Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. И. Калмыков, О явлении асимптотической катастрофы майеровских рядов
в классической статистической механике, *ТМФ*, 1999, том 119, номер 3, 475–497

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf753>

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: 18.207.199.55

26 апреля 2023 г., 15:13:04

О ЯВЛЕНИИ АСИМПТОТИЧЕСКОЙ КАТАСТРОФЫ МАЙЕРОВСКИХ РЯДОВ В КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

Обсуждается проблема асимптотической катастрофы при вычислении коэффициентов майеровских разложений. При обычном представлении коэффициентов майеровских рядов средняя квадратичная ошибка оценки по методу Монте-Карло коэффициента при переменной в степени n катастрофически быстро стремится к бесконечности с ростом n , если только при этом объем вычислений не стремится весьма быстро к бесконечности. Напротив, в случае представления этих коэффициентов древесными суммами указанная ошибка стремится к нулю с ростом n . Введено определение понятия асимптотической катастрофы степенных рядов, отличающегося от понятия асимптотической катастрофы майеровских рядов, введенного Иванчином. Доказано, что в случае неотрицательного потенциала с твердым ядром, быстро убывающего на бесконечности, при традиционном представлении коэффициентов майеровских рядов имеет место асимптотическая катастрофа как в смысле данного в статье определения этого понятия, так и в смысле понятия, введенного Иванчином. Даны выражения вириальных коэффициентов в виде многочленов от древесных сумм.

ВВЕДЕНИЕ

Рассматривается большой канонический ансамбль однокомпонентных систем частиц с парным взаимодействием [1], заключенных в ν -мерной связной области $\Lambda \subset \mathbf{R}^\nu$. Предполагается, что множество Λ ограничено и измеримо по Лебегу, а частицы взаимодействуют посредством центральных сил, характеризуемых потенциалом парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r} = (r^{(1)}, r^{(2)}, \dots, r^{(\nu)}) \in \mathbf{R}^\nu$. Предполагается, что потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией и удовлетворяет условию устойчивости [1]: существует такое число $B \geq 0$, что неравенство

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \geq -nB \quad (1)$$

имеет место при всех $n \geq 2$ и всех $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n \in \mathbf{R}^\nu$.

*Центр физических исследований им. П. Н. Лебедева, Москва, Россия

Введем обозначения: $F(n) = \{G\}$ – совокупность всех связных помеченных графов с множеством помеченных вершин $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$; $\tilde{X}(G)$ – множество ребер графа G ; $\{i, j\}$ – ребро, инцидентное вершинам i и j .

Как обычно, обозначим майеровскую функцию следующим образом:

$$f_{ij} = \exp\{-\beta\Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\} - 1, \quad (2)$$

где $\beta = 1/kT$, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. Мера множества Λ обозначим $|\Lambda|$.

Как известно [2], из условия (1) вытекает, что давление p_Λ и плотность ρ_Λ разлагаются в майеровские ряды по степеням активности z :

$$p_\Lambda(z) = \beta^{-1}|\Lambda|^{-1} \ln \Xi(\Lambda, z, \beta) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\Lambda, \beta) z^n, \quad (3)$$

$$\rho_\Lambda(z) = \sum_{n=1}^{\infty} n b_n(\Lambda, \beta) z^n, \quad (4)$$

где майеровские коэффициенты $b_n(\Lambda, \beta)$ выражаются формулами

$$b_1(\Lambda, \beta) = 1$$

и

$$b_n(\Lambda, \beta) = \frac{1}{n!} |\Lambda|^{-1} \sum_{G \in F(n)} \int_{\Lambda^n} \prod_{\{i,j\} \in \tilde{X}(G)} f_{ij}(d\mathbf{r})_n, \quad n \geq 2. \quad (5)$$

Здесь и далее

$$(d\mathbf{r})_n = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n, \\ d\mathbf{r}_i = dr_i^{(1)} dr_i^{(2)} \dots dr_i^{(\nu)}.$$

Пусть теперь парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ удовлетворяет условию регулярности [1], а множество Λ стремится к бесконечности в смысле Фишера [1]. Тогда в разложениях (3) и (4) при малых z возможен переход к термодинамическому пределу [1, 3]

$$p(z) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} p_\Lambda(z) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta) z^n, \quad (6)$$

$$\rho(z) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \rho_\Lambda(z) = \sum_{n=1}^{\infty} n b_n(\beta) z^n. \quad (7)$$

Коэффициенты $b_n(\beta)$ определяются формулами

$$b_1(\beta) = 1 \quad (8)$$

и

$$b_n(\beta) = \sum_{G \in F(n)} \frac{1}{n!} \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in \tilde{X}(G)} f_{ij}(d\mathbf{r})_{1,n}, \quad n \geq 2, \quad (9)$$

здесь и далее

$$(d\mathbf{r})_{1,n} = d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \cdot \dots \cdot d\mathbf{r}_n, \quad n \geq 2.$$

Функция $p(z)$ называется термодинамическим пределом давления, а функция $\rho(z)$ – термодинамическим пределом плотности.

При малых значениях термодинамического предела плотности ρ термодинамический предел давления p представляется [2, 4, 5] вириальным разложением по степеням термодинамического предела плотности:

$$p = p(z) = \beta^{-1} \left(\rho + \sum_{n=2}^{\infty} B_n \rho^n \right). \quad (10)$$

В этом разложении вириальные коэффициенты B_n определяются формулой

$$B_n = - \sum_{G \in \mathfrak{B}(n)} \frac{n-1}{n!} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_{\Lambda^n} \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(G)} f_{uv}(d\mathbf{r})_n, \quad (11)$$

где $\mathfrak{B}(n)$ – совокупность всех блоков [6] с множеством помеченных вершин V_n .

Представление вириальных коэффициентов (11) приводит к асимптотической катастрофе.

В работах [7] Иванчик показал, что суть асимптотической катастрофы состоит в следующем. С одной стороны, число слагаемых в сумме, представляющей по формуле (11) вириальный коэффициент B_n , равно числу всех блоков с множеством помеченных вершин V_n и при $n \rightarrow \infty$ растет как $2^{n(n-1)/2}(1 + o(1))$.

С другой стороны, поскольку вириальное разложение сходится [1] в некотором круге ненулевого радиуса с центром в начале координат, то модуль n -го вириального коэффициента является при $n \rightarrow \infty$ величиной, ограниченной по сравнению с величиной A^n , где A – некоторая положительная константа. Следовательно, при $n \rightarrow \infty$ n -й вириальный коэффициент B_n является бесконечно малой величиной по сравнению с числом слагаемых в сумме, определяющей по формуле (11) этот коэффициент.

Полагая, что во всех физически интересных случаях в сумме, стоящей в правой части (11), доля слагаемых, модуль которых не больше величины порядка $C^n 2^{-n(n-1)/2}$, при любом $C > 0$ стремится к нулю с ростом n , Иванчик приходит к выводу, что во всех этих случаях значительная часть слагаемых в рассматриваемой сумме с большой точностью уничтожается, так как слагаемые являются величинами противоположных знаков. Иначе говоря, сумма, стоящая в правой части (11), при $n \rightarrow \infty$ оказывается бесконечно малой величиной как по сравнению с суммой ее положительных слагаемых, так и по сравнению с суммой ее отрицательных слагаемых. В результате эта сумма, а следовательно, и представляющая интерес величина B_n оказываются недоступными непосредственному исследованию.

Феномен асимптотической катастрофы имеет место [8] и при представлении майеровских коэффициентов $b_n(\Lambda, \beta)$ формулой (5), а также при представлении коэффициентов $b_n(\beta)$ формулой (9).

В этой статье будет указано еще одно, весьма существенное, проявление асимптотической катастрофы, суть которого состоит в том, что при $n \rightarrow \infty$ практически неизбежен катастрофически быстрый рост ошибок вычислений майеровских коэффициентов. Далее будет доказано, что в случае неотрицательного регулярного парного потенциала частиц с твердыми ядрами действительно имеет место выдвинутое Иванчиком предположение, что в сумме, стоящей в правой части (11), доля слагаемых, модуль которых не больше величины порядка $C^n 2^{-n(n-1)/2}$, при любом $C > 0$ стремится к нулю с ростом n . Наконец, будут найдены такие представления вириальных коэффициентов B_n , которые решают проблему асимптотической катастрофы.

