

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/>)

Йосип Андрійович Гуменюк
Михайло Васильович Токарчук

ЛАНЦЮЖОК РІВНЯНЬ ПЕРЕНОСУ ГІДРОДИНАМІЧНОГО ТИПУ ДЛЯ СИСТЕМИ ЧАСТИНОК З ГЛАДКОЮ ЦЕНТРАЛЬНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

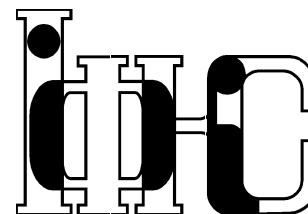
Роботу отримано 7 грудня 2006 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України
© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-06-24U

Гуменюк Й.А., Токарчук М.В.

ЛАНЦЮЖОК РІВНЯНЬ ПЕРЕНОСУ ГІДРОДИНАМІЧНОГО
ТИПУ ДЛЯ СИСТЕМИ ЧАСТИНОК З ГЛАДКОЮ
ЦЕНТРАЛЬНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

ЛЬВІВ

УДК: 532.5; 532.7; 533.7

PACS: 05.20.Jj; 05.60.Cd; 05.20.Dd

Ланцюжок рівнянь переносу гідродинамічного типу для системи частинок з гладкою центральною взаємодією

Гуменюк Й.А., Токарчук М.В.

Анотація. Представлено системний підхід до виведення гідродинамічних рівнянь переносу, заснований на використанні ланцюжка рівнянь ББГКІ. Розглянуто випадки багаточастинкової локальної та двочастинкової нелокальної гідродинамічних густин і подано явні вирази для внесків різних типів до їхніх потоків та джерел. Схему застосовано до набору густин збережуваних величин, отримано рівняння для їхніх потоків, котрі становлять перше розширення звичайної гідродинаміки. Передбачено принципову можливість наступних розширень і одержання нескінченного ланцюжка рівнянь гідродинамічного типу. Знайдено вигляд рівнянь переносу для тензора напружень і вектора теплового потоку у локальній рухомій системі відліку.

Hydrodynamic-type transport equation hierarchy for a system of particles with smooth central interaction

Humenyuk Y.A., Tokarchuk M.V.

Abstract. A systematic approach to derivation of hydrodynamic transport equations based on the BBGKY hierarchy is presented. Cases of many-particle local and two-particle nonlocal hydrodynamic densities are considered and explicit expressions for contributions of different types to their fluxes as well as sources are given. The scheme is applied to the set of conserved quantities. Equations for their fluxes are obtained, which form the first extension of the usual hydrodynamics. Principal possibility of next extensions resulting in an infinite hierarchy of equations of hydrodynamic type is predicted. Explicit transport equations for the stress tensor and the heat flux vector in the local frame of reference are written.

Зміст

1. Вступ	2
2. Феноменологічний підхід неперервного середовища	3
3. Функції розподілу і макроскопічні густини	6
3.1. Частинкові функції розподілу	7
3.2. Представлення локальних макроскопічних величин . . .	10
4. Рівняння переносу для локальних густин	11
4.1. Перехід до спряжених операторів	12
4.2. Симетризація	14
4.3. Об'єднання внесків	17
4.4. Аналіз рівняння переносу	18
5. Багаточастинкова локальна густина	22
5.1. Загальний випадок	22
5.2. Двочастинкова локальна густина	28
5.3. Рівняння переносу звичайної гідродинаміки	28
6. Нелокальна двочастинкова густина	30
6.1. Друге рівняння ланцюжка	31
6.2. Симетризація двочастинкового внеску	33
6.3. Результат симетризації тричастинкових внесків	35
6.4. Об'єднання внесків	36
6.5. Підсумок	37
7. Перше розширення рівнянь звичайної гідродинаміки	38
7.1. Рівняння для потоку імпульсу	38
7.2. Потік енергії	40
7.3. Аналогії з ланцюжком ББГКІ	44
8. Перехід до лягранжевого опису	46
8.1. Аналіз гідродинамічних величин	47
8.2. Перетворення рівнянь переносу	49
8.3. Обговорення рівнянь опису Лягранжа	52
9. Висновки	53
Література	55

1. Вступ

Питання про виведення рівнянь переносу для макроскопічних густин, що описують газ чи рідину, є традиційним у кінетичній теорії. Вперше воно розглядалося Максвелом [1] для газу, молекули якого вважаються точковими відштовхувальними центрами з потенціалом, обернено пропорційним до четвертого степеня відстані між ними (див. напр. [2]).

З одного боку, ці рівняння для густин маси, імпульсу та енергії можна отримати з феноменологічного розгляду [3, 4] (для довільної густини системи), а з другого, вони мають виводитися [5–7] з того чи іншого кінетичного рівняння для одночастинкової функції розподілу, яке однак має обмеження області свого застосування, зокрема по густині.

Тут присутні дві обставини. Для кожного кінетичного рівняння зі своїм інтегралом зіткнень потрібно наново виводити рівняння переносу, ґрунтуючись при цьому на симетричних властивостях цього інтеграла зіткнень. Друге те, що останній записано, використовуючи певні наближення, і отже, отримані в результаті рівняння переносу, з явними виразами для потоків, також є наближеними. Тому на окремому увагу заслуговує питання отримати ці гідродинамічні рівняння переносу, виходячи з таких позицій, що містили б якнайменшу кількість припущень чи наближень. Видається логічним розвивати підхід до проблеми не на основі конкретного (і наближеного) кінетичного рівняння, а за допомогою його точного відповідника — першого рівняння ланцюжка ББГКІ.

Виходячи з таких передумов, у препринті здійснено виведення рівнянь переносу для класичних газу чи рідини з плавним міжчастинковим потенціалом взаємодії, виходячи з єдиних загальних позицій і за відправний пункт взявши ланцюжок зачеплених рівнянь ББГКІ. Подальший виклад організовано у вигляді трьох логічно окремих частин, по кілька параграфів кожна, і прикінцевих висновків.

У першій частині — вступній або підготовчій — крім цього вступу (§1), коротко описано феноменологічний підхід неперервного середовища і детальніше сформульовано ідею роботи (§2), та приділено увагу частинковим функціям розподілу, ланцюжку рівнянь ББГКІ для них і представленню макроскопічних густин через ці функції (§3).

Друга частина — основна — містить систематичне виведення рівнянь переносу для локальних одночастинкових (§4), локальних багаточастинкових (§5) та нелокальних двочастинкових густин (§6) з

ілюстративним застосуванням отриманих здобутків.

У третій частині загальні результати другої застосовано до питання розширення рівнянь звичайної гідродинаміки і виведено рівняння переносу для *потоків* імпульсу та енергії (§7). Перехід до опису в локальній рухомій системі координат, опису Ляг'ранжа, для звичайного і розширеного набору гідродинамічних параметрів подано в § 8.

Завершують виклад висновки, що стосуються роботи в цілому, і перелік використаних джерел.

2. Феноменологічний підхід неперервного середовища

На гідродинамічному рівні опису газ чи рідина розглядається як неперервне середовище, яке описують за допомогою густин макроскопічних величин — густин маси ρ (або числа частинок n), імпульсу \mathbf{p} та енергії e чи параметрів, що безпосередньо через них визначаються. Найчастіше замість густин імпульсу та енергії використовують масову (гідродинамічну) швидкість \mathbf{V} і температуру T , які з термодинамічної точки зору є інтенсивними параметрами. Всі ці величини вважають параметрично залежними від часу t функціями неперервних координат $\{r_x, r_y, r_z\} \equiv \mathbf{r}$, заданими в об'ємі V , у якому перебуває рідина чи газ: $\rho(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$, $e(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$.

У такому підході повністю нехтується дискретна атомно-молекулярна природа флюїду і опис ведеться засобами теорії неперервного середовища. Система розглядається як розподілений у просторі континуум, а перелічені функції є польовими величинами [3, 4]. При розвитку теорії ніяк не використовують атомно-молекулярних аргументів.

На основі такого континуального уявлення про рідину чи газ засобами математичної теорії поля можна отримати рівняння переносу для введених польових величин. У нерухомій для спостерігача системі відліку рівняння переносу для густин маси, імпульсу та енергії мають наступний вигляд [3, 4]:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\mathbf{V} \rho) = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t \mathbf{p} + \nabla \cdot (\mathbf{V} \mathbf{p} + \mathbf{P}) = \rho \mathbf{F}^{\text{ext}}, \quad (2)$$

$$\partial_t e + \nabla \cdot (\mathbf{V} e + \mathbf{P} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}) = \rho \mathbf{F}^{\text{ext}} \cdot \mathbf{V}. \quad (3)$$

де $\partial_t \equiv \partial/\partial t$, $\nabla \equiv \partial/\partial \mathbf{r}$. $\mathbf{V} = \mathbf{p}/\rho$ — гідродинамічна швидкість, \mathbf{P} — тензор напружень, \mathbf{F}^{ext} — зовнішня сила, що діє на одиницю маси, \mathbf{q} — вектор теплового потоку. Усі залежать від \mathbf{r} і t . Важливо, що

система рівнянь (1)–(3) незамкнута, оскільки явний вигляд функцій $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ і $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ не відомий.

Розгляньмо ситуацію зі загальних позицій, ведучи розгляд у нерухомій системі відліку. Нехай A — довільна адитивна фізична величина скалярного типу, яка стосується всієї системи. Позначмо через $a(\mathbf{r}, t)$ її локальну густину:

$$\int_V d\mathbf{r} a(\mathbf{r}, t) = A(t), \quad (4)$$

так, що $a(\mathbf{r}, t)\delta V$ задає кількість величини A у фізично малому елементі об'єму δV біля точки \mathbf{r} в момент часу t .

З теорії неперервного середовища відомо, що густина $a(\mathbf{r}, t)$ задовольняє таке рівняння балансу [3, 4, 8]:

$$\partial_t a(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}_a(\mathbf{r}, t) = s_a(\mathbf{r}, t), \quad (5)$$

де \mathbf{J}_a — густина потоку через одиничну площадку, а s_a — інтенсивність джерел і стоків у одиниці об'єму, які стосуються величини A .

Внески до \mathbf{J}_a та s_a можна розділити на два типи. Ті, що зумовлені іззовні або зовнішніми полями сил (*external*) і ті, що зумовлені внутрішніми міжмолекулярними процесами у системі (*internal*):

$$\mathbf{J}_a = \mathbf{J}_a^{\text{int}} + \mathbf{J}_a^{\text{ext}}, \quad (6)$$

$$s_a = s_a^{\text{int}} + s_a^{\text{ext}}. \quad (7)$$

Крім того, як можна бачити зі системи (1)–(3), внесок до потоку $\mathbf{J}_a^{\text{int}}$, викликаний внутрішніми процесами, можна подати у вигляді двох складових — конвективної $\mathbf{J}_a^{\text{conv}} = \mathbf{V}a$, що зумовлена рухом флюїду в точці \mathbf{r} з гідродинамічною швидкістю $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ і властиво молекулярної (завдяки хаотичному тепловому рухові частинок на тлі регулярного гідродинамічного):

$$\mathbf{J}_a^{\text{int}} = \mathbf{J}_a^{\text{conv}} + \mathbf{J}_a^{\text{mol}}. \quad (8)$$

В результаті, рівняння переносу (5) можна подати у розгорнутому вигляді так:

$$\partial_t a + \nabla \cdot [\mathbf{J}_a^{\text{conv}} + \mathbf{J}_a^{\text{mol}} + \mathbf{J}_a^{\text{ext}}] = s_a^{\text{int}} + s_a^{\text{ext}}. \quad (9)$$

Наступний частковий випадок дає можливість глянути на рівняння гідродинаміки (1)–(3) під потрібним нам кутом зору — в контексті збережуваності величин. Розгляньмо флюїд за умови відсутності

зовнішніх сил. В цьому разі рівняння переносу для a набуває вигляду:

$$\partial_t a + \nabla \cdot [\mathbf{J}_a^{\text{conv}} + \mathbf{J}_a^{\text{mol}}] = s_a^{\text{int}}. \quad (10)$$

Якщо величина A не виробляється і не витрачається всередині системи, то відповідне джерело рівне нулю $s_a^{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = 0$ в кожній точці \mathbf{r} в довільний момент часу t . Саме так є для густин величин, що зберігаються, тобто для густини маси $\rho(\mathbf{r}, t)$, імпульсу $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ та повної енергії $e(\mathbf{r}, t)$. Тому їх називають повільними змінними і вони природньо утворюють базис (набір функцій) для опису найповільніших гідродинамічних процесів у нерівноважному флюїді.

Як вже було зазначено, у рівняння переносу для $\{\rho, \mathbf{p}, e\}$ входять невідомі величини

$$\mathbf{J}_p^{\text{mol}} \equiv \mathbf{P}, \quad \mathbf{J}_e^{\text{mol}} \equiv \mathbf{q}.$$

Явні залежності від \mathbf{r} і t для них отримують або завдяки певним феноменологічним припущенням, або звертаючись до ширшої — наприклад, кінетичної — теорії. З другого боку, можна усвідомити, що величини $\{\rho, \mathbf{p}, e\}$ утворюють лише *перший* рівень гідродинамічного опису.

Можна піти далі, розширивши набір функцій — і тим самим, систему гідродинамічних рівнянь — додавши до неї рівняння переносу для невідомих потоків $\mathbf{J}_p^{\text{mol}}, \mathbf{J}_e^{\text{mol}}$. Оскільки ці додаткові величини не є густинами збережувальних величин, то, на протигагу першому рівню, їхні рівняння переносу міститимуть джерела внутрішнього типу $s^{\text{int}} \neq 0$ у правій частині. Можна зробити припущення, записавши для кожного з повних потоків $\mathbf{J}_p, \mathbf{J}_e$ рівняння на основі загального виразу (10), підставивши туди \mathbf{J}_a замість a :

$$\partial_t \mathbf{J}_a + \nabla \cdot \mathbf{J}_{\mathbf{J}_a}^{\text{int}} = \mathbf{s}_{\mathbf{J}_a}^{\text{int}}. \quad (11)$$

Ці рівняння утворюватимуть *другий* рівень гідродинамічного опису флюїду з невідомими функціями $\mathbf{J}_{\mathbf{J}_a}^{\text{int}}, \mathbf{s}_{\mathbf{J}_a}^{\text{int}}$. Задавши їх (завдяки припущенням чи якимось по-іншому), ми замкнемо рівняння переносу другого рівня. В результаті розширена система гідродинамічних рівнянь не міститиме невідомих величин, тобто буде замкнута, але вже на другому рівні опису.

Проте, можна не робити замикання, а повторити схему знову. Поряд з невідомими потоками $\mathbf{J}_{\mathbf{J}_a}^{\text{int}}$ невідомими є і джерела $\mathbf{s}_{\mathbf{J}_a}^{\text{int}}$. Тому потрібно записати рівняння переносу і для них. Продовжуючи і далі, отримуємо в результаті *нескінченний ланцюжок* рівнянь переносу *гідродинамічного* типу, який буде ускладнюватися завдяки двом факторам:

а) зростанню тензорного рангу потоків та джерел наступного рівня опису порівняно з попереднім;

б) появі рівнянь переносу для джерел, які, у свою чергу, міститимуть нові невідомі потоки цих джерел і джерела цих джерел, залишаючи систему рівнянь незамкнутою.

Наявність зовнішніх полів, наприклад, потенціального типу, не порушуватиме загальної структури ланцюжка гідродинамічних рівнянь, даючи лише свій питомий внесок у відповідні потоки і джерела. (Як буде виявлено, зовнішнє потенціальне поле дає внески лише в джерела.)

Оскільки підхід неперевного середовища у великій мірі ґрунтується на експериментальних відомостях і аргументах феноменологічного характеру, то краще будувати теорію вищих рівнів гідродинамічного опису на основі добре розвинутої мікроскопічної теорії. Ми розглянемо це питання на основі атомно-молекулярних уявлень, застосовуючи метод функцій розподілу. Метою буде отримати рівняння переносу наступних рівнів гідродинамічного опису, виразивши явно вищі потоки і джерела через s -частинкові функції розподілу, які задовольняють ланцюжок рівнянь ББГКІ.

3. Функції розподілу і макроскопічні густини

Ми будемо розглядати систему N класичних частинок, що взаємодіють за допомогою парних центральних сил з гладким потенціалом $\phi(r_{ij})$, поміщену в зовнішнє поле $U(\mathbf{r})$. Функція Гамільтона системи має традиційний вигляд:

$$H(x_1, \dots, x_N) = H^0(\mathbf{v}^N) + \phi_N(\mathbf{r}^N) + U_N(\mathbf{r}^N), \quad (12)$$

де кінетична частина H^0 гамільтоніана, N -частинковий потенціал взаємодії ϕ_N і потенціал частинок у полі зовнішніх сил U_N рівні:

$$H^0(\mathbf{v}^N) = \sum_{i=1}^N H_i^0(\mathbf{v}_i) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m v_i^2, \quad (13)$$

$$\phi_N(\mathbf{r}^N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1(\neq i)}^N \phi(r_{ij}), \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, \quad (14)$$

$$U_N(\mathbf{r}^N) = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i). \quad (15)$$

Задля зручності подальшого викладу ми традиційно, як у кінетичній теорії, вибираємо залежність функцій не від канонічних змінних

$\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\}$, а від просторових координат і від швидкостей $x_i \equiv \{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i\}$. Також, при потребі, будемо вживати скорочені позначення:

$$\mathbf{r}^N \equiv \{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}, \quad \mathbf{v}^N \equiv \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N\}, \quad x^N \equiv \{x_1, \dots, x_N\}.$$

Зауважмо, що для вигляду гамільтоніана (12)–(15), функції H^0 і U_N подаються як суми одночастинкових внесків, коли ж у внеску (14) підсумування ведеться по всім можливим впорядкованим парам (i, j) частинок. Функцію $\phi(r)$ парної взаємодії вважатимемо диференційовною необхідну кількість раз, що і буде означати *гладкість* міжчастинкового потенціала.

3.1. Частинкові функції розподілу

N -частинкова функція розподілу $\varrho(x^N, t)$ є функцією фазових координат x^N , а від часу залежить параметрично. Вона задовольняє замкнуте рівняння Ліувіля

$$\partial_t \varrho(x^N, t) = L_N \varrho(x^N, t) \quad (16)$$

й умову нормування на одиницю:

$$\int dx^N \varrho(x^N, t) = 1. \quad (17)$$

N -частинковий оператор Ліувіля L_N означається через дужки Пуансона $[\cdot, \cdot]_P$ з гамільтоніаном [7]:

$$L_N \varrho \stackrel{\text{df}}{=} [H, \varrho]_P \equiv \sum_{i=1}^N \{ \nabla_i H \cdot \partial_{\mathbf{p}_i} \varrho - \partial_{\mathbf{p}_i} H \cdot \nabla_i \varrho \}, \quad (18)$$

де $\nabla_i = \partial/\partial \mathbf{r}_i$, $\partial_{\mathbf{p}_i} = \partial/\partial \mathbf{p}_i$. Серед інших, запис рівняння Ліувіля у вигляді (16) вигідний тим, що виражає похідну від функції ϱ по параметру t через оператор Ліувіля, який містить похідні по її аргументах x^N .

Для випадку парного центрального потенціала, який ми розглядаємо, функція $\varrho(x_1, \dots, x_N, t)$ симетрична відносно перестановки довільних двох своїх аргументів x_i, x_j :

$$\varrho(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots, t) = \mathcal{P}_{x_i x_j} \varrho(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots, t), \quad (19)$$

де введено позначення для операції перестановки координат між собою:

$$\mathcal{P}_{x_i x_j} \varrho(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots, t) \stackrel{\text{df}}{=} \varrho(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots, t). \quad (20)$$

Приведені s -частинкові функції розподілу f_s вводяться через $\varrho(x^N, t)$ за допомогою співвідношень [7]:

$$f_s(x^s, t) \stackrel{\text{df}}{=} \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{s+1} \dots dx_N \varrho(x_1, \dots, x_N, t), \quad (21)$$

які дещо відрізняються від введених Боголюбовим [9, 10].

