Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Р. Фалкао, А. Франсиско Нето, Э. Перейра, Аналитический подход к (ан)гармоническим кристаллическим цепочкам с самосогласованными стохастическими резервуарами, *ТМФ*, 2008, том 156, номер 1, 138–146

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6235>

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: 3.85.5.30

26 апреля 2023 г., 17:37:27

© 2008 г. Р. Фалкао*, А. Франсиско Нето[†], Э. Перейра[‡]

АНАЛИТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К (АН)ГАРМОНИЧЕСКИМ КРИСТАЛЛИЧЕСКИМ ЦЕПОЧКАМ С САМОСОГЛАСОВАННЫМИ СТОХАСТИЧЕСКИМИ РЕЗЕРВУАРАМИ

Рассмотрены гармонические и ангармонические цепочки осцилляторов с самосогласованными стохастическими резервуарами и выведено интегральное представление (в духе Фейнмана–Каца) для корреляций, в частности для потока тепла. Для гармонической цепочки дается новое доказательство конечности ее теплопроводности в стационарном состоянии. Подход, опирающийся на это интегральное представление для корреляций и на пертурбативный анализ, имеет весьма общий характер и может быть распространен на более сложные системы.

Ключевые слова: (ан)гармонические кристаллы, стохастические резервуары, поток тепла.

1. ВВЕДЕНИЕ

В неравновесной статистической механике аналитический вывод макроскопических термодинамических законов для микроскопических моделей взаимодействующих частиц представляет собой вызов теоретикам. В частности, даже в одномерном контексте нет строгого вывода закона теплопроводности Фурье, согласно которому поток тепла пропорционален градиенту температуры [1]. Многие работы, почти все с использованием компьютерных вычислений [2] и с результатами, противоречащими друг другу, были посвящены этой теме со времени первых строгих исследований по гармоническим цепочкам осцилляторов с термостатами на границах [3] – модели, которая не подчиняется закону Фурье. Недавно к гармонической цепочке осцилляторов вернулись в рамках аналитических исследований, но при условии, что каждый узел взаимодействует со стохастическим резервуаром. Было доказано [4],

*Centro de Formação de Professores, UFRB Amargosa, BA, Brazil.
E-mail: rfalcao@fisica.ufmg.br

[†]Núcleo de Física, UFS Itabaiana, Brazil. E-mail: afneto@fisica.ufs.br

[‡]Departamento de Física-ICEx, UFMG, Belo Horizonte, Brazil.
E-mail: emmanuel@fisica.ufmg.br

что в этом случае имеет место закон Фурье. Разумеется, если нет взаимодействия с внутренними резервуарами, теплопроводность расходится, и закон Фурье более не выполняется, как ранее было показано в [3]. Поскольку методика, предложенная в работе [4], целиком зависела от линейности динамики (т.е. от гармоничности потенциала), некоторые из авторов настоящей работы предложили другой подход к исследованию цепочки осцилляторов с резервуаром в каждом узле с целью изучения задачи с ангармоническими потенциалами и выяснения их поведения при наличии термостатов только на границах [5]–[8]. Предложенный подход опирается на интегральное представление для корреляций (связанных с тепловым потоком), которое анализируется пертурбативным методом.

В настоящей статье, продолжая наши предыдущие теоретические работы (включающие, как было сказано, ангармонические взаимодействия), мы строго выводим интегральное представление для корреляций (и тем самым для потока тепла). Более того, мы обращаемся к более простому случаю гармонической цепочки с резервуаром в каждом узле и даем новое доказательство конечности теплопроводности, используя наш подход и пертурбативный анализ (мы доказываем сходимость ряда теории возмущений). Представленное здесь выражение для теплопроводности совпадает с выражением из [4].

