

# 基于有限元法的材料电特性计算机仿真研究

王 伦, 范珍珍, 郭 晨  
(长安大学 信息工程学院, 陕西 西安 710064)

**摘 要:**等效电特性(如介电常数和电导率)是复合材料的重要物理属性,通常受到材料成分、占比、几何结构等多种因素影响。为深入研究夹杂物形状对复合材料等效电特性的影响机理,采用有限元法(FEM)模拟分析了具有不同形状夹杂物的复合材料模型在静电场下所表现出的等效介电特性,并提出以模型内部所产生的平均场浓度和场波动参数来观察并解释夹杂物几何结构对等效电特性的影响规律。论文借助计算机仿真技术,计算了复合材料模型中,当夹杂物和宿主的介电常数比值不同时,夹杂物几何结构对材料等效介电常数的影响,并将仿真结果与几种经典混合模型的解析公式进行了比较。分析结果表明,复合材料的内部平均场强及场波动变化与等效介电常数变化规律相吻合,而场波动与夹杂物几何结构特征有较为直接的相关性,从而可对材料等效电特性的变化进行合理解释。这一模拟分析方法可为复合材料设计等应用研究提供理论参考依据。

**关键词:**计算机建模仿真;有限元算法;等效介电常数;场波动;场浓度

**中图分类号:**TP391.9

**文献标识码:**A

**文章编号:**1673-629X(2022)06-0145-05

**doi:**10.3969/j.issn.1673-629X.2022.06.024

## Study on Computer Simulation of Electrical Properties for Materials Based on Finite Element Method

WANG Lun, FAN Zhen-zhen, GUO Chen  
(School of Information Engineering, Chang'an University, Xi'an 710064, China)

**Abstract:** Effective electrical property (e.g. permittivity and conductivity) is the important physical property of composite materials, which usually determined by various factors such as material composition, proportion, and geometric structure. In order to investigate the influence mechanism of inclusion shape on the effective electrical properties of composite materials, the finite-element method (FEM) is used to compute the effective dielectric properties of composite with different shapes of inclusions under the electrostatic field simulation. Two parameters including the average field concentration (AFC) and the field fluctuation (FF) are proposed to observe thus explain how the inclusion geometry influences the effective electrical properties. In this study, the influence of inclusion geometry on the effective permittivity of two-phase composite material is calculated by computer simulation technology when the permittivity contrast ratio of between each phase varies, and the simulation results are compared with the several analytical mixing laws. The results show that the variation of the AFC and FF in the composite are consistent with the variation of the effective permittivity, and the FF is directly related to the geometrical structure characteristics of the inclusion, which can reasonably explain the variation of the effective electrical properties of the composite material. This simulation analysis method is expected to provide a theoretical reference for composite material design and other applications.

**Key words:** computer modeling and simulation; FEM; effective permittivity; field fluctuation; field concentration

## 0 引 言

随着科学技术的不断发展与进步,新型复合材料因其能满足不同的物理、化学性能,在电子、机械、医学等各领域得到了广泛的应用<sup>[1]</sup>。设计一种具有特定电学性能的复合材料之前,以计算机仿真实验等方法分

析其电特性的变化规律对设计工作具有重要指导意义<sup>[2-4]</sup>。材料科学领域中对材料特性的研究工作往往从材料组分的化学、物理属性出发,以纳米或分子尺度去研究材料的力学及电学性能<sup>[5-6]</sup>,而较少有研究从改变混合材料各固体夹杂物的几何形状或分布结构等

收稿日期:2021-08-30

修回日期:2021-12-30

基金项目:国家自然科学基金面上项目(42074170)

作者简介:王 伦(1995-),男,硕士研究生,研究方向为有限元法的建模仿真、复合材料电特性;郭 晨,教授,博士,研究方向为电磁地球物理建模与仿真、智能化数字岩芯分析。

