УДК 530.1 (075.8)

В. М. СОМСИКОВ, А. Б. АНДРЕЕВ

(ДТОО «Институт ионосферы» АО «Национальный центр космических исследований и технологий», г. Алматы)

О ПРИБЛИЖЕНИИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

Аннотация. На примере задачи о движении системы потенциально взаимодействующих материальных точек в неоднородном поле сил изучается переход от дискретного описания систем к термодинамическому описанию. Рассмотрено изменение внутренней энергии системы при движении системы в неоднородном поле сил в зависимости от числа элементов системы. Показано, как меняется амплитуда флуктуаций энергетических параметров систем, выполнены оценки динамиче-ской энтропии. Получено два критических числа задачи. Первое число определяет переход системы к необратимой динамике, а второе число определяет переход к термодинамическому описанию. Показано соответствие результатов расчета теоретическим основам динамики систем.

Ключевые слова: нелинейность, классическая механика, энергия, термодинамика, форма-лизмы Лагранжа, неголономные связи, необратимость.

Тірек сөздер: бейсызықтық, классикалық механика, энергия, термодинамика, Лагранж формализмдері, голономдық емес байланыстар, қайтымсыздық.

Keywords: nonlinearity, classical mechanics, energy, thermodynamics, Lagrange formalism, nonho-lonomic constraints, irreversibility.

Введение. В настоящее время нет достаточно ясных критериев применимости термодинамического описания, эргодических теорем, статистических методов для изучения неравновесных систем. Нет строгих критериев перехода к физике сплошных сред через полное механическое описание. Основная трудность на пути обоснования эмпирических законов термодинамики связана с тем, что до последнего времени в рамках законов классической механики не существовало объяснения необратимости [1-3].

Анализ огромного числа попыток найти объяснение второго закона термодинамики строго на основе законов классической механики наталкивает на мысль [4,5], что решение этой проблемы в рамках существующих формализмов классической механики отсутствует. Это означает, либо то, что в классической механике в принципе нет ему объяснения, либо то, что формализмы классической механики требуют снятия ограничений, при которых они строились. Оказалось, что если снять некоторые ограничения формализмов классической механики, то в рамках законов Ньютона появляется возможность предложить объяснение необратимости [4-6]. Оно было найдено в результате построения механики структурированных частиц (СЧ). Согласно уравнению движения СЧ, нарушение симметрии и времени должна наблюдаться при движении СЧ в неоднородном пространстве [7]. Величина изменения внутренней энергии СЧ пропорциональна величине градиентов сил внешнего поля. Внутренняя энергия СЧ не может трансформироваться в энергию ее движения. В этом суть природы детерминированной необратимости. Наличие детерминированной необратимости позволило предложить понятие детерминированной энтропии, определяемой отношением приращения внутренней энергии системы к ее величине [5].

Уравнение движения СЧ нелинейно. Поэтому его аналитические расчеты практически невозможны. В связи с этим на сегодня остается единственная возможность выполнить численные эксперименты по анализу этих теоретических результатов.

Цель работы: путем численного моделирования провести исследования уравнения движения систем потенциально взаимодействующих МТ в неоднородном поле внешних сил. Для этого будут поведены расчеты величины флуктуаций внутренней энергии системы в зависимости от начальных данных и параметров барьера, исследована область применения детерминированной энтропии, изучена зависимость изменения внутренней энергии от ширины барьера. Это поможет определить, как можно обосновать эмпирические разделы физики в рамках классической механики.

