

Kirkwood-Salzburg equation for connected correlation functions

Oleksii Rebenko

Institute of Mathematics, Ukrainian National Academy of Sciences, Kyiv, Ukraine.

26.12.2025

MY GREETINGS TO EVERYONE
PRESENT!
MERRY CHRISTMAS!

0. ВСТУП

Найважливішою проблемою опису нескінченних систем взаємодіючих частинок є доведення існування фазових переходів. Звичайно це стосується систем, взаємодія яких описується загально прийнятим у фізиці потенціалом типу **Lennard-Jones type**:

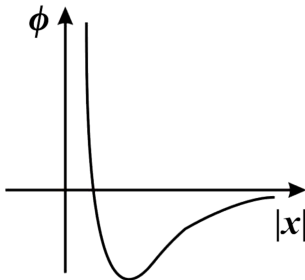


Fig. 2.1

1. Ознаки фазових переходів

Наявність точки фазового переходу в системі визначає:

- 1) аналітична поведінка термодинамічних потенціалів тиску, густини,
- 2) або характер розкладів кореляційних функцій в ряди.
- 3) Іншою ознакою може бути біфуркаційна поведінка рівнянь, яким вони задовольняють.

Щоб визначити кореляційні функції визначимо систему точкових частинок, яку ми будемо розглядати.

2. Простори конфігурацій

Нехай $\mathbb{R}^d$ це d -вимірний простір, $d \geq 1$, а σ – міра Лебега в $\mathbb{R}^d$.

Припускається, що позиції $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ ідентичних частинок утворюють локально скінченну підмножину Γ в $\mathbb{R}^d$:

$$\Gamma = \Gamma_{\mathbb{R}^d} := \{ \gamma \subset \mathbb{R}^d \mid |\gamma \cap \Lambda| < \infty \text{ для всіх } \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d) \}, \quad (1)$$

$|A|$ — кількість точок в A . Позначаємо через γ_Λ обмеження γ на обмежений об'єм Λ і позначимо простір скінченних конфігурацій в $\mathbb{R}^d$ через Γ_0 , а простір скінченних конфігурацій в Λ через Γ_Λ .

3. Міра Пуассона

Стан ідеального газу в рівноважній статистичній механіці описується мірою Пуассона $\pi_{z\sigma}$ на конфігураційному просторі Γ , де $z > 0$ – активність (фізичний параметр, який пов'язаний з густиною частинок в системі). Спершу введемо так звану міру Лебега-Пуассона $\lambda_{z\sigma} = \lambda_{z\sigma}^\Lambda$ на просторі скінченних конфігурацій Γ_X , $\Gamma_X \in \{\Gamma_\Lambda, \Gamma_0\}$ за формулою:

$$\int_{\Gamma_X} F(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_X \cdots \int_X F(\{x_1, \dots, x_n\}) \sigma(dx_1) \cdots \sigma(dx_n) \quad (2)$$

для всіх вимірних функцій $F = \{F_n\}_{n \geq 0}$, $F_n \in L^\infty(\Lambda^n)$ (або $F_n \in L^1(\mathbb{R}^{dn})$). Міра Пуассона

$$\pi_{z\sigma}^\Lambda := e^{-z\sigma(\Lambda)} \lambda_{z\sigma}^\Lambda, \quad \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d). \quad (3)$$

4. Нескінченно-подільність

Важливою характеристикою мір $\pi_{z\sigma}$ і $\lambda_{z\sigma}$ є властивість нескінченно-подільності. На мові інтегралів цю властивість можна сформулювати у вигляді леми:

Lemma

Нехай $X_1 \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, $X_2 \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ і $X_1 \cap X_2 = \emptyset$, $X_1 \cup X_2 = \Lambda$. Функції F_i , ($i = 1, 2$) є $\mathcal{B}(\Gamma_{X_i})$ -вимірні. Тоді

$$\int_{\Gamma_\Lambda} F_1(\gamma) F_2(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \int_{\Gamma_{X_1}} F_1(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) \int_{\Gamma_{X_2}} F_2(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma). \quad (4)$$

5. Технічна лема

Наведемо ще одну важливу технічну лему, яку будемо використовувати нижче.