微观角度出发(微米或毫米尺度)来研究其对材料等效介电常数、电导率等电学参数的影响。研究表明,微观结构的变化以及不同固体夹杂物的排列对电特性具有明显影响,但这一影响规律及机理相对复杂,掌握复合材料夹杂物几何结构对其等效电特性的影响规律,可以为工程行业所需的特定性能新型材料设计提供有效的指导依据。

复合材料的等效介电性能与夹杂物的形状、尺寸、空间取向和各组分的电学性能密切相关<sup>[7]</sup>。早些年, Sihvola 等人提出了一种数值计算二维随机混合物等效介电常数的方法<sup>[8-9]</sup>。马念茹等人基于计算机仿真技术研究了混合介质的电特性<sup>[10]</sup>。吴裕功等人利用傅里叶展开技术研究了双组分周期复合材料的静态电导率和介电常数<sup>[11]</sup>。Gao 和 Gu 等人研究了双组分复合材料的等效介电常数,并推导出了考虑各组分形状分布的微分有效介质近似值<sup>[12]</sup>。Luo 等人研究了夹杂物的体积比和形状对复合材料等效介电常数和电导率的影响<sup>[13]</sup>。然而只有少数研究从物理角度对微观几何结构对复合材料电性能的影响机理给出定量或直观的解释。

为了系统地研究夹杂物的几何结构对材料电特性的影响规律,该文基于有限元法对含有不同几何形状夹杂物的两相复合材料模型进行了计算机数值模拟。通过产生的电场波动,合理解释了几何效应对等效介电常数计算的影响。

## 1 理论方法

### 1.1 混合规则

在分析复合材料的电学性能时,有许多预测其等效介电常数的理论公式。本节给出一些较为经典的混合公式<sup>[14-15]</sup>。式中  $\varepsilon_i$  为夹杂物的相对介电常数,  $\varepsilon_m$  为主体介质的相对介电常数,  $\varepsilon_{\text{eff}}$  为复合材料的等效介电常数,  $q$  为夹杂物的体积分数。

Maxwell-Garnett 公式<sup>[14]</sup>:

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_m + 3q\varepsilon_m \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_m}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_m - q(\varepsilon_i - \varepsilon_m)} \quad (1)$$

Maxwell-Garnett 理论公式是假设夹杂物为球形时推导出来的。球形夹杂物之间没有接触且夹杂物之间的距离远大于其半径,因此它适用于夹杂物占比较低的复合材料。

Bruggenman 公式<sup>[14]</sup>:

$$(1-q) \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_{\text{eff}}}{\varepsilon_m + \varepsilon_{\text{eff}}} + q \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_{\text{eff}}}{\varepsilon_i + \varepsilon_{\text{eff}}} = 0 \quad (2)$$

Bruggenman 混合规则利用平均场理论分析夹杂物之间的相互作用。

幂律公式<sup>[15]</sup>:

$$\varepsilon_{\text{eff}}^{\frac{1}{n}} = q\varepsilon_i^{\frac{1}{n}} + (1-q)\varepsilon_m^{\frac{1}{n}} \quad (3)$$

$$\varepsilon_{\text{eff}}^{\frac{1}{n}} = q\varepsilon_i^{\frac{1}{n}} + (1-q)\varepsilon_m^{\frac{1}{n}} \quad (4)$$

在建模分析中,幂律模型也可用于预测复合材料的等效介电常数。

Lichtenecker 公式<sup>[15]</sup>:

$$\ln \varepsilon_{\text{eff}} = q \ln \varepsilon_i + (1-q) \ln \varepsilon_m \quad (5)$$

当两相介质分层交替排列或随机平行排列时,则采用 Lichtenecker 混合理论。

### 1.2 电场波动定理

通常情况下,当对复合材料施加均匀电场时会导致复合材料的内外各相引起不同的电场波动。而这种波动往往取决于复合材料中夹杂物的形状、介电性能、体积分数和排列方式。对于场波动与复合材料介电特性的关系,首先需要量化不同复合介质模型的电场波动,在这里 Guo 等人<sup>[16]</sup>提出将电场波动定理应用于分析混合物的等效电特性,定理 1:将复合材料的等效介电常数与各相的平均电场浓度联系起来;对于两相复合材料,可以导出浓度因子的表达式:

$$R_i = \frac{\| \langle E(r)_i \rangle \|}{\| \langle E(r) \rangle \|} = \frac{\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_m}{f_i(\varepsilon_i - \varepsilon_m)} \quad (6)$$

