Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Э. А. Аринштейн, Р. М. Ганопольский, Многочастичные прямые корреляции,
ТМФ, 2002, том 131, номер 2, 278–287

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf330>

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: 54.237.59.107

26 апреля 2023 г., 11:25:52

© 2002 г. Э. А. Аринштейн*, Р. М. Ганопольский*

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ПРЯМЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ

Подробно рассмотрены свойства многочастичных прямых корреляций. Построена система последовательных приближений для производящего функционала прямых корреляционных функций, причем этот подход, в отличие от иерархии Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона, не требует аппроксимации старших корреляций. Эти приближения определяют соответствующие аппроксимации термодинамического потенциала. В явном виде построены неприводимые части многочастичных прямых корреляций.

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая статья является продолжением работы [1], в которой показано, что все многочастичные плотности (и корреляции) определяются из вариационной задачи для термодинамического потенциала (там же приведена библиография по этому вопросу). В статье [1] проблема нахождения многочастичных корреляций сведена к задаче определения минимума функционала

$$A(\rho) = \int \rho(q) \ln \left(\frac{\rho}{z} \right) dq + R(\xi) \otimes_{\xi} \Phi_0(\xi) - \int_0^1 dt (R(\xi) - R(\xi | t)) \otimes_{\xi} Q(\xi; \lambda | t) \otimes_{\lambda} \frac{\partial R(\lambda | t)}{\partial t}, \quad (1.1)$$

где ρ — унарная плотность, z — активность, Φ_0 — производящий функционал многочастичных потенциалов:

$$\Phi_0(\xi) = \frac{1}{kT} \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \int \varphi_n(\{n\}) \prod_i \xi(i) d\{n\}, \quad (1.2)$$

R — производящий функционал многочастичных плотностей:

$$R(\xi) = \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \int \rho_n(\{n\}) \prod_i \xi(i) d\{n\}, \quad (1.3)$$

*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия. E-mail: earin@tsu.tmn.ru

Q – вспомогательный функционал, который содержит все прямые корреляционные функции и связан соотношением

$$Q(\eta; \gamma) \otimes_{\gamma} P(\gamma; \xi) = I(\eta; \xi) \quad (1.4)$$

с другим вспомогательным функционалом P , содержащим все полные корреляции:

$$P(\xi; \eta) = P(\eta; \xi) = (R(\xi) + 1)(R(\eta) + 1) - (R(\xi + \eta + \xi\eta) + 1). \quad (1.5)$$

Функциональная свертка (обозначается знаком $\otimes$) определяется выражением

$$A(\xi) \otimes_{\xi} B(\xi) \equiv A\left(\frac{\delta}{\delta\xi}\right) B(\xi)|_{\xi=0} \equiv B\left(\frac{\delta}{\delta\xi}\right) A(\xi)|_{\xi=0}. \quad (1.6)$$

Функционал $I(\eta; \xi) = \exp\left(\int \eta\xi dq\right) - 1$ при свертке является единичным оператором:

$$I(\eta; \xi) \otimes_{\xi} B(\xi) = B(\eta). \quad (1.7)$$

В дальнейшем мы будем использовать функционалы, не содержащие постоянного слагаемого, т.е. удовлетворяющие условию $B(0) = 0$.

Числовой параметр t вводится в функции ρ_n таким образом, чтобы значение $t = 1$ соответствовало исследуемому состоянию, а $t = 0$ – состоянию идеального газа той же плотности. Один из способов введения параметра t – задать зависимость всех полных корреляций от данного параметра по линейному закону

$$M_k(1, \dots, k | t) = tM_k(1, \dots, k), \quad (1.8)$$

где M_k – произвольные корреляционные функции. В данной работе используются аддитивные многочастичные корреляции, производящий функционал которых $G(\eta)$ связан с $R(\eta)$ соотношением

$$R(\eta) = \exp\left(\int \rho\eta dq + G(\eta)\right) - 1, \quad (1.9)$$

а также мультипликативные корреляции, определяемые соотношением

$$\rho_n(\{n\}) = \prod_{1 \leq i \leq n} \rho_1(i) \prod_{1 \leq i \leq j \leq n} (1 + M_2(i, j)) \dots (1 + M_n(\{n\})). \quad (1.10)$$

Функционал A на экстремали является термодинамическим потенциалом системы. Тем самым все определяемые параметры системы являются термодинамически согласованными. Явный вид и свойства функционала Q в работе [1] рассмотрены очень кратко. Указано только, что он состоит из всевозможных цепочек корреляций. Но этого общего свойства недостаточно для практического вычисления выражения (1.1).

