

01

© 1990 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ВОЛОКНИСТЫХ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ С ПОМОЩЬЮ ПРЯМОГО ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А. З. Зинченко

Рассматривается задача [1] об эффективной диэлектрической проницаемости ϵ^* локально-однородного композиционного материала с хорошо проводящими волокнами в виде параллельных друг другу, но хаотически расположенных цилиндров одинакового радиуса a в среде проницаемости ϵ_0 . В предположении о (локальной) равновероятности всех геометрически возможных реализаций материала получены высокоточные значения безразмерной функции $\epsilon^*/\epsilon_0 = f(c)$ в широком диапазоне концентрации включений c . Метод расчета включает экономичное численное решение [1] соответствующей электростатической «задачи N тел» для большого числа слабокоррелированных случайных конфигураций и осреднение методом NVT -ансамбля с переходом к «термодинамическому» (« T ») пределу $N \rightarrow \infty$; для очень высоких c развита специальный алгоритм, основанный на комбинации «точного» решения задачи N тел с асимптотическим приближением тонкого слоя. Обсуждается связь неаналитичности $f(c)$ с явлением фазового перехода в жидкости из твердых дисков [2]; изучается структура эргодических классов в конфигурационном пространстве. Данная задача является двумерным аналогом классической проблемы вычисления ϵ^* в системе сфер, ее точное решение может служить эталоном для проверки как аналитических теорий [3, 4], так и приближенных методов расчета N -частичного взаимодействия в схемах прямого численного моделирования [5]. Основные принципы двумерного расчета применимы также и в трехмерной задаче, которая, несмотря на значительный прогресс [6], еще далека от точного решения.

Введение

Рассматривается задача [1] об эффективной диэлектрической проницаемости ϵ^* локально-однородного композиционного материала с хорошо проводящими волокнами в виде параллельных друг другу, но хаотически расположенных цилиндров одинакового радиуса a в среде проницаемости ϵ_0 . В предположении о (локальной) равновероятности всех геометрически возможных реализаций материала получены высокоточные значения безразмерной функции $\epsilon^*/\epsilon_0 = f(c)$ в широком диапазоне концентрации включений c . Метод расчета включает экономичное численное решение [1] соответствующей электростатической «задачи N тел» для большого числа слабокоррелированных случайных конфигураций и осреднение методом NVT -ансамбля с переходом к «термодинамическому» (« T ») пределу $N \rightarrow \infty$; для очень высоких c развита специальный алгоритм, основанный на комбинации «точного» решения «задачи N тел» с асимптотическим приближением тонкого слоя. Обсуждается связь неаналитичности $f(c)$ с явлением фазового перехода в жидкости из твердых дисков [2]; изучается структура эргодических классов в конфигурационном пространстве. Данная задача является двумерным аналогом классической проблемы вычисления ϵ^* в системе сфер и ее точное решение может служить эталоном для проверки как аналитических теорий [3, 4], так и приближенных методов расчета N -частичного взаимодействия в схемах прямого численного моделирования [5]. Основные принципы двумерного расчета применимы также и в трехмерной задаче, которая, несмотря на значительный прогресс [6], еще далека от точного решения.

1. Общая схема расчета

Рассматриваем дисперсную систему, полученную из конечного числа кругов («частиц») с центрами $\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^N \in V = [0, 1) \times [0, 1)$ путем стандартного двоякопериодического продолжения с периодом 1, причем $\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^N$ могут принимать любые случайные, геометрически допустимые значения, при которых (рис. 1)

$$\zeta_{\alpha\beta} = \min_{k_1, k_2=0, \pm 1} |\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}^\beta + k_1 \mathbf{e}_1 + k_2 \mathbf{e}_2| / a > 2, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq N, \quad \alpha \neq \beta, \quad (1)$$

где $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ — орты осей x_1, x_2 .

Краевая задача для потенциала $\varphi(\mathbf{x})$ имеет вид

$$\operatorname{div}(\epsilon \nabla \varphi) = 0, \quad [\varphi] = \left[\epsilon \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right] = 0 \quad (\mathbf{x} \in S_\alpha \pmod{(1, 1)}), \quad (2a)$$

$$\varphi(\mathbf{x}) = -\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \mathbf{x} + \varphi_1(\mathbf{x}), \quad (2б)$$

где $\epsilon = \epsilon_0$ или ϵ' (ϵ' — проницаемость волокон), $[\dots]$ — скачок, S_α — контур частицы ($1 \leq \alpha \leq N$), n — внешняя к S_α нормаль, искомая функция $\varphi_1(\mathbf{x})$ двоякопериодична, а вектор $\langle \mathbf{E} \rangle$ (нормальный к осям цилиндров) задан и фиксирует среднее (по V) поле $\langle -\nabla \varphi \rangle_V = \langle \mathbf{E} \rangle$.

Решение задачи (2) в наиболее интересном пределе $\epsilon' / \epsilon_0 = \infty$ однозначно определяет средний вектор индукции

$$\langle \mathbf{D} \rangle_V = \langle -\epsilon \nabla \varphi \rangle_V = \epsilon_0 \mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{E} \rangle \quad (3)$$

и соответствующий безразмерный тензор диэлектрической проницаемости \mathbf{F} для каждой конфигурации $\mathbf{R} = (\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^N)$, что позволяет (пока формально) выполнить осреднение по всем случайным реализациям

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \int \dots \int \mathbf{F}(\mathbf{R}) P_N(\mathbf{R}) dx^1 \dots dx^N \quad (4)$$

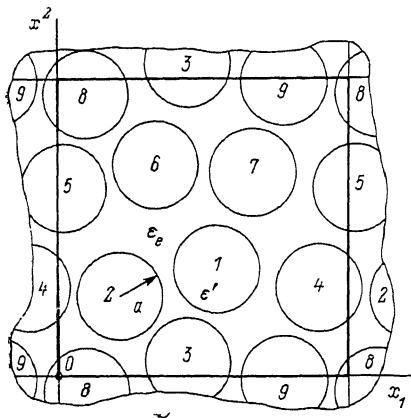


Рис. 1. Система с квадратным продолжением.

с фиксированными N и $c = \pi a^2 N$. В отсутствие информации о способе приготовления материала наиболее естественно предположить равновероятность всех геометрически возможных состояний, т. е. однородность функции распределения $P_N(\mathbf{R})$ в области (1). Однородность $P_N(\mathbf{R})$ фактически предполагалась в аналитических исследованиях [3-4, 7] по неподвижным суспензиям и композитам; этот простейший вид $P_N(\mathbf{R})$, как известно, индуцирует парную функцию распределения с характерными осцилляциями (исчезающими лишь при $c \rightarrow 0$). Искомая величина ϵ^* / ϵ_0 определяется диагональными элементами шарового тензора $\langle \mathbf{F} \rangle$ в « T »-пределе $N \rightarrow \infty$.

