УДК 517.9

П. В. Малишев, О. Л. Ребенко (Ін-т математики НАН України, Київ)

АПРОКСИМАЦІЯ ФІНІТНИМИ ПОТЕНЦІАЛАМИ

We consider infinite systems of point particles whose interaction is described by a stable two-body interaction potential ϕ with infinite range. A sequence of finite interaction potentials ϕ_R pointwise convergent to ϕ as $R \to \infty$ is introduced. It is shown that the corresponding sequence of correlation functions ρ_R converges to ρ in the norm of the Ruelle space E_ξ.

Рассматриваются бесконечные системы точечных частиц, взаимодействие в которых определяется устойчивым двухточечным потенциалом с бесконечным радиусом действия ϕ. Введена последовательность финитных потенциалов взаимодействия ϕ_R, поточечно сходящаяся к ϕ при $R \to \infty$. Доказано, что соответствующая последовательность корреляционных функций ρ_R сходится к ρ по норме пространства Рюэлля E_ξ.

1. Вступ. Проблема апроксимації кореляційних функцій нескінченних систем, взаємодія в яких визначається потенціалом з нескінченним радіусом дії, кореляційними функціями, що відповідають фінітним потенціалам, є технічною. Дуже часто вона допомагає значно спростити доведення деяких важливих результатів. Для обмежених систем, що знаходяться в деякому контейнері Λ, збіжність кореляційних функцій ρ_R^Λ до функцій ρ^Λ є наслідком поточкової збіжності послідовності потенціалів $\{\phi_R\}$ до потенціалу ϕ і умови стійкості взаємодії. В той же час для граничних ($\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$) функцій ρ_R і ρ така збіжність не є очевидною. Ситуація трохи спрощується в області регулярності термодинамічних параметрів: активності z і оберненої температури β. У цьому випадку кореляційні функції задовольняють рівняння Кірквуда – Зальцбурга, але послідовність операторів Кірквуда – Зальцбурга K_R не задовольняє умови, що забезпечують рівномірну збіжність до відповідного оператора K. Тому проблема збіжності послідовності кореляційних функцій ρ_R, які побудовані за потенціалами ϕ_R, до функцій ρ є нетривіальною.

В даній роботі наведено просте розв'язання цієї проблеми в області регулярності термодинамічних параметрів z і β.

2. Позначення і опис системи. Розглянемо d-мірний евклідів простір $\mathbb{R}^d$. Локально обмежена множина у просторі $\mathbb{R}^d$ визначається як будь-яка множина положень однакових частинок $\{x_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ в цьому просторі. Набір всіх можливих множин такого типу утворює так званий конфігураційний простір

$$\Gamma = \Gamma_{\mathbb{R}^d} := \left\{ \gamma \subset \mathbb{R}^d \middle| \, |\gamma \cap \Lambda| < \infty \text{ для всіх } \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d) \right\},$$

де $|A|$ — число елементів множини A, а $\mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ — система всіх можливих борелівських множин з компактним замиканням в $\mathbb{R}^d$. Нам також необхідно визначити простір скінченних конфігурацій Γ_0:

$$\Gamma_0 = \bigsqcup_{n\in\mathbb{N}_0} \Gamma^{(n)}, \quad \Gamma^{(n)} := \{\eta \subset \mathbb{R}^d \mid |\eta| = n\}, \quad \mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}.$$

Визначимо також простір конфігурацій, що знаходяться в обмеженому об'ємі $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$:

$$\Gamma_\Lambda := \{\eta \in \Gamma_0 \mid \eta \subset \Lambda\}.$$

Позначимо σ-алгебри Γ, Γ_0 та Γ_Λ через $\mathcal{B}(\Gamma)$, $\mathcal{B}(\Gamma_0)$ та $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$ відповідно. Для заданої міри інтенсивності σ (в даному випадку σ — міра Лебега на $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$) і будь-якого $n \in \mathbb{N}$ добуток мір $\sigma^{\otimes n}$ розглядається як міра на множинах

$$\widetilde{(\mathbb{R}^d)^n} = \left\{ (x_1, \ldots, x_n) \in (\mathbb{R}^d)^n \,\middle|\, x_k \neq x_l, \text{ якщо } k \neq l \right\}$$

