Прикладная математика & Физика, 2020, том 52, № 2, С. 62–70.

УДК 517.952 DOI 10.18413/2687-0959-2020-52-2-62-70

УРАВНЕНИЯ КИРКВУДА – ЗАЛЬЦБУРГА ДЛЯ РЕШЕТЧАТЫХ КЛАССИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Ю. П. Вирченко, Е. Ю. Московченко

Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
г. Белгород, 308015, Россия

E-mail:virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Изучается класс решетчатых моделей статистической механики классических систем с суммируемым парным потенциалом взаимодействия, которые с физической точки зрения описывают т.н. разбавленные системы многих частиц. Получена система уравнений для частных распределений вероятностей, аналогичная системе уравнений Кирквуда – Зальцбурга, которая применяется для исследования непрерывных систем.

Ключевые слова: статистическая механика, распределения Гиббса, решетчатые системы, уравнения Кирквуда-Зальцбурга, статистическая сумма, термодинамический предел, гамильтониан, периодические условия.

Для цитирования: Вирченко Ю. П., Московченко Е. Ю. 2020. Уравнения Кирквуда – Зальцбурга для решетчатых классических моделей статистической механики. Прикладная математика & Физика, 52(2): 62–70. DOI 10.18413/2687-0959-2020-52-2-62-70.

KIRKWOOD – SALZBURG EQUATIONS FOR LATTICE CLASSICAL MODELS OF STATISTICAL MECHANICS

Yu. P. Virchenko, E. Yu. Moskovchenko

Belgorod National Research University,
Belgorod, 308015, Russia

E-mail: virch@bsu.edu.ru

Received February 1, 2020

Abstract. Lattice models of statistical mechanics of classical systems with a summable pair interaction potential, which from the physical point of view describe the so-called diluted systems of many particles are studied. The equations system of partial probabilities is obtained that is similar to the Kirkwood – Salzburg system which is used when continuous models are studied.

Key words: statistical mechanics, Gibbs distributions, lattice systems, Kirkwood – Salzburg equations, partition function, thermodynamic limit, hamiltonian, periodic conditions.

For citation: Virchenko Yu. P., Moskovchenko E. Yu. 2020. Kirkwood – Salzburg's equations for lattice classical models of statistical mechanics. Applied Mathematics & Physics, 52(2): 62–70 (in Russian).
DOI 10.18413/2687-0959-2020-52-2-62-70.

Введение. Математическим объектом изучения в равновесной статистической механике являются гиббсовские вероятностные меры. Частным случаем таких мер, который изучается в настоящей работе, являются гиббсовские меры, связанные с т. н. решетчатыми моделями, которые являются математическими моделями систем многих частиц, рассматриваемых в физике твердого тела. Для решетчатых моделей меры определяются посредством задания семейства согласованных между собой частных распределений вероятностей $\mathsf{P}_\Lambda[\cdot]$ на пространствах элементарных событий $\Omega(\Lambda)$, каждое из которых сопоставляется множеству $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $|\Lambda| < \infty$, $d = 1, 2, 3$ (конечной части кристаллической решетки), принадлежащему специальному классу конечных подмножеств из $\mathbb{Z}^d$. Тогда гиббсовская мера $\mathsf{P}[\Sigma]$ случайного события Σ, связанного с фиксированным конечным множеством $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ определяется как совокупность предельных значений последовательности $\langle \mathsf{P}_\Lambda[\Sigma]; \Lambda \subset \mathbb{Z}^d \rangle$, $\Sigma \subset \Omega(\Lambda)$, которая соответствует расширяющейся последовательности множеств $\Lambda \to \mathbb{Z}^d$. Такие предельные значения вероятностей называются *термодинамически предельными вероятностями.* По поводу используемой терминологии (см., например, [Минлос, 2002], [Gallavotti, 1999]).

Одной из задач статистической механики является задача вычисления предельных значений $P[\Sigma]$ и один из подходов к решению этой задачи связывается с нахождением подходящей системы уравнений, связывающих предельные значения $\mathsf{P}[\Sigma]$ различных случайных событий Σ. В простейшем случае решетчатых моделей, которые соответствуют гиббсовским точечным случайным полям и называются «решеточным газом», такой системой уравнений являются интегральные уравнения, которые применялись для исследования таких моделей в работах [Gallavotti, Miracle-Sole, 1967], [Добрушин, 1968], а также ее видоизменение в работе [Пастур, 1974]. В последнем случае система уравнений аналогична системе уравнений Кирквуда – Зальцбурга [Kirkwood, Salsburg, 1953], используемой при изучении непрерывных моделей статистической механики. Настоящая работа посвящена выводу системы интегральных уравнений, которая представляет собой обобщение систем уравнений, полученных в цитируемых работах, на случай решетчатых систем, которые представляют собой *векторные расслоения* гиббсовских точечных случайных полей. Кроме того, мы распространим положения спектральной теории Л. А. Пастура для полученной нами системы уравнений.

2. Векторные решетчатые модели статистической механики. Определим для каждого множества Λ вероятностные пространства $\langle\mathfrak{S}(\Lambda), \mathsf{P}_\Lambda\rangle$ решетчатых систем статистической механики, изучаемых в настоящей работе, где $\mathfrak{S}(\Lambda)$ — пространство состояний системы (пространство элементарных случайных событий) и P_Λ — нормированная мера, заданная в соответствии со структурой измеримости на $\Omega(\Lambda)$.

Прежде всего, опишем класс подмножеств $\Lambda(L) \equiv \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$. Определим для любого $L \in \mathbb{N}_+$ множество $\Lambda = \{0, 1, ..., L\}^d - a_L\langle 1, ..., 1\rangle$ с $a_L = L/2$, если L — четное, и $(L-1)/2$, если L – нечетное. При этом для любого L имеет место включение $\Lambda(L+1) \supset \Lambda(L)$ и $\bigcup_{L=0}^{\infty} \Lambda(L) = \mathbb{Z}^d$. Число L будем называть *размером* множества Λ. При этом число точек в множестве Λ с размером L равно $|\Lambda| \equiv (L+1)^d$.

