Йосип Андрійович Гуменюк
Михайло Васильович Токарчук

Ланцюжок гідродинамічних рівнянь переносу для системи твердих кульок

Роботу отримано 14 грудня 2007 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ICMP–07–20U

Гуменюк Й.А., Токарчук М.В.

ЛАНЦЮЖОК ГІДРОДИНАМІЧНИХ РІВНЯНЬ ПЕРЕНОСУ ДЛЯ СИСТЕМИ ТВЕРДИХ КУЛЬОК

ЛЬВІВ

УДК: 532.5; 532.7; 533.7

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

Ланцюжок гідродинамічних рівнянь переносу для системи твердих кульок

Гуменюк Й.А., Токарчук М.В.

Анотація. Виходячи з ланцюжка рівнянь ББГКІ для системи твердих кульок у зовнішньому потенціальному полі виведено загальні рівняння переносу гідродинамічного типу для багаточастинкової локальної і двочастинкової нелокальної величин. Подано явні вирази для внесків до їхніх потоків та джерел. За їх допомогою отримано рівняння переносу для потоків імпульсу й енергії, котрі дещо відрізняються від результатів для гладкого потенціала, отриманих раніше. В одержаних нових рівняннях переносу здійснено перехід до представлення у локальній рухомій системі відліку. Обговорюється аналогія запропонованої схеми з моментним методом Ґреда.

Hierarchy of hydrodynamic transport equations for a hard-sphere system

Humenyuk Y.A., Tokarchuk M.V.

Abstract. Starting from the BBGKY hierarchy for a hard-sphere system in an external potential field, general transport equations of the hydrodynamic type for many-particle local and two-particle nonlocal hydrodynamic densities are derived. Explicit expressions for contributions to their fluxes and sources are given. Transport equations for the momentum and energy fluxes are obtained which differ from the smooth-potential results previously obtained. Transition to the local frame of reference in the obtained new transport equations is made. Analogy of the proposed scheme to the Grad moment method is discussed.

Зміст

1. Вступ

Першопочатково засади кінетичної теорії формулювалися для розрідженого газу, для якого поняття двочастинкового зіткнення добре визначено, а зіткнення, у яких одночасно беруть участь 3 і більше частинок, є дуже рідкісними подіями і ними можна знехтувати. Невдовзі після робіт Максвела, Больцман отримав своє кінетичне рівняння для одночастинкової функції розподілу [1–4]. Значно пізніші намагання розвинути кінетичну теорію для густих систем з притяганням і скінченним характерним часом зіткнення між частинками зустрілися з проблемою як врахувати зіткнення вищої ніж друга кратности.

Як у рівноважній, так і в нерівноважній статистичній механіці система твердих кульок вважається найпростішою модельною системою, а результати для неї в багатьох випадках є тестовими і служать нульовим наближенням для подальших розрахунків. В цьому відношенні доволі успішною слід вважати кінетичну теорію Енскога — узагальнення рівняння Больцмана на вищі густини для системи твердих кульок [5]. Тут завдяки миттєвому характеру зіткнень між частинками, можна розглядати лише парні зіткнення та їх послідовності, а одночасні 3- і вищечастинкові теж можна відкинути [6]. Характерно, що при розв'язуванні кінетичного рівняння Енскога чи його варіантів і пошуку нормальних розв'язків переважно застосовують відомий метод Чепмена-Енскога, сформульований для рівняння Больцмана.

Ґред запропонував альтернативний метод розв'язування кінетичного рівняння Больцмана [3, 7, 8]. Ідея полягає в тому, щоби до перших п'яти моментів одночастинкової функції розподілу, які перетворюють у нуль інтеґрал зіткнень Больцмана (адитивні інваріанти) і відповідають густинам маси, імпульсу й енергії, долучити наступні моменти і таким способом *розширити* набір гідродинамічних змінних, за допомогою яких описується система. У результаті нескінченна кількість рівнянь для моментів (які для розрідженого газу є повільними змінними) утворює систему рівнянь переносу Ґреда, яку певним способом обривають щоби замкнути.

В деяких роботах зроблено спробу застосувати моментний метод Ґреда до кінетичного рівняння Енскога для системи твердих кульок. В роботі [9] розглянуто 13-ти і 5-ти моментні наближення й проаналізовано їхні лінеаризовані варіанти. Досліджено розв'язки рівнянь для моментів у формі плоских гармонічних хвиль і отримано дисперсійне співвідношення для звуку.

Автори роботи [10] використовують метод Ґреда для двовимірної системи твердих дисків, не обмежуючись лінійним наближенням. При цьому розширена система рівнянь переносу має другий порядок за ґрадієнтами. Її застосовують до одновимірної задачі теплопровідности і питання про нерівноважний тиск. Тут же дано детальний огляд попередніх робіт. В роботі [11] за допомогою цих рівнянь вивчають явища передачі тепла між нерівноважною і рівноважною 2D системами твердих дисків, розділених пористою перегородкою.

Проте рівняння, що долучаються до рівнянь для збережуваних величин, записують лише для *кінетичних* внесків до потоків імпульсу й енергії, залишивши внески від взаємодії твердих кульок в рамках наближення звичайної гідродинаміки. На нашу гадку це і є слабким місцем цих робіт.

У нашому попередньому препринті [12] розвинуто загальний підхід до виведення гідродинамічних рівнянь переносу для газу чи рідини з плавним потенціалом взаємодії. Одержані результати застосовано до потоків імпульсу й енергії і таким чином здійснено перше розширення рівнянь звичайної гідродинаміки. Думка перенести ці результати на випадок системи твердих кульок має крім суто теоретичної ще дві причини.

Перше те, що отримане нами рівняння переносу для потоку імпульсу має досить простий вигляд і не містить в потоці й джерелі членів, які б визначалися через тричастинкову функцію розподілу [12]. Тому виникає гіпотеза, що якісно такий же результат мусить бути і для потенціала твердих кульок, бо його можна розглядати як границю послідовности плавних потенціалів, що все ближче підходять до нескінченно високої стінки твердої кульки, і інтенсивність далекодії яких поступово зменшується до 0, а характерний радіус дії — до діаметра твердої кульки. Ми покажемо, що ця гіпотеза не підтверджується. Друга причина пов'язана властиво зі згадуваними вже роботами про застосування методу Ґреда і його узагальненням для повних вищих потоків (а не тільки їхніх кінетичних внесків, як це зроблено в [9–11]) як для твердих кульок, так і для інших густих систем з плавним потенціалом взаємодії.

Як і в попередньому препринті тут здійснено виведення загальних рівнянь переносу для системи твердих кульок виходячи з ланцюжка рівнянь ББГКІ та представлення макроскопічних густин через частинкові функції розподілу. Спочатку ми викладаємо суть ідеї розширення гідродинамічного опису (§2). Потім наводимо необхідні відомості стосовно вигляду ланцюжка у випадку відштовхування твердих кульок (§3).

Далі подано виведення загальних рівнянь переносу для довільних локальної багаточастинкової (§4) та нелокальної двочастинкової густин (§5). Їхнє застосування до розширення рівнянь звичайної гідродинаміки для твердих кульок і виведення рівнянь переносу для *потоків* імпульсу та енергії наведено в (§6). У §7 здійснено перехід в отриманих рівняннях до локальної рухомої системи координат для розширеного набору гідродинамічних параметрів.

Завершують виклад прикінцеві висновки і перелік джерел.

2. Ідея розширення рівнянь гідродинаміки

У гідродинаміці характерні просторові масштаби, на яких помітно змінюються величини, що описують газ чи рідину (найчастіше — це густини збережуваних величин), набагато більші за міжмолекулярні відстані чи радіус взаємодії частинок. Тому дискретність атомів чи молекул нехтується і система вважається неперервною.

Густини маси, імпульсу та енергії задовольняють рівняння переносу, які для густини $a(\mathbf{r},t)$ довільної адитивної величини A мають такий загальний вигляд [13–15]:

$$\partial_t a(\mathbf{r},t) + \nabla\cdot\mathbf{J}_a(\mathbf{r},t) = s_a(\mathbf{r},t), \tag{1}$$

де $\mathbf{J}_a$ — густина потоку через одиничну площадку, а s_a — інтенсивність джерел і стоків у одиниці об'єму, які стосуються величини A. Записане рівняння виражає баланс густини $a(\mathbf{r},t)$ в кожній точці $\mathbf{r}$ в момент часу t.

Зокрема, система рівнянь типу (1) для густин маси $\rho(\mathbf{r},t)$, імпульсу $\mathbf{p}(\mathbf{r},t)$ й енергії $e(\mathbf{r},t)$ є незамкнутою, оскільки потоки $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$ і $\mathbf{J}_e(\mathbf{r},t)$ є невідомими функціями. Відповідно, треба запропонувати певний спосіб замикання.

Ідея *розширення* полягає в тому, аби записати рівняння переносу для самих невідомих функцій — потоків $\mathbf{J}_a$ та джерел s_a — подібні до рівняння для густин (1):

$$\partial_t\mathbf{J}_a \;+\; \nabla\cdot\mathsf{J}_{\mathbf{J}_a} = \mathbf{s}_{\mathbf{J}_a}, \tag{2}$$

$$\partial_t s_a \;+\; \nabla\cdot\mathbf{J}_{s_a} = s_{s_a}. \tag{3}$$

Тим самим, ми розширюємо набір змінних $\{a\}$, за допомогою яких описуємо систему, додаючи до нього ще набір $\{\mathbf{J}_a, s_a\}$. Однак, збільшується кількість рівнянь, які треба розв'язувати, і кількість невідомих функцій, на які переноситься проблема замикання. Повторюючи

такі дії і далі, ми в результаті приходимо до ланцюжка рівнянь переносу гідродинамічного типу. Для больцманівського газу описане розширення зводиться до долучення в набір адитивних інваріантів вищих моментів одночастинкової функції розподілу, що й було запропоновано Ґредом [7, 8].

Як вже було зазначено нами раніше [12], дана схема на рівні вихідної ідеї про розширення набору змінних опису пов'язана також із методом узагальнених колективних мод [16, 17], у якому в ролі змінних розширення вибрано вищі часові похідні густин збережуваних величин.

Опис за допомогою набору $\{a\}$ надалі будемо називати *першим рівнем гідродинамічного опису*, за допомогою $\{a, \mathbf{J}_a, s_a\}$ — *другим рівнем* і т.д. Також, набір змінних, що долучається на наступному рівні опису до вже наявного, називатимемо розширенням: набір $\{\mathbf{J}_a, s_a\}$ — 1-ше розширення; далі йде 2-ге і т.д.

Як вже згадано у вступі, нами отримано ланцюжок рівнянь переносу (принаймні, рівняння першого розширення) для системи з гладким (диференційовним) потенціалом взаємодії між частинками [12]. Тепер наша мета — перенести ці результати на випадок системи твердих кульок і застосувати до потоків імпульсу та енергії. Для цього будемо базуватися на методі функцій розподілу, використовуючи відповідний ланцюжок рівнянь ББГКІ.

3. Функції розподілу і макроскопічні густини

Розглядатимемо систему N твердих кульок з масою m та діаметром σ, яка перебуває в деякому об'ємі у присутності зовнішнього поля з потенціалом $U(\mathbf{r})$. Функцію Гамільтона можна подати у такому вигляді:

$$H(x_1,\ldots,x_N) = H^0(\mathbf{v}^N) + \phi_N^{\mathrm{hs}}(\mathbf{r}^N) + U_N(\mathbf{r}^N), \tag{4}$$

де кінетична частина H^0 гамільтоніана і потенціальна енергія U_N частинок у полі зовнішніх сил рівні:

$$H^0(\mathbf{v}^N) = \sum_{i=1}^{N} H_i^0(\mathbf{v}_i) = \sum_{i=1}^{N}\tfrac{1}{2}mv_i^2, \qquad U_N(\mathbf{r}^N) = \sum_{i=1}^{N} U(\mathbf{r}_i). \tag{5}$$

Тверді кульки не взаємодіють між собою на відстані, проте не можуть перекриватися. Цьому формально відповідає нескінченне значення N-частинкового потенціала взаємодії

$$\phi_N^{\mathrm{hs}}(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) = \begin{cases} \infty, & \text{якщо } \min|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|<\sigma, \quad i,j=1\div N,\\ 0, & \text{якщо протилежне,}\end{cases} \tag{6}$$

який можна також представити як суму парних внесків:

$$\phi_N^{\mathrm{hs}}(\mathbf{r}^N) = \tfrac{1}{2}\sum_{i,j=1(j\neq i)}^{N}\phi^{\mathrm{hs}}(r_{ij}), \qquad \phi^{\mathrm{hs}}(r_{ij}) = \begin{cases}\infty, & r_{ij}<\sigma,\\ 0, & r_{ij}>\sigma,\end{cases} \tag{7}$$

де $r_{ij}=|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|$.

Як прийнято у кінетичній теорії, ми вибираємо залежність функцій не від канонічних змінних $\{\mathbf{r}_i,\mathbf{p}_i\}$, а від просторових координат і швидкостей $x_i\equiv\{\mathbf{r}_i,\mathbf{v}_i\}$. Вживаємо, також, скорочені позначення:

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

Зауважмо, що функції H^0 і U_N подаються як суми одночастинкових внесків, а внесок ϕ_N^{hs} формально забезпечує умову взаємної непроникности твердих кульок.

3.1. Рівняння Ліувіля і 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

$$\partial_t\varrho(x^N,t) = L\varrho(x^N,t) \tag{8}$$

й умову нормування на одиницю:

$$\int\!\mathrm{d}x^N\varrho(x^N,t)=1. \tag{9}$$

Для системи з плавним міжчастинковим потенціалом оператор Ліувіля L означується через дужки Пуасона з функцією Гамільтона (див. напр. [2, 3, 18, 19]). Проте, у випадку твердих кульок $H(x^N)$ містить “потенціал” $\phi_N^{\mathrm{hs}}(\mathbf{r}^N)$, який не є диференційовним саме в тій області конфіґурацій, у якій відбувається взаємодія, тобто, при контакті кульок.

Серед різних способів обійти цю трудність, найпослідовнішим можна вважати запропонований у роботі [6], який базується на формальних властивостях оператора еволюції системи e^{Lt}, а не на побудові оператора Ліувіля через функцію Гамільтона. Головний тут висновок цієї роботи той, що зміна $\varrho(x^N,t)$ системи твердих кульок задається для $t>0$ і $t<0$ *псевдо*-ліувілевими операторами $\overline{L}_-$ та $\overline{L}_+$, відповідно:

$$\overline{L}_{\mp} \stackrel{\mathrm{df}}{=} L^0+\overline{T}_{\mp}+L^U \equiv \sum_{i=1}^{N}L_i^0+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}\overline{T}_{\mp}(ij)+\sum_{i=1}^{N}L_i^U. \tag{10}$$

Порівняно з плавним потенціалом, змін зазнає́ лише частина, що відповідає взаємодії твердих куль. Явний вигляд операторів $\overline{T}_-$ (для $t>0$) подаємо в наступному підпараграфі.

Далі ми означимо частинкові функції розподілу. Спочатку зауважмо, що для системи однакових частинок $\varrho(x_1,\ldots,x_N,t)$ симетрична відносно перестановки довільних двох своїх арґументів x_i, x_j:

$$\varrho(\ldots,x_i,\ldots,x_j,\ldots,t)=\mathcal{P}_{x_ix_j}\varrho(\ldots,x_i,\ldots,x_j,\ldots,t), \tag{11}$$

де введено позначення для операції перестановки координат між собою:

$$\mathcal{P}_{x_ix_j}\varrho(\ldots,x_i,\ldots,x_j,\ldots,t)\stackrel{\mathrm{df}}{=}\varrho(\ldots,x_j,\ldots,x_i,\ldots,t). \tag{12}$$

Ця властивість зумовлює такі ж симетрійні властивості приведених s-частинкових функцій розподілу f_s, що вводяться за допомогою співвідношень [19]

$$f_s(x^s,t)\stackrel{\mathrm{df}}{=}\frac{N!}{(N-s)!}\int\!\mathrm{d}x_{s+1}\ldots\mathrm{d}x_N\,\varrho(x_1,\ldots,x_N,t), \tag{13}$$

котрі трохи відрізняються від введених Боголюбовим [20, 21].

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. Двочастинкова — $f_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{v}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{v}_2,t)$ — визначає густину ймовірности одночасного розташування двох кульок в точках $\mathbf{r}_1$ та $\mathbf{r}_2$ зі швидкостями $\mathbf{v}_1$ і $\mathbf{v}_2$, відповідно, в момент часу t. Умови нормування для них

$$\int\!\mathrm{d}x_1f_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{v}_1,t)=N, \qquad \int\!\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2f_2(x_1,x_2,t)=N(N-1) \tag{14}$$

задають відповідно кількості частинок та впорядкованих пар частинок у системі.

Врешті, s-частинкова функція розподілу $f_s(x^s,t)$ описує густину імовірности конфіґурації s частинок з фазовими координатами

$x_1, \ldots, x_s$. Вона симетрична відносно перестановки будь-яких двох фазових змінних між собою:

$$f_s(\ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, t) = \mathcal{P}_{x_i x_j} f_s(\ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, t). \tag{15}$$

Умова нормування

$$\int \mathrm{d}x^s f_s(x^s, t) = \frac{N!}{(N-s)!} \tag{16}$$

характеризує кількість всеможливих впорядкованих комбінацій $(j_1, j_2, \ldots, j_s)$ з s частинок, які можна утворити з N частинок.

3.2. Ланцюжок ББГКІ для системи твердих кульок

Як відомо, у випадку гладких міжчастинкових потенціалів функції $f_s(x^s, t)$ задовольняють ланцюжок рівнянь ББГКІ [20, 21] (див. також [2, 3, 19]). Аналогічний ланцюжок можна записати і для твердих кульок, ввівши певні зміни, що враховують умову взаємної непроникности і миттєвий характер взаємодій [6, 22–24]:

$$\begin{aligned}
\partial_t f_1(x_1) &= [L_1^0 + L_1^U] f_1(x_1) + \int \mathrm{d}x_2\, \overline{T}_-(12) f_2(x_1, x_2), && (17)\\
\partial_t f_2(x_1, x_2) &= [L_1^0 + L_1^U + L_2^0 + L_2^U + \overline{T}_-(12)] f_2(x_1, x_2) + && (18)\\
&+ \int \mathrm{d}x_3\, [\overline{T}_-(13) + \overline{T}_-(23)] f_3(x_1, x_2, x_3),\\
&\ldots\\
\partial_t f_s(x^s) &= \Big[\sum_{i=1}^{s} (L_i^0 + L_i^U) + \sum_{i=1}^{s} \sum_{j>i}^{s} \overline{T}_-(ij)\Big] f_s(x^s) + && (19)\\
&+ \sum_{i=1}^{s} \int \mathrm{d}x_{s+1}\, \overline{T}_-(i, s+1) f_{s+1}(x^{s+1}),\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots,
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
L_i^0 &= -\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i, && (20)\\
L_i^U &= -\mathbf{F}_i^U \cdot \boldsymbol{\partial}_i, && (21)
\end{aligned}$$

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

Замість диференціальних операторів, що походили б від гладкого потенціала міжчастинкової взаємодії, у ланцюжку стоять так звані

T-оператори парних зіткнень, котрі відповідають відштовхуванню твердих кульок [6, 22, 24]:

$$\overline{T}_-(ij) \stackrel{\mathrm{df}}{\equiv} \sigma^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma}\, v_{ij\sigma} \theta(v_{ij\sigma}) \big[\delta(\mathbf{r}_{ij} - \boldsymbol{\sigma})\, b^{ij}(\hat{\sigma}) - \delta(\mathbf{r}_{ij} + \boldsymbol{\sigma})\big], \tag{22}$$

де $\hat{\sigma}$ — одиничний вектор з напрямком від центра частинки i до центра частинки j, $\boldsymbol{\sigma} = \sigma\hat{\sigma}$, $v_{ij\sigma} = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \hat{\sigma}$, $\theta(x)$ — сходинкова функція Хевісайда, рівна 1 при $x > 0$ і нулю при $x < 0$, $\delta(x)$ — δ-функція Дірака, $b^{ij}(\hat{\sigma}) \equiv b^{ij}_{\hat{\sigma}}$ — оператор підстановки швидкостей, який діє на довільну функцію F за правилом:

$$b^{ij}_{\hat{\sigma}} F(., \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j, .) = F(., [b^{ij}_{\hat{\sigma}} \mathbf{v}_i], [b^{ij}_{\hat{\sigma}} \mathbf{v}_j], .) = F(., \mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j, .),$$

залишаючи незмінними інші швидкості, від яких залежить F, а

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}'_i \\ \mathbf{v}'_j \end{pmatrix} \equiv b^{ij}_{\hat{\sigma}} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_i \\ \mathbf{v}_j \end{pmatrix} \stackrel{\mathrm{df}}{\equiv} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}\hat{\sigma} \\ \mathbf{v}_j + \mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}\hat{\sigma} \end{pmatrix} \tag{23}$$

мають сенс швидкостей твердих кульок i та j після зіткнення, $\mathbf{v}_{ij} \equiv \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$. Зауважмо ще:

$$\mathbf{v}'_{ij} \equiv \mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_{ij} - 2\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}\hat{\sigma} \qquad \text{і} \qquad \mathbf{v}'_{ij} \cdot \hat{\sigma} = -\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma} = -v_{ij\sigma}. \tag{24}$$

Друге співвідношення означає інверсію нормальної складової відносної швидкости $\mathbf{v}_{ij}$ при зіткненні.

Варто відмітити дві важливі властивості оператора $b^{ij}_{\hat{\sigma}}$:

$$b_1)\quad b^{ij}_{(-\hat{\sigma})} = b^{ij}_{\hat{\sigma}} \qquad \text{і} \qquad b_2)\quad b^{ji}_{\hat{\sigma}} = b^{ij}_{\hat{\sigma}}. \tag{25}$$

Другу властивість відразу видно, якщо співвідношення (23) записати у симетричній формі відносно індексів:

$$b^{ij}_{\hat{\sigma}} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_i \\ \mathbf{v}_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}\hat{\sigma} \\ \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_{ji} \cdot \hat{\sigma}\hat{\sigma} \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Оператор $\overline{T}_-(ij)$ можна також записати у безінтеґральній формі, провівши інтеґрування по кутових змінних, що задаються одиничним вектором $\hat{\sigma}$. Використавши тотожність для δ-функції

$$\delta^{(3)}(\mathbf{r}_{ij} \mp \boldsymbol{\sigma}) = \sigma^{-2}\, \delta^{(1)}(r_{ij} - \sigma)\, \delta^{(2)}(\hat{r}_{ij} \mp \hat{\sigma}), \tag{27}$$

отримаємо:

$$\overline{T}_-(ij) = \delta^{(1)}(r_{ij} - \sigma)\, (\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij})\, \big[\theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij})\, b^{ij}(\hat{r}_{ij}) + \theta(-\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{r}_{ij})\big]. \tag{28}$$

Звідси, використавши властивості (25), можна легко отримати, що цей оператор не змінюється при перестановці індексів:

$$\overline{T}_{-}(ji) = \overline{T}_{-}(ij), \tag{29}$$

що також можна показати, виходячи з виразу (22). Отже, цей оператор має ту ж саму властивість, що й відповідні оператори Θ_{ij} у випадку плавного потенціала.

