92-480

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-92-480

В.К.Федянин, В.Б.Роганков*

ФЛУКТУАЦИОННАЯ ТЕОРИЯ СРЕД С ВЫРАЖЕННОЙ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТЬЮ

Направлено в журнал «ТМФ»

*Одесский институт низкотемпературной техники и энергетики

1992

Памяти Д.Н.Зубарева

1. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на значительные успехи современной теории флюида в микро- и макроскопической интерпретации необратимых процессов, протекающих в реальных веществах, ряд вопросов требует дальнейшего изучения и углубления. В неравновесных задачах к ним, прежде всего, относится исследование сред, в которых интенсивные термодинамические переменные могут испытывать существенные, апериодические и нерегулярные в пространстве-времени (x_i, t) локальные изменения. В таких системах обычные допущения линеаризованных соотношений термодинамики о малости отклонений от состояний с x_i– $(\partial/\partial x_i = 0)$, t– $(\partial/\partial t = 0)$ или (x_i, t)-однородностью оказываются неадекватными, и поведение вещества должно описываться с учетом возможных нарушений непрерывности распределений или собственно интенсивных переменных, или их частных производных, рассматриваемых как функции от (x_i, t). В равновесных задачах к частному типу подобных сред относятся области фазовых переходов. Основной целью работы является анализ возможности нетрадиционного подхода к решению перечисленных, практически важных вопросов теории существенно (x_i, t)-неоднородного флюида.

Развитие инициированного работами Н.Н.Боголюбова [1] динамического подхода в современной статистической механике (СМ) позволило получить, исходя из микроскопического уровня описания, уравнения, управляющие эволюцией макроскопических переменных. Прямым следствием такого построения неравновесной тоерии (НТ) является использование в качестве базиса $q_j(x_i, t)$ эйлеровой динамики (ЭД) непрерывных сред плотностей числа частиц, импульса и энергии, имеющих микроскопические механические аналоги. Наиболее общим образом эвоюция систем многих частиц описывается функциональным вариантом уравнения марковского типа для функции распределения от перечисленных переменных [2,3], где предварительно выполнено статистическое усреднение на основе интеграции по микроскопическим степеням свободы. При этом в качестве параметров функции распределения наряду с механическими величинами применяются переменные, подобные температуре T, имеющие термодинамический, т.е. характеризующий макроскопические свойства системы, смысл. Отсюда, строго говоря, уже в равновесной СМ нарушается общая концепция вывода макроскопической теории из чисто микроскопических, механических принципов, что особенно сказывается при переходе к формулировке неравновесной СМ. Дело в том, что для процессов, достаточно удаленных от состояния равновесия, плохо определенной, в силу априорного незнания развития параметров функции распределения во времени t, представляется именно указанная процедура статистического усреднения. Таким образом, при всей завершенности и эвристической мощи метода СМ вопросы изучения зависимостей термодинамических (не только механических, но и тепловых) переменных от t следует считать не до конца выясненными.

Другим вопросом, нуждающимся, как нам кажется, в дальнейшем обсуждении, является вопрос целесообразности использования техники функционального дифференцирования при построении флуктуационной НТ. В ЭД непрерывных сред такой подход применяется для доказательства изоморфности уравнений с функциональными производными в $q_j(x_j, t)$-представлении систем уравнений лагранжевой или гамильтоновой динамик (ЛД или ГД) точки в (q_j, t)- или, соответственно, в (q_j, p_j, t)-представлениях. Результатом являются не только удручающе громоздкие выражения флуктуационной НТ уже в окрестности равновесия [4,5], но и смешанный характер координатного (q_j, x_i)-описания, тогда как в ЭД пространственные координаты имеют сходный с t, а не с q_j смысл.

С учетом высказанных соображений, в данной работе предлагается метод построения флуктуационной НТ, позволяющий на начальном этапе установить динамическую структуру детерминированной макроскопической теории ЭД в терминах ЛД изображающей точки без применения техники функционального дифференцирования. В качестве исходных при этом будут использованы допускающие строгую СМ-интерпретацию [1] уравнения баланса в модели идеальной жидкости (ИЖ) и, затем, в модели ИЖ с теплопроводностью (ИЖТ). Важным моментом следует считать [6—9] переход к альтернативному общепринятому в неравновесной СМ плотностному базису конфигурационного пространства q_j на основе выбора для данной цели термодинамических полевых переменных, к которым для простого флюида относятся: μ — химический потенциал, T — температура и локальный потенциал-давление P. То обстоятельство, что указанные величины непрерывны и слабо флуктуируют в области фазовых переходов, позволяет надеяться на возможность экстраполяции с их помощью представления о локальном равновесии (ЛР) в ту область объемов и интервалов времени, где использование сильно флуктуирующих переменных: ρ — плотности числа частиц; σ — плотности энтропии; ε — плотности внутренней энергии, заставляет переходить [3] к более сложным методам нелокальной НТ. Замена базисных переменных одновременно означает переход от обычной формулировки гипотезы ЛР с помощью соотношения Гиббса к применению соотношения Гиббса — Дюгема, в котором роль локального термодинамического потенциала вместо ε (или σ) играет давление P.

Понятно, что предлагаемое построение формализма НТ становится возможным в силу выбора в качестве одной из независимых обобщенных координат тепловой переменной T и отхода тем самым от концепции чисто механической интерпретации величин q_j. Тогда плотность энтропии σ имеет смысл канонически сопряженной T переменной и большое значение приобретает взаимодействие тепловой (T, σ) и механической (μ, ρ) мод [6—8], наблюдаемое в модели ИЖ на уровне детерминированного описания. Последнее приводит к вырожденности соответствующих ЛД- и ГД-формализмов в q_j-пространстве термодинамических полей, что, в свою очередь, отражается на вероятностном описании флуктуационной НТ.