Lemma

Для всіх вимірних функцій $G : \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ і $H : \Gamma_0 \times \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$, для яких $G(\xi \cup \gamma)H(\xi, \gamma) \in L^1(\Gamma_0 \times \Gamma_0, \lambda_\sigma \otimes \lambda_\sigma)$, справедлива така рівність:

$$\int_{\Gamma_0} G(\gamma) \sum_{\xi \subseteq \gamma} H(\xi, \gamma \setminus \xi) \lambda_\sigma(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} G(\xi \cup \gamma) H(\xi, \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\xi). \quad (5)$$

6. Умови на потенціал взаємодії

Умова стійкості:

$$U(\gamma) = U_N(x_1, \dots, x_N) := \sum_{1 \leq i < j \leq N} \phi(|x_i - x_j|) \geq -BN. \quad (6)$$

Умова регулярності:

$$C(\beta) = \int_{\mathbb{R}^d} |e^{-\beta\phi(|x|)} - 1| dx < \infty, \quad \beta = \frac{1}{kT}. \quad (7)$$

7. Кореляційні функції

Кореляційні функції це щільності кореляційних мір, які пов'язані з мірою Гіббса співвідношенням

$$\int_{\Gamma} \sum_{\eta \in \gamma} G(\eta) \mu(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} G(\eta) \rho(\eta) \lambda_{\sigma}(d\eta), \quad (8)$$

де значок $\eta \in \gamma$ означає сумування за усіми скінченними підмножинами η нескінченної конфігурації γ . Перепишуємо це співвідношення для обмеженого $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ отримаємо вигляд кореляційних функцій до термодинамічного переходу:

$$\rho_{\Lambda}(\eta) = \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_{\Lambda}} \int_{\Gamma_{\Lambda}} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \quad (9)$$

8. Рівняння Кірквуда–Зальцбурга (КЗ)

$$\rho(\eta) = ze^{-\beta W(x_1; \eta')} \int_{\Gamma_0} K(x_1; \xi) \rho(\eta' \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi). \quad (10)$$

$$K(x_1; \xi) := \begin{cases} \prod_{y \in \xi} (e^{-\beta \phi(|x_1 - y|)} - 1), & |\xi| \geq 1, \\ 1, & \xi = \emptyset. \end{cases} \quad (11)$$

$$\eta' := \eta \setminus \{x_1\}, \quad W(x_1; \eta \setminus \{x_1\}) \geq -2B, \quad (12)$$

$$W(\gamma; \xi) := \sum_{\substack{x \in \gamma \\ y \in \xi}} \phi(|x - y|). \quad (13)$$

9. Рівняння КЗ. Розв'язок

Будемо шукати розв'язок рівнянь (10) у такому вигляді:

$$\rho(\eta) = \int_{\Gamma_0} T(\eta|\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma), \quad (14)$$

Отримаємо рекурентне співвідношення

$$T(\eta|\gamma) = ze^{-\beta W(x_1; \eta')} \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi) T(\eta' \cup \xi | \gamma \setminus \xi) \quad (15)$$

та дві додаткові умови, які є наслідком того, що $\rho_j(\emptyset) = 1$:

$$T(\emptyset|\emptyset) = 1, \quad T(\emptyset|\gamma) = 0, \quad \text{якщо } \gamma \neq \emptyset. \quad (16)$$

Можна також накласти умову несутимісності перетинних конфігурацій:

$$T(\eta|\gamma) = 0, \quad \text{якщо } \gamma \cap \eta \neq \emptyset. \quad (17)$$

10. Рівняння КЗ. Основний результат

Theorem

Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови стійкості і регулярності. Тоді існує **єдиний розв'язок** рівняння Кірквуда–Зальцбурга в термодинамічній границі, який можна записати у вигляді (14), де ядра $T(\eta|\gamma)$, $\eta, \gamma \in \Gamma_0$, є мономами за змінною z , а інтеграл є збіжним за умови

$$|z| < e^{-2\beta B-1} C(\beta)^{-1}, \quad C(\beta) = \int_{\mathbb{R}^d} |e^{-\beta\phi(|x|)} - 1| dx. \quad (18)$$

Аналітичний вираз ядер $T(\eta|\gamma) = T(\{x_1, \dots, x_l\}|\{y_1, \dots, y_n\})$ можна записати за допомогою графів-лісів.