Пространства состояний решетчатых систем статистической механики для каждого из указанных выше множеств Λ представляются в виде прямого произведения

$$\mathfrak{S}(\Lambda) = \bigotimes_{\mathbf{x}\in\Lambda} \mathfrak{S}(\{\mathbf{x}\})\,. \tag{1}$$

Подразумевается, что на пространстве состояний $\mathfrak{S}_\Lambda$ имеется структура измеримости и на ней определен интеграл по σ-аддитивной мере. При этом измеримые множества определяются как прямые произведения измеримых множеств в каждом из пространств $\mathfrak{S}(\{\mathbf{x}\})$ состояний с $\mathbf{x} \in \Lambda$, а мера на $\mathfrak{S}(\Lambda)$ определяется как произведение мер $\prod_{\mathbf{x}\in\Lambda} \mathsf{dm}_{\mathbf{x}}$, где входящие в это произведение меры $\mathsf{dm}_{\mathbf{x}}$, $\mathbf{x} \in \Lambda$ эквивалентны. Тогда гиббсовские распределения вероятностей $\mathsf{P}_\Lambda[\Sigma]$ случайных событий $\Sigma \subset \mathfrak{S}(\Lambda)$ для систем статистической механики определяются, для каждого Λ, на основе задания функционала $\mathsf{H}_\Lambda[\cdot]$ на пространстве состояний $\mathfrak{S}(\Lambda)$ посредством формулы

$$\mathsf{P}_\Lambda[\Sigma] = Q_\Lambda^{-1} \int_\Sigma \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda/T\Big) \prod_{\mathbf{x}\in\Lambda} \mathsf{dm}_{\mathbf{x}}\,, \tag{2}$$

$$Q_\Lambda = \int_{\mathfrak{S}_\Lambda} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda/T\Big) \prod_{\mathbf{x}\in\Lambda} \mathsf{dm}_{\mathbf{x}}\,. \tag{3}$$

Здесь параметр $T > 0$, называемый температурой. Функционал $\mathsf{H}_\Lambda[\cdot]$ называется *гамильтонианом* системы.

Для рассматриваемых нами в этой работе *векторных решетчатых моделей* пространство состояний $\mathfrak{S}(\{\mathbf{x}\})$ в каждой точке $\mathbf{x} \in \Lambda$ определяется формулой

$$\mathfrak{S}(\{x\}) = \{\langle\rho(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x})\rangle\, : \rho(\mathbf{x}) \in \{0,1\}, \mathbf{s}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n, \mathbf{s}^2(\mathbf{x}) \le s^2\}, \tag{4}$$

$s \in (0, \infty)$, $n \in \mathbb{N}$ так, что все пространство $\mathfrak{S}(\Lambda)$ составляют множество пар $\langle\rho(\mathbf{x}), \mathsf{s}(\mathbf{x})\rangle$ функций на Λ, из которых $\rho(\mathbf{x})$ — дихотомическая функция со значениями $\{0,1\}$ и $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ — векторное поле на Λ со значениями в $\mathbb{R}^n$, $n = 1, 2, 3$. Следовательно, элементами пространства $\mathfrak{S}(\Lambda)$ являются пары $\langle\rho(\mathbf{x}), \mathsf{s}(\mathbf{x})\rangle$ и гамильтониан $\mathsf{H}_\Lambda[\cdot]$ сопоставляет каждой такой паре число из $\mathbb{R}$. Поэтому его значения мы будем, далее, обозначать посредством $\mathsf{H}_\Lambda[\rho, \mathsf{s}]$.

В свою очередь, для векторных моделей измеримые множества в каждом из пространств $\mathfrak{S}(\{\mathbf{x}\})$, $\mathbf{x} \in \Lambda$ определяются измеримыми по Лебегу множествами в $\mathbb{R}^n$ как при значении $\rho(\mathbf{x}) = 0$, так и при значении $\rho(\mathbf{x}) = 1$, а мера $\mathsf{dm}[\mathsf{s}(\mathbf{x})]$ на каждом из этих пространств определяется сферически симметричной плотностью $f(s)$, сосредоточенной на $[0, s]$ так, что для фиксированной точки $\mathbf{x} \in \Lambda$ дифференциал меры множества точек пространства $\mathfrak{S}(\{\mathbf{x}\})$ для каждого значения $\rho = \rho(\mathbf{x}) \in \{0,1\}$, составляющий дифференциальную часть $s^{n-1}dsd\Omega$ сферического слоя около точки $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ с $|\mathbf{s}| = s$, определяемую дифференциалом телесного угла $d\Omega$, равен $w(s)s^{n-1}dsd\Omega \equiv w(s)d\mathbf{s}$. Таким образом, в соответствии с формулами (2), (3), гиббсовское распределение вероятностей для измеримых множеств Σ в пространстве $\mathfrak{S}(\Lambda)$ векторных моделей определяется следующим образом:

$$\mathsf{P}_\Lambda[\Sigma] = Q_\Lambda^{-1} \sum_{\substack{\rho(\mathbf{x})\in\{0,1\}^\Lambda:\\ \langle\rho,\mathbf{s}\rangle\in\Sigma}} \int_{\Sigma_\mathbf{s}} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]/T\Big) \prod_{\mathbf{x}\in\Lambda} w(s(\mathbf{x}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{x})\,, \tag{4}$$

$$Q_\Lambda = \sum_{\rho(\mathbf{x})\in\{0,1\}^\Lambda} \int_{(\mathbb{R}^n)^{|\Lambda|}} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]/T\Big) \prod_{\mathbf{x}\in\Lambda} w(s(\mathbf{x}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{x})\,, \tag{5}$$

где $|\mathbf{s}(\mathbf{x})| = s(\mathbf{x})$ и введено обозначение $\Sigma_\mathbf{s} = \{\langle\mathbf{s}(\mathbf{x}); \mathbf{x}\in\boldsymbol{\Lambda}\rangle : \langle\langle\rho(\mathbf{x}),\mathbf{s}(\mathbf{x})\rangle; \mathbf{x}\in\boldsymbol{\Lambda}\rangle\in\boldsymbol{\Sigma}\}$.

