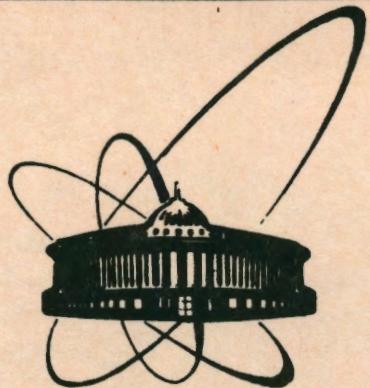


92-481.



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
дубна

P17-92-481

В.К.Федягин, В.Б.Роганков\*

МАСШТАБНОЕ УРАВНЕНИЕ  
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ  
ФЛЮИДА.  
ФЛУКТУАЦИИ В МАЛЫХ ОБЪЕМАХ  
МАКРОСКОПИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Направлено в журнал «Fluid Phase Equilibria»

\*Одесский институт низкотемпературной техники и энергетики

1992

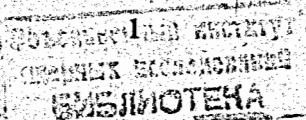
1. В [1] было установлено, что интервал  $a$ -состояний  $\tau \in [0, \tau_c]$  при детерминированном способе описания соответствует в РТ неподвижной точке  $q_0$  (1.15)\* рассматриваемой ДС. Учет флуктуаций интенсивных переменных, обусловленных реально существующими  $(x_i, t)$ -неоднородностями распределений вещества и энергии внутри отдельных  $V_\tau$ -подсистем и увеличивающейся с уменьшением значения  $V_\tau$  интенсивностью их обменного взаимодействия с окружением, формально не изменяет этого вывода для  $\tau \in [0, \tau_c]$ . Другими словами, ограниченные по величине гауссовые  $\delta$ -флуктуации плотностей  $\{a_j\}$  и полей  $\{b_j\}$  в макроскопических объемах  $V_\tau > V_c$ :

$$|\delta| \ll \Delta_\tau \quad (1)$$

можно связывать с беспорядочным  $T$ -движением изображающей точки  $q(\tau)$  в малой окрестности  $\Delta_\tau$  вблизи равновесной точки  $q_0$ , относящейся к типу простейших аттракторов ДС [2]. Отсутствие практической необходимости в изучении такой детерминированной траектории  $q(\tau)$ , безусловно, оправдывает переход к вероятностному описанию совокупности (ансамбля) изображающих точек, нормально распределенных вблизи  $q_0$ . При применении гауссовой флуктуационной теории (ФТ) к РТ вначале предполагается [3, 4] выполнение следующих требований:

- а) Для  $V_\tau$ -подсистемы и ее окружения, имеющего объем  $(V_0 - V_\tau) \gg V_\tau$ , могут реализовываться только состояния равновесия, отвечающие отдельным точкам на ТП (1.1);
- б) Условная вероятность обнаружить экстенсивные параметры  $V_\tau$ -подсистемы в интервале значений от  $A_\tau$  до  $A_\tau + dA_\tau$ , если  $V_0$ -система описывается с помощью величин  $\{A_0\}$ , равна (для чистого вещества, в котором  $j = 1, 2$ ):

\*Ссылки на формулы из [1] в этой работе даются, как (1....)



$$\psi \left( A_{\tau_j}, V_{\tau} | A_0, V_0 \right) dA_{\tau_1} dA_{\tau_2} = \Delta_{\tau} \exp \left[ S_0 \left( A_0 | A_{\tau_j} \right) / k \right] dA_{\tau_1} dA_{\tau_2}, \quad (2)$$

где полная энтропия  $S_0$  характеризует  $V_0$ -систему, когда  $V_{\tau}$ -подсистема имеет значения  $A_{\tau_j}$ .

в) Энтропия  $S_0$  является аддитивной функцией:

$$S_0 \left( A_0 | A_{\tau_j} \right) = V_{\tau} \sigma \left( a_{\tau_j} \right) + (V_0 - V_{\tau}) \sigma \left( a_{0,\tau_j} \right), \quad (3)$$

в которой величины  $a_{\tau_j}$  определяются в приближении  $(x, t)$ -однородности (1.5) и аналогично (для  $V_0 = \text{const}$ ):

$$a_{0,\tau_j} = \left( A_{0,j} - A_{\tau_j} \right) / (V_0 - V_{\tau}) \xrightarrow[V_{\tau} \rightarrow V_c]{} a_{0,j} = A_{0,j} / V_0. \quad (4)$$