Все используемые функционалы определяются своими ядрами:

$$\begin{aligned}
 Q &= Q_{11} + Q_{12} + Q_{21} + Q_{22} + \dots = \\
 &= \int Q_{11}(1; 2) \xi(1) \eta(2) d(1, 2) + \frac{1}{2!} \int Q_{12}(1; 2, 3) \xi(1) \eta(2) \eta(3) d(1, 2, 3) + \\
 &\quad + \frac{1}{2!} \int Q_{21}(1, 2; 3) \xi(1) \xi(2) \eta(3) d(1, 2, 3) + \\
 &\quad + \frac{1}{2!} \frac{1}{2!} \int Q_{22}(1, 2; 3, 4) \xi(1) \xi(2) \eta(3) \eta(4) d(1, 2, 3, 4) + \dots
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

Функционал P определяется своими ядрами аналогично. Ядра функционала Q являются обобщенными прямыми корреляционными функциями.

В настоящей работе функционал Q исследован более подробно. Показано, что можно построить эффективную систему последовательных приближений. При этом:

1. Построено разложение функционала Q по связным диаграммам, дающее правильную (линейную) зависимость термодинамических величин от объема.

2. Найдена процедура, позволяющая исключить недиагональные ядра (Q_{mn} : $m \neq n$). Эти ядра явно выражаются через диагональные (Q_{nn}). Таким образом, сначала определяется Q_{11} , затем Q_{22} . Через эти ядра выражается ядро Q_{21} (и транспонированное к нему Q_{12}) и т.д. Уравнение (1.4) приводит к неоднородным линейным интегральным уравнениям для диагональных ядер (Q_{nn}), позволяющим выразить их через многочастичные корреляционные функции порядка до $2n$.

3. Решение уравнения (1.4) итерационным методом приводит к бесконечной совокупности цепочек определенной структуры, образованных свертками многочастичных корреляций.

2. ВЫДЕЛЕНИЕ СВЯЗНЫХ ЧАСТЕЙ ПРОИЗВОДЯЩИХ ФУНКЦИОНАЛОВ

При формальном решении функционального уравнения (1.4) в разложении функционала Q возникают множители, содержащие члены, пропорциональные различным степеням объема системы. В термодинамическом пределе, с использованием теоремы о связных диаграммах [2], [3], эти члены должны приводить к правильной зависимости термодинамических величин от объема. Хорошо известно, что термодинамический потенциал выражается только через связные диаграммы, пропорциональные объему. Аналогично можно выделить в используемых производящих функционалах P и Q связные части. Тем самым мы перейдем к новому функциональному уравнению (эквивалентному уравнению (1.4)), позволяющему получить правильную зависимость от объема в каждом приближении. Это преобразование также позволяет осуществить разложение многочастичных корреляций по корреляциям меньшей размерности с неприводимыми многочастичными добавками.

Воспользуемся тождеством

$$R^{-1}(\eta\lambda) \otimes_{\lambda} R(\lambda\gamma) = I(\eta; \gamma) \tag{2.1}$$

для преобразования функционального уравнения (1.4):

$$\begin{aligned} R^{-1}(\xi\nu) \otimes_\nu P(\nu; \eta) \otimes_\eta R^{-1}(\eta\lambda) \otimes_\lambda R(\lambda\gamma) \otimes_\gamma Q(\gamma; \tau) \otimes_\tau R(\tau\sigma) = \\ = R^{-1}(\xi\nu) \otimes_\nu I(\nu; \tau) \otimes_\tau R(\tau\sigma) = I(\xi; \sigma). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Рассмотрим отдельно преобразование функционала P , воспользовавшись его определением (1.5):

$$\begin{aligned} R^{-1}(\xi\nu) \otimes_\nu P(\nu; \eta) \otimes_\eta R^{-1}(\eta\lambda) = \\ = \exp\left(\int \xi dq + \int \lambda dq\right) - R^{-1}(\xi\nu) \otimes_\nu R(\nu + \eta + \nu\eta) \otimes_\eta R^{-1}(\eta\lambda), \end{aligned} \quad (2.3)$$

