ФУНКЦІОНАЛЬНО-СТОХАСТИЧНИЙ МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ КОРЕЛЯЦІЙ У БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМАХ

К. К. Печарський
Національний університет "Львівська політехніка",
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна

(Отримано 15 грудня 2014 р.; в остаточному вигляді — 28 липня 2015 р.)

Розглянуто підхід до вивчення класичних систем взаємодіючих частинок, зокрема функцій розподілу, із використанням теорії випадкових полів та інтеґрування за мірою Вінера. Для ліувіллівської функції розподілу визначено статистичний функціонал, для якого виведено ланцюжок рівнянь у вінерівському просторі, за формою аналогічний ланцюжку рівнянь Боголюбова для функцій розподілу у фазовому просторі.

Використовуючи розвинення статистичних функціоналів, які входять у виведений ланцюжок рівнянь, у ряд, який побудував Н. Вінер, при "переході" з вінерівського у фазовий простір визначаємо відповідні наближення різночастинкових функцій розподілу, для яких виводимо системи лінійних диференціальних рівнянь.

Розв'язок рівняння для нульового наближення одночастинкової функції розподілу представляє локально рівноважний розподіл, який при
$t \to \infty$ переходить у відому функцію Максвелла. Усі розв'язки однорідних рівнянь для різних наближень одночастинкової функції розподілу при $t = 0$ однакові, що дає змогу визначати невідомі наближення двочастинкових, тричастинкових і т. д. функцій розподілу при $t = 0$.

Окремо також показано, що з ланцюжка рівнянь Боголюбова можна отримати послідовність замкнених систем лінійних диференціальних рівнянь, які збігаються з розглянутими в цій праці системами.

У випадку статистичної рівноваги всі похідні за часом для всіх наближень функції розподілу дорівнюють нулеві, а функції, незалежні від часу, розпадаються на добуток двох незалежних функцій координат та імпульсів.

Отримані рівняння для певних наближень функцій розподілу легко розв'язати. Для нульового та першого наближень двочастинкової функції розподілу дістаємо відомі значення. Для другого наближення цієї ж функції розподілу отримуємо вираз, у якому один із доданків є розбіжним, але в об'єднанні з наступним доданком такого ж порядку їх сума дорівнює нулеві, що узгоджується із загальними вимогами до ортогонального розвинення статистичного функціонала, і тоді друге наближення є скінченним.

Для третього наближення цієї ж функції розподілу отримано вираз, який складається з 214 різнотипних доданків із різними кількостями добутків функцій Маєра. Ураховуючи згадані вимоги до ортогонального розвинення статистичного функціонала, третє наближення також приймає скінченне значення.

Ключові слова: функція розподілу, вінерівський простір, статистичний функціонал, ортогональні стохастичні функціонали.

PACS number(s): 05.10.Gg

I. ВСТУП

Досить ефективним методом статистичного вивчення рівноважних та нерівноважних процесів у багаточастинкових взаємодіючих системах є впровадження та вивчення послідовності функцій розподілу та встановлення сукупності зачеплених рівнянь для цих функцій, тобто отримання ланцюжка рівнянь, який тут будемо називати ланцюжком Боголюбова, у якому кожне з рівнянь цього ланцюжка не є замкненим. Щоб отримати замкнене рівняння для s-частинкової функції розподілу, треба в s-му рівнянні $(s+1)$-частинкову функцію розподілу наближено виразити через s-частинкові функції.

При цьому важливим є питання: для якого за порядком рівняння та в якій конкретній формі можна провести подібний "обрив" ланцюжка Боголюбова, вивчаючи ту чи іншу систему, щоб за допомогою замкненого рівняння для s-частинкової функції розподілу, відкинувши весь останній "хвіст" ланцюжка рівнянь отримати достатньо добру точність для опису розглядуваної системи.

У застосуванні до конденсованих систем це питання дотепер відкрите, незважаючи на його важливість та принципове значення в статистичній механіці.

У зв'язку зі сказанним теоретичне зацікавлення викликає задача встановлення й вивчення цих функцій розподілу в теорії конденсованих систем як у рівноважному, так і в нерівноважному випадках за умови мінімального використання звичних методів і положень статистичної механіки.

II. ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ СТАТИСТИЧНОГО ФУНКЦІОНАЛА СИСТЕМИ ВЗАЄМОДІЮЧИХ ЧАСТИНОК

У цій статті розвинуто підхід до вивчення класичних систем взаємодіючих частинок, зокрема функцій розподілу М. М. Боголюбова [1], із використанням теорії випадкових полів та інтеґрування за мірою Вінера [2, 3].

Означення 1. *Статистичним функціоналом системи взаємодіючих частинок назвемо вимірний полілінійний функціонал на вінерівськoму просторі $C_n(\Gamma^{N-s})$, який визначається співвідношенням [4, 5]*

$$\rho_s(t,x_1,x_2,\dots,x_s;P) = \int_\Gamma \overset{(N-s)}{\cdots} \int_\Gamma F_N(t,x_1,\dots,x_s,x_{s+1},\dots,x_N) \prod_{k=s+1}^{N} dP(x_k). \quad (1)$$

Якщо $F_N(t,x_1,\dots,x_N) \in L_2(\Gamma^N)$, то $\rho_s(t,x_1,\dots,x_s) \in L_2(C_n)$ [2, 3]. Тут $\Gamma^N = \prod_{k=1}^{N}\Gamma_k$, Γ_k — шестивимірний куб у фазовому просторі k-ї частинки, $C_n(\Gamma^{N-s})$ — вінерівський простір усіх неперервних випадкових функцій $P(x_n) \in C_n(\Gamma^{N-s})$, $F_N(t,x_1,\dots,x_N)$ — функція розподілу, яка задовольняє рівняння Ліувілля.

Функціонали (1) в просторі з мірою Вінера можна розглядати як функціонали у фазовому просторі станів газу [2–4].

Для статистичного функціонала (1) виконується рекурентне співвідношення

$$\rho_s(t,x_1,\dots,x_s;P) = \int_\Gamma \rho_{s+1}(t,x_1,\dots,x_s,x_{s+1};P)dP(x_{s+1}),$$

що за формою збігається з таким же співвідношенням для функції розподілу $F_s(t,x_1,\dots,x_s)$ [1].

За допомогою функціонала (1) можна представити функцію розподілу. Справді, маємо

Теорему 1. *Нехай задана ліувіллівська функція розподілу $F_N(t,x_1,\dots,x_s,x_{s+1},\dots,x_N)$ та функціонал (1). Тоді будемо мати співвідношення [4]:*

$$\int_{C_n}\left\{\rho_s(t,x_1,x_2,\dots,x_s;P)\int_\Gamma \overset{(N-s)}{\cdots}\int_\Gamma dP(y_{s+1})\dots dP(y_N)\right\}d_WP = \frac{(N-s)!}{V^s}F_s(t,x_1,\dots,x_s), \quad (2)$$

d_WP — позначення міри Вінера.

Доводимо “переходом” з вінерівського у фазовий простір, враховуючи при цьому умову, що функція розподілу $F_N(t,x_1,\dots,x_N)$ дорівнює нулеві за ототожнення хоча б двох її змінних.