Вычисление $\mathbf{F}(\mathbf{R})$ для каждой случайной конфигурации \mathbf{R} сводится к решению бесконечной системы уравнений [1] относительно нормализованных коэффициентов Фурье-разложения потенциала на границах включений. Традиционная редукция системы к конечномерной путем отбрасывания гармоник выше определенного порядка k_0 еще не дает эффективного решения, поскольку не учитывает короткодействующий характер большинства взаимодействий между гармониками (что приводит к большой неэкономичности при итерационном решении, если $k_0, N \gg 1$; прямой же метод решения заведомо неприемлем [1]). Вместо этого развит специальный алгоритм [1] дополнительного обнуления коэффициентов системы (модифицированная k_0 -аппроксимация) с сохранением сходимости к точному решению при $k_0 \rightarrow \infty$; практически не увеличивая погрешности аппроксимации, экономичный метод значительно снижает вычислительные затраты на одной итерации. Выигрыш, особенно существенный при больших N и высокой точности вычисления $\mathbf{F}(\mathbf{R})$, практически может достигать двух порядков (см. [1] и ниже).

Формальная идентичность $P_N(\mathbf{R})$ равновесной функции распределения в «жидкости» из твердых дисков позволяет применить для вычисления средних (4) метод NVT -ансамбля [8, 9]. Из произвольного начального состояния \mathbf{R}_0 , удовлетворяющего (1), строится цепь Маркова последующих состояний \mathbf{R}_μ . Переход от \mathbf{R}_μ к $\mathbf{R}_{\mu+1}$ задаем случайным равновероятным выбором номера частицы α и независимо вектора смещения ξ с равномерным распределением в квадрате $[-\delta^*, \delta^*] \times [-\delta^*, \delta^*]$, полагая $\mathbf{R}_{\mu+1} = [\dots, x^\alpha + \xi \pmod{(1, 1)}, \dots]$, если новое положение $x^\alpha + \xi \pmod{(1, 1)}$ не нарушает (1), иначе $\mathbf{R}_{\mu+1} = \mathbf{R}_\mu$. Известно [8, 9], что при условии принадлежности всех допустимых состояний (1) одному эргодическому классу (с учетом неразличимости частиц) предельная при $\mu \rightarrow \infty$ плотность вероятности состояния \mathbf{R}_μ однородна, что и требуется. Параметр δ^* , управляющий лишь скоростью сходимости цепи Маркова, выбираем эмпирически [8], так чтобы доля p_s принимаемых смещений составляла около 1/2. Интегралы (4) вычисляются оценкой

$$\frac{1}{N_c} \sum_{m=1}^{N_c} F(\mathbf{R}_\mu), \quad \mu = \mu_0 + (m-1)\Delta M, \quad N_c \rightarrow \infty. \quad (5)$$

Значение $\mu_0 \gg 1$, отсекающее нестационарный участок цепи Маркова, выбиралось в основном из условия установления с высокой точностью величины p_s ; целое $\Delta M \gg 1$ подчиняем требованию малости коэффициентов последовательной корреляции r_{ij} между $F_{ij}(\mathbf{R}_\mu)$ и $F_{ij}(\mathbf{R}_{\mu+\Delta M})$, причем r_{ij} обязательно вычисляются по циклической схеме [10, с. 86], иначе плохая статистическая устойчивость не позволяет получить даже оценку. Стандартное отклонение средних (5) для F_{ij} оценивалось как $(N_c)^{-1/2} (1 + 2r_{ij} + \dots)^{1/2} \delta(F_{ij})$ через среднеквадратичные флуктуации $\delta(F_{ij})$ величин F_{ij} . Для проверки выхода цепи Маркова на стационарный участок и для независимой оценки статистической погрешности применялся также метод контрольной карты [8, 9]; это особенно необходимо, если коррекция $1 + 2r_{ij}$ не слишком мала.

2. Результаты для умеренных концентраций ($0.5 \leq c \leq 0.65$)

Эти, более ранние, результаты получены непосредственно по схеме раздела 1 на БЭСМ-6. Диапазон $c < 0.5$ менее интересен и не исследовался, поскольку сравнение виримального разложения [7]

$$f(c) = 1 + 2c + 2.74c^2 + \dots \quad (6)$$

с формулой Максвелла

$$f_M(c) = (1+c)(1-c)^{-1} = 1 + 2c + 2c^2 + \dots \quad (7)$$

указывает на неприменимость (7) лишь при достаточно больших c .

Проверялась нечувствительность результатов осреднения к выбору как \mathbf{R}_0 , так и датчика псевдослучайных чисел $X \in (0, 1)$. Использовался как датчик 1 [11]

$$I_{n+1} = 5^{17} I_n \pmod{2^{40}}, \quad I_0 \neq 0 \pmod{2}, \quad X = 2^{-40} I_n, \quad (8)$$

так и существенно иной датчик 2, полученный комбинацией (8) с алгоритмом [12]

$$J_{n+1} = 7^5 J_n \pmod{(2^{31} - 1)}, \quad X = (2^{31} - 1)^{-1} J_n. \quad (9)$$

Точнее говоря, последовательность (9), поступающая в массив объемом $N_b \gg 1$ ячеек, извлекается из него в случайном порядке, определяемом датчиком 1, по методу Макларена—Марсальи [10, с. 47]. Было обнаружено, что для данной задачи один лишь генератор (9) имеет недостаточную мощность и приводит к небольшому, но систематическому занижению значений $\langle F_{11} \rangle$.

На рис. 2 приведены значения компоненты F_{11} для первых конфигураций просеянной цепи Маркова (5) при $c = 0.6498$ в четырех вариантах расчетов. В ка-

честве R_0 для вариантов 1 ($N=33$) и 2 ($N=60$) задавались соответственно «почти квадратная» и «почти гексагональная» решетки. Значения F_{11} , F_{12} вычислялись экономичным методом [1] с гарантированной абсолютной точностью сходимости итераций $\delta=0.002$. Расчет одной конфигурации требовал (в среднем) 2 мин для варианта 1 и 5 мин для варианта 2 с числом итераций 22; время перехода от R_μ к $R_{\mu+\Delta M}$ существенно меньше (25 и 36 с). Статистический анализ не обнаружил никаких значимых корреляций между $F_{ij}(R_\mu)$ и $F_{ij}(R_{\mu+\Delta M})$. С целью контроля качества аппроксимации $k_0=30$ краевой задачи (2) для наугад выбранных 8 конфигураций варианта 1 и 5 конфигураций варианта 2 значения F_{11} , F_{12} сравнивались с результатами более точного расчета ($k_0=60$) и определялись