где первое слагаемое получено из соотношения

$$R^{-1}(\xi\nu) \otimes_\nu R(\nu) R(\eta) \otimes_\eta R^{-1}(\eta\lambda) = \exp\left(\int \xi dq + \int \lambda dq\right) - 1. \quad (2.4)$$

Выразив функционалы R и R^{-1} через ядра явно, получим

$$\begin{aligned} R^{-1}(\xi\nu) \otimes_\nu R(\nu + \eta + \nu\eta) \otimes_\eta R^{-1}(\eta\lambda) = \\ = \sum_{m, n, s} \frac{1}{m! n! s!} \int \frac{\rho_{m+n+s}}{\rho_{m+s} \rho_{n+s}} \prod_{m+s} \xi \prod_{n+s} \lambda d\{m+n+s\}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Выделяя мультипликативные корреляции между совокупностями m , n и s ,

$$\begin{aligned} \rho_{m+n+s} &= \rho_m \rho_n \rho_s \prod_{\{m'n's'\}} (1 + M_{m'n's'}), & \{m'\} &\in \{m\}, \\ \rho_{m+s} &= \rho_m \rho_s \prod_{\{m's'\}} (1 + M_{m's'}), & \{n'\} &\in \{n\}, \\ \rho_{n+s} &= \rho_n \rho_s \prod_{\{n's'\}} (1 + M_{n's'}), & \{s'\} &\in \{s\}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

получим отношение многочастичных плотностей в виде

$$\frac{\rho_{m+n+s}}{\rho_{m+s} \rho_{n+s}} = \frac{\prod_{\{m'n's'\}} (1 + M_{m'n's'})}{\rho_s}, \quad (2.7)$$

где в произведение входят только те множители, для которых $\{m'\} \neq \emptyset \cap \{n'\} \neq \emptyset$. Обратную степень плотности также разложим в произведение:

$$\frac{1}{\rho_s} = \frac{1}{\prod_s \rho_1} \prod_{s''} \left(1 - \frac{M_{s''}}{1 + M_{s''}}\right) = \frac{\prod_{s''} (1 + b_{s''})}{\prod_s \rho_1}, \quad b = -\frac{M}{1 + M}. \quad (2.8)$$

Применяя теорему о связанных диаграммах, получим

$$R^{-1}(\xi\nu) \otimes_\nu R(\nu + \eta + \nu\eta) \otimes_\eta R^{-1}(\eta\lambda) = \exp\left(\int \xi dq + \int \lambda dq + \int \frac{\xi\lambda}{\rho_1} dq\right) \times \\ \times \exp\left(\sum_{m,n,s} \frac{1}{m!n!s!} \int \prod_{m',n',s'} M_{m'n's'b_{\{s''\}}} \prod_{m+s} \xi(i) \prod_{n+s} \lambda(j) d\{m+n+s\}\right)_c, \quad (2.9)$$

где индекс “с” обозначает экспоненту только от связанных диаграмм.

Введем новые модифицированные функционалы:

$$\tilde{P}(\xi; \eta) = 1 - \exp\left(\int dq \frac{\xi\eta}{\rho_1} + \sum_{m,n,s} \frac{1}{m!n!s!} \times \right. \\ \left. \times \int \prod_{m',n',s'} M_{m'n's'b_{\{s''\}}} \prod_{m+s} \xi \prod_{n+s} \lambda d\{m+n+s\}\right)_c, \quad (2.10) \\ \tilde{Q}(\eta; \gamma) = R((\eta+1)\nu) \otimes_\nu Q(\nu; \lambda) \otimes_\lambda R(\lambda(\gamma+1)),$$

где было использовано свойство оператора сдвига

$$B(\eta) \exp\left(\int \eta dq\right) \otimes_\eta R(\eta\nu) = B(\eta) \otimes_\eta R((\eta+1)\nu), \quad (2.11)$$

B – произвольный функционал. Тогда соотношение (1.4) запишется в виде

$$\tilde{P}(\xi; \eta) \otimes_\eta \tilde{Q}(\eta; \gamma) = I(\xi; \gamma). \quad (2.12)$$

