

Complexity of representations of coefficients of power series in classical statistical mechanics. Their classification and complexity criteria

G.I. Kalmykov

English version

Abstract

It is declared that the aim of simplifying representations of coefficients of power series of classical statistical mechanics is to simplify a process of obtaining estimates of the coefficients using their simplified representations.

The aim of the article is: to formulate criteria for the complexity (from the above point of view) of these representations and to demonstrate their application by examples of comparing Ree-Hoover representations of virial coefficients (briefly — Ree-Hoover representations) and such representations of power series coefficients that are based on the conception of the frame classification of labeled graphs.

To solve these problems, mathematical notions were introduced (such as a base product, a base integral, a base linear combination of integrals, a base linear combination of integrals with coefficients of negligible complexity, a base set of base linear combinations of integrals with coefficients of negligible complexity); and a classification of representations of coefficients of power series of classical statistical mechanics is proposed. In this classification the class of base linear combinations of integrals with coefficients of negligible complexity is the most important class. It includes the most well-known representations of the coefficients of power series of classical statistical mechanics.

Three criteria are formulated to estimate the comparative complexity of base linear combinations of integrals with coefficients of negligible complexity and their extensions to the totality of base sets of base linear combinations of integrals with coefficients of negligible complexity are constructed. The application of all the constructed criteria is demonstrated by examples of comparing with each other of Ree-Hoover representations and of such power series coefficients representations, which are constructed on the basis of the concept of frame classification of labeled graphs. The obtained results are presented in the tables and commented.

1. The article discusses thermodynamic equilibrium one-component systems of classical particles, both enclosed in a bounded set Λ of ν -dimensional real Euclidean space \mathbf{R}^ν and enclosed in ν -dimensional real Euclidean space \mathbf{R}^ν . It is assumed that these particles interact through central forces, characterized by the potential of pairwise interaction $\Phi(\mathbf{r})$, where $\mathbf{r} = (r^{(1)}, r^{(2)}, \dots, r^{(\nu)}) \in \mathbf{R}^\nu$. It is also assumed that the potential of pairwise interaction $\Phi(\mathbf{r})$ is a measurable function, and the interaction (pairwise interaction) satisfies the stability condition [24, 17, 49] and regularity condition [24, 17, 49].

As usual, we denote Mayer function

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

where $i \neq j$, $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \in \mathbf{R}^\nu$, $\beta = 1/kT$ is inverse temperature, k is the Boltzmann constant, T is absolute temperature. By \tilde{f}_{ij} we denote **Boltzmann function** [24, 49], assuming

$$\tilde{f}_{ij} = 1 + f_{ij} = \exp\{-\beta\Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\}. \quad (2)$$

In the case, when such a system of particles is enclosed in a limited set Λ , the dependence of the pressure $p(\Lambda)$ on the density ϱ in such a system can be presented in two forms: in the form of virial expansion of pressure $p(\Lambda)$ in powers of density ϱ and in parametric form, i.e. as two equations expressing the dependence of the pressure $p(\Lambda)$ and the density $\varrho(\Lambda)$ on the parameter z , called activity [23, 24, 44, 49].

The virial expansion is:

$$p(\beta, \Lambda) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} B_n(\beta, \Lambda) \varrho^n. \quad (3)$$

Below we will omit the argument β of the coefficients B_n for simplicity. In this expansion, the coefficients $B_n(\Lambda)$ are called virial coefficients. The virial coefficient $B_1(\Lambda)$ is 1, and for $n > 1$ virial coefficients are defined by the formula:

$$B_n(\Lambda) = -\frac{n-1}{|\Lambda|n!} \sum_{B \in \mathfrak{B}_n} \int_{(\Lambda^\nu)^n} \prod_{\{u,v\} \in X(B)} f_{uv}(d\mathbf{r})_n, \quad (4)$$

where $|\Lambda|$ is the measure of the set Λ , \mathfrak{B}_n is the totality of all doubly connected labeled graphs (blocks) with the set of vertices $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$, $X(B)$ is the set of all edges of block B ; $(d\mathbf{r})_n = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n$, $d\mathbf{r}_i = dr_i^{(1)} dr_i^{(2)} \dots dr_i^{(\nu)}$.

Here and in what follows, following [25, 28], we assume that every graph G , by definition, has neither multiple edges nor loops.

Hereinafter in the text, we assume that the vertices of edges and of graphs are labeled with natural numbers. Therefore, throughout the article, we identify vertices of graphs with their labels. In the same way, we identify the vertices, incident to edges, with their labels.

These representations of virial coefficients were obtained by J. Mayer. He also noticed that for $n \geq 2$ the virial coefficients $B_n(\Lambda)$ quickly tend to their limit B_n as Λ grows. This makes it possible as an estimate of the limit of the coefficient $B_n(\Lambda)$ to take the value of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ where the set Λ is not very large.

He also found a parametric representation of the pressure dependence $p(\beta, \Lambda)$ on the density $\varrho(\beta, \Lambda)$:

$$p(\beta, \Lambda) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta, \Lambda) z^n; \quad (5)$$

$$\varrho(\beta, \Lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} n b_n(\beta, \Lambda) z^n. \quad (6)$$

Below we will omit the argument β of the coefficients $b_n(\beta, \Lambda)$ for simplicity. In expansions (5) and (6) in degrees of activity z the coefficients $b_n(\Lambda)$ are called, like virial coefficients, Mayer coefficients. Unlike virial coefficients, we will call them Mayer coefficients in the degrees of activity z . And in those cases where their meaning is uniquely determined by the context, we will briefly call them Mayer coefficients.

Mayer coefficient $b_1(\Lambda)$ is 1, and for $n > 1$ the Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ are defined by the formula:

$$b_n(\Lambda) = \frac{1}{|\Lambda|n!} \sum_{G \in \mathbf{G}_n} \int_{(\Lambda^V)^n} \prod_{\{u,v\} \in X(G)} f_{uv} d\mathbf{r}_n, \quad (7)$$

where \mathbf{G}_n is the totality of all connected labeled graphs with the set of vertices $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$, $X(G)$ is the set of all edges of the graph G .

However, it was subsequently noticed that these representations have very unpleasant property, thanks to which they are practically unsuitable both for the calculation of virial coefficients (except for the first three) and for the theoretical analysis of the behavior of the higher coefficients. For the first time this property of Mayer representations of the coefficients of power series of classical statistical mechanics was pointed out by I.I. Ivanchik. In his works [1, 30], he was the first to qualitatively describe this property and called it an **asymptotic catastrophe**. What is the manifestation of an asymptotic catastrophe? The fact is that Mayer representation of the n -th coefficient of the power series contains a factor that is the sum of integrals. Such sums of integrals have the following feature: even with not very large values of n a significant part of the integrals of such a sum with large accuracy mutually cancel out as values of opposite signs.

Relatively small the remainder remaining after such a mutual annihilation is, for $n \rightarrow \infty$, an infinitesimal quantity compared to with the number of terms in the sum traditionally determining this coefficient. This "remainder" of primary interest becomes inaccessible for direct research even for small n .

Further, the author of this article in the book [17] gave a rigorous mathematical definition of the asymptotic catastrophe. For the convenience of the reader, we present this definition here.

Definition 1. In representations of power series coefficients there is the asymptotic catastrophe phenomenon if for any $B > 0$ the number of terms in the sum, representing the coefficient of the variable to the power of n , for $n \rightarrow \infty$ grows faster than the value $(n!)^2 B^n$. ■

The meaning of this definition is that it enables to separate those representations of the coefficients of the power series, where already for relatively small n the number of terms is too large, from representations, in which the number of terms grows significantly slower.

When trying to estimate the coefficients of Mayer expansions, based on those representations where the phenomenon of an asymptotic catastrophe is present, it is almost inevitable that with an increase in n , a catastrophically rapid increase in the estimation errors of these coefficients takes place.

Over the past few decades, the efforts of a number of scientists have been directed towards to simplify representations of coefficients of power series of classical statistical mechanics and their estimation.

The aim of simplifying the representations of the coefficients of these power series was to simplify the process of obtaining estimates of these coefficients using their simplified representations. For brevity, a complexity of the process of obtaining an estimate of a given coefficient by means of this representation, we will call the **complexity of the given representation of this coefficient**.

The most famous results in simplifying the representations of the virial coefficients are apparently Ree-Hoover representations [46], [47], [48]. In these representations, for each $n \geq 4$, the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is represented as a linear combination of integrals, the integrands of which are labeled with complete labeled graphs. In every integral, which is a term of such a linear combination, the integrand is the product of Mayer and Boltzmann functions. And the set of all Mayer and Boltzmann functions included in this product, is in one-to-one correspondence with the set of edges of the graph, labeling the integrand of this integral. Moreover, each edge of this graph labeled with Mayer function corresponds to Mayer function that is a label of this edge. And each edge labeled with Boltzmann function corresponds to Boltzmann function that is a label of this edge. So the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is represented as a linear combination of integrals, in each of which the integrand is the product of Mayer and Boltzmann functions, total number of which is $n(n-1)/2$. These representations are called **Ree-Hoover representations**.

Using Ree-Hoover representations of virial coefficients, a number of scientists have calculated [50] estimates of the virial coefficients $B_n(\Lambda)$ (for $n = \overline{4, 8}$) for a number of different values temperatures. Later, on a graphical computer, the estimates of the virial coefficients $B_n(\Lambda)$ were calculated [51] for $n = \overline{6, 9}$ for the Lennard-Jones potential for different temperatures. At that the previously calculated estimates of the values of these coefficients were made precise. Moreover, estimates of the values of these coefficients were calculated for $n = \overline{10, 16}$ for several (from one to four) temperatures. By the way, the fact that for $n = \overline{10, 16}$ it was possible to find estimates for the value of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ at no more than four different temperatures, indicates that for $n > 9$ the calculations volume required to estimate one of the values of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by Ree-Hoover method is so large that these calculations require a very considerable time even when working on a modern computer with high performance. However, the question remains: are the Ree-Hoover representations free from the asymptotic catastrophe?

A different approach to simplifying the representations of the coefficients of power series of classical statistical mechanics is developed by the author of this article. It is based on a concept of classification of labeled graphs. This concept is developing by the author [2–9, 13–20, 31–34, 37–39]. We will call it **the frame sum method**.

Within the bounds of this method, he obtained the avoiding the asymptotic catastrophe representations: of Mayer coefficients of expansions of pressure and density in powers of activity, of coefficients of expansion of m -partial distribution function in powers of activity, of coefficients of expansion of the ratio of activity to density in powers of activity and of virial coefficients [3, 4, 6–9, 15, 17, 31–34, 37, 39].

The advantage of these representations is that they are free from asymptotic catastrophe [9, 11, 15, 17, 36, 37, 39]. Using these representations, it was possible to obtain [9, 10, 12, 17, 35, 39] an upper bound for the radius of convergence of Mayer expansions in degrees of activity (for non-negative potential). And also it was possible, using these representations, on a personal computer calculate, fairly accurately, the estimates of the thermodynamic limits of the 4th, 5th and 6th virial coefficients at one of the temperature values.

3. The purpose of the article is: to define criteria for estimation of a complexity of repre-

representations of coefficients of power series of the classical statistical mechanics; to demonstrate application of these criteria with examples of comparison of Ree-Hoover representations of virial coefficients and such power series coefficients representations that are based on the concept of frame classification of labeled graphs.

It is obvious that even for comparison in the complexity of two different representations of a given coefficient of a certain power series you must have a criterion. This kind of criterion is all the more necessary if the task is set to compare the complexity of given representations of given coefficients of a variable in a power n of two different power series.

The creation of such criteria facilitates the fact that many well-known representations of the coefficients of power series of classical statistical mechanics are linear combinations of multidimensional integrals, the integrands of which are labeled with labeled graphs, in which each edge is labeled with either Mayer or Boltzmann functions. In every integral that is a term of such a linear combination, the integrand is the product of Mayer and Boltzmann functions (such are, for example, proposed by Ree and Hoover [46, 47, 48] representations of virial coefficients).

In the article [39], a classification of the representations of the coefficients of power series of classical statistical mechanics is made. The most important class of this classification contains obtained by the frame sums method the virial coefficients representations in the thermodynamic limit and the representations of the thermodynamic limits of Mayer coefficients of the pressure and density expansions in the degrees of activity. These representations are linear combinations of multidimensional integrals described in the previous parbox.

To estimate the comparative complexity of the included in this class representations of the coefficients of power series, in [39], for the first time, three criteria were constructed, ordered by their accuracy. Also, in [39], three criteria were constructed, ordered by their accuracy, for a comparative estimation of the complexity of polynomials in linear combinations included in the above mentioned class of representations of the coefficients of power series of classical statistical mechanics.

In the given article, this class is extended so that this extension includes many well-known representations of the coefficients of power series arising in the investigations of thermodynamic equilibrium one-component systems of classical particles as enclosed in ν -dimensional real Euclidean space \mathbf{R}^ν , and those enclosed in bounded the set Λ contained in the space \mathbf{R}^ν . This article introduces the concept of **comparable** linear combinations belonging to this extension and constructs criteria for a comparative estimation of the complexity of comparable linear combinations. Also proposed criteria for comparative estimation of complexity of polynomials in linear combinations included in this extension.

To describe these criteria, the mathematical concepts introduced in [39] and some properties of these concepts are used. For the convenience of readers, all these mathematical concepts and their properties are given in this article. In those cases when the proofs of theorems and lemmas taken from [39] were not clear enough, or not detailed enough, they were replaced by clear and detailed proofs with references to sources and used formulas.

The application of these criteria is demonstrated by examples of the estimates of the comparative complexity of Ree-Hoover representations of the virial coefficients and of the power series coefficients representations based on the concept of frame classification of labeled graphs.

3. Before proceeding to the description of the proposed classification and the proposed criteria of the complexity of representations of the coefficients of power series, we will give definitions of the mathematical concepts necessary for their descriptions, and dwell on some

properties of these concepts.

First of all, we will slightly expand the concept of an edge of a labeled graph, introducing the following

Definition 2 [39]. An unordered pair $\{i, j\}$ of different natural numbers is called an **edge**. ■

In this article, we will consider only the sets of pairwise distinct edges without mention this circumstance. ■

Definition 3 [39]. We will say that a set of edges $X_f = \{\{i, j\}\}$ **defines** the set $F = \{f_{ij}\}$ of Mayer functions, if any Mayer function f_{ij} belongs to the set F if and only if the edge $\{i, j\}$ belongs to the set X_f . At that, the set of edges X_f will be called a **set of Mayer edges with respect to this set F of Mayer functions**. ■

Definition 4 [39]. We will also say that a set of edges $X_{\tilde{f}} = \{\{i', j'\}\}$ **defines** the set $\tilde{F} = \{\tilde{f}_{i'j'}\}$ of Boltzmann functions if any Boltzmann function $\tilde{f}_{i'j'} = f_{i'j'} + 1$ is contained in the set \tilde{F} if and only if the edge $\{i', j'\}$ belongs to the set $X_{\tilde{f}}$. At that the set $X_{\tilde{f}}$ will be called a **set of Boltzmann edges with respect to this set \tilde{F} of Boltzmann functions**. ■

Let's introduce the notations:

$$P(F, \tilde{F}) = \prod_{f_{ij} \in F} \prod_{\tilde{f}_{i'j'} \in \tilde{F}} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'} \quad (8)$$

is the product of all Mayer functions belonging to a set of Mayer functions F , and all Boltzmann functions belonging to a set of Boltzmann functions \tilde{F} . It is obvious that the product $P(F, \tilde{F})$ is a function of sets F and \tilde{F} . For brevity, we will omit the arguments F and \tilde{F} of the product P . The product P will be called a **product of Mayer and Boltzmann functions**.

$\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$ is an ordered pair of disjoint sets: a set of edges $X_f = \{\{i, j\}\}$ and a set of edges $X_{\tilde{f}} = \{\{i', j'\}\}$.

$V(X_f)$ is the set of ends (vertices) of all edges from the set X_f .

$V(X_{\tilde{f}})$ is the set of ends (vertices) of all edges from the set $X_{\tilde{f}}$.

$|V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}})|$ is the cardinality of the sum of sets $V(X_f)$ and $V(X_{\tilde{f}})$.

we will also consider such ordered pairs $\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$ of disjoint sets, in which the second set is empty, that is pairs of the form $\mathbf{X} = \{X_f, \emptyset\}$.

Definition 5 [39]. If disjoint sets of edges X_f and $X_{\tilde{f}}$ satisfy the condition

$$V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}}) = V_n = \{1, 2, \dots, n\}, \quad (9)$$

where

$$n = |V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}})|, \quad (10)$$

then the ordered pair $\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$ of these sets will be called a **canonical pair of sets**, and the number n will be called the **order** of this canonical pair of sets. In a canonical pair of sets $\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$, the first set X_f will be called a **set of Mayer edges**, and the second set $X_{\tilde{f}}$ will be called a **set of Boltzmann edges**. ■

By $\mathfrak{X}_n = \{\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})\}$ we denote the totality of all canonical pairs of sets of order n . Note that in a pair $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$, included in the totality \mathfrak{X}_n , the set of Boltzmann edges $X_{\tilde{f}}$ can be empty.

To each canonical pair of sets $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ of order n we assign the product of Mayer and Boltzmann functions $P_n(\mathbf{X})$ defined by the formula

$$P_n(\mathbf{X}) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(\mathbf{X})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\tilde{f}}(\mathbf{X})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (11)$$

Obviously, the product of Mayer and Boltzmann functions $P_n(\mathbf{X})$ is the restriction to the set \mathfrak{X}_n of the function $P(F, \tilde{F})$, defined by formula (8).

Definition 6 [39]. We will say that a canonical pair of sets $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ of order n **defines** the product of functions $P_n(\mathbf{X})$ and call this product of functions a **canonical product**, and number n is **order** of this product. ■

By $\mathfrak{P}_n = \{P: P = P_n(\mathbf{X}), \mathbf{X} \in \mathfrak{X}_n\}$ denote the set of all canonical products defined by canonical pairs of sets from the totality \mathfrak{X}_n .

From the definitions of the totality \mathfrak{X}_n , of the set \mathfrak{P}_n and of the product $P_n(\mathbf{X})$ by formula (11) it follows that the correlation

$$P = P_n(\mathbf{X}) \quad (12)$$

between the elements $\mathbf{X} \in \mathfrak{X}_n$ and $P \in \mathfrak{P}_n$ is a mapping of the totality $\mathfrak{X}_n = \{\mathbf{X}\}$ onto the set $\mathfrak{P}_n = \{P\}$.

Note that the mapping $P_n: \mathfrak{X}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$ is a one-to-one mapping of the totality \mathfrak{X}_n onto the set \mathfrak{P}_n . Since each functions product P from the set \mathfrak{P}_n under the mapping P_n has, and, moreover, the only one, preimage $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ in the totality \mathfrak{X}_n , then this preimage can be taken as the label of this product and this product can be considered labeled with the canonical pair of sets $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$. At that, any canonical pair of sets $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ from the totality \mathfrak{X}_n turns out to be the label of the canonical product of functions, which is included in the set \mathfrak{P}_n and is uniquely defined by this pair of sets by formulas (12) and (11). Other methods of labeling the canonical products of functions will be described below. All these methods have found their application in this article.

Let us denote by $\mathfrak{G}_n = \{G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})\}$ a set of all labeled graphs with the vertex set $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$ and an edges set X , which is the union of two disjoint sets: a set $X_f = \{\{i, j\}\}$ and a set $X_{\tilde{f}} = \{\{i', j'\}\}$, is forming a canonical pair of sets $(X_f, X_{\tilde{f}}) \in \mathfrak{X}_n$.

For graphs belonging to the set $\mathfrak{G}_n = \{G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})\}$, we introduce the notation: $X_f(G) = X_f$, $X_{\tilde{f}}(G) = X_{\tilde{f}}$ where $G = G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}}) \in \mathfrak{G}_n$. The edges set $X_f(G)$ will be called **the set of Mayer edges of the graph** $G \in \mathfrak{G}_n$, and the set $X_{\tilde{f}}(G)$ will be called **the set of Boltzmann edges of the graph** $G \in \mathfrak{G}_n$.

We define a mapping A_n of the set \mathfrak{G}_n onto the set \mathfrak{X}_n , setting

$$A_n(G) = (X_f(G), X_{\tilde{f}}(G)), \quad (13)$$

where $G \in \mathfrak{G}_n$. The mapping A_n defined by formula (13) is a one-to-one mapping of the set \mathfrak{G}_n onto the set \mathfrak{X}_n .

Recall that the mapping P_n , defined by the formulas (11) and (12), is a mapping of the set \mathfrak{X}_n onto the set \mathfrak{P}_n . Hence, there is the mappings composition $P_n \circ A_n$, which is a map of the set \mathfrak{G}_n onto the set \mathfrak{P}_n . Since the mappings A_n and P_n are one-to-one, their composition $P_n \circ A_n$ is also [22, 40] one-to-one.

Remark 1 [39]. Each product of functions P from the set \mathfrak{P}_n under the mapping $P_n \circ A_n$ has, and moreover unique, preimage in the set \mathfrak{G}_n . This means that this preimage can be taken as a graph-label of this product and this product can be considered labeled. Moreover,

any graph $G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$ from the set \mathfrak{G}_n turns out to be a label of a functions product, which we will denote $P_{1n}(G)$. This product is included in the set \mathfrak{P}_n and is uniquely defined by this graph according to the formula

$$P_{1n}(G) = (P_n \circ A_n)(G) = P_n(A_n(G)) = P_n((X_f(G), X_{\tilde{f}}(G))) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(G)} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\tilde{f}}(G)} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (14)$$

■

Since the product $P_{1n}(G)$ is included in the set \mathfrak{P}_n , then the definition of this set implies that the product $P_{1n}(G)$ is canonical.

Based on Remark 1, we formulate the following

Definition 7 [39]. If a graph $G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$ belongs to the set \mathfrak{G}_n , then the canonical functions product $P_{1n}(G)$ defined by formula (14) will be called **the product labeled with the graph** $G = G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$, and the graph $G = G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$ will be called **the graph-label** of this product of functions. ■

Let us consider a graph $G = G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$, belonging to the set of graphs \mathfrak{G}_n . We denote by $R(G) = (V_n; X_f)$ the graph with the set of vertices V_n and the set of edges X_f . The graph $R(G)$ is a subgraph of the graph G . By definition, the set of edges of the graph $R(G)$ is the set $X_f(G)$ of Mayer edges of the graph G . This set of edges defines the set of Mayer functions included in the functions product $P_{1n}(G)$. But the graph $R(G)$, by definition, does not contain, unlike the graph G , the set $X_{\tilde{f}}(G)$ of Boltzmann edges. By Definition 4 this set $X_{\tilde{f}}(G)$ of Boltzmann edges defines the set of Boltzmann functions included in the functions product $P_{1n}(G)$. Therefore, we will call subgraph $R(G)$ of graph G **insufficient label** of the functions product $P_{1n}(G)$ labeled with the graph G .

Definition 8 [39]. Product of functions $P \in \mathfrak{P}_n$ will be called **base product of order** n , if its graph-label $G \in \mathfrak{G}_n$ satisfies the condition: the subgraph $R(G)$ of the graph G is a connected graph. If the subgraph $R(G)$ of the graph-label $G \in \mathfrak{G}_n$ is not connected, then the product of functions P labeled with the graph G will be called **pseudobase product**. ■

Let's introduce the notation: $\mathfrak{P}_{bn} = \{P\}$ is the set of all base products, belonging to the set \mathfrak{P}_n ; \mathfrak{G}_{bn} is the set of all graphs that are graphs-label of base products belonging to the set \mathfrak{P}_{bn} .

Definitions 7 and 8 and Remark 1 imply

Corollary 1. *The sets \mathfrak{P}_{bn} and \mathfrak{G}_{bn} are in one-to-one correspondence.*

Lemma 1 [39]. *If the subgraph $R(G)$ of a graph-label $G \in \mathfrak{G}_n$ is connected, then, firstly, each edge from the set $X_{\tilde{f}}(G)$ connects two non-adjacent vertices of the graph $R(G)$ and, secondly, the canonical product $P_{1n}(G)$, which is labeled with graph G , is a function of n variables $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$.*

Proof. Since any edge from the set $X_{\tilde{f}}(G)$ belongs to the graph G by the definition of this graph, then both vertices incident to this edge belong to the set V_n . Therefore, these vertices belong to the graph $R(G)$ by its definition. From the conditions of the lemma by Definition 8 it follows that the graph G belongs to the set \mathfrak{G}_n . From here by the definition of this set it follows that the sets $X_{\tilde{f}}$ and X_f have no common edges and form a canonical pair of order n . This means that the set X_f does not contain an edge connecting two vertices incident to some edge from the set $X_{\tilde{f}}(G)$. Hence, each edge from the set $X_{\tilde{f}}$ connects two non-adjacent vertices of the graph $R(G)$. The first assertion of the lemma is proved.

Let us now prove the second assertion of the lemma. Let i be a vertex belonging to the set V_n . As the subgraph $R(G) = (V_n; X_f)$ of the graph G is connected, then in the set of edges $X_f(G)$ there exists an edge connecting the vertex i with some vertex $j \in V_n$. Hence, by the definition of the product $P_{1n}(G)$ by formula (14), it follows that the Mayer function f_{ij} is included in this product. And since the Mayer function f_{ij} by the definition is a function of the variables \mathbf{r}_i and \mathbf{r}_j , then these variables are included in the set of variables of the functions product $P_{1n}(G)$. Thus, for any $i \in V_n$ the variable \mathbf{r}_i is a variable of the function that is the functions product $P_{1n}(G)$.

On the other hand, if $i \notin V_n$, then i is not a vertex of the graph G and cannot be a vertex incident to any edge of this graph. Therefore, it follows from the definition of the product $P_{1n}(G)$ that the variable \mathbf{r}_i is not a variable of any of the functions, included in this product. The results obtained imply the second assertion of the lemma. ►

Lemma 1 implies the following.

Corollary 2 [39]. *A base product $P \in \mathfrak{P}_{bn}$ is a function of n variables $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$, where n is the number of vertices of the graph-label G .*

Definition 9. If the integrand of an integral is a base product $P \in \mathfrak{P}_{bn}$ of order n , and the integration domain of this integral is either real space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, or a connected bounded Lebesgue measurable set contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$, then this integral will be called a **base integral**, and the number n will be called its **order**. ■

Let $G \in \mathfrak{G}_{bn}$, and U be a connected bounded Lebesgue measurable set contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$. Let's introduce the notation:

$$I(G, U) = \int_U P_{1n}(G)(d\mathbf{r})_n \quad (15)$$

$$I(G) = I(P_{1n}(G)) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} P_{1n}(G)(d\mathbf{r})_{1,n-1}, \quad (16)$$

where $(d\mathbf{r})_{1,n-1} = d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_n$.

Theorem 1. *If the potential of the pairwise interaction $\Phi(\mathbf{r})$ is a measurable function, the pairwise interaction satisfies the conditions of stability and regularity, and the graph G belongs to the set \mathfrak{G}_{bn} , then the following statements are true:*

A₁) the function $P_{1n}(G)$ is integrable over the space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, and the integral $I(G)$ converges and does not depend on the value of the variable \mathbf{r}_1 ;

A₂) the function $P_{1n}(G)$ is integrable on any connected bounded Lebesgue measurable set U contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$, and the integral $I(G, U)$ converges.

Proof. First of all, note that the regularity of the pairwise interaction means that the Mayer function $f(\mathbf{r})$ at some $C > 0$ satisfies the inequality

$$\int_{\mathbf{R}^\nu} |f(\mathbf{r})| d\mathbf{r} < C. \quad (17)$$

Recall that this article considers only systems of particles with a pairwise interaction. In such systems, the interaction is stable in if and only if there is a number $B \geq 0$ such that for all $n > 1$, the inequality

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) > -nB. \quad (18)$$

takes place. In particular, for $n = 2$, the inequality

$$\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) > -2B. \quad (19)$$

takes place. Therefore, the Boltzmann function $\tilde{f}(\mathbf{r})$ satisfies the inequality

$$\tilde{f}(\mathbf{r}) < \exp(2\beta B). \quad (20)$$

It follows that the Mayer function $f(\mathbf{r})$ for some $D \geq 1$ satisfies the inequality

$$|f(\mathbf{r})| < D. \quad (21)$$

From the definition of the function $P_{1n}(G)$ by the formula (14) and from the inequalities (20) and (21) it follows that the function $P_{1n}(G)$ for some $E > 0$ satisfies the inequality

$$|P_{1n}(G)| < E. \quad (22)$$

for all $(\mathbf{r})_n \in (\mathbf{R}^\nu)^n$.

Since the potential of pairwise interaction $\Phi(\mathbf{r})$ is measurable function, and Boltzmann function \tilde{f} by its definition is a continuous function of this potential Φ , then, by the properties of measurable functions [21], Boltzmann function \tilde{f} is also measurable. Hence, by the properties of measurable functions [21] it follows that the Mayer function $f(\mathbf{r})$ is measurable.

By Lemma 1, the function $P_{1n}(G)$ is a function of the n variables $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$. And according to its definition by formula (14), this function is the product of a finite number of functions, which, as we have already established, are measurable.

So, the function $P_{1n}(G)$ is a product of a finite number of measurable functions and is defined in real space $(\mathbf{R}^\nu)^n$. Hence, by the properties of measurable functions, it follows that the function $P_{1n}(G)$ is a measurable function in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$. From this and from the inequality (22) by the properties of integrable functions it follows that the function $P_{1n}(G)$ is integrable on any connected bounded Lebesgue measurable set U , contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$ and the integral $I(G, U)$ converges.

It follows from the conditions of the theorem that the graph $R(G)$ is connected. Therefore, there is a tree $t(G)$, which is a subgraph of the graph $R(G)$. Therefore, the integrand $P_{1n}(G)$ of the integral $I(G)$ can be present as follows

$$P_{1n}(G) = \Omega(\mathbf{r})_n \prod_{\{i,j\} \in X(t(G))} y(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (23)$$

where

$$\Omega(\mathbf{r})_n = \prod_{\{ij\} \in [X_f(G) \setminus X(t(G))]} f_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \prod_{\{i'j'\} \in X_{\tilde{f}}(t(G))} \tilde{f}_{i'j'}(\mathbf{r}_{i'} - \mathbf{r}_{j'}), \quad (24)$$

$$y(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}). \quad (25)$$

From the inequalities (17) and (21) and from the definition (25) of the function $y(\mathbf{r})$ it follows that the function $y(\mathbf{r})$ also satisfies inequalities

$$\int_{\mathbf{R}^\nu} |y(\mathbf{r})| d\mathbf{r} < C. \quad (26)$$

and

$$|y(\mathbf{r})| < D. \quad (27)$$

From the definition of the function Ω by the formula (24) and from the inequalities (20) and (21) it follows that the function $\Omega(\mathbf{r})_n$ for some $E' > 0$ the inequality

$$|\Omega(\mathbf{r})_n| < E' \quad (28)$$

satisfies.

Since Mayer function $f(\mathbf{r})$ is measurable, then by the properties of measurable functions [21] it follows that the function $y(\mathbf{r})$, defined by the formula (25) is also measurable in the space \mathbf{R}^ν .

The function $\Omega(\mathbf{r})_n$, defined by the formula (24), is a product of a finite number of functions, which, as we have already established, are measurable in their definition domain. Hence, by the properties of measurable functions [21], it follows that the function $\Omega(\mathbf{r})_n$ is measurable in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$. From the definition of the function $\Omega(\mathbf{r})_n$ by the formula (24) it follows that this function is a translationally invariant function [17], [24], [49].

So, the integrand $P_{1n}(G)$ of the integral $I(G)$ is represented by the formula (23), where the measurable function $y(\mathbf{r})$ satisfies the inequalities (26) and (27), and the measurable function $\Omega(\mathbf{r})_n$ satisfies the inequality (28) and is a translationally invariant function. Hence, by Theorem 3 from Chapter III of [17], it follows that the function $P_{1n}(G)$ represented by the formula (23) is a function integrable over the space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, and the improper integral $I(G)$ converges and does not depend on the value of the variable \mathbf{r}_1 . Theorem 1 is proved. \blacktriangleright

Remark 2. Since the article deals only with particles systems satisfying the conditions of Theorem 1, then every improper integral $I(G)$, taken over the space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$ and labeled by a graph $G \in \mathfrak{G}_{bn}$, and every integral of the form $I(G, U)$, labeled by a graph $G \in \mathfrak{G}_{bn}$ and taken over any connected bounded Lebesgue measurable set U contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$, satisfy conditions of Theorem 1 and are convergent by Theorem 1. \blacksquare

Definition 10 [39]. An Integral of a pseudobase product of functions will be called a **pseudobase integral**. \blacksquare

Definition 11. If in a linear combination L of convergent base integrals of order n all integrals have one and the same integration domain $U(L)$, and the coefficient for each of the integrals included in it is a real number and is defined by the graph labeling the integrand of this integral, then the linear combination L is called a **base linear combination**, the number n is called its **order**, and the integration domain $U(L)$ is called a **set, associated with the given linear combination L** . \blacksquare

Remark 3. Definition 11 implies that any base integral of a given base linear combination is completely defined by the set, which is associated with a given linear combination, and by its integrand, which, being the base product $P \in \mathfrak{P}_{bn}$, is defined by the graph-label $G \in \mathfrak{G}_{bn}$ of this base product. Hence, any base integral of a given base linear combination is completely defined by the set associated with the given linear combination and by the graph-label G of the base product, which is its integrand. \blacksquare

Definition 12. If in a linear combination of integrals of products of Mayer and Boltzmann functions at least one integral is not convergent base integral, then this linear combination of integrals is called a **pseudo-base linear combination**. \blacksquare

Example 1 Consider Ree-Hoover representation [48] of a virial coefficient $B_n(\Lambda)$ for $n \geq 2$. It was stated above that this representation is a linear combination of integrals. In each of these integrals, the integrand is a product of Mayer and Boltzmann functions. The definition of Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ implies that in this linear combination each integral is labeled (in sense Ree-Hoover [48]) with some complete graph $G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$. Moreover, the edges set X_f by Definition 3 defines the set $F = \{f_{ij}\}$ of Mayer functions included as factors in the integrand of the integral, labeled with the graph $G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$; and the edges set $X_{\tilde{f}}$ by Definition 4 defines the set $\tilde{F} = \{\tilde{f}_{i',j'}\}$ of Boltzmann functions included as factors in this integrand.

From the definition of the Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ it follows that the sets X_f and $X_{\bar{f}}$ of the graph G are disjoint and form a sets canonical pair $\mathbf{X} = (X_f, X_{\bar{f}})$ of order n . Two conclusions follow from this: 1) by Definition 6, the integrand of the integral labeled (in sense Ree-Hoover) with the graph G , is the canonical product $P_n(\mathbf{X})$ of order n , defined by the sets canonical pair $(\mathbf{X}) = ((X_f, X_{\bar{f}}))$ according to formula (11); 2) the graph $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ belongs to the set \mathfrak{G}_n by the definition of this set.

From conclusion 2) by Definition 7, it follows that the graph $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ is the graph-label of the functions product $P_{1n}(G)$, which is the product labeled by this graph, is uniquely defined by this graph according to formula (14) and, by Remark 1, belongs to the set \mathfrak{P}_n .

From the definition of the product of functions $P_{1n}(G)$ by formula (14) it follows that this product is the canonical product $P(X_f, X_{\bar{f}})$ of order n , which is the integrand of the integral included in considered Ree-Hoover representation and labeled (in sense Ree-Hoover [48]) by the graph G . Since in this case the subgraph $R(G)$ of the graph $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ is, as is known [48], doubly connected graph, then by Definition 8 this integrand is a base product of order n . This base product belongs to the set \mathfrak{P}_{bn} by the definition of this sets. And the graph-label G of this base product belongs to the set \mathfrak{G}_{bn} by the definition of this set.

So, the integrand of any integral, that is included in Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$, is a base product labeled by the complete graph belonging to the set \mathfrak{G}_{bn} and labeling (in sense Ree-Hoover) this integral. This integrand is defined by the formula (14), where G is the above graph. From the formula (14) it follows that the number of Mayer and Boltzmann functions included in the canonical product labeled by a complete graph with n vertices is equal to the number $n(n-1)/2$ of edges of this graph.

In [48], Ree and Hoover considered systems of particles enclosed in a bounded volume Λ and obtained representations of the virial coefficients $B_n(\Lambda)$ for a case of a bounded volume Λ as integrals linear combination in which all integrals have the same domain of integration Λ^n . We can hold that Ree-Hoover representations are integrals linear combinations, in each of which all integrals have the same integration domain, completely defined by this linear combination.

In what follows, we will assume that the set Λ^n is connected, bounded, and Lebesgue measurable. Since in this case the integrand of each integral of this linear combination is a base product of order n , then, by Definition 9, each integral in the linear combination that is Ree-Hoover representation of a virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is a base integral of order n .

So, under the above conditions, the Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ has the following properties: 1) this representation is a linear combination of the integrals whose domain of integration is the connected bounded and Lebesgue measurable set contained in space $(\mathbf{R}^\nu)^n$; 2) the integrand of each integral of this linear combination is a base product whose graph-label belongs to the set \mathfrak{G}_{bn} .

This article deals only with thermodynamic equilibrium one-component systems of classical particles with pair interaction [24, 49]. In this case, it is assumed that the pair interaction satisfies the conditions of stability and regularity, and the pair potential $\Phi(\mathbf{r})$ is a measurable function. Under these restrictions and for $n \geq 2$, the integrands of all integrals included in the Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$, by Theorem 1, are integrable on any connected, bounded and Lebesgue measurable set U , contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$, and all these integrals converge.

So, in the case when systems of particles enclosed in a bounded volume satisfy the conditions listed above in this example, for $n \geq 2$ the Ree-Hoover representation of the virial

coefficient $B_n(\Lambda)$ is a linear combination of converging base integrals.

As is known [48], the integrals linear combination, which is Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$, satisfies the condition: the coefficient of each integral included in this linear combination is a real number and is defined by the graph labeling (in sense Ree-Hoover) this integral. Based on this fact and the fact that everyone included in this linear combination integrals are convergent base integrals of order n , having the same domain of integration, we come to the conclusion: by Definition 11, this linear combination is a base one of order n . So, in the cases considered in this example, Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ for $n \geq 2$ is a base linear combination of order n .

According to Remark 3, each integral in this linear combination is completely defined by its integrand and the set, associated with this linear combination. It has been established above that this integrand is a base product of order n belonging to the set $\mathfrak{P}_{bn} \subset \mathfrak{P}_n$ and labeled with the labeled graph G belonging to the set \mathfrak{G}_{bn} . By Corollary 1, this base product is uniquely determined by its graph-label $G \in \mathfrak{G}_{bn}$. Therefore, each integral in this linear combination is completely defined by the set, associated with the given linear combination, and by the graph-label of the base product, which is the integrand of this integral. ►

Let's introduce the notation:

$\mathfrak{G}(L)$ is the set of all graphs serving as graphs-labels of such the base products that are the integrands of the integrals included in the base linear combination L ;

$$R(\mathfrak{G}(L)) = \{R(G) : G \in \mathfrak{G}(L)\}. \quad (29)$$

Definition 13. If L is a base linear combination, then the set of graphs $\mathfrak{G}(L)$ will be called **the set of graphs-labels** of this base linear combination, and the number of integrals included in it will be called the **length** of this linear combination and denote by $q(L)$. ■

There are often cases when for labeling a canonical product of functions $P \in \mathfrak{P}_n$ it is easier to use other graphs rather than the graph-label of such a product of functions. For example, to use the graph $\tilde{G}(V_n, X_f)$, where X_f is the set of Mayer edges with respect to the set F of all Mayer functions, included in this canonical product of functions $P \in \mathfrak{P}_n$.

The graph $\tilde{G}(V_n, X_f)$ makes it possible directly to define only Mayer functions included in the functions product $P(X_f, X_{\tilde{f}})$. To define the Boltzmann functions included in such a product, in some cases it is preferable, bypassing the definition of the graph-label of such a product, directly to specify the set $X_{\tilde{f}}$ of Boltzmann edges with respect to the set \tilde{F} of all Boltzmann functions, included in this canonical product $P \in \mathfrak{P}_n$, or to specify a constructive method for constructing this set. This gives the ability to directly define the Boltzmann functions included into the functions product labeled with the graph \tilde{G} . The set $X_{\tilde{f}}$ complements the set of edges of the graph \tilde{G} to the set of edges of the graph-label of this product. Let's call this set **complementary** and denote by $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, setting $X_{\text{ad}}(\tilde{G}) = X_{\tilde{f}}$.

We denote by $\tilde{\mathfrak{G}}_n = \{\tilde{G}\}$, where $n \geq 3$, a finite set of pairwise distinct connected labeled graphs that have the set V_n as their set of vertices and satisfy the condition: for each graph from this set it is defined the complementary set $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, that is put in correspondence to this graph, and does not intersect with Mayer edges set $X_f(\tilde{G})$ and forms with it a canonical pair $(X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})) \in \mathfrak{X}_n$.

Definition 14 [39]. Graphs from a set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ will be called **completed**. ■

Let's introduce the notation:

$$\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) = \{(X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})) : \tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n\}$$

$\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) = P_n(\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n))$ is the image of the set of canonical pairs $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \subset \mathfrak{X}_n$ under the map $P_n: \mathfrak{X}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$;

$\mathfrak{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} = P_n|_{\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)}$ is the restriction of mapping P_n on the subset $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \subset \mathfrak{X}_n$.

By definition, the mapping $\mathfrak{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ is the one-to-one mapping the set $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ on the set $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$.

We define a mapping $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ of the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ to the set $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$, letting that

$$A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) = (X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})), \quad \tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n. \quad (30)$$

The mapping $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ defined by formula (30) is the one-to-one mapping of the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ on the set $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$.

Remark 4. Since the definition domain of the mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ is the same as the values domain of the mapping $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$, then the composition of the mappings $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ exists and is the mapping of the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ on the set $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$.

Since the mappings $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ and $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ are the one-to-one mappings, then their composition $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ is [22, 40] the one-to-one mapping of the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ to the set $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$. ■

Remark 4 implies

Corollary 3 [39]. *When mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$, each functions product \tilde{P} from the set $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ has, and at that the only, preimage in the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$. This means that this preimage is a graph, which can be taken as a label of this product, and this product can be considered labeled with this graph. At that, every graph \tilde{G} from the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ turns out to be the label of the functions product, which is the image of this graph when mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$.*

Image of the graph $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ under the mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ denote $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$.