11. Граф-ліс

У m -зв'язного граф-лісу ($m \geq 1$) кожна зв'язна складова є поміченим кореневим графом-деревом. Корені відповідних зв'язних компонент цього графа утворюють конфігурацію $\eta = \{x_1, \dots, x_m\} \in \Gamma^{(m)}$. Усі інші вершини утворюють деяку конфігурацію $\gamma = \{y_1, \dots, y_n\}$, $n = 0, 1, \dots$. Будь-яка підмножина точок з γ , які належать одному дереву з коренем x_k , не може належати іншому дереву з коренем x_l , $l \neq k$. Випадок $n = 0$ означає, що m -зв'язний граф f складається з m точок-вершин. У випадку $m = 1$ граф f є поміченим графом-деревом з $n + 1$ -ю вершиною і з n ребрами. Такі графи називають *поміченими кореневими лісовими графами* (*rooted labeled graph-forest*). Множину всіх таких лісів із заданою конфігурацією коренів η і вершин γ позначимо $\mathfrak{F}_{\eta;\gamma}$.

12. Приклад

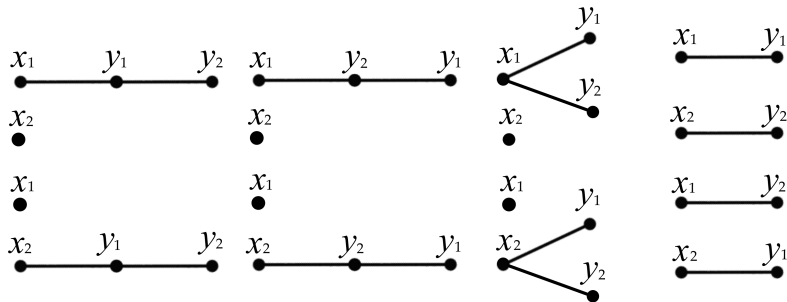


Рис. 4.1.

13. Аналітичні вирази

Внутрішнім лініям графа G відповідає функція

$$C_{xy} := e^{-\beta\phi(|x-y|)} - 1, \quad (19)$$

а вершинам константа

$$ze^{-\beta W(x_1; \eta')} \leq ze^{2\beta B} = h. \quad (20)$$

14. Рівняння КЗ. Кількість графів-лісів

Lemma

Кількість графів-лісів у виразі (14), який є розв'язком рекурентного співвідношення (15) із заданими значеннями $n = |\gamma|$, $m = |\eta|$, виражаються формулою

$$N(m|n) = m(m+n)^{n-1}, \quad n \geq 0. \quad (21)$$

Remark

Легко помітити, що $N(1|n) = (n+1)^{n-1}$. Ця формула є відомою формулою Келі (Cauley) кількості помічених графів-дерев з n вершинами.

15. Зв'язні кореляційні функції

Фізичні кореляції між частинками описуються зв'язними кореляційними функціями (ЗКФ). В російській літературі їх називають *семіінваріантами*. Для заданої конфігурації $\eta = \{x_1, \dots, x_n\} \in \Gamma_0$ з $|\eta| = n \in \mathbb{N}$, вони визначаються рекурентними формулами:

$$\begin{aligned}\rho^T(x_1) &:= \rho(\{x_1\}), \\ \rho^T(\eta) &:= \rho(\eta) - \sum_{k=2}^n \sum_{I_k \subset \{1, \dots, n\}}^* \prod_{l=1}^k \rho^T(\eta_{I_l}), \quad n \geq 2,\end{aligned}\tag{22}$$

де $\rho(\eta)$ це кореляційні функції, а зірочка над сумою означає суму за усіми розбиттями множини $\{1, \dots, n\}$ на k непорожніх неперетинних підмножин, а

$$\eta_{I_l} = \{x_{i_1}, \dots, x_{i_{|I_l|}}\}, \quad I_l = \{i_1, \dots, i_{|I_l|}\}, \quad \cup_{l=1}^k I_l = \{1, \dots, n\}.\tag{23}$$

16. ЗКФ в термінах кореляційних функцій

ЗКФ також можна записати явно в термінах кореляційних функцій $\rho(\eta)$ як Мебіусова інверсія виразу $\rho(\eta)$ з (22):

$$\rho^T(x_1, \dots, x_n) = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} (k-1)! \sum_{I_1, \dots, I_k \subset \{1, \dots, n\}}^* \prod_{l=1}^k \rho(\eta_{I_l}). \quad (24)$$

