Физика и техника высоких давлений 2017, том 27, № 2

PACS: 62.20.F–, 62.20.fg, 62.30.+d, 81.40.Jj

С.В. Терехов[1], В.Н. Варюхин[1], Т.Н. Мельник[1], А.Г. Петренко[2], В.М. Юрченко[1]

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОСТИ. II. СОСТОЯНИЯ НЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ И ИХ ЭВОЛЮЦИЯ

[1]Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

[2]Донецкий национальный университет

Статья поступила в редакцию 4 марта 2017 года

В рамках модели компенсации неравновесности проведена классификация состояний синергетической системы. Установлено существование нового инварианта движения, представляющего собой сумму функции неравновесности и энтропии системы. Продемонстрирована взаимосвязь кинетических и динамических процессов, порождающая периодические изменения значений интенсивных и экстенсивных величин в синергетической системе. Получены уравнения эволюции потенциалов термодинамических полей и найдены явные зависимости этих потенциалов от сопряженной экстенсивной характеристики и скорости ее изменения.

Ключевые слова: термодинамическая система, неравновесность, самоорганизация, энтропия, необратимые процессы

1. Введение: классификация неравновесных состояний

Значительные отклонения открытой системы от положения термодинамического равновесия сопровождаются возникновением периодических структур, колебаний экстенсивных величин и волн термодинамических полей [1–8]. Коллективная реакция синергетической системы на изменения внешних условий приводит к перестройке ее внутренней структуры и полей, обеспечивающих ее устойчивое состояние. В этой связи целью данной работы является классификация неравновесных состояний синергетической системы, а также определение условий перехода от необратимых процессов к возникновению в системе колебательных и волновых движений.

В работе [9] предложен термодинамический подход к описанию синергетической системы, состояние которой формируется необратимыми процессами. Вид процесса, протекающего в неравновесной системе, определяется в *P*-пространстве (см. обозначения в [9]) обращением в нуль дифференциала энтропии $\mathrm{D}S$ ($\mathrm{D}S = \mathrm{d}_r S + \mathrm{d}_q S = 0$ – обратимый процесс, напомним, что для неравновесной синергетической системы энтропия является функцией $S(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i)$ от времени, пространственных координат, обобщенных термодинамических величин и скоростей их изменения) или его нетривиальностью ($\mathrm{D}S > 0$ (хаотизация) или $\mathrm{D}S < 0$ (упорядочение) – необратимый процесс). При этом необходимым, но недостаточным условием (дополнительно требуется выполнение равенства нулю функции неравновесности ($W = 0$, согласно [9] $W(t,\mathbf{r},\varphi_i,\dot{q}_i) = S(t,\mathbf{r},q_i,\dot{q}_i) - \sum_{i=1}^{3}\varphi_i q_i$), которое определяет равновесие, а $W \neq 0$ – его отсутствие) нахождения системы в состоянии равновесия является обращение в нуль дифференциала функции неравновесности $\mathrm{D}W$ ($\mathrm{D}W = \mathrm{D}_r W + \mathrm{D}_q W = 0$) в P-пространстве (состоит из обычного пространства-времени R и пространства термодинамических обобщенных координат Q). В частности, классификация состояний неравновесной системы в модели перекрестной компенсации асимметричного типа (формулы (29), (31) и (33) из [9]) приведена в таблице.

Таблица

Состояния синергетической системы и условия обратимости неравновесных процессов

Номер группы	R-пространство		Q-пространство		P-пространство		Условие обратимости процесса в P-пространстве
	$\mathrm{d}_r S$	$\mathrm{d}_r W$	$\mathrm{d}_q S$	$\mathrm{d}_q W$	$\mathrm{D}S$	$\mathrm{D}W$	
I	0 0	0 Ø	0 0	0 Ø	0	0	$\mathrm{d}_r S = 0$ и $\mathrm{d}_q S = 0$
II	0 0	0 Ø	Ø Ø	0 Ø	$\mathrm{d}_q S$	0	$\mathrm{d}_q S = 0$
III	Ø Ø Ø	Ø 0 Ø	0 0 0	0 Ø Ø	$\mathrm{d}_r S$	$-\mathrm{d}_r S$	$\mathrm{d}_r S = 0$
IV	Ø Ø Ø	Ø 0 Ø	Ø Ø Ø	0 Ø Ø	$\mathrm{d}_r S + \mathrm{d}_q S$	$-\mathrm{d}_r S$	$\mathrm{d}_r S + \mathrm{d}_q S = 0$

Примечание. Ø означает, что величина отлична от нуля.