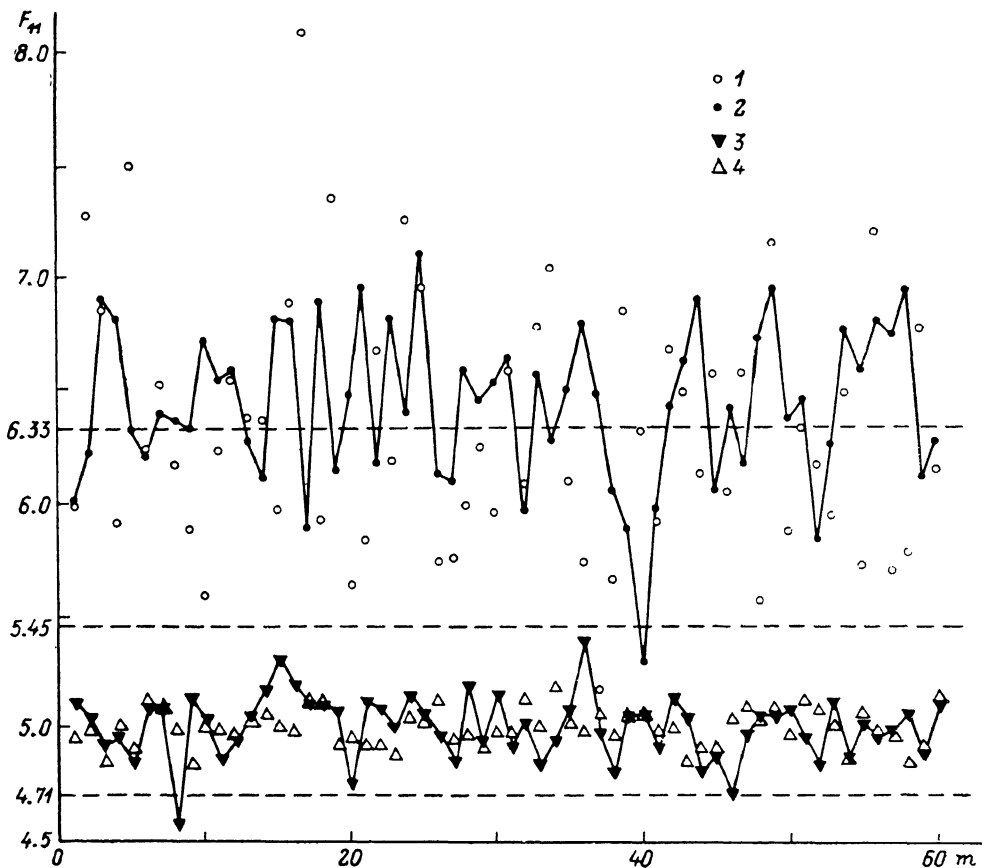


Рис. 2. Значения F_{11} для первых конфигураций просеянной цепи Маркова (5) при $c=0.6498$ ($\delta^*=0.2a$, датчик 2, $\mu_0=10^5-3 \cdot 10^5$).

N : 1 — 33, 2 — 60, 3 — 33, 4 — 96; k_0 : 1, 2 — 30; 3, 4 — 1; N_0 : 1, 3 — 61; 2, 3 — 101; ΔM : 1—3 — 10^4 ; 4 — $1.6 \cdot 10^4$. Уровни 4.71, 5.45, 6.33 отвечают соответственно приближению Максвелла, модели квадратной решетки и среднему $\langle F_{11} \rangle$ для варианта 2.

максимальная ϵ_{\max} и средняя $\langle \epsilon \rangle$ (по выбранным R_μ) абсолютные ошибки. Ниже даны результаты исследования вариантов 1 и 2.

Вариант	N_0	$\langle F_{11} \rangle$	$\langle F_{12} \rangle$	$\delta(F_{11})$	$\delta(F_{12})$	ϵ_{\max}	$\langle \epsilon \rangle$	$\langle c_{\text{eff}} \rangle$
Вариант 1	720	6.31 ± 0.016	0.001 ± 0.01	0.42	0.29	0.013	0.007	$\frac{12}{12}$
Вариант 2	483	6.33 ± 0.015	0.005 ± 0.01	0.32	0.22	0.011	0.005	18

Здесь $\langle c_{\text{eff}} \rangle$ — среднее значение коэффициента эффективности [1] экономического метода, величины $\langle F_{12} \rangle$ вычислены для контроля равенства $\langle F_{12} \rangle = 0$. Значения $\delta(F_{ij})$ хорошо подтверждают закон убывания флуктуаций $\delta \sim N^{-1/2}$. Вариант 2 также рассчитан с датчиком 1 и «почти квадратной» R_0 , получены результаты $\langle F_{11} \rangle = 6.35 \pm 0.015$, $\langle F_{12} \rangle = 0.003 \pm 0.01$, $\delta(F_{11}) = 0.32$, $\delta(F_{12}) = 0.21$

($N_c=450$), хорошо согласующиеся с приведенными выше. Аналогичный анализ для $c=0.6$ подтверждает, что при $N=60$ значения $\langle F_{11} \rangle$ столь же близки к искомому « T »-пределу.

На рис. 2 также даны результаты расчета F_{11} в простейшем приближении $k_0=1$. Сравнение средних $\langle F_{11} \rangle = 5.024 \pm 0.011$ ($N=33$, $N_c=163$) и $\langle F_{11} \rangle = 5.012 \pm 0.008$ ($N=96$, $N_c=124$) и здесь указывает на достижение « T »-предельного значения, которое, однако, практически не точнее приближения Максвелла $f_M=4.71$. Приближение гармоник первого порядка аналогично (хотя и неэквивалентно) классическому дипольному приближению, в рамках которого аналитическая теория (два члена флуктуационного разложения [3] в задаче сфер) опять же не дает заметного отличия от формулы Максвелла. Можно заключить, что (по крайней мере в задачах данного типа) прямое численное моделирование имеет смысл только при отказе от дипольного приближения в любой его форме.

Ниже даны результаты расчета $\langle F_{11} \rangle$ и $\delta(F_{11})$ ($N=60$, датчик 2, $N_b=101$, $k_0 \rightarrow \infty$) для различных концентраций.

c	0.6498	0.625	0.6	0.575	0.55	0.5
$\langle F_{11} \rangle$	6.33 ± 0.02	5.70 ± 0.02	5.18 ± 0.02	4.68 ± 0.01	4.27 ± 0.01	3.57 ± 0.01
$\delta(F_{11})$	0.32	0.26	0.24	0.22	0.17	0.13

Проведенный анализ позволяет утверждать, что эти значения $\langle F_{11} \rangle$ близки к искомому $f(c)$ с точностью до долей процента. Уменьшение c существенно облегчает расчет благодаря уменьшению числа итераций и необходимым значениям k_0 .

