

多孔和复合媒质直流电导率的计算方法(I)*

应用于周期性多孔媒质

顾 国 庆 陶 瑞 宝

(复旦大学物理系)

1987 年 6 月 11 日收到

提 要

我们发展了一种计算多孔和复合媒质直流电导率的第一性原理方法。本文具体讨论周期性多孔媒质直流电导率的理论计算。我们用幂级数展开法、Fourier 级数展开高斯消去法和 Fourier 级数展开迭代法计算了许多二维多孔媒质的有效电导率,并采用改进的迭代法计算了 Sierpinski 地毯的直流电导率的临界指数。所有结果都与最新的实验结果符合相当好。

一、引 言

多孔和复合媒质的物理常数(如有效弹性模量、有效电导等)的计算长期以来就引起人们的重视。但在数年前,大多数的工作似乎是属“平均场”类型的理论,如有效媒质理论(EMT)^[1-4]和 Maxwell-Garnett 理论(MGT)^[5]等。不过所有这些理论在给出这些物理常数的精确性方面,存在一定的困难,特别是在处理孔隙度比较大区域的媒质时,用各种 EMT 或 MGT 计算的结果相差较大。近几年来,有些作者开始研究第一性原理的方法^[6-9]。Nemat-Nasser^[7,8]等人发展了一种第一性原理的静力学方法,计算了周期性孔隙媒质弹性模量。Tao 和 Sheng^[9]发展了一种动力学的方法,能够比较有效地计算较复杂的周期性微结构的多孔和复合媒质的有效弹性模量。本文推广了 Nemat-Nasser 的方法,发展了一种能很精确地计算周期性微结构的多孔媒质电导的理论方法,并分别用幂级数展开法、Fourier 级数展开高斯消去法和 Fourier 级数展开迭代法结合外推的技巧,对许多结构进行了计算。结