Перша з ряду, одночастинкова функція розподілу $f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t)$, описує розподіл частинок по швидкостях в даній точці простору \mathbf{r}_1 в момент часу t . Умову нормування для неї можна розписати так:

$$\int d\mathbf{v}_1 f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) = n(\mathbf{r}_1, t), \quad \int d\mathbf{r}_1 n(\mathbf{r}_1, t) = N, \quad (22)$$

де $n(\mathbf{r}_1, t)$ — густина числа частинок.

Двочастинкова функція розподілу $f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t)$ пропорційна до густини імовірності одночасного розташування двох частинок в точках \mathbf{r}_1 та \mathbf{r}_2 зі швидкостями \mathbf{v}_1 і \mathbf{v}_2 , відповідно, в момент часу t . Як відомо, вона є симетричною функцією фазових змінних x_1, x_2 :

$$f_2(x_1, x_2, t) = f_2(x_2, x_1, t). \quad (23)$$

Умова нормування для неї має вигляд

$$\int dx_1 dx_2 f_2(x_1, x_2, t) = N(N-1), \quad (24)$$

що задає кількість впорядкованих пар частинок у системі.

Врешті, s -частинкова функція розподілу $f_s(x^s, t)$ описує густину імовірності конфігурації s частинок з фазовими координатами x_1, \dots, x_s . Вона симетрична відносно перестановки будь-яких двох фазових змінних між собою:

$$f_s(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots, t) = \mathcal{P}_{x_i x_j} f_s(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots, t), \quad (25)$$

і задовольняє умову нормування:

$$\int dx^s f_s(x^s, t) = \frac{N!}{(N-s)!}. \quad (26)$$

Проінтегрована по всіх координатах f_s дає в результаті кількість всеможливих впорядкованих комбінацій (j_1, j_2, \dots, j_s) з s частинок, які можна утворити з N частинок.

Симетрійні властивості й умови нормування для приведених функцій розподілу слідує з їхніх означень та відповідних властивостей функції розподілу $\varrho(x^N, t)$.

Як відомо, функції $f_s(x^s, t)$ задовольняють ланцюжок рівнянь ББГКІ [9, 10], який для гладких міжчастинкових потенціалів має добре відомий вигляд (див. також [2, 6, 7]):

$$\partial_t f_1(x_1) = [L_1^0 + L_1^U] f_1(x_1) + \int dx_2 \Theta_{12} f_2(x_1, x_2), \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \partial_t f_2(x_1, x_2) &= [L_1^0 + L_1^U + L_2^0 + L_2^U + \Theta_{12}] f_2(x_1, x_2) + \\ &+ \int dx_3 [\Theta_{13} + \Theta_{23}] f_3(x_1, x_2, x_3), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \partial_t f_s(x^s) &= \left[\sum_{i=1}^s (L_i^0 + L_i^U) + \sum_{i=1}^s \sum_{j>i}^s \Theta_{ij} \right] f_s(x^s) + \\ &+ \sum_{i=1}^s \int dx_{s+1} \Theta_{i,s+1} f_{s+1}(x^{s+1}), \end{aligned} \quad (29)$$

де

$$L_i^0 = -\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i, \quad (30)$$

$$L_i^U = -\mathbf{F}_i^U \cdot \boldsymbol{\partial}_i, \quad (31)$$

$$\Theta_{ij} = \frac{1}{m} \nabla_i \phi(r_{ij}) \cdot \boldsymbol{\partial}_i + \frac{1}{m} \nabla_j \phi(r_{ji}) \cdot \boldsymbol{\partial}_j. \quad (32)$$

Тут $\mathbf{F}_i^U \equiv \mathbf{F}^U(\mathbf{r}_i) = -\frac{1}{m} \nabla_i U(\mathbf{r}_i)$ — сила, з якою зовнішнє поле діє на одиничну масу, $\boldsymbol{\partial}_i \equiv \partial/\partial \mathbf{v}_i$.

Оскільки потенціал взаємодії ϕ сферично-симетричний, то

$$\nabla_i \phi(r_{ij}) = -\nabla_j \phi(r_{ji}), \quad (33)$$

до того ж, градієнт потенціала виражається через вектор відносного розташування частинок i та j :

$$\nabla_i \phi(r_{ij}) = \phi'(r_{ij}) \hat{r}_{ij}, \quad \nabla_j \phi(r_{ji}) = \phi'(r_{ji}) \hat{r}_{ji}, \quad (34)$$

де $\phi'(r) = \partial \phi(r)/\partial r$, $\hat{r} = \mathbf{r}/r$ — одиничний вектор в напрямку \mathbf{r} . Тоді оператор Θ_{ij} можна подати у вигляді:

$$\Theta_{ij} = \Theta_\phi(\mathbf{r}_{ij}) \cdot \boldsymbol{\partial}_{ij}, \quad (35)$$

де $\Theta_\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{m} \phi'(r) \hat{r}$ — векторна функція, *непарна* по \mathbf{r} , а $\boldsymbol{\partial}_{ij} \equiv \boldsymbol{\partial}_i - \boldsymbol{\partial}_j$.

Ця формула дає детальніші відомості про особливості оператора Θ_{ij} . А саме, він представляється як скалярний добуток векторної

функції $\Theta_\phi(\mathbf{r}_{ij})$ (що антисиметрично залежить від перестановки індексів $i \neq j$) на векторний (диференціальний) оператор ∂_{ij} , теж антисиметричний відносно цієї перестановки. У результаті, оператор Θ_{ij} виходить симетричний відносно $i \neq j$, що також видно з його означення (32). Особливість (35) відіграє суттєву роль в наступних параграфах при виведенні рівнянь переносу.

3.2. Представлення локальних макроскопічних величин

Макроскопічні величини можна виразити через частинкові функції розподілу. Зокрема, густина маси $\rho(\mathbf{r}, t)$, імпульсу $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ та кінетичної енергії $e^k(\mathbf{r}, t)$ виражаються лише через одночастинкову функцію розподілу $f_1(x_1, t)$:

$$\begin{bmatrix} \rho(\mathbf{r}_1, t) \\ \mathbf{p}(\mathbf{r}_1, t) \\ e^k(\mathbf{r}_1, t) \end{bmatrix} \stackrel{\text{df}}{=} \int d\mathbf{v}_1 f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) \begin{bmatrix} m \\ m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \langle m \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 \\ \langle m\mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 \\ \langle \frac{1}{2}mv_1^2 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 \end{bmatrix}. \quad (36)$$

Такі й подібні макроскопічні величини можна назвати одночастинковими.

Густина потенціальної енергії міжчастинкової взаємодії виражається через $f_2(x_1, x_2, t)$:

$$e^p(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \frac{1}{2} \int d\mathbf{v}_1 dx_2 f_2(x_1, x_2, t) \phi(r_{12}) \equiv \langle \frac{1}{2}\phi(r_{12}) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2. \quad (37)$$

Множник $\frac{1}{2}$ введено для того, щоб густина $e^p(\mathbf{r}_1, t)$, проінтегрована по макроскопічній малій області δV дала енергію потенціальної взаємодії частинок, що їй належать. Величини з подібним представленням можна назвати двочастинковими.

Продовжуючи далі, розгляньмо загальну ситуацію для деякої макроскопічної густини a , що має внески до S -го порядку включно:

$$a(\mathbf{r}_1, t) = \sum_{k=1}^S a_k(\mathbf{r}_1, t), \quad (38)$$

$$a_k(\mathbf{r}_1, t) = \langle \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k, \quad (39)$$

де $\psi_a^k(x^k, t)$ — молекулярна характеристика k -частинкового внеску до макроскопічної величини $a(\mathbf{r}_1, t)$ і для операції усереднення характеристики ψ_a^k з k -частинковою функцією розподілу введено позначення:

$$\langle \psi \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k \stackrel{\text{df}}{=} \int d\mathbf{v}_1 dx_2 \dots dx_k f_k(x^k, t) \psi. \quad (40)$$

У верхньому індексі біля знака усереднення вказано номер функції, а в нижньому — перелік аргументів, за якими проводиться інтегрування. Тут ми по суті застосовуємо до макроскопічних густин підхід, використаний в монографії [7] для представлення термодинамічних та гідродинамічних величин.

Наведемо ще для прикладу вигляд молекулярних характеристик для величин, означених у виразах (22), (36) та (37):

$$\begin{bmatrix} \psi_n^1 \\ \psi_\rho^1 \\ \psi_p^1 \\ \psi_{e^k}^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ m \\ m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix}, \quad \psi_{n,\rho,\mathbf{p},e^k}^k = 0, \quad k \geq 2, \quad (41)$$

$$\begin{bmatrix} \psi_{e^p}^1 \\ \psi_{e^p}^2 \\ \psi_{e^p}^3 \\ \dots \\ \psi_{e^p}^S \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{2}\phi(r_{12}) \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (42)$$

Маючи явні вирази для всіх характеристик ψ_a^k , ми можемо однозначно подати величину a у вигляді (38), (39). Для одних макроскопічних величин ці характеристики легко визначити відразу, для інших — їх треба ще встановити. Зазвичай, виникає потреба розглядати величини, що мають лише кілька перших кількочастинкових внесків, відмінних від нуля.

Якщо макроскопічну величину можна подати у вигляді (38), (39), то кажуть [7], що вона має *локальне представлення* через частинкові функції розподілу. Тут скажемо, що не всі величини можна так подати. Існують такі, що мають інше функціональне вираження через частинкові функції розподілу, і пізніше доведеться мати справу також з *нелокальними* представленнями макроскопічних величин.

4. Рівняння переносу для локальних густин

Виведення рівняння переносу для довільної локальної k -частинкової величини буде представлено пізніше, а зараз ми розглянемо схему виведення на прикладі одночастинкової густини:

$$a_1(\mathbf{r}_1, t) = \int d\mathbf{v}_1 f_1(x_1, t) \psi_a^1(x_1, t) \equiv \langle \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (43)$$

де ми припускаємо найзагальнішу з можливих ситуацій, коли ψ_a^1 залежить від \mathbf{r}_1 , \mathbf{v}_1 і t . Отже, величина a_1 залежить від часу через ψ_a^1

та f_1 :

$$\partial_t a_1(\mathbf{r}_1, t) = \langle \partial_t \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \langle \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^{\partial_t f_1}, \quad (44)$$

де

$$\langle \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^{\partial_t f_1} \equiv \int d\mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1, t) \partial_t f_1(x_1, t).$$

Для цього доданка використаємо перше рівняння (27) ланцюжка ББГКІ з результатом:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^{\partial_t f_1} &= \int d\mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1, t) [L_1^0 + L_1^U] f_1(x_1) + \\ &+ \int d\mathbf{v}_1 dx_2 \psi_a^1(x_1, t) \Theta_{12} f_2(x_1, x_2). \end{aligned} \quad (45)$$

Права частина цього виразу містить крім одночастинкового ще й двочастинковий внесок $\sim f_2$. Подальше її перетворення проводиться у два етапи. Перший базується на представленні виразів через оператори, спряжені до тих, що фігурують у формулі (45). Другий етап полягає в тому, щоб подати отриманий на першому етапі результат як дивергенцію деякого вектора плюс залишок. Для двочастинкового внеску це робиться за допомогою відомої процедури симетризації (див. напр. [2]). Здійснивши ці завдання, ми прийдемо до бажаної цілі і розглянемо випадки рівнянь переносу для конкретних локальних одночастинкових густин.

4.1. Перехід до спряжених операторів

Зараз ми введемо кілька означень, які дещо формалізують подальший виклад, а тому зроблять його доволі загальним і ясним. Введемо означення скалярного добутку двох функцій ψ та f , залежних від \mathbf{v} :

$$(\psi, f)_{\mathbf{v}} \stackrel{\text{df}}{=} \int d\mathbf{v} \psi(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}). \quad (46)$$

Розглядувані нами функції завжди будуть такі, що інтеграл, який означає скалярний добуток, буде скінченний. Для даного оператора $\hat{O}_{\mathbf{v}}$, що діє на функції від \mathbf{v} , означмо за допомогою наступного співвідношення спряжений оператор $\hat{O}_{\mathbf{v}}^\dagger$ відносно введеного (46) скалярного добутку:

$$(\psi, \hat{O}_{\mathbf{v}} f)_{\mathbf{v}} \stackrel{\text{df}}{=} (\hat{O}_{\mathbf{v}}^\dagger \psi, f)_{\mathbf{v}} = \int d\mathbf{v} [\hat{O}_{\mathbf{v}}^\dagger \psi(\mathbf{v})] f(\mathbf{v}). \quad (47)$$

Аналогічно вводиться скалярний добуток функцій ψ , f , залежних від двох змінних \mathbf{v} , \mathbf{u} :

$$(\psi, f)_{\mathbf{v}\mathbf{u}} \stackrel{\text{df}}{=} \int d\mathbf{v} d\mathbf{u} \psi(\mathbf{v}, \mathbf{u}) f(\mathbf{v}, \mathbf{u}). \quad (48)$$

Означення оператора, спряженого до даного $\hat{O}_{\mathbf{v}\mathbf{u}}$, котрий діє на функції від \mathbf{v} та \mathbf{u} , вводиться подібно до попереднього випадку:

$$(\psi, \hat{O}_{\mathbf{v}\mathbf{u}} f)_{\mathbf{v}\mathbf{u}} \stackrel{\text{df}}{=} (\hat{O}_{\mathbf{v}\mathbf{u}}^\dagger \psi, f)_{\mathbf{v}\mathbf{u}} = \int d\mathbf{v} d\mathbf{u} [\hat{O}_{\mathbf{v}\mathbf{u}}^\dagger \psi(\mathbf{v}, \mathbf{u})] f(\mathbf{v}, \mathbf{u}). \quad (49)$$

За допомогою введених означень скалярних добутків, вираз (45) набуває форми:

$$\langle \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^{\partial_t f_1} = (\psi_a^1, L_1^0 f_1)_{\mathbf{v}_1} + (\psi_a^1, L_1^U f_1)_{\mathbf{v}_1} + (\psi_a^1, \Theta_{12} f_2)_{\mathbf{v}_1 x_2}. \quad (50)$$

Перший доданок правої частини з $L_1^0 = -\mathbf{v}_1 \cdot \nabla_1$ можна переписати так:

$$(\psi_a^1, L_1^0 f_1)_{\mathbf{v}_1} = -\nabla_1 \cdot \langle \mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 - \langle L_1^0 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1. \quad (51)$$

Другий доданок з L_1^U можна перетворити, записавши через спряжений оператор $L_1^{U\dagger} = \mathbf{F}_1^U \cdot \partial_1 = -L_1^U$. Для цього треба провести інтегрування по частинах з використанням тієї властивості, що функція f_1 перетворюється в нуль при $|\mathbf{v}_1| \rightarrow +\infty$. Тоді

$$(\psi_a^1, L_1^U f_1)_{\mathbf{v}_1} = (L_1^{U\dagger} \psi_a^1, f_1)_{\mathbf{v}_1} = \langle L_1^{U\dagger} \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1. \quad (52)$$

В останньому доданку виразу (50) оператор Θ_{12} діє на функції від \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 і його записуємо через спряжений подібно до випадку з L_1^U (ще треба також використати, що f_2 швидко прямує до нуля при $|\mathbf{v}_1|, |\mathbf{v}_2| \rightarrow +\infty$). В результаті маємо, що

$$\int d\mathbf{r}_2 (\psi_a^1, \Theta_{12} f_2)_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2} = \int d\mathbf{r}_2 (f_2, \Theta_{12}^\dagger \psi_a^1)_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2} = \langle \Theta_{12}^\dagger \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2, \quad (53)$$

де спряжений оператор дорівнює

$$\Theta_{12}^\dagger = \Theta_{\phi}^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot \partial_{12} = -\Theta_{12}, \quad (54)$$

а $\Theta_{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{m} \phi'(r) \hat{r} = \Theta_{\phi}(\mathbf{r})$ — векторна функція, непарна по \mathbf{r} . (Порівнюючи з формулою (35) для Θ_{ij} бачимо, що у виразі (54) взято зворотній порядок індексів у аргументі функції Θ_{ϕ}^\dagger .)

Підставляючи отримані результати (51), (52), (53) у праву частину початкового виразу (45) знайдемо:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^{\partial_t f_1} &= -\nabla_1 \cdot \langle \mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 - \langle L_1^0 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \\ &+ \langle L_1^U \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \langle \Theta_{12}^\dagger \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2. \end{aligned} \quad (55)$$

Оскільки мета виведення полягає в тому, щоб надати рівнянню переносу вигляду, продиктованого відповідним феноменологічним рівнянням (5), то далі ми спробуємо подати внесок, що містить Θ_{12}^\dagger , у вигляді суми дивергенції деякого вектора плюс залишок, який буде віднесено до джерела. Як вже було згадано, це здійснюється на основі процедури симетризації, схему якої викладено у наступному підпараграфі.

4.2. Симетризація

Сама ідея цієї процедури спирається на симетрію (54) оператора Θ_{12}^\dagger відносно переставляння індексів та на симетричну властивість (23) двочастинкової функції розподілу f_2 . А причина першого і другого — у сферичній симетрії міжчастинкового парного потенціала.

Отже, розгляньмо останній доданок правої частини виразу (55):

$$\langle \Theta_{12}^\dagger \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2 = \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 f_2(x_1, \mathbf{r}_1 + \mathbf{R}, \mathbf{v}_2) \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^1(x_1, t), \quad (56)$$

де було введено нову змінну $\mathbf{R} \equiv \mathbf{r}_{21}$. Далі здійснюємо традиційні маніпуляції [2, 5–7].

Перепозначмо “німі” змінні $\mathbf{v}_1 \rightleftharpoons \mathbf{v}_2$, а від змінної інтегрування \mathbf{R} перейдімо до нової змінної $\mathbf{R}' = -\mathbf{R}$. Якобіан такого переходу рівний одиниці:

$$|J_{\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}'}| = 1. \quad (57)$$

Вираз (56) набуває вигляду:

$$\int d\mathbf{R}' |J_{\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}'}| d\mathbf{v}_2 d\mathbf{v}_1 f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}', \mathbf{v}_1) \Theta_\phi^\dagger(-\mathbf{R}') \cdot \partial_{21} \psi_a^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2, t). \quad (58)$$

Переставмо в ньому пари аргументів у f_2 (згідно властивості (23)), позначмо \mathbf{R}' через \mathbf{R} і врахуймо непарність функції Θ_ϕ^\dagger :

$$\int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2) \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2, t). \quad (59)$$

Після проведених перетворень отриманий вираз тотожний до початкового (56). Взявши їх півсуму, можемо записати:

$$\begin{aligned} \langle \Theta_{12}^\dagger \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \left[f_2(x_1, \mathbf{r}_1 + \mathbf{R}, \mathbf{v}_2) \times \right. \\ &\times \partial_{12} \psi_a^1(x_1, t) + f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2) \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2, t) \left. \right]. \end{aligned} \quad (60)$$

Останній крок — віднімемо і додаймо до виразу у квадратних дужках комбінацію

$$f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2) \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, t). \quad (61)$$

Прийдемо до такого результату:

$$\begin{aligned} \langle \Theta_{12}^\dagger \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \left\{ \left[f_2(x_1, \mathbf{r}_1 + \mathbf{R}, \mathbf{v}_2) \times \right. \right. \\ &\times \partial_{12} \psi_a^1(x_1, t) - f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2) \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, t) \left. \right] + \\ &+ \left[\partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2, t) + \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, t) \right] f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (62)$$

Далі, розгляньмо нарізно кожен з двох великих доданків у фігурних дужках.

Дівергенція потоку

Перший з них, що містить різницю добутоків $f_2 \partial_{12} \psi_a^1$ можна представити через різницю δ -функцій:

$$\int d\mathbf{x} \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1) - \delta(\mathbf{x} - [\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}]) \} f_2(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, \mathbf{x} + \mathbf{R}, \mathbf{v}_2) \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t). \quad (63)$$

Різницю δ -функцій у свою чергу можна записати через дивергенцію по \mathbf{r}_1 за допомогою інтегрування по параметру:

$$\delta(\mathbf{x} - [\mathbf{r}_1 + \mathbf{y}]) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1) = \nabla_{\mathbf{r}_1} \cdot \mathbf{y} \int_0^1 d\lambda \delta(\mathbf{x} - [\mathbf{r}_1 + \lambda \mathbf{y}]). \quad (64)$$

Використавши це співвідношення у виразі (63) й інтегруючи по $d\mathbf{x}$ прийдемо до такого:

$$\nabla_1 \cdot \mathbf{R} \int_0^1 d\lambda f_2(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda] \mathbf{R}, \mathbf{v}_2) \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, t). \quad (65)$$

Тоді результат для першого доданка у фігурних дужках правої частини виразу (62) набуває вигляду:

$$\nabla_1 \cdot \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot [\partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{v}_1, t)] f_2(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_{2\lambda}, \mathbf{v}_2), \quad (66)$$

де введено такі позначення:

$$\mathbf{r}_{1\lambda} \equiv \mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, \quad \mathbf{r}_{2\lambda} \equiv \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda] \mathbf{R}. \quad (67)$$

У наступних формулах ми будемо ще вживати позначення $x_{1\lambda} \equiv \{\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{v}_1\}$ і подібні (див. вираз (68) та ін.).