Как видно из таблицы, в P-пространстве можно выделить 4 группы по условию равновесности состояния системы и типу производства энтропии. Группы I и II являются равновесноподобными, а группы III и IV – неравновесными. В группе I первая строка определяет сохранение энтропии и функции неравновесности в обеих частях P-пространств, вторая строка задает сохранение тех же величин, если выполняется равенство (32) из [9]. Группа II формируется состояниями, которые обеспечивают сохранение энтропии в R-пространстве при ее изменении в Q-пространстве, которое не влияет на равновесноподобное состояние системы (состояние, которое описывается второй строкой группы II, отвечает выполнению условия (32) из [9]). Группа III отвечает состояниям, которые формируются при производстве энтропии в R-пространстве и его отсутствии в Q-пространстве. При этом производство неравновесности может происходить в одной из частей расширенного пространства (первая строка в R-пространстве, вторая строка – в Q-пространстве) или одновременно в обеих областях P-пространства (третья строка группы III). Группа IV определяется производством энтропии в обеих областях P-пространства с описанными выше случаями производства неравновесности для группы III. Многообразие состояний неравновесной системы, классификация которых была проведена в рамках ограниченной модели перекрестной компенсации асимметричного типа, указывает на возможность обнаружения в этой системе разнообразных явлений, в частности появления новых инвариантов движения.

2. Инвариант движения *W* + *S*

В рамках общей модели компенсации [9], когда величина $\xi_i \neq 0$ ($\xi_i = \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \frac{\mathrm{d}_q \varphi_i}{\mathrm{d}t}$, φ_i – потенциалы термодинамических полей [9]), исследуем возможность появления в P-пространстве нового инварианта движения, определяющего сумму функции неравновесности и энтропии. Вычитая выражение (31) из (29) (см. [9]) и учитывая формулы (28), (30) и (32) (см. [9]), найдем, что выполняется равенство

$$\frac{\mathrm{D}(W+S)}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{3} \left(\zeta_i \ddot{q}_i + \varphi_i \dot{q}_i - \xi_i q_i \right), \tag{1}$$

где управляющими параметрами (коэффициенты дифференциального уравнения) являются: частная производная от функции неравновесности W по обобщенной скорости $\dot{q}_i$ (величина ζ_i), потенциал i-го термодинамического поля (коэффициент φ_i, см. [9, п. 2]) и его кинетическое изменение (параметр ξ_i, формула (33) из [9]). Формула (1) показывает, что величина $W + S$ является инвариантом движения, например, при выполнении дифференциального уравнения

$$\zeta_i \ddot{q}_i + \varphi_i \dot{q}_i - \xi_i q_i = 0 . \tag{2}$$

Если ограничиться поиском условий, при которых наблюдается экспоненциальный рост или убыль экстенсивных характеристик, то решение уравнения (2) можно искать в виде

$$q_i = \exp\left(\int \eta_i(t) \mathrm{d}t \right). \tag{3}$$

Подстановка (3) в (2) приводит к уравнению

$$\zeta_i \dot{\eta}_i = -\left(\zeta_i \eta_i^2 + \varphi_i \eta_i - \xi_i \right), \tag{4}$$

из которого следует, что постоянство функции $\eta_i(t)$ (или экспоненциальное изменение экстенсивных величин) связано с обращением в нуль правой части уравнения (4). Вид решения уравнения

$$\zeta_i\eta_i^2 + \varphi_i\eta_i - \xi_i = 0 \tag{5}$$

задается значением дискриминанта Δ_i.

Если управляющие параметры постоянны, то в зависимости от значения дискриминанта $\Delta_i = \varphi_i^2 + 4\zeta_i\xi_i$ уравнение (2) имеет следующие решения:

$$\text{а) } \Delta_i < 0:\ q_i = \mathrm{e}^{\alpha_i t}\left(C_{1i}\cos(\beta_i t) + C_{2i}\sin(\beta_i t)\right)$$
$$(\alpha_i = -0.5\varphi_i/\zeta_i,\ \ \beta_i = 0.5\sqrt{|\Delta_i|}\Big/\zeta_i); \tag{6}$$

$$\text{б) } \Delta_i = 0:\ q_i = \mathrm{e}^{\alpha_i t}\left(C_{1i} + C_{2i}t\right); \tag{7}$$

$$\text{в) } \Delta_i > 0:\ q_i = C_{1i}\mathrm{e}^{\gamma_{1i}t} + C_{2i}\mathrm{e}^{\gamma_{2i}t}\ (\gamma_{1,2i} = 0.5\left(-\varphi_i \mp \sqrt{\Delta_i}\right)\Big/\zeta_i). \tag{8}$$

Формула (6) в зависимости от знака коэффициента α_i определяет возникновение в неравновесной системе затухающих ($\alpha_i < 0$), стационарных ($\alpha_i = 0$) или нарастающих ($\alpha_i > 0$) временных периодических структур. Формула (7) соответствует затухающему ($\alpha_i < 0$), стационарному ($\alpha_i = 0$) или нарастающему ($\alpha_i > 0$) отклику неравновесной системы. Формула (8) описывает экспоненциальную реакцию системы с различными вариантами персистентности. Отметим, что по уравнению (2) обращению в нуль параметра ξ_i (модель перекрестной компенсации асимметричного типа) отвечает постоянство экстенсивных характеристик ($\dot{q}_i = 0$) или протекание обратимых превращений ($\mathrm{d}_q S = 0$) в Q-пространстве. Следовательно, в общем случае формулы (6)−(8) определяют условия и характер экспоненциального изменения обобщенных термодинамических координат.