В разделе 2 определены требования к термодинамически согласованному описанию непрерывных сред, на основе которых в разделах 3 и 4 последовательно сформулированы вариационные принципы (ВП) моделей ИЖ и ИЖТ. В разделе 5 коротко обсуждаются возможности предлагаемого метода при переходе к вероятностному описанию флуктуационной НТ.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ СОГЛАСОВАННОЙ ФОРМУЛИРОВКЕ ДЕТЕРМИНИРОВАННОЙ НТ НЕОДНОРОДНЫХ НЕПРЕРЫВНЫХ СРЕД

Известно, что одной из наиболее сложных задач НТ является описание нелинейных процессов, далеких от состояния равновесия, с помощью теории, удовлетворяющей предельному переходу к линейной НТ и, далее, к соотношениям равновесной термодинамики (РТ). Предложенные детерминированные формулировки НТ [10—13] не всегда согласованы даже в таких принципиальных вопросах, как существование неравновесной энтропии, что приводит или к принятию гипотезы ЛР в обобщенной НТ [10], или к отказу от нее в расширенной НТ [11—13]. В том и другом случаях используется локальное представление термодинамической поверхности (ТП) Гиббса в обобщенном:

$$T\frac{ds}{dt} = \frac{de}{dt} - \frac{P}{\rho^2}\frac{d\rho}{dt} \qquad (2.1)$$

или расширенном варианте:

$$T\frac{ds}{dt}=\frac{de}{dt}-\frac{P}{\rho^2}\frac{d\rho}{dt}-X_j\frac{dY_j}{dt},\quad j=1,2,..., \tag{2.2}$$

где обобщение относится к использованию соответствий операторов:

$$d\longleftrightarrow\frac{d}{dt}\longleftrightarrow\delta, \tag{2.3}$$

связывающих полный дифференциал РТ d с субстанциональной производной d/dt:

$$\frac{d}{dt}=\frac{\partial}{\partial t}=v_j\frac{\partial}{\partial x_j}, \tag{2.4}$$

а расширение заключается в добавлении обобщенных сил X_j и сопряженных им потоков Y_j, задающих модель неравновесной системы.

Та же идея расширения термодинамического пространства за счет характеристик недиссипативного движения флюида: «силы» $X=v_i(x_i)$ и «потока» $Y=\rho(x_i)\ v_i(x_i)$ лежит в основе нелокальной формулировки НТ [3]. Для общности рассмотрения отнесем теперь экстенсивные величины не к единице массы, как это сделано в (2.1, 2.2), а к единице объема и используем (снова не указывая явно зависимость переменных от x_i) второе из записанных в (2.3) соответствий

$$T\,\delta\,\sigma=\delta\,\varepsilon-\left(\mu-\frac{v_i^2}{2}\right)\delta\,\rho-v_i\,\delta\,(\rho\,v_i). \tag{2.5}$$

Нетрудно заметить, что ни плотностные $(\rho v_i,\varepsilon,\rho)$, ни сопряженные им (в энтропийном представлении) полевые переменные $\left(-v_i/T,1/T,-\left(\mu-v_i^2/2\right)/T\right)$ в таком подходе уже не являются, как в РТ, независимыми, отражая известные представления о взаимодействии мод. Не вполне рациональным представляется определение термодинамических сил X_j в (2.5) с помощью флуктуирующих переменных, типа $1/T(x_i)$, если учесть, что физической причиной неравновесных процессов является наличие градиентов: $\partial/\partial\,x_i\neq0$ или, еще точнее (см. (2.3; 2.4)), изменение $\delta\longleftrightarrow d/dt\neq0$ термодинамических полей (μ,T,P) во времени t.

В данной работе гипотеза ЛР будет использоваться в виде

$$\frac{dP}{dt}=\rho\frac{d\mu}{dt}+\sigma\frac{dT}{dt}, \tag{2.6}$$

где в полном соответствии с РТ и формализмом большого канонического ансамбля в СМ локальный потенциал P рассматривается как функция переменнных (μ,T), определяющий глобальное уравнение ТП:

$$P=P(q_1,q_2)=P(\mu,T), \tag{2.7}$$

а оператор d/dt имеет смысл (2.4). Здесь учтено, что часто используемые в выводах НТ [4] и неравновесной СМ [14] формы гипотезы ЛР:

$$d\longleftrightarrow\frac{\partial}{\partial t}\longleftrightarrow\delta\ \text{(а)},\qquad d\longleftrightarrow\frac{\partial}{\partial x_i}\longleftrightarrow\delta\ \text{(б)}, \tag{2.8}$$

соответствуют допущениям x_i- или t-однородности (термин «стационарный» будет использован далее, как это принято в вариационном исчислении) и не отвечают наиболее общему типу взаимодействия открытых систем с окружением. Заметим, что в силу (2.4) поле скорости $v_i(x_i,t)$ входит в выражение (2.6), и тем самым предполагается возможность локального описания самых общих, а не только, например, ламинарных движений флюида, не выходя за рамки термодинамического пространства. Разумеется, принятие второго из соответствий (2.3), указывающего явно на интервал t, требуемый для развития отклонений локальных параметров от начальных значений, напоминает постулат Онсагера о связи детерминированного движения d/dt со спонтанными флуктуациями δ. Существенная разница заключается в том, что в качестве уравнений эволюции в данной работе будут использованы не полуэмпирические конституитивные линейные соотношения между потоками Y_j и X_j силами или их квазилинейные обобщения, выбранные для построения флуктуационной НТ в [15,16], но имеющие фундаментальное значение уравнения баланса.

