Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра физики и методико-информационных технологий

Собственные функции и собственные значения оператора дальней корреляции статистической системы твердых сфер

АВТОРЕФЕРАТ

студентки 4 курса 461 группы
направления 44.03.01 "Педагогическое образование"
профиль "Физика"
физического факультета
Подлесновой Ольги Сергеевны

Научный руководитель
Старший преподаватель ______ 19.06.17г. М.Н.Нурлыгаянова

Зав. Кафедрой
д.ф.-м.н.,профессор ______ 16.06.17г. Б.Е. Железовский

Саратов – 2017

В 1914 году было выведено знаменитое уравнение Орнштейна-Цернике для прямой корреляционной функции. Все уравнения были записаны для случая разреженных систем: газов и простых жидкостей, что не позволяло применить их для случая жидкостей вблизи точки кристаллизации и для кристаллов. При рассмотрении непрямой корреляционной функции для твердых сфер представляется возможным записать оператор, который будет отвечать за опосредованное воздействие одной частицы на другую через третью. В результате изучения непрямой корреляционной функции был определен оператор дальней корреляции (ОДК). В данной работе речь идет о нахождении параметров собственных функций оператора дальней корреляции в статистической системе твердых сфер.

Целью работы является определение параметров собственных функций оператора дальней корреляции.

Задачи работы:

1. Анализ уравнения для непрямой корреляционной функции и определение оператора дальней корреляции.
2. Определение действительных собственных функций оператора дальней корреляции.
3. Вывод уравнения для параметров собственных функций оператора дальней корреляции.
4. Разработка алгоритма и расчёт параметров собственных функций ОДК.

Работа состоит из введения, двух глав, заключения и списка литературы. В первой главе представлен вывод уравнения для параметров собственной функции, а вторая глава посвящена нахождению параметров.

Первая глава посвящена оператору дальней корреляции и параметрам собственной функции(ОДК), а также анализу уравнения для непрямой корреляционной функции. Рассмотрим парную корреляционную функцию:

$$W_2(1,2) = F_2(1,2) - F_1(1) \cdot F_1(2), \quad (1)$$

$$F_2(1,2) \approx e^{\frac{-\Phi(1,2)}{KT}} F_1(1) \cdot F_1(2), \quad (2)$$

где $\Phi(1,2)$ – это потенциал взаимодействия двух частиц. Если заменить в (2) $F_2(1,2)$, то получаем

$$W_2(1,2) = (e^{\frac{-\Phi(1,2)}{KT}} - 1) F_1(1) \cdot F_1(2). \quad (3)$$

$f_m(1,2) = (e^{\frac{-\Phi(1,2)}{KT}} - 1)$ – функция Майера.

Пусть [2]

$$\frac{F_2(1,2)}{F_1(1) \cdot F_1(2)} = F(1,2), \quad (4)$$

Делим (4) на $F_1(1) \cdot F_1(2)$, получаем

$$\frac{W_2(1,2)}{F_1(1)\cdot F_1(2)} = \frac{F_2(1,2)}{F_1(1)\cdot F_1(2)} - 1 = F(1,2) - 1 = W(1,2), \text{(корреляция)} \quad (5)$$

В 1914 году Леонард Орнштейн совместно с Фрицем Цернике вывели одноимённое уравнение. Уравнение Орнштейна - Цернике – это интегральное уравнение статистической механики для определения прямой корреляционной функции.[3] Оно описывает, как может быть рассчитана корреляция между двумя молекулами, в частности, корреляция плотности между двумя точками. Можно получить уравнение Орнштейна-Цернике из следующих эвристических соображений. Удобно ввести полную корреляционную функцию:

$$W(1,2) = F(1,2) - 1\,, \quad (6)$$

которая является мерой для «воздействия» молекулы 1 на молекулу 2, расположенную на расстоянии $r(1,2)$ от первой, в системе с радиальной функцией распределения $F(1,2)$. В 1914 году Орнштейн и Цернике предложили разделить это влияние на два вклада: прямой и косвенный. Прямой вклад по определению задается прямой корреляционной функцией, обозначаемой $C(1,2)$. Косвенный вклад связан с влиянием молекулы 1 на третью молекулу 3, которая, в свою очередь, влияет на молекулу 2 непосредственно. Такое опосредованное воздействие умножается на плотность и усредняется по всем возможным положениях координаты молекулы 3. Математически это можно записать в виде формулы:

$$W(1,2) = C(1,2) + n \int d3W(1,3)F_1(3)\, C(2,3), \tag{7}$$

которая и называется уравнением Орнштейна - Цернике.