1. КАТАСТРОФИЧЕСКИЙ РОСТ ОШИБОК ВЫЧИСЛЕНИЙ И ЕГО ПРЕОДОЛЕНИЕ

Как известно, основным методом вычисления майеровских коэффициентов является метод Монте-Карло. Пусть производится оценка коэффициента $b_n(\beta)$ по методу Монте-Карло, причем используется представление этого коэффициента формулой (9). Обозначим через $\sigma(G)$, где $G \in F(n)$, среднюю квадратичную ошибку оценки интеграла

$$I'(G) = \int_{(\mathbf{R}^v)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in \tilde{X}(G)} f_{ij}(d\mathbf{r})_{1,n-1}$$

по методу Монте-Карло. Интеграл $I'(G)$ назовем интегралом Майера. Тогда дисперсия ошибки оценки коэффициента $b_n(\beta)$, где $n \geq 2$, составляет

$$\sigma_n^2 = (n!)^{-2} \sum_{G \in F(n)} \sigma^2(G). \quad (12)$$

Пусть $|M|$ — мощность конечного множества M (любого),

$$\langle \sigma_n^2 \rangle = |F(n)|^{-1} \sum_{G \in F(n)} \sigma^2(G).$$

Тогда равенство (12) можно представить следующим образом:

$$\sigma_n^2 = (n!)^{-2} |F(n)| \langle \sigma_n^2 \rangle.$$

Так как $|F(n)| = 2^{n(n-1)/2} (1 + o(1))$, то средняя квадратичная ошибка оценки коэффициента $b_n(\beta)$ есть величина

$$\sigma_n = (n!)^{-1} 2^{n(n-1)/4} (1 + o(1)) \sqrt{\langle \sigma_n^2 \rangle}.$$

При этом коэффициент вариации $k_V(n)$ оценки коэффициента $b_n(\beta)$, равный отношению средней квадратичной ошибки оценки этого коэффициента к его модулю, будет не меньше величины

$$(n!)^{-1} A_b^{-n} 2^{n(n-1)/4} (1 + o(1)) \sqrt{\langle \sigma_n^2 \rangle},$$

где A_b – константа, удовлетворяющая условию $|b_n(\beta)| < A_b^n$ при любом $n \geq 2$ (существование такой константы A_b вытекает из сходимости ряда в правой части (6) в некотором круге ненулевого радиуса [1, 9]). Отсюда вытекает, что этот коэффициент вариации $k_V(n)$ при росте n быстро стремится к бесконечности, если только величина $\langle \sigma_n^2 \rangle$ не стремится достаточно быстро к нулю, что весьма сложно обеспечить практически, т.е. вероятность того, что относительная ошибка погрешности оценки коэффициента $b_n(\beta)$ не будет неограниченно возрастать, катастрофически быстро стремится к нулю с ростом n .

Аналогично проявляется асимптотическая катастрофа и при вычислении коэффициентов $b_n(\Lambda, \beta)$ по формуле (5), и при вычислении вириальных коэффициентов по формуле (11).

Иначе обстоит дело при представлении коэффициентов $b_n(\beta)$ формулой, полученной в [3] для случая устойчивого и регулярного потенциала парного взаимодействия:

$$b_n(\beta) = \frac{1}{n!} \sum_{t \in T_n} I(t), \quad n = 2, 3, \dots, \quad (13)$$

где T_n – множество всех растущих деревьев с множеством помеченных вершин $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$, имеющих своим корнем число 1,

$$I(t) = \int_{(\mathbf{R}^n)^{n-1}} \prod_{(u,v) \in X(t)} f_{uv} \prod_{\{\bar{u}, \bar{v}\} \in \tilde{X}'(t)} \exp\{-\beta \Phi(\mathbf{r}_{\bar{u}} - \mathbf{r}_{\bar{v}})\} (d\mathbf{r})_{1, n-1}.$$

$X(t)$ – множество дуг дерева t , а множество ребер $\tilde{X}'(t)$ определено в приложении формулой (П.1). Сумма по деревьям в правой части (13) называется древесной суммой¹⁾.

В статье [8] отмечено, что такое представление коэффициентов $b_n(\beta)$ древесными суммами решает проблему асимптотической катастрофы, и указан ряд преимуществ этого представления.

Ниже будет показано еще одно весьма существенное преимущество этого представления коэффициентов $b_n(\beta)$ древесными суммами, имеющее место при оценке этих коэффициентов по методу Монте-Карло.

Пусть коэффициенты $b_n(\beta)$ вычисляются по методу Монте-Карло, причем используются их представления древесными суммами по формуле (13). Обозначим через $\sigma(t)$ среднюю квадратичную ошибку оценки интеграла $I(t)$, полученной методом Монте-Карло. Тогда дисперсия оценки коэффициента $b_n(\beta)$ составляет

$$\sigma_{t,n}^2 = (n!)^{-2} \sum_{t \in T_n} \sigma^2(t).$$

¹⁾ Термин предложен И. И. Иванчиком.

Так как число деревьев в множестве T_n равно n^{n-2} , то, полагая

$$\langle \sigma_{t,n}^2 \rangle = n^{2-n} \sum_{t \in T_n} \sigma^2(t), \quad (14)$$

дисперсию $\sigma_{t,n}^2$ можно представить следующим образом:

$$\sigma_{t,n}^2 = \frac{n^{n-2}}{(n!)^2} \langle \sigma_t^2(n) \rangle.$$

Отсюда вытекает, что средняя квадратичная ошибка $\sigma_{t,n}$ оценки коэффициента $b_n(\beta)$, представленного древесной суммой по формуле (13), будет

$$\sigma_{t,n} = n^{(n-2)/2} (n!)^{-1} \sqrt{\langle \sigma_t^2(n) \rangle}, \quad (15)$$

а коэффициент вариации $k'_v(n)$ оценки коэффициента $b_n(\beta)$, равный отношению средней квадратичной ошибки этой оценки к модулю коэффициента $b_n(\beta)$, определяется формулой

$$k'_v(n) = \frac{n^{(n-2)/2} \sqrt{\langle \sigma_t^2(n) \rangle}}{n! |b_n(\beta)|}. \quad (16)$$

Из равенства (15) следует, что средняя квадратичная ошибка оценки по методу Монте-Карло коэффициента $b_n(\beta)$, представленного древесной суммой по формуле (13), быстро стремится к нулю с ростом n , если только величина $\langle \sigma_t^2(n) \rangle$ не стремится слишком быстро к бесконечности.

Пусть теперь $\Phi(\mathbf{r})$ – регулярный неотрицательный парный потенциал. Тогда для модуля коэффициента $b_n(\beta)$ имеет место следующая оценка снизу [10, 1, 3]:

$$|b_n(\beta)| \geq \frac{\{C(\beta)\}^{n-1}}{n}, \quad (17)$$

где

$$C(\beta) = \int_{\mathbf{R}^{\nu}} |e^{-\beta \Phi(\mathbf{r})} - 1| d\mathbf{r}.$$

Используя оценку (17), из равенства (16) получаем

$$k'_v(n) \leq \frac{n^{(n-2)/2} \sqrt{\langle \sigma_t^2(n) \rangle}}{(n-1)! (C(\beta))^{n-1}}. \quad (18)$$

Наконец, используя асимптотическое представление гамма-функции, из неравенства (18) имеем

$$k'_v(n) < \frac{e^n \sqrt{\langle \sigma_t^2(n) \rangle}}{n^{(n+1)/2} \sqrt{2\pi} (C(\beta))^{n-1}}. \quad (19)$$

Поскольку функция $\Phi(\mathbf{r})$ является неотрицательной, то $\exp\{-\beta \Phi(\mathbf{r})\} \leq 1$ и, следовательно, можно выбрать такой вариант метода Монте-Карло, при котором дисперсия ошибки $\sigma^2(t)$ оценки интеграла $I(t)$ не превосходила бы величины $(C(\beta))^{n-1} (4N)^{-1}$, где N – число испытаний, произведенных для оценки интеграла $I(t)$. Тогда из определения величины $\langle \sigma_{t,n}^2 \rangle$ формулой (14) и неравенства (19) вытекает, что коэффициент вариации $k_v(n)$ оценки коэффициента $b_n(\beta)$ будет стремиться к нулю с ростом n , т.е. вероятность того, что относительная ошибка оценки коэффициента $b_n(\beta)$ останется конечной, будет стремиться к единице с ростом n .