Based on Remark 4 and Corollary 3, we formulate the following

Definition 15 [39]. The functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, which is the image of a graph $\tilde{G}(V_n, X_f) \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ under the mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$, we will call the **product labeled with the graph $\tilde{G} = \tilde{G}(V_n, X_f)$** , and the graph $\tilde{G}(V_n, X_f)$ is the **completed graph-label** of this product. ■

Lemma 2 [39]. *If a graph $\tilde{G}(V_n, X_f)$ belongs to the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$, then the functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ labeled with this graph is a canonical product of order n . In this case this product is represented by the formula*

$$\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(\tilde{G})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(\tilde{G})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (31)$$

Proof. Let us first prove that the functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ is a canonical one of order n . From the definition of the set $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ it follows that this set is a subset of the set \mathfrak{P}_n of canonical products of the order n . From this and Remark 4 it follows that the set of values of the mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ is a set of canonical products of order n . Therefore, whatever a graph $\tilde{G}(V_n, X_f) \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$, its image $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ under mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}: \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ is a canonical product of order n . By Definition 15, the product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ is a product labeled with the graph \tilde{G} . So, it is proved that the functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ labeled with the graph $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ is a canonical product of order n .

Let us now prove that the functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, which is labeled with the graph $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$, is represented by formula (31). From the definition of the functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, the definitions of the mapping $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$, the definitions of the mapping $P_n : \mathfrak{X}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$ by formulas (11) and (12) and the definitions of the mapping $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ by the formula (30) it follow that

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) &= P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) = P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})) = P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}((X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})) = \\ &= P_n((X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(\tilde{G})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(\tilde{G})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \end{aligned} \quad (32)$$

Hence formula (31) follows. Lemma 2 is completely proved. \blacktriangleright

Theorem 2. *If the graph $\tilde{G}(V_n, X_f)$ belongs to the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ and to it has assigned the complementary set $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, then the following assertions are true:*

A₁. The graph $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ belongs to the set \mathfrak{G}_{bn} and is the graph-label of the product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$.

A₂. The graph \tilde{G} is the image of the graph-label $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ under the mapping R .

A₃. The product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ of Mayer and Boltzmann functions is a base product of order n , and the graph \tilde{G} is its completed graph-label.

Proof. By the definition of the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$, the complementary set $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$ forms with the edges set $X_f(\tilde{G})$ a canonical pair $(X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})) \in \mathfrak{X}_n$.

Hence it follows that the graph $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ belongs to the graphs set \mathfrak{G}_n by the definition of this set. By Remark 1, the functions product $P_{1n}(G)$, which is labeled with this graph G , belongs to the set \mathfrak{P}_n and is canonical by the definition of this set. By Definition 7, the functions product $P_{1n}(G)$ is defined by formula (14), which in this case has the form

$$\begin{aligned} P_{1n}(G) &= (P_n \circ A_n)(G) = P_n(A_n(G)) = P_n((X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))) = \\ &= \prod_{\{i,j\} \in X_f(\tilde{G})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(\tilde{G})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \end{aligned} \quad (33)$$

By Lemma 2, the functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ is canonical and is defined by formula (31). From formulas (33) and (31) it follows that

$$P_{1n}(G) = \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}). \quad (34)$$

Hence, by Definition 7 it follows that the graph $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$, is the graph-label of the product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$.

Since the graph $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ belongs to the graphs set \mathfrak{G}_n , then it belongs to the definition domain of the mapping R by the definition of this mapping. Assertion A_2 follows from the definitions of the graphs \tilde{G} and G by the conditions of Theorem 2 and from the definition of the mapping R .

By the conditions of Theorem 2, the graph \tilde{G} belongs to the graphs set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ and, therefore, is a connected graph by the definition of this set. Since in this case the graph

$G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ is the graph-label of the product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, then Assertion A_2 by Definition 8 implies that this product is the base one of order n . Hence it follows that its graph-label $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ belongs to the graphs set \mathfrak{G}_{bn} by the definition of this set. Statement A_1 is completely proved.

From the conditions of Theorem 2 it follows that by Definition 15 the product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ is the product labeled with the graph $\tilde{G} = \tilde{G}(V_n, X_f)$ and the graph \tilde{G} is the completed graph-label of this product. The Assertion A_3 is proved. Theorem 2 is completely proved.

►

For each graph $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ let's define the integrals $\tilde{I}(\tilde{G})$ and $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$, setting

$$\tilde{I}(\tilde{G}) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})(d\mathbf{r})_{1,n-1}; \quad (35)$$

$$\tilde{I}(\tilde{G}, U) = \int_U \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})(d\mathbf{r})_n, \quad (36)$$

where U is a connected, bounded and Lebesgue measurable set, contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$.

Remark 5. If the graph $\tilde{G}(V_n, X_f)$, to which the complementary set $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$ has been assigned, belongs to the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$, then by Theorem 2, the functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, defined by the formula (31), is a base one of order n , and the graph $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$, belongs to the set \mathfrak{G}_{bn} and is the label of this product.

Hence, it follows that, by Definition 9, the integral $\tilde{I}(\tilde{G})$ and integrals of the form $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$, defined by the formulas (35) and (36), respectively, are base integrals of order n . Their integrand is the base functions product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ of order n . ■

Theorem 3. *Let us the potential of a pairwise interaction $\Phi(\mathbf{r})$ be a measurable function, the pairwise interaction satisfies the conditions of stability and regularity, and the graph $\tilde{G}(V_n, X_f)$, to which the complementary set $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$ is putted in correspondence, belongs to the set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$. Then the product of functions $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, defined by formula (31) has the following properties:*

A_1) *it is integrable over the space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, and its integral $\tilde{I}(\tilde{G})$ is a base convergent integral of order n that does not depend on the value of the variable \mathbf{r}_1 ;*

A_2) *it is integrable on any connected bounded Lebesgue measurable set U contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$, and the integral $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$ is a base convergent integral of order n .*

Proof. By Theorem 2, the product of functions $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, defined by the formula (31), is a functions base product of order n , the graph $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ belongs to the set \mathfrak{G}_{bn} and is the label of the product $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, that is equality (34) holds.

By Remark 5, the integral $\tilde{I}(\tilde{G})$ is a base integral of order n . By Remark 5, the integral $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$ is also a base integral of order n for any connected bounded Lebesgue measurable set U contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$. This and the conditions of Theorem 3 by Theorem 1 imply Assertions A_1) and A_2) of Theorem 3. Theorem 3 is completely proved. ►

Theorem 4. *Let the potential $\Phi(\mathbf{r})$ of a pairwise interaction be a measurable function, the pairwise interaction satisfies the conditions of stability and regularity, and a non-empty subset $\tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}$ of the graphs set $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ satisfies the condition: for each graph $\tilde{G}(V_n; X_f) \in \tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}$ a coefficient $c(\tilde{G})$, which corresponds to this graph and is a real number, is been defined.*

Then the following statements are true:

A_1 . *The linear combination*

$$L = \sum_{\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}} c(\tilde{G}) \tilde{I}(\tilde{G}), \quad (37)$$

of the integrals over the space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, where every integral $\tilde{I}(\tilde{G})$ is defined by the formula (35), is a base linear combination of order n .

A_2 . *For any connected bounded Lebesgue measurable set U contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$, the linear combination*

$$\tilde{L} = \sum_{\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}} c(\tilde{G}) \tilde{I}(\tilde{G}, U), \quad (38)$$

of the integrals of the form (36) over the set U is a base linear combination of order n .

Proof. It follows from the conditions of Theorem 4 that every integral in the linear combination L , and every integral included in the linear combination \tilde{L} , by Theorem 3 are converging base integrals of order n . Hence, from this and the conditions of Theorem 4 by Definition 11 it follows both statements of Theorem 4. ►

Let's denote by $\tilde{\mathfrak{G}}(\tilde{L})$ the set of all graphs serving as completed graphs-labels of such base products that are integrands of integrals, included in the base linear combination \tilde{L} .

Definition 16. If \tilde{L} is a base linear combination, then the set of graphs $\tilde{\mathfrak{G}}(\tilde{L})$ we will call **the set of the completed graphs-labels** of this base linear combination. ■

Remark 6 [39]. For the purpose stated in the article, we have enough to establish a criterion for the comparative complexity of representations of the coefficients of a power series only for the case when such representations are base linear combinations, and the complexity of the estimation of the coefficient of any of the integrals included in such a linear combination is negligible. In what follows, such base linear combinations will be called **base linear combinations with coefficients of the negligible complexity**. ■

4. The article proposes criteria for comparing the complexity of such base linear combinations with coefficients of negligible complexities that satisfy the condition: their associated sets coincide with each other.

First, let's give the following

Definition 17. Two base linear combinations L and L_1 with negligible complexity coefficients are called **comparable** if their orders are equal and $U(L) = U(L_1)$. ■

Let $U \subset (\mathbf{R}^\nu)^n$ be a connected bounded measurable set.

Let's introduce the notation:

$\mathfrak{L}(n, U)$ is the set of all linear combinations that are base linear combinations of order n with coefficients of negligible complexity and have as an associated set the set U ;

$\mathfrak{L}(n)$ is the set of all base linear combinations of order n with coefficients of negligible complexities and with associated sets that are connected bounded measurable sets contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^n$;

$\mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1})$ is the set of all base linear combinations of convergent improper base integrals of order n over space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$ with coefficients of negligible complexity.

Obviously, the set $\mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1})$ consists of pairwise comparable base linear combinations of order n with coefficients of negligible complexity.

Remark 7 [39]. Of all the computer time spent on calculations performed to estimate the base integral, the overwhelming majority are the time spent on calculating the values of Mayer and Boltzmann functions included in the representation of the integrand of this integral. Remaining within the framework of the roughest comparison (so to speak, "in

the first approximation"), we can hold that of the two basic converging integrals whose integration domains coincide, more complicated is the estimate of the integral, of which the integrand representation includes a greater number of Mayer and Boltzmann functions. If the representations of the integrands of both integrals include equal number of Mayer and Boltzmann functions, then we will hold that the estimates of these integrals in complexity **are negligibly differ** from each other, and we say that the complexity of these estimates **approximately are equal**. ■

Thus, remark 7 contains the criterion of the complexity of estimating of base integrals. All criteria proposed in the article are based on just this criterion.

The simplest such criterion is length $q(L)$ of a base linear combination L . We denote this criterion Cr_1 by setting $Cr_1(L) = q(L)$. Its definitional domain is denoted by $D(Cr_1)$. This domain is defined by the formula

$$D(Cr_1) = \left[\bigcup_{n \geq 2} \mathfrak{L}(n) \right] \cup \left[\bigcup_{n \geq 2} \mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1}) \right]. \quad (39)$$

This criterion is applicable in cases where the compared base linear combinations differ from each other in length, while integrals included in them and their coefficients differ negligibly from each other in their complexity. It follows from the definition of the criterion Cr_1 that its value depends only on the length of a linear combination and does not depend on set associated with this linear combination .

As another criterion, it is proposed the sum of all edges of all graph-labels from the set $\mathfrak{G}(L)$, where L is a given base linear combination. This criterion will be denoted by $Cr_2(L)$. It is defined by the formula

$$Cr_2(L) = \sum_{G \in \mathfrak{G}(L)} (|X_f(G)| + |X_{\tilde{f}}(G)|), \quad (40)$$

where $|X_f(G)|$ is the cardinality of the set $X_f(G)$ of Mayer functions; $|X_{\tilde{f}}(G)|$ is the cardinality of the set $X_{\tilde{f}}(G)$ of Boltzmann functions. Its domain of definition coincides with the set $D(Cr_1)$.

From the definition of the criterion Cr_2 by formula (40) it follows that its value on a linear combination included in its domain of definition depends only on the set $\mathfrak{G}(L)$ of the graphs serving as labels for the integrands of integrals included in this linear combination, and does not depend from the set associated with this linear combination.

One more, more precise, criterion can be proposed. It can be applied in the case when an equivalent probabilistic model is used to estimate each integral from the estimated linear combination.

In this probabilistic model, the estimated integral is a mathematical expectation of a product of Mayer and Boltzmann functions of linear combinations of independent random variables taking values in the ν -dimensional real Euclidean space \mathbf{R}^ν .

Moreover, each of these random variables is distributed with a density, equal to the normalized modulus of Mayer function. And the number of such random values is equal to the number $n - 1$. Thus, the problem of estimating the base integral, whose integrand is labeled with the graph-label $G \in \mathfrak{G}_{bn}$ is reduced to the estimation the mathematical expectation of the product of Mayer and Boltzmann functions of the linear combinations of independent continuous random variables. This product includes $|X_f(G)| - n + 1$ Mayer and $|X_{\tilde{f}}(G)|$ of Boltzmann functions.

The only known way to estimate the mathematical expectation of this product is the construction of an approximating discrete stochastic model, which is obtained from the above probabilistic model by substitution in place of all continuous random variables by discrete random variables approximating them. As a result, the problem of an estimation the base integral is reduced to an estimation mathematical expectation of the product of Mayer and Boltzmann functions of linear combinations of discrete random variables.

Of all the computer time spent on calculations performed to estimate this mathematical expectation, the overwhelming majority is the time spent on calculating the values of Mayer and Boltzmann functions whose number $N_1(G)$ is determined by the formula

$$N_1(G) = |X_f(G)| - n + 1 + |X_{\tilde{f}}(G)|. \quad (41)$$

Therefore, the value $N_1(G)$ defined by the formula (41) can serve as a **modernized criterion of the complexity of estimation the improper base integral**, whose integrand is labeled with the graph G , where $G \in \mathfrak{G}_{bn}$.

Definition 18. In the case $N_1(G) = 0$, we will say that the complexity of the estimation the improper convergent base integral, whose integrand is labeled with the graph G , according to the modernized criterion for the complexity of estimating an improper convergent base integral is **negligible**. Otherwise, we will say that the complexity of estimating the integral, whose integrand is labeled with the graph G , is **considerable** according to the modernized criterion for the complexity of estimation an improper convergent base integral.

■

Example 2. Consider the graph $G = G(V_3; X_f, X_{\tilde{f}})$, where $X_f = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}\}$, $X_{\tilde{f}} = \emptyset$. The graph G belongs to the set \mathfrak{G}_3 by the definition of the set \mathfrak{G}_n . As its subgraph $R_{\tilde{f}}(G) = G$ is connected, then the canonical product $P_{1n}(G)$ labeled with the graph G , where $n = 3$, is a base one by Definition 8 and belongs to set \mathfrak{P}_{b3} by the definition of this set. And the graph G belongs to set \mathfrak{G}_{b3} by the definition of this set. Hence, by Definition 9, it follows that the defined by formula (16) integral $I(G)$, whose integrand is labeled with the graph G , is an improper base integral of order 3. In the case when particles systems satisfy conditions of Theorem 1, this integral is, by Remark 2, a convergent one.

Using the criterion N_1 for the complexity of estimating an improper convergent base integral, we estimate the complexity of this improper integral $I(G)$. From the definition of the sets X_f and $X_{\tilde{f}}$ it follows: $|X_f| = 2$, $|X_{\tilde{f}}| = 0$. From here by formula (41) we obtain

$$N_1(G) = 0. \quad (42)$$

From (42), by Definition 18, it follows that the complexity of the estimation of the integral $I(G)$ is negligible according to the modernized complexity criterion $N_1(G)$. ►

The proposed third, more precise, criterion for the complexity of base linear combinations of improper convergent base integrals is denoted by $Cr_3(L)$, and its definitional domain is $D(Cr_3)$. This domain is defined by the formula

$$D(Cr_3) = \bigcup_{n \geq 2} \mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1}). \quad (43)$$

The criterion Cr_3 , is based on the complexity criterion $N_1(G)$ of the estimation improper convergent base integrals. As such a criterion there is proposed the sum over all the integrals,

which are included in a given base linear combination, of the complexity estimates of these integrals. This sum is defined by the formula

$$Cr_3(L) = \sum_{G \in \mathfrak{G}(L)} N_1(G), \quad (44)$$

where $N_1(G)$ is defined by formula (41).

From the definition of the criterion Cr_3 by the formulas (41) and (44) it follows that its value on a linear combination included in its definition domain depends only on the set of the graphs-labels of the integrands of the integrals included in this linear combination, and does not depend from the set associated with this linear combination.

Definition 19. Let L and L_1 be two comparable base linear combinations of integrals with the negligible complexity coefficients. And let these two linear combinations belong to the domain of definition of a criterion Cr_i , $i = 1, 2, 3$. We will hold that **by the criterion Cr_i , the base linear combination L_1 is considerably more complicated than the base linear combination L** , if $Cr_i(L_1) > Cr_i(L)$. If $Cr_i(L_1) = Cr_i(L)$, then we will hold that by criterion Cr_i the complexity of one of these two base linear combinations is **equal or negligibly different** from complexity another of them, and say that according to the criterion Cr_i the complexity of one of them is **approximately equal** to another's complexity.

If it is known that the base linear combination L_1 is more complicated than the base linear combination L , and $Cr_i(L_1) = Cr_i(L)$, then we will suppose that according to the criterion Cr_i , the linear combination L_1 is **negligibly more complicated** than the linear combination L . ■

The proposed criteria of the complexity of base linear combinations with coefficients of the negligible complexity are constructed so, that they, with some exceptions, satisfy the principle: if, according to this criterion, one of the two base linear combinations is considerably more complicated than the other one, then in fact the estimation of the value represented by this base linear combination is considerably more complicated than estimation of the value represented by the other base linear combination. And in the case when, according to this criterion, the complexity of one of the two base linear combinations is negligibly different from the complexity of the other of them, then in fact the estimation complexity of the value represented by one of these two base linear combinations, negligibly differs from the estimation complexity of the value represented by the other base linear combination.

In the case when the conclusions drawn on the values of one of the criteria are in conflict with the conclusions, based on values of another, more precise, criterion, preference should be given to conclusions drawn on the basis of the values of a more precise criterion.

Example 3. Let L and L_1 be two linear combinations belonging to the set $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$. In this case, the linear combination L_1 includes two improper convergent integrals $I(G)$ and $I(G_1)$, whose integrands are labeled by the graphs G and G_1 respectively; these integrals are defined by the formulas (23) and (14). Here G is the graph considered in Example 2, and the graph $G_1 = G_1(V_3; X_{f,1}, X_{\tilde{f},1})$ has a set $X_{f,1} = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}\}$ of Mayer edges and the set $X_{\tilde{f},1} = \{\{2, 3\}\}$ of Boltzmann edges. The linear combination L contains only one integral $I(G_1)$, whose integrand is labeled with the graph-label G_1 . Moreover, in both linear combinations, the coefficients of the base integrals $I(G)$ and $I(G_1)$ are defined and equal to 1.

Graph $G_1 = G_1(V_3; X_{f,1}, X_{\bar{f},1})$ belongs to the set \mathfrak{G}_3 by definition of the set \mathfrak{G}_n . Since its subgraph $R(G_1)$ is connected, then the canonical product $P_{13}(G_1)$ labeled with the graph G_1 is a base product by Definition 8 and belongs to set \mathfrak{P}_{b3} . And the graph G belongs to the set \mathfrak{G}_{b3} by its definition. From this, by Definition 9, it follows that the integral $I(G_1)$, the integrand of which is labeled with the graph-label G_1 , is an improper base integral of order 3 over the space $(\mathbf{R}^\nu)^2$. In the case when particle systems satisfy conditions of Theorem 1, this integral is, by Remark 2, converging and belongs to the set $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$ by its definition.

The linear combination L contains only one integral $I(G_1)$. In the above case this integral is a convergent base one, and its coefficient is given and therefore no effort is required at all to calculate this coefficient. Hence, by Definition 11 and Remark 7 follows that the linear combination L is a base linear combination of order 3 with the coefficient of the negligible complexity and belongs to the set $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$ by its definition.

In Example 2, it was proved that the integral $I(G)$, whose integrand is labeled with the graph G , is a convergent base integral. Thus, both the integrals included in the linear combination L_1 are convergent base ones, and the coefficients of these integrals are given and therefore no effort is required at all to calculate these coefficients. This implies that, by Definition 11 and Remark 7, the linear combination L_1 is also a base linear combination of order 3 with coefficients of the negligible complexity and belongs to the set $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$ by its definition.

Using the criterion Cr_3 , we estimate the complexity of linear combinations L and L_1 . Note, that the base linear combination L_1 , besides the integral labeled with the graph G_1 , also contains one base integral, whose integrand is labeled with the graph G . Therefore, it is natural to be of opinion that base linear combination L_1 is more complicated than the base linear combination L .

Using the definition of the complexity criterion of the estimation an improper convergent base integral by formula (41), let us find the value of this criterion for the integral labeled with the Graph G_1 :

$$N_1(G_1) = |X_f(G_1)| - 3 + 1 + |X_{\bar{f}}(G_1)| = 1. \quad (45)$$

The value of this criterion for the integral labeled with graph G , was found in example 2 (see formula (42)).

Based on the definition of the criterion Cr_3 by formula (44) and using formulas (42) and (45), we find the values of this criteria for the base linear combinations L and L_1 of improper integrals:

$$Cr_3(L) = Cr_3(L_1) = 1. \quad (46)$$

From formula (46) by Definition 19 it follows that according to the criterion Cr_3 the base linear combination L_1 is negligibly more complicated than the base linear combination L . ►

From the definition of the criterion Cr_3 and Definition 19 it follows

Corollary 4. *Let L and L_1 be two base linear combinations of improper integrals with coefficients of the negligible complexity that belong to the set $\mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1})$ and satisfy the conditions:*

1. *The length of the linear combination L_1 is greater than the length of the linear combination L .*
2. *Each integral included in the linear combination L is included and also into the linear combination L_1 .*

Suppose that among the improper base integrals included in the linear combination L_1 and not included in the linear combination L , there is at least one integral such that graph-label G of its integrand satisfies the inequality $N_1(G) > 0$. Then, according to the criterion Cr_3 , the base linear combination L_1 is considerably more complicated than the base linear combination L . Otherwise, the base linear combination L_1 is negligibly more complicated than the base linear combination L .

Proof. Suppose that among the improper base integrals, which are included in the linear combination L_1 and are not included in the linear combination L , there is at least one integral having a nonzero value of the complexity criterion Cr_3 of its estimation. Then by the definition of the criterion Cr_3 by the formula (44) from the conditions of Corollary 4 the inequality $Cr_3(L_1) > Cr_3(L)$ follows. From this, by Definition 19, it follows that by the criterion Cr_3 the base linear combination L_1 is considerably more complicated than the base linear combination L . In other words, the base linear combination L is considerably simpler than the base linear combination L_1 .

Let us now consider the opposite case, when every integral included in the linear combination L_1 and not included in the linear combination L is such that the graph-label G of its integrand satisfies the equality $N_1(G) = 0$. In this case, by the definition of the criterion Cr_3 by the formula (44) from the conditions Corollary 4 the equality $Cr_3(L_1) = Cr_3(L)$ follows. Hence, by Definition 19, it follows that the base linear combination L_1 is negligibly more complicated than the base linear combination L . ►

Definition 20 [39]. A base product $P(G)$ is called **complete** if its graph-label G is complete. Otherwise, the base product is called **incomplete**. ■

Definition 21. The base integral is called **complete** if its integrand is a complete base product. The base integral is called **incomplete** if its integrand is an incomplete base product. ■

Definition 22. A base linear combination is called **complete** if all the integrals included in it are complete. Otherwise, the base linear combination is called **incomplete**. ■

From the definition of the Ree-Hoover representations [48], Example 1 and Definitions 20, 21 and 22 follow

Corollary 5. For any $n > 1$, Ree-Hoover representation of of the virial coefficient B_n is a complete base linear combination of order n with the negligible complexity coefficients.

Definitions 20 and 21 and Remark 7 imply the following

Remark 8. Let one of the two convergent base integrals be complete, and the other incomplete, and let the integrands of both of these integrals are labeled with graphs with the same set of vertices, and let their integration domains of both of these integrals coincide with each other. Then the estimate of the complete integral is considerably more complicated than estimate of the incomplete integral. ■

Remark 8 implies

Corollary 6 Let L_1 be an incomplete base linear combination with the negligible complexity coefficients, and L_2 be a complete base linear combination with the negligible complexity coefficients. And let these two linear combinations be comparable. And let the number of the integrals in the linear combination L_1 be at most the number of the integrals in the linear combination L_2 .

If all the integrals included in these base linear combinations are improper integrals, then, according to Remark 8, the linear combination L_2 is considerably more complicated than the linear combinations L_1 by the criteria Cr_2 and Cr_3 . If all the integrals included in these

base linear combinations are proper, then, according to Remark 8, the linear combination L_2 is considerably more complicated than linear combination L_1 by the criterion Cr_2 .

5. Within the framework of the frame sums method, two approaches can be distinguished.

For the exposition of the first of them, we need to introduce the definition of a tree sum. In order to simplify the exposition and without striving for maximal generality, we will give this definition in the sense, although not the most general, but sufficient for the purposes that set out in this article.

For this, we introduce the following definitions:

$T_n = \{t\}$ is a set of all labeled trees with the set of vertices V_n , where $n > 1$, and with the root 1;

$X_f(t) = \{\{u, v\}\}$ is the set of edges of a tree $t \in T_n$;

$\tilde{X}_{ad}(t) = \{\{u, v\}\}$ is the set of admissible edges [9, 13, 17] of a tree $t \in T_n$;

$$I(t) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in X_f(t)} f_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}_{ad}(t)} (1 + f_{\tilde{u}\tilde{v}})(d\mathbf{r})_{1,n-1}, \quad (47)$$

$$I(t, \Lambda) = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda^n} \prod_{\{u,v\} \in X_f(t)} f_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}_{ad}(t)} (1 + f_{\tilde{u}\tilde{v}})(d\mathbf{r})_n, \quad (48)$$

where $t \in T_n$ and Λ is a connected, bounded and Lebesgue measurable set contained in the space \mathbf{R}^ν .

Let T' be a non-empty subset of the trees set T_n , where $n > 1$; and to each tree $t \in T'$ is assigned the set $\tilde{X}_{ad}(t)$ of admissible edges.

Let us introduce the notation:

$c(t | T')$, $c_1(t | T')$ is real functions defined on the trees set T' .

$$L(T') = \sum_{t \in T'} c(t | T') I(t), \quad (49)$$

where for each $t \in T'$ the integral $I(t)$ is defined by the formula (47).

$$L(T', \Lambda) = \sum_{t \in T'} c_1(t | T') I(t, \Lambda), \quad (50)$$

where for each $t \in T'$ the integral $I(t, \Lambda)$ is defined by the formula (48).

Definition 23. Linear combinations $L(T')$ and $L(T', \Lambda)$, where $T' \subset T_n$ and $n \geq 2$ is called **tree sums**. ■

Remark 9. From the definition of the set of admissible edges $\tilde{X}_{ad}(t)$ it follows that this set does not intersect with the edges set $X_f(t)$ of the tree $t \in T_n$ and consists of pairwise distinct edges, each of which connects two non-adjacent vertices of the tree t . ■

Theorem 5. Let the potential $\Phi(\mathbf{r})$ of a pairwise interaction be a measurable function, the pairwise interaction satisfies the conditions of stability and regularity. Then the tree sums $L(T')$ and $L(T', \Lambda)$, defined by the formulas (49) and (50), where $T' \subset T_n$ and $n \geq 2$, are base linear combinations of the order n , and each tree $t \in T'$ is the completed graph-label of the integrand of the integral $I(t)$ in the tree sum $L(T')$, and this tree is the completed graph-label of the integrand of the integral $I(t, \Lambda)$ in the tree sum $L(T', \Lambda)$. Moreover, to each such tree t is assigned, as a complementary set, the set of admissible edges $\tilde{X}_{ad}(t) = \{\{u, v\}\}$.

Proof. Definitions of integrals $I(t)$ and $I(t, \Lambda)$ by the formulas (47) and (48) respectively mean that for each tree $t \in T'$ is defined the finite set $\tilde{X}_{ad}(t)$ of admissible edges that is put

in correspondence to this tree. By Remark 9, this set does not intersect with the set $X_f(t)$ and consists of pairwise distinct edges, each of which connects two non-adjacent vertices of the tree t . From the definition of the integrals $I(t)$ and $I(t, \Lambda)$ by the formulas (47) and (48) it follows that for each tree $t \in T'$ these integrals have the same integrand, which is a product of Mayer and Boltzmann functions.

Moreover, the set of edges $X_f(t)$ of the tree t labeling the integrand of integrals $I(t)$ and $I(t, \Lambda)$, defines the set F of all Mayer functions of this product and is, by Definition 3, the set of Mayer edges with respect to the set F of Mayer functions. And by Definition 4, the set of admissible edges $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ defines the set \tilde{F} of all Boltzmann functions of this product and is the set of Boltzmann edges with respect to the set \tilde{F} of Boltzmann functions. Thus, by the definition of a complementary set, the set $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ is a complementary set put in correspondence to the tree t . The sets $X_f(t)$ and $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ form an ordered pair $\mathbf{X} = (X_f, X_{\text{ad}}(t))$.

By the definition of the trees set T_n , every tree $t \in T_n$ is a connected graph with vertex set V_n and, hence, the equality $V(X_f(t)) = V_n$ holds. This and Remark 9 imply the equality $V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}}) = V_n$. From this equality, by Definition 5, it follows that an ordered pair of sets $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ is canonical. It follows from the results obtained that any tree $t \in T_n$ belongs to the set \mathfrak{G}_n by its definition.

Hence, by Definition 15 and Lemma 2, it follows that each tree $t \in T'$ is the completed graph-label of the canonical product of functions $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(t)$, which is labeled by this tree, is of order n and is represented by formula

$$\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(t) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(t)} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(t)} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (51)$$

The right-hand side of the formula (51) coincides with both the integrand of the integral $I(t)$ and the integrand of the integral $I(t, \Lambda)$. Therefore, the functions product $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(t)$ labeled by the tree t is the integrand of the integrals $I(t)$ and $I(t, \Lambda)$; and the tree t is the completed graph-label of the integrand of the integrals $I(t)$ and $I(t, \Lambda)$.

Hence, by Remark 5, it follows that the integrand of the integrals $I(t)$ and $I(t, \Lambda)$ is a functions base product of order n . And the integrals $I(t)$ and $I(t, \Lambda)$ by Definition 9 are base integrals of order n . By Theorem 3, for any connected bounded Lebesgue measurable set Λ contained in the space (\mathbf{R}^ν) , this functions product is an integrable function on the set Λ^n , and the integral $I(t, \Lambda)$ of this functions product converges; moreover, this functions product is an integrable function over the space $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, and the integral $I(t)$ of this product converges and does not depend on the value of the variable \mathbf{r}_1 .

Recall that functions $c(t | T')$ and $c_1(t | T')$ are defined on the trees set T' , and take real values on the trees of this set. For each $t \in T'$, the value $c(t | T')$ is the coefficient of the integral $I(t)$ belonging to the tree sum $L(T')$. In exactly the same way, for each $t \in T'$, the quantity $c_1(t | T')$ is the coefficient of the integral $I(t, \Lambda)$ belonging to the tree sum $L(T', \Lambda)$.

From the results obtained, it follows by Theorem 4 that the tree sums $L(T')$ and $L(T', \Lambda)$ defined by the formulas (49) and (50), where $T' \subset T_n$ and $n > 1$, are base linear combinations of order n . Theorem 5 is completely proved. \blacktriangleright

If the tree sum is a base linear combination of order n , then we will call the number n **order** of this tree sum.

6. As an example of representing the coefficients of power series by tree sums, one can cite the representations of Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ obtained by the author [3, 9, 17],

free of asymptotic catastrophe. These representations were obtained for the case when the thermodynamic equilibrium one-component system of classical particles with pairwise interaction [24, 49] is enclosed in a bounded volume Λ , which is connected, bounded and Lebesgue measurable set contained in the space \mathbf{R}^ν . It was assumed that the pairwise interaction satisfies the conditions of stability and regularity, and the pair potential $\Phi(\mathbf{r})$ is measurable function. For all $n \geq 2$, each of the representations of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ obtained by the author under these conditions is a tree sum, which is a base linear combination of order n with coefficients of insignificant complexity and with an associated set $\Lambda^n \subset (\mathbf{R}^\nu)^n$.

Initially, were obtained such representations, in which the coefficient $b_n(\Lambda)$ was expressed as the product of the number $1/n!$ by the sum of all integrals, whose integrands are labeled with labeled trees with n vertices [25, 28, 9, 17] and with the root vertex labeled with 1 [3]. Moreover, to each labeling tree t was assigned the set of admissible edges $\tilde{X}_{ad}(t) = \{\{u, v\}\}$. By Definition 23, such a sum is a tree sum. In this sum coefficient of each integral included in this sum is equal to unity. Therefore, no calculations are required to determine the values of the coefficients of the integrals included in this sum. Hence, by Theorem 5 and Remark 6, it follows that this tree sum is a base linear combination of order n with the coefficients of the negligible complexity.

Subsequently, these representations were simplified [9, 17]. For this purpose, a binary relation of maximal isomorphism of labeled rooted trees was introduced. This relation has the properties of reflexivity, symmetry and transitivity, that is, it is a relation of equivalence [21] and decomposes the set $\{T_n\}$, consisting of all labeled trees with the vertices set $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$ and rooted vertex 1 into classes of maximally isomorphic trees. These classes have a very useful property: in the above representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by the tree sum are equal all integrals whose integrands are labeled with maximally isomorphic trees. In the works [9, 17] is introduced a constructive definition of such the subset $TR(n) \subset T_n$ that satisfies the condition: a) no two trees belonging to the set $TR(n)$ are maximal isomorphic, b) the cardinality of the set $TR(n)$ is equal to the number of classes of maximal isomorphic trees, belonging to the set T_n .

Using the representation of coefficients $b_n(\Lambda)$ as the sum of all integrals, whose integrands are labeled with the labeled trees with the vertices set $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$ and with the rooted vertex 1, decomposition of the set of rooted labeled trees with the vertices set V_n and with the rooted vertex labeled 1 into classes of maximally isomorphic trees, and the above property of maximally isomorphic trees, the representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by the tree sum was obtained in the form:

$$b_n(\Lambda) = \frac{1}{n!|\Lambda|} \sum_{t \in TR(n)} |TI(t)| I(t, \Lambda). \quad (52)$$

Here $TI(t)$ is the set of the trees belonging to the set T_n and maximally isomorphic to the tree t ; $|TI(t)|$ is cardinality of the set $TI(t)$; $I(t, \Lambda)$ is the integral defined by formula (48).

Passing in the representations of Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ by the formula (52) to the thermodynamic limit, it was possible to obtain [9, 17] Mayer coefficients representations in thermodynamic limit as tree sums. For short, the thermodynamic limit of Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ will be called the **limiting Mayer coefficient** and denoted b_n . These representations are such:

$$b_n = \frac{1}{n!} \sum_{t \in TR(n)} |TI(t)| I(t). \quad (53)$$

From the definition by the formula (52) of Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ representations and the definition by the formula (53) of representations of limiting Mayer coefficients b_n it follows: at all $n \geq 2$ the set of trees $TR(n)$ is the set of all trees that are graphs-labels labeling both the integrands of the integrals, included in the tree sums representing Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$, and the integrands of the integrals, included in the tree sums representing limiting Mayer coefficients b_n .

The number of the trees in the set $TI(t)$ is completely defined by the tree t according to the formula

$$|TI(t)| = (n-1)! \left(\prod_{i=1}^{H(t)-1} n(t,i)! \right)^{-1} \left(\prod_{i=1}^{n(t,H(t)-1)} (d(t,i)-1)! \right)^{-1}. \quad (54)$$

Here $H(t)$ is height [9, 17, 5] of the tree t ; $n(t,i)$ is the number of vertices of the tree t located at height i ; $d(t,i)$ is degree of the i -th vertex from the set of all vertices of the tree t located at the height $H(t) - 1$.

Lemma 3. *For $n \geq 2$ the representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by the tree sum according to the formulas (52) and (48) and the representation of limiting Mayer coefficient b_n by the tree sum according to the formulas (53) and (47) are base linear combinations of order n with coefficients of negligible complexity.*

Proof. The sum on the right-hand side of equality (52) and the sum on the right-hand side of equality (53) have the following properties: 1) the set of trees $TR(n)$ is a subset of the set T_n ; 2) the integrals included in the first sum are defined by formula (48), and the integrals included in the second sum are defined by formula (47); 3) the coefficient of each of these integrals is the number of trees that are maximally isomorphic to the tree t labeling the integrand of this integral; this number is defined by the tree t according to formula (54). Hence, by Definition 23, it follows that these sums are tree sums. By Theorem 5, these tree sums are base linear combinations of order n .

From the definition of the coefficients of these tree sums by formula (54) it follows that the complexity of the calculation of these coefficients is negligible. Therefore, these tree sums are base linear combinations of the order n with coefficients of the negligible complexity. Lemma is proven. ►

The number of trees in the set $TR(n)$ is calculated by the formula

$$|TR(n)| = 1 + (2^{n-2} - 1) + \sum_{H=3}^{n-1} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbf{N}(H, n-1)} \frac{(n(H-1) + n(H) - 1)!}{n(H)!(n(H-1) - 1)!} \prod_{i=2}^{H-1} \{[n(i-1)]^{n(i)}\}. \quad (55)$$

Here $\mathbf{N}(H, k) = \{(n(1), n(2), \dots, n(H))\}$ is the set of H -dimensional vectors whose components are natural numbers, and the vectors themselves satisfy the condition: $\sum_{i=1}^H n(i) = k$.

The results of the calculations by formula (55) are shown in Table 1. This table lists the cardinalities of the sets $TR(n)$ for all n satisfying the inequalities $2 \leq n \leq 10$.

Recall that the set $TR(n)$ is the set of completed graphs-labels of the integrands of all integrals included in a base linear combination that is a representation of the thermodynamic limit b_n of Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ as a tree sum according to the formulas (53) and (47). The set $TR(n)$ is also the set of completed graphs-labels of the integrands of all integrals included in the linear combination representing Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ as a tree sum by formulas

(52) and (48) for any volume Λ that is a connected, bounded and Lebesgue measurable set contained in the space \mathbf{R}^ν . All of these representations are base linear combinations of the same length equal to the cardinality of the set $TR(n)$, and differ only in their associated sets. Therefore, on all these representations the complexity criterion Cr_1 takes the same value equal to the cardinality of the set $TR(n)$.

Let us now compare the complexity of the representations of Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ according to the formulas (52) and (48) with the complexity of Ree-Hoover representations of the virial coefficients by the criterion Cr_1 in the case when thermodynamic equilibrium one-component system of classical particles with pairwise interaction [24, 49] is enclosed in a bounded volume Λ , which is a connected, bounded and Lebesgue measurable set contained in the space \mathbf{R}^ν . In this case, it is assumed that the pairwise interaction satisfies stability and regularity conditions, and the pair potential $\Phi(\mathbf{r})$ is Lebesgue measurable function. Under these conditions, Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is defined for all $n \geq 2$ and is a base linear combination of order n with coefficients of negligible complexity and with an associated set $\Lambda^n \subset (\mathbf{R}^\nu)^n$. In this case, by definition 17 the considered representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ and Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ are comparable for any $n \geq 2$ and for any Λ satisfying the above conditions.

In the simplest case, when $n = 2$, both Mayer coefficient $b_2(\Lambda)$, and the virial coefficient $B_2(\Lambda)$ are represented by the same integral and their representations differ only in sign. There is nothing to simplify here.

Further, from Table 1 it is clear that for $n = 7, 8, 9, 10$, the representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by formula (52) contains a smaller number of summable integrals than Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$. Therefore, for these values of n according to the criterion Cr_1 the Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is considerably more complicated than representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ as a tree sum according to formulas (52) and (48).

Now let's see what result is obtained according to the criterion Cr_2 .

From the definition of the set $\tilde{X}_{ad}(t) = \{\{u, v\}\}$ of the admissible edges of the tree t it follows that for any $n > 2$, the tree sum defined by formulas (52) and (48) satisfies the condition: in this sum only one integral, labeled with the star [25, 28], all edges of which are incident to its root, is a complete base integral; while everyone else the integrals in this sum are incomplete base integrals. Hence, by Definition 22 and Lemma 3, it follows that for any $n > 2$ representation of the Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by the tree sum according to formulas (52) and (48) is an incomplete base linear combination of order n with coefficients of the negligible complexity.

On the other hand, by Corollary 5, Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is a complete base linear combination of order of n with coefficients of the negligible complexity.

From the above, by Corollary 6 it follows that for the values $n = 7, 8, 9, 10$ Ree-Hoover representation of virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is considerably more complicated by the criterion Cr_2 than representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by the tree sum defined according to formulas (52) and (48).

Note that for $n = 8, 9, 10$, the number of integrals in the sum representing according to Ree-Hoover method, the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ greatly exceeds the number of integrals in the sum representing Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by formulas (52) and (48). Therefore, by Corollary 6, for these values of n , the representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by formulas

(52) and (48) is considerably simpler than the representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by Ree-Hoover method.

However, for $n = 3, 4, 5, 6$ the comparing representations do not satisfy the conditions of Corollary 6. Hence, for these values of n this corollary cannot be applied for such comparison. At that for these values of n according to the criteria Cr_1 and Cr_2 representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by formulas (52) and (48) is more complicated than the representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by Ree-Hoover method.

7. Another example of a representation of power series coefficients in the form of tree sums is the representation of the coefficients a_n of the expansion of the ratio of the activity z [23, 24, 44, 49] to the density $\varrho(z)$ in a series in degrees of activity z :

$$z/\varrho(z) = 1 - \sum_{n=2}^{\infty} n a_n z^{n-1}. \quad (56)$$

This expansion was considered by Lieb [41] and Penrose [45].

Penrose proposed two methods for finding the coefficients a_n : either in a very complicated way using the Kirkwood-Salzburg equations; or in a simpler way, proceeding from the relations

$$n b_n = \sum_{q=1}^{n-1} (q+1) a_{q+1} (n-q) b_{n-q} \quad (57)$$

between these coefficients and Mayer coefficients b_n .

In [4, 31, 9, 17], it was proposed to represent the coefficients a_n as a sum of integrals whose integrands are labeled with trees. For this purpose, it was defined the set $T(n, 0)$ consisting of all trees belonging to the set T_n and satisfying the conditions:

a) any layer of a tree, with the exception of the zero and, perhaps, the last, consists of at least two vertices;

b) except for the zero layer, a tree has no layer, in which only the highest vertex has a degree, greater than one.

