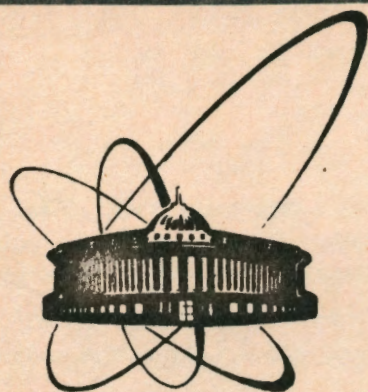


92-482



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17-92-482

В.К.Федянин, В.Б.Роганков*

МАСШТАБНОЕ УРАВНЕНИЕ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ
ФЛЮИДА.
О РОЛИ ФОРМАЛИЗМА
ИДЕАЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ
ПРИ ИЗУЧЕНИИ СРЕД С ВЫРАЖЕННОЙ
ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ
НЕОДНОРОДНОСТЬЮ

Направлено в журнал «Fluid Phase Equilibria»

*Одесский институт низкотемпературной техники и энергетики

1992

1. В наших предыдущих работах [1,2]* сформулирован ряд положений метода, позволяющего исследовать поведение N -систем с существенной (x_j, t) -неоднородностью распределений макроскопических параметров $\{a_j, b_j\}$, рассматриваемых в малых (для областей β -, σ -состояний) масштабах объема V_j и физического времени t . Факт малости указанных масштабов следует особо подчеркнуть, чтобы провести определенное разграничение между предлагаемым в работе подходом и принятыми способами изучения выраженных (x_j, t) -неоднородностей интенсивных переменных в макроскопической газо- и гидродинамике [3,4].

Как известно, эти способы, в частности, предназначены для детерминированного описания слабых разрывов, когда скачки или расходимости имеются в частных производных $(\partial/\partial t, \partial/\partial x_j)$ от непрерывных функций $\{a_j(x_j, T); b_j(x_j, t)\}$, а также для детерминированного описания ударных волн (сильных разрывов), в которых скачок уже испытывают собственно данные функции. Важным свойством применяемого для таких целей математического формализма в макроскопической газо- и гидродинамике является использование системы уравнений баланса в дифференциальном виде и при допущении адиабатичности движения каждой из частиц флюида:

$$ds/dt = 0, \quad (1)$$

приводящем к известной модели идеальной (бездиссипативной) жидкости (ИЖ):

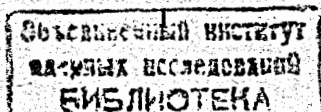
$$\rho \left(\partial v_i / \partial t + v_k \partial v_i / \partial x_k \right) = - \partial P / \partial x_i, \quad (2)$$

$$\partial \rho / \partial t + \partial \rho v_i / \partial x_i = 0, \quad (3)$$

$$\partial \sigma / \partial t + \partial \sigma v_i / \partial x_i = 0. \quad (4)$$

Согласно (1) и равенству РТ, справедливому для любой V_j -подсистемы, т.е. локально:

*Ссылки на формулы из [1], [2] соответственно, даются в виде (1....) (2.....), а на литературу — [1.], [2.]



$$\sigma = \rho s, \quad (5)$$

уравнения (3,4) не являются независимыми. На траектории обратимого относительно физического времени t T -движения, совпадающей с изоэнтропой $s = \text{const}$, измерение одной из плотностей: ρ или σ , соответствующих в представлении РТ (1.20, 21) обобщенным импульсам p_j (1.19), полностью определяет измерение другой плотности. Нетрудно показать, что на рассматриваемой траектории между обобщенными координатами $\{q_j\} = \{\mu, T\}$ также существует локальная связь, поскольку из (1,3,4,9) следует

$$e(v, s) + P v = i [P(\mu, T), s] = \mu + s T. \quad (6)$$

Конечно, введение еще одной, априори неизвестной (подобно зависимости $P(\mu, T)$) функции $i(P, s)$ снова не вносит каких-либо конструктивных изменений в задачу поиска явного вида уравнения ТП. Вместе с тем наличие отмеченных связей между плотностями (ρ, σ) (5) и полевыми (μ, T) (6) величинами на изоэнтропах $s = \text{const}$ свидетельствует о принципиальной возможности уменьшения в модели ИЖ размерностей, соответственно, координатного Q^{n-1} и фазового \mathcal{P}^{2n-2} пространств. В РТ подобная редукция числа независимых переменных осуществима только локально и, как отмечалось в [1], может рассматриваться в виде замены одной из «старых» координат q_j (μ или T) «новым» T -временем τ в T -гамильтониане $H(q_j; p_j)$ (1.21). Согласно (6) зависимость $q_j(\tau)$, в общем случае, не является линейной и в задаче T -движения допустимо параллельное использование двух эквивалентных базисов канонически сопряженных переменных:

$$\tau \leftrightarrow T; \quad q_1 \leftrightarrow \mu; \quad p_1 \leftrightarrow \rho, \quad (7)$$

$$\tau \leftrightarrow \mu; \quad q_2 \leftrightarrow T; \quad p_2 \leftrightarrow \sigma, \quad (8)$$

между которыми с помощью масштабного фактора s можно установить взаимно однозначное соответствие. Для определенности в дальнейшем будет говориться об эволюции тепловой $(q_2, p_2) = (T, \sigma)$ и механической $(q_1, p_1) = (\mu, \rho)$ T -мод на траектории T -движения, где их взаимодействие, в силу условий (1,5,6), можно назвать « T -симметрией» состояния ЛР.

