



ИТОГИ НАУКИ И ТЕХНИКИ.
Современная математика и ее приложения.
Тематические обзоры.
Том 195 (2021). С. 10–24
DOI: 10.36535/0233-6723-2021-195-10-24

УДК 517.968.28

РАЗРЕШИМОСТЬ СИСТЕМЫ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ РЕШЕТЧАТЫХ МОДЕЛЕЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

© 2021 г. Ю. П. ВИРЧЕНКО

Посвящается академику НАНУ Л. А. Пастуру

Аннотация. В работе дается обзор результатов относительно разрешимости системы интегральных уравнений, которая является аналогом уравнений Кирквуда–Зальцбурга для бесконечного набора частных распределений вероятностей гиббсовских случайных множеств на \mathbb{Z}^d , соответствующих моделям решетчатого газа равновесной статистической механики с парным потенциалом взаимодействия U . Изучается связь разрешимости системы с расположением нулей статистических сумм $Q_\Lambda(z)$ моделей.

Ключевые слова: статистическая механика, распределение Гиббса, решетчатая система, уравнения Кирквуда–Зальцбурга, статистическая сумма, термодинамический предел.

SOLVABILITY OF THE SYSTEM OF INTEGRAL EQUATIONS OF LATTICE MODELS OF STATISTICAL MECHANICS

© 2021 Yu. P. VIRCHENKO

ABSTRACT. The paper is a review of results on the solvability of a system of integral equations, which is an analog of the Kirkwood–Salzburg equations for an infinite set of partial probability distributions of Gibbs random sets on \mathbb{Z}^d corresponding to lattice gas models of equilibrium statistical mechanics with a pair interaction potential U . We study the relationship between the solvability of the system and the location of zeros of the partition functions $Q_\Lambda(z)$ of models.

Keywords and phrases: statistical mechanics, Gibbs distribution, lattice system, Kirkwood–Salzburg equations, partition function, thermodynamic limit.

AMS Subject Classification: 82B20, 60K35, 46N55

1. Введение. Математическим объектом изучения в равновесной статистической механике являются гиббсовские вероятностные меры. В частном случае, при исследовании так называемых *классических систем* типа *решетчатого газа*, такие меры описывают гиббсовские случайные множества \tilde{X} (здесь и далее знак «тильда» указывает на случайность математического объекта) в \mathbb{Z}^d , $d = 1, 2, 3$ (см., например, [6, 7, 9, 11]).

Гиббсовские меры \mathbf{p} так называемых классических решетчатых моделей статистической механики определяются посредством задания согласованным определенным образом семейством частных распределений вероятностей p_Λ , $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $|\Lambda| < \infty$ для случайных конечных множеств $\tilde{X} \cap \Lambda$, где Λ принадлежат определенному классу. Тогда мера \mathbf{p} представляет собой семейство предельных значений $p(X)$ вероятностей $p_\Lambda(X) = \Pr\{\tilde{X} \cap \Lambda = X\}$, $X \subset \mathbb{Z}^d$, $|X| < \infty$, вычисляемых на основе расширяющейся последовательности $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$, — семейства так называемых *термодинамически предельных вероятностей*. Этот набор вероятностей определяет распределение \mathbf{p} вероятностей для гиббсовского случайного множества в \mathbb{Z}^d .

Предельные значения $p(X)$ при некоторых исключительных (критических) значениях параметров, определяющих распределение Гиббса, могут определяться не единственным образом. Такие исключительные значения параметров соответствуют, с физической точки зрения, так называемым *фазовым переходам*.

Одной из задач статистической механики является определение точек фазовых переходов. В [18] был предложен математический механизм, согласно которому могут возникать неоднозначности при термодинамическом предельном переходе при определенных значениях параметров, определяющих гиббсовскую меру случайного множества. Этот механизм связан с появлением существенных особенностей в аналитических зависимостях предельных значений $p(X)$ от параметров, определяющих гиббсовскую меру. В рассматриваемом в работе случае вероятности $p_\Lambda(X)$, равно как и их предельные значения $p(X)$, являются функциями параметра $z > 0$, который называется *активностью*. Поэтому в дальнейшем мы используем для них соответственно обозначения $p_\Lambda(X, z)$ и $p(X, z)$, подчеркивая явно их зависимость от параметра z . Неоднозначности возникают при появлении существенных особенностей в аналитической зависимости $p(X, z)$ $z \in \mathbb{C}$ в том случае, когда множество таких особенностей соприкасается с лучом $\{z : \text{Im } z = 0, \text{Re } z \geq 0\}$.

Вероятности $p_\Lambda(X, z)$ являются мероморфными функциями от $z \in \mathbb{C}$. Полюсы $p_\Lambda(X, z)$ по z при каждом фиксированном Λ определяются нулями *статистической суммы* $Q_\Lambda(z)$, которая является целой функцией. Особенности возникают вследствие того, что ее нули при термодинамическом предельном переходе $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ могут располагаться так, что их *топологически предельное множество* (см. разд. 4) содержит кривую, пересекающую положительную полуось в плоскости z в некоторой точке z_* , в то время как точки $\{z : \text{Im } z = 0, \text{Re } z \geq 0\}$ не могут быть нулями $Q_\Lambda(z)$. Точка z_* является точкой фазового перехода при изменении параметра z . Следует заметить, что еще в [15, 16] предпринималась попытка интерпретации фазового перехода как возникновения точек неаналитичности функций представляемых степенными рядами по z без указания типа особых точек.

В [19] была подтверждена реализация описанного механизма появления существенно особой точки на $\{z : \text{Im } z = 0, \text{Re } z \geq 0\}$ для *модели Изинга* при $d = 2$. Было вычислено распределение всех нулей статистических сумм $Q_\Lambda(z)$, которые являются полиномами степени $|\Lambda|$. Эти нули оказались сосредоточенными на окружности фиксированного радиуса z_* . При этом с увеличением числа точек $|\Lambda|$ топологически предельное множество $\bar{\mathfrak{Z}}$ для множеств \mathfrak{Z}_Λ нулей функций $Q_\Lambda(z)$ заполняло дугу окружности. При достаточно малых значениях параметра T распределения Гиббса, который называется *температурой*, эта дуга совпадает с окружностью. Такое положение обуславливает появление существенно неаналитической особенности по параметру z в точке z_* .

В дальнейшем наличие критических значений для z и T было доказано (см. [2, 10, 13]) для решетчатых моделей, принадлежащих классу моделей с притягивающим парным взаимодействием при $d > 1$. Наоборот, при $d = 1$ такие критические значения, как правило, отсутствуют. В частности, они отсутствуют у моделей с парным *потенциалом* $U(\mathbf{x})$ *взаимодействия*, $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}$, если он является суммируемым на \mathbb{Z} (см. [9, § 5.6]).

Кроме определения множества точек фазовых переходов — *фазовых диаграмм*, возникает задача вычисления предельных значений $p(X, z)$. Если значения параметров распределения Гиббса не являются критическими, то следует ожидать, что вероятности $p(X, z)$ однозначно определены. Один из методов решения этой задачи основан на использовании систем уравнений для набора $p(z)$. Такой системой интегральных уравнений, в частности, является система уравнений, предложенная в [4, 12], которая является модификацией, в применении к решетчатым моделям, известной системы Кирквуда—Зальцбурга (см. [14]), используемой при изучении непрерывных моделей статистической механики. Для конечных множеств Λ эта модификация представляет собой конечную систему размерности $2^{|\Lambda|} - 1$ линейных алгебраических уравнений для конечного набора вероятностей $p_\Lambda(X, z)$, $\emptyset \neq X \subset \Lambda$, которая однозначно разрешима при $z > 0$. Этой системе сопоставляется бесконечная система интегральных уравнений для бесконечного набора $p(X, z)$, $\emptyset \neq X \subset \mathbb{Z}^d$ вероятностей, которые могут служить предельными при $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ значениями для $p_\Lambda(X, z)$. В связи с этим возникает вопрос об установлении разрешимости этой *предельной системы* уравнений и установлении необходимых и достаточных условий, при которых ее решения,

действительно, определяют предельные значения для $p_\Lambda(X, z)$. С этим вопросом связан вопрос о том, характеризуют ли эти условия множество пар $\langle z, T \rangle$, которые соответствуют фазовым переходам.

2. Гиббсовские случайные множества на \mathbb{Z}^d . В этом разделе мы определяем гиббсовские случайные множества на \mathbb{Z}^d , 1, 2, 3 с парным взаимодействием. Их распределение вероятностей строится на основе последовательности конечных подмножеств $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ такой, что $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ в теоретико-множественном смысле и упорядоченной пары $\langle \Omega(\Lambda), \mathbf{H}_\Lambda[\cdot] \rangle$, которые являются, соответственно, *пространством состояний* (элементарных событий случайных множеств) и функционалом на этом пространстве, который называется *гамильтонианом* (см., например, [9, гл. 2]).

