

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОВОДИМОСТИ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ РЭЛЕЯ ПРИ КРИТИЧЕСКОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ: СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ МУЛЬТИПОЛЬНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ И АНАЛИТИЧЕСКОГО БИНАРНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Б. Я. Балагуров*, О. А. Васильев**

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 12 ноября 2024 г.,
после переработки 12 ноября 2024 г.
Принята к публикации 16 ноября 2024 г.

Проведено исследование эффективной проводимости двумерной модели Рэля — тонкой пленки с периодическим расположением включений круговой формы — численным методом мультипольного разложения. Как сама проводимость, так и производные по ее аргументам определены при фиксированной концентрации, равной критической, практически во всем диапазоне $h \leq 1$, где h — отношение проводимостей компонент. Показано, что в критической области (окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик) вычисленные значения проводимости и ее производных совпадают с соответствующими результатами, полученными в рамках бинарного приближения. Это означает, что найденные ранее аналитические результаты с приемлемой точностью описывают эффективную проводимость рассмотренной модели в критической области.

DOI: 10.31857/S0044451025040121

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение процессов переноса в композиционных материалах является актуальной задачей теории и эксперимента. В то же время попытка вычисления эффективных характеристик подобных сред (проводимости, теплопроводности, диэлектрической проницаемости и т.д.) наталкивается на известные принципиальные трудности в случае неупорядоченных композитов. Несколько лучше ситуация для систем с регулярной структурой. Примером такого композита может служить двумерная модель Рэля [1] — изотропной пленки с периодическим распределением круговых включений. В работах [2, 3] (см. также [4]) для этой модели разными методами дана последовательная схема вычисления ее проводимости с помощью мультипольного разложения. В результате исходная задача сведена к решению бесконечной системы линейных уравнений для некото-

рых величин ξ_n ($n = 0, 1, 2, \dots$), через которые вычисляется как сама эффективная проводимость модели, так и ее производные при произвольных концентрации и отношении проводимостей компонент.

Изучение двумерной модели Рэля интересно также с общезначимой точки зрения, так как в ней возможен фазовый переход типа металл–диэлектрик. В работах [5–7] поведение эффективной проводимости этой модели в критической области (в окрестности точки фазового перехода) дано в рамках бинарного приближения. Представляется необходимым проверить аналитические результаты, полученные в [5–7], прямым расчетом проводимости модели методом мультипольного разложения [2, 3].

В настоящей работе в рамках мультипольного разложения численными методами рассмотрены эффективные характеристики модели при фиксированной концентрации, соответствующей соприкосновению соседних включений, практически во всем интервале изменения отношения проводимостей компонент $h \leq 1$. При применении метода работ [2, 3] необходимо выбрать конечную подсистему. Выбор размера подсистемы N диктуется величиной параметра h , при котором производят-

* E-mail: byabalagurov@mail.ru

** E-mail: ol.vasilyev@mail.ru

ся соответствующие вычисления. Так, в интервале $10^{-2} \leq h \leq 1$ для определения эффективных характеристик модели с точностью до 1% достаточно использовать $N = 40$. В диапазоне $10^{-8} \leq h \leq 10^{-2}$, включающем критическую область, использовалась подсистема размером до $N = 200000$. Проведенный в настоящей работе компьютерный эксперимент показал, что в интервале $10^{-6} \leq h \leq 10^{-3}$ данные численного счета с разумной точностью согласуются с аналитическими результатами работы [7], что подтверждает адекватность выбранного в [5–7] метода бинарного приближения.

2. МУЛЬТИПОЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ДЛЯ ЗАДАЧИ РЭЛЕЯ

Двумерная модель Рэлея представляет собой матрицу — изотропную пленку проводимости σ_1 с включениями круговой формы радиуса R и проводимости σ_2 . Центры включений расположены в узлах квадратной решетки периода $2a$. Такая система электрически изотропна, и ее эффективная проводимость является скалярной величиной $\sigma_e = \sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2)$, где p — концентрация (доля занимаемой площади) первой компоненты — матрицы. Для дальнейшего удобно ввести безразмерную эффективную проводимость $f(p, h)$ по соотношению

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1 f(p, h). \tag{1}$$

Здесь

$$p = 1 - c, \quad c = \frac{\pi R^2}{4a^2}, \quad h = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}, \tag{2}$$

где c — концентрация второй компоненты — включений ($0 \leq c \leq \pi/4$).