3.3. Представлення локальних макроскопічних величин

Найпростіші макроскопічні густини системи твердих кульок, густина маси $\rho(\mathbf{r},t)$, імпульсу $\mathbf{p}(\mathbf{r},t)$ та (кінетичної) енергії $e^{\mathrm{k}}(\mathbf{r},t)$, виражаються через одночастинкову функцію розподілу $f_1(x_1,t)$:

$$\begin{bmatrix} \rho(\mathbf{r}_1,t) \\ \mathbf{p}(\mathbf{r}_1,t) \\ e^{\mathrm{k}}(\mathbf{r}_1,t) \end{bmatrix} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_1 f_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{v}_1,t) \begin{bmatrix} m \\ m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \langle m\rangle^1_{\mathbf{v}_1} \\ \langle m\mathbf{v}_1\rangle^1_{\mathbf{v}_1} \\ \langle \frac{1}{2}mv_1^2\rangle^1_{\mathbf{v}_1} \end{bmatrix}. \tag{30}$$

Відповідно, такі макроскопічні густини називатимемо одночастинковими. Оскільки тверді кульки не можуть перекриватися, то потенціальна енергія взаємодії у системі рівна нулю.

Можна ввести багаточастинкові величини, які узагальнюють уявлення про представлення макроскопічних густин типу (30) через частинкові функції розподілу [12]. Нехай деяка макроскопічна густина a має внески до S-частинкового порядку включно:

$$a(\mathbf{r}_1,t) = \sum_{k=1}^{S} a_k(\mathbf{r}_1,t), \tag{31}$$

$$a_k(\mathbf{r}_1,t) = \langle \psi_a^k(x^k,t)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k}, \tag{32}$$

де $\psi_a^k(x^k,t)$ — молекулярна характеристика k-частинкового внеску до макроскопічної величини $a(\mathbf{r}_1,t)$, а під

$$\langle \psi\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_1 \mathrm{d}x_2 \ldots \mathrm{d}x_k f_k(x^k,t)\, \psi \tag{33}$$

розуміємо операцію усереднення з k-частинковою функцією розподілу. У верхньому індексі вказано номер функції, а в нижньому — перелік арґументів, за якими проводиться інтеґрування. Подібні представлення використано, наприклад, в роботах [19,25] для запису термодинамічних та гідродинамічних величин як середніх. Отже, довільну густину a вигляду (31), (32) можемо однозначно подати через

її характеристики ψ_a^k. Зокрема, молекулярні характеристики для величин (30) такі:

$$\begin{bmatrix} \psi_\rho^1 \\ \boldsymbol{\psi}_{\mathbf{p}}^1 \\ \psi_{e^{\mathrm{k}}}^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m \\ m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix}, \qquad \psi^k_{\rho,\mathbf{p},e^{\mathrm{k}}} = 0,\ k \geq 2. \tag{34}$$

Якщо макроскопічну величину можна подати у вигляді (31), (32), то кажуть [19], що вона має *локальне представлення* через частинкові функції f_k. Далі зустрінуться також густини, що мають інше функціональне вираження через функції розподілу.

4. Рівняння переносу для локальних густин

Виведення рівняння переносу для довільної локальної k-частинкової величини проводиться цілком подібно до аналогічного випадку для системи з гладким потенціалом [12]. Тут ми розглянемо детально лише відмінності, пов'язані зі сингулярним характером $\overline{T}_{-}$-операторів.

Виходячи з рівнянь (32), (33) для доданка $a_k(\mathbf{r}_1,t)$ знаходимо:

$$\partial_t a_k(\mathbf{r}_1,t) = \langle \partial_t \psi_a^k(x^k,t)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k} + \langle \psi_a^k(x^k,t)\rangle^{\partial_t f_k}_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k}, \tag{35}$$

де

$$\langle \psi_a^k(x^k,t)\rangle^{\partial_t f_k}_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k} \equiv \int \mathrm{d}\mathbf{v}_1 \mathrm{d}x_2 \ldots \mathrm{d}x_k \psi_a^k(x^k,t)\, \partial_t f_k(x^k,t).$$

Ми припускаємо найзагальнішу з можливих ситуацій, коли ψ_a^k залежить також і від часу t. Підставмо тут замість $\partial_t f_k$ праву частину k-го рівняння ланцюжка ББГКІ для твердих кульок (19):

$$\begin{aligned} &\langle \psi_a^k(x^k,t)\rangle^{\partial_t f_k}_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k} = \\ &\quad= \sum_{i=1}^{k} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_1 \mathrm{d}x_2 \ldots \mathrm{d}x_k \psi_a^k(x^k,t) \Big[L_i^0 + L_i^U\Big] f_k(x^k) + \\ &\quad+ \sum_{i=1}^{k}\sum_{j>i}^{k} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_1 \mathrm{d}x_2 \ldots \mathrm{d}x_k \psi_a^k(x^k,t)\, \overline{T}_{-}(ij)\, f_k(x^k) + \\ &\quad+ \sum_{i=1}^{k} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_1 \mathrm{d}x_2 \ldots \mathrm{d}x_k \mathrm{d}x_q \psi_a^k(x^k,t)\, \overline{T}_{-}(iq)\, f_q(x^q)\Big|_{q=k+1}. \end{aligned} \tag{36}$$

Далі увага приділяється перетворенню отриманого виразу, яке проводиться у два етапи. Побудова кожного з доданків така, що молекулярна характеристика $\psi_a^k(x^k,t)$, що є відомою функцією координат, швидкостей і часу для кожного конкретного внеску a^k, інтеґрується з відповідною функцією розподілу, на яку діє деякий оператор. Перший етап полягає в тому, щоби перенести дію оператора з невідомої нам функції $f_k(x^k)$ на відому $\psi_a^k(x^k,t)$. Це — перехід до спряжених операторів. Другий етап полягає в тім, щоби подати кожен внесок з $\overline{T}_-$-оператором як "діверґенцію чогось" плюс залишок. Як для плавних, так і для сингулярних операторів це робиться за допомогою відомої процедури симетризації (див. напр. [2]).

4.1. Перехід до спряжених операторів

Як і в роботі [12], введімо означення скалярного добутку для двох функцій ψ та f, залежних принаймні від однієї швидкости $\mathbf{v}$ або ж від двох $\mathbf{v},\mathbf{u}$:

$$(\psi,f)_{\mathbf{v}} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \int \mathrm{d}\mathbf{v}\,\psi(\mathbf{v})f(\mathbf{v}), \qquad (\psi,f)_{\mathbf{vu}} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \int \mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\mathbf{u}\,\psi(\mathbf{v},\mathbf{u})f(\mathbf{v},\mathbf{u}). \tag{37}$$

Ці функції завжди будуть такі, що інтеґрал в означенні скалярних добутків скінченний. Для даних операторів $\hat{O}_{\mathbf{v}}$ та $\hat{O}_{\mathbf{vu}}$, що діють на функції від $\mathbf{v}$ чи $\mathbf{v},\mathbf{u}$, означмо за допомогою відповідних співвідношень спряжені до них оператори $\hat{O}^\dagger_{\mathbf{v}}$ та $\hat{O}^\dagger_{\mathbf{vu}}$ відносно відповідних скалярних добутків (37):

$$(\psi,\hat{O}_{\mathbf{v}}f)_{\mathbf{v}} \stackrel{\mathrm{df}}{=} (\hat{O}^\dagger_{\mathbf{v}}\psi,f)_{\mathbf{v}} = \int \mathrm{d}\mathbf{v}\,[\hat{O}^\dagger_{\mathbf{v}}\psi(\mathbf{v})]\,f(\mathbf{v}), \tag{38}$$

$$(\psi,\hat{O}_{\mathbf{vu}}f)_{\mathbf{vu}} \stackrel{\mathrm{df}}{=} (\hat{O}^\dagger_{\mathbf{vu}}\psi,f)_{\mathbf{vu}} = \int \mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\mathbf{u}\,[\hat{O}^\dagger_{\mathbf{vu}}\psi(\mathbf{v},\mathbf{u})]\,f(\mathbf{v},\mathbf{u}). \tag{39}$$

Ще домовмося, що у виразах, зустрінутих нижче, ми будемо в нижньому індексі скалярного добутку вказувати також всі інші змінні, по яких проводиться інтеґрування і від яких оператор, що фіґурує у цих виразах, не залежить.

Тоді, за допомогою введених означень вираз (36) подамо так:

$$\begin{aligned} &\langle\psi_a^k(x^k,t)\rangle^{\partial_t f_k}_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k} = \\ &\quad = \sum_{i=1}^k(\psi_a^k,[L_i^0+L_i^U]f_k)_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k} + \sum_{i=1}^k\sum_{j>i}(\psi_a^k,\,\overline{T}_-(ij)f_k)_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k} + \\ &\quad + \sum_{i=1}^k(\psi_a^k,\,\overline{T}_-(iq)f_q)_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_kx_q}\Big|_{q=k+1}. \end{aligned} \tag{40}$$

Перехід до спряжених операторів у доданках першої суми правої частини цього виразу проведено нами раніше [12]:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k(\psi_a^k,[L_i^0+L_i^U]f_k)_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k} &= -\nabla_1\cdot\langle\mathbf{v}_1\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k} + \\ &+ \sum_{i=1}^k\langle[-L_i^0+L_i^{U\dagger}]\,\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k}, \end{aligned} \tag{41}$$

де $L_i^{U\dagger} = \mathbf{F}_i^U\cdot\partial_i = -L_i^U$. Тут і далі ми не вказуємо явно залежність ψ_a^k від часу.

Оператор парних зіткнень

Розгляньмо перехід до спряженого оператора в решті доданках на прикладі внеску з оператором $\overline{T}_-(ij)$:

$$\begin{aligned} (\psi_a^k,\,\overline{T}_-(ij)f_k)_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j} &= \int \mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j\psi_a^k(x^k)\,\sigma^2\int\mathrm{d}\hat{\sigma}\;v_{ij\sigma}\theta(v_{ij\sigma})\,\times \\ &\times\big[\delta(\mathbf{r}_{ij}-\boldsymbol{\sigma}\,)\,b_{\hat{\sigma}}^{ij}-\delta(\mathbf{r}_{ij}+\boldsymbol{\sigma}\,)\big]\,f_k(x^k). \end{aligned} \tag{42}$$

Для переходу, перетворення потребує лише той з двох доданків у квадратних дужках, котрий містить оператор підстановки $b_{\hat{\sigma}}^{ij}$. Його запишемо так:

$$\begin{aligned} &\sigma^2\int\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j\mathrm{d}\hat{\sigma}\;\psi_a^k(x^k)\,v_{ij\sigma}\theta(v_{ij\sigma})\delta(\mathbf{r}_{ij}-\boldsymbol{\sigma}\,)\,\times \\ &\qquad\times\;f_k(\ldots,\mathbf{r}_i,\mathbf{v}'_i,\ldots,\mathbf{r}_j,\mathbf{v}'_j,\ldots), \end{aligned} \tag{43}$$

де $\{\mathbf{v}'_i,\mathbf{v}'_j\} = [b_{\hat{\sigma}}^{ij}]\{\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j\}$.

Перейдімо від $\{\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j\}$ до нових змінних інтеґрування $\{\mathbf{v}'_i,\mathbf{v}'_j\}$. Однак спочатку, за допомогою співвідношень (24) знаходимо зворотні до них співвідношення:

$$\begin{pmatrix}\mathbf{v}_i\\ \mathbf{v}_j\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathbf{v}'_i-\mathbf{v}'_{ij}\cdot\hat{\sigma}\hat{\sigma}\\ \mathbf{v}'_j+\mathbf{v}'_{ij}\cdot\hat{\sigma}\hat{\sigma}\end{pmatrix} \equiv\; b_{\hat{\sigma}}^{ij}\begin{pmatrix}\mathbf{v}'_i\\ \mathbf{v}'_j\end{pmatrix}. \tag{44}$$

Звідси, на додачу до (25), отримуються ще дві властивості для $b_{\hat{\sigma}}^{ij}$:

$$b_3)\quad [b_{\hat{\sigma}}^{ij}]^{-1} = b_{\hat{\sigma}}^{ij} \qquad\text{і}\qquad b_4)\quad b_{\hat{\sigma}}^{ij}b_{\hat{\sigma}}^{ij} = 1. \tag{45}$$

З них, зокрема, слідує, що якобіан переходу до нових змінних рівний 1:

$$J_{\{\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j\}\to\{\mathbf{v}'_i,\mathbf{v}'_j\}} = 1,$$

що також можна отримати, обчислюючи його безпосередньо з формул переходу (44).

Використавши цей результат, вираз (43) можна подати так:

$$\sigma^2\!\int\!\mathrm{d}\mathbf{v}'_i\mathrm{d}\mathbf{v}'_j\mathrm{d}\hat{\sigma}\;\psi_a^k(\ldots,\mathbf{r}_i,[b_{\hat{\sigma}}^{ij}\mathbf{v}'_i],\ldots,\mathbf{r}_j,[b_{\hat{\sigma}}^{ij}\mathbf{v}'_j],\ldots)\,(-v'_{ij\sigma})\times \\ \times\,\theta(-v'_{ij\sigma})\delta(\mathbf{r}_{ij}-\boldsymbol{\sigma}\;)\,f_k(\ldots,\mathbf{r}_i,\mathbf{v}'_i,\ldots,\mathbf{r}_j,\mathbf{v}'_j,\ldots), \tag{46}$$

де $v'_{ij\sigma}\equiv[\mathbf{v}'_i-\mathbf{v}'_j]\cdot\hat{\sigma}$ і було використано властивість (24). Крім того, відповідні арґументи $\mathbf{v}_i$ та $\mathbf{v}_j$ функції ψ_a^k виражено через нові змінні інтеґрування за допомогою співвідношень (44). Далі позначмо німі змінні інтеґрування $\{\mathbf{v}'_i,\mathbf{v}'_j\}$ як нештриховані:

$$\sigma^2\!\int\!\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j\mathrm{d}\hat{\sigma}\;\psi_a^k(\ldots,\mathbf{r}_i,[b_{\hat{\sigma}}^{ij}\mathbf{v}_i],\ldots,\mathbf{r}_j,[b_{\hat{\sigma}}^{ij}\mathbf{v}_j],\ldots)\,(-v_{ij\sigma})\times \\ \times\,\theta(-v_{ij\sigma})\delta(\mathbf{r}_{ij}-\boldsymbol{\sigma}\;)\,f_k(\ldots,\mathbf{r}_i,\mathbf{v}_i,\ldots,\mathbf{r}_j,\mathbf{v}_j,\ldots)= \\ =\sigma^2\!\int\!\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j\mathrm{d}\hat{\sigma}\;[b_{\hat{\sigma}}^{ij}\psi_a^k(x^k)]\,|v_{ij\sigma}|\,\theta(-v_{ij\sigma})\delta(\mathbf{r}_{ij}-\boldsymbol{\sigma}\;)\,f_k(x^k). \tag{47}$$

Підставивши результат, отриманий в останньому рядку, замість внеску у формулі (42), який ми перетворювали, прийдемо до того, що скалярний добуток (42) можна подати так:

$$(\psi_a^k,\,\overline{T}_-(ij)f_k)_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j}=([T_+(ij)\psi_a^k],\,f_k)_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j}, \tag{48}$$

де $T_+(ij)$ є спряженим до $\overline{T}_-(ij)$ відносно другого скалярного добутку (37), $T_+(ij)=\overline{T}_-^{\dagger}(ij)$, і має вигляд:

$$T_+(ij)\stackrel{\mathrm{df}}{=}\sigma^2\!\int\!\mathrm{d}\hat{\sigma}\;|v_{ij\sigma}|\,\theta(-v_{ij\sigma})\,\delta(\mathbf{r}_{ij}-\boldsymbol{\sigma}\;)\,[\,b_{\hat{\sigma}}^{ij}-1\,]. \tag{49}$$

Вперше цей оператор у такому вигляді було отримано в роботі [6], де встановлено його головну роль в розкладі по парних зіткненнях оператора еволюції вперед, e^{L_+t}, для мікроскопічних динамічних величин системи твердих куль. Фактично з нього отримано, як спряжений до нього, оператор $\overline{T}_-(ij)$.

Зауважмо, що $T_+(ij)$ теж можна подати у безінтеґральній формі, якщо використати тотожність (27)[1]:

$$T_+(ij)\;=\;|\mathbf{v}_{ij}\cdot\hat{r}_{ij}|\,\theta(-\mathbf{v}_{ij}\cdot\hat{r}_{ij})\,\delta^{(1)}(r_{ij}-\sigma)\,[\,b^{ij}(\hat{r}_{ij})-1\,] \tag{50}$$

[1]Див. строге означення (245) цього оператора у додатку А. Подібне можна запровадити і для інтеґральної форми (49) і для оператора $\overline{T}_-(ij)$.

або

$$T_+(ij)\equiv t_+(-v_{ijr_{ij}},r_{ij})\,[b^{ij}(\hat{r}_{ij})-1], \tag{51}$$

$$\text{де}\qquad t_+(-v_{ijr_{ij}},r_{ij})\equiv|v_{ijr_{ij}}|\,\theta(-v_{ijr_{ij}})\,\delta(r_{ij}-\sigma), \tag{52}$$

і використано скорочення позначень $v_{ijr_{ij}}\equiv\mathbf{v}_{ij}\cdot\mathbf{r}_{ij}$. Ми розбили оператор на два множники, перший з яких — функція t_+, залежна від скалярного добутку $\mathbf{v}_{ij}\cdot\mathbf{r}_{ij}$ та відносної відстані r_{ij}, а другий — властиво операторний. З виразів (50) чи (51) легко побачити незмінність T_+ при перестановці індексів:

$$T_+(ji)=T_+(ij), \tag{53}$$

аналогічно до властивости (29) оператора $\overline{T}_-$.

Повертаючись тепер до виразу (36), скалярні добутки в його останніх двох сумах можемо записати через оператори T_+, спряжені до $\overline{T}_-$, котрі діють вже на $\psi_a^k(x^k)$, а функції розподілу не стоять під дією операторів.

Нарешті, використавши результат (41), вираз (40) можна повністю подати через спряжені оператори:

$$\langle\psi_a^k(x^k)\rangle^{\partial_t f_k}_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k}= \\ =\;-\nabla_1\cdot\langle\mathbf{v}_1\psi_a^k\rangle^k_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k}+\sum_{i=1}^k\langle[-L_i^0+L_i^{U\dagger}]\psi_a^k\rangle^k_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k}+ \\ +\;\sum_{i=1}^k\sum_{j>i}\langle T_+(ij)\psi_a^k\rangle^k_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k}+\sum_{i=1}^k\langle T_+(iq)\psi_a^k(x^k)\rangle^q_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_q}\big|_{q=k+1}. \tag{54}$$

4.2. Симетризація

Підсумні внески двох останніх сум треба симетризувати, використовуючи тут симетрійні властивості (15) функцій розподілу f_k, f_{k+1} та оператора T_+. Для прикладу перший з двох, за допомогою безінтеґрального представлення (50) для $T_+(ij)$:

$$\langle T_+(ij)\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1x_2\ldots x_k}=\int\!\mathrm{d}\{*\}\mathrm{d}\mathbf{r}_i\mathrm{d}\mathbf{R}\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j\;|v_{ijR}|\,\theta(v_{ijR})\times \\ \times\,\delta(R-\sigma)\big\{[b_{\hat{R}}^{ij}-1]\psi_a^k(*,\mathbf{r}_i,\mathbf{v}_i,\mathbf{r}_i+\mathbf{R},\mathbf{v}_j)\big\}f_k(*,\mathbf{r}_i,\mathbf{v}_i,\mathbf{r}_i+\mathbf{R},\mathbf{v}_j), \tag{55}$$

де замість $\mathbf{r}_j$ введено змінну відносного розташування $\mathbf{R}=\mathbf{r}_{ji}$, а значок $*$ позначає всі решта змінні, крім x_i,x_j. Наприклад, в $\mathrm{d}\{*\}$

він означає

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

Надалі нам часто зустрічатимуться вирази, у яких в операторі $T_+(ij)$ замість $\mathbf{r}_{ij}$ стоятиме вектор *відносної* відстані між центрами кульок $\mathbf{R}$. Тому далі ми користуватимемося особливим позначенням цього оператора для таких випадків:

$$T_+(ij;\mathbf{R}) \equiv t_+(v_{ijR}, R)[b^{ij}_{\hat{R}} - 1], \tag{56}$$

$$\text{де} \qquad t_+(v_{ijR}, R) \equiv |v_{ijR}|\,\theta(v_{ijR})\,\delta(R-\sigma), \tag{57}$$

фактично $T_+(ij;\mathbf{R}) \equiv T_+(ij)\big|_{(\mathbf{r}_{ij}\to -\mathbf{R})}$. У введених позначеннях вираз (55) запишемо так:

$$\langle T_+(ij)\psi^k_a(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k} = \int \mathrm{d}\{*\}\mathrm{d}\mathbf{r}_i \mathrm{d}\mathbf{R}\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j \times \tag{58}$$
$$\times f_k(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i+\mathbf{R}, \mathbf{v}_j)\,\big[T_+(ij;\mathbf{R})\,\psi^k_a(*, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i+\mathbf{R}, \mathbf{v}_j)\big].$$

Зауважмо, що при такій операції, як одночасні інверсія вектора $\mathbf{R}$ та взаємне перепозначення *швидкостей* $\mathbf{v}_i$, $\mathbf{v}_j$,

$$\mathbf{R} \to -\mathbf{R}, \qquad\qquad \mathbf{v}_i \rightleftarrows \mathbf{v}_j, \tag{59}$$

(котру ми далі будемо застосовувати), не тільки має місце незмінність оператора $T_+(ij;\mathbf{R})$,

$$T_+(ji;-\mathbf{R}) = T_+(ij;\mathbf{R}), \tag{60}$$

але й кожен з його співмножників *окремо* залишається незмінним (див. властивості (25) для оператора $b^{ij}_{\hat{R}}$).

Підсмуймо, що нам відомо про вираз (58):

- f_k) функція f_k симетрична відносно перестановки між собою фазових координат $\{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i\}$ та $\{\mathbf{r}_i+\mathbf{R}, \mathbf{v}_j\}$, вл-ть (15).
- T_+) високий ступінь симетрії оператора $T_+(ij;\mathbf{R})$;
- ψ) ми не ніяк фіксуємо і не будемо використовувати властивостей функції ψ^k_a, хоч вважаємо її відомою;

Теорема про представлення інтеґрала

Щоб симетризувати внески з T_+, які виникають при виведенні рівнянь переносу для *локальних* густин, достатньо розглянути вираз загального типу $\langle \hat{O}(ij)\,\psi(x_i,x_j)\rangle^f_{\mathbf{v}_i x_j}$. Проте ми тут розглянемо дещо ширшу ситуацію, коли обидві функції f та ψ беруться у відмінних від $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_j$ точках координатного простору частинок i та j, зміщених на деякі вектори $\mathbf{d}_i$ та $\mathbf{d}_j$. Це буде потрібно далі, щоб симетризувати аналогічні внески при виведенні рівняння переносу для *нелокальних* густин. Для локального випадку результат отримується, поклавши $\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j = 0$.

Введімо позначення:

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_I &\equiv \mathbf{r}_i + \mathbf{d}_i, & x_I &\equiv \{\mathbf{r}_I, \mathbf{v}_i\},\\
\mathbf{r}_J &\equiv \mathbf{r}_j + \mathbf{d}_j, & x_J &\equiv \{\mathbf{r}_J, \mathbf{v}_j\},\\
\boldsymbol{\rho} &\equiv \mathbf{r}_J - \mathbf{r}_I, & \boldsymbol{\rho} &= \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i + \mathbf{d}_j - \mathbf{d}_i = \mathbf{r}_{ji} + \mathbf{d}_{ji},
\end{aligned} \tag{61}$$

де $\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j$ — фіксовані вектори просторового “зміщення”, $\boldsymbol{\rho}$ — відносна відстань.