і, відповідно, $\sigma^{(n)}$ — як міра у просторі $\Gamma^{(n)}$, що будується за допомогою відображення

$$\mathrm{sym}_n : \widetilde{(\mathbb{R}^d)^n} \ni (x_1, ..., x_n) \mapsto \{x_1, ..., x_n\} \in \Gamma^{(n)}.$$

Міра Лебега – Пуассона $\lambda_{z\sigma}$ на $\mathcal{B}(\Gamma_0)$ визначається формулою

$$\lambda_{z\sigma} := \sum_{n \geq 0} \frac{z^n}{n!} \sigma^{(n)}.$$

Звуження $\lambda_{z\sigma}$ на $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$ також позначимо $\lambda_{z\sigma}$. Більш детальний опис конфігураційних просторів Γ, Γ_0 та Γ_Λ можна знайти, наприклад, у роботах [1 – 3].

(A) Припущення щодо потенціалу взаємодії. *В даній статті ми розглядаємо двочастинкові потенціали загального вигляду ϕ, неперервні на $\mathbb{R}_+ \setminus \{0\}$ і такі, що існують сталі $r_0 > 0$, $B \geq 0$, $R_0 > 0$, $\varphi_0 > 0$ та $\varepsilon_0 > 0$, для яких*

$$\phi(|x|) \equiv \phi^+(|x|) \quad \text{для} \quad |x| \leq r_0, \tag{2.1}$$

$$\phi(|x|) \equiv -\phi^-(|x|) \geq -\frac{\phi_0}{|x|^{d+\varepsilon_0}} \quad \text{для} \quad |x| \geq R_0, \tag{2.2}$$

де

$$\phi^+(|x|) := \max\{0, \phi(|x|)\}, \qquad \phi^-(|x|) := -\min\{0, \phi(|x|)\},$$

а енергія взаємодії частинок конфігурації γ задовольняє умову стійкості

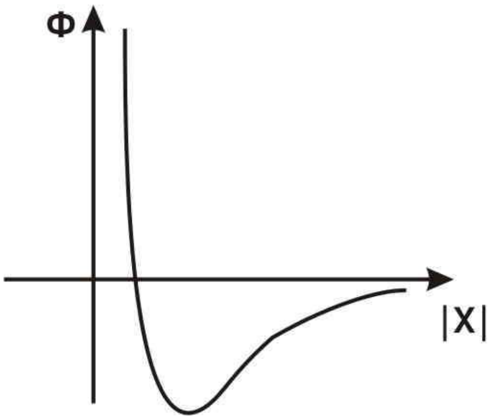
$$U(\gamma) = \sum_{x,y \in \gamma} \phi(|x - y|) \geq -B|\gamma|, \qquad \gamma \in \Gamma_0.$$

У молекулярній фізиці має безпосереднє застосування потенціал Ленарда – Джонса

$$\phi(|x|) = \frac{C}{|x|^{12}} - \frac{D}{|x|^6},$$

де $C > 0$, $D > 0$ — деякі сталі. В подальшому ми будемо розглядати потенціали типу Ленарда – Джонса. Поведінку потенціалів такого типу зображено на рисунку.

3. Кореляційні функції і рівняння Кірквуда – Зальцбурга. Кореляційні функції є (в певному сенсі) моментами міри Гіббса, за якими розраховують середні значення спостережуваних величин, а статистична сума відіграє важливу роль у побудові термодинамічних функцій, вільної енергії та тиску в системі (див., наприклад, [4 – 6]).