Таким образом, изменчивость управляющих параметров в уравнении (1) при выполнении условий (2) порождает разнообразие возможных состояний неравновесной системы, которые отличаются от иных состояний сохранением инварианта движения $W + S$. В этой связи возникает необходимость в рамках модели перекрестной компенсации асимметричного типа найти условия, при которых инвариант движения $W + S$ сохраняется в R-области P-пространства.

Пространственно-временная эволюция неравновесного состояния определяется скоростью изменения функции неравновесности и энтропии, т.е. производством неравновесности и энтропии в реальном пространстве-времени. В рамках модели перекрестной компенсации асимметричного типа [9] сохранение инварианта движения $W + S$ в R-пространстве согласно формуле (37) из [9] определяется выражением

$$\frac{\mathrm{d}_r(W+S)}{\mathrm{d}t} = -\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{\partial\varphi_i}{\partial t}q_i + \frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i\right). \tag{9}$$

Правая часть равенства (9) обращается в нуль в ряде случаев:

– экстенсивные характеристики сохраняются в Q-пространстве ($\dot{q}_i = 0$) при стационарности потенциалов термодинамических полей ($\partial\varphi_i/\partial t = 0$);

– экстенсивные характеристики изменяются с постоянной скоростью ($\dot{q}_i = C_i$, $i = 1,2,3$), а потенциалы термодинамических полей не зависят от обобщенных термодинамических координат (все величины $\partial\varphi_i/\partial q_j = 0$), т.е. стационарны (см. формулу (33) из [9]);

– для всех характеристик ($i = 1,2,3$) выполняется система равенств, которая определяет стационарность потенциалов термодинамических полей ($\partial\varphi_i/\partial t = 0$) и отсутствие явной зависимости функции неравновесности от скоростей изменения обобщенных термодинамических координат ($\partial W/\partial\dot{q}_i = 0$):

$$\begin{cases}\partial\varphi_i/\partial t = 0,\\ \partial W/\partial\dot{q}_i = 0;\end{cases} \tag{10}$$

– для всех величин справедливо соотношение $\frac{\partial\varphi_i}{\partial t}q_i + \frac{\partial W}{\partial\dot{q}_i}\ddot{q}_i = 0$ ($i = 1,2,3$: $\partial\varphi_i/\partial t \neq 0$, $\partial W/\partial\dot{q}_i \neq 0$, $\dot{q}_i \neq C_i$);

– выполняется равенство ($i = 1,2,3$: $\partial\varphi_i/\partial t \neq 0$, $\partial W/\dot{q}_i \neq 0$, $\dot{q}_i \neq C_i$):

$$\sum_{i=1}^{3}\left(q_i\frac{\partial\varphi_i}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial\dot{q}_i}\ddot{q}_i\right) = 0. \tag{11}$$

Три первых из указанных случаев описывают ситуации со стационарными ($\partial\varphi_i/\partial t = 0$), а два оставшихся случая – с нестационарными ($\partial\varphi_i/\partial t \neq 0$) потенциалами термодинамических полей.

Пусть для всех описанных вариантов функция неравновесности постоянна и равна константе W_0 (при этом $\mathrm{d}_r S = 0$, т.е. в R-пространстве протекают обратимые процессы). Если величина $W_0 = 0$, то система находится в стабильном состоянии, отвечающем термодинамическому равновесию. При значении параметра $W_0 \neq 0$ ее состояние метастабильное, т.е. система неустойчива по отношению к малым флуктуациям характеристик. Следовательно, неравновесная система может длительное время пребывать в устойчивом состоянии со стационарными потенциалами ($\partial\varphi_i/\partial t = 0$) термодинамических полей (стационарное состояние) или в метастабильном состоянии при постоянном ненулевом значении функции неравновесности в случае нестационарных интенсивных величин ($\partial\varphi_i/\partial t \neq 0$). Последнее состояние, несмотря на нестационарность, может быть устойчивым, т.е. оно отвечает динамическому равновесию.

Таким образом, формулы (22)–(35) из [9] и (1)–(11) описывают переход системы к новому равновесному ($\mathrm{D}W \to 0$) состоянию за счет уменьшения производства энтропии в результате протекания обратимых ($\mathrm{D}S = 0$) или необратимых ($\mathrm{D}S \neq 0$) процессов. Транспортные явления сопровождаются возникновением потоков неравновесных характеристик, которые приводят к перераспределению энергии и вещества в системе. Поэтому рассмотрим потоки неравновесных экстенсивных аргументов в реальном пространстве-времени и потоки интенсивных величин в термодинамической фазовой области расширенного пространства.