式中,  $R_i$  为夹杂物的场浓度因子,  $f_i$  为夹杂物的体积分数。定理 2:将复合材料等效介电常数相对于各相介电常数的导数与各相电场的波动联系起来。夹杂物相的方差的表达式:

$$\sigma_i^2 = \frac{\langle \| E - \langle E \rangle_i \|^2 \rangle_i}{\| \langle E \rangle \|^2} = \frac{\langle \| E \|^2 \rangle_i}{\| \langle E \rangle \|^2} - \frac{\| \langle E \rangle_i \|^2}{\| \langle E \rangle \|^2} = \zeta_i - R_i^2 \quad (7)$$

该文量化了有效介质模型的电场空间波动,对于分析不同夹杂物等效电特性的变化具有重要意义。

## 2 数值模拟方法

FEM 是一种常用的、高性能的数值计算方法。它计算的核心思想是将连续的求解域进行离散化的处理得到一组单元的组合物,根据设定的初始条件求解每个剖分单元区域电参数的近似解,然后由已知的算法模块对离散化区域的方程组进行处理得到真解。有限元法的实现大致需要三个阶段:前期处理阶段、计算求解阶段以及后期处理阶段。前期处理阶段主要有物理场的选取、添加研究(激励)、建立模型以及定义相应的模型参数等(例如设置材料属性);计算求解阶段主要是用户求解微分方程或微分方程组,或者根据求解的物理量自定义微分方程;后处理阶段是对求解的数据进行输出,方便对结果进行分析。

该文研究不同几何结构对电特性的影响规律,考虑到文中所分析的夹杂物结构边缘较不规则,在网格

剖分处理上需要兼顾收敛速度与精度,因此选用基于 FEM 方法的 COMSOL Multiphysics® 多物理场仿真软件进行建模与仿真分析。该方法的特点是当建立的模型比较复杂时,FEM 对边界条件、网格剖分参数的处理较为灵活,在电磁场等领域研究得到了广泛的应用。而 COMSOL Multiphysics® 多物理场仿真软件是一种基于高级数值方法的软件,用于建模和模拟多物理场问题,具有强大的数据后处理功能,为本研究可提供高效的技术支持。

### 3 数值仿真实验

在场波动理论的基础上,为进一步分析解释复合夹杂物几何结构对材料等效电特性的影响,并为材料结构的建模设计提供参考,该文采用有限元方法对不同几何结构的夹杂物进行了计算机数值模拟实验。相关的实验硬件选取及实验设置为:CPU 处理器是 Intel (R) Core (TM) i5-8500 CPU @ 3.00 GHz,64 位操作系统;COMSOL Multiphysics® 多物理场软件为 COMSOL 5.4 版本。在 COMSOL Multiphysics® 选取创建二维几何结构,设置每一相材料属性(相对介电常数),添加物理场接口(AC/DC 模块中的静电场)稳态研究,在模型 X 方向施加激励,Y 方向接地,周期性边界条件。仿真中选取物理场控制网格剖分,仿真验证得到不同的网格剖分对求解等效介电常数值没有大的影响,但是由于网格剖分越精细,所需要的内存和时间越多。因此,文中对等效介电常数求解的网格设置为常规网格,既节省了时间成本,又达到求解介电常数的效果。根据域内各点的电场  $E$  和电位移  $D$  的平均值以及各相的体积分数等可以得到各相的电场浓度和整个复合材料的等效介电常数。复合材料的等效介电常数取决于夹杂物的形状和大小,文中所模拟的理想模型中夹杂物的形状为:圆形、方形、菱形、十字形,如图 1 所示。

