$\beta = 1/k_B T$이며, k_B는 볼츠만 상수입니다. 이 방정식은 $b(r, \sigma_1, \sigma_2)$, 즉 so-called bridge function에 대한 근사식을 추가해야 합니다. 이 함수의 정식 정의는 밀도에 대한 무한 급수이지만, 실용적인 지침을 제공하는 데는 제한이 있습니다. c에 대한 대부분의 근사적 폐합은 b를 암시적으로 정의합니다.

OZ 방정식의 수치적 평가는 푸리에 변환 표현에서 더 간단합니다. 이 표현은 r에 대한 적분을 분해합니다. 따라서 변환 공간에서 식 (3)은 다음과 같이 됩니다:

$$\widetilde{\gamma}(k, \sigma_1, \sigma_2) = \rho \int_0^\infty d\sigma_3 f(\sigma_3) \tilde{c}(k, \sigma_1, \sigma_3) \widetilde{\gamma}(k, \sigma_1, \sigma_3) \tilde{c}(k, \sigma_3, \sigma_2),$$

여기서 하나의 적분만 남아 있습니다. 또한, 2차원에서 원형 대칭 함수의 푸리에 변환은 한켈 변환으로 변환됩니다:

$$\widetilde{w}(k) = 2\pi \int_0^\infty dr\, r w(r) J_0(kr),$$

여기서 $J_0(x)$는 0차 비셀 함수입니다. (6)의 역변환은 다음과 같습니다:

$$w(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk\, k \widetilde{w}(k) J_0(kr).$$

식 (5)의 마지막 적분도 제거될 수 있으며, 모든 σ에 의존하는 함수를 직교 다항식 $p_j(\sigma), j = 0, 1, 2, \ldots$로 전개하여 OZ 방정식의 평가를 대수로 줄일 수 있습니다. 이 다항식은 다음과 같이 정의됩니다:

$$\int_0^\infty d\sigma f(\sigma) p_i(\sigma) p_j(\sigma) = \delta_{ij},$$

여기서 δ_{ij}는 크로네커 델타입니다. 그리고

$$\widetilde{\gamma}_i(k, \sigma_1, \sigma_2) = \sum_{j=0}^\infty \widetilde{\gamma}_{ij}(k, p_i(\sigma_1) p_j(\sigma_2))$$

와 유사한 $\tilde{c}(k, \sigma_1, \sigma_2)$의 전개를 통해 식 (5)는 다음과 같이 됩니다:

$$\widetilde{\gamma}_{ij}(k) = \rho \sum_l [\tilde{c}_{il}(k) + \widetilde{\gamma}_{il}(k)] \tilde{c}_{lj}(k),$$

또는 행렬 표기로:

$$\Gamma(k) = \rho[\widetilde{C}(k) + \Gamma(k)]\widetilde{C}(k) = \rho \widetilde{C}(k) \widetilde{C}(k) [I - \rho \widetilde{C}(k)]^{-1}.$$

이 방정식들에서 $\Gamma(k), \widetilde{C}(k)$는 요소 $\widetilde{\gamma}*{ij}(k), \widetilde{c}*{ij}(k)
를가지는대칭행렬이며,I
는단위행렬입니다. 직교성은식(9)의역산을쉽게수행할수있게합니다 :
$\widetilde{\gamma}_{ij}(k) = \int d\sigma_1 d\sigma_2 f(\sigma_1) f(\sigma_2) \widetilde{\gamma}(k, \sigma_1, \sigma_2) p_i(\sigma_1) p_j(\sigma_2)$.r$ 공간의 함수에 대한 유사한 전개와 역산도 가능합니다.

J_0 변환 (6)과 (7)을 해당 사인 변환으로 대체하면, 이 요소들은 2차원 다이스퍼즈된 유체와 3차원 다이스퍼즈된 유체[16]의 요소와 동일해지며, 동일한 수치적 절차로 해결할 수 있습니다. 새로운 특징인 한켈 변환은 직교성을 유지하는 알고리즘[17]을 사용하여 계산됩니다.

일반화된 쌍 분포 함수

[
g(r, \sigma_1, \sigma_2) = \exp[-\beta \phi(r, \sigma_1, \sigma_2)

- \gamma(r, \sigma_1, \sigma_2) + b(r, \sigma_1, \sigma_2)] \] 은 (OZ+폐합) 방정식의 자가일관적 해로부터 계수 $\gamma_{ij}(r)$를 구하여 구성됩니다. 이로부터 직접 계산 가능한 열역학적 양은 내부 에너지 U, \[\frac{\beta U}{N} = \frac{1}{2\rho} \int dr d\sigma d\sigma' f(\sigma)f(\sigma') \times g(r, \sigma, \sigma')\beta \phi(r, \sigma, \sigma'), \] 와 압력 p, \[\frac{\beta p}{\rho} = 1 - \frac{1}{4\rho} \int dr d\sigma d\sigma' f(\sigma)f(\sigma') \times g(r, \sigma, \sigma') r \frac{d\beta \phi(r, \sigma, \sigma')}{dr} \] 입니다. 또한, 등온 압축률 K_T, \[\frac{1}{\rho k_B T K_T} = \rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T = 1 - \rho \int dr d\sigma d\sigma' f(\sigma)f(\sigma')c(r, \sigma, \sigma') = 1 - \rho \widetilde{c}_{00}(0), \] 은 직접 상관 함수로부터 계산됩니다.

관심 있는 쌍 함수는 계산된 계수로 직접 표현될 수 있습니다. 특히, 수-수 쌍 분포 함수와 수-수 구조 함수[18]는 각각 다음과 같습니다:

$$g_{NN}(r) = \int d\sigma_1 d\sigma_2 f(\sigma_1) f(\sigma_2) g(r, \sigma_1, \sigma_2) = g_{00}(r),$$

[
S_{NN}(k) = \int d\sigma_1 d\sigma_2 [L(f(\sigma_1)\delta(\sigma_1 - \sigma_2)

- \rho f(\sigma_1)f(\sigma_2)\widetilde{h}(k, \sigma_1, \sigma_2)] = 1 + \rho \widetilde{h}_{00}(k). \] 또한, $g(r, \sigma_1, \sigma_2)$의 낮은 차수 계수는 물리적 해석이 가능합니다. 따라서, 밀도와 크기의 국소 변동은 정규화된 형태로 다음과 같이 표현됩니다: \[\delta \rho(r) = \frac{1}{\rho} \left| \sum_{j=1}^N \delta(r - r_j) - \rho \right|, \] \[\delta p_1(r) = \frac{1}{\sigma_{p_1} s} \left| \sum_{j=1}^N \sigma_j \delta(r - r_j) - \overline{\sigma} \rho \right|. \] 그들의 공간 상관은 다음과 같습니다: