СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р5 - 10237

А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СРЕДНИХ В РАМКАХ МЕТОДА Н.Н.БОГОЛЮБОВА(мл.) ДЛЯ МИНИМАКСНОЙ ЗАДАЧИ ОБЩЕГО ВИДА

1976

P5 - 10237

А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СРЕДНИХ В РАМКАХ МЕТОДА Н.Н.БОГОЛЮБОВА(мл.) ДЛЯ МИНИМАКСНОЙ ЗАДАЧИ ОБЩЕГО ВИДА

Ермилов А.Н., Курбатов А.М.

Р5 - 10237

Вычисление термодинамических средних в рамках метода Н.Н.Боголюбова (мл.) для минимаксной задачи общего вида

В настоящей работе реализована программа точного в термодинамическом пределе вычисления статистических средних в рамках метода Н.Н.Боголюбова (мл.), намеченная в работе [4].

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

Ermilov A.N., Kurbatov A.M.

P5 - 10237

Calculation of Thermodynamical Averages in the Frame of N.N.Bogolubov (Jr.) Method for Minimax Problem of General Form

In the present paper the program of thermodynamical exact calculation of statistical averages outlined in paper [4] is implemented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1976

I. ВВЕДЕНИЕ

При исследовании многочастичных квантовых систем значительный успех был достигнут в рамках метода Н.Н.Боголюбова (мл.) [1, 2]. Суть этого метода состоит в переходе от задачи с исходным модельным гамильтонианом, решение которой не представляется возможным прямыми методами, к точно решаемой модельной задаче с определенным образом конструируемым аппроксимирующим гамильтонианом с последующим доказательством того, что свободные энергии, корреляционные функции и термодинамические средние, вычисленные на основе этих гамильтонианов,совпадают в термодинамическом пределе. Следует подчеркнуть необходимость доказательства асимптотической близости статистических средних операторов, входящих в модельный гамильтониан, т.к. они являются наблюдаемыми исследуемой системы (напр.,намагниченность, параметр энергетической щели и т.п.) и их аналитические свойства представляют нам точную картину поведения физических характеристик системы в термодинамическом пределе,в том числе позволяют судить о наличии в системе тех или иных важных свойств. В частности,именно термодинамические средние позволяют определить возможность фазового превращения.

Вопрос об асимптотической близости термодинамических средних, вычисленных на основе термодинамически эквивалентных гамильтонианов (в смысле Вентцеля [3]), был проанализирован в работе [4] на примере модели с четырехфермионным отрицательным взаимодействием. Методом, развитым в этой работе,случай дальнодействующего ферромагнитного взаимодействия рассматривался в [5].

В настоящей работе исследование вопроса асимптотически точного вычисления термодинамических средних проводится для широкого класса гамильтонианов, содержащих члены как с отрицательным, так и с положительным взаимодействием общего вида. Результаты нашей работы дают возможность при изучении как конкретных задач, так и целых классов модельных систем ограничиться доказательством лишь асимптотической близости свободных энергий модельного и аппроксимирующего гамильтонианов, поскольку, как показано ниже, из этого следует совпадение в термодинамическом пределе соответствующих средних во всех точках, в которых отсутствует фазовый переход.

В связи с этим следует отметить, что в терминах функции свободной энергии наличие фазового перехода в некоторой точке означает разрыв первой производной функции свободной энергии по соответствующему источнику или же тот факт, что ее не существует. Поэтому требуемое в рамках настоящей работы существование некоторых производных по источникам означает, что асимптотически точное вычисление термодинамических средних проводится вне точек фазового перехода.

2. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ЗНАЧЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКИХ СРЕДНИХ КАК ПРОИЗВОДНЫЕ ПРЕДЕЛЬНОЙ ФУНКЦИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ПО ИСТОЧНИКАМ

Итак, рассмотрим следующий класс модельных гамильтонианов:

$$H = T - V\sum_{i=1}^{\tau} \gamma_i A_i A_i^+ + V\sum_{j=\tau+1}^{\tau+s} \gamma_j A_j A_j^+ + V\sum_{m=1}^{\tau+s} (\nu_m A_m^+ + \nu_m^+ A_m), \qquad (\mathrm{I})$$

где $T = T^+$, A_m, A_m^+ – динамические операторы или конструкции из них, которые в данной работе не конкретизируются, γ_m – положительные числа, V – объем системы.*)

---

*) Здесь и далее индекс m пробегает значения от 1 до $\tau+s$, индексы i и ℓ – от 1 до τ, j и t – от $\tau+1$ до $\tau+s$. Кроме того, индекс k принимает произвольное фиксированное значение от 1 до $\tau+s$, индекс p – произвольное фиксированное значение от 1 до τ и индекс q – произвольное фиксированное значение от $\tau+1$ до $\tau+s$.

Данный класс моделей включает в себя многочисленные физически важные гамильтонианы. Примеры конкретных моделей можно найти в работах /I,2,4-II/.

В соответствии с /2/ аппроксимирующий гамильтониан имеет вид

$$H_0(\bar{a}^{(V)}) = T - V\sum_{i=1}^{\tau} \gamma_i (\bar{a}_i^{(V)} A_i^+ + \bar{a}_i^{(V)+} A_i - \bar{a}_i^{(V)} \bar{a}_i^{(V)+}) + V\sum_{j=\tau+1}^{\tau+s} \gamma_j (\bar{a}_j^{(V)} A_j^+ + \bar{a}_j^{(V)+} A_j - \bar{a}_j^{(V)} \bar{a}_j^{(V)+}) - V\sum_{m=1}^{\tau+s} (\nu_m A_m^+ + \nu_m^+ A_m), \qquad (2)$$

где постоянные $\bar{a}_m^{(V)}$ определяются из условия минимакса: сначала $\tilde{a}_j^{(V)}$ определяются как функции a_i согласно условию абсолютного максимума функции свободной энергии

$$f_V[\Gamma] = -\frac{\theta}{V} \ln \mathrm{Sp}\, e^{-\frac{\Gamma}{\theta}}$$

для аппроксимирующего гамильтониана $H_0(a)$ по переменным a_j

$$f_V[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(V)}(a_i))] = \max_{a_j} f_V[H_0(a_i, a_j)], \qquad (3)$$

а затем $\bar{a}_m^{(V)}$ из условия

$$f_V[H_0(\bar{a}_i^{(V)}, \tilde{a}_j^{(V)}(\bar{a}_i^{(V)}))] = \min_{a_i} f_V[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(V)}(a_i))], \qquad (4)$$

$$\bar{a}_j^{(V)} = \tilde{a}_j^{(V)}(\bar{a}_i^{(V)}). \qquad (5)$$

В любой точке ν дифференцируемости $f_V[H]$ и $f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]$ по источнику ν_k

$$\frac{\partial f_V[H]}{\partial \nu_k} = \langle A_k^+ \rangle_H^{(V)}, \qquad \frac{\partial f_V[H]}{\partial \nu_k^+} = \langle A_k \rangle_H^{(V)}, \qquad (6)$$

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial \nu_k} = \langle A_k^+ \rangle_{H(\bar{a}^{(V)})}^{(V)}, \qquad \frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial \nu_k^+} = \langle A_k \rangle_{H(\bar{a}^{(V)})}^{(V)}. \qquad (7)$$

Обозначая $\nu_m = x_m + i y_m$, находим, что в каждой точке ν дифференцируемости $f_V[H]$ и $f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]$ по ν_k

$$\frac{\partial f_V[H]}{\partial x_k} = \langle A_k^+ + A_k \rangle_H^{(V)}, \qquad \frac{\partial f_V[H]}{\partial y_k} = i\langle A_k^+ - A_k \rangle_H^{(V)}, \qquad (8)$$

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial x_k} = \langle A_k^+ + A_k \rangle^{(V)}_{H_0(\bar{a}^{(V)})}, \quad \frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial y_k} = i \langle A_k^+ - A_k \rangle^{(V)}_{H_0(\bar{a}^{(V)})}, \tag{9}$$

откуда

$$\langle A_k \rangle^{(V)}_H = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial f_V[H]}{\partial x_k} + i \frac{\partial f_V[H]}{\partial y_k} \right\}, \tag{I0}$$

$$\langle A_k \rangle^{(V)}_{H_0(\bar{a}^{(V)})} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial x_k} + i \frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial y_k} \right\}. \tag{II}$$

Таким образом, для того чтобы исследовать асимптотическое поведение термодинамических средних $\langle A_k \rangle^{(V)}_H$ и $\langle A_k \rangle^{(V)}_{H_0(\bar{a}^{(V)})}$ необходимо рассмотреть производные соответствующих функций свободной энергии по действительной и мнимой частям источника ν_k:

$$\frac{\partial f_V[H]}{\partial x_k}, \quad \frac{\partial f_V[H]}{\partial y_k}, \quad \frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial x_k}, \quad \frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]}{\partial y_k}.$$

Свободные энергии $f_V[H]$ и $f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]$ являются вещественными функциями вещественных аргументов x_k и y_k, причем они имеют вид

$$f_V[\mathfrak{A} + t \cdot \mathfrak{B}], \quad (t = x_k, y_k;\ \mathfrak{A}^+ = \mathfrak{A},\ \mathfrak{B}^+ = \mathfrak{B}).$$

