З наведених результатів обчислювального експерименту можна зробити висновок про можливість застосування методів декомпозиції області для розв'язання різноманітних задач усталеної напірної фільтрації, які мають практичне значення.

1. Аравин В.И., Нумеров С.И. Теория движения жидкостей и газов в недеформируемой пористой среде. М., 1953. 2. Коллинз Р. Течение жидкостей через пористые материалы. М., 1964. 3. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование миграции подземных вод. М.,1986. 4. Ляшко И.И., Сергиенко И.В., Мистецкий Г.Е. Скопецкий В.В. Вопросы автоматизации решения задач фильтрации на ЭВМ. К., 1981. 5. Марчук Г.И. Математическое моделирование в геофизической гидродинамике. Л., 1987. 6. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. М., 1977. 7. Сергиенко И.В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. К., 1991. 8. P.E.Bjorstad. Multiplicative and Additive Schwarz Methods: Convergence in the Two-Domain Case. In: Domain Decomposition Methods. Proceedings of the 2nd Int. Symp. on Domain Decomposition Methods,L.A.,Calif.,Jan. 14-16, 1988. Edited by Tony F.Chan, R.Glowinski, J.Periaux, O.B.Widlund. S.I.A.M. Philadelphia, 1989. 9. A.M. Bruaset, H.P. Langtangen. Diffpack User's Guide. URL: http://www.nobjects.com/Reports/. 10. Diffpack WWW home page. URL: http://www.nobjects.com/Products/Diffpack/. 11. Barry F. Smith, Petter E. Bjorstad, William D. Gropp. Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations. Cambridge University Press, 1991.

УДК 548:537.621

Ю.К.Рудавський, О.З.Ватаманюк
Національнийуніверситет "Львівська політехніка", кафедра вищої математики

ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ЗОБРАЖЕННЯ ВІЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ МОДЕЛІ ІЗІНГА З БІКВАДРАТИЧНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ ДЛЯ S=3/2

Підхід функціонального інтегрування застосовано до аналізу моделі Ізінга з біквадратичною взаємодією для S=3/2. Отримано функціональне зображення вільної енергії системи.

A functional integration approach is used for the investigation of the spin-3/2 Ising model with biquadratic exchange interaction. Functional representation for the free energy is obtained.

Розглянемо систему, гамільтоніан якої має вигляд

$$H = H_0 + H_{int} \tag{1}$$

Доданок

$$H_{int} = -\frac{\lambda_1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} J\left(|\vec{R}_i - \vec{R}_j|\right)\vec{S}_i\vec{S}_j - \frac{\lambda_2}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} J\left(|\vec{R}_i - \vec{R}_j|\right)Q_i^0 Q_j^0 \tag{2}$$

описує білінійну $\lambda_1 J(|\vec{R}_i - \vec{R}_j|)$ та біквадратичну $\lambda_2(|\vec{R}_i - \vec{R}_j|)$ обмінні взаємодії двох атомів з спінами S^z, розміщених у вузлах кристалічної гратки з координатами $\vec{R}_i$ та $\vec{R}_j$, де $i, j = 1,...N$, N – кількість вузлів гратки. Квадрупольний оператор у випадку значення спіна $S = 3/2$

$$Q_i^0 = (S_i^z)^2 - \tfrac{5}{4} \; . \tag{3}$$

Гамільтоніан системи відліку

$$H_0 = -h\sum_{i=1}^{N} S_i^z - \Omega\sum_{i=1}^{N} Q_i^0 \tag{4}$$

описує взаємодію ідеальної системи спінів та квадруполів з зовнішнім магнітним полем h, спрямованим вздовж осі Oz та полем типу одноіонної анізотропії Ω, що діє на квадруполі.

За відомого*, запропонованому в [1], статистичну суму системи подано у вигляді функціонального інтеграла

$$Z = exp(-\beta F_0)\int exp(F[\varphi])(d\varphi) \; , \tag{5}$$

де β – обернена температура; вільна енергія системи відліку

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} ln\, Sp\, exp(-\beta H_0); \tag{6}$$

інтегрування здійснюється за функціональними змінними, спряженими до Фур’є-образів спінових та квадрупольних операторів. Коефіцієнти функціоналу вільної енергії $F[\varphi]$ є незвідними середніми Фур’є-образів згаданих операторів за системою відліку.