Далее, в этой работе мы будем исследовать векторные модели, гамильтонианы которых содержат только парное взаимодействие между точками $\mathbf{x}\in\Lambda$. Такого рода функционалы определяются формулой

$$\mathsf{H}_\Lambda[\rho(\mathbf{x}),\mathbf{s}] = -\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}\rho(\mathbf{x})(\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{h}) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda^2} U(\mathbf{x}-\mathbf{y})\rho(\mathbf{x})I\big(\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{s}(\mathbf{y})\big)\rho(\mathbf{y})\,. \tag{6}$$

Здесь в первом слагаемом $(\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{h})$ обозначает скалярное произведение вектора $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ и постоянного вектора $\mathbf{h}$. Функция $U(\cdot) : \mathbb{Z}^d \mapsto \mathbb{R}$ обладает свойством $U(-\mathbf{x}) = U(\mathbf{x})$, $U(0) = 0$ и является суммируемой $\sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d}|U(\mathbf{x})| < \infty$. Кроме того, функция $I(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$ является симметричной относительно перестановок аргументов, ограниченной $|I(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)| \le I$, $\mathbf{s}_j\in\mathbb{R}^n$, $j = 1,2$ некоторой постоянной $I > 0$. Функция $I(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$ предполагается зависящей только от инвариантов пары векторов $\langle\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2\rangle$, то есть от $\mathbf{s}_1^2$, $\mathbf{s}_2^2$ и скалярного произведения $(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)$.

Для каждого $n = 1 \div |\Lambda|$ и непустого множества $X\subset\Lambda$, $|X| = m$ и связанного с ним набора $\langle\Sigma_{\mathbf{s}(\mathbf{x})}; \mathbf{x}\in X\rangle$ рассмотрим вероятности

$$\Pr\{\tilde\rho(\mathbf{x}) = 1 \vee \tilde{\mathbf{s}}(\mathbf{x})\in\Sigma_{\mathbf{s}(\mathbf{x})}; \mathbf{x}\in X\} = Q_\Lambda^{-1}\sum_{\rho\in\{0,1\}^\Lambda}\Big(\prod_{\mathbf{x}\in X}\rho(\mathbf{x})\Big)\times$$
$$\times \int_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{x})\in\Sigma_{\mathbf{s}(\mathbf{x})};\\ \mathbf{x}\in X}} \int_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{x})\in\mathbb{R}^n;\\ \mathbf{x}\in\Lambda\setminus X}} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]/T\Big)\prod_{\mathbf{y}\in\Lambda} w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})\,.$$

Здесь знаком «тильда» помечены случайные величины.

Введем плотности $f_m(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{x}\in X)$ распределения этих вероятностей, которые выражаются производными по мере $\prod_{\mathbf{x}\in X}\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{x})$ множества $\Sigma_\mathbf{s}$,

$$f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{x}\in X) = Q_\Lambda^{-1}\sum_{\rho\in\{0,1\}^\Lambda}\Big(\prod_{\mathbf{x}\in X}\rho(\mathbf{x})w(s(\mathbf{x}))\Big)\times$$
$$\times\int_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in\Lambda\setminus X}} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]/T\Big)\prod_{\mathbf{y}\in\Lambda\setminus X} w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})\,. \tag{7}$$

Тогда каждая из вероятностей $p(X) = \Pr\{\tilde\rho(\mathbf{x}) = 1; \mathbf{x}\in X\}$, $\varnothing\ne X\subset\Lambda$ определяется формулой

$$p(X) = \sum_{\rho\in\{0,1\}^\Lambda}\int_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in X}} f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{x}\in X)\prod_{\mathbf{y}\in X} w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y}) =$$
$$= Q_\Lambda^{-1}\sum_{\rho\in\{0,1\}^\Lambda}\Big(\prod_{\mathbf{x}\in X}\rho(\mathbf{x})w(s(\mathbf{x}))\Big)\int_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in\Lambda\setminus X}} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]/T\Big)\prod_{\mathbf{y}\in\Lambda\setminus X} w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y}).$$

Формулу (7) можно записать в иной форме, более удобной для решения той задачи, которой посвящена настоящая работа. Сопоставим каждой функции $\rho(\mathbf{x})$, множество $Z = \{\mathbf{z}\in\Lambda : \rho(\mathbf{z}) = 1\}$, в терминах которого запишем формулу (6) для гамильтониана системы

$$\mathsf{H}_\Lambda[\rho(\mathbf{x}),\mathbf{s}] \equiv H_\Lambda(Z;\mathbf{s}) = -\sum_{\mathbf{z}\in Z}(\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{h}) + \frac{1}{2}\sum_{\langle\mathbf{x},\mathbf{y}\rangle\in Z} U(\mathbf{x}-\mathbf{y})I\big(\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{s}(\mathbf{y})\big)\,. \tag{8}$$

Плотность $f_m^{(\Lambda)}(X; \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in X)$ в терминах такой функции $H(Z)$, $Z \subset \Lambda$ записывается в виде

$$f_m^{(\Lambda)}(X; \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in X) = Q_\Lambda^{-1}\Big(\prod_{\mathbf{x}\in X} w(s(\mathbf{x}))\Big) \times$$
$$\times \sum_{Y\subset \Lambda\setminus X} \int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in \mathbf{\Sigma}_{\mathbf{x}};\\ \mathbf{y}\in Y}} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y; \mathbf{s})/T\Big)\prod_{\mathbf{y}\in Y} w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y}), \tag{9}$$

$$Q_\Lambda = \sum_{X\subset\Lambda}\int_{\mathbf{s}(\mathbf{x});\mathbf{x}\in\mathbf{X}} \exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda(X; \mathbf{s})/T\Big)\prod_{\mathbf{x}\in X} w(s(\mathbf{x}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{x})\,. \tag{10}$$

3. Периодические условия. В статистической механике часто применяется аппроксимация, основанная на замене гамильтониана H_Λ гамильтонианом $\hat{\mathsf{H}}_\Lambda$, получаемом в результате отождествления противоположных граней параллелепипеда Λ, на котором определено пространство $\mathfrak{S}(\Lambda)$ состояний модели. Получаемая при этом модель называется моделью с периодическими граничными условиями, соответствующей исходной решеточной модели (см. [Минлос, 2002]). Использование модели с периодическими граничными условиями упрощает всевозможные конструкции в рамках статистической механики, связанные с вычислениями статистических и термодинамических характеристик модели и доказательства утверждений о ее качественных свойствах.

