ДОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

https://doi.org/10.15407/dopovidi2022.03.003
УДК 517.9:531.19

І.В. Гап'як [1], https://orcid.org/0000-0003-2102-1583
В.І. Герасименко [1, 2], https://orcid.org/0000-0003-2577-2237

[1] Київський національний університет ім. Тараса Шевченка
[2] Інститут математики НАН України, Київ
E-mail: gapjak@ukr.net, gerasym@imath.kiev.ua

Ієрархія еволюційних рівнянь для кореляцій плинів твердих сфер

Представлено членом-кореспондентом НАН України В.Г. Самойленком

Обговорюється підхід до опису кореляцій у системі багатьох твердих сфер на основі ієрархії еволюційних рівнянь для кореляційних функцій. Встановлено, що побудована динаміка кореляцій лежить в основі опису динаміки як скінченного, так і нескінченного числа твердих сфер, яка описується ієрархіями рівнянь ББГКІ для редукованих функцій розподілу або редукованих кореляційних функцій.

Ключові слова: *ієрархія ББГКІ, ієрархія Ліувілля, кореляційна функція.*

Останнім часом, головним чином у зв'язку з проблемою строгого виведення кінетичних рівнянь з динаміки багатьох частинок [1, 2], з'явилася низка статей [4—13], в яких обговорюються можливі підходи до опису еволюції стану системи твердих сфер.

У цьому повідомленні розвинуто підхід до опису еволюції стану за допомогою як редукованих функцій розподілу, так і редукованих кореляційних функцій, який ґрунтується на динаміці кореляцій багатьох твердих сфер.

Як відомо [1—3], у просторі $\mathbb{R}^3$ у початковий момент стан системи твердих сфер не фіксованого, тобто довільного, але скінченного середнього числа однакових частинок, описується послідовністю $D(0)=(1,D_1^0,\ldots,D_n^0,\ldots)$ функцій розподілу ймовірності $D_n^0=D_n^0(x_1,\ldots,x_n), n\geqslant 1$, визначених на фазовому просторі $\mathbb{R}^{3n}\times(\mathbb{R}^{3n}\setminus\mathbb{W}_n)$ системи n твердих сфер. Кожна тверда сфера діаметром $\sigma>0$ характеризується координатами фазового простору $(q_i,p_i)\equiv x_i\in\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3$, $i\geqslant 1$, і для конфігурацій у просторі виконуються такі нерівності: $|q_i-q_j|\geqslant\sigma, i\neq j\geqslant 1$, тобто множина $\mathbb{W}_n\equiv\{(q_1,\ldots,q_n)\in\mathbb{R}^{3n}\,\|\,q_i-q_j|<\sigma$ хоча б для однієї пари $(i,j):i\neq j\in(1,\ldots,n)\}$ є множиною заборонених конфігурацій. Невід'ємні функції D_n^0, $n\geqslant 1$, які симетричні відносно перестановок аргументів $x_1,\ldots,x_n$ і дорівнюють нулю на мно-

Цитування: Гап'як І.В., Герасименко В.І. Ієрархія еволюційних рівнянь для кореляцій плинів твердих сфер. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2022. № 3. С. 3—12. https://doi.org/10.15407/dopovidi2022.03.003

жині заборонених конфігурацій $\mathbb{W}_n$, вважатимемо належать простору інтегрованих функцій $L_n^1 \equiv L^1(\mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n})$ з нормою: $\|f_n\|_{L_n^1} = \int\limits_{\mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n}} dx_1 \ldots dx_n \, |f_n(x_1, \ldots, x_n)|$.

Еволюція всіх можливих станів системи багатьох твердих сфер описується послідовністю $D(t) = (1, D_1(t), \ldots, D_n(t), \ldots)$ таких функцій розподілу ймовірності:

$$D_n(t, x_1, \ldots, x_n) = S_n(-t, 1, \ldots, n) D_n^0(x_1, \ldots, x_n) =$$

$$= \begin{cases} D_n^0(X_1(-t, x_1, \ldots, x_n), \ldots, X_n(-t, x_1, \ldots, x_n)), \\ \qquad\qquad\qquad \text{if } (x_1, \ldots, x_n) \in (\mathbb{R}^{3n} \times (\mathbb{R}^{3n} \setminus \mathbb{W}_n)), \\ 0, \qquad\qquad\quad \text{if } (q_1, \ldots, q_n) \in \mathbb{W}_n, \end{cases} \tag{1}$$

де для $t \in \mathbb{R}$ функція $X_i(-t, x_1, \ldots, x_n)$ — фазова траєкторія i-ї твердої сфери, побудована в [1]. Зазначимо, що ця функція визначена майже всюди на фазовому просторі $\mathbb{R}^{3n} \times (\mathbb{R}^{3n} \setminus \mathbb{W}_n)$, а саме — поза множиною $\mathbb{M}_n^0$ нульової міри Лебега, яка складається з точок фазового простору $(x_1, \ldots, x_n)$, для яких у процесі еволюції можуть відбуватися багаторазові зіткнення, тобто зіткнення більш ніж двох частинок, одночасні зіткнення двох частинок і нескінченне число зіткнень на скінченному інтервалі часу [1, 2].

