

УДК 621.391.1 : 519.2

© 2012 г. В.А. Мальшев

ТОНКАЯ СТРУКТУРА ОДНОМЕРНОЙ ДИСКРЕТНОЙ СИСТЕМЫ ТОЧЕК

Рассматривается конечная система N точек $x_1 < \dots < x_N$ на отрезке. Идеальной (кристаллом) называется система, где расстояния между соседними точками одинаковы. Отклонение от идеальности характеризуется системой конечных разностей $\nabla_i^1 = x_{i+1} - x_i$, $\nabla_i^{k+1} = \nabla_{i+1}^k - \nabla_i^k$ для всевозможных i и k . Находятся асимптотические оценки при $N \rightarrow \infty$, $k \rightarrow \infty$ для системы точек, дающих минимум потенциальной энергии кулоновской системы во внешнем поле.

§ 1. Введение

Пусть задана система

$$0 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_N < 1$$

из N различных точек на отрезке $[0, 1]$. Если эта система точек случайна, существует множество способов характеризовать ее структуру, например, как структуру случайного процесса приращений $\Delta_i = x_{i+1} - x_i$. Если же никакой случайности нет, то нет и общепринятого способа характеризовать ее организацию. Один из возможных способов – рассмотреть систему разностей некоторых порядков $\ell = 1, 2, \dots$

$$\nabla x_i = \Delta_i = x_{i+1} - x_i, \quad \nabla^2 x_i = x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i, \quad \dots, \quad \nabla^\ell x_i, \quad \dots,$$

которые являются естественными локальными характеристиками этой системы точек (или набора чисел), даже если бы мы не знали метрики пространства, куда они вложены, или даже самого пространства. Это соответствует ситуации в анализе, где существование производных достаточного порядка говорит о “качестве” рассматриваемой функции. В дискретном случае нет проблемы существования (так, на окружности разности любого порядка определены), и заменой существования может быть скорость убывания разностей по ℓ (при достаточно больших N). Далее все зависит от того, как задается система точек. Самое популярное задание – дискретизация гладких функций. Уже давно дискретные разности интенсивно используются в вычислительной математике в связи с задачами приближения, интерполяции, решения дифференциальных уравнений и т.д. Однако там не рассматриваются разности слишком высоких порядков. Для произвольных же порядков существует наука – исчисление конечных разностей, см. [1–4]), идущая еще от И. Ньютона (ряд Ньютона, разделенные разности и т.д.). В § 2 мы приводим необходимые определения и результаты из этой науки.

Нас интересуют случаи, когда нет естественной гладкой функции, дискретизацией которой является данная система точек. Такие системы возникают, например, как неподвижные точки естественных динамических систем в физике.

Мы предлагаем здесь взгляд на систему конечных разностей как индикаторов шкалы отклонений от идеальной системы. *Идеальной системой* будем называть

случай, когда все расстояния между соседями равны. В этом случае конечные разности любого порядка, большего единицы, равны нулю. В физике это соответствует идеальному кристаллу, и много работ было посвящено доказательству идеальности кристалла в пределе при $N \rightarrow \infty$ (см. [5–9]). Нас интересуют случаи, в некотором смысле близкие к идеальному. Поэтому термодинамический предельный переход здесь противоположен – наша задача более тонкая.

Разности данного порядка ℓ зависят от N и от i . Нас интересуют асимптотики или хотя бы оценки сверху для заданного ℓ , равномерные по i . Будем говорить, что разности порядка ℓ определены на шкале $\varkappa(N, \ell)$ (не видны на шкалах выше $\varkappa(N, \ell)$), если число $\varkappa(N, \ell)$ является асимптотикой для разностей порядка ℓ , равномерной по i (оценкой сверху для данного ℓ равномерно по i). Под *тонкой структурой* системы точек мы будем понимать набор чисел $\varkappa(N, \ell)$.

Так, в физике шкала порядка 1 соответствует макрошкале, а шкала N^{-1} – микрошкале.

Формулировка задачи. Часто система точек задается не явно, а как конфигурация, дающая минимум некоторому потенциалу, или как неподвижная конфигурация. Мы изучаем здесь конкретную систему точек на $[0, 1]$, которая определяется системой уравнений

$$f(x_i - x_{i-1}) - f(x_{i+1} - x_i) + F(x_i) = 0, \quad i = 2, \dots, N - 1, \quad (1)$$

а для каждой из крайних точек x_1 и x_N есть альтернатива – либо $x_1 = 0$ ($x_N = 1$) и при этом, соответственно,

$$-f(x_2 - x_1) + F(x_1) \leq 0 \quad (f(x_N - x_{N-1}) + F(x_N) \geq 0),$$

либо, соответственно,

$$-f(x_2 - x_1) + F(x_1) = 0 \quad (f(x_N - x_{N-1}) + F(x_N) = 0).$$

Эта система интерпретируется как неподвижная конфигурация, когда на точки x_i действуют силы взаимодействия $f(x_i - x_{i-1})$ и $-f(x_{i+1} - x_i)$ с левым и правым соседом соответственно (мы рассматриваем кулоновское отталкивающее взаимодействие $f(r) = r^{-2}$). Кроме того, есть внешняя сила $F(x)$. Очевидно, что если $F(x) \equiv 0$, то $x_1 = 0$, $x_N = 1$, а все $x_{i+1} - x_i$ равны – идеальный случай.

В данной статье, являющейся естественным продолжением работ [10, 11], рассматриваются три примера внешней силы F – постоянная, линейная и степенная. Только в первом случае удастся получить точную асимптотику, которая основывается на технике, развитой в комбинаторике для чисел Стирлинга второго рода. В двух других случаях мы получаем оценки сверху, которые тем не менее кажутся довольно точными, так как проводятся “на грани” точных оценок. Доказательство в линейном случае опирается опять же на комбинаторику и индуктивную процедуру по ℓ . В степенном случае действует несколько другая индуктивная процедура, аналогичная линейному случаю.

