Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. И. Калмыков, Об оценке радиуса сходимости майеровских разложений (случай неотрицательного потенциала), *ТМФ*, 1998, том 116, номер 3, 417–430

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf913>

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: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 17:04:30

© 1998 г.

Г. И. Калмыков*

ОБ ОЦЕНКЕ РАДИУСА СХОДИМОСТИ МАЙЕРОВСКИХ РАЗЛОЖЕНИЙ (СЛУЧАЙ НЕОТРИЦАТЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА)

Для случая неотрицательного регулярного парного потенциала дана последовательность оценок сверху радиуса сходимости разложения термодинамического предела давления по степеням активности, сходящаяся к этому радиусу.

В статье 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 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n \in \mathbf{R}^\nu$. Введем следующие обозначения:

$$(\mathbf{r})_n = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n), \quad (2)$$

где $\mathbf{r}_i \in \mathbf{R}^\nu, i = 1, 2, \dots, n$;

$$U(\mathbf{r})_n = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (3)$$

$$d(\mathbf{r})_n = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n, \quad (4)$$

где

$$d\mathbf{r}_i = dr_i^{(1)} dr_i^{(2)} \dots dr_i^{(\nu)};$$

*Московский государственный заочный институт пищевой промышленности, Центр физических исследований им. П. Н. Лебедева, Москва, Россия

k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, $\beta = 1/kT$ – обратная температура, $|\Lambda|$ – лебегова мера множества Λ .

Из условия (1) следует сходимость большой статистической суммы [1]

$$\Xi(\Lambda, z, \beta) = 1 + z + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} \exp\{-\beta U(\mathbf{r})_n\} (d\mathbf{r})_n, \quad (5)$$

где z – активность [1, 2]. При этом, как известно [2], давление

$$p_{\Lambda}(z) = \beta^{-1} |\Lambda|^{-1} \ln \Xi(\Lambda, z, \beta)$$

разлагается в ряд по степеням активности,

$$p_{\Lambda}(z) = \beta^{-1} |\Lambda|^{-1} \ln \Xi(\Lambda, z, \beta) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\Lambda, \beta) z^n. \quad (6)$$

В дальнейшем предполагается, что парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ удовлетворяет условию регулярности [1]: интеграл

$$C(\beta) = \int_{\mathbf{R}^d} |e^{-\beta \Phi(\mathbf{r})} - 1| d\mathbf{r} \quad (7)$$

сходится при некотором $\beta > 0$ (а следовательно, при всех $\beta > 0$).

Если множество Λ стремится к бесконечности в смысле Фишера [1], то в некотором круге ненулевого радиуса комплексной z -плоскости с центром в точке $z = 0$ ряд в правой части (6) сходится почленно к пределу [1, 3]

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\Lambda, \beta) z^n = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta) z^n. \quad (8)$$

При положительных значениях z , принадлежащих кругу сходимости ряда в правой части (8), определяемая этим рядом функция, представляет собой термодинамический предел давления,

$$p(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} p_{\Lambda}(z) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta) z^n. \quad (9)$$

Последний ряд называется майеровским разложением термодинамического предела давления.

Одной из задач классической статистической механики является [1, 4] определение радиуса сходимости майеровского разложения. В книге [1] получена оценка снизу этого радиуса для случая устойчивого и регулярного парного потенциала. Для случая регулярного неотрицательного парного потенциала в статье [5] были найдены двусторонние оценки радиуса сходимости. Эти же оценки были получены более простым путем в статье [3]. Однако указанные оценки являются, по-видимому, очень грубыми. В связи с этим И. И. Иванчик поставил перед автором статьи задачу совершенствования этих оценок.

В данной статье для случая регулярного неотрицательного парного потенциала уточняется полученная в работе [5] оценка сверху радиуса сходимости майеровского разложения в правой части (9). Получена последовательность верхних оценок этого радиуса, сходящаяся к нему.

Основной результат статьи формулируется в следующей теореме.

ТЕОРЕМА. Если потенциал парного взаимодействия неотрицательный и регулярный, то:

- 1) при любом $k \geq 2$ величина $(k|b_k(\beta)|)^{-1/(k-1)}$ является оценкой сверху радиуса сходимости R майеровского разложения (9);
- 2) последовательность

$$(2|b_2(\beta)|)^{-1}, (3|b_3(\beta)|)^{-1/2}, \dots, (n|b_n(\beta)|)^{-1/(n-1)}, \dots \quad (10)$$

имеет конечный предел, равный R .

Доказательство опирается на сформулированные и доказанные ниже шесть лемм и четыре следствия из них.

Предварительно мы приведем некоторые необходимые понятия, введенные в статьях [3, 6, 7]. Будем придерживаться терминологии книги [8] и статьи [6].