На просторі $L_n^1 \equiv L^1(\mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n})$ однопараметричне відображення (1) утворює сильно неперервну групу ізометричних операторів. Інфінітезимальний генератор $\mathcal{L}_n^*$ цієї групи операторів має таку структуру:

$$\mathcal{L}_n^*(1, \ldots, n) f_n \doteq \sum_{j=1}^{n} \mathcal{L}^*(j) f_n + \sum_{j_1 < j_2 = 1}^{n} \mathcal{L}_{\text{int}}^*(j_1, j_2) f_n, \tag{2}$$

де оператор Ліувілля вілного руху $\mathcal{L}^*(j) \doteq -\langle p_j, \frac{\partial}{\partial q_j} \rangle$, який визначено на підпросторі $L_{n,0}^1 \subset L_n^1$, позначено символом $\mathcal{L}^*(j)$ і для $t > 0$ оператор $\mathcal{L}_{\text{int}}^*(j_1, j_2)$ описується формулою

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

$$\times \delta(q_{j_1} - q_{j_2} + \sigma\eta) - f_n(x_1, \ldots, x_n) \delta(q_{j_1} - q_{j_2} - \sigma\eta)). \tag{3}$$

Тут символом $\langle \cdot, \cdot \rangle$ позначено скалярний добуток, δ — міра Дірака, $\mathbb{S}_+^2 \doteq \{\eta \in \mathbb{R}^3 \mid |\eta| = 1 \langle \eta, (p_1 - p_2) \rangle > 0\}$, імпульси p_i^*, p_j^* до зіткнення твердих сфер визначаються такими виразами:

$$p_i^* \doteq p_i - \eta \langle \eta, (p_i - p_j) \rangle,$$

$$p_j^* \doteq p_j + \eta \langle \eta, (p_i - p_j) \rangle.$$

У випадку $t < 0$ оператор $\mathcal{L}_{\text{int}}(j_1, j_2)$ визначається відповідним виразом [1].

Якщо $D_n^0 \in L_n^1$, $n \geqslant 1$, послідовність функцій розподілу, яка визначена формулою (1), є єдиним розв'язком задачі Коші для послідовності еволюційних рівнянь для стану, відомого як слабке формулювання рівняннь Ліувілля для твердих сфер [1].

Альтернативний підхід до опису станів системи скінченної кількості твердих сфер ґрунтується на використанні функцій, які визначаються кластерними розкладами функцій розподілу ймовірностей. Такі функції інтерпретуються як кореляційні функції або кумулянти функцій розподілу ймовірностей.

Введемо послідовність кореляційних функцій $g(t) = (1, g_1(t, x_1), \ldots, g_s(t, x_1, \ldots, x_s), \ldots)$ за допомогою кластерних розкладів функцій розподілу ймовірностей $D(t) = (1, D_1(t, x_1), \ldots, D_n(t, x_1, \ldots, x_n), \ldots)$, визначених на дозволених конфігураціях $\mathbb{R}^{3n} \setminus \mathbb{W}_n$ у такий спосіб:

$$D_n(t, x_1, \ldots, x_n) = g_n(t, x_1, \ldots, x_n) + \sum_{\mathrm{P}:\, (x_1, \ldots, x_n) = \bigcup_i X_i,\, |\mathrm{P}|>1} \prod_{X_i \subset \mathrm{P}} g_{|X_i|}(t, X_i), \quad n \geqslant 1, \tag{4}$$

де $\sum_{\mathrm{P}:\, (x_1, \ldots, x_n) = \bigcup_i X_i,\, |\mathrm{P}|>1}$ — сума за всіма можливими розбиттями P множини аргументів $(x_1, \ldots, x_n)$ на $|\mathrm{P}| > 1$ непорожніх підмножин $X_i \subset (x_1, \ldots, x_n)$, які взаємно не перетинаються.

На множині $\mathbb{R}^{3n} \setminus \mathbb{W}_n$ розв'язки рекурсійних співвідношень (4) визначаються такими розкладами:

$$g_s(t, x_1, \ldots, x_s) = D_s(t, x_1, \ldots, x_s) + \\ + \sum_{\mathrm{P}:\, (x_1, \ldots, x_s) = \bigcup_i X_i,\, |\mathrm{P}|>1} (-1)^{|\mathrm{P}|-1}(|\mathrm{P}|-1)! \prod_{X_i \subset \mathrm{P}} D_{|X_i|}(t, X_i), \quad s \geqslant 1. \tag{5}$$

Структура розкладів (5) така, що кореляційні функції можна трактувати як кумулянти (напівінваріанти) функцій розподілу ймовірностей (1).