Постановка задачи. Для решения задачи бралась система потенциально взаимодействующих МТ. В качестве начальных значений задавалась ее внутренняя энергия, энергия движения центра масс (ЦМ). Распределение МТ в системе задавалось случайным образом. Рассчитывались изменения ее параметров при прохождении потенциального барьера. Задача решалась в дуальной системе координат. То есть в системе координат, в которой независимыми переменными являются микро и макропеременные [5]. Микропеременные определяют движение каждой МТ относительно ЦМ системы, а макропеременные определяют движение ЦМ относительно барьера. Рассчитывались изменения внутренней энергии системы, энергии движения, динамическая энтропия и другие параметры задачи в зависимости от количества МТ, высоты и ширины барьера, начальных условий. Полученные результаты численного моделирования сопоставлялись со статистическими законами и с выводами, полученными на основе уравнения движения СЧ [4-7]. За основу бралось следующее уравнение движения СЧ [4]:

$$M_N \overline{V}_N = -\vec{F}^{env} - (\Phi^{env} + \dot{E}_N^{ins})\vec{V}_N / V_N^2, \tag{1}$$

Здесь $\vec{V}_N = \overline{R}_N = (1/N)\sum_{i=1}^{N} \dot{\vec{r}}_i$ -скорость ЦМ $i = 1,2,3...N$ -номера МТ, $M_N = N_M$; $F^{env} = \sum F_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$, $\dot{E}_N^{ins} = \sum_{i=1}^{N} \tilde{v}_i (m\dot{\tilde{v}}_i + F(\tilde{r}_i)_i)$ – изменение внутренней энергии системы,

$\Phi^{env} = \sum \tilde{v}_i F_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$, $\vec{F}_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$ - сила, действующая на i-ую МТ, со стороны внешнего поля, $r_i = R_N + \tilde{r}_i$, $\tilde{r}_i$ – координаты МТ относительно ЦМ.

Силы взаимодействия МТ $F_i(\tilde{r}_{ij})$ задавались законом Гука. Внешние силы задавались в виде одного периода косинусоиды: $U(x_i) = U_b(\cos(2\pi(x_i - R_b)/a) + 1)$, при условии. $(\mathrm{R}_b - a/2) < x_i < (\mathrm{R}_b + a/2)$ Силы, действующие на каждую из МТ, определяются выражением:

$$F_i(x_i) = U_b sin(2\pi(x_i - R_b)\ /a) \tag{2}$$

где U_b – высота барьера; R_b – положение экстремума барьера; a – ширина барьера; x_i – расстояние от i – номер соответствующей МТ. Согласно (2), сила пропорциональна высоте барьера и обратно пропорциональна его ширине.

Чтобы определить характер изменений энергии движения и внутренней энергии системы в зависимости от количества МТ и начальных значений энергий, расчеты прохождения барьера выполнялись для различных начальных распределений МТ.

Изменения внутренней энергии в зависимости от начальных данных и числа МТ. Для консервативных неравновесных систем, представленных совокупность СЧ, со временем должно наблюдаться увеличение внутренней энергии СЧ за счет их энергии относительного движения [3-5]. К этому выводу можно прийти также и из статистических законов [7]. Важным является вопрос, для какого количества МТ систему можно считать равновесной. В качестве критерия равновесности системы возьмем число МТ, при котором внутренняя энергия системы способна только увеличиваться. Очевидно, что этот критерий, помимо зависимости от числа МТ, будет зависеть от относительных величин внутренней энергии, энергии движения системы, высоты потенциального барьера. Чтобы изучить поведение этого критерия в зависимости от параметров задачи, нами, прежде всего, выполнялись расчеты изменения внутренней энергии системы для различных значений энергий и в зависимости от числа МТ.

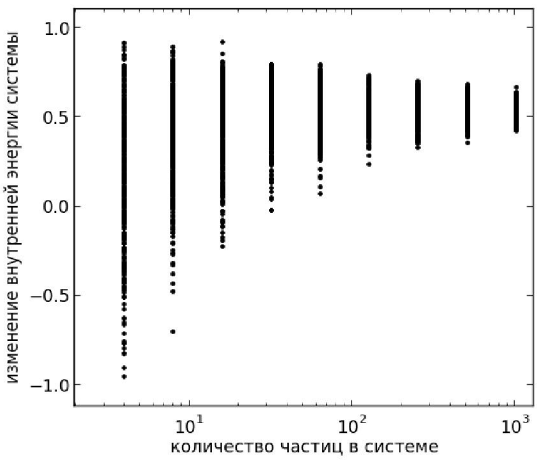

Рисунок 1 – Поведение величины флуктуации внутренней энергии системы в зависимости от числа МТ

