

thod // J. Phys. Soc. Japan. — 1962. — V. 17, No. 7. — P. 1100—1120. 5. Maradudin A.A., Flinn P.A. Anharmonic Contributions to the Debye — Waller Factor // Phys. Rev. — 1962. — V. 129, No. 6. — P. 2529—2547. 6. Maradudin A.A., Flinn P.A., Coldwell-Horsfall R.A. Anharmonic Contributions to Vibrational Thermodynamic Properties of Solids. Part II: The High Temperature Limit // Annals of Phys. — 1961. — V. 15, No. 3. — P. 360—386.

УДК 531.19

В.С. ВИХРЕНКО

## ВЛИЯНИЕ МЕЖЧАСТИЧНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ПОТЕНЦИАЛЫ СРЕДНИХ СИЛ В МЕТОДЕ УСЛОВНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

Корреляции в положениях частиц твердого тела играют исключительную роль в формировании его физико-механических свойств и определяют само существование твердого тела. Поэтому важное значение имеет разработка методов учета этих корреляций. Неоднократно отмечалось, что уравнения метода условных распределений [1] дают основу для последовательного учета корреляций.

Полный учет межчастичных корреляций численным решением системы интегральных уравнений относительно потенциалов средних сил [1, 2, 7] связан со значительными трудностями, и поэтому при рассмотрении кристаллического состояния вещества в ряде случаев можно воспользоваться малостью среднеквадратических отклонений частиц от узлов кристаллической решетки [3—5]. Однако построение приближенного решения интегральных уравнений путем выделения центрально-симметричной одночастичной функции распределения в качестве функции с резким максимумом и ограничения первым (квадратичным) слагаемым [4, 5] уравнения метода Лапласа существенно подавляет влияние межчастичных корреляций на потенциал средней силы.

Для устранения отмеченного недостатка выберем, как и в работе [6] (ниже сохраним обозначения, используемые в этой работе), в качестве базисных две нормированных на единицу гауссовых функции распределения

$$F_1(\vec{q}_i) = [\beta c / (2\pi)]^{3/2} \exp(-\beta c q_i^2 / 2), \quad (1)$$

$$F_2(\vec{q}_i, \vec{q}_j) = \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2} \det^{1/2} \|\hat{k}\| \exp\left[-\frac{1}{2} \beta \hat{k} \cdot (\vec{q}_j - \hat{\alpha} \vec{q}_i - \vec{\gamma})^2\right] \quad (2)$$

и введем переопределенные потенциалы

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_{ij}(\vec{q}_i, \vec{q}_j) &= \Phi_{ij}(|\vec{q}_i + \vec{R}_{ij} - \vec{q}_j|) - \Phi_{ij}(|\vec{R}_{ij} + \vec{q}_i|) - \\ &- \Phi_{ij}(|\vec{q}_j - \vec{R}_{ij}|) + \Phi_{ij}(R_{ij}) - \hat{\Phi}_{ij}^{(2)} \cdot \vec{q}_i \vec{q}_j, \quad \tilde{\Psi}_{ij}(\vec{q}_j) = \psi_{ij}(\vec{q}_j) - \\ &- \psi_{ij}^{(0)} - \tilde{\psi}_{ij}^{(1)} \cdot \vec{q}_j - \frac{1}{2} \hat{\psi}_{ij}^{(2)} \cdot \vec{q}_j^2. \end{aligned}$$

Потенциалы  $\psi_{ij}$  определены уравнениями (3) работы [6],  $\beta = (k_B T)^{-1}$  — обратная температура.

Характерной особенностью потенциалов, отмеченных тильдами, является то, что из них изъяты слагаемые до квадратичных включительно по отклонениям  $\vec{q}_i, \vec{q}_j$  частиц от узлов кристаллической решетки. Кроме того, в разложении потенциала  $\tilde{\Phi}(\vec{q}_i, \vec{q}_j)$  по  $\vec{q}_i$  и  $\vec{q}_j$  отсутствуют слагаемые, в которые входили бы степени только  $\vec{q}_i$  или только  $\vec{q}_j$ .

Система интегральных уравнений относительно потенциалов  $\psi_{ij}(\vec{q}_i)$  имеет вид

$$\exp \left\{ -\beta [ \psi_{ij}(\vec{q}_i) + \frac{1}{2} \hat{\kappa} \cdot (\hat{a} \cdot \vec{q}_i + \vec{\gamma})^2 + \Phi_{ij}^{(0)} + \psi_{ij}^{(0)} ] \right\} = \frac{c^{3/2} \int_{V_j} \exp \left\{ -\beta [ \tilde{\Phi}_{ij} - \tilde{\Psi}_{ij}(\vec{q}_j) ] \right\} F_2(\vec{q}_j / \vec{q}_i) d\vec{q}_j}{\det^{1/2} \|\hat{\kappa}\| \int_{V_j} \exp [ -\beta \sum_{k \neq j} \tilde{\Psi}_{jk}(\vec{q}_j) ] F_1(\vec{q}_j) d\vec{q}_j} \quad (3)$$

Ввиду возможности переопределения потенциалов средних сил на произвольные функции термодинамических параметров здесь в знаменателе использован нормирующий интеграл от центрально-симметричной функции.