Теорема 1. Інтеґральний вираз

$$\langle \hat{O}(IJ)\,\psi(x_I,x_J)\rangle^f_{\mathbf{v}_i x_J} \equiv \int \mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j\mathrm{d}\mathbf{r}_J f(x_I,x_J)\,\hat{O}(IJ)\,\psi(x_I,x_J), \tag{62}$$

у якому

- f) функція f володіє симетрією $f(x_I,x_J) = f(x_J,x_I)$;
- $\hat{O}$) $\hat{O}(IJ)$ діє на функції $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j$ і залежить параметрично лише від вектора відносного розташування $\boldsymbol{\rho}$, $\hat{O}(IJ) = \hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)$, причому задовольняє умову $\hat{O}(\mathbf{v}_j,\mathbf{v}_i;-\boldsymbol{\rho}\,) = \hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)$;
- ψ) $\psi(x_I,x_J)$ — довільна функція, для якої разом з функцією f інтеґрал (62) добре визначений (зокрема, скінченний),

можна подати у вигляді суми діверґенції деякого потоку і симетричного по x_I та x_J залишку:

$$\nabla_i \cdot \langle \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\rho}\ \hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,\psi(x_{I\xi},x_{J\bar{\xi}})\rangle^f_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j(\boldsymbol{\rho}\ \xi)_{IJ}} + \tag{63}$$
$$+\,\langle \tfrac{1}{2}\hat{O}(IJ)\,[1+\mathcal{P}_{x_I x_J}]\,\psi(x_I,x_J)\rangle^f_{\mathbf{v}_i x_J}.$$

(У першому члені використано позначення для нового типу усереднення, пояснене при закінченні доведення, вирази (73), (74).)

Доведення. Оскільки ми не використовуємо ніяких симетрійних властивостей функції ψ, то подаймо її у виразі (62) як суму антисиметричної та симетричної частин [26][2]:

$$\psi(x_I, x_J) = \tfrac{1}{2}[\psi(x_I, x_J) - \psi(x_J, x_I)] + \tfrac{1}{2}[\psi(x_I, x_J) + \psi(x_J, x_I)]. \quad (64)$$

Друга, симетрична, частина, підставлена у вираз (62) дасть другий внесок формули (63). Відповідну антисиметричну частину інтеґрального виразу (62) можна записати так:

$$\tfrac{1}{2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\ \mathrm{d}\mathbf{v}_i \mathrm{d}\mathbf{v}_j f(\mathbf{r}_I, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_I + \boldsymbol{\rho}, \mathbf{v}_j) \times \quad (65)$$
$$\times \hat{O}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j; \boldsymbol{\rho})\, [\psi(\mathbf{r}_I, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_I + \boldsymbol{\rho}, \mathbf{v}_j) - \psi(\mathbf{r}_I + \boldsymbol{\rho}, \mathbf{v}_j, \mathbf{r}_I, \mathbf{v}_i)],$$

де замість змінної $\mathbf{r}_J$ введено відносну відстань $\boldsymbol{\rho}$ як незалежну змінну.

Зосередьмо увагу на внеску з мінусом у прямокутних дужках і проведімо такі тотожні перетворення: перепозначмо змінні інтеґрування $\mathbf{v}_i \rightleftarrows \mathbf{v}_j$ і перейдім до нової змінної $\boldsymbol{\rho}' = -\boldsymbol{\rho}$ (якобіан такого переходу $|J_{\boldsymbol{\rho} \to \boldsymbol{\rho}'}| = 1$):

$$-\tfrac{1}{2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{\rho}' \mathrm{d}\mathbf{v}_j \mathrm{d}\mathbf{v}_i f(\mathbf{r}_I, \mathbf{v}_j, \mathbf{r}_I - \boldsymbol{\rho}', \mathbf{v}_i)\, \hat{O}(\mathbf{v}_j, \mathbf{v}_i; -\boldsymbol{\rho}')\psi(\mathbf{r}_I - \boldsymbol{\rho}', \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_I, \mathbf{v}_j). \quad (66)$$

Тепер переставмо пари арґументів функції f, згідно її властивості, використаймо симетрійну властивість оператора $\hat{O}$ і позначмо $\boldsymbol{\rho}'$ знову через $\boldsymbol{\rho}$. Одержимо формулу

$$-\tfrac{1}{2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\ \mathrm{d}\mathbf{v}_j \mathrm{d}\mathbf{v}_i f(\mathbf{r}_I - \boldsymbol{\rho}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_I, \mathbf{v}_j)\, \hat{O}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j; \boldsymbol{\rho})\psi(\mathbf{r}_I - \boldsymbol{\rho}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_I, \mathbf{v}_j), \quad (67)$$

у якій аргументи функцій f та ψ з'являються у тому ж самому порядку. Те ж саме має місце і для першого доданка виразу (65). Підставляючи в нього отриманий нами результат (67) можемо його записати як

$$\tfrac{1}{2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\ \mathrm{d}\mathbf{v}_i \mathrm{d}\mathbf{v}_j \int \mathrm{d}\mathbf{x} \big\{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_I) - \delta(\mathbf{x} - [\mathbf{r}_I - \boldsymbol{\rho}])\big\} \times \quad (68)$$
$$\times f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i, \mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, \mathbf{v}_j)\, \hat{O}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j; \boldsymbol{\rho})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i, \mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, \mathbf{v}_j).$$

Різницю δ-функцій можна переписати у вигляді

$$\delta(\mathbf{x_d} - \mathbf{r}_i) - \delta(\mathbf{x_d} - [\mathbf{r}_i - \boldsymbol{\rho}]),$$

[2]Ми використовуємо дещо іншу інтерпретацію процедури симетризації, ніж у попередньому препринті [12], запозичену з роботи [26].

де $\mathbf{x_d} \equiv \mathbf{x} - \mathbf{d}_i$ і за допомогою інтеґрування по параметру подати як діверґенцію, обчислену, що суттєво, в точці $\mathbf{r}_i$ (а не в зміщеній точці $\mathbf{r}_I$!):

$$\delta(\mathbf{x_d} - \mathbf{r}_i) - \delta(\mathbf{x_d} - [\mathbf{r}_i - \boldsymbol{\rho}]) = \nabla_i \cdot \boldsymbol{\rho} \int_0^1 \mathrm{d}\xi\, \delta(\mathbf{x} - [\mathbf{r}_I - \xi\boldsymbol{\rho}]). \quad (69)$$

Підставивши це у вираз (68) замість різниці δ-функцій і провівши інтеґрування по $\mathrm{d}\mathbf{x}$, одержимо нарешті таке:

$$\nabla_i \cdot \int_0^1 \mathrm{d}\xi \int \mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\ \mathrm{d}\mathbf{v}_i \mathrm{d}\mathbf{v}_j f(\mathbf{r}_{I\xi}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_{J\bar{\xi}}, \mathbf{v}_j) \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\rho}\ \hat{O}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j; \boldsymbol{\rho})\psi(\mathbf{r}_{I\xi}, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_{J\bar{\xi}}, \mathbf{v}_j), \quad (70)$$

де було вжито позначення

$$\mathbf{r}_{I\xi} \equiv \mathbf{r}_I - \xi\boldsymbol{\rho}, \qquad \mathbf{r}_{J\bar{\xi}} \equiv \mathbf{r}_J + [1 - \xi]\boldsymbol{\rho}. \quad (71)$$

Аналогічно, позначивши

$$x_{I\xi} \equiv \{\mathbf{r}_{I\xi}, \mathbf{v}_i\}, \qquad x_{J\bar{\xi}} \equiv \{\mathbf{r}_{J\bar{\xi}}, \mathbf{v}_j\}, \quad (72)$$

усереднення в (70) запишеться компактніше:

$$\int_0^1 \mathrm{d}\xi \int \mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\ \mathrm{d}\mathbf{v}_i \mathrm{d}\mathbf{v}_j f(x_{I\xi}, x_{J\bar{\xi}}) \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\rho}\ \hat{O}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j; \boldsymbol{\rho})\psi(x_{I\xi}, x_{J\bar{\xi}}). \quad (73)$$

Тут, крім інтеґрувань по відносній координаті та швидкостях, є ще інтеґрування по параметру ξ і для таких усереднень нового типу ми вводимо особливе позначення:

$$\langle \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\rho}\ \hat{O}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j; \boldsymbol{\rho})\, \psi(x_{I\xi}, x_{J\bar{\xi}})\rangle^f_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j(\boldsymbol{\rho}\ \xi)_{IJ}}, \quad (74)$$

використане вже у формулюванні теореми.

Застосуймо результати доведеної теореми до симетризації останніх двох доданків правої частини виразу (54). У цьому разі, вектори просторового зміщенне $\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j = 0$, а у кінцевій формулі типу (63) замість x_I, x_J фіґуруватимуть просто x_i, x_j. Як функція f_k $(k \geq 2)$, оператор $T_+(ij)$, так і молекулярна характеристика ψ_a^k задовольняють всі умови теореми, тому

$$\begin{aligned}\langle T_+(ij)\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_i x_j} &= \nabla_i \cdot \langle \tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, T_+(ij; \mathbf{R})\, \psi_a^k(*, x_{i\lambda}, x_{j\bar{\lambda}})\rangle^k_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j(\mathbf{R}\lambda)_{ij}} + \\ &+ \langle \tfrac{1}{2}\, T_+(ij)\, [1 + \mathcal{P}_{x_i x_j}]\, \psi_a^k(*, x_i, x_j)\rangle^k_{\mathbf{v}_i x_j}, \quad (75)\\ \langle T_+(iq)\psi_a^k(x^k)\rangle^q_{\mathbf{v}_i x_j} &= \nabla_i \cdot \langle \tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, T_+(iq; \mathbf{R})\, \psi_a^k(*, x_{i\lambda})\rangle^q_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_q(\mathbf{R}\lambda)_{iq}} + \\ &+ \langle \tfrac{1}{2}\, T_+(iq)\, [1 + \mathcal{P}_{x_i x_q}]\, \psi_a^k(x^k)\rangle^q_{\mathbf{v}_i x_q}\Big|_{q=k+1}, \quad (76)\end{aligned}$$

де використано позначення

$$x_{i\lambda} \equiv \{\mathbf{r}_{i\lambda}, \mathbf{v}_i\}, \qquad x_{j\bar{\lambda}} \equiv \{\mathbf{r}_{j\bar{\lambda}}, \mathbf{v}_j\}, \tag{77}$$

$$\mathbf{r}_{i\lambda} \equiv \mathbf{r}_i - \lambda\mathbf{R}, \qquad \mathbf{r}_{j\bar{\lambda}} \equiv \mathbf{r}_i + [1-\lambda]\mathbf{R}, \tag{78}$$

аналогічні до позначень (71), (72).

Оскільки треба ще проінтеґрувати по решті змінних, зокрема по $\mathrm{d}\mathbf{r}_i$ для всіх i за винятком $i = 1$, то всі доданки з діверґенціями у виразах (75), (76) для $i \neq 1$ пропадуть. Тоді кінцевий результат для двох останніх сум виразу (54) набуде вигляду:

$$\sum_{i=1}^{k}\sum_{j>i}^{k}\langle T_+(ij)\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k} = \tag{79}$$

$$= \sum_{j=2}^{k}\nabla_1\cdot\langle\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(1j;\mathbf{R})\psi_a^k(x_{1\lambda},*,x_{j\bar{\lambda}})\rangle^k_{\{*\}(\mathbf{vR}\lambda)_{1j}} +$$

$$+ \sum_{i=1}^{k}\sum_{j>i}^{k}\langle\tfrac{1}{2}\,T_+(ij)[1+\mathcal{P}_{x_i x_j}]\psi_a^k(*,x_i,x_j)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k},$$

$$\sum_{i=1}^{k}\langle T_+(iq)\psi_a^k(x^k)\rangle^q_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_q} = \tag{80}$$

$$= \nabla_1\cdot\langle\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(iq;\mathbf{R})\psi_a^k(x_{1\lambda},x_2\ldots x_k)\rangle^q_{\{*\}(\mathbf{vR}\lambda)_{1q}} +$$

$$+ \sum_{i=1}^{k}\langle\tfrac{1}{2}\,T_+(iq)[1+\mathcal{P}_{x_i x_q}]\psi_a^k(x^k)\rangle^q_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_q}\big|_{q=k+1}.$$

Тут ще введено скорочення позначень в середніх

$$\langle\ldots\rangle^k_{\{*\}(\mathbf{vR}\lambda)_{ij}} \equiv \langle\ldots\rangle^k_{\{*\}\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j(\mathbf{R}\lambda)_{ij}},$$

яке ми будемо вживати, коли це не викликатиме двозначного трактування.

Кінцевий вигляд

Підставляючи кінцеві результати (79) та (80) у вираз (54), а його — у стартове співвідношення (35), можемо записати рівняння переносу для локальної величини a_k у такому загальному вигляді:

$$\partial_t a_k \;+\; \nabla_1\cdot\big[\mathbf{J}^{\mathrm{k},1}_{a_k} + \sum_{j=2}^{k}\mathbf{J}^{\phi,1j}_{a_k} + \mathbf{J}^{\phi,1q}_{a_k}\big] = \tag{81}$$

$$= s^t_{a_k} + \sum_{i=1}^{k} s^{r,i}_{a_k} + \sum_{i=1}^{k}\sum_{j>i}^{k} s^{\phi,ij}_{a_k} + \sum_{i=1}^{k} s^{\phi,iq}_{a_k}\big|_{q=k+1} + \sum_{i=1}^{k} s^{U,i}_{a_k}.$$

Розшифрування позначень:

$$\mathbf{J}^{\mathrm{k},1}_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\mathbf{v}_1\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k}, \tag{82}$$

$$\mathbf{J}^{\phi,1j}_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle-\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(1j;\mathbf{R})\,\psi_a^k(x_{1\lambda},*,x_{j\bar{\lambda}})\rangle^k_{\{*\}(\mathbf{vR}\lambda)_{1j}}, \tag{83}$$

$$\mathbf{J}^{\phi,1q}_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle-\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(iq;\mathbf{R})\,\psi_a^k(x_{1\lambda},x_2\ldots x_k)\rangle^q_{\{*\}(\mathbf{vR}\lambda)_{1q}}, \tag{84}$$

$$s^t_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\partial_t\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k}, \tag{85}$$

$$s^{r,i}_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle-L_i^0\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k}, \tag{86}$$

$$s^{\phi,ij}_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\tfrac{1}{2}\,T_+(ij)[1+\mathcal{P}_{x_i x_j}]\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k}, \tag{87}$$

$$s^{\phi,iq}_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\tfrac{1}{2}\,T_+(iq)[1+\mathcal{P}_{x_i x_q}]\psi_a^k(x^k)\rangle^q_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k x_q}, \tag{88}$$

$$s^{U,i}_{a_k}(\mathbf{r}_1,t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle L_i^{U\dagger}\psi_a^k(x^k)\rangle^k_{\mathbf{v}_1 x_2\ldots x_k}. \tag{89}$$

Тут у виразах (84) і (88) слід покласти $q = k+1$.

Під знаками усереднення стоять молекулярні характеристики $\psi_{\mathbf{J}_{a_k}}$ й $\psi_{s_{a_k}}$ відповідних внесків у потік та джерело величини a_k. Тому, ці вирази служать також *означеннями* для молекулярних характеристик величин $\mathbf{J}_{a_k}$ і s_{a_k}. Лише потоки потенціального типу $\mathbf{J}^{\phi}_{a_k}$ є нелокальними середніми, всі інші — середні того ж типу, що й a_k.

У скорочених позначеннях рівняння (81) набуває форми:

$$\partial_t a_k + \nabla_1\cdot\mathbf{J}^{\mathrm{k}+\phi}_{a_k} = s^{t+r+\phi+U}_{a_k}, \tag{90}$$

де однотипні сумарні внески виглядають так:

$$\mathbf{J}^{\phi}_{a_k} \;\equiv\; \sum_{j=2}^{k}\mathbf{J}^{\phi,1j}_{a_k} + \mathbf{J}^{\phi,1\,k+1}_{a_k}, \tag{91}$$

$$s^{r}_{a_k} \;\equiv\; \sum_{i=1}^{k} s^{r,i}_{a_k}, \qquad s^{U}_{a_k} \equiv \sum_{i=1}^{k} s^{U,i}_{a_k}, \tag{92}$$

$$s^{\phi}_{a_k} \;\equiv\; \sum_{i=1}^{k}\sum_{j>i}^{k} s^{\phi,ij}_{a_k} + \sum_{i=1}^{k} s^{\phi,i\,k+1}_{a_k}. \tag{93}$$

У нашому виведенні використано припущення про поведінку функцій розподілу на нескінченності і не накладено суттєвих обмежень на молекулярну характеристику ψ_a^k.

Далі розгляньмо два підвипадки, коли k-частинкова молекулярна характеристика ψ_a^k залежить лише від швидкостей або лише від просторових координат. У першому випадку, $\psi_a^k(\mathbf{v}^k)$, внески $s_{a_k}^t$ та $s_{a_k}^{r,i}$ перетворяться в нуль й рівняння переносу набуває вигляду:

$$\partial_t a_k + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_k}^{\mathrm{k}+\phi} = s_{a_k}^{\phi+U}. \tag{94}$$

Коли присутня лише залежність від координат, $\psi_a^k(\mathbf{r}^k)$, то у нуль перетворяться члени з операторами $T_+(ij)$ та $L_i^{U\dagger}$, що діють на функції швидкостей. А це $\mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1j}$, $\mathbf{J}_{a_k}^{\phi,1\,k+1}$, $s_{a_k}^{U,i}$, $s_{a_k}^{\phi,ij}$ та $s_{a_k}^{\phi,i\,k+1}$. Тоді рівняння переносу має таку форму:

$$\partial_t a_k + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{a_k}^{\mathrm{k}} = s_{a_k}^{r}. \tag{95}$$

Воно не містить доданків нелокального типу. Ще тут нема членів, означених через наступну функцію розподілу f_{k+1} — щоб знати відповідні потоки і джерела, достатньо мати лише f_k. Тому рівняння переносу для локальних величин типу $\psi_a^k(\mathbf{r}^k)$ *не зачіпляють* наступної частинкової функції розподілу.

У двох часткових випадках для

$$a_1(\mathbf{r}_1,t) = \langle \psi_a^1(x_1,t)\rangle_{\mathbf{v}_1}^1 \qquad \text{i} \qquad a_2(\mathbf{r}_1,t) = \langle \psi_a^2(x_1,x_2,t)\rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2, \tag{96}$$

покладаючи у рівнянні (81) відповідно $k=1$ та $k=2$, отримуємо рівняння переносу загального типу для локальних одно- і двочастинкової густин.

$$\partial_t a_1 + \nabla_1 \cdot \left[\mathbf{J}_{a_1}^{\mathrm{k},1} + \mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12}\right] = s_{a_1}^t + s_{a_1}^{r,1} + s_{a_2}^{\phi,12} + s_{a_1}^{U,1}, \tag{97}$$

де

$$\mathbf{J}_{a_1}^{\mathrm{k},1} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \mathbf{v}_1 \psi_a^1(x_1,t)\rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \tag{98}$$

$$\mathbf{J}_{a_1}^{\phi,12} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, T_+(12;\mathbf{R})\, \psi_a^1(x_{1\lambda})\rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2, \tag{99}$$

$$s_{a_1}^t \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \partial_t \psi_a^1(x_1,t)\rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \tag{100}$$

$$s_{a_1}^{r,1} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -L_1^0 \psi_a^1(x_1,t)\rangle_{\mathbf{v}_1}^1, \tag{101}$$

$$s_{a_1}^{\phi,12} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \tfrac{1}{2}\, T_+(12)[1+\mathcal{P}_{x_1x_2}]\psi_a^1(x_1,t)\rangle_{\mathbf{v}_1 x_2}^2, \tag{102}$$

$$s_{a_1}^{U,1} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle L_1^{U\dagger} \psi_a^1(x_1,t)\rangle_{\mathbf{v}_1}^1. \tag{103}$$

Для двочастинкової густини ми наводимо лише вигляд рівняння без виразів для потоків і джерел:

$$\partial_t a_2 \;+\; \nabla_1 \cdot \left[\mathbf{J}_{a_2}^{\mathrm{k},1} + \mathbf{J}_{a_2}^{\phi,12} + \mathbf{J}_{a_2}^{\phi,13}\right] = \tag{104}$$

$$= \; s_{a_2}^t + \sum_{i=1}^{2} s_{a_2}^{r,i} + s_{a_2}^{\phi,12} + \sum_{i=1}^{2} s_{a_2}^{\phi,i3} + \sum_{i=1}^{2} s_{a_2}^{U,i}.$$

4.3. Рівняння переносу звичайної гідродинаміки

Перш ніж розглянути рівняння переносу для густин маси ρ, імпульсу $\mathbf{p}$ та кінетичної енергії e^{k}, зробімо деякі зауваження відносно оператора парних зіткнень $T_+(ij)$. Вираз для нього було одержано, розглядаючи двочастинкові оператори еволюції і використовуючи міркування геометрії зіткнення двох твердих кульок [6]. Особливо це стосується оператора зсуву швидкостей $b_{\hat\sigma}^{ij}$ та правил парного зіткнення (23), за якими він діє. У свою чергу, ґеометрія парного зіткнення (ij) базується на законах збереження імпульсу та енергії

$$m\mathbf{v}_i' + m\mathbf{v}_j' \;=\; m\mathbf{v}_i + m\mathbf{v}_j, \tag{105}$$

$$\tfrac{1}{2}mv_i'^2 + \tfrac{1}{2}mv_j'^2 \;=\; \tfrac{1}{2}mv_i^2 + \tfrac{1}{2}mv_j^2, \tag{106}$$

які можна записати як

$$[b_{\hat\sigma}^{ij} - 1]\begin{pmatrix} m\mathbf{v}_i + m\mathbf{v}_j \\ \frac{1}{2}mv_i^2 + \frac{1}{2}mv_j^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{107}$$

або ж

$$T_+(ij)\,[1+\mathcal{P}_{x_ix_j}]\begin{pmatrix} m\mathbf{v}_i \\ \frac{1}{2}mv_i^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{108}$$

Це теж можна долучити до раніше виявлених властивостей операторів $b_{\hat\sigma}^{ij}$ та $T_+(ij)$.

Для твердих кульок густини маси, імпульсу й енергії мають *одночастинкову* природу (34). Скориставшись рівнянням (97) отримуємо звичну систему рівнянь гідродинаміки:

$$\partial_t \rho \;+\; \nabla_1 \cdot \langle m\mathbf{v}_1\rangle_{\mathbf{v}_1}^1 = 0, \tag{109}$$

$$\partial_t \mathbf{p} \;+\; \nabla_1 \cdot [\langle m\,\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1\rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, T_+(12;\mathbf{R})\, m\mathbf{v}_1\rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2] = \rho\mathbf{F}_1^U, \tag{110}$$

$$\partial_t e^{\mathrm{k}} \;+\; \nabla_1 \cdot [\langle \tfrac{m}{2}\, v_1^2\mathbf{v}_1\rangle_{\mathbf{v}_1}^1 + \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, T_+(12;\mathbf{R})\, \tfrac{m}{2}v_1^2\rangle_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}^2] = \mathbf{p}\cdot\mathbf{F}_1^U, \tag{111}$$

у яких при розрахунку внесків у джерела $s_{\mathbf{p}}^{\phi,12}$, $s_{e^{\mathrm{k}}}^{\phi,12}$ було враховано закони збереження для парних зіткнень у формі (108). Рівняння для $\mathbf{p}$ та e^{k} містять, проте, джерела, зумовлені впливом зовнішнього поля $U(\mathbf{r})$.