Стандартный подход к решению задачи о проводимости бинарного композита состоит в введении потенциалов для обеих компонент с выполнением соответствующих граничных условий. Решения уравнения Лапласа в полярных координатах для двумерного комплексного потенциала записывается в виде ряда. Дипольная часть потенциала вычисляется суммированием по двумерной решетке выражения с дзета-функцией Вейерштрасса $\zeta(z)$. Дифференцируя это выражение, мы можем вычислить вклад в потенциал старших мультиполей. Применение подобной регулярной процедуры мультипольного разложения к рассматриваемой модели сводит задачу определения эффективной проводимости к

решению бесконечной системы линейных уравнений для величин $\xi_n (n = 0, 1, 2, \dots)$ [2, 3]:

$$\xi_n + \sum_{m=0}^{\infty} S_{nm} \xi_m = \delta_{n0}, \tag{3}$$

где δ_{n0} — символ Кронекера. Отсюда при $n = 0$ и $n \neq 0$ следует

$$\xi_0 + \sum_{m=1}^{\infty} S_{0m} \xi_m = 1, \tag{4}$$

$$\xi_n + \sum_{m=0}^{\infty} S_{nm} \xi_m = 0, \quad n = 1, 2, \dots \tag{5}$$

В формуле (4) учтено, что $S_{00} = 0$. В формулах (3)–(5) матрица S_{nm} имеет вид

$$S_{nm} = \varkappa \left(\frac{R^2}{a^2} \right)^{n+m+1} Q_{nm}, \tag{6}$$

где

$$\varkappa = \frac{1-h}{1+h}$$

и

$$Q_{nm} = \frac{(2n+2m)! c_{n+m+1}}{\sqrt{(2n)!(2n+1)!(2m)!(2m+1)!}}. \tag{7}$$

Здесь c_{n+m+1} — коэффициенты в разложении функции Вейерштрасса $\zeta(z)$ в окрестности точки $z = 0$ [8]; отношение радиуса включения к полупериоду структуры $R/a = 1$ в критической точке. Если для рассматриваемой квадратной решетки (лемнискатный случай) коэффициенты c_n с нечетным индексом равны нулю, то величина S_{nm} отлична от нуля только в том случае, когда индексы m и n имеют разную четность. При этом

$$c_2 = \frac{g_2}{20}, \quad c_4 = \frac{g_2^2}{3 \cdot 20^2}, \dots, \tag{8}$$

где $g_2 = [K(1/\sqrt{2})]^4$ — инвариант функции Вейерштрасса (для лемнискатного случая $g_3 = 0$) и $K(1/\sqrt{2}) = 1.85407\dots$ — полный эллиптический интеграл первого рода. А остальные коэффициенты c_{2k} при $k > 2$ могут быть найдены из рекуррентного соотношения по следующей формуле [8]:

$$c_{2k} = \frac{3}{(4k+1)(2k-3)} \sum_{m+1}^{k-1} c_{2m} c_{2k-2m}. \tag{9}$$

Для коэффициентов S_{nm} имеем соответственно

$$\begin{aligned} S_{01} &= \frac{c_2 \varkappa}{\sqrt{3}} \left(\frac{R}{a} \right)^4, \\ S_{03} &= \frac{c_4 \varkappa}{\sqrt{7}} \left(\frac{R}{a} \right)^8, \dots \end{aligned} \tag{10}$$

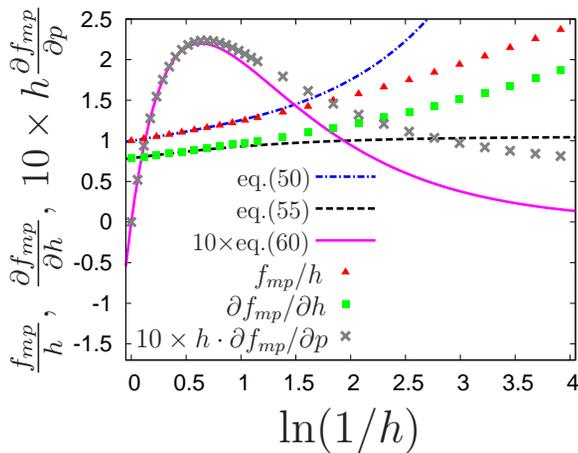


Рис. 1. Безразмерная проводимость из мультипольного приближения f_{mp} , деленная на h (\blacktriangle), производная безразмерной проводимости $\frac{\partial f_{mp}}{\partial h}$ (\blacksquare) и производная безразмерной проводимости $10h \frac{\partial f_{mp}}{\partial p}$ (\times), умноженная на 10, как функции параметра $\ln(1/h)$ на интервале $[0, 4]$ для системы размером $N = 1000$ в сравнении с результатами разложения в ряд (50), (55) и (60), изображенными штрихпунктирной, штриховой и сплошной линиями