В указанном пределе  $V_{\tau}$  приближается к значению  $V_c$  сверху, так что  $(V_0 - V_{\tau}) \approx V_0 >> V_{\tau}$  и флюктуации  $\delta a_j(V_{\tau})$  не имеют обычной асимптотики РТ (1.16), поскольку, при соответствии прочих условий,  $V_{\tau}$  здесь не устремляется к бесконечности. В мысленной процедуре уменьшения  $V_{\tau}$  и перехода в область  $b$ -состояний:  $\tau \approx \tau_c$ , использование соотношений детерминированной РТ (1—6) достигает предела применимости. В частности, нарушается эмпирическое условие макроскопической эквивалентности (1.3), обеспечивающее возможность выбора одной из величин  $A_j$  в качестве масштаба и понижения размерности  $Q_j$ -пространства РТ на единицу, а также возможность локальной взаимозаменяемости в РТ полей  $\{b_j\}$  и плотностей  $\{a_j\}$  на основе полного (1.6) или частичного:

$$f(\rho, T) = -P(\mu, T) + \mu\rho, \quad (5)$$

преобразования Лежандра. Само использование сильно флюктуирующих экстенсивных величин  $A_{\tau_j}$  при описании малых объемов  $V_{\tau}$ , и тем более определение с их помощью по формулам (1.4, 1.5) интенсивных переменных  $\{a_j, b_j\}$ , представляется физически необоснованным.

Следующим шагом построения гауссовой ФТ обычно является [3,4] аппроксимация функции:

$$S_0 \left( A_{0,j} | A_{\tau_j} \right) \equiv S_0 \left( \delta A_j \right), \quad (6)$$

достигающей максимума при  $\delta A_j = 0$ , с помощью ее разложения в ряд по степеням  $\delta A_j$  и сохранения членов второго порядка:

$$S_0 \left( \delta A_j \right) = S_0(0) = (1/2) \sum_{j,k}^{n=2} \partial^2 S_0 / \partial (\delta A_j) \partial (\delta A_k) |_{\delta A_j = 0} \delta A_j \delta A_k. \quad (7)$$

На флюктуации экстенсивных переменных  $\{\delta A_j\}$  здесь налагается требование малости (1), которое естественно, нарушается в малых объемах  $V_{\tau}$ . То же утверждение относится к флюктуациям плотностных переменных  $\{\delta a_j\}$ , часто используемых в гауссовой ФТ [4,5] вместо  $\{\delta A_j\}$ . Рассмотрим, как входит введенный нами в [1] параметр  $\tau$  (1.18) в данную ФТ.

Поскольку в объеме  $V_0$  каждая из экстенсивных величин  $\{A_j\}$  сохраняется при равновесном обменном взаимодействии открытой  $V_{\tau}$ -подсистемы с окружением, имеющим объем  $(V_0 - V_{\tau})$ , запишем это условие, вводя два типа флюктуаций плотностей относительно  $a_0$ :

$$(V_0 - V_{\tau}) (a_{0,\tau} - a_0) + V_{\tau} (a_{\tau} - a_0) = (V_0 - V_{\tau}) \delta a_{0,\tau} + V_{\tau} \delta a_{\tau} = 0. \quad (8)$$

В предельном переходе (4) в область  $b$ -состояний ( $\tau \approx \tau_c$ ) от начального значения  $\tau_0 \approx 1$  ( $V_{\tau} \approx V_0$ ) из области  $a$ -состояний флюктуации  $\delta a_{0,\tau}$  в окружающей  $(V_0 - V_{\tau})$ -подсистеме все с большим основанием могут быть отнесены к характеристикам собственно  $V_0$ -системы и названы «гауссовыми». Напротив, флюктуации  $\delta a_{\tau}$  в  $V_{\tau}$ -подсистеме должны увеличиваться так, что их гауссово описание становится проблематичным и достигает предела применимости при значениях  $\tau \approx \tau_c$ . Тогда из (8) имеем

$$\tau = \tau_0 - \frac{\delta a_{\tau}}{\delta a_{0,\tau}} = \frac{a_{0,\tau} - a_{\tau}}{a_{0,\tau} - a_0}, \quad \tau_0 = 1, \quad (9)$$

где параметр  $\tau$  характеризует в малых  $V_{\tau}$ -подсистемах соотношение флюктуаций  $\delta a_{\tau} \approx (a_{0,\tau} - a_{\tau})$ , имеющих тенденцию становиться при  $\tau \approx \tau_c$  «негауссовым» к флюктуациям гауссова типа  $\delta a_{0,\tau} = (a_{0,\tau} - a_0)$ .

