УДК 537.311

ЭФФЕКТИВНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ДВУМЕРНЫХ ЗАМОЩЕНИЙ ПЛОСКОСТИ: СРАВНЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ И ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Л. Ю. Бараш, И. М. Халатников

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ РАН), Научный центр РАН в Черноголовке

Представлен 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 сшивки на границах между областями компонент с разными проводимостями 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. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися аналитическими результатами.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (РНФ) (проект № 14-21-00158).

Ключевые слова: композитные материалы, эффективная проводимость, теория макроскопически неоднородных сред, уравнение Лапласа.

ВВЕДЕНИЕ

Теория проводимости макроскопически неупорядоченных сред насчитывает более ста лет, её возникновение связано с именами Максвелла и Рэлея [Rayleigh, 1892]. В первых теоретических работах были рассмотрены слабонеоднородные среды и системы с малой концентрацией включений сферической формы (см., напр., [Ландау, Лифшиц, 2005]). В дальнейшем для вычисления проводимости были предложены различные приближённые аналитические подходы, наиболее удачным из которых является теория эффективной среды Брюггемана (см, напр., обзор [Kirkpatrick, 1973]). Значительный интерес к таким системам также связан с изучением фазового перехода металл-диэлектрик по концентрации включений [Efros, Shklovskii, 1976]. В двумерном случае для проводимости бинарных систем был получен ряд важных точных аналитических результатов, таких как соотношение взаимности [Дыхне, 1970; Keller, 1964]. Из соотношения взаимности следует, что для случайно-неоднородной двумерной среды с равными концентрациями компонент (а также для системы со структурой шахматной доски) эффективная проводимость равна среднему геометрическому из проводимостей компонент. Двумерные случайные системы и периодические решётки относятся к одному классу универ-

Бараш Лев Юрьевич — младший научный сотрудник ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН, научный сотрудник Научного центра РАН в Черноголовке, кандидат физико-математических наук, barash@itp.ac.ru

Халатников Исаак Маркович — почётный директор ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН, главный научный сотрудник Научного центра РАН в Черноголовке, академик РАН, доктор физико-математических наук, профессор

сальности вблизи точки фазового перехода [Дыхне, 1970; Емец, 1989]. Аналитическое решение задачи о проводимости было также найдено для ряда двумерных двоякопериодических систем, в основном, с диэлектрическими или идеальнопроводящими включениями [Емец, 1986]. Для структуры шахматной доски известна точная зависимость эффективной проводимости от параметра $h=\sigma_2/\sigma_1$ (здесь σ_1 и σ_2 — проводимости компонент композита), а также асимптотика электрического поля рядом с углами решётки, приводящая к нарушению линейного режима протекания тока при небольших значениях h [Дыхне, 1970; Емец, 1989; Сатанин и др., 1996]. Имеется весьма обширная литература, посвящённая нахождению различных приближений для эффективной проводимости для гетерогенных систем (см., напр., [Torquato, 2002]). Отметим также развитие метода двухточечных корреляционных функций для определения эффективной проводимости стохастических систем [Li et al., 2006], успешные применения математических методов из теории случайных блужданий для определения эффективной проводимости стохастических систем [Fel, Khanin, 2002]. В последние 10 лет теория эффективной проводимости активно применяется для исследования задач нанотехнологий: для определения эффективной проводимости композитных материалов с углеродными нанотрубками, с графеновыми нанолистами, для нахождения эффективной теплопроводности коллоидных наножидкостей и во многих других исследованиях [Bagchi, Nomura, 2006; Prasher, 2006; Xie et al., 2008].

В 2000 г. была разработана диаграммная техника, на основе которой были получены эффективные проводимости двумерных композитных систем в случаях, когда различие в проводимостях компонент композита мало по сравнению с самими проводимостями [Khalatnikov, Kamenshchik, 2000]. В настоящей работе представлен численный метод, который позволяет определить эффективную проводимость с высокой точностью как в области применимости теории возмущений, так и в случаях, когда проводимости компонент существенно различны. Ниже проведено тестирование развитого подхода для двумерной структуры шахматной доски с двухцветными и трёхцветными раскрасками и сравнение с имеющимися аналитическими результатами. В дальнейшем планируется рассмотрение более сложных систем.

