



4. Aranson I.S., Kramer L. The world of the complex Ginzburg – Landau equation // *Rev. Mod. Phys.* 2002. V. 74. P. 99 – 143.
5. Sakaguchi H., Shinomoto S., Kuramoto Y. Local and global self-entrainments in oscillator lattices // *Progr. Theor. Phys.* 1978. V. 77. P. 1005.
6. Strogatz S.H., Mirollo R.E. Phase-locking and critical phenomena in lattices of coupled nonlinear oscillators with random intrinsic frequencies // *Physica D.* 1988. V. 31. P. 143 – 168.
7. Ermentrout G.B., Kopell N. Frequency plateaus in a chain of weakly coupled nonlinear oscillators // *Physica D.* 1990. V. 41. P. 219 – 231.
8. Osipov G.V., Sushchik M.M. Synchronized clusters and multistability in arrays of oscillators with different natural frequencies // *Phys. Rev. E.* 1998. V. 58, № 6. P. 7198.
9. Ermentrout G.B., Troy W.C. Phase locking in a reaction-diffusion system with a linear frequency gradient // *SIAM J. Math. Anal.* 1986. V. 46, № 3. P. 359.
10. Diamant N.E., Bortoff A. Nature of the intestinal slow-wave frequency // *Amer. J. Physiol.* 1969. V. 216, № 2. P. 301 – 307.
11. Winfree A.T. *The geometry of biological time.* N. Y.: Springer, 1980.
12. Anishchenko V.S., Vadivasova T.E., Okrokvertskhov G.A. et al. Chaotic dynamics of a spatio-inhomogeneous medium // *Intern. J. of Bifurcation and Chaos.* 2005. V. 15, №11. P. 3661 – 3673.
13. Vadivasova T.E., Strelkova G.I., Anishchenko V.S. Phase-frequency synchronization in a chain of periodic oscillators in the presence of noise and harmonic forcings // *Phys. Rev. E.* 2001. V. 63. P. 036225.
14. Garcia-Ojalvo J., Sancho J.M. *Noise in Spatially Extended Systems.* N. Y.: Springer, 1999.
15. Berge P., Pomeau Y., Vidal Ch. *Order within chaos.* N. Y.: Wiley, 1984.
16. Schuster H.G. *Deterministic Chaos.* Wienheim: Physik-Verlag, 1984.
17. Dubois M., Rubio M.A., Berge P. Experimental Evidence of Intermittencies Associated with a Subharmonic Bifurcation // *Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 51. P. 1446 – 1449.
18. Anishchenko V.S., Herzog H. Noise induced chaos in a system with homoclinic points // *ZAMM.* 1988. V. 68, № 7. P. 317.

УДК 548.0: 532.783

УНАРНАЯ ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЖЕСТКИХ СФЕР У ИДЕАЛЬНОЙ СТЕНКИ

В.П. Вешнев

Саратовский государственный университет,
Институт нелинейной динамики
E-mail: vechnevVP@info.sgu.ru

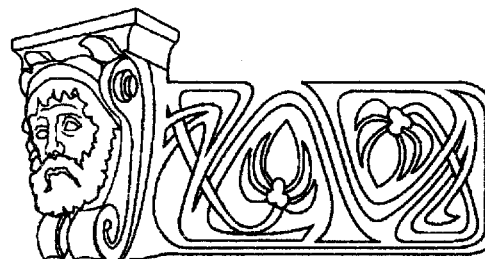
Методами равновесной статистической физики в рамках ансамбля Гиббса получено интегральное уравнение для одночастичной функции распределения жестких сфер в конфигурационном пространстве системы в присутствии идеальной стенки. Проведён анализ решения. Численные результаты даны в виде графиков зависимости локальной относительной плотности частиц от расстояния до стенки.

UNARY FUNCTION OF HARD SPHERE DISTRIBUTION NEAR IDEAL WALL

V.P. Veshnev

Hard sphere system upon ideal wall was analyzed using equilibrium statistic physics methods. The integration equation for oneparticle distribution function of coordinate region is received. Resolve of obtaining equation we analyzed. Numerical results illustrating particles local relative density depending of distance to the wall are showed.

Рассмотрим вековую статистическую систему, состоящую из одинаковых шаров с жестким взаимодействием. Пусть состояние этой системы описывается распределением



Гиббса. В дальнейшем нас будет интересовать лишь его конфигурационная часть.

Поместим систему во внешнее поле и обозначим через $\psi(i)$ потенциальную энергию частицы с координатами $i=(x_i, y_i, z_i)$. Распределение Гиббса системы теперь будет зависеть от функции ψ . В частности, статистический интеграл системы будет функционалом Ψ и, следовательно, станут функционалами внешнего поля как все частичные функции распределения системы, так и её термодинамические характеристики. Учитывая этот факт, будем одночастичную функцию распределения системы, то есть её локальную плотность, записывать в виде $n(i; \psi)$.

