УДК 517.9

В. І. Скрипник (Ін-т математики НАН України, Київ)

РОЗВ'ЯЗКИ РІВНЯННЯ КІРКВУДА – ЗАЛЬЦБУРГА ДЛЯ ЧАСТИНОК З НЕПАРНИМ ВІДШТОВХУВАННЯМ ФІНІТНОЇ ДІЇ

For a system of classical particles interacting via stable pair integrable and positive many-body (non-pair) finite-range potentials, the existence of a solution of the symmetrized Kirkwood – Salsburg equation is proved.

Для системы классических частиц, взаимодействующих благодаря четному устойчивому интегрируемому и многочастичным (нечетным) положительным финитным (конечного действия) потенциалам, доказано существование решения симметризованного уравнения Кирквуда – Зальцбурга.

Рівняння резольвентного типу Кірквуда – Зальцбурга (КЗ) визначають рівноважний (гіббсівський) стан системи нескінченного числа класичних d-вимірних частинок, який задається за допомогою послідовності кореляційних функцій великого канонічного ансамблю $\rho = \{\rho(x_{(m)}), m \geq 1\}$, $x_{(m)} = (x_1, \ldots, x_m) \in \mathbb{R}^{dm}$ таким чином [1, 2]:

$$\rho = zK\rho + z\alpha,$$

де z — активність частинок, повязана з густиною та оберненою температурою β-термодинамічними параметрами канонічного ансамблю, α — послідовність, всі компоненти якої, крім одиничної першої, дорівнюють нулю, а лінійний оператор задається формулою

$$(KF)(x_{(m)}) = \sum_{n\geq 0}(n!)^{-1}\int K(x_j|x_{(m\backslash j)}; y_{(n)})F(x_{(m\backslash j)}, y_{(n)})dy_{(n)},$$

$$m > 1, \quad j \in (1, \ldots, n),$$

де інтегрування здійснюється по $\mathbb{R}^{dn}$, $(m\backslash j) = (x_1, \ldots, x_{j-1}, x_{j+1}, \ldots, x_m)$. При $m = 1$ доданком з $n = 0$ нехтують.

Інтегральні ядра $K(x_1|x_{(m\backslash 1)}; y_{(n)})$, що залежать від потенціальної енергії $U(x_{(m)})$ (симетричної вимірної функції) m частинок, мають вигляд

$$K(x_j|x_{(m\backslash j)}; y_{(n)}) = \sum_{S'\subseteq(n)} (-1)^{n-|S'|} e^{-\beta W(x_j|x_{(m\backslash j)}, y_{S'})}.$$

Тут S' — підмножина множини цілих додатних чисел $(n) = (1, \ldots, n)$, $|S'|$ — кількість елементів у цій підмножині, $y_S = (y_j, j \in S')$ — послідовність змінних, індексованих елементами цієї підможини,

$$W(x_j|x_{(m\backslash j)}, y_{S'}) = U(x_{(m)}, y_{S'}) - U(x_{(m\backslash j)}, y_{S'}).$$

На просторі симетричних функцій ці ядра задано таким чином:

$$K(x_j|x_{(m\setminus j)};y_{(n)}) = \sum_{l=0}^{n}(-1)^{n-l}C_n^l e^{-\beta W(x_j|x_{(m\setminus j)},y_{(l)})}, \quad C_n^l = \frac{n\,!}{l!(n-l)\,!}.$$

Важливою умовою для існування розв’язку рівняння КЗ є умова стійкості [3]

$$U(x_{(n)}) = \sum_{l<\infty}\frac{1}{l\,!}\sum_{j_k\neq j_l\in(n)}\phi_l(x_{j_{(l)}}) \geq -Bn,$$

де B — константа та ϕ_l — l-частинковий трансляційно-інваріантний потенціал взаємодії (одночастинковий потенціал ϕ_1 є потенціалом зовнішнього поля).

Рівняння КЗ для парної взаємодії при деяких умовах на кореляційні функції є наслідком стаціонарної ієрархії ББГКІ [4].

