ческими сплайнами по формулам (13). Сглаженная кривая мало отличается от аппроксимации исходного многоугольника В-сплайнами шестого порядка (рис.3). Двукратное преобразование исходной последовательности уже не имеет смысла (рис.6), так как осталось всего три точки и основная информация о кривой утеряна. Каскадный алгоритм предполагает использование обеих процедур: сглаживание кривой в её ступенчатом представлении (вейвлет- преобразование) и сглаживание посредством аппроксимации ступенчатой кривой все более гладкими функциями, например, В-сплайнами. Между глубиной обработки данных тем и другим способом должен быть установлен компромисс: глубокая проработка на уровне ступенчатого представления приводит к возможности аппроксимации сплайнами низкого порядка и наоборот. Компромисс зависит от цели- минимум потери информации при хранении, визуализации, или передачи данных по каналам связи.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Волков А.М. Геологическое картирование нефтегазоносных территорий с помощью ЭВМ. М.: Недра. 1988. 221 с.

2. Аронов В.И. Методы построения карт геолого-геофизических признаков и геометризация залежей нефти и газа на ЭВМ. М.: Недра. 1990. 301 с.

3. Стечкин С.Б.,Субботин Ю.Н. Сплайны в вычислительной математике. М.: Наука.1976. 248 с.

4. Петухов А.П. Введение в теорию базисов всплесков. СПб: Издательство СпбТУ. 1999.132 с.

5. Переберин А.Б. Построение изолиний с автоматическим масштабированием //Вычислительные методы и программирование. 2001.Т. 2. С. 22-32.

***Алексей Викторович ТАТОСОВ — доцент кафедры математического моделирования, кандидат физико-математических наук***

**УДК 536.75**

# ОДНОМЕРНЫЙ РЕШЕТЧАТЫЙ ГАЗ

*АННОТАЦИЯ. Рассматривается задача о нахождении внешнего поля, выравнивающего осцилляции плотности вблизи стенки. Получены выражения младших корреляционных функций непосредственно из уравнений Кирквуда-Зальцбурга для бесконечной системы частиц на одномерной решетке с бинарным взаимодействием ближайших соседей.*

*The particle function of the infinite one-dimensional system distribution is derived. The external field that corrects the oscillation density near the wall is found.*

Одним из эффективных методов изучения бесконечных статистических систем является метод частичных функций распределения, введенный Н. Н. Боголюбовым. Частичные функции удовлетворяют некоторым известным системам уравнений. Однако сами системы уравнений являются бесконечными, поэтому общеприняты приближенные методы их решения. Всякое же точное аналитическое решение системы уравнений для частичных функций распределения представляет определенный интерес.

Рассмотрим бесконечную систему частиц на одномерной решетке Z с бинарным взаимодействием ближайших соседей во внешнем поле. Бинарный потенциал взаимодействия имеет вид:

$$\Phi_2(|i-j|)=\begin{cases}\infty & i=j\\ \varepsilon & |i-j|=1,\\ 0, & |i-j|>1.\end{cases}$$

$$f_{ij}=h_{ij}-1=\begin{cases}-1, & i=j\\ f=h-1=\exp(-\beta\varepsilon)-1, & |i-j|=1,\\ 0, & |i-j|>1.\end{cases}$$

Функция Майера есть

$$\rho_m(i)_m=\sum{}^{-1}\sum_{n\geq m}\frac{z^n}{(n-m)!}\sum_{\langle i\rangle_{n-m}}\exp(-\beta U(i)_n),\ U(i)_n=\sum_{1\leq k<d\leq n}\Phi_2(|i_d-i_k|),$$

Корреляционные функции бесконечной системы удовлетворяют уравнениям Кирквуда-Зальцбурга [1,2]:

$$\rho_{ii_1\dots i_k}=z_i h_{ii_1}\dots h_{ii_k}\left[\rho_{i_1\dots i_k}+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\sum_{\langle j\rangle_n}\rho_{\langle i\rangle_k,\langle j\rangle_n}f_{ij_1}\dots f_{ij_n}\right],$$
$$z_i=z\exp(-\beta\Phi_1(i)), \tag{1}$$

где z — активность, $\beta=(kT)^{-1}$, $\Phi_1(i)$ — потенциал внешнего поля.