Опишем нашу модель. Рассмотрим решеточную систему с неограниченными скалярными переменными в пространстве $\Lambda \subset \mathbb{Z}$ и со стохастическим термостатом в каждом узле. Точнее, мы возьмем систему N осцилляторов с гамильтонианом

$$H(p, q) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} (p_j^2 + M q_j^2) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,l=1 \\ j \neq l}}^N q_j J_{jl} q_l + \sum_{j=1}^N \lambda \mathcal{P}(q_j), \quad (1)$$

где $J_{lj} = J_{jl}$, $J_{lj} = f(|l - j|)$, $\mathcal{P}(q_j)$ – ангармонический потенциал, например $\mathcal{P}(q_j) = q_j^4$ (φ^4 -модель жесткой ангармоничности) или $\mathcal{P}(q_j) = 1 - \cos(q_j)$ (модель Френкеля–Контровой мягкой ангармоничности). Как правило, индексы j и l выбираются соседними, причем $J_{j,j+1} = J$ для любого j . В этом случае межчастичные взаимодействия можно также записать в виде

$$\sum_{j=1}^N V(q_j - q_{j+1}), \quad V = \frac{J^2}{2} q^2, \quad (2)$$

после необходимой корректировки коэффициента M при q_j^2 и предполагая граничные условия Дирихле $q_0 = q_{N+1} = 0$. Рассмотрим временную эволюцию Ланжевена, задаваемую стохастическими дифференциальными уравнениями

$$dq_j = p_j dt, \quad dp_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \xi p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3)$$

где B_j – независимые винеровские процессы (т.е. $\eta_j = dB_j/dt$ – независимые белые шумы), ξ – взаимодействие между узлом j и его термостатом, $\gamma_j = 2\xi T_j$, где T_j – температура j -го резервуара. Как обычно, определим энергию одного осциллятора следующим образом:

$$H_j(q, p) = \frac{1}{2} p_j^2 + q_j^2 + U(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} V(q_j - q_l), \quad (4)$$

где выражения для U и V следуют из (1) и из равенства $\sum_j H_j = H$. Тогда для энергетического тока получаем

$$\left\langle \frac{dH_j}{dt} \right\rangle = \langle R_j \rangle - \langle \mathcal{F}_{j\leftarrow} - \mathcal{F}_{j\rightarrow} \rangle, \quad (5)$$

где $\langle \cdot \rangle$ – ожидание по шумовому распределению, R_j – поток энергии между j -м резервуаром и j -м узлом,

$$\langle R_j \rangle = \xi(T_j - \langle p_j^2 \rangle), \quad (6)$$

а энергетический ток в цепочке выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{j\rightarrow} &= \sum_{l>j} \nabla V(q_j - q_l) \frac{p_j + p_l}{2}, \\ \mathcal{F}_{j\leftarrow} &= \sum_{l<j} \nabla V(q_l - q_j) \frac{p_l + p_j}{2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Как хорошо известно, стационарное состояние характеризуется условием $\langle dH_i/dt \rangle = 0$. По физическим причинам интересно рассмотреть “условие самосогласованности” вида $\langle R_j \rangle = 0$ в стационарном состоянии. Для линейной динамики существование стационарного состояния и сходимость к нему при $t \rightarrow \infty$ являются давно решенными задачами (см., например, [9]).

2. ИНТЕГРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Введем вектор $\phi = (q, p)$ в фазовом пространстве и запишем динамику в виде

$$\dot{\phi} = -A\phi - \lambda \mathcal{P}'(\phi) + \sigma \eta, \quad (8)$$

где $A = A^0 + \mathcal{J}$, $\sigma - (2N \times 2N)$ -матрицы,

$$A^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \mathcal{M} & \Gamma \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ J & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\Gamma\mathcal{T}} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

I – единичная $(N \times N)$ -матрица, $J - (N \times N)$ -матрица межчастичных взаимодействий, $\mathcal{M}$, Γ и $\mathcal{T}$ – диагональные $(N \times N)$ -матрицы: $M_{jl} = M\delta_{jl}$, $\Gamma_{jl} = \xi\delta_{jl}$, $\mathcal{T} = T_j\delta_{jl}$. Кроме того, η – независимые белые шумы, $\mathcal{P}'(\phi) - (2N \times 1)$ -матрица, для которой $\mathcal{P}'(\phi)_j = 0$ при $j = 1, 2, \dots, N$ и

$$\mathcal{P}'(\phi)_i = \frac{d\mathcal{P}(\phi_{i-N})}{d\phi_{i-N}}, \quad i = N+1, N+2, \dots, 2N. \quad (10)$$

Далее мы будем использовать следующие индексные обозначения: i для значений индекса во множестве $\{N+1, N+2, \dots, 2N\}$; j для значений во множестве $\{1, 2, \dots, N\}$ и k для значений в $\{1, 2, \dots, 2N\}$. Очевидные символы суммирования по повторяющимся индексам опускаются.

