

PACS: 05.70.Ce, 05.70.Ln, 62.20.Mk

Л.С. Метлов

КОНЦЕПЦИЯ ОСНОВНОГО ЛОКАЛЬНО-НЕРАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 26 июля 2016 года

Посредством явного учета основных каналов диссипации энергии на внутренних степенях свободы при генерации структурных дефектов в результате интенсивных внешних воздействий обобщено понятие локально-равновесного состояния на случай неравновесных систем и процессов в форме основного локально-неравновесного состояния. Предложена процедура расчета приращения энтропии для этого случая.

Ключевые слова: соотношение Гиббса, неравновесное состояние, структурные дефекты, термодинамические потоки, термодинамические силы

1. Введение

Для описания процессов фрагментации и формирования дефектной структуры металлов в процессе обработки их методами интенсивной пластической деформации в Донецком физико-техническом институте им. А.А. Галкина предложен и развивается метод неравновесной эволюционной термодинамики (НЭТ) [1,2]. Важной работой в контексте формирования парадигмы этого метода была статья в журнале «Металлофизика и новейшие технологии» [2], где впервые качественно доказано термодинамическое тождество, объединяющее первый и второй законы термодинамики (равенство Гиббса), для частного случая моделирования интенсивной пластической деформации. В настоящий момент получено более строгое обоснование этого принципа как в плане концепции основного локально-неравновесного состояния [3,4], так и в аспекте более полного доказательства обобщенного равенства Гиббса для неравновесных процессов [5].

Согласно кинетическим представлениям поведение реальных твердых тел зависит не только от средних характеристик теплового движения, но также от отклонений их от средних значений, т.е. от флуктуаций (особенно от высокоэнергетических) [6]. Учет флуктуаций представляется во многих случаях принципиально важным и определяет уровень исследований в области неравновесных процессов.

В то же время проблема неравновесной перестройки структуры твердого тела кроме флуктуационного имеет еще и силовой аспект. Флуктуации важны для медленных процессов, когда достаточно времени для возникновения большой

флуктуации. В случае быстрых (интенсивных) процессов (которые в основном рассматриваются в данной статье) тепловые флуктуации большого масштаба не успевают возникнуть, и рассмотрение таких процессов в первом приближении можно вести в рамках теории среднего поля.

Внутренние процессы, протекающие в твердом теле, представляют собой сложную картину взаимных переходов и превращений энергии, хотя их природа не всегда конкретизируется [7]. Диссипация энергии с участием дефектов носит динамический характер и сопровождается переходными явлениями типа акустической эмиссии. Кинетическая энергия, возникшая в момент образования дефекта, сначала излучается в форме низкочастотных волн, которые можно рассматривать как часть общего релаксационного процесса [8]. Рассеяние этих волн на равновесных тепловых колебаниях завершает процесс релаксации с участием дефектов. Таким образом, в хаотическую тепловую форму энергия переходит не сразу, а лишь после прохождения ряда промежуточных стадий.

В теории неравновесных явлений существует два альтернативных подхода: подход Гиббса, или статистической механики, и подход Эйнштейна, или статистической термодинамики [9]. В первом случае макроскопические законы термодинамики выводятся посредством осреднения микропараметров статистического ансамбля систем, взятых в один и тот же момент времени [10]. В подходе Эйнштейна с той же самой целью осреднение флуктуирующих экстенсивных и интенсивных макропараметров осуществляется во времени для одной и той же системы [9]. Идентичность этих результатов должна гарантировать эргодическая гипотеза, которая пока еще не доказана в общем виде.

В то же время имеется еще одна возможность обоснования законов термодинамики – это осуществлять осреднение во времени для одной и той же системы, но не по флуктуирующим макропараметрам (как у Эйнштейна), а по микропараметрам системы, но не по статистическому ансамблю (как у Гиббса). Такая возможность была применена автором в работе [11] для обоснования введения им неравновесной температуры и энтропии путем осреднения во времени движения отдельных атомов кристаллической решетки. Действительно, макропараметры системы, по сути, уже сами по себе есть результат осреднения по всей системе, и в их остаточных флуктуациях уже утеряны многие тонкие особенности микросостояний системы.