Обычно, понятие системы с периодическими граничными условиями вводится в том случае, когда взаимодействие обладает конечным радиусом [Минлос, 2002]. Однако при оценке энергии конкретного состояния, в частности, при решении задачи об определении основного состояния конечной системы статистической механики, совсем не очевидно, что аппроксимация исходного гамильтониана $\mathsf{H}_\Lambda[\cdot]$ системы, который физически не обладает конечным радиусом действия, каким-либо гамильтонианом конечного радиуса действия, приводит к близости вычисляемых величин.

В этом разделе мы вводим для каждой модели, определяемой гамильтонианом (6), понятие аппроксимирующей ее модели с периодическими граничными условиями в том случае, когда потенциал U не обладает конечным радиусом действия, и находим оценку близости энергий исходной и аппроксимирующей моделей для каждого состояния из $\mathfrak{S}(\Lambda)$.

Зафиксируем множество Λ и на его основе определим для каждой точки $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ действие оператора P_Λ проектирования. Точка $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ однозначно представима в виде $\mathbf{x} = (L+1)\sum_{j=1}^d n_j\mathbf{e}_j + \mathbf{y}$, $\mathbf{y} \in \Lambda$, $\mathbf{e}_j$ – орты в $\mathbb{R}^d$, $(\mathbf{e}_j)_i = \delta_{ij}$, $n_j \in \mathbb{Z}$, $i, j = 1 \div d$. Положим, по определению, $\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{x} = \mathbf{y}$.

Определение. *Гамильтониан*

$$\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}] = -\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}\rho(\mathbf{x})(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{h}) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{x}\in\Lambda,\\ \mathbf{y}\in\mathbb{Z}^d, \mathbf{y}\neq\mathbf{x}}} U(\mathbf{x}-\mathbf{y})\rho(\mathbf{x})I\Big(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y})\Big)\rho(\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y}) \tag{11}$$

назовем гамильтонианом с периодическими граничными условиями, аппроксимирующим гамильтониан $\mathsf{H}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}]$.

Сопоставив каждой функции $\rho(\mathbf{x})$ множество $Z = \{\mathbf{x} \in \Lambda : \rho(\mathbf{x}) = 1\}$, формулу (11), определяющую гамильтониан с периодическими условиями, запишем в виде

$$\hat{\mathsf{H}}_\Lambda(Z; \mathbf{s}) = -\sum_{\mathbf{x}\in X}(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{h}) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{x}\in Z,\\ \mathbf{y}\in\mathbb{Z}^d:\mathbf{x}\neq\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y}\in Z}} U(\mathbf{x}-\mathbf{y})I\big(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y})\big)\,. \tag{12}$$

Нормой $\|\cdot\|_0$ гамильтониана $\hat{\mathsf{H}}_\Lambda$ называется число

$$\|\mathsf{H}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}]\|_0 = \max\{|\Lambda|^{-1}|\mathsf{H}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}]| : \langle\rho(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}); \mathbf{x}\in\Lambda\rangle \in \mathfrak{S}(\Lambda), \Lambda\subset\mathbb{Z}^d\}\,. \tag{13}$$

В случае гамильтониана с конечным радиусом действия, очевидно, что разность между энергиями $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]$ и $\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]$ должна быть пропорциональна площади поверхности кристалла, то есть L^{d-1} при $L \to \infty$. Если же взаимодействие является дальнодействующим, то такая оценка может быть слабее.

Для получения оценок близости по норме $\|\cdot\|_0$ гамильтонианов $\mathsf{H}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}]$ и $\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}]$ установим предварительно следующую простую геометрическую оценку

Лемма. *Для любой точки* $\mathbf{z} \in \mathbb{Z}^d$ *имеет место следующее неравенство*

$$|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z})| \le dL^{d-1}\max\{|z_j|; j = 1, ..., d\} \equiv dL^{d-1}\|\mathbf{z}\| \tag{14}$$

и при $|\mathbf{z}| > L\sqrt{d} + 1$ *выполняется* $|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = 0$.

□ Любая точка $\mathbf{x} \in \Lambda$ после сдвига вдоль одной из осей на величину L приведет к тому, что она либо выйдет за пределы Λ, либо перейдет в граничную точку Λ. Тогда сдвиг на любой вектор $\mathbf{z} = L\sum_{j=1}^{d}\theta_j\mathbf{e}_j$, $\theta_j \in \{0,1\}$ приведет к тому, что она выйдет за пределы Λ, либо попадет в угловую точку Λ. Длина вектора $\mathbf{z}$ в этом случае не превосходит $L\sqrt{d}$. Тогда точка $\mathbf{x}$, наверняка, выйдет за пределы Λ, если $|\mathbf{z}| > L\sqrt{d}$. Ввиду того, что точка $\mathbf{x} \in \Lambda$ выбрана произвольно, то $\Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z}) = \varnothing$, если $|\mathbf{z}| \geq L\sqrt{d} + 1$. Отсюда следует последнее равенство в формулировке леммы.

Доказательство неравенства (14) проведем индукцией по d. При $d = 1$ и $|\mathbf{z}| \leq L$ имеем точное равенство, так как $\Lambda = \{0, 1, ..., L\}$ и $\Lambda + \mathbf{z} = \{z, z+1, ..., z+L\}$. Тогда $|\Lambda \cap (\mathbb{Z} \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = L - (L - |z|) = |z|$.

