

Юрій Погорєлов (IFIMUP-IN, Факультет фізики та астрономії, Університет Порту, Португалія),
Олексій Ребенко¹ (Інститут математики НАН України, Київ)

ПРО ВІРІАЛЬНІ РОЗКЛАДИ КОРЕЛЯЦІЙНИХ ФУНКЦІЙ. КАНОНІЧНИЙ АНСАМБЛЬ

We present a survey of works of the Kyiv School of Mathematicians published in Soviet journals in the 1940–70s. The main results are presented in the language of contemporary methods of infinite-dimensional analysis, which significantly simplifies their proofs. Nonlinear (in the density parameter) Kirkwood–Salzburg-type equations are obtained for the correlation functions of canonical ensemble. The existence and uniqueness of solution is established under the conditions of high temperature and low density. The material presented in our survey is supplemented by the original research of one of the authors [A. L. Rebenko, *Virial expansions for correlation functions in canonical ensemble*, Preprint arXiv:2205.07095 [math-ph], <https://doi.org/10.48550/arXiv.2205.07095>] in which new expansions in the density parameter are constructed for the correlation functions.

Наведено короткий огляд праць Київської школи математиків, які були опубліковані в радянських журналах 40–70-х років минулого століття. Основні результати подано на мові сучасних методів нескінченновимірної аналізу, що значно спрощує їх доведення. Виведено нелінійні за параметром густини рівняння типу Кірквуда–Зальцбурга для кореляційних функцій канонічного ансамблю. Доведено існування та єдиність їх розв’язків у режимі високої температури та низької густини. Огляд доповнено оригінальним дослідженням одного з авторів [A. L. Rebenko, *Virial expansions for correlation functions in canonical ensemble*, Preprint arXiv:2205.07095 [math-ph], <https://doi.org/10.48550/arXiv.2205.07095>], в якому побудовано нові розклади кореляційних функцій за параметром густини.

1. Вступ. Розклади кореляційних функцій, тиску та густини за параметром активності z (*Mayer expansions*) були детально описані в роботах Рюеля [26, 27]. Складнішою є задача побудови розкладів для кореляційних функцій у канонічному ансамблі, а також розклади для тиску за параметром густини (*віріальні розклади*), які базуються на дослідженнях Лебовіца, Пенроуза [18] і Грюнвельда [10].

Але ще в 1946 році М. М. Боголюбов [3] розробив теорію розкладів за параметром густини частинок у системі, які, хоч і не були строго математично обґрунтовані, але базувалися на фундаментальних принципах статистичної механіки і включали всі відомі на той час вирази теорії Урсе-Майєра на основі виведеного ним інтегро-диференціального рівняння для m -частинкових функцій розподілу. Основи строгого математичного опису нескінченних систем у статистичній механіці були розроблені для позитивних потенціалів взаємодії в 1949 році (див. [4]). Детальний виклад результатів було опубліковано у 1956 році [13, 14]. Ці результати були узагальнені в роботі [5] на випадок стійких регулярних потенціалів. Були виведені рівняння типу Кірквуда–Зальцбурга для m -частинкових функцій розподілу, в яких роль активності z відігравала деяка функція густини $a(\rho)$, яка, в свою чергу, залежала від усіх m -частинкових функцій розподілу, що зумовлює нелінійність цих рівнянь. Але, контролюючи малий інтервал зміни цієї функції при низьких густинах, їх розглядали як нескінченну систему лінійних рівнянь операторним методом Рюеля. В роботі [20] ті ж самі рівняння були виведені безпосередньо із рівнянь Боголюбова [3] у просторі $\mathbb{R}^d$ і розглядалися як нелінійне операторне рівняння в

¹ Відповідальний за листування, e-mail: rebenkoo@ukr.net.

банаховому просторі. За теоремою про нерухому точку було встановлено існування та єдиність розв'язку для малих значень параметра густини. Праці [5, 20] покладено в основу оглядової частини цієї роботи.

Сьогодні спостерігається значне поживлення інтересу до цієї тематики. Так, в роботі [17] автори зауважили, що проблема існування термодинамічної границі для функцій розподілу або кореляційних функцій у канонічному ансамблі „є більш тонкою, ніж для термодинамічних величин логарифмічного масштабу, таких як тиск і вільна енергія”. Ще Лебовіц і Пенроуз [18] показали, що збіжність цих розкладів у термінах густини для вільної енергії можна довести на строго математичному рівні. Було встановлено оцінку радіуса збіжності. Звичайно ж, ми повинні згадати підхід Грюнвельда [10] та його подальший розвиток (див. [12]). Важливу роль у доведенні збіжності віріальних рядів відіграє техніка кластерних розкладів. Після 60-х років вони отримали подальший розвиток, і їхню ефективність було встановлено для великого класу різних систем, наприклад введення абстрактної полімерної моделі [11, 16] (див. також роботи [2, 8] та наведену в них бібліографію).

Справжня мета огляду — познайомити читачів західних країн із працями Київської школи математиків, які були опубліковані в радянських журналах у 40–70-х роках минулого століття. Ми спробували надати більш прозорий опис основних результатів. Крім того, запропоновано нову схему побудови віріальних розкладів для кореляційних функцій у канонічному ансамблі.

Статтю побудовано таким чином. У пункті 2 наведено поняття і формули, в яких здійснюється виклад статті. Третій пункт присвячено побудові рівнянь для кореляційних функцій в термодинамічній границі та рівнянь для m -частинкових функцій розподілу безпосередньо в просторі $\mathbb{R}^d$ з рівнянь Боголюбова [3]. Крім того, тут наведено основні моменти доведень теорем з двох різних точок зору. І, нарешті, в останньому пункті запропоновано новий підхід для побудови розкладів за параметром густини.

2. Деякі математичні поняття. В роботі будемо розглядати нескінченну систему тотожних точкових частинок у просторі $\mathbb{R}^d$, взаємодію яких будемо описувати парним потенціалом $V_2(x, y) = \phi(|x - y|)$, $x, y \in \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$.

2.1. Конфігураційні простори. Нескінченна множина координат системи частинок $\gamma := \{x_i\}_{i \in \mathbb{N}} \in \Gamma$ є точкою конфігураційного простору Γ , який визначається як множина всіх локально скінченних підмножин простору $\mathbb{R}^d$. Це визначення цілком природне з точки зору фізики, бо нескінченна кількість частинок не може перебувати в обмеженому об'ємі. Множину всіх скінченних конфігурацій простору Γ позначимо через Γ_0 , а простір конфігурацій з фіксованою кількістю точок — через $\Gamma^{(n)}$. Якщо всі такі конфігурації знаходяться в деякому обмеженому об'ємі $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, то відповідний простір буде $\Gamma_\Lambda^{(n)}$.

2.2. Деякі міри на просторах конфігурацій. Нехай σ — міра Лебега в $\mathbb{R}^d$. Стан ідеального газу в рівноважній статистичній механіці в рамках великого канонічного ансамблю описується мірою Пуассона $\pi_{z\sigma}$ на конфігураційному просторі Γ , де $z > 0$ — активність (фізичний параметр, який пов'язаний з густиною частинок у системі). Для систем, що знаходяться в деякому обмеженому об'ємі, спершу вводять міру, яку інколи називають мірою Лебега – Пуассона (див., наприклад, [1]) $\lambda_{z\sigma} = \lambda_{z\sigma}^\Lambda$ на просторі скінченних конфігурацій Γ_Λ (або Γ_0), за формулою

$$\int_{\Gamma_\Lambda} F(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda} \dots \int_{\Lambda} F_n(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n. \quad (1)$$

На мові інтегралів за мірою $\lambda_{z\sigma}$ наведемо одну відому тотожність (див., наприклад, [15]), яка значно скорочує громіздкі обчислення і буде використана нижче.