3. Поток неравновесного *i*-го экстенсивного аргумента q_i. Периодические изменения экстенсивной переменной

В *R*-пространстве протекание конкурирующих между собой необратимых процессов приводит к разбиению неравновесной системы на совокупность локальных областей, в которых наблюдаются флуктуации термодинамических величин и характеристических функций. Они вызывают постоянное спорадическое отклонение положения центра масс локальной области (целлы) от равновесного значения. Поэтому местоположение целлы со значением термодинамической координаты q_i *i*-го экстенсивного аргумента задается средним значением радиуса-вектора $\mathbf{r}_{(i)}$. Скорость перемещения центра масс локальной области определяется формулой $\mathbf{v}_{(i)} = \mathrm{d}\mathbf{r}_{(i)}/\mathrm{d}t$. Движение целлы происходит в направлении, противоположном градиенту *i*-й величины, вызывающему пространственное смещение локальной области. Тогда поток аргумента q_i равен

$$\mathbf{J}_i = q_i \mathbf{v}_{(i)} = \frac{\mathrm{d}\left(q_i \mathbf{r}_{(i)}\right)}{\mathrm{d}t} - \mathbf{r}_{(i)} \frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\left(q_i \mathbf{r}_{(i)}\right)}{\mathrm{d}t} - \mathbf{r}_{(i)} \frac{\partial q_i}{\partial t} - \mathbf{r}_{(i)}\left(\mathbf{v}_{(i)} \nabla q_i\right) =$$

(ниже использована формула [10, с. 20]: $\left[\left[\mathbf{A} \times \mathbf{B}\right] \times \mathbf{C}\right] = \mathbf{B}\left(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}\right) - \mathbf{A}\left(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}\right)$)

$$= \underline{\frac{\mathrm{d}\left(q_i \mathbf{r}_{(i)}\right)}{\mathrm{d}t} - \mathbf{r}_{(i)} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \left[\left[\mathbf{r}_{(i)} \times \nabla q_i\right] \times \mathbf{v}_{(i)}\right]} -$$

$$-\left(\mathbf{r}_{(i)} \mathbf{v}_{(i)}\right) \nabla q_i = -\left(\mathbf{r}_{(i)} \mathbf{v}_{(i)}\right) \nabla q_i = -k_i \nabla q_i, \tag{12}$$

где подчеркнутое выражение равно нулю (иная форма записи равенства (12)), а $k_i = \mathbf{r}_{(i)} \mathbf{v}_{(i)}$ – *i*-й коэффициент пропорциональности. Согласно линейной теории Онзагера (см., напр., [11]), кинетические коэффициенты k_i являются положительными величинами. Поэтому формула (12) показывает, что вектор скорости $\mathbf{v}_{(i)}$ движения целлы коллинеарен вектору градиента $\nabla q_{(i)}$ экстенсивной величины q_i и противоположен ему по направлению.

Транспорт энергии и вещества локальной областью может привести к возникновению обратимых во времени явлений, например периодических изменений экстенсивных функций в *R*-пространстве. Эти феномены порождаются явной зависимостью потока экстенсивного параметра от времени, т.е. являются динамической составляющей необратимого процесса.

Пусть целла с локально сохраняющейся (выполняется уравнение (7) из [9]) экстенсивной величиной q_i движется с постоянной скоростью $\mathbf{c}_{(i)}$. Тогда легко показать, что поток $\mathbf{J}_i$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial \mathbf{J}_i}{\partial t} + c_{(i)}^2 \nabla q_i = 0 . \tag{13}$$

Совместное решение уравнений (7) из [9] (первое уравнение системы уравнений (14)) и (13)

$$\begin{cases} \dfrac{\partial q_i}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{J}_i = 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{J}_i}{\partial t} + c_{(i)}^2 \nabla q_i = 0 \end{cases} \tag{14}$$

приводит к уравнениям гиперболического типа для экстенсивной характеристики q_i:

$$\frac{\partial^2 q_i}{\partial t^2} = c_{(i)}^2 \Delta q_i \tag{15}$$

($\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа) и ее потока $\mathbf{J}_i$:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{J}_i}{\partial t^2} = c_{(i)}^2 \left[\mathrm{rot}\left(\mathrm{rot}\mathbf{J}_i\right) + \Delta \mathbf{J}_i \right]. \tag{16}$$

Система уравнений (14) связывает необратимые во времени транспортные процессы с обратимыми во времени перемещениями. Формулы (15) и (16) описывают периодические изменения термодинамических величин. Возникновение, например, периодических изменений экстенсивной величины при постоянном коэффициенте пропорциональности (формула (12)) отображает стационарность потока этой характеристики, так как

$$\frac{\partial \mathbf{J}_i}{\partial t} = -k_i \frac{\partial\left(\nabla q_i\right)}{\partial t} . \tag{17}$$

Согласно формуле (17) стационарность потока экстенсивной характеристики определяется обращением в нуль смешанной производной (правая часть равенства (17)), вид которой может быть приведен к виду уравнения (15) с помощью преобразования Лоренца [13, с. 58]. В заключение этого пункта можно отметить, что неоднородная система уравнений (14) может послужить основой для построения теории иерархических изменений в неравновесной системе.