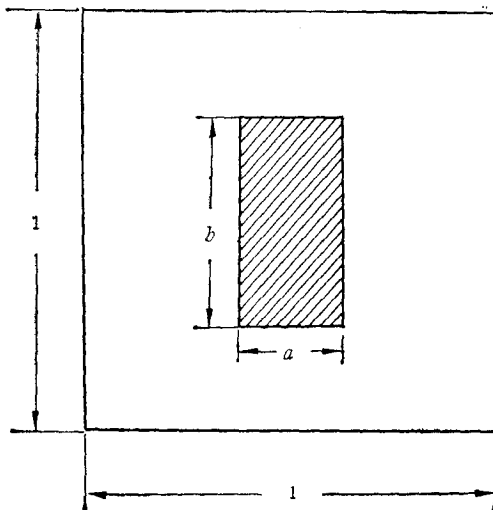


图 1

* 国家自然科学基金资助的课题。

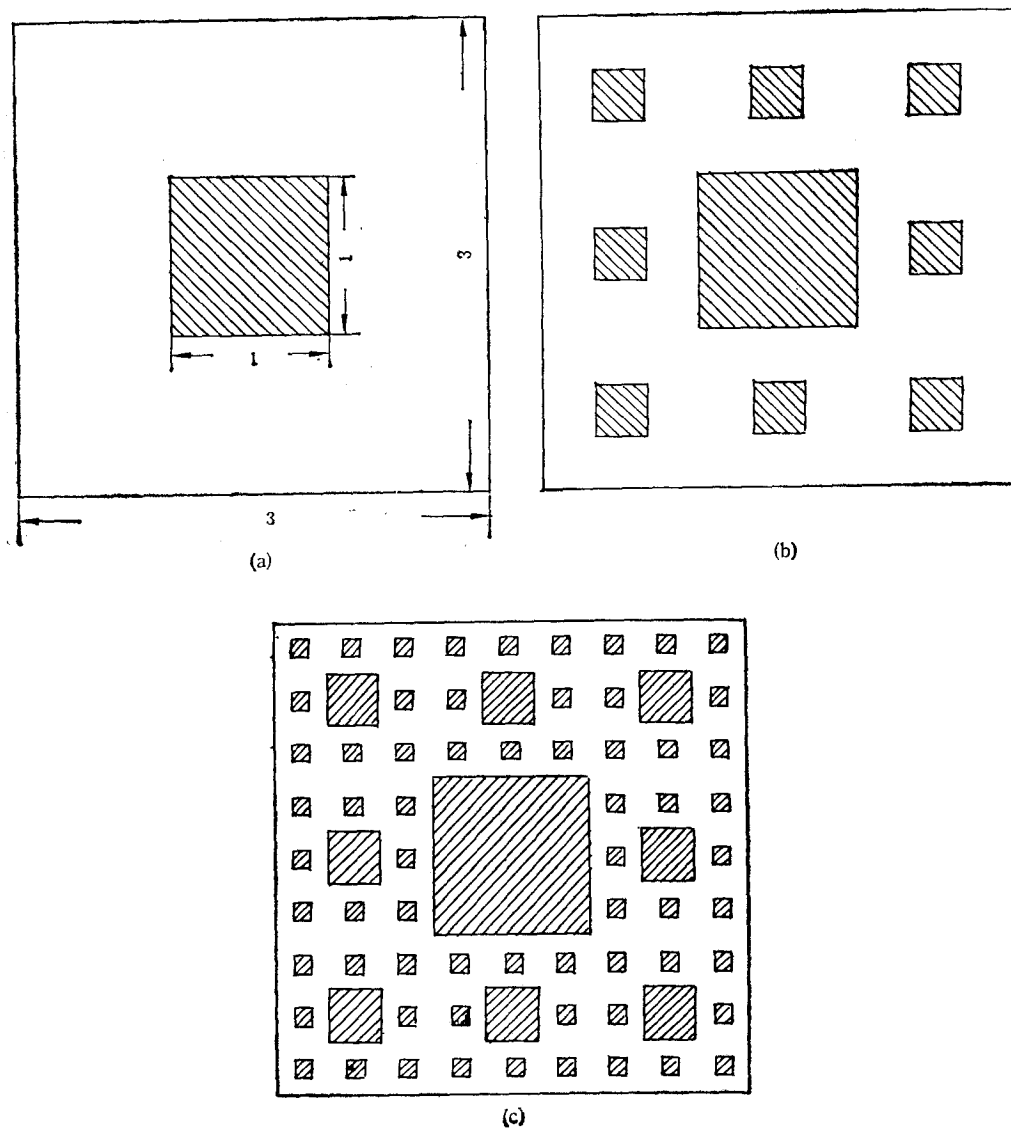


图 2

果表明, 对于简单结构, 幂级数展开法非常有效. 而对于稍复杂的结构, Fourier 展开法优于幂级数展开法. 但是对于那些孔隙度较大且比较复杂的结构, 例如图 2 中的第二、第三级结构, 根据目前的计算条件, 似乎只能用迭代的方法, 才能得到比较精确的结果. 为了说明我们的计算方法的成功, 我们选了图 1 和图 2 所示的结构进行计算, 因为它们可以与最近的实验结果^[10,11]比较. 我们的计算值可以达到与实验值十分好的符合.

二、理论方法

讨论一个电导率为 σ 的具有周期结构的金属材料, 在周期重复的原胞中分布了一些

孔隙或绝缘的颗粒. 现在在某方向上加一电压, 假如整个材料是均匀的, 则电场 $\mathbf{E}^0$ 和电流密度 $\mathbf{j}^0$ 都是均匀的, 且有关系

$$\mathbf{j}^0 = \sigma \mathbf{E}^0.$$

由于材料中存在着孔隙分布, 电场和电流密度要发生畸变, 而有 (1)

$$\mathbf{j}^T = \mathbf{j}^0 + \delta \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}^T = \sigma(\mathbf{E}^0 + \delta \mathbf{E}) \quad \text{在 } D-Q \text{ 区域}, \quad (2)$$

式中 D 为原胞占的空间, Q 为原胞中的孔隙空间. 引进势

$$\delta \mathbf{E} = -\nabla \delta \varphi. \quad (3)$$

在绝缘区, 电流密度必须为零, 为了保证这一点, 我们引进一个变换电场 $\mathbf{E}^*$, 要求 $\mathbf{E}^*$ 在 $D-Q$ 的区域中为零, 且使

$$\mathbf{j}^T = \sigma(\mathbf{E}^0 + \delta \mathbf{E} - \mathbf{E}^*) = 0 \quad \text{在 } Q \text{ 区域}, \quad (4)$$