Так, например,

$$f_V[H] = f_V\Big[T - V \sum_{i=1}^{l} \gamma_i A_i A_i^+ + V \sum_{j=l+1}^{l+s} \gamma_j A_j A_j^+ + V \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^{l+s} (\nu_m A_m^+ + \nu_m^+ A_m)$$
$$+ i y_k V (A_k^+ - A_k) + x_k V (A_k^+ + A_k)\Big] = f_V[\mathfrak{A}^{(H)}_{x_k} + x_k \cdot \mathfrak{B}^{(H)}_{x_k}].$$

Для всех реальных систем вторые частные производные свободных энергий $f_V[H]$ и $f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]$ как функции x_k (y_k) существуют на любом интервале $(x_k^{(1)}, x_k^{(2)})$ ($(y_k^{(1)}, y_k^{(2)})$) всюду за исключением, быть может, конечного числа точек. Действительно, с точки зрения физики отсутствие в некоторой точке ν второй производной функции свободной энергии по источнику означает либо наличие в этой точке фазового перехода первого или второго рода, либо скачкообразное изменение термодинамических параметров системы, допускаемое определенной симметрией системы, при снятии ее включением источников; но первая возможность в термодинамических системах может

реализовываться на любом интервале не более, чем в конечном числе точек, а вторая лишь при нулевых значениях источников.

В связи с этим следует заметить, что накладываемые ниже условия существования производных по источникам при исследовании поведения термодинамических средних в некоторой точке ν не исключают получения их асимптотического значения в физически важных случаях нулевых источников, т.к. вычисление термодинамических средних в этих точках проводится согласно концепции квазисредних, а именно, физически интересными являются предельные значения

$$\lim_{\nu \to 0} \langle A \rangle_{H(\nu)}.$$

Итак, $f_V[H]$ и $f_V[H_0(\bar{a}^{(V)})]$ являются вещественными функциями вещественных переменных x_k и y_k вида $f_V[\mathfrak{A} + t \cdot \mathfrak{B}]$, причем вторые их производные по t существуют на любом интервале $(t^{(1)}, t^{(2)})$ всюду кроме, быть может, конечного числа точек. Известно /I/, что в любой точке существования второй производной $f_V''[t] \leq 0$. Действительно, дифференцируя и обозначая $\mathfrak{A} + t \cdot \mathfrak{B}$ через Γ, имеем

$$\frac{\partial^2 f_V[\mathfrak{A} + t \cdot \mathfrak{B}]}{\partial t^2} = -\frac{V}{\theta} \int_0^1 \frac{Sp\{\mathcal{J} e^{-\frac{\tau}{\theta}\Gamma} \mathcal{J} e^{-\frac{1-\tau}{\theta}\Gamma}\}}{Sp\, e^{-\frac{1}{\theta}\Gamma}},$$

где

$$\mathcal{J} = \mathfrak{B} - \langle \mathfrak{B} \rangle^{(V)}_{\Gamma}, \quad \mathcal{J}^+ = \mathcal{J}.$$

Переходя к матричному представлению, в котором Γ диагонален, найдем /I/:

$$\frac{\partial^2 f_V[\mathfrak{A} + t \cdot \mathfrak{B}]}{\partial t^2} = -\frac{V}{Q\theta} \sum_{l,n} \int_0^1 \mathcal{J}_{ln} e^{-\frac{\tau}{\theta}\Gamma_n} \mathcal{J}_{nl} e^{-\frac{1-\tau}{\theta}\Gamma_l} d\tau$$
$$= -\frac{V}{Q\theta} \sum_{l,n} |\mathcal{J}_{ln}|^2 \int_0^1 e^{-\frac{\tau}{\theta}\Gamma_n - \frac{1-\tau}{\theta}\Gamma_l} d\tau$$
$$= -\frac{V}{Q\theta} \sum_{l,n} |\mathcal{J}_{ln}|^2 \frac{e^{-\frac{\Gamma_n}{\theta}} - e^{-\frac{\Gamma_l}{\theta}}}{\Gamma_l - \Gamma_n} \leq 0. \tag{I2}$$

Поскольку на любом интервале $(t^{(1)}, t^{(2)})$ вторая производная $f_V''[\Gamma]$ существует всюду кроме, быть может, конечного числа точек, то и первая производная $f_v'[\Gamma]$ также существует на любом интервале $(t^{(1)}, t^{(2)})$ всюду кроме, быть может, конечного числа точек. Пусть в точке $t = t_0$ $f_v'[\Gamma]$ существует. Тогда найдется $\delta_0 > 0$ такое, что $f_v'[\Gamma]$ существует всюду на интервале $(t_0 - \delta_0, t_0 + \delta_0)$.

Если вторая производная $f_v''[\Gamma]$ существует в точке $t = t_0$, то найдется $\delta \in (0, \delta_0)$ такое, что $f_v''[\Gamma]$ существует всюду на $(t_0 - \delta, t_0 + \delta)$. Так как в любой точке существования $f_v''[\Gamma] \leq 0$, то на интервале $(t_0 - \delta, t_0 + \delta)$ функция свободной энергии $f_v[\mathfrak{A} + t\cdot\mathfrak{B}]$ выпукла вверх.

Если вторая производная $f_v''[\Gamma]$ не существует в точке $t = t_0$, то найдется δ, $0 < \delta \leq \delta_0$, такое, что $f_v''[\Gamma]$ существует всюду на $(t_0 - \delta, t_0 + \delta)$ кроме точки $t = t_0$. Поскольку на интервале $(t_0 - \delta, t_0)$ $f_v''[\Gamma]$ существует всюду и всюду (I2)

$$f_v''[\Gamma] \leq 0,$$

то

$$\forall\, t_1, t_2 \in (t_0 - \delta, t_0): \; t_1 < t_2$$

$$f_v'[\Gamma(t_1)] \geq f_v'[\Gamma(t_2)]. \tag{I3}$$

Точно так же

$$\forall\, t_1, t_2 \in (t_0, t_0 + \delta): \; t_1 < t_2$$

$$f_v'[\Gamma(t_1)] \geq f_v'[\Gamma(t_2)]. \tag{I4}$$

Покажем теперь, что

$$\forall\, t_1 \in (t_0 - \delta, t_0)$$

$$f_v'[\Gamma(t_1)] \geq f_v'[\Gamma(t_0)]. \tag{I5}$$

Проведем доказательство от противного. Предположим, что это не так: пусть

$$\exists\; \tilde{t}_1 \in (t_0 - \delta, t_0): \qquad f_v'[\Gamma(\tilde{t}_1)] < f_v'[\Gamma(t_0)]. \tag{I6}$$

В силу существования $f_v'[\Gamma(t)]$ всюду на $(t_0 - \delta_0, t_0 + \delta_0)$ $f_v[\Gamma(t)]$ непрерывна на $(t_0 - \delta, t_0]$. Функция $f_v'[\Gamma(t)]$ монотонно убывает на $(t_0 - \delta, t_0)$, поэтому существует (конечный или бесконечный) предел $f_v'[\Gamma(t)]$ при $t \to t_0 - 0$. Согласно теореме о пределе производной этот предел равен производной в точке $t = t_0$, $f_v'[\Gamma(t_0)]$, которая по предположению существует, и, следовательно, конечен.

Таким образом, $g(t) = f_v'[\Gamma(t)]$ непрерывна на отрезке $[\tilde{t}_1, t_0] \subset (t_0 - \delta, t_0]$; ее производная $g'(t) = f_v''[\Gamma(t)]$ существует на интервале $(\tilde{t}_1, t_0)$. Тогда по теореме Лагранжа найдется точка $\tilde{t} \in (\tilde{t}_1, t_0) \subset (t_0 - \delta, t_0)$ такая, что

$$f_v''[\Gamma(\tilde{t})] = \frac{f_v'[\Gamma(t_0)] - f_v'[\Gamma(\tilde{t}_1)]}{t_0 - \tilde{t}_1} > 0.$$

Полученное соотношение противоречит неравенству (I2), что и доказывает утверждение (I5).

Совершенно аналогично

$$\forall\, t_2 \in (t_0, t_0 + \delta)$$

$$f_v'[\Gamma(t_0)] \geq f_v'[\Gamma(t_2)]. \tag{I7}$$

Из неравенств (I3)-(I5),(I7) следует, что

$$\forall\, t_1, t_2 \in (t_0 - \delta, t_0 + \delta): \; t_1 < t_2$$

$$f_v'[\Gamma(t_1)] \geq f_v'[\Gamma(t_2)], \tag{I8}$$

т.е., что и в том случае, когда вторая производная по t функции $f_v[\mathfrak{A} + t\cdot\mathfrak{B}]$ не существует в точке $t = t_0$, также найдется интервал $(t_0 - \delta, t_0 + \delta)$ $(\delta > 0)$, в котором $f_v[\mathfrak{A} + t\cdot\mathfrak{B}]$ монотонно не возрастает, т.е. функция $f_v[\mathfrak{A} + t\cdot\mathfrak{B}]$ выпукла вверх.