Запишемо вирази для статистичної суми та відповідного набору кореляційних функцій з допомогою інтегралів за мірою $\lambda_{z\sigma}$ по всіх можливих конфігураціях в об'ємі $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ у випадку великого канонічного ансамблю:

$$Z_\Lambda(z,\beta) := \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma),$$

$$\rho_\Lambda(\eta; z,\beta) := \frac{1}{Z_\Lambda(z,\beta)} \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \qquad \eta \in \Gamma_\Lambda.$$

Для малих значень активності z існує єдина термодинамічна границя (при $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$). Граничні функції $\rho(\eta; z,\beta)$ є розв'язками нескінченної системи рівнянь Кірквуда – Зальцбурга в банаховому просторі E_ξ (див., наприклад, [4 – 6]).

Систему рівнянь Кірквуда – Зальцбурга для функцій $\rho(\eta; z,\beta)$ можна записати у вигляді єдиного операторного рівняння (див. [4])

$$\rho = z\widetilde{K}\rho + z\delta, \tag{3.1}$$

де оператор $\widetilde{K}$ діє на довільну функцію $\varphi \in E_\xi$ у відповідності з правилом

$$(\widetilde{K}\varphi)(\{x_1\}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \ldots \int\limits_{\mathbb{R}^d} \prod_{i=1}^{k} \left(e^{-\beta\phi(|y_i - x_1|)} - 1 \right) \times$$

$$\times\, \varphi(\{y_1,\ldots,y_k\}) dy_1 \ldots dy_k, \quad \text{якщо} \quad |\eta| = 1\,(\eta = \{x_1\}), \tag{3.2}$$

$$(\widetilde{K}\varphi)(\eta) = \sum_{x\in\eta} \widetilde{\pi}(x;\eta\setminus\{x\}) e^{-\beta W(x;\eta\setminus\{x\})} \Bigg[\varphi(\eta\setminus\{x\}) +$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}\int\limits_{\mathbb{R}^d}\dots\int\limits_{\mathbb{R}^d}\prod_{i=1}^{k}\left(e^{-\beta\phi(|y_i-x|)}-1\right)\times$$

$$\left.\times\,\varphi(\eta\setminus\{x\}\cup\{y_1,\dots,y_k\})dy_1\dots dy_k\right],\quad \text{якщо}\qquad |\eta|\geq 2, \tag{3.3}$$

де

$$\widetilde{\pi}(x;\eta\setminus\{x\})=\frac{\pi_W(x;\eta\setminus\{x\})}{\sum\limits_{y\in\eta}\pi_W(y;\eta\setminus\{y\})}, \tag{3.4}$$

$$\pi_W(x;\eta\setminus\{x\})=\begin{cases}1, & \text{якщо } W(x;\eta\setminus\{x\})\geq -2B,\\ 0 & \text{— у решті випадків,}\end{cases} \tag{3.5}$$

$$\rho:=\{\rho(\eta;z,\beta)\}_{\eta\in\Gamma_0\setminus\varnothing}, \tag{3.6}$$

$$\delta(\eta)=\begin{cases}1, & \text{якщо } |\eta|=1,\\ 0 & \text{— у решті випадків.}\end{cases} \tag{3.7}$$

***Зауваження* 3.1.** Оператор $\widetilde{K}=\Pi K$ (у позначеннях Рюелля [4]), а (3.4), (3.5) — реалізація оператора Π, тобто симетризація правої частини нескінченної системи рівнянь Кірквуда–Зальцбурга. При цьому оператор $K\colon E_\xi\to E_{e^{2\beta B}\xi}$, а оператор $\widetilde{K}\colon E_\xi\to E_\xi$.

Оператор $\widetilde{K}$ є обмеженим оператором у банаховому просторі E_ξ з нормою

$$\|\varphi\|_\xi\;:=\sup_{\eta\in\Gamma_0\setminus\varnothing}|\varphi(\eta)|\xi^{-|\eta|}.$$

Розв'язок рівняння (3.1) можна подати у формі збіжних у просторі E_ξ (та точково збіжних для будь-якої фіксованої конфігурації $\eta\in\Gamma_0$) рядів

$$\rho(\eta;z,\beta)=\sum_{n=0}^{\infty}z^{n+1}(\widetilde{K}^n\delta)(\eta;z,\beta), \tag{3.8}$$