Відомо [3, 5, 6], що у випадку тільки парної додатної $(B = 0)$ взаємодії, тобто при $\phi_l = 0,\ l \neq 2$, та регулярного парного потенціалу ϕ_2 ($|e^{-\beta\phi_2} - 1|$, $\beta > 0$, є інтегровною функцією) оператор КЗ K є обмеженим у просторі послідовностей обмежених функцій E_ξ та розв’язок рівняння КЗ зображується збіжним рядом за степенями комплексного z у крузі скінченного радіуса. Такий же результат має місце у випадку, коли всі потенціали ϕ_l мають скінченну відштовхувальну дію, тобто є додатними функціями з компактним носієм [1, 2] (вони залежать тільки від різниці змінних). Норма у просторі E_ξ послідовностей вимірних обмежених функцій визначається таким чином:

$$\|F\|_\xi = \max_{n\geq 1}\operatorname*{ess\,sup}_{x_{(n)}}\xi^{-n}\big|F(x_{(n)})\big|.$$

Систему частинок з парною стійкою взаємодією з регулярним парним потенціалом уперше розглянув Рюелл. Він запропонував розглядати симетризоване рівняння КЗ для кореляційних функцій

$$\rho = z\tilde{K}\rho + z\alpha$$

та довів обмеженість симетризованого оператора КЗ в E_ξ, тобто довів, що розв’язок симетризованого рівняння КЗ зображується збіжним рядом за степенями комплексного z у крузі скінченного радіуса.

Проблема побудови розв’язків рівняння КЗ у випадку, коли є притягання, не була розв’язана в [1, 2]. У цьому випадку необхідно розглядати симетризоване рівняння КЗ, а це в [1, 2] не було зроблено. У цій статті ми вперше розглядаємо симетризоване рівняння КЗ та показуємо, що воно має розв’язок у випадку, коли всі вищі непарні потенціали є додатними та мають компактний носій (скінченний радіус дії), а парний (недодатний) потенціал є регулярним та стійким. При цьому основним прийомом є оцінка ядер КЗ з допомогою нових рекурентних співвідношень (4), які не було використано в попередній статті автора [7]. В ній було показано, що у випадку взаємодії з недодатними парним та спеціальним тернарним нефінітними потенціалами гіббсівські кореляційні функції можна визначити з допомогою рівняння КЗ з додатковими змінними та парним комплексним потенціалом взаємодії (див. також [8]).

Результат, отриманий у даній статті, узагальнюється на випадок взаємодії з додатковим припущенням, що тернарний потенціал є таким, як і в [7]. Побудову гіббсівських кореляційних функцій (взаємодія є фінітною багаточастинковою) без застосування рівняння КЗ викладено в статті [9].

Перш ніж сформулювати результат визначимо процедуру зазначеної вище симетризації Руелла. Отже, нехай потенціал ϕ_2 є стійким, тобто породжувана ним потенціальна енергія U_2 задовольняє співвідношення $U_2(x_{(n)}) \geq -nB$. Симетризація Руелла проводиться таким чином. Нехай $\chi_{(j,m)}$ — характеристична функція множини

$$W_2(x_j|x_{(m\backslash j)}) = U_2(x_{(m)}) - U_2(x_{(m\backslash j)}) = \sum_{s\in(m\backslash j)} \phi_2(x_j - x_s) \geq -2B.$$

Покладемо

$$\chi^*_{(j,m)} = \left(\sum_{j=1}^{m} \chi_{(j,m)}\right)^{-1} \chi_{(j,m)}.$$

Стійкість потенціалу ϕ_2 означає, що

$$\sum_{j=1}^{m} \chi^*_{(j,m)} = 1,$$

оскільки справджується рівність $\sum_{j=1}^{m} W_2(x_j|x_{(m\backslash j)}) = 2U_2(x_{(m)})$.

Тоді симетризований оператор КЗ задається формулою

$$(\tilde{K}F)(x_{(m)}) = \sum_{j=1}^{m} \chi^*_{(j,m)}(x_{(m)}) \sum_{n\geq 0} \frac{1}{n!} \int K(x_j|x_{(m\backslash j)}; y_{(n)}) F(x_{(m\backslash j)}, y_{(n)}) dy_{(n)}.$$

При $m = 1$ доданком з $n = 0$ нехтуємо. Перемножаючи m-ті компоненти рівняння КЗ на $\chi^*_{(j,m)}$, підсумовуючи по j та беручи до уваги наведену рівність для $\chi^*_{(j,m)}$ в лівій частині рівняння, отримуємо симетризоване рівняння КЗ.

Для норми оператора КЗ маємо нерівність

$$\|\tilde{K}F\|_\xi \leq$$

$$\leq \|F\|_\xi \xi^{-1} \max_m \operatorname*{ess\,sup}_{x_{(m)}} \sum_{n\geq 0} \frac{\xi^n}{n!} \sum_{j=1}^{m} \chi^*_{j,m}(x_{(m)}) \int |K(x_j|x_{(m\backslash j)}; y_{(n)})| dy_{(n)}.$$

Щоб довести обмеженість оператора КЗ в E_ξ, достатньо довести нерівність

$$\chi^*_{(j,m)}(x_{(m)}) \int |K(x_j|x_{(m\backslash j)}; y_{(n)})| dy_{(n)} \leq ab^n \chi^*_{(j,m)}(x_{(m)}). \tag{1}$$

Тоді норма симетризованого оператора КЗ в E_ξ буде визначена нерівністю

$$\|\tilde{K}\|_\xi \leq \xi^{-1} a e^{\xi b}.$$

Найпростіша нерівність відповідає випадку $\xi = b^{-1}$: $\|\tilde{K}\|_{b^{-1}} \leq abe$.

