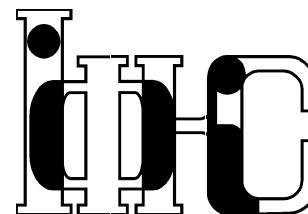


Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

Йосип Андрійович Гуменюк
Михайло Васильович Токарчук

КІНЕТИЧНА ТЕОРІЯ ГУСТИХ ГАЗОВИХ СУМІШЕЙ З
БАГАТОСХОДИНКОВИМ ПОТЕНЦІАЛОМ ВЗАЄМОДІЇ:
НОРМАЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК І КОЕФІЦІЄНТИ ПЕРЕНОСУ

Роботу отримано 21 жовтня 2011 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділів квантово-статистичної теорії процесів каталізу та теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України
© Усі права застережені

ICMP-11-06U

Й.А.Гуменюк, М.В.Токарчук

КІНЕТИЧНА ТЕОРІЯ ГУСТИХ ГАЗОВИХ СУМІШЕЙ З
БАГАТОСХОДИНКОВИМ ПОТЕНЦІАЛОМ ВЗАЄМОДІЇ:
НОРМАЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК І КОЕФІЦІЄНТИ ПЕРЕНОСУ

ЛЬВІВ

УДК: 533.7; 532.7; 533.1

PACS: 05.20.Dd, 51.10.+y, 05.60.Cd, 05.60.-k

Кінетична теорія густих газових сумішей з багатосходинковим потенціалом взаємодії: нормальний розв'язок і коефіцієнти переносу

Й.А.Гуменюк, М.В.Токарчук

Анотація. Запропоноване раніше формулювання кінетичної теорії для густих газів з багатосходинковим потенціалом взаємодії поширено на випадок суміші. Наведено гідродинамічні рівняння балансу для густин маси, імпульсу та енергії. У першому порядку модифікованого методу Чепмена-Енскога знайдено лінійні за градієнтами розв'язки для одночастинкових функцій розподілу та оберненої потенціальної квазітемператури. За їх допомогою розраховано внески до дифузійного потоку маси, тензора напружень і потоку тепла. Отримано аналітичні вирази для лінійних коефіцієнтів переносу, що описують явища в'язкості, теплопровідності й дифузії.

Kinetic theory for dense gaseous mixtures with multistep potential of interaction: The normal solution and transport coefficients

Y.A.Humenyuk, M.V.Tokarchuk

Abstract. The previously proposed formulation of the kinetic theory for dense gases with the multistep potential of interaction is extended to the case of a mixture. Hydrodynamic balance equations for the mass, momentum, and energy densities are given. In the first order of the modified Chapman-Enskog method, linear in gradients solutions for the one-particle distribution functions and the inverse potential quasitemperature are found. With their aid, contributions to the diffusion flux of mass, the stress tensor, and the heat flux are calculated. These produce analytical expressions for transport coefficients which describe diffusion, viscosity, and thermal conductivity phenomena.

Подається в Український фізичний журнал
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2011
Institute for Condensed Matter Physics 2011

Зміст

1. Вступ	2
2. Кінетичний опис і рівняння гідродинаміки	4
2.1. Кінетичне рівняння	6
2.2. Рівняння для густини потенціальної енергії	8
2.3. Співвідношення замикання	10
2.4. Гідродинамічний рівень опису	12
3. Нормальний розв'язок	14
3.1. Модифікований метод Чепмена-Енскога	14
3.1.1. Локалізація	16
3.1.2. Рівняння нульового і першого порядків	19
3.1.3. Розклади для гідродинамічних густин	21
3.2. Нульове наближення	23
3.2.1. Кінетичний рівень опису	23
3.2.2. Розрахунок потоків	27
3.3. Перший порядок: кінетичний рівень опису	31
3.3.1. Кінетичне рівняння у першому порядку	31
3.3.2. Об'єднання внесків	46
3.3.3. Додаткові умови першого порядку	49
3.3.4. Рівняння для e^P у першому порядку	52
3.4. Системи інтегральних рівнянь	58
3.4.1. Перенормування	58
3.4.2. Операторна частина	59
3.4.3. Неоднорідні частини	62
4. Потоки у першому порядку і лінійні коефіцієнти переносу	65
4.1. Кінетичні внески у потоки	66
4.2. Внески у потоки від взаємодії	68
4.2.1. Розрахунок внесків $P^{1\phi}$ та $\mathbf{q}_k^{1\phi}$	68
4.2.2. Розрахунок внесків $P^{1\nabla}$ та $\mathbf{q}_k^{1\nabla}$	72
4.2.3. Розрахунок внесків P^{1g} та \mathbf{q}_k^{1g}	75
4.3. Об'єднання внесків	80
5. Висновки	82

A. Термодинамічні співвідношення для локально-рівноважних станів	82
A.1. Односортна система	82
A.2. Кількасортна суміш	85
B. Функціонал парної функції розподілу	89
B.1. Локально-рівноважна функція Майєра для БСП	89
B.2. Градієнтний розклад парної функції розподілу	91
B.3. Груповий розклад функціонала g_2^{ij} по густині	94
B.4. Зауваження про симетризацію	96
B.5. Перетворення $I_{(1)}^{g,\beta_1}$ в односортному випадку	97
C. Функції швидкостей	98
C.1. Змінні центра мас	99
C.2. Швидкості після зіткнень	100
C.3. Локально-рівноважний розподіл Максвелла	101
C.4. Многочлени Соніна-Лягєра	102
C.5. Вирази ϕ_i та ϕ_j через \mathcal{G} та g	102
C.6. Інтегральні дужки	103
D. Інтеграли	106
D.1. Інтегрування по $\hat{\sigma}$	106
D.1.1. Випадок без кореня	107
D.1.2. Випадок із коренем	109
D.1.3. Розрахунок інтегралів j_m^{pQ}	110
D.2. Інтегрування по кутових змінних \hat{c} і \hat{G}	112
D.3. Інтегрування по модулях G і c	114
D.3.1. Опис позначень	114
D.3.2. Результати для непарних індексів	115
D.3.3. Результати для парних індексів	118
D.3.4. Зведення деяких інтегралів до гамма-функцій	120
D.4. Повна і неповні гамма-функції	122
Література	123

1. Вступ

Побудова кінетичної теорії для звичайних плавних потенціалів при високих густинах суттєво ускладнюється завдяки зіткненням вищої кратності. Тому її зазвичай розвивають для модельних потенціалів у наближенні парних зіткнень. Відносна простота і помітний успіх

кінетичної теорії Енскога для системи твердих кульок [1–5] та сумішей [7–9] сприяють тому, що вона служить основою і зразком при побудові теорій для потенціалів, що краще відтворюють реальні взаємодії, зокрема, міжчастинкове притягання.

Одним з перших таких прикладів може бути кінетична теорія Райса-Олнета [10, 11], у якій внесок типу Фокєра-Планка моделює рух частинок як броунівський в інтервалах між зіткненнями на твердій серцевині. З цією ж метою для потенціала “тверді кульки + плавний хвіст” було запропоновано кінетичну теорію середнього поля [12–15], внесок від хвоста у якій враховується через самоузгоджений інтеграл зіткнень. Хоч він не виробляє ентропії [16] і впливає непрямо на коефіцієнти переносу (через термодинамічні величини), проте ця теорія покращує [12, 16, 17] результати для коефіцієнтів переносу густих газів та рідин.

Потенціал прямокутної ями (ПЯ) слід вважати кращим в тому розумінні, що його інтеграл зіткнень явно враховує парні процеси на відстанях міжмолекулярного притягання і тому, подібно до інтеграла зіткнень Енскога, зумовлює вироблення ентропії. Дотримання закону збереження енергії в парних процесах дає змогу виявити структуру кінетичної теорії, характерну для густих систем і деякою мірою з’ясувати роль далекосяжної взаємодії у процесах переносу та релаксації.

У найперших формулюваннях кінетичної теорії систем з потенціалом прямокутної ями [18] і сумішей [19, 20], відомих як теорія DRS, знехтувано збереженням енергії, а для парної функції розподілу прийнято локально-рівноважне наближення в дусі Енскога. Пізніше ці недоліки було усунуто [21] так, що відповідна кінетична теорія (Revised DRS) задовольняє H -теорему, а для парного розподілу використано наближення неоднорідної рівноваги, аналогічне до запропонованого для твердих кульок [4]. Тут же враховано рівняння балансу для густини енергії взаємодії, яке доповнює кінетичне рівняння для одночастинкової функції розподілу. Це якісно міняє структуру теорії, зумовлюючи появу додаткового нерівноважного параметра — оберненої потенціальної квазітемператури. При цьому виникають додаткові внески в деякі коефіцієнти переносу, головним чином, в об’ємну в’язкість [16, 22]. Дослідження спектру лінеаризованої теорії виявило [23], однак, моду обмінного типу, відсутню в системах з плавною взаємодією, і тому приписану розривності потенціала ПЯ.

Багатосходинковий (БС) потенціал точніше ніж прямокутна яма відтворює реальні взаємодії, а побудована для нього кінетична теорія [24–26] дає краще узгодження результатів числового розрахун-

ку [27,28] для коефіцієнтів переносу з експериментом. Для неї також доведено H -теорему [25,26]. Дуже корисною рисою БС потенціала є більша його варіативність у порівнянні з прямокутною ямою. Так, збільшуючи кількість сходинок і одночасно зменшуючи відстані між ними, можна в границі отримати довільний наперед заданий потенціал. Показано [24,27], що відповідний інтеграла зіткнень переходить в інтеграл зіткнень кінетичної теорії середнього поля [12,14].

Завдання цієї роботи полягає в тому, щоб узагальнити попередні в кількох аспектах. По-перше, записати теорію і вивести результати для коефіцієнтів переносу кількаторної суміші і, до того ж, з БС потенціалом. Досі для нього розглядалася система частинок одного сорту. У випадку потенціала ПЯ відомо результати [19,20] для двосорної суміші, отримані, однак, без збереження енергії (в межах теорії DRS, [18]). По-друге, для парної функції розподілу суміші використати наближення неоднорідної рівноваги (як у теоріях RET [4] і RDRS [21]), яке забезпечувало б виконання співвідношень взаємності Онзагера. У попередніх працях цього теж немає. По-третє, надати викладу й результатам повнішої форми, навівши більш детально проміжні вирази, які, на жаль, відсутні у літературі як для потенціала ПЯ, так і для БС потенціала.

Отже, після формулювання рівнянь кінетичного рівня опису і умови замикання у §2, ми шукаємо нормальний розв'язок відповідної системи кінетичних рівнянь за допомогою модифікованого методу Чепмена-Енскога (§3). Тут у першому порядку по градієнтах отримуємо інтегральні рівняння для поправок до одностинкових функцій розподілу, а з рівняння для густини потенціальної енергії — вираз для поправки до оберненої потенціальної квазітемператури. У §4 розраховано внески до потоків, з яких слідує вирази для коефіцієнтів переносу. Завершують основну частину загальні висновки (§5).

У додатках наведено формулювання локальної термодинаміки сумішей (§A), градієнтний і груповий розклади парної функції розподілу (§B), довідкові вдомості про функції швидкостей (§C) та розрахунок необхідних інтегралів (§D).

2. Кінетичний опис і рівняння гідродинаміки

У кінетичній теорії систем із притяганням — наприклад, типу потенціала прямокутної ями чи багатосходинкового (БС) потенціала — процеси взаємодії на відстані (тобто, не при контакті твердих серцевин) враховуються необоротним чином. До того ж, при помірних

і високих густинах вже не можна нехтувати внеском від взаємодії у густину енергії. Тому на кінетичному рівні опису, кінетичне рівняння для одностинкової функції розподілу треба доповнювати рівнянням переносу для густини потенціальної енергії взаємодії. Цей момент якісно міняє картину кінетичного етапу еволюції [23] порівняно із системою твердих кульок і, зокрема, має враховуватись при побудові кінетичної теорії густих систем із реалістичною плавною взаємодією [29].

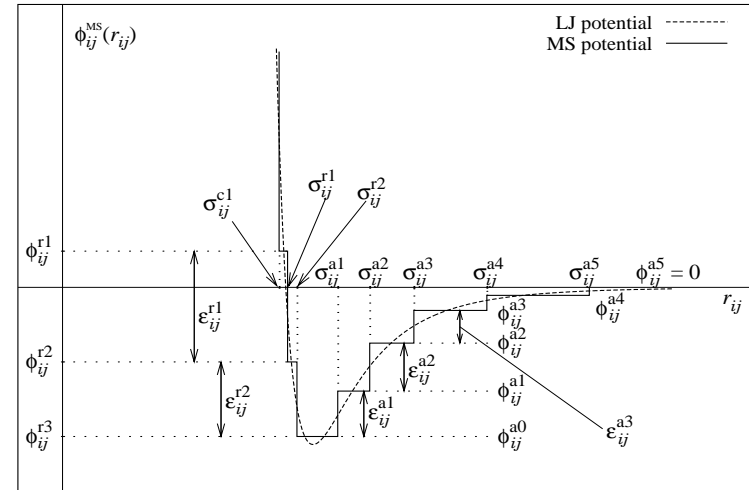


Рис. 1. Модельний багатосходинковий потенціал.

Розгляньмо M -сортну модельну систему класичних частинок, які взаємодіють за допомогою парних багатосходинкових потенціалів. Приблизно повторюючи хід реалістичного потенціала, багатосходинковий ϕ_{ij}^{MS} складається з твердої серцевини (позначеної через 'c') та системи відштовхувальних (r) і притягальних (a) стінок скінченної висоти (Рис. 1). Геометрія БС потенціала визначається такими параметрами [30,31]: σ_{ij}^{c1} , σ_{ij}^{r1} , σ_{ij}^{a1} — розташування нескінченно високої стінки твердої серцевини, відштовхувальних і притягальних стінок скінченної висоти, відповідно; $K_{ij}^c = 1$, K_{ij}^r та K_{ij}^a — кількості відповідних стінок. Параметри ϕ_{ij}^{rl} , ϕ_{ij}^{al} позначають значення БС потенціала між стінками, а

$$\epsilon_{ij}^{rl} = \phi_{ij}^{rl} - \phi_{ij}^{r,l+1}, \quad \epsilon_{ij}^{al} = \phi_{ij}^{al} - \phi_{ij}^{a,l-1} \quad (1)$$

характеризують висоти стінок. Їх означено так, що $\epsilon_{ij}^r, \epsilon_{ij}^a > 0$. Плато потенціала нумеруються в бік зростання міжчастинкової відстані: для відштовхувальної частини — починаючи від стінки твердої серцевини, для притягальної — від першої притягальної стінки.

2.1. Кінетичне рівняння

Вперше кінетичну теорію для БС потенціала було розглянуто у працях [24–28] для односортної системи. У випадку суміші рівняння для одночастинкової функції розподілу f_i частинок сорту i має вигляд [30, 31]:

$$[\partial_t + \mathbf{v}_i \cdot \nabla] f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) = I_i[f_2], \quad (2)$$

де $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$, $\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$. З частинкою сорту i можуть взаємодіяти частинки усіх сортів, тому $I_i[f_2] = \sum_{j=1}^M I_{ij}[f_2^{ij}]$, де f_2^{ij} — двочастинкові функції розподілу, співвідношення замикання для яких наведено нижче. Відповідно до структури БС потенціала, кожен з інтегралів зіткнень I_{ij} складається з двох дещо різних внесків, а саме, від зіткнень при контакті твердих серцевин та від процесів на стінках скінченної висоти. Перший подібний до інтеграла зіткнень Енскога [1–4, 9] для твердих кульок, а другий — до інтеграла зіткнень, введеного для потенціала прямокутної ями [18, 21].

Попри свої відмінності, їх можна записати спільною формулою, ввіши [30, 31] параметри *типу стінки* $q = \{c, r, a\}$ і *типу процесу* p на ній. Для с-стілки можливий лише парний процес відбиття, який будемо позначати як \ominus . Для r- і a-стінок можливі три типи (ij) -процесів, залежно від співвідношення між значенням кінетичної енергії відносного руху частинок та висоти стінки, а також від характеру взаємного руху (зближення чи віддалення), а саме: *опускання* $p = \oplus$, *підйом* $p = \ominus$ та *відбиття* $p = \otimes$. Об'єднання внесків від перелічених процесів можна подати так:

$$I_{ij}[f_2^{ij}] = \sum_q \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_p \circ|\oplus, \ominus, \otimes I_{ij}^{qlp}[f_2^{ij}], \quad (3)$$

де мається на увазі, що на стінці типу $q = c$ може відбуватися лише процес \ominus , а коли $q = \{r, a\}$ — враховуються три інші процеси. Сумування по l має враховувати всі стінки кожного типу, тому ми часто будемо писати \sum_l . Те саме стосується сум по сортах.

Інтеграли зіткнень I_{ij}^{qlp} до певної міри одноманітні, хоч відрізняються між собою в деталях. Приписавши символічним “значенням”

параметрів q та p формальні числові значення

$$q = \begin{pmatrix} c \\ r \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ +1 \end{pmatrix}, \quad p = \begin{pmatrix} \oplus & \text{опускання} \\ \ominus & \text{підйом} \\ \otimes & \text{відбиття} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

можемо записати таку спільну формулу:

$$I_{ij}^{qlp}[f_2^{ij}] = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{ji\sigma} \theta^p(v_{ji\sigma}) \times \\ \times [f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i^{qlp}, \mathbf{r} + \gamma_p \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{v}_j^{qlp}) \gamma_p^* - f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r} - \gamma_p \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{v}_j) \gamma_p], \quad (5)$$

де $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j$ та $\mathbf{v}_i^{qlp}, \mathbf{v}_j^{qlp}$ — швидкості частинок до і після процесу p на стінці (q, l) , пояснені нижче; $\hat{\sigma}$ — одиничний вектор взаємного розташування частинок, $\sigma_{ij}^{ql} = \sigma_{ij}^{ql} \hat{\sigma}$, $v_{ji\sigma} = (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \hat{\sigma}$. Характерні функції $\theta^\ominus, \theta^\otimes, \theta^\oplus$ і θ^\ominus задають обмеження по проекції відносної швидкості $v_{ji\sigma}$ і означають відповідно

$$\theta(v_{ji\sigma}), \quad \theta(v_{ji\sigma}) \theta(v_{ij}^{ql} - v_{ji\sigma}) \quad \theta(v_{ji\sigma}), \quad \theta(v_{ji\sigma} - v_{ij}^{ql}).$$

Оскільки f_2^{ij} розривна в координатному просторі у точках розриву потенціала ϕ_{ij}^{MS} , то параметри γ_p і γ_p^* покликані задавати у прямому й зворотному зіткненнях граничні значення двочастинкових функцій розподілу, означені як

$$f_2^{ij}(\mathbf{r}, \cdot, \mathbf{r} + \sigma, \cdot)^\pm \equiv \lim_{\delta \rightarrow 0^+} f_2^{ij}(\mathbf{r}, \cdot, \mathbf{r} + (\sigma \pm \delta) \hat{\sigma}, \cdot). \quad (6)$$

Для допустимих значень p вони дорівнюють:

$$\gamma_{\{\ominus, \otimes, \oplus, \ominus\}} = \{+1, -q, q, -q\}, \quad \gamma_{\{\ominus, \otimes, \oplus, \ominus\}}^* = \{+1, -q, -q, q\}.$$

Крім того, як видно з ф. (5), параметр γ_p використовується ще для визначення просторових позицій частинки j .

Закони парного зіткнення для процесів \ominus та \otimes такі ж, як і для твердих кульок, тобто $\mathbf{v}_i^{c1\ominus} = \mathbf{v}_i^{ql\otimes} = \mathbf{v}'_i$ та $\mathbf{v}_j^{c1\ominus} = \mathbf{v}_j^{ql\otimes} = \mathbf{v}'_j$, де:

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i + 2M_j \mathbf{v}_{ji} \cdot \hat{\sigma} \hat{\sigma}, \quad \mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j - 2M_i \mathbf{v}_{ji} \cdot \hat{\sigma} \hat{\sigma}; \quad (7)$$

тут, наприклад, $M_j = m_j / (m_i + m_j)$ — відносна маса, а m_j — маса частинки сорту j . Швидкості після процесів \oplus і \ominus визначаються так:

$$\mathbf{v}_i^{qlp} = \mathbf{v}_i + M_j [v_{ji\sigma} - \sqrt{v_{ji\sigma}^2 + p(v_{ij}^{ql})^2}] \hat{\sigma}, \quad (8) \\ \mathbf{v}_j^{qlp} = \mathbf{v}_j - M_i [v_{ji\sigma} - \sqrt{v_{ji\sigma}^2 + p(v_{ij}^{ql})^2}] \hat{\sigma},$$

де $v_{ij}^{ql} = (2\epsilon_{ij}^{ql}/\mu_{ij})^{1/2}$ — висота стінки в одиницях швидкості, $\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ — приведена маса.

Підсумовуючи, зауважмо, що *числові* значення параметрів p та q використовуються у ф. (5) щоб визначати тип θ -функції, точку розташування частинки j у функції f_2^{ij} та її граничні значення через параметри γ_p та γ_p^* . У всіх інших місцях, параметри q і p слід вважати *символами*. Подаймо ще явний вигляд внесків I_{ij}^{qlp} :

$$I_{ij}^{c1\ominus}[f_2^{ij}] = (\sigma_{ij}^{c1})^2 \int d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{ji\sigma} \theta(v_{ji\sigma}) \times \quad (9)$$

$$\times [f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_i, \mathbf{r} + \sigma_{ij}^{c1}, \mathbf{v}'_j)^+ - f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r} - \sigma_{ij}^{c1}, \mathbf{v}_j)^+],$$

$$I_{ij}^{ql\otimes}[f_2^{ij}] = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{ji\sigma} \theta(v_{ji\sigma}) \theta(v_{ij}^{ql} - v_{ji\sigma}) \times \quad (10)$$

$$\times [f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_i, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{v}'_j)^{-q} - f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r} + q\sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{v}_j)^{-q}],$$

$$I_{ij}^{qlp}[f_2^{ij}] = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{ji\sigma} \theta(v_{ji\sigma} - \delta_{-1,p} v_{ij}^{ql}) \times \quad (11)$$

$$\times [f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i^{qlp}, \mathbf{r} + qp\sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{v}_j^{qlp})^{-qp} - f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r} - qp\sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{v}_j)^{qp}],$$

де останній вираз стосується процесу \oplus чи \ominus і в ньому використано символ Кронекера в аргументі θ -функції.

Інтегралі зіткнень можна згрупувати за типом процесу, просумувавши по відповідних стінках:

$$I_{ij} = I_{ij}^{\ominus} + I_{ij}^{\otimes} + I_{ij}^{\oplus} + I_{ij}^{\ominus}, \quad (12)$$

де $I_{ij}^p = \sum_q \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{a}} I_{ij}^{qlp}[f_2^{ij}]$; тут мається на увазі, що q приймає значення *або с*, *або* $\{\mathbf{r}, \mathbf{a}\}$.

Миттєві процеси на стінках БС потенціала в деякій мірі відповідають незавершеним траєкторіям розсіяння в області плавної зміни міжмолекулярного потенціала реальної густої системи. Замість того, щоб враховувати складні внески від цих незавершених розсіянь, ми ефективно заміняємо їх на миттєві процеси на сходинах.

2.2. Рівняння для густини потенціальної енергії

Введімо позначення для усереднень із f_1^i та f_2^{ij} , які використовуються при розгляді гідродинамічних густин a унарного й бінарного

типів:

$$\langle \psi_a^i \rangle_{\mathbf{v}_i}^i \equiv \int d\mathbf{v}_i f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) \psi_a^i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t), \quad (13)$$

$$\langle \psi_a^{ij} \rangle_{\mathbf{v}_i x_j}^{2,ij} \equiv \int d\mathbf{v}_i dx_j f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, x_j, t) \psi_a^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, x_j, t), \quad (14)$$

де $x_j \equiv \{\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j\}$ — змінна фазового простору. У верхньому індексі знака усереднення вказано тип функції та сорти, а в нижньому — змінні інтегрування.

Густий газ чи рідина описуються на гідродинамічному рівні густинами числа частинок, імпульсу та *повної* енергії. Для визначення останньої недостатньо одночастинкової функції розподілу, тому рівняння для f_i має доповнюватися на кінетичному рівні рівнянням балансу для густини потенціальної енергії взаємодії:

$$e^p(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{i,j=1}^M \langle \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{ij}) \rangle_{\mathbf{v}_i x_j}^{2,ij} \Big|_{\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}}, \quad (15)$$

де $r_{ij} \equiv |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Його можна вивести з другого рівняння ланцюжка ББГКІ, записаного для системи з БС потенціалом. У роботах [30,31] наведено евристичне виведення цього рівняння на основі уявлень про кількість прямих і зворотніх зіткнень:

$$\partial_t e^p + \nabla \cdot [\mathbf{V} e^p + \mathbf{q}_p] = s_p, \quad (16)$$

де $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ — гідродинамічна швидкість, означена після ф. (24), а потік (у локальній системі відліку) та джерело потенціальної енергії дорівнюють:

$$\mathbf{q}_p(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j=1}^M \langle \frac{1}{2} \mathbf{c}_i \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{ij}) \rangle_{\mathbf{v}_i x_j}^{2,ij} \Big|_{\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}}, \quad (17)$$

$$s_p(\mathbf{r}, t) = - \sum_{i,j=1}^M \sum_q \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{a}} \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_p \frac{1}{2} p \epsilon_{ij}^{ql} (\sigma_{ij}^{ql})^2 \times \quad (18)$$

$$\times \int d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{ji\sigma} \theta^p(v_{ji\sigma}) f_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r} - qp\sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{v}_j)^{qp};$$

тут $\mathbf{c}_i \equiv \mathbf{v}_i - \mathbf{V}$ — теплова швидкість. Джерело, подібно до I_i , є функціоналом від двочастинкових функцій розподілу $s_p = s_p[f_2]$. Рівняння (16) — аналог відповідного рівняння для систем із потенціалом прямокутної ями [16, 21, 22].

2.3. Співвідношення замикання

Всяке замикання повинно мати симетрійні властивості функцій f_2^{ij} , на яких, зокрема, ґрунтується виведення рівнянь балансу (див. §2.4). Замикання вибираємо, нехтуючи кореляціями в просторі швидкостей:

$$f_2^{ij}(x_i, x_j, t) \approx \bar{f}_2^{ij}(x_i, x_j, t) \equiv f_i(x_i, t) f_j(x_j, t) g_2^{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, t). \quad (19)$$

Парна функція розподілу g_2^{ij} функціонально залежить від густин числа частинок $\{n\} \equiv \{n_1(\mathbf{r}, t), \dots, n_M(\mathbf{r}, t)\}$ й оберненої потенціальної квазітемператури $\beta^P(\mathbf{r}, t)$,

$$g_2^{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, t) = g_2^{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j | \{n\}, \beta^P), \quad (20)$$

так, що вона має [4, 21] такий самий груповий розклад (n -вузли, f -зв'язки¹), як у рівновазі. Однак, у нерівноважному випадку функція $n_k(\mathbf{r}, t)$ заміняє змінну n_k , а $\beta_2^P(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t) = \frac{1}{2}[\beta^P(\mathbf{r}', t) + \beta^P(\mathbf{r}'', t)]$ заміняє $1/k_B T$ на кожному зв'язку.

Це замикання обґрунтовується теоретично з високим ступенем строгості. Нехтування парної кореляції швидкостей (19) безпосередньо слідує з квазірівноважного розподілу

$$\varrho_q(x^N; t) = \exp \left\{ -\Phi(t) - \sum_{i=1}^M \int dx a_i(x, t) \hat{n}_i(x) - \int d\mathbf{r} \beta^P(\mathbf{r}, t) \hat{e}^P(\mathbf{r}) \right\},$$

який максимізує інформаційну ентропію при додаткових умовах, що він правильно відтворює змінні кінетичного рівня опису $\{f\}$ та e^P . Тут $\Phi(t)$ — функціонал Масьє-Планка, $a_i(x, t)$ — лягранжеві множники, спряжені до одночастинкових функцій розподілу, $\hat{n}_i(x)$ — мікроскопічна густина числа частинок сорту i у фазовому просторі, $\hat{e}^P(\mathbf{r})$ — мікроскопічна густина потенціальної енергії взаємодії. Обернена потенціальна квазітемпература β^P входить у ϱ_q як множник Лягранжа, спряжений до e^P .

Такий принцип максимізації застосовано при формулюванні кінетичних теорій для систем з потенціалами твердих кульок [14], “тверді кульки + плавний хвіст” [13, 14] і прямокутної ями [21, 23].

Ці ж ідеї використано в рамках більш загального методу нерівноважного статистичного оператора [32, 33] у формулюванні модифікованих граничних умов [34] до ланцюжка рівнянь ББГКІ, які виступають як засіб врахувати кореляції, зумовлені існуванням найповільніших гідродинамічних змінних, що задовольняють локальні

¹Тут f позначає рівноважну функцію Майєра $f_{ij}^M(r) \equiv e^{-\phi_{ij}(r)/k_B T} - 1$.

закони збереження. Простіші граничні умови запропоновано в праці [35]. Для односорної системи з БС потенціалом наведене замикання теж отримано [25, 26] за допомогою введення модифікованих граничних умов. Завдяки β^P прийнята функціональна гіпотеза (19) і (20) для f_2^{ij} не є боголюбівською.

Припущення про форму g_2^{ij} у вигляді групового розкладу вперше введено для твердих кульок [4] і застосовувалося для частинок з потенціалом прямокутної ями [21].

У загальних рисах прийняте замикання має вигляд наближення парних зіткнень, хоч і децю модифікованого. Всі внески до інтеграла зіткнень I_i стають білінійними операторами, а джерело s_p — білінійним функціоналом функцій f_i . Від оберненої квазітемператури вони залежать параметрично через парні функції розподілу g_2^{ij} :

$$I_i[f, f; \beta^P], \quad s_p[f, f; \beta^P].$$

Надалі ми не будемо зазначати залежності від β^P . Замикання (19), (20) має ще ту особливість, що не виражається прямо через змінну опису e^P . Як наслідок, хоч самі рівняння записані для $\{f\}$ та e^P , розв'язки отримуватимемо для $\{f\}$ і β^P . Шукаючи нормальні розв'язки, нема необхідності знати рівняння еволюції для $\beta^P(\mathbf{r}, t)$. Проте, його можна отримати, виходячи з рівняння для $e^P(\mathbf{r}, t)$ й використовуючи функціональний зв'язок між e^P й β^P .

Ще зауважмо, що отримана система рівнянь для $\{f\}$ та e^P може застосовуватися тільки в області високих густин, коли внесками від послідовних процесів на 2-х і більше сусідніх сходинках можна знехтувати (наближення парних зіткнень стосовно кожної сходинки). Це наближення зумовлює обмеження на густину системи [27, 28], яке для сумішей модифікується до:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_m^{c1}} \gg \frac{1}{4\sqrt{2}\pi n(\sigma_m^{c1})^3 g_2^m(\sigma_m^{c1})^+}, \quad (21)$$

де $\Delta\sigma$ — найменша відстань між стінками, $\sigma_m^{c1} \equiv \min\{\sigma_{ij}^{c1}\}$, n — повна густина системи, $g_2^m(\sigma_m^{c1})^+ \equiv \min\{g_2^{ij}(\sigma_m^{c1})^+\}$ — найменше з контактних значень парних функцій розподілу.

Наостанок відзначмо, що функціонал g_2^{ij} розривний у точках розриву БС потенціала і задовольняє співвідношення:

$$g_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql} | \{n\}, \beta^P)^{-q} = e^{\beta_2^P(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}) \epsilon_{ij}^{ql}} g_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql} | \{n\}, \beta^P)^q. \quad (22)$$

2.4. Гідродинамічний рівень опису

Повні густини. На гідродинамічному рівні система описується рівняннями балансу для густин збережуваних величин — маси ρ , імпульсу \mathbf{p} та енергії e . З кінетичного рівняння (2) виводяться рівняння лише для ρ , \mathbf{p} і густини *кінетичної* енергії e^k , які є одночастинкові:

$$\begin{bmatrix} \rho(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) \\ e^k(\mathbf{r}, t) \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^M \left\langle \begin{bmatrix} m_i \\ m_i \mathbf{v}_i \\ \frac{1}{2} m_i v_i^2 \end{bmatrix} \right\rangle_{\mathbf{v}_i}^i. \quad (23)$$

Їхні рівняння балансу у випадку суміші отримано у [30, 31]:

$$\partial_t \begin{bmatrix} \rho \\ \mathbf{p} \\ e^k \end{bmatrix} + \nabla \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{V}\rho \\ \mathbf{V}\mathbf{p} + \mathbf{P} \\ \mathbf{V}e^k + \mathbf{P} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ s_k \end{bmatrix}, \quad (24)$$

де під дивергенцією виділено конвективні потоки, а $\mathbf{V} \equiv \mathbf{p}/\rho$ — гідродинамічна швидкість. Тензор напружень \mathbf{P} і тепловий потік \mathbf{q}_k (що стосується e^k) складаються із внесків кінетичного типу і внесків від взаємодії (позначені верхніми індексами “k” і “MS”):

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^k + \mathbf{P}^{\text{MS}}, \quad \mathbf{q}_k = \mathbf{q}_k^k + \mathbf{q}_k^{\text{MS}}.$$

Останні, своєю чергою, зумовлені відштовхуванням на твердій серцевині (індекс \odot) і процесами на сходінках скінченної висоти: $\mathbf{P}^{\text{MS}} = \mathbf{P}^{\odot+\otimes+\oplus+\ominus}$, $\mathbf{q}_k^{\text{MS}} = \mathbf{q}_k^{\odot+\otimes+\oplus+\ominus}$. Явні вирази для усіх внесків, записані через швидкості у локальній рухомій системі відліку \mathbf{c}_i та \mathbf{c}_j , мають такий вигляд [30, 31]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{q}_k \end{pmatrix}^k = \sum_i \left\langle \begin{pmatrix} m_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \\ \frac{1}{2} m_i c_i^2 \mathbf{c}_i \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbf{c}_i}^i, \quad (25)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{q}_k \end{pmatrix}^p = \sum_{ij} \sum_q \sum_l^{c|\mathbf{r}, \mathbf{a}} \gamma_p \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 \int d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p (c_{ji\sigma}) \hat{\sigma} \times \quad (26)$$

$$\times \left(\begin{pmatrix} m_i [\mathbf{c}_i^{qlp} - \mathbf{c}_i] \\ \frac{1}{2} m_i [(c_i^{qlp})^2 - c_i^2] \end{pmatrix} \right) \int_0^1 d\lambda f_2^{ij}(\mathbf{r} + \gamma_p \lambda \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{c}_i, \mathbf{r} - \gamma_p \bar{\lambda} \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{c}_j)^{\gamma_p},$$

де внески від процесів \odot , \otimes , \oplus і \ominus виражено спільною формулою, подібно до випадку з інтегралами зіткнень. Тут використано позначення $\bar{\lambda} \equiv 1 - \lambda$, а γ_p , θ^p і \mathbf{c}_i^{qlp} означають те саме, що й у ф. (5).

Джерело s_k у правій частині рівняння (24) отримується таке, що тотожно $s_k = -s_p$, ф. (18). Тому рівняння балансу для густини повної енергії $e \equiv e^k + e^p$ не має джерела:

$$\partial_t e + \nabla \cdot [\mathbf{V}e + \mathbf{P} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}] = 0, \quad (27)$$

що означає збережуваність повної енергії; тут $\mathbf{q} \equiv \mathbf{q}_k + \mathbf{q}_p$ — повний потік тепла.

Подаймо ще рівняння для густини внутрішньої енергії $\varepsilon \equiv \varepsilon^k + \varepsilon^p$, де $\varepsilon^k \equiv e^k - \frac{1}{2} \rho V^2$ — густина внутрішньої кінетичної енергії і $\varepsilon^p \equiv e^p$. Виключім з ф. (24) для e^k конвективний внесок $\frac{1}{2} \rho V^2$, рівняння для якого отримується з рівнянь для густини імпульсу та гідродинамічної швидкості

$$d_t \mathbf{V} + \rho^{-1} \nabla \cdot \mathbf{P} = 0, \quad (28)$$

де $d_t \equiv \partial_t + \mathbf{V} \cdot \nabla$ — так звана матеріальна похідна. Тоді маємо:

$$\partial_t \varepsilon^k + \nabla \cdot [\mathbf{V} \varepsilon^k + \mathbf{q}_k] = s_k - \mathbf{P} : \nabla \mathbf{V}^\dagger. \quad (29)$$

Об'єднавши його з рівнянням (16) для e^p , отримуємо для густини повної внутрішньої енергії:

$$\partial_t \varepsilon + \nabla \cdot [\mathbf{V} \varepsilon + \mathbf{q}] = -\mathbf{P} : \nabla \mathbf{V}^\dagger. \quad (30)$$

Джерело у правій частині зумовлене процесами внутрішнього тертя.

Сортові густини. Густина маси та числа частинок сорту i

$$\rho_i(\mathbf{r}, t) \equiv \langle m_i \rangle_{\mathbf{v}_i}^i, \quad n_i(\mathbf{r}, t) \equiv \langle 1 \rangle_{\mathbf{v}_i}^i, \quad (31)$$

для яких $\sum_i \rho_i = \rho$ і $\sum_i n_i = n$, задовольняють такі рівняння [30, 31]:

$$\partial_t \begin{bmatrix} \rho_i \\ n_i \end{bmatrix} + \nabla \cdot \left[\mathbf{V} \begin{pmatrix} \rho_i \\ n_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{J}_i^{\text{md}} \\ \mathbf{J}_i^{\text{nd}} \end{pmatrix} \right] = 0, \quad (32)$$

де

$$\mathbf{J}_i^{\text{md}}(\mathbf{r}, t) \equiv \langle m_i \mathbf{c}_i \rangle_{\mathbf{c}_i}^i, \quad \mathbf{J}_i^{\text{nd}}(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \mathbf{c}_i \rangle_{\mathbf{c}_i}^i \quad (33)$$

— дифузійні потоки маси та числа частинок, які можна записати як $\mathbf{J}_i^{\text{md}} = \rho_i \mathbf{V}_i^{\text{d}}$ та $\mathbf{J}_i^{\text{nd}} \equiv n_i \mathbf{V}_i^{\text{d}}$, де дифузійна швидкість

$$\mathbf{V}_i^{\text{d}}(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \mathbf{v}_i \rangle_{\mathbf{v}_i}^i / n_i(\mathbf{r}, t) - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t), \quad (34)$$

визначається як середня теплова швидкість сорту: $\mathbf{V}_i^{\text{d}} = \langle \mathbf{c}_i \rangle_{\mathbf{c}_i}^i / n_i$. Вона визначає макроскопічний рух сорту i на тлі гідродинамічного руху всієї суміші. Дифузійні потоки маси задовольняють умову:

$$\sum_{i=1}^M \mathbf{J}_i^{\text{md}} = 0. \quad (35)$$

3. Нормальний розв'язок

На кінетичному рівні суміш описується $M + 1$ змінними:

$$\{f_1, \dots, f_M; e^P\}, \quad (36)$$

причому густина потенціальної енергії особлива тим, що не залежить від швидкостей частинок. На гідродинамічному рівні, коли необхідно описати й міжсортний рух, потрібно $M + 2$ змінних:

$$\{\rho_1, \dots, \rho_M; \mathbf{p}, e\} \quad \text{або} \quad \{\rho_1, \dots, \rho_M; \mathbf{V}, \varepsilon\}, \quad (37)$$

де другий набір відповідає опису в локальній системі відліку. Якщо міжсортні процеси нас не цікавлять, то фігурує лише сумарна густина маси ρ і суміш описується набором із трьох змінних $\{\rho, \mathbf{p}, e\}$. Всі гідродинамічні змінні є функціями часу і просторових координат.

Рівняння балансу для $\{\rho_1, \dots, \rho_M; \mathbf{p}, e\}$ за своєю природою локальні, оскільки описують зміну цих функцій у точці \mathbf{r} і момент часу t за допомогою інших функцій — потоків \mathbf{J}_i^{md} , \mathbf{P} і \mathbf{q} , обчислених також у точці \mathbf{r} і момент часу t . Однак, самі ці рівняння незамкнені, оскільки потоки не відомі. Приймаючи різні умови замикання для f_2^{ij} і застосовуючи різні методи розв'язування рівнянь кінетичного рівня, можна отримати як локальні рівняння переносу, так і просторово-нелокальні, або ж і нелокальні в часі рівняння, тобто, із пам'яттю.

Існує клас розв'язків кінетичних рівнянь, коли функція розподілу шукається у такому вигляді, що залежить від \mathbf{r} і t лише *функціонально* через змінні гідродинамічного рівня. Такі розв'язки називають *нормальними*. У випадку високої густини потрібно модифікувати поняття нормального розв'язку, прийнявши, що усі змінні кінетичного рівня (36) залежать від \mathbf{r} і t функціонально через змінні набору (37):

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) = f_i(\mathbf{v}_i | \{n\}, \mathbf{V}, \varepsilon), \quad (38)$$

$$e^P(\mathbf{r}, t) = e^P[\{n\}, \mathbf{V}, \varepsilon], \quad (39)$$

де замість $\{\rho\}$ використано густини числа частинок $\{n\}$. Нормальні розв'язки описують пізній етап релаксації системи до локально-рівноважного стану [2, 3, 37, 38].

3.1. Модифікований метод Чепмена-Енскога

Функції $\{f\}$ та e^P будемо шукати за допомогою методу послідовних наближень у вигляді розкладів по градієнтах гідродинамічних змінних (37). Він є модифікацією [22] методу, запропонованого Чепменом

і Енскогом для рівняння Больцмана [2, 3, 36, 37]. Отже

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) = f_i^0(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) + \bar{\varepsilon} f_i^1(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) + \dots, \quad (40)$$

$$e^P(\mathbf{r}, t) = e^{P0}(\mathbf{r}, t) + \bar{\varepsilon} e^{P1}(\mathbf{r}, t) + \dots, \quad (41)$$

де степінь формального параметра розкладу $\bar{\varepsilon}$ вказує на порядок градієнтів, а верхній числовий індекс позначає порядок внеску. Припускається, що обернена потенціальна квазітемпература, використана у формулюванні умови замикання, має такий же розклад

$$\beta^P(\mathbf{r}, t) = \beta^{P0}(\mathbf{r}, t) + \bar{\varepsilon} \beta^{P1}(\mathbf{r}, t) + \dots, \quad (42)$$

який означає, що в нерівноважному стані β^P релаксує до свого локально-рівноважного значення β^{P0} .

Рівняння для f_i та e^P записуємо у вигляді:

$$D_{t,i} f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i) = (\bar{\varepsilon})^{-1} I_i[\bar{f}_2], \quad (43)$$

$$\partial_t e^P + \nabla \cdot [\mathbf{V} e^P + \mathbf{q}_P] = (\bar{\varepsilon})^{-1} s_P[\bar{f}_2], \quad (44)$$

де введено стандартне позначення $D_{t,i} \equiv \partial_t + \mathbf{v}_i \cdot \nabla$. Для опису релаксації важливішою є права частина кінетичного рівняння (43), оскільки характерні часовий і просторовий масштаби зміни f_i завдяки зіткненням менші, ніж ці ж масштаби зміни величин $D_{t,i} f_i$. Аналогічно, характерний час і відстань, на яких змінюється e^P завдяки джерелу, менші, ніж завдяки лівій частині рівняння (44). Введений множник $(\bar{\varepsilon})^{-1}$ надає більшу вагу інтегралам зіткнень та джерелу s_P і зміщує праві частини відносно лівих по етапах послідовних наближень.

Результатом нульового наближення мають бути функціональні залежності для f_i^0 та e^{P0} від гідродинамічних змінних (37). Як виявиться нижче, у ці залежності можуть входити невідомі функції координат і часу, які треба виразити через $\{\rho\}$, \mathbf{p} та e . Тому, згідно методу Чепмена-Енскога, на розв'язки нульового наближення f_i^0 та e^{P0} накладаються *умови самоузгодження*. Суть їх полягає в тому, що змінні гідродинамічного рівня $\{\rho_1^0, \dots, \rho_M^0, \mathbf{p}^0, e^0\}$, визначені за допомогою знайдених розв'язків, мають дорівнювати дійсним значенням цих змінних:

$$\rho_i^0 = \rho_i, \quad \mathbf{p}^0 = \mathbf{p}, \quad e^0 = e, \quad (45)$$

де $\rho_i^0 \equiv \langle m_i \rangle_{\mathbf{v}_i}^{i,0}$, $\mathbf{p}^0 \equiv \sum_i \langle m_i \mathbf{v}_i \rangle_{\mathbf{v}_i}^{i,0}$, $e^0 = e^{k0} + e^{P0}$, $e^{k0} \equiv \sum_i \langle \frac{1}{2} m_i v_i^2 \rangle_{\mathbf{v}_i}^{i,0}$ і e^{P0} — густина потенціальної енергії, розрахована в нульовому наближенні. Ще ми ввели позначення для усереднення з f_i^0 :

$$\langle \psi_a^i \rangle_{\mathbf{v}_i}^{i,0} \equiv \int d\mathbf{v}_i f_i^0 \psi_a^i. \quad (46)$$

Умови самоузгодження (45) накладають додаткові обмеження на поправки вищих порядків, а саме:

$$\rho_i^l = 0, \quad \mathbf{p}^l = 0, \quad e^l = 0, \quad l = 1, 2, \dots \quad (47)$$

А вони ведуть до додаткових умов для поправок до f_i та e^P :

$$\int d\mathbf{v}_i f_i^l = 0, \quad \sum_i m_i \int d\mathbf{v}_i f_i^l \mathbf{v}_i = 0, \quad \sum_i \frac{1}{2} m_i \int d\mathbf{v}_i f_i^l v_i^2 + e^{P,l} = 0, \quad (48)$$

де $l = 1, 2, \dots$. Ці умови буде враховано, зокрема, у першому порядку при відшуванні поправок f_i^1 , e^{P1} та β^{P1} .

Зауважмо важливу деталь: внаслідок припущень (38) і (39), похідні $\partial_t f_i$ та $\partial_t e^P$ виражаються через часові похідні змінних (37). Вони ж виражаються через потоки \mathbf{J}_i^{md} , \mathbf{P} і \mathbf{q} , котрі можна розраховувати в нульовому, першому і т.д. порядках по градієнтах для f_i та e^P . Це згідно методу трактується як наближення різного порядку для часових похідних від змінних (37), а отже і для $\partial_t f_i$ та $\partial_t e^P$. Формально це зображається у вигляді розкладу

$$\partial_t = \partial_t^0 + \bar{\varepsilon} \partial_t^1 + \dots, \quad (49)$$

який стосується змінних як кінетичного, так і гідродинамічного рівнів опису.

3.1.1. Локалізація

Початково метод Чепмена-Енскога було розвинуто для кінетичного рівняння Больцмана, інтеграл зіткнень якого *локальний* по просторовій змінній. Щоб застосувати цей метод до нелокальних інтегралів зіткнень, треба провести розклад по нелокальності, як це робиться для інтеграла зіткнень Енскога [2, 3]. Тобто, функцію f_j в I_i та s_p треба розкласти у ряд біля \mathbf{r} , а функціонал g_2^{ij} локалізувати у точці \mathbf{r} :

$$f_j(\mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}_j) = f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}_j) + \delta \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}_j) + \dots, \quad (50)$$

$$g_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma} | \cdot) = g_2^{ij,0}(\boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{r}} + \delta g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{r}} + \dots, \quad (51)$$

де параметр δ визначає порядок розкладу. Локалізація g_2^{ij} означає (додаток В.2) його розклад у функціональний ряд і додатково — розклад у ряд Тейлора функцій $\{n\}$ і β^P , від яких g_2^{ij} залежить. Тут і надалі цю залежність позначено як $|\cdot)$.

Розклад по нелокальності теж є розкладом по градієнтах змінних гідродинамічного рівня опису. Тому формальні параметри $\bar{\varepsilon}$ і δ мають однаковий порядок.

Локалізація інтегралів зіткнень і джерела s_p . Використовуючи фф. (50) та (51), одержимо:

$$\begin{aligned} \bar{f}_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}_j) &= g_2^{ij,0}(\boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{r}} f_i(\mathbf{v}_i) f_j(\mathbf{v}_j) + \\ &+ \delta f_i(\mathbf{v}_i) \left[g_2^{ij,0}(\boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{r}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla f_j(\mathbf{v}_j) + f_j(\mathbf{v}_j) g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{r}} \right] + \dots \end{aligned} \quad (52)$$

де f_i та f_j обчислюються вже у точці \mathbf{r} ; тут і надалі не вказано цієї залежності. Тоді розклад по нелокальності для I_i та s_p виглядає так:

$$I_i[\bar{f}_2] = I_i^{(0)}[\bar{f}_2] + \delta I_i^{(1)}[\bar{f}_2] + \dots, \quad (53)$$

$$s_p[\bar{f}_2] = s_p^{(0)}[\bar{f}_2] + \delta s_p^{(1)}[\bar{f}_2] + \dots, \quad (54)$$

де верхні індекси в дужках означають порядок по нелокальності.

Внески до інтеграла зіткнень від різних типів стінок мають цілком подібний розклад, у якому:

$$I_{ij}^{qlp(0)}[f_i, f_j] = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{j\sigma} \theta^p(v_{j\sigma}) \times \quad (55)$$

$$\times [g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p^*} f_i(\mathbf{v}_i^{qlp}) f_j(\mathbf{v}_j^{qlp}) - g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} f_i(\mathbf{v}_i) f_j(\mathbf{v}_j)],$$

$$I_{ij}^{qlp(1)}[f_i, f_j] = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{j\sigma} \theta^p(v_{j\sigma}) \left\{ \gamma_p \sigma_{ij}^{ql} \cdot \quad (56)$$

$$\cdot [g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p^*} f_i(\mathbf{v}_i^{qlp}) \nabla f_j(\mathbf{v}_j^{qlp}) + g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} f_i(\mathbf{v}_i) \nabla f_j(\mathbf{v}_j)] +$$

$$+ [f_i(\mathbf{v}_i^{qlp}) f_j(\mathbf{v}_j^{qlp}) g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \gamma_p \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p^*} - f_i(\mathbf{v}_i) f_j(\mathbf{v}_j) g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \gamma_p \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p}] \},$$

Так само для джерела маємо:

$$s_p^{(0)}[f, f] = - \sum_{ij} \sum_q \sum_l \sum_p^{\oplus, \ominus} \frac{1}{2} p \epsilon_{ij}^{ql} y_2^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \times \quad (57)$$

$$\times \int d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{j\sigma} \theta^p(v_{j\sigma}) f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i) f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}_j),$$

$$s_p^{(1)}[f, f] = - \sum_{ij} \sum_q \sum_l \sum_p^{\oplus, \ominus} \frac{1}{2} p \epsilon_{ij}^{ql} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^2 \int d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j d\hat{\sigma} v_{j\sigma} \times \quad (58)$$

$$\times \theta^p(v_{j\sigma}) \left\{ g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} (-qp \sigma_{ij}^{ql}) \cdot f_i(\mathbf{v}_i) \nabla f_j(\mathbf{v}_j) +$$

$$+ f_i(\mathbf{v}_i) f_j(\mathbf{v}_j) g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - qp \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \},$$

де введено позначення $y_2^{ij}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}} \equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}$. У фф. (57) і (58) замість qp можна писати γ_p . Кожен внесок першого порядку (56) та (58) має два доданки відповідно розкладу до (52), які містять градієнт f_j та першу поправку до g_2^{ij} . Вводячи відповідні позначення, можемо записати:

$$I_{ij}^{qlp(1)}[f_i, f_j] = I_{ij}^{qlp(\nabla)}[f_i, f_j] + I_{ij}^{qlp(g)}[f_i, f_j], \quad (59)$$

$$s_p^{(1)}[f, f] = s_p^{(\nabla)}[f, f] + s_p^{(g)}[f, f]. \quad (60)$$

Локалізація e^P та \mathbf{q}_p . Ми враховуємо рівняння для густини потенціальної енергії на кінетичному рівні, тому Метод Чепмена-Енскога потребує у цьому місці модифікації. Завдяки своїй двочастинковій природі e^P та її потік \mathbf{q}_p є нелокальні і тому мають розкладатися по градієнтах змінних опису. У вибраному наближенні нехтування кореляціями (19) вирази для e^P і \mathbf{q}_p зводяться до вигляду:

$$\begin{bmatrix} e^P \\ \mathbf{q}_p \end{bmatrix} = \sum_i \begin{bmatrix} n_i(\mathbf{r}) \\ \mathbf{J}_i^{\text{nd}}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \sum_j \langle n_j(\mathbf{r}_2) \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^{ij}} \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (61)$$

Тут нелокальність присутня під знаком усереднення з g_2^{ij} завдяки $n_j(\mathbf{r}_2)$, яку розкладаємо в ряд

$$n_j(\mathbf{r}_2) = n_j(\mathbf{r}_1) + \delta \mathbf{r}_{21} \cdot \nabla_1 n_j(\mathbf{r}_1) + \dots \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}},$$

та завдяки g_2^{ij} , для якого використовуємо розклад (51). Отже,

$$e^P = e^{P(0)} + \delta e^{P(1)} + \dots, \quad \mathbf{q}_p = \mathbf{q}_p^{(0)} + \delta \mathbf{q}_p^{(1)} + \dots, \quad (62)$$

де члени нульового і першого порядку дорівнюють:

$$\begin{bmatrix} e^{P(0)} \\ \mathbf{q}_p^{(0)} \end{bmatrix} \equiv \sum_{ij} \begin{bmatrix} n_i \\ \mathbf{J}_i^{\text{nd}} \end{bmatrix} n_j \langle \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^{ij}}, \quad (63)$$

$$\begin{bmatrix} e^{P(1)} \\ \mathbf{q}_p^{(1)} \end{bmatrix} \equiv \sum_{ij} \begin{bmatrix} n_i \\ \mathbf{J}_i^{\text{nd}} \end{bmatrix} \nabla n_j \cdot \langle \mathbf{r}_{21} \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^{ij}} + \sum_{ij} \begin{bmatrix} n_i \\ \mathbf{J}_i^{\text{nd}} \end{bmatrix} n_j \langle \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^{ij}} \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (64)$$

Для $e^{P(1)}$ та $\mathbf{q}_p^{(1)}$ можна записати, подібно до фф. (59) і (60):

$$e^{P(1)} \equiv e^{P(\nabla)} + e^{P(g)}, \quad \mathbf{q}_p^{(1)} \equiv \mathbf{q}_p^{(\nabla)} + \mathbf{q}_p^{(g)}. \quad (65)$$

Отримані вирази повністю локалізовані, тобто, всі функції у них стосуються точки \mathbf{r} .

