сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна



Р17 - 12804

А.М.Курбатов

# СТРОГОЕ УСЛОВИЕ АППРОКСИМИРУЕМОСТИ В ТЕОРИИ МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

1979

Курбатов А.М.

P17 - 12804

Строгое условие аппроксимируемости в теории модельных систем классической статистической механики

Дан строгий вывод условия аппроксимируемости общего вида: модельный гамильтониан, удовлетворяя определенным предельным соотношениям, допускает термодинамически эквивалентную аппроксимацию. Доказанные при этом неравенства могут найти приложения в различных исследованиях в классической статистической механике.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Kurbatov A.M.

P17 - 12804

Strict Condition of Approximability in the Model System Theory of Classical Statistical Mechanics

A strict derivation of approximability of general type is given: a model Hamiltonian, satisfying definite boundary relations, allows a termodynamically equivalent approximation. Inequalities being proved could be applied to various investigations in classical statistical mechanics.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979



Развитие конструктивной теории аппроксимации в гамильтоновом формализме статистической механики квантовых /1-5/ и классических /6-8/ систем многих взаимодействующих частиц требует установления общих условий, которым должен быть подчинен гамильтониан исследуемой системы с тем, чтобы можно было осуществить его термодинамически эквивалентную аппроксимацию и было возможным понижение его операторной степени.

Данная работа и посвящена установлению достаточно общих условий аппроксимируемости гамильтониана для широкого класса модельных задач в классической статистической механике.

Мы будем использовать следующие вспомогательные математические утверждения.

I. Неравенство Йенсена для гиббсовских средних экспоненциального типа

$$e^{-\beta\langle\mathcal{H}\rangle} \leq \langle e^{-\beta\mathcal{H}}\rangle. \tag{I}$$

Доказательство в случае классической статистической механики можно найти в /6/.

2. Неравенство, характеризующее степень отклонения термодинамического поведения системы от подчиненного вариационному принципу Фейнмана

$$\langle e^{-\beta H}\rangle \le e^{-\beta\langle H\rangle \gamma}, \tag{2}$$

$$\gamma = e^{-\beta\frac{\langle H^2\rangle}{\langle H\rangle}}. \tag{3}$$

Определим теперь достаточные условия термодинамически эквивалентной аппроксимации системы $H$ гамильтонианом $H_0$.

Для разности плотностей термодинамического потенциала $f_\Lambda$ имеем

$$f_\Lambda[H]-f_\Lambda[H_0] = -\frac{1}{\beta\Lambda}\ln Sp\, e^{-\beta H}+\frac{1}{\beta\Lambda}\ln e^{-\beta H_0} =$$

$$= -\frac{1}{\beta\Lambda}\ln(1, e^{-\beta H})+\frac{1}{\beta\Lambda}\ln(1, e^{-\beta H_0}) = -\frac{1}{\beta\Lambda}\ln\frac{(1, e^{-\beta H})}{(1, e^{-\beta H_0})} =$$

$$= -\frac{1}{\beta\Lambda}\ln\frac{(e^{-\beta(H-H_0)}, e^{-\beta H_0})}{(1, e^{-\beta H_0})} = -\frac{1}{\beta\Lambda}\ln\langle e^{-\beta(H-H_0)}\rangle_{H_0}. \tag{4}$$

Принимая во внимание неравенства (I),(2), получаем

$$\frac{1}{\Lambda}\langle H-H_0\rangle_{H_0} \le f_\Lambda[H]-f_\Lambda[H_0] \le \frac{1}{\Lambda}\langle H-H_0\rangle_{H_0}\gamma. \tag{5}$$

Таким образом, искомыми достаточными условиями являются следующие:



$$\frac{1}{\Lambda}\langle H-H_0\rangle_{H_0} \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} 0, \tag{6}$$

$$\gamma \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} \gamma_0 < \infty. \tag{7}$$

Рассмотрим модельные гамильтонианы вида

$$H = T \pm \Lambda V^2, \tag{8}$$

где

$$T = \sum_{i=1}^{\Lambda} T(x_i), \quad V = \frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i). \tag{9}$$