Разложим далее подынтегральные экспоненты в системе (3) в ряд по  $\vec{q}_j$  и ограничимся квадратичными слагаемыми. В этом приближении интеграл в знаменателе по функции распределения (1) равен единице. Не войдут в окончательные выражения и производные потенциала  $\tilde{\Psi}$  в числителе, поскольку низшими слагаемыми в его разложении являются кубические.

После вычисления средних значений  $\vec{q}_i$  и  $\vec{q}_j^2$ , согласно функции распределения (2) и логарифмирования (3), находим

$$\begin{aligned} \psi_{ij}(\vec{q}_i) = & -\Phi_{ij}^{(0)} - \psi_{ij}^{(0)} - \frac{1}{2} \hat{\kappa} \cdot (\hat{a} \cdot \vec{q}_i + \vec{\gamma})^2 - \\ & - \frac{1}{2} \beta^{-1} \ln (c^3 / \det \|\hat{\kappa}\|) - \beta^{-1} \ln \left\{ 1 - \beta (\vec{\nabla}_j \tilde{\Phi}_{ij}) \cdot (\hat{a} \cdot \vec{q}_i + \vec{\gamma}) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \beta (\vec{\nabla}_j^2 \tilde{\Phi}_{ij} - \beta (\vec{\nabla}_j \tilde{\Phi}_{ij})^2) \cdot [\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + (\hat{a} \cdot \vec{q}_i + \vec{\gamma})^2] \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

В последнем выражении значения производных ( $\vec{\nabla}_j = \partial / \partial \vec{q}_j$ ) вычисляются при  $\vec{q}_j = 0$ . Получим далее на основании соотношения (4) замкнутую систему уравнений относительно тензорных коэффициентов разложения потенциала  $\psi$  (до второго порядка включительно)

$$\left\{ \begin{aligned} \psi_{ij}^{(0)} = & -\frac{1}{2} \Phi_{ij}^{(0)} - \frac{1}{4} \vec{\nabla}_{ij}^{(1)} \cdot \hat{\kappa}^{-1} \cdot \vec{\nabla}_{ij}^{(1)} - \frac{1}{4} \beta^{-1} \ln (c^3 / \det \|\hat{\kappa}\|), \\ \vec{\nabla}_{ij}^{(1)} = & \frac{1}{2} (\hat{E} - \hat{a})^{-1} \cdot \hat{\Phi}_{ij}^{(3)} \cdot (\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma} \vec{\gamma}), \\ \hat{\nabla}_{ij}^{(2)} = & -\hat{\Phi}_{ij}^{(2)} \cdot \hat{\kappa}^{-1} \cdot \hat{\Phi}_{ij}^{(2)} - \hat{\Phi}_{ij}^{(3)} \cdot \vec{\gamma} + 2 \hat{\Phi}_{ij*}^{(3)} \cdot \vec{\gamma} \cdot \hat{a}_* + \\ & + \frac{1}{2} \hat{\Phi}_{ij}^{(4)} \cdot (\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma} \vec{\gamma}) + \frac{1}{4} \beta [\hat{\Phi}_{ij}^{(3)} \cdot (\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma} \vec{\gamma})]^2, \end{aligned} \right. \quad (5)$$

$$\text{где } \hat{K} = c\hat{E} - \hat{\psi}_{ij}^{(2)}, \quad c\hat{E} = \sum_{j \neq i} \hat{\varphi}_{ij}^{(2)} = \sum_{j \neq i} (\hat{\Phi}_{ij}^{(2)} + \hat{\psi}_{ij}^{(2)}),$$

$$\hat{\alpha} = \hat{K}^{-1} \cdot \hat{\Phi}_{ij}^{(2)}, \quad \vec{\gamma} = -\hat{K}^{-1} \cdot \vec{\psi}_{ij}^{(1)}, \quad \hat{\Phi}_{ij}^{(k)} = \vec{\nabla}_i^k \Phi_{ij} \Big|_{\vec{q}_i = 0} \\ \Big|_{\vec{q}_j = 0}$$

Наиболее существенным отличием выражений (4), (5) настоящей работы от соотношений (36) – (39) работы [5] является более полный учет корреляций в положениях частиц в соседних ячейках. Это находит отражение, в частности, в первом слагаемом правой части  $\hat{\psi}_{ij}^{(2)}$ . Если пренебречь нелинейными слагаемыми в потенциале взаимодействия  $\Phi$ , то соотношения (5) сразу же приводят к точному решению системы интегральных уравнений для потенциалов средних сил при гармоническом межчастичном потенциале [1, 3]. В то же время уравнения работ [4, 5] для такого потенциала взаимодействия решений не имеют, а с учетом ангармонических слагаемых их решения дают очень низкие значения коррелятора смещений соседних частиц [4].