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ ПРОВОДИМОСТИ

Закон Ома для изотропной среды имеет вид $\mathbf{j}=-\sigma\boldsymbol{\nabla}\varphi$. Для стационарного распределения токов имеет место уравнение непрерывности $\operatorname{div}\,\mathbf{j}=0$. Следовательно, $\Delta\varphi+\boldsymbol{\nabla}\ln\sigma\cdot\boldsymbol{\nabla}\varphi=0$. Представим потенциал φ в виде $\varphi=-\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}+\psi(x,y)$, где среднее поле $\mathbf{E}=-\langle\boldsymbol{\nabla}\varphi\rangle$, т. е. $\langle\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle=0$. Угловые скобки обозначают здесь усреднение по всей плоскости. Итак, получаем уравнение для величины $\psi(x,y)$:

$$\Delta\psi+\boldsymbol{\nabla}\ln\sigma\cdot(-\mathbf{E}+\boldsymbol{\nabla}\psi)=0. \tag{1}$$

Для изотропного распределения проводимости эффективная проводимость σ_{eff} определяется соотношением $\mathbf{J}=\sigma_{eff}\mathbf{E}$, где $\mathbf{J}=\langle\mathbf{j}\rangle$. Зная функцию $\psi(x, y)$, можно определить эффективную проводимость, используя соотношение

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

Заметим, что если $\psi(x, y)$ — периодическая функция обоих координат — x и y, то $\langle \nabla\psi \rangle = 0$. Действительно, $\left\langle \frac{\partial\psi}{\partial y} \right\rangle = \frac{1}{S}\int \frac{\partial\psi}{\partial y}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \frac{1}{S}\int\left(\int \frac{\partial\psi}{\partial y}\,\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x = 0,$ где интегрирование производится по элементарной ячейке площади S. Точно так же, $\langle \partial\psi/\partial x \rangle = 0$. Верно и обратное утверждение: если $\langle \nabla\psi \rangle = 0$ для задачи с периодическим замощением плоскости, то $\psi(x, y)$ — периодическая функция на плоскости. Действительно, при сдвиге на период замощения в любом направлении задача не меняется. Следовательно, φ меняется на константу, но ψ остаётся прежним, так как иначе бы не выполнялось условие $\langle \nabla\psi \rangle = 0$. Для нахождения эффективной проводимости в такой задаче достаточно найти величину $\langle \nabla\psi \rangle$ в каждой области постоянной проводимости и применить соотношение (2).

Для задачи с периодическим замощением плоскости уравнение (1) сводится к уравнению Лапласа $\Delta\psi = 0$ в каждой области постоянного σ и соответствующим условиям сшивки между областями. Выведем условие сшивки для случая горизонтальной границы между областями (рис. 1). Без ограничения общности граница проходит по линии $y = 0$, рядом с которой выполняется $\sigma(y) = \sigma_2 + (\sigma_1 - \sigma_2)\,\theta(y)$, где $\theta(y)$ — функция Хевисайда. Тогда $\partial\sigma/\partial y = (\sigma_1 - \sigma_2)\,\delta(y)$. Следовательно,

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\left(\Delta\psi + \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)\,\delta(y)}{\sigma(y)}\left(-E_y + \frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right)\mathrm{d}y = 0,$$

$$\left.\frac{\partial\psi}{\partial y}\right|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} + \frac{2(\sigma_1 - \sigma_2)}{\sigma(y)}\left(-E_y + \frac{1}{2}\left(\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)_{+0} + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)_{-0}\right)\right) = 0,$$

$$\sigma_1\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)_{+0} - \sigma_2\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)_{-0} = (\sigma_1 - \sigma_2)E_y. \tag{3}$$

Таким образом, на границе между областями, изображёнными на рис. 1, величина $\psi(x, y)$ непрерывна, а $\partial\psi/\partial y$ имеет скачок, определяемый формулой (3). 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. Имеем в каждой области уравнение

$$\frac{1}{\varkappa}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}. \tag{4}$$