Таким чином, кореляційні функції (5) дають можливість описувати еволюцію станів скінченної кількості твердих сфер у еквівалентний спосіб у порівнянні з функціями розподілу ймовірностей (1), а саме на основі динаміки кореляцій [14].

Якщо початковий стан заданий послідовністю $g(0) = (1, g_1^0(x_1), \ldots, g_n^0(x_1, \ldots, x_n), \ldots)$ кореляційних функцій $g_n^0 \in L_n^1$, $n \geqslant 1$, то еволюція всіх можливих станів, тобто послідовність $g(t) = (1, g_1(t, x_1), \ldots, g_s(t, x_1, \ldots, x_s), \ldots)$ кореляційних функцій $g_s(t)$, $s \geqslant 1$, визначається такими розкладами:

$$g_s(t, x_1, \ldots, x_s) = \mathcal{G}(t; 1, \ldots, s \mid g(0)) = \\ = \sum_{\mathrm{P}:\, (x_1, \ldots, x_s) = \bigcup_j X_j} \mathfrak{A}_{|\mathrm{P}|}(t, \{\widehat{X}_1\}, \ldots, \{\widehat{X}_{|\mathrm{P}|}\}) \prod_{X_j \subset \mathrm{P}} g_{|X_j|}^0(X_j), \quad s \geqslant 1, \tag{6}$$

де $\sum_{\mathrm{P}:\, (x_1, \ldots, x_s) = \bigcup_j X_j}$ — сума за всіма можливими розбиттями P множини $(x_1, \ldots, x_s)$ на $|\mathrm{P}|$ непорожніх підмножин X_j, які взаємно не перетинаються, множина $(\{X_1\}, \ldots, \{X_{|\mathrm{P}|}\})$ складається з елементів, які є підмножинами $X_j \subset (x_1, \ldots, x_s)$, тобто $|(\{X_1\}, \ldots, \{X_{|\mathrm{P}|}\})| = |\mathrm{P}|$, і символ $\widehat{X}$ означає множину індексів множини X координат фазового простору. Твірний оператор $\mathfrak{A}_{|\mathrm{P}|}(t)$ у розкладі (6) є кумулянтом $|\mathrm{P}|$ порядку груп операторів (1), який визначається розкладом

$$\mathfrak{A}_{|\mathrm{P}|}(t, \{\widehat{X}_1\}, \ldots, \{\widehat{X}_{|\mathrm{P}|}\}) \doteq$$

$$\doteq \sum_{\mathrm{P}':(\{\widehat{X}_1\}, \ldots, \{\widehat{X}_{|\mathrm{P}|}\}) = \bigcup_k Z_k} (-1)^{|\mathrm{P}'|-1} (|\mathrm{P}'|-1)! \prod_{Z_k \subset \mathrm{P}'} S_{|\theta(Z_k)|}(-t, \theta(Z_k)), \tag{7}$$

де θ — відображення декластеризації $\theta(\{\widehat{X}_1\}, \ldots, \{\widehat{X}_{|\mathrm{P}|}\}) \doteq (1, \ldots, s)$.

Структура розкладів (6) встановлюється в результаті перестановки членів кумулянтних розкладів (5) для кореляційних функцій і кластерних розкладів (4) для початкових функцій розподілу ймовірностей. Таким чином, кумулянтне походження кореляційних функцій індукує кумулянтну структуру їх динаміки (6).

Зокрема, за відсутності кореляцій між твердими сферами в початковий момент (початковий стан, що задовольняє умову хаосу [1]) послідовність початкових кореляційних функцій на дозволених конфігураціях має вигляд $g^{(c)}(0) = (1, g_1^0(x_1), 0, \ldots, 0, \ldots)$. У цьому випадку для $(x_1, \ldots, x_s) \in \mathbb{R}^{3s} \times (\mathbb{R}^{3s} \setminus \mathbb{W}_s)$ розклади (6) зображаються таким чином:

$$g_s(t, x_1, \ldots, x_s) = \mathfrak{A}_s(t, 1, \ldots, s) \prod_{i=1}^{s} g_1^0(x_i) \mathcal{X}_{\mathbb{R}^{3s} \setminus \mathbb{W}_s}, \quad s \geqslant 1, \tag{8}$$

де характеристичну функцію дозволених конфігурацій n твердих сфер позначено $\mathcal{X}_{\mathbb{R}^{3n} \setminus \mathbb{W}_n}$ і твірний оператор $\mathfrak{A}_s(t)$ цього розкладу є кумулянтом s порядку груп операторів (1), який визначається розкладом

$$\mathfrak{A}_s(t, 1, \ldots, s) = \sum_{\mathrm{P}:(1, \ldots, s) = \bigcup_i X_i} (-1)^{|\mathrm{P}|-1} (|\mathrm{P}|-1)! \prod_{X_i \subset \mathrm{P}} S_{|X_i|}(-t, X_i), \tag{9}$$

і використано позначення, прийняті у формулі (6). Зі структури ряду (8) зрозуміло, що у разі відсутності кореляцій у початковий момент кореляції породжені внаслідок еволюції системи твердих сфер цілком визначаються кумулянтами (9) груп операторів рівняння Ліувілля.

