

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Макроскопическая проводимость случайно-неоднородных сред. Методы расчета

А.Г. Фокин

Рассматривается макроскопическая проводимость неоднородных сред (поликристаллов, композитов и т.д.). Проведено исследование одного из основных параметров, описывающих среду в целом, — тензора эффективных (макроскопических) проводимостей (ТЭП) случайно-неоднородных сред (СНС). Разработан метод построения границ для ТЭП, основанный на некоторых идеях функционального анализа, в частности на идеи проектирующих операторов и ортогональных приведенных полей. Найден критерий, позволяющий определить положение каждого последующего приближения итерационной процедуры относительно предыдущего. Показано, что результаты расчетов ТЭП, полученные на базе различных моделей и приближений, вписываются в общую схему, предложенную автором, являясь ее частными случаями. Выявлена важная роль вспомогательного параметра σ^c — нулевого уровня флуктуаций — при построении сходящихся рядов для рассчитываемых величин. Получены обобщения вариационных принципов Хашина–Штрикмана и теоремы Келлера. Введенные для описания СНС структурные параметры выражены в этом методе через n -точечные вероятности (n -частичные взаимодействия) случайного поля локальных проводимостей. Приближение кусочно-однородных "поляризованных" полей использовано в классических энергетических теоремах для нахождения наилучших границ для ТЭП в объеме информации о СНС в пределах трехточечных вероятностей.

PACS numbers: 02.90.+p, 72.90.+y

Содержание

1. Введение (1069).
2. Переход к интегральным уравнениям (1072).
3. Операторы проектирования (1074).
4. Условия сходимости метода возмущений в теории неоднородных сред (1076).
5. Тензор эффективных проводимостей (1078).
6. Учет многочастичных взаимодействий в методе возмущений (1079).
7. Сингулярное приближение (1081).
8. Вариационные методы расчета границ для σ^* (1082).
 - 8.1. Классические энергетические теоремы.
 - 8.2. Экстремальные свойства энергетических функционалов в \mathcal{H} -пространстве.
 - 8.3. Обобщение вариационных принципов Хашина–Штрикмана.
 - 8.4. Приближение Берана.
9. Виртуальные поляризованные поля (1085).
10. Точные решения (1086).
 - 10.1. Полностью симметричные среды.
 - 10.2. Самосогласованные решения.
 - 10.3. Новые решения в форме Дыхне–Мендельсона.

11. Структурные параметры неоднородных сред (1090).
 12. Асимметричные и симметричные среды (1091).
- Список литературы (1092).

1. Введение

Использование в науке и технике материалов, обладающих сложной структурой (керамик, композитов, поликристаллов, эмульсий и др.), приводит к необходимости решения ряда специфических задач, порождаемых наличием в среде неоднородностей, под которыми будем понимать отклонения локальных значений материальных характеристик среды (в случае проводимости — тензора удельных электропроводностей $\sigma = \sigma(\mathbf{r})$) от заданных значений. Ниже эти отклонения обозначаются посредством

$$\sigma' \equiv \sigma - \sigma^c, \quad (1.1)$$

где σ^c — тензор удельных электропроводностей (тензор проводимостей) вспомогательной среды (среды сравнения), отличающейся от рассматриваемой неоднородной лишь значениями материальных характеристик. Для случайно-неоднородной среды $\sigma' = \sigma'(\mathbf{r})$ — случайное тензорное поле.

Проблемы, возникающие при макроскопическом описании случайно-неоднородных сред (СНС), привлекают непрерывное внимание исследователей [1–52]. Это связано, во-первых, с существенным отличием таких сред

А.Г. Фокин. Московский институт электронной техники (Технический университет), 103498 Москва, К498 МИЭТ
Тел. (095) 532-99-63
Факс (095) 530-22-33

Статья поступила 3 ноября 1995 г., после доработки 28 мая 1996 г.

от однородных и регулярно-неоднородных, приводящим к дополнительным математическим трудностям, во вторых, с возможностью получения результатов, имеющих прикладное значение. Одной из важнейших является задача нахождения макроскопических (эффективных) материальных характеристик СНС по заданному объему статистической информации.

Решение этой задачи ведется по трем основным направлениям:

- 1) расчет приближенных значений;
- 2) определение границ, внутри которых находятся эффективные характеристики среды;
- 3) поиск точных решений для реальных сред и модельных структур.

Для макроскопического описания проводящих свойств СНС используется тензор эффективных проводимостей $\hat{\sigma}^*$, определяемый равенствами

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \langle \sigma \mathbf{E} \rangle \equiv \hat{\sigma}^* \langle \mathbf{E} \rangle, \quad (1.2)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю реализаций, совпадающее при определенных условиях [8, 14, 20, 30, 31, 37] с усреднением по объему V среды. В общем случае $\hat{\sigma}^*$ — интегральный оператор, ядро которого $\sigma^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ вводится равенством

$$\langle \mathbf{J}(\mathbf{r}_1) \rangle \equiv \int \sigma^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}_2) \rangle d\mathbf{r}_2. \quad (1.3)$$

Однако при выполнении условий:

- 1) характерные размеры СНС достаточно велики в сравнении с масштабом неоднородности среднего поля $\langle \mathbf{E} \rangle$, длиной свободного пробега носителей заряда, а также с характерными размерами области, усреднением по которой заменяется усреднение по ансамблю;
- 2) СНС обладает свойством статистической однородности, в силу которой n -точечные вероятности случайного поля $\sigma(\mathbf{r})$ инвариантны относительно преобразования трансляции;
- 3) граничные условия на поверхности S , ограничивающей объем V рассматриваемой среды, обладают свойством макрооднородности [38]:

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\mathbf{r} \cdot \langle \mathbf{E} \rangle, \quad \mathbf{r} \in S, \quad (1.4)$$

в случае задачи Дирихле и

$$J_n(\mathbf{r}) = \mathbf{n} \cdot \langle \mathbf{J} \rangle, \quad \mathbf{r} \in S, \quad (1.5)$$

в случае задачи Неймана (здесь $\langle \mathbf{E} \rangle$ и $\langle \mathbf{J} \rangle$ — постоянные векторы, а напряженность электрического поля \mathbf{E} связана с плотностью тока \mathbf{J} законом Ома), оператор $\hat{\sigma}^*$ обладает свойством локальности [12]:

$$\hat{\sigma}^* = \sigma^* \hat{I}, \quad \sigma^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sigma^* \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (1.6)$$

где σ^* — тензор эффективных (макроскопических) проводимостей (ТЭП).

Простейшие точные решения для σ^* были получены в 1912 г. Винером (см. [2, 9]). В наших обозначениях они имеют вид

$$\sigma_{11}^* = \langle \sigma \rangle, \quad \sigma_{33}^* = \langle \rho \rangle^{-1}; \quad \sigma \rho = 1, \quad (1.7)$$

$$\langle \Gamma \rangle \equiv \sum_{a=1}^N v_a \Gamma_a, \quad \sum_{a=1}^N v_a = 1; \quad \Gamma \equiv \sigma, \rho, \quad (1.8)$$

$$\sigma_{ij}^* = \sigma_{11}^* \delta_{ij} + (\sigma_{33}^* - \sigma_{11}^*) \delta_{i3} \delta_{j3}, \quad \sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{r}) \delta_{ij}. \quad (1.9)$$

Здесь σ^* — ТЭП неограниченной слоистой среды, обладающей следующими свойствами:

- 1) плоскости, ограничивающие плоскопараллельные слои, ортогональны третьей оси;
- 2) проводящие свойства слоя описываются тензором σ (1.9) одного из N однородных и изотропных компонентов;
- 3) толщина слоя и номер компонента, определяющий значение σ , — случайные числа.

Значения σ_{11}^* и σ_{33}^* образуют границы

$$\langle \rho \rangle^{-1} \equiv \sigma_W^- \leq \sigma^* \leq \sigma_W^+ \equiv \langle \sigma \rangle; \quad \sigma_{ij}^* \equiv \sigma^* \delta_{ij}, \quad (1.10)$$

внутри которых находится эффективная проводимость σ^* макроизотропной смеси однородных и изотропных компонентов. Границы (1.10) учитывают статистическую информацию о СНС в объеме одноточечных вероятностей [15, 29].

Теорема Келлера [13] и преобразования симметрии Дыхне [20] активизировали исследования симметрийных свойств неоднородных сред. Был получен ряд интересных результатов, найдены структуры, допускающие точные решения [19, 22, 25, 26, 28, 29, 32, 33, 37, 39, 40].

Полученные Бруггеманом [2] самосогласованные решения для двух- и трехмерных макроизотропных смесей двух однородных и изотропных компонентов часто используются для объяснения результатов измерений, а также в теории протекания [7, 11, 24, 27, 32, 33, 38, 39].

В работах И.М. Лифшица с сотрудниками был предложен метод расчета статических [4] и динамических [6] эффективных характеристик в задачах теории упругости, основанный на решении дифференциальных уравнений, коэффициенты которых — случайные тензорные поля. Решение задачи представляется в форме ряда, каждый член которого описывает взаимодействия соответствующей кратности. Метод теории случайных полей эффективен как при нахождении приближенных значений, так и при выборе вспомогательных полей, используемых в вариационных методах [8, 11, 12, 14, 21, 30–37, 41].

Исходя из классических энергетических неравенств, Хашин и Штрикман [9, 10, 38] разработали вариационный метод получения границ σ_{HS}^\pm , которые в отличие от границ Винера σ_W^\pm (1.10) учитывают дополнительную статистическую информацию о СНС, содержащуюся в двухточечных вероятностях. Частичный учет трехчастичных взаимодействий, проделанный Бераном [14], привел к дополнительному сужению границ в случаях трехмерной [19] и двумерной [22] макроизотропных смесей двух однородных и изотропных компонентов.

Ниже $\sigma_{(n)}^\pm$ обозначены наилучшие границы для σ^* , при расчете которых учитываются взаимодействия кратности $k \leq n$. Иными словами, статистическая информация о СНС задана в объеме n -точечных вероятностей. В этих обозначениях для границ Винера и Хашина–Штрикмана имеем

$$\sigma_W^\pm \equiv \sigma_{(1)}^\pm, \quad \sigma_{HS}^\pm \equiv \sigma_{(2)}^\pm. \quad (1.11)$$

Следует отметить, что ясное понимание общности проблем, возникающих при описании различных транспортных (и им подобных) явлений на макроскопическом уровне, пришло сравнительно недавно. Вследствие этого

решение конкретных задач велось (и нередко до сих пор еще ведется) специфическими методами, разрабатывавшимися лишь для этих задач. Можно сказать, что многообразие явлений и структур СНС породило многообразие методов, приближений и моделей.

В качестве примера структур, вписывающихся в единую схему макроскопического описания СНС, на рис. 1 даны схематические изображения поликристалла и композита. Области, выделенные штриховыми линиями, дают качественное представление о микроструктуре СНС. В первом случае зерно (область) неоднородности — кристаллит, во втором — изотропное эллипсоидальное включение. Ориентация кристаллофизических осей кристаллита (рис. 1а) или главных осей эллипса (рис. 1б) определяет реакцию зерна неоднородности на внешнее поле. Стрелка служит для условного обозначения векторов $\langle J \rangle$ при макроскопическом и J при микроскопическом описании СНС. В силу граничных условий вектор J испытывает скачкообразные изменения при переходе от зерна к зерну. Аналогичным образом может быть изображена и напряженность электрического поля E .

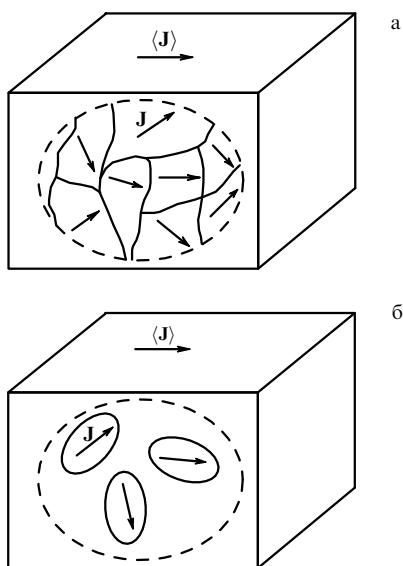


Рис. 1.

При решении задачи об установлении связи между макроскопическими материальными характеристиками неоднородной среды $\hat{\sigma}^*$ из (1.2) и случайному полем соответствующих микрохарактеристик $\sigma(\mathbf{r})$ может оказаться полезным использование некоторой терминологии, заимствованной из статистической физики. В частности, весь объем статистической информации о среде (об этом шла речь выше) удобно именовать макросостоянием этой среды (системы). Последнее, таким образом, определяется топологическими свойствами пространства СНС и материальными свойствами вещества, заполняющего это пространство. Внутренняя геометрия среды задается пространственным распределением областей неоднородности, т.е. их размерами и формой (в случае резких границ раздела) и соответствующими функциями распределения. Аналогичным образом описываются и материальные характеристики вещества. В терминах состояний переход от $\sigma(\mathbf{r})$ к $\hat{\sigma}^*$ сводится к

описанию макросостояния среды с помощью известной информации о ее микросостояниях. При этом флуктуации случайного поля $\sigma(\mathbf{r})$ могут быть выражены на языке флуктуаций соответствующих микропараметров, которые в свою очередь определяют изменения согласованных с ними макропараметров.

Одним из факторов, определяющих интенсивность флуктуаций, является разброс (разность максимального и минимального) значений случайного поля $\sigma(\mathbf{r})$. Ниже в качестве количественной меры разброса значений проводимости используется параметр $\kappa \equiv \sigma^-/\sigma^+$, где $\sigma^- \equiv \inf \sigma$, $\sigma^+ \equiv \sup \sigma$ (см. также (6.15б) и (6.14б)). В случае, когда можно ввести понятие зерна неоднородности (области, в которой $\sigma(\mathbf{r}) = \text{const}$), значение $\sigma(\mathbf{r})$ скачкообразно меняется при переходе границы раздела двух зерен, а σ^- и σ^+ — соответственно наименьшее и наибольшее главные (собственные) значения тензора $\sigma(\mathbf{r})$. Чаще других исследуются однофазные поликристаллы и механические смеси (композиты) двух изотропных компонентов. В первом случае $\kappa = \sigma_1/\sigma_3$ ($\sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \sigma_3$), где σ_k — главные значения тензора проводимости кристаллита. Во втором — $\kappa = x$, если $\sigma_1/\sigma_2 \equiv x < 1$ и $\kappa = 1/x$, если $x > 1$. Здесь σ_1 и σ_2 — скалярные проводимости первого и второго компонентов соответственно. Если параметр κ принимает значения вблизи границ областей $\kappa \in [0, 1]$, то говорят о малых ($1 - \kappa \ll 1$) и больших ($\kappa \ll 1$) флуктуациях проводимости. В последнем случае κ представим в форме $\kappa \equiv 10^{-v}$, где $v \geq 1$. При этом область $v \in [1, 3]$ реализуется в системе, находящейся в состоянии, далеком от фазового перехода (или в некотором смысле подобного ему) [1, 53–58]. Дальнейший рост v ($v \geq 10$) может при соответствующих условиях, определяемых влиянием и других параметров (например, объемных концентраций компонентов), приводить к флуктуациям, которые будем называть гигантскими. Такая ситуация возникает в бинарных системах [7, 20, 28], частным случаем которых являются композиты [59, 60]. Большой интерес вызывают различные аномальные эффекты, наблюдавшиеся в проводящих неоднородных средах вблизи порога протекания [24, 28, 51, 57, 60–67], а также индуцированные магнитным полем [28, 46, 57, 60, 61, 64–66, 68–74].

Другим фактором, определяющим интенсивность флуктуаций проводимости в случайно-неоднородной среде, является пространственное распределение неоднородностей, информация о котором труднодоступна и малоочисленна. Простейшая и широко используемая ее часть — информация о размерах и форме зерен неоднородности или о пространственных масштабах корреляций [30, 75]. По известным данным [58, 76–81] средний размер зерна неоднородности (в случае поликристалла или композита) колеблется в зависимости от рассматриваемой системы в пределах от 1 до 10^3 мкм. Средний размер (диаметр) получается усреднением по размерам зерна в различных направлениях. В отсутствии механической текстуры (анизотропии распределения размера зерна по углам Эйлера) среднее (эффективное) зерно имеет форму шара (пространственная задача) или круга (плоская задача) [21, 23, 37]. Использование информации о распределении зерен по размерам и формам при описании макроскопических свойств СНС представляется весьма интересной задачей [82], не нашедшей пока убедительного решения. Отметим, что учет эллипсоидальности эффективного зерна проводится начиная

(по-видимому) с работ Фрике [1] при расчете различных макроскопических характеристик СНС.

Наличие взаимосвязи между структурой (микросостоинием) неоднородной среды и ее макроскопическими свойствами приводит к необходимости решения ряда практически важных задач: выбора оптимальной структуры СНС, обеспечивающей реализацию требуемых параметров разрабатываемых материалов [31, 48, 51, 56, 58, 64, 73, 74, 76–79, 84–88], адекватного модельного описания различных исследуемых систем (как искусственных, так и естественных) [1, 53, 62–92] и т.п.

В данной работе для расчета σ^* и $\sigma_{(n)}^\pm$ развивается метод [27, 29, 34–37, 83], использующий преимущества как метода теории случайных полей [4, 6, 8, 11, 12, 21, 30], так и вариационного [9, 10, 14, 19, 22, 31, 38].

В разделах 2–4 излагается метод интегральных уравнений и проектирующих операторов (проекторов) для решения задачи расчета физических полей \mathbf{J} и \mathbf{E} и ТЭП для неоднородных сред. Введение приведенных материальных характеристик $\bar{\sigma}$, $\bar{\rho}$ и физических полей \mathbf{j} , \mathbf{e} (раздел 3) позволяет при решении одной граничной задачи использовать две (взаимно дуальные) итерационные процедуры, которые при соответствующем выборе вспомогательных параметров σ^c и ρ^c становятся независимыми. С помощью формализма проекторов в разделе 4 получены достаточные условия сходимости (ДУС) взаимно дуальных итерационных процедур. В разделе 5 исследованы общие свойства ТЭП. В разделе 6 рассмотрены различные варианты построения границ $\sigma_{(n)}^\pm$ на базе ограниченного объема статистической информации о СНС. Выделение локальной (сингулярной) составляющей проекторов приводит к сингулярному приближению (раздел 7), аналитические результаты которого используются в других методах (в частности — вариационных). В разделе 8 сформулированы вариационные принципы, в основе которых лежат классические энергетические теоремы. Наложение ограничений на параметры σ^c и ρ^c сводит их к обобщенным вариационным принципам Хашина–Штрикмана (раздел 8.3). В разделе 8.4 рассмотрено приближение Берана. В разделе 9 дано детальное исследование применения кусочно-однородных "поларизованных" полей τ и η для построения границ $\sigma_{(n)}^\pm$. В разделе 10 рассмотрены точные решения: 1) полностью симметричные среды Дыхне [20]; 2) самосогласованные решения; 3) новые решения в форме Дыхне–Мендельсона. Получена обобщенная форма теоремы Келлера [13]. Исследованию роли структурных параметров, характеризующих соответствующие взаимодействия между неоднородностями, посвящен раздел 11. В разделах 10–12 подробно рассмотрен случай смеси двух однородных и изотропных компонентов. Установлено соответствие между статистическими свойствами СНС и концентрационной зависимостью параметра j , описывающего вклад трехчастичных взаимодействий в $\sigma_{(3)}^\pm$. В разделе 12 анализируются модели асимметричных и симметричных ячеек материков Миллера [19].

2. Переход к интегральным уравнениям

Рассмотрим уравнения стационарного тока в отсутствии внешнего магнитного поля:

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (2.2)$$

Уравнения (2.1) и (2.2) допускают представления

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad (2.3)$$

$$\mathbf{J} = \nabla \times \boldsymbol{\psi}. \quad (2.4)$$

Здесь φ и $\boldsymbol{\psi}$ — соответственно скалярный и векторный потенциалы. При совместном решении (2.1) и (2.2) используется материальное уравнение — закон Ома — в одной из двух форм:

$$\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E}, \quad J_k = \sigma_{ki}E_i; \quad \sigma = \sigma(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

$$\mathbf{E} = \rho\mathbf{J}, \quad E_i = \rho_{ik}J_k; \quad \rho = \rho(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

где случайные тензорные поля σ и ρ связаны соотношениями

$$\sigma\rho = I, \quad \sigma_{ik}\rho_{kj} = \delta_{ij}. \quad (2.7)$$

Кроме этого должны быть заданы граничные условия, определяющие значения касательной составляющей поля \mathbf{E} и нормальной составляющей поля \mathbf{J} на поверхности S , ограничивающей объем V рассматриваемой среды.

Возможны две взаимно дуальные схемы решения уравнений (2.1) и (2.2):

1) σ -схема, базирующаяся на представлениях (2.3) и (2.5);

2) ρ -схема, использующая представления (2.4) и (2.6). Хотя они равноправны, более простой и поэтому более распространенной является первая. Однако можно показать, что в рамках каждой из них осуществим переход от одной схемы расчета к другой. Ниже это продемонстрировано на примере σ -схемы.

В σ -схеме уравнения (2.1) и (2.2) с учетом (2.3) и (2.5) сводятся к уравнению Лапласа

$$L\varphi = 0, \quad L = \nabla \cdot \sigma \nabla = \nabla_i \sigma_{ij} \nabla_j, \quad \sigma = \sigma(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in V, \quad (2.8)$$

решаемому с граничными условиями

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) &= \varphi_0, & \mathbf{r} \in S_1; & J_n(\mathbf{r}) = J_0, & \mathbf{r} \in S_2, \\ J_n &\equiv \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}, & S_1 \cup S_2 = S, \end{aligned} \quad (2.9)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор внешней нормали к поверхности S , ограничивающей V .

Для решения задачи (2.8), (2.9) введем функцию Грина уравнения Пуассона с однородными граничными условиями [93]

$$L^c G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad L^c = \nabla \cdot \sigma^c \nabla; \quad \mathbf{r}, \mathbf{r}' \in V, \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= 0, & \mathbf{r} \in S_1; & \mathbf{n} \cdot \sigma^c \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \\ \mathbf{r} \in S_2; & \mathbf{r}' \in V. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Здесь индексом "c" обозначены величины, относящиеся к среде сравнения (см. раздел 1), макроскопически (геометрия в целом, граничные условия) идентичной рассматриваемой СНС и отличающейся от нее лишь локальными значениями материальных характеристик.

Оператор L^c (2.10), поставленный в соответствие среде сравнения, трактуется нами в духе теории возмущений, вследствие чего он удовлетворяет обычным ограничениям, накладываемым на невозмущенный оператор, а именно:

1) известно решение задачи (2.8), (2.9) для L^c , имеющей вид

$$L^c \varphi^c = 0, \quad L^c = \nabla \cdot \sigma^c \nabla, \quad \mathbf{r} \in V, \quad (2.12)$$

$$\varphi^c(\mathbf{r}) = \varphi_0, \quad \mathbf{r} \in S_1; \quad J_n^c(\mathbf{r}) = J_0, \quad \mathbf{r} \in S_2; \quad (2.13)$$

2) оператор возмущения $L' \equiv L - L^c$ в определенном смысле мал, что обеспечивает сходимость ряда возмущений (см. раздел 4).

Легко видеть, что из (2.8) и (2.12) следует уравнение

$$\begin{aligned} L^c \varphi' &= -L' \varphi, \quad \mathbf{r} \in V; \\ L' &= \nabla \cdot \sigma' \nabla, \quad \varphi' \equiv \varphi - \varphi^c, \end{aligned} \quad (2.14)$$

решаемое при граничных условиях

$$\varphi' = 0, \quad \mathbf{r} \in S_1; \quad J'_n = 0, \quad \mathbf{r} \in S_2; \quad \mathbf{J}' \equiv \mathbf{J} - \mathbf{J}^c, \quad (2.15)$$

вытекающих из (2.9) и (2.13).

