Доведено існування розв"язку задачі /4/-/6/ методом Роте [2]. Користуючись принципом максимуму статті [2] і повторюючи міркування [1, с. 493], можна довести, що

$$|T(X,FO_\kappa) - T_\kappa(X)| \leq FO^* \varepsilon ,$$

де ε не залежить від κ і прямує до нуля разом з h.

При $\nu = 1$, $t_0 = 2000\,^\circ C$, $Bi = 1$, $T_c = 20^\circ C$, $FO^* = 1$, $h = 0{,}1$ проведене числове дослідження наближеного значення безрозмірної температури $\theta_\kappa(X) = T_\kappa^{1}(X)/t_0$ методом Роте. Результати обчислень представлені у вигляді графіків на рисунку. Функції $T_\kappa(X)$ обчислювалися за формулами /14/ і за явними формулами /15/. Результати обчислень практично збіглися. При збільшенні кроку за часом з 0,1 до 0,2 наближені значення безрозмірної температури $\theta_\kappa(X)$ збіглися в ті ж моменти часу незалежно від того, отримані вони з кроком h = 0,1 чи з кроком h = 0,2 /відносне відхилення результатів не перевищує 0,5 %/.

1. Смирнов В.И. Курс высшей математики. М., 1981. Т.4. Ч.2. 2. Чжоу Юй-Линь. Краевые задачи для нелинейных параболических уравнений // Матем. сб. 1959. 47 /89/. № 4. С.431-484. 3. Rothe E. Zweidimensionale parabolische Randwertaufgaben als Grenzfall eindimensionaler Randwertaufgaben // Math. Ann. Bd.102. S.650-670.

Стаття надійшла до редколегії 19.04.90

УДК 530.145

В.С.Барбуляк, Ю.Г.Кондратьев

ЗАДАННЯ ГІБСІВСЬКИХ СТАНІВ КВАНТОВИХ ГРАТКОВИХ СИСТЕМ У ТЕРМІНАХ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ІНТЕГРАЛІВ

Розглянемо цілочислову гратку $\mathbb{Z}^d = \{\kappa = (\kappa^{(1)},\dots,\kappa^{(d)}), \kappa^{(i)} \in \mathbb{Z}, i = 1,\dots,d\}$. З кожним вузлом $\kappa \in \mathbb{Z}^d$ зв"яжемо частинку з одним внутрішнім ступенем вільності. Цій частинці відповідає простір станів $\mathcal{H}_\kappa = L_2(\mathbb{R}^1, dx_\kappa)$ і канонічні оператори імпульсу та координати, що визначаються формулами

$$(p_\kappa f)(x_\kappa) = -i \frac{d}{dx_\kappa} f(x_\kappa), \; (q_\kappa f)(x_\kappa) = x_\kappa f(x_\kappa),$$

самоспряжені в $\mathcal{H}_\kappa$. Скінченній підмножині $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ відповідає простір станів $\mathcal{H}_\Lambda = L_2(\mathbb{R}^\Lambda, dx_\Lambda)(x_\Lambda \in \mathbb{R}^\Lambda = \underset{\kappa\in\Lambda}{X} \mathbb{R}^1)$ і набір операторів імпульсу та координати $\{p_\kappa, q_\kappa, \kappa \in \Lambda\}$. Ними породжена C^* - алгебра спостережуваних $\mathcal{A}_\Lambda$, що збігається з алгеброю всіх обмежених операторів у $L_2(\mathbb{R}^1)$. Можна ввести C^* - алгебру $\mathcal{A}_{loc} = \bigcup_\Lambda \mathcal{A}_\Lambda$ локальних спостережуваних та її поповнення $\mathcal{A}$ - C^*-алгебру квазілокальних спостережуваних для нескінченної системи частинок на $\mathbb{Z}^d$.