2. Концепция локально-равновесного состояния

Особое место в ряду теорий занимают теории самоорганизации Пригожина [12]. Вся теория самоорганизации базируется на принципах локального равновесия. В его основу положен тезис о том, что глобальное термодинамическое равновесие во всей системе наступает значительно позже, чем локальное термодинамическое равновесие в различных ее частях. Известно, что в общем случае объединенные первый и второй законы термодинамики имеют форму неравенства [7, с. 77]:

$$dU \leq TdS - \sum_i F_i dA_i, \quad (1)$$

где A_i – внешний параметр, F_i – сопряженная внешнему параметру обобщенная сила. В случае простых тел $A = V$, $F = p$. Знак равенства относится к равновесным элементарным процессам, а знак неравенства – к неравновесным. Только в случае равновесных процессов температуру и обобщенные силы можно вычислять как частные производные от внутренней энергии. Для неравновесных же процессов связь между этими величинами и переменными состояниями носит более сложный характер, зависящий от вида внутренних процессов.

Внутренние процессы можно подразделить на два больших класса: процессы, протекающие с изменением структурного состояния, и диссипативные процессы типа вязкого трения, движения структурных дефектов и т.д. Структурные превращения, связанные с изменением компонентного состава в результате протекания химических реакций, возникновения структурных дефектов и т.д., являются неравновесными по самой природе. Для их описания нельзя ограничиться приближением локального равновесия, а необходимо модернизировать само базовое соотношение (1).

Наиболее известный классический пример такой модернизации – это обобщение соотношения (1) на случай многокомпонентных сред с изменяющимся количеством частиц каждого типа [7, с. 114]:

$$dU \leq TdS - \sum_i F_i dA_i + \sum_k \mu_k dN_k, \quad (2)$$

где N_k – количество частиц данного вида, μ_k – химический потенциал данного компонента. Количество частиц данного сорта может меняться как в результате внешнего воздействия за счет добавления или изымания компонентов из системы, так и вследствие внутренних превращений одних компонентов в другие.

Второй класс внутренних процессов при относительно невысоких интенсивностях внешнего воздействия в определенном его диапазоне может быть описан в рамках локального равновесия. Для «простого» тела соотношение (2) можно записать в виде равенства

$$dU = TdS - pdV + \sum_k \mu_k dN_k. \quad (3)$$

Данное соотношение можно разрешить относительно дифференциала любой из переменных dS , dV или dN и рассматривать последние как некоторые новые термодинамические потенциалы. Это позволит выражать изменения указанных переменных через изменения всех оставшихся переменных, включая и внутреннюю энергию.

Однако наибольшее распространение такое преобразование получило только относительно энтропии. И в этом заложен глубокий смысл. Действительно, из всех представленных в соотношении (3) переменных только для энтропии нет прямых методов измерения. Поэтому, разрешив соотношение (3) относительно

энтропии, мы получим возможность выражать ее изменение через изменения измеряемых величин и вычислять ее с помощью формулы

$$dS = \frac{1}{T} dU + \frac{p}{T} dV - \sum_k \frac{\mu_k}{T} dN_k \quad (4)$$

или в терминах плотностей экстенсивных переменных

$$ds = \frac{1}{T} du + \frac{p}{T} dv - \sum_k \frac{\mu_k}{T} dn_k. \quad (5)$$

Скорость возникновения энтропии в адиабатной системе в единице объема равна

$$\sigma = \frac{ds}{dt} = \frac{\partial s}{\partial u} \frac{du}{dt} + \frac{\partial s}{\partial v} \frac{dv}{dt} + \sum_k \frac{\partial s}{\partial n_k} \frac{dn_k}{dt} = \sum_i I_i X_i, \quad (6)$$

где

$$X_1 = \frac{1}{T}, \quad X_2 = \frac{p}{T}, \quad X_{2+k} = \frac{\mu_k}{T} \quad (7)$$

– термодинамические силы [7, с. 257], а

$$I_1 = \frac{du}{dt}, \quad I_2 = \frac{dv}{dt}, \quad I_{2+k} = \frac{dn_k}{dt} \quad (8)$$

– термодинамические потоки.