Тогда полная корреляция $W = C + G(1,2)$, где $C -$ это прямая корреляционная функция, а $G(1,2)$ непрямая корреляционная функция[4]. Благодаря уравнению Орнштейна – Цернике, был разработан формализм прямой корреляционной функции, который стал основным методом генерирования нелинейных интегральных уравнений для бинарной функции распределения систем ансамбля Гиббса. Мы будем рассматривать непрямую корреляционную функцию.

Запишем уравнение для непрямой корреляционной функции:

$$\begin{aligned}\frac{1}{12\eta} g(r) - \theta(1-r)\int_0^{1-r} s\, ds\, 2rg(s) - \theta(2-r)\int_{|r-1|}^{1} ds\, g(s)\frac{1}{2}[1-(r-s)^2]\\ + \theta(2-r)\int_1^{r+1} ds\, g(s)\frac{1}{2}[1-(r-s)^2]\\ + \theta(r-2)\int_{r-1}^{r+1} ds\, g(s)\frac{1}{2}[1-(r-s)^2]\\ = \theta(2-r)\varphi(r) + NL\{g\}, \qquad (8)\end{aligned}$$

где η – безразмерная плотность, имеющая смысл числа сфер в объеме сферы, $NL\{g\}$ – нелинейный функционал неизвестной функции.

Рассмотрим уравнение при $r \geq 2$, в этом случае в уравнении (8) 2 и 3 слагаемого не будет, тогда получаем

$$\frac{1}{12\eta} g(r) + \theta(2-r) \int_{r-1}^{r+1} ds\, g(s) \frac{1}{2} [1-(r-s)^2] = NL\{g\}$$

Линейный оператор этого уравнения в названной области имеет вид

$$\theta(2-r) 6\eta \int_0^\infty [1-(r-s)^2] \theta(r+1-s) \theta(s-r+1) g(s) ds, \qquad (9)$$

где выражение $6\eta[1-(r-s)^2]\theta(r+1-s)\theta(s-r+1)$ – ядро оператора. Тогда

$$g_k(r) + \int_0^\infty K(r,s) g(s) ds = 0, \quad r \geq 2 \qquad (10)$$

где $K(r,s)$ ядро интегрального оператора.

$K(r,s) = K(s,r)$ – оператор симметричный, действительный, а значит он эрмитов.

Собственные функции этого оператора имеют вид $\Psi(r) = e^{\lambda r}$, где λ – параметр собственной функции. Подстановка $\Psi(r)$ в (10) даёт уравнение для параметра λ.

$$\frac{1}{24\eta} \lambda^3 + \lambda \operatorname{ch} \lambda - \operatorname{sh} \lambda = 0, \qquad (11)$$

Это уравнение имеет счетное множество комплексных решений, являющихся функциями плотности. Собственные функции соответствует значению параметра

$$\lambda_k = a_k + i b_k. \qquad (12)$$

Поскольку искомая функция убывает на бесконечности, из всех корней следует выбрать решения в виде $\lambda_k = -a_k \pm ib_k$.

Переходя к действительным параметрам, получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{1}{24\eta}(a^3 - 3ab^2) + a\cos b \operatorname{ch} a - b\sin b \operatorname{sh} a - \cos b \operatorname{ch} a = 0, \\ \frac{1}{24\eta}(3ab^2 - 3ab^2) + a\sin b \operatorname{sh} a + \cos b \operatorname{ch} a - \sin b \operatorname{ch} a = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Численное решение этой системы позволяет найти значения a_k и b_k.

Алгоритм программы.

Рассмотрим алгоритм программы для нахождения a_k и b_k.

1.Задать начальные значения.

2. Разбить первый квадрант на квадратные области и методом простых итераций найти квадрат, в котором обе исследуемые функции меняют знак.

3. Найти согласно п.2 в квадрате и методом Ньютона находим корни.

