

ЛИТЕРАТУРА

1. Жирифалько Л. Статистическая теория твердого тела. М.: Мир, 1975, 382 с.
2. Аринштейн Э. А., Хайруллин А. А. Теория дефектных кристаллов (Общая теория). Деп. в ВИНТИ, 12.07.1985, N 5016-85.

*Эдуард Абрамович АРИНШТЕЙН –
заведующий кафедрой моделирования
физических процессов и систем
физического факультета,
доктор физико-математических наук,
профессор,
Евгений Сергеевич БРИКОВ –
сотрудник информационного отдела
администрации г. Тюмени,
кандидат физико-математических наук,
Игорь Александрович ГУСЕВ –
директор средней школы № 69,
кандидат физико-математических наук*

УДК 536.758

ПРИМЕНЕНИЕ ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ МНОГОЦЕНТРОВЫХ ИНТЕГРАЛОВ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ЖИДКОСТИ

АННОТАЦИЯ. Рассмотрен пример расчета многоцентровых интегралов методами вейвлет-анализа. Показана перспективность метода. Результат расчета может быть использован для улучшения известных приближений теории жидкости.

The authors consider the example of calculations for multyvertex integrals by the methods of the wavelet analysis and demonstrate prospects of this method. The results of these calculations may be used to improve existing approximations of the liquid theory.

ВВЕДЕНИЕ

Определение термодинамических величин конденсированных систем в большинстве моделей статистической физики требует вычисления многомерных интегралов, с которыми современная вычислительная техника справляется с трудом. Например, определение термодинамического потенциала свободной энергии канонического ансамбля требует вычисления суммы многоцентровых интегралов, для которых технические трудности становятся принципиальными. К сожалению, по этой, чисто вычислительной, причине многие современные модели статистической физики остаются до сих пор не изученными.

Для решения указанной проблемы предлагается использовать достаточно удобный в исследованиях метод вейвлет (wavelet)-анализа. Основой данного подхода является теория, разработанная Грассманом и Морле в середине 80-х годов в связи с анализом свойств сейсмических и акустических сигналов[1] и представляющая собой разложение по базису, сконструированному из обладающей опреде-

ленными свойствами солитонобразной функции (вейвлета) посредством масштабных изменений и переносов:

$$\Psi_{j,k}(r) = 2^{j/2} \cdot \Psi(2^{j/2} \cdot r - k).$$

Приведем пример базового вейвлета, график которого показан на рис. 1:

$$\Psi(x) = e^{-x^2/2} - 0.5e^{-x^2/8}.$$

Вейвлет-преобразование не столь широко и хорошо известно как преобразование Фурье, поскольку применяется сравнительно недавно и математический аппарат находится в стадии активной разработки. Математическое обоснование и примеры вейвлет-анализа более подробно изложены в работах [1, 2].

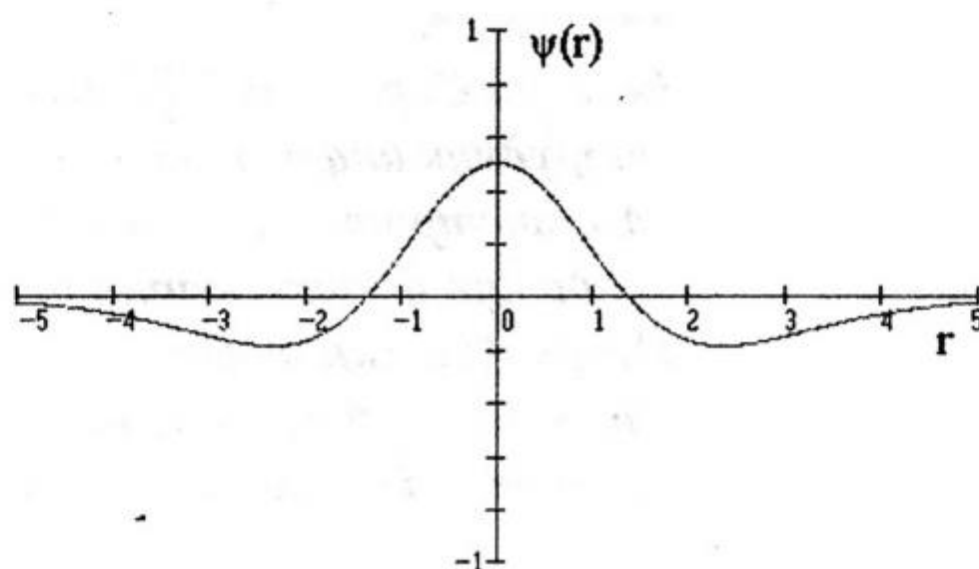


Рис. 1

РАСЧЕТ ИНТЕГРАЛЬНОГО ВКЛАДА K_4 В ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ $F(T, \rho)$ ПРИ ПОМОЩИ ВЕЙВЛЕТ РАЗЛОЖЕНИЯ

