

УДК 536.7

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ МЯГКИХ СФЕР

И. П. Базаров, П. Н. Николаев

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

На основе конкретизации структуры свободной энергии системы улучшена сходимость ряда по степеням плотности. Показана эффективность предлагаемого подхода на примере системы мягких сфер.

Наиболее эффективным методом определения уравнений состояния газов при малых плотностях является вириальное разложение. С увеличением плотности возникает потребность вычисления все большего числа вириальных коэффициентов, что при современных возможностях вычислительных машин ограничено. В результате при больших плотностях имеет место значительное расхождение теоретических и экспериментальных данных.

При имеющемся числе вириальных коэффициентов можно улучшить соответствие теоретических и экспериментальных данных, если преобразовать вириальное разложение в другой ряд, который имел бы такую же сумму, но сходилась быстрее. В математике для ускорения сходимости рядов исследуют поведение общего члена a_n при $n \rightarrow \infty$. В нашем случае это сделать практически невозможно, так как данная задача не проще, чем вычисление статистического интеграла

$$Q = \int_V \dots \int_V \exp(-\beta U) dq_1 \dots dq_N,$$

где U — потенциальная энергия системы, V — ее объем, $\beta = 1/\Theta$, $\Theta = kT$ (k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура). Но, с другой стороны, при анализе характера физических процессов, происходящих в системе, можно конкретизировать структуру общего выражения для свободной энергии

$$F = -\Theta \ln Q \quad (1)$$

и перейти от вычисления функции F к вычислению функции, для которой ряд сходится быстрее.

Данный подход введен в работе [1]. Дальнейший анализ поведения системы при больших плотностях показывает целесообразность представления F в виде

$$F = F_0 - \Theta m N \ln \bar{\rho}, \quad (2)$$

где $F_0 = -\Theta \ln Q_0$ — свободная энергия системы основного приближения, $\bar{\rho} = (Q/Q_0)^{1/(Nm)}$, $m = z/2$, z — число ближайших соседей, выбор которого осуществляется при конкретизации постановки задачи. Отметим, что (2) полностью эквивалентно (1).

В качестве примера реализации предлагаемого подхода рассмотрим систему мягких сфер, для которой $U = \sum_{i < j} \Phi(|q_i - q_j|)$, $\Phi(r) = \varepsilon(\sigma/r)^n$, $\varepsilon > 0$, $\sigma > 0$, $n > 3$. При высоких температурах она является простым и достаточно хорошим приближением, лучше описывающим термодинамические характеристики реальных систем, чем рассмотренная в [1] система твердых сфер. Для системы мягких сфер известны первые пять вириальных коэффициентов [2–4].

Для реализации нашей схемы необходимо определить F_0 , которое мы найдем, используя вариационный принцип Боголюбова:

$$F \leq F_0 = F_1 + \langle U - U_1 \rangle_{U_1}, \quad (3)$$

где U_1 и F_1 — соответственно потенциальная энергия и свободная энергия базовой системы, в качестве которой выберем систему твердых сфер (диаметром σ_1).

Для системы твердых сфер свободная энергия определена нами методом улучшенной сходимости с высокой степенью точности по формуле (2) при учете семи вириальных коэффициентов [1]. Вместе с тем определение F_0 по формуле (3) требует знания радиальной функции распределения системы твердых сфер. Если использовать обычное разложение по степеням плотности, то из-за его малой эффективности точность при известном в настоящее время числе членов мала. Поэтому мы используем метод ускоренной сходимости рядов теории возмущений, переходя от рядов по степеням плотности непосредственно для радиальной функции распределения g к ряду для функции, меняющейся медленнее и определяемой структурой хорошо известного соотношения для системы твердых сфер:

$$\frac{p_1}{\Theta \rho} = 1 + B_2 \rho g(\sigma_1, \rho) = - \frac{\partial F_1}{\partial V} \frac{1}{\Theta \rho}, \quad B_2 = 2\pi \sigma_1^3/3, \quad (4)$$

где p_1 — давление, ρ — плотность системы, B_2 — второй вириальный коэффициент системы твердых сфер.