Чтобы несколько упростить окончательные выражения, для квадратичного слагаемого в потенциале взаимодействия примем оправданное приближение

$$\hat{\Phi}_{ij}^{(2)} = \Phi_{ij}^{(2)} \vec{n}_{ij} \vec{n}_{ij}, \quad \Phi_{ij}^{(2)} = r \frac{d}{dr} \left( \frac{1}{r} \frac{d\Phi(r)}{dr} \right) \Big|_{r=R_{ij}},$$

где  $\vec{n}_{ij} = \vec{R}_{ij} / R_{ij}$  – единичный вектор в направлении линии, соединяющей  $i$ -й и  $j$ -й узлы решетки. Для двух других тензорных коэффициентов запишем точные соотношения

$$\hat{\Phi}_{ij}^{(3)} = \Phi_{ij}^{(3)} \vec{n}_{ij}^3 + (\Phi_{ij}^{(2)} / R_{ij}) (3\hat{E} \vec{n}_{ij})_s,$$

$$\hat{\Phi}_{ij}^{(4)} = \Phi_{ij}^{(4)} \vec{n}_{ij}^4 + (\Phi_{ij}^{(3)} / R_{ij}) (6\hat{E} \vec{n}_{ij} \vec{n}_{ij})_s + (\Phi_{ij}^{(2)} / R_{ij}^2) (3\hat{E}\hat{E})_s,$$

$$\Phi_{ij}^{(3)} = r^3 \left\{ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \Phi(r) \right) \right] \right\} \Big|_{r=R_{ij}} =$$

$$= r^3 \left[ \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^3 \Phi(r) \right] \Big|_{r=R_{ij}},$$

$$\Phi_{ij}^{(4)} = r^4 \left[ \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^4 \Phi(r) \right] \Big|_{r=R_{ij}},$$

где скобки (...) <sub>s</sub> означают, что стоящий в них тензор должен быть симметризован по перестановкам всех индексов.

Уравнения (5) могут быть переписаны как алгебраические относительно  $\psi_{ij}^{(1)}$ ,  $\psi_{ijE}^{(2)}$  и  $\psi_{ijn}^{(2)}$  (индексы  $ij$  для упрощения записи опустим):

$$\left. \begin{aligned}
 \psi^{(1)} &= (\Phi^{(3)} + 3\Phi^{(2)}/R) G / [2(1-\alpha)]; \\
 \psi_E^{(2)} &= -\Phi^{(2)}\gamma/R + (\Phi^{(3)} + 3\Phi^{(2)}/R) G / (2R); R = R_{jj}; \\
 \psi_n^{(2)} &= -(\Phi^{(2)})^2/\kappa + \Phi^{(3)} [(2\alpha-1)\gamma + 5G/(2R)] + \\
 &+ \Phi^{(4)} G/2 + 2\Phi^{(2)} (3\alpha-1)\gamma/R + \beta (\Phi^{(3)} + 3\Phi^{(2)}/R)^2 G^2/4,
 \end{aligned} \right\} (6)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned}
 \vec{\psi}_{ij}^{(1)} &= \psi^{(1)} \vec{n}_{ij}; \vec{\gamma}_{ij} = \gamma \vec{n}_{ij}; \gamma = -\psi^{(1)}/\kappa; \\
 \hat{\psi}_{ij}^{(2)} &= \psi_E^{(2)} \hat{E} + \psi_n^{(2)} \vec{n}_{ij} \vec{n}_{ij}; \hat{\kappa} = \kappa_E \hat{E} + \kappa_n \vec{n}_{ij} \vec{n}_{ij}; \\
 \kappa &= \kappa_E + \kappa_n; \kappa_E = c - \psi_E^{(2)}; \kappa_n = -\psi_n^{(2)}; \\
 \hat{\alpha}_{ij} &= \alpha \vec{n}_{ij} \vec{n}_{ij}; \alpha = \Phi^{(2)}/\kappa; G = (\beta^{-1}/\kappa + \gamma^2); \\
 c &= \frac{1}{3} \sum_{s=1}^{\infty} z_s (\Phi_s^{(2)} + \psi_{sn}^{(2)} + 3\psi_{sE}^{(2)}),
 \end{aligned}$$

причем в последнем соотношении суммирование ведется по координационным сферам ( $z_s$  — количество узлов, принадлежащих  $s$ -й координационной сфере).

