УДК 517.5

Д. Я. Петрина (Ін-т математики НАН України, Київ)

СТАНИ НЕСКІНЧЕННИХ РІВНОВАЖНИХ КЛАСИЧНИХ СИСТЕМ*

We construct a measure that corresponds to correlation functions of equilibrium states of infinite systems of classical statistical mechanics. The correlation functions satisfy the Bogolyubov compatibility conditions. We also construct measures that correspond to correlation functions of nonequilibrium states for the Boltzmann hierarchy and the diffusion Bogolyubov – Strel'tsova hierarchy.

Побудовано міру, що відповідає кореляційним функціям рівноважних станів нескінченних систем класичної статистичної механіки. Кореляційні функції задовольняють умови узгодження Боголюбова. Побудовано також міру, що відповідає кореляційним функціям нерівноважних станів нескінченних систем для дифузійної ієрархії Боголюбова – Стрельцової та ієрархії Больцмана.

Вступ. Звичайно під станом рівноважних нескінченних класичних систем розуміють послідовність кореляційних функцій

$$F = (F_1(q_1), \ldots, F_s(q_1, \ldots, q_s), \ldots), \tag{1}$$

які отримують в результаті термодинамічного граничного переходу з так званого розподілу Гіббса [1 – 3]. Кореляційні функції є елементами функціонального простору E_ξ з нормою

$$\| F \| = \sup_{s \geq 1} \frac{1}{\xi^s} \sup_{(q)_s} | F_s((q)_s) |, \qquad (q)_s = (q_1, \ldots, q_s), \quad q \in R^3, \tag{2}$$

де $\xi \geq 0$ — певне скінчене число. Вони мають імовірнісний зміст густин розподілу ймовірностей даних s часток при довільному положенні останнього нескінченного числа часток і є симетричними відносно перестановок аргументів, тобто

$$F_s(q_1, \ldots, q_s) = F_s\big(q_{i_1}, \ldots, q_{i_s}\big), \tag{3}$$

де $i_1, \ldots, i_s$ — довільна перестановка чисел $(1, 2, \ldots, s)$.

На перший погляд, ми знаходимося в умовах теореми Колмогорова [4, 5] про існування міри, кореляційні функції якої задаються послідовністю F. Але це не так.

Справа в тому, що для справедливості теореми Колмогорова кореляційні функції повинні були б задовольняти такі умови узгодження:

$$\int dq_{s+1} F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = F_s((q)_s), \quad s \geq 2, \qquad \int dq_1\, F_1(q_1) = 1. \tag{4}$$

Насправді вони задовольняють умови узгодження Боголюбова [1, 3, 6]

$$\begin{gathered} \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V} \int_\Lambda dq_{s+1}\, F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = F_s((q)_s), \\ \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V} \int_\Lambda dq_1\, F_1(q_1) = 1, \end{gathered} \tag{5}$$

де Λ — куля з центром у початку координат, $V = V(\Lambda)$ — об'єм кулі. Тому до послідовності кореляційних функцій (1) рівноважних класичних систем теорему Колмогорова не можна застосувати беспосередньо.

У даній роботі пропонується явна побудова ймовірнісної міри, кореляційні функції якої збігаються з даною послідовністю кореляційних функцій. Для

* Виконано при фінансовій підтримці INTAS (грант № 2000-15).

цього суттєво використовується подання кореляційних функцій через групові функції (кластери). А саме, задамо послідовність групових функцій

$$\omega = (\omega(q_1), \ldots, \omega_s(q_1, \ldots, q_s), \ldots), \tag{6}$$

через які кореляційні функції визначаються таким чином:

$$F_s(q_1, \ldots, q_s) = \sum_{i_1 + \ldots + i_n = s} \omega_{i_1}\big((q)_{i_1}\big) \ldots \omega_{i_n}\big((q)_{i_n}\big), \quad s \geq 1. \tag{7}$$

Групові функції $\omega_n((q)_n)$ є трансляційно інваріантними та сумовними відносно різницевих змінних

$$\int d(q_1 - q_n) \ldots d(q_{n-1} - q_n) \left|\omega\big(q_1, \ldots, q_{n-1}, q_n\big)\right| < \infty, \tag{8}$$

а підсумовування в (7) проводиться за всіма розбиттями множини $(q_1, \ldots, q_s)$ на n непорожніх підмножин, $1 \leq n \leq s$. Ряд у правій частині (7) рівномірно збігається на компактах, а $\xi^{-s} F_s((q)_s) \leq c < \infty$, $s \geq 1$, $F_s((q)_s) \geq 0$.