В [10, 11] доказано, что для монотонных внешних сил $F(x)$ неподвижная конфигурация существует, единственна и такова, что $x_1 = 0$, $x_N = L$, а для $i = 2, \dots, N - 1$ выполнены уравнения (1). Кроме того, там доказано, что первые разности имеют асимптотику (равномерную по i)

$$\Delta_i \sim \frac{L}{N - 1}.$$

Центральный факт – эта асимптотика не зависит от вида F . В [10] вычислен и следующий член асимптотического разложения

$$(x_{i+1} - x_i) - \frac{L}{N-1} \sim \frac{F}{2} N^{-3} \left(\frac{N}{2} - i \right), \quad i = 2, \dots, N-1,$$

для постоянной внешней силы F . Формальная выкладка показывает, что главный член асимптотики второй разности должен быть порядка N^{-3} и не зависит от i , причем, используя результаты [10], можно показать, что остальные члены асимптотического разложения не влияют на этот вывод. Можно сказать, что только вторая разность показывает макросилу F . Здесь мы изучаем асимптотику всех высших разностей. Обозначим

$$\Delta_1 = x_2 - x_1 = \Delta, \quad \Delta_i = x_{i+1} - x_i = \Delta(1 + \delta_i), \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Таким образом, $\delta_1 = 0$ по определению, а в [10, 11] доказано, что $\Delta \sim \frac{1}{N}$. Все дальнейшие доказательства основаны на исследовании следующей системы уравнений для величин δ_i , $i = 2, \dots, N-1$, которая получается суммированием уравнений (1) от 2 до i :

$$f(\Delta(1 + \delta_i)) - f(\Delta) = \sum_{i=2}^i F(x_i), \quad x_i = (i-1)\Delta + \Delta \sum_{i=2}^i \delta_i.$$

Отсюда имеем

$$\delta_i = (1 + Q_i)^{-\frac{1}{2}} - 1 = \sum_{m=1}^{\infty} \delta_{i,m}, \quad \delta_{i,m} = a_m Q_i^m, \quad (2)$$

где

$$Q_i = \Delta^2 \sum_{i=2}^i F(x_i),$$

$$(-1)^m a_m = \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2m-1)}{2^m m!} = \frac{(2m)!}{(2^m m!)^2} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi m}}, \quad |a_m| \leq 1. \quad (3)$$

Мы видим, что за исключением случая постоянной функции F эта система сильно нелинейна, и уравнения в ней переплетаются.

§ 2. Конечные разности

Пусть функция $g_i = g(i)$, $i \in \mathbb{Z}$, задана на решетке \mathbb{Z} . Назовем

$$\nabla g(i) = \nabla^+ g(i) = g(i+1) - g(i), \quad \nabla^- g(i) = g(i) - g(i-1) \quad (4)$$

ее правой и левой конечной разностью (дискретной производной). Если функция задана на части решетки, например, только для $i = 1, \dots, N$, то мы рассматриваем только те разности, которые определены. Например, разность $\nabla^\ell g(i)$ определена, если $i + \ell \leq N$.

Заметим, что

$$\nabla^n = (S-1)^n = \sum_{k=0}^n C_n^k (-1)^k S^{n-k} = \sum_{k=0}^n C_n^k (-1)^{n-k} S^k, \quad (5)$$

где S – оператор сдвига:

$$(Sf)(i) = f(i+1).$$

Отсюда, в частности,

$$\begin{aligned}\nabla x_i &= \Delta_i = x_{i+1} - x_i, \\ \nabla^2 x_i &= x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i = \nabla \Delta_i = \Delta \nabla \delta_i = \Delta(\delta_{i+1} - \delta_i).\end{aligned}\quad (6)$$

Поэтому производные коммутируют с S , и имеют место следующие формулы (Лейбница):

$$\begin{aligned}\nabla(gf)(i) &= \\ &= f(i+1)(\nabla g)(i) + g(i)(\nabla f)(i) = (Sf)(\nabla g) + g(\nabla f) = (Sg)(\nabla f) + f(\nabla g),\end{aligned}\quad (7)$$

$$\begin{aligned}\nabla(f_1 \dots f_n) &= \\ &= (\nabla f_1)S(f_2 \dots f_n) + f_1 \nabla(f_2 \dots f_n) = \dots = \sum_{k=1}^n f_1 \dots f_{k-1} (\nabla f_k) S(f_{k+1} \dots f_n).\end{aligned}\quad (8)$$

В непрерывном случае имеет место формула для дифференцирования произведения с произвольными ℓ и n :

$$(f_1 \dots f_n)^{(\ell)} = \sum_Q \frac{\ell!}{\prod_{k=1}^n \ell_k!} f_1^{(\ell_1)} \dots f_n^{(\ell_n)},\quad (9)$$

где суммирование ведется по всем наборам $Q = (\ell_1, \dots, \ell_n)$ неотрицательных целых чисел, удовлетворяющим условию $\ell_1 + \dots + \ell_n = \ell$, а индексом (ℓ) обозначается производная порядка ℓ . В дискретном случае нам понадобится аналог формулы (9)

$$\begin{aligned}\nabla^\ell(f_1 f_2) &= \sum_{k=0}^{\ell} C_\ell^k (\nabla^k f_1) (\nabla^{\ell-k} S^k f_2), \\ \nabla^\ell(f_1 \dots f_n) &= \\ &= \sum_Q \frac{\ell!}{\prod_{k=1}^n \ell_k!} (\nabla^{\ell_1} f_1) (\nabla^{\ell_2} S^{\ell_1} f_1) (\nabla^{\ell_3} S^{\ell_1+\ell_2} f_1) \dots (\nabla^{\ell_n} S^{\ell_1+\dots+\ell_{n-1}} f_n).\end{aligned}\quad (10)$$

Обе эти формулы легко доказываются по индукции, первая формула является формулой (48) в [12]. Однако операторы сдвига и их степени для нас не будут играть роли. Если обозначить

$$\gamma_k(q) = \max_{i=1, \dots, \ell-q} |S^i \nabla^q f_k|,$$

то в §§ 4, 5 нам понадобится неравенство

$$\nabla^\ell(f_1 \dots f_n) \leq \sum_Q \frac{\ell!}{\prod_{k=1}^n \ell_k!} \gamma_1(\ell_1) \dots \gamma_n(\ell_n).\quad (11)$$