Всякая плотность экстенсивной величины a макроскопической системы подчиняется уравнению баланса

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{I}_{a,n} + \sigma_a, \quad (9)$$

где a – плотность экстенсивной переменной A ; $\mathbf{I}_{a,n} = a\mathbf{v}_a + \mathbf{I}_a$ – плотность полного потока полевой переменной A , состоящего из конвективной $a\mathbf{v}_a$ и кондуктивной \mathbf{I}_a частей; \mathbf{v}_a – скорость переноса величины A (барицентрическая скорость); σ_a – плотность мощности внутреннего источника переменной A . Для сохраняющихся величин внутренние источники отсутствуют ($\sigma_a = 0$), для остальных, например для энтропии, вычисляются из полной системы конститутивных уравнений.

Для нахождения явного вида потоков и термодинамических сил необходимо привлечь уравнение баланса для экстенсивных величин (9) и соотношение Гиббса (5). В качестве примера можно привести явные выражения для твердого тела с градиентом температур, если пренебречь изменением его объема и исключить поток частиц [7, с. 259]:

$$\mathbf{I}_s = \frac{1}{T} \mathbf{I}_Q, \quad \mathbf{X}_s = \nabla \left(\frac{1}{T} \right) = -\frac{1}{T^2} \nabla T. \quad (10)$$

Здесь \mathbf{I}_s , \mathbf{I}_Q – потоки соответственно энтропии и теплоты. Формально термодинамическая сила в виде (10) оказывается равной градиенту термодинамической силы X_1 в виде (7), которую в этом контексте можно рассматривать как своего рода потенциал.

При малых отклонениях от равновесного состояния связь между потоками и термодинамическими силами носит линейный характер [7, с. 263]:

$$I_i = \sum_{k=1}^n L_{ik} X_k, \quad (11)$$

где L_{ik} – матрица кинетических коэффициентов, диагональные элементы которой определяют прямые явления переноса, а недиагональные – перекрестные или сопряженные явления. Онзагер в работах [13,14] из инвариантности микроскопических уравнений относительно изменения знака времени показал, что матрица кинетических коэффициентов симметрична:

$$L_{ik} = L_{ki}. \quad (12)$$

Соотношение (12) справедливо только в случае процессов одинаковой тензорной размерности. Перекрестные эффекты между потоками различной тензорной размерности запрещены принципом Кюри [15], ввиду чего производство энтропии (6) для изотропных систем можно представить как сумму независимых вкладов по каждой группе процессов различной тензорной размерности. Например, к группе скалярных процессов относятся химические реакции, к группе векторных процессов – теплопроводность и диффузия, к группе тензорных – вязкое затухание и движение структурных дефектов. Для кинетических коэффициентов, относящихся к процессам с различной тензорной размерностью, справедливо соотношение

$$L_{ik} = L_k \delta_{ki}. \quad (13)$$

Представлений о локальном равновесии вполне достаточно, чтобы решить широкий круг задач по самоорганизации сложных систем [12]. В то же время представления о локальном равновесии неприменимы для анализа, например, процессов обработки металлов давлением, когда плотность структурных дефектов возрастает на порядки, и процесс носит неравновесный характер. В этом случае для решения задачи самоорганизации структурных дефектов необходимо вначале модернизировать само основное термодинамическое неравенство (приблизив его к равенству), чтобы максимально учесть основные каналы диссипации и только потом применять представления «слабонеравновесной» термодинамики, но по отношению к уже модернизированному, фактически достаточно сильно неравновесному состоянию.

3. Объединенный закон, сочетающий первый и второй законы термодинамики

Основной закон термодинамики для простых твердых тел можно записать в виде

$$du = \delta a + \delta q = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + T \delta s', \quad (14)$$

где u – плотность внутренней энергии; δa , δq – соответственно работа внешних сил и приращение теплоты, приходящиеся на единицу объема; σ_{ij} , ε_{ij} – тензоры соответственно напряжений и деформаций; T , s' – соответственно температура и плотность энтропии. Здесь приращение энтропии осуществляется только за счет внешних источников.

Основной закон в форме (14) справедлив как для равновесных (обратимых), так и для неравновесных (необратимых) процессов. В первом случае тензор деформаций будет иметь упругий характер: $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e$, а приращение энтропии от внешних источников будет полностью совпадать со всем приращением энтропии: $\delta s \equiv \delta s'$ (собственные источники энтропии отсутствуют). Приращения этих переменных могут быть отождествлены с полными дифференциалами:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + T ds, \quad (15)$$

а внутренняя энергия будет однозначной функцией своих аргументов $u = u(\varepsilon_{ij}, s)$. Переменные ε_{ij} , s полностью и однозначно определяют термодинамическое состояние системы в обратимых процессах.