4. Эволюция потенциалов термодинамических полей

Интенсивные характеристики неравновесной системы изменяются в Q-области расширенного пространства, при этом они удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3} \left[\frac{\partial I_{ij}}{\partial q_j} + \frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t} \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j} \right] = \pi_i , \tag{18}$$

где $I_{ij} = \varphi_i \dot{q}_j$ – составляющие матрицы j-х компонентов i-го потока потенциала φ_i термодинамического поля в Q-пространстве; величина

$$\pi_i = \sum_{j=1}^{3} \left(\dot{q}_j \frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \dot{q}_i} \right) + \dot{\varphi}_i \delta_{ij} \right) \tag{19}$$

описывает производство (утилизацию) потенциала вида i. Наличие в формуле (18) слагаемых $\sum_{j=1}^{3} \left[\frac{\partial I_{ij}}{\partial q_j} + \frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t} \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j} \right]$ эйлеровского вида указывает на возможность их минимизации (обращения в нуль) при тривиальном значении вариации $\delta_q \int I_{ij} \mathrm{d}t = 0$ в Q-пространстве. Иная форма записи производства потенциала φ_i вида i (формула (19)):

$$\pi_i = \sum_{j=1}^{3} \left[\frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t} \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial \varphi_i}{\partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j \right]. \tag{20}$$

Из формулы (20) следует:

$$\frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t} \mathrm{div}_{\dot{q}} \mathbf{I}_i = \left(\ddot{\mathbf{q}}_{(i)} \nabla_{\dot{q}} \right) \varphi_i , \tag{21}$$

где поток $\mathbf{I}_i = \varphi_i \dot{\mathbf{q}}_{(i)}$ ($\dot{\mathbf{q}}_{(i)} = \sum_{j=1}^{3} \dot{q}_{j(i)} \mathbf{e}_j$ и $\ddot{\mathbf{q}}_{(i)}$ – соответственно скорость перемещения и ускорение элемента фазовой области с потенциалом φ_i; $\mathbf{e}_j$ – орты термодинамических осей; $\mathrm{div}_{\dot{q}} \mathbf{I}_i = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j}$ – расходимость векторных линий потока $\mathbf{I}_i$ в пространстве обобщенных скоростей) соответствует отсутствию производства (утилизации) $\pi_i = 0$ потенциала φ_i.

В общем случае производство энтропии в Q-пространстве задается формулой (см. (30) из [9]):

$$\frac{\mathrm{d}_q S}{\mathrm{d}t} = I_{1S} + \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i\right]. \quad (22)$$

Если энтропия не зависит явным образом от обобщенных скоростей $\dot{q}_i$ или эти скорости постоянны, то сумма элементов с одинаковыми индексами матрицы компонентов потоков определяет производство энтропии в Q-пространстве:

$$\frac{\mathrm{d}_q S}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{3}\varphi_i\dot{q}_i = I_{1S}\,. \quad (23)$$

В сопряженном пространстве потенциалов термодинамических полей составляющие матрицы j-х компонентов i-го потока экстенсивной величины определим формулой $P_{ij} = -q_i\dot{\varphi}_j$. Тогда производство функции неравновесности в Q-пространстве равно

$$\frac{\mathrm{d}_q W}{\mathrm{d}t} = P_{1W} + \sum_{i=1}^{3}\left[\frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i\right], \quad (24)$$

где линейный инвариант функции неравновесности $P_{1W} = -\sum_{i=1}^{3}q_i\dot{\varphi}_i$. Таким образом, в Q-пространстве разность между производствами энтропии и функции неравновесности (с учетом формулы (28) из [9]) задается разностью между линейными инвариантами соответствующих матриц

$$\frac{\mathrm{d}_q S}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}_q W}{\mathrm{d}t} = I_{1S} - P_{1W}\,. \quad (25)$$

Используя формулы (19) и (33) из [9], можно записать линейные инварианты введенных матриц в виде

$$I_{1S} = \frac{\mathrm{D}S}{\mathrm{d}t} - \sum_{i=1}^{3}\varphi_i\frac{\mathrm{d}_r q_i}{\mathrm{d}t}, \quad (26)$$

$$P_{1W} = -\frac{\mathrm{d}_r S}{\mathrm{d}t} + \sum_{i=1}^{3}q_i\frac{\mathrm{d}_r\varphi_i}{\mathrm{d}t}. \quad (27)$$

Формулы (26) и (27) показывают, что линейный инвариант энтропии определяется процессами в P-пространстве, а линейный инвариант функции неравновесности – только в R-пространстве. Разность формул (26) и (27) (при учете производной по времени в R-пространстве от формулы (18) из [9]) равна

$$I_{1S} - P_{1W} = \frac{\mathrm{D}S}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}_r W}{\mathrm{d}t}. \quad (28)$$

Из формулы (28) следует: равенство линейных инвариантов энтропии и неравновесности приводит к компенсации производства энтропии в *P*-пространстве производством функции неравновесности в *R*-пространстве. В этом случае процессы в неравновесной системе описываются моделью перекрестной компенсации симметричного типа (соотношения (34) и (35) из [9]).