Во-первых, рассмотрим уравнение (8) при $\mathcal{J} \equiv 0$, $\lambda = 0$, т.е. систему с изолированными узлами (без взаимодействия между ними). Во-вторых, введем межчастичные взаимодействия и ангармонический потенциал с использованием теоремы Гирсанова, затем получим интегральное представление для корреляционных функций.

Далее мы получим поток тепла для гармонической цепочки с помощью пертурбативного (но строгого) вычисления.

Справедлива следующая лемма.

ЛЕММА 1. *Решение уравнения (8) при $\mathcal{J} \equiv 0$ является гауссовым процессом Орнштейна–Уленбека*

$$\phi(t) = e^{-tA^0} \phi(0) + \int_0^t ds e^{-(t-s)A^0} \sigma \eta(s), \quad (11)$$

где при $\phi(0) = 0$ двухточечная корреляционная функция процесса эволюционирует следующим образом:

$$\langle \phi(t) \phi(s) \rangle_0 \equiv \mathcal{C}(t, s) = \begin{cases} e^{-(t-s)A^0} \mathcal{C}(s, s), & t \geq s, \\ \mathcal{C}(t, t) e^{-(s-t)A^{0T}}, & t \leq s, \end{cases} \quad (12)$$

$$\mathcal{C}(t, t) = \int_0^t ds e^{-sA^0} \sigma^2 e^{-sA^{0T}}. \quad (13)$$

Доказательство представляет собой простое упражнение по стохастическим дифференциальным уравнениям (см., например, [10], с. 74).

В простейшем случае, когда $\mathcal{J} \equiv 0$, при $t \rightarrow \infty$ имеем сходимость к гауссову распределению с двухточечной корреляционной функцией

$$C = \int_0^\infty ds e^{-sA^0} \sigma^2 e^{-s(A^0)^T} = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{T}}{\mathcal{M}} & 0 \\ 0 & \mathcal{T} \end{pmatrix} \quad (14)$$

(см., например, [9]).

Решение уравнения (8) с межчастичным взаимодействием и ангармоническим потенциалом выводится из частного случая при $\mathcal{J} \equiv 0$, $\lambda = 0$ с использованием теоремы Гирсанова, которая определяет меру ρ для полного процесса в терминах меры $\mu_{\mathcal{C}}$, полученной при $\mathcal{J} \equiv 0$, $\lambda = 0$. А именно, для k -точечной корреляционной функции имеем следующий результат.

ТЕОРЕМА 1. *Для корреляционных функций кристаллической цепочки с резервуарами в каждом узле (1)–(3) имеется интегральное представление (в духе Фейнмана–Каца) вида*

$$\langle \varphi_{u_1}(t_1) \dots \varphi_{u_k}(t_k) \rangle = \int \phi_{u_1}(t_1) \dots \phi_{u_k}(t_k) e^{-W(\phi)} d\mu_{\mathcal{C}}, \quad t_1, \dots, t_k \leq t, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} e^{-W(\phi)} = & \exp[-F_1(\phi(t)) + F_1(\phi(0)) - \lambda F_2(\phi(t)) + \lambda F_2(\phi(0))] \times \\ & \times \exp\left[-\int_0^t W_J(\phi(s)) ds - \int_0^t \lambda W_\lambda(\phi(s)) ds - \int_0^t \lambda W_{\lambda J}(\phi(s)) ds\right], \end{aligned} \quad (16)$$

$$F_1(\phi(t)) = \gamma_i^{-1} \phi_i(t) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(t), \quad F_2(\phi(t)) = \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)_i(t) \phi_i(t),$$

