Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. И. Калинин, О полноте описания равновесного канонического ансамбля двухчастичной функцией распределения, *ТМФ*, 2005, том 145, номер 1, 123–132

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1887>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.147.182.235

26 апреля 2023 г., 14:24:20

© 2005 г.

М. И. Калинин*

О ПОЛНОТЕ ОПИСАНИЯ РАВНОВЕСНОГО КАНОНИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ ДУХЧАСТИЧНОЙ ФУНКЦИЕЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Показано, что в равновесном классическом каноническом ансамбле частиц с парным взаимодействием полную функцию распределения Гиббса можно однозначно выразить через двухчастичную функцию распределения. Это означает, что при заданных числе частиц N равновесной системы, ее объеме V и температуре T двухчастичная функция распределения полностью описывает исследуемую N -частичную систему, как и распределение Гиббса. Последнее представлено в виде разложения в степенной ряд по двухчастичной функции распределения. В качестве примера выписан линейный член этого разложения.

Ключевые слова: равновесный канонический ансамбль, распределение Гиббса, двухчастичная функция распределения, нелинейное операторное уравнение, однозначная разрешимость.

1. ВВЕДЕНИЕ

В классической статистической механике все свойства замкнутой системы N частиц в объеме V определяются функцией распределения $F(t, \{q, p\})$, где $\{q, p\}$ – совокупность фазовых переменных: координат q_i и импульсов p_i частиц. Для системы с аддитивным взаимодействием вводятся приведенные частичные функции распределения [1], [2], с помощью которых вычисляются термодинамические характеристики системы. Считается, что частичные функции распределения содержат меньше информации о системе, чем полная N -частичная функция распределения. При этом чем ниже порядок функции распределения, тем меньше информации она содержит [1]. Однако доказательства этого утверждения в литературе не встречается.

В то же время известно, что для равновесной системы невзаимодействующих частиц распределение Гиббса $F(\{q, p\})$ распадается в произведение одночастичных функций распределения [1]. А это означает, что одночастичная функция содержит всю статистическую информацию о такой системе.

В данной работе рассматривается вопрос об эквивалентности описания равновесной системы взаимодействующих частиц полным распределением Гиббса и двухчастичной функцией распределения. Доказывается, что распределение Гиббса равновесной системы с парным взаимодействием между частицами можно однозначно выразить через

*Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы, Москва, Россия. E-mail: kalinin@rgs.phys.msu.su

двухчастичную функцию распределения. Следовательно, вся информация о равновесном каноническом ансамбле, которая имеется в распределении Гиббса, полностью содержится и в двухчастичной функции распределения.

2. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Будем рассматривать замкнутую систему N частиц с парным аддитивным взаимодействием при отсутствии внешнего поля, находящуюся в объеме V трехмерного¹⁾ евклидова пространства при температуре T . Равновесное состояние этой системы определяется функцией распределения Гиббса²⁾

$$D_N(q_1, \dots, q_N) = Q_N^{-1} e^{-\beta U_N(q_1, \dots, q_N)}, \quad q_i \in \mathcal{V}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где $\beta = 1/(kT)$, k – постоянная Больцмана, $\mathcal{V}$ – область трехмерного евклидова пространства объема V , в которой находится рассматриваемая система. Энергия взаимодействия между частицами равна

$$U_N(q_1, \dots, q_N) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} u_2(q_i, q_j). \quad (2)$$

Потенциал взаимодействия $u_2(q, q')$ является вещественной симметричной функцией. Конфигурационный интеграл Q_N определяется условием нормировки функции распределения (1) и имеет вид

$$Q_N = \int dq_1 \dots dq_N \prod_{1 \leq i < j \leq N} e^{-\beta u_2(q_i, q_j)}. \quad (3)$$

Здесь предполагается, что конфигурационные переменные q принадлежат области $\mathcal{V}$, и далее это специально не оговаривается. Интегрирование выполняется по всей этой области, и область интегрирования явно не указывается.