这样即可使孔隙边界条件的要求化成对 $\mathbf{E}^*$ 的要求. 对于恒稳电流的情况, 电流密度遵从

$$\nabla \cdot \mathbf{j}^T = 0. \quad (5)$$

因为我们讨论的问题的周期性, 电场 $\delta \mathbf{E}$, $\mathbf{E}^*$ 及 $\delta \varphi$ 等可作 Fourier 级数展开

$$\begin{aligned} \delta \varphi(\mathbf{x}) &= \sum_n \delta \varphi(\mathbf{k}_n) e^{i \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}} \\ \mathbf{E}^*(\mathbf{x}) &= \sum_n \mathbf{E}^*(\mathbf{k}_n) e^{i \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}}, \end{aligned} \quad (6)$$

$\mathbf{k}_n$ 为倒格矢. 由(6)和(4)式可得

$$\delta E_\alpha(\mathbf{x}) = -i \sum_n k_{n\alpha} \delta \varphi(\mathbf{k}_n) e^{i \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}} \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (7)$$

由(5)式可以求得

$$\delta \varphi(\mathbf{k}_n) = i \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{k}_n) / k_n^2, \quad (8)$$

代入(7)式得

$$\delta \mathbf{E}(\mathbf{x}) = \sum_n \mathbf{k}_n \frac{\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{k}_n)}{k_n^2} e^{i \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}}. \quad (9)$$

把(9)式代入(4)式, 可得 $\mathbf{E}^*(\mathbf{x})$ 所满足的积分方程为

$$-\mathbf{E}^0 = -\mathbf{E}^*(\mathbf{x}) + \frac{1}{V_D} \sum_n \frac{\mathbf{k}_n}{k_n^2} \mathbf{k}_n \cdot \int_Q \mathbf{E}^*(\mathbf{x}') e^{i \mathbf{k}_n \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} d\mathbf{x}' \quad \text{在 } Q \text{ 区域}. \quad (10)$$

根据复合材料有效电导率张量或焦耳热的定义

$$\sigma_{\alpha\beta}^* \langle E_\beta^T \rangle = \langle j_\alpha^T \rangle \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (11)$$

$$\langle E_\alpha^T \rangle \sigma_{\alpha\beta}^* \langle E_\beta^T \rangle = \langle j_\alpha^T E_\alpha^T \rangle, \quad (12)$$

可以得到计算有效电导率的公式为

$$\sigma_{\alpha\beta}^* E_\beta^0 = \sigma E_\alpha^0 - \sigma \langle E_\alpha^* \rangle \quad (13)$$

或

$$E_\alpha^0 \sigma_{\alpha\beta}^* E_\beta^0 = \sigma E_\alpha^0 E_\alpha^0 - \sigma E_\alpha^0 \langle E_\alpha^* \rangle. \quad (14)$$

可以证明有效电导率 $\sigma_{\alpha\beta}^*$ 与 $\mathbf{E}^0$ 的大小方向都无关. 现在问题归结为求解 $\mathbf{E}^*(\mathbf{x})$ 的积分方程(10)和代数方程(13)或(14).

三、数值计算

作为方法的实例,我们以二维电导问题作为例子,因为我们有一组实验数据^[10,11]可资比较,从而可以考察哪些计算方法更有效. 本文中先讨论立方对称的原胞,因此, $\sigma_{\alpha\beta}^* = \sigma_{\alpha\beta}^* \delta_{\alpha\beta}$. 下面分别介绍幂级数展开法、Fourier 级数展开高斯消去法以及 Fourier 级数展开迭代法解积分方程(10).