Як бачимо, у виразі (66) усереднення робиться з f_2 , але ще є інтегрування по параметру λ і по відносній координаті \mathbf{R} частинки 2 відносно частинки 1. Ще залежність від λ міститься в $\psi_a^1(x_{1\lambda}, t)$, а комбінація $\mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})$ може бути винесена при потребі за знак інтегрування по λ . Таке середнє ми будемо позначати особливо, дописуючи $(\mathbf{R}\lambda)_{12}$ до нижніх індексів знака усереднення. Отже, вираз (66) має такий скорочений запис:

$$\nabla_1 \cdot \langle \frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^1(x_{1\lambda}, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 (\mathbf{R}\lambda)_{12}}. \quad (68)$$

Завдяки інтегруванню по параметру λ і відносній координаті, отримане середнє суттєво відрізняється за своєю формою від введеного раніше локального середнього (40). Тут для кожного фіксованого набору аргументів $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{R}\}$ існує континуум розташувань частинок 1 і 2, що задається неперервним параметром λ , які дають внесок у це середнє. Зараз і надалі, коли макроскопічна величина, внаслідок своєї природи, подається у формі такого *нелокального середнього*, будемо про неї казати, що вона має *нелокальне представлення*. (Щоб відрізнити його від локального представлення макровеличин, введеного у параграфі 3.2 за допомогою формули (39)). Деякі фізичні макроскопічні величини, що будуть зустрічатися далі, мають представлення у вигляді суми (можливо кількох) локальних та нелокальних внесків.

Джерело

Тепер візьмімося за другий доданок виразу (62)

$$\frac{1}{2} \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \left(\partial_{12} [\psi_a^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2, t) + \psi_a^1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, t)] \right) \times \quad (69) \\ \times f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2)$$

і надаймо йому зручного і яснішого вигляду. А саме, зробимо у ньому тотожні перетворення, зворотні до тих, які було застосовано раніше:

а) переставмо пари аргументів $\{\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}, \mathbf{v}_1\}$ і $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2\}$ у функції f_2 ;

б) перепозначмо $\mathbf{v}_1 \rightleftharpoons \mathbf{v}_2$;

в) перейдімо до нової змінної $\mathbf{R}' = -\mathbf{R}$ і після переходу знову позначмо її через \mathbf{R} .

В результаті, використавши непарність функції $\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})$, ми прийдемо до виразу

$$\frac{1}{2} \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \left(\partial_{12} [\psi_a^1(x_1, t) + \psi_a^1(x_2, t)] \right) f_2(x_1, \mathbf{r}_1 + \mathbf{R}, \mathbf{v}_2), \quad (70)$$

який можна, підставивши $\mathbf{R} = \mathbf{r}_{21}$, записати як середнє:

$$\langle \frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot \partial_{12} [\psi_a^1(x_1, t) + \psi_a^1(x_2, t)] \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2}. \quad (71)$$

Додавши кінцеві результати (68) та (71) для обох доданків правої частини виразу (62) можемо записати:

$$\langle \Theta_{12}^\dagger \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2}^2 = \nabla_1 \cdot \langle \frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^1(x_{1\lambda}, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 (\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2 + \\ + \langle \frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot \partial_{12} [1 + \mathcal{P}_{x_1 x_2}] \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2}^2, \quad (72)$$

де $\mathcal{P}_{x_1 x_2}$ позначає перестановку змінних x_1 та x_2 , як було означено у співвідношенні (20). Це кінцева форма для останнього доданка виразу (55).

4.3. Об'єднання внесків

Врешті, підставляючи вираз (55) з кінцевим результатом (72) для доданка $\sim \Theta_{12}^\dagger$ у вираз (44), одержимо рівняння переносу для одночастинкової величини $a_1(\mathbf{r}_1, t)$:

$$\partial_t a_1(\mathbf{r}_1, t) = \langle \partial_t \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 - \nabla_1 \cdot \langle \mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 - \quad (73) \\ - \langle L_1^0 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \langle L_1^{U\dagger} \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \\ + \nabla_1 \cdot \langle \frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^1(x_{1\lambda}, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 (\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2 + \\ + \langle \frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot \partial_{12} [1 + \mathcal{P}_{x_1 x_2}] \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2}^2.$$

Доданки у правій частині ідентифікуємо з внесками у потік (2 і 5-ий) та в джерело (1, 3, 4 і 6-ий).

Введімо для них такі позначення:

$$\mathbf{J}_{a_1}^{k,1}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (74)$$

$$\mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^1(x_{1\lambda}, t) \rangle_{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2(\mathbf{R})_{12}}^2 \quad (75)$$

— відповідно, одночастинковий внесок у потік, зумовлений рухом частинок зі швидкістю \mathbf{v}_1 , який тому називають кінетичним або потоковим (streaming) внеском та двочастинковий (потенціальний) внесок завдяки парній міжчастинковій взаємодії і фактору залежності ψ_a^1 від \mathbf{v}_1 ;

$$s_{a_1}^t(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \partial_t \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (76)$$

$$s_{a_1}^{r,1}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle -L_1^0 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 = \langle \mathbf{v}_1 \cdot \nabla_1 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (77)$$

$$s_{a_1}^{U,1}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle L_1^U \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 = \langle \mathbf{F}_1^U \cdot \partial_1 \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (78)$$

$$s_{a_1}^{\phi,12}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r}_{21}) \cdot \partial_{12} [1 + \mathcal{P}_{x_1 x_2}] \psi_a^1(x_1, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2 \quad (79)$$

— відповідно, одночастинкові внески в джерело, зумовлені залежністю ψ_a^1 від часу t (76) і від просторової координати \mathbf{r}_1 (77), а також внаслідок наявності зовнішнього поля U і залежності ψ_a^1 від \mathbf{v}_1 (78); $s_{a_1}^{\phi,12}$ — двочастинковий внесок у джерело завдяки міжчастинковій взаємодії. У верхніх індексах величин \mathbf{J}_{a_1} і s_{a_1} вказано, завдяки якому фактору виникає цей внесок і частинки, від яких він походить.

У цих позначеннях рівняння переносу (73) для a_1 запишеться так (порівняй з рівнянням (5)):

$$\partial_t a_1 + \nabla_1 \cdot [\mathbf{J}_{a_1}^{k,1} + \mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12}] = s_{a_1}^t + s_{a_1}^{r,1} + s_{a_1}^{U,1} + s_{a_1}^{\phi,12}. \quad (80)$$

Або, опускаючи деякі елементи позначень, можемо подати ще компактнішу форму цього рівняння:

$$\partial_t a_1 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_1}^{k+\phi} = s_{a_1}^{t+r+U+\phi}. \quad (81)$$

4.4. Аналіз рівняння переносу

Ми не робили припущень відносно молекулярної характеристики ψ_a^1 , хіба що вимагали скінченність її середнього з f_1 та f_2 , що виконується у фізично цікавих випадках. Тому отримане рівняння переносу (80) є досить загальним і відображає характерні особливості структури рівнянь переносу такого типу для різноманітних одночастинкових величин, що описують класичну систему з центральної парною міжчастинковою взаємодією. Зокрема, наприклад, зовнішнє

поле $U(\mathbf{r})$ потенціального типу не дає внеску в потік густини a_1 — тільки в джерело.

Рівняння (80) містить поряд з одночастинковими і двочастинковими середніми — потік $\mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12}(\mathbf{r}_1, t)$ і джерело $s_{a_1}^{\phi,12}(\mathbf{r}_1, t)$. Хоч воно формально точне, але є незамкнутим відносно одночастинкової функції розподілу, подібно як незамкнутим є перше рівняння ланцюжка ББГКІ, з котрого його виведено. І лише за допомогою функціональної гіпотези для f_2 або заміни правої частини першого рівняння ланцюжка ББГКІ на замкнутий відносно f_1 інтеграл зіткнень (як це зазвичай є у кінетичній теорії), можна добитися замкнутості рівняння переносу (80) стосовно f_1 . Тоді все виведення слід здійснювати, виходячи з кінетичного рівняння для f_1 , а не з першого рівняння ланцюжка.

Молекулярні характеристики для потоків і джерел

Стосовно внесків до потоків та джерел можемо зауважити, що співвідношення (74)–(79) є властиво означеннями для них. Зіставляючи означення (40) з цими виразами, ототожнюємо для кожного молекулярну характеристику:

$$\psi_{\mathbf{J}_{a_1}^{k,1}}^1(x_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1, t), \quad (82)$$

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12}}^2(x_1, x_2, t) \stackrel{\text{df}}{=} -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^1(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{v}_1, t), \quad (83)$$

$$\psi_{s_{a_1}^t}^1(x_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \partial_t \psi_a^1(x_1, t), \quad (84)$$

$$\psi_{s_{a_1}^{r,1}}^1(x_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} -L_1^0 \psi_a^1(x_1, t) = \mathbf{v}_1 \cdot \nabla_1 \psi_a^1(x_1, t), \quad (85)$$

$$\psi_{s_{a_1}^{U,1}}^1(x_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} L_1^U \psi_a^1(x_1, t) = \mathbf{F}_1^U \cdot \partial_1 \psi_a^1(x_1, t), \quad (86)$$

$$\begin{aligned} \psi_{s_{a_1}^{\phi,12}}^2(x_1, x_2, t) &\stackrel{\text{df}}{=} \frac{1}{2} \Theta_{\phi}^{\dagger}[1 + \mathcal{P}_{x_1 x_2}] \psi_a^1(x_1, t) = \\ &= \frac{1}{2} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r}_{21}) \cdot \partial_{12} [1 + \mathcal{P}_{x_1 x_2}] \psi_a^1(x_1, t). \end{aligned} \quad (87)$$

У формулі (83) хвилькою над $\tilde{\psi}_{\mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12}}^2$ позначено те, що ця молекулярна характеристика усереднюється “нелокально” згідно виразу (75).

Подаймо тут же короткі зауваження, що слідує з виразів для потоків (74), (75) та джерел (76)–(79) або з виразів (82)–(87). Потоки:

к) для довільного $\psi_a^1 \neq 0$, завжди $\mathbf{J}_{a_1}^{k,1} \neq 0$;

ф) потік $\mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12} = 0$, якщо $\partial_{12} \psi_a^1 = 0$, тобто якщо ψ_a^1 не залежить від \mathbf{v}_1 .

Джерела:

т) якщо ψ_a^1 не залежить від часу, то $s_{a_1}^t = 0$;

r) якщо ψ_a^1 не залежить від \mathbf{r}_1 , то $s_{a_1}^{r,1} = 0$;
 U) $s_{a_1}^{U,1} = 0$ у двох випадках: коли U не залежить від \mathbf{r}_1 або коли ψ_a^1 не залежить від \mathbf{v}_1 ;
 ϕ) джерело $s_{a_1}^{\phi,12} = 0$, якщо виконується умова, що слідує з виразів (79) або (87):

$$\partial_1 \psi_a^1(x_1, t) - \partial_2 \psi_a^1(x_2, t) = 0;$$

це може бути, якщо $\psi_a^1(x_i, t)$ не залежить від \mathbf{v}_i , або якщо $\psi_a^1(x_i, t)$ є однорідною функцією першого ступеня відносно \mathbf{v}_i , наприклад:

$$\psi_a^1(x_i, t) = \alpha(\mathbf{r}_i, t) \mathbf{v}_i. \quad (88)$$

Коли характеристика ψ_a^1 не задовольняє цієї умови, то відповідне джерело $s_a^{\phi,12} \neq 0$.

З останнього зауваження зокрема слідує, що для густин маси з $\psi_\rho^1 = m$ та імпульсу з $\psi_{\mathbf{p}}^1 = m\mathbf{v}_1$ відповідні джерела рівні нулю

$$s_\rho^{\phi,12} = 0, \quad \mathbf{s}_{\mathbf{p}}^{\phi,12} = 0, \quad (89)$$

а для густини кінетичної енергії з $\psi_{e^k}^1 = \frac{1}{2}mv_1^2$ — ні: $s_{e^k}^{\phi,12} \neq 0$.

Часткові випадки вигляду рівняння переносу

Розгляньмо як впливає фактор залежності молекулярної характеристики ψ_a^1 від \mathbf{r}_1 , \mathbf{v}_1 і t на вигляд отриманого рівняння переносу (80), навівши три часткові випадки, коли ψ_a^1 не залежить: від \mathbf{r}_1 ; від \mathbf{v}_1 ; від \mathbf{r}_1 , \mathbf{v}_1 і часу t .

v) випадок $\psi_a^1 = \psi_a^1(\mathbf{v}_1, t)$:

$$\partial_t a_1 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_1}^{k+\phi} = s_{a_1}^{t+U+\phi}, \quad (90)$$

r) випадок $\psi_a^1 = \psi_a^1(\mathbf{r}_1, t)$:

$$\partial_t a_1 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_1}^k = s_{a_1}^{t+r}, \quad (91)$$

c) випадок $\psi_a^1 = \text{const}$:

$$\partial_t a_1 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_1}^k = 0. \quad (92)$$

Вигляд цих рівнянь відразу слідує з наведених вище зауважень стосовно потоків і джерел.

Рівняння (91) можна перетворити далі, розглянувши явні вирази для потоку і джерела. З виразів (74), (76) та (77) знаходимо, що

$$\mathbf{J}_{a_1}^k = \psi_a^1(\mathbf{r}_1, t) \mathbf{J}_n^k, \quad s_{a_1}^t = [\partial_t \psi_a^1(\mathbf{r}_1, t)] n, \quad s_{a_1}^r = [\nabla_1 \psi_a^1(\mathbf{r}_1, t)] \cdot \mathbf{J}_n^k, \quad (93)$$

де вектор потоку числа частинок \mathbf{J}_n^k введено нижче після рівняння (95). Бачимо, що рівняння переносу у випадку r) повністю визначається функціями $n(\mathbf{r}_1, t)$ та $\mathbf{J}_n^k(\mathbf{r}_1, t) = \mathbf{p}(\mathbf{r}_1, t)/m$ (для яких нижче отримуються відповідні рівняння) і тому не міститиме нових невідомих середніх. Очевидно, такий же висновок стосується і випадку c).

Застосуємо тепер здобуті результати до густин ρ , \mathbf{p} , e^k та e^U .

ρ) Молекулярна характеристика для *густини маси* є константою (41), тому згідно рівняння (92) маємо:

$$\partial_t \rho + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_\rho^{k,1} = 0, \quad (94)$$

де $\mathbf{J}_\rho^{k,1} = \mathbf{p}$, що слідує з виразу (74). Інших внесків до потоку нема. Джерел нема. Для густини числа частинок n рівняння буде таке:

$$\partial_t n + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_n^{k,1} = 0, \quad (95)$$

де $\mathbf{J}_n^{k,1} = \mathbf{J}_n^{k,1}/m = \mathbf{p}/m$.

\mathbf{p}) Молекулярна характеристика для *густини імпульсу* є лінійною функцією швидкості (41), тому згідно рівняння (90) маємо:

$$\partial_t \mathbf{p} + \nabla_1 \cdot [\mathbf{J}_\mathbf{p}^{k,1} + \mathbf{J}_\mathbf{p}^{\phi,12}] = \mathbf{s}_\mathbf{p}^{U,1}, \quad (96)$$

де потоки $\mathbf{J}_\mathbf{p}^{k,1}$, $\mathbf{J}_\mathbf{p}^{\phi,12}$ є тензорами другого рангу і дорівнюють згідно виразів (74), (75):

$$\mathbf{J}_\mathbf{p}^{k,1} = \langle m \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}, \quad \mathbf{J}_\mathbf{p}^{\phi,12} = \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) m \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 (\mathbf{R}\lambda)_{12}}. \quad (97)$$

Як вже було відзначено у формулі (89), $\mathbf{s}_\mathbf{p}^{\phi,12} = 0$, а внесок у джерело від зовнішнього поля згідно виразу (78) рівний $\mathbf{s}_\mathbf{p}^{U,1} = \rho \mathbf{F}_1^U$. Цікаво, що внесок $\mathbf{J}_\mathbf{p}^{\phi,12}$ визначається за допомогою лише координатної функції розподілу $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \stackrel{\text{df}}{=} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 f_2(x_1, x_2, t)$ з додатковим інтегруванням по параметру λ .

e^k) Молекулярна характеристика $\psi_{e^k}^1$ для *густини кінетичної енергії* є квадратичною функцією швидкості (41), тому згідно рівняння (90) маємо:

$$\partial_t e^k + \nabla_1 \cdot [\mathbf{J}_{e^k}^{k,1} + \mathbf{J}_{e^k}^{\phi,12}] = s_{e^k}^{U,1} + s_{e^k}^{\phi,12}, \quad (98)$$

де потоки і джерела визначаються виразами (74), (75) та (78), (79):

$$\mathbf{J}_{e^k}^{k,1} = \langle \frac{1}{2} m v_1^2 \mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad \mathbf{J}_{e^k}^{\phi,12} = \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot m \mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 (\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2, \quad (99)$$

$$s_{e^k}^{U,1} = \mathbf{F}_1^U \cdot \mathbf{p}, \quad s_{e^k}^{\phi,12} = \langle \frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot m [\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2] \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2. \quad (100)$$

e^U) Рівняння переносу для *густини потенціальної енергії* $e^U = \langle U(\mathbf{r}_1) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1$ системи у зовнішньому полі отримуються безпосередньо з рівняння (91) для випадку r зі зауваженнями (93):

$$\partial_t e^U + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{e^U}^{k,1} = s_{e^U}^{r,1}, \quad (101)$$

де

$$\mathbf{J}_{e^U}^{k,1} = U(\mathbf{r}_1) \mathbf{J}_n^{k,1}, \quad s_{e^U}^{r,1} = -m \mathbf{F}_1^U \cdot \mathbf{J}_n^{k,1} = -\mathbf{F}_1^U \cdot \mathbf{p}. \quad (102)$$

Також його можна вивести, стартуючи з рівняння (95) для n , оскільки

$$\partial_t e^U = U(\mathbf{r}_1) \partial_t n. \quad (103)$$

Тут ми обмежимося одним зауваженням. Як видно з формул (100) та (102), внески (різного типу) до джерел кінетичної та потенціальної енергій компенсують одне одного:

$$s_{e^k}^{U,1} = -s_{e^U}^{r,1}, \quad (104)$$

тобто густина кінетичної енергії зростає (зменшується) завдяки зменшенню (зростанню) густини потенціальної енергії у полі зовнішніх сил. Нижче буде отримано ще одну компенсаційну рівність, що стосується внесків $s_{e^k}^{\phi,12}$ та $s_{e^U}^r$.

5. Багаточастинкова локальна густина

5.1. Загальний випадок

Схема виведення рівняння переносу для доданка $a_k(\mathbf{r}_1, t)$ суми (38) повністю подібна до розглянутої в попередньому параграфі для одностинкового внеску a_1 . Тут ми дамо загальне виведення і розглянемо частковий випадок $k = 2$.