Лема 1. Для всіх вимірних функцій $G: \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ і $H: \Gamma_0 \times \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ таких, що $G(\xi \cup \gamma)H(\xi, \gamma) \in L^1(\Gamma_0 \times \Gamma_0, \lambda_\sigma \otimes \lambda_\sigma)$, справджується рівність

$$\int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} G(\xi \cup \gamma) H(\xi, \gamma) \lambda_\sigma(d\xi) \lambda_\sigma(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} G(\gamma) \sum_{\xi \subseteq \gamma} H(\xi, \gamma \setminus \xi) \lambda_\sigma(d\gamma). \quad (2)$$

Доведення. Нехай $\xi \upharpoonright \Gamma_0^{(k)} = \{x_1, \dots, x_k\} := \{x\}_1^k$, $\gamma \upharpoonright \Gamma_0^{(m)} = \{x_{k+1}, \dots, x_{k+m}\} := \{x\}_{k+1}^{k+m}$. Тоді

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} G(\xi \cup \gamma) H(\xi, \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\xi) \\ &= \sum_{k,m=0}^{\infty} \frac{1}{k!m!} \int_{\mathbb{R}^{dk}} \int_{\mathbb{R}^{dm}} G(\{x\}_1^{k+m}) H(\{x\}_1^k, \{x\}_{k+1}^{k+m}) \sigma(dx)^{k+m} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \int_{\mathbb{R}^{dn}} G(\{x\}_1^n) H(\{x\}_1^k, \{x\}_{k+1}^n) \sigma(dx)^n \\ &= \int_{\Gamma_0} G(\gamma) \sum_{\xi \subseteq \gamma} H(\xi, \gamma \setminus \eta) \lambda_\sigma(d\gamma). \end{aligned}$$

В рамках канонічного ансамблю міра Лебега – Пуассона і тотожність (2) будуть використані як технічний елемент за допомогою формули

$$\frac{1}{N!} \int_{\mathbb{R}^{dN}} F(\{y_1, \dots, y_N\}) dy_1 \dots dy_N := \frac{1}{N!} \int_{\Gamma^{(N)}} F(\gamma) d\gamma = \int_{\Gamma_0} F(\gamma) \mathbb{1}_N(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma), \quad (3)$$

де

$$\mathbb{1}_N(\gamma) := \begin{cases} 1, & |\gamma| = N, \\ 0, & |\gamma| \neq N. \end{cases}$$

2.3. Умови на потенціал взаємодії. Енергія взаємодії частинок довільної конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$ через потенціал ϵ

$$U(\gamma) = U_\phi(\gamma) := \sum_{\{x,y\} \subset \gamma} \phi(|x-y|), \quad (4)$$

а взаємодія $W(\eta; \gamma)$ частинок конфігурації $\eta \in \Gamma_0$ з частинками конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$ —

$$W(\eta; \gamma) := \sum_{\substack{x \in \eta \\ y \in \gamma}} \phi(|x-y|), \quad \eta \cap \gamma = \emptyset.$$

На потенціал взаємодії накладемо умови **(A)**:

1) умову стійкості:

$$U(\gamma) \geq -B|\gamma|, \quad B \geq 0, \quad \gamma \in \Gamma_0, \quad (5)$$

2) умову регулярності:

$$C(\beta) = \int_{\mathbb{R}^d} dx |e^{-\beta\phi(|x|)} - 1| < +\infty, \quad \beta = \frac{1}{kT}. \quad (6)$$

2.4. Кореляційні функції. Основою дослідження систем статистичної механіки є опис середнього значення спостережуваних величин, які є функціями на конфігураційному просторі Γ_Λ і обчислюються за мірою Гіббса. В канонічному ансамблі міра Гіббса рівноважних систем N тотожних частинок в обмеженому контейнері Λ , що має скінченний об'єм V , є абсолютно неперервною щодо міри Лебега в $\mathbb{R}^{dN}$, а її щільність має вигляд

$$D_\Lambda(\gamma) = \frac{1}{Q_\Lambda(N, \beta)} e^{-\beta U(\gamma)}, \quad \gamma = \{x_1, \dots, x_N\} \in \Gamma_\Lambda^{(N)},$$

де

$$Q_\Lambda(N, \beta) = \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} d\gamma, \quad d\gamma = dx_1 \dots dx_N,$$

— конфігураційний інтеграл.

У 1946 р. М. М. Боголюбов (див. [3]) увів до розгляду функції розподілу $F_\Lambda^{(N)}(\eta)$ таким чином, що $V^{-|\eta|} F_\Lambda^{(N)}(\eta) d\eta$ — ймовірність того, що група m частинок знаходиться в нескінченно малому фазовому об'ємі $d\eta$ з координатами $x_1, \dots, x_m$, $m = |\eta| \leq N$. В результаті цього визначення очевидно, що

$$F_\Lambda^{(N)}(\eta) = V^m \int_{\Gamma_\Lambda^{(N-m)}} D_\Lambda(\eta \cup \gamma) d\gamma, \quad d\gamma = dx_{m+1} \dots dx_N. \quad (7)$$

Фізичні спостережувані — це функції на конфігураційному просторі Γ . Вони мають суматорну форму $A(\gamma) = \sum_{\eta \in \gamma} H(\eta)$ (див., наприклад, (4)). Їхні середні значення визначаються інтегралами за мірою Гіббса μ , а у випадку, який ми розглядаємо, можна записати таким чином:

$$\bar{A} = \int_\Gamma \sum_{\eta \in \gamma} H(\eta) \mu(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} H(\eta) \rho(\eta) \lambda_\sigma(d\eta). \quad (8)$$

У формулі (8) $\rho(\eta) \lambda_\sigma(d\eta)$ є мірою кореляції, яка абсолютно неперервна щодо міри Лебега — Пуассона λ_σ , а відповідна похідна Радона — Нікодима визначає кореляційну функцію $\rho(\eta)$ (див., наприклад, [15], розд. 4). Кореляційні функції канонічного ансамблю в обмеженому об'ємі визначаються формулою

$$\rho_\Lambda^{(N)}(\eta) := \begin{cases} \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, N)} \int_{\Gamma_\Lambda^{(N-m)}} \frac{d\gamma}{(N-m)!} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)}, & |\eta| = m \leq N, \\ 0, & |\eta| = m > N, \end{cases} \quad (9)$$

де

$$Z_{\Lambda}(\beta, N) = \frac{1}{N!} \int_{\Gamma_{\Lambda}^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} d\gamma \quad (10)$$

— статистична сума канонічного ансамблю. Функції розподілу Боголюбова та кореляційні функції пов'язані співвідношеннями

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = \frac{N!}{(N-m)!} \frac{1}{V^m} F_{\Lambda}^{(N)}(\eta), \quad |\eta| = m.$$

В термодинамічній границі

$$\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d, \quad \lim_{\substack{V \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty}} \frac{V}{N} = v, \quad \frac{1}{v} = \varrho \quad (11)$$

цей зв'язок має вигляд

$$\rho(\eta) = \varrho^m F(\eta), \quad m = |\eta|. \quad (12)$$

Щоб отримати співвідношення, яке в термодинамічній границі перетворилось у рівняння для кореляційних функцій, скористаємось формулою (3) і виразимо кореляційні функції (9) через інтеграл за мірою Лебега–Пуассона:

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = \frac{1}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_{\Lambda}} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \mathbb{1}_{N-m}(\gamma) \lambda_{\sigma}(d\gamma), \quad |\eta| \leq N. \quad (13)$$

3. Рівняння для кореляційних функцій у термодинамічній границі. Такі рівняння отримано в [5] на основі визначення (7) і пізніше в [20] безпосередньо в нескінченному об'ємі на основі інтегро-диференціальних рівнянь Боголюбова (див. [3]). Використовуючи наведену вище техніку, коротко продемонструє їх виведення.