После решения системы уравнений (6) можно вычислить константу  $\psi^{(0)}$ , определяющую свободную энергию системы:

$$\begin{aligned}
 \psi^{(0)} &= -\frac{1}{2} \Phi^{(0)} - \frac{1}{4} (\psi^{(1)})^2/\kappa + \frac{1}{4} \beta^{-1} \ln \left[ \left(1 - \frac{\psi_E^{(2)}}{c}\right)^2 \times \right. \\
 &\times \left. \left(1 - \frac{\psi_n^{(2)}}{c}\right) \right], \\
 f &= \sum_{s=1}^{\infty} z_s \psi_s^{(0)} + \frac{3}{2} \beta^{-1} \ln [\beta c / (2\pi)],
 \end{aligned}$$

где  $f$  — свободная энергия системы, отнесенная к одной частице.

Принципиально важно из возможных решений системы нелинейных уравнений (6) отобрать то, которое соответствует физическому содержанию задачи. С этой целью, применяя итерационный метод решения, целесообразно в качестве пробных значений искомых величин принимать их низкотемпературные значения, поиск которых подробно обсуждался в [6].

В заключение определим в обсуждаемом приближении среднеквадратичное отклонение частицы из узла кристаллической решетки

$$\langle \vec{q}_i^2 \rangle = \sigma \hat{E}, \quad \sigma = k_B T/c$$

и величину, характеризующую корреляцию между положениями частиц в двух различных ячейках,

$$\langle \vec{q}_i, \vec{q}_j \rangle = \hat{a} \langle \vec{q}_i, \vec{q}_i \rangle = \sigma \hat{a}.$$

Эти соотношения имеют такой же вид, как и в гармоническом приближении, но величины  $\sigma$  и  $a$  включают ангармонические поправки.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. — М., 1979. — 280 с.
2. К статистической теории фазовых переходов кристалл—жидкость, жидкость—газ / Г.С. Бокун, В.С. Вихренко, И.И. Наркевич, Л.А. Ротт // Докл. АН СССР. — 1973. — Т. 212, № 6. — С. 1328—1331.
3. Брук-Левинсон Э.Т. Межчастичные корреляции в кристалле // Докл. АН БССР, — 1977. — Т. 21, № 6. — С. 511—514.
4. Брук-Левинсон Э.Т., Белов В.В. Статистическая теория структурных и термодинамических свойств молекулярных кристаллов // ИФЖ. — 1981. — Т. 40, № 1. — С. 126—133.
5. Белов В.В. Асимптотический метод вычисления потенциалов средних сил // Теорет. и прикл. механика. — Мн., 1982. — Вып. 9. — С. 112—119.
6. Вихренко В.С., Комаров Г.В. Определение потенциалов средних сил в методе условных распределений на основе кумулянтных разложений интегральных уравнений // Теор. и прикл. механика. — Мн., 1988. — Вып. 15. — С. 9.
7. V i k h r e n k o V.S., B o k u n G.S., K u l a k M.I. Truncation Procedure for High Order Reduced Distribution Functions // Physica. — 1980. — V. 100A, No. 3/4. — P. 397—416.

УДК 622.276.031

## 2. МЕХАНИКА ЖИДКОСТИ, ГАЗА И НЕНЬЮТОНОВСКИХ СИСТЕМ

Р.В. ШАЙМУРАТОВ

### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОВЛИЯНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ПЛАСТОВЫХ ДАВЛЕНИЙ И ВОДОНАСЫЩЕННОСТЕЙ

В связи с необходимостью аналитического исследования процесса взаимовлияния пластового давления  $p(x, t)$  и поля водонасыщенностей  $s(x, t)$  рассмотрим следующую задачу вытеснения нефти водой без учета капиллярных сил.

Пусть полосообразная нефтяная залежь шириной  $L$ , мощностью  $h$ , пористостью  $m$ , проницаемостью  $k$  разрабатывается тремя галереями: нефтяные размещены по краям вертикально расположенной полосы, нагнетательная отстоит от левого края на расстоянии  $L/2$ . На крайних галереях поддерживаются равные пластовые давления  $p_1 = p_2 = p_0 = \text{const}$ , на нагнетательной задается постоянный расход  $Q$  на единицу длины пласта.

Ось  $Oy$  направляем вдоль нагнетательной галереи, ось  $Ox$  — перпендикулярно к ней так, что в силу симметрии можно рассматривать вытеснение нефти во-