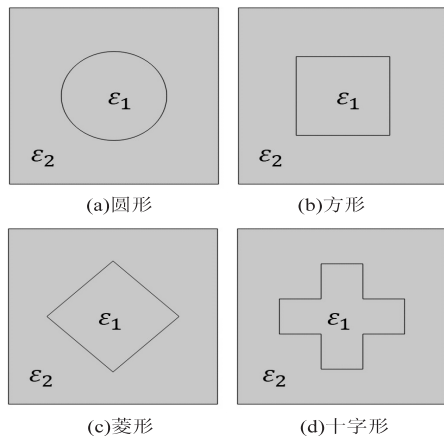


图1 COMSOL Multiphysics® 软件构建不同形状的夹杂物

对于夹杂物与宿主介质的介电常数相差较小的情况,夹杂物的介电常数  $\varepsilon_1 = 4 [F/m]$ ,基体的介电常数  $\varepsilon_2 = 2 [F/m]$ 。对于介电常数对比相差较大的情况,内外两相的介电常数分别是  $\varepsilon_1 = 80 [F/m]$  和  $\varepsilon_2 = 2 [F/m]$ 。图 2 和图 3 分别为 COMSOL Multiphysics® 模拟不同形状夹杂物的电场波动以及电场波动随夹杂物介电特性的变化。

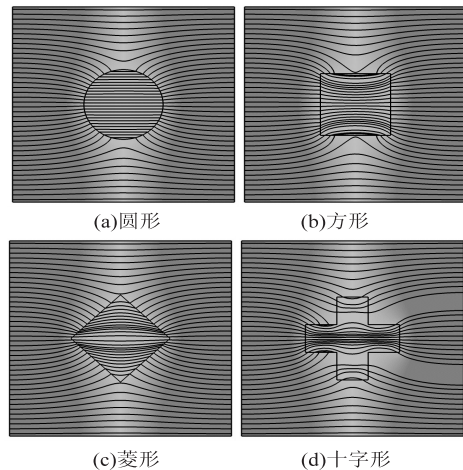
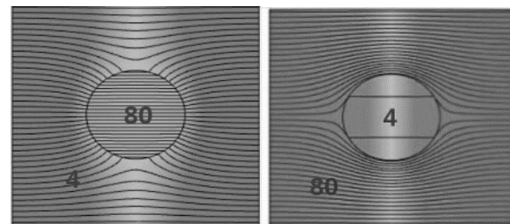


图2 COMSOL Multiphysics® 模拟不同形状夹杂物的电场波动



(a) 介电特性内高外低 (b) 介电特性内低外高

图3 电场波动随夹杂物介电特性的变化

#### 3.1 两相介电常数呈低对比度情况

图 4 ~ 图 6 表示的是夹杂物与基体的相对介电常数在低对比度的情况,夹杂物的介电常数  $\varepsilon_1 = 4 [F/m]$ ,基体的介电常数  $\varepsilon_2 = 2 [F/m]$ 。

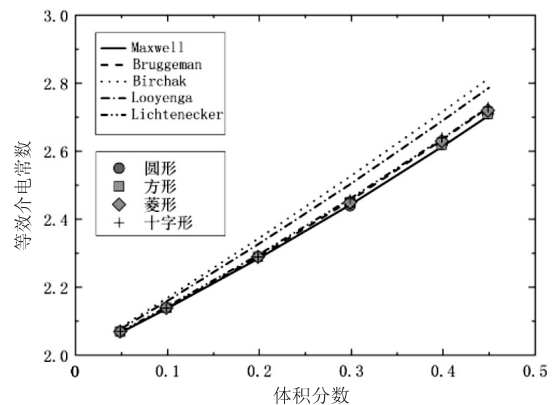


图4 低对比度下不同夹杂物的等效介电常数

图 4 给出了夹杂物与基体的相对介电常数在低对比度情况下,其数值解与理论解的等效介电常数值,可



见对于不同几何形状的夹杂物等效介电常数差异很小。当体积分数小于等于 20% 时,所有模型的等效介电常数基本相同,当体积分数大于 20% 时,菱形和十字形的等效介电常数会大于方形和圆形。相比于理论公式,圆形和方夹杂物的数值解与 Maxwell-Garnett 公式计算的解析结果吻合较好,菱形和十字形夹杂物的数值解与 Bruggeman 公式计算的解析结果较吻合。

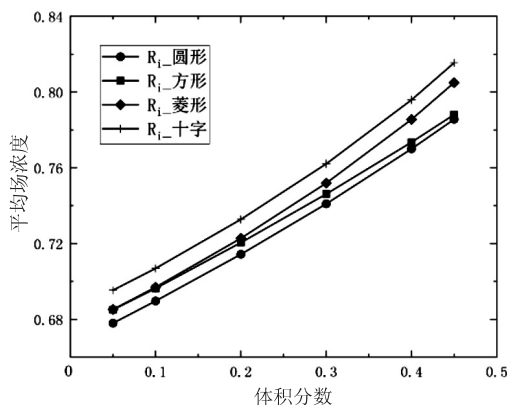


图 5 低对比度下夹杂物相的平均场浓度

图 5 计算了不同夹杂物相平均场浓度的数值解,结果表明了在低对比度情况下,随着夹杂物体积分数的增加,夹杂物的平均场浓度也会随之增加,且不同形状的夹杂物之间的场浓度相差较小。

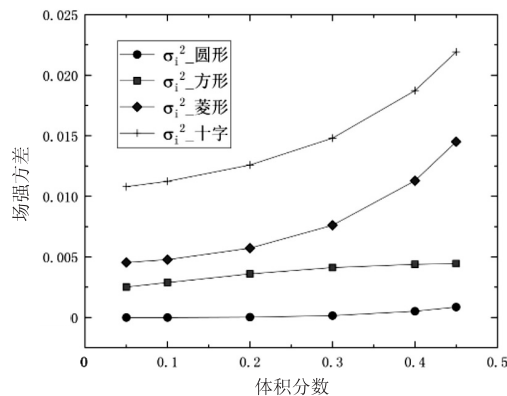


图 6 低对比度下夹杂物相的场强方差

图 6 为不同夹杂物场强方差的数值解,从图 6 的结果可以看出在低对比度情况下,随着夹杂物体积分数的增加,夹杂物的场强方差也会随之增加。不同的是,圆形和方形的场强方差变化较小,而菱形和十字形的场强方差变化较大。

### 3.2 两相介电常数呈高对比度情况

图 7 ~ 图 9 表示的是夹杂物与基体相对介电常数在高对比度的情况,夹杂物的介电常数  $\varepsilon_1 = 80 [F/m]$ ,基体的介电常数  $\varepsilon_2 = 2 [F/m]$ 。

图 7 给出了夹杂物与基体的相对介电常数在高对比度情况下,其数值解与理论解的等效介电常数值。从图 7 的结果可以看出,对于夹杂物与基体的相对介电常数在高对比度情况下,只有当夹杂物的体积分数

较低时,所有夹杂物形状的复合材料的数值解才与 Maxwell-Garnett 公式和 Bruggeman 公式吻合良好。随着夹杂物体积分数的增加,圆形和方形较吻合于 Maxwell-Garnett 公式,而菱形和十字形夹杂物的数值解有很大偏差。