2. В макроскопической гидродинамике [3—5] описание движения флюида с помощью модели ИЖ (1—4) в большинстве случаев неадекватно из-за пренебрежения диссипацией в наиболее общей форме детерминированных уравнений баланса (в отсутствие объемных внешних сил):

$$\rho \, dv_i/dt - \partial P_{ik}/\partial x_k = 0, \quad (9)$$

$$\rho \, dv/dt - \partial v_i/\partial x_i = 0, \quad v = 1/\rho, \quad (10)$$

$$\rho \, T ds/dt + \partial y_i/\partial x_i - d = 0, \quad d \geq 0, \quad (11)$$

$$\rho \, de/dt - P_{ik} v_{ik} + \partial y_i/\partial x_i = 0, \quad (12)$$

в записи которых использовано (2.10) и введены обозначения P_{ik} — тензора напряжений; y_i — компонент вектора теплового потока; d — диссипативной функции, равной отнесенной к масштабам V_τ и Δt части механической работы, необратимо переходящей в тепло. Уравнения (9—12) представляют собой [5] систему шести ($i = 1, 2, 3$) дифференциальных уравнений в частных производных с семнадцатью неизвестными функциями ($v, s, e, T, d, v_i, y_i, P_{ik}$, где симметричный тензор напряжений P_{ik} имеет шесть независимых компонент), зависящими от параметров (x_i, t) .

Мы намеренно использовали выше форму записи, включающую одновременно ρ и $v = \rho^{-1}$, чтобы указать на несущественность абсолютной величины масштабного фактора ρ для данной системы уравнения, применимых и в газовой, и в гидродинамике. Известно, что выбор конкретной модели среды полностью определяется видом тензора напряжений P_{ik} . С его помощью можно задать [2.14] самые различные модели деформируемых (упругих, пластических) тел, гидродинамические модели (идеальной и вязкой жидкости, турбулентности), а также ввести разнообразные модели электромагнитных полей. Таким образом, в теории непрерывных сред тензор P_{ik} занимает место, аналогичное гамильтониану N -систем $H(q_j; p_j; t)$, $j = 1, 2, \dots, N$ в микроскопическом подходе, учитывающем дискретность этих систем в малых масштабах (x_i, t) -переменных. Поскольку в [1,2] была обоснована возможность динамической интерпретации локального потенциала P (1.9; 1.25) в задачах с макроскопическим числом степеней свободы $n: j = 1, 2$, особый смысл приобретает сопоставление задаваемого вида макроскопической функции $H(q_j; p_j; t)$, с одной стороны, и найденной с ее помощью макроскопической зависимости P от переменных РТ, с другой.

Число УС, полученных к настоящему времени в рамках статистической механики, исходя непосредственно из конкретной модели $H(q_j; p_j; t)$, крайне невелико и сводится (с несущественными модификациями) к следующему перечню [2.3], [2.11], [2.26]:

а) модель идеального бoльцмановского газа (ИГ):

$$P = \rho kT; \quad (13)$$

б) модель твердых сфер (ТС):

$$P = \rho kT \left[\frac{1 + \rho^* + \rho^{*2} - \rho^{*3}}{(1 - \rho^*)^3} \right], \quad \rho^* = (4/3) \pi r_0^3 \rho; \quad (14)$$

в) модель флюида Ван-дер-Ваальса (В-д-В)

$$P = \rho kT \left[\frac{kT - a\rho + ab\rho^2}{kT(1 - b\rho)} \right]; \quad (15)$$

г) вириальное разложение для потенциала Леннарда — Джонса (ЛД):

$$P = \rho kT \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k(T) \rho^k \right]; \quad (16)$$

д) модель равновесной плазмы с потенциалом Кулона — Дебая:

$$P = \rho kT \left[1 - \frac{\pi^{1/2} e_0^3 \rho^{1/2}}{3 (kT)^{3/2}} \right], \quad e_0 = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}; \quad (17)$$

е) модель идеальных квантовых газов (КИГ):

$$P = \rho kT \left[1 \pm \frac{\pi^{3/2} \hbar^3}{2\xi} \cdot \frac{\rho}{(kT)^{3/2}} \right], \quad \hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Джс}. \quad (18)$$

На рис. 1 представлен качественный вид потенциальных функций $U(x)$, использованных при получении перечисленных УС.

Заметим, что здесь рассматриваются только случаи непосредственного статистико-механического перехода от микроскопических потенциалов $U(x)$ к УС ($N \rightarrow n$) и не обсуждаются многочисленные попытки представить «задним числом» микроскопическое обоснование коэффициентов в принимаемой из некоторых дополнительных соображений, той или иной форме полуэмперических УС. Исключение, сделанное для УС Ван-дер-Ваальса (15), оправдано известным [6] доказательством его соответствия потенциалу Каца (рис. 1в) при $\epsilon_0 \rightarrow 0$. Для модели ТС использовано приближение Карнагана — Стирлинга (14), суммирующее в форме паде-аппроксиманты информацию о УС этой модели, получаемую более точными методами [6].

