Л е в и н М.А. По поводу статьи Ю.А. Гурвича "Экспериментальное определение частотных характеристик стабилизирующего момента при боковом перемещении деформируемого колеса." Теоретическая и прикладная механика.Минск, 1978, вып. 5. — В сб.: Теоретическая и прикладная механика. Минск: Вышэйшая школа, 1980, вып. 7, с. 133—137. 31. Л е в и н М.А. К определению реакций опорной поверхности простейшего катящегося деформируемого колеса. — В сб.: Теоретическая и прикладная механика. Минск: Вышэйшая школа, 1981, вып. 8, с. 31—38. 32. Л е в и н М.А. Экспериментальное определение частотных характеристик продольной реакции катящегося деформируемого колеса. — В сб.: Теоретическая и прикладная механика. Минск: Вышэйшая школа, 1981, вып. 8, с. 38—47. 33. Л е в и н М.А. Представление анизотропного тела в виде регулярной стержневой модели. — ДАН БССР, 8, 1964, № 12, с. 772--775. 34. Л е в и н М.А. Некоторые задачи о регулярных стержневых системах. — Изв. вузов. Строительство и архитектура. 1965, № 9, с. 41—48. 35. Л е в и н М.А. Построение дискретной модели анизотропного тела в виде регулярной стержневой системы. — В кн.: Применение электронных вычислительных машин в строительной механике. Киев: Наукова думка, 1968, с. 74—79. 36. Л е в и н М.А. Связь между дискретными стержневыми и континуальными системами строительной механики и применение ее к расчету. Автореф. дис. канд. техн. наук. — Минск, 1965. — 23 с. 37. Л е в и н М.А. Напряжения и деформации в растущих телах. — ДАН БССР, 11, 1967, № 3, с. 222—225. 38. Л е в и н М.А. К вопросу определения растущего тела. — В сб.: Материалы секции теоретической и прикладной механики: 25-ая конференция БПИ. Минск, 1969, с. 34—39. 39. Л е в и н М.А. Напряжения в цилиндрической отливке после ее затвердевания. — X научное совещание по тепловым напряжениям в элементах конструкций: Тез. докл. Киев: Наукова думка, 1969, с. 33. 40 Л е в и н М.А. Определение напряжений в затвердевающей отливке. — Прикладная механика, 1969, вып. 9, с. 76—82. 41. Семинар по качению эластичного колеса.— Автомобильная промышленность, 1976, № 9, с. 43—44. 42. О качении эластичного колеса (по материалам семинара МАДИ). — Автомобильная промышленность, 1978, № 4, с. 45—47.

*УДК 531.391+531.19*

**В.С. Вихренко**, канд.физ.-мат.наук, доцент,
**М.И. Кулак**, ассистент
(БТИ)

## К ИССЛЕДОВАНИЮ ДИНАМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМЫ МНОГИХ ЧАСТИЦ

Исследование динамического поведения системы многих частиц является одной из актуальных задач статистической механики. В частности, представляет интерес исследование поведения системы, состоящей из взаимодействующих частиц, равновесные положения которых соответствуют узлам какой-либо кристаллической решетки. Рассмотрим систему N точечных частиц, образующих в равновесии гранецентрированную кубическую решетку. В начальный момент времени одной из частиц сообщается некоторый начальный импульс $p_{10}$ или начальное отклонение $q_{10}$ из узла решетки и задача состоит в изучении поведения системы в последующие моменты времени.

Гранецентрированная кубическая решетка обладает высокой степенью симметрии, однако вследствие начальных условий появляется выделенное направление ($q_{10}$ или $p_{10}$), что существенно понижает симметрию задачи в целом. Это ведет к тому, что при прямом исследовании, например методом молекулярной динамики, не удается в полной мере использовать свойства симметрии кристаллической решетки. Вместе с тем тензор второго ранга $\langle p_0 p(t) \rangle$, где угловые скобки представляют равновесное усреднение, является тензором, симметрия которого соответствует рассматриваемой решетке. Поэтому при исследовании его временного поведения свойства симметрии используются в максимальной мере, что позволяет более чем на порядок сократить число решаемых дифференциальных уравнений движения. Для кубических решеток указанный тензор является шаровым в начальный момент и сохраняет это свойство во все последующие моменты времени.