За допомогою рівнянь (39), (40) знаходимо, що

$$\partial_t a_k(\mathbf{r}_1, t) = \langle \partial_t \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k + \langle \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k \partial_t f_k, \quad (105)$$

де

$$\langle \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k \partial_t f_k \equiv \int d\mathbf{v}_1 dx_2 \dots dx_k \psi_a^k(x^k, t) \partial_t f_k(x^k, t).$$

Підставмо тут замість $\partial_t f_k$ праву частину k -го рівняння (29) ланцюжка ББГКІ:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k \partial_t f_k &= \\ &= \sum_{i=1}^k \int d\mathbf{v}_1 dx_2 \dots dx_k \psi_a^k(x^k, t) [L_i^0 + L_i^U] f_k(x^k) + \\ &+ \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \int d\mathbf{v}_1 dx_2 \dots dx_k \psi_a^k(x^k, t) \Theta_{ij} f_k(x^k) + \\ &+ \sum_{i=1}^k \int d\mathbf{v}_1 dx_2 \dots dx_k dx_q \psi_a^k(x^k, t) \Theta_{iq} f_q(x^q) \Big|_{q=k+1}. \end{aligned} \quad (106)$$

Виведення

Як і в § 4, ми можемо виразити праву частину через спряжені оператори $L_i^{U\dagger}$, Θ_{ij}^\dagger , Θ_{iq}^\dagger , а для доданка з L_i^0 застосувати тотожність, аналогічну до (51). Ще зваживши на те, що по $\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k$ (крім \mathbf{r}_1) провадиться інтегрування, то доданок типу

$$\int d\mathbf{r}_i [-\nabla_i \cdot \langle \mathbf{v}_i \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_i}^k], \quad (107)$$

що з'являється від L_i^0 , можна подати за формулою Остроградського у вигляді інтеграла по поверхні, яка обмежує об'єм V системи. Вважаючи, що $f_k = 0$ на межі об'єму, подібні доданки перетворюються в нуль. Залишиться лише внесок, подібний до другого члена правої частини виразу (51):

$$\int d\mathbf{r}_i [-\langle L_i^0 \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_i}^k]. \quad (108)$$

В результаті, після переходу до спряжених операторів, вираз (106) набуде форми:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k \partial_t f_k &= -\nabla_1 \cdot \langle \mathbf{v}_1 \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k + \\ &+ \sum_{i=1}^k \langle [-L_i^0 + L_i^{U\dagger}] \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k \end{aligned} \quad (109)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \langle \Theta_{ij}^\dagger \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k + \\
& + \sum_{i=1}^k \langle \Theta_{iq}^\dagger \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k x_q}^q \Big|_{q=k+1}.
\end{aligned}$$

Середні значення у двох останніх доданках треба симетризувати, подібно до одночастинкового випадку, використовуючи тут симетричні властивості (25) функцій розподілу f_k , f_{k+1} та операторів Θ_{ij}^\dagger , $\Theta_{i,k+1}^\dagger$. Розгляньмо для прикладу перший з двох доданків:

$$\begin{aligned}
\langle \Theta_{ij}^\dagger \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k &= \int d\{*\} d\mathbf{r}_i d\mathbf{R} d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \\
&\cdot [\partial_{ij} \psi_a^k(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i + \mathbf{R}, \mathbf{v}_j, t)] f_k(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i + \mathbf{R}, \mathbf{v}_j),
\end{aligned} \quad (110)$$

де введено заміну $\mathbf{R} = \mathbf{r}_{ji}$, а значок * позначає всі решта змінні, крім x_i, x_j . Наприклад, в $d\{*\}$ він означає

$$* \equiv \{\mathbf{v}_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_k\}.$$

Після маніпуляцій, пов'язаних з перепозначенням “німих” змінних $\mathbf{v}_i \rightleftharpoons \mathbf{v}_j$, переходом до нової змінної $\mathbf{R}' = -\mathbf{R}$ і т.д., цілком аналогічних до проведених у § 4, одержимо праву частину виразу (110) у вигляді:

$$\begin{aligned}
\int d\{*\} d\mathbf{r}_i d\mathbf{R}' d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}') \cdot \\
\cdot [\partial_{ij} \psi_a^k(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}', \mathbf{v}_i, t)] f_k(*, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}', \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j).
\end{aligned} \quad (111)$$

Зауважмо, що тут використано лише симетрію функції f_k , а порядок аргументів у ψ_a^k залишається *незмінний*.

Позначивши німу змінну \mathbf{R}' через \mathbf{R} і взявши півсуму виразів (110) та (111), прийдемо до результату:

$$\begin{aligned}
\langle \Theta_{ij}^\dagger \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k &= \frac{1}{2} \int d\{*\} d\mathbf{r}_i d\mathbf{R} d\mathbf{v}_i d\mathbf{v}_j \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \\
&\cdot \left([\partial_{ij} \psi_a^k(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i + \mathbf{R}, \mathbf{v}_j, t)] f_k(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i + \mathbf{R}, \mathbf{v}_j) + \right. \\
&+ \left. [\partial_{ij} \psi_a^k(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}, \mathbf{v}_i, t)] f_k(*, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j) \right).
\end{aligned} \quad (112)$$

Далі віднімаємо і додаємо у круглих дужках комбінацію

$$[\partial_{ij} \psi_a^k(*, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j)] f_k(*, \mathbf{r}_i - \mathbf{R}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j),$$

об'єднуючи комбінацію з мінусом із першим доданком, а ту, що з плюсом — з другим доданком.

Діючи як у § 4, різницю комбінацій $[\partial_{ij} \psi_a^k] f_k$ можна подати як дивергенцію вектора, а сума інших двох дасть внесок в джерело:

$$\begin{aligned}
\langle \Theta_{ij}^\dagger \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k &= \frac{1}{2} \int d\{*\} d\mathbf{r}_i \times \\
&\times \left[\nabla_i \cdot \langle \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{ij} \psi_a^k(*, \mathbf{r}_{i\lambda}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_{j\bar{\lambda}}, \mathbf{v}_j, t) \rangle_{\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j(\mathbf{R}\lambda)_{ij}}^k + \right. \\
&+ \left. \langle \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{ij} [1 + \mathcal{P}_{x_i x_j}] \psi_a^k(*, x_i, x_j, t) \rangle_{\mathbf{v}_i x_j}^k \right].
\end{aligned} \quad (113)$$

Інтегрування по $d\mathbf{r}_i$ ведеться для всіх i , за винятком $i = 1$. Тому всі перші доданки з дивергенціями у виразі (113) пропадуть, крім $i = 1$. Подвійна сума з виразу (109) набере такого остаточного вигляду:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \langle \Theta_{ij}^\dagger \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k &= \\
&= \sum_{j=2}^k \nabla_1 \cdot \langle \frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{1j} \psi_a^k(x_{1\lambda}, *, x_{j\bar{\lambda}}, t) \rangle_{\{*\}(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{1j}}^k + \\
&+ \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \langle \frac{1}{2} \Theta_{ij}^\dagger \partial_{ij} [1 + \mathcal{P}_{x_i x_j}] \psi_a^k(*, x_i, x_j, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k,
\end{aligned} \quad (114)$$

де використано позначення

$$\mathbf{r}_{i\lambda} \equiv \mathbf{r}_i - \lambda \mathbf{R}, \quad \mathbf{r}_{j\bar{\lambda}} \equiv \mathbf{r}_i + [1 - \lambda] \mathbf{R}, \quad (115)$$

$$x_{i\lambda} \equiv \{ \mathbf{r}_{i\lambda}, \mathbf{v}_i \}, \quad x_{j\bar{\lambda}} \equiv \{ \mathbf{r}_{j\bar{\lambda}}, \mathbf{v}_j \}, \quad (116)$$

аналогічні до позначень (67), і введено скорочення позначень в середніх:

$$\langle \dots \rangle_{\{*\}(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{ij}}^k \equiv \langle \dots \rangle_{\{*\} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j(\mathbf{R}\lambda)_{ij}}^k,$$

яке ми вживатимемо, коли це не викликати двозначного трактування.

Подібно до викладеного, для останньої суми $k + 1$ -частинкових середніх виразу (109) одержимо:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^k \langle \Theta_{i,k+1}^\dagger \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_{k+1}}^{k+1} &= \\
&= \nabla_1 \cdot \langle \frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{1q} \psi_a^k(x_{1\lambda}, x_2 \dots x_k, t) \rangle_{\{*\}(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{1q}}^q + \\
&+ \sum_{i=1}^k \langle \frac{1}{2} \Theta_{iq}^\dagger \partial_{iq} [1 + \mathcal{P}_{x_i x_q}] \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k x_q}^q \Big|_{q=k+1}.
\end{aligned} \quad (117)$$

Кінцевий вигляд

Підставляючи кінцеві результати (114) та (117) у вираз (109), а його — в стартове співвідношення (105), можемо записати рівняння переносу для локальної величини a_k у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \partial_t a_k + \nabla_1 \cdot [\mathbf{J}_{a_k}^{k,1} + \sum_{j=2}^k \mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1j} + \mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1q}] = \\ = s_{a_k}^t + \sum_{i=1}^k [s_{a_k}^{r,i} + s_{a_k}^{U,i}] + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k s_{a_k}^{\phi,ij} + \sum_{i=1}^k s_{a_k}^{\phi,iq} \Big|_{q=k+1}. \end{aligned} \quad (118)$$

Нижче ми подаємо розшифрування позначень, аналогічних до введених у § 4:

$$\mathbf{J}_{a_k}^{k,1}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \mathbf{v}_1 \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k, \quad (119)$$

$$\mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1j}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{R}) \cdot \partial_{1j} \psi_a^k(x_{1\lambda}, *, x_{j\bar{\lambda}}, t) \rangle_{\{*\}(\mathbf{vR}\lambda)_{1j}}^k, \quad (120)$$

$$\mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1q}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{R}) \cdot \partial_{1q} \psi_a^k(x_{1\lambda}, x_2 \dots x_k, t) \rangle_{\{*\}(\mathbf{vR}\lambda)_{1q}}^q, \quad (121)$$

$$s_{a_k}^t(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \partial_t \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k, \quad (122)$$

$$s_{a_k}^{r,i}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle -L_i^0 \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k, \quad (123)$$

$$s_{a_k}^{U,i}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle L_i^{U\dagger} \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k, \quad (124)$$

$$s_{a_k}^{\phi,ij}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_{ij}^{\dagger} [1 + \mathcal{P}_{x_i x_j}] \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k}^k, \quad (125)$$

$$s_{a_k}^{\phi,iq}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_{iq}^{\dagger} [1 + \mathcal{P}_{x_i x_q}] \psi_a^k(x^k, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 \dots x_k x_q}^q. \quad (126)$$

Тут у виразах (121) і (126) слід покласти $q = k + 1$. Подібно, як у п. 4.4, з виразів (119)–(126) можна означити молекулярні характеристики для цих потоків і джерел. Серед введених величин лише потоки потенціального типу $\mathbf{J}_{a_k}^{\phi}$ є нелокальними середніми, всі інші — середні того ж типу, що й a_k .

У скорочених позначеннях рівняння (118) набуває форми:

$$\partial_t a_k + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_k}^{k+\phi} = s_{a_k}^{t+r+U+\phi}, \quad (127)$$

де однотипні сумарні внески виглядають так:

$$\mathbf{J}_{a_k}^{\phi} \equiv \sum_{j=2}^k \mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1j} + \mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1k+1}, \quad (128)$$

$$s_{a_k}^r \equiv \sum_{i=1}^k s_{a_k}^{r,i}, \quad s_{a_k}^U \equiv \sum_{i=1}^k s_{a_k}^{U,i}, \quad (129)$$

$$s_{a_k}^{\phi} \equiv \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k s_{a_k}^{\phi,ij} + \sum_{i=1}^k s_{a_k}^{\phi,ik+1}. \quad (130)$$

Як і в § 4, у поданому виведенні використано припущення про поведінку функцій розподілу на нескінченності і не накладено суттєвих обмежень на молекулярну характеристику ψ_a^k .

Далі розглянемо два підвипадки, коли k -частинкова молекулярна характеристика ψ_a^k залежить лише від швидкостей або лише від просторових координат. У першому випадку, $\psi_a^k(\mathbf{v}^k)$, можна провести аналіз, подібний до поданого для одночастинкових величин. Тоді в нуль перетворюються внески $s_{a_k}^t$ та $s_{a_k}^{r,i}$ й рівняння переносу виглядає так:

$$\partial_t a_k + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_k}^{k+\phi} = s_{a_k}^{U+\phi}. \quad (131)$$

Коли ж є залежність лише від координат, $\psi_a^k(\mathbf{r}^k)$, то у нуль перетворюються члени з операторами, що містять похідні по швидкостях: $\mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1j}$, $\mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1k+1}$, $s_{a_k}^{U,i}$, $s_{a_k}^{\phi,ij}$ та $s_{a_k}^{\phi,ik+1}$. У цьому частковому випадку рівняння переносу має таку форму:

$$\partial_t a_k + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_k}^k = s_{a_k}^r. \quad (132)$$

Видно, що воно не містить внесків нелокального типу в потік. Одночасно, це рівняння не містить членів, означених через наступну функцію розподілу f_{k+1} . Отже, щоб знати явний вигляд його потоків і джерел, достатньо мати лише f_k . Це означає, що рівняння переносу для локальних величин, молекулярні характеристики яких залежать лише від просторових координат, *не зачіпляють* наступної частинкової функції розподілу. Один з наслідків цього факту буде продемонстровано на прикладі рівняння переносу для густини потенціальної енергії взаємодії у наступному підпараграфі.

Рівняння (131) і (132) показують, як фактор залежності ψ_a^k від $\{\mathbf{r}^k\}$ чи $\{\mathbf{v}^k\}$ впливає на присутність тих чи інших внесків у потік та джерело, і як це далі відбивається на структурі рівняння переносу для a_k .

5.2. Двочастинкова локальна густина

Розгляньмо, як виглядає виведене рівняння для двочастинкової величини:

$$a_2(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \psi_a^2(x_1, x_2, t) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2 \equiv \int d\mathbf{v}_1 dx_2 f_2(x_1, x_2, t) \psi_a^2(x_1, x_2, t). \quad (133)$$

Кладучи $k = 2$ у рівнянні (118) отримуємо:

$$\begin{aligned} \partial_t a_2 + \nabla_1 \cdot [\mathbf{J}_{a_2}^{k,1} + \mathbf{J}_{a_2}^{\phi,12} + \mathbf{J}_{a_2}^{\phi,13}] &= \\ &= s_{a_2}^t + \sum_{i=1}^2 [s_{a_2}^{r,i} + s_{a_2}^{U,i}] + s_{a_2}^{\phi,12} + \sum_{i=1}^2 s_{a_2}^{\phi,i3}. \end{aligned} \quad (134)$$

Внески до потоку і джерела означаються згідно виразів (119)–(126).

Якщо молекулярна характеристика залежить лише від координат, $\psi_a^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, то рівняння переносу набуде згідно (132) такої форми:

$$\partial_t a_2 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_2}^{k,1} = s_{a_2}^{r,1} + s_{a_2}^{r,2}. \quad (135)$$

Застосуємо цей здобуток до рівняння переносу для густини потенціальної енергії міжчастинкової взаємодії, яка має двочастинкове представлення з $\psi_{ep}^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2}\phi(r_{12})$, як вказано у виразі (42). У згоді з рівнянням (135) дістаємо:

$$\partial_t e^P + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{ep}^{k,1} = s_{ep}^{r,1} + s_{ep}^{r,2}, \quad (136)$$

де $\mathbf{J}_{ep}^{k,1} = \langle \frac{1}{2}\mathbf{v}_1\phi(r_{12}) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2 s_{ep}^{r,i} = \langle \frac{1}{2}\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i \phi(r_{12}) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2$, відповідно до означень (119), (123). Використавши для суми джерел рівність (33), яка пов'язує градієнти потенціала взаємодії по координатах різних частинок, рівняння (136) можна подати так:

$$\partial_t e^P + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{ep}^{k,1} = \langle \frac{1}{2}[\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2] \cdot \nabla_1 \phi(r_{12}) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2. \quad (137)$$

Його ми використаємо у наступному параграфі щоб записати рівняння переносу для повної енергії.

5.3. Рівняння переносу звичайної гідродинаміки

Тепер можна з'ясувати, яке місце у викладеній схемі займають рівняння переносу звичайної гідродинаміки. Отже, ми розглянемо рівняння для густин маси ρ , імпульсу \mathbf{p} та енергії e , тобто для густин величин, що зберігаються у відсутності зовнішнього поля.

Густина енергії містить три внески:

$$e = e^k + e^U + e^P, \quad (138)$$

причому, потенціальний внесок є двочастинковою величиною, а перші два — одночастинкові. Повторімо тут рівняння переносу для них: (98), (101):

$$\partial_t e^k + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{ek}^{k+\phi} = s_{ek}^{U+\phi}, \quad (139)$$

$$\partial_t e^U + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{eU}^k = s_{eU}^r. \quad (140)$$

Внески до джерел $s_{ek}^{\phi,12}$ і $s_{ep}^{r,1+2}$ скомпенсують один одного, оскільки є рівні між собою з точністю до знаку. У цьому можна переконатися, підставивши вираз для функції $\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21})$, поданий після формули (54) у вираз (100) для $s_{ek}^{\phi,12}$:

$$s_{ek}^{\phi,12} = \langle \frac{1}{2}\phi'(r_{21}) \hat{r}_{21} \cdot [\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2] \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2. \quad (141)$$

Розписавши градієнт у правій частині виразу (137) згідно першого співвідношення (34), отримаємо рівність

$$s_{ek}^{\phi,12} = -s_{ep}^{r,1+2}, \quad (142)$$

де $s_{ep}^{r,1+2} = s_{ep}^{r,1} + s_{ep}^{r,2}$. Вона у рамках викладеної схеми виведення має нетривіальне тлумачення, а саме:

1) скомпенсуються внески у джерела *одночастинкової* e^k і *двочастинкової* e^P величин;

2) ці внески зумовлені різними факторами; для e^k джерело зумовлене нелінійною залежністю відповідної молекулярної характеристики від швидкості, що у свою чергу породжує внесок, пропорційний $\phi'(r_{21})$; для e^P джерело зумовлене залежністю молекулярної характеристики ψ_{ep}^2 від координат;

3) причому сама можливість існування співвідношення (142) завдячує тому, що $\psi_{ep}^2 = \frac{1}{2}\phi(r_{12})$ залежить від модуля вектора відносного розміщення частинок 1 і 2, іншими словами тому, що потенціал взаємодії є сферично-симетричний; для інших потенціалів слід очікувати ускладнення картини завдяки залежності потенціала, наприклад, від відносних кутових координат частинок.

Співвідношення (142) є другим прикладом, коли скомпенсуються внески до джерел енергії. Його аналог було нами одержано в роботі [11] для модельного багатосходинкового потенціала.

Тепер, додавши рівняння (139), (140) та (136), як у сумі (138), отримаємо рівняння для повної енергії:

$$\partial_t e + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_e = 0, \quad (143)$$

де

$$\mathbf{J}_e = \mathbf{J}_{e^k}^{k+\phi} + \mathbf{J}_{e^U}^k + \mathbf{J}_{e^P}^k, \quad (144)$$

$$s_e = (s_{e^k}^U + s_{e^U}^r) + (s_{e^k}^\phi + s_{e^P}^r) = 0. \quad (145)$$

У виразі (145) використано компенсаційні рівності (104) та (142).

Коли цікавитися рівнянням переносу для суми $e^k + e^P$ без врахування потенціальної енергії e^U в зовнішньому полі, то рівняння (143) трансформується в таке:

$$\partial_t e^{k+P} + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{e^{k+P}} = s_{e^k}^U, \quad (146)$$

де $\mathbf{J}_{e^{k+P}} = \mathbf{J}_{e^k}^{k+\phi} + \mathbf{J}_{e^P}^k$, $s_{e^k}^U = \mathbf{F}_1^U \cdot \mathbf{p}$.

Насамкінець можна подати розгорнутий вигляд рівнянь переносу для густин зберезувальних величин, які становлять систему рівнянь звичайної гідродинаміки:

$$\partial_t \rho + \nabla_1 \cdot \langle m \mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 = 0, \quad (147)$$

$$\partial_t \mathbf{p} + \nabla_1 \cdot [\langle m \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) m \rangle_{(\mathbf{v} \mathbf{R} \lambda)_{12}}^2] = \rho \mathbf{F}_1^U, \quad (148)$$

$$\begin{aligned} \partial_t e^{k+P} + \nabla_1 \cdot [\langle \frac{1}{2} m v_1^2 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot m \mathbf{v}_1 \rangle_{(\mathbf{v} \mathbf{R} \lambda)_{12}}^2 + \\ + \langle \frac{1}{2} \mathbf{v}_1 \phi(r_{12}) \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2] = \mathbf{F}_1^U \cdot \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (149)$$

У присутності зовнішнього потенціального поля, рівняння переносу для густини імпульсу містить джерело, а вигляд рівняння для енергії залежить від того, чи відносимо ми потенціальну енергію в зовнішньому полі до густини повної енергії системи чи ні. Оскільки e^U повністю визначається через густину числа частинок n , то її зазвичай не враховують в густині повної енергії.