Из выражений (1)–(3) видно, что статистические свойства рассматриваемой системы частиц полностью определяются заданием всего одной функции, зависящей от двух конфигурационных переменных – парного потенциала взаимодействия $u_2(q, q')$ и трех внешних параметров N , V и T . Естественно возникает следующее предположение: если систему можно описать с помощью одной функции двух переменных, то ее с таким же успехом можно полностью описать с помощью другой функции двух переменных, связанной с этой, а именно, с помощью двухчастичной функции распределения. Покажем, что это действительно так.

Будем определять s -частичные функции распределения так же, как и в книге [1]. Все частичные функции распределения вещественны, неотрицательны и симметричны по

¹⁾Трехмерность пространства не является существенной. Размерность может принимать любое конечное значение. Существенным является только конечность объема V .

²⁾В действительности здесь, как и в [2], рассматривается только конфигурационная часть функции распределения Гиббса, так как в равновесии импульсная часть отделяется от нее и полностью факторизуется одночастичными распределениями Максвелла [1].

своим переменным. Выпишем явно выражение для двухчастичной функции распределения:

$$\begin{aligned} F_2(q_1, q_2) &= N(N-1) \int D_N(q_1, \dots, q_N) dq_3 \dots dq_N = \\ &= \frac{N(N-1)}{Q_N} \int \prod_{1 \leq i < j \leq N} e^{-\beta u_2(q_i, q_j)} dq_3 \dots dq_N. \end{aligned} \quad (4)$$

Если из этого выражения можно будет выразить потенциал взаимодействия $u_2(q, q')$ через $F_2(q, q')$, то подставляя его в выражение (1), мы сможем представить полное распределение Гиббса через двухчастичную функцию распределения. Соответственно, все s -частичные функции распределения также будут выражаться через $F_2(q, q')$.

Прежде чем приступить к исследованию нашей задачи, упростим ее, вводя функции $h(q, q')$ и $f(q, q')$ такие, что

$$\frac{1}{\varkappa} e^{-\beta u_2(q_i, q_j)} = 1 + h(q, q'), \quad \varkappa = \frac{1}{V^2} \int dq dq' e^{-\beta u(q, q')}, \quad (5)$$

$$F_2(q, q') \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N(N-1)}{V^2} \{1 + f(q, q')\}, \quad (6)$$

и нелинейный оператор

$$\Phi(h) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{V^2}{Q_N} \int \prod_{1 \leq i < j \leq N} [1 + h(q_i, q_j)] dq_3 \dots dq_N - 1. \quad (7)$$

В результате выражение (4) для двухчастичной функции распределения преобразуется в следующее соотношение:

$$\mathcal{F}(h, f) \stackrel{\text{def}}{=} f - \Phi(h) = 0, \quad (8)$$

которое мы рассматриваем как операторное уравнение относительно функции $h(q, q')$.

В функциональном анализе сформулирован ряд теорем о неявных функциях для операторов различной степени гладкости (см., например, [3], [4]). Мы воспользуемся теоремой для аналитических операторов в банаховых пространствах в форме, изложенной в книге [3] (теорема 22.2).

ТЕОРЕМА. Пусть $\mathcal{F}(h, f)$ – аналитический оператор в $D_r(h^{(0)}, E_1) \oplus D_\rho(f^{(0)}, E)$ со значениями в E_2 . Пусть оператор $B \stackrel{\text{def}}{=} -\partial \mathcal{F}(h^{(0)}, f^{(0)}) / \partial h$ имеет ограниченный обратный. Тогда найдутся положительные числа ρ_1 и r_1 такие, что в шаре $D_{r_1}(h^{(0)}, E_1)$ существует единственное решение $h = \chi(f)$ уравнения $\mathcal{F}(h, f) = 0$ с дополнительным условием $\mathcal{F}(h^{(0)}, f^{(0)}) = 0$. Это решение определено в шаре $D_{\rho_1}(f^{(0)}, E)$, является в нем аналитическим и удовлетворяет условию $h^{(0)} = \chi(f^{(0)})$.

