

ЭФФЕКТИВНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ПРЯМОУГОЛЬНОГО И ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ЗАМОЩЕНИЙ ПЛОСКОСТИ

Л. Ю. Бараш, И. М. Халатников*

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
Научный центр Российской академии наук в Черноголовке
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 11 декабря 2014 г.

Эффективная проводимость двумерных периодических замощений плоскости многоугольниками найдена как в рамках теории возмущений, так и численно. Получены правила построения диаграмм теории возмущений для эффективной проводимости замощений плоскости при использовании косоугольных координат. Проведены расчеты для трехцветного гексагонального замощения плоскости. Представлен численный метод, позволяющий определить эффективную проводимость с высокой точностью как в области применимости теории возмущений, так и в случаях, когда проводимости компонент существенно различны. Для малых различий между проводимостями компонент подход теории возмущений согласуется с численными результатами.

DOI: 10.7868/S0044451015080088

1. ВВЕДЕНИЕ

Теории эффективной проводимости гетерогенных систем и композитов посвящена обширная литература (см., например, [1–3]). В ранних теоретических работах по теории проводимости макроскопически неупорядоченных сред были рассмотрены слабонеоднородные среды и простейшие системы с малой концентрацией включений сферической формы и предложены приближенные аналитические подходы к описанию их свойств [4–6]. Позже интерес к таким системам возростал, в частности, в связи с изучением фазового перехода металл–диэлектрик по концентрации включений [7]. В связи с развитием нанотехнологий в последние десять лет в литературе особое внимание уделялось эффективной проводимости композитных материалов с углеродными нанотрубками, с графеновыми нанолитами, а также эффективной теплопроводности коллоидных наножидкостей и ряду других задач [8–10].

Задаче о проводимости двумерных композитов в литературе также уделяется большое внимание. Для проводимости двумерных бинарных систем был получен ряд точных аналитических результатов, например, соотношение взаимности [11–16]. Из соот-

ношения взаимности следует, что для случайно-неоднородной двумерной среды с равными концентрациями компонент (а также для периодической системы со структурой шахматной доски) эффективная проводимость равна среднему геометрическому из проводимостей компонент. Двумерные случайные системы и периодические решетки относятся к одному классу универсальности вблизи точки фазового перехода [12, 17]. Эффективная проводимость ряда двумерных двоякопериодических систем, в основном с диэлектрическими или идеально проводящими включениями, была найдена аналитически [3]. Для структуры шахматной доски известна точная зависимость эффективной проводимости от отношения проводимостей композитов $h = \sigma_1/\sigma_2$ (здесь $\sigma_{1,2}$ — проводимости компонент композита), а также асимптотика электрического поля рядом с углами решетки, приводящая к нарушению линейного режима протекания тока при небольших значениях h [12, 14, 17–19].

В настоящей работе развиваются два подхода к изучению эффективной проводимости двумерных композитов. Первый из них использует теорию возмущений по параметру $1 - h$ и базируется на построенной в работе [20] диаграммной технике, обзор которой приведен в разд. 2. В разд. 3 получены правила построения диаграмм теории возмущений для эффективной проводимости замощений плоскости при

*E-mail: barash@itp.ac.ru

использовании косоугольных координат. С использованием новых правил в разд. 4 проведены расчеты для трехцветного гексагонального замощения плоскости. В разд. 5 представлен второй рассматриваемый подход: численный метод для получения эффективной проводимости двумерных замощений плоскости многоугольниками. Для периодических структур используется сеточный метод с релаксацией для решения уравнения Лапласа с соответствующими условиями шивки на границах между областями компонент композита и с соответствующими периодическими граничными условиями. Метод позволяет определить эффективную проводимость с высокой точностью как в области применимости теории возмущений, так и в случаях, когда проводимости компонент существенно различны. В разд. 6 проведены тестирование развитого подхода для периодических замощений плоскости с двухцветными и трехцветными раскрасками и сравнение с аналитическими результатами.

Закон Ома для локально-изотропной среды имеет вид

$$\mathbf{j} = -\sigma \nabla \varphi.$$

Для стационарного распределения токов имеет место уравнение непрерывности

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

Следовательно,

$$\Delta \varphi + \nabla \ln \sigma \cdot \nabla \varphi = 0.$$

Представим потенциал φ в виде

$$\varphi = -\mathcal{E} \cdot \mathbf{r} + \psi(x, y),$$

где среднее поле $\mathcal{E} = -\langle \nabla \varphi \rangle$, т.е. $\langle \nabla \psi \rangle = 0$. Угловые скобки обозначают здесь усреднение по всей плоскости. Итак, получаем уравнение для величины $\psi(x, y)$:

$$\Delta \psi + \nabla \ln \sigma \cdot (-\mathcal{E} + \nabla \psi) = 0. \quad (1)$$

Если распределение проводимости в пространстве в среднем изотропно, то эффективная проводимость σ_{eff} является скаляром и определяется соотношением $\mathbf{J} = \sigma_{eff} \mathcal{E}$, где $\mathbf{J} = \langle \mathbf{j} \rangle$. Зная функцию $\psi(x, y)$, можно определить эффективную проводимость, используя соотношение

$$\sigma_{eff} \mathcal{E} = \langle \mathbf{j} \rangle = \langle \sigma \rangle \mathcal{E} - \langle \sigma \nabla \psi \rangle. \quad (2)$$

2. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Приведем краткий обзор теории возмущений для эффективной проводимости, построенной в работе [20]. При рассмотрении теории возмущений, считаем, что

$$\varphi = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + \psi_c(x, y),$$