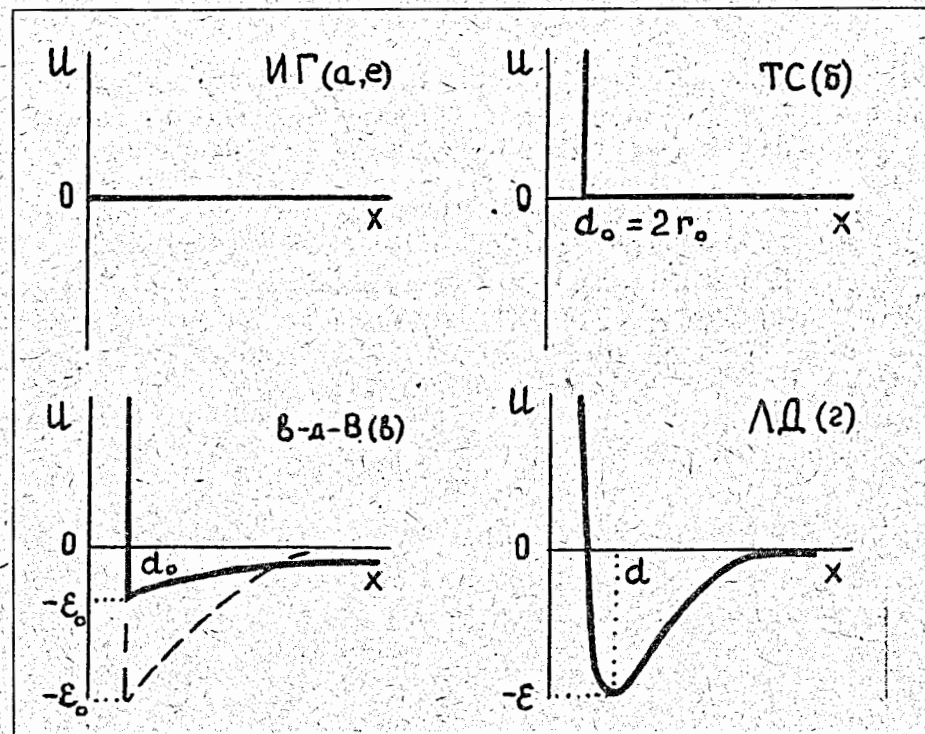


Рис. 1. Микроскопические парные потенциалы для УС а) — е)

Имеется аналогичное приближение для нескольких первых членов ряда (16), немного расширяющее область его действия.

Первые четыре УС (13—16) относятся к типу выражений (а, б) (или их прямых паде-аппроксимант), обсуждавшихся во введении к данной работе. Их общей чертой является использование аналитических рядов теории возмущений с малым параметром, выбираемым в соответствии с применяемой моделью 0-приближения. В свою очередь, модели 0-приближения определяются областью макроскопических параметров, которую требуется описать с помощью УС, и обычно оказываются непригодными при экстраполяции в смежные области ТП. Так, модель слабонеидеального, разреженного газа, подчиняющегося условию

$$\rho^* = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho \sim \hat{V}_0 / V_\tau \ll 1, \quad (19)$$

неадекватно описывает область плотных газов и жидкостей, что одновременно ставит вопрос о применимости уравнения Больцмана и некоторых его обобщений на более высокие плотности в кинетической теории жидкостей.

Согласно (19) малым параметром в вириальных разложениях выбирается плотность x_i -однородной N -системы ρ (1.5), и масштаб V_τ в таком случае отождествляется со средним расстоянием между молекулами. Для разреженного газа вводятся также [2.11]: эффективный объем свободного пробега \bar{V} (кинетический масштаб объема) и макроскопический объем N -системы V_0 , так что между ними выполняется одно из соотношений:

$$\hat{V}_0 \ll V_\tau \ll V_0 \ll \bar{V} \quad (\text{а}), \quad \hat{V}_0 \ll V_\tau \ll \bar{V} \ll V_0 \quad (\text{б}). \quad (20)$$

в том и другом случаях условием макроскопичности считается $V_0 \gg V_\tau$ (2.4), а под «бесконечно малыми физически» $\Delta V \rightarrow V_c$ (1.17) понимаются [2.11] величины, входящие в (20) как

$$\hat{V}_0 \ll V_\tau \approx V_c \ll \bar{V}. \quad (21)$$

Для них задача сглаживания или усреднения по объему V_c решается путем сопоставления с характеристикой V_τ , относимой в таком подходе к x_i -однородной N -системе в объеме V_0 . Можно заметить, что при этом нарушается смысл условия макроскопичности $V_\tau > V_c$ в локальной РТ, и последнее заставляет с определенной осторожностью оценивать распространенную практику использования значения фиктивного среднего объема, приходящегося на частицу:

$$V_\tau \sim v_0 = V_0 / N, \quad (22)$$

при описании эволюции (x_i, t) -однородных сред.

Необходимость исследования больших интервалов времени Δt и t -неоднородности N -системы ($\partial/\partial t \neq 0$) входит в известное [7] противоречие с выбором в качестве 0-приближения состояния x_i -однородности ($\partial/\partial x_i = 0$). Применение рядов теории возмущений для функций (v_i, v, e) из уравнений (9,10,12) приводит в таком подходе, как указал Н.Н.Боголюбов [7], к дополнительному требованию, согласно которому макроскопические пара-

метры (v_i, v, e) не следует разлагать по степеням малого параметра (x_i) -неоднородности $\epsilon_{x_i} \sim \rho^*$ (19):

$$v = v_0 + \epsilon_{x_i} v_1 + \dots, \quad e = e_0 + \epsilon_{x_i} e_1 + \dots, \quad v_i = v_{i_0} + \epsilon_{x_i} v_{i_1} + \dots, \quad (23)$$

поскольку в противном случае уравнения (9—12) с заменой $\{v_i, v, e\}$ на $\{v_{i_1}, v_1, e_1\}$ становятся справедливыми только в близкой по t ($\Delta t \rightarrow 0$) окрестности состояния (x_i, t) -однородного ($\partial/\partial t = 0, \partial/\partial x_i = 0$), т.е. глобального (в объеме V_0) равновесия $\{v_0, e_0, v_{i_0} = 0\}$.