2. АЛЬТЕРНАТИВНОЕ ОПИСАНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКОЙ КАТАСТРОФЫ

В этом разделе будет доказано, что в случае неотрицательного регулярного потенциала парного взаимодействия частиц с твердыми ядрами действительно имеет место выдвинутое Иванчиком предположение, что в сумме, стоящей в правой части (9), доля слагаемых, модуль которых меньше величины порядка $C^n 2^{-n(n-1)/2}$, при любом $C > 0$ стремится к нулю с ростом n .

Пусть $\Phi(\mathbf{r})$ – неотрицательный регулярный потенциал парного взаимодействия частиц с твердыми ядрами. Такой потенциал может быть представлен формулой

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} +\infty, & |\mathbf{r}| < a, \\ \Phi_1(\mathbf{r}), & |\mathbf{r}| \geq a, \end{cases} \quad (20)$$

где $\Phi_1(\mathbf{r})$ – неотрицательная функция, удовлетворяющая условию: интеграл

$$\int_{|\mathbf{r}| \geq a} |\exp\{-\beta\Phi_1(\mathbf{r})\} - 1| d\mathbf{r}$$

сходится при некотором $\beta > 0$ (а следовательно, при всех $\beta > 0$). Так как потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ неотрицательный, то он удовлетворяет условию устойчивости [1]. Поэтому из результатов статьи [3] вытекает, что при стремлении измеримого односвязного множества $\Lambda \subset \mathbf{R}^{\nu}$ к бесконечности в смысле Фишера в области сходимости ряда в правой части (6) существует термодинамический предел давления, имеющий разложение (6) по степеням активности z , коэффициенты которого определяются формулами (8) и (9).

Найдем оценку снизу модулей слагаемых суммы в правой части (9).

ТЕОРЕМА 1. Пусть $\Phi(\mathbf{r})$ – неотрицательный регулярный потенциал парного взаимодействия частиц с твердыми ядрами, определенный формулой (20). Тогда интеграл Майера $I'(G)$ абсолютно сходится при всех $n \geq 2$ и всех $G \in F(n)$ и для его модуля имеет место оценка снизу:

$$\left| \int_{(\mathbf{R})^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in \bar{X}(G)} f_{ij}(d\mathbf{r})_{1,n-1} \right| \geq \left\{ \frac{S(a)}{(2[n/2])^{\nu}} \right\}^{n-1}, \quad (21)$$

где $S(a)$ – объем ν -мерной сферы диаметра a , $[n/2]$ – целая часть числа $n/2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Введем функцию $\tilde{y}_{uv}(\mathbf{r})$, полагая

$$\tilde{y}_{uv}(\mathbf{r}) = \begin{cases} -1, & |\mathbf{r}| < \frac{a}{2[n/2]}, \\ 0, & |\mathbf{r}| \geq \frac{a}{2[n/2]}. \end{cases} \quad (22)$$

Так как потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ неотрицательный, то из определения майеровской функции (2) следует, что подынтегральная функция в интеграле (21) не меняет свой знак. Она является неотрицательной, если число ребер графа G четное, и неположительной, если число ребер графа G нечетное.

Пусть t – каркас с минимальным корнем (см. приложение) графа G . Обозначим через $\mathfrak{V}(t) = \{V(t, h)\}$ совокупность всех таких слоев $V(t, h)$ вершин дерева t , в каждом из которых содержится не менее двух вершин. Очевидно, что слоев в $\mathfrak{V}(t)$ не более чем $[n/2]$.

Обозначим через $M(t) = \{m\}$ множество натуральных чисел m , удовлетворяющих следующим условиям: в слое вершин $V(t, m)$ дерева t лишь одна вершина $v(t, m)$ не является висячей, причем в слое вершин $V(t, m)$ нет вершин, следующих за вершиной $v(t, m)$.

Пусть вершина v находится на расстоянии $h(v)$ от корня $\alpha = 1$ дерева t . Обозначим через $\overline{m}(t, v)$ наибольшее из чисел множества $M(t) = \{m\}$, удовлетворяющих условию

$$m < h(v). \quad (23)$$

Если же во множестве $M(t)$ нет чисел, удовлетворяющих условию (23), то мы полагаем $\overline{m}(t, v) = 0$ и $v(t, 0) = 1$. Тогда, очевидно, все вершины слоя $V(t, h(v))$ достижимы в дереве t из вершины $v(t, \overline{m}(t, v))$. Так как число слоев в совокупности $\mathfrak{V}(t)$ не более $[n/2]$, то расстояние вершины v и всех вершин слоя $V(t, h(v))$ от вершины $\overline{m}(t, v)$ не превосходит числа $[n/2]$.

Обозначим через $\tilde{X}(t)$ множество ребер, которые получаются из дуг множества $X(t)$, если эти дуги лишить ориентации.

Пусть произведение функций

$$\prod_{\{u, v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv}$$

принимает в точке $(\mathbf{r})_n$ ненулевое значение. Тогда из определения функции $\tilde{y}_{uv}$ формулой (22) вытекает, что в точке $(\mathbf{r})_n$ выполняется неравенство

$$|\mathbf{r}_v - \mathbf{r}_u| < \frac{a}{2[n/2]} \quad (24)$$

для всех ребер $\{u, v\} \in \tilde{X}(t)$. Так как расстояние вершины v от вершины $v(t, \overline{m}(t, v))$ не превосходит $[n/2]$, то из неравенства (24) следует неравенство

$$|\mathbf{r}_v - \mathbf{r}_{v(t, \overline{m}(t, v))}| < \frac{a}{2}. \quad (25)$$

Если вершина v' принадлежит тому же слою вершин $V(t, h(v))$, что и вершина v , то из неравенства (25) также следует

$$|\mathbf{r}_{v'} - \mathbf{r}_{v(t, \overline{m}(t, v))}| < \frac{a}{2}. \quad (26)$$

Из неравенств (25) и (26) вытекает неравенство

$$|\mathbf{r}_{v'} - \mathbf{r}_v| < a.$$

Поэтому из определения майеровской функции формулой (2) и определения парного потенциала $\Phi(\mathbf{r})$ формулой (20) следует

$$f(\mathbf{r}_v - \mathbf{r}_{v'}) = -1 \neq 0.$$

Пусть теперь вершина v принадлежит слою вершин $V(t, h)$, а вершина u – слою $V(t, h - 1)$. Если вершины u и v смежны в графе G , но дуга (u, v) не входит в множество дуг $X(t)$, то тогда из определения каркаса связного графа [11] (см. также приложение) вытекает, что вершина u не может принадлежать слою вершин $V(t, \overline{m}(t, v))$ и, следовательно,

$$\overline{m}(t, v) < h - 1 < h.$$

Поскольку вершина $v \in V(t, h)$ достижима из вершины $v(t, \overline{m}(t, v))$ в дереве t , то и все вершины слоя $V(t, h - 1)$, в том числе и вершина u , достижимы в дереве t из вершины $v(t, \overline{m}(t, v))$. Так как расстояние вершины u от вершины $v(t, \overline{m}(t, v))$ не превосходит числа $[n/2]$, то из неравенства (24) следует неравенство

$$|\mathbf{r}_u - \mathbf{r}_{v(t, \overline{m}(t, v))}| < \frac{a}{2}. \quad (27)$$

Из неравенств (25) и (27) вытекает неравенство

$$|\mathbf{r}_u - \mathbf{r}_v| < a.$$

Отсюда, используя определение майеровской функции формулой (2) и определение парного потенциала $\Phi(\mathbf{r})$ формулой (20), получаем

$$f(\mathbf{r}_u - \mathbf{r}_v) = -1 \neq 0.$$

Положим

$$\tilde{X}'(G) = \tilde{X}(G) \setminus \tilde{X}(t).$$

Из вышеизложенного вытекает, что если в точке $(\mathbf{r})_n$ произведение функций

$$\prod_{\{u, v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv}$$

принимает ненулевое значение, то в этой точке имеет место также следующее равенство:

$$\left| \prod_{\{u, v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}'(G)} f_{\tilde{u}\tilde{v}} \right| = \left| \prod_{\{u, v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv} \right|. \quad (28)$$

Из определения майеровской функции формулой (2), определения парного потенциала формулой (20), а также из определения функции $\tilde{y}$ формулой (22) получаем

$$\left| \prod_{\{u, v\} \in \tilde{X}(G)} f_{uv} \right| \geq \left| \prod_{\{u, v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}'(G)} f_{\tilde{u}\tilde{v}} \right|. \quad (29)$$

Так как подынтегральная функция в левой части неравенства (21) не меняет своего знака в области интегрирования, то из (28) и (29) следует

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(G)} f_{uv} (d\mathbf{r})_{1,n-1} \right| = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \left| \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(G)} f_{uv} \right| (d\mathbf{r})_{1,n-1} \geq \\
 & \geq \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \left| \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}'(G)} f_{\tilde{u}\tilde{v}} \right| (d\mathbf{r})_{1,n-1} = \\
 & = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \left| \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv} \right| (d\mathbf{r})_{1,n-1}. \tag{30}
 \end{aligned}$$

Из определения функций $\tilde{y}_{uv}(\mathbf{r})$ формулой (22) следует, что интеграл в правой части (30) равен объему ν -мерной сферы диаметра $a/(2[n/2])$ в степени $n-1$. Поэтому из (30) вытекают соотношения

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(G)} f_{uv} (d\mathbf{r})_{1,n-1} \right| \geq \\
 & \geq \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \left| \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(t)} \tilde{y}_{uv} \right| (d\mathbf{r})_{1,n-1} = \left\{ \frac{S(a)}{(2[n/2])^\nu} \right\}^{n-1}. \tag{31}
 \end{aligned}$$

Из (31) следует утверждение теоремы.