Якщо $g_n^0 \in L_n^1, n \geqslant 1$, то однопараметричне відображення (6) породжує сильну неперервну групу обмежених нелінійних операторів і справедлива така оцінка: $\| \mathcal{G}(t; 1, \ldots, s \,|\, g) \|_{L_s^1} \leqslant s! c^s$, де $c \equiv \max(1, \quad \max_{\mathrm{P}:(1, \ldots, s) = \bigcup_i X_i} \| g_{|X_i|} \|_{L^1_{|X_i|}})$. Для $g_n \in L^1_{n,0}, n \geqslant 1$, інфінітезимальний генератор цієї групи нелінійних операторів має таку структуру:

$$\mathcal{L}(1, \ldots, s \,|\, g) \doteq \mathcal{L}_s^*(1, \ldots, s) g_s(x_1, \ldots, x_s) +$$

$$+ \sum_{\mathrm{P}:(x_1, \ldots, x_s) = X_1 \bigcup X_2} \sum_{i_1 \in \widehat{X}_1} \sum_{i_2 \in \widehat{X}_2} \mathcal{L}_{\mathrm{int}}^*(i_1, i_2) g_{|X_1|}(X_1) g_{|X_2|}(X_2), \tag{10}$$

де використано прийняті у розкладі (6) позначення.

Якщо $g_s^0 \in L_s^1, s \geqslant 1$, то для $t \in \mathbb{R}$ послідовність кореляційних функцій (6), визначених на множині дозволених конфігурацій, є єдиним розв'язком задачі Коші для ієрархії рівнянь Ліувілля у формулюванні в слабкому сенсі

$$\frac{\partial}{\partial t} g_s(t, x_1, \ldots, x_s) = \mathcal{L}_s^*(1, \ldots, s) g_s(t, x_1, \ldots, x_s) +$$

$$+ \sum_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_s)=X_1 \cup X_2} \sum_{i_1 \in \widehat{X}_1} \sum_{i_2 \in \widehat{X}_2} \mathcal{L}_{\mathrm{int}}^*(i_1, i_2) g_{|X_1|}(t, X_1) g_{|X_2|}(t, X_2), \tag{11}$$

$$g_s(t, x_1, \ldots, x_s)\big|_{t=0} = g_s^0(x_1, \ldots, x_s), \quad s \geqslant 1, \tag{12}$$

де $\sum\limits_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_s)=X_1 \cup X_2}$ — сума за всіма можливими розбиттями P множини $(x_1, \ldots, x_s)$ на дві підмножини X_1 та X_2, які взаємно не перетинаються, символ $\widehat{X}_i$ означає множину індексів множини X_i координат фазового простору та оператор $\mathcal{L}_s^*$ визначається на підпросторі $L_0^1 \subset L^1$ формулою (2). Слід зазначити, що ієрархія рівнянь Ліувілля (11) є рекурентною системою еволюційних рівнянь.

Для довільних $t \in \mathbb{R}$ єдиний розв'язок задачі Коші для ієрархії рівнянь Ліувілля (11), (12) зображується послідовністю розкладів (6). Якщо $g_n^0 \in L_{n,0}^1 \subset L_n^1$, $n \geqslant 1$, послідовність розкладів (6) є класичним розв'язком і для довільних початкових даних $g_n^0 \in L_n^1, n \geqslant 1$, — узагальненим розв'язком.

Підкреслимо, що динаміка кореляцій, тобто фундаментальні рівняння (11), що описують еволюцію кореляцій станів твердих сфер, можна використовувати як основу для опису еволюції стану як скінченної, так і нескінченної кількості твердих сфер замість рівняння Ліувілля для стану.

Далі ми встановимо, що побудована динаміка кореляції лежить в основі опису еволюції нескінченної кількості твердих сфер за допомогою ієрархій рівнянь для редукованих функцій розподілу або редукованих кореляційних функцій.

Для системи твердих сфер нефіксованого, тобто довільного, але скінченного середнього числа однакових частинок, редуковані функції розподілу визначаються за допомогою функцій розподілу ймовірностей у такий спосіб [1]:

$$F_s(t, x_1, \ldots, x_s) \doteq (I, D(t))^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int\limits_{(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^n} dx_{s+1} \ldots dx_{s+n} D_{s+n}(t, x_1, \ldots, x_{s+n}), \quad s \geqslant 1, \tag{13}$$

де нормувальний множник $(I, D(t)) \doteq \sum\limits_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int\limits_{(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^n} dx_1 \ldots dx_n D_n(t, x_1, \ldots, x_n)$ — велика нерівноважна статистична сума. Можливість перевизначення редукованих функцій розподілу закономірно виникає в результаті ділення ряду у виразі (13) на ряд нормувального коефіцієнта.