Рассмотрим функционал поля $n(1; \psi) \exp\{\beta \Psi(1)\}$, где β – обратная абсолютная температура системы, измеряемая в единицах энергии. Разложим его в функциональный ряд Тейлора в окрестности $\psi=0$ по функционалу $n(2; \psi)$, ограничиваясь линейным членом разложения:



$$n(1; \psi) \exp\{\beta\psi(1)\} = n(1) + \int d2 \left\{ \frac{\delta[n(1; \psi) \exp(\beta\psi(1))]}{\delta n(2; \psi)} \right\}_{\psi=0} [n(2; \psi) - n(2)], \quad (1)$$

где $n(2; 0) = n(2)$, $d2 = dx_2 dy_2 dz_2$. Используя далее функциональные определения прямой корреляционной $C(2, 3; \psi)$, а также парной $n_2(1, 2; \psi)$ функций распределения во внешнем поле

$$\frac{\delta[\beta\psi(3)]}{\delta n(2; \psi)} = -\frac{\delta(2-3)}{n(2; \psi)} + C(2, 3; \psi), \quad (2)$$

$$\frac{\delta n(1; \psi)}{\delta(-\beta\psi)} = n_2(1, 2; \psi) - n(1; \psi)n(2; \psi) + n(1; \psi)\delta(1-2), \quad (3)$$

где $\delta(2-3)$ – произведение δ -функций Дирака разности координат частиц 2 и 3, с помощью уравнения Орнштейна–Цернике [1]

$$[n(2; \psi)]^{-1} [n_2(1, 2; \psi) - n(1; \psi)n(2; \psi)] - n(1; \psi)C(2, 1; \psi) = \int d3 [n_2(1, 3; \psi) - n(1; \psi)n(3; \psi)] C(2, 3; \psi) \quad (4)$$

получаем линейное интегральное уравнение для унарной функции распределения системы во внешнем поле:

$$n(1; \psi) \exp\{\beta\psi(1)\} = n(1) + \int d2 n(1)C(2, 1)[n(2; \psi) - n(2)]. \quad (5)$$

Здесь $C(2, 1)$ – прямая корреляционная функция системы жёстких сфер в отсутствии внешнего поля, то есть при $\psi=0$.

Уравнение (5) является приближённым уравнением. Его приближённость обусловлена ограничением линейного приближения при разложении в функциональный ряд (1). Однако при таком же ограничении получаются интегральные уравнения Перкуса–Йевики и ГПЦ, решившие известную проблему радиальной функции распределения. Это обстоятельство позволяет ожидать, что полученное уравнение (5) даст удовлетворительные результаты при решении поставленной в настоящей заметке задаче.

Предположим далее, что возмущающее внешнее поле есть жёсткая плоскость ZOY прямоугольной декартовой системы координат. Если d – диаметр сферы, то для статистической системы в области $x > 0$ имеем

$$\psi(1) = \psi(x_1) = \begin{cases} 0, & x > d/2, \\ \infty, & x < d/2, \end{cases} \quad (6)$$

$$\exp\{-\beta\psi(x)\} = \theta(x - d/2).$$

Здесь и далее $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда. Границу системы, определённую потенциалом (6), называют идеальной стенкой.

Вводя в уравнение (5) относительную плотность $w(1; \psi) = n(1; \psi)/n(1)$, рассмотрим однородную вдали от стенки систему. В этом случае $n(1) = n = \text{const}$, что соответствует газобразному или жидкому состоянию. При этом отметим следующие из уравнения (5) при потенциале (6) свойства решения:

- 1) $w(1; \psi) = w(x; \psi)$,
- 2) $w(x; \psi) = 0$ при $x < d/2$,
- 3) $w(\infty; \psi) = 1$.

Выделенные свойства решения уравнения (5) подсказывают целесообразность введения неизвестной функции

$$h(x) = w(x; \psi) \exp\{\beta\psi(x)\} - 1, \quad (7)$$

которая в области $x \geq d/2$ совпадает с приведённой к нулю локальной относительной плотностью системы твёрдых шаров.