3.1.2. Рівняння нульового і першого порядків

Розклад кінетичного рівняння. Враховуючи фф. (49) і (40), ліва частина рівняння (43) набуває вигляду:

$$D_{t,i} f_i = [D_{t,i}^0 + \bar{\varepsilon} \partial_t^1 + \dots] (f_i^0 + \bar{\varepsilon} f_i^1 + \dots), \quad (66)$$

де $D_{t,i}^0 \equiv \partial_t^0 + \mathbf{v}_i \cdot \nabla$. Використавши розклад (40) в інтегралі зіткнень (53) і врахувавши його білінійність відносно $\{f\}$ маємо:

$$I_i[f, f] = I_i^{(0)}[f^0, f^0] + \bar{\varepsilon} \left\{ I_i^{(0)}[f^1, f^0] + I_i^{(0)}[f^0, f^1] \right\} + \delta I_i^{(1)}[f^0, f^0] + \dots \quad (67)$$

Підставивши фф. (66) і (67) у рівняння (43), прирівнюємо члени одного порядку й одержуємо системи рівнянь для $\{f^0\}$ та $\{f^1\}$:

$$0 = I_i^{(0)}[f^0, f^0], \quad (68)$$

$$D_{t,i}^0 f_i^0 - I_i^{(1)}[f^0, f^0] = I_i^{(0)}[f^1, f^0] + I_i^{(0)}[f^0, f^1]. \quad (69)$$

На відміну від випадків кінетичного рівняння Больцмана чи Енскога, ці системи рівнянь у кожному порядку по $\bar{\varepsilon}$ доповнюються ще одним додатковим рівнянням для e^P .

Розклад рівняння для e^P . Розгляньмо спочатку питання про розклад e^P по градієнтах гідродинамічних змінних $\{\rho\}$, \mathbf{p} та e . Оскільки останні не мають розкладу по градієнтах завдяки умовам самоузгодження, то єдиною причиною існування такого розкладу для e^P є її *нелокальна залежність* від гідродинамічних змінних. Тому розклад по градієнтах для e^P збігається з розкладом по нелокальності (62) і тому можна писати $e^{P\nabla}$ та e^{Pg} , опустивши дужки у верхніх індексах.

Для \mathbf{q}_p ситуація змінюється, оскільки він виражається через $\{\mathbf{J}^{\text{nd}}\}$, які є функціоналами $\{f\}$ і тому мають $\bar{\varepsilon}$ -розклад:

$$\mathbf{J}_i^{\text{nd}} = \mathbf{J}_i^{\text{nd},0} + \bar{\varepsilon} \mathbf{J}_i^{\text{nd},1} + \dots$$

завдяки розкладу (40). Отже, \mathbf{q}_p має подвійний розклад (по δ і $\bar{\varepsilon}$):

$$\mathbf{q}_p = \mathbf{q}_p^{(0)0} + \bar{\varepsilon} \mathbf{q}_p^{(0)1} + \delta \mathbf{q}_p^{(1)0} + \delta \bar{\varepsilon} \mathbf{q}_p^{(1)1} + \dots,$$

де індекс у дужках зазначає порядок по нелокальності, а другий індекс — порядок по $\bar{\varepsilon}$ завдяки \mathbf{J}_i^{nd} . Надалі вживатимемо позначення $\mathbf{q}_p^{(0)} \equiv \mathbf{q}_p^{(0)0}$ і $\mathbf{q}_p^1 \equiv \mathbf{q}_p^{(0)1} + \mathbf{q}_p^{(1)0}$; явні вирази наведено нижче.

Ліва частина ф. (44) набуває такого вигляду:

$$(\partial_t^0 + \bar{\varepsilon} \partial_t^1 + \dots)[e^{p0} + \delta e^{p1} + \dots] + \nabla \cdot \{ \mathbf{V}[e^{p0} + \delta e^{p1} + \dots] + \mathbf{q}_p^0 + \bar{\varepsilon} \mathbf{q}_p^{(0)1} + \delta \mathbf{q}_p^{(1)0} + \dots \}. \quad (70)$$

Для правої частини підставмо ф. (40) у розклад (54) джерела s_p по нелокальності:

$$s_p[f, f] = s_p^{(0)}[f^0, f^0] + \bar{\varepsilon} \left\{ s_p^{(0)}[f^1, f^0] + s_p^{(0)}[f^0, f^1] \right\} + \delta s_p^{(1)}[f^0, f^0] + \dots \quad (71)$$

Прирівнявши ці вирази у рівнянні (44), одержуємо для трьох перших порядків:

$$0 = s_p^{(0)}[f^0, f^0], \quad (72)$$

$$\partial_t^0 e^{p0} + \nabla \cdot [\mathbf{V}e^{p0} + \mathbf{q}_p^0] = s_p^{(0)}[f^1, f^0] + s_p^{(0)}[f^0, f^1] + s_p^{(1)}[f^0, f^0], \quad (73)$$

$$\partial_t^1 e^{p0} + \partial_t^0 e^{p1} + \nabla \cdot [\mathbf{V}e^{p1} + \mathbf{q}_p^1] = s_p^2. \quad (74)$$

Ми не наводимо виразу для внеску другого порядку s_p^2 , оскільки надалі нам потрібна лише ліва частина ф. (74).

Зауважмо, що у рівняннях першого порядку (69) і (73) немає e^{p1} , оскільки s_p є функціоналом $\{f\}$ і β^p .

Внески від e^p у рівняння балансу повної енергії. Рівняння (73) дає внесок нульового порядку у рівняння для e тому, що права його частина зникне з відповідним внеском від s_k , а потік тепла має вигляд:

$$\mathbf{q}_p^0 = \sum_{ij} \mathbf{J}_i^{\text{nd},0} n_j \langle \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^0, ij} \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (75)$$

Рівняння (74) стосується *другого* порядку *кінетичного* рівня опису, однак дає свій внесок у рівняння *першого* порядку для густини повної енергії. У сумі з відповідним рівнянням для e^k внески $\partial_t^0 e^{p1}$ та $\mathbf{V}e^{p1}$ пропадуть завдяки додатковим умовам (48), що походять від умов самоузгодження, а s_p^2 — завдяки відповіднику s_k^2 . Внески у \mathbf{q}_p^1 дорівнюють:

$$\mathbf{q}_p^{(0)1} = \sum_{ij} \mathbf{J}_i^{\text{nd},1} n_j \langle \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^0, ij} \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}, \quad (76)$$

$$\mathbf{q}_p^{(1)0} = \sum_{ij} \mathbf{J}_i^{\text{nd},0} \left[\nabla n_j \cdot \langle \mathbf{r}_{21} \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^0, ij} + n_j \langle \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^1, ij} \right] \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (77)$$

Сумарно від нульового і першого порядку маємо:

$$\partial_t^{0+1} e^{p0} + \partial_t^0 e^{p1} + \nabla \cdot [\mathbf{V}e^{p,0+1} + \mathbf{q}_p^{0+1}] = s_p^{1+2}, \quad (78)$$

де через s_p^1 позначено праву частину рівняння (73).

3.1.3. Розклади для гідродинамічних густин

Завдяки умовам самоузгодження (45) для розв'язків f_i^0 та e^{p0} , серед густин ρ_i , \mathbf{p} та e^k , лише остання (або густина внутрішньої кінетичної енергії ε^k) має $\bar{\varepsilon}$ -розклад

$$e^k = e^{k0} + (\bar{\varepsilon}) e^{k1} + \dots, \quad \varepsilon^k = \varepsilon^{k0} + (\bar{\varepsilon}) \varepsilon^{k1} + \dots, \quad (79)$$

тоді, як перша і вищі поправки до ρ_i та \mathbf{p} дорівнюють нулю. Для одночастинкових потоків також можна записати:

$$a_i = a_i^0 + (\bar{\varepsilon}) a_i^1 + \dots, \quad (80)$$

де в ролі a_i можуть бути \mathbf{J}_i^{md} , \mathbf{J}_i^{nd} або просумовані по i потоки \mathbf{P}^k та \mathbf{q}_k^k . Поправка a_i^l порядку l виражається через поправку f_i^l :

$$a_i^l(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v}_i f_i^l(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) \psi_a^i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t), \quad (81)$$

де ψ_a^i — молекулярна характеристика величини $a_i(\mathbf{r}, t)$.

Всі внески до \mathbf{P}^{MS} та \mathbf{q}^{MS} нелокальні, оскільки виражаються через \bar{f}_2^{ij} . Тому вони мають, аналогічно до інтегралів зіткнень, як $\bar{\varepsilon}$ -, так і δ -розклад:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{q} \end{bmatrix}^{\text{MS}} = \begin{bmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{q} \end{bmatrix}^{\text{MS},0} + (\bar{\varepsilon}|\delta) \begin{bmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{q} \end{bmatrix}^{\text{MS},1} + \dots, \quad (82)$$

де позначення $(\bar{\varepsilon}|\delta)$ вказує на внески, лінійні по $\bar{\varepsilon}$ або δ .

Використовуючи розклади (50), (51) і (40) для \bar{f}_2^{ij} з обома просторовими аргументами, зміщеними відносно точки \mathbf{r} , знаходимо:

$$\begin{aligned} \bar{f}_2^{ij}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\varsigma}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}_j) &= f_i^0 f_j^0 \left\{ g_2^{ij,0}(|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\varsigma}|)_{\mathbf{r}} \times \right. \\ &\times \left[1 + \bar{\varepsilon} \{ \phi_i(\mathbf{v}_i) + \phi_j(\mathbf{v}_j) \} + \delta (\boldsymbol{\varsigma} \cdot \nabla \ln f_i^0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \ln f_j^0) \right] + \\ &\left. + \delta g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\varsigma}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\sigma})_{\mathbf{r}} \right\} + \dots, \end{aligned} \quad (83)$$

де, напр., $\phi_i \equiv f_i^1/f_i^0$. Підставмо цей результат у ф. (26) із $\mathbf{c} = \gamma_p \lambda \sigma_{ij}^{ql}$ та $\boldsymbol{\sigma} = -\gamma_p \bar{\lambda} \sigma_{ij}^{ql}$, й, інтегруючи по λ , отримуємо:

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{c} \mathbf{P} \\ \mathbf{q}_k \end{array} \right)^p &= \sum_{ij} \sum_q \sum_l^{\text{clr,a}} \gamma_p \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 \int d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} f_i^0 f_j^0 c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) \hat{\sigma} \times \quad (84) \\ &\times \left(\begin{array}{c} m_i [\mathbf{c}_i^{qlp} - \mathbf{c}_i] \\ \frac{1}{2} m_i [(\mathbf{c}_i^{qlp})^2 - c_i^2] \end{array} \right) \left\{ g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \left[1 + \phi_i(\mathbf{v}_i) + \phi_j(\mathbf{v}_j) + \right. \right. \\ &\left. \left. + \gamma_p \frac{1}{2} \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \ln \frac{f_i^0}{f_j^0} \right] + \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + \gamma_p \lambda \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - \gamma_p \bar{\lambda} \sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \right\}. \end{aligned}$$

Тут одиниця у квадратних дужках відповідає внескам нульового порядку. Решта доданків мають перший порядок і є стартовими для розрахунку внесків до лінійних коефіцієнтів переносу.

Порядки для рівнянь переносу. У нульовому, першому і т.д. порядках методу Чепмена-Енскога, рівняння переносу для ρ_i , \mathbf{p} та e мають однаковий вигляд, проте відрізняються тим, у якому наближенні розраховано потоки \mathbf{J}_i^{md} , \mathbf{P} і \mathbf{q} . Це, у свою чергу, визначає порядок наближення для похідної по часу ∂_t . Для першого наближення, зокрема, ці рівняння мають вигляд:

$$\partial_t^{0+1} \begin{bmatrix} \rho_i \\ \mathbf{p} \\ e \end{bmatrix} + \nabla \cdot \left[\mathbf{V} \begin{bmatrix} \rho_i \\ \mathbf{p} \\ e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{J}_i^{\text{md},0+1} \\ \mathbf{P}^{0+1} \\ \mathbf{P}^{0+1} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}^{0+1} \end{bmatrix} \right] = 0. \quad (85)$$

Відкидання внесків першого порядку до потоків веде до рівнянь переносу нульового порядку, у яких замість ∂_t^{0+1} слід писати ∂_t^0 . Цілком подібно, визначивши внески 2-го порядку до потоків і врахувавши їх у системі (85), одержимо рівняння переносу другого порядку і т.д.

Відповідні рівняння для гідродинамічної швидкості \mathbf{V} та густини внутрішньої енергії ε мають вигляд:

$$d_t^{0+1} \mathbf{V} + \rho^{-1} \nabla \cdot \mathbf{P}^{0+1} = 0, \quad (86)$$

$$\partial_t^{0+1} \varepsilon + \nabla \cdot [\mathbf{V} \varepsilon + \mathbf{q}^{0+1}] = -\mathbf{P}^{0+1} : \nabla \mathbf{V}^\dagger, \quad (87)$$

де мається на увазі, що $d_t^0 \equiv \partial_t^0 + \mathbf{V} \cdot \nabla$ та $d_t^1 \equiv \partial_t^1$.

3.2. Нульове наближення

3.2.1. Кінетичний рівень опису

Рівняння (68) та (72) становлять систему, з якої маємо шукати $\{f^0\}$ та β^{p0} . Функціональний вигляд для $\{f^0\}$ шукається подібно до випадків кінетичного рівняння Больцмана й Енскога, хоча тут з'являються методологічні відмінності, пов'язані з температурою. Пошук β^{p0} є новою особливістю, якої нема у згаданих вище кінетичних теоріях. Вперше цей момент було проаналізовано у працях [21, 22].

Рівняння для f_i^0 . Почнімо з рівнянь (68) для $\{f^0\}$:

$$I_i^{(0)}[f^0, f^0] = 0. \quad (88)$$

Вони будуть задовольнятися, якщо рівність нулю досягається для кожного із доданків суми, записаної для $I_{ij}^{(0)}$ згідно ф. (12):

$$I_{ij}^{c1\odot(0)}[f_i^0, f_j^0] = 0, \quad I_{ij}^{qlp(0)}[f_i^0, f_j^0] \Big|_{p=\{\otimes, \oplus, \ominus\}} = 0. \quad (89)$$

Тобто, $\{f^0\}$ мають перетворювати в нуль внески від кожного процесу p на кожній сходинці (q, l) . Це буде тоді, коли різниці у квадратних дужках ф. (55) дорівнюватимуть нулю:

$$f_i^0(\mathbf{v}'_i) f_j^0(\mathbf{v}'_j) - f_i^0(\mathbf{v}_i) f_j^0(\mathbf{v}_j) = 0, \quad (90)$$

$$e^{p\beta^{p0}} \varepsilon_{ij}^{ql} f_i^0(\mathbf{v}_i^{qlp}) f_j^0(\mathbf{v}_j^{qlp}) - f_i^0(\mathbf{v}_i) f_j^0(\mathbf{v}_j) = 0, \quad (91)$$

де перша умова стосується процесів \odot і \otimes , а друга — \oplus та \ominus . В ній же було використано зв'язок (351) між граничними значеннями $g_2^{ij,0}$ в точках розриву. Зрозуміло, що умови (90), (91) сильніші за умови (89), а ті — за рівняння (88), і здійснені переходи звужують множину можливих розв'язків.

Подібно до випадків кінетичних рівнянь Больцмана й Енскога, за розв'язок системи рівнянь (90), (91) — а, отже, і (88) — **приймається локально-рівноважний** розподіл Максвелла:

$$f_i^0(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) = A_i^0(\mathbf{r}, t) e^{-\alpha_i(\mathbf{r}, t)[\mathbf{v}_i - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)]^2}, \quad (92)$$

де A_i^0 , α_i й \mathbf{u} — поки-що довільні функції, проте, очевидно, \mathbf{u} має сенс швидкості, на якій центровано розподіл (92). Так вибрані $\{f^0\}$ задовольняють рівності (90) завдяки законам збереження енергії для

парних процесів \odot та \otimes , котрі в рухомій системі відліку мають вигляд:

$$\frac{m_i}{2} \zeta_i'^2 + \frac{m_i}{2} \zeta_j'^2 = \frac{m_i}{2} \zeta_i^2 + \frac{m_i}{2} \zeta_j^2 \quad (93)$$

із, напр., $\zeta_i(\mathbf{r}, t) \equiv \mathbf{v}_i - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$.

З умов самоузгодження (45) можна визначити невідомі параметри розподілу (92). Перша з них дає:

$$\langle m_i \rangle_{\mathbf{v}_i}^{i,0} = m_i A_i^0 4\pi \int_0^\infty d\zeta_i e^{-\alpha_i \zeta_i^2} \zeta_i^2 = \pi^{3/2} m_i A_i^0 \alpha_i^{-3/2} = \rho_i, \quad (94)$$

звідки слідує, що $A_i^0 = n_i (\alpha_i / \pi)^{3/2}$. З другої умови (45) отримуємо:

$$\sum_i \langle m_i [\zeta_i + \mathbf{u}] \rangle_{\mathbf{v}_i}^{i,0} = \rho^0 \mathbf{u} = \mathbf{p}, \quad (95)$$

де $\rho^0 \equiv \sum_i \rho_i^0$, і звідки слідує, використовуючи першу умову (45), що $\mathbf{u} = \mathbf{p} / \rho \equiv \mathbf{V}$, тобто, збігається з гідродинамічною швидкістю, а ζ_i — з тепловою швидкістю \mathbf{c}_i .

Третю умову (45) ми розглянемо пізніше, а зараз введемо *кінетичну температуру в 0-му наближенні*, пов'язану з густиною внутрішньої кінетичної енергії. З означення e^{k0} , поданого після умов (45), маємо:

$$e^{k0} = \frac{1}{2} \rho V^2 + \sum_i \frac{1}{2} m_i A_i^0 \int d\mathbf{c}_i e^{-\alpha_i c_i^2} c_i^2. \quad (96)$$

Для останнього доданка, який є густиною внутрішньої кінетичної енергії в нульовому наближенні $\varepsilon^{k0} \equiv e^{k0} - \frac{1}{2} \rho V^2$, знаходимо:

$$\varepsilon^{k0} = \sum_i \frac{1}{2} m_i A_i^0 \frac{2\pi \Gamma(\frac{5}{2})}{\alpha_i^{5/2}} = \sum_i \frac{3}{4} m_i A_i^0 \frac{\pi^{3/2}}{\alpha_i^{5/2}} = \frac{3}{2} \sum_i n_i \frac{m_i}{2\alpha_i}, \quad (97)$$

де при останньому переході ми скористалися співвідношенням (94) для ρ_i . Зіставляючи одержаний результат із означенням кінетичної температури в 0-му наближенні

$$\varepsilon^{k0} \equiv \frac{3}{2} n k_B T^{k0} \equiv \frac{3}{2} n \theta^{k0}, \quad (98)$$

приймаємо *припущення*, що дріб $\frac{m_i}{2\alpha_i}$ у ф. (97) *не залежить від сорту*,² і тоді,

$$\alpha_i = \frac{m_i}{2\theta^{k0}}.$$

²Більш загальний розв'язок допускає сортові температури.

Тут же, за допомогою останньої рівності виразу (94) знаходимо, що $A_i^0 = n_i \frac{m_i^{3/2}}{(2\pi\theta^{k0})^{3/2}}$. Виражений через функції n_i , \mathbf{V} і введenu нову функцію θ^{k0} , локально-рівноважний розподіл Максвела набуває звичного вигляду:

$$f_i^0(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t) = n_i(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m_i}{2\pi\theta^{k0}(\mathbf{r}, t)} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_i[\mathbf{v}_i - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t)]^2}{2\theta^{k0}(\mathbf{r}, t)}}. \quad (99)$$

Ця формула частково дає відповідь на питання про вигляд функціональної залежності f_i^0 від гідродинамічних змінних. Однак, у неї поки-що входить функція

$$\theta^{k0}(\mathbf{r}, t) \equiv k_B T^{k0}(\mathbf{r}, t), \quad (100)$$

не виражена через змінні набору (37).

Пошук розв'язку для β^{p0} . Як ми вже зазначали, з рівняння балансу потенціальної енергії отримуються розв'язки для β^p , а не e^p , оскільки через β^p сформульовано співвідношення замикавання. Розгляд рівняння (72) і всіх внесків до s_p першого порядку зручніше проводити у безрозмірних змінних центра мас:

$$s_p(\mathbf{r}, t) = - \sum_{ij} \sum_q \sum_l \sum_p \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{a}} K_{ij}^q \oplus, \otimes n_i n_j \frac{1}{2} p \epsilon_{ij}^{ql} (\sigma_{ij}^{ql})^2 \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \pi^{-3} \int d\mathcal{G} d\mathbf{g} d\hat{\sigma} \times (101)$$

$$\times g_\sigma \theta^p(g_\sigma) e^{-g^2 - g^2} \left\{ g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \left[1 + \phi_i + \phi_j - qp \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \ln f_j^0 \right] + g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - qp \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \right\},$$

де одиниця у прямокутних дужках відповідає $s_p^{(0)}[f^0, f^0]$, а решта — доданки першого порядку по градієнтах.

Рівняння (72) буде задовольнятися в цілому, якщо перетворення в нуль буде на *кожній* сходинці. Інтеграл, що відповідає нульовому внеску, має вигляд:

$$g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \int d\mathcal{G} d\mathbf{g} d\hat{\sigma} g_\sigma \theta^p(g_\sigma) e^{-g^2 - g^2} [1] \quad (102)$$

Інтегрування по $\hat{\sigma}$ дає ${}_0\mathcal{I}_1^p = 2\pi \theta^p(g) g j_2^p(g)$ (див. §D.1, ф. (402)), а для g виникають характерні інтеграли $\mathcal{J}_{g3}^p[j_2^p]$. Винісши спільні коефіцієнти за дужки, сума від процесів \oplus та \ominus зводиться до

$$\mathcal{J}_{g3}^\oplus[j_2^\oplus] - e^{\beta^{p0}} \epsilon_{ij}^{ql} \mathcal{J}_{g3}^\ominus[j_2^\ominus] = \frac{1}{4} [1 - e^{\beta^{p0}} \epsilon_{ij}^{ql} e^{-\epsilon_{ij}^{ql}/\theta^{k0}}],$$

де підставлено значення інтегралів (§D.3.3) і враховано, що $\epsilon_{ij}^{ql} \equiv \epsilon_{ij}^{ql}/\theta^{k0}$. Отриманий вираз дорівнює нулю тільки тоді, коли

$$\beta^{p0}(\mathbf{r}, t) = [\theta^{k0}(\mathbf{r}, t)]^{-1}, \quad (103)$$

що і є розв'язком рівняння (72).

Це співвідношення ми могли отримати і з умов (91) у комбінації з виглядом локально-рівноважного розподілу (99), використавши закон збереження для процесів $p = \oplus, \ominus$ у локальній рухомій системі відліку:

$$\frac{m_i}{2}(\mathbf{c}_i^{qlp})^2 + \frac{m_j}{2}(\mathbf{c}_j^{qlp})^2 = \frac{m_i}{2}c_i^2 + \frac{m_j}{2}c_j^2 + p\epsilon_{ij}^{ql}. \quad (104)$$

Тому складається враження, що в нульовому порядку можна обійтися без ф. (72), як нульового порядку рівняння балансу для e^p . І це справді так, оскільки рівність (72) означає також $s_k^{(0)}[f^0, f^0] = 0$. А вираз для s_k отримано з кінетичного рівняння у процесі виведення рівняння балансу для e^k . Однак ситуація міняється при переході до системи рівнянь (69) і (73) для першого порядку. Рівняння (73) доповнює рівняння для $\{f^1\}$, даючи співвідношення для першої поправки β^{p1} , і, очевидно, не виводиться зі системи кінетичних рівнянь для $\{f\}$.

Згідно ф. (63) для e^p у нульовому порядку, маємо:

$$e^{p0}(\mathbf{r}, t) = \sum_{ij} n_i(\mathbf{r}, t) n_j(\mathbf{r}, t) \int d\mathbf{r}_2 g_2^{ij,0}(r_{12}|\{n\}, \beta^{p0})_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \phi_{ij}^{MS}(r_{12}) \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}, \quad (105)$$

де $g_2^{ij,0}$ розраховується для дійсних густин $\{n\}$ системи і оберненої потенціальної квазітемператури $\beta^{p0}(\mathbf{r}, t)$, яка задовольняє ф. (103). Кінетична температура, у свою чергу, визначається через густину повної енергії, ф. (98):

$$\theta^{k0}(\mathbf{r}, t) = \frac{2}{3} \frac{e(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}, t)V^2(\mathbf{r}, t) - e^{p0}(\mathbf{r}, t)}{n(\mathbf{r}, t)}. \quad (106)$$

Це співвідношення є фактично *рівнянням* для θ^{k0} , оскільки вона, дорівнюючи β^{p0} , входить у функцію $g_2^{ij,0}$ відомої форми, через яку виражається e^{p0} . Співвідношення (106) забезпечує виконання третьої умови самоузгодження (45) і одночасно виражає невідомий параметр θ^{k0} в $\{f^0\}$ через змінні гідродинамічного рівня.

Підсумок. Результати нульового наближення такі. Стартуючи з інтегральних рівнянь (88) та (72) кінетичного рівня опису, ми відшукали функціональні залежності для $\{f^0; e^{p0}\}$ від $\{\rho\}$, \mathbf{p} та e , які

зручніше, однак, виразити через $\{n\}$, \mathbf{V} і θ^{k0} . Сортова функція f_i^0 при цьому залежить від n_i , \mathbf{V} і θ^{k0} , а e^{p0} — від усіх $\{n\}$ й β^{p0} , і не залежить від \mathbf{V} . Залежність e^{p0} від $\{n\}$ білінійна і додатково функціональна через $g_2^{ij,0}$, а від β^{p0} — тільки через кластерний розклад $g_2^{ij,0}$. Залежність від основних густин $\{\rho\}$ і \mathbf{p} явна, а від густини енергії неявна через параметр θ^{k0} , для якого записано рівняння у вигляді (106).

3.2.2. Розрахунок потоків

Маючи розв'язки $\{f^0; e^{p0}\}$ відшукаймо потоки у нульовому наближенні.

Кінетичні внески в потоки. За фф. (33) і (25) знаходимо, що

$$\mathbf{J}_i^{\text{md},0} = \langle m_i \mathbf{c}_i \rangle_{\mathbf{c}_i}^{i,0} = 0, \quad (107)$$

$$\mathbf{q}_k^{\text{k},0} = \sum_i \langle \frac{1}{2} m_i c_i^2 \mathbf{c}_i \rangle_{\mathbf{c}_i}^{i,0} = 0 \quad (108)$$

внаслідок непарності підінтегральної функції по \mathbf{c}_i . Ще в нуль перетворюються $\mathbf{J}_i^{\text{nd},0}$, $\mathbf{V}_i^{\text{d},0}$ та \mathbf{q}_p^0 . Внесок до тензора напружень, ф. (25) дорівнює:

$$\mathbf{p}^{\text{k},0} = \sum_i \langle m_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \rangle_{\mathbf{c}_i}^{i,0} = \sum_i \langle m_i c_i^2 \rangle_{\mathbf{c}_i}^{i,0} \frac{1}{3} \mathbf{l} = \sum_i n_i \theta^{k0} \mathbf{l}, \quad (109)$$

де \mathbf{l} — діагональний тензор.

Внески у потоки від взаємодії. Їх зручно розраховувати, виразивши інтеграли через змінних центра мас. Після переходу ф. (84) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \left(\begin{matrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q}_k \end{matrix} \right)^p &= \sum_{ij} \sum_q \sum_l^{\text{c|r,a}} K_{ij}^q n_i n_j \gamma_p \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 \pi^{-3} 2\theta^{k0} \int d\mathbf{g} d\mathbf{g} d\hat{\sigma} e^{-g^2 - g'^2} \times \\ &\times \theta^p(g_\sigma) \left(\begin{array}{c} 2g_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ p\alpha_{ij}^{ql} g_\sigma \hat{\sigma} + \\ 2\tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathbf{g} \cdot g_\sigma \hat{\sigma} \hat{\sigma} \end{array} \left| \begin{array}{c} [g_\sigma^2 - g_\sigma Q^p] \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ p\alpha_{ij}^{ql} g_\sigma \hat{\sigma} + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathbf{g} \cdot [g_\sigma^2 - g_\sigma Q^p] \hat{\sigma} \hat{\sigma} \end{array} \right. \right) \times \\ &\left\{ g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \left[1 + \phi_i + \phi_j + \gamma_p \frac{1}{2} \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \ln(f_i^0/f_j^0) \right] + \right. \\ &\left. + \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + \gamma_p \lambda \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - \gamma_p \tilde{\lambda} \sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \right\}, \end{aligned} \quad (110)$$

де у великих круглих дужках подано передачі імпульсу й кінетичної енергії у парних процесах: зліва — для \odot і \otimes , справа — для \oplus і \ominus ; ще позначено $\alpha_j^{ql} \equiv \frac{1}{2} M_j \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$ та $\mathcal{Q}^p \equiv \sqrt{g_\sigma^2 + p \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}}$. Це стартова формула і за її допомогою будемо розраховувати внески нульового і першого порядків.

Внескам $\mathbf{P}^{p,0}$ та $\mathbf{q}_k^{p,0}$ відповідає одиниця у квадратних дужках ф. (110). Розглядаючи відповідний інтеграл, можемо відкинути у великих круглих дужках доданки із \mathcal{G} , як непарні, а інтегрування по $d\mathcal{G}$ дає $2\pi\Gamma(\frac{3}{2})$. Доданок, що містить $g_\sigma \hat{\sigma}$, після інтегрування по $\hat{\sigma}$ дає вираз, непарний по \mathbf{g} , і тому його теж можна відкинути. Отже, в нульовому порядку нема внеску від взаємодії у тепловий потік:

$$\mathbf{q}_k^{\text{MS},0} = 0. \quad (111)$$

Те, що залишилося, дає внески лише до тензора напружень:

$$g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} 2\pi\Gamma(\frac{3}{2}) \int d\mathbf{g} d\hat{\sigma} e^{-g^2} \theta^p(g_\sigma) \left(2g_\sigma^2 \left[g_\sigma^2 - g_\sigma \mathcal{Q}^p \right] \right) \hat{\sigma} \hat{\sigma}.$$

Інтегрування по $\hat{\sigma}$ утворюють тензори ${}_2\mathcal{I}_2^p$ та ${}_2\mathcal{I}_2^{p-} \equiv {}_2\mathcal{I}_2^p - {}_2\mathcal{I}_2^{pQ}$, додаток D.1. Підставивши замість них результати (402) та (408), можемо проінтегрувати по орієнтаціях \hat{g} і отримати:

$$g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} 2\pi\Gamma(\frac{3}{2}) 4\pi^2 \int_0^\infty dg \theta^p(g) e^{-g^2} g^4 \left(2 \times \frac{2}{3} j_3^p(g) \left| \frac{2}{3} j_3^{p-}(g) \right| \right),$$

де було використано властивості (403) та (409). Стосовно g виникають характерні інтеграли $\mathcal{J}_{g^4}^p$ від функцій j_3^p та j_3^{p-} . Використовуючи для них вираження через гама-функції, отримуємо такі кінцеві результати для внесків від твердої серцевини і від процесів на сходах $\{\odot, \otimes, \oplus, \ominus\}$:

$$\mathbf{P}^{p,0} = \frac{2}{3} \sqrt{\pi} \theta^{k0} \left\{ \sum_{ij} n_i n_j \sum_q^{c|r,a} \sum_l^{K_{ij}^q} \gamma_p y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} \left\{ \begin{array}{l} 2\Gamma(\frac{3}{2}) \\ 2\Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \\ \Gamma(\frac{3}{2}) - e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \\ \tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) - \Gamma(\frac{3}{2}) e^{-\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \end{array} \right. \right\}. \quad (112)$$

Врахувавши значення $\gamma_p = \{+1, -q, q, -q\}$ і зв'язок (351) між граничними значеннями $g_2^{ij,0}$ по різні боки сходинок, бачимо, що $\mathbf{P}^{\oplus,0} = \mathbf{P}^{\ominus,0}$. Отже у локально-рівноважних станах ці процеси дають однаковий внесок у тиск. Множник 2 для \odot і \otimes відображає те,

що в цих процесах нормальна складова відносної швидкості міняє знак, а передача імпульсу при цьому подвоюється. Функції у фігурних дужках ф. (112) (друга і четверта для \otimes і \ominus домножені ще на $-e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}}$) задають відносні внески у тиск від даної сходинок. Їхні графіки наведено на Рис. 2.

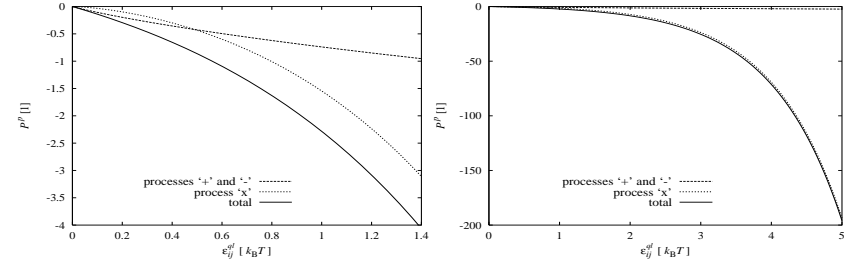


Рис. 2. Відносні внески у локально-рівноважний тиск від процесів \oplus , \ominus і \otimes в залежності від безрозмірної висоти сходинок (середні [зліва] і великі [справа] значення висоти).

Сума усіх внесків дорівнює:

$$\mathbf{P}^{\text{MS},0} = \frac{2}{3} \pi \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j \Lambda_{3;1q}^{ij} [1 - e^{\bar{\epsilon}_{ij}}] \mathbf{1}, \quad (113)$$

де введено позначення для особливої конструкції, пов'язаної зі значеннями парної функції розподілу в точці контакту твердих серцевих і на сходах. Всі споріднені конструкції можна подати такою спільною формулою:

$$\Lambda_{n; \alpha_c \alpha_q}^{ij} [\Xi(\bar{\epsilon}_{ij})] \equiv \alpha_c y_n^{ij} (\sigma_{ij}^{c1})_{\mathbf{r}}^+ + \sum_q^{r,a} \sum_l^{K_{ij}^q} \alpha_q y_n^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \Xi(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}), \quad (114)$$

де параметри можуть набувати значень $\alpha_c = \{0; 1\}$, $\alpha_q = \{q; 1\}$ і $n = \{2; 3; 4\}$; вони визначають присутність внеску типу \odot , знаки біля функцій y_n^{ij} у внеску від сходинок та їхній індекс, а Ξ — функція, що залежить від висоти сходинок.

Результат (113) можна подати в альтернативному вигляді:

$$\mathbf{P}^{\text{MS},0} = \frac{2}{3} \pi \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j \sum_q^{c,r,a} \sum_l q (\sigma_{ij}^{ql})^3 \sum_b^{\pm 1} b g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \mathbf{1}, \quad (115)$$

де $b = \pm 1$ — формальний параметр. Завдяки формальному значенню $q = c = -1$, ф. (4), внесок від $b = +1$ пропадає, оскільки граничне значення $g_2^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{c1})^- = 0$. Представлення, подібні до (115), будуть вживатися нижче і для інших величин. Внески від γ -і а-сходинок входять завдяки q з різним знаком, конкуруючи між собою: відштовхувальні підвищують, а притягальні понижують тиск в системі.

Об'єднавши фф. (115) та (111) з отриманими раніше результатами для кінетичних внесків, маємо:

$$P^0 = P1, \quad \mathbf{q}^0 = \mathbf{q}_k^{k,0+MS,0} + \mathbf{q}_p^0 = 0, \quad (116)$$

де гідростатичний тиск $P \equiv P^{k+MS}$ у локально-рівноважному стані дорівнює:

$$P = k_B T^{k0} \left\{ n + \frac{2}{3} \pi \sum_{ij} n_i n_j \Lambda_{3;1q}^{ij} [1 - e^{\bar{\epsilon}_{ij}}] \right\}.$$

Характерна комбінація, що входить у тиск, надалі зустрічається досить часто, тому для неї зручно ввести своє позначення p_{ij} таке, що $P^{MS} = \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j p_{ij}$. У явному вигляді маємо:

$$p_{ij} \equiv \frac{2}{3} \pi \left[y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{c1})_{\mathbf{r}}^+ + \sum_q \sum_l \sum_b^{\pm 1} b q y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \right]. \quad (117)$$

Рівняння переносу в нульовому порядку. Маючи розраховані потоки, фф. (107) і (116), запишімо на основі ф. (85) рівняння переносу найнижчого порядку для густин:

$$\partial_t^0 \begin{bmatrix} \rho_i \\ \mathbf{p} \\ e \end{bmatrix} + \nabla \cdot \left[\mathbf{V} \begin{bmatrix} \rho_i \\ \mathbf{p} \\ e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ P1 \\ \mathbf{V}P \end{bmatrix} \right] = 0. \quad (118)$$

Цілком подібно з ф. (86) і (87) одержуємо рівняння для гідродинамічної швидкості й густини внутрішньої енергії:

$$d_t^0 \mathbf{V} + \rho^{-1} \nabla P = 0, \quad (119)$$

$$\partial_t^0 \varepsilon + \nabla \cdot [\mathbf{V} \varepsilon] = -P \nabla \cdot \mathbf{V}. \quad (120)$$

Всі вони описують гідродинамічну поведінку суміші без врахування дисипації.

Ці рівняння буде використано у першому порядку для вираження часових похідних $\partial_t^0 f_i^0$ через градієнти змінних гідродинамічного рівня. Зокрема, для матеріальних похідних від густин n_i та повної внутрішньої енергії ε знаходимо:

$$d_t^0 n_i = -n_i \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (121)$$

$$d_t^0 \varepsilon = -(\varepsilon + P) \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (122)$$

де у дужках стоїть густина ентальпії. За допомогою ф. (122) можна відшукати $d_t^0 T^{k0}$ чи $d_t^0 \beta^{p0}$.

3.3. Перший порядок: кінетичний рівень опису

Лінеаризований оператор зіткнень. Введімо в оператор зіткнень замість f_i^1 мультиплікативну поправку ϕ_i таку, що

$$f_i^1(\mathbf{c}_i) = f_i^0(\mathbf{c}_i) \phi_i(\mathbf{c}_i).$$

Тоді праву частину інтегрального рівняння (69) для f_i^1 можна звести до лінеаризованого оператора зіткнень

$$J_i[\phi] \equiv I_i^{(0)}[f^1, f^0] + I_i^{(0)}[f^0, f^1], \quad (123)$$

який має такі ж внески, що й I_i :

$$J_i[\phi] = \sum_j J_{ij}[\phi], \quad J_{ij}[\phi] \equiv \sum_q \sum_l \sum_p^{c|r,a} \sum_{\oplus, \ominus, \otimes} K_{ij}^{ql} \circ J_{ij}^{qlp}[\phi], \quad (124)$$

з таким явним виглядом:

$$J_{ij}^{qlp}[\phi] \equiv y_2^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma p} \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p (c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 [\phi_i^{qlp} + \phi_j^{qlp} - \phi_i - \phi_j], \quad (125)$$

де, наприклад, $\phi_i \equiv \phi_i(\mathbf{c}_i)$, $\phi_i^{qlp} \equiv \phi_i(\mathbf{c}_i^{qlp})$ і, нагадаймо, $\mathbf{c}_i^{c1\oplus} = \mathbf{c}_i^{ql\otimes} = \mathbf{c}_i^c$. Для $p = \oplus, \ominus$ було використано фф. (91) і (351).

3.3.1. Кінетичне рівняння у першому порядку

У цьому підпараграфі розглянуто зведення до явного вигляду (як функцій від \mathbf{c}_i) доданків неоднорідних частин рівнянь для поправок $\{\phi\}$. Згідно фф. (69), (59) і (123) можна записати:

$$J_i[\phi] = D_{t,i}^0 f_i^0 - I_i^{(\nabla)}[f^0, f^0] - I_i^{(g)}[f^0, f^0], \quad (126)$$

де у правій частині фігурують лише $\{f^0\}$. Надалі ми будемо вживати скорочені позначення, не вказуючи аргументів:

$$I_i^\nabla \equiv I_i^{(\nabla)}[f^0, f^0], \quad I_i^g \equiv I_i^{(g)}[f^0, f^0].$$

Кожен із цих внесків зручно буде розбити на дві частини

$$I_i^\nabla = I_{i(1)}^\nabla + I_{i(2)}^\nabla, \quad I_i^g = I_{i(1)}^g + I_{i(2)}^g, \quad (127)$$

перша з яких має структуру, характерну для суміші твердих кульок, а друга притаманна виключно БС потенціалу і зумовлена його розривністю.

Результат розрахунку кожного доданка з ф. (127) виявиться лінійною комбінацією ґрадієнтів

$$\nabla n_1, \dots, \nabla n_M, \quad \nabla \ln T^{\text{k}0}, \quad \nabla \mathbf{V}, \quad \nabla \cdot \mathbf{V},$$

де для гідродинамічної швидкості виділено окремо діагональну частину $(\nabla \cdot \mathbf{V})$, пов'язану з процесами об'ємної в'язкості. Загальна форма представлення результатів така:

$$f_i^0 \left\{ \mathcal{L}_{i(l)}^{T,\alpha}(c_i^2) \mathbf{c}_i \cdot \nabla \ln T^{\text{k}0} + \mathcal{L}_{i(l)}^{\mathbf{V},\alpha}(c_i^2) \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V} + \right. \\ \left. + \mathcal{L}_{i(l)}^{I,\alpha}(c_i^2) \nabla \cdot \mathbf{V} + \sum_j \mathcal{L}_{ij(l)}^{n,\alpha}(c_i^2) \mathbf{c}_i \cdot \nabla n_j \right\},$$

де $\mathcal{L}_{i(l)}^{F,\alpha}$ — скалярна функція-коефіцієнт при ґрадієнті змінної F (для $\nabla \cdot \mathbf{V}$ використовується I як позначення *діагональності* внеску); тут $(l) = (1)$ або (2) , верхній індекс $\alpha = \{D, \nabla, g\}$ вказує якого саме доданка він стосується: $D_{t,i}^0 f_i^0$, I_i^∇ чи I_i^g . Будемо вживати ще такі позначення: $\mathbf{X}_T \equiv \nabla \ln T^{\text{k}0}$, $\mathbf{X}_\mathbf{V} \equiv \nabla \mathbf{V}$ та $\mathbf{X}_I \equiv \nabla \cdot \mathbf{V}$.

Розрахунок $D_{t,i}^0 f_i^0$. Цей потоковий оператор можна переписати так:

$$D_{t,i}^0 f_i^0 = [d_t^0 + \mathbf{c}_i \cdot \nabla] f_i^0 = f_i^0 [d_t^0 + \mathbf{c}_i \cdot \nabla] \ln f_i^0, \quad (128)$$

де дію обох похідних перенесено на $\ln f_i^0$. Це можна зробити, оскільки $f_i^0 > 0$. Похідні знаходимо за допомогою ф. (386), зокрема,

$$d_t^0 \ln f_i^0 = n_i^{-1} d_t^0 n_i + 2\tilde{m}_i \mathbf{c}_i \cdot d_t^0 \mathbf{V} + (T^{\text{k}0})^{-1} [\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2}] d_t^0 T^{\text{k}0}, \quad (129)$$

а $\nabla \ln f_i^0$ подано у ф. (387). Щоб виразити праву частину ф. (129) через ґрадієнти, у гру вступають рівняння переносу нульового порядку. Згідно фф. (121) і (119) похідні від n_i та \mathbf{V} треба замінити на

$-n_i \nabla \cdot \mathbf{V}$ та $-\rho^{-1} \nabla P$. Для ∇P використовуємо вираз

$$\nabla P = \left(\frac{\partial P}{\partial T^{\text{k}0}} \right)_{\{n\}} \nabla T^{\text{k}0} + \sum_{k=1}^M \left(\frac{\partial P}{\partial n_k} \right)_{T^{\text{k}0}, \{n\}'_k} \nabla n_k, \quad (130)$$

де нижній індекс $\{n\}'_k$ у другій частинній похідній означає фіксовані густина, крім n_k .

Виходячи з рівняння (122), можна знайти (див. додаток А.2):

$$d_t^0 T^{\text{k}0} = \omega_T \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (131)$$

де коефіцієнт пропорційності має вигляд, ф. (342):

$$\omega_T = -[\rho \tilde{c}_{v,\{n\}}]^{-1} T^{\text{k}0} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{\text{k}0}} \right)_{\{n\}'_k}^v. \quad (132)$$

Тут $\tilde{c}_{v,\{n\}}$ — питома теплоємність при постійних питомому об'ємі й густинах числа частинок. У подібному рівнянні

$$d_t^0 \beta^{\text{p}0} = \omega_\beta \nabla \cdot \mathbf{V} \quad (133)$$

вираз для коефіцієнта $\omega_\beta = -k_B^{-1} (T^{\text{k}0})^{-2} \omega_T$ слідує зі співвідношення $d_t^0 \beta^{\text{p}0} = -k_B^{-1} (T^{\text{k}0})^{-2} d_t^0 T^{\text{k}0}$.

Підставляючи фф. (121) і (119) з врахуванням ф. (130), а також ф. (131) у вираз (129), отримуємо для похідної:

$$d_t^0 \ln f_i^0 = \left\{ \frac{\omega_T}{T^{\text{k}0}} [\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2}] - 1 \right\} \nabla \cdot \mathbf{V} - \\ - \frac{2}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{\text{k}0}} \right)_{\{n\}} \tilde{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \nabla T^{\text{k}0} - \frac{2}{\rho} \sum_{k=1}^M \left(\frac{\partial P}{\partial n_k} \right)_{T^{\text{k}0}, \{n\}'_k} \tilde{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \nabla n_k. \quad (134)$$

Звідси і з ф. (387) подаємо початковий вираз (128) у вигляді:

$$D_{t,i}^0 f_i^0 = f_i^0 \left\{ \mathcal{L}_i^{T,D} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_T + \mathcal{L}_i^{\mathbf{V},D} \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V} + \mathcal{L}_i^{I,D} \nabla \cdot \mathbf{V} + \right. \\ \left. + \sum_j \mathcal{L}_{ij}^{n,D} \mathbf{c}_i \cdot \nabla n_j \right\}, \quad (135)$$

де функції $\mathcal{L}_i^{F,D}(c_i^2)$ дорівнюють:

$$\mathcal{L}_i^{T,D} = \tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2} - \frac{m_i}{k_B \rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{\text{k}0}} \right)_{\{n\}}, \quad (136)$$

$$\mathcal{L}_i^{\mathbf{V},D} = 2\tilde{m}_i, \quad (137)$$

$$\mathcal{L}_i^{I,D} = \left(\frac{\omega_T}{T^{k0}} + \frac{2}{3} \right) \left[\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2} \right], \quad (138)$$

$$\mathcal{L}_{ij}^{n,D} = \frac{\delta_{ij}}{n_i} - \frac{m_i}{\rho \theta^{k0}} \left(\frac{\partial P}{\partial n_j} \right)_{\{n\}'_j T^{k0}}. \quad (139)$$

Порівняння з попередніми теоріями. Для кінетичних рівнянь Больцмана й Енскога для сумішей результат (135) переходить у відповідні вирази цих теорій. Зокрема, для больцманівського газу маємо $P_B = nk_B T$ й $\varepsilon_B = \frac{3}{2} nk_B T$. Похідні від тиску й коефіцієнт ω_T з ф. (131) легко знайти і ф. (135) набуває вигляду:

$$D_{t,i}^0 f_i \Big|_B = f_i^0 \left\{ \left[\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2} - \frac{m_i n}{\rho} \right] \mathbf{c}_i \cdot \nabla \ln T + 2\tilde{m}_i \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V} + \sum_k \left[\frac{\delta_{ik}}{n_i} - \frac{m_i}{\rho} \right] \mathbf{c}_i \cdot \nabla n_k \right\},$$

де дифузійна частина зводиться до $\mathbf{c}_i \cdot \left[\frac{1}{n_i} \nabla n_i - \frac{m_i}{\rho} \nabla n \right]$. В монографії [3] її подано через термодифузійну силу \mathbf{d}_i *лише сорту* i у вигляді³ $\frac{n}{n_i} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{d}_i$. З другого боку, вводячи для больцманівського газу дифузійну силу $\mathbf{X}_k \equiv -m_k^{-1} (\nabla \mu_k)_T$ (градієнт при сталій температурі), або ж по-іншому $\mathbf{X}_k = -\frac{k_B T}{\rho_k} \nabla n_k$, одержуємо дифузійну частину в стандартному вигляді: $-\frac{m_i \mathbf{c}_i}{k_B T} \cdot \sum_k [\delta_{ik} - \rho_k / \rho] \mathbf{X}_k$. Такі вектори \mathbf{X}_k задовольняють умову: $\sum_k \rho_k \mathbf{X}_k = -(\nabla P)_T$.

В теорії Енскога для суміші твердих кульок вираз для ε такий же, як для ідеального газу, а вираз для тиску зазнає змін. З ф. (338) маємо $\omega_T^{\text{hs}} = -\frac{2}{3} P_{\text{hs}} / (k_B n)$ і ф. (135) набуває вигляду:

$$D_{t,i}^0 f_i \Big|_E = f_i^0 \left\{ \left[\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2} - \frac{m_i P_{\text{hs}}}{\rho k_B T_{\text{hs}}} \right] \mathbf{c}_i \cdot \nabla \ln T_{\text{hs}} + 2\tilde{m}_i \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V} + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{P_{\text{hs}}}{n k_B T_{\text{hs}}} \right) \left[\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2} \right] \nabla \cdot \mathbf{V} + \sum_k \left[\frac{\delta_{ik}}{n_i} - \frac{m_i}{\rho k_B T_{\text{hs}}} \left(\frac{\partial P_{\text{hs}}}{\partial n_k} \right)_{\{n\}'_k T_{\text{hs}}} \right] \mathbf{c}_i \cdot \nabla n_k \right\}. \quad (140)$$

³Якщо зовсім строго, то в [3] дано таке означення:

$$\mathbf{d}_i \equiv \frac{1}{n} \nabla n_i - \frac{\rho_i}{n \rho} \nabla n + \left(\frac{n_i}{n} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \nabla \ln T.$$

Проте, завдяки доданку з ∇n , у вектор \mathbf{d}_i також входять градієнти й інших густин n_k , тому відносити їх до сорту i не дуже коректно.