Решение уравнений (4), (5) позволяет в рамках мультипольного разложения найти безразмерную эффективную проводимость по формуле

$$f_{mp}(p, h) = \frac{1 - c\kappa\xi_0}{1 + c\kappa\xi_0}. \quad (11)$$

Здесь и далее индекс « mp » обозначает результат вычисления при помощи мультипольного разложения. Более полное представление о свойствах модели дают вычисления, в ходе которых исследуется не только сама проводимость $f_{mp}(p, h)$, но и ее производные по аргументам p и h . Производные удельной проводимости f по параметрам h и p вычисляются по формулам (12) и (13) соответственно (вывод этих формул для мультипольного разложения приведен в Приложении А):

$$\frac{\partial f_{mp}}{\partial h}(p, h) = \frac{4c}{(1+h)^2} \frac{1}{(1+\xi_0 c\kappa)^2} \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k^2, \quad (12)$$

$$\frac{\partial f_{mp}}{\partial p}(p, h) = \frac{2\kappa}{(1+\xi_0 c\kappa)^2} \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)\xi_k^2. \quad (13)$$

Определение производных по формулам (12), (13) позволяет избежать численного дифференцирования, особенно затруднительного в критической области — окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик.

Для определения проводимости $f_{mp}(p, h)$ и ее производных при заданных p и h в рамках мультипольного разложения необходимо выбрать конечную подсистему величин ξ_n ($n = 0, 1, 2, \dots, N$). Размер N этой подсистемы при заданной концентрации $p = p_c$ определяется минимальным значением параметра h и необходимой точностью вычислений. Так, при $1 \geq h \geq 0.01$ ($0 \leq \ln(1/h) \leq 4$) для вычисления эффективной проводимости $f_{mp}(p, h)$ и ее производных с точностью порядка 1% достаточно взять $N = 40$. На рис. 1 представлены результаты вычислений при $N = 1000$, что обеспечивает в данной области точность до двенадцатого знака после десятичной точки. Для соответствия с данными следующего раздела на рисунке приведены зависимости от аргумента $\ln(1/h)$ следующих эффективных характеристик модели: $f_{mp}(p_c, h)/h$ — проводимости, деленной на h , $\partial f_{mp}(p_c, h)/\partial h$ — производной проводимости по параметру h и $h [\partial f_{mp}(p, h)/\partial p]_{p=p_c}$ — производной проводимости по концентрации p , умноженной на h . Штрихпунктирной, штриховой и сплошной линиями на рис. 1 изображены степенные разложения для этих же величин (50), (55) и (60), вычисленные по формулам Приложения В. Результаты из приложения хорошо совпадают с расчетами методом мультипольного разложения в области $\ln(1/h) < 0.7$, что примерно соответствует интервалу $0.5 < h \leq 1$.

Однако в критической области подсистемы размера $N \sim 1000$ недостаточно и необходимо использовать подсистемы большего размера (вплоть до сотен тысяч). Изучение корректности применимости мультипольного разложения в зависимости от размера подсистемы N является одним из предметов изучения в данной работе.

3. КРИТИЧЕСКАЯ ОБЛАСТЬ И БИНАРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В пределе $p \rightarrow p_c$ и $h \rightarrow 0$ эффективная проводимость рассматриваемой системы стремится к нулю: $f(p_c, 0) = 0$. Таким образом, в двумерной модели Рэля может происходить фазовый переход типа металл–диэлектрик. Поведение проводимости $f(p, h)$ в окрестности точки фазового перехода рассмотрено в работах [5, 7] в рамках так называемого бинарного приближения. Далее величины, полученные в рамках бинарного приближения (binary approximation), будут отмечены индексом « ba ». Это приближение становится точным в пределе $h \rightarrow 0$ и $p \rightarrow p_c$, так что его результаты могут использо-

ваться в критической области — окрестности точки фазового перехода $h \ll 1$ и $p - p_c \ll 1$. Согласно [7], в этой области для эффективной проводимости $f_{ba}(p, h)$ имеем следующее выражение:

$$f_{ba}(p, h) = \frac{g}{\pi} + \frac{2h}{\pi} \left[\ln \frac{1}{g} - F(\gamma) \right], \quad \gamma = \frac{h}{g}, \quad (14)$$

где

$$F(\gamma) = -\gamma \int_0^\infty e^{-\gamma x} \ln(1 - e^{-x}) dx. \quad (15)$$

Здесь

$$g = \frac{\sqrt{a^2 - R^2}}{a}, \quad (16)$$

$$h = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}.$$

Формулы (14) и (15) описывают безразмерную эффективную проводимость исследуемой модели Рэля во всей предпороговой (до соприкосновения соседних включений при $p = p_c$) критической области. Из (15) при малых $\gamma \ll 1$ имеем

$$F(\gamma) = \frac{\pi^2}{6} \gamma - \zeta(3) \gamma^2 + \frac{\pi^4}{90} \gamma^3 + \dots, \quad (17)$$

$$\zeta(3) = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^3} = 1.202\dots \quad (18)$$