$$\begin{aligned} W_J(\phi(s)) = & \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{J}_{ij} A_{jk}^0 \phi_k(s) + \phi_k(s) A_{ki}^{0T} \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s) + \\ & + \frac{1}{2} \phi_{j'}(s) \mathcal{J}_{j'i}^T \gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\lambda W_\lambda(\phi(s)) &= \lambda \gamma_i^{-1} \phi_i(s) \mathcal{P}''(\phi)_i(s) A_{i-N,k}^0 \phi_k(s) + \lambda \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)_i(s) A_{ik}^0 \phi_k(s) + \\ &+ \frac{1}{2} \lambda^2 \gamma_i^{-1} (\mathcal{P}'(\phi)_i)^2(s),\end{aligned}$$

$$\lambda W_{\lambda J}(\phi(s)) = \lambda \gamma_i^{-1} \mathcal{P}'(\phi)_i(s) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(s),$$

где ϕ – решение (определяемое леммой 1) для процесса (8) при $\mathcal{J} \equiv 0$, $\lambda = 0$, φ – решение для полного процесса (8); двухточечная корреляционная функция $\mathcal{C}$ имеет вид (12), (13).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Используя теорему Гирсанова (формулу Камерона–Мартинана), можно записать меру ρ для нового процесса как “возмущение” меры $\mu_{\mathcal{C}}$, связанной с процессом при $J \equiv 0$, $\lambda = 0^1$. А именно, для любого измеримого множества A имеем $\rho(A) = E_0(1_A Z(t))$, где E_0 – ожидаемое значение для меры $\mu_{\mathcal{C}}$ (процесс (8) при $J \equiv 0$, $\lambda = 0$), 1_A обозначает характеристическую функцию, а

$$\begin{aligned}Z(t) &= \exp \left[\int_0^t u \cdot dB - \frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds \right], \\ \gamma_i^{1/2} u_i &= -\mathcal{J}_{ik} \phi_k - \lambda \mathcal{P}'(\phi)_i\end{aligned}\tag{17}$$

(подынтегральные произведения здесь лежат в $\mathbb{R}^{2N}$). Заметим, что u_i не равно нулю только при $i > N$ (т.е. при $i \in \{N+1, N+2, \dots, 2N\}$). Учитывая формулу (17), получаем

$$\begin{aligned}u_i dB_i &= \gamma_i^{-1/2} u_i \cdot \gamma_i^{1/2} dB_i = \gamma_i^{-1/2} u_i \cdot (d\phi_i + A_{ik}^0 \phi_k dt) = \\ &= (-\gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j - \gamma_i^{-1} \lambda \mathcal{P}'(\phi)_i) (d\phi_i + A_{ik}^0 \phi_k dt).\end{aligned}$$

Используя формулу Ито, имеем

$$-\gamma_i^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i = -dF_1 - \gamma_i^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} A_{jk}^0 \phi_k dt, \quad F_1(\phi) = \gamma_i^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_j.$$

Аналогично получаем выражение для $W(\phi)$.

Обоснуем теперь использование теоремы Гирсанова в случае некоторой жесткой ангармоничности.

ЛЕММА 2. *Интегральное представление для корреляционных функций, задаваемое приведенными выше выражениями, имеет место и в случае жестко ангармонического потенциала $\mathcal{P}(\phi) = \phi^4$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для доказательства воспользуемся теоремой 8.6.8 в [10]. Сначала заметим, что φ и ϕ (в том виде, как они были определены) являются соответственно процессом Ито и диффузией Ито. Тогда для применения теоремы Гирсанова надо показать, что $Z(t)$ есть мартингал по отношению к σ -алгебре, которую порождают $\phi(t)$ и $\mu_{\mathcal{C}}$. Будем действовать следующим образом. Определим процесс Ито

$$dX(t) = -\frac{1}{2} u^2 dt + u \cdot dB, \quad X(0) = 0,$$

¹⁾Использование этой теоремы вполне стандартно в случае, например, ограниченного ангармонического потенциала. В других случаях требуется некоторое дополнительное обоснование (см. ниже лемму 2).