При вычислении функции $g(r, \rho)$ сохраним структуру функции $g(\sigma_1, \rho)$. Тогда единственным параметром, для которого можно развить теорию возмущений (в частности, разложить в ряд по степеням плотности), будет величина σ_1^3 . Поэтому естественно сделать замену $\sigma_1^3 \rightarrow y(r) \sigma_1^3$ и развивать теорию возмущений для функции $y(r)$, т. е. искать ее в виде ряда

$$y(r) = y_0(r) + y_1(r) \rho + y_2(r) \rho^2 + \dots, \quad (5)$$

а согласно (4) и (2) для трехмерной системы твердых сфер ($m=6$),

$$g(r, \rho) = \frac{1 + (2b_3/b_2) y(r) \rho + \dots}{1 - b_2 y(r) \rho - b_3 y^2(r) \rho^2 - \dots}, \quad r > \sigma_1, \quad (6)$$

где $b_2, b_3, \dots$ — коэффициенты разложения функции $\bar{p}$ в ряд по ρ для системы твердых сфер:

$$\bar{p} = 1 - b_2 \rho - b_3 \rho^2 - \dots,$$

$$b_2 = B_2/6,$$

$$b_3 = (B_3/6 - (B_2/6)^2)/2,$$

B_i — вириальные коэффициенты для системы твердых сфер. Разлагая правую часть выражения (5) в ряд Тейлора по ρ и приравнявая коэффициенты разложения соответствующим известным пяти вириальным коэффициентам для $g(r, \rho)$ [5], находим выражения для $y_0(r)$, $y_1(r)$, $y_2(r)$:

$$y_0 = g_3(r),$$

$$y_1 = (g_4(r) - g_0^2(r) B_4) / B_3,$$

$$y_2 = (g_5(r) - B_5 y_0^3 - 2B_4 y_0 y_1) / B_3.$$

Определив таким образом функцию $g(r, \rho)$, подставим ее в соотношение (3), которое для однородной системы принимает вид

$$F_0 = F_1 + 2\pi e N \rho \int_{\sigma_1}^{\infty} \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n g(r, \rho) r^2 dr. \quad (7)$$

Для широко используемого в теоретических исследованиях случая $n=12$ из условия минимизации F_0 относительно параметра σ_1 следует

$$\partial F_0 / \partial \sigma_1 = 0, \quad (8)$$

откуда получаем уравнение для определения $\sigma_1 = \sigma_1(\sigma, \Theta, \rho, \epsilon)$.

Полученная функция σ_1 позволяет однозначно определить F_0 на основе выражения (7). Его мы используем в качестве основного приближения для вычисления свободной энергии системы мягких сфер по формуле (2). Ищем выражение для функции $\bar{\rho}$ системы мягких сфер в виде ряда по степеням плотности:

$$\bar{\rho} = 1 - \bar{b}_2 \rho - \bar{b}_3 \rho^2 - \dots$$

и

$$F = F_0 - 3\Theta N \ln(1 - \bar{b}_2 \rho - \bar{b}_3 \rho^2 - \dots).$$

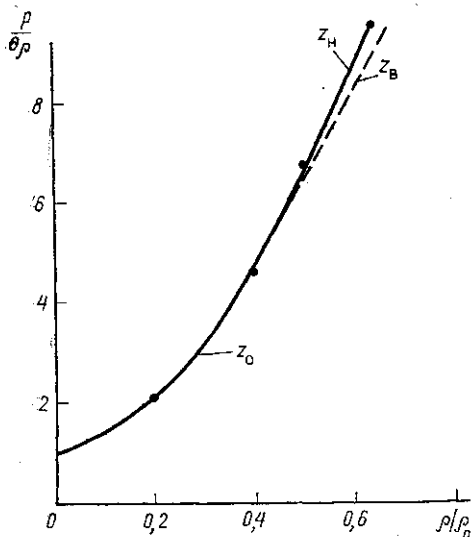
Разлагая F в ряд по степеням плотности по известным пяти вириальным коэффициентам для системы мягких сфер [2—4], находим алгебраические уравнения для определения $\bar{b}_2, \bar{b}_3, \bar{b}_4, \bar{b}_5$ и вычисляем их. В результате последнее выражение определяет свободную энергию системы мягких сфер. Зная свободную энергию, несложно найти величину

$$z = \frac{p}{\Theta \rho} = - \frac{\partial F}{\partial V} \frac{1}{\Theta \rho}. \quad (9)$$

