

УДК 537.226.1+532.6

**М.А. Коржавчиков****ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УВЛАЖНЕННЫХ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ**

*Описана процедура расчета эффективной диэлектрической проницаемости пространственно-периодических моделей дисперсных систем; Процедура апробирована на моделях кубических включений и взаимопроникающих компонентов. Предложен метод определения конфигурации воды на телах произвольной формы. Исследовано осаждение воды на центры конденсации, фиксированные в узлах кубической решетки. Рассчитаны влажностные зависимости эффективной диэлектрической проницаемости увлажненных упаковок шаров, изучено влияние капиллярного гистерезиса на тангенс угла диэлектрических потерь.*

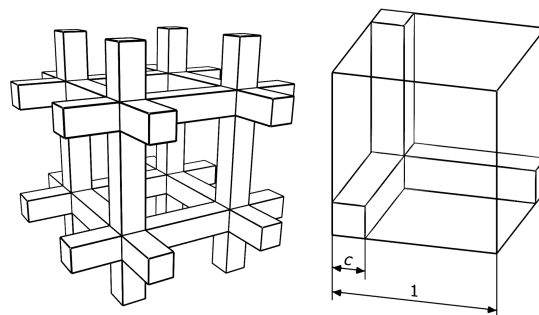
Цель работы — разработать физически обоснованный метод расчета диэлектрических характеристик увлажненных дисперсных систем (ДС) при любых значениях влажности.

**1. Введение**

Создание электродинамических моделей ДС важно для проектирования композиционных диэлектрических материалов с заданными свойствами [1], интерпретации данных дистанционного зондирования подстилающих поверхностей [2]. Решение этой задачи предполагает расчет эффективной диэлектрической проницаемости  $\epsilon_{ef}$  по известным проницаемостям составляющих фаз, их объемным концентрациям и пространственному распределению. Исследования в этом направлении привели к получению многочисленных формул, выражающих зависимость  $\epsilon_{ef}$  от параметров отдельных фаз гетерогенной системы и их объемных концентраций [1, 3]. При малом различии проницаемостей фаз формулы дают близкие друг к другу значения  $\epsilon_{ef}$  независимо от конкретного типа структуры ДС, лежащего в основе вывода той или иной формулы. Но, как известно, при высоком диэлектрическом контрасте топологические особенности расположения элементов фаз способны оказать большое влияние на  $\epsilon_{ef}$ . Вследствие многообразия структур реальных ДС не существует универсальной, физически обоснованной, точной и удобной формулы для  $\epsilon_{ef}$  концентрированных многофазных ДС с высоким диэлектрическим контрастом.

Для учета структурных особенностей ДС перспективен подход, основанный на замене неупорядоченной ДС пространственно периодичной моделью и нахождении поля внутри ее элементарной ячейки при наложении периодических граничных условий. В рамках этого подхода выведены приближенные формулы для некоторых двухфазных моделей структуры [4, 5], в

частности для модели взаимопроникающих компонентов (ВПК), изображенной на рисунке 1. Но аналитические методы либо ограничены простыми структурами, либо имеют противоречия в расчетной схеме. Для реалистичных моделей многофазных ДС возможно только численное решение электростатической задачи.



**Рисунок 1 – Модель структуры с взаимопроникающими компонентами и ее представительный объем (1/8-я часть элементарной ячейки) [4]**

Таким образом, есть потребность в создании процедуры, позволяющей вычислять  $\epsilon_{ef}$  трехмерно-периодических систем с произвольным распределением комплексной диэлектрической проницаемости.

При моделировании диэлектрических свойств увлажненных ДС (почвогрунты, мокрый снег) возникает еще одна проблема. Как известно, среди всех фаз таких ДС наибольшей проницаемостью обладает вода. Поэтому пространственное распределение воды оказывает преобладающее влияние на  $\epsilon_{ef}$  и его необходимо учитывать.

В грубодисперсных системах конфигурация свободной воды определяется силами поверхностного натяжения. Распределение воды в порошках исследовалось методами нахождения поверхностей, имеющих постоянную среднюю

кривизну и удовлетворяющих заданным краевым условиям. Рассмотрены модели ДС в виде упорядоченных или неупорядоченных укладок одинаковых шаров [6]. Определена форма водяных манжет — разобщенных скоплений воды вблизи контактов шаров друг с другом. Изучена также конфигурация воды между тремя шарами [7]. Но, если частицы несферичны или расположение шаров несимметрично, задачу не удается решить традиционными методами. Особенно большие трудности возникают при больших влажностях, когда водяные манжеты сливаются и их форма изменяется скачкообразно.

Есть потребность в создании метода, который позволил бы находить пространственное распределение воды на подложках произвольной формы и при любых значениях влажности.

