

7. Saeed K., Dardzińska A., "Natural Language Processing: Word Recognition without Segmentation," *Journal of the American Society for Information Science and Technology*, 52, pp.1273-1279, John Wiley and Sons 2001.

8. Saeed K., Dardzińska A., "Cursive Letters Language Processing: Muqla Model and Toeplitz Matrices Approach," *FQAS'2000 4<sup>th</sup> Int. Conference on Flexible Query Answering Systems*, pp. 326-333, Oct. 25 – 27, Warsaw 2000. (Printed as: *Flexible Query Answering Systems; Recent Advances*, Springer-Verlag, 2000).

9. Saeed K., Dardzińska A., "Cursive-Script Recognition using Muqla Word-Processing Model as a Tool for Segmentation," *WSES-CSCC'01 – World Scientific and Engineering Society Multi-Conf. on Circuits, Systems, Communications and Computers*, pp.373-377, July 8-15, Crete, Greece 2001.

10. Dehgham M., Faez K., "Handwritten Farsi Character Recognition Using Evolutionary Fuzzy Clustering," *Proceedings of Eusipco'98, 9<sup>th</sup> European Signal Processing Conference*, Sep. 8-11, pp. 423-426, Rhodes, Greece 1998.

УДК 531.19

Г.С. Бокун, доцент

### НЕОДНОРОДНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ В РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЕ НА ОСНОВЕ ДИАГРАММНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ

A non-uniform lattice system subjected to a first order liquid – gas phase transition is treated in the canonical ensemble. The selfconsistent diagram approximation suggested earlier for the description of uniform states is generalized to the systems under consideration. The equations describing the density profile in the interface region are formulated.

Системы с неоднородным распределением плотности широко распространены в природе, находят многочисленные приложения в технических устройствах и технологических процессах. К таким системам, в частности, относятся многофазные жидкости, полимерные материалы. Их исследованию посвящены многочисленные работы [1 – 8]. Многие вопросы, связанные с распределением плотности в межфазных переходных слоях и кинетикой процессов перераспределения плотности в системах ограниченных размеров, остаются неизученными. Поэтому полезно рассмотреть упрощенную модель решеточного газа, которая допускает более строгое и полное рассмотрение по сравнению со сложными континуальными моделями жидкостей. В настоящей работе ограничимся разработкой формализма, пригодного для исследования равновесного распределения плотности в переходном слое типа жидкость – газ, обобщая развитую ранее для однородных систем самосогласованную диаграммную аппроксимацию.

В неоднородном состоянии плотность числа частиц  $\rho_{1i}$  на  $i$ -м узле зависит от его положения на решетке и определяется усреднением оператора решеточной плотности  $\hat{\alpha}_i$  ( $\alpha_i = 1$  либо  $0$ , когда узел занят частицей либо вакантен, соответственно):

$$\rho_{1i} = \text{Sp}(\hat{\alpha}_i D_N). \quad (1)$$

Здесь операция  $\text{Sp}$  означает суммирование по всем возможным значениям чисел заполнения при дополнительном условии сохранения заданного числа частиц в отдельных областях, на которые разбивается все пространство системы из  $N$  узлов. Это позволяет отбирать состояния, обеспечивающие любое наперед заданное распределение средней плотности по пространству при выполнении условий нормировки

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i = n, \quad \sum_{i=1}^N \rho_{1i} = n, \quad (2)$$

где  $n$  – общее число частиц в системе.

При таком подходе функция распределения в (1) определяется каноническим распределением

$$D_N = \frac{1}{Q_N} \exp(-\beta H_N), \quad (3)$$

где  $\beta = 1/kT$  ( $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура),  $H_N$  – энергия взаимодействия  $n$  частиц, распределенных на  $N$  узлах,  $Q_N$  – конфигурационная сумма,

$$Q_N = \text{Sp}[\exp(-\beta H_N)], \quad (4)$$

являющаяся функционалом выбранного поля плотности  $\rho_i$ . Последнее, в свою очередь, определяется из условия экстремальности данного функционала.

