arXiv:2603.01519v1 [math-ph] 2 Mar 2026

分布配对的莱布尼茨法则与超力求和规则

TAKASHI MARUYAMA、TATSUKI SETO、VIKTOR ZAVERKIN 和 Henrik Christiansen

摘要。我们借助施瓦茨空间及其对偶空间，重新表述并推广平衡超力求和规则；该规则是对 Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon（BBGKY）层级的推广。我们证明，欧几里得空间中的超力求和规则以及任意层级的平衡 BBGKY 层级，均可通过缓增分布与施瓦茨函数的配对关于导数的莱布尼茨法则推导得出。我们还应用莱布尼茨法则，得到了具有周期边界条件的系统的超力求和规则。

引言

本文旨在借助施瓦茨空间及其对偶空间，重新表述并推广参考文献 [25, 27], 中得到的平衡超力求和规则。超力求和规则是对完全约化的 Yvon-Born-Green 方程（YBG）或 Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon（BBGKY）层级 [11], 这一类统计力学求和公式的推广 [12]。我们的分布表述自然地推广了原始超力求和规则，并涵盖任意层级的平衡 BBGKY 层级。它也可自然地应用于具有周期边界条件的系统。

超力求和规则 [25, 27] 是通过对玻尔兹曼分布下可观测量的热平均应用诺特定理 [28]的变分不变性而得到的。关于该不变性定理的典型应用，已在统计力学的多种情形中得到研究 [13, 14, 15, 16, 17, 30, 31, 32, 34]。推导超力求和规则的一项关键工具是热平均的泛函导数；对于保持哈密顿量不变的正则变换作用，该泛函导数具有不变性。具体而言，热平均被视为定义在从构型空间提升而来的微分同胚空间上的常泛函；这在很大程度上依赖于热平均在构型空间上对正则变换作用的不变性。由于该泛函在微分同胚上为常数，热平均的泛函导数在这个（微分同胚）空间上为零。这一消失性质称为超力求和规则。参考文献 [25, 27] 还表明，当可观测量设为一个（非平凡的）常函数时，超力求和规则可以恢复完全约化的BBGKY层级。这种途径不同于将BBGKY层级作为刘维尔方程[11]的推论来进行标准推导的做法。我们将在第1节回顾BBGKY层级和超力求和规则的推导。

关键词和短语。 BBGKY层级，超力求和规则，莱布尼茨法则，缓增分布，统计力学。

在概述本文的主要结果之前，我们先介绍一些记号。为简洁起见，本节不详细定义这些记号。令 N 表示欧几里得空间 $\mathbb{R}^d$中的粒子数。令 $\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$ 表示 $\mathbb{R}^d$ 上具有紧支撑的向量场集合。设 $\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 为 $\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$ 的子空间，其中 $\mathrm{Id}+\epsilon:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^d$ 是一个微分同胚，且 $\epsilon\in\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$。令 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 表示施瓦茨函数集合（即大致而言，快速衰减的光滑函数），$\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 表示其对偶空间，也就是线性泛函的集合，这些泛函称为缓增分布。换言之，根据定义，当给定 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 和 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 时，我们得到一个标量 $u(\phi)\in\mathbb{C}$。按照惯例，$u(\phi)$ 写作分布配对记号 $\langle u,\phi\rangle$。众所周知，$\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的连续函数可通过赋予积分而给出缓增分布的重要示例：对于 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$上的“良好”函数 f，我们得到一个缓增分布 u_f，其定义为

$$\langle u_f,\phi\rangle=\int_{\mathbb{R}^{dN\times 2}} f\phi\, d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_1\cdots d\boldsymbol{p}_N$$

对于 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$。关于施瓦茨函数和缓增分布理论的详细信息，另请参见附录 A。

我们工作的出发点是这样一个观察：热平均是分布配对 $\langle u,\phi\rangle$ 的一个实例。令 $\hat{A}$ 为可观测量，$e^{-\beta H}$ 为玻尔兹曼分布[1]。那么，$\hat{A}$ 的热平均定义为

$$\langle\hat{A}\rangle=\frac{1}{Z}\int_{\mathbb{R}^{dN\times 2}}\hat{A}e^{-\beta H}\,d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_1\cdots d\boldsymbol{p}_N,$$

其中，Z 是 $e^{-\beta H}$的配分函数（或归一化常数）。根据配对记号的定义，我们立即得到下式

$$\langle\hat{A}\rangle=\langle u_{\hat{A}},e^{-\beta H}/Z\rangle.$$

类似地，热平均在正则变换下的不变性也可以通过分布配对来理解。事实上，热平均的不变性对应于缓增分布的“拉回”。首先，我们考虑由 $\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 诱导的相空间 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 之间的以下微分同胚：

$$\begin{aligned}&\epsilon_\sharp(\boldsymbol{r}_1,\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}_1,\dots,\boldsymbol{p}_N)\\&\quad=((\mathrm{Id}+\epsilon)(\boldsymbol{r}_1),\dots,(\mathrm{Id}+\epsilon)(\boldsymbol{r}_N),(\mathbb{1}+\nabla\epsilon(\boldsymbol{r}_1))^{-1}\boldsymbol{p}_1,\dots,(\mathbb{1}+\nabla\epsilon(\boldsymbol{r}_N))^{-1}\boldsymbol{p}_N).\end{aligned}$$

对于缓增分布 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{dN\times 2})$，我们将 u 在 $\epsilon_\sharp$ 下的拉回 $\epsilon_\sharp^*u$ 定义为

$$\langle\epsilon_\sharp^*u,\phi\rangle=\langle u,\phi\circ\epsilon_\sharp^{-1}\rangle,\quad\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2}).$$

根据拉回的定义，该泛函

$$\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},0}(\mathbb{R}^d)\to\mathbb{C},\quad\epsilon\mapsto\langle\epsilon_\sharp^*u,\phi\circ\epsilon_\sharp\rangle$$

[1]在物理学文献中，玻尔兹曼分布有时被视为定义在谱上的指数衰减函数。本文则始终将玻尔兹曼分布视为定义在相空间 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的施瓦茨函数。

在 $\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\ 0}(\mathbb{R}^d)$ 上为常数，这相当于原热平均在正则变换下不变的分布版本。因此，其方向导数为

$$F[u,\phi]:\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)\to\mathbb{C},\quad \epsilon\mapsto \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0}\left\langle (t\epsilon)^*_\sharp u,\phi\circ(t\epsilon_\sharp)\right\rangle,$$

沿任意 $\epsilon\in\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$ 结果都为零。我们将这一消失性质称为和的平衡分布式超力和规则。

在介绍必要的预备知识之后，我们将证明，分布式超力求和规则还有另一种推导方法。这种方法乍看之下可能徒劳无功，却能巧妙地推导出超力求和规则的典型表达式。使这一推导成为可能的工具是缓增分布与快速衰减函数配对的莱布尼茨法则，正如我们在附录 A 的定理 A.14 中所示:

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0}\langle u_t,\phi_t\rangle=\left\langle \left.\frac{\mathrm{d}u_t}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0},\phi\right\rangle+\left\langle u,\left.\frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0}\right\rangle,$$

其中，我们将 $u_t=(t\epsilon)^*_\sharp u$ 和 $\phi_t=\phi\circ(t\epsilon)_\sharp$记作。将莱布尼茨法则应用于 $F[u,\phi]$，会得到两个相互抵消的项，它们构成分布式超力求和规则的主要组成部分。这两个项的表达式还导出了一个平移算子 D_i，它在概念上对应于 [25, 27]引入的无穷小平移算子$\sigma_i(\boldsymbol{r})$ 。

上述讨论可以推广到 n 体约化热平均的情形，其中 $n=0$ 对应于上文的讨论。一般情形下的主要定理如下。

定理 A (定理 2.8 和推论 2.9)。 设 $N\in\mathbb{N}$ 和 $0\le n\le N-1$。对于缓增分布 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和施瓦茨函数 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$，我们将以 i 为中心的 u 和 ϕ 的局域超力定义为一个连续函数值映射 $F_i^{(n)}[u,\phi]:\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)\to C\left(\mathbb{R}^{dn\times 2}\right)$，如下所示:

$$F_i^{(n)}[u,\phi][\epsilon]=\langle K_n[D_i(\epsilon)u],\phi\rangle+\langle K_n[u],D_i(\epsilon)\phi\rangle\,.$$

于是，局域超力之和与平衡分布式超力和 $F^{(n)}[u,\phi]$ 相同，且为零，即

$$F^{(n)}[u,\phi]=\sum_{i=n+1}^{N}F_i^{(n)}[u,\phi]=0.$$

我们对超力求和规则的分布意义解释有几个优点: 首先，我们的表述自然涵盖任意层级的平衡 BBGKY 层级以及原始的超力求和规则。这是因为我们的表述基于巴拿赫空间值分布，从而可以纳入连续函数空间 $C(\mathbb{R}^{dn\times 2})$，对 BBGKY 层级和超力求和规则提供整体性理解。此外，我们的表述自然适用于具有周期边界条件的系统，相关结果见第 3.2 节。表 1 总结了我们工作中引入的概念与 [25, 27] 中概念之间的对应关系。

推导出定理 A 后，我们证明它能导出 BBGKY 层级和原始的超力求和规则。我们首先通过阐明一个条件来开始推导

表 1. 本文与相关研究中概念的对应关系。

本文	[25, 27]
施瓦茨函数	玻尔兹曼因子
缓增分布	可观测量
微分同胚的提升	正则变换
莱布尼茨法则	泛函导数
分布式超力求和规则	超力求和规则

该条件针对哈密顿函数，是相应玻尔兹曼分布属于施瓦茨空间所必需的。这类哈密顿函数的一个典型类别是多体哈密顿量

$$H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_i}{2m_i} + u_N(\boldsymbol{r}^N) + \sum_{i=1}^{N} u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_i),$$

其中 m_i 是粒子 i的质量。快速衰减这一性质至关重要，它使这类哈密顿量能够涵盖在物理上重要的一类势函数，其中既包括谐势，也包括排斥势函数，例如伦纳德-琼斯势 [19, 20] 和库仑势 [10]。

我们证明，当缓增分布可表示为某个函数的积分时，局域超力 $F_i^{(n)}$ 对于紧支撑向量场 $\epsilon \in \mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$具有积分型泛函表示。

定理 B (引理 3.4 和定理 3.5**)**。 令 $\beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}$ 为逆温度，其中 k_{B} 表示玻尔兹曼常数， T 表示绝对温度。假设 u_N 和 u^{ext} 的选取满足 $e^{-\beta H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ ，且 f 是定义在 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$上的缓增 C^1 函数。那么，对于所有 $i \in \{n+1, \dots, N\}$ ，存在定义在 $\mathbb{R}^d$ 上的 $C(\mathbb{R}^{dn\times 2})^d$值函数$G_i^{(n)}[f, H]$ ，使得

$$F_i^{(n)}[u_{f_n}, e^{-\beta H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)}][\epsilon] = \int_{\mathbb{R}^d} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}} G_i^{(n)}[f, H](\boldsymbol{r}_i) d\boldsymbol{r}_i.$$

此外， $G_i^{(n)}[f, H]$ 在 $\mathbb{R}^d$上消失。

因此， $G_i^{(n)}[f, H]$ 的消失结果涵盖了 BBGKY层级和超力求和规则这两个特例，我们将在推论 3.6和推论 3.7中证明这一点。

定理 C （推论 3.6 和推论 3.7）。我们假设 $u_N(\boldsymbol{r}^N) = \sum u(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j)_{1\le i<j\le N}$ 其中 u 是对称的。因此，对于任意 $n = 1, 2, \dots, N-1$ 和 $k = 1, 2, ..., n$，有

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}_k} - \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u^{ext}(\boldsymbol{r}_k) + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j) \right) \right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_k} \right) \phi^{[n]}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{n+1}) \right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k} \phi^{[n+1]} \right) d\boldsymbol{r}_{n+1} d\boldsymbol{p}_{n+1}.$$

这里， $\phi^{[n]}$ 是第 *1.1* 节中定义的 ϕ 的约化相空间分布函数。此外，定义如下的映射 $G^{(n)}[f,H]:\mathbb{R}^d\to C(\mathbb{R}^{dn\times 2})^d$ 的消失

$$G^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r})$$

当 $n=0$ 时，与原超力求和规则一致。

致谢

T.M. 衷心感谢 Federico Errica 和 Francesco Alesiani 提供的宝贵建议与持续鼓励。T.M. 衷心感谢 NEC Laboratories Europe 在其外派至该实验室期间给予的支持。

1. 预备知识与假设

本节回顾 Bogolyubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon（BBGKY）层级的一种标准推导，该推导基于 [11], ，其推广形式称为超力求和规则，见 [27]。本节总体上沿用传统的物理学术语和符号。全文中，我们假设任意系统均由有限个粒子组成，且处于平衡态。因此，本文其余部分引入的所有变量均与时间无关。

1.1. Bogolyubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon（BBGKY）层级。

我们首先在包括非平衡系统的一般情形下考察 BBGKY 层级。考虑相空间 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ ，其定义在 $\mathbb{R}^{dN}$ 上，具有线性坐标 $(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_N)$，表示 N 个物体的空间坐标和动量。我们还假设这些物体被限制在 $\mathbb{R}^d$ 中的一个紧致空间内（$d\geq 1$）。

令 H 为相空间 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的哈密顿量。我们假设，对于一般势 $u_N(\boldsymbol{r}^N)$， H 可分离，并将 H 写成一般形式:

$$H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)=K_N(\boldsymbol{p}^N)+u_N(\boldsymbol{r}^N)+\sum_{k=1}^{N}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_k),$$

其中， $K_N(\boldsymbol{p}^N)=\sum_{k=1}^{N}\frac{|\boldsymbol{p}_k|^2}{2m_k}$ 的物体质量为 m_k， u_N 为原子间势能， u^{ext} 为外部单体势能。令 $\phi^{[N]}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N,t)$ 为相空间概率密度。假设 $\phi^{[N]}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N,t)$ 满足刘维尔方程:

$$\frac{\partial\phi^{[N]}}{\partial t}+\sum_{k=1}^{N}\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k}\phi^{[N]}\right)\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_k+\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k}\phi^{[N]}\right)\cdot\dot{\boldsymbol{p}}_k\right)=0.$$

这里， $\nabla_{\boldsymbol{r}}=(\frac{\partial}{\partial r_1},\dots,\frac{\partial}{\partial r_d})^{\mathrm{T}}$。利用以下关系，可将该方程改写为

$$\nabla_{\boldsymbol{r}_k}H=\nabla_{\boldsymbol{r}_k}u_N(\boldsymbol{r}^N)+\nabla_{\boldsymbol{r}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_k),$$

as

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{k=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k}\cdot\nabla_{\boldsymbol{r}_k}-\sum_{k=1}^{N}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k}u^{\mathrm{ext}}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}_k}\right)\phi^{[N]}=\sum_{k=1}^{N}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k}u_N\right)\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k}\phi^{[N]}\right).$$

我们引入一个 n体约化相空间分布函数

$$\phi^{[n]}(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n;t)=\frac{N!}{(N-n)!}\iint\phi^{[N]}d\boldsymbol{r}_n^Nd\boldsymbol{p}_n^N,$$