Здесь $D_r(x_0, \mathcal{E})$ – шар радиуса r в окрестности элемента x_0 нормированного пространства $\mathcal{E}$, знак $\oplus$ обозначает алгебраическую сумму множеств, $\partial \mathcal{F} / \partial h$ – производная Фреше [4], [5] нелинейного оператора $\mathcal{F}$; $h^{(0)}$ и $f^{(0)}$ – заданные элементы пространств E_1 и E , соответственно.

Для исследования вопроса о существовании и единственности решения уравнения (8) необходимо проверить выполнение условий теоремы для рассматриваемой системы. Вначале конкретизируем дополнительное условие, входящее в формулировку теоремы. Его легко получить, полагая

$$h^{(0)}(q, q') = 0, \quad f^{(0)}(q, q') = 0. \quad (9)$$

Такой выбор функций $h^{(0)}$ и $f^{(0)}$ соответствует системе невзаимодействующих частиц.

3. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО СУЩЕСТВОВАНИЯ РЕШЕНИЯ

Определим пространства E_1 и E , на которых задан оператор $\mathcal{F}$, и пространство E_2 , содержащее область значений этого оператора. Мы будем рассматривать системы частиц с потенциалами взаимодействия $u_2(q, q')$, ограниченными снизу почти для всех $q, q' \in \mathcal{V}$. Все обычно используемые в статистической механике потенциалы этому условию удовлетворяют. Совокупность таких функций $u_2(q, q')$ образует линейное пространство, которое мы обозначим через $\mathcal{U}$. Кроме того, функции $u_2(q, q')$ симметричны по своим аргументам.

Пользуясь свойствами вещественных функций и интегралов от них [5], легко показать, что для таких потенциалов взаимодействия функции $h(q, q')$ ограничены почти всюду в $\mathcal{V}$. Линейное пространство таких функций становится полным нормированным пространством существенно ограниченных функций L_∞ при введении нормы по правилу

$$\|h\| = \text{vrai sup}_{(q, q') \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}} |h(q, q')|, \quad (10)$$

где vrai sup обозначает существенную точную верхнюю грань функции на указанном множестве, а $\mathcal{V} \times \mathcal{V}$ – прямое произведение множества $\mathcal{V}$ на себя, т.е. множество упорядоченных пар (q, q') [4], [5]. Кроме того, $h(q, q')$ является симметричной функцией. Следовательно, $h(q, q') \in L_\infty^{(s)}(\mathcal{V} \times \mathcal{V})$. Индекс (s) означает, что используется пространство симметричных функций. Легко проверить, что пространство $L_\infty^{(s)}(\mathcal{V} \times \mathcal{V})$ с нормой (10) является полным. Поскольку конфигурационный интеграл положителен, то можно показать, что функция $f(q, q')$ также принадлежит пространству $L_\infty^{(s)}(\mathcal{V} \times \mathcal{V})$.

В силу определений (5) и (6) функции $h(q, q')$ и $f(q, q')$ удовлетворяют условиям

$$\int h(q, q') dq dq' = 0, \quad \int f(q, q') dq dq' = 0. \quad (11)$$

Множество функций, удовлетворяющих этим условиям, образует подпространство в пространстве $L_\infty^{(s)}(\mathcal{V} \times \mathcal{V})$. Введем в нем норму (10) (индуцированную норму) [4]. Легко проверить, что в этой норме указанное подпространство является полным пространством. Оно и будет пространством E_1 функций $h(q, q')$, а также пространством E функций $f(q, q')$. Нетрудно убедиться, что область значений оператора $\Phi(h)$, а значит, и оператора $\mathcal{F}(h, f)$ принадлежит тому же пространству ($E_2 = E$).

Таким образом, задача (8) определена на пространствах $E_1 = E_2 = E$ существенно ограниченных симметричных функций, удовлетворяющих условиям (11). Областью определения $D(\mathcal{F})$ оператора $\mathcal{F}(h, f)$ является множество пар (h, f) функций, удовлетворяющих условиям $h > -1$, $f > -1$ в прямом произведении пространств $E_1 \times E$. Везде в области определения оператор $\mathcal{F}(h, f)$ является аналитическим.