Виявляється, що шукана міра, точніше її густина розподілу, визначається за допомогою групових функцій таким чином:

$$F_\infty((q)_\infty) = \sum_{i_1, \ldots, i_n} \omega_{i_1}\big((q)_{i_1}\big) \ldots \omega_{i_n}\big((q)_{i_n}\big) \ldots, \tag{9}$$

де підсумовування проводиться за всіма можливими розбиттями нескінченного числа точок $(q)_\infty = (q_1, \ldots, q_s, \ldots)$ на довільні непорожні множини $(q)_i$, що не перетинаються, і їх об'єднанням є $(q)_\infty$. Ряд (9) збігається рівномірно на компактах і $\xi^{-\infty} F_\infty((q)_\infty) \leq c$. Встановлено основну формулу

$$F_s((q)_s) = \lim_{n \to \infty} \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V^{n-s}} \int_{\Lambda^{n-s}} F_n((q)_n)\, dq_{s+1} \ldots dq_n =$$

$$= \lim_{V \to \infty} \frac{V^s}{V^\infty} \int_{\Lambda^{\infty - s}} F_\infty((q)_\infty)\, d(q)_\infty^s, \quad d(q)_\infty^s = dq_{s+1}\, dq_{s+2} \ldots, \quad n > s, \tag{10}$$

яка відновлює $F_s((q)_s)$ по $F_\infty((q)_\infty)$. Ця формула нагадує (без множників $\frac{1}{V^{n-s}}$) формули для гауссівських розподілів.

Виведено рівняння для $F_\infty((q)_\infty)$.

1. Означення кореляційних функцій в рамках рівноважного канонічного ансамблю. Розглянемо N часток у кулі Λ з центром у початку координат і з радіусом R. Частки взаємодіють через парний потенціал $\Phi(q)$, відносно якого припускається, що він регулярний,

$$\int \left| e^{-\beta \Phi(q)} - 1 \right| dq = C(\beta) < \infty, \tag{1.1}$$

та стабільний, тобто

$$U((q)_N) = U(q_1, \ldots, q_N) = \sum_{i < j = 1}^{N} \Phi(q_i - q_j) \geq -BN, \quad B \geq 0, \tag{1.2}$$

де B — скінченне обмежене число, $\beta > 0$ — обернена температура.

Рівноважний стан даної системи описується канонічним розподілом Гіббса у конфігураційному просторі (густиною розподілу імовірностей):

$$D_{\Lambda,N}((q)_N) = D_{\Lambda,N}(q_1,\ldots,q_N) = Q^{-1}(N,\Lambda)e^{-\beta\sum_{i<j=1}^{N}\Phi(q_i-q_j)},$$

$$Q(N,\Lambda) = \int\limits_{\Lambda^N} e^{-\beta U((q)_N)}d(q)_N, \tag{1.3}$$

$$(q)_N = (q_1,\ldots,q_N), \quad d(q)_N = dq_1\ldots dq_N,$$

якщо всі $q_i \in \Lambda$. Якщо деяке $q_i \notin \Lambda$, то $D_{\Lambda,N}((q)_N) = 0$. Вираз $Q(N,\Lambda)$ називається конфігураційним інтегралом. При великих R він поводить себе асимптотично як R^{3N} [3, 6], тобто

$$Q(N,\Lambda) \approx V(\Lambda)^N, \tag{1.4}$$

де $V(\Lambda) = \frac{4}{3}\pi R^3$ — об'єм кулі Λ.

З означення (1.3) та асимптотики (1.4) випливає, що функція $D_{\Lambda,N}((q)_N)$ прямує до нуля, коли $V = V(\Lambda) \to \infty$ у кожній точці $(q)_N$. У статистичній механіці стани нескінченних систем отримують в результаті термодинамічного переходу, коли число часток N прямує до нескінченності, об'єм кулі $V(\Lambda)$ прямує до нескінченності, а їх відношення фіксоване, тобто

$$\frac{N}{V(\Lambda)} = \frac{1}{v}, \tag{1.5}$$

де $\frac{1}{v}$ — густина.

Тому описувати стан нескінченної системи (у термодинамічній границі) безпосередньо розподілом Гіббса (1.3) неможливо.

Виявляється, що стан нескінченної системи можна описувати послідовністю кореляційних функцій, які вводяться таким чином [1, 3, 6]:

$$F_{\Lambda,s}((q)_s) = F_{\Lambda,s}(q_1,\ldots,q_s) = \frac{N!}{(N-s)!}Q^{-1}(N,\Lambda)\int\limits_{\Lambda^{N-s}} dq_{s+1}\ldots dq_N\, e^{-\beta U((q)_N)},$$

$$1 \le s \le N. \tag{1.6}$$

Так введені кореляційні функції існують у термодинамічній границі. На наївному рівні розбіжність V^N від $Q(N,\Lambda)$ скорочується з множником $N(N-1)\ldots$ $\ldots(N-s+1)$ та фактором V^{N-s}, що виникає від інтегрування в (1.6). Сформулюємо відповідний результат про існування кореляційних функцій (1.6) у термодинамічній границі (детальніше див. [3, 6]). (Зауважимо, що V можна виразити через N, $V = vN$, і тому будемо вважати, що функції $F_{\Lambda,s}((q)_s)$ залежать тільки від N.) Має місце наступна теорема.