Рассмотрим основную систему детерминированных уравнений НТ, описывающих (в отсутствие внешних сил) диссипацию однокомпонентного флюида за счет вязкости и теплопроводности:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial\rho v_i}{\partial x_i}=0, \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial\rho e}{dt}+\frac{\partial\rho e v_i}{\partial x_i}-P_{ik}v_{ik}+\frac{\partial y_i}{\partial x_i}=0,\qquad k,i=1,2,3, \tag{2.10}$$

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t}+v_k\frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right)-\frac{\partial P_{ik}}{\partial x_k}=0, \tag{2.11}$$

$$\rho T\left(\frac{\partial s}{\partial t}+v_i\frac{\partial s}{\partial x_i}\right)+\frac{\partial y_i}{\partial x_i}-d=0, \qquad (2.12)$$

где P_{ik} — тензор напряжений; y_i — компоненты вектора теплового потока; d — диссипативная, отнесенная к единицам измерения объема и времени функция. В обобщенной НТ [10] предполагается, что изменение энтропии в (2.1) может быть выражено с помощью уравнений (2.9—2.11), допускающих микроскопическое СМ-обоснование [1]. При этом обычно используются методы теории возмущений, где в качестве 0-приближения выбирается x_i-однородное $\partial/\partial x_i=0$ или t-однородное $\partial/\partial t=0$ состояние. Тогда, например, частный вид системы уравнений (2.9—2.12), соответствующих известной модели ИЖ:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial\rho v_i}{\partial x_i}=0, \qquad (2.13)$$

$$\frac{\partial\rho e}{\partial t}+\frac{\partial\rho e v_i}{\partial x_i}+P\frac{\partial v_i}{\partial x_i}=0, \qquad (2.14)$$

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t}+v_k\frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right)+\frac{\partial P}{\partial x_i}=0, \qquad (2.15)$$

$$\frac{\partial\rho s}{\partial t}+\frac{\partial\rho s\, v_i}{\partial x_i}=0, \qquad (2.16)$$

и получаемый с допущением изотропности тензора напряжений:

$$P_{ik}=-\delta_{ik}P, \qquad (2.17)$$

может быть выведен [1] как I-приближение в разложении по малому параметру $\bar{x}$, характеризующему x_i-неодонородность состояния. Важное условие, позволяющее изучать неравновесные процессы за конечный интервал времени $\Delta t=t-t_0$, заключается [1] в том, что макроскопические параметры (ρ,e,v_i) не следует разлагать в ряд вблизи x_i-однородного состояния:

$$\rho=\rho_0+\bar{x}\rho_1+..., \qquad (2.18)$$

$$e=e_0+\bar{x}e_1+..., \qquad (2.19)$$

$$v_i=v_{i0}+\bar{x}v_{i1}+..., \qquad (2.20)$$

поскольку в противном случае уравнения (2.13—2.15) с заменой (ρ,e,v_i) на (ρ_1,e_1,v_{i1}) становятся справедливыми только в близкой окрестности состояния равновесия $(\rho_0,e_0,v_{i0}=0)$. Вместе с тем подобные условия возможности исследования реальных, а не мало отличающихся от x_i–, t– или (x_i,t)–однородных (т.е. равновесных) состояний, часто нарушаются [14,17] при линеаризации системы уравнений НТ (2.9—2.12) и получении уравнений движения для флуктуаций. Сказанное относится как к выводу с помощью модели ИЖ обратимого во времени t волного уравнения [17], так и к описанию в линейной НТ крупномасштабных необратимых движений флюида [14]. Отмечая имеющуюся в НТ [10,18] неоднозначность разбиения в уравнениях баланса вкладов от потока и источника (или производства) Z_j экстенсивной величины, можно констатировать определенное несовершенство формализма линейной НТ. Указанные ограничения детерминированного подхода особенно затрудняют экстраполяцию теории на область нелинейных процессов, далеких от равновесия.

В данной работе обсуждается довольно широкий класс неоднородных состояний, подчиняющихся соотношению (2.17), позволяющему не рассматривать тензорные процессы (вязкое затухание), а ограничиться изучением векторных явлений (теплопроводности, диффузии). Исключая вклад от теплового потока из (2.10, 2,12) и используя (2.1, 2.9), получим условие отсутствия в системе диссипации:

$$d=-\frac{P}{\rho}\frac{d\rho}{dt}-P\frac{\partial v_i}{\partial x_i}=0, \qquad (2.21)$$

заменяющее в модели ИЖТ уравнение (2.12) на

$$\rho\frac{ds}{dt}=\rho\left(\frac{\partial s}{\partial t}+v_i\frac{\partial s}{\partial x_i}\right)=-\frac{1}{T}\left(\frac{\partial y_i}{\partial x_i}\right)=z_2, \qquad (2.22)$$

и уравнение, эквивалентное системе (2.13, 2.16) в модели ИЖ,

$$\rho\frac{ds}{dt}=0. \qquad (2.23)$$

В (2.22) введено определение производства энтропии z_2, несколько отличающееся от общепринятого, билинейного по потоку y_i и силе $\partial T/\partial x_i$ выражения в уравнении баланса (2.22), записанном в виде

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sigma v_i+\frac{y_i}{T}\right)=-\frac{1}{T^2}y_i\frac{\partial T}{\partial x_i};\quad \sigma=s\cdot\rho. \qquad (2.24)$$