Для 2-частинкової:

$$\rho^T(x_1, x_2) = \rho(x_1, x_2) - \rho(x_1)\rho(x_2). \quad (25)$$

Зв'язок між функціями ρ і ρ^T зручно виразити мовою твірних функціоналів (30):

$$F_\rho(j) = e^{F_{\rho^T}(j)}. \quad (26)$$

17. ЗКФ в регулярній області

Proposition

Нехай ϕ задовольняє умовам сийкості і регулярності. Тоді, для усіх $\beta > 0$ і $0 < z < e^{-2\beta B-1}C(\beta)^{-1}$ справедливе наступне представлення

$$\rho^T(\eta) = z^{|\eta|} \int_{\Gamma_0} \Phi^T(\eta \cup \gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \quad \eta \in \Gamma_0, \quad (27)$$

де функція $\Phi^T(\gamma)$ це так звана функція Урселла, яка задана рівністю

$$\Phi^T(\gamma) = \begin{cases} 0 & \text{якщо } \gamma = 0, \\ 1 & \text{якщо } |\gamma| = 1, \\ \sum_{G \in \mathcal{G}^T(\gamma)} \prod_{\{x,y\} \in \mathcal{L}(G)} C_{xy} & \text{якщо } |\gamma| \geq 2, \end{cases} \quad (28)$$

в якій $\mathcal{G}^T(\gamma)$ це множина усіх зв'язних графів G (графи Майєра) з вершинами в точках конфігурації γ , а $\mathcal{L}(G)$ це множина усіх внутрішніх ліній графа G , і

$$C_{xy} := e^{-\beta\phi(|x-y|)} - 1. \quad (29)$$

18. Алгебра твірних функціоналів $\hat{\mathcal{A}}$

$$\begin{aligned} F_\psi(j) &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int_{\mathbb{R}^{dN}} (dx)^N j(x_1) \cdots j(x_N) \psi(x_1, \dots, x_N) = \\ &= \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) \psi(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma), \end{aligned} \quad (30)$$

де

$$\chi(j; \emptyset) = 1, \quad \chi(j; \eta) := \prod_{x \in \eta} j(x), \quad |\eta| \geq 1 \quad (31)$$

а $j : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$ – неперервна, обмежена функція з компактним носієм. Легко перевірити, знову використовуючи тотожність (5), що звичайний добуток

$$F_{\psi_1}(j) F_{\psi_2}(j) = F_{\psi_1 * \psi_2}(j), \quad (32)$$

де $\psi_1 * \psi_2$ є добуток ψ_1 на ψ_2 в комутативній алгебрі $\mathcal{A}$, яку визначив Рюель:

$$(\psi_1 * \psi_2)(\gamma) = \sum_{\xi \subseteq \gamma} \psi_1(\xi) \psi_2(\gamma \setminus \xi). \quad (33)$$

19. Оператор диференціювання в $\hat{\mathcal{A}}$

Визначимо оператор

$$\hat{D}_\eta F_\psi(j) := \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) \psi(\eta \cup \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) = F_{D_\eta \psi}(j), \quad (34)$$

де $D_\eta = \prod_{x \in \eta} D_x$, а D_x це оператор диференціювання в алгебрі Рюеля $\mathcal{A}$, який визначається як відображення $D_x : \psi \rightarrow D_x \psi$ рівністю

$$D_x \psi(\eta) = \psi(x \cup \eta) \quad (35)$$

і задовільняють тотожність

$$D_x(\psi_1 * \psi_2) = (D_x \psi_1) * \psi_2 + \psi_1 * (D_x \psi_2). \quad (36)$$

Зрозуміло що

$$\psi(\eta) = \hat{D}_\eta F_\psi(j)|_{j=0}, \quad (37)$$

$$\hat{D}_x \prod_{i=1}^k F_{\psi_i}(j) = \sum_{l=1}^k F_{\psi_1}(j) \cdots \hat{D}_x F_{\psi_l}(j) \cdots F_{\psi_k}(j) \quad (38)$$

і

$$\hat{D}_x e^{F_f(j)} = e^{F_f(j)} \hat{D}_x F_f(j). \quad (39)$$

20. Рівняння для ЗКФ-1

Основна ідея отримання рівняння для зв'язних кореляційних функцій полягає в тому щоб записати рівняння Кірквуда–Зальцбурга для твірного функціоналу $F_\rho(j)$ кореляційних функції ρ і використати зв'язок (26) з твірним функціоналом функцій ρ^T :

$$F_{\rho^T}(j) = \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) \rho^T(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma), \quad \rho^T(\emptyset) = 0, \quad \rho^T(x) = \rho(x) := \varrho. \quad (40)$$