На рисунке представлены результаты 400 экспериментов для каждого числа МТ в системе. Количество МТ соответствует степени двойки (4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024). Макропараметры начальных условий постоянные: Масса системы=1(кг), масса каждой МТ=1/N, кинетическая энергия ЦМ системы Es=150 (Дж), вектор скорости системы направлен вдоль координатной оси X, потенциальный барьер расположен с плоскости YZ и имеет ширину вдоль оси X равную a=0.2 (м), высота барьера Eb=130(Дж), внутренняя энергия системы E_0^{ins} =100 (Дж), коэффициент жёсткости связей Uo=300000(Н/м). Микропараметры начальных условий — координаты и скорости частиц задаются в каждом эксперименте случайным образом. Каждая точка на рисунке соответствует отношению величины изменения внутренней энергии системы к начальной кинетической энергии системы ($\Delta E^{ins} / E_0^{ins}$).

Из рис.1 видно, что при $N = 64$ изменение внутренней энергии могут быть только положительными. Т.е. ни один из проведенных численных экспериментов не дал отрицательного значения изменения внутренней энергии. Это означает, что для данных параметров задачи при $N \geq 64$ динамика системы необратима. Такой вывод следует из того, что критерием необратимости является невозможность трансформации внутренней энергии в ее энергию движения. Это число зависит от параметров задачи, например, от ширины барьера. Его назовем **первым** критическим числом.

Область применимости детерминированной энтропии. Внутренняя энергия равно-весной системы не может переходить в энергию движения из-за закона сохранения импульса. Это означает необратимость системы. Необратимость трансформации энергии движения во внутреннюю энергию свидетельствует о возможности перейти от уравнения движения СЧ к первому закону термодинамики [6]. Это позволило ввести в механику понятие детерминированной энтропии (она названа детерминированной, поскольку следует из законов Ньютона). По аналогии с энтропией Клаузиуса [8], такая энтропия определяется как отношение приращения внутренней энергии СЧ к ее величине. Тогда приращение энтропии неравновесной системы, которая в приближении локального термодинамического равновесия может быть представлена совокупностью СЧ, пропорционально энергии относитель-ных движений СЧ, трансформирующейся в их внутрен-нюю энергию. В этом случае изменение энтропии определяется формулой [5]:

$$\Delta S^d = \sum_{L=1}^{R} \left\{ N_L \sum_{k=1}^{N_L} [\int \sum_s F_{ks}^L v_k dt] / E_L \right\} \tag{5}$$

E_L – внутренняя энергия L – СЧ; N_L – число частиц в L-СЧ; L=1,2,3… R – количество СЧ; S – внешние МТ, взаимодействующие с k-й МТ L – СЧ; F_{ks}^L – сила, действующая на k-ю МТ СЧ со стороны S-ой МТ другой СЧ; v_k – скорость k-й МТ.

В нашем случае $L = 1$. Тогда формула (5) для изменения энтропии после прохождения барьера, определяемой формулой: $\Delta S^d = \Delta E^{ins} / E_0^{ins}$.

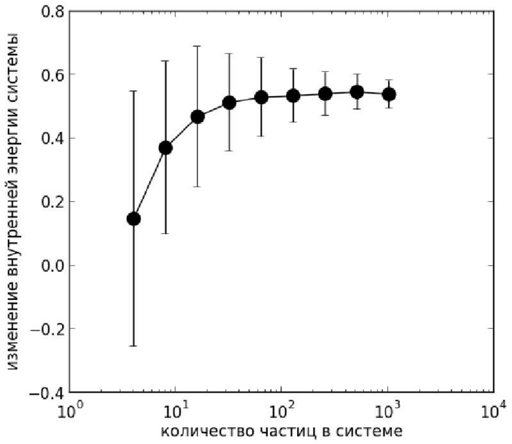

Рис. 2. Зависимость изменения относительной величины внутренней энергии от числа МТ

На рис. 2 представлены средние значения изменения внутренней энергии системы ΔE^{ins}, поделённые на начальную кинетическую энергию ЦМ системы, равную 100 Дж. Показаны доверительные интервалы этой величины. Они рассчитаны как среднеквадратическое отклонение величины, умноженное на коэффициент Стьюдента = 2.6, соответствующий доверительному уровню 0.99, для данного числа экспериментов (400 экспериментов). Эти величины с точностью до постоянного множителя представляют собой изменение энтропии ΔS^d. Согласно расчетам, эта величины становится положительной с вероятность 0,99 уже при значениях $N \geq 8$.