其中 $d\boldsymbol{r}_n^N = d\boldsymbol{r}_{n+1} \dots d\boldsymbol{r}_N$和 $d\boldsymbol{p}_n^N = d\boldsymbol{p}_{n+1} \dots d\boldsymbol{p}_N$。然后，将该表达式代入上述刘维尔方程，得到

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}_k} - \sum_{k=1}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u^{\mathrm{ext}} \right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_k} \right) \phi^{[n]} \\
(1) \qquad &= \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u_N(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j) \right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k} \phi^{[n]} \right) \\
&\quad + \frac{N!}{(N-n)!} \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=n+1}^{N} \iint \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u_N(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j) \right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k} \phi^{[N]} \right) d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N.
\end{aligned}$$

在此，我们假设 $u_N(\boldsymbol{r}^N)$是两两对称势能：

$$u_N(\boldsymbol{r}^N) = \sum_{1 \le k < j \le N} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j).$$

注意到 H 是对称的，方程**(1)**可化为称为BBGKY层级的表达式：

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}_k} - \sum_{k=1}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_k) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j) \right) \right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_k} \right) \phi^{[n]} \\
&= \sum_{k=1}^{n} \iint \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{n+1}) \right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k} \phi^{[n+1]} \right) d\boldsymbol{r}_{n+1} d\boldsymbol{p}_{n+1}.
\end{aligned}$$

本文关注该层级的平衡版本，即

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}_k} - \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_k) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j) \right) \right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_k} \right) \phi^{[n]} \\
(2) \qquad &= \sum_{k=1}^{n} \iint \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{n+1}) \right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k} \phi^{[n+1]} \right) d\boldsymbol{r}_{n+1} d\boldsymbol{p}_{n+1}.
\end{aligned}$$

该层级的一个重要成员是对应于$n = 1$情形的那个：

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}_1}{m_k} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}_1} - \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_1} u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_1) \right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_1} \right) \phi^{[1]} = \iint \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_1} u(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_1} \phi^{[2]} \right) d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{p}_2.$$

这里，我们假设 $\phi^{[N]}$ 是玻尔兹曼分布，即：

$$\phi^{[N]}(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) = \frac{1}{h^{3N} N!} \frac{\exp\left(-\beta H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)\right)}{Q_N}$$

其中归一化常数（或正则配分函数）为 Q_N 和 $\beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}} T}$，其中 k_{B} 表示玻尔兹曼常数，T 表示绝对温度[2]。

[2]引入普朗克常数 h 是 [11], 中采用的一种处理方式，旨在确保 Q_N 无量纲，并与量子统计力学中的相应量保持一致。我们注意到，舍弃该常数不会影响论文的主要结果，但会改变对分布的解释。

由于对于 $k=1,2$ 有 $\frac{\partial}{\partial p_1}\phi^{[k]} = -\frac{\beta}{m_k}\phi^{[k]}\boldsymbol{p}_1$，该方程可简化为一个简洁的形式

$$\left(k_{\mathrm{B}}T\nabla_{\boldsymbol{r}_1} + \nabla_{\boldsymbol{r}_1}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_1)\right)\phi^{[1]} = -\iint\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_1}u(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\right)\phi^{[2]}d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{p}_2. \tag{3}$$

引入约化玻尔兹曼分布

$$\rho^{(n)}(\boldsymbol{r}^n) = \frac{N!}{(N-n)!}\frac{1}{Z_N}\int \exp\left(-\beta u_N(\boldsymbol{r}^N)\right)d\boldsymbol{r}_n^N$$

利用 $Z_N = \int \exp(-\beta u_N(\boldsymbol{r}^N))d\boldsymbol{r}^N$，方程(3)可表示为

$$\left(k_{\mathrm{B}}T\nabla_{\boldsymbol{r}_1} + \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_1}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_1)\right)\right)\rho^{(1)}(\boldsymbol{r}_1) = -\int\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_1}u(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\right)\rho^{(2)}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_2. \tag{4}$$

BBGKY层级的推导基于 $\phi^{[N]}$满足刘维尔方程这一假设。相比之下，在 [27], 中导出的广义BBGKY层级（称为超力求和规则）是通过对正则系综的一阶泛函导数得到的。这一思想并不（显式地）依赖于刘维尔方程，并自然地允许超力求和包含可观测量，从而真正将BBGKY层级推广到平衡态情形。

1.2. 超力求和公式。 我们考虑与上一小节相同的哈密顿量。我们将经典迹运算设为$\mathrm{Tr}(\cdot) = \frac{1}{N!h^{dN}}\int d\boldsymbol{r}^N d\boldsymbol{p}^N\cdot$。配分和 Z 用迹表示为 $Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)}$。于是，可观测量 $\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)$的热平均 A为

$$A = \langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)e^{-\beta H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)}\right)/Z. \tag{5}$$

超力求和规则通过无穷小相空间位移得到。完整的位置分辨相空间平移算子定义为

$$\sigma(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^N\sigma_i(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^N\left(\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla_i + \boldsymbol{p}_i\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\right).$$

将此算子作用于玻尔兹曼分布，可得

$$\sigma(\boldsymbol{r})e^{-\beta H} = \beta\hat{\mathbf{F}}(\boldsymbol{r})e^{-\beta H}. \tag{6}$$

其中,

$$\hat{\mathbf{F}}(\boldsymbol{r}) = -\nabla\cdot\sum_{i=1}^N\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) - \sum_{i=1}^N\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla_i u_N(\boldsymbol{r}^N) - \sum_{i=1}^N\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r})$$

而此算子是通过构型空间上的微分同胚所诱导的正则变换的泛函导数得到的。

另一方面，将 $\sigma(\boldsymbol{r})$ 作用于可观测量 $\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)$得到

$$\begin{aligned}&\sigma(\boldsymbol{r})\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\\ &= \sum_{i=1}^N\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla_i\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N) + \nabla\cdot\sum_{i=1}^N\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\right)\boldsymbol{p}_i.\end{aligned} \tag{7}$$

对式 (6) 和 (7) 取热平均，可得单体超力求和规则，表示为

$$\left\langle\sigma(\boldsymbol{r})\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\right\rangle + \left\langle\hat{A}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\beta\,\hat{\mathbf{F}}(\boldsymbol{r})\right\rangle = 0. \tag{8}$$

^利用分部积分可证明该关系成立。当 A 为非零常函数时，该关系可化为热平衡态下的平均单体力密度关系：

$$\left\langle \beta \hat{\mathbf{F}}(\boldsymbol{r}) \right\rangle = 0,$$

将三个独立项分别展开后，这等价于以下形式：

$$-k_{\mathrm{B}}T\nabla\rho(\boldsymbol{r}) - \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla_i u_N(\boldsymbol{r}^N)) \right\rangle - \rho(\boldsymbol{r})\nabla u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{9}$$

这里， $\rho(\boldsymbol{r})$ 表示定义为如下形式的单体密度分布

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) \right\rangle.$$

本节最后指出，公式（9）等价于公式（4）中推导出的公式。

2. Case: $\mathbb{R}^d$

本节中，我们依托 [27], 在 $\mathbb{R}^d$上的相空间分布理论，对该结果进行重新表述。本节中的所有论证均采用数学文献中使用的常用记号。

令 $\mathbf{Diff}(\mathbb{R}^d)$ 为 C^∞-微分同胚的集合。我们引入三类向量场。在本节中，我们将 $\mathbb{R}^d$ 上的向量场视为 $\mathbb{R}^d$上的 C^∞-映射。首先，令 $\mathfrak{X}_{\mathrm{Id}}(\mathbb{R}^d)$为 $\mathbb{R}^d$上满足 $\mathrm{Id}+\epsilon \in \mathbf{Diff}(\mathbb{R}^d)$的向量场 $\epsilon = (\epsilon^{(1)}, \dots, \epsilon^{(d)})$ 的集合。其次，令 $\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$ 为紧支撑向量场的集合。第三，令 $\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d) = \mathfrak{X}_{\mathrm{Id}}(\mathbb{R}^d) \cap \mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$，并令相应的微分同胚类为 $\mathbf{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$。例如，满足 $\sup_{\boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^d} \|\epsilon'(\boldsymbol{r})\| < 1$ 的紧支撑向量场$\epsilon\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ 是 $\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$中的一个元素，其中 $\|\epsilon'(\boldsymbol{r})\|$表示 ϵ 在 $\boldsymbol{r}$处的雅可比矩阵的算子范数。接下来，我们简要回顾 $\mathbf{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 在函数复合下构成一个群。尽管这一事实众所周知，我们仍对其给出详细证明。

引理 2.1。 $\mathbf{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 配备函数复合后构成一个群。

证明。 我们首先说明，在 $\mathbf{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 中，微分同胚的复合定义良好。两个函数 $\mathrm{Id}+\epsilon_1$、$\mathrm{Id}+\epsilon_2 \in \mathbf{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 的复合为

$$(\mathrm{Id}+\epsilon_2)\circ(\mathrm{Id}+\epsilon_1)(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{r} + \epsilon_1(\boldsymbol{r}) + \epsilon_2(\boldsymbol{r}+\epsilon_1(\boldsymbol{r})), \quad \boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^d.$$

$\mathbf{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 中微分同胚的复合定义良好，因为根据定义，该变换是微分同胚，并且向量场 $\boldsymbol{r} \mapsto \epsilon_1(\boldsymbol{r}) + \epsilon_2(\boldsymbol{r}+\epsilon_1(\boldsymbol{r}))$ 也是光滑且具有紧支撑的。

接下来，我们将证明微分同胚的求逆运算是良定义的。对于任意 $\mathrm{Id}+\epsilon \in \mathbf{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$，令 $\epsilon_{-1}(\boldsymbol{r}) = -\epsilon((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r}))$。该向量场具有紧支撑。于是，$\mathrm{Id}+\epsilon$ 的反函数可写为 $(\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1} = \mathrm{Id}+\epsilon_{-1}$。事实上，

$$\begin{aligned}(\mathrm{Id}+\epsilon_{-1})((\mathrm{Id}+\epsilon)(\boldsymbol{r})) &= \boldsymbol{r} + \epsilon(\boldsymbol{r}) + \epsilon_{-1}(\boldsymbol{r}+\epsilon(\boldsymbol{r})) \\ &= \mathrm{Id}(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

并且我们还得到

$$\begin{aligned}(\mathrm{Id}+\epsilon)\Big((\mathrm{Id}+\epsilon_{-1})(\boldsymbol{r})\Big) &= \boldsymbol{r}+\epsilon_{-1}(\boldsymbol{r})+\epsilon\Big(\boldsymbol{r}+\epsilon_{-1}(\boldsymbol{r})\Big)\\ &= \boldsymbol{r}-\epsilon\Big((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r})\Big)+\epsilon\Big(\boldsymbol{r}-\epsilon((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r})\Big)\\ &= \boldsymbol{r}-\epsilon\Big((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r})\Big)\\ &\qquad +\epsilon\Big((\mathrm{Id}+\epsilon)((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r}))-\epsilon((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r}))\Big)\\ &= \boldsymbol{r}-\epsilon\Big((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r})\Big)\\ &\qquad +\epsilon\Big((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r})+\epsilon((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r}))-\epsilon((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r}))\Big)\\ &= \boldsymbol{r}-\epsilon\Big((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r})\Big)+\epsilon\Big((\mathrm{Id}+\epsilon)^{-1}(\boldsymbol{r})\Big)\\ &= \mathrm{Id}(\boldsymbol{r}).\end{aligned}$$

结合律可通过直接推导得到，从而完成证明。□

2.1. 广义热平均与超力分布。我们首先考虑相空间 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$，其上线性坐标为 $\boldsymbol{r}^N$ 和 $\boldsymbol{p}^N$，如第 1 节所述。对于每个 $n\in\{0,1,\dots,N-1\}$，我们还考虑其子空间 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$，并配备线性坐标 $(\boldsymbol{r}_{n+1},\dots,\boldsymbol{r}_N)$ 和 $(\boldsymbol{p}_{n+1},\dots,\boldsymbol{p}_N)$。我们记作 $\boldsymbol{r}_n^N=(\boldsymbol{r}_{n+1},\dots,\boldsymbol{r}_N)$ 和 $\boldsymbol{p}_n^N=(\boldsymbol{p}_{n+1},\dots,\boldsymbol{p}_N)$。对于 $\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$，我们在 $\mathbb{R}^{dN}$ 上定义一个微分同胚

$$\epsilon_n(\boldsymbol{r}^N)=(\boldsymbol{r}_1,\dots,\boldsymbol{r}_n,(\mathrm{Id}+\epsilon)(\boldsymbol{r}_{n+1}),\dots,(\mathrm{Id}+\epsilon)(\boldsymbol{r}_N)).$$

该微分同胚自然地诱导出 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的一个微分同胚，称为正则变换。该微分同胚表示为

$$\epsilon_{n,\sharp}:\mathbb{R}^{dN\times 2}\to\mathbb{R}^{dN\times 2},\quad (\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\mapsto(\hat{\boldsymbol{r}}^N,\hat{\boldsymbol{p}}^N)$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{r}}_i=\begin{cases}\boldsymbol{r}_i\,, & \text{if } 1\le i\le n\\ (\mathrm{Id}+\epsilon)(\boldsymbol{r}_i), & \text{otherwise}\end{cases},\qquad \hat{\boldsymbol{p}}_i=\begin{cases}\boldsymbol{p}_i\,, & \text{if } 1\le i\le n\\ (\mathbb{1}+\nabla\epsilon(\boldsymbol{r}_i))^{-1}\,\boldsymbol{p}_i, & \text{otherwise}\end{cases}.$$

其中，$\mathbb{1}$ 表示维数为 d 的单位矩阵，$\nabla\epsilon(\boldsymbol{r}_i)$ 是由 ϵ 定义的雅可比矩阵

$$\nabla\epsilon(\boldsymbol{r}_i)=\begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial r_1}\epsilon^{(1)}(\boldsymbol{r}_i) & \cdots & \frac{\partial}{\partial r_d}\epsilon^{(1)}(\boldsymbol{r}_i)\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial}{\partial r_1}\epsilon^{(d)}(\boldsymbol{r}_i) & \cdots & \frac{\partial}{\partial r_d}\epsilon^{(d)}(\boldsymbol{r}_i)\end{pmatrix}.$$

我们将$\epsilon_{n,\,\sharp}$称为 ϵ_n 到 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$上的提升。我们首先证明，通过提升$\epsilon_{n,\,\sharp}$进行拉回，会在 $\mathcal{S}\,(\mathbb{R}^{dN\times 2})$上诱导出一个良定义的映射。

定理2.2。 设 $n\in\{0,1,\dots,N-1\}$。对于任意$\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$，由提升$\epsilon_{n,\,\sharp}\in$进行拉回所诱导的$\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 之间的映射$\epsilon_{n,\,\sharp}^*\,\mathrm{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$

$$\epsilon_{n,\sharp}^*:\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})\to\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$$