Запишем уравнения (1) для данной модели, где выделен узел «i»:

$$\begin{cases}\rho_i=z_i(1+f\rho_{i-1}+f\rho_{i+1}-\rho_i-f\rho_{i-1i}-f\rho_{i+1i}+f^2\rho_{i-1i+1}-f^2\rho_{i-1ii+1})\\ \rho_{i-1i}=z_i h(\rho_{i-1}-\rho_{i-1i}+f\rho_{i-1i+1}-f\rho_{i-1ii+1}),\\ \rho_{i+1i}=z_i h(\rho_{i+1}-\rho_{i+1i}+f\rho_{i-1i+1}-f\rho_{i-1ii+1}),\\ \rho_{i-1ii+1}=z_i h^2(\rho_{i-1i+1}-\rho_{i-1ii+1}).\end{cases} \tag{2}$$

В работе [3] получено решение уравнений (2) для полубесконечной системы, когда частицы могут занимать только положительные узлы, что эквивалентно включению внешнего поля:

$$\Phi_i=\begin{cases}\infty, & i\leq 0\\ 0, & i>0.\end{cases}$$

В этом случае $z_i=z$ для $i>0$ и $z_i=0$ для узлов $i\leq 0$. Можно сказать, что в узле i = 0 находится твердая стенка, непроницаемая для частиц. Показано, что из системы (2) следует выполнение рекуррентного соотношения:

$$r_{i+1}=T^i r_1,$$

где $$r_i=\begin{bmatrix}1\\ \rho_i\\ \rho_{i+1}\\ \rho_{ii+1}\end{bmatrix},\ T=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ -\dfrac{(1+zh)}{f} & -zh & \dfrac{(1+z)(1+zh)}{zf} & \dfrac{z^2h_2-1}{zh}\\ -\dfrac{zh}{f} & -zh & \dfrac{(1+z)h}{f} & zh\end{bmatrix}.$$

Тогда разложение $r_1$ по базису, составленному из собственных векторов матрицы T с учетом ограниченности корреляционных функций, совместно с уравнением (2) для крайнего узла, однозначно определяют корреляционные функции данной системы частиц. Так, для унарной функции получено выражение

$$\rho_i = \rho(1-\lambda^i), i \geq 0 \tag{3}$$

где
$$\rho = \frac{1}{2}\frac{\sqrt{(zh-1)^2+4z}+zh-1}{\sqrt{(zh-1)^2+4z}} \tag{4}$$

$$\lambda = \frac{1}{4z(h-1)}\left[zh+1-\sqrt{(zh-1)^2+4z}\right]^2.$$

Из (3) видно, что возмущения, исходящие от крайнего узла, убывают по показательному закону и $\rho_i$ стремится к значению $\rho$, которое соответствует плотности однородной бесконечной системы.

Найдем внешнее поле $z_i = z\exp(-\beta\Phi_1(i))$ для полубесконечной системы, когда частицы могут занимать только положительные узлы $i > 0$, которое соответствует равномерной плотности распределения $\rho_i = \rho$.

Считая независимыми величинами $\rho_{i-1}, \rho_i, \rho_{i+1}$, выразим из (2) бинарную функцию $\rho_{ii+1}$. Записав уравнения (2) для узла $i+1$, выразим $\rho_{ii+1}$ через величины $\rho_i, \rho_{i+1}, \rho_{i+2}$. Приравнивая выражения для $\rho_{ii+1}$, полученные описанным способом, получим уравнение, содержащее только унарную корреляционную функцию:

$$\begin{aligned}&\rho_{i-1}\left[z_ih(1-z_{i+1}^2h^2)(1-h)\right]+ \\ &+\rho_i\left[-z_{i+1}^2h^2(1-z_i^2h^2)(1-h)+(z_i+1)h(1+z_ih)(1-z_{i+1}^2h^2)\right]- \\ &-\rho_{i+1}\left[(z_{i+1}+1)h(1+z_{i+1}h)(1-z_i^2h^2)-z_i^2h^2(1-z_{i+1}^2h^2)(1-h)\right]- \\ &-\rho_{i+2}\left[z_{i+1}h(1-z_i^2h^2)(1-h)\right]+z_{i+1}h(1+z_{i+1}h)(1-z_i^2h^2)- \\ &-z_ih(1+z_ih)(1-z_{i+1}^2h^2)=0,\end{aligned} \tag{5}$$

