сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-81-129

Нгуен Танг

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

1981

ВВЕДЕНИЕ

В неравновесной термодинамике[1-3] законы сохранения являются одним из ее исходных положений. На основе этих законов и допущения о локальном равновесии выведены уравнения баланса энтропии и производства энтропии.Однако полученное выражение производства энтропии ограничено пределом линейных неравновесных систем. Поэтому важным вопросом является построение статистической основы этих законов. Зубарев[4] получил законы сохранения в операторной форме, а не для средних значений величин для систем без внешних сил. Хотя автор написал уравнения баланса для средних величин по локально-равновесному распределению, но соответствующий оператор не удовлетворяет уравнению Лиувилля.

В данной работе мы построили законы сохранения для статистических средних, подходя к этому иным путем. По методу производной по параметру[5] средние значения величин могут быть точно определены с помощью неравновесной функции Грина. Из них получатся уравнения баланса для средних значений.

1. ОБЩИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ

Рассмотрим теперь систему, состоящую из ℓ компонент. Предположим, что при $t=-\infty$ система находится в равновесном термодинамическом состоянии и подчиняется большему каноническому распределению. Более того, допустим, что система соприкасается с довольно большим термостатом так, что ее температура постоянна в необратимом процессе, происходящем в системе. Когда система находится во внешнем поле, ее гамильтониан имеет вид

$$H=\sum_i \int H_{it}(\vec{x})\,d\vec{x}$$

$$H_{it}(\vec{x})\equiv H_0^i(\vec{x})+H_t^i(\vec{x})=\frac{h^2}{2m_i}\nabla\psi_i^+(\vec{x})\nabla\psi_i(\vec{x})+ \qquad /1/$$

$$+\sum_k\frac{1}{2}\int\Phi_{ki}(\vec{x}-\vec{x}')\psi_i^+(\vec{x})n_k(\vec{x}')\psi_i(\vec{x})d\vec{x}'+a_iV_i(\vec{x},t)\psi_i^+(\vec{x})\psi_i(\vec{x}),$$

где $\Phi_{ki}(\vec{x}-\vec{x}')$ - потенциальная энергия взаимодействия частиц сортов i и k /предполагается, что она радиально симметрична/,

$a_iV_i(\vec{x},t)$ – потенциальная энергия i-ой компоненты во внешнем поле / a_i играет роль параметров/.

Согласно [5], точная формула для среднего значения произвольной величины равна

$$\langle F(\vec{x},t)\rangle_a = \langle F(\vec{x})\rangle_0 + \sum_k \int_0^{a_k} da_k \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\vec{x}'\, V_k(\vec{x}',t')\, G^{ret}_{Fn_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t'), \qquad /2/$$

где $G^{ret}_{Fn_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t')$ – неравновесная функция Грина,

$$G^{ret}_{Fn_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t') = \eta(t-t')\frac{1}{ih}\langle[F(\vec{x},t), n_k(\vec{x}',t')]\rangle_a \qquad /3/$$

$\langle\ldots\rangle_a$ выражает усреднение по неравновесному ансамблю и $\langle\ldots\rangle_0$ – по равновесному ансамблю; операторы $F(\vec{x},t)$ и $n_k(\vec{x}',t')$ записываются в U-представлении /в полном представлении Гейзенберга/

$$F(\vec{x},t) = U^+(t)F(\vec{x})U(t), \qquad /4/$$

$U(t)$ – оператор эволюции по времени системы.

Как показано в [5], величина $\langle F(\vec{x},t)\rangle_a$ может быть определена с помощью равновесного статистического ансамбля

$$\langle F(\vec{x},t)\rangle_a = F_{лин} + F_{нел}. \qquad /5/$$

Полученный нами линейный член $F_{лин}$ совпадает с результатом теории возмущений [6]

$$F_{лин} = \langle F(\vec{x})\rangle_0 + \sum_k a_k \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\vec{x}'\, V_k(\vec{x}',t')\, G^{ret_0}_{Fn_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t'), \qquad /6/$$

где $G^{ret_0}_{Fn_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t')$ – известная равновесная функция Грина.