Визначення редукованих функцій розподілу, еквівалентне (13), формулюється на основі кореляційних функцій (6) системи твердих сфер у вигляді таких розкладів у ряд:

$$F_s(t, x_1, \dots, x_s) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^n} dx_{s+1} \dots dx_{s+n}\, g_{1+n}(t, \{x_1, \dots, x_s\}, x_{s+1}, \dots, x_{s+n}), \quad s \geqslant 1, \tag{14}$$

де на множині дозволених конфігурацій $\mathbb{R}^{3(s+n)} \setminus \mathbb{W}_{s+n}$ кореляційні функції кластерів твердих сфер $g_{1+n}(t)$, $n \geqslant 0$, визначаються розкладами

$$g_{1+n}(t, \{x_1, \dots, x_s\}, x_{s+1}, \dots, x_{s+n}) =$$

$$= \sum_{\mathrm{P}: (\{x_1, \dots, x_s\}, x_{s+1}, \dots, x_{s+n}) = \bigcup_i X_i} \mathfrak{A}_{|\mathrm{P}|}(t, \{\theta(\widehat{X}_1)\}, \dots, \{\theta(\widehat{X}_{|\mathrm{P}|})\}) \prod_{X_i \subset \mathrm{P}} g^0_{|X_i|}(X_i), \quad n \geqslant 0. \tag{15}$$

Нагадаємо, що в розкладі (15) символ $\sum_{\mathrm{P}: (\{x_1, \dots, x_s\}, x_{s+1}, \dots, x_{s+n}) = \bigcup_i X_i}$ означає суму за всіма можливими розбиттями P множини $(\{x_1, \dots, x_s\}, x_{s+1}, \dots, x_{s+n})$ на непорожні підмножини X_i, які взаємно не перетинаються, та твірний оператор $\mathfrak{A}_{|\mathrm{P}|}(t)$ є $|\mathrm{P}|$ порядку кумулянтом (7) груп операторів (1).

Оскільки кореляційні функції $g_{1+n}(t)$, $n \geqslant 0$, задовольняють відповідну ієрархію рівнянь Ліувілля для кластера твердих сфер і твердих сфер, редуковані функції розподілу (14) задовольняють ієрархію рівнянь ББГКІ для твердих сфер [1]. Зазначимо, що ієрархія рівнянь ББГКІ для твердих сфер була вперше математично обґрунтована в роботі [2] (див. також [1]).

Внаслідок визначення (14) та кумулянтної структури зображення розв'язку (6) для ієрархії рівнянь Ліувілля (11), якщо початковий стан задається послідовністю редукованих функцій розподілу $F(0) = (1, F_1^0(x_1), \dots, F_n^0(x_1, \dots, x_n), \dots)$, еволюція всіх можливих станів, тобто послідовність редукованих функцій розподілу $F_s(t)$, $s \geqslant 1$, визначається такими розкладами в ряд [15]:

$$F_s(t, x_1, \dots, x_s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^n} dx_{s+1} \dots dx_{s+n}\, \mathfrak{A}_{1+n}(t, \{1, \dots, s\},$$

$$s+1, \dots, s+n) F^0_{s+n}(x_1, \dots, x_{s+n}), \quad s \geqslant 1, \tag{16}$$

де твірними операторами таких рядів

$$\mathfrak{A}_{1+n}(t, \{1, \dots, s\}, s+1, \dots, s+n) =$$

$$= \sum_{\mathrm{P}: (\{1, \dots, s\}, s+1, \dots, s+n) = \bigcup_i X_i} (-1)^{|\mathrm{P}|-1} (|\mathrm{P}|-1)! \prod_{X_i \subset \mathrm{P}} S_{|\theta(X_i)|}(-t, \theta(X_i)) \tag{17}$$

є кумулянти відповідного порядку (7) груп операторів (1) і використано прийняті вище позначення.

Зауважимо, що зображення (16) безпосередньо встановлюється для початкових станів, які задовольняють умову хаосу, завдяки справедливості в цьому випадку зображення (14) для кореляційних функцій кластера твердих сфер та твердих сфер.

Як відомо, у мікроскопічному масштабі макроскопічні характеристики флуктуацій спостережуваних безпосередньо визначаються за допомогою редукованих кореляційних функцій (маргінальних або s-часткових кореляційних функцій, або кумулянтів маргіналів [4, 5]). У разі застосування альтернативного підходу до опису еволюції станів системи твердих сфер на основі кореляційних функцій (6) редуковані кореляційні функції визначаються за допомогою розв'язку задачі Коші для ієрархії рівнянь Ліувілля (11), (12) у такий спосіб:

$$G_s(t,x_1,\ldots,x_s) \doteq \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_{(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)^n} dx_{s+1}\ldots dx_{s+n}\, g_{s+n}(t,x_1,\ldots,x_{s+n}), \quad s\geqslant 1, \tag{18}$$

де твірна функція $g_{s+n}(t,x_1,\ldots,x_{s+n})$ визначається розкладом (6).