Вычислим оператор B , определенный в формулировке теоремы, для выбранных значений функций $h^{(0)}$ и $f^{(0)}$ (9). Он является линейным оператором, действующим из пространства E_1 в пространство E_2 . Используя определение (8), получаем $B = d\Phi(h^{(0)})/dh$. Подставляя сюда выражение (7) для оператора $\Phi(h)$ и используя условие $h^{(0)} = 0$, получаем

$$(Bh)(q, q') = h(q, q') + (N-2)[\bar{h}(q) + \bar{h}(q')] + \frac{(N-2)(N-3)}{2}\bar{\bar{h}},$$

где для любой суммируемой функции $y(q, q')$ мы ввели обозначения

$$\bar{y}(q) = \frac{1}{V} \int y(q, q') dq', \quad \bar{\bar{y}} = \frac{1}{V^2} \int y(q, q') dq dq'. \quad (12)$$

Функция $h(q, q')$ удовлетворяет условию $\bar{\bar{h}} = 0$ (см. (11)). Тогда оператор B принимает вид

$$(Bh)(q, q') = h(q, q') + (N-2)[\bar{h}(q) + \bar{h}(q')]. \quad (13)$$

Областью определения оператора B является все пространство E_1 : $D(B) = E_1$, а областью его значений – пространство E_2 : $R(B) = E_2$. Оператор B является ограниченным. Его норма, определяемая выражением (см. [4])

$$\|B\| = \sup_{\substack{h \in E_1 \\ \|h\|=1}} \|Bh\|, \quad (14)$$

легко оценивается на основании выражения (13). Используя свойства норм, получаем следующее неравенство:

$$\|Bh\| \leq \|h(q, q')\| + (N-2)\|\bar{h}(q) + \bar{h}(q')\|. \quad (15)$$

Оценивая норму второго слагаемого и используя определение (14), получаем, что

$$\|B\| \leq 2N-3. \quad (16)$$

Теперь определим ядро (пространство нулей) оператора B , т.е. найдем решение однородного уравнения $Bh = 0$. Оно имеет единственное решение $h = 0$, следовательно, пространство нулей оператора B тривиально. Это означает, что соответствующее неоднородное уравнение $Bh = f$ однозначно разрешимо. Его решение имеет вид

$$h(q, q') = (B^{-1}f)(q, q') = f(q, q') - \frac{N-2}{N-1}[\bar{f}(q) + \bar{f}(q')]. \quad (17)$$

Легко видеть, что оператор B^{-1} определен для всех $f \in E_2$, т.е. действительно $R(B) = E_2$. Также нетрудно проверить выполнение условий $B^{-1}B = BB^{-1} = 1$. Таким образом, оператор B^{-1} является и левым, и правым обратным. Следовательно, он является обратным оператором к B [6]. Оператор B^{-1} ограничен. Его норму, как и в случае оператора B , легко оценить сверху:

$$\|B^{-1}\| \leq \frac{3N-5}{N-1}. \quad (18)$$

Таким образом, все условия теоремы для задачи (8), (9) выполнены. Следовательно, существует единственное решение $h = \chi(f)$, однозначно выражающее функцию $h(q, q')$ из пространства E_1 через функцию $f(q, q')$ из пространства $E(= E_1)$. Это решение определено в шаре $D_{\rho_1}(f^{(0)}, E)$, аналитично в нем и удовлетворяет условию $\chi(0) = 0$. Мы не будем здесь приводить доказательства теоремы. Оно изложено во многих книгах по функциональному анализу. Укажем здесь только процедуру построения решения уравнения (8).