Рассмотрим поле $\delta\varphi \equiv \varphi'$ в объеме V среди сравнения. Тогда правая часть уравнения (2.14) имеет смысл источника, порождающего поле $\delta\varphi$. Соответствующие потенциалу $\delta\varphi$ напряженность $\delta\mathbf{E}$ и плотность тока $\delta\mathbf{J}$ равны

$$\varphi' = \delta\varphi \Rightarrow \delta\mathbf{E} = -\nabla\delta\varphi = \mathbf{E}', \quad \delta\mathbf{J} = \sigma^c \delta\mathbf{E} \neq \mathbf{J}'. \quad (2.16)$$

В силу граничных условий (2.15) потенциал $\delta\varphi$ обращается в нуль на части S_1 поверхности S , тогда как нормальная составляющая поля $\delta\mathbf{J}$ отлична от нуля на части S_2 поверхности S .

Введя вектор "поляризованного" тока $\mathbf{T} \equiv \mathbf{J} - \sigma^c \mathbf{E} = \sigma' \mathbf{E}$, представим задачу (2.14)–(2.16) в виде

$$L^c \delta\varphi = -g, \quad g = -\nabla \cdot \mathbf{T}, \quad \mathbf{T} = \sigma' \mathbf{E}, \quad \mathbf{r} \in V, \quad (2.17)$$

$$\delta\varphi = 0, \quad \mathbf{r} \in S_1; \quad \delta J_n = \mathbf{n} \cdot \delta\mathbf{J} = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}, \quad \mathbf{r} \in S_2. \quad (2.18)$$

Согласно обобщенной формуле Грина [93] имеем

$$\begin{aligned} \int dV [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) L^c \delta\varphi(\mathbf{r}) - \delta\varphi(\mathbf{r}) L^c G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)] + \\ + \oint d\mathbf{S} \cdot [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \delta\mathbf{J}(\mathbf{r}) + \delta\varphi(\mathbf{r}) \sigma^c \nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)] = 0. \end{aligned}$$

Отсюда, учитывая (2.10), (2.11), (2.17) и (2.18), для возмущенного потенциала получаем [35]

$$\begin{aligned} \delta\varphi(\mathbf{r}_1) &= \int G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) g(\mathbf{r}_2) dV(\mathbf{r}_2) + \\ &+ \oint G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \mathbf{T}(\mathbf{r}_2) \cdot d\mathbf{S}(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Переходя в (2.19) от поверхностного интеграла к объемному, окончательно имеем

$$\begin{aligned} \varphi'(\mathbf{r}_1) &= \int \mathbf{T}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla^{(2)} G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) dV(\mathbf{r}_2); \\ \nabla^{(a)} &\equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a}, \quad a = 1, 2. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Для возмущенного поля \mathbf{E}' согласно (2.16) и (2.20) найдем

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_1) = - \int \mathbf{T}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla^{(2)} \nabla^{(1)} G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) dV(\mathbf{r}_2). \quad (2.21)$$

Следуя [21, 27, 34, 35], введем тензорный интегральный оператор \hat{Q} , ядро которого $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ связано с функцией Грина $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ равенством

$$Q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\nabla^{(1)} \otimes \nabla^{(2)} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (2.22)$$

или в компонентах

$$Q_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\nabla_i^{(1)} \nabla_j^{(2)} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.23)$$

Тогда решение (2.21) может быть переписано в виде [27, 34, 35]

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^c + \hat{Q}\mathbf{T} = \mathbf{E}^c + \hat{X}\mathbf{E}, \quad \hat{X} \equiv \hat{Q}\sigma', \quad \mathbf{T} = \sigma' \mathbf{E}. \quad (2.24)$$

Таким образом, задача нахождения поля \mathbf{E} с помощью дифференциального уравнения (2.8), решаемого при граничных условиях (2.9), сведена к решению неоднородного интегрального уравнения второго рода [93]. В процессе решения этого уравнения устанавливается связь между неизвестным полем \mathbf{E} и известным \mathbf{E}^c .

Нетрудно видеть, что в силу (2.1) и (2.10) \hat{Q} удовлетворяет равенствам

$$\nabla \times \hat{Q} = \hat{O}, \quad \nabla \cdot \hat{P} = \hat{O}, \quad (2.25)$$

$$-\hat{P} \equiv \sigma^c \hat{I} + \sigma^c \hat{Q} \sigma^c, \quad -\hat{Q} = \rho^c \hat{I} + \rho^c \hat{P} \rho^c; \quad \sigma^c \rho^c = I, \quad (2.26)$$

где $\hat{I}(I)$ — единичный оператор (тензор) второго ранга.

Выразив \hat{Q} через \hat{P} , после несложных преобразований перейдем от (2.24) к уравнению [27, 35]

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \mathbf{J}^c + \hat{P}\mathbf{H} = \mathbf{J}^c + \hat{Y}\mathbf{J}, \quad \hat{Y} \equiv \hat{P}\rho', \\ \mathbf{H} &= \rho' \mathbf{J} = -\rho^c \mathbf{T}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

совпадающему по форме с (2.24) и позволяющему выразить неизвестное поле \mathbf{J} через известное \mathbf{J}^c . Здесь \mathbf{H} — вектор "поляризованной" напряженности, подобный вектору \mathbf{T} . Уравнения (2.24) и (2.27) эквивалентны друг другу и будут использоваться нами на равных основаниях.

Наряду с (2.24) и (2.27) нам понадобятся уравнения [37]

$$\mathbf{E} = \langle \mathbf{E} \rangle + \hat{R}\hat{X}\mathbf{E}, \quad \mathbf{J} = \langle \mathbf{J} \rangle + \hat{R}\hat{Y}\mathbf{J}, \quad (2.28)$$

где оператор \hat{R} выделения случайной составляющей некоторого поля F определяется соотношениями [27]

$$(\hat{R}F)^{n+1} \equiv F(\hat{R}F)^n - \langle F(\hat{R}F)^n \rangle, \quad n \geq 0. \quad (2.29)$$

В отличие от (2.24) и (2.27) уравнения (2.28) не содержат полей \mathbf{E}^c и \mathbf{J}^c соответственно. Последнее обстоятельство существенно упрощает расчет ТЭП.

Переход от (2.24), (2.27) к (2.28) необходим при решении задач Дирихле и Неймана, когда выполняются

равенства [37]

$$\widehat{\bar{Q}}\tilde{\mathbf{f}}_1 = 0, \quad \{\mathbf{e}^c - \langle \mathbf{e} \rangle\} = 0, \quad \tilde{\mathbf{f}}_1 \in \vec{\mathcal{H}}, \quad (2.30a)$$

$$\widehat{\bar{P}}\tilde{\mathbf{f}}_2 = 0, \quad \{\mathbf{j}^c - \langle \mathbf{j} \rangle\} = 0, \quad \tilde{\mathbf{f}}_2 \in \vec{\mathcal{H}}. \quad (2.30b)$$

Здесь использованы обозначения (3.2), (3.25), а $\tilde{\mathbf{f}}_a$ — постоянные векторы. Для однородной среды сравнения и граничных условий (1.4), (1.5) из (2.30) имеем

$$\mathbf{e}^c = \langle \mathbf{e} \rangle, \quad \widehat{\bar{Q}}\mathbf{f}_1 = \widehat{\bar{Q}}\bar{R}\mathbf{f}_1, \quad \mathbf{f}_1 \in \vec{\mathcal{H}}, \quad (2.31a)$$

$$\mathbf{j}^c = \langle \mathbf{j} \rangle, \quad \widehat{\bar{P}}\mathbf{f}_2 = \widehat{\bar{P}}\bar{R}\mathbf{f}_2, \quad \mathbf{f}_2 \in \vec{\mathcal{H}}, \quad (2.31b)$$

в первом и втором случаях соответственно, где $\langle \mathbf{f}_a \rangle = \tilde{\mathbf{f}}_a$.

3. Операторы проектирования

В данной работе рассматриваются симметричные (эрмитовы) операторы, т.е. операторы, удовлетворяющие равенству $\widehat{S}^{(+)} = \widehat{S}$ [93], где индекс (+) означает операцию сопряжения, понимаемую в смысле

$$(\mathbf{E}_1, \widehat{S}\mathbf{E}_2) \equiv (\widehat{S}^{(+)}\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2). \quad (3.1)$$

Здесь скалярное произведение двух векторных функций \mathbf{E}_1 и \mathbf{E}_2 в гильбертовом пространстве $\vec{\mathcal{H}}$, обозначаемое посредством $(\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2)$, определим равенством

$$(\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2) \equiv \int \langle \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2 \rangle dv \equiv \{\langle \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2 \rangle\}, \quad dv \equiv \frac{dV}{V}, \quad (3.2)$$

где фигурными скобками обозначено усреднение по объему.

Естествен вопрос о соотношении двух способов усреднения: статистического (1.2) и объемного (3.2). Обычно он решается в форме эргодической гипотезы (или теоремы) [8, 14, 20, 30, 31, 37, 94]. Поле называется эргодическим (или самоусредняющимся [20, 95–98]), если выполняется предельный переход

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \langle \{\xi''\}^2 \rangle = 0, \quad \{\xi''\} = \{\xi\}''; \quad f'' \equiv f - \langle f \rangle, \quad (3.3)$$

обозначаемый посредством

$$\text{l.i.m. } \{\xi\} = \langle \{\xi\} \rangle \quad (3.4)$$

и представляющий сходимость в среднем квадратичном. Вместо (3.4) будем писать [8]

$$\{\xi\} = \langle \{\xi\} \rangle = \{\xi\}, \quad (3.5)$$

понимая это равенство в смысле предельного перехода (3.4). В случае статистически однородного поля определение (3.4) упрощается:

$$\text{l.i.m. } \{\xi\} = \{\langle \xi \rangle\} = \langle \xi \rangle = \text{const}, \quad (3.6)$$

а статистическое усреднение оказывается полным. Аналогично (3.5) вместо (3.6) будем писать

$$\{\xi\} = \langle \xi \rangle. \quad (3.7)$$

Эквивалентность двух способов усреднения существенно упрощает задачу получения статистической информации

о СНС, которая (информация) оказывается сосредоточенной лишь в одной реализации случайного поля $\xi(\mathbf{r})$ и может быть получена с помощью одного образца. Часто предельный переход $V \rightarrow \infty$ в (3.6) становится излишним, а равенство (3.7) справедливым с достаточной точностью при конечных V .

В рассматриваемом случае действительных полей операция сопряжения (3.1) сводится к транспонированию. Введенный в (2.22), (2.23) оператор \widehat{Q} с учетом (3.1), (3.2) может быть представлен в виде [35]

$$\widehat{Q} = -\nabla \widehat{G} \otimes \nabla^{(+)}, \quad (3.8)$$

где \widehat{G} — интегральный оператор, ядро которого — функция Грина $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (2.10), (2.11) в силу теоремы взаимности удовлетворяет равенству [30, 93]

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \quad (3.9)$$

эквивалентному условию симметричности для оператора $\widehat{G}: \widehat{G}^{(+)} = \widehat{G}$.

Легко показать, что \widehat{Q} — симметричный оператор. Действительно, действуя оператором (+) на обе части (3.8) и принимая во внимание равенства $(\widehat{S}^{(+)})^{(+)} = \widehat{S}$, $(\widehat{S}_1 \widehat{S}_2)^{(+)} = \widehat{S}_2^{(+)} \widehat{S}_1^{(+)}$ и $\widehat{G}^{(+)} = \widehat{G}$, записываем

$$\widehat{Q}^{(+)} = -(\nabla \widehat{G} \otimes \nabla^{(+)})^{(+)} = -(\nabla^{(+)})^{(+)} \widehat{G}^{(+)} \otimes \nabla^{(+)} = \widehat{Q}. \quad (3.10)$$

Аналогичным образом из (2.26) имеем

$$\widehat{P}^{(+)} = \widehat{P}.$$

Рассмотрим равенство

$$\int \mathbf{E}' \cdot \mathbf{J}' dv = \int \varphi' \nabla \cdot \mathbf{J}' dv - \oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}' \varphi', \quad (3.11)$$

в котором поверхностный интеграл обращается в нуль в силу граничных условий (2.15). Объемный же интеграл в правой части (3.11) равен нулю вследствие уравнения

$$\nabla \cdot \mathbf{J}' = 0; \quad \mathbf{J}' = \sigma^c \mathbf{E}' + \mathbf{T}, \quad (3.12)$$

полученного из (2.17). На языке скалярных произведений равенство (3.11) имеет вид

$$(\mathbf{E}', \mathbf{J}') = 0. \quad (3.13)$$

Принимая во внимание уравнения (2.24) и (2.27), а также эрмитовость \widehat{P} и \widehat{Q} , отсюда получаем

$$(\widehat{Q}\mathbf{T}, \widehat{P}\mathbf{H}) = (\mathbf{T}, \widehat{Q}^{(+)}\widehat{P}\mathbf{H}) = (\mathbf{T}, \widehat{Q}\widehat{P}\mathbf{H}) = (\mathbf{H}, \widehat{P}\widehat{Q}\mathbf{T}). \quad (3.14)$$

Равенства (3.14) позволяют вывести важные соотношения для операторов \widehat{P} и \widehat{Q} . Подставляя в (3.14) оператор \widehat{P} согласно (2.26) и выражая поле \mathbf{H} через \mathbf{T} посредством (2.27), находим

$$(\mathbf{T}, \widehat{Q}\mathbf{T}) + (\mathbf{T}, \widehat{Q}\sigma^c\widehat{Q}\mathbf{T}) = 0 \quad (3.15)$$

или в форме операторного равенства [34, 35]

$$\widehat{Q} + \widehat{Q}\sigma^c\widehat{Q} = \widehat{O}. \quad (3.16)$$

В силу положительности интегральной (квадратичной) формы $(\mathbf{E}', \rho^c \mathbf{E}')$ равенство (3.16) означает, что \widehat{Q} отрицателен в смысле неравенства $(\mathbf{T}, \widehat{Q}\mathbf{T}) \leq 0$ [99]. Аналогичным образом из (3.14) следует равенство

$$\widehat{P} + \widehat{P}\rho^c \widehat{P} = \widehat{O}. \quad (3.17)$$

В силу положительности интегральной формы $(\mathbf{J}', \rho^c \mathbf{J}')$ равенство (3.17) означает, что \widehat{P} отрицателен, т.е. $(\mathbf{H}, \widehat{P}\mathbf{H}) \leq 0$.

В приведенных выше выкладках фигурировали два поля: \mathbf{E} и $\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E}$, принадлежащие пространству $\vec{\mathcal{H}}$, но отличающиеся размерным множителем σ . Удобнее, однако, освободиться от этих различий, перейдя к полям одинаковой размерности. Этого можно достичь путем умножения \mathbf{E} и \mathbf{J} на симметричные положительные тензоры $\sqrt{\sigma^c}$ и $\sqrt{\rho^c}$ соответственно. Положительность и симметричность σ^c делает представление $\sigma^c = (\sqrt{\sigma^c})^2$ однозначным [99].

Введем обозначения для приведенных полей и операторов:

$$\mathbf{j} \equiv \sqrt{\rho^c} \mathbf{J}, \quad \mathbf{e} \equiv \sqrt{\sigma^c} \mathbf{E}; \quad \sqrt{\sigma^c} \sqrt{\rho^c} = I, \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \widehat{P} &\equiv -\sqrt{\rho^c} \widehat{P} \sqrt{\rho^c}, & \widehat{P}^{(+)} &= \widehat{P}; \\ \widehat{Q} &\equiv -\sqrt{\sigma^c} \widehat{Q} \sqrt{\sigma^c}, & \widehat{Q}^{(+)} &= \widehat{Q}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

С учетом (3.18), (3.19) уравнения (2.24), (2.27) и (2.28) принимают вид

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}^c - \widehat{Q}\bar{\sigma}'\mathbf{e}, \quad \sigma' \equiv \sqrt{\sigma^c} \bar{\sigma}' \sqrt{\sigma^c}, \quad \mathbf{e}^c \equiv \sqrt{\sigma^c} \mathbf{E}^c, \quad (3.20)$$

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}^c - \widehat{P}\bar{\rho}'\mathbf{j}, \quad \rho' \equiv \sqrt{\rho^c} \bar{\rho}' \sqrt{\rho^c}, \quad \mathbf{j}^c = \mathbf{e}^c, \quad (3.21)$$

$$\mathbf{e} = \langle \mathbf{e} \rangle - \widehat{R}\widehat{Q}\bar{\sigma}'\mathbf{e}, \quad \mathbf{j} = \langle \mathbf{j} \rangle - \widehat{R}\widehat{P}\bar{\rho}'\mathbf{j}, \quad (3.22)$$

два операторных равенства (2.26) сводятся к одному

$$\widehat{P} + \widehat{Q} = \widehat{I}, \quad (3.23)$$

а вместо равенств (3.16), (3.17) имеем [34, 35]

$$\widehat{Q}^2 = \widehat{Q}, \quad \widehat{P}^2 = \widehat{P}. \quad (3.24)$$

В силу (3.23), (3.24) положительные симметричные операторы \widehat{Q} и \widehat{P} обладают всеми необходимыми свойствами проектирующих операторов (проекторов) [99]. Таким образом, пространство $\vec{\mathcal{H}}$ представимо в виде суммы

$$\vec{\mathcal{H}} = \vec{\mathcal{H}}_1 \oplus \vec{\mathcal{H}}_2 \quad (3.25)$$

двух ортогональных подпространств $\vec{\mathcal{H}}_1$ и $\vec{\mathcal{H}}_2$, элементами которых являются векторы $\widehat{Q}\mathbf{f}$ и $\widehat{P}\mathbf{f}$ соответственно. Для проекторов \widehat{Q} и \widehat{P} справедливы неравенства [99]

$$\widehat{O} \leq \widehat{Q} \leq \widehat{I}, \quad \widehat{O} \leq \widehat{P} \leq \widehat{I}, \quad (3.26)$$

где левые значения достигаются, когда $\vec{\mathcal{H}}_1$ или $\vec{\mathcal{H}}_2$ состоит из одного нулевого элемента, а правые, если $\vec{\mathcal{H}}_1$ или $\vec{\mathcal{H}}_2$ совпадает с $\vec{\mathcal{H}}$.

Подобно (2.24), (2.27) и (2.28) перепишем (3.20), (3.21) и (3.22) в форме

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}^c + \widehat{X}\mathbf{e}, \quad \widehat{X} \equiv -\widehat{Q}\bar{\sigma}', \quad \bar{\sigma}' = \bar{\sigma} - I, \quad (3.27)$$

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}^c + \widehat{Y}\mathbf{j}, \quad \widehat{Y} \equiv -\widehat{P}\bar{\rho}', \quad \bar{\rho}' = \bar{\rho} - I, \quad (3.28)$$

$$\mathbf{e} = \langle \mathbf{e} \rangle + \widehat{R}\widehat{X}\mathbf{e}, \quad \mathbf{j} = \langle \mathbf{j} \rangle + \widehat{R}\widehat{Y}\mathbf{j}. \quad (3.29)$$

В соответствии с (3.23) поля \mathbf{e} и \mathbf{j} могут быть разложены на суммы взаимно ортогональных составляющих, принадлежащих подпространствам $\vec{\mathcal{H}}_1$ и $\vec{\mathcal{H}}_2$. При этом оказывается, что поля \mathbf{e}' и \mathbf{j}' принадлежат только $\vec{\mathcal{H}}_1$ и $\vec{\mathcal{H}}_2$ соответственно. Это обстоятельство позволяет вместо (3.27), (3.28) записать

$$\mathbf{e}' = \widehat{X}\mathbf{e} = \vec{\mathcal{E}}_1 + \widehat{X}\mathbf{e}', \quad \widehat{X}^k \mathbf{e}^c \equiv \vec{\mathcal{E}}_k \in \vec{\mathcal{H}}_1, \quad k \geq 1, \quad (3.30)$$

$$\mathbf{j}' = \widehat{Y}\mathbf{j} = \vec{\mathcal{J}}_1 + \widehat{Y}\mathbf{j}', \quad \widehat{Y}^k \mathbf{j}^c \equiv \vec{\mathcal{J}}_k \in \vec{\mathcal{H}}_2, \quad k \geq 1, \quad (3.31)$$

где оператор \widehat{X} осуществляет отображение в себя подпространства $\vec{\mathcal{H}}_1$, а оператор \widehat{Y} — подпространства $\vec{\mathcal{H}}_2$. Таким образом, по терминологии [99, 100] уравнения (3.30), (3.31) могут быть истолкованы как функциональные уравнения в подпространствах $\vec{\mathcal{H}}_1$ и $\vec{\mathcal{H}}_2$ соответственно.

В заключение этого раздела рассмотрим свойства оператора \widehat{R} (2.29). Наряду с \widehat{R} введем оператор \widehat{M} статистического усреднения, связанный с \widehat{R} равенством

$$\widehat{R} + \widehat{M} = \widehat{I}, \quad \widehat{M}\mathbf{F} \equiv \langle \mathbf{F} \rangle. \quad (3.32)$$

Легко видеть, что операторы \widehat{R} и \widehat{M} удовлетворяют соотношениям

$$\widehat{R}^2 = \widehat{R}, \quad \widehat{R}^{(+)} = \widehat{R}; \quad \widehat{M}^2 = \widehat{M}, \quad \widehat{M}^{(+)} = \widehat{M};$$

$$\widehat{R}\widehat{M} = \widehat{M}\widehat{R} = \widehat{O}, \quad (3.33)$$

$$\widehat{O} \leq \widehat{R} \leq \widehat{I}, \quad \widehat{O} \leq \widehat{M} \leq \widehat{I}, \quad (3.34)$$

подобным (3.24) и (3.26). Поэтому \widehat{R} и \widehat{M} являются проектирующими операторами. Таким образом, пространство $\vec{\mathcal{H}}$ представимо в виде суммы

$$\vec{\mathcal{H}} = \vec{\mathcal{H}}^R \oplus \vec{\mathcal{H}}^M, \quad (3.35)$$

где

$$\vec{\mathcal{H}}^R = \vec{\mathcal{H}}_1^R \oplus \vec{\mathcal{H}}_2^R, \quad \vec{\mathcal{H}}^M = \vec{\mathcal{H}}_1^M \oplus \vec{\mathcal{H}}_2^M, \quad (3.26)$$

двух ортогональных подпространств $\vec{\mathcal{H}}^R$ и $\vec{\mathcal{H}}^M$, элементами которых являются соответственно случайные $\widehat{R}\mathbf{f}$ ($\langle \widehat{R}\mathbf{f} \rangle = 0$) и регулярные $\widehat{M}\mathbf{f}$ векторы. Каждое из подпространств $\vec{\mathcal{H}}_1$, $\vec{\mathcal{H}}_2$ также представимо в форме (3.35):

$$\vec{\mathcal{H}}_a = \vec{\mathcal{H}}_a^R \oplus \vec{\mathcal{H}}_a^M; \quad a = 1, 2. \quad (3.37)$$

Из уравнений (3.29) находим

$$\mathbf{e}'' = \widehat{R}\widehat{X}\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 + \widehat{R}\widehat{X}\mathbf{e}'', \quad (\widehat{R}\widehat{X})^k \langle \mathbf{e} \rangle \equiv \mathbf{e}_k \in \vec{\mathcal{H}}_1^R, \quad k \geq 1, \quad (3.38)$$

$$\mathbf{j}'' = \widehat{R}\widehat{Y}\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \widehat{R}\widehat{Y}\mathbf{j}'', \quad (\widehat{R}\widehat{Y})^k \langle \mathbf{j} \rangle \equiv \mathbf{j}_k \in \vec{\mathcal{H}}_2^R, \quad k \geq 1. \quad (3.39)$$

Не приводя дополнительных разъяснений, запишем аналогичные соотношения для полей вида $\hat{M}\mathbf{f}$. Действуя оператором \hat{M} на обе части уравнений (3.27) и (3.28), получаем

$$\langle \mathbf{e}' \rangle = -\hat{Q}(\hat{\sigma}^* - \hat{I})\mathbf{e}^c - \hat{Q}(\hat{\sigma}^* - \hat{I})\langle \mathbf{e}' \rangle, \quad \langle \mathbf{e}' \rangle \in \vec{\mathcal{H}}_1^M, \quad (3.40)$$

$$\langle \mathbf{j}' \rangle = -\hat{P}(\hat{\rho}^* - \hat{I})\mathbf{j}^c - \hat{P}(\hat{\rho}^* - \hat{I})\langle \mathbf{j}' \rangle, \quad \langle \mathbf{j}' \rangle \in \vec{\mathcal{H}}_2^M. \quad (3.41)$$

В последующем исследовании основную роль играют поля (3.30), (3.31), (3.38) и (3.39).