2. Из предыдущего следует, что учет флуктуаций вблизи  $q_0$  в РТ приводит к принципиальному различию в формулировке задачи  $T$ -движения, по сравнению с детерминированным описанием  $q_0$ . Оно заключается в том, что «долговременное» (по параметру  $t$ ) воздействие случайных гауссовых возмущений на ДС будет неизбежно обуславливать, как это установлено в теории стохастических ДС [6—8], возможность ухода при  $\tau \approx \tau_c$  траектории изображающей точки  $q(\tau)$  из области начального равновесного аттрактора  $q_0$ . Использование в дальнейшем результатов, полученных в рамках указанной теории относительно параметра физического времени  $t$ , применительно к ДС, изменяющей координаты  $q_j$  в зависимости от параметра  $\tau$  (1.18), учитывает приведенную нами в [1]  $T$ -динамическую интерпретацию соотношений локальной РТ.

Аналог интервала  $T$ -времени  $\Delta\tau = \tau_c - 0 \approx \tau_c - 1$ , предшествующего моменту ухода траектории  $q(\tau)$  из области притяжения аттрактора  $q_0$ , назван в работе [6] «устойчивостью» («persistence») ДС по отношению к случайным возмущениям. Аналог нестабильного состояния  $q_c (\tau \approx \tau_c)$ , когда сила, возвращающая изображающую точку в окрестность  $\Delta$  состояния равновесия  $q_0$  становится чрезвычайно малой и реализуется известная модель критического замедления, называется в стохастической теории [7] «границным» («marginal») состоянием. Помимо «расплывания» гауссова распределения вблизи  $q_0$ , вследствие увеличивающихся флуктуаций  $\delta a_i$ , этому состоянию могут сопутствовать явления скачкового (катастрофического [9]) изменения обобщенных координат  $q(\tau)$  центра этого распределения и возможного изменения числа его максимумов (модальности) [9]. В работе R.Graham [8] приведены известные качественные графики двух, наиболее характерных сценариев эволюции ДС по достижению области граничных  $b$ -состояний.

Принятое описание динамики возникновения неравновесных фазовых переходов [11] выделяет [8,12] следующие основные этапы. Вначале ДС находится в термодинамическом равновесии и на нее начинают действовать  $t$ -однородные ( $\partial/\partial t = 0$ ) внешние «силы», постепенно увеличивающейся интенсивности  $\lambda$ . Такие «силы» могут отвечать наличию сравнительно небольших градиентов ( $\partial/\partial x_i \neq 0$ ) полевых переменных  $\{b_j\}$  и связанных с ними потоков экстенсивных величин, приводящих к изменениям плотностей  $\{a_j\}$ . Если рассматриваемая «сила» достаточно мала, то ДС «откликается» на ее действие согласно линейной онсагеровой теории необратимых процессов

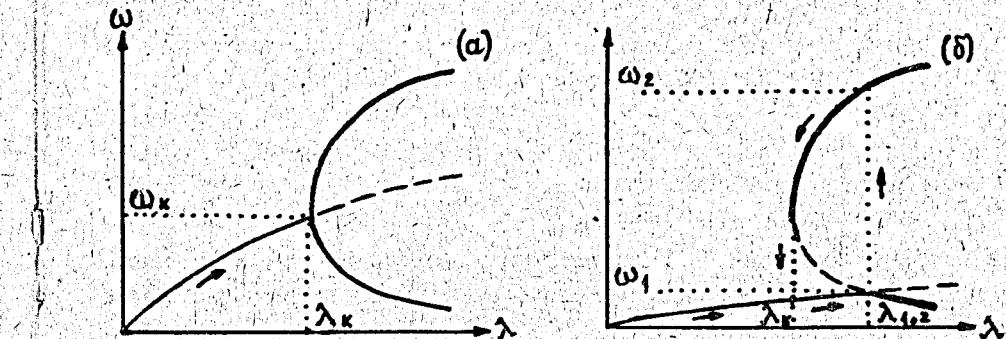


Рис.1. Бифуркации «нелинейной тепловой ветви» по типу: (а) фазового перехода второго рода; (б) фазового перехода первого рода ( $\omega$  — макроскопическая переменная,  $\lambda$  — интенсивность внешних «сил»)