Воспользуемся теперь теоремой Гриффитса /I2/, которая гласит: если последовательность выпуклых дифференцируемых на интервале $(t^{(1)}, t^{(2)})$ функций $\{f_n(t)\}$ сходится поточечно к некоторой функции $f(t)$ на $(t^{(1)}, t^{(2)})$, то в каждой точке интервала $(t^{(1)}, t^{(2)})$ непрерывной дифференцируемости предельной функции $f(t)$ последовательность производных $\{f_n'(t)\}$ сходится к $f'(t)$.

Заметим, что условия теоремы Гриффитса можно несколько ослабить. А именно, требование непрерывности производной предельной функции $f'(t)$ в точке t можно заменить требованием существования этой производной в некоторой как угодно малой окрестности точки t. Действительно как поточечный предел выпуклых функций $f_n(t)$ предельная функция $f(t)$ выпукла; но в таком случае из существования ее производной в некоторой окрестности точки t следует, что последняя монотонна в этой окрестности а стало быть и непрерывна в этой окрестности, в частности и в самой точке t.

Таким образом, если существует поточечный предел функций $f_V[\mathfrak{A}+t\cdot\mathfrak{B}]$ при $V\to\infty$

$$f_\infty[\mathfrak{A}+t\cdot\mathfrak{B}]=\lim_{V\to\infty} f_V[\mathfrak{A}+t\cdot\mathfrak{B}], \tag{19}$$

то в каждой точке t, в которой существуют производные $f_V'[\mathfrak{A}+t\cdot\mathfrak{B}]$, а производная предельной функции $f_\infty'[\mathfrak{A}+t\cdot\mathfrak{B}]$ существует в некоторой окрестности точки t,

$$f_V'[\mathfrak{A}+t\cdot\mathfrak{B}]\xrightarrow[V\to\infty]{} f_\infty'[\mathfrak{A}+t\cdot\mathfrak{B}]. \tag{20}$$

Поэтому

$$\frac{\partial f_V[H(\nu)]}{\partial x_k}=\langle A_k^+ + A_k\rangle_{H(\nu)}^{(V)}\xrightarrow[V\to\infty]{}\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial x_k}, \tag{21}$$

$$\frac{\partial f_V[H(\nu)]}{\partial y_k}=i\langle A_k^+ - A_k\rangle_{H(\nu)}^{(V)}\xrightarrow[V\to\infty]{}\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial y_k}, \tag{22}$$

если функция свободной энергии дифференцируема по источнику ν_k в точке ν, а предельная функция свободной энергии модельного гамильтониана существует и дифференцируема в некоторой окрестности ν_k. Следовательно, в таком случае

$$\langle A_k\rangle_{H(\nu)}^{(V)}\xrightarrow[V\to\infty]{}\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial x_k}+i\,\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial y_k}\right\}=\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+}, \tag{23}$$

и тем самым доказана

Т е о р е м а I

Если для модельного гамильтониана из класса (I) существует при $V\to\infty$ предельное значение функции свободной энергии

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H(\nu)]=f_\infty[H(\nu)], \tag{24}$$

то в каждой точке ν, в которой существует частная производная функции свободной энергии при конечном объеме $f_V[H(\nu)]$ по источнику ν_k $(1\le k\le r+s)$, а производная по ν_k $(1\le k\le r+s)$ предельной функции свободной энергии $f_\infty[H(\nu)]$ существует в некоторой сколь угодно малой окрестности ν_k, существует предел при $V\to\infty$ термодинамического среднего оператора A_k $(1\le k\le r+s)$ по гамильтониану $H(\nu)$, равный производной предельной функции свободной энергии по источнику ν_k^+ $(1\le k\le r+s)$:

$$\lim_{V\to\infty}\langle A_k\rangle_{H(\nu)}^{(V)}=\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+}. \tag{25}$$

Однако, к сожалению, мы не можем аналогичным образом использовать теорему Гриффитса для доказательства того, что

$$\lim_{V\to\infty}\langle A_k\rangle_{H_0(\bar{a}^{(V)}(\nu),\nu)}^{(V)}=\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} \tag{26}$$

(при условии, что имеет место асимптотическая близость функций свободной энергии модельного (I) и аппроксимирующего (2) гамильтонианов), так как свободная энергия аппроксимирующего гамильтониана является сложной функцией источников ν вида

$$f_V[H_0(\bar{a}^{(V)}(\nu),\nu)], \tag{27}$$

и, вообще говоря, последовательность $f_V[H_0(\bar{a}^{(V)}(\nu),\nu')]$ сходится к предельной функции $f_V[H(\nu')]$ лишь в точке $\nu'=\nu$.

С другой стороны, несмотря на то, что среднее оператора A_k равно также полной частной производной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана H_0:

$$\langle A_k\rangle^{(V)}_{H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)} = \frac{\mathfrak{D} f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)]}{\mathfrak{D}\nu_k^+} \tag{28}$$

(это можно показать, используя тот факт, что $\bar a^{(V)}(\nu)$ являются решением минимаксной задачи (3)-(5)), мы не можем утверждать, что

$$\frac{\mathfrak{D} f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)]}{\mathfrak{D}\nu_k} \xrightarrow[V\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial\nu_k},$$

так как не удается доказать выпуклость функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана по действительным и мнимым частям источников с учетом неявной зависимости $f_V[H_0]$ от ν посредством $\bar a^{(V)}(\nu)$.

Наконец, в предположении того, что при любых a существует поточечный предел функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0(a,\nu)] = f_\infty[H_0(a,\nu)], \tag{29}$$

можно было бы рассматривать сходимость

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu')]}{\partial\nu_k'} \xrightarrow[V\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu')]}{\partial\nu_k'}. \tag{30}$$

Однако у нас нет оснований утверждать, что

$$f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu')] \xrightarrow[V\to\infty]{} f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu')], \tag{31}$$

и, кроме того, в таком подходе необходимо, чтобы выполнялось соотношение

$$\frac{\partial f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial\nu_k} = \frac{\mathfrak{D} f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial\nu_k}, \tag{32}$$

которое требует особого рассмотрения.

Реализация последнего варианта будет осуществлена в дальнейшем.

3. РЕШЕНИЕ МИНИМАКСНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПРЕДЕЛЬНОЙ ФУНКЦИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ АППРОКСИМИРУЮЩЕГО ГАМИЛЬТОНИАНА КАК ТОЧКА СГУЩЕНИЯ РЕШЕНИЙ МИНИМАКСНОЙ ЗАДАЧИ ПРИ КОНЕЧНОМ ОБЪЕМЕ

Пусть при любых a_m существует предел

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0(a)] = f_\infty[H_0(a)]. \tag{33}$$

Следуя работе /2/, введем функции

$$\begin{aligned} F_V(a) &= f_V[H_0(a)] - \sum_{i=1}^{\tau}\gamma_i a_i a_i^+ + \sum_{j=\tau+1}^{\tau+s}\gamma_j a_j a_j^+ \\ &= -\frac{\theta}{V}\ln Sp\exp\{-\frac{1}{\theta}[T - V\sum_{i=1}^{\tau}\gamma_i(a_i A_i^+ + a_i^+ A_i) \\ &+ V\sum_{j=\tau+1}^{\tau+s}\gamma_j(a_j A_j^+ + a_j^+ A_j) + V\sum_{m=1}^{\tau+s}(\nu_m A_m^+ + \nu_m^+ A_m)]\} \\ &= -\frac{\theta}{V}\ln Sp\exp\{-\frac{1}{\theta}H'(a)\}. \end{aligned} \tag{34}$$

В силу (33) существует предельная функция

$$\lim_{V\to\infty} F_V(a) = F_\infty(a) = f_\infty[H_0(a)] - \sum_{i=1}^{\tau}\gamma_i a_i a_i^+ + \sum_{j=\tau+1}^{\tau+s}\gamma_j a_j a_j^+.$$

В дальнейшем мы будем использовать обозначения f_ϑ и F_ϑ, где символ ϑ будет указывать на то, что в соответствующих выражениях рассматриваются как функции f и F при конечном объеме f_V и F_V, так и предельные функции f_∞ и F_∞, т.е. $\vartheta = V,\infty$.