4. Условия сходимости метода возмущений в теории неоднородных сред

Решение функциональных уравнений (3.38) в $\vec{\mathcal{H}}_1$ и (3.39) в $\vec{\mathcal{H}}_2$ или (3.29) в $\vec{\mathcal{H}}$ сводится к проблеме отыскания операторов \hat{A} и \hat{B} вида [37, 99]

$$\hat{A} = (\hat{I} - \hat{R}\hat{X})^{-1}, \quad \hat{B} = (\hat{I} - \hat{R}\hat{Y})^{-1}, \quad (4.1)$$

которые при выполнении условий сходимости представимы в форме рядов Неймана

$$\hat{A} = \sum_{k=0}^{\infty} (\hat{R}\hat{X})^k, \quad \hat{B} = \sum_{k=0}^{\infty} (\hat{R}\hat{Y})^k. \quad (4.2)$$

При этом для полей \mathbf{e} и \mathbf{j} с учетом (3.38), (3.39) получим разложения

$$\mathbf{e} = \hat{A}\langle \mathbf{e} \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{e}_k, \quad \mathbf{e}'' = \hat{A}\mathbf{e}_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{e}_k, \quad \mathbf{e}_0 \equiv \langle \mathbf{e} \rangle, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{j} = \hat{B}\langle \mathbf{j} \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{j}_k, \quad \mathbf{j}'' = \hat{B}\mathbf{j}_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{j}_k, \quad \mathbf{j}_0 \equiv \langle \mathbf{j} \rangle, \quad (4.4)$$

именуемые рядами возмущений (итераций).

Ниже рассматривается равномерная (по норме) сходимость рядов (4.2)–(4.4). Будем говорить [99], что последовательность

$$\hat{A}_{(n)} \equiv \sum_{k=0}^n (\hat{R}\hat{X})^k$$

сходится к \hat{A} по норме, если $\|\hat{A}_{(n)} - \hat{A}\| \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Понятие нормы, как известно, непосредственно связано со скалярным произведением (3.2). По определению [93, 99, 100] имеем

$$\|\hat{S}\| = \sup_{\mathbf{f} \neq 0} \frac{\|\hat{S}\mathbf{f}\|}{\|\mathbf{f}\|}, \quad \|\mathbf{f}\|^2 \equiv (\mathbf{f}, \mathbf{f}), \quad \mathbf{f} \in \vec{\mathcal{H}}. \quad (4.5)$$

Согласно теореме Банаха [99, 100] оператор $(\hat{I} - \hat{R}\hat{X})$ имеет непрерывный обратный оператор \hat{A} вида (4.1), если норма оператора $\hat{R}\hat{X}$ удовлетворяет неравенству

$$\|\hat{R}\hat{X}\| \leq k_1 < 1.$$

Необходимым и достаточным условием сходимости ряда \hat{A} из (4.2) является [100] выполнение при некотором $n \geq 1$ неравенства

$$\|(\hat{R}\hat{X})^n\| \leq k_1 < 1.$$

Учитывая, что норма проекторов равна единице [99], достаточное условие сходимости (ДУС) ряда \hat{A} из (4.2) запишем в виде

$$\|\hat{R}\hat{X}\| \leq \|\hat{R}\| \|\hat{X}\| = \|\hat{X}\| \leq \|\hat{Q}\| \|\bar{\sigma}'\| = \|\bar{\sigma}'\| \leq k_1 < 1. \quad (4.6)$$

В качестве ДУС ряда \hat{B} из (4.2) имеем

$$\|\hat{R}\hat{Y}\| \leq \|\hat{R}\| \|\hat{Y}\| = \|\hat{Y}\| \leq \|\hat{P}\| \|\bar{\rho}'\| = \|\bar{\rho}'\| \leq k_2 < 1. \quad (4.7)$$

Переписывая неравенства (4.6) и (4.7) в операторной (тензорной) форме, получаем [34, 37]

$$0 \leq |\bar{\sigma}'| \leq k_1 I, \quad -k_1 I \leq \bar{\sigma}' \leq k_1 I, \quad 0 \leq k_1 < 1, \quad (4.8)$$

$$0 \leq |\bar{\rho}'| \leq k_2 I, \quad -k_2 I \leq \bar{\rho}' \leq k_2 I, \quad 0 \leq k_2 < 1, \quad (4.9)$$

где модуль оператора (тензора) \hat{s} удовлетворяет [99] соотношениям $|\hat{s}| \equiv \sqrt{\hat{s}^2} \geq \pm \hat{s}$.

В исходных обозначениях ДУС (4.8), (4.9) рядов (4.2) записываются как

$$-k_1 \sigma^c \leq \sigma' \leq k_1 \sigma^c, \quad (1 - k_1)\sigma^c \leq \sigma \leq (1 + k_1)\sigma^c, \quad (4.10a)$$

$$-k_2 \rho^c \leq \rho' \leq k_2 \rho^c, \quad (1 - k_2)\rho^c \leq \rho \leq (1 + k_2)\rho^c. \quad (4.10b)$$

Легко видеть, что в силу равенств

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}' &= \bar{\sigma} - I = \sqrt{\bar{\sigma}}(I - \bar{\rho})\sqrt{\bar{\sigma}} = -\sqrt{\bar{\sigma}}\bar{\rho}'\sqrt{\bar{\sigma}}, \\ \sigma\rho &= \sigma^c\rho^c = I \end{aligned} \quad (4.11)$$

для одной и той же среды сравнения $(\sigma^c\rho^c = I)$ и знакоопределенных $\bar{\sigma}'$ и $\bar{\rho}'$ справедливы соотношения

$$\bar{\sigma}' \geq 0 \Leftrightarrow \bar{\rho}' \leq 0. \quad (4.12)$$

Можно показать, что (4.8) и (4.9) представляют собой также ДУС рядов

$$\hat{a} = (\hat{I} - \hat{X})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{X}^k, \quad \hat{b} = (\hat{I} - \hat{Y})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{Y}^k, \quad (4.13)$$

возникающих при решении функциональных уравнений (3.27), (3.28) или (3.30), (3.31). Следует отметить, что в силу вытекающих из (4.6), (4.7) неравенств

$$\|\hat{R}\hat{X}\| \leq \|\hat{X}\|, \quad \|\hat{R}\hat{Y}\| \leq \|\hat{Y}\| \quad (4.14)$$

ряды (4.13) сходятся медленнее, чем ряды (4.2).

Операторы (4.1), (4.2) связаны (попарно) соотношениями [27]

$$\hat{A} = \hat{a}\langle \hat{a} \rangle^{-1}, \quad \hat{B} = \hat{b}\langle \hat{b} \rangle^{-1}, \quad (4.15)$$

позволяющими переходить от одних разложений к другим.

Поскольку \hat{A} и \hat{B} не зависят от параметров σ^c и ρ^c соответственно [34], выбор этих параметров регулируется лишь неравенствами (4.10). Для определения границ, внутри которых лежат значения σ^c и ρ^c , удовлетворяющие условиям сходимости рядов (4.2), перепишем

(4.10) в форме

$$\sigma(1+k_1)^{-1} \leq \sigma^c \leq \sigma(1-k_1)^{-1}, \quad 0 \leq k_1 < 1, \quad (4.16a)$$

$$\rho(1+k_2)^{-1} \leq \rho^c \leq \rho(1-k_2)^{-1}, \quad 0 \leq k_2 < 1. \quad (4.16b)$$

Видно, что существенные ограничения на σ^c и ρ^c накладывают лишь левые части неравенств (4.16).

Во многих работах, посвященных решению подобных задач, проблема сходимости используемых рядов существует лишь в неявном виде. Обычно предполагают существование необходимого малого параметра [4, 8, 11, 12, 14, 32, 33]. Однако в основе количественных оценок малости этого параметра лежат, как правило, лишь интуитивные соображения. Вследствие этого ограничения, накладываемые на малый параметр, часто оказываются либо чрезмерно сильными, либо недостаточными для обеспечения сходимости рассматриваемых рядов. К первой группе относятся неравенства [4, 8, 14, 33]

$$\sup_{\mathbf{r}} |\bar{\sigma}'(\mathbf{r})| \ll 1; \quad |\langle (\bar{\sigma}_0'')^n \rangle| \ll 1, \quad n \geq 2. \quad (4.17)$$

Неравенство же [32] (см. обозначение (6.17))

$$\langle \bar{\sigma}_0'' \bar{Q} \bar{\sigma}_0'' \rangle < I; \quad \langle \bar{\sigma}_0 \rangle \equiv I \Rightarrow \sigma^c = \langle \sigma \rangle, \quad (4.18)$$

как показано в [36], является простейшим, причем наименее жестким, в бесконечной цепи неравенств, обеспечивающих выполнение условия сходимости ряда \hat{A} (4.2) или \hat{a} (4.13).

Выполнение ДУС в одной из форм (4.6), (4.8), (4.10a), (4.16a) для ряда \hat{A} и (4.7), (4.9), (4.10b), (4.16b) для ряда \hat{B} обеспечивает существование \hat{A} и \hat{B} в формах (4.1) и (4.15) и их разложений в ряды Неймана (4.2).

На рисунке 2а представлены графики функций $\xi = \xi(x)$ (где $\xi \equiv \sigma^c/\sigma_2$, $x \equiv \sigma_1/\sigma_2$), определяющих характерные области значений параметра σ^c в случае смеси двух изотропных компонентов. Обозначения используемых при построениях функций ($\xi = 1/2$, $\xi = 1$, $\xi = 2$, $\xi = x/2$, $\xi = x$, $\xi = 2x$, $\xi = |1-x|/2$, $\xi = 2x/|1-x|$) даны по периметру квадрата.

Значения ξ , лежащие выше жирной сплошной линии, образуют множество значений ξ , удовлетворяющих ДУС в форме (4.16a). Значения ξ , лежащие ниже жирной штриховой линии, образуют множество значений ξ , удовлетворяющих ДУС в форме (4.16b). Значения ξ , принадлежащие обоим этим множествам, обеспечивают сходимость обоих рядов (5.3) и (5.4). Область значений ξ , не удовлетворяющая ДУС ни в форме (4.16a), ни в форме (4.16b), — запрещенная область — на рис. 2 отмечена косой штриховкой.

Значения ξ , лежащие выше тонкой сплошной линии, образуют множество значений ξ , для которых ряд (5.3) знакопостоянный, а ряд (5.4) знакопеременный. Значения ξ , лежащие ниже тонкой штриховой линии и выше жирной сплошной, обеспечивают сходимость ряда (5.3) при условии его знакопеременности. Эта область выделена горизонтальной штриховкой. Аналогичным образом определяются области сходимости, знакопостоянства и знакопеременности

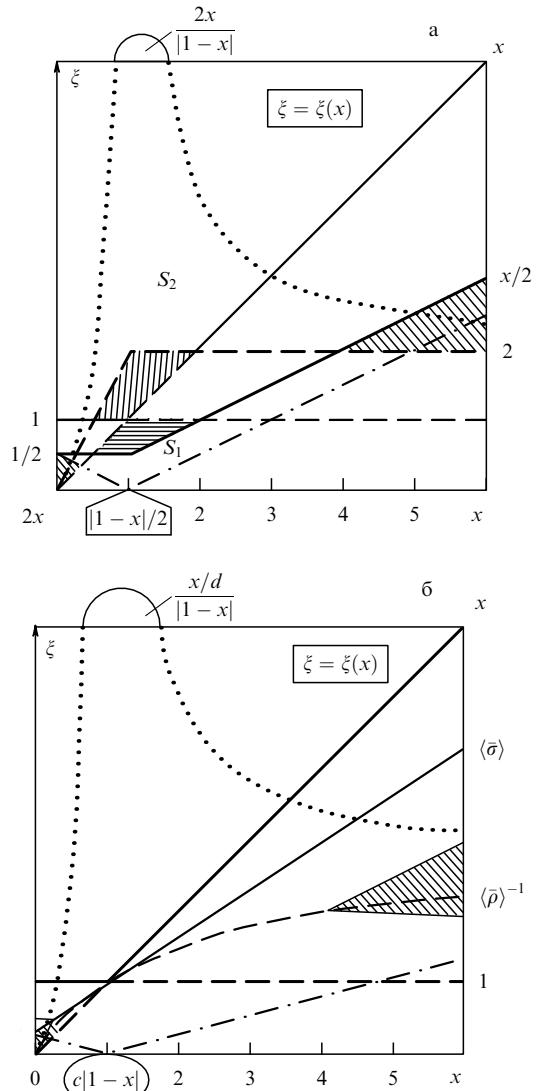


Рис. 2.

ряда (5.4). Значения ξ , обеспечивающие сходимость ряда (5.4) при условии его знакопеременности, принадлежат областям, выделенным вертикальной штриховкой.

Наряду с ДУС (4.8) и (4.9) рассмотрим более слабые ограничения (см. (6.17))

$$\langle \bar{\sigma}'' \bar{Q} \bar{\sigma}'' \rangle \leq I, \quad \langle \bar{\rho}'' \bar{P} \bar{\rho}'' \rangle \leq I, \quad (4.19)$$

которые для смеси двух изотропных компонентов принимают вид

$$\xi \geq c|1-x|, \quad c^2 \equiv \bar{Q}v_1v_2, \quad v_1 + v_2 = 1, \quad (4.20a)$$

$$\xi \leq \frac{x/d}{|1-x|}, \quad d^2 \equiv \bar{P}v_1v_2, \quad \bar{P} + \bar{Q} = 1. \quad (4.20b)$$

Значения ξ , лежащие выше штрихпунктирной линии на рис. 2а, образуют множество значений ξ , удовлетворяющих критерию (4.20a) при условиях $\bar{Q} = 1$, $v_1 = 1/2$, когда $c = c_{\max} = 1/2$ и площадь S_1 части квадрата, заключенной между жирной сплошной и штрихпунктирной линиями, достигает минимума. Значения ξ , лежащие ниже пунктирной линии, образуют множество значений

ξ , удовлетворяющих критерию (4.20б) при условиях $\bar{P} = 1$, $v_1 = 1/2$, когда $d = d_{\max} = 1/2$ и площадь S_2 части квадрата, заключенной между жирной штриховой и пунктирной линиями, достигает минимума. Значения ξ , принадлежащие множеству S_1 , удовлетворяют критерию (4.20а) и не удовлетворяют ДУС (4.16а). Поэтому такие значения не могут использоваться при построении сходящегося ряда (5.3). Аналогично, значения ξ , принадлежащие области S_2 , нарушают ДУС (4.16б), вследствие чего не могут быть использованы при построении сходящегося ряда (5.4).

На рисунке 2б жирными линиями выделены области знакопределенности рядов (5.3) и (5.4). Тонкими линиями изображены значения $\xi = \langle \bar{\sigma} \rangle$ (сплошная линия) и $\xi = \langle \bar{\rho} \rangle^{-1}$ (штриховая линия) для $v_2 = 1/3$. Штрихпунктирная и пунктирная линии имеют тот же смысл, что и на рис. 2а, но при условиях $v_2 = \bar{Q} = 1/3$, $v_1 = \bar{P} = 2/3$. Значения $\xi = \langle \bar{\sigma} \rangle$, принадлежащие левому треугольнику, и $\xi = \langle \bar{\rho} \rangle^{-1}$, принадлежащие правому треугольнику запрещенной области, не могут использоваться при построении сходящихся рядов (5.3) и (5.4).

Из рисунка 2б видно, что значения $\sigma^c = \langle \sigma \rangle$ (линия $\xi = \langle \bar{\sigma} \rangle$) всюду удовлетворяют критерию сходимости (4.18) работы [32]. Однако часть этой линии пересекает левый треугольник запрещенной области, что означает невыполнение ДУС (4.16а). Аналогично в случае $\xi = \langle \bar{\rho} \rangle^{-1}$.

Выбор $\sigma^c = \langle \sigma \rangle$ (или $\rho^c = \langle \rho \rangle$) естествен, но никак не связан с ДУС. При этом само значение σ^c имеет смысл нулевого уровня флуктуаций, который в известной степени произволен. Правильный (т.е. согласованный с ДУС ряда (5.3)) выбор σ^c позволяет получить сходящийся ряд для любых флуктуаций поля $\sigma(\mathbf{r})$. Аналогичным образом решается вопрос о выборе ρ^c — нулевого уровня флуктуаций поля $\rho(\mathbf{r})$, дуального полю $\sigma(\mathbf{r})$.

Существующие методы расчета $\hat{\sigma}_*$ (ТЭП), и модельные, и строго аналитические, сводят, как правило, решение задачи расчета $\hat{\sigma}_*$ к разложению ТЭП по соответствующему малому параметру, наличие которого, однако, не гарантирует сходимость исследуемого ряда. Для этого необходимо выполнение корректно полученных условий (например, ДУС в форме (4.8), (4.9)). Не всегда естественный выбор в качестве нулевого уровня флуктуаций статистически среднего значения рассматриваемой материальной характеристики (σ, ρ) является наилучшим. Более того, как было показано выше (см. также рис. 2б), подобный выбор σ^c и ρ^c может приводить к расходимости рядов (5.3) и (5.4). А поскольку кривые $\xi = \langle \bar{\sigma} \rangle$ и $\xi = \langle \bar{\rho} \rangle^{-1}$ лежат в области, в которой в общем случае не удается установить знаки нечетных членов ряда (6.11), положение четных границ (6.13) относительно $\bar{\sigma}_*$ также остается неопределенным. Поэтому предположение Александрова [101] о знакопеременности ряда, подобного (5.3), при $\sigma^c = \langle \sigma \rangle$ не является общим и реализуется лишь в частных случаях. Условие малости флуктуаций $1 - \varkappa \ll 1$ (см. введение), гарантирующее сходимость рядов (5.3), (5.4), обычно используется [102] для представления ТЭП в виде суммы первых трех членов (учет парных взаимодействий).

5. Тензор эффективных проводимостей

Используя определение (1.2) и закон Ома (2.5), (2.6), для приведенных материальных характеристик $\bar{\sigma}$ (3.20) и $\bar{\rho}$

(3.21) запишем

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \langle \bar{\sigma} \mathbf{e} \rangle \equiv \hat{\sigma}^* \langle \mathbf{e} \rangle, \quad \hat{\sigma}^* = \sqrt{\sigma^c} \hat{\sigma} \sqrt{\sigma^c}, \quad (5.1)$$

$$\langle \mathbf{e} \rangle = \langle \bar{\rho} \mathbf{j} \rangle \equiv \hat{\rho}^* \langle \mathbf{j} \rangle, \quad \hat{\rho}^* = \sqrt{\rho^c} \hat{\rho} \sqrt{\rho^c}. \quad (5.2)$$

Подставляя сюда (4.3) и (4.4) и учитывая (4.2), (3.38), (3.39), получаем

$$\hat{\sigma}^* = \langle \bar{\sigma} \hat{A} \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\sigma}^{(k)}; \quad \hat{\sigma}^{(k+1)} \equiv \langle \bar{\sigma}' (\hat{R} \hat{X})^k \rangle, \\ k \geq 0; \quad \hat{\sigma}^{(0)} \equiv \hat{I}, \quad (5.3)$$

$$\hat{\rho}^* = \langle \bar{\rho} \hat{B} \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\rho}^{(k)}; \quad \hat{\rho}^{(k+1)} \equiv \langle \bar{\rho}' (\hat{R} \hat{Y})^k \rangle, \\ k \geq 0; \quad \hat{\rho}^{(0)} \equiv \hat{I}. \quad (5.4)$$

В общем случае $\hat{\sigma}^*$ и $\hat{\rho}^*$ — интегральные операторы, и различные соотношения между ними понимаются в смысле соответствующих интегральных форм типа (3.1). Если же выполняются условия, приводящие к (1.6) и (3.7), то статистическое усреднение оказывается полным, а $\hat{\sigma}^*$ и $\hat{\rho}^*$ суть тензоры. В этом случае соотношения между эффективными характеристиками понимаются в смысле соответствующих квадратичных форм. Ниже, как правило, будем говорить о тензорах эффективных проводимостей σ^* и сопротивлений ρ^* , удовлетворяющих равенствам (5.10).

Наряду с (5.3), (5.4) полезны и другие представления для $\hat{\sigma}^*$ и $\hat{\rho}^*$. Выражая \hat{A} и \hat{B} в форме (4.1), из (5.3), (5.4) получаем¹

$$\hat{\sigma}^* = \hat{I} + \langle (\bar{q} \hat{I} + \hat{Q} \hat{R})^{-1} \rangle, \quad \bar{q} \bar{\sigma}' \equiv I; \quad \hat{\sigma}^* \Rightarrow \bar{\sigma}^* \hat{I}, \quad (5.5)$$

$$\hat{\rho}^* = \hat{I} + \langle (\bar{p} \hat{I} + \hat{P} \hat{R})^{-1} \rangle, \quad \bar{p} \bar{\rho}' \equiv I; \quad \hat{\rho}^* \Rightarrow \bar{\rho}^* \hat{I}, \quad (5.6)$$

где тензоры \bar{p} и \bar{q} связаны равенством

$$\bar{p} + \bar{q} = -I, \quad \sigma \rho = I. \quad (5.7)$$

Введя тензоры \bar{p}^* и \bar{q}^* , с помощью (4.15) из (5.3), (5.4) найдем

$$(\hat{q}^* + \hat{Q})^{-1} = \langle (\bar{q} \hat{I} + \hat{Q} \hat{R})^{-1} \rangle; \quad \hat{q}^* (\hat{\sigma}^* - \hat{I}) \equiv \hat{I}, \quad (5.8)$$

$$(\hat{p}^* + \hat{P})^{-1} = \langle (\bar{p} \hat{I} + \hat{P} \hat{R})^{-1} \rangle; \quad \hat{p}^* (\hat{\rho}^* - \hat{I}) \equiv \hat{I}. \quad (5.9)$$

Отсюда следуют равенства

$$\bar{p}^* + \bar{q}^* = -I, \quad \sigma^* \rho^* = I. \quad (5.10)$$

Представление $\hat{\sigma}^*$ в форме (5.5) дает возможность получить соотношение

$$\delta \hat{\sigma}^* = \langle \hat{A}^{(+)} \delta \bar{\sigma} \hat{A} \rangle, \quad (5.11)$$

устанавливающее соответствие

$$\delta \bar{\sigma}^* \geq 0 \Leftrightarrow \delta \bar{\sigma} \geq 0, \quad \sigma^c = \text{const} \quad (5.12)$$

между изменениями $\delta \bar{\sigma}^*$ и $\delta \bar{\sigma}$ эффективных и локальных проводимостей, произведенными при фиксированных внешних условиях: источниках, граничных условиях,

¹ Используемое далее свойство локальности операторов $\hat{\sigma}^*$ и $\hat{\rho}^*$ приводит к некоторым техническим упрощениям, но не изменяет структуры и смысла всех соотношений, которые без труда могут быть переведены на язык операторов.