3.1. Метод Боголюбова–Петрини–Хацета–Рюеля. 3.1.1. Рівняння для кореляційних функцій канонічного ансамблю. Введемо позначення $\eta^{(\hat{x})} := \eta \setminus \{x\}$. Нехай у конфігурації $\eta = \{x_1, \dots, x_m\}$ координата x_1 є такою, що справджується нерівність

$$W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)}) = \sum_{k=2}^m \phi(|x_1 - x_k|) \geq -B, \quad B \geq 0.$$

Існування такої координати впливає з (5) (див. [27]). Тоді з розкладу

$$U(\eta \cup \gamma) = W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)}) + W(x_1; \gamma) + U(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \gamma)$$

і

$$e^{-\beta W(x_1; \gamma)} = \prod_{y \in \gamma} \left[(e^{-\beta \phi(|x_1 - y|)} - 1) + 1 \right] = \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi), \quad (14)$$

де

$$K(x_1; \xi) := \begin{cases} \prod_{y \in \xi} (e^{-\beta \phi(|x_1 - y|)} - 1), & |\xi| \geq 1, \\ 1, & \xi = \emptyset, \end{cases}$$

отримуємо

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = \frac{e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})}}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_{\Lambda}} e^{-\beta U(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \gamma)} \mathbb{1}_{N-m}(\gamma) \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi) \mathbb{1}_{\Lambda}(\gamma \setminus \xi) \lambda_{\sigma}(d\gamma). \quad (15)$$

Застосуємо до інтеграла (15) лему 1 (тотожність (2)) з

$$G(\gamma) = e^{-\beta U(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \gamma)} \mathbb{1}_{N-m}(\gamma) \quad \text{і} \quad H(\xi; \gamma \setminus \xi) = K(x_1; \xi) \mathbb{1}_{\Lambda}(\gamma \setminus \xi).$$

Тоді

$$\begin{aligned} \rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) &= \frac{e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})}}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_{\Lambda}} \int_{\Gamma_{\Lambda}} e^{-\beta U(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi \cup \gamma)} \\ &\quad \times \mathbb{1}_{N-m}(\xi \cup \gamma) K(x_1; \xi) \mathbb{1}_{\Lambda}(\gamma) \lambda_{\sigma}(d\gamma) \lambda_{\sigma}(d\xi). \end{aligned} \quad (16)$$

Запишемо праву частину формули (16) таким чином:

$$\begin{aligned} \rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) &= e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \frac{Z_{\Lambda}(\beta, N-1)}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_{\Lambda}} K(x_1; \xi) \\ &\quad \times \left[\frac{1}{Z_{\Lambda}(\beta, N-1)} \int_{\Gamma_{\Lambda}} e^{-\beta U(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi \cup \gamma)} \mathbb{1}_{N-m-|\xi|}(\gamma) \lambda_{\sigma}(d\gamma) \right] \lambda_{\sigma}(d\xi). \end{aligned}$$

Враховуючи (13) ($N - m - |\xi| = N - 1 - (m - 1 + |\xi|)$), отримуємо

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} a_N^{\Lambda} \int_{\Gamma_{\Lambda}} K(x_1; \xi) \rho_{\Lambda}^{(N-1)}(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\sigma}(d\xi), \quad (17)$$

де $|\eta| = m$, $\eta = \{x_1, \dots, x_m\}$, $1 \leq m \leq N$, і

$$a_N^{\Lambda} = \frac{Z_{\Lambda}(\beta, N-1)}{Z_{\Lambda}(\beta, N)}. \quad (18)$$

Подібне співвідношення має місце для $\rho_{\Lambda}^{(N-l)}$ при $0 \leq l < N$:

$$\rho_{\Lambda}^{(N-l)}(\eta) = e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} a_{N-l}^{\Lambda} \int_{\Gamma_{\Lambda}} K(x_1; \xi) \rho_{\Lambda}^{(N-l-1)}(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\sigma}(d\xi). \quad (19)$$

На відміну від великого канонічного ансамблю, співвідношення (17), (19) не є рівняннями для кореляційних функцій в обмеженому об'ємі. Щоб отримати рівняння, необхідно виконати термодинамічний граничний перехід (11). Про математично строге доведення існування границі

йдеться в наступному підпункті. Дотримуючись роботи [5], ми припускаємо, що така границя існує. Крім цього скористаємось результатом М. М. Боголюбова [3] (див. гл. I, розд. 2), в якому було обчислено граничне значення відношення конфігураційних інтегралів. Маємо

$$\lim_{\substack{V=N/\varrho \\ N \rightarrow \infty}} \frac{Z_{\Lambda}(\beta, N-1)}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} = \lim_{\substack{V=N/\varrho \\ N \rightarrow \infty}} \frac{NQ_{\Lambda}(\beta, N-1)}{Q_{\Lambda}(\beta, N)} = \varrho a(\varrho), \quad V = \sigma(\Lambda). \quad (20)$$

Тоді граничні кореляційні функції будуть задовольняти рівняння

$$\rho(\eta) = \varrho a(\varrho) e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \int_{\Gamma_0} K(x_1; \xi) \rho(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\sigma}(d\xi), \quad (21)$$

що відповідає границі рекурентного співвідношення (17), і

$$\rho^{(l)} = \varrho a_l(\varrho) e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \int_{\Gamma_0} K(x_1; \xi) \rho^{(l+1)}(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\sigma}(d\xi), \quad (22)$$

що відповідає границі рекурентного співвідношення (19). Враховуючи (11), (12), для функцій розподілу $F(\eta)$ отримуємо

$$F(\eta) = a(\varrho) e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \int_{\Gamma_0} K(x_1; \xi) F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\varrho\sigma}(d\xi). \quad (23)$$

З умови $F(\{x_1\}) = F(\emptyset) = 1$ випливає, що

$$a(\varrho) = \frac{1}{\tilde{Q}(F)}, \quad \tilde{Q}(F) = \int_{\Gamma_0} K(0; \xi) F(\xi) \lambda_{\varrho\sigma}(d\xi). \quad (24)$$

Справедливість (20) і (24) випливає з умови існування граничних функцій розподілу (7), які задовольняють рівняння (23).

3.1.2. Розв'язок рівняння (21). Рівняння (21) мають такий самий вигляд, як і рівняння для кореляційних функцій у великому канонічному ансамблі. Відмінність в тому, що роль активності z відіграє функція $\varrho a(\varrho)$, яка (див. (24)) залежить від $F(\eta)$, а отже, і від $\rho(\eta)$. Це означає, що рівняння (21) є нелінійним. Але якщо $\varrho a(\varrho)$ набуває значення, близького до нуля, то ми можемо використовувати ті самі методи, що й у [27]. Але отриманий розклад не є розкладом за параметром щільності.

Як і в [27], розглянемо це рівняння в банаховому просторі $E_{\xi} \ni f$ з нормою

$$\|f\|_{E_{\xi}} := \sup_{\substack{\eta \in \Gamma_0 \\ \eta \neq \emptyset}} \xi^{-|\eta|} |f(\eta)|, \quad \xi > 0. \quad (25)$$

Позначимо через $E_{\xi}^{(n)}$ банахів простір, що складається зі стовпців f , у яких $f_k = 0$ для $k > n$, з нормою (25). Цей простір є технічним елементом при доведенні деяких тверджень. Визначимо оператор

$$(Kf)(\eta) = e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \int_{\Gamma_0} K(x_1; \xi) (1 - \delta_{0, |\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi|}) f(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\sigma}(d\xi). \quad (26)$$

Систему (21) можна записати у стандартному операторному вигляді за допомогою оператора K та оператора симетризації Π (див. [27]):

$$\rho = \varrho a(\varrho) \Pi K \rho + \rho^0, \quad (27)$$

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_1(x_1) \\ \vdots \\ \rho_N(x_1, \dots, x_N) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \rho^0 = \begin{pmatrix} \varrho a(\varrho) \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Розв'язок цього рівняння визначає така теорема.