где \mathbf{E} — среднее электрическое поле без учета влияния отклонений от средней проводимости, т.е. при $\sigma(x, y) = \langle \sigma(x, y) \rangle$. Далее полагаем

$$\langle \sigma(x, y) \rangle = 1, \quad \alpha(x, y) = \sigma(x, y) - 1.$$

Переходя в уравнении непрерывности к фурье-преобразованиям для малых величин α и ψ_c , получаем

$$k^2 \psi_{c, \mathbf{k}} = \left[\nabla \left(\alpha - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^3}{3} - \frac{\alpha^4}{4} + \dots \right) \cdot (-\mathbf{E} + \nabla \psi_c) \right]_{\mathbf{k}}. \quad (3)$$

Решая уравнение (3) итерациями по степеням малого параметра α , получаем разложение основных величин по теории возмущений:

$$\sigma_{eff, c} = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_{eff, c}^{(n)}, \quad \psi_c = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_c^{(n)}.$$

При этом

$$\nabla \psi_c^{(0)} = (i \mathbf{k} \psi_{c, \mathbf{k}}^{(0)})_{\mathbf{k} \rightarrow 0} = -\mathbf{E}, \quad \sigma_{eff, c}^{(0)} = 1,$$

а каждый следующий порядок теории возмущений выражается через предыдущий по формулам

$$\psi_{c, \mathbf{k}}^{(n)} = - \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{k^2} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} \psi_{c, \mathbf{p}}^{(n-1)}, \quad (4)$$

$$\sigma_{eff, c}^{(n)} = -i \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}}{E^2} \psi_{c, \mathbf{k}}^{(n-1)} \alpha_{-\mathbf{k}}. \quad (5)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \sigma_{eff, c}^{(n)} &= (-1)^{n+1} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{n-1}} \frac{(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{E})(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2) \dots (\mathbf{k}_{n-2} \cdot \mathbf{k}_{n-1})(\mathbf{k}_{n-1} \cdot \mathbf{E})}{E^2 \mathbf{k}_1^2 \dots \mathbf{k}_{n-1}^2} \times \\ &\times \alpha_{\mathbf{k}_1} \alpha_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1} \dots \alpha_{\mathbf{k}_{n-1} - \mathbf{k}_{n-2}} \alpha_{-\mathbf{k}_{n-1}}. \quad (6) \end{aligned}$$

Выражение (6) описывает вклад всех связанных диаграмм в каждом порядке теории возмущений. Найденная таким образом величина ψ_c , вообще говоря, не будет удовлетворять условию $\langle \nabla \psi_c \rangle = 0$. Значит, среднее электрическое поле есть

$$\mathcal{E} = \langle \nabla (\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} - \psi_c(x, y)) \rangle = \mathbf{E} - \langle \nabla \psi_c \rangle,$$

а для эффективной проводимости имеем

$$\sigma_{eff}(\mathbf{E} - \langle \nabla \psi_c \rangle) = \mathbf{E} - \langle (1 + \alpha) \nabla \psi_c \rangle,$$

в то время как величина, найденная по формуле (6), определяется соотношением

$$\sigma_{eff,c} \mathbf{E} = \mathbf{E} - \langle \alpha \nabla \psi_c \rangle.$$

Следовательно,

$$\langle \nabla \psi_c \rangle = \frac{\sigma_{eff} - \sigma_{eff,c}}{\sigma_{eff} - 1} \mathbf{E} \quad (7)$$

и, в частности, вектор $\langle \nabla \psi_c \rangle$ направлен вдоль вектора \mathbf{E} . Заметим теперь, что в полярных координатах

$$\begin{aligned} \langle \nabla \psi_c \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} i \mathbf{k} \psi_{c,\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k}) = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} i \mathbf{k} \psi_{c,\mathbf{k}} \delta(k) dk d\varphi_{\mathbf{k}} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (i \mathbf{k} \psi_{c,\mathbf{k}})_{\mathbf{k} \rightarrow 0} d\varphi_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Поэтому, пользуясь соотношениями (4), (5) и

$$\int_0^{2\pi} \cos(t - t_1) \cos(t - t_2) dt = \pi \cos(t_1 - t_2),$$

получаем

$$\begin{aligned} \langle \nabla \psi_c^{(n)} \rangle &= -i \sum_{\mathbf{p}} \frac{\alpha_{-\mathbf{p}} \psi_{c,\mathbf{p}}^{(n-1)}}{2\pi} \int_0^{2\pi} (\mathbf{i}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{i}_{\mathbf{k}} d\varphi_{\mathbf{k}} = \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p}} \psi_{c,\mathbf{p}}^{(n-1)} \mathbf{p}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\sigma_{eff,c}^{(n)} \mathbf{E} = 2 \left(\langle \nabla \psi_c^{(n)} \rangle \cdot \mathbf{i}_{\mathbf{E}} \right) \mathbf{i}_{\mathbf{E}} = 2 \langle \nabla \psi_c^{(n)} \rangle, \quad (10)$$

где $\mathbf{i}_{\mathbf{k}}$ и $\mathbf{i}_{\mathbf{E}}$ — единичные векторы вдоль \mathbf{k} и \mathbf{E} . Следовательно,

$$\langle \nabla \psi_c \rangle = \frac{1}{2} (\sigma_{eff,c} - 1) \mathbf{E}.$$

Сопоставляя последнее выражение с (7), получаем

$$\sigma_{eff} - \sigma_{eff,c} = \frac{1}{2} (\sigma_{eff} - 1) (\sigma_{eff,c} - 1), \quad (11)$$

$$\sigma_{eff} = \frac{1 + \sigma_{eff,c}}{3 - \sigma_{eff,c}} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\sigma_{eff,c} - 1)^n}{2^{n-1}}. \quad (12)$$

Соотношение (12) в точности соответствует правилу теории возмущений, сформулированному в работе [20]: из суммы диаграмм n -го порядка следует вычесть все несвязные диаграммы, состоящие из двух звеньев, затем добавить несвязные диаграммы, состоящие из трех звеньев и т. д. Отметим, что вклад диаграммы, состоящей из n звеньев равен произведению вкладов этих звеньев, найденных по формуле (6), умноженному на $(-1/2)^{n-1}$. Можно считать, что промежутки между звеньями соответствуют пропагаторам с нулевым импульсом, каждый из которых равен 1/2. При применении этих правил формула Келлера – Дыхне была подтверждена в работе [20] до 10-го порядка.

