с достаточно высокой точностью. Однако при данном способе измерений наблюдаемые величины несут мало информации о механических свойствах включения. В связи с этим удается только качественно оценить значение модуля Юнга неоднородности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Sarvazyan A., Maevsky E., Gukassian D. et al.//Abstracts of the 1993 IEEE Ultrasonic Symp., Baltimore, Maryland, USA, November 1993. P. 157.
2. Sarvazyan A., Gukassian D., Maevsky E. et al.//Proc. of Intern. Workshop «Interaction of Ultrasound with Biological Media». Valenciennes. France, 1994. P. 69.
3. Sarvazyan A. P., Skovoroda A. R., Emelianov S. Y. et al.//Acoustical Imaging. Vol. 21/Ed. J. P. Jones. N. Y.; L., 1995.
4. Gentle C. R.//J. Biomed. Eng. 1988. N 10. P. 124.
5. Sarvazyan A. P., Skovoroda A. P., Pyt'ev Yu. P.//Proc. 8th IEEE Symp. on Computer-Based Medical Systems. Lubbock, Texas, June 09—11, 1995.
6. Goodier J. N.//Trans. of ASME. 1933. 55, N 39. P. 39.
7. Pyt'ev Yu. P.//Pattern Recognition and Image Analysis. 1991. 1, N 1. P. 54.
8. Пытьев Ю. П. Методы анализа и интерпретации эксперимента. М., 1990.
9. Пытьев Ю. П. Математические методы интерпретации эксперимента. М., 1989.
10. Пытьев Ю. П.//Математическое моделирование. 1992. 4, № 2. С. 76.

Поступила в редакцию
06.03.96

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1996. № 5

УДК 536.75

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКЕ

П. Н. Николаев

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

Предложен новый метод использования асимптотических методов для задач статистической термодинамики систем, отталкивательная часть короткодействующего потенциала которых аналогична потенциалу нежестких сфер. Для таких систем получено уравнение состояния, описывающее стабильную и метастабильную фазы в пределах точности машинного эксперимента.

1. Введение

До настоящего времени имеются значительные проблемы в описании статистических неупорядоченных систем при больших плотностях в стабильной и метастабильной областях [1, 2]. Они связаны с расхождением теоретических и имеющихся экспериментальных данных, а также с проблемами описания характерных особенностей фазовых диаграмм вблизи фазовых переходов и в метастабильной области.

В данной работе мы исходим из описания таких систем на основе канонического распределения Гиббса, позволяющего вычислить свободную энергию

$$F=-kT\ln Z, \tag{1}$$

где k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, Z — статистический интеграл (или статистическая сумма в квантовом случае).

Наиболее последовательным способом вычисления F является ее реконструкция на основе имеющейся информации по асимптотическому поведению. В работе [3] нами предложен метод вычисления свобод-

ной энергии для системы твердых сфер на основе использования асимптотического разложения при $\rho \to 0$, где ρ — плотность системы. Он заключается, во-первых, в конкретизации выражения для свободной энергии с учетом характерных черт используемого гамильтониана:

$$F = F_0 - NkTm(T, V) \ln q(T, V), \tag{2}$$

где

$$F_0 = -NkT \ln Z_0$$

— свободная энергия основного приближения, а m, q, Z, Z_0 связаны соотношением $q = (Z/Z_0)^{1/Nm}$; m имеет смысл эффективного числа ближайших соседей. Во-вторых, для вычисления q (или m — эти функции взаимосвязаны) учитываются как известные общие свойства функций, следующие из физической постановки задачи, так и их асимптотическое поведение при малых и больших плотностях, температурах, в окрестности критической точки. С увеличением информации (например, с появлением новых точно известных вириальных коэффициентов) реконструируются выражения для свободной энергии. В-третьих, для ускорения сходимости рядов теории возмущений наряду с описанными выше приемами используются и математические методы, например аппроксиманты Паде.

Для системы твердых сфер в работе [3] найдено, что при выборе в качестве F_0 свободной энергии идеального газа достаточно взять q в виде $q = 1 - x$ ($x = \rho/\rho_0$, ρ_0 — плотность при плотной упаковке), а m искать в классе аппроксимант Паде. В результате уже при учете четырех первых вириальных коэффициентов получено выражение для свободной энергии, воспроизводящее все известные на настоящее время вириальные коэффициенты, т. е. до B_8 включительно [4], и данные машинного эксперимента в пределах их точности.