С ростом числа МТ флуктуация ΔS^d стремится к нулю, и уже при $N \geq 10^3$ она становится примерно равной 0.1 от абсолютного значения величины ΔS^d. При $N \geq 10^3$ дальнейшее увеличение числа МТ не приводит к увеличению внутренней энергии. Предельное значение равно $\Delta S^d = \Delta E^{ins} / E_0^{ins}$ ~0,55. Дальнейшее увеличение числа МТ не влияет на изменение динамических параметров системы. Поэтому число МТ $N = 10^3$ логично считать **вторым** числом перехода к термодинамическому описанию для данной задачи.

Зависимость изменения внутренней энергии от ширины барьера. Изменение внутренней энергии ΔE^{ins} нелинейно зависит от микро и макропеременных [5]. Величина ΔE^{ins} пропорционально разности сил, действующих на различные области системы. Проверка этого вывода осуществлялась путем расчетов зависимости ΔE^{ins} от ширины барьера. Согласно расчетам наблюдается степенное уменьшение эффективности трансформации энергии движения во внутреннюю энергию с ростом ширины барьера, т.е. с уменьшением градиента неоднородности силы. Этот вывод также следует из уравнения (1), если разложить по малому параметру внешнюю силу [5].

Заключение. Показано, что при прохождении потенциального барьера сохраняется сумма внутренней энергии и энергии движения. С ростом числа МТ наблюдается тенденция роста внутренней энергии, которая при $N \geq 10^3$ выходит на асимптотику.

Установлено минимальное число МТ, выше которого уменьшение внутренней энергии при прохождении барьера невозможно. Для наших расчетов это число равно $N \sim 10^2$. То есть при $N \geq 10^2$ динамика системы становится необратимой. Это число мы назвали первым критическим числом. Оно служит критерием возникновения необратимости и позволяет ввести понятие динамической энтропии S^d. Существует второе критическое число $N = 10^3$. При его увеличении рост ΔE^{ins} прекращается. В нашем случае ΔE^{ins} ~0,55. Так как дальнейшее увеличение числа МТ не изменяет коллективных параметров системы, то это число МТ названо вторым критическим числом перехода к термодинамическому описанию.

С уменьшением градиента внешних сил уменьшается увеличение внутренней энергии. Это подтверждает вывод о том, что изменение внутренней энергии пропорционально градиентам внешних сил [5].

Результаты свидетельствуют о необходимости описания динамики систем в соответствии с принципом дуализма энергии на основе уравнения движения СЧ.

Работа выполнялась по программе 101 «Грантовое финансирование научных исследований» в рамках темы «Развитие методов исследований неравновесной атмосферы».

ЛИТЕРАТУРА

1 Гинзбург В.Л. *Специальное заседание ред. Коллегии журнала УФН, приуроченное к 90 летию со дня рождения В.Л. Гинзбурга. УФН.* – **2007**. 177 (4). 345.

2 Пригожин И. *От существующего к возникающему. М. Наука.* **1980.**

3 Пуанкаре А. *Современное состояние математической физики и ее перспективы. УФН.* –Т.113. Вып. 4. – **1974**. – С. 663-677.

4 Somsikov V.M. *The restrictions of classical mechanics in the description of dynamics of nonequilibrium systems and the way to get rid of them. New Adv. in Physics.* – V 2. N 2. – September. – P. 125-140. – **2008.**

5 Somsikov V.M. *Nonequilibrium systems and mechanics of the structured particles. Elsever. Chaos and Complex system.* –

2013. – XV. – 581. – P. 31-40.