Одержані рівняння виведено на базі сформульованого загального підходу і збігаються з тими, які наведено в літературі як для макроскопічних густин, що описують класичну просту рідину [2], так і для їхніх мікроскопічних відповідників [12, 13].

6. Нелокальна двочастинкова густина

Важко безпомилково передбачити, який вигляд матиме середнє для k -частинкової нелокальної величини, щоб мати змогу вести розгляд

для загального випадку, тому розглянемо виведення рівняння переносу для найпростішого — двочастинкового — випадку. Потоки \mathbf{J}_P^ϕ та $\mathbf{J}_{e^k}^\phi$ є першими (і можливо) найпростішими представниками таких нелокальних величин, тому ми візьмемо за основу їхнє вираження через f_2 , ввівши мінімальне узагальнення відносно швидкісної залежності.

Нехай \tilde{a}_2 — скалярна двочастинкова величина, що має нелокальне представлення. Вважатимемо, що її молекулярна характеристика ψ_a^2 може залежати від \mathbf{r}_1 , координати відносного розташування двох частинок \mathbf{R} , швидкостей, і часу t :

$$\psi_a^2 = \psi_a^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t). \quad (150)$$

Залежність ψ_a^2 від \mathbf{r}_1 і t ми надалі не вказуватимемо.

$$\tilde{a}_2(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \langle \psi_a^2 \rangle_{(\mathbf{v} \mathbf{R} \lambda)_{12}}^2 \equiv \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) f_2(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}), \quad (151)$$

В розгорнутому вигляді права частина виглядає так:

$$\int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) f_2(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda] \mathbf{R}, \mathbf{v}_2). \quad (152)$$

Загальна схема виведення рівняння переносу для нелокальної величини \tilde{a}_2 подібна до випадку локальних величин a_1 чи a_k , однак тут є особливі моменти завдяки нелокальній формі залежності.

6.1. Друге рівняння ланцюжка

Як і раніше, можемо записати:

$$\partial_t \tilde{a}_2(\mathbf{r}_1, t) = \langle \partial_t \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v} \mathbf{R} \lambda)_{12}}^2 + \langle \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v} \mathbf{R} \lambda)_{12}}^{\partial_t f_2}, \quad (153)$$

де

$$\langle \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v} \mathbf{R} \lambda)_{12}}^{\partial_t f_2} \equiv \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \partial_t f_2(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}).$$

У правій частині цього виразу слід використати друге рівняння ланцюжка, але у дещо зміненій формі, яка одержується зі звичайної

$$\begin{aligned} \partial_t f_2(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}) = [L_{1\lambda}^0 + L_{2\bar{\lambda}}^0 + L_{1\lambda}^U + L_{2\bar{\lambda}}^U + \Theta_{1\lambda, 2\bar{\lambda}}] f_2(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}) + \\ + \int dx_3 [\Theta_{1\lambda, 3} + \Theta_{2\bar{\lambda}, 3}] f_3(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}, x_3), \end{aligned} \quad (154)$$

якщо у ній перейти до змінних $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{R}\}$, оскільки тут всі оператори стосуються просторових координат частинок $\mathbf{r}_{1\lambda} = \mathbf{r}_1 - \lambda\mathbf{R}$ та $\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}} = \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda]\mathbf{R}$. Цей перехід обґрунтовується тим, що нам потрібно отримати рівняння переносу величини \tilde{a}_2 у точці \mathbf{r}_1 . Тобто усі величини — потоки, джерела і особливо дивергенції потоків — мають стосуватися саме цієї точки. Такий перехід не зачіпає змінних $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$, від яких залежать f_2 та f_3 .

Формули (67) можна записати у вигляді

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_{1\lambda} \\ \mathbf{r}_{2\bar{\lambda}} \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{1\mathbf{R}} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{R} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{M}_{1\mathbf{R}} \stackrel{\text{df}}{=} \begin{bmatrix} 1 & -\lambda \\ 1 & 1 - \lambda \end{bmatrix} \quad (155)$$

і тлумачити як перехід до змінних $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{R}\}$ з матрицею переходу $\mathcal{M}_{1\mathbf{R}}$. Звідси легко знаходимо зворотнє перетворення:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{R} \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{1\lambda, 2\bar{\lambda}} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{1\lambda} \\ \mathbf{r}_{2\bar{\lambda}} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{M}_{1\lambda, 2\bar{\lambda}} \stackrel{\text{df}}{=} \begin{bmatrix} 1 - \lambda & \lambda \\ -1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (156)$$

Введені матриці переходу $\mathcal{M}_{1\mathbf{R}}$ і $\mathcal{M}_{1\lambda, 2\bar{\lambda}}$ взаємнообернені.

Виходячи з рівності

$$\nabla_{1\lambda}\mathcal{F} \cdot d\mathbf{r}_{1\lambda} + \nabla_{2\bar{\lambda}}\mathcal{F} \cdot d\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}} = \nabla_1\mathcal{F} \cdot d\mathbf{r}_1 + \nabla_{\mathbf{R}}\mathcal{F} \cdot d\mathbf{R}$$

для довільної функції \mathcal{F} змінних $\{\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{r}_{2\bar{\lambda}}\}$ знаходимо зв'язок між градієнтами:

$$\begin{pmatrix} \nabla_{1\lambda} \\ \nabla_{2\bar{\lambda}} \end{pmatrix} = [\mathcal{M}_{1\lambda, 2\bar{\lambda}}]^T \begin{pmatrix} \nabla_1 \\ \nabla_{\mathbf{R}} \end{pmatrix}, \quad (157)$$

де верхній індекс “T” позначає операцію транспонування. У результаті, для суми операторів L_i^0 отримаємо:

$$L_{1\lambda}^0 + L_{2\bar{\lambda}}^0 = -\mathbf{v}_1 \cdot \nabla_{1\lambda} - \mathbf{v}_2 \cdot \nabla_{2\bar{\lambda}} = L_{\mathbf{u}_1}^0 + L_{\mathbf{u}_{\mathbf{R}}}^0, \quad (158)$$

де

$$\begin{aligned} L_{\mathbf{u}_1}^0 &\stackrel{\text{df}}{=} -\mathbf{u}_1 \cdot \nabla_1, & \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \end{pmatrix} &= \mathcal{M}_{1\lambda, 2\bar{\lambda}} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \end{pmatrix}. \\ L_{\mathbf{u}_{\mathbf{R}}}^0 &\stackrel{\text{df}}{=} -\mathbf{u}_{\mathbf{R}} \cdot \nabla_{\mathbf{R}}, & & \end{aligned} \quad (159)$$

Використавши результат (158) у другому рівнянні ланцюжка у вигляді (154), отримаємо шукану форму:

$$\begin{aligned} \partial_t f_2(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}) &= \left[\sum_{i=1, \mathbf{R}} L_{\mathbf{u}_i}^0 + \sum_{i=1\lambda, 2\bar{\lambda}} L_i^U + \Theta_{1\lambda, 2\bar{\lambda}} \right] f_2(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}) + \\ &+ \int dx_3 [\Theta_{1\lambda, 3} + \Theta_{2\bar{\lambda}, 3}] f_3(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}, x_3). \end{aligned} \quad (160)$$

Підставмо її у другий доданок правої частини виразу (153), записавши результат через скалярні добутки:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^{\partial_t f_2} &= \left(\psi_a^2, \left[\sum_{i=1, \mathbf{R}} L_{\mathbf{u}_i}^0 + \sum_{i=1\lambda, 2\bar{\lambda}} L_i^U + \Theta_{1\lambda, 2\bar{\lambda}} \right] f_2 \right)_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}} + \\ &+ \left(\psi_a^2, [\Theta_{1\lambda, 3} + \Theta_{2\bar{\lambda}, 3}] f_3 \right)_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12x_3}}. \end{aligned} \quad (161)$$

До представлення через спряжені оператори переходимо так само, як у ш. 4.1 та 5.1:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^{\partial_t f_2} &= -\nabla_1 \cdot \langle \mathbf{u}_1 \psi_a^2 \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2 + \\ &+ \sum_{i=1, \mathbf{R}} \langle -L_{\mathbf{u}_i}^0 \psi_a^2 \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2 + \sum_{i=1\lambda, 2\bar{\lambda}} \langle L_i^U \psi_a^2 \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2 + \\ &+ \langle \Theta_{1\lambda, 2\bar{\lambda}}^\dagger \psi_a^2 \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2 + \sum_{l=1\lambda, 2\bar{\lambda}} \langle \Theta_{l3}^\dagger \psi_a^2 \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12x_3}}^3, \end{aligned} \quad (162)$$

де опущено доданок, подібний до першого доданка правої частини,

$$\int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} [-\nabla_{\mathbf{R}} \cdot \langle \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \psi_a^2 \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2}^2],$$

який перетворюється в нуль.

Останні два доданки виразу (162) треба симетризувати.

6.2. Симетризація двочастинкового внеску

Перший з них після перепозначень $\mathbf{v}_1 \rightleftharpoons \mathbf{v}_2$, інверсії відносної координати $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$, використання симетрії функції f_2 і взяття півсуми, запишеться так:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \\ &\cdot \{ [\partial_{12} \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)] f_2(\mathbf{r}_1 - \lambda\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda]\mathbf{R}, \mathbf{v}_2) + \\ &+ [\partial_{12} \psi_a^2(-\mathbf{R}, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_1)] f_2(\mathbf{r}_1 - [1 - \lambda]\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + \lambda\mathbf{R}, \mathbf{v}_2) \}. \end{aligned} \quad (163)$$

Від першого доданка віднімаємо, а до другого додаємо комбінацію

$$[\partial_{12} \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)] f_2(\mathbf{r}_1 - [1 - \lambda]\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + \lambda\mathbf{R}, \mathbf{v}_2),$$

отримуючи:

$$\frac{1}{2} \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \left([\partial_{12} \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)] \times \right. \quad (164)$$

$$\begin{aligned} & \times \{f_2(\mathbf{r}_{1\lambda}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_{2\bar{\lambda}}, \mathbf{v}_2) - f_2(\mathbf{r}_1 - [1 - \lambda]\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + \lambda\mathbf{R}, \mathbf{v}_2)\} + \\ & + [\partial_{12}\psi_a^2(-\mathbf{R}, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_1) + \partial_{12}\psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)] \times \\ & \times f_2(\mathbf{r}_1 - [1 - \lambda]\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + \lambda\mathbf{R}, \mathbf{v}_2). \end{aligned}$$

Другий добуток типу $[\partial_{12}\psi_a^2 + \partial_{12}\psi_a^2]f_2$ у круглих дужках після повторних перепозначень $\mathbf{v}_1 \rightleftharpoons \mathbf{v}_2$ та інверсії $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$ можна звести до вигляду:

$$\langle \frac{1}{2}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12}[1 + \mathcal{P}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2}^{\mathbf{R}^-}] \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}. \quad (165)$$

Символ $\mathcal{P}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2}^{\mathbf{R}^-}$ означає переставляння змінних \mathbf{v}_1 і \mathbf{v}_2 та інверсію відносної координати $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$.

Розгляньмо тепер перший добуток у круглих дужках виразу (164), котрий містить різницю функцій f_2 . Можна зауважити, що відповідні просторові координати частинок — аргументи цих функцій — відрізняються на вектор

$$\mathbf{R}_1 = [1 - 2\lambda]\mathbf{R}. \quad (166)$$

Цілком подібно, як було у випадку локальної густини, перший добуток можемо подати так:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot [\partial_{12}\psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)] \times \\ & \times \int d\mathbf{x} \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_{1\lambda}) - \delta(\mathbf{x} - [\mathbf{r}_{1\lambda} - \mathbf{R}_1]) \} f_2(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, \mathbf{x} + \mathbf{R}, \mathbf{v}_2). \end{aligned} \quad (167)$$

Для різниці δ -функцій, яку можна переписати як

$$\delta(\mathbf{x}'_\lambda - \mathbf{r}_1) - \delta(\mathbf{x}'_\lambda - [\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1]), \quad (168)$$

де $\mathbf{x}'_\lambda \equiv \mathbf{x} + \lambda\mathbf{R}$, використовуємо формулу (64), яка дасть у результаті:

$$\nabla_1 \cdot \mathbf{R}_1 \int_0^1 d\lambda_1 \delta(\mathbf{x} - [\mathbf{r}_1 - \lambda_1\mathbf{R}_1 - \lambda\mathbf{R}]). \quad (169)$$

Тоді розглядуваний вираз (167) можна подати як дивергенцію:

$$\begin{aligned} & \nabla_1 \cdot \int_0^1 d\lambda d\lambda_1 \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \frac{1}{2} \mathbf{R}_1 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot [\partial_{12}\psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)] \times \\ & \times f_2(\mathbf{r}_{1\lambda\lambda_1}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_{2\bar{\lambda}\lambda_1}, \mathbf{v}_2), \end{aligned} \quad (170)$$

де

$$\mathbf{r}_{1\lambda\lambda_1} \equiv \mathbf{r}_{1\lambda} - \lambda_1\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}_1 - \lambda\mathbf{R} - \lambda_1\mathbf{R}_1, \quad (171)$$

$$\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}\lambda_1} \equiv \mathbf{r}_{2\bar{\lambda}} - \lambda_1\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda]\mathbf{R} - \lambda_1\mathbf{R}_1, \quad (172)$$

$$\mathbf{R}_1 = [1 - 2\lambda]\mathbf{R}.$$

Скорочено формулу (170) запишемо так:

$$\nabla_1 \cdot \langle \frac{1}{2}[1 - 2\lambda]\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12}\psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2((\mathbf{R}\lambda)_{12}\lambda_1)_{1\lambda,2\bar{\lambda}}}. \quad (173)$$

Спосіб позначення усереднення подібний до введеного раніше. Він означає, що тут ми маємо інтегрування по одній відносній координаті \mathbf{R} і по двох неперервних параметрах λ і λ_1 .

Врешті, об'єднавши кінцеві результати (165) і (173), запишемо остаточний вираз для доданка з оператором $\Theta_{1\lambda,2\bar{\lambda}}^\dagger$ виразу (162):

$$\begin{aligned} & \langle \Theta_{1\lambda,2\bar{\lambda}}^\dagger \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}} = \\ & = -\nabla_1 \cdot \langle -\frac{1}{2}[1 - 2\lambda]\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12}\psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{((\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}\lambda_1)_{1\lambda,2\bar{\lambda}}} + \\ & + \langle \frac{1}{2}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12}[1 + \mathcal{P}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2}^{\mathbf{R}^-}] \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}. \end{aligned} \quad (174)$$

6.3. Результат симетризації тричастинкових внесків

Тричастинкові внески під останньою сумою у виразі (162) симетризуються подібно. Різниця полягає у тому, що в них оператор Θ_{l3}^\dagger стосується пар індексів $(1\lambda, 3)$ або $(2\bar{\lambda}, 3)$:

$$\langle \Theta_{l3}^\dagger \psi_a^2 \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12x_3}}^3 = \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 dx_3 f_3(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}, x_3) \Theta_{l3}^\dagger \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2). \quad (175)$$

Симетризація здійснюється по індексах $(l, 3)$, а відносна координата \mathbf{R}_1 , до якої треба перейти, має сенс $\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{1\lambda}$ чи $\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{2\bar{\lambda}}$. Діючи подібно до попереднього підпараграфа можна одержати:

$$\begin{aligned} & \langle \Theta_{1\lambda,3}^\dagger \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12x_3}}^3 = \\ & = -\nabla_1 \cdot \langle -\frac{1}{2}\mathbf{R}_1 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}_1) \cdot \partial_{13}\psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3(\mathbf{R}\lambda)_{12}(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{1\lambda,3}} + \\ & + \langle \frac{1}{2}\Theta_{1\lambda,3}^\dagger [1 + \mathcal{P}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_3}] \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12x_3}}^3, \end{aligned} \quad (176)$$

$$\begin{aligned} & \langle \Theta_{2\bar{\lambda},3}^\dagger \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12x_3}}^3 = \\ & = -\nabla_1 \cdot \langle -\frac{1}{2}\mathbf{R}_1 \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}_1) \cdot \partial_{23}\psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3(\mathbf{R}\lambda)_{12}(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{2\bar{\lambda},3}} + \\ & + \langle \frac{1}{2}\Theta_{2\bar{\lambda},3}^\dagger [1 + \mathcal{P}_{\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3}] \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12x_3}}^3, \end{aligned} \quad (177)$$

де символ $\mathcal{P}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_3}$ позначає операцію переставляння змінних \mathbf{v}_l та \mathbf{v}_3 у функції, що стоїть після нього.

6.4. Об'єднання внесків

Запишімо загальне рівняння переносу для \tilde{a}_2 з молекулярною характеристикою $\psi_a^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t)$, вираз (150). Підставивши у вираз (162) одержані після симетризації результати (174), (176), (177), а його — у початкову формулу (153) здобудемо:

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{a}_2 + \nabla_1 \cdot \left[\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{k,12} + \mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,12} + \sum_{l=1}^2 \mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3} \right] = & \quad (178) \\ = s_{\tilde{a}_2}^t + \sum_{l=1, \mathbf{R}} s_{\tilde{a}_2}^{r,l} + \sum_{l=1}^2 s_{\tilde{a}_2}^{U,l} + s_{\tilde{a}_2}^{\phi,12} + \sum_{l=1}^2 s_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3}, & \end{aligned}$$

де

$$\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{k,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \mathbf{u}_1 \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad (179)$$

$$\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}[1 - 2\lambda] \mathbf{R} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12} \lambda_1 \lambda_2 \lambda}^2, \quad (180)$$

$$\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R}_1 \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{R}_1) \cdot \partial_{l3} \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_3 (\mathbf{R}\lambda)_{12} (\mathbf{R}_1 \lambda_1)_{l3}}^3, \quad (181)$$

$$s_{\tilde{a}_2}^t \stackrel{\text{df}}{=} \langle \partial_t \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad (182)$$

$$s_{\tilde{a}_2}^{r,l} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -L_{\mathbf{u}l}^0 \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad l = 1 \text{ або } \mathbf{R}, \quad (183)$$

$$s_{\tilde{a}_2}^{U,l} \stackrel{\text{df}}{=} \langle L_l^U \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}^2) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad l = 1\lambda \text{ або } 2\bar{\lambda}, \quad (184)$$

$$s_{\tilde{a}_2}^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_{\phi}^{\dagger}(\mathbf{R}) \cdot \partial_{12} [1 + \mathcal{P}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2}^{\mathbf{R}-}] \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad (185)$$

$$s_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_{\phi}^{\dagger} [1 + \mathcal{P}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_3}] \psi_a^2(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12} x_3}^3. \quad (186)$$

Нагадаймо, що тут $\mathbf{u}_1 = [1 - \lambda]\mathbf{v}_1 + \lambda\mathbf{v}_2$, $\mathbf{uR} = -\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$.

Цими виразами одночасно задаються молекулярні характеристики внесків до потоку і джерела нелокальної величини \tilde{a}_2 . З їхнього вигляду можемо сказати, що $\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3}$ та $s_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3}$ є тричастинкові, причому потік є двократно нелокальний (по $\{\mathbf{R}, \lambda\}$ та $\{\mathbf{R}_1, \lambda_1\}$), а джерело — однократно нелокальне, як і сама \tilde{a}_2 . Решта величини двочастинкові, але потік $\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,12}$ має *другу нелокальність* по λ_1 . Також, цей потік дає нам приклад нелокальної двочастинкової величини іншого типу, ніж \tilde{a}_2 . А саме — двократно нелокальної двочастинкової величини з молекулярною характеристикою, що явно залежить від першого

параметра нелокальності λ . У цьому контексті можна припустити, що в міру побудови наступних рівнянь ланцюжка, різноманітність нелокальних величин буде проявлятися все більше.