Для вычисления (4) используем, по аналогии с работой [1], базисное распределение, отвечающее выбранному распределению средней плотности по объему системы. Энергия базисной системы представляется одночастичными потенциалами  $\varphi_{ij}(n_i)$ , зависящими теперь от плотностей  $\rho_i$  и  $\rho_j$  на узлах  $i$  и  $j$ :

$$H_N^0 = \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \varphi_{ij}(\alpha_i). \quad (5)$$

В силу одночастичного характера энергии базисной системы ее статистическая сумма  $Q_N^0$  факторизуется и принимает вид

$$Q_N^{(0)} = \text{Sp}[\exp(-\beta H_N^0)] = \prod_{i=1}^N \prod_{\alpha=0}^1 \left( \frac{Q_{\alpha i}}{\rho_{\alpha i}} \right)^{\rho_{\alpha i}}, \quad (6)$$

где  $\rho_{0i} = 1 - \rho_{1i}$ ,

$$Q_{\alpha i} = \exp \left[ -\beta \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq 1}^N \varphi_{ij}(\alpha) \right) \right]. \quad (7)$$

На основе базисного распределения с энергией (5) представим свободную энергию системы, аналогично работам [9 – 11], в форме

$$F = -k_B T \sum_{i=1}^N \left( \sum_{\alpha=0}^1 \rho_{i\alpha} \ln \frac{Q_{\alpha i}}{\rho_{\alpha i}} \right) - \frac{k_B T}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq 1}^N \sum_{\alpha, \beta} \rho_{i\alpha} \rho_{j\beta} f_{ij}^{\alpha\beta} - \dots, \quad (8)$$

где перенормированные функции Майера

$$f_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{W_{ij}^{\alpha\beta}}{x_{ij}^{(\alpha)} x_{ji}^{(\beta)}} - 1, \quad (9)$$

$$x_{ij}^{(\alpha)} = \exp \{ -\beta \varphi_{ij}(\alpha) \}, \quad W_{ij}^{\alpha\beta} = \exp \{ -\beta \Phi_{ij}(\alpha, \beta) \}, \quad (10)$$

$\Phi_{ij}(\alpha, \beta) = \Phi_{ij} \alpha_i \beta_j$  – потенциал взаимодействия частиц, расположенных на узлах  $i$  и  $j$ . Здесь и далее греческие индексы  $\alpha, \beta, \gamma$  используются для характеристики состояния узлов. Они принимают значения 0 либо 1, когда соответствующий узел пустой либо занят частицей, соответственно.

Ограничимся учетом диаграмм, соответствующих квазихимическому приближению. Тогда для переменных  $x_{ij}^{(\alpha)}$ , реализуя вариационный принцип их определения [9], получим систему уравнений

$$x_{ij}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=0}^1 \rho_{j\beta} \frac{W_{ij}^{\alpha\beta}}{x_{ji}^{(\beta)}}, \quad (11)$$

$$x_{ji}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=0}^1 \rho_{i\beta} \frac{W_{ji}^{\alpha\beta}}{x_{ij}^{(\beta)}}. \quad (12)$$

Из (11) и (12) следует, что функции  $x_{ij}^{(\alpha)}$  и  $x_{ji}^{(\alpha)}$  зависят от плотностей в узлах  $i$  и  $j$ , т.е. сохраняют локальный характер.

Рассмотрим приложение полученных результатов к описанию переходного слоя, возникающего при фазовом переходе первого рода на прямоугольной квадратной решетке размером  $N_1 \times N_2 = N$ . При этом используем подход, разработанный ранее в рамках метода условных распределений [12], основной особенностью которого является представление конфигурационной суммы неоднородной системы через парциальные составляющие [13].

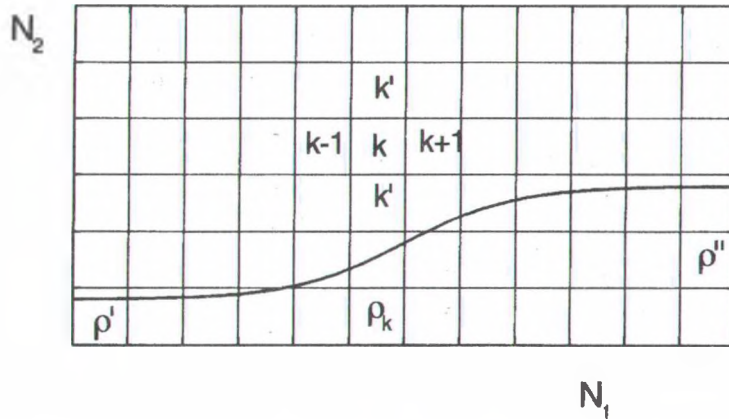


Рис. 1. Расположение слоев и профиль плотности в межфазной области

Разделим решетку на слои (см. рис. 1). В каждом  $k$ -м слое ( $k=1 \dots N_1$ ) число частиц сохраняется равным  $n_k$ ;  $\rho_{1k} = n_k / N_2$  (профиль плотности меняется вдоль горизонтальной оси):

$$\sum_{k=1}^{N_1} n_k = n, \quad N_2 \sum_{k=1}^{N_1} \rho_{1k}. \quad (13)$$

Ограничимся учетом взаимодействия между ближайшими соседями и используем  $k', k$  для обозначения пары узлов, являющихся ближайшими соседями в вертикальном  $k$ -слое.