При всей простоте последующего перехода к квадратичным по потокам Y_j и X_j силам «диссипативным потенциалам» [10,18] такая запись не выглядит достаточно обоснованной, если учесть, что к конвективному, действительно механически обратимому потоку σv_i в левой части (2.24) добавлена предположительно обратимая составляющая потока тепла y_i/T, требующая, однако, дополнительного условия изотермичности протекающего процесса. С другой стороны, сравнение (2.22) с (2.23) показывает, что принятое здесь определение z_2 полностью учитывает отличие моделей обратимого (ИЖ) и необратимого (ИЖТ) движения флюида. Заметим, что условие: $z_2 \neq 0$ в (2.22) означает нарушение симметрии между эволюцией механической (2.13) и тепловой (2.16) мод, имеющейся в модели ИЖ. Если взаимодействие указанных мод при обратимой эволюции флюида отражается с помощью уравнения (2.23), свидетельствующего о наличии интеграла движения вдоль траектории ИЖ, то нарушение симметрии в (2.22) следует считать причиной необратимости в модели ИЖТ, имеющейся уже в детерминированной формулировке НТ. В флуктуационной НТ подобное явление, приводящее к вырожденности диффузионной матрицы в уравнении Фоккера — Планка, рассмотрено в работах [16,19].

В разделах 3, 4 будет показана возможность перехода от формулировки НТ в $q_j(x_i, t)$-пространстве ЭД к динамической теории движения изображающей точки по ТП в (q_j, t)-пространстве, положенном в данной работе в основу построения флуктуационной НТ.

3. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП МОДЕЛИ ИЖ

Используем в качестве детерминированной модели обратимой эволюции флюида формализм ИЖ (2.13—2.16), не ограниченный допущениями x_i-, $t-$ или $(x_i, t)-$однородности. Уравнение (2.15), с одной стороны, и уравнение (2.13) в сумме с любым из уравнений (2.14) или (2.16), с другой стороны, образуют систему уравнений движения и связей, наложенных на это движение в (x_i, t)-пространстве. В ЛД точки под рациональным выбором q_j понимается [17] выбор, способный наилучшим образом отразить симметрию силового поля и связей, что обеспечивается максимально возможным числом циклических координат. Распространим данное требование на систему уравнений ЭД (2.13—2.16) и будем считать уравнениями эволюции механической и тепловой мод симметричную запись уравнений баланса числа частиц (2.13) и энтропии (2.16), соответственно, отвлекаясь на время от их взаимодействия посредством (2.23). Собственно уравнение

движения флюида в (x_i, t)-пространстве (2.15) рассматривается здесь в качестве уравнения связи, ограничивающей указанную эволюцию.

Запишем систему уравнений Эйлера — Лагранжа:

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial \frac{\partial q_j}{\partial t}} - \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial L}{\partial \frac{\partial q_j}{\partial x_i}} = 0, \quad i = 1, 2, 3; \; j = 1, 2, \tag{3.1}$$

соответствующих условию стационарности интеграла:

$$\delta \int_{V_0} \int_t L dx_i\, dt = 0, \tag{3.2}$$

где L — плотность лагранжиана:

$$L = L\left(q_j, \frac{\partial q_j}{dt}, \frac{\partial q_j}{\partial x_i}, x_i, t\right). \tag{3.3}$$

Введем систему обобщенных координат ($q_1 = \mu$, $q_2 = T$) и поставим уравнения (2.13), (2.16) в соответствие уравнениям (3.1). Заметим, что подобную задачу в модели ИЖ принято решать [4,20,21] с помощью введенных Клебшем скалярных потенциалов (φ, ψ) поля v_i:

$$\rho v_i = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + \sigma \frac{\partial \psi}{\partial x_i}. \tag{3.4}$$

К ограничениям, налагаемым тем самым на $v_i(x_i, t)$, можно добавить неочевидный физический смысл переменных Клебша, а также то обстоятельство, что уравнения ГД для обобщенных координат ($q_1 = \varphi$, $q_2 = \psi$) и сопряженных им обобщенных импульсов ($p_1 = \rho$; $p_2 = \sigma$) получаются в терминах функциональных производных. ВП модели ИЖ (3.2) в методе Клебша имеет вид [20,21]:

$$\delta \int_{V_0} \int_t \left(P - P_0\right) dx_i\, dt = 0, \tag{3.5}$$

где отклонение давления P от равновесного значения P_0 играет роль плотности лагранжиана L (3.3). Описанная динамическая структура детерминированной теории позволила авторам [20,21] дать квантовополевую формулировку задачи ИЖ, а в работе [4] перейти к СМ-описанию эволюции функции распределения в «фазовом» пространстве макроскопических плотностных переменных. В том и другом случаях используются функциональные производные, и, таким образом, не решена поставленная в данной работе задача перехода от формализма ЭД к ЛД (или ГД) изображающей точки, движущейся по ТП. При традиционном построении квантового и статистического описаний в цитированных работах не нашел отражения также факт взаимодействия мод, приводящий к линейной зависимости плотностей обобщенных импульсов $p_2 = \sigma = \rho s = p_1 s$ на траектории ИЖ.