где функция u введена в (17). Тогда $Z(t) = e^{X(t)}$ также является процессом Ито (см., например, теорему 4.1.2 в [10]), для которого имеем

$$dZ(t) = Z(t)u \cdot dB(t) \Rightarrow Z(t) = 1 + \int_0^t Z(s)u(s) \cdot dB(s).$$

Из этого выражения следует, что $Z(t)$ – мартингал для $Zu(\phi)$, неупреждающий и квадратично-интегрируемый (см., например, следствие 3.2.6 в [10]). Поскольку процесс ϕ допускает непрерывную реализацию, заключаем, что $Z(t)$ ограничен (заметим, что u квадратично-интегрируемо), а потому uZ квадратично-интегрируемо, т.е.

$$E_0 \left(\int_0^t u^2(s) Z^2(s) ds \right) < \infty.$$

3. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ДЛЯ ГАРМОНИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКИ

Обратимся теперь к гармонической цепочке и исследуем тепловой поток в стационарном состоянии. Сформулируем наш основной результат.

ТЕОРЕМА 2. *Для гармонической цепочки осцилляторов с резервуарами в каждом узле (1)–(3) в случае взаимодействия соседних осцилляторов, т.е. при $J_{jl} = J(\delta_{l,j+1} + \delta_{l,j-1})$, где $J < J_0$ для некоторого малого J_0 , выполнен закон Фурье*

$$\mathcal{F} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} \rangle = -\frac{\chi}{N-1} (T_N - T_1) \quad (18)$$

с условием “самосогласованности” $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle R_j \rangle = 0$ для внутренних узлов j , причем теплопроводность χ задается следующим образом:

$$\chi = \frac{J^2}{2\xi M} + \mathcal{O}(J^3). \quad (19)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Теорема, устанавливающая конечность теплопроводности для рассмотренной модели, была, как мы уже отмечали, сформулирована ранее в [4], причем с не обязательно малым межчастичным потенциалом для соседних узлов. Наша цель, как мы уже подчеркивали, состоит не в том, чтобы дать второе доказательство, а в том, чтобы представить более общий подход, распространяемый на ангармонические цепочки.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Согласно описанным ниже шагам можно также исследовать тепловой поток для слабых межчастичных взаимодействий за пределами соседних узлов, например, при $\sup_l \sum_j J_{lj} \leq J_0$.

Чтобы исследовать тепловой поток в стационарном состоянии, связанном с $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \varphi_u(t) \varphi_v(t) \rangle$, и доказать сформулированную теорему, поступим следующим образом. Прежде всего заметим, что

$$e^{-tA^0} = e^{-t\xi/2} \text{ch}(t\rho) \left\{ \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} + \frac{\text{th}(t\rho)}{\rho} \begin{pmatrix} \frac{\xi}{2} & I \\ -\mathcal{M} & -\frac{\xi}{2} \end{pmatrix} \right\}, \quad (20)$$

где $\rho = ((\xi/2)^2 - M)^{1/2}$. Это можно показать, например, диагонализацией A^0 (см. также приложение в [4]). Заметим, кроме того, что

$$\mathcal{C}(t, s) = \exp[-(t-s)A^0] C + \mathcal{O}(\exp[-(t+s)\xi/2]), \quad (21)$$

где второй член в формуле для корреляционной функции обращается в нуль в пределе при $t \rightarrow \infty$, C является корреляционной функцией (14).

Для вычисления двухточечной корреляционной функции, а тем самым и потока тепла (см. теорему 1 в случае $k = 2$ и $\lambda = 0$), разложим член e^{-W} в степенной ряд $e^{-W} = \sum_{n=0}^{\infty} (-W)^n / n!$ и вычислим связанные фейнмановские графы для $\langle \varphi_u(t) \varphi_v(t) \rangle$, используя теорему Вика (из-за нормировочного множителя остаются только связанные графы). Поскольку в экспоненте имеются квадратичные по ϕ члены (см. приведенные выше формулы для F и W), имеем

$$\left| \int \frac{\phi^{2n}}{n!} d\mu_C \right| = \left| \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^{(2n-1)!!} \underbrace{(CC \dots C)}_n \right| \leq \frac{(2n)!!}{n!} |C \dots C| = 2^n |C \dots C|. \quad (22)$$