геометрии. Подобным образом из (5.6) имеем

$$\delta\hat{\rho}^* = \langle \hat{B}^{(+)} \delta\bar{\rho} \hat{B} \rangle, \quad (5.13)$$

$$\delta\bar{\rho}^* \geq 0 \Leftrightarrow \delta\bar{\rho} \geq 0, \quad \rho^c = \text{const}. \quad (5.14)$$

Соотношения (5.11)–(5.14) имеют простую интерпретацию на языке энергетических величин.

6. Учет многочастичных взаимодействий в методе возмущений

Как правило, расчет σ^* и ρ^* проводится на базе ограниченного объема статистической информации о рассматриваемой СНС. Вследствие этого использование разложений (5.3) и (5.4) дает для них приближенные значения

$$\Gamma_{(n)}^* \equiv \sum_{k=0}^n \Gamma^{(k)}, \quad \Gamma \equiv \sigma, \rho; \quad \hat{\Gamma}^{(k)} \Rightarrow \Gamma^{(k)} \hat{I}, \quad (6.1)$$

учитывающие все k -частичные (где $k \leq n$) взаимодействия между неоднородностями. При этом в общем случае величины $\sigma_{(n)}^*$ и $\rho_{(n)}^*$ не связаны равенством (5.10). Более того, зачастую положение $\Gamma_{(n)}^*$ относительно Γ^* остается неконтролируемым. Поэтому приобретает важное значение задача установления знака разности

$$\Gamma^* - \Gamma_{(q-1)}^* = \sum_{k=q}^{\infty} \Gamma^{(k)}. \quad (6.2)$$

Для ее решения используем равенства [36, 37]

$$(\mathbf{e}_k, \bar{\sigma}' \mathbf{e}_{q-k-1}) = -(\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_{q-k}) = (\langle \mathbf{e} \rangle, \bar{\sigma}^{(q)} \langle \mathbf{e} \rangle), \quad q-1 \geq k \geq 1, \quad (6.3)$$

$$(\mathbf{j}_k, \bar{\rho}' \mathbf{j}_{q-k-1}) = -(\mathbf{j}_k, \mathbf{j}_{q-k}) = (\langle \mathbf{j} \rangle, \bar{\rho}^{(q)} \langle \mathbf{j} \rangle), \quad q-1 \geq k \geq 1, \quad (6.4)$$

обеспечивающие переброс индексов в скалярных произведениях и согласованные с определениями (3.38), (3.39) и (5.3), (5.4). Отсюда при $q = 2k$ получим неравенства

$$\Gamma^{(2k)} \leq 0, \quad k \geq 1, \quad (6.5)$$

являющиеся следствием (3.26) и не зависящие от знакоподопределенности Γ' . Если произвести замены $\mathbf{e}_k \rightarrow -\mathbf{e}_k + \mathbf{e}_{k+1}$ и $\mathbf{j}_k \rightarrow \mathbf{j}_k + \mathbf{j}_{k+1}$, то при $q = 2k$ из (6.3), (6.4) будем иметь

$$\Gamma^{(2k)} + 2\Gamma^{(2k+1)} + \Gamma^{(2k+2)} \leq 0, \quad k \geq 1. \quad (6.6)$$

Суммирование неравенств (6.6) по k от n до ∞ дает

$$\Gamma^{(2n)} + 2 \sum_{k=2n+1}^{\infty} \Gamma^{(k)} \leq 0 \quad \text{или} \quad 2 \sum_{k=2n}^{\infty} \Gamma^{(k)} \leq \Gamma^{(2n)} \leq 0. \quad (6.7)$$

Полагая в (6.2) $q = 2n$ и учитывая (6.7), получаем

$$\Gamma^* \leq \Gamma_{(2n-1)}^*, \quad n \geq 1; \quad \Gamma \equiv \sigma, \rho. \quad (6.8)$$

Таким образом, ограничиваясь в (6.1) нечетным числом членов, приходим к верхним границам для Γ^* . Совместное использование (6.8) для σ и ρ дает двусторонние

границы как для σ^* , так и для ρ^* :

$$[\rho_{(2n-1)}^*]^{-1} \leq \sigma^* \leq \sigma_{(2n-1)}^*. \quad (6.9)$$

Отсюда при $n = 1$ для σ^* находим

$$\sigma_{(1)}^- \equiv \langle \rho \rangle^{-1} \leq \sigma^* \leq \langle \sigma \rangle \equiv \sigma_{(1)}^+, \quad (6.10)$$

где использованы обозначения (1.11). Тензорные неравенства (6.10) обобщают результат Винера (1.10) на среды, локальные проводимости которых обладают произвольными симметричными свойствами и пространственным распределением. Отметим, что расчет границ (6.9) проводится с помощью параметров σ^c и ρ^c , на которые не накладывается никаких дополнительных ограничений, кроме (4.8), (4.9).

Если σ' и ρ' обладают знакоподопределенностью (не обязательно согласованной, как в (4.12)), то вместо (6.5) будем иметь [36, 37]

$$\Gamma^{(k)} \leq 0, \quad k \geq 1; \quad \Gamma' \equiv \Gamma - \Gamma^c \leq 0, \quad (6.11a)$$

$$\Gamma^{(2k)} \leq 0 \leq \Gamma^{(2k-1)}, \quad k \geq 1; \quad \Gamma' \geq 0. \quad (6.11b)$$

В силу неравенств (6.11) положение $\Gamma_{(n)}^*$ (6.1) относительно Γ^* контролируется на каждом шаге итерационного процесса. Действительно, аналогично (6.7), (6.11) нетрудно получить

$$\sum_{k=n+1}^{\infty} \Gamma^{(k)} \leq 0, \quad n \geq 0; \quad \Gamma' \leq 0, \quad (6.12a)$$

$$\sum_{k=2n+2}^{\infty} \Gamma^{(k)} \leq 0 \leq \sum_{k=2n+1}^{\infty} \Gamma^{(k)}, \quad n \geq 0; \quad \Gamma' \geq 0. \quad (6.12b)$$

Вместо (6.8) из (6.2), (6.12), (4.16) найдем

$$\Gamma^* \leq \Gamma_{(n)}^*, \quad n \geq 0; \quad \Gamma \leq \Gamma^c < \infty; \quad \sigma^c \rho^c \neq I, \quad (6.13a)$$

$$\Gamma_{(2n)}^* \leq \Gamma^* \leq \Gamma_{(2n+1)}^*, \quad n \geq 0;$$

$$\frac{\Gamma}{2} < \Gamma^c \leq \Gamma; \quad \sigma^c \rho^c \neq I. \quad (6.13b)$$

Рассмотрим случай (6.13a), когда $\sigma' \leq 0$, $\rho' \leq 0$, вследствие чего ряды (5.3), (5.4) знакопостоянные. Их совместное использование дает для Γ^* двусторонние границы вида

$$[B_{(n)}^*]^{-1} \leq \Gamma^* \leq \Gamma_{(n)}^*, \quad n \geq 0, \quad (6.14a)$$

$$\Gamma^c = \Gamma^+ \equiv \sup \Gamma = (\inf B)^{-1}; \quad B\Gamma = I, \quad \Gamma \equiv \sigma, \rho, \quad (6.14b)$$

справедливые в отличие от (6.9) для каждого n . Этого удалось добиться посредством наложения на параметры σ^c и ρ^c дополнительных ограничений в форме (6.11a) или (6.14b).

В случае (6.13b) имеем $\sigma' \geq 0$, $\rho' \geq 0$, вследствие чего ряды (5.3), (5.4) знакопеременные. Их совместное использование дает для Γ^* двусторонние границы вида:

$$[B_{(2n-1)}^*]^{-1} \leq \Gamma^* \leq \Gamma_{(2n-1)}^*,$$

$$\Gamma_{(2n)}^* \leq \Gamma^* \leq [B_{(2n)}^*]^{-1}; \quad n \geq 0, \quad (6.15a)$$

$$\Gamma^c = \Gamma^- \equiv \inf \Gamma \equiv (\sup B)^{-1}; \quad B\Gamma = I, \quad \Gamma \equiv \sigma, \rho. \quad (6.15b)$$

На рисунке 3а–в изображены три возможные схемы сужения двусторонних границ $\Gamma_{(n)}^{\pm}$ для Γ^* , представляющие итерационные процессы (6.13)–(6.15). Величины $\Gamma_{(n)}^*(\pm)$ и $B_{(n)}^*(\pm)$ обозначают $\Gamma_{(n)}^*$ и $B_{(n)}^*$, рассчитанные с помощью параметров Γ^{\pm} и B^{\pm} соответственно, и изоб-

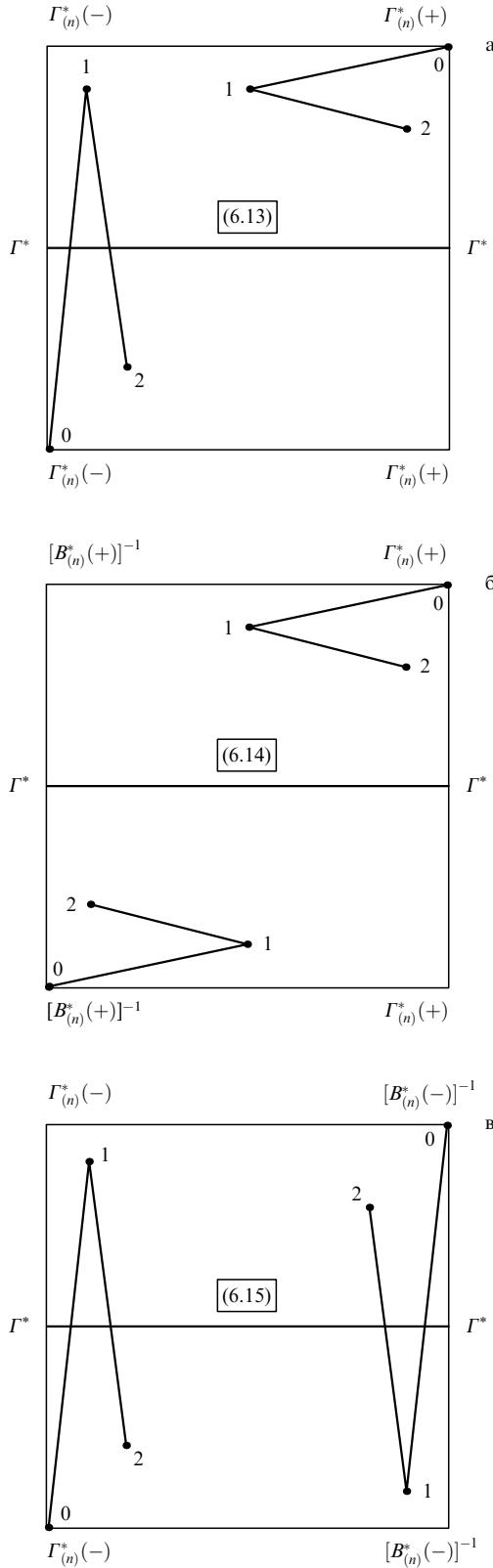


Рис. 3.

ражены точками, нумерация которых согласована с нумерацией соответствующих им значений $\Gamma_{(n)}^*$ и $[B_{(n)}^*]^{-1}$.

Из рисунка 3а видно, что для получения двусторонних границ для Γ^* в четном приближении достаточно использовать одну схему расчета, но при двух значениях Γ^{\pm} параметра Γ^c . Нечетные приближения, как это следует из рис. 3б, в и (6.10), дают двусторонние границы при любых значениях параметра Γ^c , но при использовании двух схем расчета Γ^* . Поверхностное сравнение схем (6.14) и (6.15) не позволяет определить, какая из них более эффективна. Для этого необходим детальный анализ. Однако неравенства (6.14а) оказываются более удобными, поскольку в силу (6.13а) и (4.16) на параметр Γ^c накладываются менее жесткие ограничения, чем в случае (6.13б).

При $n = 0$ из (6.14) и (6.15) имеем

$$\Gamma_{(0)}^- \equiv \Gamma^- \leq \Gamma^* \leq \Gamma^+ \equiv \Gamma_{(0)}^+, \quad \Gamma \equiv \sigma, \rho. \quad (6.16)$$

Согласно (1.11) нижний индекс (0) означает, что при расчете границ $\Gamma_{(0)}^{\pm}$ не учитывалась никакая статистическая информация о СНС. В случае $n = 1$ границы (6.14), (6.15) совпадают с (6.10).

Прежде чем рассматривать границы $\sigma_{(2)}^{\pm}$, введем обозначения [37]

$$\langle \bar{\sigma}'' \widehat{Q} \bar{\sigma}'' \rangle \equiv \langle \bar{\sigma}'' \overline{Q} \bar{\sigma}'' \rangle, \quad \langle \bar{\rho}'' \widehat{P} \bar{\rho}'' \rangle \equiv \langle \bar{\rho}'' \overline{P} \bar{\rho}'' \rangle, \quad (6.17)$$

$$0 \leq \overline{Q} \leq I, \quad 0 \leq \overline{P} \leq I; \quad \overline{P} + \overline{Q} = I, \quad (6.18)$$

где тензоры \overline{Q} и \overline{P} находятся посредством интегрирования через скалярные произведения типа (6.3), (6.4). По определению (6.17) для их расчета необходимо задать двухточечные вероятности случайного поля $\sigma(\mathbf{r})$. Тензорные соотношения (6.18) являются следствием порождающих их операторных соотношений (3.23), (3.26). Исключение составляют равенства (3.24), вместо которых имеем

$$\begin{aligned} \overline{Q} - \overline{Q}^2 &= \sqrt{\overline{Q}} (1 - \overline{Q}) \sqrt{\overline{Q}} = \sqrt{\overline{Q}} \overline{P} \sqrt{\overline{Q}} \geq 0, \\ \overline{P} - \overline{P}^2 &\geq 0. \end{aligned} \quad (6.19)$$

В общем случае тензоры \overline{Q} и \overline{P} зависят от параметров σ^c и ρ^c соответственно. Однако, если среда сравнения изотропна, \overline{Q} и \overline{P} являются чисто геометрическими параметрами. В этом случае \overline{Q} называется тензором деполяризации [1, 3, 16, 21, 37, 102].

В приближении $n = 2$ из (5.3), (5.4), (6.1) и (6.14), (6.15) с учетом обозначений (5.1), (5.2) имеем

$$\sigma_{(2)}^* = \langle \sigma \rangle + \langle \sigma'' Q \sigma'' \rangle, \quad \overline{Q} \equiv -\sqrt{\sigma^c} Q \sqrt{\sigma^c}; \quad \sigma' \geq 0, \quad (6.20a)$$

$$\rho_{(2)}^* = \langle \rho \rangle + \langle \rho'' P \rho'' \rangle, \quad \overline{P} \equiv -\sqrt{\rho^c} P \sqrt{\rho^c}; \quad \rho' \geq 0. \quad (6.20b)$$

При этом, если параметры σ^c и ρ^c удовлетворяют неравенствам $\Gamma' \geq 0$, значения $\sigma_{(2)}^*$ и $\rho_{(2)}^*$ используются по схеме (6.15). В противном случае — по схеме (6.14). В отличие от $n = 0, 1$ границы (6.20) не являются наилучшими в классе границ $n = 2$, учитывающих двухчастичные взаимодействия. Такие границы были впервые получены Хашином и Штрикманом [9, 10, 38] и будут рассмотрены ниже. Приведенный пример (случай $n = 2$)

демонстрирует роль вспомогательных параметров Γ^c . Произвольный выбор Γ^c при расчете $\Gamma_{(2)}^*$ может приводить к получению лишь односторонних границ, как в работах, обсуждавшихся Александровым [101], либо давать приближенные значения для Γ^* , положение которых относительно точных Γ^* не определено.

Учет трехчастичных взаимодействий сопряжен с громоздкими математическими выкладками, в связи с чем в большинстве работ, посвященных исследованию этого эффекта, рассматривались макроизотропные смеси двух изотропных компонентов. Одна из первых попыток использования статистической информации в объеме $n = 3$ была предпринята Бераном [14], предложившим простейшую модификацию вариационного метода (см. раздел 8.4).

Приближенные значения $\Gamma_{(3)}^*$, $[B_{(3)}^*]^{-1}$ независимо от выбора параметров Γ^c , B^c образуют согласно (6.9), (6.14), (6.15) двусторонние границы для Γ^* . Ниже произвольность параметров σ^c и ρ^c используется для получения более жестких границ в приближении $n = 3$. Из (5.3), (5.4), (6.1), (3.19) имеем

$$\sigma_{(3)}^* = \langle \sigma \rangle + 2\langle \sigma'' \hat{Q} \sigma'' \rangle + \langle \sigma'' \hat{Q} \sigma \hat{Q} \sigma'' \rangle, \quad (6.21a)$$

$$\rho_{(3)}^* = \langle \rho \rangle + 2\langle \rho'' \hat{P} \rho'' \rangle + \langle \rho'' \hat{P} \rho \hat{P} \rho'' \rangle. \quad (6.21b)$$

Рассмотрим случай изотропной среды сравнения

$$\sigma_{ij}^c = \sigma^c \delta_{ij}, \quad u \sigma^c \equiv 1; \quad \rho_{ij}^c = \rho^c \delta_{ij}, \quad v \rho^c \equiv 1. \quad (6.22a)$$

К сожалению, мы вынуждены допустить совпадение обозначения тензоров σ^c , ρ^c (6.20) и скаляров σ^c , ρ^c (6.22a). Думается, однако, что в качестве альтернативы (6.22a) можно использовать представление

$$u \sigma_{ij}^c \equiv \delta_{ij}, \quad v \rho_{ij}^c \equiv \delta_{ij}. \quad (6.22b)$$

С учетом (6.22b) перепишем (6.21) в виде

$$\sigma_{(3)}^*(u) = \langle \sigma \rangle - 2\langle \sigma'' \hat{Q} \sigma'' \rangle u + \langle \sigma'' \hat{Q} \sigma \hat{Q} \sigma'' \rangle u^2, \\ \hat{Q} = -u\hat{\bar{Q}}, \quad (6.23a)$$

$$\rho_{(3)}^*(v) = \langle \rho \rangle - 2\langle \rho'' \hat{P} \rho'' \rangle v + \langle \rho'' \hat{P} \rho \hat{P} \rho'' \rangle v^2, \\ \hat{P} = -v\hat{\bar{P}}, \quad (6.23b)$$

где \hat{Q} и \hat{P} не зависят от параметров среды сравнения, а сами равенства (6.23) понимаются в смысле соответствующих равенств для квадратичных форм в пространстве \mathcal{H}^M (3.36).

Произвольность вспомогательных параметров u , v позволяет минимизировать функции $\sigma_{(3)}^*(u)$ и $\rho_{(3)}^*(v)$. В обозначениях (4.3), (4.4) это дает

$$\min(\mathbf{e}_0, \sigma_{(3)}^* \mathbf{e}_0) = (\mathbf{e}_0, \langle \sigma \rangle \mathbf{e}_0) - \frac{(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1)^2}{(\mathbf{f}_1, \sigma \mathbf{f}_1)}, \quad \mathbf{f}_1 \equiv \hat{Q} \sigma'' \mathbf{e}_0, \quad (6.24a)$$

$$\min(\mathbf{j}_0, \rho_{(3)}^* \mathbf{j}_0) = (\mathbf{j}_0, \langle \rho \rangle \mathbf{j}_0) - \frac{(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_1)^2}{(\mathbf{g}_1, \rho \mathbf{g}_1)}, \quad \mathbf{g}_1 \equiv \hat{P} \rho'' \mathbf{j}_0. \quad (6.24b)$$

Объединяя (6.24a) и (6.24b), подобно (6.9) запишем

$$[\rho_{(3)}^*(v^c)]^{-1} \leq \sigma^* \leq \sigma_{(3)}^*(u^c), \quad \sigma^* \rho^* = I, \quad (6.25)$$

где u^c и v^c — значения параметров u и v , при которых $\sigma_{(3)}^*(u)$ и $\rho_{(3)}^*(v)$ достигают минимумов. Отсюда видно, что все границы (6.9) при $n \geq 2$ допускают улучшение в духе (6.24).

Изложенный здесь метод учета многочисленных взаимодействий на базе рядов возмущений может быть распространен на любые значения n . Для практического осуществления этой программы необходима лишь информация о соответствующих n -точечных вероятностях случайного поля $\sigma(\mathbf{r})$.

Границы (6.24), (6.25) при условиях $\sigma' \leq 0$, $\rho' \leq 0$ могут быть получены [37] посредством использования обобщенного неравенства Шварца для оценки каждого члена рядов (5.3), (5.4) и их последующего суммирования.

7. Сингулярное приближение

Часто оказывается целесообразным выделение в операторе \hat{Q} (или \hat{P}) локальной части (см. (5.5) и (1.6)) и исследование ее роли в построении решения уравнений (3.20)–(3.22).

Следуя [103], представим \hat{Q} в виде суммы

$$\hat{Q} = \hat{Q}^s + \hat{Q}^f, \quad \hat{Q}^s \equiv \bar{Q} \hat{I}, \quad (7.1)$$

двух операторов: локального \hat{Q}^s и нелокального \hat{Q}^f . Нахождение постоянного тензора \bar{Q} — самостоятельная задача, решение которой должно проводиться в каждом конкретном случае отдельно [103, 11, 16, 21, 23, 37]. Аналогично (7.1) для \hat{P} запишем

$$\hat{P} = \hat{P}^s + \hat{P}^f, \quad \hat{P}^s \equiv \bar{P} \hat{I}. \quad (7.2)$$

Ниже тензоры \bar{Q} , \bar{P} определяются согласно (6.17)–(6.19).

Одним из наиболее простых методов расчета полей \mathbf{e} , \mathbf{j} и эффективных характеристик $\bar{\sigma}^*$, $\bar{\rho}^*$, учитывающих многочастичные взаимодействия, является сингулярное приближение (s -приближение) [21, 23, 104]

$$\hat{Q} \rightarrow \hat{Q}^s = \bar{Q} \hat{I}, \quad \hat{P} \rightarrow \hat{P}^s = \bar{P} \hat{I}. \quad (7.3)$$

Подстановка (7.3) в (3.20)–(3.22) дает

$$\mathbf{e} \rightarrow \mathbf{e}^s = \mathbf{e}^c - \bar{Q} \bar{\sigma}' \mathbf{e}^s = \langle \mathbf{e}^s \rangle - \bar{Q} \bar{R} \bar{\sigma}' \mathbf{e}^s, \quad (7.4a)$$

$$\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}^s = \mathbf{j}^c - \bar{P} \bar{\rho}' \mathbf{j}^s = \langle \mathbf{j}^s \rangle - \bar{P} \bar{R} \bar{\rho}' \mathbf{j}^s. \quad (7.4b)$$

Операторы \hat{A} и \hat{B} (4.2) в s -приближении имеют вид

$$\hat{A} \rightarrow A^s \hat{I}, \quad A^s = (I + \bar{Q} \bar{R} \bar{\sigma}')^{-1} = (I + \bar{Q} \bar{\sigma}')^{-1} \langle (I + \bar{Q} \bar{\sigma}')^{-1} \rangle^{-1}, \quad (7.5a)$$

$$\hat{B} \rightarrow B^s \hat{I}, \quad B^s = (I + \bar{P} \bar{R} \bar{\rho}')^{-1} = (I + \bar{P} \bar{\rho}')^{-1} \langle (I + \bar{P} \bar{\rho}')^{-1} \rangle^{-1}. \quad (7.5b)$$

Наконец, вместо (5.5), (5.6) и (5.8), (5.9) будем иметь

$$\bar{\sigma}^s = \langle \bar{\sigma} A^s \rangle, \quad (\bar{q}^s + \bar{Q})^{-1} = \langle (\bar{q} + \bar{Q})^{-1} \rangle, \quad (7.6a)$$

$$\bar{\rho}^s = \langle \bar{\rho} B^s \rangle, \quad (\bar{p}^s + \bar{P})^{-1} = \langle (\bar{p} + \bar{P})^{-1} \rangle. \quad (7.6b)$$

Наряду с \bar{Q} и \bar{P} используются тензоры \bar{T} и \bar{S} , определяемые равенствами [23, 105]

$$(I + \bar{T})\bar{Q} \equiv I, \quad (I + \bar{S})\bar{P} \equiv I, \quad (7.7)$$

с помощью которых из (7.6) получаем

$$(\sigma^s + T)^{-1} = \langle (\sigma + T)^{-1} \rangle, \quad T \equiv \sqrt{\sigma^c} \bar{T} \sqrt{\sigma^c}, \quad (7.8a)$$

$$(\rho^s + S)^{-1} = \langle (\rho + S)^{-1} \rangle, \quad ST \equiv I = \sigma^s \rho^s = \sigma^c \rho^c. \quad (7.8b)$$

Скалярный параметр типа T вводился Бруггеманом [2] при получении расчетных формул для эффективных диэлектрических проницаемостей смесей двух изотропных компонентов. Еще раньше Фрике [1] с подобной целью использовал величины, аналогичные \bar{T} .