定义良好。

证明。我们首先证明 $N = 1$ 和 $n = 0$ 的情形。我们运用（多元版本的）Faà di Bruno公式[4, 7]来证明这一论证；详情见附录 B。多元 Faà di Bruno 公式是两个函数$\boldsymbol{g} = (g^{(1)}, \dots, g^{(m)}) : \mathbb{R}^{\ell} \to \mathbb{R}^m$和 $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$的复合 $f \circ \boldsymbol{g}$ 的导数的显式表达式。该公式的完整表达式见式（15），它是以下涉及 $\boldsymbol{g}$ 和 f 的偏导数的项构成的有限和

$$C \cdot f_{\boldsymbol{\lambda}} \prod_{j=1}^{s} [\boldsymbol{g}_{\ell_j}]^{\boldsymbol{k}_j}, \tag{10}$$

对于多重指标 $\boldsymbol{\lambda}$、$\boldsymbol{k}_j \in \mathbb{N}_0^m$ 和 $\ell_j \in \mathbb{N}_0^{\ell}$，其中 j 的取值范围为从 1 到正整数 s。这里，C 表示构成公式 (15) 的各项中所涉及的常数。根据定义，(10) 展开为

$$\begin{aligned}
(10) &= C \cdot D_{\boldsymbol{y}}^{\boldsymbol{\lambda}} f(\boldsymbol{y}_0) \prod_{j=1}^{s} \prod_{i=1}^{\ell} (g_{\ell_j}^{(i)})^{k_{j,i}} \\
&= C \cdot D_{\boldsymbol{y}}^{\boldsymbol{\lambda}} f(\boldsymbol{y}_0) \prod_{j=1}^{s} \prod_{i=1}^{\ell} (D_{\boldsymbol{x}}^{\ell_j} g^{(i)}(\boldsymbol{x}_0))^{k_{j,i}} \\
&= C \cdot \frac{\partial^{|\boldsymbol{\lambda}|} f}{\partial y_1^{\lambda_1} \cdots \partial y_m^{\lambda_m}}(\boldsymbol{y}_0) \prod_{j=1}^{s} \prod_{i=1}^{\ell} \left(\frac{\partial^{|\ell_j|} g^{(i)}}{\partial x_1^{\ell_{j,1}} \cdots \partial x_{\ell}^{\ell_{j,\ell}}}(\boldsymbol{x}_0) \right)^{k_{j,i}}, \qquad (11)
\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}^m$ 和 $\boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_0) \in \mathbb{R}^m$。

我们令 $\ell = m = d \times 2$ 和 $\boldsymbol{x}_0 = (\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \in \mathbb{R}^{d \times 2}$。我们将 $\boldsymbol{g} : \mathbb{R}^{d \times 2} \to \mathbb{R}^{d \times 2}$ 定义为

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \epsilon_{0,\sharp}(\boldsymbol{x}) = \left((\mathrm{Id} + \epsilon)(\boldsymbol{r}), (\mathbb{1} + \nabla \epsilon(\boldsymbol{r}))^{-1} \boldsymbol{p} \right).$$

此外，对 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{d \times 2})$，令 $f = \phi$。将 $\boldsymbol{g}$ 和 f 代入 (11)，得到

$$\begin{aligned}
(11) = C \cdot & \frac{\partial^{|\boldsymbol{\lambda}|} f}{\partial \hat{r}_1^{\lambda_1} \cdots \partial \hat{r}_d^{\lambda_d} \partial \hat{p}_1^{\lambda_{d+1}} \cdots \partial \hat{p}_d^{\lambda_{2d}}} ((\mathrm{Id} + \epsilon)(\boldsymbol{r}), (\mathbb{1} + \nabla \epsilon(\boldsymbol{r}))^{-1} \boldsymbol{p}) \\
& \times \prod_{j=1}^{s} \Bigg\{ \prod_{i=1}^{d} \underbrace{\left(\frac{\partial^{|\ell_j|}}{\partial r_1^{\ell_{j,1}} \cdots \partial r_d^{\ell_{j,d}} \partial p_1^{\ell_{j,d+1}} \cdots \partial p_d^{\ell_{j,2d}}} (\mathrm{Id} + \epsilon)(\boldsymbol{r})_i \right)}_{\text{(a)}}^{k_{j,i}} \\
& \times \prod_{k=d+1}^{2d} \underbrace{\left(\frac{\partial^{|\ell_j|}}{\partial r_1^{\ell_{j,1}} \cdots \partial r_d^{\ell_{j,d}} \partial p_1^{\ell_{j,d+1}} \cdots \partial p_d^{\ell_{j,2d}}} ((\mathbb{1} + \nabla \epsilon(\boldsymbol{r}))^{-1} \boldsymbol{p})_{k-d} \right)}_{\text{(b)}}^{k_{j,k}} \Bigg\}.
\end{aligned}$$

表2总结了关于相空间变量 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$的各阶导数 (a) 和 (b) 的渐近行为。由表2可知，(11) 是快速衰减的，因为导数 (a) 和 (b) 的增长率至多为多项式。下面我们详细说明表2中行为的推导：项 (a) 有界，因为当 $\sum_{i=1}^{d} \ell_{j,\,i} > 0$ 时，(a) 变为一个常函数，或 ϵ 在紧支撑上的 n 阶导数；否则为 0。类似地，(b) 关于空间坐标 $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^d$ 也有界

当 $\sum_{i=1}^{d} \ell_{j,\ i} \geq 0$ 时。最后，(b) 与快速衰减函数 $f_{\boldsymbol{\lambda}}$相乘后，沿 $\boldsymbol{p}$ 轴仍然快速衰减，因为 (b) 的乘积 $\prod_{k=d+1}^{2d}$ 只涉及 $\boldsymbol{p}$ 的有限阶多项式。

表2. 提升$\epsilon_{n,\ \sharp}$ 关于相空间变量的（任意阶）导数的渐近行为。

	$\boldsymbol{r}$轴	$\boldsymbol{p}$轴
(a)	有界	常数
(b)	有界的	多项式

请回忆，对于任意的 N 和 n，提升 $\epsilon_{n,\ \sharp}$ 被定义为恒等映射 $(\mathrm{Id}+\epsilon)(\boldsymbol{r})$ 和 $(\mathbb{1}+\nabla\epsilon(\boldsymbol{r}))^{-1}\boldsymbol{p}$ 的 N 重直积。因此，在 $N=1$ 和 $n=0$ 情况下得到证明的结论，可以自然地推广到任意 N 和 n 的情况。□

下面的定义用（缓增）分布和快速衰减函数给出了热平均。附录 A 回顾了施瓦茨空间和缓增分布的定义及其一些基本性质。广义约化热平均是一种重要的可观测量，用于描述微观状态的宏观行为。

定义 2.3（广义热平均）。设 $n \in \{0,1,\dots,N-1\}$。对于 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$ 上的缓增分布 $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$，我们定义一个取值于 $C(\mathbb{R}^{dn\times 2})$ 的缓增分布 $K_n[u] \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{dN\times 2}; C(\mathbb{R}^{dn\times 2}))$，其定义为

$$\langle K_n[u],\phi\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n) = \langle u, \phi(\boldsymbol{r}^n,\cdot,\boldsymbol{p}^n,\cdot)\rangle$$

对于 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 和 $(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n) \in \mathbb{R}^{dn\times 2}$。我们称函数 $\langle K_n[u],\ \phi\rangle \in C(\mathbb{R}^{dn\times 2})$ 为 u 和 ϕ 的广义约化热平均。

广义热平均的第一个例子是缓增分布通过函数的积分来实现的情形。

例 2.4。热平均的一个重要情形是 u 为 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$ 上的温和连续函数 f 的积分；见定义 *A.4*。在这种情况下，u_f 和 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 的广义热平均为

$$\left\langle K_n[u_f],\phi\right\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n) = \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} f(\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}_n^N)\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N$$

对于 $(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n) \in \mathbb{R}^{dn\times 2}$。

另一个重要的例子是狄拉克 δ 泛函。

例 2.5。对于 $n \in \{0,1,\dots,N-1\}$ 和 $i \in \{n+1,\dots,N\}$，子空间 $\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{a}$ 上的狄拉克 δ 泛函 $\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{a})} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 定义为

$$\left\langle \delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{a})},\phi\right\rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)}\times\mathbb{R}^{d(N-n)}} \phi(\boldsymbol{r}_{n+1},\dots,\boldsymbol{r}_{i-1},\overset{i}{\breve{\boldsymbol{a}}},\boldsymbol{r}_{i+1},\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}_n^N)d\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}_i}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N$$

对于 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$。这里，我们所说的 $\widehat{d\boldsymbol{r}_i}$ 是指排除 $d\boldsymbol{r}_i$ 。注意，由于狄拉克泛函 $\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{a})}$ 可以扩展到可积连续函数，因此我们通常也对可积连续函数 ϕ 使用相同的记号 $\left\langle \delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{a})},\ \phi \right\rangle$ 。 $\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{a})} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$的广义热平均为

$$\begin{aligned}&\left\langle K_n\left[\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{a})}\right],\phi\right\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n)\\&\quad=\int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)}\times\mathbb{R}^{d(N-n)}}\phi(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{r}_{n+1},\ldots,\overset{i}{\check{\boldsymbol{a}}},\ldots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}^N)d\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}_i}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N\end{aligned}$$

对于 $(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n)\in\mathbb{R}^{dn\times 2}$。请注意，该定义在数学上等价于物理学中采用的狄拉克δ函数 $\delta(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{a})$ ，其定义为

$$\left\langle K_n\left[\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{a})}\right],\phi\right\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n)=\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)}\times\mathbb{R}^{d(N-n)}}\delta(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{a})\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N$$

狄拉克 δ 泛函在推导有用的可观测量（例如密度函数，如第*1.2*节中的单体密度分布 $\rho(\boldsymbol{r})$ ）时起着核心作用。

现在，我们对每个 $n\in\{0,1,\ldots,N-1\}$ 定义一个关于 $\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 的泛函。首先，对于给定的 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ ，我们在 $\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 上定义一个泛函，如下所示：

$$\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},0}(\mathbb{R}^d)\to C\left(\mathbb{R}^{dn\times 2}\right),\quad \epsilon\mapsto\langle\epsilon_{n,\sharp}^* K_n[u],\epsilon_{n,\sharp}^*\phi\rangle.$$

这里，$\epsilon_{n,\,\sharp}^* u$ 是 u 与 $\epsilon_{n,\,\sharp}\in\mathrm{Diff}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 的复合，其定义见定义 A.8。请注意，广义热平均$\langle K_n[u],\phi\rangle$ 不受任何 $\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 所诱导的微分同胚带来的相空间变换影响，始终保持不变：由 $\epsilon_{n,\,\sharp}^*$ 的定义可立即得到$\left\langle\epsilon_{n,\,\sharp}^* K_n[u],\epsilon_{n,\,\sharp}^*\phi\right\rangle=\langle K_n[u],\phi\rangle$ ，对任意 $\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$ 均成立。

该泛函的性质导致其导数具有相应的性质：对于任意满足 $|t|<\left(\sup_{\boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^d}\|\epsilon'(\boldsymbol{r})\|\right)^{-1}$ 的紧支撑向量场 $\epsilon\in\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$ 和 $t\in\mathbb{R}$ ，我们有 $t\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)$，并且映射

$$t\mapsto\left\langle(t\epsilon)_{n,\sharp}^* K_n[u],(t\epsilon)_{n,\sharp}^*\phi\right\rangle$$

在 $t=0$ 附近定义良好。由于对于任意 $\epsilon\in\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$，该映射在 $t=0$ 附近为常数，因此该映射在 $t=0$ 处的导数对于所有 $\epsilon\in\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$ 也都为零。我们将上述讨论正式表述为如下定义和引理。

定义2.6。设 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$。我们称泛函

$$F^{(n)}[u,\phi]:\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)\to C\left(\mathbb{R}^{dn\times 2}\right),\quad \epsilon\mapsto\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0}\left\langle(t\epsilon)_{n,\sharp}^* K_n[u],(t\epsilon)_{n,\sharp}^*\phi\right\rangle$$

为 u 和 ϕ 在 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$上的平衡分布式超力和。

引理 2.7。对于 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$， u 和 ϕ 的平衡分布式超力和 $F^{(n)}[u,\phi]$ 在 $\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)$ 上消失。我们将 $F^{(n)}[u,\phi]$ 的这一消失性质称为平衡分布超力求和法则。

下面我们给出定理 2.8 中 $F^{(n)}[u,\phi]$ 的另一种表达方式，使其不涉及关于 t 的导数。该推导

利用了缓增分布配对的导数乘积法则。尽管从数学角度看，引理 2.7 的结果乍看之下并无明显启示，而且这一推导似乎多此一举，但事实证明，这条看似平凡的消失规则涉及一类具有重要物理意义的现象；事实上，当 f 是缓增光滑函数且 ϕ 是玻尔兹曼分布时，超力求和规则 [27] 和 BBGKY层级 [11] 均可由平衡分布式超力和规则恢复。推论 3.6 和 3.7 将给出证明，而证明依赖于定理 2.8。

我们首先通过对 $F^{(n)}[u,\phi]$ 应用分布的乘积法则，重新改写 $F^{(n)}[u,\phi]$ 的表达式；令 $u_t = (t\epsilon)^*_{n,\sharp} K_n[u]$ 和 $\phi_t = (t\epsilon)^*_{n,\sharp}\phi$，其中 $t\in\mathbb{R}$。根据定理 A.14 中的乘积法则，可得以下表达式：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}\langle u_t,\phi_t\rangle = \left\langle \frac{\mathrm{d}u_t}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0},\phi\right\rangle + \left\langle u,\frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}\right\rangle. \tag{12}$$

为了计算方程 (12) 的右端，我们注意到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}\phi\circ(t\epsilon)_{n,\sharp}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\\ &= \sum_{i=n+1}^{N}\Big((\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\epsilon(\boldsymbol{r}_i) - (\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi)^{\mathrm{T}}(\nabla\epsilon)(\boldsymbol{r}_i)\cdot\boldsymbol{p}_i\Big).\end{aligned} \tag{13}$$

这里，我们记

$$\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi = \left[\tfrac{\partial\phi}{\partial r_i^1},\tfrac{\partial\phi}{\partial r_i^2},\dots,\tfrac{\partial\phi}{\partial r_i^d}\right]^{\mathrm{T}} \quad\text{and}\quad \nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi = \left[\tfrac{\partial\phi}{\partial p_i^1},\tfrac{\partial\phi}{\partial p_i^2},\dots,\tfrac{\partial\phi}{\partial p_i^d}\right]^{\mathrm{T}}.$$

我们还引入映射 $\delta_i,\hat{\delta}_i\colon \mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d)\to C(\mathbb{R}^{dN\times 2},\mathbb{R}^d)$，它们针对 $i=n+1,\dots,N$ 定义如下

$$\delta_i(\epsilon)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N) = \epsilon(\boldsymbol{r}_i) \quad\text{and}\quad \hat{\delta}_i(\epsilon)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N) = (\nabla\epsilon)(\boldsymbol{r}_i)\cdot\boldsymbol{p}_i, \quad \text{for } \epsilon\in\mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d).$$

于是，方程 (13) 可改写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}\phi\circ(t\epsilon)_{n,\sharp} = \sum_{i=n+1}^{N}\Big((\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\delta_i(\epsilon) - (\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\hat{\delta}_i(\epsilon)\Big).$$

同理，我们有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}\phi\circ(t\epsilon)^{-1}_{n,\sharp} = \sum_{i=n+1}^{N}\Big(-(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\delta_i(\epsilon) + (\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\hat{\delta}_i(\epsilon)\Big).$$