[12]. При этом ДС уходит от начального равновесия  $q_0$  и достигает нового, «близкого к  $q_0$ », неравновесного установившегося состояния  $\bar{q}$ . На рис.1 описываемому процессу отвечает малая (локальная) область в окрестности начала координат ( $\omega, \lambda = 0$ ), где в качестве переменной  $\omega$  естественно рассматривать отклонения детерминированных значений плотностей  $\bar{a}$  от  $a_0$ , т.е.  $\omega = (a_0 - \bar{a})$ , а в качестве характеристики интенсивности внешних сил  $\lambda$  — аналогичные отклонения полевых переменных:  $\lambda = (b_0 - \bar{b})$ . Связь  $\omega$  с  $\lambda$  на малых отрезках детерминированной траектории ( $\lambda$ ) определяется линейными соотношениями теории Онсагера. Непрерывное увеличение значения  $\lambda$  может перевести ДС в область, «далекую от состояния  $q_0$ » [13], где ее «отклик» на действие  $\lambda$  будет становиться локально нелинейным. Возникающие типы неустойчивого поведения ДС (бифуркации «тепловой ветви») изображены на рис.1.

3. Сравним обсуждаемую в данной работе модель  $T$ -движения изображающей точки  $q(\tau)$  с описанным выше изменением детерминированных переменных  $\omega(\lambda)$  при протекании необратимых относительно физического времени  $t$  процессов. Прежде всего заметим, что в том и другом случаях траектории ДС полностью принадлежат ТП. Для системы детерминированных уравнений неравновесной термодинамики (НТ) и дополняющих их линейных соотношений теории Онсагера это утверждение имеет смысл гипотезы локального равновесия (ЛР) [13]. Согласно этой гипотезе в НТ рассматриваются только такие изменения интенсивных термодинамических величин  $\{a_j; b_j\}$ , обеспечивающих макроскопическое описание необратимо-

го процесса, которые не нарушают при любых значениях  $(x_i, t)$ -параметров вида функций (1.7, 1.8), определяющих ТП. В равновесной гауссовой ФТ это предположение распространяется (см. а)) на функцию (1.1), зависящую от экстенсивных переменных  $\{A_j\}$ . Укажем, что принятие гипотезы ЛР неявно подразумевалось также в приведенном выше утверждении о возможности интерпретации интенсивности внешних «сил»  $\lambda$ , действующих на ДС с помощью флюктуаций полей РТ:  $\lambda = (b_0 - b) \approx \delta b$ . При этом часто используемое в линейной НТ ограничение  $t$ -однородности [13,14] для  $\lambda$  представляется излишним, и в настоящей работе будет применяться более общая форма:

$$\delta \leftrightarrow d \leftrightarrow d/dt = \partial/\partial t + v_i \partial/\partial x_i, \quad (10)$$

предположения Л.Онсагера о связи флюктуаций ( $\delta$ ) и детерминированных изменений ( $d/dt$ ) переменных РТ вдоль траектории необратимого процесса на ТП. Справа в (10) нами введено обычное определение оператора субстанциональной производной, действующей на любую из величин  $\{a_j; b_j\}$  таким образом, что в общем случае учитываются как  $x_i$ -так и  $t$ -неоднородности этих переменных. Другими словами, к обычному определению термодинамических «сил»  $\{x_j\}$  в линейной НТ [14]:

$$\delta_{x_i} \mu \leftrightarrow X_1 = \partial \mu / \partial x_i \quad (\text{а}) \quad \delta_{x_i} T \leftrightarrow X_2 = \partial T / \partial x_i \quad (\text{б}), \quad (11)$$

вызывающих «потоки» диффузии и теплопроводности, здесь предлагается добавить учет возможной  $t$ -неоднородности протекающих процессов:

$$\delta \mu \leftrightarrow X_1 = \partial \mu / \partial t \quad (\text{а}) \quad \delta T \leftrightarrow X_2 = \partial T / \partial t \quad (\text{б}). \quad (12)$$

Совершенно аналогично в определении «потоков»  $\{Y_j\}$  нами предлагается включить оба рассматриваемых фактора  $(x_i, t)$ -неоднородности:

$$\delta \rho \leftrightarrow Y_1 = d \rho / dt \quad (\text{а}), \quad \delta \sigma \leftrightarrow Y_2 = d \sigma / dt \quad (\text{б}). \quad (13)$$

В выражения (10—13) входит величина поля скорости  $v_i(x_i, t)$ , зависящего в эйлеровом описании НТ наряду с переменными  $\{a_j; b_j\}$  непрерывным образом от  $(x_i, t)$ -параметров. Для малых объемов  $V_t$  подсистем в задаче  $T$ -движения предположения о непрерывности указанных функций и возможности дифференцирования по  $(x_i, t)$  требуют оправдания, поскольку

переменные  $\{a_j; b_j\}$ , как уже отмечалось, сильно зависят от  $(x_i, t)$ . Отсюда, нам необходимо дополнить гипотезу ЛР некоторой гарантией ее применимости при изучении малых объемов  $V_t \in V_0$   $N$ -системы, находящейся в макроскопическом равновесии в объеме  $V_0$ .

