И.И. Клебанов, Д.А. Емелин

МЕТОДЫ ГРУППОВОГО АНАЛИЗА В ЗАДАЧАХ КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Челябинск
2015

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Челябинский государственный педагогический университет»

И.И. Клебанов, Д.А. Емелин

МЕТОДЫ ГРУППОВОГО АНАЛИЗА В ЗАДАЧАХ КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Монография

Челябинск
2015

УДК 53
ББК 22.311
К 48

Клебанов, И.И. Методы группового анализа в задачах классической статистической механики [Текст]: монография / И.И. Клебанов, Д.А. Емелин. – Челябинск: Изд-во Челяб. гос. пед. ун-та, 2015. – 77 с.

ISBN 978-5-906777-37-9

В монографии представлены основы современного группового анализа математических моделей естествознания и полученные авторами результаты в области группового анализа цепочки уравнений Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона.

Данное издание предназначено для математиков, физиков-теоретиков, а также студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

Рецензенты:
М.М. Кипнис, д-р физ.-мат. наук, профессор
В.П. Бескачко, д-р физ.-мат. наук, профессор

ISBN 978-5-906777-37-9

Введение

Групповой анализ дифференциальных уравнений, открытый Софусом Ли в конце XIX-го века, уже давно является неотъемлемой частью аппарата математической физики, но к интегро-дифференциальным уравнениям применяется сравнительно недавно. В то же время интегродифференциальные уравнения являются основным математическим аппаратом классической и квантовой статистической механики.

Настоящая монография состоит из двух глав. В первой главе дается введение в современный групповой анализ дифференциальных уравнений, так что предварительная подготовка в области группового анализа от читателя не требуется. Изложение ведется на уровне «для пешеходов». Для более глубокого изучения основ группового анализа рекомендуем обратиться к фундаментальным монографиям [8, 16, 17, 71, 76, 77, 58] или учебному пособию [9].

Во второй главе после разъяснения физического смысла задачи проводится групповой анализ цепочки уравнений Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ). Поскольку развитая теория группового анализа интегро-дифференциальных уравнений на сегодняшний день отсутствует, мы применяем для анализа уравнений Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона прямой эвристический метод, наиболее близкий к классическому методу Ли – Овсянникова [84]. Расчет проводится настолько подробно, чтобы читатель, разобравшийся в материале первой главы, мог понять полученные авторами результаты.

Для читателя, желающего расширить представления о возможностях группового анализа, написаны два приложения.

Надеемся, что монография будет интересна широкому кругу специалистов в области теоретической и математической физики, студентов и аспирантов.

ГЛАВА 1. ОСНОВЫ ГРУППОВОГО АНАЛИЗА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

1. Группы Ли в изложении «для пешеходов»

1.1. Однопараметрическая группа преобразований

Удобнее всего ввести понятие группы Ли на примере преобразования плоскости $(x, y) \to (\bar{x}, \bar{y})$, которое задается следующими формулами:

$$\begin{cases} \bar{x} = \varphi(x, y, a), \\ \bar{y} = \psi(x, y, a), \end{cases} \quad a \in \mathbb{R}. \tag{1.1}$$

Сейчас и в дальнейшем будем считать, что все функции обладают достаточной степенью гладкости.

Потребуем, чтобы наше преобразование обладало следующими свойствами:

1) Якобиан $J = \begin{vmatrix} \varphi_x & \varphi_y \\ \psi_x & \psi_y \end{vmatrix} \neq 0$ (существование обратного преобразования);

2) выберем параметр a так, что $\begin{cases} \bar{x}(x, y, a = 0) = x, \\ \bar{y}(x, y, a = 0) = y, \end{cases} \to T_0$; (тождественное преобразование)

3) $\exists T_a^{-1}$ – см. п. 1;

4) определим композицию преобразований:

$$(x, y) \overset{T_a}{\to} (\bar{x}, \bar{y}) \overset{T_b}{\to} (\bar{\bar{x}}, \bar{\bar{y}})$$

$$\begin{cases} \bar{\bar{x}} = \varphi(\bar{x}, \bar{y}, a) = \varphi(x, y, c), \\ \bar{\bar{y}} = \psi(\bar{x}, \bar{y}, a) = \psi(x, y, c), \end{cases}$$

где $c = f(a, b)$ – достаточно гладкая функция.

Очевидна ассоциативность для любых трех преобразований.

Если все 4 свойства выполняются, то преобразования образуют группу, а параметр a будет называться групповым параметром.

Групповой параметр всегда можно выбрать таким образом, чтобы $f(a,b) = a + b$. Таким образом выбранный параметр называется каноническим.

Пример 1. Группа трансляций $\bar{x} = x + a$:

$$\bar{\bar{x}} = \bar{x} + a = x + (a + b). \tag{1.2}$$

Пример 2. Группа неоднородных растяжений (α – не канонический):

$$\begin{cases} \bar{x} = \alpha x, \\ \bar{y} = \alpha^m y. \end{cases} \tag{1.3}$$

Если сделать замену $\alpha = e^a$, очевидно, что этот параметр уже будет каноническим, что следует из свойств экспоненты:

$$\begin{cases} \bar{x} = e^a x, \\ \bar{y} = e^{ma} y; \end{cases} \quad T_b \cdot T_a = T_{a+b}. \tag{1.4}$$

Другие примеры групп [16]

- трансляции;
- растяжения;
- повороты;
- группа Галилея;
- группа Лоренца.

1.2. Орбита точки и касательное векторное поле

Вернемся к преобразованию $\begin{cases} \bar{x} = \varphi(x,y,a), \\ \bar{y} = \psi(x,y,a). \end{cases}$

Рассмотрим, что произойдет с точкой плоскости при непрерывном изменении параметра.

Очевидно, эта точка будет двигаться по некоторой кривой. Эта кривая называется орбитой точки.

Если $\vec{\tau}$ – касательный вектор к орбите в начальной точке, то его компоненты в декартовых координатах:

$$\tau_x = \xi(x,y) = \frac{\partial \varphi}{\partial a}/_{a=0}, \tag{1.5}$$

$$\tau_y = \eta(x,y) = \frac{\partial \psi}{\partial a}/_{a=0}. \tag{1.6}$$

Иначе говоря, в окрестности значения $a = 0$ можно представить преобразование плоскости в виде:

$$\begin{cases} \bar{x} = x + a\xi(x, y) + o(a), \\ \bar{y} = y + a\eta(x, y) + o(a). \end{cases} \quad (1.7)$$

Пара функций (ξ, η) называется компонентами касательного векторного поля, а преобразование называется инфинитезимальным.

1.3. Генератор группы

Генератор группы (инфинитезимальный оператор) – это оператор вида $\hat{X} = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial y}$.

Другими словами, действие оператора на дифференцируемую функцию $F(x, y)$ даст следующий результат:

$$\hat{X}F = \xi \frac{\partial F}{\partial x} + \eta \frac{\partial F}{\partial y}. \quad (1.8)$$

1.4. Теорема Ли

Софус Ли доказал теорему, суть которой в следующем: зная генератор, можно восстановить полную группу преобразований, то есть по бесконечно малому преобразованию можно восстановить конечное преобразование. Для этого нужно решить систему уравнений Ли:

$$\begin{cases} \frac{d\bar{x}}{da} = \xi(\bar{x}, \bar{y}), \quad \bar{x}(a = 0) = x, \\ \frac{d\bar{y}}{da} = \eta(\bar{x}, \bar{y}); \quad \bar{y}(a = 0) = y. \end{cases} \quad (1.9)$$

Более строгую формулировку и доказательство теоремы можно найти, например, в [9].

Пример 3. Рассмотрим группу поворотов:

$$\begin{cases} \bar{x} = x cos a + y sin a, \\ \bar{y} = -x sin a + y cos a. \end{cases} \quad (1.10)$$

Решим прямую задачу, то есть найдем генератор группы.

$$\xi = \frac{\partial \bar{x}}{\partial a}(a = 0) = (-xsina + ycosa)/_{a=0} = y. \tag{1.11}$$

$$\eta = \frac{\partial \bar{y}}{\partial a}(a = 0) = (-xcosa - ysina)/_{a=0} = -x. \tag{1.12}$$

Тогда $\hat{X} = y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}$.

Пример 4. Решим обратную задачу, то есть по генератору найдем группу преобразований:

$$\hat{X} = y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}.$$

Решаем уравнения Ли:

$$\begin{cases} \frac{d\bar{x}}{da} = \bar{y}, & \bar{x}(a = 0) = x, \\ \frac{d\bar{y}}{da} = -\bar{x}; & \bar{y}(a = 0) = y. \end{cases} \tag{1.13}$$

Возьмем первое уравнение и еще раз продифференцируем по параметру a:

$$\frac{d^2\bar{x}}{da^2} = \frac{d\bar{y}}{da} = -\bar{x} - \textit{ уравнение гармонических колебаний.}$$

Тогда y можно найти из первого уравнения дифференцированием по a. Получим:

$$\bar{y} = \frac{d\bar{x}}{da} = -C_1 sina + C_2 cosa. \tag{1.14}$$

Константы найдем, используя начальные условия (1.13).

Окончательно получаем группу поворотов:

$$\begin{cases} \bar{x} = xcosa + ysina, \\ \bar{y} = -xsina + ycosa. \end{cases} \tag{1.15}$$

Замечание. II способ решения системы уравнений Ли – это экспоненциальное отображение, или экспоненцирование векторного поля.

Пусть есть генератор $\hat{X} = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \eta\frac{\partial}{\partial y}$.

Рассмотрим оператор $e^{a\hat{X}}$(под экспонентой от оператора понимается формальный ряд Тейлора для нее):

$$e^{a\hat{X}} = \hat{I} + a\hat{X} + \frac{(a\hat{X})^2}{2!} + \frac{(a\hat{X})^3}{3!} + \cdots,$$

где $(\hat{X})^2$– 2-кратное действие оператора на функцию, аналогично для степени n.

Тогда решение уравнений Ли запишется короче:

$$\begin{cases} \bar{x} = e^{a\hat{X}}(x), \\ \bar{y} = e^{a\hat{X}}(y). \end{cases} \tag{1.16}$$

Пример 5. Для трансляций $\hat{X} = \frac{\partial}{\partial x}$.

Тогда оператор $e^{a\hat{X}}$ имеет вид:

$$e^{a\hat{X}} = \hat{I} + a\frac{\partial}{\partial x} + \frac{a^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cdots + \frac{a^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n} + \cdots, \tag{1.17}$$

следовательно, его действие на переменную x приводит к трансляции x+a.

1.5. Инварианты группы

Инвариантом группы называется функция $F(x, y)$, вид которой не меняется при групповых преобразованиях: $F(\bar{x}, \bar{y}) = F(x, y)$.

Критерий инвариантности Ли: Необходимое и достаточное условие инвариантности заключается в том, что действие генератора на функцию должно давать 0: $\hat{X}F = 0$, то есть $\xi\frac{\partial F}{\partial x} + \eta\frac{\partial F}{\partial y} = 0$.

Решение последнего уравнения в частных производных эквивалентно решению обыкновенного дифференциального уравнения характеристики $\frac{dx}{\xi} = \frac{dy}{\eta}$. Его решение всегда можно представить в виде $\Phi(x, y) = C$. Функция $\Phi(x, y)$ называется базисным инвариантом. Следовательно, любая достаточно гладкая функция $F(\Phi)$, зависящая от базисного инварианта, также будет инвариантом.

Пример 6. Группа вращений с генератором $\hat{X} = y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}$.

$$\begin{cases} \xi = y, \\ \eta = -x. \end{cases}$$

Уравнение характеристик имеет вид:

$$\frac{dx}{y} = \frac{dy}{-x},\ 2xdx + 2ydy = 0,\ d(x^2 + y^2) = 0,\ x^2 + y^2 = C. \quad (1.18)$$

Следовательно, $\Phi = x^2 + y^2$ – инвариант группы. Значит, любая функция $F(x^2 + y^2)$ также будет инвариантом группы вращений.

Замечание. Оказывается, для любой однопараметрической группы преобразований плоскости можно ввести канонические перемененные, а именно:

$$(x, y) \to (t, u), \text{где} \begin{cases} t = t(x, y), \\ u = u(x, y); \end{cases} \text{при этом } \hat{X} = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \eta\frac{\partial}{\partial y} \to \frac{\partial}{\partial t}. \quad (1.19)$$

Другими словами любую однопараметрическую группу подходящей заменой переменных можно привести к группе трансляций. Для доказательства достаточно применить правило дифференцирования сложной функции.

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial t} \cdot \frac{\partial t}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{\partial F}{\partial y} = \frac{\partial F}{\partial t} \cdot \frac{\partial t}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial u} \cdot \frac{\partial u}{\partial y}. \end{cases} \quad (1.20)$$

Тогда:

$$\hat{X} = \xi\left(\frac{\partial t}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial u}\right) + \eta\left(\frac{\partial t}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial u}\right) = \left(\xi\frac{\partial t}{\partial x} + \eta\frac{\partial t}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial t} + (\xi\frac{\partial u}{\partial x} + $$
$$+ \eta\frac{\partial u}{\partial y})\frac{\partial}{\partial u}.$$

Потребуем, чтобы выполнялись следующие условия:

$$\begin{cases} \xi\frac{\partial u}{\partial x} + \eta\frac{\partial u}{\partial y} = 0, \\ \xi\frac{\partial t}{\partial x} + \eta\frac{\partial t}{\partial y} = 1. \end{cases} \quad (1.21)$$

Из первого уравнения следует, что u – инвариант группы, значит, в качестве u можно взять базисный инвариант.

В качестве переменной t можно взять любое частное решение второго уравнения.

Пример 7. Группа поворотов с генератором $\hat{X} = y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}$.

Базисный инвариант $u = x^2 + y^2 = r^2$.

Решаем второе уравнение для t:

$$y\frac{\partial t}{\partial x} - x\frac{\partial t}{\partial y} = 1.$$

Будем искать такую функцию t, которая зависит только от x:

$$y\frac{dt}{dx} = 1,\ \sqrt{r^2 - x^2}\frac{dt}{dx} = 1,\ t = \int\frac{dx}{\sqrt{r^2-x^2}} = \arcsin\left(\frac{x}{r}\right). \quad (1.22)$$

$$\begin{cases} u = x^2 + y^2, \\ t = \arcsin\left(\frac{x}{r}\right); \end{cases} \qquad \begin{cases} \bar{u} = u, \\ \bar{t} = t + a. \end{cases} \quad (1.23)$$

1.6. Обобщение на случай *n*-мерного пространства

Рассмотрим точку n-мерного пространства $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Рассмотрим преобразование

$$\overline{x_i} = \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n, a),\ i = \overline{1,n}. \quad (1.24)$$

Генератор группы имеет вид

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^{n}\xi_i(x)\frac{\partial}{\partial x_i}, \xi_i(x) = \frac{\partial\varphi_i}{\partial a}/_{a=0}.$$

Уравнения Ли запишутся следующим образом:

$$\frac{\partial\overline{x_i}}{\partial a} = \xi_i(\overline{x_1}, \overline{x_2}, \dots, \overline{x_n}),\ \ \overline{x_i}(a = 0) = x_i. \quad (1.25)$$

Инвариант группы: $F(\bar{x}) = F(x)$.

Условие инвариантности не меняется: $\hat{X}F = 0$, то есть

$$\xi_1\frac{\partial F}{\partial x_1} + \xi_2\frac{\partial F}{\partial x_2} + + \cdots + \xi_n\frac{\partial F}{\partial x_n} = 0. \quad (1.26)$$

Уравнения характеристик будут выглядеть так:

$$\frac{dx_1}{\xi_1} = \frac{dx_2}{\xi_2} = \cdots = \frac{dx_n}{\xi_n}. \quad (1.27)$$

Таких уравнений (*n–1).* Значит, будет набор из (*n–1)* базисных инвариантов $J_1, J_2, \dots J_{n-1}$. Следовательно, инвариантом группы преобразований n-мерного пространства будет любая функция базисных инвариантов $F(J_1, J_2, \dots J_{n-1})$.

1.7. Инвариантное многообразие

Рассмотрим n-мерное пространство, в котором задана система уравнений:

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ \quad \dots \\ F_s(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \end{cases} \quad \text{где } s < n. \tag{1.28}$$

В такой системе независимых переменных будет $n - s$.

Введем следующее требование:

$$\forall x \; Rg \left\| \frac{\partial F_k}{\partial x} \right\| = s, \text{где } i = \overline{1,n}, k = \overline{1,s}. \tag{1.29}$$

Тогда в n-мерном пространстве задана (n–s)-мерная гиперповерхность, или многообразие размерности (n–s).

В дальнейшем исходную систему уравнений будем обозначать буквой M.

Пример 8.

В случае $n=3$, $s=1$ имеем одно уравнение M: $F(x,y,z)=0$ – уравнение двумерной поверхности в 3-мерном пространстве.

Введем понятие инвариантной поверхности (инвариантного многообразия).

Пусть n-мерное пространство допускает однопараметрическую группу с генератором $\hat{X} = \sum_{i=1}^{n} \xi_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i}$.

Тогда гиперповерхность называется инвариантной относительно групповых преобразований, если любая ее точка под действием преобразований группы движется по этой же поверхности (орбита каждой точки принадлежит самой поверхности).

Критерий инвариантности многообразия: Необходимое и достаточное условие инвариантности заключается в том, что действие генератора группы на каждое уравнение системы в точках, принадлежащих поверхности, должно давать 0: $\hat{X}(F_k)/_M = 0, k = \overline{1,s}$.

Пример 9. M: $F = z - x^2 - y^2 = 0$ – параболоид вращения, осью которого является ось Oz. Допускается группа неоднородных растяжений:

$$\begin{cases} x \to e^a x, \\ y \to e^a y, \\ z \to e^{2a} z; \end{cases} \textit{с генератором } \hat{X} = x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + 2z\frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.30)$$

Воспользуемся критерием инвариантности:

$$\hat{X}(F)/_M = \left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + 2z\frac{\partial}{\partial z}\right)(z - x^2 - y^2)/_M = (-2x^2 - 2y^2 +$$

$$+2z)/_M = 2(z - x^2 - y^2)/_M \equiv 0. \quad (1.31)$$

Найдем базисные инварианты:

$$\frac{dx}{x} = \frac{dy}{y} = \frac{dz}{2z}. \quad (1.32)$$

$$\frac{dx}{x} = \frac{dz}{2z},\ \frac{dz}{z} = 2\frac{dx}{x},\ \ln|z| = 2\ln|x| + \ln|C_1|,\ \frac{z}{x^2} = C_1. \quad (1.33)$$

Аналогично получим $\frac{dy}{y} = \frac{dz}{2z},\ \frac{z}{y^2} = C_2$.

Получили 2 базисных инварианта $J_1 = \frac{x^2}{z}, J_2 = \frac{y^2}{z}$.