6 Somsikov V.M. *The equilibration of an hard-disks system. IJBC*. – **2004**. November. – V 14. – N 11. – P. 4027-4033.

7 Somsikov V.M. *Thermodynamics and classical mechanics, Journal of physics*: *Conference series*. 23. – **2005**. – P.7-16.

8 Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Статистическая физика*. – М. – **1976**. – 583 с. – Lanczos C. *The variation principles of mechanics. University of Toronto press*. – **1962**.

REFERENCES

1 Ginzburg V.L. *Spetsial'noe zasedanie red. Kollegii zhurnala UFN, priurochennoe k 90 letiiu so dnia rozhdeniia V.L. Ginzburga. UFN*. – **2007**. 177 (4). 345 (in Russ.).

2 Prigozhin I. *Ot sushchestvuiushchego k voznikaiushchemu. M. Nauka*. – **1980** (in Russ.).

3 Puankare A. *UFN*. T.113, vyp. 4 **1974**. s. 663-677 (in Russ.).

4 Somsikov V.M. *New Adv. in Physics*. – V. 2. – N 2. September. P. 125-140. – **2008**.

5 Somsikov V. M. Elsever. *Chaos and Complex system*. – **2013**. – XV, 581 – P. 31-40.

6 Somsikov V.M. *IJBC*. – **2004**. November. – V 14. – N 11. – P. 4027-4033.

7 Somsikov V.M. *Journal of physics: Conference series*. – 23. – **2005**. – P.7-16.

8 Landau L.D., Lifshits E.M. *Statisticheskaia fizika*. – M. – 1976. – 583 c. (in Russ.).

Резюме

В. М. Сомсиков, А. Б. Андреев

(«Ионосфера институты» ЕЖШС «Ұлттық ғарыштық зерттеулер
мен технологиялар орталығы» АҚ, Алматы қ-сы)

ЖАППАЙ ОРТАНЫҢ ЖАҚЫНДАУЫ ТУРАЛЫ

Біртекті емес күштер өрісінде потенциалды әрекеттесетін материалдық нүктелер жүйесінің қозғалысы туралы міндеттің мысалында жүйенің дискретті сипаттамадан термодинамикалық сипаттамаға өтуі зерттеледі. Жүйе элементтерінің санына байланысты біртекті емес күштер өрісінде жүйенің қозғалысында жүйенің ішкі қуаттың өзгерісі қаралған. Жүйелердің энергетикалық параметрлері флуктуацияларының амплитудасы өзгертілгені, динамикалық энтропияны бағалауы атқарылғаны көрсетілген. Міндеттің екі критикалық саны алынған. Бірінші сан жүйенің қайтымсыз динамикаға өтуін анықтайды, ал екінші сан термодинамикалық сипаттамаға өтуін анықтайды. Жүйелер динамикасының теориялық негіздеріне есеп нәтижелерінің сәйкестігі көрсетілген.

Тірек сөздер: сызық бейсызықтық, классикалық механика, энергия, термодинамика, Лагранж формализмдері, голономдық емес байланыстар, қайтымсыздық.

Summary

V. M. Somsikov, A. B. Andreev

(Institute of Ionosphere, National Center for Space Research
and Technology, Almaty)

ON THE CONTINUUM APPROACH

For the problem of motion of the system of potentially interacting material points in a nonuniform field of forces the transition from a discrete description of systems to the description in the continuum approach is studied. The change in the internal energy of the system when the system moves in nonuniform field of forces depending from the number of system elements is analyzed. How the amplitude of the fluctuations of the energy parameters of systems is shown. The estimates of the dynamic entropy are realized. The two critical numbers are obtained. The first number determines the transition to irreversible dynamics of the system, and the second number specifies the thermodynamic description.

Keywords: nonlinearity, classical mechanics, energy, thermodynamics, Lagrange formalism, nonho-lonomic constraints, irreversibility.

Поступила «____»_____________2014 г.