Последовательность множеств $\Lambda = \{\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d : \mathbf{x} = n_1 \mathbf{e}_1 + \dots + n_d \mathbf{e}_d, n_j = 0, \dots, L-1, j = 1, \dots, d\}$, где \mathbf{e}_j — орты в \mathbb{R}^d , которое служит пространством погружения \mathbb{Z}^d , определяется параметром $L \in \mathbb{N}$. Посредством стремления $L \rightarrow \infty$ и трансляцией $\Lambda \Rightarrow \Lambda - (L/2)(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3)$ определяется переход к пределу $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$.

Пространство случайных состояний $\Omega(\Lambda)$ определим в виде класса всех дихотомических функций $\tilde{\rho}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Lambda$ со значениями 0 и 1. Функционал $\mathbf{H}[\tilde{\rho}]$ на $\Omega(\Lambda)$ определяется следующей формулой:

$$\mathbf{H}_\Lambda[\tilde{\rho}] = -\mu \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \tilde{\rho}(\mathbf{x}) + \mathbf{U}_\Lambda[\tilde{\rho}], \quad \mathbf{U}_\Lambda[\tilde{\rho}] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{x} \in \Lambda, \\ \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d, \mathbf{y} \neq \mathbf{x}}} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \tilde{\rho}(\mathbf{x}) \tilde{\rho}(\mathbf{P}_\Lambda \mathbf{y}), \quad (1)$$

где $\mu \in \mathbb{R}$ и функция $U(\mathbf{x})$ со значениями в \mathbb{R} — центрально-симметрична, $U(-\mathbf{x}) = U(\mathbf{x})$ и суммируема на \mathbb{Z}^d ,

$$\|U\| \equiv \sum_{\mathbf{z} \in \mathbb{Z}^d} |U(\mathbf{z})| < \infty, \quad (2)$$

причем $U(0) = 0$. Она называется *потенциалом взаимодействия*. Гамильтониан, записанный в форме (1) (см. [5]), называется гамильтонианом с *периодическими граничными условиями* (см. [9, с. 38]), где \mathbf{P}_Λ — оператор проектирования, определяемый $\mathbf{P}_\Lambda \mathbf{x} = \mathbf{z} \in \Lambda$ для каждого вектора $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ на основе однозначного его представления в виде $\mathbf{x} = \mathbf{z} + L(n_1 \mathbf{e}_1 + \dots + n_d \mathbf{e}_d)$, $\langle n_1, \dots, n_d \rangle \in \mathbb{Z}^d$.

На основе гамильтониана (1) вводится распределение вероятностей Гиббса на пространстве $\Omega(\Lambda)$:

$$\Pr\{\tilde{\rho} = \rho\} = Q_\Lambda^{-1}(z) \exp(-\mathbf{H}_\Lambda[\rho]/T), \quad T > 0, \quad (3)$$

$$Q_\Lambda(z) = \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} \exp(-\mathbf{H}_\Lambda[\rho]/T) = \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} z^{\|\rho\|} \exp(-\mathbf{U}_\Lambda[\rho]/T), \quad z = e^{\mu/T}. \quad (4)$$

При этом вероятность $p_\Lambda(X, z)$ для любого непустого $X \subset \Lambda$ представляется формулами

$$p_\Lambda(X, z) = \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} \left(\prod_{\mathbf{x} \in X} \rho(\mathbf{x}) \right) \Pr\{\tilde{\rho} = \rho\} = Q_\Lambda^{-1}(z) \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} \left(\prod_{\mathbf{x} \in X} \rho(\mathbf{x}) \right) z^{\|\rho\|} \exp(-\mathbf{U}_\Lambda[\rho]/T). \quad (5)$$

Так как $|\Omega(\Lambda)| = 2^{|\Lambda|}$, $|\Lambda| = L^3$, то суммы в (4) и (5) конечны. Заметим, что согласно этому определению можно ввести обозначение $p_\Lambda(\emptyset, z) = 1$.

Обозначим посредством \mathfrak{E}_Λ конечномерное пространство размерности $2^{|\Lambda|} - 1$ всех наборов $\mathbf{f} = \langle f(X) : \emptyset \neq X \subset \Lambda \rangle$ так, что набор $\mathbf{p}_\Lambda(z) = \langle p_\Lambda(X, z) : \emptyset \neq X \subset \Lambda \rangle$ является элементом \mathfrak{E}_Λ .

Определенная решетчатая модель обладает симметрией (см. [9]) в том смысле, что она эквивалентна модели, которая получается из нее заменой всех случайных функций $\tilde{\rho}(\mathbf{x})$ на $1 - \tilde{\rho}(\mathbf{x})$ в каждой точке $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ с соответствующим изменением гамильтониана. Следующее утверждение является следствием этой эквивалентности.

Теорема 1. *Вероятности $p_\Lambda(X, z)$, $X \neq \emptyset$, удовлетворяют тождеству*

$$p_\Lambda(X, z) = \sum_{Y \subset X} (-1)^{|Y|} p_\Lambda(Y, z^{-1} e^{U_0/T}), \quad U_0 = \sum_{\mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} U(\mathbf{y}). \quad (6)$$

Доказательство. Используя автоморфизм $\tilde{\rho} \Rightarrow 1 - \tilde{\rho}$ пространства $\Omega(\Lambda)$, произведем замену переменной суммирования в определении вероятностей (4) и (5),

$$p_\Lambda(X) = \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} \left(\prod_{\mathbf{x} \in X} (1 - \rho(\mathbf{x})) \right) \Pr\{\tilde{\rho} = 1 - \rho\} = \sum_{Y \subset X} (-1)^{|Y|} \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} \left(\prod_{\mathbf{x} \in Y} \rho(\mathbf{x}) \right) \Pr\{\tilde{\rho} = 1 - \rho\}. \quad (7)$$

Согласно (1) получаем

$$H_\Lambda[1 - \rho] = -\mu|\Lambda| + \mu \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \rho(\mathbf{x}) + U_\Lambda[1 - \rho] = C + (\mu - U_0) \sum_{\mathbf{z} \in \Lambda} \rho(\mathbf{z}) + U_\Lambda[\rho], \quad (8)$$

$$C = -|\Lambda| \left(\mu - \frac{1}{2} U_0 \right), \quad (9)$$

так как посредством замены переменной суммирования $\mathbf{y} - \mathbf{x} \Rightarrow \mathbf{y}$ нетрудно получить

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{x}) &= U_0 \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda} \rho(\mathbf{y}), \\ \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{P}_\Lambda \mathbf{y}) &= \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda} \rho(\mathbf{y}) \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \sum_{\mathbf{v} \in \mathbb{Z}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y} + L\mathbf{v}) = \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda} \rho(\mathbf{y}) \sum_{\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = U_0 \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda} \rho(\mathbf{y}). \end{aligned}$$

Из формулы (8) следует, что статистическая сумма преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} Q_\Lambda(z) &= \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} \exp(-H_\Lambda[1 - \rho]/T) = \\ &= e^{-C|\Lambda|/T} \sum_{\rho \in \Omega(\Lambda)} \exp(-H_\Lambda[\rho]/T)_{\mu \Rightarrow U_0 - \mu} = e^{-C|\Lambda|/T} Q_\Lambda(z^{-1} e^{U_0/T}) \end{aligned} \quad (10)$$

и, следовательно, вероятность каждой реализации —

$$\begin{aligned} \Pr\{\tilde{\rho} = 1 - \rho\} &= Q_\Lambda^{-1}(z) \exp(-H_\Lambda[1 - \rho]/T) = \\ &= [Q_\Lambda^{-1}(z) \exp(-H_\Lambda[\rho]/T)]_{\mu \Rightarrow U_0 - \mu} = \Pr\{\tilde{\rho} = \rho\}_{\mu \Rightarrow U_0 - \mu}. \end{aligned} \quad (11)$$

Подстановка этого выражения в (7) приводит к формуле (6). \square

Следствие 1. *Имеет место формула*

$$p_\Lambda(X, z^{-1} e^{U_0/T}) = \sum_{Y \subset X} p_\Lambda(Y, z). \quad (12)$$

3. Система Кирквуда—Зальцбурга для решетчатых моделей. Выведем систему уравнений для вероятностей $p_\Lambda(X, z)$ модели решетчатого газа с парным потенциалом U , аналогичную системе Кирквуда—Зальцбурга (см. [14]), которая используется для анализа многочастичных конфигурационных функций в статистической механике непрерывных систем.