## 2. Методика численного расчета $\epsilon_{ef}$ периодических систем

### 2.1. Расчетная схема

Исследуемые хаотически микронеоднородные ДС изотропны, следовательно, их упорядоченные модели должны иметь кубическую симметрию. Выберем систему координат с началом в центре элементарной ячейки с периодом  $a$  и осями  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$ , перпендикулярными к ее граням. Пусть распределение диэлектрической проницаемости в элементарной ячейке симметрично относительно координатных плоскостей

$$\epsilon(x, y, z) = \epsilon(-x, y, z) = \epsilon(x, -y, z) = \epsilon(x, y, -z)$$

и перестановки координатных осей

$$\epsilon(x, y, z) = \epsilon(y, x, z) = \epsilon(x, z, y). \quad (1)$$

Направим поле вдоль оси  $Oz$ . Распределение потенциала будет симметрично относительно нее

$$\phi(x, y, z) = \phi(-x, y, z) = \phi(x, -y, z) = \phi(-x, -y, z),$$

а разность потенциалов отлична от нуля только на гранях ячейки, перпендикулярных к  $Oz$ :

$$\begin{aligned} \phi(x+a, y, z) &= \phi(x, y+a, z) = \phi(x, y, z), \\ \phi(x, y, z+a) &= \phi(x, y, z) + \Delta\phi. \end{aligned}$$

Величина внешнего поля и абсолютный размер ячейки несущественны для расчета  $\epsilon_{ef}$  в электростатическом приближении; пусть  $a = 2$ ,  $\Delta\phi = 2$ . Вследствие симметрии достаточно рассмотреть только 1/8 часть элементарной ячейки (пример на рисунке 1). Разобьем ее на  $N^3$  параллелепипедов (блоков) плоскостями, параллельными координатным. Каждый блок однозначно определяется заданием тройки чисел  $(i, j, k)$ , являющихся номерами слоев вдоль соответствующих осей  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$ ;  $i, j, k = 1, 2, \dots, N$ . Размеры блока  $(i, j, k)$  вдоль этих осей  $l_i$ ,  $l_j$ ,  $l_k$  могут быть неодинаковы. Значения электростатического потенциала в центрах блоков  $\phi_{i,j,k}$  являются неиз-

вестными при решении системы линейных уравнений.

На границах между блоками должна быть непрерывна нормальная составляющая электростатической индукции

$$D_{i,j,k}^x = D_{\underline{i+1},j,k}^x, \quad D_{i,j,k}^y = D_{i,\underline{j+1},k}^y, \quad D_{i,j,k}^z = D_{i,j,\underline{k+1}}^z.$$

Надчеркивание индекса означает смещение из центра ячейки в центр грани в положительном направлении соответствующей оси, подчеркивание индекса — в отрицательном направлении.

Будем считать, что в пределах каждого блока проницаемость  $\epsilon_{i,j,k}$  постоянна, а потенциал изменяется линейно от центра блока к центрам его граней. Тогда, учитывая, что  $\vec{D}_{i,j,k} = \epsilon_{i,j,k} \vec{E}_{i,j,k}$  и выражая напряженности через потенциалы, получаем

$$D_{i,j,k}^x = -2 \frac{k_{i,j,k} k_{i+1,j,k}}{k_{i,j,k} + k_{i+1,j,k}} (\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i,j,k}),$$

где  $k_{i,j,k} = \epsilon_{i,j,k} / l_i$ ,  $k_{i+1,j,k} = \epsilon_{i+1,j,k} / l_{i+1}$ .

Аналогично

$$D_{i,j,k}^y = -2 \frac{k_{i,j,k} k_{i-1,j,k}}{k_{i,j,k} + k_{i-1,j,k}} (\phi_{i,j,k} - \phi_{i-1,j,k}).$$

Система линейных уравнений (СЛУ), связывающих значения потенциала в узлах сетки, составляется на основе теоремы Гаусса: поток индукции  $\vec{D}$  наружу через все грани элементарного блока равен нулю:

$$\frac{D_{i,j,k}^x - D_{\underline{i},j,k}^x}{l_i} + \frac{D_{i,j,k}^y - D_{i,\underline{j},k}^y}{l_j} + \frac{D_{i,j,k}^z - D_{i,j,\underline{k}}^z}{l_k} = 0$$

(уравнение разделено на объем блока  $l_i l_j l_k$ ).

