УДК 517.9+531.19+530.145

В. І. Герасименко, А. Г. Корнієнко

Кінетичне рівняння Больцмана з кореляціями для плинів твердих куль

(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. Л. Горбачуком)

Обгрунтовано узагальнення кінетичного рівняння Больцмана, яким описується еволюція плину системи багатьох частинок з початковими кореляціями в скейлінговій границі Больцмана–Греда.

Сучасний прогрес математичної теорії нелінійних кінетичних рівнянь, зокрема, пов'язаний з розвитком строгих методів їх виведення з динаміки систем багатьох частинок. У цьому напрямку відомими є результати з обгрунтування кінетичного рівняння Больцмана в скейлінговій границі Больцмана–Греда для систем частинок, які взаємодіють як тверді кулі з пружними зіткненнями [1–4]. Однією з відкритих проблем теорії еволюційних рівнянь систем багатьох частинок залишається опис кінетичної еволюції за наявності кореляцій початкових станів, якими характеризуються системи в конденсованих станах.

Мета роботи полягає в математичному описі кінетичної еволюції плинів системи твердих куль з пружними зіткненнями в скейлінговій границі Больцмана–Греда у випадку початкових станів, які характеризуються кореляціями. В роботі встановлено еквівалентність опису кінетичної еволюції такої системи твердих куль за допомогою асимптотики Больцмана–Греда непертурбативного розв'язку дуальної ієрархії рівнянь ББГКІ (Боголюбов–Борн–Грін–Кірквуд–Івон) для маргінальних спостережуваних та одночастинковою (маргінальною) функцією розподілу, яка є розв'язком кінетичного рівняння Больцмана з початковими кореляціями. Також описано еволюцію початкових кореляцій в скейлінговій границі Больцмана–Греда.

Розглянемо систему не фіксованої (довільної) кількості частинок, які взаємодіють між собою як тверді кулі одиничної маси з пружними зіткненнями. Величину відношення діаметра $\sigma > 0$ твердих куль до середньої довжини їх вільного пробігу будемо позначати безрозмірним параметром $\epsilon > 0$. Нехай тверді кулі характеризуються відповідними фазовими змінними $(q_i, p_i) \equiv x_i \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$. Для такої системи частинок множина конфігурацій $\mathbb{W}_n \equiv \{(q_1, \ldots, q_n) \in \mathbb{R}^{3n} \big| |q_i - q_j| < \sigma$ хоча б для однієї пари $(i,j)\colon i \neq j \in (1, \ldots, n)\}$ є множиною заборонених конфігурацій.

Нехай C_γ — простір послідовностей $b = (b_0, b_1, \ldots, b_n, \ldots)$ вимірних обмежених функцій, визначених на відповідних фазових просторах $b_n(x_1, \ldots, x_n)$, які є симетричними відносно перестановок аргументів $x_1, \ldots, x_n$ (елемент b_0 — дійсне число), з нормою $\|b\|_{C_\gamma} = \max_{n \geqslant 0} \dfrac{\gamma^n}{n!} \|b_n\|_{C_n}$, де $\|b_n\|_{C_n} = \max_{x_1, \ldots, x_n} \big|b_n(x_1, \ldots, x_n)\big|$ та $0 < \gamma < 1$ — параметр.

© В. І. Герасименко, А. Г. Корнієнко, 2015

Еволюція системи твердих куль з пружними зіткненнями описується за допомогою послідовності $B(t) = (B_0, B_1(t, x_1), \ldots, B_s(t, x_1, \ldots, x_s), \ldots)$ таких маргінальних (s-частинкових) спостережуваних величин [3]:

$$B_s(t, x_1, \ldots, x_s) = \sum_{n=0}^{s} \frac{1}{n!} \sum_{j_1 \neq \ldots \neq j_n = 1}^{s} \mathfrak{A}_{1+n}(t, \{Y \setminus Z\}, Z) \times$$

$$\times B_{s-n}^{\epsilon,0}(x_1, \ldots, x_{j_1-1}, x_{j_1+1}, \ldots, x_{j_n-1}, x_{j_n+1}, \ldots, x_s), \qquad (1)$$