Сопоставим каждой дихотомической функции $\rho(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Lambda$, множество $X = \{\mathbf{x} : \rho(\mathbf{x}) = 1\} \subset \Lambda$. Тогда

$$H_\Lambda[\rho] = -\mu|X| + U_\Lambda(X), \quad U_\Lambda[\rho] \equiv U_\Lambda(X) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\{\mathbf{y}, \mathbf{P}_\Lambda \mathbf{z}\} \subset X, \\ \mathbf{z} \in \mathbb{Z}^d}} U(\mathbf{y} - \mathbf{z}). \quad (13)$$

Выражение (3) для вероятностей $p_\Lambda(X, z)$ запишем в следующем виде

$$p_\Lambda(X, z) = Q_\Lambda^{-1}(z) \sum_{Y \subset \Lambda \setminus X} z^{|X \cup Y|} \exp(-U_\Lambda(X \cup Y)/T), \quad U_\Lambda(Z) = \sum_{\substack{\{\mathbf{x}, \mathbf{P}_\Lambda \mathbf{y}\} \subset Z \\ \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d}} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (14)$$

где $z = e^{\mu/T}$.

Рассмотрим функцию $K(\mathbf{x}) = \exp(-U(\mathbf{x})/T) - 1$, определенную для каждого $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$, а также следующую функцию на $\mathbb{Z}^d \times \mathfrak{P}(\mathbb{Z}^d)$, где $\mathfrak{P}(\mathbb{Z}^d)$ — семейство всех конечных подмножеств \mathbb{Z}^d :

$$W_\Lambda(\mathbf{x}; X) = \exp\left(-\sum_{\substack{P_\Lambda z \in X, \\ \mathbf{x} \neq z \in \mathbb{Z}^d}} U(\mathbf{x} - z)/T\right), \quad W_\Lambda(\mathbf{x}; \emptyset) = 1. \quad (15)$$

Тогда для любых $X \subset \Lambda \setminus \{\mathbf{x}\}$, $Y \subset \Lambda \setminus \{\mathbf{x}\}$, $X \cap Y = \emptyset$ имеет место цепочка равенств

$$\begin{aligned} \exp(-U_\Lambda(\{\mathbf{x}\} \cup X \cup Y)/T) &= W_\Lambda(\mathbf{x}; X)W_\Lambda(\mathbf{x}; Y) \exp(-U_\Lambda(X \cup Y)/T) = \\ &= W_\Lambda(\mathbf{x}; X) \prod_{\mathbf{y} \in Y} (1 + K(\mathbf{x} - \mathbf{y})) \exp(-U_\Lambda(X \cup Y)/T). \end{aligned} \quad (16)$$

Это равенство сохраняется и при $|X \cup Y| = 1$, так как в этом случае $U_\Lambda(X \cup Y) = 0$. Далее, определим функцию

$$K(\mathbf{x}; Y) = \begin{cases} \prod_{\mathbf{y} \in Y} K(\mathbf{x} - \mathbf{y}) & \text{при } |Y| > 0, \\ 1 & \text{при } |Y| = 0, \end{cases} \quad (17)$$

удовлетворяющую условию

$$\prod_{\mathbf{x} \in Z} (1 + K(\mathbf{x} - \mathbf{y})) = \sum_{Y \subset Z} \prod_{\mathbf{y} \in Y} K(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{Y \subset Z} K(\mathbf{x}; Y). \quad (18)$$

Введем теперь в рассмотрение $|\Lambda|$ -мерное пространство $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)} \subset \mathfrak{E}_\Lambda$ всех наборов $\mathbf{f} = \langle f(X) : \emptyset \neq X \subset \Lambda \rangle$, определяемых формулой

$$f(X) = \sum_{Z \subset \Lambda \setminus X} c_{|X \cup Z|} \exp(-U_\Lambda(X \cup Z)/T), \quad \emptyset \neq X \subset \Lambda, \quad (19)$$

с произвольным набором коэффициентов $\langle c_n \in \mathbb{C} : n = 1, \dots, |\Lambda| \rangle$. Подставим (16), вместе с (18), в выражение $f(X \cup \{\mathbf{x}\})$ для любого значения из набора вида (19) с $X \subset \Lambda \setminus \{\mathbf{x}\}$:

$$f(X \cup \{\mathbf{x}\}) = W_\Lambda(\mathbf{x}; X) \sum_{Z \subset \Lambda \setminus (X \cup \{\mathbf{x}\})} c_{1+|X \cup Z|} W_\Lambda(\mathbf{x}; Z) \exp(-U_\Lambda(X \cup Z)/T), \quad (20)$$

и произведем следующие преобразования:

$$\begin{aligned} &\sum_{Z \subset \Lambda \setminus (X \cup \{\mathbf{x}\})} c_{1+|X \cup Z|} \sum_{Y \subset Z} K(\mathbf{x}; Y) \exp(-U_\Lambda(X \cup Z)/T) = \\ &= \sum_{Y \subset \Lambda \setminus (X \cup \{\mathbf{x}\})} K(\mathbf{x}; Y) \sum_{Z: Y \subset Z \subset \Lambda \setminus (X \cup \{\mathbf{x}\})} c_{1+|X \cup Z|} \exp(-U_\Lambda(X \cup Z)/T) = \\ &= \sum_{Y \subset \Lambda \setminus (X \cup \{\mathbf{x}\})} K(\mathbf{x}; Y) \sum_{Z \subset \Lambda \setminus (\{\mathbf{x}\} \cup X \cup Y)} c_{1+|(X \cup Y) \cup Z|} \exp(-U_\Lambda((X \cup Y) \cup Z)/T) = \\ &= \sum_{Y \subset \Lambda \setminus (X \cup \{\mathbf{x}\})} K(\mathbf{x}; Y) [g(X \cup Y) - g(\{\mathbf{x}\} \cup X \cup Y)], \end{aligned} \quad (21)$$

где мы использовали разбиение суммы

$$\sum_{Z \subset \Lambda \setminus (\{\mathbf{x}\} \cup X \cup Y)} (\cdot) = \sum_{Z \subset \Lambda \setminus (X \cup Y)} (\cdot) - \sum_{\mathbf{x} \in Z \subset \Lambda \setminus (X \cup Y)} (\cdot)$$

и ввели такие числа

$$g(X) = \sum_{Z \subset \Lambda \setminus X} c_{1+|X \cup Z|} \exp(-U_\Lambda(X \cup Z)/T), \quad X \subset \Lambda, \quad (22)$$

что набор $\mathbf{g} = \langle g(X) : \emptyset \neq X \subset \Lambda \rangle$ принадлежит $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$. Таким образом, выделив слагаемое с $Z = \emptyset$ при $X = \emptyset$ и заменив $X \cup \{\mathbf{x}\} \Rightarrow X$, согласно (19) находим, что

$$f(X) - g(\emptyset)\delta_{1,|X|} = (\mathbf{K}_\Lambda \mathbf{g})(X), \quad (23)$$

где линейный оператор \mathbf{K}_Λ , действующий в $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$, определяется формулой

$$(\mathbf{K}_\Lambda \mathbf{g})(X) = W_\Lambda(\mathbf{x}; X \setminus \{\mathbf{x}\}) \sum_{Y \subset \Lambda \setminus X} K(\mathbf{x}; Y) [(1 - \delta_{0,|X \setminus \{\mathbf{x}\}|})g(X \setminus \{\mathbf{x}\} \cup Y) - g(X \cup Y)]. \quad (24)$$

Так как при $\emptyset \neq X \subset \Lambda$ имеет место

$$\sum_{Z \subset \Lambda \setminus X} \delta_{1,|X \cup Z|} \exp(-U_\Lambda(X \cup Z)/T) = \delta_{1,|X|} \exp(-U_\Lambda(X)/T) = 1, \quad (25)$$

то набору $\mathbf{e} = \langle \delta_{1,|X|} : \emptyset \neq X \subset \Lambda \rangle$ можно поставить в соответствие набор коэффициентов $\langle c_n = \delta_{1,n}; n = 1, \dots, |\Lambda| \rangle$ на основе которых, заменяя числа $f(X)$ в формуле (19) на компоненты $e(X)$ набора \mathbf{e} , они могут быть получены. Поэтому $\mathbf{e} \in \mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$ и, совместно с (24), это означает, что доказано следующее утверждение.