Таким образом, мы получили значения a_k и b_k.После этого, построили графики:

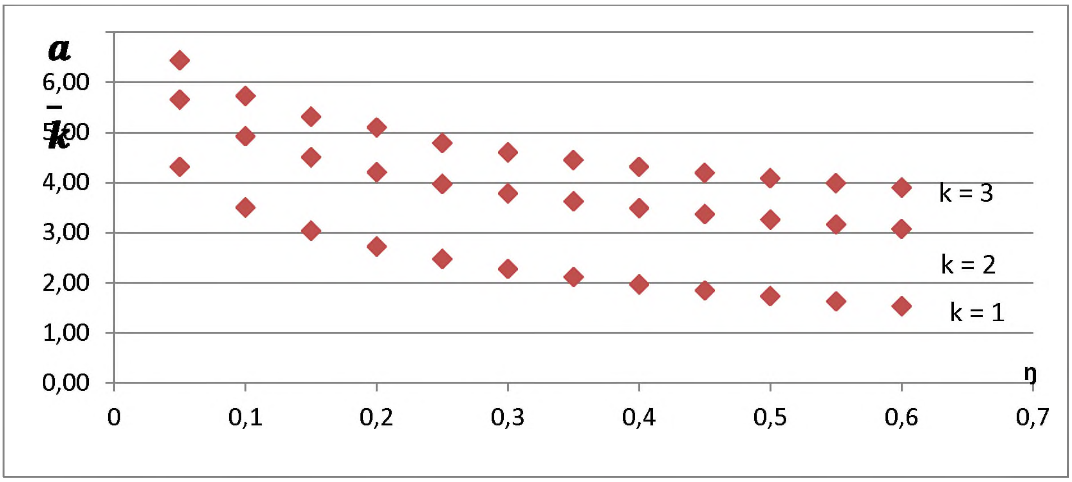

График 3. Зависимость a_kот плотности.

Значения каждого a_k убывают с ростом плотности. Однако, значения a_k коэффициентов затухания заметно возрастают с ростом k.

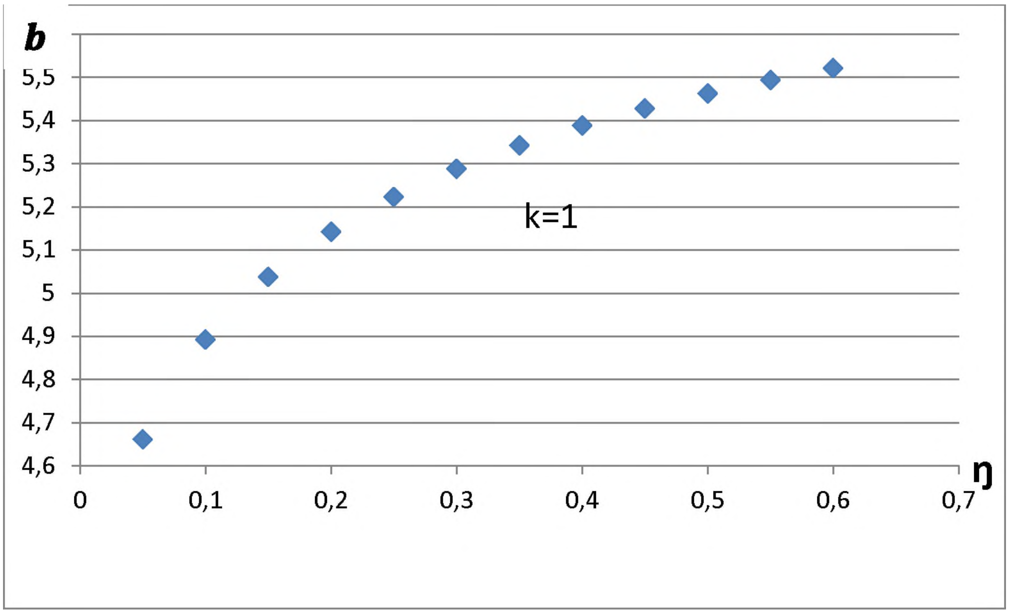

График 4. Зависимость b_k от плотности, при k = 1.