Обозначим через $T(V) = \{t\}$ множество помеченных растущих деревьев с множеством вершин $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Без ограничения общности можно считать, что вершины дерева t помечены натуральными числами, и отождествлять множество вершин V с множеством натуральных чисел мощности n . В дальнейшем изложении мы будем считать, что множество V представляет собой множество n натуральных чисел. Если t — дерево из множества $T(V)$, то множество его дуг будет обозначаться через $X(t)$. Дуга, исходящая из вершины i и входящая в вершину j , отождествляется с упорядоченной парой (i, j) . Множество дуг дерева t отождествляется с множеством соответствующих пар. Подмножество деревьев с корнем α обозначается $T(V, \alpha)$. Подмножество деревьев $T(V_n, 1) = \{t\}$, где $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$ обозначается как $T_n = \{t\}$.

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

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

Пусть $V(t, h)$ — слой вершин дерева t , находящийся на высоте h ; $H(t)$ — высота дерева t ; $|M|$ — мощность конечного множества M .

Граф G с множеством помеченных вершин V и множеством ребер $\tilde{X} = \{\tilde{x}\}$ обозначается $G(V, \tilde{X})$. Каждое ребро $\tilde{x} \in \tilde{X}$ графа $G(V, \tilde{X})$ представляет собой неупорядоченную пару $\{i, j\}$ различных вершин множества V . В дальнейшем каждая неупорядоченная пара $\{i, j\}$ вершин из множества V будет называться ребром. Множество ребер графа G обозначается через $\tilde{X}(G)$, а множество вершин графа G — через $V(G)$.

Пусть $t \in T(V, \alpha)$. Обозначим

$$Z(t) = \bigcup_{h=1}^{H(t)} \{\tilde{x} = \{i, j\} : i, j \in V(t, h), i \neq j\}. \quad (11)$$

Если $j \in V(t, h)$ ($2 \leq h \leq H(t)$) и (i, j) – дуга дерева t , входящая в вершину j , то $Y(t, j)$ – совокупность всех дуг из множества $V^{[2]}$, исходящих из вершин слоя $V(t, h-1)$, входящих в вершину j и следующих за дугой (i, j) . Пусть

$$Y(t) = \bigcup_{h=2}^{H(t)} \bigcup_{j \in V(t, h)} Y(t, j), \quad (12)$$

$\tilde{Y}(t)$ – множество всех неориентированных ребер, которые получаются из дуг множества $Y(t)$ после удаления ориентации,

$$\tilde{X}'(t) = \tilde{Y}(t) \cup Z(t), \quad (13)$$

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

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. Максимальным надграфом дерева $t \in T(V, \alpha)$ называется граф с множеством вершин V и множеством ребер $\tilde{X}(t) \cup \tilde{X}'(t)$.

Как известно, всякое растущее дерево является ориентированным графом. Исходя из определения изоморфизма ориентированных помеченных графов [9] изоморфизм растущих помеченных деревьев можно сформулировать следующим образом.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 4. Два растущих помеченных дерева $t(V, X)$ и $t'(V', X')$ **изоморфны** тогда, когда существует такое взаимно однозначное отображение $\varphi: V \leftrightarrow V'$, что если дуга (u, v) принадлежит множеству X дуг дерева t , то дуга $(\varphi(u), \varphi(v))$ принадлежит множеству X' дуг дерева t' .

Для целей этой статьи потребуется более сильное определение изоморфизма растущих помеченных деревьев. Такой более сильный изоморфизм мы назовем максимальным изоморфизмом.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 5. Два растущих помеченных дерева $t(V, X)$ и $t'(V', X')$ являются **максимально изоморфными**, если существует взаимно однозначное отображение $\varphi: V \leftrightarrow V'$, удовлетворяющее условиям: 1) если дуга (u, v) принадлежит множеству X дуг дерева t , то дуга $(\varphi(u), \varphi(v))$ принадлежит множеству X' дуг дерева t' ; 2) отображение φ сохраняет смежность ребер максимального надграфа $G(t)$ дерева t , т.е. если $\{u, v\} \in \tilde{X}(G(t))$, то ребро $\{\varphi(u), \varphi(v)\}$ принадлежит множеству ребер максимального надграфа $G(t')$ дерева t' ; 3) обратное отображение $\varphi^{-1}: V' \leftrightarrow V$, так же как и отображение φ , сохраняет смежность ребер максимального надграфа $G(t')$ дерева t' , т.е. если $\{u', v'\} \in \tilde{X}(G(t'))$, то ребро $\{\varphi^{-1}(u'), \varphi^{-1}(v')\}$ принадлежит множеству ребер $\tilde{X}(G(t))$ максимального надграфа $G(t)$ дерева t .