При постоянных скоростях изменения экстенсивных величин ($\dot{q}_j = C_j$) уравнение (18) распадается на два равенства (см. формулы (18) и (20)):

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \displaystyle\sum_{j=1}^{3} \dfrac{\partial I_{ij}}{\partial q_j} = 0, \\ \displaystyle\sum_{j=1}^{3} \dfrac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t}\left(\dfrac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j}\right) = \pi. \end{cases} \tag{29}$$

Согласно (29) кинетическая перестройка потенциалов термодинамических полей неравновесной системы происходит в силу их нестационарности и возникновения потоков в термодинамической фазовой области *P*-пространства. Первое уравнение системы (29) можно переписать в векторной форме:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \mathrm{div}_q \mathbf{I}_i = 0, \tag{30}$$

где $\mathrm{div}_q \mathbf{I}_i = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial I_{ik}}{\partial q_k}$ – расходимость векторных линий потока $\mathbf{I}_i$ в пространстве обобщенных координат. Уравнение (30) имеет вид закона локального сохранения потенциала φ_i в термодинамическом фазовом пространстве.

Поток интенсивной величины возникает под действием ее градиента в *Q*-пространстве, поэтому согласно формуле (12) можно записать, что матричные элементы I_{ij} равны

$$I_{ij} = -\Omega_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial q_j}, \tag{31}$$

где Ω_i – кинетический коэффициент *i*-го типа. Для постоянного коэффициента Ω_i однородное ($\pi_i = 0$) уравнение (18) принимает вид

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \Omega_i \left(\Delta_q \varphi_i + \sum_{j=1}^{3} \frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial \dot{q}_j \partial q} \right) \right), \tag{32}$$

здесь $\Delta_q = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial q_j^2}$ – оператор Лапласа в *Q*-пространстве. Первое слагаемое в правой части уравнения (32) может описывать возникновение фрактальных объектов (см., напр., пункты 8.2 и 8.3 работы [14]), а второе – различных динамических эффектов. При выполнении условия (21), учете равенства (31) и переменном коэффициенте Ω_i однородное уравнение (18) принимает вид

$$\frac{\partial\varphi_i}{\partial t}=\sum_{j=1}^{3}\left[a_{ij}\frac{\partial\varphi_i}{\partial q_j}+b_{ij}\frac{\partial^2\varphi_i}{\partial q_j^2}+c_{ij}\frac{\partial^2\varphi_i}{\partial\dot{q}_j\partial q_j}+\Omega_i\frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial^2\varphi_i}{\partial\dot{q}_j\partial q_j}\right)+\right.$$
$$\left.+\sum_{\substack{k=1\\k\neq j}}^{3}\left(e_{ijk}\frac{\partial^2\varphi_i}{\partial q_j\partial q_k}+f_{ijk}\frac{\partial^2\varphi_i}{\partial q_j\partial\dot{q}_k}\right)\right], \tag{33}$$

где параметры $a_{ij}=\frac{\partial\Omega_i}{\partial q_j}+\frac{\mathrm{d}_q}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\Omega_i}{\partial\dot{q}_j}\right)$, $b_{ij}=\Omega_i+\dot{q}_j\frac{\partial\Omega_i}{\partial\dot{q}_j}$, $c_{ij}=\ddot{q}_j\frac{\partial\Omega_i}{\partial\dot{q}_j}+\frac{\mathrm{d}_q\Omega_i}{\mathrm{d}t}$, $e_{ijk}=\dot{q}_k\frac{\partial\Omega_i}{\partial\dot{q}_j}$, $f_{ijk}=\ddot{q}_k\frac{\partial\Omega_i}{\partial\dot{q}_j}$ определяются зависимостью кинетического параметра Ω_i i-го типа от экстенсивных обобщенных координат q_i и скоростей их изменения $\dot{q}_i$.

Решения некоторых частных случаев уравнения (33) представлены в [15]:

а) отметим, что автомодельное решение уравнения параболического типа (диффузия и др.)