Рассмотрим функции F_ϑ при значении аргумента $a+\Delta a$:

$$\begin{aligned} F_V(a+\Delta a) = -\frac{\theta}{V}\ln Sp\exp\{-\frac{1}{\theta}H'(a) + \frac{V}{\theta}[\sum_{i=1}^{\tau}\gamma_i(\Delta a_i A_i^+ \\ + \Delta a_i^+ A_i) - \sum_{j=\tau+1}^{\tau+s}\gamma_j(\Delta a_j A_j^+ + \Delta a_j^+ A_j)]\}. \end{aligned}$$

Далее в отличие от первой части нашей работы будем рассматривать тот случай, когда операторы A_m являются ограниченными:

$$\|A_m\| \leqslant M. \tag{35}$$

Тогда

$$\|\Delta a_m A_m^+ + \Delta a_m^+ A_m\| \le 2|\Delta a_m|\|A_m\| \le 2|\Delta a_m| M,$$

и, следовательно,

$$-\frac{\theta}{V}\ln Sp\exp\{-\frac{1}{\theta}H'\} - 2M\sum_{m=1}^{r+s}\gamma_m|\Delta a_m| \le -\frac{\theta}{V}\ln Sp\exp\{-\frac{1}{\theta}H' + \frac{V}{\theta}[\sum_{i=1}^{r}\gamma_i(\Delta a_i A_i^+ + \Delta a_i^+ A_i) - \sum_{j=r+1}^{r+s}\gamma_j(\Delta a_j A_j^+ + \Delta a_j^+ A_j)]\}$$
$$\le -\frac{\theta}{V}\ln Sp\exp\{-\frac{1}{\theta}H'\} + 2M\sum_{m=1}^{r+s}\gamma_m|\Delta a_m|.$$

Откуда для любого V

$$|F_V(a+\Delta a) - F_V(a)| \le 2M\sum_{m=1}^{r+s}\gamma_m|\Delta a_m|. \tag{36}$$

Переходя здесь к пределу $V \to \infty$, имеем

$$|F_\infty(a+\Delta a) - F_\infty(a)| \le 2M\sum_{m=1}^{r+s}\gamma_m|\Delta a_m|. \tag{37}$$

Таким образом,

$$|F_\vartheta(a+\Delta a) - F_\vartheta(a)| \le 2M\sum_{m=1}^{r+s}\gamma_m|\Delta a_m|. \tag{38}$$

Полагая $\Delta a_j = -a_j$, найдем

$$f_\vartheta[H_0(\{a_i\},\{a_j\})] - f_\vartheta[H_0(\{a_i\},\{0\})] \le \sum_{j=r+1}^{r+s}\gamma_j|a_j|(2M-|a_j|),$$

откуда

$$f_\vartheta[H_0(\{a_i\},\{0\})] + M^2\sum_{j=r+1}^{r+s}\gamma_j \ge f_\vartheta[H_0(\{a_i\},\{a_j\})].$$

Следовательно, при любых фиксированных a_i существует точная верхняя грань функции $f_\vartheta[H_0(a)]$ относительно переменных a_j, которую мы обозначим через

$$\sup_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)].$$

Положив в (38)

$$\Delta a_{r+1} = (\lambda-1)a_{r+1}, \quad 0<\lambda<1,$$
$$\Delta a_m = 0, \quad (m = r+2, r+3, \dots, r+s),$$

имеем

$$f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)] - f_\vartheta[H_0(a_1,\dots,a_r,\lambda a_{r+1},a_{r+2},\dots,a_{r+s})] \le (1-\lambda^2)\gamma_{r+1}|a_{r+1}|(|a_{r+1}| - \frac{2}{1+\lambda}M).$$

В силу определения точной верхней грани

$$f_\vartheta[H_0(a_1,\dots,a_r,\lambda a_{r+1},a_{r+2},\dots,a_{r+s})] \le \sup_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)],$$

следовательно,

$$f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)] - \sup_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)] \le (1-\lambda^2)\gamma_{r+1}|a_{r+1}|(\frac{2}{1+\lambda}M - |a_{r+1}|).$$

Повторяя только что приведенные рассуждения для $j=r+2,r+3,\dots,r+s$, найдем

$$f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)] - \sup_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)] \le (1-\lambda^2)\gamma_j|a_j|(\frac{2}{1+\lambda}M - |a_j|).$$

Отсюда видно, что, если хотя бы для одного j $|a_j| = M+\varepsilon$ $(\varepsilon>0)$, то всегда найдется $\lambda = \frac{M}{|a_j|} \in (0,1)$ такое, что

$$f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)] - \sup_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)] \le -\varepsilon^2 < 0.$$

Поэтому верхняя грань $\sup_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)]$ может достигаться лишь на следующем множестве $\mathfrak{N} \subset \mathbb{C}^s$:

$$|a_j| \le M, \tag{39}$$

причем она действительно достигается на $\mathfrak{N}$, т.к. множество $\mathfrak{N}$ ограничено и замкнуто, а функции $f_V[H_0(\{a_i\},\{a_j\})]$ непрерывны по $\{a_j\}$ (38).

Таким образом, как для предельной функции свободной энергии, так и для функции свободной энергии при любом конечном объеме V при любых a_i существует решение $\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i)$ следующей задачи на абсолютный максимум

$$f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i)] = \max_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)], \tag{40}$$

причем

$$\forall\,\vartheta,\ \forall\{a_i\} \qquad \{\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i)\}\in\mathfrak{N}. \tag{41}$$

В силу определения $\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i)$

$$f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i))] - f_\vartheta[H_0(a_i+\Delta a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i+\Delta a_i))]$$
$$\geq f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i+\Delta a_i))] - f_\vartheta[H_0(a_i+\Delta a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i+\Delta a_i))]$$
$$= F_\vartheta(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i+\Delta a_i)) - F_\vartheta(a_i+\Delta a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i+\Delta a_i))$$
$$+\sum_{i=1}^{r}\gamma_i[a_i a_i^+ - (a_i+\Delta a_i)(a_i^+ +\Delta a_i^+)],$$

откуда, учитывая неравенство (38), найдем

$$\sum_{i=1}^{r}\gamma_i[a_i a_i^+ - (a_i+\Delta a_i)(a_i^+ +\Delta a_i^+)] - 2M\sum_{i=1}^{r}|\Delta a_i|$$
$$\leq f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i))] - f_\vartheta[H_0(a_i+\Delta a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i+\Delta a_i))]. \tag{42}$$

Полагая здесь сначала $\Delta a_i = -a_i$, а затем $\Delta a_p = (\lambda-1)a_p$ $(p=1,\ \ldots, r)$, путем рассуждений, аналогичных проведенным выше, легко показать, что для $\vartheta = V, \infty$ решение следующей задачи на абсолютный минимум

$$f_\vartheta[H_0(\bar{a}_i^{(\vartheta)},\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(\bar{a}_i^{(\vartheta)}))] = \min_{a_i} f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i))]$$

существует, причем

$$\forall\,\vartheta \qquad \{\bar{a}_i^{(\vartheta)}\}\in\mathcal{L}, \tag{43}$$

где $\mathcal{L}$ – следующая область пространства $\mathbb{C}^{r}$

$$|a_i|\leq M. \tag{44}$$

Откуда, обозначая, как обычно, $\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(\bar{a}_i^{(\vartheta)})$ через $\bar{a}_j^{(\vartheta)}$, получаем

$$\forall\,\vartheta \qquad \{\bar{a}_m^{(\vartheta)}\}\in\mathfrak{M}, \tag{45}$$

где $\mathfrak{M}$ – следующая область пространства $\mathbb{C}^{r+s}$

$$|a_m|\leq M. \tag{46}$$

Таким образом, для предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана, так же, как для функции свободной энергии при конечном объеме, существует решение $\bar{a}_m^{(\vartheta)}$ минимаксной задачи

$$f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i))] = \max_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j)], \tag{47}$$
$$f_\vartheta[H_0(\bar{a}_i^{(\vartheta)},\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(\bar{a}_i^{(\vartheta)}))] = \min_{a_i} f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i))], \tag{48}$$
$$\bar{a}_j^{(\vartheta)} = \tilde{a}_j^{(\vartheta)}(\bar{a}_i^{(\vartheta)}) \tag{49}$$

причем

$$\forall\,\{a_i\}\ \forall\,\vartheta\ \{\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i)\}\in\mathfrak{N} \tag{50}$$
$$\forall\,\vartheta\ \{\bar{a}_i^{(\vartheta)}\}\in\mathcal{L} \tag{51}$$
$$\forall\,\vartheta\ \{\bar{a}_m^{(\vartheta)}\}\in\mathfrak{M}. \tag{52}$$

Ввиду того, что $\mathfrak{M}$ есть замкнутая ограниченная область, из (52) следует, что для любого $\nu=(\nu_1,\nu_2,\ \ldots,\nu_{r+s})\in\mathbb{C}^{r+s}$ существует такая последовательность $V_n^{(\nu)}\to\infty$, что последовательность $\{a_m^{(V_n^{(\nu)})}\}$ сходится к некоторому пределу, лежащему в $\mathfrak{M}$, который мы будем обозначать через $\{\tilde{a}_m\}$.

Покажем, что этот предел является решением $\tilde{a}_m^{(\infty)}$ минимаксной задачи (47)-(49) для предельной функции свободной энергии.