This made it possible to obtain [4, 31, 9, 17] free from asymptotic catastrophe representations of the coefficients a_n as the sum of all integrals whose integrands are labeled with trees from the set $T(n, 0)$:

$$a_n = \frac{1}{n!} \sum_{t \in T(n, 0)} I(t), \quad (58)$$

where $I(t)$ is the integral defined by formula (47).

Subsequently, these representations were simplified [9, 17]. For this purpose, the set $TR(n, 0) = TR(n) \cap T(n, 0)$ was defined [9, 17].

From the definition of the maximal isomorphism relation of rooted labeled trees and the definitions of the sets $T(n, 0)$ and $TR(n, 0)$ it follows that the set $T(n, 0)$ decomposes into classes $TI(t)$ of maximally isomorphic trees, where t is the tree that is a label of a class $TI(t) \subset T(n, 0)$ and belongs to the set $TR(n, 0)$. And the set $TR(n, 0)$ consists of all trees t that are labels of the included in the set $T(n, 0)$ classes $TI(t)$ of maximally isomorphic trees.

Using the representation of the coefficients a_n by formula (58), the concept maximal isomorphism of labeled rooted trees, decomposition of the set $T(n, 0)$ into classes of maximally isomorphic trees and properties of maximally isomorphic trees, the author proposed simpler

representations of the coefficients a_n free from asymptotic catastrophe:

$$a_n = \frac{1}{n!} \sum_{t \in TR(n,0)} |TI(t)| I(t). \quad (59)$$

Here, as in formula (58), $I(t)$ is the integral defined by formula (47); $|TI(t)|$ is the defined by formula (54) number of trees in the set $TI(t)$, labeled with the tree t .

The number of trees in the set $TR(n, 0)$ is calculated by the formula

$$|TR(n, 0)| = 1 + \sum_{\mathbf{n}}' \left(\frac{[n(2) + n(1) - 1]!}{[n(1) - 1]! n(2)!} - 1 \right) + \\ + \sum_{H=3}^N \sum_{\mathbf{n}}' \left(\frac{[n(H) + n(H-1) - 1]!}{[n(H-1) - 1]! n(H)!} - 1 \right) \prod_{i=2}^{H-1} ([n(i-1)]^{n(i)} - 1), \quad (60)$$

where $N = \lceil (n-1)/2 \rceil$ is the smallest of those integers that is at least $(n-1)/2$, and the symbol $\sum_{\mathbf{n}}'$ in formula (60) means summation over all H -dimensional vectors (n_1, n_2, \dots, n_H)

whose components are natural numbers, and the vectors themselves satisfy the conditions:

$$\text{a) } n_i \geq 2, \quad i = 1, 2, \dots, H-1; \quad \text{b) } n_H \geq 1; \quad \text{c) } \sum_{i=1}^H n(i) = n-1.$$

Lemma 4. *Let the potential of the paired interaction $\Phi(\mathbf{r})$ is a measurable function, and the pair interaction satisfies the conditions of stability and regularity. Then the representation of the coefficient a_n by the tree sum according to the formulas (59) and (47) for $n > 3$ is a base linear combination of order n with coefficients of negligible complexity.*

Proof. The sum on the right-hand side of equality (59) has the following properties: 1) the trees set $TR(n, 0)$ is a subset of the set T_n ; 2) the integrals included in this sum are defined by formula (47); 3) the coefficient for each of these integrals is the number of trees, maximally isomorphic to the tree t labeling the integrand of this integral; this number is defined by the tree t by formula (54). Hence, by Definition 23 it follows that this sum is a tree sum.

By Theorem 5, this tree sum is a base linear combination of order n .

From the definition of the coefficients of this tree sum by formula (54) it follows that the complexity of the calculation of these coefficients is negligible. Therefore this tree sum is a base linear combination of order n with coefficients of the negligible complexity. The lemma is proved. ►

Remark 10. From the definition [4, 31, 9, 17] of the set $\tilde{X}_{ad}(t) = \{\{u, v\}\}$ of admissible edges of a tree t it follows that for any $n > 3$, the tree sum defined by formulas (59) and (47) satisfies the condition: in this sum only one integral, whose integrand is labeled with the star, all edges of which are incident to its root, is a complete base integral; and everyone else the integrals in this sum are incomplete base integrals. Hence, by Definition 22 and Lemma 4, it follows that for any $n > 3$ representation of the coefficient a_n by the tree sum according to formulas (59) and (47) is an incomplete base linear combination of order n with coefficients of the negligible complexity. ■

From representation (53) of Mayer coefficients b_n and from representation (59) of coefficients a_n it is obvious that $b_2 = a_2$. The indicated representations of these coefficients coincide and have the same complexity.

And from the definitions of the sets $TR(n)$ and $TR(n, 0)$ for $n > 2$ it follows that the set $TR(n, 0)$ is a proper subset of the set $TR(n)$. This has two corollaries:

1. for any $n > 2$, the length of the base linear combination, which is a tree sum representing Mayer coefficient b_n by formulas (53) and (47), is more the length of the base linear combination, which is the tree sum representing the coefficient a_n by formulas (59) and (47).
2. for any $n > 1$, each integral included in the sum representing by formulas (59) and (47) the coefficient a_n is also included in the sum representing by formulas (53) and (47) the Mayer coefficient b_n .

The definition of the set of trees $TR(n)$ implies that the set $TR(3)$ consists of two trees, which are the graphs G and G_1 , introduced in examples 2 and 3, respectively. Further, from the definition of the trees set $TR(n, 0)$ it follows that the set $TR(3, 0)$ consists of one tree, which is the graph G_1 . From the results obtained in example 3, it is clear that the base linear combination, which is the tree sum representing Mayer coefficient b_3 by formulas (53) and (47), is negligibly more complicated than a base linear combination, which is the tree sum representing coefficient a_3 by formulas (59) and (47).

for $n > 3$, the set $TR(n)$ contains at least one tree, which does not belong to the set $T(n, 0)$ and has a non-empty set of admissible edges. Such trees include, in particular, all trees from the set $TR(n)$ of height $H > 1$ that are not a chain and have such layer of vertices, in which only the highest vertex has degree greater than one. Obviously, the integrals, whose integrands are labeled with such a trees, have a positive value of the criterion N_1 of the complexity of their estimations. They are included in the base linear combination, which is the tree sum representing Mayer coefficient b_n by formulas (53) and (47), and are not included in the base linear combination, which is the tree sum representing a coefficient a_n by formulas (59) and (47).

Thus, in the situation under consideration, all conditions of Corollary 4 are satisfied. From this, by Corollary 4, it follows that according to the criterion Cr_3 for $n > 3$ the base linear combination, which is the tree sum, representing the Mayer coefficient b_n by the formulas (53) and (47), is considerably more complicated than the base linear combination, which is the tree sum representing the coefficient a_n by formulas (59) and (47).

Table 3 shows the Cr_3 criterion values calculated for $n = 3, 4, 5, 6$ for the base linear combinations that are the representations of Mayer coefficients b_n in the form of tree sums by formulas (53) and (47), and for base linear combinations that are the representations of the coefficients a_n in the form of tree sums by formulas (59) and (47).

These values are a numerical confirmation of the obtained by a theoretical way of comparative estimations of the complication of these base linear combinations.

Hence it follows that for estimation the coefficients a_n the direct method, based on their representation in the form of tree sums by formulas (59) and (47), is simpler and more rational than the method proposed by Penrose for estimation the coefficients a_n proceeding from relations (57), between these coefficients and the Mayer coefficients b_n . Relations (57) are more expedient to use to represent coefficients b_n in terms of coefficients a_n , in order then to apply these representations both for estimating Mayer coefficients b_n , and to estimate the virial coefficients B_n .

These conclusions are also numerically confirmed by the Cr_1 criterion values calculated for $n = \overline{2, 10}$ for base linear combinations, which are representations of limiting Mayer coefficients b_n in the form of tree sums according to the formulas (53) and (47), and for base linear combinations, which are representations of the coefficients a_n in the form of tree sums according to the formulas (59) and (47).

The value of the Cr_1 criterion for the base linear combination, which is the representation of the coefficient a_n by the tree sum is equal to the number of integrals in this tree sum. From the representation of the coefficient a_n as a tree sum according to the formula (59) it follows that the number of integrals in this tree sum is equal to the number of trees in the set $TR(n, 0)$, which is calculated by the formula (60).

The results of calculating the cardinality of the set $TR(n, 0)$ for $n = \overline{2, 10}$ are given in Table 1. The data in this table support the conclusions already drawn. According to these data, for $n = \overline{4, 10}$, the number of integrals in the sum representing limiting Mayer coefficient b_n by formula (53) exceeds the number of integrals in the representation of the coefficient a_n by formula (59) by more than 2 times. Hence, according to the simplest criterion, i.e. the length of the base linear combination, the conclusion follows: for $n = \overline{4, 10}$ such a representation of the coefficient a_n is several times simpler than Mayer representation coefficient b_n as a tree sum according to formulas (53) and (47).

8. Another example of successful application of the frame sums method is the representations of virial coefficients obtained by this method. Within the framework of this method, two ways of representing virial coefficients have been developed.

The first is as follows: each virial coefficient is represented as a polynomial in tree sums. As examples of this way of representing virial coefficients can be given representations of the virial coefficients free of the asymptotic catastrophe of two types: 1) in the form of polynomials in tree sums representing Mayer coefficients b_n , and 2) in the form of polynomials in tree sums representing the coefficients a_n .

Representations of the virial coefficients in the form of polynomials in tree sums representing Mayer coefficients b_n can be obtained by using the results obtained by Mayer [23, 42, 43, 44]. In [44] is given a representation (in the form of polynomials in Mayer coefficients b_n) of the quantities β_μ , by which the virial coefficients are expressed according to the formula

$$B_n(\Lambda) = -\frac{n-1}{n}\beta_{n-1}(\Lambda), \quad n > 1. \quad (61)$$

Let us present this representation, somewhat simplifying the notation and at the same time correcting noticed a typo. For this purpose, we introduce the notation

$\mathbf{M}(n) = \{\mathbf{m}\}$ is the set of $(n-1)$ -dimensional vectors $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_{n-1})$ whose components are whole non-negative numbers satisfying the condition:

$$\sum_{j=1}^{n-1} jm_j = n-1. \quad (62)$$

For each vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)$ define the **vector norm**, denoting it $\|\mathbf{m}\|$ and setting

$$\|\mathbf{m}\| = \sum_{i=1}^{n-1} m_i. \quad (63)$$

In this notation, the quantity β_μ is represented as follows:

$$\beta_\mu(\Lambda) = -\frac{1}{\mu!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu+1)} (\mu + \|\mathbf{m}\| - 1)! \prod_{j=1}^{\mu} \frac{1}{m_j!} [-(j+1)b_{j+1}(\Lambda)]^{m_j}. \quad (64)$$

Formulas (61) and (64) imply the representations of the virial coefficients as polynomials in Mayer coefficients b_n :

$$B_n(\Lambda) = \frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! \prod_{j=1}^{n-1} \frac{1}{m_j!} [-(j+1)b_{j+1}(\Lambda)]^{m_j}. \quad (65)$$

The thermodynamic limit B_n of virial coefficients $B_n(\Lambda)$ can be represented in a similar way in the form of polynomials in limiting Mayer coefficients b_n :

$$B_n = \frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! \prod_{j=1}^{n-1} \frac{1}{m_j!} [-(j+1)b_{j+1}]^{m_j}. \quad (66)$$

Formulas (65) and (66) will be called **Mayer formula**.

For short, the thermodynamic limit of virial coefficients $B_n(\Lambda)$ will be called the **limiting virial coefficient** and denoted B_n .

Let Mayer coefficients $b_n(\Lambda)$ in formula (65) be defined by their representations in the form of tree sums according to formulas (52) and (48). Then formulas (65), (52) and (48) are representations of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ as polynomials in tree sums representing Mayer coefficients $b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)$. Such the representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ will be called its **representation by Mayer formula and formulas (52) and (48)**. Similarly, the representation of the limiting virial coefficient B_n in the form of a polynomial in tree sums representing limiting Mayer coefficients b_2, b_3, \dots, b_n we will call its **representation by the Mayer formula and formulas (53) and (47)**.

Further, for the sake of brevity, we will omit the Λ argument of the virial coefficients B_n where it will not cause difficulties for the reader to understand.

Obviously, the procedure for calculating the estimate a limiting virial coefficient B_n on base of its representation by Mayer formula and by formulas (53) and (47) has the same complexity as the evaluation procedure virial coefficient $B_n(\Lambda)$ on base of its representation by Mayer formula and formulas (52) and (48).

If the procedure of the calculation of the estimate of a virial coefficient $B_n(\Lambda)$ is based on its representation by Mayer formula and by formulas (52) and (48), then, for brevity, the complexity of this procedure we will call **the complexity of representation of the virial coefficient by Mayer formula and formulas (52) and (48)**.

The question of interest is: what is the complexity of calculation of the estimates of virial coefficients using these representations? To answer this question, you need to clearly define the process of the calculation of these estimates. This article suggests the following scheme of this process:

Stage 1. The calculation of the estimates of Mayer coefficients included in the representation of a given virial coefficient according to Mayer formula.

Stage 2. The calculation of the estimate of a given virial coefficient. The calculation is performed according to Mayer formula, in which instead of Mayer coefficients, the calculated estimates of these coefficients are substituted.

To estimate the complexity of these the calculations using Mayer formula, we present this formula in a slightly different, more convenient form for solving this problem.

For this purpose, we introduce the notation:

$$Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}) = \prod_{j=1}^{n-1} \frac{1}{m_j!} (y_j x_j)^{m_j}. \quad (67)$$

Let

$$x_i = -b_{i+1}(\Lambda), \quad i = 1, 2, \dots, n-1; \quad \mathbf{b}(\Lambda) = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}; \quad (68)$$

$$y_i = i + 1, \quad i = 1, 2, \dots, n-1. \quad (69)$$

In this notations, Mayer formula (65) takes the form

$$B_n(\Lambda) = \frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}). \quad (70)$$

Condition (62) implies that the norm of any vector $m \in \mathbf{M}(n)$ satisfies the inequality

$$\|\mathbf{m}\| \leq n - 1. \quad (71)$$

Remark 11 [39]. From the definition of the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ by formula (67) it follows that in the case when the values of the components of the vector \mathbf{y} are calculated by formulas (69), and the values of the components of the vector \mathbf{x} are given, to calculate the value of the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ it is required to perform no more than $5\|\mathbf{m}\|$ arithmetic operations.

Also in the case when the values of the components of the vector \mathbf{y} are calculated according to the formula

$$y_i = -i - 1, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (72)$$

and the values of the components of the vector \mathbf{x} are given, to calculate the value of the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ it is required to perform no more than $5\|\mathbf{m}\|$ arithmetic operations.

In the case when all the components of the vector \mathbf{y} are equal to the number 1, and the values of the components of the vector \mathbf{x} are given, to calculate the value of the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ for given values of vectors \mathbf{x} and \mathbf{y} it is required to perform no more than $3\|\mathbf{m}\|$ arithmetic operations. ■

Remark 12 [39]. From the definition of the sum $\sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)}$ it follows that the number of terms in this sum is equal to the number of all unordered expansions of the number $n-1$ into a sum of natural terms. Following [26, 29], we denote this number by $p(n-1)$.

The value of $p(n)$ grows with the growth of n rather slow. Its values are given in the book [26, 29] (see Table 4.2). So, at $n=9$ this value takes on the value 30, and at $n=10$ this value is 42. ■

From Remark 12, from formula (67) and from inequality (71) it follows that for $n \leq 10$ to calculate the sum

$$\sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}),$$

where \mathbf{x} and \mathbf{y} are defined by formulas (68) and (69) accordingly, it takes less than 2430 arithmetic operations. From this estimate and Mayer formula, it follows that to calculate the estimate of the virial coefficient B_n according to Mayer formula by use of the known estimates of Mayer coefficients b_n for $n \leq 10$ require perform less than 2440 arithmetic operations.

This is a negligible number of arithmetic operations compared with the number of operations required to obtain an estimate of even the first virial coefficients such as B_4, B_5, B_6 (and as Mayer coefficients b_4, b_5, b_6) by known methods. Indeed, in the procedure for calculating estimates of these coefficients by Monte Carlo method, about 10^{10} and more statistical tests are performed. This implies the following

Remark 13. In the case when the process of the calculation of the estimate of a virial coefficient is based on the representation of this coefficient by Mayer formula and formulas (52) and (48), the complexity of this process is negligibly exceeds the complexity of all the calculations performed at the first stage of this process. This makes it possible to use the criterion of the complexity of all the calculations performed at the first stage, as a criterion of the complexity of the representation of this virial coefficient by Mayer formula and formulas (52) and (48). ■

Of course, the complexity of the procedure of the calculation of the estimates of Mayer coefficients depends on their representations. For brevity, the complexity of the procedure of the calculation of the estimates of all Mayer coefficients from the set $\{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}$ with the help of given representations of all these coefficients we will call **the complexity of the given set of the representations of Mayer coefficients**.

Based on Remark 13, we will hold that a criterion of the complexity of the representation of a virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by Mayer formula and formulas (52) and (48) is a criterion of the complexity of the set of the representations of Mayer coefficients $b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)$. Similarly, we will hold that the complexity criterion of the representation of the limiting virial coefficient B_n by Mayer formula and formulas (53) and (47) is the complexity criterion of the set, consisting of representations of the limiting Mayer coefficients b_2, b_3, \dots, b_n .

In the cases considered below, Mayer coefficients are represented by formulas of the form (52) and (48). By Lemma 3, these representations are base linear combinations with coefficients of the negligible complexity.

In order to estimate the complexity of the set of base linear combinations representing Mayer coefficients b_2, b_3, \dots, b_n , it is necessary to introduce criteria for the complexity of evaluating a finite set of base linear combinations with coefficients of negligible complexity. For this purpose, we introduce the following notation:

$\mathfrak{L} = \{L\}$ is a finite set of base linear combinations with coefficients of negligible complexity;

$\mathfrak{U}(\mathfrak{L}) = \{U(L) : L \in \mathfrak{L}\}$ is the totality of all sets associated with a base linear combinations belonging to the set \mathfrak{L} .

Definition 24. The totality $\mathfrak{U}(\mathfrak{L})$ is called **the sets totality, associated with the set \mathfrak{L} of base linear combinations**. ■

Definition 25. The totality of sets $\mathfrak{U}(\mathfrak{L})$ is called **ordered** if there exists a connected, bounded and Lebesgue measurable set $\Lambda \subset \mathbf{R}^\nu$ such that for any linear combination $L \in \mathfrak{L}$ its the associated set $U(L)$ can be represented as: $U(L) = \Lambda^k$, where k is order of the linear combination L . In this case, the set Λ is called **conjugate to the set \mathfrak{L}** . ■

Definition 26. A linear combinations set \mathfrak{L} is called a **base set** if it satisfies one of the following two conditions:

1) Each base linear combination of order k belonging to it belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$; in this case the space \mathbf{R}^ν is called **conjugate to the set \mathfrak{L}** .

2) Each base linear combination of order k belonging to it belongs to the set $\mathfrak{L}(k)$, and the population of sets $\mathfrak{U}(\mathfrak{L})$ is ordered. ■

Definition 27. The largest of the numbers serving as order of one of the base linear combinations included to the base set \mathfrak{L} is called **order** of this set. ■

Definition 28. The base sets \mathfrak{L}_1 and \mathfrak{L}_2 are called **comparable**, if they both have the same order n and if they both satisfy one of the following two conditions:

1) any base linear combination of order k belonging to at least one of these two base sets, belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$, where $k \leq n$, n is the order of these base sets;

2) each of these two base sets has a conjugate set, and these two conjugate sets coincide with each other. ■

In what follows, we will consider only such sets of base linear combinations that are base sets.

In the article are proposed three criteria of the complexity of estimation of a base set of linear combinations. Each of these criteria is generated by one of the above the criteria of the complexity of base linear combinations. The criterion generated by the Cr_i criterion, where $i = 1, 2, 3$, we denote Cr'_i .

We define the complexity criterion $Cr'_i(\mathfrak{L})$ on all base sets consisting of such base linear combinations on which the criterion of complexity Cr_i is defined.

On each such base set $\mathfrak{L} = \{L\}$, let's define the value of the criterion $Cr'_i(\mathfrak{L})$, putting

$$Cr'_i(\mathfrak{L}) = \sum_{L \in \mathfrak{L}} Cr_i(L), \quad i = 1, 2, 3. \quad (73)$$

Since the criteria Cr_1 and Cr_2 are defined on all base linear combinations, the criteria Cr'_1 and Cr'_2 , according to their definition by the formula (73), are defined on all base sets. And since the criterion Cr_3 is defined only on base linear combinations of base improper convergent integrals, then the criterion Cr'_3 according to its definition by the formula (73) is defined on all base sets consisting only of base linear combinations of base improper convergent integrals.

So, we have defined the complexity criteria Cr'_i , Cr'_2 and Cr'_3 . At this definition the domain of the complexity criterion Cr'_i (where $i = 1, 2, 3$) is the totality of all finite subsets of the set of all base linear combinations at which the complexity criterion Cr_i defined.

It was noted above that the value of each of the criteria Cr_1 , Cr_2 and Cr_3 on a linear combination included in its definition domain, depends only on the set of graphs serving as labels of the integrands of the integrals, which are included in this linear combination, and does not depend on the associated set of this linear combination. Hence and from the definition of the criteria Cr'_1 , Cr'_2 and Cr'_3 by the formula (73) it follows that the value of each of the criteria Cr'_1 , Cr'_2 and Cr'_3 on a base set included in its definition domain depends only on the set of graphs serving as labels of the integrands of integrals included in the linear combinations that belong to this set, and this value does not depend on the conjugate set of this base set.

Definition 29. Let the criterion Cr'_i , where i can take the values $i = 1, 2, 3$, is defined on comparable base sets \mathfrak{L} and \mathfrak{L}_1 of linear combinations.

We will hold that **by the criterion Cr'_i , the base set \mathfrak{L}_1 is considerably more complicated than the base set \mathfrak{L}** , if $Cr'_i(\mathfrak{L}_1) > Cr'_i(\mathfrak{L})$. If $Cr'_i(\mathfrak{L}_1) = Cr'_i(\mathfrak{L})$, then we will hold that, according to the criterion Cr'_i , the complexity of one of these two base sets is **equal or negligibly different** from complexity another of them, and say that according to the criterion Cr'_i , the complexity of one of them **is approximately equal to** the complexity of the other. If it is known that the base set \mathfrak{L}_1 is more complicated than the base set \mathfrak{L} , and $Cr'_i(\mathfrak{L}_1) = Cr'_i(\mathfrak{L})$, then we will hold that by the criterion Cr'_i , the set \mathfrak{L}_1 **is negligibly more complicated** then the set \mathfrak{L} . ■

Let L_0 be a base linear combination with the coefficients of negligible complexity, which belongs to the domain of the complexity criterion Cr_i . Let us put in correspondence to the linear combination L_0 the base set $\mathfrak{L}_0 = \{L_0\}$, consisting of one linear combinations L_0 . Obviously, the base linear combination L_0 and the set \mathfrak{L}_0 have the same computational complexity.

The set \mathfrak{L}_0 , by its definition, belongs to the domain of definition of the complexity criterion Cr'_i . Therefore, the value of the complexity criterion Cr'_i is defined for it. According to the definition of the criterion Cr'_i by the formula (73), the following equality holds:

$$Cr'_i(\mathfrak{L}_0) = Cr_i(L_0). \quad (74)$$

Definition 30. A base set \mathfrak{L} and a base linear combination L_0 are called **comparable** if they both have the same order n , and if any base linear combination $L \in \mathfrak{L}$ of order n is comparable to the linear combination L_0 . ■

For any $i = 1, 2, 3$ this definition, together with equality (74), makes it possible to introduce a definition that makes it possible to compare the complexity of any basic linear combination L_0 , on which the criterion Cr_i is defined, with the complexity of the base set $\mathfrak{L} = \{L\}$, which is comparable to the base linear combination L_0 and on which the criterion Cr'_i has been defined.

Definition 31. Let L be a base linear combination, on which a criterion Cr_i is defined, and \mathfrak{L} be a linear combinations base set, comparable with the base linear combination L . We will hold that **according to the criterion Cr'_i the base linear combination L is considerably more complicated than the base linear combinations base set \mathfrak{L}** , if $Cr_i(L) > Cr'_i(\mathfrak{L})$. If $Cr_i(L) < Cr'_i(\mathfrak{L})$, then we will hold that **according to the criterion Cr'_i the base linear combination L is considerably simpler than the base linear combinations base set \mathfrak{L}** .

In the case when $Cr_i(L) = Cr'_i(\mathfrak{L})$, we will hold that **according to the criterion Cr'_i the complexity of the base linear combination L is approximately equal to the complexity of the base linear combinations base set \mathfrak{L}** , ■

Let us denote by $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda) = \{L\}$ the base set of tree sums, each of which is the representation of a coefficient from the set of coefficients $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda) = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}$ according to formulas (52) and (48). Following the above, we hold that a complexity criterion of the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ of tree sums is a complexity criterion of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ representation according to Mayer formula (65) and formulas (52) and (48).

Lemma 5. *Let the potential $\Phi(\mathbf{r})$ of a pairwise interaction be a measurable function, and the pairwise interaction satisfies the conditions of stability and regularity. And let the set Λ be a connected, bounded and Lebesgue measurable set contained in the space \mathbf{R}^ν . Then the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ is a base set of base linear combinations. This set is of order n , and the set Λ is the conjugate set of this base set.*

Proof. From the definition of the tree sums set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ it follows that any tree sum belonging to this set is a representation of some Mayer coefficient $b_k(\Lambda)$ belonging to the Mayer coefficients set $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda) = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}$. From the definition of the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ by Lemma 3 it follows that this tree sum is a base linear combination of order k with coefficients of negligible complexity. Thus, the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ is a finite set of all base linear combinations that are defined by the formulas (52) and (48) and are representations Mayer coefficients belonging to the set $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$. In this case, the representation of Mayer coefficient $b_k(\Lambda) \in \mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$ is the base linear combination of order k from the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$.

From the definition by the formulas (52) and (48) of the base linear combinations belonging to the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ it follows that the set Λ^k is associated to the base linear combination of order k from the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$. From the conditions of Lemma 5 it follows that for any natural number k the associated set Λ^k is a connected, bounded and Lebesgue measurable set [21] contained in the space $(\mathbf{R}^\nu)^k$.

From this, first, it follows that for any $k = 2, 3, \dots, n$ the base linear combination of order k from the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ belongs to set $\mathfrak{L}(k)$ by the definition of this set. Second, from this, by Definition 25, it follows that the totality of all sets associated to base linear combinations belonging to the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$, is ordered, and the set Λ is conjugate to the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$.

From the results obtained, by Definition 26, it follows that the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ is a base set of base linear combinations.

Any Mayer coefficient $b_k(\Lambda)$ from Mayer coefficients set $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$ is represented by the base linear combination of order k from the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$, and this base set contains only base linear combinations that are representations of Mayer coefficients belonging to the set $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$. Therefore, no base linear combination of order more than n belongs to the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$. On the other hand, this base set contains a base linear combination of order n , which is the representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ belonging to the set $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$. Hence, the number n is the largest of the numbers that serve as the order of one of the base linear combinations included to the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$. From here by definition 27 it follows that the number n is order of the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$. Lemma 5 is completely proven. ►

Example 4. Let us consider the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ of all tree sums that according to the formulas (52) and (48) are representations of Mayer coefficients, belonging to the set $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda) = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}$. Moreover, we will assume that the conditions of Lemma 5 are satisfied. By Lemma 5, this set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ is a base set of base linear combinations with coefficients of negligible complexity and has order n , and the set Λ is the conjugate set of this base set. The set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ contains only one base linear combination of order n . Its associated set is the set Λ^n . By Definition 17, this linear combination of order n is comparable to Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$. This statement is based on the analysis of Ree-Hoover representation set out in Example 1, where it is shown that this representation of the coefficient $B_n(\Lambda)$ is a base linear combination with coefficients of negligible complexity and has order n , and the set Λ^n is the associated set of this base linear combination. From this statement, by Definition 30, it follows that the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ is comparable to Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$. Since the criteria Cr_1 and Cr_2 are defined on this Ree-Hoover representation, and the criteria Cr'_1 and Cr'_2 are defined on the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$, the complexity of the representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by the formulas (65), (52) and (48) was been compared with the complexity of Ree-Hoover representation of this coefficient at the stated below values of n . Since the values of the criteria Cr'_1 and Cr'_2 do not depend on the set Λ conjugate to a base set, then in examples 4 and 5 the symbol Λ only denotes that the set Λ conjugate to a base set is a connected, bounded and measurable by Lebesgue set contained in the space \mathbf{R}^ν .

Table 4 shows the calculated values of the criterion $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda))$ for $n = 2, 10$. where $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ is representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ according to Mayer formula (65) and formulas (52) and (48). In particular, $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(8, \Lambda)) = 857$, $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(9, \Lambda)) = 3709$, $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(10, \Lambda)) = 17756$. Comparing these values with the values of the complexity criterion Cr_1 of Ree-Hoover representations given in Table 4, we see that the values of the criterion $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda))$ for $n = 8, 9, 10$ are less than the values of the complexity criterion $Cr_1(L_{RH}(n, \Lambda))$ (see tables notations) for corresponding Ree-Hoover representations. Therefore, by Definition 31, at these values of n , the representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ according to formulas (65), (52) and (48) are considerably simpler than Ree-Hoover representation of this coefficient at any bounded volume $\Lambda \subset \mathbf{R}^\nu$. ►

Example 5 Let us compare, according to the criterion Cr'_2 , the complexity of Ree-Hoover representations of the virial coefficients $B_3(\Lambda)$, $B_4(\Lambda)$, $B_5(\Lambda)$, $B_6(\Lambda)$ and $B_7(\Lambda)$ with

the complexity of their representations in the form of a polynomial in tree sums by formulas (65), (52) and (48).

Table 5 shows, in particular, the following results:

$$\begin{aligned} Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(3, \Lambda)) &= 6, & Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(4, \Lambda)) &= 28, & Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(5, \Lambda)) &= 121, \\ Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(6, \Lambda)) &= 524, & Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(7, \Lambda)) &= 2406, \\ Cr_2(L_{RH}(3)) &= 3, & Cr_2(L_{RH}(4)) &= 12, & Cr_2(L_{RH}(5)) &= 50, \\ Cr_2(L_{RH}(6)) &= 345, & Cr_2(L_{RH}(7)) &= 3591. \end{aligned} \quad (75)$$

Table 5 shows, in particular, that the inequality $Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(n)) > Cr_2(L_{RH}(n))$ holds for $n = 3, 4, 5, 6$. From this, by Definition 31, it follows that for values $n = 3, 4, 5, 6$ the representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by the formulas (65), (52) and (48) is considerably more complicated than Ree-Hoover representation of this coefficient for any bounded volume $\Lambda \subset \mathbf{R}^\nu$. And for $n = 7$ the inequality $Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(7)) < Cr_2(L_{RH}(7))$ holds. From this inequality, by Definition 31, it follows that the representation of the virial coefficient $B_7(\Lambda)$ by the formulas (65), (52) and (48) is considerably simpler than Ree-Hoover representation of this coefficient for any bounded volume $\Lambda \subset \mathbf{R}^\nu$. ►

9. Let us now turn to representations of limiting virial coefficients B_n in the form of polynomials in tree sums representing the coefficients a_n by formulas (59) and (47). These representations of limiting virial coefficients for $n > 1$ have the form [9, 11, 17, 36, 39]:

$$B_n = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} \|\mathbf{m}\|! e_{\|\mathbf{m}\|} \prod_{j=1}^n (m_j!)^{-1} [\tau_j]^{m_j}, \quad n \geq 2, \quad (76)$$

where coefficients e_μ and τ_μ are defined by the formulas

$$e_1 = \tau_1 = 1; \quad e_\mu = \mu^{-1} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} \|\mathbf{m}\|! \prod_{j=1}^{\mu-1} (m_j!)^{-1} [(j+1)a_{j+1}]^{m_j}, \quad \mu \geq 2; \quad (77)$$

$$\tau_\mu = (\mu - 1)! \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} [(\mu - \|\mathbf{m}\|)!]^{-1} \prod_{j=1}^{\mu-1} (m_j!)^{-1} \{-(j+1)a_{j+1}\}^{m_j}. \quad \mu \geq 2. \quad (78)$$

According to these formulas, a limiting virial coefficient B_n is represented as a polynomial in tree sums representing coefficients a_n .

Of interest is the question: what is complexity of the calculation of the estimate of a limiting virial coefficient B_n using its representation by the formulas (76), (77) and (78)?

To estimate complexity of these calculations, first of all we represent the limiting virial coefficient B_n and the quantities e_m and τ_m in a form more convenient for this purpose.

Namely, using the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ introduced by formula (67), transform the representations of the quantities B_n , e_m and τ_m by formulas, respectively (76), (77) and (78) as follows:

$$e_1 = 1; \quad e_\mu = \mu^{-1} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} \|\mathbf{m}\|! Q_m(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad \mu \geq 2, \quad (79)$$

where

$$x_j = a_{j+1}, \quad y_j = j + 1, \quad 1 \leq j < \mu; \quad (80)$$

$$\tau_1 = 1; \quad \tau_\mu = (\mu - 1)! \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} \{[\mu - \|\mathbf{m}\|]!\}^{-1} Q_\mu(\mathbf{x}; -\mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad \mu \geq 2, \quad (81)$$

where the vectors \mathbf{y} and \mathbf{x} are defined by formulas (80), and the vector $-\mathbf{y}$ is defined by the formula

$$-\mathbf{y} = (-y_1, -y_2, \dots, -y_{\mu-1}); \quad (82)$$

$$B_n = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} \|\mathbf{m}\|! e_{\|\mathbf{m}\|} Q_{n+1}(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad n \geq 2, \quad (83)$$

where the values e_j for $j = \overline{1, n}$ are defined by the formulas (79),

$$x_j = \tau_j, \quad y_j = 1 \quad \text{for } j = \overline{1, n}, \quad (84)$$

and the quantities τ_j are defined by formulas (81), where the vectors \mathbf{y} and \mathbf{x} are defined by formulas (80), and the vector $-\mathbf{y}$ defined by formula (82).

In these transformed representations, the limiting virial coefficient B_n also, as in the representations by formulas (76), (77) and (78), is presented as a polynomial in the tree sums representing the coefficients a_n .

Further, in order to answer the question posed, you need to clearly define the process of the calculation of the estimate of the limiting virial coefficient B_n . This article suggests the following scheme of this process:

Stage 1. A calculation of estimates of the values of the coefficients a_k for all $k = \overline{2, n}$. The estimate of the value of the coefficient a_k is denoted by a'_k , $k = \overline{2, n}$.

Stage 2. A calculation of estimates of the values of all quantities from the set $\mathbf{e}_n = \{e_2, e_3, \dots, e_n\}$. The estimate of the value of e_k is denoted by e'_k . The calculation is performed according to the formulas (79) and (80), into which, instead of the coefficients a_k , where $k = \overline{2, n}$, are substituted the their estimates a'_k that were calculated at stage 1, and instead of the quantity e_k , is substituted the estimate e'_k of the value of this quantity.

Stage 3. A calculation of estimates for the values of all quantities from the set $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_2, \tau_3, \dots, \tau_n\}$. The calculation is performed according to the formula (81) and (80), into which, instead of the coefficients a_k , where $k = \overline{2, n}$, are substituted the their estimates a'_k that were calculated at stage 1, and instead of the quantity τ_k , is substituted the estimate τ'_k of the value of this quantity.

Stage 4. A calculation of the estimate of the value of the given limiting virial coefficient. The estimate of the value of this coefficient will be denoted by B'_n . The calculation is made according to the formula (83), into which instead of this coefficient the its value estimate B'_n is substituted, and instead of the quantities e_k and τ_k , are substituted the estimates of the values of these quantities respectively e'_k and τ'_k calculated at stages 2 and 3.

Our immediate goal is to find an upper bound of the number of arithmetic operations required for the computations performed in stages 2–4. Let's introduce the notation:

$$\mathbf{e}'_n = (e'_1, e'_2, \dots, e'_n), \quad \boldsymbol{\tau}'_n = (\tau'_1, \tau'_2, \dots, \tau'_n), \quad \mathbf{a}'_n = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_n\}, \quad n \geq 2;$$

$E_1(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu)$ is an upper bound of the number of arithmetic operations, which at a given value of $\mu \geq 2$ and at a given vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ are required to calculate the estimate of the value of the product $\|\mathbf{m}\|! Q_\mu(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$, where the $(\mu - 1)$ -dimensional vectors \mathbf{x} and \mathbf{y} are defined by the formulas (80), in which instead of the coefficients a_k the these coefficients values estimates calculated at the stage 1 are substituted;

$E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu)$ is an upper bound of the number of arithmetic operations that at a given value of $\mu \geq 2$ and a given vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ are required to calculate the estimate of the value of the product $\mu! \{[\mu - \|\mathbf{m}\|]!\}^{-1} Q_\mu(\mathbf{x}; -\mathbf{y}; \mathbf{m})$, where the $(\mu - 1)$ -dimensional vectors \mathbf{x} and \mathbf{y} are defined by formulas (80), in which instead of the coefficients a_k the these coefficients values estimates calculated at the stage 1 are substituted, and the vector $-\mathbf{y}$ is defined by formula (82);

$$\alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n) = \|\mathbf{m}\|! e_{\|\mathbf{m}\|} Q_{n+1}(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad \mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1), \quad (85)$$

where the n -dimensional vectors \mathbf{y} and \mathbf{x} are defined by formulas (84), in which instead of the coefficients a_k the these coefficients values estimates calculated at the stage 1 are substituted;

$E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$ is an upper bound of the number of arithmetic operations, which at a given vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)$ are required to calculate the estimate of the value of the product $\alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$, where the n -dimensional vectors \mathbf{y} and \mathbf{x} are defined by the formulas (84), in which instead of the quantities τ_k the these quantities values estimates calculated at the stage 3 are substituted, and instead of the quantity $e_{\|\mathbf{m}\|}$ the this quantity value estimate calculated at the stage 2 is substituted;

$E(e_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ is upper estimate of the number of arithmetic operations required at the stage 2 to calculate the estimate of the value of the quantity e_μ under all estimates, which belong to the set $\mathbf{a}'_\mu = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_\mu\}$ and are calculated at the stage 1;

$E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ is an upper bound of the number of arithmetic operations required at the stage 3 to calculate the estimate of the value of quantity τ_μ under all estimates, which belong to the set $\mathbf{a}'_\mu = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_\mu\}$ and are calculated at the stage 1;

$E(\mathbf{e}_n \mid \mathbf{a}_n)$ is an upper bound of the number of arithmetic operations, required at the stage 2 to calculate the estimates of the values of all quantities from the set $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ under all estimates, which belong to the set $\mathbf{a}'_\mu = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_\mu\}$ and are calculated at the stage 1;

$E(\boldsymbol{\tau}_n \mid \mathbf{a}_n)$ is an upper bound of the number of arithmetic operations required at the stage 3 to calculate the estimates of the values of all quantities from the set $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$ under all estimates, which belong to the set $\mathbf{a}'_\mu = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_\mu\}$ and are calculated at the stage 1;

$E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$ is an upper estimate of the number of arithmetic operations required at stage 4 to calculate the estimate of the limiting virial coefficient B_n under the estimates of the values of all quantities from the population $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ and of the values of all quantities from the set $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$ obtained as results of the calculations at the stages 1, 2 and 3;

$E(B_n \mid \mathbf{a}_n)$ is an upper estimate of the number of arithmetic operations required at stage 4 to calculate the estimate of the limiting virial coefficient B_n under the estimates obtained as results of the calculations at the stages 1, 2 and 3, that is under the estimates of the values of all coefficients from the set $\mathbf{a}_n = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$, under the estimates of the values of all quantities from the population $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ and under the estimates of the values of all quantities from the set $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$.

Let us find an upper bound for the number of arithmetic operations required at stage 2 to calculate the estimates of the values of all quantities from the set $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ under all estimates, which belong to the set $\mathbf{a}'_n = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_n\}$ and have been calculated at the stage 1.

From the definition of the vectors set $\mathbf{M}(\mu)$ it follows that for any $\mu \geq 2$ every vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ satisfies the inequality

$$\|\mathbf{m}\| \leq \mu - 1. \quad (86)$$

From the definition of the estimate $E_1(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n)$, the definition of the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ by formula (67), inequality (86), and Remark 11 it follows that for any $\mu \geq 2$ and any vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ the inequality

$$E_1(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu) \leq 7(\mu - 1) \quad (87)$$

holds.

From the definition of e_μ by formula (79), inequality (87), Remark 12 and definitions of the estimates $E(e_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ and $E_1(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n)$ implies the estimate

$$E(e_\mu \mid \mathbf{a}_\mu) \leq \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} E_1(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu) \leq 7p(\mu - 1)(\mu - 1). \quad (88)$$

Using inequality (88) and the monotonic increase of the function $p(n)$, from the definitions of estimates $E(e_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ and $E(\mathbf{e}_n \mid \mathbf{a}_n)$ we obtain the inequality

$$E(\mathbf{e}_n \mid \mathbf{a}_n) \leq \sum_{\mu=2}^n E(e_\mu \mid \mathbf{a}_\mu) \leq 7p(n-1) \sum_{\mu=2}^n (\mu - 1) = 7p(n-1)n(n-1)/2. \quad (89)$$

Let us find an upper bound for the number of arithmetic operations required at stage 3 to calculate the estimates of the values of all quantities from the set $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$ under all estimates, which belong to the set $\mathbf{a}'_n = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_n\}$ and have been calculated at the stage 1.

From the definition of the estimate $E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu)$, from the definition of the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ by formula (67), from inequality (86) and Remark 11 it follows that for any $\mu \geq 2$ and any vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ the inequality

$$E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu) \leq 7(\mu - 1) \quad (90)$$

holds.

From the definition of the quantity τ_μ by formula (81), from inequality (90), from Remark 12 and the definitions of estimates $E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ and $E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu)$ the estimate

$$E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_\mu) \leq \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu) \leq 7p(\mu - 1)(\mu - 1). \quad (91)$$

follows.