Уравнение параболоида теперь можно записать в виде $1 - J_1 - J_2 = 0$ – представление уравнения поверхности через базисные инварианты группы.

2. Группы, допускаемые дифференциальными уравнениями

2.1. Вводные замечания

Обыкновенное дифференциальное уравнение (ОДУ) n-го порядка – это соотношение, которое связывает между собой независимую переменную, зависимую переменную и производные вплоть до n-го порядка: $F\left(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}\right) = 0$.

Уравнение в частных производных n-го порядка – это уравнение, которое связывает между собой набор независимых переменных, функцию, которая зависит от этих переменных, и частные производные до некоторого порядка p включительно:

$F(x_1, x_2, \dots, x_n, u(x_1, x_2, \dots, x_n), u_1, u_2, \dots, u_p) = 0$, где u_i – всевозможные частные производные i-го порядка.

Для системы дифференциальных уравнений в дальнейшем будем использовать такие обозначения:

$u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ – набор m зависимых переменных,

$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ – набор n независимых переменных,

$\overrightarrow{u_{(1)}} = \frac{\partial u_i}{\partial x_k}, \overrightarrow{u_{(2)}} = \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2}, \dots$ – всевозможные частные производные 1-го, 2-го, … порядка ($i = \overline{1, m}, k = \overline{1, n}$).

Тогда саму систему дифференциальных уравнений можно записать в виде:

$$F_\alpha\left(x, u, \overrightarrow{u_{(1)}}, \overrightarrow{u_{(2)}}, \dots, \overrightarrow{u_{(p)}}\right) = 0, \alpha = \overline{1, s}. \tag{2.1}$$

В дальнейшем рассматриваются системы уравнений, в которых число уравнений равно числу неизвестных функций: $s = m$.

Требуется найти все возможные преобразования зависимых и независимых переменных, которые оставляют уравнение неизменным. При этом производные тоже будут меняться. Например, $\overrightarrow{\bar{u}_{(1)}} = \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}_k}$, то есть все действия выполняются в новых переменных.

Если при таких преобразованиях переменных (зависимых и независимых) вид уравнения не меняется, то говорят, что уравнение инвариантно относительно этой замены, или уравнение допускает данную группу преобразований.

Пример 1. Однородное дифференциальное уравнение первого порядка

$$y' = f\left({}^{y}/_{x}\right). \tag{2.2}$$

Это уравнение допускает группу однородных растяжений:

$$\begin{cases} \bar{x} = e^a x, \\ \bar{y} = e^a y, \end{cases} \tag{2.3}$$

поскольку $\frac{\bar{y}}{\bar{x}} = \frac{y}{x}$, $\frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{x}} = \frac{\partial y}{\partial x}$.

Пример 2. Уравнение теплопроводности $u_t = u_{xx}$, $u = u(x, t)$

В физике это уравнение описывает такие процессы как диффузия и теплопроводность.

Очевидно, это уравнение допускает трансляции по переменным x и t и растяжения по u:

$$\bar{t} = t + a, \bar{x} = x + a, \bar{u} = e^{a}u. \quad (2.4)$$

В данном случае это не все допустимые симметрии.

Задача состоит в том, как вычислить все допустимые преобразования.

Алгоритм такого вычисления дал Софус Ли в последней четверти XIX века. Его идея состояла в том, чтобы представить себе дифференциальное уравнение (или систему дифференциальных уравнений) как многообразие в так называемом продолженном пространстве, в котором роль независимых переменных играют функции, аргументы и производные.

Пример 3. ОДУ первого порядка $y' = y^2 + x^2$.

Рассмотрим трехмерное пространство, в котором y' играет роль третьей координаты.

Тогда в этом воображаемом продолженном пространстве данное дифференциальное уравнение будет уравнением параболоида вращения.

Дифференциальное уравнение будет допускать группу преобразований, если гиперповерхность в продолженном пространстве, соответствующая этому уравнению, будет инвариантным многообразием, то есть если орбита любой точки, принадлежащей гиперповерхности, будет принадлежать этой же гиперповерхности.

Это эквивалентно утверждению: под действием группы преобразований любое решение дифференциального уравнения будет переходить в его же решение. В частном случае решение может переходить само в себя. Такие решения называются инвариантными.

2.2. Формулы продолжения

Рассмотрим задачу вычисления генератора группы преобразований в продолженном пространстве по известному генератору в исходном пространстве зависимых и независимых переменных.

Пусть есть генератор однопараметрической группы:

$$\hat{X} = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial y}. \tag{2.5}$$

Это означает, что когда параметр $a \to 0$, можно записать формулу инфинитезимального преобразования:

$$\begin{cases} \bar{x} = x + a\xi(x, y) + o(a), \\ \bar{y} = y + a\eta(x, y) + o(a). \end{cases} \tag{2.6}$$

Тогда инфинитезимальное преобразование производных имеет вид:

$$\frac{d\bar{y}}{d\bar{x}} = \frac{dy}{dx} + \varphi^x\left(x, y, y'\right)a + o(a), \tag{2.7}$$

$$\frac{d^2\bar{y}}{d\bar{x}^2} = \frac{d^2y}{dx^2} + \varphi^{xx}\left(x, y, y', y''\right)a + o(a), \tag{2.8}$$

Необходимо установить связь между функциями $\xi(x, y)$ и $\eta(x, y)$ и функциями $\varphi^x\left(x, y, y'\right), \varphi^{xx}\left(x, y, y', y''\right), \dots$. Такая связь называется формулой продолжения.

Пример 4. Для обыкновенного дифференциального уравнения 2-го порядка $F\left(x, y, y', y''\right) = 0$ требуется найти второе продолжение: $\hat{X}^{(2)}$.

Оно будет выглядеть следующим образом:

$$\hat{X}^{(2)} = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial y} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial y'} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial y''}. \tag{2.9}$$

Пример 5. Для уравнения теплопроводности $u_t = u_{xx}$ рассмотрим подробно, что будет играть роль продолженного пространства и как будет выглядеть второе продолжение.

В уравнение входят первая производная по времени и вторая – по координате. Это значит, что продолженное пространство должно включать все первые и все вторые производные, то есть координатами продолженного пространства будут

$(t, u, x, u_t, u_x, u_{tt}, u_{xx}, u_{xt})$, то есть продолженное пространство восьмимерно в то время как исходное пространство трехмерно.

Генератор группы преобразований имеет вид:

$$\hat{X} = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \tau \frac{\partial}{\partial y} + \varphi \frac{\partial}{\partial u}. \quad (2.10)$$

а второе продолжение:

$$\hat{X}^{(2)} = \hat{X} + \varphi^t \frac{\partial}{\partial u_t} + \varphi^x \frac{\partial}{\partial u_x} + \varphi^{xx} \frac{\partial}{\partial u_{xx}} + \varphi^{tt} \frac{\partial}{\partial u_{tt}} + \varphi^{xt} \frac{\partial}{\partial u_{xt}}. \quad (2.11)$$

В общем случае m зависимых и n независимых переменных формулы продолжения строятся следующим образом.

Вначале определим оператор полной частной производной функции $f(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, u_2, \dots, u_m, \overrightarrow{u_{(1)}}, \overrightarrow{u_{(2)}}, \dots, \overrightarrow{u_{(p)}})$ по переменной x_i (правило дифференцирования сложной функции)

$$D_i = \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{\partial f}{\partial u_1} \cdot \frac{\partial u_1}{\partial x_i} + \frac{\partial f}{\partial u_{(1,j)}} \cdot \frac{\partial u_{(1,j)}}{\partial x_i} + \cdots, где\, u_{(1,j)} = \frac{\partial u_1}{\partial x_j}. \quad (2.12)$$

Пример 6. В случае одной зависимой и одной независимой переменной:

$$D_x = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot y' + \frac{\partial f}{\partial y'} \cdot y'' + \frac{\partial f}{\partial y'} \cdot y''' + \cdots. \quad (2.13)$$

Рассмотрим далее систему дифференциальных уравнений в частных производных вида:

$$F_\alpha(x, u, u_{(1)}, u_{(2)}, \dots, u_{(p)}) = 0, \alpha = \overline{1, m}, \quad (2.14)$$
$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n),$$
$$u = (u_1, u_2, \dots, u_m).$$

Генератор группы преобразований имеет вид:

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^{n} \xi_i(x, u) \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{m} \varphi_j(x, u) \frac{\partial}{\partial u_j}. \quad (2.15)$$

Формула n-го продолжения:

$$\hat{X}^{(p)} = \hat{X} + \sum_{j=1}^{m} \varphi_j^I(x, u, u_{(1)}, u_{(2)}, \dots, u_{(p)}) \frac{\partial}{\partial u_I^j}, \quad (2.16)$$

где I – мультииндекс (указывает, производную по каким переменным преобразуем), индекс j указывает, какую функцию из зависимых переменных дифференцируем,

$$\varphi_j^I = D_I\left(\varphi_j - \sum_{i=1}^{n} \xi_i \cdot u_i^j\right) + \sum_{i=1}^{n} \xi_i \cdot u_{I,i}^j, \quad (2.17)$$

D_I – оператор дифференцирования по мультииндексу,

$$u_i^j = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, u_{I,i}^j = \frac{\partial u_I^j}{\partial x_i} \quad (2.18)$$

2.3. Определяющие уравнения

Критерий инвариантности системы дифференциальных уравнений

Рассматривается система дифференциальных уравнений:

$$M: \begin{cases} F_\alpha\left(x, u, u_{(1)}, u_{(2)}, \dots, u_{(p)}\right) = 0, \\ \alpha = \overline{1, m}. \end{cases} \quad (2.19)$$

Необходимое и достаточное условие того, что данная система уравнений допускает группу с генератором $\hat{X}$, состоит в том, что действие n-го продолжения генератора на левые части уравнений в точках, принадлежащих многообразию, дает 0: $\hat{X}^{(p)} F_\alpha/_M = 0, \alpha = \overline{1, m}$.

Это уравнение называется определяющим. Рассматривая производные как независимые переменные, получим переопределенную систему линейных уравнений в частных производных относительно компонент касательного векторного поля, решение которой определяет все симметрии, допускаемые исходной системой уравнений.

Пример 7. $u_t = u_{xx}$ – уравнение теплопроводности.

Запишем его в виде M: $u_t - u_{xx} = 0, u = u(x, t)$.

Следовательно, генератор группы будем искать в следующем виде:

$$\hat{X} = \xi(x, t, u)\frac{\partial}{\partial x} + \tau(x, t, u)\frac{\partial}{\partial y} + \varphi(x, t, u)\frac{\partial}{\partial u}. \quad (2.20)$$

Тогда второе продолжение будет выглядеть так:

$$\hat{X}^{(2)} = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \tau\frac{\partial}{\partial y} + \varphi\frac{\partial}{\partial u} + \varphi^x\frac{\partial}{\partial u_x} + \varphi^t\frac{\partial}{\partial u_t} + \varphi^{xx}\frac{\partial}{\partial u_{xx}} +$$

$$+\varphi^{tt}\frac{\partial}{\partial u_{tt}} + +\varphi^{xt}\frac{\partial}{\partial u_{xt}} \quad (2.21)$$

Подействуем вторым оператором второго продолжения на уравнение теплопроводности, при этом все производные рассматриваются как независимые переменные. Тогда ненулевыми будут только те слагаемые генератора, в которых идет дифференцирование по u_t *и* u_{xx}:

$$\hat{X}^{(2)}(u_t - u_{xx}) = \varphi^t - \varphi^{xx}. \qquad (2.22)$$

Тогда критерий инвариантности запишется так:

$$(\varphi^t - \varphi^{xx})/_{u_t=u_{xx}} = 0. \qquad (2.23)$$

Задача свелась к вычислению φ^t, φ^{xx} и (после замены) $u_t = u_{xx}$, к получению определяющих уравнений, которые будут дифференциальными уравнениями относительно ξ, τ *и* φ.

По формуле продолжения получим следующее выражение для φ^t:

$$\varphi^t = D_t(\varphi - \xi \cdot u_x - \tau \cdot u_t) + \xi \cdot u_{xx} + \tau \cdot u_{xt},$$

здесь мультииндекс $I = (x)$,

$$D_t(\varphi) = \varphi_t + \varphi_u u_t,$$
$$D_t(\xi) = \xi_t + \xi_u u_t,$$
$$D_t(\tau) = \tau_t + \tau_u u_t,$$
$$D_t(u_x) = u_{xt},$$
$$D_t(u_t) = u_{tt}. \qquad (2.24)$$

Окончательно получаем:

$$\varphi^t = \varphi_t - \xi_t u_x + (\varphi_u - \tau_t)u_t - \xi_u u_x u_t - \tau_u {u_t}^2. \qquad (2.25)$$

Для φ^{xx} получим следующее выражение:

$$\varphi^{xx} = D_x D_x(\varphi - \xi \cdot u_x - \tau \cdot u_t) + \xi \cdot u_{xxx} + \tau \cdot u_{xxt},$$

мультииндекс $I = (xx)$,

$$D_x(\varphi - \xi \cdot u_x - \tau \cdot u_t) = \varphi_x + \varphi_u u_x - \xi u_{xx} - \xi_x u_x + \xi_u {u_x}^2 - \tau u_{xt} - \tau_x u_t - -\tau_u u_x u_t. \qquad (2.26)$$

Действуя аналогично, окончательно получаем:

$$\varphi^{xx} = \varphi_{xx} + (2\varphi_{ux} - \xi_{xx})u_x - \tau_{xx}u_t + (\varphi_{uu} - 2\xi_{xu}){u_x}^2 - 2\tau_{xu}u_x u_t - \xi_{uu}{u_x}^3 - \tau_{uu}{u_x}^2 u_t + (\varphi_u - 2\xi_x)u_{xx} - 2\tau_x u_{xt} - 3\xi_u u_x u_{xx} - \tau_u u_t u_{xx} - 2\tau_u u_x u_{xt}. \qquad (2.27)$$

Далее находим разность $(\varphi^t - \varphi^{xx})/_{u_t=u_{xx}} \equiv 0$ и приравниваем все коэффициенты при одинаковых комбинациях производных к нулю:

$u_x u_{xt}$: $\quad -2\tau_u = 0.$

u_{xt}: $\quad 2\tau_x = 0.$ (2.28)

Отсюда следует, что $\tau = \tau(t)$.

${u_{xx}}^2$: $\quad 0 = 0$ (*верно*).

${u_x}^2 u_{xx}$: $\quad \tau_{uu} = 0$ (*верно*).

$u_x u_{xx}$: $2\xi_u + 2\tau_{xu} = 0.$ (2.29)

Следовательно, $\xi = \xi(x,t)$.

u_{xx}: $\quad \varphi_u - \tau_t = -\tau_{xx} + \varphi_u - 2\xi_x.$ (2.30)

Тогда:

${u_x}^3$: $\quad -\xi_{uu} = 0$ (*верно*).

${u_x}^2$: $\quad \varphi_{uu} - 2\xi_{xu} = 0.$ (2.31)

Тогда $\varphi_{uu} = 0,\ \varphi = \alpha(x,t)u + \beta(x,t)$.

u_x: $\quad -\xi_t = 2\varphi_{ux} - \xi_{xx}.$

1: $\quad \varphi_t = \varphi_{xx}.$ (2.32)

Таким образом, получили общую структуру τ, ξ, φ. Имеются четыре функции, подлежащих определению: τ, f, α, β. Для этого воспользуемся системой из последних двух уравнений:

$$\begin{cases} -\xi_t = 2\varphi_{ux} - \xi_{xx}, & (1) \\ \varphi_t = \varphi_{xx}. & (2) \end{cases} \qquad (2.33)$$

Подставив выражения для функций τ, ξ, φ в эти уравнения, дальше продолжим расщепление.

Итак, подставим в (1) уравнение:

$$-\left(\frac{1}{2}\tau_{tt}x + f_t\right) \equiv 2\alpha_x - 0. \quad (I) \qquad (2.34)$$

Подставим во (2) уравнение:

$$\alpha_t u + \beta_t \equiv \alpha_{xx} u + \beta_{xx}. \qquad (2.35)$$

Поскольку α *и* β *от* u не зависят, нужно приравнять слагаемые отдельно при u и без u:

$\alpha_t = \alpha_{xx}, \quad (II)$

$\beta_t = \beta_{xx}. \quad (III)$ (2.36)

Зная, что $\alpha = \alpha(x, t)$, можем уравнение (I) проинтегрировать по x:

$$\alpha = -\frac{1}{4}\tau_{tt}\frac{x^2}{2} - \frac{1}{2}f_t(t)x + \psi(t). \quad (2.37)$$

Продифференцируем последнее равенство по t и по x дважды, чтобы воспользоваться уравнением (II):

$$\alpha_t = -\frac{1}{8}\tau_{ttt}x^2 - \frac{1}{2}f_{tt}x + \psi_t,$$

$$\alpha_x = -\frac{1}{4}\tau_{tt}x - \frac{1}{2}f_t,$$

$$\alpha_{xx} = -\frac{1}{4}\tau_{tt}. \quad (2.38)$$

Тогда из (II) получим:

$$-\frac{1}{8}\tau_{ttt}x^2 - \frac{1}{2}f_{tt}x + \psi_t \equiv -\frac{1}{4}\tau_{tt},$$

$$-\frac{1}{8}\tau_{ttt}x^2 - \frac{1}{2}f_{tt}x + \psi_t + \frac{1}{4}\tau_{tt} \equiv 0. \quad (2.39)$$

Поскольку функции τ, f, ψ от x не зависят, приравняем слагаемые при одинаковых степенях x:

$$x^2\colon \tau_{ttt} = 0. \quad (2.40)$$

Тогда $\tau(t) = a_1 + a_2 t + a_3 t^2$.

$$x\colon \quad f_{tt} = 0. \quad (2.41)$$

Тогда $f(t) = b_1 + b_2 t$.

$$1\colon \quad \psi_t = -\frac{1}{4}\tau_{tt}. \quad (2.42)$$

Получим $\tau_{tt} = 2a_3, \psi_t = -\frac{1}{2}a_3$, отсюда $\psi = -\frac{1}{2}a_3 t + C$.

Осталось найти функцию β. Оказывается, β отделилась от всех функций, то есть по уравнению (III) можно сказать, что β – любая функция, являющаяся решением того же самого уравнения теплопроводности: $\beta_t = \beta_{xx}$.

Итак, еще раз выпишем все, что получилось:

1) $\alpha = -\frac{1}{4}\tau_{tt}\frac{x^2}{2} - \frac{1}{2}f_t(t)x + \psi(t)$,

где $\tau(t) = a_1 + a_2 t + a_3 t^2$,

$f(t) = b_1 + b_2 t$,

$\psi = -\frac{1}{2}a_3 t + C.$

2) $\xi = \frac{1}{2}\tau_t x + f(t).$

3) $\varphi = \alpha(x,t)u + \beta(x,t),$ (2.43)

$\beta(x,t)$ подчиняется исходному уравнению $\beta_t = \beta_{xx}$.