якщо взаємодія задовольняє умову **(A)**, а значення хімічної активності z належать кругу:

$$|z|\leq e^{-2\beta B}\xi e^{-\xi C(\beta)}. \tag{3.9}$$

Оптимальним значенням параметра ξ є $\xi=C(\beta)^{-1}$, де

$$C(\beta)=\int\limits_{\mathbb{R}^d}\left|e^{-\beta\phi(|x|)}-1\right|dx. \tag{3.10}$$

4. Наближення скінченного радіуса дії. У цьому пункті ми покажемо, що кореляційні функції $\rho(\cdot\,; z,\beta)$, які відповідають нескінченній системі частинок, що взаємодіють на як завгодно великих відстанях, можна апроксимувати кореляційними функціями, що побудовані на потенціалах фінітної дії. Запишемо потенціал взаємодії ϕ у вигляді

$$\phi \;=\; \phi_R \;+\; \Delta\phi_R,$$

де

$$\phi_R(|x|) \;= \begin{cases} \phi(|x|) & \text{для } |x| \le R, \\ 0 & \text{для } |x| \;>\; R, \end{cases} \qquad \Delta\phi_R(|x|) \;= \begin{cases} \phi(|x|) & \text{для } |x| \ge R, \\ 0 & \text{для } |x| \;<\; R. \end{cases}$$

Нехай $R \ge R_0$. Тоді

$$\Delta\phi_R \le 0.$$

Кореляційні функції, що відповідають потенціалу ϕ_R, позначимо $\rho_R(\cdot\,; z,\beta)$. Очевидно, що вони задовольняють такі самі рівняння Кірквуда – Зальцбурга з оператором $\widetilde{K}_R$, який діє за формулами (3.2), (3.3) з потенціалом ϕ_R замість ϕ:

$$\rho_R = z\widetilde{K}_R\rho_R + z\delta. \tag{4.1}$$

Розв'язки цього рівняння можна зобразити у вигляді ряду

$$\rho_R(\cdot; z,\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1}\left(\left(\widetilde{K}_R\right)^n \delta\right)(\cdot; z,\beta). \tag{4.2}$$

Норма оператора $\widetilde{K}_R$ в E_ξ задовольняє таку ж оцінку, як і норма оператора $\widetilde{K}$ з $C_R(\beta)$ замість $C(\beta)$:

$$\|\widetilde{K}_R\|_\xi \;\le\; e^{2\beta B}\xi^{-1}e^{\xi C_R(\beta)}, \tag{4.3}$$

$$C_R(\beta) = \int\limits_{|x|\le R} \left|e^{-\beta\phi(|x|)} - 1\right| dx = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \left|e^{-\beta\phi_R(|x|)} - 1\right| dx. \tag{4.4}$$

Очевидно, що

$$C(\beta) = C_R(\beta) + \Delta C_R(\beta), \tag{4.5}$$

$$\Delta C_R(\beta) = \int\limits_{|x|>R} \left|e^{-\beta\phi(|x|)} - 1\right| dx = \int\limits_{\mathbb{R}^d} \left|e^{-\beta\Delta\phi_R(|x|)} - 1\right| dx, \tag{4.6}$$

а

$$\lim_{R\to\infty} \Delta C_R(\beta) \;=\; 0.$$

Якщо знову вибрати $\xi = C(\beta)^{-1}$, то

$$\|\widetilde{K}_R\|_\xi \;\le\; e^{2\beta B+1}C(\beta)e^{-\frac{C_R(\beta)}{C(\beta)}} \le \|\widetilde{K}\|_\xi. \tag{4.7}$$

Нескладно довести таке твердження.