Рассмотрим более детально формулу (6). Введем обозначения

$$T_i = \frac{1}{2} \frac{k_{ix}^2 + k_{iy}^2}{k_i^2}, \quad G_i = \frac{k_{ix} k_{iy}}{k_i^2}, \quad F_i = \frac{1}{2} \frac{k_{ix}^2 - k_{iy}^2}{k_i^2},$$

$$T_{ij} = k_{ix} k_{jx} + k_{iy} k_{jy}, \quad F_{ij} = k_{ix} k_{jx} - k_{iy} k_{jy},$$

$$G_{ij} = k_{ix} k_{jy} + k_{iy} k_{jx}, \quad H_{ij} = k_{ix} k_{jy} - k_{iy} k_{jx}.$$

Справедливы следующие тождества:

$$T_{i-1,i} T_{i,i+1} / k_i^2 = T_i T_{i-1,i+1} + G_i G_{i-1,i+1} + F_i F_{i-1,i+1}, \quad (13)$$

$$G_{i-1,i} T_{i,i+1} / k_i^2 = T_i G_{i-1,i+1} + G_i T_{i-1,i+1} - F_i H_{i-1,i+1}, \quad (14)$$

$$F_{i-1,i} T_{i,i+1} / k_i^2 = T_i F_{i-1,i+1} + G_i H_{i-1,i+1} + F_i T_{i-1,i+1}, \quad (15)$$

$$H_{i-1,i} T_{i,i+1} / k_i^2 = T_i H_{i-1,i+1} + G_i F_{i-1,i+1} - F_i G_{i-1,i+1}. \quad (16)$$

Отсюда следуют сформулированные в работе [20] правила о замене пропагаторов на F -, G - и T -пропагаторы, соответствующие правила знаков, а также правила о четности числа F - и G -пропагаторов.

Для анизотропного распределения $\alpha(x, y)$ необходимо рассматривать тензор эффективной проводимости $J_i = \sigma_{eff,i,j} \mathcal{E}_j$. Можно показать, что в этом случае правая часть формулы (6) определяет значение величины $E_i \sigma_{eff,c,i,j} E_j / E^2$, а вместо (11) будет справедливо выражение

$$\begin{aligned} E_i (\sigma_{eff,i,j} - \sigma_{eff,c,i,j}) E_j &= \\ &= \frac{1}{2} (\sigma_{eff,i,j} - 1) E_j (\sigma_{eff,c,i,k} - 1) E_k. \end{aligned}$$

Следовательно, рассмотрение теории возмущений для вектора \mathbf{E} , направленного вдоль оси x , позволяет определить значение $\sigma_{eff,x,x}$, а для вектора \mathbf{E} , направленного вдоль оси y , — значение $\sigma_{eff,y,y}$. Для определения тензора эффективной проводимости по теории возмущений удобно последовательно находить величины

$$\begin{aligned} \sigma_{eff,I} &= (\sigma_{eff,x,x} + \sigma_{eff,y,y})/2, \\ \sigma_{eff,A} &= (\sigma_{eff,x,x} - \sigma_{eff,y,y})/2, \quad \sigma_{eff,x,y}. \end{aligned}$$

3. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В КОСОУГОЛЬНЫХ КООРДИНАТАХ

В ряде случаев, например, для гексагонального замощения (см. разд. 4), нахождение эффективной проводимости при помощи теории возмущений, записанной в прямоугольных декартовых координатах, оказывается весьма громоздкой и трудновыполнимой процедурой. Использование косоугольных координат и соответствующим образом измененных правил диаграммной техники значительно упрощает решение таких задач. Обозначим через φ угол между ортами координатных осей x и y . Тогда скалярное произведение записывается в виде

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{t} = s_x t_x + s_y t_y + (s_x t_y + s_y t_x) \cos \varphi$$

и, в частности,

$$k_i^2 = k_{ix}^2 + k_{iy}^2 + 2k_{ix}k_{iy} \cos \varphi.$$

Введем теперь обозначения

$$\begin{aligned} \tilde{T}_i &= T_i + G_i \cos \varphi = \frac{1}{2}, \\ \tilde{G}_i &= G_i + T_i \cos \varphi = \frac{k_{ix}k_{iy} \sin^2 \varphi}{k_i^2} + \frac{\cos \varphi}{2}, \\ \tilde{F}_i &= F_i = \frac{1}{2} \frac{k_{ix}^2 - k_{iy}^2}{k_i^2}, \\ \tilde{T}_{ij} &= T_{ij} + G_{ij} \cos \varphi, \quad \tilde{G}_{ij} = G_{ij} + T_{ij} \cos \varphi, \\ \tilde{F}_{ij} &= F_{ij} \sin^2 \varphi, \quad \tilde{H}_{ij} = H_{ij} \sin^2 \varphi. \end{aligned}$$