Подставив найденные выражения для функций $\xi, \tau\ и\ \varphi$ и переобозначив переменные, окончательно получим:

$\xi = C_1 + C_4 x + 2C_5 t + 4C_6 xt,$

$\tau = C_2 + 2C_4 t + 4C_6 t^2,$

$\varphi = (C_3 - C_5 x - 2C_6 t - C_6 x^2)u + \beta(x,t),$ (2.44)

где $\beta_t = \beta_{xx}$.

Таким образом, вычислены компоненты касательного векторного поля, то есть найдена полная группа преобразований, допускаемая уравнением теплопроводности. Проанализируем полученный результат.

Мы искали однопараметрические группы, но когда нашли генератор, то видим, что он содержит 6 произвольных констант и 1 произвольную функцию. Значит, на самом деле в общем случае получаем 6-параметрическую группу и бесконечномерную группу (поскольку β – произвольная функция). Такая бесконечномерная группа всегда допускается линейными уравнениями и является тривиальной. Нетривиальная 6-параметрическая группа, допускаемая уравнением теплопроводности, означает, что это уравнение допускает 6 однопараметрических групп преобразований с базисными генераторами (поочередно приравниваем 5 постоянных к нулю, а шестую постоянную к единице).

$C_1 = 1: \hat{X}_1 = \frac{\partial}{\partial x};$

$C_2 = 1: \hat{X}_2 = \frac{\partial}{\partial t};$

$C_3 = 1: \hat{X}_3 = u\frac{\partial}{\partial u};$

$C_4 = 1: \hat{X}_4 = x\frac{\partial}{\partial x} + 2t\frac{\partial}{\partial t};$

$C_5 = 1: \hat{X}_5 = 2t\frac{\partial}{\partial x} - xu\frac{\partial}{\partial u};$

$$C_6 = 1: \hat{X}_6 = 4xt\frac{\partial}{\partial x} + 4t^2\frac{\partial}{\partial t} - (2t + x^2)u\frac{\partial}{\partial u}. \qquad (2.45)$$

Каждому генератору соответствует своя группа преобразований (свое однопараметрическое преобразование), то есть, решив уравнения Ли, можно найти конечные преобразования, которые соответствуют каждому генератору. Таким образом, получим:

$\hat{X}_1$: $\bar{x} = x + a, \bar{t} = t, \bar{u} = u$ (*трансляция по оси* x);

$\hat{X}_2$: $\bar{x} = x, \bar{t} = t + a, \bar{u} = u$ (*трансляция по времени*);

$\hat{X}_3$: $\bar{x} = x, \bar{t} = t, \bar{u} = e^a u$ (*однородное растяжение по* u);

$\hat{X}_4$: $\bar{x} = e^a x, \bar{t} = e^{2a} t, \bar{u} = u$ (*неоднородное растяжение по* x *и* t);

$\hat{X}_5$: $\bar{x} = x + 2ta, \bar{t} = t, \bar{u} = ue^{-xa-2ta^2}$ *(преобразование Галилея)*;

$$\hat{X}_6: \ \bar{x} = \frac{x}{1-4ta}, \bar{t} = \frac{t}{1-4ta}, \bar{u} = u\sqrt{1-4ta} \cdot e^{\frac{-x^2 a}{1-4ta}}. \qquad (2.46)$$

2.4. Алгебры Ли

Аппарат алгебр Ли позволяет просто и компактно описать n-параметрическую группу преобразований.

Введем вначале понятие коммутатора двух операторов.

Коммутатором операторов X_1, X_2 называется разность:

$$[X_1, X_2] = X_1 \cdot X_2 - X_2 \cdot X_1 \neq 0 \text{ (\textit{в общем случае})}.$$

Другими словами, действие коммутатора действует на функцию F сводится к:

$$[X_1, X_2](F) = X_1 \cdot X_2(F) - X_2 \cdot X_1(F). \qquad (2.47)$$

Теперь рассмотрим (по аналогии с векторным пространством) n-мерное пространство операторов, то есть такое пространство L, в котором можно выбрать n линейно независимых базисных операторов $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$, и тогда любой другой оператор этого пространства может быть записан в виде линейной комбинации базисных операторов: $\forall X \in L: X = \sum_{i=1}^{n} C_i \cdot X_i$.

Теперь можно ввести понятие алгебры Ли.

Пространство является алгеброй Ли, если оно замкнуто относительно действия коммутатора, то есть: $\forall(X, Y) \in L: [X, Y] \in L$.

Это условие верно и для базисных операторов, поэтому можно написать, что для любой пары генераторов $\forall(X_i, X_k)$ из базиса коммутатор $[X_i, X_k]$ можно представить в виде линейной комбинации базисных же операторов: $[X_i, X_k] = \sum_{l=1}^{n} C_{ik}^{l} \cdot X_l$, где C_{ik}^{l} – структурные константы алгебры Ли.

Таким образом, чтобы проверить, является ли набор операторов алгеброй Ли, нужно построить таблицу коммутаторов.

Важное утверждение состоит в том, что генераторы допускаемых дифференциальными уравнениями однопараметрических групп преобразований всегда образуют базис алгебры Ли.

Таким образом, вместо того, чтобы говорить о группе симметрии дифференциального уравнения, можно говорить об алгебре Ли этого уравнения.

Пусть имеется алгебра Ли. Если в этом множестве можно выделить подмножество меньшей размерности, которое само по себе образует алгебру Ли, то оно называется подалгеброй.

3. Возможности группового анализа

3.1. Интегрирование ОДУ первого порядка

Практически все методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) находят свое обоснование в групповом анализе.

Естественно начать с самого простого случая – с ОДУ первого порядка, разрешенного относительно производной: $y' = f(x, y)$. Это уравнение всегда можно переписать в следующем виде:

$$M(x, y)dx + N(x, y)dy = 0. \quad (3.1)$$

Софус Ли доказал, что групповой анализ позволяет решать такие уравнения двумя способами.

1 Если данное уравнение допускает группу симметрий с генератором $\hat{X} = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial y}$, то оно имеет интегрирующий множитель следующего вида:

$$\mu = \frac{1}{\xi M + \eta N}. \quad (3.2)$$

Это означает, что после умножения уравнения на μ получаем уравнение в полных дифференциалах.

2. Второй способ решения уравнения – переход к каноническим переменным, когда генератор $\hat{X}$ сводится к трансляции:

После перехода к каноническим переменным уравнение переходит в уравнение с разделяющимися переменными.

Пример 1. Уравнение $2xydx + (y^2 - 3x^2)dy = 0$.

Легко увидеть, что оно допускает группу однородных растяжений:

$$\begin{cases} \bar{x} = e^a x, \\ \bar{y} = e^a y. \end{cases} \quad (3.3)$$

Генератор этой группы $\hat{X} = x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y}$, то есть $\xi = x, \eta = y$.

1. Строим интегрирующий множитель:

$$\mu = \frac{1}{2x^2y + y(y^2 - 3x^2)} = \frac{1}{y(y^2 - x^2)}. \quad (3.4)$$

Получим после умножения исходного уравнения на μ следующее:

$$\frac{2x}{y^2 - x^2}dx + \frac{y^2 - 3x^2}{y(y^2 - x^2)}dy = 0,$$

$$P = \frac{2x}{y^2 - x^2}, Q = \frac{y^2 - 3x^2}{y(y^2 - x^2)}. \quad (3.5)$$

Легко проверить, что $\frac{dP}{dy} = \frac{dQ}{dx}$, в силу чего можно решать систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dF}{dx} = \frac{2x}{y^2-x^2}, \\ \frac{dF}{dy} = \frac{y^2-3x^2}{y(y^2-x^2)}, \end{cases} \quad (3.6)$$

и получить общее решение $F(x,y) = ln\left|\frac{y^3}{y^2-x^2}\right| = C$.

2. Перейдем к каноническим переменным.

$$\begin{cases} x\frac{du}{dx} + y\frac{du}{dy} = 0, \\ x\frac{dt}{dx} + y\frac{dt}{dy} = 1. \end{cases} \quad (3.7)$$

Решаем первое уравнение системы и получаем:

$$\frac{dx}{x} = \frac{dy}{y},\ ln|x| = ln|y| + C,\ u = C = \frac{y}{x}. \quad (3.8)$$

Для решения второго уравнения системы возьмем в качестве t следующее частное решение: $t = t(x)$. Тогда получим следующее уравнение с очевидным частным решением:

$$x\frac{dt}{dx} = 1,\ t = ln|x|. \quad (3.9)$$

Делаем подстановку $y = x \cdot u(x)$ в исходное уравнение:

$$2x^2udx + (x^2u^2 - 3x^2)(udx + xdu) = 0. \quad (3.10)$$

Раскрывая скобки и учитывая, что $dt = \frac{dx}{x}$, окончательно получим уравнение с разделяющимися переменными:

$$(u^3 - u)dt + (u^2 - 3)du = 0, \quad (3.11)$$

интегрирование которого с последующим переходом к переменным (x,y) дает общее решение исходного уравнения.

3.2. Интегрирование ОДУ второго порядка

В случае обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка, разрешенного относительно второй производной: $y'' = f(x,y,y')$, действуют следующим образом.

Пусть это уравнение допускает однопараметрическую группу с генератором:

$$\hat{X} = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \eta\frac{\partial}{\partial y}. \quad (3.12)$$

Тогда переходом к каноническим переменным порядок уравнения можно понизить на единицу.

Если уравнение допускает двумерную алгебру Ли:

$$\hat{X}_1 = \xi_1 \frac{\partial}{\partial x} + \eta_1 \frac{\partial}{\partial y},$$

$$\hat{X}_2 = \xi_2 \frac{\partial}{\partial x} + \eta_2 \frac{\partial}{\partial y}, \qquad (3.13)$$

то уравнение можно проинтегрировать полностью по алгоритму Ли, то есть перейти к каноническим переменным, что приведет алгебру Ли к одной из четырех стандартных форм. В новых переменных уравнение также примет одну из четырех стандартных форм, каждая из которых легко интегрируется [9].

3.3. Интегрирование уравнений в частных производных

Перейдем к интегрированию уравнений в частных производных. Для определенности будем все объяснять на примере уравнения второго порядка для функции двух переменных:

$$F(x, t, u, u_t, u_x, u_{xx}, u_{tt}, u_{tx}) = 0. \qquad (3.14)$$

Пусть уравнение допускает группу симметрий с генератором:

$$\hat{X} = \xi(x, t, u) \frac{\partial}{\partial x} + \tau(x, t, u) \frac{\partial}{\partial t} + \varphi(x, t, u) \frac{\partial}{\partial u}. \qquad (3.15)$$

Тогда можно, решая уравнения Ли, получить конечные преобразования:

$$\begin{cases} \bar{x} = \bar{x}(x, t, u, a), \\ \bar{t} = \bar{t}(x, t, u, a), \\ \bar{u} = \bar{u}(x, t, u, a). \end{cases} \qquad (3.16)$$

Появляются 2 возможности.

1. Можно «размножать» решения, поскольку группа всегда одно решение переводит в другое решение. Этот алгоритм достаточно прост.

Пусть известно какое-либо решение $u = \Phi(x,t)$.

Тогда в новых переменных эту формулу можно переписать так:

$$\bar{u} = \Phi(\bar{x}, \bar{t}). \qquad (3.17)$$

Теперь подставим в это равенство явные выражения, которые связывают новые переменные и старые:

$$\bar{u}(x,t,u,a) = \Phi(\bar{x}(x,t,u,a), \bar{t}(x,t,u,a)). \qquad (3.18)$$

Это уравнение уже можно разрешить относительно u, и тем самым получим новое решение.

Пример 2. $u_t = u_{xx}$ – уравнение теплопроводности.

Возьмем ранее найденный генератор $\hat{X}_5$:

$$\hat{X}_5 = 2t\frac{\partial}{\partial x} - xu\frac{\partial}{\partial u}. \qquad (3.19)$$

Уравнения Ли представляют собой следующую систему:

$$\begin{cases} \dfrac{d\bar{x}}{da} = 2\bar{t}, & \bar{x}(a=0) = x, \\ \dfrac{d\bar{t}}{da} = 0, & \bar{t}(a=0) = t, \\ \dfrac{d\bar{u}}{da} = -\bar{x}\bar{u}, & \bar{u}(a=0) = u. \end{cases} \qquad (3.20)$$

Решение этой системы дает следующие конечные преобразования:

$$\begin{cases} \bar{x} = 2ta + x, \\ \bar{t} = t, \\ \bar{u} = ue^{-xa-ta^2}. \end{cases} \qquad (3.21)$$

Получили преобразование Галилея.

Тогда получим после подстановки следующее равенство:

$$ue^{-xa-ta^2} = \Phi(2ta + x, t). \qquad (3.22)$$

Теперь задавая функцию Ф, можно «размножать» решения.

К примеру, пусть $\Phi = 1$. Тогда получим новое решение в таком виде:

$$u = e^{xa+ta^2}. \qquad (3.23)$$

То есть имея тривиальное решение 1, получаем решение нетривиальное.

Таким образом, решения можно «размножать» с помощью каждого генератора.

2. Инвариантные решения.

Сначала найдем инварианты группы:

$$\xi \frac{\partial J}{\partial x} + \tau \frac{\partial J}{\partial t} + \varphi \frac{\partial J}{\partial u} = 0. \quad (3.24)$$

Для этого составляем уравнения характеристик:

$$\frac{dx}{\xi} = \frac{dt}{\tau} = \frac{du}{\varphi}. \quad (3.25)$$

В результате получим два базисных инварианта: J_1, J_2.

Теперь делается простой шаг – переход от переменных (u, x, t) к базисным инвариантам (J_1, J_2): $(u, x, t) \to (J_1, J_2)$. В этом случае ищется один базисный инвариант как функция другого: $J_1 = f(J_2)$. В результате уменьшается число переменных.

В самых простых случаях можно свести уравнение в частных производных к обыкновенному дифференциальному уравнению.

Далее составляется уравнение для функции f, оно уже будет ОДУ.

Если это ОДУ решается аналитически, то получим групповое инвариантное решение в аналитической форме, либо решим ОДУ численно, что значительно проще, чем численное решение уравнения в частных производных.

Пример 3. $u_t = u_{xx}$ – уравнение теплопроводности с генератором

$$\hat{X}_5 = 2t \frac{\partial}{\partial x} - xu \frac{\partial}{\partial u}. \quad (3.26)$$

Посмотрим, к каким инвариантным решениям приводит этот генератор, то есть будем искать решения, инвариантные относительно группы Галилея.

Составляем формальные уравнения для инвариантов группы:

$$\frac{dx}{2t} = \frac{du}{-xu} = \frac{dt}{(0)}. \quad (3.27)$$

Интегрирование первого уравнения даст $C = ue^{\frac{x^2}{4t}}$.

Тогда в качестве базисных инвариантов возьмем $J_1 = t$ (поскольку время не преобразуется).

Тогда для $J_1 = f(J_2)$ в качестве $f(t)$ возьмем $f(t) = ue^{\frac{x^2}{4t}}$.

Значит, $u = e^{-\frac{x^2}{4t}} \cdot f(t)$.

Продифференцировав по t и дважды по x, а затем подставив все в исходное уравнение теплопроводности, получим уравнение относительно функции

$$f\colon \frac{df}{dt} + \frac{f}{2t} = 0. \tag{3.28}$$

Решение последнего уравнения имеет вид $f(t) = \frac{\text{C}}{\sqrt{t}}$.

Окончательно для u получим следующее выражение:

$$u(x,t) = \frac{\text{C}}{\sqrt{t}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4t}}. \tag{3.29}$$

Итак, получили решение, инвариантное относительно группы преобразований Галилея.

Пример 4. Возьмем два генератора $\hat{X}_1, \hat{X}_2$ уравнения теплопроводности $u_t = u_{xx}$:

$$\hat{X}_1 = \frac{\partial}{\partial x}, \hat{X}_2 = \frac{\partial}{\partial t}. \tag{3.30}$$

Рассмотрим их линейную комбинацию:

$$\hat{X} = \hat{X}_1 + C\hat{X}_2 = \frac{\partial}{\partial x} + C\frac{\partial}{\partial t}. \tag{3.31}$$

Найдем инварианты этого генератора:

$$\frac{dx}{1} = \frac{dt}{C}. \tag{3.32}$$

Получим $C_1 = x - \frac{t}{C}$. При этом u не меняется: $\bar{u} = u$.

Итак, обозначив $C = \frac{1}{a}$, окончательно получим следующие 2 инварианта:

$$J_1 = x - at,\ J_2 = u. \tag{3.33}$$

Будем искать $u = f(x - at)$ (бегущая волна)

Подставляем это выражение в уравнение теплопроводности, обозначив $z = x - at$:

$u_x = u_z \cdot z_x = u_z$,

$$u_{xx} = u_{zz},$$
$$u_t = u_z \cdot z_t = u_z \cdot (-a),$$
$$-au_z = u_{zz}. \tag{3.34}$$

Получаем ОДУ для u, которое легко решается понижением порядка путем введения замены переменной $u_z = F(z), u_{zz} = F_z$. Тогда получим:

$$-aF = F_z,\ F = C_1 \cdot e^{-az};$$
$$C_1 \cdot e^{-az} = u_z,\ u = -\frac{C_1}{a} e^{-az} + C_2. \tag{3.35}$$

Переобозначив константы, получим в итоге:

$$u = Ae^{-az} + B = Ae^{-a(x-at)} + B. \tag{3.36}$$

Таким образом, получили еще одно групповое инвариантное решение. Ясно что, можно построить бесконечно много инвариантных решений. Все ли полученные инвариантные решения будут разными? На самом деле, многие из них будут связаны друг с другом заменой переменных.

Поэтому задача состоит в том, чтобы найти все возможные существенно различные инвариантные решения.

Для решения этой задачи разработан аппарат оптимальной системой подалгебр и программа *подмодели*. Заинтересованному читателю рекомендуем монографию [24].

ГЛАВА 2. ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ БОГОЛЮБОВА – БОРНА – ГРИНА – КИРКВУДА – ИВОНА

1. Мотивация исследования

Известно, что для создания новых перспективных материалов необходимо уметь предсказывать их макроскопические характеристики. Для расчета термодинамических характеристик равновесных многочастичных систем необходимо развитие методов приближенного расчета статистических сумм или частичных функций распределения. Частичные функции распределения подчиняются системе интегродифференциальных уравнений Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона, допускающей приближенные решения по теории возмущений в случае низкой плотности или слабого взаимодействия.