Уравнения, описывающие эволюцию тензоров вида $\langle p_0 p(t) \rangle$, формируются на основании уравнения Лиувилля методами статистической механики. Так, в рамках условных распределений [1] в [2, 3] была получена замкнутая система уравнений относительно частичных функций динамических переменных $\beta_1(k, t) \equiv \beta_1(q_k, p_k, t)$, $\beta_2(k, j; t)$ описывающая динамическое поведение системы в терминах временных корреляционных функций $\langle p_0 p(t) \rangle$, $\langle p_0 q(t) \rangle$, $\langle q_0 p(t) \rangle$ и т.д.

Разложим импульсную часть функций $\beta_1(k; t)$ и $\beta_2(k, j, t)$ в ряд по тензорным полиномам Эрмита, используя максвелловское распределение по импульсам, как производящую функцию

$$\begin{cases} \beta_1(q_k, p_k; t) = [\alpha(q_k; t) + p_k \cdot \beta(q_k; t) + \ldots]\, A^{-1} \exp(-p_k^2/2\theta); \\ \beta_2(k, j; t) = [\gamma(q_k, q_j; t) + \ldots]\, A^{-2} \exp[-(p_k^2 + p_j^2)/2\theta], \end{cases} \qquad (1)$$

где A — нормировочная постоянная максвелловского распределения; $\theta$ — безразмерная температура.

Уравнения для коэффициентов разложения имеют вид

$$\begin{cases} \dot{\alpha}(k; t) = -\sqrt{\theta}\, \dfrac{\partial}{\partial q_k}\, \beta(k; t); \\ \dot{\beta}(k; t) = -\sqrt{\theta}\, F_{11}(q_k) \dfrac{\partial}{\partial q_k} \left[ \dfrac{\alpha(k; t)}{F_{11}(q_k)} \right] + \dfrac{1}{\sqrt{\theta}} \sum\limits_{j \neq k}^{N} \int\limits_{v_j} G_{kj} \times \\ \times [\alpha(j; t) F_{11}^{(1)}(k/j) + \gamma(k, j; t)]\, dq_j; \\ \dot{\gamma}(k, j; t) = -\dfrac{1}{\sqrt{\theta}} [\Delta G_{kj}\, \beta(k; t) F_{11}^{(1)}(j/k) + \\ + \Delta G_{jk} \cdot \beta(j; t) F_{11}^{(1)}(k/j)]. \end{cases} \qquad (2)$$

Здесь $G_{kj} = -\dfrac{\partial \Phi(|q_k - q_j|)}{\partial q_k}$ — точечная сила, действующая со стороны частицы j на частицу k; $\Delta G_{kj} = G_{kj} - F_{kj}$; $F_{kj}(q_k) = \int\limits_{v_j} G_{kj} F_{11}^{(1)}(j/k)\, dq_j$ — средняя сила, действующая на k-ю частицу со стороны j-й; $F_{11}(q_k)$ — одночастичная равновесная функция условных распределений [1]; $F_{11}^{(1)}(j/k)$ — дважды условная равновесная функция условных распределений; $v=V/N$ — молекулярный объем; $V$ и $N$ — объем и число частиц системы.

Дифференцируя уравнение для $\dot{\beta}$ по времени и используя уравнения для $\dot{\alpha}$ и $\dot{\gamma}$, получим

$$\begin{aligned}
\ddot{\beta}(k;t) = {} & \theta\, F_{11}(q_k) \frac{\partial}{\partial q_k} \left[ \frac{1}{F_{11}(q_k)} \frac{\partial}{\partial q_k} \cdot \beta(k;t) - \right. \\
& - \sum_{j\neq k}^{N} \int_{v_j} G_{kj} \left( \frac{\partial}{\partial q_j} \cdot \beta(j;t) \right) F_{11}^{(1)}(k/j)\, dq_j - \\
& - \frac{1}{\theta} \sum_{j\neq k}^{N} \langle G_{kj} \Delta G_{kj} \rangle_k \cdot \beta(k;\ t) - \\
& - \frac{1}{\theta} \sum_{j\neq k}^{N} \int_{v_j} G_{kj} \Delta G_{jk} \cdot \beta(j;t) F_{11}^{(1)}(k/j)\, dq_j .
\end{aligned} \tag{3}$$