Насамперед доведемо нерівність (1), припустивши, що всі трансляційно-інваріантні потенціали мають радіус дії R, тобто для будь-якого $s \in (l)$ та всіх $k \in (l\backslash s)$

при $|x_s - x_k| \geq R$ справджується рівність $\phi_l(x_1, \ldots, x_l) = 0$. Важливим наслідком цього припущення є рівність

$$K(x_j|x_{(m\setminus j)}; y_{(n)}) = 0, \quad |x_j - y_l| \geq R, \tag{2}$$

для довільного $l \in (n)$. Це випливає з рівностей $W(x|y_{(n)}) = W(x|y_{(n\setminus s)}), |x - - y_s| \geq R$.

На носії $\chi_{(j,m)}$ виконується нерівність

$$W_2(x_j|x_{(m\setminus j)}, y_S) = W_2(x_j|x_{(m\setminus j)}) + W_2(x_j|y_S) \geq -2B - |S|\,|\phi_{0,2}|_+,$$

де $|\phi_2|_+ = \inf\limits_x \phi_2(x)$. Це приводить до нерівності

$$\chi^*_{(j,m)}(x_{(m)})|K(x_j|x_{(m\setminus j)}; y_{(n)})| \leq ab_0^n \chi^*_{(j,m)}(x_{(m)}), \tag{3}$$

в якій $a = e^{2\beta B}$, $b_0 = 2e^{\beta|\phi_2|_+}$. При цьому ми скористались тим, що $\sum_{S\subseteq(n)} 1 = = \sum_{l=0}^n C_n^l = 2^n$.

З рівності (2) випливає, що інтегрування в лівій частині (1) виконується за n-кратним декартовим добутком гіперкулі радіуса R з центром у точці x_j. Отже, має місце (1) з $a = e^{2\beta B}$, $b = 2v_R e^{\beta|\phi_2|_+}$, де v_R — об'єм гіперкулі радіуса R.

Отже, для випадку фінітного парного потенціалу ми довели наступну **теорему**.

Для потенціальної енергії зі стійким парним регулярним потенціалом та додатними непарними фінітними потенціалами симетризований оператор КЗ $\tilde{K}$ є обмеженим у банаховому просторі E_ξ, а симетризоване рівняння КЗ має єдиний розв'язок у E_ξ, що зображується рядом

$$\rho = z \sum_{n\geq 0} z^n \tilde{K}^n \alpha,$$

збіжним у крузі $|z| < \|\tilde{K}\|_\xi^{-1}$.

Доведемо тепер цю теорему для випадку нефінітної парної взаємодії. Важливу роль при доведенні (1) відіграє рекурентне співвідношення, яке ми встановимо нижче:

$$K(x|x_{(m)}; y_{(n)}) =$$

$$= \sum_{S'\subseteq(n)} K(x|x_{(m)}; y_{S'})\chi_{B_x(R)}(y_{S'})G(x|y_{(n)\setminus S'})\chi_{B_x^c(R)}(y_{(n)\setminus S'}), \tag{4}$$

де

$$G(x|y_S) = \sum_{S'\subseteq S} (-1)^{|S\setminus S'|} e^{-\beta W_2(x|y_{S'})} = \prod_{l\in S}(e^{-\beta\phi_2(x-y_l)} - 1),$$

$B_x^c(R) = \mathbb{R}^d \setminus B_x(R)$, $W_2(x|y_S) = \sum_{j\in S} \phi_2(x - y_j)$, $B_x(R)$ — гіперкуля радіуса R з центром у точці x, $\chi_A(y_S)$ — добуток характеристичних функцій множини A, що залежать від змінних, індексованих множиною S. З цього співвідношення та з (3) випливає нерівність

$$\chi^*_{j,m}(x_{(m)})|K(x_j|x_{(m\backslash j)};y_{(n)})| \leq$$

$$\leq e^{2\beta B}\sum_{S'\subseteq(n)}(2e^{\beta|\phi_2|_+})^{|S'|}\chi_{B_x(R)}(y_{S'})G(x_j|y_{(n\backslash S')})\chi^*_{j,m}(x_{(m)}) =$$

$$= e^{2\beta B}\prod_{l=1}^{n}\left[G(x_j|y_l)+2e^{\beta|\phi_2|_+}\chi_{B_x(R)}(y_l)\right]\chi^*_{j,m}(x_{(m)}).$$