Разностные представления для вторых производных на равномерной сетке имеют вид

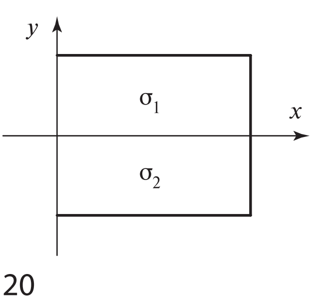

Рис. 1. Сшивка величины ψ на границе между областями с проводимостями σ_1 и σ_2

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

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

Как известно, неявный метод с переменой направлений для решения уравнения состоит из двух частей. На первом шаге метода производная по x учитывается неявно, и разностным представлением уравнения (4) является

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+1/2}-\psi_{i,j}^{n}}{\varkappa h_t/2}=\hat{\delta}_x^2\psi_{i,j}^{n+1/2}+\hat{\delta}_y^2\psi_{i,j}^{n}.$$

Это выражение можно переписать в виде

$$c_i'\psi_{i-1,j}^{n+1/2}+\left(d_i'-\frac{2}{\varkappa h_t}\right)\psi_{i,j}^{n+1/2}+e_i'\psi_{i+1,j}^{n+1/2}=c_j''\psi_{i,j-1}^{n}+\left(d_j''-\frac{2}{\varkappa h_t}\right)\psi_{i,j}^{n}+e_j''\psi_{i,j+1}^{n}. \quad (5)$$

Здесь $c_i'=e_i'=1/h_x^2$; $d_i'=-2/h_x^2$; $c_j''=e_j''=-1/h_y^2$; $d_j''=2/h_y^2$. Правая часть выражения (5) известна, поскольку ψ на шаге n известно. Для каждого j применяем прогонку для решения системы уравнений (5), и получаем ψ на шаге $n+1/2$.

На втором шаге метода производная по y берётся неявно, и разностным представлением для уравнения (4) становится

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+1}-\psi_{i,j}^{n+1/2}}{\varkappa h_t/2}=\hat{\delta}_x^2\psi_{i,j}^{n+1/2}+\hat{\delta}_y^2\psi_{i,j}^{n+1}.$$

Это выражение можно переписать в виде

$$c_j''\psi_{i,j-1}^{n+1}+\left(d_j''+\frac{2}{\varkappa h_t}\right)\psi_{i,j}^{n+1}+e_j''\psi_{i,j+1}^{n+1}=c_i'\psi_{i-1,j}^{n+1/2}+\left(d_i'+\frac{2}{\varkappa h_t}\right)\psi_{i,j}^{n+1/2}+e_i'\psi_{i+1,j}^{n+1/2}. \quad (6)$$

Правая часть выражения (6) известна, поскольку ψ на шаге $n+1/2$ известно. Для каждого i применяем прогонку для решения системы уравнений (6), и получаем ψ на шаге $n+1$.

Для периодических граничных условий вместо трёхдиагональной матрицы A линейного уравнения, решаемого методом прогонки, имеем матрицу вида

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

Как показано в работе [Karniadakis, Kirby, 2003], метод решения такой системы уравнений сводится к обычному алгоритму прогонки, применённому для усечённой матрицы

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

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для двумерной двухцветной шахматной доски результат численного определения эффективной проводимости совпадает с формулой Келлера-Дыхне. Это проверено численно для многих пар значений σ_1, σ_2.

Для двумерной трёхцветной шахматной доски результат вычислений эффективной проводимости при $|\sigma_1 - \sigma_2| \ll \sigma_1$ совпадает с результатами работы [Khalatnikov, Kamenshchik, 2000] для всех рассмотренных раскрасок и порядков теории возмущений. На рис. 2 изображены замощения плоскости, рассмотренные в работе [(Khalatnikov, Kamenshchik, 2000]. Отметим, что для замощения плоскости, приведённого на последнем рисунке, вычисленная эффективная проводимость совпадает с результатом, полученным в работе [Khalatnikov, Kamenshchik, 2000] при помощи теории возмущений, но не совпадает с приближённым значением эффективной проводимости, полученным при помощи теории среднего поля Брюгеммана, предполагающей круглую форму включений.