При рассматриваемом распределении частиц по пространству решетки из (11), (12) следует, что для каждого слоя необходимо ввести три типа функций:

$$x_{kk'}^{\alpha} = \sum_{\beta=0}^1 \rho_{k\beta} \frac{W_{kk'}^{(\alpha, \beta)}}{x_{k'k}}, \quad x_{kk'} = x_{k'k}, \quad (14)$$

$$x_{k, k\pm 1}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=0}^1 \rho_{k\pm 1, \beta} \frac{W_{k, k\pm 1}^{(\alpha, \beta)}}{x_{k\pm 1, k}^{(\beta)}}, \quad x_{k\pm 1, k}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=0}^1 \rho_{k\beta} W_{k\pm 1, k}^{(\alpha, \beta)} / x_{k, k\pm 1}^{(\beta)}. \quad (15)$$

Найденные из (14) и (15) функции  $x$  позволяют представить свободную энергию (8) системы следующим функционалом поля плотности  $\rho_k$ :

$$F = -kTN_2 \sum_{k=1}^{N_1} f_k, \quad (16)$$

$$f_k = \sum_{\alpha} \rho_{k\alpha} \ln(Q_{k\alpha} / \rho_{k\alpha})$$

при

$$Q_{k\alpha} = (x_{kk'}^{(\alpha)})^2 x_{k, k+1}^{(\alpha)} x_{k, k-1}^{(\alpha)}. \quad (17)$$

Здесь  $f_k$  – свободная энергия, отнесенная к одному узлу решетки.

Для нахождения поля плотности используем экстремальность свободной энергии (16) при учете дополнительного требования (13). Для обоснования требования экстремальности представим статистическую сумму рассматриваемой системы в форме

$$Q_N = \sum_{\{n_1, \dots, n_k, \dots\}} \exp \left\{ N_1 \sum_k^{N_2} f_k \right\}, \quad (18)$$

где, согласно (16), (17),  $f_k$  отвечает избранному набору из  $\{n_1, \dots, n_k, \dots\}$ .

Далее обозначим максимальное значение суммы под знаком экспоненты через  $F_{\max}$ . Тогда, оставляя в первом случае в (18) только один максимальный член, а все остальные полагая равными нулю, а во втором заменяя все слагаемые в сумме максимальным членом, получим в термодинамическом пределе неравенства

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \ln \sqrt{N} + \frac{F_{\max}}{\sqrt{N}} \geq \frac{\ln Q_N}{N} \geq \frac{F_{\max}}{\sqrt{N}}, \quad (19)$$

доказывающие возможность определения профиля плотности из условия экстремальности отдельного слагаемого.

При дифференцировании (16) учтем, что в соответствии с (15) величины, входящие в (17), зависят от плотности в избранном  $k$ -слое и плотностей в слоях, граничащих с избранным. В итоге запишем условие экстремальности в форме

$$\frac{\partial}{\partial \rho_{1m}} (f_{m-1} + f_m + f_{m+1}) - \mu = 0, \quad (20)$$

где  $\mu$  – множитель Лагранжа, входящий в (20) из-за условия (13).

Покажем, что  $\mu$  имеет смысл химического потенциала системы. Для этого перейдем к формализму большого канонического ансамбля и рассмотрим вычисление статистической суммы. Опираясь на (18), с учетом (13) запишем

$$Z_N = \sum_{\{n_1 \dots n_k \dots\}} \exp \left\{ \sqrt{N} \left( \beta \sum_k (\mu \rho_{1k} - f_k) \right) \right\}. \quad (21)$$

Дифференцируя (21) по  $\rho_{1m}$ , приходим к условию (20). Взаимная согласованность результатов в обоих ансамблях следует при применении условия (20) к случаю однородной системы, когда  $\rho_{1k} = \rho_1$  при всех значениях  $k$ .