Отметим еще, что если функция $f(i)$ не зависит от i , то ее дифференцирование дает ноль. Легко показать также, что

$$\nabla^\ell i^n = 0, \quad \ell > n.\quad (12)$$

Высшие разности для степенной функции. Числа

$$S(n, \ell, i) = \frac{1}{\ell!} \nabla^\ell i^n$$

иногда называются обобщенными числами Стирлинга второго рода [13]. Частным случаем являются обычные числа Стирлинга второго рода

$$\left\{ \begin{matrix} n \\ \ell \end{matrix} \right\} = S(n, \ell) = S(n, \ell, 0) = \frac{1}{\ell!} \nabla^\ell 0^n = \frac{1}{\ell!} \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^{\ell-k} C_{\ell}^k k^n,$$

где значение величины $\nabla^\ell i^n$ в точке $i = 0$ обозначено через $\nabla^\ell 0^n$. Хорошо известно, что

$$\left\{ \begin{matrix} n \\ \ell \end{matrix} \right\} = 0, \quad n < \ell, \quad \left\{ \begin{matrix} n \\ \ell \end{matrix} \right\} = 1, \quad n = \ell. \quad (13)$$

Известны только некоторые асимптотики для $S(n, \ell, i)$:

1. Асимптотика Риордана для $n \rightarrow \infty$, $\ell = \text{const}$

$$S(n, \ell) \sim \frac{\ell^n}{\ell!};$$

2. При $\ell \rightarrow \infty$, $n = \ell + k$, где k ограничено, для всех i имеет место соотношение (см. [13])

$$S(n, \ell, i) \sim C_{\ell+k}^k \left(i + \frac{\ell}{2} \right)^k, \quad (14)$$

частным случаем которого является результат [14] для $S(n, \ell)$;

3. При $n \rightarrow \infty$, $\ell \rightarrow \infty$ и $\varkappa = \frac{k}{\ell}$, отделенном от нуля и бесконечности, результат был получен в [15] для $i = 0$ и обобщен в [13] для медленно растущих i .

Дискретизация гладких функций. О случае дискретизации аналитической функции дает представление следующий пример. Если функция $g(x)$ задана на окружности S_1 , то это эквивалентно функции с периодом 1, заданной на всей прямой \mathbb{R} . Примером может быть $g(x) = \sin 2\pi x$. Положим

$$g_i = \sin \frac{2\pi i}{N}, \quad i = 1, \dots, N, \quad g_{i,n} = \nabla^n g_i, \quad \Delta = \frac{1}{N}. \quad (15)$$

Тогда

$$\begin{aligned} g_{i,1} &= \nabla g_i = g_{i+1} - g_i = \int_{x_i}^{x_i+\Delta} g^{(1)}(y_1) dy_1, \\ g_{i,2} &= \nabla g_{i,1} = g_{i+1,1} - g_{i,1} = \int_{x_{i+1}}^{x_{i+1}+\Delta} g^{(1)}(y) dy - \int_{x_i}^{x_i+\Delta} g^{(1)}(y) dy = \\ &= \int_{x_i}^{x_i+\Delta} (g^{(1)}(y_1 + \Delta) - g^{(1)}(y_1)) dy_1 = \int_{x_i}^{x_i+\Delta} dy_1 \int_{y_1}^{y_1+\Delta} g^{(2)}(y_2) dy_2 \end{aligned}$$

и т.д.,

$$\begin{aligned} g_{i,n+1} &= \nabla^{n+1} g_i = g_{i+1,n} - g_{i,n} = \\ &= \int_{x_i}^{x_i+\Delta} dy_1 \left(\int_{y_1}^{y_1+\Delta} dy_2 \dots \left(\int_{y_n}^{y_n+\Delta} dy_{n+1} g^{(n+1)}(y_{n+1}) \right) \right), \end{aligned}$$

и поэтому, если $|g^{(n)}(x)| \leq C^{n+1}(g)$ для некоторой константы $C(g) > 0$, то

$$|g_{i,n}| \leq C^{n+1}(g)\Delta^n.$$

§ 3. Постоянная внешняя сила

Теорема 1. Пусть $F(x) = F$ постоянна, тогда при $N \rightarrow \infty$ и $1 \leq \ell = o(N)$ равномерно по $i < N - \ell$

$$\nabla^{\ell+1} x_i \sim (-1)^\ell \sqrt{2} \left(\frac{F}{e} \ell \Delta^2 \right)^\ell \Delta.$$

Доказательство. Ввиду (6) достаточно доказать, что

$$\nabla^\ell \delta_i \sim \sqrt{2} \left(\frac{F}{e} \ell \Delta^2 \right)^\ell.$$

Из (2) имеем

$$\nabla^\ell \delta_{i+1} = \sum_{m=1}^{\infty} \nabla^\ell \delta_{i+1,m}, \quad \delta_{i+1,m} = a_m i^m \Delta^{2m} F^m. \quad (16)$$

Ввиду (12) или (13) в случае $\ell > m$

$$\nabla^\ell \delta_{i,m} = 0.$$

Лемма 1. При $\ell = m$

$$\nabla^\ell \delta_{i+1,m} = a_\ell \ell! (F \Delta^2)^\ell.$$

Доказательство. Заметим, что согласно (5)

$$\nabla^\ell i^{\ell+p} = \sum_{k=0}^{\ell} C_\ell^k (-1)^{\ell-k} (i+k)^{\ell+p}. \quad (17)$$

Тогда лемма следует из цепочки равенств

$$\nabla^m i^m = \sum_{k=0}^m C_m^k (-1)^{m-k} (i+k)^m = \sum_{k=0}^m C_m^k (-1)^{m-k} k^m = m! \left\{ \begin{matrix} m \\ m \end{matrix} \right\} = m!,$$

где второе равенство можно объяснить двояко: либо с помощью (13), либо потому, что каждое дифференцирование понижает степень многочлена от i на единицу, и поэтому второе выражение не должно зависеть от i . \blacktriangle

Для доказательства теоремы покажем, что сумма членов ряда (16) для $m > \ell$ будет асимптотически меньше "главного" члена $\ell = m$.