在上述记号下，方程 (12) 右端的第一项进一步展开如下：

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\mathrm{d}u_t}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0},\phi\right\rangle &= \left\langle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}(t\epsilon)^*_{n,\sharp}K_n[u],\phi\right\rangle = \lim_{h\to 0}\left\langle\frac{(h\epsilon)^*_{n,\sharp}K_n[u]-K_n[u]}{h},\phi\right\rangle\\ &= \lim_{h\to 0}\left\langle K_n[u],\frac{\phi\circ(h\epsilon)^{-1}_{n,\sharp}-\phi}{h}\right\rangle = \left\langle K_n[u],\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}\phi\circ(t\epsilon)^{-1}_{n,\sharp}\right\rangle\\ &= \sum_{i=n+1}^{N}\Big\langle K_n[u],-(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\delta_i(\epsilon) + (\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\hat{\delta}_i(\epsilon)\Big\rangle.\end{aligned}$$

类似地，第二项可改写为

$$\left\langle u,\, \frac{d\phi_t}{dt}\Big|_{t=0} \right\rangle = \left\langle K_n[u],\, \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} (t\epsilon)^*_{n,\sharp}\phi \right\rangle$$
$$= \sum_{i=n+1}^{N} \left\langle K_n[u], (\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\delta_i(\epsilon) - (\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi)^{\mathrm{T}}\hat{\delta}_i(\epsilon) \right\rangle.$$

这里，我们定义无穷小相移算子

$$D_i(\epsilon)\colon \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2}) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$$

by

$$D_i(\epsilon)\phi = \delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi - \hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi$$

对于 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$。利用导数的乘积法则，右侧平移算子的第一项可改写为

$$\delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi\right) = \sum_{k=1}^{d} \delta_i(\epsilon)^{(k)} \frac{\partial\phi}{\partial r_i^k}$$
$$= \sum_{k=1}^{d} \left(\frac{\partial}{\partial r_i^k}\left(\delta_i(\epsilon)^{(k)}\phi\right) - \frac{\partial \delta_i(\epsilon)^{(k)}}{\partial r_i^k}\phi \right).$$

类似地，根据乘积法则以及 $\delta_i(\epsilon)$ 在 $\boldsymbol{p}_i$ 上为常函数这一事实，第二项可表示为

$$\hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}(\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi) = \sum_{k=1}^{d} \hat{\delta}_i(\epsilon)^{(k)} \frac{\partial\phi}{\partial p_i^k}$$
$$= \sum_{k=1}^{d} \left(\frac{\partial}{\partial p_i^k}\left(\hat{\delta}_i(\epsilon)^{(k)}\phi\right) - \frac{\partial \hat{\delta}_i(\epsilon)^{(k)}}{\partial p_i^k}\phi \right)$$
$$= \sum_{k=1}^{d} \left(\frac{\partial}{\partial p_i^k}\left(\hat{\delta}_i(\epsilon)^{(k)}\phi\right) - \frac{\partial \delta_i(\epsilon)^{(k)}}{\partial r_i^k}\phi \right).$$

因此，对于任意 $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和 $(\boldsymbol{r}_n, \boldsymbol{p}_n) \in \mathbb{R}^{dn\times 2}$，我们有

$$\langle u, D_i(\epsilon)\phi(\boldsymbol{r}_n, \cdot, \boldsymbol{p}_n, \cdot)\rangle = \sum_{k=1}^{d} \left\langle u, \left(\frac{\partial}{\partial r_i^k}\left(\delta_i(\epsilon)^{(k)}\phi\right) - \frac{\partial}{\partial p_i^k}\left(\hat{\delta}_i(\epsilon)^{(k)}\phi\right) \right)(\boldsymbol{r}_n, \cdot, \boldsymbol{p}_n, \cdot) \right\rangle$$
$$= -\sum_{k=1}^{d} \left\langle \delta_i(\epsilon)^{(k)} \frac{\partial u}{\partial r_i^k} - \hat{\delta}_i(\epsilon)^{(k)} \frac{\partial u}{\partial p_i^k}, \phi(\boldsymbol{r}_n, \cdot, \boldsymbol{p}_n, \cdot) \right\rangle$$
$$= -\left\langle \left(\delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i} - \hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\right) u, \phi(\boldsymbol{r}_n, \cdot, \boldsymbol{p}_n, \cdot) \right\rangle.$$

因此算子 $D_i(\epsilon)$ 可以在 $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 上延拓为

$$\langle D_i(\epsilon)u, \phi(\boldsymbol{r}_n, \cdot, \boldsymbol{p}_n, \cdot)\rangle = -\langle u, D_i(\epsilon)\phi(\boldsymbol{r}_n, \cdot, \boldsymbol{p}_n, \cdot)\rangle$$

对 $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$，我们得到

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}u_t}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}, \phi \right\rangle = \langle K_n[D_i(\epsilon)u], \phi\rangle.$$

由上述讨论可得以下结果：

定理 2.8。 对于 $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2})$ 和 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$，我们将局部化超力 u 和 ϕ 以 i 为中心的连续函数值映射 $F_i^{(n)}[u,\phi] : \mathfrak{X}_0(\mathbb{R}^d) \to C\left(\mathbb{R}^{dn\times 2}\right)$ 定义为：

$$F_i^{(n)}[u,\phi][\epsilon] = \langle K_n[D_i(\epsilon)u],\phi\rangle + \langle K_n[u], D_i(\epsilon)\phi\rangle\,.$$

那么，局部化超力之和与平衡分布式超力和一致，即：

$$F^{(n)}[u,\phi] = \sum_{i=n+1}^{N} F_i^{(n)}[u,\phi].$$

根据引理 2.7，我们有以下结论。

推论 2.9 (平衡分布式超力求和规则**).** 平衡分布超力求和法则等价于

$$F_i^{(n)}[u,\phi] = 0, \quad for\ any\ i.$$

该结果是对[27]中推导的平衡超力求和规则的推广。我们将在推论 3.6 中证明，平衡分布式超力求和规则可导出 [27] 的求和规则以及 BBGKY 层级。

注 2.10. 本节中的论证可以推广到取值于巴拿赫空间的缓增分布。尽管这种推广可能有助于应用，例如基于[9]，给出另一种推导玻尔兹曼方程的方法，但由于这超出了本文的范围，我们不再赘述。

3. 应用

3.1. 分布式超力求和公式的物理解释。 在本小节中，我们将证明，当 u 中局域超力 $F_i^{(n)}[u,\phi]$ 是某个连续函数 f的积分^{u}f 时，超力求和作为函数值泛函恒等于零。我们还将说明，该结果与 [27]中称为超力求和规则的原始结果一致。

对于一个取值于 $\mathbb{R}\cup\{\infty\}$ 的函数 H，我们将 H 的“奇异”点定义为

$$\Delta_H = \{(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N) \in \mathbb{R}^{dN\times 2}\,;\, H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N) = \infty\}.$$

定义 3.1. 设 $H \in C(\mathbb{R}^{dN\times 2};\mathbb{R}\cup\{\infty\})$。当 $e^{-H} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 时， H 称为哈密顿函数。我们用 $\mathcal{H}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 表示哈密顿函数的集合。

注意， $H \in \mathcal{H}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 的取值为扩展实数，而 H 在 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^{dN\times 2}$ 处的连续性定义为

$$\lim_{\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}_0} H(\boldsymbol{x}) = H(\boldsymbol{x}_0).$$

该定义表明，无论 H 在 Δ_H 上取何值， e^{-H} 的导数都可以连续延拓到整个定义域 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 。这种表述对于纳入物理系统中具有代表性的哈密顿函数至关重要，例如与空间距离成反比的排斥势；我们将在下文的例 3.2 中详细说明。

例 3.2. 我们对 $\mathcal{H}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 的定义包括由三部分构成的哈密顿量：动能、粒子间相互作用势以及外部单体势。

$$H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{2m_i}+u_N(\boldsymbol{r}^N)+\sum_{i=1}^{N}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_i).$$

粒子间势 u_N：使 e^{-H} 属于施瓦茨类的一种典型粒子间势是包含谐势的势，例如我们也能在经典分子力场 [5, 35, 38] 中看到这种情况。我们对哈密顿量的定义允许上述表达式中的粒子间势 u_N 包含排斥势，例如伦纳德-琼斯势 [19, 20] 和库仑势 [10]。

外势 u^{ext}：一个例子是三维聚合物系统中的场势 [36], ，其中一个场对每个单体施加作用力。另一个例子是处于沉降-扩散平衡态 [17]，的热系统的总外势，它由引力贡献和与容器壁相关的排斥贡献组成。

通过选取并固定一个哈密顿函数 $H\in\mathcal{H}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$，为简便起见，我们引入表示热平均的简单记号：对于定义在 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$ 上的缓增分布u，以及定义在 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$ 的某个子集上的函数 f，若$K_n[u]$ 的定义域可以扩展到包含乘积 fe^{-H}，则定义

$$\langle uf\rangle_n=\left\langle K_n[u],fe^{-H}\right\rangle.$$

请注意，对于 $n=0$，$\langle u\rangle_0$ 是方程（5）中热平均的一种分布推广（相差温度和玻尔兹曼常数的因子）。

例 3.3. 假设 f 是 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$上的缓增连续函数。对于给定的 $(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n)\in\mathbb{R}^{dn\times 2}$，我们定义 $f_n(\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}_n^N)=f(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}^n,\boldsymbol{p}_n^N)$。那么 f_n 是 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$上的缓增连续函数。对于 $H\in\mathcal{H}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$，约化热平均 $^{u_{f_n}}$和 $\phi=e^{-H}$

$$\left\langle u_{f_n}\right\rangle_n(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n)=\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}}f_n(\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}_n^N)e^{-H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)}d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N$$

是有限的。例如，当 f 是缓增函数时，可以保证其有限；参见定义 ***A.4***。此时，$\left\langle u_{f_n}\right\rangle_0$ 与标准热平均一致（相差温度和玻尔兹曼常数的因子）。此外，当 $f=1$ 时，此热平均也与正则配分函数一致（相差温度和玻尔兹曼常数的因子）。

我们证明，推论 2.9 中所示的分布意义下的超力消失现象，涵盖了原始超力求和规则 (8) 和平衡 BBGKY 层级这两个特例；设 H 为例 3.2 中引入的形式的哈密顿函数，由三项组成（关于 $\mathbb{R}^d$）：动能、粒子间相互作用势和外部单体势：

$$H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{2m_i}+u_N(\boldsymbol{r}^N)+\sum_{i=1}^{N}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_i).$$

引理 3.4。令 $\beta=\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}$，其中 k_{B} 表示玻尔兹曼常数，T表示绝对温度。假设选取 u_N 和 u^{ext}，使得 $e^{-\beta H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)}\in$

$\mathcal{S}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 且 f 是定义在 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的缓增 C^1 函数。对所有 $i\in\{n+1,\dots,N\}$、$k=1$、2、3、4，在 $\mathbb{R}^d$ 上定义如下取 $C(\mathbb{R}^{dn\times 2})^d$ 值的函数 $G_{i,\,k}^{(n)}[f,H]$；这里，对于 $\boldsymbol{a}\in\mathbb{R}^d$，记 $\mathbb{R}^{d,\,N}_{n,\,i}(\boldsymbol{a})=\mathbb{R}^{d(i-n-1)}\times\{\boldsymbol{a}\}\times\mathbb{R}^{d(N-i)}\times\mathbb{R}^{d(N-n)}$：

$$G_{i,1}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i}(\boldsymbol{r}_i)}\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}f\right)e^{-\beta H}\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N,$$

$$G_{i,2}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i}(\boldsymbol{r}_i)}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left((\nabla_{\boldsymbol{p}_i}f)e^{-\beta H}\right)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\boldsymbol{p}_i\,d\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N,$$

$$G_{i,3}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i}(\boldsymbol{r}_i)}\left(f\,\nabla_{\boldsymbol{r}_i}e^{-\beta H}\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N,$$

$$G_{i,4}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)=-\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i}(\boldsymbol{r}_i)}\beta\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m_i}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(fe^{-\beta H}\right)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N.$$

于是我们有

$$F_i^{(n)}[u_{f_n},e^{-\beta H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)}][\epsilon]=\sum_{k=1}^{4}\int_{\mathbb{R}^d}\epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}}G_{i,k}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)d\boldsymbol{r}_i.$$

证明。令 $\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)=e^{-\beta H(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)}$。由于 f可微，对任意 i，局部化超力 $F_i^{(n)}[u_f,\phi]$可写为

$$\begin{aligned}F_i^{(n)}[u_{f_n},\phi][\epsilon]&=\left\langle K_n[D_i(\epsilon)u_{f_n}],\phi\right\rangle+\left\langle K_n[u_{f_n}],D_i(\epsilon)\phi\right\rangle\\&=\left\langle K_n[\delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}u_{f_n}],\phi\right\rangle-\left\langle K_n[\hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}u_{f_n}],\phi\right\rangle\\&\qquad+\left\langle K_n[u_{f_n}],\delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi\right\rangle-\left\langle K_n[u_{f_n}],\hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi\right\rangle.\end{aligned}$$

上式右侧的每一项都可按如下方式计算；这里，我们对第二项和第四项应用分部积分。

$$\begin{aligned}&\left\langle K_n[\delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}u_{f_n}],\phi\right\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n)\\&\quad=\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}}\left(\delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}f_n\right)(\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}_n^N)\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N\\&\quad=\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}}\epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}}\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}f\right)\phi\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N\\&\quad=\int_{\mathbb{R}^d}\epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}}G_{i,1}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)d\boldsymbol{r}_i,\\&\left\langle K_n[\hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}u_{f_n}],\phi\right\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n)\\&\quad=\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}}\left(\hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}f_n\right)(\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}_n^N)\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N\\&\quad=\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}}\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\epsilon\right)(\boldsymbol{r}_i)\cdot\boldsymbol{p}_i\right)^{\mathrm{T}}\left((\nabla_{\boldsymbol{p}_i}f)\phi\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} \left((\nabla_{\boldsymbol{p}_i} f)\phi\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)^{\mathrm{T}}(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\epsilon)(\boldsymbol{r}_i)\cdot\boldsymbol{p}_i\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= -\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left((\nabla_{\boldsymbol{p}_i} f)\phi\right)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\cdot\boldsymbol{p}_i\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= -\int_{\mathbb{R}^d} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}} G_{i,2}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)\, d\boldsymbol{r}_i,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\left\langle K_n[u_{f_n}], \delta_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi\right\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n) \\
&= \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} f(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\left(\delta(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} f(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}}(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\phi)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}} G_{i,3}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)\, d\boldsymbol{r}_i,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\left\langle K_n[u_{f_n}], \hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi\right\rangle(\boldsymbol{r}^n,\boldsymbol{p}^n) \\
&= \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} f(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\left(\hat{\delta}_i(\epsilon)^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} f(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\epsilon\right)(\boldsymbol{r}_i)\cdot\boldsymbol{p}_i\right)^{\mathrm{T}}\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= \int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} \left(f\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi\right)\right)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\epsilon\right)(\boldsymbol{r}_i)\cdot\boldsymbol{p}_i\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= -\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} \epsilon^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r}_i)\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(f\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\phi\right)\right)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\cdot\boldsymbol{p}_i\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= \frac{\beta}{m_i}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}(f\phi\boldsymbol{p}_i)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\cdot\boldsymbol{p}_i\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= \frac{\beta}{m_i}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}(f\phi)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N \\
&= -\int_{\mathbb{R}^d} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}} G_{i,4}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i)\, d\boldsymbol{r}_i.
\end{aligned}
$$