Лема 4.1. *Для будь-якого скінченного $\varphi \in E_\xi$, де перші N елементів відмінні від нуля і $\varphi_n \equiv 0$ для всіх $n > N$ та $R > R_0$ (див. (2.2)), виконується нерівність*

$$\|(\widetilde{K} - \widetilde{K}_R)\varphi\|_\xi \;\le\; ((N-1)\varepsilon_R(\beta) \;+\; \Delta C_R(\beta))\,\|\widetilde{K}\|_\xi \|\varphi\|_\xi, \tag{4.8}$$

де

$$\varepsilon_R(\beta) = 1 - e^{-\beta \frac{\phi_0}{R^{d+\varepsilon_0}}}.$$

Доведення. З визначення операторів $\widetilde{K}$ і $\widetilde{K}_R$ (див. (3.2), (3.3)) отримуємо

$$\Big((\widetilde{K} - \widetilde{K}_R)\varphi\Big)(\{x\}) =$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \int\limits_{\mathbb{R}^{kd}} \left[\prod_{i=1}^{k}\Big(e^{-\beta\phi(|x-y_i|)} - 1\Big) - \prod_{i=1}^{k}\Big(e^{-\beta\phi_R(|x-y_i|)} - 1\Big)\right] \varphi(\{y\}_k)(dy)_k. \tag{4.9}$$

Водночас для η з $|\eta| \ge 2$ можна записати

$$\Big((\widetilde{K} - \widetilde{K}_R)\varphi\Big)(\eta) = \sum_{x\in\eta} \widetilde{\pi}(x;\eta\setminus\{x\}) \left[e^{-\beta W(x;\eta\setminus\{x\})} - e^{-\beta W_R(x;\eta\setminus\{x\})}\right] \times$$

$$\times \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \int\limits_{\mathbb{R}^{kd}} \prod_{i=1}^{k}\Big(e^{-\beta\phi(|x-y_i|)} - 1\Big) \varphi(\eta\setminus\{x\}\cup\{y_1,...,y_k\})(dy)_k +$$

$$+ \sum_{x\in\eta} \widetilde{\pi}(x;\eta\setminus\{x\}) e^{-\beta W_R(x;\eta\setminus\{x\})} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \int\limits_{\mathbb{R}^{kd}} \Big[\prod_{i=1}^{k}\Big(e^{-\beta\phi(|x-y_i|)} - 1\Big) -$$

$$- \prod_{i=1}^{k}\Big(e^{-\beta\phi_R(|x-y_i|)} - 1\Big)\Big] \varphi(\eta\setminus\{x\}\cup\{y_1,\ldots,y_k\})(dy)_k. \tag{4.10}$$

У першому рядку (4.10) ми використовуємо нерівність

$$\left|e^{-\beta W(x;\eta\setminus\{x\})} - e^{-\beta W_R(x;\eta\setminus\{x\})}\right| =$$

$$= e^{-\beta W(x;\eta\setminus\{x\})} \left|1 - e^{+\beta \sum\limits_{y\in\eta\setminus\{x\}} \Delta\phi_R(|x-y|)}\right| \le (|\eta|-1)\varepsilon_R(\beta) e^{2\beta B},$$

яка випливає з нерівності

$$e^{-\beta W(x;\eta\setminus\{x\})} \;\le\; e^{2\beta B}$$

внаслідок означень (3.4), (3.5) та тотожності

$$\prod_{i=1}^{k} a_i \;-\; \prod_{i=1}^{k} b_i \;=\; \sum_{i=1}^{k}(a_i \;-\; b_i) a_1 \cdots a_{i-1} b_{i+1} \cdots b_k \tag{4.11}$$

з $a_i = 1$, $b_i = e^{\beta\Delta\phi_R(|x-y_i|)}$, $k = |\eta \setminus \{x_i\}| = |\eta| - 1$.

У рівнянні (4.9) та третьому і четвертому рядках (4.10) знову використано тотожність (4.11) з $a_i = e^{-\beta\phi(|x-y_i|)} - 1$ та $b_i = e^{-\beta\phi_R(|x-y_i|)} - 1$. Далі, використовуючи визначення (3.10), (4.4), (4.5) та (4.6), оцінки (4.3) і (4.7) та властивості оператора $\widetilde{\pi}(x;\eta\setminus\{x\})$ (див. (3.4), (3.5)), отримуємо нерівність (4.8).

Лему 4.1 доведено.

На завершення сформулюємо основний результат роботи у вигляді теореми.