Пусть неравенство (14) имеет место для значения d. Тогда, так как, в общем случае,

$$|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = (L+1)^d - \prod_{j=1}^{d}(L + 1 - |z_j|)\,,$$

то для значения $(d+1)$ и любой точки $\mathbf{z} = \langle z_1, ..., z_d, z_{d+1}\rangle$, имеем, согласно предположению индукции,

$$|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^{d+1} \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = (L+1)^{d+1} - \prod_{j=1}^{d+1}(L + 1 - |z_j|) =$$

$$= (L+1)\Big((L+1)^d - \prod_{j=1}^{d}(L+1-|z_j|)\Big) + \Big((L+1)\prod_{j=1}^{d}(L+1-|z_j|) - \prod_{j=1}^{d+1}(L+1-|z_j|)\Big) \leq$$

$$\leq dL^d \max\{|z_j|; j = 1, ..., d\} + \Big(\prod_{j=1}^{d}(L+1-|z_j|)\Big)(L + 1 - (L + 1 - |z_{d+1}|)) \leq$$

$$\leq d(L+1)^d \max\{|z_j|; j = 1, ..., d\} + (L+1)^d|z_{d+1}| \leq (d+1)(L+1)^d \max\{|z_j|; j = 1, ..., d+1\}. \blacksquare$$

Из полученной геометрической оценки следует оценка близости энергий произвольного состояния $\langle\rho(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x})\rangle$, $\mathbf{x} \in \Lambda$, вычисленных на основе гамильтонианов H_Λ и $\hat{\mathsf{H}}_\Lambda$.

Теорема. *Имеет место следующее неравенство:*

$$\|\mathsf{H}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}] - \tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}]\|_0 \leq \frac{dI}{2(L+1)} \sum_{\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d : \mathbf{z} \neq 0} |U(\mathbf{z})|\, \|\mathbf{z}\|\,. \tag{15}$$

□ Очевидны следующие неравенства:

$$|\mathsf{H}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}] - \hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\rho, \mathbf{s}]| \leq \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{x} \in \Lambda, \\ \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda}} |U(\mathbf{x} - \mathbf{y})| \Big| I\Big(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda \mathbf{y})\Big)\Big| \leq$$

$$\leq \frac{I}{2} \sum_{\substack{\mathbf{x} \in \Lambda, \\ \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda}} |U(\mathbf{x} - \mathbf{y})| = \frac{I}{2} \sum_{z \in \mathbb{Z}^d : \mathbf{z} \neq 0} |U(\mathbf{z})|\, |\Gamma(\mathbf{z}; \Lambda)|\,, \tag{16}$$

где $\Gamma(\mathbf{z}; \Lambda) = \{\langle\mathbf{x}, \mathbf{y}\rangle : \mathbf{x} - \mathbf{y} = \mathbf{z}, \mathbf{x} \in \Lambda, \mathbf{y} \notin \Lambda\}$.

Каждая пара, принадлежащая $\Gamma(\mathbf{z}, \Lambda)$, взаимно однозначным образом определяется точкой $\mathbf{x} \in \Lambda$ так, что $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{z} \notin \Lambda$. При этом $\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{z} \in \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z}$. Следовательно,

$$\{\mathbf{x} : \langle\mathbf{x}, \mathbf{y}\rangle \in \Gamma(\mathbf{z}, \Lambda)\} \subset \{\mathbf{x} : \mathbf{x} \in \Lambda, \mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z}\} = \Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z})\,.$$

Тогда $|\Gamma(\mathbf{z}, \Lambda)| \leq |\Lambda \cap ((\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda) + \mathbf{z})|$. Поэтому, применив оценку (14), получаем (15). $\blacksquare$

Из полученной оценки (15) разности энергий следует, что для дальнодействующих взаимодействий с конечной нормой $\|\cdot\|_0$, для которых

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d} |U(\mathbf{x})|\, \|\mathbf{x}\| = \infty\,,$$

разность (15) возрастает быстрее, чем площадь поверхности Λ. Это затрудняет использование аппроксимации исходной системы соответствующей ей системой с периодическими граничными условиями в случае дальнодействующих потенциалов взаимодействия. Этот факт был отмечен в работах [Клюев, Вирченко 2015], [Вирченко, 1991]. Тем не менее, справедливо

Следствие. *Если* $\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]$ *имеет конечную норму, то при термодинамическом предельном переходе имеет место*

$$\lim_{|\Lambda|\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}|\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]-\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]|=0\,. \tag{17}$$

□ Так как $\|\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]\|_0<\infty$, то $\sum_{\mathbf{z}\in\mathbb{Z}^d}|U(\mathbf{z})|<\infty$. Для функций $U(\cdot)$ такого типа имеет место

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\sum_{\mathbf{z}\in\Lambda}|U(\mathbf{z})|\|\mathbf{z}\|=0\,.$$

В самом деле, выберем произвольное число $\varepsilon>0$ и найдем такой размер L_ε, для которого

$$\sum_{\mathbf{z}\,:|\mathbf{z}|>L_\varepsilon}|U(\mathbf{z})|<\varepsilon\,.$$

Тогда при $L>L_\varepsilon$ справедлива оценка

$$\sum_{\mathbf{z}\in\Lambda}|U(\mathbf{z})|\|\mathbf{z}\|=\sum_{\mathbf{z}\in\Lambda\,:|\mathbf{z}|>L_\varepsilon}|U(\mathbf{z})|\,\|\mathbf{z}\|+\sum_{\mathbf{z}\in\Lambda\,:|\mathbf{z}|\le L_\varepsilon}|U(\mathbf{z})|\,\|\mathbf{z}\|\,.$$

Для оценки первой суммы используем неравенство $\|\mathbf{z}\|<L$ при фиксированном L_ε,

$$\sum_{\mathbf{z}\in\Lambda}|U(\mathbf{z})|\|\mathbf{z}\|<\varepsilon L+\sum_{\mathbf{z}\in\Lambda\,:|\mathbf{z}|\le L_\varepsilon}|U(\mathbf{z})|\,\|\mathbf{z}\|\,.$$