Інтеґруючи рівняння Ліувілля для функції $F_N(t,x_1,\dots,x_N)$ за вінерівським полем $\int_\Gamma dP(y_{s+1})\dots\int_\Gamma dP(y_N)$, отримуємо ланцюжок рівнянь для функціонала (1):

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\rho_s(t,x_1,\dots,x_s;P) = -\sum_{i=1}^{s}\frac{p_i}{m}\frac{\partial}{\partial q_i}\rho_s(t,x_1,\dots,x_s;P)\\
&+\sum_{i=1}^{s}\frac{\partial U_s(q_1,\dots,q_s)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\rho_s(t,x_1,\dots,x_s;P)\\
&+\sum_{j=s+1}^{N}\sum_{i=1}^{s}\int_\Gamma\frac{\partial\Phi(|q_i-q_j|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\rho_{s+1}(t,x_1,\dots,x_s,x_j;P)dP(x_j)\\
&-\sum_{j=s+1}^{N}\int_\Gamma\frac{p_j}{m}\frac{\partial}{\partial q_j}\rho_{s+1}(t,x_1,\dots,x_s,x_j;P)dP(x_j)\\
&+\sum_{j=s+1}^{N}\sum_{i=1}^{s}\int_\Gamma\frac{\partial\Phi(|q_i-q_j|)}{\partial q_j}\frac{\partial}{\partial p_j}\rho_{s+1}(t,x_1,\dots,x_s,x_j;P)dP(x_j)\\
&+\sum_{j=s+1}^{N}\sum_{\substack{i=s+1\\(i<j)}}^{N}\iint_{\Gamma^2}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_j|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\rho_{s+2}(t,x_1,\dots,x_s,x_i,x_j;P)dP(x_i)dP(x_j).
\end{aligned} \quad (3)$$

Ланцюжок рівнянь (3) за формою тотожний ланцюжку рівнянь Боголюбова для функцій розподілу $F_s(t, x_1, \ldots, x_s)$ у фазовому просторі [1].

Інтеґруючи обидві частини ланцюжка (3) за мірою Вінера з вінерівським полем $\int\limits_\Gamma dP(y_{s+1}) \ldots \int\limits_\Gamma dP(y_N)$, отримаємо ланцюжок рівнянь Боголюбова [1, 6].

Для дослідження ланцюжка (3) при "переході" з вінерівського у фазовий простір будемо враховувати в ньому тільки три перші доданки його правої частини, тобто будемо розглядати ланцюжок рівнянь

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_s(t, x_1, \ldots, x_s; P) + \mathcal{H}_s(x_1, \ldots, x_s)\rho_s(t, x_1, \ldots, x_s; P)$$
$$= (N - s)\sum_{i=1}^{s}\int\limits_\Gamma \frac{\partial \Phi(|q_i - q_{s+1}|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\rho_{s+1}(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}; P)\, dP(x_{s+1}). \quad (4)$$

Щоб одержати розчеплену систему рівнянь для функцій розподілу, визначмо насамперед послідовні наближення цієї функції розподілу, для чого використаймо розвинення статистичного функціонала (1) за ортогональними стохастичними функціоналами [2, 3], розглядаючи в заданій формулі n-частинну суму ряду:

$$\rho_s(t, x_1, \ldots, x_s; P) = f_s^0(x_1, \ldots, x_s)$$
$$+ \sum_{i=1}^{n} G_s^j[f_s^j(t, x_1, \ldots, x_{s+j}); P]. \quad (5)$$

Такі ж розвинення використаймо і для статистичних функціоналів $\rho_{s+1}(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}; P)$, $\rho_{s+2}(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}, x_{s+2}; P), \ldots$, які входять у ланцюжок рівнянь (4).

Для прикладу запишімо декілька перших ортогональних стохастичних функціоналів:

$$G_s^1[f_s^1(t, x_1, \ldots, x_{s+1}); P] =$$
$$\int\limits_\Gamma f_s^1(t, x_1, \ldots, x_{s+1}) dP(x_{s+1}); \quad (6)$$

$$G_s^2[f_s^2(t, x_1, \ldots, x_{s+1}, x_{s+2}); P]$$
$$= \iint\limits_{\Gamma^2} f_s^2(t, x_1, \ldots, x_{s+1}, x_{s+2}) dP(x_{s+1}) dP(x_{s+2})$$
$$- \int\limits_\Gamma f_{s(2)}^2(t, x_1, \ldots, x_s, \hat{x}_{s+1}) dx_{s+1}; \quad (7)$$

$$G_s^3[f_s^3(t, x_1, \ldots, x_{s+1}, x_{s+2}, x_{s+3}); P]$$
$$= \iiint\limits_{\Gamma^3} f_s^3(t, x_1, \ldots, x_{s+2}, x_{s+3}) dP(x_{s+1}) \ldots dP(x_{s+3})$$
$$-3 \iint\limits_{\Gamma^2} f_{s(2)}^3(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}, \hat{x}_{s+2}) dP(x_{s+1}) dx_{s+2}$$

і т.д. (8)

Тут змінна $\hat{x}_{s+2}$ означає, що в цій формулі при обчисленні інтеґралів ототожнено дві змінні, наприклад $(x_{s+2}, x_{s+3}) = \hat{x}_{s+2}$.

Тепер, використовуючи ортогональне розвинення (5), знайдемо різні наближення функцій розподілу, для чого з вінерівського простору "перейдемо" у фазовий простір. Для цього інтеґруємо розвинення (5) за мірою Вінера, записане в "розгорненому" вигляді, і отримуємо

$$\int\limits_{C_n} \rho_s(t, x_1, x_2, \ldots, x_s; P) d_W P =$$
$$f_s^0(t, x_1, \ldots, x_s) \equiv \mathcal{R}_s^0(t, x_1, \ldots, x_s), \quad (9)$$

нульове наближення s-частинкової функції розподілу.

Далі інтеґруємо розвинення (5) за мірою Вінера з вінерівським полем $\int\limits_\Gamma dP(y)$ та нормуючим множником $\frac{1}{V}$.

Одержуємо

$$\frac{1}{V}\int\limits_{C_n}\left\{\rho_s(t, x_1, x_2, \ldots, x_s; P)\int\limits_V dP(y)\right\} d_W P$$
$$= \frac{1}{V}\int\limits_\Gamma f_s^1(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}) dx_{s+1}. \quad (10)$$

Звідси, за означенням, отримуємо перше наближення функції розподілу

$$\mathcal{R}_s^1(t, x_1, \ldots, x_s) = \frac{1}{V}\int\limits_\Gamma f_s^1(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}) dx_{s+1}. \quad (11)$$

Інтеґруємо далі ряд (5) за мірою Вінера з вінерівським полем

$\iint\limits_{\Gamma^2} dP(y_1) dP(y_2)$ та нормуючим множником $\dfrac{1}{2! V^2}$, у результаті чого одержуємо

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2!V^2}\int\limits_{C_n}\left\{\rho_s(t,x_1,x_2,\ldots,x_s;P)\iint\limits_{\Gamma^2}dP(y_1)dP(y_2)\right\}d_WP\\
&=\frac{\mu(\Gamma)}{2!V^2}\mathcal{R}_s^0(t,x_1,\ldots,x_s) \qquad (12)\\
&+\frac{1}{V^2}\iint\limits_{\Gamma^2}f_s^2(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1},x_{s+2})dx_{s+1}dx_{s+2}.
\end{aligned}
$$

звідки, за означенням, отримуємо друге наближення функції розподілу

$$
\mathcal{R}_s^2(t,x_1,\ldots,x_s)=\frac{1}{V^2}\iint\limits_{\Gamma^2}f_s^2(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1},x_{s+2})dx_{s+1}dx_{s+2}. \qquad (13)
$$

(Тут $\mu(\Gamma)$ — міра простору Γ).

Продовжуючи інтеґрування ряду (5) за мірою Вінера з відповідним вінерівським полем та нормуючим множником, одержуємо наступні наближення функції розподілу. Для прикладу, третє наближення функції розподілу матиме вигляд

$$
\mathcal{R}_s^3(t,x_1,\ldots,x_s)=\frac{1}{V^3}\iiint\limits_{\Gamma^3}f_s^3(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1},\ldots,x_{s+3})dx_{s+1}\ldots dx_{s+3},
$$

і т.д.

Отже, ми отримуємо формули для запису довільного наближення $\mathcal{R}_s^j(t,x_1,\ldots,x_s)$ $(j=0,1,2,\ldots)$ функцій розподілу для довільного фіксованого s, $(s=1,2,\ldots,k)$.