Для системы твердых сфер относительно просто удается получить асимптотику выражения для свободной энергии при больших плотностях, где x (приведенная плотность) меняется в конечных пределах. Уже для мягких сфер решение данной проблемы осложняется тем, что плотность может меняться в бесконечных пределах, а асимптотическое выражение для больших плотностей имеет сложный вид и не позволяет дать простого выражения для m и q, справедливого при всех плотностях. В термодинамической теории возмущений эта проблематика известна как задача отыскания эффективного диаметра системы мягких сфер (или частиц с потенциалом взаимодействия Леннарда—Джонса и др.). Решению этой проблемы, а также обобщению метода, предложенного в [3], на системы мягких сфер и подобные им системы посвящена данная работа.

2. Вириальное разложение для систем с короткодействующим потенциалом взаимодействия

Вириальные ряды представляют собой асимптотическое разложение для термодинамических потенциалов и функций в ряд по степеням плотности. Для короткодействующих потенциалов взаимодействия коэффициенты разложения могут быть выражены либо через интегралы от произведения функций Майера, либо через групповые интегралы Урселла.

Наиболее часто рассматриваются системы в предположении парности взаимодействий. Для молекулярных систем реалистичным является потенциал Леннарда—Джонса. Однако в этом случае возникают

большие сложности при строгом количественном анализе, особенно при больших плотностях, поскольку число известных вириальных коэффициентов ограничено. По этой причине разработаны различные варианты термодинамической теории возмущений, использующие обычно в качестве базовой системы систему твердых сфер, для которой известны с достаточной степенью точности свободная энергия, а также радиальная функция распределения.

Перед строгим количественным изучением системы Леннарда—Джонса нам представляется естественным вначале рассмотреть систему мягких сфер, которая соответствует поведению системы Леннарда—Джонса в пределе высоких температур. К тому же предлагаемый ниже подход применим к любым нежестким сферам (не обязательно со степенной зависимостью потенциала). Поэтому фактически мы решаем здесь задачу построения статистической термодинамики систем с короткодействующим потенциалом взаимодействия между частицами при больших плотностях и достаточно высоких температурах.

Потенциал взаимодействия для мягких сфер имеет вид

$$\Phi(r)=\varepsilon(\sigma/r)^n, \tag{3}$$

где ε и σ — параметры, значение n обычно берут равным 12. Уравнение состояния для этой системы является функцией одного параметра

$$\alpha=\rho'(T')^{-3/n}, \tag{4}$$

где

$$\rho'=N\sigma^3/V,$$

$$T'=kT/\varepsilon,$$

V — объем системы, N — число частиц. В дальнейшем нам будет удобнее величина $y=\alpha/\sqrt{2}$ (при $n\to\infty$ $y\to x$). Выражение для сжимаемости в вириальной форме имеет вид

$$\frac{pV}{kT}=1+B_2y+B_3y^2+B_4y^3+\ldots, \tag{5}$$

где

$$B_2=3{,}6296,\quad B_3=7{,}5816,\quad B_4=9{,}9793,\quad B_5=8{,}4520. \tag{6}$$

Как отмечается в работе [2], основная сложность, которая возникает при использовании вириального разложения и различных методов ускорения сходимости, заключается в том, что при $y\to\infty$ статистический интеграл обращается в нуль, а свободная энергия — в бесконечность. То есть разложение по степеням y необходимо рассматривать на всей полуоси от 0 до ∞. Для нахождения выражения свободной энергии таких систем в нулевом приближении будем исходить из вариационного принципа Боголюбова.