Если грань не лежит на границе 1/8 элементарной ячейки, то, например, за счет члена  $(D_{i,j,k}^x - D_{\underline{i},j,k}^x) / l_i$  коэффициент при  $\phi_{i+1,j,k}$  в матрице СЛУ возрастет на

$$-\frac{2}{l_i} \cdot \frac{k_{i,j,k} k_{i+1,j,k}}{k_{i,j,k} + k_{i+1,j,k}},$$

коэффициент при  $\phi_{i-1,j,k}$  — на

$$-\frac{2}{l_i} \cdot \frac{k_{i,j,k} k_{i-1,j,k}}{k_{i,j,k} + k_{i-1,j,k}},$$

а коэффициент при  $\phi_{i,j,k}$  уменьшится на сумму этих приращений.

Если грань лежит на боковой границе 1/8 ячейки ( $x = 0$  или  $x = 1$ , или  $y = 0$ , или  $y = 1$ ), то поток через нее равен нулю и коэффициенты останутся без изменения. Если грань лежит на верхней границе ( $z = 1$ ), потенциал которой  $\phi_{up} = 1$ , то за счет потока через нее свободный член в соответствующей строке и коэффициент

при  $\varphi_{i,j,N}$  возрастут на  $2k_{i,j,N}/l_N$ . Если грань лежит на нижней границе ( $z = 0$ ), то за счет наружного (по отношению к ячейке и блоку) потока через нее коэффициент при  $\varphi_{i,j,1}$  в матрице возрастет на  $2k_{i,j,1}/l_1$ , а свободный член не изменится.

Сформированная таким образом матрица СЛУ получается симметричной семидиагональной. Для каждой ее строки достаточно хранить четыре коэффициента плюс свободный член. СЛУ решается итерационным методом бисопряженных градиентов, алгоритм которого позаимствован из свободно распространяемой программы электродинамического моделирования ЕМАР4 (авторы Mohammad Ali, Girish Bhat).

Эффективная проницаемость вычисляется из соотношения  $\langle D_z \rangle = \varepsilon_{ef} \langle E_z \rangle$  между средними по объему  $1/8$  ячейки значениями составляющих напряженности и индукции, параллельных  $Oz$ . Итерационные вычисления останавливаются в трех случаях: при превышении максимального числа итераций (типичное значение которого  $10^3$ ); при уменьшении относительной невязки СЛУ ниже заданного порога (например,  $10^{-10}$ ); по достижении заданной относительной разности (0.5%) между модулями промежуточных значений  $\varepsilon_{ef}$ , которые соответствуют уменьшению невязки СЛУ на порядок (начиная с  $10^{-2}$ ). Последний критерий является основным.

Когда не выполняется условие (1) (модель анизотропна), методика дает главное значение тензора  $\varepsilon_{ef}$ , соответствующее оси  $Oz$ .

### 2.2. Тестирование процедуры расчета $\varepsilon_{ef}$

Методика проверялась на моделях структуры, для которых имеются апробированные аналитические решения. Наибольших погрешностей расчета следует ожидать в случаях бесконечного диэлектрического контраста:  $\varepsilon_2/\varepsilon_1 \rightarrow \infty$  или  $\varepsilon_1/\varepsilon_2 \rightarrow \infty$ . Но для сходимости итерационных вычислений контраст все же должен оставаться конечным; в следующих примерах он равен  $10^3$ .

1. Для поперечно- и продольно-слоистых моделей получались точные результаты даже при  $N = 2$  (несущественные отклонения вызывались только погрешностью решения СЛУ, причем требовалось лишь несколько итераций).

2. Для  $\varepsilon_{ef}$  матричной системы с кубическими включениями, размещенными в узлах простой кубической решетки известны две приближенные формулы, справедливые при любой объемной концентрации включений  $f_2$ . Одна из них — формула Максвелла Гарнетта [1, 3]

$$\varepsilon_{ef} = \varepsilon_1 \frac{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1 + 2f_2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\varepsilon_2 + 2\varepsilon_1 - f_2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}, \quad (2)$$

применимость которой для кубических включений теоретически обоснована в работе [8] и подтверждена экспериментально [9]. Другая получена в работе [5, с.29]:

$$\varepsilon_{ef} = \varepsilon_1 - \frac{\varepsilon_1 f_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - (1 + f_2) \frac{1 - f_2^{1/3}}{1 + f_2^{1/3}}}, \quad (3)$$

где  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  — проницаемости матрицы и включений соответственно.