Розгляньмо тепер систему рівнянь ланцюжка (4), у якій почергово використовуємо розвинення (5) для функціоналів $\rho_s(t,x_1,\ldots,x_s;P)$, $\rho_{s+1}(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1};P)$, …. Після "переходу" з вінерівського у фазовий простір у цих рівняннях отримуємо відповідні рівняння для різних наближень функцій розподілу:

$$
\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_s^0(t,x_1,\ldots,x_s)+\mathcal{H}_s(x_1,\ldots,x_s)\mathcal{R}_s^0(t,x_1,\ldots,x_s)=0 \qquad (14)
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\Gamma}f_s^1(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1})dx_{s+1}+\frac{1}{V}\mathcal{H}_s(x_1,\ldots,x_s)\int\limits_{\Gamma}f_s^1(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1})dx_{s+1}\\
&=\frac{N-s}{V}\sum_{i=1}^{s}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}f_{s+1}^0(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1})dx_{s+1}. \qquad (15)
\end{aligned}
$$

або, враховуючи означення (9) та (11), рівняння (15) записуємо

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_s^1(t,x_1,\ldots,x_s)+\mathcal{H}_s(x_1,\ldots,x_s)\mathcal{R}_s^1(t,x_1,\ldots,x_s)\\
&=\frac{N-s}{V}\sum_{i=1}^{s}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\mathcal{R}_{s+1}^0(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1})dx_{s+1}. \qquad (16)
\end{aligned}
$$

У рівняння (16) входить функція $\mathcal{R}_{s+1}^0(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1})$, для якої використовуємо рівняння (14)

$$
\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_{s+1}^0(t,x_1,\ldots,x_{s+1})+\mathcal{H}_{s+1}(x_1,\ldots,x_{s+1})\mathcal{R}_{s+1}^0(t,x_1,\ldots,x_{s+1})=0, \qquad (15_1)
$$

яке приєднуємо до рівняння (16), у результаті чого отримуємо замкнену систему двох рівнянь для знаходження першого наближення функції розподілу $\mathcal{R}_s^1(t,x_1,\ldots,x_s)$.

Продовжуючи потрібні обчислення при "переході" з вінерівського у фазовий простір, одержуємо замкнену систему лінійних диференціальних рівнянь для обчислення другого наближення $\mathcal{R}_s^2(t,x_1,\ldots,x_s)$ функції розподілу

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_s^2(t,x_1,\dots,x_s)+\mathcal{H}_s(x_1,\dots,x_s)\mathcal{R}_s^2(t,x_1,\dots,x_s)\\
&=\frac{N-s}{V}\sum_{i=1}^{s}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\\
&\times\mathcal{R}_{s+1}^1(t,x_1,\dots,x_s,x_{s+1})dx_{s+1};\\
&\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_{s+1}^1(t,x_1,\dots,x_{s+1})+\mathcal{H}_{s+1}(x_1,\dots,x_{s+1})\\
&\times\mathcal{R}_{s+1}^1(t,x_1,\dots,x_{s+1})\\
&=\frac{N-s-1}{V}\sum_{i=1}^{s+1}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_{s+2}|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\\
&\times\mathcal{R}_{s+2}^0(t,x_1,\dots,x_{s+1},x_{s+2})dx_{s+2};\\
&\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_{s+2}^0(t,x_1,\dots,x_{s+2})+\mathcal{H}_{s+2}(x_1,\dots,x_{s+2})\\
&\times\mathcal{R}_{s+2}^0(t,x_1,\dots,x_{s+2})=0.
\end{aligned}\right\}\tag{17}$$

Із системи рівнянь (17) відразу видно алґоритм запису наступної замкненої системи рівнянь для встановлення вищих наближень функції розподілу.

Зауваження. Замість ланцюжка рівнянь (3), ми використовували ланцюжок (4). Якщо користуватися ланцюжком (3) та використовувати розвинення (5), які підставляємо в ланцюжок (3), та з отриманих рівностей знаходити наближення функцій розподілу, то матимемо такий самий результат, що і з ланцюжка (4), тому що додаткові доданки наближень функцій розподілу дорівнюють нулеві.

Отже, ми завжди маємо послідовність замкнених систем рівнянь для потрібних, заданих наближень, з яких однозначно знаходимо шукане наближення функції розподілу.

При цьому в знайдені розв'язки заданих замкнених систем диференціальних рівнянь входять множники, які в "термодинамічній границі" мають вигляд $(\frac{1}{v})^k$, $(k=1,2,\dots)$, і цей множник $\frac{1}{v}$ не є параметром розвинення, не впливає на знаходження розв'язків цих систем рівнянь і не обов'язково є досить малим.

Розгляньмо тепер розв'язки декількох записаних систем рівнянь.

Нульове наближення функції розподілу

$$\begin{aligned}
&\mathcal{R}_s^0(t,x_1,\dots,x_s)=e^{-t\mathcal{H}_s(x_1,\dots,x_s)}\\
&\times\mathcal{R}_s^0(0,x_1,\dots,x_s),
\end{aligned}\tag{18}$$

де $e^{-t\mathcal{H}_s(x_1,\dots,x_s)}$ – оператор динамічного зсуву в часі для сукупності s частинок [1,6], який пов'язаний із рухом ізольованих s – частинних груп у фазовому просторі, $\mathcal{R}_s^0(0,x_1,\dots,x_s)$ – невідома функція розподілу при $t=0$.

Перше наближення функції розподілу отримуємо, розв'язуючи систему рівнянь (15_1) та (16):

$$\begin{aligned}
&\mathcal{R}_s^1(t,x_1,\dots,x_s)=e^{-t\mathcal{H}_s(x_1,\dots,x_s)}\mathcal{R}_s^1(0,x_1,\dots,x_s)\\
&+\frac{N-s}{V}\int\limits_0^t e^{-(t-t_1)\mathcal{H}_s(x_1,\dots,x_s)}dt_1\sum_{i=1}^{s}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}{\partial q_i}\\
&\times\frac{\partial}{\partial p_i}e^{-t_1\mathcal{H}_{s+1}(x_1,\dots,x_{s+1})}\mathcal{R}_{s+1}^0(0,x_1,\dots,x_{s+1})dx_{s+1}.
\end{aligned}\tag{19}$$

Розв'язком системи рівнянь (17) є друге наближення функції розподілу

$$\begin{aligned}
&\mathcal{R}_s^2(t,x_1,\dots,x_s)=e^{-t\mathcal{H}_s(x_1,\dots,x_s)}\mathcal{R}_s^2(0,x_1,\dots,x_s)\\
&+\frac{N-s}{V}\int\limits_0^t e^{-(t-t_1)\mathcal{H}_s(x_1,\dots,x_s)}dt_1\sum_{i=1}^{s}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}{\partial q_i}
\end{aligned}$$

$$\times \frac{\partial}{\partial p_i} e^{-t_1 \mathcal{H}_{s+1}(x_1,\ldots,x_{s+1})} \mathcal{R}^1_{s+1}(0,x_1,\ldots,x_{s+1}) dx_{s+1}$$
$$+ \frac{(N-s)(N-s-1)}{V^2} \int\limits_0^t e^{-(t-t_1)\mathcal{H}_s(x_1,\ldots,x_s)} dt_1 \tag{20}$$
$$\times \sum_{i=1}^{s} \int\limits_{\Gamma} \frac{\partial \Phi(|q_i - q_{s+1}|)}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \int\limits_0^{t_1} e^{-(t_1-t_2)\mathcal{H}_{s+1}(x_1,\ldots,x_{s+1})} dt_2 dx_{s+1}$$
$$\times \sum_{i=1}^{s+1} \int\limits_{\Gamma} \frac{\partial \Phi(|q_i - q_{s+2}|)}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} e^{-t_2 \mathcal{H}_{s+2}(x_1,\ldots,x_{s+2})}$$
$$\times \mathcal{R}^0_{s+2}(0,x_1,\ldots,x_{s+2}) dx_{s+2}.$$

Так само можна записати розв'язки наступних замкнених систем рівнянь, використовуючи алґоритм запису попередніх розв'язків.