Покажем, что предлагаемый нами выбор координат q_j дает термодинамически согласованное решение задачи построения ВП для модели ИЖ [8]. Действительно, в рассматриваемом базисе q_j должно выполняться

$$\frac{\partial L}{\partial \frac{\partial q_j}{\partial t}} = p_j, \quad \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \mu}{\partial t}} = \rho, \quad \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial T}{\partial t}} = \sigma, \tag{3.6}$$

где p_j — плотность канонического импульса, а также

$$\frac{\partial L}{\partial \frac{\partial q_j}{\partial x_i}} = p_j v_i, \quad \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \mu}{\partial x_i}} = \rho v_i; \quad \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial T}{\partial x_i}} = \sigma v_i. \tag{3.7}$$

Здесь поле скорости $v_i(x_i, t)$ характеризует связь эволюции механической (ρ, μ) и тепловой (σ, T) мод, другим выражением которой является основное уравнение модели ИЖ (2.23). Поскольку гипотеза ЛР рассматривает неравновесные процессы в масштабах больших по сравнению с единицей объема, плотности импульсов p_j, а также $p_j v_i$ не должны явно зависеть от пространственных и временных производных q_j. Тогда с учетом (3.6, 3.7) L имеет вид билинейного выражения:

$$L = \rho \frac{\partial \mu}{\partial t} + \sigma \frac{\partial T}{\partial t} + \rho v_i \frac{\partial \mu}{\partial x_i} + \sigma v_i \frac{\partial T}{\partial x_i}, \tag{3.8}$$

которое с помощью (2.4) можно переписать как

$$L = \rho \frac{d\mu}{dt} + \sigma \frac{dT}{dt} = p_j \frac{dq_j}{dt}. \tag{3.9}$$

Воспользовавшись гипотезой ЛР (2.6), находим соотношение, изоморфное связи лагранжиана L с механическим действием P в ЛД точки:

$$L = \frac{dP}{dt}, \tag{3.10}$$

что позволяет сформулировать ВП уравнений ИЖ в виде

$$\delta \int\limits_{V_0} \int p_j \, dq_j \, dx_i = \delta \int\limits_{V_0} (P - P_0) \, dx_i = 0. \tag{3.11}$$

Полученное выражение записано, в отличие от метода Клебша [4,20,21], с помощью имеющих ясный физический смысл переменных и обобщает на неравновесные процессы термодинамический потенциал РТ для открытых систем: $-PV_0$. Укажем, что вопрос интеграции по x_i в (3.11) далеко не тривиален и должен учитывать наличие зависящих от (μ, T) в каждой точке ТП корреляционных объемов для ЛР [6,7]. Согласованность РТ с приведенным выводом ВП дополнительно подтверждается следующими из (2.6) и (3.6) определениями:

$$p_1 = \rho = \frac{\partial P}{\partial \mu} = \frac{\partial P}{\partial q_1}; \quad p_2 = \sigma = \frac{\partial P}{\partial T} = \frac{\partial P}{\partial q_2}. \tag{3.12}$$

То обстоятельство, что (3.11) имеет вид ВП «укороченного» действия в ЛД, при котором q_j фиксированы на концах, а (x_i, t) в отличие от ВП Гамильтона варьируются, свидетельствует о более общем характере предлагаемого ВП по сравнению с (3.5) и обратимости уравнения движения ИЖ в (q_j, t).

Заметим, что более оправданно [22] назвать L, входящий в левую часть (3.9, 3.10), «понтрягианом», поскольку именно эта функция использовалась Л.С.Понтрягиным при формулировке принципа максимума в теории управляемых динамических систем. Максимизация L тогда приводит к частной форме уравнения Гамильтона — Якоби в ГД:

$$H(p_j, q_j) = 0, \tag{3.13}$$

которую также можно получить, применяя преобразование Лежандра:

$$H = p_j \frac{dq_j}{dt} - L = 0. \tag{3.14}$$

Приведенные выражения соответствуют условию t-однородности действия P, следующему также из (2.7), и позволяют установить связь (x_i, t)- и (q_j, t)-представлений в явном виде:

$$\frac{dq_i}{dt} \frac{\partial P}{\partial q_j} = v_i \frac{\partial P}{\partial x_i}. \tag{3.15}$$

Подставляя в (3.15) уравнение связи (2.15) и интегрируя результат с учетом (2.23), получим интеграл Бернулли для траектории ИЖ:

$$\frac{v_i^2}{2} + \mu + sT = \frac{v_i^2}{2} + h = \text{const}, \tag{3.16}$$

где h — энтальпия, отнесенная к одной частице или единице массы.

Нетрудно видеть, что установленная выше динамическая структура теории отвечает описанию открытых систем, где вероятностная интерпретация должна основываться скорее на функции действия (2.7), а не гамильтониане задачи (3.13). То обстоятельство, что действием здесь становится не функционал энтропии, использованный Эйнштейном при построении гауссовой флуктуационной теории, но зависящая от слабо флуктуирующих переменных разница давлений в начальном и конечном состоянии, позволяет надеяться на лучшую сходимость ряда теории возмущений при переходе к формулировке флуктуационной НТ. В этом случае более оправданным представляется добавление к L в (3.11) функций градиентов $\partial/\partial x_i$ (или, более обще (см. (2.4)) — производных: d/dt) от термодинамических полей (μ, T), а не градиентов $\partial/\partial x_i$ от сильно флуктуирующих переменных, типа ρ [9]. В указанном смысле вводимый в следующем разделе ВП модели ИЖТ представляет собой обобщение часто применяемого в классической и масштабной теориях равновесных неоднородных сред локального потенциала:

$$\int_{V_0} \left\{ \left[f(\rho, T) - \mu \rho \right] + c \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right)^2 \right\} dx_i , \tag{3.17}$$

где выражение в квадратных скобках представляет собой просто преобразование Лежандра по одной переменной от локального потенциала в (3.11). Гауссово приближение и форма Гинзбурга — Ландау соответствуют тогда использованию в (3.17) устойчивых, в смысле теории катастроф [23], моделей для P:

$$P_г = a_0 - \mu \rho + a_2 \rho^2, \quad (а)$$

$$P_{г-л} = a_0 - \mu \rho + a_2 \rho^2 + a_4 \rho^4. \quad (б) \tag{3.18}$$

Подобная интерпретация, как показано в работе [3], возможна и при использовании в нелокальной НТ функционала энтропии.