Тензор второго ранга

$$\langle G_{kj} \Delta G_{kj} \rangle_k = \int_{v_j} G_{kj}\ \Delta G_{kj} F_{11}^{(1)}(q_j/q_k)\, dq_j .$$

Поскольку в равновесном состоянии распределение частиц около узлов кристаллической решетки близко к гауссовой форме, то и конфигурационную часть $\beta(k;t)$ можно разложить в ряд по ортогональным полиномам, используя в качестве производящей функции $F_{11}(q_k)$

$$\beta(q_k;t) = [\beta_k(t) + \ldots] F_{11}(q_k) . \tag{4}$$

Подставив (4) в (3) и проинтегрировав по $q_k$, находим

$$\ddot{\beta}_k + \omega^2 \beta_k = \sum_{j\neq k}^{N} C_{jk} \cdot \beta_j ; \tag{5}$$

$$\omega^2 = \frac{1}{3\theta} \sum_{j\neq k}^{N} [\ \langle \Delta G_{kj} \Delta G_{kj} \rangle + \langle F_k F_{kj} \rangle\ ] = \frac{1}{3\theta} \sum_{j\neq k}^{N} C_{kj} ;$$

$$C_{kj} = \frac{1}{\theta} [\ \langle \Delta G_{kj} \Delta G_{kj} \rangle + \langle F_k F_{kj} \rangle\ ] .$$

Здесь $F_k(q_k) = \sum_{j\neq k}^{N} F_{kj}(q_k)$ — средняя сила, действующая на частицу k со стороны ее равновесного окружения.

Далее используем тензорные представления

$$\beta_k(t) = \beta_k^e(t)\,E + \beta_k^d(t)\,D_{0k}; \tag{6}$$

$$\begin{cases} C_{jk} = C_{jk}^e E + C_{jk}^d D_{kj}; \\ D_{kj} = n_{kj} n_{kj} - \dfrac{1}{3} E, \end{cases} \tag{7}$$

где $n_{kj}$ — единичный вектор вдоль направления, соединяющего центры k-й и j-й ячеек; E — единичный тензор.

Тогда (5) приобретет вид

$$\begin{gathered} (\ddot{\beta}_k^e + \omega^2 \beta_k^e)\,E + (\ddot{\beta}_k^d + \omega^2 \beta_k^d)\,D_{0k} = (\sum_{j\neq k}^{N} C_{jk}^e \beta_j^e)\,E + \\ + \sum_{j\neq k}^{N} C_{jk}^d \beta_j^e D_{kj} + \sum_{j\neq k}^{N} (C_{jk}^e E + C_{jk}^d D_{kj})\cdot D_{oj}\beta_j^d . \end{gathered} \tag{8}$$

Ввиду высокой симметрии гранецентрированной кубической решетки можно полагать, что имеется ось симметрии, совпадающая по направлению с $n_{ok}$. Поэтому второе слагаемое в правой части (8) должно быть представлено в форме бесшпурового тензора $D_{0k}$

$$\sum_{j\neq k}^{N} C_{jk}^d \beta_j^e D_{kj} = C_k^d D_{0k}. \tag{9}$$

Для определения $C_k^d$ умножаем (9) на $D_{0k}$ и производим двойную свертку

$$C_k^d = \frac{1}{2} \sum_{j\neq k}^{N} C_{jk}^d \,[3\,(n_{kj}\cdot n_{ok})^2 - 1]\,\beta_j^e . \tag{10}$$

Последнее слагаемое в (8) представимо в виде

$$\sum_{j\neq k}^{N} (C_{jk}^e E + C_{jk}^d D_{kj})\cdot D_{oj}\,\beta_j^d = C_k^{de} E + (C_k^{dd} + C_k^{ed})\,D_{0k}. \tag{11}$$

Умножая (11) на E и $D_{0k}$ и произведя двойную свертку, получим, аналогично (9), (10), выражения для $C_k^{de}$, $C_k^{dd}$, $C_k^{ed}$.