Параметрическая зависимость σ^s от T обеспечивает получение всего спектра значений σ^* [2, 23, 37, 106]. Действительно, из (7.8) и (6.10) при $T = 0$ и $S = 0$ соответственно находим

$$\sigma^s = \langle \rho \rangle^{-1} \equiv \sigma_{(1)}^-, \quad \sigma_{(1)}^+ \equiv \langle \sigma \rangle = (\rho^s)^{-1}. \quad (7.9)$$

Параметр T достигает нуля при $\sigma^c = 0$ или при $\bar{T} = 0$, что согласно (7.7) возможно при $\bar{Q} = 1$. В другом предельном случае ($S = 0$) имеем: или $\rho^c = 0$, или $\bar{P} = 1$. На языке параметров σ^c и \bar{Q} это значит: $\sigma^c = \infty$ или $\bar{Q} = 0$. Для сужения границ (7.9) должен существовать критерий, регулирующий выбор параметров T и S , подстановка которых в (7.8) приводит к соответствующим границам для σ^* . Определения (6.17) дают возможность в случае изотропной среды сравнения (6.22б) найти геометрический параметр \bar{T} . В рамках s-приближения вопрос о надлежащем выборе параметров σ^c для получения границ σ^\pm остается открытым.

Перейдем к рассмотрению вариационных методов расчета σ^\pm , где задача отыскания σ^c решается естественным образом.

8. Вариационные методы расчета границ для σ^*

Часто при решении различных задач в теории СНС оказывается продуктивным использование вариационных методов, в основе которых лежат классические энергетические теоремы.

8.1. Классические энергетические теоремы

С учетом обозначений (2.9) введем функционалы U_2 , U_1 вида [37]

$$U_2 = \int w_\sigma dV + \int_{S_2} \varphi J_0 dS, \quad 2w_\sigma \equiv \mathbf{E} \cdot \sigma \mathbf{E}, \quad (8.1a)$$

$$U_1 = - \int w_\rho dV - \int_{S_1} \varphi_0 J_n dS, \quad 2w_\rho \equiv \mathbf{J} \cdot \rho \mathbf{J}. \quad (8.1b)$$

Здесь U_2 — потенциальная энергия, а $(-U_1)$ — дополнительная, причем $U_1 = U_2 = U$, если φ является решением задачи (2.8), (2.9); $\rho\sigma = I$, $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$, $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$.

Согласно теореме (принципу) минимума потенциальной энергии [107–109]

$$U_2 \leq \tilde{U}_2, \quad (8.2a)$$

где \tilde{U}_2 — значение U_2 , определенное на виртуальном кусочно-непрерывно дифференцируемом потенциале $\tilde{\varphi}$,

для которого справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}} &= -\nabla\tilde{\varphi}, & 2\tilde{w}_\sigma &= \tilde{\mathbf{E}} \cdot \sigma \tilde{\mathbf{E}}, & \mathbf{r} &\in V; \\ \tilde{\varphi} &= \varphi_0, & \mathbf{r} &\in S_1. \end{aligned} \quad (8.3a)$$

Однако $\tilde{\varphi}$ не является решением задачи (2.1), (2.2), (2.9), поскольку $\nabla \cdot \sigma \tilde{\mathbf{E}} \neq 0$ и не удовлетворяются граничные условия на части S_2 поверхности S .

Согласно теореме (принципу) минимума дополнительной энергии [107–109]

$$U_1 \geq \tilde{U}_1, \quad (8.2b)$$

где \tilde{U}_1 — значение U_1 , определенное на виртуальной кусочно-непрерывно дифференцируемой плотности тока $\tilde{\mathbf{J}}$, для которой справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}} &= 0, & 2\tilde{w}_\rho &= \tilde{\mathbf{J}} \cdot \rho \tilde{\mathbf{J}}, & \mathbf{r} &\in V; \\ \tilde{J}_n &= J_0, & \mathbf{r} &\in S_2. \end{aligned} \quad (8.3b)$$

Однако $\tilde{\mathbf{J}}$ не является решением задачи (2.1), (2.2), (2.9), поскольку $\nabla \times \rho \tilde{\mathbf{J}} \neq 0$ и не удовлетворяются граничные условия на части S_1 поверхности S .

Объединив (8.2), получим двусторонние границы для потенциальной энергии U электрического поля в среде

$$\tilde{U}_1 \leq U \leq \tilde{U}_2, \quad (8.4)$$

которые можно использовать в обеих схемах расчета, причем в σ -схеме конечные результаты выражаются через поле \mathbf{E} , а в ρ -схеме — через \mathbf{J} .

8.2. Экстремальные свойства

энергетических функционалов в Н-пространстве

Рассмотрим σ -схему. Наряду с полем $\tilde{\varphi}$ теоремы (8.2a) введем плотность тока $\tilde{\mathbf{J}}$, связанную с $\tilde{\mathbf{E}}$ из (8.3a) равенством

$$\tilde{\mathbf{J}} = \sigma^c \tilde{\mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{T}}, \quad (8.5)$$

где в правой части добавлен вектор $\tilde{\mathbf{T}}$ "поляризованного" тока, необходимый для того, чтобы поле $\tilde{\mathbf{J}}$ удовлетворяло соотношениям

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}} = 0, \quad \mathbf{r} \in V; \quad \tilde{J}_n = J_0, \quad \mathbf{r} \in S_2. \quad (8.6)$$

Термин "поляризованный" по аналогии с подобным в теории электростатического поля был использован Кренером [110] для обозначения полей, введенных Эшелби [111] при решении задачи об эллипсоидальном включении. Окончательное оформление этой идеи дано Хиллом [107].

Решая граничную задачу (8.3a), (8.5), (8.6), вместо (2.24) получим

$$\tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{E}^c + \hat{Q}\tilde{\mathbf{T}}, \quad \tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{J}} - \sigma^c \tilde{\mathbf{E}} \neq \sigma' \tilde{\mathbf{E}}. \quad (8.7)$$

Осуществляя преобразования (3.18)–(3.20), перепишем (8.5), (8.7) в виде

$$\tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e}^c - \hat{Q}\tilde{\mathbf{t}}, \quad \tilde{\mathbf{j}} = \tilde{\mathbf{e}} + \tilde{\mathbf{t}}, \quad \tilde{\mathbf{T}} \equiv \sqrt{\sigma^c} \tilde{\mathbf{t}}. \quad (8.8)$$

Для упрощения последующих выкладок исключим из неравенств (8.4) потенциальную энергию U^c среды

сравнения. Затем ввиду свойства (3.4) перейдем к полному усреднению (по объему и по ансамблю реализации) энергетических характеристик СНС. С этой целью введем обозначения

$$\langle U - U^c \rangle \equiv Vu', \quad \langle \tilde{U}_x - U^c \rangle \equiv VF_x; \quad x = 1, 2. \quad (8.9)$$

После несложных преобразований имеем [36]

$$2u' = (\mathbf{e}^c, \bar{\sigma}'\mathbf{e}), \quad (8.10a)$$

что вместе с (5.1), (5.3), (5.5), (5.8) и (4.15) дает

$$2u' = (\mathbf{e}^c, (\hat{\sigma}^* - \hat{I})(\mathbf{e})) = (\mathbf{e}^c, (\hat{q}^* + \hat{Q})^{-1}\mathbf{e}^c). \quad (8.10b)$$

Вычитая U^c из \tilde{U}_2 , проводя усреднение по ансамблю и используя (8.8) и обозначения (8.9), (3.30), получаем

$$2F_2 = (\mathbf{e}^c, \bar{\sigma}'\mathbf{e}^c) + 2(\tilde{\tau}, \vec{\mathcal{E}}_1) + (\tilde{\tau}, \hat{Q}\bar{\sigma}\hat{Q}\tilde{\tau}). \quad (8.11)$$

Аналогичным образом, вычитая U^c из \tilde{U}_1 , проводя усреднение по ансамблю и используя соотношения

$$\tilde{\mathbf{j}} = \mathbf{j}^c - \hat{P}\tilde{\eta}, \quad \tilde{\mathbf{e}} = \tilde{\mathbf{j}} + \tilde{\eta}; \quad \tilde{\mathbf{H}} \equiv \sqrt{\rho^c}\tilde{\eta}, \quad \tilde{\eta} = -\tilde{\tau}, \quad (8.12)$$

заменяющие (8.8), и обозначения (8.9), (3.31), находим

$$2F_1 = -(\mathbf{j}^c, \bar{\rho}'\mathbf{j}^c) - 2(\tilde{\eta}, \vec{\mathcal{J}}_1) - (\tilde{\eta}, \hat{P}\bar{\rho}\hat{P}\tilde{\eta}). \quad (8.13)$$

Таким образом, в силу (8.9), (8.11), (8.13) вместо неравенств (8.4) имеем

$$F_1 \leq u' \leq F_2. \quad (8.14)$$

Для исследования экстремальных свойств F_x необходимо знать их первые и вторые функциональные (вариационные) производные. В обозначениях [30] вторые производные F_x имеют вид

$$\frac{\delta}{\delta\tilde{\eta}} \otimes \frac{\delta}{\delta\tilde{\eta}} F_1 = -\hat{P}\bar{\rho}\hat{P} < 0, \quad \frac{\delta}{\delta\tilde{\tau}} \otimes \frac{\delta}{\delta\tilde{\tau}} F_2 = \hat{Q}\bar{\sigma}\hat{Q} > 0. \quad (8.15)$$

Неравенства (8.15) позволяют сформулировать следующие вариационные принципы.

1. Функционал F_1 вида

$$F_1[\eta] = -\frac{1}{2}(\mathbf{j}^c, \bar{\rho}'\mathbf{j}^c) - (\eta, \vec{\mathcal{J}}_1) - \frac{1}{2}(\eta, \hat{P}\bar{\rho}\hat{P}\eta), \quad (8.16)$$

определенный на принадлежащем гильбертову пространству $\tilde{\mathcal{H}}$ поле "поляризованной" напряженности η , достигает при условии

$$\bar{p}\eta = \mathbf{j}^c - \hat{P}\eta = \mathbf{j}, \quad \bar{p}\bar{\rho}' = I \quad (8.17)$$

максимума

$$F_1^{\max} = -\frac{1}{2}(\mathbf{j}^c, \bar{\rho}'\mathbf{j}^c) - \frac{1}{2}(\eta, \vec{\mathcal{J}}_1) = -\frac{1}{2}(\mathbf{j}^c, \eta), \quad (8.18)$$

равного истинной потенциальной энергии

$$u' = -\frac{1}{2}(\mathbf{j}^c, \bar{\rho}'\mathbf{j}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{j}^c, (\bar{\rho}\hat{I} + \hat{P})^{-1}\mathbf{j}^c). \quad (8.19)$$

2. Функционал F_2 вида

$$F_2[\tau] = \frac{1}{2}(\mathbf{e}^c, \bar{\sigma}'\mathbf{e}^c) + (\tau, \vec{\mathcal{E}}_1) + \frac{1}{2}(\tau, \hat{Q}\bar{\sigma}\hat{Q}\tau), \quad (8.20)$$

определенный на принадлежащем гильбертову пространству $\tilde{\mathcal{H}}$ поле "поляризованного" тока τ , достигает при условии

$$\bar{q}\tau = \mathbf{e}^c - \hat{Q}\tau = \mathbf{e}, \quad \bar{q}\bar{\sigma}' = I \quad (8.21)$$

минимума

$$F_2^{\min} = \frac{1}{2}(\mathbf{e}^c, \bar{\sigma}'\mathbf{e}^c) + \frac{1}{2}(\tau, \vec{\mathcal{E}}_1) = \frac{1}{2}(\mathbf{e}^c, \tau), \quad (8.22)$$

равного истинной потенциальной энергии

$$u' = \frac{1}{2}(\mathbf{e}^c, \bar{\sigma}'\mathbf{e}) = \frac{1}{2}(\mathbf{e}^c, (\bar{q}\hat{I} + \hat{Q})^{-1}\mathbf{e}^c). \quad (8.23)$$

С помощью равенства $\tau = -\eta$ (8.12) оба вариационных принципа могут быть сформулированы на языке τ или η .

Если на используемые в принципах 1 и 2 аппроксимирующие поля $\tilde{\tau}$ и $\tilde{\eta}$ наложить некоторые ограничения, это приведет к тому, что в результате их применения будут получены границы F^\pm для u' . Этот случай рассмотрен ниже (см. раздел 9).

8.3. Обобщение вариационных принципов

Хашина – Штрикмана

Другой способ упрощения функционалов F_x из (8.16), (8.20) состоит в наложении ограничений на параметры σ^c и ρ^c среды сравнения. Используя идею Хилла [107], приведем неравенства (8.4) к виду

$$-R_1 \leq u' - M \leq R_2, \quad 2M[\tilde{\tau}] = (\tilde{\tau}, 2\mathbf{e}^c - \hat{Q}\tilde{\tau} - \bar{q}\tilde{\tau}), \quad (8.24a)$$

$$2R_1 \equiv (\tilde{\mathbf{f}}, \bar{\rho}'\tilde{\mathbf{f}}), \quad 2R_2 \equiv (\tilde{\mathbf{f}}, \bar{\sigma}'\tilde{\mathbf{f}}); \quad \tilde{\mathbf{f}} \equiv \tilde{\mathbf{e}} - \bar{q}\tilde{\tau}. \quad (8.24b)$$

Неравенства (8.24a) представляют собой обобщение вариационных принципов Хашина – Штрикмана [9, 10] на случай граничных условий (2.9). Кроме того, что более существенно, в формулировку принципов введен проектирующий оператор \hat{Q} . Это позволяет наряду с прояснением и упрощением известных результатов получить новые (с учетом трехчастичных взаимодействий) на базе принципов 1 и 2 из раздела 8.2. Знаки R_1 и R_2 , определяемые тензорами ρ' и σ' , противоположны из-за (4.12). Если ограничить произвол в выборе параметров ρ^c и σ^c посредством условий $R_1 \leq 0$ и $R_2 \leq 0$, то, отбросив R_1 или R_2 , из (8.24) получим

$$M^- \leq u', \quad R_1 \leq 0, \quad \bar{\rho}' \leq 0 \leq \bar{\sigma}', \quad (8.25a)$$

$$u' \leq M^+, \quad R_2 \leq 0, \quad \bar{\sigma}' \leq 0 \leq \bar{\rho}', \quad (8.25b)$$

где M^- и M^+ — значения функционала M при условии, что параметры ρ^c и σ^c удовлетворяют неравенствам $R_1 \leq 0$ и $R_2 \leq 0$ соответственно. Вследствие этого границы (8.25) слабее, чем (8.14).

Для исследования экстремальных свойств M запишем первую и вторую производные функционала M из

(8.24a):

$$\frac{\delta}{\delta \tilde{\tau}} M = \mathbf{e}^c - (\bar{q}\hat{I} + \hat{Q})\tilde{\tau}, \quad \frac{\delta}{\delta \tilde{\tau}} \otimes \frac{\delta}{\delta \tilde{\tau}} M = -(\bar{q}\hat{I} + \hat{Q}). \quad (8.26)$$

Равенство нулю первой производной с учетом (8.8) приводит в отличие от (8.7) к соотношениям

$$\bar{q}\tilde{\tau} = \mathbf{e}^c - \hat{Q}\tilde{\tau} = \tilde{\mathbf{e}} \Rightarrow \tilde{\tau} = \bar{\sigma}'\tilde{\mathbf{e}}, \quad (8.27)$$

эквивалентным (2.24) и справедливым для поля $\tilde{\mathbf{e}}$, удовлетворяющего (2.1), (2.2), (2.9), т.е. в силу единственности решения совпадающего с полем \mathbf{e} . Характер экстремума M при условии (8.27) определяется знаком второй производной (8.26), записанной на языке операторов.

Пусть $\bar{q} \geq 0$. Тогда из (3.23), (3.26), (4.12) и (5.5)–(5.7) имеем

$$\hat{O} \leq \bar{q}\hat{I} + \hat{Q} = -(\bar{p}\hat{I} + \hat{P}), \quad \bar{\rho}' \leq 0 \leq \bar{\sigma}', \quad (8.28)$$

и, следовательно, данный экстремум есть максимум. В противоположном случае, когда $\bar{q} \leq 0$, вместо (8.28) найдем

$$\hat{O} \leq \bar{p}\hat{I} + \hat{P} = -(\bar{q}\hat{I} + \hat{Q}), \quad \bar{\sigma}' \leq 0 \leq \bar{\rho}'. \quad (8.29)$$

Значит, вторая производная функционала M (8.26) положительна, и исследуемый экстремум есть минимум. Легко видеть, что при условии (8.27) экстремальное значение M_e совпадает с истинной потенциальной энергией u' (8.10). С учетом (8.27)–(8.29) из (8.10) и (8.25) получим

$$2M_e^\pm = (\tau, (\bar{q}\hat{I} + \hat{Q})\tau), \quad \bar{\sigma}' \leq 0, \quad \tilde{\tau} = \tau. \quad (8.30)$$

Суммируя сказанное, сформулируем вариационные принципы.

3. Функционал M вида

$$M = M[\tau] \equiv \frac{1}{2}(\tau, 2\mathbf{e}^c - \hat{Q}\tau - \bar{q}\tau), \quad (8.31)$$

определенный на принадлежащем гильбертову пространству $\vec{\mathcal{H}}$ поле "поляризованного" тока τ , достигает экстремума при условии

$$\bar{q}\tau = \mathbf{e}^c - \hat{Q}\tau = \mathbf{e}, \quad \bar{q}\bar{\sigma}' = I. \quad (8.32)$$

Его экстремальное значение M_e , равное истинной потенциальной энергии u' , является минимумом:

$$M_e^+ = \frac{1}{2}(\tau, (\bar{q}\hat{I} + \hat{Q})\tau) = u' \leq 0, \quad (8.33a)$$

если $\bar{\sigma}' \leq 0$, и максимумом:

$$M_e^- = \frac{1}{2}(\tau, (\bar{q}\hat{I} + \hat{Q})\tau) = u' \geq 0, \quad (8.33b)$$

если $\bar{\sigma}' \geq 0$.

4. Функционал N вида

$$N = N[\mathbf{n}] \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{n}, 2\mathbf{j}^c - \hat{P}\mathbf{n} - \bar{p}\mathbf{n}), \quad (8.34)$$

определенный на принадлежащем гильбертову пространству $\vec{\mathcal{H}}$ поле "поляризованной" напряженности \mathbf{n} ,

достигает экстремума при условии

$$\bar{p}\mathbf{n} = \mathbf{j}^c - \hat{P}\mathbf{n} = \mathbf{j}, \quad \bar{p}\bar{\rho}' = I. \quad (8.35)$$

Его экстремальное значение N_e , равное взятой со знаком минус истинной потенциальной энергии u' , является минимумом:

$$N_e^+ = \frac{1}{2}(\mathbf{n}, (\bar{p}\hat{I} + \hat{P})\mathbf{n}) = -u' \leq 0, \quad (8.36a)$$

если $\bar{\rho}' \leq 0$, и максимумом:

$$N_e^- = \frac{1}{2}(\mathbf{n}, (\bar{p}\hat{I} + \hat{P})\mathbf{n}) = -u' \geq 0, \quad (8.36b)$$

если $\bar{\rho}' \geq 0$.

Отметим, что четвертый вариационный принцип, альтернативный третьему, получен при расчете границ (8.4) в ρ -схеме. Кроме того, он, как и третий, слабее классических принципов из раздела 8.2 и приводит, подобно (6.25), к менее жестким границам, чем (8.14).

В отличие от известных [9, 10] сформулированные выше вариационные принципы включают в себя проектирующие операторы \hat{Q} и \hat{P} , что позволяет расширить область их применения с помощью итерационной процедуры, введенной в разделах 4, 6. Отсутствие в методе Хашина–Штрукмана операторов \hat{Q} и \hat{P} существенно ограничивает его возможности. В рамках этого метода были решены лишь простейшие задачи для СНС.

8.4. Приближение Берана

Первое решение проблемы нахождения границ для σ^* с учетом информации о трехточечных вероятностях было дано Бераном [14, 31]. В его работах рассчитывалась эффективная диэлектрическая проницаемость ϵ^* неограниченной СНС, обладающей свойствами статистической однородности и изотропности, в случаях граничных условий, эквивалентных (1.4) или (1.5). Дополнительное упрощение достигалось расчетом лишь верхней границы (8.4) в первом случае и нижней — во втором.

Функционалы (8.1) принимают вид

$$U_1 = - \int w_\rho dV - \int_S \varphi_0 J_n dS,$$

$$U_2 = \int w_\sigma dV \equiv W_\sigma; \quad S_2 = 0, \quad (8.37a)$$

если выполняются граничные условия (1.4), и

$$U_1 = - \int w_\rho dV \equiv W_\rho,$$

$$U_2 = \int w_\sigma dV + \int_S \varphi J_0 dV; \quad S_1 = 0 \quad (8.37b)$$

в случае (1.5). Для энергии электрического поля

$$W = W_\rho = W_\sigma = \frac{1}{2} \int \mathbf{e} \cdot \mathbf{j} dV \quad (8.38)$$

в силу (8.4) и в соответствии с (8.37) имеем

$$\tilde{U}_1 \leq W_\sigma \leq \tilde{U}_2 \equiv \tilde{W}_\sigma, \quad (8.39a)$$

$$-\tilde{W}_\rho \equiv \tilde{U}_1 \leq -W_\rho \leq \tilde{U}_2. \quad (8.39b)$$

На базе правого из (8.39a) и левого из (8.39b) неравенств Беран сформулировал вариационные принципы мини-

мума функционалов

$$2\tilde{W}_\rho \equiv \int \tilde{\mathbf{j}} \cdot \bar{\rho} \tilde{\mathbf{j}} \, dV, \quad 2\tilde{W}_\sigma \equiv \int \tilde{\mathbf{e}} \cdot \bar{\sigma} \tilde{\mathbf{e}} \, dV, \quad (8.40)$$

приводящие к верхним границам

$$\rho^* \leq \rho^+, \quad \sigma^* \leq \sigma^+ \quad (8.41)$$

для эффективных характеристик.

Совместное использование неравенств (8.41), полученных при решении различных граничных задач, для нахождения двусторонних границ [14, 31] эквивалентно допущению независимости σ^* от вида граничных условий. Последнее справедливо лишь при рассмотрении неограниченных сред, когда граничные эффекты не учитываются.