Наряду с (20) в статистической механике [2.11], [2.27] слабонеидеального газа вводятся характерные временные параметры с использованием представления о средней (тепловой) скорости движения молекул $v_0 \sim \sqrt{\langle v^2 \rangle}$:

$$\hat{V}_0^{1/3} / v_0 \ll V_\tau^{1/3} / v_0 \approx V_c^{1/3} / v_0 \ll \bar{V}^{1/3} / v_0. \quad (24)$$

Очевидно, что конкретный физический смысл, исходя из микроскопической картины движения и взаимодействия большого числа частиц N , здесь можно приписать только крайним членам в цепочке сильных неравенств (24). Действительно, $V_0^{1/3} / v_0 = t_0$ характеризует время взаимодействия t_0 , зависящее от вида рассматриваемого потенциала (рис.1), а $\bar{V}^{1/3} / v_0 = \bar{t}$ — время между взаимодействиями. Что касается фиктивной величины $V_\tau^{1/3} / v_0 = t_\tau$, то она входит [7] в условие применимости вириальных разложений по степеням малого параметра ρ^* (19) только для интервалов времени Δt :

$$\Delta t \ll \hat{t}_0 / \rho^*. \quad (25)$$

Данное сильное неравенство препятствует изучению долговременного поведения N -системы с помощью вириального ряда, у которого сохраняется несколько первых членов. Как отмечалось выше, отказ от разложений (23), включающих линейные вклады по ϵ_{x_i} и подразумевающих непрерывное изменение макроскопических величин $\{v_i, v, e\}$ в зависимости от x_i -параметров, исправляет ситуацию.

На шкале физического времени t при этом вводится оператор ослабления корреляций [7], заменяющий координаты отдельных частиц x_{ij} ($i = 1, 2, 3; j = 1, 2, \dots$) значениями

$$x_{ij} \rightarrow x_{ij} - v_{ij} \Delta t \quad (26)$$

при неизменных величинах v_{ij} за интервал Δt . Тем самым допускается представление о равномерном и прямолинейном (свободном) движении каждой из этих частиц за время Δt , большее, чем время взаимодействия t_0 , но меньшее, чем время между взаимодействиями \bar{t} . Обратим внимание на то, что таким образом для указанного промежутка времени Δt принимается, во-первых, условие обратимости механического движения частиц, а во-вторых, не исключается возможность усредненного (сглаженного) описания распределения скоростей v_{ij} в малых объемах $\sim V_r$. Фактически, это обстоятельство позволяет обсуждать наличие эффективного поля скорости $v_i(x_i, t)$, «медленно» изменяющегося за интервал времени $\sim \hat{t}_0/\rho^*$, и «быстрого» процесса синхронизации [7] корреляционных функций за время $\sim \hat{t}_0$. Фундаментальное значение введенных Н.Н.Боголюбовым представлений об ослаблении корреляций, по-видимому, не исчерпывается областью разреженных газов. В частности, принятие более слабого условия частичного (а не полного) ослабления начальных мелкомасштабных корреляций дает возможность обобщить [2.11] кинетическую теорию для сред с выраженной (x_i, t) -неоднородностью. Развиваемое в данной работе существенно макроскопическое описание подобных сред также является попыткой расширения области действия указанных представлений.

3. Чтобы подтвердить это, перечислим те обобщения, которые вводятся в работе при рассмотрении плотных (x_i, t) -неоднородных сред, в которых малый параметр ρ^* (19) отсутствует. Поскольку в жидкости характерные масштабы объема и времени для взаимодействий (\bar{V}_0, \bar{t}_0) и между взаимодействиями (\bar{V}, \bar{t}) отличаются, в среднем, только на порядок (например, 10^{-15} с или 10^{-14} с, соответственно, для воды [6]) сильные неравенства (20) и (24) уже не имеют места. В условиях более близкого расположения частиц и более частого их взаимодействия друг с другом неизбежно возникает необходимость учета долговременных и крупномасштабных корреляций. Это обстоятельство намного усложняет обычный статистико-механический путь построения кинетической теории [9], но в то же время открывает возможности для экстраполяции макроскопических представлений на микроскопические масштабы объема и времени. Важными примерами такой экстраполяции следует считать результаты численного моделирования в задаче количественного объяснения долговременного «хвоста» автокорреляционной функции скорости в жидкости [8,9] и современную равновесную теорию критической области [2.15,16].

В первом случае согласие молекулярно-динамических и гидродинамических вычислений было обнаружено уже после 10–20 взаимодействий

(столкновений в модели ТС, рис.1б) и для объемов также, всего лишь на порядок превышающих объем взаимодействия V_0 . В принципе, данный факт свидетельствует о возможности определенного пересмотра принятых значений характерных гидродинамических масштабов, обычно полагаемых [20] намного большими, чем характерные кинетические масштабы. Другими словами, не исключено, что интервалы времени и объемы, в которых частицы релаксируют к состояниям ЛР-в жидкости, не только сопоставимы с физически естественными масштабами (V_0, t_0) и (\bar{V}, \bar{t}) , но и позволяют использовать систему гидродинамических уравнений для описания эволюции этих состояний. Конечно, в рассматриваемых условиях следует отказаться от применения характеристик пространственно-однородной $(\partial/\partial x_i = 0)$ среды, типа (22), и относить V_r к элементу среды, для которого могут быть определены макроскопические функции, как это предполагалось в [11].

Часто употребляемая ссылка [2.14, 27], [8] на «все еще большое число частиц» в «физически бесконечно малом объеме» (1.17) представляется излишней, если воспользоваться теоретико-полевым формализмом. Тогда снова можно допустить наличие эффективного поля скорости $v_i(x_i, t)$ (подобного обсуждавшемуся выше и соответствующего оператору ослабления корреляций), с помощью которого движущиеся частицы среды взаимодействуют друг с другом. Разумеется, такое поле v_i должно отражать коллективные свойства среды и определяться не только механическими, но и тепловыми ее свойствами. Непрерывность полей $\{\mu(x_i, t), T(x_i, t)\}$ в существенно (x_i, t) -неоднородных средах, по нашему предположению, является гарантией существования в малых масштабах V_r эффективного поля скорости v_i , обобщающего на плотные N -системы эффективное поле скорости, которое может быть введено также в теории [7] слабонеидеальных разреженных газов.