Рівняння переносу для густини *потенціальної* енергії системи твердих кульок у зовнішньому полі $e^U = \langle U(\mathbf{r}_1)\rangle^1_{\mathbf{v}_1}$ нічим не відрізняється від подібного випадку для системи з гладким потенціалом [12]. Тому наводимо лише результат:

$$\partial_t e^U + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}^{\mathrm{k},1}_{e^U} = s^{r,1}_{e^U}, \tag{112}$$

де

$$\mathbf{J}^{\mathrm{k},1}_{e^U} = U(\mathbf{r}_1)\,\mathbf{p}/m, \qquad s^{r,1}_{e^U} = -\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{F}^U_1. \tag{113}$$

Як легко бачити, внески до джерел кінетичної та потенціальної енергій скомпенсовують одне одного:

$$s^{U,1}_{e^{\mathrm{k}}} = -s^{r,1}_{e^U}. \tag{114}$$

Це означає: зростання (зменшення) кінетичної енергії кульок відбувається завдяки зменшенню (зростанню) їхньої потенціальної енергії в зовнішньому полі. Тоді густина повної енергії

$$e = e^{\mathrm{k}} + e^U \tag{115}$$

задовольняє рівняння без джерела:

$$\partial_t e + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_e = 0, \tag{116}$$

де $\mathbf{J}_e = \mathbf{J}^{\mathrm{k}+\phi}_{e^{\mathrm{k}}} + \mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^U}$. Отже, у присутності зовнішнього потенціального поля, рівняння переносу для густини імпульсу містить джерело, а вигляд рівняння для енергії залежить від того, чи долучаємо ми потенціальну енергію e^U до кінетичної чи ні.

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 [1, 2, 19], так і для їхніх мікроскопічних відповідників [18, 27]. Їхній загальний вигляд повністю подібний до відповідних рівнянь для системи з гладким потенціалом. Хоча є суттєва відмінність — завдяки тому, що нема взаємодії на відстані, всі змінні опису визначаються лише через *одночастинкову* функцію розподілу.

5. Нелокальна двочастинкова густина

Як зі загального рівняння переносу (81) і виразів (83) та (84), так і з конкретних рівнянь (110), (111) для густин збережуваних величин видно, що у схемі опису з'являються середні якісно іншого типу,

які визначаються значеннями функцій розподілу у зміщених точках простору і містять інтеґрування по параметру. Через це вони і називаються *нелокальними* і пов'язані зі взаємодією частинок. Для прикладу, в рівняннях (110), (111) — це внески в потоки імпульсу й енергії від твердокулькового відштовхування на контакті:

$$\begin{pmatrix} \mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}} \\ \mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}} \end{pmatrix} = \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R}) \begin{pmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ \tfrac{1}{2}mv_1^2 \end{pmatrix} \rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}. \tag{117}$$

Відповідні молекулярні характеристики залежать від вектора відносного розташування $\mathbf{R}$, відносної швидкости $\mathbf{v}_{12}$ (через оператор T_+) та від $\mathbf{v}_1$. Вказуючи змінні, від яких залежить молекулярна характеристика, наприклад, для $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$, можемо записати:

$$\tilde{\boldsymbol{\psi}}^{\,2}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}(\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2).$$

Однак окремі координати частинок присутні у функції розподілу f_2 і рівні $\mathbf{r}_{1\lambda}$ й $\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}}$ відповідно, а наведений запис для $\tilde{\boldsymbol{\psi}}^{\,2}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}$ відображає ту особливість, що є залежність лише різниці $\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}} - \mathbf{r}_{1\lambda}$. Проте далі ми будемо вказувати координати частинок у функціональній залежності молекулярної характеристики.

Отже, ми розглянемо виведення рівняння переносу для найпростішого нелокального середнього з виглядом

$$\tilde{a}_2(\mathbf{r}_1, t) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}, t)\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}, \tag{118}$$

де залежність від t ми надалі не вказуватимемо. У попередньому випадку (117) $\psi^2_{\tilde{a}}$ залежить від різниці $\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}} - \mathbf{r}_{1\lambda} = \mathbf{R}$, а не окремо від $\mathbf{r}_{1\lambda}$ та $\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}}$. В розгорнутому вигляді права частина виглядає так:

$$\int\limits_0^1 \mathrm{d}\lambda \int \mathrm{d}\mathbf{R}\mathrm{d}\mathbf{v}_1\mathrm{d}\mathbf{v}_2\, \psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}}) f_2(\mathbf{r}_1 - \lambda\mathbf{R}, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + [1-\lambda]\mathbf{R}, \mathbf{v}_2). \tag{119}$$

Виведення рівняння переносу для $\tilde{a}_2$ таке ж, як і для систем з гладким потенціалом [12] і тут буде розглянуто лише відмінності.

Зміна в часі величини $\tilde{a}_2$ визначається двома чинниками:

$$\partial_t \tilde{a}_2(\mathbf{r}_1, t) = \langle \partial_t \psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}} + \langle \psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda}, x_{2\bar{\lambda}})\rangle^{\partial_t f_2}_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}, \tag{120}$$

де

$$\langle\psi^2_{\tilde a}(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda})\rangle^{\partial_t f_2}_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}} \equiv \int_0^1\mathrm{d}\lambda\int\mathrm{d}\mathbf{R}\mathrm{d}\mathbf{v}_1\mathrm{d}\mathbf{v}_2\psi^2_{\tilde a}(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda})\,\partial_t f_2(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda}).$$

Оскільки f_2 у правій частині береться у зміщених точках, то похідні у другому рівнянні ланцюжка теж будуть стосуватися зміщених точок. Однак нам потрібно записати це рівняння у такій формі, яка стосується змінних $\{\mathbf{r}_1,\mathbf{R}\}$, а не $\{\mathbf{r}_{1\lambda},\mathbf{r}_{2\bar\lambda}\}$. (Це тому, що потрібно отримати рівняння переносу величини $\tilde a_2$ у точці $\mathbf{r}_1$, коли всі величини — потоки і джерела, а особливо діверґенції потоків — мають стосуватися саме цієї точки.)

Змінена форма одержується зі звичайної

$$\begin{aligned}\partial_t f_2(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda}) \;=\; & [L^0_{1\lambda}+L^0_{2\bar\lambda}+\overline{T}_-(1\lambda,2\bar\lambda)+L^U_{1\lambda}+L^U_{2\bar\lambda}]f_2(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda})+\\ &+\int\mathrm{d}x_3\,[\overline{T}_-(1\lambda,3)+\overline{T}_-(2\bar\lambda,3)]f_3(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda},x_3)\end{aligned}\qquad(121)$$

за допомогою переходу до нових змінних. Формули прямого (до $\{\mathbf{r}_1,\mathbf{R}\}$) і зворотнього (до $\{\mathbf{r}_{1\lambda},\mathbf{r}_{2\bar\lambda}\}$) переходів мають вигляд [12]:

$$\begin{pmatrix}\mathbf{r}_{1\lambda}\\ \mathbf{r}_{2\bar\lambda}\end{pmatrix}=\mathcal{M}_{1\mathbf{R}}\begin{pmatrix}\mathbf{r}_1\\ \mathbf{R}\end{pmatrix},\qquad \mathcal{M}_{1\mathbf{R}}\stackrel{\mathrm{df}}{=}\begin{bmatrix}1 & -\lambda\\ 1 & 1-\lambda\end{bmatrix},\qquad(122)$$

$$\begin{pmatrix}\mathbf{r}_1\\ \mathbf{R}\end{pmatrix}=\mathcal{M}_{1\lambda,2\bar\lambda}\begin{pmatrix}\mathbf{r}_{1\lambda}\\ \mathbf{r}_{2\bar\lambda}\end{pmatrix},\qquad \mathcal{M}_{1\lambda,2\bar\lambda}\stackrel{\mathrm{df}}{=}\begin{bmatrix}1-\lambda & \lambda\\ -1 & 1\end{bmatrix},\qquad(123)$$

з матрицями переходів $\mathcal{M}_{1\mathbf{R}}$ і $\mathcal{M}_{1\lambda,2\bar\lambda}$, які є взаємнообернені з одиничними детермінантами. Такий перехід не зачіпає змінних $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$, від яких залежать f_2 та f_3.

У результаті рівняння (121) набирає такої форми:

$$\begin{aligned}\partial_t f_2(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda}) \;=\; & \Big[\sum_{i=1,\mathbf{R}}L^0_{\mathbf{u}i}+\overline{T}_-(1\lambda,2\bar\lambda)+\sum_{i=1\lambda,2\bar\lambda}L^U_i\Big]f_2(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda})+\\ &+\int\mathrm{d}x_3\,[\overline{T}_-(1\lambda,3)+\overline{T}_-(2\bar\lambda,3)]f_3(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda},x_3),\end{aligned}\qquad(124)$$

де

$$\begin{aligned}L^0_{\mathbf{u}1}&\stackrel{\mathrm{df}}{=}-\mathbf{u}_1\!\cdot\!\nabla_1,\\ L^0_{\mathbf{uR}}&\stackrel{\mathrm{df}}{=}-\mathbf{u}_{\mathbf{R}}\!\cdot\!\nabla_{\mathbf{R}},\end{aligned}\qquad \begin{pmatrix}\mathbf{u}_1\\ \mathbf{u}_{\mathbf{R}}\end{pmatrix}=\mathcal{M}_{1\lambda,2\bar\lambda}\begin{pmatrix}\mathbf{v}_1\\ \mathbf{v}_2\end{pmatrix},\qquad(125)$$

а оператор $\overline{T}_-(1\lambda,2\bar\lambda)$ фактично залежить від відносної відстані $\mathbf{R}$. Тоді другий доданок правої частини виразу (120) можемо записати

через скаляні добутки:

$$\begin{aligned}\langle\psi^2_{\tilde a}\rangle^{\partial_t f_2}_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}} \;=\; & \Big(\psi^2_{\tilde a},\Big[\sum_{i=1,\mathbf{R}}L^0_{\mathbf{u}i}+\overline{T}_-(1\lambda,2\bar\lambda)+\sum_{i=1\lambda,2\bar\lambda}L^U_i\Big]f_2\Big)_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}+\\ &+\Big(\psi^2_{\tilde a},[\overline{T}_-(1\lambda,3)+\overline{T}_-(2\bar\lambda,3)]\,f_3\Big)_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}x_3}.\end{aligned}\qquad(126)$$

До представлення через спряжені оператори переходимо так само, як і раніше у §4:

$$\begin{aligned}\langle\psi^2_{\tilde a}(x_{1\lambda},x_{2\bar\lambda})\rangle^{\partial_t f_2}_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}} \;=\; & -\nabla_1\!\cdot\!\langle\mathbf{u}_1\psi^2_{\tilde a}\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}+\\ &+\sum_{i=1,\mathbf{R}}\langle -L^0_{\mathbf{u}i}\psi^2_{\tilde a}\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}+\sum_{i=1\lambda,2\bar\lambda}\langle L^{U\dagger}_i\psi^2_{\tilde a}\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}+\\ &+\langle\,T_+(1\lambda,2\bar\lambda)\,\psi^2_{\tilde a}\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}+\sum_{l=1\lambda,2\bar\lambda}\langle\,T_+(l3)\,\psi^2_{\tilde a}\rangle^3_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}x_3},\end{aligned}\qquad(127)$$

де опущено доданок, який перетворюється в нуль:

$$\int_0^1\mathrm{d}\lambda\int\mathrm{d}\mathbf{R}\,[-\nabla_{\mathbf{R}}\cdot\langle\,\mathbf{u}_{\mathbf{R}}\psi^2_{\tilde a}\,\rangle^2_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2}].$$

5.1. Симетризація двочастинкового внеску

Стосовно першого з двох останніх доданків правої частини виразу (127), то подібно до симетризації локальних середніх, розгляньмо загальніший вираз

$$\langle\hat O(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,\tilde\psi(x_{i\xi},x_{j\bar\xi})\rangle^f_{(\mathbf{v}\boldsymbol{\rho}\ \xi)_{ij}}$$

із оператором $\hat O(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)$ з тими ж симетрійними властивостями, що й у попередній теоремі (с. 17). Подаймо $\tilde\psi(x_{i\xi},x_{j\bar\xi})$ через суму антисиметричної та симетричної частин, подібно до (64):

$$\begin{aligned}\tilde\psi(x_{i\xi},x_{j\bar\xi}) \;=\; & \tfrac12[\tilde\psi(x_{i\xi},x_{j\bar\xi})-\tilde\psi(x_{j\bar\xi},x_{i\xi})]+\\ &+\tfrac12[\tilde\psi(x_{i\xi},x_{j\bar\xi})+\tilde\psi(x_{j\bar\xi},x_{i\xi})]\equiv\\ &\equiv\Big\{\tfrac12[1-\mathcal{P}_{x_{i\xi},x_{j\bar\xi}}]+\tfrac12[1+\mathcal{P}_{x_{i\xi},x_{j\bar\xi}}]\Big\}\,\tilde\psi(x_{i\xi},x_{j\bar\xi}),\end{aligned}\qquad(128)$$

де символ $\mathcal{P}_{x_{i\xi},x_{j\bar\xi}}$ звично позначає операцію переставляння фазових змінних $x_{i\xi}$ та $x_{j\bar\xi}$. (Коли $\tilde\psi$ залежить від відносної координати, то така операція означає переставляння швидкостей $\mathbf{v}_i$ і $\mathbf{v}_j$ та інверсію відносної координати $\mathbf{r}_{j\bar\xi}-\mathbf{r}_{i\xi}$ на $\mathbf{r}_{i\xi}-\mathbf{r}_{j\bar\xi}$.)

Симетрична (друга) частина дасть:

$$\langle \tfrac{1}{2}\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,[1+\mathcal{P}_{x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}}}]\tilde{\psi}(x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}})\rangle^f_{(\mathbf{v}\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}}, \tag{129}$$

тоді як антисиметричну

$$\langle \tfrac{1}{2}\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,[\tilde{\psi}(x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}})-\tilde{\psi}(x_{j\bar{\xi}},x_{i\xi})]\rangle^f_{(\mathbf{v}\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}}, \tag{130}$$

треба подати у вигляді діверґенції. Весь подальший виклад повторює локальний випадок або ж відповідну частину роботи [12].

Розгляньмо той доданок у середньому, що з мінусом:

$$-\tfrac{1}{2}\int_0^1\!\mathrm{d}\xi\!\int\!\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\;\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j f(x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}})\,\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,\tilde{\psi}(\mathbf{r}_{j\bar{\xi}},\mathbf{v}_j,\mathbf{r}_{i\xi},\mathbf{v}_i) \tag{131}$$

і проведім звичні маніпуляції — перепозначмо змінні інтеґрування $\mathbf{v}_i \rightleftarrows \mathbf{v}_j$ і перейдім до нової змінної $\boldsymbol{\rho}\,' = -\boldsymbol{\rho}$ (з $|J_{\boldsymbol{\rho}\,\to\boldsymbol{\rho}\,'}| = 1$):

$$\begin{aligned}&-\tfrac{1}{2}\int_0^1\!\mathrm{d}\xi\!\int\!\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\,'\,\mathrm{d}\mathbf{v}_j\mathrm{d}\mathbf{v}_i\, f(\mathbf{r}_i-[1-\xi]\boldsymbol{\rho}\,',\mathbf{v}_i,\mathbf{r}_i+\xi\boldsymbol{\rho}\,',\mathbf{v}_j)\times\\ &\quad\times\;\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,')\,\tilde{\psi}(\mathbf{r}_i-[1-\xi]\boldsymbol{\rho}\,',\mathbf{v}_i,\mathbf{r}_i+\xi\boldsymbol{\rho}\,',\mathbf{v}_j).\end{aligned} \tag{132}$$

У цій формулі ми ще переставили пари арґументів функції f і використали симетрійну властивість оператора $\hat{O}$: $\hat{O}(\mathbf{v}_j,\mathbf{v}_i;-\boldsymbol{\rho}\,') = \hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,')$.

У формулі (130) функція f має такий порядок арґументів $f(\mathbf{r}_i-\xi\boldsymbol{\rho}\,,\mathbf{v}_i,\mathbf{r}_i+[1-\xi]\boldsymbol{\rho}\,,\mathbf{v}_j)$, тому підставляючи туди результат (132) на місце доданка з мінусом, можемо її записати так:

$$\begin{aligned}&\tfrac{1}{2}\int_0^1\!\mathrm{d}\xi\!\int\!\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\;\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j\!\int\!\mathrm{d}\mathbf{x}\big\{\delta(\mathbf{x}-\mathbf{r}_{i\xi})-\delta(\mathbf{x}-[\mathbf{r}_{i\xi}-\boldsymbol{\rho}\,_1])\big\}\times\\ &\times f(\mathbf{x},\mathbf{v}_i,\mathbf{x}+\boldsymbol{\rho}\,,\mathbf{v}_j)\,[\hat{O}\,(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\tilde{\psi}(\mathbf{x},\mathbf{v}_i,\mathbf{x}+\boldsymbol{\rho}\,,\mathbf{v}_j)],\end{aligned} \tag{133}$$

де $\boldsymbol{\rho}\,_1 \equiv [1-2\xi]\boldsymbol{\rho}$. Для різниці δ-функцій, яку можна переписати як

$$\delta(\mathbf{x}'_\xi-\mathbf{r}_i)-\delta(\mathbf{x}'_\xi-[\mathbf{r}_i-\boldsymbol{\rho}\,_1]), \tag{134}$$

де $\mathbf{x}'_\xi \equiv \mathbf{x}+\xi\boldsymbol{\rho}$, використовуємо формулу (134), яка дасть у результаті:

$$\nabla_i\cdot\boldsymbol{\rho}\,_1\int_0^1\!\mathrm{d}\xi_1\,\delta(\mathbf{x}-[\mathbf{r}_i-\xi\boldsymbol{\rho}\,-\xi_1\boldsymbol{\rho}\,_1]). \tag{135}$$

Тоді розглядуваний вираз (133) можна подати як діверґенцію

$$\nabla_1\cdot\int_0^1\!\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi\!\int\!\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\;\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j f_2(\mathbf{r}_{i\xi\xi_1},\mathbf{v}_i,\mathbf{r}_{j\bar{\xi}\xi_1},\mathbf{v}_j)\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\rho}\,_1\hat{O}\,\tilde{\psi}(x_{i\xi\xi_1},x_{j\bar{\xi}\xi_1}) \tag{136}$$

зі скороченим позначенням середнього

$$\nabla_1\cdot\langle\tfrac{1}{2}[1-2\xi]\boldsymbol{\rho}\;\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\tilde{\psi}(x_{i\xi\xi_1},x_{j\bar{\xi}\xi_1})\rangle^f_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j((\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}\xi_1)_{i\xi,j\bar{\xi}}}, \tag{137}$$

де

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{i\xi\xi_1} &\equiv \mathbf{r}_{i\xi}-\xi_1\boldsymbol{\rho}\,_1 \quad = \mathbf{r}_i-\xi\boldsymbol{\rho}\,-\xi_1\boldsymbol{\rho}\,_1, &(138)\\ \mathbf{r}_{j\bar{\xi}\xi_1} &\equiv \mathbf{r}_{j\bar{\xi}}-\xi_1\boldsymbol{\rho}\,_1 \quad = \mathbf{r}_i+[1-\xi]\boldsymbol{\rho}\,-\xi_1\boldsymbol{\rho}\,_1, &(139)\\ x_{i\xi\xi_1} &= \{\mathbf{r}_{i\xi\xi_1},\mathbf{v}_i\},\quad x_{j\bar{\xi}\xi_1} = \{\mathbf{r}_{j\bar{\xi}\xi_1},\mathbf{v}_i\}.\end{aligned}$$

Спосіб позначення усереднення подібний до введеного раніше. Він означає, що тут ми маємо інтеґрування по одній відносній координаті $\boldsymbol{\rho}$ і по двох неперервних параметрах ξ і ξ_1.

Врешті, об'єднавши кінцеві результати (129) і (137), запишімо остаточний вираз:

$$\begin{aligned}&\langle\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\tilde{\psi}(x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}})\rangle^f_{(\mathbf{vR}\xi)_{ij}} = \\ &=\nabla_i\cdot\langle\tfrac{1}{2}[1-2\xi]\boldsymbol{\rho}\,\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\tilde{\psi}(x_{i\xi\xi_1},x_{j\bar{\xi}\xi_1})\rangle^f_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j((\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}\xi_1)_{i\xi,j\bar{\xi}}}+\\ &+\langle\tfrac{1}{2}\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,[1+\mathcal{P}_{x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}}}]\tilde{\psi}(x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}})\rangle^f_{(\mathbf{v}\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}}.\end{aligned} \tag{140}$$

Таким чином, ми довели теорему, подібну до локального випадку.

Теорема 2. Інтеґральний вираз

$$\begin{aligned}&\langle\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,\tilde{\psi}(x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}})\rangle^f_{(\mathbf{v}\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}}\equiv\\ &\equiv\int_0^1\!\mathrm{d}\xi\!\int\!\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}\;\mathrm{d}\mathbf{v}_i\mathrm{d}\mathbf{v}_j f(\mathbf{r}_{i\xi},\mathbf{v}_i,\mathbf{r}_{j\bar{\xi}},\mathbf{v}_j)\,\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\tilde{\psi}(x_{i\xi},x_{j\bar{\xi}}),\end{aligned} \tag{141}$$

у якому

- f) функція f є симетричною $f(x,y)=f(y,x)$;
- $\hat{O}$) оператор $\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)$ діє на функції $\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j$, залежить від вектора відносного розташування $\boldsymbol{\rho}$ і задовольняє таку умову $\hat{O}(\mathbf{v}_j,\mathbf{v}_i;-\boldsymbol{\rho}\,)=\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)$;
- ψ) $\tilde{\psi}$ — довільна функція, для якої інтеґрал (141) скінченний,

можна подати у вигляді (140).

Теорему доведено для довільної залежности функції $\tilde{\psi}$ від просторових координат. Якщо ж вона залежить лише від відносної відстані $\boldsymbol{\rho}$, то результат теореми можна записати також в альтернативному до (140) вигляді:

$$\begin{aligned}&\langle \hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\tilde{\psi}(\boldsymbol{\rho}\,,\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)\rangle^f_{(\mathbf{vR}\xi)_{ij}} = \\&= \nabla_i\cdot\langle\tfrac{1}{2}[1-2\xi]\boldsymbol{\rho}\,\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\tilde{\psi}(\boldsymbol{\rho}\,,\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)\rangle^f_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j((\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}\xi_1)_{i\xi,j\bar{\xi}}} + \\&+\langle\tfrac{1}{2}\hat{O}(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j;\boldsymbol{\rho}\,)\,[1+\mathcal{P}^{\boldsymbol{\rho}\,-}_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j}]\tilde{\psi}(\boldsymbol{\rho}\,,\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)\rangle^f_{(\mathbf{v}\boldsymbol{\rho}\,\xi)_{ij}},\end{aligned} \tag{142}$$

де $\mathcal{P}^{\boldsymbol{\rho}\,-}_{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_j}$ позначає операцію переставляння змінних $\mathbf{v}_i$ і $\mathbf{v}_j$ та інверсію відносної координати $\boldsymbol{\rho}\,\to-\boldsymbol{\rho}$.