Таке зображення для редукованих кореляційних функцій (18) може бути отримано як результат того, що редуковані кореляційні функції є кумулянтами редукованих функцій розподілу (14). Дійсно, традиційно редуковані кореляційні функції вводяться за допомогою кластерних розкладів редукованих функцій розподілу, подібно до кластерних розкладів функцій розподілу ймовірностей (4) і на множині дозволених конфігурацій $\mathbb{R}^{3n}\setminus\mathbb{W}_n$ вони мають вигляд

$$F_s(t,x_1,\ldots,x_s) = \sum_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_s)=\bigcup_i X_i}\ \prod_{X_i\subset\mathrm{P}} G_{|X_i|}(t,X_i), \quad s\geqslant 1, \tag{19}$$

де, як і вище, $\sum_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_s)=\bigcup_i X_i}$ — сума за всіма можливими розбиттями P множини $(x_1,\ldots,x_s)$ на $|\mathrm{P}|$ підмножин $X_i\subset(x_1,\ldots,x_s)$, які взаємно не перетинаються. Внаслідок цього розв'язок рекурентних співвідношень (19) зображується через редуковані функції розподілу в такий спосіб:

$$G_s(t,x_1,\ldots,x_s) = \sum_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_s)=\bigcup_i X_i} (-1)^{|\mathrm{P}|-1}(|\mathrm{P}|-1)!\prod_{X_i\subset\mathrm{P}} F_{|X_i|}(t,X_i), \quad s\geqslant 1. \tag{20}$$

Функції (20) інтерпретуються як функції, якими описуються кореляції станів твердих сфер. Структура розкладів (20) така, що редуковані кореляційні функції є кумулянтами (напівінваріантами) редукованих функцій розподілу (16).

Оскільки кореляційні функції $g_{s+n}(t)$, $n\geqslant 0$, задовольняють ієрархію рівнянь Ліувілля для твердих сфер (11), редуковані кореляційні функції, визначені формулою (18), задовольняють ієрархію еволюційних нелінійних рівнянь для твердих сфер (нелінійна ієрархія рівнянь ББГКІ):

$$\frac{\partial}{\partial t}G_s(t,x_1,\ldots,x_s) = \mathcal{L}_s^{*}G_s(t,x_1,\ldots,x_s) +$$

$$+\sum_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_s)=X_1\cup X_2}\sum_{i_1\in\widehat{X}_1}\sum_{i_2\in\widehat{X}_2}\mathcal{L}^*_{\mathrm{int}}(i_1,i_2)G_{|X_1|}(t,X_1)G_{|X_2|}(t,X_2)+$$

$$+\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3}dx_{s+1}(\sum_{i=1}^{s}\mathcal{L}^*_{\mathrm{int}}(i,\cdots s+1)G_{s+1}(t,x_1,\ldots,x_{s+1})+$$

$$+\sum_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_{s+1})=X_1\cup X_2}\sum_{i\in\widehat{X}_1;\,s+1\in\widehat{X}_2}\mathcal{L}^*_{\mathrm{int}}(i,s+1)G_{|X_1|}(t,X_1)G_{|X_2|}(t,X_2)),\quad s\geqslant 1, \tag{21}$$

де $\sum_{\mathrm{P}:(x_1,\ldots,x_{s+1})=X_1\cup X_2}$ — сума за всіма можливими розбиттями множини аргументів $(x_1,\ldots,x_{s+1})$ на дві підмножини X_1 та X_2, які взаємно не перетинаються, $\sum_{i\in\widehat{X}_1;\,s+1\in\widehat{X}_2}$ — сума за індексом i, який набуває значень з підмножини $\widehat{X}_1$ за умови, що індекс $s+1$ належить підмножині $\widehat{X}_2$, і використано позначення, прийняті в ієрархії рівнянь Ліувілля (11).

У конкретному випадку початкового стану, заданого послідовністю редукованих кореляційних функцій $G^{(c)}=(1,G_1^0,0,\ldots,0,\ldots)$ на дозволених конфігураціях, тобто за відсутності кореляцій між твердими сферами в початковий момент часу [1], згідно з визначенням кореляційних функцій редуковані кореляційні функції зображуються такими розкладами в ряд:

$$G_s(t,x_1,\ldots,x_s)=$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_{(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)^n}dx_{s+1}\ldots dx_{s+n}\mathfrak{A}_{s+n}(t;1,\ldots,s+n)\prod_{i=1}^{s+n}G_1^0(x_i)\mathcal{X}_{\mathbb{R}^{3(s+n)}\setminus\mathbb{W}_{s+n}},\quad s\geqslant 1, \tag{22}$$

де твірний оператор $\mathfrak{A}_{s+n}(t)$ — кумулянт (9) груп операторів (1) рівнянь Ліувілля. Підкреслимо, що за відсутності кореляцій станів твердих сфер на дозволених конфігураціях у початковий момент часу генератори розкладів у ряд редукованих кореляційних функцій (22) і редукованих функцій розподілу (16) відрізняються лише порядком кумулянтів груп операторів твердих сфер. Тому за допомогою таких редукованих функцій розподілу або редукованих кореляційних функцій описується процес створення кореляцій у плинах твердих сфер.