Поскольку наличие поля v_i , согласно предыдущему, связано с взаимодействием движущихся частиц, рассмотрим более подробно его соотношение с типичным гамильтонианом N -системы $H(x_N = \{q_j, p_j\})$:

$$H(x_N) = \sum_j^N \left[\frac{v_j^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq j}^N U_{kj} (|q_j - q_k|) \right] \quad (27)$$

(здесь и далее предполагается отсутствие внешнего поля и не учитывается масса частиц) в статистической механике. Важными свойствами $H(x_N)$ (27) являются разделение во времени и в пространстве процессов взаимо-

действий и свободного движения частиц, а также допущение парной аддитивности при определении потенциальной энергии. Ни одно из этих свойств, строго говоря, не выполняется для плотных сред, в которых процессы взаимодействия и движения реализуются в сопоставимых масштабах (t_0, V_0) и (t, V) и на поведение каждой частицы оказывает влияние большое число частиц ее окружающих. Практическая невозможность описания столь сложных процессов на микроскопическом уровне оправдывает переход к теоретико-полевому рассмотрению и решеточным моделям статистической механики, учитывающим перечисленные факторы эффективным образом.

Напомним, что уравнение эволюции N -частичной функции распределения $\rho_N(x_N, t)$:

$$\frac{d\rho_N}{dt} = \frac{\partial \rho_N}{\partial t} + v_N \frac{\partial \rho_N}{\partial x_N} = \frac{\partial \rho_N}{\partial t} - [H; \rho_N] = 0, \quad (28)$$

где

$$[H; \rho_N] = \sum_j^N \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial \rho_N}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial \rho_N}{\partial q_j} \right), \quad (29)$$

описывает движение несжимаемой «жидкости» в фазовом пространстве (x_N, t) . В более общей форме уравнения непрерывности (3) условию несжимаемости соответствует одновременное выполнение условия «гамильтоновости потока» [11,12]:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (30)$$

являющегося следствием системы уравнений Гамильтона в фазовом пространстве (x_N, t) :

$$\rho_N \partial v_N / \partial x_N = 0. \quad (31)$$

В силу механической обратимости указанной системы относительно времени t , признаками этого свойства можно считать, согласно (28,21), сохранение ρ_N на траектории движения или равенство нулю дивергенции поля скорости $\partial v_N / \partial x_N$. В декартовом (x_i) -пространстве условию (30) отвечает свойство соленоидальности (трубчатости) векторного поля $v_i(x_i)$.

Заметим теперь, что в равновесной статистической механике гамильтониан $H(x_N)$ также предполагается сохраняющимся на траектории в (x_N, t) -

пространстве, и это налагает дополнительное требование потенциальности рассматриваемого поля $v_N(x_N)$:

$$v_N(x_N) = \partial H(x_N) / \partial x_N. \quad (32)$$

Характерным свойством таких полей является отсутствие завихренности:

$$\text{rot } v_N(x_N) = 0, \quad (33)$$

которое в сочетании с (31) приводит к уравнению Лапласа для $H(x_N)$:

$$\partial^2 H(x_N) / \partial x_N^2 = \text{div grad } H = 0. \quad (34)$$

Его решение исследуется в теории потенциала и отвечает полевому формализму, связанному с исходной постановкой задачи в рамках гамильтоновой динамики N -частиц. Решение задачи Неймана, возникающей для несжимаемого (28) потока при условии равенства нулю интеграла от $v_N(x_N)$ по ограничивающей объем V_0 поверхности F_0 :

$$\int_{F_0} v_N(x_N) dF = 0, \quad x_N \in F_0, \quad (35)$$

определяется с точностью до аддитивной постоянной и выражается с помощью гармонических функций. Вводя дополнительные, не обязательно выполняющиеся в реальных флюидах физически, требования непрерывности или непрерывной дифференцируемости $H(x_N)$ в V_0 и на F_0 , здесь можно прийти, соответственно, к уравнениям

$$H(x_N) = 0, \quad (H=0) \in F_0, \quad (36)$$

$$H(x_N) = \text{const}, \quad (v_N=0) \in F_0, \quad (37)$$

второе из которых используется при построении равновесной статистической механики. В континуальной теории поля скорость $v_N(x_N)$ подчиняется, таким образом, важным ограничениям потенциальности (32, 33) и гамильтоновости потока (31).

Снова распространяя результаты предыдущего обсуждения на эффективное поле скорости $v_i(x_i, t)$, наличие которого предполагается в малых масштабах объема и времени, можно заметить, что требование несжимаемости жидкости (30) исключает из рассмотрения флуктуационный механизм распространения малых возмущений равновесных характеристик (2.1) в непрерывной среде. Для его учета используются, как известно [4],

линеаризованные с помощью (23) уравнения модели ИЖ (1—4) без ограничения несжимаемости (30). Волновое уравнение для возмущений малой амплитуды содержит характерную скорость звука v_0 , определяемую значением термодинамической производной:

$$v_0^2 = \left(\partial P / \partial \rho \right)_s, \quad (38)$$

которая вычисляется в принадлежащей ТП точке глобального равновесия флюида в объеме V_0 и в предположении локальности линейной связи между флуктуациями поля λ_p и плотности w_p для $s = \text{const}$:

$$\lambda_p = \left(\partial P / \partial \rho \right)_s w_p. \quad (39)$$

Понятно, что линеаризация задачи снова приводит к ограничению близости к (x, t) -однородному состоянию равновесия. Тем не менее, можно считать, что учет малых флуктуаций характеристик среды обобщает гамильтониан $H(x_N)$ (27, 36, 37) консервативных N -систем на зависящие от времени t процессы:

$$\frac{\partial^2 H(x_N, t)}{\partial x_N^2} - \frac{1}{v_{0N}^2} \frac{\partial^2 H(x_N, t)}{dt^2} = 0, \quad (40)$$

где формально введено обозначение «скорости звука» v_{0N} в фазовом пространстве (x_N, t) . С учетом (32) волновому уравнению (40) подчиняется также поле скорости $v_N(x_N, t)$.