Теорема 1. *Кореляційні функції* $F_{\Lambda,s}((q)_s)$, $s \ge 1$, *існують у термодинамічній границі*

$$\lim_{N\to\infty} F_{\Lambda,s}((q)_s) = F_s((q)_s) \tag{1.7}$$

при достатньо малих густинах $\frac{1}{v}$ *в сенсі рівномірної збіжності на компактах і є голоморфними функціями густини. Граничні кореляційні функції* $F_s((q)_s)$, $s \ge 1$, *задовольняють умови узгодження*

$$\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\int_{\Lambda} dq_{s+1}F_{\Lambda,s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\int_{\Lambda} dq_{s+1}F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = F_s((q)_s) \tag{1.8}$$

рівномірно на компактах. Існує певна константа $\xi > 0$ *така, що* $\xi^{-s}F_s((q)_s) \leq \leq c < \infty$, $s \geq 1$.

Розглянемо s-частинкову спостережувану

$$a(q_1, \ldots, q_N) = \sum_{1\leq i_1 < \ldots < i_s}^{N} a_s(q_{i_1}, \ldots, q_{i_s}), \tag{1.9}$$

де підсумовування проводиться за всіма s числами $i_1 < \ldots < i_s$ з чисел $(1, \ldots, N)$, а основна функція $a_s(q_{i_1}, \ldots, q_{i_s})$ — фінітна. Тоді середнє від спостережуваної $a(q_1, \ldots, q_N)$ відносно розподілу Гіббса (1.3) виражається формулою

$$\langle a, D_{\Lambda,N}\rangle = \int_{\Lambda^s} dq_1 \ldots dq_s\, a_s(q_1, \ldots, q_s) F_{\Lambda,s}(q_1, \ldots, q_s). \tag{1.10}$$

У цій формулі можна перейти до термодинамічної границі і середнє від s-частинкової спостережуваної буде дорівнювати інтегралу

$$\int dq_1 \ldots dq_s\, a_s(q_1, \ldots, q_s) F_s(q_1, \ldots, q_s), \tag{1.10$'$}$$

який є скінченним, оскільки $F_s((q)_s) \leq c\xi^s$, а функція $a_s((q)_s)$ — фінітна.

Пояснимо формули (1.10), (1.10′). Вони, фактично, задають правило підрахунку ймовірностей на σ-алгебрі множин. А саме, нехай $\chi_A(q_1, \ldots, q_s)$ є характеристичною функцією паралелепіпеда $A(q_1 \in A_1, \ldots, q_s \in A_s)$, де A_i — паралелепіпеди в R^3. Побудуємо функцію $a_s(q_1, \ldots, q_s)$ як симетризацію функції $\chi_A(q_1, \ldots, q_s)$

$$a_s(q_1, \ldots, q_s) = \frac{1}{s!}\operatorname{sym}(\chi_A(q_1, \ldots, q_s)). \tag{1.11}$$

Тоді згідно з (1.9) – (1.10′) та (1.11) отримаємо ймовірність множини A у вигляді інтегралу

$$P(A) \doteq \int a_s(q_1, \ldots, q_s) F_s(q_1, \ldots, q_s) dq_1 \ldots dq_s =$$
$$= \int_{A_1} dq_1 \ldots \int_{A_s} dq_s\, F_s(q_1, \ldots, q_s). \tag{1.12}$$

Таким чином, ми визначили σ-алгебру множин та ймовірності на ній.

М. М. Боголюбов [1] ввів послідовність кореляційних функцій при дещо змінених умовах нормування:

$$F_{\Lambda,s}((q)_s) = V^s Q^{-1}(N, \Lambda) \int_{\Lambda^{N-s}} dq_{s+1} \ldots dq_N\, e^{-\beta U((q)_N)}. \tag{1.6$'$}$$

У цьому випадку умови узгодження мають вигляд

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_{\Lambda} dq_{s+1}\, F_{\Lambda,s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_{\Lambda} dq_{s+1}\, F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = F_s((q)_s) \tag{1.8$'$}$$

рівномірно на компактах. (Знову у лівій частині (1.8′) вважаємо, що N виражене через V, $N = \frac{1}{v}V$, тому функції $F_{\Lambda,s}((q)_s)$ залежать тільки від V.) Виконуються також умови нормування повної ймовірності на одиницю

$$\lim_{V\to\infty} \frac{1}{V^s} \int_{\Lambda^s} d(q)_s \, F_{\Lambda,s}((q)_s) \;=\; \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V^s} \int_{\Lambda^s} d(q)_s \, F_s((q)_s) \;=\; 1. \tag{1.13}$$

Зауважимо, що послідовність кореляційних функцій $F_{\Lambda,s}((q)_s)$ фінітна, оскільки $F_{\Lambda,s}((q)_s) = 0$ при $s > N$, а $F_{\Lambda,N}((q)_N) = V^N Q^{-1}(N,\Lambda)\, D_{\Lambda,N}((q)_N)$. Формули (1.6′), (1.8′) означають, що вся послідовність кореляційних функцій $F_{\Lambda,s}((q)_s)$, $s < N$, визначається за допомогою „останньої" $F_{\Lambda,N}((q)_N)$. Далі буде показано, що це справедливо і після термодинамічної границі.