В случае отсутствия малых параметров вместо цепочки ББГКИ строятся приближенные интегральные уравнения для расчета частичных функций распределения, в основном для парной корреляционной функции. На сегодняшний день известно несколько десятков таких уравнений. Наиболее известными в силу широкой применимости являются уравнения Перкуса – Йевика, гиперцепное и суперпозиционное. За исключением уравнения Перкуса – Йевика, приближенные интегральные уравнения не допускают аналитического решения даже для простейших потенциалов твердых сфер и прямоугольной ямы и потому решаются численно. Известно, что численные методы решения интегральных уравнений являются трудоемкими. Кроме того, наиболее известные приближенные интегральные уравнения не удовлетворяют условию термодинамической согласованности.

Альтернативным подходом является применение численных методов молекулярной динамики и метода Монте-Карло или их разновидностей. Данные методы также являются трудоемкими и ресурсозатратными. Поэтому актуальным является создание новых аналитических методов приближенного расчета статистических сумм и частичных функций распределения.

Из квантовой теории поля известно, что решения, полученные по теории возмущений, могут быть улучшены на основе метода ренормгруппы, таким образом, что улучшенное решение будет справедливым и при значениях «малого» параметра порядка единицы. В работах Ковалева, Ширкова и Пустовалова [12, 13, 61–67] метод ренормгруппы был развит для дифференциальных и интегродифференциальных уравнений математической физики. Анализ литературы показал, что к цепочке уравнений ББГКИ данный метод не применялся. Для построения ренормгруппы необходимо исследовать возможности классического группового анализа Ли применительно к системе уравнений ББГКИ.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Вычислить точечные симметрии классической цепочки ББГКИ.

2. Вычислить точечные симметрии цепочки ББГКИ, включив в множество независимых переменных плотность и температуру.

3. Исследовать полученные группы на возможность построения ренормгурппы.

4. Исследовать полученные ренормгруппы на предмет построения улучшенных по сравнению с теорией возмущений решений.

2. Микроскопические модели жидкого состояния

Читателю, желающему получить более детальное представление о современной теории жидкостей, рекомендуем работы [1–7, 18–26, 28, 78].

На сегодняшний день основным аппаратом описания равновесных и неравновесных свойств жидкостей является аппарат статистической механики. Согласно ее положениям, для описания системы (*) из N-взаимодействующих химически стабильных частиц (N~$6.022\cdot 10^{23}$) в объеме V при температуре T, необходимо воспользоваться теоремой Лиувилля [2] и решить уравнение

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i^j}\frac{dq_i^j}{dt}+\frac{\partial\rho}{\partial p_i^j}\frac{dp_i^j}{dt}\right)=\frac{d\rho}{dt}, \qquad (2.1)$$

где $\rho=\rho(\vec{q}_1..\vec{q}_N,\vec{p}_1..\vec{p}_N,t)$ – функция распределения частиц с обобщенными импульсами и координатами ($\vec{q}_i,\vec{p}_i$). Случай зависимости ρ от времени рассматривает физическая кинетика [3]. Случай независимости ρ от времени рассматривает равновесная статистическая механика [1].

Рассмотрим состояние равновесия классической системы частиц с парным взаимодействием (*). Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i}+U_N(\vec{r}_1..\vec{r}_N), \qquad (2.2)$$

где $\vec{p}_i, \vec{m}_i$ – импульс и масса i-ой частицы, U_N – потенциальная энергия системы N частиц. Тогда, в случае канонического распределения, которое мы берем за основу в дальнейшем, плотность вероятности нахождения системы в равновесном состоянии

$$\rho=\frac{1}{Z_N}e^{-\frac{H}{\theta}}. \qquad (2.3)$$

Нормировочный множитель Z_N в статистической механике называется статистической суммой и определяется как

$$Z_N=\int e^{-\frac{H}{\theta}}d\Gamma. \qquad (2.4)$$

Рассмотрим случай простых классических жидкостей. В этом случае потенциальную энергию системы удобно записать в виде последовательности $U_N = U(1)+U(2)+U(3)+...$, где первый член – потенциальная энергия одной частицы без учета взаимодействия с другими, второй член потенциальная энергия парных взаимодействий и т.д. В состоянии равновесия, вдали от фазовых переходов, основной вклад в уравнения состояния вносит парный потенциал [4]. На рисунке 1 представлен типичный парный потенциал взаимодействия простых жидкостей.

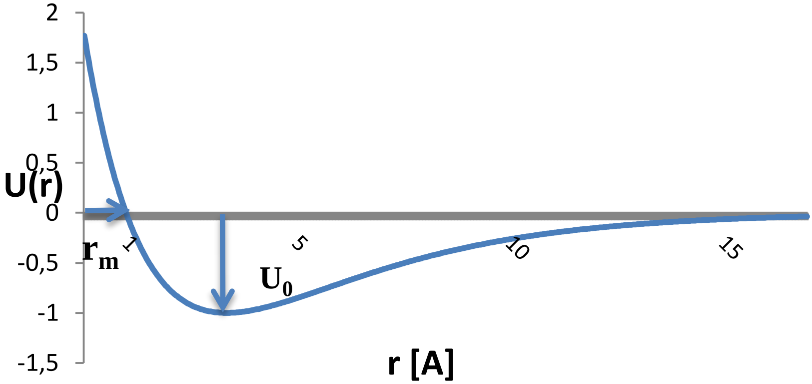

Рис. 1. Потенциал: U_0 – глубина ямы,
r_m – расстояние до минимума потенциала

Область потенциала можно разделить на три основных части, а именно:

1. Область отталкивания – область, в которой действуют обменные и кулоновские силы.

2. Промежуточная область с глобальным потенциальным минимумом, в котором преобладают электростатические, обменные, обменно-поляризационные силы, а также возможен перенос зарядов.

3. Область притяжения – область с преобладающими электростатическими мультипольными, индукционными, дисперсионными силами. На сверхдальних расстояниях преобладают релятивистские вклады в электростатическое взаимодействие и запаздывающий электронный потенциал.

Модельные межмолекулярные потенциалы. Модельные потенциалы разделяются по количеству участников взаимодействия и по набору параметров, характеризующих это взаимодействие. В самом простом случае – случае простых жидкостей – потенциал $U(r)$ парный и изотропный. Для таких систем достаточно двух и более параметров для описания взаимодействия. В случае двух параметров типичный потенциал (рис. 1) имеет глобальный минимум в области 2 и расстояние до этого минимума. Эти характеристики и вводятся как параметры.

Потенциал, описывающий свойства благородных газов – потенциал Леннарда – Джонса, его общий вид

$$U(R)=\frac{A_n}{R^n}-\frac{B_m}{R^m}. \qquad (2.5)$$

Самое большое распространение получила его форма «12-6»

$$U(R)=4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right), \qquad (2.6)$$

где ε – глубина потенциальной ямы, σ – диаметр частицы. Член m = 16 учитывает дисперсионное диполь-дипольное взаимодействие. Выбор n = 12 обусловлен математическим удобством.

Термодинамический потенциал, соответствующий каноническому ансамблю, есть свободная энергия Гельмгольца:

$$F = U_N - TS, \qquad (2.7)$$

где U и S – потенциальная энергия и энтропия системы. Связь полученной плотности вероятности с уравнением состояния осуществляется через статистическую сумму, а именно:

$$F = -\theta \ln Z_N. \qquad (2.8)$$

В природе чаще всего мы имеем дело с классическими жидкостями (вода, ее растворы, расплавы металлов, солей, полимеров и т.д.). Квантовые жидкости встречаются гораздо реже. Яркими примерам таких жидкостей могут служить ферми- и бозе-жидкости – два изотопа гелия (^{3}He, ^{4}He).

В настоящей работе рассматриваются исключительно классические системы.

3. Система уравнений Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона

Как известно, точный расчет статистической суммы возможен лишь для небольшого количества модельных систем, в основном идеальных . Поэтому в качестве альтернативного метода в работах Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона [1] был введен метод частичных функций распределения, которые для рассматриваемой в настоящей работе системы определяются как:

$$F_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_s)=\frac{V^{3s}}{Z_Q}\iiint e^{-\frac{\frac{1}{2}\sum\limits_{i,j}^{i\neq j}\Phi(r_{i,j})}{\theta}}dq_{s+1}^1...dq_N^3 \quad (3.1)$$

,

где Z_Q – конфигурационный интеграл. Частичные функции распределения подчиняются системе интегродифференциальных уравнений, в дальнейшем называемой системой ББГКИ

$$\theta\frac{\partial}{\partial q_i^\alpha}F_s+F_s\frac{\partial}{\partial q_i^\alpha}U_s+\frac{N-s}{V}\int\limits_V\frac{\partial}{\partial q_i^\alpha}\Phi(\vec{r}_i,\vec{r}_{s+1})F_{s+1}d\vec{q}_{s+1}=0, \quad (3.2)$$

где *s* = *1...N*, *α* = *1...3*, *i* = *1...N*. В термодинамическом пределе система становится бесконечной и незамкнутой. Система даже в самых простых случаях не имеет точного решения, но является основой для получения различных приближений для частичных функций распределения.

4. Методы приближенного расчета радиальной функции распределения. Приближение Кирквуда

Отправная точка данного приближения – идея о разложении радиальных функций распределения высших порядков (порядка выше второго) через радиальные функции распределения второго и первого порядка. Так, согласно этой идее для изотропной жидкости

$$F_3(1,2,3) = F_2(1,2)F_2(2,3)F_2(1,3). \qquad (4.1)$$

Подставим выражение в уравнение для $s = 2$, которое имеет вид

$$\theta \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} F_2(1,2) + F_2(1,2) \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \Phi(1,2) +$$

$$+\frac{N-2}{V}\int_V \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \Phi(1,3) F_2(1,2) F_2(2,3) F_2(1,2) d\vec{q}_3 = 0.$$

Разделим уравнение на $F_2(1, 2)$ и преобразуем производную, приходя к выражению

$$\theta \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \ln(F_2(1,2)) + \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \Phi(1,2) + \frac{N-2}{V} \int_V \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \Phi(1,3) F_2(2,3) F_2(1,3) d\vec{q}_3 = 0 \,. \qquad (4.2)$$

Введем функцию

$$E(x) = \int_\infty^x \frac{\partial}{\partial r} \Phi(r_{1,3}) F_2(r_{1,3}) dr_{1,3}, \qquad (4.3)$$

и заметим, что

$$\frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} F_2(r) = \frac{\partial E(r)}{\partial r}. \qquad (4.4)$$

Проинтегрируем уравнение по первой координате

$$\theta \ln(F_2(1,2)) + \Phi(1,2) + \frac{N-2}{V} \int_V E(13) F_2(2,3) d\vec{q}_3 = C \qquad (4.5)$$

и устремим $\vec{r}_{1,2} \to \infty \Rightarrow$ F2(1,2)→∞; $\Phi(\vec{r}_{1,2}) \to 0$. Константа С определяется соотношением

$$C = \frac{N-2}{V} \int_V E(13) d\vec{q}_3 \,. \qquad (4.6)$$

Тогда

$$\theta \ln(F_2(1,2)) + \Phi(1,2) + \frac{N-2}{V}\int\limits_V E(13)\left[F_2(2,3)-1\right]d\vec{q}_3 = 0. \qquad (4.7)$$

Данное уравнение в литературе называется уравнением Боголюбова. Как было показано в [5], оно неудовлетворительно предсказывает термодинамические свойства системы.

Гиперцепное приближение

Одно из самых известных приближений – гиперцепное приближение. Пусть

$$h(r) = F_2(r) - 1, \qquad (4.8)$$

корреляционная функция. Ее интерпретируют как физическую величину, характеризующую влияние движения второй молекулы по отношению к первой. Функция *c(r)* – прямая корреляционная функция, связанная с *h(r)* уравнением Орншетрйна – Цернике

$$h(r_{1,2}) = c(r_{1,2}) + \frac{N}{V}\int c(r_{1,3})h(r_{2,3})d3, \qquad (4.9)$$

имеет смысл корреляционного вклада третьей частицы на поведение первых двух. Аппроксимируем $F_2(1,2)$ функцией вида

$$F_2(1,2) = e^{\frac{-\Phi(1,2)}{\theta}+h(1,2)-c(1,2)} \qquad (4.10)$$

и перепишем уравнения (2.8) и (2.9). Обозначим за $b(1,2) = h(1,2) - c(1,2)$. Уравнение Орншетрйна – Цернике примет вид

$$b(1,2) = \rho\int f(\{\Phi(1,3)-\theta b(1,3)\})f(\{\Phi(2,3)-\theta b(2,3)\}) -$$
$$-b(1,3)f(\{\Phi(1,3)-\theta b(1,3)\})d3,$$

где f – функция Майера. Разлагая $b(1,2)$ в ряд по степеням плотности

$$b(1,2) = b_0(1,2) + \rho b_1(1,2) + \rho^2 b_2(1,2) + \ldots, \qquad (4.11)$$

приходим к суммированию Майеровских диаграмм вида

$$b_0(1,2)=0\,;\ b_1(1,2)=$$  $;\ b_2(1,2)=$  $;\ldots \qquad (4.12)$

Обозначения можно найти в [6]. Полученные результаты показывают, что данное приближение хорошо описывает радиальную функцию распределения для системы с короткодействующими силами взаимодействия [6].

Приближение Перкуса – Йевика

Аппроксимируем $F_2(1,2)$ функцией вида

$$F_2(1,2)=e^{\frac{-\Phi(1,2)}{\theta}}\left(1+b(1,2)\right). \qquad (4.13)$$

Выражение (4.13) получается при разложении экспоненты в ряд и учет малости поправок порядка O(n^2). Тогда уравнение (4.11) будет иметь вид

$$b(1,2)=\rho\int f(\{\Phi(1,3)\})[1+b(1,3)]\left\{f(\{\Phi(2,3)\})[1+b(2,3)]+b(2,3)\right\}d3. \qquad (4.14)$$

Уравнение (4.13) и (4.14) эквивалентно уравнению Орншетрйна – Цернике, дополненному соотношением

$$c(1,2)=f(\{\Phi(1,2)\})e^{\frac{\Phi(1,2)}{\theta}}g(1,2). \qquad (4.15)$$

Данное приближение также хорошо описывает системы с короткодействующими силами. На сегодняшний день, основной проблемой теории жидкостей является оценка диаграмм для различных систем и способ выбора их сумм.

5. Теория возмущений Боголюбова

Как было показано Боголюбовым, систему уравнения (1.9) можно использовать для получения разложения по степеням плотности выражений для функций распределения. В предположении парного взаимодействия для выбранной нами модели удобно записать выражение для радиальных функций распределения

$$F_2(1,2)=e^{-\frac{\Phi(1,2)}{\theta}}\left(1+\rho y_1(1,2)+\rho^2 y_2(1,2)+...\right). \qquad (5.1)$$

Уравнения для $y_n(1,2)$ находятся при подстановке выражения в (1.9). Данное выражение учитывает только определенный класс связных диаграмм [6]. Выражение для определения первой функции из $y_n(1,2)$ имеет вид

$$y_1(1,2)=\int_V e^{-\frac{\Phi(2,3)+\Phi(1,3)}{\theta}}d3 \qquad (5.2)$$

и может быть получено более громоздкими методами, как и последующие поправки. В частности, при помощи диаграммного метода Урселла – Майера [1]. Результаты, полученные по теории возмущения Боголюбова, справедливы для систем с низкой плотностью.

В течение последних двадцати лет в работах Ковалева, Ширкова и Пустовалова (см. обзор [12] и цитируемую там литературу) был развит метод ренормализационной группы для дифференциальных и интегродифференциальных уравнений математической физики, позволяющий улучшать решения, полученные по теории возмущений. Данный метод, основанный на классическом групповом анализе Ли, применим к уравнениям ББГКИ (3.2).

6. Метод ренормгруппы Ковалева – Ширкова – Пустовалова

Рассмотрим более подробно метод ренормгруппы Ковалева – Ширкова – Пустовалова [12]. Метод состоит из четырех шагов, представленных на рис. 2.

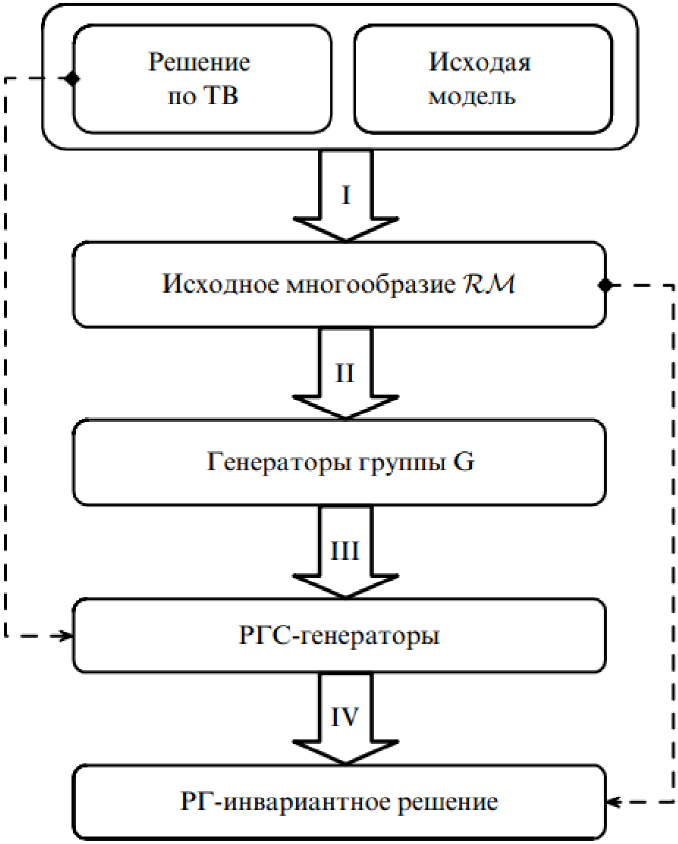

Рис. 2. Алгоритм метода ренормгруппы
Ковалева – Ширкова – Пустовалова

Рассмотрим подробно реализацию метода на примере уравнения Хопфа

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)-\varepsilon u(x,t)\frac{\partial}{\partial x}u(x,t)=0 \quad v(x,0)=\varepsilon U(x). \qquad (6.1)$$

Первый и второй шаг. Включим малый параметр ε в множество независимых переменных. Тогда, алгебра Ли состоит из генераторов

$$X_1 = f_1(x,t,u,\varepsilon)\left(\frac{\partial}{\partial t} + u\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\right); \quad X_2 = f_2(x,u,\varepsilon,x-\varepsilon ut)\frac{\partial}{\partial x} \qquad (6.2)$$

$$X_3 = f_3(x,u,\varepsilon,x-\varepsilon ut)\left(x\frac{\partial}{\partial x} + u\frac{\partial}{\partial u}\right) \quad X_4 = f_4(x,u,\varepsilon,x-\varepsilon ut)\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial \varepsilon} + x\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Третий шаг. Решение по теории возмущений имеет вид

$$u(x,0) = U(x) - \varepsilon t U(x)\frac{\partial}{\partial x}U(x) + \ldots \qquad (6.3)$$

и несправедливо только при $t \gg \varepsilon^{-1}$. Сузим полученную группу симметрии на данном решении, т.е. потребуем

$$[X_1 + X_2 + X_3 + X_4]\big(u(x,0) - \varepsilon U(x)\big)|_{u(x,0)-\varepsilon U(x)=0} = 0. \quad (6.4)$$

В результате чего получим РГ-инфинитезимальный оператор

$$R_1 = f_1(x,t,u,\varepsilon)\left(\frac{\partial}{\partial t} + u\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\right); \quad R_3 = f_4(x,u,\varepsilon,x-\varepsilon ut)\left(tu\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\right)$$

$$R_2 = f_4(x,u,\varepsilon,x-\varepsilon ut)u\left[(\varepsilon t + \frac{1}{U_{x-tu\varepsilon}})\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial u}\right] \qquad (6.5)$$

Четвертый шаг. Решая уравнения Ли для генератора R_3 (положим $\varepsilon f_4 = 1$) получим

$$x' = x + atu \quad \varepsilon' = \varepsilon + a \quad t' = t \quad u' = u. \qquad (6.6)$$

Здесь a – параметр группы, t и u – инварианты, а ε и x представляют преобразование сдвига, которые для переменной x зависят от t и u. При $\varepsilon=0$ и учете (3.24) величины x и u связаны соотношением $x=H(u)$, где $H(u)$ – функция, обратная к $U(x)$. Исключая a, t, u из (6.6) и опуская штрихи у переменных, приходим к искомому решению краевой задачи в неявной форме

$$x - \varepsilon tu(x,t) = H(u(x,t)) \quad U^{-1}(x) = H.$$

В этом случае улучшенное решение по теории возмущений восстанавливает верную асимптотику.