де $B(0) = (B_0, B_1^{\epsilon,0}(x_1), \ldots, B_s^{\epsilon,0}(x_1, \ldots, x_s), \ldots) \in C_\gamma$ — послідовність початкових маргінальних спостережуваних. Твірний оператор $\mathfrak{A}_{1+n}(t)$ з розкладу (1) є кумулянтом $(1+n)$-го порядку груп операторів систем твердих куль, який визначається такою формулою:

$$\mathfrak{A}_{1+n}(t, \{Y \setminus Z\}, Z) \doteq \sum_{\mathrm{P}\colon (\{Y \setminus Z\}, Z) = \cup_i Z_i} (-1)^{|\mathrm{P}|-1} (|\mathrm{P}| - 1)! \prod_{Z_i \subset \mathrm{P}} S_{|\theta(Z_i)|}(t, \theta(Z_i)),$$

де відповідними символами позначено множини індексів: $Y \equiv (1, \ldots, s)$, $Z \equiv (j_1, \ldots, j_n) \subset \subset Y$, що вказують, на які змінні діють оператори; множина $\{Y \setminus Z\}$ складається з одного елементу $Y \setminus Z = (1, \ldots, j_1 - 1, j_1 + 1, \ldots, j_n - 1, j_n + 1, \ldots, s)$; символом $\sum_{\mathrm{P}}$ позначено суму за всіма можливими розбиттями P множини $(\{Y \setminus Z\}, Z)$ на $|\mathrm{P}|$ непорожніх підмножин $Z_i \in (\{Y \setminus Z\}, Z)$, які взаємно не перетинаються; відображення $\theta(\cdot)$ є оператором декластеризації елементів множини $\theta(\{Y \setminus Z\}, Z) = Y$. Група операторів $S_{|\theta(Z_i)|}(t, \theta(Z_i))$ системи $|\theta(Z_i)|$ твердих куль з пружними зіткненнями визначена в роботі [4]. На просторі $C_{|\theta(Z_i)|}$ вона є ізометричною w*-неперервною групою, інфінітезимальний генератор якої збігається з оператором Ліувілля системи твердих куль з пружними зіткненнями [3].

Зауважимо, що послідовність функцій (1) є непертурбативним розв'язком задачі Коші для дуальної ієрархії рівнянь ББГКІ системи твердих куль з пружними зіткненнями [3].

Якщо існує границя Больцмана–Греда для початкових маргінальних спостережуваних у сенсі $*$-слабкої збіжності простору $\mathcal{C}_n$

$$\mathrm{w}^*\!-\lim_{\epsilon \to 0} (\epsilon^{-2n} B_n^{\epsilon,0} - b_n^0) = 0,$$

то для довільного інтервалу часу існує границя Больцмана–Греда маргінальних спостережуваних (1)

$$\mathrm{w}^*\!-\lim_{\epsilon \to 0} (\epsilon^{-2s} B_s(t) - b_s(t)) = 0,$$

де гранична функція $b_s(t)$ визначається таким розкладом [3]:

$$b_s(t, x_1, \ldots, x_s) = \sum_{n=0}^{s-1} \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n S_s^0(t - t_1) \times$$

$$\times \sum_{i_1 \neq j_1 = 1}^{s} \mathcal{L}_{\mathrm{int}}^0(i_1, j_1) S_{s-1}^0(t_1 - t_2) \cdots S_{s-n+1}^0(t_{n-1} - t_n) \times$$

$$\times \sum_{\substack{i_n \neq j_n = 1,\\ i_n, j_n \neq (j_1, \ldots, j_{n-1})}}^{s} \mathcal{L}_{\mathrm{int}}^0(i_n, j_n) S_{s-n}^0(t_n) b_{s-n}^0((x_1, \ldots, x_s) \setminus (x_{j_1}, \ldots, x_{j_n})). \qquad (2)$$