Зведення дифузійної частини до дифузійних сил \mathbf{X}_T , означених через хімічний потенціал, здійснено в праці [4].

У наведених виразах лише доданок із $\nabla \mathbf{V}$ не змінюється.

Розрахунок I_i^∇ . Кожен доданок суми

$$I_i^\nabla = \sum_j \sum_q \sum_l \sum_p \sum_{\ominus|\oplus,\ominus,\otimes} I_{ij}^{qlp,\nabla},$$

потрібно проінтегрувати по \mathbf{c}_j та $\hat{\sigma}$. Як відомо [2,3], внески від процесу \ominus на твердій серцевині можна проінтегрувати до кінця, отримавши в результаті явні функції від \mathbf{c}_i . Для процесів \oplus , \ominus та \otimes також було би корисно отримати результати у явному вигляді й порівняти, наскільки вони відрізняються від многочленів Соніна-Лягера, які виникають у кінцевих виразах для $I_{ij}^{clp,\nabla}$.

Проте, розраховуючи їх, натрапляємо на ускладнення завдяки двом обставинам: 1) при інтегруванні по $\hat{\sigma}$ з'являються доданки із c_{ji} у знаменнику, зумовлені функціями $\theta^\ominus(c_{ji\sigma})$ і $\theta^\otimes(c_{ji\sigma})$; 2) для процесів \oplus і \ominus величина $c_{ji\sigma}$ фігурує ще й під коренем. Для \ominus ці обставини проявляються одночасно, роблячи перетворення найскладнішим. Першу обставину можна відслідкувати далі: поява c_{ji} у знаменнику змушує змінювати змінну інтегрування $\mathbf{c}_j \rightarrow \mathbf{c}_{ji}$, а це веде до появи в експоненті функції f_j^0 скалярного добутку $\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_{ji}$ і робить складними й громіздкими подальші інтегрування по кутовій змінній \hat{c}_{ji} .

Зважаючи на ці труднощі, доцільно не шукати кінцевих виразів у явній формі, а зупинитися на проміжних виразах, оскільки далі треба розв'язувати інтегральні рівняння для кожного градієнта і при цьому переходити до змінних центра мас.

Внески від усіх процесів можна записати спільною формулою

$$I_{ij}^{qlp,\nabla} = \gamma_p y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql}) \gamma_p^p \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 \hat{\sigma} \cdot \nabla \ln \left\{ f_j^0(\mathbf{c}_j^{qlp}) f_j^0(\mathbf{c}_j) \right\}, \quad (141)$$

де було використано співвідношення (91) і (351). Розписуючи градієнт логарифма (390) для процесів \ominus , \otimes та \oplus , \ominus за допомогою фф. (381) і (382), зручно виділити *спільну* частину, характерну для всіх процесів (нижче — зліва від вертикальної риски) й залишок, що

стосується тільки \oplus і \ominus (справа від риски):

$$\left[\begin{array}{c} 2 \\ 2\tilde{m}_j \\ \tilde{m}_j \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 2\mathbf{c}_j - 2M_i c_\sigma \hat{\sigma} \\ 2c_j^2 - 4M_i \mathbf{c}_j \cdot \hat{\sigma} c_\sigma + \\ + 4M_i^2 c_\sigma^2 \end{array} \right. \left. \begin{array}{l} 0 \\ M_i [c_\sigma + Q_{ij}^{qlp}] \hat{\sigma} \\ pM_i^2 (v_{ij}^{ql})^2 + 2M_i \mathbf{c}_j \cdot \hat{\sigma} c_\sigma - 2M_i^2 c_\sigma^2 + \\ + 2M_i \mathbf{c}_j \cdot \hat{\sigma} Q_{ij}^{qlp} - 2M_i^2 c_\sigma Q_{ij}^{qlp} \end{array} \right\},$$

де перший, другий і два останні рядки являють собою вирази, на які мають домножуватися $\nabla \ln n_j$, $\nabla \mathbf{V}^\dagger$ і $\nabla \ln T^{k0}$ відповідно; тут позначено $\mathbf{c} \equiv \mathbf{c}_{j_i}$. крім цього, як видно з ф. (390), від виразу в останніх двох рядках треба відняти 3. Як зазначено вище, таке розбиття позначаємо нижніми індексами (1) і (2):

$$I_{ij}^\nabla = I_{ij(1)}^\nabla + I_{ij(2)}^\nabla.$$

Далі кожен рядок спільної частини (зліва) треба проінтегрувати з кожною θ^p -функцією, а рядки справа — з θ^\oplus і θ^\ominus . Але спільна частина ніяк не залежить від типу процесу і тому для неї внески від процесів \otimes та \ominus можна *об'єднати*, уникнувши тих ускладнень, про які йшла мова на початку. У результаті для кожного внеску $I_{ij(1)}^{qlp,\nabla}$ приходимо до інтеграла по $\hat{\sigma}$ з “повною” функцією $\theta(c_\sigma)$:

$$I_{ij(1)}^{qlp,\nabla} = \gamma_p y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} f_i^0 \int d\mathbf{c}_j f_j^0 \int d\hat{\sigma} \theta(c_\sigma) \times \quad (142)$$

$$\times \left(\left[\begin{array}{c} 2 \\ 2\tilde{m}_j \\ \tilde{m}_j \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} c_\sigma \hat{\sigma} \\ 2\mathbf{c}_j c_\sigma \hat{\sigma} - 2M_i c_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ 2c_j^2 c_\sigma \hat{\sigma} - 4M_i \mathbf{c}_j \cdot c_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ + 4M_i^2 c_\sigma^3 \hat{\sigma} \end{array} \right\} - \left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 3c_\sigma \hat{\sigma} \end{array} \right] \right) \left(\begin{array}{c} \cdot \nabla \ln n_j \\ : \nabla \mathbf{V} \\ \cdot \mathbf{X}_T \end{array} \right),$$

де $\gamma_p = \{\ominus, \otimes, \oplus\} = \{+1, -q, q\}$. Вирази у великих фігурних дужках такі ж, які виникають у випадку твердих кульок.

Залишок, притаманний лише процесам \oplus та \ominus (справа від вертикальної риски) дорівнює:

$$I_{ij(2)}^{qlp,\nabla} = qp y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} f_i^0 2\tilde{\mu}_{ij} \int d\mathbf{c}_j f_j^0 \int d\hat{\sigma} \theta^p(c_\sigma) \times \quad (143)$$

$$\times \left\{ \begin{array}{l} c_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} + c_\sigma Q_{ij}^{qlp} \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ \mathbf{c}_j \cdot c_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} - M_i c_\sigma^3 \hat{\sigma} + p\nu_i^{ql} c_\sigma \hat{\sigma} + \\ + \mathbf{c}_j \cdot c_\sigma Q_{ij}^{qlp} \hat{\sigma} \hat{\sigma} - M_i c_\sigma^2 Q_{ij}^{qlp} \hat{\sigma} \end{array} \right\} \left(\begin{array}{c} : \nabla \mathbf{V} \\ \cdot \mathbf{X}_T \end{array} \right),$$

де $\nu_i^{ql} \equiv \frac{1}{2} M_i (v_{ij}^{ql})^2$. У сумарному доданку

$$I_{i(2)}^\nabla = \sum_j \sum_q^{r,a} \sum_l \sum_p^{\oplus, \ominus} I_{ij(2)}^{qlp,\nabla}$$

нема внесків \odot та \otimes . Далі фф. (142) і (143) розглядаємо нарізно.

Спільна частина. Після інтегрування по $\hat{\sigma}$ за допомогою ф. (402), інтеграл ф. (142) набуває вигляду:

$$A_j^0 \int_0^\infty d c_j e^{-\tilde{m}_j c_j^2} c_j^2 \int d\hat{c}_j \theta(c) \times \quad (144)$$

$$\times \pi \left(\left[\begin{array}{c} 2 \\ 2\tilde{m}_j \\ \tilde{m}_j \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} \frac{2}{3} \mathbf{c} \\ \frac{4}{3} \mathbf{c}_j \mathbf{c} - \frac{4}{15} M_i [c^2 \mathbf{1} + 2\mathbf{c}\mathbf{c}] \\ \frac{4}{3} c_j^2 \mathbf{c} - \frac{8}{15} M_i \mathbf{c}_j \cdot [c^2 \mathbf{1} + 2\mathbf{c}\mathbf{c}] + \frac{8}{5} M_i^2 c^2 \mathbf{c} \end{array} \right\} - \left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 2\mathbf{c} \end{array} \right] \right).$$

Виражаємо \mathbf{c} через \mathbf{c}_j та \mathbf{c}_i й відкидаємо непарні по \mathbf{c}_j доданки, які пропадають після інтегрування по орієнтаціях \hat{c}_j . Великі круглі дужки ф. (144) переходять у

$$\pi \left(\left[\begin{array}{c} 2 \\ 2\tilde{m}_j \\ \tilde{m}_j \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} -\frac{2}{3} \mathbf{c}_i \\ \frac{4}{3} \mathbf{c}_j \mathbf{c}_j - \frac{4}{15} M_i [(c_i^2 + c_j^2) \mathbf{1} + 2(\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j \mathbf{c}_j)] \\ -\frac{4}{3} c_j^2 \mathbf{c}_i + \frac{8}{15} M_i [2c_j^2 \mathbf{c}_i + 4\mathbf{c}_j \mathbf{c}_j \cdot \mathbf{c}_i] - \\ -\frac{8}{5} M_i^2 [c_i^2 \mathbf{c}_i + c_j^2 \mathbf{c}_i + 2\mathbf{c}_j \mathbf{c}_j \cdot \mathbf{c}_i] \end{array} \right\} + \left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 2\mathbf{c}_i \end{array} \right] \right).$$

Інтегруємо по \hat{c}_j за допомогою ф. (424) й отримуємо:

$$4\pi^2 \left(\left[\begin{array}{c} 2 \\ 2\tilde{m}_j \\ \tilde{m}_j \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} -\frac{2}{3} \mathbf{c}_i \\ -\frac{4}{15} M_i (2\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i + c_i^2 \mathbf{1}) + \frac{4}{9} [1 - M_i] c_j^2 \mathbf{1} \\ -\frac{8}{5} M_i^2 c_i^2 \mathbf{c}_i + \frac{4}{3} [-1 + \frac{4}{3} M_i - 2M_i^2] c_j^2 \mathbf{c}_i \end{array} \right\} + \left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 2\mathbf{c}_i \end{array} \right] \right).$$

Далі згідно з ф. (144) інтегруємо по c_j за допомогою ф. (427): c_j^2 дає $\frac{1}{2} \tilde{m}_j^{-3/2} \Gamma(\frac{3}{2})$, а c_j^4 дає $\frac{1}{2} \tilde{m}_j^{-5/2} \Gamma(\frac{5}{2})$. Результат має вигляд:

$$A_j^0 \frac{2\pi^2 \Gamma(\frac{3}{2})}{\tilde{m}_j^{3/2}} \left[\begin{array}{c} 2 \\ 2\tilde{m}_j \\ \tilde{m}_j \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} -\frac{2}{3} \mathbf{c}_i \\ -\frac{4}{15} M_i (2\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i + c_i^2 \mathbf{1}) + \frac{2}{3} M_j \tilde{m}_j^{-1} \mathbf{1} \\ -\frac{8}{5} M_i^2 c_i^2 \mathbf{c}_i + 4M_i [\frac{2}{3} - M_i] \tilde{m}_j^{-1} \mathbf{c}_i \end{array} \right\},$$

де у фігурні дужки було перенесено $2\mathbf{c}_i$ з останнього стовпця. Нагромаджений коефіцієнт зводиться до $n_j \pi$ і початковий вираз (142) набуває вигляду:

$$I_{ij(1)}^{qlp,\nabla} = \gamma_p y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} f_i^0 n_j \pi \times \quad (145)$$

$$\times \left\{ \begin{array}{l} -\frac{4}{3} \mathbf{c}_i \\ -\frac{4}{3} [\frac{4}{5} \tilde{\mu}_{ij} \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i + (\frac{2}{5} \tilde{\mu}_{ij} c_i^2 - M_j) \mathbf{1}] \\ -4M_i (\frac{2}{5} \tilde{\mu}_{ij} c_i^2 + M_i - \frac{2}{3}) \mathbf{c}_i \end{array} \right\} \left(\begin{array}{c} \cdot \nabla \ln n_j \\ : \nabla \mathbf{V} \\ \cdot \mathbf{X}_T \end{array} \right).$$

Додавши внески від процесів отримуємо такий результат:

$$I_{i(1)}^{\nabla} = f_i^0 \left\{ \mathcal{L}_{i(1)}^{T,\nabla} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_T + \mathcal{L}_{i(1)}^{\mathbf{V},\nabla} \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V} + \mathcal{L}_{i(1)}^{I,\nabla} \nabla \cdot \mathbf{V} + \right. \quad (146)$$

$$\left. + \sum_j \mathcal{L}_{ij(1)}^{n,\nabla} \mathbf{c}_i \cdot \nabla n_j \right\},$$

де коефіцієнти мають вигляд:

$$\mathcal{L}_{i(1)}^{T,\nabla} = -\frac{12}{5} \sum_j M_i M_j n_j p_{ij} \left[\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{5}{2} \right] - 2 \sum_j M_i n_j p_{ij}, \quad (147)$$

$$\mathcal{L}_{i(1)}^{\mathbf{V},\nabla} = -\frac{8}{5} \sum_j \tilde{\mu}_{ij} n_j p_{ij}, \quad (148)$$

$$\mathcal{L}_{i(1)}^{I,\nabla} = -\frac{4}{3} \sum_j M_j n_j p_{ij} \left[\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2} \right], \quad (149)$$

$$\mathcal{L}_{ij(1)}^{n,\nabla} = -2 p_{ij}. \quad (150)$$

Величину p_{ij} означено раніше за допомогою ф. (117), а у фф. (147) і (149) виділено многочлени Соніна-Лягера.

Залишок від обмінних процесів. Для нього ми наводимо проміжну формулу, у вигляді інтегралів по \mathbf{c}_j , виражаючи передачі імпульсу й енергії у фігурних дужках ф. (143) через швидкість центра мас \mathbf{G} і відносну швидкість \mathbf{c} :

$$\int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} f_j^0 \theta^p(c_\sigma) \left\{ [c_\sigma^2 + c_\sigma Q_{ij}^{qlp}] \hat{\sigma} \hat{\sigma} \right. \quad (151)$$

$$\left. \left\{ \mathbf{G} \cdot [c_\sigma^2 + c_\sigma Q_{ij}^{qlp}] \hat{\sigma} \hat{\sigma} + p \nu_i^{ql} c_\sigma \hat{\sigma} \right\} \begin{pmatrix} : \nabla \mathbf{V} \\ \cdot \mathbf{X}_T \end{pmatrix} \right\}.$$

Інтегрування фігурних дужок по $\hat{\sigma}$ за фф. (402) та (408) дає:

$$\pi \theta^p(c) \left\{ \frac{2}{3} j_3^{p+} \mathbf{l} + i_{22}^{p+} \mathbf{c} \circ \mathbf{c} \right. \quad (152)$$

$$\left. \left\{ \mathbf{G} \cdot [c^2 i_{02}^{p+} \mathbf{l} + i_{22}^{p+} \mathbf{c} \mathbf{c}] + p \nu_i^{ql} \frac{2}{3} j_3^p \mathbf{c} \right\} \right\},$$

де у верхньому рядку виділено діагональний і позадіагональний внески використавши ф. (403); вигляд функцій j_3^p та i_{rk}^{p+} наведено в додатках D.1.1 та D.1.2.

Як вже було згадано, подальші інтегрування по \hat{c}_j ведуть до ускладнень, тому запишімо проміжний результат у вигляді:

$$I_{i(2)}^{\nabla} = f_i^0 \left\{ \mathcal{L}_{i(2)}^{T,\nabla} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_T + \mathcal{L}_{i(2)}^{\mathbf{V},\nabla} \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V} + \mathcal{L}_{i(2)}^{I,\nabla} \nabla \cdot \mathbf{V} \right\}, \quad (153)$$

де завдяки виразу (152) з ф. (143) отримуємо:

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}_{i(2)}^{T,\nabla} \mathbf{c}_i \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{\mathbf{V},\nabla} \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{I,\nabla} \end{bmatrix} = \sum_j \sum_q \sum_l \sum_p^{\oplus, \ominus} q p \pi y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_r^{qp} 2 \tilde{\mu}_{ij} \int d\mathbf{c}_j f_j^0 \times \quad (154)$$

$$\times \theta^p(c) \begin{bmatrix} \mathbf{G} \cdot [c^2 i_{02}^{p+} \mathbf{l} + i_{22}^{p+} \mathbf{c} \mathbf{c}] + p \nu_i^{ql} \frac{2}{3} j_3^p \mathbf{c} \\ i_{22}^{p+} \mathbf{c} \circ \mathbf{c} \\ \frac{2}{3} c^2 j_3^{p+} \end{bmatrix}.$$

Розрахунок I_i^g . Подібно до попереднього випадку можемо записати:

$$I_i^g = \sum_j \sum_q \sum_l \sum_p^{\ominus | \oplus, \ominus, \otimes} I_{ij}^{qlp,g}, \quad (155)$$

де вигляд внесків задається такою спільною формулою:

$$I_{ij}^{qlp,g} = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 \times \quad (156)$$

$$\times \left[g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \sigma_{ij}^{cl})_r^+ - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \sigma_{ij}^{cl})_r^+ \right. \\ \left. \left[g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql})_r^{-q} - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + q\sigma_{ij}^{ql})_r^{-q} \right] \right]; \\ \left[e^{-p\tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + qp\sigma_{ij}^{ql})_r^{-qp} - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - qp\sigma_{ij}^{ql})_r^{qp} \right];$$

тут остання різниця стосується процесів \oplus та \ominus . Хоч вирази у дужках не залежать від швидкостей, проінтегрувати по швидкості \mathbf{c}_j непросто через присутність функцій θ^{\otimes} і θ^{\ominus} . Тому спробуємо об'єднати їх. Різницю для $p = \ominus$ (третьій рядок у дужках),

$$\theta^{\ominus}(c_{ji}) [e^{+\tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql})_r^{+q} - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + q\sigma_{ij}^{ql})_r^{-q}]$$

розбиймо на дві частини, віднявши і додавши $g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql})_r^{-q}$. Внесок, пов'язаний із першою частиною

$$\theta^{\ominus}(c_{ji}) [e^{+\tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql})_r^{+q} - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql})_r^{-q}] \quad (157)$$

будемо розглядати окремо, а доданок від

$$\theta^{\ominus}(c_{ji}) [g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql})_r^{-q} - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + q\sigma_{ij}^{ql})_r^{-q}] \quad (158)$$

об'єднаймо із внеском \otimes з ф. (156) Ця сума (позначена значком $\otimes \ominus$) отримує біля себе звичайну функцію $\theta(c_{ji})$. Проробімо те ж у внеску \oplus з ф. (156), додавши й віднявши $g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + q\sigma_{ij}^{ql})_r^q$.

Після цього ф. (156) розпадається на дві частини, одна з яких містить доданки типу (158), але з функцією $\theta(c_{ji\sigma})$

$$I_{ij(1)}^{qlp,g} \Big|_{p=\{\odot, \otimes, \oplus\}} = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 \times \quad (159)$$

$$\times \left[g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \gamma_p \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \gamma_p \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p} \right],$$

де $\gamma_{\otimes} = -q$, а інші значення без змін. Друга частина містить доданки типу (157) для процесів \oplus і \ominus :

$$I_{ij(2)}^{qlp,g} \Big|_{p=\{\oplus, \ominus\}} = (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 \times \quad (160)$$

$$\times \left[e^{-p\epsilon_{ij}^{ql}} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + qp \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{-qp} - g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + qp \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \right].$$

Перший внесок (159) назвімо умовно *основним*. Він перетворюється подібно до свого відповідника для суміші твердих кульок [4]. Другий внесок, ф. (160), характерний лише для обмінних процесів, назвімо *залишковим*. Тоді для сумарного доданка маємо:

$$I_i^g = I_{i(1)}^g + I_{i(2)}^g,$$

де вираз для $I_{i(1)}^g$ повторює ф. (155), а $I_{i(2)}^g$ не має внесків \odot і \otimes :

$$I_{i(2)}^g = \sum_j \sum_{q, a} \sum_l \sum_p^{\oplus, \ominus} I_{ij(2)}^{qlp,lg}.$$

Основний внесок $I_{i(1)}^g$. Хоч залежність від \mathbf{c}_{ji} у ф. (159) простіша, ніж від $\hat{\sigma}$, однак спроба проінтегрувати по \mathbf{c}_{ji} веде завдяки $\theta(c_{ji\sigma})$ до ускладнень. Тому наступне перетворення $I_{ij(1)}^g$ покликане усунути θ -функцію.

У доданках квадратних дужок ф. (159), які містять $g_2^{ij,1}$ з мінусом, перейдімо до нової змінної $\hat{\sigma}' = -\hat{\sigma}$. При цьому вони набувають такого ж вигляду, як і залишені доданки. У сумі на місці $\theta(c_{ji\sigma})$ з'являється $[\theta(c_{ji\sigma}) + \theta(-c_{ji\sigma})]$, що тотожно дорівнює 1, і тепер легко проінтегрувати по \mathbf{c}_j з результатом:

$$I_{ij(1)}^{qlp,g} \Big|_{p=\{\odot, \otimes, \oplus\}} = -f_i^0 n_j \mathbf{c}_i \cdot (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \gamma_p \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p}. \quad (161)$$

Для сумарного внеску, використавши формальний параметр b , значення $+1$ якого відповідає процесу \oplus на сходинках $\{r, a\}$, а $b = -1$

— внеску від \otimes на сходинках і \odot на твердій серцевині ($c = -1$), маємо:

$$I_{i(1)}^g = -f_i^0 \mathbf{c}_i \cdot \sum_j n_j \sum_q \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_b^{\pm 1} (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + bq \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq}. \quad (162)$$

Поправка $g_2^{ij,1}$ під інтегралом містить градієнти $\{n\}$ і β^{p0} , тому цей внесок розпадається на два

$$I_{i(1)}^g = I_{i(1)}^{g,n} + I_{i(1)}^{g,\beta}. \quad (163)$$

Їх вигляд одержуємо, замінюючи $g_2^{ij,1}$ у ф. (162) на $g_2^{ij,1n}$ чи $g_2^{ij,1\beta}$, ф. (349). У випадку суміші твердих кульок доданка $I_{i(1)}^{g,\beta}$ нема.

Подібно до роботи [4], в $I_{i(1)}^{g,n}$ виділяємо градієнт локально-рівно-важної функції Майєра, записавши його так:

$$I_{i(1)}^{g,n} = -f_i^0 \mathbf{c}_i \cdot \sum_j n_j \sum_q \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_b^{\pm 1} (\sigma_{ij}^{ql})^2 \times \quad (164)$$

$$\times \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} W_{ij}^0(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \chi_{ij}^{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 + bq \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}},$$

де виділено больцманівський множник W_{ij}^0 , ф. (361). Тут і надалі в аргументах функцій внеску $I_{i(1)}^{g,n}$ зручніше писати \mathbf{r}_1 замість \mathbf{r} (проте $\mathbf{r}_1 \equiv \mathbf{r}$). Вводячи δ -функції, інтеграл ф. (164) подаємо так:

$$(\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\mathbf{r}_2 \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} W_{ij}^0(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \delta(\mathbf{r}_{21} - bq \sigma_{ij}^{ql}) \chi_{ij}^{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}}.$$

Розписавши δ -функцію через змінні сферичної системи координат

$$\delta(\mathbf{r}_{21} - bq \sigma_{ij}^{ql}) = r_{21}^{-2} \delta(r_{21} - \sigma_{ij}^{ql}) \delta^{(2)}(\hat{r}_{21} - bq \hat{\sigma}),$$

можна зняти інтегрування по $\hat{\sigma}$ і, просумувавши по всіх сходинках, як у ф. (164), одержимо:

$$\int d\mathbf{r}_2 \hat{r}_{21} \sum_q \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_b^{\pm 1} bq W_{ij}^0(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \delta(r_{21} - \sigma_{ij}^{ql}) \chi_{ij}^{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}}.$$

Під інтегралом біля χ_{ij}^{1n} стоїть градієнт функції Майєра для БС потенціала (додаток В.1), тому

$$I_{i(1)}^{g,n} = -f_i^0 \mathbf{c}_i \cdot \sum_j n_j \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f_{ij}^M(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{21}} \chi_{ij}^{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}}. \quad (165)$$

Починаючи з цього місця, подальші перетворення носять загальний характер в тому розумінні, що справджуються для *довільного* потенціала, а не тільки багатосходинкового. Підставивши явний вираз (360) для χ_{ij}^{1n} і змінивши порядок інтегрування й підсумовування, прийдемо до такого вигляду:

$$I_{i(1)}^{g,n} = -f_i^0 \mathbf{c}_i \sum_k \nabla n_k : \int d\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_{31} \sum_j n_j \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f_{ij}^M(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{21}} H_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}}. \quad (166)$$

Вираз під внутрішньою сумою розглянули ван Бейєрен і Ернст для суміші твердих кульок [4]. Вони показали, що він зводиться до градієнта функції $c_{ik}(r_{13})_{\mathbf{r}} - \chi_{ik}^0(\sigma)_{\mathbf{r}} f_{ik}^M(r_{13})_{\mathbf{r}}$, де c_{ik} — пряма кореляційна функція, а $\chi_{ik}^0(\sigma)_{\mathbf{r}}$ — контакте значення χ_{ik}^0 для суміші твердих кульок. У випадку довільного потенціала цей результат модифікується лише в аргументі χ_{ik}^0 :

$$\sum_j n_j \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f_{ij}^M(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{21}} H_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} = \frac{\partial c_{ik}(r_{13})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{31}} - \frac{\partial f_{ik}^M(r_{13})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{31}} \chi_{ik}^0(r_{13})_{\mathbf{r}}, \quad (167)$$

тобто, повного градієнта не виходить завдяки додатковій залежності від r_{13} через χ_{ik}^0 . Підставмо це у ф. (166): доданок із c_{ik} інтегрується за частинами, даючи діагональний тензор $-\tilde{c}_{ik}(\mathbf{0})_{\mathbf{r}} \mathbf{l}$, де $\tilde{c}_{ik}(\mathbf{k})_{\mathbf{r}} \equiv \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} c_{ik}(r')_{\mathbf{r}} - \text{фур'є-образ функції } c_{ik}$; другий доданок зводимо, розписуючи градієнт f_{ik}^M через δ -функції, до вигляду $2p_{ik} \mathbf{l}$. Остаточно одержуємо:

$$I_{i(1)}^{g,n} = f_i^0 \mathbf{c}_i \cdot \sum_k \left[\tilde{c}_{ik}(\mathbf{0})_{\mathbf{r}} + 2p_{ik} \right] \nabla n_k. \quad (168)$$

Розгляньмо тепер другий доданок ф. (163):

$$I_{i(1)}^{g,\beta} = -f_i^0 \mathbf{c}_i \cdot \sum_j n_j \sum_q \sum_{l=1}^{c,r,a} \sum_b^{K_{ij}^q \pm 1} (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} g_2^{ij,1\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + bq\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq}. \quad (169)$$

Застосуємо до нього співвідношення (362), додаток В.3, яке для ф. (169) набуває вигляду:

$$g_2^{ij,1\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + bq\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} = \nabla \beta^{p0} \cdot \left[-\frac{1}{2} bq \sigma_{ij}^{ql} \phi_{ij}^{\text{MS}}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} + \right. \\ \left. + W_{ij}^0(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \chi_{ij}^{1\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + bq\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}} \right]. \quad (170)$$

Тут перший доданок зумовлено залежністю g_2^{ij} від β^p через функціонал W_{ij} , ф. (354). Завдяки попередній формулі внесок розпадається на два доданки:

$$I_{i(1)}^{g,\beta} = I_{i(1)}^{g,\beta 0} + I_{i(1)}^{g,\beta 1}, \quad (171)$$

де верхній числовий індекс вказує на порядок поправки до χ_{ij} .

Інтеграл ф. (169) для $I_{i(1)}^{g,\beta 0}$ дорівнює:

$$-\frac{1}{2} bq \sigma_{ij}^{ql} g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \phi_{ij}^{\text{MS}}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \nabla \beta^{p0} \cdot \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \hat{\sigma},$$

а інтегрування дає $4\pi \frac{1}{3} \mathbf{l}$ і ми, врешті, отримуємо:

$$I_{i(1)}^{g,\beta 0} = f_i^0 \sum_j n_j Y_{ij}^{\beta 0} \mathbf{c}_i \cdot \nabla \beta^{p0}, \quad (172)$$

де позначено

$$Y_{ij}^{\beta 0} \equiv \frac{2}{3} \pi \sum_q \sum_{l=1}^{c,r,a} \sum_b^{K_{ij}^q \pm 1} bq y_3^{ij}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq} \phi_{ij}^{\text{MS}}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{bq}. \quad (173)$$

Другий доданок ф. (171) має такий же вигляд, як і ф. (164), якщо там замінити χ_{ij}^{1n} на $\chi_{ij}^{1\beta}$. Його теж виражаємо через функцію Майєра:

$$I_{i(1)}^{g,\beta 1} = -f_i^0 \mathbf{c}_i \cdot \sum_j n_j Y_{ij}^{\beta 1} \cdot \nabla \beta^{p0}, \quad (174)$$

де введено позначення для тензора

$$Y_{ij}^{\beta 1}(\mathbf{r}_1) \equiv \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f_{ij}^M(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{21}} \int d\mathbf{r}_3 H_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \mathbf{r}_{31}. \quad (175)$$

Проте, ситуація з ф. (175) інша тому, що функціональна похідна H_{ij}^{β} має *інакшу топологічну структуру діаграм*, ніж H_{ij}^n . Щоб зрозуміти, до якої форми має звестися вираз (174), звернімося спочатку до його односортового варіанта, додаток В.5. Як видно з ф. (368), результат виражається через температурну похідну від потенціального внеску в тиск.

Для кількасортного варіанту, фф. (174) і (175), зауважмо, що тензор $Y_{ij}^{\beta 1}$ діагональний $Y_{ij}^{\beta 1} = Y_{ij}^{\beta 1} \mathbf{l}$, бо через залежність H_{ij}^{β} лише від відносних відстаней внутрішній інтеграл ф. (175) зводиться (додаток В.4) до:

$$\hat{r}_{21} \int d\mathbf{r}_3 H_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \mathbf{r}_{31} \cdot \hat{r}_{21}.$$

Тому ф. (174) можемо переписати так:

$$I_{i(1)}^{g,\beta 1} = -f_i^0 \sum_j n_j Y_{ij}^{\beta 1} \mathbf{c}_i \cdot \nabla \beta^{p0}.$$

Додавши її до результату (172), одержуємо перший варіант:

$$I_{i(1)}^{g,\beta} = f_i^0 \sum_j \frac{n_j}{\theta^{k0}} [Y_{ij}^{\beta 1} - Y_{ij}^{\beta 0}] \mathbf{c}_i \cdot \nabla \ln T^{k0}. \quad (176)$$

Спробуємо використати симетрійні аргументи (як це зроблено в односортного випадку), розбивши $Y_{ij}^{\beta 1}$ у ф. (174) на симетризовану і антисиметричну частини

$$Y_{ij}^{\beta 1} = \frac{1}{2}(Y_{ij}^{\beta 1} + Y_{ji}^{\beta 1}) + \frac{1}{2}(Y_{ij}^{\beta 1} - Y_{ji}^{\beta 1}), \quad (177)$$

де, використавши, що $H_{ji}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} = H_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}}$, маємо:

$$Y_{ij}^{\beta 1} \pm Y_{ji}^{\beta 1} \equiv \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f_{ij}^M(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{21}} \int d\mathbf{r}_3 \{H_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \pm H_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}}\} \mathbf{r}_{31}. \quad (178)$$

Для доданка з плюсом застосуємо зауваження про симетризацію (додаток В.4) з таким результатом для внутрішнього інтеграла:

$$\frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} 2 \frac{\partial \chi_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \beta^{p0}}.$$

Діючи далі, як в односортному випадку, одержуємо:

$$\frac{1}{2}(Y_{ij}^{\beta 1} + Y_{ji}^{\beta 1}) = l \left\{ \frac{\partial p_{ij}}{\partial \beta^{p0}} + Y_{ij}^{\beta 0} \right\},$$

де другий доданок пропадає після додавання виразу (172).

Як перетворювати піврізницю з ф. (177) нам невідомо, але вона, як зауважено раніше, є діагональною $l \frac{1}{2}(Y_{ij}^{\beta 1} - Y_{ji}^{\beta 1})$. Підставляючи це і попередній вираз у ф. (177), а її — у ф. (174), отримуємо після додавання ф. (172) другий варіант:

$$I_{i(1)}^{g,\beta} = f_i^0 \sum_j \frac{n_j}{\theta^{k0}} \left\{ \frac{\partial p_{ij}}{\partial \beta^{p0}} + \frac{1}{2}(Y_{ij}^{\beta 1} - Y_{ji}^{\beta 1}) \right\} \mathbf{c}_i \cdot \nabla \ln T^{k0}. \quad (179)$$

При $j = i$ піврізниця у фігурних дужках пропадає; в односортному випадку вираз переходить у ф. (368).

Об'єднавши фф. (168) і (179), записуємо кінцевий вираз для $I_{i(1)}^g$ у вигляді

$$I_{i(1)}^g = f_i^0 \left\{ \sum_j \mathcal{L}_{ij(1)}^{n,g} \mathbf{c}_i \cdot \nabla n_j + \mathcal{L}_{i(1)}^{T,g} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_T \right\}, \quad (180)$$

де коефіцієнти дорівнюють:

$$\mathcal{L}_{ij(1)}^{n,g} = \tilde{c}_{ij}(\mathbf{0})_{\mathbf{r}} + 2p_{ij}, \quad (181)$$

$$\mathcal{L}_{i(1)}^{T,g} = \sum_j \frac{n_j}{\theta^{k0}} \left\{ -(\theta^{k0})^2 \frac{\partial p_{ij}}{\partial \theta^{k0}} + \frac{1}{2}(Y_{ij}^{\beta 1} - Y_{ji}^{\beta 1}) \right\}. \quad (182)$$

Обидві ці функції не залежать від швидкості \mathbf{c}_i . З ф. (176) маємо ще альтернативний варіант: $\mathcal{L}_{i(1)}^{T,g} = \sum_j (n_j/\theta^{k0}) [Y_{ij}^{\beta 1} - Y_{ji}^{\beta 0}]$.

Залишковий внесок $I_{i(2)}^g$. Різницю під інтегралом ф. (160) можна замінити, згідно ф. (350), на вираз

$$g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} p \epsilon_{ij}^{ql} [\beta^{p1}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} q p \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^{p0}(\mathbf{r})].$$

При цьому поправка $g_2^{ij,1}$ випадає із розгляду, а висота сходинки ϵ_{ij}^{ql} з'являється у ролі множника і з ф. (160) маємо:

$$I_{ij(2)}^{qlp,g} \Big|_{p=\{\oplus, \ominus\}} = f_i^0 y_2^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} p \epsilon_{ij}^{ql} \times \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} f_j^0 c_{ji\sigma} \theta^p (c_{ji\sigma}) [\beta^{p1} + \frac{1}{2} q p \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^{p0}]. \quad (183)$$

Після інтегрування по $\hat{\sigma}$ за допомогою фф. (402) інтеграл цього виразу набуває вигляду:

$$2\pi \int d\mathbf{c}_j f_j^0 \theta^p (c_{ji}) [c_{ji} j_2^p (c_{ji}) \beta^{p1} + \frac{1}{2} q p \sigma_{ij}^{ql} j_3^p (c_{ji}) \mathbf{c}_{ji} \cdot \nabla \beta^{p0}]. \quad (184)$$

Проміжний результат для внеску $I_{i(2)}^g$ подаємо так:

$$I_{i(2)}^g = f_i^0 \left\{ \mathcal{L}_{i(2)}^{T,g} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_T + \mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g} \beta^{p1} \right\}, \quad (185)$$

де функції виражаються через інтеграли:

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}_{i(2)}^{T,g} \mathbf{c}_i \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g} \end{bmatrix} = \sum_j \sum_q^{\mathbf{r},\mathbf{a}} \sum_l^{\oplus, \ominus} \sum_p \pi y_2^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \begin{bmatrix} -q \sigma_{ij}^{ql} \epsilon_{ij}^{ql} \\ 2p \epsilon_{ij}^{ql} \end{bmatrix} \int d\mathbf{c}_j f_j^0 \theta^p (c) \begin{bmatrix} j_3^p \mathbf{c} \\ c j_2^p \end{bmatrix}, \quad (186)$$

Табл. 1. Градієнти у внесках неоднорідної частини.

Внесок	$\mathbf{c}_i \cdot \nabla \ln T^{k0}$	$\mathbf{c}_i^o \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V}$	$\nabla \cdot \mathbf{V}$	$\mathbf{c}_i \cdot \nabla n_k$	β^{p1}
$D_{t,i}^0 f_i^0$	\mathcal{L}	\mathcal{L}	\mathcal{L}	\mathcal{L}	—
$I_{i(1)}^\nabla$	\mathcal{L}	\mathcal{L}	\mathcal{L}	\mathcal{L}	—
$I_{i(1)}^g$	\mathcal{L}	—	—	\mathcal{L}	—
$I_{i(2)}^\nabla$	\mathcal{L}	\mathcal{L}	\mathcal{L}	—	—
$I_{i(2)}^g$	\mathcal{L}	—	—	—	\mathcal{L}

де було враховано, що $\nabla \beta^{p0} = -(\theta^{k0})^{-1} \nabla \ln T^{k0}$.

Нижче у підпараграфі, де розглядається рівняння для e^p у першому порядку, показано, що β^{p1} має лише одну компоненту по градієнтах: $\beta^{p1} = \Omega_\beta \nabla \cdot \mathbf{V}$, а коефіцієнт пропорційності Ω_β залежить функціонально від поправок $\{\phi\}$. Тому внесок $I_{i(2)}^g$ містить насправді, крім $\nabla \ln T^{k0}$, ще і $\nabla \cdot \mathbf{V}$.

Підсумок. У таблиці зведено відомості про те, які градієнти містить кожен із розрахованих доданків неоднорідної частини. Відмітка \mathcal{L} означає наявність відповідної функції біля того чи іншого градієнта. Поточковий член у першому рядку є єдиним внеском у випадку кінетичного рівняння Больцмана. У другому і третьому рядках стоять внески, аналоги енскогівських, але для випадку системи з БС потенціалом. Відмінним тут є доданок у третьому рядку $\sim \nabla \ln T^{k0}$ від $I_{i(1)}^g$, якого кінетичне рівняння Енскога не дає. Внески четвертого і п'ятого рядків названо “залишковими”, оскільки вони характерні лише для БС потенціала, а в енскогівському випадку не виникають. П'ятий рядок містить першу поправку до β^p і забезпечує зв'язаність рівнянь для f_i та e^p у першому порядку за градієнтами.

3.3.2. Об'єднання внесків

Після об'єднання внесків з однаковими градієнтами, неоднорідна частина набуває вигляду:

$$D_{t,i}^0 f_i^0 - I_i^\nabla - I_i^g = f_i^0 \left\{ \mathcal{L}_i^T \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_T + \mathcal{L}_i^V \mathbf{c}_i^o \mathbf{c}_i : \nabla \mathbf{V} + \mathcal{L}_i^I \nabla \cdot \mathbf{V} + \right. \quad (187)$$

$$\left. + \sum_k \mathcal{L}_{ik}^\mu \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_k - \mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g} \beta^{p1} \right\},$$

де дифузійний внесок виражено через дифузійні сили $\{\mathbf{X}\}$, пов'язані з градієнтами хімічних потенціалів, див. ф. (194). Явні вирази

для \mathcal{L}_i^T , \mathcal{L}_i^V , \mathcal{L}_i^I та \mathcal{L}_{ik}^μ подано нижче. Виділяючи у перших трьох функціях явну і неявну залежність від \mathbf{c}_i , запишемо їх так:

$$\mathcal{L}_i^F = \mathcal{L}_{i(1)}^F + \mathcal{L}_{i(2)}^F, \quad (188)$$

де у першому доданку враховано лише основні внески $I_{i(1)}^\nabla$ та $I_{i(1)}^g$. Надалі $\mathcal{L}_{i(1)}^F$ зручно представляти у формі лінійних комбінацій від многочленів Соніна-Лягера $S_\nu^m(C_i^2)$, додаток С.4, де $\mathbf{C}_i \equiv \sqrt{\tilde{m}_i} \mathbf{c}_i$. Залишкові внески $I_{i(2)}^\nabla$ та $I_{i(2)}^g$, характерні лише для БС потенціала, віднесено до $\mathcal{L}_{i(2)}^F$ і залишено у формі інтегралів по \mathbf{c}_j .

Температурна частина. Згідно введених позначень, маємо:

$$\mathcal{L}_{i(1)}^T \equiv \mathcal{L}_i^{T,D} - \mathcal{L}_{i(1)}^{T,\nabla} - \mathcal{L}_{i(1)}^{T,g}, \quad \mathcal{L}_{i(2)}^T \equiv -\mathcal{L}_{i(2)}^{T,\nabla} - \mathcal{L}_{i(2)}^{T,g}, \quad (189)$$

де функції справа подано у фф. (136), (147), (182), (154) і (186). Вираз для частини з явною залежністю зручно записати так:

$$\mathcal{L}_{i(1)}^T = L_{i(1)}^{T,0} S_{3/2}^0(C_i^2) + L_{i(1)}^{T,1} S_{3/2}^1(C_i^2),$$

де коефіцієнти мають вигляд:

$$L_{i(1)}^{T,0} \equiv 1 - \frac{m_i}{k_B \rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{k0}} \right)_{\{n\}} + 2 \sum_j M_i n_j p_{ij} - \mathcal{L}_{i(1)}^{T,g},$$

$$L_{i(1)}^{T,1} \equiv - \left(1 + \frac{12}{5} \sum_j M_i M_j n_j p_{ij} \right).$$

$\mathcal{L}_{i(1)}^{T,g}$ містить доданок, що виражається через інтеграл від функціональної похідної H_{ij}^β , проте не залежить від \mathbf{c}_i .

Позадіагональна в'язкісна частина. Доданки з явною і неявною залежностями дорівнюють:

$$\mathcal{L}_{i(1)}^V \equiv \mathcal{L}_i^{V,D} - \mathcal{L}_{i(1)}^{V,\nabla}, \quad \mathcal{L}_{i(2)}^V \equiv -\mathcal{L}_{i(2)}^{V,\nabla}, \quad (190)$$

де фф. (137), (148) і (154) задають вигляд функцій справа. Перша містить лише нульовий многочлен:

$$\mathcal{L}_{i(1)}^V = L_{i(1)}^{V,0} S_{5/2}^0(C_i^2), \quad L_{i(1)}^{V,0} \equiv \frac{m_i}{\theta^{k0}} \left(1 + \frac{4}{5} \sum_j M_j n_j p_{ij} \right).$$

Діагональна в'язкісна частина. Згідно таблиці, внески із $\nabla \cdot \mathbf{V}$ присутні у таких доданках $D_{t,i}^0 f_i^0$, $I_{i(1)}^\nabla$ і $I_{i(2)}^\nabla$. Відповідні функції мають вигляд:

$$\mathcal{L}_{i(1)}^I \equiv \mathcal{L}_i^{I,D} - \mathcal{L}_{i(1)}^{I,\nabla}, \quad \mathcal{L}_{i(2)}^I \equiv -\mathcal{L}_{i(2)}^{I,\nabla}. \quad (191)$$

а фф. (138), (149) і (154) задають доданки у правих частинах. Для першої функції легко знаходимо:

$$\mathcal{L}_{i(1)}^I = L_{i(1)}^{I,1} S_{1/2}^1(C_i^2), \quad L_{i(1)}^{I,1} \equiv -\left(\frac{\omega_T}{T^{k0}} + \frac{2}{3} + \frac{4}{3} \sum_j M_j n_j p_{ij}\right).$$

Тут доречно нагадати про внесок $\mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g} \beta^{p1}$ з останнього стовпця таблиці. Завдяки йому повна функція \mathcal{L}_i^I матиме ще поправку, оскільки $\beta^{p1} \sim \nabla \cdot \mathbf{V}$, ф. (221).

Дифузійна частина. Четвертий стовпчик таблиці 1 (с. 46) містить лише основні внески: $\mathcal{L}_{ij}^{n,D}$, $\mathcal{L}_{ij(1)}^{n,\nabla}$ та $\mathcal{L}_{ij(1)}^{n,g}$. Видно, що $\mathcal{L}_{ij(1)}^{n,\nabla}$, ф. (150), лише знаком відрізняється від другого доданка функції $\mathcal{L}_{ij(1)}^{n,g}$, ф. (181). Їх суму $\mathcal{L}_{ij(1)}^{n,\nabla} + \mathcal{L}_{ij(1)}^{n,g} = \tilde{c}_{ij}(\mathbf{0})_{\mathbf{r}}$ віднімемо від δ_{ij}/n_i — першого доданка функції $\mathcal{L}_{ij}^{n,D}$, ф. (139), який з'явився у внеску $D_{t,i}^0 f_i^0$ завдяки $\mathbf{c}_i \cdot \nabla \ln f_i^0$ і, домноживши на ∇n_j , просумуємо по j :

$$\sum_j \left[\frac{\delta_{ij}}{n_i} - \tilde{c}_{ij}(\mathbf{0})_{\mathbf{r}} \right] \nabla n_j = \frac{1}{\theta^{k0}} \sum_j \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial n_j} \right)_{\{n\}'_j} T^{k0} \nabla n_j. \quad (192)$$

Цей перехід зроблено на основі зв'язку між фур'є-образом прямої кореляційної функції в нулі та частинними похідними від хімічного потенціала. Сума справа дорівнює градієнту хімпотенціала при постійній локально-рівноважній температурі:

$$(\nabla \mu_i)_{T^{k0}} \equiv \sum_j \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial n_j} \right)_{\{n\}'_j} T^{k0} \nabla n_j.$$

Другий доданок функції $\mathcal{L}_{ij}^{n,D}$, ф. (139), що походить від $d_t^0 f_i^0$, помножений на ∇n_j і просумований по j , перетворюється за допомогою зміни порядку підсумовування з використанням рівності локальної термодинаміки

$$\left(\frac{\partial P}{\partial n_j} \right)_{\{n\}'_j} T^{k0} = \sum_k n_k \left(\frac{\partial \mu_k}{\partial n_j} \right)_{\{n\}'_j} T^{k0}.$$

Це приводить до такого результату:

$$-\frac{m_i}{\rho \theta^{k0}} \sum_j \left(\frac{\partial P}{\partial n_j} \right)_{\{n\}'_j} T^{k0} \nabla n_j = -\frac{m_i}{\rho \theta^{k0}} \sum_k n_k (\nabla \mu_k)_{T^{k0}}. \quad (193)$$

Вслід за роботою [4] означмо дифузійні термодинамічні сили

$$\mathbf{X}_k \equiv -\frac{1}{m_k} (\nabla \mu_k)_{T^{k0}}. \quad (194)$$

Тоді сума результатів (192) та (193) набуває вигляду:

$$\sum_j \left[\mathcal{L}_{ij}^{n,D} - \mathcal{L}_{ij(1)}^{n,\nabla} - \mathcal{L}_{ij(1)}^{n,g} \right] \nabla n_j = \sum_k \mathcal{L}_{ik}^\mu \mathbf{X}_k,$$

де

$$\mathcal{L}_{ik}^\mu \equiv -(m_i/\theta^{k0}) [\delta_{ik} - \rho_k/\rho], \quad (195)$$

а повна дифузійна частина дорівнює

$$-f_i^0 \frac{m_i}{\theta^{k0}} \sum_k \left[\delta_{ik} - \frac{\rho_k}{\rho} \right] \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_k.$$

Дифузійні сили $\{\mathbf{X}\}$ задовольняють умову $\sum_k \rho_k \mathbf{X}_k = -(\nabla P)_{T^{k0}}$. У роботі [4] показано, що таке їх означення задовольняє умови взаємності Онзагера лінійної нерівноважної термодинаміки.

3.3.3. Додаткові умови першого порядку

Згідно методу Чепмена-Енскога поправка першого порядку f_i^1 лінійна за градієнтами, ф. (40). Отже, поправку ϕ_i шукаємо у вигляді лінійної комбінації:

$$\phi_i(\mathbf{C}_i) = -A_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{X}_T - B_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i : \nabla \mathbf{V} - H_i \nabla \cdot \mathbf{V} - \sum_k E_{ik} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{X}_k, \quad (196)$$

де $\mathbf{C}_i \equiv \sqrt{\bar{m}_i} \mathbf{c}_i$ — безрозмірна швидкість, а невідомі функції A_i , B_i , H_i та E_{ik} залежать від C_i^2 . Їх шукатимемо у вигляді розкладів по системах многочленів Соніна-Лягера: A_i й E_{ik} — індекса 3/2, B_i та H_i — індексів 5/2 та 1/2, відповідно⁴ (додаток С.4):

$$A_i(C_i^2) = \sum_{m=0}^{\infty} a_i^m S_{3/2}^m(C_i^2), \quad E_{ik}(C_i^2) = \sum_{m=0}^{\infty} e_{ik}^m S_{3/2}^m(C_i^2), \quad (197)$$

$$B_i(C_i^2) = \sum_{m=0}^{\infty} b_i^m S_{5/2}^m(C_i^2), \quad H_i(C_i^2) = \sum_{m=0}^{\infty} h_i^m S_{1/2}^m(C_i^2). \quad (198)$$

⁴Індекс для кожної функції визначається степенем вектора \mathbf{C}_i біля неї.

Рівняння для цих функцій розглянуто нижче у §3.4.

Розгляньмо, якого вигляду набувають додаткові умови (48) для ϕ_i завдяки умовам самоузгодження (45). У першому порядку вони означають: $n_i^1 = 0$, $\mathbf{p}^1 = \mathbf{0}$, $e^1 = 0$. Дві з них скалярні, а одна векторна. Перші дві зостаються такими ж, як у випадку кінетичних теорій Больцмана чи Енскога для сумішей. Третю було детально проаналізовано [39] для узагальненого кінетичного рівняння Больцмана у зв'язку несуперечливим означенням температури і його впливом на коефіцієнт в'язкості. Проте в цьому аналізі рівняння для енергії взаємодії не задіяно в теоретичну схему, що і становить відмінність від нашої ситуації.