В противоположном случае больших значений $\gamma \gg 1$ имеем

$$F(\gamma) = -\ln \frac{1}{\gamma} + \mathbb{C} + \frac{1}{2\gamma} - \frac{1}{12} \frac{1}{\gamma^2} + \frac{1}{120} \frac{1}{\gamma^4} + \dots \quad (19)$$

Последующие члены разложения в формуле (19) представляют собой четные степени величины $1/\gamma$. Здесь

$$\mathbb{C} = \int_0^\infty e^{-x} \ln(x) dx \simeq 0.577216\dots$$

— постоянная Эйлера.

Таким образом, из (14), (15) и (19) при $g \ll h \ll 1$ имеем

$$f_{ba}(p, h) = h \left\{ \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{1}{h} - \mathbb{C} \right) + \frac{1}{6\pi} \frac{g^2}{h^2} - \frac{1}{60\pi} \frac{g^4}{h^4} + \dots \right\}. \quad (20)$$

Из формулы (20) при $p = p_c$ ($g = 0$) следует

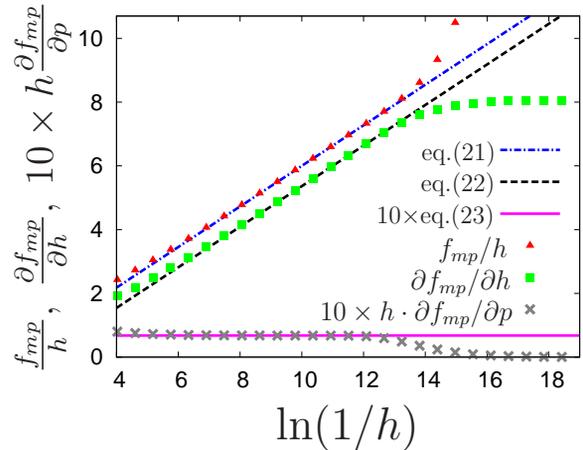


Рис. 2. Безразмерная проводимость из мультипольного приближения f_{mp} , деленная на h (\blacktriangle), производная безразмерной проводимости $\frac{\partial f_{mp}}{\partial h}$ (\blacksquare) и производная безразмерной проводимости $10h \frac{\partial f_{mp}}{\partial p}$ (\times), умноженная на 10, как функции параметра $\ln(1/h)$ на интервале [4, 19] для системы размером $N = 200000$ в сравнении с формулами (21), (22) и (23)

$$\frac{f_{ba}(p_c, h)}{h} = \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{1}{h} - \mathbb{C} \right), \quad (21)$$

$$\frac{\partial f_{ba}(p_c, h)}{\partial h} = \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{1}{h} - \mathbb{C} - 1 \right). \quad (22)$$

Величины (21) и (22) являются линейными функциями аргумента $\ln(1/h)$. Заметим также, что из разложения (20) следует (с учетом $g^2 = (4/\pi)(p - p_c)$)

$$h \left[\frac{\partial f(p, h)}{\partial p} \right]_{p=p_c} = \frac{2}{3\pi^2} = 0.0675475\dots \quad (23)$$

На рис. 2 зависимости величин (21) и (22) от аргумента $\ln(1/h)$ представлены в виде штрихпунктирной и штриховой параллельных линий. Произведение (23) на том же рисунке представляет собой сплошную линию, параллельную оси абсцисс. Для наглядности значение этой величины увеличено в 10 раз (отмечено 10×). Аналитические результаты (21)–(23), полученные в рамках бинарного приближения, взаимно проверялись в настоящей работе с выражениями (11), (12) и (13), полученными численным методом при помощи мультипольного разложения.

При вычислениях, проведенных в работе [3] вне критической области при рассмотрении значений параметра при $h > 10^{-2}$, было достаточно использовать подсистему размера $N = 40$. При переходе к меньшим значениям h (до 10^{-8}), включаю-