$F_{нел}$ – нелинейный член и во втором приближении для $\langle F(\vec{x},t)\rangle_a$, член $F_{нел}$ имеет вид [5]:

$$F_{нел} = \sum_{i,k} a_i a_k \iint_{-\infty}^{\infty} dt'dt'' \iint d\vec{x}'d\vec{x}''\, V_i(\vec{x}',t')V_k(\vec{x}'',t'') \times$$
$$\times[\Gamma^{ret_0}_{Fn_kn_i}(\vec{x},t;\vec{x}'',t'';\vec{x}',t') + Д^{ret_0}_{Fn_in_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t';\vec{x}'',t'')], \qquad /7/$$

где равновесные функции Грина $\Gamma^{ret_0}_{Fn_kn_i}(\vec{x},t;\vec{x}'',t'';\vec{x}',t')$, $Д^{ret_0}_{Fn_in_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t';\vec{x}'',t'')$ принимают вид

$$\Gamma^{ret_0}_{Fn_kn_i}(\vec{x},t;\vec{x}'',t'';\vec{x}',t') = \frac{1}{(ih)^2}\eta(t-t'')\eta(t-t')\langle[[F^\circ(\vec{x},t), n_k^\circ(\vec{x}'',t'')]n_i^\circ(\vec{x},t)]\rangle_0, \qquad /8/$$

$$Д^{ret_0}_{Fn_in_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t';\vec{x}'',t'') = \frac{1}{(ih)^2}\eta(t-t')\eta(t'-t'')\langle[F^\circ(\vec{x},t)[n_i^\circ(\vec{x}',t'), n_k^\circ(\vec{x}'',t'')]]\rangle_0, \qquad /9/$$

в которых операторы $F^\circ(\vec{x},t)$, $n^\circ(\vec{x},t)$ записываются в представлении Гейзенберга с гамильтонианом H_0.

Нелинейный член /7/ существенно отличается от получаемого в теории возмущений, так как в /7/ вычисляется корреляция между величинами F и плотностью частиц n в моменты $t''>t'$. Таким образом, по методу производной по параметру мы получаем точную формулу для отклика системы и более полную формулу /по сравнению с теорией возмущений/ для средних значений.

3. УРАВНЕНИЯ БАЛАНСА

Уравнение движения для $\psi_i(\vec{x})$ имеет вид

$$ih\frac{\partial\psi_i(\vec{x})}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m_i}\nabla^2\psi_i(\vec{x}) + \sum_k \int \Phi_{ki}(\vec{x}-\vec{x}')n_k(\vec{x}')\psi_i(\vec{x})dx' + a_iV_i(\vec{x},t)\psi_i(\vec{x}). \qquad /10/$$

При помощи перестановочных соотношений для $\psi_i(\vec{x})$, $\psi_i^+(\vec{x})$ и /10/ найдем операторное уравнение

$$\frac{\partial n_i(\vec{x})}{\partial t} + div\,\vec{j}_i(\vec{x}) = 0, \qquad /11/$$

где

$$\vec{j}_i(\vec{x}) = \frac{h}{2m_i i}\{\psi_i^+(\vec{x})\nabla\psi_i(\vec{x}) - \nabla\psi_i^+(\vec{x})\psi_i(\vec{x})\}$$

– плотность потока частиц i-ой компоненты. Используя выражение /2/, средние плотности числа частиц и потока частиц можно записать в виде:

$$\langle n_i(\vec{x},t)\rangle_a = \langle n_i(\vec{x})\rangle_0 + \sum_k \int_0^{a_k} da_k \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\vec{x}'\, V_k(\vec{x}',t')\, G^{ret}_{n_in_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t'), \qquad /12/$$

$$\langle\vec{j}_i(\vec{x},t)\rangle_a = \sum_k \int_0^{a_k} da_k \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int dx'\, V_k(\vec{x}',t')\, G^{ret}_{\vec{j}_in_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t'). \qquad /13/$$

С помощью /11/-/13/ легко вывести уравнение сохранения плотности числа частиц

$$\frac{\partial\langle n_i(\vec{x},t)\rangle_a}{\partial t} + div\langle\vec{j}_i(\vec{x},t)\rangle_a = 0. \qquad /14/$$

Аналогично получаем уравнение движения в операторной форме

$$\frac{\partial\vec{p}_i(\vec{x})}{\partial t} + Div\,T_i(\vec{x}) = \vec{f}_i(\vec{x}) - a_i\,grad\,V_i(\vec{x},t)\cdot n_i(\vec{x}), \qquad /15/$$