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=b\frac{\partial^2\varphi}{\partial q^2}$$

может приводить к потенциалу вида (здесь и далее по тексту C_i, a_i и b_i – постоянные величины):

$$\varphi(\xi)\approx a_1\xi\exp\left(-b_1\xi^2\right), \tag{34}$$

где $\xi = q^2/\tau$, константы интегрирования $a_1=2C_1$ и $b_1=0.25$ связаны с параметрами исследуемой среды (см. [15]). Применение же к этому уравнению метода Фурье (метода разделения переменных) дает для потенциала φ выражение

$$\varphi=\exp\left(-\lambda^2\tau\right)\left[C_1\cos(\lambda q)+C_2\sin(\lambda q)\right]$$

(λ – параметр разделения, связанный с характерным временем процесса), которое описывает возникновение диссипативных (потенциал убывает с ростом времени) периодических структур в Q-области расширенного пространства;

б) если локальная скорость изменения потенциала термодинамического поля определяется в Q-пространстве смешанной производной потенциала по обобщенным координате и скорости, то уравнение разрушения имеет вид

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial\tau^2} = \frac{\partial^2\varphi}{\partial\dot{q}^2} - \frac{\partial^2\varphi}{\partial q^2},$$

а стационарное решение (при $\partial\varphi/\partial t = 0$, после введения преобразования Лоренца $\dot{q}_1 = \dfrac{\dot{q} - u\tau}{\sqrt{1-u^2}}$ [15]) в качестве слагаемого содержит потенциал Людвика φ_L [16]:

$$\varphi = \varphi_L + a_2 \ln\left[1 - \left(\frac{q_1}{b_2}\right)^2\right], \tag{35}$$

где $\varphi_L = 2C_1 \ln|\dot{q}_1| + C_2$ (C_i, $a_2 = C_1$ и b_2 – константы интегрирования [15], причем параметр $b_2 = \dot{q}_1$ определяет постоянную скорость разрушения). Стационарность потенциала термодинамического поля неравновесной системы существует в ограниченной области изменения экстенсивной величины ($(q/b_2)^2 < 1$), т.е. вне этой области его стационарность может разрушаться. Аналогичная картина наблюдается при деформировании материалов, когда приложенная внешняя энергия не только преобразует внутреннюю структуру, но и вызывает появление новых поверхностей раздела (пор, микротрещин и т.д.), т.е. разрушение (фрактуризацию) материала [17]. Поиск решения нестационарного уравнения фрактуризации методом Фурье в виде $\varphi = T(\tau)Q(\zeta)$ ($\tau = ct$ – безразмерное время, $\zeta = \dot{q}_1^2 - q_1^2$, $\dot{q}_1 = \dot{q} + q$, $q_1 = \dot{q} - q$) приводит к формулам

$$T(\tau) = \exp\left(-\lambda^2\tau\right), \quad Q(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \zeta^n, \tag{36}$$

где λ – константа, определяемая из начальных и граничных условий. Коэффициенты ряда удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$4(n+1)^2 a_{n+1} + \lambda^2 a_n = 0. \tag{37}$$

Полагая коэффициент $a_0 = 1$, получим решение в виде

$$Q(\zeta) = 1 - \left(\frac{\lambda}{2}\right)^2 \zeta + \left(\frac{\lambda}{2}\right)^4 \frac{\zeta^2}{4} - \left(\frac{\lambda}{2}\right)^6 \frac{\zeta^3}{36} + \ldots \tag{38}$$

Из выражения (38) видно, что, например, при $\zeta = 1.5$ и значениях параметра $|\lambda| << 2$ коэффициенты ряда быстро убывают до нуля, а при выполнении противоположного условия ($|\lambda| >> 2$) они возрастают до очень больших значений.

Таким образом, значение параметра $|\lambda| = 2$ является пороговым и определяет точку ветвления, после прохождения которой изменяется поведение нестационарного потенциала разрушения;

в) согласно (17) условием стационарности потока интенсивной характеристики является постоянство во времени градиента потенциала в Q-пространстве

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t \partial q} = 0 . \tag{39}$$

В переменных $\tau = t + \frac{q}{u}$, $q_1 = q - ut$ (u – скорость перемещения волны потенциала) (39) принимает вид

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} - u^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q_1^2} = 0 . \tag{40}$$

Уравнение (40) описывает продольную волну потенциала термодинамического поля, которая распространяется со скоростью u вдоль оси q_1. Уравнение (40) в термодинамическом фазовом пространстве имеет вид

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau_1^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \dot{q}^2} , \tag{41}$$

где $\tau_1 = u\tau$. Введение нового аргумента Лоренца [13,18] $\dot{q}_1 = \frac{\dot{q} - v\tau_1}{\sqrt{1 - v^2}}$ (v – безразмерная скорость перемещения одной системы отсчета относительно другой вдоль оси обобщенных скоростей $\dot{q}$) позволяет преобразовать уравнение (41) к виду

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \dot{q}_1^2} = 0 . \tag{42}$$

Решение уравнения (42) определяется такой же функцией, как и движение дислокаций в обычном пространстве [18]:

$$\varphi = a_3 \mathrm{arctg}\left(b_3 q\right) , \tag{43}$$

где $a_3 = C_1$ и $b_3 = q_1^{-1}$ – константы интегрирования [15].