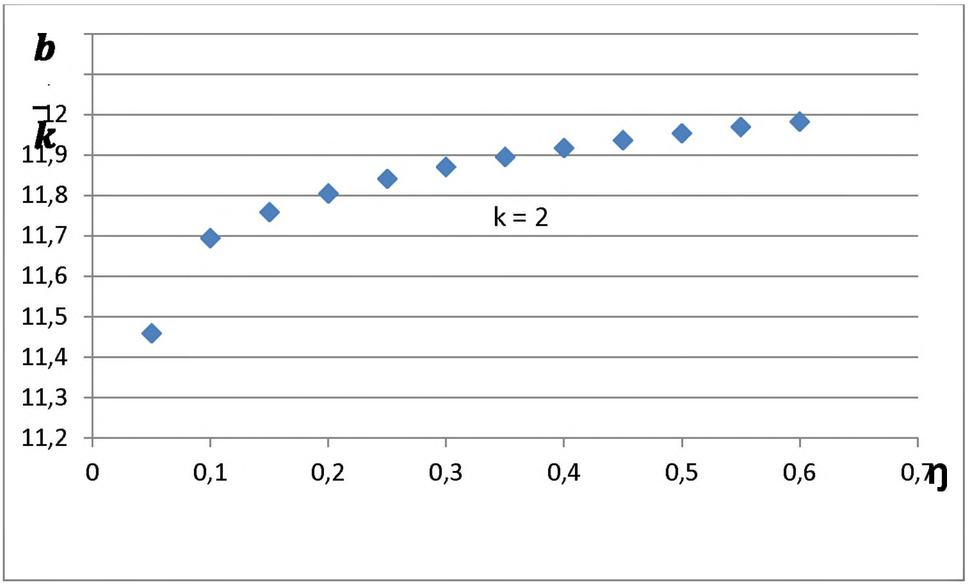

График 5. Зависимость b_k от плотности, при k = 2.

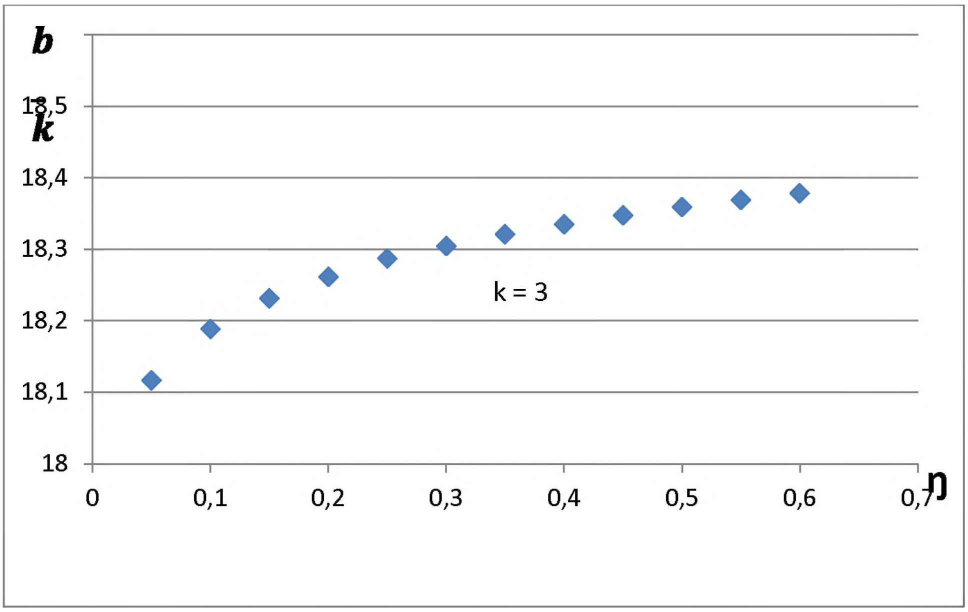

График 6. Зависимость b_k от плотности, при k = 3.

Построили графики зависимости a_k , b_k от безразмерной плотности, в результате a_k убывает от плотности, а b_k наоборот возрастает.

Заключение

Произведен анализ уравнения для непрямой корреляционной функции. Получено уравнение для параметров собственных функций ОДК. Разработан алгоритм расчета параметров собственных функций ОДК. Построены графики зависимости a_k, b_k от безразмерной плотности.