Кореляційні функції в рамках великого канонічного ансамблю. У рамках великого канонічного ансамблю рівноважний стан системи в кулі Λ задається послідовністю розподілів Гіббса [2, 3]

$$\Xi^{-1}(z,\Lambda)^{-1}\left(1, z, \ldots, \frac{z^n}{n!} e^{-\beta U((q)_n)}, \ldots\right), \quad n \geq 2, \tag{1.14}$$

де z — активність $(z > 0)$, якою фіксується густина, $\Xi(z,\Lambda)$ — велика статистична сума

$$\Xi(z,\Lambda) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} dq_1 \ldots dq_n \, e^{-\beta U((q)_n)}. \tag{1.15}$$

Послідовність кореляційних функцій задається таким чином:

$$F_{\Lambda,s}((q)_s) \;=\; \Xi^{-1}(z,\Lambda) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{s+n}}{n!} \int_{\Lambda^n} dq_{s+1} \ldots dq_{s+n} \, e^{-\beta U((q)_{s+n})}, \quad s \geq 1. \tag{1.16}$$

З умови (1.2) випливає

$$\Xi(z,\Lambda) \;\leq\; e^{\beta BV}, \qquad \Xi(z,\Lambda)\, F_{\Lambda,s}((q)_s) \;<\; z^s e^{\beta Bs} e^{\beta BV}.$$

Отже, $F_{\Lambda,s}((q)_s)$ є відношенням двох виразів, які експоненціально розбігаються по об'єму $V = V(\Lambda)$. У свою чергу, всі розподіли Гіббса в кожній точці $(q)_n$ прямують до нуля, коли $V \to \infty$.

Виявляється, що експоненціальні розбіжності в (1.16) скорочуються, і кореляційні функції $F_{\Lambda,s}((q)_s)$ існують у термодинамічній границі. А саме, має місце наступна теорема [2, 3].

Теорема 2. *Кореляційні функції* $F_{\Lambda,s}((q)_s)$, $s \geq 1$, *великого канонічного ансамблю* (1.16) *існують у термодинамічній границі*

$$\lim_{V\to\infty} F_{\Lambda,s}((q)_s) \;=\; F_s((q)_s) \tag{1.17}$$

при достатньо малих активностях z *в сенсі рівномірної збіжності на компактах і є голоморфними функціями активності. Граничні кореляційні функції* $F_s((q)_s)$, $s \geq 1$, *задовольняють умови узгодження*

$$\lim_{V\to\infty} \frac{v}{V} \int_{\Lambda} dq_{s+1} \, F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) \;=\; F_s((q)_s) \tag{1.18}$$

рівномірно на компактах. Існує певна константа $\xi > 0$ *така, що* $\xi^{-s} F_s((q)_s) \leq \leq c < \infty$, $s \geq 1$. *У рамках великого канонічного ансамблю середні від* s*-частинкових спостережуваних виражаються тими ж формулами* (1.10), (1.10′).

Імовірності на σ-алгебрі множин задаються формулою (1.12).

Послідовності граничних кореляційних функцій канонічного (1.6) та великого канонічного (1.16) ансамблів є еквівалентними в тому сенсі, що можна виразити активність як функцію густини, і тоді послідовність кореляційних функцій великого канонічного ансамблю переходить у послідовність кореляційних функцій канонічного ансамблю [3, 6]. Тому умова узгодження (1.18) випливає з умови узгодження (1.8). Ми дамо незалежне доведення умови узгодження (1.18), що випливає з кластерних властивостей функцій $F_s((q)_s)$.

2. Кластерні властивості послідовності кореляційних функцій. ***2.1. Кластери чи групові функції.*** Розглянемо функцію $F_s((q)_s)$. Як відомо, вона має вигляд [2]

$$F_s((q)_s) = \sum_{i_1+\ldots+i_n=s} \omega_{i_1}\big((q)_{i_1}\big)\ldots\omega_{i_n}\big((q)_{i_n}\big), \tag{2.1}$$

де $(q)_{i_1}, \ldots, (q)_{i_n}$ — розбиття s точок $(q_1, \ldots, q_s)$ на n різних непорожніх підмножин, $(q)_{i_1} \cup \ldots \cup (q)_{i_n} = (q)_s$, $1 \le n \le s$, а підсумовування в (2.1) проводиться за всіма довільними розбиттями множини $(q)_s$ на n непорожніх множин. Групові функції $\omega_n((q)_n)$ (кластери) є функціями трансляційно інваріантними, тобто

$$\omega_n(q_1, \ldots, q_n) = \omega_n(q_1 + a, \ldots, q_n + a), \tag{2.2}$$

де a — довільний вектор. Тому вони залежать від $n-1$ різницевих змінних, наприклад, $q_1 - q_n, \ldots, q_{n-1} - q_n$,

$$\omega_n(q_1, \ldots, q_n) = \omega_n\big(q_1 - q_n, \ldots, q_{n-1} - q_n\big), \tag{2.3}$$