4. ПРОЦЕДУРА ПОСТРОЕНИЯ РЕШЕНИЯ

Введем вспомогательную функцию $g(q, q')$ соотношением

$$\frac{1}{V^{N-2}} \int \prod_{1 \leq i < j \leq N} [1 + h(q_i, q_j)] dq_3 \dots dq_N \stackrel{\text{def}}{=} 1 + g(q_1, q_2). \quad (19)$$

Эта функция является полиномиальным оператором $g(h)$ степени $\mathcal{N} = N(N-1)/2$, действующим из пространства E_1 в пространство $L_\infty^{(s)}(\mathcal{V} \times \mathcal{V})$. Раскрывая произведение в равенстве (19), запишем его в виде

$$g(h) = \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} g_s(h), \quad (20)$$

где $g_s(h)$ — однородный степенной оператор степени s по h ,

$$g_s(h) = \frac{1}{V^{N-2}} \int \dots \int dq_3 \dots dq_N \sum_{1 \leq K_1 < \dots < K_s \leq \mathcal{N}} h(X_{K_1}) \dots h(X_{K_s}). \quad (21)$$

Каждый такой оператор $g_s(h)$ в конфигурационном пространстве является функцией двух переменных q и q' , которую мы будем обозначать, когда это будет необходимо, как $g_s(q, q')$. При этом $g_1(h) = Bh$. Здесь мы ввели следующие обозначения: K_l — обобщенные индексы, пробегающие значения от 1 до $\mathcal{N}$, нумерующие все возможные различные пары индексов (ij) , удовлетворяющие условию $i < j$, которые можно составить из чисел $1, 2, \dots, N$; X_K обозначает соответствующую пару координат (q_i, q_j) . Такое взаимно однозначное соответствие $K \leftrightarrow (ij)$ легко построить.

С помощью введенной операторной функции $g(h)$ уравнение (8) преобразуется к следующему виду:

$$f - \frac{g(h) - \bar{g}(h)}{1 + \bar{g}(h)} = 0. \quad (22)$$

При $|\bar{g}| < 1$ дробь в левой части уравнения (22) можно разложить в ряд, при этом

$$f - (g - \bar{g}) \sum_{k=0}^{\infty} (-\bar{g})^k = 0. \quad (23)$$

Используя представление (20), получаем

$$f - \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \sum_{\alpha_1=2}^{\mathcal{N}} \bar{g}_{\alpha_1} \dots \sum_{\alpha_k=2}^{\mathcal{N}} \bar{g}_{\alpha_k} \sum_{l=1}^{\mathcal{N}} (g_l - \bar{g}_l) = 0.$$

Здесь суммирование по $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$ выполняется, начиная с 2, а не с 1, поскольку $\bar{g}_1 = 0$. В произведении сумм по $\alpha_1, \dots, \alpha_k, l$ можно поменять порядок суммирования следующим образом:

$$\sum_{\alpha_1=2}^{\mathcal{N}} \dots \sum_{\alpha_k=2}^{\mathcal{N}} \sum_{l=1}^{\mathcal{N}} = \sum_{s=2k+1}^{\mathcal{N}(k+1)} \sum_{\substack{\alpha_1 + \dots + \alpha_k + l = s \\ 2 \leq \alpha_i \leq \mathcal{N}, 1 \leq l \leq \mathcal{N}}}.$$

Тогда наше уравнение переписывается в виде

$$f - \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \sum_{s=2k+1}^{\mathcal{N}(k+1)} \sum_{\substack{\alpha_1+\dots+\alpha_k+l=s \\ 2 \leq \alpha_i \leq \mathcal{N}, 1 \leq l \leq \mathcal{N}}} \bar{g}_{\alpha_1} \dots \bar{g}_{\alpha_k} (g_l - \bar{g}_l) = 0. \quad (24)$$