7. Точечные группы симметрии цепочки ББГКИ

В этом разделе для расчета группы симметрии, допускаемой цепочкой уравнений ББГКИ, мы применяем эвристический метод, развитый в [84].

Для детального изучения существующих методов группового анализа интегро-дифференциальных уравнений и связанных с этим математических проблем рекомендуем работы [29–50, 52–59, 68, 69, 72, 73, 79, 81–83] и обзорную монографию [51].

Для системы, состоящей из *N* частиц, находящихся в объеме *V* при температуре *T*, с парным потенциалом взаимодействия *Φ*, запишем систему уравнений ББГКИ в явном виде

$$\begin{cases} \theta \dfrac{\partial F_1(1)}{\partial q_i^j} + n \displaystyle\int_{V_2} F_2(1,2) \dfrac{\partial \Phi(1,2)}{\partial q_i^j} dV_2 = 0; \\ . \\ . \\ \theta \dfrac{\partial F_s(1...s)}{\partial q_i^j} + F_s(1...s) \dfrac{\partial}{\partial q_i^j} \displaystyle\sum_{k=1;k<p}^{s,s} \Phi(k,p) + n \int_{V_{s+1}} F_{s+1}(1,..s+1) \dfrac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j} dV_{s+1} = 0; \\ . \\ . \\ \theta \dfrac{\partial F_N(1...N)}{\partial q_i^j} + F_s(1...N) \dfrac{\partial}{\partial q_i^j} \displaystyle\sum_{k=1;k<p}^{N,N} \Phi(k,p) = 0; \end{cases} \quad (7.0)$$

где 1 обозначает зависимость от радиус-вектора частицы под номером 1, q_i^j – *i* проекция радиус-вектора *k* частицы на ось, Φ(1,2) – парный потенциал взаимодействия, F_s(1,...s) – нормированная на объем корреляционная функция s-го порядка.

Выберем множество $\{q_j^i, F_s(1,2,...,s)\}$ как вектор независимых величин, где *i* = 1, 2, 3; *j* = 1, ... *N*; *s* = 1, ... *N*. Введем параметр – $\frac{N-s}{V} \approx \frac{N}{V} = n$, перейдя к термодинамическому пределу.

Тогда инфинитезимальный оператор точечной группы симметрии имеет вид

$$X=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j(\vec{q},\vec{F})\frac{\partial}{\partial q_i^j}+\sum_{k=1}^{N}\eta_k(\vec{q},\vec{F})\frac{\partial}{\partial F_k}, \qquad (7.1)$$

где $\vec{q}$ и $\vec{F}$ – все наборы координат и корреляционных функций, n-атомная концентрация. Запишем явно формулы продолжения оператора на производные и интегралы [84]. Для производных они имеют вид

$$\eta_{k_{q_y^x}}(\vec{q},\vec{F})=D_{q_y^x}(\eta_k(\vec{q},\vec{F}))-\sum_{p=1}^{N}\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial F_p(1...p)}{\partial q_i^j}D_{q_y^x}(\xi_i^j(\vec{q},\vec{F})), \qquad (7.2)$$

а для интегралов

$$\tilde{I}_{s+1}^{i,j}=\int X(F_{s+1}(1,...j+1)\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i})+F_{s+1}(1,...s+1)\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}J_{s+1}^{i,j}d(s+1) \qquad (7.3)$$

или

$$\tilde{I}_{s+1}^{i,j}=\int\eta_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+F_{j+1}(j+1)X\frac{\partial\Phi(1,j+1)}{\partial q_1^i}+$$

$$+F_{s+1}(1,...s+1)\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}\left[\sum_{j=1}^{3}D_{q_{s+1}^j}(\xi_{s+1}^j(\vec{q},\vec{F}))\right]d(s+1), \qquad (7.4)$$

где $D_{q_j^k}$ – оператор полной частной производной. Запишем явный вид продолженного оператора $prX=$

$$=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j\frac{\partial}{\partial q_i^j}+\sum_{k=1}^{N}\eta^k\frac{\partial}{\partial F_k(1..k)}+\sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\eta_{q_i^j}^k\frac{\partial}{\partial[F_k(1..k)]_{q_i^j}}+$$

$+\sum_{j=0}^{N-1}\sum_{i=1}^{3}\tilde{I}_{j+1}^i\frac{\partial}{\partial J_{j+1}^i}$, где выражение $\frac{\partial}{\partial J_{j+1}^i}$ обозначает действие оператора на нелокальную часть.

Подействуем продолженным оператором на систему уравнений (7.0) и запишем результат в явном виде

$$\theta\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_i^j}+\theta\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial F_t}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}+\eta_s(\vec{q},\vec{F})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}-$$

$$-\theta\sum_{t=1}^{N}\sum_{p=1}^{t}\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial F_t}{\partial q_p^k}\left(\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_i^j}+\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial F_t}{\partial q_p^k}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}\right)+ \tag{7.5}$$

$$+F_s(1...s)X\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+n\int\eta_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+F_{s+1}X\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+$$

$$+F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial\xi_{s+1}^j(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_{s+1}^j}+F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}\sum_{t=1}^{N}\frac{\partial F_t}{\partial q_{s+1}^j}\frac{\partial\xi_{s+1}^j(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}dV_{s+1}\Bigg|_{\vec{F}=0}\equiv 0,$$

где $\vec{F}=0$ – исследуемое многообразие. Выразим из системы ББГКИ частные производные вида $\dfrac{\partial F_s(1,...,s)}{\partial q_1^i}$, а именно

$$\frac{\partial F_s}{\partial q_1^i}=-\frac{1}{\theta}F_s\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}-\frac{n}{\theta}\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1} \tag{7.6}$$

и подставим в (7.5). Результат имеет вид

$$\theta\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1}^{N}\left[F_t\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}+n\int_{V_{s+1}}F_{t+1}\frac{\partial\Phi(1,t+1)}{\partial q_i^j}dV_{t+1}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}\right]+$$

$$+\eta_s(\vec{q},\vec{F})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\sum_{t=1}^{N}\sum_{p=1}^{t}\sum_{k=1}^{3}\left(\left(F_t(1,2...t)\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_p^k}+\right.\right.$$

$$\left.+n\int_{V_{s+1}}F_{t+1}\frac{\partial\Phi(1,t+1)}{\partial q_p^k}dV_{t+1}\right)\left(\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1}^{N}F_t(1,2...t)\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}+\right.$$

$$\left.\left.+n\int_{V_{s+1}}F_{t+1}\frac{\partial\Phi(1,t+1)}{\partial q_i^j}dV_{t+1}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}\right)\right)+F_s(1...s)X\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+$$

$$+n\int\eta_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+F_{s+1}X\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+\sum_{r=1}^{3}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_{s+1}^r}+$$

$$+F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}\sum_{t=1}^{N}F_t\sum_{k=1;k<p}^{t,t}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_{s+1}^r}\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}+ \tag{7.7}$$

$$+F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}n\int\limits_{V_{s+1}}F_{t+1}\frac{\partial\Phi(s+1,t+1)}{\partial q_{s+1}^r}dV_{t+1}\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}dV_{s+1}\equiv 0.$$

Данное уравнение является определяющим. Обратим внимание на присутствие в этом уравнении локальной и нелокальной части.

Подействуем оператором второй вариационной производной на определяющее уравнение (7.8)

$$\frac{\delta^2}{\delta F_{t'+1}\delta F_{t''+1}}:\frac{\partial\Phi(s'+1,t'+1)}{\partial q_{s'+1}^r}\frac{\partial\Phi(s''+1,t''+1)}{\partial q_{s'+1}^r}\left(\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q}\,',\vec{F}\,')}{\partial F_t}-\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}\right)=0,$$

где штрихом обозначен аргумент вариационной производной.

Решение этих уравнений есть функции

$$\xi_i^j=\xi_i^j(\vec{q}).$$

С учетом этого условия определяющее уравнение имеет вид

$$\theta\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1}^{N}\left[F_t\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}+n\int\limits_{V_{s+1}}F_{t+1}\frac{\partial\Phi(1,t+1)}{\partial q_i^j}dV_{t+1}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}\right]+$$

$$+\eta_s(\vec{q},\vec{F})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\sum_{t=1}^{N}\sum_{p=1}^{t}\sum_{k=1}^{3}\left(\left(F_t(1,2...t)\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_p^k}+\right.\right.$$

$$\left.\left.+n\int\limits_{V_{s+1}}F_{t+1}\frac{\partial\Phi(1,t+1)}{\partial q_p^k}dV_{t+1}\right)\left(\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q})}{\partial q_i^j}\right)\right)+F_s(1...s)X\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+$$

$$+n\int\eta_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+F_{s+1}X\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+\sum_{r=1}^{3}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q})}{\partial q_{s+1}^r}dV_{s+1}\equiv 0.$$

Подействуем операторами первой вариационной производной $\frac{\delta}{\delta F_{s+1}}$ и $\frac{\delta}{\delta F_{s+2}}$ на данное уравнение. Полученное выражение имеет вид

$$\frac{\delta}{\delta F_{s+2}}:\frac{\partial\Phi(1,s+2)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_{s+1}}+\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q'})}{\partial q_i^j}\frac{\partial\Phi(1,s+2)}{\partial q_i^j}+\eta_{s+1F_{S+2}}(\vec{q},\vec{F})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}=0;$$

$$\frac{\delta}{\delta F_{s+1}}:\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_s}+\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q'})}{\partial q_i^j}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}+\eta_{s+1F_{S+1}}(\vec{q},\vec{F})\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_1^i}+$$

$$+X\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_1^i}+\sum_{r=1}^{3}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q}')}{\partial q_{s+1}^r}dV_{s+1}=0. \tag{7.9}$$

Преобразуем исходное определяющее уравнение.

$$\theta\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1}^{N}\left[F_t\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_t}\right]+$$

$$+\eta_s(\vec{q},\vec{F})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\sum_{t=1}^{N}\sum_{p=1}^{t}\sum_{k=1}^{3}\left(F_t(1,2...t)\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_p^k}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q})}{\partial q_i^j}\right)+$$

$$+F_s(1...s)X\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+n\int\eta_{s+1}^0(\vec{q})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}dV_{s+1}\equiv 0,$$

где $\eta_{s+1}(\vec{q})=\eta_{s+1}^0(\vec{q})+\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})$. Перепишем уравнение в виде.

$$\theta\frac{\partial\eta_{s+1}^0(\vec{q})}{\partial q_i^j}+\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\frac{\partial\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1}^{N}\left[F_t\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial}{\partial F_t}\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})\right]+$$

$$+\eta_{s+1}^0(\vec{q})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+$$

$$+\sum_{t=1}^{N}\sum_{p=1}^{t}\sum_{k=1}^{3}\left(F_t(1,2...t)\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_p^k}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q})}{\partial q_i^j}\right)+$$

$$+F_s(1...s)X\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+n\int\eta_{s+1}^0(\vec{q})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}dV_{s+1}\equiv 0.$$

Заметим, что

$$\theta\frac{\partial\eta_{s+1}^{0}(\vec{q})}{\partial q_i^j}+\eta_{s+1}^{0}(\vec{q})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+n\int\eta_{s+1}^{0}(\vec{q})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}dV_{s+1}\equiv 0$$
.

Так как $\eta_{s+1}^{0}(\vec{q})$ является решением цепочки, преобразуем полученное выражение и приходим к

$$\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\frac{\partial\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1}^{N}\left[F_t\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial}{\partial F_t}\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})\right]+$$

$$\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\sum_{t=1}^{N}\sum_{p=1}^{t}\sum_{k=1}^{3}\left(F_t(1,2...t)\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_p^k}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q})}{\partial q_i^j}\right)+$$

$$+F_s(1...s)X\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\equiv 0$$
.

В результате получаем систему

$$\frac{\partial\Phi(1,s+2)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_{s+1}}+\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q}')}{\partial q_i^j}\frac{\partial\Phi(1,s+2)}{\partial q_i^j}+\eta_{s+1F_{S+2}}(\vec{q},\vec{F})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}=0$$
;

$$\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta_s(\vec{q},\vec{F})}{\partial F_s}+\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q}')}{\partial q_i^j}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}+\eta_{s+1F_{S+1}}(\vec{q},\vec{F})\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_1^i}+$$

$$+X\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_1^i}+\sum_{r=1}^{3}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\xi_{s+1}^r(\vec{q}')}{\partial q_{s+1}^r}dV_{s+1}=0$$
.

$$\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\frac{\partial\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1}^{N}\left[F_t\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial}{\partial F_t}\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})\right]+$$

$$\sum_{w=1}^{N}\sum_{n=1}^{+\infty}F_w^n\eta_{w,s+1}^{(n)}(\vec{q})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\sum_{t=1}^{N}\sum_{p=1}^{t}\sum_{k=1}^{3}\left(F_t(1,2...t)\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_p^k}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{q})}{\partial q_i^j}\right)+$$

$$+F_s(1...s)X\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\equiv 0$$
.

Для произвольного парного межчастичного потенциала система уравнений имеет решение

$$\eta_1 = \lambda F_1 + \eta_1^0(1),$$
$$\eta_s = \lambda F_s + \eta_s^0(1 \dots s),$$
$$\eta_N = \lambda F_N + \eta_N^0(1 \dots N),$$
$$\xi_i^j = 0. \qquad (7.10)$$

Для изотропного межчастичного потенциала система уравнений имеет решение

$$\eta_1 = \lambda_1 F_1 + \eta_1^0(1),$$
$$\eta_s = \lambda_1 F_s + \eta_s^0(1 \dots s),$$
$$\eta_N = \lambda_1 F_N + \eta_N^0(1 \dots N),$$
$$\xi_i^j = \lambda_2. \qquad (7.11)$$

Рассмотрим возможность расширения группы при помощи введения дополнительных параметров в множество независимых величин. Введем новое множество независимых величин $\vec{R} = \{q_j^i, F_s(1,2,\dots,s), \theta, n\}$, где θ, n – соответственно температура (в единицах энергии) и атомная концентрация. Искать симметрии будем в классе точных классических локальных групп. Инфинитезимальным оператором такого множества независимых величин является выражение

$$X = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j(\vec{R})\frac{\partial}{\partial q_i^j} + \sum_{k=1}^{N}\eta^k(\vec{R})\frac{\partial}{\partial F_k(1..k)} + \alpha(\vec{R})\frac{\partial}{\partial \theta} + \beta(\vec{R})\frac{\partial}{\partial n}. \qquad (7.12)$$

Для проверки предыдущего результата воспользуемся каноническим оператором для нахождения компонент векторного поля. Каноническая форма инфинитезимального оператора имеет вид

$$X - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j D_{q_i^j} = Y = \sum_{k=1}^{N}\left(\eta^k(\vec{R}) - \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j\frac{\partial F_k}{\partial q_i^j}\right)\frac{\partial}{\partial F_k} + \alpha(\vec{R})\frac{\partial}{\partial \theta} + \beta(\vec{R})\frac{\partial}{\partial n}.$$

Обозначим $\overset{k}{\eta}(\vec{R}) = \eta^k(\vec{R}) - \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j \frac{\partial F_k}{\partial q_i^j}$. Формула продолжения канонического оператора на производные имеет вид

$$\overset{k}{\eta}(\vec{R})_{q_y^x}(\vec{q},\vec{F}) = D_{q_y^x}(\overset{k}{\eta}(\vec{R})).$$

Формула продолжения на нелокальные части системы уравнений имеет вид

$$\tilde{I}_{s+1}^{i,j} = \int \overset{k}{\eta}(\vec{R}) \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i} dV_{s+1}.$$

Учитывая это, запишем продолженный канонический оператор.

$$prY = \sum_{k=1}^{N} \overset{k}{\eta}(\vec{R}) \frac{\partial}{\partial F_k} + \sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{3} D_{q_i^j}(\overset{k}{\eta}(\vec{R})) \frac{\partial}{\partial [F_k]_{q_i^j}} + \sum_{j=0}^{N-1}\sum_{i=1}^{3} \tilde{I}_{j+1}^{i} \frac{\partial}{\partial J_{j+1}^{i}} + \alpha(\vec{R})\frac{\partial}{\partial \theta} + \beta(\vec{R})\frac{\partial}{\partial n}.$$

Подействуем продолженным оператором на систему (7.0). Выпишем результат в явном виде.

$$\theta D_{q_i^j}(\overset{s}{\eta}(\vec{R})) + \alpha(\vec{R})\frac{\partial F_s}{\partial q_i^j} + \overset{s}{\eta}(\vec{R}) \sum_{k=1;k<p}^{s,s} \frac{\partial \Phi(k,p)}{\partial q_i^j} + \tag{7.13}$$

$$+\beta(\vec{R}) \int_{V_{s+1}} F_{s+1} \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j} dV_{s+1} + n \int \overset{s+1}{\eta}(\vec{R}) \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i} dV_{s+1} \Bigg|_{\vec{F}=0} \equiv 0$$