Рассмотрим множество деревьев $T(V, \alpha)$. Элементы множества V обозначим $v_1, v_2, \dots, v_n$, где $n = |V|$. Без ограничения общности можно считать, что $v_1 = \alpha$ и $v_i < v_j$, если $2 \leq i < j \leq n$. Определим отображение ω на множестве V формулой

$$\omega(v_i) = i. \quad (14)$$

Отображение ω устанавливает взаимно однозначное соответствие между множествами V и V_n , где $n = |V|$. Оно индуцирует взаимно однозначное отображение Ω множества дуг $V^{[2]}$ на множество дуг $V_n^{[2]}$, определяемое формулой

$$\Omega((u, v)) = (\omega(u), \omega(v)), \quad (15)$$

где $(u, v) \in V^{[2]}$.

Обозначим через A оператор, определенный на множестве деревьев $T(V, \alpha)$ и отображающий дерево $t \in T(V, \alpha)$ с множеством дуг $X(t)$ в ориентированный помеченный граф At с множеством вершин V_n и множеством дуг $\Omega(X(t))$.

ЛЕММА 1. *При любом $t \in T(V, \alpha)$ граф $At(V_n, \Omega(X(t)))$ является деревом. При этом расстояние любой вершины $v \in V$ от корня в дереве t равно расстоянию вершины $\omega(v)$ от корня в дереве At .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Докажем, что любая вершина $j \in V_n$, где $j \neq 1$, достижима из вершины $1 \in V_n$ в графе At . Пусть последовательность $\alpha, v_{i(1)}, v_{i(2)}, \dots, v_{i(\mu)}, v_j$ есть путь из корня α в вершину v_j в дереве t . Тогда дуги $(\alpha, v_{i(1)}), (v_{i(1)}, v_{i(2)}), \dots, (v_{i(\mu)}, v_j)$ принадлежат множеству дуг $X(t)$. При этом из определения отображения Ω следует, что дуги $(i, i(1)), (i(1), i(2)), \dots, (i(\mu), j)$ принадлежат множеству дуг $\Omega(X(t))$. Следовательно, вершина j достижима из вершины 1 в графе At , а длина пути $1, i(1), i(2), \dots, i(\mu), j$ в графе At совпадает с длиной пути $\alpha, v_{i(1)}, v_{i(2)}, \dots, v_{i(\mu)}, v_j$ в дереве t . Так как отображение Ω является взаимно однозначным, то число дуг в множестве $\Omega(X(t))$, как и число дуг в множестве $X(t)$, равно $n - 1$. Отсюда вытекает, что граф At — помеченное растущее дерево. Следовательно, какова бы ни была вершина $j \in V_n$, в дереве At существует лишь один путь из корня $1 \in V_n$ в эту вершину. Как уже доказано, длина этого пути совпадает с длиной пути из корня $\alpha \in V$ в вершину V_j в дереве t . Что и требовалось доказать.

ЛЕММА 2. *При любом $t \in T(V, \alpha)$ деревья t и At максимально изоморфны.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Отображение ω является по определению взаимно однозначным отображением множества V на множество V_n , где $n = |V|$. Из определения отображения Ω следует, что если $(u, v) \in X(t)$, то дуга $(\omega(u), \omega(v))$ принадлежит множеству дуг дерева At . Из леммы 1 вытекает, что

$$\omega(V(t, h)) = V(At, h). \quad (16)$$

Таким образом, отображение ω сохраняет смежность пар вершин максимального надграфа $G(t)$ дерева t , принадлежащих одному и тому же слою $V(t, h)$ вершин дерева t , т.е. если $\{u, v\} \in \tilde{X}(G(t))$ и вершины u и v принадлежат одному и тому же слою $V(t, h)$ вершин дерева t , то ребро $\{\omega(u), \omega(v)\}$ принадлежит множеству ребер $\tilde{X}(G(At))$ максимального надграфа дерева At .

Пусть теперь $\{u, v\} \in \tilde{X}(G(t))$ и вершины u и v не принадлежат одному и тому же слою $V(t, h)$ дерева t . Без ограничения общности можно считать $u \in V(t, h)$,

$v \in V(t, h+1)$, где $0 \leq h \leq H(t) - 1$. При этом возможны два случая, когда (u, v) является либо дугой дерева t , либо дугой из множества $Y(t, v)$.

Допустим, что (u, v) – дуга дерева t . Тогда $(\omega(u), \omega(v)) \in X(At)$, а $\{\omega(u), \omega(v)\}$ – ребро максимального надграфа $G(At)$ дерева At , которое получается из дуги $(\omega(u), \omega(v))$, если ее лишить ориентации.