Меняем здесь порядок суммирования по k и по s . Суммирование по s выполняется в пределах $1 \leq s < \infty$. Для каждого фиксированного s суммирование по k выполняется по всем целочисленным значениям, лежащим в области $s/\mathcal{N}-1 \leq k \leq (s-1)/2$. Нижний предел $\underline{k}(s)$ суммирования по k определяется как минимальное целое число из указанной области, а верхний предел $\bar{k}(s)$ – как максимальное целое число из этой области. Эти значения нетрудно вычислить:

$$\underline{k}(s) = \left\lceil \frac{s-1}{\mathcal{N}} \right\rceil, \quad \bar{k}(s) = \lfloor (s-1)/2 \rfloor, \quad s \geq 1, \quad (25)$$

где $[x]$ – целая часть числа x . В результате уравнение (24) можно переписать в виде

$$f - \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=\underline{k}(s)}^{\bar{k}(s)} (-1)^k \sum_{\substack{\alpha_1+\dots+\alpha_k+l=s \\ 2 \leq \alpha_i \leq \mathcal{N}, 1 \leq l \leq \mathcal{N}}} \bar{g}_{\alpha_1} \dots \bar{g}_{\alpha_k} \cdot (g_l - \bar{g}_l) = 0. \quad (26)$$

Выделяя в этом равенстве выражение для $s=1$, равное $g_1(h) = Bh$, и перенося его в правую часть равенства, получаем

$$Bh = f + \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{k=\underline{k}(s)}^{\bar{k}(s)} (-1)^{k+1} \sum_{\substack{\alpha_1+\dots+\alpha_k+l=s \\ 2 \leq \alpha_i \leq \mathcal{N}, 1 \leq l \leq \mathcal{N}}} \bar{g}_{\alpha_1} \dots \bar{g}_{\alpha_k} \cdot (g_l - \bar{g}_l). \quad (27)$$

Сумма, стоящая в правой части, представляет собой ряд по степеням функции h , начинающийся с квадратичного члена. Перепишем это уравнение в компактной форме

$$h = B^{-1}f + B^{-1} \sum_{s=2}^{\infty} B_s(h), \quad (28)$$

где мы ввели обозначение

$$B_s(h) = \sum_{k=\underline{k}(s)}^{\bar{k}(s)} (-1)^{k+1} \sum_{\substack{\alpha_1+\dots+\alpha_k+l=s \\ 2 \leq \alpha_i \leq \mathcal{N}, 1 \leq l \leq \mathcal{N}}} \bar{g}_{\alpha_1}(h) \dots \bar{g}_{\alpha_k}(h) [g_l(h) - \bar{g}_l(h)], \quad s \geq 2. \quad (29)$$

При этом $B_s(h)$ – однородный степенной оператор по h степени s . Решение уравнения (28), как и в [3], будем искать в виде разложения в ряд по f .

Вначале определим полилинейные операторы

$$G_s(h_1, \dots, h_s) = \frac{1}{V^{N-2}} \int dq_3 \dots dq_N \times \\ \times \sum_{1 \leq K_1 < \dots < K_s \leq \mathcal{N}} h_1(X_{K_1}) \dots h_s(X_{K_s}), \quad s = 1, 2, \dots \quad (30)$$

Здесь все функции h_i принадлежат пространству E_1 . Область значений всех таких операторов принадлежит пространству $L_\infty^{(s)}(\mathcal{V} \times \mathcal{V})$, т.е. они определяют функции от двух конфигурационных переменных, и мы можем ввести операторы (точнее, функционалы) $\overline{\overline{G}}_s(h_1, \dots, h_s)$ с помощью формул (12). Эти s -линейные операторы порождают степенные операторы g_s и $\bar{g}_s$ вида

$$g_s(h) = G_s(h, \dots, h), \quad \bar{g}_s(h) = \overline{\overline{G}}_s(h, \dots, h), \quad s = 1, 2, 3, \dots \quad (31)$$