В плотных средах, где практически одновременно и в малых объемах коррелирует большое число частиц, допущение свободного движения каждой из них в интервалах (V, t) между взаимодействиями, приводящее к (26), становится не вполне адекватным. Детерминированное описание эволюции N -системы с помощью теоремы Лиувилля (28) и гамильтоновых уравнений может быть обобщено [2.3, 27] путем перехода к квантово-статистической форме, использующей уравнение Шредингера. Последнее, при определенных условиях, точно эквивалентно волновому уравнению (40), откуда следует, что обсуждавшаяся выше линеаризованная модель слабо (x, t) -неоднородной среды соответствует именно такому обобщению. В КК-приближении [2.24] оно отвечает уравнениям классической гамильтоновой динамики N -частиц и, таким образом, описывает их механически обратимую эволюцию во времени t .

Естественно возникает вопрос о возможности распространения представлений о микроскопической обратимости эволюции системы многих частиц на достаточно большой промежуток времени Δt . Процедура линеаризации, используемая при выводе волнового уравнения, позволяет, как известно [5], полностью разделить макроскопические степени свободы. Действительно, флуктуации каждой из термодинамических переменных $\{\rho, T, P, \dots\}$ могут быть описаны уравнением (40), вне зависимости от изменений остальных величин, если выполняется основное условие модели ИЖ (1). На микроскопическом уровне подобное разделение степеней свободы осуществляется посредством допущений о свободном движении частиц в интервалах между взаимодействиями и парной аддитивности процессов взаимодействий, что отражено в модели гамильтониана систем N -частиц (27). Собственно взаимодействия двух частиц описываются в статистической механике консервативных N -систем или с помощью модели упругих столкновений $(\hat{t}_0 = 0, \hat{V}_0 = 4/3\pi r_0^3)$ для системы ТС (рис. 1б), у которой сохраняется полная кинетическая энергия, или с помощью более реалистичных потенциалов неупругих взаимодействий (рис. 1г), когда часть кинетической энергии преобразуется в потенциальную энергию, при сохранении полной энергии $H(x_N)$ (27).

Более реалистичными данные потенциалы являются вследствие учета силы взаимного притяжения, действующей в масштабах (t_0, V_0) и быстро уменьшающейся по величине с ростом расстояния между частицами. Для нейтральных молекул чаще всего применяется потенциал ЛД (рис. 1г), в котором составляющая притяжения спадает как $\sim (-r^{-6})$, что находит некоторое объяснение в дисперсионной формуле Лондона. Другой вариант спада обеспечивается зависящим от скалярного параметра потенциалом Каца (рис. 1в) [6, 13], соответствующим в ван-дер-ваальсовом пределе $(\epsilon_0 \rightarrow 0)$ УС В-д-В (15). Не переходя к данному пределу и изменяя указанный параметр, можно исследовать, по замечанию автора [13], весь непрерывный ряд взаимодействий — от слабого дальнего действия до сильного короткого действия (типа постулируемого в решеточных моделях). Этот ряд будет включать и потенциал с притяжением, количественно близким к рассматриваемому в функции ЛД (см. штриховую линию на рис. 1в), и потенциал, являющийся зеркальным отражением отталкивательного потенциала кулоновского взаимодействия одинаково заряженных частиц, медленно спадающего, как $\sim (r^{-1})$ (см. сплошную линию на рис. 1д).

В сущности, именно указанные симметричные потенциалы характеризуют фундаментальные силы гравитационного и электромагнитного взаимодействия частиц, имеющих конечные размеры, тогда как другие возмож-

ные потенциалы неизбежно являются эффективными. В этом смысле важное значение приобретает известный эффект самосогласованного поля, использованный при построении теории классической плазмы [6]. Согласно ему частицы, связанные дальнедействующими отталкивательными взаимодействиями, распределяются в (x_i) -пространстве таким образом, что происходит экранировка «хвоста» потенциала на больших расстояниях и фактически реализуется модель короткодействия в виде потенциала Дебая (штриховая линия на рис.1д). Принципиальным моментом такого подхода является то, что самосогласование эффективного потенциала и парной функции распределения осуществляется [6] с помощью теоретико-полевого уравнения Пуассона, обобщающего уравнение Лапласа (34) в теории потенциала. Другими словами, в линейном приближении теории заряженных частиц справедливо уравнение Гельмгольца, существование которого в теории нейтральных частиц было обосновано выше независимым образом. Действительно, для постоянного значения частоты колебаний волновое уравнение (40) трансформируется [5] в уравнение Гельмгольца.

Предыдущее означает, что экранировка дальнедействующего «хвоста» потенциала должна существовать и для ветви притяжения, обуславливая реальное короткодействие частиц и тем самым ослабление корреляций в плотной среде на больших расстояниях. Косвенным подтверждением приведенных выше, скорее интуитивных, нежели строгих рассуждений можно считать форму эффективного потенциала ЛД (рис.1г) с выраженным короткодействием. Вместе с тем, принимая итог этих рассуждений естественно прийти к выводу о возможной неаналитической форме зависимостей от плотности ρ термодинамических функций и, в частности, УС реальных флюидов, как это имеет место в теории классической плазмы (17) [6]. Указанные функции не следует разлагать в ряд Тейлора вблизи начала $\rho = 0$, являющегося согласно (17) точкой их ветвления. Последнее ставит под сомнение обычно предполагаемую обязательность включения идеально-газового вклада в УС плотного флюида.