Отже, у статті розглянуто математичні проблеми опису еволюції багатьох твердих сфер за допомогою функцій, які описують процес поширення кореляцій. Підкреслимо, що структура розкладів для кореляційних функцій (6), в яких твірними операторами є кумулянти відповідного порядку (7) груп операторів (1) твердих сфер, породжує відповідну кумулянтну структуру розкладів у ряди для редукованих функцій розподілу та редукованих кореляційних функцій.

Зазначимо, що деякі нові підходи до виведення кінетичних рівнянь для системи багатьох твердих сфер, зокрема кінетичних рівнянь з початковими кореляціями, розглянуто в працях авторів [10—13].

Дослідження виконано за підтримки гранта Міністерства освіти і науки України за перспективний розвиток наукового напряму «Математичні науки і природничі науки» у Київському національному університеті ім. Тараса Шевченка та за часткової підтримки державної програми пріоритетних наукових досліджень Відділення математики НАН України на 2022—2023 рр. (проєкт II-01-22, реєстраційний номер № 7/1/241).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Cercignani C., Gerasimenko V.I., Petrina D.Ya. Many-particle dynamics and kinetic equations. Amsterdam: Springer, 2012. 255 p.
2. Petrina D.Ya., Gerasimenko V.I. Mathematical problems of statistical mechanics of a system of elastic balls. *Russ. Math. Surv.* 1990. **45**, № 3. P. 153—211. https://doi.org/10.1070/RM1990v045n03ABEH002360
3. Gallagher I., Saint-Raymond L., Texier B. From Newton to Boltzmann: hard spheres and short-range potentials. Zürich: EMS Publ. House, 2014. 148 p. (Zürich Lectures in Advanced Mathematics, Vol. 18).
4. Bodineau T., Gallagher I., Saint-Raymond L., Simonella S. Fluctuation theory in the Boltzmann—Grad limit. *J. Stat. Phys.* 2020. **180**. P. 873—895. https://doi.org/10.1007/s10955-020-02549-5
5. Duerinckx M., Saint-Raymond L. Lenard—Balescu correction to mean-field theory. *Probab. Math. Phys.* 2021. **2**, № 1. P. 27—69. https://doi.org/10.2140/pmp.2021.2.27
6. Duerinckx M. On the size of chaos via Glauber calculus in the classical mean-field dynamics. *Commun. Math. Phys.* 2021. **382**. P. 613—653. https://doi.org/10.1007/s00220-021-03978-3
7. Simonella S. Evolution of correlation functions in the hard sphere dynamics. *J. Stat. Phys.* 2014. **155**, № 6. P. 1191—1221. https://doi.org/10.1007/s10955-013-0905-7
8. Pulvirenti M., Simonella S. Propagation of chaos and effective equations in kinetic theory: a brief survey. *Math. Mech. Complex Syst.* 2016. **4**, № 3-4. P. 255—274. https://doi.org/10.2140/memocs.2016.4.255
9. Ivankiv L.I., Prykarpatsky Y.A., Samoilenko V.H., Prykarpatski A.K. Quantum current algebra symmetry and description of Boltzmann type kinetic equations in statistical physics. *Symmetry*. 2021. **13**, № 8. 1452. https://doi.org/10.3390/sym13081452
10. Герасименко В.І., Гап'як І.В. Немарковське кінетичне рівняння Фоккера—Планка для системи твердих куль. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2014. № 12. С. 29—35. https://doi.org/10.15407/dopovidi2014.12.029
11. Gerasimenko V.I., Gapyak I.V. Hard sphere dynamics and the Enskog equation. *Kinet. Relat. Models*. 2012. **5**, № 3. P. 459—484. https://doi.org/10.3934/krm.2012.5.459
12. Gerasimenko V.I., Gapyak I.V. Boltzmann–Grad asymptotic behavior of collisional dynamics. *Rev. Math. Phys.* 2021. **33**. 2130001. 32 p. https://doi.org/10.1142/S0129055X21300016
13. Gerasimenko V., Gapyak I. Low-density asymptotic behavior of observables of hard sphere fluids. *Adv. Math. Phys.* 2018. **2018**. 6252919. 11 p. https://doi.org/10.1155/2018/6252919
14. Prigogine I. Non-equilibrium statistical mechanics. New York: John Wiley & Sons, 1962. 328 p.
15. Gerasimenko V.I., Ryabukha T.V., Stashenko M.O. On the structure of expansions for the BBGKY hierarchy solutions. *J. Phys. A: Math. Gen.* 2004. **37**. P. 9861—9872. https://doi.org/10.1088/0305-4470/37/42/002