3. Вариационный принцип Боголюбова для системы мягких сфер

В качестве базовой системы используем систему твердых сфер. В результате для свободной энергии мягких сфер F_{ss} имеем

$$F_{ss}\leqslant\overline{F}=F_{rs}+\frac{3B_2\rho kT}{x^3}\int_1^\infty\frac{\mu(yx,\ z)}{z^{10}}\,dz, \tag{7}$$

где свободная энергия твердых сфер берется в форме [3]

$$F_{rs}=F_0+kT\varphi(yx), \tag{9}$$

F_0 — свободная энергия идеального газа, μ — радиальная функция распределения системы твердых сфер, а параметр x определяется из условия

$$\frac{\partial \overline{F}}{\partial x}=0. \tag{10}$$

Для радиальной функции распределения известны лишь три первых коэффициента в разложении в ряд по степеням плотности, т. е.

$$\mu(yx,\ r)=1+\frac{B_3}{B_2}yx\mu^1(r)+\frac{B_4}{B_2}(yx)^2\mu^2(r)+\frac{B_5}{B_2}(yx)^3\mu^3(r) \quad (r\geqslant 1). \tag{11}$$

С другой стороны, зная свободную энергию с высокой степенью точности, мы можем найти $\mu(yx, 1)$ также с высокой степенью точности из соотношения [2]:

$$\mu(1)=\left(\rho\frac{\partial F}{\partial\rho}/(NkT)-1\right)/(B_2\rho). \tag{12}$$

Известное точное аналитическое выражение для μ одномерной системы твердых сфер позволяет выбрать в трехмерном случае для y, близких к 1, следующую структуру выражения для μ:

$$\mu(xy,\ r)=\mu(1)\exp[-(\mu(1)-1)\chi(xy,\ r)], \tag{13}$$

где функцию χ ищем в виде ряда по степеням плотности:

$$\chi=\chi_0(r)+\chi_1(r)xy+\ \ldots \tag{14}$$

и χ_i находим из условия совпадения при $y\to 0$ рядов для μ из (13) и (11). Несложно видеть, что (13), согласно построению, точно воспроизводит все известные коэффициенты в своем разложении при $y=1$ уже при учете первого коэффициента. Область изменения y в пределах $1\leqslant y\leqslant 2$ вносит основной вклад в интегральную часть вариационного принципа. Таким образом, решается проблема ускорения сходимости ряда по степеням ρ для радиальной функции распределения μ.

Итак, на основе (7) с использованием известного выражения для свободной энергии системы твердых сфер и выражения для радиальной функции распределения (13) мы находим свободную энергию мягких сфер в нулевом приближении:

$$F^0{}_{ss}=\overline{F}=F_0+NkT\overline{\varphi}^0(y), \tag{15}$$

где вид $\overline{\varphi}^0$ однозначно определяется из (7)—(14).

4. Метод последовательных замен

Найденное выражение для свободной энергии системы мягких сфер (15) само по себе, как показывают расчеты, хорошо описывает термодинамику данной системы. С другой стороны, известны точные выражения для первых пяти вириальных коэффициентов системы мягких сфер. Для учета этой информации будем использовать структуру нулевого приближения, полученного из вариационного принципа, для введения неизвестной функции $f(y)$, позволяющей записать точное равенство

$$F_{ss}=\bar{F}_0+NkT\bar{\varphi}^0(yf(y)), \tag{16}$$

где

$$\bar{F}=F_{ss}|_{f=1}, \tag{17}$$

а саму неизвестную функцию f мы ищем из условия совпадения коэффициентов разложения в ряд по y (16) с известными точными вириальными коэффициентами (6). То есть ищем $f(y)$ в виде ряда

$$f=f_0+f_1y+f_2y^2+\ldots. \tag{18}$$

Таким образом, суть метода последовательных замен состоит, во-первых, в получении нулевого приближения на основе использования вариационного принципа для поиска неизвестного параметра x в виде ряда по степеням y, во-вторых, в использовании нулевого приближения в качестве той структуры, которая позволяет ввести новую функцию f, и для нее находить по известным вириальным коэффициентам разложение в ряд по степеням y.

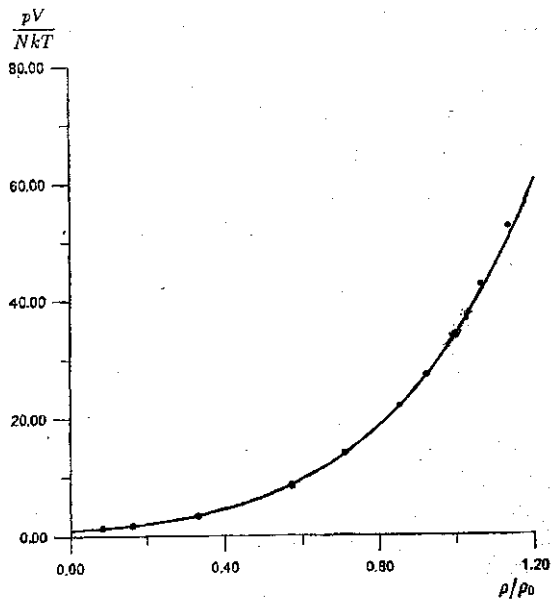
В общем же случае метод последовательных замен заключается в учете всей имеющейся информации о точном асимптотическом поведении термодинамических функций при их реконструкции и в использовании вариационных принципов или каких-либо вариантов теории возмущений.