Теорема 1. Рівняння (27) у просторі E_ξ має єдиний розв'язок у вигляді ряду

$$\rho = \sum_{n=0}^{\infty} (\varrho a(\varrho) \Pi K)^n \rho^0,$$

який є рівномірно збіжним, якщо

$$|a(\varrho)| < 2, \quad |\varrho| < \left(2e^{2\beta B+1} C(\beta)\right)^{-1}. \quad (29)$$

Доведення. З визначення норми у просторі E_ξ , інтеграла (1) і умови (5) отримуємо

$$\|\Pi K f\|_{E_\xi} \leq \frac{e^{2\beta B+C(\beta)\xi}}{\xi} \|f\|_{E_\xi}.$$

Ця оцінка свідчить про справедливість твердження теореми при $\xi = C(\beta)^{-1}$.

Зауваження 1. Для віріальних розкладів вільної енергії техніка абстрактних полімерних розкладів і нерівності деревоподібного графа забезпечує вдвічі більший радіус збіжності (див. [23], розд. 4, і [22]).

3.1.3. Існування кореляційних функцій у термодинамічній границі. Щоб встановити існування термодинамічної границі (11) для функцій (17), розглянемо співвідношення (17)–(19) в банаховому просторі E_ξ . Почнемо з доведення (20), яке є наслідком такої леми.

Лема 2. Виконується нерівність

$$a_N^\Lambda = \frac{Z_\Lambda(\beta, N-1)}{Z_\Lambda(\beta, N)} < \frac{\varrho}{1 - \varrho C(\beta)}. \quad (30)$$

Доведення. Маємо

$$\begin{aligned} Q_\Lambda(\beta, N) &= \int_{\Lambda^{N-1}} (dx)^{N-1} e^{-\beta U(\gamma \setminus \{x_N\})} \int_{\Lambda} dx_N e^{-\beta W(x_N; \gamma \setminus \{x_N\})} \\ &= \int_{\Lambda^{N-1}} (dx)^{N-1} e^{-\beta U(\gamma \setminus \{x_N\})} \int_{\Lambda} dx_N \prod_{i=1}^{N-1} (C_{x_i, x_N} + 1) \\ &\geq Q_\Lambda(\beta, N-1) (V - (N-1)C(\beta)), \end{aligned}$$

де використано нерівність $\prod_{i=1}^{N-1} (1 + a_i) \geq 1 - \sum_{i=1}^{N-1} |a_i|$, якщо $1 + a_i \geq 0$ і $a_i = C_{x_i, x_N} = e^{-\beta \phi(|x_i - x_N|)} - 1$.

Наслідок 1. *Із нерівності (30) випливає, що якщо умова $\varrho < 1/2C(\beta)$ виконується, то послідовність обмежена числом 2. Це означає, що існує така підпослідовність N_i , що $\lim_{N_i \rightarrow \infty} a_{N_i}^\Lambda = \varrho a(\varrho)$ при умові, що $V = N_i/\varrho$.*

Визначимо оператор K_m , який діє на вектор $f \in E_\xi$ таким чином:

$$(K_m f)(\eta) = (\Pi K f)(\eta), \text{ якщо } \eta \in \Gamma^{(m)}, \text{ і } (K_m f)(\eta) = 0, \text{ якщо } \eta \in \Gamma^{(n)}, \quad n \neq m.$$

Визначимо також у просторі E_ξ оператори $K_m^{(N-l)}$ і $K^{(N-l)}$:

$$(K_m^{(N-l)} f)(\eta) = \begin{cases} a_{N-l}^\Lambda \Pi e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1; \xi) (1 - \delta_{0, |\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi|}) \\ \quad \times \mathbb{1}_{|\xi|+m-1 \leq N-l-1}(\xi) f(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi), & |\eta| = m, \\ 0, & |\eta| \neq m, \end{cases}$$

$$K^{(N-l)} = K_1^{(N-l)} + K_2^{(N-l)} + \dots + K_{(N-l)}^{(N-l)},$$

$$K_{[n]}^{(N-l)} = K_1^{(N-l)} + K_2^{(N-l)} + \dots + K_n^{(N-l)}, \quad n < N-l,$$

$$K_{[n]} = K_1 + K_2 + \dots + K_n.$$

Оператори K_m і $K_m^{(N-l)}$ діють з E_ξ в підпросторі $E_\xi^{(n)}$. Вони визначені для доведення проміжних оцінок основних теорем.

Лема 3. *Нехай виконується нерівність (29). Тоді*

$$\lim_{\substack{V=N/\varrho \\ N \rightarrow \infty}} \left\| \chi_\Lambda \left(\varrho a(\varrho) K_m - K_m^{(N-l)} \right) \right\| = 0, \quad V = \sigma(\Lambda). \quad (31)$$

Доведення. Враховуючи дію операторів K_m , $K_m^{(N-l)}$, записуючи міру $\lambda_\sigma(d\xi)$ в (26) у вигляді

$$\lambda_\sigma(d\xi) = \mathbb{1}_{|\xi|+m-1 \leq N-l-1}(\xi) \lambda_\sigma(d\xi) + \mathbb{1}_{|\xi|+m-1 > N-l-1}(\xi) \lambda_\sigma(d\xi)$$

і враховуючи наслідок 1, отримуємо (31) (див. деталі в роботі [5]).

Наступним кроком є узагальнення лемми 3 на послідовність операторів $\chi_\Lambda(\varrho a(\varrho) K_{[n]} - K_{[n]}^{(N-l)})$. Ці оператори є скінченною сумою операторів у лемі 3, вони діють із простору E_ξ у простір $E_\xi^{(n)}$, а їхні норми менші за одиницю, якщо виконується нерівність (29), і тому для них справедливі подібні оцінки. Але це не стосується операторів $\chi_\Lambda(\varrho a(\varrho) K - K^{(N-l)})$, тому важливо зауважити наступне.

Зауваження 2. На відміну від операторів у лемі 3, для операторів $\chi_\Lambda(\varrho a(\varrho) K - K^{(N-l)})$ ця лема не є справедливою. Справді, оператор $\chi_\Lambda K^{(N-l)}$ діє з простору E_ξ в простір $E_\xi^{(N-l)}$ на тих елементах $f \in E_\xi$, на яких $f_m = 0$ для $m \leq N-l$, $\chi_\Lambda K^{(N-l)} f = 0$. Тому для довільних великих N існує такий елемент f , що $\chi_\Lambda K^{(N-l)} f = 0$, $\chi_\Lambda \varrho a(\varrho) K f \neq 0$, а норма цього елемента є скінченною.

Використовуючи оператори $K^{(N-l)}$ і стовпчики $\rho^{(N-l)}$ (див. (28)) з $\rho_k^{(N-l)} = 0$ для $k > N-l$, вираз (19) можна записати у вигляді

$$\rho^{(N-l)} = K^{(N-l)} \rho^{(N-l-1)} + \rho^{0(N-l)},$$

де $\rho_k^{0(N-l)} = a_{N-l}^\Lambda \delta_{k1}$. Ітерація цього співвідношення приводить до виразу

$$\rho^{(N-l)} = \prod_{M=N-l}^3 K^{(M)} \rho^{(M-1)} + \sum_{i=0}^{N-l-1} \left(\prod_{j=0}^i K^{(N-l-j)} \right) \rho^{0(N-l-i-1)} + \rho^{0(N-l)}. \quad (32)$$

Співвідношення (32) дозволяє довести таку теорему.

Теорема 2. Для довільного фіксованого $l > 0$ і густини ϱ з круга $|\varrho| < (2e^{2B+1}C(\beta))^{-1}$ послідовність $\chi_\Lambda(\rho^{(N-l)} - \rho^{(l)})$ прямує до нуля за нормою простору E_ξ при $N \rightarrow \infty$, $V = N/\varrho$ і $V = \sigma(\Lambda)$.