Суммарное действие потенциалов (34), (35) и (43) позволяет описать определенные отклики синергетической системы. В частности, в работе [15] развитый формализм был применен к описанию возникающего напряжения в материале в зависимости от деформации. Результаты моделирования механических состояний приведены в работе [15].

5. Заключение

В работе предложена модель неравновесной термодинамической системы, определяемая любым известным термодинамическим потенциалом при добавлении потенциала энтропии неравновесности. Такая термодинамическая концепция неравновесности в предельных случаях дает переход к известным результатам равновесной термодинамики. С другой стороны, предлагаемая модель позволяет получать новые физические представления неустойчивых состояний синергетических систем, проводить их классификацию и исследовать частные случаи эволюционных преобразований. Переструктурирование системы может сопровождаться сохранением определенных величин, что указывает на возникновение нового вида симметрии. В результате взаимодействия кинетического и динамического подуровней в системе могут зарождаться продольные и поперечные волны термодинамических величин. В случае динамического равновесия с внешней средой система может строить иерархии необратимых процессов.

В рамках одной из моделей компенсации неравновесности были получены кинетические уравнения для частных случаев потенциалов термодинамических полей. Получены явные зависимости потенциалов от сопряженной обобщенной координаты. Сумма этих потенциалов позволяет смоделировать различные отклики синергетической системы на внешние воздействия.

1. *В. Эбелинг*, Образование структур при необратимых процессах. Введение в теорию диссипативных структур, Мир, Москва (1979).
2. *А.М. Жаботинский*, Концентрационные автоколебания, Наука, Москва (1974).
3. *А.Г. Хачатурян*, Теория фазовых превращений и структура твердых растворов, Наука, Москва (1974).
4. *Е.Ф. Мищенко, В.А. Садовничий, А.Ю. Колесов, Н.Х. Розов*, Автоволновые процессы в нелинейных средах с диффузией, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2005).
5. *А.Г. Шашков, В.А. Бубнов, С.Ю. Яновский*, Волновые явления теплопроводности: Системно-структурный анализ, Едиториал УРСС, Москва (2004).
6. *Г. Кольский*, Волны напряжения в твердых телах, Изд-во иностр. лит., Москва (1955).
7. *Р.М. Дэйвис*, Волны напряжения в твердых телах, Изд-во иностр. лит., Москва (1961).
8. *В.И. Ерофеев*, Волновые процессы в твердых телах с микроструктурой, Изд-во МГУ, Москва (1999).
9. *С.В. Терехов, В.Н. Варюхин, Т.Н. Мельник, В.М. Юрченко*, ФТВД **27**, № 1, 103 (2017).
10. *А.И. Борисенко*, *И.Е. Тарапов*, Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Вища школа, Харьков (1986).
11. *И.П. Базаров*, *Э.В. Геворкян*, *П.Н. Николаев*, Неравновесная термодинамика и физическая кинетика, Изд-во МГУ, Москва (1989).
12. *Ф.М. Морс*, *Г. Фешбах*, Методы теоретической физики, Т.1, Изд-во иностр. лит., Москва (1958).

13. *А.Х. Коттрелл*, Дислокации и пластическое течение в кристаллах, Металлургиздат, Москва (1958).
14. *С.В. Терехов*, Фракталы и физика подобия, Цифровая типография, Донецк (2011).
15. *С.В. Терехов*, *В.Н. Саяпин*, ФТВД **24**, № 3–4, 39 (2014).
16. *Физическое* металловедение, Т.2. Фазовые превращения в металлах и сплавах и сплавы с особыми физическими свойствами, Р.У. Кан, П.Т. Хаазен (ред), Металлургия, Москва (1987).
17. *Ю.Г. Матвиенко*, Модели и критерии механики разрушения, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2006).
18. *А. Коттрел*, Теория дислокаций, Мир, Москва (1969).

S.V. Terekhov, V.N. Varyukhin, T.N. Melnik, A.G. Petrenko, V.M. Yurchenko

THERMODYNAMIC CONCEPT OF NON-EQUILIBRIUM.
II. STATES OF A NON-EQUILIBRIUM SYSTEM AND THEIR EVOLUTION

Within the framework of the model of compensation of non-equilibrium, classification of the states of a synergetics system is carried out. The existence of a new invariant of motion is set, that is a sum of the function of non-equilibrium and the entropy of the system. Intercommunication of kinetic and dynamic processes is shown, that gives rise to periodic changes of intensive and extensive parameters in a synergetic system. The equations of evolution of the potentials of the thermodynamic fields are obtained and explicit dependencies of these potentials on conjugate extensive characteristics and the rate of its change are found.

Keywords: thermodynamic system, non-equilibrium, self-organization, entropy, irreversible processes