1. 幂级数展开法

考虑图 1 所示的结构,计及对称性并注意 E^0 沿 x 方向,我们可取如下展开式:

$$\begin{aligned} E_x^*(\mathbf{x}) &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} C_{i,2j} \left(\frac{x}{l}\right)^i \left(\frac{y}{l}\right)^{2j}, \\ E_y^*(\mathbf{x}) &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} D_{i,2j} \left(\frac{x}{l}\right)^i \left(\frac{y}{l}\right)^{2j+1}, \end{aligned} \quad (15)$$

l 为原胞边长,由于 $E^*(\mathbf{x})$ 局限于孔隙区域,所以幂级数收敛. 用矩法可以得到确定系数 $C_{i,2j}$ 和 $D_{i,2j+1}$ 的线性方程组. 严格说来,因为展开式(15)是无穷的,所以方程组是无限大的. 但作为近似,可以取展开式(15)的前面若干项,从而使线性方程组成为有限的.

可以证明,总指数为奇数的项的系数等于零. 于是,若保留的最高项的总指数为 $2(n-1)$,我们称它为 n 级近似. 对于图 1 的简单结构,本方法的收敛性很好. 表 1 中列出

表 1 幂级数展开法对图 1 结构的有效电导率计算

孔隙尺寸		一 级	二 级	三 级	实验值 ^[11]
a	b				
1/2	1/2	0.6013	0.5823	0.5808	0.5824
1/3	1/3	0.8014	0.7885	0.7870	0.7853
1/4	1/4	0.8837	0.8757	0.8744	0.8735
1/5	1/5	0.9243	0.9190	0.9179	0.9167
1/6	1/6	0.9469	0.9433	0.9413	0.9414
1/5	2/5	0.7979	0.7828	0.7785	0.7746
1/5	3/5	0.6371	0.6106	0.6035	0.5980
1/5	4/5	0.4330	0.3999	0.3919	0.3987
2/5	1/5	0.8848	0.8782	0.8781	0.8826
3/5	1/5	0.8493	0.8428	0.8427	0.8498
4/5	1/5	0.8186	0.8140	0.8138	0.8155

了一级、二级和三级近似下的理论计算结果,并列出实验结果^[11]加以比较. 结果表明,对于这些孔隙度不太大且比较简单的结构,只要作三级近似,就可以达到相当高的精度(千分之几的误差). 这种方法的快速逼近,使计算工作量很小.

对于那些孔隙度较大或孔隙分布相当分散的结构,可以预计展开式(15)的收敛性较慢,需要作相当高的切断近似,会使计算工作量急剧上升,并且由于受矩阵元平方性质存储的影响,需要占用更大的计算机存储空间,由于受到目前计算机存储量的限制,只能作

量级小于 1000×1000 的矩阵存储, 从而大大限制了幂级数展开方法的近似的级次. 表 2 给出对图 2 的 Sierpinski 前面两级地毯的幂级数展开法的计算结果和实验值^[10]的比较. 从中可以看到, 对于二级地毯, 较低级的幂级数展开与实验值有较大的偏差. 对于这类结构, 用下面的 Fourier 级数展开高斯消去法就比较有利一些.

2. Fourier 级数展开高斯消去法

我们仍以图 1、图 2 的结构作为方法的说明, 由于对称性, 可作如下的展开:

$$E_x^*(x) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \lambda_{m,n} (B_x(m, n) \cos(\pi m x) \cos(\pi n y) + C_x(m, n) \sin(\pi m x) \cos(\pi n y)),$$

$$E_y^*(x) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \lambda_{m,n} (G_y(m, n) \cos(\pi m x) \sin(\pi n y) + F_y(m, n) \sin(\pi m x) \sin(\pi n y)),$$

$$\lambda_{m,n} = (1 - 0.5 \delta_{m,0})(1 - 0.5 \delta_{n,0}).$$

用矩法可以得到系数应满足的线性方程组, 并可证明对有效电导率有贡献的只是

表 2 幂级数展开法和 Fourier 级数展开高斯消去法对图 2(a) 和(b)有效电导率 σ^* 的计算

实验值 ^[10]	一级地毯		二级地毯		
有效电导率 σ^*	0.785		0.621		
幂级数展开法幂次 $m, (i, j \leq m)$	有效电导率 σ^*		Fourier 级数展开高斯消去法 N	有效电导率 σ^*	
	一级地毯	二级地毯		一级地毯	二级地毯
0	0.8014	0.6576	1	0.8497	0.7584
1	0.7885	0.6521	2	0.8122	0.7106
2	0.7870	0.6497	3	0.8003	0.6775
3	0.7847		4	0.7960	0.6727
			5	0.7931	0.6709
			6	0.7912	0.6488
			7	0.7901	0.6474
			8	0.7891	0.6465
			9	0.7884	0.6392

$B_x(m, n)$ 和 $F_y(m, n)$, 而且它们与 $C_x(m, n)$, $G_y(m, n)$ 不相耦合.