Доведення базується на розкладі (32) та подібному розкладі для функцій $\rho^{(l)}$:

$$\rho^{(l)} = \sum_{i=0}^{\infty} \prod_{j=0}^i (a_{l+j}) (\Pi K)^i \rho^{(0)},$$

які з'являються внаслідок ітерації рівняння (22).

Деталі доведення див. у [5].

Наслідок 2. З теореми 2 випливає, що послідовності $\rho_\Lambda^{(N)}(\eta)$ і $\rho_\Lambda^{(N-l)}(\eta)$ збігаються до функцій $\rho(\eta)$ і $\rho^{(l)}(\eta)$, які задовольняють рівняння (21) і (22).

Питання єдиності розв'язку і рівностей $a_l(\varrho) = a(\varrho)$ і $\rho^{(l)}(\eta) = \rho(\eta)$ детально висвітлені в [5] (розд. 4.).

3.2. Рівняння для кореляційних функцій в $\mathbb{R}^d$. **3.2.1. Виведення рівнянь (23) з рівнянь Боголюбова.** У цьому підпункті будемо розглядати рівняння (див. [20]), в яких значення фізичних параметрів температури і густини є такими, що існує термодинамічна границя (11). Граничні функції розподілу $F(\eta) = F(\{x_1, \dots, x_m\}) = F_m(x_1, \dots, x_m)$ є трансляційно інваріантними симетричними функціями, для яких виконується умова спадання кореляцій у вигляді [21]

$$\lim_{\text{dist}(\eta_1, \eta_2) \rightarrow \infty} F(\eta_1 \cup \eta_2) = F(\eta_1)F(\eta_2), \quad (33)$$

а рівняння Боголюбова для рівноважних функцій розподілу у просторі $\mathbb{R}^d$ мають вигляд

$$\frac{\partial F(\eta)}{\partial x_1^{(1)}} = -\beta \frac{\partial U(\eta)}{\partial x_1^{(1)}} F(\eta) - \beta \varrho \int dy \frac{\partial \phi(|x_1 - y|)}{\partial x_1^{(1)}} F(\eta \cup \{y\}), \quad (34)$$

де $\eta = \{x_1, \dots, x_m\}$, а інтегрування виконується по всьому простору $\mathbb{R}^d$.

Зауваження 3. Умову (33) можна довести подібно до аналогічної властивості кореляційних функцій великого канонічного ансамблю (див. [6]).

Виконуючи заміну

$$F(\eta) = e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} C(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)}),$$

визначаємо нові функції, для яких рівняння (34) набирають вигляду

$$\frac{\partial C(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})}{\partial x_1^{(1)}} = \varrho \int dy \frac{\partial f(|x_1 - y|)}{\partial x_1^{(1)}} C(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y\}), \quad (35)$$

де

$$f(|x_1 - y|) = e^{-\beta\phi(|x_1 - y|)} - 1.$$

Позначимо через $x_1(z)$ вектор

$$x_1(z) := (x_1^{(1)}, \dots, x_1^{(d)})|_{x_1^{(1)}=z}$$

та зінтегруємо обидві частини рівняння (35), врахувавши властивість (33). В результаті отримаємо інтегральне рівняння

$$C(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)}) = F(\eta^{(\hat{x}_1)}) - \varrho \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} C(x_1(z_1); \eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1\}). \quad (36)$$

Записуючи те саме співвідношення для функції $C(x_1(z_1); \eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1\})$ і підставляючи його в (36), маємо

$$\begin{aligned} C(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)}) &= F(\eta^{(\hat{x}_1)}) - \varrho \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1\}) \\ &\quad + \varrho^2 \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} \\ &\quad \times \int_{z_1}^{\infty} dz_2 \int dy_2 \frac{\partial f(|x_1(z_2) - y_2|)}{\partial z_2} C(x_1(z_2); \eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1, y_2\}). \end{aligned}$$

Продовжуючи цей процес до нескінченності, отримуємо

$$\begin{aligned} F(\eta) &= e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \left[F(\eta^{(\hat{x}_1)}) + \sum_{n=1}^{\infty} (-\varrho)^n \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} \right. \\ &\quad \left. \dots \int_{z_{n-1}}^{\infty} dz_n \int dy_n \frac{\partial f(|x_1(z_n) - y_n|)}{\partial z_n} F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1, \dots, y_n\}) \right]. \end{aligned}$$

Справедливою є така лема.

Лема 4. Нехай потенціал ϕ задовольняє умову (6), а функції F задовольняють умову (33). Тоді вираз

$$I_n = (-1)^n \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} \dots \int_{z_{n-1}}^{\infty} dz_n \int dy_n \frac{\partial f(|x_1(z_n) - y_n|)}{\partial z_n} F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1, \dots, y_n\}) \quad (37)$$

задовольняє рекурентне рівняння

$$I_n = - \sum_{k=1}^n I_{n-k} a_k + b_n, \quad (38)$$

де

$$a_k = \frac{1}{k!} \int dy_1 \dots \int dy_k \prod_{i=1}^k f(|y_i|) F(\{y_1, \dots, y_k\}), \quad (39)$$

$$b_n = \frac{1}{n!} \int dy_1 \dots \int dy_n \prod_{k=1}^n f(|x_1 - y_k|) F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1, \dots, y_n\}). \quad (40)$$

Доведення базується на тому факті, що в останньому інтегралі за змінною dz_n у виразі (37) можна виконати інтегрування шляхом розгляду інтеграла в границях від z_{n-1} до L . Потім, переходячи до границі $L \rightarrow \infty$ та поступово видаляючи інтегрування за допомогою формули

$$\begin{aligned} & \int_z^{\infty} dz' \int dy_{n-k+1} \dots dy_n \frac{\partial f(|x_1(z') - y_{n-k+1}|)}{\partial z'} f(|x_1(z') - y_{n-k+2}|) \\ & \dots f(|x_1(z') - y_n|) F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1, \dots, y_n\}) \\ & = F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1, \dots, y_{n-k}\}) \frac{1}{k} \int dy_{n-k+1} \dots dy_n \prod_{i=1}^k f(|y_{n-k+i}|) F(\{y_{n-k+1}, \dots, y_n\}) \\ & - \frac{1}{k} \int dy_{n-k+1} \dots dy_n \prod_{i=1}^k f(|x_1(z) - y_{n-k+i}|) F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \{y_1, \dots, y_n\}), \end{aligned}$$

отримуємо формулу (38).

Рекурентне відношення (38) означає (див. [9], формула 0.313), що I_n є коефіцієнтом розкладу за параметром густини $\varrho = \frac{1}{v}$, який виник в результаті операції ділення двох нескінченних рядів

$$\sum_{k=0}^{\infty} I_k \varrho^k = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} b_k \varrho^k}{\sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k}.$$

Із урахуванням цього факту рівняння (39) набере остаточного вигляду

$$F(\eta) = \tilde{Q}(F)^{-1} e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1; \xi) F(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\varrho\sigma}(d\xi), \quad (41)$$

тобто матиме такий самий вигляд, як (23) з $\tilde{Q}(F)$ (24).

3.2.2. Існування розв'язків нелінійних рівнянь (41). Рівняння (41) можна розглядати як операторне рівняння в E_ξ :

$$F = AF, \quad F = F(\eta) = F(\{x_1, \dots, x_m\}) = F_m(x_1, \dots, x_m),$$

а нелінійний оператор A задається таким чином:

$$(A\varphi)(x_1) = 1, \quad (A\varphi)_m(x_1, \dots, x_m) = \tilde{Q}(\varphi)^{-1} (K\varphi)_m(x_1, \dots, x_m), \quad m \geq 2,$$

де K — лінійний оператор в E_ξ :

$$(K\varphi)(x_1) = 0, \quad (K\varphi)(\eta) = e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1; \xi) \varphi(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_{\varrho\sigma}(d\xi). \quad (42)$$

Діючи оператором симетрії Π на рівнянні (42), отримуємо нелінійне операторне рівняння в E_ξ :

$$F = \Pi AF, \quad F = F(\eta) = F(\{x_1, \dots, x_m\}) = F_m(x_1, \dots, x_m). \quad (43)$$

Сформулюємо таку теорему.