Using the inequality (91) and the monotonic increase of the function $p(n)$, from the definitions of the estimates $E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ and $E(\boldsymbol{\tau}_n \mid \mathbf{a}_n)$ we obtain the inequality

$$E(\boldsymbol{\tau}_n \mid \mathbf{a}_n) \leq \sum_{\mu=1}^n E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_\mu) \leq 7p(n-1) \sum_{\mu=2}^n (\mu - 1) = 7p(n-1)n(n-1)/2. \quad (92)$$

Let us find an upper bound for the number of arithmetic operations required to calculate the estimate of the limiting virial coefficient B_n under all estimates, which belong to the set $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ and have been calculated at the stage 2, and under all estimates, which belong to the set $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$ and have been calculated at the stage 3.

From inequality (86), the definition of the product $\alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$ by formula (85), the definition of the estimate $E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$, the definition of the function $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ by formula (67) and Remark 11 it follows that for any $n \geq 2$ and any vector $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)$ the inequality

$$E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n) \leq 5n \quad (93)$$

holds.

Definition by formula (83) of the limiting virial coefficient B_n and definition by formula (85) of the product $\alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$ implies that the coefficient B_n can be represented by the sum

$$B_n = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} \alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n). \quad (94)$$

Hence, using the definitions of the estimates $E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$ and $E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$, we obtain the inequality

$$E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n) \leq \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n). \quad (95)$$

Hence, by Remark 12 and inequality (93), the estimate follows

$$E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n) \leq 5np(n). \quad (96)$$

From the proposed scheme of the computation process for the estimate of the virial coefficient B_n it follows that the sole purpose of all calculations at stages 2, 3 and 4 of this scheme is to estimate this coefficient by the estimates of the coefficients a_1, a_2, \dots, a_n calculated at stage 1. The number of all arithmetic operations required to achieve this goal is the sum of all arithmetic operations that should be performed on these stages. Hence, applying the definitions of estimates $E(\mathbf{e}_n \mid \mathbf{a}_n)$, $E(\boldsymbol{\tau}_n \mid \mathbf{a}_n)$, $E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$ and $E(B_n \mid \mathbf{a}_n)$, we get the estimate

$$E(B_n \mid \mathbf{a}_n) \leq E(\mathbf{e}_n \mid \mathbf{a}_n) + E(\boldsymbol{\tau}_n \mid \mathbf{a}_n) + E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n). \quad (97)$$

The inequalities (97), (89), (92), and (96) imply the estimate

$$E(B_n \mid \mathbf{a}_n) \leq 7p(n-1)n(n-1)/2 + 7p(n-1)n(n-1)/2 + p(n)5n = 7p(n-1)n(n-1) + 5np(n). \quad (98)$$

In particular, from formula (98) and Remark 12 it follows that for $n \leq 10$ it takes less than 21000 of arithmetic operations to compute the estimate of the limiting virial coefficient B_n by the estimates of the coefficients a_2, a_3, \dots, a_n computed at stage 1.

This is a negligible number of arithmetic operations compared to the number of operations necessary to obtain an estimate of any of the coefficients a_4, a_5, \dots . Indeed, it takes about 10^{10} and more statistical trials to compute estimates of these coefficients by the Monte Carlo method. This implies

Remark 14. For $n \geq 4$ the main difficulty of the calculation procedure of the estimate of a limiting virial coefficient by means of its representation as the polynomial in the coefficients a_n according to formulas (76), (77), (78), (59) and (47) consists in complexity of the estimation procedure of all coefficients from the set $\{a_2, a_3, \dots, a_n\}$. Moreover, complexity of the calculation procedure of the estimate of the limiting virial coefficient B_n negligibly

exceeds the complexity of the calculation procedure of the estimates of all coefficients a_m from this set. Hence, the criterion of complexity of representation of this set is a criterion for the complexity of the given representation of the limiting virial coefficient B_n . ■

Let us introduce the notation:

$\mathfrak{L}_{TR}(n, 0) = \{L\}$ is the set of all tree sums, each of which by the formulas (59) and (47) represents coefficient from the set of coefficients $\mathbf{a}_{1,n-1} = \{a_2, a_3, \dots, a_n\}$, where $n \geq 2$;

$\mathfrak{L}_{TR}(n) = \{L\}$ is the set of all tree sums, each of which by the formulas (53) and (47) represents the limiting Mayer coefficient from the set of coefficients $\mathbf{b}_{1,n-1} = \{b_2, b_3, \dots, b_n\}$, where $n \geq 2$.

Lemma 6. *Let a pair interaction potential $\Phi(\mathbf{r})$ be a measurable function, and the pair interaction satisfies the conditions of stability and regularity. Then the set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ is a base set of base linear combinations. This set has order n , and for each $k \in \{2, 3, \dots, n\}$ the base linear combination of order k belonging to this base set belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$.*

Proof. From the definition of the tree sums set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ it follows that every tree sum belonging to this set is a representation of some limiting Mayer coefficient $b_k \in \mathbf{b}_{1,n-1}$, where $1 < k \leq n$. By Lemma 3, this tree sum is a base linear combination of order k with coefficients of negligible complexity. Thus, the set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ is a finite set of all base linear combinations that by the formulas (53) and (47) are representations of the limiting Mayer coefficients belonging to the set $\mathbf{b}_{1,n-1}$. At that, the representation of the limiting Mayer coefficient $b_k \in \mathbf{b}_{1,n-1}$ is a base linear combination of order k from the set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$.

From the definition of this base linear combination of order k by the formulas (53) and (47) it follows that the space $(\mathbf{R}^\nu)^{k-1}$ is the integration domain of all integrals included in this linear combination. Therefore, this linear combination of order k belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$ by the definition of this set. So, the set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ is a base linear combinations finite set, in which each base linear combination of order k belonging to it belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$. This means that this set is the base set of base linear combinations by definition 26.

Any Mayer coefficient b_k from the set of Mayer coefficients $\mathbf{b}_{1,n-1}$ is represented by a base linear combination of order k from the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$, and this base set contains only base linear combinations that are representations of Mayer coefficients belonging to the set $\mathbf{b}_{1,n-1}$. Therefore, no base linear combination of order more than n belongs to the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. On the other hand, this base set contains a base linear combination of order n , which is a representation of Mayer coefficient b_n belonging to the set $\mathbf{b}_{1,n-1}$. Hence, the number n is the largest of the numbers serving as the order of one of the base linear combinations included to the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. Hence, by Definition 27, it follows that the number n is the order of the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. Lemma 6 completely proven. ►

Lemma 7. *Let a pair interaction potential $\Phi(\mathbf{r})$ be a measurable function, and the pair interaction satisfies the conditions of stability and regularity. Then the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ is a base set of base linear combinations. This set is of order n , and each its base linear combination of order k belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$.*

Proof. From the definition of the set of tree sums $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ it follows that any tree sum belonging to this set is a representation by the formulas (59) and (47) of a certain coefficient a_k from the coefficients set $\mathbf{a}_{1,n-1} = \{a_2, a_3, \dots, a_n\}$, where $1 < k \leq n$. By Lemma 4, this tree sum is a base linear combination of order k with coefficients of negligible complexity. Thus, the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ is a finite set of all base linear combinations that by the formulas (59) and (47) are representations of the coefficients belonging to the set $\mathbf{a}_{1,n-1}$. At that, the representation of the coefficient $a_k \in \mathbf{a}_{1,n-1}$ is a base linear combination of order k from the

set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$.

From the definition of this base linear combination of order k by the formulas (59) and (47) it follows that the space $(\mathbf{R}^\nu)^{k-1}$ is the integration domain of all integrals included in this linear combination. Therefore, this linear combination of order k belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$ by the definition of this set. So, the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ is a base linear combinations finite set, in which each base linear combination of order k belonging to it belongs to the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$. This means that this set is the base set of base linear combinations by definition 26.

Any coefficient a_k from the coefficients set $\mathbf{a}_{1,n-1}$ is represented by a base linear combination of order k from the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$, and this base set contains only base linear combinations that are representations of the coefficients belonging to the set $\mathbf{a}_{1,n-1}$. Therefore, no base linear combination of order more than n belongs to the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$. On the other hand, this base set contains a base linear combination of order n , which is a representation of the coefficient a_n belonging to the set $\mathbf{a}_{1,n-1}$. Hence, the number n is the largest of the numbers serving as order of one of the base linear combinations included to the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$. Hence, by Definition 27, it follows that the number n is the order of the base collection $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$. Lemma 7 completely proven. ►

By Definition 28, Lemma 6 and Lemma 7 imply

Corollary 7 *Base sets $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ and $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ are comparable.*

For any $k > 1$, the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$ is a subset of the set $D(Cr_3)$ defined by the formula (43). The set $D(Cr_3)$ is the definitional domain of the complexity criterion Cr_3 . From here by Lemmas 6 and 7 it follows that for any $n > 1$ the sets $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ and $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ are base sets containing only such base linear combinations that belong to the set $D(Cr_3)$. The set $D(Cr_3)$ is contained in the set $D(Cr_1)$ that is defined by the formula (39) and is the definitional domain of the complexity criteria Cr_1 and Cr_2 . This means that three complexity criteria are defined on the set $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$: Cr_1 , Cr_2 and Cr_3 . Hence it follows that for any $n > 1$ the sets $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ and $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ are base sets containing only such base linear combinations on that three complexity criteria are defined: Cr_1 , Cr_2 and Cr_3 . Therefore, these sets belong to the definitional domain of complexity criteria: Cr'_1 , Cr'_2 and Cr'_3 , defined by the formula (73). This makes it possible to compare by these criteria the complexity of the finite set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ of the tree sums, which are the representations of the coefficients a_2, a_3, \dots, a_n , with the complexity of the finite set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ of tree sums, which are the representations of the limiting Mayer coefficients b_2, b_3, \dots, b_n .

As an example, for $n = \overline{2, 10}$, the criterion $Cr'_1(\mathfrak{L})$ values were calculated for the sets of the tree sums of the form $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0) = \{L\}$ and for the set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ of the tree sums. The results are shown in Table 4. Further, for $n = \overline{2, 6}$, the criteria $Cr'_2(\mathfrak{L})$ and $Cr'_3(\mathfrak{L})$ values were calculated for the set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ of the tree sums and for the set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ of the tree sums. The results are shown in Tables 5 and 6, respectively.

Comparison the values of criteria Cr'_1 , Cr'_2 and Cr'_3 on the sets of tree sums of the form $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ with their values on the sets of tree sums of the form $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ confirms the conclusion immediately following from the above results: for $n > 3$ the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ is considerably simpler than the comparable base set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. Hence, for $n > 3$ any function of negligible complexity of the base set $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ is considerably simpler than any function of negligible complexity of the comparable base set $\mathfrak{L}_{TR}(n)$.

10. Using the frame sum method, you can get also representations of power series coefficients that are not tree sums. So, by the method of frame sums, the author obtained

representations of virial coefficients in the form:

$$B_n = -\frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{C} \in \mathfrak{C}(n)} J(\mathbf{C}). \quad (99)$$

Here $\mathfrak{C}(n)$ is the set of ensembles of frame cycles [14-16, 18-20, 37-39] of all doubly connected graphs with the set of vertices $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$; \mathbf{C} is an ensemble of frame cycles from the set $\mathfrak{C}(n)$;

$$J(\mathbf{C}) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in X(S(\mathbf{C}))} f_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in X_{ad}(\mathbf{C})} (1 + f_{\tilde{u}, \tilde{v}})(d\mathbf{r})_{1, n-1}, \quad (100)$$

Where $S(\mathbf{C})$ is the union of all cycles of the ensemble \mathbf{C} [14, 15, 19, 37]; $X(S(\mathbf{C}))$ is the set of all edges of the graph $S(\mathbf{C})$ [14, 15, 19, 37]; $X_{ad}(\mathbf{C})$ is the set of all admissible edges [14, 15, 19, 37] of the ensemble \mathbf{C} ; $\{u, v\}$ is an edge incident to the vertices u and v .

From the definition of integrals of the form $J(\mathbf{C})$ by formula (100) it follows that in each of the integrals that are terms of the sum on the right-hand side (99), the integrand is the product of Mayer functions labeled with the edges of the cycles included into the frame cycles ensemble that labels this integral, and Boltzmann functions labeled with edges from the set $X_{ad}(\mathbf{C}) = \{\{u, v\}\}$. We will call such a sum of integrals **a frame sum**.

From the definition of the set $X_{ad}(\mathbf{C})$ [14, 15, 19, 37] follows that this set consists of pairwise distinct edges, and each edge, contained in this set connects two non-adjacent vertices of the graph $S(\mathbf{C})$.

Theorem 6. *If the potential of the pairwise interaction $\Phi(\mathbf{r})$ is a measurable function and the pairwise interaction satisfies the conditions of stability and regularity, then for any ensemble of frame cycles $\mathbf{C} \in \mathfrak{C}(n)$ the integral $J(\mathbf{C})$ is a convergent improper base integral of order n , and the graph $S(\mathbf{C})$ is a completed graph-label of the integrand of this integral.*

Proof. First, we prove that the integrand of the integral $J(\mathbf{C})$ is a base product of order n .

For this purpose, we first of all prove that the sets of edges $X(S(\mathbf{C}))$ and $X_{ad}(\mathbf{C})$ form a canonical pair of sets $\mathbf{X} = (X(S(\mathbf{C})), X_{ad}(\mathbf{C}))$ of order n . From the definition of the edges set $X(S(\mathbf{C}))$ it follows that this set consists of pairwise different edges. As noted above, the set $X_{ad}(\mathbf{C})$ also consists of pairwise distinct edges, and each edge contained in this set connects two non-adjacent vertices of the graph $S(\mathbf{C})$. Two conclusions follow from this:

1) disjoint sets $X(S(\mathbf{C}))$ and $X_{ad}(\mathbf{C})$ form an ordered pair $\mathbf{X} = (X(S(\mathbf{C})), X_{ad}(\mathbf{C}))$ of sets;

2) the vertices of all edges from the set $X_{ad}(\mathbf{C})$ belong to the set of vertices of the graph $S(\mathbf{C})$.

Since \mathbf{C} is an ensemble of frame cycles from of the set $\mathfrak{C}(n)$, then, as is known [19], the graph $S(\mathbf{C})$ is a doubly connected graph with the set vertices V_n .

Hence, the equality

$$V(X(S(\mathbf{C}))) \cup V(X_{ad}(\mathbf{C})) = V_n \quad (101)$$

holds. Here $V(X(S(\mathbf{C})))$ is the set of all vertices of the graph $S(\mathbf{C})$, and $V(X_{ad}(\mathbf{C}))$ is the set of vertices of all admissible edges of the ensemble \mathbf{C} . From equality (101) by Definition 5 it follows that the ordered pair of sets $\mathbf{X} = (X(S(\mathbf{C})), X_{ad}(\mathbf{C}))$ is a canonical pair of order n .

From the obtained results it follows that the graph $S(\mathbf{C})$, to which the set $X_{ad}(\mathbf{C})$ is putted in correspondence, belongs to the set of graphs $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ by the definition of this set.

Hence, by Lemma 2, it follows that the Mayer and Boltzmann functions product $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(S(\mathbf{C}))$ labeled by this graph is a base product of order n and is defined by the formula

$$\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(S(\mathbf{C})) = \prod_{\{i,j\} \in X(S(\mathbf{C}))} \prod_{\{i',j'\} \in X_{ad}(\mathbf{C})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (102)$$

Hence, by Theorem 2, it also follows that the graph $S(\mathbf{C})$ is a completed graph-label of the product $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(S(\mathbf{C}))$.

Comparison of formulas (100) and (102) implies that the integrand of the integral $J(\mathbf{C})$ is identical to the functions base product $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(S(\mathbf{C}))$. Therefore, this integrand is a functions base product of order n , it is labeled with the graph $S(\mathbf{C})$, and the graph $S(\mathbf{C})$ is a completed graph-label of the integrand of the integral $J(\mathbf{C})$. Hence, by theorem 3, it follows that the improper integral $J(\mathbf{C})$ is an improper convergent base integral of order n . Theorem 6 is proved. ►

Theorem 6 implies the following

Corollary 8. *The frame sum on the right-hand side (99) is, by Definition 11 and Remark 6, a base linear combination with coefficients of negligible complexity.*

This circumstance makes it possible to use the proposed in this article criteria Cr_1 , Cr_2 and Cr_3 for comparison in complexity of representations of the virial coefficients by frame sums with other base linear combinations with coefficients of negligible complexity.

This circumstance also makes it possible to use the criteria Cr'_1 , Cr'_2 and Cr'_3 proposed in this article for comparison in complexity of representations of limiting virial coefficients by frame sums with representations of these coefficients by polynomials in base linear combinations with coefficients of negligible complexity.

From tables 1, 2, 3, 4, 5 and 6 the conclusions follow.

According to the criteria Cr_1 , Cr_2 and Cr_3 , the complexity of the representation of the limiting virial coefficient B_3 by the frame sum according to the formulas (99) and (100) differs negligibly from the complexity of the representation of the coefficient a_3 by the tree sum according to formulas (59) and (47).

According to the criteria Cr_1 and Cr_2 , this representation of the limiting virial coefficient B_3 by the frame sum is considerably simpler than the representation of the limiting Mayer coefficient b_3 by tree sums according to formulas (53) and (47). But according to the Cr_3 criterion, these two representations in their complexity differ negligibly from each other.

According to the criteria Cr'_1 and Cr'_2 , the representation of the limiting virial coefficient B_3 by the frame sum is considerably simpler than its representation by formula (66) in the form of the polynomial in tree sums, representing the limiting coefficients b_n by formulas (53) and (47); also according to the criteria Cr'_1 and Cr'_2 , this representation of the limiting virial coefficient B_3 by the frame sum is considerably simpler than its representation by formulas (76), (77) and (78) in the form of the polynomial in tree sums representing the coefficients a_n by formulas (59) and (47). But according to the criterion Cr'_3 , all these three representations in their complexity differ negligibly from each other.

According to the criteria Cr_1 , Cr_2 and Cr_3 , the representation of the limiting virial coefficient B_4 by the frame sum according to the formulas (99) and (100) is considerably more complicated than the representation of the coefficient a_4 by the tree sum according to the formulas (59) and (47).

The complexity of the representation of the limiting virial coefficient B_4 by the frame sum according to the criterion Cr_1 negligibly differ from the complexity of the representation of the limiting Mayer coefficient b_4 by the tree sum according to formulas (53) and (47).

However, according to the criteria Cr_2 and Cr_3 , this representation of the limiting virial coefficient B_4 is considerably more complicated than the above representation of limiting Mayer coefficient b_4 . Since the criteria Cr_2 and Cr_3 are more accurate, then, apparently, it should be assumed that the representation of the limiting virial coefficient B_4 by the frame sum is considerably more complicated than the above representation of limiting Mayer coefficient b_4 .

Further, according to the criteria Cr'_1 and Cr'_2 the representation of the limiting virial coefficient B_4 by the frame sum is considerably simpler than the representation of this coefficient by the formula (66) in the form of the polynomial in tree sums, representing the limiting Mayer coefficients b_n by the formulas (53) and (47). But according to the Cr'_3 criterion, the first of these two representations of the limiting virial coefficient B_4 is considerably more complicated than the second one. Since the criterion Cr'_3 is more accurate than the criteria Cr'_1 and Cr'_2 , then, apparently, it should be assumed that the given representation of the limiting virial coefficient B_4 by the frame sum is considerably more complicated than the representation of this limiting coefficient as a polynomial in tree sums representing coefficients b_n .

Finally, according to the criteria Cr_1 , Cr_2 and Cr_3 , the representation of the limiting virial coefficient B_4 by the frame sum according to the formulas (99) and (100) is considerably more complicated than its representation by the formulas (76), (77) and (78) as a polynomial in tree sums representing the coefficients a_n by formulas (59) and (47).

Acknowledgment. The author considers it his pleasant duty to express his deep thanks to prof. D.A. Kofke for a fast and efficient informational support and for fast and detailed answers to questions of interest to the author, to prof. G.A. Martynov for effective information support and useful discussion, to Dr. R. Hellman for a fast and efficient informational support, to Dr. N. Cleesby for quick and effective informational and organizational support and high appreciation of the author's works and to PhD in Physics and Mathematics V.I. Cebro for fast and effective information and technical support and helpful advices.

**Complexity tables of representations of Mayer coefficients b_n and coefficients a_n
by tree sums, representations of virial coefficients by frame sums and
Ree-Hoover representations of virial coefficients**

Table 1 of complexity by the criterion Cr_1

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr_1(L_{TR}(n))$	1	2	5	14	44	157	634	2852	14047
$Cr_1(L_{TR}(n,0))$	1	1	2	5	15	55	239	1169	6213
$Cr_1(L_F(n))$	1	1	5	57	-	-	-	-	-
$Cr_1(L_{RH}(n))$	1	1	2	5	23	171	2606	81564	4 980 756

Table 2 of complexity by the criterion Cr_2

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr_2(L_{TR}(n))$	1	5	22	93	403	1882	9671	54370	329325
$Cr_2(L_{TR}(n,0))$	1	3	11	42	172	804	4330	25930	166666
$Cr_2(L_F(n))$	1	3	26	-	-				
$Cr_2(L_{RH}(n))$	1	3	12	50	345	3591	72968	2936304	224134020

Table 3 of complexity by the criterion Cr_3

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr_3(L_{TR}(n))$	0	1	7	37	183	940	5233	31554	202902
$Cr_3(L_{TR}(n,0))$	0	1	5	22	97	474	2657	16578	110749
$Cr_3(L_F(n))$	0	1	11	-	-				

The tables use the following designations:

n is index of Mayer (virial) coefficient;

$L_{TR}(n)$ is the representation of Mayer coefficient $b_n(\Lambda)$ by tree sum, defined according to formulas (52) and (48), and the representation of the limiting Mayer coefficient b_n by tree sum, defined according to formulas (53) and (47);

$\Lambda \subseteq \mathbf{R}^\nu$ is the volume containing a particle system;

$L_{TR}(n,0)$ is the representation of the coefficient a_n by tree sum, defined according to formulas (59) and (47);

$L_F(n)$ is representation of the limiting virial coefficient B_n by the frame sum according to formulas (99) and (100);

$L_{RH}(n)$ is Ree-Hoover representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$.

Complexity tables of representations of virial coefficients: 1) representations by means of the Mayer coefficients b_n , presented by tree sums; 2) representations by means of the coefficients a_n , represented by tree sums; 3) representations by frame sums; 4) Ree-Hoover representation;

Table 4 of complexity by the criterion Cr'_1

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n))$	1	3	8	22	66	223	857	3709	17756
$Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n,0))$	1	2	4	9	24	79	318	1487	7700
$Cr'_1(L_F(n))$	1	1	5	57	-	-	-	-	-
$Cr'_1(L_{RH}(n))$	1	1	2	5	23	171	2606	81564	4 980 756

Table 5 of complexity by the criterion Cr'_2

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(n))$	1	6	28	121	524	2406	12077	66447	395772
$Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(n,0))$	1	4	15	57	229	1033	5363	31293	197959
$Cr'_2(L_F(n))$	1	3	26	-	-				
$Cr'_2(L_{RH}(n))$	1	3	12	50	345	3591	72968	2936304	224134020

Table 6 of complexity by the criterion Cr'_3

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr'_3(\mathfrak{L}_{TR}(n))$	0	1	8	45	228	1168	6401	37955	240857
$Cr'_3(\mathfrak{L}_{TR}(n,0))$	0	1	6	28	125	599	3256	19834	130583
$Cr'_3(L_F(n))$	0	1	11	-	-				

The tables use the following designations:

n is index of virial coefficient;

$\mathfrak{L}_{TR}(n)$ is the representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by Mayer formula (65) as a polynomial in all tree sums being representations of Mayer coefficients $b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)$ by formulas (52) and (48), and the representation of the limiting virial coefficient B_n by Mayer formula (65) as a polynomial in all tree sums that are representations of the limiting Mayer coefficients b_2, b_3, \dots, b_n by formulas (53) and (47);

$\mathfrak{L}_{TR}(n,0)$ is representation of the limiting virial coefficient B_n by formulas (79)–(84) as a polynomial in all tree sums that are representations of the coefficients a_2, a_3, \dots, a_n by formulas (59) and (47);

$\mathfrak{L}_F(n)$ is frame sum representation of the limiting virial coefficient B_n according to formulas (99) and (100);

$L_{RH}(n)$ is representation of the virial coefficient $B_n(\Lambda)$ by Ree-Hoover method;

Note. In Tables 1 and 4, the values of lengths of the base linear combinations that are Ree-Hoover representations of the virial coefficients B_n , were borrowed from the article [27]. Criterion values Cr_2 for Ree-Hoover representations of virial coefficients B_n were calculated based on the definition [46, 47, 48] of these representations and using length values of base linear combinations given in [27].

References

- [1] И.И. Иванчик. Метод ковариантного суммирования диаграмм в классической статистике. Дис. ... д — ра физ. — мат. наук. М., 1987.
- [2] Г.И. Калмыков, Полуупорядочение деревьев. — М.: ВИНТИ, 1988. — 10 с. — Деп. в ВИНТИ 12.02.88, № 2600–В88.
- [3] Г.И. Калмыков. О представлении коэффициентов разложения Майера и вириальных коэффициентов. // Теоретическая и математическая физика, 1990. т. 84, № 2, с. 279–289.
- [4] Г.И. Калмыков, Аналитическое продолжение разложений Майера и вириального разложения. // Теоретическая и математическая физика, 1992, т. 92, № 1, с. 139–149.
- [5] Г.И. Калмыков, О частичном упорядочении деревьев и классификации связных графов и блоков. // Дискретная математика, 1992, т. 4, вып. 2, с. 66–73.
- [6] Г.И. Калмыков, О представлении коэффициентов разложения в степенной ряд плотности распределения одной частицы в большом каноническом ансамбле. // Теоретическая и математическая физика, 1993, т. 97, № 3, с. 452–458.
- [7] Г.И. Калмыков, О плотности распределения одной частицы в большом каноническом ансамбле. // Теоретическая и математическая физика. — 1994. — т. 100, № 1. — с. 45–58.
- [8] Г.И. Калмыков, Разложение по степеням активности корреляционных функций большого канонического ансамбля. // Теоретическая и математическая физика, 1994, т. 101, № 1, с. 94–109.
- [9] Г.И. Калмыков, Об оценке радиуса сходимости майеровских разложений (случай неотрицательного потенциала). // Теоретическая и математическая физика. — 1998. т. 116, № 3. — с. 417–430.
- [10] Г.И. Калмыков, Метод древесных сумм и его приложение к решению математических проблем классической статистической механики. Дис. ... д — ра физ. — мат. наук. М., 1998, 175 с.
- [11] Г.И. Калмыков, О явлении асимптотической катастрофы майеровских рядов в классической статистической механики. // Теоретическая и математическая физика. 1999, т. 119, № 3, с. 475–497.
- [12] Г.И. Калмыков, Приложение метода древесных сумм к оценке радиуса сходимости майеровских разложений (случай неотрицательного потенциала). // В сб.: Проблемы теоретической кибернетики. Тезисы докладов XII Международной конференции (Нижегород, 17–22 мая 1999 г.). Часть I, с. 91, Москва, 1999.
- [13] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация графов // В сб.: Труды IV Международной конференции "Дискретные модели в теории управляющих систем", Красновидово, 2000 (19–25 июня 2000 г.). Под ред. В.Б. Алексеева, В.А. Захарова. М.: МАКС Пресс, 2000, с. 34.

- [14] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация помеченных блоков// В сб.: Материалы VII Международного семинара "Дискретная математика и ее приложения" (29 января–2 февраля 2001 г.). Часть II/ Под ред. О.Б. Лупанова. М.: Изд-во центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2001, с. 221.
- [15] Г.И. Калмыков, Представление вириальных коэффициентов, позволяющее избежать асимптотической катастрофы.// Теоретическая и математическая физика. – 2002. – т. 130, № 3. – с. 508–528.
- [16] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация редуцированных помеченных блоков// в сб.: Проблемы теоретической кибернетики. Тезисы докладов XIII Международной конференции (Казань, 27–31 мая 2002 г.). Часть I. Под общей редакцией чл.-корр. РАН О.Б. Лупанова. М.: Изд-во центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2002, с. 80.
- [17] Г.И. Калмыков, Древесная классификация помеченных графов. М.: Физматлит, 2003, 188 с.
- [18] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация помеченных блоков// В сб.: Труды V Международной конференции "Дискретные модели в теории управляющих систем", Ратмино, (26–29 мая 2003 г.). Под ред. В.Б. Алексеева, А.А. Сапоженко. М.: Издательский отдел факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова, 2003, с. 39–42.
- [19] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация помеченных графов. М.: Научный мир, 2006, 240 с.
- [20] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация редуцированных помеченных блоков. // Дискретная математика". – 2015. – т. 27, вып. 1, с. 59–72.
- [21] А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин, Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1976.
- [22] К. Куратовский, Топология, том 1, Издательство "Мир", Москва, 1966.
- [23] Дж. Майер, М. Гешперт-Майер, Статистическая механика. М.: Мир, 1980.
- [24] Д. Рюэль, Статистическая механика. Строгие результаты. – М.: Мир, 1971.
- [25] Ф.Харари, Теория графов. М.: Мир, 1973.
- [26] М. Холл, Комбинаторика. М.: Мир, 1970.
- [27] N. Clisby and B.M. McCoy, Ninth and Tenth Order Virial Coefficients for Hard Spheres in D Dimensions.// Journal of Statistical Physics. January 2006, Vol. 122, № 1, pp. 15–57.
- [28] Frank Harary, Graph Theory. Addison-Wesley publishing company, Reading, Massachusetts Menio Park, California, london, 1969.

- [29] Marshall, Ju. Hall, Combinatorial Theory. Blaisdell publishing company, Waltham (Massachusetts), Toronto, London, 1967.
- [30] I.I. Ivanchik, Generalized Mayer Series in Classical Statistical Mechanics. N.Y., US, Nova Science Publishers, Inc., 1993.
- [31] G.I. Kalmykov, Analytic continuation of Mayer and virial expansions. // — 1993. Translated from *Teoreticheskya i Matematicheskya Fizika*, Vol. 92, № 1, pp. 139–149. Plenum Publishing Corporation 0040-5779/92/9201-0791. pp. 791–798.
- [32] G.I. Kalmykov, Representation of the power-series coefficients for one-point correlation function in grand canonical ensemble. // — 1994. Translated from *Teoreticheskya i Matematicheskya Fizika*, V. 97, № 3, pp. 452–458. Plenum Publishing Corporation 0040-5779/93/9703-1405. pp. 1405–1408.
- [33] G.I. Kalmykov, One-particle distribution density in the grand canonical ensemble. // *Theoretical and Mathematical Physics*. 1994. Vol. 100, № 1. pp. 834–845.
- [34] G.I. Kalmykov, Expansion of the correlation functions of the grand canonical ensemble in powers of the activity. // *Theoretical and Mathematical Physics*. 1994, Vol. 101, № 1, pp. 1224–1234.
- [35] G.I. Kalmykov, Estimating the convergence radius of Mayer expansions: the nonnegative exponential case. // *Theoretical and Mathematical Physics*. — 1998. Vol. 116, № 3. pp. 1063–1073.
- [36] G.I. Kalmykov, Mayer-series asymptotic catastrophe in classical statistical mechanics. // *Theoretical and Mathematical Physics*. — 1999. Vol. 119, № 3. pp. 778–795.
- [37] G.I. Kalmykov, A representation of virial coefficients that avoid the asymptotical catastrophe. // *Theoretical and Mathematical Physics*. 2002, Vol. 130, № 3, pp. 432–457.
- [38] G.I. Kalmykov, Frame classification of the reduced labeled blocks // *Discrete Mathematics and Applications*. — 2016. Vol. 26, Issue 1, pp. 1–12.
- [39] G.I. Kalmykov, Representations of coefficients of power series in classical statistical mechanics. Their classification and complexity criteria. // <http://arxiv.org/abs/2007.02146> (in russian)
- [40] K. Kuratowski, Topology, volume 1, Academic Press, New York and London, Panstwowe Wydawnictwo, Warszawa, 1966.
- [41] E. Lieb, New Method in the theory of imperfect gases and liquids. // *Journal of Mathematical Physics*. — 1963. — Vol. 4, № 5. pp. 671–678.
- [42] J. E. Mayer, Statistical Mechanics of Condensing Systems // *Journ. Phys. Chem.* 1939. Vol. 43, pp. 71–95.
- [43] J. E. Mayer, 1942. Contribution to Statistical Mechanics. // *J. Chem. Phys.* V. 10, № 10, pp. 629–643 (1942); doi: 10.1063/1.1723631

- [44] J.E. Mayer and M. Geppert-Mayer, *Statistical Mechanics*, second edition. Wiley-Interscience Publishing, John Wiley and Sons, New York, London, Sydney, Toronto, 1977.
- [45] O. Penrose, The remainder in Mayer's fugacity series.// *Journal of Mathematical Physics*, 1963. Vol. 4, № 12. pp. 1488–1494.
- [46] Francis R. Ree and William G. Hoover. Fifth and Sixth Virial coefficients for Hard Spheres and Hard Disks.// *Journal of Chemical Physics*, 40:4, February 15, 1964, pp. 939–950.
- [47] Francis R. Ree and William G. Hoover. Seventh Virial coefficients for Hard Spheres and Hard Disks.// *Journal of Chemical Physics*, 46:11, June 01, 1967, pp. 4181–4197.
- [48] Francis R. Ree and William G. Hoover. Reformulation of the Virial Series for Classical Fluids.// *Journal of Chemical Physics*, 41:6, September 15, 1964, pp. 1635–1645.
- [49] David Ruelle, *Statistical Mechanics, Regorous Results*. W.A. Benjamin, inc. New York, Amsterdam, 1969.
- [50] Andrew J. Schultz and David A. Kofke. Sixth, seventh and eighth virial coefficients of the Lennard-Jones model.// *Molecular Physics*, Vol. 107, No. 21, 10 November 2009, pp. 2309–2318.
- [51] Andrew J. Schultz, Nathaniel S. Barlow, Vipin Chaudhary, David A. Kofke. Mayer Sampling Monte Carlo calculation of virial coefficients on graphics processors.// *Molecular Physics*, 2013, Vol. 111, № 4, pp. 535–543.

Russian version

Сложность представлений коэффициентов степенных рядов в классической статистической механике. Их классификация и критерии сложности.

Г.И. Калмыков

Аннотация

Декларировано, что целью упрощений представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики является упростить процесс получения оценок этих коэффициентов с помощью их упрощенных представлений.

Цель статьи: сформулировать критерии сложности (с вышеуказанной точки зрения) представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики и продемонстрировать их применение на примерах сравнения друг с другом представлений Ри-Гувера вириальных коэффициентов и представлений коэффициентов степенных рядов, основанных на концепции каркасной классификации помеченных графов.

Для решения этих задач введен ряд новых математических понятий (таких, как базовое произведение, базовый интеграл, базовая линейная комбинация, базовая линейная комбинация с коэффициентами незначительной сложности и базовое множество базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности) и предложена классификация представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики. В этой классификации наиболее важным классом является класс базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности. К нему относятся, в частности, представления вириальных коэффициентов по методу Ри-Гувера и представления майеровских коэффициентов разложений давления и плотности по степеням активности, основанные на концепции древесной классификации помеченных графов.

Сформулированы три критерия для оценки сравнительной сложности базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности и построены расширения всех этих критериев на совокупность базовых множеств базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности. Построенные критерии упорядочены по их точности.

Применение всех построенных критериев демонстрируется на примерах сравнения между собой представлений Ри-Гувера и таких представлений коэффициентов степенных рядов, которые построены на основе концепции каркасной классификации помеченных графов. Полученные результаты представлены в таблицах и прокомментированы.

1. В статье рассматриваются термодинамические равновесные однокомпонентные системы классических частиц, как заключенных в ограниченном множестве Λ ν -мерного

действительного евклидова пространства \mathbf{R}^ν так и заключенных в ν -мерном действительном евклидовом пространства \mathbf{R}^ν . Предполагается, что эти частицы взаимодействуют посредством центральных сил, характеризуемых потенциалом парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r} = (r^{(1)}, r^{(2)}, \dots, r^{(\nu)}) \in \mathbf{R}^\nu$. Также предполагается, что потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, а взаимодействие (парное взаимодействие) удовлетворяет условиям устойчивости [24, 17, 49] и регулярности [24, 17, 49]. Как обычно, обозначим майеровскую функцию

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

где $i \neq j$, $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \in \mathbf{R}^\nu$, $\beta = 1/kT$ — обратная температура, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Через \tilde{f}_{ij} обозначим **больцмановскую функцию** [24, 49], полагая

$$\tilde{f}_{ij} = 1 + f_{ij} = \exp\{-\beta\Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\}. \quad (2)$$

В случае, когда такая система частиц заключена в ограниченном множестве Λ , зависимость давления от плотности ϱ в этой системе может быть представлена в двух видах: в форме вириального разложения давления $p(\Lambda)$ по степеням плотности ϱ и в параметрическом виде, т.е. в виде двух уравнений, выражающих зависимость давления $p(\Lambda)$ и плотности $\varrho(\Lambda)$ от параметра z , называемого активностью [23, 24, 44, 49]. Вириальное разложение имеет вид:

$$p(\Lambda) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} B_n(\beta, (\Lambda)) \varrho^n. \quad (3)$$

Ниже мы будем для простоты опускать аргумент β коэффициентов $B_n((\beta, LL))$. В этом разложении коэффициенты $B_n(\Lambda)$ называются вириальными коэффициентами. Вириальный коэффициент $B_1(\Lambda)$ равен 1, а при $n > 1$ вириальные коэффициенты определяются формулой:

$$B_n(\Lambda) = -\frac{n-1}{|\Lambda|n!} \sum_{B \in \mathfrak{B}_n} \int_{(\Lambda^\nu)^n} \prod_{\{u,v\} \in X(B)} f_{uv}(d\mathbf{r})_n, \quad (4)$$

где $|\Lambda|$ — мера множества Λ , \mathfrak{B}_n — совокупность всех двусвязных n -вершинных помеченных графов (блоков) с множеством вершин $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$, $X(B)$ — совокупность всех ребер блока B , $(d\mathbf{r})_n = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n$, $d\mathbf{r}_i = dr_i^{(1)} dr_i^{(2)} \dots dr_i^{(\nu)}$.

Здесь и в дальнейшем изложении, следуя [25, 28], мы считаем, что всякий граф G по определению не имеет ни кратных ребер, ни петель.

Здесь и далее по тексту мы полагаем, что вершины ребер и графов помечены натуральными числами. Поэтому всюду в статье мы отождествляем вершины графов с их метками. Точно также мы отождествляем вершины, инцидентные ребрам, с их метками.

Эти представления вириальных коэффициентов были получены Д. Майером [23, 42–44]. Он же заметил, что при $n \geq 2$ вириальные коэффициенты $B_n(\Lambda)$ быстро стремятся к своему пределу B_n с ростом Λ , что дает возможность в качестве оценки предела коэффициента B_n использовать значение вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ при множестве Λ не очень большой меры.

Майер нашел и параметрическое представление зависимости давления $p(\Lambda)$ от плотности $\varrho(\Lambda)$:

$$p(\Lambda) = \beta^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta, \Lambda) z^n; \quad (5)$$

$$\varrho = \sum_{n=1}^{\infty} n b_n(\beta, \Lambda) z^n. \quad (6)$$

Ниже мы будем для простоты опускать аргумент β коэффициентов $b_n(\beta, \Lambda)$. В разложениях (5) и (6) по степеням активности z коэффициенты $b_n(\Lambda)$ называются, как и вириальные коэффициенты, майеровскими коэффициентами. В отличие от вириальных коэффициентов мы их будем называть майеровскими коэффициентами по степеням активности z . А в тех случаях, когда их смысл однозначно определяется контекстом, будем называть кратко майеровскими коэффициентами.

Майеровский коэффициент b_1 равен 1, а при $n > 1$ майеровские коэффициенты $b_n(\Lambda)$ определяются формулой:

$$b_n(\Lambda) = \frac{1}{|\Lambda|n!} \sum_{G \in \mathbf{G}_n} \int_{(\Lambda^V)^n} \prod_{\{u,v\} \in X(G)} f_{uv}(d\mathbf{r})_n, \quad (7)$$

где \mathbf{G}_n — совокупность всех связных n -вершинных помеченных графов с множеством вершин $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$, $X(G)$ — совокупность всех ребер графа G .

Однако впоследствии было замечено, что эти представления имеют весьма неприятное свойство, благодаря которому они практически непригодны как для вычисления вириальных коэффициентов (за исключением первых трех), так и для теоретического анализа поведения старших коэффициентов. Впервые на это свойство майеровских представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики обратил внимание И.И. Иванчик. В своих работах [1, 30] он впервые качественно описал это свойство и назвал его **асимптотической катастрофой**. Она проявляется в том, что при майеровском представлении коэффициентов степенного ряда значительная часть слагаемых в сумме интегралов, определяющей n -ый коэффициент ряда, с большой точностью взаимно сокращаются как величины противоположных знаков.

Сравнительно небольшой остаток, остающийся после такого взаимного уничтожения, является при $n \rightarrow \infty$ бесконечно малой величиной по сравнению с числом слагаемых в сумме, традиционно определяющей этот коэффициент. Этот "остаток представляющий основной интерес, даже при небольших n становится недоступным для непосредственного исследования.

В дальнейшем автор данной статьи в книге [17] дал строгое математическое определение асимптотической катастрофы. Для удобства читателей приведем здесь это определение.

О п р е д е л е н и е 1. В представлениях коэффициентов степенного ряда присутствует феномен асимптотической катастрофы, если при любом $B > 0$ число слагаемых в сумме, представляющей коэффициент при переменной в степени n , при $n \rightarrow \infty$ растет быстрее, чем величина $(n!)^2 B^n$. ■

Значение этого определения состоит в том, что оно дает возможность отделить те представления коэффициентов степенного ряда, где уже при сравнительно небольших n число слагаемых слишком велико, от представлений, в которых число слагаемых растет значительно медленнее.

При попытках вычисления коэффициентов майеровских разложений, исходя из таких их представлений, где присутствует феномен асимптотической катастрофы, практически неизбежно с ростом n происходит катастрофически быстрый рост ошибок вычислений этих коэффициентов.