Як видно із записаних розв'язків, у кожний із них входять невідомі функції розподілу відповідних наближень при $t = 0$.

У статистичній механіці не задаються ні правила, ні рівняння для знаходження цих функцій.

Отже, ми дістаємо такі "віріальні розвинення" для функцій розподілу, залежних від часу.

Зрозуміло також, що в усіх формулах треба виконати граничний перехід звичайним способом [1], і тоді інтеґрування поширюється на весь простір.

III. ДЕЯКІ ПИТАННЯ КІНЕТИЧНОЇ ТЕОРІЇ

У кінетичній теорії газ описують за допомогою одночастинкової функції розподілу, для знаходження якої використовують, зокрема, рівняння Больцмана, складне інтеґро-диференціальне рівняння, і справедливе воно для розгляду тільки нерівноважного ідеального газу.

М. М. Боголюбов зауважує: "... Для розвитку кінетичної теорії важливо не тільки уточнення розв'язків кінетичного рівняння, але й уточнення самого кінетичного рівняння..." (з передмови до книги [7]).

У праці [1] М. М. Боголюбов побудував методику математичного формалізму, яка, у принципі, дає змогу отримати кінетичні рівняння для одночастинкової функції розподілу в довільному наближенні за ступенем густини.

Методу Боголюбова присвячено багато праць, систематичний розгляд яких дано, зокрема, у [6].

Критичні зауваження до методу Боголюбова розглянуті, наприклад у [8], де проаналізовано дослідження багатьох авторів і показано, що внески в інтеґрали зіткнень, у яких використано вищі наближення за густиною двочастинкової функції розподілу, містять розбіжні (за часом) інтеґрали.

Як уже говорилося в розділі II, тут для вивчення нерівноважних процесів та знаходження різних наближень одночастинкової функції розподілу запропоновано розгляд послідовності замкнених систем лінійних диференціальних рівнянь для різних наближень одночастинкової функції — для чого тут використаймо розв'язки рівнянь з розділу II при $s = 1$.

Отже, розгляньмо ці функції

$$\mathcal{R}^0_1(t,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)} \mathcal{R}^0_1(0,x_1). \tag{21}$$

Для функції $\mathcal{R}^0_1(0,x_1)$ маємо рівняння

$$\mathcal{H}_1(x_1)\mathcal{R}^0_1(0,x_1) = 0,$$

для якого складаємо рівняння характеристик

$$\frac{dq_1}{\dfrac{p_1}{m}} = -\frac{dp_1}{\dfrac{\partial \Phi(|q_1|)}{\partial q_1}}, \qquad \text{або} \qquad \frac{\partial \Phi(|q_1|)}{\partial q_1} dq_1 = -\frac{p_1}{m} dp_1,$$

звідки

$$\frac{\partial \Phi(|q_1|)}{\partial q_1} dq_1 = 0; \quad -\frac{p_1}{m} dp_1 = 0, \quad \text{і звідси}$$

$$c_1 = -\frac{{p_1}^2}{2m}; \quad c_2 = -\Phi(|q_1|).$$

Тоді

$$\mathcal{R}^0_1(0,x_1) = e^{-\frac{{p_1}^2}{2m\theta}} \cdot e^{-\frac{1}{\theta}\Phi(|q_1|)}. \tag{22}$$

Тепер

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^0_1(t,x_1) &= e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)} \mathcal{R}^0_1(0,x_1) \\ &= e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)} e^{-\frac{{p_1}^2}{2m\theta}} e^{-\frac{1}{\theta}\Phi(|q_1|)} \\ &= e^{-\frac{{p_1}^2}{2m\theta}} e^{-\frac{1}{\theta}\Phi(|q_1 - \frac{p_1}{m}t|)} \ \text{при } t \neq 0, t < +\infty; \end{aligned} \tag{23}$$

$\lim\limits_{t\to\infty} \mathcal{R}^0_1(t,x_1) = e^{-\frac{{p_1}^2}{2m\theta}}$ — відома функція Максвелла.

Для першого наближення $\mathcal{R}^1_1(t,x_1)$ отримуємо формулу

$$\mathcal{R}_1^1(t,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^1(0,x_1) + \frac{N-1}{V}\int\limits_0^t e^{-(t-t_1)\mathcal{H}_1(x_1)}dt_1 \int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1} \times \frac{\partial}{\partial p_1} e^{-t_1\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2)dx_2. \tag{24}$$

Для другого наближення $\mathcal{R}_1^2(t,x_1)$ маємо розв'язок

$$\mathcal{R}_1^2(t,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^2(0,x_1) + \frac{N-1}{V}\int\limits_0^t e^{-(t-t_1)\mathcal{H}_1(x_1)}dt_1 \int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1} \times \frac{\partial}{\partial p_1} e^{-t_1\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^1(0,x_1,x_2)dx_2 + \frac{(N-1)(N-2)}{V^2}\int\limits_0^t e^{-(t-t_1)\mathcal{H}_1(x_1)}dt_1 \tag{25}$$

$$\times \int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}dx_2 \frac{\partial}{\partial p_1}\int\limits_0^{t_1} e^{-(t_1-t_2)\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}dt_2 \times \sum_{i=1}^2 \int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_i-q_3|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}e^{-t_2\mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)} \times \mathcal{R}_3^0(0,x_1,x_2,x_3)dx_3, \text{ і т.д.}$$

Розв'язком рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_1^0(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)\mathcal{R}_1^0(t,x_1) = 0$$

є функція

$$\mathcal{R}_1^0(t,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1).$$

Відповідно, розв'язком рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_1^1(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)\mathcal{R}_1^1(t,x_1) = 0$$

також буде функція

$$\mathcal{R}_1^1(t,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^1(0,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1). \tag{26}$$

Таким же розв'язком рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_1^2(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)\mathcal{R}_1^2(t,x_1) = 0$$

також буде функція $\mathcal{R}_1^2(t,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^2(0,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1)$, і т. д.

Отже, наявні рівності — розв'язки однорідних рівнянь для різних наближень одночастинкової функції при $t=0$:

$$\mathcal{R}_1^0(0,x_1) = \mathcal{R}_1^1(0,x_1) = \mathcal{R}_1^2(0,x_1) = \ldots, \tag{27}$$

а також

$$e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^1(0,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^2(0,x_1) = \ldots. \tag{28}$$

Наступний крок. Треба наближено визначити невідомі функції $\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2)$, $\mathcal{R}_2^1(0,x_1,x_2)$, $\mathcal{R}_2^2(0,x_1,x_2),\ldots$, для чого вже необхідно використати функціональну гіпотезу Боголюбова про відсутність кореляції в початковому стані та прийняти також до уваги й таке ([8], стор. 65):
"... трудність, з якою ми тут зіштовхуємося, насправді має фундаментальний характер. Очевидно, існує тільки один розв'язок цієї дилеми: ми повинні припустити, що можна знехтувати будь-якими кореляціями, які є в початковому стані".

Надалі ми будемо розглядати тільки такі системи взаємодіючих частинок, для яких ця умова виконується (див. напр. [1,6,8]).

Важливим наслідком цього припущення є те, що, проводячи різницю між минулим та майбутнім, ми вносимо в кінетичну теорію необоротність.

Для визначення функції $\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2)$ використаймо "граничні умови" Боголюбова [1,6]:

$$e^{-t\mathcal{H}_s(x_1,\ldots,x_s)}\left\{\mathcal{R}_s^0(0,x_1,\ldots,x_s) - \prod_{i=1}^s \mathcal{R}_1^0(0,x_i)\right\} \to 0$$

при $t\to\infty$, $s=2,3,\ldots$.