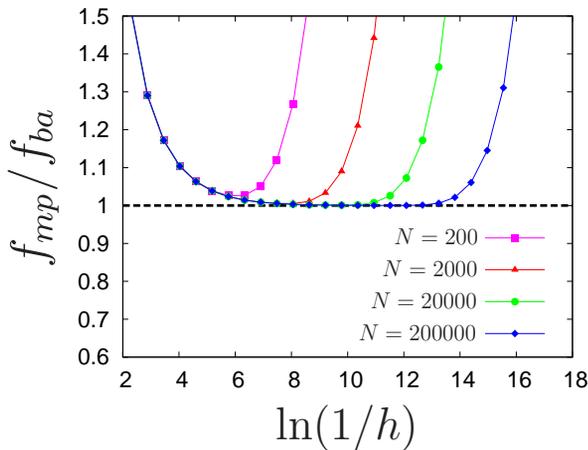


Рис. 3. Отношение f_{mp}/f_{ba} как функция параметра $\ln(1/h)$ для $N = 200$ (■), 2000 (▲), 20000 (●), 200000 (◆). Горизонтальная линия на уровне 1 для удобства восприятия

щим критическую область, необходимо значительно увеличить размер соответствующей подсистемы N , что приводит к резкому росту объема и времени вычислений. В настоящей работе эти вычисления проводились до $N = 200000$. Результаты вычислений методом мультипольного разложения для $N = 2 \cdot 10^5$ приведены на рис. 2 в виде символов: треугольников для f/h , квадратов для $\partial f/\partial h$ и крестиков для $h(\partial f/\partial p)$. Как следует из этого рисунка, все три характеристики при $h \sim 10^{-3}$ (что эквивалентно $\ln(1/h) \simeq 7$) приближаются к соответствующим теоретическим значениям, вычисленным методом бинарного приближения, практически совпадая при дальнейшем уменьшении параметра h , так что $h \sim 10^{-3}$ является границей критической области. Это совпадение прекращается при $h \sim 10^{-6}$ ($\ln(1/h) \simeq 13.5$), что является границей применимости метода мультипольного разложения, использующего подсистему данного размера $N = 2 \cdot 10^5$. Для дальнейшего расширения области совпадения необходимо переходить к подсистемам еще большего размера. Проведенный в настоящей работе численный эксперимент подтверждает адекватность аналитического подхода, использованного в работе [7], для описания эффективной проводимости двумерной модели Рэля в критической области.

Для детального определения интервалов, где два рассмотренных метода дают одинаковые результаты, мы построили отношение величин, полученных мультипольным разложением (mp) и бинарным приближением (ba). На рис. 3 построено отношение f_{mp}/f_{ba} как функция параметра $\ln(1/h)$ для систем размером $N = 200, 2000, 20000, 200000$. При совпа-

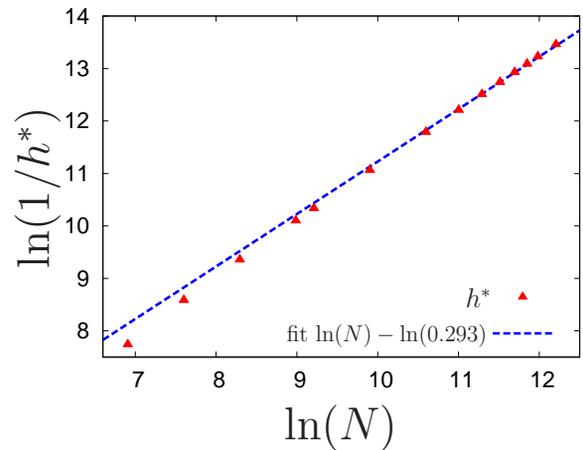


Рис. 4. Логарифм $\ln(1/h^*)$ (▲), обратной величины параметра h^* , при котором на рис. 3 справа отклонение отношения f_{mp}/f_{ba} от единицы равно 1%, как функция логарифма размера системы $\ln(N)$. Штриховой линией показаны результаты аппроксимации $\ln(N) - \ln(0.293(2))$.

дении результатов для мультипольного разложения и бинарного приближения это отношение равно 1. Для удобства восприятия на этом уровне проведена горизонтальная штриховая линия. Как видно, при $\ln(1/h) > 6$ наблюдается «полка», правый конец которой сдвигается вправо при увеличении размера системы N . Это демонстрирует увеличение области применения мультипольного разложения при росте размера матрицы $N \times N$, соответствующей системе линейных уравнений (3) для коэффициентов мультипольного разложения.

Дадим количественный ответ на вопрос, как размер интервала, в котором выполняется равенство $f_{mp}/f_{ba} \simeq 1$, зависит от размера системы N . Обозначим h^* такое значение параметра h , при котором отклонение отношения f_{mp}/f_{ba} от единицы становится равным 1%,

$$\left| \frac{f_{mp}}{f_{ba}}(h^*) - 1 \right| = 0.01.$$

Обратный логарифм $\ln(1/h^*)$ определенного выше параметра h^* как функция логарифма размера системы $\ln(N)$, полученный численным решением соответствующего уравнения, построен на рис. 4 треугольниками. Мы видим, что точки лежат на прямой. При аппроксимации на интервале $\ln(N) > 10$ линейной функцией

$$\ln(1/h^*) \simeq A \ln(N) + B$$

для коэффициента пропорциональности получают значения $A = 1.04$. Мы принимаем, что коэф-