Обратим внимание на компоненты векторного поля, отвечающие за преобразование плотности и температуры. Так как они могут быть внесены под знак интеграла, то и компоненты векторного поля должны обладать этим свойством. Из этого следует условие

$$\alpha = \alpha(\vec{R}) = \alpha(n,\theta)$$

$$\beta = \beta(\vec{R}) = \beta(n,\theta).$$

Тогда (7.13) перепишется в виде

$$\theta D_{q_i^j}(\eta^s(\vec{R})-\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j\frac{\partial F_s}{\partial q_i^j})+\alpha(n,\theta)\frac{\partial F_s}{\partial q_i^j}+\left(\eta^s(\vec{R})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\right)-$$

$$-\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j\frac{\partial F_s}{\partial q_i^j}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\beta(n,\theta)\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}+$$

$$+n\int\left(\eta^{s+1}(\vec{R})-\sum_{i=1}^{s+1}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j\frac{\partial F_{s+1}}{\partial q_i^j}\right)\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}dV_{s+1}\Bigg|_{\vec{F}=0}\equiv 0 \tag{7.14}$$

Распишем формулы продолжения в явном виде

$$\theta\frac{\partial\eta^s(\vec{R})}{\partial q_i^j}+\theta\sum_k^N\frac{\partial F_k}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta^s(\vec{R})}{\partial F_k}-\theta\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial q_i^j}+\sum_k^N\frac{\partial F_k}{\partial q_i^j}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial F_k}\right)\frac{\partial F_s}{\partial q_i^j}+$$

$$-\theta\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j(\vec{R})\frac{\partial^2 F_s}{\partial(q_i^j)^2}+\alpha(n,\theta)\frac{\partial F_s}{\partial q_i^j}+\eta^s(\vec{R})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}-$$

$$-\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j\frac{\partial F_s}{\partial q_i^j}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\beta(n,\theta)\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}+$$

$$+n\int\left(\eta^{s+1}(\vec{R})-\sum_{i=1}^{s+1}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j\frac{\partial F_{s+1}}{\partial q_i^j}\right)\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}dV_{s+1}\Bigg|_{\vec{F}=0}\equiv 0\,. \tag{7.15}$$

Учитывая условие $\vec{F}$ = 0, получаем определяющее уравнение

$$\theta\frac{\partial\eta^s(\vec{R})}{\partial q_i^j}-\sum_k^N F_k\sum_{t=1;t<p}^{k,k}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta^s(\vec{R})}{\partial F_k}-\sum_k^N n\int_{V_{k+1}}F_{k+1}\frac{\partial\Phi(1,k+1)}{\partial q_i^j}dV_{k+1}\frac{\partial\eta^s(\vec{R})}{\partial F_k}$$

$$+\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial q_i^j}F_s\sum_{t=1;t<p}^{k,k}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_i^j}+\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial q_i^j}n\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}+$$

$$+\sum_k^N\left(\frac{1}{\theta}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial F_k}\left(F_sF_k\sum_{t=1;t<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_i^j}\sum_{t=1;t<p}^{k,k}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_i^j}+\right.\right.$$

$$+F_k \sum_{t=1;t<p}^{k,k} \frac{\partial \Phi(t,p)}{\partial q_i^j} n \int\limits_{V_{s+1}} F_{s+1} \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j} dV_{s+1} \Bigg) + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \xi_i^j(\vec{R})}{\partial F_k} \Bigg(F_s \sum_{t=1;t<p}^{s,s} \frac{\partial \Phi(t,p)}{\partial q_i^j} \cdot$$

$$\cdot n \int\limits_{V_{k+1}} F_{k+1} \frac{\partial \Phi(1,k+1)}{\partial q_i^j} dV_{k+1} + n^2 \int\limits_{V_{k+1}} F_{k+1} \frac{\partial \Phi(1,k+1)}{\partial q_i^j} dV_{k+1} \int\limits_{V_{s+1}} F_{s+1} \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j} dV_{s+1} \Bigg)\Bigg) -$$

$$-\theta \sum_{i=1}^{s} \sum_{j=1}^{3} \xi_i^j(\vec{R}) \frac{\partial^2 F_s}{\partial (q_i^j)^2} - \frac{\alpha(n,\theta)}{\theta} F_s \sum_{k=1;k<p}^{s,s} \frac{\partial \Phi(k,p)}{\partial q_i^j} -$$

$$-\frac{\alpha(n,\theta) n}{\theta} \int\limits_{V_{s+1}} F_{s+1} \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j} dV_{s+1} + \eta^s(\vec{R}) \sum_{k=1;k<p}^{s,s} \frac{\partial \Phi(k,p)}{\partial q_i^j} +$$

$$+\sum_{i=1}^{s} \sum_{j=1}^{3} \Bigg(\frac{\xi_i^j}{\theta} F_s \sum_{k=1;k<p}^{s,s} \frac{\partial \Phi(k,p)}{\partial q_i^j} \sum_{k=1;k<p}^{s,s} \frac{\partial \Phi(k,p)}{\partial q_i^j} + +\beta(n,\theta) \int\limits_{V_{s+1}} F_{s+1} \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j} dV_{s+1} +$$

$$+\sum_{k=1;k<p}^{s,s} \frac{\partial \Phi(k,p)}{\partial q_i^j} \frac{\xi_i^j n}{\theta} \int\limits_{V_{s+1}} F_{s+1} \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j} dV_{s+1} \Bigg) +$$

$$+n \int \eta^{s+1}(\vec{R}) \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i} + \frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i} \frac{1}{\theta} \sum_{i=1}^{s+2} \sum_{j=1}^{3} \xi_i^j F_s \sum_{k=1;k<p}^{s+1,s+1} \frac{\partial \Phi(k,p)}{\partial q_i^j} +$$

$$+\frac{\partial \Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i} \frac{\xi_i^j n}{\theta} \int\limits_{V_{s+1}} F_{s+2} \frac{\partial \Phi(1,s+2)}{\partial q_i^j} dV_{s+2} dV_{s+1} \equiv 0 \quad . \qquad (7.16)$$

Подействуем оператором второй вариационной производной на определяющее уравнение. Результат имеет вид

$$\frac{\delta^2}{\delta F_{s'+1} \delta F_{s'+1}} : \frac{\partial \xi_i^j(\vec{R})}{\partial F_k} - \frac{\partial \xi_i^j(\vec{R}')}{\partial F_k} = 0 .$$

Решение этих уравнений есть функции

$$\xi_i^j = \xi_i^j(\vec{q}, n, \theta) .$$

Перепишем с учетом этого условия определяющее уравнение. Оно имеет вид

$$\theta \frac{\partial \eta^s(\vec{R})}{\partial q_i^j} - \sum_{k}^{N} F_k \sum_{t=1;t<p}^{k,k} \frac{\partial \Phi(t,p)}{\partial q_i^j} \frac{\partial \eta^s(\vec{R})}{\partial F_k} - \sum_{k}^{N} n \int\limits_{V_{k+1}} F_{k+1} \frac{\partial \Phi(1,k+1)}{\partial q_i^j} dV_{k+1} \frac{\partial \eta^s(\vec{R})}{\partial F_k} +$$

$$+\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial q_i^j}F_s\sum_{t=1;t<p}^{k,k}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_i^j}+\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial q_i^j}n\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}-$$

$$-\theta\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j(\vec{R})\frac{\partial^2 F_s}{\partial(q_i^j)^2}-\frac{\alpha(n,\theta)}{\theta}F_s\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}-$$

$$-\frac{\alpha(n,\theta)n}{\theta}\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}+\eta^s(\vec{R})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+$$

$$+\beta(n,\theta)\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}+\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\xi_i^j}{\theta}F_s\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\right.$$

$$\left.+\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\xi_i^j n}{\theta}\int_{V_{s+1}}F_{s+1}\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}\right)+ \qquad (7.17)$$

$$+n\int\eta^{s+1}(\vec{R})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}+\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}\frac{1}{\theta}\sum_{i=1}^{s+2}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j F_s\sum_{k=1;k<p}^{s+1,s+1}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}dV_{s+1}\equiv 0$$

.

Подействуем операторами первой вариационной производной $\frac{\delta}{\delta F_{s+1}}$ и $\frac{\delta}{\delta F_{s+2}}$ на уравнение (7.17). Полученное выражение имеет вид

$$\frac{\delta}{\delta F_{s+1}}:\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}\frac{\partial\eta^s(\vec{R})}{\partial F_k}n+n\frac{\partial\xi_i^j(\vec{R})}{\partial q_i^j}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}-$$

$$-\frac{\alpha(n,\theta)n}{\theta}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}+\beta(n,\theta)\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}+$$

$$+\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}\frac{\xi_i^j(\vec{R})n}{\theta}+n\eta^{s+1}{}_{F_{s+1}}(\vec{R}')\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_1^i}+$$

$$+n\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_1^i}\frac{1}{\theta}\sum_{i=1}^{s+2}\sum_{j=1}^{3}\xi_i^j(\vec{R}')\sum_{k=1;k<p}^{s+1,s+1}\frac{\partial\Phi(k',p')}{\partial q_i^j}=0$$

$$\frac{\delta}{\delta F_{s+2}}:s\neq k\frac{\partial\eta^s(\vec{R})}{\partial F_k}=0$$

.

Решение второго уравнений являются функции $\eta^s=\eta^s(q,F_s,n,\theta)$. Разложим функции η^s в формальный ряд по степеням корреляционной функции порядка *s*. Из первого уравнения следует $\eta^{s}=\eta_{s}^{0}(q,n,\theta)+\eta_{s}^{1}(q,n,\theta)F_{s}$. Тогда первое уравнение имеет вид

$$\frac{\delta}{\delta F_{s+1}}:\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_{i}^{j}}\eta_{s}^{1}(\vec{R})n+n\frac{\partial\xi_{i}^{j}(\vec{R})}{\partial q_{i}^{j}}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_{i}^{j}}-$$

$$-\frac{\alpha(n,\theta)n}{\theta}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_{i}^{j}}+\beta(n,\theta)\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_{i}^{j}}+$$

$$+\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_{i}^{j}}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_{i}^{j}}\frac{\xi_{i}^{j}(\vec{R})n}{\theta}+n\eta_{s+1}^{1}(\vec{R}')\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_{1}^{i}}+$$

$$+n\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_{1}^{i}}\frac{1}{\theta}\sum_{i=1}^{s+2}\sum_{j=1}^{3}\xi_{i}^{j}(\vec{R}')\sum_{k=1;k<p}^{s+1,s+1}\frac{\partial\Phi(k',p')}{\partial q_{i}^{j}}=0.$$

Перепишем далее определяющее уравнение

$$\theta\frac{\partial\eta_{s}^{0}(\vec{R})}{\partial q_{i}^{j}}-\sum_{t=1;t<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_{i}^{j}}F_{s}\eta_{s}^{1}(n,\theta)-n\int\limits_{V_{k+1}}F_{k+1}\frac{\partial\Phi(1,k+1)}{\partial q_{i}^{j}}dV_{k+1}\eta_{s}^{1}(n,\theta)+$$

$$+\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial\xi_{i}^{j}(\vec{R})}{\partial q_{i}^{j}}F_{s}\sum_{t=1;t<p}^{k,k}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_{i}^{j}}-$$

$$-\theta\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\xi_{i}^{j}(\vec{R})\frac{\partial^{2}F_{s}}{\partial(q_{i}^{j})^{2}}-\frac{\alpha(n,\theta)}{\theta}F_{s}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_{i}^{j}}+\eta^{s}(\vec{R})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_{i}^{j}}+$$

$$+\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{3}\frac{\xi_{i}^{j}}{\theta}F_{s}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_{i}^{j}}\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_{i}^{j}}+$$

$$+n\int\eta_{s+1}^{0}(\vec{R})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_{1}^{i}}dV_{s+1}\equiv 0. \qquad (7.18)$$

Отметим единственность слагаемого $\frac{\partial^{2}F_{s}}{\partial(q_{i}^{j})^{2}}$. Из этого следует $\xi_{i}^{j}(\vec{R})=0$. Из этого следует также тождество между канонической и обычной формой и инфинитезимального оператора.

Перепишем систему определяющих уравнений. Она теперь имеет вид

$$\theta\frac{\partial\eta_s^0(\vec{R})}{\partial q_i^j}-\sum_{t=1;t<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(t,p)}{\partial q_i^j}F_s\eta_s^1(n,\theta)-n\int\limits_{V_{k+1}}F_{k+1}\frac{\partial\Phi(1,k+1)}{\partial q_i^j}dV_{k+1}\eta_s^1(n,\theta)-$$

$$-\frac{\alpha(n,\theta)}{\theta}F_s\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+\eta^s(\vec{R})\sum_{k=1;k<p}^{s,s}\frac{\partial\Phi(k,p)}{\partial q_i^j}+$$

$$+n\int\eta_{s+1}^0(\vec{R})\frac{\partial\Phi(1,s+1)}{\partial q_1^i}dV_{s+1}\equiv 0\cdot \tag{7.19}$$

$$\frac{\delta}{\delta F_{s+1}}:\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}\eta_s^1(\vec{R})n-\frac{\alpha(n,\theta)n}{\theta}\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}+\beta(n,\theta)\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_i^j}+$$

$$+n\eta_{s+1}^1(\vec{R}')\frac{\partial\Phi(1,s'+1)}{\partial q_1^i}=0.$$

Решение данной системы имеет вид

$$\eta_1=\lambda_1(n,\theta)F_1+\eta_1^0(1)$$
$$\eta_s=\lambda_1(n,\theta)F_s+\eta_s^0(1...s)$$
$$\eta_N=\lambda_1(n,\theta)F_N+\eta_N^0(1...N)$$
$$\xi_i^j=0$$
$$\alpha=\beta=0.$$

Для изотропной системы

$$\eta_1=\lambda_1(n,\theta)F_1+\eta_1^0(1)$$
$$\eta_s=\lambda_1(n,\theta)F_s+\eta_s^0(1...s)$$
$$\eta_N=\lambda_1(n,\theta)F_N+\eta_N^0(1...N)$$
$$\xi_i^j=\xi_i^j(n,\theta)$$
$$\alpha=\beta=0.$$

Отметим, что данная группа содержит раннее полученные нами группы трансляций по координатам и трансляций и растяжений по корреляционным функциям.

8. Ренормгруппы

Выпишем полученные результаты в таблицу 1.

Таблица 1

Инфинитезимальные операторы цепочки ББГКИ

Множество переменных	Инфинитезимальный оператор
$w_1=\{q_1^1,...q_i^j,...,F_1,...F_s,...\}$	$\hat{X}^1=\sum_{i=1}^{\infty}\{F_i\lambda_1+\beta_iF_i*\}\frac{\partial}{\partial F_i}$
$w_2=\{q_1^1,...q_i^j,...,F_1,...F_s,...n,\theta\}$	$\hat{X}^2=\sum_{i=1}^{\infty}\{\lambda(n,\theta)F_i+\beta_iF_i*\}\frac{\partial}{\partial F_i}$
$w_3=\{q_1^1,...q_i^j,...F_1,...F_s,...\Phi\}$	$\hat{X}^3=\sum_{i=1}^{\infty}\{F_i\lambda_1+\beta_3F_i*\}\frac{\partial}{\partial F_i}+(\mu+\beta_2\Phi*)\frac{\partial}{\partial\Phi}$
$w_4=\{q_1^1,...q_i^j,...\Phi\}$	$\hat{X}^4=(\rho+\lambda_1\Phi^*)\frac{\partial}{\partial\Phi}$
$w_5=\{q_1^1,...q_i^j,...\Phi,n,\theta\}$	$\hat{X}^5=(\rho(n,\theta)+\lambda_1(n,\theta)\Phi^*)\frac{\partial}{\partial\Phi}$
$w_6=\{q_1^1,...q_i^j,...,F_1,...F_s,...\Phi,n,\theta\}$	$\hat{X}^6=\sum_{i=1}^{\infty}\{F_i\lambda_1(n,\theta)+\beta_3(n,\theta)F_i*\}\frac{\partial}{\partial F_i}+\beta_4(n,\theta)\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+$ $+(\mu(n,\theta)+\beta_2(n,\theta)\Phi*+\Phi\beta_4(n,\theta))\frac{\partial}{\partial\Phi}$

Выберем третий оператор из таблицы 1

$$\hat{X}^3=\sum_{i=1}^{\infty}\{F_i\lambda_1+\beta_3F_i*\}\frac{\partial}{\partial F_i}+(\mu+\beta_2\Phi*)\frac{\partial}{\partial\Phi}, \qquad (8.1)$$

как пример для построения ренормгруппы. Тогда, этот оператор определяет группу допустимых ренормгрупповых преобразований тогда и только тогда, когда инфинитезимальный оператор удовлетворяет критерию инвариантности

$$X_3\left(F_2-e^{-\frac{\Phi(1,2)}{\theta}}\left(1+\rho y_1(1,2)+\rho^2y_2(1,2)+...\right)\right)\Big|_{(1.4)}=0 \qquad (8.2)$$

Ренормгрупповой оператор для (8.1) иметь вид

$$\hat{X}^3 = \sum_{i=1}^{\infty} \{F_i \mu\} \frac{\partial}{\partial F_i} + (\mu) \frac{\partial}{\partial \Phi} \qquad (8.3)$$

Аналогично третьему инфинитезимальному оператору выпишем в таблицу 2 полученные ренормгрупповые операторы для всех операторов.

Таблица 2

Ренормгрупповые инфинитезимальные операторы

Множество	Ренормгрупповой инфинитезимальный оператор
$w_1 = \{q_1^1, ...q_i^j, ..., F_1, ...F_s, ...\}$	$\hat{X}^1 = 0 \frac{\partial}{\partial F_i}$
$w_2 = \{q_1^1, ...q_i^j, ..., F_1, ...F_s, ...n, \theta\}$	$\hat{X}^2 = 0 \frac{\partial}{\partial F_i}$
$w_3 = \{q_1^1, ...q_i^j, ...F_1, ...F_s, ...\Phi\}$	$\hat{X}^3 = \sum_{i=1}^{\infty} \{F_i \mu\} \frac{\partial}{\partial F_i} + (\mu) \frac{\partial}{\partial \Phi}$
$w_4 = \{q_1^1, ...q_i^j, ...\Phi\}$	$\hat{X}^2 = 0 \frac{\partial}{\partial F_i}$
$w_5 = \{q_1^1, ...q_i^j, ...\Phi, n, \theta\}$	$\hat{X}^2 = 0 \frac{\partial}{\partial F_i}$
$w_6 = \{q_1^1, ...q_i^j, ..., F_1, ...F_s, ...\Phi, n, \theta\}$	$\hat{X}^6 = \beta_4(n,\theta)\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \Phi \beta_4(n,\theta) \frac{\partial}{\partial \Phi}$

Запишем для шестого оператора из таблицы 2 уравнение, определяющее инвариантное решение для цепочки ББГКИ. Оно имеет вид

$$\frac{d\theta}{\beta(n,\theta)\theta} = \frac{d\Phi}{\beta(n,\theta)\Phi}.$$

Решение такого уравнения есть соотношение

$$\frac{\Phi}{\theta} = \lambda = const.$$

Третий оператор приводит экспоненциальной зависимости корреляционной функции от потенциала Ф, то есть РГ-инвариантные решения воспроизводят известный результат нулевого приближения теории возмущений.