Аппроксимирующий гамильтониан в таком случае имеет вид

$$H_0(a) = T \pm \Lambda(2aV - a^2). \tag{10}$$

Для статистической суммы $Q(a)$

$$f_\Lambda[H_0(a)] = -\frac{1}{\beta\Lambda}\ln Q(a) \tag{11}$$

имеем

$$Q(a) = \int\ldots\int dx_1\ldots dx_\Lambda\, e^{-\beta H_0(a)} =$$

$$= e^{\pm\beta a^2\Lambda}\int\ldots\int dx_1\ldots dx_\Lambda \exp\left\{-\beta\sum_i[T(x_i)\pm 2aV(x_i)]\right\} =$$

$$= e^{\pm\beta a^2\Lambda}\int\ldots\int dx_1\ldots dx_\Lambda \prod_i \exp\left\{-\beta[T(x_i)\pm 2aV(x_i)]\right\} =$$

$$= e^{\pm\beta a^2\Lambda}\left[\int dx \exp\{-\beta[T(x)\pm 2aV(x)]\}\right]^{\Lambda} =$$

$$= e^{\pm\beta a^2\Lambda}\, I^{\Lambda}(\beta;a), \tag{I2}$$

где, по определению,

$$I(\beta,a) = \int dx \exp\{-\beta[T(x)\pm 2aV(x)]\}, \tag{I3}$$

и окончательно

$$f_{\Lambda}[H_0(a)] = -\frac{1}{\beta}\ln I(\beta;a) \mp a^2. \tag{I4}$$

Рассмотрим интеграл

$$Q_s(a) = \int\ldots\int V(x_1)\ldots V(x_s)\, e^{-\beta H_0(a)}. \tag{I5}$$

Разбивая его на произведение $\Lambda$ однократных интегралов, находим

$$Q_s(a) = e^{\pm\beta a^2\Lambda}\int\ldots\int dx_1\ldots dx_{\Lambda} V(x_1)\ldots V(x_s)\prod_i \exp\{-\beta[T(x_i)\pm 2aV(x_i)]\} =$$

$$= e^{\pm\beta a^2\Lambda}\left[\int dx\, V(x)\exp\{-\beta[T(x)\pm 2aV(x)]\}\right]^{s}\left[\int dx \exp\{-\beta[T(x)\pm 2aV(x)]\}\right]^{\Lambda-s} =$$

$$= e^{\pm\beta a^2\Lambda}\, I_1^{s}(\beta;a)\, I^{\Lambda-s}(\beta;a), \tag{I6}$$

где



$$I_1(\beta;a) = \int dx\, V(x)\exp\{-\beta[T(x)\pm 2aV(x)]\}. \tag{I7}$$

Таким образом,

$$\langle V(x_1)\ldots V(x_s)\rangle_{H_0} = \frac{Q_s(a)}{Q(a)} = \left[\frac{I_1(\beta;a)}{I(\beta;a)}\right]^{s} = \mathcal{J}^{s}(\beta;a), \tag{I8}$$

где мы по определению положили

$$\mathcal{J}(\beta;a) = \frac{I_1(\beta;a)}{I(\beta;a)}. \tag{I9}$$

Для разности гамильтонианов $H - H_0$ и ее квадрата соответственно имеем

$$H - H_0(a) = \pm\Lambda\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i) - a\right)^2 = \pm\Lambda\left[\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i)\right)^2 - 2\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i)\right)a + a^2\right] \tag{20}$$

$$(H - H_0(a))^2 = \Lambda^2\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i) - a\right)^4 =$$

$$= \Lambda^2\left[\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i)\right)^4 - 4\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i)\right)^3 a + 6\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i)\right)^2 a^2 -\right.$$

$$\left. - 4\left(\frac{1}{\Lambda}\sum_{i=1}^{\Lambda} V(x_i)\right)a^3 + a^4\right]. \tag{2I}$$

На основании (I8) среднее $\langle \frac{1}{\Lambda}\sum_i V(x_i)\rangle_{H_0}$ имеет вид

$$\left\langle \frac{1}{\Lambda}\sum_i V(x_i)\right\rangle_{H_0(a)} = \langle V(x_1)\rangle_{H_0} = \mathcal{J}(\beta;a). \tag{22}$$