Отже, в нашому випадку приймаємо

$$e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2) = e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}(\mathcal{R}_1^0(0,x_1)\cdot\mathcal{R}_1^0(0,x_2)) = e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1)\cdot e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_1^0(0,x_2),$$

що справедливо для цього оператора еволюції.

Для наближеного розкриття дії оператора еволюції

$$e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1)$$

можна використати відому тотожність (див. [9], т. 2):

$$e^{t(-A+B)} = e^{-tA} + e^{-tA}\int\limits_0^t dt_1 e^{-t_1A}Be^{t_1(-A+B)},$$

де A та B — некомутуючі оператори, $\mathcal{H}_2(x_1,x_2) = A_2 - B_2$. Тоді

$$e^{t(-A_2+B_2)} = e^{-tA_2} + \int\limits_0^t dt_1 e^{-(t-t_1)A_2}B_2 e^{t_1(-A_2+B_2)} = e^{-tA_2} + \int\limits_0^t dt_1 e^{-(t-t_1)A_2}B_2 e^{-t_1A_2} + \int\limits_0^t dt_1 e^{-(t-t_1)A_2}B_2 \int\limits_0^{t_1} dt_2 e^{-(t_1-t_2)A_2}B_2 e^{t_2(-A_2+B_2)} = \ldots \tag{29}$$

Для практичного користування тотожністю (29) у цій тотожності треба розглядати певні наближення (за взаємодією оператора еволюції B_2). Наприклад, у першому наближенні за взаємодією оператора еволюції маємо:

$$\mathcal{R}_2^0(t,x_1,x_2) = e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2) = \left\{ e^{-tA_2} + \int\limits_0^t dt_1 e^{-(t-t_1)A_2} B_2 e^{-t_1A_2} \right\}$$
$$\times e^{-\frac{1}{2m\theta}(p_1^2+p_2^2)} \cdot e^{-\frac{1}{\theta}[\Phi(|q_1|)+\Phi(|q_2|)]} = \mathcal{R}_1^0(t,x_1)\mathcal{R}_1^0(t,x_2) \tag{30}$$
$$+ \int\limits_0^t dt_1 e^{-(t-t_1)A_2} \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1} \left[\frac{\partial}{\partial p_1} - \frac{\partial}{\partial p_2}\right] \mathcal{R}_1^0(t_1,x_1)\mathcal{R}_1^0(t_1,x_2),$$

де

$$\mathcal{R}_1^0(t,x_1) = e^{-\frac{p_1^2}{2m\theta}} \cdot e^{-\frac{1}{\theta}\Phi(|q_1-\frac{p_1}{m}t|)}; \quad \mathcal{R}_1^0(t,x_2) = e^{-\frac{p_2^2}{2m\theta}} \cdot e^{-\frac{1}{\theta}\Phi(|q_2-\frac{p_2}{m}t|)}$$

та, відповідно, функції $\mathcal{R}_1^0(t_1,x_1)$, $\mathcal{R}_1^0(t_1,x_2)$.

Так само за функціональною гіпотезою Боголюбова можна записувати

$$e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^1(0,x_1,x_2) = e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\left(\mathcal{R}_1^1(0,x_1)\mathcal{R}_1^1(0,x_2)\right) = e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\left(\mathcal{R}_1^0(0,x_1)\mathcal{R}_1^0(0,x_2)\right) \quad \text{і т.д.}$$

За цим же принципом наближено визначаємо

$$\begin{aligned} &e^{-t\mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)}\mathcal{R}_3^0(0,x_1,x_2,x_3) \\ &= e^{-t\mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)}\prod_{i=1}^3 \mathcal{R}_1^0(0,x_i), \\ &e^{-t\mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)}\mathcal{R}_3^1(0,x_1,x_2,x_3) \\ &= e^{-t\mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)}\prod_{i=1}^3 \mathcal{R}_1^1(0,x_i) \\ &= e^{-t\mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)}\prod_{i=1}^3 \mathcal{R}_1^0(0,x_i), \quad \text{і т.д.} \end{aligned}$$

Розглядаючи систему з рівнянь (15_1) та (17) (розділ II) при $s=1$, отримуємо лінійне кінетичне рівняння для першого наближення функції $\mathcal{R}_1^1(t,x_1)$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_1^1(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)\mathcal{R}_1^1(t,x_1) \\ &= \frac{N-1}{V}\int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}\frac{\partial}{\partial p_1} \\ &\times e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2)dx_2, \end{aligned} \tag{31}$$

розв'язком якого є функція (24).

Розглядаючи наступні системи рівнянь при $s=1$, можемо записати кінетичні рівняння для вищих наближень $\mathcal{R}_1^2(t,x_1)$, $\mathcal{R}_1^3(t,x_1)$, … .

Розглянута тут методика знаходження різних наближень кінетичного рівняння для одночастинкової функції розподілу відрізняється від загальновживаного способу, коли в ланцюжку Боголюбова для одночастинкової функції розподілу

$$\frac{\partial}{\partial t}F_1(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)F_1(t,x_1) = \frac{1}{v}\int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}\frac{\partial}{\partial p_1}F_2(t,x_1,x_2)dx_2, \tag{B$_1$}$$

функцію $F_2(t,x_1,x_2)$ “замінюють” її розвиненням за малим параметром $\frac{1}{v}$:

$$F_2(t,x_1,x_2) = F_2^0(t,x_1,x_2) + \frac{1}{v}F_2^1(t,x_1,x_2) + \dots,$$

у якому для невідомих функцій $F_2^0(t,x_1,x_2)$, $F_2^1(t,x_1,x_2),\dots$ нема ніяких рівнянь, а їх замінюють квадратичними, кубічними, … формами за $F_1(t,\cdot)$ з відповідними операторами, побудованими з операторів еволюції.

В описаній тут методиці при вивченні нерівноважних процесів розглядаємо ланцюжки рівнянь для “одночастинкового”, “двочастинкового”, … статистичних функціоналів, звідки при “переході” з вінерівського у фазовий простір отримуємо одне однорідне та всі інші неоднорідні рівняння для різних наближень одночастинкової функції розподілу.

Для обґрунтування того, що рівняння (31) є кінетичним, треба довести т. зв. H-теорему. Доведемо її.

Формула (24) точна, якщо відоме точне значення виразу $e^{-t_1\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2)$.

Наближено для найпростішого оператора $\mathcal{H}_2(x_1,x_2)$ візьмімо

$$e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\mathcal{R}_2^0(0,x_1,x_2) = e^{-t\left(\frac{p_1}{m}\frac{\partial}{\partial q_1}+\frac{p_2}{m}\frac{\partial}{\partial q_2}\right)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1)\mathcal{R}_1^0(0,x_2).$$

Після зазначеного наближення диференціальне рівняння (31) для функції $\mathcal{R}_1^1(t,x_1)$ набирає вигляду

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_1^1(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)\mathcal{R}_1^1(t,x_1) = \frac{N-1}{V}\int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}\frac{\partial}{\partial p_1}\mathcal{R}_1^0(t,x_1)\mathcal{R}_1^0(t,x_2)dx_2.$$

Звідси знаходимо $\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_1^1(t,x_1)$, відтак обчислюємо (оцінюємо) вираз

$$\frac{dH(t)}{dt} = \int\limits_\Gamma \left[1+\ln\mathcal{R}_1^1(t)\right]\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_1^1(t,x_1)dx_1.$$

Звідси, при ще одному наближенні, отримуємо

$$\frac{dH(t)}{dt} \le 0.$$

Тепер покажімо, що певним "силовим" методом можна одержати таку саму послідовність замкнених систем лінійних рівнянь для знаходження різних наближень одночастинкових функцій розподілу $F_1^i(t,x_1)$ $(i=0,1,\ldots)$, користуючись першими "зачепленими" рівняннями ланцюжка Боголюбова (B_1):

$$\frac{\partial}{\partial t}F_2(t,x_1,x_2) + \mathcal{H}_2(x_1,x_2)F_2(t,x_1,x_2)$$

$$= \frac{1}{v}\sum_{i=1}^{2}\int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_i-q_3|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}F_3(t,x_1,x_2,x_3)dx_3. \tag{B$_2$}$$

Тут пропонуємо знаходження нульового наближення $F_1^0(t,x_1)$: розглядаємо однорідне рівняння, побудоване з рівняння (B_1), у якому $F_1^0(t,x_1)=F_1(t,x_1)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}F_1^0(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)F_1^0(t,x_1) = 0, \tag{B$_3$}$$

яке збігається з рівнянням для функції $\mathcal{R}_1^0(t,x_1)$ з розв'язком (26), тобто $F_1^0(t,x_1) = \mathcal{R}_1^0(t,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}\mathcal{R}_1^0(0,x_1) = e^{-t\mathcal{H}_1(x_1)}F_1^0(0,x_1)$.