Якщо порівнювати розгорнутий вигляд рівняння (178) для \tilde{a}_2 з таким же (134) для *локальної* двочастинкової величини a_2 , то відмінності “нелокального” рівняння такі:

1) внесок $\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^k$ є дещо іншого типу ніж у локальному випадку, оскільки в ньому входить явним чином не тільки \mathbf{v}_1 , але й \mathbf{v}_2 ;

2) є два тричастинкові внески у потік (замість одного в рівнянні (134));

3) другий внесок в джерело від координатної залежності молекулярної характеристики ψ_a^2 зумовлений відносною координатою \mathbf{R} , а не \mathbf{r}_2 (134).

У скорочених позначеннях отримане рівняння переносу має вже знайомий вигляд:

$$\partial_t \tilde{a}_2 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{k+\phi} = s_{\tilde{a}_2}^{t+r+U+\phi}. \quad (187)$$

У частковому випадку, коли молекулярна характеристика ψ_a^2 залежить лише від \mathbf{R} , потоки і джерела, що містять диференціальні оператори по швидкостях, перетворяться в нуль:

$$\partial_t \tilde{a}_2 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{k,12} = s_{\tilde{a}_2}^{r,\mathbf{R}}. \quad (188)$$

Цей результат ми використаємо у наступному параграфі щоб отримати рівняння переносу для внеску $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}^{\phi,12}$ до потоку імпульсу.

6.5. Підсумок

В останніх трьох параграфах (§§ 4, 5, 6) нами одержані рівняння переносу для макроскопічних густин з різними представленнями. Зокрема, у § 4 з деталями подано виведення загального рівняння переносу для довільної одночастинкової величини $a_1(\mathbf{r}_1, t)$. Проведено аналіз отриманих виразів для внесків до потоку $\mathbf{J}_{a_1}(\mathbf{r}_1, t)$ та джерела $s_{a_1}(\mathbf{r}_1, t)$, а результати проілюстровано на прикладі відомих раніше рівнянь для густин маси $\rho(\mathbf{r}_1, t)$, імпульсу $\mathbf{p}(\mathbf{r}_1, t)$ та кінетичної енергії $e^k(\mathbf{r}_1, t)$.

За тією ж схемою у § 5 представлено виведення і кінцевий вигляд рівняння переносу довільної k -частинкової макроскопічної густини $a_k(\mathbf{r}_1, t)$, що представляється локальним середнім. Розглянуто частковий випадок двочастинкової величини $a_2(\mathbf{r}_1, t)$ і за його допомогою продемонстровано, як отримується рівняння для густини потенціальної енергії взаємодії $e^p(\mathbf{r}_1, t)$.

За результатами §§ 4, 5 у підпараграфі 5.3 наведено аналіз рівнянь звичайної гідродинаміки для густин збережуваних величин $\{\rho, \mathbf{p}, e\}$ і показано взаємну зв'язаність джерел кінетичного і потенціального внесків до густини повної енергії.

У § 6 наведено аналогічне виведення для нелокальної двочастинкової густини $\tilde{a}_2(\mathbf{r}_1, t)$, вказано на відмінності між нею та локальним відповідником $a_2(\mathbf{r}_1, t)$. Розглянуто вигляд рівняння переносу в одному частковому випадку, що зустрінемо нижче.

Далі подано нове застосування здобутків цих параграфів [14, 15].

7. Перше розширення рівнянь звичайної гідродинаміки

Результатів попередньої частини достатньо, щоб вирішити питання про те, який вигляд мають рівняння переносу, що розширюють рівняння звичайної гідродинаміки, тобто рівняння для потоків імпульсу \mathbf{J}_p та енергії \mathbf{J}_e . (У загальному випадку слід розглядати також рівняння і для джерел, але останні рівні нулю для \mathbf{p} та e .)

Нагадаймо вигляд потоків:

$$\mathbf{J}_p = \mathbf{J}_p^{k,1} + \mathbf{J}_p^{\phi,12}, \quad (189)$$

$$\mathbf{J}_e = \mathbf{J}_{e_k}^{k,1} + \mathbf{J}_{e_k}^{\phi,12} + \mathbf{J}_{e_p}^{k,1}. \quad (190)$$

Тут фігурують локальні одностинкові $\mathbf{J}_p^{k,1}$, $\mathbf{J}_{e_k}^{k,1}$ і двочастинковий $\mathbf{J}_{e_p}^{k,1}$ внески кінетичного типу, а також нелокальні внески $\mathbf{J}_p^{\phi,12}$, $\mathbf{J}_{e_k}^{\phi,12}$ від потенціала взаємодії. Молекулярні характеристики для них такі:

$$\psi_{\mathbf{J}_p^{k,1}}^1 = m\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1, \quad \tilde{\psi}_{\mathbf{J}_p^{\phi,12}}^2 = -\frac{1}{2}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})m, \quad (191)$$

$$\psi_{\mathbf{J}_{e_k}^{k,1}}^1 = \frac{1}{2}mv_1^2\mathbf{v}_1, \quad \tilde{\psi}_{\mathbf{J}_{e_k}^{\phi,12}}^2 = -\frac{1}{2}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})\cdot m\mathbf{v}_1, \quad (192)$$

$$\psi_{\mathbf{J}_{e_p}^{k,1}}^2 = \frac{1}{2}\phi(r_{12})\mathbf{v}_1. \quad (193)$$

Для локальних внесків (лівий стовпчик) використовуємо результати підпараграфів 4.4 та 5.2, а для нелокальних (справа) — результати, отримані в підпараграфі 6.4.

7.1. Рівняння для потоку імпульсу

Молекулярна характеристика внеску $\mathbf{J}_p^{k,1}$ (далі \mathbf{J}_p^k) залежить лише від швидкості (191). Це відповідає частковому випадкові \mathbf{v} , роз-

глянутому в п. 4.4, тому рівняння переносу матиме вигляд типу (90)

$$\partial_t a_1 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_1}^{k+\phi} = s_{a_1}^{U+\phi} \quad (194)$$

з відмінним від нуля джерелом:

$$\partial_t \mathbf{J}_p^k + \nabla_1 \cdot \left[{}_3\mathbf{J}_p^{k,1} + {}_3\mathbf{J}_p^{\phi,12} \right] = s_{\mathbf{J}_p^k}^{U,1} + s_{\mathbf{J}_p^k}^{\phi,12}, \quad (195)$$

де за допомогою конструкції ${}_3\mathbf{J}$ позначено тензори третього рангу. Явний вигляд внесків до потоку та джерела легко знайти, користуючись формулами (74), (75), (78), (79):

$${}_3\mathbf{J}_p^{k,1} \stackrel{\text{df}}{=} \langle m\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (196)$$

$${}_3\mathbf{J}_p^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot m(\mathbf{l}\mathbf{v}_1 + \mathbf{l}_{13}\mathbf{v}_1) \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2, \quad (197)$$

$$s_{\mathbf{J}_p^k}^{U,1} \stackrel{\text{df}}{=} \mathbf{F}_1^U \cdot \langle m(\mathbf{l}\mathbf{v}_1 + \mathbf{l}_{13}\mathbf{v}_1) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (198)$$

$$s_{\mathbf{J}_p^k}^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot m(\mathbf{l}\mathbf{v}_{12} + \mathbf{l}_{13}\mathbf{v}_{12}) \rangle_{\mathbf{v}_1x_2}^2, \quad (199)$$

де $\mathbf{l} \equiv \delta_{\alpha\beta}$ — одиничний тензор другого рангу, а за допомогою конструкції $\mathbf{l}_{13}\mathbf{v}$ тут і далі позначено тензор третього рангу, “діагональний” по першому і третьому індексам:

$$(\mathbf{l}_{13}\mathbf{v})_{\alpha\beta\gamma} \equiv \delta_{\alpha\gamma}v_\beta,$$

$\delta_{\alpha\gamma}$ — символ Кронекера.

Отримаємо тепер відповідне рівняння для внеску $\mathbf{J}_p^{\phi,12}$ (далі \mathbf{J}_p^ϕ). Його молекулярна характеристика залежить лише від вектора відносного розташування, вираз (191), тому можна використати результат для часткового випадку, розглянутого у кінці підпараграфу 6.4, рівняння (188):

$$\partial_t \mathbf{J}_p^\phi + \nabla_1 \cdot {}_3\mathbf{J}_p^{k,12} = s_{\mathbf{J}_p^\phi}^{r,\mathbf{R}}, \quad (200)$$

де згідно загальних виразів (179), (183) для потоку і джерела можемо записати:

$${}_3\mathbf{J}_p^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}\mathbf{u}_1\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})m \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2, \quad (201)$$

$$s_{\mathbf{J}_p^\phi}^{r,\mathbf{R}} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}\mathbf{u}_R \cdot \nabla_R [\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})m] \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2. \quad (202)$$

Додавши результати (195) і (200) для двох внесків отримаємо перше рівняння, яке розширює набір рівнянь звичайної гідродинаміки:

$$\partial_t \mathbf{J}_p + \nabla_1 \cdot {}_3\mathbf{J}_p = s_{\mathbf{J}_p}. \quad (203)$$

Тут введено позначення для суми внесків у потік та джерело:

$$3J_{\mathbf{J}_p} = 3J_{\mathbf{J}_p}^{k,1} + 3J_{\mathbf{J}_p}^{\phi,12} + 3J_{\mathbf{J}_p}^{k,12}, \quad (204)$$

$$s_{\mathbf{J}_p} = s_{\mathbf{J}_p}^{U,1} + s_{\mathbf{J}_p}^{\phi,12} + s_{\mathbf{J}_p}^{r,\mathbf{R}}. \quad (205)$$

Рівняння (203) повністю відповідає ідеї, сформульованій у § 2, рівняння (11).

Можна ще подати кінцеві вирази для потоків і джерел, децю перетворивши їх і виразивши через потенціал взаємодії, а не за допомогою функції $\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) = \frac{1}{m}\phi'(R)\hat{R}$:

$$\begin{aligned} 3J_{\mathbf{J}_p}^{\phi,12} &= \langle -\frac{1}{2}\phi'(R)\mathbf{R}[\hat{R}\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_1\hat{R}] \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \\ 3J_{\mathbf{J}_p}^{k,12} &= \langle -\frac{1}{2}\phi'(R)\mathbf{u}_1\mathbf{R}\hat{R} \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2; \\ s_{\mathbf{J}_p}^{U,1} &= \mathbf{F}_1^U \mathbf{p} + \mathbf{p}\mathbf{F}_1^U, \\ s_{\mathbf{J}_p}^{\phi,12} &= \langle \frac{1}{2}\phi'(r_{21})[\hat{r}_{21}\mathbf{v}_{12} + \mathbf{v}_{12}\hat{r}_{21}] \rangle_{\mathbf{v}_1x_2}^2, \\ s_{\mathbf{J}_p}^{r,\mathbf{R}} &= \langle -\frac{1}{2}\{\phi'(R)\mathbf{u}_R\hat{R} + [-\phi'(R) + R\phi''(R)]\mathbf{u}_R \cdot \hat{R}\hat{R}\hat{R} + \\ &\quad + \phi'(R)\hat{R}\mathbf{u}_R\} \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \end{aligned}$$

де $\hat{R} \equiv \mathbf{R}/R$ — одиничний вектор в напрямку \mathbf{R} .

7.2. Потік енергії

Тут ми розглянемо по черзі рівняння переносу для $\mathbf{J}_{e_k}^{k,1}$, $\mathbf{J}_{e_k}^{\phi,12}$, $\mathbf{J}_{e_p}^{k,1}$ (далі $\mathbf{J}_{e_k}^k$, $\mathbf{J}_{e_k}^\phi$, $\mathbf{J}_{e_p}^k$). Результат для внеску $\mathbf{J}_{e_k}^k$ шукаємо так само, як і для \mathbf{J}_p^k , оскільки $\psi_{\mathbf{J}_{e_k}^k}^1$ теж залежить лише від швидкості. Тому згідно загального вигляду рівняння (194) маємо:

$$\partial_t \mathbf{J}_{e_k}^k + \nabla_1 \cdot \left[\mathbf{J}_{e_k}^{k,1} + \mathbf{J}_{e_k}^{\phi,12} \right] = s_{\mathbf{J}_{e_k}^k}^{U,1} + s_{\mathbf{J}_{e_k}^k}^{\phi,12}, \quad (206)$$

де

$$J_{\mathbf{J}_{e_k}^k}^{k,1} = \langle \frac{1}{2}mv_1^2\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (207)$$

$$J_{\mathbf{J}_{e_k}^k}^{\phi,12} = \langle -\frac{1}{2}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \frac{m}{2}(2\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 + v_1^2\mathbf{l}) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2; \quad (208)$$

$$s_{\mathbf{J}_{e_k}^k}^{U,1} \stackrel{\text{df}}{=} \mathbf{F}_1^U \cdot \langle \frac{m}{2}(2\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 + v_1^2\mathbf{l}) \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (209)$$

$$s_{\mathbf{J}_{e_k}^k}^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot \frac{m}{2}[(\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\mathbf{v}_2) + (v_1^2 - v_2^2)\mathbf{l}] \rangle_{\mathbf{v}_1x_2}^2. \quad (210)$$

Рівняння для нелокального внеску $\mathbf{J}_{e_k}^\phi$ можна отримати, підставивши його молекулярну характеристику (192) у загальне рівняння переносу (178) для довільної нелокальної двочастинкової величини (підпараграф 6.4):

$$\partial_t \mathbf{J}_{e_k}^\phi + \nabla_1 \cdot \left[\mathbf{J}_{e_k}^{k,12} + \mathbf{J}_{e_k}^{\phi,12} + \mathbf{J}_{e_k}^{\phi,13} \right] = s_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^{r,\mathbf{R}} + s_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^{U,1\lambda}. \quad (211)$$

Тут усі джерела типу $s_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^\phi$, зумовлені потенціалом взаємодії, перетворюються в нуль, бо $\tilde{\psi}_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{R})$ є лінійною функцією \mathbf{v}_1 (192). Такий випадок нам вже траплявся при аналізі джерел одночастинкової локальної величини (с. 20). У рівнянні (211) потокові внески і джерела мають такий явний вигляд:

$$J_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^{k,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}\mathbf{u}_1\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot m\mathbf{v}_1 \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad (212)$$

$$J_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{4}[1 - 2\lambda]m[\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})]^2\mathbf{R}\mathbf{R} \rangle_{((\mathbf{vR}\lambda)_{12})_{1\lambda,2\lambda}}^2, \quad (213)$$

$$J_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^{\phi,13} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{4}m\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}_1) \cdot \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})\mathbf{R}_1\mathbf{R} \rangle_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3(\mathbf{R}\lambda)_{12}(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{1\lambda,3}}^3, \quad (214)$$

$$s_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^{r,\mathbf{R}} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}\mathbf{u}_R \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \left[\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \right] \cdot m\mathbf{v}_1 \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad (215)$$

$$s_{\mathbf{J}_{e_k}^\phi}^{U,1\lambda} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \mathbf{F}^U(\mathbf{r}_{1\lambda}) \cdot [-\frac{1}{2}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})\mathbf{R}m] \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2. \quad (216)$$

Залишилося розглянути рівняння для (кінетичного) потоку потенціальної енергії $\mathbf{J}_{e_p}^k$. Молекулярна характеристика для нього є лінійною функцією \mathbf{v}_1 і залежить від r_{12} . Отже рівняння має вигляд згідно виразу (134):

$$\partial_t \mathbf{J}_{e_p}^k + \nabla_1 \cdot \left[\mathbf{J}_{e_p}^{k,1} + \mathbf{J}_{e_p}^{\phi,12} + \mathbf{J}_{e_p}^{\phi,13} \right] = s_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{r,1+2} + s_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{U,1} + s_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{\phi,13}, \quad (217)$$

де

$$J_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{k,1} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2}\phi(r_{12})\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \quad (218)$$

$$J_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{\phi,12} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{4}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})\phi(R) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \quad (219)$$

$$J_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{\phi,13} \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{4}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})\phi(r_{1\lambda,2}) \rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{13x_2}}^3; \quad (220)$$

$$s_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{r,1+2} \equiv \sum_{i=1}^2 s_{\mathbf{J}_{e_p}^k}^{r,i} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2}m\mathbf{v}_1\mathbf{v}_{12} \cdot \Theta_\phi(\mathbf{r}_{12}) \rangle_{\mathbf{v}_1x_2}^2, \quad (221)$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1} \stackrel{\text{df}}{=} \mathbf{F}_1^U \cdot \langle \frac{1}{2} \phi(r_{12}) \mathbf{l} \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}, \quad (222)$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,13} \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{31}) [\phi(r_{12}) - \phi(r_{32})] \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 x_3}. \quad (223)$$

Інші внески у джерело, $\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12}$ та $\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,23}$, рівні нулю.

Об'єднавши рівняння (206), (211), (217) для різних внесків до повного потоку енергії, маємо:

$$\partial_t \mathbf{J}_e + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e} = \mathbf{S}_{\mathbf{J}_e}, \quad (224)$$

де

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e} = \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{k,1} + \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} + \quad (225)$$

$$+ \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{k,12} + \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} + \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,13} +$$

$$+ \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{k,1} + \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} + \mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,13},$$

$$\mathbf{S}_{\mathbf{J}_e} = \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1} + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{r,\mathbf{R}} + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1\lambda} + \quad (226)$$

$$+ \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{r,1+2} + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1} + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,13}.$$

Вирази для цих величин, далі перетворені і записані безпосередньо через потенціал взаємодії:

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} = \langle -\frac{1}{4} \phi'(R) \mathbf{R} [2\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1 \cdot \hat{R} + v_1^2 \hat{R}] \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}},$$

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{k,12} = \langle -\frac{1}{2} \phi'(R) \hat{R} \cdot \mathbf{v}_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{R} \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}},$$

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} = \langle \frac{1}{4m} [1 - 2\lambda] [\phi'(R)]^2 \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle_{((\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12\lambda_1})_{1\lambda,2\lambda}},$$

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,13} = \langle \frac{1}{4m} \phi'(R_1) \phi'(R) \hat{R}_1 \cdot \hat{R} \mathbf{R}_1 \mathbf{R} \rangle_{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_3 (\mathbf{R}\lambda)_{12} (\mathbf{R}_1 \lambda_1)_{1\lambda,3}},$$

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{k,1} = \langle \frac{1}{2} \phi(r_{12}) \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2},$$

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} = \langle -\frac{1}{4m} \phi(R) \phi'(R) \mathbf{R} \hat{R} \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}},$$

$$\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,13} = \langle -\frac{1}{4m} \phi(r_{1\lambda,2}) \phi'(R) \mathbf{R} \hat{R} \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{13x_2}},$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1} = \mathbf{F}_1^U \cdot \mathbf{J}_{\mathbf{P}}^k + e^k \mathbf{F}_1^U,$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,12} = \langle \frac{1}{4} \phi'(r_{21}) [2(\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2) \cdot \hat{r}_{21} + (v_1^2 - v_2^2) \hat{r}_{21}] \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2},$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{r,\mathbf{R}} = \langle -\frac{1}{2} [\phi'(R) \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \hat{R} + [-\phi'(R) + R\phi''(R)] \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \cdot \hat{R} \hat{R} \hat{R} + \phi'(R) \hat{R} \mathbf{u}_{\mathbf{R}}] \cdot \mathbf{v}_1 \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}},$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1\lambda} = \mathbf{F}_1^U \cdot [\mathbf{J}_{\mathbf{P}}^\phi]^\top + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\Delta \mathbf{F}^U},$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{r,1+2} = \langle \frac{1}{2} \phi'(r_{12}) \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{r}_{12} \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2},$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1} = e^p \mathbf{F}_1^U,$$

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\phi,13} = \langle \frac{1}{2m} [\phi(r_{12}) - \phi(r_{32})] \phi'(r_{31}) \hat{r}_{31} \rangle_{\mathbf{v}_1 x_2 x_3},$$

де у виразі для $\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1\lambda}$ “залишок” дорівнює

$$\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\Delta \mathbf{F}^U} \equiv \langle (\mathbf{F}_{1\lambda}^U - \mathbf{F}_1^U) \cdot [-\frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \mathbf{R} m] \rangle_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}.$$

Сумарний внесок в джерело від зовнішнього поля виражається через густини енергії та імпульсу:

$$\mathbf{S}_{\mathbf{J}_e}^U \equiv \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1} + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1\lambda} + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{U,1} = e^{k+p} \mathbf{F}_1^U + \mathbf{J}_{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{F}_1^U + \mathbf{s}_{\mathbf{J}_e^k}^{\Delta \mathbf{F}^U}.$$

Рівняння для \mathbf{J}_e є другим, поряд з (203), яке розширює набір рівнянь звичайної гідродинаміки.