Далее $m = \ell + p$, $p > 0$. Рассмотрим два случая. Пусть сначала $p > \ell$, тогда из (17) следует

$$|(\nabla^+)^{\ell} \delta_{i+1,\ell+p}| \leq |a_{\ell+p}| (F \Delta^2)^{\ell+p} 2^\ell N^{\ell+p} = |a_{\ell+p}| 2^\ell F^{2\ell} \Delta^{2\ell} (F \Delta)^{p-\ell}.$$

Возьмем минимальное ℓ_0 , такое что для всех $\ell \geq \ell_0$

$$\ell! > 2^\ell F^\ell.$$

Тогда для $\ell \geq \ell_0$

$$|a_{\ell+p}| 2^\ell F^{2\ell} \Delta^{2\ell} (F\Delta)^{p-\ell} \leq |a_\ell| (F\Delta^2)^\ell (F\Delta)^{p-\ell} \ell! \leq (F\Delta)^{p-\ell} |\nabla^\ell \delta_{i+1,\ell}|,$$

и значит, сумма по $p > \ell$ членов с $\ell \geq \ell_0$ (асимптотически) мажорируется “главным” членом. Если же $\ell < \ell_0$, то соответствующий член не превосходит

$$C(\ell_0, F) \Delta^{p-\ell} |\nabla^\ell \delta_{i+1,\ell}|$$

для некоторой константы $C(\ell_0, F) > 0$.

Случай $1 \leq p \leq \ell$ сложнее. Нетрудно доказать (см., например, [13]) известное равенство

$$\nabla^\ell i^{\ell+p} = \sum_{q=0}^p C_{\ell+p}^q i^q (\nabla^\ell 0^{\ell+p-q}).$$

Для случая $\ell \rightarrow \infty$ нам понадобится тот факт, что конечные разности $\nabla^\ell i^n$ (и числа Стирлинга) имеют простой комбинаторный смысл [13]. Напомним, что $\nabla^\ell 0^n$ равно числу способов разместить n различных объектов по ℓ различным ячейкам так, чтобы ни одна из ячеек не оказалась пустой. Аналогично, пусть имеется $\ell + i$ различных ячеек, из которых ℓ выделены. Тогда $\nabla^\ell i^n$ – число способов разместить n различных объектов по этим ячейкам так, чтобы ни одна из выделенных ℓ ячеек не была пустой. Отсюда следует, что $\nabla^\ell i^n$ неотрицательны (при $i \geq 0$) и возрастают по n .

Лемма 2. Справедливо соотношение

$$\nabla^\ell i^{n+1} \leq (\ell + i + n\ell) \nabla^\ell i^n.$$

Доказательство. Имеем

$$\nabla^\ell i^n \leq \nabla^\ell i^{n+1} = (\ell + i) \nabla^\ell i^n + \ell \nabla^{\ell-1} i^n.$$

Действительно, неравенство очевидно, а равенство проще всего объяснить следующим образом. Выделим один элемент (например, последний в некоторой фиксированной нумерации). Расположение остальных может быть двух видов: 1) так, чтобы все выделенные ℓ ячеек были непустыми, тогда выделенный элемент может быть размещен $\ell + i$ способами; 2) ровно одна из ℓ выделенных ячеек свободна, тогда выделенный элемент должен быть положен в свободную ячейку.

Кроме того, очевидно, что

$$\nabla^{\ell-1} i^n \leq n \nabla^\ell i^n. \quad \blacktriangle$$

Так как $\ell + i \leq N$ и $n\ell \leq 2\ell^2 = o(\Delta^2)$, из леммы получаем

$$\left| \frac{\nabla^\ell \delta_{i+1,n+1}}{\nabla^\ell \delta_{i+1,n}} \right| \leq \left| \frac{a_{\ell+1}}{a_\ell} \right| (\ell + i + n\ell) F \Delta^2 = o(\Delta),$$

и значит, сумма членов с $1 \leq p < \ell$ асимптотически меньше $\nabla^\ell \delta_{i+1,n}$, что завершает доказательство теоремы. \blacktriangle

Замечание 1. Асимптотика для случая, когда ℓ имеет порядок N , связана с нерешенной проблемой комбинаторики о нахождении максимума унимодальной последовательности чисел Стирлинга (см. [16, предложение 3.30]). Но, например, оценки

при $\ell \sim \varepsilon N$

$$(1 - C\varepsilon) < \frac{|\nabla^\ell \delta_i|}{\sqrt{2} \left(\frac{F}{e} \ell \Delta^2\right)^\ell} < (1 + C\varepsilon)$$

для некоторой константы $C > 0$ и всех достаточно малых $\varepsilon > 0$ следуют из выше-приведенного доказательства.

§ 4. Линейная внешняя сила

Теорема 2. Пусть $F(x) = \alpha x$, $\alpha \geq 1$. Тогда равномерно по ℓ , $2 \leq \ell \leq N - i$, справедливо

$$|\nabla^\ell x_i| \leq \Delta (C\Delta)^\ell \ell!$$

Доказательство. Ввиду (6) достаточно доказать, что

$$|\nabla^{\ell-1} \delta_i| \leq (C\Delta)^\ell \ell!$$

Аналогично предыдущему

$$\nabla^{\ell-1} \delta_i = \sum_{m=1}^{\infty} \nabla^{\ell-1} \delta_{i,m}, \quad \delta_{i,m} = a_m \Delta^{2m} \alpha^m \left(\sum_{k=2}^i x_k \right)^m. \quad (18)$$

Метод оценки каждого слагаемого будет зависеть от пары m, ℓ .