3. Область высоких концентраций

Существенные трудности расчетов в этой области обусловлены сильной зависимостью результатов как от N , так и от R_0 , не говоря о больших вычислительных затратах при осреднении точных значений $F(R_p)$. Предлагаемая основная идея, позволяющая практически преодолеть трудности, состоит в представлении

$$F(R) = F^a(R) + [F(R) - F^a(R)], \quad (10)$$

где $F^a(R)$ содержит все резко меняющиеся составляющие $F(R)$ (ср. с [13, с. 307]) и определяется решением простой вспомогательной задачи, а остаточный член имеет малую дисперсию и слабо зависит от N .

Асимптотика [14] близкого взаимодействия двух цилиндров, разделенных зазором ha ($h \ll 1$) и имеющих потенциалы φ_1 и φ_2 , дает следующее выражение для потока вектора индукции через контур частицы 1

$$\int_{S_1} D_n ds \simeq \frac{\pi \varepsilon_s}{\sqrt{h}} (\varphi_1 - \varphi_2). \quad (11)$$

Определим в системе с периодическим продолжением для каждой частицы α ($x^\alpha \in V$) с потенциалом φ_α множество \mathcal{A}_α «ближайших соседей», имеющих центры $x^\beta + k^{a\beta}$ ($x^\beta \in V$, $k^{a\beta}$ — подходящее целочисленное смещение или 0). Предполагая малость зазоров между S_α и окружающими частицами, учитывая локальность формулы (11) и соотношение (2б), имеем для каждого α «закон Кирхгофа»

$$\sum_{\beta \in \mathcal{A}_\alpha} \frac{(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) + \langle E \rangle \cdot k^{a\beta}}{\sqrt{h_{a\beta}}} = 0, \quad h_{a\beta} = \zeta_{a\beta} - 2. \quad (12)$$

Для среднего вектора индукции (3) в пределе $\varepsilon'/\varepsilon_s = \infty$ справедливо точное равенство [15]

$$\langle D \rangle_V = \varepsilon_s \langle E \rangle + \frac{1}{|V|} \sum_{\alpha=1}^N \int_{S_\alpha} (x - x^\alpha) D_n ds, \quad (13)$$

где $|V| (=1)$ — объем ячейки, x — вектор текущей точки контура S_α .

Полагая в каждой области малого зазора $(\mathbf{x}-\mathbf{x}^a)/a$ приближенно равным единичному вектору соответствующей линии центров, используя (11) и пренебрегая первым членом (13), получим

$$\langle \mathbf{D} \rangle_{\gamma} \approx \frac{\varepsilon_a \pi a}{|V|} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta \in \mathcal{A}_{\alpha}} \frac{(\mathbf{x}^{\beta} - \mathbf{x}^{\alpha} + \mathbf{k}^{\alpha\beta}) (\varphi_{\alpha} - \varphi_{\beta} + \langle \mathbf{E} \rangle \cdot \mathbf{k}^{\alpha\beta})}{|\mathbf{x}^{\beta} - \mathbf{x}^{\alpha} + \mathbf{x}^{\alpha\beta}| \sqrt{\hbar_{\alpha\beta}}} = \varepsilon_a \mathbf{F}^a \cdot \langle \mathbf{E} \rangle. \quad (14)$$

Конечно, общие соотношения типа (12), (14) рассматривались (в трехмерной задаче без условия периодического продолжения [15]), но неизвестны примеры их применения в прямом численном моделировании нерешеточных систем. При фиксированном выборе \mathcal{A}_{α} тензор $\mathbf{F}^a(\mathbf{R})$ всегда определен однозначно, поскольку система уравнений (12) относительно φ_a имеет единственное решение с точностью до несущественных аддитивных констант в каждом классе связности, определяемом множествами \mathcal{A}_{α} (что легко следует из принципа максимума). В данной работе в качестве \mathcal{A}_{α} выбирались шесть ближайших образов (максимальное координационное число при касании); другие возможности обсуждаются ниже. Отметим, что даже при $c \approx c_{\max} = \pi/(2\sqrt{3})$ в большой системе существуют хаотические конфигурации с изолированными частицами, к которым приближение тонкого слоя заведомо неприменимо; тем более при меньших c полезность формального приближения \mathbf{F}^a можно проверить лишь путем численного эксперимента. Значения φ_a , выраженные из (12), итерировались методом Зейделя с начальным приближением $\varphi_a = -\langle \mathbf{E} \rangle \cdot \mathbf{x}^a$; расчеты показали, что в этом случае компоненты $\langle \mathbf{D} \rangle_{\gamma}$, вычисляемые из (14) после каждой γ -й итерации, допускают эффективное ускорение сходимости путем Δ^2 -преобразования аналогично точному решению [1]. До начала итераций осуществлялся эффективный поиск шести ближайших образов с помощью цепочечной сетки [16]; в результате элементы $\mathbf{F}^a_{ij}(\mathbf{R})$ вычислялись для каждого \mathbf{R} не более чем за несколько секунд с погрешностью $\sim 0.01\%$. Эта же сетка из $M \times M$ ячеек (где $M = \lfloor (2a)^{-1} \rfloor$, [...] — целая часть) и соответствующие ей связные списки [16] (с коррекцией на каждом шаге) использовались в алгоритме быстрого перемешивания для проверки перекрывания смещенной частицы с частицами девяти

Т а б л и ц а 1

c	δ^*/a	N	ΔM	N_c	$\langle \Psi^a \rangle$	$\delta(\Psi^a)$	τ	$\langle F_{12} \rangle$	$\delta(F_{12})$
0.6498 ¹	0.2	162	16000	811	9.72	0.16	0.03	0.00	0.15
0.68 ¹	0.17	162	20000	612	10.96	0.20	0.21	-0.01	0.17
0.68 ¹	0.17	361	40000	518	10.95	0.14	0.19	0.00	0.12
0.69 ¹	0.15	100	15000	253	11.45	0.27	0.18	-0.04	0.22
0.69 ¹	0.15	225	30000	722	11.28	0.19	0.24	0.00	0.15
0.69 ¹	0.15	361	40000	199	11.31	0.16	0.30	-0.01	0.12
0.721 ¹	0.12	100	15000	591	12.65	0.28	0.04	0.13	0.24
0.721 ²	0.12	100	15000	2218	12.68	0.30	0.11	0.02	0.26
0.721 ¹	0.12	211	30000	326	12.56	0.21	0.08	-0.04	0.16
0.721 ²	0.12	211	30000	1936	12.59	0.21	0.21	-0.01	0.16
0.721 ¹	0.12	413	80000	1016	12.46	0.15	0.15	-0.02	0.12
0.721 ²	0.12	413	80000	282	12.48	0.14	0.19	0.00	0.11
0.735 ¹	0.12	100	20000	1114	13.47	0.32	0.06	-0.05	0.27
0.735 ²	0.12	100	20000	982	13.48	0.31	0.12	-0.06	0.28
0.735 ³	0.12	100	20000	1226	13.44	0.29	0.05	-0.15	0.27
0.735 ⁴	0.12	100	20000	659	13.40	0.32	0.15	-0.20	0.25
0.735 ⁵	0.12	100	20000	521	13.43	0.30	0.05	-0.14	0.28
0.735 ¹	0.12	225	40000	696	13.20	0.20	0.01	-0.02	0.16
0.735 ⁵	0.12	225	30000	782	13.21	0.20	0.10	-0.11	0.16
0.77 ¹	0.07	100	40000	1000	16.00	0.39	0.10	0.48	0.31
0.77 ²	0.07	100	25000	714	15.98	0.37	0.06	0.46	0.31
0.77 ⁴	0.07	100	25000	759	16.16	0.37	0.04	-0.03	0.32
0.77 ⁵	0.07	100	25000	548	16.15	0.39	0.05	-0.05	0.34
0.77 ¹	0.07	225	40000	717	15.61	0.24	0.01	-0.02	0.20
0.77 ²	0.07	225	40000	464	15.42	0.22	0.03	-0.19	0.17
0.77 ⁵	0.08	225	30000	614	15.60	0.24	0.08	0.00	0.21