Лемма 1 (Л. А. Пастур, [8]). *Пространство $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$ переводится оператором \mathbf{K}_Λ в себя.*

В связи со свойством инвариантности пространства $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$ относительно действия \mathbf{K}_Λ , $\mathbf{K}_\Lambda \mathbf{g}$ не зависит от выбора точки \mathbf{x} в каждом из множеств $X \subset \Lambda$ при вычислении $(\mathbf{K}_\Lambda \mathbf{g})(X)$. Поэтому ее выбор можно унифицировать. Будем полагать, что в каждом $X \subset \Lambda$ эта точка выбирается первой в смысле лексикографического порядка.

Применение утверждения леммы к набору $\mathbf{p}_\Lambda(z) = \langle p_\Lambda(X, z); X \subset \Lambda, X \neq \emptyset \rangle$ вероятностей того, что пересечение случайной реализации \tilde{X} с Λ содержит X , непосредственно, указывает на то, что справедливо следующее утверждение.

Теорема 2 (Л. А. Пастур, [8]). *Набор $\mathbf{p}_\Lambda(z)$ подчинен следующей системе линейных уравнений в пространстве $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$:*

$$\mathbf{p}_\Lambda(z) = z\mathbf{e} + z\mathbf{K}_\Lambda \mathbf{p}_\Lambda(z). \quad (26)$$

Доказательство. Из определения (14) вероятностей $p_\Lambda(X, z)$, $\emptyset \neq X \subset \Lambda$ следует, что набор $\mathbf{p}_\Lambda(z)$ принадлежит пространству $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$ и ему соответствует набор коэффициентов $c_n = z^n Q_\Lambda^{-1}(z)$, для которых $c_{n+1} = z^{n+1} Q_\Lambda^{-1}(z)$, $n = 1, \dots, |\Lambda|$. Тогда для вероятностей $p_\Lambda(X, z)$, $\emptyset \neq X \subset \Lambda$ применима формула (19). Полагая в $f(X) = p_\Lambda(X, z)$ и, следовательно, $g(X) = zp_\Lambda(X, z)$, $g(\emptyset) = z$, получаем на основе (21)–(24) систему уравнений для $X \neq \emptyset$:

$$p_\Lambda(X, z) = z\delta_{1,|X|} + zW_\Lambda(\mathbf{x}; X \setminus \{\mathbf{x}\}) \sum_{Y \subset \Lambda \setminus X} K(\mathbf{x}; Y) [p_\Lambda(X \setminus \{\mathbf{x}\} \cup Y, z) - p_\Lambda(X \cup Y, z)], \quad (27)$$

где $X \subset \Lambda$. □

Система (26) может рассматриваться как видоизменение, по отношению к классическим решетчатым моделям, известной системы интегральных уравнений Кирквуда–Зальцбурга (см. [14]) в статистической механике непрерывных моделей.

4. Спектр оператора \mathbf{K}_Λ . Если заменить $z\mathbf{e}$ в уравнении (26) произвольным элементом $\mathbf{h} \in \mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$, то оно принимает вид уравнения Фредгольма, у которого z играет роль спектрального параметра. Так как набор $\mathbf{p}_\Lambda(z)$ представляет решение этого уравнения при каждом z , который не является нулем функции $Q_\Lambda(z)$, и при этом \mathbf{e} не является собственным элементом для конечномерного оператора \mathbf{K}_Λ , так как для любого двухточечного множества $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\}$ выполняется соотношение

$$(\mathbf{K}_\Lambda \mathbf{e})(\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\}) = W(\mathbf{x}, \{\mathbf{y}\})K(\mathbf{x}; \emptyset)e(\mathbf{x}) = \exp(-U(\mathbf{x} - \mathbf{y})/T) \neq 0.$$

Тогда, вследствие альтернативы Фредгольма, $\det(\mathbf{1} - z\mathbf{K}_\Lambda) \neq 0$, если z не является нулем статистической суммы $Q_\Lambda(z)$. Следовательно, решение $\mathbf{p}_\Lambda = (\mathbf{1} - z\mathbf{K}_\Lambda)^{-1}\mathbf{e}$ уравнения (26) представляется для каждого непустого $X \subset \Lambda$ в виде отношения полиномов по z

$$\mathbf{p}_\Lambda(X, z) = [\det(\mathbf{1} - z\mathbf{K}_\Lambda)]^{-1}[\mathbf{R}(z; \mathbf{K}_\Lambda)\mathbf{e}](X), \quad (28)$$

где $\mathbf{R}(z; \mathbf{K}_\Lambda)$ — определяемая оператором \mathbf{K}_Λ резольвентная матрица размера $|\Lambda| \times |\Lambda|$. Причем, с учетом того, что знаменатель равен 1 при $z = 0$, это представление единственно, если полиномы в числителе и знаменателе не имеют общих нулей сразу для всех $X \subset \Lambda$. В этом случае знаменатель обращается в нуль в тех и только тех точках $z_* \in \mathbb{C}$, для которых z_*^{-1} является собственным числом оператора \mathbf{K}_Λ .

Теорема 3 (Л. А. Пастур, [8]). *Статистическая сумма $Q_\Lambda(z)$ классических решетчатых моделей статистической механики с суммируемым парным потенциалом взаимодействия, как функция от $z \in \mathbb{C}$, является детерминантом Фредгольма для оператора \mathbf{K}_Λ , определяемого формулой (24).*

Доказательство. Известное решение системы, даваемое формулой (5) при всех z , для которых $Q_\Lambda(z) \neq 0$, имеет вид отношения двух полиномов. Причем по крайней мере для одного множества $X \subset \Lambda$ эти полиномы не имеют общих нулей, так как $p_\Lambda(\Lambda, z) = Q_\Lambda^{-1}(z)z^{|\Lambda|} \exp(-U(\Lambda)/T) \neq 0$, а знаменатель $Q_\Lambda(0) = 1$. Тогда, учитывая, что $\dim \mathfrak{E}_\Lambda^{(0)} = \deg Q_\Lambda(z) = |\Lambda|$, получаем, ввиду единственности представления (28), что $\det(\mathbf{1} - z\mathbf{K}_\Lambda) = Q_\Lambda(z)$. \square

В модели решетчатого газа с периодическими условиями расположение нулей статистической суммы $Q_\Lambda(z)$ и, следовательно, точек спектра оператора \mathbf{K}_Λ обладает замечательным свойством инвариантности.

Теорема 4. *Пусть гамильтониан модели с определяется формулой (1) с суммируемым потенциалом U . Тогда множество \mathfrak{Z}_Λ всех нулей статистической суммы — полинома $Q_\Lambda(z)$ относительно $z \in \mathbb{C}$ инвариантно при действии инволюции $\zeta \mapsto \zeta^{-1}$, $\zeta = z \exp[-U_0/2T]$ при любом $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ и поэтому таким же свойством обладает спектр оператора \mathbf{K}_Λ .*

Доказательство. Статистическая сумма $Q_\Lambda(z)$ определяется формулой (4). Преобразуем гамильтониан (1) к следующему виду:

$$\mathbf{H}_\Lambda[\rho] = -(\mu - U_0/2) \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \rho(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y})(1 - \rho(\mathbf{x}))\rho(\mathbf{P}_\Lambda \mathbf{y}),$$

где мы использовали формулу

$$U_0 \sum_{\mathbf{y} \in \Lambda} \rho(\mathbf{y}) = \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} U(\mathbf{x} - \mathbf{y})\rho(\mathbf{P}_\Lambda \mathbf{y}).$$

Подставив в формулу (3) гамильтониан в такой форме и заменив суммирование по $\rho(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Lambda$ на суммирование по $X = \{\mathbf{x} \in \Lambda : \rho(\mathbf{x}) = 1\}$, находим

$$\begin{aligned} Q_\Lambda(z) &= \sum_{X \subset \Lambda} \zeta^{|X|} \prod_{\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in \Lambda \setminus X} \prod_{\mathbf{v} \in \mathbb{Z}^d} \exp(U(\mathbf{x} - \mathbf{y} - L\mathbf{v})/2T) = \\ &= \zeta^{|\Lambda|} \sum_{X \subset \Lambda} \zeta^{-|\Lambda \setminus X|} \prod_{\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in \Lambda \setminus X} \prod_{\mathbf{v} \in \mathbb{Z}^d} \exp(U(\mathbf{x} - \mathbf{y} - L\mathbf{v})/2T) = Q_\Lambda(z^{-1} \exp(U_0/2T)), \end{aligned} \quad (29)$$

где произведены замены суммирований: по $X \Rightarrow \Lambda \setminus X$ и по $\mathbf{v} \in \mathbb{Z}^d \Rightarrow (-\mathbf{v}) \in \mathbb{Z}^d$ в каждом множителе произведения каждого из слагаемых суммы. \square

Теперь распространим известный результат о расположении нулей статистической суммы для модели решетчатого газа с потенциалом притяжения $U(\mathbf{x}) \leq 0$ на модели с периодическими условиями. Доказательство, как и в классическом случае, основано на следующем утверждении, которое приведем без доказательства (см., например, [9, с. 161]).