В течение нескольких последних десятилетий усилия ряда ученых были направлены на упрощение представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики и их вычисление.

Целью упрощений представлений коэффициентов этих степенных рядов являлось упростить процесс получения оценок этих коэффициентов с помощью их упрощенных представлений. Для краткости сложность процесса получения оценки данного коэффициента с помощью данного его представления мы будем называть **сложностью данного представления этого коэффициента**.

Наиболее известными результатами в упрощении представлений вириальных коэффициентов, по-видимому, являются представления Ри-Гувера [46], [47], [48]. В этих представлениях при каждом $n \geq 4$ вириальный коэффициент $B_n(\Lambda)$ представляется линейной комбинацией сходящихся интегралов, маркированных полными помеченными графами, в которых каждое ребро помечено либо майеровской, либо больцмановской функциями. В каждом интеграле, являющемся членом такой линейной комбинации, подинтегральная функция является произведением майеровских и больцмановских функций. А множество всех майеровских и больцмановских функций, входящих в это произведение, находится во взаимно однозначном соответствии с множеством ребер графа, маркирующего этот интеграл. При этом каждому помеченному майеровской функцией ребру этого графа соответствует майеровская функция, являющаяся меткой этого ребра. А каждому ребру, помеченному больцмановской функцией, соответствует больцмановская функция, являющаяся меткой этого ребра. Таким образом, вириальный коэффициент $B_n(\Lambda)$ представляется линейной комбинацией интегралов, в каждом из которых подинтегральная функция является произведением майеровских и больцмановских функций, общим числом $n(n-1)/2$ функции. Эти представления мы будем называть **представлениями по методу Ри-Гувера**.

Используя представления Ри-Гувера вириальных коэффициентов, рядом ученых были вычислены [50] оценки значений вириальных коэффициентов B_n (при $n = 4, 8$) для ряда различных значений температур. Позднее, на графическом компьютере были вычислены [51] для потенциала Леннарда-Джонса оценки значений вириальных коэффициентов B_n при $n = 6, 9$ для различных значений температур. В том числе были уточнены ранее вычисленные оценки значений этих коэффициентов. Кроме того, при $n = 10, 16$ были вычислены оценки значений этих коэффициентов для нескольких (от одного до четырех) значений температур. Кстати, то, что при $n = 10, 16$ удалось найти оценку значения вириального коэффициента B_n не более чем при четырех различных значениях температур, указывает на то, что при $n > 9$ объем вычислений, необходимых для оценки одного из значений вириального коэффициента B_n по методу Ри-Гувера, так велик, что для этих вычислений требуется весьма значительное время даже при работе на современном компьютере с высокой производительностью. Однако, остается открытым вопрос: свободны ли представления Ри-Гувера от асимптотической катастрофы.

Иной подход к упрощению представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики разрабатывался автором данной статьи. Он основан на развиваемой автором концепции каркасной классификации помеченных графов [2–9, 13–20, 31–34, 37, 38, 39]. Мы будем его называть **методом каркасных сумм**. В рамках этого метода им были получены свободные от асимптотической катастрофы представления майеровских коэффициентов разложений давления и плотности по степеням активности, представления коэффициентов разложения m -частичной функции распределения в ряд по степеням активности, представления коэффициентов разложе-

ния отношения активности к плотности в ряд по степеням активности и представления вириальных коэффициентов [3, 4, 6–9, 15, 17, 31–34, 37, 39].

Достоинством этих представлений является то, что они свободны от асимптотической катастрофы [9, 11, 15, 17, 36, 37, 39]. Используя эти представления, удалось получить [9, 10, 12, 17, 35, 39] оценку сверху радиуса сходимости майеровских разложений по степеням активности (для неотрицательного потенциала). А также удалось, используя эти представления, на бытовом компьютере вычислить, довольно точно, оценки термодинамических пределов 4-ого, 5-ого и 6-ого вириальных коэффициентов при одном из значений температуры.

2. Целью статьи является: определить критерии для оценки сложности представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики; продемонстрировать их применение на примерах сравнения представлений Ри-Гувера вириальных коэффициентов и представлений коэффициентов степенных рядов, основанных на концепции каркасной классификации помеченных графов.

Очевидно, что даже для сравнения по сложности двух различных представлений данного коэффициента некоторого степенного ряда надо иметь критерий. Тем более необходим такого рода критерий, если поставлена задача сравнить по сложности данные представления коэффициентов при переменной в степени n двух различных степенных рядов.

Создание такого рода критериев облегчает то обстоятельство, что многие известные представления коэффициентов степенных рядов классической статистической механики являются линейными комбинациями многомерных интегралов, подынтегральные функции которых маркированы помеченными графами, в которых каждое ребро помечено либо майеровской, либо больцмановской функциями. В каждом интеграле, являющемся членом такой линейной комбинации, подынтегральная функция является произведением майеровских и больцмановских функций (таковы, например, предложенные Ри и Гувером [46, 47, 48] представления вириальных коэффициентов).

В статье [39] произведена классификация представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики. Наиболее важный класс этой классификации содержит полученные методом каркасных сумм представления в термодинамическом пределе вириальных коэффициентов и представления в термодинамическом пределе майеровских коэффициентов разложений давления и плотности по степеням активности. Эти представления являются линейными комбинациями многомерных интегралов, описанными в предыдущем абзаце.

Для оценки сравнительной сложности входящих в этот класс представлений коэффициентов степенных рядов в статье [39] впервые построены три критерия, упорядоченные по их точности. Там также построены критерии для сравнительной оценки сложности многочленов от линейных комбинаций, входящих в вышеупомянутый класс представлений коэффициентов степенных рядов классической статистической механики.

В предлагаемой вниманию читателя статье этот класс расширен так, что в это расширение входят многие известные представления коэффициентов степенных рядов, возникающих при исследовании термодинамических равновесных однокомпонентных систем классических частиц, как заключенных в ν -мерном действительном евклидовом пространстве \mathbf{R}^ν , так и заключенных в ограниченном множестве Λ , содержащемся в пространстве \mathbf{R}^ν . В этой статье введено понятие **сравнимых** линейных комбинаций, принадлежащих этому расширению и построены критерии для сравнительной оценки

сложности сравнимых линейных комбинаций. также предложены критерии для сравнительной оценки сложности многочленов от линейных комбинаций, входящих в это расширение.

Для описания этих критериев используются введенные в [39] математические понятия и некоторые свойства этих понятий. Для удобства читателей, все эти математические понятия и их свойства приведены в данной статье. В тех случаях, когда доказательства теорем и лемм, заимствованных из [39], были недостаточно четкими, или недостаточно подробными, они заменены четкими и детальными доказательствами со ссылками на источники и на использованные формулы.

Применение этих критериев продемонстрировано на примерах оценки сравнительной сложности представлений Ри-Гувера вириальных коэффициентов и представлений коэффициентов степенных рядов, основанных на концепции каркасной классификации помеченных графов.

3. Прежде, чем перейти к описанию предлагаемой классификации и предлагаемых критериев сложности представлений коэффициентов степенных рядов, дадим определения математических понятий, необходимых для их описания, и остановимся на некоторых свойствах этих понятий.

Прежде всего мы несколько расширим понятие ребра помеченного графа, введя следующее

О п р е д е л е н и е 2. Неупорядоченная пара $\{i, j\}$ различных натуральных чисел называется **ребром**. ■

В данной статье мы будем рассматривать только множества попарно различных ребер, не оговаривая это обстоятельство.

О п р е д е л е н и е 3. Будем говорить, что множество ребер $X_f = \{\{i, j\}\}$ **определяет** множество $F = \{f_{ij}\}$ майеровских функций, если майеровская функция f_{ij} входит во множество F тогда и только тогда, когда ребро $\{i, j\}$ принадлежит множеству X_f . При этом множество ребер X_f будем называть **множеством майеровских ребер по отношению к этому множеству F майеровских функций**. ■

О п р е д е л е н и е 4. Будем также говорить, что множество ребер $X_{\tilde{f}} = \{\{i', j'\}\}$ **определяет** множество $\tilde{F} = \{\tilde{f}_{i'j'}\}$ больцмановских функций, если больцмановская функция $\tilde{f}_{i'j'} = f_{i'j'} + 1$ содержится во множество \tilde{F} тогда и только тогда, когда ребро $\{i', j'\}$ принадлежит множеству $X_{\tilde{f}}$. При этом множество $X_{\tilde{f}}$ будем называть **множеством больцмановских ребер по отношению к этому множеству \tilde{F} больцмановских функций**. ■

Введем обозначения:

$$P(F, \tilde{F}) = \prod_{f_{ij} \in F} \prod_{\tilde{f}_{i'j'} \in \tilde{F}} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'} \quad (8)$$

— произведение всех майеровских функций, принадлежащих множеству майеровских функций F , и всех больцмановских функций, принадлежащих множеству больцмановских функций \tilde{F} . Очевидно, что произведение $P(F, \tilde{F})$ является функцией множеств F и \tilde{F} . Для краткости письма мы будем опускать аргументы F и \tilde{F} произведения P . А произведение P будем называть **произведением майеровских и больцмановских функций**.

$\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$ — упорядоченная пара непересекающихся множеств: множества ребер $X_f = \{\{i, j\}\}$ и множества ребер $X_{\tilde{f}} = \{\{i', j'\}\}$.

$V(X_f)$ — множество концов (вершин) всех ребер из множества X_f .

$V(X_{\tilde{f}})$ — множество концов (вершин) всех ребер из множества $X_{\tilde{f}}$.

$|V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}})|$ — мощность суммы множеств $V(X_f)$ и $V(X_{\tilde{f}})$.

Ниже мы будем рассматривать и такие упорядоченные пары $\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$ непересекающихся множеств, в которых второе множество является пустым множеством, то есть пары, имеющие вид $\mathbf{X} = \{X_f, \emptyset\}$.

О п р е д е л е н и е 5. Если множества ребер X_f и $X_{\tilde{f}}$ не пересекаются и удовлетворяют условию

$$V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}}) = V_n = \{1, 2, \dots, n\}, \quad (9)$$

где

$$n = |V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}})|, \quad (10)$$

то упорядоченную пару $\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$ этих множеств будем называть **канонической парой множеств**, а число n — **порядком** этой канонической пары множеств. В канонической паре множеств $\mathbf{X} = \{X_f, X_{\tilde{f}}\}$ первое множество X_f будем называть **множеством майеровских ребер**, а второе множество $X_{\tilde{f}}$ — **множеством больцмановских ребер**. ■

Через $\mathfrak{X}_n = \{\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})\}$ обозначим совокупность всех канонических пар множеств порядка n . Заметим, что в паре $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$, входящей в совокупность \mathfrak{X}_n , множество больцмановских ребер $X_{\tilde{f}}$ может быть и пустым.

Каждой канонической паре множеств $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ порядка n поставим в соответствие произведение майеровских и больцмановских функций $P_n(\mathbf{X})$, определенное формулой

$$P_n(\mathbf{X}) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(\mathbf{X})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\tilde{f}}(\mathbf{X})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (11)$$

Очевидно, что произведение майеровских и больцмановских функций $P_n(\mathbf{X})$ является сужением на множество \mathfrak{X}_n функции $P(F, \tilde{F})$, определенной формулой (8).

О п р е д е л е н и е 6. Будем говорить, что каноническая пара множеств $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ порядка n **определяет** произведение функций $P_n(\mathbf{X})$ и называть это произведение функций **каноническим произведением**, а число n — **порядком** этого произведения. ■

Через $\mathfrak{P}_n = \{P: P = P_n(\mathbf{X}), \mathbf{X} \in \mathfrak{X}_n\}$ обозначим множество всех канонических произведений, определенных каноническими парами множеств из совокупности \mathfrak{X}_n .

Из определения совокупности \mathfrak{X}_n , определения множества \mathfrak{P}_n и определения произведения $P_n(\mathbf{X})$ формулой (11) следует, что соотношение

$$P = P_n(\mathbf{X}) \quad (12)$$

между элементами $\mathbf{X} \in \mathfrak{X}_n$ и $P \in \mathfrak{P}_n$ является отображением совокупности $\mathfrak{X}_n = \{\mathbf{X}\}$ на множество $\mathfrak{P}_n = \{P\}$.

Заметим, что так определенное отображение $P_n: \mathfrak{X}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$ является взаимно однозначным отображением совокупности \mathfrak{X}_n на множество \mathfrak{P}_n . Так как каждое произведение функций P из множества \mathfrak{P}_n при отображении P_n имеет, и при том единственный, прообраз $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ в совокупности \mathfrak{X}_n , то этот прообраз можно принять за метку этого произведения и считать это произведение помеченным канонической парой множеств $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$. При этом всякая каноническая пара множеств $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ из

совокупности \mathfrak{X}_n окажется меткой канонического произведения функций, которое входит во множество \mathfrak{P}_n и однозначно определяется этой парой множеств по формулам (12) и (11). Ниже будут изложены и другие способы пометки канонических произведений функций, нашедшие свое приложение в данной статье.

Обозначим через $\mathfrak{G}_n = \{G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})\}$ множество всех помеченных графов с множеством вершин $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$ и множеством ребер X , являющимся объединением двух непересекающихся множеств: множества $X_f = \{\{i, j\}\}$ и множества $X_{\bar{f}} = \{\{i', j'\}\}$, — образующих каноническую пару множеств $(X_f, X_{\bar{f}}) \in \mathfrak{X}_n$.

Для графов, принадлежащих множеству $\mathfrak{G}_n = \{G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})\}$, введем обозначения: $X_f(G) = X_f$, $X_{\bar{f}}(G) = X_{\bar{f}}$, где $G = G(V_n; X_f, X_{\bar{f}}) \in \mathfrak{G}_n$. Множество ребер $X_f(G)$ будем называть **множеством майеровских ребер графа** $G \in \mathfrak{G}_n$, а множество $X_{\bar{f}}(G)$ — **множеством больцмановских ребер графа** $G \in \mathfrak{G}_n$.

Определим отображение A_n множества \mathfrak{G}_n на множество \mathfrak{X}_n , полагая

$$A_n(G) = (X_f(G), X_{\bar{f}}(G)), \quad (13)$$

где $G \in \mathfrak{G}_n$. Отображение A_n , определенное формулой (13) является взаимно однозначным отображением множества \mathfrak{G}_n на множество \mathfrak{X}_n .

Напомним, что отображение P_n , определенное формулами (11) и (12), является отображением множества \mathfrak{X}_n на множество \mathfrak{P}_n . Значит, существует композиция отображений $P_n \circ A_n$, являющееся отображением множества \mathfrak{G}_n на множество \mathfrak{P}_n .

Так как отображения A_n и P_n — взаимно однозначные отображения, то и их композиция $P_n \circ A_n$ также является [22, 40] взаимно однозначным отображением.

Замечание 1. Каждое произведение функций P из множества \mathfrak{P}_n при отображении $P_n \circ A_n$ имеет, и при том единственный, прообраз во множестве \mathfrak{G}_n . Значит, этот прообраз можно принять за граф-метку этого произведения и считать это произведение помеченным.

При этом всякий граф $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ из множества \mathfrak{G}_n окажется меткой произведения функций, которое мы обозначим $P_{1n}(G)$. Это произведение входит во множество \mathfrak{P}_n и однозначно определяется этим графом по формуле

$$P_{1n}(G) = (P_n \circ A_n)(G) = P_n(A_n(G)) = P_n((X_f(G), X_{\bar{f}}(G))) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(G)} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\bar{f}}(G)} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (14)$$

Так как произведение $P_{1n}(G)$ входит во множество \mathfrak{P}_n , то из определения этого множества следует, что произведение $P_{1n}(G)$ является каноническим.

Опираясь на замечание 1, сформулируем следующее

Определение 7. Если граф $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ принадлежит множеству \mathfrak{G}_n , то каноническое произведение функций $P_{1n}(G)$, определенное формулой (14) будем называть **произведением, помеченным графом** $G = G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$, а граф $G = G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ — **графом-меткой** этого произведения функций. ■

Обозначим $R(G) = (V_n; X_f)$ граф с множеством вершин V_n и множеством ребер X_f , являющийся подграфом графа $G = G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$, принадлежащего множеству графов \mathfrak{G}_n . Множеством ребер графа $R(G)$ по определению является множество $X_f(G)$ майеровских ребер графа G . Это множество ребер определяет множество майеровских функций, входящих в произведение функций $P_{1n}(G)$. Но граф $R(G)$ по определению не

содержит, в отличие от графа G , множества $X_{\bar{f}}(G)$ больцмановских ребер, определяющего множество больцмановских функций, входящих в произведение функций $P_{1n}(G)$. Поэтому будем называть подграф $R(G)$ графа G **недостаточной меткой** произведения функций $P_{1n}(G)$, помеченного графом G .

Определение 8. Произведение функций $P \in \mathfrak{P}_n$ будем называть **базовым произведением порядка n** , если его граф-метка $G \in \mathfrak{G}_n$ удовлетворяет условию: подграф $R(G)$ графа G является связным графом. Если же подграф $R(G)$ графа G не является связным, то произведение функций P будем называть **псевдобазовым произведением**. ■

Введем обозначения: $\mathfrak{P}_{bn} = \{P\}$ — множество всех базовых произведений, принадлежащих множеству \mathfrak{P}_n ; \mathfrak{G}_{bn} — множество всех графов, являющихся графами-метками базовых произведений, принадлежащих множеству \mathfrak{P}_{bn} .

Из определений 7 и 8 и замечания 1 вытекает

Следствие 1. Множества \mathfrak{P}_{bn} и \mathfrak{G}_{bn} находятся во взаимно однозначном соответствии.

Лемма 1. Если граф-метка G принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} , то, во-первых, каждое ребро из множества $X_{\bar{f}}(G)$ соединяет две несмежные вершины графа $R(G)$ и, во-вторых, помеченное графом G каноническое произведение $P_{1n}(G)$ является функцией n переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$.

Доказательство. Так как любое ребро из множества $X_{\bar{f}}(G)$ принадлежит графу G по определению этого графа, то обе инцидентные ему вершины принадлежат множеству V_n . Следовательно, эти вершины принадлежат графу $R(G)$ по его определению. Из условий леммы по определению 8 следует, что граф G принадлежит множеству \mathfrak{G}_n . Отсюда по определению этого множества следует, что множества $X_{\bar{f}}$ и X_f не имеют общих ребер и образуют каноническую пару порядка n . Это означает, что множество X_f не содержит ребра, соединяющего две вершины, инцидентные какому-нибудь ребру из множества $X_{\bar{f}}(G)$. Значит, каждое ребро из множества $X_{\bar{f}}$ соединяет две несмежные вершины графа $R(G)$. Первое утверждение леммы доказано.

Докажем теперь второе утверждение леммы. Пусть i — вершина, принадлежащая множеству V_n . Так как подграф $R(G) = (V_n; X_f)$ графа G является связным, то во множестве ребер $X_f(G)$ существует ребро, соединяющее вершину i с некоей вершиной $j \in V_n$. Отсюда по определению произведения $P_{1n}(G)$ формулой (14) следует, что майеровская функция f_{ij} входит в это произведение. А так как майеровская функция f_{ij} является по определению функцией переменных \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j , то эти переменные входят в число переменных произведения функций $P_{1n}(G)$. Таким образом, при любом $i \in V_n$ переменная \mathbf{r}_i входит в число переменных функции, являющейся произведением функций $P_{1n}(G)$.

С другой стороны, если $i \notin V_n$, то i не является вершиной графа G и не может быть вершиной, инцидентной какому-либо ребру этого графа. Поэтому из определения произведения $P_{1n}(G)$ следует, что переменная \mathbf{r}_i не является переменной какой-либо из функций, входящих в это произведение. Из полученных результатов следует второе утверждение леммы. ►

Из леммы 1 вытекает следующее

Следствие 2. Базовое произведение $P \in \mathfrak{P}_n$ является функцией n переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$, где n — число вершин графа-метки G .

Определение 9. Если подынтегральной функцией интеграла является базовое произведение $P \in \mathfrak{P}_{bn}$ порядка n , а область интегрирования этого интеграла является

либо действительным пространством $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, либо связным ограниченным измеримым по Лебегу множеством, содержащимся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$, то этот интеграл будем называть **базовым интегралом**, а число n — его **порядком**. ■

Пусть $G \in \mathfrak{G}_{bn}$, а U — связное, ограниченное и измеримое по Лебегу множество, содержащееся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$. Введем обозначения:

$$I(G, U) = \int_U P_{1n}(G)(d\mathbf{r})_n; \quad (15)$$

$$I(G) = I(P_{1n}(G)) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} P_{1n}(G)(d\mathbf{r})_{1,n-1}, \quad (16)$$

где $(d\mathbf{r})_{1,n-1} = d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_n$.

Теорема 1. Если потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности, а граф G принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} , то верны следующие утверждения:

A_1) функция $P_{1n}(G)$ интегрируема по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, а интеграл $I(G)$ сходится и не зависит от значения переменной \mathbf{r}_1 ;

A_2) функция $P_{1n}(G)$ интегрируема на любом связном ограниченном измеримом по Лебегу множестве U , содержащемся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$, а интеграл $I(G, U)$ сходится.

Доказательство. Заметим прежде всего, что регулярность парного взаимодействия означает, что майеровская функция $f(\mathbf{r})$ при некотором $C > 0$ удовлетворяет неравенству

$$\int_{\mathbf{R}^\nu} |f(\mathbf{r})| d\mathbf{r} < C. \quad (17)$$

Напомним, что в статье рассматриваются только системы частиц с парным взаимодействием. В таких системах взаимодействие устойчиво в том и только в том случае, если существует такое число $B \geq 0$, что при всех $n > 1$ имеет место неравенство

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) > -nB. \quad (18)$$

В частности, при $n = 2$ имеет место неравенство

$$\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) > -2B. \quad (19)$$

Следовательно, больцмановская функция $\tilde{f}(\mathbf{r})$ удовлетворяет неравенству

$$\tilde{f}(\mathbf{r}) < \exp(2\beta B). \quad (20)$$

Отсюда следует, что майеровская функция $f(\mathbf{r})$ при некотором $D \geq 1$ удовлетворяет неравенству

$$|f(\mathbf{r})| < D. \quad (21)$$

Из определения функции $P_{1n}(G)$ формулой (14) и из неравенств (20) и (21) следует, что функция $P_{1n}(G)$ при некотором $E > 0$ удовлетворяет неравенству

$$|P_{1n}(G)| < E. \quad (22)$$

при всех $(\mathbf{r})_n \in (\mathbf{R}^\nu)^n$.

Так как потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, а больцмановская функция \tilde{f} по ее определению является непрерывной функцией этого потенциала Φ , то, по свойствам измеримых функций [21], больцмановская функция \tilde{f} также является измеримой. Отсюда по свойствам измеримых функций [21] следует, что майеровская функция $f(\mathbf{r})$ измерима.

Функция $P_{1n}(G)$ по лемме 1 является функцией n переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$. А по ее определению формулой (14) эта функция является произведением конечного числа функций, которые, как мы уже установили, являются измеримыми.

Итак, функция $P_{1n}(G)$ является произведением конечного числа измеримых функций и определена в действительном пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$. Отсюда по свойствам измеримых функций следует, что функция $P_{1n}(G)$ — измеримая функция в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$. Отсюда и из неравенства (22) по свойствам интегрируемых функций следует, что функция $P_{1n}(G)$ интегрируема на любом связном ограниченном измеримом по Лебегу множестве U , содержащемся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$, а интеграл $I(G, U)$ сходится.

Из условий теоремы вытекает, что граф $R(G)$ является связным. Поэтому существует дерево $t(G)$, которое является подграфом графа $R(G)$. Поэтому подынтегральную функцию $P_{1n}(G)$ интеграла $I(G)$ можно представить следующим образом

$$P_{1n}(G) = \Omega(\mathbf{r})_n \prod_{\{i,j\} \in X(t(G))} y(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (23)$$

где

$$\Omega(\mathbf{r})_n = \prod_{\{ij\} \in [X_f(G) \setminus X(t(G))]} f_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \prod_{\{i'j'\} \in X_{\tilde{f}}(t(G))} \tilde{f}_{i'j'}(\mathbf{r}_{i'} - \mathbf{r}_{j'}), \quad (24)$$

$$y(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}). \quad (25)$$

Из неравенств (17) и (21) и из определения (25) функции $y(\mathbf{r})$ следует, что функция $y(\mathbf{r})$ также, как майеровская функция, удовлетворяет неравенствам

$$\int_{\mathbf{R}^\nu} |y(\mathbf{r})| d\mathbf{r} < C. \quad (26)$$

и

$$|y(\mathbf{r})| < D. \quad (27)$$

Из определения функции Ω формулой (24) и из неравенств (20) и (21) следует, что функция $\Omega(\mathbf{r})_n$ при некотором $E' > 0$ удовлетворяет неравенству

$$|\Omega(\mathbf{r})_n| < E'. \quad (28)$$

Так как майеровская функция $f(\mathbf{r})$ является измеримой, то по свойствам измеримых функций [21] следует, что функция $y(\mathbf{r})$, определенная формулой (25) также измерима в пространстве \mathbf{R}^ν .

Функция $\Omega(\mathbf{r})_n$, определенная формулой (24), является произведением конечного числа функций, которые, как мы уже установили, являются измеримыми в области своего определения. Отсюда по свойствам измеримых функций [21] следует, что функция $\Omega(\mathbf{r})_n$ измерима в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$. Из определения функции $\Omega(\mathbf{r})_n$ формулой (24) следует, эта функция является трансляционно-инвариантной [17], [24], [49].

Итак, подынтегральная функция $P_{1n}(G)$ интеграла $I(G)$ представляется формулой (23), где измеримая функция $y(\mathbf{r})$ удовлетворяет неравенствам (26) и (27), а измеримая функция $\Omega(\mathbf{r})_n$ удовлетворяет неравенству (28) и является трансляционно-инвариантной. Отсюда по теореме 3 из главы III книги [17] следует, что функция $P_{1n}(G)$, представленная формулой (24), интегрируема по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, а несобственный интеграл $I(G)$ сходится и не зависит от значения переменной \mathbf{r}_1 . Теорема 1 доказана. ►

Замечание 2. Так как в статье рассматриваются только системы частиц, удовлетворяющие условиям теоремы 1, то всякий несобственный интеграл $I(G)$ по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, помеченный графом $G \in \mathfrak{G}_{bn}$, и всякий помеченный графом $G \in \mathfrak{G}_{bn}$ интеграл вида $I(G, U)$ по любому связному ограниченному измеримому по Лебегу множеству U , содержащемуся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$, удовлетворяют условиям теоремы 1 и являются по теореме 1 сходящимися. ■

Определение 10. Интеграл от псевдобазового произведения функций будем называть **псевдобазовым интегралом**. ■

Определение 11. Линейная комбинация L сходящихся базовых интегралов порядка n , в которой все интегралы имеют одну и ту же область интегрирования $U(L)$, а коэффициент при каждом из входящих в нее интегралов является действительным числом и определяется графом-меткой подынтегральной функции этого интеграла, называется **базовой линейной комбинацией**, число n называется ее **порядком**, а область интегрирования $U(L)$ — множеством, **ассоциированным** с данной линейной комбинацией L . ■

Замечание 3. Из определения 11 вытекает, что любой базовый интеграл данной базовой линейной комбинации L полностью определяется множеством, ассоциированным с данной линейной комбинацией и его подынтегральной функцией, которая, будучи базовым произведением $P \in \mathfrak{P}_{bn}$, определяется графом-меткой $G \in \mathfrak{G}_{bn}$ этого базового произведения. Следовательно, любой базовый интеграл данной базовой линейной комбинации полностью определяется множеством, ассоциированным с данной линейной комбинацией и графом-меткой G базового произведения, являющегося его подынтегральной функцией. ■

Определение 12. Линейная комбинация интегралов от произведений майеровских и больцмановских функций, в которой хотя бы один интеграл не является базовым, называется **псевдобазовой линейной комбинацией**. ■

Пример 1 Рассмотрим представление Ри-Гувера [48] вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ при $n \geq 2$. Выше было указано, что это представление является линейной комбинацией интегралов. В каждом из этих интегралов подынтегральная функция является произведением майеровских и больцмановских функций. Из определения представления Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ следует, что каждый из этих интегралов (в смысле Ри-Гувера [48]) неким полным графом $G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$.

При этом множество ребер X_f по определению 3 определяет множество $F = \{f_{ij}\}$ майеровских функций, входящих множителями в подынтегральную функцию интеграла, помеченного графом $G(V_n; X_f, X_{\tilde{f}})$. А множество ребер $X_{\tilde{f}}$ по определению 4 определяет множество $\tilde{F} = \{\tilde{f}_{i'j'}\}$ больцмановских функций, входящих множителями в эту подынтегральную функцию.

Из определения представления Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ следует, что множества X_f и $X_{\tilde{f}}$ графа G не пересекаются и образуют каноническую пару множеств $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ порядка n . Отсюда следуют два вывода: 1) по определению

6) подынтегральная функция интеграла, помеченного (в смысле Ри-Гувера) графом G , является каноническим произведением $P_n(\mathbf{X})$ порядка n , определенным по формуле (11) канонической парой множеств $(\mathbf{X}) = ((X_f, X_{\bar{f}}))$; 2) граф $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ принадлежит множеству \mathfrak{G}_n по определению этого множества.

Из вывода 2) по определению 7, следует, что граф $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ является графом-меткой произведения функций $P_{1n}(G)$, которое является произведением, помеченным этим графом, однозначно определяется этим графом по формуле (14) и принадлежит, по замечанию 1, множеству \mathfrak{P}_n .

Из определения произведения функций $P_{1n}(G)$ формулой (14) следует, что это произведение есть каноническое произведение $P(X_f, X_{\bar{f}})$ порядка n , являющееся подынтегральной функцией интеграла, помеченного (в смысле Ри-Гувера) графом G . Так как при этом подграф $R(G)$ графа $G(V_n; X_f, X_{\bar{f}})$ является, как известно [48], двусвязным графом, то по определению 8 эта подынтегральная функция является базовым произведением порядка n . Это базовое произведение принадлежит множеству \mathfrak{B}_{bn} по определению этого множества. А граф-метка G этого базового произведения принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} по определению этого множества.

Итак, подынтегральная функция любого интеграла, входящего в представление Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$, является базовым произведением, помеченным полным графом, маркирующим этот интеграл, и определяется формулой (14), где G — принадлежащий множеству \mathfrak{G}_{bn} граф, которым помечен (в смысле Ри-Гувера) этот интеграл. Из формулы (14) следует, что число майеровских и больцмановских функций, входящих в каноническое произведение, помеченное полным графом с n вершинами, равно числу $n(n-1)/2$ ребер этого графа.

В статье [48] Ри и Гувер рассматривали системы частиц, заключенных в ограниченном объеме Λ , и получили представления вириальных коэффициентов $B_n(\Lambda)$ для случая ограниченного объема Λ в виде линейной комбинации интегралов, в которой все интегралы имеют одну и ту же область интегрирования Λ^n . Можно считать, что представления Ри-Гувера являются линейными комбинациями интегралов, в каждой из которых все интегралы имеют одну и ту же область интегрирования, полностью определяемую этой линейной комбинацией.

Далее по тексту мы будем полагать, что множество Λ^n является связным, ограниченным и измеримым по Лебегу. Так как при этом подынтегральная функция каждого интеграла этой линейной комбинации является базовым произведением порядка n , то, по определению 9, каждый интеграл в линейной комбинации, являющейся представлением Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$, является базовым интегралом порядка n .

Итак, при указанных выше условиях представление Ри-Гувера [48] вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ обладает следующими свойствами: 1) это представление является линейной комбинацией интегралов, областью интегрирования которых является связное ограниченное и измеримое по Лебегу множество, содержащееся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$; 2) подынтегральная функция каждого интеграла этой линейной комбинации является базовым произведением, граф-метка которого принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} .

В данной статье рассматриваются только термодинамические равновесные однокомпонентные системы классических частиц с парным взаимодействием [24, 49]. При этом предполагается, что парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности, а парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией.

При этих ограничениях и при $n \geq 2$, подынтегральные функции всех интегралов,

входящих в представление Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$, по теореме 1 являются интегрируемыми на любом связном, ограниченном и измеримом по Лебегу множестве U , содержащемся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$, а все эти интегралы сходятся.

Итак, в случае, когда системы частиц, заключенных в ограниченном объеме, удовлетворяют перечисленным выше в этом примере условиям, представление Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ при $n \geq 2$ является линейной комбинацией сходящихся базовых интегралов.

Как известно [48], в линейной комбинации интегралов, являющейся представлением Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$, коэффициент при каждом входящем в нее интеграле является действительным числом и определяется графом, которым помечен (в смысле Ри-Гувера) этот интеграл. Исходя из этого факта и из того, что все входящие в эту линейную комбинацию интегралы являются сходящимися базовыми интегралами порядка n , имеющими одну и ту же область интегрирования, приходим к выводу: эта линейная комбинация является, по определению 11, базовой порядка n . Итак, в рассматриваемых в данном примере случаях представление Ри-Гувера вириального коэффициента B_n при $n \geq 2$ является базовой линейной комбинацией порядка n .

По замечанию 3, каждый интеграл в этой линейной комбинации полностью определяется его подынтегральной функцией и множеством, ассоциированным с данной линейной комбинацией. Выше было установлено, что эта подынтегральная функция является базовым произведением порядка n , принадлежащим множеству $\mathfrak{P}_{bn} \subset \mathfrak{P}_n$ и помеченным графом-меткой G , принадлежащим множеству \mathfrak{G}_{bn} . По следствию 1 это базовое произведение однозначно определяется его графом-меткой $G \in \mathfrak{G}_{bn}$. Поэтому каждый интеграл в этой линейной комбинации полностью определяется множеством, ассоциированным с данной линейной комбинацией, и графом-меткой базового произведения, являющегося подынтегральной функцией этого интеграла. ►

Введем обозначения:

$\mathfrak{G}(L)$ — множество всех графов, служащих графами-метками таких базовых произведений, которые являются подынтегральными функциями интегралов, входящих в базовую линейную комбинацию L ;

$$R(\mathfrak{G}(L)) = \{R(G) : G \in \mathfrak{G}(L)\}. \quad (29)$$

Определение 13. Если L — базовая линейная комбинация, то множество графов $\mathfrak{G}(L)$ будем называть **множеством графов-меток** этой базовой линейной комбинации, а число входящих в нее интегралов будем называть **длиной** этой линейной комбинации и обозначать $q(L)$. ■

Часто встречаются случаи, когда для маркировки канонического произведения функций $P \in \mathfrak{P}_n$ проще использовать не граф-метку такого произведения функций, а другие графы. Например, граф $\tilde{G} = \tilde{G}(V_n, X_f)$, где X_f — множество майеровских ребер по отношению к множеству F всех майеровских функций, входящих в данное каноническое произведение функций $P \in \mathfrak{P}_n$.

Граф $\tilde{G}(V_n, X_f)$ дает возможность непосредственно определить только майеровские функции, входящие в произведение функций $P(X_f, X_{\tilde{f}})$. Для определения же больцмановских функций, входящих в это произведение, в ряде случаев предпочтительнее, в обход определения графа-метки этого произведения, прямо указать множество $X_{\tilde{f}}$ больцмановских ребер по отношению к множеству \tilde{F} всех больцмановских функций,

входящих в данное каноническое произведение функций $P \in \mathfrak{P}_n$, или же указать конструктивный метод построения этого множества. Это дает возможность непосредственно определить больцмановские функции, входящие в помеченное графом \tilde{G} произведение функций. Множество $X_{\tilde{f}}$ дополняет множество ребер графа \tilde{G} до множества ребер графа-метки этого произведения. Назовем это множество **дополняющим множеством, поставленным в соответствие графу \tilde{G}** , и обозначим $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, полагая $X_{\text{ad}}(\tilde{G}) = X_{\tilde{f}}$. Для краткости множество $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$ будем называть **дополняющим множеством**.

Обозначим $\tilde{\mathfrak{G}}_n = \{\tilde{G}\}$, где $n \geq 3$, конечное множество попарно различных связанных помеченных графов с множеством вершин V_n , каждому из которых поставлено в соответствие дополняющее множество $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, которое не пересекается с множеством $X_f(\tilde{G})$ майеровских ребер и образует с ним каноническую пару $(X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})) \in \mathfrak{X}_n$.

Определение 14. Графы из множества $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ будем называть **укомплектованными**. ■

Введем обозначения:

$$\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) = \{(X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})) : \tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n\}$$

$\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) = P_n(\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n))$ — образ множества канонических пар $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \subset \mathfrak{X}_n$ при отображении $P_n : \mathfrak{X}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$;

$$P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} = P_n|_{\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)} — \text{сужение отображения } P_n \text{ на подмножество } \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \subset \mathfrak{X}_n.$$

По определению отображение $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ является взаимно однозначным отображением множества $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ на множество $\mathfrak{P}_n(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$.

Определим отображение $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ множества $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ на множество $\mathfrak{X}_n(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$, полагая

$$A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) = (X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})), \quad \tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n. \quad (30)$$

Отображение $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$, определенное формулой (30) является взаимно однозначным отображением множества $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ на множество $\mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$.

Замечание 4. Так как область определения отображения $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ совпадает с областью значений отображения $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$, то композиция отображений $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ существует и является отображением множества $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ на множество $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$.

Так как отображения $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ и $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ — взаимно однозначные, то их композиция $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ является [22, 40] взаимно однозначным отображением множества $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ на множество $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$. ■

Из замечания 4 вытекает

Следствие 3. Каждое произведение функций P из множества $\mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ при отображении $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ имеет, и при том единственный, прообраз во множестве $\tilde{\mathfrak{G}}_n$. Значит, этот прообраз является графом, который можно принять за метку этого произведения и считать это произведение помеченным этим графом. При этом всякий граф \tilde{G} из множества $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ окажется меткой произведения функций, которое является образом этого графа при отображении $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$.

Образ графа $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ при отображении $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$ обозначим $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$.

Опираясь на замечание 4 и следствие 3, сформулируем следующее

Определение 15. Произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(G)$, являющееся по определению образом графа $\tilde{G}(V_n, X_f) \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ при отображении $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$, будем называть **произведением, помеченным графом $\tilde{G} = \tilde{G}(V_n, X_f)$** , а граф $\tilde{G}(V_n, X_f)$ — **укомплектованным графом-меткой** этого произведения. ■

Лемма 2. Если граф $\tilde{G}(V_n, X_f)$ принадлежит множеству $\tilde{\mathfrak{G}}_n$, то помеченное этим графом произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ является каноническим произведением порядка n и представляется формулой

$$\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(\tilde{G})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(\tilde{G})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (31)$$

Доказательство. Докажем сначала, что произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ является каноническим произведением порядка n . Из определения множества $\tilde{\mathfrak{P}}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ следует, что это множество является подмножеством множества \mathfrak{P}_n канонических произведений порядка n . Отсюда и из замечания 4 следует, что множество $\tilde{\mathfrak{P}}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}$ значений отображения $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \tilde{\mathfrak{P}}_n$ является множеством канонических произведений порядка n . Стало быть, каков бы ни был граф $\tilde{G}(V_n, X_f) \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$, его образ $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ при отображении $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \tilde{\mathfrak{P}}_n$ является каноническим произведением порядка n . По определению 15 произведение $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ является произведением, помеченным графом \tilde{G} . Итак, доказано, что помеченное графом $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ произведение функций $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ является каноническим произведением порядка n .

Докажем теперь, что помеченное графом $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ представляется формулой (31). Из определения произведения функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, определения отображения $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n) \rightarrow \mathfrak{P}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$, определения отображения $P_n : \mathfrak{X}_n \rightarrow \mathfrak{P}_n$ формулами (11) и (12) и определения отображения $A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} : \tilde{\mathfrak{G}}_n \rightarrow \mathfrak{X}(\tilde{\mathfrak{G}}_n)$ формулой (30) следует

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) &= P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n} \circ A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}) = P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(A_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})) = P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}((X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))) = \\ &= P_n((X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(\tilde{G})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(\tilde{G})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \end{aligned} \quad (32)$$

Отсюда следует формула (31). Лемма 2 полностью доказана. \blacktriangleright

Теорема 2. Если граф $\tilde{G}(V_n, X_f)$, которому поставлено в соответствие дополняющее множество $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, принадлежит множеству $\tilde{\mathfrak{G}}_n$, то верны следующие утверждения:

A_1 . Граф $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$, принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} и является графом-меткой произведения $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$.

A_2 . Граф \tilde{G} является образом графа-метки $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ при отображении R .

A_3 . Произведение $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ майеровских и больцмановских функций является базовым произведением порядка n , а граф \tilde{G} — его укомплектованным графом-меткой.

Доказательство. По определению множества $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ дополняющее множество $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$ образует с множеством ребер $X_f(\tilde{G})$ каноническую пару $(X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G})) \in \mathfrak{X}_n$.

Отсюда следует, что граф $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ принадлежит множеству графов \mathfrak{G}_n по определению этого множества. По замечанию 1, помеченное этим графом произведение функций $P_{1n}(G)$ принадлежит множеству \mathfrak{P}_n и по определению этого множества является каноническим. По определению 7 оно определяется формулой (14), которая в

данном случае имеет вид

$$P_{1n}(G) = (P_n \circ A_n)(G) = P_n(A_n(G)) = P_n((X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(\tilde{G})} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(\tilde{G})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (33)$$

По лемме 2 произведение функций $P_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ является каноническим и определяется формулой (31). Из формул (33) и (31) следует равенство

$$P_{1n}(G) = \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G}). \quad (34)$$

Отсюда по определению 7 следует, что граф $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ является графом-меткой произведения $\tilde{P}_{1n}(\tilde{G})$.

Так как граф $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ принадлежит множеству графов \mathfrak{G}_n , то он принадлежит области определения отображения R по определению этого отображения. Из определения графов \tilde{G} и G условиями теоремы 2 и определения отображения R следует утверждение A_2 .

По условиям теоремы 2 граф \tilde{G} принадлежит множеству графов $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ и, следовательно, является связным по определению этого множества. Так как при этом граф $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ является графом-меткой произведения $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, то из утверждения A_2 по определению 8 следует, что это произведение является базовым порядка n . Отсюда следует, его граф-метка $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ принадлежит множеству графов \mathfrak{G}_{bn} по определению этого множества. Утверждение A_1 полностью доказано.