і є сумовними відносно них, тобто

$$\int d(q_1 - q_n)\ldots d\big(q_{n-1} - q_n\big)\left|\omega_n\big(q_1 - q_n, \ldots, q_{n-1} - q_n\big)\right| < \infty \tag{2.4}$$

для тих же значень z або $\frac{1}{v}$, для яких існують $F_s((q)_s)$. Умову (2.4) можна записати ще так:

$$\int dq_2 \ldots dq_n |\omega_n(q_1, q_2, \ldots, q_n)| < \infty. \tag{2.4$'$}$$

Очевидно, що

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_\Lambda dq_n\, \omega_n(q_1, \ldots, q_n) = 0, \quad n \ge 2, \tag{2.5}$$

оскільки за теоремою Фубіні інтеграл в (2.5) існує і є скінченним майже скрізь відносно решти $n-2$ різницевих змінних, наприклад, $q_1 - q_{n-1}, \ldots, q_{n-2} - q_{n-1}$.

Зауважимо, що зображення (2.1) справедливе для послідовностей кореляційних функцій як для канонічного, так і для великого канонічного ансамблів завдяки їх еквівалентності.

2.2. Умови узгодження для функцій $F_s((q)_s)$. Умови узгодження (1.8$'$) та (1.18) можуть бути зведені до єдиного уніфікованого вигляду (1.8$'$), якщо від кореляційних функцій великого канонічного ансамблю (1.12), (1.14) перейти до кореляційних функцій, перенормованих таким чином: $v^s F_s((q)_s)$. Збережемо для перенормованих кореляційних функцій та групових функцій ті ж позначення $F_s((q)_s)$ та $\omega_s((q)_s)$, і для них отримаємо єдині умови узгодження для канонічного та великого канонічного ансамблів:

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_\Lambda dq_{s+1}\, F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = F_s((q)_s), \tag{2.6}$$

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_{\Lambda} dq_1\, F_1(q_1) = 1.$$

Із зображення (2.1) випливає, що $F_1(q_1) = \omega_1(q_1)$, і згідно з (2.6) $F_1(q_1) = \omega_1(q_1) = 1$. Остання рівність є умовою нормування повної ймовірності на одиницю.

Теорема 3. *Умови узгодження* (2.6) *випливають із зображення* (2.1) *кореляційних функцій через групові функції (кластери).*

Доведення. Розглянемо $F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big)$ і подамо її у вигляді

$$F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = \omega_1(q_{s+1})F_s((q)_s) + M_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big), \tag{2.7}$$

де функція $M_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big)$ теж зображується у вигляді (2.1), але змінна q_{s+1} обов'язково входить у число аргументів деякого кластера $\omega_i((q)_i)$ з $i \geq 2$. Щоб отримати зображення (2.7), достатньо у сумі (2.1) для $F_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big)$ виділити доданки, в яких q_{s+1} є аргументом тільки $\omega_1(q_{s+1})$. Очевидно, що сума всіх множників при $\omega_1(q_{s+1})$ дорівнює $F_s((q)_s)$. Тоді сума решти доданків дорівнює $M_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big)$, оскільки q_{s+1} обов'язково входить у число аргументів якогось кластера $\omega_i((q)_i)$ з $i \geq 2$.

Підставимо (2.7) у ліву частину рівності (2.6). Покажемо спочатку, що

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_{\Lambda} dq_{s+1}\, M_{s+1}\big((q)_s, q_{s+1}\big) = 0. \tag{2.8}$$

Це випливає з того, що q_{s+1} обов'язково входить у число аргументів якогось $\omega_i((q)_i) = \omega_i\big((q)_{i-1}, (q)_{s+1}\big)$, $i \geq 2$, а

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_{\Lambda} dq_{s+1}\, \omega_i\big((q)_{i-1}, (q)_{s+1}\big) = 0$$

згідно з (2.5).

Отже, у лівій частині рівності (2.6) відмінний від нуля вклад дає тільки доданок $\omega_1(q_{s+1})F_s((q)_s)$, а оскільки

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_{\Lambda} dq_{s+1}\, \omega_1(q_{s+1}) = 1,$$

рівність (2.6) доведено.

Зауважимо, що аналогічні міркування з усіма подробицями можна знайти в [7] (гл. 6).

2.3. Умова узгодження для функцій $F_s((q)_s)$ у слабкому сенсі. Розглянемо певну скінченну послідовність кореляційних функцій

$$F_1((q)_1),\ F_2((q)_2),\ \ldots,\ F_s((q)_s),$$

і нехай $\varphi_n((q)_n)$ — основна функція з компактним носієм, $n < s$. Доведемо, що має місце рівність

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V^{s-n}}\int_{\Lambda} d(q)_s\, \varphi_n((q)_n)\, F_s((q)_s) = \int d(q)_n\, \varphi_n((q)_n)\, F_n((q)_n). \tag{2.9}$$

Щоб отримати рівність (2.9), достатньо послідовно інтегрувати за змінними q_s, $q_{s-1}, \ldots, q_{s-n+1}$ і використовувати умови узгодження (2.6).