В заключение раздела отметим, что выбор координатного базиса в данной работе обеспечивает полную цикличность термодинамических полей q_j, имеющих смысл «угловых (линейно зависящих от t) переменных», когда p_j соответствует «переменным действия», квантование которых было положено Бором в основу ранней формулировки квантовой механики. Интересно указать, что переход для конечных интервалов t к переменным действия и угловым переменным возможен в системе двух независимых осцилляторов (нормальных мод), в рамках модели которых обычно трактуются флуктуации интенсивных переменных в макросистемах в гауссовом приближении. Если теперь учесть, что на самом деле тепловая и механическая моды взаимодействуют между собой, то можно прийти [6,9] к гамильтониану модели связанных осцилляторов.

В следующем разделе будет сформулирован ВП модели ИЖТ, с помощью которого получены уравнения движения для флуктуаций, а также выведено явное выражение для изменения производства энтропии z_2 (2.22) со временем t в необратимом процессе.

4. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП МОДЕЛИ ИЖТ

Как уже отмечалось в конце раздела 2, формулировка ВП с линейной и квазилинейной НТ осуществляется [15,16,18] путем введения в уравнение локального баланса энтропии квадратичных по потокам Y_j и X_j силам диссипативных функций Рэлея — Онсагера. Следует подчеркнуть, что задача вывода линейных конституитивных выражений, рассматриваемых в качестве уравнений эволюции неравновесной системы, непосредственно решается [18] только в силовом, связанном с отклонениями термодинамических полей ($\delta\mu$, δT), X_j-представлении. В потоковом, относящемся к изменениям плотностей ($\delta\rho$, $\delta\sigma$), Y_j-представлении для этой цели требуется введение дополнительного предположения о наличии не имеющих непосредственного физического смысла потенциалов поля скорости $v_i(x_i, t)$, аналогичных переменным Клебша (φ, ψ). В разделе 3 была установлена потенциальность поля обобщенных импульсов p_j в выбранном нами (q_j, t)-представлении, следующая из уравнений баланса ЭД (2.13), (2.16) гипотезы ЛР (2.6) и определения плотности действия (2.7).

Заметим, что ни ВП, предложенный авторами [15,16] в форме, изоморфной ВП ЛД точки:

$$\delta \int_t L\, dt = 0, \tag{4.1}$$

ни ВП работы [18], использующей эйлерово представление переменных $q_j(x_i, t)$, где интеграл берется по макроскопическому объему V_0:

$$\delta \int_{V_0} L\, dx_i = 0, \tag{4.2}$$

не соответствуют наиболее общему виду ВП ЭД (3.2) и требуют введния дополнительных, ограничивающих общность рассмотрения предположений. Задача обобщения ВП на нелинейные процессы представляется столь сложной, что в обощенной НТ [10] ставится под сомнение само существование ВП для этих случаев, тогда как в расширенной НТ [11] билинейное по потокам и силам выражение для призводства энтропии обобщается так, что диссипативная функцйя не считается более квадратичной по потокам Y_j. Другую возможность в расширенной НТ [13] дает введение конституитивных соотношений в неонсагеровой форме, с учетом релаксационной матрицы $\bar{t}$. Тогда диссипативные эффекты удается рассмотреть [12,13] путем не вполне мотивированного физически включения в L асимметричной во времени t функции: $\exp(-t/\bar{t})$.

Покажем, что в рамках предлагаемого в данной работе подхода возможен определенный прогресс при обсуждении перечисленных, трудно решаемых задач НТ. Используя ранее найденное для модели ИЖ L_0 (3.10) и вводя малый параметр (релаксации) $\bar{t}$ с размерностью времени, запишем L модели ИЖТ как

$$L = L_0 + \bar{t}\, L_1 = \delta P + \frac{\bar{t}}{2}\delta^2 P = \frac{dP}{dt} + \frac{\bar{t}}{2}\frac{d^2P}{dt^2}. \qquad (4.3)$$

Преобразуем это выражение к виду, удобному для дальнейшего:

$$L = \rho\frac{\partial\mu}{\partial t} + \rho v_i\frac{\partial\mu}{\partial x_i} + \sigma\frac{\partial T}{\partial t} + \sigma v_i\frac{\partial T}{\partial x_i} +$$

$$+\frac{\bar{t}}{2}\left(\frac{d\rho}{dt}\frac{\partial\mu}{\partial t} + \frac{d\rho}{dt}v_i\frac{\partial\mu}{\partial x_i} + \frac{d\sigma}{dt}\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{d\sigma}{dt}v_i\frac{\partial T}{\partial x_i}\right), \qquad (4.4)$$

и рассмотрим уравнение баланса для механической моды, подставляя (4.4) в общую форму (3.1) (поскольку выполняется (2.21)):

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho v_i}{\partial x_i} + \frac{\bar{t}}{2}\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{d\rho}{dt}\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(v_i\frac{d\rho}{dt}\right)\right] =$$

$$= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho v_i}{\partial x_i} + \frac{\bar{t}}{2}\left[\left(\frac{d^2\rho}{dt^2}\right) - \frac{1}{\rho}\left(\frac{d\rho}{dt}\right)^2\right] = 0. \qquad (4.5)$$

Левая часть (4.5) содержит сумму уравнения сохранения (2.13) и уравнения баланса для возмущений: $\delta\rho = d\rho/dt$, получаемого обычно при линеаризации уравнений НТ в окрестности равновесия. Здесь указанного ограничения нет. Аналогичным образом можно записать формально симметричное (4.5) уравнение для тепловой моды:

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} + \frac{\partial\sigma v_i}{\partial x_i} + \frac{\bar{t}}{2}\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{d\sigma}{dt}\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(v_i\frac{d\sigma}{dt}\right)\right] = 0, \qquad (4.6)$$