Теорема 3. Припустимо, що для фізичних параметрів β і ϱ існує таке ξ , що виконуються умови

$$e^{\xi \varrho C(\beta)} - 1 < \xi$$

й

$$A_\xi = \frac{\exp[2\beta B + \xi \varrho C(\beta)]}{\xi + 1 - e^{\xi \varrho C(\beta)}} < 1.$$

Тоді рівняння (43) має єдиний розв'язок у просторі E_ξ .

Доведення. Розглянемо в E_ξ множину

$$\mathfrak{S} = \{\varphi: \varphi_1(x_1) = 1, |\varphi_m(x_1, \dots, x_m)| \leq \xi^{m-1}, m \geq 2\}.$$

Тоді для $\varphi \in \mathfrak{S}$ отримуємо оцінку

$$|(\Pi K\varphi)(x_1, \dots, x_m)| \leq \xi^{m-2} e^{2\beta B + \varrho C(\beta)\xi}, \quad |\tilde{Q}(\varphi)| \geq \frac{\xi + 1 - e^{\varrho C(\beta)\xi}}{\xi}, \quad (44)$$

з якої випливає, що

$$|(\Pi A\varphi)(x_1, \dots, x_m)| \leq A_\xi \xi^{m-1} < \xi^{m-1}.$$

Таким чином, $(\Pi A\varphi)(x_1, \dots, x_m) \in \mathfrak{S}$.

Множина $\mathfrak{S}$ є замкнутою і випуклою, тобто містить разом з довільними двома векторами φ_1 і φ_2 сегмент, що їх містить: $\varphi(\alpha) = \alpha\varphi_1 + (1 - \alpha)\varphi_2, 0 \leq \alpha \leq 1$.

Визначимо відстань між векторами в $\mathfrak{S}$: $d(\varphi_1, \varphi_2) = \|\varphi_1 - \varphi_2\|_\xi$ і візьмемо два нескінченно близьких вектори $\varphi_1 = \varphi$ і $\varphi_2 = \varphi + \delta\varphi$ з $\|\delta\varphi\|_\xi < \varepsilon$. Тоді для достатньо малих ε , враховуючи, що $\tilde{Q}(\varphi + \delta\varphi) = \tilde{Q}(\varphi) + \tilde{Q}(\delta\varphi)$ (див. (24)), та оцінок (44) маємо

$$d(\Pi A \varphi_1, \Pi A \varphi_2) \leq a_\varphi \|\delta\varphi\|_\xi = a_\varphi d(\varphi_1, \varphi_2)$$

з $a_\varphi < 1$. Тому ΠA — стискаючий оператор в $\mathfrak{S}$. Тоді за теоремою про нерухому точку [7] (Exercise 3.1) рівняння (43) має єдиний розв'язок в $\mathfrak{S}$, який визначається як границя послідовності

$$F = \lim_{n \rightarrow \infty} F^{(n)}, \quad F^{(n)} = \Pi A F^{(n-1)},$$

а за $F^{(0)}$ можна вибрати будь-який вектор з $\mathfrak{S}$.

Наступним кроком у цьому описі є оптимальний вибір ξ , тобто простору E_ξ , так, щоб для заданого β густина ϱ мала максимальне значення.

4. Побудова розкладу для кореляційних функцій за параметром густини ϱ . У цьому пункті ми побудуємо розклад за параметром густини ϱ , виходячи з рівняння (21) як нелінійного рівняння.

Ідея побудови розкладу полягає в тому, щоб записати ліву частину рівняння (21) у вигляді добутку двох твірних функціоналів, привівши вирази для $\tilde{Q}(\rho_j)$ та $\rho_j(\eta)$ до такого ж вигляду, і прирівняти аргументи правої та лівої частини утворених твірних функціоналів.

Для множини довільних функцій $\psi \in C_0(\Gamma_0)$ визначимо *твірний функціонал*

$$\tilde{F}_\psi(j) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int_{\mathbb{R}^{dN}} (dx)^N j(x_1) \dots j(x_N) \psi(x_1, \dots, x_N) = \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) \psi(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma),$$

де функціонал $\chi(j; \gamma)$ визначено формулою

$$\chi(j; \gamma) := \begin{cases} 1, & \gamma = \emptyset, \\ \prod_{x \in \gamma} j(x), & \gamma \in \Gamma_0 \setminus \{\emptyset\}, \end{cases}$$

а $j \in C_0(\mathbb{R}^d)$ — обмежена, неперервна, невід'ємна функція.

Легко підрахувати, скориставшись, наприклад, лемою 1 (див. також [27], гл. 4), що

$$\tilde{F}_{\psi_1}(j) \tilde{F}_{\psi_2}(j) = \tilde{F}_{\psi_1 * \psi_2}(j) = \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) (\psi_1 * \psi_2)(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma),$$

де $\psi_1 * \psi_2$ є добутком ψ_1 і ψ_2 в комутативній алгебрі $\mathcal{A}$, яка була введена Рюелем:

$$(\psi_1 * \psi_2)(\gamma) = \sum_{\xi \subseteq \gamma} \psi_1(\xi) \psi_2(\gamma \setminus \xi).$$

4.1. Рекурентне співвідношення для ядра. Запишемо рівняння (21), (24) у вигляді

$$\tilde{Q}(\rho_j)\rho_j(\eta) = \varrho e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} j(x_1) \int_{\Gamma_0} K(x_1; \xi) \rho_j(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi), \quad (45)$$

$$\tilde{Q}(\rho_j) = \int_{\Gamma_0} K(x_1; \xi) \rho_j(\xi) \lambda_\sigma(d\xi). \quad (46)$$

Дотримуючись роботи [19], будемо розглядати рівняння Кірквуда–Зальцбурга для неперервного функціонала $\rho_j(\eta)$, де вводиться додатна обмежена функція $j: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$ така, що $\rho(\eta) = \rho_j(\eta)|_{j=1}$, а розв'язок шукатимемо у вигляді

$$\rho_j(\eta) = \chi(j; \eta) \int_{\Gamma^0} T(\eta|\gamma) \chi(j; \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma). \quad (47)$$

Таким чином, підставляючи в (46) відповідний вираз для $\rho_j(\xi)$, отримуємо

$$\tilde{Q}(\rho_j) = \int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} \chi(j; \xi \cup \gamma) K(x_1; \xi) T(\xi|\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\xi). \quad (48)$$

Застосуємо до інтеграла в правій частині (48) лему 1 з

$$G(\xi \cup \gamma) = \chi(j; \xi \cup \gamma) \quad \text{і} \quad H(\xi; \gamma) = K(x_1; \xi) T(\xi|\gamma).$$

Тоді

$$\tilde{Q}(\rho_j) = \tilde{F}_{\psi_1}(j) = \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) \psi_1(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma)$$

з

$$\psi_1(\gamma) = \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi) T(\xi|\gamma \setminus \xi).$$

Запишемо (47) у вигляді твірного функціонала

$$\rho_j(\eta) = \tilde{F}_{\psi_2}(j) = \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) \psi_2(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma)$$

з

$$\psi_2(\gamma) = \chi(j; \eta) T(\eta|\gamma).$$

Ліва частина (45) є такою:

$$\tilde{Q}(\rho_j)\rho_j(\eta) = \tilde{F}_{\psi_1}(j)\tilde{F}_{\psi_2}(j) = \tilde{F}_{\psi_1 * \psi_2}(j) = \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) (\psi_1 * \psi_2)(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma), \quad (49)$$