Допустим теперь, что $(u, v) \in Y(t, v)$. Обозначим через $u(v)$ вершину дерева t , из которой исходит дуга дерева t , входящая в вершину v . Из определения множества $Y(t, v)$ следует, что $u(v) < u$. Поэтому из определения отображения ω вытекает, что $\omega(u(v)) < \omega(u)$, причем из равенства (16) видно, что вершины $\omega(u(v))$ и $\omega(u)$ принадлежат одному и тому же слою $V(At, h)$ дерева At . Поскольку $(\omega(u(v)), \omega(v))$ – дуга дерева At , то $(\omega(u), \omega(v))$ – дуга множества $Y(At, \omega(v))$, а $\{\omega(u), \omega(v)\}$ – ребро максимального надграфа $G(At)$ дерева At . Таким образом, отображение ω удовлетворяет условию 2 определения 5. Аналогично доказывается, что отображение ω удовлетворяет условию 3 определения 5, т.е. обратное отображение ω^{-1} множества вершин V_n на множество вершин V сохраняет смежность пар вершин максимального надграфа $G(At)$ дерева At . Отсюда следует утверждение леммы 2.

ЛЕММА 3. *Отображение A является взаимно однозначным отображением множества $T(V, \alpha)$ на множество T_n .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Докажем, что отображение A является взаимно однозначным отображением. Допустим противное. Тогда существуют такие деревья $t_1, t_2 \in T(V, \alpha)$, $t_1 \neq t_2$, что $At_1 = At_2 = t$. При этом из определения отображения A вытекает, что

$$\Omega(X(t_1)) = \Omega(X(t_2)). \quad (17)$$

Так как $t_1 \neq t_2$, то, очевидно, что $X(t_1) \neq X(t_2)$, и, следовательно, $X(t_1) \setminus X(t_2) \neq \emptyset$. Рассмотрим дугу $(u, v) \in [X(t_1) \setminus X(t_2)]$. Из равенства (17) следует, что в множестве $X(t_2)$ имеется такая дуга $(u', v') \neq (u, v)$, что $\Omega((u', v')) = \Omega((u, v))$. Однако это противоречит тому, что отображение Ω является взаимно однозначным. Следовательно, множество $A(T(V, \alpha))$ содержит столько же различных элементов, сколько элементов содержит множество $T(V, \alpha)$, т.е. n^{n-2} различных элементов из множества T_n . Отсюда и вытекает, что $A(T(V, \alpha)) = T_n$. Значит, отображение A является взаимно однозначным отображением множества $T(V, \alpha)$ на множество T_n . Лемма 3 доказана.

Рассмотрим майеровскую функцию

$$f_{ij} = \exp\{-\beta\Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\} - 1 \quad (18)$$

и введем обозначения

$$(\mathbf{r})_V = \{\mathbf{r}_v, v \in V\}, \quad (19)$$

$$(d\mathbf{r})_V = \prod_{v \in V} d\mathbf{r}_v. \quad (20)$$

Пусть $t \in T(V, \alpha)$. Обозначим

$$D(t, (\mathbf{r})_V) = \prod_{(u,v) \in X(t)} f_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}'(t)} \exp\{-\beta \Phi(\mathbf{r}_{\tilde{u}} - \mathbf{r}_{\tilde{v}})\}, \quad (21)$$

$$I(t) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} D(t, (\mathbf{r})_V) (d\mathbf{r})_{V \setminus \{\alpha\}}. \quad (22)$$

В статье [10] доказано, что для любого растущего дерева t с множеством V помеченных вершин и корнем $\alpha \in V$ несобственный интеграл $I(t)$ сходится в случае устойчивого и регулярного парного потенциала и не зависит от значения $\mathbf{r}_\alpha$. Так как неотрицательный потенциал является устойчивым, то отсюда вытекает, что несобственный интеграл $I(t)$ сходится в случае неотрицательного и регулярного парного потенциала.

В работе [3] было получено следующее представление коэффициентов $b_n(\beta)$ в случае устойчивого и регулярного парного потенциала:

$$b_n(\beta) = \frac{1}{n!} \sum_{t \in T_n} I(t), \quad n = 2, 3, \dots \quad (23)$$

Поскольку неотрицательный потенциал является устойчивым, то представление (23) коэффициентов $b_n(\beta)$ имеет место, в частности, в случае неотрицательного регулярного парного потенциала.

ЛЕММА 4. *Если парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ устойчивый и регулярный, то для любого множества вершин V и при любом $\alpha \in V$ имеет место равенство*

$$\sum_{t \in T(V, \alpha)} I(t) = \sum_{t \in T_n} I(t) = n! b_n(\beta), \quad (24)$$

где $n = |V|$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Так как парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ устойчивый и регулярный, то интеграл $I(t)$ сходится для любого помеченного растущего дерева t . Из определения интеграла $I(t)$ следует, что для любых двух максимально изоморфных деревьев t и t' имеет место равенство $I(t) = I(t')$. Введенное выше отображение A является по лемме 3 взаимно однозначным отображением множества деревьев $T(V, \alpha)$ на множество деревьев T_n . При этом по лемме 2 деревья $t \in T(V, \alpha)$ и $At \in T_n$ максимально изоморфны и для них имеет место равенство

$$I(t) = I(At). \quad (25)$$

Отсюда вытекает, что

$$\sum_{t \in T(V, \alpha)} I(t) = \sum_{t \in T(V, \alpha)} I(At) = \sum_{t \in T_n} I(t). \quad (26)$$

Из соотношений (26) и (23) следует соотношение (24). Лемма 4 доказана.