Введем обозначения: $F^+(n)$ – множество всех связанных графов с множеством вершин V_n и четным числом ребер; $F^-(n)$ – множество всех связанных графов с множеством вершин V_n и нечетным числом ребер.

Из теоремы 1 вытекает следствие.

СЛЕДСТВИЕ 1. Пусть $\Phi(\mathbf{r})$ – регулярный неотрицательный потенциал частиц с твердыми ядрами. Тогда при $n \geq 5$ имеют место следующие оценки:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{G \in F^+(n)} \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(G)} f_{uv} (d\mathbf{r})_{1,n-1} \geq \\
 & \geq \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} (1 - (n+4)2^{1-n}) \left(\frac{S(a)}{n^\nu} \right)^{n-1}, \tag{32}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \sum_{G \in F^-(n)} \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in \tilde{X}(G)} f_{uv} (d\mathbf{r})_{1,n-1} \leq \\
 & \leq -\exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} (1 - (n+4)2^{1-n}) \left(\frac{S(a)}{n^\nu} \right)^{n-1}. \tag{33}
 \end{aligned}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Так как $\Phi(\mathbf{r})$ — неотрицательный парный потенциал частиц с твердыми ядрами, то из определения майеровской функции формулой (2) вытекает, что эта функция является неположительной. Отсюда следует, что подынтегральная функция в интеграле (21) является произведением неположительных майеровских функций, число которых равно числу ребер графа G . По определению множества $F^+(n)$ любой граф из этого множества имеет четное число ребер. Поэтому в каждом из интегралов, являющихся слагаемыми суммы в левой части неравенства (32), подынтегральная функция является неотрицательной. Применяя теорему 1 и следствие П.1 приложения, получаем оценку (32).

Аналогично доказывается неравенство (33). По определению множества $F^-(n)$ любой граф из этого множества имеет нечетное число ребер. Поэтому в каждом из интегралов, являющихся слагаемыми суммы в левой части неравенства (33), подынтегральная функция есть произведение нечетного числа неположительных майеровских функций и поэтому тоже неположительная. Применяя теорему 1 и следствие П.1, получаем оценку (33). Следствие 1 доказано.

Из следствия 1 вытекает, что коэффициент $b_n(\beta)$ представляется в виде суммы двух слагаемых разных знаков: положительного слагаемого, представляющего собой левую часть неравенства (32), и отрицательного слагаемого, представляющего собой левую часть неравенства (33). Из неравенств (32) и (33) следует, что логарифм модуля каждой из этих величин является положительным и при $n \rightarrow \infty$ имеет порядок, не меньший чем $n(n-1)/2$. С другой стороны, ряды в правых частях (6) и (7) сходятся в круге ненулевого радиуса [1]. Отсюда вытекает, что логарифм модуля коэффициента $b_n(\beta)$ ограничен сверху положительной величиной, имеющей при $n \rightarrow \infty$ порядок, не больший чем величина n . Следовательно, коэффициент $b_n(\beta)$ является при $n \rightarrow \infty$ бесконечно малой величиной по сравнению с величинами, стоящими в левых частях неравенств (32) и (33), сумма которых и равна коэффициенту $b_n(\beta)$. Это одно из проявлений асимптотической катастрофы, препятствующих непосредственному исследованию коэффициентов $b_n(\beta)$ с помощью их представления формулой (9).

По мнению Иванчика [8] аналогичная картина имеет место и в случае знакопеременного устойчивого и регулярного потенциала.

Учитывая важность этого проявления асимптотической катастрофы, целесообразно, по-видимому, положить его в основу альтернативного описания понятия асимптотической катастрофы и определить ее следующим образом.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. В представлениях коэффициентов степенного ряда

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n z^n$$

конечными суммами присутствует феномен асимптотической катастрофы, если при любом $B > 0$ число слагаемых в сумме, представляющей коэффициент c_n , при $n \rightarrow \infty$ растет быстрее, чем величина $(n!)^2 B^n$, причем и сумма всех положительных, и сумма всех

отрицательных слагаемых этой суммы являются при $n \rightarrow \infty$ бесконечно большими величинами по сравнению с самой суммой, представляющей коэффициент c_n .

По следствию 1 в случае регулярного неотрицательного потенциала парного взаимодействия в представлении (9) коэффициентов майеровских разложений (6) и (7) присутствует феномен асимптотической катастрофы как в смысле определения 1, так и в смысле описания асимптотической катастрофы, данного в [7] и [8].

3. РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ АСИМПТОТИЧЕСКОЙ КАТАСТРОФЫ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ ВИРИАЛЬНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Цель этого раздела – найти такие представления вириальных коэффициентов, которые являлись бы решением проблемы асимптотической катастрофы при вычислении этих коэффициентов. На важность решения этой задачи внимание автора статьи обратил Иванчик. Одним из таких представлений является представление вириальных коэффициентов в виде многочленов от коэффициентов $b_n(\beta)$.

Введем обозначения: $\mathbf{K}_n$ – множество всех n -мерных векторов $\mathbf{k} = (k_1, k_2, \dots, k_n)$ с целочисленными неотрицательными компонентами; $\mathbf{K}'_n$ – подмножество множества векторов $\mathbf{K}_n$, состоящее из всех векторов $\mathbf{k} = (k_1, k_2, \dots, k_n) \in \mathbf{K}_n$, удовлетворяющих условию $k_1 = 0$;

$$q(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^n k_i,$$

где $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_n$;

$$\tau_1(\beta) = 1; \quad (34)$$

$$\tau_n(\beta) = (n!)^{-1} \sum'_{\mathbf{k}} (n + q(\mathbf{k}) - 1)! \prod_{j=2}^n (k_j!)^{-1} \{-j b_j(\beta)\}^{k_j}, \quad n = 2, 3, \dots \quad (35)$$

В этой статье $\sum'_{\mathbf{k}}$ означает суммирование по всем векторам $\mathbf{k} \in \mathbf{K}'_n$, удовлетворяющим условию

$$\sum_{j=2}^n (j-1)k_j = n-1.$$

ТЕОРЕМА 2. Если термодинамический предел плотности $\rho = \rho(z)$ представляется разложением (7) по степеням активности z , сходящимся в некотором круге ненулевого радиуса, то существует такое число $R_\rho > 0$, что в круге

$$|\rho| < R_\rho \quad (36)$$

ряд

$$z = \sum_{n=1}^{\infty} \tau_n(\beta) \rho^n, \quad (37)$$

где коэффициенты $\tau_n(\beta)$ определены формулами (34) и (35), является обратной функцией по отношению к функции $\rho(z)$, определенной разложением (7).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из разложения (7) и формулы (8), определяющей коэффициент $b_1(\beta)$, следует

$$\rho'(0) = b_1(\beta) = 1 \neq 0.$$

Поэтому существует ряд по степеням ρ вида (37), который в некотором круге (36) является обратным по отношению к ряду в правой части (7). Коэффициенты этого обратного ряда вычисляются по формуле обращения Лагранжа:

$$\tau_n(\beta) = \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^{n-1}}{\partial z^{n-1}} \left(1 + \sum_{n=2}^{\infty} n b_n(\beta) z^{n-1} \right)^{-n} \right]_{z=0}. \quad (38)$$

В частности, из (38) следует, что коэффициент $\tau_1(\beta)$ определен формулой (34).