Для нахождения ρ^+ и σ^+ из (8.40) необходимо задать виртуальные поля $\tilde{\mathbf{j}}$ и $\tilde{\mathbf{e}}$, удовлетворяющие условиям (8.3б) при $S_2 = S$ и (8.3а) при $S_1 = S$ соответственно. Аппроксимирующие поля Берана в обозначениях (4.3), (4.4) имеют вид

$$\tilde{\mathbf{j}} = \mathbf{j}_0 + v\mathbf{j}_1, \quad \tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e}_0 + u\mathbf{e}_1, \quad (8.42)$$

где v и u — произвольные скалярные параметры. Подстановка (8.42) в (8.40) и последующая минимизация функций (6.23) приводит к границам, совпадающим с (6.24), (6.25), полученным нами совершенно иным путем. Развитый для макроизотропных сред метод Берана [14] был использован для расчета σ^\pm трехмерных [9] и двумерных [22] макроизотропных смесей двух однородных и изотропных компонентов. Приближение же (6.24), (6.25) применимо для СНС, симметрийные свойства которых в микро- и макромасштабах произвольны.

9. Виртуальные поляризованные поля

Выбор виртуальных полей, используемых для аппроксимации функционалов, рассмотренных в разделе 8, существенным образом влияет на характер и точность решений, получаемых с помощью вариационных принципов.

Продемонстрируем это на примере полей (8.42). Сужение границ (6.25) может быть достигнуто, если вместо (8.42) выбрать поля

$$\tilde{\mathbf{j}} = (\hat{I} - \hat{\bar{P}}\bar{\rho}''g)\mathbf{j}_0, \quad \tilde{\mathbf{e}} = (\hat{I} - \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma}''f)\mathbf{e}_0, \quad (9.1)$$

где g и f — регулярные тензорные поля, определяемые путем варьирования функционалов (8.40). Подставляя (9.1) в (8.40), вместо (6.23) запишем

$$2\tilde{W}[g] = \left(\mathbf{j}_0, [\langle \bar{\rho} \rangle \hat{I} + 2\hat{\bar{\rho}}^{(2)}g + g(\hat{\bar{\rho}}^{(3)} - \hat{\bar{\rho}}^{(2)})g] \mathbf{j}_0 \right), \quad (9.2a)$$

$$2\tilde{W}[f] = \left(\mathbf{e}_0, [\langle \bar{\sigma} \rangle \hat{I} + 2\hat{\bar{\sigma}}^{(2)}f + f(\hat{\bar{\sigma}}^{(3)} - \hat{\bar{\sigma}}^{(2)})f] \mathbf{e}_0 \right). \quad (9.2b)$$

Здесь использованы обозначения (5.3), (5.4). Экстремумы $\tilde{W}[g]$ и $\tilde{W}[f]$, являющиеся минимумами, достигаются при условиях

$$g^e \hat{I} = [\hat{\bar{\rho}}^{(2)} - \hat{\bar{\rho}}^{(3)}]^{-1} \hat{\bar{\rho}}^{(2)}, \quad f^e \hat{I} = [\hat{\bar{\sigma}}^{(2)} - \hat{\bar{\sigma}}^{(3)}]^{-1} \hat{\bar{\sigma}}^{(2)} \quad (9.3)$$

и приводят к верхним границам

$$\hat{\bar{\rho}}^+ = \langle \bar{\rho} \rangle \hat{I} - \langle \bar{\rho}'' \hat{\bar{P}}\bar{\rho}'' \rangle \langle \bar{\rho}'' \hat{\bar{P}}\bar{\rho} \hat{\bar{P}}\bar{\rho}'' \rangle^{-1} \langle \bar{\rho}'' \hat{\bar{P}}\bar{\rho}'' \rangle, \quad (9.4a)$$

$$\hat{\bar{\sigma}}^+ = \langle \bar{\sigma} \rangle \hat{I} - \langle \bar{\sigma}'' \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma}'' \rangle \langle \bar{\sigma}'' \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma} \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma}'' \rangle^{-1} \langle \bar{\sigma}'' \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma}'' \rangle. \quad (9.4b)$$

Используя неравенство Шварца [99]

$$|(\psi_1, \psi_2)|^2 \leq (\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2), \\ \psi_1 \equiv \hat{B}^{1/2}\mathbf{e}_0, \quad \psi_2 \equiv \hat{B}^{-1/2}\hat{A}\mathbf{e}_0; \\ \hat{B} \equiv \langle \bar{\sigma}'' \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma} \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma}'' \rangle, \quad \hat{A} \equiv \langle \bar{\sigma}'' \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma}'' \rangle, \quad (9.5)$$

из (6.24а) и (9.4б) найдем

$$\min(\mathbf{e}_0, \hat{\bar{\sigma}}_{(3)}^* \mathbf{e}_0) \geq (\mathbf{e}_0, \hat{\bar{\sigma}}^+ \mathbf{e}_0), \quad (9.6a)$$

и аналогично из (6.24б) и (9.4а)

$$\min(\mathbf{j}_0, \hat{\bar{\rho}}_{(3)}^* \mathbf{j}_0) \geq (\mathbf{j}_0, \hat{\bar{\rho}}^+ \mathbf{j}_0). \quad (9.6b)$$

Полученные нами границы (9.4) уже границы Берана [14].

Перейдем теперь к рассмотрению кусочно-однородных случайных полей $\tilde{\tau}$ и $\tilde{\eta}$, применяемых в различных модификациях [9, 10, 17, 18, 38, 107] метода Хашина – Штирикмана. Ниже исследуются лишь вариационные принципы из раздела 8.2, поскольку они сильнее принципов из раздела 8.3, а принципы из раздела 8.4 являются их частными случаями. Для упрощения математических выкладок используются равенства (2.31), позволяющие сразу, без дополнительных преобразований, получать границы для σ^* .

Итак, решается задача о нахождении экстремальных значений функционалов F_1 (8.16) и F_2 (8.20), преобразованных к виду

$$2F_1 = \left(\langle \mathbf{j} \rangle, (I - \bar{\rho}^+[f_1]) \langle \mathbf{j} \rangle \right), \\ 2F_2 = \left(\langle \mathbf{e} \rangle, (\bar{\sigma}^+[f_2] - I) \langle \mathbf{e} \rangle \right), \quad (9.7)$$

$$\bar{\rho}^+[f_1] = \langle \bar{\rho} \rangle - \langle f_1'' \hat{\bar{P}}\bar{\rho}'' \rangle - \langle \bar{\rho}'' \hat{\bar{P}}f_1'' \rangle + \\ + \langle f_1'' [\bar{P} + \bar{P}\bar{\rho}'_j \bar{P}] f_1'' \rangle, \quad f_1 = f_1(\bar{\rho}'), \quad (9.8a)$$

$$\bar{\sigma}^+[f_2] = \langle \bar{\sigma} \rangle - \langle f_2'' \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma}'' \rangle - \langle \bar{\sigma}'' \hat{\bar{Q}}f_2'' \rangle + \\ + \langle f_2'' [\bar{Q} + \bar{Q}\bar{\sigma}'_j \bar{Q}] f_2'' \rangle, \quad f_2 = f_2(\bar{\sigma}'), \quad (9.8b)$$

где наряду с (4.18), (6.17) обозначено

$$\langle f_1'' \hat{\bar{P}}\bar{\rho} \hat{\bar{P}}f_1'' \rangle \equiv \langle f_1'' [\bar{P} + \bar{P}\bar{\rho}'_j \bar{P}] f_1'' \rangle, \\ \rho \equiv \sqrt{\bar{\rho}^j} (I + \bar{\rho}'_j) \sqrt{\bar{\rho}^j}, \quad (9.9a)$$

$$\langle f_2'' \hat{\bar{Q}}\bar{\sigma} \hat{\bar{Q}}f_2'' \rangle \equiv \langle f_2'' [\bar{Q} + \bar{Q}\bar{\sigma}'_j \bar{Q}] f_2'' \rangle,$$

$$\sigma \equiv \sqrt{\bar{\sigma}^j} (I + \bar{\sigma}'_j) \sqrt{\bar{\sigma}^j}. \quad (9.9b)$$

Ввиду кусочной однородности тензоров f_1 и f_2 и однородности $\langle \mathbf{j} \rangle$ и $\langle \mathbf{e} \rangle$ величины, получаемые в результате статистического усреднения (9.9), являются тензорами, а представление их в форме правых частей равенств (9.9)

возможно благодаря произвольности параметров ρ^c и σ^c . Таким образом, соотношения (9.9) определяют значения ρ^j и σ^j параметров ρ^c и σ^c , подстановка которых соответственно в F_1 и F_2 приводит последние к виду (9.7), (9.8). Определения (9.9) можно также представить в виде

$$(g''_1, \bar{\rho}'_j g''_1) \equiv 0, \quad g_1 \equiv (\widehat{P} - \overline{P} \widehat{I}) f_1, \quad (9.10a)$$

$$(g''_2, \bar{\sigma}'_j g''_2) \equiv 0, \quad g_2 \equiv (\widehat{Q} - \overline{Q} \widehat{I}) f_2. \quad (9.10b)$$

Здесь индекс j отвечает значению статистического параметра, полученного с помощью трехточечной вероятности случайного поля $\sigma(\mathbf{r})$. Этот параметр (или, в общем случае, параметры) может иметь геометрическое истолкование, поскольку несет информацию (в объеме трехчастичных взаимодействий) о характере пространственного распределения неоднородностей.

Варьируя функционалы F_1 , F_2 или, что то же, тензоры $\bar{\rho}^+[f_1]$, $\bar{\sigma}^+[f_2]$ по виртуальным полям f_1 и f_2 соответственно, получаем

$$\bar{\rho}_{(3)}^+ \equiv \bar{\rho}^+[f_1^c] = I + \langle f_1^c \rangle = I + \langle (\bar{p}_j + \overline{P} \widehat{R})^{-1} \rangle, \quad \bar{p}_j \bar{\rho}'_j \equiv I, \quad (9.11a)$$

$$\bar{\sigma}_{(3)}^+ \equiv \bar{\sigma}^+[f_2^c] = I + \langle f_2^c \rangle = I + \langle (\bar{q}_j + \overline{Q} \widehat{R})^{-1} \rangle, \quad \bar{q}_j \bar{\sigma}'_j \equiv I. \quad (9.11b)$$

Решения (9.11) имеют форму (7.6), причем в отличие от сингулярного приближения найдены соотношения (9.10), позволяющие однозначно определить параметры ρ^j и σ^j двух сред сравнения ($\rho^j \sigma^j \geq I$), подстановка которых в (9.11a, б) приводит к границам $\sigma_{(3)}^\pm$ для σ^* .

Используя "обратимость" (7.8) формул s -приближения, перепишем границы (9.11) в форме

$$\sigma_F^- \leq \sigma^* \leq \sigma_F^+, \quad \sigma_F^\pm \equiv \sigma^s(\sigma_F^\pm), \quad \sigma^s \equiv \sigma^s(\sigma^c); \quad (9.12)$$

$$\sigma_j^+ \equiv \sigma^j, \quad \sigma_j^- \equiv (\rho^j)^{-1}; \quad \sigma_j^- \leq \sigma_j^+. \quad (9.13)$$

Можно показать [21, 37], что вариационные принципы из раздела 8.3 приводят к границам

$$\sigma_{MN}^- \leq \sigma^* \leq \sigma_{MN}^+, \quad \sigma_{MN}^\pm \equiv \sigma^s(\sigma^\pm) \quad (9.14)$$

представимым в той же форме, что и границы (9.12).

Параметры $\sigma^c = \sigma^\pm$, определяемые согласно (6.14б), (6.15б), связаны с σ_j^\pm неравенствами

$$\sigma^- \leq \sigma_j^- \leq \sigma_j^+ \leq \sigma^+, \quad (9.15)$$

являющимися следствием неравенств

$$M^- \leq M - R_1 = F_1 \leq u' \leq F_2 = M + R_2 \leq M^+, \quad (9.16)$$

вытекающих из (8.14), (8.24а), и аналогичных неравенств с участием функционала N .

Неравенства (9.15) дают возможность найти предельные значения структурного параметра j . В простейшем случае смеси двух однородных и изотропных компонентов из (9.15) находим [37, 83]

$$j \in [0, 1]; \quad \sigma_j^+ = \sigma_j^- = \begin{cases} \sigma^+, & j = j^+ = 1, \\ \sigma^-, & j = j^- = 0. \end{cases} \quad (9.17)$$

Вводя подобно (1.11), (6.14б), (6.15б), (6.16) обозначения

$$\begin{aligned} \Gamma_{(0)}^\pm &\equiv \Gamma^\pm, & \Gamma_{(1)}^+ &\equiv \langle \Gamma \rangle, & \Gamma_{(1)}^- &\equiv \langle \Gamma^{-1} \rangle^{-1}, \\ \Gamma_{(2)}^\pm &\equiv \Gamma^s(\Gamma^\pm), & \Gamma_{(3)}^\pm &\equiv \Gamma^s(\Gamma_j^\pm), & \Gamma^s &\equiv \Gamma^s(\Gamma^c), \end{aligned} \quad (9.18)$$

запишем цепочку сужающихся границ $\Gamma_{(n)}^\pm$ для Γ^* :

$$\begin{aligned} \Gamma_{(0)}^- \leq \Gamma_{(1)}^- \leq \Gamma_{(2)}^- \leq \Gamma_{(3)}^- \leq \Gamma^* \leq \Gamma_{(3)}^+ \leq \Gamma_{(2)}^+ \leq \Gamma_{(1)}^+ \leq \Gamma_{(0)}^+; \\ \Gamma \equiv \sigma, \rho. \end{aligned} \quad (9.19)$$

Здесь знаки равенств реализуются при предельных значениях соответствующих геометрических параметров.

Границы (9.12) учитывают информацию о СНС в объеме трехточечных вероятностей (трехчастичных взаимодействий между неоднородностями) и являются наилучшими в приближении кусочно-однородных случайных полей "поляризованного" тока $\tilde{\tau}$ и "поляризованной" напряженности $\tilde{\eta}$.

Более детальное описание СНС посредством задания n -точечных (где $n \geq 4$) вероятностей приведет к сужению границ (9.12). Практически это может быть осуществлено введением в $\tilde{\tau}$ (и аналогично в $\tilde{\eta}$) слагаемых вида $\bar{\sigma}' e_k$ (где $k \geq 1$), определенных согласно (3.39).

10. Точные решения

Помимо упомянутых в (1.7) до сих пор было найдено лишь несколько точных решений для σ^* . При этом, как и в случаях (1.7), среди, описываемые ТЭП, представляемыми простыми аналитическими формулами, обладают высокими симметричными свойствами. Это объясняется тем, что и пространственное распределение неоднородностей таких сред соответствует некоторым предельным структурам.

10.1. Полностью симметричные среды

Для двумерной смеси двух изотропных компонентов (включения одинаковой формы и размеров распределены в матрице таким образом, что их центры образуют прямоугольную решетку, оси симметрии которой совпадают с осями симметрии включений) была доказана теорема [13], согласно которой x -компоненты $\sigma_{xx}^*(\sigma_1, \sigma_2)$ ТЭП для среды, у которой матрица описывается проводимостью σ_1 (см. обозначение (1.9)), а включения — σ_2 , связана с y -компонентой $\sigma_{yy}^*(\sigma_2, \sigma_1)$ для среды, у которой проводимость матрицы — σ_2 , а включений — σ_1 , соотношением

$$\sigma_{xx}^*(\sigma_1, \sigma_2) \sigma_{yy}^*(\sigma_2, \sigma_1) = \sigma_1 \sigma_2, \quad (10.1)$$

причем внутренняя геометрия обеих сред одинакова. Мендельсон [25] показал, что теорема Келлера справедлива при менее жестких ограничениях, накладываемых на геометрию включений и их пространственное распределение. Подобные соотношения другим путем были получены Дыхне [20], который обнаружил преобразование симметрии, связывающее среды, фигурирующие в теореме Келлера. Случай нетекстуированных поликристаллических сред рассматривался в работах [20, 28, 39, 40, 112] (преобразование Дыхне) и [113, 114] (теорема Келлера).

В дальнейшем потребуется обобщенная форма теоремы Келлера, применимая и для трехмерных сред. Для модификации равенства (10.1) введем обозначения

$$\begin{aligned}\sigma_i^* &\equiv \sigma^*(\sigma_1, \sigma_2; v_1, v_2; \bar{Q}_{ii}) \equiv \sigma^*(\bar{Q}_{ii}), \quad i \in [1, 3], \\ \tilde{\sigma}_i^* &\equiv \sigma^*(\sigma_2, \sigma_1; v_1, v_2; \bar{P}_{ii}) \equiv \tilde{\sigma}^*(\bar{Q}_{ii}); \\ \bar{P}_{ii} &= 1 - \bar{Q}_{ii}, \quad \sum_{i=1}^3 \bar{Q}_{ii} = 1,\end{aligned}\quad (10.2)$$

где \bar{Q}_{ij} и \bar{P}_{ij} — компоненты тензоров \bar{Q} и \bar{P} , введенных соотношениями (6.17)–(6.19) и определяемых внутренней геометрией (структурой) среды. Ниже рассматривается случай изотропной среды сравнения (6.22), когда \bar{Q} имеет смысл тензора деполяризации.

Как видно из (7.6), тензор \bar{Q} существенным образом влияет на величину и симметрийные свойства σ^s (и аналогично в случае ρ^s). Обусловленное изменением структуры ($d\bar{Q} \neq 0 = d\sigma^c$) изменение $d\bar{\sigma}^s$ в силу (7.6) и (6.18) имеет вид

$$\begin{aligned}d\bar{\sigma}^s &= \langle (\bar{q} + \bar{Q}\hat{R})^{-1} \hat{R} d\bar{P} \hat{R} (\bar{q} + \bar{Q}\hat{R})^{-1} \rangle, \\ -d\bar{Q} &= d\bar{P} \neq 0 = d\sigma^c.\end{aligned}\quad (10.3)$$

Равенство (10.3) означает, что σ^s возрастает с увеличением структурного параметра \bar{P} и достигает границ (7.9) для предельных значений \bar{P} (6.18). Аналогичным образом из (5.5), (3.23), (7.1) и (7.2) следуют соотношения

$$\begin{aligned}\hat{d}\hat{\sigma}^* &= \langle (\hat{q}\hat{I} + \hat{Q}\hat{R})^{-1} \hat{R} d\hat{P} \hat{R} (\hat{q}\hat{I} + \hat{Q}\hat{R})^{-1} \rangle, \\ -d\hat{Q} &= d\hat{P} \neq 0 = d\sigma^c \hat{I}; \\ d\hat{Q} &= d\bar{Q}\hat{I} + d\hat{Q}^f, \quad d\hat{P} = d\bar{P}\hat{I} + d\hat{P}^f,\end{aligned}\quad (10.4)$$

означающие, что $\hat{\sigma}^*$, как и $\bar{\sigma}^s$, возрастает с увеличением параметра \bar{P} при фиксированном \hat{P}^f , достигая границ (7.9) для предельных значений $\hat{P}^s = \bar{P}\hat{I}$ (6.18), совпадающих с предельными значениями \hat{P} (3.26).

Для двумерной среды из (10.1), (10.2) имеем

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^*(\sigma_1, \sigma_2) &\equiv \sigma_1^* \equiv \sigma^*(\bar{Q}), \\ \sigma_{yy}^*(\sigma_1, \sigma_2) &\equiv \sigma_2^* \equiv \sigma^*(\bar{P}); \quad \bar{Q} \equiv \bar{Q}_{11}, \\ \sigma_{yy}^*(\sigma_2, \sigma_1) &\equiv \sigma^*(\sigma_2, \sigma_1; v_1, v_2; \bar{P}) \equiv \tilde{\sigma}_1^* \equiv \tilde{\sigma}^*(\bar{Q}), \\ \bar{P} &\equiv 1 - \bar{Q} = \bar{Q}_{22}.\end{aligned}\quad (10.5)$$

В этих обозначениях (10.1) примет вид

$$\sigma^*(\bar{Q})\tilde{\sigma}^*(\bar{Q}) = \sigma_1\sigma_2. \quad (10.6)$$

Решение σ^s (7.6) удовлетворяет согласно (7.9) соотношению

$$\sigma^c \in [0, \infty] \Rightarrow \sigma^s \in [\langle \rho \rangle^{-1}, \langle \sigma \rangle], \quad (10.7)$$

означающее, что σ^s описывает все возможные реальные структуры неоднородных сред. Поэтому оно должно удовлетворять теореме Келлера в форме (10.6).

Для смеси двух изотропных однородных компонентов из (7.6)–(7.8) и обозначений (1.8), (1.9) получим

$$\sigma^s = \langle \sigma \rangle - \frac{\bar{Q}D_\sigma}{\bar{Q}[\sigma] + \bar{P}\sigma^c} = \frac{\bar{Q}\sigma_1\sigma_2 + \bar{P}\sigma^c \langle \sigma \rangle}{\bar{Q}[\sigma] + \bar{P}\sigma^c}, \quad (10.8a)$$

$$D_\sigma \equiv \langle (\sigma'')^2 \rangle = v_1v_2(\sigma_1 - \sigma_2)^2,$$

$$[\sigma] \equiv v_1\sigma_2 + v_2\sigma_1, \quad \langle \sigma \rangle \equiv v_1\sigma_1 + v_2\sigma_2, \quad (10.9a)$$

$$\sigma_a \equiv \sigma(\mathbf{r}_a), \quad \mathbf{r}_a \equiv \mathbf{r} \in V_a, \quad v_a \equiv \frac{V_a}{V}, \quad v_a \in [0, 1]. \quad (10.9b)$$

Учитывая определение (10.2), отсюда найдем

$$\tilde{\sigma}^s = \frac{\bar{P}\sigma_1\sigma_2 + \bar{Q}\tilde{\sigma}^c[\sigma]}{\bar{P}\langle \sigma \rangle + \bar{Q}\tilde{\sigma}^c}; \quad \sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2 \Rightarrow [\sigma] \leftrightarrow \langle \sigma \rangle. \quad (10.8b)$$

Подставляя (10.8) в (10.6), получаем равенство [83]

$$\sigma^c \tilde{\sigma}^c = \sigma_1\sigma_2, \quad (10.10)$$

которому должны удовлетворять параметры σ^c и $\tilde{\sigma}^c$ "взаимных" (по терминологии [112]) сред.

Покажем, что одномерные структуры (слоистые среды) удовлетворяют равенству (10.6). Положив $\bar{P} = 0$, для проводимости в направлении нормали к слоям из (10.8) и (10.2) получим

$$\bar{P} = 0, \quad \bar{Q} = 1 \Rightarrow \sigma^* = \frac{\sigma_1\sigma_2}{[\sigma]} = \langle \rho \rangle^{-1}, \quad \tilde{\sigma}^* = [\sigma]. \quad (10.11a)$$

Аналогично, положив $\bar{P} = 1$, для проводимости в направлении, параллельном слоям, из (10.8) и (10.2) найдем

$$\bar{P} = 1, \quad \bar{Q} = 0 \Rightarrow \sigma^* = \langle \sigma \rangle, \quad \tilde{\sigma}^* = \frac{\sigma_1\sigma_2}{\langle \sigma \rangle} = [\rho]^{-1}. \quad (10.11b)$$

Таким образом, "одномерные" СНС удовлетворяют теореме Келлера. Сравнивая (10.11) с (9.18), (9.19), заключаем, что наилучшие границы $\sigma_{(n)}^\pm$ при $n = 1$ согласованы с (10.6). Случай $n = 0$ из (9.18), (9.19) является тривиальным.