Лемма 2 (Lee T. D., Yang C. N.). Пусть A_{ij} — симметричная матрица со значениями в \mathbb{R} , элементы которой удовлетворяют требованию $-1 \leq A_{ij} \leq 1$ при $i \neq j$, $i, j = 1, \dots, n$. Тогда полином

$$P_n(\zeta_1, \dots, \zeta_n) = \sum_{\Sigma \subset I_n} \prod_{i \in \Sigma} \zeta_i \prod_{j \in I_n \setminus \Sigma} A_{ij}, \quad I_n = \{1, \dots, n\},$$

от набора переменных $\{\zeta_j \in \mathbb{C}; j = 1, \dots, n\}$, у которого коэффициенты в слагаемых с $\Sigma = \emptyset$, $\Sigma = I_n$ равны 1, обладает следующим свойством. Если $P_n(\zeta_1, \dots, \zeta_n) = 0$ и $|\zeta_j| \geq 1$, $j = 1, \dots, n-1$, то $|\zeta_n| \leq 1$.

Следствие 2. Все нули полинома $P_n(\zeta) = P_n(\zeta, \dots, \zeta)$ лежат на единичной окружности в плоскости $\{\zeta \in \mathbb{C}\}$.

Теорема 5. Пусть гамильтониан модели определяется формулой (1) с суммируемым потенциалом U таким, что $U(\mathbf{x}) \leq 0$, $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$. Тогда все нули статистической суммы $Q_\Lambda(z)$ принадлежат окружности $\{z \in \mathbb{C} : |z| = \exp[U_0/2T]\}$.

Доказательство. Доказательство следует из представления $Q_\Lambda(z)$ в виде (29) применением следствия леммы, учитывая, что матрица

$$A_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} = \prod_{\mathbf{v} \in \mathbb{Z}^d} \exp(U(\mathbf{x} - \mathbf{y} - L\mathbf{v})/2T), \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{y},$$

симметрична и ее элементы удовлетворяют условию $1 \geq A_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} > 0$. □

Определение. Пусть $\langle \mathfrak{Z}_m \subset \mathbb{C}; m \in \mathbb{N} \rangle$ — последовательность подмножеств из \mathbb{C} . Множество

$$\bar{\mathfrak{Z}} = \bigcap_{m=1}^{\infty} \text{cl} \left(\bigcup_{n=m}^{\infty} \mathfrak{Z}_n \right)$$

будем называть *топологически предельным множеством*.¹

Множество $\bar{\mathfrak{Z}}$ обладает следующими очевидными свойствами:

- (i) $\bar{\mathfrak{Z}}$ замкнуто;
- (ii) Для любого замкнутого множества $\mathfrak{D} \subset \mathbb{C}$, для которого $\mathfrak{D} \cap \bar{\mathfrak{Z}} = \emptyset$, найдется такое $n(\mathfrak{D})$, что $\mathfrak{Z}_n \cap \mathfrak{D} = \emptyset$ при $n > n(\mathfrak{D})$.

Рассмотрим теперь последовательность множеств $\langle \mathfrak{Z}_\Lambda; \Lambda \subset \mathbb{Z}^d \rangle$, занумерованную числами $L \in \mathbb{N}$, где \mathfrak{Z}_Λ — множество нулей статистической суммы $Q_\Lambda(z)$. Пусть $\bar{\mathfrak{Z}}$ — топологически предельное при $L \rightarrow \infty$ множество в смысле данного определения. Тогда ввиду вещественности полиномов $Q_\Lambda(z)$ множества \mathfrak{Z}_Λ , $L \in \mathbb{N}$, и, следовательно, множество $\bar{\mathfrak{Z}}$ симметричны относительно действительной оси на плоскости $\mathbb{C} \ni z$.

Из теоремы 5 следует, что в случае $U(\mathbf{x}) \leq 0$ множество $\bar{\mathfrak{Z}}$ принадлежит окружности $\{z \in \mathbb{C} : |z| = \exp[U_0/2T]\}$.

Допустим, что существуют какие-либо из вероятностей $p(X, z)$, которые являются аналитическими функциями от $z \in \mathbb{C}$ и их значения являются предельными при $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ для вероятностей $p_\Lambda(X, z)$, $X \subset \mathbb{Z}^d$. Пусть, далее, $\bar{\mathfrak{Z}} \cap \{z \in \mathbb{C} : z \geq 0\} \neq \emptyset$, причем, так как множества \mathfrak{Z}_Λ нулей функции $Q_\Lambda(z)$ расположены симметрично относительно действительной оси, то указанное пересечение содержит дугу кривой, пересекающей действительную ось ортогональным образом. В этих точках пересечения вероятности $p(X, z)$ имеют существенную особенность на $\{z \in \mathbb{C} : z \geq 0\}$.

¹Понятие топологически предельного множества, равно как и утверждения теорем 5 и 6, распространяются на любое топологическое хаусдорфово пространство.

5. Разрешимость уравнений Кирквуда—Зальцбурга при $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$. Формальный переход к термодинамическому пределу $|\Lambda| \rightarrow \infty$ в системе уравнений (26) приводит к *термодинамически предельной* системе линейных интегральных уравнений для бесконечного набора $\mathbf{p}(z) = \langle p(X, z); \emptyset \neq X \subset \Lambda \rangle$ вероятностей на \mathbb{Z}^d :

$$\mathbf{p}(z) = z\mathbf{e} + z\mathbf{K}\mathbf{p}(z), \quad (30)$$

с оператором \mathbf{K} , определяемым при $\mathbf{x} \in X$ формулой

$$(\mathbf{K}\mathbf{g})(X) = W(\mathbf{x}; X) \sum_{Y \subset \mathbb{Z}^d \setminus X} K(\mathbf{x}; Y) [(1 - \delta_{0, |X \setminus \{\mathbf{x}\}|})g(X \setminus \{\mathbf{x}\} \cup Y) - g(X \cup Y)], \quad (31)$$

$$W(\mathbf{x}; X) = \exp\left(-\sum_{\mathbf{y} \in X} U(\mathbf{x} - \mathbf{y})/T\right), \quad (32)$$

имеющей смысл для любого набора $\mathbf{g} = \langle g(X) : \emptyset \neq X \subset \mathbb{Z}^d \rangle$ чисел $g(X)$, для которых сходится ряд в правой части равенства при всех непустых $X \subset \mathbb{Z}^d$. В этой формуле точка \mathbf{x} , согласно указанной выше договоренности, является первой в смысле лексикографического порядка в множестве X .

Учтем, что согласно своему вероятностному смыслу, для всех $p(X, z)$ с непустыми $X \subset \mathbb{Z}^d$, при всех $z > 0$ имеет место априорная оценка $0 \leq p(X) \leq 1$. Тогда, в условиях суммируемости потенциала U , все ряды сходятся, так как

$$\begin{aligned} K &\equiv \sum_{Y \subset \mathbb{Z}^d \setminus X} |K(\mathbf{x}; Y)| |(1 - \delta_{0, |X \setminus \{\mathbf{x}\}|})p(X \setminus \{\mathbf{x}\} \cup Y) - p(X \cup Y)| \leq \\ &\leq 2 \sum_{Y \subset \mathbb{Z}^d \setminus X} \prod_{\mathbf{y} \in Y} |K(\mathbf{x} - \mathbf{y})| < 2 \sum_{Y \subset \mathbb{Z}^d} \prod_{\mathbf{y} \in Y} |K(\mathbf{x} - \mathbf{y})| = \\ &= 2 \prod_{\mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} (1 + |K(\mathbf{x} - \mathbf{y})|) = 2 \prod_{\mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} (1 + |K(\mathbf{y})|). \end{aligned} \quad (33)$$

В частности, если $U(\mathbf{y}) \leq 0$, то $1 + |K(\mathbf{y})| = e^{-U(\mathbf{y})/T}$ и поэтому $K < 2 \exp(\|U\|/T)$.