Применяя правило дифференцирования сложной функции (см., например, [12, формулы 0.430]), в результате получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{n-1}}{\partial z^{n-1}} \left[\left(1 + \sum_{n=2}^{\infty} n b_n(\beta) z^{n-1} \right)^{-n} \right]_{z=0} &= \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' \frac{(n-1)!}{\prod_{j=2}^n k_j!} \frac{(n+q(\mathbf{k})-1)!}{(n-1)!} \prod_{j=2}^n (-j b_j(\beta))^{k_j}. \end{aligned} \quad (39)$$

Разлагая правую часть (38) по формуле (39), получаем представление коэффициентов $\tau_n(\beta)$ обратного ряда (37) в виде (35). Теорема 2 полностью доказана.

СЛЕДСТВИЕ 2. В круге (36) вириальное разложение (10) сходится. Вириальные коэффициенты $B_n(\beta)$ этого разложения представляются в виде многочленов от коэффициентов $b_n(\beta)$ и $\tau_n(\beta)$:

$$B_n(\beta) = \sum_{\mathbf{k}}'' b_{q(\mathbf{k})} q(\mathbf{k})! \prod_{j=1}^n \{ (k_j!)^{-1} [\tau_j(\beta)]^{k_j} \}, \quad (40)$$

где $\sum_{\mathbf{k}}''$ означает суммирование по всем векторам $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_n$, удовлетворяющим условию

$$\sum_{j=1}^n j k_j = n,$$

а коэффициенты $\tau_j(\beta)$ представляются формулами (34) и (35) в виде многочленов от коэффициентов $b_n(\beta)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из разложения (37) активности по степеням термодинамического предела плотности ρ следует

$$z^n = \left(\sum_{m=1}^{\infty} \tau_m(\beta) \rho^m \right)^n = \sum_{i=n}^{\infty} \rho^i \sum_{\mathbf{k}}''' n! \prod_{j=1}^i \{ (k_j!)^{-1} [\tau_j(\beta)]^{k_j} \}, \quad (41)$$

где $\sum_{\mathbf{k}}'''$ означает суммирование по всем векторам $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_i$, удовлетворяющим условиям

$$\sum_{j=1}^i j k_j = i, \quad \sum_{j=1}^i k_j = n.$$

Подставляя в степенной ряд, стоящий в правой части (6), вместо z^n его разложение по степеням термодинамического предела плотности ρ и меняя порядок суммирования, получаем

$$p(\beta, \rho) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \rho^n \sum_{\mathbf{k}}'' q(\mathbf{k})! b_{q(\mathbf{k})} \prod_{j=1}^n \{ (k_j)^{-1} [\tau_j(\beta)]^{k_j} \}. \quad (42)$$

Так как ряд (37), где коэффициенты $\tau_n(\beta)$ определяются формулами (34) и (35), охватывает круг (36) внутри области сходимости степенного ряда, стоящего в правой части (6), то ряд в правой части (42) сходится в круге (36). Следствие 2 полностью доказано.

ПРИМЕР 1. Найдем представление вириальных коэффициентов $B_2(\beta)$, $B_3(\beta)$, $B_4(\beta)$ в виде многочленов от коэффициентов $b_n(\beta)$. С этой целью найдем сначала с помощью формулы (35) представление коэффициентов $\tau_2(\beta)$, $\tau_3(\beta)$, $\tau_4(\beta)$. В результате получаем

$$\begin{aligned} \tau_2(\beta) &= -2b_2(\beta), \quad \tau_3(\beta) = 8[b_2(\beta)]^2 - 3b_3(\beta), \\ \tau_4(\beta) &= 30b_2(\beta)b_3(\beta) - 40[b_2(\beta)]^3 - 4b_4(\beta). \end{aligned}$$

Затем, применяя формулу (40), найдем представление вириальных коэффициентов $B_2(\beta)$, $B_3(\beta)$, $B_4(\beta)$ в виде многочленов от коэффициентов $b_n(\beta)$:

$$\begin{aligned} B_2(\beta) &= -b_2(\beta), \quad B_3(\beta) = 4[b_2(\beta)]^2 - 2b_3(\beta), \\ B_4(\beta) &= 18b_2(\beta)b_3(\beta) - 20[b_2(\beta)]^3 - 3b_4(\beta). \end{aligned}$$

Следствие 2 дает возможность решить проблему асимптотической катастрофы при вычислении вириальных коэффициентов. Действительно, по формуле (40) вириальные коэффициенты $B_2(\beta)$, $B_3(\beta)$, ..., $B_n(\beta)$ представляются в виде многочленов от коэффициентов $\tau_1(\beta)$, $\tau_2(\beta)$, ..., $\tau_n(\beta)$ и коэффициентов $b_2(\beta)$, $b_3(\beta)$, ..., $b_n(\beta)$, для которых, как показано в [8], явление асимптотической катастрофы отсутствует, если использовать их представления в виде (13).

Очевидно, что число слагаемых в сумме, стоящей в правой части (35), равно числу $p(n-1)$ неупорядоченных разбиений [13] натурального числа $n-1$ на $k \geq 1$ частей. Как известно [13], это число при $n \rightarrow \infty$ асимптотически равно величине

$$\frac{1}{4(n-1)\sqrt{3}} e^{A\sqrt{n-1}},$$

где $A = \pi\sqrt{2/3}$. Следовательно, это число растет с ростом n значительно медленнее, чем величина C^n при любом $C > 1$. Отсюда следует, что если при вычислении коэффициентов $b_n(\beta)$ не возникает асимптотической катастрофы (например, при вычислении

по формуле (13)), то и при вычислении коэффициентов $\tau_n(\beta)$ по формуле (35) не возникает проблемы асимптотической катастрофы.

Далее, число слагаемых в сумме, стоящей в правой части (40), равно числу $p(n)$ неупорядоченных разбиений натурального числа n на $k \geq 1$ частей, при $n \rightarrow \infty$ асимптотически равному величине

$$\frac{1}{4n\sqrt{3}} e^{A\sqrt{n}}.$$

Очевидно, что это число растет с ростом n значительно медленнее, чем величина C^n при любом $C > 1$. Отсюда следует, что если при вычислении коэффициентов $b_n(\beta)$ не возникает асимптотической катастрофы, а коэффициенты $\tau_n(\beta)$ вычисляются по формуле (35), то при вычислении вириальных коэффициентов $B_n(\beta)$ по формуле (40) не возникает проблемы асимптотической катастрофы. При этом вычисление первых $n-1$ вириальных коэффициентов $B_2(\beta), B_3(\beta), \dots, B_n(\beta)$ лишь незначительно усложняется по сравнению с вычислением $b_2(\beta), b_3(\beta), \dots, b_n(\beta)$ за счет вычисления многочленов (35) и (40). Вычисляя оценки коэффициентов $b_2(\beta), b_3(\beta), \dots, b_n(\beta)$ с достаточно высокой точностью, мы можем с достаточной точностью вычислить многочлены вида (35) и (40), а тем самым с достаточной точностью найти оценки вириальных коэффициентов $B_2(\beta), B_3(\beta), \dots, B_n(\beta)$. Таким образом, проблему асимптотической катастрофы при вычислении вириальных коэффициентов можно считать решенной.

Нашей следующей задачей является дальнейшее упрощение структуры вириальных коэффициентов. При этом мы по-прежнему предполагаем, что парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является устойчивым и регулярным. Следуя [14] (см. также [11]), введем обозначения: $T(n, 0)$ – множество всех деревьев $t \in T_n$, максимальным надграфом (см. определение П.7 приложения) которых является блок [6]

$$a_n(\beta) = \frac{1}{n!} \sum_{t \in T(n, 0)} I(t). \quad (43)$$

Так как $T(n, 0) \subset T_n$, то структура величины $a_n(\beta)$ проще, чем структура коэффициента $b_n(\beta)$, и при вычислении величин $a_n(\beta)$ не возникает проблемы асимптотической катастрофы.

