

## Реферат по теме лекции номер 9 «Коррекционно- прогностический метод Реатто»

Для начала было бы хорошо напомнить о пользе прямой корреляционной функции  $c(r)$ , которая позволит определить парный потенциал межмолекулярного взаимодействия.

Прямая корреляционная функция была введена в рассмотрение Орнштайном и Цернике (1914 год). Они предложили интегральное уравнение, связывающее ее с полной корреляционной функцией  $h(r)$ , которая, в свою очередь, связана с радиальной функцией распределения  $g(r)$ :  $h(r) = g(r) - 1$ . Функции  $h(r)$  и  $c(r)$  могут быть получены из экспериментов. Также при низких плотностях уравнение О – Ц сводится к виду:  $h(12) \cong c(12)$  и  $g(12) \cong 1 + c(12)$ . Более того, при низких плотностях  $c(r)$  сводится к функции Майера, что, безусловно, упрощает рассмотрение.

Теперь непосредственно о коррекционно- прогностическом методе. В рассмотрение берется однокомпонентный флюид сферических частиц, их взаимодействие описывается парным потенциалом. Цель задачи состоит в определении парного потенциала взаимодействия с опорой на известную радиальную функцию распределения.

Левек и Реатто используют уравнение сверхпереплетающихся цепочек, связывающее потенциал  $v(r)$  с  $g(r)$ :

$$c(r) = -\beta v(r) + g(r) - 1 - \ln(g(r)), (1)$$

где  $\beta = (kT)^{-1}$  и  $c(r)$  – прямая корреляционная функция.

Однако, стоит отметить, что, если последовательность  $g_i(r)$  сходится к  $g(r)$ , не означает, что  $v_i(r)$  сходится к  $v(r)$ . Эти значения могут сильно отличаться. Левек и Реатто продемонстрировали этот момент. Тогда ими было взято более точное термодинамическое соотношение: усовершенствованное уравнение сверхпереплетающихся цепочек, считающееся формально точным:

$$g(r) = \exp[-\beta v(r) + g(r) - 1 - c(r) + E(r/v)] \quad (2)$$

где  $E(r/v)$  – бридж-функция.

Бридж – функцию можно заменить на функцию  $E_{HS}(r/v)$ , которая соответствует модели твердых сфер, так как  $E(r/v)$  зависит в меньшей степени от формы  $v(r)$  чем  $g(r)$  от истинной  $v(r)$ . Также функция  $E_{HS}$  определяется фактором упаковки  $\eta = \frac{4}{3}\pi \frac{d^3 N}{8V}$  ( $d$  – диаметр сферы).

Учитывая все сказанное выше уравнение (2) перепишем в новом виде:

$$\beta v_{\text{мсц}}(r) = g(r) - 1 - c(r) - \ln[g(r)] + E_{HS}(r, \eta) \quad (3)$$

Полученную  $v_0(r) = v_{\text{мсц}}(r)$  будем считать «затравочной» функцией. С помощью методов Монте-Карло, МД найдем  $g_0(r)$  и  $c_0(r)$ . Далее для системы с потенциалом  $v_0(r)$  соберем бридж-функцию и подставим в (3).

В итоге итерации будут осуществляться по следующей рекуррентной формуле:

$$\beta v_i(r) = \beta v_{i-1}(r) + g(r) - g_{i-1}(r) - \ln[g(r)/g_{i-1}(r)] - [c(r) - c_{i-1}(r)] \quad (4)$$

Итерационный процесс прекращаются, когда значения  $[g_i(r) - g(r)]$  и  $[c_i(r) - c(r)]$  будут на уровне компьютерного шума.

Тестирование итерационной схемы Левек и Реатто проводят, используя в качестве модели потенциал Леннарда – Джонса. Симуляционными методами определяют точную  $g(r)$ , и сравнивают результаты итерационной схемы с итерационной схемой Шоммерса ( $\beta v_i(r) = \beta v_{i-1}(r) - \ln(g(r)/g_{i-1}(r))$ ).

Сравнивая результаты, можно явно увидеть, что парный потенциал полученный по схеме Реатто – Левека уже на нулевой итерации дает более согласующиеся результаты с парным потенциалом Леннарда – Джонса, чем по схеме Шоммерса на более высоких итерациях (Fig. 6). Данные результаты получены для состояния вблизи тройной точки.

Также, нужно отметить тот факт, что даже для случая рассмотрения парного потенциала вблизи тройной точки, на 8 – 12 итерации хорошо воспроизводится исходный потенциал (Fig. 4). Для состояния, когда меньшая

плотность и высокие температуры, достаточно нескольких итераций для получения обоснованно точных результатов (Fig. 4).

Также Левек и Реатто тестируют свою итерационную схему для точных данных  $g(r)$  натрия при температуре  $100^{\circ}\text{C}$ . При сравнении явно виднеется довольно правдоподобная форма потенциала (Fig. 8).