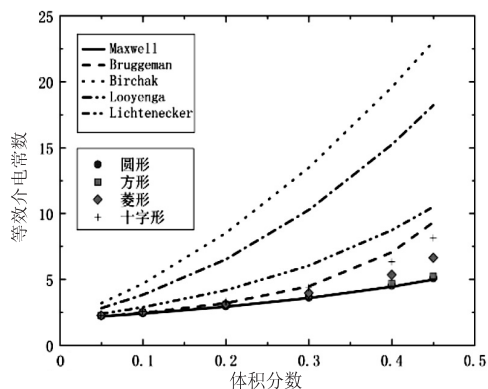


图 7 高对比度下不同夹杂物的等效介电常数

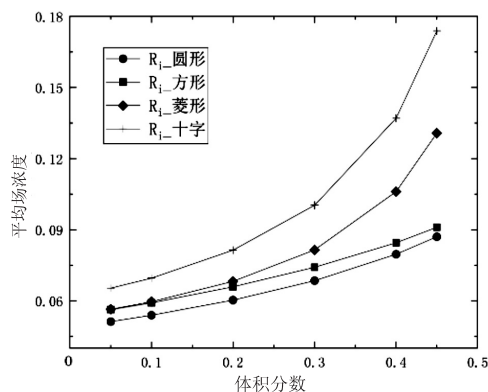


图 8 高对比度下夹杂物相的平均场浓度

图 8 的结果表明在了高对比度情况下,随着夹杂物体积分数的增加,夹杂物的平均场浓度也随之增加。夹杂物的形状不同,其平均场浓度的变化幅度也会不一样。由图 8 可知,圆形和方形的场浓度变化较小,而菱形和十字形的场浓度变化非常大。

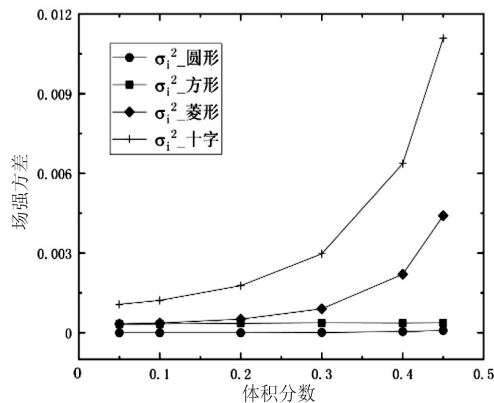


图 9 高对比度下夹杂物相的场强方差

从图 9 的结果可以看出在高对比度情况下,随着夹杂物体积分数的增加,夹杂物的场强方差也会随之变化。圆形和方形的场强方差基本不随体积分数的改

变而变化,而菱形和十字形的场强方差变化非常大。

以上模拟实验结果表明:对于两相介电常数呈低对比度情况,当体积分数小于等于 20% 时,圆形、方形、菱形和十字形的介电常数的数值解基本相同,随着体积分数的增加,十字形和菱形的介电常数略大于圆形和方形;夹杂物的几何结构不同其计算出的平均场浓度和场强方差也是不同的,其平均场浓度也是十字形最大,其次是菱形、方形和圆形,而十字形和菱形的场强方差变化较大,圆形和方形的场强方差变化较小。

对于两相介电常数呈高对比度情况,十字形夹杂物的相对介电常数最大,其次是菱形、方形和圆形,且随着体积分数的增大,介电常数的相差就越大;其十字形和菱形的平均场浓度和场强方差也是变化比较大,而圆形和方形的平均场浓度变化较小,场强方差基本不变。所以,当夹杂物体积分数变化时,复合材料等效介电常数的变化规律与夹杂物相的场浓度和场强方差的变化规律相吻合。

#### 4 结束语

对两相复合材料模型进行了数值模拟,分析了夹杂物几何形状对复合材料等效介电常数的影响。采用有限元方法计算的等效介电常数数值解与几种经典的理论公式进行了比较,并分析了低对比度与高对比度下复合材料的平均场浓度和场波动的变化规律。由分析结果可以得出以下结论:

(1) 不同几何结构的夹杂物对复合材料的电特性影响不同;当夹杂物的体积分数相同时,无论复合材料的两相介电常数呈低对比度还是高对比度,十字形夹杂物的相对介电常数总是最大,其次是菱形、方形和圆形。