где $T_i(x)$ - оператор тензора напряжений i -ой компоненты, $\vec{f}_i(\vec{x})$ - оператор плотности силы взаимодействия молекул между i -ой компонентой и остальными[4]. Они имеют вид

$$T^{i}_{\alpha\beta}(\vec{x})=\frac{h^2}{2m_i}\{\nabla_\beta\psi^{+}_{i}(\vec{x})\nabla_\alpha\psi_i(\vec{x})+\nabla_\alpha\psi^{+}_{i}(\vec{x})\nabla_\beta\psi_i(\vec{x})-\frac{1}{2}\nabla^{2}_{\beta\alpha}n_i(\vec{x})\}+$$
$$+\frac{1}{4}\sum_{n\geq 1}\frac{(-1)^n}{n!}\nabla_\beta^{n-1}\int d\vec{x}'\,\nabla_\alpha\Phi_{ik}(\vec{x}-\vec{x}')(x_\beta-x'_\beta)^n[\psi^{+}_{k}(\vec{x}')n_i(\vec{x})\psi_k(\vec{x}')+ \qquad /16/$$
$$+\psi^{+}_{k}(\vec{x})n_i(x')\psi_k(\vec{x})],$$

$$\vec{f}_i(\vec{x})=-\frac{1}{2}\sum_k\int\nabla\Phi_{ik}(\vec{x}-\vec{x}')[n_k(\vec{x}')n_i(\vec{x})-n_k(\vec{x})n_i(\vec{x}')]d\vec{x}'. \qquad /17/$$

Согласно /2/, средние значения соответствующих величин равны

$$<T_i(\vec{x},t)>_a=<T_i(\vec{x})>_0+\sum_k\int_0^{a_k}da_k\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int d\vec{x}'\,V_k(\vec{x}',t')G^{ret}_{T_i n_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t'), \qquad /18/$$

$$<\vec{f}_i(\vec{x},t)>_a=<f_i(\vec{x})>_0+\sum_k\int_0^{a_k}da_k\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int d\vec{x}'\,V_k(\vec{x}',t')G^{ret}_{\vec{f}_i n_k}(\vec{x},t;\vec{x}',t'). \qquad /19/$$

Второй член правой части /18/ выражает тензор вязкого давления системы. А величина $<\vec{f}_i(\vec{x},t)>_a - <\vec{f}_i(\vec{x})>_0$ равна разности средних плотностей сил взаимодействия молекул i -ой компоненты и остальных в момент t и в равновесном состоянии. Поэтому она имеет смысл плотности силы трения.

Используя /15/-/19/, находим уравнение движения i -ой компоненты

$$\frac{\partial<\vec{p}_i(\vec{x},t)>_a}{\partial t}+\mathrm{Div}<T_i(\vec{x},t)>_a=<\vec{f}_i(\vec{x},t)>_a-a_i\,\mathrm{grad}\,V_i(\vec{x},t)<n_i(\vec{x},t)>_a \qquad /20/$$

и полной системы

$$\frac{\partial<\vec{p}(\vec{x},t)>_a}{\partial t}+\mathrm{Div}<T(\vec{x},t)>_a=-\sum_i a_i\,\mathrm{grad}\,V_i(\vec{x},t)<n_i(\vec{x},t)>_a, \qquad /21/$$

$$<\vec{p}(\vec{x},t)>_a=\sum_i<\vec{p}_i(\vec{x},t)>_a,\quad <T(\vec{x},t)>_a=\sum_i<T_i(\vec{x},t)>_a.$$

Уравнение /21/ справедливо как для консервативных, так и для неконсервативных систем. Левая часть уравнения /21/ является силой, действующей на систему.

Введем теперь скорость центра массы системы

$$\left.\begin{aligned}\vec{v}(\vec{x},t)&=\frac{<\vec{p}(\vec{x},t)>_a}{<\rho(\vec{x},t)>_a},\\ <\rho(\vec{x},t)>_a&=\sum_i<\rho_i(\vec{x},t)>_a=\sum_i m_i<n_i(\vec{x},t)>_a\end{aligned}\right\} \qquad /22/$$

и оператор диффузионного потока i -ой компоненты

$$\vec{J}_i(\vec{x},t)=m_i[\vec{j}_i(\vec{x},t)-n_i(\vec{x},t)\vec{v}]. \qquad /23/$$

Следовательно, из /23/ и /22/ выводим

$$\sum_i<\vec{J}_i(\vec{x},t)>_a=0, \qquad /24/$$

т.е. только $\ell-1$ из ℓ диффузионных потоков являются независимыми[1].