ТЕОРЕМА 3. Если потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является устойчивым и регулярным, то коэффициенты $\tau_n(\beta)$ ряда (37) при $n \geq 2$ могут быть представлены следующим образом в виде многочленов от величин $a_n(\beta)$:

$$\tau_n(\beta) = (n-1)! \sum_{\mathbf{k}}' \{[n - q(\mathbf{k})]!\}^{-1} \prod_{j=2}^n (k_j!)^{-1} \{-ja_j(\beta)\}^{k_j}. \quad (44)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно результатам работы [14] существует такая окрестность точки $z = 0$, в которой ряд

$$\sum_{n=2}^{\infty} na_n(\beta) z^{n-1}$$

сходится, а ряд в правой части (7) представим в виде

$$\sum_{n=1}^{\infty} n b_n(\beta) z^n = \frac{z}{1 - \sum_{n=2}^{\infty} n a_n(\beta) z^{n-1}}. \quad (45)$$

Из формулы (38) с помощью формулы (45) получаем

$$\begin{aligned} \tau_n(\beta) &= \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^{n-1}}{\partial z^{n-1}} \left(1 + \sum_{m=2}^{\infty} m b_m(\beta) z^{m-1} \right)^{-n} \right]_{z=0} = \\ &= \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^{n-1}}{\partial z^{n-1}} \left(1 - \sum_{k=2}^{\infty} k a_k(\beta) z^{k-1} \right)^n \right]_{z=0}. \end{aligned} \quad (46)$$

Разлагая функцию

$$\left(1 - \sum_{k=2}^{\infty} k a_k(\beta) z^{k-1} \right)^n$$

в ряд по степеням z , находя коэффициент этого разложения при z^{n-1} , умножая этот коэффициент на $(n-1)!$ и подставляя его в правую часть (46) вместо значения производной

$$\frac{\partial^{n-1}}{\partial z^{n-1}} \left(1 - \sum_{k=2}^{\infty} k a_k(\beta) z^{k-1} \right)^n$$

при $z = 0$, мы получаем представление коэффициента $\tau_n(\beta)$ формулой (44).

ПРИМЕР 2. Найдем представления коэффициентов $\tau_2(\beta)$, $\tau_3(\beta)$ и $\tau_4(\beta)$ в виде многочленов от величин $a_2(\beta)$, $a_3(\beta)$ и $a_4(\beta)$. Применяя формулу (44), получаем

$$\begin{aligned} \tau_2(\beta) &= -2a_2(\beta), \quad \tau_3(\beta) = 4[a_2(\beta)]^2 - 3a_3(\beta), \\ \tau_4(\beta) &= -8[a_2(\beta)]^3 + 18a_2(\beta)a_3(\beta) - 4a_4(\beta). \end{aligned}$$

ТЕОРЕМА 4. Пусть $\Phi(\mathbf{r})$ – устойчивый и регулярный потенциал парного взаимодействия, а G – содержащая точку $z = 0$ область в комплексной плоскости (z), в которой функция

$$f(z) = \frac{z}{1 - \sum_{n=2}^{\infty} n a_n(\beta) z^{n-1}}$$

является аналитической. Тогда в общей части области G и круга сходимости ряда в правой части (6) функция $\beta p(z, \beta)$ имеет следующее разложение в степенной ряд:

$$\beta p(z, \beta) = z + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{z^n}{n} \sum_{\mathbf{k}}' q(\mathbf{k})! \prod_{j=2}^n (k_j!)^{-1} [j a_j(\beta)]^{k_j}. \quad (47)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно результатам статьи [14] в общей части области сходимости ряда в правой части (6) и области G имеем

$$\beta p(z, \beta) = \int_0^z \left(1 - \sum_{n=2}^{\infty} n a_n(\beta) z^{n-1} \right)^{-1} dz.$$

Разлагая подынтегральную функцию в ряд по степеням z и затем интегрируя почленно, получаем утверждение теоремы.

Для краткости обозначим

$$e_1 = 1, \quad (48)$$

$$e_n = n^{-1} \sum_{\mathbf{k}}' q(\mathbf{k})! \prod_{j=2}^n (k_j!)^{-1} [j a_j(\beta)]^{k_j}, \quad n \geq 2. \quad (49)$$

Тогда разложение (47) функции $\beta p(z, \beta)$ в ряд по степеням активности z можно представить в следующем виде:

$$\beta p(z, \beta) = \sum_{n=1}^{\infty} e_n z^n, \quad (50)$$

где коэффициенты e_n определяются формулами (48) и (49).

СЛЕДСТВИЕ 3. Если парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является устойчивым и регулярным, то вириальные коэффициенты представляются формулой

$$B_n = \sum_{\mathbf{k}}'' q(\mathbf{k})! e_q(\mathbf{k}) \prod_{j=1}^n [\tau_j(\beta)]^{k_j} (k_j!)^{-1}, \quad n \geq 2, \quad (51)$$

где коэффициенты e_n определяются формулами (48) и (49), а коэффициенты $\tau_n(\beta)$ — формулами (34) и (35) или (44).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Подставим в правую часть равенства (50) вместо z^n его представление (41), где коэффициенты $\tau_n(\beta)$ даются формулами (34) (при $n = 1$) и (35) или (44) (при $n \geq 2$). Разлагая получившееся выражение в ряд по степеням ρ , получаем вириальное разложение, в котором вириальные коэффициенты B_n определяются формулой (51).

Следствие 3 дает возможность решить проблему асимптотической катастрофы при вычислении вириальных коэффициентов. Действительно, по формуле (51) вириальные коэффициенты $B_2(\beta), B_3(\beta), \dots, B_n(\beta)$ представляются в виде многочленов от коэффициентов $\tau_1(\beta), \tau_2(\beta), \dots, \tau_n(\beta)$ и коэффициентов $e_1(\beta), e_2(\beta), \dots, e_n(\beta)$. Число слагаемых как в сумме, стоящей в правой части (49), так и в сумме, стоящей в правой части (44), равно числу $p(n-1)$ неупорядоченных разбиений натурального числа $n-1$ на $k \geq 1$ частей и растет с ростом n значительно медленнее, чем величина C^n при любом $C > 1$. Так как при вычислении коэффициентов $a_n(\beta)$ по формуле (43) не возникает

асимптотической катастрофы, то при вычислении как коэффициентов $e_n(\beta)$ по формуле (49), так и коэффициентов $\tau_n(\beta)$ по формуле (44) не возникает проблемы асимптотической катастрофы.

Далее, число слагаемых в сумме, стоящей в правой части (51), равно числу $p(n)$ неупорядоченных разбиений натурального числа n на $k \geq 1$ частей и растет с ростом n значительно медленнее, чем величина C^n при любом $C > 1$. Из вышеизложенного вытекает, что при вычислении вириальных коэффициентов $B_n(\beta)$ по формуле (51) не возникает проблемы асимптотической катастрофы. При этом вычисление первых $n - 1$ вириальных коэффициентов $B_2(\beta), B_3(\beta), \dots, B_n(\beta)$ несколько сложнее вычисления коэффициентов $a_2(\beta), a_3(\beta), \dots, a_n(\beta)$ за счет вычисления многочленов вида (44) и (49).

Задача вычисления коэффициентов $a_n(\beta)$ по формуле (43) упрощается, если воспользоваться понятием максимального изоморфизма деревьев, введенным в [15]. При этом упрощается и вычисление вириальных коэффициентов по формуле (51), где коэффициенты $e_n(\beta)$ при $n \geq 2$ определяются по формуле (49), а коэффициенты $\tau_n(\beta)$ (при $n \geq 2$) — по формуле (44).

Например, для определения значений коэффициентов $a_2(\beta), a_3(\beta), a_4(\beta), a_5(\beta)$ и $a_6(\beta)$ достаточно будет вычислить 24 интеграла вида $I(t)$.

Следовательно, для того чтобы найти значения вириальных коэффициентов $B_2(\beta), B_3(\beta), B_4(\beta), B_5(\beta)$ и $B_6(\beta)$ по формулам (51), (49) и (44), достаточно вычислить 24 интеграла вида $I(t)$, тогда как для определения значений этих коэффициентов, исходя из традиционного представления этих коэффициентов по формуле (11), требуется вычислить 11 888 интегралов Майера вида $I'(G)$, где $G \in \mathfrak{B}(n)$. Даже если воспользоваться тем, что интегралы $I'(G)$ и $I'(G')$ совпадают в случае, когда блоки G и G' изоморфны, то и тогда для определения значений вириальных коэффициентов $B_2(\beta), B_3(\beta), B_4(\beta), B_5(\beta)$ и $B_6(\beta)$ потребуется вычислить 70 интегралов Майера вида $I'(G)$.