Малые m, ℓ . Пусть $\ell = 2$, $m = 1$. Тогда

$$\nabla \delta_{i,1} = a_1 \Delta^2 \alpha \nabla \sum_{k=2}^i x_k = a_1 \Delta^2 \alpha x_{i+1}. \quad (19)$$

Пусть $\ell = 3$, $m = 1$. Тогда

$$\nabla^2 \delta_{i,1} = a_2 \Delta^2 \alpha \nabla^2 \sum_{k=2}^i x_k = a_2 \Delta^2 \alpha \nabla x_{i+1} \sim a_2 \alpha \Delta^3. \quad (20)$$

Пусть $\ell = 3$, $m = 2$. Тогда

$$\nabla^2 \delta_{i,2} = a_2 \Delta^4 \alpha^2 \nabla^2 \left(\sum_{k=2}^i x_k \right)^2 = O(\Delta^4). \quad (21)$$

Случай $2 \leq \ell \leq m$. Мы “честно” продифференцируем один раз, а для оставшихся $\ell - 2$ дифференцирований используем очевидную оценку (верную для любой функции $f(i)$)

$$|\nabla^{\ell-2} f(i)| \leq 2^{\ell-2} \max |f(i)|. \quad (22)$$

А именно, обозначая $\psi_i = \sum_{k=2}^i x_k$, имеем

$$\begin{aligned} |(\nabla^+)^{\ell-1} \delta_{i,m}| &\leq \Delta^{2m} \alpha^m |(\nabla^+)^{\ell-2} [x_{i+1} (\psi_{i+1}^{m-1} + \psi_{i+1}^{m-2} \psi_i + \dots + \psi_i^{m-1})]| \leq \\ &\leq \Delta^{2m} \alpha^m 2^{\ell-2} m (i+1)^{m-1} \leq \alpha^m \Delta^{m+1} 2^{\ell-2} m \end{aligned}$$

и

$$\sum_{m \geq \ell \geq 2} |(\nabla^+)^{\ell-1} \delta_{i,m}| \leq 2^{\ell-2} \sum_{m \geq \ell \geq 2} m \alpha^m \Delta^{m+1} \leq \ell (2\alpha)^\ell \Delta^{\ell+1}.$$

Мы доказали больше, а именно, что формулы (19) и (20) дают асимптотику для $\ell = 2$ и $\ell = 3$ соответственно.

Случай $m < \ell \leq N$. Здесь оценки существенно сложнее. Обозначая

$$\gamma_k = \max_{i: i+k \leq N} |\nabla^k x_i|,$$

используем (для $\ell \geq 3$) индуктивное предположение

$$\gamma_k \leq \Delta (C\Delta)^k k!, \quad k = 2, \dots, \ell - 1. \quad (23)$$

Рассмотрим сначала первое слагаемое (т.е. при $m = 1$) в (18), которое равно

$$a_1 \alpha \Delta^2 \nabla^{\ell-2} x_{i+1},$$

тогда результат непосредственно следует из индуктивного предположения.

При $m \geq 2$ с помощью формулы (10) модуль выражения

$$\nabla^{\ell-1} \left(\sum_{k=2}^i x_k \right)^m$$

после $\ell - 1$ дифференцирований можно оценить следующим образом:

$$\begin{aligned} \left| \nabla^{\ell-1} \left(\sum_{k=2}^i x_k \right)^m \right| &\leq \sum_Q C(m, \ell - 1 | q_0, \dots, q_{\ell-1}) \left(\max_i \sum_{k=2}^i x_k \right)^{q_0} \times \\ &\times \left(\max_i x_{i+1} \right)^{q_1} \left(\max_i |\nabla x_{i+1}| \right)^{q_2} \prod_{k \geq 3} \gamma_{k-1}^{q_k}, \end{aligned} \quad (24)$$

где через \sum_Q обозначена сумма по конечным упорядоченным наборам неотрицательных целых чисел $Q = q_0, q_1, \dots, q_\ell$, таких что

$$q_0 + \sum_{k \geq 1} q_k = m, \quad \sum_{k \geq 1} k q_k = \ell - 1.$$

Такие наборы будем называть допустимыми. Их смысл в том, что ровно q_0 множителей $\sum_{k=2}^i x_k$ не дифференцируются вообще, q_1 множителей дифференцируются ровно один раз, после чего имеют вид x_{i+1} , и т.д., $q_{\ell-1}$ множителей дифференцируются ровно $\ell - 1$ раз. Перенумеруем m множителей в $\left(\sum_{k=2}^i x_k \right)^m$ от 1 до m . Каждое из последовательных дифференцирований применяется к одному из этих множителей, давая разные слагаемые в формуле (12). При этом, так как мы берем максимум по i , операторы сдвига в формуле (10) можно не учитывать.

Для заданного набора Q рассмотрим конечные занумерованные наборы $\alpha = \{A_k, k = 0, \dots, \ell - 1\}$ подмножеств множества $\{1, \dots, m\}$, такие что $|A_k| = q_k$ и

$$\{1, \dots, m\} = \bigcup A_k.$$

В множество A_k мы включаем те и только те элементы, которые дифференцируются ровно k раз.

Кроме того, последовательность $\ell - 1$ дифференцирований разбивается на группы $B_{k,p}$, $p = 1, \dots, q_k$, так что

$$\{1, \dots, \ell - 1\} = \bigcup_{k,p} B_{k,p}, \quad |B_{k,p}| = k.$$

Смысл множества $B_{k,p}$ состоит в том, что каждое дифференцирование из $B_{k,p}$ применяется к p -му по порядку элементу множества A_k .