Выделим в подынтегральном выражении в формуле (1.1) новый функционал $\tilde{Q}$. Для этого снова воспользуемся соотношением (2.1):

$$R(\xi | t') \otimes_\xi Q(\xi; \lambda | t) \otimes_\lambda \frac{\partial R(\lambda | t)}{\partial t} = \\ = R(\xi | t') \otimes_\xi R^{-1}(\xi\eta | t) \otimes_\eta R(\eta\sigma | t) \otimes_\sigma Q(\sigma; \nu | t) \otimes_\nu \\ \otimes_\nu R(\nu\gamma | t) \otimes_\gamma R^{-1}(\gamma\lambda | t) \otimes_\lambda \frac{\partial R(\lambda | t)}{\partial t}, \quad (2.13)$$

где t' принимает два значения: 1 и t . Последняя свертка представляет собой производящий функционал Lr :

$$R^{-1}(\gamma\lambda | t) \otimes_\lambda \frac{\partial R(\lambda | t)}{\partial t} = \frac{\partial \text{Lr}(\gamma | t)}{\partial t} = \exp\left(\int \gamma dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\gamma | t)}{\partial t}, \quad (2.14)$$

где

$$\text{Lr}(\xi) = \sum_n \frac{1}{n!} \int \ln \rho_n \prod_i \xi_i d\{n\}, \quad \text{Lm}(\xi) = \exp\left(-\int \xi dq\right) \text{Lr}(\xi). \quad (2.15)$$

Для преобразования первой свертки разложим $R(\xi | 1)$ в ряд Тейлора:

$$R(\xi | 1) = R(\xi | (1-t)+t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-t)^n}{n!} \frac{\partial^n R(\xi | t)}{\partial t^n} = R(\xi | t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1-t)^n}{n!} \frac{\partial^n R(\xi | t)}{\partial t^n}.$$

Следовательно,

$$(R(\xi | 1) - R(\xi | t)) \otimes_{\xi} R^{-1}(\xi \eta | t) = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1-t)^n}{n!} \frac{\partial^n R(\xi | t)}{\partial t^n} \right) \otimes_{\xi} R^{-1}(\xi \eta | t).$$

Приведем первые члены полученного разложения $\partial R(\xi | t)/\partial t$ и $\partial^2 R(\xi | t)/\partial t^2$, воспользовавшись определением функционала $\text{Lm}(\xi | t)$ (2.15):

$$\begin{aligned} \frac{\partial R(\xi | t)}{\partial t} &= \exp\left(\int \nu dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t} \otimes_{\nu} R(\nu \xi | 1), \\ \frac{\partial^2 R(\xi | t)}{\partial t^2} &= \exp\left(\int \nu dq\right) \frac{\partial^2 \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t^2} \otimes_{\nu} R(\nu \xi | 1) + \\ &\quad + \exp\left(\int \nu dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t} \exp\left(\int \gamma dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\gamma | t)}{\partial t} \otimes_{\nu, \gamma} R(\nu \xi \gamma | 1). \end{aligned}$$

Сворачивая каждую производную с $R^{-1}(\xi \eta | t)$, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial R(\xi | t)}{\partial t} \otimes_{\xi} R^{-1}(\xi \eta | t) &= \exp\left(\int \nu dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t} \otimes_{\nu} R(\nu \xi | 1) \otimes_{\xi} R^{-1}(\xi \eta | t) = \\ &= \exp\left(\int \nu dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t} \otimes_{\nu} \exp\left(\int \nu \eta dq\right) = \\ &= \frac{\partial \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t} \otimes_{\nu} \exp\left(\int (\nu + 1) \eta dq\right) = \frac{\partial \text{Lm}(\eta | t)}{\partial t} \exp\left(\int \eta dq\right), \\ \frac{\partial^2 R(\xi | t)}{\partial t^2} \otimes_{\xi} R^{-1}(\xi \eta | t) &= \exp\left(\int \nu dq\right) \frac{\partial^2 \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t^2} \otimes_{\nu} \exp\left(\int \nu \eta dq\right) + \\ &\quad + \exp\left(\int \nu dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t} \times \\ &\quad \times \exp\left(\int \gamma dq\right) \frac{\partial \text{Lm}(\gamma | t)}{\partial t} \otimes_{\nu, \gamma} \exp\left(\int \nu \xi \gamma dq\right) = \\ &= \frac{\partial^2 \text{Lm}(\eta | t)}{\partial t^2} \exp\left(\int \eta dq\right) + \\ &\quad + \frac{\partial \text{Lm}(\nu | t)}{\partial t} \frac{\partial \text{Lm}(\gamma | t)}{\partial t} \otimes_{\nu, \gamma} \exp\left(\int (\nu \eta \gamma + \nu \eta + \eta \gamma) dq\right) \exp\left(\int \eta dq\right), \end{aligned}$$