至此，证明完成。 □

由引理 3.4 可得以下 level n 下的约化超力规则：

定理 3.5 (level n 下的约化超力规则)。 假设与引理 *3.4* 中相同的条件。令

$$
G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i) = \sum_{k=1}^{4} G_{i,k}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i).
$$

于是，对于 $i = n+1, \cdots, N$，我们有 $G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i) = 0$。

证明。 由推论 2.9 和引理 3.4，我们有

$$
\int_{\mathbb{R}^d} \epsilon(\boldsymbol{r}_i)^{\mathrm{T}} G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i) d\boldsymbol{r}_i = 0.
$$

由于该方程对任意紧支撑向量场 ϵ 均成立，因此我们得到$G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i) = 0$对于 $i = n+1, \cdots, N$。 □

定理 3.5 得出平衡 BBGKY 层级 (2)。

推论 3.6. 假设满足引理 *3.4* 中相同的条件。我们还假设$u_N(\boldsymbol{r}^N) = \sum u(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j)$与 u对称。那么，对于任意 $n = 1, 2, \dots, N-1$ 以及 $k = 1, 2, \dots, n$，我们有

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}_k} - \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u^{ext}(\boldsymbol{r}_k) + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j) \right) \right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_k} \right) \phi^{[n]}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{n+1}) \right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k} \phi^{[n+1]} \right) d\boldsymbol{r}_{n+1} d\boldsymbol{p}_{n+1}.$$

这里， $\phi^{[n]}$ 是第 *1.1* 节中定义的 $\phi = e^{-\beta H}$ 的约化相空间分布函数。因此，对所有 k 的项求和可得平衡 *BBGKY* 层级(2)。

证明。 代入 $f = 1$后， $G_i^{(n)}[f, H](\boldsymbol{r}_i)$ 可化简为

$$G_i^{(n)}[1, H](\boldsymbol{r}_i) = G_{i,3}^{(n)}[1, H](\boldsymbol{r}_i) + G_{i,4}^{(n)}[1, H](\boldsymbol{r}_i),$$

其中

$$G_{i,3}^{(n)}[1, H](\boldsymbol{r}_i) = \int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i}(\boldsymbol{r}_i)} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i} \phi \right) (\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) d\boldsymbol{r}_{n+1} \cdots \widehat{d\boldsymbol{r}_i}^{\,i} \cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N$$

and

$$G_{i,4}^{(n)}[1, H](\boldsymbol{r}_i) = -\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i}(\boldsymbol{r}_i)} \beta \frac{\boldsymbol{p}_i \boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m_i} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i} \phi \right) (\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) d\boldsymbol{r}_{n+1} \cdots \widehat{d\boldsymbol{r}_i}^{\,i} \cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N.$$

我们假设 $i = n + 1$。于是,

$$\begin{aligned} G_{n+1,3}^{(n)}[1, H](\boldsymbol{r}_{n+1}) &= \int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}} \phi \right) (\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) \widehat{d\boldsymbol{r}_{n+1}}^{\,n+1} d\boldsymbol{r}_{n+2} \cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N \\ &= -\beta \underbrace{\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})} \nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}} u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1}) \phi(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) \, d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N}_{I} \\ &\quad - \beta \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq n+1}}^{N} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})} \nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}} u(\boldsymbol{r}_{n+1}, \boldsymbol{r}_j) \phi(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) \, d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N}_{I_j}. \end{aligned}$$

这里，我们为 $1 \le k \le n + 1$引入以下记号:

$$\begin{aligned} Z_{n+1} &= \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\beta \boldsymbol{p}_{n+1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_{n+1}} d\boldsymbol{p}_{n+1}, \\ \phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_k}}(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) &= e^{-\beta (H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) - \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_k)}, \\ \phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_k}}^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1}, \boldsymbol{p}^{n+1}) &= \frac{N!}{(N-n-1)!} \int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)\times 2}} \phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_k}}(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_{n+1}^N, \end{aligned}$$

$$\phi^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})=\frac{N!}{(N-n-1)!}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)\times 2}}\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_{n+1}^N.$$

第一项中的积分 I 进一步展开为

$$\begin{aligned}I&=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1})\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\ d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N\\&=Z_{n+1}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)\times 2}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1})\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\ d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_{n+1}^N\\&=Z_{n+1}\frac{(N-n-1)!}{N!}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1})\phi^{[n+1]}_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1}).\end{aligned}$$

类似地， I_j 可改写为

$$\begin{aligned}I_j&=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\ d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N\qquad(\text{for}\quad j=1,2,\dots,n)\\&=Z_{n+1}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)\times 2}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\ d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_{n+1}^N\\&=Z_{n+1}\frac{(N-n-1)!}{N!}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\phi^{[n+1]}_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}I_j&=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\phi(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\ d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N\qquad(\text{for}\quad j=n+2,\dots,N)\\&=Z_{n+1}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)\times 2}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\ d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_{n+1}^N\\&=Z_{n+1}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)\times 2}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_{n+2})\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_{n+1}^N\\&=Z_{n+1}\frac{(N-n-2)!}{N!}\int_{\mathbb{R}^{2d}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_{n+2})\phi^{[n+2]}_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}(\boldsymbol{r}^{n+2},\boldsymbol{p}^{n+2})d\boldsymbol{r}_{n+2}d\boldsymbol{p}_{n+2}.\end{aligned}$$

另一方面，利用分部积分， $G_i^{(n)},{}_4[1,H](\boldsymbol{r}_{n+1})$ 可写为

$$\begin{aligned}G^{(n)}_{i,4}[1,H](\boldsymbol{r}_{n+1})&=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})}\left(\left(-\beta\frac{\boldsymbol{p}_{n+1}\boldsymbol{p}_{n+1}^{\mathrm{T}}}{m_{n+1}}\right)\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}\phi\right)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N\\&=\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})}\left(\boldsymbol{p}_{n+1}\left(\nabla^{\mathrm{T}}_{\boldsymbol{p}_{n+1}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}\phi\right)\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N\\&=-\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,n+1}(\boldsymbol{r}_{n+1})}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}\phi\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_n^N\\&=-Z_{n+1}\int_{\mathbb{R}^{d(N-n-1)\times 2}}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}\right)(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)d\boldsymbol{r}_{n+1}^N d\boldsymbol{p}_{n+1}^N\\&=-Z_{n+1}\frac{(N-n-1)!}{N!}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}\phi^{[n+1]}_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}\right)(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{r}^{n+1}),\end{aligned}$$

这里， $\nabla_{\boldsymbol{p}_{n+1}}^{\mathrm{T}}$ 是沿着 $\boldsymbol{p}_{n+1}$ 的“散度”算子。因此，注意到 $G^{(n)}[1,H]=0$ 后重新排列

$$-\frac{1}{\beta}G_{n+1,4}^{(n)}[1,H](\boldsymbol{r}_{n+1})+I+\sum_{j=1}^{n}I_j=-\sum_{j=n+2}^{N}I_j,$$

我们有

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{1}{\beta}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}+\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1})+\sum_{j=1}^{n}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\right)\right\}\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})\\&\quad=-\int_{\mathbb{R}^{2d}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_{n+2})\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}^{[n+2]}(\boldsymbol{r}^{n+2},\boldsymbol{p}^{n+2})d\boldsymbol{r}_{n+2}d\boldsymbol{p}_{n+2}.\end{aligned}$$

注意，该方程不涉及 $\boldsymbol{p}_{n+1}$。因此，该方程等价于

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{\boldsymbol{p}_{n+1}}{m_{n+1}}\cdot\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}-\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1})+\sum_{j=1}^{n}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\right)\cdot\frac{\beta\boldsymbol{p}_{n+1}}{m_{n+1}}\right\}\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})\\&\quad=\frac{\beta\boldsymbol{p}_{n+1}}{m_{n+1}}\cdot\int_{\mathbb{R}^{2d}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_{n+2})\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_{n+1}}}^{[n+2]}(\boldsymbol{r}^{n+2},\boldsymbol{p}^{n+2})d\boldsymbol{r}_{n+2}d\boldsymbol{p}_{n+2}.\end{aligned}$$

由于

$$\phi^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})=\left(e^{-\beta\frac{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_k}{2m_k}}\right)\phi_{\widehat{\boldsymbol{p}_k}}^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})$$

对于任意 $k=1$、2、…、$n+1$，上述方程等价于

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{\boldsymbol{p}_{n+1}}{m_{n+1}}\cdot\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}-\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1})+\sum_{j=1}^{n}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\right)\cdot\frac{\beta\boldsymbol{p}_{n+1}}{m_{n+1}}\right\}\phi^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})\\&\quad=\frac{\beta\boldsymbol{p}_{n+1}}{m_{n+1}}\cdot\int_{\mathbb{R}^{2d}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_{n+2})\phi^{[n+2]}(\boldsymbol{r}^{n+2},\boldsymbol{p}^{n+2})d\boldsymbol{r}_{n+2}d\boldsymbol{p}_{n+2}.\end{aligned}$$

此外，注意到对于任意 $k=1$、2、…、$n+1$，
$\nabla_{\boldsymbol{p}_k}\phi^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})=-\dfrac{\beta}{m_k}\boldsymbol{p}_k\phi^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})$，我们有

$$\begin{aligned}&\left\{\frac{\boldsymbol{p}_{n+1}}{m_{n+1}}\cdot\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}-\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_{n+1})+\sum_{j=1}^{n}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_j)\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}_{n+1}}\right\}\phi^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})\\&\quad=\int_{\mathbb{R}^{2d}}\nabla_{\boldsymbol{r}_{n+1}}u(\boldsymbol{r}_{n+1},\boldsymbol{r}_{n+2})\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}_{n+1}}\phi^{[n+2]}(\boldsymbol{r}^{n+2},\boldsymbol{p}^{n+2})d\boldsymbol{r}_{n+2}d\boldsymbol{p}_{n+2}.\end{aligned}$$

最后，直到上述方程为止的推导，对于任意 $k=1$、2、…、$n+1$ 情形下的线性坐标 $(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_{n+2},\dots,\boldsymbol{r}_N)$ 与 $(\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_{n+2},\dots,\boldsymbol{p}_N)$ 同样成立。

因此，对于任意 $k=1$、2、…、$n+1$，下列公式同样成立：

$$\left\{\frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k}\cdot\nabla_{\boldsymbol{r}_k}-\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k}u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_k)+\sum_{\substack{j=1\\j\neq k}}^{n+1}\nabla_{\boldsymbol{r}_k}u(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_j)\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}_k}\right\}\phi^{[n+1]}(\boldsymbol{r}^{n+1},\boldsymbol{p}^{n+1})$$
$$=\int_{\mathbb{R}^{2d}}\nabla_{\boldsymbol{r}_k}u(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_{n+2})\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}_k}\phi^{[n+2]}(\boldsymbol{r}^{n+2},\boldsymbol{p}^{n+2})d\boldsymbol{r}_{n+2}d\boldsymbol{p}_{n+2}.$$

对所有 k 将该方程求和（并将 $n+1$ 替换为 n），即得平衡BBGKY公式(2)。□

推论 3.7. 定义一个映射 $G^{(n)}[f,H]:\mathbb{R}^d\to C(\mathbb{R}^{dn\times 2})^d$ 为

$$G^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}).$$

于是，我们有 $G^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r})=0$，这是（平衡态）超力求和规则(8)的推广；也就是说，令 $n=0$即可恢复原来的超力求和规则(8) 。

证明。 公式 $G^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r})=0$ 可由定理 3.5直接得到。

假设 $n=0$ 和 $f=\hat{A}$。我们可以将 $G^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})$ 改写为

$$G^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}\left(G_{i,1}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})+G_{i,2}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})\right)$$
$$+\sum_{i=1}^{N}\left(G_{i,3}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})+G_{i,4}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})\right).$$

回顾第1.2节和例 2.5 中的两个符号 $\sigma(\boldsymbol{r})$ 和 $\mathbf{F}(\boldsymbol{r})$：

$$\sigma(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}\sigma_i(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}\left(\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla_{\boldsymbol{r}_i}+\boldsymbol{p}_i\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\right)$$
$$=\sum_{i=1}^{N}\left(\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}-\left(\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})}\right)\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\right)$$

and

$$\hat{\mathbf{F}}(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}\hat{\mathbf{F}}_i(\boldsymbol{r})$$
$$=-\sum_{i=1}^{N}\left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)+\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla_{\boldsymbol{r}_i}u_N(\boldsymbol{r}^N)+\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\nabla u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r})\right)$$
$$=\sum_{i=1}^{N}\left(\underbrace{\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})}}_{\hat{\mathbf{F}}_{i,1}(\boldsymbol{r})}-\underbrace{\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}u_N(\boldsymbol{r}^N)+\nabla u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r})\right)}_{\hat{\mathbf{F}}_{i,2}(\boldsymbol{r})}\right).$$

对于每个 i，左边和右边分别表示如下:

$$
\begin{aligned}
&G_{i,1}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})+G_{i,2}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})\\
&=\int_{\mathbb{R}_{0,i}^{d,N}(\boldsymbol{r})}\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\hat{A}\right)\,e^{-\beta H}\right)(\boldsymbol{r}_1,\dots,\overset{i}{\breve{\boldsymbol{r}}},\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_1\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}^N\\
&\quad+\int_{\mathbb{R}_{0,i}^{d,N}(\boldsymbol{r})}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\hat{A}\right)e^{-\beta H}\right)\right)(\boldsymbol{r}_1,\dots,\overset{i}{\breve{\boldsymbol{r}}},\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}^N)\cdot\boldsymbol{p}_i\,d\boldsymbol{r}_1\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}^N\\
&=\left\langle\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})},\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\hat{A}\right)e^{-\beta H}\right\rangle+\left\langle\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})},\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(\left(\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\hat{A}\right)e^{-\beta H}\right)\boldsymbol{p}_i\right\rangle\\
&=\left\langle\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\hat{A}\right),e^{-\beta H}\right\rangle-\left\langle\left(\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})}\right)\nabla_{\boldsymbol{p}_i}\hat{A},e^{-\beta H}\right\rangle\\
&=\left\langle\sigma_i(\boldsymbol{r})\hat{A}\right\rangle_0.
\end{aligned}
$$