В связи с тем, что система (30) имеет смысл при условии равномерной ограниченности компонент набора $\mathbf{p}(z)$, будем далее изучать ее разрешимость в случае, если наборы $\mathbf{p}(z)$ являются элементами банахова пространства \mathfrak{E} бесконечных наборов $\mathbf{p}(z)$ с конечной нормой $\|\mathbf{p}(z)\|_0 \equiv \sup\{|p(X, z)| : \emptyset \neq X \subset \mathbb{Z}^d\}$. Разрешимость системы (30) при малых значениях z устанавливается на основе оценки (33) и следующих неравенств:

$$\left| \sum_{\mathbf{y} \in X} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right| \leq \sum_{\mathbf{y} \in X} |U(\mathbf{y})| \leq \|U\|, \quad W(\mathbf{x}; X) < \exp(\|U\|/T). \quad (34)$$

Теорема 6. *Внутри круга $\{z \in \mathbb{C} : |z| < K^{-1} \exp(-\|U\|/T)\}$ уравнение (30) имеет единственное решение.*

Доказательство. Если сходится степенной ряд

$$p(X, z) = \sum_{m=0}^{\infty} z^{m+1} [\mathbf{K}^m \mathbf{e}](X), \quad (35)$$

то он представляет решение уравнения (30). Так как для любого набора $\mathbf{f} \in \mathfrak{E}$, при применении оценок (33), (34), имеет место

$$\|\mathbf{K}\mathbf{f}\|_0 = \sup_{\substack{X \subset \mathbb{Z}^d: \\ X \neq \emptyset}} \|[\mathbf{K}\mathbf{f}](X)\| \leq 2\|\mathbf{f}\|_0 \sup_{\substack{X \subset \mathbb{Z}^d: \\ X \neq \emptyset}} W(\mathbf{x}; X) \sum_{Y \subset \mathbb{Z}^d \setminus X} |K(\mathbf{x}; Y)| < \|\mathbf{f}\|_0 K \exp(\|U\|/T),$$

то, учитывая $\|\mathbf{e}\|_0 = 1$, находим, что $\|\mathbf{K}^m \mathbf{e}\|_0 < K^m \exp(m\|U\|/T)$ и, следовательно,

$$|\mathbf{p}(z) - \sum_{m=0}^{N-1} z^{m+1} [\mathbf{K}^m \mathbf{e}](X)| \leq \sum_{m=N}^{\infty} |z|^{m+1} \|\mathbf{K}^m \mathbf{e}\|_0 < \frac{|z|^{N+1} K^N \exp(N\|U\|/T)}{1 - |z|K \exp(\|U\|/T)} \rightarrow 0$$

при $|z|K \exp(\|U\|/T) < 1$. □

Следствие 3. При условии теоремы 6 уравнение (26) имеет единственное решение.

Доказательство. Для нормы оператора K_Λ справедлива точно такая же оценка, как и для нормы оператора K . □

Следствие 4. При $U(\mathbf{x}) \leq 0$, $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ уравнение (30) имеет единственное решение внутри круга $\{z \in \mathbb{C} : |z| < 2^{-1} \exp(2U_0/T)\}$.

Доказательство. Оценка радиуса круга вытекает из неравенства $K < 2 \exp(\|U\|/T)$, $\|U\| = -U_0$. □

Тот факт, что полученная оценка радиуса области разрешимости для неположительного потенциала намного меньше радиуса круга $\exp(U_0/2T)$ расположения нулей статистических сумм Q_Λ , то есть круга аналитичности вероятностей $p_\Lambda(X, z)$, $X \subset \mathbb{Z}^d$, связан с тем, что при получении оценки, представленной в теореме 6, никак не была использована принадлежность набора этих вероятностей пространству $\mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$.

Теорема 7. Множества \mathfrak{Z}_Λ при всех непустых $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ и, следовательно, множество $\bar{\mathfrak{Z}}$ содержатся в кольце

$$\{z \in \mathbb{C} : K \exp(U_0/T - \exp(-\|U\|/T)) > |z| > K^{-1} \exp(-\|U\|/T)\}. \quad (36)$$

Доказательство. Тот факт, что множество нулей содержится в кольце, следует из того, что набор функций $\mathbf{p}_\Lambda(z) = \langle p_\Lambda(X, z); \emptyset \neq X \subset \mathbb{Z}^d \rangle$ удовлетворяет уравнению (26). Приняв во внимание следствие 4, находим, что все функции $p_\Lambda(X, z)$, входящие в набор $\mathbf{p}_\Lambda(z)$, являются ограниченными в круге, содержащем точку $z = 0$. В области $\{z : |z| > K \exp(U_0/T - \exp(-\|U\|/T))\}$ все они являются ограниченными вследствие формулы (6). Следовательно, знаменатель в формуле (28) не обращается в нуль в точках, находящихся вне кольца, указанного в условии теоремы, так как числитель в этой формуле по крайней мере для одной из функций набора $\mathbf{p}_\Lambda(z)$ не равен нулю, а именно, $p_\Lambda(\Lambda, z) \neq 0$. □

6. Система уравнений Добрушина—Робинсона—Миракль—Соль. Рассмотрим модификацию уравнения (30), которая позволит расширить область параметров z и T , в которой имеется возможность вычисления предельных вероятностей $p(X, z)$ посредством итераций в уравнении Фредгольма 2-го рода.

В сумме (27) выделим слагаемое с $Y = \emptyset$ и преобразуем уравнение (26) в уравнение, на основе которого анализировались решетчатые классические модели в [4, 12]:

$$\mathbf{p}_\Lambda(z) = z(1+z)^{-1}\mathbf{e}_\Lambda + \bar{K}_\Lambda \mathbf{p}_\Lambda(z). \quad (37)$$

Здесь оператор \bar{K}_Λ действует на любой набор $\mathbf{f} \in \mathfrak{E}_\Lambda^{(0)}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} (\bar{K}_\Lambda \mathbf{f})(X) = & \frac{zW_\Lambda(\mathbf{x}; X \setminus \{\mathbf{x}\})}{1 + zW_\Lambda(\mathbf{x}; X \setminus \{\mathbf{x}\})} \left[(1 - \delta_{0,|X \setminus \{\mathbf{x}\}|})f(X \setminus \{\mathbf{x}\}) + \right. \\ & \left. + \sum_{\emptyset \neq Y \subset \Lambda \setminus X} K(\mathbf{x}; Y)[f(X \setminus \{\mathbf{x}\} \cup Y) - f(X \cup Y)] \right]. \quad (38) \end{aligned}$$

Формальный предельный переход $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ в этом уравнении приводит к термодинамически предельному уравнению:

$$\mathbf{p}(z) = z(1+z)^{-1}\mathbf{e} + \bar{K}\mathbf{p}(z), \quad (39)$$

с оператором \bar{K} , определяемым для любого набора $\mathbf{g} \in \mathfrak{E}$ при $\mathbf{x} \in X$ формулой

$$(\bar{K}\mathbf{g})(X) = \frac{zW(\mathbf{x}; X)}{1 + zW(\mathbf{x}; X)} \left[(1 - \delta_{0, |X \setminus \{\mathbf{x}\}|})g(X \setminus \{\mathbf{x}\}) + \sum_{\emptyset \neq Y \subset \mathbb{Z}^d \setminus X} K(\mathbf{x}; Y)[g(X \setminus \{\mathbf{x}\} \cup Y) - g(X \cup Y)] \right]. \quad (40)$$

Разрешимость уравнения (39) эквивалентна разрешимости уравнения (30), так как оно получается из (30) точно таким же элементарным алгебраическим преобразованием, посредством которого получается уравнение (37) из уравнения (26).

На основе уравнения (39) получим более сильную оценку радиуса круга аналитичности вероятностей набора $\mathbf{p}(z)$, но при $\operatorname{Re} z \geq 0$.

Аналогично оценке (33) получается неравенство

$$\bar{K} \equiv \sum_{\emptyset \neq Y \subset \mathbb{Z}^d \setminus X} |K(\mathbf{x}; Y)| \| [p(X \setminus \{\mathbf{x}\} \cup Y, z) - p(X \cup Y, z)] \| < 2 \left[\prod_{\mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} (1 + |K(\mathbf{y})|) - 1 \right]. \quad (41)$$

В частности, если $U(\mathbf{y}) \leq 0$, то $\bar{K} < 2[\exp(\|U\|/T) - 1]$. Если $\operatorname{Re} z > 0$, то множитель перед знаком суммы в (40) оценивается возрастающей функцией от переменной $\xi = \exp(-\sum_{\mathbf{y} \in X} U(\mathbf{y})/T) > 0$:

$$\left| \frac{zW(\mathbf{x}; X)}{1 + zW(\mathbf{x}; X)} \right| = \frac{|z|\xi}{[(1 + \xi \operatorname{Re} z)^2 + \xi^2 \operatorname{Im}^2 z]^{1/2}} \leq \frac{|z|\xi}{[1 + \xi^2 |z|^2]^{1/2}}.$$