Константы $C(m, \ell - 1 | q_0, \dots, q_{\ell-1})$ для допустимых наборов Q равны числу таких разбиений, т.е.

$$\begin{aligned} & (C_m^{q_0} C_{m-q_0}^{q_1} C_{m-q_0-q_1}^{q_2} \dots) (C_{\ell-1}^{q_1} (q_1!)) \left(C_{\ell-1-q_1}^{2q_2} \frac{(2q_2)!}{2^{q_2}} \right) \dots \\ & \dots \left(C_{\ell-1-q_1-2q_2-\dots}^{kq_k} \frac{(kq_k)!}{(k!)^{q_k}} \right) \dots = \frac{m!}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \frac{(\ell-1)!}{\prod_{k=1}^{\ell-1} (k!)^{q_k}}. \end{aligned}$$

Оценим сверху модули слагаемых в (18), пользуясь равенством (24). При этом используем индуктивное предположение (23) для оценки γ_k , а также очевидные оценки для $|\sum x_i|$, $|x_i|$ и $|\nabla x_{i+1}|$. В результате получим

$$|\nabla^{\ell-1} \delta_{i,m}| \leq \alpha^m \Delta^{2m} N^{q_0} \Delta^{\sum_{k \geq 3} q_k} \prod_{k \geq 2} \left((C\Delta)^{k-1} (k-1)! \right)^{q_k} \frac{m!}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \frac{(\ell-1)!}{\prod_{k=1}^{\ell-1} (k!)^{q_k}}.$$

В итоге Δ будет в степени

$$\begin{aligned} 2m - q_0 + m - q_0 - q_1 - q_2 + \sum_{k \geq 2} (k-1)q_k &= 2m - q_0 + m - q_0 - q_1 - q_2 + \\ + \ell - 1 - q_1 - m + q_0 + q_1 &= 2m + \ell - 1 - q_0 - q_1 - q_2 \geq m + \ell - 1, \end{aligned}$$

а константа C – в степени

$$\ell - 1 - q_1 - m + q_0 + q_1 = \ell - 1 - m + q_0.$$

Окончательной оценкой будет

$$\begin{aligned} & \alpha^m \Delta^{m+\ell-1} C^{\ell-1-m+q_0} \frac{m!}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} (\ell-1)! \prod_{k \geq 2} \frac{((k-1)!)^{q_k}}{(k!)^{q_k}} \leq \\ & \leq \alpha^m (C\Delta)^{\ell-1} (\ell-1)! \Delta^2 m^2 2^{-\frac{m}{2}} C^{-m+q_0} \frac{1}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \prod_{k \geq 2} \frac{1}{k^{q_k}}. \end{aligned}$$

Действительно, поскольку для всех $k \geq 2$

$$k! \leq k^k 2^{-\frac{k}{2}},$$

то

$$\Delta^m m! \leq \Delta^m m^m 2^{-\frac{m}{2}} \leq \Delta^2 m^2 2^{-\frac{m}{2}}.$$

Теперь остается выполнить суммирование по всем Q :

$$\begin{aligned} \sum_Q C^{q_0} \frac{1}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \prod_{k \geq 2} \frac{1}{k^{q_k}} &\leq \left(\sum_{q_0} \frac{C^{q_0}}{q_0!} \right) \prod_{k=1}^{\ell-1} \sum_{q_k=0}^m \frac{k^{-q_k}}{q_k!} \leq e^C e^{e^{\sum_i^{\ell-1} k^{-1}}} \leq \\ &\leq e^{C+\ln(\ell-1)} = e^C (\ell-1), \end{aligned}$$

после чего имеем оценку слагаемого (18) при данном m

$$(C\Delta)^\ell \ell! \Delta^2 m^2 C^{-m} e^C 2^{-\frac{m}{2}} \alpha^m.$$

Суммирование по m дает

$$(C\Delta)^\ell \ell! \Delta^2 \sum_{m=1}^{\ell-1} m^2 C^{-m} e^C 2^{-\frac{m}{2}} \alpha^m.$$

Заметим, что при $C > \frac{\alpha}{\sqrt{2}}$ величина

$$\sum_{m=1}^{\ell-1} m^2 C^{-m} 2^{-\frac{m}{2}} e^C \alpha^m$$

равномерно ограничена по ℓ (и N). Учитывая также (18), видим, что теорема доказана с константой

$$C = 2\alpha. \quad \blacktriangle$$

Замечание 2. Случай $\alpha < 1$ рассматривается аналогично, меняется только константа C . Мы видели также, что при $\ell = 2$ асимптотика зависит от i , а в случае $\ell = 3$ – не зависит.

§ 5. Степенная внешняя сила

Теорема 3. Пусть $F(x) = \alpha x^n$, $\alpha \geq 1$. Тогда для всех i и всех ℓ , $2 \leq \ell \leq N - i$, справедливо

$$|\nabla^\ell x_i| \leq \Delta (\Delta C)^\ell \ell!, \quad C = 2\alpha n! e^6.$$

Доказательство. Аналогично предыдущему надо оценить

$$\nabla^{\ell-1} \delta_i = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \Delta^{2m} \alpha^m \nabla^{\ell-1} \left(\sum_{k=2}^i x_k^n \right)^m. \quad (25)$$

Случай $\ell = 2$, $m = 1$. В этом случае

$$\nabla \delta_{i,1} = a_1 \Delta^2 \alpha \nabla \sum_{k=2}^i x_k^n = a_1 \Delta^2 \alpha x_{i+1}^n. \quad (26)$$

Случай $2 \leq \ell \leq m$. Мы “честно” продифференцируем один раз (по формуле (8)), а для оставшихся $\ell - 2$ дифференцирований используем оценку (22). А именно,

обозначая $\psi_i = \sum_{k=2}^i x_k^n$, имеем

$$\begin{aligned} |\nabla^{\ell-1} \delta_{i,m}| &\leq \Delta^{2m} \alpha^m |\nabla^{\ell-2} [x_{i+1}^n (\psi_{i+1}^{m-1} + \psi_{i+1}^{m-2} \psi_i + \dots + \psi_i^{m-1})]| \leq \\ &\leq \Delta^{2m} \alpha^m 2^{\ell-2} m (i+1)^{m-1} \leq \alpha^m \Delta^{m+1} 2^{\ell-2} m \end{aligned}$$

и

$$2^{\ell-2} \sum_{m \geq \ell \geq 2} m \alpha^m \Delta^{m+1} \leq \ell (2\alpha)^\ell \Delta^{\ell+1}.$$

Отсюда и из (26) следует результат теоремы для $\ell = 2$.