С помощью /22/ уравнения сохранения числа частиц и баланса импульса могут быть написаны в другом виде

$$\frac{d<\rho_i(\vec{x},t)>_a}{dt}=-<\rho_i(\vec{x},t)>_a\,\mathrm{div}\,\vec{v}-\mathrm{div}<\vec{J}_i(\vec{x},t)>_a, \qquad /25/$$

$$\frac{d<\rho(\vec{x},t)>_a}{dt}=-<\rho(\vec{x},t)>_a\,\mathrm{div}\,\vec{v}, \qquad /26/$$

$$<\rho(\vec{x},t)>_a\frac{d\vec{v}}{dt}+\mathrm{Div}<P(\vec{x},t)>_a=-\sum_i a_i\,\mathrm{grad}\,V_i(\vec{x},t)<n_i(\vec{x},t)>_a, \qquad /27/$$

где

$$<P(\vec{x},t)>_a=<T(\vec{x},t)>_a-<\rho(\vec{x},t)>_a\vec{v}\vec{v} \qquad /28/$$

- тензор напряжений без конвективной части $<\rho(\vec{x},t)>_a\vec{v}\vec{v}$.

Уравнение /27/ является точным. Если выразим средние величины в уравнении через равновесные функции Грина /напр., использовать формулу /5//, то получим приближенные уравнения различных порядков. Например, в нулевом приближении

$$<\rho(\vec{x},t)>_a\approx<\rho(\vec{x})>_0\equiv\rho;\qquad <n_i(\vec{x},t)>_a\approx<n_i(\vec{x})>_0\equiv n_i$$
$$<P(\vec{x},t)>_a\approx<P(\vec{x})>_0=p(\vec{x})U,$$

где p - давление, U - единичный тензор, из /27/ получаем уравнение движения Эйлера для идеальной жидкости

$$\rho\frac{d\vec{v}}{dt}+\mathrm{grad}\,p=-\sum_i a_i\,\mathrm{grad}\,V_i(\vec{x},t)n_i. \qquad /29/$$

Из уравнения движения /27/ нетрудно найти уравнение баланса кинетической энергии системы

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}<\rho(\vec x,t)>_a v^2\right)+\mathrm{div}\left[\left(\frac{1}{2}<\rho(\vec x,t)>_a v^2+<P(\vec x,t)>_a\right)\vec v\,\right]= \qquad /30/$$

$$=<P(\vec x,t)>_a:\mathrm{Grad}\,\vec v-\sum_i a_i\,\mathrm{grad}\,V_i(\vec x,t)\,\vec v<n_i(\vec x,t)>_a .$$

Член $\frac{1}{2}<\rho(\vec x,t)>_a v^2\vec v$ представляет плотность потока кинетической энергии, связываемой с конвективным движением, а $<P(\vec x,t)>_a\vec v$ связывается с трансляционным движением. Член $<P(\vec x,t)>_a:\mathrm{Grad}\,\vec v$ есть плотность источника кинетической энергии, обусловленного неоднородностью системы, а последний член есть плотность источника, возникающая во внешнем поле.

Рассмотрим теперь изменение плотности энергии $H_0(\vec x)=\sum_i H_0^i(\vec x)$

$$H_0^i(\vec x)=\frac{h^2}{2m_i}\nabla\psi_i^+(\vec x)\nabla\psi_i(\vec x)+\frac{1}{2}\sum_k\int\Phi_{ik}(\vec x-\vec x')\psi_i^+(\vec x)n_k(\vec x')\psi_i(\vec x)\,d\vec x'.$$

Уравнение баланса энергии в операторной форме имеет вид

$$\frac{\partial H_0^i(\vec x)}{\partial t}+\mathrm{div}\,\vec j_{H_0^i}(\vec x)=J_{H_0^i}(\vec x)-a_i\,\mathrm{grad}V_i(\vec x,t)\,\vec j_i(\vec x), \qquad /31/$$

где $\vec j_{H_0^i}(\vec x)$ - оператор плотности потока энергии i-ой компоненты, $J_{H_0^i}(\vec x)$ - оператор, описывающий скорость изменения энергии i-ой компоненты вследствие взаимодействия ее с остальными[4]:

$$\vec j_{H_0^i}(\vec x)=\frac{h^3}{4m_i^2 i}\{\nabla\psi_i^+(\vec x)\nabla^2\psi_i(\vec x)-\nabla^2\psi_i^+(\vec x)\nabla\psi_i(\vec x)\}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_k\int\Phi_{ki}(\vec x-\vec x')\psi_k^+(\vec x')\vec j_i(\vec x)\psi_k(\vec x')\,d\vec x'+\frac{1}{8}\sum_k\sum_{n\geq 1}\frac{(-1)^n}{n!}\nabla^{n-1}\int d\vec x'(\vec x-\vec x')^n\times$$