5. Численные результаты для системы мягких сфер

Из (16) находим выражение для сжимаемости системы мягких сфер

$$\frac{pV}{NkT}=1+y\frac{\partial\bar{\varphi}^0}{\partial y}. \tag{19}$$

Численные расчеты по формуле (19) при учете (15) и (18) приведены на рисунке (сплошная линия). Здесь же приведены данные машинного эксперимента [5, 6] (изображены кружками). Непосредственно видно хорошее согласие теории и эксперимента как в стабильной ($0\leqslant y\leqslant 0{,}813$), так и в метастабильной области ($0{,}813\leqslant y\leqslant 1{,}103$). Если представить (19) в виде ряда по степеням y, то первые пять его коэффициентов совпадают с точными значениями вириальных коэффициентов, шестой вириальный коэффициент совпадает с коэффициентом, полученным в [5] путем подгонки соответствующего ряда к известным данным машинного эксперимента, а далее ряд носит знакопеременный характер. От-



сюда ясно, почему при весьма небольшом числе известных вириальных коэффициентов для системы мягких сфер удается получить достаточно точные результаты. Из (15) следует, что при $y \to \infty$ $pV/(NkT) \sim y^4$. Поэтому естественно записать (19) в виде

$$\frac{pV}{NkT} = 1 + B_2 y + B_3 y^2 + B_4 y^3 + B_5 y^4 \omega(y), \tag{20}$$

где $\omega(y)$ ищется на классе аппроксимант Паде из условия наилучшего описания имеющихся экспериментальных данных при учете минимального числа коэффициентов разложения. Нами получено, что при выборе

$$\omega = \frac{1 + 0{,}6764y}{1 + 0{,}1440y} \tag{21}$$

мы описываем известные данные машинного эксперимента в пределах его точности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Calleja M., Rickayzen G.//Phys. Rev. Lett. 1995. **74**, N 22. P. 4452.
2. Базаров И. П., Николаев П. Н.//Журн. физ. химии. 1995. **69**, № 10. С. 1758.
3. Николаев П. Н.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1995. № 5. С. 21 (Moscow University Phys. Bull. 1995. N 5).
4. Janse van Rensburg K. F.//J. Phys. A: Math. Gen. 1993. **26**, N 19. P. 4805.
5. Cope J. N., Woodcock L. V.//J. Chem. Phys. 1980. **72**, N 2. P. 976.
6. Kumbayashi S., Hivatari Y.//J. Phys. Soc. Japan. 1987. **56**, N 8. P. 2788.

Поступила в редакцию
08.04.96

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1996. № 5

РАДИОФИЗИКА

УДК 621.373

ВЫБОР ПАРАМЕТРОВ СЛОЖНОЙ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ПРИ ДРОБНО-КРАТНОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ

Н. В. Малетин, И. И. Минакова

(кафедра молекулярной физики и физических измерений)

Методами компьютерного моделирования исследовано изменение областей взаимной синхронизации при дробно-кратном соотношении частот генерации автоколебательной системы (АКС). Рассмотрена система двух генераторов, связанных посредством резонансного контура, у которых совпадают по частоте различные по номеру гармоники. Для этой системы определены области параметров, при которых существует синхронный режим стабилизации частоты. Установлена связь между частотными характеристиками пассивной части АКС, спектральным составом колебаний генераторов и шириной полосы синхронизации.

Интерес к изучению сложных, в частности многоконтурных, автоколебательных систем при наличии больших нелинейных затуханий, приводящих к отличию автоколебаний от квазигармонических, определяется следующим обстоятельством. У таких систем в спектрах колебаний генераторов имеются сравнительно большие по амплитуде гармоники, что при наличии связей на частотах гармоник генераторов оп-