В случае необратимых процессов часть работы внешних сил идет на внутренний разогрев, и работу внешних сил можно разбить на обратимую и необратимую части:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^n + T \delta s'. \quad (16)$$

Здесь мы учли, что упругие деформации по самой своей природе являются обратимыми, поэтому их приращения записали через полный дифференциал. Напряжения на упругом и неупругом элементах среды считаем одинаковыми (тело Максвелла). Для дислокаций это условие выполняется [16], а будет ли оно выполняться для других типов дефектов, вопрос остается пока открытым. По-видимому, в некоторых случаях необходимо предусматривать возможность соединения элементов среды в соответствии с моделью Фогта или привлекать более сложные аналоги из механики.

Необратимая часть работы внешних напряжений (второе слагаемое в (16)) идет на образование объектов с избыточной потенциальной энергией – фононов, микротрещин, границ зерен и т.д., которые и определяют каналы диссипации энергии. При наличии только теплового канала диссипации вся необратимая часть работы превращается в тепло, поэтому следует положить

$$\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^n \equiv T \delta s'', \quad (17)$$

где $\delta s''$ – дополнительное производство энтропии за счет внутренних процессов.

Суммируя производство энтропии от внешних и внутренних источников, получим термодинамическое тождество, которое объединяет первый и второй законы термодинамики для простых тел:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T\delta s' + T\delta s'' = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds. \quad (18)$$

Здесь полагаем, что дополнительная теплота, возникшая за счет внутренних источников, успела прийти в равновесное состояние, поэтому для обоих тепловых вкладов используем одну и ту же равновесную температуру. Кроме того, каждая по отдельности энтропия от внешних и внутренних источников не определяет состояние среды, поэтому их приращения записываем через δ -символы. Поскольку же память о происхождении энтропии в тепловом равновесии утеряна и полная энтропия в равновесном состоянии по своей сути однозначно определяет состояние системы, для записи ее приращения используем знак полного дифференциала.

Следует отметить, что в соотношениях (14)–(18) для описания, по сути, сильнонеравновесных процессов используется равновесное определение температуры. Это объясняется тем, что сильная неравновесность здесь связывается со структурными переходами, в то время как чисто тепловые процессы полагаются либо равновесными, либо слабонеравновесными в смысле стандартной концепции локально-равновесного состояния.

Обычное термодинамическое неравенство, объединяющее первый и второй законы термодинамики, получим, если к тождеству (18) еще раз прибавим необратимую часть работы внешних сил, которая фактически уже учтена в тепловом слагаемом:

$$du \leq \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + Tds. \quad (19)$$

Если же не вся теплота, возникшая за счет внутренних источников, успела прийти в равновесное состояние, то часть ее будет присутствовать в системе в неравновесной форме, например в форме неравновесных фононов. Мы не имеем права для этой части использовать равновесную температуру в качестве множителя, гарантирующего выполнение закона сохранения энергии по всей системе. Поэтому для неравновесной части теплового движения введем дополнительное слагаемое, так что соотношение (21) примет вид

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \tilde{T} \delta \tilde{s}. \quad (20)$$

Последнее слагаемое здесь записано для того, чтобы соблюсти общий энергетический баланс, так как во внутреннюю энергию вносят вклад все виды внутреннего движения независимо от того, в какой форме (равновесной или неравновесной) они пребывают. Неравновесная температура \tilde{T} определяется из тех соображений, чтобы выполнялся общий энергетический баланс в системе. Неравновесная энтропия \tilde{s} вводится феноменологически.

Неравновесная теплота может присутствовать в системе либо в форме тепловых флуктуаций, либо в виде неравновесных фононов, возникающих в результате

рождения и движения дефектов. В первом случае эта величина мала, и для больших систем ею можно пренебречь. Во втором случае она присутствует как промежуточный продукт релаксации. В результате производства и движения дефектов при интенсивном внешнем воздействии она постоянно генерируется равномерно во всем объеме, но вследствие нелинейного рассеяния на равновесных тепловых фонах и на неоднородностях решетки их энергия постоянно перекачивается в равновесную тепловую подсистему [11].