Тепер означимо кореляційну функцію від нескінченного числа змінних $(q_1, \ldots, q_s, \ldots) = (q)_\infty \in \prod_{i=1}^{\infty} \otimes R_i^3$ згідно з формулою

$$F_\infty(q_1,\ldots,q_s,\ldots) = F_\infty((q)_\infty) = \sum_{i_1,\ldots,i_n\ldots} \omega_{i_1}\big((q)_{i_1}\big)\ldots\omega_{i_n}\big((q)_{i_n}\big)\ldots, \qquad (2.10)$$

де підсумовування проводиться за всіма можливими розбиттями нескінченного числа точок $(q)_\infty$ на довільні непорожні множини $(q)_i$, що не перетинаються, і їх об'єднанням є $(q)_\infty$:

$$(q)_{i_1}\cup\ldots\cup(q)_{i_n}\cup\ldots = (q)_\infty.$$

Як відомо [2, 3], ряд (2.10) збігається рівномірно на компактах і $\xi^{-\infty}F_\infty((q)_\alpha) \le \le c < \infty$ (див. теореми 1, 2).

Функція $F_\infty((q)_\infty)$ є невід'ємною та інтегровною у сенсі

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V^\infty}\int_{\Lambda^\infty} d(q)_\infty F_\infty((q)_\infty) = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V^\infty}\int_{\Lambda^\infty} dq_1\ldots dq_s\ldots F_\infty(q_1,\ldots,q_s,\ldots) = 1. \qquad (2.11)$$

Рівність (2.11) отримується з урахуванням рівностей (2.5) та $\omega_1(q_1) = 1$ і може розглядатися як той факт, що функція $F_\infty((q)_\infty)$ є густиною ймовірнісної міри, визначеної на нескінченних послідовностях $(q)_\infty$.

Функція $F_\infty((q)_\infty)$ є слабкою границею кореляційних функцій $F_s((q)_s)$ у сенсі

$$\lim_{s\to\infty}\lim_{V\to\infty}\frac{V^n}{V^s}\int_{\Lambda^\infty} d(q)_\infty a_n((q)_n)F_s((q)_s) = \lim_{V\to\infty}\frac{V^n}{V^\infty}\int_{\Lambda^\infty} d(q)_\infty a_n((q)_n)F_\infty((q)_\infty). \qquad (2.12)$$

Дійсно, враховуючи (2.9), ліворуч при фіксованому $s > n$ отримуємо

$$\lim_{V\to\infty}\frac{V^n}{V^s}\int_{\Lambda^s} d(q)_s a_n((q)_n)F_s((q)_s) = \lim_{V\to\infty}\int_{\Lambda^n} d(q)_n a_n((q)_n)\times$$

$$\times\frac{1}{V^{s-n}}\int_{\Lambda^{s-n}} dq_{n+1}\ldots dq_s F_s((q)_s) = \int d(q)_n a_n((q)_n)F_n((q)_n).$$

Праворуч, згідно з умовою узгодження (2.11), також отримуємо $\int d(q)_n a_n((q)_n)F_n((q)_n)$.

2.4. Умови узгодження та рівняння для кореляційних функцій. Розглянемо рівняння для кореляційних функцій, наприклад рівняння Кірквуда – Зальцбурга

$$F_s(q_1,\ldots,q_s) = ze^{-\beta\sum_{i=2}^{s}\Phi(q_1-q_i)}\Bigg[F_{s-1}(q_2,\ldots,q_s) +$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}\int dy_1\ldots dy_s\prod_{i=1}^{k}\varphi_{q_1}(y_i)F_{s-1+k}(q_2,\ldots,q_s,y_1,\ldots,y_k)\Bigg], \qquad s\ge 1, \quad F_0 = 1, \qquad (2.13)$$

$$\varphi_{q_1}(y) = e^{-\beta\Phi(q_1-y)} - 1.$$

Покажемо, що з рівняння для F_s випливає рівняння для F_{s-1}, якщо виконуються умови узгодження (2.6).

Для цього скористаємося тотожністю

$$e^{-\beta\sum_{i=2}^{s}\Phi(q_1-q_i)} = e^{-\beta\sum_{i=2}^{s-1}\Phi(q_1-q_i)}\Big[\Big(e^{-\beta\Phi(q_1-q_s)}-1\Big)+1\Big] \qquad (2.14)$$

та візьмемо від лівої та правої частин рівняння (2.13) інтеграл $\lim\limits_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_\Lambda dq_s$. Враховуючи умову (1.1), отримуємо

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int\limits_\Lambda dq_s\left[e^{-\beta\Phi(q_1-q_s)}-1\right]F_{s-1+k}(q_2,\ldots,q_s,y_1,\ldots,y_k) = 0, \quad k\geq 0,$$

оскільки $\left|F_{s-1+k}\right|\leq c\xi^{s-1+k}$. Враховуючи умови (2.6), одержуємо