Наступне наближення одночастинкової функції $F_1^1(t,x_1)$ знаходимо з рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t}F_1^1(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)F_1^1(t,x_1)$$
$$= \frac{1}{v}\int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}\frac{\partial}{\partial p_1}F_2^0(t,x_1,x_2)dx_2, \tag{32}$$

у якому невідому функцію $F_2^0(t,x_1,x_2)$ "беремо" з однорідного рівняння, побудованого з другого рівняння (B_2) ланцюжка Боголюбова

$$\frac{\partial}{\partial t}F_2^0(t,x_1,x_2) + \mathcal{H}_2(x_1,x_2)F_2^0(t,x_1,x_2) = 0. \tag{33}$$

Отже, одержуємо замкнену систему рівнянь ((32) і (33)), яка збігається з системою рівнянь розглянутих у [10], стор. 393, у якій наближення функцій $F_1^1(t,x_1)$ та $F_2^0(t,x_1,x_2)$ не позначені верхніми індексами, хоча автор зазначив, що при розв'язуванні цієї системи рівнянь гарантується знаходження першого наближення одночастинкової функції $F_1^1(t,x_1)$ (перший порядок за параметром $\frac{1}{v}$).

Із невідомих причин автор підручника [10] не розвинув далі цієї ідеї й не записав наступних замкнених систем рівнянь для знаходження наступних наближень одночастинкової функції розподілу $F_1^i(t,x_1)$ $(i=0,1,\ldots)$.

Використовуючи далі рівняння ланцюжка Боголюбова, можемо записати замкнені системи лінійних рівнянь для знаходження наступних наближень одночастинкової функції розподілу $F_1^i(t,x_1)$. Наприклад, для $F_1^2(t,x_1)$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t}F_1^2(t,x_1) + \mathcal{H}_1(x_1)F_1^2(t,x_1) = \dfrac{1}{v}\displaystyle\int\limits_\Gamma \dfrac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}\dfrac{\partial}{\partial p_1}F_2^1(t,x_1,x_2)dx_2, \\ \dfrac{\partial}{\partial t}F_2^1(t,x_1,x_2) + \mathcal{H}_2(x_1,x_2)F_2^1(t,x_1,x_2) \\ = \frac{1}{v}\sum\limits_{i=1}^{2}\int\limits_\Gamma \frac{\partial\Phi(|q_i-q_3|)}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}F_3^0(t,x_1,x_2,x_3)dx_3, \\ \dfrac{\partial}{\partial t}F_3^0(t,x_1,x_2,x_3) + \mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)F_3^0(t,x_1,x_2,x_3) = 0, \quad \text{і т. д.} \end{cases} \tag{34}$$

Частково розв'язуючи ці системи рівнянь, легко записати кінетичні рівняння для різних наближень одночастинкової функції розподілу $F_1^i(t,x_1)$ $(i = 0,1,\ldots)$. Наприклад,

$$\frac{\partial}{\partial t}F_1^1(t,x_1)+\mathcal{H}_1(x_1)F_1^1(t,x_1) = \frac{1}{v}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}\frac{\partial}{\partial p_1}e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}F_2^0(0,x_1,x_2)dx_2, \tag{35}$$

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}F_1^2(t,x_1)+\mathcal{H}_1(x_1)F_1^2(t,x_1)\\ &= \frac{1}{v}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}\frac{\partial}{\partial p_1}e^{-t\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}F_2^1(0,x_1,x_2)dx_2\\ &+\frac{1}{v^2}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1}dx_2\frac{\partial}{\partial p_1}\int\limits_0^t dt_1 e^{-(t-t_1)\mathcal{H}_2(x_1,x_2)}\\ &\times\sum_{i=1}^{2}\int\limits_{\Gamma}\frac{\partial\Phi(|q_i-q_3|)}{\partial q_i}\\ &\times\frac{\partial}{\partial p_i}e^{-t_1\mathcal{H}_3(x_1,x_2,x_3)}F_3^0(0,x_1,x_2,x_3)dx_3 \quad \text{і т. д.}\end{aligned} \tag{36}$$

IV. ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ В РІВНОВАЖНОМУ ВИПАДКУ

У випадку статистичної рівноваги, коли всі похідні

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{R}_s^j(t,x_1,\ldots,x_s,x_{s+1},\ldots,x_{s+j})=0, \quad (j=0,1,2,\ldots),$$

а функції $\mathcal{R}_s^j(x_1,\ldots,x_s,x_{s+1},\ldots,x_{s+j})$ змінних $(x_1,\ldots,x_{s+j})$ розпадаються на добуток двох незалежних функцій координат та імпульсів:

$$\mathcal{R}_s^j(x_1,\ldots,x_s,x_{s+1},\ldots,x_{s+j}) = e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s+j}p_k^2}g_s^j(q_1,\ldots,q_{s+j}), \tag{37}$$

замкнені системи рівнянь для нерівноважних функцій переходять у замкнені системи відповідних рівнянь для рівноважних функцій, які порівняно легко розв'язати.

Для нульового наближення функції розподілу $\mathcal{R}_s^0(x_1,\ldots,x_s)$ маємо рівняння

$$\mathcal{H}_s(x_1,\ldots,x_s)\mathcal{R}_s^0(x_1,\ldots,x_s)=0,$$

яке, враховуючи умову (37), переходить у рівняння

$$\sum_{i=1}^{s}\left[\frac{\partial}{\partial q_i}g_s^0(q_1,\ldots,q_s)+\frac{1}{\theta}\frac{\partial}{\partial q_i}U_s(q_1,\ldots,q_s)\cdot g_s^0(q_1,\ldots,q_s)\right]=0.$$

Звідси $g_s^0(q_1,\ldots,q_s)=e^{-\frac{1}{\theta}U_s(q_1,\ldots,q_s)}$, а

$$\mathcal{R}_s^0(x_1,\ldots,x_s)=e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s}p_k^2}\cdot e^{-\frac{1}{\theta}U_s(q_1,\ldots,q_s)} \quad [1]. \tag{38}$$

Для знаходження першого наближення функції розподілу маємо систему рівнянь

$$\begin{cases}\mathcal{H}_s(x_1,\ldots,x_s)\mathcal{R}_s^1(x_1,\ldots,x_s)\\ =\dfrac{N-s}{V(2\pi m\theta)^{3/2}}\sum\limits_{i=1}^{s}\int\limits_{\Gamma}\dfrac{\partial\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}{\partial q_i}\dfrac{\partial}{\partial p_i}\mathcal{R}_{s+1}^0(x_1,\ldots,x_{s+1})dx_{s+1},\\ \mathcal{H}_{s+1}(x_1,\ldots,x_{s+1})\mathcal{R}_{s+1}^0(x_1,\ldots,x_{s+1})=0.\end{cases} \tag{39}$$

З означення першого наближення функції розподілу та враховуючи (38), записуємо

$$\mathcal{R}_s^1(x_1,\ldots,x_s)=\frac{1}{V(2\pi m\theta)^{3/2}}\int\limits_{\Gamma}f_s^1(x_1,\ldots,x_s,x_{s+1})dx_{s+1}=e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s}p_k^2}g_s^1(q_1,\ldots,q_s),$$