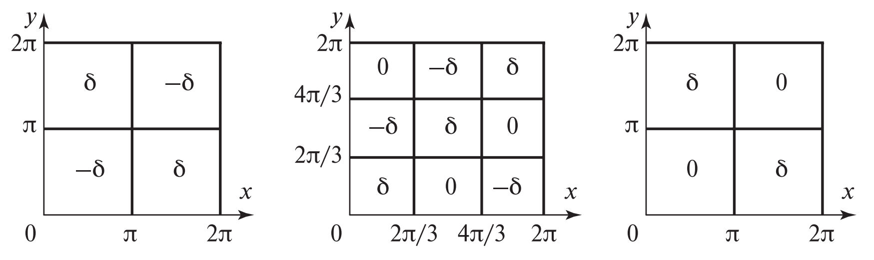

Рис. 2. Замощения плоскости, рассмотренные в работе [Khalatnikov, Kamenshchik, 2000]

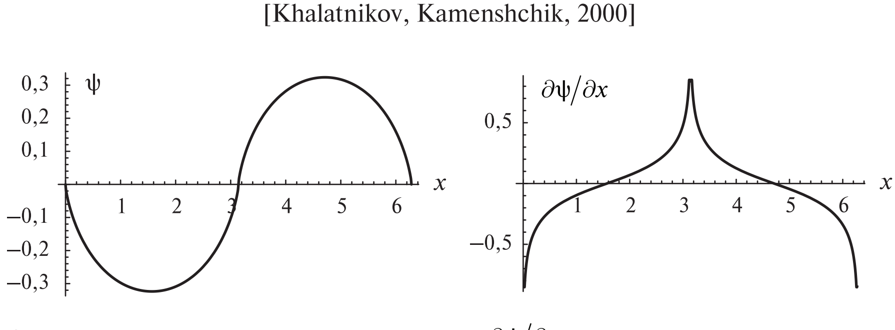

Рис. 3. Вычисленные значения величин ψ и $\partial\psi/\partial x$ вдоль горизонтальной границы для структуры двухцветной шахматной доски с $\sigma_1 = 1{,}3$, $\sigma_2 = 0{,}7$ и периодом 2π

Компьютерное моделирование подтверждает интегрируемую расходимость в локальном электрическом поле вблизи углов границ областей со степенной зависимостью, приведённой в работе [Сатанин и др., 1996]. На рис. 3 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 $(\sigma_1 - \sigma_2)/\sigma_1 = 1 - h$, поскольку они интегрируемы и показатель степени $2\,\mathrm{arctg}\dfrac{1-h}{2\sqrt{h}}$ в этом случае мал. В силу интегрируемости особенностей локального поля, расходимость не возникает в самой величине ψ, определяемой численно.

Проведённые расчёты показывают, что развитый метод хорошо работает для периодических замощений плоскости со структурой шахматной доски с двухцветными и трёхцветными раскрасками и может быть применён к более сложным случаям.

ЛИТЕРАТУРА

[Дыхне, 1970] *Дыхне А. М.* Проводимость двумерной двухфазной системы // Журн. эксперим. и теор. физики (ЖЭТФ). 1970. Т. 59. С. 110.

[Емец, 1986] *Емец Ю. П.* Электрические характеристики композиционных материалов с регулярной структурой. Киев: Наукова думка, 1986. 192 с.

[Емец, 1989] *Емец Ю. П.* Преобразование симметрии двухмерной двухкомпонентной электропроводной системы // Журн. эксперим. и теор. физики (ЖЭТФ). 1989. Т. 96. С. 701–711.

[Ландау, Лифшиц, 2005] *Ландау Л. Д.*, *Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика: уч. пособие. Т. 8. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2005. 649 р.

[Сатанин и др., 1996] *Сатанин А. М.*, *Скузоваткин В. В.*, *Хорьков С. В.* Нарушение линейного режима протекания тока в периодических структурах // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 64(7). С. 495–499.