Рассмотрим растущее дерево t с помеченными вершинами и корнем $\alpha(t)$. Обозначим через $M(t) = \{m\}$ такую совокупность натуральных чисел, что 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 множество $M(t)$ непусто и $m \in M(t)$. Введем следующие обозначения: $t_1(t, m)$ – поддерево, которое получается из дерева t удалением всех вершин, достижимых из вершины $v(t, m)$, за исключением вершины $v(t, m)$; $t_2(t, m)$ – поддерево с корнем $v(t, m)$, получающееся из дерева t удалением всех вершин, не достижимых из вершины $v(t, m)$. Очевидно, что дерево t есть объединение [8] поддеревьев $t_1(t, m)$ и $t_2(t, m)$, т.е.

$$t = t_1(t, m) \cup t_2(t, m).$$

Из определения поддеревьев $t_1(t, m)$ и $t_2(t, m)$ следует [7, 10, 11], что

$$X(t) = X(t_1(t, m)) \cup X(t_2(t, m)), \quad (27)$$

$$G(t) = G(t_1(t, m)) \cup G(t_2(t, m)), \quad (28)$$

$$\tilde{X}'(t) = \tilde{X}'(t_1(t, m)) \cup \tilde{X}'(t_2(t, m)). \quad (29)$$

Обозначим через $T(n | s)$ множество деревьев $t \in T_n$, удовлетворяющих условию $t_1(t, H(s)) = s$, а через $V(t)$ – множество вершин дерева t ; $n(t) = |V(t)|$.

Каково бы ни было растущее помеченное дерево s с корнем $\alpha = 1$, удовлетворяющее условию

$$V(s) \subset V_n, \quad (30)$$

для всех деревьев t из множества $T(n | s)$ выполняется соотношение $H(s) \in M(t)$. Кроме того, все деревья t из множества $T(n | s)$ имеют одну и ту же вершину $v(t, H(s))$, которая однозначно определяется деревом s . Обозначим эту вершину $v(s)$.

Если $s \in T(V, 1)$, где $V \subset V_n$, то совокупность деревьев $\{t_2(t, H(s)) : t \in T(n | s)\}$ совпадает с совокупностью деревьев $T((V_n \setminus V) \cup \{v(s)\}, v(s))$.

ЛЕММА 5. Пусть парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является неотрицательным и регулярным, а растущее помеченное дерево s , имеющее своим корнем вершину $\alpha = 1$, и число n удовлетворяют условию (30). Тогда имеет место соотношение

$$\sum_{t \in T(n | s)} I(t) = I(s)(n - n(s) + 1)! b_{n - n(s) + 1}(\beta). \quad (31)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из определения множества деревьев $T(n | s)$ и соотношений (27), (29) следует, что для всякого дерева $t \in T(n | s)$ имеем

$$D(t, (\mathbf{r})_n) = D(s, (\mathbf{r})_{V(s)}) D(t_2(t, H(s)), (\mathbf{r})_{(V_n \setminus V(s)) \cup \{v(s)\}}), \quad (32)$$

$$I(t) = I(s) I(t_2(t, H(s))). \quad (33)$$

Из совпадения множества деревьев $\{t_2(t, H(s)): t \in T(n | s)\}$ с множеством деревьев $T((V_n \setminus V(s)) \cup \{v(s)\}, v(s))$ и из соотношения (33) следует, что

$$\sum_{t \in T(n | s)} I(t) = I(s) \sum_{t \in T((V_n \setminus V(s)) \cup \{v(s)\}, v(s))} I(t). \quad (34)$$

Так как мощность множества $(V_n \setminus V(s)) \cup \{v(s)\}$ равна $n - n(s) + 1$, то, применяя лемму 4, из равенства (34) получаем равенство (31), что и требовалось доказать.

СЛЕДСТВИЕ 1. Пусть парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является неотрицательным и регулярным, а число n и множество V удовлетворяют условиям

$$V \subset V_n, \quad 1 \in V. \quad (35)$$

Тогда имеет место равенство

$$\sum_{s \in T(V, 1)} \sum_{t \in T(n | s)} I(t) = |V| b_{|V|}(\beta) (n - |V| + 1)! b_{n - |V| + 1}(\beta). \quad (36)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. По определению $T(V, 1)$ любое дерево s из этого множества имеет своим множеством вершин множество V , а своим корнем – вершину $1 \in V$. При этом данные число n и множество V удовлетворяют условиям (35). Следовательно, любое дерево $s \in T(V, 1)$ удовлетворяет при данном n условию (30). Применяя лемму 5, получаем

$$\sum_{s \in T(V, 1)} \sum_{t \in T(n | s)} I(t) = \sum_{s \in T(V, 1)} I(s) (n - |V| + 1)! b_{n - |V| + 1}(\beta). \quad (37)$$

По лемме 4 имеем

$$\sum_{s \in T(V, 1)} I(s) = |V| b_{|V|}(\beta). \quad (38)$$

Из (37) и (38) следует (36). Следствие 1 доказано.