$$\begin{cases} C_k^{de} = \dfrac{1}{9} \sum\limits_{j\neq k}^{N} [3\,(n_{kj}\cdot n_{oj})^2 - 1]\; C_{jk}^d \beta_j^d ; \\ C_k^{dd} = \dfrac{1}{6} \sum\limits_{j\neq k}^{N} [9\,(n_{ok}\cdot n_{kj})\,(n_{oj}\cdot n_{kj})\,(n_{oj}\cdot n_{ok}) - 3\,\{(n_{oj}\cdot n_{ok})^2 + \end{cases} \tag{12}$$

$$
\left\{
\begin{aligned}
&+(n_{oj}\cdot n_{kj})^2 + (n_{ok}\cdot n_{kj})^2\} + 2]\, C^d_{jk}\,\beta^d_j\,; \\
&C^{ed}_k = \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}^{N} [3\,(n_{oj}\cdot n_{ok})^2 - 1]\; C^e_{jk}\beta^e_j\,.
\end{aligned}
\right. \tag{12}
$$

Рассмотрим далее систему с взаимодействием ближайших соседей. В этом случае

$$
C^e_{jk} = C^e;\; C^d_{jk} = C^d \tag{13}
$$

не зависят от индексов суммирования. Суммирование в гранецентрированном кристалле будет производиться по 12 ближайшим соседям. Уравнение (8) для каждой частицы распадается на систему двух уравнений

$$
\left\{
\begin{aligned}
&\ddot\beta^e_k + \omega^2\beta^e_k = C^e\sum_{j\neq k}^{12}\beta^e_j + C^{de}_k\,; \\
&\ddot\beta^d_k + \omega^2\beta^d_k = C^d_k + C^{dd}_k + C^{ed}_k\,; \quad \omega^2 = 12C^e\,;
\end{aligned}
\right. \tag{14}
$$

$$
C^{de}_k = \frac{1}{9}\,C^d\sum_{j\neq k}^{12} [3\,(n_{kj}\cdot n_{oj})^2 - 1]\,\beta^d_j\,;
$$

$$
C^d_k = \frac{C^d}{2}\sum_{j\neq k}^{12} [3\,(n_{kj}\cdot n_{ok})^2 - 1]\;\beta^e_j\,;
$$

$$
C^{dd}_k = \frac{C^d}{6}\sum_{j\neq k}^{12} \{9\,(n_{oj}\cdot n_{kj})\,(n_{ok}\cdot n_{kj})\,(n_{oj}\cdot n_{ok}) - 3[\,(n_{oj}\cdot n_{ok})^2 +
$$

$$
+\;(n_{oj}\cdot n_{kj})^2 + (n_{ok}\cdot n_{kj})^2] + 2\}\,\beta^d_j\,;
$$

$$
C^{ed}_k = \frac{C^e}{2}\sum_{j\neq k}^{12} [3\,(n_{oj}\cdot n_{ok})^2 - 1]\;\beta^d_j\,.
$$

Для центральной ячейки $\beta^d_o = 0,\ \beta^e_o = \beta_o$:

$$
\ddot\beta_o + \omega^2\,\beta_o = \omega^2\beta^e_1 + \frac{8}{3}\,C^d\beta^d_1\,, \tag{15}
$$

где $C^d = \dfrac{3}{2\theta}\,\langle(\Delta G_{kj}\cdot n_{kj})\,(\Delta G_{kj}\cdot n_{kj}) + (F_{kj}\cdot n_{kj})\,(F_k\cdot n_{kj})\rangle - \dfrac{3}{2}\,C^e.$ (16)

Приведем некоторые сведения из геометрии гранецентрированной решетки. Введем r такое, чтобы расстояние между ближайшими соседями составляло величину $r\sqrt{2}$. Тогда радиус-вектор произвольного узла по отношению к центральному запишется в виде

$$r_{ok} = r(m_1 i_1 + m_2 i_2 + m_3 i_3), \tag{17}$$

где $i_1$, $i_2$, $i_3$ — направляющие орты, а целые числа $m_1$, $m_2$ и $m_3$ удовлетворяют соотношениям

$$m_1 + m_2 + m_3 = 2m. \tag{18}$$

Расстояние от выбранной частицы до произвольной определится как

$$|r_{ok}| = r\sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2} = r\sqrt{2z}. \tag{19}$$

Сумма трех квадратов $m_1^2 + m_2^2 + m_3^2$ при наложении условия (18) дает четные числа натурального ряда, т.е.

$$m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 = 2z, \tag{20}$$

где z определяет номер соседа по отношению к центральному узлу.