Тем самым, для контроля за разложением требуется только оценка для n сверток двухточечных корреляционных функций C типа $c^n J^n$, где c – некоторая постоянная. Таким образом, по крайней мере для малых J этот простой анализ приводит к сходимости ряда теории возмущений. Для получения нужной оценки используем формулы (20), (21) для C , приведенную ниже лемму 3 и следующие неравенства:

$$\|C(t, t)\| \leq c_1(1 - e^{-2\alpha t}), \quad \|e^{-tA^0}\| \leq c_2 e^{-\alpha t}, \quad \|A^0\| \leq c_3,$$

где $\alpha = \min\{\xi/2, M/\xi\}$ ($\|\cdot\|$ – норма в пространстве $M_{2N \times 2N}(\mathbb{R})$).

ЛЕММА 3. Пусть I_t имеет вид

$$I_t = \int_0^t e^{-\alpha|t-s_1|} e^{-\alpha|s_1-s_2|} \dots e^{-\alpha|t-s_n|} ds_1 \dots ds_n, \quad \alpha > 0. \quad (23)$$

Тогда $\lim_{t \rightarrow \infty} I_t \leq (c_\alpha)^n$, где c_α не зависит от n .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. При $f(x) = e^{-\alpha|x|}$ имеем

$$\tilde{f}(p) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx} e^{-\alpha|x|} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2\alpha}{\alpha^2 + p^2}. \quad (24)$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} I_t &\leq \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha|t-s_1|} e^{-\alpha|s_1-s_2|} \dots e^{-\alpha|t-s_n|} ds_1 \dots ds_n = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} f(t-s_1) f(s_1-s_2) \dots f(s_n-t) ds_1 \dots ds_n = \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{f * f * \dots * f}_{n+1}(0) = \frac{1}{2} (2\pi)^{(n-1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{f}(p))^{n+1} dp, \end{aligned} \quad (25)$$

где $*$ обозначает свертку и в последнем равенстве использована теорема Парсеваля. Поэтому

$$\lim_{t \rightarrow \infty} I_t \leq \frac{1}{2} (2\pi)^{(n-1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi)^{(n+1)/2}} \left(\frac{2\alpha}{\alpha^2 + p^2} \right)^{n+1} dp \leq (c_\alpha)^n. \quad (26)$$

Таким образом, используя формулы (20), (21) для двухточечной корреляционной функции и лемму 3, можно оценить члены порядка J^2 и выше в представлении для двухточечной функции следующим образом:

$$\sum_{n=2}^{\infty} (c' J)^n \leq c'' J^2, \quad (27)$$

где c' и c'' – некоторые величины, не зависящие от n .

Для доказательства теоремы 2 вычислим двухточечную корреляционную функцию с точностью до первого порядка по J . Выполняя простые вычисления для $\langle \varphi_u \varphi_v \rangle \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \varphi_u(t) \varphi_v(t) \rangle$, получаем

$$\langle \varphi_u \varphi_v \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2\xi M} [\mathcal{J}_{v+N, u-N} T_{u-N} - \mathcal{J}_{u, v} T_v] & \text{при } u \in \{N+1, N+2, \dots, 2N\}, \\ & v \in \{1, 2, \dots, N\}, \\ T_{u-N} \delta_{u, v} & \text{при } u, v \in \{N+1, N+2, \dots, 2N\}. \end{cases} \quad (28)$$

Поэтому из (7) имеем

$$\mathcal{F}_{j \rightarrow} = \sum_{r > j} \mathcal{J}_{j+N, r} (\varphi_j - \varphi_r) \frac{(\varphi_{j+N} + \varphi_{r+N})}{2}, \quad r \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad (29)$$

и (для $\langle \varphi_u \varphi_v \rangle$ с точностью до первого порядка по J)

$$\langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} \rangle = \sum_{r > j} \frac{(\mathcal{J}_{j+N, r})^2}{2\xi M} (T_r - T_j). \quad (30)$$

Тем самым, для взаимодействий в соседних узлах

$$\mathcal{F}_{j \rightarrow j+1} = \langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} \rangle = \frac{(\mathcal{J}_{j+N, j+1})^2}{2\xi M} (T_{j+1} - T_j). \quad (31)$$

Вычисление в первом порядке теории возмущений (28) по-прежнему дает $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle R_j(t) \rangle = 0$.