Тогда получаем следующую оценку нормы $\|\bar{K}\|_0$ оператора \bar{K} при $\operatorname{Re} z \geq 0$:

$$\|\bar{K}\|_0 \|\mathbf{f}\|_0 \equiv \sup_{\emptyset \neq X \subset \mathbb{Z}^d} |(\bar{K}\mathbf{f})(X)| \leq \|\mathbf{f}\|_0 \frac{|z|\xi}{[1 + \xi^2 |z|^2]^{1/2}} (\bar{K} + 1). \quad (42)$$

Потребуем теперь, чтобы $|z|\xi(\bar{K} + 1)/[1 + \xi^2 |z|^2]^{1/2} < 1$. В этом случае должно выполняться $|z| < [\xi((\bar{K} + 1)^2 - 1)^{1/2}]^{-1}$. Так как $\xi \leq \exp(\|U\|/T)$ (в случае $U_0 \geq 0$ можно положить $\xi \leq \exp((\|U\| - U_0)/T)$), то в общем случае для выполнимости оценки $\bar{K} < 1$ достаточно, чтобы

$$|z| < \frac{\exp((\theta U_0 - \|U\|)/T)}{2\sqrt{\Pi(\Pi - 1)}}, \quad \Pi = \prod_{\mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} (1 + |K(\mathbf{y})|),$$

где $\theta = 0$ при $U_0 < 0$ и $\theta = 1$ при $U_0 \geq 0$. Воспользовавшись неравенством $\Pi < \exp(\|U\|/T)$, находим достаточное условие разрешимости в виде

$$|z| < \frac{\exp[(\theta U_0 - 2\|U\|)/T]}{2[1 - \exp(-\|U\|/T)]^{1/2}}. \quad (43)$$

При выполнении оценки (43) сходится по норме $\|\cdot\|_0$ ряд

$$\mathbf{p}(z) = \frac{z}{1 + z} \sum_{m=0}^{\infty} \bar{K}^m \mathbf{e}. \quad (44)$$

Так как для оператора \bar{K}_Λ справедливы точно такие же оценки, как и для оператора \bar{K} , то набор вероятностей $\mathbf{p}_\Lambda(z)$ представим в виде сходящегося по норме ряда

$$\mathbf{p}_\Lambda(z) = \frac{z}{1 + z} \sum_{m=0}^{\infty} \bar{K}_\Lambda^m \mathbf{e}_\Lambda. \quad (45)$$

Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 8. Уравнение (39) с оператором (40), равно как и уравнение (37) с оператором (38), определяемые суммируемым потенциалом U , разрешимы однозначным образом в области $\{z : \operatorname{Re} z \geq 0\} \subset \mathbb{C}$ при выполнении условия (43). При этом их решения представимы в виде сходящихся по норме $\|\cdot\|_0$ рядов, соответственно, (44) и (45).

Замечание. Согласно теоремам 6 и 8, наборы вероятностей $\mathbf{p}(z)$ допускают вычисление на основе сходящихся по норме $\|\cdot\|_0$ рядов в составной области

$$\left\{ z : \operatorname{Re} z \geq 0, |z| < \frac{\exp[(\theta U_0 - 2\|U\|)/T]}{2[1 - \exp(-\|U\|/T)]^{1/2}} \right\} \cup \{z : |z| < K^{-1} \exp(-\|U\|/T)\} \quad (46)$$

так, что в точках, принадлежащих левой компоненте объединения, используется ряд (44), а в правой — (35).

Покажем теперь, что радиус круга сходимости ряда (44) больше, чем радиус сходимости степенного ряда, определяемого теоремой 6. Для этого нужно убедиться в справедливости неравенства

$$\frac{\exp[(\theta U_0 - 2\|U\|)/T]}{2[1 - \exp(-\|U\|/T)]^{1/2}} > K^{-1} \exp(-\|U\|/T),$$

которое, с учетом (33), эквивалентно, согласно определению числа θ , следующему очевидному неравенству $\Pi \cdot \exp(2\theta U_0) > [1 - \exp(-\|U\|/T)]^{1/2}$.

Решим теперь вопрос о наличии интервала \mathfrak{T} изменения параметра T , где зависящий от T радиус полукруга разрешимости уравнения (39) в комплексной плоскости z перекрывается с областью, которая получается инволюцией $\zeta \mapsto \zeta^{-1}$ этого полукруга. Это так называемый случай *высоких температур*.

Теорема 9. При выполнении условий теоремы 8, если $T > \|U\|/|\ln \varkappa_0|$, где \varkappa_0 — единственный корень полинома $\varkappa^4 + 4(\varkappa - 1)$ на отрезке $[0, 1]$, все вероятности $p(X, z)$ с непустыми $X \subset \mathbb{Z}^d$, получаемые как решения уравнения (39), определены при всех вещественных $z \in [0, \infty)$. Они являются могут быть вычислены для всех значений $\operatorname{Re} z > 0$, на основе (44) и следствия 1.

Доказательство. Если $T \in \mathfrak{T}$, то значения параметра z , наряду с неравенством (43), должны удовлетворять неравенству

$$|z|^{-1} \exp(U_0/T) < \frac{\exp[(\theta U_0 - 2\|U\|)/T]}{2[1 - \exp(-\|U\|/T)]^{1/2}}. \quad (47)$$

Отсюда следует, что такое положение реализуется, если выполняется

$$\exp(U_0/2T) < \frac{\exp[(\theta U_0 - 2\|U\|)/T]}{2[1 - \exp(-\|U\|/T)]^{1/2}}.$$

Это неравенство эквивалентно следующему при любом знаке числа U_0 :

$$\exp((|U_0| - 4\|U\|)/T) > 4(1 - \exp(-\|U\|/T)). \quad (48)$$

Так как левая часть неравенства убывает по T^{-1} и равна 1 при $T \rightarrow \infty$ и 0 при $T \rightarrow 0$, а правая возрастает по T^{-1} и, в соответствующих случаях, равна 0 и 4, то существует единственная точка T_* пересечения графиков этих функций, в которой имеет место равенство

$$\exp((|U_0| - 4\|U\|)/T) = 4(1 - \exp(-\|U\|/T)),$$

и при $T > T_*$ выполняется (48). Так как функции в обеих частях равенства выпуклы по T^{-1} , то ввиду свойств их монотонного изменения уменьшение левой части равенства сдвигает точку T_*^{-1} влево. Следовательно, корень \varkappa_0 уравнения $\varkappa^4 + 4(\varkappa - 1) = 0$ определяет, согласно $\varkappa = \exp(-\|U\|/T)$, точку $\|U\|/|\ln \varkappa_0|$, которая превосходит T_* так, что при $T > \|U\|/|\ln \varkappa_0|$ имеет место неравенство (48). \square

Следствие 5. При выполнении условия теоремы 9, для каждого множества \mathfrak{Z}_Λ , $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ имеет место $\mathfrak{Z}_\Lambda \cap \{z : \operatorname{Re} z \geq 0\} = \emptyset$ и, соответственно, для топологически предельного множества $\bar{\mathfrak{Z}}$ выполняется $\bar{\mathfrak{Z}} \cap \{z : \operatorname{Re} z > 0\} = \emptyset$.

Доказательство. Первая часть утверждения следует из того, что при ограничениях на $z \in \mathbb{C}$, указанных в условиях теоремы 8, все функции $p_\Lambda(X, z)$ с непустым $X \subset \Lambda$ ограничены, так как их набор $\mathbf{p}_\Lambda(z)$ представим в виде сходящегося по норме $\|\cdot\|_0$ ряда (45). При выполнении условия

теоремы 9 область аналитичности всех функций p_Λ содержит все множество $\{z : \operatorname{Re} z \geq 0\}$. Верность второй части утверждения доказывается переходом к топологическому пределу $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ множеств, определяемых неравенствами (36). \square

7. Предельные вероятности. Теперь докажем утверждение, связывающее набор $p_\Lambda(z)$ вероятностей с набором $p(z)$ решений системы уравнений (39).