Фіксованому $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d, |\Lambda| < \infty$ зіставимо локальний гамільтоніан

$$H_\Lambda = \frac{1}{2}\sum_{\kappa\in\Lambda} p_\kappa^2 + \sum_{\kappa\in\Lambda} V_\kappa(q_\kappa) + \sum_{\kappa,j\in\Lambda} W_{\kappa j}(q_\kappa, q_j).$$

Вважається, що потенціали V_κ задовольняють умови

$$V_\kappa \in L_{2,loc}(\mathbb{R}^1); \qquad /1/$$

$$V_\kappa(q) \geq a_\kappa q^2 + b_\kappa, \; a_\kappa, b_\kappa \in \mathbb{R}, \; a_\kappa > 0. \qquad /2/$$

При певних припущеннях щодо $W_{\kappa j}$ /які уточнюються для кожної конкретної моделі/ оператор H_Λ істотно самоспряжений в $\mathcal{H}_\Lambda$, а оператор $exp(-\beta H_\Lambda)$ ядерний.

Гібсівський стан системи в області Λ при оберненій температурі $\beta > 0$ визначається як функціонал на $\mathcal{A}_\Lambda$ виду

$$\omega_{\beta,\Lambda}(A) = \frac{T_r(Ae^{-\beta H_\Lambda})}{T_r(e^{-\beta H_\Lambda})}, \quad A \in \mathcal{A}_\Lambda. \qquad /3/$$

Гібсівський стан нескінченної системи, що задається формальним гамільтоніаном

$$H_{\mathbb{Z}^d} = \frac{1}{2}\sum_{\kappa\in\mathbb{Z}^d} p_\kappa^2 + \sum_{\kappa\in\mathbb{Z}^d} V_\kappa(q_\kappa) + \sum_{\kappa,j\in\mathbb{Z}^d} W_{\kappa j}(q_\kappa, q_j),$$

визначається як функціонал ω_β на алгебрі $\mathcal{A}_{loc}$, отриманий з /3/ в результаті термодинамічного граничного переходу $\Lambda \to \mathbb{Z}^d$.

Для задання стану ω_β в термінах функціональних інтегралів розглянемо випадок однієї квантової частинки з гамільтоніаном

$$H^0 = -\frac{1}{2}\Delta + V.$$

Нехай S_β - коло довжини β. Можна побудувати [1] міру ν_β^0 на множині всіх траєкторій $S_\beta^{\mathbb{R}} = \{\omega : S_\beta \to \mathbb{R}\}$, а по ній - ймовірнісну міру

$$d\nu_\beta^V(\omega(\cdot)) = \frac{1}{Z} e^{-\int_0^\beta V(\omega(\tau))d\tau} d\nu_\beta^0(\omega(\cdot)).$$

Якщо потенціал $V = V_1 + V_2$, де V_1 задовольняє /1/ і /2/, а V_2 – /1/, то з мультиплікативної формули стандартним чином випливає аналог формули Фейнмана-Каца [2]

$$d\nu_\beta^V(\omega(\cdot)) = \frac{1}{Z} e^{-\int_0^\beta V_2(\omega(\tau))d\tau} d\nu_\beta^{V_1}(\omega(\cdot)). \qquad /4/$$

Якщо ввести простір гельдерових на S_β функцій

$$H_\sigma(S_\beta) = \{\omega \in C(S_\beta) \mid |\omega(s_1) - \omega(s_2)| \leq C_\omega |s_1 - s_2|^\sigma;\ s_1, s_2 \in S_\beta,\ \sigma > 0\}$$

з нормою

$$\|\omega\|_\sigma = \sup_{s_1, s_2 \in S_\beta;\, s_1 \neq s_2} \frac{|\omega(s_1) - \omega(s_2)|}{|s_1 - s_2|^\sigma} + \sup_{s \in S_\beta} |\omega(s)|, \qquad /5/$$

то з /4/ випливає лема 1.

Лема 1. Якщо для потенціалу V виконуються умови /1/, /2/, то $\forall \sigma \in (0, \frac{1}{2})$ $\nu_\beta^V(H_\sigma(S_\beta)) = 1$.

Ця лема дає змогу вибрати як простір станів однієї частинки $\mathcal{S} = H_\sigma(S_\beta)$ з фіксованим $\sigma < 1/2$ і топологією, індукованою з $C(S_\beta)$.