Отже, проаналізуємо третю умову. Для цього спочатку розрахуймо внески до e^{P^1} , що присутні у фф. (62), (65). Середнє в e^{P^∇} непарне по \mathbf{r}_{21} і тому перетворюється в нуль:

$$e^{P^\nabla} \sim \int d\mathbf{r}_{21} g_2^{ij,0}(r_{12})_{\mathbf{r}} \mathbf{r}_{21} \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}} = 0. \quad (199)$$

Внесок e^{Pg} , згідно ф. (348) для $g_2^{ij,1}$, розпадається на два: $e^{Pg} = e^{Pg,\beta} + e^{Pg,n}$, де

$$e^{Pg,\beta} \equiv \nabla \beta^{P^0} \cdot \sum_{ij} n_i n_j \int d\mathbf{r}_2 \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \int d\mathbf{r}_3 \bar{H}_{ij}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \mathbf{r}_{31} \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}},$$

$$e^{Pg,n} \equiv \sum_k \nabla n_k \cdot \sum_{ij} n_i n_j \int d\mathbf{r}_2 \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \int d\mathbf{r}_3 \bar{H}_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \mathbf{r}_{31} \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}.$$

Покажімо на прикладі першого, що обидва внески пропадають завдяки симетрії. Перепозначивши індекси $i \rightleftharpoons j$ й узивши півсуму результату й початкового виразу, отримуємо:

$$e^{Pg,\beta} = \nabla \beta^{P^0} \cdot \sum_{ij} n_i n_j \int d\mathbf{r}_{21} \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \times \int d\mathbf{r}_3 \frac{1}{2} \{ \bar{H}_{ij}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} + \bar{H}_{ij}^\beta(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \} \mathbf{r}_{31}, \quad (200)$$

де враховано, що $\bar{H}_{ji}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} = \bar{H}_{ij}^\beta(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}}$. Підінтегральна функція внутрішнього інтеграла симетрична відносно перестановки $\mathbf{r}_1 \rightleftharpoons \mathbf{r}_2$, тому на основі зауваження про симетризацію (додаток В.4) внутрішній інтеграл дорівнює

$$\frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} \int d\mathbf{r}_3 \frac{1}{2} \{ \bar{H}_{ij}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} + \bar{H}_{ij}^\beta(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \} = \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} \frac{\partial g_2^{ij,0}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \beta^{P^0}}.$$

Тоді у ф. (200) під інтегралом по \mathbf{r}_{21} виникає функція, непарна по \mathbf{r}_{21} , і тому $e^{Pg,\beta} = 0$. Так само $e^{Pg,n} = 0$ і, отже, $e^{Pg} = 0$. Разом з результатом (199) це дає для всієї поправки: $e^{P^1} = 0$. Тобто й третя додаткова умова теж виявляється такою, як у теоріях Больцмана й Енскога:

$$e^{k1} = 0. \quad (201)$$

Отже, поправка e^{P^1} є лінійною комбінацією ∇n_k і $\nabla \beta^{P^0}$, ф. (64), з коефіцієнтами, що, як ми показали, перетворюються в нуль. Проте в роботі [22], де розглянуто це ж питання для односоротної системи з потенціалом прямокутної ями, подано співвідношення

$$e^{P^1} = \frac{\partial e^{P^0}}{\partial \beta^{P^0}} \beta^{P^1},$$

хибне на нашу думку тому, що $\beta^{P^1} \sim \nabla \cdot \mathbf{V}$, §3.3.4. Тому весь аналіз цих авторів стосовно поправки T^{k1} до кінетичної температури також не має підґрунтя, бо мусить справджуватись ф. (201).

Можемо зробити такі висновки: а) у першому порядку за градієнтами узагальненого методу Чепмена-Енскога *немає обміну* між e^k й e^P , хоч він може бути у другому порядку; а оскільки $\beta^{P^1} \neq 0$, то $\beta^P - 1/k_B T^{k0}$ не має сенсу індикатора такого енергетичного обміну (принаймні, в рамках методу Чепмена-Енскога); б) у виразах для e^{P^1} не використовувалися ніякі властивості БС потенціала, тому поданий аналіз годиться *для всякого потенціала*; якби вдалося сформулювати подібну кінетичну теорію для нерозривного потенціала, то в першому порядку методу Чепмена-Енскога енергетичного обміну теж би не було; в) β^{P^1} з'являється у виразах тільки *завдяки розривності* ϕ_{ij}^{MS} . Ці висновки — наслідок умови самоузгодження (45) для густини енергії.

Виражені через теплову швидкість \mathbf{c}_i додаткові умови (48) для ϕ_i з урахуванням результату (201) набувають вигляду:

$$\int d\mathbf{c}_i f_i^0 \phi_i = 0, \quad \sum_i m_i \int d\mathbf{c}_i f_i^0 \mathbf{c}_i \phi_i = 0, \quad \sum_i \frac{1}{2} m_i \int d\mathbf{c}_i f_i^0 c_i^2 \phi_i = 0.$$

Кожна з них розпадається на чотири незалежні умови за числом функцій. Деякі з них задовольняються *автоматично* (див. таблицю 2) з причин непарності (нп.) підінтегральних виразів чи бездіврігентності (бд.) тензора $\mathbf{C}_i^c \mathbf{C}_i$, для якого $\int d\hat{C}_i \mathbf{C}_i^c \mathbf{C}_i = 0$.

Як видно з таблиці, жодна з умов ніяк не обмежує функцію B_i . Перша й третя умови зумовлюють обмеження на H_i , а друга — на

Табл. 2. Умови для функцій A_i, B_i, H_i, E_{ik} .

Функція	$n_i^1 = 0$	$\mathbf{p}^1 = \mathbf{0}$	$e^{k1} = 0$
A_i	нп.	+	нп.
B_i	бд.	нп.	бд.
H_i	+	нп.	+
E_{ik}	нп.	+	нп.

A_i й E_{ik} (всі відзначено плюсом)⁵:

$$\int d\mathbf{C}_i f_i^0 H_i = 0, \quad \sum_i m_i^{-3/2} \int d\mathbf{C}_i f_i^0 C_i^2 H_i = 0,$$

$$\sum_i m_i^{-1} \int d\mathbf{C}_i f_i^0 C_i^2 \begin{Bmatrix} A_i \\ E_{ik} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}.$$

З них слідує умови для коефіцієнтів розкладу h_i^m, a_i^m та e_{ik}^m цих функцій по системах многочленів $\{S_\nu\}$:

$$h_i^0 = 0, \quad \sum_i n_i h_i^1 = 0; \quad \sum_i \sqrt{m_i} n_i \begin{Bmatrix} a_i^0 \\ e_{ik}^0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (202)$$

Завдяки їм в односортному випадку розклад H починається з $h^2 S_{1/2}^2$, а розклад функції A — з $h^1 S_{3/2}^1$.

3.3.4. Рівняння для e^p у першому порядку

У попередньому підпараграфі отримано неоднорідну частину інтегрального рівняння першого порядку, яка містить невідому величину — β^{p1} . Щоб виразити її через градієнти, скористаймося рівнянням першого порядку для густини потенціальної енергії. Цей крок методологічно відрізняється від способу виключення β^{p1} , запропонованого в праці [22].

Отже, це рівняння, ф. (73), можна записати у вигляді:

$$s_p^\phi = d_t^0 e^{p0} + e^{p0} \nabla \cdot \mathbf{V} - s_p^\nabla - s_p^g, \quad (203)$$

⁵Можна зауважити, що скалярні умови обмежують скалярну частину поправки ϕ_i , що описується функцією H_i , а векторна умова — функції A_i й E_{ik} векторної частини. Для B_i , яка визначає недіагональний тензорний внесок у поправці ϕ_i , всі умови (які мають нижчу тензорну вимірність) задовольняються автоматично.

де доданок $\nabla \cdot \mathbf{q}_p^0$ опущено, бо $\mathbf{q}_p^0 = 0$. Внесок s_p^ϕ — це лінійний функціонал від поправок $\{\phi\}$

$$s_p^\phi[\phi] \equiv s_p^{(0)}[f^1, f^0] + s_p^{(0)}[f^0, f^1],$$

а інші два доданки

$$s_p^\nabla \equiv s_p^{(\nabla)}[f^0, f^0], \quad s_p^g \equiv s_p^{(g)}[f^0, f^0]$$

позначено згідно ф. (60), подібно до складових інтеграла зіткнень $I_i^{(1)}$. Явні вирази для цих внесків отримуємо з ф. (101):

$$\begin{Bmatrix} s_p^\phi \\ s_p^\nabla \\ s_p^g \end{Bmatrix} = - \sum_{ij} \sum_{q, a} \sum_l \sum_p^{\oplus, \ominus} n_i n_j \frac{1}{2} p \epsilon_{ij}^{ql} (\sigma_{ij}^{ql})^2 \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \pi^{-3} \times \quad (204)$$

$$\times \int d\mathcal{G} d\mathcal{g} d\hat{\sigma} \theta^p(g_\sigma) e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} \begin{bmatrix} g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} (\phi_i + \phi_j) \\ g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} (-qp \sigma_{ij}^{ql}) \cdot \nabla \ln f_j^0 \\ g_2^{ij,1} (\mathbf{r}, \mathbf{r} - qp \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} \end{bmatrix}.$$

Права частина ф. (203) нагадує неоднорідні частини рівнянь для $\{\phi\}$, ф. (126). Зауважмо, що ф. (203) не містить поправки e^{p1} .

Далі ми виразимо $d_t^0 e^{p0}$ через градієнти гідродинамічних змінних і розрахуємо величини (204), проінтегрувавши по $\hat{\sigma}$ і швидкостях.

Розрахунок $d_t^0 e^{p0}$. Величина e^{p0} залежить від $\{n\}$ безпосередньо й через $g_2^{ij,0}$, а від β^{p0} — лише через $g_2^{ij,0}$, ф. (105). Тому

$$d_t^0 e^{p0} = \sum_{k=1}^M \left(\frac{\partial e^{p0}}{\partial n_k} \right)_{\beta^{p0}} d_t^0 n_k + \left(\frac{\partial e^{p0}}{\partial \beta^{p0}} \right)_{\{n\}} d_t^0 \beta^{p0}. \quad (205)$$

Використавши для похідних від n_k та β^{p0} рівняння нульового порядку (121) і (133), знаходимо:

$$d_t^0 e^{p0} = \omega_{e^p} \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (206)$$

$$\omega_{e^p} \equiv \left[\omega_\beta \left(\frac{\partial e^{p0}}{\partial \beta^{p0}} \right)_{\{n\}} - \sum_{k=1}^M n_k \left(\frac{\partial e^{p0}}{\partial n_k} \right)_{\beta^{p0}} \right]_{\{n\}_k}. \quad (207)$$

Частинні похідні можна шукати, виходячи з ф. (105):

$$\left(\frac{\partial e^{p0}}{\partial \beta^{p0}} \right)_{\{n\}} = \sum_{ij} n_i n_j \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial g_2^{ij,0}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \beta^{p0}} \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}, \quad (208)$$

$$\left(\frac{\partial e^{p0}}{\partial n_k}\right)_{\beta^{p0}, \{n\}'_k} = 2 \sum_j n_j \langle \frac{1}{2} \phi_{jk}^{\text{MS}}(r_{12}) \rangle_{\mathbf{r}_2}^{g_2^0, jk} + \sum_{ij} n_i n_j \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial g_2^{ij,0}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial n_k} \frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \Big|_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}}. \quad (209)$$

Проте, якщо використати співвідношення $e^{p0} = \varepsilon - \varepsilon^{k0}$, то пошук значно спрощується. Маючи частинні похідні від ε (§A.2, фф. (336) та (337)) й ε^{k0} ,

$$\left(\frac{\partial \varepsilon^{k0}}{\partial T^{k0}}\right)_{\{n\}} = \frac{3}{2} k_B n, \quad \left(\frac{\partial \varepsilon^{k0}}{\partial n_k}\right)_{T^{k0}, \{n\}'_k} = \frac{3}{2} k_B T^{k0},$$

знаходимо такий вираз:

$$\omega_{eP} = \omega_T [\rho \tilde{c}_{v, \{n\}} - \frac{3}{2} k_B n] - \sum_{k=1}^M \frac{\rho_k}{\rho} \left[\varepsilon + P - T^{k0} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{k0}} \right)_{v, \{n\}} \right] + \varepsilon^{k0},$$

де використано зв'язок між ω_β і ω_T , поданий після ф. (133). Внески від хімічних потенціалів випали з розгляду завдяки рівності (341). Спростімо цей вираз, підставивши у нього ф. (132) для ω_T і зауваживши, що множник у прямокутних дужках під сумою не залежить від індекса суми:

$$\omega_{eP} = - \left[e^{p0} + P - \frac{\frac{3}{2} k_B n}{\rho \tilde{c}_{v, \{n\}}} T^{k0} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{k0}} \right)_{v, \{n\}} \right]. \quad (210)$$

Перші два доданки подібні на коефіцієнт у рівнянні (122) для ε , а останній фігурує в коефіцієнтах ω_T та ω_β . У чисельнику дробу перед похідною стоїть теплоємність одиниці об'єму суміші ідеальних газів $\rho \tilde{c}_{v, \{n\}}^{\text{id.g.}}$ або ж суміші твердих кульок $\rho \tilde{c}_{v, \{n\}}^{\text{hs}}$ з дійсними густинами n_1, \dots, n_M . Ми подали термодинамічне виведення ф. (210), тому вона годиться для будь-якого потенціала взаємодії.

Розгляд $s_p^\phi[\phi]$. Вираз (204) для s_p^ϕ симетричний по сортах i та j , тому досить знайти внесок від, напр., ϕ_i й помножити результат на 2. Від інтегрування по $\hat{\sigma}$ виникає інтеграл ${}_0\mathcal{I}_1^p$, який дорівнює $2\pi \theta^p(g) g j_2^p(g)$, див. §D.1, ф. (402). Тоді відповідний інтеграл ф. (204) має вигляд:

$$2 \times g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{qp} 2\pi \int d\mathbf{g} d\mathbf{g} \theta^p(g) e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} g j_2^p(g) \phi_i(\mathbf{C}_i), \quad (211)$$

де $\mathbf{C}_i = \sqrt{\tilde{m}_i} \mathbf{c}_i$ — безрозмірна швидкість.

З чотирьох доданків поправки ϕ_i з виглядом (196) залишається лише внесок із H_i . Справді, функції A_i , B_i , H_i та E_{ik} аналітичні, тому розкладаються у ряди Тейлора за степенями C_i^2 . Внески із \mathbf{X}_T й \mathbf{X}_k пропадають, оскільки C_i^2 у довільному степені, помножене на \mathbf{C}_i , дає доданки непарного степеня по \mathcal{G} або по \mathbf{g} , які після інтегрування по $\hat{\mathcal{G}}$ чи \hat{g} перетворюються в нуль. Тензор біля B_i зводиться до

$$\mathbf{C}_i^\circ \mathbf{C}_i = M_i \mathcal{G}^\circ \mathcal{G} + M_j g^\circ g - M_i^{1/2} M_j^{1/2} 2(\mathcal{G}^\circ g)^\dagger,$$

тому після розкладу $B_i(C_i^2)$ отримуємо ряд з доданками, векторна частина яких може мати один із 3-х типів:

$$(\hat{\mathcal{G}} \cdot \hat{g})^k \begin{bmatrix} \hat{\mathcal{G}}^\circ \hat{\mathcal{G}} \\ \hat{g}^\circ \hat{g} \\ 2(\hat{\mathcal{G}}^\circ \hat{g})^\dagger \end{bmatrix}$$

із $k \geq 0$. Кожен із цих тензорів перетворюється в нуль після інтегрування по орієнтаціях $\hat{\mathcal{G}}$ і \hat{g} (§D.2), тому внесок із B_i пропадає. Отже інтеграл ф. (211) зводиться до

$$- \int d\mathbf{g} d\mathbf{g} \theta^p(g) e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} g j_2^p(g) H_i(C_i^2) \nabla \cdot \mathbf{V}. \quad (212)$$

Не знаючи явного вигляду функцій $\{H\}$, використовуємо тут розклад по многочленах Соніна-Лягера, ф. (198). Виразивши H_i в наближенні другого многочлена

$$H_i(C_i^2) \approx h_i^0 + h_i^1 \left(\frac{3}{2} - C_i^2 \right) + h_i^2 \left(\frac{15}{4} - 5C_i^2 + C_i^4 \right)$$

через змінні центра мас, можемо проінтегрувати по орієнтаціях $\hat{\mathcal{G}}$ та \hat{g} з таким результатом:

$$(4\pi)^2 \left\{ h_i^0 + h_i^1 \left(\frac{3}{2} - M_i \mathcal{G}^2 - M_j g^2 \right) + h_i^2 \left(\frac{15}{4} - 5[M_i \mathcal{G}^2 + M_j g^2] + M_i^2 \mathcal{G}^4 + M_j^2 g^4 + \frac{10}{3} M_i M_j \mathcal{G}^2 g^2 \right) \right\}.$$

Після інтегрування по \mathcal{G} ф. (212) набуває вигляду:

$$-(4\pi)^2 \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left\{ h_i^0 \mathcal{J}_{g3}^p[j_2^p] + h_i^1 M_j \mathcal{J}_{g3}^p[S_{1/2}^1 j_2^p] + h_i^2 M_j^2 \mathcal{J}_{g3}^p[S_{1/2}^2 j_2^p] \right\} \nabla \cdot \mathbf{V},$$

де \mathcal{J}_{g3}^p позначає характерні інтеграли по g , ф. (429). Сума внесків \oplus та \ominus утворює характерні конструкції C_{g3}^{2-} від j_2^p , $S_{1/2}^1 j_2^p$ та $S_{1/2}^2 j_2^p$,

які дорівнюють 0, $\frac{1}{4}\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$ та $\frac{1}{4}[-(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^2 + \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}]$. Врахувавши залишений у ф. (211) коефіцієнт, приходимо до такого остаточного результату в наближенні другого многочлена:

$$s_p^\phi[\phi] = \Omega_\phi[H] \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (213)$$

$$\Omega_\phi[H] \equiv 2\sqrt{2\pi}(\theta^{k0})^{3/2} \sum_{ij} n_i n_j \mu_{ij}^{-1/2} \times \quad (214)$$

$$\times \left\{ h_i^1 M_j \Lambda_{2;01}^{ij} [\bar{\epsilon}_{ij}^2] + h_i^2 M_j^2 \Lambda_{2;01}^{ij} [-\bar{\epsilon}_{ij}^3 + \bar{\epsilon}_{ij}^2] \right\}.$$

Саме цей внесок зв'язує рівняння для e^p в першому порядку по g -градієнтах із одностинковими функціями розподілу f_i , а точніше, з їх об'ємно-в'язкісними складовими $\{H\}$. З іншими складовими зв'язку нема.

Розрахунок s_p^∇ . Коефіцієнт $g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})^{qp}(-qp\sigma_{ij}^{ql})$ у ф. (204) для s_p^∇ можна винести. Інтегрування по $\hat{\sigma}$ дає ${}_1\mathcal{I}_1^p = 2\pi g \theta^p(g) j_2^p(g)$ (§D.1, ф. (402)). Щоб підінтегральний вираз був парний по швидкостях, у $\nabla \ln f_j^0$, ф. (388), треба відкинути доданки, що непарні по \mathcal{G} і парні по g — залишиться лише $2\tilde{m}_j^{1/2} M_i^{1/2} g \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger$. Тоді результат інтегрування по орієнтаціях $\hat{\mathcal{G}}$ і \hat{g} векторної частини дорівнює $2\tilde{m}_j^{1/2} M_i^{1/2} (4\pi)^2 \frac{1}{3} g^2 \nabla \cdot \mathbf{V}$.

Інтегрування по \mathcal{G} дає $\frac{1}{2}\Gamma(\frac{3}{2})$, а для g виникають характерні інтеграли $\mathcal{J}_{g4}^p[j_3^p]$. Завдяки \sum_p утворюються комбінації $\mathcal{C}_{g4}^{2+}[j_3^p]$, результат для яких дорівнює $\frac{1}{4}\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql})$. Остаточо знаходимо:

$$s_p^\nabla = \Omega_\nabla \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (215)$$

$$\Omega_\nabla \equiv \frac{\pi}{3} \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j \Lambda_{3;0q}^{ij} [\tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}) \bar{\epsilon}_{ij}]. \quad (216)$$

Локально-рівноважна температура θ^{k0} входить у коефіцієнт Ω_∇ ще через $g_2^{ij,0}$ та безрозмірні висоти сходинок $\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$. У конструкціях $\Lambda_{3;0q}^{ij}$ внески від притягальних та відштовхувальних сходинок конкурують між собою, входячи з різними знаками.

Розрахунок s_p^g . Явна залежність $g_2^{ij,1}$ від $\hat{\sigma}$ складна, тому вираз для s_p^g , ф. (204), легше проінтегрувати по швидкостях. Для \mathcal{G} це дає $2\pi\Gamma(\frac{3}{2})$, а для \hat{g} виникає інтеграл, що тотожний до ${}_0\mathcal{I}_1^p$, якщо змінні поміняти ролями $\hat{g} \rightleftharpoons \hat{\sigma}$. Підставивши його результат $2\pi \theta^p(g) g j_2^p(g)$, бачимо, що для g виникають характерні інтеграли $\mathcal{J}_{g3}^p[j_2^p]$, §D.1.

Для внеску \ominus використовуємо зв'язок (352) для значень $g_2^{ij,1}$ по різні боки сходинок. Завдяки цьому співвідношенню в об'їгу з'являється перша поправка до потенціальної квазітемператури $\beta^{p1}(\mathbf{r}, t)$. Сума двох внесків \oplus та \ominus дорівнює:

$$4\pi^2 \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ \mathcal{J}_{g3}^\oplus[j_2^\oplus] \int d\hat{\sigma} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} - q\sigma_{ij}^{ql})_q - \right.$$

$$\left. - \mathcal{J}_{g3}^\ominus[j_2^\ominus] \int d\hat{\sigma} e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \left[g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_q \epsilon_{ij}^{ql} \beta^{p1}(\mathbf{r}, t) + g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} + q\sigma_{ij}^{ql})_q \right] \right\},$$

де доданок із $\nabla \beta^{p0}$ відкинуто, як непарний по $\hat{\sigma}$.

Замінивши в останній $g_2^{ij,1}$ змінну $\hat{\sigma}$ на $\hat{\sigma}' = -\hat{\sigma}$ й об'єднавши її з першою, отримуємо конструкцію $\mathcal{C}_{g3}^{2-}[j_2^p]$, яка дорівнює 0. Використавши, що $\mathcal{J}_{g3}^\ominus[j_2^\ominus] = \frac{1}{4} \exp(-\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})$, зводимо попередню формулу до $-4\pi^3 \Gamma(\frac{3}{2}) g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_q \epsilon_{ij}^{ql} \beta^{p1}$. Кінцевий результат має вигляд:

$$s_p^g = \Omega_g \beta^{p1}, \quad (217)$$

$$\Omega_g \equiv \sqrt{2\pi}(\theta^{k0})^{5/2} \sum_{ij} n_i n_j \mu_{ij}^{-1/2} \Lambda_{2;01}^{ij} [\bar{\epsilon}_{ij}^2]. \quad (218)$$

У коефіцієнті варто відмітити степінь θ^{k0} і квадратичну залежність від $\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$, на противагу коефіцієнту Ω_∇ .

Підсумок. Ми виявили, що всі доданки рівняння (203), за винятком s_p^g , пропорційні до $\nabla \cdot \mathbf{V}$. Підставляючи результати (206), (213), (215) та (217) у це рівняння, отримуємо:

$$\Omega_\phi[H] \nabla \cdot \mathbf{V} = [\omega'_{ep} - \Omega_\nabla] \nabla \cdot \mathbf{V} - \Omega_g \beta^{p1}, \quad (219)$$

де коефіцієнти задаються фф. (214), (216) і (218), а вираз для $\omega'_{ep} \equiv \omega_{ep} + e^{p0}$ отримується з ф. (210):

$$\omega'_{ep} = -P + \frac{\frac{3}{2} k_B n}{\rho \bar{c}_{v,\{n\}}} T^{k0} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{k0}} \right)_{\{n\}}^v. \quad (220)$$

Рівняння (219) доповнює систему інтегральних рівнянь для $\{\phi\}$, даючи змогу виключити з них невідому величину β^{p1} . Вона ж виявляється пропорційною до дивергенції гідродинамічної швидкості, а інших градієнтів не містить:

$$\beta^{p1} = \Omega_\beta[H] \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (221)$$

$$\Omega_\beta[H] \equiv (\omega'_{ep} - \Omega_\nabla) / \Omega_g - \Omega_g^{-1} \Omega_\phi[H]. \quad (222)$$

Коефіцієнт $\Omega_\beta \in$ різницею константи $\Omega_\beta^0 \equiv \Omega_g^{-1}(\omega'_{ep} - \Omega_\nabla)$ і функціонала $\Omega_\beta^1[H] \equiv \Omega_g^{-1}\Omega_\phi[H]$. Сама поправка β^{p1} перетворюється в нуль у тих областях простору, де $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$, або ж коли $\Omega_\beta = 0$. З другого боку, у нерівноважних станах із $\{H\} = 0$ поправка $\beta^{p1}(\mathbf{r})$ відмінна від нуля завдяки внеску Ω_β^0 .

Як вже було згадано, у праці [39] розглянуто проблему означення температури з позицій локальної термодинаміки і як воно впливає на коефіцієнт об'ємної в'язкості. Один з вагомих висновків полягав у тому, що різні означення можуть відрізнитися в першому порядку по градієнтах лише на доданок із $\nabla \cdot \mathbf{V}$. Така ж ситуація виникає і в нашому випадку. Однак в цитованій роботі розглянута кінетична теорія базується лише на узагальненому рівнянні Больцмана. Залучення рівняння для густини потенціальної енергії якісно міняє структуру теорії і, крім того, β^p не є температурою ні в сенсі локальної термодинаміки, ні в інших сенсах, обговорюваних у праці [39]. Тому її висновки не зовсім тут застосовні, хоча виявлений збіг потребує додаткового дослідження. Питання означення температури розглядалося ще в роботах [40, 41].

3.4. Системи інтегральних рівнянь

3.4.1. Перенормування

Інтегральне рівняння (126) зазнає деяких змін. Підставмо вираз (221) для β^{p1} у його неоднорідну частину, знайдену у вигляді (187), врахувавши, що $\Omega_\beta = \Omega_\beta^0 - \Omega_\beta^1[H]$. Другий доданок з невідомими функціями $\{H\}$ потрібно перенести в операторну частину до $J_i[\phi]$, одержуючи з ф. (126) таке рівняння:

$$J_i[\phi] - J_i^\beta[H] = f_i^0 \left\{ \mathcal{L}_i^T \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_T + \mathcal{L}_i^V \mathbf{c}_i \cdot \nabla \mathbf{V} + \mathcal{L}_i^{I*} \nabla \cdot \mathbf{V} + \sum_k \mathcal{L}_{ik}^\mu \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{X}_k \right\}, \quad (223)$$

де $J_i^\beta[H] \equiv f_i^0 \Omega_\beta^1[H] \mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g}$ та $\mathcal{L}_i^{I*} \equiv \mathcal{L}_i^I - \Omega_\beta^0 \mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g}$ ($\mathcal{L}_{i(2)}^{I*} \equiv \mathcal{L}_{i(2)}^I - \Omega_\beta^0 \mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g}$). Поправка до оператора якісно відрізняє кінетичні теорії для розривних потенціалів [16, 22], у яких береться до уваги баланс потенціальної енергії, від теорій, заснованих на моделі твердих кульок чи таких, де цим балансом знехтувано [14, 18, 27]. Проте, це перенормування інтегрального оператора зачіпає лише функції $\{H\}$ і впливає на коефіцієнт об'ємної в'язкості [22].

Підставивши ф. (196) у рівняння (223) і прирівнявши доданки при однакових градієнтах, одержуємо рівняння для кожної функції зокрема:

$$-J_i \begin{bmatrix} A(C^2) \mathbf{C} \\ B(C^2) \mathbf{C} \circ \mathbf{C} \\ E(C^2) \mathbf{C} \end{bmatrix} = f_i^0 \begin{bmatrix} \mathcal{L}_i^T \mathbf{c}_i \\ \mathcal{L}_i^V \mathbf{c}_i \circ \mathbf{c}_i \\ \mathcal{L}_{ik}^\mu \mathbf{c}_i \end{bmatrix}, \quad (224)$$

$$-J_i^*[H(C^2)] = f_i^0 \mathcal{L}_i^{I*}, \quad (225)$$

де оператор J_i^* має додатковий внесок:

$$J_i^*[H] \equiv J_i[H] + J_i^\beta[H]. \quad (226)$$

Щоби рівняння (224) і (225) розглядати спільно, введемо позначення $\mathbf{C}_i^{[\nu]}$ для конструкцій вектора \mathbf{C}_i , яке означає: $\mathbf{C}_i^{[3/2]} \equiv \mathbf{C}_i$, $\mathbf{C}_i^{[5/2]} \equiv \mathbf{C}_i \circ \mathbf{C}_i$ та $\mathbf{C}_i^{[1/2]} \equiv 1$. Ще введемо позначення $\tilde{m}_i^{[\nu]}$ таке, що $\tilde{m}_i^{[\nu]} \mathbf{c}_i^{[\nu]} = \mathbf{C}_i^{[\nu]}$, звідки слідує, що $\tilde{m}_i^{[3/2; 5/2; 1/2]} \equiv \{\tilde{m}_i^{1/2}; \tilde{m}_i; 1\}$. За допомогою цих позначень рівняння (224) і (225) можна записати спільною формулою:

$$-J_i[F(C^2) \mathbf{C}^{[\nu]}] = f_i^0 \mathcal{L}_i^F \mathbf{c}_i^{[\nu]}, \quad (227)$$

де F позначає одну з чотирьох функцій, а \mathcal{L}_i^F — відповідна функція неоднорідної частини. Оператори J_i та J_i^* можна представити для кожного з рівнянь (224) і (225) через матричні елементи, побудовані за допомогою відповідних систем многочленів. Для цього треба домножити обидві частини ф. (227) на $\tilde{m}_i^{[\nu]} S_\nu^n(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]}$ й проінтегрувати по \mathbf{c}_i :

$$-\tilde{m}_i^{[\nu]} \int d\mathbf{c}_i J_i[F \mathbf{C}^{[\nu]}] \odot S_\nu^n(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]} = K_i^{F,n}, \quad (228)$$

де введено позначення для неоднорідних частин

$$K_i^{F,n} \equiv \tilde{m}_i^{[\nu]} \int d\mathbf{c}_i f_i^0 \mathcal{L}_i^F \mathbf{c}_i^{[\nu]} \odot S_\nu^n(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]}, \quad (229)$$

тут \odot означає для $\nu = 3/2, 5/2$ та $1/2$, відповідно ‘ \cdot ’, ‘ \circ ’ і звичайне перемноження. Перетворення цього рівняння розглянуто нижче у §3.4.2 і §3.4.3 для операторної та неоднорідної частин.

3.4.2. Операторна частина

Перетворення оператора J_i . Оператор зіткнень (125) доречно розбити на два доданки, що відповідають “центральної” частинці

(сорт якої позначено через i) та частинці, що налітає (сорту j):

$$J_{ij}^{qlp}[\phi] = \tilde{J}_{ij}^{qlp}[\phi_i] + \tilde{J}_{ij}^{qlp}[\phi_j],$$

де, наприклад,

$$\tilde{J}_{ij}^{qlp}[\phi_i] \equiv y_2^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma p} \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{jio} \theta^p(c_{jio}) f_i^0 f_j^0 [\phi_i^{qlp} - \phi_i]. \quad (230)$$

Тоді ліва частина ф. (227) набуває вигляду:

$$-J_i[F(C^2)\mathbf{C}^{[\nu]}] = -\sum_j \left\{ \tilde{J}_{ij} + \tilde{J}_{ij} \mathcal{P}_{ij} \right\} [F_i(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}], \quad (231)$$

де \mathcal{P}_{ij} переставляє індекси, а в прямокутних дужках стоїть аргумент обох операторів \tilde{J}_{ij} . Підставивши розклад по многочленах Соніна-Лягера, тобто $F_i(C_i^2) = \sum_{m=0}^{\infty} f_i^m S_\nu^m(C_i^2)$, отримуємо:

$$-J_i[F(C^2)\mathbf{C}^{[\nu]}] = -\sum_j \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ f_i^m \tilde{J}_{ij} + f_j^m \tilde{J}_{ij} \mathcal{P}_{ij} \right\} [S_\nu^m(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}].$$

Алгебраїчні рівняння для невідомих коефіцієнтів $\{f^m\}$ знаходимо з ф. (228) у вигляді:

$$\tilde{m}_i^{[\nu]} \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ f_i^m \left[\sum_{j=1}^M \mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn} + \mathcal{B}_{ii;\nu}^{\prime;mn} \right] + \sum_{j \neq i}^M f_j^m \mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn} \right\} = K_i^{F,n}, \quad (232)$$

де \sum_j розбито на діагональний і недиагональні внески і введено позначення для інтегральних дужок⁶:

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn} \equiv -\int d\mathbf{c}_i \tilde{J}_{ij} [S_\nu^m(C_k^2)\mathbf{C}_k^{[\nu]}] \odot S_\nu^n(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}. \quad (233)$$

Тут для випадку $k = i$ треба покласти $\mathbf{C}_k = \mathbf{C}_i$, а для $k = \prime - \mathbf{C}_k = \mathbf{C}_j$. Ці величини виражено через Ω -інтеграли і наведено в додатку С.6.

⁶У літературі використовується позначення $[S_\nu^m(C^2)\mathbf{C}^{[\nu]}, S_\nu^n(C^2)\mathbf{C}^{[\nu]}]_{ij}'$ та $[\dots]_{ij}'$, відповідно.

Перетворення J_i^* . Шукаємо представлення J_i^β через його матричні елементи \mathcal{B}_{ij}^β , побудовані на наборі $\{S_{1/2}\}$ у вигляді:

$$\int d\mathbf{c}_i J_i^\beta[H] S_{1/2}^n(C_i^2) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_j h_j^m \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\beta;mn}. \quad (234)$$

Залежність від $\{H\}$ реалізується через функціонал $\Omega_\beta^1 \sim \Omega_\phi$. Для останнього можемо згідно ф. (214) записати:

$$\Omega_\phi[H] = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_j h_j^m \Omega_{\phi,j}^m, \quad (235)$$

де коефіцієнти представлення функціонала через набір многочленів $\{S_{1/2}\}$ мають вигляд:

$$\Omega_{\phi,j}^m \equiv \sqrt{2\pi} (\theta^{k0})^{3/2} n_j \sum_k n_k \mu_{jk}^{-1/2} M_k^m \Lambda_{2;01}^{jk} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \bar{\epsilon}_{jk}^2 \right. \\ \left. - \frac{2}{\sqrt{\pi}} (-\bar{\epsilon}_{jk}^3 + \bar{\epsilon}_{jk}^2) \right]. \quad (236)$$

Тут верхня позиція у прямокутних дужках відповідає $m = 1$, а нижня — $m = 2$. Для інтеграла, виділеного з ф. (234), маємо:

$$K_{i(2)}^{\beta g,n} \equiv \int d\mathbf{c}_i f_i^0 \mathcal{L}_{i(2)}^{\beta,g} [\delta_{1n} S_{1/2}^1(C_i^2) + \delta_{2n} S_{1/2}^2(C_i^2) + \dots] = \\ = \delta_{1n} \Omega_{\phi,i}^1 + \delta_{2n} \Omega_{\phi,i}^2 + \dots, \quad (237)$$

де ми скористалися тим, що його вигляд після переходу до безрозмірних швидкостей збігається з інтегралом в s_p^ϕ , ф. (204). Зіставляючи цей результат і ф. (235) з початковим виразом (234) і ф. (222), отримуємо:

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\beta;mn} = \Omega_g^{-1} \Omega_{\phi,j}^m \Omega_{\phi,i}^n. \quad (238)$$

Тепер можемо записати загальний результат для оператора $-J_i^*$ замість лівої частини ф. (232):

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left\{ h_i^m \left[\sum_{j=1}^M \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;mn} + \mathcal{B}_{ii;1/2}^{\prime;mn} - \mathcal{B}_{ii;1/2}^{\beta;mn} \right] + \sum_{j \neq i}^M h_j^m \left[\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;mn} - \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\beta;mn} \right] \right\}. \quad (239)$$

У цьому виразі перенормування оператора J_i представлено на мові матричних елементів.

Отже, операторні частини інтегральних рівнянь задаються формулами (232) та (239). Відшукаймо вигляд неоднорідних частин $K_i^{F,n}$ для інтегральних рівнянь (224) та (225).

3.4.3. Неоднорідні частини

Як зазначено у §3.3.2, функції \mathcal{L}_i^F складаються з двох доданків, ф. (188). Перший з них явно залежить від \mathbf{C}_i , а другий виражено через інтеграл по \mathbf{c}_j . Тоді, згідно ф. (229), маємо:

$$K_i^{F,n} = K_{i(1)}^{F,n} + K_{i(2)}^{F,n}. \quad (240)$$

Внески від $\mathcal{L}_{i(1)}^F$ розраховуємо подібно до випадку кінетичної теорії Енскога для твердих кульок. Зокрема, частини $K_{i(1)}^{F,n}$ для $\{A, B, H, E\}$ відмінні від нуля лише для кількох перших n :

$$\begin{bmatrix} K_{i(1)}^{T,n} \\ K_{i(1)}^{\mathbf{V},n} \\ K_{i(1)}^{I^*,n} \\ K_{i(1)}^{\mu,n} \end{bmatrix} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} n_i \begin{bmatrix} 1 \\ \left(\frac{2}{3}\right) \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} (\mathcal{L}_{i(1)}^F, S_\nu^n)_\nu = n_i \begin{bmatrix} \delta_{0n} \frac{3}{2} L_{i(1)}^{T,0} + \delta_{1n} \frac{15}{4} L_{i(1)}^{T,1} \\ \delta_{0n} \frac{5}{2} L_{i(1)}^{\mathbf{V},0} \\ \delta_{1n} \frac{3}{2} L_{i(1)}^{I,1} \\ \delta_{0n} \frac{3}{2} L_{i(1)}^{\mu,0} \end{bmatrix}, \quad (241)$$

де використано представлення $\mathcal{L}_{i(1)}^F$ через многочлени (див. §3.3.2) та умови їх нормування.

Розгляньмо другий внесок

$$K_{i(2)}^{F,n} \equiv \tilde{m}_i^{[\nu]} \int d\mathbf{c}_i f_i^0 \begin{bmatrix} \mathcal{L}_{i(2)}^T \mathbf{c}_i \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{\mathbf{V}} \mathbf{c}_i^{\circ} \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{I^*} \end{bmatrix} \odot S_\nu^n(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]}.$$

Зважаючи на вигляд $\mathcal{L}_{i(2)}^F$, фф. (189), (190) та (191), маємо:

$$\begin{bmatrix} K_{i(2)}^{T,n} \\ K_{i(2)}^{\mathbf{V},n} \\ K_{i(2)}^{I^*,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -K_{i(2)}^{T\nabla,n} - K_{i(2)}^{Tg,n} \\ -K_{i(2)}^{\mathbf{V}\nabla,n} \\ -K_{i(2)}^{I\nabla,n} - \Omega_\beta^0 K_{i(2)}^{\beta g,n} \end{bmatrix}. \quad (242)$$

Отже, потрібно розрахувати такі інтеграли, фф. (154) та (186):

$$\begin{bmatrix} K_{i(2)}^{T\nabla,n} \\ K_{i(2)}^{\mathbf{V}\nabla,n} \\ K_{i(2)}^{I\nabla,n} \\ K_{i(2)}^{Tg,n} \end{bmatrix} = \tilde{m}_i^{[\nu]} \int d\mathbf{c}_i f_i^0 \begin{bmatrix} \mathcal{L}_{i(2)}^{T,\nabla} \mathbf{c}_i \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{\mathbf{V},\nabla} \mathbf{c}_i^{\circ} \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{I,\nabla} \\ \mathcal{L}_{i(2)}^{T,g} \mathbf{c}_i \end{bmatrix} \odot S_\nu^n(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]}, \quad (243)$$

де інтеграл $K_{i(2)}^{\beta g,n}$ для $\mathcal{L}_{i(2)}^{\beta g}$ знайдено раніше, ф. (237).

Переходячи до безрозмірних змінних центра мас, попередня формула набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned} & \tilde{m}_i^{[\nu]} \sum_j \sum_q \sum_l \sum_p^{\oplus, \ominus} q p y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_r^{qp} n_i n_j 2\pi^{-2} \int d\mathbf{g} d\theta \theta^p(g) \times \quad (244) \\ & \times e^{-g^2 - g^2} \begin{bmatrix} \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot [g^2 i_{20}^{p+} + i_{22}^{p+} \mathbf{g}\mathbf{g}] + p \alpha_i^{ql} \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} 2j_3^p \mathbf{g} \\ i_{22}^{p+} \mathbf{g}^{\circ} \mathbf{g} \\ \frac{2}{3} g^2 j_3^{p+} \\ (-\frac{1}{2} \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \epsilon_{ij}^{ql}) p j_3^p \mathbf{g} \end{bmatrix} \odot \\ & \odot \left(\delta_{0n} S_\nu^0(C_i^2) + \delta_{1n} S_\nu^1(C_i^2) + \delta_{2n} S_\nu^2(C_i^2) + \dots \right) \mathbf{C}_i^{[\nu]}, \end{aligned}$$

де, нагадаємо, $\alpha_i^{ql} \equiv \frac{1}{2} M_i (v_{ij}^{ql})^2$. Для $\nu = \{\frac{3}{2}; \frac{5}{2}; \frac{1}{2}\}$ обмежуємося першим, нульовим і другим многочленом у круглих дужках.

Далі розглядаємо сам інтеграл. Останній доданок першого рядка в прямокутних дужках на коефіцієнт $-2M_i$ відрізняється від останнього рядка (обидва домножуються на $S_{3/2}^n$). Тому його відзначаємо далі як α , а результати переворень пишемо для останнього рядка. Рядок з многочленами виражаємо через \mathcal{G} та \mathbf{g} і, перемножуючи з великими прямокутними дужками, відкидаємо непарні по швидкостях доданки з таким результатом:

$$\begin{bmatrix} \frac{M}{\sqrt{\tilde{m}_{i+j}}} \left\{ [G^2 g^2 i_{20}^{p+} + i_{22}^{p+} \mathcal{G}_g^2] (\delta_{0n} + \delta_{1n} S_{3/2}^{10}) - \delta_{1n} 4m^2 g^2 j_5^{p+} \mathcal{G}_g^2 \right\} + \alpha \\ \delta_{0n} m^2 i_{22}^{p+} \mathbf{g}^{\circ} \mathbf{g} \\ \frac{2}{3} g^2 j_3^{p+} (\delta_{0n} + \delta_{1n} S_{1/2}^{10} + \delta_{2n} S_{1/2}^{20}) \\ (-\frac{1}{2} \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \epsilon_{ij}^{ql}) p j_3^p \left[m g^2 (\delta_{0n} + \delta_{1n} S_{3/2}^{10}) - \delta_{1n} 2M^2 m \mathcal{G}_g^2 \right] \end{bmatrix}.$$

Інтегруючи по орієнтаціях $\hat{\mathcal{G}}$ і \hat{g} й по величині \mathcal{G} , виносимо множник $(4\pi)^2 \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2})$. Функції у великих дужках зводяться до $S_\nu^n(g^2)$. Для g виникають характерні інтеграли \mathcal{J}_{gk}^p від відповідних функцій, які після сумування по p творять комбінації $C_{gk}^{2\mp}$ (залишені $y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_r^{qp}$ слід при цьому змінити на $y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_r^q$):

$$\begin{aligned} & (4\pi)^2 \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \times \quad (245) \\ & \times \begin{bmatrix} \frac{M}{\sqrt{\tilde{m}_{i+j}}} \left\{ \delta_{0n} C_{g4}^{2-} [j_3^{p+}] + \delta_{1n} m^2 \left(C_{g4}^{2-} [S_{3/2}^1 j_3^{p+}] - 2C_{g6}^{2-} [j_5^{p+}] \right) \right\} + \alpha \\ \delta_{0n} \frac{2}{3} m^2 C_{g6}^{2-} [i_{22}^{p+}] \\ \frac{2}{3} \left(\delta_{0n} C_{g4}^{2-} [j_3^{p+}] + \delta_{1n} m^2 C_{g4}^{2-} [S_{1/2}^1 j_3^{p+}] + \delta_{2n} m^4 C_{g4}^{2-} [S_{1/2}^2 j_3^{p+}] \right) \\ (-\frac{1}{2} \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \epsilon_{ij}^{ql}) m \left(\delta_{0n} C_{g4}^{2+} [j_3^p] + \delta_{1n} m^2 C_{g4}^{2+} [S_{3/2}^1 j_3^p] \right) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Врахуємо тепер, що $\{M, m\}_i = \{M_i^{1/2}, -M_j^{1/2}\}$, і підставмо явні вирази для комбінацій. Тоді ф. (244) набуває такого вигляду:

$$\tilde{m}_i^{[\nu]} n_i \sum_j n_j \sum_q \sum_l^{r,a} q y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_r^q 2\pi \times \quad (246)$$

$$\times \begin{bmatrix} \delta_{1n} 3M_i^{1/2} M_j \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \Psi_{3/2}^{\nabla,1} - M_i M_j^{1/2} \mu_{ij}^{-1/2} (\delta_{0n} \Psi_{3/2}^{g,0} + \delta_{1n} M_j \Psi_{3/2}^{g,1}) \\ \delta_{0n} (-\frac{4}{3}) M_j \Psi_{5/2}^{\nabla,0} \\ \frac{2}{3} (\delta_{1n} M_j \Psi_{1/2}^{\nabla,1} + \delta_{2n} M_j^2 \Psi_{1/2}^{\nabla,2}) \\ \frac{1}{2} M_j^{1/2} \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} (\delta_{0n} \Psi_{3/2}^{g,0} + \delta_{1n} M_j \Psi_{3/2}^{g,1}) \end{bmatrix},$$

де замість α підставлено результат четвертого рядка, домножений на $-2M_i$. Зручно означити характерну функцію

$$\tilde{\Psi}(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \equiv \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$$

й виразити через неї $\Psi_{3/2}^{\nabla,1} = \Psi_{5/2}^{\nabla,0} = \Psi_{1/2}^{\nabla,1} = \tilde{\Psi}$ і, крім того,

$$\Psi_{1/2}^{\nabla,2} \equiv -\frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1-2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^2 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^{5/2},$$

для решти маємо: $\Psi_{3/2}^{g,0} = \tilde{\Psi}$, $\Psi_{3/2}^{g,1} \equiv -\frac{1}{\sqrt{\pi}} (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^{5/2}$, $\Psi_{1/2}^{g,1} \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^2$, $\Psi_{1/2}^{g,2} \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} [-(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^3 + (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^2]$. Останні дві означено згідно ф. (236).

Подібно до ф. (241), запишімо результат у вигляді:

$$\begin{bmatrix} K_{i(2)}^{T,n} \\ K_{i(2)}^{\mathbf{V},n} \\ K_{i(2)}^{I^*,n} \end{bmatrix} = n_i \begin{bmatrix} \delta_{0n} \frac{3}{2} L_{i(2)}^{T,0} + \delta_{1n} \frac{15}{4} L_{i(2)}^{T,1} \\ \delta_{0n} \frac{5}{2} L_{i(2)}^{\mathbf{V},0} \\ \delta_{1n} \frac{3}{2} L_{i(2)}^{I^*,1} + \delta_{2n} \frac{15}{2} L_{i(2)}^{I^*,2} \end{bmatrix}, \quad (247)$$

де коефіцієнти $L_{i(2)}^{F,n}$, які є проєкціями функцій $\mathcal{L}_{i(2)}^F$ на відповідні набори $\{S_\nu\}$, знаходимо з одержаних результатів і ф. (242):

$$L_{i(2)}^{T,0} \equiv \frac{2}{3} \pi \sum_j n_j M_{i-j} \Lambda_{3;0q}^{ij} [\Psi_{3/2}^{g,0}], \quad (248)$$

$$L_{i(2)}^{T,1} \equiv \frac{4}{15} \pi \sum_j n_j M_j \left(-6M_i \Lambda_{3;0q}^{ij} [\Psi_{3/2}^{\nabla,1}] + M_{i-j} \Lambda_{3;0q}^{ij} [\Psi_{3/2}^{g,1}] \right), \quad (249)$$

$$L_{i(2)}^{\mathbf{V},0} \equiv \frac{m_i}{\theta_{k0}} \frac{8}{15} \pi \sum_j n_j M_j \Lambda_{3;0q}^{ij} [\Psi_{5/2}^{\nabla,0}], \quad (250)$$

$$L_{i(2)}^{I^*,1} \equiv -\sum_j n_j M_j \left(\frac{8}{9} \pi \Lambda_{3;0q}^{ij} [\Psi_{1/2}^{\nabla,1}] + \right. \quad (251)$$

$$\left. + \frac{2\sqrt{2}}{3} \pi \Omega_\beta^0 (\theta^{k0})^{3/2} \mu_{ij}^{-1/2} \Lambda_{2;01}^{ij} [\Psi_{1/2}^{g,1}] \right), \quad (252)$$

$$L_{i(2)}^{I^*,2} \equiv -\sum_j n_j M_j^2 \left(\frac{8}{45} \pi \Lambda_{3;0q}^{ij} [\Psi_{1/2}^{\nabla,2}] + \right.$$

$$\left. + \frac{2\sqrt{2}}{15} \pi \Omega_\beta^0 (\theta^{k0})^{3/2} \mu_{ij}^{-1/2} \Lambda_{2;01}^{ij} [\Psi_{1/2}^{g,2}] \right).$$

У випадку одного сорту $L_{i(2)}^{T,0}$ і доданок з M_{i-j} в $L_{i(2)}^{T,1}$ пропадають. Матричні елементи всієї неоднорідної частини дорівнюють:

$$\begin{bmatrix} K_{i(2)}^{T,n} \\ K_{i(2)}^{\mathbf{V},n} \\ K_{i(2)}^{I^*,n} \\ K_{i(2)}^{\mu,n} \end{bmatrix} = n_i \begin{bmatrix} \delta_{0n} \frac{3}{2} L_{i(2)}^{T,0} + \delta_{1n} \frac{15}{4} L_{i(2)}^{T,1} \\ \delta_{0n} \frac{5}{2} L_{i(2)}^{\mathbf{V},0} \\ \delta_{1n} \frac{3}{2} L_{i(2)}^{I^*,1} + \delta_{2n} \frac{15}{2} L_{i(2)}^{I^*,2} \\ \delta_{0n} \frac{3}{2} L_{i(2)}^{\mu,0} \end{bmatrix}, \quad (253)$$

де, згідно ф. (240), коефіцієнти $L_{i(2)}^{F,n} = L_{i(2)}^{F,n} + L_{i(2)}^{F,n}$ отримуються з результатів (241) і (247). Вирази (253) слід використати в системах рівнянь типу (232) для відшукування коефіцієнтів $\{a^0, a^1\}$, $\{b^0\}$, $\{h^1, h^2\}$ та $\{e^0, e^1\}$.

4. Потоки у першому порядку і лінійні коефіцієнти переносу

Коефіцієнти переносу зсувної η і об'ємної \varkappa в'язкостей, теплопровідності λ , дифузії D_{ij} та термодифузії D_i^T означаються з лінійних за градієнтами співвідношень для внесків першого порядку до тензора напружень, потоку тепла і дифузійної швидкості:

$$\mathbf{P}^1 = -2\eta \mathbf{S} - \varkappa (\nabla \cdot \mathbf{V}) \mathbf{I}, \quad (254)$$

$$\mathbf{q}^1 = -\lambda \nabla T^{k0} + \sum_{l=1}^M \omega_l \mathbf{X}_l, \quad (255)$$

$$\mathbf{V}_i^{d,1} = -D_i^T \nabla \ln T^{k0} + \sum_{j=1}^M D_{ij} \mathbf{X}_j, \quad (256)$$

де $\mathbf{S} \equiv (\overset{\circ}{\nabla} \mathbf{V})^\ddagger$ — тензор швидкостей зсуву, ω_l — коефіцієнти дифузійного теплопереносу. Плюс біля доданків з $\{\mathbf{X}\}$ зумовлений прийнятим означенням $\mathbf{X}_j \equiv -m_j^{-1} (\nabla \mu_j)_{T^{k0}}$.