$$\times\ \nabla\Phi_{ki}(\vec x-\vec x')\{\psi_k^+(\vec x')\vec j_i(\vec x)\psi_k(\vec x')+\psi_i^+(\vec x)\,j_k(\vec x')\psi_i(\vec x)+ \qquad /32/$$

$$+\psi_i^+(\vec x')\vec j_k(\vec x)\psi_i(\vec x')+\psi_k^+(\vec x)\vec j_i(\vec x')\psi_k(\vec x)\},$$

$$J_{H_0^i}(\vec x)=-\frac{1}{4}\sum_k\int\nabla\Phi_{ki}(\vec x-\vec x')\{n_k(\vec x')\vec j_i(\vec x)+n_i(\vec x)\vec j_k(\vec x')-n_i(\vec x')j_k(\vec x)- \qquad /33/$$

$$-n_k(\vec x)\vec j_i(\vec x')\}\,d\vec x'.$$

Согласно /2/, выражения средних значений равны

$$<H_0^i(\vec x,t)>_a=<H_0^i(\vec x)>_0+\sum_k\int_0^{a_k}da_k\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int d\vec x'\,V_k(\vec x',t')\,G^{ret}_{H_0^i n_k}(\vec x,t;\vec x',t'), \qquad /34/$$

$$<\vec j_{H_0^i}(\vec x,t)>_a=\sum_k\int_0^{a_k}da_k\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int d\vec x'\,V_k(\vec x',t')\,G^{ret}_{\vec j_{H_0^i}\cdot n_k}(\vec x,t;\vec x',t'), \qquad /35/$$

$$<J_{H_0^i}(\vec x,t)>_a=\sum_k\int_0^{a_k}da_k\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int d\vec x'\,V_k(\vec x',t)\,G^{ret}_{J_{H_0^i}n_k}(\vec x,t;\vec x',t'). \qquad /36/$$

Из /31/ и /34/-/36/ выводим уравнение баланса энергии

$$\frac{\partial<H_0(\vec x,t)>_a}{\partial t}+\mathrm{div}<\vec j_{H_0}(\vec x,t)>_a=-\sum_i a_i\,\mathrm{grad}\,V_i(\vec x,t)<\vec j_i(\vec x,t)>_a ,$$

$$<\vec j_{H_0}(\vec x,t)>_a=\sum_i<\vec j_{H_0^i}(\vec x,t)>_a;\quad \sum_i<J_{H_0^i}(\vec x,t)>_a=0. \qquad /37/$$

Правая часть /37/ равна сумме произведений потоков и сил и имеет смысл источника изменения энергии.

3. ЭНТРОПИЯ И ЕЕ УРАВНЕНИЕ БАЛАНСА

Как известно, для неравновесных систем энтропия, определенная выражением

$$S_t=-k\,\mathrm{Sp}(\rho_t\ln\rho_t), \qquad /38/$$

не изменяется со временем, т.е. не удовлетворяет закону возрастания энтропии изолированных систем. Недостаток определения /38/ состоит в том, что среднее значение величины $-k\ln\rho_t$ тесно связывается лишь с одним моментом t, а не с процессом. Поэтому для неравновесных процессов заменяют ρ_t на крупнозернистый статистический оператор ρ_t^*, и соответствующая энтропия S^* возрастает со временем. Однако скорость возрастания зависит от размеров областей усреднения для статистического оператора ρ_t и не определяется объективно измеряемыми параметрами.

В[4] энтропия неравновесных систем определяется с помощью квазиравновесного распределения. Однако определенная таким путем энтропия несправедлива для неравновесных нелинейных систем, так как квазиравновесное распределение используется лишь в случае линейных неравновесных систем[7].

В[8] энтропия рассматривается как динамическая переменная

$$S(t)=-k\,\mathrm{Sp}(\rho_t\ln\rho_0)=-k<\ln\rho_0>_a , \qquad /39/$$

где ρ_0 - статистический оператор начального состояния, который может быть как равновесным, так и неравновесным. Исходя из определения /39/ в[8] были указаны закон возрастания энтропии и ее необходимые свойства. Кроме того, в[8] мы построили основное уравнение неравновесной термодинамики

$$T^\circ \frac{dS(t)}{dt} = \frac{d\langle H_0\rangle_a}{dt} + \sum_k a_k^\circ \frac{d\langle A_k\rangle_a}{dt} - \sum_i \mu_i^\circ \frac{d\langle N_i\rangle_a}{dt}, \qquad /40/$$

где T°, a_k° и μ_i° - соответственно температура, обобщенные силы и химические потенциалы системы в начальном равновесном состоянии; A_k и N_k - операторы обобщенных координат и чисел частиц компонент.