从某个最大的 N 起对方程作截断, 可以求解该方程组. 我们用 Fourier 级数展开高斯消去法, 取 $N \leq 9$, 对一级、二级 Sierpinski 地毯作了计算. 计算结果列于表 2. 对于一级地毯, 幂级数展开法比较优越, 作二级近似值为 $\sigma^* \approx 0.7885$, 而 Fourier 级数展开高斯消去法, 需要作到 $N = 9$ 的展开, 才能达到相同的精度. 但对于孔隙比较分散的较复杂的地毯, 幂级数展开法就很不好. 当作到三级近似时, 已花了相当长的时间, 但只能达到 0.6497 (实验值为 0.621). 而 $N = 9$ 的 Fourier 级数展开高斯消去法, 可以达到 0.6392, 更逼近实验值, 计算时间少于幂级数展开法很多, 具有比幂级数展开法较好的收敛速度.

3. Fourier 级数展开迭代法

上面介绍的两种方法都需要计算逆矩阵,而逆矩阵的阶是由展开系数中所保留的个数决定的。对于愈复杂的结构,展开的系数要保留愈多,需要占用的计算机存储也愈多。它与阶数成平方方式增加,我们称这种矩阵的存储为平方存储。就目前我校的计算机而言,仅能计算量级上 100×100 的矩阵。为解决这一问题,这里介绍 Fourier 级数展开迭代法。目的是利用迭代法中可以只用向量形式的存储,无需平方存储。因此原则上只要使用足够长的计算时间,可以计算 10^5-10^6 个系数的展开式。象我们的计算机,可以较容易地计算保留 10^4 数量级系数的情况,从而可以计算较复杂的结构。

下面讨论积分方程(10)的迭代解法,作复式 Fourier 展开:

$$\begin{cases} \mathbf{E}^*(\mathbf{x}) = \sum_n \mathbf{E}^*(\mathbf{k}_n) e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}}, \\ \mathbf{E}^*(\mathbf{k}_n) = \frac{1}{V_D} \int_Q \mathbf{E}^*(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}. \end{cases} \quad (16)$$

我们用 $\frac{1}{V_D} e^{-i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}}$ 乘方程(10)等号两边,在 Q 区域上积分,并定义特征函数:

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in Q \\ 0 & \mathbf{x} \in D - Q \end{cases} \quad (17)$$

表3 Fourier 级数展开迭代法对一、二、三级 Sierpinski 地毯有效电导率的计算

一级地毯		二级地毯		三级地毯	
N	有效电导率 $\sigma^*(N)/\sigma_0$	N	有效电导率 $\sigma^*(N)/\sigma_0$	N	有效电导率 $\sigma^*(N)/\sigma_0$
1	0.8497	1	0.7584	1	0.6744
2	0.8122	3	0.6776	3	0.5895
3	0.8003	6	0.6500	6	0.5662
4	0.7960	9	0.6395	9	0.5417
5	0.7931	12	0.6358	12	0.5382
6	0.7912	15	0.6332	15	0.5363
7	0.7901	18	0.6313	18	0.5205
8	0.7891	21	0.6303	21	0.5196
9	0.7884	24	0.6294	24	0.5178
10		27	0.6286	27	0.5117
最佳 α 值	1.74	最佳 α 值	1.10	最佳 α 值	0.61
外推值	0.7862	外推值	0.6227	外推值	0.4832
实验值 ^[10]	0.785	实验值 ^[10]	0.621	实验值 ^[10]	0.487
相对精度	$\sim 0.15\%$	相对精度	$\sim 0.26\%$	相对精度	$\sim 0.78\%$

和相应的 Fourier 分量 $\chi(\mathbf{k}_n)$, 则积分方程(10)变为

$$\mathbf{E}^*(\mathbf{k}_m) = \chi(\mathbf{k}_m) \mathbf{E}^0 + \sum_n \chi(\mathbf{k}_m - \mathbf{k}_n) \mathbf{k}_n \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{k}_n) / k_n^2. \quad (18)$$