Лема 2. $\forall p > 0$ $D_p = \{\omega \in H_\sigma(S_\beta) \mid \|\omega\|_\sigma < p\}$ – компактна множина в топології, породженій нормою /5/.

Взявши $K = 1, 2, \ldots$, отримаємо $\mathcal{S} = \bigcup_{K=1}^{\infty} D_K$.

Означення 1. Компактна функція – це невід"ємна вимірна функція $h : \mathcal{S} \to \mathbb{R}^1$ така, що $\forall c > 0$ $\{\omega \in \mathcal{S} \mid h(\omega) \leq c\}$ – компактна множина в $\mathcal{S}$.

Нехай $\mathcal{M}$ – сукупність всіх ймовірнісних мір на $\mathcal{S}$. Справедлива така теорема Прохорова.

Теорема. Множина $\mathcal{N} \subset \mathcal{M}$ слабко компактна, якщо існує компактна функція h і стала C такі, що $\forall \mu \in \mathcal{N}$

$$\int_{\mathcal{S}} h(\omega) d\mu(\omega(\cdot)) \leq C < \infty.$$

Множину

$$\Omega_\beta(\Lambda) = \{\omega_\Lambda(\cdot) = (\omega_K(\cdot))_{K \in \Lambda} \mid \omega_\Lambda : S_\beta \to \mathbb{R}^\Lambda,\ \omega_K \in \mathcal{S},\ \Lambda \subset \mathbb{Z}^d\}$$

назвемо множиною конфігурацій в об"ємі Λ. Множину $\Omega_\beta \equiv \Omega_\beta(\mathbb{Z}^d)$ назвемо множиною конфігурацій /у нескінченному об"ємі/.

Для $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ через $G(\Lambda)$ позначимо σ-алгебру підмножин простору Ω_β, породжену циліндричними множинами виду

$$\{\omega\in\Omega_\beta \mid \omega_\kappa\in C_\kappa,\ C_\kappa\in\mathcal{B}(\mathcal{Y}),\ \kappa\in\Lambda_1\subset\Lambda,\ |\Lambda_1|<\infty\};$$

σ – алгебру $G(Z^d)$ позначимо G.

Нехай $\mathcal{P}$ – сукупність усіх ймовірнісних мір на (Ω_β, G). З теореми випливає, що множина $\mathcal{K}\subset\mathcal{P}$ слабко компактна, якщо $\forall t\in Z^d$, існує компактна функція h_t і стала C_t такі, що $\forall\nu\in\mathcal{K}$

$$\int\limits_{\Omega_\beta} h_t(\omega_t)\,d\nu(\omega(\cdot)) \le C_t < \infty. \qquad /6/$$

Нехай для $\Lambda\subset Z^d$ задано функцію $W_A(x)=W_A(x_A)\in R^1$, $x_A=\{x_\kappa, \kappa\in A\}$. Визначимо функцію $W_A(\omega(\cdot))$ наступним чином:

$$W_A(\omega(\cdot))=\int\limits_\beta W_A(\omega(\tau))\,d\tau.$$

Набір функцій $W^0=\{W_A(\omega(\cdot)), A\subset Z^d, A\neq\phi, |A|<\infty\}$ назвемо взаємодією.

<u>Означення 2.</u> Формальним потенціалом взаємодії називається вираз

$$E(\omega(\cdot))=\sum_{\substack{A\subset Z^d\\ 1<|A|<\infty}} W_A(\omega(\cdot)).$$

Розглянемо об"єм $\Lambda\subset Z^d$, $|\Lambda|<\infty$, конфігурацію $\omega_\Lambda\in\Omega_\beta(\Lambda)$ і фіксовану конфігурацію $\bar\omega\in\Omega_\beta$.