Введем в рассмотрение множество деревьев $S(n, k)$, полагая

$$S(n, k) = \bigcup'_{V_{n, k}} \bigcup_{s \in T(V, 1)} T(n | s), \quad (39)$$

где $\bigcup'_{V_{n, k}}$ означает суммирование по всем имеющим мощность k подмножествам V множества V_n , удовлетворяющим условиям (35).

ЛЕММА 6. Если парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является неотрицательным и регулярным, то коэффициенты $b_n(\beta)$ разложения (9) удовлетворяют неравенству

$$n |b_n(\beta)| \geq k |b_k(\beta)| (n - k + 1) |b_{n - k + 1}(\beta)|, \quad (40)$$

где $2 \leq k < n$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Очевидно, что множество деревьев $S(n, k)$ входит в множество деревьев T_n . Поэтому множество T_n можно представить в виде суммы двух непересекающихся подмножеств

$$T_n = S(n, k) \cup (T_n \setminus S(n, k)). \quad (41)$$

Используя формулу (23) для коэффициентов $b_n(\beta)$, с помощью разложения (41) получаем, что

$$b_n(\beta) = \frac{1}{n!} \sum_{t \in T_n} I(t) = \frac{1}{n!} \sum_{t \in S(n, k)} I(t) + \frac{1}{n!} \sum_{t \in (T_n \setminus S(n, k))} I(t). \quad (42)$$

Так как парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ неотрицательный, то все не равные нулю интегралы $I(t)$, входящие в равенство (42), имеют один и тот же знак. Поэтому из (42) следует, что

$$|b_n(\beta)| \geq \frac{1}{n!} \left| \sum_{t \in S(n, k)} I(t) \right| = \frac{1}{n!} \sum'_V \left| \sum_{s \in T(V, 1)} \sum_{t \in T(n|s)} I(t) \right|, \quad (43)$$

где $\sum'_V$ означает суммирование по всем имеющим мощность k подмножествам V множества V_n , удовлетворяющим условиям (35). Число таких подмножеств равно числу

$$\binom{n-1}{k-1} = \frac{(n-1)!}{(k-1)!(n-k)!}.$$

Поэтому, применяя следствие 1 к правой части соотношений (43), после элементарных алгебраических преобразований получаем

$$\begin{aligned} n|b_n(\beta)| &\geq n(n!)^{-1} \binom{n-1}{k-1} |k! b_k(\beta)(n-k+1)! b_{n-k+1}(\beta)| = \\ &= k|b_k(\beta)|(n-k+1)|b_{n-k+1}(\beta)|. \end{aligned} \quad (44)$$

Лемма 6 доказана.

СЛЕДСТВИЕ 2. Если парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является неотрицательным и регулярным, то при всех k , удовлетворяющих условию $2 \leq k < n$, имеет место неравенство

$$n|b_n(\beta)| \geq \{k|b_k(\beta)|\}^{[(n-1)/(k-1)]} [r(n-1, k-1) + 1] |b_{r(n-1, k-1)+1}(\beta)|, \quad (45)$$

где $[a]$ означает целую часть числа a , $r(n, k)$ — наименьший неотрицательный вычет $[12]$ числа n по модулю k .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Применяя последовательно несколько раз лемму 6, получаем

$$\begin{aligned} n|b_n(\beta)| &\geq k|b_k(\beta)|(n-k+1)|b_{n-k+1}(\beta)| \geq k^2|b_k(\beta)|^2(n-2k+2)|b_{n-2k+2}(\beta)| \geq \dots \\ &\dots \geq \{k|b_k(\beta)|\}^{[(n-1)/(k-1)]} [r(n-1, k-1) + 1] |b_{r(n-1, k-1)+1}(\beta)|. \end{aligned} \quad (46)$$

Следствие 2 доказано.

СЛЕДСТВИЕ 3. Если парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является неотрицательным и регулярным, то коэффициенты $b_n(\beta)$ разложения (9) при любом $k \geq 2$ удовлетворяют неравенству

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} (n|b_n(\beta)|)^{-1/(n-1)} \leq (k|b_k(\beta)|)^{-1/(k-1)}. \quad (47)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из следствия 2 вытекает, что

$$\begin{aligned} (n|b_n(\beta)|)^{-1/(n-1)} &\leq \\ &\leq \left\{ \{k|b_k(\beta)|\}^{[(n-1)/(k-1)]} (r(n-1, k-1) + 1) |b_{r(n-1, k-1)+1}(\beta)| \right\}^{-1/(n-1)}. \end{aligned} \quad (48)$$

Устремляя в этом неравенстве n к бесконечности, получаем утверждение следствия 3.