С помощью операторов G_s и $\overline{\overline{G}}_s$ построим другую систему полилинейных операторов

$$\begin{aligned} P_s(h_1, \dots, h_s) &= \sum_{k=\underline{k}(s)}^{\bar{k}(s)} (-1)^{k+1} \sum_{\substack{\alpha_1 + \dots + \alpha_k + l = s \\ 2 \leq \alpha_i \leq \mathcal{N}, 1 \leq l \leq \mathcal{N}}} \overline{\overline{G}}_{\alpha_1}(h_1, \dots, h_{\alpha_1}) \dots \\ &\dots \overline{\overline{G}}_{\alpha_k}(h_{s-l-\alpha_k+1}, \dots, h_{s-l}) [G_l(h_{s-l+1}, \dots, h_s) - \overline{\overline{G}}_l(h_{s-l+1}, \dots, h_s)], \quad s \geq 2, \end{aligned} \quad (32)$$

которая порождает степенные операторы

$$B_s(h) = P_s(h, \dots, h), \quad s = 2, 3, \dots$$

Тогда уравнение (28) можно переписать в виде

$$h = B^{-1}f + B^{-1} \sum_{s=2}^{\infty} P_s(h, \dots, h). \quad (33)$$

Записанное в такой форме уравнение позволяет построить рекуррентную процедуру вычисления его решения в виде степенного ряда по f :

$$h = \sum_{k=1}^{\infty} h_k(f), \quad (34)$$

где $h_k(f)$ – однородные степенные операторы степени k , действующие из пространства E в пространство E_1 . Другими словами, каждая величина $h_k(f)$ является симметричной функцией двух конфигурационных переменных.

Подставляя последнее равенство в уравнение (33), получаем

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} h_k(f) &= B^{-1}f + B^{-1} \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{k_1=1}^{\infty} \dots \sum_{k_s=1}^{\infty} P_s(h_{k_1}(f), \dots, h_{k_s}(f)) = \\ &= B^{-1}f + B^{-1} \sum_{s=2}^{\infty} \sum_{k=s}^{\infty} \sum_{k_1 + \dots + k_s = k} P_s(h_{k_1}(f), \dots, h_{k_s}(f)). \end{aligned}$$

Меняя в последнем выражении порядок суммирования по k и по s , приходим к соотношению

$$\sum_{k=1}^{\infty} h_k(f) = B^{-1}f + B^{-1} \sum_{k=2}^{\infty} \sum_{s=2}^k \sum_{k_1 + \dots + k_s = k} P_s(h_{k_1}(f), \dots, h_{k_s}(f)). \quad (35)$$

Приравнивая согласно теореме о единственности аналитических операторов [7] члены одинаковых порядков по f , получаем рекуррентную систему для определения операторов $h_k(f)$:

$$\begin{aligned} h_1(f) &= B^{-1}f, \\ h_k(f) &= B^{-1} \sum_{s=2}^k \sum_{k_1+\dots+k_s=k} P_s(h_{k_1}(f), \dots, h_{k_s}(f)), \quad k = 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (36)$$

Из нее последовательно вычисляются все члены разложения (34). Его сходимость к аналитической операторной функции $\chi(f)$ устанавливается методом Коши–Гурса, изложенным в [3] при доказательстве теоремы 22.2.

Итак, мы доказали, что задача (8), (9) имеет единственное решение $h = \chi(f)$, это решение аналитично по f и удовлетворяет дополнительному условию $\chi(0) = 0$. Так как функцию распределения (1) можно представить в виде отношения двух операторных полиномов степени $\mathcal{N}$ по функции h со знаменателем Q_N , не обращающимся в нуль, то распределение Гиббса (1) является аналитической операторной функцией относительно f . Мы не можем получить явное выражение для нее, но можем выразить ее в виде ряда по степеням f . Запишем

$$D_N(q_1, \dots, q_N) = V^{-N} [1 + \varphi(q_1, \dots, q_N)], \quad (37)$$

где функция $\varphi(q_1, \dots, q_N)$ является аналитическим оператором $\varphi(f)$ по $f(q, q')$. Его можно записать в виде операторного ряда по степеням f :

$$\varphi(f) = \sum_{r=1}^{\infty} \varphi_r(f). \quad (38)$$

На основании определений (4) и (6) двухчастичной функции распределения и функции f и в силу теоремы о единственности аналитических операторов [7] функции $\varphi_r(q_1, \dots, q_N)$ удовлетворяют соотношениям

$$\frac{1}{V^{N-2}} \int dq_3 \dots dq_N \varphi_r(q_1, \dots, q_N) = f(q_1, q_2) \delta_{1r}, \quad r = 1, 2, \dots, \quad (39)$$

где δ_{ir} – символ Кронекера.