<u>Означення 3.</u> Відносним потенціалом взаємодії називається вираз

$$E_\Lambda(\omega_\Lambda(\cdot)\mid\bar\omega_{\Lambda^c}(\cdot))=\sum_{\substack{A\subset Z^d\\ 1<|A|<\infty;\ A\cap\Lambda\neq\phi}} W_A((\omega_\Lambda\cup\bar\omega_{\Lambda^c})(\cdot)).$$

Тут $\Lambda^c=Z^d\setminus\Lambda$, $\omega_\Lambda\cup\bar\omega_{\Lambda^c}$ – це конфігурація з Ω_β така, що

$$(\omega_\Lambda\cup\bar\omega_{\Lambda^c})\big|_\Lambda=\omega_\Lambda,\quad (\omega_\Lambda\cup\bar\omega_{\Lambda^c})\big|_{\Lambda^c}=\bar\omega_{\Lambda^c}=\bar\omega\big|_{\Lambda^c}.$$

Розглянемо випадок, коли $\forall\kappa\in Z^d$ $V_\kappa=V$. Позначимо для $\kappa\in Z^d$

$$d\nu_{0,\Lambda}(\omega(\cdot))=\mathop{X}_{\kappa\in\Lambda} d\nu_0^{V_\kappa}(\omega_\kappa(\cdot)) \ \text{ і } \ d\nu_0(\omega(\cdot))=\mathop{X}_{\kappa\in Z^d} d\nu_0^{V_\kappa}(\omega_\kappa(\cdot)).$$

Побудуємо ймовірнісні міри

а/ на $(\Omega_\beta(\Lambda), G(\Lambda))$ при фіксованій граничній умові $\bar\omega\in\Omega_\beta$

$$d\nu_\Lambda(\omega_\Lambda(\cdot)\mid\bar\omega_{\Lambda^c}(\cdot))=\frac{1}{Z_\Lambda}e^{-E_\Lambda(\omega_\Lambda(\cdot)\mid\bar\omega_{\Lambda^c}(\cdot))}\,d\nu_{0,\Lambda}(\omega(\cdot)); \qquad /7/$$

б/ на $(\Omega_\beta, \mathfrak{G})$

$$d\nu(\omega(\cdot)) = \frac{1}{Z} e^{-E(\omega(\cdot))} d\nu_0(\omega(\cdot)), \qquad /8/$$

де Z_Λ, Z – нормуючі множники. Зображення /8/ носить формальний характер. Існування міри /8/ [1] еквівалентне існуванню гіббсівського стану системи, що відповідає гамільтоніану

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} p_k^2 + E(\omega(\cdot)) + \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} V(q_k). \qquad /9/$$

Доведення збіжності мір виду /7/ до міри виду /8/ при термодинамічному граничному переході $\Lambda \to \mathbb{Z}^d$ – досить складне завдання. Воно здійснюється з використанням різноманітних технічних прийомів, вибір яких залежить від конкретного класу розглядуваних моделей.

1. Глоба С.А., Кондратьев Ю.Г. Построение гиббсовских состояний квантовых решеточных систем // Применение методов функционального анализа в задачах математической физики. К., 1987. С.4-16. 2. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. М., 1978. Т.2.

Стаття надійшла до редколегії 04.06.90

УДК 530.145

В.С.Барбуляк, Ю.Г.Кондратьев

КРИТЕРІЇ ІСНУВАННЯ ГІББСІВСЬКИХ СТАНІВ КВАНТОВИХ ҐРАТКОВИХ СИСТЕМ

У праці [1] побудовано ймовірнісні міри

$$d\nu_\Lambda(\omega_\Lambda(\cdot)|\bar{\omega}_{\Lambda^c}(\cdot)) = \frac{1}{Z_\Lambda} e^{-E_\Lambda(\omega_\Lambda(\cdot)|\bar{\omega}_{\Lambda^c}(\cdot))} d\nu_{0,\Lambda}(\omega(\cdot)) \qquad /1/$$

на вимірному просторі $(\Omega_\beta(\Lambda), \mathfrak{G}(\Lambda))$ при фіксованій граничній умові $\bar{\omega} \in \Omega_\beta$ та

$$d\nu(\omega(\cdot)) = \frac{1}{Z} e^{-E(\omega(\cdot))} d\nu_0(\omega(\cdot)) \qquad /2/$$

на вимірному просторі $(\Omega_\beta, \mathfrak{G})$. Існування міри /2/ еквівалентне