Внески від взаємодії до \mathbf{P}^1 і \mathbf{q}^1 зумовлені такими чинниками: нерівноважністю одночастинкових функцій розподілу, врахуванню

просторової неоднорідності у цих функціях та нерівноважністю парних функцій розподілу. Відповідні внески відзначено верхніми індексами ϕ , ∇ і g . Крім того, \mathbf{q} має ще внесок від потоку потенціальної енергії, який відзначаємо нижнім індексом p . Перерахуємо в цих позначеннях ненульові внески до η , \varkappa і λ :

$$\eta = \eta^k + \eta^\phi + \eta^\nabla, \quad (257)$$

$$\varkappa = \varkappa^\phi + \varkappa^\nabla + \varkappa^g, \quad (258)$$

$$\lambda = \lambda_k^k + \lambda_k^\phi + \lambda_k^\nabla + \lambda_k^g + \lambda_p, \quad (259)$$

$$\omega_l = \omega_{k,l}^k + \omega_{k,l}^\phi + \omega_{p,l}. \quad (260)$$

4.1. Кінетичні внески у потоки

Розрахуємо за допомогою знайденої поправки внески першого порядку до кінетичних потоків:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P}_i^{k,1} \\ \mathbf{q}_{k,i}^{k,1} \\ \mathbf{J}_i^{\text{md},1} \end{bmatrix} = \int d\mathbf{c}_i f_i^0 \phi_i(\mathbf{C}_i) \begin{bmatrix} m_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \\ \frac{1}{2} m_i c_i^2 \mathbf{c}_i \\ m_i \mathbf{c}_i \end{bmatrix}. \quad (261)$$

З результату для $\mathbf{J}_i^{\text{md},1}$ зможемо одержати формулу для $\mathbf{q}_p^{(0)1}$, ф. (76). Інтеграл ф. (261), виражений через безрозмірну швидкість, набуває вигляду:

$$\rho_i \pi^{-3/2} \begin{bmatrix} \tilde{m}_i^{-1} \\ \tilde{m}_i^{-3/2} \\ \tilde{m}_i^{-1/2} \end{bmatrix} \int d\mathbf{C}_i e^{-C_i^2} \begin{bmatrix} -B_i \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i^0 \mathbf{C}_i : \mathbf{X}_V - H_i \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i X_I \\ \left\{ -A_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{X}_T - \sum_k E_{ik} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{X}_k \right\} \begin{pmatrix} C_i^2 \mathbf{C}_i \\ \mathbf{C}_i \end{pmatrix} \end{bmatrix}. \quad (262)$$

де опущено непарні степені \mathbf{C}_i , що пропадають при інтегруванні.

Верхній рядок других квадратних дужок містить незначимі внески від ϕ_i до $\mathbf{P}_i^{k,1}$, а нижній — до $\mathbf{q}_{k,i}^{k,1}$ та $\mathbf{J}_i^{\text{md},1}$. Після інтегрування по $d\hat{C}_i$ інтеграл у ф. (262) зводиться до вигляду ($\mathbf{X}_I \equiv X_I$):

$$\frac{4}{3} \pi \int_0^\infty dC_i e^{-C_i^2} \begin{bmatrix} -B_i C_i^6 \frac{2}{5} S - H_i C_i^4 X_I \\ \left\{ -A_i C_i^4 \mathbf{X}_T - \sum_k E_{ik} C_i^4 \mathbf{X}_k \right\} \begin{pmatrix} C_i^2 \\ 1 \end{pmatrix} \end{bmatrix}. \quad (263)$$

Розгляньмо інтеграл ф. (263) для першого рядка. Використавши розклад B_i й H_i по $\{S_\nu\}$ і провівши заміну $C_i^2 = x$, отримуємо:

$$-\frac{2}{3} \pi \int_0^\infty dx e^{-x} \begin{pmatrix} x^{5/2} \\ x^{1/2} \end{pmatrix} \sum_{n=0}^\infty \begin{pmatrix} b_i^n S_{5/2}^n(x) \\ h_i^n S_{1/2}^n(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{5/2}^0(x) \\ \frac{3}{2} S_{1/2}^0(x) - S_{1/2}^1(x) \end{pmatrix} = (264)$$

$$= -\frac{2}{3} \pi \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{5}{2} b_i^0 \\ h_i^0 - h_i^1 \end{pmatrix},$$

де було використано умови нормування многочленів; верхні позиції у круглих дужках стосується B_i , а нижні — H_i . Верхній рядок треба домножити на $\frac{2}{5} S$, а нижній — на X_I . Підставивши отримане у ф. (262) і врахувавши обмеження (202) для h_i^0 , маємо:

$$\mathbf{P}_i^{k,1} = -n_i \theta^{k0} [b_i^0 S - h_i^1 X_I].$$

При сумуванні по i другий доданок пропадає завдяки умові (202) для h_i^1 :

$$\mathbf{P}^{k,1} = -\theta^{k0} \sum_i n_i b_i^0 S. \quad (265)$$

Розгляньмо нижній рядок ф. (263) для, напр., температурної частини. Ввівши заміну $C_i^2 = x$, маємо:

$$-\frac{2}{3} \pi \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \sum_{n=0}^\infty a_i^n S_{3/2}^n(x) \begin{pmatrix} \frac{5}{2} S_{3/2}^0(x) - S_{3/2}^1(x) \\ S_{3/2}^0(x) \end{pmatrix} = (266)$$

$$= -\frac{2}{3} \pi \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{5}{2} [a_i^0 - a_i^1] \\ a_i^0 \end{pmatrix},$$

Підстановка цього результату у ф. (262) дає змогу записати кінцеві вирази для дифузійного потоку і внесків у потік тепла:

$$\mathbf{J}_i^{\text{md},1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\theta^{k0}} n_i \sqrt{m_i} \left(a_i^0 \mathbf{X}_T + \sum_k e_{ik}^0 \mathbf{X}_k \right), \quad (267)$$

$$\mathbf{q}_{k,i}^{k,1} = -\frac{5}{2\sqrt{2}} (\theta^{k0})^{3/2} \frac{n_i}{\sqrt{m_i}} \left([a_i^0 - a_i^1] \mathbf{X}_T + \sum_k [e_{ik}^0 - e_{ik}^1] \mathbf{X}_k \right). \quad (268)$$

Сумарні внески до потоку тепла від ε^k та e^p мають вигляд:

$$\mathbf{q}_k^{k,1} = -\frac{5}{2\sqrt{2}} (\theta^{k0})^{3/2} \sum_i \frac{n_i}{\sqrt{m_i}} \left([a_i^0 - a_i^1] \mathbf{X}_T + \sum_k [e_{ik}^0 - e_{ik}^1] \mathbf{X}_k \right), \quad (269)$$

$$\mathbf{q}_p^{(0)1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\theta^{k0}} \left(\sum_{ij} m_i^{-1/2} e_{ij}^p a_i^0 \mathbf{X}_T + \sum_{ijk} m_i^{-1/2} e_{ij}^p e_{ik}^0 \mathbf{X}_k \right). \quad (270)$$

З фф. (265), (267), (269) і (270) отримуємо вирази для внесків у коефіцієнти переносу (врахувавши, що $\mathbf{J}_i^{\text{md},1} = \rho_i \mathbf{V}_i^{\text{d},1}$):

$$\eta^k \equiv \frac{1}{2} \theta^{k0} \sum_i n_i b_i^0, \quad (271)$$

$$D_i^T \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{k_B T^{k0}} m_i^{-1/2} a_i^0, \quad (272)$$

$$D_{ij} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{k_B T^{k0}} m_i^{-1/2} e_{ij}^0, \quad (273)$$

$$\lambda_k^k \equiv \frac{5}{2\sqrt{2}} \sqrt{k_B^3 T^{k0}} \sum_i \frac{n_i}{\sqrt{m_i}} [a_i^0 - a_i^1], \quad (274)$$

$$\omega_{k,l}^k \equiv -\frac{5}{2\sqrt{2}} (\theta^{k0})^{3/2} \sum_i \frac{n_i}{\sqrt{m_i}} [e_{il}^0 - e_{il}^1], \quad (275)$$

$$\lambda_p \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{k_B/T^{k0}} \sum_{ij} \frac{e_{ij}^{p0}}{\sqrt{m_i}} a_i^0, \quad (276)$$

$$\omega_{p,l} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{k_B T^{k0}} \sum_{ij} \frac{e_{ij}^{p0}}{\sqrt{m_i}} e_{il}^0. \quad (277)$$

4.2. Внески у потоки від взаємодії

4.2.1. Розрахунок внесків $P^{1\phi}$ та $q_k^{1\phi}$

Внески в потоки від нерівноважних поправок $\{\phi\}$ мають вигляд:

$$\begin{aligned} \left(\begin{matrix} P \\ q_k \end{matrix} \right)^{1\phi,p} &= \sum_{ij} \sum_q \sum_l^{c|r,a} K_{ij}^q \gamma_p n_i n_j \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_r^p \pi^{-3} 2\theta^{k0} \times \\ &\times \int d\mathcal{G} d\mathcal{g} d\hat{\sigma} e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} \theta^p(g_\sigma) \times \\ &\times \left(\begin{array}{l} 2g_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ 2\tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot g_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} \end{array} \left| \begin{array}{l} [g_\sigma^2 - g_\sigma \mathcal{Q}^p] \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ p\alpha_j^{ql} g_\sigma \hat{\sigma} + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot [g_\sigma^2 - g_\sigma \mathcal{Q}^p] \hat{\sigma} \hat{\sigma} \end{array} \right. \right) [\phi_i + \phi_j]. \end{aligned} \quad (278)$$

Перш за все зауважмо, що вираз симетричний по сортах i та j за винятком другого рядка у правих півдужках. Для всіх інших доданків, можна провадити розрахунок для, скажімо, ϕ_j , домноживши весь вираз на 2. Або ж одержати результат для ϕ_i , взаємно замінивши вкінці індекси сортів. Однак, через зазначений виняток, ми не будемо вдаватися до цих спрощень.

Інтегрування по $\hat{\sigma}$ великих круглих дужок дає:

$$\left(\begin{array}{l} 2 {}_2\mathcal{I}_2^p \\ 2\tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot {}_2\mathcal{I}_2^p \end{array} \left| \begin{array}{l} {}_2\mathcal{I}_2^p - 2\mathcal{I}_2^{pQ} \\ p\alpha_j^{ql} {}_1\mathcal{I}_1^p + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot [{}_2\mathcal{I}_2^p - 2\mathcal{I}_2^{pQ}] \end{array} \right. \right).$$

Надалі не вказуємо варіанти зліва від вертикальної риски. Їх можна відтворити по варіантах справа, відкинувши доданки із \mathcal{Q}^p , поклав-

ши $\alpha_j^{ql} = 0$ і домноживши на 2. Позначивши ${}_2\mathcal{I}_2^{p-} \equiv {}_2\mathcal{I}_2^p - 2\mathcal{I}_2^{pQ}$ і підставивши попередній вираз в інтеграл ф. (278), маємо:

$$\int d\mathcal{G} d\mathcal{g} e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} \left(\begin{array}{l} {}_2\mathcal{I}_2^{p-} \\ p\alpha_j^{ql} {}_1\mathcal{I}_1^p + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot {}_2\mathcal{I}_2^{p-} \end{array} \right) [P_{ki} + P_{kj}] \phi_k, \quad (279)$$

де, напр., P_{ki} позначає перестановку індексів k та i .

У додатку С.5 поправку ϕ_k виражено через безрозмірні змінні центра мас \mathcal{G} та \mathcal{g} . Інтеграл ${}_2\mathcal{I}_2^{p-}$ парний, а ${}_1\mathcal{I}_1^p$ непарний відносно \mathcal{g} . Тому для першого рядка ф. (279) треба залишати з виразу (393) доданки, парні по \mathcal{G} і \mathcal{g} ; для другого — парні по \mathcal{G} і непарні по \mathcal{g} ; для третього — непарні по \mathcal{G} і парні по \mathcal{g} . Тоді ф. (279) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} & - \int d\mathcal{G} d\mathcal{g} e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} \left(\begin{array}{l} {}_2\mathcal{I}_2^{p-} \\ p\alpha_j^{ql} {}_1\mathcal{I}_1^p + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} {}_2\mathcal{I}_2^{p-} \end{array} \right) [P_{ki} + P_{kj}] \times \\ & \times \left\{ \begin{array}{l} b_k^0 (M^2 \mathcal{G} \mathcal{G} + m^2 \mathcal{g} \mathcal{g}) : \mathbf{X}_V + (h_k^1 S_{1/2}^{1,0} + h_k^2 S_{1/2}^{2,0}) X_I \\ m [a_k^0 \mathcal{g} + a_k^1 (S_{3/2}^{1,0} \mathcal{g} - 2M^2 \mathcal{G}_g \mathcal{G})] \cdot \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \\ M [a_k^0 \mathcal{G} \mathcal{G} + a_k^1 (S_{3/2}^{1,0} \mathcal{G} \mathcal{G} - 2m^2 \mathcal{G} \mathcal{G}_g \mathcal{g})] \cdot \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \end{array} \right\}, \end{aligned} \quad (280)$$

де мається на увазі, що спочатку перемножуємо вирази у кожному рядку, а потім результати другого і третього додаємо. Через [d.p.] позначено дифузійну частину, а результат для неї запишемо по аналогії з результатом для температурної частини. Інтегрування фігурних дужок по $\hat{\mathcal{G}}$, фф. (424) і (425), дає:

$$4\pi \left\{ \begin{array}{l} b_k^0 m^2 \mathcal{g} \mathcal{g} : \mathbf{X}_V + (h_k^1 S_{1/2}^{1,0} + h_k^2 S_{1/2}^{2;\hat{\mathcal{G}}}) X_I \\ m [a_k^0 \mathcal{g} + a_k^1 (S_{3/2}^{1,0} \mathcal{g} - \frac{2}{3} M^2 \mathcal{G}^2 \mathcal{g})] \cdot \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \\ \frac{1}{3} M [a_k^0 \mathcal{G}^2 + a_k^1 (S_{3/2}^{1,0} \mathcal{G}^2 - 2m^2 \mathcal{G}^2 \mathcal{g} \mathcal{g})] \cdot \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \end{array} \right\}, \quad (281)$$

де $S_{1/2}^{2;\hat{\mathcal{G}}}$ позначає поліном $S_{1/2}^2(C_k^2)$, проінтегрований по $\hat{\mathcal{G}}$, ф. (392).

Далі ф. (281) можна проінтегрувати по модулю швидкості центра мас \mathcal{G} . Підставляючи результат у ф. (280), одержуємо:

$$\begin{aligned} & -2\pi^2 \Gamma(\frac{3}{2}) \int d\mathcal{g} e^{-g^2} \theta^p(g) \left(\begin{array}{l} g^2 [i_{02}^{p-} 1 + i_{22}^{p-} \hat{g} \hat{g}] \\ p\alpha_j^{ql} 2j_3^p \mathcal{g} + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} g^2 [i_{02}^{p-} 1 + i_{22}^{p-} \hat{g} \hat{g}] \end{array} \right) \times \\ & \times [P_{ki} + P_{kj}] \left\{ \begin{array}{l} m^2 [b_k^0 \mathcal{g} \mathcal{g} : \mathbf{X}_V + (h_k^1 S_{1/2}^1(g^2) + h_k^2 m^2 S_{1/2}^2(g^2)) X_I] \\ m \mathcal{g} [a_k^0 + a_k^1 m^2 S_{3/2}^1(g^2)] \cdot \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \\ \frac{1}{2} M [a_k^0 + a_k^1 m^2 (S_{3/2}^1(g^2) - 2 \mathcal{g} \mathcal{g})] \cdot \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \end{array} \right\}, \end{aligned} \quad (282)$$

де було використано явний вигляд ${}_2\mathcal{I}_2^{p-}$ та ${}_1\mathcal{I}_1^p$. Векторні частини кожного рядка великих “півдужок” перемножуємо із відповідними рядками великих фігурних дужок й інтегруємо по \hat{g} за допомогою фф. (424) і (425) з таким результатом:

$$-8\pi^3\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \int_0^\infty dg g^2 \theta^p(g) e^{-g^2} \left[\begin{array}{l} g^2 \\ p\alpha_j^{ql} 2j_3^p + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} g^2 \end{array} \right] [\mathcal{P}_{ki} + \mathcal{P}_{kj}] \times \quad (283)$$

$$\times \left\{ \begin{array}{l} m^2 \left[\frac{2}{15} b_k^0 g^2 i_{22}^{p-} \mathbf{S} + \frac{2}{3} (h_k^1 S_{1/2}^1 j_3^{p-} + h_k^2 m^2 S_{1/2}^2 j_3^{p-}) \mathbf{X}_I \right] \\ \frac{1}{3} m g^2 [a_k^0 + a_k^1 m^2 S_{3/2}^1] \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \\ \frac{1}{3} M [a_k^0 j_3^{p-} + a_k^1 m^2 (S_{3/2}^1 j_3^{p-} - 2 g^2 j_5^{p-})] \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \end{array} \right\},$$

де функції S_j^m та j_n^p залежать від g і було використано співвідношення (403) і (409) для комбінацій i_{rk}^{p-} .

Використавши для інтегралів позначення \mathcal{J}_{gk}^p , ф. (429), маємо:

$$-8\pi^3\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left[\begin{array}{l} 1 \\ 2p\alpha_j^{ql} + \\ + \frac{1}{3} \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \end{array} \right] [\mathcal{P}_{ki} + \mathcal{P}_{kj}] \times \quad (284)$$

$$\times \left\{ \begin{array}{l} \frac{2}{15} b_k^0 m^2 \mathcal{J}_{g6}^p [i_{22}^{p-}] \mathbf{S} + \\ + \frac{2}{3} (h_k^1 m^2 \mathcal{J}_{g4}^p [S_{1/2}^1 j_3^{p-}] + h_k^2 m^4 \mathcal{J}_{g4}^p [S_{1/2}^2 j_3^{p-}]) \mathbf{X}_I \\ [a_k^0 m \mathcal{J}_{g4}^p [j_3^p] + a_k^1 m^3 \mathcal{J}_{g4}^p [S_{3/2}^1 j_3^p]] \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \\ M [a_k^0 \mathcal{J}_{g4}^p [j_3^p] + a_k^1 m^2 (\mathcal{J}_{g4}^p [S_{3/2}^1 j_3^p] - 2 \mathcal{J}_{g6}^p [j_5^p])] \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \end{array} \right\}.$$

Результат для необмінних процесів \odot та \otimes отримуємо з попередньої формули, відкинувши другий рядок, домноживши на 2 і замінивши $\varphi^{p-} \rightarrow \varphi^p$:

$$-8\pi^3\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{2}{3} \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \right) [\mathcal{P}_{ki} + \mathcal{P}_{kj}] \times \quad (285)$$

$$\times \left\{ \begin{array}{l} \frac{2}{15} b_k^0 m^2 \mathcal{J}_{g6}^p [i_{22}^p] \mathbf{S} + \\ + \frac{2}{3} (h_k^1 m^2 \mathcal{J}_{g4}^p [S_{1/2}^1 j_3^p] + h_k^2 m^4 \mathcal{J}_{g4}^p [S_{1/2}^2 j_3^p]) \mathbf{X}_I \\ M [a_k^0 \mathcal{J}_{g4}^p [j_3^p] + a_k^1 m^2 (\mathcal{J}_{g4}^p [S_{3/2}^1 j_3^p] - 2 \mathcal{J}_{g6}^p [j_5^p])] \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \end{array} \right\}.$$

Далі потрібно згрупувати доданки біля коефіцієнтів b_k^0 , h_k^n та a_k^n , просумувавши спочатку внески \otimes , \oplus та \ominus для кожної сходинки і виділивши окремо внесок від твердої серцевини. Якщо використати для \otimes та \ominus зв'язок між граничними значеннями $g_2^{ij,0}$, то виявимо, що для другого рядка ф. (284) виникають комбінації $C_{gk}^{2+}[\varphi^p]$, а для

першого і третього рядків цієї формули і для обох рядків ф. (285) виникають комбінації $C_{gk}^{3-}[\varphi^{p-}]$, фф. (434) і (435), додаток D.3. Після дії операторів \mathcal{P} і перемножень отримуємо такий кінцевий результат:

$$\left(\mathbf{P}_{\mathbf{q}_k} \right)^{1\phi} = \sum_{ij} \sum_q^{\text{c.r.a}} \sum_l n_i n_j \left[\begin{array}{l} 1 \\ q \end{array} \right] y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}^q}^{[+]} \theta^{k0} \left(-\frac{2}{3}\pi \right) \times \quad (286)$$

$$\times \left(\begin{array}{l} \frac{2}{5} (b_i^0 M_j + b_j^0 M_i) \left[\begin{array}{l} 1 \\ \Phi_B^0 \end{array} \right] \mathbf{S} + \\ + \left\{ - (h_i^1 M_j + h_j^1 M_i) \left[\begin{array}{l} 1 \\ \Phi_H^1 \end{array} \right] + (h_i^2 M_j^2 + h_j^2 M_i^2) \left[\begin{array}{l} 0 \\ \Phi_H^2 \end{array} \right] \right\} \mathbf{X}_I \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\theta^{k0}}}{m_{i+j}} \left\{ (a_i^0 \sqrt{m_i} + a_j^0 \sqrt{m_j}) \left[\begin{array}{l} 1 \\ \Phi_A^{0'} \end{array} \right] - \right. \\ - 3(a_i^1 \sqrt{m_i} M_j + a_j^1 \sqrt{m_j} M_i) \left[\begin{array}{l} 1 \\ \Phi_A^{1'} \end{array} \right] + \\ + (a_i^0 \sqrt{m_i} [-m_{j/i}] + a_j^0 \sqrt{m_j}) \left[\begin{array}{l} 0 \\ \Phi_A^{0''} \end{array} \right] + \\ \left. + (a_i^1 \sqrt{m_i} M_j [-m_{j/i}] + a_j^1 \sqrt{m_j} M_i) \left[\begin{array}{l} 1 \\ \Phi_A^{1''} \end{array} \right] \right\} \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] \end{array} \right),$$

де перші два рядки у великих дужках стосуються $\mathbf{P}^{1\phi}$, а чотири наступні — $\mathbf{q}_k^{1\phi}$. Верхні позиції у прямокутних дужках відповідають твердій серцевині, а нижні — сходинкам. Введені функції Φ_F^q залежать від $\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$; деякі з них виражаються через таку функцію:

$$\Phi(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \equiv 1 - e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^* \left(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql} \right) \bar{\epsilon}_{ij}^{ql},$$

зокрема, $\Phi_B^0 = \Phi$, $\Phi_H^1 = \Phi$, $\Phi_A^{1'} = \Phi$,

$$\Phi_H^2(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \equiv \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1-2e}^* \left(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql} \right) (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^2 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^{5/2},$$

$$\Phi_A^{0'}(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \equiv 1 - e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}},$$

$$\Phi_A^{0''}(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) = \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^* \left(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql} \right) \bar{\epsilon}_{ij}^{ql},$$

$$\Phi_A^{1''}(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \equiv -\frac{1}{\sqrt{\pi}} (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^{5/2}.$$

Для перших чотирьох рядків у великих дужках ф. (286) характерно те, що коефіцієнти біля величин b_j^0 , h_j^n чи a_j^n отримуються з коефіцієнтів біля i -тих величин за допомогою перестановки індексів $i \rightleftharpoons j$. Тому один додаєнок (напр., j -тий) із кожної пари можна опустити⁷, ввівши множник 2. Однак останні два рядки не виявля-

⁷Кожну подвійну суму $\sum_{ij} s_{ij}$ можна записати у симетризованому вигляді $\frac{1}{2} \sum_{ij} [s_{ij} + s_{ji}]$ і навпаки.

ють симетрії по сортах для a_j^n . Тому ми їх спочатку симетризуємо з результатом, наприклад, для a_j^0 ,

$$\frac{1}{2}(a_i^0 \sqrt{m_i} [1 - m_{j/i}] + a_j^0 \sqrt{m_j} [1 - m_{i/j}]),$$

а потім відкинемо внески із a_j^n , домноживши на 2. Тоді фігурні дужки біля \mathbf{X}_T набувають вигляду:

$$2 \left\{ a_i^0 \sqrt{m_i} \left[\frac{1}{\Phi_A^0} \right] - 3a_i^1 \sqrt{m_i} M_j \left[\frac{1}{\Phi_A^1} \right] \right\}.$$

Нові функції $\Phi_A^0 \equiv \Phi_A^0 + \frac{1}{2}[1 - m_{j/i}] \Phi_A^{0'}$ і $\Phi_A^1 \equiv \Phi_A^1 - \frac{1}{6}[1 - m_{j/i}] \Phi_A^{1'}$ мають такий явний вигляд:

$$\begin{aligned} \Phi_A^0 &= 1 - e^{\epsilon_{ij}^{ql}} + \frac{1}{4}[1 - m_{j/i}] \tilde{\Gamma}_{1+2e}^* \left(\frac{3}{2}; \epsilon_{ij}^{ql} \right) \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}, \\ \Phi_A^1 &= \Phi + \frac{1}{6}[1 - m_{j/i}] \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^{5/2}. \end{aligned}$$

Для внесків до коефіцієнтів переносу знаходимо:

$$\eta^\phi \equiv \frac{4}{15} \pi \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j b_i^0 M_j \Lambda_{3;1q}^{ij} [\Phi_B^0], \quad (287)$$

$$\varkappa^\phi \equiv \frac{4}{3} \pi \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j \left\{ -h_i^1 M_j \Lambda_{3;1q}^{ij} [\Phi_H^1] + h_i^2 M_j^2 \Lambda_{3;0q}^{ij} [\Phi_H^2] \right\}, \quad (288)$$

$$\begin{aligned} \lambda_k^\phi &\equiv \frac{2\sqrt{2}}{3} \pi k_B \sqrt{\theta^{k0}} \sum_{ij} n_i n_j \frac{\sqrt{m_i}}{m_{i+j}} \times \\ &\times \left\{ a_i^0 \Lambda_{3;1q}^{ij} [\Phi_A^0] - 3a_i^1 M_j \Lambda_{3;1q}^{ij} [\Phi_A^1] \right\}, \end{aligned} \quad (289)$$

$$\begin{aligned} \omega_{k,l}^\phi &\equiv -\frac{2\sqrt{2}}{3} \pi (\theta^{k0})^{3/2} \sum_{ij} n_i n_j \frac{\sqrt{m_i}}{m_{i+j}} \times \\ &\times \left\{ e_{il}^0 \Lambda_{3;1q}^{ij} [\Phi_A^0] - 3e_{il}^1 M_j \Lambda_{3;1q}^{ij} [\Phi_A^1] \right\}. \end{aligned} \quad (290)$$

4.2.2. Розрахунок внесків $P^{1\nabla}$ та $\mathbf{q}_k^{1\nabla}$

Розрахуймо внески, зумовлені градієнтом логарифма у ф. (110):

$$\begin{aligned} \left(\begin{matrix} P \\ \mathbf{q}_k \end{matrix} \right)^{1\nabla, p} &= \sum_{ij} \sum_q \sum_l^{c|r, a} K_{ij}^q \gamma_p^2 n_i n_j \frac{1}{4} (\sigma_{ij}^{ql})^4 g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \pi^{-3} 2\theta^{k0} \times \\ &\times \int d\mathcal{G} d\mathbf{g} d\hat{\sigma} e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} \theta^p (g_\sigma) \times \end{aligned} \quad (291)$$

$$\times \left(2g_\sigma^2 \hat{\sigma}^3 \left| \begin{array}{l} [g_\sigma^2 - g_\sigma \mathcal{Q}^p] \hat{\sigma}^3 \\ p\alpha_j^{ql} g_\sigma \hat{\sigma} \hat{\sigma} + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot [g_\sigma^2 - g_\sigma \mathcal{Q}^p] \hat{\sigma}^3 \end{array} \right. \right) \cdot \nabla \ln(f_i^0 / f_j^0),$$

де $\hat{\sigma}^3 \equiv \hat{\sigma} \hat{\sigma} \hat{\sigma}$. Розгляньмо цей інтеграл. Результат інтегрування по $\hat{\sigma}$ виражається через тензори ${}_l \mathcal{I}_k^p$ та ${}_l \mathcal{I}_k^{pQ}$, фф. (402) та (408):

$$\left(2 {}_3 \mathcal{I}_2^p \left| \begin{array}{l} 3\mathcal{I}_2^p - 3\mathcal{I}_2^{pQ} \\ p\alpha_j^{ql} {}_2 \mathcal{I}_1^p + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot [3\mathcal{I}_2^p - 3\mathcal{I}_2^{pQ}] \end{array} \right. \right).$$

На місце градієнта логарифма у ф. (291) маємо підставити ф. (389), яку наводимо тут:

$$\begin{aligned} \nabla \ln \frac{n_i}{n_j} + \left(2\tilde{m}_{i-j}^{1/2} M_{i-j}^{1/2} \mathcal{G} - 4\tilde{\mu}_{ij}^{1/2} \mathbf{g} \right) \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger + \\ + \left[M_{i-j} (\mathcal{G}^2 - g^2) - 4(M_i M_j)^{1/2} \mathcal{G} \cdot \mathbf{g} \right] \mathbf{X}_T. \end{aligned}$$

Однак з цього виразу досить залишити лише ті доданки, що забезпечують парність по \mathcal{G} і по \mathbf{g} відповідних добутоків. Оскільки ${}_3 \mathcal{I}_2^{p-}$ — непарний, а ${}_2 \mathcal{I}_1^p$ — парний по \mathbf{g} , то опустивши непарні доданки, надаємо інтегралу ф. (291) такого вигляду:

$$\int d\mathcal{G} d\mathbf{g} e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} \left(\begin{array}{l} {}_3 \mathcal{I}_2^{p-} \\ p\alpha_j^{ql} {}_2 \mathcal{I}_1^p + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} \cdot {}_3 \mathcal{I}_2^{p-} \end{array} \right) \cdot \left\{ \begin{array}{l} -4\tilde{\mu}_{ij}^{1/2} \mathbf{g} \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger \\ \nabla \ln \frac{n_i}{n_j} + M_{i-j} (\mathcal{G}^2 - g^2) \mathbf{X}_T \\ -4(M_i M_j)^{1/2} \mathcal{G} \cdot \mathbf{g} \mathbf{X}_T \end{array} \right\}, \quad (292)$$

де ми не наводимо варіанти зліва від вертикальної риски, тому що їх можна відтворити по варіантах справа, поклавши $\alpha_j^{ql} = 0$ і домноживши на 2. Кожен рядок круглих півдужок домножується на відповідний рядок фігурних дужок і після цього другий і третій рядки додаються.

Інтегруємо по $\hat{\mathcal{G}}$ за допомогою фф. (424) та (425) і по \mathcal{G} , ф. (427), з таким результатом:

$$2\pi \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \int d\mathbf{g} e^{-g^2} \left(\begin{array}{l} {}_3 \mathcal{I}_2^{p-} \mathbf{g} \\ p\alpha_j^{ql} {}_2 \mathcal{I}_1^p + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} {}_3 \mathcal{I}_2^{p-} \cdot \mathbf{g} \end{array} \right) \cdot \left\{ \begin{array}{l} : (-4\tilde{\mu}_{ij}^{1/2} \nabla \mathbf{V}^\dagger) \\ \cdot (\nabla \ln \frac{n_i}{n_j} + M_{i-j} (\frac{3}{2} - g^2) \mathbf{X}_T) \\ \cdot (-2(M_i M_j)^{1/2} \mathbf{X}_T) \end{array} \right\}. \quad (293)$$

Підставляємо явний вигляд тензорів ${}_l \mathcal{I}_k^{p-}$ й інтегруємо круглі пів-

дужки по \hat{g} :

$$4\pi^2\theta^p(g) \left(\begin{array}{l} \frac{1}{3}g^3 [i_{12}^{p-} + \frac{1}{5}i_{32}^{p-}] 3(\mathbb{I})^\ddagger \\ p\alpha_j^{ql} g [i_{01}^p + \frac{1}{3}i_{21}^p] \mathbb{I} + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \frac{5}{3}g^3 [i_{12}^{p-} + \frac{1}{5}i_{32}^{p-}] \mathbb{I} \end{array} \right).$$

Спростуючи характерні комбінації функцій за допомогою співвідношень (403), (404) та (410), зводимо ф. (293) до вигляду:

$$8\pi^3\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left(\begin{array}{l} \frac{2}{15}\mathcal{J}_{g_5^p}[j_4^{p-}] \{ -4\tilde{\mu}_{ij}^{1/2} 3(\mathbb{I})^\ddagger : \nabla\mathbf{V}^\dagger \} \\ p\alpha_j^{ql} \frac{2}{3} \{ \mathcal{J}_{g_3^p}[j_2^p] \nabla \ln \frac{n_i}{n_j} + M_{i-j} \mathcal{J}_{g_3^p}[S_{1/2}^1 j_2^p] \mathbf{X}_T \} + \\ + \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \frac{2}{3} \mathcal{J}_{g_5^p}[j_4^{p-}] \{ -2(M_i M_j)^{1/2} \mathbf{X}_T \} \end{array} \right), \quad (294)$$

де введено характерні інтеграли $\mathcal{J}_{gk}^p[\varphi]$, означені у ф. (429). Такий же вираз для необмінних процесів \odot і \otimes має вигляд:

$$8\pi^3\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left(\begin{array}{l} 2 \times \frac{2}{15}\mathcal{J}_{g_5^p}[j_4^p] \{ -4\tilde{\mu}_{ij}^{1/2} 3(\mathbb{I})^\ddagger : \nabla\mathbf{V}^\dagger \} \\ 2 \times \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \frac{2}{3} \mathcal{J}_{g_5^p}[j_4^p] \{ -2(M_i M_j)^{1/2} \mathbf{X}_T \} \end{array} \right). \quad (295)$$

Щоб знайти результат для однієї сходинки, треба додати відповідні внески від процесів \oplus , \ominus та \otimes , які утворюють характерну комбінацію $\mathcal{C}_{g_5^+}^{3+}[j_4^{p-}]$, див. ф. (435). Другий рядок ф. (294), однак, утворює комбінації $\mathcal{C}_{g_3^+}^{2-}$. Використовуємо для цих комбінацій фф. (438) та (436) і, спростивши коефіцієнти, отримуємо:

$$\left(\mathbf{P} \right)_{\mathbf{q}_k}^{1\nabla} = - \sum_{ij} \sum_q^{c,r,a} \sum_l n_i n_j y_4^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{[q+]} \theta^{k0} \frac{4}{3} \sqrt{2\pi} \sqrt{\mu_{ij}} \times \quad (296)$$

$$\times \left(\begin{array}{l} \frac{1}{5\sqrt{\theta^{k0}}} \left[\begin{array}{l} 1 \\ \Phi_{\nabla}(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \end{array} \right] \left\{ 2S + \frac{5}{3}\mathbf{X}_I \right\} \\ \frac{\sqrt{\theta^{k0}}}{m_{i+j}} \left\{ \left[\begin{array}{l} 1 \\ \Phi_{\nabla}(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \end{array} \right] - \frac{1}{8}(1 - m_{j/i})(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} \mathbf{X}_T \end{array} \right),$$

де введено позначення

$$\Phi_{\nabla}(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \equiv e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}_{ij}^{ql} - e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \frac{1}{2}\bar{\epsilon}_{ij}^{ql} K_1\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}\right),$$

а K_1 — модифікована функція Беселя другого роду. Верхня позиція у прямокутних дужках ф. (296) відповідає твердій серцевині, а нижня — сходинкам.

З ф. (296) легко отримуємо внески до коефіцієнтів переносу зсувної та об'ємної в'язкостей і теплопровідності:

$$\eta^\nabla \equiv \frac{4}{15} \sqrt{2\pi} \sqrt{\theta^{k0}} \sum_{ij} n_i n_j \sqrt{\mu_{ij}} \Lambda_{4;11}^{ij} [\Phi_{\nabla}], \quad (297)$$

$$\varkappa^\nabla = \frac{5}{3} \eta^\nabla, \quad (298)$$

$$\lambda_k^\nabla \equiv \frac{4}{3} \sqrt{2\pi} k_B \sqrt{\theta^{k0}} \sum_{ij} n_i n_j \frac{\sqrt{\mu_{ij}}}{m_{i+j}} \Lambda_{4;11}^{ij} [\Phi_{\nabla} - \frac{1}{8}(1 - m_{j/i}) \bar{\epsilon}_{ij}^2]. \quad (299)$$

4.2.3. Розрахунок внесків \mathbf{P}^{1g} та \mathbf{q}_k^{1g}

Відшукаймо внески у тензор напружень і тепловий потік, зумовлені нерівноважною частиною $g_2^{ij,1}$ парної функції розподілу. У ф. (110) у великих круглих дужках можна відкинути доданки із \mathcal{G} , як непарні. Інтегрування по $d\mathcal{G}$ дає множник $2\pi\Gamma(\frac{3}{2})$. Вектор $\hat{\sigma}$ входить у $g_2^{ij,1}$, тому проінтегрувати по ньому непросто. Зате можна проінтегрувати по орієнтаціях вектора \mathbf{g} , тобто, знайти

$$\int d\hat{g} \theta^p(g_\sigma) \left(\begin{array}{l} 2g_\sigma^2 \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ 0 \end{array} \left| \begin{array}{l} g_\sigma^2 - g_\sigma \mathcal{Q}^p \\ p\alpha_j^{ql} g_\sigma \hat{\sigma} \end{array} \right. \hat{\sigma} \hat{\sigma} \right).$$

Віднісши модуль g до $\hat{\sigma}$ у скалярних добутках $\mathbf{g} \cdot \hat{\sigma}$, бачимо, що у верхньому рядку виходять інтеграли ${}_0\mathcal{I}_2^p$ та ${}_0\mathcal{I}_2^{p-}$, а в нижньому — ${}_0\mathcal{I}_1^p$, якщо вектори $\hat{\sigma}$ і \hat{g} поміняти ролями в означеннях (400) і (405). Підстановка результатів (402) та (408) дає:

$$\pi\theta^p(g) \left(\begin{array}{l} 4g^2 j_3^p(g) \\ 0 \end{array} \left| \begin{array}{l} 2g^2 j_3^{p-}(g) \\ p\alpha_j^{ql} 2g j_2^p(g) \end{array} \right. \right) \left(\begin{array}{l} \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} \end{array} \right).$$

Як бачимо, змінні \mathbf{g} і $\hat{\sigma}$ вже не зв'язані між собою, а інтеграли по них факторизувалися. Тоді на місці інтеграла, що слідує з ф. (110), отримуємо такий вираз:

$$2\pi^2\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left(\begin{array}{l} 4\mathcal{J}_{g_4^p}[j_3^p] \\ 0 \end{array} \left| \begin{array}{l} 2\mathcal{J}_{g_4^p}[j_3^{p-}] \\ p\alpha_j^{ql} 2\mathcal{J}_{g_3^p}[j_2^p] \end{array} \right. \right) \times \quad (300)$$

$$\times \int d\hat{\sigma} \left(\begin{array}{l} \hat{\sigma} \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} \end{array} \right) \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + \gamma_p \lambda \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - \gamma_p \tilde{\lambda} \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma_p},$$

де використано позначення для характерних інтегралів, ф. (429). Верхня позиція у круглих дужках відповідає \mathbf{P}^{1g} , а нижня — \mathbf{q}_k^{1g} . Розгляньмо далі ці величини окремо.

Пошук \mathbf{q}_k^{1g} . Підстановка результату (300) для \mathbf{q}_k^{1g} у ф. (110) дає такий вираз:

$$\mathbf{q}_k^{1g} = \sum_{ij} \sum_q^{r,a} \sum_l q n_i n_j \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 \pi^{-1} 2\theta^{k0} 2\Gamma(\frac{3}{2}) \alpha_j^{ql} \sum_p \left[\frac{1}{2} e^{-\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \right] \times (301)$$

$$\times \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + qp\lambda\sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - qp\tilde{\lambda}\sigma_{ij}^{ql})^{qp},$$

де враховано, що $p^2 = 1$, а в прямокутних дужках подано результати для $\mathcal{J}_{g_3^p}^p[j_2^p]$, верхня позиція відповідає \oplus , а нижня $-\ominus$.

Для подальшого немає потреби явно інтегрувати $g_2^{ij,1}$. Досить, зробивши заміну $\hat{\sigma}' = -\hat{\sigma}$ в доданку \ominus (який через це отримує множник -1), врахувати зв'язок між граничними значеннями по різні боки сходинок і знайти суму внесків від \oplus та \ominus . Легко бачити, що доданки із $g_2^{ij,1}$ взаємно знищуються, а замість $\sum_p \dots$ залишається:

$$\frac{1}{2} \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \int_0^1 d\lambda \left[-g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_r^q \epsilon_{ij}^{ql} \left\{ \beta^{p1}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} q \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^{p0}(\mathbf{r}) \right\} \right].$$

Внесок із β^{p1} непарний по $\hat{\sigma}$, тому отримуємо:

$$\frac{1}{2} \times \frac{4}{3} \pi g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_r^q \epsilon_{ij}^{ql} \frac{1}{2} q \sigma_{ij}^{ql} \nabla \beta^{p0}.$$

Це дає такий остаточний результат для всього внеску:

$$\mathbf{q}_k^{1g} = - \sum_{ij} \sum_q^{r,a} \sum_l n_i n_j y_4^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_r^q (\bar{\epsilon}_{ij}^{ql})^2 [\theta^{k0}]^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{3\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m_j/i}{m_{i+j}}} \mathbf{X}_T. (302)$$

Розрахунок P^{1g} . Для внеску до тензора напружень маємо:

$$P^{1g} = \sum_p^{\circ|\otimes,\oplus,\ominus} \sum_{ij}^c \sum_q^{r,a} \sum_l K_{ij}^q \gamma_p \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 n_i n_j \pi^{-1} 2\theta^{k0} 2\Gamma(\frac{3}{2}) \times (303)$$

$$\times \begin{bmatrix} \Gamma(\frac{3}{2}) \\ \Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \\ \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \\ -\frac{1}{2} e^{-\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \odot \\ \otimes \\ \oplus \\ \ominus \end{bmatrix} \times$$

$$\times \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + \gamma_p \lambda \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - \gamma_p \tilde{\lambda} \sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p},$$

де у великих прямокутних дужках явно вказано результати інтегрування по g для кожного типу внеску. Використовуючи зв'язок між граничними значеннями, можна позбутися інтегрування $g_2^{ij,1}$ по $\hat{\sigma}$. Спочатку ми об'єднаємо внески \oplus та \ominus , а потім, виділяючи у великих прямокутних дужках $\Gamma(\frac{3}{2})$, отримаємо залишок, який дасть ненульовий результат. Доданки із $\Gamma(\frac{3}{2})$, як ми покажемо, перетворюються в нуль.

Перейдімо у внеску \ominus до $\hat{\sigma}' = -\hat{\sigma}$ і застосуємо зв'язок між граничними значеннями. Інтеграл набуває вигляду:

$$\int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \int_0^1 d\lambda e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \left[g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_r^{+q} \epsilon_{ij}^{ql} \left\{ \beta^{p1}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} q \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^{p0}(\mathbf{r}) \right\} + \right.$$

$$\left. + g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + q\lambda\sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - q\tilde{\lambda}\sigma_{ij}^{ql})^{+q} \right].$$

Внесок із β^{p0} непарний по $\hat{\sigma}$, а внесок із β^{p1} позначаємо як

$$P_{1\beta}^{1g} = \sum_{ij} \sum_q^{r,a} \sum_l [-q] \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 n_i n_j \pi^{-1} 2\theta^{k0} 2\Gamma(\frac{3}{2}) \times$$

$$\times \left[-\frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \right] \frac{4}{3} \pi g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_r^q \epsilon_{ij}^{ql} \beta^{p1},$$

де було проінтегровано по $\hat{\sigma}$. Залишений доданок із $g_2^{ij,1}$ об'єднаємо із внеском \oplus . Після спрощень одержуємо:

$$P_{1\beta}^{1g} \equiv \sum_{ij} \sum_q^{r,a} \sum_l q n_i n_j y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_r^q \epsilon_{ij}^{ql} \theta^{k0} \frac{2}{3} \sqrt{\pi} \tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \beta^{p1}. (304)$$

Головний доданок без знайденого дорівнює:

$$P^{1g} - P_{1\beta}^{1g} = \sum_p^{\circ|\otimes,\oplus,\ominus} \sum_{ij}^c \sum_q^{r,a} \sum_l \gamma_p \frac{1}{2} (\sigma_{ij}^{ql})^3 n_i n_j \pi^{-1} 2\theta^{k0} 2\Gamma(\frac{3}{2}) \times (305)$$

$$\times \left[\begin{bmatrix} \Gamma(\frac{3}{2}) \\ \Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \\ \tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \odot \\ \otimes \\ \oplus \end{bmatrix} \right] \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + \gamma_p \lambda \sigma_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - \gamma_p \tilde{\lambda} \sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p},$$

де для об'єданого внеску $\gamma_{\oplus\ominus} = q$. Виділім у великих прямокутних дужках $\Gamma(\frac{3}{2})$, а різниці для внесків \otimes і $\oplus\ominus$, що дорівнюють $\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql})$ та $\tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql})$, віднесімо до окремого доданка:

$$P_{2\beta}^{1g} = \sum_p^{\otimes,\oplus\ominus} \sum_{ij} \sum_q^{r,a} \sum_l q (\sigma_{ij}^{ql})^3 n_i n_j \theta^{k0} \pi^{-1} 2\Gamma(\frac{3}{2}) \tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}) \times (306)$$

$$\times \left[\frac{1}{-e^{\epsilon_{ij}^{ql}}} \left| \begin{array}{c} \otimes \\ \oplus \end{array} \right. \right] \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r} + \begin{bmatrix} -q \\ q \end{bmatrix} \lambda \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}, \mathbf{r} - \begin{bmatrix} -q \\ q \end{bmatrix} \tilde{\lambda} \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}) \begin{bmatrix} -q \\ q \end{bmatrix}.$$

Перейдімо у внеску \otimes до $\hat{\sigma}' = -\hat{\sigma}$. Використавши знову зв'язок між граничними значеннями, бачимо, що внески із $g_2^{ij,1}$ взаємно знищуються, доданок із $\nabla\beta^{p0}$ непарний по $\hat{\sigma}$, тому одержуємо:

$$P_{2\beta}^{1g} = \sum_{ij} \sum_q^{r,a} \sum_l q n_i n_j y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})^q \epsilon_{ij}^{ql} \theta^{k0} \frac{4}{3} \sqrt{\pi} \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}) \beta^{p1}. \quad (307)$$

Цей внесок відрізняється множником $\frac{4}{3}$ і функцією $\tilde{\Gamma}_{2e}$ від ф. (304). Їх сума дорівнює:

$$P_{1+2,\beta}^{1g} = \sum_{ij} \sum_q^{r,a} \sum_l q n_i n_j y_3^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})^q \epsilon_{ij}^{ql} \theta^{k0} \frac{1}{3} \pi \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}) \beta^{p1}. \quad (308)$$

Головний внесок без цих двох має вигляд:

$$P^{1g} - P_{1+2,\beta}^{1g} = \frac{1}{2} \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j \sum_q^{c,r,a} \sum_l^{K_{ij}^q} \sum_b^{\pm 1} b q (\sigma_{ij}^{ql})^3 \times \quad (309)$$

$$\times \int d\hat{\sigma} \hat{\sigma} \int_0^1 d\lambda g_2^{ij,1}(\mathbf{r}_1 + b q \lambda \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}, \mathbf{r}_1 - b q \tilde{\lambda} \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql})^{bq},$$

де в аргументах функції $g_2^{ij,1}$ зручно було ввести $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}$; для $q = c = -1$ значення $b = -1$ дає $g_2^{ij,1}(\cdot)_{\mathbf{r}^-} = 0$, а для $b = +1$ правильно відтворює внесок від твердої серцевини.

Скористаймося тим, що вираз (309) нагадує формулу для функції Майєра. Після заміни $\hat{\sigma}' = -\hat{\sigma}$ введемо під інтегралом по $\hat{\sigma}$ δ -функцію $\delta(\mathbf{r}_{21} - b q \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}) = r_{12}^{-2} \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{ql}) \delta^{(2)}(\hat{r}_{21} - b q \hat{\sigma})$ з інтегруванням по \mathbf{r}_2 . Інтегруючи по $\hat{\sigma}$, одержимо:

$$P^{1g} - P_{1+2,\beta}^{1g} = \frac{1}{2} \theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_{21} \hat{r}_{21} \times \quad (310)$$

$$\times \sum_q^{c,r,a} \sum_l \sum_b^{\pm 1} b q \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{ql}) g_2^{ij,1}(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}})^{bq},$$

де $\mathbf{r}_{1\lambda} \equiv \mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{r}_{21}$, $\mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}} \equiv \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda] \mathbf{r}_{21}$. Конструкція між \hat{r}_{21} та $g_2^{ij,1}$ нагадує вираз для градієнта локально-рівноважної функції Майєра

для БС потенціала. Забраклий множник $W_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}}^{bq}$ можемо “виділити” з $g_2^{ij,1}$. Згідно фф. (361) і (362) можемо записати (враховуючи, що $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}$):

$$g_2^{ij,1}(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}})_{\mathbf{r}}^{bq} = W_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}}^{bq} \times$$

$$\times \left\{ \nabla\beta^{p0}(\mathbf{r}) \cdot \left[\frac{1}{2} - \lambda \right] \mathbf{r}_{21} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12})^{bq} \chi_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}} + \chi_{ij}^1(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}})_{\mathbf{r}} \right\}.$$

Підставивши її, доданок із $\nabla\beta^{p0}$ можна відкинути, як непарний по \mathbf{r}_{21} , і все зводиться до виразу:

$$P^{1g} - P_{1+2,\beta}^{1g} = \frac{1}{2} \theta^{k0} \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_{21} \hat{r}_{21} \sum_{ij} n_i n_j \frac{\partial f_{ij}^M(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial r_{12}} \chi_{ij}^1(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}})_{\mathbf{r}}, \quad (311)$$

де

$$\chi_{ij}^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} = \int d\mathbf{r}_3 \mathbf{H}_{ij}^{\chi^1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}),$$

$$\mathbf{H}_{ij}^{\chi^1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} = \sum_k \nabla n_k(\mathbf{r}) H_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} + \nabla\beta^{p0}(\mathbf{r}) H_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}}.$$

Покажімо далі, що ф. (311) перетворюється в нуль. Завдяки подвійній сумі по сортах, її можна подати у симетризованій формі, замінивши χ_{ij}^1 на симетризовану

$$\chi_{ij}^{1,\text{sym}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} \equiv \frac{1}{2} [\chi_{ij}^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} + \chi_{ij}^1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)_{\mathbf{r}}].$$

Для останньої відповідна функція $\mathbf{H}_{ij}^{\chi^{1,\text{sym}}}$ симетрична по перших двох своїх аргументах. Тоді для

$$\chi_{ij}^{1,\text{sym}}(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}})_{\mathbf{r}} = \int d\mathbf{r}_3 \mathbf{H}_{ij}^{\chi^{1,\text{sym}}}(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}}; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{1\lambda} + \mathbf{r}_{1\lambda} - \mathbf{r}],$$

підставленої у ф. (311), можна застосувати симетризацію (§B.4). Зокрема, $\mathbf{r}_{1\lambda} - \mathbf{r} = -\lambda \mathbf{r}_{21}$ (бо $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}$) можна винести за інтеграл по \mathbf{r}_3 , а застосувавши твердження з §B.4 до $\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{1\lambda}$, отримаємо:

$$\left[\frac{1}{2} - \lambda \right] \mathbf{r}_{21} \int d\mathbf{r}_3 \mathbf{H}_{ij}^{\chi^{1,\text{sym}}}(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\tilde{\lambda}}; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}}.$$

Цей інтеграл зводиться до частинних похідних по n_k і β^{p0} від локально-рівноважної $\chi_{ij}^{0,\text{sym}}(r_{12})_{\mathbf{r}}$, які не залежать від орієнтації \hat{r}_{21} . Внаслідок цього інтеграл у ф. (311) виявляється непарним по \hat{r}_{21} і тому дорівнює нулю: $P^{1g} - P_{1+2,\beta}^{1g} = 0$.

У підсумку, з фф. (308) і (302) можемо записати вирази для внесків у коефіцієнти об'ємної в'язкості і теплопровідності:

$$\varkappa^g \equiv -\frac{1}{3}\pi(\theta^{k0})^2 \Omega_\beta[H] \sum_{ij} n_i n_j \Lambda_{3;0q}^{ij}[\Phi_g], \quad (312)$$

$$\lambda_k^g \equiv \frac{1}{6}\sqrt{2\pi} k_B \sqrt{\theta^{k0}} \sum_{ij} n_i n_j \sqrt{\frac{m_{j/i}}{m_{i+j}}} \Lambda_{4;01}^{ij}[\tilde{\epsilon}_{ij}^2], \quad (313)$$

де $\Phi_g(\tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}) \equiv \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}) \tilde{\epsilon}_{ij}^{ql}$. Функція $\tilde{\epsilon}_{ij}^2$ у виразі для λ_k^g нагадує додатковий член біля Φ_∇ у ф. (299) для λ_k^∇ .