Целью данной статьи является иллюстрация возможностей использования вейвлет-разложения при вычислении 6-кратного интеграла — типичного многоцентрового интеграла в статистической задаче определения термодинамического потенциала. Известно, что эти многоцентровые интегралы имеют вид, изображаемый диаграммами [3]:

$$K_4 = \rho^3/4! \cdot \text{[Diagram: 4-point star graph]} ; K_5 = \rho^4/5! \cdot \left(\text{[Diagram: 5-point star graph]} + 10 \cdot \text{[Diagram: 5-point star graph with 10 edges]} + 15 \cdot \text{[Diagram: 5-point star graph with 15 edges]} \right)$$

и т. д., где прямая линия обозначает полную бинарную мультипликативную корреляционную функцию $M_2(r)$, вершина многоугольника — интегрирование по соответствующей координате, ρ — плотность жидкости (в однородной модели считается величиной постоянной). В более подробной записи K_4 выглядит следующим образом:

$$K_4 = \rho^3/4! \cdot \int \int \int_{V_1, V_2, V_3} M_2(\vec{r}_1) M_2(\vec{r}_2) M_2(\vec{r}_3) M_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) M_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|) M_2(|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 d^3\vec{r}_3.$$

Очевидно, что K_4 определяется шестикратным несобственным интегралом, а K_5 — девятикратным.

Для дальнейшего использования в вычислениях представим функцию $M_2(r)$ в виде суммы гауссовых функций, интегрирование которых не вызывает каких-либо трудностей:

$$M_2(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m_n}{(\pi \cdot n)^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{n}}.$$

Данное упрощенное вейвлет-представление оказалось достаточным для решения поставленной проблемы. Значения коэффициентов разложения функции $M_2(r)$ легко получить, решая систему уравнений, вытекающую из налагаемых на нее условий:

$$M_2(0) = -1 ; \quad M_2(r_0) = 0 ; \quad M_2(r_{\max}) = h_{\max} ;$$

$$\left. \frac{\partial M_2(r)}{\partial(r^2)} \right|_{r=0} = 0 ; \quad \left. \frac{\partial M_2(r)}{\partial(r^2)} \right|_{r=r_{\max}} = 0 ,$$

где r_{\max} — точка первого максимума корреляционной функции $M_2(r)$, h_{\max} — высота этого максимума. Налагаемые условия определены из типичного поведения $M_2(r)$, известного из экспериментальных исследований и проведенных ранее численных расчетов. Параметры r_{\max} , h_{\max} подлежат определению из вариационной задачи для термодинамического потенциала свободной энергии.

Приведем результат расчета K_4 вейвлет-методом. Подставляя в K_4 значения для корреляционной функции в виде вейвлет-разложения, получим:

$$K_4 = \frac{\rho^3}{4!} \sum_{n,m,p,k,q,g} M_n M_m M_p M_k M_q M_g \cdot A_{n,m,p,k,q,g},$$

где $A_{n,m,p,k,q,g}$ — многомерная матрица, легко определяемая при вычислении гауссовых интегралов без привлечения вычислительной техники. В итоге вычисление 6-кратного интеграла свелось к суммированию, которое не представляет труда для современной машинной обработки. В результате расчета получена следующая зависимость K_4 от h_{\max} (см. рис. 2) в зависимости от значения параметра r_{\max} .