окружающих ячеек. Применялся более быстрый, чем в разделе 1, псевдослучайный генератор, получаемый путем перемешивания последовательности [10, с. 112]

$$J_{n+1} = 5^{15} J_n \pmod{2^{35}}, \quad J_0 \neq 0 \pmod{2}, \quad X = 2^{-35} J_n$$

датчиком (8) при $N_b = 64, 128$ или 256 , и не обнаруживалось статистически значимой чувствительности результатов к выбору N_b . Этот алгоритм (с реализацией наиболее существенных элементов на автокоде БЭСМ-6) дает переход от R_μ к $R_{\mu+1}$ в среднем менее чем за 0.001 с (в «оптимальном» режиме, когда $p_s \approx \approx 0.5$) независимо от N и s . Наконец, при высоких s необходимо осреднять вместо F_{11} функцию $\Psi(\mathbf{R}) = 1/2 (F_{11} + F_{22})$, поскольку это снимает некоторые искусственные квазиэргодические трудности (и уменьшает дисперсию).

В табл. 1 даны результаты расчета средних $\langle \Psi^a \rangle$, $\langle F_{12}^a \rangle$, соответствующих среднеквадратичных флуктуаций $\delta(\Psi^a)$, $\delta(F_{12}^a)$ и эмпирического коэффициента корреляции r между $\Psi^a(\mathbf{R}_\mu)$ и $\Psi^a(\mathbf{R}_{\mu+\Delta M})$. Стандартные отклонения средних $\langle \Psi^a \rangle$, оцениваемые как в разделе 1, не превышают $0.01-0.02$; значения r подвержены наибольшей статистической погрешности (обычно несколько сотых) и дают в основном лишь правильный порядок величины. Для каждой пары s, N , как правило, применялось несколько существенно различных (и как можно более произвольных) способов задания начальной конфигурации. Варианты с индексом 1 отвечают (почти) квадратной R_0 . В вариантах 2 из упорядоченной почти плотной упаковки, содержащей $N_1 \approx 2N$ частиц, исключались случайно-выбранные $N_1 - N$ частицы, далее система подвергалась стохастическому размешиванию с полидисперсным уплотнением: после каждого смещения частицы α с радиусом a_α новое значение радиуса (если a_α меньше окончательно необходимого значения a) полагалось равным $(x=1/2)$

$$\min \{a, a_\alpha + x(a_\alpha^* - a_\alpha)\}, \quad (15)$$

где a_α^* — геометрически максимально допустимое значение после смещения.

В вариантах 3 и 4 этот способ применялся при $N_1 = 182$ и 132 соответственно. Варианты 5 отвечают способу 2 с медленной кинетикой ($x=0.1/N$), при этом уплотнение является практически монодисперсным. Как и следовало ожидать, трудности (резкое возрастание коэффициента корреляции r) начинаются вблизи левой границы интервала $0.69 \leq s \leq 0.72$, определяющего (по данным [2]) фазовый переход в молекулярной системе из твердых дисков. При $s=0.69$ и 0.721 результаты еще не зависят (или слабо зависят) от R_0 , но экстраполяция на « T »-предел затруднительна. Резкое уменьшение r при $s=0.735, 0.77$ по сравнению со значениями при $s=0.69$ отражает разделение конфигурационного пространства на эргодические классы. Результаты при $s=0.77$ определенно указывают, что с точностью до тривиальных преобразований симметрии квадрата имеются ровно два класса, причем класс с низким значением $\langle \Psi^a \rangle$ более анизотропен. Конечно, как следует из табл. 1, эффект анизотропии в пределе $N \rightarrow \infty$ исчезает; вместе с тем устойчивые ненулевые значения $\langle F_{12}^a \rangle$ даже при квадратной начальной конфигурации, по-видимому, указывают на то, что переходы вдоль цепи Маркова и между существенными классами невозможны лишь «термодинамически». При $s=0.735$ и 0.77 можно грубо оценить искомые « T »-предельные значения $\langle \Psi^a \rangle$ путем линейной по N^{-1} экстраполяции (что недопустимо в двухфазной области [8]), это дает соответственно $12.98-13.06$ и $14.96-15.16$. Более точный расчет требует изменения методики (см. ниже), но прежде отметим практическое отсутствие подобных трудностей при осреднении остаточного члена $\Delta(\mathbf{R}) = \Psi(\mathbf{R}) - \Psi^a(\mathbf{R})$; соответствующие результаты даны в табл. 2. В качестве начальных конфигураций стационарного участка взяты конечные конфигурации соответствующих вариантов из табл. 1. Параметр ΔM выбран очень большим для полного устранения корреляций осредняемых величин. Значения $\Psi(\mathbf{R})$ для N_c просеянных конфигураций рассчитаны экономичным методом [1] при итерировании F_{ij} с абсолютной точностью $0.002-0.005$; среднее время расчета одной конфигурации составляло 35 мин при $s=0.68, N=162$ и 42 мин при $s=0.77, N=100$ (причем вычислительные затраты были бы примерно в 30 раз больше при неэкономичном итерировании). Для наугад выбранных 6

Таблица 2

c	N	k_0	ΔM	N_c	$\langle \Delta \rangle$	$\delta(\Delta)$	$\delta(\Psi)$	$\langle c_{eff} \rangle$
0.6498 ¹	162	30	120000	18	-3.36	0.057	0.11	34
0.68 ¹	162	30	160000	30	-3.69	0.056	0.17	33
0.721 ²	100	40	120000	30	-4.18	0.086	0.30	31
0.721 ²	211	40	250000	10	-4.17	0.072	0.12	53
0.735 ¹	100	40	120000	27	-4.35	0.080	0.20	30
0.735 ¹	100	40	120000	27	-4.31	0.094	0.21	30
0.77 ¹	100	40	120000	25	-4.74	0.093	0.31	27
0.77 ¹	100	40	120000	26	-4.75	0.110	0.28	28
0.77 ²	225	40	250000	12	-4.70	0.048	0.14	46