Середнє $\langle\,T_+(1\lambda,2\bar{\lambda})\,\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}$ задовольняє всі умови доведеної теореми, тому використовуючи її можемо записати результат симетризації:

$$\begin{aligned}&\langle T_+(1\lambda,2\bar{\lambda})\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}} = \\&= \nabla_1\cdot\langle\tfrac{1}{2}[1-2\lambda]\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R})\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda\lambda_1},x_{2\bar{\lambda}\lambda_1})\rangle^2_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2((\mathbf{R}\lambda)_{12}\lambda_1)_{1\lambda,2\bar{\lambda}}} + \\&+\langle\tfrac{1}{2}T_+(12;\mathbf{R})\,[1+\mathcal{P}_{x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}}}]\,\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}.\end{aligned} \tag{143}$$

5.2. Результат симетризації тричастинкових внесків

Тричастинкові внески під останньою сумою у виразі (127) симетризуються подібно до локального випадку. Хоч тут є інтеґрування по параметру та відносній координаті, але симетризація стосується тих змінних, що присутні в операторі $T_+(l3)$: $(1\lambda,3)$ або $(2\bar{\lambda},3)$. Тому можна оперувати середнім з меншою кількістю інтеґрувань:

$$\langle T_+(l3)\psi^2_{\tilde{a}}\rangle^3_{\mathbf{v}_l x_3} = \int\!\mathrm{d}\mathbf{v}_l\mathrm{d}x_3\;f_3(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}},x_3)T_+(l3)\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}}). \tag{144}$$

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 $\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_{2\bar{\lambda}}$, вектор зміщення $\mathbf{d}_1$ рівний $-\lambda\mathbf{R}$ та $[1-\lambda]\mathbf{R}\}$, а $\mathbf{d}_3=0$. За теоремою 1, що на с. 17, одержуємо в результаті:

$$\begin{aligned}&\langle T_+(1\lambda,3)\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}x_3} = \\&= -\nabla_1\cdot\langle-\tfrac{1}{2}\mathbf{R}_1T_+(13;\mathbf{R}_1)\,\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3(\mathbf{R}\lambda)_{12}(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{1\lambda,3}} + \\&+\langle\tfrac{1}{2}T_+(1\lambda,3)[1+\mathcal{P}_{x_{1\lambda},x_3}]\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}x_3},\end{aligned} \tag{145}$$

$$\begin{aligned}&\langle T_+(2\bar{\lambda},3)\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}x_3} = \\&= -\nabla_1\cdot\langle-\tfrac{1}{2}\mathbf{R}_1T_+(23;\mathbf{R}_1)\,\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3(\mathbf{R}\lambda)_{12}(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{2\bar{\lambda},3}} + \\&+\langle\tfrac{1}{2}T_+(2\bar{\lambda},3)[1+\mathcal{P}_{x_{2\bar{\lambda}},x_3}]\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}x_3}.\end{aligned} \tag{146}$$

5.3. Об'єднання внесків

Запишімо загальне рівняння переносу для $\tilde{a}_2$ з молекулярною характеристикою $\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})$. Підставивши у вираз (127) одержані після симетризації результати (143), (145), (146), а його — у початкову фурмулу (120) здобудемо:

$$\begin{aligned}&\partial_t\tilde{a}_2\;+\;\nabla_1\cdot\Big[\mathbf{J}^{\mathrm{k},12}_{\tilde{a}_2}+\mathbf{J}^{\phi,12}_{\tilde{a}_2}+\sum_{l=1}^{2}\mathbf{J}^{\phi,l3}_{\tilde{a}_2}\Big] = \\&\qquad = s^t_{\tilde{a}_2}+\sum_{l=1,\mathbf{R}}s^{r,l}_{\tilde{a}_2}+s^{\phi,12}_{\tilde{a}_2}+\sum_{l=1}^{2}s^{\phi,l3}_{\tilde{a}_2}+\sum_{l=1}^{2}s^{U,l}_{\tilde{a}_2},\end{aligned} \tag{147}$$

де

$$\mathbf{J}^{\mathrm{k},12}_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\mathbf{u}_1\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}, \tag{148}$$

$$\mathbf{J}^{\phi,12}_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle-\tfrac{1}{2}\mathbf{R}'T_+(12;\mathbf{R})\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda\lambda_1},x_{2\bar{\lambda}\lambda_1})\rangle^2_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2((\mathbf{R}\lambda)_{12}\lambda_1)_{1\lambda,2\bar{\lambda}}}, \tag{149}$$

$$\mathbf{J}^{\phi,l3}_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle-\tfrac{1}{2}\mathbf{R}_1T_+(l3;\mathbf{R}_1)\,\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3(\mathbf{R}\lambda)_{12}(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{l3}}, \tag{150}$$

$$s^t_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\partial_t\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}, \tag{151}$$

$$s^{r,l}_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle-L^0_{\mathbf{u}l}\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}},\qquad l=1\ \text{або}\ \mathbf{R}, \tag{152}$$

$$s^{\phi,12}_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\tfrac{1}{2}T_+(12,\mathbf{R})\,[1+\mathcal{P}_{x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}}}]\,\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}, \tag{153}$$

$$s^{\phi,l3}_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle\tfrac{1}{2}T_+(l3)[1+\mathcal{P}_{x_l,x_3}]\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^3_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}x_3}, \tag{154}$$

$$s^{U,l}_{\tilde{a}_2} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle L^{U\dagger}_l\psi^2_{\tilde{a}}(x_{1\lambda},x_{2\bar{\lambda}})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}},\qquad l=1\lambda\ \text{або}\ 2\bar{\lambda}. \tag{155}$$

Нагадаймо, що тут $\mathbf{u}_1=[1-\lambda]\mathbf{v}_1+\lambda\mathbf{v}_2$, $\mathbf{u}_\mathbf{R}=-\mathbf{v}_1+\mathbf{v}_2$, а в другому рядку $\mathbf{R}'\equiv[1-2\lambda]\mathbf{R}$.

Цими виразами одночасно задаються молекулярні характеристики внесків до потоку і джерела нелокальної величини $\tilde{a}_2$. Структура ріняння переносу формально повністю подібна до випадку гладкого потенціала [12]. Як бачимо, є тричастинкові внески $\mathbf{J}^{\phi,l3}_{\tilde{a}_2}$ та $s^{\phi,l3}_{\tilde{a}_2}$, причому потік є двократно нелокальний (по $\{\mathbf{R},\lambda\}$ та $\{\mathbf{R}_1,\lambda_1\}$), а джерело — однократно нелокальне. Потік $\mathbf{J}^{\phi,12}_{\tilde{a}_2}$ хоч і двочастинковий, але має *другу нелокальність* по λ_1. Він 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 нелокальности λ. У скорочених позначеннях отримане рівняння переносу має все той же вигляд:

$$\partial_t \tilde{a}_2 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}^{\mathrm{k}+\phi}_{\tilde{a}_2} = s^{t+r+\phi+U}_{\tilde{a}_2}. \tag{156}$$

Ці результати доволі просто поширити на випадок k-частинкової величини з одною або кількома однократними нелокальностями.

Порівняймо одержане з результатом для гладкого потенціала [12]. У цьому випадку у виразах для потоків і джерел стоять диференціальні оператори по швидкостях, помножені на ґрадієнт потенціала взаємодії. І в частковому випадку, коли молекуляна характеристика $\psi^2_{\tilde{a}}$ залежить лише від відносної координати $\mathbf{R}$, відповідні молекулярні характеристики потоків та джерел, що містять ці диференціальні оператори, перетворяться в нуль. При цьому залишаються лише двочастинкові середні:

$$\partial_t \tilde{a}_2 + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}^{\mathrm{k},12}_{\tilde{a}_2} = s^{r,\mathbf{R}}_{\tilde{a}_2}\Big|_{\text{Гл.пот.}} \tag{157}$$

— зокрема так є для потенціального внеску в потік імпульсу $\mathsf{J}^{\phi,12}_{\mathbf{p}}$.

У нашому ж випадку відштовхування твердих кульок, оператори від взаємодії не є диференціальними, а мають іншу природу. І для потенціального внеску в потік імпульсу *існують також тричастинкові* внески в потік і джерело цієї величини! Така ситуація видається нам парадоксальною, оскільки тверді кульки можна вважати граничним випадком плавного потенціала взаємодії, для якого отримано якісно іншу картину [12]. Детальніше ми це проаналізуємо пізніше при розгляді питання про розширення рівнянь звичайної гідродинаміки і виведення рівнянь переносу для потенціальних внесків до потоків імпульсу й енергії.

Для цього ми в наступному підпараграфі зупинимося на одному частковому вигляді рівняння переносу для двочастинкової нелокальної величини.

5.4. Частковий випадок

Згідно формули (117) для потоків $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$, $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$, відшукаймо вигляд рівняння переносу для нелокальної густини $\tilde{\boldsymbol{a}}_2$, молекулярна характеристика якої має вигляд:

$$\boldsymbol{\psi}^{\,2}_{\tilde{a}} \;=\; -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, T_{+}(12;\mathbf{R})\, \psi^1_a(x_{1\lambda},t) = \tag{158}$$

$$= \;-\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, t_{+}(v_{12R},R)\, [b^{12}_{\hat{R}}-1]\, \psi^1_a(x_{1\lambda},t),$$

тобто, через T_+-оператор пов'язана з молекулярною характеристикою ψ^1_a деякої *одночастинкової* величини, яку для простоти вважаємо скаляром.

Шукаючи явний вигляд внесків до потоку і джерела, заданих виразами (148)–(154), ми можемо використати конкретніший вигляд (158) характеристики $\boldsymbol{\psi}^{\,2}_{\tilde{a}}$. Поряд із $\psi^1_a(x_{1\lambda},t)$, функція t_+ і оператор $b^{12}_{\hat{R}}$ додатково вносять залежність від $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ та $\mathbf{R}$.

Для деяких внесків ми можемо пронести відповідні оператори, які можна переставляти з T_+:

$$\begin{bmatrix} \mathsf{J}^{\mathrm{k},12}_{\tilde{a}_2} \\ \mathbf{s}^{t}_{\tilde{a}_2} \\ \mathbf{s}^{r,1}_{\tilde{a}_2} \end{bmatrix} = \langle -\tfrac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1\mathbf{R} \\ \mathbf{R} \\ \mathbf{R}\,\mathbf{u}_1\cdot \end{bmatrix} T_{+}(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} 1 \\ \partial_t \\ \nabla_1 \end{bmatrix} \psi^1_a(x_{1\lambda},t)\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}. \tag{159}$$

Деталі рохрахунку джерел $\mathbf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\tilde{a}_2}$ та $\mathbf{s}^{U,l}_{\tilde{a}_2}$ ($l=1\lambda, 2\bar{\lambda}$) подано в додатку A. Тут ми наводимо лише результати:

$$\mathbf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\tilde{a}_2} = \mathbf{s}^{r,\mathbf{R}(0)}_{\tilde{a}_2} + \mathbf{s}^{r,\mathbf{R}(1)}_{\tilde{a}_2} + \mathbf{s}^{r,\mathbf{R}(2)}_{\tilde{a}_2}, \tag{160}$$

$$\mathbf{s}^{r,\mathbf{R}(0)}_{\tilde{a}_2} \;=\; \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{u}_{\mathbf{R}} T_{+}(12;\mathbf{R})\psi^1_a(x_{1\lambda})\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \tag{161}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{s}^{r,\mathbf{R}(1)}_{\tilde{a}_2} \;=\; &\langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{u}_{\mathbf{R}}\cdot \big[t^{v}_{+}(\mathbf{v}_{12}-v_{12R}\hat{R})\hat{R} + \\ &+ t^{R}_{+}\hat{R}\mathbf{R}\big](b^{12}_{\hat{R}}-1)\psi^1_a(x_{1\lambda})\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}},\end{aligned} \tag{162}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{s}^{r,\mathbf{R}(2)}_{\tilde{a}_2} \;=\; &\langle +\tfrac{1}{2}\, t_{+}\mathbf{u}_{\mathbf{R}}\cdot \Big\{\lambda\, [b^{12}_{\hat{R}}-1]\,\big\{\nabla_{1\lambda}\psi^1_a(x_{1\lambda})\big\}\,\mathbf{R} + \\ &+ R^{-1}(\mathsf{I}_{13}\mathbf{R}v_{12R} + \mathbf{v}_{12}\mathbf{R}\hat{R} - 2\hat{R}\mathbf{R}\hat{R}\,v_{12R})\cdot \\ &\cdot\big[b^{12}_{\hat{R}}\boldsymbol{\partial}_{\,1}\psi^1_a(x_{1\lambda})\big]\Big\}\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}\;;\end{aligned} \tag{163}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{s}^{U,1\lambda}_{\tilde{a}_2} \;=\; &\langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\mathbf{F}^{U}_{1\lambda}\cdot \big\{t^{v}_{+}\hat{R}\,[b^{12}_{\hat{R}}-1] + \\ &+\; t_{+}\big(\mathsf{I}\,[b^{12}_{\hat{R}}-1] - \hat{R}\hat{R}\,b^{12}_{\hat{R}}\big)\cdot\boldsymbol{\partial}_{\,1}\big\}\psi^1_a(x_{1\lambda})\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}},\end{aligned} \tag{164}$$

$$\mathbf{s}^{U,2\bar{\lambda}}_{\tilde{a}_2} \;=\; \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\mathbf{F}^{U}_{2\bar{\lambda}}\cdot \hat{R}\,\big\{-t^{v}_{+}[b^{12}_{\hat{R}}-1] + t_{+}\hat{R}\cdot b^{12}_{\hat{R}}\boldsymbol{\partial}_{\,1}\big\}\psi^1_a\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \tag{165}$$

де використано позначення для функцій

$$t^{v}_{+}(v_{12R},R) \;\equiv\; [\theta(v_{12R}) + v_{12R}\,\delta(v_{12R})]\,\delta(R-\sigma), \tag{166}$$

$$t^{R}_{+}(v_{12R},R) \;\equiv\; v_{12R}\theta(v_{12R})\,\delta'_R(R-\sigma), \tag{167}$$

які виникають при диференціюванні функції t_+ по $\mathbf{v}_1$ та по $\mathbf{R}$. Другий доданок в t_+^v з $\delta(v_{12R})$ можна опустити, оскільки $x\delta(x)$ — тотожній нуль. Суму внесків $\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U,1\lambda}$ і $\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U,2\bar{\lambda}}$ можна подати так:

$$\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U} \equiv \mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U,1\lambda+2\bar{\lambda}} = \mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U(0)} + \mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U(1)} + \mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U(2)}, \tag{168}$$

де
$$\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U(0)} = \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\mathbf{F}_{1\lambda}^{U}\cdot T_+(12;\mathbf{R})\,\boldsymbol{\partial}_{\,1}\psi_a^1(x_{1\lambda})\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \tag{169}$$
$$\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U(1)} = \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}(\mathbf{F}_{1\lambda}^{U} - \mathbf{F}_{2\bar{\lambda}}^{U})\cdot\hat{R}\, t_+^v[b_{\hat{R}}^{12} - 1]\,\psi_a^1(x_{1\lambda})\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \tag{170}$$
$$\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{U(2)} = \langle +\tfrac{1}{2}\mathbf{R}(\mathbf{F}_{1\lambda}^{U} - \mathbf{F}_{2\bar{\lambda}}^{U})\cdot\hat{R}\, t_+\hat{R}\cdot b_{\hat{R}}^{12}\,\boldsymbol{\partial}_{\,1}\psi_a^1(x_{1\lambda})\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}. \tag{171}$$

У записаних виразах похідні чи оператори підстановки швидкостей діють вже на молекулярну характеристику ψ_a^1.

Двочастинкові потенціальні внески в потік $\mathsf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,12}$ і джерело $\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{\phi,12}$ рівні нулю, бо містять два оператори $T_+(12,\mathbf{R})$, що стоять поруч:

$$\mathsf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,12} = 0, \qquad s_{\tilde{a}_2}^{\phi,12} = 0. \tag{172}$$

У додатку А детальніше показано, чому послідовна дія двох однакових T_+-операторів на довільну функцію дає нуль. Рівності (172) слідують з властивостей оператора парних зіткнень $T_+(ij)$ і ніяк не залежать від вигляду характеристики $\psi_a^1(x_{1\lambda})$, яка задає $\psi_{\tilde{a}}^2$.

Для тричастинкових внесків від взаємодії $\mathsf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3}$, $\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3}$ не вдається добитися ніяких спрощень. В розглядуваному частковому випадку вони набувають вигляду:

$$\mathsf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \tfrac{\mathbf{R}_1\mathbf{R}}{4} T_+(l3;\mathbf{R}_1) T_+(12;\mathbf{R})\,\psi_a^1(x_{1\lambda})\rangle^3_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3(\mathbf{R}\lambda)_{12}(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{l3}}, \tag{173}$$
$$\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -\tfrac{1}{4}T_+(l3)[1 + \mathcal{P}_{\mathbf{v}_l,\mathbf{v}_3}^{\mathbf{R}-}]\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R})\,\psi_a^1(x_{1\lambda})\rangle^3_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}x_3}. \tag{174}$$

Записані вирази ми використаємо у наступному параграфі при виведенні рівнянь переносу для потенціальних внесків до потоків імпульсу й енергії. Оскільки для них $\psi_a^1(x_{1\lambda}) = \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ mv_1^2/2 \end{bmatrix}$ залежить лише від швидкости, то $\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{t}$ й $\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{r,1}$, а також доданок в $\mathbf{s}_{\tilde{a}_2}^{r,\mathbf{R}}$, який містить $\nabla_{1\lambda}\psi_a^1$, перетворяться в нуль.

5.5. Підсумок

У §§ 4,5 виведено загальні рівняння переносу для макроскопічних густин системи твердих кульок: для k-частинкової локальної $a_k(\mathbf{r}_1,t)$ і двочастинкової нелокальної $\tilde{a}_2(\mathbf{r}_1,t)$ густин. Усі внески до їхніх потоків та джерел, за винятком $\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,12}$, $\mathbf{J}_{\tilde{a}_2}^{\phi,l3}$, теж є величинами одного з цих двох типів. І для них також можна отримати свої рівняння переносу, користуючись цими результатами.

Запропонована схема виведення таких рівнянь, що складається з двох кроків — переходу до спряжених операторів і процедури симетризації — є загальною і на нашу думку може бути адаптована до густини з довільним типом нелокальности. Отримуючи рівняння переносу для початкової величини a, потім — для її потоку $\mathbf{J}_a$ і джерела s_a, і далі — для вищих потоків і джерел, ми "розгортаємо" ланцюжок незамкнутих рівнянь гідродинамічного типу, що зачіпає все вищі потоки і джерела, містячи середні по f_k зі щораз вищим k і складнішим типом нелокальности.

Це ми продемонструємо на густинах збережуваних величин.

6. Перше розширення рівнянь звичайної гідродинаміки

У рівняннях переносу звичайної гідродинаміки є дві невідомі функції — потоки імпульсу та енергії. Записавши для них свої рівняння переносу ми розширимо набір змінних, за допомогою яких описується стан системи твердих кульок на гідродинамічному рівні, а отже — розширимо і набір рівнянь.

Ці потоки можна подати так:

$$\mathsf{J}_{\mathbf{p}} = \mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\mathrm{k},1} + \mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\phi,12}, \tag{175}$$
$$\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}} = \mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}^{\mathrm{k},1} + \mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}^{\phi,12}. \tag{176}$$

У правих частинах першими стоять локальні одночастинкові внески кінетичного типу, а другими — нелокальні двочастинкові внески від взаємодії твердих кульок. Їхні молекулярні характеристики:

$$\psi^1_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\mathrm{k},1}} = m\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1, \qquad \tilde{\psi}^2_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\phi,12}} = -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R})m\mathbf{v}_1, \tag{177}$$
$$\boldsymbol{\psi}^{\,1}_{\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}^{\mathrm{k},1}} = \tfrac{1}{2}mv_1^2\mathbf{v}_1, \qquad \tilde{\boldsymbol{\psi}}^{\,2}_{\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}^{\phi,12}} = -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R})\tfrac{1}{2}mv_1^2. \tag{178}$$

Виведім рівняння переносу для потоків імпульсу й енергії. Для їхніх локальних внесків використовуємо результати §4, а для нелокальних — ті, що отримані в §5.

6.1. Рівняння для кінетичних внесків до потоків

Молекулярні характеристики внесків $\mathsf{J}^{\mathrm{k},1}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\mathrm{k},1}_{e^{\mathrm{k}}}$ (далі $\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}$) залежать лише від швидкости $\mathbf{v}_1$, тому внески типу $\mathbf{s}^t$ та $\mathbf{s}^{r,1}$ рівні нулю. Рівняння переносу матимуть вигляд типу (94) і ми розглянемо їх разом:

$$\partial_t \begin{bmatrix} \mathsf{J}_{\mathbf{p}} \\ \mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}} \end{bmatrix}^{\mathrm{k}} + \nabla_1 \cdot \left\{ \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\mathrm{k},1} + \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\phi,12} \right\} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\phi,12} + \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{U,1}. \tag{179}$$

Явний вигляд внесків до потоків та джерел знаходимо користуючись формулами (98)–(102):

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\mathrm{k},1} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2\mathbf{v}_1 \end{bmatrix} \mathbf{v}_1 \rangle^1_{\mathbf{v}_1}, \tag{180}$$

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\phi,12} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\, T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2\mathbf{v}_1 \end{bmatrix} \rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \tag{181}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\phi,12} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \tfrac{1}{2} T_+(12) \begin{bmatrix} m[\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2\mathbf{v}_2] \\ \frac{m}{2}(v_1^2\mathbf{v}_1 + v_2^2\mathbf{v}_2) \end{bmatrix} \rangle^2_{\mathbf{v}_1 x_2}, \tag{182}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{U,1} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \mathbf{F}^U_1 \cdot \langle \begin{bmatrix} m(\mathsf{I}\mathbf{v}_1 + \mathsf{I}_{13}\mathbf{v}_1) \\ \frac{m}{2}(2\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1 + v_1^2\mathsf{I}) \end{bmatrix} \rangle^1_{\mathbf{v}_1} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}^U_1\mathbf{p} + \mathbf{p}\mathbf{F}^U_1 \\ \mathbf{F}^U_1 \cdot \mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}} + e^{\mathrm{k}}\mathbf{F}^U_1 \end{bmatrix}, \tag{183}$$

де $\mathsf{I} \equiv \delta_{\alpha\beta}$ — одиничний тензор другого ранґу, $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера, символ ${}_3\mathsf{J}$ позначає тензор третього ранґу, а $\mathsf{I}_{13}\mathbf{v}$ тут і далі позначає тензор третього ранґу, "діагональний" по першому і третьому індексах:

$$(\mathsf{I}_{13}\mathbf{v})_{\alpha\beta\gamma} \equiv \delta_{\alpha\gamma} v_\beta.$$

Ці рівняння нагадують подібні для гладкого потенціала [12]: потоки кінетичного типу і джерела від зовнішнього поля тотожні, а внески від взаємодії різняться лише операторами. Тензор $\mathsf{s}^{\phi,12}_{\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}}$ має нульовий слід, а рівняння для $\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}$, домножене скалярно на $:\frac{1}{2}\mathsf{I}$, дає рівняння для e^{k}.