По определению 15 из условий теоремы 2 следует, что это произведение является произведением, помеченным графом $\tilde{G} = \tilde{G}(V_n, X_f)$, а граф \tilde{G} является укомплектованным графом-меткой этого произведения. Утверждение A_3 доказано. Теорема 2 полностью доказана. ►

Для каждого графа $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n$ определим интегралы $\tilde{I}(\tilde{G})$ и $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$, полагая

$$\tilde{I}(\tilde{G}) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})(d\mathbf{r})_{1,n-1}; \quad (35)$$

$$\tilde{I}(\tilde{G}, U) = \int_U \tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})(d\mathbf{r})_n, \quad (36)$$

где U — связное, ограниченное и измеримое по Лебегу множество, содержащееся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$.

Замечание 5. Если граф $\tilde{G}(V_n, X_f)$, которому поставлено в соответствие дополняющее множество $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, принадлежит множеству $\tilde{\mathfrak{G}}_n$, то по теореме 2 произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, определенное формулой (31), является базовым порядка n , а граф $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$, принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} и является меткой этого произведения.

Отсюда следует, что по определению 9 интеграл $\tilde{I}(\tilde{G})$ и интегралы вида $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$, определенные формулами (35) и (36) соответственно, являются базовыми интегралами порядка n . Их подынтегральной функцией является базовое произведение $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$ порядка n . ■

Теорема 3. Если потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности, а граф $\tilde{G}(V_n, X_f)$, которому поставлено в соответствие дополняющее множество $X_{\text{ad}}(\tilde{G})$, принадлежит множеству $\tilde{\mathfrak{G}}_n$, то произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, определенное формулой (31), обладает следующими свойствами:

1) оно является интегрируемой функцией на любом связном ограниченном измеримом по Лебегу множестве U , содержащемся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$, а интеграл $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$ от этого произведения функций является базовым сходящимся интегралом порядка n ;

2) оно является интегрируемой функцией по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, а интеграл $\tilde{I}(\tilde{G})$ от этого произведения является базовым сходящимся интегралом порядка n и не зависит от значения переменной \mathbf{r}_1 .

Доказательство. По теореме 2 произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(\tilde{G})$, определенное формулой (31), является базовым, а граф $G(V_n; X_f(\tilde{G}), X_{\text{ad}}(\tilde{G}))$ принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} и является меткой этого произведения, то есть имеет место равенство (34). По замечанию 5 интеграл $\tilde{I}(\tilde{G})$ является базовым. По замечанию 5 интеграл $\tilde{I}(\tilde{G}, U)$ также является базовым при любом связном ограниченном измеримом по Лебегу множестве U , содержащемся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$. Отсюда и из условий теоремы 3 по теореме 1 следуют оба утверждения теоремы 3. Теорема 3 полностью доказана. ►

Теорема 4. Пусть потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности, а непустое подмножество графов $\tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}$ множества графов $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ удовлетворяет условиям: на подмножестве графов $\tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}$ определена функция $c(\tilde{G})$, принимающая на принадлежащих этому подмножеству графах действительные значения.

Тогда верны следующие утверждения:

A_1 . линейная комбинация

$$L = \sum_{\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}} c(\tilde{G}) \tilde{I}(\tilde{G}), \quad (37)$$

интегралов порядка n по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$, где при всех графах $\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}$ интеграл $\tilde{I}(\tilde{G})$ определяется формулой (35), является базовой линейной комбинацией порядка n .

A_2 . При любом связном ограниченном измеримом по Лебегу множестве U , содержащемся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$, линейная комбинация

$$\tilde{L} = \sum_{\tilde{G} \in \tilde{\mathfrak{G}}_n^{(0)}} c(\tilde{G}) \tilde{I}(\tilde{G}, U), \quad (38)$$

интегралов порядка n вида (36) по множеству U является базовой линейной комбинацией порядка n .

Доказательство. Из условий теоремы 4 вытекает, что всякий интеграл, входящий в линейную комбинацию L , и всякий интеграл, входящий в линейную комбинацию \tilde{L} , по теореме 3 являются сходящимися базовыми интегралами порядка n . Отсюда и из условий теоремы 4 по определению 11 следуют оба утверждения теоремы 4. ►

Обозначим $\tilde{\mathfrak{G}}(\tilde{L})$ множество всех графов, служащих укомплектованными графами-метками таких базовых произведений, которые являются подынтегральными функциями интегралов, входящих в базовую линейную комбинацию \tilde{L} .

Определение 16. Если \tilde{L} — базовая линейная комбинация, то множество графов $\tilde{\mathfrak{E}}(L)$ будем называть **множеством укомплектованных графов-меток** этой базовой линейной комбинации. ■

Замечание 6. Для цели, поставленной в статье, нам достаточно установить критерий сравнительной сложности представлений коэффициентов степенного ряда лишь для случая, когда такие представления являются базовыми линейными комбинациями, а сложность вычисления коэффициента при любом из интегралов, входящих в такую линейную комбинацию, незначительна. В дальнейшем такие базовые линейные комбинации мы будем называть **базовыми линейными комбинациями с коэффициентами незначительной сложности**. ■

4. В статье предлагаются критерии для сравнения по сложности таких базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности, которые удовлетворяют условию: их ассоциированные множества совпадают друг с другом.

Для начала дадим следующее

Определение 17. Две базовые линейные комбинации L и L_1 с коэффициентами незначительной сложности называются **сравнимыми**, если их порядки равны и $U(L) = U(L_1)$. ■

Пусть $U \subset (\mathbf{R}^\nu)^n$ — связное ограниченное измеримое множество.

Введем обозначения:

$\mathfrak{L}(n, U)$ — множество всех базовых линейных комбинаций порядка n с коэффициентами незначительной сложности, ассоциированным множеством которых является множество $U \subset (\mathbf{R}^\nu)^n$;

$\mathfrak{L}(n)$ — множество всех таких базовых линейных комбинаций порядка n с коэффициентами незначительной сложности, чьи ассоциированные множества являются связными ограниченными измеримыми множествами, содержащимися в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^n$;

$\mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1})$ — множество всех базовых линейных комбинаций несобственных базовых интегралов порядка n по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}$ с коэффициентами незначительной сложности.

Очевидно, что множество $\mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1})$ состоит из попарно сравнимых базовых линейных комбинаций порядка n с коэффициентами незначительной сложности.

Замечание 7. Из всех затрат машинного времени на вычисления, выполняемые для оценки базового интеграла, подавляющее большинство составляют затраты на вычисления значений майеровских и больцмановских функций, входящих в представление подынтегральной функции этого интеграла. Оставаясь в рамках самого грубого сравнения (так сказать, "в первом приближении"), можно считать, что из двух базовых сходящихся интегралов, области интегрирования которых совпадают, сложнее оценка того интеграла, в представлении подынтегральной функции которого входит большее число майеровских и больцмановских функций. Если в представлении подынтегральных функций обоих интегралов входит равное количество майеровских и больцмановских функций, то мы будем считать, что оценки этих интегралов по сложности **незначительно отличаются** друг от друга, и будем говорить, что сложности этих оценок **приблизительно равны**. ■

Все предлагаемые в статье критерии опираются на содержащийся в замечании 7 критерий сложности оценки базовых интегралов.

Простейшим таким критерием является длина $q(L)$ базовой линейной комбинации L . Мы обозначим этот критерий Cr_1 , полагая $Cr_1(L) = q(L)$. Множество его определения

обозначим $D(Cr_1)$. Оно определяется формулой

$$D(Cr_1) = \left[\bigcup_{n \geq 2} \mathfrak{L}(n) \right] \cup \left[\bigcup_{n \geq 2} \mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1}) \right]. \quad (39)$$

Этот критерий применим в тех случаях, когда сравниваемые базовые линейные комбинации отличаются друг от друга по длине, тогда как входящие в них интегралы и их коэффициенты незначительно отличаются друг от друга по своей сложности. Из определения критерия Cr_1 вытекает, что его значения зависят только от длины линейной комбинации и не зависят от ее ассоциированного множества.

В качестве другого критерия предлагается сумма всех ребер всех графов-меток из множества $\mathfrak{G}(L)$, которые маркируют интегралы, являющиеся членами данной базовой линейной комбинации. Этот критерий обозначим через $Cr_2(L)$. Он определяется формулой

$$Cr_2(L) = \sum_{G \in \mathfrak{G}(L)} (|X_f(G)| + |X_{\tilde{f}}(G)|), \quad (40)$$

где $|X_f(G)|$ — мощность множества $X_f(G)$; $|X_{\tilde{f}}(G)|$ — мощность множества $X_{\tilde{f}}(G)$ больцмановских функций. Его область определения совпадает с множеством $D(Cr_1)$.

Из определения критерия Cr_2 формулой (40) вытекает, что его значение на линейной комбинации, входящей в область его определения, зависит только от множества $\mathfrak{G}(L)$ графов, служащих метками подынтегральных функций интегралов, входящих в эту линейную комбинацию, и не зависит от ассоциированного множества этой линейной комбинации.

Можно предложить еще один, более точный, критерий. Он может быть применен в случае, когда для оценки каждого интеграла из оцениваемой линейной комбинации используется эквивалентная ему вероятностная модель. В этой вероятностной модели оцениваемый интеграл является математическим ожиданием произведения майеровских и больцмановских функций от линейных комбинаций независимых случайных величин, принимающих значения в ν -мерном действительном евклидовом пространстве \mathbf{R}^ν . При этом каждая из этих случайных величин распределена с плотностью, равной нормированному модулю майеровской функции. А число таких случайных величин равно числу $n - 1$. Таким образом, задача оценки базового интеграла, маркируемого графом-меткой $G \in \mathfrak{G}_{bn}$, сводится к оценке математического ожидания произведения майеровских и больцмановских функций от линейных комбинаций независимых непрерывных случайных величин. В это произведение входят $|X_f(G)| - n + 1$ майеровских и $|X_{\tilde{f}}(G)|$ больцмановских функций.

Единственным известным способом оценки математического ожидания этого произведения является построение аппроксимирующей дискретной стохастической модели, которая получается из описанной выше вероятностной модели заменой всех непрерывных случайных величин аппроксимирующими их дискретными случайными величинами. В результате задача оценки базового интеграла сводится к оценке математического ожидания произведения майеровских и больцмановских функций от линейных комбинаций независимых дискретных случайных величин.

При оценке этого математического ожидания в каждом статистическом испытании приходится вычислять значения $|X_f(G)| - n + 1$ майеровских и $|X_{\tilde{f}}(G)|$ больцмановских

функций. Из всех затрат машинного времени на вычисления, выполняемые для оценки этого математического ожидания, подавляющее большинство составляют затраты на вычисления значений майеровских и больцмановских функций, число $N_1(G)$ которых определяется формулой

$$N_1(G) = |X_f(G)| - n + 1 + |X_{\tilde{f}}(G)|, \quad (41)$$

где $G \in \mathfrak{G}_{bn}$. Поэтому величина $N_1(G)$, определенная формулой (41), может служить **модернизированным критерием сложности оценки несобственного сходящегося базового интеграла**, маркируемого графом $G \in \mathfrak{G}_{bn}$.

Определение 18. В случае $N_1(G) = 0$ будем говорить, что сложность оценки несобственного сходящегося базового интеграла, маркируемого графом G , по модернизированному критерию сложности оценки несобственного сходящегося базового интеграла является **незначительной**. В противном случае будем говорить, что сложность оценки интеграла, маркируемого графом G , по модернизированному критерию сложности оценки несобственного сходящегося базового интеграла **является значительной**. ■

Пример 2. Рассмотрим граф $G = G(V_3; X_f, X_{\tilde{f}})$, где $X_f = \{\{1, 2\}, \{2, 3\}\}$, $X_{\tilde{f}} = \emptyset$. Пользуясь критерием N_1 сложности оценки несобственного сходящегося базового интеграла, оценим сложность помеченного графом G несобственного интеграла $I(G)$, определенного формулой (16). Граф G по определению принадлежит множеству \mathfrak{G}_3 . Так как его подграф $R(G) = G$ является связным, то помеченное графом G каноническое произведение $P_{1n}(G)$ принадлежит множеству \mathfrak{P}_{bn} , а граф G принадлежит множеству \mathfrak{G}_{bn} , где $n = 3$. Отсюда по определению 9 следует, что помеченный графом G интеграл $I(G)$ является несобственным базовым интегралом порядка 3 по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^2$. В случае, когда системы частиц удовлетворяют условиям теоремы 1, этот интеграл является, по замечанию 2, сходящимся.

Из определения множеств X_f и $X_{\tilde{f}}$ следует: $|X_f| = 2$, $|X_{\tilde{f}}| = 0$. Отсюда по формуле (41) получаем

$$N_1(G) = 0. \quad (42)$$

Из (42) по определению 18 следует вывод: сложность оценки интеграла, подынтегральная функция которого помечена графом-меткой G , по модернизированному критерию сложности $N_1(G)$ является незначительной. ►

Предлагаемый третий, более точный, критерий сложности базовых линейных комбинации L несобственных интегралов обозначим $Cr_3(L)$, а его множество определения — $D(Cr_3)$. Это множество определяется формулой

$$D(Cr_3) = \bigcup_{n \geq 2} \mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1}). \quad (43)$$

Критерий Cr_3 опирается на критерий $N_1(G)$ сложности оценки несобственных базовых интегралов. В качестве такого критерия предлагается сумма по всем интегралам, входящим в данную базовую линейную комбинацию, оценок сложности этих интегралов. Он определяется формулой

$$Cr_3(L) = \sum_{G \in \mathfrak{G}(L)} N_1(G), \quad (44)$$

где $N_1(G)$ определяется формулой (41).

Из определения критерия Cr_3 формулами (41) и (44) вытекает, что его значение на линейной комбинации, входящей в область его определения, зависит только от множества графов-меток подынтегральных функций интегралов, входящих в эту линейную комбинацию, и не зависит от ассоциированного множества этой линейной комбинации.

Определение 19. Пусть L и L_1 — две сравнимые базовые линейные комбинации интегралов, принадлежащие области определения критерия Cr_i , где i может принимать значения $i = 1, 2, 3$. Будем считать, что **по критерию Cr_i** , базовая линейная комбинация L_1 значительно сложнее базовой линейной комбинации L , если $Cr_i(L_1) > Cr_i(L)$. Если же $Cr_i(L_1) = Cr_i(L)$, то будем считать, что по критерию Cr_i сложность одной из этих двух базовых линейных комбинаций **равна или незначительно отличается** от сложности другой из них, и говорить что по критерию Cr_i сложность одной из них **приблизительно равна** сложности другой. Если известно, что базовая линейная комбинация L_1 сложнее базовой линейной комбинации L , и $Cr_i(L_1) = Cr_i(L)$, то будем считать, что по критерию Cr_i линейная комбинация L_1 **незначительно сложнее** линейной комбинации L . ■

Предлагаемые критерии сложности базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности построены так, чтобы они в основном, за некоторыми исключениями, удовлетворяли принципу: если по данному критерию одна из двух базовых линейных комбинаций значительно сложнее другой, то и на самом деле оценка значения представляемой ею величины значительно сложнее, чем оценка значения величины, представляемой другой базовой линейной комбинацией. А в случае, когда по данному критерию сложность одной из двух базовых линейных комбинаций незначительно отличается от сложности другой из них, то и на самом деле сложность оценки значения величины, представляемой одной из этих двух базовых линейных комбинаций, незначительно отличается от сложности оценки значения величины, представляемой другой базовой линейной комбинацией.

В случае, когда выводы, сделанные на основании значений одного из критериев находятся в противоречии с выводами, сделанными на основании значений другого, более точного, критерия, предпочтение следует отдать выводам, сделанным на основании значений более точного критерия.

Пример 3. Пусть L и L_1 — две линейные комбинации, принадлежащие множеству $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$. При этом в линейную комбинацию L_1 входят два несобственных сходящихся интеграла $I(G)$ и $I(G_1)$, подынтегральные функции которых помечены графами G и G_1 ; эти интегралы определены формулами (16) и (14). Здесь G — граф, рассмотренный в примере 2, а граф $G_1 = G_1(V_3; X_{f,1}, X_{\tilde{f},1})$ имеет множество майеровских ребер $X_{f,1} = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}\}$ и множество больцмановских ребер $X_{\tilde{f},1} = \{\{2, 3\}\}$. В линейную комбинацию L входит только один интеграл $I(G_1)$, подынтегральная функция которого помечена графом-меткой G_1 . При этом в обеих линейных комбинациях коэффициенты при базовых интегралах $I(G)$ и $I(G_1)$ определены и равны 1.

Граф $G_1 = G_1(V_3; X_{f,1}, X_{\tilde{f},1})$ по определению принадлежит множеству \mathfrak{G}_3 по определению этого множества. Так как его подграф $R(G_1)$ является связным, то помеченное графом G_1 каноническое произведение $P_{13}(G_1)$ является по определению 8 базовым. Отсюда по определению 9 следует, что интеграл $I(G_1)$, подынтегральная функция которого помечена графом-меткой G_1 , является несобственным базовым порядка 3 по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^2$. В случае, когда системы частиц удовлетворяют условиям теоремы 1, этот интеграл является, по замечанию 2, сходящимся и принадлежит множеству $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$ по его определению.

В линейную комбинацию L входит только один интеграл $I(G_1)$. В данном случае этот интеграл является несобственным сходящимся базовым интегралом порядка 3, а коэффициент при нем задан и поэтому вообще не требуется никаких усилий для его вычисления. Поэтому линейная комбинация L по определению 11 и по замечанию 6 является базовой линейной комбинацией порядка 3 с коэффициентами незначительной сложности и принадлежит множеству $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$ по его определению.

В примере 2 было доказано, что интеграл $I(G)$ является несобственным сходящимся базовым интегралом порядка 3 по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^2$. Таким образом, оба входящих в линейную комбинацию L_1 интеграла являются несобственными сходящимися базовыми интегралами порядка 3 по пространству $(\mathbf{R}^\nu)^2$, а коэффициенты при них заданы и поэтому вообще не требуется никаких усилий для их вычисления. Отсюда следует, что линейная комбинация L_1 по определению 11 и по замечанию 6 также является базовой линейной комбинацией порядка 3 с коэффициентами незначительной сложности и принадлежит множеству $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$ по его определению.

Пользуясь критерием Cr_3 , оценим сложность линейных комбинаций L и L_1 . Заметим, что базовая линейная комбинация L_1 кроме интеграла, подынтегральная функция которого помечена графом-меткой G_1 , содержит еще один базовый интеграл $I(G)$, помеченный графом G . Естественно полагать, что базовая линейная комбинация L_1 сложнее, чем базовая линейная комбинация L .

Используя определение критерия сложности оценки несобственного сходящегося базового интеграла формулой (41), найдем значение этого критерия для интеграла, помеченного графом G_1 :

$$N_1(G_1) = |X_f(G_1)| - n + 1 + \left| X_{\bar{f}}(G_1) \right| = 1. \quad (45)$$

Значение этого критерия для интеграла, помеченного графом G , было найдено в примере 2 (см. формулу (42)).

Так как обе линейные комбинации L и L_1 принадлежат множеству $\mathfrak{L}(3, (\mathbf{R}^\nu)^2)$, то, по определению 17, они сравнимы по критерию Cr_3 . Сравним их по этому критерию.

Исходя из определения критерия Cr_3 формулой (44) и используя формулы (42) и (45), получаем:

$$Cr_3(L) = Cr_3(L_1) = 1. \quad (46)$$

Из формулы (46) по определению 19 следует, что базовая линейная комбинация L_1 по критерию Cr_3 незначительно сложнее базовой линейной комбинации L . ►

Из определения критерия Cr_3 и определения 19 вытекает

Следствие 4. Пусть L и L_1 — две базовые линейные комбинации несобственных интегралов, принадлежащие множеству $\mathfrak{L}(n, (\mathbf{R}^\nu)^{n-1})$ и удовлетворяющие условиям:

1. Длина линейной комбинации L_1 больше длины линейной комбинации L .
2. Каждый интеграл, входящий в линейную комбинацию L , входит и в линейную комбинацию L_1 .

Допустим, что среди несобственных базовых интегралов, входящих в линейную комбинацию L_1 и не входящих в линейную комбинацию L , имеется хоть один интеграл, такой, что граф-метка G его подынтегральной функции удовлетворяет неравенству $N_1(G) > 0$. Тогда по критерию Cr_3 базовая линейная комбинация L_1 значительно сложнее базовой линейной комбинации L . В противном случае базовая линейная комбинация L_1 незначительно сложнее базовой линейной комбинации L .

Доказательство. Рассмотрим сначала случай, когда среди интегралов, входящих в линейную комбинацию L_1 и не входящих в линейную комбинацию L , имеется хотя один интеграл, такой, что граф-метка G его удовлетворяет неравенству $N_1(G) > 0$. Тогда по определению критерия Cr_3 формулой (44) из условий следствия 4 вытекает неравенство $Cr_3(L_1) > Cr_3(L)$. Отсюда по определению 19 следует, что по критерию Cr_3 базовая линейная комбинация L_1 значительно сложнее базовой линейной комбинации L .

Рассмотрим теперь противоположный случай, когда всякий интеграл, входящий в линейную комбинацию L_1 и не входящий в линейную комбинацию L , таков, что граф-метка G его подынтегральной функции удовлетворяет равенству $N_1(G) = 0$. В этом случае по определению критерия Cr_3 формулой (44) из условий следствия 4 вытекает равенство $Cr_3(L_1) = Cr_3(L)$. Отсюда по определению 19 следует, что базовая линейная комбинация L_1 незначительно сложнее базовой линейной комбинации L . Следствие 4 полностью доказано. ►

Определение 20. Базовое произведение $P(G)$ называется **полным**, если его граф-метка G является полным. В противном случае базовое произведение называется **неполным**. ■

Определение 21. Базовый интеграл называется **полным**, если его подынтегральная функция является полным базовым произведением. Базовый интеграл называется **неполным**, если его подынтегральная функция является неполным базовым произведением. ■

Определение 22. Базовая линейная комбинация называется **полной**, если все входящие в нее интегралы являются полными. В противном случае базовая линейная комбинация называется **неполной**. ■

Из определения представлений Ри-Гувера [48], примера 1 и определений 20, 21 и 22 вытекает

Следствие 5. При любом $n > 1$ представление Ри-Гувера виртуального коэффициента B_n является полной базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности.

Из определений 20 и 21 и замечания 7 вытекает следующее

Замечание 8. Пусть один из двух базовых сходящихся интегралов является полным, а другой — неполным, причем подынтегральные функции обоих этих интегралов помечены графами с одним и тем же множеством вершин, а их области интегрирования совпадают. Тогда по замечанию 7 оценка полного интеграла значительно сложнее, чем оценка неполного интеграла. ■

Из замечания 8 вытекает

Следствие 6 Пусть L_1 — неполная базовая линейная комбинация порядка n с коэффициентами незначительной сложности, а L_2 — полная базовая линейная комбинация порядка n с коэффициентами незначительной сложности. И пусть при этом их ассоциированные множества совпадают, а число интегралов в линейной комбинации L_1 не больше числа интегралов в линейной комбинации L_2 .

Если все интегралы, входящие в эти базовые линейные комбинации, являются не-собственными, то, по замечанию 8 и критериям Cr_2 и Cr_3 , линейная комбинация L_2 значительно сложнее линейной комбинации L_1 . Если же все интегралы, входящие в эти базовые линейные комбинации, являются собственными, то, по замечанию 8 и критерию Cr_2 , линейная комбинация L_2 значительно сложнее линейной комбинации L_1 .

5. В рамках метода каркасных сумм можно выделить два подхода.

Для изложения первого из них нам потребуется ввести определение древесной суммы. С целью упрощения изложения и не стремясь к максимальной общности, мы дадим это определение в смысле, хотя и не самом общем, но достаточном для целей, поставленных в этой статье.

Для этого введем следующие определения:

$T_n = \{t\}$ — множество всех помеченных деревьев с множеством вершин V_n , где $n > 1$, и корнем 1;

$X_f(t) = \{\{u, v\}\}$ — множество ребер дерева $t \in T_n$;

$\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ — множество допустимых ребер [9, 13, 17] дерева $t \in T_n$;

$$I(t) = \int_{(\mathbf{R}^{\nu})^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in X_f(t)} f_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}_{\text{ad}}(t)} (1 + f_{\tilde{u}\tilde{v}})(d\mathbf{r})_{1,n-1}, \quad (47)$$

$$I(t, \Lambda) = \int_{\Lambda^n} \prod_{\{u,v\} \in X_f(t)} f_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in \tilde{X}_{\text{ad}}(t)} (1 + f_{\tilde{u}\tilde{v}})(d\mathbf{r})_n, \quad (48)$$

где $t \in T_n$, Λ — связное, ограниченное и измеримое по Лебегу множество, содержащееся в пространстве \mathbf{R}^{ν} .

Пусть T' — непустое подмножество множества деревьев T_n , где $n \geq 1$; а каждому дереву $t \in T'$ поставлено в соответствие множество допустимых ребер $\tilde{X}_{\text{ad}}(t) = \{\{u, v\}\}$. Введем обозначения:

$c(t)$ и $c_1(t)$ — функции, определенные на множестве деревьев T' и принимающие на принадлежащих этому множеству деревьях действительные значения.

$$L(T') = \sum_{t \in T'} c(t)I(t), \quad (49)$$

где при каждом $t \in T'$ интеграл $I(t)$ определен формулой (47).

$$L(T', \Lambda) = \sum_{t \in T'} c_1(t)I(t, \Lambda), \quad (50)$$

где при каждом $t \in T'$ интеграл $I(t, \Lambda)$ определен формулой (48).

Определение 23. Линейные комбинации интегралов $L(T')$ и $L(T', \Lambda)$, в которых $T' \subseteq T_n$ и $n \geq 2$, называются **древесными суммами**. ■

Замечание 9. Из определения множества допустимых ребер $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ вытекает, что это множество не пересекается с множеством $X_f(t)$ ребер дерева $t \in T_n$ и состоит из попарно различных ребер, каждое из которых соединяет две несмежные вершины дерева t . ■

Теорема 5. Пусть потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, а парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности. Тогда древесные суммы $L(T')$ и $L(T', \Lambda)$, определенные формулами (49) и (50), где $T' \subseteq T_n$ и $n > 1$, являются базовыми линейными комбинациями порядка n , а каждое дерево $t \in T'$ в древесной сумме $L(T')$ является укомплектованным графом-меткой подынтегральной функции интеграла $I(t)$, а в древесной сумме $L(T', \Lambda)$ — укомплектованным графом-меткой подынтегральной функции интеграла $I(t, \Lambda)$. При этом каждому такому дереву t поставлено в соответствие, в качестве дополняющего множества, множество допустимых ребер $\tilde{X}_{\text{ad}}(t) = \{\{u, v\}\}$.

Доказательство. Определения интегралов $I(t)$ и $I(t, \Lambda)$ формулами (47) и (48) соответственно означают, что для каждого дерева $t \in T'$ определено поставленное ему в соответствие конечное множество $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ допустимых ребер. По замечанию 9 это множество не пересекается с множеством $X_f(t)$ и состоит из попарно различных ребер, каждое из которых соединяет две несмежные вершины дерева t . Из определения интегралов $I(t)$ и $I(t, \Lambda)$ формулами (47) и (48) следует, что эти интегралы имеют одну и ту же подынтегральную функцию, которая является произведением майеровских и больцмановских функций. При этом множество ребер $X_f(t)$ дерева t , маркирующего это произведение определяет множество F всех майеровских функций этого произведения и является, по определению 3, множеством майеровских ребер по отношению к множеству F майеровских функций. А по определению 4 множество допустимых ребер $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ определяет множество \tilde{F} всех больцмановских функций этого произведения и является множеством больцмановских ребер по отношению к множеству \tilde{F} больцмановских функций. Таким образом, по определению дополняющего множества, множество $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ является дополняющим множеством, поставленным в соответствие дереву t . Множества $X_f(t)$ и $\tilde{X}_{\text{ad}}(t)$ образуют упорядоченную пару $\mathbf{X} = (X_f, X_{\text{ad}}(t))$.

По определению множества деревьев T_n всякое дерево $t \in T_n$ является связным графом с множеством вершин V_n и, значит, имеет место равенство $V(X_f(t)) = V_n$. Отсюда и из замечания 9 следует равенство $V(X_f) \cup V(X_{\tilde{f}}) = V_n$. Из этого равенства по определению 5 следует, что упорядоченная пара множеств $\mathbf{X} = (X_f, X_{\tilde{f}})$ является канонической парой. Из полученных результатов следует, что всякое дерево $t \in T_n$ принадлежит множеству $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ по его определению.

Отсюда по определению 15 и лемме 2 следует, что каждое дерево $t \in T'$ является укомплектованным графом-меткой канонического произведения функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(t)$, которое помечено этим деревом, имеет порядок n и представляется формулой

$$\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(t) = \prod_{\{i,j\} \in X_f(t)} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(t)} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (51)$$

Правая часть формулы (51) совпадает как с подынтегральной функцией интеграла $I(t)$, так и с подынтегральной функцией интеграла $I(t, \Lambda)$. Следовательно, помеченное деревом t произведение функций $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(t)$ является подынтегральной функцией как интеграла $I(t)$, так и интеграла $I(t, \Lambda)$, а дерево t является укомплектованным графом-меткой подынтегральной функции интегралов $I(t)$ и $I(t, \Lambda)$.

Отсюда по замечанию 5 следует, что подынтегральная функция интегралов $I(t)$ и $I(t, \Lambda)$ является базовым произведением функций порядка n . А интегралы $I(t)$ и $I(t, \Lambda)$ по определению 9 являются базовыми интегралами порядка n . По теореме 3 при любом связном ограниченном измеримом по Лебегу множестве Λ , содержащемся в пространстве (\mathbf{R}^{ν}) , это произведение функций является интегрируемой функцией на множестве Λ^n , а интеграл $I(t, \Lambda)$ от этого произведения функций сходится; кроме того, это произведение функций является интегрируемой функцией по пространству $(\mathbf{R}^{\nu})^{n-1}$, а интеграл $I(t)$ от этого произведения сходится и не зависит от значения переменной \mathbf{r}_1 .

Напомним, что на множестве деревьев T' определены функции $c(t)$ и $c_1(t)$, принимающие на деревьях этого множества действительные значения. При каждом $t \in T'$ величина $c(t)$ является коэффициентом при интеграле $I(t)$, входящем в древесную сумму $L(T')$. Точно также при каждом $t \in T'$ величина $c_1(t)$ является коэффициентом при интеграле $I(t, \Lambda)$, входящем в древесную сумму $L(T', \Lambda)$.

Из полученных результатов по теореме 4 следует, что древесные суммы $L(T')$ и $L(T', \Lambda)$, определенные формулами (49) и (50), где $T' \subset T_n$ и $n > 1$, являются базовыми линейными комбинациями порядка n . Теорема 5 полностью доказана. ►

Если древесная сумма является базовой линейной комбинацией порядка n , то мы будем называть число n **порядком** этой древесной суммы.

6. В качестве примера представления коэффициентов степенных рядов древесными суммами можно привести полученные автором [3, 9, 17] представления майеровских коэффициентов $b_n(\Lambda)$, свободные от асимптотической катастрофы. Эти представления были получены для случая, когда термодинамическая равновесная однокомпонентная система классических частиц с парным взаимодействием [24, 49] заключена в ограниченном объеме Λ , являющемся связным, ограниченным и измеримым по Лебегу множеством, содержащимся в пространстве \mathbf{R}^ν . При этом предполагалось, что парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности, а парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией. При всех $n \geq 2$ каждое из представлений майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$, полученных автором при этих условиях, является древесной суммой, являющейся базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности и с ассоциированным множеством $\Lambda^n \subset (\mathbf{R}^\nu)^n$.

Вначале были получены [3] такие представления, в которых коэффициент $b_n(\Lambda)$ выражался произведением числа $1/(|\Lambda|n!)$ на базовую линейную комбинацию порядка n с ассоциированным множеством Λ^n , состоящую из всех интегралов, чьи подынтегральные функции помечены n -вершинными корневыми помеченными деревьями [25, 28, 9, 17] с корневой вершиной, помеченной числом 1 [3]. При этом каждому маркирующему дереву t было поставлено в соответствие множество допустимых ребер $\tilde{X}_{\text{ad}}(t) = \{\{u, v\}\}$. По определению 23 такая базовая линейная комбинация порядка n является древесной суммой порядка n . В этой сумме коэффициент при каждом входящем в нее интеграле равен единице. Поэтому не требуется никаких вычислений для определения значений коэффициентов при входящих в эту сумму интегралах. Отсюда по теореме 5 и по замечанию 6 следует, что эта древесная сумма является базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности.

Впоследствии эти представления были упрощены [9, 17]. С этой целью было введено бинарное отношение максимального изоморфизма корневых помеченных деревьев. Это отношение обладает свойствами рефлексивности, симметричности и транзитивности, то есть является отношением эквивалентности [21] и разбивает множество $\{T_n\}$, состоящее из всех помеченных деревьев с множеством вершин $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$ и корнем 1 на классы максимально изоморфных деревьев. Эти классы обладают очень полезным свойством: в вышеупомянутом представлении майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ древесной суммой равны все интегралы, подынтегральные функции которых помечены максимально изоморфными деревьями. Было найдено конструктивное определение такого подмножества $TR(n) \subset T_n$ [9, 17], в котором никакие два дерева не являются максимально изоморфными, а мощность которого равна числу классов максимально изоморфных деревьев, принадлежащих множеству T_n .

Используя представления коэффициентов $b_n(\Lambda)$ древесной суммой всех интегралов, чьи подынтегральные функции помечены n -вершинными корневыми помеченными деревьями с корневой вершиной, помеченной числом 1, разложение множества корневых помеченных деревьев на классы максимально изоморфных деревьев и вышеупомянутое свойство максимально изоморфных деревьев, удалось получить представления майеро-

вских коэффициентов $b_n(LL)$ древесными суммами в виде [9, 17]:

$$b_n(\Lambda) = \frac{1}{|\Lambda|n!} \sum_{t \in TR(n)} |TI(t)| I(t, \Lambda). \quad (52)$$

Здесь $TI(t)$ — совокупность деревьев, принадлежащих множеству T_n и максимально изоморфных дереву t ;

$|TI(t)|$ — мощность множества $TI(t)$;

$I(t, \Lambda)$ — интеграл, определенный формулой (48). Переходя в представлениях майеровских коэффициентов $b_n(\Lambda)$ формулой (52) к термодинамическому пределу, удалось получить [9, 17] представления древесными суммами майеровских коэффициентов в термодинамическом пределе. Для краткости термодинамический предел майеровских коэффициентов $b_n(LL)$ мы будем называть предельным майеровским коэффициентом и обозначать его b_n . Эти представления имеют вид:

$$b_n = \frac{1}{n!} \sum_{t \in TR(n)} |TI(t)| I(t). \quad (53)$$

Из определения формулой (52) представления майеровских коэффициентов $b_n(LL)$ и определения формулой (53) представления предельных майеровских коэффициентов b_n следует: при всех $n \geq 1$ множество деревьев $TR(n)$ является множеством всех деревьев, являющихся графами-метками маркирующими как интегралы, входящие в древесные суммы, представляющие майеровские коэффициенты $b_n(LL)$, так и интегралы, входящие в древесные суммы, представляющие предельные майеровские коэффициенты b_n .

Число деревьев во множестве $TI(t)$ полностью определяется деревом t по формуле

$$|TI(t)| = (n-1)! \left(\prod_{i=1}^{H(t)-1} n(t,i)! \right)^{-1} \left(\prod_{i=1}^{n(t,H(t)-1)} (d(t,i)-1)! \right)^{-1}. \quad (54)$$

Здесь $H(t)$ — высота [9, 17, 5] дерева t ; $n(t,i)$ — число вершин дерева t , находящихся на высоте i ; $d(t,i)$ — степень i -ой вершины из множества всех вершин дерева t , находящихся на высоте $H(t) - 1$.

Лемма 3. *Представления майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ древесной суммой по формулам (52) и (48) и представление предельного майеровского коэффициента b_n древесной суммой по формулам (53) и (47) при $n > 1$ являются базовыми линейными комбинациями порядка n с коэффициентами незначительной сложности.*

Доказательство. Сумма в правой части равенства (52) и сумма в правой части равенства (53) имеют следующие свойства: 1) множество деревьев $TR(n)$ является подмножеством множества T_n ; 2) интегралы, входящие в первую сумму, определяются формулой (48), а интегралы, входящие во вторую сумму, — формулой (47); 3) коэффициентом при каждом из этих интегралов является число деревьев, максимально изоморфных дереву t , маркирующему этот интеграл; это число определяется деревом t по формуле (54). Отсюда по определению 23 следует, что эти суммы являются древесными суммами. По теореме 5 эти древесные суммы являются базовыми линейными комбинациями порядка n .

Из определения коэффициентов этих древесных сумм формулой (54) следует, что сложность вычисления этих коэффициентов незначительна. Поэтому эти древесные

суммы являются базовыми линейными комбинациями порядка n с коэффициентами незначительной сложности. Лемма доказана. ►

Число деревьев во множестве $TR(n)$ вычисляется по формуле

$$|TR(n)| = 1 + (2^{n-2} - 1) + \sum_{H=3}^{n-1} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbf{N}(H, n-1)} \frac{(n(H-1) + n(H) - 1)!}{n(H)!(n(H-1) - 1)!} \prod_{i=2}^{H-1} \{[n(i-1)]^{n(i)}\}. \quad (55)$$

Здесь $\mathbf{N}(H, k) = \{(n(1), n(2), \dots, n(H))\}$ — множество H -мерных векторов, компонентами которых являются натуральные числа, а сами векторы удовлетворяют условию:

$$\sum_{i=1}^H n(i) = k.$$

Результаты вычислений по формуле (55) приведены в таблице 1.

В этой таблице приведены мощности множеств $TR(n)$ для всех n , удовлетворяющих неравенствам $2 \leq n \leq 10$. Напомним, что множество $TR(n)$ является множеством укомплектованных графов-меток всех интегралов, входящих в линейную комбинацию, являющуюся представлением термодинамического предела b_n майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ в виде древесной суммы по формулам (53) и (47). Множество $TR(n)$ также является множеством укомплектованных графов-меток всех интегралов, входящих в линейную комбинацию, являющуюся представлением майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ в виде древесной суммы по формулам (52) и (48) при любом объеме Λ , являющемся связным, ограниченным и измеримым по Лебегу множеством, содержащимся в пространстве \mathbf{R}^ν . Все эти представления являются базовыми линейными комбинациями одной и той же длины, равной мощности множества $TR(n)$, и отличаются только своими ассоциированными множествами. Стало быть, на всех этих представлениях критерий сложности Cr_1 принимает одно и то же значение, равное мощности множества $TR(n)$.

Сравним теперь сложность этих представлений со сложностью представлений Ри-Гувера вириальных коэффициентов по критерию Cr_1 в случае, когда термодинамическая равновесная однокомпонентная система классических частиц с парным взаимодействием [24, 49] заключена в ограниченном объеме Λ , являющемся связным, ограниченным и измеримым по Лебегу множеством, содержащимся в пространстве \mathbf{R}^ν . При этом предполагается, что парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности, а парный потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией. В этих условиях представление Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ определено при всех $n \geq 2$ и является базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности и с ассоциированным множеством $\Lambda^n \subset (\mathbf{R}^\nu)^n$. В этом случае по определению 17 рассматриваемое представление майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ и представление Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ сравнимы при любом $n \geq 2$ и при любом Λ , удовлетворяющем указанным выше условиям.

В простейшем случае, когда $n = 2$, и майеровский коэффициент $b_2(\Lambda)$, и вириальный коэффициент $B_2(\Lambda)$ представляются через один и тот же интеграл и их представления отличаются лишь знаком. Упрощать здесь нечего.

Далее, из таблицы 1 явствует, что при $n = 7, 8, 9, 10$ представление майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ по формуле (52) содержит меньшее число слагаемых интегралов, чем представление Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$. Следовательно, при этих значениях n по критерию Cr_1 сложность представления Ри-Гувера вириального

коэффициента $B_n(\Lambda)$ значительно больше, чем сложность представления майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ древесной суммой по формулам (52) и (48).

Посмотрим теперь, какой результат получается по критерию Cr_2 . Из определения множества $\tilde{X}_{\text{ad}}(t) = \{\{u, v\}\}$ допустимых ребер дерева t следует, что при любом $n > 2$ определенная формулами (52) и (48) древесная сумма удовлетворяет условию: в этой сумме только один интеграл, маркируемый звездой [25, 28], все ребра которой инцидентны ее корню, является полным базовым интегралом; а все остальные интегралы в этой сумме являются неполными базовыми интегралами. Отсюда по определению 22 и лемме 3 следует, что при любом $n > 2$ представление майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ древесной суммой по формулам (52) и (48) является неполной базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности.

С другой стороны, по следствию 5 представление Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ является полной базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности.

Из вышеизложенного по следствию 6 вытекает, что при значениях $n = 7, 8, 9, 10$ по критерию Cr_2 сложность представления Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ значительно больше, чем сложность представления майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ древесной суммой по формулам (52) и (48).

Заметим, что при $n = 8, 9, 10$ число интегралов в сумме, представляющей по методу Ри-Гувера вириальный коэффициент $B_n(\Lambda)$ сильно превышает число интегралов в сумме, представляющей майеровский коэффициент $b_n(\Lambda)$ по формулам (52) и (48). Поэтому по следствию 6 при этих значениях n представление майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ по формулам (52) и (48) является весьма значительно более простым, чем представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ по методу Ри-Гувера.

Однако, при $n = 3, 4, 5, 6$ сравниваемые представления не удовлетворяют условиям следствия 6. Значит, при этих значениях n данное следствие невозможно применить для такого сравнения. А по критериям Cr_1 и Cr_2 представление майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ по формулам (52) и (48) является более сложным, чем представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ по методу Ри-Гувера.

7. Другим примером представления коэффициентов степенных рядов в виде древесных сумм является представление коэффициентов a_n разложения отношения активности z [23, 24, 44, 49] к плотности $\rho(z)$ в ряд по степеням активности z :

$$z/\rho(z) = 1 - \sum_{n=2}^{\infty} n a_n z^{n-1}. \quad (56)$$

Это разложение рассматривалось Либом [41] и Пенроузом [45].