где i =2,3,…. В случае $\rho = \text{const}$ из (5) следует соотношение:

$$(z_ih+1)(z_{i+1}+1)(z_{i+1}-z_i)=0,\ i=2,3,....,$$

которое выполняется только при $z_{i+1} = z_i$. Следовательно, внешнее поле имеет вид:

$$z_i = \begin{cases} z_1, & i=1, \\ z, & i>1. \end{cases} \tag{6}$$

Таким образом, во всех узлах решетки, кроме крайнего, внешнее поле должно быть одинаковым или совсем отсутствовать, т. е.

$$\rho_i = \text{const} \Rightarrow z_i = \text{const}, i > 1.$$

Это утверждение позволяет получить соотношение (4) иным способом. Действительно, для внешнего поля (6) плотность полубесконечной системы, удаляясь от начального узла к бесконечности, в точности равна плотности бесконечной системы с однородным внешним полем $z_i = z$ для всех i. Если же потребовать постоянства плотности, то $\rho_{полуб} = \rho_{беск}$.

Тогда задачу о нахождении $\rho(z,h)$ бесконечной системы можно ограничить рассмотрением уравнений (2) только для двух крайних узлов.

Полагая $\rho_i = \text{const}$ и считая узел i = 1 крайним, имеем:

$$\begin{cases} \rho = z_1(1+f\rho-\rho-f\rho_{12}) \\ \rho_{12}z_1h(\rho-\rho_{12}) \end{cases} \tag{7}$$

для узла $i = 2$ $(z_2 = z)$, имеем:

$$\begin{cases} \rho = z(1+2f\rho-\rho-f\rho_{12}-f\rho_{23}+f^2\rho_{13}-f^2\rho_{123}) \\ \rho_{12} = zh(\rho-\rho_{12}+f\rho_{12}-f\rho_{123}) \\ \rho_{23} = zh(\rho-\rho_{23}+f\rho_{13}-f\rho_{123}) \\ \rho_{123} = zh^2(\rho_{13}-\rho_{123}) \end{cases} \tag{8}$$

Из уравнений (7), (8), считая заданными z и h, можно найти корреляционные функции входящие в эти уравнения, а также внешнее поле $z_i = z$.

Применяя к уравнениям (7), (8) процедуру указанную при выводе (14), получим:

$$\rho\frac{z_1h}{z_1h+1} = \rho\frac{h(zh-1)-2zh}{(1-zh)(1-h)}+\frac{zh}{(1-zh)(1-h)} \tag{9}$$

Также, из (7) непосредственно следует:

$$z_1^2h(1-\rho)+z_1(1-2\rho)-\rho = 0 \tag{10}$$

Уравнения (9) и (10) образуют систему, из которой определяем искомые величины. Относительно $\rho$ получаем кубическое уравнение, которое вырождается в квадратное:

$$\rho^2-\rho+\frac{z}{(zh-1)^2+4z} = 0$$

Отбрасывая лишний корень, находим окончательно:

$$\rho = \frac{1}{2}\frac{\sqrt{(zh-1)^2+4z}+zh-1}{\sqrt{(zh-1)^2+4z}} \quad ,$$

что совпадает с (4). Другие корреляционные функции теперь могут быть непосредственно найдены из уравнений (1). Для внешнего поля $z_1$, выравнивающего осцилляции плотности, получаем:

$$z_1 = \frac{2\rho-1+\sqrt{(2\rho-1)^2+4h(1-\rho)\rho}}{2h(1-\rho)}$$

Из вышесказанного можно сделать следующий вывод. Если мы имеем систему, состоящую из конечного числа частиц $(n \geq 3)$ с бинарным взаимодействием ближайших соседей, то для выравнивания плотности $\rho$ достаточно включить внешнее поле $z_i$ только в крайних узлах. При этом $\rho$ будет равно плотности бесконечной системы в отсутствии внешнего поля.

## ЛИТЕРАТУРА


1. Боголюбов Н. Н. Избранные труды. Т. 2. Киев: Наукова думка. 1988. 378 с.
2. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты. М.: Мир. 1971. 256 с.
3. Назин Г. И., Татосов А. В. Решение уравнений Кирквуда-Зальцбурга для одномерного решетчатого газа. ТМФ. 1995. Т. 102, № 3. С. 463-469.