6.2. Рівняння для внесків до потоків від взаємодії

Щоб отримати відповідні рівняння для внесків від взаємодії $\mathsf{J}^{\phi,12}_{\mathbf{p}}$ та $\mathbf{J}^{\phi,12}_{e^{\mathrm{k}}}$ (далі $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$) використаймо результати розгляду рівняння

для нелокальної густини у частковому випадку (п. 5.4). Згідно цих результатів, двочастинкові внески потенціального типу в потік та джерело перетворюються в нуль, так як містять два однакові T_+-оператори, розташовані поруч (див. дод. A). Ще пропадуть внески в джерело типу (t) і $(r,1)$. Спільне рівняння переносу набуває вигляду:

$$\partial_t \begin{bmatrix} \mathsf{J}_{\mathbf{p}} \\ \mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}} \end{bmatrix}^{\phi} + \nabla_1 \cdot \left[\mathsf{J}^{\mathrm{k},12}_{\tilde a_2} + \sum_{l=1}^{2} \mathsf{J}^{\phi,l3}_{\tilde a_2} \right] = \mathbf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\tilde a_2} + \sum_{l=1\lambda,2\bar\lambda} \mathbf{s}^{U,l}_{\tilde a_2} + \sum_{l=1}^{2} \mathbf{s}^{\phi,l3}_{\tilde a_2}, \tag{184}$$

де у нижньому індексі різних внесків під $\tilde a_2$ треба розуміти $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$. Явний вигляд внесків до потоків та джерел:

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\mathrm{k},12} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{u}_1 T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix} \rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \tag{185}$$

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\phi,l3} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle \frac{\mathbf{R}_1\mathbf{R}}{4} T_+(l3;\mathbf{R}_1) T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ \frac{m}{2}v_1^2 \end{bmatrix} \rangle^3_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}\mathbf{v}_3(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{l3}}, \tag{186}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{r,\mathbf{R}} \stackrel{\mathrm{df}}{=}\ & \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{u}_{\mathbf{R}} T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix} - \\ & - \tfrac{1}{2}\mathbf{u}_{\mathbf{R}} \cdot \Big\{ \big[t^v_+(\mathbf{v}_{12} - v_{12R}\hat R)\hat R + t^R_+ \hat R \mathbf{R} \big] (b^{12}_{\hat R} - 1) \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix} - \\ & - t_+ \tfrac{m}{R} \big(\mathsf{I}_{13}\mathbf{R} v_{12R} + \mathbf{v}_{12}\mathbf{R}\hat R - 2\hat R \mathbf{R} \hat R v_{12R} \big) \cdot \begin{bmatrix} \mathsf{I} \\ \mathbf{v}_1' \end{bmatrix} \Big\} \rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \end{aligned} \tag{187}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{\phi,l3} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -\tfrac{1}{4} T_+(l3)[1 + \mathcal{P}^{\mathbf{R}-}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_3}] \mathbf{R} T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ \frac{m}{2}v_1^2 \end{bmatrix} \rangle^3_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}x_3}, \tag{188}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{U} \equiv \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{U,1\lambda+2\bar\lambda} = \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{s}^{U(0)}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{U(1)} + \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{U,(2)}, \tag{189}$$

$$\text{де}\quad \mathbf{s}^{U(0)}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\mathbf{F}^U_{1\lambda} \cdot T_+(12;\mathbf{R})\, m\mathbf{v}_1 \rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \tag{190}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}} \end{bmatrix}^{U(1)} \stackrel{\mathrm{df}}{=} \langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}(\mathbf{F}^U_{1\lambda} - \mathbf{F}^U_{2\bar\lambda}) \cdot \hat R\, t^v_+ (b^{12}_{\hat R} - 1) \begin{bmatrix} m\mathbf{v}_1 \\ \frac{1}{2}mv_1^2 \end{bmatrix} \rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}},$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{U(2)} \stackrel{\rm df}{=} \langle +\tfrac{1}{2}\mathbf{R}(\mathbf{F}^{U}_{1\lambda} - \mathbf{F}^{U}_{2\bar\lambda})\cdot \hat{R}\, t_{+}\, \hat{R}\cdot b^{12}_{\hat{R}} \begin{bmatrix} m\mathsf{I} \\ m\mathbf{v}_1 \end{bmatrix} \rangle^{2}_{(\mathbf{vR}\lambda)_{12}}. \tag{191}$$

Функції t_+, t^v_+, t^R_+ подано раніше виразами (52), (166), (167).

6.3. Порівняння з результатами для гладкого потенціала

Додавши рівняння (179) і (184) для кінетичних внесків і внесків від твердокулькової взаємодії, отримаємо рівняння для повних потоків імпульсу й енергії, $\mathsf{J}^{\rm k+\phi}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\rm k+\phi}_{e^{\rm k}}$, у вигляді:

$$\partial_t \begin{bmatrix} \mathsf{J}_{\mathbf{p}} \\ \mathbf{J}_{e^{\rm k}} \end{bmatrix} + \nabla_1\cdot \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}, \tag{192}$$

де

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{\rm k,1} + \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{\phi,12} + \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{\rm k,12} + \sum_{l=1}^{2} \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathsf{J}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{\phi,l3}, \tag{193}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{\phi,12} + \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{U,1} + \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{r,\mathbf{R}} + \sum_{l=1}^{2} \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{\phi,l3} + \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}} \end{bmatrix}^{U}. \tag{194}$$

Завдяки наявності внутрішніх джерел, рівняння для $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}_{e^{\rm k}}$ мають *релаксаційний* тип. Вони розширюють набір рівнянь звичайної гідродинаміки, становлячи *перше розширення*, а самі змінні $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}_{e^{\rm k}}$ додаються до набору *розширеного* гідродинамічного опису:

$$\{\, \rho,\ \mathbf{p},\ e^{\rm k};\quad \mathsf{J}_{\mathbf{p}},\ \mathbf{J}_{e^{\rm k}}\,\}. \tag{195}$$

При наступному — другому розширенні — треба записати рівняння переносу для таких потоків та джерел:

$$\{{}_3\mathsf{J}_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}},\ \mathsf{s}_{\mathsf{J}_{\mathbf{p}}},\quad \mathsf{J}_{\mathbf{J}_{e^{\rm k}}},\ \mathbf{s}_{\mathbf{J}_{e^{\rm k}}}\}. \tag{196}$$

Зважаючи на те, що кількість нових змінних і кількість внесків до них поступово зростає, то наступні рівняння ставатимуть щораз громіздкішими. Тим не менше, продовжуючи далі можна отримати ланцюжок рівнянь гідродинамічного типу для вищих потоків і джерел,

що походять від густин збережуваних величин, які описують систему твердих кульок. Цей ланцюжок — аналог того, який передбачено для систем із гладким потенціалом [12].

Нижче в таблиці наведено порівняння одержаних результатів для цих двох потенціалів. Тут зведено дані про рівняння для густин, їхніх потоків і джерел, обмежуючись першим розширення рівнянь звичайної гідродинаміки. У верхній частині подано густини маси, імпульсу і внески до густини енергії. У нижній — внески до потоків імпульсу й енергії. Нижче ми вказуємо на особливості і виявлені розбіжності у вигляді рівнянь переносу для обох типів взаємодії.

Гус-тина	Пот-ціал	Внески в потік $\mathbf{J}_a$				Внески в джерело s_a					
		k	ϕ			r	ϕ			U	
ρ	Гл.п.	1									
$\equiv$	Тв.к.	$\equiv$									
$\mathbf{p}$	Гл.п.	1	12							1	
$\equiv$	Тв.к.	$\equiv$	″							$\equiv$	
$e^{\rm k}$	Гл.п.	1	12				12			1	
$\equiv$	Тв.к.	$\equiv$	″				—			$\equiv$	
$e^{\rm p}$	Гл.п.	1				1;2					
—	Тв.к.	—				—					
e^{U}	Гл.п.	1				1					
$\equiv$	Тв.к.	$\equiv$				$\equiv$					
$\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}$	Гл.п.	1	12				12			1	
$\equiv$	Тв.к.	$\equiv$	″				″			$\equiv$	
$\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$	Гл.п.	12		—	—	$\mathbf{R}$		—	—	—	—
″	Тв.к.	″		13	23	″		13	23	1λ	$2\bar\lambda$
$\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}$	Гл.п.	1	12				12			1	
$\equiv$	Тв.к.	$\equiv$	″				″			$\equiv$	
$\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}$	Гл.п.	12	12	13	—	$\mathbf{R}$		—	—	1λ	—
″	Тв.к.	″	—	″	23	″		13	23	″	$2\bar\lambda$
$\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm p}}$	Гл.п.	1	12	13		1;2		13		1	
—	Тв.к.	—	—	—		—		—		—	

Верхня частина таблиці. Означення всіх густин збережуваних величин (також і внесків) є тотожніми (значок ‘$\equiv$’) для обох взаємодій. Потоки кінетичного типу (k) й джерела від зовнішнього поля (U) теж тотожні, а $\mathbf{J}^{\phi}$ та s^{ϕ}, звісно, різні, так як зумовлені взаємодією. Виняток становить $e^{\rm p}$, яка відсутня для твердих кульок. Рівняння переносу для обох систем одинакові, хоч відрізняються явним виглядом внесків від взаємодії до потоків і джерел. Наявність відповідника для твердих кульок позначено як (″). Відсутність відповідника позначено як ‘—’.

Нижня частина таблиці. Подібну до попереднього поведінку виявляють лише внески кінетичного типу $\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}$ й $\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}$, котрі самі тотожні для обох потенціалів. Внески $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ й $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$ поводяться по-різному. Потік і джерело потоку $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ мають усі внески, які можливо, за винятком ${}_3\mathsf{J}^{\phi,12}_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}}$ що рівне 0, в той час як для гладкого потенціала є лише один внесок в потік і один в джерело.

Просте пояснення полягає в тому, що молекулярні характеристики для різних потенціалів залежать від різних змінних,

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}^2_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}}(\mathbf{R})\Big|_{\text{Гл.пот.}} &= -\tfrac{1}{2}\,\mathbf{R}\hat{R}\,\phi'(R),\\
\tilde{\psi}^2_{\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}}(\mathbf{R},\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2)\Big|_{\text{Тв.к.}} &= -\tfrac{1}{2}\,\mathbf{R}\,t_+(v_{12R},R)\,[b^{12}_{\hat{R}}-1]\,m\mathbf{v}_1,
\end{aligned}$$

і, зрозуміло, усереднюються з різними функціями розподілу — $n_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t)\overset{\text{df}}{=}\int\!\mathrm{d}\mathbf{v}_1\mathrm{d}\mathbf{v}_2 f_2(x_1,x_2,t)$ та $f_2(x_1,x_2,t)$, відповідно.

Для внеску $\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}\big|_{\text{Гл.пот.}}$ ситуація змінюється, порівняно з попереднім потоком $\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}\big|_{\text{Гл.пот.}}$, бо з'являється лінійна залежність молекулярної характеристики від $\mathbf{v}_1$, що зумовлює появу двох додаткових внесків у потік — $\mathsf{J}^{\phi,12}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}\big|_{\text{Гл.пот.}}$ і $\mathsf{J}^{\phi,13}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}\big|_{\text{Гл.пот.}}$. У випадку твердих кульок рівняння для $\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}\big|_{\text{Тв.к.}}$ таке ж, як і для $\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}}\big|_{\text{Тв.к.}}$:

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}^2_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}(\mathbf{R},\mathbf{v}_1)\Big|_{\text{Гл.пот.}} &= -\tfrac{1}{2}\,\mathbf{R}\,\phi'(R)\,\hat{R}\cdot\mathbf{v}_1,\\
\tilde{\psi}^2_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}(\mathbf{R},\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2)\Big|_{\text{Тв.к.}} &= -\tfrac{1}{2}\,\mathbf{R}\,t_+(v_{12R},R)\,[b^{12}_{\hat{R}}-1]\,\tfrac{1}{2}mv_1^2.
\end{aligned}$$

Тут потік для гладкого потенціала визначається через проінтеґрований 2-ч. розподіл $f_{2,\mathbf{v}_2}(x_1,\mathbf{r}_2,t)\overset{\text{df}}{=}\int\!\mathrm{d}\mathbf{v}_2 f_2(x_1,x_2,t)$, а для твердих кульок — через повну функцію $f_2(x_1,x_2,t)$.

Саме згадана лінійна зележність від $\mathbf{v}_1$ вирішально впливає на те, що $\mathbf{s}^{\phi,12}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}\big|_{\text{Гл.пот.}}$ і $\mathbf{s}^{\phi,13}_{\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}}\big|_{\text{Гл.пот.}}$ рівні нулю. Ще для внесків у джерела типу $(r,\mathbf{R})$ і (U,l) для твердих кульок характерно те, що $\nabla_{\mathbf{R}}$ і ∂_l діючи на комбінацію $T_+\psi_1$, творять громіздкі вирази, яких нема у випадку гладкого потенціала.

$\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{p}}}$ відсутній для твердих кульок, як і сама e^{p}.

Хоч між твердими кульками нема *сил взаємодії* — тому нема взаємного перетворення між e^{k} й e^{p}, однак умова неперекриття і миттєвий характер відштовхування зумовлюють складнішу залежність молекулярних характеристик для $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$ від швидкостей, ніж це є для системи з диференційовним потенціалом. І як наслідок — гідродинамічні рівняння першого розширення для внесків від взаємодії до потоків, а отже і для повних потоків $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}$, є складніші. Це виглядає досить парадоксально, бо якщо уявити собі граничний перехід від гладкого потенціала взаємодії з поступовим виключенням притягальної частини і одночасним "ожорстчуванням" відштовхувальної аж до нескінченно високої стінки твердих кульок, то рівняння для ρ, $\mathbf{p}$ і e *переходять* у відповідні для твердих кульок, а рівняння для потоків $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}$ — *ні.* Внески у ці рівняння, яких нема у гладкого потенціала, так і не з'являться при переході. Це може означати, що сам граничний перехід є або особливим, або неправомірним — у всякому разі потребує додаткового теоретичного розгляду, якщо взагалі це питання про граничний перехід є важливим.

На наш погляд, тенденція появи нових внесків, відсутніх у випадку гладкого потенціала, розвиватиметься і далі на наступних рівнях опису, створюючи ще більші ускладнення для молекулярних характеристик вищих потоків та джерел.

7. Перехід до ляґранжевого опису

Дотепер розгляд вівся у нерухомій системі відліку. Такий спосіб опису називається описом Ейлера або *просторовим* [13, 14], оскільки величини стосуються даної точки простору (макроскопічно малого об'єму навколо неї).

Якщо величини, що характеризують систему у даній точці $\mathbf{r}$ в момент часу t, розглядати у системі відліку, яка рухається з гідродинамічною швидкістю[3] макроскопічно малого елемента рідини чи газу навколо цієї точки,

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}_1,t)\overset{\text{df}}{=}\mathbf{p}(\mathbf{r}_1,t)/\rho(\mathbf{r}_1,t), \tag{197}$$

то ми перейдемо до альтернативного способу опису — опису Ляґранжа [13, 14]. Його ще називають *матеріальним* (або субстанціональним), бо величини стосуються макроскопічно малого об'єму матерії.

За допомогою підстановки

$$\mathbf{v}_i=\mathbf{V}(\mathbf{r}_1,t)+\mathbf{c}_i, \tag{198}$$

[3] Інша назва — масова швидкість.

$\mathbf{c}_i$ — швидкості частинок в локальній системі координат, в означення величини a, молекулярна характеристика якої залежить від швидкостей, ми подамо її як суму конвективного $a^{\rm conv}$ та властиво молекулярного $a^{\rm mol}$ внесків з подальшим виключенням внесків від конвективного регулярного руху. Рівняння переносу для внесків $a^{\rm mol}$ від хаотичного молекулярного (теплового) руху частинок і становлять опис Ляґранжа. Щоб здійснити цей перехід, треба послідовно виключити з рівнянь переносу внески, пов'язані з конвективним рухом.

Дотримуючись тієї ж схеми, що й раніше [12], ми спочатку подамо густини ρ, $\mathbf{p}$, $e^{\rm k}$ та потоки $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}_{e^{\rm k}}$ у вигляді сум конвективних і властиво молекулярних внесків, а потім перейдемо до ляґранжевого опису в їхніх рівняннях переносу.

7.1. Перехід у гідродинамічних величинах

Молекулярна характеристика густини маси $\rho(\mathbf{r}_1,t)=\langle m\rangle^1_{\mathbf{v}_1}$ не залежить від швидкости і тому не зазнає перетворень.

Замість густини імпульсу $\mathbf{p}(\mathbf{r}_1,t)=\langle m\mathbf{v}_1\rangle^1_{\mathbf{v}_1}$ дуже часто в ролі альтернативної змінної розглядають гідродинамічну швидкість $\mathbf{V}(\mathbf{r}_1,t)$, введену раніше (197).

Густина кінетичної енергії та потоки. Для густини енергії $e^{\rm k}$ і потоків $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$ та $\mathbf{J}_{e^{\rm k}}$, вводимо нові позначення для внеску типу $a^{\rm mol}$: $\varepsilon^{\rm k}$, P та $\mathbf{q}$ відповідно. Використовуючи підстановку (198) в означеннях величин $e^{\rm k}$ і $\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}$, отримаємо [12]:

$$e^{\rm k}=\tfrac12\rho V^2+\varepsilon^{\rm k}, \qquad \varepsilon^{\rm k}\stackrel{\rm df}{=}\langle\tfrac12 mc_1^2\rangle^1_{\mathbf{c}_1}, \tag{199}$$

$$\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}=\rho\mathbf{V}\mathbf{V}+\mathsf{P}^{\rm k}, \qquad \mathsf{P}^{\rm k}\stackrel{\rm df}{=}\langle m\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1\rangle^1_{\mathbf{c}_1}. \tag{200}$$

$\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ можемо записати так:

$$\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}=\langle-\tfrac12\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R})\,m\mathbf{c}_1\rangle^2_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}\equiv\mathsf{P}^{\phi},$$

де оператор T_+ діє вже на функції швидкостей в локальній рухомій системі відліку. (Правила його дії та сам вигляд у локальній системі відліку можна отримати, замінивши $\mathbf{v}_i$ на $\mathbf{c}_i$.) Тоді

$$\mathsf{J}_{\mathbf{p}}=\rho\mathbf{V}\mathbf{V}+\mathsf{P}, \qquad \mathsf{P}\equiv\mathsf{P}^{\rm k+\phi}, \tag{201}$$

де P — тензор напружень.

Подібно дiємо із внесками до потоку енергії $\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}$ і $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}$:

$$\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}} = \mathbf{J}^{\rm k,conv}_{e^{\rm k}}+\mathbf{J}^{\rm k,cm}_{e^{\rm k}}+\mathbf{J}^{\rm k,mol}_{e^{\rm k}} \equiv e^{\rm k}\mathbf{V}+\mathsf{P}^{\rm k}\cdot\mathbf{V}+\mathbf{q}^{\rm k}, \tag{202}$$

$$\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}} = \mathbf{J}^{\phi,\rm cm}_{e^{\rm k}}+\mathbf{J}^{\phi,\rm mol}_{e^{\rm k}} \equiv \mathsf{P}^{\phi}\cdot\mathbf{V}+\mathbf{q}^{\phi}, \tag{203}$$

де внески в потік тепла $\mathbf{q}$:

$$\mathbf{q}^{\rm k} \stackrel{\rm df}{=} \langle\tfrac12 mc_1^2\mathbf{c}_1\rangle^1_{\mathbf{c}_1}, \tag{204}$$

$$\mathbf{q}^{\phi} \stackrel{\rm df}{=} \langle-\tfrac12\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R})\,mc_1^2\,\rangle^2_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}. \tag{205}$$

У виразах для $\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}$ та $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\rm k}}$ присутні "перехресні" конвективно-молекулярні внески (верхній індекс "cm") $\mathsf{P}^{\rm k}\cdot\mathbf{V}$ і $\mathsf{P}^{\phi}\cdot\mathbf{V}$, які теж треба виключати при переході до ляґранжевого опису. Додавши праві частини виразів (202), (203) отримаємо для потоку енергії:

$$\mathbf{J}_{e^{\rm k}}=\mathbf{V}e^{\rm k}+\mathsf{P}\cdot\mathbf{V}+\mathbf{q}, \tag{206}$$

де $\mathbf{q}\equiv\mathbf{q}^{\rm k}+\mathbf{q}^{\phi}$ — повний потік тепла.

Отже, від рівнянь переносу для набору $\{\rho,\ \mathbf{p},\ e^{\rm k},\ \mathsf{J}_{\mathbf{p}},\ \mathbf{J}_{e^{\rm k}}\}$, які отримано раніше, ми повинні перейти до рівнянь для набору

$$\{\,\rho,\mathbf{V},\varepsilon,\mathsf{P},\mathbf{q}\,\}. \tag{207}$$

Потоки і джерела потоків. Властиво молекулярні внески до потоків величин $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}_{e^{\rm k}}$ позначатимемо ${}_3\mathsf{R}$ і Q відповідно.

Спочатку розгляньмо внески у потоки і джерела для кінетичних внесків $\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}$, а потім — для внесків від взаємодії. Підставляючи (198) у вирази (180)–(182) для внесків до потоків та джерел цих величин, записуємо їх через змінні опису Ляґранжа:

$$\mathsf{J}^{\rm k,1}_{[\,\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}\,]} = \begin{bmatrix}\rho\mathbf{V}\mathbf{V}\mathbf{V}+\mathbf{V}\mathsf{P}^{\rm k}+\mathsf{P}^{\rm k}_{13}\mathbf{V}+\mathsf{P}^{\rm k}\mathbf{V}+{}_3\mathsf{R}^{\rm k}_{\rm k}\\ \mathbf{V}\mathbf{V}(\frac{\rho}{2}V^2+\varepsilon^{\rm k})+\mathbf{V}\mathsf{P}^{\rm k}\cdot\mathbf{V}+\mathsf{P}^{\rm k}\cdot\mathbf{V}\mathbf{V}\end{bmatrix}+ \tag{208}$$

$$+\begin{bmatrix}0\\ \frac{V^2}{2}\mathsf{P}^{\rm k}+\mathbf{V}\mathbf{q}^{\rm k}+\mathbf{q}^{\rm k}\mathbf{V}+{}_3\mathsf{R}^{\rm k}_{\rm k}\cdot\mathbf{V}+\mathsf{Q}^{\rm k}_{\rm k}\end{bmatrix},$$

$$\mathsf{J}^{\phi,12}_{[\,\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}\,]} = \begin{bmatrix}\mathsf{P}^{\phi}_{13}\mathbf{V}+\mathsf{P}^{\phi}\mathbf{V}+{}_3\mathsf{R}^{\phi}_{\rm k}\\ \mathsf{P}^{\phi}\cdot\mathbf{V}\mathbf{V}+\frac{V^2}{2}\mathsf{P}^{\phi}+\mathbf{q}^{\phi}\mathbf{V}+{}_3\mathsf{R}^{\phi}_{\rm k}\cdot\mathbf{V}+\mathsf{Q}^{\phi}_{\rm k}\end{bmatrix}, \tag{209}$$

$$\mathsf{s}^{\phi,12}_{[\,\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}\,]} = \begin{bmatrix}\mathsf{s}^{\phi,12}_{\mathsf{P}^{\rm k}}\\ \mathsf{s}^{\phi,12}_{\mathsf{P}^{\rm k}}\cdot\mathbf{V}+\mathbf{s}^{\phi,12}_{\mathbf{q}^{\rm k}}\end{bmatrix}, \tag{210}$$

$$\mathsf{s}^{U}_{[\,\mathsf{J}^{\rm k}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\rm k}_{e^{\rm k}}\,]} = \begin{bmatrix}\mathbf{F}^U_1\rho\mathbf{V}+\rho\mathbf{V}\mathbf{F}^U_1\\ (\frac{\rho}{2}V^2+\varepsilon^{\rm k})\mathbf{F}^U_1+(\rho\mathbf{V}\mathbf{V}+\mathsf{P}^{\rm k})\cdot\mathbf{F}^U_1\end{bmatrix}. \tag{211}$$

У перших двох виразах першими записано суто конвективні внески, останніми — властиво молекулярні.