Теорема 10. *Для каждого фиксированного непустого множества $X \subset \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ вероятность $p_\Lambda(X, z)$ при $z \in \mathbb{C}$, удовлетворяющих неравенству (43), стремится к вероятности $p(X, z)$ при $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$, которая входит в решение $p(z)$ уравнения (39).*

Доказательство. Набор $p_\Lambda(z)$ при каждом $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ удовлетворяет уравнению (37). Распространим определение набора $p_\Lambda(X)$ на все непустые $X \subset \mathbb{Z}^d$ посредством добавления к нему вероятностей $p_\Lambda(X, z) = 0$ при $X \cap \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$ и точно так же доопределим набор e_Λ . Тогда уравнение (37) записывается в виде

$$p_\Lambda(z) = \frac{z}{1+z} e_\Lambda + \bar{K} p_\Lambda(z). \quad (49)$$

Согласно (39) и (49) разность $\Delta_\Lambda(z) = p(z) - p_\Lambda(z)$ удовлетворяет уравнению

$$\Delta_\Lambda(z) = \frac{z}{1+z} (e - e_\Lambda) + \bar{K} \Delta_\Lambda(z). \quad (50)$$

Тогда на основании теоремы 8 имеем

$$\Delta_\Lambda(z) = \frac{z}{1+z} \sum_{m=0}^{\infty} \bar{K}^m [e - e_\Lambda]. \quad (51)$$

Отсюда следует, что

$$\Delta_\Lambda(z) = \frac{z}{1+z} [e - e_\Lambda] + \frac{z}{1+z} \sum_{m=0}^{\infty} \bar{K}^m (\bar{K}[e - e_\Lambda]). \quad (52)$$

Так как

$$(\bar{K}[e - e_\Lambda])(X) = \delta_{1,|X|} \frac{z}{1+z} \sum_{\mathbf{y} \notin X} K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) [e(\mathbf{y}) - e_\Lambda(\mathbf{y})],$$

то для любого фиксированного $L_0 < L$, $L_0 \in \mathbb{N}$, при $\Lambda_0 \subset \Lambda$ имеем

$$\|\bar{K}[e - e_\Lambda]\|_{\Lambda_0} \equiv \sup_{X \subset \Lambda_0} |\bar{K}[e - e_\Lambda](X)| \leq \frac{z}{1+z} \sum_{\mathbf{y} \notin X} |K(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \rightarrow 0, \quad \Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d,$$

ввиду того, что допустимо использование оценки на норму оператора \bar{K} и имеет место равенство $\|e - e_\Lambda\|_{\Lambda_0} = 0$. Тогда из (52) следует

$$\|\Delta_\Lambda(z)\|_{\Lambda_0} = \left(\frac{|z|}{|1+z|} \right)^2 \sum_{m=0}^{\infty} \|\bar{K}\|_0^m \|\bar{K}[e - e_\Lambda]\|_{\Lambda_0} \rightarrow 0, \quad \Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d. \quad (53)$$

Теорема доказана. \square

Доказанная теорема приводит к следующим важным следствиям.

Следствие 6. *Для предельных вероятностей $p(X, z)$ имеют место формулы*

$$p(X, z) = \sum_{Y \subset X} (-1)^{|Y|} p(Y, z^{-1} e^{U_0/T}), \quad p(X, z^{-1} e^{U_0/T}) = \sum_{Y \subset X} p(Y, z). \quad (54)$$

Доказательство. Формулы получаются переходом к пределу $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ в формулах (6) и (12). \square

Следствие 7. *При выполнении условий теоремы 8 предельные вероятности являются аналитическими функциями при $z \in \mathbb{C}$ в области (46) и области, получаемой из нее инволюцией $\zeta \mapsto \zeta^{-1}$.*

Доказательство. В области сходимости ряда (44), если z удовлетворяет неравенству (43), и ряда (35), если z удовлетворяет неравенству $|z| < K^{-1} \exp(-\|U\|/T)$, каждая вероятность $p(X, z)$ с непустым $X \subset \mathbb{Z}^d$, входящая в набор $\mathbf{p}(z)$, как функция от z , ограничена на каждом замкнутом множестве \mathfrak{D} в области значений z , удовлетворяющих неравенству (43). При этом каждая такая функция от $z \in \mathfrak{D}$ согласно теореме 10 является пределом последовательности $\langle p_\Lambda(X, z); \Lambda \subset \mathbb{Z}^d \rangle$ при $L \rightarrow \infty$ аналитических функций. Тогда согласно *теореме Витали* (см. [3]) предельная функция является аналитической на \mathfrak{D} . Ввиду произвольности замкнутого множества \mathfrak{D} получаем, что каждая функция $p(X, z)$, $X \subset \mathbb{Z}^d$, аналитическая в области, где z удовлетворяет неравенству (43).

Аналитичность функций $p(X, z)$, $X \subset \mathbb{Z}^d$, относительно z в области, получаемой инволюцией $\zeta \mapsto \zeta^{-1}$, следует из формул (54). \square

8. Заключение. Обзор результатов, представленный в работе, дает основание думать, что точки $\bar{\mathfrak{J}} \cap \{z : \text{Im } z = 0, \text{Re } z \geq 0\}$ являются единственными точками фазовых переходов при изменении параметра z . Для подтверждения этой гипотезы необходимы априорные оценки на вероятности $p_\Lambda(X, z)$, $X \subset \Lambda$, в точках $z \notin \bar{\mathfrak{J}}_\Lambda$ независимо от структуры множества $\bar{\mathfrak{J}}$. Само предельное множество $\bar{\mathfrak{J}}$ может быть устроено довольно сложным образом. В частности, может быть довольно сложным его пересечение с $\{z \in \mathbb{C} : \text{Im } z = 0, \text{Re } z > 0\}$. Оно может не состоять только из одной точки, как это имеет место в том случае, когда парный потенциал взаимодействия неположителен. Расположение нулей на окружности, по-видимому, является характеристическим свойством моделей с $U(\mathbf{x}) \leq 0$, так как для суммируемых на \mathbb{Z}^d потенциалов взаимодействия U в общем случае нет никаких оснований думать, что множество $\bar{\mathfrak{J}}$ расположено на окружности (см. [12]). Поэтому для анализа фазовых переходов при изменении z необходима теория, устанавливающая структуру этого множества. Возможной подвижкой в этом направлении является работа [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Басуев А. Г. Гамильтониан границы раздела фаз и фазовые переходы первого рода. Обобщение теоремы Ли—Янга// Теор. мат. физ. — 2007. — 153, № 1. — С. 98–123.
2. Березин Ф. А., Синай Я. Г. Существование фазового перехода для решетчатого газа с притяжением между частицами// Тр. Моск. мат. о-ва. — 1967. — 17. — С. 197–212.
3. Гурвиц А., Курант Р. Теория функций. — М.: Наука, 1968.
4. Добрушин Р. Л. Гиббсовские случайные поля для решетчатых систем с попарным взаимодействием// Функци. анал. прилож. — 1968. — 4, № 1. — С. 31–43.
5. Клюев А. С., Вирченко Ю. П. Оценка энергии векторной решеточной модели с периодическими граничными условиями// Науч. вед. Белгород. гос. ун-та. Мат. Физ. — 2015. — 11 (208), № 39. — С. 121–125.
6. Минлос Р. А. Лекции по статистической физике// Усп. мат. наук. — 1968. — 23, № 1. — С. 133–190.
7. Минлос Р. А. Введение в математическую статистическую физику. — М.: МЦНМО, 2002.
8. Пастур Л. А. Спектральная теория уравнений Кирквуда—Зальцбурга в конечном объеме// Теор. мат. физ. — 1974. — 18, № 2. — С. 233–242.
9. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты. — М.: Мир, 1971.
10. Dobrushin R. L. Existence of phase transition in models of a lattice gas// Proc. V Berkeley Symp. Mat. Stat. Prob. — 1967. — VII A. — P. 73–87.
11. Gallavotti G. Statistical Mechanics. — Roma: Univ. di Roma, 1999.
12. Gallavotti G., Miracle-Sole S. Statistical mechanics of lattice systems// Commun. Math. Phys. — 1967. — 5. — P. 317–323.
13. Ginibre J., Grossman A., Ruelle D. Condensation of lattice gases// Commun. Math. Phys. — 1966. — 3. — P. 187–193.
14. Kirkwood J. G., Salsburg Z. W. The statistical mechanical theory of molecular distribution functions in liquids// Discuss. Faraday Soc. — 1953. — 15, № 1. — P. 28–34.
15. Mayer J., Harrison S. F. Statistical mechanics of condensing systems. III// J. Chem. Phys. — 1938. — 6, № 2. — P. 87–100.
16. Mayer J., Harrison S. F. Statistical mechanics of condensing systems. IV// J. Chem. Phys. — 1938. — 6, № 2. — P. 101–104.

17. *Ruelle D.* Correlation functions of classical gases// *Ann. Phys.* — 1963. — 25, № 1. — P. 109–120.
18. *Yang C. N., Lee T. D.* Statistical theory of equation of state and phase transitions. I. Theory of condensation// *Phys. Rev.* — 1952. — 87. — P. 404–409.
19. *Yang C. N., Lee T. D.* Statistical theory of equation of state and phase transitions. II. Lattice gas and Ising model// *Phys. Rev.* — 1952. — 87. — P. 410–419.

Вирченко Юрий Петрович

Белгородский государственный национальный исследовательский университет

E-mail: virch@bsu.edu.ru