Можна порівняти між собою рівняння переносу для $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}$ та \mathbf{J}_e за кількістю внесків у потоки та джерела цих величин. Тензор потоку імпульсу має лише два внески — локальний і нелокальний, — причому для нелокального $\tilde{\psi}_{\mathbf{P}}^2$ залежить лише від відносної координати \mathbf{R} . Тому маємо лише 3 внески в потік з $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}$ і 3 (2 без поля U) внески в джерело $\mathbf{s}_{\mathbf{J}_{\mathbf{P}}}$. Для потоку енергії ситуація ускладнюється тим, що він містить вже три внески: локальний, нелокальний і локальний двочастинковий (190). В останніх двох молекулярні характеристики залежать як від координат, так і від швидкості \mathbf{v}_1 . Разом це дає 8 внесків у потік потоку енергії $\mathbf{J}_{\mathbf{J}_e}$ та 7 (4 без поля U) внесків у джерело потоку енергії $\mathbf{s}_{\mathbf{J}_e}$, вирази (225), (226).

Обидва ці рівняння складні: для потоку імпульсу — завдяки тензорній розмірності, а для потоку енергії — завдяки, грубо кажучи, більшій кількості доданків різного походження від густин як кінетичної, так і потенціальної енергій. Цікаво також зауважити, що рівняння для $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}$ не містить величин, які усереднюються з тричастинковою функцією розподілу, на відміну від рівняння для потоку енергії. Корисно би було проаналізувати вигляд цих рівнянь переносу в рамках того чи іншого наближення для f_2 та f_3 .

Ці два рівняння становлять, так би мовити, *перше розширення*. Наступне — друге — розширення полягає у тому, щоб записати рівняння переносу для чотирьох величин, двох потоків та двох джерел:

$$\begin{aligned} 3J_p, & \quad s_{J_p}, \\ J_e, & \quad s_{J_e} \end{aligned} \quad (227)$$

— одного тензора третього рангу, двох тензорів другого рангу й одного вектора.

7.3. Аналогії з ланцюжком ББГКІ

Продовжуючи і так далі отримуємо ланцюжок рівнянь гідродинамічного типу, який в термодинамічній границі стає нескінченним. Оскільки його отримано на основі ієрархії ББГКІ, то мабуть варто наголосити на виявлених подібностях та відмінностях між ними. Спочатку ми перелічимо основні особливості ієрархії ББГКІ, а потім те, що їм відповідає у випадку ланцюжка гідродинамічних рівнянь.

Отже:

а) ланцюжок ББГКІ записано для скалярних функцій $f_s(x^s, t)$, які означаються за допомогою $\varrho(x^N, t)$; кожна наступна функція розподілу повністю визначає всі молодші; різні функції залежать від різної кількості аргументів і тому належать до різних класів функцій;

б) кожній функції розподілу відповідає свій рівень опису: одночастинковий, двочастинковий і т.д.; зазвичай, тільки перші два рівні є “фізично цікаві” і піддаються розв’язанню;

в) кожне рівняння ланцюжка є незамкнуте і зачіпляє одну старшу функцію розподілу; всі рівняння слідує з рівняння Ліувіля і виводяться шляхом відінтегрування частини ступенів вільності всієї N -частинкової системи; можна сказати, що рівняння Ліувіля ніби “згортається” до рівня s -го рівняння;

г) ланцюжок ББГКІ, як і рівняння Ліувіля, є одночасовим (чи марківським), не містять ефектів пам’яті, а всі рівняння є точними, поки не зроблено обриву і замикання за допомогою того чи іншого наближення; залежно від характеру останнього в отриманому наближеному описі може з’явитися “немарковість”.

В ланцюжку гідродинамічних рівнянь переносу (ГДРП) переліченим властивостям відповідають такі:

а’) ланцюжок записано для тензорних функцій, ранг яких поступово зростає, починаючи для простої рідини з двох скалярних та

однієї векторної величин; функції означено за допомогою функцій розподілу з використанням молекулярних характеристик, як додаткових складників гідродинамічного ланцюжка; попри різний ранг, всі тензорні функції, проте, залежать тільки від просторової координати і (параметрично) від часу;

б’) рівень опису за допомогою гідродинамічних функцій визначається як правило повільністю їхньої зміни, починаючи, як вже нераз згадувано, з густин збережуваних величин, їхніх потоків, потоків і джерел цих потоків і т.д.; на кожному рівні з’являються тензорні функції вищого рангу;

в’) кожне рівняння ланцюжка ГДРП для певної величини є незамкнуте і містить нові невідомі функції — потік і джерело, — через які може зачіплятися наступна функція розподілу; тут маємо ситуацію, що ланцюжок ГДРП ніби розгортається, починаючи з найповільніших макроскопічних густин; кожен наступні потоки і джерела розширюють набір функцій; в результаті такої розгортання отримуємо “природний” набір змінних для опису поведінки системи засобами функцій-полів, залежних від (\mathbf{r}, t) ;

г’) рівняння переносу теж є формально точними і марківськими; обрив і замикання ланцюжка можна здійснити за допомогою наближень або для самих вищих потоків та джерел, або для вищих функцій розподілу, котрі їх означають.

Можна відслідкувати, як міняється кількість змінних опису і отже, кількість рівнянь для них, якщо рухатися “вверх” по ланцюжку до вищих рівнів опису.

Розгляньмо випадок тривимірного простору:

- 1-ий рівень: 2 скаляри і 1 вектор — 3 змінні, 5 компонент;
- 2-ий рівень (перше розширення): додалися 1 тензор другого рангу і 1 вектор: 2 змінні, 12 компонент ($3^2 + 3$);
- 3-ій рівень (друге розширення): з’являються 1 тензор третього рангу, 2 тензори другого рангу і 1 вектор, див. (227): 4 змінних, 48 компонент ($3^3 + 2 \cdot 3^2 + 3$);
- 4-ий рівень: буде 1 тензор четвертого рангу, 3 тензори третього рангу, 3 тензори другого рангу і 1 вектор: 8 змінних і 192 компоненти;

Тут кількість змінних Q та максимальна кількість компонент C_{\max} зростають в показниковій залежності від номера рівня L як

$$Q = 2^{L-1} \quad \text{та} \quad C_{\max} = 3 \cdot 4^{L-1}.$$

Проте, легко бачити, що тензор потоку імпульсу є симетричний і тому замість усіх 9 слід врахувати лише 6 незалежних його компонент. Припустивши, що всі наступні потоки і джерела будуть симетричними по *vis* своїх тензорних індексах, можемо отримати оцінку знизу C_{\min} для кількості незалежних компонент. Симетричний тензор r -го рангу у тривимірному просторі має $K_3(r) = \frac{1}{2}(r+1)(r+2)$ незалежних компонент. Тому на другому, третьому і четвертому рівнях буде відповідно

$$\begin{aligned} 2: & \quad 9 = 6 + 3, \\ 3: & \quad 25 = 10 + 2 \cdot 6 + 3, \\ 4: & \quad 66 = 15 + 3 \cdot 10 + 3 \cdot 6 + 3 \end{aligned}$$

рівнянь. Отже, для рівня $L \geq 2$ мінімальна кількість рівнянь для незалежних компонент буде дорівнювати:

$$C_{\min} = \sum_{k=1}^L C_{L-1}^{k-1} K_3(k) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^L \frac{(L-1)! (k+1)(k+2)}{(k-1)! (L-1-(k-1))!},$$

де C_m^n — число комбінацій. Дійсне число незалежних компонент лежить між C_{\min} і C_{\max} .

І без наведених оцінок ясно, що кількість змінних опису і кількість рівнянь будуть швидко зростати при переході до наступних рівнів гідродинамічного опису. (І навіть перевищать за своєю кількістю $6N$ динамічних рівнянь Гамільтона для індивідуальних координат та імпульсів частинок усієї системи). В застосуваннях, мабуть лише перші 2 чи 3 рівні опису можуть бути корисними.

8. Перехід до лягранжевого опису

До цього місця всі рівняння переносу розглядалися у нерухомій відносно спостерігача системі відліку. Це так званий просторовий спосіб опису, який також називають описом Ейлера [3,4]. З макроскопічної точки зору рух кожної молекули можна “розкласти” на дві складові: конвективну і властиво молекулярну. Перша пов’язана з конвективним рухом макроскопічно малого елемента маси як цілого, що задається гідродинамічною швидкістю $\mathbf{V}(\mathbf{r}_1, t)$. Другу складову частіше називають тепловою і вона характеризує внесок від хаотичного молекулярного руху на тлі макроскопічного конвективного. Завдяки такому розділенню кожен гідродинамічну величину, молекулярна характеристика якої містить залежність від швидкостей, можна інтерпретувати як суму конвективного та властиво молекулярного внесків, а також, як буде з’ясовано, і перехресних конвективно-молекулярних (конвективно-теплових) внесків.

Альтернативним є опис Лягража [3,4], коли гідродинамічні величини розглядаються у рухомій системі координат, яка рухається у даній точці простору \mathbf{r}_1 в момент часу t з гідродинамічною швидкістю $\mathbf{V}(\mathbf{r}_1, t)$. У цьому разі рівняння переносу записуються лише для властиво молекулярних внесків. При переході від опису Ейлера до опису Лягража внески, пов’язані з конвективним рухом, послідовно виключаються з рівнянь переносу. Зв’язковою ланкою між двома способами опису є гідродинамічна швидкість $\mathbf{V}(\mathbf{r}_1, t)$, яка тим самим посідає особливе місце серед інших гідродинамічних величин.

У цьому параграфі подано перехід до лягранжевого опису в рівняннях переносу звичайної гідродинаміки і в рівняннях переносу для потоків імпульсу та енергії, які становлять перше розширення. Але спочатку ми відділимо конвективні та властиво молекулярні внески у самих величинах.

8.1. Аналіз гідродинамічних величин

Густина маси $\rho(\mathbf{r}_1, t) = \langle m \rangle_{\mathbf{v}_1}^1$ є найпростішою величиною гідродинамічного типу, а її молекулярна характеристика $\psi_\rho^1 = m$ не залежить ні від швидкості \mathbf{v}_1 , ні від координати \mathbf{r}_1 . Тому рівняння переносу для неї теж має найпростіший вигляд (94).

Густина імпульсу $\mathbf{p}(\mathbf{r}_1, t) = \langle m\mathbf{v}_1 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1$ є потоком величини $\rho(\mathbf{r}_1, t)$ і одночасно служить для означення гідродинамічної швидкості за допомогою співвідношення:

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \mathbf{p}(\mathbf{r}_1, t) / \rho(\mathbf{r}_1, t).$$

Тепер кожен величину a , молекулярна характеристика якої залежить від швидкостей, можна представити як суму конвективного a^{conv} та властиво молекулярного a^{mol} внесків. Це здійснюється за допомогою підстановки

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{V} + \mathbf{c}_1 \quad (228)$$

в означення величини a , де \mathbf{c}_1 — швидкість частинки в локальній системі координат, що рухається зі швидкістю $\mathbf{V}(\mathbf{r}_1, t)$ (теплова швидкість).

Далі буде розглянуто густину енергії e і потоки імпульсу \mathbf{J}_p та енергії \mathbf{J}_e , вводячи для кожної з цих величин нове позначення для внеску типу a^{mol} .

Виділивши в густині кінетичної енергії $e^k = \langle \frac{1}{2} m v_1^2 \rangle_{\mathbf{v}_1}^1$ конвективний внесок $e^{k, \text{conv}} = \frac{1}{2} \rho V^2$ за допомогою підстановки (228) отримуємо:

$$e^k = \frac{1}{2} \rho V^2 + \varepsilon^k, \quad \varepsilon^k \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} m c_1^2 \rangle_{\mathbf{c}_1}^1. \quad (229)$$

Молекулярна характеристика для густини потенціальної енергії $\psi_{eP}^2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2}\phi(r_{12})$ не залежить від швидкостей молекул 1 та 2, тому $e^P(\mathbf{r}_1, t)$ як і $\rho(\mathbf{r}_1, t)$ не інтерпретується в термінах конвективного і молекулярного внесків. В результаті, густина повної енергії $e(\mathbf{r}_1, t)$ запишеться так:

$$e(\mathbf{r}_1, t) = \frac{1}{2}\rho V^2 + \varepsilon(\mathbf{r}_1, t), \quad (230)$$

де

$$\varepsilon(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\text{df}}{=} \varepsilon^k(\mathbf{r}_1, t) + e^P(\mathbf{r}_1, t)$$

— властиво молекулярний внесок до густини повної енергії, який є ніщо інше, як густина внутрішньої енергії.

Потік імпульсу \mathbf{J}_P має два внески: \mathbf{J}_P^k та \mathbf{J}_P^ϕ . Виділивши в \mathbf{J}_P^k конвективний внесок $\rho\mathbf{V}\mathbf{V}$ за допомогою підстановки (228), одержимо:

$$\mathbf{J}_P^k = \rho\mathbf{V}\mathbf{V} + P^k, \quad P^k \stackrel{\text{df}}{=} \langle m\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1 \rangle_{\mathbf{c}_1}^1.$$

Прийнявши позначення P^ϕ для внеску від парної взаємодії

$$P^\phi \equiv \mathbf{J}_P^\phi = \langle -\frac{1}{2}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})m \rangle_{\mathbf{c}_1\mathbf{c}_2(\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2,$$

можемо записати:

$$\mathbf{J}_P = \rho\mathbf{V}\mathbf{V} + P, \quad P \equiv P^{k+\phi}, \quad (231)$$

де P — тензор напружень (властиво молекулярний внесок у тензор потоку імпульсу).

За допомогою підстановки (228) кожний з трьох внесків до потоку енергії $\mathbf{J}_{e^k}^k$, $\mathbf{J}_{e^k}^\phi$, $\mathbf{J}_{e^P}^k$ можна подати так:

$$\mathbf{J}_{e^k}^k = \mathbf{J}_{e^k}^{k,\text{conv}} + \mathbf{J}_{e^k}^{k,\text{cm}} + \mathbf{J}_{e^k}^{k,\text{mol}} \equiv e^k\mathbf{V} + P^k \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}_k^k, \quad (232)$$

$$\mathbf{J}_{e^k}^\phi = \mathbf{J}_{e^k}^{\phi,\text{cm}} + \mathbf{J}_{e^k}^{\phi,\text{mol}} \equiv P^\phi \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}_k^\phi, \quad (233)$$

$$\mathbf{J}_{e^P}^k = \mathbf{J}_{e^P}^{k,\text{conv}} + \mathbf{J}_{e^P}^{k,\text{mol}} \equiv e^P\mathbf{V} + \mathbf{q}_P^k, \quad (234)$$

де введено позначення для внесків різного типу в потік тепла \mathbf{q} :

$$\mathbf{q}_k^k \stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2}m\mathbf{c}_1^2\mathbf{c}_1 \rangle_{\mathbf{c}_1}^1, \quad (235)$$

$$\mathbf{q}_k^\phi \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot m\mathbf{c}_1 \rangle_{\mathbf{c}_1\mathbf{c}_2(\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2, \quad (236)$$

$$\mathbf{q}_P^k \stackrel{\text{df}}{=} \langle \mathbf{c}_1 \frac{1}{2}\phi(r_{12}) \rangle_{\mathbf{c}_1 x_2}^2 \quad (237)$$

Нижній індекс біля \mathbf{q} вказує тип енергії, а верхній — тип самого внеску. У виразах для $\mathbf{J}_{e^k}^k$ та $\mathbf{J}_{e^k}^\phi$ з'явилися ще й “перехресні” конвективно-молекулярні внески, $P^k\mathbf{V}$ і $P^\phi\mathbf{V}$, відповідно (позначені верхнім індексом “cm”).

Додавши праві частини виразів (232)–(234) отримаємо для потоку енергії:

$$\mathbf{J}_e = e\mathbf{V} + P \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}, \quad (238)$$

де $\mathbf{q} = \mathbf{q}_k^k + \mathbf{q}_k^\phi + \mathbf{q}_P^k$ — повний потік тепла. У попередніх позначеннях ці внески до \mathbf{J}_e в (238) означають відповідно $\mathbf{J}_e^{\text{conv}}$, \mathbf{J}_e^{cm} , $\mathbf{J}_e^{\text{mol}}$. Перехід до опису Лягранжа означає, що замість рівнянь переносу для набору величин $\{\rho, \mathbf{p}, e, \mathbf{J}_P, \mathbf{J}_e\}$, які отримано раніше, переходять до опису системи за допомогою рівнянь для набору

$$\{\rho, \mathbf{V}, \varepsilon, P, \mathbf{q}\}. \quad (239)$$

8.2. Перетворення рівнянь переносу

Рівняння для густин збережувальних величин. У рівняннях переносу опису Лягранжа замість частинної похідної по часу деколи зручно вживати матеріальну (субстанціональну) похідну

$$d_t \stackrel{\text{df}}{=} \partial_t + \mathbf{V} \cdot \nabla.$$

Записуючи рівняння переносу для ρ через змінні набору (239) одержимо:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot [\rho\mathbf{V}] = 0 \quad \text{або} \quad d_t \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{V} = 0. \quad (240)$$

Рівняння для гідродинамічної швидкості отримується з рівняння переносу для густини імпульсу, комбінуючи його з рівнянням (240) для ρ :

$$d_t \mathbf{V} + \rho^{-1} \nabla \cdot P = \mathbf{F}^U. \quad (241)$$

Це рівняння можна записати в іншому вигляді, сформувавши у лівій частині дивергенцію потоку:

$$d_t \mathbf{V} + \nabla \cdot [\mathbf{V}\mathbf{V}] = \mathbf{F}^U + \mathbf{V} \nabla \cdot \mathbf{V} - \rho^{-1} \nabla \cdot P, \quad (242)$$

де член під дивергенцією тлумачиться як внесок конвективного типу $\mathbf{J}_V^{\text{conv}}$ до потоку величини \mathbf{V} . Відповідно, другий і третій доданки правої частини є конвективний і тепловий внески до джерела \mathbf{s}_V . Однак, сама гідродинамічна швидкість не належить до густин адитивних величин. Вдаючись до аналогії з поділом термодинамічних

величин на адитивні та інтенсивні, $\mathbf{V}(\mathbf{r}_1, t)$ можна охарактеризувати як інтенсивну гідродинамічну величину. З цієї причини запис рівняння для неї в термінах дивергенції потоку та джерела не має такої безпосередньої інтерпретації, як для густин адитивних величин, і тому виглядає можливо дещо штучно.

Рівняння для густини внутрішньої енергії отримується якщо, згідно співвідношення (230), від рівняння (146) для e , у якому здійснено підстановку (228), відняти рівняння для конвективного внеску e^{conv} . Оскільки $e^{\text{conv}} = \frac{1}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{V}$, то рівняння для неї отримується шляхом комбінації рівнянь для \mathbf{p} та \mathbf{V} з результатом:

$$\partial_t e^{\text{conv}} + \nabla \cdot [e^{\text{conv}}\mathbf{V}] = \rho\mathbf{V}\cdot\mathbf{F}^U - \mathbf{V}\nabla:P. \quad (243)$$

Тоді для густини внутрішньої енергії ε одержуємо рівняння в термінах конвективного і теплового потоків та джерела:

$$\partial_t \varepsilon + \nabla \cdot [\varepsilon\mathbf{V} + \mathbf{q}] = -P: [\nabla\mathbf{V}]^T, \quad (244)$$

де верхній індекс "Т" позначає операцію транспонування. Джерело у правій частині описує незбережуваність густини внутрішньої енергії завдяки процесам внутрішнього тертя. Ще зауважмо, що в (244) нема доданків, пов'язаних зі зовнішнім полем.

Отримані рівняння (241) та (244) для \mathbf{V} , ε разом з рівнянням (240) для ρ становлять основу опису Лягранжа в рамках звичайної гідродинаміки простої рідини.