где подчеркнут общий множитель $\exp\left(\int \eta dq\right)$. Следовательно, можно упростить следующую свертку в (2.13) с $R(\eta \sigma | t)$:

$$\begin{aligned} \exp\left(\int \eta dq\right) \otimes_{\eta} R(\eta \sigma | t) \otimes_{\sigma} Q(\sigma; \nu | t) \otimes_{\nu} R(\nu \gamma | t) \otimes_{\gamma} \exp\left(\int \gamma dq\right) \text{Lm}(\gamma | t) &= \\ &= \otimes_{\eta} R((\eta + 1)\sigma | t) \otimes_{\sigma} Q(\sigma; \nu | t) \otimes_{\nu} R(\nu(\gamma + 1) | t) \otimes_{\gamma} \text{Lm}(\gamma | t) = \\ &= \otimes_{\eta} \tilde{Q}(\eta; \gamma | t) \otimes_{\gamma} \text{Lm}(\gamma | t). \end{aligned}$$

Важно заметить, что выражение (2.12) имеет тот же вид, что и выражение (1.4). Ввиду того что исходные функционалы в дальнейшем изложении использоваться не будут, прежние обозначения P и Q будут относиться к модифицированным функционалам.

3. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ

Система уравнений (2.12) содержит все ядра вспомогательных функционалов. При ее решении необходимо определять как диагональные, так и недиагональные ядра функционала Q . Покажем, что независимо требуется определять только диагонализированные ядра Q . Недиagonalные ядра будут выражаться через диагонализированные явно.

Процедура диагонализации производится следующим образом.

Все рассматриваемые производящие функционалы являются интегро-степенными. Введем ограничивающий функционал I^n :

$$I^n(\xi; \eta) = \int \xi \eta dq + \frac{1}{2!} \left(\int \xi \eta dq \right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\int \xi \eta dq \right)^3 + \cdots + \frac{1}{n!} \left(\int \xi \eta dq \right)^n. \quad (3.1)$$

Тогда функционал P^n , определенный следующим образом:

$$P^n(\xi; \eta) = I^n(\xi; \gamma) \otimes_{\gamma} P(\gamma; \lambda) \otimes_{\lambda} I^n(\lambda; \eta), \quad (3.2)$$

содержит ядра степени не старше n по каждой из функций ξ и η :

$$P^n(\xi; \eta) = P_{11} + P_{12} + P_{21} + P_{22} + \cdots + P_{nn}. \quad (3.3)$$

Введем также двусторонне-ограничивающий функционал I_m^n :

$$I_m^n = I^n - I^{m-1}. \quad (3.4)$$

Тогда функционал I_m^n будет выделять одно ядро степени n в любом функционале. Введем функционалы Q^n , P_n^n и Q_n^n , определяемые соотношениями

$$Q^n \otimes P^n = I^n, \quad (3.5)$$

$$P_n^n = P^n - P^n \otimes Q^{n-1} \otimes P^n, \quad (3.6)$$

$$Q_n^n \otimes P_n^n = I_n^n. \quad (3.7)$$

Функционал P_n^n зависит только от ядер функционалов P и Q степени не старше n и имеет только одно ядро порядка nn .

Найдем первое приближение для Q_{11} , воспользовавшись соотношением (3.7) для $n = 1$ (в этом случае Q_1^1 равно Q_{11}):

$$P_{11}(\xi; \gamma) \otimes_{\gamma} Q_{11}(\gamma; \eta) = \int \xi \eta dq. \quad (3.8)$$

Разлагая (1.5) и используя мультипликативную корреляцию M_2 , получим P_{11} :

$$P_{11}(1, 2) = \frac{\delta(1, 2)}{\rho(1)} - M_2(1, 2). \quad (3.9)$$

Подставим (3.9) в (3.8) и получим уравнение для ядра Q_{11} :

$$\int \left(\frac{\delta(1, 3)}{\rho(1)} - M_2(1, 3) \right) Q_{11}(3, 2) \rho(3) d(3) = -\delta(1, 2). \quad (3.10)$$