Тоді, використовуючи (34)-(37) перепишемо рівняння КЗ (10) у вигляді

$$\widehat{D}_\eta F_\rho(j)|_{j=0} = z \sum_{x \in \eta} \widetilde{\pi}(x; \eta^{\hat{x}}) \chi(e^{-\beta\phi_{x\cdot}}; \eta^{\hat{x}}) \widehat{D}_{\eta^{\hat{x}}} F_\rho(C_x). \quad (41)$$

$$C_{xy} = e^{-\beta\phi_{xy}} - 1 = C(|x - y|) = e^{-\beta\phi(|x-y|)} - 1. \quad (42)$$

21. Рівняння для ЗКФ-2

Вставляючи (26) в (41) та використовуючи властивості (38)–(39), маємо:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m \sum_{\{\eta_1, \dots, \eta_k\} \subseteq \eta}^* \rho^T(\eta_1) \cdots \rho^T(\eta_k) &= z \sum_{x \in \eta} \tilde{\pi}(x; \eta^{\hat{x}}) \chi(e^{-\beta \phi_{x \cdot}}; \eta^{\hat{x}}) e^{F_{\rho^T}(C_{x \cdot})} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{m-1} \sum_{\{\eta_1, \dots, \eta_k\} \subseteq \eta^{\hat{x}}}^* \hat{D}_{\eta_1} F_{\rho^T}(C_{x \cdot}) \cdots \hat{D}_{\eta_k} F_{\rho^T}(C_{x \cdot}), \end{aligned} \quad (43)$$

$$\tilde{\pi}(x; \eta^{\hat{x}}) = \frac{\pi_W(x; \eta^{\hat{x}})}{\sum_{y \in \eta} \pi_W(y; \eta^{\hat{y}})}, \quad \pi_W(x; \eta^{\hat{x}}) = \begin{cases} 1 & \text{if } W(x; \eta^{\hat{x}}) \geq -2B, \\ 0 & \text{in other cases,} \end{cases} \quad (44)$$

22. Рівняння для ЗКФ-3

$$\begin{aligned} F_{\rho^T}(C_{x\cdot}) &= \int_{\Gamma_0} \chi(C_{x\cdot}; \xi) \rho^T(\xi) \lambda_\sigma(d\xi) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^{dn}} (dy)^n C_{xy_1} \cdots C_{xy_n} \rho_n^T(y_1, \dots, y_n). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widehat{D}_{\eta_j} F_{\rho^T}(C_{x\cdot}) &= \int_{\Gamma_0} \chi(C_{x\cdot}; \xi) \rho^T(\eta_j \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^{dn}} (dy)^n C_{xy_1} \cdots C_{xy_n} \rho_{n+m_j}^T(x_{i_1}, \dots, x_{i_{m_j}}, y_1, \dots, y_n), \end{aligned} \tag{45}$$

де $j = 1, \dots, k$ і $\eta_j = \{x_{i_1}, \dots, x_{i_{m_j}}\}$.

23. Рівняння для ЗКФ у просторі E_ξ

Розглядатимемо це рівняння у банаховому просторі E_ξ , $\xi > 0$ з нормою

$$\|f\| := \sup_{\emptyset \neq \eta \in \Gamma_0} \xi^{-|\eta|} |f(\eta)|. \quad (46)$$

У просторі послідовностей $\psi \in E_\xi$ визначимо такі оператори:

$$(\mathcal{D}_x \psi)(\eta) := \widehat{D}_\eta F_\psi(C_{x\cdot}) = \int_{\Gamma_0} \chi(C_{x\cdot}; \gamma) \psi(\eta \cup \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma), \quad (47)$$

$$(\mathcal{M}\psi)(\eta) := \sum_{k=1}^m \sum_{\{\eta_1, \dots, \eta_k\} \subseteq \eta}^* \psi(\eta_1) \cdots \psi(\eta_k), \quad m = |\eta|, \quad (48)$$

$$(\mathcal{K}_x \psi)(\eta) := \widetilde{\pi}(x; \eta^{\hat{x}}) \chi(e^{-\beta \phi_{x\cdot}}; \eta^{\hat{x}}) \psi(\eta^{\hat{x}}). \quad (49)$$

Тоді рівняння (43) можна записати в операторній формі:

$$(\mathcal{M} \rho^T)(\eta) = \varrho \sum_{x \in \eta} (\mathcal{K}_x \mathcal{M} \mathcal{D}_x \rho^T)(\eta). \quad (50)$$

Оператори $\mathcal{D}_x$ і $\mathcal{K}_x$ лінійні, а оператор $\mathcal{M}$ нелінійний, але він має обернений оператор, який діє за формулою (24).