ПРИМЕР 3. Найдем выражение вириальных коэффициентов $B_2(\beta), B_3(\beta)$ и $B_4(\beta)$ через многочлены от величин $a_2(\beta), a_3(\beta)$ и $a_4(\beta)$. Используя формулу (44), получаем

$$\begin{aligned} e_2(\beta) &= a_2(\beta), \quad e_3(\beta) = \frac{4}{3}[a_2(\beta)]^2 + a_3(\beta), \\ e_4(\beta) &= 2[a_2(\beta)]^3 + 3a_2(\beta)a_3(\beta) + a_4(\beta). \end{aligned} \quad (52)$$

Из формулы (51) с помощью (52) находим

$$\begin{aligned} B_2(\beta) &= -a_2(\beta), \quad B_3(\beta) = \frac{4}{3}[a_2(\beta)]^2 - 2a_3(\beta), \\ B_4(\beta) &= -2[a_2(\beta)]^3 + 9a_2(\beta)a_3(\beta) - 3a_4(\beta). \end{aligned}$$

Другой подход к получению представления вириальных коэффициентов через величины $a_n(\beta)$ — с помощью теории вычетов — был предложен Иванчиком в статье [8].

Благодарности. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 98-01-01029.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Здесь для удобства читателя приводятся понятия теории графов, введенные в статьях [3, 11]. При этом мы будем придерживаться терминологии книги [6] и статьи [11].

Обозначим через $T(V) = \{t\}$ множество помеченных растущих деревьев с множеством вершин $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. В дальнейшем изложении мы будем считать, что множество V представляет собой множество n натуральных чисел. Дуга дерева $t \in T(V)$, исходящая из вершины i и заходящая в вершину j , отождествляется с упорядоченной парой (i, j) . Множество дуг дерева $t \in T(V)$ отождествляется с множеством соответствующих упорядоченных пар и обозначается $X(t)$. Подмножество деревьев с корнем $\alpha \in V$ обозначается через $T(V, \alpha)$. Обозначим символом $V^{[2]}$ множество упорядоченных пар, определяемое равенством

$$V^{[2]} = (V \times V) \setminus \left(\bigcup_{i \in V} \{(i, i)\} \right).$$

Элементы этого множества будем называть дугами.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ П.1. Две дуги из множества $V^{[2]}$ называются **соседними**, если у них совпадают вторые компоненты.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ П.2. Дуга (i, j) **предшествует** соседней дуге (k, j) , если $i < k$.

Введем следующие обозначения: $V(t, h)$ – слой вершин дерева t , находящихся на высоте h ; $H(t)$ – высота дерева t ; $|M|$ – мощность конечного множества M .

Пусть $t, t' \in T(V, \alpha)$. Через $h_0(t, t')$ обозначим минимальное число h (если оно существует), удовлетворяющее условию $V(t, h) \neq V(t', h)$.

На множестве $T(V, \alpha)$ введем отношение порядка.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ П.3. Дерево $t \in T(V, \alpha)$ **предшествует** дереву $t' \in T(V, \alpha)$ (обозначение $t \prec t'$), если выполняется одно из следующих условий: 1) величина $h_0(t, t')$ существует, причем $|V(t, h_0(t, t'))| > |V(t', h_0(t, t'))|$; 2) величина $h_0(t, t')$ не существует, $V(t, h) = V(t', h)$, $h = 1, 2, \dots, H(t)$, причем каждая дуга из множества $X(t) \setminus X(t')$ предшествует соседней дуге из множества $X(t') \setminus X(t)$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ П.4. Дерево $t \in T(V, \alpha)$ называется **псевдокаркасом** неориентированного графа $G(V, \tilde{X})$ с множеством вершин V и множеством ребер $\tilde{X}$, если оно, рассматриваемое как неориентированный граф, является подграфом графа G . Граф G в этом случае называется **надграфом** дерева t .

ТЕОРЕМА П.1 [11, 3]. Пусть $G(V, \tilde{X})$ – связный граф. Тогда для любой вершины $\alpha \in V$ существует **единственное** дерево $t \in T(V, \alpha)$, являющееся псевдокаркасом графа G , такое, что нет предшествующих ему деревьев, которые также являются псевдокаркасами графа G .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ П.5. Дерево $t \in T(V, \alpha)$ называется **каркасом с корнем α** графа $G(V, \tilde{X})$, если оно является псевдокаркасом графа G и не имеет предшествующих деревьев, также являющихся псевдокаркасами графа G .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ П.6. Каркас графа $G(V, \tilde{X})$, корнем которого является наименьшая вершина из множества V , называется **каркасом с минимальным корнем** графа G .

Рассмотрим произвольное дерево $t \in T(V, \alpha)$. Введем множество ребер $Z(t)$, полагая

$$Z(t) = \bigcup_{h=1}^{H(t)} \{ \{u, v\} : u, v \in V(t, h) \}.$$

Пусть $v \in V(t, h)$, где $2 \leq h \leq H(t)$, (u, v) – дуга дерева t , заходящая в вершину v . Введем обозначения: $Y(t, v)$ – совокупность дуг, исходящих из вершин слоя $V(t, h-1)$, заходящих в вершину v и следующих за дугой (u, v) ;

$$Y(t) = \bigcup_{h=2}^{H(t)} \bigcup_{v \in V(t, h)} Y(t, v);$$

$\tilde{Y}(t)$ – множество неориентированных ребер, которые получаются из дуг множества $Y(t)$, если эти дуги лишить ориентации;

$$\tilde{X}'(t) = \tilde{Y}(t) \bigcup Z(t); \quad (\text{П.1})$$

$\tilde{X}(t)$ – множество ребер, которые получаются из дуг множества $X(t)$, если их лишить ориентации.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ П.7. **Максимальным надграфом** [11] дерева $t \in T(V, \alpha)$ называется граф $G(t)$ с множеством вершин V и множеством ребер $\tilde{X}(t) \bigcup \tilde{X}'(t)$.

Введем обозначения: $F^+(n)$ – множество всех связных помеченных графов с множеством вершин V_n и четным числом ребер; $F^-(n)$ – множество всех связных помеченных графов с множеством вершин V_n и нечетным числом ребер; $C_n^+ = |F^+(n)|$; $C_n^- = |F^-(n)|$; $C_n = |F(n)|$. Для определенности будем считать, что множество $F^+(1)$ состоит из одного тривиального $(1, 0)$ -графа, а множество $F^-(1)$ пустое. Из введенных определений вытекает, что $F^+(n) \cap F^-(n) = \emptyset$ и

$$F^+(n) \bigcup F^-(n) = F(n), \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{П.2})$$

Отсюда следует

$$C_n^+ + C_n^- = C_n. \quad (\text{П.3})$$

Из определения множеств $F^+(n)$ и $F^-(n)$ также вытекает

$$C_1^+ = 1, \quad C_1^- = 0, \quad C_2^+ = 0, \quad C_2^- = 1, \quad C_3^+ = 3, \quad C_3^- = 1.$$

ТЕОРЕМА П.2. При $n \geq 4$ число всех связных помеченных графов с множеством вершин V_n и четным числом ребер определяется формулой

$$C_n^+ = \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} - (n-1)C_{n-1}^+ - \exp\{(C_{n-1}^2 - 1) \ln 2\} - \sum_{k=2}^{n-2} C_{n-1}^{k-1} \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\} C_k, \quad (\text{П.4})$$

а число всех связных графов с множеством помеченных вершин V_n и нечетным числом ребер определяется формулой

$$C_n^- = \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} - (n-1)C_{n-1}^- - \exp\{(C_{n-1}^2 - 1) \ln 2\} - \sum_{k=2}^{n-2} C_{n-1}^{k-1} \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\} C_k. \quad (\text{П.5})$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Введем обозначения: $V(G)$ – множество вершин графа G ; $\mathfrak{G}^+(V)$ – множество всех графов с множеством V помеченных вершин и четным числом ребер; $\mathfrak{G}^-(V)$ – множество всех графов с множеством V помеченных вершин и нечетным числом ребер; $\mathfrak{G}^+(\tilde{G}, n)$ – множество всех графов, которые можно представить в виде объединения [6] графов $\tilde{G}$ и H , где $H \in \mathfrak{G}^+(V_n \setminus V(\tilde{G}))$; $\mathfrak{G}^-(\tilde{G}, n)$ – множество всех графов, которые можно представить в виде объединения графов $\tilde{G}$ и H , где $H \in \mathfrak{G}^-(V_n \setminus V(\tilde{G}))$; $F^+(V)$ – множество всех связных графов с множеством V помеченных вершин и четным числом ребер; $F^-(V)$ – множество всех связных графов с множеством V помеченных вершин и нечетным числом ребер; $\tilde{G}_0$ – тривиальный $(1, 0)$ -граф с вершиной $v = 1$.