По-видимому, долговременная обратимость эволюции N -систем в малых масштабах может обсуждаться и вне рамок линейного приближения, разделяющего степени свободы на микро- и макроскопических уровнях. Как показано выше, учет эффекта коллективных взаимодействий частиц самосогласованным образом не изменяет обратимой формы уравнений, описывающих их эволюцию. В данной работе подобный подход предлагается реализовать путем экстраполяции представлений о существовании тепловых (неаддитивных) величин в область малых масштабов объема и времени. Отсюда, понятие механической обратимости естественно обобщить с помощью условия (1) локальной термодинамической обратимости и в дальнейшем использовать модель ИЖ без ограничений линейности и «гамиль-

тоновости» поля скоростей $v_i(x_i)$ (30). Тем самым в малых масштабах объема и времени здесь допускается существование состояний ЛР в открытых V_T -подсистемах, обмен между которыми частицами и энергией описывается уравнениями (1—4), а условием «самосогласования» следует считать T -симметрию (5,6) механической (μ, ρ) и тепловой (T, σ) мод на траектории $s = \text{const}$. Уравнения T -симметрии указывают также на взаимодействие мод при обратимом T -движении.

4. В [2] обсуждался (2.9) физический смысл введенного в работе параметра T -времени τ (1.18) в связи с флуктуациями термодинамических величин в малых масштабах объема V_T (в областях β -, α -состояний). Из (20,24) следует, что в статистическом описании слабо (x_i, t) -неоднородных N -систем характерные объемные и временные масштабы связаны с помощью значения среднестатистической, тепловой скорости v_0 . При исследовании сред с выраженной (x_i, t) -неоднородностью и введенным нами эффективным полем локальной скорости $v_i(x_i)$ большое значение приобретает оценка относительных характеристик типа

$$d\tau/\tau = -dV_T/V_T, \quad (41)$$

получаемых, например, при дифференцировании обеих частей (1.18). Поскольку, согласно принятому в работе условию (2.10), любое d -изменение термодинамической величины на ТП осуществляется за счет имеющихся (x_i, t) -неоднородностей в распределении состояний ЛР по объему V_0 и длится в физическом времени ($d/dt \leftrightarrow d$) или в T -времени ($d/d\tau \leftrightarrow d$), важно установить связь относительного параметра временной эволюции (d/dt) с формальным параметром ($d\tau/\tau$) из (41). Для этого напомним, что в предыдущем обсуждении (x_i, t) -неоднородности была обоснована необходимость перехода от значения V_T (22), рассматриваемого как характеристика (x_i) -однородной среды к V_T , относимому к элементу среды, имеющему макроскопические свойства (типа «бесконечно малых физически»). Тогда относительное изменение dV_T/V_T сразу может быть записано [5] с помощью дивергенции поля скорости:

$$dV_T/(V_T dt) = \partial v_i/\partial x_i, \quad (42)$$

т.е. величины, определяющей сжимаемость среды (30) и, следовательно, являющейся причиной распространения в среде малых возмущений (звуковых волн). С учетом того, что величина $\partial v_i/\partial x_i$ характеризует обратное вре-

мя (t^{-1}) протекания подобного процесса и принимая во внимание (41), находим искомое соотношение между относительными изменениями физического времени t и T -времени τ :

$$d\tau/\tau = -dt/t. \quad (43)$$

Оно изоморфно выражению (41) и прямо указывает на возможность изучения траектории обратимого T -движения, «получаемой» с помощью мысленной процедуры непрерывного изменения масштаба измерения объема V_τ с использованием физической модели ИЖ, описывающей временную эволюцию N -системы. Выражения (41—43) можно рассматривать в качестве определения τ с помощью детерминированных переменных, подобно тому, как в (2.9) τ определяется флуктуациями термодинамических величин. Заметим, что при обосновании ренормгруппового метода в равновесной теории К.О. К. Вильсон также указывает [2.19] на близость общей концепции непрерывного измерения масштаба объема в области его микроскопических значений и допущений, принимаемых при определении локальных переменных в гидродинамике.

Несмотря на то, что в данной работе поставлена основная задача исследования равновесных свойств ТП, предыдущее рассмотрение обеспечивает возможность уточнения определений ряда характерных параметров неравновесных процессов на шкалах времени и объема. Действительно, считая, что характерные масштабы \tilde{t} и \tilde{V} задаются с помощью эффективной скорости и ее дивергенции, соответственно, как

$$\tilde{t} \sim (\partial v_i / \partial x_i)^{-1}, \quad \tilde{V} \sim (v_i^{-1} \partial v_i / \partial x_i)^{-3}, \quad (44)$$

можно предположить наличие следующей «иерархии» неравновесных процессов в области малых значений этих масштабов. Непосредственно за характеристиками (\tilde{t}, \tilde{V}) механически обратимого микроскопического движения должен следовать интервал термодинамической обратимости, т.е. применимости модели ИЖ, величина которого зависит от макроскопического поведения вещества. Если в объеме V_0 флюид находится в состоянии равновесия, то область $(t_{ИЖ}, V_{ИЖ})$ занимает интервал b -, v -состояний, вплоть до V_c . В том случае, когда в объеме V_0 реализуются неравновесные процессы вязкости, теплопроводности и самодиффузии, то в качестве V_c в работе предлагается выбор масштаба объема \tilde{V}_c , в котором величина макроскопического, обуславливающего наличие вязкости поля скорости $\tilde{v}_i(x_i)$ может быть принята равной нулю, соответствуя, таким образом, обычному определению состояния ЛР при условии локального механического равновесия.