24. Рівняння для густини частинок

У випадку $\eta = \{x\}$ рівняння (43) має вигляд

$$\rho^T(x) = ze^{F_{\rho^T}(C_{x\cdot})}. \quad (51)$$

Внаслідок трансляційної інваріантності $\rho^T(x) = \rho(x) = \varrho = \text{const}$.
Тому, рівняння може бути записане таким чином

$$\varrho = ze^{C_0(\beta)\varrho + \sum_{n=2}^{\infty} I_n}, \quad (52)$$

де

$$\begin{aligned} I_n &= \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} (dy)^n C(|y_1|) \cdots C(|y_n|) \rho^T(y_1, \dots, y_n) = \\ &= \int_{\Gamma_0^{(n)}} \chi(C(|\cdot|); \eta) \rho^T(\eta|z) \lambda_{\sigma}(d\eta), \end{aligned} \quad (53)$$

$$\text{з } C_0(\beta) = \int_{\mathbb{R}^d} C(|y|) dy \text{ і}$$

$$C_{xy} = e^{-\beta\phi_{xy}} - 1 = C(|x-y|) = e^{-\beta\phi(|x-y|)} - 1.$$

25. Апроксимація двочастинковими кореляціями-1

Вставимо в експоненту вираз (27) для $|\eta| \geq 2$. Таким чином, рівняння (52) стає нелінійним рівнянням для функції густини, яка залежить від змінних z, β і його можна переписати у вигляді:

$$\varrho = ze^{C_0(\beta)\varrho + I(z)}, \quad (54)$$

де

$$I(z) = \int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} \chi(C(|\cdot|); \eta) \Phi^T(\eta \cup \gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) \mathbb{1}_{|\eta| \geq 2}(\eta) \lambda_{z\sigma}(d\eta). \quad (55)$$

Знову застосуємо тотожність (5) з $G(\gamma) = \Phi^T(\gamma)$ і $H(\eta; \gamma) = \mathbb{1}_{|\eta| \geq 2}(\eta) \chi(C(|\cdot|); \eta) \mathbb{1}(\gamma)$. Тоді

$$I(z) = \int_{\Gamma_0} \Phi^T(\gamma) \sum_{\eta \subseteq \gamma} \mathbb{1}_{|\eta| \geq 2}(\eta) \chi(C(|\cdot|); \eta) \lambda_{z\sigma}(d\gamma). \quad (56)$$

26. Апроксимація двочастинковими кореляціями-2

Обмежуючись першим членом розкладу, отримуємо таке нелінійне рівняння для функції $\varrho = \varrho(z, \beta)$:

$$\varrho = ze^{\varrho K_1 + z^2 K_2}, \quad (57)$$

з

$$K_1 = \int_{\mathbb{R}^d} \left(e^{-\beta\phi(|y|)} - 1 \right) dy, \quad (58)$$

і

$$K_2 = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \left(e^{-\beta\phi(|y_1|)} - 1 \right) \left(e^{-\beta\phi(|y_1 - y_2|)} - 1 \right) \left(e^{-\beta\phi(|y_2|)} - 1 \right) dy_1 dy_2. \quad (59)$$

27. Апроксимація двочастинковими кореляціями-3

Легко отримати похідну по z :

$$\varrho'_z = \frac{\partial \varrho}{\partial z} = \frac{\varrho(1 + 2K_2 z^2)}{z(1 - \varrho K_1)} \quad (60)$$

У випадку $K_1 \leq 0$ є тільки один розв'язок, оскільки графіки функцій

$$\varphi_1(\varrho) = \varrho \text{ і } \varphi_2(\rho) = z e^{\varrho K_1 + z^2 K_2} \quad (61)$$

перетнуться лише в одній точці. Цей випадок відповідає малому β і голоморфній поведінці по z ($\varrho'_z > 0$ для малого z).

Для $K_1 > 0$ існує три випадки, залежно від поведінки функції $\varphi_2(\rho)$.