Пенроузом было предложено два метода нахождения коэффициентов a_n : либо весьма сложным путем с помощью уравнений Кирквуда–Зальцбурга; либо более простым путем, исходя из соотношений

$$n b_n = \sum_{q=1}^{n-1} (q+1) a_{q+1} (n-q) b_{n-q} \quad (57)$$

между этими коэффициентами и майеровскими коэффициентами b_n .

В работах [4, 31, 9, 17] было предложено представление коэффициентов a_n в виде суммы интегралов, маркируемых деревьями. С этой целью было определено множество $T(n, 0)$, состоящее из всех деревьев множества T_n , удовлетворяющих условиям:

а) любой слой этого дерева, за исключением нулевого и, может быть, последнего, состоит не менее чем из двух вершин;

б) за исключением нулевого слоя, дерево не имеет ни одного слоя, в котором лишь самая старшая вершина имеет степень, большую чем единица.

Это позволило получить [4, 31, 9, 17] свободные от асимптотической катастрофы представления коэффициентов a_n в виде суммы всех интегралов, маркируемых деревьями из множества $T(n, 0)$:

$$a_n = \frac{1}{n!} \sum_{t \in T(n, 0)} I(t), \quad (58)$$

где $I(t)$ — интеграл, определенный формулой (47).

Впоследствии эти представления были упрощены [9, 17]. С этой целью было определено множество $TR(n, 0) = TR(n) \cap T(n, 0)$ [9, 17].

Из определения отношения максимального изоморфизма корневых помеченных деревьев и определения множеств $T(n, 0)$ и $TR(n, 0)$ следует, что множество $T(n, 0)$ разлагается на классы $TI(t)$ максимально изоморфных деревьев, маркируемые деревьями из множества $TR(n, 0)$.

А множество $TR(n, 0)$ состоит из всех деревьев t , являющихся метками входящих во множество $T(n, 0)$ классов $TI(t)$ максимально изоморфных деревьев.

Используя представление коэффициентов a_n формулой (58), понятие максимального изоморфизма корневых помеченных деревьев, разложение множества $T(n, 0)$ на классы максимально изоморфных деревьев и свойства максимально изоморфных деревьев, автором были предложены более простые представления коэффициентов a_n , свободные от асимптотической катастрофы:

$$a_n = \frac{1}{n!} \sum_{t \in TR(n, 0)} |TI(t)| I(t). \quad (59)$$

Здесь, как и в формуле (53), $I(t)$ — интеграл, определенный формулой (47); $|TI(t)|$ — число деревьев во множестве $TI(t)$, определяемое деревом t по формуле (54).

Число деревьев во множестве $TR(n, 0)$ вычисляется по формуле

$$|TR(n, 0)| = 1 + \sum_{\mathbf{n}}' \left(\frac{[n(2) + n(1) - 1]!}{[n(1) - 1]! n(2)!} - 1 \right) + \\ + \sum_{H=3}^N \sum_{\mathbf{n}}' \left(\frac{[n(H) + n(H-1) - 1]!}{[n(H-1) - 1]! n(H)!} - 1 \right) \prod_{i=2}^{H-1} ([n(i-1)]^{n(i)} - 1), \quad (60)$$

где $N = \lceil (n-1)/2 \rceil$ — наименьшее из тех целых чисел, которые не меньше числа $(n-1)/2$, а символ $\sum_{\mathbf{n}}'$ в формуле (60) означает суммирование по всем H -мерным векторам (n_1, n_2, \dots, n_H) , компоненты которых являются натуральными числами, а сами векторы удовлетворяют условиям:

$$\text{а) } n_i \geq 2, \quad i = 1, 2, \dots, H-1; \quad \text{б) } n_H \geq 1; \quad \text{в) } \sum_{i=1}^H n(i) = n-1.$$

Лемма 4. Пусть потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, а парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности. Тогда представление коэффициента a_n древесной суммой по формулам (59) и (47) при $n > 3$ является базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности.

Доказательство. Сумма в правой части равенства (59) имеет следующие свойства: 1) множество деревьев $TR(n, 0)$ является подмножеством множества T_n ; 2) интегралы, входящие в эту сумму, определяются формулой (47); 3) коэффициентом при каждом из этих интегралов является число деревьев, максимально изоморфных дереву t , маркирующему этот интеграл; это число определяется деревом t по формуле (54). Отсюда по определению 23 следует, что эта сумма является древесной суммой.

По теореме 5 эта древесная сумма является базовой линейной комбинацией порядка n .

Из определения коэффициентов этой древесной суммы формулой (54) следует, что сложность вычисления этих коэффициентов незначительна. Поэтому эта древесная сумма является базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности. Лемма доказана. ►

Замечание 10. Из определения [4, 31, 9, 17] множества $\tilde{X}_{\text{ad}}(t) = \{\{u, v\}\}$ допустимых ребер дерева t следует, что при любом $n > 3$ определенная формулами (59) и (47) древесная сумма удовлетворяет условию: в этой сумме только один интеграл, маркируемый звездой, все ребра которой инцидентны ее корню, является полным базовым интегралом; а все остальные интегралы в этой сумме являются неполными базовыми интегралами. Отсюда по определению 22 и лемме 4 следует, что при любом $n > 3$ представление коэффициента a_n древесной суммой по формулам (59) и (47) является неполной базовой линейной комбинацией порядка n с коэффициентами незначительной сложности. ■

Из представления (53) майеровских коэффициентов b_n и из представления (59) коэффициентов a_n очевидно, что $b_2 = a_2$. Указанные представления этих коэффициентов совпадают и имеют одну и ту же сложность.

А из определения множеств $TR(n)$ и $TR(n, 0)$ при $n > 2$ следует, что множество $TR(n, 0)$ является собственным подмножеством множества $TR(n)$. Отсюда вытекают два следствия:

1. При любом $n > 2$ длина базовой линейной комбинации, являющейся древесной суммой, представляющей майеровский коэффициент b_n по формулам (53) и (47), больше длины базовой линейной комбинации, являющейся древесной суммой, представляющей коэффициент a_n по формулам (59) и (47).

2. При любом $n > 1$ каждый интеграл, входящий в сумму, представляющую по формулам (59) и (47) коэффициент a_n , входит и в сумму, представляющую по формулам (53) и (47) майеровский коэффициент b_n .

Из определения множества деревьев $TR(n)$ следует, что множество $TR(3)$ состоит из двух деревьев, являющимися графами G и G_1 , введенными в примерах 2 и 3 соответственно. Далее, из определения множества деревьев $TR(n, 0)$ следует, что множество $TR(3, 0)$ состоит из одного дерева, являющегося графом G_1 . Из результатов, полученных в примере 3, явствует, что базовая линейная комбинация, являющаяся древесной суммой, представляющей майеровский коэффициент b_3 по формулам (53) и (47), незначительно сложнее, чем базовая линейная комбинация, являющаяся древесной суммой, представляющей коэффициент a_3 по формулам (59) и (47).

При $n > 3$ множество $TR(n)$ содержит по крайней мере одно дерево, которое не принадлежит множеству $TR(n, 0)$ и имеет непустое множество допустимых ребер. К таким деревьям относятся, в частности, все деревья из множества $TR(n)$ высоты $H > 1$, не являющиеся цепью и имеющие такой слой вершин, в котором лишь самая старшая вершина имеет степень большую чем единица. Очевидно, что интегралы, маркируемые такими деревьями, имеют положительное значение модернизированного критерия N_1 сложности их оценки. Они входят в базовую линейную комбинацию, являющуюся древесной суммой, представляющей майеровский коэффициент b_n по формулам (53) и (47), и не входят в базовую линейную комбинацию, являющуюся древесной суммой, представляющей коэффициент a_n по формулам (59) и (47).

Таким образом, в рассматриваемой ситуации удовлетворяются все условия следствия 4. Отсюда по следствию 4 следует вывод, что при $n > 3$ базовая линейная комбинация, являющаяся древесной суммой, представляющей майеровский коэффициент b_n по формулам (53) и (47), значительно сложнее, чем базовая линейная комбинация, являющаяся древесной суммой, представляющей коэффициент a_n по формулам (59) и (47).

В таблице 3 приведены вычисленные при $n = \overline{2, 10}$ значения критерия Cr_3 для базовых линейных комбинаций, являющихся представлениями предельных майеровских коэффициентов b_n в виде древесных сумм по формулам (53) и (47), и для базовых линейных комбинаций, являющихся представлениями коэффициентов a_n в виде древесных сумм по формулам (59) и (47).

Эти значения являются численным подтверждением полученной теоретическим путем сравнительной оценки сложности этих базовых линейных комбинаций.

Отсюда следует вывод, что прямой метод оценки коэффициентов a_n , основанный на их представлении древесными суммами по формулам (59) и (47), проще и рациональнее предложенного Пенроузом метода оценки коэффициентов a_n , исходящего из соотношений (57), между этими коэффициентами и майеровскими коэффициентами b_n . Соотношения же (57) целесообразнее использовать для представления коэффициентов b_n через коэффициенты a_n , чтобы затем применить эти представления как для оценки майеровских коэффициентов b_n , так и для оценки вириальных коэффициентов B_n .

Эти выводы численно подтверждаются также и приведенными в таблице 1 вычисленными при $n = \overline{2, 10}$ значениями критерия Cr_1 на базовых линейных комбинациях, являющихся представлениями предельных майеровских коэффициентов b_n в виде древесных сумм по формулам (53) и (47), и для базовых линейных комбинаций, являющихся представлениями коэффициентов a_n в виде древесных сумм по формулам (59) и (47).

Значение критерия Cr_1 на базовой линейной комбинации, являющейся представлением коэффициента a_n древесной суммой равно числу интегралов в этой древесной сумме. Из представления коэффициента a_n древесной суммой по формуле (59) следует, что число интегралов в этой древесной сумме равно числу деревьев во множестве $TR(n, 0)$, которое вычисляется по формуле (60).

Результаты вычисления мощности множества $TR(n, 0)$ при $n = \overline{2, 10}$ приведены в таблице 1. Данные этой таблицы подкрепляют уже сделанные выводы. По этим данным при $n = \overline{4, 10}$ число интегралов в сумме, представляющей майеровский коэффициент b_n по формуле (52) более чем в 2 раза больше числа интегралов в представлении коэффициента a_n по формуле (59). Отсюда по простейшему критерию, каким является длина базовой линейной комбинации, следует вывод: при $n = \overline{4, 10}$ такое представление коэф-

фициента a_n в несколько раз проще, чем представление майеровского коэффициента b_n древесной суммой по формулам (52) и (47).

8. Еще одним примером успешного применения метода каркасных сумм являются полученные этим методом представления вириальных коэффициентов. В рамках этого метода были разработаны два способа представления вириальных коэффициентов.

Первый из них состоит в следующем: каждый вириальный коэффициент представляется в виде многочлена от древесных сумм. В качестве примеров такого способа представления вириальных коэффициентов можно привести представления вириальных коэффициентов, свободные от асимптотической катастрофы, двух видов: 1) в виде многочленов от древесных сумм, представляющих майеровские коэффициенты $b_n(\Lambda)$ и 2) в виде многочленов от древесных сумм, представляющих коэффициенты a_n .

Представления вириальных коэффициентов в виде многочленов от древесных сумм, представляющих майеровские коэффициенты b_n можно получить, используя результаты, полученные Майером [23, 42, 43, 44]. В статье [44] дано представление (в виде многочленов от майеровских коэффициентов b_n) величин β_μ , через которые выражаются вириальные коэффициенты по формуле

$$B_n(\Lambda) = -\frac{n-1}{n}\beta_{n-1}(\Lambda), \quad n > 1. \quad (61)$$

Приведем это представление, несколько упростив обозначения и заодно исправив замеченную опечатку. С этой целью введем обозначения

$\mathbf{M}(n) = \{\mathbf{m}\}$ — множество $(n-1)$ -мерных векторов $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_{n-1})$, компоненты которых являются целыми неотрицательными числами, удовлетворяющими условию:

$$\sum_{j=1}^{n-1} jm_j = n-1. \quad (62)$$

Для каждого вектора $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)$ определим **норму вектора**, обозначив ее $\|\mathbf{m}\|$ и полагая

$$\|\mathbf{m}\| = \sum_{i=1}^{n-1} m_i. \quad (63)$$

В этих обозначениях величина $\beta_\mu(\Lambda)$ представляется следующим образом:

$$\beta_\mu(\Lambda) = -\frac{1}{\mu!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu+1)} (\mu + \|\mathbf{m}\| - 1)! \prod_{j=1}^{\mu} \frac{1}{m_j!} (-(j+1)b_{j+1})^{m_j}. \quad (64)$$

Здесь и далее для краткости письма опущен аргумент Λ у майеровских коэффициентов b_n .

Из формул (61) и (64) вытекают представления вириальных коэффициентов в виде многочленов от майеровских коэффициентов b_n :

$$B_n(\Lambda) = -\frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! \prod_{j=1}^{n-1} \frac{1}{m_j!} (-(j+1)b_{j+1})^{m_j}. \quad (65)$$

Аналогичным образом может быть представлен и термодинамический предел B_n вириального коэффициента в виде многочленов от термодинамических пределов b_n

майеровских коэффициентов:

$$B_n = -\frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! \prod_{j=1}^{n-1} \frac{1}{m_j!} (-(j+1)b_{j+1})^{m_j}. \quad (66)$$

Формулы (65) и (66) будем называть **формулой Майера**.

Далее для краткости письма мы будем опускать аргумент Λ у вириальных коэффициентов B_n там, где это не вызовет затруднений в понимании у читателя.

Пусть в формуле (65) майеровские коэффициенты $b_n(\Lambda)$ определяются по формулам (52) и (48) их представлениями в виде древесных сумм. Тогда формулы (65), (52) и (48) являют собой представления вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ в виде многочленов от древесных сумм, представляющих майеровские коэффициенты $b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)$. Такое представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ будем называть его **представлением формулой Майера и формулами (52) и (48)**. Аналогично, представление термодинамического предела B_n вириального коэффициента в виде многочленов от древесных сумм, представляющих термодинамические пределы b_2, b_3, \dots, b_n майеровских коэффициентов будем называть его **представлением формулой Майера и формулами (53) и (47)**. Очевидно, что процедура вычисления оценки термодинамического предела B_n вириального коэффициента, основанная на его представлении формулой Майера и формулами (53) и (47) имеет такую же сложность, как и процедура вычисления оценки вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$, основанная на его представлении формулой Майера и формулами (52) и (48).

Для краткости сложность процедуры вычисления оценки вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$, основанной на его представлении формулой Майера и формулами (52) и (48) будем называть **сложностью представления вириального коэффициента формулой Майера и формулами (52) и (48)**.

Представляет интерес вопрос: какова же сложность вычислений оценок вириальных коэффициентов с помощью этих представлений? Чтобы ответить на этот вопрос, нужно четко определить процесс вычислений этих оценок. В данной статье предлагается следующая схема этого процесса:

Этап 1. Вычисление оценок майеровских коэффициентов, входящих в представление данного вириального коэффициента по формуле Майера.

Этап 2. Вычисление оценки данного вириального коэффициента. Вычисление производится по формуле Майера, в которую вместо майеровских коэффициентов подставляются вычисленные оценки этих коэффициентов.

Для оценки сложности этих вычислений по формуле Майера представим эту формулу в несколько ином, более удобном для решения этой задачи виде.

С этой целью введем обозначения:

$$Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}) = \prod_{j=1}^{n-1} \frac{1}{m_j!} (y_j x_j)^{m_j}. \quad (67)$$

Здесь $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{n-1})$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_{n-1})$ и $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_{n-1})$ — $(n-1)$ -мерные векторы, причем компоненты вектора \mathbf{m} являются целыми неотрицательными числами, удовлетворяющими условию (62).

Положим

$$x_i = -b_{i+1}(\Lambda), \quad i = 1, 2, \dots, n-1; \quad \mathbf{b}(\Lambda) = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}; \quad (68)$$

$$y_i = i + 1, \quad i = 1, 2, \dots, n - 1. \quad (69)$$

В этих обозначениях формула Майера (65) принимает вид

$$B_n(\Lambda) = -\frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}). \quad (70)$$

Из условия (62) вытекает, что норма любого вектора $m \in \mathbf{M}(n)$ удовлетворяет неравенству

$$\|\mathbf{m}\| \leq n - 1. \quad (71)$$

Замечание 11. Из определения функции $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ формулой (67) следует, что в случае, когда значения компонент вектора \mathbf{y} вычисляются по формулам (69), а значения компонент вектора \mathbf{x} заданы, для вычисления значения функции $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ требуется произвести не более $5\|\mathbf{m}\|$ арифметических операций,

Также и в случае, когда значения компонент вектора \mathbf{y} вычисляются по формуле

$$y_i = -i - 1, \quad i = 1, 2, \dots, n - 1, \quad (72)$$

а значения компонент вектора \mathbf{x} заданы, для вычисления значения функции $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ требуется произвести не более $5\|\mathbf{m}\|$ арифметических операций,

В случае же, когда все компоненты вектора \mathbf{y} равны числу 1, а значения компонент вектора \mathbf{x} заданы, для вычисления значения функции $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ при данных значениях векторов \mathbf{x} и \mathbf{y} требуется произвести не более $3\|\mathbf{m}\|$ арифметических операций. ■

Замечание 12 [39]. Из определения суммы $\sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)}$ следует, что число слагаемых в этой сумме равно числу всех неупорядоченных разложений числа $n - 1$ в сумму натуральных слагаемых. Следуя [26, 29], обозначим это число $p(n - 1)$.

Величина $p(n)$ растет с ростом n довольно медленно. Ее значения приведены в книге [26, 29] (см. Таблицу 4.2). Так, при $n = 9$ эта величина принимает значение 30, а при $n = 10$ эта величина равна 42. ■

Из замечания 12, из формулы (67) и из неравенства (71) вытекает, что при $n \leq 10$ для вычисления суммы

$$\sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n)} (n + \|\mathbf{m}\| - 2)! Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}),$$

где \mathbf{x} и \mathbf{y} определяются формулами (68) и (69) соответственно, требуется произвести менее 2430 арифметических операций. Из этой оценки и формулы Майера следует, что для вычисления по формуле Майера оценки вириального коэффициента B_n по известным оценкам майеровских коэффициентов b_n при $n \leq 10$ требуется произвести менее 2440 арифметических операций.

Это — ничтожно малое число арифметических операций по сравнению с числом операций, необходимых для получения оценки даже первых вириальных коэффициентов, таких как B_4, B_5, B_6 (и как майеровских коэффициентов b_4, b_5, b_6). Ведь при процедуре вычисления оценок этих коэффициентов методом Монте-Карло производится порядка 10^{10} и более статистических испытаний. Отсюда вытекает следующее

Замечание 13. Сложность процесса вычисления оценки вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$, основанного на представлении этого коэффициента формулой Майера и формулами (52) и (47'), незначительно превышает сложность всех вычислений, осуществляемых на первом этапе этого процесса. Это дает возможность использовать критерий сложности всех вычислений, осуществляемых на первом этапе, в качестве критерия сложности представления этого вириального коэффициента формулой Майера и формулами (52) и (48). ■

Разумеется, сложность процедуры вычисления оценок майеровских коэффициентов зависит от их представлений. Для краткости сложность процедуры вычисления оценок всех майеровских коэффициентов из совокупности $\{b_2, b_3, \dots, b_n\}$ с помощью данных их представлений мы будем называть **сложностью данной совокупности представлений майеровских коэффициентов**.

Опираясь на замечание 13, будем считать, что критерием сложности представления вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ формулой Майера и формулами (52) и (48) является критерий сложности совокупности, состоящей из представлений майеровских коэффициентов $b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)$. Аналогично, мы будем считать, что критерием сложности представления термодинамического предела B_n вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ формулой Майера и формулами (53) и (47) является критерий сложности совокупности $\{b_2, b_3, \dots, b_n\}$, состоящей из представлений термодинамического пределов майеровских коэффициентов $b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)$.

В рассматриваемых ниже случаях майеровские коэффициенты представляются древесными суммами по формулам (52) и (48). По лемме 3 эти представления являются базовыми линейными комбинациями с коэффициентами незначительной сложности.

В дальнейшем изложении мы будем рассматривать только базовые линейные комбинации интегралов с коэффициентами незначительной сложности. Для краткости мы их будем называть **базовыми линейными комбинациями**.

Для того, чтобы оценить сложность совокупности базовых линейных комбинаций, представляющих майеровские коэффициенты b_2, b_3, \dots, b_n , нужно ввести критерии сложности оценки конечной совокупности базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности. С этой целью введем следующие обозначения:

$\mathfrak{L} = \{L\}$ — конечная совокупность базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности;

$\mathfrak{U}(\mathfrak{L}) = \{U(L) : L \in \mathfrak{L}\}$ — совокупность всех множеств, ассоциированных с базовыми линейными комбинациями, принадлежащими совокупности \mathfrak{L}

Определение 24. Совокупность $\mathfrak{U}(\mathfrak{L})$ называется **совокупностью множеств, ассоциированной с совокупностью \mathfrak{L} базовых линейных комбинаций**. ■

Определение 25. Совокупность множеств $\mathfrak{U}(\mathfrak{L})$ называется **упорядоченной**, если существует такое связное, ограниченное и измеримое по Лебегу множество $\Lambda \subset \mathbf{R}^\nu$, что ассоциированное множество $U(L)$ любой базовой линейной комбинации $L \in \mathfrak{L}$ может быть представлено в виде: $U(L) = \Lambda^k$, где k — порядок линейной комбинации L . При этом множество Λ называется **сопряженным с совокупностью \mathfrak{L}** . ■

Определение 26. Конечная совокупность базовых линейных комбинаций \mathfrak{L} называется **базовой**, если она удовлетворяет одному из следующих двух условий:

1) каждая принадлежащая ей базовая линейная комбинация порядка k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$;

2) каждая принадлежащая ей базовая линейная комбинация порядка k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k)$, а совокупность множеств $\mathfrak{U}(\mathfrak{L})$ является упорядоченной. ■

Определение 27. Наибольшее из чисел, служащих в качестве порядка одной из базовых линейных комбинаций, входящих в базовую совокупность \mathfrak{L} , называется **порядком** этой совокупности. ■

Определение 28. Базовые совокупности \mathfrak{L}_1 и \mathfrak{L}_2 называются **сравнимыми**, если они обе имеют один и тот же порядок n и если они обе удовлетворяют одному из следующих двух условий:

1) Любая базовая линейная комбинация порядка k , принадлежащая хотя бы одной из этих двух базовых совокупностей, принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^n)^{k-1})$; здесь $k \leq n$ — порядок этих базовых совокупностей.

2) Каждая из этих двух базовых совокупностей обладает сопряженным множеством, и эти два сопряженных множества совпадают друг с другом. ■

В дальнейшем изложении мы будем рассматривать только такие совокупности линейных комбинаций интегралов, которые являются базовыми совокупностями.

Каждый из предлагаемых критериев сложности оценки базовой совокупности линейных комбинаций порождается одним из изложенных выше критериев сложности базовых линейных комбинаций. Обозначим Cr'_i , где $i = 1, 2, 3$, критерий сложности оценки базовой совокупности линейных комбинаций, порожденный критерием Cr_i .

Критерий сложности $Cr'_i(\mathfrak{L})$ мы определим на всех базовых совокупностях, состоящих из таких базовых линейных комбинаций, на которых определен критерий сложности Cr_i .

На каждой такой базовой совокупности $\mathfrak{L} = \{L\}$ значение критерия $Cr'_i(\mathfrak{L})$ определим формулой

$$Cr'_i(\mathfrak{L}) = \sum_{L \in \mathfrak{L}} Cr_i(L), \quad (73)$$

Так как критерии Cr_1 и Cr_2 определены на всех базовых линейных комбинациях, то критерии Cr'_1 и Cr'_2 , по их определению формулой (73), определены на всех базовых совокупностях. А так как критерий Cr_3 определен только на базовых линейных комбинациях базовых несобственных сходящихся интегралов, то критерий Cr'_3 по его определению формулой (73), определен на всех базовых совокупностях, состоящих только из базовых линейных комбинаций базовых несобственных сходящихся интегралов.

Выше было замечено, что значение каждого из критериев Cr_1 , Cr_2 и Cr_3 на линейной комбинации L , входящей в область его определения, зависит только от множества $\mathfrak{G}(L)$ графов, служащих метками подынтегральных функций интегралов, входящих в эту линейную комбинацию, и не зависит от ассоциированного множества этой линейной комбинации. Отсюда и из определения критериев Cr'_1 , Cr'_2 и Cr'_3 формулой (73) вытекает, что значение каждого из критериев Cr'_1 , Cr'_2 и Cr'_3 на базовой совокупности, входящей в область его определения, зависит только от множества графов, служащих метками подынтегральных функций интегралов, входящих в линейные комбинации, принадлежащие этой совокупности, и не зависит от сопряженного множества этой базовой совокупности.

Определение 29. Пусть критерий Cr'_i , где i может принимать значения $i = 1, 2, 3$, определен на сравнимых базовых совокупностях \mathfrak{L} и \mathfrak{L}_1 линейных комбинаций.

Будем считать, что **по критерию Cr'_i , базовая совокупность \mathfrak{L}_1 значительно сложнее базовой совокупности \mathfrak{L}** , если $Cr'_i(\mathfrak{L}_1) > Cr_i(\mathfrak{L})$. Если же $Cr_i(\mathfrak{L}_1) = Cr_i(\mathfrak{L})$, то будем считать, что по критерию Cr'_i сложность одной из этих двух базовых совокупностей **равна или незначительно отличается** от сложности другой из них, и

говорить что по критерию Cr'_i сложность одной из них **приблизительно равна** сложности другой. Если известно, что базовая совокупность \mathfrak{L}_1 сложнее базовой совокупности \mathfrak{L} , и $Cr_i(\mathfrak{L}_1) = Cr_i(\mathfrak{L})$, то будем считать, что по критерию Cr'_i совокупность \mathfrak{L}_1 **незначительно сложнее** совокупности \mathfrak{L} . ■

Пусть L_0 — базовая линейная комбинация с коэффициентами незначительной сложности, принадлежащая области определения критерия сложности Cr_i . Поставим ей в соответствие совокупность $\mathfrak{L}_0 = \{L_0\}$, состоящую из одной линейной комбинации L_0 . Очевидно, что базовая линейная комбинация L_0 и совокупность \mathfrak{L}_0 имеют одну и ту же сложность вычислений.

Совокупность \mathfrak{L}_0 по ее определению принадлежит области определения критерия сложности Cr'_i . Поэтому для нее определено значение критерия сложности Cr'_i . По определению критерия Cr'_i формулой (73) имеет место равенство

$$Cr'_i(\mathfrak{L}_0) = Cr_i(L_0). \quad (74)$$

Определение 30. Базовая совокупность \mathfrak{L} и базовая линейная комбинация L_0 называются **сравнимыми**, если они обе имеют один и тот же порядок n , и если любая базовая линейная комбинация $L \in \mathfrak{L}$ порядка n является сравнимой с линейной комбинацией L_0 . ■

Это определение вместе с равенством (74) дают возможность ввести определение, предоставляющее возможность сравнивать сложность всякой базовой линейной комбинации L_0 , на которой определен критерий Cr_i , со сложностью сравнимой с ней базовой совокупности $\mathfrak{L}' = \{L\}$, на которой определен критерий Cr'_i .

Используя равенство (74), дадим следующее

Определение 31. Пусть L — базовая линейная комбинация, на которой определен критерий Cr_i ; а \mathfrak{L} — сравнимая с ней базовая совокупность линейных комбинаций. Будем считать, что по критерию Cr'_i базовая линейная комбинация L **значительно сложнее совокупности базовых линейных комбинаций \mathfrak{L}** , если $Cr_i(L) > Cr'_i(\mathfrak{L})$. Если же $Cr_i(L) < Cr'_i(\mathfrak{L})$, то будем считать, что по критерию Cr'_i базовая линейная комбинация L **значительно проще совокупности базовых линейных комбинаций \mathfrak{L}** .

В случае, когда $Cr_i(L) = Cr'_i(\mathfrak{L})$, будем считать, что по критерию Cr'_i сложность базовой линейной комбинации L **приблизительно равна сложности совокупности базовых линейных комбинаций \mathfrak{L}** . ■

Обозначим $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda) = \{L\}$ множество всех древесных сумм, являющихся представлениями по формулам (52) и (48) майровских коэффициентов, принадлежащих множеству $(\mathbf{b}_{1,n-1}) = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}$. Следуя изложенному выше, мы полагаем, что критерий сложности множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ древесных сумм является критерием сложности представления вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ по формуле (65) Майера и формулам (52) и (48).

Лемма 5. Пусть потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности. И пусть множество Λ есть связное, ограниченное и измеримое по Лебегу множество, содержащееся в пространстве \mathbf{R}^{ν} . Тогда множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ является базовым множеством базовых линейных комбинаций. Это множество имеет порядок n , а множество Λ является сопряженным множеством этого базового множества.

Доказательство. Из определения множества древесных сумм $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ следует, что всякая принадлежащая этому множеству древесная сумма является представле-

нием некоего майеровского коэффициента $b_k(\Lambda)$ из совокупности майеровских коэффициентов $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda) = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}$. Из определения множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ по лемме 3 следует, что эта древесная сумма является базовой линейной комбинацией порядка k с коэффициентами незначительной сложности. Таким образом, множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ является конечным множеством всех базовых линейных комбинаций, являющихся представлениями по формулам (52) и (48) майеровских коэффициентов, принадлежащих множеству $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$. При этом представлением майеровского коэффициента $b_k \in \mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$ является базовая линейная комбинация порядка k из множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$.

Из определения этих базовых линейных комбинаций из множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ формулами (52) и (48) следует, что с базовой линейной комбинацией порядка k из этого множества ассоциировано множество Λ^k . Из условий леммы 5 следует, что при любом натуральном числе k это ассоциированное множество Λ^k является связным, ограниченным и измеримым по Лебегу множеством [21], содержащимся в пространстве $(\mathbf{R}^\nu)^k$. Отсюда, во-первых, следует, что при любом $k = 2, 3, \dots, n$ базовая линейная комбинация порядка k из множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k)$ по определению этого множества. Во-вторых, отсюда по определению 25 следует, что совокупность всех множеств, ассоциированных с базовыми линейными комбинациями, принадлежащими множеству $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$, является упорядоченной, а множество Λ является сопряженным с множеством $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$.

Из полученных результатов по определению 26 следует, что множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ является базовым множеством базовых линейных комбинаций.

Всякий майеровский коэффициент $b_k(\Lambda)$ из совокупности майеровских коэффициентов $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$, представляется базовой линейной комбинацией порядка k из базового множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$, а это базовое множество содержит только базовые линейные комбинации, являющиеся представлениями майеровских коэффициентов, принадлежащих множеству $\mathbf{b}_{1,n-1}(\Lambda)$. Стало быть, ни одна базовая линейная комбинация порядка более чем n не принадлежит базовому множеству $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$. С другой стороны, это базовое множество содержит базовую линейную комбинацию порядка n , являющуюся представлением майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$, принадлежащего множеству $\mathbf{b}_{1,n-1}$. Значит, число n является наибольшим из чисел, служащих в качестве порядка одной из базовых линейных комбинаций, входящих в базовую совокупность $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$. Отсюда по определению 27 следует, что число n является порядком базовой совокупности $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$. Лемма 5 полностью доказана. ►

Пример 4 Рассмотрим множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda) = \{L\}$ всех древесных сумм, являющихся представлениями по формулам (52) и (48) майеровских коэффициентов, принадлежащих множеству $\mathbf{b}_{1,n-1} = \{b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)\}$. При этом мы будем полагать, что выполняются условия леммы 5. По лемме 5 это множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ является базовым множеством базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности и имеет порядок n , а множество Λ является сопряженным множеством этого базового множества. Множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ содержит только одну базовую линейную комбинацию порядка n . Ее ассоциированным множеством является множество Λ^n . По определению 17 она сравнима с представлением Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$. Это утверждение опирается на изложенный в примере 1 анализ представления Ри-Гувера, где показано, что это представление коэффициента $B_n(\Lambda)$ является базовой линейной комбинацией с коэффициентами незначительной сложности и имеет порядок n , а множество Λ^n является ассоциированным множеством этой базовой линейной

комбинации. Из этого утверждения по определению 30 следует, что базовое множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$ сравнимо с представлением Ри-Гувера вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$. Так как критерии Cr_1 и Cr_2 определены на этом представлении Ри-Гувера, а критерии Cr'_1 и Cr'_2 определены на базовом множестве $\mathfrak{L}_{TR}(n, \Lambda)$, то сравним по этим критериям сложность представления вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ формулами (65), (52) и (48) со сложностью представления Ри-Гувера этого коэффициента при указанных ниже значениях n . Так как значения критериев Cr'_1 , Cr'_2 и Cr'_3 не зависят от множества Λ , сопряженного с базовым множеством, то в примерах 4 и 5 символ Λ лишь обозначает, что множество Λ , сопряженное с базовым множеством является связным, ограниченным и измеримым по Лебегу множеством, содержащимся в пространстве \mathbf{R}^ν .

В таблице 4 приведены вычисленные значения критерия $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n))$ при $n = \overline{2, 10}$. В частности, $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(8, \Lambda)) = 857$, $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(9, \Lambda)) = 3709$, $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(10, \Lambda)) = 17056$. Сравнивая эти значения со значениями критерия сложности Cr_1 представлений Ри-Гувера, приведенными в таблице 1, мы видим, что значения критерия $Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n))$ при $n = 8, 9, 10$ меньше значений критерия сложности $Cr_1(L_{RH}(n))$ (см. принятые обозначения в таблицах) для соответствующих представлений Ри-Гувера. Отсюда по определениям 30 и 31 следует, что при этих значениях n представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ формулами (65), (52) и (48) значительно проще представления Ри-Гувера этого коэффициента при любом ограниченном объеме Λ . ►

Пример 5 Сравним по критерию Cr'_2 сложность представлений вириальных коэффициентов $B_3(\Lambda)$, $B_4(\Lambda)$, $B_5(\Lambda)$, $B_6(\Lambda)$ и $B_7(\Lambda)$ по методу Ри-Гувера со сложностью их представлений в виде многочлена от древесных сумм по формулам (65), (52) и (48). В таблице 5 приведены, в частности, следующие результаты:

$$\begin{aligned} Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(3, \Lambda)) &= 6, & Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(4, \Lambda)) &= 28, & Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(5, \Lambda)) &= 121, \\ Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(6, \Lambda)) &= 504, & Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(7, \Lambda)) &= 2406, \\ Cr_2(L_{RH}(3)) &= 3, & Cr_2(L_{RH}(4)) &= 12, & Cr_2(L_{RH}(5)) &= 50, \\ Cr_2(L_{RH}(6)) &= 345, & Cr_2(L_{RH}(7)) &= 3591. \end{aligned} \quad (75)$$

Из сравнения этих значений критериев сложности Cr'_2 и Cr_2 следует, что при значениях $n = 3, 4, 5, 6$ представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ формулами (65), (52) и (48) значительно сложнее представления Ри-Гувера этого коэффициента при любом ограниченном объеме Λ . А при значении $n = 7$ представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ формулами (65), (52) и (48) значительно проще, чем представление Ри-Гувера этого коэффициента при любом ограниченном объеме Λ . ►

9. Перейдем теперь к представлениям термодинамических пределов вириальных коэффициентов $B_n(\Lambda)$ в виде многочленов от древесных сумм, представляющих по формулам (59) и (47) коэффициенты a_n . Для краткости термодинамический предел вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ будем называть **предельным вириальным коэффициентом** и обозначать B_n . Эти представления предельных вириальных коэффициентов при $n > 1$ имеют вид [9, 11, 17, 36]:

$$B_n = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} \|\mathbf{m}\|! e_{\|\mathbf{m}\|} \prod_{j=1}^n [\tau_j]^{m_j} (m_j!)^{-1}, \quad n \geq 2, \quad (76)$$

где коэффициенты e_μ и τ_μ определяются формулами

$$e_1 = \tau_1 = 1; \quad e_\mu = \mu^{-1} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} \|\mathbf{m}\|! \prod_{j=1}^{\mu-1} (m_j!)^{-1} [(j+1)a_{j+1}]^{m_j}, \quad \mu \geq 2; \quad (77)$$

$$\tau_\mu = (\mu-1)! \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} [(\mu - \|\mathbf{m}\|)!]^{-1} \prod_{j=1}^{\mu-1} (m_j!)^{-1} \{-(j+1)a_{j+1}\}^{m_j}. \quad \mu \geq 2. \quad (78)$$

По этим формулам предельный вириальный коэффициент B_n представляется в виде многочлена от древесных сумм, представляющих коэффициенты a_n .

Представляет интерес вопрос: какова же сложность вычислений оценки вириального коэффициента B_n с помощью его представления формулами (76), (77) и (78)?

Чтобы оценить сложность этих вычислений, прежде всего представим предельный вириальный коэффициент B_n и величины e_m и τ_m в более удобном для этой цели виде.

А именно, используя введенную формулой (67) функцию $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$, представления величин B_n , e_m и τ_m формулами соответственно (76), (77) и (78) преобразуем следующим образом:

$$e_1 = 1; \quad e_\mu = \mu^{-1} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} \|\mathbf{m}\|! Q_m(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad \mu \geq 2, \quad (79)$$

где

$$x_j = a_{j+1}, \quad y_j = j+1, \quad 1 \leq j < \mu; \quad (80)$$

$$\tau_1 = 1; \quad \tau_\mu = (\mu-1)! \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} \{[\mu - \|\mathbf{m}\|]!\}^{-1} Q_m(\mathbf{x}; -\mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad \mu \geq 2, \quad (81)$$

где векторы \mathbf{y} и \mathbf{x} определены формулами (80), а вектор $-\mathbf{y}$ определен формулой

$$-\mathbf{y} = (-y_1, -y_2, \dots, -y_{\mu-1}); \quad (82)$$

$$B_n = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} \|\mathbf{m}\|! e_{\|\mathbf{m}\|} Q_{n+1}(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad n \geq 2, \quad (83)$$

где величины e_j при $j = \overline{1, n}$ определены формулами (79),

$$x_j = \tau_j, \quad y_j = 1 \quad \text{при} \quad j = \overline{1, n}, \quad (84)$$

а величины τ_j определены формулами (81), где векторы \mathbf{y} и \mathbf{x} определены формулами (80), а вектор $-\mathbf{y}$ определен формулой (82).

В этих преобразованных представлениях вириальный коэффициент B_n также, как и в представлениях формулами (76), (77) и (78), представляется в виде многочлена от древесных сумм, представляющих коэффициенты a_n .

Далее, чтобы ответить на поставленный вопрос, нужно четко определить процесс вычислений оценки вириального коэффициента B_n . В данной статье предлагается следующая схема этого процесса:

Этап 1. Вычисление оценок значений коэффициентов a_k при всех $k = \overline{2, n}$. Оценку значения коэффициента a_k обозначим a'_k , $k = \overline{2, n}$.

Этап 2. Вычисление оценок значений всех величин, принадлежащих множеству $\mathbf{e}_n = \{e_2, e_3, \dots, e_n\}$. Оценку значения величины e_k обозначим e'_k , $k = \overline{2, n}$. Вычисление производится по формулам (79) и (80), в которые вместо коэффициентов a_k подставляются вычисленные на этапе 1 оценки a'_k этих коэффициентов, а вместо величины e_k — оценка e'_k значения этой величины.

Этап 3. Вычисление оценок значений всех величин, принадлежащих множеству $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_2, \tau_3, \dots, \tau_n\}$. Оценку значения величины τ_k обозначим τ'_k , $k = \overline{2, n}$. Вычисление производится по формулам (81) и (80), в которые вместо коэффициентов a_k подставляются вычисленные оценки этих коэффициентов, а вместо величины τ_k — оценка τ'_k значения этой величины.

Этап 4. Вычисление оценки значения данного вириального коэффициента B_n . Оценку значения этого коэффициента обозначим B'_n . Вычисление производится по формуле (83), в которую вместо этого коэффициента подставляется его оценка B'_n , а вместо величин e_k и τ_k подставляются вычисленные на этапах 2 и 3 оценки значений этих величин e'_k и τ'_k .

Нашей ближайшей целью является оценить сверху число арифметических операций, потребных для вычислений, осущетвляемых на этапах 2–4.