коэффициент пропорциональности равен 1. Поэтому мы выполнили аппроксимацию прямыми

$$\ln(1/h^*) \simeq \ln(N) - \ln(B),$$

получив результат

$$\ln(1/h^*) \simeq \ln(N) - \ln(0.293(2)).$$

На рис. 4 эта прямая построена штриховой линией. Иначе говоря, требуется провести вычисления для системы размером $N \geq 0.293(2)/h^*$, чтобы для значения переменной $h > h^*$ точность вычисления эффективной проводимости была лучше 1%. Такой вывод можно сделать также из рис. 3, на котором при увеличении размера системы N в десять раз график как функция $\ln(1/h)$ смещается на одно и то же значение вправо.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мультипольное приближение применено к вычислению эффективной проводимости f композитного материала с регулярной матрицей включений круглой формы (задачи Рэля) в окрестностях критической точки. Для получения корректных результатов потребовалось численное решение системы из большого числа линейных уравнений. Показано, что результаты вычислений совпадают с аналитическими результатами бинарного приближения, которые были ранее выведены для окрестностей критической области. При помощи мультипольного разложения также вычислены производные эффективной проводимости $\partial f/\partial h$ по отношению проводимостей компонент $h = \sigma_2/\sigma_1$, а также производная $\partial f/\partial p$ по концентрации p первой компоненты. Продемонстрировано, что для корректности мультипольного разложения в области малого параметра $h \ll 1$ требуется рассмотрение системы большого размера $N \sim h^{-1}$.

Благодарности. Один из авторов (О.А.В.) благодарит Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН (www.jssc.ru) за предоставленные вычислительные ресурсы.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема 122041400110-4).

ПРИЛОЖЕНИЕ А. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРОИЗВОДНОЙ ЭФФЕКТИВНОЙ БЕЗРАЗМЕРНОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПО ПАРАМЕТРУ h И КОНЦЕНТРАЦИИ p

Дифференцируя выражение (11) для эффективной проводимости $f_{mp}(p, h)$ по аргументу h , получим

$$\frac{\partial f_{mp}(p, h)}{\partial h} = -\frac{2c}{(1 + c\kappa\xi_0)^2} \left(\frac{d\kappa}{dh} \xi_0 + \kappa \frac{d\xi_0}{dh} \right). \quad (24)$$

Для того чтобы найти производную $d\xi_0/dh$, рассмотрим ту же модель с измененным отношением проводимостей компонент: $\tilde{\kappa} = (1 - \tilde{h})/(1 + \tilde{h})$, где $\tilde{h} = h + \delta h$. Уравнение типа (3) для измененной модели,

$$\tilde{\xi}_n + \sum_{m=0}^{\infty} \tilde{S}_{nm} \tilde{\xi}_m = \delta_{n0}, \quad (25)$$

умножим на ξ_n и просуммируем по всем n :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\xi}_n \xi_n + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \tilde{S}_{nm} \tilde{\xi}_m \xi_n = \xi_0. \quad (26)$$

Аналогичным образом, умножив уравнение (3) на $\tilde{\xi}_n$ и просуммировав по всем n , найдем

$$\sum_{n=0}^{\infty} \xi_n \tilde{\xi}_n + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} S_{nm} \xi_n \tilde{\xi}_m = \tilde{\xi}_0. \quad (27)$$

Поменяв в (27) $n \rightleftharpoons m$ и вычтя из (26) преобразованное выражение (27), получим для $\delta\xi_0 = \tilde{\xi}_0 - \xi_0$ выражение

$$\delta\xi_0 = -\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (\tilde{S}_{nm} - S_{nm}) \xi_n \tilde{\xi}_m. \quad (28)$$

При $\tilde{h} = h + \delta h$ и $\delta h \rightarrow 0$ имеем

$$\tilde{\kappa} - \kappa = \frac{d\kappa}{dh} \delta h, \quad (29)$$

так что

$$\delta S_{nm} = \tilde{S}_{nm} - S_{nm} \rightarrow \frac{1}{\kappa} \frac{d\kappa}{dh} S_{nm} \delta h. \quad (30)$$

Поэтому из (28) находим

$$\frac{d\xi_0}{dh} = -\frac{1}{\kappa} \frac{d\kappa}{dh} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} S_{nm} \xi_n \xi_m. \quad (31)$$

Умножим равенство (3) на ξ_n и, просуммировав по всем n , получим

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} S_{nm} \xi_n \xi_m = \xi_0 - \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n^2. \quad (32)$$

Подставив $d\xi_0/dh$ из (31) — (32) в соотношение (24), приходим к выражению (12) для производной по h .