(2) 当夹杂物体积分数变化时,复合材料的等效介电常数的变化规律与夹杂物相的场浓度和场强方差的变化规律相吻合;随着夹杂物体积分数增大时,十字形和菱形夹杂物场浓度以及场强方差的变化趋势相对比较大,而圆形和方形的则比较小。

(3) 在夹杂物体积分数相同的情况下,不同夹杂物与基体介质的介电常数对比度差异也会影响复合材料内部场浓度以及场强方差的计算;无论是低对比度还是高对比度,在相同的体积分数下,十字形夹杂物计算出的平均场浓度和场强方差均是最大的,其次是菱形、方形和圆形,因此夹杂物的几何结构特征与场波动之间有直接的相关性。

该文仅讨论了简单二维复合材料模型,后期工作中将会建立更为复杂的三维几何结构模型研究其微观结构对等效电特性的影响规律。以上的计算机仿真研究工作对设计具有特定电特性的复合材料提供了理论

参考依据。

#### 参考文献:

- [1] THOMPSON B S. An introduction to composite materials [J]. *Materials Design*, 1996, 17(5-6): 303-304.
- [2] 曲宝龙,王丽芳. 两相复合材料等效介电常数数值计算 [J]. *功能材料*, 2016, 47(1): 1172-1176.
- [3] 丁世敬,葛德彪,申 宁. 复合介质等效电磁参数的数值研究 [J]. *物理学报*, 2010, 59(2): 943-948.
- [4] 陈小林,成永红,吴 锴,等. 两相复合材料等效复介电常数的计算 [J]. *自然科学进展*, 2009, 19(5): 532-536.
- [5] 钟汝能,郑勤红,向 泰,等. 颗粒填充二元复合材料等效介电特性的修正通用有效介质计算公式 [J]. *材料导报*, 2018, 32(24): 4258-4263.
- [6] 廖 意,蔡 昆,张 元,等. 高浓度纤维增强材料介电特性计算方法 [J]. *物理学报*, 2016, 65(2): 84-91.
- [7] WANG Moran, PAN Ning. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials [J]. *Materials Science & Engineering R: Reports*, 2008, 63(1): 1-30.
- [8] PEKONEN O, KÄRKKÄINEN K, SIHVOLA A, et al. Numerical testing of dielectric mixing rules by FDTD method [J]. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 1999, 13(1): 67-87.
- [9] KARKKAINEN K, SIHVOLA A, NIKOSKINEN K. Analysis of a three-dimensional dielectric mixture with finite difference method [J]. *IEEE Transaction on Geoscience & Remote Sensing*, 2001, 39(5): 1013-1018.
- [10] 郭 晨,马念茹. 基于计算机仿真技术的混合介质电特性研究 [J]. *计算机技术与发展*, 2020, 30(6): 177-180.
- [11] 吴裕功,沈洪亮,赵选贺,等. 两相复合介质等效介电常数的二维模拟计算 [J]. *哈尔滨理工大学学报*, 2002, 7(6): 24-26.
- [12] GAO L, GU J Z. Effective dielectric constant of a two-component material with shape distribution [J]. *Journal of Physics*, 2002, 35(3): 267-271.
- [13] LUO M, LIU C, PAN H P. Numerical simulation on dielectric enhancement of periodic composite media using a 3D finite difference method [J]. *The European Physical Journal Applied Physics*, 2010, 52(2): 138-144.
- [14] TUNCER E, SERDYUK Y V, GUBANSKI S M. Dielectric mixtures: electrical properties and modeling [J]. *IEEE Transactions on Dielectrics & Electrical*, 2002, 9(5): 809-827.
- [15] JI Jinzu, MA Yunpeng, WANG Yibo. Inclusion's distribution pattern's influence on mixture's effective permittivity in two dimension utilizing finite difference method (FDM) [J]. *Optik*, 2020, 200(5): 163384-1-163384-8.
- [16] GUO C, MAVKO G. Spatial variability of electric field implied by common dielectric effective medium models [J]. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 2020, 58(6): 4424-4435.