Введем обозначения:

$$\mathbf{e}'_n = \{e'_1, e'_2, \dots, e'_n\}, \quad \boldsymbol{\tau}'_n = \{\tau'_1, \tau'_2, \dots, \tau'_n\}, \quad \mathbf{a}'_n = \{a'_1, a'_2, \dots, a'_n\}, \quad n \geq 2;$$

$E_1(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu)$ — оценка сверху числа арифметических операций, которые при данном значении $\mu \leq n$ и данном векторе $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ потребны для вычисления оценки значения произведения $\|\mathbf{m}\|! Q_\mu(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$, где $(\mu - 1)$ -мерные векторы \mathbf{x} и \mathbf{y} определяются по формулам (80), в которые вместо коэффициентов a_k подставляются вычисленные на этапе 1 оценки значений этих коэффициентов;

$E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_\mu)$ — оценка сверху числа арифметических операций, которые при данном значении $\mu \leq n$ и данном векторе $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ потребны для вычисления оценки значения произведения $\mu! \{[\mu - \|\mathbf{m}\|]!\}^{-1} Q_\mu(\mathbf{x}; -\mathbf{y}; \mathbf{m})$, где $(\mu - 1)$ -мерные векторы \mathbf{x} и \mathbf{y} определены формулами (80), в которые вместо коэффициентов a_k подставляются вычисленные на этапе 1 оценки значений этих коэффициентов, а вектор $-\mathbf{y}$ определен формулой (82);

$$\alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}'_n, \boldsymbol{\tau}'_n) = \|\mathbf{m}\|! e_{\|\mathbf{m}\|} Q_{n+1}(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m}), \quad \mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1), \quad (85)$$

где n -мерные векторы \mathbf{y} и \mathbf{x} определяются по формулам (84), в которые вместо величин τ_k подставляются вычисленные на этапе 3 оценки значений этих величин, а вместо величины $e_{\|\mathbf{m}\|}$ подставляется вычисленная на этапе 2 оценка значения этой величины;

$E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}'_n, \boldsymbol{\tau}'_n)$ — оценка сверху числа арифметических операций, которые при данном векторе $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)$ потребны для вычисления значения произведения $\alpha(\mathbf{m} \mid \mathbf{e}'_n, \boldsymbol{\tau}'_n)$, где n -мерные векторы \mathbf{y} и \mathbf{x} определяются по формулам (84), в которые вместо величин τ_k подставляются вычисленные на этапе 3 оценки значений этих величин, а вместо величины $e_{\|\mathbf{m}\|}$ подставляется вычисленная на этапе 2 оценка значения этой величины;

$E(e_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ — оценка сверху числа арифметических операций, потребных на этапе 2 для вычисления оценки значения величины e_μ при вычисленных на этапе 1 оценках значений коэффициентов из множества $\mathbf{a}_\mu = \{a_1, a_2, \dots, a_\mu\}$;

$E(\tau_\mu | \mathbf{a}_\mu)$ — оценка сверху числа арифметических операций, потребных на этапе 3 для вычисления оценки значения величины τ_μ при вычисленных на этапе 1 оценках значений коэффициентов из множества $\mathbf{a}_\mu = \{a_1, a_2, \dots, a_\mu\}$;

$E(\mathbf{e}_n | \mathbf{a}_n)$ — оценка сверху числа арифметических операций, потребных на этапе 2 для вычисления оценок значений всех величин из совокупности $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ по формулам (79) и (81), в которые при вычисленных на этапе 1 оценках значений коэффициентов из множества \mathbf{a}_n ;

$E(\boldsymbol{\tau}_n | \mathbf{a}_n)$ — оценка сверху числа арифметических операций, потребных на этапе 3 для вычисления оценок значений всех величин из совокупности $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$ при вычисленных на этапе 1 оценках значений коэффициентов из множества $(\mathbf{a})_n = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$;

$E(B_n | \mathbf{e}_n, \boldsymbol{\tau}_n)$ — оценка сверху числа арифметических операций, потребных на этапе 4 для вычисления оценки значения вириального коэффициента B_n при полученных в результате вычислений на этапах 1, 2 и 3 оценках всех величин из совокупности $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ и всех величин из совокупности $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$;

$E(B_n | \mathbf{a}_n)$ — оценка сверху числа арифметических операций, потребных на этапах 2, 3 и 4 для оценки значения вириального коэффициента B_n при вычисленных на этапе 1 оценках значений всех коэффициентов из множества $\mathbf{a}_n = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$.

Найдем оценку сверху числа арифметических операций, потребных на этапе 2 для вычисления оценок значений всех величин из совокупности $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ при вычисленных на этапе 1 оценках значений коэффициентов из множества \mathbf{a}_n .

Из определения множества векторов $\mathbf{M}(\mu)$ следует, что при любом $\mu \geq 2$ всякий вектор $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ удовлетворяет неравенству

$$\|\mathbf{m}\| \leq \mu - 1. \quad (86)$$

Из определения оценки $E_1(\mu, \mathbf{m} | \mathbf{a}_n)$, определения функции $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ формулой (67), неравенства (86) и замечания 11 вытекает, что при любом $\mu \geq 2$ и любом векторе $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ имеет место неравенство

$$E_1(\mu, \mathbf{m} | \mathbf{a}_n) \leq 7(\mu - 1). \quad (87)$$

Из определения величины e_μ формулой (79), неравенства (87), замечания 12 и определений оценок $E(e_\mu | \mathbf{a}_\mu)$ и $E_1(\mu, \mathbf{m} | \mathbf{a}_n)$ вытекает оценка

$$E(e_\mu | \mathbf{a}_\mu) \leq \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} E_1(\mu, \mathbf{m} | \mathbf{a}_\mu) \leq 7p(\mu - 1)(\mu - 1). \quad (88)$$

Используя неравенство (88) и монотонное возрастание функции $p(n)$, из определений оценок $E(e_\mu | \mathbf{a}_\mu)$ и $E(\mathbf{e}_n | \mathbf{a}_n)$ получаем неравенство

$$E(\mathbf{e}_n | \mathbf{a}_n) \leq \sum_{\mu=2}^n E(e_\mu | \mathbf{a}_\mu) \leq 7p(n-1) \sum_{\mu=2}^n (\mu - 1) = 7p(n-1)n(n-1)/2. \quad (89)$$

Найдем оценку сверху числа арифметических операций, потребных на этапе 3 для вычисления оценок значений всех величин из совокупности $\boldsymbol{\tau}_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$ при вычисленных на этапе 1 оценках коэффициентов из множества \mathbf{a}_n .

Из определения оценки $E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n)$, определения функции $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ формулой (67), неравенства (86) и замечания 11 вытекает, что при любом $\mu \geq 2$ и любом векторе $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)$ имеет место неравенство

$$E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n) \leq 7(\mu - 1). \quad (90)$$

Из определения величины τ_μ формулой (81), неравенства (90), замечания 12 и определений оценок $E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_\mu)$ и $E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n)$ вытекает оценка

$$E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_n) \leq \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(\mu)} E_2(\mu, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n) \leq 7p(\mu - 1)(\mu - 1). \quad (91)$$

Используя неравенство (91) и монотонное возрастание функции $p(n)$, из определений оценок $E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_n)$ и $E(\tau_n \mid \mathbf{a}_n)$ получаем неравенство

$$E(\tau_n \mid \mathbf{a}_n) \leq \sum_{\mu=1}^n E(\tau_\mu \mid \mathbf{a}_n) \leq 7p(n-1) \sum_{\mu=2}^n (\mu - 1) = 7p(n-1)n(n-1)/2. \quad (92)$$

Найдем оценку сверху числа арифметических операций, потребных для вычисления оценки значения данного вириального коэффициента B_n при вычисленных на этапе 2 оценках значений всех величин e_i , $i = \overline{1, n}$ из совокупности $\mathbf{e}_n = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ и при вычисленных на этапе 3 оценках значений всех величин τ_i , $i = \overline{1, n}$ из совокупности $\tau_n = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n\}$.

Из неравенства (86), определения произведения $\alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \tau_n)$ формулой (85), определения оценки $E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \tau_n)$, определения функции $Q_n(\mathbf{x}; \mathbf{y}; \mathbf{m})$ формулой (67) и замечания 11 вытекает, что при любом $n \geq 2$ и любом векторе $\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)$ имеет место неравенство

$$E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \tau_n) \leq 5n. \quad (93)$$

Из определения вириального коэффициента B_n формулой (83) и определения произведения $\alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \tau_n)$ формулой (85) следует, что коэффициент B_n может быть представлен суммой

$$B_n = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} \alpha(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{e}_n, \tau_n). \quad (94)$$

Отсюда, используя определения оценок $E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n)$ и $E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \tau_n)$, получаем неравенство

$$E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \tau_n) \leq \sum_{\mathbf{m} \in \mathbf{M}(n+1)} E_3(n, \mathbf{m} \mid \mathbf{a}_n). \quad (95)$$

Отсюда по замечанию 12 и неравенству (93) следует оценка

$$E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \tau_n) \leq 5np(n). \quad (96)$$

Применяя определения оценок $E(\mathbf{e}_n \mid \mathbf{a}_n)$, $E(\tau_n \mid \mathbf{a}_n)$, $E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \tau_n)$ и $E(B_n \mid \mathbf{a}_n)$, получаем оценку

$$E(B_n \mid \mathbf{a}_n) \leq E(\mathbf{e}_n \mid \mathbf{a}_n) + E(\tau_n \mid \mathbf{a}_n) + E(B_n \mid \mathbf{e}_n, \tau_n). \quad (97)$$

Из неравенств (97), (89), (92) и (96) вытекает оценка

$$E(B_n \mid \mathbf{a}_n) \leq 7p(n-1)n(n-1)/2 + 7p(n-1)n(n-1)/2 + p(n)5n = 7p(n-1)n(n-1) + 5np(n). \quad (98)$$

В частности, при $n \leq 10$ из формулы (76) и замечания 12 следует, что для вычисления оценки значения предельного вириального коэффициента B_n по вычисленным на этапе 1 оценкам значений коэффициентов a_2, a_3, \dots, a_n требуется произвести менее 21000 арифметических операций.

Это — ничтожно малое число арифметических операций по сравнению с числом операций, необходимых для получения оценки любого из коэффициентов a_4, a_5, \dots . Ведь при процедуре вычисления оценок этих коэффициентов методом Монте-Карло производится порядка 10^{10} и более статистических испытаний. Отсюда следует

Замечание 14. Основная сложность процедуры вычисления оценки предельного вириального коэффициента посредством его представления в виде многочлена от коэффициентов a_n по формулам (76), (77), (78), (59) и (47) при $n \geq 4$ состоит в сложности процедуры вычисления оценок всех коэффициентов из совокупности $\mathbf{a}_{1,n-1} = \{a_2, a_3, \dots, a_n\}$. При этом сложность процедуры вычисления оценки предельного вириального коэффициента B_n незначительно превышает сложность процедуры вычисления оценок всех коэффициентов a_m из этой совокупности. Значит, критерий сложности представления этой совокупности является критерием сложности данного представления вириального коэффициента B_n . ■

Введем обозначения:

$\mathfrak{L}_{TR}(n, 0) = \{L\}$ — множество всех древесных сумм, каждая из которых представляет по формулам (59) и (47) коэффициент из совокупности коэффициентов $\mathbf{a}_{1,n-1}$, где $n \geq 2$;

$\mathfrak{L}_{TR}(n) = \{L\}$ — множество всех древесных сумм, каждая из которых представляет по формулам (53) и (47) предельный майеровский коэффициент из совокупности коэффициентов $\mathbf{b}_{1,n-1} = \{b_2, b_3, \dots, b_n\}$, где $n \geq 2$.

Лемма 6. Пусть потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, а парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности. Тогда множество $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ является базовым множеством базовых линейных комбинаций. Это множество имеет порядок n , и при каждом $k \in \{2, 3, \dots, n\}$ принадлежащая ему базовая линейная комбинация порядка k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$.

Доказательство. Из определения множества древесных сумм $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ следует, что это множество является конечным мощности $n - 1$, а всякая принадлежащая этому множеству древесная сумма является представлением по формулам (53) и (47) некоего предельного майеровского коэффициента b_k , где $1 < k \leq n$, из совокупности коэффициентов $b_{1,n-1}$. По лемме 3 эта древесная сумма является базовой линейной комбинацией порядка k с коэффициентами незначительной сложности. Таким образом, множество $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ является конечным множеством всех базовых линейных комбинаций, являющихся представлениями по формулам (53) и (47) предельных майеровских коэффициентов, принадлежащих множеству $\mathbf{b}_{1,n-1}$. При этом представлением предельного майеровского коэффициента $b_k \in \mathbf{b}_{1,n-1}$ является базовая линейная комбинация порядка k из множества $\mathfrak{L}_{TR}(n)$.

Из определения этой базовой линейной комбинации порядка k формулами (53) и (47) следует, что областью интегрирования всех интегралов, входящих в эту линейную комбинацию, является пространство $(\mathbf{R}^\nu)^{k-1}$. Следовательно, эта линейная комбинация порядка k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$ по определению этого множества.

Итак, множество $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ является конечным множеством базовых линейных комбинаций, в котором каждая принадлежащая ему базовая линейная комбинация порядка

k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$. Значит, это множество является базовым множеством базовых линейных комбинаций по определению 26.

Всякий майеровский коэффициент b_k из совокупности майеровских коэффициентов $\mathbf{b}_{1,n-1}$, представляется базовой линейной комбинацией порядка k из базового множества $\mathfrak{L}_{TR}(n)$, а это базовое множество содержит только базовые линейные комбинации, являющиеся представлениями майеровских коэффициентов, принадлежащих множеству $\mathbf{b}_{1,n-1}$. Стало быть, ни одна базовая линейная комбинация порядка более чем n не принадлежит базовому множеству $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. С другой стороны, это базовое множество содержит базовую линейную комбинацию порядка n , являющуюся представлением майеровского коэффициента b_n , принадлежащего множеству $\mathbf{b}_{1,n-1}$. Значит, число n является наибольшим из чисел, служащих в качестве порядка одной из базовых линейных комбинаций, входящих в базовую совокупность $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. Отсюда по определению 27 следует, что число n является порядком базовой совокупности $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. Лемма 6 полностью доказана. ►

Лемма 7. Пусть потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, а парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности. Тогда множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ является базовым множеством базовых линейных комбинаций. Это множество имеет порядок n , а каждая принадлежащая ему базовая линейная комбинация порядка k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$.

Доказательство. Из определения множества древесных сумм $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ следует, что это множество является конечным мощностью $n - 1$, а всякая принадлежащая этому множеству древесная сумма является представлением по формулам (59) и (47) некоего коэффициента a_k , где $1 < k \leq n$, из совокупности коэффициентов $\{a_2, a_3, \dots, a_n\}$. По лемме 4 эта древесная сумма является базовой линейной комбинацией порядка k с коэффициентами незначительной сложности. Таким образом, множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ является конечным множеством всех базовых линейных комбинаций, являющихся представлениями по формулам (59) и (47) коэффициентов a_k , принадлежащих множеству $\mathbf{a}_{1,n-1}$. При этом представлением коэффициента $a_k \in \mathbf{a}_{1,n-1}$ является базовая линейная комбинация порядка k из множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$.

Из определения этой базовой линейной комбинации порядка k формулами (59) и (47) следует, что областью интегрирования всех интегралов, входящих в эту линейную комбинацию, является пространство $(\mathbf{R}^\nu)^{k-1}$. Следовательно, эта линейная комбинация порядка k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$ по определению этого множества.

Итак, множество $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ является конечным множеством базовых линейных комбинаций, в котором каждая принадлежащая ему базовая линейная комбинация порядка k принадлежит множеству $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$. Значит, это множество является базовым множеством базовых линейных комбинаций по определению 26.

Всякий коэффициент a_k из множества $\mathbf{a}_{1,n-1}$, представляется базовой линейной комбинацией порядка k из базового множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$, а это базовое множество содержит только базовые линейные комбинации, являющиеся представлениями коэффициентов a_k , принадлежащих множеству $\mathbf{a}_{1,n-1}$. Стало быть, ни одна базовая линейная комбинация порядка более чем n не принадлежит базовому множеству $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$. С другой стороны, это базовое множество содержит базовую линейную комбинацию порядка n , являющуюся представлением коэффициента a_n , принадлежащего множеству $\mathbf{a}_{1,n-1}$. Значит, число n является наибольшим из чисел, служащих в качестве порядка одной из базовых линейных комбинаций, входящих в базовую совокупность $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$. Отсюда по определению 27 следует, что число n является порядком базовой совокупности $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$.

Лемма 7 полностью доказана. ►

По определению 28 из Леммы 6 и Леммы 7 вытекает

Следствие 7 *Базовые множества $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ и $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ сравнимы*

При любом $k > 1$ множество $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$ является подмножеством определенного формулой (43) множества $D(Cr_3)$, являющегося областью определения критерия сложности Cr_3 . Отсюда по леммам 6 и 7 следует, что множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ и $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ при любом $n > 1$ являются базовыми множествами, содержащими только такие базовые линейные комбинации, которые принадлежат множеству $D(Cr_3)$. Множество $D(Cr_3)$ содержится во множестве $D(Cr_1)$, определенном формулой (39) и являющемся областью определения критериев сложности Cr_1 и Cr_2 . Значит, на множестве $\mathfrak{L}(k, (\mathbf{R}^\nu)^{k-1})$ определены три критерия сложности: Cr_1 , Cr_2 и Cr_3 . Отсюда следует, что при любом $n > 1$ множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ и $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ являются базовыми множествами, содержащими только такие базовые линейные комбинации, на которых определены три критерия сложности: Cr_1 , Cr_2 и Cr_3 . Поэтому эти множества принадлежат области определения критериев сложности: Cr'_1 , Cr'_2 и Cr'_3 , — определенных формулой (73). Это дает возможность сравнить по этим критериям сложность конечного множества $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ древесных сумм, являющихся представлениями коэффициентов a_2, a_3, \dots, a_n , со сложностью конечного множества $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ древесных сумм, являющихся представлениями предельных майеровских коэффициентов b_2, b_3, \dots, b_n .

В качестве примеров при $n = 2, 10$ для совокупностей древесных сумм вида $\mathfrak{L}_{TR}(n) = \{L\}$ и совокупностей древесных сумм вида $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0) = \{L\}$ были вычислены значения критериев Cr'_1 (см. таблицу 4), Cr'_2 (см. таблицу 5) и Cr'_3 (см. таблицу 6).

Сравнение значений критериев Cr'_1 , Cr'_2 и Cr'_3 на совокупностях древесных сумм вида $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ с их значениями на совокупностях древесных сумм вида $\mathfrak{L}_{TR}(n)$ подтверждает вывод, непосредственно следующий из приведенных выше результатов: при $n > 3$ базовая совокупность $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ значительно проще сравнимой с ней базовой совокупностью $\mathfrak{L}_{TR}(n)$. Значит, при $n > 3$ всякая функция незначительной сложности от базовой совокупности $\mathfrak{L}_{TR}(n, 0)$ значительно проще всякой функции незначительной сложности от сравнимой с ней базовой совокупности $\mathfrak{L}_{TR}(n)$.

10. Методом каркасных сумм можно получить и представления коэффициентов степенных рядов, не являющиеся древесными суммами. Так, методом каркасных сумм автором было получены представления вириальных коэффициентов в виде:

$$B_n = -\frac{n-1}{n!} \sum_{\mathbf{C} \in \mathfrak{C}(n)} J(\mathbf{C}). \quad (99)$$

Здесь $\mathfrak{C}(n)$ — множество ансамблей каркасных циклов [14–16, 18–20, 37–39] всех двусвязных графов с множеством вершин $V_n = \{1, 2, \dots, n\}$; \mathbf{C} — ансамбль каркасных циклов из множества $\mathfrak{C}(n)$;

$$J(\mathbf{C}) = \int_{(\mathbf{R}^\nu)^{n-1}} \prod_{\{u,v\} \in X(S(\mathbf{C}))} f_{uv} \prod_{\{\tilde{u}, \tilde{v}\} \in X_{\text{ad}}(\mathbf{C})} (1 + f_{\tilde{u}, \tilde{v}})(d\mathbf{r})_{1, n-1}, \quad (100)$$

где $S(\mathbf{C})$ — объединение всех циклов ансамбля \mathbf{C} [14–16, 19, 37, 38]; $X(S(\mathbf{C}))$ — множество всех ребер графа $S(\mathbf{C})$ [14, 15, 19, 37]; $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ — множество всех допустимых ребер [14–16, 19, 37, 38] ансамбля \mathbf{C} ; $\{u, v\}$ — ребро, принадлежащее множеству $X(S(\mathbf{C}))$

и инцидентное вершинам u и v ; $\{\tilde{u}, \tilde{v}\}$ — ребро, принадлежащее множеству $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ и инцидентное вершинам \tilde{u} и \tilde{v} .

Из определения интегралов вида $J(\mathbf{C})$ формулой (100) следует, что в каждом из интегралов, являющихся слагаемыми суммы в правой части (99), подинтегральная функция представляет собой произведение майеровских функций, помеченных ребрами циклов, входящих в ансамбль каркасных циклов, маркирующий данный интеграл, и больцмановских функций, помеченных ребрами из множества $X_{\text{ad}}(\mathbf{C}) = \{\{\tilde{u}, \tilde{v}\}\}$. Такую сумму интегралов мы будем называть **каркасной суммой**.

из определения множества $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ следует, что это множество состоит из попарно различных ребер, а каждое ребро, содержащееся в этом множестве, соединяет две несмежные вершины графа $S(\mathbf{C})$.

Теорема 6. *Если потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{r})$ является измеримой функцией, а парное взаимодействие удовлетворяет условиям устойчивости и регулярности, то при любом ансамбле каркасных циклов $\mathbf{C} \in \mathfrak{C}(n)$ интеграл $J(\mathbf{C})$ является несобственным сходящимся базовым интегралом порядка n , а граф $S(\mathbf{C})$ является укомплектованным графом-меткой подинтегральной функции этого интеграла.*

Доказательство. Сначала докажем, что подинтегральная функция интеграла $J(\mathbf{C})$ является базовой.

С этой целью прежде всего докажем, что множества ребер $X(S(\mathbf{C}))$ и $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ образуют каноническую пару множеств $\mathbf{X} = (X(S(\mathbf{C})), X_{\text{ad}}(\mathbf{C}))$ порядка n . Из определения множества ребер $X(S(\mathbf{C}))$ следует, что это множество состоит из попарно различных ребер. Как было отмечено выше, множество $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ также состоит из попарно различных ребер, а каждое ребро, содержащееся в этом множестве, соединяет две несмежные вершины графа $S(\mathbf{C})$. Отсюда следуют два вывода:

- 1) непересекающиеся множества $X(S(\mathbf{C}))$ и $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ образуют упорядоченную пару $\mathbf{X} = (X(S(\mathbf{C})), X_{\text{ad}}(\mathbf{C}))$ множеств;
- 2) вершины всех ребер из множества $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ принадлежат множеству вершин графа $S(\mathbf{C})$.

Так как \mathbf{C} — ансамбль каркасных циклов из множества $\mathfrak{C}(n)$, то, как известно [19], граф $S(\mathbf{C})$ является двусвязным графом с множеством вершин V_n .

Значит, имеет место равенство

$$V(X(S(\mathbf{C}))) \cup V(X_{\text{ad}}(\mathbf{C})) = V_n, \quad (101)$$

где $V(X(S(\mathbf{C})))$ — множество всех вершин графа $S(\mathbf{C})$, а $V(X_{\text{ad}}(\mathbf{C}))$ — множество вершин всех допустимых ребер ансамбля \mathbf{C} .

Из равенства (101) по определению 5 следует, что упорядоченная пара множеств $\mathbf{X} = (X(S(\mathbf{C})), X_{\text{ad}}(\mathbf{C}))$ является канонической парой порядка n .

Из полученных результатов вытекает, что граф $S(\mathbf{C})$ с поставленным ему в соответствие множеством $X_{\text{ad}}(\mathbf{C})$ принадлежит множеству графов $\tilde{\mathfrak{G}}_n$ по определению этого множества.

Отсюда по лемме 2 следует, что помеченное этим графом произведение $\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(S(\mathbf{C}))$ майеровских и больцмановских функций является каноническим произведением порядка n и определяется формулой

$$\tilde{P}_{\tilde{\mathfrak{G}}_n}(S(\mathbf{C})) = \prod_{\{i,j\} \in X(S(\mathbf{C}))} \prod_{\{i',j'\} \in X_{\text{ad}}(\mathbf{C})} f_{ij} \tilde{f}_{i'j'}. \quad (102)$$

По теореме 2 отсюда также следует, что это произведение $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(\tilde{G})$ майеровских и больцмановских функций является базовым произведением порядка n , а граф $S(\mathbf{C})$ является укомплектованным графом-меткой произведения $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(S(\mathbf{C}))$.

Из сравнения формул (100) и (102) следует, что подынтегральная функция интеграла $J(\mathbf{C})$ тождественна базовому произведению функций $\tilde{P}_{\mathfrak{G}_n}(S(\mathbf{C}))$ и, следовательно, является базовым произведением функций порядка n , помеченным графом $S(\mathbf{C})$, а граф $S(\mathbf{C})$ является укомплектованным графом-меткой произведения, являющегося подынтегральной функцией интеграла $J(\mathbf{C})$.

Отсюда по теореме 3 следует, что несобственный интеграл $J(\mathbf{C})$ является базовым сходящимся интегралом порядка n . Теорема 6 полностью доказана. ►

Из теоремы 6 вытекает следующее

Следствие 8. *Каркасная сумма в правой части (99) является, по определению 11 и замечанию 6, базовой линейной комбинацией с коэффициентами незначительной сложности.*

Это обстоятельство позволяет использовать предлагаемые в этой статье критерии Cr_1 , Cr_2 и Cr_3 для сравнения по сложности представлений вириальных коэффициентов каркасными суммами с иными базовыми линейными комбинациями с коэффициентами незначительной сложности. Это обстоятельство также позволяет использовать предлагаемые в этой статье критерии Cr'_1 , Cr'_2 и Cr'_3 для сравнения по сложности представлений предельных вириальных коэффициентов каркасными суммами с представлениями этих коэффициентов многочленами от базовых линейных комбинаций с коэффициентами незначительной сложности.

Из таблиц 1, 2, 3, 4, 5 и 6 вытекают следующие выводы.

По критериям Cr_1 , Cr_2 и Cr_3 сложность представления предельного вириального коэффициента B_3 каркасной суммой по формулам (99) и (100) незначительно отличается от сложности представления коэффициента a_3 древесной суммой по формулам (59) и (47).

По критериям Cr_1 и Cr_2 это представление предельного вириального коэффициента B_3 каркасной суммой значительно проще представления предельного майеровского коэффициента b_3 древесными суммами по формулам (53) и (47). Но по критерию Cr_3 эти два представления по своей сложности незначительно отличаются друг от друга.

По критериям Cr'_1 и Cr'_2 представление предельного вириального коэффициента B_3 каркасной суммой значительно проще его представления формулой (65) в виде многочлена от древесных сумм, представляющих предельные коэффициенты b_n по формулам (53) и (47). По критерию Cr'_1 представление предельного вириального коэффициента B_3 каркасной суммой значительно проще его представления формулами (77), (78) и (79) в виде многочлена от древесных сумм, представляющих коэффициенты a_n по формулам (59) и (47). Также и по критерию Cr'_2 первое из этих двух представлений значительно проще второго. Но по критерию Cr'_3 все эти три представления по своей сложности незначительно отличаются друг от друга.

По критериям Cr_1 , Cr_2 и Cr_3 представление предельного вириального коэффициента B_4 каркасной суммой по формулам (99) и (100) значительно сложнее представления коэффициента a_4 древесной суммой по формулам (59) и (47).

Сложность представления предельного вириального коэффициента B_4 каркасной суммой по критерию Cr_1 не отличается от сложности представления предельного майеровского коэффициента b_4 древесной суммой по формулам (53) и (47). Однако по критериям Cr_2 и Cr_3 это представление предельного вириального коэффициента B_4

значительно сложнее вышеупомянутого представления майеровского коэффициента b_4 . Так как критерии Cr_2 и Cr_3 являются более точными, то, видимо, следует считать, что представление вириального коэффициента B_4 каркасной суммой значительно сложнее этого представления майеровского коэффициента b_4 .

Далее, представление вириального коэффициента B_4 каркасной суммой по критериям Cr'_1 и Cr'_2 значительно проще представления этого коэффициента формулой (65) в виде многочлена от древесных сумм, представляющих коэффициенты b_n по формулам (53) и (47). Но по критерию Cr'_3 первое из этих двух представлений вириального коэффициента B_4 значительно сложнее второго. Так как критерий Cr'_3 является более точным, чем критерии Cr'_1 и Cr'_2 , то, видимо, следует считать, что данное представление вириального коэффициента B_4 каркасной суммой сложнее его представления в виде многочлена от древесных сумм, представляющих коэффициенты b_n .

Наконец, по критериям Cr_1 , Cr_2 и Cr_3 представление предельного вириального коэффициента B_4 каркасной суммой по формулам (99) и (100) значительно сложнее его представления формулами (77), (78) и (79) в виде многочлена от древесных сумм, представляющих коэффициенты a_n по формулам (59) и (47).

Благодарности. Автор считает своим приятным долгом выразить свою глубокую благодарность проф. Д.А. Кофке за быструю и эффективную информационную поддержку и за быстрые и обстоятельные ответы на интересующие автора вопросы, проф. Г.А. Мартынову — за эффективную информационную поддержку и полезные обсуждения, доктору Р. Хеллману — за быструю и эффективную информационную поддержку, доктору Н. Клисби — за быстрые и эффективные информационную и организационную поддержки и высокую оценку работ автора и к.ф.-м.н. В.И. Цебро — за быстрые и эффективные информационную и техническую поддержки и полезные советы.

Таблицы сложности представлений древесными суммами майеровских коэффициентов и коэффициентов a_n , представлений каркасными суммами вириальных коэффициентов и представлений Ри-Гувера вириальных коэффициентов

Таблица 1 сложности по критерию Cr_1

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr_1(L_{TR}(n))$	1	2	5	14	44	157	634	2852	14047
$Cr_1(L_{TR}(n,0))$	1	1	2	5	15	55	239	1169	6213
$Cr_1(L_F(n))$	1	1	5	49	784	-	-	-	-
$Cr_1(L_{RH}(n))$	1	1	2	5	23	171	2606	81564	4 980 756

Таблица 2 сложности по критерию Cr_2

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr_2(L_{TR}(n))$	1	5	22	93	403	1882	9671	54370	329325
$Cr_2(L_{TR}(n,0))$	1	3	11	42	172	804	4330	25930	166666
$Cr_2(L_F(n))$	1	3	26	-	-				
$Cr_2(L_{RH}(n))$	1	3	12	50	345	3591	72968	2936304	224134020

Таблица 3 сложности по критерию Cr_3

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr_3(L_{TR}(n))$	0	1	7	37	183	940	5233	31554	202902
$Cr_3(TR(n, 0))$	0	1	5	22	97	474	2657	16578	110749
$Cr_3(L_F(n))$	0	1	11	-	-				
$Cr_3(L_{RH}(n))$	0	1	6	30	230	2565			

В таблицах приняты следующие обозначения:

n — индекс майеровского (вириального) коэффициента;

$L_{TR}(n)$ — представление майеровского коэффициента $b_n(\Lambda)$ древесной суммой, определяемой по формулам (52) и (48), и представление древесной суммой предельного майеровского коэффициента b_n древесной суммой, определяемой по формулам (53) и (47);

$\Lambda \subseteq \mathbf{R}^\nu$ — объем, в котором содержится система частиц;

$L_{TR}(n, 0)$ — представление древесной суммой коэффициента a_n , определяемой по формулам (59) и (47);

$L_F(n)$ — представление каркасной суммой предельного вириального коэффициента B_n по формулам (99) и (100);

$L_{RH}(n)$ — представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ по методу Ри-Гувера;

Таблицы сложности представлений вириальных коэффициентов:
 1) представлений посредством майеровских коэффициентов, представленных древесными суммами; 2) представлений посредством коэффициентов a_n , представленных древесными суммами; 3) представлений каркасными суммами; 4) представлений Ри-Гувера;

Таблица 4 сложности по критерию Cr'_1

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n))$	1	3	8	22	66	223	857	3709	17756
$Cr'_1(\mathfrak{L}_{TR}(n,0))$	1	2	4	9	24	79	318	1487	7700
$Cr'_1(L_F(n))$	1	2	5	57	784	-	-	-	-
$Cr'_1(L_{RH}(n))$	1	1	2	5	23	171	2606	81564	4 980 756

Таблица 5 сложности по критерию Cr'_2

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(n))$	1	6	28	121	524	2406	12077	66447	395772
$Cr'_2(\mathfrak{L}_{TR}(n,0))$	1	4	15	57	229	1033	5363	31293	197959
$Cr'_2(L_F(n))$	1	3	26	-	-				
$Cr'_2(L_{RH}(n))$	1	3	12	50	345	3591	72968	2936304	224134020

Таблица 6 сложности по критерию Cr'_3

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Cr'_3(\mathfrak{L}_{TR}(n))$	0	1	8	45	228	1168	6401	37955	240857
$Cr'_3(\mathfrak{L}_{TR}(n,0))$	0	1	6	28	125	599	3256	19834	130583
$Cr'_3(L_F(n))$	0	1	11	-	-				

В таблицах приняты следующие обозначения:

n — индекс вириального коэффициента;

$\mathfrak{L}_{TR}(n)$ — представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ по формуле (65) Майера многочленом от всех древесных сумм, являющихся представлениями майеровских коэффициентов $b_2(\Lambda), b_3(\Lambda), \dots, b_n(\Lambda)$ по формулам (52) и (48);

$\Lambda \subseteq \mathbf{R}^\nu$ — объем, в котором содержится система частиц;

$\mathfrak{L}_{TR}(n,0)$ — представление предельного вириального коэффициента B_n по формулам (79)–(84) многочленом от всех древесных сумм, являющихся представлениями коэффициентов a_2, a_3, \dots, a_n по формулам (59) и (47);

$\mathfrak{L}_F(n)$ — представление каркасной суммой предельного вириального коэффициента B_n по формулам (99) и (100);

$L_{RH}(n)$ — представление вириального коэффициента $B_n(\Lambda)$ по методу Ри-Гувера.

Примечание. В таблицах 1 и 4 значения длин базовых линейных комбинаций, являющихся представлениями вириальных коэффициентов B_n по методу Ри-Гувера, заимствованы из статьи [27]. Значения критериев Cr_2 и Cr_3 для представлений вириальных коэффициентов B_n по методу Ри-Гувера вычислены, исходя из определения [46–48] этих представлений и используя значения длин базовых линейных комбинаций, приведенные в [27].

Список литературы

- [1] И.И. Иванчик. Метод ковариантного суммирования диаграмм в классической статистике. Дис. ... д — ра физ. — мат. наук. М., 1987.
- [2] Г.И. Калмыков, Полуупорядочение деревьев. — М.: ВИНТИ, 1988. — 10 с. — Деп. в ВИНТИ 12.02.88, № 2600–В88.
- [3] Г.И. Калмыков. О представлении коэффициентов разложения Майера и вириальных коэффициентов. // Теоретическая и математическая физика, 1990. т. 84, № 2, с. 279–289.
- [4] Г.И. Калмыков, Аналитическое продолжение разложений Майера и вириального разложения. // Теоретическая и математическая физика, 1992, т. 92, № 1, с. 139–149.
- [5] Г.И. Калмыков, О частичном упорядочении деревьев и классификации связанных графов и блоков. // Дискретная математика, 1992, т. 4, вып. 2, с. 66–73.
- [6] Г.И. Калмыков, О представлении коэффициентов разложения в степенной ряд плотности распределения одной частицы в большом каноническом ансамбле. // Теоретическая и математическая физика, 1993, т. 97, № 3, с. 452–458.
- [7] Г.И. Калмыков, О плотности распределения одной частицы в большом каноническом ансамбле. // Теоретическая и математическая физика. — 1994. — т. 100, № 1. — с. 45–58.
- [8] Г.И. Калмыков, Разложение по степеням активности корреляционных функций большого канонического ансамбля. // Теоретическая и математическая физика, 1994, т. 101, № 1, с. 94–109.
- [9] Г.И. Калмыков, Метод древесных сумм и его приложение к решению математических проблем классической статистической механики. Дис. ... д — ра физ. — мат. наук. М., 1998, 175 с.
- [10] Г.И. Калмыков, Об оценке радиуса сходимости майеровских разложений (случай неотрицательного потенциала). // Теоретическая и математическая физика. — 1998. т. 116, № 3. — с. 417–430.
- [11] Г.И. Калмыков, О явлении асимптотической катастрофы майеровских рядов в классической статистической механики. // Теоретическая и математическая физика. 1999, т. 119, № 3, с. 475–497.
- [12] Г.И. Калмыков, Приложение метода древесных сумм к оценке радиуса сходимости майеровских разложений (случай неотрицательного потенциала). // В сб.: Проблемы теоретической кибернетики. Тезисы докладов XII Международной конференции (Нижний Новгород, 17–22 мая 1999 г.). Часть I, с. 91, Москва, 1999.
- [13] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация графов // В сб.: Труды IV Международной конференции "Дискретные модели в теории управляющих систем Краснови́дово, 2000 (19–25 июня 2000 г.). Под ред. В.Б. Алексеева, В.А. Захарова. М.: МАКС Пресс, 2000, с. 34.

- [14] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация помеченных блоков// В сб.: Материалы VII Международного семинара "Дискретная математика и ее приложения"(29 января–2 февраля 2001 г.). Часть II/ Под ред. О.Б. Лупанова. М.: Изд-во центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2001, с. 221.
- [15] Г.И. Калмыков, Представление вириальных коэффициентов, позволяющее избежать асимптотической катастрофы.// Теоретическая и математическая физика. – 2002. – т. 130, № 3. – с. 508–528.
- [16] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация редуцированных помеченных блоков// в сб.: Проблемы теоретической кибернетики. Тезисы докладов XIII Международной конференции (Казань, 27–31 мая 2002 г.). Часть I. Под общей редакцией чл.-корр. РАН О.Б. Лупанова. М.: Изд-во центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2002, с. 80.
- [17] Г.И. Калмыков, Древесная классификация помеченных графов. М.: Физматлит, 2003, 188 с.
- [18] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация помеченных блоков// В сб.: Труды V Международной конференции "Дискретные модели в теории управляющих систем Ратмино, (26–29 мая 2003 г.). Под ред. В.Б. Алексеева, А.А. Сапоженко. М.: Издательский отдел факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова, 2003, с. 39–42.
- [19] Г.И. Калмыков, Каркасная классификация помеченных графов. М.: Научный мир, 2006, 240 с.
- [20] Каркасная классификация редуцированных помеченных блоков. // Дискретная математика". – 2015. – т. 27, вып. 1, с. 59–72.
- [21] А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин, Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1976.
- [22] К. Куратовский, Топология, том 1, Издательство "Мир Москва, 1966.
- [23] Дж. Майер, М. Гешперт-Майер, Статистическая механика. М.: Мир, 1980.
- [24] Д. Рюэль, Статистическая механика. Строгие результаты. – М.: Мир, 1971.
- [25] Ф.Харари, Теория графов. М.: Мир, 1973.
- [26] М. Холл, Комбинаторика. М.: Мир, 1970.
- [27] N. Clisby and B.M. McCoy, Ninth and Tenth Order Virial Coefficients for Hard Spheres in D Dimensions.// Journal of Statistical Physics. January 2006, Vol. 122, № 1, pp. 15–57.
- [28] Frank Harary, Graph Theory. Addison-Wesley publishing company, Reading, Massachusetts Menio Park, California, london, 1969.

- [29] Marshall, Ju. Hall, Combinatorial Theory. Blaisdell publishing company, Waltham (Massachusetts), Toronto, London, 1967.
- [30] I.I. Ivanchik, Generalized Mayer Series in Classical Statistical Mechanics. N.Y., US, Nova Science Publishers, Inc., 1993.
- [31] G.I. Kalmykov, Analytic continuation of Mayer and virial expansions.// — 1993. Translated from Teoreticheskya i Matematicheskya Fizika, Vol. 92, № 1, pp. 139–149. Plenum Publishing Corporation 0040-5779/92/9201-0791. pp. 791–798.
- [32] G.I. Kalmykov, Representation of the power-series coefficients for one-point correlation function in grand canonical ensemble.// — 1994. Translated from Teoreticheskya i Matematicheskya Fizika, V. 97, № 3, pp. 452–458. Plenum Publishing Corporation 0040-5779/93/9703-1405. pp. 1405–1408.
- [33] G.I. Kalmykov, One-particle distribution density in the grand canonical ensemble.// Theoretical and Mathematical Physics. 1994. Vol. 100, № 1. pp. 834–845.
- [34] G.I. Kalmykov, Expansion of the correlation functions of the grand canonical ensemble in powers of the activity.// Theoretical and Mathematical Physics. 1994, Vol. 101, № 1, pp. 1224–1234.
- [35] G.I. Kalmykov, Estimating the convergence radius of Mayer expansions: the nonnegative exponential case.// Theoretical and Mathematical Physics. — 1998. Vol. 116, № 3. pp. 1063–1073.
- [36] G.I. Kalmykov, Mayer-series asymptotic catastrophe in classical statistical mechanics.// Theoretical and Mathematical Physics. — 1999. Vol. 119, № 3. pp. 778–795.
- [37] G.I. Kalmykov, A representation of virial coefficients that avoid the asymptotical catastrophe.// Theoretical and Mathematical Physics. 2002, Vol. 130, № 3, pp. 432–457.
- [38] G.I. Kalmykov, Frame classification of the reduced labeled blocks// Discrete Mathematics and Applications. — 2016. Vol. 26, Issue 1, pp. 1–12.
- [39] G.I. Kalmykov, Representations of coefficients of power series in classical statistical mechanics. Their classification and complexity criteria. // <http://arxiv.org/abs/2007.02146> (in russian)
- [40] K. Kuratowski, Topology, volume 1, Academic Press, New York and London, Panstwowe Wydawnictwo, Warszawa, 1966.
- [41] E. Lieb, New Method in the theory of imperfect gases and liquids.// Journal of Mathematical Physics. — 1963. — Vol. 4, № 5. pp. 671–678.
- [42] J. E. Mayer, Statistical Mechanics of Condensing Systems// Journ. Phys. Chem. 1939. Vol. 43, pp. 71–95.
- [43] J. E. Mayer, 1942. Contribution to Statistical Mechanics.// J. Chem. Phys. V. 10, № 10, pp. 629–643 (1942); doi: 10.1063/1.1723631

- [44] J.E. Mayer and M. Geppert-Mayer, *Statistical Mechanics*, second edition. Wiley-Interscience Publishing, John Wiley and Sons, New York, London, Sydney, Toronto, 1977.
- [45] O. Penrose, The remainder in Mayer's fugacity series.// *Journal of Mathematical Physics*, 1963. Vol. 4, № 12. pp. 1488–1494.
- [46] Francis R. Ree and William G. Hoover. Fifth and Sixth Virial coefficients for Hard Spheres and Hard Disks.// *Journal of Chemical Physics*, 40:4, February 15, 1964, pp. 939–950.
- [47] Francis R. Ree and William G. Hoover. Seventh Virial coefficients for Hard Spheres and Hard Disks.// *Journal of Chemical Physics*, 46:11, June 01, 1967, pp. 4181–4197.
- [48] Francis R. Ree and William G. Hoover. Reformulation of the Virial Series for Classical Fluids.// *Journal of Chemical Physics*, 41:6, September 15, 1964, pp. 1635–1645.
- [49] David Ruelle, *Statistical Mechanics, Rigorous Results*. W.A. Benjamin, inc. New York, Amsterdam, 1969.
- [50] Andrew J. Schultz and David A. Kofke. Sixth, seventh and eighth virial coefficients of the Lennard-Jones model.// *Molecular Physics*, Vol. 107, No. 21, 10 November 2009, pp. 2309–2318.
- [51] Andrew J. Schultz, Nathaniel S. Barlow, Vipin Chaudhary, David A. Kofke. Mayer Sampling Monte Carlo calculation of virial coefficients on graphics processors.// *Molecular Physics*, 2013, Vol. 111, № 4, pp. 535–543.