У виразі (2) для груп операторів невзаємодіючих частинок використано позначення

$$S^0_{s-n+1}(t_{n-1}-t_n)\equiv S^0_{s-n+1}(t_{n-1}-t_n,Y\setminus(j_1,\ldots,j_{n-1}))=\prod_{j\in Y\setminus(j_1,\ldots,j_{n-1})}S_1(t_{n-1}-t_n,j)$$

та введено оператор $\mathcal{L}^0_{\mathrm{int}}(j_1,j_2)$, який визначено на просторі $\mathcal{C}_n$,

$$(\mathcal{L}^0_{\mathrm{int}}(j_1,j_2)b_n)(x_1,\ldots,x_n)\doteq\int\limits_{\mathbb{S}^2_+}d\eta\langle\eta,(p_{j_1}-p_{j_2})\rangle(b_n(x_1,\ldots,q_{j_1},p^*_{j_1},\ldots,q_{j_2},p^*_{j_2},\ldots,x_n)-$$
$$-\,b_n(x_1,\ldots,x_n))\delta(q_{j_1}-q_{j_2}),\qquad(3)$$

де $\mathbb{S}^2_+\doteq\{\eta\in\mathbb{R}^3\big||\eta|=1,\langle\eta,(p_{j_1}-p_{j_2})\rangle>0\}$, символом $\langle\cdot,\cdot\rangle$ позначено скалярний добуток векторів, і значення імпульсів частинок після розсіяння $p^*_{j_1}$ та $p^*_{j_2}$ визначаються такими виразами:

$$\begin{aligned}p^*_{j_1}&\doteq p_{j_1}-\eta\langle\eta,(p_{j_1}-p_{j_2})\rangle,\\ p^*_{j_2}&\doteq p_{j_2}+\eta\langle\eta,(p_{j_1}-p_{j_2})\rangle.\end{aligned}\qquad(4)$$

Зауважимо, якщо $b(0)=(b_0,b^0_1,\ldots,b^0_s,\ldots)\in\mathcal{C}_\gamma$, то послідовність функцій, що зображується розкладами (2), є узагальненим глобальним розв'язком задачі Коші для дуальної ієрархії рівнянь Больцмана, яка має структуру системи рекурсивних еволюційних рівнянь:

$$\frac{\partial}{\partial t}b_s(t,x_1,\ldots,x_s)=\sum_{j=1}^{s}\Big\langle p_j,\frac{\partial}{\partial q_j}\Big\rangle b_s(t,x_1,\ldots,x_s)+$$
$$+\sum_{j_1\neq j_2=1}^{s}\int\limits_{\mathbb{S}^2_+}d\eta\langle\eta,(p_{j_1}-p_{j_2})\rangle(b_{s-1}(x_1,\ldots,x_{j_1-1},x_{j_1+1},\ldots,q_{j_2},p^*_{j_2},\ldots,x_s)-$$
$$-\,b_{s-1}(t,x_1,\ldots,x_{j_1-1},x_{j_1+1},\ldots,x_s))\delta(q_{j_1}-q_{j_2}),\qquad(5)$$

$$b_s(t,x_1,\ldots,x_s)\mid_{t=0}=b^0_s(x_1,\ldots,x_s),\qquad s\geqslant 1.\qquad(6)$$

Таким чином, кінетична еволюція системи твердих куль з пружними зіткненнями в границі Больцмана–Греда описується за допомогою граничних маргінальних спостережуваних (2), які задовольняють задачу Коші для дуальної ієрархії рівнянь Больцмана (5), (6). Подібний підхід до опису еволюції квантових систем багатьох частинок у скейлінговій границі середнього поля використано в роботі [6] (див. також [7]).