СЛЕДСТВИЕ 4. Если парный потенциал является неотрицательным и регулярным, то существует предел

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (n|b_n(\beta)|)^{-1/(n-1)}. \quad (49)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Устремляя в неравенстве (47) величину k к бесконечности, получаем

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} (nb_n(\beta))^{-1/(n-1)} \leq \underline{\lim}_{k \rightarrow \infty} (k|b_k(\beta)|)^{-1/(k-1)}. \quad (50)$$

Из (50) следует существование предела (49). Следствие 4 доказано.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ. Из следствия 4 вытекает, что ряд в правой части (9) имеет радиус сходимости R , равный пределу (49). Отсюда по следствию 3 следует, что при любом $k \geq 2$ величина $(k|b_k(\beta)|)^{-1/(k-1)}$ является оценкой сверху радиуса сходимости R , т.е.

$$R \leq (k|b_k(\beta)|)^{-1/(k-1)}. \quad (51)$$

Теорема доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Первый член $(2|b_2(\beta)|)^{-1}$ последовательности оценок (10) совпадает с оценкой Гренвельда

$$R < [C(\beta)]^{-1}. \quad (52)$$

В самом деле, т.к. потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ по условию неотрицательный и регулярный, то функция Майера $f(\mathbf{r})$ является неположительной и интегрируемой по пространству $\mathbf{R}^\nu$, поэтому

$$2|b_2(\beta)| = \int_{\mathbf{R}^\nu} |f(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)| d\mathbf{r}_2 = C(\beta).$$

Следовательно, оценка Гренвельда (52) является первым членом последовательности оценок (10).

ЗАМЕЧАНИЕ 2. При $k > 2$ оценка (51) лучше, чем оценка Гренвельда (52). Действительно, множество деревьев T_n можно представить в виде суммы двух непересекающихся множеств:

$$T_n = P_n \cup (T_n \setminus P_n), \quad (53)$$

где $P_n = \{t\}$ – совокупность всех деревьев $t \in T_n$, являющихся направленными путями [8]. Очевидно, что мощность множества P_n равна $(n-1)!$.

Все деревья $t \in P_n$ максимально изоморфны дереву $t_0 \in P_n$ с множеством вершин V_n и множеством дуг $X(t_0) = \{(i, i+1), i = 1, 2, \dots, n-1\}$, и для них имеет место равенство

$$I(t) = I(t_0) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{i=1}^{n-1} f_{i,i+1}(d\mathbf{r})_{1,n-1} = \left(\int_{\mathbf{R}^\nu} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^{n-1}. \quad (54)$$

Отсюда вытекает, что

$$\frac{1}{(n-1)!} \sum_{t \in P_n} I(t) = \frac{1}{(n-1)!} |P_n| I_0(t_0) = \left(\int_{\mathbf{R}^\nu} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^{n-1}. \quad (55)$$

Используя представление коэффициентов $b_n(\beta)$ формулой (23), с помощью разложения (53) получаем

$$nb_n(\beta) = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{t \in P_n} I(t) + \frac{1}{(n-1)!} \sum_{t \in (T_n \setminus P_n)} I(t). \quad (56)$$

Так как потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ неотрицательный и регулярный, то все не равные нулю интегралы $I(t)$, входящие в равенство (56), имеют один и тот же знак, а среди деревьев, входящих в множество $T_n \setminus P_n$, найдутся такие деревья t , для которых интеграл $I(t)$ отличен от нуля. Поэтому из соотношения (56), используя равенство (55), получаем

$$n|b_n(\beta)| > \frac{1}{(n-1)!} \sum_{t \in P_n} |I(t)| = \left(\int_{\mathbf{R}^\nu} |f(\mathbf{r})| d\mathbf{r} \right)^{n-1} = [C(\beta)]^{n-1},$$

откуда следует, что

$$(k|b_k(\beta)|)^{-1/(k-1)} < \frac{1}{C(\beta)}$$

и, значит, оценка (51) при всех $k > 2$ лучше оценки Гренвельда (52).