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int\limits_\Lambda dq_s\,F_{s-1+k}(q_2,\ldots,q_{s-1},q_s,y_1,\ldots,y_k) = F_{s-2+k}(q_2,\ldots,q_{s-1},y_1,\ldots,y_k).$$

Отже, вклад від першого доданка в (2.14) дорівнює нулю, а інтегрування правої частини (2.13) з другим доданком приводить до заміни F_{s-1+k} на F_{s-2+k}. В результаті з рівняння (2.13) для $F_s(q_1,\ldots,q_s)$ отримуємо рівняння для $F_{s-1}(q_1,\ldots,q_{s-1})$

$$F_{s-1}(q_1,\ldots,q_{s-1}) = ze^{-\beta}\sum_{i=2}^{s-1}\Phi(q_1-q_i)\Bigg[F_{s-2}(q_2,\ldots,q_{s-1}) +$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}\int dy_1\ldots dy_k\prod_{i=1}^{k}\varphi_{q_1}(y_i)F_{s-2+k}(q_2,\ldots,q_{s-1},y_1,\ldots,y_k)\Bigg], \quad s\geq 2.$$

Очевидно, що з рівняння для $F_1(q_1)$ одержуємо

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int dq_1\,F_1(q_1) = 1,$$

оскільки права частина рівняння до $F_1(q_1)$ є сталою $\frac{1}{v}$, а після перенормування стає одиницею.

Таким чином, виходячи з рівняння для $F_s(q_1,\ldots,q_s)$ і використовуючи умови узгодження, отримуємо всі рівняння для $F_1(q_1),\ldots,F_{s-1}(q_1,\ldots,q_{s-1})$.

У цьому сенсі ланцюжок рівнянь Кірквуда – Зальцбурга є еквівалентним одному рівнянню для $F_\infty(q_1,\ldots,q_s,\ldots)$

$$F_\infty(q_1,\ldots,q_s,\ldots) = ze^{-\beta}\sum_{i=2}^{\infty}\Phi(q_1-q_i)\Bigg[F_\infty(q_2,\ldots,q_s,\ldots) +$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}\int dy_1\ldots dy_k\prod_{i=1}^{k}\varphi_{q_1}(y_i)F_\infty(q_2,\ldots,q_s,y_1,\ldots,y_k)\Bigg]. \tag{2.15}$$

Рівняння для $F_s(q_1,\ldots,q_s)$ можуть бути виведені з одного рівняння (2.15) для $F_\infty(q_1,\ldots,q_s,\ldots)$ точно такою ж процедурою, як з рівняння для $F_s(q_1,\ldots,q_s)$ було отримано рівняння для $F_{s-1}(q_1,\ldots,q_{s-1})$.

Рівняння (2.15) можна покласти в основу рівноважної статистичної механіки. У наступній роботі буде показано, що воно має розв'язок, як і рівняння Кірквуда – Зальцбурга, при тих же обмеженнях на потенціал Φ та активність z, і що кластерні властивості (2.10) можуть бути виведені безпосередньо з рівняння (2.15).

3. Нерівноважні стани. ***3.1. Випадок класичної статистичної механіки.*** Як відомо [1, 3], нерівноважні стани у класичній механіці описуються послідовністю кореляційних функцій

$$F(t) = (F_1(t,x_1),\ldots,F_s(t,x_1,\ldots,x_s),\ldots), \tag{3.1}$$

які задовольняють ієрархію ББГКІ. Тут $x = (q, p)$ — точка фазового простору, q — положення, p — імпульс.

У тих випадках, коли розв'язки ієрархії ББГКІ існують [3], можна лише стверджувати, що

$$\lim_{V \to \infty} \frac{1}{V^s} \int\limits_{(\Lambda \times R^3)^s} dx_1 \ldots dx_s\, F_s(t, x_1, \ldots, x_s) = 1, \tag{3.2}$$

якщо початкові кореляційні функції $F_s(0, x_1, \ldots, x_s)$ задовольняють умови (3.2).

Поки що невідомо, чи кореляційні функції $F_s(t, (x)_s)$ мають зображення, аналогічне (2.1), тобто

$$F_s(t, (x)_s) = \sum_{i_1 + \ldots + i_n = s} \omega_{i_1}\big(t, (x)_{i_1}\big) \ldots \omega_{i_n}\big(t, (x)_{i_n}\big), \tag{3.3}$$

де кластери $\omega_n(t, (x)_n)$ задовольняють умови

$$\int dq_2 \ldots dq_n\, dp_1 \ldots dp_n\, |\omega_n(t, (x)_n)| = \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V} \int\limits_{\Lambda^n} d(q)_n \int d(p)_n\, |\omega_n(t, (x)_n)| < \infty. \tag{3.4}$$

Якби умови (3.3), (3.4) виконувались, що є аналогом умов (2.4), (2.5) для рівноважних станів, та виконувалася б решта умов, що є аналогом (2.6), тоді можна було б довести аналог теореми 3.