По этой причине неравновесная теплота, в отличие от равновесной, не может накапливаться в системе, и по величине она всегда значительно меньше равновесной. Однако полностью ею пренебречь нельзя, ибо эта «промежуточная субстанция» и определяет сущность релаксационного процесса. Кроме того, в отличие от тепловых флуктуаций ее плотность не зависит от размеров системы, а определяется только интенсивностью генерации дефектов, которая, в свою очередь, зависит от интенсивности внешнего воздействия.

Таким образом, термодинамическое неравенство в форме (19), объединяющее первый и второй законы термодинамики, является всего лишь ущербным выражением общего термодинамического тождества (18). Неравенство получается потому, что в (19) учитываются полная работа, произведенная над системой, и полная теплота, полученная от внешних тел и произведенная внутри системы, и не учитывается преобразование энергии (17) на внутренних степенях свободы (каналы диссипации энергии).

В то же время следует понимать, что термодинамическое тождество (18) является идеализированным, или модельным. Поскольку в реальном случае нет систем только с одним (тепловым) каналом диссипации, остальные каналы диссипации нарушат равенство (18), и его все равно придется записать в форме неравенства

$$du \leq \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds, \quad (21)$$

но в отличие от общего неравенства (19) оно будет значительно более ослабленным.

Если же необратимая работа идет не только на разогрев, но и на создание других высокоэнергетических объектов в объеме твердого тела типа различного рода структурных дефектов (например, дополнительных границ при интенсивной пластической деформации), то для частного случая учета только одного типа дефекта тождество (17) следует переписать в виде [2]:

$$\sigma_{ij} \delta\varepsilon_{ij}^n \equiv T\delta s^n + \varphi \delta h, \quad (22)$$

где φ и h – сопряженная пара термодинамических переменных, которая характеризует дефектность материала, – соответственно средняя энергия дефекта и его плотность. Сравнивая слагаемые в правой части (22), переменную φ можно ассоциировать с некоторой статической температурой, отличной от обычной тепловой температуры T , имеющей динамическую природу, а переменную h – со статической энтропией. В итоге термодинамическое тождество для тела с одним видом

дефектов будет иметь вид

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \tilde{T}\delta\tilde{s} + \varphi\delta h \quad (23)$$

или в пренебрежении неравновесной теплотой

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \varphi\delta h . \quad (24)$$

Эти записи выражают объединенный закон, сочетающий первый и второй законы термодинамики, в форме равенства. По сути же это приближенное соотношение, поскольку учитывает не все возможные каналы диссипации, а только некоторые основные. В отличие от него классическое выражение (19) устанавливает абсолютно точную границу между обратимыми и необратимыми процессами, но оно ничего не говорит об их соотношении и в этом контексте по самой сути неравенства является еще более приближенным. Наоборот, тождества (23) и (24) такое соотношение устанавливают и при правильном выборе основных каналов диссипации могут быть достаточно точными. С учетом остальных, слабых по определению каналов диссипации соотношение (24) по аналогии с (21) следует переписать в форме слабого неравенства

$$du \leq \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \varphi\delta h . \quad (25)$$

Итак, приращения равновесных термодинамических переменных ε_{ij}^e и s в (23) и (24) выражаются через полные дифференциалы, а сопряженные с ними дуальные переменные σ_{ij} и T вычисляются путем простого дифференцирования внутренней энергии:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{ij}^e}, \quad T = \frac{\partial u}{\partial s}, \quad (26)$$

т.е. фактически по формулам равновесной термодинамики и, следовательно, в соответствии с принципом локального равновесия.

Приращения же неравновесных переменных \tilde{s} и h не выражаются через полные дифференциалы, а сопряженные с ними дуальные переменные \tilde{T} и φ не могут быть напрямую вычислены путем дифференцирования внутренней энергии, и для них необходимо искать свои собственные соотношения и уравнения.