4.3. Об'єднання внесків

Наведемо сумарні вирази для основних коефіцієнтів переносу. Одночастинкові за своєю природою коефіцієнти термодифузії та взаємної дифузії подано вище за допомогою фф. (272) та (273).

Додавши усі внески до коефіцієнта зсувної в'язкості, фф. (271), (287) та (297), отримуємо такий кінцевий вираз:

$$\eta = \frac{1}{2}\theta^{k0} \sum_i n_i \left\{ b_i^0 \left(1 + \frac{8}{15}\pi \sum_j n_j M_j \Lambda_{3;1q}^{ij}[\Phi_B^0] \right) + \frac{8}{15}\sqrt{2\pi}(\theta^{k0})^{-1/2} \sum_j n_j \sqrt{\mu_{ij}} \Lambda_{4;11}^{ij}[\Phi_\nabla] \right\}. \quad (314)$$

Цілком подібно, сума фф. (288), (298) та (312) дає вираз для об'ємної в'язкості:

$$\varkappa = \frac{4}{3}\pi\theta^{k0} \sum_{ij} n_i n_j \left\{ -h_i^1 M_j \Lambda_{3;1q}^{ij}[\Phi_H^1] + h_i^2 M_j^2 \Lambda_{3;0q}^{ij}[\Phi_H^2] + \frac{1}{3}\sqrt{2/\pi}(\theta^{k0})^{-1/2} \sqrt{\mu_{ij}} \Lambda_{4;11}^{ij}[\Phi_\nabla] - \frac{1}{4}\theta^{k0} \Omega_\beta[H] \Lambda_{3;0q}^{ij}[\Phi_g] \right\}. \quad (315)$$

Стосовно коефіцієнта теплопровідності, то внески λ_k^∇ і λ_k^g , задані фф. (299) і (313), частково компенсують одини одного:

$$\lambda_k^{\nabla+g} = \frac{4}{3}\sqrt{2\pi} k_B \sqrt{\theta^{k0}} \sum_{ij} n_i n_j \frac{\sqrt{\mu_{ij}}}{m_{i+j}} \Lambda_{4;11}^{ij}[\Phi_\nabla + \frac{1}{4}m_{j/i}\tilde{\epsilon}_{ij}^2].$$

Додавши фф. (274), (276), (299) і знайдену, одержуємо такий вираз:

$$\lambda = \frac{5}{2\sqrt{2}}k_B\sqrt{\theta^{k0}} \sum_i \frac{n_i}{\sqrt{m_i}} \left\{ a_i^0 \left(1 + \frac{8}{15}\pi \sum_j n_j M_i \Lambda_{3;1q}^{ij}[\Phi_A^0] + \frac{2}{5\theta^{k0}n_i} \sum_j e_{ij}^{p0} \right) - a_i^1 \left(1 + \frac{8}{5}\pi \sum_j n_j M_i M_j \Lambda_{3;1q}^{ij}[\Phi_A^1] \right) + \frac{16}{15}\sqrt{\pi} \sum_j n_j M_i \sqrt{M_j} \Lambda_{4;11}^{ij}[\Phi_\nabla + \frac{1}{4}\frac{m_j}{m_i}\tilde{\epsilon}_{ij}^2] \right\}. \quad (316)$$

Останній доданок в множинику біля a_i^0 — внесок від λ_p .

Так само, фф. (275), (277) і (290), у сумі дають:

$$\omega_l = -\frac{5}{2\sqrt{2}}(\theta^{k0})^{3/2} \sum_i \frac{n_i}{\sqrt{m_i}} \left\{ e_{il}^0 \left(1 + \frac{8}{15}\pi \sum_j n_j M_i \Lambda_{3;1q}^{ij}[\Phi_A^0] + \frac{2}{5\theta^{k0}n_i} \sum_j e_{ij}^{p0} \right) - e_{il}^1 \left(1 + \frac{8}{5}\pi \sum_j n_j M_i M_j \Lambda_{3;1q}^{ij}[\Phi_A^1] \right) \right\}. \quad (317)$$

Наведені вирази знайдено в наближенні, коли в поправках до одночастинкових функцій розподілу взято кілька перших многочленів Соніна-Лягера: для η — один, для \varkappa — три, для λ й ω_l — два. Якщо відкинути двочастинкові внески (всі \sum_j), отримані вирази за своєю формою представляють результати кінетичної теорії Больцмана. Якщо покласти, що всі $\Phi_\alpha = 0$, і врахувати будову конструкцій Λ^{ij} , одержимо вигляд результатів кінетичної теорії Енскога.

Стосовно порівняння з результатами кінетичних теорій для прямокутної ями [16, 18, 21, 22], її варіанта для сумішей [19, 20], а також БС потенціала [24–28], то головні відмінності стосуються \varkappa і λ й ω_l : 1) виявлено новий внесок у \varkappa (останній доданок ф. (315)), зумовлений врахуванням збереження повної енергії і формулюванням теорії через β^p ; 2) виявлено нові внески у λ й ω_l [другі \sum_j у фф. (316) і (317)], зумовлені перенесенням енергії міжчастинкової взаємодії; 3) об'ємну в'язкість знайдено у вищому наближенні (трьох многочленів; див. доданок із коефіцієнтом h_i^2) для поправок $\{H\}$ до одночастинкових функцій розподілу, ніж це зроблено у попередніх працях. Крім того, отримані результати для кількасортної системи узагальнюють досі відомі вирази для двосортної суміші з потенціалом прямокутної ями [19].

5. Висновки

У препринті запропоновано узагальнення кінетичної теорії густих систем з багатосходковим потенціалом взаємодії на випадок сумішей. Такий потенціал покликаний моделювати взаємодії між частинками у реальних газах чи рідинах. Він дає змогу, розвинути в наближенні парних зіткнень кінетичну теорію, подібну до теорії Енскога, і отримати аналітичні вирази для лінійних коефіцієнтів переносу, у яких явним чином враховано парні процеси на відстанях міжмолекулярного притягання.

Дотримання закону збереження енергії у цих процесах призводить до залучення рівняння балансу для густини потенціальної енергії в схему побудови кінетичної теорії. Це, своєю чергою, зумовлює появу оберненої потенціальної квазітемператури, від якої залежить парна функція розподілу і через яку формулюється співвідношення замикання.

Так побудована теорія володіє кількома особливостями, серед яких: а) виконання співвідношення взаємності Онзагера для дифузійних термодинамічних сил; б) перенормування інтегрального рівняння для об'ємно-в'язкісної компоненти поправки до функції розподілу; в) додатковий внесок від нерівноважної частини парної функції розподілу до об'ємної в'язкості і теплопровідності і г) дифузійний внесок у теплопровідність від переносу потенціальної енергії.

У наступних працях отримані вирази буде апробовано в числових розрахунках коефіцієнтів переносу реальних систем.

А. Термодинамічні співвідношення для локально-рівноважних станів

При вираженні похідної $\partial_t T^{k0}$ через градієнти (§ 3.3.1) за допомогою рівнянь переносу нульового порядку постала проблема розрахунку частинних похідних від густини внутрішньої енергії. Тут для одного й кількох випадків ці похідні виражено через інші, більш зручні, термодинамічні характеристики.

А.1. Односортна система

В роботі [22] для односортного випадку запропоновано використати термодинамічне співвідношення

$$d\tilde{\varepsilon} = \tilde{c}_v dT^{k0} + \left[T^{k0} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{k0}} \right) - P \right] dv, \quad (318)$$

де хвилькою відзначено питомі внутрішню енергію $\tilde{\varepsilon}$ і теплоємність \tilde{c}_v при постійному питомому об'ємі v . Всі величини цього рівняння локальні, тобто стосуються точки \mathbf{r} і моменту часу t , а саме рівняння годиться тільки за умов локальної рівноваги.

Локальна термодинаміка. Співвідношення для станів локальної рівноваги узагальнюють відповідні вирази рівноважної термодинаміки і формулюються на їх основі [42]. При виведенні можна виходити з першого закону термодинаміки $dU = TdS - PdV$. Його вигляд для питомих рівноважних величин одержимо, поділивши на масу M системи: $d(U/M) = Td(S/M) - Pd(V/M)$. Далі робиться припущення, що таке ж співвідношення для питомих величин справджується і для локально-рівноважних станів

$$d\tilde{\varepsilon} = Td\tilde{s} - Pd v, \quad (319)$$

у яких $\tilde{\varepsilon}$, \tilde{s} і v , а також T і P плавно змінюються від точки до точки, будучи функціями \mathbf{r} і t . Припускається, що $\tilde{\varepsilon}$ така ж функція \tilde{s} і v , як це є для питомих величин у рівновазі. Як наслідок, $T(\mathbf{r}, t)$ і $P(\mathbf{r}, t)$ є частинними похідними від $\tilde{\varepsilon}$ по відповідних змінних.

Зауважмо, що це узагальнення зручно робити саме для *питомих* величин, оскільки в цьому разі термодинамічними змінними є локальні питома ентропія \tilde{s} і питомий об'єм v . Можна робити таке ж припущення і для *густин*, але тоді локальними змінними для густини енергії ε мусять бути густини ентропії s і маси ρ , $\varepsilon = \varepsilon(s, \rho)$, або ж числа частинок $\varepsilon = \varepsilon(s, n)$.

Нижче показано, як ф. (318) слідує з першого закону термодинаміки для локально-рівноважних станів (319). Перейшовши в ньому від локальної питомої ентропії до локальної температури за допомогою співвідношення

$$d\tilde{s} = \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial T} \right)_v dT + \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial v} \right)_T dv,$$

отримуємо:

$$d\tilde{\varepsilon} = T \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial T} \right)_v dT + \left[T \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial v} \right)_T - P \right] dv. \quad (320)$$

З означення локальної питомої теплоємності $\tilde{c} \equiv \frac{\delta \tilde{Q}}{dT} = T \frac{d\tilde{s}}{dT}$ бачимо, що біля dT у ф. (320) стоїть локальна питома теплоємність \tilde{c}_v при постійному питомому об'ємі, як і записано у ф. (318).

Похідну від питомої ентропії у другому доданку ф. (320) добре було б виразити через спостережувані величини. Для цього використаємо рівність мішаних похідних питомої вільної енергії $\tilde{f} = \tilde{\varepsilon} - T\tilde{s}$:

$$\left[\frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial T} \right) \right]_T = \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial v} \right) \right]_v.$$

Звідси й зі співвідношення $d\tilde{f} = -\tilde{s}dT - Pdv$ слідує рівність

$$\left[\frac{\partial \tilde{s}}{\partial v} \right]_T = \left[\frac{\partial P}{\partial T} \right]_v,$$

яка після підстановки у вираз (320) дає аналог ф. (318):

$$d\tilde{\varepsilon} = \tilde{c}_v dT + \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v - P \right] dv. \quad (321)$$

Залишається тільки ототожнити локальну температуру $T(\mathbf{r}, t)$, введене для локально-рівноважних станів, із кінетичною температурою $T^{k0}(\mathbf{r}, t)$, введеною в нульовому порядку модифікованого методу Чепмена-Енскога.

Густина внутрішньої енергії. Використаймо ф. (321) у виразі для диференціала густини внутрішньої енергії $\varepsilon = \rho\tilde{\varepsilon}$ у змінних T й n . Підставивши її у $d\varepsilon = \rho d\tilde{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}d\rho$ й узявши до уваги зв'язок $dv = -\rho^{-2}d\rho$, отримуємо:

$$d\varepsilon = \rho\tilde{c}_v dT + n^{-1} \left[\varepsilon + P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v \right] dn, \quad (322)$$

де було перейдено від $d\rho$ до dn . Зіставляючи це з формулою

$$d\varepsilon = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_n dT + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n} \right)_T dn, \quad (323)$$

отримуємо явні вирази для частинних похідних:

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_n = \rho\tilde{c}_v, \quad \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n} \right)_T = n^{-1} \left[\varepsilon + P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v \right]. \quad (324)$$

Вводючи T^{k0} замість T , знаходимо з ф. (323) потрібну похідну:

$$d_t^0 T^{k0} = -[\rho\tilde{c}_v]^{-1} T^{k0} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{k0}} \right)_v \nabla \cdot \mathbf{V}. \quad (325)$$

Для твердих кульок цей вираз зводиться до ф. (338), оскільки в цьому разі тиск залежить від температури лінійно, а питома теплоємність при постійному об'ємі дорівнює $c_v^{\text{hs}} = \frac{3}{2}k_B m^{-1}$.

А.2. Кількасортна суміш

Будемо діяти як в односортному випадку: а) виходитимемо з диференціального співвідношення для питомої внутрішньої енергії $\tilde{\varepsilon}$; б) замість питомої ентропії \tilde{s} в ролі незалежної змінної введемо локальну температуру T ; в) похідні від \tilde{s} виразимо через похідні від експериментально спостережуваних величин, використовуючи термодинамічні співвідношення для питомої вільної енергії; г) одержаний вираз для $d\tilde{\varepsilon}$ використаємо, щоб знайти $d\varepsilon = d[\rho\tilde{\varepsilon}]$ у змінних $\{T, \rho_1, \dots, \rho_M\}$, а потім перейдемо від $d\rho_k$ до dn_k .

Рівноважний вираз для диференціала внутрішньої енергії багатосортової суміші має вигляд:

$$dU = TdS - PdV + \sum_k \mu_k dM_k, \quad (326)$$

де μ_k — хімічний потенціал сорту k , який стосується одиниці маси.⁸ При переході до рівноважного співвідношення для питомих величин є одна особливість, яку треба прояснити. У ф. (326) диференціали dM_k є незалежними змінними (можна сказати, що з погляду статистичної механіки їм відповідає багатосортний великий канонічний ансамбль). Щоб перейти до питомих величин, треба *зафіксувати* загальну масу системи $M = \sum_k M_k = \text{const}$, щоб мати змогу поділити на неї кожен з диференціалів:

$$d\left(\frac{U}{M}\right) = Td\left(\frac{S}{M}\right) - Pd\left(\frac{V}{M}\right) + \sum_k \mu_k d\left(\frac{M_k}{M}\right). \quad (327)$$

Така фіксація означає для питомих змінних $\left(\frac{M_k}{M}\right)$ *термодинамічну в'язь* — вони стають залежними, оскільки $\sum_k \frac{M_k}{M} = 1$. Щоб співвідношення (326) і (327) були еквівалентними, введена термодинамічна в'язь апостеріорі має стосуватися і першого з них. Такого формулювання рівноважної термодинаміки для питомих величин достатньо, щоб сформулювати співвідношення локальної термодинаміки.

Локальна термодинаміка суміші. Для локальних питомих величин, залежних від \mathbf{r} і t , припускають, що питома внутрішня енергія $\tilde{\varepsilon}$ така ж функція змінних \tilde{s} , v і ξ_k , як у рівновазі (де $\xi_k(\mathbf{r}, t) = \rho_k(\mathbf{r}, t)/\rho(\mathbf{r}, t)$ — масові концентрації сорту k з умовою $\sum_k d\xi_k = 1$).

⁸Суму можна подати й через диференціали числа частинок $\sum_k \mu'_k dN_k$, де μ'_k — хімічний потенціал, що стосується однієї частинки; тоді $\mu_k = \mu'_k/m_k$.

Тому для $\tilde{\varepsilon}$ справджується співвідношення, подібне до ф. (327):

$$d\tilde{\varepsilon} = Td\tilde{s} - Pdv + \sum_k \mu_k d\xi_k, \quad (328)$$

Величини $T(\mathbf{r}, t)$, $P(\mathbf{r}, t)$ і $\mu_k(\mathbf{r}, t)$ є частинними похідними від $\tilde{\varepsilon}$ по відповідних змінних.

Перейдімо у ф. (328) від локальної питомої ентропії \tilde{s} до локальної температури T , записавши для диференціала

$$d\tilde{s} = \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}} dT + \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial v} \right)_{T, \{\xi\}} dv + \sum_k \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial \xi_k} \right)_{T, v, \{\xi\}'_k} d\xi_k,$$

де $\{\xi\} \equiv \{\xi_1, \xi_2, \dots\}$, а $\{\xi\}'_k$ означає всі ξ_l крім $l = k$. Підстановка цього виразу у ф. (328) дає:

$$d\tilde{\varepsilon} = T \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}} dT + \left[T \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial v} \right)_{T, \{\xi\}} - P \right] dv + \sum_k \left[T \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial \xi_k} \right)_{T, v, \{\xi\}'_k} + \mu_k \right] d\xi_k. \quad (329)$$

Коефіцієнт біля dT — це питома теплоємність $\tilde{c}_{v, \{\xi\}}$ при постійних питомому об'ємі й сортовому складі суміші.

Виразім похідні від питомої ентропії через інші термодинамічні похідні. Диференціал питомої вільної енергії суміші $\tilde{f} = \tilde{\varepsilon} - T\tilde{s}$ дорівнює:

$$d\tilde{f} = -\tilde{s}dT - Pdv + \sum_k \mu_k d\xi_k. \quad (330)$$

З рівності мішаних похідних

$$\left[\frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}} \right]_{T, \{\xi\}} = \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial v} \right)_{T, \{\xi\}} \right]_{v, \{\xi\}},$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi_k} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}} \right]_{T, v, \{\xi\}'_k} = \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \xi_k} \right)_{T, v, \{\xi\}'_k} \right]_{v, \{\xi\}'_k}$$

і виразу (330) отримуємо співвідношення

$$\left[\frac{\partial \tilde{s}}{\partial v} \right]_{T, \{\xi\}} = \left[\frac{\partial P}{\partial T} \right]_{v, \{\xi\}}, \quad \left[\frac{\partial \tilde{s}}{\partial \xi_k} \right]_{T, v, \{\xi\}'_k} = - \left[\frac{\partial \mu_k}{\partial T} \right]_{v, \{\xi\}'_k},$$

які після підстановки у ф. (329) надають їй такого вигляду:

$$d\tilde{\varepsilon} = \tilde{c}_{v, \{\xi\}} dT + \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}} - P \right] dv + \sum_k \left[\mu_k - T \left(\frac{\partial \mu_k}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}'_k} \right] d\xi_k. \quad (331)$$

Коефіцієнти біля диференціалів дорівнюють відповідним частинним похідним від $\tilde{\varepsilon}$.

Густина внутрішньої енергії. Відшукаймо, як виражається $d\varepsilon$ через ці похідні. Підставивши у $d\varepsilon = \tilde{\varepsilon}d\rho + \rho d\tilde{\varepsilon}$ вираз (331) у формі

$$d\tilde{\varepsilon} = \tilde{c}_{v, \{\xi\}} dT - \rho^{-2} \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial v} \right)_{T, \{\xi\}} d\rho + \sum_k \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \xi_k} \right)_{T, v, \{\xi\}'_k} d\xi_k, \quad (332)$$

де використано, що $dv = -\rho^{-2}d\rho$, отримаємо:

$$d\varepsilon = \rho \tilde{c}_{v, \{\xi\}} dT + \rho^{-1} \left[\varepsilon - \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial v} \right)_{T, \{\xi\}} \right] d\rho + \rho \sum_k \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \xi_k} \right)_{T, v, \{\xi\}'_k} d\xi_k. \quad (333)$$

Оскільки $d\rho = \sum_l d\rho_l$ і $d\xi_k = \rho^{-1} \sum_l [\delta_{lk} - \rho_l/\rho] d\rho_l$, то у ф. (333) можна перейти до парціальних густин маси:

$$d\varepsilon = \rho \tilde{c}_{v, \{\xi\}} dT + \sum_l \left\{ \rho^{-1} \left[\varepsilon - \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial v} \right)_{T, \{\xi\}} \right] - \sum_k \rho_k \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \xi_k} \right)_{T, v, \{\xi\}'_k} + \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \xi_l} \right)_{T, v, \{\xi\}'_l} \right\} d\rho_l. \quad (334)$$

Зауважмо, що доданок у прямих дужках не залежить від індекса l зовнішньої суми, тому його можна винести, а $\sum_l d\rho_l$ біля нього дасть $d\rho$. Проте, ми шукаємо вираз для $d\varepsilon$ у змінних $\{T, n_1, n_2, \dots\}$, а для них такого кроку вже не можна зробити. Справді, вивіши $d\rho_l = m_l dn_l$ й обмінявши індекси для зовнішньої та внутрішньої сум, отримаємо:

$$d\varepsilon = \rho \tilde{c}_{v, \{\xi\}} dT + \sum_k m_k \left\{ \rho^{-1} \left[\varepsilon - \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial v} \right)_{T, \{\xi\}} \right] + \sum_l (\delta_{lk} - \rho_l/\rho) \left(\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \xi_l} \right)_{T, v, \{\xi\}'_l} \right\} dn_k. \quad (335)$$

Підставляючи частинні похідні від $\tilde{\varepsilon}$ з ф. (331), одержимо для ε :

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_{\{n\}} = \rho \tilde{c}_{v, \{\xi\}} \quad (336)$$

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_k} \right)_{T, \{n\}'_k} = m_k \left\{ \rho^{-1} \left[\varepsilon + P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}} \right] + \sum_l (\delta_{lk} - \rho_l/\rho) \left[\mu_l - T \left(\frac{\partial \mu_l}{\partial T} \right)_{v, \{\xi\}} \right] \right\}. \quad (337)$$

Сюди входять лише похідні по T при постійних v і $\{\xi\}$, які еквівалентні похідним при постійних питомому об'ємі v і густинах числа частинок $\{n\}$. Отже треба знати теплоємність $\tilde{c}_{v,\{n\}}$ та температурні залежності тиску P й хімічних потенціалів μ_i .

Пошук $d_t^0 T^{k0}$. У випадку твердих кульок густина внутрішньої енергії не має потенціального внеску, а (кінетична) температура означається як $\frac{3}{2} n k_B T_{hs} \equiv \varepsilon_{hs}^k$. Тоді з рівнянь для n і для густини внутрішньої (кінетичної) енергії $d_t^0 \varepsilon_{hs}^k = -(\varepsilon_{hs}^k + P_{hs}) \nabla \cdot \mathbf{V}$ (яке не містить джерела!) отримується:

$$d_t^0 T_{hs} = -\frac{2}{3} \frac{P_{hs}}{k_B n} \nabla \cdot \mathbf{V}. \quad (338)$$

Для БСП-системи ситуація ускладнюється тим, що, хоч зв'язок між T^{k0} і ε^{k0} такий самий, як і для твердих кульок, сама густина ε^{k0} вже не є *повільною змінною*. Тому вихідною є ф. (122) для повної внутрішньої енергії. Щоб знайти $d_t^0 T^{k0}$, використовуємо співвідношення:

$$d_t^0 \varepsilon = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T^{k0}} \right)_{\{n\}} d_t^0 T^{k0} + \sum_{k=1}^M \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_k} \right)_{T^{k0}, \{n\}'_k} d_t^0 n_k, \quad (339)$$

з якого одержуємо:

$$d_t^0 T^{k0} = \left[\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T^{k0}} \right)_{\{n\}} \right]^{-1} \left\{ -(\varepsilon + P) + \sum_{k=1}^M \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_k} \right)_{T^{k0}, \{n\}'_k} n_k \right\} \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (340)$$

де для похідних від n_k й ε було використано рівняння нульового порядку (121) і (122).

Ототожнивши термодинамічну T з T^{k0} , можемо підставити частинні похідні (336) та (337) у рівняння (340). При цьому внесок, що містить похідну по n_k у фігурних дужках ф. (340) сильно спрощується, оскільки

$$\sum_k m_k n_k \sum_l (\delta_{lk} - \rho_l / \rho) \left[\mu_l - T \left(\frac{\partial \mu_l}{\partial T} \right)_{v, \{n\}} \right] = 0, \quad (341)$$

так, що хімічні потенціали випадають з розгляду. Остаточна формула така ж, як і ф. (325) для односортої системи:

$$d_t^0 T^{k0} = -[\rho \tilde{c}_{v, \{n\}}]^{-1} T^{k0} \left(\frac{\partial P}{\partial T^{k0}} \right)_{v, \{n\}} \nabla \cdot \mathbf{V}, \quad (342)$$

де $\tilde{c}_{v, \{n\}}$ і P — питома теплоємність і тиск суміші. Вираз біля $\nabla \cdot \mathbf{V}$ і є коефіцієнтом ω_T , який введено у ф. (131). У випадку суміші твердих кульок знаходимо, що $\tilde{c}_{v, \{n\}}^{hs} = \frac{3}{2} k_B n / \rho$ і вираз (342) теж переходить у ф. (338).

В. Функціонал парної функції розподілу

В.1. Локально-рівноважна функція Майєра для БСП

Тут наведено деякі співвідношення, корисні для роботи з розкладами парної функції розподілу.

Багатосходниковий потенціал. На кожному проміжку між сусідніми точками розриву, значення БС потенціала можна задати аналітично за допомогою добутку θ -функцій

$$\theta_2(r_{12}; a, b) = \theta(r - a) \theta(b - r), \quad b > a.$$

Графіком цієї функції є прямокутний бар'єр одиничної висоти. Весь БС потенціал можна подати у вигляді суми таких бар'єрів:

$$\begin{aligned} \phi_{ij}^{MS}(r_{12}) = & \phi_{ij}^{c1} \theta(\sigma_{ij}^{c1} - r_{12}) + \sum_{l=1}^{K_{ij}^r} \phi_{ij}^{rl} \theta_2(r_{12}; \sigma_{ij}^{r,l-1}, \sigma_{ij}^{rl}) + \\ & + \sum_{l=1}^{K_{ij}^a} \phi_{ij}^{a,l-1} \theta_2(r_{12}; \sigma_{ij}^{a,l-1}, \sigma_{ij}^{al}), \end{aligned}$$

де $\phi_{ij}^{c1} = +\infty$, ϕ_{ij}^{rl} та ϕ_{ij}^{al} — висоти бар'єрів. Нумерацію стінок і плато вибрано так, що для відштовхувальної частини потенціала плато з номером l йде *після*, а для притягальної частини — *перед* стінкою з тим же номером l . Дно потенціальної ями віднесено до суми притягальних плато (з ототожненням $\sigma_{ij}^{a0} \equiv \sigma_{ij}^{r, K_{ij}^r}$), а останнє плато з номером K_{ij}^a не включено в суму, оскільки $\phi_{ij}^{a, K_{ij}^a} = 0$.

Значення потенціала на плато можна подати як ліві чи праві граничні значення функції $\phi_{ij}^{MS}(r_{12})$ в точках розриву:

$$\begin{aligned} \phi_{ij}^{rl} &= \phi_{ij}^{MS}(\sigma_{ij}^{rl})^-, & \phi_{ij}^{a,l-1} &= \phi_{ij}^{MS}(\sigma_{ij}^{al})^-; \\ \phi_{ij}^{r,l+1} &= \phi_{ij}^{MS}(\sigma_{ij}^{rl})^+, & \phi_{ij}^{al} &= \phi_{ij}^{MS}(\sigma_{ij}^{al})^+. \end{aligned} \quad (343)$$

Функція Майєра. На кожному проміжку $(\sigma_{ij}^{q,l-1}; \sigma_{ij}^{ql})$ потенціал ϕ_{ij}^{MS} задається незалежно, тому ми можемо змодельовувати локально-рівноважну функцію Майєра (358) окремо для кожного значення ϕ між стінками. Для $\bar{\phi} \equiv \beta^{p0}(\mathbf{r}) \phi$ має місце рівність

$$e^{-\bar{\phi}\theta_2(r;a,b)} = e^{-\bar{\phi}\theta_2(r;a,b)} + \theta(a-r) + \theta(r-b),$$

тому

$$e^{-\bar{\phi}\theta_2(r;a,b)} - 1 = [e^{-\bar{\phi}} - 1]\theta_2(r;a,b).$$

Функцію Майєра будемо як суму прямокутних бар'єрів з висотами, заданими правою частиною попереднього виразу:

$$\begin{aligned} f_{ij}^{\text{M}}(r_{12})_{\mathbf{r}} &= [e^{-\bar{\phi}_{ij}^{c1}} - 1]\theta(\sigma_{ij}^{c1} - r_{12}) + \\ &+ \sum_{l=1}^{K_{ij}^r} [e^{-\bar{\phi}_{ij}^{rl}} - 1]\theta_2(r_{12}; \sigma_{ij}^{r,l-1}, \sigma_{ij}^{rl}) + \\ &+ \sum_{l=1}^{K_{ij}^a} [e^{-\bar{\phi}_{ij}^{a,l-1}} - 1]\theta_2(r_{12}; \sigma_{ij}^{a,l-1}, \sigma_{ij}^{al}). \end{aligned}$$

Гرادієнт функції Майєра. Пошук градієнта

$$\frac{\partial f_{ij}^{\text{M}}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{21}} = \hat{r}_{21} \frac{\partial f_{ij}^{\text{M}}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial r_{12}}$$

зводиться до пошуку похідної по r_{12} . Залежність від відстані міститься лише в θ -функціях, для яких

$$\begin{aligned} \partial\theta_2(r;a,b)/\partial r &= \delta(r-a)\theta(b-r) + \theta(r-a)[- \delta(b-r)] = \\ &= \delta(r-a) - \delta(r-b). \end{aligned}$$

Тому, позначивши $f_{ij}^{\text{M};ql} \equiv e^{-\bar{\phi}_{ij}^{ql}} - 1$, маємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{ij}^{\text{M}}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial r_{12}} &= -f_{ij}^{\text{M};c1} \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{c1}) + \\ &+ \sum_{l=1}^{K_{ij}^r} f_{ij}^{\text{M};rl} [\delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{r,l-1}) - \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{rl})] + \\ &+ \sum_{l=1}^{K_{ij}^a} f_{ij}^{\text{M};a,l-1} [\delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{a,l-1}) - \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{al})]. \end{aligned}$$

Перейдімо від сумувань по номерах плато до сумувань по номерах стінок, змінивши індекс на $l' = l - 1$ у доданках з першими δ -функціями під обома сумами й об'єднавши внески з однаковими σ_{ij}^{ql} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{ij}^{\text{M}}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial r_{12}} &= [f_{ij}^{\text{M};r1} - f_{ij}^{\text{M};c1}] \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{c1}) + \\ &+ \sum_{l=1}^{K_{ij}^r} [f_{ij}^{\text{M};r,l+1} - f_{ij}^{\text{M};rl}] \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{rl}) + \\ &+ \sum_{l=1}^{K_{ij}^a} [f_{ij}^{\text{M};al} - f_{ij}^{\text{M};a,l-1}] \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{al}), \end{aligned}$$

де взято до уваги, що $f_{ij}^{\text{M};r,K_{ij}^r+1} = f_{ij}^{\text{M};a0}$ і $f_{ij}^{\text{M};a,K_{ij}^a} = 0$.

Зауваживши рівність $f_{ij}^{\text{M};ql} - f_{ij}^{\text{M};q,l-1} = e^{-\bar{\phi}_{ij}^{ql}} - e^{-\bar{\phi}_{ij}^{q,l-1}}$, можемо за допомогою співвідношень (343) виразити ці різниці так:

$$f_{ij}^{\text{M};al} - f_{ij}^{\text{M};a,l-1} = \sum_b^{\pm 1} b \exp\{-\bar{\phi}_{ij}^{\text{MS}}(\sigma_{ij}^{al})^b\} = \sum_b^{\pm 1} b W_{ij}^0(\sigma_{ij}^{al})^b_{\mathbf{r}},$$

де другу суму записано через локально-рівноважний больцманівський множник, Φ (356). Такий же вираз отримується і для r -стінок. Кінцева формула для градієнта набуває вигляду:

$$\frac{\partial f_{ij}^{\text{M}}(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \mathbf{r}_{21}} = \hat{r}_{21} \sum_q^{\text{c,r,a}} \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_b^{\pm 1} b W_{ij}^0(\sigma_{ij}^{ql})^b_{\mathbf{r}} \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{ql}). \quad (344)$$

Підсумний член ще можна записати як $bqW_{ij}^0(\sigma_{ij}^{ql})^b_{\mathbf{r}} \delta(r_{12} - \sigma_{ij}^{ql})$ на основі того, що при значенні $q = -1$ доданки із $b = +1$ й $b = -1$ просто міняються місцями.

В.2. Градієнтний розклад парної функції розподілу

При локалізації інтегралів зіткнень I_{ij}^{qlp} й джерела s_p , для g_2^{ij} , як функціонала $\{n\}$ і β^p , використовується розклад по градієнтах, взятих у точці \mathbf{r} . Нижче показано, як отримується такий розклад і наводяться у явному вигляді співвідношення для g_2^{ij} .

Функціональний і градієнтний розклади. Довільний “достатньо хороший” функціонал $\Phi[n]$, що залежить від функції $n(\mathbf{x})$, можна розкласти у *функціональний ряд* біля деякої фіксованої функції

$\nu(\mathbf{x})$:

$$\begin{aligned} \Phi[n] = & \Phi[\nu] + \int d\mathbf{x}_1 \frac{\delta\Phi}{\delta n(\mathbf{x}_1)} \Big|_{\nu} [n(\mathbf{x}_1) - \nu(\mathbf{x}_1)] + \\ & + \frac{1}{2!} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{\delta^2\Phi}{\delta n(\mathbf{x}_1)\delta n(\mathbf{x}_2)} \Big|_{\nu} [n(\mathbf{x}_1) - \nu(\mathbf{x}_1)][n(\mathbf{x}_2) - \nu(\mathbf{x}_2)] + \dots, \end{aligned} \quad (345)$$

де біля варіаційних похідних вказано, що вони обчислюються для деякого фіксованого аргумента $\nu(\mathbf{x})$. Якщо в ролі $\nu(\mathbf{x})$ взяти константу n_0 , що дорівнює значенню функції n у певній точці \mathbf{x}_0 ,

$$n_0 \equiv n(\mathbf{x}_0) = \text{const} \quad \longrightarrow \quad \nu(\mathbf{x})$$

то функціональний ряд набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \Phi[n] = & \Phi[n_0] + \int d\mathbf{x}_1 \frac{\delta\Phi}{\delta n(\mathbf{x}_1)} \Big|_{n_0} [n(\mathbf{x}_1) - n_0] + \\ & + \frac{1}{2!} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{\delta^2\Phi}{\delta n(\mathbf{x}_1)\delta n(\mathbf{x}_2)} \Big|_{n_0} [n(\mathbf{x}_1) - n_0][n(\mathbf{x}_2) - n_0] + \dots, \end{aligned} \quad (346)$$

де \mathbf{x}_0 називається *точкою локалізації* функціонала Φ .

Розклавши різниці в прямокутних дужках у ряди біля \mathbf{x}_0 ,

$$n(\mathbf{x}_i) = n(\mathbf{x}_0) + \mathbf{x}_{i0} \cdot \nabla n(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x}_0} + \frac{1}{2!} \mathbf{x}_{i0} \mathbf{x}_{i0} : \nabla \nabla n(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x}_0} + \dots,$$

тут $\mathbf{x}_{i0} \equiv \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_0$, $\nabla \equiv \partial/\partial\mathbf{x}$, і підставивши їх у ф. (346), одержуємо *градієнтний розклад* функціонала Φ :

$$\begin{aligned} \Phi[n] = & \Phi[n_0] + \nabla_0 n(\mathbf{x}_0) \cdot \int d\mathbf{x}_1 \frac{\delta\Phi}{\delta n(\mathbf{x}_1)} \Big|_{n_0} \mathbf{x}_{10} + \\ & + \frac{1}{2!} \nabla_0 \nabla_0 n(\mathbf{x}_0) : \int d\mathbf{x}_1 \frac{\delta\Phi}{\delta n(\mathbf{x}_1)} \Big|_{n_0} \mathbf{x}_{10} \mathbf{x}_{10} + \\ & + \frac{1}{2!} [\nabla_0 n(\mathbf{x}_0)] \nabla_0 n(\mathbf{x}_0) : \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{\delta^2\Phi}{\delta n(\mathbf{x}_1)\delta n(\mathbf{x}_2)} \Big|_{n_0} \mathbf{x}_{10} \mathbf{x}_{20} + \dots, \end{aligned} \quad (347)$$

де $\nabla_0 \equiv \partial/\partial\mathbf{x}_0$. У другому і третьому рядках ф. (347) наведено члени другого порядку по градієнтах.

Градієнтний розклад для g_2^{ij} . Взявши точку \mathbf{r} , для якої записано рівняння балансу, в ролі точки локалізації функціонала $g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \{n\}, \beta^P)$, можемо записати:

$$g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \cdot) = g_2^{ij,0}(\mathbf{r}_{12})_{\mathbf{r}} + g_2^{ij,1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} + \dots \quad (348)$$

Внесок першого порядку $g_2^{ij,1}$ містить M градієнтів від густин $\{n\}$ і один від оберненої потенціальної квазітемператури β^P :

$$\begin{aligned} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} = & g_2^{ij,1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} + g_2^{ij,1\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}}, \\ g_2^{ij,1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} = & \sum_{k=1}^M \nabla n_k(\mathbf{r}) \cdot \int d\mathbf{r}_3 \bar{H}_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}), \\ g_2^{ij,1\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} = & \nabla \beta^P(\mathbf{r}) \cdot \int d\mathbf{r}_3 \bar{H}_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (349)$$

де введено позначення для варіаційних похідних

$$\bar{H}_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \equiv \frac{\delta g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \cdot)}{\delta n_k(\mathbf{r}_3)} \Big|_{\mathbf{r}}, \quad \bar{H}_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} \equiv \frac{\delta g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \cdot)}{\delta \beta^P(\mathbf{r}_3)} \Big|_{\mathbf{r}}.$$

Нижній індекс \mathbf{r} після аргументів позначає точку локалізації, а символ $\Big|_{\mathbf{r}}$ біля будь-якого функціонала означає, що всі його функцій-аргументи покладаються рівними своїм значенням у точці \mathbf{r} . У внеску нульового порядку $g_2^{ij,0}$ відображено, що він залежить від міжчастинкової відстані та від \mathbf{r} . Явні вирази для наведених внесків подано у §В.3.

Граничні значення $g_2^{ij,0}$ та $g_2^{ij,1}$. З формули зв'язку (22) між граничними значеннями функціонала g_2^{ij} слідує співвідношення для членів розкладу (348): $g_2^{ij,0}$, $g_2^{ij,1}$ і вищих. У ф. (22) фігурує півсума

$$\beta_{ij}^P(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}) = \frac{1}{2} [\beta^P(\mathbf{r}) + \beta^P(\mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql})].$$

Розкладаючи в ряд значення β^P у зміщеній точці

$$\beta^P(\mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql}) = \beta^P(\mathbf{r}) \pm \delta \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^P(\mathbf{r}) + \dots,$$

де δ — формальний параметр, подаємо ф. (22) так:

$$\begin{aligned} g_2^{ij,0}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{-q} + \delta g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{-q} + \dots = \\ = \exp \left\{ [\beta^P(\mathbf{r}) \pm \delta \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^P(\mathbf{r}) + \dots] \epsilon_{ij}^{ql} \right\} \times \\ \times \left[g_2^{ij,0}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q + \delta g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q + \dots \right]. \end{aligned} \quad (350)$$

Використавши розклад (42) в експоненті ф. (350), розкладімо її у ряд, вважаючи β^{P1} і $\nabla \beta^{P0}$ малими величинами:

$$e^{\beta^{P0}(\mathbf{r}) \epsilon_{ij}^{ql}} \epsilon_{ij}^{ql} \left[1 + \bar{\epsilon} \beta^{P1}(\mathbf{r}) \pm \delta \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^{P0}(\mathbf{r}) + \dots \right].$$

Прирівнюючи внески однакових порядків, отримуємо зв'язок між граничними значеннями поправок до g_2^{ij} :

$$g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{-q} = e^{\beta^{p0}(\mathbf{r})} \epsilon_{ij}^{ql} g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q, \quad (351)$$

$$g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{-q} = e^{\beta^{p0}(\mathbf{r})} \epsilon_{ij}^{ql} \times \quad (352)$$

$$\times \left[g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \epsilon_{ij}^{ql} \{ \beta^{p1}(\mathbf{r}) \pm \frac{1}{2} \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^{p0}(\mathbf{r}) \} + \right.$$

$$\left. + g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \right].$$

Перша рівність — узагальнення рівноважного співвідношення на локально-рівноважний стан. Друга — нерівноважна поправка першого порядку до цього узагальнення, справедлива при умові малого відхилення від локальної рівноваги.

Цікаво, що коли у ф. (352) виділити окремо β^{p1} ,

$$\beta^{p1}(\mathbf{r}) = \mp \frac{1}{2} \sigma_{ij}^{ql} \cdot \nabla \beta^{p0}(\mathbf{r}) + \left(e^{-\beta^{p0}(\mathbf{r})} \epsilon_{ij}^{ql} g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{-q} - \quad (353)$$

$$- g_2^{ij,1}(\mathbf{r}, \mathbf{r} \pm \sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \right) \left[g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \epsilon_{ij}^{ql} \right]^{-1},$$

то виникає певний парадокс: справа стоять внески з градієнтами $\{n\}$ і β^{p0} , ф. (349), а зліва — доданок із $\nabla \cdot \mathbf{V}$, ф. (221).

В.3. Груповий розклад функціонала g_2^{ij} по густині

Згідно способу замикання [21] рівнянь кінетичного рівня опису (див. §2.3) функціонал парної функції розподілу має вигляд:

$$g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \{n\}, \beta^p) = W_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \chi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \{n\}, \beta^p), \quad (354)$$

де функції справа

$$W_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \equiv \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\beta^p(\mathbf{r}_1, t) + \beta^p(\mathbf{r}_2, t)] \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) \right\},$$

$$\chi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \cdot) \equiv 1 + \sum_k \int d\mathbf{r}_3 n_k(\mathbf{r}_3, t) V_{ijk}^{(3)}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3, t) +$$

$$+ \frac{1}{2!} \sum_{kl} \int d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 n_k(\mathbf{r}_3, t) n_l(\mathbf{r}_4, t) V_{ijkl}^{(4)}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_4, t) + \dots$$

— це нерівноважний больцманівський множник, залежний лише від β^p , і нерівноважний груповий розклад по густині. $V_{ij\dots}^{(s)}$ — це суми всіх майєрівських діаграм з s пронумерованими вершинами, які стають

двоzv'язними після додавання зв'язка (12). Топологічна структура діаграм у $V_{ij\dots}^{(s)}$ подібна до рівноважної (див. напр. [38]), однак кожен зв'язок у діаграмах представляє нерівноважну функцію Майєра

$$f_{ij}^{\text{M}}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t) \equiv \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\beta^p(\mathbf{r}', t) + \beta^p(\mathbf{r}'', t)] \phi_{ij}^{\text{MS}}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) \right\} - 1. \quad (355)$$

Таким чином, $W_{ij}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t) = f_{ij}^{\text{M}}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t) + 1$. Функціонал g_2^{ij} розривний у конфігураціях розривності потенціала ϕ_{ij}^{MS} , а функціонал χ_{ij} — неперервний.

Розгляньмо явний вигляд $g_2^{ij,0}$ та $g_2^{ij,1}$ з градієнтного розкладу (348). Для них введені нерівноважні функції W_{ij} , f_{ij}^{M} та ін. переходять у локально-рівноважні, залежні через локальні $\{n\}$ і β^{p0} від точки локалізації \mathbf{r} і часу t (що ми, як і раніше, відзначатимемо нижнім індексом \mathbf{r}). Для внеску нульового порядку маємо:

$$g_2^{ij,0}(r_{12})_{\mathbf{r}} = g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \cdot)_{\mathbf{r}} = W_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}} \chi_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}},$$

$$W_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}} \equiv e^{-\beta^{p0}(\mathbf{r})} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}), \quad (356)$$

$$\chi_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}} \equiv 1 + \sum_k n_k(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_3 V_{ijk}^{(3)}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} + \quad (357)$$

$$+ \frac{1}{2!} \sum_{kl} n_k(\mathbf{r}) n_l(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 V_{ijkl}^{(4)}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_4)_{\mathbf{r}} + \dots$$

У функціях $V_{ij\dots}^{(s)}(\cdot)_{\mathbf{r}}$ фігурують локально-рівноважні функції Майєра

$$f_{ij}^{\text{M}}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|)_{\mathbf{r}} = e^{-\beta^{p0}(\mathbf{r})} \phi_{ij}^{\text{MS}}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) - 1. \quad (358)$$

Запишімо, подібно до g_2^{ij} , градієнтний розклад для χ_{ij} :

$$\chi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \cdot) = \chi_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}} + \chi_{ij}^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} + \dots; \quad (359)$$

внесок першого порядку теж розпадається на дві частини

$$\chi_{ij}^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} = \chi_{ij}^{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} + \chi_{ij}^{1\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}}, \quad (360)$$

$$\chi_{ij}^{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} = \sum_{k=1}^M \nabla n_k(\mathbf{r}) \cdot \int d\mathbf{r}_3 H_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}),$$

$$\chi_{ij}^{1\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_{\mathbf{r}} = \nabla \beta^p(\mathbf{r}) \cdot \int d\mathbf{r}_3 H_{ij}^{\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_{\mathbf{r}} (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}),$$

де використано позначення для варіаційних похідних:

$$H_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} \equiv \left. \frac{\delta \chi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\delta n_k(\mathbf{r}_3)} \right|_\mathbf{r}, \quad H_{ij}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} \equiv \left. \frac{\delta \chi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\delta \beta^P(\mathbf{r}_3)} \right|_\mathbf{r}.$$

Діаграмні суми $V_{ij\dots}^{(s)}$ симетричні по змінних після крапки з комою, тому знаходимо в явному вигляді:

$$H_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} = V_{ijk}^{(3)}(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} + \sum_l n_l(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_4 V_{ijkl}^{(4)}(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3\mathbf{r}_4)_\mathbf{r} + \\ + \frac{1}{2!} \sum_{lm} n_l(\mathbf{r}) n_m(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_4 d\mathbf{r}_5 V_{ijklm}^{(5)}(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3\mathbf{r}_4\mathbf{r}_5)_\mathbf{r} + \dots$$

Пошук явного вигляду для $H_{ij}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r}$ значно громіздкіший.

Відшукаймо внески до $g_2^{ij,1}$, ф. (349). Лише функціонал χ_{ij} залежить від густин, ф. (354), тому

$$\bar{H}_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} = W_{ij}^0(r_{12})_\mathbf{r} H_{ijk}^n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r}, \\ \bar{H}_{ij}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} = -\frac{1}{2} \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) g_2^{ij,0}(r_{12})_\mathbf{r} [\delta(\mathbf{r}_{31}) + \delta(\mathbf{r}_{32})] + \\ + W_{ij}^0(r_{12})_\mathbf{r} H_{ij}^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r},$$

де у варіаційної похідної по β^P з'являється завдяки W_{ij} ще один доданок. У результаті одержуємо:

$$g_2^{ij,1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_\mathbf{r} = W_{ij}^0(r_{12})_\mathbf{r} \chi_{ij}^{1n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_\mathbf{r}, \quad (361)$$

$$g_2^{ij,1\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_\mathbf{r} = \nabla \beta^0 \cdot \left[\mathbf{r} - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right] \phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12}) g_2^{ij,0}(r_{12})_\mathbf{r} + \\ + W_{ij}^0(r_{12})_\mathbf{r} \chi_{ij}^{1\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)_\mathbf{r}. \quad (362)$$

В.4. Зауваження про симетризацію

Перетворення інтегралів з варіаційними похідними від парної функції розподілу, наведене у роботі [4], використовує лише симетрійні властивості, тому тут його виокремлено у вигляді твердження.

Твердження. Якщо функція $H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)$ є симетрична відносно двох перших аргументів, $H(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3) = H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)$ і залежить лише від відносних відстаней r_{12} , r_{23} та r_{31} , то має місце рівність:

$$\int d\mathbf{r}_3 H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3) \mathbf{r}_{31} = \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} \int d\mathbf{r}_3 H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3). \quad (363)$$

Доведення. Розбиймо \mathbf{r}_{31} на складову $\mathbf{r}_{31}^\parallel$ вздовж вектора \hat{r}_{21} і перпендикулярну до \hat{r}_{21} , позначену через \mathbf{r}_{31}^\perp :

$$\mathbf{r}_{31}^\parallel \equiv \mathbf{r}_{31} \cdot \hat{r}_{21} \hat{r}_{21}, \quad \mathbf{r}_{31}^\perp \equiv \mathbf{r}_{31} \cdot (\mathbf{I} - \hat{r}_{21} \hat{r}_{21}).$$

Можна переконатися, що внесок від \mathbf{r}_{31}^\perp пропадає при інтегруванні по азимутальному куту вектора \mathbf{r}_{31} у біполярній системі координат, пов'язаній з частинками 1 і 2 внаслідок залежності H лише від відносних відстаней.

У внеску від $\mathbf{r}_{31}^\parallel$

$$\hat{r}_{21} \int d\mathbf{r}_3 H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3) \mathbf{r}_{31} \cdot \hat{r}_{21} \quad (364)$$

підінтегральний вираз не змінюється при перестановці $\mathbf{r}_1 \rightleftharpoons \mathbf{r}_2$. Це тому, що кожній конфігурації (1;2;3) з проекцією $\mathbf{r}_{31} \cdot \hat{r}_{21}$ відповідає дзеркально симетрична (відносно середньої лінії відрізка [1;2]) конфігурація (2;1;3') з такою ж самою проекцією за величиною. Тому цей інтеграл дорівнює $\int d\mathbf{r}_3 H(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3) \mathbf{r}_{32} \cdot \hat{r}_{12}$. Взнявши півсуму останнього й інтеграла у ф. (364), і врахувавши ще раз симетрійну властивість H , отримуємо ф. (363). Її також можна довести [43], розглянувши все у біполярній системі координат.

В.5. Перетворення $\Gamma_{(1)}^{g,\beta 1}$ в односортному випадку

Функція H^β у внутрішньому інтегралі ф. (175) з виглядом

$$\int d\mathbf{r}_3 H^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} \mathbf{r}_{31} \quad (365)$$

є симетрична: $H^\beta(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} = H^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r}$. Тоді його можна перетворити подібно до того, як це зроблено в праці [4] з односортним відповідником, що містить H^n (див. додаток В.4). В результаті таких перетворень інтеграл (365) дорівнює

$$\frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} \int d\mathbf{r}_3 H^\beta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3)_\mathbf{r} = \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} \frac{\partial \chi^0(r_{12})_\mathbf{r}}{\partial \beta^0},$$

а тензор $\Upsilon^{\beta 1}$ з ф. (175) зводиться до діагонального:

$$\int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f^M(r_{12})_\mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_{21}} \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} \frac{\partial \chi^0(r_{12})_\mathbf{r}}{\partial \beta^0} = \frac{2}{3} \pi l \int dr_{12} r_{12}^3 \frac{\partial f^M(r_{12})_\mathbf{r}}{\partial r_{12}} \frac{\partial \chi^0(r_{12})_\mathbf{r}}{\partial \beta^0}.$$

Якщо похідну від функції Майєра у правій частині розписати через δ -функції, ф. (344), то результат стає подібний на внесок від ϕ_{ij}^{MS} у локально-рівноважний тиск:

$$Y^{\beta 1} = \frac{2}{3}\pi l \sum_q \sum_l \sum_b^{K_{ij}^q \pm 1} b q W^0 (\sigma^{ql})^{bq} \int dr_{12} r_{12}^3 \delta(r_{12} - \sigma^{ql}) \frac{\partial \chi^0(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \beta p^0}.$$

Після інтегрування, вводячи g_2^0 замість χ^0 за допомогою

$$\frac{\partial g_2^{ij,0}(r_{12})_{\mathbf{r}}^{bq}}{\partial \beta p^0} = -\phi_{ij}^{\text{MS}}(r_{12})^{bq} g_2^{ij,0}(r_{12})_{\mathbf{r}}^{bq} + W_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}}^{bq} \frac{\partial \chi_{ij}^0(r_{12})_{\mathbf{r}}}{\partial \beta p^0}, \quad (366)$$

приходимо до такого результату:

$$I_{(1)}^{g,\beta 1} = -f^0 \mathbf{c}_1 \cdot \nabla \beta p^0 n \left\{ \frac{\partial}{\partial \beta p^0} \left[\frac{P^\phi}{n^2 \theta^{k0}} \right] + Y^{\beta 0} \right\}, \quad (367)$$

де $Y^{\beta 0}$ — односортний аналог величини $Y_{ij}^{\beta 0}$, ф. (173). Вочевидь, цей результат отримано на основі симетрійних міркувань.