Тут кількість перехресних конвективно-молекулярних внесків збільшилася порівняно зі, скажімо, потоком енергії $\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}$. Математично це пов'язано зі зростанням степеня $\mathbf{v}_1$ у молекулярних характеристиках і зростанням тензорної розмірности вищих потоків. З точки зору макроскопічної теорії неперервного середовища це би мало означати, що вищі потоки мають більше "зв'язкових процесів" перетворення регулярного конвективного руху в хаотичний властиво молекулярний. Через ці процеси відбувається згасання вищих потоків на швидкому етапі еволюції, аж поки вони не згаснуть настільки, що пропаде необхідність долучати їх в якості незалежних до набору змінних опису.

Явні вирази для внесків ${}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}}_{\mathrm{k}}$, ${}_3\mathsf{R}^{\phi}_{\mathrm{k}}$, $\mathsf{Q}^{\mathrm{k}}_{\mathrm{k}}$ і $\mathsf{Q}^{\phi}_{\mathrm{k}}$ до потоків та внесків $\mathsf{s}^{\phi,12}_{\mathsf{P}^{\mathrm{k}}}$ і $\mathbf{s}^{\phi,12}_{\mathbf{q}^{\mathrm{k}}}$ до джерел подано нижче, (219)–(223), після розгляду подібних виразів для $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$. Деякі доданки у виразах (208) і (209) можна об'єднати. Додавши їх, одержимо:

$$\mathsf{J}^{\mathrm{k},1+\phi,12}_{[\,\mathsf{J}^{\mathrm{k}}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\mathrm{k}}_{e^{\mathrm{k}}}]} = \begin{bmatrix} \rho\mathbf{VVV} + \mathbf{V}\mathsf{P}^{\mathrm{k}} + \mathsf{P}_{13}\mathbf{V} + \mathsf{P}\mathbf{V} + {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}+\phi}_{\mathrm{k}} \\ \mathbf{VV}e^{\mathrm{k}} + \mathbf{V}\mathsf{P}^{\mathrm{k}}\!\cdot\!\mathbf{V} + \mathsf{P}\!\cdot\!\mathbf{VV} + \frac{V^2}{2}\mathsf{P} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{V}\mathbf{q}^{\mathrm{k}} + \mathbf{q}^{\mathrm{k}+\phi}\mathbf{V} + {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}+\phi}_{\mathrm{k}}\!\cdot\!\mathbf{V} + \mathsf{Q}^{\mathrm{k}+\phi}_{\mathrm{k}} \end{bmatrix}, \tag{212}$$

де, очевидно, ${}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}+\phi}_{\mathrm{k}} \equiv {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}}_{\mathrm{k}} + {}_3\mathsf{R}^{\phi}_{\mathrm{k}}$, $\mathsf{Q}^{\mathrm{k}+\phi}_{\mathrm{k}} \equiv \mathsf{Q}^{\mathrm{k}}_{\mathrm{k}} + \mathsf{Q}^{\phi}_{\mathrm{k}}$.

Подібним чином проводимо перетворення потоків та джерел для внесків $\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}}$ і $\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}$. За допомогою підстановки (198) вирази (185)–(189) запишуться так:

$$\mathsf{J}^{\mathrm{k},12}_{[\,\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}]} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}\mathsf{P}^{\phi} + {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}}_{\phi} \\ \mathbf{V}\mathsf{P}^{\phi}\!\cdot\!\mathbf{V} + \mathbf{V}\mathbf{q}^{\phi} + {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}}_{\phi}\!\cdot\!\mathbf{V} + \mathsf{Q}^{\mathrm{k}}_{\phi} \end{bmatrix}, \tag{213}$$

$$\mathsf{J}^{\phi,l3}_{[\,\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}]} = \begin{bmatrix} {}_3\mathsf{R}^{\phi,l3}_{\phi} \\ {}_3\mathsf{R}^{\phi,l3}_{\phi}\!\cdot\!\mathbf{V} + \mathsf{Q}^{\phi,l3}_{\phi} \end{bmatrix}, \tag{214}$$

$$\mathsf{s}^{r,\mathbf{R}}_{[\,\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}]} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\mathsf{P}^{\phi}} \\ \mathsf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\mathsf{P}^{\phi}}\!\cdot\mathbf{V} + \mathbf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\mathbf{q}^{\phi}} \end{bmatrix}, \tag{215}$$

$$\mathsf{s}^{\phi,l3}_{[\,\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}]} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}^{\phi,l3}_{\mathsf{P}^{\phi}} \\ \mathsf{s}^{\phi,l3}_{\mathsf{P}^{\phi}}\!\cdot\mathbf{V} + \mathbf{s}^{\phi,l3}_{\mathbf{q}^{\phi}} \end{bmatrix}, \tag{216}$$

$$\mathsf{s}^{U,1\lambda+2\bar{\lambda}}_{[\,\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}]} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}^{U(1+2)}_{\mathsf{P}^{\phi}} \\ \mathsf{P}^{\phi}\!\cdot\mathbf{F}^{U}_{1} + \mathbf{s}^{U(0)\Delta\mathbf{F}}_{\mathbf{q}^{\phi}} + \mathsf{s}^{U(1+2)}_{\mathsf{P}^{\phi}}\!\cdot\mathbf{V} + \mathbf{s}^{U(1+2)}_{\mathbf{q}^{\phi}} \end{bmatrix}. \tag{217}$$

Тут кількість перехресних внесків помітно менша з попереднім випадком. Для суми внесків (213) і (214) до потоків маємо:

$$\mathsf{J}^{\mathrm{k},12+\phi,13+\phi,23}_{[\,\mathsf{J}^{\phi}_{\mathbf{p}},\,\mathbf{J}^{\phi}_{e^{\mathrm{k}}}]} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}\mathsf{P}^{\phi} + {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}+\phi}_{\phi} \\ \mathbf{V}\mathsf{P}^{\phi}\!\cdot\!\mathbf{V} + \mathbf{V}\mathbf{q}^{\phi} + {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}+\phi}_{\phi}\!\cdot\!\mathbf{V} + \mathsf{Q}^{\mathrm{k}+\phi}_{\phi} \end{bmatrix}, \tag{218}$$

де ${}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}+\phi}_{\phi} \equiv {}_3\mathsf{R}^{\mathrm{k}}_{\phi} + {}_3\mathsf{R}^{\phi,13}_{\phi} + {}_3\mathsf{R}^{\phi,23}_{\phi}$, $\mathsf{Q}^{\mathrm{k}+\phi}_{\phi} \equiv \mathsf{Q}^{\mathrm{k}}_{\phi} + \mathsf{Q}^{\phi,13}_{\phi} + \mathsf{Q}^{\phi,23}_{\phi}$.

Наведімо у явному вигляді вирази для внесків до ${}_3\mathsf{R}$ і Q, а також до відповідних джерел:

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{R} \\ \mathsf{Q} \end{bmatrix}^{\mathrm{k}}_{\mathrm{k}} \overset{\mathrm{df}}{=} \Big\langle \begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1 \\ \frac{1}{2}mc_1^2\mathbf{c}_1 \end{bmatrix} \mathbf{c}_1 \Big\rangle^{1}_{\mathbf{c}_1}, \tag{219}$$

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{R} \\ \mathsf{Q} \end{bmatrix}^{\phi}_{\mathrm{k}} \overset{\mathrm{df}}{=} \Big\langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1 \\ \frac{1}{2}mc_1^2\mathbf{c}_1 \end{bmatrix} \Big\rangle^{2}_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}, \tag{220}$$

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{R} \\ \mathsf{Q} \end{bmatrix}^{\mathrm{k}}_{\phi} \overset{\mathrm{df}}{=} \Big\langle -\tfrac{1}{2}(\mathbf{c}_1 + \lambda\mathbf{c}_{21})\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1 \\ \frac{1}{2}mc_1^2 \end{bmatrix} \Big\rangle^{2}_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}, \tag{221}$$

$$\begin{bmatrix} {}_3\mathsf{R} \\ \mathsf{Q} \end{bmatrix}^{\phi,l3}_{\phi} \overset{\mathrm{df}}{=} \Big\langle \tfrac{\mathbf{R}_1\mathbf{R}}{4}\,T_+(l3;\mathbf{R}_1)T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1 \\ \frac{m}{2}c_1^2 \end{bmatrix} \Big\rangle^{3}_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}\mathbf{c}_3(\mathbf{R}_1\lambda_1)_{l3}}, \tag{222}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{P}^{\mathrm{k}}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{q}^{\mathrm{k}}} \end{bmatrix}^{\phi} \overset{\mathrm{df}}{=} \Big\langle \tfrac{1}{2}\,T_+(12) \begin{bmatrix} m(\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2\mathbf{c}_2) \\ \frac{1}{2}m(c_1^2\mathbf{c}_1 + c_2^2\mathbf{c}_2) \end{bmatrix} \Big\rangle^{2}_{\mathbf{c}_1 x_2}, \tag{223}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{P}^{\phi}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{q}^{\phi}} \end{bmatrix}^{r,\mathbf{R}} \overset{\mathrm{df}}{=}\; & \Big\langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{u}_{\mathbf{R}}\,T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1 \\ \frac{m}{2}c_1^2 \end{bmatrix} - \\ & - \tfrac{1}{2}\mathbf{u}_{\mathbf{R}}\cdot\Big\{\big[t^{v}_{+}(\mathbf{c}_{12} - c_{12R}\hat{R})\hat{R} + t^{R}_{+}\hat{R}\,\mathbf{R}\big](b^{12}_{\hat{R}} - 1)\begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1 \\ \frac{m}{2}c_1^2 \end{bmatrix} - \\ & - t_+\tfrac{m}{R}\big(\mathsf{I}_{13}\mathbf{R}c_{12R} + \mathbf{c}_{12}\mathbf{R}\hat{R} - 2\hat{R}\mathbf{R}\hat{R}c_{12R}\big)\begin{bmatrix} 1 \\ \cdot\,\mathbf{c}'_1 \end{bmatrix}\Big\}\Big\rangle^{2}_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}}, \end{aligned} \tag{224}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{P}^{\phi}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{q}^{\phi}} \end{bmatrix}^{\phi,l3} \overset{\mathrm{df}}{=} \Big\langle -\tfrac{1}{4}T_+(l3)\big[1 + \mathcal{P}_{\mathbf{c}_l\mathbf{c}_3}\big]\mathbf{R}\,T_+(12;\mathbf{R}) \begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1 \\ \frac{m}{2}c_1^2 \end{bmatrix} \Big\rangle^{3}_{(\mathbf{cR}\lambda)_{12}x_3}, \tag{225}$$

$$\begin{bmatrix} \mathsf{s}_{\mathsf{P}^{\phi}} \\ \mathbf{s}_{\mathbf{q}^{\phi}} \end{bmatrix}^{U(1+2)} \overset{\mathrm{df}}{=} \Big\langle -\tfrac{1}{2}\mathbf{R}(\mathbf{F}^{U}_{1\lambda} - \mathbf{F}^{U}_{2\bar{\lambda}})\cdot\hat{R}\,\times \tag{226}$$

$$\times \left\{ t_+^v\,(b_{\hat R}^{12}-1)\begin{bmatrix} m\mathbf{c}_1\\ \frac12 mc_1^2\end{bmatrix} - t_+ m\,\hat R\begin{bmatrix}1\\ \cdot\,\mathbf{c}_1'\end{bmatrix}\right\}\rangle^2_{(\mathbf{c}\mathbf{R}\lambda)_{12}},$$

$$\mathsf{s}_{\mathbf{q}^\phi}^{U(0)\Delta\mathbf{F}} \overset{\text{df}}{=} \langle -\tfrac12\mathbf{R}(\mathbf{F}^U_{1\lambda}-\mathbf{F}_1)\cdot T_+(12;\mathbf{R})\, m\mathbf{c}_1\rangle^2_{(\mathbf{c}\mathbf{R}\lambda)_{12}}. \qquad (227)$$

Внески в потоки ${}_3\mathsf{R}$ та ${}_3\mathsf{Q}$ і джерело $\mathsf{s}_{\mathbf{q}^\phi}$ *повторюють* своїх відповідників у нерухомій системі відліку, якщо в останніх зробити заміну $\mathbf{v}_i \to \mathbf{c}_i$. Внески усіх типув у джерела $\mathsf{s}_{\mathsf{P}^\mathrm{k}}$, $\mathsf{s}_{\mathsf{P}^\phi}$ та внесок ${}_3\mathsf{R}_\phi^{\phi,l3}$ *рівні* відповідним внескам опису Ейлера. Отримуючи вирази для джерел (223) ми скористалися законами збереження у формі (108). Внески $\mathsf{s}^U_{\mathsf{J}^\mathrm{k}_\mathbf{p}}$ і $\mathsf{s}^U_{\mathbf{J}^\mathrm{k}_{e^\mathrm{k}}}$ було виражено через інші змінні.

Вирази для повних потоків і джерел величин $\mathsf{J}_\mathbf{p}$, $\mathbf{J}_{e^\mathrm{k}}$, які наводяться нижче, містять певним чином симетризовані тензори. Для компактности ми вводимо потрібні позначення. Операцію транспонування тензора позначатимемо значком †. Будемо розрізняти транспонування тензора k-го ранґу ${}_k\mathsf{D} \equiv D_{\alpha\beta\ldots\zeta\eta}$ справа ${}_k\mathsf{D}^\dagger$ і зліва ${}^\dagger_k\mathsf{D}$:

$${}_k\mathsf{D}^\dagger \overset{\text{df}}{=} D_{\eta\alpha\beta\ldots\zeta}, \qquad {}^\dagger_k\mathsf{D} \overset{\text{df}}{=} D_{\beta\ldots\zeta\eta\alpha}.$$

Для тензора 2-го ранґу B використовують тільки перший варіант, оскільки ${}^\dagger\mathsf{B} = \mathsf{B}^\dagger$. Також очевидно, що для тензора 3-го ранґу ${}_3\mathsf{T}$ мають місце рівності: ${}^\dagger_3\mathsf{T} = {}_3\mathsf{T}^{\dagger\dagger}$ та ${}^{\dagger\dagger}_3\mathsf{T} = {}_3\mathsf{T}^\dagger$. Повністю симетризовані тензори 2-го і 3-го ранґів позначатимемо значками ‡ і †3, відповідно:

$$\mathsf{B}^\ddagger \overset{\text{df}}{=} \tfrac12[\mathsf{B}+\mathsf{B}^\dagger], \qquad {}_3\mathsf{T}^{\dagger 3} \overset{\text{df}}{=} \tfrac13[{}_3\mathsf{T} + {}_3\mathsf{T}^\dagger + {}^\dagger_3\mathsf{T}].$$

У цих позначеннях суми усіх внесків до потоків і до джерел запишемо так:

$$\mathsf{J}_{[\,\mathsf{J}_\mathbf{p},\,\mathbf{J}_{e^\mathrm{k}}\,]} = \begin{bmatrix} \rho\mathbf{VVV} + 3(\mathbf{V}\mathsf{P})^{\dagger 3} + {}_3\mathsf{R} \\ \mathbf{VV}e^\mathrm{k} + \frac{V^2}{2}\mathsf{P} + 2\mathbf{V}\mathbf{P}^\ddagger_\mathbf{V} + 2\mathbf{V}\mathbf{q}^\ddagger + {}_3\mathsf{R}\cdot\mathbf{V} + \mathsf{Q}\end{bmatrix}, \quad (228)$$

$$\mathsf{s}_{[\,\mathsf{J}_\mathbf{p},\,\mathbf{J}_{e^\mathrm{k}}\,]} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}_\mathsf{P} + 2\rho(\mathbf{V}\mathbf{F}_1^U)^\ddagger \\ \mathsf{s}_\mathbf{q} + \mathsf{s}_\mathsf{P}\cdot\mathbf{V} + e^\mathrm{k}\mathbf{F}_1^U + \mathsf{J}_\mathbf{p}\cdot\mathbf{F}_1^U\end{bmatrix}. \qquad (229)$$

$\mathbf{P}_\mathbf{V} \equiv \mathsf{P}\cdot\mathbf{V}$, тензор $3(\mathbf{V}\mathsf{P})^{\dagger 3}$ згідно введених означень дорівнює $\mathbf{V}\mathsf{P} + \mathsf{P}_{13}\mathbf{V} + \mathsf{P}\mathbf{V}$, а ${}_3\mathsf{R} \equiv {}_3\mathsf{R}_\phi^{\mathrm{k}+\phi} + {}_3\mathsf{R}_\mathrm{k}^{\mathrm{k}+\phi}$, $\mathsf{Q} \equiv \mathsf{Q}_\phi^{\mathrm{k}+\phi} + \mathsf{Q}_\mathrm{k}^{\mathrm{k}+\phi}$ або явніше:

$$\begin{bmatrix}{}_3\mathsf{R}\\ \mathsf{Q}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}{}_3\mathsf{R}\\ \mathsf{Q}\end{bmatrix}^\mathrm{k}_\mathrm{k} + \begin{bmatrix}{}_3\mathsf{R}\\ \mathsf{Q}\end{bmatrix}^\phi_\mathrm{k} + \begin{bmatrix}{}_3\mathsf{R}\\ \mathsf{Q}\end{bmatrix}^\mathrm{k}_\phi + \begin{bmatrix}{}_3\mathsf{R}\\ \mathsf{Q}\end{bmatrix}^{\phi,13}_\phi + \begin{bmatrix}{}_3\mathsf{R}\\ \mathsf{Q}\end{bmatrix}^{\phi,23}_\phi. \qquad (230)$$

Властиво молекулярні джерела s_P і $\mathsf{s}_\mathbf{q}$ складаються з:

$$\begin{bmatrix}\mathsf{s}_\mathsf{P}\\ \mathsf{s}_\mathbf{q}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{s}^{\phi,12}_{\mathsf{P}^\mathrm{k}} + \mathsf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\mathsf{P}^\phi} + \mathsf{s}^{\phi,13}_{\mathsf{P}^\phi} + \mathsf{s}^{\phi,23}_{\mathsf{P}^\phi} + \mathsf{s}^{U(1+2)}_{\mathsf{P}^\phi} \\ \mathsf{s}^{\phi,12}_{\mathbf{q}^\mathrm{k}} + \mathsf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\mathbf{q}^\phi} + \mathsf{s}^{\phi,13}_{\mathbf{q}^\phi} + \mathsf{s}^{\phi,23}_{\mathbf{q}^\phi} + \mathsf{s}^{U(1+2)}_{\mathbf{q}^\phi} + \mathsf{s}^{U(0)\Delta\mathbf{F}}_{\mathbf{q}^\phi}\end{bmatrix}. \qquad (231)$$

7.2. Перетворення рівнянь переносу

Рівняння для густин збережуваних величин. Рівняння переносу для ρ записане через змінні (207) набуває вигляду:

$$\partial_t\rho + \nabla\cdot(\mathbf{V}\rho) = 0. \qquad (232)$$

Рівняння для $\mathbf{V}$ отримується з рівняння переносу для $\mathbf{p}$, використовуючи попереднє (232):

$$\partial_t\mathbf{V} = -\mathbf{V}\cdot\nabla\mathbf{V} - \rho^{-1}\nabla\cdot\mathsf{P} + \mathbf{F}^U. \qquad (233)$$

Зауважмо[4] у правій частині крім $\nabla\mathbf{V}$ ще й $\nabla\cdot\mathsf{P}$. Цей другий ґрадієнт, відсутній у рівнянні для густини внутрішньої енергії (236), з'являється у рівняннях опису Ляґранжа для конвективних потоків і для $\mathbf{q}$.

Для конвективного внеску $e^\mathrm{conv} = \frac12\rho V^2 = \frac12\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{V}$ знаходимо:

$$\partial_t e^\mathrm{conv} + \nabla\cdot(\mathbf{V}e^\mathrm{conv}) = -\mathbf{V}\nabla{:}\mathsf{P} + \rho\mathbf{V}\cdot\mathbf{F}^U. \qquad (235)$$

Тоді віднявши його від рівняння для e^k, у якому здійснено підстановку (198), одержимо для густини внутрішньої енергії:

$$\partial_t\varepsilon^\mathrm{k} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\varepsilon^\mathrm{k} + \mathbf{q}) = -\mathsf{P}{:}\,[\nabla\mathbf{V}]^\dagger. \qquad (236)$$

Права частина описує незбережуваність густини ε^k завдяки процесам внутрішнього тертя, які мають місце при $\nabla\mathbf{V} \neq 0$. Відзначмо, що у (236) нема внесків від зовнішнього поля. Внутрішня енергія складається лише з кінетичної, тому тут можна ввести для неї інтенсивний параметр — локальну (кінетичну) температуру T^k:

$$\varepsilon^\mathrm{k}(\mathbf{r}_1,t) \overset{\text{df}}{=} \tfrac{d}{2}\,n(\mathbf{r}_1,t)\,\theta^\mathrm{k}(\mathbf{r}_1,t), \qquad \theta^\mathrm{k}(\mathbf{r}_1,t) \equiv k_\text{Б}T^\mathrm{k}(\mathbf{r}_1,t)$$

де d — вимірність простору, $\theta^\mathrm{k}(\mathbf{r}_1,t)$ — температура в енергетичних одиницях. θ^k так само пов'язано з ε^k, як $\mathbf{V}$ з $\mathbf{p}$, тому й рівняння для θ^k виходить дещо подібне[5] до (233):

$$\partial_t\theta^k = -\mathbf{V}\cdot\nabla\theta^k - \tfrac{2}{d}\,n^{-1}\nabla\cdot\mathbf{q} - \tfrac{2}{d}\,n^{-1}\mathsf{P}{:}\,[\nabla\mathbf{V}]^\dagger. \qquad (239)$$

[4] Рівняння (233) можна записати по-іншому [12], ввівши $\nabla\cdot(\mathbf{VV})$ для $\mathbf{V}$:

$$\partial_t\mathbf{V} + \nabla\cdot(\mathbf{VV}) = \mathbf{V}\nabla\cdot\mathbf{V} - \rho^{-1}\nabla\cdot\mathsf{P} + \mathbf{F}^U. \qquad (234)$$

Однак сама гідродинамічна швидкість не є густиною адитивної величини і тому ця форма виглядає "підігнаною під загальну схему".

[5] Аналогічно до (234), є альтернативні вигляди рівняння (239):

$$\partial_t\theta^k + \nabla\cdot(\tfrac{2}{d}\mathbf{q}/n) = -\mathbf{V}\cdot\nabla\theta^k - \tfrac{2}{d}\,\mathbf{q}\cdot\nabla n^{-1} - \tfrac{2}{d}\,n^{-1}\mathsf{P}{:}\,[\nabla\mathbf{V}]^\dagger, \qquad (237)$$

$$\partial_t\theta^k + \nabla\cdot(\mathbf{V}\theta^k) = \theta^k\nabla\cdot\mathbf{V} - \tfrac{2}{d}\,n^{-1}\nabla\cdot\mathbf{q} - \tfrac{2}{d}\,n^{-1}\mathsf{P}{:}\,[\nabla\mathbf{V}]^\dagger \qquad (238)$$

зі суто молекулярним (237) і конвективним (238) "потоками температури".

Рівняння (232), (233) і (236) для ρ, $\mathbf{V}$ і ε утворюють гідродинамічний опис системи твердих кульок в підході Лягранжа з явними внесками у P і $\mathbf{q}$, поданими раніше.