Рассмотрим теперь обобщенные границы Хашина–Штрикмана $\sigma_{(2)}^\pm$ (9.18), (9.19), для которых согласно (10.8) запишем

$$\begin{aligned}\sigma_{(2)}^+ &= \sigma_2 \frac{\bar{Q}\sigma_1 + \bar{P}\langle \sigma \rangle}{\bar{Q}[\sigma] + \bar{P}\sigma_2}, \quad \tilde{\sigma}_{(2)}^+ = \sigma_1 \frac{\bar{P}\sigma_2 + \bar{Q}[\sigma]}{\bar{P}\langle \sigma \rangle + \bar{Q}\sigma_1}; \\ \sigma^c &= \sigma^+ \equiv \sigma_2,\end{aligned}\quad (10.12a)$$

$$\sigma_{(2)}^- = \sigma_1 \frac{\bar{Q}\sigma_2 + \bar{P}\langle \sigma \rangle}{\bar{Q}[\sigma] + \bar{P}\sigma_1}, \quad \tilde{\sigma}_{(2)}^- = \sigma_2 \frac{\bar{P}\sigma_1 + \bar{Q}[\sigma]}{\bar{P}\langle \sigma \rangle + \bar{Q}\sigma_2};$$

$$\sigma^c = \sigma^- \equiv \sigma_1. \quad (10.12b)$$

Отсюда следуют равенства

$$\sigma_{(2)}^\pm \tilde{\sigma}_{(2)}^\pm = \sigma_1\sigma_2, \quad (10.13)$$

означающие, что наилучшие границы в случае $n = 2$ удовлетворяют (10.6). При $3\bar{Q} = 1$ значения $\sigma_{(2)}^\pm$ описывают возможные реальные трехмерные структуры, рассчитанные в [9].

Границы $\sigma_{(3)}^\pm$ (9.18) учитывают трехчастичные взаимодействия, поэтому среда (или модель), для которой они представляют точные решения, должна содержать три "степени свободы", т.е. быть либо трехкомпонентной, либо иметь дополнительный параметр, описывающий ориентацию несферических включений. Подстас-

новка в (10.10) вместо σ^c и $\tilde{\sigma}^c$ значений σ_j^\pm и $\tilde{\sigma}_j^\pm$ соответственно должна приводить, подобно (10.10), к равенству, связывающему j и \tilde{j} , где \tilde{j} — значение параметра j для "взаимной" среды (см. раздел 11).

Полученное нами обобщение (10.6) теоремы Келлера (10.1) распространяет ее применимость на трехмерные среды. Использование двумерного варианта (10.1) для оценок σ^* трехмерных сред приводит [115] к неравенству

$$\sigma_{xx}^*(\sigma_1, \sigma_2)\sigma_{yy}^*(\sigma_2, \sigma_1) \geq \sigma_1\sigma_2. \quad (10.14)$$

Из этого делается вывод об отсутствии в трехмерном случае теоремы вида (10.1).

Среди бесконечного множества двумерных СНС выделяются среды, макроскопическая проводимость которых инвариантна относительно перестановки компонентов: $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$. Требование идентичности статистических свойств компонентов [15, 29] весьма существенно сужает класс рассматриваемых сред (см. раздел 12). При заданных значениях σ_1 и σ_2 такие среды описываются одинаковым для всех значением макроскопической проводимости, которая согласно (10.1) и (10.6) равна [20, 25]

$$\sigma^* = \tilde{\sigma}^* = \sqrt{\sigma_1\sigma_2}, \quad v_1 = v_2 = \bar{Q} = \bar{P} = \frac{1}{2}. \quad (10.15)$$

Единственное решение (10.15) описывает проводящие свойства двумерной однородной среды. Макроскопическая проводимость СНС, статистические свойства компонентов которых идентичны (тождественны), равна (10.15). Используя терминологию [15, 26], ниже такие СНС называются полностью симметричными средами.

10.2. Самосогласованные решения

Исследования проводящих свойств различных макроскопических систем (моделей) привели к отысканию точных решений для σ^* , именуемых ниже самосогласованными. Часто их не совсем точно называют приближениями теории эффективной среды [24, 28, 106, 112]. Однако обычно этот термин используется для обозначения однородной среды, свойства которой (например, проводимость) равны макроскопическим свойствам различных реализаций рассматриваемого ансамбля неоднородных сред.

Идея самосогласования была впервые реализована Бруггеманом [2] при расчете эффективных диэлектрических проницаемостей трех- и двумерных макроизотропных сред. Для этих случаев в формулах (10.8) соответственно имеем: $\bar{Q} = 1/3$ и $\bar{Q} = 1/2$.

По определению [2, 7, 27, 55, 83, 105] самосогласованное решение, обозначаемое σ^{SCS} , получается из (7.6) при условии $\sigma^c = \sigma^{SCS}$. Легко видеть, что σ^{SCS} удовлетворяет уравнению

$$\langle(\bar{q} + \bar{Q}\hat{R})^{-1}\rangle = 0, \quad \sigma^c = \sigma^{SCS}. \quad (10.16)$$

Отсюда, а также из (10.8) для смеси двух однородных и изотропных компонентов получим уравнение

$$\bar{P}(\sigma^{SCS})^2 - b\sigma^{SCS} - \bar{Q}\sigma_1\sigma_2 = 0, \quad b \equiv \bar{P}\langle\sigma\rangle - \bar{Q}[\sigma], \quad (10.17a)$$

решение которого

$$2\bar{P}\sigma^{SCS} = \Delta + b, \quad \Delta^2 \equiv b^2 + 4\bar{P}\bar{Q}\sigma_1\sigma_2 \quad (10.18a)$$

при различных $\bar{P} = 1 - \bar{Q}$ определяет главные значения σ^{SCS} . Решение (10.18a) описывает макроанизотропные самосогласованные среды и является наиболее общим из полученных до сих пор решений подобного типа. Анизотропия макроскопической проводимости возникает либо за счет отклонения (в статистическом смысле) формы зерен неоднородности от сферической, либо вследствие анизотропности их распределения в пространстве [13, 16, 21–23, 37, 38, 83, 104, 105, 111, 112]. Отметим также, что решение (10.18a) учитывает в неявной форме многочастичные взаимодействия. Кроме того, оно симметрично относительно характеристик компонентов (проводимостей и концентраций), в силу чего среда, описываемая проводимостью σ^{SCS} , принадлежит классу симметричных. Следуя [29], называем среду симметричной, если ее макроскопические свойства инвариантны относительно преобразования инверсии компонентов:

$$(\sigma_1, v_1) \leftrightarrow (\sigma_2, v_2), \quad (10.19)$$

обозначающего пространственную перестановку компонентов $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$ с одновременной заменой их концентраций $v_1 \leftrightarrow v_2$. Эта инвариантность накладывает довольно жесткие ограничения на статистические свойства СНС [15, 29, 112].

Рассмотрим теперь самосогласованное решение для "взаимной" среды. Вместо (10.17a) и (10.18a) соответственно запишем

$$\bar{Q}(\tilde{\sigma}^{SCS})^2 + b\tilde{\sigma}^{SCS} - \bar{P}\sigma_1\sigma_2 = 0, \quad (10.17b)$$

$$2\bar{Q}\tilde{\sigma}^{SCS} = \Delta - b; \quad \tilde{b} = -b, \quad \tilde{\Delta} = \Delta. \quad (10.18b)$$

Перемножая левые и правые части (10.18a) и (10.18b), получаем

$$\sigma^{SCS}\tilde{\sigma}^{SCS} = \sigma_1\sigma_2. \quad (10.20)$$

Решение $\tilde{\sigma}^{SCS}$, как и σ^{SCS} , принадлежит классу симметричных. Ниже (см. раздел 12) будет показано, что среды, описываемые σ^{SCS} и $\tilde{\sigma}^{SCS}$, являются в некотором смысле предельными в классе симметричных.

Для каждого числа $\bar{P} = 1 - \bar{Q}$ среди самосогласованных решений существует единственное — полностью симметричное — инвариантное относительно перестановки $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$ решение вида

$$v_1 = v_2 \Rightarrow \sigma^{SCS}(\sigma_1, \sigma_2) = \sigma^{SCS}(\sigma_2, \sigma_1) \equiv \sigma^{CSM}. \quad (10.21)$$

Среды такого типа рассматривались Фришем [15], Дыхне [20], Мендельсоном [25], Шульгассером [26], автором [29], Швидлером [39], Балагуровым [112]. С учетом (10.21) из (10.17a) найдем

$$b = (\bar{P} - \bar{Q})\langle\sigma\rangle, \quad \langle\sigma\rangle = [\sigma] = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}. \quad (10.22)$$

Подставляя (10.22) в (10.18), получаем значения

$$4\sigma^{CSM} = (\langle\sigma\rangle^2 + 8\sigma_1\sigma_2)^{1/2} + \langle\sigma\rangle, \quad v_2 = \frac{1}{2},$$

$$2\tilde{\sigma}^{CSM} = (\langle\sigma\rangle^2 + 8\sigma_1\sigma_2)^{1/2} - \langle\sigma\rangle, \quad \bar{P} = \frac{2}{3} \quad (10.23a)$$

в случае трехмерных макроизотропных сред и

$$\sigma^{\text{CSM}} = \tilde{\sigma}^{\text{CSM}} = \sqrt{\sigma_1 \sigma_2} \equiv \sigma^{\text{DM}}, \quad v_2 = \bar{P} = \frac{1}{2} \quad (10.23\delta)$$

в случае двумерных макроизотропных сред соответственно.

10.3. Новые решения в форме Дыхне–Мендельсона

Детальное исследование выражений (10.18) показывает, что решение в форме Дыхне–Мендельсона (10.23б), справедливое для полностью симметричных сред, реализуется в определенном диапазоне концентраций для любых сред, принадлежащих классу симметричных.

Можно показать, что равенства (10.23б) имеют место при условии

$$2\bar{P}\bar{Q}(\sigma^{\text{SCS}} - \tilde{\sigma}^{\text{SCS}}) = (\bar{Q} - \bar{P})\Delta + b = 0, \quad (10.24)$$

откуда после несложных преобразований находим

$$b = (\bar{P} - \bar{Q})\Delta, \quad \Delta = \sqrt{\sigma_1 \sigma_2}. \quad (10.25)$$

Из (10.25) и определения (10.17а) получим, что для концентрации

$$v_2 = v_0 \equiv \bar{P}v_m + \bar{Q}(1 - v_m) = \frac{\bar{Q} + \bar{P}\sqrt{x}}{1 + \sqrt{x}},$$

$$v_0 \in [v_m, 1 - v_m], \quad (10.26)$$

$$v_m \equiv \frac{\sqrt{x}}{1 + \sqrt{x}}, \quad \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \equiv x \in [0, 1], \quad (10.27)$$

и произвольных значений \bar{P} и $\bar{Q} = 1 - \bar{P}$ выполняются равенства

$$\sigma^0 \equiv \sigma^{\text{SCS}} = \tilde{\sigma}^{\text{SCS}} = \sqrt{\sigma_1 \sigma_2}, \quad \bar{Q} \in [0, 1]. \quad (10.28)$$

Полагая $\bar{Q} \equiv \bar{Q}_{11}$, $\bar{P} \equiv 1 - \bar{Q}_{11} = \bar{Q}_{22}$ и учитывая обозначения (10.2), (10.5), для двумерной симметричной среды отсюда имеем

$$\sigma_{xx}^{\text{SCS}}(\sigma_1, \sigma_2) = \sigma_{yy}^{\text{SCS}}(\sigma_2, \sigma_1) = \sigma^0, \quad v_2 = v_0 = \frac{\bar{Q} + \bar{P}\sqrt{x}}{1 + \sqrt{x}}, \quad (10.29\alpha)$$

$$\sigma_{xx}^{\text{SCS}}(\sigma_2, \sigma_1) = \sigma_{yy}^{\text{SCS}}(\sigma_1, \sigma_2) = \sigma^0,$$

$$v_2 = v'_0 \equiv \frac{\bar{Q} + \bar{P}/\sqrt{x}}{1 + 1/\sqrt{x}} = 1 - v_0, \quad (10.29\beta)$$

$$\sigma_{xx}^{\text{SCS}}(\sigma_2, \sigma_1) \leq \sigma_{xx}^{\text{SCS}}(\sigma_1, \sigma_2) = \sigma^0 =$$

$$= \sigma_{yy}^{\text{SCS}}(\sigma_2, \sigma_1) \leq \sigma_{yy}^{\text{SCS}}(\sigma_1, \sigma_2),$$

$$v_2 = v_0 \gtrless \frac{1}{2} \gtrless \bar{P}. \quad (10.30)$$

Легко видеть, что решения (10.29а) и (10.29б) описывают СНС, связанные преобразованием (10.19). При $\bar{P} = \bar{Q}$ формулы (10.29) переходят в (10.23б).

Для дальнейшего анализа удобно ввести функции

$$R_{(n)}^{\pm} \equiv \frac{\sigma_{(n)}^{\pm} - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1}, \quad \tilde{R}_{(n)}^{\pm} \equiv \frac{\tilde{\sigma}_{(n)}^{\pm} - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1},$$

$$R^0 \equiv \frac{\sigma^0 - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1}, \quad R^{\text{DM}} \equiv \frac{\sigma^{\text{DM}} - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1}, \quad (10.31)$$

где использованы обозначения (9.18), (10.23б), (10.28). Отсюда найдем

$$R_{(0)}^- = 0, \quad R_{(0)}^+ = 1; \quad R_{(1)}^- = \frac{v_2 x}{v_1 + v_2 x}, \quad R_{(1)}^+ = v_2,$$

$$\tilde{R}_{(1)}^- = \frac{v_1 x}{v_1 x + v_2}, \quad \tilde{R}_{(1)}^+ = v_1; \quad R^0 = \frac{\sqrt{x}}{1 + \sqrt{x}} = v_m. \quad (10.32)$$

На рисунке 4 для случая $5x = 1$ изображены графики функций (10.31)–(10.33). Области 1 и 2 представляют множества значений функций

$$\tilde{R}^{\text{SCS}} \equiv \frac{\tilde{\sigma}^{\text{SCS}} - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1}, \quad R^{\text{SCS}} \equiv \frac{\sigma^{\text{SCS}} - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1} \quad (10.33)$$

соответственно. Штриховкой выделено пересечение этих множеств. Горизонтальная прямая ($\bar{Q} \in [0, 1]$), проведенная в штрихованной области, — множество значений R^0 . Точки a и b этой прямой соответствуют решениям (10.29а) и (10.29б), связанным преобразованием $(\sigma_1, 1 - v_0) \leftrightarrow (\sigma_2, v_0)$, а точка DM — решению Дыхне–Мендельсона (10.23б).

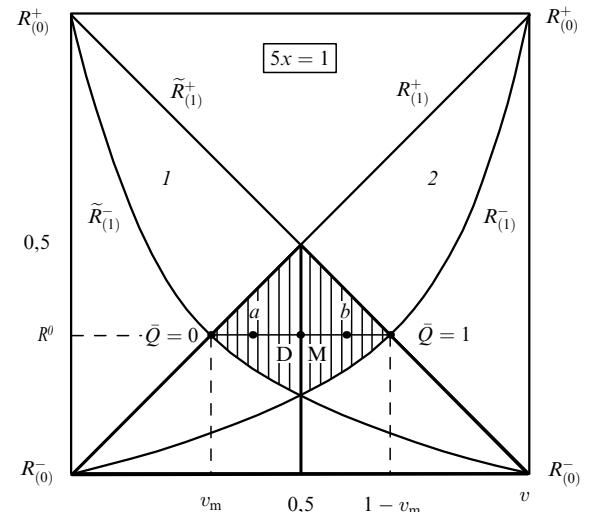


Рис. 4.

Если снять ограничение ($5x = 1$), накладываемое на параметр x , допустив его изменение в диапазоне $x \in [0, 1]$, то штрихованная область увеличится, заполнив треугольник, образованный диагоналями квадрата и осью абсцисс. Высота этого треугольника, опущенная на гипотенузу, представляет множество значений функции R^{DM} (10.31).

Штрихованная область диапазона $x \in [1, \infty]$, соответствующего значениям $\sigma_1 \geq \sigma_2$, изображается верхним треугольником, который получается из нижнего преобразованием инверсии относительно центра квадрата.

Таким образом, множество всевозможных значений R^0 , соответствующих решениям вида (10.28), (10.29), занимает половину квадрата (см. рис. 4). Вторую половину этого квадрата образует множество значений функции R , полученной для решений, не удовлетворяющих равенству (10.28). Наконец, множество значений

R^{DM} изображается отрезком вертикальной прямой (единичной длины), проходящей через центр квадрата.

Итак, нами показано, что решение вида (10.23б) при значениях концентрации $v_2 = v_0$, определяемом геометрическим параметром $\bar{P} = 1 - \bar{Q}$ и отношением x проводимостей компонентов согласно (10.29а), реализуется для любой симметричной среды. Определения функций (10.31)–(10.33) не зависят от размерности СНС, поэтому рис. 4 справедлив и в случае трехмерной среды при соответствующей интерпретации его областей, кривых и точек.

11. Структурные параметры неоднородных сред

При решении различных задач в теории неоднородных сред часто оказывается полезным введение параметров, получаемых на базе имеющейся статистической информации о СНС. Эти параметры, именуемые структурными (статистическими), дают представление о пространственном распределении неоднородностей, т.е. о внутренней геометрии среды.

Ниже эти параметры рассматриваются на примере простейшей СНС — смеси двух однородных и изотропных компонентов. Следуя [15, 29, 116], введем скалярную индикаторную функцию f вида

$$f(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \in V_1, \\ 1, & \mathbf{r} \in V_2, \end{cases} \quad V_1 \cup V_2 = V. \quad (11.1)$$

Здесь область V_a , занимаемая a -м компонентом, обозначается той же буквой, что и объем этой области.

В обозначениях (1.9), (4.18), (10.9), (11.1) случайное скалярное поле $\sigma(\mathbf{r})$, его среднее значение $\langle\sigma\rangle$ и флуктуация σ'' имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_1 + (\sigma_2 - \sigma_1)f; \quad \sigma = \sigma(\mathbf{r}), \quad f = f(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in V, \\ \langle\sigma\rangle &= \sigma_1 + (\sigma_2 - \sigma_1)\langle f \rangle, \quad \sigma'' = (\sigma_2 - \sigma_1)f'', \\ f'' &= f - \langle f \rangle. \end{aligned} \quad (11.2a)$$

Будем предполагать статистическую однородность и эргодичность [8, 14, 30, 31, 37] скалярного случайного поля $f(\mathbf{r})$. Величины с такими свойствами часто называются самоусредняющимися [20, 95–98]. Тогда в силу (3.7) запишем

$$\langle f \rangle = v_2 \equiv v, \quad f''(\mathbf{r}) = \begin{cases} (-v_2), & \mathbf{r} \in V_1, \\ v_1, & \mathbf{r} \in V_2, \end{cases} \quad (11.3)$$

где v имеет смысл геометрической вероятности попадания точки \mathbf{r} в область V_2 [15]. Равенство $\langle f \rangle$ объемной концентрации v_2 придает этому статистическому параметру экстенсивный характер. Для центральной моментной функции второго порядка будем иметь [21, 30]

$$\begin{aligned} \langle f''(\mathbf{r}_1)f''(\mathbf{r}_2) \rangle &= \Phi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \\ \Phi(0) &\equiv D_f = v_1v_2. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Наряду с v рассмотрим тензорные параметры \bar{P} и \bar{Q} (подобно (10.5), (10.17), (10.18) посредством \bar{P} и \bar{Q} будем обозначать также и главные значения этих тензоров), которые для поля $\bar{\sigma}$ (11.2а) согласно определениям (6.17)

принимают вид [21, 37]

$$\begin{aligned} \bar{P} &\equiv (\bar{f}'', \widehat{\bar{P}}\bar{f}''), \quad \bar{Q} \equiv (\bar{f}'', \widehat{\bar{Q}}\bar{f}''); \\ \bar{f} &\equiv fD_f^{-1/2}, \quad D_f = \|f''\|^2. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Для эллипсоидального включения тензор деполяризации \bar{Q} был рассчитан Осборном [3]. В отличие от v статистические параметры \bar{P} и \bar{Q} имеют интенсивный характер. Как видно из изложенного в разделе 9, они играют важную роль при определении численных значений и симметричных свойств тензоров $\sigma_{(n)}^\pm$ (где $n \geq 2$). В случае, когда эффективное (среднее по ансамблю) зерно неоднородности СНС представимо трехосным эллипсоидом, задача сводится к нахождению трех главных значений тензоров \bar{Q} и $\sigma_{(n)}^\pm$ соответственно.

Для расчета границ $\sigma_{(3)}^\pm$ (см. раздел 9) необходимо ввести тензорный параметр j , учитывающий статистическую информацию в объеме трехточечных вероятностей, задаваемых с помощью моментов случайного поля $f(\mathbf{r})$ [15, 29]. Согласно (9.10) и с учетом (11.5), (6.19) параметр j определяется соотношениями

$$\begin{aligned} j &\equiv (g, fg); \quad g \equiv G\|G\|^{-1}, \quad \|g\| = 1; \quad j \in [0, 1], \\ G &\equiv (\widehat{\bar{Q}} - \bar{Q}\widehat{\bar{I}})f'' = (\bar{P}\widehat{\bar{I}} - \widehat{\bar{P}})f''; \\ \|G\|^2 &= (f'', \bar{P}\bar{Q}f'') \geq 0. \end{aligned} \quad (11.6)$$

Отметим, что вследствие (6.22) операторы \bar{P} , \bar{Q} и тензоры \bar{P} , \bar{Q} не зависят от материальных характеристик исходной среды сравнения. Поэтому статистический параметр j (имеющий, как и v , экстенсивный характер) также не зависит от σ^c (или ρ^c), а его свойства отражают те особенности пространственного распределения неоднородностей, которые описываются на языке трехточечных вероятностей.

С помощью (11.6) для σ^j и ρ^j из (9.10) будем иметь [37, 83]

$$\Gamma^j = \Gamma_1 + (\Gamma_2 - \Gamma_1)j, \quad j \in [0, 1]; \quad \Gamma \equiv \sigma, \rho. \quad (11.7)$$

Связь j с макроструктурой СНС проявляется также и в зависимости этого параметра от \bar{P} (или \bar{Q}). В общем случае главные оси тензоров j (11.6) и \bar{P} , \bar{Q} (11.5) не совпадают, поэтому под $j = j(\bar{Q})$ следует понимать диагональную компоненту тензора j , соответствующую данному главному значению тензора \bar{Q} .

Из (11.7) для σ_j^\pm (9.13), используемых в (9.12), найдем

$$\begin{aligned} \sigma_j^+ &\equiv \sigma^j = \langle\sigma\rangle_j, \quad \sigma_j^- \equiv (\rho^j)^{-1} = \frac{\sigma_1\sigma_2}{[\sigma]_j}, \\ \langle\sigma\rangle_j &\equiv \sigma_1 + (\sigma_2 - \sigma_1)j, \quad [\sigma]_j \equiv \sigma_2 + (\sigma_1 - \sigma_2)j; \quad j \in [0, 1]. \end{aligned} \quad (11.8)$$

Параметры σ_j^\pm удовлетворяют соотношениям (9.17), обеспечивающим соглашенность последующих границ $\sigma_{(3)}^\pm$ с предыдущими $\sigma_{(2)}^\pm$.

