета эффективных электродинамических параметров (тензоров восприимчивостей) периодической среды (кристалла с ячейкой в виде параллелепипеда) обладает хорошей масштабируемостью по отношению к размеру сетки.

В случае равенства нулю тензоров  $\chi_{PB}$  и  $\chi_{ME}$  задача может быть разделена на независимые подзадачи для электрического и магнитного полей, что позволяет уменьшить потребность в объеме памяти ЭВМ и ускорить расчет.

*Данная работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №15-38-20717 мол\_а\_вед.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Каблов Е.Н. Конструкционные и функциональные материалы – основа экономического и научно-технического развития России // Вопросы материаловедения. 2006. №1. С. 64–67.
2. Каблов Е.Н. Инновационные разработки ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ по реализации «Стратегических направлений развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года» // Авиационные материалы и технологии. 2015. №1 (34) С. 3–33. DOI:10.18577/2071-9140-2015-0-1-3-33.
3. Кондрашов С.В., Гуревич Я.М., Попков О.В., Шашкеев К.А. и др. Широкополосные радиопоглощающие материалы на основе пористых композитов с углеродными нанотрубками // Все материалы: Энциклопедический справочник (в печати).
4. Qinand F., Brosseau C. A review and analysis of microwave absorption in polymer composites filled with carbonaceous particles // J. Appl. Phys. 2012. Vol. 111. Paper No. 061301. DOI: 10.1063/1.3688435.
5. Кондрашов С.В., Шашкеев К.А., Попков О.В., Соловьянич Л.В. Перспективные технологии получения функциональных материалов конструкционного назначения на основе нанокompозитов с УНТ (обзор) // Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн. 2016. №3. Ст. 07. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 05.07.2016). DOI: 10.18577/2307-6046-2016-0-3-7-7.
6. Кондрашов С.В., Шашкеев К.А., Попков О.В., Соловьянич Л.В. Физико-механические свойства нанокompозитов с УНТ (обзор) // Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн. 2016. №5. Ст. 08. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 05.07.2016). DOI: 10.18577/2307-6046-2016-0-5-8-8.
7. Каблов Е.Н., Кондрашов С.В., Юрков Г.Ю. Перспективы использования углеродсодержащих наночастиц в связующих для полимерных композиционных материалов // Российские нанотехнологии. 2013. Т. 8. №3–4. С. 28–42.

8. Кондрашов С.В., Гуняева А.Г., Шашкеев К.А. и др. Электропроводящие гибридные полимерные композиционные материалы на основе нековалентно функционализированных углеродных нанотрубок // Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн. 2016. №2. Ст. 10. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 05.07.2016). DOI: 10.18577/2307-6046-2016-0-2-10-10.
9. Акатенков Р.В., Аношкин И.В., Беляев А.А., Битт В.В., Богатов В.А., Дьячкова Т.П., Куцевич К.Е., Кондрашов С.В. и др. Влияние структурной организации углеродных нанотрубок на радиоэкранирующие и электропроводящие свойства нанокompозитов // Авиационные материалы и технологии. 2011. №1. С. 35–42.
10. Challa R.K., Kajfez D., Demir V., Gladden J.R., Elsherbeni A.Z. Characterization of Multiwalled Carbon Nanotube (MWCNT) Composites in a of Square Cross Section Waveguide // IEEE Microwave and Wireless Components Letters. 2008. Vol. 18. No. 3. P. 161–163. <http://ieeexplore.ieee.org/document/4459260/> (дата обращения: 23.01.2017). DOI: 10.1109/LMWC.2008.916776.
11. De Vivo B., Guagno L., Lamberti P. et al. Electromagnetic properties of Carbon NanoTube/epoxy nanocomposites // International Symposium on Electromagnetic Compatibility – EMC Europe. Athens, 2009. P. 1–4. <http://ieeexplore.ieee.org/document/5189674/> (дата обращения: 23.01.2017). DOI: 10.1109/EMCEUROPE.2009.5189674.
12. Huang Q., Holland T.B., Mukherjee A.K. et al. Carbon nanotube RF absorbing materials // Proc. SRF2009. Berlin, 2009. P. 648–651.
13. Huang Yi., Li N., Ma Y. et al. The influence of single-walled carbon nanotube structure on the electromagnetic interference shielding efficiency of its epoxy composites // Carbon. 2007. Vol. 45. P. 1614–1621. DOI: 10.1016/j.carbon.2007.04.016.
14. Liu Z.F., Bai G., Huang Y. et al. Microwave Absorption of Single-Walled Carbon Nanotubes/Soluble Cross-Linked Polyurethane Composites // J. Phys. Chem. C. 2007. Vol. 111. No. 37. P. 13696–13700. DOI: 10.1021/jp0731396.
15. Fan Z., Luo G., Zhang Z. et al. Electromagnetic and microwave absorbing properties of multi-walled carbon nanotubes/polymer composites // Materials Science and Engineering B. 2006. Vol. 132. P. 85–89.
16. Zhang Y., Zhang A., Ding L. et al. The effect of polymer spatial configuration on the microwave absorbing properties of non-covalent modified MWNTs // Composites. Part A. 2016. Vol. 81. P. 264–270.
17. Che R.C., Liang C.Y., Shi H.L. et al. Electron energy-loss spectroscopy characterization and microwave absorption of iron-filled carbon-nitrogen nanotubes // Nanotechnology. Vol. 18. No. 35. Paper No. 355705.
18. Qi X., Hu Q., Xu J. et al. Enhanced microwave absorption properties and mechanism of core/shell structured magnetic nanoparticles/carbon-based nanohybrids // Materials Science and Engineering B. 2016. Vol. 211. P. 53–60.