Область $\mathcal{R} \subset \mathbb{C}^s$ ограничена, следовательно из последовательности $\{\tilde{a}_j^{(V_n^{(\nu)})}(a_i)\}$, принадлежащей $\mathcal{R}$ при любых a_i, всегда можно выбрать сходящуюся подпоследовательность. Таким образом, для любых a_i существует последовательность V_n, являющаяся подпоследовательностью $V_n^{(\nu)}$ такая, что последовательность $\{\tilde{a}_j^{(V_n)}(a_i)\}$ сходится; ее предельное значение мы будем обозначать через $\{\breve{a}_j(a_i)\}$:

$$\breve{a}_j(a_i) = \lim_{n\to\infty} \tilde{a}_j^{(V_n)}(a_i). \tag{53}$$

Докажем, что для любых фиксированных a_i оно доставляет абсолютный максимум предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана по переменным a_j, т.е. докажем, что

$$\begin{gathered} \forall\ a_i \\ \breve{a}_j(a_i) = \lim_{n\to\infty} \tilde{a}_j^{(V_n)}(a_i) = \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_i). \end{gathered} \tag{54}$$

Из определения (33) предельной функции свободной энергии следует, что

$$\forall a_i \exists\ V_n : \forall \varepsilon > 0\ \exists N_1 : \forall n > N_1$$

$$-\varepsilon < f_{V_n}[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_i))] - f_\infty[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_i))], \tag{55}$$

$$-\varepsilon < f_\infty[H_0(a_i, \breve{a}_j(a_i))] - f_{V_n}[H_0(a_i, \breve{a}_j(a_i))]. \tag{56}$$

В силу свойства (38) равностепенной непрерывности семейства функций $F_\nu(a)$

$$\begin{aligned} &|f_\nu[H_0(a+\Delta a)] - f_\nu[H_0(a)]| \\ &\qquad \leqslant \sum_{m=1}^{s+1} (2M + 2|a_m| + |\Delta a_m|)\gamma_m |\Delta a_m|. \end{aligned} \tag{57}$$

Откуда в силу определения величин $\breve{a}_j(a_i)$ (53) имеем

$$\forall a_i\ \exists V_n : \forall \varepsilon > 0\ \exists N_2 : \forall n > N_2$$

$$-\varepsilon < f_{V_n}[H_0(a_i, \breve{a}_j(a_i))] - f_{V_n}[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(V_n)}(a_i))]. \tag{58}$$

Значения $a_j = \tilde{a}_j^{(V)}(a_i)$ доставляют абсолютный максимум функции $f_V[H_0(a_i, a_j)]$ при фиксированных a_i, в частности,

$$\begin{gathered} \forall\ a_i,\ \forall n \\ 0 \leqslant f_{V_n}[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(V_n)}(a_i))] - f_{V_n}[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_i))]. \end{gathered} \tag{59}$$

Складывая почленно неравенства (55),(56),(58),(59), получаем:

$$\forall a_i,\ \forall \varepsilon > 0$$

$$-3\varepsilon < f_\infty[H_0(a_i, \breve{a}_j(a_i))] - f_\infty[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_i))].$$

Совершая здесь предельный переход $\varepsilon \to 0$, найдем, что

$$\begin{aligned} \forall a_i \qquad & f_\infty[H_0(a_i, \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_i))] \\ &= \max_{a_j} f_\infty[H_0(a_i, a_j)] \leqslant f_\infty[H_0(a_i, \breve{a}_j(a_i))]. \end{aligned}$$

В силу самой структуры этого соотношения в нем в действительности реализуется лишь знак равенства, что как раз и означает, что при любых a_i величины $\breve{a}_j(a_i)$ доставляют абсолютный максимум функции $f_V[H_0(a_i, a_j)]$.

Выше для каждого $\{a_i\} \in \mathbb{C}^s$ была построена последовательность V_n такая, что последовательность $\{\tilde{a}_j^{(V_n')}(a_i)\}$ сходится. С другой стороны, последовательность $\{\tilde{a}_j^{(V_n)}(\bar{a}_i)\}$ при любом $\{a_i\} \in \mathbb{C}^s$ целиком принадлежит ограниченной области $\mathcal{R}$, следовательно из нее всегда можно выбрать сходящуюся подпоследовательность $\{\tilde{a}_j^{(V_n')}(\bar{a}_i)\}$.

В таком случае, согласно (54),

$$\begin{aligned} &\lim_{n\to\infty} \tilde{a}_j^{(V_n')}(\bar{a}_i) = \tilde{a}_j^{(\infty)}(\bar{a}_i), \\ &\lim_{n\to\infty} \tilde{a}_j^{(V_n')}(a_i) = \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_i), \end{aligned}$$

откуда ввиду (57) получаем

$$\forall a_i\ \exists\ V_n' : \forall \varepsilon>0\ \exists N_1 : \forall n>N_1$$

$$-\varepsilon<\int_{V_n'}[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(V_n')}(\bar a_i))]-\int_{V_n'}[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(\bar a_i))], \tag{60}$$

$$-\varepsilon<\int_{V_n'}[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(a_i))]-\int_{V_n'}[H_0(a_i, \tilde a_j^{(V_n')}(a_i))]. \tag{61}$$

Докажем теперь, что функции $\int_v[H_0(a_i,\tilde a_j^{(v)}(a_i))]$ непрерывны по совокупности переменных a_i равномерно относительно V.

Действительно, величины $\tilde a_j^{(v)}(a_i+\Delta a_i)$ доставляют абсолютный максимум функции $\int_V[H_0(a_i+\Delta a_i, a_j)$ по переменным a_j, поэтому

$$\int_v[H_0(a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i))]-\int_v[H_0(a_i+\Delta a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i+\Delta a_i))]$$
$$\leqslant\int_v[H_0(a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i))]-\int_v[H_0(a_i+\Delta a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i))]$$
$$=F_v(a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i))-F_v(a_i+\Delta a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i))$$
$$-\sum_{i=1}^{z}\gamma_i\,(a_i\Delta a_i^+ + a_i^+\Delta a_i+\Delta a_i\Delta a_i^+).$$

Учитывая неравенство (38), имеем

$$\int_v[H_0(a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i))]-\int_v[H_0(a_i+\Delta a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i+\Delta a_i))]$$
$$\geqslant\sum_{i=1}^{z}\gamma_i\,(2M+2|a_i|+|\Delta a_i|)\cdot|\Delta a_i|.$$

Откуда, принимая во внимание (42), получаем требуемое соотношение:

$$\begin{aligned}&\left|\int_v[H_0(a_i+\Delta a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i+\Delta a_i))]-\int_v[H_0(a_i, \tilde a_j^{(v)}(a_i))]\right|\\&\leqslant\sum_{i=1}^{z}\gamma_i\,(2M+2|a_i|+|\Delta a_i|)\cdot|\Delta a_i|.\end{aligned} \tag{62}$$

В таком случае, поскольку

$$\lim_{n\to\infty}\bar a_i^{(V_n')}=\lim_{n\to\infty}\bar a_i^{(V_n^{(\nu)})}=\bar a_i,$$

справедливо утверждение

$$\forall \varepsilon>0\ \exists N_2 : \forall n>N_2$$

$$-\varepsilon<\int_{V_n'}[H_0(\bar a_i^{(V_n')}, \tilde a_j^{(V_n')}(\bar a_i^{(V_n')}))]-\int_{V_n'}[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(V_n')}(\bar a_i))]. \tag{63}$$

В силу определения предельной функции свободной энергии (33),

$$\forall a_i, \forall V_n' : V_n'\xrightarrow[n\to\infty]{}\infty, \forall\varepsilon>0\ \exists N_3 : \forall n>N_3$$

$$-\varepsilon<\int_\infty[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(a_i))]-\int_{V_n'}[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(a_i))], \tag{64}$$

$$-\varepsilon<\int_{V_n'}[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(\bar a_i))]-\int_\infty[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(\bar a_i))]. \tag{65}$$

Согласно (48), имеем

$$\forall a_i, \forall n$$

$$0\leqslant\int_{V_n'}[H_0(a_i, \tilde a_j^{(V_n')}(a_i))]-\int_{V_n'}[H_0(\bar a_i^{(V_n')}, \tilde a_j^{(V_n')}(\bar a_i^{(V_n')}))]. \tag{66}$$

Складывая почленно неравенства (60),(61), (63)-(66), получаем

$$\forall a_i, \forall\varepsilon>0$$

$$-5\varepsilon<\int_\infty[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(a_i))]-\int_\infty[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(\bar a_i))].$$

Переходя здесь к пределу $\varepsilon\to 0$, находим, что

$$\forall a_i$$

$$\int_\infty[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(\bar a_i))]\leqslant\int_\infty[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(a_i))],$$

т.е., что

$$\int_\infty[H_0(\bar a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(\bar a_i))]=\min_{a_i}\int_\infty[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\infty)}(a_i))], \tag{67}$$

или в наших обозначениях

$$\bar a_i=\lim_{n\to\infty}\bar a_i^{(V_n^{(\nu)})}=\tilde a_i^{(\infty)}. \tag{68}$$

С другой стороны, ввиду определения функции $f_\infty[H_0(a)]$, имеем

$$\forall\, a_j,\ \forall\ V_n^{(\nu)}\ :\ V_n^{(\nu)}\xrightarrow[n\to\infty]{}\infty,\ \forall\,\varepsilon>0\ \exists\, N_1:\ \forall n>N_1$$

$$-\varepsilon < f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, a_j)] - f_\infty[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, a_j)], \tag{69}$$

$$-\varepsilon < f_\infty[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, \bar a_j)] - f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, \bar a_j)]. \tag{70}$$

Согласно только что доказанному соотношению (68) и определению величин $\bar a_j$, свойство (57) дает

$$\forall a_j\ \exists\ V_n^{(\nu)}\ :\ \forall\,\varepsilon>0\ \exists\, N_2:\ \forall n>N_2$$

$$-\varepsilon < f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(V_n^{(\nu)})}, a_j)] - f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, a_j)], \tag{71}$$

$$-\varepsilon < f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, \bar a_j)] - f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(V_n^{(\nu)})}, \bar a_j)]. \tag{72}$$

По построению $\bar a_j^{(V)}$ (49) $\bar a_j^{(V)} = \tilde a_j^{(V)}(\bar a_i^{(V)})$, поэтому

$$\forall a_j,\ \forall_n$$

$$0 \leqslant f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(V_n^{(\nu)})}, \bar a_j^{(V_n^{(\nu)})})] - f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_i^{(V_n^{(\nu)})}, a_j)]. \tag{73}$$

Складывая почленно (69)-(73) и переходя в полученном неравенстве к пределу $\varepsilon\to 0$, получаем

$$\forall a_j \qquad f_\infty[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, a_j)] \leqslant f_\infty[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, \bar a_j)].$$

Откуда

$$f_\infty[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, \bar a_j)] = \max_{a_j} f_\infty[H_0(\bar a_i^{(\infty)}, a_j)].$$

Таким образом,

$$\bar a_j = \lim_{n\to\infty} \bar a_j^{(V_n^{(\nu)})} = \tilde a_j^{(\infty)}(\bar a_i^{(\infty)}) = \bar a_j^{(\infty)}, \tag{74}$$

т.е. $\bar a_j = \lim_{n\to\infty}\bar a_j^{(V_n^{(\nu)})}$ так же, как и $\bar a_i = \lim_{n\to\infty}\bar a_i^{(V_n^{(\nu)})}$ (68) являются решениями минимаксной задачи (47)-(49) для предельной функции свободной

энергии аппроксимирующего гамильтониана.

Итак, согласно основным результатам (68) и (74) получаем следующую теорему

Т е о р е м а 2

Если для модельного гамильтониана из класса (I) с ограниченными операторами A_m

$$\|A_m\| \leqslant M \tag{75}$$

при любых a_m (m=I, 2, ..., $\tau+s$) существует предел функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0(a_m)] = f_\infty[H_0(a_m)], \tag{76}$$

то

I) для этой предельной функции, так же, как и для функции свободной энергии при конечном объеме существует решение $\bar a_m^{(\vartheta)}$(m=I, 2, ..., $\tau+s$) следующей минимаксной задачи:

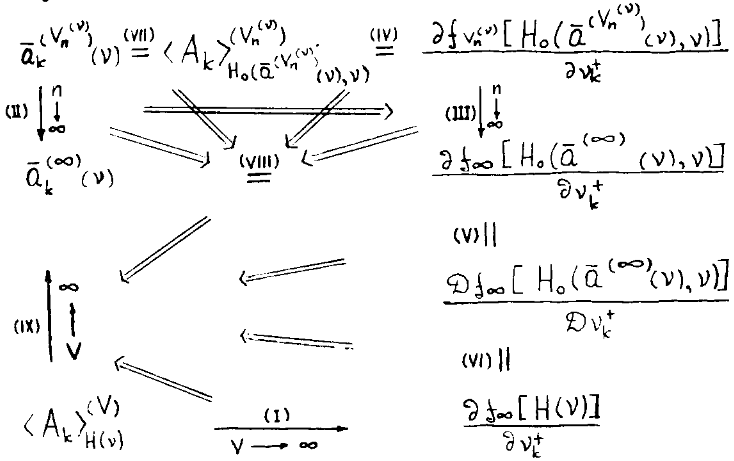
$$\begin{gathered} f_\vartheta[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\vartheta)}(a_i))] = \max_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i, a_j)], \\ f_\vartheta[H_0(\bar a_i^{(\vartheta)}, \tilde a_j^{(\vartheta)}(\bar a_i^{(\vartheta)}))] = \min_{a_i} f_\vartheta[H_0(a_i, \tilde a_j^{(\vartheta)}(a_i))], \\ \bar a_j^{(\vartheta)} = \tilde a_j^{(\vartheta)}(\bar a_i^{(\vartheta)}), \\ (i=1,2,\dots,\tau;\ \ j=\tau+1, \tau+2, \dots, \tau+s;\ \ \vartheta = V, \infty). \end{gathered} \tag{77}$$

2) любая сходящаяся последовательность $\{\bar a_m^{(V_n^{(\nu)})}(\nu)\}\in\mathbb{C}^{\tau+s}$ (m=I, 2, ..., $\tau+s$) такая, что $V_n^{(\nu)}\xrightarrow[n\to\infty]{}\infty$, сходится к решению $\{\bar a_m^{(\infty)}(\nu)\}$ (m=I, 2, ..., $\tau+s$) минимаксной задачи п.I для предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана, причем множество таких последовательностей не пусто:

$$\lim_{n\to\infty} \bar a_m^{(V_n^{(\nu)})}(\nu) = \bar a_m^{(\infty)}(\nu). \tag{78}$$

4. АСИМПТОТИЧЕСКАЯ БЛИЗОСТЬ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СРЕДНИХ, ВЫЧИСЛЕННЫХ НА ОСНОВЕ МОДЕЛЬНОГО И АППРОКСИМИРУЮЩЕГО ГАМИЛЬТОНИАНОВ

Доказательство основных утверждений будем производить согласно следующей схеме:



I) Согласно теореме I п. 2 настоящей работы в любой точке ν, в которой существует производная функции свободной энергии и непрерывная производная предельной функции свободной энергии модельного гамильтониана по источнику ν_k,

$$\langle A_k\rangle^{(V)}_{H(\nu)} \xrightarrow[V\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+}. \qquad (79)$$

II) Для произвольного ν возьмем некоторую последовательность $V_n^{(\nu)}$, стремящуюся к бесконечности при $n\to\infty$, такую, что последовательность $\{\bar a_m^{(V_n^{(\nu)})}(\nu)\}$ сходится. Тогда по п.2 теоремы 2

$$\bar a_m^{(V_n^{(\nu)})}(\nu) \xrightarrow[n\to\infty]{} \bar a_m^{(\infty)}(\nu). \qquad (80)$$

III) В таком случае, в силу свойства (27), имеем

$$\forall \nu' \ \forall \varepsilon>0 \ \exists N_1 : \forall n>N_1$$

$$-\varepsilon < f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_m^{(V_n^{(\nu)})}(\nu),\nu')] - f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_m^{(\infty)}(\nu),\nu')] < \varepsilon. \qquad (81)$$

Ввиду определения (33) функции $f_\infty[H_0(a_m)]$

$$\forall \nu' \ \forall \varepsilon>0 \ \exists N_2 : \forall n>N_2$$

$$-\varepsilon < f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_m^{(\infty)}(\nu),\nu')] - f_\infty[H_0(\bar a_m^{(\infty)}(\nu),\nu')] < \varepsilon. \qquad (82)$$

Складывая почленно неравенства (80) и (81), получаем, что

$$\forall \nu' \qquad f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a_m^{(V_n^{(\nu)})}(\nu),\nu')] \xrightarrow[n\to\infty]{} f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu')]. \qquad (83)$$

В п.2 настоящей работы было показано, что

$$f_V[H_0(\bar a^{(V)}(x_m,y_m),x_1,\dots,x_{k-1},x_k',x_{k+1},\dots,x_{t+s},y_m)],$$

$$f_V[H_0(\bar a^{(V)}(x_m,y_m),x_m,y_1,\dots,y_{k-1},y_k',y_{k+1},\dots,y_{t+s})]$$

выпуклы вверх по переменным x_k' и y_k'. Тогда, согласно теореме Гриффитса /I2/, если частная производная функции $f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)]$ по ν_k существует в точке ν, а производная предельной функции $f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]$ по ν_k существует в некоторой окрестности точки ν_k, то

$$\frac{\partial f_{V_n^{(\nu)}}[H_0(\bar a^{(V_n^{(\nu)})}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k^+} \xrightarrow[n\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k^+}. \qquad (84)$$

IУ) В каждой точке ν, в которой существует частная производная функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана по источнику ν_k,

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k^+} = \langle A_k\rangle^{(V)}_{H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)}. \qquad (85)$$

У) Согласно определению (34), функция $F_V(a,\nu)$ имеет вид

$$F_V(a,\nu) = F_V(\nu_i-\gamma_i a_i,\ \nu_j+\gamma_j a_j),$$

поэтому и ее предел $F_\infty(a,\nu)=\lim\limits_{V\to\infty} F_V(a,\nu)$ является функцией тех же аргументов:

$$F_\infty(a,\nu) = F_\infty(\nu_i - \gamma_i a_i, \nu_j + \gamma_j a_j).$$

Тогда, если в некоторой точке (a,ν) $f_\vartheta[H_0(a,\nu)]$, а следовательно, и $F_\vartheta(a,\nu)$ дифференцируема по ν_k, то в этой точке $F_\vartheta(a,\nu)$, а следовательно, и $f_\vartheta[H_0(a,\nu)]$ дифференцируема по ν_k.