[Bagchi, Nomura, 2006] *Bagchi A.*, *Nomura S.* On the effective thermal conductivity of carbon nanotube reinforced polymer composites // Composites Science and Technology. 2006. V. 66. P. 1703–1712.

[Efros, Shklovskii, 1976] *Efros A. L.*, *Shklovskii B. I.* Critical behavior of conductivity and dielectricconstant near metal-non-metal transition threshold // Physica Status Solidi B: Basic Research. 1976. V. 76. N. 2. P. 475–485.

[Fel, Khanin, 2002] *Fel L. G.*, *Khanin K. M.* On Effective Conductivity on $\mathbb{Z}^d$ Lattice // J. Statistical Physics. 2002. V. 108. P. 1015–1031.

[Karniadakis, Kirby, 2003] *Karniadakis G. E.*, *Kirby R. M.* Parallel Scientific Computing in C++ and MPI. Cambridge: Cambridge University Press, UK, 2003. 628 p.

[Keller, 1964] *Keller J. B.* Theorem on conductivity of composite medium // J. Mathematical Physics. 1964. V. 5. P. 548–549.

[Khalatnikov, Kamenshchik, 2000] *Khalatnikov I. M.*, *Kamenshchik A. Yu.* A Diagram Technique For Perturbation Theory Calculations Of The Effective Conductivity Of Two-Dimensional Systems // Журн. эксперим. и теор. физики (ЖЭТФ). 2000. Т. 118. Вып. 6. С. 1456–1462 [JETP. 2000. V. 91(6). P. 1261–1267].

[Kirkpatrick, 1973] *Kirkpatrick S.* Percolation and conduction // Reviews of Modern Physics. 1973. V. 45. N. 4. P. 574–588.

[Li et al., 2006] *Li D. S.*, *Sahelia G.*, *Khaleelb M.*, *Garmestani H.* Quantitative Prediction of Effective Conductivity in Anisotropic Heterogeneous Media Using Two–point Correlation Functions // Computational Materials Science. 2006. V. 38. Iss. 1. P. 45–50.

[Prasher et al., 2006] *Prasher R*, *Evans W.*, *Fish J.* et al. Effect of aggregation on thermal conduction in colloidal nanofluids // Applied Physics Letters. 2006. V. 89. P. 143119. doi: 10.1063/1.2360229.

[Rayleigh, 1892] *Lord Rayleigh*. On the Instability a Cylinder of Viscous Liquid under Capillary Force // Philosophical Magazine and J. Sciences. 1892. Ser. 5. V. 34. N. 207. P. 145–155.

[Torquato, 2002] *Torquato S.* Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties. Springer, 2002. 701 p.

[Xie et al., 2008] *Xie S. H.*, *Liu Y. Y.*, *Li J. Y.* Comparison of the effective conductivity between composites reinforced by graphene nanosheets and carbon nanotubes // Applied Physics Letters. 2008. V. 92. Iss. 24. P. 243121.

EFFECTIVE CONDUCTIVITY OF THE PLANE CONSISTING OF PIECES OF DIFFERENT CONDUCTIVITIES: COMPARING ANALYTICAL AND NUMERICAL RESULTS

L. Yu. Barash, I. M. Khalatnikov

Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences,
Science Center in Chernogolovka, Russian Academy of Sciences

The numerical method for calculating effective conductivity of the plane consisting of pieces of different conductivities is presented. For periodic structures we use a finite difference method with relaxation for solving Laplace equation with corresponding matching conditions between components and corresponding periodic boundary conditions. The method allows one to obtain effective conductivity with high accuracy both when perturbation theory is applicable and when the conductivities of components are essentially different. The results obtained are in good agreement with available analytical results.

Keywords: composites, effective conductivity, macroscopically disordered media, Laplace equation.

Barash Lev Yuryevich — junior researcher, Landau Institute for Theoretical Physics RAS; researcher, Science Center in Chernogolovka RAS, PhD, barash@itp.ac.ru

Khalatnikov Isaak Markovich — honorary director Landau Institute for Theoretical Physics RAS; principal researcher, Science Center in Chernogolovka RAS, Academician of Russian Academy of Sciences, Doctor of Science, professor