Таким образом, группы преобразований, рассчитанные эвристическким методом Завистовского [84] недостаточно «богаты» для построения РГ-операторов, улучшающих решение по теории возмущений. В то же время расчет по алгоритму, изложенному в работе [84], приводит к тем же результатам, что подтверждает их справедливость. Остается открытым вопрос, является ли найденная группа полной группой симметрии, допускаемой уравнениями ББГКИ? Дальнейшая работа состоит в поиске ответа на этот вопрос, а также в расчете нелокальных симметрий.

Приложение 1

Группа эквивалентности. Принцип априорного использования симметрий

В настоящем приложении мы рассмотрим группу эквивалентности, обобщающую понятие классической группы преобразований.

До сих пор рассматривались уравнения, которые не содержали никаких произвольных элементов (свободных параметров, функций). Если принять во внимание этот факт, то возникает более общая задача.

Будем рассматривать ее на конкретном примере обобщенного уравнения теплопроводности $u_t = F(x,u)u_{xx}$, где $F(x,u)$ – произвольная гладкая функция.

Естественно, что эта функция сужает группу симметрий уравнения, поскольку в силу произвольного характера зависимости $F(x,u)$ преобразования переменных x и u невозможны.

В этом случае возникает задача групповой классификации, состоящая в нахождении всех возможных значений произвольного элемента, при которых группа симметрии расширяется по сравнению с исходной группой.

Для решения задачи групповой классификации вводится понятие группы эквивалентности.

Как было сказано ранее, группа симметрии – это группа преобразований, которая оставляет уравнение неизменным: $\bar{u}_{\bar{t}} = F(\bar{x},\bar{u})\bar{u}_{\bar{x}\bar{x}}$.

Группой эквивалентности называется группа преобразований зависимых и независимых переменных, которая не меняет вида уравнения, но при этом может менять вид произвольного элемента: $\bar{u}_{\bar{t}} = \bar{F}(\bar{x},\bar{u})\bar{u}_{\bar{x}\bar{x}}$.

Иными словами, когда ищется преобразование эквивалентности, произвольный элемент рассматривается как новая переменная.

Очевидно, что группа эквивалентности включает в себя группу симметрии, которая допускается при произвольном элементе. С. Ли и Л.В. Овсянников определяют генератор группы эквивалентности следующим образом:

$$\hat{X}^{\varepsilon} = \xi(x,t,u)\frac{\partial}{\partial x} + \tau(x,t,u)\frac{\partial}{\partial t} + \varphi(x,t,u)\frac{\partial}{\partial u} + \psi(x,t,u,F)\frac{\partial}{\partial F}. \quad (\text{П}.1.1)$$

Чтобы вычислить группу эквивалентности, нужно подействовать этим оператором не только на исходное уравнение, но и на дополнительные связи, которые оно предполагает.

В нашем уравнении $u_t = Fu_{xx}$ произвольная функция F от x и u, поэтому нужно добавить условие $F_t = 0$.

Таким образом, генератором нужно действовать на систему уравнений:

$$\begin{cases} u_t = Fu_{xx}, \\ F_t = 0. \end{cases} \quad (\text{П}.1.2)$$

Существует общее определение группы эквивалентности [16], в котором от произвольного элемента зависят все компоненты векторного поля. В этом случае расчеты значительно усложняются, но появляется возможность расширения группы преобразований.

Итак, что же дает группа эквивалентности? Она позволяет провести групповую классификацию (перечислить все свободные элементы, при которых симметрия будет шире, чем при произвольном F и на ее основе выбирать определенные модели, имеющие физический смысл. Задача групповой классификации выходит за рамки нашей работы (см. [16]).

Ограничимся полезной теоремой, доказанной Н.Х. Ибрагимовым в 1986 году [11]. Сформулируем ее на примере рассмотренного уравнения теплопроводности.

Пусть известен генератор эквиваленции $\hat{X}^{\varepsilon}$.

Вначале построим проекцию на основное пространство переменных, то есть оставим только те слагаемые генератора, которые зависят от $x, t,$ и u:

$$prX^{\varepsilon}(x,t,u) = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \tau\frac{\partial}{\partial t} + \varphi\frac{\partial}{\partial u} = \tilde{X}_1^{\varepsilon}. \qquad (\text{П.1.3})$$

Теперь построим проекцию на пространство тех переменных, от которых зависит F и на саму F:

$$prX^{\varepsilon}(x,u,F) = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \varphi\frac{\partial}{\partial u} + \psi\frac{\partial}{\partial F} = \tilde{X}_2^{\varepsilon}. \qquad (\text{П.1.4})$$

Теорема о проекциях. Пусть произвольный элемент F удовлетворяет следующему уравнению:

$$\tilde{X}_2^{\varepsilon}\big(F - F(x,u)\big) = 0, \text{то есть } \psi - \xi\frac{\partial F}{\partial x} - \varphi\frac{\partial F}{\partial u} = 0. \qquad (\text{П.1.5})$$

Тогда для такого произвольного элемента уравнение допускает группу симметрии с генератором $\tilde{X}_1^{\varepsilon}$.

Что же дает данная теорема? Предположим, есть некоторая модель с «бедной» группой симметрии. Тогда можно погрузить ее в более общую модель, содержащую произвольные элементы, найти группу эквивалентности и с помощью теоремы о проекциях множество допускаемых симметрий.

Другими словами, всегда можно погрузить уравнение с бедной симметрией в более широкую модель с более богатой симметрией и находить новые решения. Это называется принципом априорного использования симметрий [11].

Рассмотрим в качестве примера обобщенное волновое уравнение, полная групповая классификация которого проведена в [70]:

$$f = u_{tt} - u_{xx} + F(x,t,u)\cdot u_t + Q(x,t,u) = 0, \qquad (\text{П.1.6})$$

где u может иметь смысл компоненты напряженности электрического поля.

Задача состоит в том, чтобы найти группы симметрий и соответствующие им частные решения.

Очевидно, что если что F и Q – произвольные функции всех трех переменных, генератор группы будет нулевым.

Вычислим генератор группы эквивалентности по классическому алгоритму Ли – Овсянникова следующим образом:

$$\hat{X}_{\varepsilon} = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \tau\frac{\partial}{\partial t} + \varphi\frac{\partial}{\partial u} + \mu_1\frac{\partial}{\partial F} + \mu_2\frac{\partial}{\partial Q},$$

$$\begin{aligned}
&\xi = \xi(x,t,u),\\
&\tau = \tau(x,t,u),\\
&\varphi = \varphi(x,t,u),\\
&\mu_1 = \mu_1(x,t,u,F,Q),\\
&\mu_2 = \mu_2(x,t,u,F,Q).
\end{aligned} \tag{П.1.7}$$

Построим продолжение этого оператора:

$$pr^{(2)}\hat{X}_\varepsilon = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \tau\frac{\partial}{\partial t} + \varphi\frac{\partial}{\partial u} + \mu_1\frac{\partial}{\partial F} + \mu_2\frac{\partial}{\partial Q} + \varphi^t\frac{\partial}{\partial u_t} + \\ +\varphi^{tt}\frac{\partial}{\partial u_{tt}} + \varphi^{xx}\frac{\partial}{\partial u_{xx}}. \tag{П.1.8}$$

Дальше действуем формулой второго продолжения на f в точках многообразия:

$$pr^{(2)}\hat{X}_\varepsilon(f)|_{f=0} \equiv 0. \tag{П.1.9}$$

Получим:

$$\begin{aligned}
&\varphi^{tt} - \varphi^{xx} + \mu_1 u_t + F\varphi^t + \mu_2|_{f=0} \equiv 0,\\
&u_{tt} = u_{xx} - F\cdot u_t - Q.
\end{aligned} \tag{П.1.10}$$

Составляя и решая определяющие уравнения (предлагаем читателю в качестве упражнения), получим следующие компоненты касательного векторного поля:

$$\begin{aligned}
&\xi = C_1x + C_2,\\
&\tau = C_1t + C_3,\\
&\varphi = \alpha(t)u + \beta(x,t),\\
&\mu_1 = -C_1F - 2\alpha_t,\\
&\mu_2 = -(\alpha_{tt}u + \beta_{tt}) + (\alpha(t) - 2C_1)Q + \beta_{xx} - F(\alpha_t u + \beta_t).
\end{aligned} \tag{П.1.11}$$

Таким образом, базисные генераторы алгебры эквивалентности имеют вид

$\hat{X}_1^\varepsilon = \frac{\partial}{\partial x}$ (трансляция по оси x),

$\hat{X}_2^\varepsilon = \frac{\partial}{\partial t}$ (трансляция по времени),

$\hat{X}_3^\varepsilon = x\frac{\partial}{\partial x} + t\frac{\partial}{\partial t} - F\frac{\partial}{\partial F} - 2Q\frac{\partial}{\partial Q}$ (неоднородное растяжение),

$$\hat{X}_4^\varepsilon = \alpha(t)u\frac{\partial}{\partial u} - 2\alpha_t\frac{\partial}{\partial F} + (-\alpha_{tt}u + \alpha(t)Q - \alpha_t uF)\ \frac{\partial}{\partial Q},$$

$$\hat{X}_5^\varepsilon = \ \beta(x,t)\frac{\partial}{\partial u} + (-\beta_{tt} + \beta_{xx} - \beta_t F)\ \frac{\partial}{\partial Q}. \qquad (\text{П}.1.12)$$

Алгебра эквивалентности бесконечномерна, так как содержит две произвольные функции: α и β.

К любому из этих генераторов можно применить теорему о проекциях.

Проекция генератора эквиваленции на переменные *Q*, *F*, *x*, *t*, *u* совпадает с самим генератором:

$$pr\hat{X}_\varepsilon|_{(Q,F,x,t,u)} = \hat{X}_\varepsilon. \qquad (\text{П}.1.13)$$

Найдем проекцию генератора группы эквивалентности на основные переменные *x*, *t*, *u*:

$$pr\hat{X}_\varepsilon|_{(x,t,u)} = \xi\frac{\partial}{\partial x} + \tau\frac{\partial}{\partial t} + \varphi\frac{\partial}{\partial u} = \tilde{X}_\varepsilon. \qquad (\text{П}.1.14)$$

Далее подберем функции F и Q таким образом, чтобы они удовлетворяли следующим уравнениям:

$$\begin{cases} \hat{X}_\varepsilon\big(F - F(x,t,u)\big) = 0, \\ \hat{X}_\varepsilon\big(Q - Q(x,t,u)\big) = 0. \end{cases} \qquad (\text{П}.1.15)$$

Тогда проекция $\tilde{X}_\varepsilon$ на переменные *x*, *t*, *u* будет генератором точечной группы, допускаемой этими уравнениями с данными функциями F и Q.

Таким образом, для каждой пары функций F и Q удовлетворяющих таким уравнениям, можно сразу найти симметрию.

Пример 1. Рассмотрим генератор $\hat{X}_3^\varepsilon$:

$$\hat{X}_3^\varepsilon = x\frac{\partial}{\partial x} + t\frac{\partial}{\partial t} - F\frac{\partial}{\partial F} - 2Q\frac{\partial}{\partial Q}.$$

Решим систему уравнений:

$$\begin{cases} \hat{X}_3^\varepsilon\big(F - F(x,t,u)\big) = 0, \\ \hat{X}_3^\varepsilon\big(Q - Q(x,t,u)\big) = 0; \end{cases}$$

$$\begin{cases} -F\frac{\partial F}{\partial F} - x\frac{\partial F}{\partial x} - t\frac{\partial F}{\partial t} = 0, \\ -2Q\frac{\partial Q}{\partial Q} - x\frac{\partial Q}{\partial x} - t\frac{\partial Q}{\partial t} = 0; \end{cases}$$

$$\begin{cases} F\frac{\partial F}{\partial F} + x\frac{\partial F}{\partial x} + t\frac{\partial F}{\partial t} = 0, \\ 2Q\frac{\partial Q}{\partial Q} + x\frac{\partial Q}{\partial x} + t\frac{\partial Q}{\partial t} = 0. \end{cases}$$

Решаем первое уравнение через уравнение характеристик:

$$F\frac{\partial F}{\partial F} + x\frac{\partial F}{\partial x} + t\frac{\partial F}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{dx}{x} = \frac{dt}{t} = \frac{dF}{-F}. \quad (П.1.16)$$

В первом случае получим $\frac{x}{t} = C$, во втором – $Ft = C$. Тогда $Ft = \varphi(\frac{x}{t})$, то есть $F = \frac{1}{t}\varphi(\frac{x}{t})$, где φ – любая гладкая функция.

Аналогично получим $Q = \frac{1}{t^2}\psi(\frac{x}{t})$, где ψ – также любая гладкая функция.

При таких произвольных элементах обобщенное волновое уравнение уравнение допускает группу однородных растяжений по координате и времени.

Пример 2. Рассмотрим линейную комбинацию генераторов $\hat{X}_1^\varepsilon$ и $\hat{X}_2^\varepsilon$:

$$\hat{X}_\varepsilon = \frac{\partial}{\partial t} + C\frac{\partial}{\partial x}. \quad (П.1.17)$$

Решим систему уравнений для произвольных элементов

$$\begin{cases} \hat{X}_\varepsilon\big(F - F(x,t,u)\big) = -\frac{\partial F}{\partial t} - C\frac{\partial F}{\partial x} = 0, \\ \hat{X}_\varepsilon\big(Q - Q(x,t,u)\big) = -\frac{\partial Q}{\partial t} - C\frac{\partial Q}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (П.1.18)$$

Имеем:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + C\frac{\partial F}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{C},$$

$$Ct = x + C_1 \Rightarrow J_1 = x - Ct. \quad (П.1.19)$$

Получили $F = F(x - Ct)$, $Q = Q(x - Ct)$.

Введем новую переменную $\xi = x - Ct$, получим:

$$u_{tt} - u_{xx} + F(x - Ct, u) \cdot u_t + Q(x - Ct, u) = 0,$$

$$u_t = u_\xi \cdot (-C),$$

$$u_{tt} = C^2 \cdot u_{\xi\xi},$$

$$u_{xx} = u_{\xi\xi}. \qquad (\text{П.1.20})$$

Выполняя подстановку, окончательно получим:

$$u_{\xi\xi}(C^2 - 1) + F(\xi, u) \cdot (-C) \cdot u_\xi + Q(\xi, u) = 0. \qquad (\text{П.1.21})$$

Итак, мы добились перехода от уравнения в частных производных к обыкновенному дифференциальному уравнению относительно новой переменной ξ (координата бегущей волны).

Для продолжения дальнейших исследований необходимо из физических соображений задать конкретный вид функций F и Q

Приложение 2

Групповой анализ уравнений для производящего функционала

Производящим функционалом в статистической физике конденсированного состояния вещества в состоянии равновесия называют функционал вида

$$L_N(u)=\iiint D_N(q_1,q_2,...q_N)\prod_{1\le i\le N}(1+n\cdot u(q_i))dq_1dq_2...dq_N, \quad (\text{П.2.1})$$

где $D(q_1, q_2, \quad q_N)$ – равновесная функция распределения, q_i – радиус вектор до i частицы, $u(q_i)$ – регулярная функция, n – концентрация частиц. Функционал L_N называется производящим, поскольку через его вариационные производные выражаются равновесные функции распределения, а именно

$$\left[\frac{\delta^s L_N(u)}{\delta u_{q_1}(q_i)\delta u_{q_2}(q_i)...\delta u_{q_s}(q_i)}\right]_{u(q)=0}=F_s(q_1...q_s). \quad (\text{П.2.2})$$

Уравнение для производящего функционала в состоянии равновесия в NVT-ансамбле имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial q_i^\alpha}\frac{\delta L_N(u)}{\delta u(q_i)}+\frac{1}{\Theta}\int_{V_1}\frac{\partial \Phi(q_i,q_j)}{\partial q_i^\alpha}\cdot\frac{\delta^2 L_N(u)}{\delta u(q_i)\delta u(q_j)}\cdot\left(n+u(q_j)\right)dq_j=0 \quad (\text{П.2.3})$$

и эквивалентно цепочке уравнений ББГКИ (см. например [13]). В настоящем приложении мы проведем групповой анализ уравнения (П.2.3) на основе эвристического подхода, предложенного в работе [74].

Выберем в качестве вектора независимых величин $\vec{R}=\{q,[u(q)],\quad L_N(u(q))\}$. Запишем в явном виде инфинитезимальный оператор для этого вектора

$$X=\alpha(q,[u],L_N)\frac{\delta}{\delta u}+\beta([u],L_N)\frac{\delta}{\delta L_N}, \quad (\text{П.2.4})$$

где β_1 – первое продолжение, β_2 – второе продолжение, индекс у производящего функционала соответствует вариационной производной, θ, n – соответственно температура (в единицах энергии) и атомная концентрация.

Формулы продолжения для первой и второй производной:

$$\beta_1(q',[u],L_N)=\frac{\delta}{\delta u'}\beta([u],L_N)-\int\frac{\delta L_N}{\delta u''}\cdot\frac{\delta}{\delta u''}\alpha(q'',[u],L_N)dq'' \qquad (\text{П.2.5})$$

$$\beta_2(q'',q',[u],L_N)=\frac{\delta}{\delta u''}\beta_1([u],L_N)-\int\frac{\delta^2 L_N}{\delta u'\delta u'''}\cdot\frac{\delta}{\delta u'''}\alpha(q''',[u],L_N)dq'''.$$

Подействуем оператором (40) на уравнение (37) и в результате получим определяющее уравнение

$$\frac{\partial}{\partial q_i^\alpha}\beta_1(q',[u],L_N)+\frac{1}{\Theta}\int_{V_1}\frac{\partial\Phi(q_i,q_j)}{\partial q_i^\alpha}\cdot\Big[\beta_2(q_i,q_j,[u],L_N)\cdot \qquad (\text{П.2.6})$$

$$\left.\cdot\Big(n+u(q_j)\Big)+\frac{\delta^2 L_N(u)}{\delta u(q_i)\delta u(q_j)}\cdot\Big(\alpha(q_j,[u],L_N)\Big)\Big]dq_j\right|_{F=0}\equiv 0.$$

Опустим промежуточные вычисления и перейдем к результату. Он имеет вид

$$\alpha(q,[u],L_N)=0$$

$$\beta([u],L_N)=\lambda_1 L_N+\lambda_2, \qquad (\text{П.2.7})$$

где λ_1, λ_2 – произвольные постоянные. Группа преобразований с векторным полем (43) соответствует трансляциям и растяжениям.