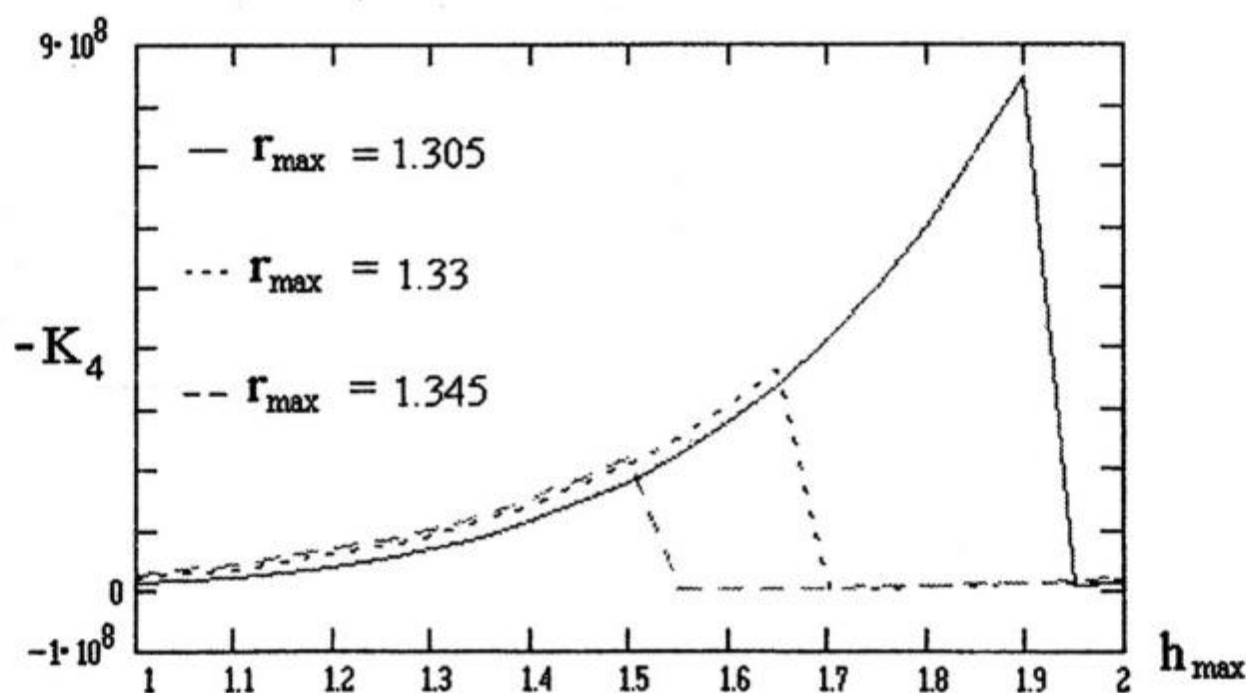


Рис. 2

Исходя из физических свойств функции $M_2(r)$, можно сделать предположение о наиболее подходящих значениях параметров r_{\max} , h_{\max} (см. рис. 2). Уточнение этих соображений требует решения полной вариационной задачи для термодинамического потенциала. На рис. 3 приведен график $M_2(r)$ при $h_{\max} = 2$, $r_{\max} = 1.33$.

Другим примером удобства использования вейвлет-анализа в статистических расчетах может служить вейвлет-разложение потенциала межмолекулярного вза-

имодействия. Потенциал взаимодействия удобно выразить с помощью ряда гауссовых функций:

$$\varphi(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n}{(\pi n)^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{n}}$$

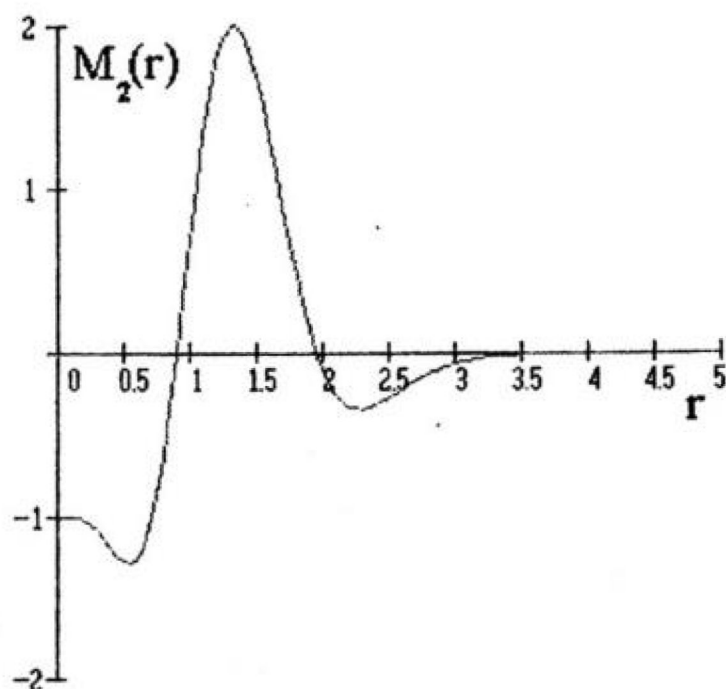


Рис. 3

Учитывая условия, определяющие характерные свойства потенциала взаимодействия

$$\varphi(\sigma) = 0 \quad ; \quad \varphi(r_0) = \varepsilon = 1 \quad ; \quad \left. \frac{\partial \varphi(r)}{\partial (r^2)} \right|_{r=r_0} = 0,$$

где r_0 — точка минимума потенциальной ямы, σ — эффективный диаметр молекулы, определим вейвлет-разложение $\varphi(r)$, фактически мало отличающееся от хорошо всем известного «степенного» потенциала Ленарда-Джонса (см. рис. 4).