Тогда справедливы тождества

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{i-1,i} \tilde{T}_{i,i+1} / k_i^2 &= \tilde{T}_i \tilde{T}_{i-1,i+1} + \tilde{G}_i \tilde{G}_{i-1,i+1} + \\ &+ \tilde{F}_i \tilde{F}_{i-1,i+1}, \quad (17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{i-1,i} \tilde{T}_{i,i+1} / k_i^2 &= \tilde{T}_i \tilde{G}_{i-1,i+1} + \tilde{G}_i \tilde{T}_{i-1,i+1} - \\ &- \tilde{F}_i \tilde{H}_{i-1,i+1}, \quad (18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i-1,i} \tilde{T}_{i,i+1} / k_i^2 &= \tilde{T}_i \tilde{F}_{i-1,i+1} + \tilde{G}_i \tilde{H}_{i-1,i+1} + \\ &+ \tilde{F}_i \tilde{T}_{i-1,i+1}, \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{i-1,i} \tilde{T}_{i,i+1} / k_i^2 &= \tilde{T}_i \tilde{H}_{i-1,i+1} + \tilde{G}_i \tilde{F}_{i-1,i+1} - \\ &- \tilde{F}_i \tilde{G}_{i-1,i+1}. \quad (20) \end{aligned}$$

Это позволяет использовать теперь обычные правила диаграммной техники. Обозначая $\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_n = \mathbf{E}$, получим

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{0,n} &= E^2, \quad \tilde{G}_{0,n} = (E_x^2 + E_y^2) \cos \varphi + 2E_x E_y, \\ \tilde{F}_{0,n} &= (E_x^2 - E_y^2) \sin^2 \varphi, \quad \tilde{H}_{0,n} = 0. \end{aligned}$$

Выбирая вектор \mathbf{E} параллельным оси x , имеем

$$\begin{aligned} E_x &= E, \quad E_y = 0, \quad \tilde{T}_{0,n} = E^2, \\ \tilde{G}_{0,n} &= E^2 \cos \varphi, \quad \tilde{F}_{0,n} = E^2 \sin^2 \varphi. \end{aligned}$$

Выбирая вектор \mathbf{E} ортогональным оси x , имеем

$$\begin{aligned} E_x &= -E \operatorname{ctg} \varphi, \quad E_y = E / \sin \varphi, \\ \tilde{T}_{0,n} &= E^2, \quad \tilde{G}_{0,n} = -E^2 \cos \varphi, \quad \tilde{F}_{0,n} = -E^2 \sin^2 \varphi. \end{aligned}$$

Таким образом, для изотропной части тензора эффективной проводимости получаем

$$\tilde{T}_{0,n} = E^2, \quad \tilde{G}_{0,n} = \tilde{F}_{0,n} = \tilde{H}_{0,n} = 0.$$

В частности, во втором порядке теории возмущений,

$$\sigma_{eff,I}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}. \quad (21)$$

4. ТРЕХЦВЕТНОЕ ГЕКСАГОНАЛЬНОЕ ЗАМОЩЕНИЕ

Пусть $\alpha(x, y)$ — периодическая функция с периодами 2π , которая в области $0 \leq x < 2\pi$, $0 \leq y < 2\pi$ определяется следующим образом:

$$\alpha(x, y) = \alpha_1,$$

если $x + y < 2\pi/3$ или $x + y > 10\pi/3$, или $x > 4\pi/3$, $y < 2\pi/3$, или $x < 2\pi/3$, $y > 4\pi/3$,

$$\alpha(x, y) = \alpha_3,$$

если $x + y > 2\pi$ и $\alpha(x, y) \neq \alpha_1$,

$$\alpha(x, y) = \alpha_2,$$

если $\alpha(x, y) \neq \alpha_1$ и $\alpha(x, y) \neq \alpha_3$ (рис. 1). Предполагаем также выполнение условия

$$\langle \alpha(x, y) \rangle = (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) / 3 = 0.$$

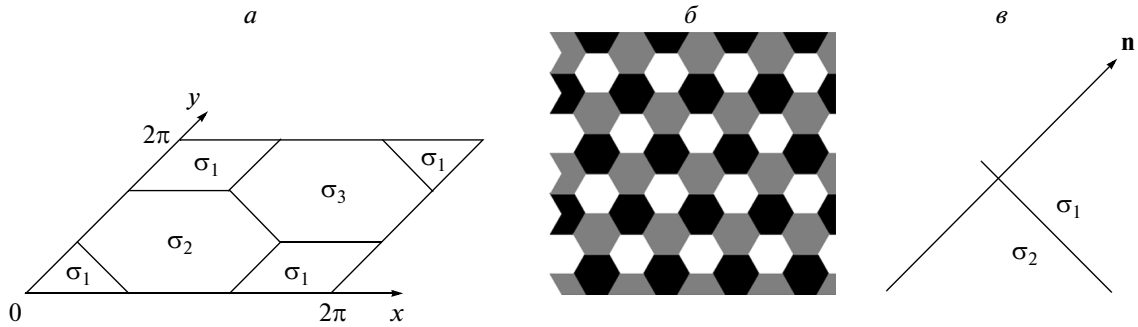


Рис. 1. а, б) Трехцветное гексагональное замощение. в) Сшивка величины ψ на границе между областями с проводимостями σ_1 и σ_2

Тогда элементарная ячейка является ромбом с углом $\varphi = \pi/3$, равным углу между координатными осями x и y . Фурье-компоненты в косоугольных координатах имеют вид

$$\alpha_{k_x, k_y} = \beta_{k_x + k_y \cos \varphi, k_y + k_x \cos \varphi},$$

где

$$\beta_{n,m} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \alpha(x, y) e^{-i(nx+my)} dx dy,$$