При этих условиях из (15) и (17) вытекает

$$\frac{\partial \ln Q_{k\alpha}}{\partial \rho_{1k}} = \frac{\partial \ln Q_{k\alpha}}{\partial \rho_{1k+1}} = \frac{\partial \ln Q_{k\alpha}}{\partial \rho_{1k-1}} = \frac{1}{3} \frac{\partial \ln Q_k}{\partial \rho_1}. \quad (23)$$

С учетом (23) условие (20) принимает вид

$$\mu = \frac{\partial f_k}{\partial \rho_1}, \quad (24)$$

служащий определением химического потенциала для однородной системы. При температурах, меньших критической, уравнение (24) имеет два решения, определяющие плотности  $\rho'$  и  $\rho''$  (см. рис.1) сосуществующих фаз. Эти значения плотностей служат граничными условиями для системы разностных нелинейных уравнений (20).

Рассмотрим решение последних, когда изменение плотности на молекулярных размерах является малой величиной и можно перейти к системе линейных уравнений. Тогда для отклонений от локальных значений

$$\begin{aligned} x_{k,k+1}^{(\alpha)} &= x_{kk'}^{(\alpha)} + \delta x_{k,k+1}^{(\alpha)}; & \rho_{\alpha,k+1} &= \rho_{\alpha,k} + \delta \rho_{k+1,k}^{(\alpha)}, \\ x_{k+1,k}^{(\alpha)} &= x_{kk'}^{(\alpha)} + \delta x_{k+1,k}^{(\alpha)}; & \rho_{\alpha,k-1} &= \rho_{\alpha,k} + \delta \rho_{k-1,k}^{(\alpha)}, \end{aligned} \quad (25)$$

из (15) получим систему уравнений:

$$\delta x_{k,k+1}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=0}^1 \left( \frac{W_{kk'}^{(\alpha\beta)}}{x_{kk'}^{(\beta)}} \delta \rho_{k+1,k}^{(\beta)} - \rho_{k\beta} \frac{W_{k+1,k}^{(\alpha\beta)}}{(x_{kk'}^{(\beta)})^2} \delta x_{k+1,k}^{(\beta)} \right),$$

$$\delta x_{k+1,k}^{(\beta)} = - \sum_{\gamma=0}^1 \rho_{k\gamma} \frac{W_{k+1,k}^{(\beta\gamma)}}{\left(x_{kk'}^{(\gamma)}\right)^2} \delta x_{k,k+1}^{(\gamma)}. \quad (26)$$

Второе уравнение из системы (26) используем для исключения  $\delta x_{k+1,k}^{(\beta)}$  и придем к системе, определяющей  $\delta x_{k,k+1}^{(\alpha)}$ :

$$\sum_{\gamma=0}^1 A_{\alpha\gamma} \delta x_{k,k+1}^{(\gamma)} = c_{\alpha}, \quad (27)$$

где

$$A_{\alpha\gamma} = \delta_{\alpha\gamma} - \sum_{\beta=0}^1 \rho_{k\beta} \frac{W_{kk'}^{(\alpha\beta)}}{\left(x_{kk'}^{(\beta)}\right)^2} \rho_{k\gamma} \frac{W_{kk'}^{(\beta\gamma)}}{\left(x_{kk'}^{(\gamma)}\right)^2}, \quad (28)$$

$$c_{\alpha} = \sum_{\beta=0}^1 \frac{W_{kk'}^{(\alpha\beta)}}{x_{kk'}^{(\beta)}} \delta \rho_{k+1,k}^{(\beta)}. \quad (29)$$

С учетом (25) для (16), (17) получим выражение

$$Q_{k\alpha} = \left(x_{kk'}^{(\alpha)}\right)^4 \left(1 + \frac{\delta x_{k+1,k}^{(\alpha)}}{x_{kk'}^{(\alpha)}} + \frac{\delta x_{k-1,k}^{(\alpha)}}{x_{kk'}^{(\alpha)}}\right). \quad (30)$$