Список используемых источников

1. Корреляция, корреляционная зависимость [Электронный ресурс] // Математическая статистика [Электронный ресурс] : [сайт]. URL: http://statpsy.ru/correlation/correlation/ (дата обращения 06.03.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;
2. Реальное статистическое описание реальных газов [Электронный ресурс] // Химическая информационная сеть [Электронный ресурс] : [сайт]. URL: http://www.chem.msu.su/rus/teaching/realgases/chap2(4).html (дата обращения 03.02.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;
3. Википедия [Электронный ресурс] : свободная энциклопедия / текст доступен по лицензии Creative Commons Attribution-ShareAlike; Wikimedia Foundation, Inc, некоммерческой организации. Электрон. дан. (712413 статей, 2479181 страниц, 117 104 загруженных файлов). Wikipedia®, 2001- . URL: https://ru.wikipedia.org/wiki (дата обращения: 03.05.2017). Загл. с экрана. Последнее изменение страницы: 9 апреля 2017 в 17:04. Яз. Рус.;
4. Численный метод решения уравнения Орнштейна – Цернике для многокомпонентных систем с длиннодействующими кулоновскими межмолекулярного взаимодействия газов [Электронный ресурс] // НАУЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА «КИБЕРЛЕНИНКА» [Электронный ресурс] URL: https://cyberleninka.ru/article/n/chislennyy-metod-resheniya-uravneniya-ornshteyna-tsernike-dlya-mnogokomponentnyh-sistem-s-dlinnodeystvuyuschimi-kulonovskimi; (дата обращения 03.02.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус. Имеется печатный аналог;
5. Коваленко Н. П. ,Фишер И. З. "Метод интегральных уравнений в статистической теории жидкостей"/ Коваленко Н. П. ,Фишер И. З.//Журнал Успехи физических наук. 1972 . №6 С. 209–239;
6. Уравнение Перкуса — Йевика и гиперцепное уравнение [Электронный ресурс] // Энциклопедия по машиностроению XXL [Электронный ресурс]

: [сайт]. URL: http://mash-xxl.info/info/566532/ (дата обращения 06.03.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;

7. Функция Хевисайда [Электронный ресурс] // Математика [Электронный ресурс] : [сайт]. URL: / http://ru.math.wikia.com/wiki/ (дата обращения 06.03.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;
8. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика: в 2 т./ Балеску Р., 1978
9. Интегральный оператор [Электронный ресурс] // Энциклопедия Физики и техники [Электронный ресурс] : [сайт]. URL:http://femto.com.ua/articles/part_1/1375.html (дата обращения 06.04.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;
10. Википедия [Электронный ресурс] : свободная энциклопедия / текст доступен по лицензии Creative Commons Attribution-ShareAlike; Wikimedia Foundation, Inc, некоммерческой организации. Электрон. дан. (712413 статей, 2479181 страниц, 117 104 загруженных файлов). Wikipedia®, 2001- . URL: https://ru.wikipedia.org/wiki (дата обращения: 03.02.2017). Загл. с экрана. Последнее изменение страницы: 26 декабря 2016 в 16:14. Яз. Рус.;
11. Уравнение Вольтерра первого рода [Электронный ресурс] // Научная библиотека [Электронный ресурс] : [сайт]. URL: http://edu.sernam.ru/book_sm_math41.php?id=55 (дата обращения 06.04.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;
12. Формула Эйлера для комплексных чисел[Электронный ресурс] //Онлайн сервисы для учебы [Электронный ресурс] : [сайт]. URL: http://ru.solverbook.com/spravochnik/kompleksnye-chisla/formula-ejlera/ (дата обращения 06.03.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;
13. Википедия [Электронный ресурс] : свободная энциклопедия / текст доступен по лицензии Creative Commons Attribution-ShareAlike; Wikimedia Foundation, Inc, некоммерческой организации. Электрон. дан. (712413 статей, 2479181 страниц, 117 104 загруженных файлов). Wikipedia®, 2001- . URL: https://ru.wikipedia.org/wiki (дата обращения:

03.02.2017). Загл. с экрана. Последнее изменение страницы: 6 марта 2017. Яз. Рус.;

14. Численные методы: решение нелинейных уравнений [Электронный ресурс] //Портал Знаний [Электронный ресурс] : [сайт]. URL: http://statistica.ru/branches-maths/chislennye-metody-resheniya-uravneniy/ (дата обращения 04.02.2017).Загл. с экрана. Яз. Рус;