Теорема 4.1. *Припустимо, що потеціал взаємодії* ϕ *є неперервним на* $\mathbb{R}_+ \setminus \{0\}$ *і задовольняє припущення* **(A)**. *Тоді для достатньо малих значень параметра* z, *що задовольняє нерівність* (3.9), *розв'язок рівняння Кірквуда – Зальцбурга* (4.1) *для* ρ_R *прямує до розв'язку рівняння* (3.1) *за нормою простору* E_ξ :

$$\lim_{R\to\infty} \|\rho - \rho_R\|_\xi = 0.$$

Доведення. З (3.8), (4.2) (враховуючи позначення (3.6)) отримуємо

$$\rho - \rho_R = \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1}(\widetilde{K}^n - \widetilde{K}_R^n)\delta.$$

Для оператора $\widetilde{K}^n - \widetilde{K}_R^n$ ми використаємо таку тотожність:

$$\widetilde{K}^n - \widetilde{K}_R^n = \sum_{i=0}^{n} \widetilde{K}^{i-1}(\widetilde{K} - \widetilde{K}_R)\widetilde{K}_R^{n-i}.$$

Вектор $\widetilde{K}_R^{n-i}\delta$ є фінітним і має рівно $n-i+1$ відмінних від нуля компонент. Тоді за лемою 4.1

$$\|(\widetilde{K} - \widetilde{K}_R)\widetilde{K}_R^{n-i}\delta\|_\xi \le ((n-i)\varepsilon_R(\beta) + \Delta C_R(\beta))\,\|\widetilde{K}\|_\xi \|\widetilde{K}_R^{n-i}\delta\|_\xi.$$

Отже,

$$\|(\widetilde{K}^n - \widetilde{K}_R^n)\delta\|_\xi \le \sum_{i=1}^{n} \|\widetilde{K}\|_\xi^{i-1}\|\widetilde{K}\|_\xi\,((n-i)\varepsilon_R(\beta) + \Delta C_R(\beta))\,\|\widetilde{K}_R^{n-i}\delta\|_\xi.$$

Враховуючи (4.7) і те, що $\|\delta\| = 1$, отримуємо нерівність

$$\|\rho - \rho_R\|_\xi \le \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1}\|\widetilde{K}\|_\xi^n \sum_{i=1}^{n} ((n-i)\varepsilon_R(\beta) + \Delta C_R(\beta)) \le$$

$$\le \frac{1}{2} z\varepsilon_R(\beta) \sum_{n=0}^{\infty} z^n \|\widetilde{K}\|_\xi^n n(n+1),$$

де

$$\varepsilon_R(\beta) \ := \ \max\{\varepsilon_R(\beta), \Delta C_R(\beta)\}.$$

Теорему 4.1 доведено.

Насамкінець зазначимо, що доведення аналогічного результату для кореляційних функцій $\rho(\cdot; z, \beta)$ при довільних значеннях параметрів β, z є відкритою математичною проблемою.

1. *Добрушин Р. Л., Синай Я. Г., Сухов Ю. М.* Динамические системы статистической механики // Итоги науки и техники. Сер. Совр. пробл. математики. Фундам. направления / ВИНИТИ. – 1985. – **2**. – С. 235 – 284.
2. *Kerstan J., Mattes K., Mekke J.* Infinitely divisible point processes. – M: Nauka, 1982. – 392 p.
3. *Albeverio S., Kondratiev Yu. G., Röckner M.* Analysis and geometry on configuration spaces // J. Funct. Anal. – 1998. – **154**, № 2. – P. 444 – 500.
4. *Ruelle D.* Statistical mechanics, rigorous results. – New York; Amsterdam: Benjamin, 1969.
5. *Петрина Д. Я., Герасименко В. И., Малышев П. В.* Математические основы классической статистической механики. – Киев: Наук. думка, 1985.
6. *Petrina D. Ya., Gerasimenko V. I., Malyshev P. V.* Mathematical foundations of classical statistical mechanics. Continuous systems. – 2nd ed. – New York; London: Taylor and Francis, 2002. – 336 p.

Одержано 27.07.12,
після доопрацювання — 02.04.13