如果把 $\chi(\mathbf{k}_m) \mathbf{E}^0$ 作为自由项,它象一个 Dyson 方程,可以用迭代法求解 $\mathbf{E}^*(\mathbf{k}_m)$ 。记第 p 次迭代解为 $\mathbf{E}^{*(p)}(\mathbf{k}_m)$, 则

$$\mathbf{E}^{*(p+1)}(\mathbf{k}_m) = \chi(\mathbf{k}_m) \mathbf{E}^0 + \sum_n \chi(\mathbf{k}_m - \mathbf{k}_n) \mathbf{k}_n \mathbf{k}_n \cdot \mathbf{E}^{*(p)}(\mathbf{k}_n) / k_n^2, \quad (19)$$

如果解收敛,则当 $p \rightarrow \infty$ 时的收敛解即为方程(18)的解。

对于迭代的方程作简单的分析即可知道, 计算时间与切断 N 的 4 次方成正比, 因此在较大 k_n 切断时, 需要尽量节约计算时间. 选择较合理的初值, 可以使迭代次数大大减少, 甚至只要少数几次迭代就可以达到所要求的精度. 我们这里采用如下手续来逐步改善对初值的选取. 首先我们取较小的 k_n 切断, 限于较小的 k_n 空间来求解方程(18), 选用 $\chi(k) E_0$ 作初值, 这时可期望仅迭代少数几次就可得到较精确的解. 再把结果作为初值, 代入较大 k_n 切断时的 Dyson 方程作迭代. 这样逐步扩大 k_n 的切断, 逐步改善初值, 可望较多地节省计算时间. 我们在计算机上作了实验. 计算结果表明, 用这种逐步逼近的方法是一种可能的节省计算时间的方法, 而且 N 愈大, 节省的计算时间越显著.

我们用这种改进了的迭代法, 对二级和三级 Sierpinski 地毯(图 2(b) 和 (c))进行了计算. 计算表明, 对任意的 N 切断, 只要迭代一、二十次, 都可达到三位以上有意义的有效精度. 我们再把些迭代值, 作一序列. 按迭代次数 n 中 2^m 的规律, 选取序列中任一子序列, 用 Richardson 外推法, 都可得到同样的外推值, 可以假定这个外推值靠近迭代收敛的精确解. 对于每一个 N , 都得到一个外推值, 而我们要得到的真正解是 $N \rightarrow \infty$ 的情况. 任何计算, 都只能限于有限的 N , 即使我们的迭代法, 由于变平方存储为向量存储, 使 N 可以作得相当大(受计算时间限制), 但我们仍旧需要估计所有 k_n 大于切断值的总贡献有多大, 因此需要设法选择一个最好的按 N 的外推, 求出 $N \rightarrow \infty$ 的外推值. 我们选择了 $\sigma^*(N)/\sigma_0$ 按 $\frac{1}{(2N+1)^\alpha}$ 的函数关系, 适当调节 α , 使之成为一条直线, 这一点可以用

最小两乘法来决定最佳的 α , 然后求 $N \rightarrow \infty$ 的 $\sigma^*(N)$, 就容易地从 $\sigma^*(N)/\sigma_0 - \frac{1}{(2N+1)^\alpha}$

直线与 y 轴的交截求得. 和文献[12]中一样, $\sigma^*(N)/\sigma_0 - \frac{1}{(2N+1)^\alpha}$ 的函数形式的选