В безразмерных цилиндрических координатах при замене $x/d \rightarrow x$ с использованием безразмерной средней плотности $\eta = \pi d^3 n/6$ для прямой корреляционной функции однородной статистической системы жёстких сфер применим известное аналитическое выражение, полученное в приближении Перкуса–Йевики Вертхаймом:

$$C(2, 1) = C(r) = \theta(1-r)(1-\eta)^{-4} \{-(1+2\eta)^2 + 6\eta(1+\eta/2)^2 r - \eta(1+2\eta)^2 r^3/2\}, \quad (8)$$

где r – расстояние между шарами, измеряемое в единицах диаметра шара. С учётом уравнений (6–8) и в новых обозначениях уравнение (5) преобразуется к виду

$$\int_{1/2}^{\infty} \theta(1-|x-y|) P_5(|x-y|) h(y) dy - h(x) = F(x), \quad (9)$$

где принято:

$$P_5(t) = \frac{1}{2} a(1-t^2) + \frac{1}{3} b(1-t^3) + \frac{1}{5} c(1-t^5),$$

$$a = -12\eta \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}; \quad b = 72\eta^2 \frac{(1+\eta/2)^2}{(1-\eta)^4};$$

$$c = -6\eta^2 \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}.$$

Неоднородное слагаемое $F(x)$ уравнения (9) отлично от нуля лишь в области $x < 3/2$. Причём на каждом интервале длиной $1/2$ функция представляется полиномом, а именно



$$F(x) = \theta\left(\frac{1}{2} - x\right)F_1(x) + \\ + \theta\left(x - \frac{1}{2}\right)\theta(1-x)F_2(x) + \\ + \theta(x-1)\theta\left(\frac{3}{2} - x\right)F_3(x);$$

$$F_1(x) = \frac{11}{48}a + \frac{31}{192}b + \frac{191}{1920}c + \\ + x\left(\frac{1}{8}a + \frac{1}{24}b - \frac{1}{160}c\right) - \\ - x^2\left(\frac{1}{4}a + \frac{1}{8}b + \frac{1}{32}c\right) + \\ + x^3\left(\frac{b}{6} + \frac{c}{12}\right) - x^4\left(\frac{b}{6} + \frac{c}{8}\right) + \\ + x^5\frac{c}{10} - x^6\frac{c}{15};$$

$$F_2(x) = \frac{11}{48}a + \frac{33}{192}b + \frac{193}{1920}c + \\ + x\left(\frac{a}{8} - \frac{b}{24} - \frac{c}{160}\right) + \\ + x^2\left(-\frac{a}{4} + \frac{b}{8} + \frac{c}{32}\right) - x^3\left(\frac{b}{6} + \frac{c}{12}\right) + \\ + x^4\frac{c}{8} - x^5\frac{c}{10};$$

$$F_3(x) = \frac{27}{48}a + \frac{81}{192}b + \frac{513}{1920}c - \\ - x\left(\frac{3}{8}a + \frac{3}{8}b + \frac{33}{160}c\right) + \\ + x^2\left(-\frac{a}{4} + \frac{b}{8} + \frac{c}{32}\right) + \\ + x^3\left(\frac{a}{6} - \frac{b}{6} - \frac{c}{12}\right) + x^4\left(\frac{b}{12} + \frac{c}{8}\right) - \\ - x^5\frac{c}{10} + x^6\frac{c}{30}.$$

$F(x)$ равномерно непрерывна вместе со своей первой производной, включая точку $x=3/2$. Тот факт, что $F(x)=0$ при $x>3/2$ отвечает условию стремления решения уравнения (9) к нулю при удалении от стенки. Уравнение (9) элементарными преобразованиями легко сводится к неоднородному линейному интегральному уравнению типа Вольтера с

областью определения неизвестной функции в полупространстве $x > 0$.

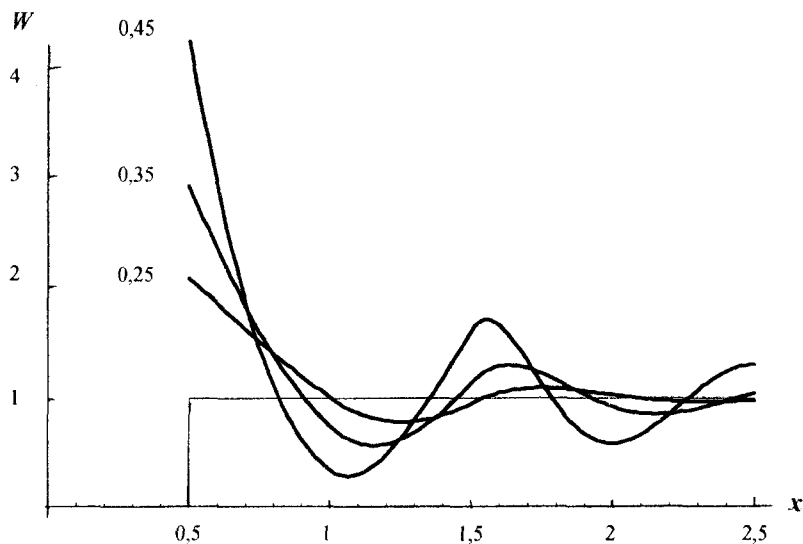
Путем разбиения неизвестной функции на две части, отличающиеся областями определения, а именно $x < 1/2$ и $x > 1/2$, уравнение (9) представляется в виде двух интегральных уравнений. При этом уравнение в первой области имеет решение, выражающееся через решение уравнения в области $x > 1/2$. Последнее уравнение, решением которого является приведённая локальная относительная плотность системы, является замкнутым интегральным уравнением в полубесконечной области оси ОХ. Это уравнение легко может быть получено из (9) путём умножения последнего на $\theta(x-1/2)$.