Розглянемо початкові стани системи твердих куль, які визначаються одночастинковою (маргінальною) функцією розподілу f^0_1 та кореляційними функціями g_n, а саме:

$$f^{(c)}=\bigg(1,f^0_1(x_1),g_2(x_1,x_2)\prod_{i=1}^{2}f^0_1(x_i),\ldots,g_n(x_1,\ldots,x_n)\prod_{i=1}^{n}f^0_1(x_i),\ldots\bigg).\qquad(7)$$

Одночастинкова функція розподілу f^0_1 задовольняє оцінку $|f^0_1(x_i)|\leqslant ce^{-\beta p_i^2/2}$, де $c>0$, $\beta\geqslant 0$ — параметри [4], та функції g_n, якими описуються початкові кореляції системи $n\geqslant 2$

твердих куль, — обмежені симетричні відносно перестановок аргументів $x_1, \ldots, x_n$ функції, які дорівнюють нулю на множині заборонених конфігурацій $\mathbb{W}_n$. Зазначимо, що за відсутності кореляцій стани (7) є типовими початковими станами для опису кінетичної еволюції систем багатьох частинок [1–4]. Оскільки системи частинок в конденсованих станах характеризуються кореляціями, то послідовністю маргінальних функцій розподілу (7) описується початковий стан кінетичної еволюції плинів твердих куль.

Для системи твердих куль у початковому стані (7) функціонал, за допомогою якого визначаються середні значення (математичні очікування) маргінальних спостережуваних величин в границі Больцмана–Греда, зображується таким розкладом у ряд:

$$(b(t), f^{(c)}) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \int\limits_{(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^s} dx_1 \cdots dx_s b_s(t, x_1, \ldots, x_s) g_s(x_1, \ldots, x_s) \prod_{i=1}^{s} f_1^0(x_i). \tag{8}$$

Якщо $b(0) \in \mathcal{C}_\gamma$ і f_1^0 задовольняє сформульовану вище умову, то на скінченному інтервалі часу функціонал (8) існує.

Сформулюємо основний результат роботи, а саме, встановимо співвідношення між асимптотикою Больцмана–Греда (2) маргінальних спостережуваних (1) та розв'язком узагальнення кінетичного рівняння Больцмана для системи твердих куль, початковий стан яких характеризується наявністю кореляцій (7).

У випадку початкових маргінальних спостережуваних адитивного типу [5], тобто послідовностей $b^{(1)}(0) = (0, b_1^0(x_1), 0, \ldots)$, справедлива рівність

$$(b^{(1)}(t), f^{(c)}) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \int\limits_{(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^s} dx_1 \cdots dx_s b_s^{(1)}(t, x_1, \ldots, x_s) g_s(x_1, \ldots, x_s) \prod_{i=1}^{s} f_1^0(x_i) =$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} dx_1 b_1^0(x_1) f_1(t, x_1),$$

де функція $b_s^{(1)}(t)$ зображується частковим випадком розкладу (2):

$$b_s^{(1)}(t, x_1, \ldots, x_s) = \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{s-2}} dt_{s-1} S_s^0(t - t_1) \times$$

$$\times \sum_{i_1 \neq j_1 = 1}^{s} \mathcal{L}_{\mathrm{int}}^0(i_1, j_1) S_{s-1}^0(t_1 - t_2) \cdots S_2^0(t_{s-2} - t_{s-1}) \times$$

$$\times \sum_{\substack{i_{s-1} \neq j_{s-1} = 1, \\ i_{s-1}, j_{s-1} \neq (j_1, \ldots, j_{s-2})}}^{s} \mathcal{L}_{\mathrm{int}}^0(i_{s-1}, j_{s-1}) S_1^0(t_{s-1}) b_1^0((x_1, \ldots, x_s) \setminus (x_{j_1}, \ldots, x_{j_{s-1}})),$$

та одночастинкова (маргінальна) функція розподілу $f_1(t)$ на скінченному інтервалі часу зображується рівномірно збіжним на кожному компакті рядом

$$f_1(t, x_1) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \int\limits_{(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^n} dx_2 \cdots dx_{n+1} S_1(-t + t_1, 1) \mathcal{L}_{\mathrm{int}}^{0,*}(1, 2) \times$$

$$\times S_1(-t_1+t_2,j_1)\cdots\prod_{i_n=1}^{n} S_1(-t_n+t_n,i_n)\times$$

$$\times\sum_{k_n=1}^{n}\mathcal{L}^{0,*}_{\mathrm{int}}(k_n,n+1)\prod_{j_n=1}^{n+1} S_1(-t_n,j_n)g_{n+1}(x_1,\ldots,x_{n+1})\prod_{i=1}^{n+1} f_1^0(x_i), \tag{9}$$