Такой гарантией предположительно может являться отказ от допущения РТ о равноправии полей  $\{b_j\}$  и плотностей  $\{a_j\}$  при описании локальных свойств  $N$ -системы и выбор подмножества полевых величин  $\{b_1 = \mu, b_2 = T\}$  в качестве обобщенных координат  $\{q_j\}$  в задаче  $T$ -движения. Физическая корректность этого выбора подтверждается непрерывностью полей  $\{b_j\}$  в области равновесных и неравновесных (рис.16) фазовых переходов первого рода и предпочтительностью их использования как базисных переменных при анализе критических явлений (рис.1a) [15,16]. Отметим, что в НТ и ФТ применение координатного базиса полей  $\{q_j\} = \{b_j\}$  также дает важные преимущества, по сравнению с базисом плотностей  $\{a_j\}$ . Как указано в [14], дифференциальные уравнения необратимых процессов могут быть непосредственно получены только в  $X_j$ -представлении (17,18), тогда как их вывод в  $Y_j$ -представлении требует дополнительного предположения о наличии потенциалов поля скорости  $v_j(x_i, t)$ .

При исследовании глобальных траекторий необратимых процессов, принадлежащих ТП (1.9) и изображаемых «нелинейной тепловой ветвью» на рис.1, приближение линейной НТ справедливо для малых отрезков траекторий, где выполняется

$$Y_j \leftrightarrow \delta a_j = P_{jk} \delta b_k \leftrightarrow P_{jk} X_k. \quad (14)$$

Данное выражение (подразумевающее суммирование по повторяющимся индексам) обобщает конститутивные соотношения Онсагера в том смысле, что вместо экстенсивной энтропии  $S_0$ , определяющей «силы» как [3]:

$$\delta b_j = - \partial S_0 / \partial (\delta A_j) = S_{jk} \delta A_k, \quad (15)$$

в (14) входит матрица вторых производных от локального потенциала  $P(\mu, T)$  (1.9). Вопреки обычному предположению гауссовой ФТ о возможности выразить  $S_0$  через любые переменные РТ (поскольку в случае линейной зависимости (15) выполняется [3]):

$$dS_0 = - \delta b_k d(\delta A_k) = - S_{kj} \delta A_j d(\delta A_k) = - \delta A_j d(\delta b_j), \quad (16)$$

где принято  $\delta A_j = -\delta S_0 / \delta (\delta b_j)$ , термодинамически согласованная форма выражения (2) должна или использовать естественные переменные потенциала РТ  $S_0(\delta N, \delta E)$ , или переходить к другому потенциалу РТ, соответствующему новому выбору переменных. При замене переменных полная энтропия  $S_0$ , являющаяся функцией состояния, преобразуется как скаляр, но трансформация элемента «площади»  $\delta A_j \delta A_k$  в (7) должна включать якобиан преобразования к новым переменным. В общем случае он не равен постоянной, как то предполагается в гауссовой ФТ [3,5], и форма выражения (2) в другой системе координат не будет сохраняться. Это обстоятельство учтено нами при переходе к исследованию  $N$ -систем с выраженной  $(x_j, t)$ -неоднородностью в терминах полей  $\{b_j\}$  путем использования соответствующего им локального потенциала  $P$ .

Сопряженные плотности  $\{a_j\}$  определяются тогда как частные производные (1.19) от непрерывной функции (1.9) и могут быть отнесены к любой из  $V_\tau$ -подсистем, без дополнительного требования их непрерывности как функций от параметров  $(x_j, t)$  и координат  $\{q_j\}$ . Тем самым нами допускается возможность реализации в малых масштабах  $V_\tau$  практически мгновенных по времени  $t$  состояний ЛР, в которых плотности  $\{a_j\}$  могут испытывать разрывы в зависимости от значений  $(x_j, t)$  и  $\{q_j\}$ . Подобное поведение флюида, в свою очередь, может рассматриваться как неустойчивый и микроскопический в масштабах  $(x_j, t)$  аналог явлений, наблюдавшихся в макроскопических масштабах при фазовых переходах. Согласно предыдущему обсуждению, данное состояние  $N$ -системы с большой вероятностью будет «далеким от состояния  $q_0$ », поскольку с уменьшением значения  $V_\tau$  (увеличением  $\tau$ ) поведение флюида в объеме  $V_0$  все менее оказывается на поведении каждой из  $V_\tau$ -подсистем. На первый план в такой процедуре выходит необходимость учета усиливающихся обменных взаимодействий между соседними  $V_\tau$ -подсистемами, определяемых выраженной  $(x_j, t)$ -неоднородностью флюида. Важной особенностью подобных корреляций должна быть их обратимость во времени  $t$ , так как мысленное изменение масштаба объема  $V_\tau$ , разумеется, не приводит к возникновению необратимых процессов в первоначально равновесной  $N$ -системе. Процесс увеличения параметра  $\tau$  для наглядности можно сравнить с применением микроскопа, имеющего непрерывно увеличивающуюся разрешающую способность. Благодаря этому свойству почти однородное распределение вещества в масштабе  $V_\tau = V_0$