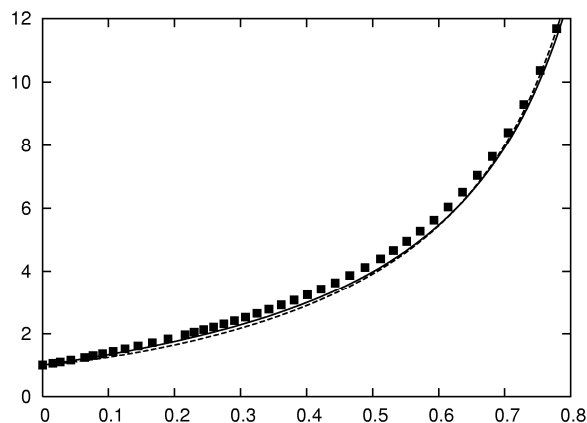


Рисунок 2 – Зависимость  $\varepsilon_{ef}$  от объемной концентрации  $f_2$  проводящих кубических включений;

■ ■ ■ численные результаты при  $N = 25$   
 ————— формула (2)  
 - - - формула (3)

На рисунке 2 представлена зависимость  $\varepsilon_{ef}(f_2)$  при  $\varepsilon_1 = 1$  и  $\varepsilon_2 = 10^3$  (проводящие частицы). Отклонение результатов численного эксперимента от формулы (2) не превышает 8.3%.

Исследованы также зависимости  $\varepsilon_{ef}/\varepsilon_1$  от  $f_2$  для другого предельного случая матричной системы:  $\varepsilon_2 = 1$  и  $\varepsilon_1 = 10^3$  (пористый проводник). Рассчитанные по изложенной методике данные хорошо согласуются с известными формулами и с результатами численных расчетов из работы [4, с.24]. Подтверждена малая чувствительность  $\varepsilon_{ef}$  к форме включений в этом случае.

3. Для  $\varepsilon_{ef}$  структурной модели ВПК справедлива приближенная формула [5, с.31]

$$\varepsilon_{ef} = \varepsilon_1 \frac{\varepsilon_1 c^2 + \varepsilon_2 c(1-c)}{\varepsilon_2 c(1-c) + \varepsilon_1 (1-c+c^2)} + \varepsilon_2 \frac{\varepsilon_2 (1-c)^2 + \varepsilon_1 c(1-c)}{\varepsilon_1 c(1-c) + \varepsilon_2 (1-c+c^2)}. \quad (4)$$

Здесь  $c$  — отношение размера бруса первой фазы к периоду решетки (рисунок 1); связь с концентрацией дается уравнением  $2c^3 - 3c^2 + 1 = f_2$ .

На рисунке 3 показана зависимость  $\varepsilon_{ef}/\varepsilon_1$  от  $f_2$  для модели ВПК при  $\varepsilon_1 = 10^3$  и  $\varepsilon_2 = 1$ . Расхождение результатов численного эксперимента и значений, рассчитанных по формуле (4), не превышает 10.3%. При высоком содержании прово-

дующей фазы ( $f_2 \rightarrow 0$ ) полученные данные лучше описываются «рефракционной» формулой

$$\sqrt{\varepsilon_{\text{эф}}} = (1 - f_2)\sqrt{\varepsilon_1} + f_2\sqrt{\varepsilon_2}. \quad (5)$$

Вывод: численная процедура дает результаты, согласующиеся с известными аналитическими решениями в пределах их точности.

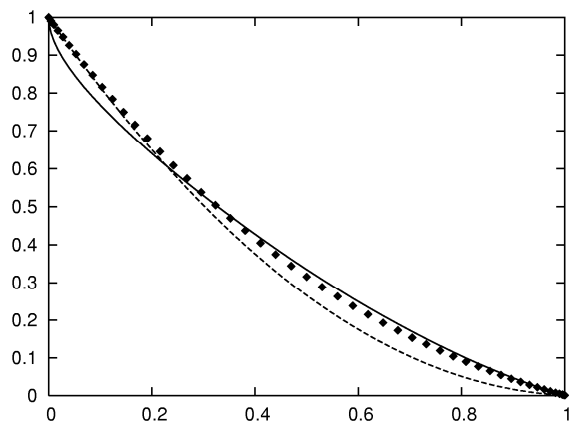


Рисунок 3 – Зависимость  $\varepsilon_{\text{эф}}/\varepsilon_1$  от объемной концентрации  $f_2$  изолирующей фазы для модели взаимопроникающих компонентов;

- ◆◆◆ численные результаты при  $N = 25$
- формула (4)
- формула (5)

## 2. Метод моделирования распределения воды в дисперсных системах

### 2.1. Идея метода

Метод основан на известной молекулярной интерпретации изменения давления насыщенного пара вблизи изогнутой поверхности раздела газ-жидкость. Молекулярные силы имеют ограниченную сферу действия. Молекула, находящаяся вблизи, например, вогнутой поверхности, взаимодействует в среднем с несколько большим числом соседних молекул, чем находящаяся вблизи плоскости. Энергия этого взаимодействия определяет вероятность удержания данной молекулы. Чтобы снизить трудоемкость вычислений, рассматриваются не отдельные молекулы, а физически малые объемы, содержащие множество молекул, но имеющие размеры, гораздо меньшие, чем радиусы кривизны поверхности. Для этого система разбивается на одинаковые блоки. Рассчитывается энергия взаимодействия каждого межфазного блока с его соседями, лежащими в окрестности, радиус, которой уже сравним со средним радиусом кривизны поверхности раздела, что позволяет обнаружить различие энергии связи разных блоков. Затем вычисляется средняя энергия всех пограничных блоков. Те блоки, которые имеют большее чем среднее значение энергии, связаны сильнее и подлежат заполнению водой, а блоки, имеющие

меньшую энергию, являются кандидатами на удаление из них воды.