Рівняння для тензора напружень P. Рівняння для потоків, одержані в § 6, перетворюються подібно. Для конвективного внеску $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\mathrm{conv}} \equiv \rho\mathbf{V}\mathbf{V}$ у потік імпульсу отримуємо з попередніх рівнянь (для $\mathbf{p}$ та $\mathbf{V}$):

$$\partial_t \mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\mathrm{conv}} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\mathrm{conv}}) = -2[\mathbf{V}\nabla\cdot\mathsf{P}]^{\ddagger} + 2[\rho\mathbf{V}\mathbf{F}_1^U]^{\ddagger}. \tag{240}$$

(Якщо рівняння (240) домножити скалярно на $:\frac{1}{2}\mathsf{I}$, то отримаємо рівняння переносу (235) для e^{conv}.)

Віднявши (240) від рівняння для $\mathsf{J}_{\mathbf{p}}$, у якому зроблено підстановку (198), здобудемо рівняння переносу для тензора напружень:

$$\partial_t \mathsf{P} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathsf{P} + {}_3\mathsf{R}) = \mathsf{s}_{\mathsf{P}} - 2[\mathsf{P}^{\dagger}\cdot\nabla\mathbf{V}]^{\ddagger}. \tag{241}$$

Тут $\mathbf{V}\mathsf{P} \equiv {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{P}}^{\mathrm{conv}}$, ${}_3\mathsf{R} \equiv {}_3\mathsf{J}_{\mathsf{P}}^{\mathrm{mol}}$ — конвективний і тепловий внески до потоку тензора напружень, а другий доданок правої частини являє собою конвективно-молекулярний внесок у джерело, зумовлений просторовою неоднорідністю гідродинамічної швидкости. Джерело s_{P} має внесок від зовнішнього поля, на противагу випадку гладкого потенціала.

Рівняння для потоку тепла $\mathbf{q}$. Запишімо спочатку рівняння переносу для внесків $\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}^{\mathrm{conv}} = \mathbf{V}e^{\mathrm{k}}$ та $\mathbf{P}_{\mathbf{V}} \equiv \mathsf{P}\cdot\mathbf{V}$, які виводяться з рівнянь для $\mathbf{V}$ й e^{k} та зі щойно одержаного рівняння (241) для P. Можна отримати:

$$\begin{aligned}\partial_t \mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}^{\mathrm{conv}} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathbf{J}_{e^{\mathrm{k}}}^{\mathrm{conv}}) &= -\mathbf{V}\nabla\cdot[\mathbf{P}_{\mathbf{V}} + \mathbf{q}] - (e^{\mathrm{k}}/\rho)\nabla\cdot\mathsf{P} + \\ &+ e^{\mathrm{k}}\mathbf{F}_1^U + \mathsf{J}_{\mathbf{p}}^{\mathrm{conv}}\cdot\mathbf{F}_1^U, \qquad (242)\\ \partial_t \mathbf{P}_{\mathbf{V}} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathbf{P}_{\mathbf{V}}) &= \mathsf{s}_{\mathsf{P}}\cdot\mathbf{V} - \left(\nabla\cdot{}_3\mathsf{R} + 2[\mathsf{P}^{\dagger}\cdot\nabla\mathbf{V}]^{\ddagger}\right)\cdot\mathbf{V} - \\ &- \rho^{-1}\mathsf{P}\nabla:\mathsf{P} + \mathsf{P}\cdot\mathbf{F}_1^U. \qquad (243)\end{aligned}$$

Віднявши їх від рівняння переносу для $\mathbf{J}_e$, у якому здійснено підстановку (198), одержуємо рівняння[6] для теплового потоку $\mathbf{q}$:

$$\partial_t\mathbf{q} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathbf{q} + \mathsf{Q}) = \mathbf{s}_{\mathbf{q}} - \left[\mathsf{I}\mathbf{q} + {}_3^{\dagger}\mathsf{R}\right]:\nabla\mathbf{V} + \rho^{-1}\left[\mathsf{I}\varepsilon^{\mathrm{k}} + \mathsf{P}\right]\cdot(\nabla\cdot\mathsf{P}), \tag{244}$$

[6] У відповідному рівнянні для системи з гладким потенціалом взаємодії [12] нами пропущено доданок $\rho^{-1}\mathsf{P}\cdot(\nabla\cdot\mathsf{P})$.

де об'єднано разом внески при однакових ґрадієнтах. На відміну від рівняння для P, тут джерело ще містить два конвективно-молекулярні внески, зумовлені $\nabla\cdot\mathsf{P}$, і додатковий внесок від зовнішнього поля $\mathbf{s}_{\mathbf{q}^{\phi}}^{U(0)\Delta\mathbf{F}}$, як це є і для гладкого потенціала [12].

7.3. Обговорення рівнянь опису Ляґранжа

Задля наочности, запишімо разом рівняння переносу опису Ляґганжа для властиво молекулярних густин, доповнивши їх рівняннями для ρ і $\mathbf{p}$:

$$\begin{aligned}\partial_t\rho + \nabla\cdot\mathbf{p} &= 0,\\ \partial_t\mathbf{p} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathbf{p} + \mathsf{P}) &= \rho\mathbf{F}_1^U,\\ \partial_t\varepsilon^{\mathrm{k}} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\varepsilon^{\mathrm{k}} + \mathbf{q}) &= -\mathsf{P}:[\nabla\mathbf{V}]^{\dagger},\\ \partial_t\mathsf{P} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathsf{P} + {}_3\mathsf{R}) &= \mathsf{s}_{\mathsf{P}} - 2[\mathsf{P}^{\dagger}\cdot\nabla\mathbf{V}]^{\ddagger},\\ \partial_t\mathbf{q} + \nabla\cdot(\mathbf{V}\mathbf{q} + \mathsf{Q}) &= \mathbf{s}_{\mathbf{q}} - \left[\mathsf{I}\mathbf{q} + {}_3^{\dagger}\mathsf{R}\right]:\nabla\mathbf{V} + \tfrac{1}{\rho}\left[\mathsf{I}\varepsilon^{\mathrm{k}} + \mathsf{P}\right]\cdot(\nabla\cdot\mathsf{P}).\end{aligned}$$

Видно, як при переході до наступних рівнів опису в джерелах наростає число нових доданків. Можна виділити два ряди рівнянь, що починаються з густини маси — $\{\rho, \mathbf{p}, \mathsf{P}, \ldots\}$ та густини внутрішньої енергії — $\{\varepsilon^{\mathrm{k}}, \mathbf{q}, \ldots\}$: перший не містить змінних другого.

Рівняння для тензора напружень і вектора теплового потоку мають релаксаційний тип, містячи в джерелах крім перехресних внесків також і суто молекулярні, що походять від хаотичного руху частинок. У рівнянні для потоку тепла виникає внесок у джерело від просторової неоднорідности тензора напружень. Можна висунути гіпотезу, що у рівняннях наступного розширення, записаних для

$$\{{}_3\mathsf{R}, \mathsf{Q}, \mathsf{s}_{\mathsf{P}}, \mathbf{s}_{\mathbf{q}}\},$$

будуть присутні внески від просторової неоднорідности ще і наступних потоків: тепла $\mathbf{q}$, потоку тензора напружень ${}_3\mathsf{R}$, потоку теплового потоку Q і т.д.

8. Висновки

Детальніші висновки стосовно результатів, отриманих у другій і третій частинах — §§ 4,5 і 6,7 — зроблено в кінці кожної з них. Тут ми в загальному підсумовуємо досягнуте.

Схему виведення загальних рівнянь переносу і розширення рівнянь звичайної гідродинаміки, запропоновану раніше для гладкого потенціала [12], застосовано до системи твердих кульок у зовнішньому потенціальному полі. Стартуючи з представлення макроскопічних величин через частинкові функції розподілу та частинкові молекулярні характеристики, і відповідного варіанту ланцюжка рівнянь ББГКІ, виведено рівняння переносу для довільної k-частинкової густини з локальним представленням і 2-частинкової з нелокальним представленням. Адаптуючи схему до густин зі складнішими представленнями, котрі з'являються як потоки від взаємодії для попередніх простіших густин, в принципі можна отримати рівняння переносу і для них, і таким чином "розгортати" ланцюжок гідродинамічного типу. Отримані результати годяться як для 3D, так і для 2D систем.

Використавши загальні рівняння переносу, записано рівняння для потоків імпульсу та енергії, котрі становлять перше розширення рівнянь звичайної гідродинаміки. При цьому виявлено особливість системи твердих кульок: для неї, як для простішої системи зі взаємодією при контакті і без взаємодії "на відстані", рівняння переносу містять додаткові внески, яких система з гладким потенціалом не має.

A. Внески в потік і джерело в частковому випадку

Щоби знайти вирази для джерел $\mathbf{s}^{r,\mathbf{R}}_{\tilde{a}_2}$ та $\mathbf{s}^{U,l}_{\tilde{a}_2}$ ($l = 1\lambda, 2\bar{\lambda}$) у частковому випадку (158) треба мати дію похідних $\nabla_{\mathbf{R}}$ та $\boldsymbol{\partial}_{\,l}$, $l = 1; 2$ на комбінацію $[T_+(12; \mathbf{R})\, \psi^1_a(x_{1\lambda})]$.

Використавши для T_+-оператора безінтеґральну форму (50), ми за допомогою співвідношень

$$\nabla_{\mathbf{R}} \begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ R \\ \hat{R} \\ \hat{R}\hat{R} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathsf{I} \\ \hat{R} \\ R^{-1}(\mathsf{I} - \hat{R}\hat{R}) \\ R^{-1}(\mathsf{I}\hat{R} + \mathsf{I}_{13}\hat{R} - 2\hat{R}\hat{R}\hat{R}) \end{bmatrix}$$

знаходимо:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{R}}\, \delta(R-\sigma) &= \delta'_R(R-\sigma)\hat{R}, \\ \nabla_{\mathbf{R}} \left(v_{12R}\theta(v_{12R})\right) &= R^{-1}[\mathbf{v}_{12} - v_{12R}\hat{R}]\,[\theta(v_{12R}) + v_{12R}\,\delta(v_{12R})], \\ \nabla_{\mathbf{R}} \left([b^{12}_{\hat{R}} - 1]\, \psi^1_a(x_{1\lambda})\right) &= -\lambda\, [b^{12}_{\hat{R}} - 1]\, \nabla_{1\lambda}\psi^1_a(x_{1\lambda}) - \\ &- \tfrac{1}{R}[\mathsf{I}v_{12R} + \mathbf{v}_{12}\hat{R} - 2\hat{R}\hat{R}v_{12R}]\cdot b^{12}_{\hat{R}}\boldsymbol{\partial}_{\,1}\psi^1_a(x_{1\lambda}). \end{aligned}$$

Також враховуючи, що $\boldsymbol{\partial}_{\,l} v_{12R} = (-1)^{l-1}\hat{R}$, отримуємо похідні відповідних комбінацій по швидкостях:

$$\boldsymbol{\partial}_{\,l} t_+(v_{12R}, R) = (-1)^{l-1}\hat{R}\, t^v_+(v_{12R}, R),$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\partial}_{\,1}[b^{12}_{\hat{R}} - 1]\, \psi^1_a(x_{1\lambda}) &= \{\mathsf{I}\,[b^{12}_{\hat{R}} - 1] - \hat{R}\hat{R}\, b^{12}_{\hat{R}}\}\cdot \boldsymbol{\partial}_{\,1}\psi^1_a(x_{1\lambda}), \\ \boldsymbol{\partial}_{\,2}[b^{12}_{\hat{R}} - 1]\, \psi^1_a(x_{1\lambda}) &= \hat{R}\hat{R}\, b^{12}_{\hat{R}}\cdot \boldsymbol{\partial}_{\,1}\psi^1_a(x_{1\lambda}). \end{aligned}$$

Одержані вирази дозволяють подати у явному вигляді похідні

$$\begin{pmatrix} \nabla_{\mathbf{R}} \\ \boldsymbol{\partial}_{\,l} \end{pmatrix} [T_+(12; \mathbf{R})\, \psi^1_a(x_{1\lambda})], \qquad l = 1, 2$$

й записати кінцеві вирази для дежрел (160)–(165).

Двочастинкові внески від взаємодії містять послідовну дію двох операторів $T_+(12; \mathbf{R})$:

$$\begin{aligned} \mathsf{J}^{\phi,12}_{\tilde{a}_2} &= \langle \tfrac{1}{4}\mathbf{R}'\, T_+(12, \mathbf{R})\mathbf{R}\, T_+(12, \mathbf{R})\psi^1_a(x_{1\lambda\lambda_1})\rangle^2_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2((\mathbf{R}\lambda)_{12}\lambda_1)_{1\lambda,2\bar{\lambda}}}, \\ s^{\phi,12}_{\tilde{a}_2} &= \langle -\tfrac{1}{4}T_+(12, \mathbf{R})\,[1 + \mathcal{P}^{\mathbf{R}-}_{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2}]\,\mathbf{R}\, T_+(12, \mathbf{R})\psi^1_a(x_{1\lambda})\rangle^2_{(\mathbf{v}\mathbf{R}\lambda)_{12}}, \end{aligned}$$

де $\mathbf{R}' \equiv [1 - 2\lambda]\mathbf{R}$.

Для простоти викладу далі ми будемо працювати з оператором $T_+(12)$ і покажемо, що для довільної функції $\mathcal{F}(x_1, x_2)$ має місце рівність[7] :

$$T_+(12)\, T_+(12)\, \mathcal{F}(x_1, x_2) = 0.$$

Для твердих кульок властиво те, що деякі функції двох і більше фазових змінних мають особливості (напр., розриви) у просторі розташувань для конфіґурацій, у яких хоча б дві частинки дотикаються. Оператор $T_+(12)$ ґенерує динаміку системи і його дія на такі функції для згаданих конфіґурацій є невизначеною, якщо користуватися введеним раніше означенням (49) чи (50). Через це, *строге означення* оператора T_+ вводять таким чином, щоби уникнути цієї невизначеності [6]:

$$T^*_+(12) \stackrel{\mathrm{df}}{=} \lim_{t\to 0+} \mathcal{S}^0_t |\mathbf{v}_{12}\cdot\hat{r}_{12}|\, \theta(-\mathbf{v}_{12}\cdot\hat{r}_{12})\, \delta(r_{12} - \sigma)\, [\, b^{12}(\hat{r}_{12}) - 1\,], \quad (245)$$

де $\mathcal{S}^0_t = \exp\{-tL^0\}$ — оператор вільної еволюції, що діє за правилом:

$$\mathcal{S}^0_t F(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \ldots) = F(\mathbf{r}_i + \mathbf{v}_i t, \mathbf{r}_j + \mathbf{v}_j t, \ldots).$$

Введене означення для $T_+(12)$ відрізняється від поданого раніше (50) присутністю оператора $\mathcal{S}^0_t$ і взяттям границі. Граничний перехід до конфіґурації контакту двох кульок робиться з боку реальних фізичних кофіґурацій, коли тверді кульки не перекривають одна одну.

[7] Фактично це треба довести для введеного нижче оператора $T^*_+(12)$.

Для функцій без особливостей при контакті твердих куль обидва означення еквівалентні.

Очевидно, що $T_+^*(12)T_+^*(12) \sim \mathcal{S}_\tau^0 T_+(12)\mathcal{S}_t^0 T_+(12)$. Для $t > 0$ розгляньмо:

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_t^0\, T_+(12)\mathcal{F}(x_1,x_2) = \\ &= \delta(|\mathbf{r}_{12}+\mathbf{v}_{12}t|-\sigma)\,\tfrac{|\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}+v_{12}^2 t|}{|\mathbf{r}_{12}+\mathbf{v}_{12}t|}\,\theta(-\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}-v_{12}^2 t)\\ &\times\big[\mathcal{F}(\mathbf{r}_1+\mathbf{v}_1 t,\mathbf{v}_1',\mathbf{r}_2+\mathbf{v}_2 t,\mathbf{v}_2')-\mathcal{F}(\mathbf{r}_1+\mathbf{v}_1 t,\mathbf{v}_1,\mathbf{r}_2+\mathbf{v}_2 t,\mathbf{v}_2)\big].\end{aligned}$$

Подіявши другим оператором $T_+(12)$, отримаємо:

$$\begin{aligned}T_+(12)\,\mathcal{S}_t^0\,T_+(12)\mathcal{F}(x_1,x_2) &= \delta(r_{12}-\sigma)|\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}|\theta(-\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12})\times\\ &\times\Big\{\delta(|\mathbf{r}_{12}+(\mathbf{v}_{12}-2\mathbf{v}_{12}\cdot\hat{r}_{12}\hat{r}_{12})t|-\sigma)\times\\ &\times\tfrac{|-\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}+v_{12}^2 t|}{|\mathbf{r}_{12}+(\mathbf{v}_{12}-2\mathbf{v}_{12}\cdot\hat{r}_{12}\hat{r}_{12})t|}\,\theta(\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}-v_{12}^2 t)\times\\ \times\big[\mathcal{F}(\mathbf{r}_1+\mathbf{v}_1' t,\mathbf{v}_1,\mathbf{r}_2+\mathbf{v}_2' t,\mathbf{v}_2)&-\mathcal{F}(\mathbf{r}_1+\mathbf{v}_1' t,\mathbf{v}_1',\mathbf{r}_2+\mathbf{v}_2' t,\mathbf{v}_2')\big]-\\ &-\delta(|\mathbf{r}_{12}+\mathbf{v}_{12}t|-\sigma)\tfrac{|\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}+v_{12}^2 t|}{|\mathbf{r}_{12}+\mathbf{v}_{12}t|}\theta(-\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}-v_{12}^2 t)\\ \times\big[\mathcal{F}(\mathbf{r}_1+\mathbf{v}_1 t,\mathbf{v}_1',\mathbf{r}_2+\mathbf{v}_2 t,\mathbf{v}_2')&-\mathcal{F}(\mathbf{r}_1+\mathbf{v}_1 t,\mathbf{v}_1,\mathbf{r}_2+\mathbf{v}_2 t,\mathbf{v}_2)\big]\Big\}.\end{aligned}$$

Два великі доданки у фігурних дужках домножуються на комбінацію перед цими дужками. Нижче подано аналіз, чому цей вираз рувний нулю для хоч якого малого $t > 0$.

Перший великий доданок містить $\theta(\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12}-v_{12}^2 t)$, що домножується на $\theta(-\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12})$ перед дужками. Остання вимагає, щоб було $\mathbf{v}_{12}\cdot\mathbf{r}_{12} < 0$, а перша — щоб цей скалярний добуток був більший за деяке додатнє число. У результаті добуток цих θ-функцій дає нуль.

Аналіз другого доданка можна подати, напр., так. Позначмо

$$\mathbf{r}_{12}+\mathbf{v}_{12}t \equiv \mathbf{R}_{12}, \qquad \mathbf{v}_{12}t \equiv \mathbf{s}.$$

Вектори $\mathbf{r}_{12}, \mathbf{s}, \mathbf{R}_{12}$ мають формувати трикутник, оскільки $\mathbf{r}_{12}+\mathbf{s} = \mathbf{R}_{12}$. З внутрішньої δ-функції слідує, що $|\mathbf{R}_{12}| = \sigma$, а з внутрішньої θ-функції — що $\mathbf{R}_{12}\cdot\mathbf{s} < 0$. Крім того, зі зовнішніх δ- і θ-функцій має виконуватись $|\mathbf{r}_{12}| = \sigma$, $\mathbf{r}_{12}\cdot\mathbf{s} < 0$. Наведені умови суперечать існуванню такого трикутника, а тому частинки 1 і 2 не можуть формувати конфіґурації, заданої зовнішніми і внутрішніми δ- і θ-функціями. У результаті другий доданок у фігурних дужках теж є нулем.

Цим показано, що послідовна дія двох $T_+^*(12)$-операторів на довільну функцію дає 0. Цей оператор створює траєкторії у фазовому просторі, тому фізично це означає, що не може бути двох послідовних (12)-зіткнень, розділених вільною еволюцією.

Література

1. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов, Москва, Изд. иностр. лит., 1960, 510 с.
2. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. Москва, Мир, 1976, 554 с.
3. Либов Р.Л. Введение в теорию кинетических уравнений, Москва, Мир, 1974, 371 с.
4. Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов, Москва, Наука, 1971, 331 с.
5. Enskog D. Kinetische Theorie der Warmeleitung Reibung und Selbstdiffusion in gevissen verdichtetten Gasen und Flussigkeiten. // Svenska Vetenskapsaked. Handl., 1922, vol. 63, p. 4.
6. Ernst M.H., Dorfman J.R., Hoegy W.R., van Leeuwen J.M.J. Hard-sphere dynamics and binary-collision operators. // Physica, 1969, vol. 45, No 1, p. 127–146.
7. 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.
8. 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.
9. 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.
10. Ugawa H., Cordero P. Extended Hydrodynamics from Enskog’s Equation for a Two-Dimensional System General Formalism. // J. Stat. Phys., 2007, vol. 127, No 2, p. 339–358;
Див. ткж. `arXiv:cond-mat/0602038, 2006, 10 p.`
11. Ugawa H. Extended hydrodynamics from Enskog’s equation: The bidimensional case. // Physica A, 2005, vol. 354, p. 77–87;
Див. ткж. `arXiv:cond-mat/0507102, 2005, 9 p.`
12. Гуменюк Й.А., Токарчук М.В. Ланцюжок рівнянь переносу гідродинамічного типу для системи частинок з гладкою центральною взаємодією. / Препринт ІФКС НАН України, ICMP-06-24U, Львів, 2006, 57 с.
13. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы, Москва, Мир, 1974, 304 с.

14. Седов Л.И. Механика сплошной среды, Москва, Наука, 1973, т. 1, 536 с.
15. Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов (физические основы), Москва, Наука, 1978, 128 с.
16. 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 fliud. // Phys. Rev. A, 1988, vol. 38, No 1, p. 271–287.
17. Mryglod I.M., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Generalized collective modes for the Lennard-Jones fliud. // Molecular Physics, 1995, vol. 84, No 2, p. 235–259.
18. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика, Москва, Наука, 1971, 415 с.
19. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика, Москва, Мир, 1978, т. 1, 405 с.; т. 2, 400 с.
20. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике, Москва–Ленинград, Гостехиздат, 1946, 120 с.;
21. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике, В: Избран. тр. в трех томах, Киев, Наукова думка, 1970, т. 2, 520 с.
22. Ernst M.H., Dorfman J.R. Nonanalitic dispersion relations in classical fluids. I. The hard sphere gas. // Physica, 1972, vol. 61, p. 157–181.
23. Hopfield J.J., Bastin J.F. New Approach to Transport Theory in Classical Gases. // Phys. Rev., 1968, vol. 168, No 1, p. 193–199.
24. Ernst M.H., Cohen E.G.D. Nonequilibrium fluctuations in μ-space. // J. Stat. Phys., 1981, vol. 25, No 1, p. 153–180.
25. Боголюбов Н.Н. О стохастических процессах в динамических системах. // Физ. элемент. частиц и ат. ядра, 1978, т. 9, No 4, с. 501–579.
26. Lutsko J.F. Kinetic Theory and Hydrodynamics of Dense, Reacting Fluids far from Equilibrium. // J. Chem. Phys, 2004, vol. 120, No 14, p. 6325–6345.
    Див. ткж. `arXiv:cond-mat/0311233 v1, 2003, 44 p.`
27. Форстер Д. Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции, Москва, Атомиздат, 1980, 288 с.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alrting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

CONTACT INFORMATION:
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +380(322)760908; Fax: +380(322)761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua   http://www.icmp.lviv.ua