В качестве таких уравнений мы можем использовать эволюционные уравнения типа Ландау–Халатникова, но записанные в терминах внутренней энергии:

$$\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} = \gamma_{\tilde{s}} \left(\frac{\partial u}{\partial \tilde{s}} - \tilde{T}_s \right) = \gamma_{\tilde{s}} (\tilde{T} - \tilde{T}_s), \quad (27)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma_h \left(\frac{\partial u}{\partial h} - \varphi_s \right) = \gamma_h (\varphi - \varphi_s). \quad (28)$$

Здесь производные от внутренней энергии по неравновесным переменным суть

обобщенные термодинамические силы, а \tilde{T}_s и φ_s – их значения в стационарном состоянии. Термодинамические силы совпадают с текущими значениями дуальных термодинамических переменных, которые входят в термодинамическое «тождество» (28):

$$\tilde{T} = \frac{\partial u}{\partial \tilde{s}}, \quad \varphi = \frac{\partial u}{\partial h}. \quad (29)$$

Переменную \tilde{T} можно понимать как неравновесную температуру, способную в отличие от равновесной принимать и положительные, и отрицательные значения. Переменную φ можно понимать как неравновесную энергию дефекта, которая также способна принимать и положительные, и отрицательные значения, но в стационарных состояниях должна быть только положительной (наблюдаемой) величиной.

4. Концепция основного локально-неравновесного состояния

Концепция локально-равновесного состояния применима для слабонеравновесных термодинамических процессов. В этом случае основное термодинамическое соотношение (1) представляет собой равенство. В случае неравновесных процессов оно приобретает форму неравенства. Существует большое количество попыток придать ему вид равенства путем формального прибавления к нему некоторых дополнительных слагаемых [17–19]. Ранее такие попытки предпринимались в работах [17,20] в рамках термокинетики и энергодинамики, в [19] – в теориях разрушения горных пород, а также в [21] – в рамках неравновесной термодинамики и стохастичности. Нами эта процедура была реализована посредством явного учета каналов диссипации, связанных с генерацией структурных дефектов.

На примере твердых тел с вакансиями можно показать, что соотношения типа (29) выбираются не произвольно, как здесь, а естественно следуют из процедуры поиска наиболее вероятного состояния [22]. Это дает право заменить в соотношении (23) приращения неравновесных переменных их полными дифференциалами:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T ds + \tilde{T} d\tilde{s} + \varphi dh. \quad (30)$$

Но тогда внутренняя энергия будет однозначной функцией всех своих аргументов

$$u = u(\varepsilon_{ij}^e, s, \tilde{s}, h), \quad (31)$$

т.е. в формальном смысле все переменные, определяющие термодинамическое состояние системы, будут равноправными.

Таким образом, в случае необратимых процессов состояние системы, выраженное только в равновесных переменных ε_{ij}^e и s , является неоднозначной функцией этих переменных. Однако расширенное за счет введения неравновесных переменных состояния \tilde{s} и h оно становится однозначной функцией всех своих аргументов.

Соотношение (30) есть обобщение уравнения Гиббса на случай неравновесных процессов генерации дефектов в твердых телах. Причем в классике такое соотношение носит форму неравенства (см. [7, с. 77]), но явный учет основных каналов дисси-

пации энергии позволил снизить степень неопределенности и записать это соотношение в форме равенства или уравнения. При этом параллельно с достаточно сильно неравновесными процессами в твердом теле (например, генерацией структурных дефектов) могут протекать и слаборавновесные процессы, такие, например, как вязкое движение структурных дефектов. Эффект возрастания энтропии за счет этих слаборавновесных процессов можно доучесть, уже исходя из принципов локального неравновесного состояния, описываемого уравнением (30). В этом случае аналогично тому, как это делается для локально-равновесных состояний, данное уравнение необходимо разрешить относительно энтропии

$$ds = \frac{1}{T} du - \frac{\sigma_{ij}}{T} d\varepsilon_{ij}^e - \frac{\tilde{T}}{T} d\tilde{s} - \frac{\varphi}{T} dh, \quad (32)$$

и выражение для производства энтропии обобщить в виде

$$\sigma = \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T} \frac{du}{dt} - \frac{\sigma_{ij}}{T} \frac{d\varepsilon_{ij}^e}{dt} - \frac{\tilde{T}}{T} \frac{d\tilde{s}}{dt} - \frac{\varphi}{T} \frac{dh}{dt}. \quad (33)$$

Отсюда, зная эволюцию каждого из параметров u , ε_{ij}^e , \tilde{s} и h , можно найти дополнительное производство энтропии. Последнее соотношение можно легко обобщить на случай большего количества типов структурных дефектов.

