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]:

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

Здесь $\vec{V}_N = \bar{R}_N = (1/N)\sum_{i=1}^{N} \dot{\vec{r}}_i$ -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:

$$F_i(x_i) = U_b sin(2\pi(x_i - R_b)\ /a) \qquad (2)$$

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.

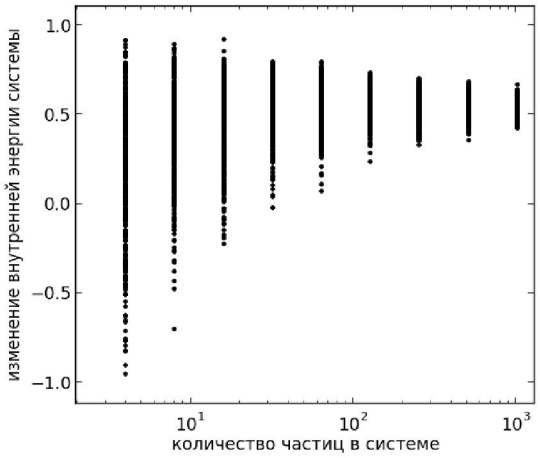

Рисунок 1 – Поведение величины флуктуации внутренней энергии системы в зависимости от числа МТ

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]:

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

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: $\Delta S^d = \Delta E^{ins} / E_0^{ins}$.

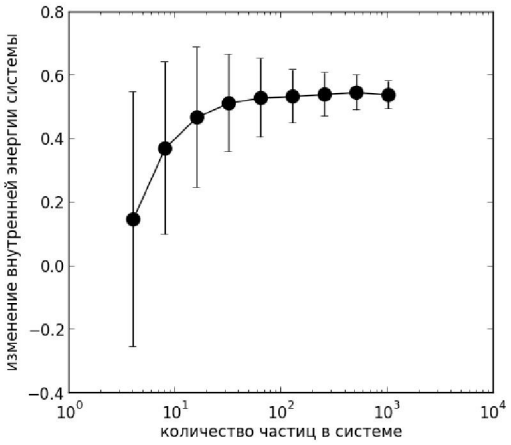

Рис. 2. Зависимость изменения относительной величины внутренней энергии от числа МТ

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