Как и в предыдущем случае, рассмотрим вариант расширения пространства независимых переменных посредством добавления частичной концентрации и температуры. Соответствующий инфинитезимальный оператор имеет вид

$$X=\alpha(q,[u],L_N,\theta,n)\frac{\delta}{\delta u}+\beta([u],L_N,\theta,n)\frac{\delta}{\delta L_N}+$$

$$+\xi[u],L_N,\theta,n)\frac{\partial}{\partial\theta}+\eta([u],L_N,\theta,n)\frac{\partial}{\partial n}. \qquad (\text{П.2.8})$$

Тогда после действия оператора (44) на (39) определяющее уравнение имеет вид

$$\Theta \frac{\partial}{\partial q_i^{\alpha}} \beta_1(q',[u],L_N,\theta,n) + \xi([u],L_N,\theta,n) \frac{\partial}{\partial q_i^{\alpha}} \frac{\delta L_N(u)}{\delta u(q_i)} + \tag{П.2.9}$$

$$+ \int_{V_1} \frac{\partial \Phi(q_i,q_j)}{\partial q_i^{\alpha}} \cdot \Big[\beta_2(q_i,q_j,[u],L_N,\theta,n) \cdot \big(n + u(q_j)\big) +$$

$$+ \frac{\delta^2 L_N(u)}{\delta u(q_i)\delta u(q_j)} \cdot \big(\eta([u],L_N,\theta,n) + \alpha(q_j,[u],L_N,\theta,n)\big) \Big] dq_j \Big|_{F=0} \equiv 0.$$

Опуская выкладки, приходим к результату:

$$\begin{aligned} &\alpha(q,\theta,n) = \alpha(q,\theta,n); \\ &\beta(q,\theta,n) = \Psi_1(\theta,n)L_N + \Psi_2(\theta,n); \\ &\xi([u],L_N,\theta,n) = \Psi_1(\theta,n)(\theta^2 + \theta^3); \\ &\eta([u],L_N,\theta,n) = -\alpha(q,\theta,n); \end{aligned} \qquad . \tag{П.2.10}$$

Отметим, полученные группы симметрии являются обобщениями трансляций и растяжений для исходной системы уравнений ББГКИ.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Боголюбов, Н.Н. Избранные труды по статистической физике / Н.Н. Боголюбов. – М.: Изд-во МГУ, 1979.
2. Боголюбов, Н.Н. К теории сверхтекучести / Н.Н. Боголюбов // Избранные труды в 3 т.: Т. 2. – Киев: Наукова думка, 1970. – С. 210–224.
3. Боголюбов, Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике / Н.Н. Боголюбов. – М.: Изд-во Гостехиздат, 1946. – 120 с.
4. Боголюбов, Н.Н. Уравнения гидродинамики в статистической механике (1948) / Н.Н. Боголюбов // Избранные труды в 3 т.: Т. 2. – Киев: Наукова думка, 1970. – С. 258–276.
5. Боголюбов, Н.Н. Собрание научных трудов: в 12 т. / Н.Н. Боголюбов. – М.: Наука, 2006. – Т. 5: Неравновесная статистическая механика, 1939–1980.
6. Гуров, К.П. Основания кинетической теории (метод Н.Н. Боголюбова) / К.П. Гуров. – М.: Наука, 1966. – 352 с.
7. Данилов, В.И. Строение и кристаллизация жидкости / В.И. Данилов // Избранные статьи / В.И. Данилов; под ред. Г.В. Курдюмова. – Киев: Изд-во АН УССР, 1956. – 568 с.
8. Ибрагимов, Н.Х. Группы преобразований в математической физике / Н.Х. Ибрагимов. – М.: Наука, 1983.
9. Ибрагимов, Н.Х. Практический курс дифференциальных уравнений и математического моделирования / Н.Х. Ибрагимов. – Н. Новгород: Изд-во НГУ им. Н.И. Лобачевского, 2007.
10. Ибрагимов, Н.Х. Принцип априорного использования симметрий в теории нелинейных волн / Н.Х. Ибрагимов, О.В. Руденко // Акуст. журнал, 2004. – Т. 50. – № 4. – С. 481–495.
11. Ковалев, В.Ф. Ренормгрупповые симметрии для решений нелинейных краевых задач / В.Ф. Ковалев, Д.В. Ширков // Успехи физических наук. – Т. 178. – С. 849–865.
12. Ковалев, В.Ф. Функциональная автомодельность и ренормгрупповая симметрия в математической физике. Теоретическая и математическая физика: Т. 121 / В.Ф. Ковалев, Д.В. Ширков. – 1999. – С. 66–86.

13. Темперли, Г. Физика простых жидкостей / Г. Темперли, Дж. Роулинс, Дж. Рашбрук. – Т. 1, 2. – М.: Мир, 1971.
14. Крокстон, К. Физика жидкого состояния. Статистическое введение / К. Крокстон; пер. с англ. – М.: Мир, 1978. – 400 с.
15. Овсянников Л.В. Гупповой анализ дифференциальных уравнений / Л.В. Овсянников. – М.: Наука, 1978.
16. Овсянников, Л.В. Групповые свойства дифференциальных уравнений / Л.В. Овсянников. – Новосибирск: Изд-во Сибирского Отделения АН СССР, 1962.
17. Поттер, Д. Вычислительные методы в физике / Д. Поттер. – М.: Мир, 1975.
18. Резибуа, П. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов / П. Резибуа, М. Де Ленер. – М.: Мир, 1980. – 424 с.
19. Физика простых жидкостей: Т. 1. Статистическая теория / пер. с англ.; под ред. Д.Н. Зубарева и Н.М. Плакиды. – М.: Мир, 1971. – 308 с.
20. Физика простых жидкостей: Т. 2. Экспериментальные исследования / пер. с англ.; под ред. А.З. Голика и Ю.И. Шиманского. – М.: Мир, 1973. – 400 с.
21. Фишер, И.З. Статистическая теория жидкостей / И.З. Фишер. – М.: Наука, 1961. – 280с.
22. Френкель, Я.И. Кинетическая теория жидкостей / Я.И. Френкель. – Л.: Наука, 1975.
23. Чиркунов, Ю.А. Элементы симметрийного анализа дифференциальных уравнений механики сплошной среды / Ю.А. Чиркунов, С.В. Хабиров. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2012. – 659 с.
24. Шелест, А.В. Метод Боголюбова в динамической теории кинетических уравнений / А.В. Шелест. – М.: Наука, 1990. – 160 с.
25. Юльметьев, Р.М. Введение в статистическую физику жидкостей / Р.М. Юльметьев. – Казань: Изд-во КГПИ, 1972. – 218 с.
26. Abraham-Shrauner, B. Exact, time-dependent solutions of the one-dimensional Vlasov–Maxwell equations / B. Abraham-Shrauner // Phys. Fluids, 27(1). – 1984. – P. 197–202.
27. Allen, M.P. Computer simulation of liquids / M.P. Allen, D.J. Tildesley. – New York: Clarendon Press, 1987.

28. Bobylev, A.V. The method of Fourier transform in the theory of the Boltzmann equation for Maxwell molecules / A.V. Bobylev // Dokl. AS USSR. – 1975. – V. 225. – P. 1041–1044.
29. Bobylev, A.V. On exact solutions of the Boltzmann equation / A.V. Bobylev // Dokl. AS USSR. – 1975. – V. 225(6). – P. 1296–1299.
30. Bobylev, A.V. The Boltzmann equation and group transformations / A.V. Bobylev // Math. Models Metods Appl. Sci. – 1993. – V. 3. – P. 443–476.
31. Bobylev, A.V. Exact solutions of the Boltzmann equation / A.V. Bobylev // Sov. Phys. Dokl. – 1976. – V. 21(12). P. 822–824.
32. Bobylev, A.V. On one class of invariant solutions of the Boltzmann equation / A.V. Bobylev // Dokl. AS USSR. – 1976. – V. 231(3). – P. 571–574.
33. Bobylev, A.V. On exact solutions of the nonlinear Boltzmann equation and its models / A.V. Bobylev // Struminsky V. (ed.) Molecular Gasdynamics, Nauka. – Moscow, 1982. – P. 50–54.
34. Bobylev, A.V. Exact solutions of the nonlinear Boltzmann equation and relaxation theory of the Maxwellian gas / A.V. Bobylev // Theor. Math. Phys. – 1984. – V. 60(2). – P. 280–310.
35. Buckwar, E. Invariance of a partial differential equation of fractional order under the Lie group of scaling transformations / E. Buckwar, Y. Luchko // Math. Anal. Appl. – 1998. – V. 227. – P. 71–97.
36. Bunimovich, A.I. Invariant-group solutions of kinetic equations / A.I. Bunimovich, A.V. Meh. Krasnoslobodtsev // Zidkosti Gas. – 1982. – P. 135–140.
37. Bunimovich, A.I. On some invariant transformations of kinetic equations. Vestn. / A.I. Bunimovich, A.V. Krasnoslobodtsev. – Moscow State Univ., 1983. – Ser. 1, Mat. Meh. (4). – P. 69–72.
38. Cercignani, C. Exact solutions of the Boltzmann equation / C. Cercignani // Modern Group Analysis: Advanced Analytical and Computational Methods in Mathematical Physics. – P. 125–136.
39. Chesnokov, A.A. Characteristic properties and exact solutions of the kinetic equation of bubbly liquid / A.A. Chesnokov // Appl. Mech. Tech. Phys. – 2003. – V. 44(3). – P. 336–343.

40. Chetverikov, V.N. A method for computing symmetries and conservation laws of integro-differential equations / V.N. Chetverikov, A.G. Kudryavtsev // Acta Appl. Math. – 1995. – V. 41. – P. 45–56.
41. Chetverikov, V.N. Modelling integro-differential equations and a method for computing their symmetries and conservation laws / V.N. Chetverikov, A.G. Kudryavtsev // Amer. Math. Soc. Transl. – 1995. – V. 167. – P. 1–22.
42. Cohen, A. An Introduction to the Lie Theory of One-Parameter Groups, with Applications to the Solutions of Differential Equations. Health / A. Cohen. – New York, 1911.
43. Cornille, H. Oscillating Maxwellians / H. Cornille // Phys. A. Math. Gen. – 1985. – V. 18. – L. 839–844.
44. Ernst, M.H. Exact solution of the non-linear Boltzmann equation for Maxwell models / M.H. Ernst // Phys. Lett. A 69(6). – 1979. – P. 390–392.
45. Ernst, M.H. Exact solutions of the nonlinear Boltzmann equation / M.H. Ernst // Stat. Phys. – 1984. – V. 34(5/6). – P. 1001–1017.
46. Ferziger, J.H. Mathematical Theory of Transport Processes in Gases / J.H. Ferziger, H.G. Kaper. – North-Holland; Amsterdam, 1972.
47. Gazizov, R.K. Symmetries and group-invariant solutions of nonlinear fractional differential equations / R.K. Gazizov, A.A. Kasatkin, A.Y. Lukashchuk // Phys. Scr., 227 (2009). Topical articles: Fractional Differentiation and Its Applications (FDA 08), Ankara, 5–7 November. – Ankara, 2008.
48. Grad, H. On the kinetic theory of rarefied gases / H. Grad // Commun. Pure Appl., Math. II. – 1949. – P. 331–407.
49. Grigoriev, Y.N. Investigation of invariant solutions of the Boltzmann kinetic equation and its models / Y.N. Grigoriev, S.V. Meleshko. – 1986.
50. Grigoriev, Y.N. Symmetries of Integro-Differential Equations / Y.N. Grigoriev, N.H. Ibragimov, V.F. Kovalev, V. Meleshko. – Berlin: Springer; Dordrecht, 2010. – P. 320.
51. Grigoriev, Y.N. Group analysis of the integro-differential Boltzmann equation / Y.N. Grigoriev, S.V. Meleshko // Dokl. AS USSR. – 1987. – V. 297(2). – P. 323–327.

52. Grigoriev, Y.N. Group analysis of kinetic equations / Y.N. Grigoriev, S.V. Meleshko // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. – 1995. – V. 9(5). – P. 425–447.
53. Grigoriev, Y.N. Classification of invariant solutions of the Boltzmann equation / Y.N. Grigoriev, S.V. Meleshko, P. Sattayatham // J. Phys. A, Math. Gen. – 1999. – V. 32. – P. 337–343.
54. Grigoryev, Y.N. A class of exact solutions of one nonlinear kinetic equation / Y.N. Grigoryev // Dyn. Contin. – 1976. P. 30–43.
55. Grigoryev, Y.N. A spectral method of solving Boltzmann's kinetic equation numerically / Y.N. Grigoryev, A.N. Mikhalitsyn // USSR Comput. Math. Phys. – 1985. – V. 23(6). – P. 105–111.
56. Ibragimov, N.H. Approximate and Renormgroup Symmetries / N.H. Ibragimov, V.F. Kovalev. – Berlin: Springer, 2009.
57. Ibragimov, N.H: CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations, vols. 1, 2, 3. CRC Press, Boca Raton / (ed.) N.H. Ibragimov. – 1994, 1995, 1996.
58. Ibragimov, N.H. Symmetries of integro-differential equations: a survey of methods illustrated by the Benney equations / N.H. Ibragimov, V.F. Kovalev, V.V. Pustovalov // Nonlinear Dyn. – V. 28(2). – P. 135–153.
59. Ibragimov, N.H. Lie-Backlund Transformations in applications / N.H. Ibragimov, R.L. Anderson. – Philadelphia: SIAM, 1979.
60. Kovalev, V.F. Group symmetry of the kinetic equations of the collisionless plasma / V.F. Kovalev, S.V. Krivenko, V.V. Pustovalov // JETP Lett. – 1992. – V. 55(4). – P. 256–259.
61. Kovalev, V.F. The Renormalization group, method based on group analysis / V.F. Kovalev, S.V. Krivenko, V.V. Pustovalov. – Singapore, 1992.
62. Kovalev, V.F. Group analysis and renormgroup symmetries / V.F. Kovalev, V.V. Pustovalov, D.V. Shirkov // J. Math. Phys. – V. 39. – P. 1170–1188.
63. Kovalev, V.F. Bogoliubov renormalization group and symmetry of solution in mathematical physics / V.F. Kovalev, D.V. Shirkov // Phys. Rep. – V. 352(4–6), 219. – 2001.
64. Kovalev, V.F. The renormalization group symmetry for solution of integral equations / V.F. Kovalev, D.V. Shirkov // Proc. of

the 5th Intern. Conf. on Symmetry in Nonlinear Mathematical Physics. – Kiev, 2004. – V. 50. – P. 850–861.

65. Kovalev, V.F. Renormgroup symmetry for functionals of boundary value problem solutions / V.F. Kovalev, D.V. Shirkov // J. Phys. A, Math. Gen. – 2006. – V. 39. – P. 8061–8073.
66. Kovalev, V.F. Renormalization-group symmetries for solutions of nonlinear boundary value problems / V.F. Kovalev, D.V. Shirkov // Phys.-Usp. – 2008. – V. 51(8). – P. 815–830.
67. Krook, M. Formation of Maxwellian tails / M. Krook, T.T. Wu // Phys. Rev. Lett. – 1976. – V. 36(19). – P. 1107–1109.
68. Krook, M. Exact solutions of the Boltzmann equation / M. Krook, T.T. Wu // J. Phys. Fluids. – 1977. – V. 20(10). – P. 1589–1595.
69. Lachno, V. Group classification of nonlinear wawe equation / V. Lachno, R. Zhdanov // J. Math. Phys. – 2005. – V. 46.
70. Lie, S. Lectures on Differential Equations with Known Infinitesimal Transformations / S. Lie, G. Scheffers. – Teubner, Leipzig, 1891.
71. Meleshko, S.V. Methods for Constructing Exact Solutions of Partial Differential Equations / S.V. Meleshko. – New York: Springer, 2005.
72. Morgenstern, D. Analytical studies related to the Maxwell–Boltzmann equation / D. Morgenstern // J. Ration. Mech. Anal. – 1955. – V. 4(4). – P. 533–555.
73. Nikolskii, A.A. The simplest exact solutions of the Boltzmann equation of a rarefied gas motion / A.A. Nikolskii // Dokl. AS USSR. – 1963. – V. 151(2). – P. 299–301.
74. Obelack, M. On the extension of Lie group analysis to functional differential Equations / M. Oberlack, M. Waclawczyk // Arch. Mech. – Warszawa, 2006. – V. 58 (6). – P. 597–618.
75. Olver, P.J. Applications of Lie Groups to Differential Equations / P.J. Olver. – New York: Springer, 1986.
76. Olver, P.J. Applications of Lie Groups to Differential Equations / P.J. Olver. – New York: Springer–Verlag, 1986.
77. Ovsiannikov, L.V. Group Analysis of Differential Equations / L.V. Ovsiannikov. – New York, 1982.
78. Renormalization Group ‘91, Proc. of Second Intern. Conf., Sept. 1991, Dubna, USSR // World Scientific. – Singapore, 1992. – P. 1–10.

79. Senashov, S.I. Group classification of viscoelastic bar equation / S.I. Senashov // Model. Meh. – 1990. – V. 4(21) (1). – P. 69–72.
80. Shirkov, D.V.: Several topics on renorm-group theory / D.V. Shirkov, V.B. Priezzhev (eds.). – Singapore, 1992.
81. Taranov, V.B. On symmetry of one-dimensional high frequency motions of collisionless plasma / V.B. Taranov // J. Tech. Phys. – 1976. – V. 46(6). – P. 1271–1277.
82. Taranov, V.B. Symmetry extensions and their physical reasons in the kinetic and hydrodynamic plasma models / V.B. Taranov // SIGMA. – 2008. – V. 4, 006. – 7 p.
83. Tenti, G. Some classes of exact solutions of the nonlinear Boltzmann equation / G. Tenti, W.H. Hui // J. Math. Phys. – 1978. – V. 19(4). – P. 774–779.
84. Zawistowski, Z.J. Symmeries of Integro-Differential Equations / Z.J. Zawistowski // Proceedings of Institute of Mathematics of NAS Ukraine. – 2002. – V. 43. – P. 263–270.

СОДЕРЖАНИЕ

Научное издание

Игорь Иосифович Клебанов
Дмитрий Анатольевич Емелин

**МЕТОДЫ ГРУППОВОГО АНАЛИЗА
В ЗАДАЧАХ КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ**

Монография

ISBN 978-5-906777-37-9

Работа рекомендована РИСом университета.
Протокол №1/14 (пункт 15) от 2015 г.

Издательство ЧГПУ
454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 69

Редактор О.В. Максимова
Технический редактор Т.Н. Никитенко

Подписано в печать 31.03.2015
Формат 60×84 1/16. Объем 4,3 уч.-изд. л.
Тираж 500. Заказ №

Отпечатано с готового оригинал-макета в типографии ЧГПУ
454080, Челябинск, пр. Ленина, 69