Подстановка разложения (34) в выражение для функции распределения Гиббса и перегруппировка слагаемых, как и выше, позволяют однозначно выразить все члены φ_k разложения (38) через единственную функцию f . Приводить здесь вывод и общее выражение для членов разложения мы не будем ввиду их громоздкости. Приведем лишь в качестве примера выражение для члена первого порядка по f :

$$\varphi_1(q_1, \dots, q_N) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} f(q_i, q_j) - (N-2) \sum_{i=1}^N \bar{f}(q_i).$$

Легко проверить, что свойство (39) для этой функции выполняется.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании теоремы о существовании и единственности решения нелинейного операторного уравнения (8) показано, что распределение Гиббса (1) однозначно выражается через двухчастичную функцию распределения. В свою очередь, двухчастичная функция распределения по определению однозначно выражается через полную функцию распределения Гиббса. Отсюда следует, что преобразование $D_N(q_1, \dots, q_N) \mapsto F_2(q, q')$ является взаимно однозначным, и описание равновесного канонического ансамбля двухчастичной функцией распределения полностью эквивалентно описанию с помощью распределения Гиббса. Следовательно, двухчастичная функция распределения содержит всю информацию о системе, которая содержится в полном распределении Гиббса, как, впрочем, и все s -частичные функции распределения при $s > 2$, которые также однозначно выражаются через двухчастичную функцию.

Одночастичная функция распределения $F_1(q)$ содержит, по-видимому, не всю информацию о системе частиц с парным взаимодействием. Если попытаться осуществить указанную программу для нее, то не удастся удовлетворить все условия теоремы о существовании и единственности решения. Ядро соответствующего оператора B будет состоять из произвольных функций $h(q, q') \in E_1$, ограниченных одним условием $\bar{h}(q) \equiv 0$. Такой оператор B не имеет обратного.

Выбор функции $h(q, q')$ в виде (5) означает факторизацию пространства $\mathcal{U}$ потенциалов взаимодействия по многообразию постоянных на $\mathcal{V}$ функций [8], т.е. отождествление всех потенциалов взаимодействия, отличающихся на произвольную постоянную и выбор конкретной функции представителя из каждой такой совокупности. Физический результат от такого выбора не зависит. Действительно, так как изменение потенциала на постоянную величину не меняет функций распределения, то полученный выше результат от способа факторизации не зависит. При исследовании термодинамического предела обычно используется другой способ факторизации, а именно, рассматриваются потенциалы взаимодействия, обращающиеся в нуль при разнесении частиц на бесконечно большое расстояние.

Список литературы

- [1] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т.1. М.: Мир, 1978.
- [2] Н. Н. Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике. В сб.: Избранные труды в трех томах. Т.2. Киев: Наукова думка, 1970. С. 99–196; М.: Гостехиздат, 1946.
- [3] М. М. Вайнберг, В. А. Треногин. Теория ветвления решений нелинейных уравнений. М.: Наука, 1969.
- [4] Л. В. Канторович, Г. П. Акилов. Функциональный анализ. М.: Наука, 1977.
- [5] Б. З. Вулих. Краткий курс теории функций вещественной переменной. М.: Наука, 1973.
- [6] В. А. Треногин. Функциональный анализ. М.: Наука, 1980.
- [7] Э. Хилле, Р. Ф. Филлипс. Функциональный анализ и полугруппы. М.: ИЛ, 1962.
- [8] С. Г. Крейн (ред.). Функциональный анализ. М.: Наука, 1972.

Поступила в редакцию 21.VII.2004 г.,
после доработки 24.I.2005 г.