### 2.2. Расчетная схема

Поскольку требуется многократный пересчет энергии, важно ускорить эту процедуру за счет уменьшения числа блоков и легкости расчета величины, играющей роль энергии связи. При выполнении (1) можно ограничиться областью  $k \geq i \geq j$ , что позволяет уменьшить число блоков почти в 6 раз. Каждому блоку из этой области ставится в соответствие номер элемента массива в памяти ЭВМ  $(k-1)k(k+1)/6 + (i-1)i/2 + j$ . Если происходит обращение к блоку, лежащему вне представительного объема, его координаты  $i', j', k'$  преобразуются согласно «зеркальным» граничным условиям: если  $i' \leq 0$ , то  $i = 1 - i'$ ; если  $i' \geq 2N - 1$ , то  $i = 2N + 1 - i'$  (аналогично для  $j$  и  $k$ ).

Каждый блок может содержать определенные количества воды, воздуха и материала подложки, на которую осаждается вода. Подложка по смачивающим свойствам предполагается неотличимой от воды (полное смачивание), но не может перетекать, т.е. ее содержание в блоке остается неизменным. Блок считается межфазным, если он частично заполнен (водой или материалом подложки) либо соседствует (вдоль грани) хотя бы с одним блоком, имеющим другую степень заполнения.

Для межфазных блоков рассчитывается величина  $U$ , играющая роль энергии связи. Хотя существует несколько физически обоснованных потенциалов межмолекулярного взаимодействия, тесты показали, что конкретный вид этой зависимости не принципиально влияет на получаемые результаты. Важна лишь ограниченность сферы действия потенциалов. Для повышения быстродействия в качестве энергии связи используется доля заполненной (водой или материалом подложки)  $P$ -окрестности рассматриваемого блока:  $\Delta i^2 + \Delta j^2 + \Delta k^2 \leq P^2$ , где  $P$  — некоторое натуральное число. Данная величина чувствительнее к искривлению поверхности, а значит, позволяет надежнее проводить селекцию блоков по сравнению с другими потенциалами.

Полученный набор значений энергии блоков имеет значительный разброс даже при равновесной конфигурации, что обусловлено дискретным представлением поверхности. Чтобы уменьшить разброс, производится сглаживание  $U$  путем нахождения для каждого межфазного блока среднего значения энергии по ансамблю соседних с ним межфазных блоков. При этом центральный блок и его соседи вдоль граней имеют единичный вес, а соседи с  $\Delta i^2 + \Delta j^2 + \Delta k^2 = 2$  участвуют в усреднении с весом  $1/\sqrt{2}$ .

После сглаживания вычисляется среднеарифметическое значение энергии связи  $U_{\text{mid}}$  по ансамблю всех межфазных блоков. При этом в зависимости от того, производится на следующем этапе увлажнение, либо осушение, учитываются только те блоки, которые действительно могут быть заполнены водой (т.е. содержащие воздух), либо осушены (т.е. содержащие воду). Соответственно, для одной и той же конфигурации получаются два значения средней энергии  $U_{\text{mid}}^+$  и  $U_{\text{mid}}^-$ , причем обычно  $U_{\text{mid}}^+ \leq U_{\text{mid}}^-$ , так как наиболее связанные блоки находятся среди полностью заполненных (наименее связанные блоки — среди сухих). Впоследствии те межфазные блоки, которые имеют энергию связи  $U \geq U_{\text{mid}}^+$ , подлежат заполнению водой, а блоки с  $U \leq U_{\text{mid}}^-$  — осушению. Минимальная порция воды, которая может быть добавлена или удалена из блока, равна  $1/255$  от его полного объема. Чем больше отклонение энергии блока  $U$  от  $U_{\text{mid}}$ , тем на большее число порций изменяется содержимое блока; это число равно целой части выражения  $\left| \frac{U - U_{\text{mid}}}{U_{\text{mid}} - U_{\text{ext}}} \right| n_{\text{doze}}$ , где  $n_{\text{doze}}$  — максимальное число порций (достаточно 3–6),  $U_{\text{ext}}$  — максимальная энергия блоков, которые могут быть заполнены, или минимальная энергия блоков, которые могут быть осушены.