Вільна енергія моделі записується як

$$F = F_0 - \frac{1}{\beta} ln\int exp(F[\varphi])(d\varphi) \, . \tag{7}$$

У наближенні молекулярного поля вільна енергія системи відліку має вигляд

$$\begin{aligned} F_{mol} = &-\frac{N}{\beta} ln\, 2 + \frac{N}{\beta}\frac{(y_1 - \beta h)^2}{2\alpha_1(0)} + \frac{N}{\beta}\frac{(y_2 - \beta\Omega)^2}{2\alpha_2(0)} - \\ &-\frac{N}{\beta} ln\left\{ e^{y_2} cosh\frac{3y_1}{2} + e^{-y_2} cosh\frac{y_1}{2} \right\}, \end{aligned} \tag{8}$$

тут здійснено перехід до самоузгоджених полів

$$\begin{aligned} y_1 &= \beta h + \beta\lambda_1 \nu(0)\left\langle S^z \right\rangle, \\ y_2 &= \beta\Omega + \beta\lambda_2 \nu(0)\left\langle Q^0 \right\rangle, \end{aligned} \tag{9}$$

де $\nu(0)$ – Фур’є-образ обмінного інтеграла $J(|\vec{R}_j|)$ для хвильового вектора $\vec{k} = 0$, $\langle ... \rangle$ означає статистичне усереднення за розподілом Гіббса з гамільтоніаном (1),

$$\alpha_1(k) = \lambda_1 \beta \nu(k), \quad \alpha_2(k) = \lambda_2 \beta \nu(k) \, . \tag{10}$$

* Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К. Метод функционального интегрирования в теории спинових систем // ТМФ. 1981.49. Вып.2. С. 234-247.

З умов $\frac{\partial F}{\partial y_1}=0$ та $\frac{\partial F}{\partial y_2}=0$ одержуємо систему самоузгоджених рівнянь

$$\left\langle S^z \right\rangle = \frac{3e^{y_2}\sinh\frac{3y_1}{2}+e^{-y_2}\sinh\frac{y_1}{2}}{2\left(e^{y_2}\cosh\frac{3y_1}{2}+e^{-y_2}\cosh\frac{y_1}{2}\right)},$$

$$\left\langle Q^0 \right\rangle = \frac{e^{y_2}\cosh\frac{3y_1}{2}-e^{-y_2}\cosh\frac{y_1}{2}}{e^{y_2}\cosh\frac{3y_1}{2}+e^{-y_2}\cosh\frac{y_1}{2}}. \qquad (11)$$

Розглянемо декілька часткових випадків

1) $\lambda_2=0,\ \Omega=0$.

При

$$T_d=\frac{5}{4}\lambda_1\nu(0) \qquad (12)$$

відбувається перехід з парамагнітного $\left(\left\langle S^z\right\rangle=0,\left\langle Q^0\right\rangle=0\right)$ у феромагнітний $(\left\langle S^z\right\rangle\neq 0,$ $\left\langle Q^0\right\rangle\neq 0)$ стан.

2) $\lambda_2=0,\ \Omega\neq 0$.

Для температури переходу у феромагнітний стан отримуємо рівняння

$$T_d=\frac{5}{4}\lambda_1\nu(0)\left(1+\frac{4\Omega}{5T_d}\right). \qquad (13)$$

Для малих значень Ω одержуємо

$$T_d=\frac{5}{4}\lambda_1\nu(0)+\frac{4}{5}\Omega. \qquad (14)$$

У випадку Ω>>1 маємо

$$T_d=\frac{9}{4}\lambda_1\nu(0). \qquad (15)$$

3) $\lambda_1=0$.

Покладаючи Ω=0, отримуємо температуру переходу у квадрупольну $\left(\left\langle S^z\right\rangle\neq 0,\left\langle Q^0\right\rangle\neq 0\right)$ фазу:

$$T_Q=\lambda_2\nu(0). \qquad (16)$$

У наступній статті фазову діаграму системи буде проаналізовано за допомогою розкладу Ландау вільної енергії.