конфигураций варианта $c=0.77^4$ использовалось большее число итераций, значения $\Psi(\mathbf{R})$ сравнивались с результатами более точного расчета ($k_0=70$). Приближение $k_0=40$ всегда занижает значения $\Psi(\mathbf{R})$, но максимальная и средняя абсолютные ошибки составляли всего 0.028 и 0.017; вместе с результатами раздела 1 это дает основание считать усредненные значения Δ отвечающими «точному» решению «задачи N тел». Стандартное отклонение $\delta(\Delta)/\sqrt{N_c}$ средних $\langle \Delta \rangle$ составляет 0.01–0.02. Наиболее

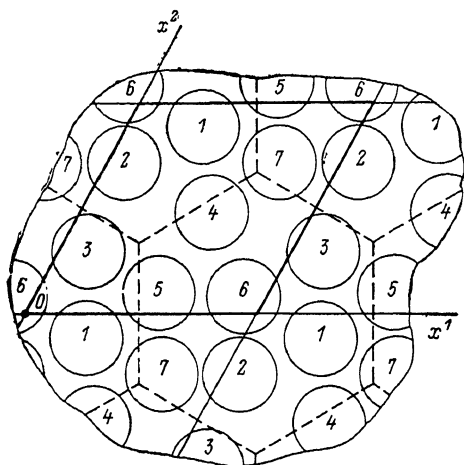


Рис. 3. Система с гексагональным продолжением.

важно отметить малость флуктуаций $\Delta(\mathbf{R})$ по сравнению с флуктуациями $\Psi(\mathbf{R})$; при одинаковом уровне статистической погрешности усреднение Δ требует, вообще говоря, на порядок меньшего числа конфигураций (если $c \geq 0.68$). Представление (10) эффективно даже при $c=0.6498$ и позволяет найти (табл. 1, 2) $\langle F_{11} \rangle = 6.36$ при $N=162$, что уточняет результат раздела 1. Близкие значения $\delta(\Delta)$ и $\delta(\Psi)$ при $c=0.721$, $N=211$ объясняются или недостаточной статистикой ($N_c=10$) или аномалиями в «двухфазной» области при $N \rightarrow \infty$. Эффективность представления (10) зависит от способа определения множества «ближайших соседей». Простейший жесткий критерий $\zeta_{a\beta} < 2+h_0$ (где $h_0 > 0$ — малое фиксированное число) безуспешен (если c не слишком близко к c_{max}): для всех вариантов из табл. 2 наилучший выбор $h_0 = [\sin(\pi/7)]^{-1} - 2$ (максимальное значение h_0 , при котором в h_0 -зоне находится не более 6 соседей) даже увеличивает $\delta(\Delta)$ по сравнению с $\delta(\Psi)$. Вероятно, наилучшим способом уменьшения дисперсии $\Delta(\mathbf{R})$ было бы более сложное определение ближайших соседей с помощью многоугольников Вороного (как в молекулярных исследованиях [17]). Успешность выбора в качестве \mathcal{A}_a шести ближайших образцов даже для «жидкого» состояния ($c=0.68$) может быть связана с тем, что среднее координационное число для многоугольника Вороного всегда равно 6 [17].

Сравнение результатов в табл. 1 и 2 показывает, что величина $\langle \Delta \rangle$ в отличие от $\langle \Psi^a \rangle$ практически одинакова в различных эргодических классах (различие средних -4.35 и -4.31 с вероятностью 10 % является статистическим) и слабо зависит от N . В пределах желаемой точности найденные значения $\langle \Delta \rangle$ отвечают искомому « T »-пределу.

Возвращаясь к вычислению « T »-предельных значений $\langle \Psi^a \rangle$, используем альтернативный способ гексагонального продолжения, взяв в качестве основной ячейки V ромб, образованный единичными векторами e_1, e_2 ($\widehat{e_1 e_2} = \pi/3$), что эквивалентно продолжению с помощью шестиугольных ячеек Вигнера—

Таблица 3

c	δ^*/a	N	ΔM	N_c	$\langle \Psi^a \rangle$	$\delta(\Psi^a)$	τ	N_1	α
0.6498 ¹	0.27	100	10000	2401	9.729	0.213	0.06	—	—
0.68 ¹	0.23	100	10000	4701	10.957	0.266	0.23	—	—
0.68 ¹	0.23	400	20000	1476	10.950	0.127	0.23	—	—
0.69 ¹	0.22	100	5000	9551	11.155	0.323	0.47	—	—
0.69 ¹	0.22	400	20000	2051	11.378	0.144	0.29	—	—
0.7 ¹	0.22	100	5000	9701	11.41	0.28	0.26	—	—
0.7 ¹	0.22	400	20000	1621	11.570	0.165	0.47	—	—
0.735 ¹	0.19	100	5000	4401	12.962	0.284	0.08	—	—
0.735 ²	0.18	100	7000	1546	13.354	0.310	0.11	225	0.5
0.735 ²	0.18	100	7000	1341	13.379	0.302	0.09	169	0.5
0.735 ²	0.18	100	7000	1497	13.388	0.303	0.08	144	0.5
0.735 ³	0.19	100	10000	812	13.395	0.316	-0.03	—	0.1/N
0.735 ²	0.18	225	15000	873	13.186	0.201	0.11	400	0.5
0.735 ³	0.19	225	10000	2001	13.162	0.204	0.12	—	0.1/N
0.735 ¹	0.19	400	15000	805	12.972	0.148	0.11	—	—
0.735 ²	0.19	400	20000	751	13.080	0.143	0.14	441	0.5
0.735 ³	0.19	400	18000	1426	13.116	0.146	0.13	—	0.05/N
0.735 ³	0.19	400	18000	6701	13.110	0.145	0.14	—	0.025/N
0.735 ³	0.19	400	18000	4500	13.082	0.149	0.13	—	0.005/N
0.77 ¹	0.15	100	10000	1641	15.079	0.336	0.06	—	—
0.77 ³	0.15	100	10000	1577	15.769	0.350	0.04	—	0.1/N
0.77 ³	0.15	225	10000	1601	15.432	0.236	0.10	—	0.05/N
0.77 ¹	0.15	400	40000	535	15.111	0.164	-0.03	—	—
0.83 ¹	0.08	225	20000	821	21.406	0.295	0.02	—	—
0.86 ¹	0.05	225	15000	2201	28.231	0.405	0.02	—	—
0.89 ¹	0.02	225	7000	3141	48.346	0.673	0.02	—	—
0.9 ¹	0.01	225	5000	1680	76.369	1.04	0.11	—	—
0.9 ¹	0.01	400	10000	741	76.400	0.792	0.06	—	—