На основании этого разложения, определяя  $\delta x_{k,k+1}$  и  $\delta x_{k-1,k}$  из (27), находим

$$f_k = \bar{f}(\rho_k) + \Delta f_k, \quad (31)$$

где

$$\Delta f_k = \sum_{\beta=0}^1 B_{\beta} (\rho_{k+1,\beta} - 2\rho_{k\beta} + \rho_{k-1,\beta}), \quad (32)$$

$$B_{\beta} = \sum_{\alpha,\gamma} \rho_{k\alpha} A_{\alpha\gamma}^{-1} \frac{W_{kk'}^{\gamma\beta}}{x_{kk'}^{(\alpha)} x_{kk'}^{(\beta)}}. \quad (33)$$

Используя (31), с учетом (32), (33) в условии (20), приходим к системе уже линейных разностных уравнений, решение которой показывает, каким образом изменение «локального» химического потенциала компенсируется возникновением переходного слоя с неоднородным изменением плотности между фазами с плотностями  $\rho'$  и  $\rho''$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Lifshitz I.M., Slyosov V.V. // J. Phys. Chem. Solids. – 1961. – V. 19. – P. 35.
2. Folbers M.J., Hope P.S. Polymer Blends and Alloys. – London: Blackie Academic & Professional, 1993.

3. Binder K. In: Material Science and Technology / Eds. R.W. Kohn, P. Haasen and E.J. Kramer. – Weinheim: VCH, 1991. – V. 5. – P. 405.
4. Bray A.J. // Adv. Phys. – 1994. – V. 43. – P. 357.
5. Schweizer K.S., Curro J.G. // Adv. Chem. Phys. – 1997. – V. 97. – P. 1.
6. Plapp M., Gouyet J.-F. // Phys. Rev. Lett. – 1997. – V. 78. – P. 4970.
7. Reister E., Müller M., Binder K. // Phys. Rev. – 2001. – V. 64, no.4. – Art. no. 041804.
8. Tafa K., Puri S., Kumar D. // Phys. Rev. – 2001. – V. 64, no. 5. – Art. no. 056139.
9. Bokun G.S., Groda Ya.G., Belov V.V., Uebing C., Vikhrenko V.V. // Eur. Phys. Journ. B. – 2000. – V. 15, no.2. – P. 297–304.
10. Argyrakis P., Groda Ya.G., Bokun G. S., Vikhrenko V.S. // Physical Review E. – 2001. – V 64, no. 6. – Article 066108.
11. Bokun G. S., Groda Ya.G., Uebing C., Vikhrenko V.S. // Physica A. – 2001. – V. 296, no. 1/2. – P. 83.
12. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979.
13. Наркевич И.И., Бокун Г.С. Неоднородные молекулярные системы. – Гл. IX в кн. [12]. – С. 240 – 268.

УДК 531.19

Г.С. Бокун, доцент; В.С. Вихренко, профессор

### ДИФФУЗИЯ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ

The quasi-equilibrium distribution is used to derive the expressions for the diffusion coefficients of a two-component lattice gas system. This approximation corresponds to neglecting the specific statistical memory effects, which are important for ordered states of lattice gases. The chemical diffusion coefficients are represented in terms of equilibrium lattice gas characteristics, such as the chemical potentials, the probabilities for two nearest neighbor lattice sites to be vacant, and the derivatives of the chemical potentials over the concentrations. The time scale of the diffusion processes is determined by the transition rates of particles at zero concentration limit.

Многокомпонентные системы по своим равновесным и неравновесным характеристикам существенно отличаются от однокомпонентных. Наличие дополнительных термодинамических степеней свободы обеспечивает им более разнообразное поведение, а исследование их свойств сопряжено с дополнительными трудностями. Представляется целесообразным рассмотреть особенности диффузионных процессов в двухкомпонентных решеточных системах, поскольку диффузия в однокомпонентных системах была исследована достаточно подробно ранее [1 – 6].

Рассмотрим двухкомпонентную систему. Каждый узел решетки из  $N$  узлов может быть занят частицей сорта  $a$  либо  $b$  или быть вакантным (сорт  $v$ ). Удобно обобщить представление чисел заполнения, обозначая состояние  $i$ -го узла греческой буквой, имеющей смысл вектора состояния, принимающего значения  $a, b, v$ , т.е.  $\alpha_i, \beta_i = a, b, v$ . Кроме этого, используем обозначение  $a_i$ , когда необходимо отметить, что узел  $i$  занят частицей сорта  $a$ . Для удобства записи некоторых выражений сохраняем обозначение  $n_{\alpha_i}$  для чисел заполнения, которые принимают значения  $n_{a_i} = 1, n_{b_i} = 1, n_{v_i} = 0$ , если