ПРИМЕР. Пусть $\Phi(\mathbf{r})$ – потенциал парного взаимодействия частиц с твердыми сердцевинами, распределенных в трехмерном пространстве $\mathbf{R}^3$,

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \infty, & |\mathbf{r}| < a, \\ 0, & |\mathbf{r}| \geq a. \end{cases} \quad (57)$$

Очевидно, что в этом случае

$$C(\beta) = \frac{4}{3}\pi a^3$$

и оценка Гренвельда принимает вид

$$R < \frac{1}{\frac{4}{3}\pi a^3}. \quad (58)$$

Вычислим оценку сверху $(3|b_3|)^{-1/2}$ радиуса сходимости R , являющуюся вторым членом последовательности оценок (10). Очевидно, что множество T_3 состоит из двух направленных путей, входящих в множество P_3 , и дерева t' с множеством дуг $X(t') = \{(1, 2), (1, 3)\}$. Для каждого дерева $t \in P_3$ по формуле (54) имеем

$$I(t) = \left(\int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^2. \quad (59)$$

Вычисляя интеграл $I(t')$ по формулам (21) и (22), получаем

$$I(t') = \int_{(\mathbf{R}^3)^2} f_{12} f_{13} (1 + f_{23}) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 = \frac{17}{18} \pi^2 a^6. \quad (60)$$

Из формул (59) и (60) следует равенство

$$3|b_3| = \frac{1}{2!} \left[2 \frac{16}{9} \pi^2 a^6 + \frac{17}{18} \pi^2 a^6 \right] = \frac{9}{4} \pi^2 a^6.$$

Отсюда по формуле (51) получаем оценку

$$R < 3b_3^{-1/2} = \frac{2}{3\pi a^3} = \frac{8}{9} \frac{1}{\frac{4}{3}\pi a^3}, \quad (61)$$

лучшую, чем оценка Гренвельда (52).

Улучшим оценку (61), воспользовавшись неравенством

$$R < (4|b_4|)^{-1/3}, \quad (62)$$

вытекающим из теоремы этой статьи.

Множество T_4 содержит шесть направленных путей, принадлежащих множеству P_4 , дерево t_1 с множеством дуг $X(t_1) = \{(1, 2), (1, 3), (3, 4)\}$ и еще двумя максимально изоморфными ему деревьями, дерево t_2 с множеством дуг $X(t_2) = \{(1, 2), (2, 3), (2, 4)\}$ и еще двумя максимально изоморфными ему деревьями, дерево t_3 с множеством дуг $X(t_3) = \{(1, 2), (1, 3), (2, 3)\}$ и еще двумя максимально изоморфными ему деревьями и дерево t_4 с множеством дуг $X(t_4) = \{(1, 2), (1, 3), (1, 4)\}$.

Для каждого дерева $t \in P_4$ по формуле (54) находим, что

$$I(t) = \left(\int_{\mathbf{R}^3} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^3. \quad (63)$$

Вычисляя интегралы $I(t_1)$, $I(t_2)$ и $I(t_3)$ по формулам (21) и (22), получаем

$$I(t_1) = I(t_2) = -\frac{34}{27}\pi^3 a^9, \quad (64)$$

$$I(t_3) = -\frac{11923}{11340}\pi^3 a^9. \quad (65)$$

Так как для любых двух максимально изоморфных деревьев t и t' имеет место равенство $I(t) = I(t')$, а $I(t_4) < 0$, то из формул (63)–(65) следует

$$4|b_4| > \frac{1}{3!}\pi^3 a^9 \left(\frac{64}{27} + 3\frac{34}{27} + 3\frac{11923}{11340} \right) = \frac{94243\pi^3 a^9}{22680}.$$

Отсюда вытекает оценка

$$R < (4|b_4|)^{-1/3} < \frac{\sqrt[3]{22680}}{\sqrt[3]{94243\pi^3 a^9}} < 0.83 \cdot \frac{1}{\frac{4}{3}\pi a^3},$$

что лучше как оценки Гренвельда (52), так и оценки (61).

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность И. И. Иванчику за постановку задачи и полезные обсуждения проблем статистической механики.

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

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. 279–289.
- [4] Дж. Уленбек, Дж. Форд. Лекции по статистической механике. М.: Мир, 1965.
- [5] J. Groeneveld. Phys. Lett. 1962. V. 3. № 1. P. 50–51.
- [6] Г. И. Калмыков. Дискретная математика. 1992. Т. 4. Вып. 2 С. 66–73.
- [7] Г. И. Калмыков. ТМФ. 1992. Т. 92. № 1. С. 139–149.
- [8] Ф. Харари. Теория графов. М.: Мир, 1973.
- [9] Ф. Я. Ветухновский. Графы и сети. В сб.: Дискретная математика и математические вопросы кибернетики. Т. 1. Ред. С. В. Яблонский, О. Б. Лупанов. М.: Наука, 1974.
- [10] Г. И. Калмыков. ТМФ. 1994. Т. 100. № 1. С. 44–58.
- [11] Г. И. Калмыков. ТМФ. 1993. Т. 97. № 3. С. 452–458.
- [12] И. М. Виноградов. Основы теории чисел. М.: Наука, 1981.

Поступила в редакцию 13.III.1998 г.