Поэтому, если в точке ν существует частная производная

$$\frac{\partial f_\vartheta[H_0(\bar{a}_m^{(\vartheta)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k^+},$$

то в этой точке существует и производная

$$\frac{\partial f_\vartheta[H_0(a_m,\nu)]}{\partial a_k^+}\bigg|_{a_m=\bar{a}_m^{(\vartheta)}(\nu)},$$

а так как $\bar{a}_j^{(\vartheta)} = \tilde{a}_j^{(\vartheta)}(\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu),\nu)$ и, следовательно, $\bar{a}_q^{(\vartheta)} = \tilde{a}_q^{(\vartheta)}(\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu),\nu)$ доставляет абсолютный максимум функции $f_\vartheta[H_0(\bar{a}_i^{(\vartheta)}, \bar{a}_{\tau+1}^{(\vartheta)},\dots,a_q,\dots,\bar{a}_{\tau+s}^{(\vartheta)})]$,

$$\frac{\partial f_\vartheta[H_0(\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu),a_j,\nu)]}{\partial a_q^+}\bigg|_{a_j=\bar{a}_j^{(\vartheta)}(\nu)} = 0. \tag{86}$$

Пусть в точке ν существуют производные

$$\frac{\partial \tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu)}{\partial a_p}\bigg|_{a_i=\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)}; \tag{87}$$

в таком случае, если существуют частные производные

$$\frac{\partial f_\vartheta[H_0(\bar{a}_m^{(\vartheta)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_j}, \quad \frac{\partial f_\vartheta[H_0(\bar{a}_m^{(\vartheta)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_p},$$

то полная производная

$$\frac{\mathcal{D} f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu)]}{\mathcal{D} a_p}\bigg|_{a_i=\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)}$$

также существует и равна

$$\frac{\partial f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu]}{\partial a_p}\bigg|_{a_i=\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)}:$$

$$\frac{\mathcal{D} f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu)]}{\mathcal{D} a_p} = \frac{\partial f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu)]}{\partial a_p} + \sum_{j=\tau+1}^{\tau+s} \frac{\partial f_\vartheta[H_0(\bar{a}_i^{(\vartheta)},a_j,\nu)]}{\partial a_j}\bigg|_{a_j=\bar{a}_j^{(\vartheta)}(\nu)} \cdot \frac{\partial \tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu)}{\partial a_p}\bigg|_{a_i=\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)}$$

$$= \frac{\partial f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu)]}{\partial a_p}\bigg|_{a_i=\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)},$$

где было использовано соотношение (86).

Так как по определению $\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)$ доставляют абсолютный минимум функции $f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu)]$, то

$$\frac{\partial f_\vartheta[H_0(a_i,\bar{a}_j^{(\vartheta)}(\nu),\nu)]}{\partial a_p}\bigg|_{a_i=\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)} = \frac{\mathcal{D} f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde{a}_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu)]}{\mathcal{D} a_p}\bigg|_{a_i=\bar{a}_i^{(\vartheta)}(\nu)} = 0. \tag{88}$$

Если в точке ν существуют производные

$$\frac{\partial \bar{a}_m^{(\infty)}(\nu)}{\partial \nu_k}, \quad \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar{a}_m^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_m}, \quad \frac{\partial \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_\ell,\nu)}{\partial a_i}\bigg|_{a_\ell=\bar{a}_\ell^{(\infty)}(\nu)}, \tag{89}$$

то, согласно равенствам (86), (88), получаем, что и полная производная

$$\frac{\mathcal{D} f_\infty[H_0(\bar{a}_m^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\mathcal{D} \nu_k}$$

существует и равна

$$\frac{\partial f_\infty[H_0(\bar{a}_m^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k}:$$

$$\frac{\mathcal{D} f_\infty[H_0(\bar{a}_\ell^{(\infty)}(\nu),\bar{a}_t^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\mathcal{D} \nu_k} = \sum_{i=1}^{\tau} \frac{\partial f_\infty[H_0(a_\ell,\bar{a}_t^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial a_i}\bigg|_{a_\ell=\bar{a}_\ell^{(\vartheta)}(\nu)} \times \frac{\partial \bar{a}_i^{(\infty)}(\nu)}{\partial \nu_k} + \sum_{j=\tau+1}^{\tau+s} \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar{a}_\ell^{(\infty)}(\nu),a_t,\nu)]}{\partial a_j}\bigg|_{a_t=\bar{a}_t^{(\infty)}(\nu)} \cdot \frac{\partial \bar{a}_j^{(\infty)}(\nu)}{\partial \nu_k} + \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar{a}_\ell^{(\infty)}(\nu),\bar{a}_t^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k} = \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar{a}_\ell^{(\infty)}(\nu),\bar{a}_t^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k}. \tag{90}$$

VI) Предположим, что разность свободных энергий модельного и аппроксимирующего гамильтонианов стремится к нулю в термодинамическом пределе:

$$f_V[H_0(\bar{a}_m^{(V)}(\nu),\nu)] - f_V[H(\nu)] \xrightarrow[V\to\infty]{} 0. \tag{91}$$

В таком случае соотношение (83) дает

$$f_\infty[H_0(\bar{a}_m^{(\infty)}(\nu),\nu] = f_\infty[H(\nu)], \tag{92}$$

откуда

$$\frac{\mathcal{D} f_\infty[H_0(\bar{a}_m^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\mathcal{D}\nu_k^+} = \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} . \tag{93}$$

Таким образом, согласно соотношениям (84),(85),(90),(93) для произвольной последовательности $V_n^{(\nu)}$ такой, что $V_n^{(\nu)} \to \infty$ при $n \to \infty$ и последовательность $\{\bar{a}_m^{(V_n^{(\nu)})}\}$ сходится,

$$\langle A_k \rangle^{(V_n^{(\nu)})}_{H_0(\bar{a}_m^{(V_n^{(\nu)})}(\nu),\nu)} \xrightarrow[n\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} . \tag{94}$$

Докажем, что в действительности при сделанных предположениях относительно существования производных (85),(89) для любой последовательности V_n, стремящейся к бесконечности при $n \to \infty$,

$$\langle A_k \rangle^{(V_n)}_{H_0(\bar{a}_m^{(V_n)}(\nu),\nu)} \xrightarrow[n\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} , \tag{95}$$

т.е., что

$$\langle A_k \rangle^{(V)}_{H_0(\bar{a}_m^{(V)}(\nu),\nu)} \xrightarrow[V\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} . \tag{96}$$

Предположим противное: пусть существует последовательность $\widetilde{V}_n$, стремящаяся к бесконечности при $n \to \infty$, такая, что

$$\exists \varepsilon > 0 : \forall N \ \exists n > N :$$

$$\langle A_k \rangle^{(\widetilde{V}_n)}_{H_0(\bar{a}_m^{(\widetilde{V}_n)}(\nu),\nu)} \notin \left(\frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} - \varepsilon, \ \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} + \varepsilon \right) = \delta_{k,\varepsilon} ,$$

тогда, учитывая свойство (52), получаем, что существует подпоследовательность $\widetilde{V}_n'$ последовательности $\widetilde{V}_n$, такая, что

$$\forall n \quad \langle A_k \rangle^{(\widetilde{V}_n')}_{H_0(\bar{a}_m^{(\widetilde{V}_n')}(\nu),\nu)} \in \mathfrak{M} / \delta_{k,\varepsilon} ,$$

поскольку множество $\mathfrak{M} / \delta_{k,\varepsilon}$ ограничено и замкнуто, то, в свою очередь, из $\{\bar{a}_m^{(\widetilde{V}_n')}\}$ можно выбрать сходящуюся подпоследовательность $\{\bar{a}_m^{(\widetilde{V}_n'')}\}$ такую, что $\widetilde{V}_n'' \to \infty$ при $n \to \infty$ и

$$\langle A_k \rangle^{(\widetilde{V}_n'')}_{H_0(\bar{a}^{(\widetilde{V}_n'')}(\nu),\nu)} \not\xrightarrow[n\to\infty]{} \frac{\partial f_\infty[H(\nu)]}{\partial \nu_k^+} . \tag{97}$$

Соотношение (97) противоречит (94), что и доказывает утверждение (96).