а числа $n = k_x + k_y \cos \varphi$ и $m = k_y + k_x \cos \varphi$ — целые. Итак, фурье-коэффициенты для трехцветного гексагонального замощения имеют вид

$$\beta_{3n,3m} = \beta_{3n+2,3m+1} = \beta_{3n+1,3m+2} = 0, \quad (22)$$

$$\beta_{3n+1,3m+1} = \frac{3 [2\alpha_1 + (i\sqrt{3}-1)\alpha_2 - (1+i\sqrt{3})\alpha_3]}{8(3m+1)(3n+1)\pi^2} + \frac{[2\sqrt{3}\alpha_1 - (\sqrt{3}-3i)\alpha_2 - (\sqrt{3}+3i)\alpha_3] \delta_{n,m}}{12\pi(3n+1)}, \quad (23)$$

$$\beta_{3n+2,3m+2} = \frac{3 [2\alpha_1 - (i\sqrt{3}+1)\alpha_2 + (i\sqrt{3}-1)\alpha_3]}{8(3m+2)(3n+2)\pi^2} + \frac{[-2\sqrt{3}\alpha_1 + (\sqrt{3}+3i)\alpha_2 + (\sqrt{3}-3i)\alpha_3] \delta_{n,m}}{12\pi(3n+2)}, \quad (24)$$

$$\beta_{3m,3n+1} = \beta_{3n+1,3m} = \beta_{3n+1,3(n-m)+1}^*, \quad (25)$$

$$\beta_{3m,3n+2} = \beta_{3n+2,3m} = \beta_{3n+2,3(n-m)+2}^*.$$

Обозначим $A = -3(\alpha_1\alpha_2 + \alpha_1\alpha_3 + \alpha_2\alpha_3)$. Тогда во втором порядке теории возмущений имеем

$$\sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \beta_{3n+1,3m} \beta_{-3n-1,-3m} = \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \beta_{3n+2,3m} \beta_{-3n-2,-3m} = \frac{A}{27}, \quad (26)$$

$$\sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \beta_{3n,3m+1} \beta_{-3n,-3m-1} = \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \beta_{3n,3m+2} \beta_{-3n,-3m-2} = \frac{A}{27}, \quad (27)$$

$$\sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \beta_{3n+1,3m+1} \beta_{-3n-1,-3m-1} = \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \beta_{3n+2,3m+2} \beta_{-3n-2,-3m-2} = \frac{A}{27}, \quad (28)$$

$$\sigma_{eff,I}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \beta_{n,m} \beta_{-n,-m} = -\frac{A}{9} = -\frac{1}{6} (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2). \quad (29)$$

Это совпадает с общим выражением для эффективной проводимости двумерной изотропной слабонеоднородной среды [5, § 9],

$$\sigma_{eff,I} = \langle \sigma \rangle \left(1 - \frac{1}{2} \frac{(\sigma - \langle \sigma \rangle)^2}{\langle \sigma \rangle^2} \right). \quad (30)$$

5. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ ПРОВОДИМОСТИ

Для задачи с периодическим замощением плоскости, уравнение (1) сводится к уравнению Лапласа $\Delta\psi = 0$ в каждой области постоянных значений σ с соответствующими условиями сшивки между областями. При рассмотрении численного метода используем прямоугольные декартовы координаты x и y . Условие $\langle \nabla\psi \rangle = 0$ будет выполняться, поскольку найденная численно величина $\psi(x, y)$ будет периодической функцией обеих координат. Для численного

нахождения эффективной проводимости достаточно найти величину $\langle \nabla \psi \rangle$ в каждой области, где величина σ постоянна, и применить соотношение (2). Выведем условие сшивки для случая прямолинейной границы между областями (см. рис. 1б). Без ограничения общности, граница проходит по линии $n = 0$, рядом с которой $\sigma(n) = \sigma_2 + (\sigma_1 - \sigma_2)\theta(n)$, где $\theta(n)$ — функция Хевисайда. Тогда $\partial\sigma/\partial n = (\sigma_1 - \sigma_2)\delta(n)$. Следовательно,

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left[\Delta\psi + \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)\delta(n)}{\sigma(n)} \left(-\mathcal{E}_n + \frac{\partial\psi}{\partial n} \right) \right] dn = 0, \quad (31)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial n} \Big|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} + \frac{2(\sigma_1 - \sigma_2)}{\sigma_1 + \sigma_2} \times \left\{ -\mathcal{E}_n + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial n} \right)_{+0} + \left(\frac{\partial\psi}{\partial n} \right)_{-0} \right] \right\} = 0, \quad (32)$$

$$\sigma_1 \left(\frac{\partial\psi}{\partial n} \right)_{+0} - \sigma_2 \left(\frac{\partial\psi}{\partial n} \right)_{-0} = (\sigma_1 - \sigma_2)\mathcal{E}_n. \quad (33)$$

Таким образом, на границе между областями, изображенными на рис. 1б, величина $\psi(x, y)$ непрерывна, а $\partial\psi/\partial n$ имеет скачок, определяемый формулой (33). Для решения уравнения (1) применим в каждой области сеточный метод с релаксацией, с соответствующими условиями сшивки на границах между областями и с соответствующими периодическими граничными условиями. В каждой области имеем уравнение

$$\frac{1}{\kappa} \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}, \quad (34)$$

где зависящая от времени величина $\psi = \psi(x, y, t)$ стремится к искомой функции $\psi(x, y)$, а κ — постоянный параметр. Разностные представления для вторых производных на равномерной сетке имеют вид

$$\hat{\delta}_x^2\psi_{i,j} = \frac{1}{h_x^2}(\psi_{i-1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i+1,j}), \quad (35)$$

$$\hat{\delta}_y^2\psi_{i,j} = \frac{1}{h_y^2}(\psi_{i,j-1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j+1}), \quad (36)$$

где h_x и h_y — шаги сетки в направлениях x и y . Как известно, неявный метод с переменной направлений для решения уравнения состоит из двух частей.