Подставим эту оценку в (15), где учтем, что при $|\mathbf{z}|>L\sqrt{d}+1$, $\Lambda\cap((\mathbb{Z}^d\setminus\Lambda)+\mathbf{z})=\varnothing$,

$$|\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]-\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]|<\frac{1}{2}\,d(L+1)^{d-1}I\sum_{\substack{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d\,:\,\mathbf{z}\ne 0\\ |\mathbf{z}|\le L\sqrt{d}+1}}|U(\mathbf{z})|\,\|\mathbf{z}\|<$$

$$<\frac{1}{2}\,dL^dI\varepsilon+\frac{1}{2}\,d(L+1)^{d-1}I\sum_{\substack{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d\,:\,\mathbf{z}\ne 0,|\mathbf{z}|\le L_\varepsilon\\ |\mathbf{z}|\le L\sqrt{d}+1}}|U(\mathbf{z})|\,\|\mathbf{z}\|\,,$$

так как $L\sqrt{d}+1>L_\varepsilon$. Поделим обе части неравенства на $|\Lambda|=L^d$ и перейдем к пределу $L\to\infty$. В результате, так как второе слагаемое в правой части стремится к нулю при фиксированной величине L_ε, то мы получим, что

$$\lim_{|\Lambda|\to\infty}\frac{1}{|\Lambda|}|\mathsf{H}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]-\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\rho,\mathbf{s}]|\le\varepsilon\,.$$

Ввиду произвольности величины $\varepsilon>0$, получаем (17). ■

4. Интегральные уравнения для плотностей f_m. Выведем систему уравнений для плотностей $f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{x}\in X)$ модели решеточного газа с парным потенциалом U, аналогичную системе, введенной в работе [Пастур, 1974], при изучении модели решеточного газа. При ее выводе используется схема рассуждений, аналогичная той (см. [Рюэль, 1971]), которая используется для анализа многочастичных конфигурационных функций в статистической механике непрерывных систем.

Пусть $X=\{\mathbf{x}:\rho(\mathbf{x})=1\}\subset\Lambda$. Воспользовавшись формулой (12), запишем выражение (7) для плотностей $f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{x}\in X)$ в следующем виде:

$$f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{x}\in X)=Q_\Lambda^{-1}\sum_{Y\subset\Lambda\setminus X}\Big(\prod_{\mathbf{x}\in X}w(s(\mathbf{x}))\Big)\times$$

$$\times\int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n\,:\\ \mathbf{y}\in Y}}\exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y;\mathbf{s})/T\Big)\prod_{\mathbf{y}\in Y}w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})\,. \tag{18}$$

Введем в рассмотрение функцию $K(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2;\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)=\exp(-U(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)I(\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2)/T)-1$, определенную для каждых $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2\in\mathbb{Z}^d$, $\mathbf{s}_1,\mathbf{s}_2\in\mathbb{R}^n$, а также следующую функцию на $\mathbb{Z}^d\times\mathfrak{P}(\mathbb{Z}^d)$, где $\mathfrak{P}(\mathbb{Z}^d)$ – семейство всех конечных подмножеств $\mathbb{Z}^d$:

$$W_\Lambda(\mathbf{x};X;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X)=\exp\Big([(\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{h})-\sum_{\substack{\mathbf{x}\in X,\mathbf{y}\in\mathbb{Z}^d:\\ \mathbf{x}\ne\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y}\in X}}U(\mathbf{x}-\mathbf{y})I\big(\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y})\big)]/T\Big)\,,$$

$W_\Lambda(\mathbf{x};\varnothing)=1$. Тогда для любых $X\subset\Lambda\setminus\{\mathbf{x}\}$, $Y\subset\Lambda\setminus\{\mathbf{x}\}$, $X\cap Y=\varnothing$ имеет место

$$\exp\big(-\mathsf{H}_\Lambda(\{\mathbf{x}\}\cup X\cup Y;\mathbf{s})/T\big)=$$
$$=W_\Lambda(\mathbf{x};X;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X)W_\Lambda(\mathbf{x};Y;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in Y)\exp\big(-\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y;\mathbf{s})/T\big)=$$
$$=W_\Lambda(\mathbf{x};X;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X)\prod_{\mathbf{y}\in Y}\Big(1+K(\mathbf{x}-\mathbf{y};\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{s}(\mathbf{y}))\Big)\exp\big(-\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y;\mathbf{s})/T\big)\,. \tag{19}$$

Это равенство сохраняется и при $|X\cup Y|=1$, так как в этом случае $\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y;\mathbf{s})=\exp((\mathbf{h},\mathbf{s}(\mathbf{z})))$, где $\mathbf{z}=\mathbf{x},\mathbf{y}$, в зависимости от того, какое из множеств пусто.

Определим, далее, функцию

$$K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y)=\Big\{\prod_{\mathbf{y}\in Y}K(\mathbf{x}-\mathbf{y};\mathbf{s},\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in Y),\ \text{при } |Y|>0\,;\ \ 1,\ \text{при } |Y|=0\,.\Big\}$$

такую, что

$$\prod_{\mathbf{y}\in Z}\Big(1+K(\mathbf{x}-\mathbf{y};\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{s}(\mathbf{y}))\Big)=\sum_{Y\subset Z}\prod_{\mathbf{y}\in Y}K(\mathbf{x}-\mathbf{y};\mathbf{s}(\mathbf{x}),\mathbf{s}(\mathbf{y}))=\sum_{Y\subset Z}K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y). \tag{20}$$

Наконец, введем в рассмотрение пространство $\mathfrak{E}_\Lambda$ всех наборов $\mathsf{f}^\lambda=\langle f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\ \mathbf{x}\in X):\varnothing\neq X\subset\Lambda\rangle$ функций с $\mathbf{s}(\mathbf{x})\in\mathbb{R}^n$, $\mathbf{x}\in\Lambda$.