де $g_s^1(q_1,\ldots,q_s)=\frac{1}{V}\int\limits_V f_s^1(q_1,\ldots,q_s,q_{s+1})dq_{s+1}$, і з системи (39) одержуємо рівняння

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{s}\left[\frac{p_i}{m}\frac{\partial}{\partial q_i}-\frac{\partial U_s}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\right]e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s}p_k^2}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)=\frac{N-s}{V}e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s}p_k^2}\cdot e^{-\frac{1}{\theta}U_s}\\ \times\sum_{i=1}^{s}\frac{p_i}{m}\int\limits_V\frac{\partial}{\partial q_i}\left(e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}\right)dq_{s+1}.\end{aligned}$$

Звідси

$$\sum_{i=1}^{s}\frac{p_i}{m}\left[\frac{\partial}{\partial q_i}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)+\frac{1}{\theta}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)\frac{\partial U_s}{\partial q_i}\right]=$$
$$=\frac{N-s}{V}\sum_{i=1}^{s}\frac{p_i}{m}e^{-\frac{1}{\theta}U_s}\frac{\partial}{\partial q_i}\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}.$$

Виділивши лінійно незалежні множники $\frac{p_i}{m}$, отримуємо рівняння

$$\sum_{i=1}^{s}\left\{\frac{\partial}{\partial q_i}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)+\frac{1}{\theta}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)\frac{\partial U_s}{\partial q_i}-\right. \tag{40}$$
$$\left.-\frac{N-s}{V}e^{-\frac{1}{\theta}U_s}\frac{\partial}{\partial q_i}\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}\right\}=0.$$

Для виконання рівності (40) достатньо, щоб виконувалися рівності

$$\left.\begin{array}{l}
\dfrac{\partial}{\partial q_1}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)+\dfrac{1}{\theta}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)\dfrac{\partial U_s}{\partial q_1}=\\
=\dfrac{N-s}{V}e^{-\frac{1}{\theta}U_s}\dfrac{\partial}{\partial q_1}\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1};\\
\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\\
\dfrac{\partial}{\partial q_s}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)+\dfrac{1}{\theta}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)\dfrac{\partial U_s}{\partial q_s}=\\
=\dfrac{N-s}{V}e^{-\frac{1}{\theta}U_s}\dfrac{\partial}{\partial q_s}\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}.
\end{array}\right\} \tag{41}$$

Кожне рівняння системи (41) домножуємо відповідно на dq_1, dq_2, ..., dq_s і додаємо. У результаті одержуємо лінійне неоднорідне диференціальне рівняння

$$d_s\left(g_s^1(q_1,\ldots,q_s)\right)+\frac{1}{\theta}g_s^1(q_1,\ldots,q_s)d_s\left(U_s\right)$$
$$=\frac{N-s}{V}e^{-\frac{1}{\theta}U_s}d_s\left(\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}\right). \tag{42}$$

Його розв'язком є функція

$$g_s^1(q_1,\ldots,q_s)=\frac{N-s}{V}e^{-\frac{1}{\theta}U_s}$$
$$\times\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}+C_s^1\cdot e^{-\frac{1}{\theta}U_s}.$$

Таким чином, маємо перше наближення функції розподілу

$$\mathcal{R}_s^1(x_1,\ldots,x_s)=C_s^1e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s}p_k^2}\cdot e^{-\frac{1}{\theta}U_s} \tag{43}$$
$$+\frac{N-s}{V}e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s}p_k^2}\cdot e^{-\frac{1}{\theta}U_s}\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}.$$

Сталу C_s^1 визначаємо з умови послаблення кореляції:

$$\lim_{\substack{|q_i-q_k|\to\infty\\(i,k=\overline{1,s};i\neq k)}}\mathcal{R}_s^1(x_1,x_2,\ldots,x_s)=\lim_{\substack{|q_i-q_k|\to\infty\\(i,k=\overline{1,s};i\neq k)}}\mathcal{R}_s^0(x_1,\ldots,x_s),$$

звідки одержуємо

$$C_s^1=1-\frac{N-s}{V}\lim_{\substack{|q_i-q_k|\to\infty\\(i,k=\overline{1,s};i\neq k)}}\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}. \tag{44}$$

Отже, маємо

$$\mathcal{R}_s^1(x_1,\ldots,x_s)=e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{s}p_k^2}\cdot e^{-\frac{1}{\theta}U_s}\left\{1+\frac{N-s}{V}\left[\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}\right.\right.$$
$$\left.\left.-\lim_{\substack{|q_i-q_k|\to\infty\\(i,k=\overline{1,s};i\neq k)}}\int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i-q_{s+1}|)}dq_{s+1}\right]\right\}, \tag{45}$$

що можна записати

$$\mathcal{R}_s^1(x_1,\ldots,x_s)=\mathcal{R}_s^0(x_1,\ldots,x_s)\left\{1+\frac{N-s}{V}L_{q_1q_2\cdots q_s}^{q_{s+1}}\right\}, \tag{46}$$

де

$$L_{q_1 q_2 \cdots q_s}^{q_{s+1}} = \int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i - q_{s+1}|)} dq_{s+1} - \lim_{\substack{|q_i - q_k| \to \infty \\ (i,k=\overline{1,s}; i \neq k)}} \int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{s}\Phi(|q_i - q_{s+1}|)} dq_{s+1}. \tag{47}$$

Зокрема, для $s = 2$:

$$\mathcal{R}_2^1(x_1, x_2) = \mathcal{R}_2^0(x_1, x_2)\left\{1 + \frac{N-2}{V} L_{q_1 q_2}^{q_3}\right\} = e^{-\frac{1}{2m\theta}\sum\limits_{k=1}^{2} p_k^2} \cdot e^{-\frac{1}{\theta} U_2(q_1, q_2)} \left\{1 + \frac{N-2}{V}\int\limits_V f_{13} f_{23}\, dq_3\right\}. \tag{48}$$

Повторюючи попередні обчислення, для другого наближення функції розподілу $\mathcal{R}_2^2(x_1, x_2)$ отримуємо вираз

$$\mathcal{R}_2^2(x_1, x_2) = \mathcal{R}_2^0(x_1, x_2)\left\{1 + \frac{N-2}{V} L_{q_1 q_2}^{q_3} + \frac{(N-2)(N-3)}{V^2} L_{q_1 q_2 q_3}^{(1) q_4}\right\}, \tag{49}$$

де

$$L_{q_1 q_2 q_3}^{(1) q_4} = \int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{2}\Phi(|q_i - q_3|)} dq_3 \cdot L_{q_1 q_2 q_3}^{q_4} - \lim_{\substack{|q_i - q_k| \to \infty \\ (i,k=1,2; i \neq k)}} \int\limits_V e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{i=1}^{2}\Phi(|q_i - q_3|)} dq_3 \cdot L_{q_1 q_2 q_3}^{q_4}. \tag{50}$$

У “розгорненому” вигляді функцію (49) записуємо

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_2^2(x_1, x_2) &= \mathcal{R}_2^0(x_1, x_2)\Bigg\{1 + \frac{N-2}{V}\int\limits_V f_{13} f_{23} dq_3 + \frac{(N-2)(N-3)}{V^2}\iint\limits_{V^2} (f_{14} f_{24} + \\
&+ f_{14} f_{24} f_{34})\, dq_3 dq_4 + \frac{(N-2)(N-3)}{V^2}\iint\limits_{V^2} [(f_{13} f_{14} f_{24} + f_{23} f_{14} f_{24}) \\
&+ (f_{14} f_{24} f_{13} f_{34} + + f_{14} f_{24} f_{23} f_{34} + f_{13} f_{23} f_{14} f_{34} + f_{13} f_{23} f_{24} f_{34}) \\
&+ (f_{13} f_{23} f_{14} f_{24} + f_{13} f_{23} f_{14} f_{24} f_{34})]\, dq_3 dq_4\Bigg\} \\
&= \mathcal{R}_2^0(x_1, x_2)\Bigg\{1 + \frac{N-2}{V}\int\limits_V f_{13} f_{23} dq_3 + \frac{(N-2)(N-3)}{V^2}\iint\limits_{V^2} [2 f_{13} f_{14} f_{24} + \\
&+ 4 f_{14} f_{24} f_{13} f_{34} + f_{13} f_{23} f_{14} f_{24} + f_{13} f_{23} f_{14} f_{24} f_{34}]\, dq_3 dq_4\Bigg\},
\end{aligned} \tag{51}$$

тому що доданок $\iint\limits_{V^2} (f_{14} f_{24} + f_{14} f_{24} f_{34})\, dq_3 dq_4 = 0$ при ототожненні змінних q_3 та q_4. Тепер вираз (51) має скінченне значення при $q_3 = q_4$, узгоджуючись із загальними вимогами до ортогонального розвинення статистичного функціонала [2,3].