同理,

$$
\begin{aligned}
&G_{i,3}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})+G_{i,4}^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})\\
&=\int_{\mathbb{R}_{0,i}^{d,N}(\boldsymbol{r})}\left(\hat{A}\nabla_{\boldsymbol{r}_i}e^{-\beta H}\right)(\boldsymbol{r}_1,\dots,\overset{i}{\breve{\boldsymbol{r}}},\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_1\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}^N\\
&\quad-\int_{\mathbb{R}_{0,i}^{d,N}(\boldsymbol{r})}\beta\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(\hat{A}e^{-\beta H}\right)\right)(\boldsymbol{r}_1,\dots,\overset{i}{\breve{\boldsymbol{r}}},\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_1\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}^N\\
&=-\beta\int_{\mathbb{R}_{0,i}^{d,N}(\boldsymbol{r})}\left(\hat{A}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}u_N+\nabla u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r})\right)e^{-\beta H}\right)(\boldsymbol{r}_1,\dots,\overset{i}{\breve{\boldsymbol{r}}},\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_1\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}^N\\
&\quad-\beta\int_{\mathbb{R}_{0,i}^{d,N}(\boldsymbol{r})}\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(\hat{A}e^{-\beta H}\right)\right)(\boldsymbol{r}_1,\dots,\overset{i}{\breve{\boldsymbol{r}}},\dots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}^N)\,d\boldsymbol{r}_1\cdots\widehat{d\boldsymbol{r}}\cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}^N\\
&=-\beta\left\langle\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})},\hat{A}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}u_N+\left(\nabla u^{\mathrm{ext}}\right)(\boldsymbol{r}_i)\right)e^{-\beta H}\right\rangle-\beta\left\langle\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})},\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(\hat{A}e^{-\beta H}\right)\right)\right\rangle\\
&=-\beta\left\langle\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})},\hat{A}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}u_N+\left(\nabla u^{\mathrm{ext}}\right)(\boldsymbol{r}_i)\right)e^{-\beta H}\right\rangle+\beta\left\langle\frac{\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\delta_{(\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r})}\right)\hat{A},e^{-\beta H}\right\rangle
\end{aligned}
$$

$$= -\left\langle \beta\hat{\mathbf{F}}_{i,2}(\boldsymbol{r})\hat{A}\right\rangle_0 + \left\langle \beta\hat{\mathbf{F}}_{i,1}(\boldsymbol{r})\hat{A}\right\rangle_0 .$$

因此，我们得到

$$\begin{aligned} G^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r}) &= \sum_{i=1}^{N}\left(G^{(0)}_{i,1}[\hat{A},H](\boldsymbol{r}) + G^{(0)}_{i,2}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})\right) \\ &\qquad + \sum_{i=1}^{N}\left(G^{(0)}_{i,3}[\hat{A},H](\boldsymbol{r}) + G^{(0)}_{i,4}[\hat{A},H](\boldsymbol{r})\right) \\ &= \sum_{i=1}^{N}\left(\left\langle \sigma_i(\boldsymbol{r})\hat{A}\right\rangle_0 + \left\langle \beta\hat{\mathbf{F}}_{i,1}(\boldsymbol{r})\hat{A}\right\rangle_0 - \left\langle \beta\hat{\mathbf{F}}_{i,2}(\boldsymbol{r})\hat{A}\right\rangle_0\right). \end{aligned}$$

因此， $G^{(0)}[\hat{A},H](\boldsymbol{r}) = 0$ 推出公式（8）。 □

3.2. 周期边界系统的分布式超力求和规则。作为第2节所发展的理论的另一项应用，我们给出具有周期边界条件的系统的超力求和规则表述。除了一些细微差异外，周期边界条件下的理论将以与欧几里得空间中的推导平行的方式展开。所得结果可转化为环面等价形式的超力求和规则。

设 $\{\boldsymbol{v}_1,\dots,\boldsymbol{v}_d\}$ 为 $\mathbb{R}^d$ 的基，并令

$$\Gamma = \left\{\sum_{k=1}^{d} a_k\boldsymbol{v}_k\,;\, a_k\in\mathbb{Z}\right\} \quad\text{and}\quad \Lambda = \left\{\sum_{k=1}^{d} a_k\boldsymbol{v}_k\,;\, 0\le a_k\le 1\right\}.$$

我们称 $\mathbb{R}^d$ 上的函数 f 是 Γ-周期的，如果对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d$ 和 $\gamma\in\Gamma$， $f(\boldsymbol{x}+\gamma) = f(\boldsymbol{x})$ 成立。

令 $\mathfrak{X}^{\Gamma}(\mathbb{R}^d)$ 为 $\mathbb{R}^d$ 上的 Γ-周期向量场集合。从现在起，若向量场 $\epsilon = (\epsilon^{(1)},\dots,\epsilon^{(d)})\colon \mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^d$ 的每个分量 $\epsilon^{(i)}\colon \mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ 都是 Γ-周期的，则称 $\epsilon = (\epsilon^{(1)},\dots,\epsilon^{(d)})\colon \mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^d$ 为 Γ-周期的。任意 $\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)\cap\mathfrak{X}^{\Gamma}(\mathbb{R}^d)$ 都会诱导微分同胚 $\epsilon_{n,\,\sharp}\colon \mathbb{R}^{dN\times 2}\to\mathbb{R}^{dN\times 2}$，如第2节所述。于是，$\epsilon_{n,\,\sharp}$ 在构型空间中是 Γ-等变的，也就是说，

$$\epsilon_{n,\sharp}(\boldsymbol{r}^N+\gamma^N,\boldsymbol{p}^N) = \epsilon_{n,\sharp}(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N) + (\gamma^N,0)$$

对任意 $(\boldsymbol{r}^N,\boldsymbol{p}^N)\in\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 和 $\gamma^N = (\gamma_1,\dots,\gamma_N)\in\Gamma^N$ 均成立。

在下面的定理3.8中，我们将给出定理2.2的一个 Γ-周期版本。令 $n\in\{0,1,\dots,N-1\}$。若函数 f 定义在 $\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$ 上，且对任意 $(\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}_n^N)\in\mathbb{R}^{d(N-n)\times 2}$ 和 $\gamma^{N-n} = (\gamma_1,\dots,\gamma_{N-n})\in\Gamma^{N-n}$ 都满足方程 $f(\boldsymbol{r}_n^N+\gamma^{N-n},\boldsymbol{p}_n^N) = f(\boldsymbol{r}_n^N,\boldsymbol{p}_n^N)$，则称其在构型空间中是 Γ-周期的。我们还用 $\mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 表示 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的快速衰减函数集合，其中的函数满足 Γ-构型空间周期性。

定理3.8。设 $n\in\{0,1,\dots,N-1\}$。对于任意 $\epsilon\in\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},\,0}(\mathbb{R}^d)\cap\mathfrak{X}^{\Gamma}(\mathbb{R}^d)$，由拉回诱导的映射 $\epsilon^*_{n,\,\sharp}$，其定义在 $\mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 之间

$$\epsilon^*_{n,\sharp}\colon \mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})\to\mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$$

定义良好。

证明。我们只需证明，函数 $\epsilon^*_{n,\sharp}\phi$ 在构型空间中是 Γ-周期的。事实上，对于任意的 $(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) \in \mathbb{R}^{dN\times 2}$和 $\gamma^N \in \Gamma^N$，我们有

$$\begin{aligned}(\epsilon^*_{n,\sharp}\phi)\left(\boldsymbol{r}^N+\gamma^N, \boldsymbol{p}^N\right) &= \phi\left(\epsilon_{n,\sharp}(\boldsymbol{r}^N+\gamma^N, \boldsymbol{p}^N)\right) = \phi\left(\epsilon_{n,\sharp}(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)+(\gamma^N, 0)\right)\\ &= \phi\left(\epsilon_{n,\sharp}(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)\right) = (\epsilon^*_{n,\sharp}\phi)\left(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N\right).\end{aligned}$$

□

定义 3.9 (Γ-周期约化热平均)。设 $n \in \{0, 1, \ldots, N-1\}$。对于满足条件 Γ（在构型空间中为 Γ- 周期）和 $\phi \in \mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 的缓增连续函数 $f \in C(\mathbb{R}^{dN\times 2})$，我们定义一个在 $\mathbb{R}^{dn\times 2}$ 上的连续函数如下：

$$K_n[f,\phi](\boldsymbol{r}^n, \boldsymbol{p}^n) = \int_{\Lambda^{N-n}\times\mathbb{R}^{d(N-n)}} f(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)\phi(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}^N_n d\boldsymbol{p}^N_n.$$

我们称 $K_n[f,\phi]$ 为 f 和 ϕ 的 Γ-周期广义约化热平均。

与欧几里得空间的情形类似，对于构型空间中任意一对由 Γ-周期缓增连续函数 $f \in C(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 和 $\phi \in \mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 定义在 $\mathfrak{X}^\Gamma(\mathbb{R}^d)$ 上的泛函，当 n 时均为零；定义拉回

$$\tilde{\epsilon}_{n,\sharp}(f) = f\circ\epsilon_{n,\sharp}\cdot\left|\det\epsilon'_{n,\sharp}\right|$$

f的；关于该定义的背景，见例 A.9。然后，一个映射

$$\mathfrak{X}_{\mathrm{Id},0}(\mathbb{R}^d)\cap\mathfrak{X}^\Gamma(\mathbb{R}^d)\to C\left(\mathbb{R}^{dn\times 2}\right),\quad \epsilon\mapsto K_n[\tilde{\epsilon}_{n,\sharp}(f), \epsilon^*_{n,\sharp}\phi]$$

对每个 $n \in \{0, 1, \ldots, N-1\}$ 均为常数，这是由于变量替换公式。因此，对任意 $\epsilon \in \mathfrak{X}^\Gamma(\mathbb{R}^d)$，我们得到如下在 $t = 0$ 附近为常数的映射：

$$t\mapsto K_n\left[(\tilde{t\epsilon})_{n,\sharp}(f), (t\epsilon)^*_{n,\sharp}\phi\right].$$

定义 3.10. 设 f 是构型空间中 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的 Γ-周期温和连续函数，且 $\phi \in \mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$。我们称映射

$$F^{(n)}[f,\phi] : \mathfrak{X}^\Gamma(\mathbb{R}^d)\to C\left(\mathbb{R}^{dn\times 2}\right),\quad \epsilon\mapsto \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} K_n\left[(\tilde{t\epsilon})_{n,\sharp}(f), (t\epsilon)^*_{n,\sharp}\phi\right]$$

为 f 与 ϕ的 Γ-周期平衡分布式超力和。

引理 3.11. 设 f 是构型空间中 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 上的 Γ-周期温和连续函数，且 $\phi \in \mathcal{S}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$。$f$与 ϕ 的 Γ-周期平衡分布式超力和 $F^{(n)}[f,\phi]$ 在 $\mathfrak{X}^\Gamma(\mathbb{R}^d)$上为零。我们将 $F^{(n)}[f,\phi]$ 的这一消失性质称为 Γ-周期平衡分布超力求和法则。

最后，我们将证明第 3.1 节中的结果可以推广到Γ-周期情形。我们引入相应的哈密顿量及其具体实例。

定义 3.12。用 $\mathcal{H}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 表示满足构型空间中 Γ- 周期性的哈密顿量集合。

在下文中，我们假设 $H \in \mathcal{H}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN\times 2})$ 满足以下形式

$$H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) = \sum_{i=1}^N \frac{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_i}{2m_i} + u_N(\boldsymbol{r}^N) + \sum_{i=1}^N u^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}_i).$$

例3.13。 一个具有周期条件的代表性物理系统是由环面上的 N 粒子组成的（单原子）理想气体系统，其中粒子之间互不作用，且没有内部结构。此时一个典型的哈密顿量为

$$H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_i}{2m_i}.$$

哈密顿量产生一个有限的归一化常数，也称为玻尔兹曼因子 $e^{-H(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)}$ 的配分函数。

u_N 的一类可见于 *Weeks-Chandler-Andersen*（*WCA*）系统 [37],: 该系统在标准 *Lennard-Jones* 对势的最小值处截断势，随后通过添加一个常数对势进行平移，使其最小值提升至零:

$$u_N(\boldsymbol{r}^N) = \sum_{1 \le i < j \le N} u(r_{i,j}), \quad u(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[(r/\sigma)^{-12} - (r/\sigma)^{-6} \right] + \epsilon, & (r < 2^{1/6}\sigma) \\ 0, & (r \ge 2^{1/6}\sigma). \end{cases}$$

这里，$r_{i,\ j} = ||\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j||$, $\sigma (> 0)$ 表示粒子半径，而 ϵ 是 *LJ* 势阱的能量深度。相应的哈密顿量（含动能项）在周期边界系统中给出有限的配分函数 Z，而在欧几里得空间中则发散。类似地，以下用于研究具有有限作用范围的排斥势 *jam* [29] 的势也是另一个这样的例子:

$$u(r_{i,j}) = \begin{cases} \epsilon \left(1 - r_{i,j}/\sigma_{i,j}\right)^{\alpha} / \alpha, & (r_{i,j} < \sigma_{i,j}) \\ 0, & (r_{i,j} \ge \sigma_{i,j}). \end{cases}$$

这里，σ_{ij} 是粒子 i 和 j 的半径之和，而 ϵ 是相互作用的特征能量尺度。

在哈密顿函数上施加 Γ-周期性时，例 *3.2* 中引入的所有系统也都是合理的。

令 $\beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}} T}$，其中 k_{B} 表示玻尔兹曼常数，T 表示绝对温度。与引理 3.4 类似，我们假设选择 u_N 和 u^{ext}，使得 $H \in \mathcal{H}_{\mathrm{per}}(\mathbb{R}^{dN \times 2})$，且 f 是构型空间中 $\mathbb{R}^{dN \times 2}$ 上的一个 Γ-周期缓增 C^1 函数。设以下 $C(\mathbb{R}^{dn \times 2})^d$值函数 $G_{i}^{(n),\ k}[f, H]$ 定义在 $\mathbb{R}^d$上，对所有 $i \in \{n+1, \dots, N\}$, $k = 1, 2, 3, 4$ 均成立；这里记 $\mathbb{R}^{d,\ n\ i}{}^{N}{}_{,,\ \mathrm{per}}(\boldsymbol{a}) = \Lambda^{d(i-n-1)} \times \{\boldsymbol{a}\} \times \Lambda^{d(N-i)} \times \mathbb{R}^{d(N-n)}$ 为 $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^d$:

$$G_{i,1}^{(n)}[f, H](\boldsymbol{r}_i) = \int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i,\mathrm{per}}(\boldsymbol{r}_i)} \left((\nabla_{\boldsymbol{r}_i} f)\, e^{-\beta H} \right) (\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_{n+1} \cdots \overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}} \cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N,$$

$$G_{i,2}^{(n)}[f, H](\boldsymbol{r}_i) = \int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i,\mathrm{per}}(\boldsymbol{r}_i)} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i} \left((\nabla_{\boldsymbol{p}_i} f) e^{-\beta H} \right) \right) (\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) \boldsymbol{p}_i\, d\boldsymbol{r}_{n+1} \cdots \overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}} \cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N,$$

$$G_{i,3}^{(n)}[f, H](\boldsymbol{r}_i) = \int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i,\mathrm{per}}(\boldsymbol{r}_i)} \left(f\, \nabla_{\boldsymbol{r}_i} e^{-\beta H} \right) (\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_{n+1} \cdots \overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}} \cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N,$$

$$G_{i,4}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i) = -\int_{\mathbb{R}^{d,N}_{n,i,\mathrm{per}}(\boldsymbol{r}_i)} \beta \frac{\boldsymbol{p}_i \boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}}{m_i} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_i}\left(f e^{-\beta H}\right)\right)(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N)\, d\boldsymbol{r}_{n+1} \cdots \overset{i}{\widehat{d\boldsymbol{r}_i}} \cdots d\boldsymbol{r}_N d\boldsymbol{p}_n^N.$$