Як $\varphi_1(0) = 0$, а $\varphi_2(0) = z e^{z^2 K_2} > 0$ та їх похідні

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial \varrho} = 1; \text{ і } \frac{\partial \varphi_2}{\partial \varrho} = z K_1 e^{\varrho K_1 + z^2 K_2}, \quad (62)$$

28. Апроксимація двочастинковими кореляціями-4

графіки функцій не перетинаються якщо

$$zK_1e^{\varrho K_1+z^2K_2} > 1. \quad (63)$$

У випадку коли

$$\begin{cases} zK_1e^{\varrho K_1+z^2K_2} & = 1 \\ ze^{\varrho K_1+z^2K_2} & = \varrho \end{cases} \quad (64)$$

графіки функцій торкаються один одного і маємо точку біфуркації. І два різних кореня $\varrho_1 \neq \varrho_2$ ми маємо якщо

$$\begin{cases} zK_1e^{\varrho_1 K_1+z^2K_2} & < 1 \\ ze^{\varrho_1 K_1+z^2K_2} & = \varrho_1, \end{cases} \quad (65)$$

і

$$\begin{cases} zK_1e^{\varrho_2 K_1+z^2K_2} & > 1 \\ ze^{\varrho_2 K_1+z^2K_2} & = \varrho_2. \end{cases} \quad (66)$$

29. Рівняння для ρ^T у випадку потенціалів з твердою серцевиною

Для простоти розглянемо потенціал зі скінченним радіусом взаємодії:

$$\phi(|x|) = \begin{cases} +\infty, & \text{якщо } |x| \leq a, \\ -b, & \text{якщо } a < |x| \leq R, \\ 0, & \text{якщо } |x| > R \end{cases} \quad (67)$$

для деяких позитивних a, R і $R > 2a$. Функція-відповідник $C(| \cdot |)$:

$$C(|x|) = \begin{cases} -1, & \text{якщо } |x| \leq a, \\ \varepsilon = \varepsilon(\beta) = e^{\beta b} - 1, & \text{якщо } a < |x| \leq R, \\ 0, & \text{якщо } |x| > R. \end{cases} \quad (68)$$

Для спрощення позначення введемо три області A , B і C :

$$A := \{x \in \mathbb{R}^d : |x| \leq a\}, \quad B := \{x \in \mathbb{R}^d : a < |x| \leq R\}, \quad C := \{x \in \mathbb{R}^d : |x| > R\} \quad (69)$$

а для множин X, Y, Z із множини множин $\{A, B, C\}$ введемо характеристичну функцію

$$\mathbb{1}_{XYZ}(x, y, x - y) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } x \in X, y \in Y, x - y \in Z, \\ 0, & \text{якщо інакше.} \end{cases} \quad (70)$$

Відповідні інтеграли позначимо через I_{XYZ} . Тоді для K_1 маємо:

$$K_1 = C_0(\beta) = \pi(R^2 - a^2)\varepsilon(\beta) - \pi a^2, \quad \varepsilon(\beta) = e^{\beta b} - 1. \quad (71)$$

Для K_2 , використовуючи (68) факт, що $I_{AAB} = I_{ABA} = I_{BAA}$ і $I_{ABB} = I_{BAB} = I_{BBA}$, можемо записати

$$\begin{aligned} K_2 &= \sum_{(X,Y,Z) \in \{A,B,C\}} \int \int \mathbb{1}_{XYZ}(x, y, y - x) C(|x|) C(|x - y|) C(|x|) dx dy = \\ &= \sum_{(X,Y,Z) \in \{A,B\}} \int \int \mathbb{1}_{XYZ}(x, y, x - y) C(|x|) C(|x - y|) C(|x|) dx dy = \end{aligned}$$

31. Висновок

Нескінченна система рівнянь (43), яку в операторній формі можна записати у вигляді

$$(\mathcal{M}\rho^T)(\eta) = \varrho \sum_{x \in \eta} (\mathcal{K}_x \mathcal{M} \mathcal{D}_x \rho^T)(\eta). \quad (73)$$

в банаховому просторі E_ξ є досить складними для дослідження існування їх розв'язків зовні області регулярності параметрів z, β . Навіть їх 2-частинкова апроксимація

$$\varrho = ze^{K_1 + z^2 K_2}, \quad (74)$$

залишає рівняння нелінійним і потребує нетривіальних досліджень. Виникають два напрямки:

- 1) розвинути операторний підхід;
- 2) застосувати чисельні методи для аналізу рівняння

ДЯКУЮ ЗА УВАГУ!

THANK YOU FOR ATTENTION!