Когда происходит слияние водяных манжет или, наоборот, разрыв пленок, конфигурация воды в системе скачкообразно изменяется. Для уточнения равновесного распределения воды вблизи интересующего значения влажности производится многократное заполнение и осушение системы на минимальную величину по принципу «шаг вперед, шаг назад». Критерием равновесия служит отсутствие потоков вещества. Для его реализации вычисляется количество следующих подряд осушений или заполнений каждого межфазного блока. Если максимум этой величины по ансамблю всех межфазных блоков меньше некоторого малого числа в течение нескольких десятков шагов, равновесие считается достигнутым. Поскольку установление равновесия требует много таких шагов, конфигурация уточняется только для некоторых предварительно заданных значений влажности. В промежутках между ними содержимое межфазных блоков изменяется монотонно.

Если первоначально межфазная поверхность имеет резкую границу, т.е. полностью заполнен-

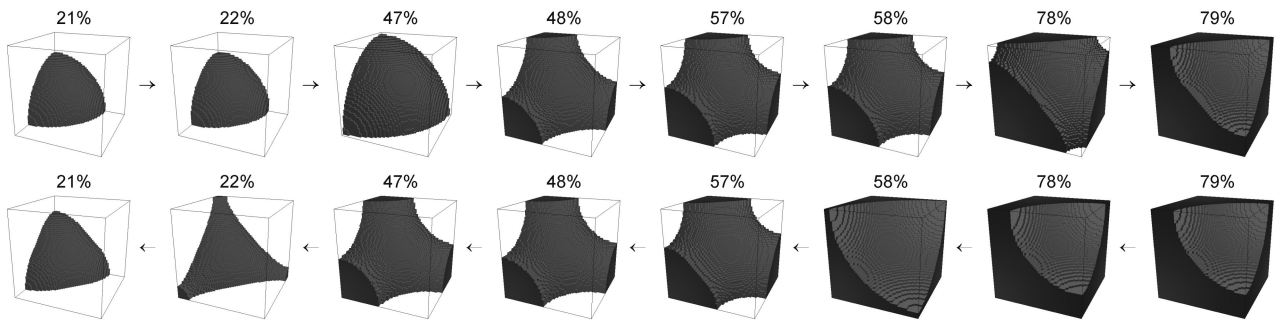
ные межфазные блоки соседствуют с пустыми, то при переходе через поверхность происходит скачок  $U$  на величину, равную примерно  $3/(4P)$  (когда  $1/8 \leq U \leq 7/8$ ). Этот скачок приводит к упомянутому различию  $U_{\text{mid}}^+$  и  $U_{\text{mid}}^-$ , что после нескольких шагов заполнения-осушения обеспечивает появление небольшого количества частично заполненных межфазных блоков, очень важных для точного представления поверхности.

Выбор порядка окрестности  $P$  диктуется следующими требованиями. С одной стороны, значение  $P$  не должно быть меньше протяженности «ступенек» на поверхности, обусловленных ее резкой дискретизацией. В противном случае на этих участках возможно появление «ряби», вызванной постепенным приближением или отступлением «ступеньки». Для грубой оценки  $P$  по этому критерию примем, что минимальная кривизна поверхности такая же, как у вписанного в элементарную ячейку шара. Тогда  $P/N > \sqrt{2/N}$ . Практически  $P$  может оставаться приблизительно в два раза меньше приведенной оценки, так как имеются частично заполненные блоки, снижающие эффект «ряби».

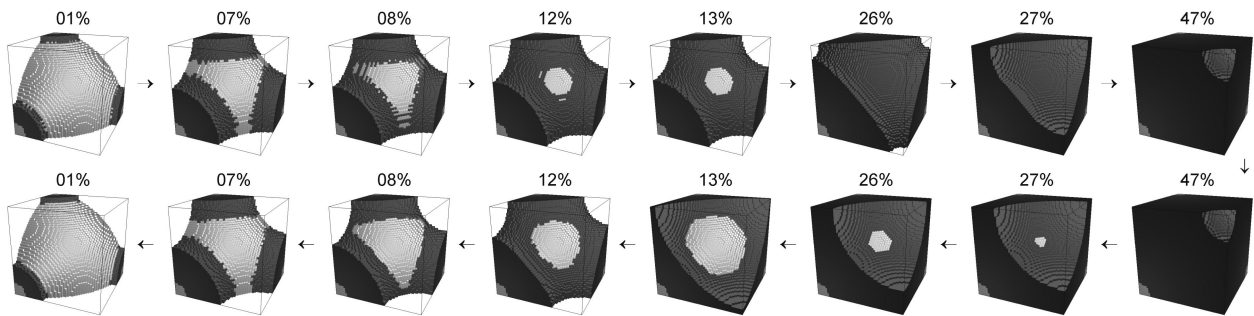
С другой стороны, параметр  $P/N$  должен быть как можно меньше, чтобы точнее отражать локальный характер осреднения поверхности. Если не принять специальных мер, конечность значения  $P/N$  проявляется в том, что при увлажнении системы изолированные скопления воды начинают сливаться преждевременно: когда между ними еще остается зазор порядка  $P$ , образуются «мостики». Это существенно уменьшает порог перколяции. Для снижения эффекта при расчете энергии связи блока учитываются лишь те его соседи из  $P$ -окрестности, которые принадлежат тому же кластеру, что ближайший к центру окрестности заполненный блок. То есть заполненные даже частично блоки не могут взаимодействовать, если они разделены воздушной прослойкой в пределах  $P$ -окрестности. Маркировка кластеров производится по алгоритму Хошена-Копельмана [10].