На даний час умови (3.2) – (3.4) встановлено для ієрархії Больцмана [8], для якої має місце таке зображення кореляційних функцій:

$$F_s(t, x_1, \ldots, x_s) = F_1(t, x_1) \ldots F_1(t, x_s), \tag{3.5}$$

де одночастинкова кореляційна функція задовольняє нелінійне рівняння Больцмана та справджується рівність

$$\lim_{V \to \infty} \frac{1}{V} \int\limits_{\Lambda} dq \int dp\, F_1(t, x) = \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V} \int\limits_{\Lambda} dq \int dp\, F_1(0, x) = 1. \tag{3.6}$$

Ми припускаємо, що умова (3.6) для $F_1(0, x)$ виконується.

У цьому випадку можна дослівно повторити всі результати для рівноважних станів.

3.2. Випадок дифузійної ієрархії. У серії праць [9 – 11] В. І. Скрипник довів, що послідовність нерівноважних кореляційних функцій, які є розв'язками задачі Коші для дифузійної ієрархії Боголюбова – Стрельцової, задовольняють ті ж умови, що й рівноважні функції розподілу. А саме,

$$F_s(t, (q)_s) = \sum_{i_1 + \ldots + i_n = s} \omega_{i_1}\big(t, (q)_{i_1}\big) \ldots \omega_{i_n}\big(t, (q)_{i_n}\big), \tag{3.7}$$

причому виконуються умови (2.2) – (2.6).

Тому можна повторити всі результати п. 2 для кореляційних функцій дифузійної ієрархії.

Зауважимо, що існують інші підходи до побудови міри на конфігураційному просторі нескінченних рівноважних систем. Умовно їх можна виділити у три групи. До першої групи можна віднести праці Мінлоса [12, 13] та Рюелля [2, 14], в яких за кореляційними функціями відновлюються послідовності умовних густин імовірностей та їхні умови узгодження. До другої групи належать праці Добрушина – Ленфорда – Рюелля [15 – 17], де отримано так зване рівняння ДЛР для міри і показано еквівалентність станів, заданих мірами чи кореляційними функціями. Нарешті, до третьої групи можна віднести роботу Рюелля [14], де використовується умова додатної визначеності кореляційних функцій для побудови аналога польового оператора та послідовності умовних густин імовірностей.

1. *Боголюбов Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. – М.: Гостехиздат, 1946. – 119 с.
2. *Рюэль Д.* Статистическая механика. Строгие результаты. – М.: Мир, 1971. – 364 с.
3. *Петрина Д. Я., Герасименко В. И., Малышев П. В.* Математические основы классической статистической механики. – Киев: Наук. думка, 1985. – 262 с.
4. *Колмогоров А. Н.* Основные понятия теории вероятностей. – М.: ОНТИ, 1936.
5. *Гихман И. И., Скороход А. В.* Теория случайных процессов: В 3 т. – М.: Наука, 1971. – Т. 1.
6. *Боголюбов Н. Н., Петрина Д. Я., Хацет Б. И.* Математическое описание равновесного состояния классических систем на основе формализма канонического ансамбля // Теорет. и мат. физика. – 1969. – **1**. – С. 251 – 274.
7. *Petrina D. Ya.* Mathematical foundations of quantum statistical mechanics. – Dordrecht: Kluwer, 1995. – 444 p.
8. *Cercignani C., Gerasimenko V. I., Petrina D. Ya.* Many-particle dynamics and kinetic equations. – Dordrecht: Kluwer, 1997. – 244 p.
9. *Skrypnik W. I.* On generalized Gibbs type solutions of the diffusion Bogoliubov – Streltsova hierarchy // Teor. Mat. Fiz. – 1984. – **58**, № 3. – P. 398 – 420.
10. *Skrypnik W. I.* Correlation functins of infinite system of interactin Brownian particles: local in time evolution close to equilibrium // J. Stat. Phys. – 1985. – **35**, № 5/6. – P. 587 – 602.
11. *Skrypnik W. I.* Mean-field limit in a generalized Gibbs system and an equivalent system of interacting Brownian particles // Teor. Mat. Fiz. – 1988. – **76**, № 1. – P. 100 – 117.
12. *Минлос Р. А.* Предельное распределение Гиббса // Функцион. анализ и его прил. – 1967. – **1**, № 2. – С. 60 – 73.
13. *Минлос Р. А.* Регулярность предельного распределения Гиббса // Там же. – № 3. – С. 40 – 53.
14. *Ruelle D.* States of classical statistical mechanics // J. Math. Phys. – 1966. – **8**, № 8. – P. 1657 – 1668.
15. *Добрушин Р. Л.* Описание случайного поля при помощи условных вероятностей и условия его регулярности // Теория вероятностей и ее применения. – 1968. – **13**, № 2. – С. 201 – 229.
16. *Добрушин Р. Л.* Гиббсовские поля. Общий случай // Функцион. анализ и его прил. – 1969. – **3**, № 1. – С. 27 – 35.
17. *Lanford O., Ruelle D.* Observables at infinity and states with short range correlations in statistical mechanics // Communs Math. Phys. – 1969. – **13**, № 3. – P. 194 – 215.

Одержано 23.07.2002