которое, однако, нетрудно привести к виду, свидетельствующему о фактическом нарушении указанной симметрии:

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} + \frac{\partial\sigma v_i}{\partial x_i} + \frac{\bar{t}s}{2}\left[\frac{d^2\rho}{dt^2} - \frac{1}{\rho}\left(\frac{d\rho}{dt}\right)^2\right] + \frac{\bar{t}}{2}\frac{d}{dt}\left(\rho\frac{ds}{dt}\right) = 0. \qquad (4.7)$$

Умножая (4.5) на s и подставляя результат в (4.7), получим

$$\rho\frac{ds}{dt} + \frac{\bar{t}}{2}\frac{d}{dt}\left(\rho\frac{ds}{dt}\right) = 0, \qquad (4.8)$$

что интегрируется с весьма важным результатом (см. (2.22)):

$$\rho\frac{ds}{dt} = z_2(t) = z_2^0\exp(-2t/\bar{t}). \qquad (4.9)$$

Согласно (4.9) локальное производство энтропии z_2 убывает с ростом t (или при уменьшении времени релаксации $\bar{t}$) не только в окрестности t- или (x_i, t)-однородных состояний. Интересно указать на некоторую аналогию уравнений детерминированной эволюции механической и тепловой (4.6) мод с уравнением Фоккера — Планка флуктуационной НТ, где импульсы $p_j = (\rho, \sigma)$ играют роль «плотностей распределения» в (x_i, t)-пространстве. Подобно тому, как взаимодействие указанных мод приводило в модели ИЖ к (2.23), взаимодействие флуктуаций в модели ИЖТ дает асимметричное во времени t уравнение (4.9) для локального производства энтропии z_2 в (2.22). В точке q_0 детерминированного равновесия, где $\delta p = 0$, разложение (4.3) имеет особенность, поскольку $L_0 \ll \bar{t}\, L_1$. Тогда детерминированное движение флюида отсутствует и «диффузионная матрица» уравнений (4.5) и (4.6) вырождена таким образом, что z_2 для состояний с конечным временем релаксации $\bar{t}$ сохраняется во времени t и, в общем случае, не равно нулю. Для быстро осциллирующих вблизи равновесия интенсивных переменных $\bar{t} \to 0$, и приближенно можно считать, что z_2 линейно зависит от времени t. В пределе $\bar{t} \to \infty$ разложение (4.3) также имеет особенность типа указанной выше для общей точки ТП: $L_0 \ll \bar{t}\, L_1$. Отсюда следует важный вывод о принципиальном сходстве характера флуктуаций в окрестности равновесных точек ТП с конечным $\overline{t}$ и $\overline{t} \to \infty$.

Этот результат полностью согласуется с флуктуационной теорией построения глобального уравнения ТП, развитой в [6,7], где «временным» параметром считалось отношение фиксированного объема V^0 к непрерывно уменьшающемуся масштабу измерения этой величины. При достижении последним значений, близких к корреляционному объему V_c, указанное сходство характера флуктуаций наблюдалось для состояний с конечным V_c и $V_c \to \infty$. С учетом этого обстоятельства в работе [7] найден явный вид уравнения (2.7), сингулярного в каждой (а не только критической) из точек, принадлежащих ТП. Задача получения данного уравнения решалась как задача Коши для специального вида (3.13) нелинейного дифференциального уравнения с частными производными первого порядка. Характеристическими линиями при этом являются изоэнтропы s, отвечающие модели обратимого равновесного обмена открытой системы с окружением веществом и энергией [6].

Укажем, что, не прибегая к обычному виду уравнения теплопроводности (вывод которого основан на не всегда оправданных физически допущениях [12,13]), в модели ИЖТ получили детерминированное выражение (4.9), позволяющее обобщить динамику на стохастический эволюционный процесс для случайной переменной $z_2(t)$:

$$f\left(t, z_2^0, z_2\right) dz_2 = Pr\left[z_2 \le Z_2(t) \le z_2 + dz_2 \mid Z_2(0) = z_2^0\right], \qquad (4.10)$$

в котором f дает решение задачи теплопроводности в рамках т.н. «процесса Орнштейна — Уленбека» [24]. Указанная переменная нормально распределена вблизи траектории (4.9), и в этом смысле полученные результаты обобщают гауссову флуктуационную НТ на исследование эволюции производства энтропии: $Z_2(t)$ в модели ИЖТ.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установленная в предыдущих разделах динамическая структура детерминированной макроскопической теории дает базис для перехода к вероятностному описанию эволюции системы в рамках флуктуационной НТ. Снятие ограничения (2.17) будет обобщать тогда рассмотренную выше динамику звуковой составляющей механической моды и ее взаимодействие с тепловой модой на изучение вязкой составляющей. Флуктуации интенсивных термодинамических переменных подчинены в развитом подходе требо-

ванию принадлежности ТП в любой точке (x_i, t) [9]. Возникающее отсюда предположение о пригодности полученных результатов для произвольного поля скорости $v_i(x_i, t)$ приводит к необходимости стохастической интерпретации указанных переменных и возможности построения замкнутой системы уравнений для их средних значений. Концептуально такой подход не противоречит недавно предложенному механизму возникновения турбулентности [25] и согласуется с выводом нелокальной НТ [3] о предпочтительности использования при анализе взаимодействия мод в качестве параметра упорядочения (точнее — параметра беспорядка, асимметричного в НТ параметру порядка ρ [6]) переменной σ.