Таким образом, условие стационарности $\langle dH_i/dt \rangle = 0$ приводит к равенствам

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow 2} = \mathcal{F}_{2 \rightarrow 3} = \dots = \mathcal{F}_{N-1 \rightarrow N} \equiv \mathcal{F}. \quad (32)$$

Поэтому в более простом случае одинаковых взаимодействий между любыми двумя соседними узлами, т.е. при $J = \mathcal{J}_{j+N, j+1}$ для всех j , получаем (для $\langle \varphi_u \varphi_v \rangle$ с точностью до первого порядка по J)

$$\mathcal{F}_{\rightarrow} = \chi \frac{T_N - T_1}{N-1}, \quad \chi = \frac{J^2}{2\xi M}. \quad (33)$$

Из (27) и (29) легко видеть, что вычисление оставшихся членов (высших порядков по J) даст вклад $J \times cJ^2 = cJ^3$ в χ (температурные члены $T_{j+1} - T_j$ можно найти с помощью пертурбативного анализа, вычисляя произведения величин C , двухточечной корреляционной функции C (13), появляющейся в гауссовом взаимодействии, и членов γ_i , возникающих из разложения для $Z(t)$). Таким образом, теорема 2 доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ 3. В случае ангармонических членов в формулах для W и F стандартное разложение не приводит к нужному результату, но мы надеемся развить пертурбативный подход с использованием некоторого кластерного разложения, которое хорошо известно в теории поля и статистической механике. В более простом случае неконсервативной нелинейной стохастической динамической модели, описывающей систему в контакте с тепловыми резервуарами при той же температуре, а потому стремящейся к равновесию, сходящееся кластерное разложение приведено в [11], а убывание четырехточечной функции исследовано в [12], [13]. Полный и строгий результат в [12] добавляет лишь малые поправки к пертурбативному вычислению первого порядка [13].

Благодарности. Работа выполнена при частичной поддержке CNPq и CAPES (Бразилия).

Список литературы

- [1] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, L. Rey-Bellet, “Fourier’s law: a challenge to theorists”, *Mathematical Physics*, eds. A. Fokas, A. Grigoryan, T. Kibble, B. Zegarliński, Imp. Coll. Press, London, 2000, 128–150.
- [2] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, *Phys. Rep.*, **377**:1 (2003), 1–80.
- [3] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, E. Lieb, *J. Math. Phys.*, **8**:5 (1967), 1073–1078.
- [4] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, J. Lukkarinen, *J. Stat. Phys.*, **116**:1–4 (2004), 783–813.
- [5] E. Pereira, R. Falcao, *Phys. Rev. E*, **70**:4 (2004), 046105.
- [6] E. Pereira, R. Falcao, *Phys. Rev. Lett.*, **96**:10 (2006), 100601.
- [7] A. Francisco Neto, H. C. F. Lemos, E. Pereira, *J. Phys. A*, **39**:30 (2006), 9399–9410.
- [8] F. Barros, H. C. F. Lemos, E. Pereira, *Phys. Rev. E*, **74**:5 (2006), 052102.
- [9] J. Snyders, M. Zakai, *SIAM J. Appl. Math.*, **18**:3 (1970), 704–714.
- [10] B. Øksendal, *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications*, Springer, Berlin, 2003.
- [11] J. Dimock, *J. Stat. Phys.*, **58**:5–6 (1990), 1181–1207.
- [12] P. A. Faria da Veiga, M. O’Carroll, E. Pereira, R. Schor, *Comm. Math. Phys.*, **220**:2 (2001), 377–402.
- [13] R. Schor, J. C. A. Barata, P. A. Faria da Veiga, E. Pereira, *Phys. Rev. E*, **59**:3 (1999), 2689–2694.

Поступила в редакцию 22.06.2007