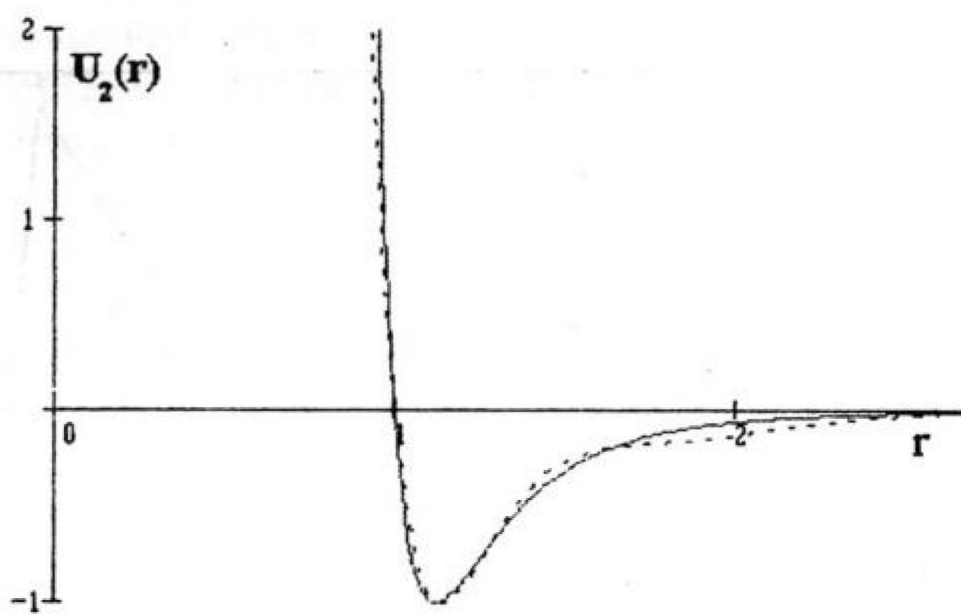


Рис. 4

Данное вейвлет-представление потенциала оказывается необходимым при вычислении других важных кратных интегралов в статистической теории жидкости, в которые входит как подынтегральная функция межмолекулярный потенциал взаимодействия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показана ценность и преимущество использования вейвлет-анализа при статистических вычислениях. Хорошо известно, что многоцентровые интег-



ралы встречаются не только в статистической физике, но и во многих других областях исследований. Можно с уверенностью сказать, что представленный метод позволит разработать эффективные алгоритмы вычислений многоцентровых интегралов и найдет широкое применение во многих областях физики и прикладной математики.

* * *

Авторы признательны М. Я. Флягину, И. А. Рзаеву и Р. М. Ганопольскому за ценное обсуждение затронутых в статье проблем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Grossmann A., Morlet J. // SIAM J. Math. Anal. 1984.15, 723-786.
2. Астафьева Н. М. Вейвлет-анализ: основы теории и примеры применения // УФН. 1996. 166. №11. С. 1145-1170.
3. Аринштейн Э. А. Функциональные преобразования в теории частичных функций распределения // Проблемы статистической физики. Тюмень, 1976. С. 26-50.

*Людмила Петровна СЕМИХИНА –
доцент кафедры механики многофазных
систем физического факультета,
кандидат физико-математических наук*

УДК 538.69:532; 541.133

ВОЗМОЖНОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО МЕТОДА ДЛЯ АНАЛИЗА СОСТОЯНИЯ ВОДНЫХ СИСТЕМ ПОСЛЕ ФИЗИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

АННОТАЦИЯ. Разработана методика анализа состояния водных систем по частотной зависимости $\operatorname{tg}\delta$ в области частот менее 1 МГц. Возможности метода продемонстрированы на примере анализа состояния дистиллированной воды при изменении ее температуры и магнитной обработке.

An experimental method for detection the physical actions effects on water systems was developed. The water conditions after increasing the temperature and magnetic field treatment have been analysed.

В последние годы все более актуальной становится проблема оценки степени влияния всевозможных физических воздействий, прежде всего электромагнитных полей, на человека и другие биологические объекты. Все биологические объекты в той или иной степени содержат воду. Поэтому водные системы являются наиболее простыми моделями для изучения этого влияния.

Проанализируем, какие физико-химические свойства водных систем следует регистрировать с целью обнаружения эффектов воздействия на них. Очевидно, что нельзя ожидать заметных эффектов, например, при магнитной обработке воды, по таким ее физическим параметрам, которые даже при столь глобальном ее изменении, каким является фазовый переход воды в лед, меняются не более чем на 20% (статическая диэлектрическая проницаемость, показатель преломления, плотность, спектральные максимумы валентных, деформационных и либрационных колебаний) либо всего в несколько раз (теплопроводность, теплоемкость, скорость звука). Наиболее сильно — на 6 порядков — при фазовом переходе воды в лед меня-