Аналогично

$$\left\langle \left(\frac{1}{\Lambda}\sum_i V(x_i)\right)^2 \right\rangle_{H_0(a)} = \left\langle \frac{1}{\Lambda^2}\sum_i (V(x_i))^2 + \frac{1}{\Lambda^2}\sum_{i\neq j} V(x_i)V(x_j)\right\rangle_{H_0} =$$

$$= \frac{1}{\Lambda} J_2(\beta;a) + \frac{\Lambda(\Lambda-1)}{\Lambda^2} J_1(\beta;a) = \frac{1}{\Lambda}J_2(\beta;a) + \left(1-\frac{1}{\Lambda}\right) J_1(\beta;a), \qquad (23)$$

где

$$J_2(\beta;a) = \frac{I_2(\beta;a)}{I(\beta;a)}, \qquad (24)$$

$$I(\beta;a) = \int dx\, V^2(x)\exp\{-\beta[T(x)\pm 2aV(x)]\}. \qquad (25)$$

Для третьей и четвертой степеней оператора $\frac{1}{\Lambda}\sum_i V(x_i)$ усреднение по $H_0(\bar a)$ дает

$$\left\langle \left(\frac{1}{\Lambda}\sum_i V(x_i)\right)^3 \right\rangle_{H_0(\bar a)} =$$

$$= \left\langle \frac{1}{\Lambda^3}\sum_i (V(x_i))^3 + \frac{1}{\Lambda^3}\sum_i (V(x_i))^2 \sum_{j\neq i} V(x_j) + \frac{1}{\Lambda^3}\sum_{i\neq j\neq k} V(x_i)V(x_j)V(x_k)\right\rangle_{H_0} =$$

$$= \frac{1}{\Lambda^2} J_3(\beta;\bar a) + 3\frac{\Lambda(\Lambda-1)}{\Lambda^3} J_2(\beta;\bar a) J_1(\beta;\bar a) + \frac{\Lambda(\Lambda-1)(\Lambda-2)}{\Lambda^3} J_1^3(\beta;\bar a) =$$

$$= \frac{1}{\Lambda^2} J_3(\beta;\bar a) + 3\left(\frac{1}{\Lambda}-\frac{1}{\Lambda^2}\right) J_2(\beta;\bar a)\bar a + \left(1-\frac{3}{\Lambda}+\frac{2}{\Lambda^2}\right) a^3 ; \qquad (26)$$

$$\left\langle \left(\frac{1}{\Lambda}\sum_i V(x_i)\right)^4 \right\rangle_{H_0(\bar a)} = \left\langle \frac{1}{\Lambda^4}\sum_i (V(x_i))^4 + \frac{1}{\Lambda^4}\sum_i (V(x_i))^3 \sum_{j\neq i} V(x_j) + \right.$$

$$+ \frac{1}{\Lambda^4}\sum_i (V(x_i))^2 \sum_{j\neq i} (V(x_j))^2 + \frac{1}{\Lambda^4}\sum_i (V(x_i))^2 \sum_{k\neq j\neq i} V(x_k)V(x_j) +$$

$$\left. + \frac{1}{\Lambda^4}\sum_{i\neq j\neq k\neq m} V(x_i)V(x_j)V(x_k)V(x_m)\right\rangle_{H(\bar a)} =$$



$$= \frac{1}{\Lambda^3} J_4(\beta;\bar a) + 4\frac{\Lambda(\Lambda-1)}{\Lambda^4} J_3(\beta;\bar a) J_1(\beta;\bar a) + 3\frac{\Lambda(\Lambda-1)}{\Lambda^4} J_2^2(\beta;\bar a) +$$

$$+ 6\frac{\Lambda(\Lambda-1)(\Lambda-2)}{\Lambda} J_2(\beta;\bar a) J_1^2(\beta;\bar a) + \frac{\Lambda(\Lambda-1)(\Lambda-2)(\Lambda-3)}{\Lambda^4} J_1^4(\beta;a) =$$

$$= \frac{1}{\Lambda^3} J_4 + 4\left(\frac{1}{\Lambda^2}-\frac{1}{\Lambda^3}\right) J_3 \bar a + 3\left(\frac{1}{\Lambda^2}-\frac{1}{\Lambda^3}\right) J_2^2(\beta;a) + 6\left(\frac{1}{\Lambda}-\frac{3}{\Lambda^2}+\frac{2}{\Lambda^3}\right) J_2 \bar a^2 \qquad (27)$$

$$+ \left(1-\frac{6}{\Lambda}+\frac{11}{\Lambda^2}-\frac{6}{\Lambda^3}\right)\bar a^4 ,$$