В результаті має місце (1) з константами

$$a = e^{2\beta B}, \qquad b = 2v_R\left(e^{\beta|\phi_2|_+}+\int|e^{-\beta\phi_2(x)}-1|dx\right).$$

Встановимо співвідношення (4). Нехай $S = S_1\cup S_2$, тоді

$$W(x|x_{(m)},y_S) = W(x|x_{(m)},y_{S_1})+W_2(x|y_{S_2}), \qquad y_l\notin B_x(R), \quad l\in S_2. \tag{5}$$

Ця рівність є наслідком рівності

$$W_2(x|y_S) = W_2(x|y_{S_1})+W_2(x|y_{S_2}).$$

Підставимо рівність

$$1 = \prod_{j=1}^{n}(\chi_{B_x^c(R)}(y_j)+\chi_{B_x(R)}(y_j)) = \sum_{S'\subseteq(n)}\chi_{B_x(R)}(y_{S'})\chi_{B_x^c(R)}(y_{(n)\backslash S'})$$

у вираз для ядер КЗ. Після підсумовування та застосування (5) отримаємо

$$K(x|x_{(m)};y_{(n)}) =$$

$$= \sum_{S\subseteq(n)}(-1)^{n-|S|}e^{-\beta W(x|x_{(m)},y_S)}\sum_{S'\subseteq(n)}\chi_{B_x(R)}(y_{S'})\chi_{B_x^c(R)}(y_{(n)\backslash S'}) =$$

$$= \sum_{S'\subseteq(n)}\chi_{B_x(R)}(y_{S'})\chi_{B_x^c(R)}(y_{(n)\backslash S'})\times$$

$$\times\sum_{S_2\subseteq(n)\backslash S'}\sum_{S_1\subseteq S'}(-1)^{n-|S_1\cup S_2|}e^{-\beta W(x|x_{(m)},y_{S_1\cup S_2})} =$$

$$= \sum_{S'\subseteq(n)}\chi_{B_x^c(R)}(y_{(n)\backslash S'})\chi_{B_x(R)}(y_{S'})\sum_{S_2\subseteq(n)\backslash S'}\sum_{S_1\subseteq S'}(-1)^{n-|S_1|-|S_2|}\times$$

$$\times e^{-\beta[W(x|x_{(m)},y_{S_1})+W_2(x|x_{(m)},y_{S_2})]} =$$

$$= \sum_{S'\subseteq(n)}\chi_{B_x(R)}(y_{S'})\chi_{B_x^c(R)}(y_{(n)\backslash S'})\sum_{S_1\subseteq S'}(-1)^{|S'|-|S_1|}e^{-\beta W(x|x_{(m)},y_{S_1})}\times$$

$$\times\sum_{S_2\subseteq(n)\backslash S'}(-1)^{n-|S'|-|S_2|}e^{-\beta W_2(x|x_{(m)},y_{S_2})}.$$

Остання рівність і доводить (4).

1. *Greenberg W.* Thermodynamic states of classical systems // Communs Math Phys. – 1971. – **22**. – P. 259 – 268.
2. *Moraal H.* The Kirkwood – Saltsburg equation and the virial expansion for many-body potentials // Phys. Lett. A. – 1976. – **59**, № 1. – P. 9 – 10.
3. *Ruelle D.* Statistical mechanics. Rigorous results. – W. A. Benjamin Inc., 1969. – 219 p.
4. *Gallavotti G., Verboven E.* On the classical KMS boundary conditions // IL Nuovo Cimento B. – 1975. – **28**, № 1. – P. 274 – 286.
5. *Боголюбов Н. Н., Петрина Д. Я., Хацет Б. И.* Математическое описание равновесного состояния класических систем на основе канонического ансамбля // Теорет. и мат. физика. – 1969. – **1**, № 2. – С. 251 – 274.
6. *Petrina D. Ya., Gerasimenko V. I., Malyshev P. V.* Mathematical foundations of classical statistical mechanics. – Holland: Gordon and Breach, 1989. – 332 p.
7. *Скрипник В. І.* Про гіббсівські квантові та класичні системи частинок з трьохчастинковими силами // Укр. мат. журн. – 2006. – **58**, № 7. – С. 976 – 996.
8. *Скрипник В. І.* Метод функціонального інтегралу для гіббсівських систем з багаточастинковими потенціалами. I // Теорет. и мат. физика. – 1991. – **88**, № 1. – С. 115 – 121.
9. *Rebenko A.* Polymer expansions for continuous classical systems with many-body interaction // Meth. Funct. Anal. and Top. – 2005. – **11**, № 1. – P. 73 – 87.

Одержано 15.12.06