Дифференцируя выражение (11) для $f_{mp}(p, h)$ по радиусу R , найдем

$$\frac{\partial f_{mp}(p, h)}{\partial R} = -\frac{2c\kappa}{(1+c\kappa\xi_0)^2} \left(\frac{2}{R}\xi_0 + \frac{\partial\xi_0}{\partial R} \right). \quad (33)$$

Для вычисления производной $\partial\xi_0/\partial R$ рассмотрим модель с радиусом $\tilde{R} = R + \delta R$. В этом случае аналогично (30) имеем

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{nm} - S_{nm} &\propto (R + \delta R)^{2n+2m+2} - R^{2n+2m+2} \simeq \\ &\simeq R^{2n+2m+2} (2n + 2m + 2) \frac{\delta R}{R}, \end{aligned} \quad (34)$$

так что из формулы типа (28) находим (здесь можно заменить $(n + m + 1)$ на $2n + 1$)

$$\frac{\partial\xi_0}{\partial R} = -\frac{2}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} S_{nm} (2n + 1) \xi_n \xi_m. \quad (35)$$

Далее, умножив равенство (3) на $(2n + 1)\xi_n$ и просуммировав по всем n , получим

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} S_{nm} (2n + 1) \xi_n \xi_m = \xi_0 - \sum_{n=0}^{\infty} (2n + 1) \xi_n^2. \quad (36)$$

Подстановка $\partial\xi_0/\partial R$ из (35), (36) в формулу (33) дает

$$\frac{\partial f_{mp}(p, h)}{\partial R} = -\frac{2c\kappa}{(1+c\kappa\xi_0)^2} \frac{2}{R} \sum_{n=0}^{\infty} (2n + 1) \xi_n^2. \quad (37)$$

Так как

$$\frac{\partial f_{mp}(p, h)}{\partial p} = -\frac{R}{2c} \frac{\partial f_{mp}(p, h)}{\partial R}, \quad (38)$$

из (37) следует выражение (13).

ПРИЛОЖЕНИЕ В. РАЗЛОЖЕНИЕ ПРОВОДИМОСТИ И ЕЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПО МАЛОМУ ПАРАМЕТРУ $|1 - h| \ll 1$

Можно ввести новые переменные η_n по соотношению

$$\xi_n = \xi_0 \eta_n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (39)$$

В этом случае из формулы (3) следует система уравнений для переменных η_n :

$$\eta_n + \sum_{m=1}^{\infty} S_{nm} \eta_m = -S_{0n}, \quad (40)$$

не содержащая величины ξ_0 , которая ищется из равенства

$$\frac{1}{\xi_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} S_{0n} \eta_n. \quad (41)$$

При рассматриваемой концентрации $p = p_c (R = a)$

$$S_{nm} = \kappa Q_{nm} \quad (42)$$

с матрицей Q_{nm} из (7). При $|1 - h| \ll 1$ ($|\kappa| \ll 1$) может быть развита теория возмущений, дающая для проводимости $f_{mp}(p, h)$ и ее производных последовательные разложения по степеням малого параметра $(1 - h)$. В линейном по κ приближении из системы уравнений (40) находим

$$\eta_n = -S_{0n}, \quad (43)$$

так что из формулы (41) следует

$$\xi_0 = 1 + \delta\xi_0, \quad \delta\xi_0 = \sum_{n=1}^{\infty} S_{0n}^2. \quad (44)$$

С учетом определения (6) для S_{nm} имеем

$$\delta\xi_0 = \kappa^2 \beta_1(c),$$

где зависящая от концентрации c величина выражается через сумму:

$$\beta_1(c) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{4c}{\pi} \right)^{2n+2} Q_{0n}^2. \quad (45)$$

При $c \ll 1$

$$\beta_1(c) = \left(\frac{4}{\pi} \right)^4 Q_{01}^2 c^4 = \left(\frac{4}{\pi} \right)^4 \frac{c_2^2}{3} c^4, \quad (46)$$

а при критической концентрации $c = \pi/4$

$$\beta_1(\pi/4) = \sum_{n=1}^{\infty} Q_{0n}^2 \simeq 0.11831355068 \dots \quad (47)$$

Для проводимости $f_{mp}(p, h)$ из формулы (11) с точностью до величин порядка $(1 - h)^3$ включительно находим

$$f(p, h) = 1 + 2 [-c\kappa + c^2\kappa^2 - c^3\kappa^3 - c\kappa\delta\xi_0]. \quad (48)$$