Поставим задачей настоящей заметки получение численного решения этого уравнения. Единственным его параметром, от которого зависит решение, является безразмерная средняя плотность η . Известно, что кристаллизация системы твёрдых шаров наступает при плотности η порядка 0,4. Так как записанное уравнение справедливо лишь для однородной в объёме системы, то нам необходимо получить его решение в интервале плотности $0 < \eta < 0.5$.

Решение уравнения достаточно быстро убывает с ростом расстояния от стенки. Следовательно, если значение $|h|$ будет меньше ошибки решения, то при дальнейшем увеличении x им можно пренебречь. В свою очередь, интегрирование в уравнении не может проводиться по высокочастотным формулам, так как высшие производные подынтегральной функции терпят разрывы на границах половинных интервалов. Совокупность указанных свойств диктует интегрирование методом трапеций с задаваемой точностью, позволяющей определять число точек на единичном интервале области интегрирования.

Записывая интегральное уравнение в виде системы линейных алгебраических уравнений относительно значений неизвестной функции в узловых точках на интервале до двадцати диаметров, решаем эту систему методом обратной матрицы. В получаемом таким образом решении обеспечивается ошибка не выше 10^{-4} . При этом матрица системы уравнений имеет обратную во всей физически допустимой области изменения средней плотности η .

На рисунке приведены решения уравнения (9) для $w(1; \psi)$ при плотностях $\eta = \{0.25; 0.35; 0.45\}$. Для удобства сравнения дан график ступенчатой функции $\theta(x-1/2)$, являющейся, как легко видеть из уравнения (9), его решением в пределе $\eta \rightarrow 0$.



Зависимость унарной функции распределения жёстких сфер от расстояния до идеальной стенки при плотностях $\eta = \{0.25; 0.35; 0.45\}$. С увеличением плотности значения функции при $x = 1/2$ увеличиваются

С ростом средней плотности локальная плотность непосредственно у стенки ($x=1/2$) весьма быстро возрастает. Так, при $\eta=0,35$ она в 2,91 раза больше средней плотности, а при $\eta=0,45$ – в 4,25 раза. Зависимость локальной плотности от расстояния до стенки – осциллирующая относительно решения при $\eta \rightarrow 0$ с быстрым затуханием. Уже при плотности $\eta = 0,25$ возникает явно выраженный максимум в районе третьего $1/2$ -интервала. С ростом средней плотности этот максимум возрастает, становится круче, сдвигаясь ближе к стенке. Естественно, что при стремлении средней плотности к значению плотности плотной упаковки координата первого максимума стремится к 1,5. Между этими двумя максимумами существует углубляющийся с ростом средней плотности минимум.

Сам факт существования второго максимума у функции распределения частиц вблизи идеальной стенки свидетельствует о возникновении в статистической системе жёстких сфер дальнего порядка индуцированного идеальной стенкой. Естественно, что возникающий дальний порядок является следствием коллективного статистического взаимодействия частиц и характерен для

твёрдой фазы. Соответственно будет изменяться уравнение состояния вблизи стенки [2].

Используемый в настоящей заметке формализм вследствие применения условия однородности на больших расстояниях от стенки не может быть применён для описания фазового перехода жидкость – кристалл твёрдых шаров. Однако из результатов проведённого анализа следует, что индуцирование стенкой дальнего порядка в системе должно изменить параметры фазового перехода [3] жидкость – кристалл в системе твёрдых шаров.

Библиографический список

1. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика: В 2 т. М.: Мир, 1978. Т. 1. 405 с.
2. Kim I.Y., Vae Y.C. // Fluid Phase Equilibria. 2000. 167. P. 187–206.
3. Вешнев В.П., Птичкин И.И. Скачок теплоёмкости, коэффициента теплового расширения и сжимаемости при фазовом переходе нематик – смектик в системе твёрдых параллельных тел вращения с центром инверсии / Саратов. гос. пед. ин-т. Саратов, 1997. 8 с. Деп. ВИНТИ, № 1502-В-97.