для состояния  $q_0$  при ближайшем рассмотрении будет выглядеть как совокупность мгновенно исчезающих и мгновенно появляющихся в масштабах  $V_\tau \gtrsim V_c$  «скоплений» и «разрежений» в распределении вещества, обусловленных движением и взаимодействием микроскопических частиц.

Справедливость описываемой физической картины поведения флюида в малых масштабах  $V_\tau$  базируется на предположении о применимости к ним гипотезы ЛР, сформулированной исключительно в терминах полей  $\{b_j\}$ . Аналогичная замена основных, допускающих макроскопическое истолкование переменных (т.е. переход от  $\{a_j\}$  к использованию  $\{b_j\}$ , как уже отмечалось, требуется в КО [15,16]), где экспериментально изучаемые объемы  $V_0$  часто принадлежат области  $b$  ( $\tau \approx \tau_k$ ), и даже  $a$ -состояний ( $\tau > \tau_c$ ) вследствие увеличения значений  $V_c$  для состояний  $q_0$ , близких к критической точке  $q_k$ . Формально к таким объемам неприменимы соотношения РТ, что вызывает использование в этой области «полумакроскопических» потенциалов, типа предложенного Ландау и Гинзбургом. В ренормгрупповой (РГ-) теории [19] к параметрам подобных потенциалов, допускающим микроскопическую интерпретацию и зависящим от полевых переменных  $\{b_j\}$ , применяется процедура непрерывного увеличения масштаба объема  $V_\tau$ . Выбор направления изменения  $V_\tau$ , обратного исследуемому в данной работе, определяется постановкой в РГ-теории задачи последовательного понижения числа микроскопических степеней свободы от  $N$  до  $n$  так, что чисто термодинамическое описание становится возможным при  $V_\tau = V_c \rightarrow \infty$  в критической точке.

При несомненной ценности основной идеи РГ-метода и результатов, полученных с его помощью, нам представляется плодотворной и мысль о возможности введения обратной процедуры непрерывного уменьшения масштаба измерения  $V_\tau$  при сохранении макроскопического числа  $n$  независимых переменных, высказанная практически одновременно в работах [5,20]. В таком подходе исследование произвольных, а не обязательно близких к критической точке состояний  $q_0$  при значениях  $\tau > \tau_c$  (т.е. для областей  $b$ - и  $a$ -состояний по терминологии данной работы) представляет особый интерес. Как установлено выше, для указанных значений  $\tau$  не исключена реализация на ТП (1.9) обратимой в физическом времени  $t$  траектории  $T$ -движения, являющейся частным случаем, в общем необратимых по  $t$  траекторий «нелинейной тепловой ветви», изображенной на рис.1. Предполагаемый качественный характер распределений стохастической плотностной переменной  $\hat{\omega}$  вблизи наиболее вероятных значений  $\omega$  ( $\lambda$ ) представлен

на рис.2 в обозначениях, согласующихся с рис.1. Он соответствует основным этапам необратимой эволюции стохастических ДС, названным в работах M.Suzuki [21–23] « начальным » ( $a$ -состояния), « скейлинговым » ( $b$ -состояния) и « конечным » ( $c$ -состояния) режимами.