Так как при $|1 - h| \ll 1$

$$\kappa = \frac{1 - h}{2} + \frac{(1 - h)^2}{4} + \frac{(1 - h)^3}{8} + \dots, \quad (49)$$

из (48) находим

$$\begin{aligned} f(p, h) &= 1 - c(1 - h) - \frac{1}{2} c(1 - c)(1 - h)^2 - \\ &- \frac{1}{4} c [(1 - c)^2 + \beta_1(c)] (1 - h)^3 + \dots, \end{aligned} \quad (50)$$

где $p = 1 - c$. Разложение (50) справедливо при $|1 - h| \ll 1$ в диапазоне $0 \leq c \leq \pi/4$. При выводе аналогичного разложения для $\partial f/\partial h$ из общего выражения (12) следует ограничиться членами порядка $(1 - h)^2$ включительно. Поэтому в знаменателе формулы (12) нужно положить $\xi_0 = 1$, опустив добавку $\delta\xi_0$:

$$\frac{\partial f(p, h)}{\partial h} \simeq \frac{4c}{(1+h)^2} \frac{1}{(1+c\kappa)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n^2. \quad (51)$$

Для знаменателя этой формулы имеем

$$[(1+h)(1+c\kappa)]^2 = 4 \left[1 - (1-c) \frac{(1-h)}{2} \right]^2. \quad (52)$$

Так что

$$\frac{4c}{(1+h)^2(1+c\kappa)^2} = \frac{c}{\left[1 - \frac{1}{2}(1-c)(1-h) \right]^2} \simeq c \left[1 + (1-c)(1-h) + \frac{3}{4}(1-c)^2(1-h)^2 + \dots \right]. \quad (53)$$

С другой стороны,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \xi_n^2 = (1 + \delta\xi_0)^2 \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \eta_n^2 \right) = (1 + \delta\xi_0)^3 \simeq 1 + 3\delta\xi_0. \quad (54)$$

С учетом (53) и (54) из формулы (51) получаем

$$\frac{\partial f(p, h)}{\partial h} = c + c(1-c)(1-h) + \frac{3}{4}c \left[(1-c)^2 + \beta_1(c) \right] (1-h)^2 + \dots \quad (55)$$

Для производной $\partial f/\partial p$ в формуле (13) общим множителем является κ , так что с нужной точностью в выражении (13) следует положить $\xi_0 = 1$, т. е. также опустить поправку $\delta\xi_0$:

$$\frac{\partial f(p, h)}{\partial p} \simeq \frac{2\kappa}{(1+c\kappa)^2} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)\xi_n^2. \quad (56)$$

Отсюда с точностью до $(1-h)^3$ включительно имеем

$$\frac{2\kappa}{(1+c\kappa)^2} = 2 \left[\kappa - 2c\kappa^2 + 3c^2\kappa^3 \right]. \quad (57)$$

Подставляя в (57) разложение (49), найдем

$$\frac{2\kappa}{(1+c\kappa)^2} = (1-h) + \frac{1}{2}(1-2c)(1-h)^2 + \frac{1}{4}(1-c)(1-3c)(1-h)^3. \quad (58)$$

С другой стороны,

$$\sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)\xi_n^2 = 1 + 2\delta\xi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} S_{0n}^2 = 1 + \frac{(1-h)^2}{4} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+3) \left(\frac{4c}{\pi} \right)^{2n+2} Q_{0n}^2. \quad (59)$$

С учетом (57), (58) и (59) из формулы (56) следует

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(p, h)}{\partial p} &= (1-h) + \frac{1}{2}(1-2c)(1-h)^2 + \\ &+ \frac{1}{4}(1-c)(1-3c)(1-h)^3 + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \left[(2n+3) \left(\frac{4c}{\pi} \right)^{2n+2} Q_{0n}^2 \right] (1-h)^3 + \dots, \end{aligned} \quad (60)$$

где при $c = \pi/4$

$$\sum_{n=1}^{\infty} (2n+3)Q_{0n}^2 \simeq 0.599387922739\dots \quad (61)$$

Разложения (55) и (60) следуют также из формулы (50) для проводимости $f(p, h)$ путем дифференцирования по ее аргументам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lord Rayleigh, Philos. Mag. **34**(211), 481 (1892).
2. W. T. Perrins, D. R. McKenzie, and R. C. McPhedran, Proc. Roy. Soc. London A **369**, 207 (1979).
3. Б. Я. Балагуров, В. А. Кашин, ЖЭТФ **117**, 978 (2000).
4. Б. Я. Балагуров, *Электрофизические свойства композитов. Макроскопическая теория*, URSS, Москва (2015).
5. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **157**, 669 (2020).
6. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **159**, 553 (2021).
7. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **161**, 358 (2022).
8. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, Наука, Москва (1979).