于是，我们得到超力求和规则及其推论的以下 Γ-周期版本。其证明与定理 3.5、推论 3.6 和推论 3.7 的证明完全相同。

定理 3.14 （Γ周期的第 n 级约化超力规则）。 设

$$G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i) = \sum_{k=1}^{4} G_{i,k}^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i).$$

那么，对于 $i = n+1$，$\cdots$，N，有 $G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}_i) = 0$。

推论 3.15 （Γ周期的第 n 级 BBGKY层级）。 设 $u_N(\boldsymbol{r}^N) = \sum u(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j)$，其中 u 为对称的。那么，对于任意 $n = 1, 2, \ldots, N-1$ 和 $1 \le i < j \le N k = 1, 2, \ldots, n$，有

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}_k}{m_k} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}_k} - \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u^{ext}(\boldsymbol{r}_k) + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_j)\right)\right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}_k}\right) \phi^{[n]}$$

$$= \int_{\Lambda \times \mathbb{R}^d} \left(\nabla_{\boldsymbol{r}_k} u(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{n+1})\right) \cdot \left(\nabla_{\boldsymbol{p}_k} \phi^{[n+1]}\right) d\boldsymbol{r}_{n+1} d\boldsymbol{p}_{n+1}.$$

这里，我们记

$$\phi^{[n]}(\boldsymbol{r}^n, \boldsymbol{p}^n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int_{\Lambda^{N-n} \times \mathbb{R}^{d(N-n)}} \phi(\boldsymbol{r}^N, \boldsymbol{p}^N) d\boldsymbol{r}_n^N d\boldsymbol{p}_n^N.$$

推论 3.16 （Γ-周期超力求和规则（层级为 n））。 定义映射 $G^{(n)}[f,H]: X \to C(\mathbb{R}^{dn\times 2})^d$ 如下:

$$G^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N} G_i^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}).$$

于是，我们有 $G^{(n)}[f,H](\boldsymbol{r}) = 0$。

Summary and Outlook

本文给出了平衡态超力求和规则 [25, 27] 的分布形式。我们将广义热平均引入为缓增分布与快速衰减函数的配对。我们定义了一个在向量场子空间上为常数的泛函，由此得到该泛函沿向量场的导数为零这一性质。此外，我们证明，导数的莱布尼茨法则是原超力求和公式的分布等价形式。事实上，我们证明了莱布尼茨法则可导出超力求和规则和平衡 BBGKY 层级。作为另一项应用，我们还将这一论证应用于周期缓增函数与快速衰减函数这一类函数，并立即推导出环面上的超力求和规则。

未来的工作中，自然可以考虑借助流形上的典范余切丛，将我们的结果推广到一般流形。

此外，从函子性泊松结构的视角探究我们结果的范畴解释 [23, 39]也很有意义。另一个可能的推广方向是，为平衡流体混合物 [24],非平衡 BBGKY 层级 [26], 以及广义非平衡 BBGKY 层级 [3]提供分布解释。将理论结果转化为实际应用也颇具吸引力。一个方向是探究本研究结果，尤其是超力求和规则，在机器学习原子势 [1, 2, 21, 22]中的应用。另一个有趣的问题是，如何提出一种参数化微分同胚的方法，以便通过基于梯度的优化加速分子模拟。

附录 A. 缓增分布的定义和基本性质

我们回顾正文中使用的缓增分布的定义和一些基本性质。读者可参阅例如 [18] 了解更多细节。

定义 A.1. 我们用 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 表示所有满足下述条件的 C^∞ 函数 ϕ

$$\sup_{x\in\mathbb{R}^d}\left|(1+\|x\|)^{k/2}\,D^\alpha\phi(x)\right|<\infty$$

对所有 $k\in\mathbb{N}_0$ 和多重指标 $\alpha\in\mathbb{N}_0^d$均成立。我们称 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 为施瓦茨空间，也称为施瓦茨函数集合。我们常称函数 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 为快速衰减函数。

我们可以根据上述定义，为 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 赋予半范数拓扑。具体而言，以下半范数族使 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 成为弗雷歇空间:

$$\left\{p_{\alpha,k}(\phi)=\sup_{x\in\mathbb{R}^d}\left|(1+\|x\|)^{k/2}\,D^\alpha\phi(x)\right|\;;\,\forall k\in\mathbb{N}_0,\,\forall\alpha\in\mathbb{N}_0^d\right\}.$$

这些半范数给出了施瓦茨空间中序列收敛的定义：当 $p_{\alpha,k}(\phi_n-\phi)\to 0$对任意 $k\in\mathbb{N}_0$ 和 $\alpha\in\mathbb{N}_0^d$均成立时，序列 $\{\phi_n\}\subset\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 在 $\mathcal{S}$ 中收敛到 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$。由此还可定义缓增分布空间中的收敛。

定义 A.2. 连续线性泛函 $u:\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)\to\mathbb{C}$ 称为缓增分布。全体缓增分布构成的集合记为 $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$。若对每个 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$均有$\lim_{j\to\infty}u_j(\phi)=u(\phi)$，则称序列 $\{u_j\}\subset\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ 在 $\mathcal{S}'$ 中收敛到 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$。

每一点 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 处的收敛会导出在 $\mathcal{S}'$中的收敛。

定理 A.3. 设 $\{u_j\}\subset\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ 是 $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$中的一个序列。若 $\mathbb{C}$ 中的序列 $\{u_j(\phi)\}$对任意 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$都收敛，则存在一个缓增分布 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$，使得 u_j 在 $\mathcal{S}'$中收敛到 u。

对于分布，采用配对记号也是一种常见且实用的做法。具体而言，通常写作

$$\langle u,\phi\rangle=u(\phi)$$

对于 $u\in\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ 和 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$。这个定义使我们能够通过赋予积分，将 $\mathbb{R}^d$ 上的连续函数与缓增分布对应起来。

例 A.4. 设 f 是 $\mathbb{R}^d$上的连续函数。假设 f 是缓增的，也就是说，存在常数 $C>0$ 和 $\ell>0$，使得

$$|f(x)| \le C(1+\|x\|)^\ell$$

对所有 $x \in \mathbb{R}^d$。则如下泛函

$$u_f \colon \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \to \mathbb{C}, \qquad \phi \mapsto \langle u_f, \phi\rangle = \int_{\mathbb{R}^d} f(x)\phi(x)\,dx$$

是良定义的，并且是一个缓增分布。基于$u_f = u_g$ 表明 $f = g$这一事实，该等同是合理的。

第二个重要例子是**"狄拉克泛函"**。

例 A.5. 对于任意 $a \in \mathbb{R}^d$，在 a 处的狄拉克泛函 δ_a 定义如下：

$$\langle \delta_a, \phi\rangle = \phi(a), \quad \textit{for } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d).$$

这是物理学文献中用 $\delta(x-a)$ 表示的**"狄拉克函数"**的概念对应物。另请参阅 [6,节 5]，了解狄拉克泛函的详细信息。

我们引入分布的微分与乘法的概念。

定义 A.6. 对于 $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$，定义

$$\langle \partial_k u, \phi\rangle = -\langle u, \partial_k \phi\rangle, \quad \textit{for } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d).$$

对于缓增的 C^∞ 函数 f，定义

$$\langle fu, \phi\rangle = \langle u, f\phi\rangle, \quad \textit{for } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d).$$

例 A.7. 上述定义源于积分型分布的某些性质。事实上，若在 $\mathbb{R}^d$ 上有一个缓增的 C^1 函数 u，则通过分部积分可得

$$\int_{\mathbb{R}^d} (\partial_k u)(x)\phi(x)\,dx = -\int_{\mathbb{R}^d} u(x)(\partial_k\phi)(x)\,dx, \quad \textit{for } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d).$$

如果 f 是一个缓增的 C^∞ 函数，那么我们还可以得到

$$\int_{\mathbb{R}^d} (fu)(x)\phi(x)\,dx = \int_{\mathbb{R}^d} u(x)(f\phi)(x)\,dx, \quad \textit{for } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d),$$

其中 $f\phi$ 仍属于 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$。

对于微分同胚 $f \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ 和快速衰减函数 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$，拉回函数 $f^*\phi = \phi \circ f$ 不一定是快速衰减的。因此，利用一般的微分同胚进行拉回，并不能定义施瓦茨空间之间的良定义映射。不过，将微分同胚限制在某些特定类别内时，拉回是良定义的。这类微分同胚包括具有紧支撑的微分同胚。

定义 A.8. 设 $g \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ 是 $\mathbb{R}^d$ 之间的微分同胚，且存在一个紧子集 $K \subset \mathbb{R}^d$ 和一个 d 阶可逆矩阵 T，使得$g|_{\mathbb{R}^d \setminus K} = T$。注意，根据多元 ***Faà di Bruno*** 公式（见附录 ***B***），当 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$时，拉回函数 $g^*\phi = \phi \circ g^{-1}$ 是快速衰减的，因此我们有如下定义的连续映射 $g^* : \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \to \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$：

$$\langle g^* u, \phi\rangle = \langle u, \phi \circ g^{-1}\rangle \quad \textit{for } u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \textit{ and } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d).$$

我们称 g^*u 为 g对 u 的复合或拉回。

当该分布是带有一个函数的积分型时，该分布的拉回可通过变量替换来解释：

例 A.9. 设 f 是定义在 $\mathbb{R}^d$ 上的温和连续函数，且 g 是 $\mathbb{R}^d$ 之间的微分同胚，使得存在一个紧子集 $K \subset \mathbb{R}^d$ 和一个 d 阶可逆矩阵 T，满足 $g|_{\mathbb{R}^d \setminus K} = T$。那么复合 $g^* u_f$ 由 $g^* u_f = u_{\tilde{g}(f)}$给出，其中 $\tilde{g}(f) = f \circ g \cdot |$ 行列式 $g'|$。

我们可以将分布的取值推广到巴拿赫空间。

注 A.10. 设 B 是一个巴拿赫空间。通过推广定义 *A.2*，连续线性映射 $u \colon \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \to B$ 称为取值于 B的缓增分布。所有缓增分布的集合记为 $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d; B)$。通过将复数的绝对值重新解释为 B的范数，我们可以仿照定义 *A.8* 之前的论述，定义取值于 B的缓增分布的收敛、微分、乘法和复合。

这里我们还回顾一下，缓增分布与施瓦茨函数之间的导数乘积法则（莱布尼茨型公式）成立。我们采用弗雷歇空间的一致有界原理 [8]。

定理 A.11. 设 $X \subset \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d; B)$ 是一个有界集，也就是说，对于任意 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$，集合 $\{\langle u, \phi \rangle \in B \,;\, u \in X\}$ 在 B中有界。则存在常数 $C > 0$和一族有限的半范数 $\{p_{\alpha_i, k_j}\}$，使得对于任意 $u \in B$ 和 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$，下列公式成立：

$$\|\langle u, \phi \rangle\|_B \leq C \max_{i,j} p_{\alpha_i, k_j}(\phi).$$

定义 A.12. 设 $\phi_t \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ $(t \in \mathbb{R})$ 是一族快速下降函数。若极限$\lim_{h \to 0} \dfrac{\phi_{a+h} - \phi_a}{h}$ 在 $\mathcal{S}$中收敛，则称 ϕ_t 在 $t = a$ 处关于 $\mathcal{S}$ 可微。我们将该极限记作$\mathrm{d}\phi_t \, \mathrm{d}t \,(a)$。 ——

定义 A.13. 设 $u_t \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d; B)$ $(t \in \mathbb{R})$ 是一个取值于 B 的缓增分布族。若极限 $\lim_{h \to 0} \dfrac{u_{a+h} - u_a}{h}$ 在 $\mathcal{S}'$ 中收敛，则称 u_t 在 $\mathcal{S}'$ 中于 $t = a$ 处可微。我们用 $\dfrac{\mathrm{d}u_t}{\mathrm{d}t}(a)$ 表示该极限。 ——

定理 A.14. 设 $\{\phi_t\}_{t \in \mathbb{R}} \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 是 $\mathcal{S}$ 中的可微族，且 $\{u_t\}_{t \in \mathbb{R}} \subset \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d; B)$ 是 $\mathcal{S}'$ 中的可微族。那么有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle u_t, \phi_t \rangle = \left\langle \frac{\mathrm{d}u_t}{\mathrm{d}t}, \phi_t \right\rangle + \left\langle u_t, \frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t} \right\rangle.$$

证明。 根据导数的定义，有

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle u_t, \phi_t \rangle &= \lim_{h \to 0} \frac{\langle u_{t+h}, \phi_{t+h} \rangle - \langle u_t, \phi_t \rangle}{h} \\ &= \lim_{h \to 0} \left\langle \frac{u_{t+h} - u_t}{h}, \phi_t \right\rangle + \lim_{h \to 0} \left\langle u_{t+h}, \frac{\phi_{t+h} - \phi_t}{h} \right\rangle. \end{aligned}$$

根据 $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ 中收敛序列的定义，第一项收敛到 $\left\langle \mathrm{d}u_t \, \mathrm{d}t, \phi_t \right\rangle$。第二项的收敛性可通过使用一致

有界原理证明；参见定理 A.11。在接下来的证明中，我们将证明公式 $\lim_{h\to 0}\left\langle u_{t+h}, \dfrac{\phi_{t+h}-\phi_t}{h}\right\rangle = \left\langle u_t, \mathrm{d}\phi_t\,\mathrm{d}t\right\rangle$。我们首先改写

$$\begin{aligned}&\left\langle u_{t+h}, \frac{\phi_{t+h}-\phi_t}{h}\right\rangle - \left\langle u_t, \frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\right\rangle \\ &= \left\langle u_{t+h}, \frac{\phi_{t+h}-\phi_h}{h} - \frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\right\rangle + \left\langle u_{t+h}-u_t, \frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\right\rangle. \end{aligned} \tag{14}$$

由于族 $\{u_{t+h}\}_h$ 是 $\mathcal{S}'$ 中的一个收敛序列，因此当 ϵ 充分小时，子集 $\{\langle u_{t+h},\phi\rangle\}_{h\in[-\epsilon,\epsilon]}\subset B$ 对任意 $\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 都有界。由定理 A.11，存在常数 $C>0$ 和有限个半范数 $\{p_{\alpha_i,k_j}\}$，使得

$$\left\|\left\langle u_{t+h}, \frac{\phi_{t+h}-\phi_t}{h} - \frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\right\rangle\right\|_B \le C\cdot\max_{i,j}\boldsymbol{p}_{\alpha_i,k_j}\left(\frac{\phi_{t+h}-\phi_t}{h} - \frac{\mathrm{d}\phi_t}{\mathrm{d}t}\right)\xrightarrow{h\to 0} 0.$$

根据 $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ 中收敛序列的定义，式 (14) 的第二项也收敛到 0，由此证明得证。□

Appendix B. Multivariate Faà di Bruno's formula

参见 [7]。令 $\mathbb{N}_0$ 为非负整数集。对于 $\boldsymbol{\nu}=(\nu_1,\cdots,\nu_\ell)\in\mathbb{N}_0^\ell$ 和 $\mathbf{z}\in\mathbb{R}^\ell$，其中 ℓ 为正整数，我们定义

$$|\boldsymbol{\nu}| = \sum_{i=1}^{\ell}\nu_i,\quad \mathbf{z}^{\boldsymbol{\nu}} = \prod_{i=1}^{\ell} z_i^{\nu_i}.$$