На первом шаге метода производная по x учитывается неявно, и разностным представлением уравнения (34) является

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+1/2} - \psi_{i,j}^n}{\kappa h_t/2} = \hat{\delta}_x^2\psi_{i,j}^{n+1/2} + \hat{\delta}_y^2\psi_{i,j}^n. \quad (37)$$

Это выражение можно переписать в виде

$$c'_i\psi_{i-1,j}^{n+1/2} + \left(d'_i - \frac{2}{\kappa h_t} \right) \psi_{i,j}^{n+1/2} + e'_i\psi_{i+1,j}^{n+1/2} = b'_i. \quad (38)$$

Здесь

$$c'_i = e'_i = \frac{1}{h_x^2}, \quad d'_i = -\frac{2}{h_x^2}, \quad c''_j = e''_j = -\frac{1}{h_y^2},$$

$$d''_j = \frac{2}{h_y^2}, \quad b'_i = c''_j\psi_{i,j-1}^n + \left(d''_j - \frac{2}{\kappa h_t} \right) \psi_{i,j}^n + e''_j\psi_{i,j+1}^n.$$

Правая часть выражения (38) известна, поскольку значение ψ на шаге n известно. На границах между компонентами композита коэффициенты c'_i , d'_i , e'_i и b'_i вычисляются отдельно при помощи применения условия сшивки (33) и с использованием значения ψ на шаге n . Для каждого j применяем прогонку для решения системы уравнений (38) и получаем ψ на шаге $n + 1/2$.

На втором шаге метода производная по y берется неявно и разностным представлением для уравнения (34) является

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+1} - \psi_{i,j}^{n+1/2}}{\kappa h_t/2} = \hat{\delta}_x^2\psi_{i,j}^{n+1/2} + \hat{\delta}_y^2\psi_{i,j}^{n+1}. \quad (39)$$

Это выражение можно переписать в виде

$$c''_j\psi_{i,j-1}^{n+1} + \left(d''_j + \frac{2}{\kappa h_t} \right) \psi_{i,j}^{n+1} + e''_j\psi_{i,j+1}^{n+1} = b''_j, \quad (40)$$

где известно значение

$$b''_j = c'_i\psi_{i-1,j}^{n+1/2} + \left(d'_i + \frac{2}{\kappa h_t} \right) \psi_{i,j}^{n+1/2} + e'_i\psi_{i+1,j}^{n+1/2},$$

поскольку ψ на шаге $n + 1/2$ известно. На границах между компонентами композита коэффициенты c''_j , d''_j , e''_j и b''_j , входящие в линейное уравнение (40), вычисляются отдельно при помощи применения условия сшивки (33). Для каждого i применяем прогонку для решения системы уравнений (40) и получаем ψ на шаге $n + 1$.

Для периодических граничных условий вместо трехдиагональной матрицы \mathcal{A} линейного уравнения, решаемого методом прогонки, имеем матрицу вида

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} d_1 & e_1 & 0 & 0 & \dots & c_1 \\ c_2 & d_2 & e_2 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & c_{n-1} & d_{n-1} & e_{n-1} \\ e_n & \dots & 0 & 0 & c_n & d_n \end{pmatrix}. \quad (41)$$

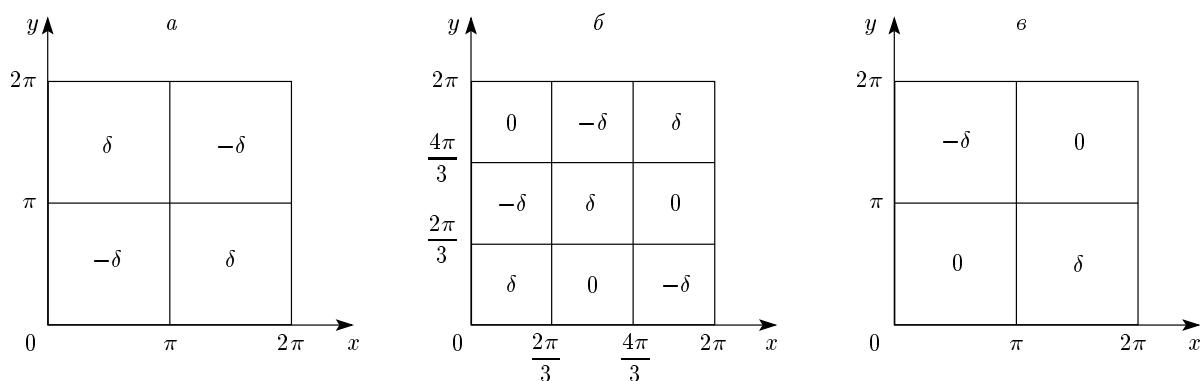


Рис. 2. Замощения плоскости, рассмотренные в работе [20]. Изображено распределение $\alpha(x, y)$, здесь δ — малая величина, не зависящая от координат

Как показано в [21], метод решения такой системы уравнений сводится к обычному алгоритму прогонки, примененному для усеченной матрицы

$$A^c = \begin{pmatrix} d_1 & e_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ c_2 & d_2 & e_2 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & c_{n-2} & d_{n-2} & e_{n-2} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & c_{n-1} & d_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (42)$$

6. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

На рис. 2 изображены замощения плоскости, рассмотренные в работе [20]. Для двумерной двухцветной шахматной доски (рис. 2а) результат численного определения эффективной проводимости совпадает с высокой точностью с эффективной проводимостью, вычисленной по формуле Келлера–Дыхне. Это проверено численно для многих пар значений σ_1, σ_2 . Для двумерной трехцветной шахматной доски (рис. 2б, в) результаты вычислений эффективной проводимости изображены на рис. 3. Сплошная линия показывает эффективную проводимость, вычисленную в работе [20] в шестом (рис. 3а) и четвертом (рис. 3б) порядках теории возмущений. Точки соответствуют эффективной проводимости, вычисленной численно. Штриховая линия на рис. 3б показывает эффективную проводимость, полученную при помощи теории среднего поля Брюгеммана, предполагающей круглую форму включений. Из рисунка видно, что четвертый порядок теории возмущений в этом случае более точно описывает эффективную проводимость, чем формула Брюгеммана (см. также обсуждение в работе [20]). При малых различиях между проводимостями компонент резуль-

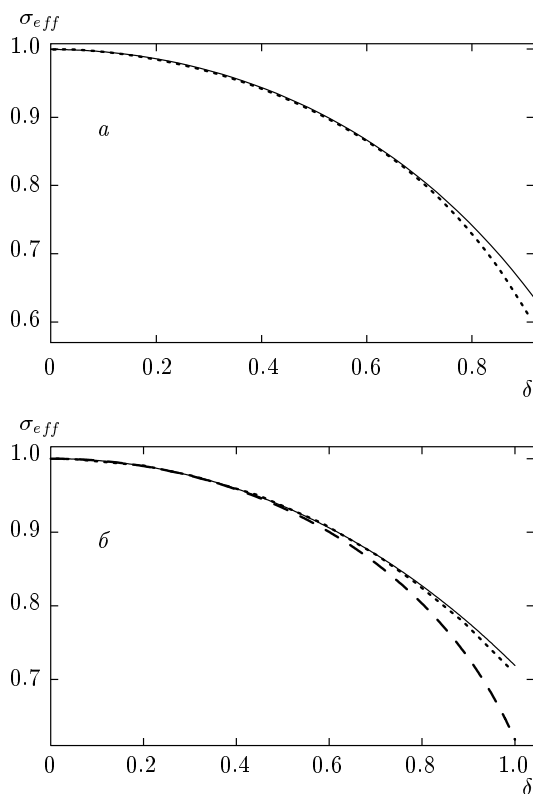


Рис. 3. Эффективная проводимость прямоугольных трехцветных замощений плоскости, изображенных (а) на рис. 2б и (б) на рис. 2в, в зависимости от параметра δ : сплошные линии — результаты вычислений по теории возмущений для малого параметра δ ; точки — численные вычисления. Штриховая линия — вычисления по теории среднего поля Брюгеммана

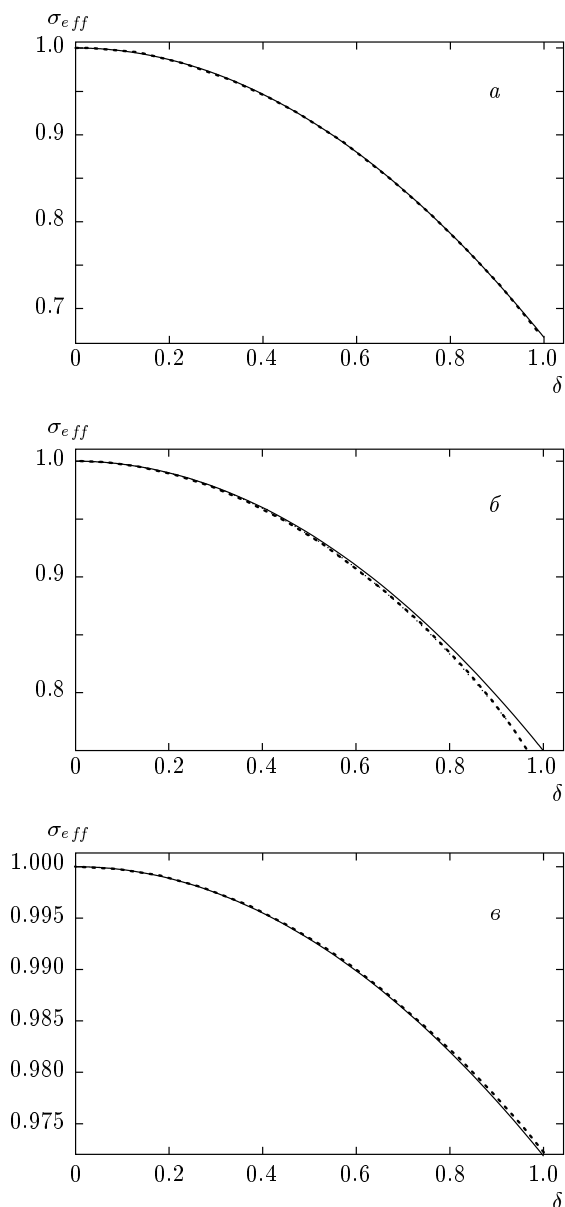


Рис. 4. Эффективная проводимость гексагонального замощения плоскости, изображенного на рис. 1, в зависимости от параметра δ , где $\sigma_1 = 1 + \delta$, $\sigma_2 = 1 - \delta$, $\sigma_3 = 1$ (а); $\sigma_1 = 1 + \delta/2$, $\sigma_2 = 1 - \delta$, $\sigma_3 = 1 + \delta/2$ (б); $\sigma_1 = 1 + \delta/3$, $\sigma_2 = 1 - 2\delta/15$, $\sigma_3 = 1 - \delta/5$ (в). Сплошные линии — результаты вычислений по теории возмущений для малого параметра δ , пунктирные — численные вычисления

тат численного определения эффективной проводимости совпадает с результатами работы [20].