На рисунке приведены зависимости z от ρ/ρ_0 (где $\rho_0 = \sqrt{2}/\sigma^3$), определенные по данным машинного эксперимента (z_0) [6] (точность 1%) и найденные из вириального уравнения состояния с учетом пяти вириальных коэффициентов (z_B) и из уравнения (9) (z_H). Непосредственно видна эффективность предлагаемого метода вычисления уравнения состояния, который дает совпадение теоретических и экспериментальных данных с точностью 1% и выше, а вириальное разложение — с точностью 4% (для однородной фазы).

Обобщение предлагаемого подхода на другие виды потенциалов не составляет труда. Для это-

го необходимо решить соответствующую задачу на минимизацию функционала в вариационном принципе Боголюбова (3), а также иметь несколько рассчитанных вириальных коэффициентов и функциональных коэффициентов разложения в ряд по степеням плотности для радиальной функции распределения.



Сравнение предлагаемого метода с другими методами улучшения сходимости рядов, используемых в теории плотных газов (метод аппроксимант Паде и др.) [7], а также вариантами термодинамической теории возмущений [8] показывает, что он дает большую точность совпадения теоретических и экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Базаров И. П., Николаев П. Н. // ДАН СССР. 1982. 267, № 6. С. 1344.
[2] Kihara T. // Rev. Mod. Phys. 1953. 25, N 4. P. 831. [3] Rowlinson J. S. // Mol. Phys. 1963. 6, N 4. P. 429. [4] Henderson D., Oden L. // Mol. Phys. 1966. 10, N 5. P. 405. [5] Ree F. H., Keeler R. N., Carthy Mc. S. L. // J. Chem. Phys. 1966. 44, N 9. P. 3407. [6] Andersen H. C., Weeks J. D., Chandler D. // Phys. Rev. 1971. A4, N 4. P. 1597. [7] Крокстон К. Физика жидкого состояния. М., 1978. [8] Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С. Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике. М., 1981.

Поступила в редакцию
30.09.86

После переработки
01.02.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1988. Т. 29, № 4

УДК 539.17

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ОБРАБОТКИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В РЕАЛЬНОМ МАСШТАБЕ ВРЕМЕНИ С ПОВЫШЕНИЕМ РАЗРЕШЕНИЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНОГО ТРАКТА

С. И. Ашкиназе, В. А. Воронов, Ю. И. Нечаев

(НИИЯФ)

Рассматривается решение задачи редукиции как средства повышения разрешения спектрометрического тракта при реализации ее модифицированным методом «цифра за цифрой» с применением специальной стратегии, существенно сокращающей время обработки.

1. Введение. Искажение сигналов в результате прохождения через спектрометрический тракт, обладающий конечной аппаратной функцией, является одной из причин возникновения трудноустраняемых погрешностей измерения (наложение, размытие и др.) [1]. Создание тракта для обработки спектрометрической информации, обладающего минимальными искажениями, остается одной из самых актуальных проблем при разработке специализированных измерительно-вычислительных систем, применяемых на ускорителях заряженных частиц, при спектрометрических исследованиях в ядерной геофизике и геологии и других областях науки и техники.

Наряду с другими одним из эффективных методов, позволяющих преодолеть упомянутые трудности, является решение задачи редукиции с применением метода Гаусса, который позволяет, не используя дорогостоящие детекторы и аппаратуру с более высокими параметрами, существенно увеличить разрешающую способность тракта в целом. Данная работа использует постановку задачи, изложенной в [2]. По разработанной методике уже создана программа, позволяющая обрабатывать спектры размером до 1024 каналов, причем время обработки на микро-ЭВМ составляет несколько минут [3].

Однако используемое программное обеспечение требует привлечения арифметики с плавающей запятой и существенного объема памяти, что в значительной мере сказывается на времени обработки и це-