Якщо в третьому доданку правої частини формули (51) поки що тимчасово не враховувати умови $q_3 = q_4$, то цей доданок збігається з наближенням Урселла–Маєра, отриманим із розвинення функції розподілу $\mathcal{R}_2^2(x_1, x_2)$ за малим параметром. Але цю умову $q_3 = q_4$ треба враховувати до всієї правої частини формули (51). У цьому випадку формула (51) набирає вигляду

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_2^2(x_1, x_2) = \mathcal{R}_2^0(x_1, x_2)\Bigg\{&1 + \frac{N-2}{V}\int\limits_V f_{13} f_{23} dq_3 \\
&-2\frac{(N-2)(N-3)}{V^2}\int\limits_V f_{13} dq_3 \int\limits_V f_{14} f_{24} dq_4\Bigg\},
\end{aligned} \tag{15$_1$}$$

що не збігається з наближенням Урселла–Маєра та узгоджується з поясненням, розглянутим у [9], (т. 1, гл. 8, §8.3).

Для третього наближення двочастинкової функції розподілу отримуємо формулу

$$\mathcal{R}_2^3(x_1,x_2) = \mathcal{R}_2^0(x_1,x_2)\left\{1 + \frac{N-2}{V}L_{q_1q_2}^{q_3} + \frac{(N-2)(N-3)}{V^2}L_{q_1q_2q_3}^{(1)q_4} + \frac{(N-2)\cdots(N-4)}{V^3}L_{q_1q_2\cdots q_4}^{(2)q_5}\right\}. \qquad (52)$$

Тут додатковою є функція $L_{q_1q_2\cdots q_4}^{(2)q_5}$, у якій наявні 214 різнотипних доданків з відповідними кількостями добутків функцій Маєра. Щоб цей вираз мав скінчене значення, у ньому треба об'єднувати вже 38 доданків із різною кількістю добутків функцій Маєра (інтеґрування відбувається за змінними q_3, q_4 та q_5), у яких ототожнюються змінні:

$$q_3 = q_4; \quad q_3 = q_5; \quad q_4 = q_5.$$

Після такого об'єднання кожний із 19 "об'єднаних" доданків дорівнює нулеві, а залишений вираз, що складається зі 176 різнотипних доданків з добутками чотирьох, 5-и, 6-и, 7-и, 8-и та 9-и функцій Маєра, має скінченне значення при цьому ототожненні відповідних змінних:
$q_3 = q_4$, $q_3 = q_5$, $q_4 = q_5$, узгоджуючись із загальними вимогами до ортогонального розвинення статистичного функціоналу [2, 3].

У цьому випадку загальна сума зазначених 176 доданків дорівнює

$$4\int\limits_V f_{13}f_{23}dq_3\int\limits_V f_{24}dq_4\int\limits_V f_{15}dq_5,$$

ураховуючи міркування, розглянуті у [9], (т. 1, гл. 8, §8.3).

Таким чином, третє наближення двочастинкової функції розподілу (52) набирає вигляду

$$\mathcal{R}_2^3(x_1,x_2) = \mathcal{R}_2^0(x_1,x_2)\left\{1 + \frac{N-2}{V}\int\limits_V f_{13}f_{23}dq_3 - 2\frac{(N-2)(N-3)}{V^2}\int\limits_V f_{13}dq_3\int\limits_V f_{14}f_{24}dq_4 + 4\frac{(N-2)(N-3)(N-4)}{V^3} \times \int\limits_V f_{13}f_{23}dq_3\int\limits_V f_{24}dq_4\int\limits_V f_{15}dq_5\right\}. \qquad (16_1)$$

Подяка. Висловлюю щиру подяку І. В. Стасюкові за обговорення результатів роботи.

[1] Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике* (Гостехиздат, Москва, 1946).

[2] N. Wiener, *The homogeneous chaos*, Am. J. Math. **60**, 897 (1938).

[3] Н. Винер, *Нелинейные задачи в теории случайных процессов* (Изд-во иностр. лит., Москва, 1961).

[4] К. К. Печарский, Укр. мат. журн. **30**, 634 (1978).

[5] К. К. Печарський, Доп. Акад. Наук УРСР **№4**, 62 (1984).

[6] К. П. Гуров, *Основание кинетической теории. Метод Н. Н. Боголюбова* (Наука, Москва, 1966).

[7] С. Чепмен, Т. Каулинг, *Математическая теория неоднородных газов* (Иностр. лит-ра, Москва, 1960).

[8] Дж. Ферцигер, Г. Капер, *Математическая теория процессов переноса в газах* (Мир, Москва, 1976).

[9] Р. Балеску, *Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1, 2* (Мир, Москва, 1978).

[10] И. А. Квасников, *Термодинамика и статистическая физика. Теория неравновесных систем* (Изд-во Мос. ун-та, Москва, 1987).

FUNCTIONAL-STOCHASTIC METHOD OF CORRELATIONS RESEARCH IN MANY-PARTICLE SYSTEMS

K. Pechars'kyi
Lviv Polytechnic National University
12, Bandery St., Lviv, UA–79013, Ukraine

The paper deals with an approach to the study of classical systems of interacting particles including distribution functions using random field theory and integration following the Wiener measure. For a Liouville distribution function, statistical functionality is determined for which a string of equations in the Wiener space similar in shape to the Bogoliubov chain of equations for the distribution functions in the phase space is derived. With the use of the development of statistical functionals included in the output string of equations in a row built by Wiener, in "transition" from the Wiener into the phase space, corresponding approximations for the different functions of the particles are determined, for which systems of linear differential equations are derived. The solution to the equation for the zero approximation of the one-particle distribution function represents the local equilibrium distribution, which, when $t \to \infty$, enters the well-known Maxwell function. All the solutions to homogeneous equations for different approximations of the one-particle distribution function if $t = 0$ are the same, which makes it possible to determine the unknown two-particle approximation, three-particle, etc. distribution function at $t = 0$. It is also indicated separately that the Bogoliubov chain of equations can produce a sequence of closed systems of linear differential equations matching the systems discussed in this paper. In the case of the statistical equilibrium all time derivatives for all approximations of the distribution function equal zero, and the time-independent functions fall into the product of two independent functions of the coordinates and impulses. The equations obtained for the distribution functions of certain approximations are easily solved. For the zero and first approximations of two-particle distribution function we obtain the known values. For the second approximation of the distribution function an expression is obtained in which one of the components is divergent, but in the combination with the following addend of the same order their sum is zero - in accordance with the general requirements for orthogonal expansions of the stochastic functional, following which the next approximation is finite. For the third approximation of this very distribution function is an expression that consists of 214 different types of addends by different amounts of the Mayer functions' products. Given the above-mentioned requirements for the orthogonal statistical functional expansion, the third approximation takes finite values too.