Множество графов $\mathfrak{G}^+(V_n)$ можно представить в виде следующего разложения на непересекающиеся множества:

$$\mathfrak{G}^+(V_n) = \mathfrak{G}^+(\tilde{G}_0, n) \cup \left\{ \bigcup_{k=2}^{n-1} \bigcup_{\substack{\{1\} \subset V \subset V_n \\ |V|=k}} \left[\left(\bigcup_{\tilde{G} \in F^+(V)} \mathfrak{G}^+(\tilde{G}, n) \right) \cup \left(\bigcup_{\tilde{G} \in F^-(V)} \mathfrak{G}^-(\tilde{G}, n) \right) \right] \right\} \cup F^+(n). \quad (\text{П.6})$$

Заметим, что мощность множества $\mathfrak{G}^+(V)$ равна числу $\exp\{(C_{|V|}^2 - 1) \ln 2\}$. Если мощность множества $V(\tilde{G})$ равна k и $V(\tilde{G}) \subset V_n$, то множества графов $\mathfrak{G}^+(V_n \setminus V(\tilde{G}))$ и $\mathfrak{G}^-(V_n \setminus V(\tilde{G}))$ имеют мощность $\exp\{[C_{n-k}^2 - 1] \ln 2\}$. Поэтому из разложения (П.6) следует

$$\begin{aligned} \exp\{[C_n^2 - 1] \ln 2\} &= \exp\{[C_{n-1}^2 - 1] \ln 2\} + \\ &+ \sum_{k=2}^{n-2} \sum_{\substack{\{1\} \subset V \subset V_n \\ |V|=k}} \left[\sum_{\tilde{G} \in F^+(V)} \exp\{[C_{n-k}^2 - 1] \ln 2\} + \right. \\ &+ \left. \sum_{\tilde{G} \in F^-(V)} \exp\{[C_{n-k}^2 - 1] \ln 2\} \right] + \sum_{\substack{\{1\} \subset V \subset V_n \\ |V|=n-1}} |F^+(V)| + C_n^+. \end{aligned}$$

Отсюда, используя введенные обозначения, получаем

$$\begin{aligned} \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} &= \exp\{(C_{n-1}^2 - 1) \ln 2\} + \sum_{k=2}^{n-2} C_{n-1}^{k-1} [C_k^+ \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\} + \\ &+ C_k^- \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\}] + (n-1)C_{n-1}^+ + C_n^+, \end{aligned}$$

откуда после элементарных преобразований с учетом равенства (П.3) и следует соотношение (П.4).

Докажем теперь соотношение (П.5). Множество графов $\mathfrak{G}^-(V_n)$ можно представить в виде следующего разложения:

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}^-(V_n) &= \mathfrak{G}^-(\tilde{G}_0, n) \cup \left\{ \bigcup_{k=2}^{n-1} \bigcup_{\substack{\{1\} \subset V \subset V_n \\ |V|=k}} \left[\left(\bigcup_{\tilde{G} \in F^+(V)} \mathfrak{G}^-(\tilde{G}, n) \right) \cup \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cup \left(\bigcup_{\tilde{G} \in F^-(V)} \mathfrak{G}^+(\tilde{G}, n) \right) \right] \right\} \cup F^-(n). \end{aligned} \quad (\text{П.7})$$

Из разложения (П.7) вытекает

$$\begin{aligned} \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} &= \exp\{(C_{n-1}^2 - 1) \ln 2\} + \\ &+ \sum_{k=2}^{n-2} \sum_{\substack{\{1\} \subset V \subset V_n \\ |V|=k}} \left[\sum_{\tilde{G} \in F^+(V)} \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\tilde{G} \in F^-(V)} \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\} \right] + \sum_{\substack{\{1\} \subset V \subset V_n \\ |V|=n-1}} |F^-(V)| + C_n^-. \end{aligned}$$

Отсюда, используя введенные обозначения, получаем

$$\begin{aligned} \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} &= \exp\{(C_{n-1}^2 - 1) \ln 2\} + \sum_{k=2}^{n-2} C_{n-1}^{k-1} [C_k^+ \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\} + \\ &+ C_k^- \exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\}] + (n-1)C_{n-1}^- + C_n^-, \end{aligned}$$

откуда с учетом (П.3) и следует соотношение (П.5). Теорема 2 полностью доказана.

СЛЕДСТВИЕ П.1. При $n \geq 5$ число всех связных помеченных графов с множеством вершин V_n и четным числом ребер и число всех связных помеченных графов с множеством вершин V_n и нечетным числом ребер удовлетворяют неравенствам

$$\exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} [1 - (2n+8)2^{-n}] < C_n^+, \quad C_n^- < \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\}. \quad (\text{П.8})$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из (П.4) и (П.5) следует оценка сверху

$$C_n^+, C_n^- < \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\}, \quad n \geq 4. \quad (\text{П.9})$$

Как известно [6], число C_n всех связанных помеченных графов с множеством вершин V_n удовлетворяет неравенству

$$C_n \leq \exp\{C_n^2 \ln 2\}, \quad n \geq 2. \quad (\text{П.10})$$

Из неравенства (П.10) при всех k , удовлетворяющих условиям $2 \leq k \leq n-2$, следует оценка

$$\exp\{(C_{n-k}^2 - 1) \ln 2\} C_k \leq \exp\{[C_n^2 - k(n-k) - 1] \ln 2\} \leq \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} 2^{4-2n}. \quad (\text{П.11})$$

Из (П.4), (П.9) и (П.11) при $n \geq 4$ получается оценка

$$\begin{aligned} C_n^+ &> \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} \left(1 - n2^{1-n} - \sum_{k=2}^{n-2} C_{n-1}^{k-1} 2^{4-2n}\right) \geq \\ &\geq \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} [1 - (2n+8)2^{-n}]. \end{aligned} \quad (\text{П.12})$$

Из (П.5), (П.9) и (П.11) при $n \geq 4$ имеем оценку

$$\begin{aligned} C_n^- &> \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} \left(1 - n2^{1-n} - \sum_{k=2}^{n-2} C_{n-1}^{k-1} 2^{4-2n}\right) \geq \\ &\geq \exp\{(C_n^2 - 1) \ln 2\} [1 - (2n+8)2^{-n}]. \end{aligned} \quad (\text{П.13})$$

Из (П.9), (П.12) и (П.13) следует (П.8). Тем самым следствие П.1 полностью доказано.

При $n \geq 5$ оценка снизу в (П.8) положительна и, следовательно, не является тривиальной.

Список литературы

- [1] Д. Рюэль. Статистическая механика. Строгие результаты. М.: Мир, 1971.
- [2] Дж. Майер, М. Генперт-Майер. Статистическая механика. М.: Мир, 1980.
- [3] Г. И. Калмыков. ТМФ. 1990. Т. 84. № 2. С. 279.
- [4] Дж. Уленбек, Дж. Форд. Лекции по статистической механике. М.: Мир, 1965.
- [5] Д. Н. Зубарев. ДАН СССР. 1958. Т. 118. № 5. С. 903.
- [6] Ф. Харари. Теория графов. М.: Мир, 1973.
- [7] И. И. Иванчик. Метод ковариантного суммирования диаграмм в классической статистике. Дисс. на соискание уч. ст. д-ра физ.-мат. наук. М.: ФИАН, 1987; *I. I. Ivanchik. Generalized Mayer Series in Classical Statistical Mechanics.* N. Y.: Nova Science Publishers, 1993.
- [8] И. И. Иванчик. ТМФ. 1996. Т. 108. № 1. С. 135.
- [9] R. Penrose. J. Math. Phys. 1963. V. 4. № 12. P. 1488.
- [10] J. Groeneveld. Phys. Lett. 1962. V. 3. № 1. P. 50.
- [11] Г. И. Калмыков. Дискретная математика. 1992. Т. 4. Вып. 2. С. 66.
- [12] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1962.
- [13] М. Холл. Комбинаторика. М.: Мир, 1970.
- [14] Г. И. Калмыков. ТМФ. 1992. Т. 92. № 1. С. 139.
- [15] Г. И. Калмыков. ТМФ. 1998. Т. 116. № 3. С. 417.

Поступила в редакцию 13.V.1998 г.,
после доработки 10.XII.1998 г.