Подставим (19), вместе с (20), в выражение для $f_{m+1}^{(\Lambda)}(X\cup\{\mathbf{x}\};\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X\cup\{x\})$ с $X\subset\Lambda\setminus\{\mathbf{x}\}$, получаемое на основе (18):

$$f_{m+1}^{(\Lambda)}(X\cup\{\mathbf{x}\};\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X\cup\{\mathbf{x}\})=w(\mathbf{s}(\mathbf{x}))W_\Lambda(\mathbf{x};X;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X)\ \times$$
$$\times Q_\Lambda^{-1}\sum_{Y\subset\Lambda\setminus X\cup\{\mathbf{x}\}}\ \sum_{\substack{Z:\,Y\subset Z,\\ Z\subset\Lambda\setminus X\cup\{\mathbf{x}\}}}\Big(\prod_{\mathbf{y}\in X}w(s(\mathbf{y}))\Big)\int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in Y}}K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y)\times$$
$$\times\exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y;\mathbf{s})/T\Big)\prod_{\mathbf{y}\in Y}w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y}) \tag{21}$$

и произведем следующие преобразования суммы:

$$Q_\Lambda^{-1}\sum_{Y\subset\Lambda\setminus X\cup\{\mathbf{x}\}}\ \sum_{\substack{Z:\,Y\subset Z,\\ Z\subset\Lambda\setminus X\cup\{\mathbf{x}\}}}\Big(\prod_{\mathbf{y}\in X}w(s(\mathbf{y}))\Big)\int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in Y}}K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y)\times$$
$$\times\exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y;\mathbf{s})/T\Big)\prod_{\mathbf{y}\in Y}w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})=$$
$$=\sum_{Y\subset\Lambda\setminus X\cup\{\mathbf{x}\}}\ \int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in Y}}K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y)\prod_{\mathbf{y}\in X\cup Y}w(s(\mathbf{y}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})\ \times$$
$$\times Q_\Lambda^{-1}\sum_{Z\subset\Lambda\setminus(X\cup Y\cup\{\mathbf{x}\})}\ \int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{z})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{z}\in\Lambda Z}}\exp\Big(-\mathsf{H}_\Lambda(X\cup Y\cup Z;\mathbf{s})/T\Big)\prod_{\mathbf{z}\in Z}w(s(\mathbf{z}))\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{z})=$$
$$=\sum_{Y\subset\Lambda\setminus(X\cup\{\mathbf{x}\})}\ \int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in Y}}K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y)\ \times$$
$$\times\big[f_{m+|Y|}^{(\Lambda)}(X\cup Y;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup Y)-f_{m+1+|Y|}^{(\Lambda)}(\{\mathbf{x}\}\cup X\cup Y;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup Y\cup\{\mathbf{x}\})\big]\prod_{\mathbf{y}\in Y}\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})\,,$$

так как $\sum_{Z\subset\Lambda\setminus(\{\mathbf{x}\}\cup X\cup Y)}(\cdot)=\sum_{Z\subset\Lambda\setminus(X\cup Y)}(\cdot)-\sum_{\mathbf{x}\in Z\subset\Lambda\setminus(X\cup Y)}(\cdot)$. Подставим полученное выражение в (21). Выделив слагаемые с $Y=\varnothing$, получаем систему линейных алгебраических тождеств набора плотностей распределения вероятностей $f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{x}),\ \mathbf{x}\in X)$ с $\mathbf{s}(\mathbf{x})\in\mathbb{R}^n$, $\mathbf{x}\in X$, $\varnothing\neq X\subset\Lambda$:

$$f_{m+1}^{(\Lambda)}(X\cup\{\mathbf{x}\};\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X\cup\{\mathbf{x}\})=w(\mathbf{s}(\mathbf{x}))W_\Lambda(\mathbf{x};X;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X)\ \times$$

$$\times\Big[f_m^{(\Lambda)}(X;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X)-f_{m+1}^{(\Lambda)}(\{\mathbf{x}\}\cup X;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup\{\mathbf{x}\})+$$

$$+\sum_{Y\subset\Lambda\backslash(X\cup\{\mathbf{x}\})}\int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in Y}} K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y)\times$$

$$\times\big[f_{m+|Y|}^{(\Lambda)}(X\cup Y;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup Y)-f_{m+1+|Y|}^{(\Lambda)}(\{\mathbf{x}\}\cup X\cup Y;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup Y\cup\{\mathbf{x}\})\big]\prod_{\mathbf{y}\in Y}\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})\Big]. \quad (22)$$

Таким образом, нами получена система интегральных уравнений Фредгольма 2-го рода, которой подчинен набор плотностей распределения для векторных решетчатых моделей.

Можно показать, что эту систему можно рассматривать в пространстве $\mathfrak{E}_\Lambda$. В связи с этим, ее вид не зависит от выбора точки $\mathbf{x}$ в каждом из множеств $X\cup\{\mathbf{x}\}\subset\Lambda$. Поэтому ее выбор можно унифицировать. Будем полагать, что в каждом $X\subset\Lambda$ эта точка выбирается первой в смысле лексикографического порядка на решетке $\mathbb{Z}^d$.