Таким образом, принимая во внимание соотношение (79), получаем следующую теорему:

Т е о р е м а 3

Пусть для модельного гамильтониана из класса (I) с ограниченными операторами A_m:

$$\| A_m \| \leq M , \quad (m = 1, 2, \dots, r+s) \tag{98}$$

при любых a_m ($m = 1, 2, \dots, r+s$) существует предел при $V \to \infty$ функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана (2):

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0(a,\nu)] = f_\infty[H_0(a,\nu)] , \tag{99}$$

тогда, если имеет место асимптотическая близость функций свободной энергии модельного и аппроксимирующего гамильтонианов:

$$\lim_{V\to\infty} \{ f_V[H_0(\bar{a}^{(V)}(\nu),\nu)] - f_V[H(\nu)] \} = 0 , \tag{100}$$

то в каждой точке ν, в которой существуют производные

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar{a}^{(V)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k} , \quad \frac{\partial f_V[H(\nu)]}{\partial \nu_k} , \quad \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar{a}^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_m} , \ (1 \leq k \leq r+s, m = 1, \dots, r+s) \tag{101}$$

$$\frac{\partial \bar{a}_m^{(\infty)}(\nu)}{\partial \nu_k} , \quad \left. \frac{\partial \tilde{a}_j^{(\infty)}(a_\ell,\nu)}{\partial a_i} \right|_{a_\ell = \bar{a}_\ell^{(\infty)}(\nu)} , \ (1 \leq k \leq r+s; m = 1, \dots, r+s; i,\ell = 1, \dots, r; j = 1, \dots, r+s) \tag{102}$$

а производные

$$\frac{\partial f_\infty[H_0(\bar{a}^{(\infty)}(\nu),\nu')]}{\partial \nu_k'} , \quad \frac{\mathcal{D} f_\infty[H_0(\bar{a}^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\mathcal{D}\nu_k} , \quad (1 \leq k \leq r+s) \tag{103}$$

существуют в некоторой окрестности ν_k, имеет место асимптотическая близость термодинамических средних оператора A_k, вычисленных на основе модельного и аппроксимирующего гамильтонианов, причем их общий предел равен частной и полной производным предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана по источнику ν_k^+:

$$\lim_{V\to\infty} \langle A_k\rangle^{(V)}_{H(\nu)} = \lim_{V\to\infty} \langle A_k\rangle^{(V)}_{H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)} \tag{104}$$

$$= \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k^+} = \frac{\mathcal{D} f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\mathcal{D}\nu_k^+}, \quad (1\le k\le r+s). \tag{105}$$

5. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ЗНАЧЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СРЕДНИХ КАК РЕШЕНИЯ МИНИМАКСНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПРЕДЕЛЬНОЙ ФУНКЦИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

УII) Если в точке ν существуют производные

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar a_m^{(V)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k}, \tag{106}$$

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar a_m^{(V)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_j}, \quad \frac{\partial \tilde a_j^{(V)}(a_i,\nu)}{\partial a_k}\Big|_{a_i=\bar a_i^{(V)}(\nu)} \tag{107}$$

(существование производных (107) необходимо лишь если $1\le k\le r$), то согласно соотношениям (96),(88) имеем:

$$\bar a_k^{(V)}(\nu) = \langle A_k\rangle^{(V)}_{H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)}. \tag{108}$$

УIII) В силу (80),(84),(85),(108), получаем

$$\bar a_k^{(\infty)}(\nu) = \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k^+}. \tag{109}$$

IX) Откуда, ввиду соотношений (79),(90),(93), следует, что

$$\langle A_k\rangle^{(V)}_{H(\nu)} \xrightarrow[V\to\infty]{} \bar a_k^{(\infty)}(\nu). \tag{110}$$

Таким образом, резюмируя полученные результаты, убеждаемся в справедливости следующей теоремы:

Т е о р е м а 4

Если для модельного гамильтониана из класса (I) с ограниченными операторами A_m:

$$\|A_m\| \le M, \quad (m=1,\ldots,r+s) \tag{111}$$

при любых a_m (m=I, ..., $r+s$) существует предел при $V\to\infty$ функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана (2):

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0(a,\nu)] = f_\infty[H_0(a,\nu)], \tag{112}$$

то

I) для этой предельной функции, так же, как и функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана, при конечном объеме существует решение $\bar a_m^{(\vartheta)}(\nu)$ (m=I, ..., $r+s$; $\vartheta = V,\infty$) следующей минимаксной задачи:

$$f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde a_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu))] = \max_{a_j} f_\vartheta[H_0(a_i,a_j,\nu)],$$

$$f_\vartheta[H_0(\bar a_i^{(\vartheta)}(\nu),\tilde a_j^{(\vartheta)}(\bar a_i^{(\vartheta)}(\nu),\nu),\nu)] = \min_{a_i} f_\vartheta[H_0(a_i,\tilde a_j^{(\vartheta)}(a_i,\nu),\nu)], \tag{113}$$

$$\bar a_j^{(\vartheta)}(\nu) = \tilde a_j^{(\vartheta)}(\bar a_i^{(\vartheta)}(\nu),\nu),$$

$$(i=1,\ldots,r;\ j=r+1,\ldots,r+s;\ \vartheta=V,\infty);$$

2) если разность свободных энергий модельного и аппроксимирующего гамильтонианов стремится к нулю в термодинамическом пределе:

$$\lim_{V\to\infty}\{f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)] - f_V[H(\nu)]\} = 0, \tag{114}$$

то в каждой точке ν, в которой существуют производные

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_k}, \quad \frac{\partial f_V[H(\nu)]}{\partial \nu_k}, \quad \frac{\partial f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_m}, \quad (1\le k\le r+s;\ m=1,\ldots,r+s), \tag{115}$$

$$\frac{\partial \bar a_m^{(\infty)}(\nu)}{\partial \nu_k}, \quad \frac{\partial \tilde a_j^{(\infty)}(a_\ell,\nu)}{\partial a_i}\Big|_{a_\ell=\bar a_\ell^{(\infty)}(\nu)}, \quad (1\le k\le r+s;\ m=1,\ldots,r+s;\ i,\ell=1,\ldots,r;\ j=r+1,\ldots,r+s), \tag{116}$$

$$\frac{\partial f_V[H_0(\bar a^{(V)}(\nu),\nu)]}{\partial \nu_j}, \quad \frac{\partial \tilde a_j^{(V)}(a_\ell,\nu)}{\partial a_k}\Big|_{a_\ell=\bar a_\ell^{(V)}(\nu)}, \quad (1\le k\le r+s;\ \ell=1,\ldots,r;\ j=r+1,\ldots,r+s) \tag{117}$$

(существование производных (117) необходимо лишь, если $1\le k\le r$), а производные

$$\frac{\partial f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu')]}{\partial \nu_k'}, \quad \frac{\mathcal{D} f_\infty[H_0(\bar a^{(\infty)}(\nu),\nu)]}{\mathcal{D}\nu_k}, \quad (1\le k\le r+s) \tag{118}$$

существуют в некоторой окрестности ν_k, предел при $V\to\infty$ термодинамического среднего оператора A_k по модельному гамильтониану $H(\nu)$ существует и равен решению $\bar{a}_k^{(\infty)}(\nu)$ минимаксной задачи п.I для предельной функции свободной энергии $f_\infty[H_0(a,\nu)]$:

$$\lim_{V\to\infty} \langle A_k\rangle_{H(\nu)}^{(V)} = \bar{a}_k^{(\infty)}(\nu). \tag{II9}$$

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В настоящей работе детально рассмотрена и полностью обоснована схема точного в термодинамическом пределе вычисления статистических средних в рамках метода Н.Н.Боголюбова(мл.) для минимаксной задачи общего вида, охватывающей широкий класс модельных задач (см., напр.,[/I/,/2/,/4/-/II/]).

Основные результаты сформулированы в теоремах I,3,4. Теорема I утверждает возможность асимптотически точного вычисления статистических средних для системы с гамильтонианом (I) как производных предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана (2) по источникам. Интересно отметить, что в условиях этой теоремы не накладывается никаких ограничений на операторы, входящие в гамильтониан. В теореме 3 сформулированы условия асимптотической близости статистических средних для термодинамически эквивалентных в смысле Вентцеля [/3/] модельного (I) и аппроксимирующего (2) гамильтонианов для случая ограниченных операторов A_m. Теорема 4 обосновывает наиболее удобный и наиболее часто встречающийся на практике способ асимптотически точного вычисления наблюдаемых системы как решений минимаксной задачи для предельной функции свободной энергии аппрксимирующего гамильтониана (33).

Столь подробное проведение достаточно простых с математической точки зрения рассуждений обусловлено стремлением авторов максимально полно и в завершенном виде представить схему вычисления термодинамических средних, что представляет большое значение для развития метода аппроксимирующих гамильтонианов.

Авторы выражают глубокую благодарность профессору Н.Н.Боголюбову (мл.) за постановку задачи и постоянное внимание к работе, а также участникам семинара сектора теории конденсированного состояния за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

I. N.N.Bogolubov (Jr.), Physica, 32, 933, 1966.
2. Н.Н.Боголюбов (мл.), Метод исследования модельных гамильтонианов, М., Наука , 1974.
3. G.Wentzel, Phys. Rev., 120, 1572, 1960.
4. Н.Н.Боголюбов (мл.), ИТФ, 67-I, Киев, 1967.
5. И.Г.Бранков, ОИЯИ, Р4-7000, Дубна, 1973.
6. Б.В.Мощинский, В.К.Федянин, ОИЯИ, Р4-8575, Дубна, 1975.
7. Н.Н.Боголюбов (мл.), В.Н.Плечко, ОИЯИ, Р4-8491, Дубна, 1975.
8. И.Г.Бранков, А.С.Шумовский, ОИЯИ, Р4-6899, Дубна, 1973.
9. И.Г.Бранков, ОИЯИ, Р4-6998, Дубна, 1973.
IO. И.Г.Бранков, В.А.Загребнов, ОИЯИ, Р4-7097, Дубна, 1973.
II. N.N.Bogolubov (Jr.), J.G.Brankov, V.N.Plechko, ICTP-76-51, Miramare - Trieste, 1976.
I2. R.B.Griffiths, Journ. Math. Phys., 5, 1215, 1964.

Рукопись поступила в издательский отдел
I9 ноября I976 года.