Очевидно, что обсуждаемый здесь эвристический метод выделения обратимой траектории  $T$ -движения из множества допустимых на ТП траекторий необратимых процессов окажется полезным при изучении равновесных свойств ТП, если будет обоснована возможность перехода от стохастических к наиболее вероятным значениям переменных  $\{a_i; b_j\}$  на указанной траектории. В стохастической теории ДС [6–8] и квантовой механике [3,12] такая замена вероятностного описания детерминированным носит название квазиклассического (КК-) приближения [24]. Можно предположить, что применение слабо флюктуирующих полей  $\{b_j\}$  в качестве обобщенных координат  $\{q_j\}$ , однозначно определенных в любой точке  $q$  на ТП, имеет преимущества, по сравнению с применением сильно флюктуирующих в малых объемах  $V_t$  плотностей  $\{a_j\}$ . Это важно отметить, так как основное динамическое уравнение теории стохастических ДС – уравнение Фоккера – Планка в линейном [12] и нелинейном [21–23,25,27] вариантах обычно анализируется в терминах плотностных переменных  $\{\omega_j\}$ . Интересно указать, что R.Kubo, K.Matsu, K.Kitahara [25] предложили использовать величину обратного объема  $(-V_0^{-1})$  в качестве аналога квантово-механической постоянной Планка  $\hbar$  для задачи КК-перехода от вероятностного к детерминированному описанию траекторий необратимых процессов. Подобный прием оправдан исчезновением флюктуаций плотно-

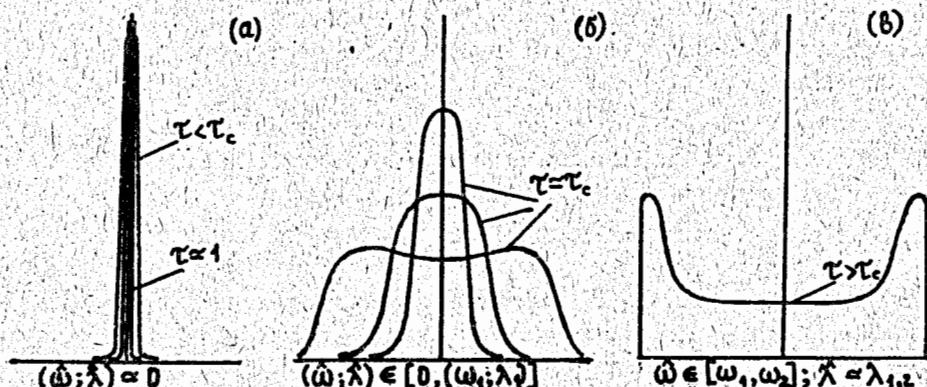


Рис.2. Плотность вероятности значений переменной  $\hat{\omega}$  в а-, б- и в-состояниях

стей  $\delta/a_j$  в  $T$ -пределе  $(V_0^{-1} \rightarrow 0)$  (1.16), когда использование детерминированных уравнений баланса НТ становится строго обоснованным. В предлагаемой нами модели  $T$ -движения, с учетом предыдущего, непротиворечивым представляется допущение о наличии стохастического уравнения обратимой по  $t$  эволюции  $\{a_j(x_p, t), b_j(x_p, t)\}$ -переменных в конечном объеме  $V_0$  и отвечающих ему детерминированных уравнений баланса, описывающих взаимодействие  $V_t$ -подсистем с ближайшим окружением. Вопросы вывода уравнения обратимого  $T$ -движения и дальнейшего обоснования разываемого подхода будут составлять содержание следующих работ.

## Литература

- 1.Fedyanin V.K., Rogankov V.B. — JINR, E17-91-347, Dubna, 1991; Phys. Lett., 160, 1991, p.274.
- 2.Парс Л.А. — Аналитическая динамика, М.: Наука, 1971.
- 3.Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Теоретическая физика, т.5. Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
- 4.Ruppeiner G. — Phys. Rev., 1979, v.A20, N 4, p.1608.
- 5.Ruppeiner G. — Phys. Rev., 1983, v.A27, N 2, p.1116.
- 6.Ludwig D. — SIAM Rev., 1975, v.17, N 4, p.605.
- 7.Mangel M. — Physica, 1979, v.97A, p.597.
- 8.Graham R. — In: «Fluctuations, Instabilitites and Phase Transitions». N.Y. Plenum, 1975, p.215.
- 9.Гилмор Р. — Теория катастроф для ученых и инженеров, М.: Мир, 1984, т.1, т.2.
- 10.Эбелинг В., Энгель-Герберт Г. — В сб.: «Термодинамика и кинетика биологических процессов». М.: Наука, 1980, с.158.
- 11.Климонтович Ю.Л. — Статистическая физика. М.: Наука, 1982.
- 12.Грэхем Р. — В сб.: «Синергетика». М.: Мир, 1984, с.95.
- 13.Глендорф П., Пригожин И. — Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флюктуаций. М.: Мир, 1973.
- 14.Дьярмати И. — Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1974.
- 15.Widom B. — J. Chem. Phys., 1965, v.43, N 4.
- 16.Паташинский А.З., Покровский В.И. — Флуктуационная теория фазовых переходов, М.: Наука, 1975.
- 17.Peterson M.A. — Am. J. Phys., 1979, v.46, N 6, p.488.
- 18.Преснов Е.В., Мальгин С.Н. — В сб.: «Термодинамика и кинетика биологических процессов», М.: Наука, 1980, с.197.
- 19.Вильсон К., Когут Д. — Ренормгруппа и  $\epsilon$ -разложение, М.: Мир, 1975.