### 2.3. Проверка метода

Моделировалось осаждение воды на малых центрах конденсации, фиксированных в узлах кубической решетки. На рисунке 4 приведены изображения выбранных равновесных конфигураций системы в пределах  $1/8$  элементарной ячейки. Шаг влажности по равновесным конфигурациям составлял 1%,  $N = 50$ ,  $P = 6$ ,  $n_{\text{doze}} = 6$ .



**Рисунок 4** – Серия изображений 1/8 ячейки при осаждении воды на центрах конденсации, расположенных в узлах кубической решетки. Числа обозначают объемную влажность. Верхний ряд соответствует увлажнению, нижний — осушению от влажности 99 %



**Рисунок 5** – Серия изображений 1/8 ячейки при осаждении воды на простой кубической укладке шаров. Темные области соответствуют воде, более светлые — подложке

Пока капли разделены их поверхность сферическая. Слияние капель должно происходить при их соприкосновении, что соответствует теоретическому значению объемной влажности  $\pi/6 \approx 52,4\%$ . Но, вследствие дискретизации поверхности, слияние происходит несколько раньше — в диапазоне 47-48% (если проверка на перколяцию отключена — при 40-41%). Следующее скачкообразное изменение конфигурации при 78-79% соответствует исчезновению пронизывающих систему воздушных каналов, что приводит к потере воздушной фазы непрерывности. Становится невозможным уход воздуха из системы, а значит и поступление воды. Но формально увлажнение можно продолжить вплоть до того, как радиус сферических пузырьков воздуха станет порядка  $R$ . При осушении почти заполненной системы наблюдается выраженный капиллярный гистерезис — различие пространственного распределения воды при увлажнении и осушении ДС. Так, разрыв стенок воздушного пузыря происходит при 58-57%, а потеря непрерывности водной фазы — только при 22-21%.

В областях скачкообразных изменений вода принимает равновесную форму не сразу, а только после двух-трех процедур установления равновесия (см. рисунок 4 при 21%). Это связано с

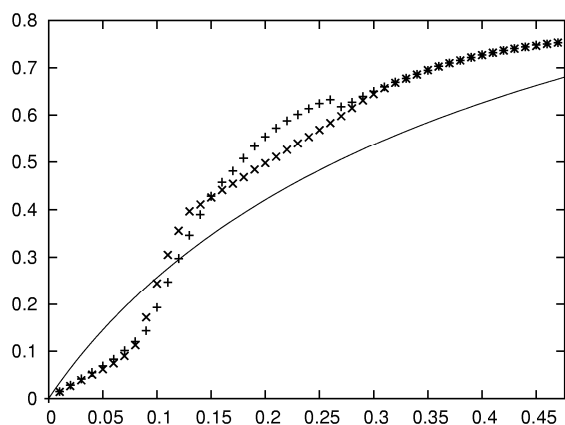
тем, что различие  $U_{mid}^+$  и  $U_{mid}^-$  делает не вполне определенным отличие (по средней энергии связи) неравновесных конфигураций от равновесной. Данные отклонения формы поверхности незначительно влияют на  $\epsilon_{ef}$ . Целесообразно области скачкообразных изменений исследовать повторно с меньшим шагом по влажности.

Вывод: хотя методика не учитывает ряда физических аспектов (в частности, устойчивости водных пленок), она адекватно предсказывает последовательность изменений состояний воды для рассматриваемой модельной системы. Точность метода достаточна для последующего расчета  $\epsilon_{ef}$ .

### 3. Расчет диэлектрических характеристик увлажненных упаковок шаров

Моделировалось осаждение воды на упаковке шаров. На рисунке 5 изображены конфигурации воды на простой кубической укладке соприкасающихся шаров. Значения параметров те же, что в пункте 2.3.