Первая индуктивная процедура. Надо оценить

$$\sum_{m=1}^{\ell-1} \nabla^{\ell-1} \delta_{i,m} = \sum_{m=1}^{\ell-1} a_m \alpha^m \Delta^{2m} \nabla^{\ell-1} \left(\sum_{k=2}^i x_k^n \right)^m. \quad (27)$$

Для этого мы проводим индуктивную конструкцию, очень похожую на проведенную для линейной внешней силы. При этом (для $\ell \geq 3$) мы используем индуктивное предположение

$$\gamma_k = \max_{i: i+k \leq N} |\nabla^k x_i| \leq \Delta (C\Delta)^k k!, \quad k = 2, \dots, \ell-1, \quad (28)$$

для получения оценки величины $|\nabla^{\ell-1} x_i^n|$. Аналогично § 4 имеем

$$|\nabla^{\ell-1} x_{i+1}^n| \leq \sum_Q C(n, \ell-1 | q_0, \dots, q_\ell) \left(\max_i x_{i+1} \right)^{q_0} \left(\max_i |\nabla x_{i+1}| \right)^{q_1} \prod_{k \geq 2}^{\ell-1} \gamma_k^{q_k}, \quad (29)$$

где

$$\sum_{k \geq 0} q_k = n, \quad \sum_{k \geq 1} k q_k = \ell - 1.$$

Константы $C(n, \ell-1 | q_0, \dots, q_\ell)$ для допустимых наборов Q такие же, как и в § 4:

$$\frac{n!}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \frac{(\ell-1)!}{\prod_{k=1}^{\ell-1} (k!)^{q_k}}.$$

Пользуясь индуктивным предположением, оценим сверху выражение (29):

$$\begin{aligned} \Delta^{\sum_{k \geq 1} q_k} \prod_{k \geq 2}^{\ell-1} ((C\Delta)^k k!)^{q_k} \frac{n!}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \frac{(\ell-1)!}{\prod_{k=1}^{\ell-1} (k!)^{q_k}} &= \Delta^{\ell-1 + \sum_{k \geq 2} q_k} C^{\ell-1 - q_1} \frac{n!}{\prod_{k=0}^{\ell} q_k!} (\ell-1)! \leq \\ &\leq (C\Delta)^{\ell-1} (\ell-1)! n! \Delta^{\sum_{k \geq 2} q_k} C^{-q_1} \frac{1}{\prod_{k=0}^{\ell} q_k!}. \end{aligned}$$

Теперь остается выполнить суммирование по всем Q :

$$\sum_Q \Delta^{\sum_{k \geq 2} q_k} C^{-q_1} \frac{1}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \leq \sum_{q_0} \frac{1}{q_0!} \sum_{q_1} \frac{C^{-q_1}}{q_1!} \prod_{k=2}^{\ell-1} \sum_{q_k=0}^{\ell-1} \frac{\Delta^{q_k}}{q_k!} \leq e^{1+c^{-1}+(\ell-3)\Delta}.$$

В результате имеем оценку

$$|\nabla^{\ell-1} x_{i+1}^n| \leq (C\Delta)^{\ell-1} (\ell-1)! n! e^{2+C^{-1}}. \quad (30)$$

Случай 1 = $m < \ell \leq N$. Аналогично оценим слагаемое с $m = 1$, используя

$$\begin{aligned} |\nabla^{\ell-1} \delta_{i,1}| &\leq a_1 \alpha \Delta^2 \left| \nabla^{\ell-1} \left(\sum_{k=2}^i x_k^n \right) \right| = a_1 \alpha \Delta^2 |\nabla^{\ell-2} x_{i+1}^n| \leq \\ &\leq a_1 \alpha \Delta^2 \sum_Q C(n, \ell-2 | q_0, \dots, q_{\ell-2}) \left(\max_i x_{i+1} \right)^{q_0} \left(\max_i |\nabla x_{i+1}| \right)^{q_1} \prod_{k \geq 2}^{\ell-2} (\gamma_k)^{q_k}, \quad (31) \end{aligned}$$

где

$$\sum_{k \geq 0} q_k = n, \quad \sum_{k \geq 1} k q_k = \ell - 2.$$

Константы $C(n, \ell-2 | q_0, \dots, q_{\ell-2})$ для допустимых наборов Q такие же, как и выше:

$$\frac{n!}{\prod_{k=0}^{\ell-2} q_k!} \frac{(\ell-2)!}{\prod_{k=1}^{\ell-2} (k!)^{q_k}}.$$

Пользуясь индуктивным предположением (30), оценим сверху модуль слагаемого в сумме (31):

$$\begin{aligned} &\alpha \Delta^2 \Delta^{\sum_{k \geq 1}^{\ell-2} q_k} \prod_{k \geq 2}^{\ell-2} ((C\Delta)^k k!)^{q_k} \frac{n!}{\prod_{k=0}^{\ell-2} q_k!} \frac{(\ell-2)!}{\prod_{k=1}^{\ell-2} (k!)^{q_k}} = \\ &= \alpha \Delta^{2+\ell-2+\sum_{k \geq 2} q_k} C^{\ell-2-q_1} \frac{n!}{\prod_{k=0}^{\ell-2} q_k!} (\ell-2)! \leq \\ &\leq \alpha (C\Delta)^\ell \ell! n! \frac{1}{\ell(\ell-1)} \Delta^{\sum_{k \geq 2} q_k} C^{-2-q_1} \frac{1}{\prod_{k=0}^{\ell-2} q_k!}. \end{aligned}$$

Теперь остается выполнить суммирование по всем Q :

$$\sum_Q \Delta^{\sum_{k \geq 2} q_k} C^{-q_1} \frac{1}{\prod_{k=0}^{\ell-2} q_k!} \leq \sum_{q_0} \frac{1}{q_0!} \sum_{q_1} \frac{\Delta^{q_1} C^{-q_1}}{q_1!} \prod_{k=2}^{\ell-2} \sum_{q_k=0}^{\ell-2} \frac{\Delta^{q_k}}{q_k!} \leq e^{1+C^{-1}+(\ell-4)\Delta}.$$