Если сравнить (3.10) с соотношением Орнштейна–Цернике

$$M_2(1, 2) = C_2(1, 2) + \int M_2(1, 3) C_2(3, 2) \rho(3) d(3), \quad (3.11)$$

то сразу же видно, что

$$Q_{11}(1, 2) = C_2(1, 2) - \frac{\delta(1, 2)}{\rho(1)}. \quad (3.12)$$

Проверим справедливость рекуррентного соотношения

$$Q^n = Q^{n-1} + (I^n - Q^{n-1} \otimes P^n) \otimes Q_n^n \otimes (I^n - P^n \otimes Q^{n-1}), \quad (3.13)$$

которое определяет процедуру получения последовательных приближений для ядер функционала Q . Очевидно, что для $n = 1$ это соотношение является тождеством.

Проверим справедливость (3.13) для $n > 1$, пользуясь методом индукции:

$$\begin{aligned} Q^n &= Q^{n-1} + Q_n^n + Q^{n-1} \otimes P^n \otimes Q_n^n \otimes P^n \otimes Q^{n-1} - \\ &\quad - Q^{n-1} \otimes P^n \otimes Q_n^n - Q_n^n \otimes P^n \otimes Q^{n-1}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Сворачивая полученное выражение с P^n и воспользовавшись соотношениями (3.6) и (3.7), получим

$$\begin{aligned} P^n \otimes Q^n &= P^n \otimes Q^{n-1} + P^n \otimes Q_n^n + P^n \otimes Q^{n-1} \otimes P^n \otimes Q_n^n \otimes P^n \otimes Q^{n-1} - \\ &\quad - P^n \otimes Q^{n-1} \otimes P^n \otimes Q_n^n - P^n \otimes Q_n^n \otimes P^n \otimes Q^{n-1} = \\ &= (P^n \otimes Q_n^n - P^n \otimes Q^{n-1} \otimes P^n \otimes Q_n^n) + \\ &\quad + (P^n \otimes Q^{n-1} \otimes P^n \otimes Q_n^n \otimes P^n \otimes Q^{n-1} - P^n \otimes Q_n^n \otimes P^n \otimes Q^{n-1}) + \\ &\quad + P^n \otimes Q^{n-1} = P_n^n \otimes Q_n^n - P_n^n \otimes Q_n^n \otimes P^n \otimes Q^{n-1} + P^n \otimes Q^{n-1} = \\ &= I_n^n + P^{n-1} \otimes Q^{n-1} = I^n. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Из выражений (3.5)–(3.13) следует, что находя Q_n^n для каждого n из (3.7) и подставляя его в (3.13), мы будем получать выражение для Q^n (n -е приближение для Q), которое будет содержать ядра степени не старше n и удовлетворять соотношению (3.5). При $n \rightarrow \infty$ Q^n будет стремиться к функционалу Q , входящему в уравнение (2.12).

Отсюда следует вывод о характере предлагаемой системы последовательных приближений: для нахождения Q^n требуются диагональные ядра от P_{11} до P_{nn} , причем P_{nn}

включает корреляции от M_2 до M_{2n} ; для каждого следующего приближения функционала Q порядок используемых корреляций возрастает на 2.

Процедуру диагонализации можно представить детально, записав вспомогательные функционалы в виде суммы членов разного порядка:

$$Q = Q_{11} + Q_{12} + Q_{21} + Q_{22} + \cdots = \sum_{k \geq 1, m \geq 1} Q_{km},$$

$$P = P_{11} + P_{12} + P_{21} + P_{22} + \cdots = \sum_{k \geq 1, m \geq 1} P_{km}.$$