Рівняння для тензора напружень \mathbf{P} . Рівняння для потоків, одержані в § 7, перетворюються подібно. З рівнянь для \mathbf{p} та \mathbf{V} отримуємо рівняння для конвективного потоку імпульсу $\mathbf{J}_p^{\text{conv}}$:

$$\partial_t(\rho\mathbf{V}\mathbf{V}) + \nabla \cdot [\rho\mathbf{V}\mathbf{V}\mathbf{V}] = [1 + \mathcal{T}_{12}](-\mathbf{V}\nabla\cdot\mathbf{P} + \rho\mathbf{V}\mathbf{F}_1^U). \quad (245)$$

Тут і далі $\mathcal{T}_{\alpha\beta}$ означає операцію транспонування тензора відносно компонент α та β . (Взявши $\frac{1}{2}$ і домноживши скалярно це рівняння на $:1$, отримаємо рівняння переносу (243) для e^{conv} .)

Віднявши (245) від рівняння для \mathbf{J}_p , у якому зроблено підстановку (228), здобудемо рівняння переносу для тензора напружень:

$$\partial_t \mathbf{P} + \nabla \cdot [\mathbf{V}\mathbf{P} + \mathbf{z}\mathbf{R}] = \mathbf{s}_p^{\text{mol}} - [1 + \mathcal{T}_{12}](\mathbf{P}^T \cdot \nabla\mathbf{V}). \quad (246)$$

Тут $\mathbf{V}\mathbf{P} \equiv \mathbf{z}\mathbf{J}_p^{\text{conv}}$, $\mathbf{z}\mathbf{R} \equiv \mathbf{z}\mathbf{J}_p^{\text{mol}}$ — конвективний і тепловий внески до потоку тензора напружень, $\mathbf{s}_p^{\text{mol}}$ — джерело властиво молекулярного

типу, а другий доданок правої частини являє собою конвективно-молекулярний внесок у джерело. Явний вигляд для $\mathbf{z}\mathbf{R}$ і $\mathbf{s}_p^{\text{mol}}$ такий:

$$\mathbf{z}\mathbf{R} = \mathbf{z}\mathbf{R}_k^k + \mathbf{z}\mathbf{R}_k^\phi + \mathbf{z}\mathbf{R}_\phi^k, \quad \mathbf{s}_p^{\text{mol}} = \mathbf{s}_{pk}^\phi + \mathbf{s}_{p\phi}^k, \quad (247)$$

де

$$\mathbf{z}\mathbf{R}_k^k \stackrel{\text{df}}{=} \langle m\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1 \rangle_{\mathbf{c}_1}^1, \quad (248)$$

$$\mathbf{z}\mathbf{R}_k^\phi \stackrel{\text{df}}{=} [1 + \mathcal{T}_{23}] \langle -\frac{1}{2}\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})m\mathbf{c}_1 \rangle_{(\mathbf{c}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2, \quad (249)$$

$$\mathbf{z}\mathbf{R}_\phi^k \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}(\mathbf{c}_1 + \lambda\mathbf{c}_{21})\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})m \rangle_{(\mathbf{c}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2, \quad (250)$$

$$\mathbf{s}_{pk}^\phi \stackrel{\text{df}}{=} [1 + \mathcal{T}_{12}] \langle \frac{1}{2}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21})m\mathbf{c}_{12} \rangle_{\mathbf{c}_1x_2}^2, \quad (251)$$

$$\mathbf{s}_{p\phi}^k \stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2}\mathbf{c}_{21} \cdot \nabla_{\mathbf{R}}[\mathbf{R}\Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})]m \rangle_{(\mathbf{c}\mathbf{R}\lambda)_{12}}^2. \quad (252)$$

Добре видно, що рівняння (246) володіє симетрією тензора \mathbf{P} : внески в джерело — просто симетричні тензори, а поточкові внески симетричні по двох останніх індексах. Ще воно, як і рівняння для густини внутрішньої енергії (244), не містить внеску від зовнішнього поля $U(\mathbf{r})$.

Рівняння для потоку тепла \mathbf{q} . Запишімо спочатку рівняння переносу для внесків $e\mathbf{V}$ та $\mathbf{P}\mathbf{V} \equiv \mathbf{P} \cdot \mathbf{V}$, які виводяться з рівнянь для \mathbf{V} й e та зі щойно одержаного рівняння (246) для \mathbf{P} . У результаті отримуємо:

$$\begin{aligned} \partial_t(e\mathbf{V}) + \nabla \cdot [e\mathbf{V}\mathbf{V}] &= -\mathbf{V}\nabla \cdot [\mathbf{P}_V + \mathbf{q}] - (e/\rho)\nabla \cdot \mathbf{P} + \\ &+ e\mathbf{F}_1^U + \mathbf{F}_1^U \cdot \rho\mathbf{V}\mathbf{V}, \end{aligned} \quad (253)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\mathbf{P}_V) + \nabla \cdot [\mathbf{V}\mathbf{P}_V] &= -[\nabla \cdot \mathbf{z}\mathbf{R} + \mathbf{P}^T \cdot \nabla\mathbf{V} + [\nabla\mathbf{V}]^T \cdot \mathbf{P}] \cdot \mathbf{V} + \\ &+ \mathbf{s}_p^{\text{mol}} \cdot \mathbf{V} - \rho^{-1}\mathbf{P}\nabla:P + \mathbf{P} \cdot \mathbf{F}_1^U. \end{aligned} \quad (254)$$

Віднявши їх від рівняння переносу для \mathbf{J}_e , у якому здійснено підстановку (228), одержуємо рівняння для теплового потоку \mathbf{q} :

$$\partial_t \mathbf{q} + \nabla \cdot [\mathbf{V}\mathbf{q} + \mathbf{Q}] = \mathbf{s}_q^{\text{mol}} - \mathbf{q} \cdot \nabla\mathbf{V} - \frac{\mathbf{T}}{3}\mathbf{R}:\nabla\mathbf{V} + (\varepsilon/\rho)\nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (255)$$

де \mathbf{Q} , $\mathbf{s}_q^{\text{mol}}$ — властиво молекулярні внески у потік та джерело теплового потоку \mathbf{q} . Вони мають вигляд:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{qk}^k + \mathbf{Q}_{qk}^\phi + \mathbf{Q}_{qk}^k + \mathbf{Q}_{qk}^\phi + \mathbf{Q}_{qk}^k + \mathbf{Q}_{qk}^\phi, \quad (256)$$

$$\mathbf{s}_q^{\text{mol}} = \mathbf{s}_{qk}^\phi + \mathbf{s}_{qk}^r + \mathbf{s}_{qk}^{\Delta\mathbf{F}^U} + \mathbf{s}_{qk}^r + \mathbf{s}_{qk}^\phi, \quad (257)$$

де явні вирази для окремих внесків такі:

$$\begin{aligned}
Q_{\mathbf{q}_k}^k &\stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} m c_1^2 \mathbf{c}_1 \mathbf{c}_1 \rangle_{\mathbf{c}_1}, \\
Q_{\mathbf{q}_k}^\phi &\stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot \frac{m}{2} (2\mathbf{c}_1 \mathbf{c}_1 + c_1^2 \mathbf{I}) \rangle_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}, \\
Q_{\mathbf{q}_k}^k &\stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2} (\mathbf{c}_1 + \lambda \mathbf{c}_{21}) \mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R}) \cdot m \mathbf{c}_1 \rangle_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}, \\
Q_{\mathbf{q}_k}^\phi &\stackrel{\text{df}}{=} J_{\mathbf{J}_{e^k}^\phi}^{\phi,12} + J_{\mathbf{J}_{e^k}^\phi}^{\phi,13}, \\
Q_{\mathbf{q}_p}^k &\stackrel{\text{df}}{=} \langle \mathbf{c}_1 \mathbf{c}_1 \frac{1}{2} \phi(r_{12}) \rangle_{\mathbf{c}_1 x_2}, \\
Q_{\mathbf{q}_p}^\phi &\stackrel{\text{df}}{=} J_{\mathbf{J}_{e^p}^k}^{\phi,12} + J_{\mathbf{J}_{e^p}^k}^{\phi,13}, \\
s_{\mathbf{q}_k}^\phi &\stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{21}) \cdot \frac{m}{2} [2(\mathbf{c}_1 \mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_2 \mathbf{c}_2) + (c_1^2 - c_2^2) \mathbf{I}] \rangle_{\mathbf{c}_1 x_2}, \\
s_{\mathbf{q}_k}^r &\stackrel{\text{df}}{=} \langle -\frac{1}{2} \mathbf{c}_{21} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} [\mathbf{R} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{R})] \cdot m \mathbf{c}_1 \rangle_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}, \\
s_{\mathbf{q}_p}^r &\stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \mathbf{c}_1 \mathbf{c}_{12} \cdot m \Theta_\phi(\mathbf{r}_{12}) \rangle_{\mathbf{c}_1 x_2}, \\
s_{\mathbf{q}_p}^\phi &\stackrel{\text{df}}{=} \langle \frac{1}{2} \Theta_\phi^\dagger(\mathbf{r}_{31}) [\phi(r_{12}) - \phi(r_{32})] \rangle_{\mathbf{c}_1 x_2 x_3}^3 \equiv s_{\mathbf{J}_{e^p}^k}^{\phi,13}.
\end{aligned}$$

Вони повторюють вирази своїх відповідників, записаних у нерухомій системі відліку, якщо в останніх зробити заміну $\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{c}_1$. Ті внески, що не містять залежності від швидкостей, залишаються незмінними. На відміну від ε та P , рівняння для \mathbf{q} явно містить вплив поля U через доданок $\mathbf{s}_{\mathbf{q}_k}^{\Delta \mathbf{F}^U} \equiv \mathbf{s}_{\mathbf{J}_{e^k}^\phi}^{\Delta \mathbf{F}^U}$.

8.3. Обговорення рівнянь опису Лягранжа

Як видно з рівнянь для ε , P , \mathbf{q} , властиво молекулярні потоки P , \mathbf{q} , ${}_3R$ можуть входити у ці рівняння не тільки лінійно під знаком дивергенції, а також нелінійно через добуток з $\nabla \mathbf{V}$, котрий не фігурує самостійно у рівняннях переносу опису Лягранжа, починаючи з рівняння для внутрішньої енергії. В цьому також проявляється особлива роль гідродинамічної швидкості. Можна припустити, що така особливість буде зберігатися у другому і наступних розширеннях.

Можна ще відзначити, що при переході до опису Лягранжа відбувається деяке перегрупування доданків. Воно проявляється у появі пропорційних до $\nabla \mathbf{V}$ внесків конвективно-молекулярного типу в джерело у правій частині рівнянь для густин ε , P , \mathbf{q} , а також у відсутності внесків від поля U в джерело для ε та P .

Рівняння переносу для ε , P , \mathbf{q} можна також вивести альтернативним способом, записавши для них відповідні молекулярні характеристики, що залежать не від \mathbf{v}_1 , а від теплової швидкості $\mathbf{c}_1(\mathbf{r}_1, t) = \mathbf{v}_1 - \mathbf{V}(\mathbf{r}_1, t)$ та координати \mathbf{r}_1 через \mathbf{V} і використавши загальні рівняння переносу.

З точки зору застосовності рівнянь першого розширення, то тут можливо є деякі труднощі, зокрема при заданні початкових чи граничних умов, оскільки феноменологічна теорія цих рівнянь не має достатнього розвитку. Наприклад, для того, щоби замкнути ланцюжок гідродинамічних рівнянь на другому рівні опису (подібно до того, як це робиться на першому рівні, задаючи явний вигляд для величин P та \mathbf{q}), треба запропонувати певні функціональні співвідношення для наступних молекулярних потоків ${}_3R$ і Q та джерел $\mathbf{s}_p^{\text{mol}}$ і $\mathbf{s}_q^{\text{mol}}$, виразивши їх через функції набору (239). Це можна зробити або на основі феноменологічних здогадів чи припущень, або за допомогою розвитку кінетичної теорії в цьому напрямку.

Найпростіше феноменологічне рівняння, яке описує процеси згасання внутрішніх напружень у рідині після того, як повністю згасне конвективний рух, має вигляд звичайного наближення часу релаксації [16]:

$$d_t P = -\frac{1}{\tau} P.$$

Порівнюючи його з рівнянням (246), принаймні видно, які доданки не враховано зовсім. Зокрема $\nabla \cdot {}_3R$, яке при $\mathbf{V} = 0$ може бути відмінне від нуля. Для джерела зроблено наближення $\mathbf{s}_p^{\text{mol}} \approx -\tau^{-1} P$.

9. Висновки

Нами розглянуто один з найпростіших випадків класичної системи частинок з поступальними ступенями вільності, що взаємодіють між собою. Міжчастинковий потенціал і внесок зовнішніх сил в гамільтоніан теж взято найпростішими з можливих. Для доволі загальних стартових умов (посилок) сформульовано проблему виведення рівняння переносу для густини довільної макроскопічної адитивної величини, котру вирішено в доволі загальних припущеннях. Потоки і джерела, що виникають у виведених рівняннях, задовольняють свої рівняння переносу, які зрозуміло як отримати у рамках запропонованої схеми. В результаті ми одержуємо ланцюжок рівнянь гідродинамічного типу, який в термодинамічній границі стає нескінченним.

Оскільки при виведенні рівнянь переносу ніде не конкретизувався і не використовувався такий фактор, як вимірність простору, то

можна вважати, що результати годяться як для 3D, так і для 2D систем.

Розгляд загальної макроскопічної густини, для якої виводиться рівняння переносу, спирається на концепцію представлення макроскопічних величин за допомогою частинкових функцій розподілу, яка у свою чергу використовує поняття частинкових молекулярних характеристик даної густини a . Останні є прямим узагальненням поняття зіткненнявих інваріантів, що вводяться при дослідженні кінетичного рівняння Больцмана, одночастинкових за своєю природою. Також молекулярні характеристики узагальнюють характеристики моментів одночастинкової функції розподілу в моментному методі Греда розв'язування рівняння Больцмана.

Схему продемонстровано на прикладі набору густин зберезуваних величин, які використовують для опису простих рідин чи густих газів. З'ясовано деякі деталі виведення рівнянь звичайної гідродинаміки, на які раніше не звертано належної уваги [2] та виведено рівняння для потоків імпульсу й енергії (тензора напружень і вектора потоку тепла в — лягранжевому описі), котрі є першим розширенням рівнянь переносу для густин маси, імпульсу та енергії.

В основі підходу використано відому ідею про розширення набору величин, за допомогою яких описується система. В цьому контексті, можна провести паралелі з деякими іншими методами теорії нерівноважних процесів, зокрема з методом узагальнених колективних мод [17, 18] та моментним методом Греда. Перший запроваджено для дослідження рівноважних часових кореляційних функцій і колективних збуджень у простих рідинах, який виявився також ефективним у застосуванні до полярних і магнітних рідин, кулонівських систем та ін. В цьому методі до основного набору параметрів, який складається з густин зберезуваних величин, долучаються їхні вищі часові похідні.

Набагато тісніші аналогії можна побачити між запропонованим підходом і методом Греда, розвинутим для кінетичного рівняння Больцмана [19, 20]. Отримані нами рівняння переносу годяться як для низьких, так і для високих густин. При пониженні густини системи роль потенціальних внесків \mathbf{J}^ϕ у потоки буде зменшуватися, а при больцманівських густинах ними можна знехтувати зовсім. Залишається лише кінетичні частини \mathbf{J}^k , які збігаються з наступними після перших моментами, введеними Гредом. Моментний метод часом застосовують до кінетичного рівняння Енскога, уникаючи ускладнень, пов'язаних із зіткненнявим переносом [21–23] і розвиваючи теорію тільки на основі кінетичних внесків до потоків. Отримані вище ре-

зультати дещо прояснюють питання про те, як саме цей метод повинен бути модифікований в застосуванні до густих флюїдів. Хоча, детальніший аналіз стосовно методу Греда заслуговує окремої уваги.

Підхід можна узагальнити на випадок класичних систем частинок з обертовими ступенями вільності, або розглянути вплив зовнішнього електричного чи магнітного поля, вважаючи, що частинки володіють дипольним чи магнітним моментами. Також запропоновану схему можна зреалізувати і для модельних потенціалів типу відштовхування твердих кульок, потенціала прямокутної ями чи багатосходинкового потенціала. Деяким з цих питань буде присвячено наступні наші роботи.

Подяки

Автори висловлюють вдячність к.ф.-м.н. В.В.Ігнатьоку за спільне обговорення деяких питань роботи.

Література

1. Maxwell J.C. On the dynamical theory of gases. // Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1867, vol. 157, p. 49.
2. Ферцигер Дж., Калер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. Москва, Мир, 1976, 554 с.
3. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы, Москва, Мир, 1974, 304 с.
4. Седов Л.И. Механика сплошной среды, Москва, Наука, 1973, т. 1, 536 с.
5. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов, Москва, Изд. иностр. лит., 1960, 510 с.
6. Либов Р.Л. Введение в теорию кинетических уравнений, Москва, Мир, 1974, 371 с.
7. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика, Москва, Мир, 1978, т. 1, 405 с.; т. 2, 400 с.
8. Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов (физические основы), Москва, Наука, 128 с.
9. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике, Москва–Ленинград, Гостехиздат, 1946, 120 с.;
10. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике, В: Избран. тр. в трех томах, Киев, Наукова думка, 1970, т. 2, 520 с.

11. Токарчук М.В., Гуменюк Й.А. Виведення рівнянь гідродинаміки для густих сумішей газів зі сходинковою взаємодією між частинками. / Препринт ІФКС НАН України, ICMP-04-09U, Львів, 2004, 26 с.
12. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика, Москва, Наука, 1971, 415 с.
13. Форстер Д. Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции, Москва, Атомиздат, 1980, 288 с.
14. Humenyuk Y.A., Tokarchuk M.V. Extension of hydrodynamic equations obtained from the BBGKY hierarchy. In: Book of abstracts of International Conference in Ukraine “Statistical Physics 2006. Condensed Matter: Theory & Applications”, September 12–15, 2006, Kharkiv, Ukraine, p. 80.
15. Humenyuk Y.A., Tokarchuk M.V. Hydrodynamic-type transport equation hierarchy for a fluid with a smooth central interparticle interaction. In: Book of abstracts of “2-nd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics QEDSP2006”, 19–23 September, 2006, Kharkiv, Ukraine, p. 149.
16. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости, Москва, Наука, 1965, 203 с; § 36. Очень вязкие жидкости, с. 200–202.
17. de Schepper I.M., Cohen E.G.D., Bruin C., van Rijs J.C., Montfrooij W., de Graaf L.A. Hydrodynamic time correlation functions for a Lennard-Jones fluid. // Phys. Rev. A, 1988, vol. 38, No 1, p. 271–287.
18. Mryglod I.M., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Generalized collective modes for the Lennard-Jones fluid. // Molecular Physics, 1995, vol. 84, No 2, p. 235–259.
19. Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases. // Comm. Pure Appl. Math., 1949, vol. 2, p. 311; В: Механика, No 4, с. 71, No 5, с. 61, Изд-во “Иностранная Литература”, 1952.
20. Grad H. Principles of the kinetic theory of gases. In: Handbuch der Physik, vol. 12, ed. S.Flügge, (Springer Verlag, Berlin, 1958); В: Термодинамика газов, Москва, Машиностроение, 1970.
21. Kremer G.M., Rosa E., Jr. On Enskog’s dense gas theory. I. The method of moments for monatomic gases. // J. Chem. Phys., 1988, vol. 89, No 5, p. 3240–3247;
Erratum: On Enskog’s dense gas theory. I. The method of moments for monatomic gases. [J. Chem. Phys. 89, 3240 (1988)]. // J. Chem. Phys., 1990, vol. 92, No 2, p. 1516.
22. Ugawa H. Extended hydrodynamics from Enskog’s equation: The

- bidimensional case. // Physica A, 2005, vol. 354, p. 77–87. ; *See also* arXiv: cond-mat/0507102, 2005, 9 p.
23. Ugawa H., Cordero P. Extended hydrodynamics from Enskog’s equation for a two-dimensional system general formalism. // arXiv: cond-mat/0602038, 2006, 10 p.