对于由以下函数复合定义的光滑函数 $h:\mathbb{R}^\ell\to\mathbb{R}$

$$\boldsymbol{g} = (g^{(1)}(x_1,\dots,x_\ell),\dots,g^{(m)}(x_1,\dots,x_\ell)):\mathbb{R}^\ell\to\mathbb{R}^m$$

以及 $f:\mathbb{R}^m\to\mathbb{R}$，我们进一步定义以下记号：

$$g^{(i)}_{\boldsymbol{\mu}} = D^{\boldsymbol{\nu}}_{\boldsymbol{x}} g^{(i)}(\boldsymbol{x}_0),\quad \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{\mu}} = (g^{(1)}_{\boldsymbol{\mu}},\dots,g^{(\ell)}_{\boldsymbol{\mu}}),\quad h_{\boldsymbol{\nu}} = D^{\boldsymbol{\nu}}_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}_0),\quad f_{\boldsymbol{\lambda}} = D^{\boldsymbol{\lambda}}_{\boldsymbol{y}} f(\boldsymbol{y}_0),$$

其中，$\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{N}_0^m$、$\boldsymbol{\mu}\in\mathbb{N}_0^\ell$ 和 $D^{\boldsymbol{\nu}}_{\boldsymbol{x}}$ 定义为

$$D^{\boldsymbol{\nu}}_{\boldsymbol{x}} = \frac{\partial^{|\boldsymbol{\nu}|}}{\partial x_1^{\nu_1}\cdots\partial x_\ell^{\nu_\ell}},\quad \text{for } |\nu|>0.$$

我们在 $\mathbb{N}_0^\ell$ 上引入一个线性序。对于 $\boldsymbol{\nu}$、$\boldsymbol{\mu}\in\mathbb{N}_0^\ell$，若满足以下条件之一，则记作 $\boldsymbol{\mu}\prec\boldsymbol{\nu}$：

(i) $|\boldsymbol{\nu}|<|\boldsymbol{\mu}|$；(ii) $|\boldsymbol{\nu}|=|\boldsymbol{\mu}|$ 和 $\mu_1<\nu_1$；或 (iii) 对某个 $1\le k<\ell$，$|\boldsymbol{\nu}|=|\boldsymbol{\mu}|$、$\mu_1=\nu_1$、…、$\mu_k=\nu_k$ 和 $\mu_{k+1}<\nu_{k+1}$。

我们还定义如下有序多重指标集合：

$$p_s(\boldsymbol{\nu},\boldsymbol{\lambda}) = \{(\boldsymbol{k}_1,\dots,\boldsymbol{k}_s,\ell_1,\dots,\ell_s):|\boldsymbol{k}_i|>0,\ 0\prec\ell_1\prec\cdots\prec\ell_s,\ \sum_{i=1}^{s}\boldsymbol{k}_i=\boldsymbol{\lambda},\ \sum_{i=1}^{s}|\boldsymbol{k}_i|\ell_i=\boldsymbol{\nu}\}.$$

于是，多元 Faà di Bruno 公式为

$$h_{\boldsymbol{\nu}} = \sum_{1\le|\boldsymbol{\lambda}|\le n} f_{\boldsymbol{\lambda}}\sum_{s=1}^{n}\sum_{p_s(\boldsymbol{\nu},\boldsymbol{\lambda})}(\boldsymbol{\nu}!)\prod_{j=1}^{s}\frac{[\boldsymbol{g}_{\ell_j}]^{\boldsymbol{k}_j}}{(\boldsymbol{k}_j!)[\ell_j!]^{|\boldsymbol{k}_j|}}, \tag{15}$$

其中 $n=|\boldsymbol{\nu}|$，并令 $0^0=1$。

附录 C。（部分）扩展实数

我们给出扩展实数的定义和基本性质。需要更详细阐述的读者可参阅，例如 [33]。

扩展实数轴 $\bar{\mathbb{R}} = \{-\infty\} \cup \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ 具有以下性质：

1. $x \in \mathbb{R} \Rightarrow -\infty < x < +\infty$；2. $x \in \mathbb{R} \Rightarrow x + \infty = +\infty$，
$x - (+\infty) = -\infty$，$x/(\pm\infty) = 0$；3. $x > 0 \Rightarrow x \cdot (+\infty) = +\infty$，
$x \cdot (-\infty) = -\infty$；4. $x < 0 \Rightarrow x \cdot (+\infty) = -\infty$，$x \cdot (-\infty) = +\infty$；
5. $(+\infty) + (+\infty) = +\infty$，$(-\infty) - (+\infty) = -\infty$；以及 6.
$(+\infty) \cdot (\pm\infty) = \pm\infty$，$(-\infty) \cdot (\pm\infty) = \mp\infty$。

我们将定义在 $\mathbb{R}$ 上的不等式扩展到 $\bar{\mathbb{R}}$，方法是为任意实数 $c \in \mathbb{R}$ 定义 $c < +\infty$ 和 $-\infty < c$。我们进一步定义

$$
\begin{aligned}
[c, +\infty] &= [c, +\infty) \cup \{+\infty\} = \{p \in \bar{\mathbb{R}}\,;\, p \geq c\},\\
(c, +\infty] &= (c, +\infty) \cup \{+\infty\} = \{p \in \bar{\mathbb{R}}\,;\, p > c\},\\
[-\infty, c] &= (-\infty, c] \cup \{-\infty\} = \{p \in \bar{\mathbb{R}}\,;\, p \leq c\},\\
[-\infty, c) &= (-\infty, c) \cup \{-\infty\} = \{p \in \bar{\mathbb{R}}\,;\, p < c\}.
\end{aligned}
$$

$\bar{\mathbb{R}}$ 与 $[-1, 1]$ 之间存在一个保序双射函数：

$$\phi(c) = \frac{c}{1 + |c|}.$$

若定义 $d(c, c') = |\phi(c) - \phi(c')|$，则可在 $\bar{\mathbb{R}}$ 上定义一个度量。因此，$(\bar{\mathbb{R}}, d)$ 是一个度量空间。由于它通过双射 ϕ 与 $[-1, 1]$ 同胚，该空间是紧致的。

我们定义在 $\bar{\mathbb{R}}$ 上的函数的连续性。此定义是对 $\mathbb{R}$ 上函数连续性概念的直接推广。之所以能够忠实地推广这一概念，是因为 $\bar{\mathbb{R}}$ 中无限序列的收敛性，可转化为经 ϕ 映射到 $[-1, 1]$ 的序列的收敛性。

定义 *C.1.* </style>函数 $f : \bar{\mathbb{R}} \to \bar{\mathbb{R}}$ 是连续的，若对任意收敛序列 $\{c_n\} \subset \bar{\mathbb{R}}$，都有

$$\lim_{n\to\infty} f(c_n) = f\left(\lim_{n\to\infty} c_n\right).$$

一般而言，为取值于 $\bar{\mathbb{R}}$ 的函数给出导数的形式化定义并非易事，因为 $\pm\infty - (\pm\infty)$ 未定义。不过，若能通过应用另一个函数将无穷数变为零，从而“隐藏”无穷值，这种情况或许就能迎刃而解。

此例包含定义 3.1 中定义的哈密顿量 $\mathcal{H}$。哈密顿量 $H \in \mathcal{H}$ 定义为一个取值于 $\bar{\mathbb{R}} \cup \{\infty\}$ 的连续函数。将指数映射 e^{-x} 应用于 H 后，$e^{-H(r^N, p^N)}$ 结果是一个从 $\mathbb{R}^{dN\times 2}$ 到 $\bar{\mathbb{R}}$ 的函数。该函数在通常意义下也是连续的，因为 $\bar{\mathbb{R}} \cup \{\infty\}$ 与 (-1, 1] 同胚。

参考文献

[1] Ilyes Batatia、David P Kovacs、Gregor Simm、Christoph Ortner与Gábor Csányi。MACE：用于快速且精确力场的高阶等变消息传递神经网络。载于神经信息处理系统进展，第35卷，第11423–11436页，2022年。

[2] Simon Batzner、Albert Musaelian、Lixin Sun、Mario Geiger、Jonathan P. Mailoa、Mordechai Kornbluth、Nicola Molinari、Tess E. Smidt与Boris Kozinsky。面向数据高效且精确原子间势的E(3)等变图神经网络。《自然-通讯》，13(1)，2022年。[3] Leonardo Biagetti、Maciej Lebek、Milosz Panfil与Jacopo De Nardis。近可积动力学的广义BBGKY层级，2024年。arXiv:2408.00593。[4] Francesco Brioschi。论雅可比函数按自变量升幂的展开。《纯粹与应用数学年刊》，1(1):41–42，1858年。[5] Bernard R. Brooks、Robert E. Bruccoleri、Barry D. Olafson、David J. States、S. Swaminathan与Martin Karplus。CHARMM：用于大分子能量、极小化与动力学计算的程序。《计算化学杂志》，4(2):187–217，1983年。[6] Rustum Choksi。偏微分方程——初级课程，《纯粹与应用本科教材》第54卷。美国数学学会，罗得岛州普罗维登斯，2022年。[7] Gregory M. Constantine与Thomas H. Savits。多元Faà di Bruno公式及其应用。《美国数学会汇刊》，348(2):503–520，1996年。[8] Jean Dieudonné。《分析学论著》。纽约与伦敦：学术出版社XIV，1970年。[9] V. I. Gerasimenko。含硬球碰撞的玻尔兹曼方程推导方法，2013年。arXiv:1308.1789。[10] David Halliday、Robert Resnick与Jearl Walker。《物理学基础（扩展版）》。Wiley，第10版，2013年。[11] Jean-Pierre Hansen与Ian R. McDonald。《简单液体理论》。学术出版社，伦敦，第3版，1990年。[12] Douglas Henderson。《非均匀流体基础》。CRC出版社，2021年。[13] Sophie Hermann、Florian Sammüller与Matthias Schmidt。软物质平衡力结构的诺特不变性理论。《物理学杂志 A：数学与理论》，57(17):175001，2024年。[14] Sophie Hermann与Matthias Schmidt。统计力学中的诺特定理。《物理通讯》，4(1):176，2021年。[15] Sophie Hermann与Matthias Schmidt。由诺特定理得到的热量子多体系统中的力平衡。《物理学杂志 A：数学与理论》，55(46):464003，2022年。[16] Sophie Hermann与Matthias Schmidt。由诺特不变性得到的涨落方差。《物理通讯》，5(1):276，2022年。[17] Sophie Hermann与Matthias Schmidt。为何诺特定理适用于统计力学。《物理学杂志：凝聚态物质》，34(21):213001，2022年。[18] Lars Hörmander。线性偏微分算子分析。I：分布理论与傅里叶分析。数学经典。柏林：施普林格，第2版重印，2003年。[19] John E. Jones。论分子场的确定。II. 由气体状态方程出发。《伦敦皇家学会会刊》A辑：数学与物理性质论文，106(738):463–477，1924年。[20] John E. Jones。论分子场的确定。——I. 由气体黏度随温度的变化出发。《伦敦皇家学会会刊》A辑：数学与物理性质论文，106(738):441–462，1924年。[21] Yi-Lun Liao与Tess Smidt。Equiformer：面向三维原子图的等变图注意力变换器。载于国际学习表征会议，2023年。[22] Yi-Lun Liao、Brandon Wood、Abhishek Das与Tess Smidt。EquiformerV2：面向扩展至更高阶表示的改进等变变换器。载于国际学习表征会议，2024年。[23] Jerrold E. Marsden、Philip J. Morrison与Alan Weinstein。BBGKY层级方程的哈密顿结构。载于《流体与等离子体：几何与动力学》，《当代数学》第28卷，第115–124页。美国数学学会，1984年。[24] Joshua Matthes、Silas Robitschko、Johanna Müller、Sophie Hermann、Florian Sammüller与Matthias Schmidt。平衡流体混合物的规范不变性与超力关联理论。《化学物理学杂志》，164(4):044903，2026年。[25] Johanna Müller、Sophie Hermann、Florian Sammüller与Matthias Schmidt。平衡统计力学的规范不变性。《物理评论快报》，133:217101，2024年。[26] Johanna Müller、Florian Sammüller与Matthias Schmidt。统计力学的动力学规范不变性，2025年。arXiv:2504.17599。

[27] Johanna Müller、Florian Sammüller 和 Matthias Schmidt。规范不变性为何适用于统计力学。《物理学杂志 *A*：数学与理论》，58(12):125003，2025年3月。[28] 埃米·诺特。《不变变分问题》 [不变变分问题]。哥廷根皇家科学学会学报，数学与物理学部，第235–257页，1918年。[29] Corey S. O'Hern、Leonardo E. Silbert、Andrea J. Liu 和 Sidney R. Nagel。零温度和零外加应力下的堵塞：无序的典型体现。《物理评论 *E*》，68 011306，2003：。[30] Silas Robitschko、Florian Sammüller、Matthias Schmidt 和 Sophie Hermann。通过任意可观测量的热诺特不变性实现超力平衡。《物理通讯》，7 103，2024 1( )：。[31] Florian Sammüller、Sophie Hermann、Daniel de las Heras 和 Matthias Schmidt。平衡液体中的诺特约束关联。《物理评论快报》，130:268203，2023。[32] Florian Sammüller、Sophie Hermann 和 Matthias Schmidt。基于力的经典密度泛函理论比较研究。《物理评论 *E*》，107:034109，2023。[33] Houshang H. Sohrab。《实分析基础》。纽约，纽约州：Birkhäuser/Springer，第2版（扩充版），2014年。[34] Salomée M. Tschopp、Florian Sammüller、Sophie Hermann、Matthias Schmidt 和 Joseph M. Brader。平衡态与非平衡态下的力密度泛函理论。《物理评论 *E*》，106:014115，2022年。[35] David Van Der Spoel、Erik Lindahl、Berk Hess、Gerrit Groenhof、Alan E. Mark 和 Herman J. C. Berendsen。GROMACS：快速、灵活且免费的软件。《计算化学杂志》，26(16):1701–1718，2005年。[36] Dustin Warkotsch、Henrik Christiansen、Johannes Zierenberg 和 Wolfhard Janke。牵拉接枝柔性聚合物可能导致扭曲束。《软物质》，20:4916–4927，2024年。[37] John D. Weeks、David Chandler 和 Hans C. Andersen。排斥力在决定简单液体平衡结构中的作用。《化学物理学杂志》，54(12):5237–5247，1971年。[38] Paul K. Weiner 和 Peter A. Kollman。AMBER：辅助建模与能量精修。一个用于分子及其相互作用建模的通用程序。《计算化学杂志》，2(3):287–303，1981年。[39] Alan Weinstein。拉格朗日力学与群胚。《菲尔兹研究所通讯》，7:207–231，1996年。NEC安全系统平台研究实验室，日本神奈川县川崎市中原区下沼部1753电子邮箱： 49takashi@nec.com明治药科大学通识教育与研究中心，日本东京清濑市野盐2-522-1电子邮箱： tatsukis@my-pharm.ac.jpNEC Laboratories Europe，Kurfürsten-Anlage 36，69115 海德堡，德国电子邮箱： viktor.zaverkin@neclab.euNEC Laboratories Europe，Kurfürsten-Anlage 36，69115 海德堡，德国电子邮箱： henrik.christiansen@neclab.eu