Надійшло до редакції 21.12.2021

REFERENCES

1. Cercignani, C., Gerasimenko, V. I. & Petrina, D. Ya. (2012). Many-particle dynamics and kinetic equations. Amsterdam: Springer.
2. Petrina, D. Ya. & Gerasimenko, V. I. (1990). Mathematical problems of statistical mechanics of a system of elastic balls. Russ. Math. Surv., 5, No. 3, pp. 153-211. https://doi.org/10.1070/RM1990v045n03ABEH002360
3. Gallagher, I., Saint-Raymond, L. & Texier, B. (2014). From Newton to Boltzmann: hard spheres and short-range potentials. Zürich Lectures in Advanced Mathematics (vol. 18). Zürich: EMS Publ. House.

4. Bodineau, T., Gallagher, I., Saint-Raymond, L. & Simonella, S. (2020). Fluctuation theory in the Boltzmann–Grad limit. J. Stat. Phys., 180, pp. 873-895. https://doi.org/10.1007/s10955-020-02549-5
5. Duerinckx, M. & Saint-Raymond, L. (2021). Lenard–Balescu correction to mean-field theory. Probab. Math. Phys., 2, No. 1, pp. 27-69. https://doi.org/10.2140/pmp.2021.2.27
6. Duerinckx, M. (2021). On the size of chaos via Glauber calculus in the classical mean-field dynamics. Commun. Math. Phys., 382, pp. 613-653. https://doi.org/10.1007/s00220-021-03978-3
7. Simonella, S. (2014). Evolution of correlation functions in the hard sphere dynamics. J. Stat. Phys., 155, No. 6, pp. 1191-1221. https://doi.org/10.1007/S10955-013-0905-7
8. Pulvirenti, M. & Simonella, S. (2016). Propagation of chaos and effective equations in kinetic theory: a brief survey. Math. Mech. Complex Syst., 4, No. 3-4, pp. 255-274. https://doi.org/10.2140/memocs.2016.4.255
9. Ivankiv, L. I., Prykarpatsky, Y. A., Samoilenko, V. H. & Prykarpatski, A. K. (2021). Quantum current algebra symmetry and description of Boltzmann type kinetic equations in statistical physics. Symmetry, 13, No. 8, 1452. https://doi.org/10.3390/sym13081452
10. Gerasimenko, V. I. & Gapyak, I. V. (2014). The non-Markovian Fokker–Planck kinetic equation for a system of hard spheres. Dopov. Nac. akad. nauk Ukr., No. 12, pp. 29-35 (in Ukrainian). https://doi.org/10.15407/dopovidi2014.12.029
11. Gerasimenko, V. I. & Gapyak, I. V. (2012). Hard sphere dynamics and the Enskog equation. Kinet. Relat. Models., 5, No. 3, pp. 459-484. https://doi.org/10.3934/krm.2012.5.459
12. Gerasimenko, V. I. & Gapyak, I. V. (2021). Boltzmann–Grad asymptotic behavior of collisional dynamics. Rev. Math. Phys., 33, 2130001. https://doi.org/10.1142/S0129055X21300016
13. Gerasimenko, V. & Gapyak, I. (2018). Low-density asymptotic behavior of observables of hard sphere fluids. Adv. Math. Phys., 2018, 6252919. https://doi.org/10.1155/2018/6252919
14. Prigogine, I. (1962). Non-equilibrium statistical mechanics. New York: John Wiley & Sons.
15. Gerasimenko, V. I., Ryabukha, T. V. & Stashenko, M. O. (2004). On the structure of expansions for the BBGKY hierarchy solutions. J. Phys. A: Math. Gen., 37, pp. 9861-9872. https://doi.org/10.1088/0305-4470/37/42/002

Received 21.12.2021

I.V. Gapyak[1], https://orcid.org/0000-0003-2102-1583
V.I. Gerasimenko[2], https://orcid.org/0000-0003-2577-2237

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv
[2] Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kyiv

E-mail: gapjak@ukr.net, gerasym@imath.kiev.ua

HIERARCHY OF EVOLUTION EQUATIONS
FOR CORRELATIONS OF HARD-SPHERE FLUIDS

In the communication we discuss an approach to describing the correlations in a system of many hard spheres based on the hierarchy of evolution equations for correlation functions. It is established that the constructed dynamics of correlations underlies the description of the dynamics of both finitely and infinitely many hard-spheres governed by the BBGKY hierarchies for reduced distribution functions or reduced correlation functions.

Keywords: *BBGKY hierarchy, Liouville hierarchy, correlation function.*