На рис. 4 приведена зависимость изотропной части эффективной проводимости гексагонального замощения, изображенного на рис. 1, в зависимости от параметра δ . Сплошная линия показывает эф-

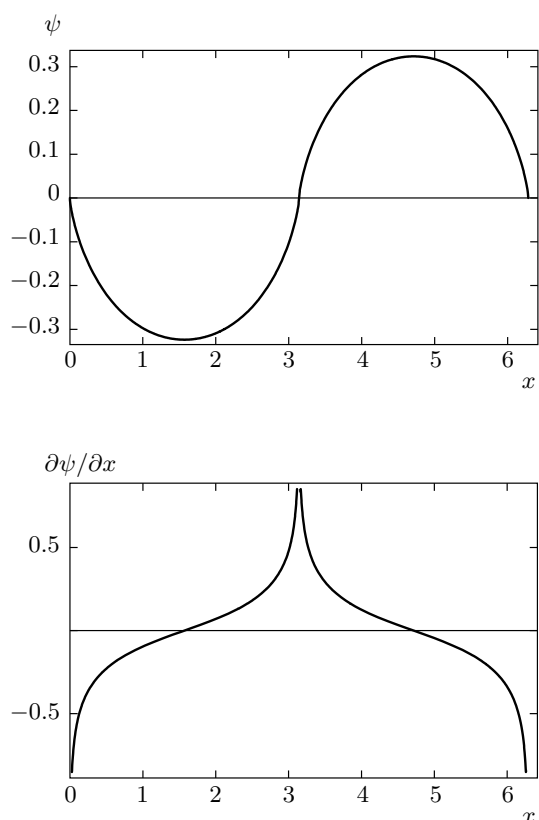


Рис. 5. Вычисленные значения величин ψ и $\partial\psi/\partial x$ вдоль горизонтальной границы для структуры шахматной доски с $\sigma_1 = 1.3$, $\sigma_2 = 0.7$ и периодом 2π

фективную проводимость, вычисленную при помощи формулы (29), пунктирная — вычисленную численно. Отметим хорошее согласие между вторым порядком теории возмущений и более точным численным расчетом даже в области $\delta \approx 1$, что, вообще говоря, могло быть и не выполнено.

Компьютерное моделирование подтверждает интегрируемую расходимость в локальном электрическом поле вблизи углов границ областей со степенной зависимостью, приведенной в работе [18]. На рис. 5 приведены графики величин ψ и $\partial\psi/\partial x$ вдоль горизонтальной границы, которые иллюстрируют расходимость локального электрического поля вблизи углов границ структуры двухцветной шахматной доски с $\sigma_1 = 1.3$, $\sigma_2 = 0.7$ и периодом 2π . Расходимости не влияют на построение теории возмущений для эффективной проводимости по малому параметру $(\sigma_2 - \sigma_1)/\sigma_2 = 1 - h$, поскольку они интегрируемы и показатель степени $(2/\pi) \arctg[(1 - h)/2\sqrt{h}]$ в этом случае мал. В силу интегрируемости особенностей локального поля расходимость не возникает в самой величине ψ , определяемой численно.

Проведенные расчеты показывают, что развитый метод позволяет с высокой точностью описать свойства периодических замощений плоскости со структурой шахматной доски с двухцветными и трехцветными раскрасками, а также гексагонального замощения плоскости.

Результаты, представленные в разд. 2, 5, 6, поддержаны Российским научным фондом (грант № 14-21-00158). Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова [22].

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*, Springer (2002).
2. D. S. Lia, G. Sahelia, M. Khaleelb, and H. Garmestani, *Comput. Mater. Sci.* **38**, 45 (2006).
3. Ю. П. Емец, *Электрические характеристики композиционных материалов с регулярной структурой*, Наукова думка, Киев (1986).
4. Lord Rayleigh, *Phil. Mag. Ser. 5*, **34**, 481 (1892).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).
6. S. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 574 (1973).
7. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, *Phys. Stat. Sol. (b)* **76**, 475 (1976).
8. S. H. Xie, Y. Y. Liu, and J. Y. Li, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 243121 (2008).
9. A. Bagchi and S. Nomura, *Composites Sci. and Technol.* **66**, 1703 (2006).
10. R. Prasher, W. Evans, P. Meakin et al., *Appl. Phys. Lett.* **89**, 143119 (2006).
11. J. V. Keller, *J. Math. Phys.* **5**, 548 (1964).
12. А. М. Дыхне, *ЖЭТФ* **59**, 110 (1970).
13. В. Г. Марихин, *Письма в ЖЭТФ* **71**, 391 (2000).
14. Ю. Н. Овчинников, А. М. Дюгаев, *ЖЭТФ* **117**, 1013 (2000).
15. Ю. Н. Овчинников, И. А. Лукьянчук, *ЖЭТФ* **121**, 239 (2002).
16. Ю. Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **125**, 181 (2004).
17. Ю. П. Емец, *ЖЭТФ* **96**, 701 (1989).
18. А. М. Сатанин, В. В. Скузоваткин, С. В. Хорьков, *Письма в ЖЭТФ* **64**, 495 (1996).
19. А. М. Сатанин, В. В. Скузоваткин, С. В. Хорьков, *ЖЭТФ* **112**, 643 (1997).
20. I. M. Khalatnikov and A. Yu. Kamenshchik, *ЖЭТФ* **118**, 1456 (2000).
21. G. E. Karniadakis and R. M. Kirby II, *Parallel Scientific Computing in C++ and MPI*, Cambridge (2003).
22. В. Воеводин, С. Жуматий, С. Соболев и др., *Открытые системы* **7**, 36 (2012).