где

$$J_3 = \frac{I_3(\beta;a)}{I(\beta;a)} \qquad (28)$$

$$I_3(\beta;a) = \int dx\, V^3(x)\exp\{-\beta[T(x)\pm 2aV(x)]\}. \qquad (29)$$

В таком случае среднее разности гамильтонианов $H - H_0(\bar a)$ имеет вид

$$\langle H - H_0(\bar a)\rangle_{H_0(\bar a)} = \pm\Lambda\left[\frac{1}{\Lambda}J_2(\beta;\bar a) + a^2 - \frac{1}{\Lambda}a^2 - 2a^2 + a^2\right] =$$

$$= \mp[\bar a^2 - J_2(\beta;\bar a)]. \qquad (30)$$

В свою очередь, для среднего квадрата разности $H-H_0(\bar a)$ получаем

$$\langle (H-H_0(\bar a))\rangle_{H_0(\bar a)} = \Lambda^2\left[\frac{1}{\Lambda^3}J_4 + \left(\frac{4}{\Lambda^2}-\frac{4}{\Lambda^3}\right)J_3\bar a + \left(\frac{3}{\Lambda^2}-\frac{3}{\Lambda^3}\right)J_2^2 + \right.$$

$$+ \left(\frac{6}{\Lambda}-\frac{18}{\Lambda^2}+\frac{12}{\Lambda^3}\right)J_2\bar a^2 + \left(1-\frac{6}{\Lambda}+\frac{11}{\Lambda^2}-\frac{6}{\Lambda^3}\right)\bar a^4 -$$

$$- \frac{4}{\Lambda^2}J_3\bar a - \left(\frac{12}{\Lambda}-\frac{12}{\Lambda^2}\right)J_2\bar a^2 - \left(4-\frac{12}{\Lambda}+\frac{8}{\Lambda^2}\right)\bar a^4 +$$

$$+\frac{6}{\Lambda}J_2\bar{a}^2+\left(6-\frac{6}{\Lambda}\right)\bar{a}^4-4\bar{a}^4+\bar{a}^4\Big]=$$

$$=3a^4-6J_2\,\bar{a}^2+3J_2^2+O\left(\frac{1}{\Lambda}\right). \tag{31}$$

Таким образом,

$$\frac{1}{\Lambda}\langle H-H_0(\bar{a})\rangle_{H_0(\bar{a})}=\mp\frac{\bar{a}^2-J_2(\beta;\bar{a})}{\Lambda}\xrightarrow[\Lambda\to\infty]{}0, \tag{32}$$

$$\gamma=\exp\left\{-\beta\frac{\langle(H-H_0(\bar{a}))^2\rangle_{H_0(\bar{a})}}{\langle H-H_0(\bar{a})\rangle_{H_0(\bar{a})}}\right\}=\exp\left\{-\beta 3\,[\bar{a}^2-J_2(\beta;\bar{a})]+O\left(\frac{1}{\Lambda}\right)\right\}$$

$$\xrightarrow[\Lambda\to\infty]{}\gamma_0=\exp\left\{\pm 3\beta\,[\bar{a}^2-J_2(\beta;\bar{a})]\right\}<\infty, \tag{33}$$

так что аппроксимация гамильтониана $H$ гамильтонианом $H_0(\bar{a})$ является термодинамически эквивалентной.

Литература.


1. N.N.Bogolubov, Jr. Physica, 32, 933, 1966.
2. Н.Н.Боголюбов(мл.). Ядерная физика, 10, 425, 1969.
3. Н.Н.Боголюбов(мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов, Наука, Москва, 1974.
4. В.А.Загребнов, Й.Г.Бранков, Н.С.Тончев. ДАН СССР, 225, 71, 1975.
5. Н.Н.Боголюбов(мл.), А.М.Курбатов, В.Н.Плечко. Сообщение ОИЯИ, Д17-9737, Дубна, 1976.
6. A.M.Kurbatov. JINR Communication, E5-12431, Dubna, 1979.
7. A.M.Kurbatov. JINR Communication, E5-12432, Dubna, 1979.
8. A.M.Kurbatov. JINR Communication, E17-12433, Dubna, 1979.



Рукопись поступила в издательский отдел
19 сентября 1979 года.