Наконец, укажем, что предельные плотности $f_m(X;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X)$, $m\in\mathbb{N}$, $\varnothing\neq X\subset\mathbb{Z}^d$, получаемые при термодинамическом предельном переходе $\Lambda\to\mathbb{Z}^d$, должны удовлетворять следующей предельной системе интегральных уравнений:

$$f_{m+1}(X\cup\{\mathbf{x}\};\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X\cup\{\mathbf{x}\})=w(\mathbf{s}(\mathbf{x}))W(\mathbf{x};X;\mathbf{s}(\mathbf{y}),\mathbf{y}\in X)\times$$

$$\times\Big[f_m(X;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X)-f_{m+1}(\{\mathbf{x}\}\cup X;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup\{\mathbf{x}\})+$$

$$+\sum_{Y\subset\mathbb{Z}^d\backslash(X\cup\{\mathbf{x}\})}\int\limits_{\substack{\mathbf{s}(\mathbf{y})\in\mathbb{R}^n:\\ \mathbf{y}\in Y}} K(\mathbf{x},\mathbf{s};Y;\mathbf{s}(y),\mathbf{y}\in Y)\times$$

$$\times\big[f_{m+|Y|}(X\cup Y;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup Y)-f_{m+1+|Y|}(\{\mathbf{x}\}\cup X\cup Y;\mathbf{s}(\mathbf{z}),\mathbf{z}\in X\cup Y\cup\{\mathbf{x}\})\big]\prod_{\mathbf{y}\in Y}\mathrm{d}\mathbf{s}(\mathbf{y})\Big]. \quad (23)$$

Эта система может рассматриваться как видоизменение, по отношению к классическим векторным решетчатым моделям, известной системы интегральных уравнений Кирквуда – Зальцбурга [Kirkwood, Salsburg, 1953] в статистической механике непрерывных моделей.

Список литературы

1. Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. 1967. Спиновые волны. М., Наука, 368.
2. Вирченко Ю. П. 1991. К теории основного состояния обменной модели Гейзенберга. Проблемы теоретической физики. Киев: Наукова думка, 80–96.
3. Добрушин Р. Л. 1968. Гиббсовские случайные поля для решетчатых систем с попарным взаимодействием. Функциональный анализ и его приложения, 4(1): 31–43.
4. Клюев А. С., Вирченко Ю. П. 2015. Оценка энергии векторной решеточной модели с периодическими граничными условиями. Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Математика. Физика, 11(208)(39): 121–125.
5. Минлос Р. А. 1968. Лекции по статистической физике. Успехи мат. наук, 1: 133–190.
6. Минлос Р. А. 2002. Введение в математическую статистическую физику. М., МЦНМО, 111.
7. Пастур Л. А. 1974. Спектральная теория уравнений Кирквуда – Зальцбурга в конечном объеме. Теорет. и матем. физика, 18(2): 233–242.
8. Рюэль Д. 1971. Статистическая механика. Строгие результаты. М., Мир, 367.
9. Gallavotti G., Miracle-Sole S. 1967. Statistical Mechanics of Lattice Systems. Commun. Math. Phys, 5: 317–323.
10. Gallavotti G. Statistical mechanics. 1999. Roma: Dipartimento di Fisica Universitá di Roma, 349.
11. de Lacheisserie E., Gignoux D., Schlenker M. 2005. Magnetism: Fundamentals. Springer, 1: 315–317.
12. Kirkwood J. G., Salsburg Z. 1953. W. The statistical mechanical theory of molecular distribution functions in liquids. Discussion of the Faraday Society, 15(1): 28–34.

13. Stohr J., Siegmann H. C. 2006. Magnetism: From Fundamentals to Nanoscale Dynamics. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 290–293.

References

1. Akhiezer A. I., Baryakhtar V. G., Peletminsky S. V. 1967. Spinovye volny [Spin waves]. M., Nauka, 368.
2. Virchenko Yu. P. 1991. K teorii osnovnogo sostoyaniya obmennoj modeli Gejzenberga [On the theory of the ground state of the Heisenberg exchange model]. Problemy teoreticheskoj fiziki. Kiev: Naukova dumka, 80–96.
3. Dobrushin R. L. 1968. Gibbsovskie sluchajnye polya dlya reshetchatyh sistem s poparnym vzaimodejstviem [Gibbs random fields for lattice systems with pairwise interaction]. Funkcional'nyj analiz i ego prilozheniya, 4(1): 31–43.
4. Klyuev A. S., Virchenko Yu. P. 2015. Ocenka energii vektornoj reshetochnoj modeli s periodicheskimi granichnymi usloviyami [Energy estimation of a vector lattice model with periodic boundary conditions]. Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Matematika. Fizika, 11(208)(39): 121–125.
5. Minlos R. A. 1968. Lekcii po statisticheskoj fizike [Lectures on statistical physics]. Uspekhi mat. nauk, 1: 33–190.
6. Minlos R. A. 2002. Vvedenie v matematicheskuyu statisticheskuyu fiziku [Introduction to mathematical statistical physics]. M., MCNMO, 111.
7. Pastur L. A. 1974. Spektral'naya teoriya uravnenij Kirkvuda-Zal'cburga v konechnom ob"eme [The spectral theory of the Kirkwood – Salzburg equations within the corresponding limits]. Teoret. i matem. fizika, 18(2): 233-242.
8. Ruelle D. 1969. Statistical Mechanics. Rigorous Results. New York-Amsterdam: W. A. Benjamin, Inc, 367.
9. Gallavotti G., Miracle-Sole S. 1967. Statistical Mechanics of Lattice Systems. Commun. Math. Phys. 5: 317–323.
10. Gallavotti G. Statistical mechanics. 1999. Roma: Dipartimento di Fisica Universitá di Roma, 349.
11. de Lacheisserie E., Gignoux D., Schlenker M. 2005. Magnetism: Fundamentals. Springer, 1: 315–317.
12. Kirkwood J. G., Salsburg Z. 1953. W. The statistical mechanical theory of molecular distribution functions in liquids. Discussion of the Faraday Society. 15(1): 28-34.
13. Stohr J., Siegmann H. C. 2006. Magnetism: From Fundamentals to Nanoscale Dynamics. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 290–293.

Получена 01.02.2020

Вирченко Юрий Петрович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры теоретической и математической физики института инженерных и цифровых технологий Белгородского государственного национального исследователького университета

ул. Победы, 85, г. Белгород, Россия, 308015

E-mail: virch@bsu.edu.ru

Московченко Екатерина Юрьевна – аспирантка первого года обучения кафедры прикладной математики и компьютерного моделирования института инженерных и цифровых технологий Белгородского государственного национального исследователького университета

ул. Победы, 85, г. Белгород, Россия, 308015

E-mail: 1079708@bsu.edu.ru