Полагая, что при интенсивной пластической деформации производство дефектов является основным, слагаемое с производством неравновесной теплоты можно опустить:

$$\sigma = \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T} \frac{du}{dt} - \frac{\sigma_{ij}}{T} \frac{d\varepsilon_{ij}^e}{dt} - \frac{\varphi}{T} \frac{dh}{dt}. \quad (34)$$

Выводы

Предложена концепция основного локально-неравновесного состояния, которая позволяет развивать технику теории самоорганизации на случаи сильнонеравновесных процессов. В рамках этой концепции предложено дифференциальное соотношение, описывающее производство энтропии и позволяющее выразить его интенсивность через вклады от интенсивностей работы упругих сил и генерацию дефектов.

В заключение отметим, что предложенный подход является перспективным для разработки большого количества частных моделей, например для описания процессов проскальзывания в смазках [23] или для моделирования процессов фрагментации, протекающих в металлах при интенсивной пластической деформации [24,25].

1. Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов, ФТВД 7, №3, 58 (1997).
2. Л.С. Метлов, МФиНТ 29, 335 (2007).
3. L.S. Metlov, e-print <http://arxiv.org/abs/1312.3602>
4. Л.С. Метлов, Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения, Ноу-

- лидж, Донецк (2014).
5. *L.S. Metlov*, Phys. Rev. **E90**, 022124 (2014).
 6. *В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский*, Кинетическая природа прочности твердых тел, Наука, Москва (1974).
 7. *И.П. Базаров*, Термодинамика, Высшая школа, Москва (1991).
 8. *F.J. Perez-Reche, L. Truskinovsky, G. Zanzotto*, Phys. Rev. Lett. **99**, 075501 (2007).
 9. *Ю.Г. Рудой, А.Д. Суханов*, УФН **170**, 1265 (2000).
 10. *Дж.В. Гиббс*, Основные принципы статистической механики, ОГИЗ, Москва–Ленинград (1946).
 11. *L.S. Metlov*, Phys. Rev. **E81**, 051121 (2010).
 12. *П. Гленсдорф, И. Пригожин*, Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций, Мир, Москва (1973).
 13. *L. Onsager*, Phys. Rev. **37**, 405 (1931).
 14. *L. Onsager*, Phys. Rev. **38**, 2265 (1931).
 15. *I. Prigogine*, Etude thermodynamique des phenomenes irreversibles, Desoer, Liege (1947).
 16. *Л.И. Седов*, Механика сплошной среды, Том 2, Наука, Москва (1970).
 17. *В.А. Эткин*, Термокинетика (термодинамика неравновесных процессов переноса и преобразования энергии), Тольятти (1999).
 18. *В.А. Эткин*, К решению проблем термодинамических неравенств, viXra:1205.0053 от 13.05.2011.
 19. *P. Van*, Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics **26**, № 2, 167 (2001).
 20. *В.А. Эткин*, Энергодинамика (синтез теорий переноса и преобразования энергии), Наука, СПб (2008).
 21. *W. Muschik*, e-print <https://arxiv.org/abs/1603.02135v1>.
 22. *L.S. Metlov*, Phys. Rev. Lett. **106**, 165506 (2011).
 23. *I.A. Lyashenko, A.V. Khomenko, L.S. Metlov*, Tribology International **44**, 476 (2011).
 24. *A.V. Khomenko, D.S. Troshchenko, D.V. Boyko, M.V. Zaharov*, Journal of Nano- and Electronic Physics **7**, 01039 (2015).
 25. *A.V. Khomenko, D.S. Troshchenko, L.S. Metlov*, Condensed Matter Physics **18**, 33004 (2015).

L.S. Metlov

CONCEPT OF THE GROUND LOCAL NON-EQUILIBRIUM STATE

By taking into account the main channels of energy dissipation by the intrinsic degrees of freedom during the generation of structural defects under severe external actions, a concept of the local equilibrium state is generalized in the case of non-equilibrium systems and the processes in the form of a ground local non-equilibrium state. A technique for the calculation of entropy increment is proposed for this case.

Keywords: Gibbs relation, non-equilibrium state, structural defects, thermodynamic fluxes, thermodynamic forces