Врешті, врахувавши фф. (172) і (367), одержуємо для односортно-го варіанта ф. (171) такий кінцевий вираз:

$$I_{(1)}^{g,\beta} = -f^0 \theta^{k0} \frac{\partial}{\partial \theta^{k0}} \left[\frac{P^\phi}{n \theta^{k0}} \right] \mathbf{c}_1 \cdot \nabla \ln T^{k0}, \quad (368)$$

де було перейдено до $\nabla \ln T^{k0}$ і $\partial/\partial \theta^{k0}$. Цей же результат можна було б вивести з односортного варіанту ф. (169), скориставшись симетрією варіаційної похідної \bar{H}^β , через яку виражається $g_2^{1\beta}$.

С. Функції швидкостей

Крім мас m_i та m_j , у формулах природнім чином виникають їх комбінації, для яких ми наводимо означення: $\mu_{ij} \equiv m_i m_j / (m_i + m_j)$ — приведена маса, $M_i \equiv m_i / (m_i + m_j)$ та $M_j \equiv m_j / (m_i + m_j)$ — відносні маси. Очевидно, що $M_i + M_j = 1$, $m_i M_j = m_j M_i = \mu_{ij}$. Поруч з приведеною, часто використовується сумарна маса $m_{i+j} \equiv m_i + m_j$ і дещо рідше — інші комбінації мас: $m_{i-j} \equiv m_i - m_j$ та $m_{i/j} \equiv m_i / m_j$. Легко бачити, що $m_{i+j} \mu_{ij} = m_i m_j$.

Для експоненти локально-рівноважного розподілу Максвела зручно ввести $\tilde{m}_i \equiv m_i / (2\theta^{k0})$ і $\tilde{m}_j \equiv m_j / (2\theta^{k0})$, а також $\tilde{\mu}_{ij} \equiv \mu_{ij} / (2\theta^{k0})$, $\tilde{m}_{i+j} \equiv m_{i+j} / (2\theta^{k0})$ і подібні, де $\theta^{k0} \equiv k_B T^{k0}$ — кінетична температура в нульовому порядку.

С.1. Змінні центра мас

У більшості випадків в інтегралах по двох швидкостях \mathbf{c}_i й \mathbf{c}_j ($\mathbf{c}_j \equiv \mathbf{v}_j - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$) зручніше перейти до змінних центра мас — швидкості центра мас \mathbf{G} у локальній рухомій системі координат і відносної швидкості $\mathbf{c} \equiv \mathbf{c}_j$:

$$\mathbf{G} \equiv M_i \mathbf{c}_i + M_j \mathbf{c}_j, \quad \mathbf{c} \equiv \mathbf{c}_j - \mathbf{c}_i. \quad (369)$$

Означмо безрозмірні швидкості $\mathbf{C}_i \equiv \sqrt{\tilde{m}_i} \mathbf{c}_i$ та $\mathbf{C}_j \equiv \sqrt{\tilde{m}_j} \mathbf{c}_j$ і безрозмірні змінні центра мас $\mathbf{G} \equiv \sqrt{\tilde{m}_{i+j}} \mathbf{G}$ та $\mathbf{g} \equiv \sqrt{\tilde{\mu}_{ij}} \mathbf{c}$ із модулями $\mathcal{G} \equiv |\mathbf{G}|$ та $g \equiv |\mathbf{g}|$.

Із введених означень і маємо, що

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= (\tilde{m}_i M_i)^{1/2} \mathbf{C}_i + (\tilde{m}_j M_j)^{1/2} \mathbf{C}_j = M_i^{1/2} \mathbf{C}_i + M_j^{1/2} \mathbf{C}_j, \\ \mathbf{g} &= \tilde{\mu}_{ij}^{1/2} \mathbf{c}_j - \tilde{\mu}_{ij}^{1/2} \mathbf{c}_i = M_i^{1/2} \mathbf{C}_j - M_j^{1/2} \mathbf{C}_i. \end{aligned}$$

Легко знайти зворотні співвідношення:

$$\mathbf{c}_i = \mathbf{G} - M_j \mathbf{c}, \quad \mathbf{c}_j = \mathbf{G} + M_i \mathbf{c}; \quad (370)$$

$$\mathbf{c}_i = \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} - M_j \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \mathbf{g}, \quad \mathbf{c}_j = \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} + M_i \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \mathbf{g}; \quad (371)$$

$$\mathbf{C}_i = M_i^{1/2} \mathcal{G} - M_j^{1/2} \mathbf{g}, \quad \mathbf{C}_j = M_j^{1/2} \mathcal{G} + M_i^{1/2} \mathbf{g}. \quad (372)$$

Якобіани переходу до нових змінних при інтегруванні, напр.,

$$\int d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j [\dots] = \int d\mathcal{G} d\mathbf{g} J_{\{\mathbf{c}_i \mathbf{c}_j\} \rightarrow \{\mathcal{G} \mathbf{g}\}} [\dots]$$

дорівнюють:

$$\begin{aligned} J_{\{\mathbf{c}_i \mathbf{c}_j\} \rightarrow \{\mathbf{G} \mathbf{c}\}} &= J_{\{\mathbf{C}_i \mathbf{C}_j\} \rightarrow \{\mathcal{G} \mathbf{g}\}} = 1, \\ J_{\{\mathbf{c}_i \mathbf{c}_j\} \rightarrow \{\mathbf{C}_i \mathbf{C}_j\}} &= J_{\{\mathbf{c}_i \mathbf{c}_j\} \rightarrow \{\mathcal{G} \mathbf{g}\}} = \tilde{m}_i^{-3/2} \tilde{m}_j^{-3/2}. \end{aligned}$$

Для квадратів швидкостей знаходимо, що

$$c_i^2 = G^2 + M_j^2 c^2 - 2M_j \mathbf{G} \cdot \mathbf{c}, \quad c_j^2 = G^2 + M_i^2 c^2 + 2M_i \mathbf{G} \cdot \mathbf{c}. \quad (373)$$

Використавши рівність $\tilde{m}_i c_i^2 + \tilde{m}_j c_j^2 = \mathcal{G}^2 + g^2$ у добутку $f_i^0 f_j^0$, отримуємо формулу переходу:

$$\int d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j f_i^0 f_j^0 [\dots] = n_i n_j \pi^{-3} \int d\mathcal{G} d\mathbf{g} e^{-\mathcal{G}^2 - g^2} [\dots], \quad (374)$$

де коефіцієнт перед інтегралом походить від характерного добутку $A_i^0 A_j^0 \tilde{m}_i^{-3/2} \tilde{m}_j^{-3/2}$ при переході до безрозмірних швидкостей.

С.2. Швидкості після зіткнень

У супровідній системі відліку, що рухається зі швидкістю $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, закони парних зіткнень подібні до фф. (7) та (8):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}'_i \\ \mathbf{c}'_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_i \\ \mathbf{c}_j \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} M_j \\ -M_i \end{bmatrix} c_\sigma \hat{\sigma}, \quad (375)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}^{qlp}_i \\ \mathbf{c}^{qlp}_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_i \\ \mathbf{c}_j \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} M_j \\ -M_i \end{bmatrix} [c_\sigma - Q^p] \hat{\sigma}, \quad (376)$$

де $Q^p \equiv \sqrt{c_\sigma^2 + p(v_{ij}^{ql})^2}$ — величина, що залежить від проекції \mathbf{c} на напрямок $\hat{\sigma}$. Легко бачити, що \mathbf{c}'_i та \mathbf{c}^{qlp}_i у фф. (375) і (376) переходять у \mathbf{c}'_j та \mathbf{c}^{qlp}_j й навпаки при взаємній заміні індексів $i \rightleftharpoons j$ (при цьому $\mathbf{c} \equiv \mathbf{c}_{ji}$ переходить у $-\mathbf{c}$). Тому надалі результати для \mathbf{c}_j можна отримати з таких же результатів для \mathbf{c}_i .

Вирази для квадратів швидкостей мають вигляд:

$$c_i'^2 = c_i^2 + 4M_j \mathbf{c}_i \cdot \hat{\sigma} c_\sigma + 4M_j^2 c_\sigma^2, \quad (377)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{c}_i^{qlp})^2 &= c_i^2 + 2M_j \mathbf{c}_i \cdot \hat{\sigma} c_\sigma + 2M_j^2 c_\sigma^2 + \\ &+ pM_j^2 (v_{ij}^{ql})^2 - 2M_j \mathbf{c}_i \cdot \hat{\sigma} Q^p - 2M_j^2 c_\sigma Q^p. \end{aligned} \quad (378)$$

Передачі імпульсу й кінетичної енергії у парному процесі p , виражені через змінні центра мас, дорівнюють:

$$m_i [\mathbf{c}_i^p - \mathbf{c}_i] = \begin{cases} 2\mu_{ij} c_\sigma \hat{\sigma}, \\ \mu_{ij} [c_\sigma - Q^{qlp}] \hat{\sigma}; \end{cases} \quad (379)$$

$$\frac{1}{2} m_i [(c_i^p)^2 - c_i^2] = \begin{cases} 2\mu_{ij} \mathbf{G} \cdot \hat{\sigma} c_\sigma, \\ \frac{1}{2} p M_j \mu_{ij} (v_{ij}^{ql})^2 + \mu_{ij} \mathbf{G} \cdot \hat{\sigma} [c_\sigma - Q^{qlp}]. \end{cases} \quad (380)$$

Верхні позиції стосуються необмінних $\{\odot, \otimes\}$, а нижні — обмінних $\{\oplus, \ominus\}$ процесів.

Суми $\mathbf{c}_j^p + \mathbf{c}_j$ та $(c_j^p)^2 + c_j^2$ зустрічаються при розрахунку I_i^∇ . На основі зазначеної вище властивості симетрії знаходимо:

$$\mathbf{c}_j^p + \mathbf{c}_j = \begin{cases} 2\mathbf{c}_j - 2M_i c_\sigma \hat{\sigma}, \\ 2\mathbf{c}_j - M_i [c_\sigma - Q^p] \hat{\sigma}; \end{cases} \quad (381)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{c}_j^p)^2 + c_j^2 &= \begin{cases} 2c_j^2 - 4M_i \mathbf{c}_j \cdot \hat{\sigma} c_\sigma + 4M_i^2 c_\sigma^2, \\ 2c_j^2 - 2M_i \mathbf{c}_j \cdot \hat{\sigma} c_\sigma + 2M_i^2 c_\sigma^2 + \\ + pM_i^2 (v_{ij}^{ql})^2 + 2M_i \mathbf{c}_j \cdot \hat{\sigma} Q^p - 2M_i^2 c_\sigma Q^p. \end{cases} \end{aligned} \quad (382)$$

Суму квадратів можна записати компактніше через \mathbf{G} :

$$(\mathbf{c}_j^p)^2 + c_j^2 = \begin{cases} 2c_j^2 - 4M_i \mathbf{G} \cdot \hat{\sigma} c_\sigma, \\ 2c_j^2 + pM_i^2 (v_{ij}^{ql})^2 - 2M_i \mathbf{G} \cdot [c_\sigma - Q^p] \hat{\sigma}. \end{cases} \quad (383)$$

С.3. Локально-рівноважний розподіл Максвела

Локальна функція розподілу Максвела

$$f_i^0(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi\theta^{k0}} \right)^{3/2} e^{-m_i c_i^2 / (2\theta^{k0})}, \quad (384)$$

де f_i^0 залежить від \mathbf{r} і t через n_i , \mathbf{V} і θ^{k0} . Тому для всякого диференціального оператора $\hat{D}_{\mathbf{r}t}$, що діє на функції \mathbf{r} і t , має місце співвідношення:

$$\hat{D}_{\mathbf{r}t} \ln f_i^0 = \left[\hat{D}_{\mathbf{r}t} n_i \partial_{n_i} + \hat{D}_{\mathbf{r}t} \mathbf{V} \cdot \partial_{\mathbf{V}} + \hat{D}_{\mathbf{r}t} T^{k0} \partial_{T^{k0}} \right] \ln f_i^0. \quad (385)$$

Розписавши логарифм у вигляді

$$\ln f_i^0 = \ln n_i + \frac{3}{2} \ln \frac{m_i}{2\pi k_B} - \frac{3}{2} \ln T^{k0} - \tilde{m}_i c_i^2,$$

легко знаходимо частинні похідні

$$\begin{bmatrix} \partial_{n_i} \\ \partial_{\mathbf{V}} \\ \partial_{T^{k0}} \end{bmatrix} \ln f_i^0 = \begin{bmatrix} n_i^{-1} \\ 2\tilde{m}_i \mathbf{c}_i \\ (T^{k0})^{-1} [\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2}] \end{bmatrix}.$$

Підставивши їх у ф. (385), одержуємо результат:

$$\hat{D}_{\mathbf{r}t} \ln f_i^0 = n_i^{-1} \hat{D}_{\mathbf{r}t} n_i + 2\tilde{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \hat{D}_{\mathbf{r}t} \mathbf{V} + (T^{k0})^{-1} [\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2}] \hat{D}_{\mathbf{r}t} T^{k0}. \quad (386)$$

За його допомогою отримуємо необхідні нам формули, виражені, де треба, через безрозмірні швидкості:

$$\nabla \ln f_i^0 = \nabla \ln n_i + 2\tilde{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger + [\tilde{m}_i c_i^2 - \frac{3}{2}] \nabla \ln T^{k0}, \quad (387)$$

$$\begin{aligned} \nabla \ln f_j^0 &= \nabla \ln n_j + 2\tilde{m}_j^{1/2} \left(M_j^{1/2} \mathbf{g} + M_i^{1/2} \mathbf{g} \right) \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger + \\ &+ \left[M_j \mathcal{G}^2 + M_i g^2 + 2M_i^{1/2} M_j^{1/2} \mathbf{g} \cdot \mathbf{g} - \frac{3}{2} \right] \mathbf{X}_T, \end{aligned} \quad (388)$$

$$\begin{aligned} \nabla \ln \frac{f_i^0}{f_j^0} &= \nabla \ln \frac{n_i}{n_j} + 2(\tilde{m}_i^{1/2} \mathbf{C}_i - \tilde{m}_j^{1/2} \mathbf{C}_j) \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger + [C_i^2 - C_j^2] \mathbf{X}_T \\ &= \nabla \ln \frac{n_i}{n_j} + \left(2\tilde{m}_{i-j}^{1/2} M_{i-j}^{1/2} \mathbf{g} - 4\tilde{\mu}_{ij}^{1/2} \mathbf{g} \right) \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger + \\ &+ \left[M_{i-j} (\mathcal{G}^2 - g^2) - 4M_i^{1/2} M_j^{1/2} \mathbf{g} \cdot \mathbf{g} \right] \mathbf{X}_T, \end{aligned} \quad (389)$$

де $\mathbf{X}_T \equiv \nabla \ln T^{k0}$. Цілком подібно, для градієнта в $I_{ij}^{qlp,\nabla}$, ф. (141), можемо записати:

$$\nabla \ln \left\{ f_j^0(\mathbf{c}_j^{qlp}) f_j^0(\mathbf{c}_j) \right\} = 2\nabla \ln n_j + 2\tilde{m}_j(\mathbf{c}_j^{qlp} + \mathbf{c}_j) \cdot \nabla \mathbf{V}^\dagger + \quad (390)$$

$$+ [\tilde{m}_j \{ (\mathbf{c}_j^{qlp})^2 + \mathbf{c}_j^2 \} - 3] \nabla \ln T^{k0}.$$

Подальший вигляд цього виразу залежить від типу процесу p і одержується за допомогою фф. (381) та (382).

С.4. Многочлени Соніна-Лягера

Многочлени індекса ν задаються формулою [45]

$$S_\nu^m(x) \equiv \sum_{s=0}^m (-x)^s \frac{m!}{s!(m-s)!} \frac{\Gamma(\nu+1+m)}{\Gamma(\nu+1+s)}$$

і задовольняють умову нормування:

$$(S_\nu^m, S_\nu^n)_\nu \equiv \int_0^\infty dx x^\nu e^{-x} S_\nu^m(x) S_\nu^n(x) = \delta_{mn} m! \Gamma(\nu+1+m).$$

Наведемо явно перші три многочлени кожного індекса:

$$\begin{aligned} S_{1/2}^0(x) &= 1, & S_{1/2}^1(x) &= \frac{3}{2} - x, & S_{1/2}^2(x) &= \frac{15}{4} - 5x + x^2; \\ S_{3/2}^0(x) &= 1, & S_{3/2}^1(x) &= \frac{5}{2} - x, & S_{3/2}^2(x) &= \frac{35}{4} - 7x + x^2; \\ S_{5/2}^0(x) &= 1, & S_{5/2}^1(x) &= \frac{7}{2} - x, & S_{5/2}^2(x) &= \frac{63}{4} - 9x + x^2. \end{aligned}$$

С.5. Вираження ϕ_i та ϕ_j через \mathcal{G} та \mathbf{g}

Щоб не писати окремо вирази для ϕ_i та ϕ_j , ми скористаємося подібністю виразів для \mathbf{C}_i та \mathbf{C}_j , ф. (372). Введемо формальні змінні M та m такі, що пара (M, m) для випадків i та j , дорівнює $(M, m)_i = (M_i^{1/2}, -M_j^{1/2})$ та $(M, m)_j = (M_j^{1/2}, M_i^{1/2})$ з властивістю $M^2 + m^2 = 1$, відтворює ф. (372). Тоді вираз

$$\phi_k(\mathbf{C}_k) = -A_k \mathbf{C}_k \cdot \mathbf{X}_T - B_k \mathbf{C}_k^\circ \mathbf{C}_k : \mathbf{X}_V - H_k X_I - \sum_n E_{kn} \mathbf{C}_k \cdot \mathbf{X}_n,$$

де $\mathbf{X}_V \equiv \nabla \mathbf{V}$ й $X_I \equiv \nabla \cdot \mathbf{V}$, охоплює випадки i та j , якщо прийняти $\mathbf{C}_k \equiv M\mathcal{G} + m\mathbf{g}$. В прийнятому наближенні поправка дорівнює:

$$\begin{aligned} \phi_k(\mathbf{C}_k) \approx & - \left\{ [a_k^0 + a_k^1 S_{3/2}^1(C_k^2)] \mathbf{C}_k \cdot \mathbf{X}_T + [\text{d.p.}] + \right. \quad (391) \\ & \left. + b_k^0 \mathbf{C}_k^\circ \mathbf{C}_k : \mathbf{X}_V + [h_k^1 S_{1/2}^1(C_k^2) + h_k^2 S_{1/2}^2(C_k^2)] X_I \right\}, \end{aligned}$$

де [d.p.] відзначає дифузійну частину; результат для неї отримується формально з результату для температурної частини.

Запишімо алгебраїчні комбінації вектора \mathbf{C}_k , необхідні для ф. (391), відділяючи скалярну і векторну частини відносно \mathcal{G} і \mathbf{g} , а в кожній з них — парну і непарну частини стосовно цих векторів:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_k \mathbf{C}_k &= M^2 \mathcal{G} \mathcal{G} + m^2 \mathbf{g} \mathbf{g} + Mm 2(\mathcal{G} \mathbf{g})^\dagger, \\ \mathbf{C}_k^\circ \mathbf{C}_k &= M^2 \mathcal{G}^\circ \mathcal{G} + m^2 \mathbf{g}^\circ \mathbf{g} + Mm 2(\mathcal{G}^\circ \mathbf{g})^\dagger, \\ C_k^2 &= M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2 + 2Mm \mathcal{G}_g, \\ C_k^4 &= (M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2)^2 + 4M^2 m^2 \mathcal{G}_g^2 + 4(M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2) Mm \mathcal{G}_g, \end{aligned}$$

де $\mathcal{G}_g \equiv \mathcal{G} \cdot \mathbf{g}$. Для многочленів одержуємо:

$$\begin{aligned} S_\nu^1(C_k^2) &= S_\nu^{1,0} - 2Mm \mathcal{G}_g, \\ S_\nu^1(C_k^2) \mathbf{C}_k &= S_\nu^{1,0} M \mathcal{G} - 2M^2 m \mathcal{G}_g \mathcal{G} + S_\nu^{1,0} m \mathbf{g} - 2Mm^2 \mathcal{G}_g \mathbf{g}, \\ S_{1/2}^2(C_k^2) &= S_{1/2}^{2,0} - 4Mm S_{3/2}^{1,0} \mathcal{G}_g, \end{aligned}$$

де частини многочленів, парні по \mathcal{G} і \mathbf{g} , позначено як

$$\begin{aligned} S_\nu^{1,0} &\equiv \nu + 1 - (M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2), \\ S_{1/2}^{2,0} &\equiv \frac{15}{4} - 5(M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2) + (M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2)^2 + 4M^2 m^2 \mathcal{G}_g^2. \end{aligned}$$

У ході розрахунків виникає ще проінтегрований по $\hat{\mathcal{G}}$ многочлен $S_{1/2}^2(C_k^2)$, вигляд якого теж наводимо:

$$S_{1/2}^{2;\hat{\mathcal{G}}} \equiv \frac{15}{4} - 5(M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2) + (M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2)^2 + \frac{4}{3} M^2 m^2 \mathcal{G}_g^2. \quad (392)$$

Головний результат для поправки має вигляд:

$$\begin{aligned} \phi_k(\mathbf{C}_k) \approx & - \left\{ [a_k^0 (M\mathcal{G} + m\mathbf{g}) + \right. \quad (393) \\ & + a_k^1 (-2M^2 m \mathcal{G}_g \mathcal{G} + S_{3/2}^{1,0} m \mathbf{g} + S_{3/2}^{1,0} M \mathcal{G} - 2Mm^2 \mathcal{G}_g \mathbf{g})] \cdot \mathbf{X}_T + \\ & + [\text{d.p.}] + b_k^0 [M^2 \mathcal{G}^\circ \mathcal{G} + m^2 \mathbf{g}^\circ \mathbf{g} + Mm 2(\mathcal{G}^\circ \mathbf{g})^\dagger] : \mathbf{X}_V + \\ & \left. + [h_k^1 (S_{1/2}^{1,0} - 2Mm \mathcal{G}_g) + h_k^2 (S_{1/2}^{2,0} - 4Mm S_{3/2}^{1,0} \mathcal{G}_g)] X_I \right\}. \end{aligned}$$

С.6. Інтегральні дужки

Згідно будови оператора \tilde{J}_{ij} , яка слідує з ф. (124), інтегральні дужки (233) мають внески від процесів на твердій серцевині та сходинках:

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn} = \sum_q \sum_l \sum_p \overset{\text{c|r,a}}{\oplus} \overset{K_{ij}^q}{\oplus} \overset{\ominus|\oplus,\ominus,\otimes}{\oplus} \mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn;qlp}, \quad (394)$$

де

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn;qlp} &\equiv y_2^{ij}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma p} \int d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 \times \\ &\times [S_\nu^m (C_k^2) \mathbf{C}_k^{[\nu]} - S_\nu^m ((C_k^{qlp})^2) \mathbf{C}_k^{qlp[\nu]}] \odot S_\nu^n (C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]} \end{aligned} \quad (395)$$

із $k = \{I, II\}$, $\nu = \{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2}\}$ і $\gamma_{\{\odot, \otimes, \oplus, \ominus\}} = \{+1, -q, q, -q\}$. Результати для усіх цих внесків отримуються у вигляді:

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn;qlp} = n_i n_j g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^{\gamma p} \times [\dots].$$

Нижче ми наводимо вирази, які слід підставити замість $[\dots]$.

Діагональні внески. Для $k = I$ отримано такі результати:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;00;qlp} &: M_j \Omega_{ij}^{(11)}, \\ \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;01;qlp} &: M_j^2 [\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} - \Omega_{ij}^{(12)}], \\ \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;10;qlp} &: M_j^2 [\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} - \Omega_{ij}^{(12)} + p\bar{\epsilon} (\frac{5}{2} m_{i/j} \Omega_{ij}^{(00)} + \Omega_{ij}^{(11)})], \\ \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;11;qlp} &: M_j^3 [(\frac{25}{4} + \frac{15}{2} m_{i/j}^2) \Omega_{ij}^{(11)} - 5 \Omega_{ij}^{(12)} + \Omega_{ij}^{(13)} + 2 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(22)} + \\ &+ p\bar{\epsilon} (\frac{25}{4} m_{i/j} \Omega_{ij}^{(00)} - \frac{7}{2} m_{i/j} \Omega_{ij}^{(01)} + \frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} - \Omega_{ij}^{(12)})]; \\ \mathcal{B}_{ij;5/2}^{\prime;00;qlp} &: M_j^2 [\frac{10}{3} m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(22)} + \frac{1}{3} p\bar{\epsilon} \Omega_{ij}^{(01)}]; \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;10;qlp} &: M_j p\bar{\epsilon} \Omega_{ij}^{(00)}, \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;11;qlp} &: M_j^2 [2 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} + p\bar{\epsilon} (\frac{3}{2} \Omega_{ij}^{(00)} - \Omega_{ij}^{(01)})], \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;12;qlp} &: M_j^3 [10 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} - 4 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(12)} + \\ &+ p\bar{\epsilon} (\frac{15}{4} \Omega_{ij}^{(00)} - 5 \Omega_{ij}^{(01)} + \Omega_{ij}^{(02)})], \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;20;qlp} &: M_j^2 p\bar{\epsilon} ([5 - p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(00)} - 2 \Omega_{ij}^{(01)}), \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;21;qlp} &: M_j^3 [10 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} - 4 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(12)} + \\ &+ p\bar{\epsilon} ([\frac{15}{2} + m_{i/j}^2 - \frac{3}{2} p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(00)} - [8 - p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(01)} + 2 \Omega_{ij}^{(02)} + \\ &+ 4 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)})], \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;22;qlp} &: M_j^4 [(50 m_{i/j} + 20 m_{i/j}^3) \Omega_{ij}^{(11)} - 40 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(12)} + 8 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(13)} + \\ &+ 8 m_{i/j}^2 \Omega_{ij}^{(22)} + p\bar{\epsilon} ([\frac{75}{4} + 25 m_{i/j}^2 - \frac{15}{4} p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(00)} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &- [\frac{65}{2} + 14 m_{i/j}^2 - 5 p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(01)} + [15 - p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(02)} - 2 \Omega_{ij}^{(03)} + \\ &+ 20 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} - 8 m_{i/j} \Omega_{ij}^{(12)} - 8 m_{i/j}^2 \Omega_{ij}^{(21)}]; \end{aligned}$$

крім того, $\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;0n;qlp} = 0$.

Недіагональні внески. Для $k = II$ отримано такі результати:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;00;qlp} &: \sqrt{M_i M_j} [-\Omega_{ij}^{(11)}], \\ \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;01;qlp} &: \sqrt{M_i M_j^3} [-\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(12)}], \\ \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;10;qlp} &: \sqrt{M_i^3 M_j} [-\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(12)} + p\bar{\epsilon} (\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(00)} - \Omega_{ij}^{(11)})], \\ \mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;11;qlp} &: \sqrt{M_i^3 M_j^3} [-\frac{55}{4} \Omega_{ij}^{(11)} + 5 \Omega_{ij}^{(12)} - \Omega_{ij}^{(13)} + 2 \Omega_{ij}^{(22)} + \\ &+ p\bar{\epsilon} (\frac{25}{4} \Omega_{ij}^{(00)} - \frac{7}{2} \Omega_{ij}^{(01)} - \frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(12)})]; \\ \mathcal{B}_{ij;5/2}^{\prime\prime;00;qlp} &: M_i M_j [-\frac{10}{3} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(22)} + \frac{1}{3} p\bar{\epsilon} \Omega_{ij}^{(01)}]; \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;10;qlp} &: M_i p\bar{\epsilon} \Omega_{ij}^{(00)}, \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;11;qlp} &: M_i M_j [-2 \Omega_{ij}^{(11)} + p\bar{\epsilon} (\frac{3}{2} \Omega_{ij}^{(00)} - \Omega_{ij}^{(01)})], \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;12;qlp} &: M_i M_j^2 [-10 \Omega_{ij}^{(11)} + 4 \Omega_{ij}^{(12)} + p\bar{\epsilon} (\frac{15}{4} \Omega_{ij}^{(00)} - 5 \Omega_{ij}^{(01)} + \Omega_{ij}^{(02)})], \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;20;qlp} &: M_i^2 p\bar{\epsilon} ([5 - p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(00)} - 2 \Omega_{ij}^{(01)}), \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;21;qlp} &: M_i^2 M_j [-10 \Omega_{ij}^{(11)} + 4 \Omega_{ij}^{(12)} + \\ &+ p\bar{\epsilon} ([\frac{17}{2} - \frac{3}{2} p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(00)} - [8 - p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(01)} + 2 \Omega_{ij}^{(02)} - 4 \Omega_{ij}^{(11)})], \\ \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;22;qlp} &: M_i^2 M_j^2 [-70 \Omega_{ij}^{(11)} + 40 \Omega_{ij}^{(12)} - 8 \Omega_{ij}^{(13)} + 8 \Omega_{ij}^{(22)} + \\ &+ p\bar{\epsilon} ([\frac{175}{4} - \frac{15}{4} p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(00)} - [\frac{93}{2} - 5 p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(01)} + \\ &+ [15 - p\bar{\epsilon}] \Omega_{ij}^{(02)} - 2 \Omega_{ij}^{(03)} - 20 \Omega_{ij}^{(11)} + 8 \Omega_{ij}^{(12)} - 8 \Omega_{ij}^{(21)})]; \end{aligned}$$

крім того, $\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;0n;qlp} = 0$.

У наведених виразах замість $\bar{\epsilon}$ слід підставити $\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$. Кожен Ω -інтеграл є внеском від процесу p на сходінці (ql) і тому містить додаткові індекси, $\Omega_{ij}^{(tr)qlp}$, не виписані задля компактності. Для процесів \oplus і \ominus , крім стандартних Ω -інтегралів, присутні доданки $\Omega_{ij}^{(tr)}$ іншого

типу, які домножуються на $p\bar{\epsilon}$ і пов'язані зі зміною модуля відносної швидкості. Для процесів \odot і \otimes ці внески відсутні (і слід покласти $p = 0$). Отримані вирази узагальнюють результати для сумішей, відомі в літературі [2, 3, 36, 44].

Ω -інтеграли обох типів означаються звичним чином [2, 3, 36]:

$$\Omega_{ij}^{(tr)qlp} \equiv \left(\frac{k_B T^{k0}}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty dg e^{-g^2} g^{2r+3} Q_{ij}^{(t)qlp}(g),$$

де

$$Q_{ij}^{(t)qlp}(g) \equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\hat{\sigma} (\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) \theta^p(\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) [1 - \cos^t \chi_\sigma^{qlp}],$$

$$Q_{ij}^{(t)qlp}(g) \equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\hat{\sigma} (\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) \theta^p(\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) [\cos^t(\chi_\sigma^{qlp})];$$

тут $\chi_\sigma^{qlp} \equiv \pi - 2\theta_\sigma$ — кут розсіяння в процесі p на сходинці (ql), θ_σ — полярний кут (див. §D.1). Кожну з останніх двох величин можна подати у більш звичному вигляді [2, 3, 36], виразивши через прицільний параметр $b \equiv \sigma_{ij}^{ql} \cos \frac{1}{2} \chi_\sigma^{qlp}$. Напр., перша дорівнює:

$$Q_{ij}^{(t)qlp}(g) = 2\pi \int db b [1 - \cos^t \chi_\sigma^{qlp}].$$

D. Інтеграли

Характерні θ -функції для процесів $p = \odot, \oplus, \ominus, \otimes$ позначаємо через $\theta^p(\zeta)$, тобто

$$\theta^\odot(\zeta) = \theta^\oplus(\zeta) \equiv \theta(\zeta), \quad \theta^\ominus(\zeta) \equiv \theta(\zeta - v), \quad \theta^\otimes(\zeta) \equiv \theta(\zeta) \theta(v - \zeta).$$

Для них має місце рівність $\theta^\ominus(\zeta) + \theta^\otimes(\zeta) = \theta^\oplus(\zeta)$.

D.1. Інтегрування по $\hat{\sigma}$

В нульовому й першому порядках методу Чепмена-Енскога зустрічаються інтеграли, які спільно можна записати так:

$$i\mathcal{I}[f] \equiv \int d\hat{\sigma} f(c_\sigma) \underbrace{\hat{\sigma} \dots \hat{\sigma}}_l, \quad (396)$$

де $c_\sigma = \mathbf{c} \cdot \hat{\sigma}$. Надалі тензорну частину будемо позначати як $\hat{\sigma}^l$. Інтегрування проводиться по орієнтаціях вектора $\hat{\sigma}$, а саме — по полярному θ_σ і азимутальному φ_σ кутах:

$$\int d\hat{\sigma} [\dots] \equiv \int_0^\pi d\theta_\sigma \sin \theta_\sigma \int_0^{2\pi} d\varphi_\sigma [\dots].$$

Спрямувавши полярну вісь вздовж виділеного напрямку, вектора \mathbf{c} , підінтегральну функцію розбиваємо на дві частини. Одна з них не залежить від φ_σ , а друга є степенем вектора

$$\hat{\sigma} = (\sin \theta_\sigma \cos \varphi_\sigma, \sin \theta_\sigma \sin \varphi_\sigma, \cos \theta_\sigma),$$

тобто тензором рангу l . Тоді

$$i\mathcal{I}[f] = \int_{-1}^1 dt_\sigma f(ct_\sigma) \int_0^{2\pi} d\varphi_\sigma \hat{\sigma}^l, \quad (397)$$

де введено заміну $t_\sigma = \cos \theta_\sigma$. Для $l = 0, 1, 2, 3$ знаходимо:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_\sigma \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma}\hat{\sigma} \\ \hat{\sigma}\hat{\sigma}\hat{\sigma} \end{bmatrix} = \pi \begin{bmatrix} 2 \\ 2t_\sigma \hat{c} \\ (1-t_\sigma^2)l + (-1+3t_\sigma^2)\hat{c}\hat{c} \\ (t_\sigma - t_\sigma^3)\{l\hat{c} + l_{13}\hat{c} + \hat{c}l\} + (-3t_\sigma + 5t_\sigma^3)\hat{c}\hat{c}\hat{c} \end{bmatrix}, \quad (398)$$

де $\hat{c} \equiv \mathbf{c}/c$, l — одиничний тензор, а $(l_{13}\hat{c})_{\alpha\beta\gamma} \equiv \delta_{\alpha\gamma}\hat{c}_\beta$.

D.1.1. Випадок без кореня

Пошук $i\mathcal{I}[f]$ для випадку $f(c_\sigma) = \theta^p(c_\sigma) c_\sigma^k$ зводиться, враховуючи ф. (398), до відшукування інтеграла $\int_{-1}^1 dt_\sigma \theta^p(ct_\sigma) t_\sigma^n$. Для трьох випадків параметра p знаходимо:

$$\int_{-1}^1 dt_\sigma \theta \begin{bmatrix} \oplus \\ \ominus \\ \otimes \end{bmatrix} (ct_\sigma) t_\sigma^n = \frac{1}{n+1} \begin{bmatrix} \theta^\oplus(c) \\ \theta^\ominus(c) \{1 - (v/c)^{n+1}\} \\ \theta^\otimes(c) + \theta^\ominus(c) (v/c)^{n+1} \end{bmatrix}. \quad (399)$$

Сума результатів для \ominus і \otimes дає результат для \oplus . Зручно ввести позначення для функцій від c , які виникли при інтегруванні:

$$j_n^\ominus(c) \equiv \frac{1}{n} [1 - (v/c)^n], \quad j_n^\otimes(c) \equiv \frac{1}{n} [\theta^\otimes(c) + \theta^\ominus(c) (v/c)^n]$$

і доозначити для \oplus , що $j_n^\oplus(c) \equiv \frac{1}{n}$. Тоді $\theta^\ominus(c)j_n^\ominus + j_n^\otimes = \theta^\oplus(c)j_n^\oplus$.

Найпростіші інтеграли

$$i\mathcal{I}_k^p(\mathbf{c}) \equiv \int d\hat{\sigma} \theta^p(c_\sigma) c_\sigma^k \hat{\sigma}^l, \quad (400)$$

де l вказує на тензорний ранг, задовольняють рівність:

$$i\mathcal{I}_k^\otimes + i\mathcal{I}_k^\ominus = i\mathcal{I}_k^\oplus. \quad (401)$$

Користуючись фф. (398) і (399) знаходимо⁹ для $l = 0, 1, 2, 3$:

$$\begin{bmatrix} 0\mathcal{I}_k^p \\ 1\mathcal{I}_k^p \\ 2\mathcal{I}_k^p \\ 3\mathcal{I}_k^p \end{bmatrix} = \pi\theta^p(c)c^k \begin{bmatrix} 2j_{k+1}^p(c) \\ 2j_{k+2}^p(c)\hat{c} \\ i_{0k}^p(c)l + i_{2k}^p(c)\hat{c}\hat{c} \\ i_{1k}^p(c)\{l\hat{c} + l_{13}\hat{c} + \hat{c}l\} + i_{3k}^p(c)\hat{c}\hat{c}\hat{c} \end{bmatrix}. \quad (402)$$

Результати для $p = \otimes$ відрізняються від наведених тим, що множника θ^\otimes після π нема, а θ^\otimes і θ^\ominus входять в означення функцій j_n^\otimes та i_{rk}^\otimes . Тензори $2\mathcal{I}_k^p$ та $3\mathcal{I}_k^p$ виражено через нові функції i_{rk}^p . Індекс r означає степені \hat{c} в тензора, біля якого i_{rk}^p стоїть у ф. (402). Явні вирази для i_{0k}^p та i_{2k}^p зручніше записати через $\bar{v} \equiv v/c$:

$$\begin{aligned} i_{0k}^\oplus(c) &= \frac{2}{(k+1)(k+3)}, \\ i_{2k}^\oplus(c) &= \frac{2k}{(k+1)(k+3)}, \\ i_{0k}^\ominus(c) &= \frac{2}{(k+1)(k+3)} - \frac{\bar{v}^{k+1}}{k+1} + \frac{\bar{v}^{k+3}}{k+3}, \\ i_{2k}^\ominus(c) &= \frac{2k}{(k+1)(k+3)} + \frac{\bar{v}^{k+1}}{k+1} - 3\frac{\bar{v}^{k+3}}{k+3}, \\ i_{0k}^\otimes(c) &= \theta^\otimes(c)\frac{2}{(k+1)(k+3)} + \theta^\ominus(c)\left(\frac{\bar{v}^{k+1}}{k+1} - \frac{\bar{v}^{k+3}}{k+3}\right), \\ i_{2k}^\otimes(c) &= \theta^\otimes(c)\frac{2k}{(k+1)(k+3)} + \theta^\ominus(c)\left(-\frac{\bar{v}^{k+1}}{k+1} + 3\frac{\bar{v}^{k+3}}{k+3}\right). \end{aligned}$$

Функції i_{1k}^p та i_{3k}^p , що входять в $3\mathcal{I}_k^p$, дорівнюють:

$$\begin{aligned} i_{1k}^\oplus(c) &= \frac{2}{(k+2)(k+4)}, \\ i_{3k}^\oplus(c) &= \frac{2k-2}{(k+2)(k+4)}, \\ i_{1k}^\ominus(c) &= \frac{2}{(k+2)(k+4)} - \frac{\bar{v}^{k+2}}{k+2} + \frac{\bar{v}^{k+4}}{k+4}, \\ i_{3k}^\ominus(c) &= \frac{2k-2}{(k+2)(k+4)} + 3\frac{\bar{v}^{k+2}}{k+2} - 5\frac{\bar{v}^{k+4}}{k+4}, \\ i_{1k}^\otimes(c) &= \theta^\otimes(c)\frac{2}{(k+2)(k+4)} + \theta^\ominus(c)\left(\frac{\bar{v}^{k+2}}{k+2} - \frac{\bar{v}^{k+4}}{k+4}\right), \end{aligned}$$

⁹ Інтеграл $i\mathcal{I}_k^\oplus$ можна записати як $\int_{\Omega^+} d\hat{c} c_\sigma^k \hat{\sigma}^l$ (де Ω^+ — одинична півсфера, для якої $\mathbf{c} \cdot \hat{\sigma} > 0$). При диференціюванні по \mathbf{c} підвищується тензорний ранг інтеграла: $\partial_{\mathbf{c}} i\mathcal{I}_k^\oplus = k[l_{l+1}\mathcal{I}_{k-1}^\oplus]$. Тому одержуємо рекурентну формулу:

$$i\mathcal{I}_k^\oplus = \frac{1}{k+1} \partial_{\mathbf{c}} [l_{l-1}\mathcal{I}_{k+1}^\oplus].$$

За допомогою ф. (402) для $0\mathcal{I}_{k+1}^\oplus$ і співвідношень $\partial_{\mathbf{c}}\{\mathbf{c}, c, \hat{c}\} = \{l, \hat{c}, c^{-1}[l - \hat{c}\hat{c}]\}$, можна знайти $i\mathcal{I}_k^\oplus$ із $l = 1, 2, 3, \dots$ і будь-яким $k \geq 0$.

$$i_{3k}^\otimes(c) = \theta^\otimes(c)\frac{2k-2}{(k+2)(k+4)} + \theta^\ominus(c)\left(-3\frac{\bar{v}^{k+2}}{k+2} + 5\frac{\bar{v}^{k+4}}{k+4}\right).$$

Як бачимо, функції i_{rk}^\oplus не залежать від c , а для i_{kr}^\otimes функції θ^\otimes і θ^\ominus включено в їхні означення. Неважко перевірити, що результати (402) задовольняють співвідношення (401).

Корисними в розрахунках є характерні комбінації введених функцій:

$$i_{0k}^p + \frac{1}{3}i_{2k}^p = \frac{2}{3}j_{k+1}^p, \quad i_{0k}^p + i_{2k}^p = 2j_{k+3}^p; \quad (403)$$

$$i_{1k}^p + \frac{1}{5}i_{3k}^p = \frac{2}{5}j_{k+2}^p, \quad i_{1k}^p + \frac{1}{3}i_{3k}^p = \frac{2}{3}j_{k+4}^p. \quad (404)$$

D.1.2. Випадок із коренем

Розгляньмо інтегралі, характерні лише для процесів $p = \{\oplus, \ominus\}$:

$$i\mathcal{I}_k^{pQ} \equiv \int d\hat{\sigma} \theta^p(c_\sigma) c_\sigma^{k-1} Q^p \hat{\sigma}^l, \quad (405)$$

де $Q^p \equiv \sqrt{c_\sigma^2 + pv^2}$. Тут $f(c_\sigma) = \theta^p(c_\sigma) c_\sigma^{k-1} Q^p$ з ф. (396) не залежить від азимутального кута. Застосувавши ф. (398) для інтегрування по φ_σ , виявимо, що результати виражаються через інтегралі вигляду $\int_{-1}^1 dt_\sigma \theta^p(ct_\sigma) t_\sigma^m Q^p$, які дорівнюють

$$\theta^p(c) c \int_{-1}^1 dt_\sigma \theta(t_\sigma - \delta_{-1,p}\bar{v}) t_\sigma^m \sqrt{t_\sigma^2 + p\bar{v}^2}. \quad (406)$$

Підінтегральна θ -функція визначає нижні межі, які для процесів \oplus і \ominus дорівнюють 0 і \bar{v} . Позначмо характерний інтеграл як

$$j_m^{pQ}(c) \equiv \int_{\{0;\bar{v}\}}^1 dt t^{m-2} \sqrt{t^2 + p\bar{v}^2}, \quad m \geq 2, \quad (407)$$

зауваживши, що c входить у нього тільки через $\bar{v} = v/c$. Його розраховано у наступному підпараграфі й наведено явні вирази для $m = 2 \div 7$.

Враховуючи фф. (398) і (406), отримуємо [порівн. із ф. (402)]:

$$\begin{bmatrix} 0\mathcal{I}_k^{pQ} \\ 1\mathcal{I}_k^{pQ} \\ 2\mathcal{I}_k^{pQ} \\ 3\mathcal{I}_k^{pQ} \end{bmatrix} = \pi\theta^p(c)c^k \begin{bmatrix} 2j_{k+1}^{pQ}(c) \\ 2j_{k+2}^{pQ}(c)\hat{c} \\ i_{0k}^{pQ}(c)l + i_{2k}^{pQ}(c)\hat{c}\hat{c} \\ i_{1k}^{pQ}(c)\{l\hat{c} + l_{13}\hat{c} + \hat{c}l\} + i_{3k}^{pQ}(c)\hat{c}\hat{c}\hat{c} \end{bmatrix}, \quad (408)$$

де введено позначення

$$\begin{aligned} i_{0k}^{pQ} &\equiv j_{k+1}^{pQ} - j_{k+3}^{pQ}, & i_{2k}^{pQ}(c) &\equiv -j_{k+1}^{pQ} + 3j_{k+3}^{pQ}; \\ i_{1k}^{pQ} &\equiv j_{k+2}^{pQ} - j_{k+4}^{pQ}, & i_{3k}^{pQ}(c) &\equiv -3j_{k+2}^{pQ} + 5j_{k+4}^{pQ}. \end{aligned}$$

З них знаходимо співвідношення, подібні до (403) і (404):

$$i_{0k}^{pQ} + \frac{1}{3}i_{2k}^{pQ} = \frac{2}{3}j_{k+1}^{pQ}, \quad i_{0k}^{pQ} + i_{2k}^{pQ} = 2j_{k+3}^{pQ}; \quad (409)$$

$$i_{1k}^{pQ} + \frac{1}{5}i_{3k}^{pQ} = \frac{2}{5}j_{k+2}^{pQ}, \quad i_{1k}^{pQ} + \frac{1}{3}i_{3k}^{pQ} = \frac{2}{3}j_{k+4}^{pQ}. \quad (410)$$

У розрахунках інтеграли $i\mathcal{I}_k^{pQ}$ зустрічаються в різницях та сумах із $i\mathcal{I}_k^p$. Для цих комбінацій вводимо позначення:

$$i\mathcal{I}_k^{p\mp} \equiv i\mathcal{I}_k^p \mp i\mathcal{I}_k^{pQ}. \quad (411)$$

Подібно позначаємо відповідні функції, напр., $i_{rk}^{p\mp} \equiv i_{rk}^p \mp i_{rk}^{pQ}$.

D.1.3. Розрахунок інтегралів j_m^{pQ}

Для інтеграла (407) спочатку розглянуто випадок непарних m , а потім отримано рекурентну формулу і подано вирази для кількох перших непарних і парних значень m .

Непарні m . Заміна $y = t^2 + p\bar{v}^2$ перетворює ф. (407) до вигляду

$$j_{m+2}^{pQ} = \frac{1}{2} \int_{\{\bar{v}^2; 0\}}^{1+p\bar{v}^2} dy (y - p\bar{v}^2)^{\frac{m-1}{2}} \sqrt{y}.$$

Інтеграл легко знайти, якщо $n \equiv \frac{m-1}{2}$ — ціле невід'ємне число:

$$\begin{aligned} j_{2n+3}^{pQ} &= \sum_{l=0}^n C_n^l (-p\bar{v}^2)^{n-l} \frac{1}{2l+3} \left\{ \begin{array}{l} (1 + \bar{v}^2)^{l+3/2} - \bar{v}^{2l+3} \\ (1 - \bar{v}^2)^{l+3/2} \end{array} \right\} \Big|_{\ominus}^{\oplus} = \quad (412) \\ &= (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} \sum_{l=0}^n \frac{(-p)^{n-l} C_n^l}{2l+3} (1 + p\bar{v}^2)^l (\bar{v}^2)^{n-l} - \\ &- \delta_{1p} \bar{v}^{2n+3} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^{n-l} C_n^l}{2l+3}, \end{aligned}$$

де $C_n^l = n! / (l! [n-l]!)$ — біноміальні коефіцієнти. Останній доданок відмінний від нуля лише для $p = \oplus$. Вирази для $m = 3, 5, 7$ подано нижче.

Рекурентна формула. Проінтегруймо ф. (407) для j_{m+2}^{pQ} в межах від τ_1 до τ_2 за частинами (з $u = t^{m-1}$ і $dv = t\sqrt{t^2 + p\bar{v}^2} dt$):

$$j_{m+2}^{pQ} = \frac{1}{3} t^{m-1} (t^2 + p\bar{v}^2)^{3/2} \Big|_{\tau_1}^{\tau_2} - \frac{m-1}{3} j_{m+2}^{pQ} - \frac{m-1}{3} p\bar{v}^2 j_m^{pQ},$$

де $(t^2 + p\bar{v}^2)^{3/2}$ під інтегралом було подано як $(t^2 + p\bar{v}^2)\sqrt{t^2 + p\bar{v}^2}$. Перенісши другий доданок у ліву частину, отримуємо рекурентну формулу:

$$j_{m+2}^{pQ} = \frac{1}{m+2} t^{m-1} (t^2 + p\bar{v}^2)^{3/2} \Big|_{\tau_1}^{\tau_2} - \frac{m-1}{m+2} p\bar{v}^2 j_m^{pQ}. \quad (413)$$

Цей вираз для меж $[0; 1]$ і $[\bar{v}; 1]$, що у ф. (407), набуває вигляду:

$$j_{m+2}^{pQ} = \frac{1}{m+2} (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} - p \frac{m-1}{m+2} \bar{v}^2 j_m^{pQ}. \quad (414)$$

Парні m . Щоб застосувати рекурентну формулу для парних m , треба відшукати

$$j_2^{pQ} \equiv \int_{\tau_1}^{\tau_2} dt \sqrt{t^2 + p\bar{v}^2}.$$

Його знаходимо за допомогою підстановок $t = \bar{v} \sinh x|_{p=\oplus}$ і $t = \bar{v} \cosh x|_{p=\ominus}$. Для обох значень p результат можна подати спільно:

$$j_2^{pQ} = \left(\frac{1}{2} t \sqrt{t^2 + p\bar{v}^2} + \frac{1}{2} p\bar{v}^2 \ln[t + \sqrt{t^2 + p\bar{v}^2}] \right) \Big|_{\tau_1}^{\tau_2}.$$

Для меж $[0; 1]$ та $[\bar{v}; 1]$, що відповідають $p = \oplus$ і \ominus , знаходимо:

$$j_2^{pQ} = \frac{1}{2} \sqrt{1 + p\bar{v}^2} + \frac{1}{2} p\bar{v}^2 \ln \frac{1 + \sqrt{1 + p\bar{v}^2}}{\bar{v}}. \quad (415)$$

Далі за допомогою ф. (414) одержуємо для парних m :

$$j_4^{pQ} = \frac{1}{4} (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} - p \frac{1}{4} \bar{v}^2 j_2^{pQ}, \quad (416)$$

$$j_6^{pQ} = (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} \left[\frac{1}{6} - p \frac{1}{8} \bar{v}^2 \right] + \frac{1}{8} \bar{v}^4 j_2^{pQ}. \quad (417)$$

Явні вирази для непарних m можна знайти рекурентним способом або ж за допомогою ф. (412):

$$j_3^{pQ} = \frac{1}{3} (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} - \delta_{1p} \frac{1}{3} \bar{v}^3, \quad (418)$$

$$j_5^{pQ} = (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} \left[\frac{1}{5} - p \frac{2}{15} \bar{v}^2 \right] + \delta_{1p} \frac{2}{15} \bar{v}^5, \quad (419)$$

$$j_7^{pQ} = (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} \left[\frac{1}{7} - p \frac{4}{35} \bar{v}^2 + \frac{8}{105} \bar{v}^4 \right] - \delta_{1p} \frac{8}{105} \bar{v}^7. \quad (420)$$

D.2. Інтегрування по кутових змінних \hat{c} і \hat{G}

Орієнтація \hat{G} швидкості центра мас нічим не обмежується і може бути будь-якою, тому інтегрування по \hat{G} напростіші. Для першого порядку потрібно мати лише інтеграли від 1, $\hat{G}\hat{G}$ та $\hat{G}^{\circ}\hat{G}$. Вони є граничним випадком складніших інтегрувань, розглянутих для \hat{c} . Потрібні для \hat{G} результати подано у фф. (424) і (425).