де

$$\begin{aligned}(\psi_1 * \psi_2)(\gamma) &= \sum_{\xi \subseteq \gamma} \psi_1(\xi) \psi_2(\gamma \setminus \xi) = \sum_{\xi \subseteq \gamma} \psi_2(\gamma \setminus \xi) \psi_1(\xi) \\&= \chi(j; \eta) \sum_{\xi \subseteq \gamma} T(\eta | \gamma \setminus \xi) \sum_{\zeta \subseteq \xi} K(x_1; \zeta) T(\zeta | \xi \setminus \zeta).\end{aligned}$$

Права частина (45) після підстановки $\rho_j(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi)$ (47) набирає вигляду

$$\varrho e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \chi(j; \eta) \int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} \chi(j; \xi \cup \gamma) K(x_1; \xi) T(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi | \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\xi).$$

Знову використаємо лему 1 з

$$G(\xi \cup \gamma) = \chi(j; \xi \cup \gamma) \quad \text{і} \quad H(\xi; \gamma) = K(x_1; \xi) T(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi | \gamma).$$

Тоді права частина (45) матиме вигляд

$$\varrho e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \chi(j; \eta) \int_{\Gamma_0} \chi(j; \gamma) \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi) T(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi | \gamma \setminus \xi) \lambda_\sigma(d\gamma). \quad (50)$$

Прирівняємо вирази біля $\chi(j; \gamma)$ під інтегралами виразів (49) і (50) і, скоротивши множники $\chi(j; \eta)$, отримаємо співвідношення

$$\begin{aligned}\sum_{\xi \subseteq \gamma} T(\eta | \gamma \setminus \xi) \sum_{\zeta \subseteq \xi} K(x_1; \zeta) T(\zeta | \xi \setminus \zeta) \\&= \varrho e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi) T(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi | \gamma \setminus \xi).\end{aligned} \quad (51)$$

Виділяючи член з $\xi = \emptyset$ у лівій частині співвідношення (51) і враховуючи, що $T(\emptyset | \emptyset) = 1$ та $T(\emptyset | \gamma) = 0$, якщо $\gamma \neq \emptyset$, отримуємо нелінійне рекурентне співвідношення

$$\begin{aligned}T(\eta | \gamma) &= \varrho e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi) T(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi | \gamma \setminus \xi) \\&\quad - \sum_{\substack{\xi \subseteq \gamma \\ \xi \neq \emptyset}} T(\eta | \gamma \setminus \xi) \sum_{\substack{\zeta \subseteq \xi \\ \zeta \neq \emptyset}} K(x_1; \zeta) T(\zeta | \xi \setminus \zeta).\end{aligned} \quad (52)$$

Початкові умови мають вигляд

$$T(\emptyset | \emptyset) = 1, \quad T(\emptyset | \gamma) = 0, \quad \text{якщо} \quad \gamma \neq \emptyset, \quad (53)$$

$$T(\{\eta | \gamma) = 0, \quad \text{якщо} \quad \eta \cap \gamma \neq \emptyset. \quad (54)$$

4.2. Графічна інтерпретація розв'язків. Як і у випадку рівнянь Кірквуда–Зальцбурга для великого канонічного ансамблю (див. деталі в [24]), аналітичний вираз ядра $T(\eta | \gamma)$ можна

подати за допомогою внесків графів-лісів. Число $N(m|n)$, $m = |\eta|$, $n = |\gamma|$ усіх графів-лісів можна обчислити, розв'язавши рекурентне рівняння

$$N(m|n) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} N(m+k-1|n-k) + \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} N(m|n-k) \sum_{l=1}^k \binom{k}{l} N(l|k-l). \quad (55)$$

Якщо вилучити нелінійний доданок, рекурентне рівняння (55) можна розв'язати точно: $N(m|n) = m(m+n)^{n-1}$ (див. [24]). Ця формула дозволяє довести збіжність інтеграла (47) при $j = 1$ і малих значеннях густини. Але нелінійний член, очевидно, значно збільшує кількість лісових графів. Проте, згідно з формулою (52), кожен внесок лісового графа, який містить дерево з внеском множника $K(x_1; \xi)$, $\xi \in \gamma$, що з'являється у другій сумі в (52), включається зі знаком мінус. Наприклад, обчислення

$$T(x_1|y) = \varrho^2[K(x_1; y) - K(x_1; y)] = 0. \quad (56)$$

Це легко визначити. Тому необхідно більш детально проаналізувати цей рекурентний зв'язок. Справедливою є така пропозиція.

Пропозиція 1. З початкових умов (53), (54) випливає, що

$$T(x_1|\emptyset) = \varrho, \quad T(x_1|\gamma) = 0 \quad \text{для} \quad \gamma \neq \emptyset,$$

що забезпечує рівність $\rho(x_1) = \varrho$. Крім того, $T(\eta|\emptyset) = \varrho^{|\eta|} \exp[-\beta U(\eta)]$.

Доведення випливає з (52) і (56) за індукцією.

Щоб отримати розв'язок (52) мовою графів [10, 28], визначимо множини $\mathcal{D}(\eta; \gamma)$.

Зауваження 4. Множина $\mathcal{D}(\eta; \gamma)$ є множиною кореневих графів, зв'язні компоненти яких є двозв'язними графами щодо конфігурації γ . Будь-який граф $G \in \mathcal{D}(\eta; \gamma)$ має $m = |\eta|$ вершин конфігурації η і $n = |\gamma|$ вершин конфігурації γ . Кожна вершина з η може бути вільною від ліній або з'єднуватися лише з вершинами y конфігурації γ . Кожна вершина $y \in \gamma$ сполучається з вершинами x або y принаймні двома лініями. Якщо до експоненти $\exp[-\beta U(\eta)]$ застосувати розклад (14), то множина $\exp[-\beta U(\eta)]\mathcal{D}(\eta; \gamma)$ буде збігатись з множиною $\mathcal{D}(W; B)$ з роботи [12] (розд. 2). Роль коренів графа відіграє конфігурація η . Одноточковий граф $G \in \mathcal{D}(x_1; \emptyset)$. Внесок будь-якої вершини дорівнює ϱ . Внесок лінії $w(l_{xy})$, яка з'єднує дві вершини x та y або y_i та y_j , це $K(x; y)$.

Зауваження 5. Відповідно до (47) інтегрування виконується в точках конфігурації γ , а згідно з рівнянням (52), в ядрах $T(\theta; \xi)$ конфігурації $\xi \subseteq \gamma$ і θ можуть містити обидві змінні від η і γ . Тому відповідні графи множин $\mathcal{D}(\theta; \xi)$ можуть містити лише вершини конфігурації γ .

Основним твердженням цього пункту є така пропозиція.

Пропозиція 2. Розв'язок рекурентного співвідношення (52) можна записати внесками від графів множини $\mathcal{D}(\eta; \gamma)$:

$$T(\eta|\gamma) = \varrho^{|\eta|+|\gamma|} \exp[-\beta U(\eta)] \sum_{G \in \mathcal{D}(\eta; \gamma)} w_G(\eta, \gamma).$$

Доведення базується на процедурі індукції. Легко побачити скорочення вкладів відповідних графів, наприклад, для ядер $T(x_1, x_2|y_1)$ і $T(x_1, x_2|y_1, y_2)$. Після припущення справедливості леми для $T(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi|\gamma \setminus \xi)$, $T(\eta|\gamma \setminus \xi)$ і $T(\zeta|\xi \setminus \zeta)$ необхідно подати відповідні експоненти у вигляді

$$e^{-\beta W(x_1; \eta^{(\hat{x}_1)})} e^{-\beta U(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi)} = e^{-\beta U(\eta)} e^{-\beta U(\xi)} \prod_{i=2}^m \prod_{j=1}^k [K(x_i; y_j) + 1], \quad (57)$$

де $m = |\eta|$, $k = |\xi|$.