Уравнение /40/ написано для покоящейся в целом системы. Оно справедливо как для линейных, так и для нелинейных систем. Чтобы использовать уравнение /40/ для рассматриваемой выше системы, проведем переход к системе координат, где данная система покоится в целом. Для этого выполним преобразование

$$\left.\begin{aligned} &\psi(\vec{x},t) = \psi'(\vec{x},t)\, e^{i\phi(\vec{x},t)},\\ &\vec{v}(\vec{x},t) = \frac{h}{m}\quad \phi(\vec{x},t),\\ &\langle \vec{p}'(\vec{x},t)\rangle_a = 0. \end{aligned}\right\} \qquad /41/$$

Таким образом, легко получим

$$\left.\begin{aligned} &\langle \vec{p}(\vec{x},t)\rangle_a = \langle \rho(\vec{x},t)\rangle_a \vec{v},\\ &\langle H_0(\vec{x},t)\rangle_a = \langle H_0'(\vec{x},t)\rangle_a + \frac{1}{2}\langle \rho(\vec{x},t)\rangle_a v^2,\\ &\langle n(\vec{x},t)\rangle_a = \langle n'(\vec{x},t)\rangle_a, \end{aligned}\right\} \qquad /42/$$

т.е. скорость $\vec{v}$ системы координат удовлетворяет /22/. Следовательно, из /40/ получаем уравнение баланса плотности энтропии

$$\frac{\partial s(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{1}{T}\left\{ \frac{\partial\langle H_0'(\vec{x},t)\rangle_a}{\partial t} - \sum_i \mu_i^\circ \frac{\partial\langle n_i'(\vec{x},t)\rangle_a}{\partial t} \right\}, \qquad /43/$$

где объем системы предполагается постоянным, и T° заменено на T, так как температура системы не изменяется.

Используя /42/ и уравнения баланса /11/, /30/, /37/ и /23/, находим уравнение баланса энтропии

$$\frac{\partial s(\vec{x},t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_s(\vec{x},t) = \sigma(\vec{x},t), \qquad /44/$$

где поток энтропии равен

$$\vec{j}_s(\vec{x},t) = \frac{1}{T}\left\{ \langle \vec{j}_{H_0}(\vec{x},t)\rangle_a - \left(\frac{1}{2}\langle\rho(\vec{x},t)\rangle_a v^2 + \langle P(\vec{x},t)\rangle_a\right)\vec{v} - \sum_i \mu_i^\circ \langle \vec{j}_i(\vec{x},t)\rangle_a \right\} \qquad /45/$$

и производство энтропии имеет вид

$$\sigma(\vec{x},t) = -\frac{1}{T}\sum_i \frac{a_i}{m_i} \operatorname{grad} V_i(\vec{x},t) \langle \vec{J}_i(\vec{x},t)\rangle_a - \frac{1}{T}\langle P(\vec{x},t)\rangle_a : \operatorname{Grad}\vec{v} - \frac{1}{T}\sum_i \langle \vec{j}_i(\vec{x},t)\rangle_a \operatorname{grad}\mu_i^\circ . \qquad /46/$$

Следовательно, в случае нелинейных неравновесных систем производство энтропии равно сумме произведений потоков и сопряженных сил. Результаты /45/ и /46/ справедливы не только для консервативных, но и для неконсервативных систем.

Автор выражает искреннюю благодарность профессорам Я.П.Терлецкому и В.К.Федянину за помощь при выполнении этой работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Де Грут С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. "Мир", М., 1964.
2. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. ИЛ, М., 1960.
3. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. "Мир", М., 1974.
4. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. "Наука", М., 1971.
5. Нгуен Танг. ДАН СССР, 1980, 251, с.1365.
6. Kubo R.J. Phys.Soc.Jap., 1957, 12, p.570.
7. Kubo R.J. Suppl.Prog.Theor.Phys., 1978, 64, p.1.
8. Терлецкий Я.П., Нгуен Танг. ДАН СССР, 1980, 255, №1, с.83.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 февраля 1981 года.