Інтеграли по орієнтаціях вектора \mathbf{c} схожі на розраховані раніше інтеграли I_{lk}^p , ф. (400). Однак, тут немає ніяких обмежень на скалярний добуток $G_c \equiv \mathbf{G} \cdot \hat{c}$ (накладених, напр., за допомогою θ -функцій). В розрахунках виникають такі інтеграли:

$${}_l\mathcal{J}_k(\mathbf{G}) \equiv \int d\hat{c} G_c^k \hat{c}^l, \quad (421)$$

де l в позначенні вказує на тензорний ранг інтеграла. Прямий розрахунок для $l = 3, 4, \dots$ стає особливо громіздкий. Результат ще можна знайти за допомогою рекурентної по l формули, отриманої шляхом послідовного диференціювання по \mathbf{G} (див. зноску на с. 108):

$${}_l\mathcal{J}_k(\mathbf{G}) = \frac{1}{k+1} \partial_{\mathbf{G}} [{}_{l-1}\mathcal{J}_{k+1}(\mathbf{G})]. \quad (422)$$

${}_0\mathcal{J}_k$ знаходимо, безпосередньо інтегруючи у ф. (421), а наступні — за допомогою рекурентної формули (422):

$$\begin{aligned} {}_0\mathcal{J}_k &= \pi \frac{2}{k+1} [1 + (-1)^k] G^k, \\ {}_1\mathcal{J}_k &= \pi \frac{2}{k+2} [1 + (-1)^{k+1}] G^k \hat{G}, \\ {}_2\mathcal{J}_k &= \pi \frac{2}{(k+1)(k+3)} [1 + (-1)^k] G^k \{1 + k\hat{G}\hat{G}\}, \\ {}_3\mathcal{J}_k &= \pi \frac{2}{(k+2)(k+4)} [1 + (-1)^{k+1}] G^k \{3(\hat{G})^{\ddagger} + (k-1)\hat{G}\hat{G}\hat{G}\}, \\ {}_4\mathcal{J}_k &= \pi \frac{2}{(k+1)(k+3)(k+5)} [1 + (-1)^k] G^k \times \\ &\quad \times \{3(\mathbb{I})^{\ddagger} + k6(\hat{G}\hat{G})^{\ddagger} + (k-2)k\hat{G}\hat{G}\hat{G}\hat{G}\}, \end{aligned}$$

де повністю симетризовані тензори 3-го і 4-го рангів, утворені з тензора \mathbb{I} та вектора \hat{G} дорівнюють:

$$\begin{aligned} 3(\hat{G})^{\ddagger} &\equiv \hat{G} + \mathbb{I}_3 \hat{G} + \hat{G} \mathbb{I}, \\ 3(\mathbb{I})^{\ddagger} &\equiv \mathbb{I} + \mathbb{I}_3 \mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_4 \mathbb{I}_2, \\ 6(\hat{G}\hat{G})^{\ddagger} &\equiv \hat{G}\hat{G} + \mathbb{I}_3 \hat{G}\hat{G} + \mathbb{I}_4 \hat{G}\hat{G} + \hat{G} \mathbb{I} \hat{G} + \hat{G} \mathbb{I}_2 \hat{G} + \hat{G}\hat{G} \mathbb{I}. \end{aligned}$$

Деякі властивості ${}_l\mathcal{J}_k$ можна вивести з міркувань симетрії. Зокрема, покажімо, що він перетворюється в нуль, коли l і k мають різну парність.

Інтеграли по додатній Ω^+ ($G_c > 0$) та від'ємній Ω^- ($G_c < 0$) півсферах,

$${}_i\mathcal{J}_k^{\Omega^{\pm}}(\mathbf{G}) \equiv \int d\hat{c} \theta(\pm G_c) G_c^k \hat{c}^l \quad (423)$$

теж задовольняють рекурентне співвідношення (422). Ясно, що ${}_i\mathcal{J}_k = {}_i\mathcal{J}_k^{\Omega^+} + {}_i\mathcal{J}_k^{\Omega^-}$. Зауваживши, що ${}_i\mathcal{J}_k^{\Omega^-}(\mathbf{G}) = (-1)^k {}_i\mathcal{J}_k^{\Omega^+}(-\mathbf{G})$ і той факт, що ${}_i\mathcal{J}_k^{\Omega^+}(\mathbf{G})$ парний по \mathbf{G} , коли l — парне, і непарний по \mathbf{G} , коли l — непарне, маємо:

$${}_i\mathcal{J}_k(\mathbf{G}) = {}_i\mathcal{J}_k^{\Omega^+}(\mathbf{G}) \times \begin{cases} [1 + (-1)^k], & l \text{ — парне,} \\ [1 + (-1)^{k+1}], & l \text{ — не парне.} \end{cases}$$

Це узгоджується з явними виразами. Можна навести простіші міркування, записавши ф. (421) у вигляді ${}_i\mathcal{J}_k(\mathbf{G}) = \mathbf{G}^k \overset{k}{\odot} \int d\hat{c} \hat{c}^{k+l}$, де $\overset{k}{\odot}$ позначає k -кратний скалярний добуток. Тут інтеграл по \hat{c} відмінний від нуля, якщо його степінь — парний, а отже, коли k і l мають однакову парність.

Нижче наведено результати для інтегрувань, які найчастіше зустрічаються. Поклавши $k = 0$, отримуємо:

$$\int d\hat{c} \begin{bmatrix} 1 \\ \hat{c}\hat{c} \\ \hat{c}\hat{c}\hat{c}\hat{c} \end{bmatrix} = 4\pi \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{3}\mathbb{I} \\ \frac{1}{15}3(\mathbb{I})^{\ddagger} \end{bmatrix}, \quad (424)$$

а для непарних степенів інтеграл дорівнює нулю. За допомогою цих формул можемо записати готові результати і для інших тензорів, складених із \hat{c} та \mathbb{I} , що виникають безпосередньо у розрахунках:

$$\int d\hat{c} \begin{bmatrix} \hat{c}^{\circ}\hat{c} \\ \hat{c}\hat{c}\hat{c}^{\circ}\hat{c} \\ 3(\hat{c})^{\ddagger}\hat{c} \end{bmatrix} = 4\pi \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{15}[3(\mathbb{I})^{\ddagger} - \frac{5}{3}\mathbb{I}] \\ \frac{1}{3}3(\mathbb{I})^{\ddagger} \end{bmatrix}. \quad (425)$$

Очевидно, що фф. (424) і (425) справедливі й для змінної \hat{G} .

За допомогою результатів для ${}_1\mathcal{J}_k$ та ${}_2\mathcal{J}_k$ знаходимо:

$$\int d\hat{c} (\hat{G} \cdot \hat{c})^k \begin{bmatrix} 2(\hat{G}^{\circ}\hat{c})^{\ddagger} \\ \hat{c}^{\circ}\hat{c} \end{bmatrix} = 4\pi \begin{bmatrix} \frac{1}{k+2} [1 + (-1)^{k+1}] \hat{G}^{\circ}\hat{G} \\ \frac{k}{2(k+1)(k+3)} [1 + (-1)^k] \hat{G}^{\circ}\hat{G} \end{bmatrix}. \quad (426)$$

Скалярні перемноження з тензорами. Наведімо результати для деяких скалярних добутків, що виникають у перетвореннях:

$$\begin{aligned} 3(\hat{c})^{\ddagger} \cdot \hat{c} &= \mathbb{I} + 2\hat{c}\hat{c}, \\ \mathbb{I} : \nabla \mathbf{V} &= \nabla \cdot \mathbf{V}, \\ 3(\mathbb{I})^{\ddagger} : \nabla \mathbf{V}^{\dagger} &= 2(\overset{\circ}{\nabla \mathbf{V}})^{\ddagger} + \frac{5}{3}\mathbb{I}(\nabla \cdot \mathbf{V}). \end{aligned}$$

D.3. Інтегрування по модулях G і c

D.3.1. Опис позначень

Інтегралі по модулю швидкості центра мас G можна виразити через гамма-функцію, § D.4:

$$\int_0^\infty dG e^{-\tilde{m}G^2} G^k = \frac{1}{2} \tilde{m}^{-\frac{k+1}{2}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right). \quad (427)$$

Результат інтегрування по безрозмірній швидкості $\mathcal{G} \equiv \sqrt{\tilde{m}}G$ не містить множника з \tilde{m} .

Інтегрування по модулю відносної швидкості c дещо різноманітніше, тому позначмо

$$\mathcal{J}_{ck}^p \equiv \int_0^\infty dc \theta^p(c) e^{-\tilde{\mu}c^2} c^k, \quad (428)$$

де в нижньому індексі позначення вказано змінну інтегрування та її степінь, а p може означати \oplus , \ominus чи \otimes . Зокрема, інтеграл у ф. (427) можна позначити як \mathcal{J}_{Gk}^\oplus .

Якщо в інтегралі ф. (428) крім c^k присутня як множник ще інша функція $\varphi(c)$, то її будемо вказувати як функціональний аргумент:

$$\mathcal{J}_{ck}^p[\varphi] \equiv \int_0^\infty dc \theta^p(c) e^{-\tilde{\mu}c^2} c^k \varphi(c). \quad (429)$$

Найпростіші інтегрування по c , ф. (428), виражаються через повну й неповні гамма-функції, § D.4:

$$\mathcal{J}_{ck}^p = \frac{1}{2} \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right) \\ \tilde{\Gamma}_2\left(\frac{k+1}{2}; \bar{\epsilon}\right) \\ \Gamma_2\left(\frac{k+1}{2}; \bar{\epsilon}\right) \end{array} \left| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \\ \otimes \end{array} \right. \right\}, \quad (430)$$

де у правій колонці вказано значення p і ще використано співвідношення $\tilde{\mu}v^2 = \bar{\epsilon}$. За допомогою цих формул можна знайти інтегралі $\mathcal{J}_{ck}^p[\varphi]$ для функцій j_n^p , i_{rk}^p та ін. Зокрема, одержуємо:

$$\mathcal{J}_{ck}^p[j_n^p] = \frac{1}{2n} \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right) \\ \tilde{\Gamma}_2\left(\frac{k+1}{2}; \bar{\epsilon}\right) - \bar{\epsilon}^{n/2} \tilde{\Gamma}_2\left(\frac{k+1-n}{2}; \bar{\epsilon}\right) \\ \Gamma_2\left(\frac{k+1}{2}; \bar{\epsilon}\right) + \bar{\epsilon}^{n/2} \tilde{\Gamma}_2\left(\frac{k+1-n}{2}; \bar{\epsilon}\right) \end{array} \left| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \\ \otimes \end{array} \right. \right\}. \quad (431)$$

Надалі всі результати наводимо для інтегралів по безрозмірній відносній швидкості $\mathbf{g} \equiv \tilde{\mu}^{1/2}\mathbf{c}$, оскільки

$$\mathcal{J}_{ck}^p[\varphi] = \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} \mathcal{J}_{gk}^p[\varphi].$$

Для добутків функцій φ із $S_\nu^1(g^2) \equiv \nu+1-g^2$ та $S_{1/2}^2(g^2) \equiv \frac{15}{4}-5g^2+g^4$ легко знаходимо:

$$\mathcal{J}_{gk}^p[S_\nu^1\varphi] = (\nu+1)\mathcal{J}_{gk}^p[\varphi] - \mathcal{J}_{g,k+2}^p[\varphi], \quad (432)$$

$$\mathcal{J}_{gk}^p[S_{1/2}^2\varphi] = \frac{15}{4}\mathcal{J}_{gk}^p[\varphi] - 5\mathcal{J}_{g,k+2}^p[\varphi] + \mathcal{J}_{g,k+4}^p[\varphi]. \quad (433)$$

Табл. 3. Характерні інтегралі та їх комбінації.

§	$\mathcal{J}_{gk}^p[\varphi^p]$	Комб.	$\mathcal{J}_{gk}^p[\varphi^{pQ}]$	Комб.
D.3.2	$j_3^p, S_\nu^m j_3^p$	$\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}$	$j_3^{pQ}, S_\nu^m j_3^{pQ}$	$\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}$
D.3.2	j_5^p, i_{22}^p	$\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}$	j_5^{pQ}, i_{22}^{pQ}	$\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}$
D.3.3	$j_2^p, S_{1/2}^1 j_2^p$	$\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}$		
D.3.3	j_4^p	$\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}, \mathcal{C}_{gk}^{3-}$	j_4^{pQ}	\mathcal{C}_{gk}^{2-}

Розрахунки цих інтегралів для всієї сходинки зводяться до характерних комбінацій двох (\oplus і \ominus) і трьох (\oplus , \ominus та \otimes) внесків, узятих для відповідних функцій:

$$\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}[\varphi^p] \equiv \mathcal{J}_{gk}^\oplus[\varphi^\oplus] \mp e^\epsilon \mathcal{J}_{gk}^\ominus[\varphi^\ominus], \quad (434)$$

$$\mathcal{C}_{gk}^{3\mp}[\varphi^p] \equiv \mp 2e^\epsilon \mathcal{J}_{gk}^\otimes[\varphi^\otimes] + \mathcal{J}_{gk}^\oplus[\varphi^\oplus] \mp e^\epsilon \mathcal{J}_{gk}^\ominus[\varphi^\ominus], \quad (435)$$

де у верхньому індексі позначень відображено знак біля внесків \ominus і \otimes . Комбінації $\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}$ виникають як для функцій типу φ^p , так і типу φ^{pQ} . Комбінацію \mathcal{C}_{gk}^{3-} для $\varphi^{p-} \equiv \varphi^p - \varphi^{pQ}$ треба розуміти з доозначенням $\varphi^{\otimes Q} \equiv 0$.

Нижче подаємо результати для $\mathcal{J}_{gk}^p[\varphi]$, $\mathcal{C}_{gk}^{2\mp}[\varphi^p]$ і $\mathcal{C}_{gk}^{3-}[\varphi^p]$, обчислених як для самих функцій j_n^p , j_n^{pQ} , i_{rk}^p та i_{rk}^{pQ} з необхідними конкретними значеннями індексів, так і для деяких добутків із S_ν^m . Послідовність наведення результатів відзначено у таблиці 3. У всіх виразах неповні гамма-функції з півцілим значення першого аргумента зведено до їх значення при $z = \frac{3}{2}$.

D.3.2. Результати для непарних індексів

Функції j_3^p . Для неї потрібно найбільше характерних інтегралів:

$$\mathcal{J}_{g4}^p[j_3^p] = \frac{1}{4} \left\{ \oplus: \Gamma\left(\frac{3}{2}\right), \quad \ominus: \tilde{\Gamma}_2\left(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}\right), \quad \otimes: \Gamma_2\left(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}\right) \right\},$$

$$\mathcal{J}_{g6}^p[j_3^p] = \frac{1}{4} \left\{ \oplus: \frac{5}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right), \quad \ominus: \frac{5}{2}\tilde{\Gamma}_2\left(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}\right) + e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2}, \right\}$$

$$\begin{aligned} & \otimes: \frac{5}{2}\Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2} \}, \\ \mathcal{J}_{g8}^p[j_3^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \frac{35}{4}\Gamma(\frac{3}{2}), \quad \ominus: \frac{35}{4}\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + e^{-\bar{\epsilon}}(\bar{\epsilon}^{5/2} + \frac{9}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}), \\ & \otimes: \frac{35}{4}\Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - e^{-\bar{\epsilon}}(\bar{\epsilon}^{5/2} + \frac{9}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}) \}. \end{aligned}$$

За їх допомогою знаходимо результати для добутків j_3^p із S_{ν}^1 :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{g4}^p[S_{1/2}^1 j_3^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: -\Gamma(\frac{3}{2}), \quad \ominus: -\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2}, \\ & \otimes: -\Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2} \}, \\ \mathcal{J}_{g4}^p[S_{3/2}^1 j_3^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 0, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}[-\bar{\epsilon}^{3/2}], \quad \otimes: e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2} \} \end{aligned}$$

та із $S_{1/2}^2$:

$$\mathcal{J}_{g4}^p[S_{1/2}^2 j_3^p] = \frac{1}{4} \{ \oplus: 0, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}[\bar{\epsilon}^{5/2} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}], \quad \otimes: e^{-\bar{\epsilon}}[-\bar{\epsilon}^{5/2} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}] \}.$$

Для характерних комбінацій двох внесків \oplus та \ominus маємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[j_3^p] &= \frac{1}{4}\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}), \\ \mathcal{C}_{g6}^{2\mp}[j_3^p] &= \frac{1}{4}[\frac{5}{2}\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \mp \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g8}^{2\mp}[j_3^p] &= \frac{1}{4}[\frac{35}{4}\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \mp \bar{\epsilon}^{5/2} \mp \frac{9}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[S_{1/2}^1 j_3^p] &= \frac{1}{4}[-\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \pm \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[S_{3/2}^1 j_3^p] &= \frac{1}{4}[\pm \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[S_{1/2}^2 j_3^p] &= \frac{1}{4}[\mp \bar{\epsilon}^{5/2} \pm \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}], \end{aligned}$$

де три останні вирази стосуються добутків із S_{ν}^m .

Функції j_3^{pQ} . Для них потрібні такі ж характерні інтеграли, що й для j_3^p :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{g4}^p[j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}), \quad \ominus: \Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}} \}, \\ \mathcal{J}_{g6}^p[j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})[-\bar{\epsilon} + \frac{5}{2}] + \bar{\epsilon}^{3/2}, \quad \ominus: \Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}}[\bar{\epsilon} + \frac{5}{2}] \}, \\ \mathcal{J}_{g8}^p[j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})[\bar{\epsilon}^2 - 5\bar{\epsilon} + \frac{35}{4}] - \bar{\epsilon}^{5/2} + \frac{9}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}, \\ & \ominus: \Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}}[\bar{\epsilon}^2 + 5\bar{\epsilon} + \frac{35}{4}] \}. \end{aligned}$$

За їх допомогою знаходимо інтеграли для добутків із S_{ν}^m :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{g4}^p[S_{1/2}^1 j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})[\bar{\epsilon} - 1] - \bar{\epsilon}^{3/2}, \quad \ominus: \Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}}[-\bar{\epsilon} - 1] \}, \\ \mathcal{J}_{g4}^p[S_{3/2}^1 j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^{3/2}, \quad \ominus: \Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}}[-\bar{\epsilon}] \}, \\ \mathcal{J}_{g4}^p[S_{1/2}^2 j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon}^2 - \bar{\epsilon}^{5/2} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}, \quad \ominus: \Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^2 \}. \end{aligned}$$

Для комбінацій внесків \oplus та \ominus отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\mp \tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})], \\ \mathcal{C}_{g6}^{2\mp}[j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\mp \tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} \mp \frac{5}{2}\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g8}^{2\mp}[j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\mp \tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon}^2 \mp 5\tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} \mp \frac{35}{4}\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - \\ & - \bar{\epsilon}^{5/2} + \frac{9}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[S_{1/2}^1 j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\pm \tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} \pm \tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[S_{3/2}^1 j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\pm \tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g4}^{2\mp}[S_{1/2}^2 j_3^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\mp \tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon}^2 - \bar{\epsilon}^{5/2} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{3/2}]. \end{aligned}$$

де три останні формули стосуються добутків із S_{ν}^m .

Функції j_5^p та i_{22}^p . Для них потрібно мати такі інтеграли:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{g6}^p[j_5^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \frac{3}{2}\Gamma(\frac{3}{2}), \quad \ominus: \frac{3}{2}\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2}, \\ & \otimes: \frac{3}{2}\Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2} \}, \\ \mathcal{J}_{g6}^p[i_{22}^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 2\Gamma(\frac{3}{2}), \quad \ominus: 2\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + 2e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2}, \\ & \otimes: 2\Gamma_2(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - 2e^{-\bar{\epsilon}}\bar{\epsilon}^{3/2} \}. \end{aligned}$$

Характерні комбінації внесків \oplus та \ominus дорівнюють:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{g6}^{2\mp}[j_5^p] &= \frac{1}{4} [\frac{3}{2}\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \mp \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g6}^{2\mp}[i_{22}^p] &= \frac{1}{4} [2\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \mp 2\bar{\epsilon}^{3/2}]. \end{aligned}$$

Ці результати узгоджуються з тим, що $i_{22}^p = -j_3^p + 3j_5^p$.

Функції j_5^{pQ} та i_{22}^{pQ} . Перелік необхідних інтегралів такий же, як і в попередньому випадку:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{g6}^p[j_5^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})[-\bar{\epsilon} + \frac{3}{2}] + \bar{\epsilon}^{3/2}, \quad \ominus: \Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}}[\bar{\epsilon} + \frac{3}{2}] \}, \\ \mathcal{J}_{g6}^p[i_{22}^{pQ}] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 2\tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})[-\bar{\epsilon} + 1] + 2\bar{\epsilon}^{3/2}, \quad \ominus: 2\Gamma(\frac{3}{2})e^{-\bar{\epsilon}}[\bar{\epsilon} + 1] \}. \end{aligned}$$

Характерні комбінації внесків \oplus та \ominus дорівнюють:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{g6}^{2\mp}[j_5^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\mp \tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} \mp \frac{3}{2}\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ \mathcal{C}_{g6}^{2\mp}[i_{22}^{pQ}] &= \frac{1}{4} [\mp 2\tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} \mp 2\tilde{\Gamma}_{1\mp 2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + 2\bar{\epsilon}^{3/2}]. \end{aligned}$$

Ці результати узгоджуються з тим, що $i_{22}^{pQ} = -j_3^{pQ} + 3j_5^{pQ}$.

Комбінації C_{gk}^{2-} для функцій $\varphi^{p\mp}$. Тут наводимо результат для комбінацій внесків \oplus та \ominus , що стосуються $\varphi^{p\mp} \equiv \varphi^p \mp \varphi^{pQ}$. Їх легко отримуюємо, знайшовши різницю чи суму комбінацій C_{gk}^{2-} для функцій φ^p та φ^{pQ} . Зокрема, для φ^{p-} маємо:

$$\begin{aligned} C_{g4}^{2-}[j_3^{p-}] &= \frac{1}{4} \times 2\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}), \\ C_{g6}^{2-}[j_3^{p-}] &= \frac{1}{4} [\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} + 5\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - 2\bar{\epsilon}^{3/2}], \\ C_{g8}^{2-}[j_3^{p-}] &= \frac{1}{4} [\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}^2 + 5\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} + \frac{35}{2}\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - 9\bar{\epsilon}^{3/2}], \\ C_{g4}^{2-}[S_{1/2}^1 j_3^{p-}] &= \frac{1}{4} [-\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} - 2\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) + 2\bar{\epsilon}^{3/2}], \\ C_{g4}^{2-}[S_{3/2}^1 j_3^{p-}] &= \frac{1}{4} [-\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} + 2\bar{\epsilon}^{3/2}], \\ C_{g4}^{2-}[S_{1/2}^2 j_3^{p-}] &= \frac{1}{4} [\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}^2 + \bar{\epsilon}^{3/2}], \\ C_{g6}^{2-}[j_5^{p-}] &= \frac{1}{4} [\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} + 3\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - 2\bar{\epsilon}^{3/2}], \\ C_{g6}^{2-}[i_{22}^{p-}] &= \frac{1}{4} [2\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} + 4\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) - 4\bar{\epsilon}^{3/2}]. \end{aligned}$$

Для функцій φ^{p+} знаходимо:

$$\begin{aligned} C_{g4}^{2-}[j_3^{p+}] &= 0, \\ C_{g4}^{2-}[S_{1/2}^1 j_3^{p+}] &= \frac{1}{4} \tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}, \\ C_{g4}^{2-}[S_{3/2}^1 j_3^{p+}] &= \frac{1}{4} \tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}, \\ C_{g4}^{2-}[S_{1/2}^2 j_3^{p+}] &= \frac{1}{4} [-\tilde{\Gamma}_{1-2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}^2 - 2\bar{\epsilon}^{5/2}], \\ C_{g6}^{2-}[j_5^{p+}] &= \frac{1}{4} [-\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}], \\ C_{g6}^{2-}[i_{22}^{p+}] &= \frac{1}{4} [-2\tilde{\Gamma}_{1+2e}(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}]. \end{aligned}$$

D.3.3. Результати для парних індексів

Функції j_2^p . Для неї потрібно лише два характерні інтеграли:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{g3}^p[j_2^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 1, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}, \quad \otimes: [1 - e^{-\bar{\epsilon}}] \}, \\ \mathcal{J}_{g5}^p[j_2^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 2, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}(\bar{\epsilon} + 2), \quad \otimes: [2 - e^{-\bar{\epsilon}}(\bar{\epsilon} + 2)] \}. \end{aligned}$$

За їх допомогою знаходимо для добутку j_2^p із $S_{1/2}^1$:

$$\mathcal{J}_{g3}^p[S_{1/2}^1 j_2^p] = \frac{1}{4} \{ \oplus: -\frac{1}{2}, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}(-\bar{\epsilon} - \frac{1}{2}), \quad \otimes: [-\frac{1}{2} + e^{-\bar{\epsilon}}(\bar{\epsilon} + \frac{1}{2})] \}.$$

Для комбінацій внесків \oplus та \ominus знаходимо:

$$C_{g3}^{2\mp}[j_2^p] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad C_{g5}^{2\mp}[j_2^p] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -\bar{\epsilon} \\ \bar{\epsilon} + 4 \end{bmatrix}, \quad C_{g3}^{2\mp}[S_{1/2}^1 j_2^p] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} \bar{\epsilon} \\ -\bar{\epsilon} - 1 \end{bmatrix}. \quad (436)$$

Функції j_2^{pQ} у розрахунках не виникають явно.

Функції j_4^p . Зустрічається лише такий інтеграл:

$$\mathcal{J}_{g5}^p[j_4^p] = \frac{1}{4} \{ \oplus: 1, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}(\bar{\epsilon} + 1), \quad \otimes: [1 - e^{-\bar{\epsilon}}(\bar{\epsilon} + 1)] \}.$$

Характерні комбінації двох і трьох внесків дорівнюють:

$$C_{g5}^{2\mp}[j_4^p] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -\bar{\epsilon} \\ \bar{\epsilon} + 2 \end{bmatrix}, \quad C_{g5}^{3\mp}[j_4^p] = \frac{1}{4} \left\{ \mp 2e^{\bar{\epsilon}} \pm \bar{\epsilon} + \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \right\}.$$

Функції j_4^{pQ} . Для неї потрібно знати такий інтеграл, ф. (443):

$$\mathcal{J}_{g5}^{pQ}[j_4^{pQ}] = \frac{1}{4} \{ \oplus: e^{\bar{\epsilon}/2} \frac{1}{2} \bar{\epsilon} K_1(\bar{\epsilon}/2), \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}/2} \frac{1}{2} \bar{\epsilon} K_1(\bar{\epsilon}/2) \},$$

де K_1 — модифікована функція Бесселя другого роду, ф. (442). Характерні комбінації двох внесків дорівнюють:

$$C_{g5}^{2\mp}[j_4^{pQ}] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 0 \\ e^{\bar{\epsilon}/2} \bar{\epsilon} K_1(\bar{\epsilon}/2) \end{bmatrix}.$$

Комбінації C_{gk}^{3-} для функцій φ^{p-} . До них зводяться розрахунки внесків першого порядку до тензора напружень і потоку тепла, тому доречно подати їх разом для усіх функцій:

$$\begin{aligned} C_{g4}^{3-}[j_3^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) [1 - e^{-\bar{\epsilon}}], & (437) \\ C_{g6}^{3-}[j_3^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ \frac{5}{2} [1 - e^{-\bar{\epsilon}}] + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} \right\}, \\ C_{g8}^{3-}[j_3^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ \frac{35}{4} [1 - e^{-\bar{\epsilon}}] + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1-2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}^2 + \frac{5}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \bar{\epsilon}^{5/2} \right\}, \\ C_{g4}^{3-}[S_{1/2}^1 j_3^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ -1 + e^{-\bar{\epsilon}} - \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} \right\}, \\ C_{g4}^{3-}[S_{3/2}^1 j_3^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ -\frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} \right\}, \\ C_{g4}^{3-}[S_{1/2}^2 j_3^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1-2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon}^2 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \bar{\epsilon}^{5/2} \right\}, \\ C_{g6}^{3-}[j_5^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ \frac{3}{2} [1 - e^{-\bar{\epsilon}}] + \frac{1}{2} \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} \right\}, \\ C_{g6}^{3-}[i_{22}^{p-}] &= \frac{1}{2} \Gamma(\frac{3}{2}) \left\{ 2[1 - e^{-\bar{\epsilon}}] + \tilde{\Gamma}_{1+2e}^*(\frac{3}{2}; \bar{\epsilon}) \bar{\epsilon} \right\}. \end{aligned}$$

Наведімо ще потрібний результат для j_4^{p-} :

$$C_{g5}^{3+}[j_4^{p-}] = \frac{1}{4} \{ 2e^{\bar{\epsilon}} - \bar{\epsilon} - e^{\bar{\epsilon}/2} \bar{\epsilon} K_1(\bar{\epsilon}/2) \}. \quad (438)$$

D.3.4. Зведення деяких інтегралів до гамма-функцій

Для розрахунку $\mathcal{J}_{gk}^p[\varphi^{pQ}]$ потрібно знати такі інтеграли:

$$\mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^l] \equiv \int_0^\infty dc \theta^p(c) e^{-\bar{\mu}c^2} c^k [1 + p\bar{v}^2]^{l/2}, \quad (439)$$

де $p = \{\oplus, \ominus\}$, l непарне, $k \geq l$, $\bar{Q} \equiv \sqrt{1 + p\bar{v}^2}$ — безрозмірний корінь і $\bar{v} \equiv v/c$. Степінь \bar{Q} можна понизити до одиниці:

$$\mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^l] = \mathcal{J}_{ck}^p[(1 + p\bar{v}^2)^m \bar{Q}] = \sum_{r=0}^m C_m^r (p\bar{v}^2)^r \mathcal{J}_{c,k-2r}^p[\bar{Q}], \quad (440)$$

де $m \equiv (l-1)/2$. Для $l = 3; 5$ маємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^3] &= \mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}] + p\bar{v}^2 \mathcal{J}_{c,k-2}^p[\bar{Q}], \\ \mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^5] &= \mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}] + p2\bar{v}^2 \mathcal{J}_{c,k-2}^p[\bar{Q}] + \bar{v}^4 \mathcal{J}_{c,k-4}^p[\bar{Q}]. \end{aligned} \quad (441)$$

Непарні степені швидкості. Коли k непарне, $\mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^l]$ можна подати як лінійну комбінацію, ф. (440). Вирази (415) та (416) подаємо у вигляді $j_2^{pQ} = \frac{1}{2}[\bar{Q} + p\bar{v}^2 j_{-2}^{pQ}]$ та $j_4^{pQ} = \frac{1}{4}[\bar{Q}^3 - p\bar{v}^2 j_2^{pQ}]$, де $j_{-2}^{pQ} = \ln[(1 + \bar{Q})/\bar{v}]$. Звідси і з ф. (441) отримуємо для j_4^{pQ} :

$$\mathcal{J}_{ck}^p[j_4^{pQ}] = \frac{1}{4} \mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}] + p\frac{1}{8}v^2 \mathcal{J}_{c,k-2}^p[\bar{Q}] - \frac{1}{8}v^4 \mathcal{J}_{c,k-4}^p[j_{-2}^{pQ}];$$

для $k = 5$ маємо:

$$\mathcal{J}_{c5}^p[j_4^{pQ}] = \frac{1}{4} \mathcal{J}_{c5}^p[\bar{Q}] + p\frac{1}{8}v^2 \mathcal{J}_{c3}^p[\bar{Q}] - \frac{1}{8}v^4 \mathcal{J}_{c1}^p[j_{-2}^{pQ}].$$

Проте ці інтеграли можна виразити явно (як це зроблено у [18]) через модифіковані функції Бесселя другого роду $K_\nu(z)$, які мають, напр., таке інтегральне представлення [45]:

$$K_\nu(z) = \int_0^\infty dx e^{-z \cosh x} \cosh(\nu x). \quad (442)$$

Це досягається завдяки серії заміні змінних, які тут наводимо.

Заміни $t = \bar{v} \sinh x|_{\oplus}$ і $t = \bar{v} \cosh x|_{\ominus}$ приводять інтеграл $j_m^{pQ} \equiv \int_{t_p}^0 dt t^{m-2} \sqrt{t^2 + p\bar{v}}$ із $t_{\{\oplus, \ominus\}} = \{0; 1\}$ до вигляду:

$$j_m^{pQ} = \bar{v}^m \int_0^{x_p} dx \left\{ \begin{array}{l} \cosh^2 x \sinh^{m-2} x \\ \sinh^2 x \cosh^{m-2} x \end{array} \middle| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \end{array} \right\}, \quad x_p = \left\{ \begin{array}{l} \operatorname{arcsch} \bar{v}^{-1} \\ \operatorname{arcch} \bar{v}^{-1} \end{array} \middle| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \end{array} \right\}.$$

Надалі варіанти для $p = \{\oplus; \ominus\}$ беремо у фігурні дужки, а для різних m — у прямокутні. Для $m = \{2; 4\}$ знаходимо:

$$j_{\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 4 \end{smallmatrix}\right]}^{pQ} = \left[\begin{array}{c} \frac{1}{2}\bar{v}^2 \\ \frac{1}{4}\bar{v}^4 \end{array} \right] \int_0^{x_p} dx \left[\begin{array}{c} \cosh 2x + p \\ \cosh^2 2x - 1 \end{array} \right].$$

Заміна $g = \sqrt{\bar{\epsilon}q}$ в $\mathcal{J}_{gk}^p[j_m^{pQ}]$ дає:

$$\mathcal{J}_{gk}^p[j_m^{pQ}] = \bar{\epsilon}^{-\frac{k+1}{2}} \int_0^\infty dq \theta(\{q_{q-1}\}) e^{-\bar{\epsilon}q^2} q^k j_m^{pQ}(g = \sqrt{\bar{\epsilon}q})|_{\bar{v}=q^{-1}}.$$

Звідси одержуємо:

$$\mathcal{J}_{gk}^p[j_{\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 4 \end{smallmatrix}\right]}^{pQ}] = \bar{\epsilon}^{-\frac{k+1}{2}} \left[\begin{array}{c} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} \end{array} \right] \int_0^\infty dq \theta(\{q_{q-1}\}) e^{-\bar{\epsilon}q^2} \left[\begin{array}{c} q^{k-2} \\ q^{k-4} \end{array} \right] \int_0^{x_p} dx \left[\begin{array}{c} \cosh 2x + p \\ \cosh^2 2x - 1 \end{array} \right].$$

Змінюємо порядок інтегрування (нові межі — $x \in [0; +\infty)$ та $q \in [q_p; +\infty)$, де $q_{\{\oplus; \ominus\}} = \{\sinh x; \cosh x\}$) і вводимо заміни $y = \bar{\epsilon}q^2$ та $t = 2x$; внутрішній інтеграл являє собою функцію $\tilde{\Gamma}_2$:

$$\mathcal{J}_{gk}^p[j_{\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 4 \end{smallmatrix}\right]}^{pQ}] = \bar{\epsilon}^{\left[\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 4 \end{smallmatrix}\right]} \int_0^\infty dt \left[\begin{array}{c} \cosh t + p \\ \cosh^2 t - 1 \end{array} \right] \tilde{\Gamma}_2\left(\frac{1}{2}\left[\begin{smallmatrix} k-1 \\ k-3 \end{smallmatrix}\right]; y_p\right),$$

де $y_p = \frac{1}{2}\bar{\epsilon}[\cosh t - p]$. Для перших цілих значень аргумента функції $\tilde{\Gamma}_2$ знаходимо, ф. (449):

$$\tilde{\Gamma}_2\left(\left[\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \end{array}\right]; y_p\right) = e^{p\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} e^{-\frac{1}{2}\bar{\epsilon} \cosh t} \tilde{\gamma}_2\left(\left[\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \end{array}\right]; y_p\right),$$

$$\tilde{\gamma}_2\left(\left[\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \end{array}\right]; y_p\right) \equiv \left[\begin{array}{c} 1 \\ \frac{1}{2}\bar{\epsilon}(\cosh t - p) + 1 \\ \frac{1}{4}\bar{\epsilon}^2(\cosh^2 t - p2 \cosh t + 1) + \bar{\epsilon}(\cosh t - p) + 2 \end{array} \right].$$

Отже, кінцеві результати для різних k та $m = \{2; 4\}$ виражаються через такі характерні інтеграли:

$$\tilde{G}_{\left[\begin{smallmatrix} 2 \\ 4 \end{smallmatrix}\right]}(z; n) \equiv \int_0^\infty dt e^{-z \cosh t} \left[\begin{array}{c} \cosh t + p \\ \cosh^2 t - 1 \end{array} \right] \tilde{\gamma}_2(n; z[\cosh t - p]), \quad z = \frac{1}{2}\bar{\epsilon}.$$

Для $k = 5, m = 4$ знаходимо:

$$\tilde{G}_4(z; 1) = \frac{1}{2}[K_2(z) - K_0(z)] = K_1(z)/z,$$

де використано властивість $K_{\nu+1}(z) - K_{\nu-1}(z) = 2\nu z^{-1}K_\nu(z)$, [45]. Тоді для потрібного нам інтеграла маємо:

$$\mathcal{J}_{g5}^p[j_4^{pQ}] = e^{p\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \frac{1}{8}\bar{\epsilon} K_1\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right). \quad (443)$$

Парні степені швидкості. Для парного k інтеграл $\mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^l]$ зводиться до неповних гамма-функцій. Запишімо його у вигляді:

$$\mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^l] = \int_{\{0; v\}}^{\infty} dc e^{-\tilde{\mu}c^2} c^{k-l} [c^2 + pv^2]^{l/2}, \quad (444)$$

де 0 і v у нижній межі відповідають значенням $p = \oplus$ і \ominus . Ввівши у ф. (444) заміну $\tilde{\mu}c^2 = x$ і врахувавши, що $\tilde{\mu}v^2 = \bar{\epsilon}$, маємо:

$$\mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^l] = \frac{1}{2} \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} \int_{\{0; \bar{\epsilon}\}}^{\infty} dx e^{-x} x^{\frac{k-l-1}{2}} [x + p\bar{\epsilon}]^{l/2}. \quad (445)$$

Друга заміна $x + p\bar{\epsilon} = t$ зводить цей інтеграл до неповних гамма-функцій, якщо $n \equiv \frac{k-l-1}{2}$ — невід'ємне ціле число, тобто, коли k парне. В результаті отримуємо:

$$\mathcal{J}_{ck}^p[\bar{Q}^l] = \frac{1}{2} \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} e^{p\bar{\epsilon}} \sum_{s=0}^n C_n^s (-p\bar{\epsilon})^{n-s} \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Gamma}_2(s+1+\frac{l}{2}; \bar{\epsilon}) \\ \Gamma(s+1+\frac{l}{2}) \end{array} \middle| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \end{array} \right\}. \quad (446)$$

Бачимо, що результат більшою мірою залежить від різниці $k-l$. Для перших трьох значень n кінцева формула набуває вигляду:

$$\begin{aligned} n=0: & \quad \frac{1}{2} \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{l+2}{2}; \bar{\epsilon}) \\ e^{-\bar{\epsilon}} \Gamma(\frac{l+2}{2}) \end{array} \right\}, \\ n=1: & \quad \frac{1}{2} \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} \left\{ \begin{array}{l} -\tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{l+2}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} + \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{l+4}{2}; \bar{\epsilon}) \\ e^{-\bar{\epsilon}} [\Gamma(\frac{l+2}{2})\bar{\epsilon} + \Gamma(\frac{l+4}{2})] \end{array} \right\}, \\ n=2: & \quad \frac{1}{2} \tilde{\mu}^{-\frac{k+1}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{l+2}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon}^2 - 2\tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{l+4}{2}; \bar{\epsilon})\bar{\epsilon} + \tilde{\Gamma}_{2e}(\frac{l+6}{2}; \bar{\epsilon}) \\ e^{-\bar{\epsilon}} [\Gamma(\frac{l+2}{2})\bar{\epsilon}^2 + 2\Gamma(\frac{l+4}{2})\bar{\epsilon} + \Gamma(\frac{l+6}{2})] \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

D.4. Повна і неповні гамма-функції

Наведемо інтегральні означення повної і неповних гамма-функцій:

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{z-1}, \quad (447)$$

$$\Gamma_2(z; x) \equiv \int_0^x dt e^{-t} t^{z-1}, \quad \tilde{\Gamma}_2(z; x) \equiv \int_x^{\infty} dt e^{-t} t^{z-1}. \quad (448)$$

Функцію $\tilde{\Gamma}_2$ будемо називати доповненням неповної гамма-функції Γ_2 , оскільки

$$\Gamma_2(z; x) + \tilde{\Gamma}_2(z; x) = \Gamma(z).$$

Очевидно, що $\Gamma_2(z; +\infty) = \tilde{\Gamma}_2(z; 0) = \Gamma(z)$.

Деякі властивості. Для цілих додатніх $z = n$ гамма-функція зводиться до факторіала $\Gamma(n) = (n-1)!$, зокрема $\Gamma(2) = \Gamma(1) = 1$. Для півцілих значень аргумента $\Gamma(n + \frac{1}{2}) = \sqrt{\pi} \frac{(2n-1)!!}{2^n}$, зокрема $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$.

Інтегруючи у фф. (447) і (448) за частинами, отримуємо властивість $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ і рекурентні формули:

$$\Gamma_2(z+1; x) = z\Gamma_2(z; x) - e^{-x}x^z, \quad \tilde{\Gamma}_2(z+1; x) = z\tilde{\Gamma}_2(z; x) + e^{-x}x^z.$$

Знайшовши інтеграли (448) для $z=1$ і користуючись поданими співвідношеннями, знаходимо для наступних цілих z :

$$\begin{aligned} \Gamma_2(1; x) &= 1 - e^{-x}, & \tilde{\Gamma}_2(1; x) &= e^{-x}, \\ \Gamma_2(2; x) &= 1 - e^{-x}[1+x], & \tilde{\Gamma}_2(2; x) &= e^{-x}[1+x], \\ \Gamma_2(3; x) &= 2 - e^{-x}[2+2x+x^2], & \tilde{\Gamma}_2(3; x) &= e^{-x}[2+2x+x^2], \\ \Gamma_2(4; x) &= 6 - e^{-x}[6+6x+3x^2+x^3], & \tilde{\Gamma}_2(4; x) &= e^{-x}[6+6x+3x^2+x^3]. \end{aligned} \quad (449)$$

Так само функції від півцілих значень z виражаємо через відповідні значення від $\frac{3}{2}$, зокрема:

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_2(\frac{1}{2}; x) &= 2\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; x) - e^{-x}2x^{1/2}, & (450) \\ \tilde{\Gamma}_2(\frac{5}{2}; x) &= \frac{3}{2}\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; x) + e^{-x}x^{3/2}, \\ \tilde{\Gamma}_2(\frac{7}{2}; x) &= \frac{5}{2}\tilde{\Gamma}_2(\frac{5}{2}; x) + e^{-x}x^{5/2} = \frac{15}{4}\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; x) + e^{-x}[\frac{5}{2}x^{3/2} + x^{5/2}], \\ \tilde{\Gamma}_2(\frac{9}{2}; x) &= \frac{7}{2}\tilde{\Gamma}_2(\frac{7}{2}; x) + e^{-x}x^{7/2} = \frac{35}{4}\tilde{\Gamma}_2(\frac{5}{2}; x) + e^{-x}[\frac{7}{2}x^{5/2} + x^{7/2}] = \\ &= \frac{105}{8}\tilde{\Gamma}_2(\frac{3}{2}; x) + e^{-x}[\frac{35}{4}x^{3/2} + \frac{7}{2}x^{5/2} + x^{7/2}]. \end{aligned}$$

Комбінації $\tilde{\Gamma}_2$ -функцій. У записі результатів ми широко використовуємо позначення для комбінацій, у яких фігурує добуток $\tilde{\Gamma}_2$ з експонентою, та відповідних приведених комбінацій:

$$\tilde{\Gamma}_{2e}(z; x) \equiv e^x \tilde{\Gamma}_2(z; x), \quad (451)$$

$$\tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(z; x) \equiv \Gamma(z) \pm \tilde{\Gamma}_{2e}(z; x), \quad (452)$$

$$\tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}^*(z; x) \equiv \tilde{\Gamma}_{1\pm 2e}(z; x)/\Gamma(z) = 1 \pm e^x \tilde{\Gamma}_2(z; x)/\Gamma(z). \quad (453)$$

Література

1. Enskog D. Kinetische Theorie der Wärmeleitung Reibung und Selbstdiffusion in gewissen verdichteten Gasen und Flüssigkeiten. // Svenska Vetenskapsakad. Handl., 1922, **63**, p. 4.

2. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов, Москва, Изд. иностр. лит., 1960, 510 с.
3. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. Москва, Мир, 1976, 554 с.
4. Van Beijeren H., Ernst M.H. The modified Enskog equation. // *Physica (Utrecht)*, 1973, **68**, No 3, p. 437–456.
5. Résibois P. *H*-Theorem for the (modified) nonlinear Enskog equation. // *Phys. Rev. Lett.*, 1978, **40**, No 22, p. 1409–1411.
6. Résibois P. *H*-theorem for the (modified) nonlinear Enskog equation. // *J. Stat. Phys.*, 1978, **19**, No 6, p. 593–603.
7. Tham M.K., Gubbins K.E. Kinetic theory of multicomponent dense fluid mixtures of rigid spheres. // *J. Chem. Phys.*, 1971, **55**, No 1, p. 268–279.
8. Barajas L., García-Colín L.S., Piña E. On the Enskog-Thorne theory for a binary mixture of dissimilar rigid spheres.
9. Van Beijeren H., Ernst M.H. The modified Enskog equation for mixtures. // *Physica (Utrecht)*, 1973, **70**, p. 225–242.
10. Rice S.A., Allnatt A.R. On the kinetic theory of dense fluids. VI. Singlet distribution function for rigid spheres with an attractive potential. // *J. Chem. Phys.*, 1961, **34**, No 6, p. 2144–2155.
11. Wei Ching Cheng, Davis H.T. Kinetic Theory of Dense Fluid Mixtures. II. Solution to the Singlet Distribution Functions for the Rice-Allnatt Model. // *J. Chem. Phys.*, 1966, **45**, No 7, p. 2533–2544.
12. Karkheck J., Stell G. Kinetic mean-field theories. // *J. Chem. Phys.*, 1981, **75**, No 3, p. 1475–1787.
13. Stell G., Karkheck J., van Beijeren H. Kinetic mean-field theories: Results of energy constraint in maximizing entropy. // *J. Chem. Phys.*, 1983, **79**, No 6, p. 3166–3167.
14. Karkheck J., Stell G. Maximization of entropy, kinetic equations, and irreversible thermodynamics. // *Phys. Rev. A*, 1982, **25**, No 6, p. 3302–3327.
15. Karkheck J., Martina E., Stell G. Kinetic variational theory for mixtures: Kac-tail limit. // *Phys. Rev. A*, 1982, **25**, No 6, p. 3328–3334.
16. Karkheck J., Stell G., Xu J. Transport theory for the Lennard-Jones dense fluid. // *J. Chem. Phys.*, 1988, **89**, No 9, p. 5829–5833.
17. Dyer K.M., Pettitt B.M., Stell G. Systematic investigation of theories of transport in the Lennard-Jones fluid. // *J. Chem. Phys.*, 2007, **126**, 034502, 9 p.
18. Davis H.T., Rice S.A., Sengers J.V. On the kinetic theory of dense fluids. IX. The fluid of rigid spheres with a square-well attraction.

19. McLaughlin I.L., Davis H.T. Kinetic Theory of Dense Fluid Mixtures. I. Square-Well Model. // *J. Chem. Phys.*, 1966, **45**, No 6, p. 2020–2031.
20. Palyvos J., Luks K.D., McLaughlin I.L., Davis H.T. Kinetic Theory of Dense-Fluid Mixtures. IV. Square-Well Model Computations. // *J. Chem. Phys.*, 1967, **47**, No 6, p. 2082–2089.
21. Karkheck J., van Beijeren H., de Schepper I., Stell G. Kinetic theory and *H* theorem for a dense square-well fluid. // *Phys. Rev. A*, 1985, **32**, No 4, p. 2517–2520.
22. Van Beijeren H., Karkheck J., Sengers J.V. Nonequilibrium temperature and bulk viscosity for a dense fluid of square-well molecules. // *Phys. Rev. A*, 1988, **37**, No 6, p. 2247–2250.
23. Leegwater J.A., van Beijeren H., Michels P.J. Linear kinetic theory of the square-well fluid. // *J. Phys.: Condens. Matter*, 1989, **1**, No 1, p. 237–255.
24. Токарчук М.В., Омелян І.П. К кинетической теории процессов переноса в плотных газах. Препринт Ин-та теор. физики АН УССР, ИТФ-87-152Р, Киев, 1987, 36 с.
25. Токарчук М.В., Омелян І.П. Кинетическое уравнение для плотных систем с многоступенчатым межчастичным потенциалом. *H*-теорема. Препринт Ин-та теор. физики АН УССР, ИТФ-89-49Р, Киев, 1989, 40 с.
26. Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Kinetic equation for liquids with a multistep potential of interaction. *H*-theorem. // *Physica A*, 1996, **234**, p. 89–107.
27. Токарчук М.В., Омелян І.П. Модельні кінетичні рівняння для густих газів і рідин. // *Укр. фіз. журн.*, 1990, **35**, No 8, с. 1255–1261.
28. Tokarchuk M.V., Omelyan I.P., Kobryn A.E. Kinetic equation for liquids with a multistep potential of interaction: Calculation of transport coefficients. // *Phys. Rev. E*, 2000, **62**, No 6, p. 8021–8036.
29. Leegwater J.A. Kinetic theory of Lennard-Jones fluids. // *J. Chem. Phys.*, 1991, **95**, No 11, p. 8346–8356.
30. Токарчук М.В., Гуменюк Й.А. Виведення рівнянь гідродинаміки для густих сумішей газів зі сходявкою взаємодією між частинками. / Препринт ІФКС НАН України, ICMP-04-09U, Львів, 2004, 26 с.
31. Tokarchuk M.V., Humenyuk Y.A. Hydrodynamic equations for dense fluid mixtures with multistep interaction between particles. // *J. Chem. Phys.*, 1961, **35**, No 6, p. 2210–2233.

- // *Condens. Matter Phys.*, 2007, **10**, No 2(50), p. 151–163.
32. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика, Москва, Наука, 1971, 415 с.
 33. Зубарев Д.Н. Современные методы статистической теории неравновесных процессов. В: Итоги науки и техники. Современные проблемы математики, Москва, ВИНТИ, 1980, **15**, с. 131–226.
 34. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г. Формулировка граничных условий к цепочке Боголюбова с учетом локальных законов сохранения. // *Теор. мат. физ.*, 1984, **60**, No 2, с. 270–279.
 35. Зубарев Д.Н., Новиков М.Ю. Обобщенная формулировка граничного условия к уравнению Лиувилля и цепочке Б-Б-Г-К-И. // *Теор. мат. физ.*, 1972, **13**, No 3, с. 406–420.
 36. Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов, Москва, Наука, 1971, 331 с.
 37. Либов Р.Л. Введение в теорию кинетических уравнений, Москва, Мир, 1974, 371 с.
 38. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика, Москва, Мир, 1978, **1**, 405 с.; **2**, 400 с.
 39. Ernst M.H. Transport coefficients and temperature definition. // *Physica*, 1966, **32**, p. 252–272.
 40. García-Colín L.S., Green M.S. Definition of temperature in the kinetic theory of dense gases. // *Phys. Rev.*, 1966, **150**, No 1, p. 153–158.
 41. Nicolis G., Severne G. Nonstationary contributions to the bulk viscosity and other transport coefficients. // *J. Chem. Phys.*, 1966, **44**, No 4, p. 1477–1486.
 42. Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов (физические основы), Москва, Наука, 127 с.
 43. Tokarchuk M.V., Humenyuk Y.A. General expressions of the second-order approximation of the Chapman-Enskog method for the Enskog-Landau kinetic equation. // *Condensed Matter Physics*, 2000, **3**, No 4(24), p. 711–726.
 44. Lopez de Haro M., Cohen E.G.D., Kincaid J.M. The Enskog theory for multicomponent mixtures. I. Linear transport theory. // *J. Chem. Phys.*, 1983, **78**, No 5, p. 2746–2759.
 45. Корн Г.А., Корн Т.М. Справочник по математике для научных работников и инженеров, Москва, Наука, 1974, 831 с.
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavrukh, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>