Расстояние между ближайшими соседями

$$r_{kj} = q_j - q_k = r(\Delta m_1 i_1 + \Delta m_2 i_2 + \Delta m_3 i_3); \tag{21}$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1; \quad (l = 1,2,3); \quad \sum_{l=1}^{3} \Delta m_l = 0, \pm 2; \quad \sum_{l=1}^{3} \Delta m_l^2 = 2.$$

Различные комбинации $\Delta m_l$ определяют 12 ближайших соседей и позволяют произвести суммирование в (14).

Определим косинусы углов. Учитывая, что

$$q_k = r(m_1 i_1 + m_2 i_2 + m_3 i_3); \tag{22}$$

$$q_j = r[(m_1 + \Delta m_1^j) i_1 + (m_2 + \Delta m_2^j) i_2 + (m_3 + \Delta m_3^j) i_3];$$

$$z_j = z_k + 1 + m_1 \Delta m_1^j + m_2 \Delta m_2^j + m_3 \Delta m_3^j, \tag{23}$$

находим

$$n_{ok} \cdot n_{oj} = \frac{q_k \cdot q_j}{|q_k||q_j|} = \frac{z_k + z_j - 1}{2\sqrt{z_k z_j}}; \quad n_{ok} \cdot n_{kj} = \frac{z_j - z_k - 1}{2\sqrt{z_k}};$$

$$n_{oj} \cdot n_{kj} = \frac{z_j - z_k + 1}{2\sqrt{z_j}}. \tag{24}$$

Решение системы уравнений (14), (15) возможно численными методами. Для этих целей была использована явная трехслойная схема Верле [4], имеющая следующий вид:

$$\beta^{n+1} = 2\beta^n - \beta^{n-1} + \ddot{\beta}^n h_t^2 + \beta^{(IV)n} \frac{h_t^4}{12} . \qquad (25)$$

Сеточная функция $\beta^n \in \Omega_t = \{ t_n = h_t n,\ n = 0,1,... \}$ аппроксимирует функции $\beta_k^e$ и $\beta_k^d$. Производные $\ddot{\beta}^n$ и $\beta^{(IV)n}$ на n-м временном слое вычислялись по (14), (15).

В расчетах было принято максимальное значение z = 200, что с учетом симметрии гранецентрированной решетки соответствует системе, состоящей из 16756 частиц. При решении задачи методами молекулярной динамики с учетом такого количества частиц пришлось бы интегрировать систему порядка десяти тысяч уравнений, тогда как полное использование свойств симметрии позволило ограничиться интегрированием системы всего 907 уравнений. Для ее решения требуется 60 минут работы ЭВМ средней мощности (ЕС-1022). Полученные в результате решения корреляционные функции импульсов согласуются с данными, полученными методом молекулярной динамики [5].

## Литература

1. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. — М.: Наука, 1979. — 280 с. 2. Вихренко В.С., Кулак М.И. Метод приведенных динамических функций в теории временных корреляционных функций. — ДАН БССР, 1980, т. 24, № 2, с. 129—132. 3. Кулак М.И., Вихренко В.С. Исследование временных корреляционных функций с помощью кинетического уравнения. — Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук, 1980, № 6, с. 90—94. 4. Verlet J. Computer "Experiments" on Classical Fluids. — Phys. Rev., 1968, v. 159, No 1, p. 98—103. 5. Dikey J.M., Paskin A. Computer Simulation of the Lattice Dynamics of Solids. — Phys. Rev., 1969, v. 188, no. 3, p. 1407—1418.

*УДК 536.1*

**В.В. Белов**, канд.физ.-мат.наук
(БТИ)

## АСИМПТОТИЧЕСКИЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ

Описание механических и тепловых свойств кристаллов можно осуществить как в рамках традиционной динамической теории [1], так и на основе интенсивно развиваемых в последнее время статистических теорий [2—6], характерной чертой которых является тот или иной способ обрыва цепочки уравнений для частичных функций распределения. Специфические особенности метода условных распределений [5] позволяют эффективно решать эту задачу на уровне интегральных членов, имеющих смысл потенциалов средних сил (ПСС), что приводит к достаточно полному учету межчастичных корреляций. Последнее составляет существенное отличие развитой в [6] теории от подходов [2—4]. В данной работе рассматривается способ решения нелинейного интегрального уравнения для упомянутых ПСС, основанный на асимптотическом разложении интегралов.