В этой связи укажем на интересную возможность [6—8] механической интерпретации базисных переменных данной работы (μ, T), основанную на мысленном делении макроскопического объема флюида V_0 на плотно заполняющие его одинаковые кубические подсистемы с объемом V_τ, равным единице измерения V_0, взаимодействующие между собой путем обмена веществом и тепловой энергией. Согласно гипотезе ЛР, отдельную ячейку V_τ можно описать с помощью макроскопического ячеечного гамильтониана H, в котором постоянная μ характеризует приложенное «магнитное поле», а постоянная T характеризует свободную энергию f для V_τ в (3.17). Тогда указанное выше взаимодействие «спиновых» переменных ρ для соседних ячеек отражается наличием второго (дополнительно к H_0 (3.13)) слагаемого в H, обобщающего квадратичный по градиенту $(\partial \rho / \partial x_i)$ член в (3.17) и определяемого используемой для L формой (4.3). В такой «решеточной» трактовке флюидной динамики, внутренне близкой полевому формализму ЭД, а не ЛД или ГД точки, возможно также вероятностно-механическое обобщение смысла импульсных переменных (ρ, σ), связанное с переходом к квантовой интерпретации интенсивных переменных в отдельной ячейке V_τ [6]. В этом случае величинам ρ и σ могут быть поставлены в соответствие одно- и двух-«частичные» функции распределения [1] в q_j-пространстве, очевидным образом обобщаемые на марковский формализм одно- и двухвременных функций, при изучении зависящих от t явлений. Тогда соотношение $\sigma = s\rho$ приобретает смысл определения вероятности перехода s, занимающей центральное место в указанном формализме, а уравнение (2.23) обеспечивает аналог теоремы Лиувилля при рассмотрении обратимых процессов.

Изложенная выше эвристическая программа построения макроскопической флуктуационной НТ, не требующая больцмановского определения

s в СМ и наделяющая термодинамическим смыслом основные объекты СМ, выглядит достаточно привлекательно, что оправдывает, по нашему мнению, дальнейшую работу в данном направлении. В качестве указателя на этом пути полезно отметить разницу динамических формализмов, обусловленную введением в теорию пары канонически сопряженных тепловых величин $(q_2, p_2) = (T, \sigma)$. Подчеркнем, прежде всего, неэквивалентность полевого: $q_j = (\mu, T)$- и плотностного: $p_j = (\rho, \sigma)$-представлений уже при рассмотрении модели обратимой эволюции флюида. Действительно, дифференциальные уравнения движения в модели ИЖ являются уравнениями второго порядка только при использовании в качестве координат q_i термодинамических полевых переменных (раздел 3), тогда как в плотностном конфигурационном пространстве они соответствуют уравнениям первого порядка. Другим различием, обсуждавшимся выше, является взаимодействие механической и тепловой мод, приводящее к специальному типу уравнения Гамильтона — Якоби (3.13). Отсюда в квантовой формулировке можно ожидать изменения обычного квантово-механического соотношения неопределенности. Это обстоятельство, на наш взгляд, нужно учитывать при оценке появившихся в последнее время довольно многочисленных работ, авторы которых при построении флуктуационной НТ буквально следуют основным этапам построения квантово-механической теории. Термодинамический аналог постоянной Планка — константа Больцмана — отражает неопределенность, возникающую при одновременном измерении механических и тепловых координат (q_j, q_k) или импульсов (p_j, p_k), но не сопряженных величин (q_j, p_j).

Литература

1. Боголюбов Н.Н. — Избранные труды по статистической физике. М.: МГУ, 1979.
2. Zubarev D.N., Morozov V.G. — Physica, 1983, v.120A, N 3, p.411.
3. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г. — Проблемы современной статистической физики. Киев, Наукова думка, 1985, с.120.
4. Van Saarloos W., Bedeaux D., Mazur P. — Physica, 1981, v.96A, 1, p.109.
5. Van Saarloos W., Bedeaux D., Mazur P. — Physica, 1982, v.110A, 1/2, p.147.
6. Rogankov V.B. — Acta Phys. Hung., 1985, v.57, 1—2, p.13.
7. Роганков В.Б. — ДАН СССР, 1986, т.289, 1, с.141.
8. Роганков В.Б. — ДАН СССР, 1987, т.295, 3, с.600.
9. Rogankov V.B., Mezey L.—Z., Giber J. — Acta Phys. Polon., 1984, v.A66, 2, p.119.

10. Гленсдорф П., Пригожин Н. — Термодинамическия теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973.
11. Eu B.C. — Апп. Phys., 1982, v.140, 2, p.341.
12. Casas—Vazquez J. — Thermodynamic Theory of Stability.— Lecture Notes in Physics, v.164, Heidelberg, New York: Springer Verlag, 1982, p.1.
13. Sieniutycz S. — J. Non-Euqilib. Therm., 1984, v.9, 1, p.61.
14. Балеску Р. — Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978.
15. Grabert H., Green M.S. — Phys. Rev., 1979, v.19A, 4, p.1747.
16. Grabert H., Graham R., Green M.S. — Phys. Rev., 1980, v.21A, 6, p.2136.
17. Ольховский И.И. — Курс теоретической механики для физиков. М.: МГУ, 1974.
18. Дьярмати И. — Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974.
19. Морозов В.Г. — ТМФ, 1984, т.58, 1, с.79.
20. Kronig R., Thellung A. — Physica, 1952, v.18, 10, p.749.
21. Thellung A. — Physica, 1953, v.19, 2, p.217.
22. Бутковский А.Г. — Фазовый портрет управляемых динамических систем. М.: Мир, 1985.
23. Постон Т., Стюарт И. — Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980.
24. Ludwig D. — SIAM Rev., 1975, v.17, 4, p.605.
25. Маслов В.П. — ТМФ, 1986, т.69, 3, с.361.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 декабря 1992 года.