Поле эффективной скорости $\tilde{v}_i(x_i)$, обсуждавшейся выше, при этом конечно по величине и может наряду с термодинамически обратимым движением, описываемым моделью ИЖ, характеризовать явления переноса, т.е. теплопроводность и самодиффузию на микроскопическом уровне. Отсюда можно видеть, что в интервале от микроскопических (\tilde{t}, \tilde{V}) до макроскопических величин (t_c, V_c) предполагается существование только одного характерного параметра (\tilde{t}, \tilde{V}) , отделяющего область термодинамической обратимости (модель ИЖ) от области необратимости за счет теплопроводности и связанного с ней процесса самодиффузии (модель ИЖТ). Интересно указать, что при определении спектра флуктуаций по рассеянию нейтронов пик Рэля (относящийся к теплопроводности) «сливается» [8] с пиками Бриллюэна (относящимися к сдвиговой и объемной вязкости, а также к теплопроводности), образуя общий пик. Возможны два варианта интерпретации этого «слияния». В первом можно считать, что общий пик обладает свойствами бриллюэновских пиков, и, таким образом, существует внутреннее трение в микроскопических масштабах [8]. Во-втором, представляющемся нам более физичным, — в этих масштабах происходит не слияние, а исчезновение пиков Бриллюэна и вязкость в микроскопических масштабах отсутствует, поскольку в них сохраняется только пик Рэля.

5. Покажем в заключение, что сделанные предположения можно подтвердить, исходя из общей формы системы уравнений (9—12), описывающих среду с любой степенью (x_i, t) -неоднородности. Введем с этой целью основное допущение изотропности тензора напряжений:

$$P_{ik} = -P \delta_{ik}, \quad (45)$$

отделяющее различные модели вязких сред от невязких (и в том числе, от модели ИЖ). С учетом (45) исключим далее производную $(\partial v_i / \partial x_i)$, подставляя (12) в (11), что дает:

$$d = \rho \left[T \frac{ds}{dt} - \frac{de}{dt} \right] - P \frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \quad (46)$$

Принимая во внимание (10) и термодинамическое соотношение (1.24), получаем из (46) условие отсутствия диссипации за счет вязкости:

$$d = 0, \quad (47)$$

что трансформирует систему уравнений (9—12) к виду

$$\rho \, dv_i / dt = -\partial P / \partial x_i, \quad (48)$$

$$\rho \, dv / dt = \partial v_i / \partial x_i, \quad (49)$$

$$\rho ds/dt = - (1/T) \partial y_i / \partial x_i, \quad (50)$$

$$\rho de/dt = - P \partial v_i / \partial x_i - \partial y_i / \partial x_i, \quad (51)$$

занимающему промежуточное положение между уравнениями (9—12), учитывающими вязкость, и уравнениями (1—4) модели ИЖ. Естественно, обсуждая (48—50), ввести представление о модели ИЖТ, в которой термодинамическая необратимость возникает вследствие наличия в правой части (50) выражения $(-T^{-1} \partial y_i / \partial x_i)$, в отличие от обратимого соотношения (1). Вводимое таким образом определение локального производства энтропии, несомненно, является более общим, нежели обычно принимаемое в линейной НТ [2.13], [2.14]:

$$\rho \frac{ds}{dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{y_i}{T} \right) = - \frac{1}{T^2} y_i \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (52)$$

в котором второй член слева, не вполне обоснованно, полагается обратимым, при описывании «изотермического переноса тепла».

Как уже отмечалось, уравнения НТ не являются независимыми вследствие наличия ТП, и учет этого обстоятельства должен сопутствовать любому их рассмотрению. Выше показано (путем исключения $\partial v_i / \partial x_i$ и $\partial y_i / \partial x_i$), что уравнения (49—51) эквивалентны одному дифференциальному соотношению РТ (1.24):

$$Tds - de - Pdv = 0. \quad (53)$$

Тем самым его можно рассматривать в виде дифференциальной связи, наложенной на уравнение движения (48). Информация об этой связи полностью эквивалентна системе гамильтоновых дифференциальных уравнений T -движения (1.24 а—в) с параметром T -времени τ . Добавляя к уравнениям модели ИЖ (3,4) уравнение внутренней энергии, в котором $\partial y_i / \partial x_i = 0$, можно сделать аналогичный вывод и далее учесть, что по сравнению с (53) дифференциальная связь, наложенная на уравнение движения (20), приобретает еще более простой вид (1). Наличие соотношения (53) понижает число независимых уравнений модели ИЖТ (48—51) до трех, и наличие соотношения (1) приводит число уравнений модели ИЖ (1—4) к двум. Принципиально возможное исключение эффективного поля скорости v_i из этих уравнений с помощью оператора d/dt (2.10) будет приводить к уравнению траектории обратимого T -движения на ТП, соответствующей условию изоэнтропы $s = \text{const}$, в терминах только термодинамических переменных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fedyanin V.K., Rogankov V.B. — JINR, E17-91-347, Dubna, 1991, Phys. Lett., 160, 1991, p.274.
2. Федянин В.К., Роганков В.Б. — ОИЯИ, P17-92-481, Дубна. Направлено в журнал «Fluid Phase Equilibria».
3. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. — Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Теоретическая физика, т.6, Гидродинамика, М.: Наука, 1988.
5. Ольховский И.И. — Курс теоретической механики для физиков М.: Изд. МГУ, 1974.
6. Балеску Р. — Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978, т.1, т.2.
7. Боголюбов Н.Н. — Избранные труды по статистической физике. М.: Изд. МГУ, 1979.
8. Олдер Б.Д., Алли У.Э. — В сб.: «Физика за рубежом», М.: Мир, 1986, с.52.
9. Коэн Э.Д. — В сб.: «Физика за рубежом», М.: Мир, 1986, с.73.
10. Петров Н., Бранков Й. — Современные проблемы термодинамики, М.: Мир, 1986.
11. Дубровин Б.А., Новиков С.П. — ДАН СССР, 1983, т.270, 4, с.781.
12. Царев С.П. — ДАН СССР, 1985, 3, с.534.
13. Кац М. — В сб.: «Устойчивость и фазовые переходы», М.: Мир, 1973, с.164.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 декабря 1992 года.