де оператор $\mathcal{L}^{0,*}_{\mathrm{int}}(j_1,j_2)$ є спряженим до оператора (3) в сенсі функціонала (8)

$$\mathcal{L}^{0,*}_{\mathrm{int}}(j_1,j_2)f_n \doteq \int\limits_{\mathbb{S}^2_+} d\eta\langle\eta,(p_{j_1}-p_{j_2})\rangle(f_n(x_1,\ldots,q_{j_1},p^*_{j_1},\ldots,q_{j_2},p^*_{j_2},\ldots,x_n)-$$

$$-f_n(x_1,\ldots,x_n))\delta(q_{j_1}-q_{j_2})$$

і використано позначення (3), (4), введені вище.

На скінченному інтервалі часу функція (9) є слабким розв'язком задачі Коші для кінетичного рівняння Больцмана з початковими кореляціями

$$\frac{\partial}{\partial t}f_1(t,x_1)=-\Big\langle p_1,\frac{\partial}{\partial q_1}\Big\rangle f_1(t,x_1)+$$

$$+\int\limits_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{S}^2_+} dp_2d\eta\langle\eta,(p_1-p_2)\rangle(g_2(q_1-p_1^*t,p_1^*,q_2-p_2^*t,p_2^*)f_1(t,q_1,p_1^*)f_1(t,q_1,p_2^*)-$$

$$-g_2(q_1-p_1t,p_1,q_2-p_2t,p_2)f_1(t,x_1)f_1(t,q_1,p_2)), \tag{10}$$

$$f_1(t,x_1)|_{t=0}=f_1^0(x_1). \tag{11}$$

Це твердження доводиться аналогічно випадку доведення існування розв'язку для ієрархії рівнянь ББГКІ, який зображується рядом ітерацій [4]. Кінетичне рівняння (10) побудовано також в роботі [8] іншим методом, а саме, за допомогою узагальненого кінетичного рівняння Енскога [9].

Таким чином, для початкових станів (7), які визначаються одночастинковою (маргінальною) функцією розподілу та кореляціями, еквівалентний метод опису еволюції системи твердих куль до підходу за допомогою дуальної ієрархії рівнянь Больцмана (5) у випадку маргінальних спостережуваних адитивного типу полягає в описі еволюції станів одночастинковою функцією розподілу, яка є розв'язком задачі Коші для кінетичного рівняння Больцмана з початковими кореляціями (10), (11).

У випадку k-арних ($k\geqslant 2$) початкових маргінальних спостережуваних [5], тобто послідовностей $b^{(1)}(0)=(0,\ldots,b_k^0(x_1,\ldots,x_k),0,\ldots)$, на скінченному інтервалі часу справедлива така рівність:

$$(b^{(k)}(t),f^{(c)})=\sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{s!}\int\limits_{(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)^s} dx_1\cdots dx_s b_s^{(k)}(t,x_1,\ldots,x_s)g_s(x_1,\ldots,x_s)\prod_{j=1}^{s} f_1^0(x_j)=$$

$$=\frac{1}{k!}\int\limits_{(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)^k} dx_1\cdots dx_k b_k^0(x_1,\ldots,x_k)\prod_{i_1=1}^{k} S_1(-t,i_1)g_k(x_1,\ldots,x_k)\times$$

$$\times \prod_{i_2=1}^{k} S_1(t,i_2) \prod_{j=1}^{k} f_1(t,x_j), \tag{12}$$

де одночастинкова функція розподілу $f_1(t,x_j)$ зображується розкладом в ряд (9) і, отже, визначається задачею Коші для рівняння Больцмана з початковими кореляціями (10), (11). Це твердження доводиться аналогічно доведенню властивості поширення початкового хаосу в границі Больцмана–Греда [3].