Наилучшие (в приближении кусочно-однородных "поляризованных" полей) границы (9.12) согласно (9.18), (10.8) и (11.8) имеют вид

$$\sigma_{(3)}^+ = \frac{\bar{Q}\sigma_1\sigma_2 + \bar{P}\langle\sigma\rangle\langle\sigma\rangle_j}{\bar{Q}[\sigma] + \bar{P}\langle\sigma\rangle_j}, \quad \sigma_{(3)}^- = \sigma_1\sigma_2 \frac{\bar{Q}[\sigma]_j + \bar{P}\langle\sigma\rangle}{\bar{Q}[\sigma][\sigma]_j + \bar{P}\sigma_1\sigma_2}, \quad (11.9a)$$

и аналогично для "взаимных" сред

$$\tilde{\sigma}_{(3)}^+ = \frac{\bar{P}\sigma_1\sigma_2 + \bar{Q}[\sigma][\sigma]_{\tilde{j}}}{\bar{P}[\sigma] + \bar{Q}[\sigma]_{\tilde{j}}}, \quad \tilde{\sigma}_{(3)}^- = \sigma_1\sigma_2 \frac{\bar{P}[\sigma]_{\tilde{j}} + \bar{Q}[\sigma]}{\bar{P}[\sigma]\langle\sigma\rangle_{\tilde{j}} + \bar{Q}\sigma_1\sigma_2}, \quad (11.96)$$

где \tilde{j} — значение параметра j для "взаимной" среды.

Для того чтобы $\sigma_{(3)}^\pm$ и $\tilde{\sigma}_{(3)}^\pm$ удовлетворили теореме (10.6), параметры σ_j^\pm и $\tilde{\sigma}_{\tilde{j}}^\pm$ должны удовлетворять равенству (10.10), в силу которого для параметров j и \tilde{j} имеем

$$\sigma_{(3)}^+ \tilde{\sigma}_{(3)}^+ = \sigma_1\sigma_2 \Rightarrow \sigma_j^+ \tilde{\sigma}_{\tilde{j}}^+ = \sigma_1\sigma_2 \Rightarrow j\tilde{j} = \frac{j\sigma_2 - \tilde{j}\sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1}, \quad (11.10a)$$

$$\sigma_{(3)}^- \tilde{\sigma}_{(3)}^- = \sigma_1\sigma_2 \Rightarrow \sigma_j^- \tilde{\sigma}_{\tilde{j}}^- = \sigma_1\sigma_2 \Rightarrow j\tilde{j} = \frac{j\sigma_1 - \tilde{j}\sigma_2}{\sigma_1 - \sigma_2}. \quad (11.10b)$$

Выполнение обоих соотношений возможно при условии

$$j = \tilde{j} = j^\pm, \quad j \in [0, 1], \quad (11.12)$$

переводящем согласно (9.17) границы $\sigma_{(3)}^\pm$ в $\sigma_{(2)}^\pm$ ($j = j^+ = 1$) и $\sigma_{(2)}^-$ ($j = j^- = 0$).

Таким образом, упомянутая в разделе 10 среда с тремя "степенями свободы" не удовлетворяет соотношениям, вытекающим из обобщенной теоремы Келлера. Это можно объяснить либо отсутствием точного решения подобного типа, либо "привязанностью" теоремы Келлера к двухкомпонентным системам.

12. Асимметричные и симметричные среды

Для непосредственного расчета j по формулам (11.6) необходимо задать трехточечную центральную моментную функцию $\Psi(\mathbf{R}_3)$ третьего порядка [15, 29]:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{R}_3) &\equiv \langle f''(\mathbf{r}_1)f''(\mathbf{r}_2)f''(\mathbf{r}_3) \rangle = \\ &= v_1v_2[v_1\varphi_1(\mathbf{R}_3) - v_2\varphi_2(\mathbf{R}_3)], \end{aligned} \quad (12.1)$$

где функции φ_a ($a = 1, 2$) выражаются через соответствующие вероятности случайного поля $f(\mathbf{r})$. Учитывая (12.1), (11.4) и вспомогательное равенство

$$\langle f''(\mathbf{r}_1)f(\mathbf{r}_3)f''(\mathbf{r}_2) \rangle = v_2\Phi(\mathbf{r}) + \Psi(\mathbf{R}_3), \quad \langle f(\mathbf{r}_3) \rangle = v_2,$$

представим j в форме

$$j = v_1j_1 + v_2(1 - j_2), \quad \bar{S}_a - \bar{S} \equiv j_a \in [0, 1]; \quad a = 1, 2; \quad \bar{S}\bar{P} = \bar{Q}. \quad (12.2)$$

Здесь \bar{S} определен согласно (7.7), а \bar{S}_a — геометрические параметры, получаемые из (11.6) с помощью соответствующих членов (12.1). Легко видеть, что область изменения параметров j_a совпадает с (11.6). Это также следует из метода асимптотических разложений, предложенного Миллером [19], собственные результаты которого для асимметричных сред ошибочны. На языке параметра j его результаты имеют вид

$$j^M = v_1^2 j_1^M + v_2(1 - v_2) j_2^M, \quad j_a^M \in [0, 1]. \quad (12.3)$$

Поскольку области значений j_a (12.2) и j_a^M (12.3) совпадают, границы параметров j и j^M , определяющие гра-

ницы $\sigma_{(3)}^\pm$, связаны соотношениями

$$\begin{aligned} j^- \leq j_M^- \leq j_M^+ \leq j^+; \quad j \in [0, 1], \\ j^M \in [v_1v_2, 1 - v_1v_2]. \end{aligned} \quad (12.4)$$

Сужение спектра значений структурного параметра j^M в модели Миллера приводит к соответствующему сужению границ σ_M^\pm в сравнении с $\sigma_{(3)}^\pm$. При этом образуются не обращающиеся (в общем случае) в нуль "щели" Δ^\pm -вида [37]

$$\Delta^- \equiv \frac{\sigma_M^- - \sigma_{(3)}^-}{\sigma_{(3)}^+ - \sigma_{(3)}^-}, \quad \Delta^+ \equiv \frac{\sigma_{(3)}^+ - \sigma_M^+}{\sigma_{(3)}^+ - \sigma_{(3)}^-}, \quad (12.5)$$

делающие σ_M^\pm несогласованными с $\sigma_{(2)}^\pm$ в смысле предельных переходов (9.17). Легко видеть, что структуры, описываемые параметром j , лежащим в полуоткрытых интервалах

$$j \in [j^-, j_M^-] \cup (j_M^+, j^+], \quad (12.6)$$

не охватываются моделью асимметричной среды Миллера. Двумерный вариант этой модели реализован в работе [22]. Дефекты модели асимметричной среды с позиций теории вероятностей были обнаружены Брауном [117].

Перейдем теперь к рассмотрению симметричных сред (см. раздел 10), макроскопические свойства которых инвариантны относительно преобразования инверсии компонентов (10.19). Свойство симметрии сужает класс функций, используемых в качестве центральных моментов случайного поля f . В частности, вместо (12.1) будем иметь [29]

$$\Psi^{SM}(\mathbf{R}_3) = v_1v_2(v_1 - v_2)\varphi(\mathbf{R}_3). \quad (12.7)$$

В силу (12.7) перепишем (12.2) в виде

$$j^{SM} = v_2 + \bar{j}(v_1 - v_2), \quad \bar{j} \in [0, 1]. \quad (12.8)$$

Отсюда следует

$$\begin{aligned} j^{SM} &\in [j_M^-, j_M^+]; \quad j_M^- \equiv \min(v_1, v_2), \\ j_M^+ &= \max(v_1, v_2). \end{aligned} \quad (12.9)$$

Полагая в (12.3) $j_1^M = j_2^M \equiv \bar{j}^M$, получим

$$j_M^{SM} = v_2 + \bar{j}^M(v_1 - v_2), \quad v_1 + v_2 = 1, \quad (12.10)$$

что совпадает с (12.8). Таким образом, в случае двух компонентов модель Миллера для симметричной среды приводит к правильным результатам. При этом квадратичная зависимость в (12.3) не проявилась из-за особенностей двухкомпонентной среды. Применение модели Миллера симметричной среды в случае трех компонентов, приведет к тем же трудностям, что и для модели асимметричной среды.

Рассмотрим частные случаи. При $v_1 = v_2$ из (12.8) следует

$$j^{CSM} = \frac{1}{2}, \quad (12.11)$$

т.е. лишь одна макроструктура неоднородной среды удовлетворяет требованию полной статистической симметрии Дыхне [20] (см. раздел 10.1).

Найдем множество значений j^{SCS} параметра j^{SM} , описывающих самосогласованные решения (см. раздел 10.2). Используя определение (10.16) и границы $\sigma_{(1)}^\pm$ и $\sigma_{(2)}^\pm$ из (6.10), (6.14)–(6.16), запишем

$$\sigma_1 \equiv \sigma^- \leq \langle \rho \rangle^{-1} \leq \sigma^{\text{SCS}} = \sigma^c \leq \langle \sigma \rangle \leq \sigma^+ \equiv \sigma_2. \quad (12.12)$$

Отсюда видно, что область изменения параметра σ^c для самосогласованного решения ограничена значениями $\langle \rho \rangle^{-1}$ и $\langle \sigma \rangle$, которые, будучи представлены в форме (11.7)

$$\langle \Gamma \rangle = \Gamma_1 + (\Gamma_2 - \Gamma_1)j^{\text{SCS}}; \quad \Gamma = \sigma, \rho, \quad (12.13)$$

используемой для получения границ $\sigma_{(3)}^\pm$ с учетом трехчастичных взаимодействий, приводят к значению

$$j^{\text{SCS}} = v_2 \quad (12.14a)$$

для сред, описываемых σ^{SCS} . Для "взаимных" сред (10.18б) вместо (12.14а) имеем

$$\tilde{j}^{\text{SCS}} = v_1 = 1 - j^{\text{SCS}}. \quad (12.14b)$$

Соотношения (12.14б) являются следствием более общего равенства

$$\tilde{j} = 1 - j, \quad (12.15)$$

которое может быть получено в случае смеси двух изотропных компонентов, когда имеют место связи

$$\tilde{f} = 1 - f, \quad \tilde{f}'' = -f''. \quad (12.16)$$

Отметим, что в силу (12.6), (12.9) и (9.17) обобщенные решения Хашина–Штрикмана (10.12), которым соответствуют значения $j = 0$ и $j = 1$, не реализуются в классах асимметричных сред Миллера (12.3) и симметричных сред (12.8).

На рисунке 5 изображено множество значений геометрического параметра $j = j(v)$, реализующих все возможные структуры СНС. Диагонали квадрата выделяют области значений j^{SM} , описывающих все возможные структуры, принадлежащие классу симметричных

сред. Штрихованные области, ограниченные параболами и горизонтальными сторонами квадрата, описывают структуры, не реализуемые в рамках модели асимметричной среды Миллера. Диагональ квадрата, проведенная сплошной линией, — это множество значений параметра j^{SCS} , описывающих структуры, принадлежащие классу самосогласованных. Диагональ квадрата, изображенная штриховой линией, — это множество значений параметра \tilde{j}^{SCS} , описывающих структуры, принадлежащие классу "взаимных" самосогласованным средам. Горизонтальные стороны квадрата — это два множества значений параметра $j_{\text{GHS}}^- = 0$ и $j_{\text{GHS}}^+ = 1$, описывающих структуры, реализуемые в классе обобщенных решений Хашина–Штрикмана, и приводящих соответственно к нижним $\sigma_{(2)}^-$ и верхним $\sigma_{(2)}^+$ границам. Точка пересечения диагоналей квадрата $j^{\text{CSM}} = 1/2$ описывает все возможные реализации СНС, макроскопически эквивалентные полностью симметричной среде Дыхне.

Список литературы

1. Fricke H *Phys. Rev.* **24** 575 (1924)
2. Bruggeman D A G *Ann. Phys.* **24** 636 (1935)
3. Osborn J A *Phys. Rev.* **67** 351 (1945)
4. Лишин И М, Розенцвейг Л Н *ЖЭТФ* **16** 967 (1946) (Исправления: *ЖЭТФ* **21** 1184 (1951))
5. Pekeris C L *Phys. Rev.* **71** 268 (1947)
6. Лишин И М, Пархомовский Г Д *ЖЭТФ* **20** 175 (1950)
7. Landauer R *J. Appl. Phys.* **23** 779 (1952)
8. Brown W F Jr *J. Chem. Phys.* **23** 1514 (1955)
9. Hashin Z, Shtrikman S *J. Appl. Phys.* **33** 3125 (1962)
10. Hashin Z, Shtrikman S *Phys. Rev.* **130** 129 (1963)
11. Финкельберг В М *ЖТФ* **34** 509 (1964)
12. Финкельберг В М *ЖТФ* **46** 725 (1964)
13. Keller J B *J. Math. Phys.* **5** 548 (1964)
14. Beran M *Nuovo Cimento* **38** 771 (1965)
15. Frisch H L *Trans. Soc. Rheol.* **9** 293 (1965)
16. Рыжов Ю А *Изв. вузов. Радиофизика* **9** 39 (1966)
17. Walpole L *J. Mech. Phys. Solids* **14** 151 (1966)
18. Walpole L *J. Mech. Phys. Solids* **14** 289 (1966)
19. Miller M N *J. Math. Phys.* **10** 1988 (1969)
20. Дыхне А М *ЖЭТФ* **59** 110 (1970)
21. Фокин А Г *ЖТФ* **41** 1073 (1971)
22. Beran M J, Silnitzer N R *J. Composite Mater.* **5** 246 (1971)
23. Фокин А Г *ЖТФ* **43** 71 (1973)
24. Kirkpatrick S *Rev. Mod. Phys.* **45** 574 (1973)
25. Mendelson K *S. J. Appl. Phys.* **46** 917 (1975)
26. Schulgasser K *J. Math. Phys.* **17** 382 (1976)
27. Фокин А Г *ЖТФ* **47** 1121 (1977)
28. Шкловский Б И *ЖЭТФ* **72** 288 (1977)
29. Фокин А Г *ПММ* **42** 546 (1978)
30. Рытов С М, Кравцов Ю А, Татарский В И *Введение в статистическую радиофизику Ч. 2 Случайные поля* (М.: Наука, 1978)
31. Беран М Дж, в кн. *Композиционные материалы Т. 2 Механика композитных материалов* (Под ред. Дж. Сендецки) (М.: Мир, 1978) с. 242
32. Willemse M W M Ph. D. Thesis. Tech. Univ. Twente, 1979
33. Willemse M W M, Caspers W J J. *Math. Phys.* **20** 1824 (1979)
34. Фокин А Г *Изв. вузов. Сер. физика* **24** (7) 117 (1981)
35. Fokin A G *Phys. Status Solidi B* **111** 281 (1982)
36. Fokin A G *Phys. Status Solidi B* **115** 509 (1983)
37. Fokin A G *Phys. Status Solidi B* **119** 741 (1983)
38. Hashin Z *ASME J. Appl. Mech.* **50** 481 (1983)
39. Швидлер М И *ЖЭТФ* **84** 1185 (1983)
40. Балагуров Б Я *ЖЭТФ* **89** 1796 (1985)
41. Рожнов Г В *ЖЭТФ* **98** 1737 (1990)
42. Фокин А Г *ЖЭТФ* **101** 67 (1992)
43. Bergman D *J. Phys. Rep.* **43** 377 (1978)
44. Milton G W *J. Mech. Phys. Solids* **30** 177 (1982)

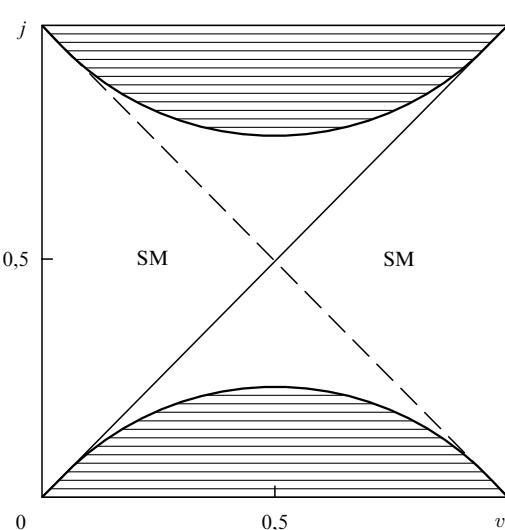


Рис. 5.

45. Milton G W, Golden K, in *Thermal Conductivity 18* (Eds T Ashworth, D R Smith) (New York: Plenum Press, 1985) p. 571
46. Milton M *Phys. Rev. B* **38** 11296 (1988)
47. Beran M, Molyneux J *Nuovo Cimento* **30** 1406 (1963)
48. Kohler W, Papanicolaou G C, in *Macroscopic Properties of Disordered Media* (Eds R Burridge, S Childress, G Papanicolaou) (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1982) p. 111
49. Willis J R *J. Mech. Phys. Solids* **25** 185 (1977)
50. Willis J R *J. Mech. Phys. Solids* **39** 73 (1991)
51. Torquato S *Rev. Chem. Eng.* **4** 151 (1987)
52. Weng G *J. Int. J. Engng. Sci.* **28** 1111 (1990)
53. Cook H F *Nature* (London) **168** 247 (1951)
54. Оделевский В И *ЖТФ* **21** 667 (1951)
55. Оделевский В И *ЖТФ* **21** 678 (1951)
56. Mitoff S P *Adv. Mater. Res.* Vol. 3 (New York, London, Sydney, Toronto, 1968) p. 305
57. Cohen M H, Jortner J *Phys. Rev. Lett.* **30** 696 (1973)
58. Hale D K *J. Mater. Sci.* **11** 2105 (1976)
59. Kerner E H *Proc. Phys. Soc. London B* **69** 802 (1956)
60. Carmona F, El Amarti A *Phys. Rev. B* **35** 3284 (1987)
61. Cohen M H, Jortner J *Phys. Rev. Lett.* **30** 699 (1973)
62. Шкловский Б И, Эфрос А Л *УФН* **117** 401 (1975)
63. Shklovskii B I *Phys. Status Solidi B* **85** K111 (1978)
64. Landauer R, in *Electrical, Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media* Am. Inst. of Phys. Conf. Proc. No. 40 (Eds J C Garland, D B Tanner) (New York: AIP, 1978) p. 2
65. Глушков Е А, Резцов В В *ФТП* **13** 1469 (1979)
66. Шпинар Л И, Яковец И И *ФТП* **26** 1725 (1984)
67. Неймарк А В *ЖЭТФ* **98** 611 (1990)
68. Juretschke H J, Landauer R, Swanson J A *J. Appl. Phys.* **27** 838 (1956)
69. Herring C *J. Appl. Phys.* **31** 1939 (1960)
70. Дыхне А М *ЖЭТФ* **59** 641 (1970)
71. Дрейзин Ю А, Дыхне А М *ЖЭТФ* **63** 242 (1972)
72. Stroud D *Phys. Rev. B* **12** 3368 (1975)
73. Емец Ю П *Электрические характеристики композиционных материалов с регулярной структурой* (Киев: Наукова думка, 1986)
74. Кучис Е В *Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования* (М.: Радио и связь, 1990)
75. Барабаненков Ю Н и др. *УФН* **102** 3 (1970)
76. Волков С Д, Ставров В П *Статистическая механика композитных материалов* (Минск: Изд-во БГУ, 1978)
77. Мехонцева Д М, Рыбалко П В, Волков С Д *ФММ* **22** 135 (1966)
78. Кристенсен Р *Введение в механику композитов* (М.: Мир, 1982)
79. Азьмуко А А и др. *Заводская лаборатория* (12) 26 (1985)
80. Пападакис Э, в кн. *Применения физической акустики в квантовой физике и физике твердого тела* Т. IVБ *Физическая акустика* (Под ред. У Мэзона) (М.: Мир, 1970) с. 317
81. Hershey A V *J. Appl. Mech.* **21** 236 (1954)
82. Batchelor G K *Ann. Rev. Fluid Mech.* **6** 227 (1974)
83. Фокин А Г *ЖЭТФ* **104** 3178 (1993)
84. Фонштейн Н М, Борцов А Н, Чернявский К С *Заводская лаборатория* (12) 34 (1985)
85. Лурье К А, Черкаев А В *Усп. механики* **9** (2) 3 (1986)
86. Клейза В В, Клейза И В *ДАН* **325** 711 (1992)
87. Демишиев С В и др. *УФН* **164** 195 (1994)
88. Поляков В В, Егоров А В *ФММ* **77** (6) 41 (1994)
89. Якубов И Т *УФН* **163** (5) 35 (1993)
90. Гезеловиц Д *Б ТИИЭР* **77** (6) 34 (1989)
91. Семенов М А и др. *Биофизика* **39** 628 (1994)
92. Беляев А Ю *ДАН СССР* **304** 575 (1989)
93. Корн Г, Корн Т *Справочник по математике для научных работников и инженеров* (М.: Наука, 1974) гл. 14, § 4; гл. 15
94. Алимов Ю И, Кравцов Ю А *УФН* **162** (7) 149 (1992)
95. Лифшиц И М, Гредескул С А, Паустр Л А *Введение в теорию неупорядоченных систем* (М.: Наука, 1982)
96. Гредескул С А, Фрейлихер В Д *УФН* **160** (2) 239 (1990)
97. Кляцкин В И, Саичев А И *УФН* **162** (3) 161 (1992)
98. Доценко В С *УФН* **165** 481 (1995)
99. Рис Ф, Секефальви-Надь Б *Лекции по функциональному анализу* (М.: Мир, 1979)
100. Канторович Л В, Акилов Г П *Функциональный анализ* (М.: Наука, 1977)
101. Александров К С *ДАН СССР* **176** 295 (1967)
102. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Электродинамика сплошных сред* (М.: Наука, 1992)
103. Гельфанд И М, Шилов Г Е *Обобщенные функции и действия над ними* Вып. 1 (М.: Наука, 1959)
104. Фокин А Г, в кн. *Сб. научн. тр. по пробл. микроэлектроники, физ.-мат. сер.* (Под ред. А Н Васильева) (М.: МИЭТ, 1969) с. 141
105. Фокин А Г *ПМТФ* (1) 98 (1972)
106. Monecke J *Phys. Status Solidi B* **140** 279 (1987)
107. Hill R, in *Progr. in Appl. Mech., The Prager Anniversary Volume* (New York, London, 1963) p. 99
108. Прагер В *Введение в механику сплошных сред* (М.: ИЛ, 1963)
109. Новацкий В *Теория упругости* (М.: Мир, 1975) гл. 4
110. Kröner E Z. *Phys.* **151** 504 (1958)
111. Eshelby J D *Proc. R. Soc. London Ser. (A)* **241** 376 (1957)
112. Балагуров Б Я *ЖЭТФ* **81** 665 (1981)
113. Mendelson K S *J. Appl. Phys.* **46** 4740 (1975)
114. Schulgasser K *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10** 407 (1977)
115. Schulgasser K *J. Math. Phys.* **17** 378 (1976)
116. Picinbono M B *C.R. Acad. Sci.* **240** 2206 (1955)
117. Brown W F Jr *J. Math. Phys.* **15** 1516 (1974)

Macroscopic conductivity of random inhomogeneous media. Calculation methods

A.G. Fokin

Moscow Institute of Electronic Technology (Technology University)
K498 MIET, 103498 Moscow, Russia
Tel. (7-095) 532-99 63. Fax (7-095) 530-22 33

The macroscopic conductivity of nonhomogeneous media such as polycrystals, composites, etc., is discussed. One of the major global parameters of a randomly inhomogeneous medium (RIM), the effective (macroscopic) conductivity tensor (ECT), is considered. Based on functional analysis ideas, particularly the projector and orthogonal reduced field concepts, a method for obtaining bounds on ECT components is developed. A criterion is given by which a position of each iteration solution relative to the preceding one is determined. It is shown that previous model ECT results fall within, and are in fact special cases, of the scheme proposed by the author. The importance of the auxiliary, zero-fluctuation parameter σ^c in constructing convergent series for quantities of interest is established. Extended versions of the Hashin–Shtrikman variational principles and of Keller's theorem are obtained. The structural parameters introduced for describing an RIM are expressed, in the proposed method, in terms of the n -point probabilities for (n -point interactions associated with) the random local conductivity field. The piecewise homogeneous ‘polarised’ field approximation is combined with classical energy theorems to obtain the ECT bounds best achievable within the n -point RIM description.

PACS numbers: 02.90.+p, 72.90.+y

Bibliography — 117 references

Received 3 November 1995, revised 28 May 1996