20. Роганков В.Б. — Динамическая структура равновесных теорий флюидного состояния. Деп. ВИНИТИ, 1982, ч.1, 5710-82.
21. Suzuki M. — Progr. Theor. Phys., 1976, v.56, N 1, p.77.
22. Suzuki M. — Progr. Theor. Phys., 1976, v.56, N 2, p.477.
23. Suzuki M. — Progr. Theor. Phys., 1977, v.57, N 2, p.380.
24. Маслов В.П., Федорюк М.В. — Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. — М.: Наука, 1976.
25. Kubo R. Matsuo K., Kitahara K. — J. Stat. Phys., 1973, v.9, p.51.
26. Grabert H., Green M.S. — Phys. Rev., 1979, v.A19, N 4, p.1747.
27. Grabert H., Graham R., Green M.S. — Phys. Rev., 1980, v.A21, N 6, p.2136.

Роганков В.Б., Федянин В.К.  
Масштабное уравнение термодинамической поверхности флюида.  
Флуктуации в малых объемах макроскопических систем

P17-92-481

Работа является продолжением нашей работы JINR, E17-91-347, Dubna, 1991 (Phys. Lett., 160, 1991, p.274—278), цитируемой далее как [1]. Ссылки на формулы из этой работы даются как (1....).

Обсуждается модель  $T$ -движения, в которой мы отказываемся от равноправия полей  $\{b_1 = \mu, b_2 = T\}$  и плотностей  $\{a_1 = \rho, a_2 = \sigma\}$ , при  $V_r \rightarrow (V_c)_+$ . Параметром  $\tau$  при  $V_r \rightarrow (V_c)_+$  служит  $\tau = V_c/V_r$ <sup>[1]</sup>,  $1 \leq \tau \leq \tau_c : V_r \geq V_c$ . Увеличение флуктуаций при  $V_r \rightarrow (V_c)_+$  диктует введение конвенциональной производной  $\delta = \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v_i(r, t) \frac{\partial}{\partial x_i}$ : автоматически учитываются  $(r, t)$ -однородности. Весьма примечательны изменения плотности распределения вероятности при  $(\tau < \tau_c)$ ,  $(\tau = \tau_c)$ ,  $(\tau \geq \tau_c)$ , обусловленные бифуркацией «нелинейной тепловой ветви» по типу фазового перехода II-го рода ( $\tau < \tau_c$ ), I-го рода ( $\tau = \tau_c$ ) и переходом в «конечный режим» ( $\tau \geq \tau_c$ ).

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

#### Перевод авторов

Rogankov V.B., Fedyanin V.K.  
Scale Equation for the Thermodynamic Surface of Fluid.  
Fluctuations in Small Volumes of Macroscopic Systems

P17-92-481

This paper is a continuation of our work JINR, E17-91-347, Dubna, 1991 (Phys. Lett., 160, 1991, p.247—278) further cited as [1], references (1....)).

The model of  $T$ -motion is discussed in which we assume that the fields  $\{b_1 = \mu, b_2 = T\}$  and densities  $\{a_1 = \rho, a_2 = \sigma\}$  are not equally justified at  $V_r \rightarrow (V_c)_+$ . As a parameter  $\tau$  as  $V_r \rightarrow (V_c)_+$  we take  $\tau = V_c/V_r$ <sup>[1]</sup>,  $1 \leq \tau \leq \tau_c : V_r \geq V_c$ . The increase of fluctuations as  $V_r \rightarrow (V_c)_+$  forces one to introduce the conventional derivative  $\delta = \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v_i(r, t) \frac{\partial}{\partial x_i}$ : the  $(r, t)$  inhomogeneities are automatically taken into account. We should mention the changes of the probability distribution density at  $\tau < \tau_c$ ,  $\tau = \tau_c$ ,  $\tau \geq \tau_c$  which are due to bifurcation of a «nonlinear thermal branch» of the type of a phase transition of the second kind ( $\tau < \tau_c$ ), first kind ( $\tau = \tau_c$ ) and transition to the «final regime» ( $\tau \geq \tau_c$ ).

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Рукопись поступила в издательский отдел  
30 декабря 1992 года.