Зейтца (рис. 3). Тензор F^a и функция $\Psi^a = 1/2 (F^a)_i^i$ вычисляются тем же методом из (12), (14) при $|V| = \sqrt{3}/2$. Для вектора случайного смещения ξ допустима любая плотность вероятности $p(\xi) = p(-\xi)$ [8, 9]. Однако с учетом высокой симметрии гексагонального продолжения для наиболее быстрого размещения выбиралось равномерное распределение в правильном шестиугольнике со стороной $\delta^* \leq a$. Такой вектор ξ легко получается из равномерного распределения в параллелограмме на векторах $e_1, e_2 - e_1$ путем случайного поворота на угол $2\pi k/3$ ($k=0, 1, 2$) и сжатия. При поиске ближайших образов и в быстром NVT -алгоритме (включая и стадию полидисперсного уплотнения) используется цепочечная сетка из $M \times M$ ромбических ячеек ($M \approx \sqrt{3}/(4a)$) с той же эффективностью, что и для квадратного продолжения. Расчеты в основном проводились на ЕС 1045; в качестве генератора использовались последовательности (8), перемешанные датчиками [11] ($N_b = 128, 256$)

$$J_{n+1} = 5^{12} J_n \pmod{2^{42}}, J_0 \neq 0 \pmod{2}, X = 2^{-42} J_n.$$

Результаты приведены в табл. 3. В вариантах 1 в качестве R_0 выбиралось гексагональное расположение частиц. Варианты 2 соответствуют начальной конфигурации, получаемой путем случайного удаления $N_1 - N$ частиц с последующим полидисперсным уплотнением (см. выше). В вариантах 3 начальное состояние построено из равновесного в «жидкой» области ($c=0.68$) с помощью медленного уплотнения (15). Стандартное отклонение $(N_c)^{-1/2} \delta(\Psi^a) (1+2r)^{1/2}$ средних $\langle \Psi^a \rangle$ при $c=0.69, 0.7$ должно быть увеличено в несколько раз. В «жидкой» области результаты полностью согласуются с данными табл. 1, но в «двухфазном» диапазоне концентраций по-прежнему возможны лишь приближенные расчеты. При $c=0.735, N=100$ 4 существенно различных способа приготовления R_0 дают практически одинаковый результат, что указывает на наличие двух эргодических классов. В отдельных случаях способ 2 приводит систему в гексагональный класс (варианты 1) с быстрой релаксацией, но никогда не наблюдалось промежуточных состояний. Изолированное значение 13.354 отражает наличие близких (при $c=0.735, N=100$) метастабильных уровней во 2-м классе.

В большой системе равновесные состояния, дающие основной вклад в средние (4), очевидно, получаются способом 3 с бесконечно медленной кинетикой ($x \rightarrow 0$) и, что весьма вероятно, соответствуют наимизшему из метастабильных уровней $\langle \Psi^a \rangle$. При $c=0.735$ средние (см. табл. 3) 13.354, 13.162, 13.082 практически линейно зависят от N^{-1} и экстраполяция по последним двум значениям дает результат 12.979. Таким образом, оказывается, что, хотя $\langle \Psi^a \rangle$ в гексагональном классе и не является (при реально достижимых N) истинным средним типа (4), в «Т»-пределе дает правильный результат. Это совпадение можно объяснить, заметив, что для молекулярной системы гексагональный класс отвечает идеальному, а 2-й класс — реальному кристаллу (с дефектами). Аналитическая оценка $2.5 \exp[-2c/(c_{\max}-c)]$ плотности числа моновакансий в равновесном кристалле из твердых дисков [18] при $c=0.735$ дает значение $5 \cdot 10^{-4}$. Несмотря на то что теория [18] является только асимптотической при $c \rightarrow c_{\max}$, полученные выше численные результаты для $c=0.735, 0.77$ подтверждают возможность пренебречь дефектами в «твердотельной» области практически вплоть до «плавления». Отметим также, что и для системы с квадратным продолжением класс с более низким значением $\langle \Psi^a \rangle$ отвечает «идеальному кристаллу», а небольшая анизотропия ($\langle F_{12} \rangle \neq 0$) является следствием неполной совместности гексагонального расположения с квадратной формой ячейки.

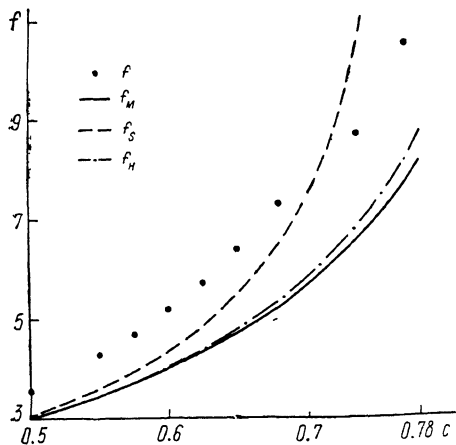


Рис. 4. Сравнение точной зависимости $f(c)$ с приближением Максвелла и решеточными моделями.

Несмотря на то что молекулярная система твердых дисков интенсивно изучалась численными методами, в соответствующих работах не применялось гексагональное продолжение и не были получены столь определенные выводы (ср. с [8]) относительно структуры конфигурационного пространства. Возможность выбора идеально-кристаллического начального состояния (максимально совместимого с квадратной или прямоугольной формой ячейки) для расчета уравнения состояния в твердотельной области всегда предполагалась [8, 19], но не исследовалась.

Найденные «Т»-предельные значения $\langle \Psi^a \rangle$ и $\langle \Delta \rangle$ позволяют дополнить расчеты раздела 2 (погрешность $f(c)$ не превышает долей процента)

На рис. 4 значения $f(c)$ сравниваются с приближением Максвелла (7) (f_M) и результатами [20] для квадратной (f_S) и гексагональной (f_H) решеток. Как видно из рис. 4, близкое согласие значения f_M, f_S, f_H между собой не может служить критерием их применимости к хаотической системе. Неизбежным следствием «фазового перехода» является неаналитичность $f(c)$, отсутствующая в приближенных моделях. Как известно, в молекулярной системе из твердых дисков расчет безразмерного давления $p/nkT = \varphi(c)$ методом молекулярной динамики [2] дает слабо выраженную петлю Ван дер Ваальса, которая в T -пределе по теореме ван Хофа должна вырождаться в плоский участок при $c_1 \leq c \leq c_2$, где $[c_1, c_2] \approx [0.69, 0.72]$ — интервал сосуществования фаз [2, 9]. В данной задаче в силу формального совпадения $P_N(\mathbf{R})$ с распределением Гиббса для системы твердых дисков также следует ожидать разделения $f(c)$ на три аналитических ветви, но отсутствуют соображения для точного определения $f(c)$ при $c_1 < c < c_2$ и пока не представляется возможным исследовать характер разрыва производных $f(c)$ при $c=c_1, c_2$.