В этом случае функционалы P^n , Q^n , P_n^n имеют вид

$$\begin{aligned} P^n &= \sum_{1 \leq k \leq n, 1 \leq m \leq n} P_{km}, & Q^n &= \sum_{1 \leq k \leq n, 1 \leq m \leq n} Q_{km}, \\ P_n^n &= \sum_{1 \leq k \leq n, 1 \leq m \leq n} P_{km} - \\ &- \left(P^{n-1} + \sum_{1 \leq k \leq n-1} P_{nk} \right) \otimes Q^{n-1} \otimes \left(P^{n-1} + \sum_{1 \leq k \leq n-1} P_{kn} \right) = \\ &= \sum_{1 \leq k \leq n, 1 \leq m \leq n} P_{km} - P^{n-1} - \sum_{1 \leq k \leq n-1} P_{nk} - \sum_{1 \leq k \leq n-1} P_{kn} - \\ &- \sum_{1 \leq k \leq n-1, 1 \leq m \leq n-1} P_{nk} \otimes Q_{km} \otimes P_{mn} = \\ &= P_{nn} - P_{nk} \otimes Q_{km} \otimes P_{mn}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

где Q_{km} — ядра функционала Q , полученные в предыдущем приближении.

4. ИТЕРАЦИОННАЯ ПРОЦЕДУРА

Решения систем уравнений вида (2.12) и диагонализированных систем (3.5)–(3.7) можно искать разными методами. Наиболее очевидным способом является метод итераций, когда каждое следующее приближение получается из предыдущего. Этот метод не является универсальным, так как требует проверки условий сходимости. Для того чтобы получить формулу итераций, выделим в функционалах Q и P экспоненты от их младших ядер (3.8)–(3.12), которые при свертке являются операторами сдвига:

$$Q = Q' - (e^{-Q_{11}} - 1), \quad P = P' - (e^{-P_{11}} - 1). \quad (4.1)$$

Подставляя выражения (4.1) в (2.12), получим

$$Q \otimes P = Q' \otimes P' - (e^{-Q_{11}} - 1) \otimes P' - Q' \otimes (e^{-P_{11}} - 1) + (e^{-Q_{11}} - 1) \otimes (e^{-P_{11}} - 1) = I. \quad (4.2)$$

Воспользуемся очевидным соотношением

$$(e^{-Q_{11}} - 1) \otimes (e^{-P_{11}} - 1) = e^{Q_{11} \otimes P_{11}} - 1 = I. \quad (4.3)$$

Вычитая равенство (4.3) из выражения (4.2), получим

$$Q' \otimes P' - e^{-Q_{11}} \otimes P' - Q' \otimes e^{-P_{11}} = 0 \quad (4.4)$$

(функциональная свертка данных функционалов с константой равна нулю).

Свернем данное выражение справа с $e^{-Q_{11}}$, снова воспользовавшись соотношениями (4.3) и (1.7):

$$Q' = -e^{-Q_{11}} \otimes P' \otimes e^{-Q_{11}} + Q' \otimes P' \otimes e^{-Q_{11}}. \quad (4.5)$$

Многokратно выполнив итерации, получим бесконечный ряд для функционала Q' :

$$Q' = -e^{-Q_{11}} \otimes P' \otimes e^{-Q_{11}} - e^{-Q_{11}} \otimes P' \otimes e^{-Q_{11}} \otimes P' \otimes e^{-Q_{11}} - \dots \quad (4.6)$$

Таким образом, функционал Q содержит всевозможные цепочки из произведений полных корреляций, связанных ядрами Q_{11} . Этот вид решения аналогичен выражению для бинарной прямой корреляции Орнштейна–Черника, содержащему цепочки бинарных полных корреляционных функций. Это позволяет назвать ядра функционала Q многочастичными прямыми корреляциями.

Используя формулу (4.5) для решения уравнения (3.6), можно объединить методы диагонализации и итераций. В итоге процесс упрощения уравнений для последующего их решения состоит из следующих этапов. Во-первых, для каждого n из (3.16) найдем P_n^n :

$$P_n^n = P'_{nn} - P_{nk} \otimes Q_{km} \otimes P_{mn}, \quad (4.7)$$

где P'_{nn} — диагонализированные ядра функционала P' (см. (4.1)). Во-вторых, используя итерационный процесс (4.5) в применении к уравнению (3.7), находим Q_n^n , а затем из соотношения (3.13) получим Q^n .

Список литературы

- [1] Э. А. Аринштейн. ТМФ. 2000. Т. 124. № 1. С. 136–147.
- [2] Дж. Уленбек, Дж. Форд. Лекции по статистической механике. М.: Мир, 1965.
- [3] К. Хуанг. Статистическая механика. М.: Наука, 1966.

Поступила в редакцию 16.VIII.2001 г.