В результате получаем

$$\alpha (C\Delta)^\ell \ell! n! \frac{1}{\ell(\ell-1)} \frac{e^{2+C^{-1}}}{C^2}.$$

Вторая индуктивная процедура. Теперь, пользуясь оценкой (30), рассмотрим случай $2 \leq m < \ell \leq N$, т.е. оценим при $m \geq 2$ выражение

$$a_m \alpha^m \Delta^{2m} \nabla^{\ell-1} \left(\sum_{k=2}^i x_k^n \right)^m. \quad (32)$$

Обозначая

$$\beta_k = \max_i |\nabla^k x_{i+1}^n|,$$

выражение (32) после $\ell - 1$ дифференцирований можно представить в виде

$$a_m \alpha^m \Delta^{2m} \sum_Q C(m, \ell - 1 | q_0, \dots, q_{\ell-1}) \left(\max_i \sum_{k=2}^i x_k^n \right)^{q_0} \left(\max_i x_{i+1}^n \right)^{q_1} \prod_{k \geq 2}^{\ell-1} \beta_k^{q_k}. \quad (33)$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned} |\nabla^{\ell-1} \delta_{i,m}| &= \left| a_m \Delta^{2m} \alpha^m \nabla^{\ell-1} \left(\sum_{k=2}^i x_k^n \right)^m \right| \leq \\ &\leq \left| \alpha^m \Delta^{2m} N^{q_0} \Delta^{\sum_{k \geq 3} q_k} \prod_{k \geq 2} \left((C\Delta)^{(k-1)} (k-1)! n! e^{2+C^{-1}} \right)^{q_k} \frac{m!}{\prod_{k=0}^{\ell-1} q_k!} \frac{(\ell-1)!}{\prod_{k=1}^{\ell-1} (k!)^{q_k}} \right|. \end{aligned}$$

Теперь удобнее рассмотреть множители отдельно.

Степень Δ равна

$$2m - q_0 + \sum_{k \geq 3} q_k + \ell - q_1 - m + q_0 + q_1 = m + \ell + \sum_{k \geq 3} q_k,$$

степень C равна

$$\ell - q_1 - m + q_0 + q_1 = \ell - m + q_0,$$

остальные константы –

$$(n! e^{2+C^{-1}})^{m-q_0-q_1}.$$

После выделения множителя $(C\Delta)^\ell \ell!$ остается множитель

$$m! \ell^{-1} \Delta^m \leq \ell^{-1}.$$

Суммирование дает

$$\sum_Q \left[\sum_{q_0=0}^{\ell-1} \frac{1}{q_0!} \right] \left[\sum_{q_1=0}^{\ell-1} \frac{1}{q_1!} \right] \prod_{k=2}^{\ell-1} \left[\sum_{q_k=0}^{\ell-1} \frac{1}{q_k!} \frac{1}{k^{q_k}} \Delta^{q_k} \right] \leq e^3.$$

Окончательно получаем константы

$$C^{-m+q_0} (\alpha n! e^{2+C^{-1}})^{m-q_0-q_1} e^3,$$

что доказывает теорему при

$$C = 2\alpha n! e^6. \quad \blacktriangle$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Jordan C.* Calculus of Finite Differences. New York: Chelsea Publ. Co., 1950.
2. *Milne-Thomson L.M.* The Calculus of Finite Differences. London: Macmillan and Co. Ltd., 1933.
3. *Гельфонд А.О.* Исчисление конечных разностей. Москва: ГИФМЛ, 1959.
4. *Flajolet P., Sedgewick R.* Mellin Transforms and Asymptotics: Finite Differences and Rice's Integrals // Theoret. Comput. Sci. 1995. V. 144. № 1–2. P. 101–124.
5. *Ventevogel W.* On the Configuration of a One-Dimensional System of Interacting Particles with Minimum Potential Energy per Particle // Physica A. 1978. V. 92. № 3–40. P. 343–361.
6. *Duneau M., Katz A.* Structural Stability of Classical Lattices in One Dimension // Ann. Inst. H. Poincaré (A) Phys. Théor. 1984. V. 41. № 3. P. 269–290.
7. *Radin C.* Existence of Ground State Configurations // Math. Phys. Electron. J. 2004. V. 10. Paper 6 (electronic).
8. *Radin C.* Crystals and Quasicrystals: A Lattice Gas Model // Phys. Lett. A. 1986. V. 114. № 7. P. 381–383.
9. *Radin C., Schulman L.S.* Periodicity of Classical Ground States // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. № 8. P. 621–622.
10. *Malyshev V.A.* Fixed Points for One-Dimensional Particle System with Strong Interaction // Mosc. Math. J. 2012. V. 12. № 1. P. 139–147.
11. *Мальшев В.А.* Критические состояния многочастичных систем с сильным взаимодействием на окружности // Пробл. передачи информ. 2011. Т. 47. № 2. С. 117–127.
12. *Spiegel M.R.* Calculus of Finite Differences and Difference Equations. New York: McGraw-Hill, 1971.
13. *Медведев Ю., Ивченко Г.* Асимптотическое представление конечных разностей от степенной функции в произвольной точке // Теория вероятностей и ее применения. 1966. Т. 10. № 1. С. 151–156.
14. *Hsu L.C.* Note on the Asymptotic Expansion of the n th Difference of Zero // Ann. Math. Statistics. 1948. V. 19. P. 273–277.
15. *Good I.* An Asymptotic Formula for the Differences of the Power at Zero // Ann. Math. Stat. 1961. V. 32. № 1. P. 249–256.
16. *Айгнер М.* Комбинаторная теория. М.: Мир, 1982.

Мальшев Вадим Александрович
 Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
 механико-математический факультет,
 лаборатория больших случайных систем
 malyshev@yahoo.com

Поступила в редакцию
 30.11.2011
 После переработки
 28.05.2012