Рівність (12) описує еволюцію початкових кореляцій (7) в границі Больцмана–Греда. Дійсно, маргінальні кореляційні функції [7] в скейлінговій границі Больцмана–Греда зображуються такими розкладами:

$$g_s(t,x_1,\dots,x_s) = \widetilde{g}_s(q_1 - p_1 t, p_1, \dots, q_s - p_s t, p_s) \prod_{j=1}^{s} f_1(t,x_j), \qquad s \geqslant 2,$$

де використано позначення

$$\widetilde{g}_s(x_1,\dots,x_s) = \sum_{\mathrm{P}\colon (x_1,\dots,x_s)=\cup_i X_i} \prod_{X_i \subset \mathrm{P}} g_{|X_i|}(X_i),$$

$\sum_{\mathrm{P}}$ — сума за всіма розбиттями P множини аргументів $(x_1,\dots,x_s)$ на $|\mathrm{P}|$ непорожніх підмножин X_i, які взаємно не перетинаються, та одночастинкова функція розподілу $f_1(t)$ визначається задачею Коші (10), (11).

Таким чином, для початкових станів (7), які визначаються одночастинковою (маргінальною) функцією розподілу та кореляціями, метод опису еволюції системи твердих куль за допомогою розв'язку дуальної ієрархії рівнянь Больцмана (5) у випадку маргінальних спостережуваних k-арного ($k \geqslant 2$) типу є аналогом опису еволюції початкових кореляцій в скейлінговій границі Больцмана–Греда.

1. *Gallagher I., Saint-Raymond L., Texier B.* From Newton to Boltzmann: hard spheres and short-range potentials / Zürich Lectures in Advanced Mathematics. – Zürich: EMS Publ. House, 2014. – 148 p.
2. *Pulvirenti M., Saffirio C., Simonella S.* On the validity of the Boltzmann equation for short range potentials // Rev. Math. Phys. – 2014. – **26**, No 2. – 1450001, 64 p.
3. *Gerasimenko V. I.* On the approaches to the derivation of the Boltzmann equation with hard sphere collisions // Proc. Inst. Math. NAS of Ukraine. – 2013. – **10**, No 2. – P. 71–95.
4. *Cercignani C., Gerasimenko V. I., Petrina D. Ya.* Many-particle dynamics and kinetic equations. – Dordrecht: Kluwer, 1997. – 254 p.
5. *Borgioli G., Gerasimenko V. I.* The dual BBGKY hierarchy for the evolution of observables // Riv. Mat. Univ. Parma. – 2001. – **4**. – P. 251–267.
6. *Gerasimenko V. I.* Heisenberg picture of quantum kinetic evolution in mean-field limit // Kinet. Relat. Models. – 2011. – **4**, No 1. – P. 385–399.
7. *Gerasimenko V. I.* Hierarchies of quantum evolution equations and dynamics of many-particle correlations // Statistical Mechanics and Random Walks: Principles, Processes and Applications. – New York: Nova Science, 2012. – P. 233–288.
8. *Gapyak I. V.* The kinetic equations of a hard sphere system with initial correlations // Proc. Inst. Math. NAS of Ukraine. – 2014. – **11**, No 1. – P. 166–177.
9. *Gerasimenko V. I., Gapyak I. V.* Hard sphere dynamics and the Enskog equation // Kinet. Relat. Models. – 2012. – **5**, No 3. – P. 459–484.

Інститут математики НАН України, Київ
Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 14.10.2014

В. И. Герасименко, А. Г. Корниенко

Кинетическое уравнение Больцмана с корреляциями для текущих сред твердых шаров

Обосновано обобщение кинетического уравнения Больцмана, которым описывается эволюция состояния текущей среды системы многих частиц с начальными корреляциями в скейлинговом пределе Больцмана–Грэда.

V. I. Gerasimenko, A. G. Kornienko

The Boltzmann kinetic equation with correlations for hard sphere fluids

For the fluid of a system of many particles with initial correlations, a generalization of the Boltzmann kinetic equation is justified in the Boltzmann–Grad scaling limit.