Рельеф поверхности шара приводит к гистерезису смачивания — различию краевого угла при натекании и оттекании (см. рисунок 6 при 12%). Гистерезис смачивания практически отсутствует, если подложка имеет гладкую поверхность, например, в случае осаждения воды на каркас ВПК.



**Рисунок 6** — Тангенс угла диэлектрических потерь простой кубической укладки шаров в зависимости от объемной влажности;

+++ численный эксперимент  
в режиме увлажнения

xxx численный эксперимент  
в режиме осушения

— формула (5)

Рассчитана комплексная эффективная проницаемость  $\varepsilon_{ef} = \varepsilon'_{ef} + i\varepsilon''_{ef}$  увлажненных подложек: кубических упаковок шаров (простой, объемноцентрированной, гранецентрированной) и модели ВПК. Диэлектрическая проницаемость подложки принята равной  $\varepsilon_1 = 5$  (типичное значение для грунтов), воды —  $\varepsilon_2 = 36 + i37$  (соответствует частоте 20 ГГц при комнатной температуре). На рисунке 6 представлены результаты для  $\text{tg } \delta_{ef} = \varepsilon''_{ef} / \varepsilon'_{ef}$  простой укладки шаров. Там же для сравнения приведена кривая, рассчитанная по формуле (5), которая часто используется для построения электродинамических моделей влажных почвогрунтов в диапазоне СВЧ [2]. Рефракционная формула хорошо описывает влажностные зависимости действительной части  $\varepsilon'_{ef}$ : для всех исследованных структур отличие не превышает 9%. Но для диэлектрических потерь соответствие гораздо хуже. При малых влажностях (до ~10%) формула (5) дает значения  $\text{tg } \delta_{ef}$ , завышенные примерно в 2,4 раза (1,7 для каркаса ВПК). При больших влажностях формула (5), наоборот, дает заниженные на ~20% значения  $\text{tg } \delta_{ef}$ .

Вывод: для всех исследованных структур капиллярный гистерезис слабо отражается на влажностной зависимости действительной части  $\varepsilon'_{ef}$ , но существенно влияет на  $\text{tg } \delta_{ef}$ . Это можно объяснить тем, что проводимость является более

чувствительной к перколяции характеристикой, чем проницаемость.

#### 4. Заключение

1. Представлена методика расчета комплексной  $\varepsilon_{ef}$  в квазистатическом приближении. Она имеет самостоятельное значение и может использоваться как для предсказания  $\varepsilon_{ef}$  неоднородных материалов (в том числе композитов), так и для решения обратных задач, например определения проницаемости какой-либо фазы ДС по экспериментальным значениям  $\varepsilon_{ef}$ .

2. Предложен новый подход, позволяющий по заданной структуре скелета ДС находить пространственное распределение капиллярной воды.

3. Совместно эти методики могут быть использованы для теоретического анализа и калибровки диэлектрических методов измерения влажности, в том числе дистанционных.

Автор благодарен проф. В.А. Ильину (МПУ) за постановку задачи и обсуждение результатов исследований.

#### Библиографический список

1. Виноградов А.П. Электродинамика композитных материалов. — М.: Эдиторитал УРСС, 2001. — 208 с.
2. Комаров С.А., Миронов В.Л., Романов А.Н. Аэрокосмическое зондирование гидрологического состояния почв радиофизическими методами. — Барнаул: Алтайский государственный университет, 1997. — 101 с.
3. Духин С.С., Шилов В.Н. Диэлектрические явления и двойной слой в дисперсных системах и полиэлектролитах. — Киев: Наукова Думка, 1978. — 208 с.
4. Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Справочная книга. — Л.: Энергия, 1974. — 264 с.
5. Дульнев Г.Н., Новиков В.В. Процессы переноса в неоднородных средах. — Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. отд-ние, 1991. — 248 с.
6. Gladkikh M., Bryant S. Prediction of imbibition in unconsolidated granular materials // Journal of Colloid and Interface Science. 2005. V.288. PP.526-539.
7. Rynhart P. R. Mathematical modelling of granulation processes. Ph.D. thesis. Massey University, 2004. 168 p.
8. Оделевский В.И. Расчет обобщенной проводимости гетерогенных систем // Журнал технической физики. 1951. Т. 21. Вып. 6. С. 667–685.
9. Whites K.W. Applications of homogenization in electromagnetics // XXVIIth Triennial General Assembly of the International Union of Radio Science (URSI), Maastricht, The Netherlands, URSI Paper No.636, Aug. 17–24, 2002.
10. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Ч.2. — М.: Мир, 1990. — 400 с.