择是不坏的. 适当选择 α , 是可以使许多 N 值都很好地落在一条直线上. 表 3 给出了对前面三级 Sierpinski 地毯有效电导率的计算. 表 3 中的 N 代表 k_N 在 x, y 方向最大切断的 n 值. 从计算知, 对一级地毯, 外推值与 $N=9$ 的值, 仅差 0.3%; 对于二级地毯, 外推值与 $N=9$ 的值相差 2.7% 左右, 而与 $N=27$ 的值相差约 0.95%; 对于三级地毯, 外推值与 $N=9$ 的值相差达 12.1%, 与 $N=27$ 的值相差达 5.9%. 这说明对于愈复杂愈精细的结构, 孔隙度愈大, 愈需要考虑更大的 k_n 切断, 然后再取外推值, 似乎比较合理, 愈能接近真实的实验值. 因此外推的手续是相当重要的. 当然对于十分复杂的高孔隙度的结构, 用这里的外推手续, 不能期望得到较精确的结果. 因为任何可以计算的合理的 N 值, 得到的有效电导率如果与精确值相差十分大, 就不能期望外推值是很合理的, 因为外推的函数仍然存在不确定性. 但通过我们对三级 Sierpinski 地毯的计算和现在的实验值的比较, 我们相信, 即使对这样已经相当复杂的体系, 其外推值仍然可以与实验值达到 0.8% 左右的误差. 因此似乎表明, 至少到如此复杂结构程度的模型, 我们这里建立的 Fourier 级数展开迭代法, 是相当成功的.

四、结 论

用我们的理论方法, 原则上可以计算各种复杂结构的周期性媒质的有效直流电导率.

对于较简单及孔隙度不大的多孔体系,幂级数展开的近似方法有很好的收敛性,计算时间最快. 但对于稍复杂和孔隙分散的体系, Fourier 级数展开高斯消去法比幂级的展开法要优越一些,计算速度要快. 但这两种方法都基于计算一个矩阵的逆,不同的只是选择了不同的展开基. 因此在计算时存储需要平方形式,展开的项数不能很多. 而在计算孔隙度较大,结构复杂的多孔媒质时,需要展开很多的项,因此不能采用幂级数展开法和 Fourier 级数展开高斯消去法. 对于复杂体系,我们可以采用 Fourier 级数展开迭代法. 它把计算机所需的平方存储化为向量存储. 当我们选用了改进后的逐步逼近初值的迭代法后,可以大大节省计算时间. 由于二维孔隙媒质的电导率有现成的实验值,所以用我们的理论方法着重计算了二维模型,包括二维的前面三级 Sierpinski 地毯. 计算得到的有效电导率与实验值符合得十分好.

参 考 文 献

- [1] J. P. Watt, G. F. Davies and R. J. O'Connell, *Rev. Geophys. Space Phys.*, **14**(1976), 541 and references therein.
- [2] J. G. Berryman, *J. Acoust. Soc. Am.*, **68**(1980), 1809.
- [3] P. Sheng and A. J. Callegari, *Appl. Phys. Lett.*, **44**(1984), 738.
- [4] P. Sheng, *Phys. Rev. Lett.*, **45**(1980), 60.
- [5] P. Sheng, *Phys. Rev. Lett.*, **B22**(1980), 6364.
- [6] K. C. Nunan and J. B. Keller, *J. Mech. Phys. Solids*, **32**(1984), 259.
- [7] S. Nemat-Nasser and M. Taya, *J. Appl. Math.*, **39**(1981), 43.
- [8] S. Nemat-Nasser, T. Iwakuma and M. Hajazi, *Mech. Mater.*, **1**(1982), 239.
- [9] R. Tao and S. Sheng, *J. Acoust. Soc. Am.*, **77**(1985), 1651.
- [10] L. Y. Yuan and R. Tao, *Phys. Lett.*, **116A**(1986), 284.
- [11] L. Y. Yuan and R. Tao, to be published.
- [12] P. Sheng and R. Tao, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 6131.

A METHOD FOR CALCULATING DC CONDUCTIVITIES OF THE POROUS MEDIUM AND COMPOSITE (I) AN APPROACH TO THE POROUS MEDIUM WITH PERIODIC STRUTURE

GU GUO-QING TAO RUI-BAO

(Department of Physics, Fudan Univeresity, Shanghai)

ABSTRACT

A first-principle approach to the calculation of dc conductivities of the porous medium and composite is developed. In this paper, the case of the porous medium with periodic structure is discussed in detail. The effective conductivities for many two dimensional porous systems are calculated by polynomial approximation, Fourier expansion using elimination procedure and iterative approach of Fourier expansion. Critical exponents for the dc conductivity of Sierpinski carpets are also calculated by an improved iterative approach. All the theoretical results agree fairly with recent experimental measurements.