При $c \rightarrow c_{\max}$ главный член асимптотики $f(c)$ определяется лишь приближением тонкого слоя $\langle \Psi^a \rangle$ (ср. значения $\langle \Delta \rangle$ и $\langle \Psi^a \rangle$) и расчеты в гексагональном классе легко дают результат

c	0.6498	0.68	0.735	0.77
$f(c)$	6.36	7.26	8.64	10.42

При $c \rightarrow c_{\max}$ главный член асимптотики $f(c)$ определяется лишь приближением тонкого слоя $\langle \Psi^a \rangle$ (ср. значения $\langle \Delta \rangle$ и $\langle \Psi^a \rangle$) и расчеты в гексагональном классе легко дают результат

$$f(c) \approx (4.75 \pm 0.03) \left[1 - \left(\frac{c}{c_{\max}} \right)^{1/2} \right]^{-1/2}$$

(численный коэффициент 4.75 в 1.23 раза выше, чем для гексагональной решетки). Однако задача аналитического продолжения вириального разложения (6) и отыскания его асимптотики при высоких c значительно сложнее и здесь не рассматривается (до сих пор не решен более простой вопрос о радиусе сходимости вириальных разложений в молекулярных системах твердых дисков и сфер [21]).

Как всегда [2, 21], при численном моделировании в «твердотельной» области с произвольной кинетикой приготовления R_0 значительно легче получаются метастабильные состояния (с неопределенно большим «временем жизни»), чем равновесные (особенно если N или c велики и используется гексагональное продолжение): так, при $c=0.77$, $N=100$ найденный метастабильный уровень $\langle \Psi^a \rangle = 16.77$ существенно отличается от равновесного 15.77. Это заставляет предположить, что свойства реального хаотического трехмерного композита при высоких c могут решающим образом зависеть от способа приготовления. Тем не менее трехмерная постановка задачи с однородной функцией распределения $P_N(R)$ даже при высоких c оправдана для покоящихся суспензий из-за наличия броуновской релаксации, «кристаллизующей» систему [22]. Отметим, наконец, что предложенный выше способ существенного уменьшения дисперсии с помощью приближения тонкого слоя применим также в ряде задач гидродинамики и теории упругости хаотических систем.

В заключение заметим, что в недавних работах [23–25] исследовалась математически эквивалентная задача эффективной теплопроводности волокнистого композита, но не использовались идеи экономичного решения [1] краевой задачи при больших N и представление (10), а также не изучались трудности, связанные с «фазовым переходом». В [23] определялись границы эффективной теплопроводности (с другой функцией распределения). В [24] рассматривались волокна конечной проводимости, и краевая задача для $c=0.2, 0.4, 0.6$ решалась методом граничных интегральных элементов при $N \leq 16$ с осреднением по 15 конфигурациям. В [25] краевая задача решалась для $c=0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ с сохранением мультиполей не выше 10-го порядка. При $c=0.7$ результаты [25] содержат значительную неопределенность, а при $c=0.5$ дают $f(c)=3.40 \pm 0.06$. Несовпадение с более точным значением 3.57 (см. раздел 2 данной работы) обусловлено скорее всего малым значением N (16), более грубым решением краевой задачи и, вероятно, ограниченным числом осредняемых конфигураций (8–10) в работе [25].

Список литературы

- [1] Зинченко А. З. // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 1. С. 29–39.
- [2] Alder B. J., Wainwright T. E. // Phys. Rev. 1962. Vol. 127. N 2. P. 359–361.
- [3] Geigenmüller U., Mazur P. // Physica. 1986. Vol. A136. N 2/3. P. 316–369.
- [4] Torquato S. // Rev. Chem. Eng. 1987. Vol. 4. N 3/4. P. 151–204.
- [5] Brady J. F., Phillips R. J., Lester J. C., Bossis G. // J. Fluid Mech. 1988. Vol. 195. P. 257–280.
- [6] Sangani A. S., Yao C. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63. N 5. P. 1334–1341.
- [7] Peterson J. M., Hermans J. J. // J. Compos. Mater. 1969. Vol. 3. N 2. P. 338–354.
- [8] Вуд В. // Физика простых жидкостей. Экспериментальные исследования. М.: Мир, 1973. С. 275–396.
- [9] Замалин В. М., Норман Г. Э., Филинов В. С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977. 228 с.
- [10] Кнут Д. Искусство программирования для ЭВМ. Т. 2. М.: Мир, 1977. 728 с.
- [11] Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1975. 472 с.
- [12] Lewis P. A. W., Goodman A. S., Miller J. M. // IBM Syst. J. 1969. Vol. 8. N 2. P. 136–146.
- [13] Бахвалов Н. С. Численные методы. Т. 1. М.: Наука, 1973. 632 с.
- [14] Keller J. B. // J. Appl. Phys. 1963. Vol. 34. N 4. Pt 1. P. 991–993.
- [15] Batchelor G. K., O'Brien R. W. // Proc. Roy. Soc. London. 1977. Vol. A355. N 1682. P. 313–333.
- [16] Хокни П., Истгауд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.
- [17] Allen M. P., Frenkel D., Gignac W., McTague J. P. // J. Chem. Phys. 1983. Vol. 78. N 6. Pt 2. P. 4206–4222.

- [18] *Stillinger F. H., Salsburg Z. W., Kornegay R. L.* // J. Chem. Phys. 1965. Vol. 43. N 3. P. 932—943.
- [19] *Alder B. J., Hoover W. G., Young D. A.* // J. Chem. Phys. 1968. Vol. 49. N 8. P. 3688—3696.
- [20] *Perrins W. T., McKenzie D. R., McPhedran R. C.* // Proc. Roy. Soc. London. 1979. Vol. A369. N 1737. P. 207—225.
- [21] *Angell C. A., Clark J. H. R., Woodcock L. V.* // Advances in Chem. Phys. 1981. Vol. 48. P. 397—453.
- [22] *Pusey P. N., Van Megen W.* // Nature. 1986. Vol. 320. N 6060. P. 340—342.
- [23] *Smith P. A., Torquato S.* // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 65. N 3. P. 893—900.
- [24] *Durand P. P., Ungar L. H.* // Int. J. Numer. Meth. Eng. 1988. Vol. 26. N 11. P. 2487—2501.
- [25] *Sangani A. S., Yao C.* // Phys. Fluids. 1988. Vol. 31. N 9. P. 2426—2434.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Институт механики

Поступило в Редакцию
28 апреля 1989 г.
В окончательной редакции
3 ноября 1989 г.