Для $k = 0$ ($\xi = \emptyset$) у першому рядку формули (52) вираз $T(\eta^{(\hat{x}_1)} | \gamma)$ відповідає аналітичному вкладу всіх графів $\mathcal{D}(\eta; \gamma)$, у яких вершина x_1 не має ребер. Для $k \geq 1$ ($\xi \neq \emptyset$) вершини ξ стають коренями в множині графів від $\mathcal{D}(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi | \gamma \setminus \xi)$. Деякі множини $\zeta \subseteq \xi$ (нехай $|\zeta| = l$) не мають ребер, а інші $\xi \setminus \zeta$ мають принаймні одне ребро з вершинами в $\gamma \setminus \xi$, і після інтегрування $\int (dy)^l K(x_1; \{y\}_1^l)$ ця операція залишає цей граф у множині $\mathcal{D}(\eta; \gamma)$. Але вершини з першої групи отримують лише одну лінію, яка з'єднує їх з вершиною x_1 . Ці вершини не сполучаються між собою та вершинами $\xi \setminus \zeta$. Тому вони належать $\mathcal{D}(\zeta; \xi \setminus \zeta)$ і всім графам з $\mathcal{D}(\eta^{(\hat{x}_1)} \cup \xi | \gamma \setminus \xi)$, які мають структуру $w_{G_1}(\eta; \gamma \setminus \xi) K(x_1; \zeta) w_{G_2}(\zeta; \xi \setminus \zeta)$. Отже, такі графи не належать $\mathcal{D}(\eta; \gamma)$, і їх потрібно скоротити. Це забезпечується наявністю аналогічного внеску у другому рядку формули (52). Відповідно, ми застосовуємо такий самий розклад експоненти $e^{-\beta U(\xi)}$, що й у (57), і підсумовування за всіма можливими $\zeta \subseteq \xi$.

4.3. Висновок про збіжність розкладу. Існування єдиного розв'язку нелінійного рівняння (21) як операторного рівняння в банаховому просторі E_ξ було доведено в [20] і коротко викладено у попередньому пункті. Узагальнена версія критерію збіжності Грюневелда для віріального розкладу та рекурентне співвідношення для твірних функціоналів двозв'язних графів описані в роботі [12]. Тому ми не обговорюємо це питання у цьому огляді. Можливо більш ґрунтовне дослідження співвідношення (52) може внести деякі коригування.

Виконано за часткової фінансової підтримки за проектом „Симетрія та інтегровність рівнянь сучасної математичної фізики” на 2020–2024 рр. (номер державної реєстрації III-03-20) Бюро Відділення математики НАН України (протокол № 5 від 25.06.2020 р.).

Література

1. S. Albeverio, Yu. G. Kondratiev, M. Röckner, *Analysis and geometry on configuration spaces*, J. Funct. Anal., **154**, № 2, 444–500 (1998).
2. R. Bissacot, R. Fernandez, A. Procacci, *On the convergence of cluster expansions for polymer gases*, J. Stat. Phys., **139**, № 4, 598–617 (2010).
3. N. N. Bogolyubov, *Problems of dynamical theory in statistical physics* (in Russian), Gostekhteorizdat, Moscow (1946); Translation: N. N. Bogoliubov, Problems of a dynamical theory in statistical physics, Studies in Statistical Mechanics, J. Boer, G. E. Uhlenbeck (eds.), **1**, 1–118 (1962).
4. N. N. Bogolyubov, B. I. Khatset, *On some mathematical problems of the theory of statistical equilibrium*, Dokl. Akad. Nauk SSSR (N.S.), **66**, 321–324 (1949).
5. N. N. Bogolyubov, D. Ya. Petrina, B. I. Khatset, *Mathematical description of the equilibrium state of classical systems on the basis of the canonical ensemble formalism*, Teor. Mat. Fiz., **1**, № 2, 251–274 (1969).
6. T. C. Dorlas, A. L. Rebenko, B. Savoie, *Correlation of clusters: partially truncated correlation functions and their decay*, J. Math. Phys., **61**, № 3, 033301-30 (2020).
7. R.E. Edwards, *Functional analysis*, New York (1965).
8. W. G. Faris, *Combinatorics and cluster expansions*, Probab. Surv., **7**, 157–206 (2010).
9. I. S. Gradstein, I. M. Ryzhik, *TABLES of integrals, sums, series and products* (in Russian), Nauka, Moscow (1971).
10. J. Groeneveld, *Estimation methods for Mayer's graphical expansions*, PhD Diss., Holland-Breumelhof (Grote Wittenburgerstraat 97) (1967).
11. C. Gruber, H. Kunz, *General properties of polymer systems*, Commun. Math. Phys., **22**, 133–161 (1971).

12. S. Jansen, *Revisiting Groeneveld's approach to the virial expansion*, J. Math. Phys., **62**, № 2, 023302 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0030148>.
13. B. I. Khatset, *Asymptotic expansions by degrees of density of the distribution function of systems in the state of statistical equilibrium* (in Ukrainian), Nauk. Zap. Zhitom. Pedag. Inst., Fizmat Ser., **3**, 113–138 (1956).
14. B. I. Khatset, *Asymptotic expansions by degrees of density of the distribution function of systems in the state of statistical equilibrium* (in Ukrainian), Nauk. Zap. Zhitom. Pedag. Inst., Fizmat Ser., **3**, 139–157 (1956).
15. Yu.G. Kondratiev, T. Kuna, *Harmonic analysis on configuration spaces. I. General theory*, Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. and Relat. Top., **5**, № 2, 201–233 (2002).
16. R. Koteckiy, D. Preiss, *Cluster expansion for abstract polymer models*, Commun. Math. Phys., **103**, 491–498 (1986).
17. T. Kuna, D. Tsagkarogiannis, *Convergence of density expansions of correlation functions and the Ornstein–Zernike equation*, Ann. Henri Poincaré, **19**, № 4, 1115–1150 (2018).
18. J. L. Lebowitz, O. Penrose, *Convergence of virial expansions*, J. Math. Phys., **5**, 841 (1964); <https://doi.org/10.1063/1.1704186>.
19. R. A. Minlos, S. K. Pogosyan, *Estimates of Ursell functions, group functions, and their derivatives*, Theor. Math. Phys., **31**, № 2, 408–418 (1977).
20. Yu. G. Pogorelov, *Convergence of virial expansions for a classical canonical ensemble*, Theor. and Math. Phys., **24**, № 2, 808–812 (1975); <https://doi.org/10.1007/BF01029066>.
21. Yu. G. Pogorelov, *Cluster property in a classical canonical ensemble*, Theor. and Math. Phys., **30**, № 3, 227–232 (1977); <https://doi.org/10.1007/BF01036715>.
22. S. Poghosyan, D. Ueltschi, *Abstract cluster expansion with applications to statistical mechanical systems*, J. Math. Phys., **50**, 053509 (2009); <https://doi.org/10.1063/1.3124770>.
23. E. Pulvirenti, D. Tsagkarogiannis, *Cluster expansion in the canonical ensemble*, Commun. Math. Phys., **316**, № 2, 289–306 (2012).
24. O. L. Rebenko, *On the connection of some approaches to solving the Kirkwood–Salzburg equations*, Ukr. Math. J., **73**, № 3, 93–106 (2021).
25. A. L. Rebenko, *Virial expansions for correlation functions in canonical ensemble*, Preprint arXiv:2205.07095 [math-ph], <https://doi.org/10.48550/arXiv.2205.07095>.
26. D. Ruelle, *Correlation functions of classical gases*, Ann. Phys., **25**, № 1, 109–120 (1963).
27. D. Ruelle, *Statistical mechanics (rigorous results)*, W. A. Benjamin, Inc., New York, Amsterdam (1969).
28. G. Stell, *Cluster expansions for classical systems in equilibrium*, *The Equilibrium Theory of Classical Fluids*, H. L. Frisch and J. L. Lebowitz, eds., Benjamin, New York (1964), p. 171–261.

Одержано 25.02.23