PACS: 02.10.De, 66.30.Ny

С.В. Терехов

О ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ПСЕВДОКВАТЕРНИОНОВ К ОПИСАНИЮ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Донецкий национальный технический университет
ул. Артема, 58, г. Донецк, 83000, Украина

Статья поступила в редакцию 16 января 2006 года

Проведено исследование применения псевдофункций пространственных комплексных переменных (псевдокватернионов) к проблеме описания кинетических процессов. Показано, что гипераналитичность псевдокватернионов приводит к уравнениям, которые аналогичны уравнениям неразрывности или дифференциальным уравнениям сохранения той или иной физической величины. Псевдокватернионная трактовка «работы» термодинамических сил требует введения новых кинетических функций, которые в линейной теории обращаются в нуль за счет соотношений, налагаемых на кинетические коэффициенты. Продемонстрировано существование двух термодинамических функций, отличающихся скалярными частями, которые могут быть использованы в качестве функций, описывающих возможные состояния неравновесной системы.

1. Введение

В середине XIX в. (1843 г.) Гамильтоном была предложена новая алгебра с некоммутативным произведением ее элементов. Произведения мнимых единиц i, j и k этой алгебры имеют вид:

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1\,;\; ij = -ji = k\,;\; jk = -kj = i\,;\; ki = -ik = j\,.$$

Алгебру Гамильтона попытался применить Максвелл для записи уравнений электромагнетизма, но полученные уравнения не были подтверждены экспериментом. Неудача Максвелла, который использовал кватернионы, а не пседокватернионы (как это было сделано в работе [1]), на целое столетие отодвинуло использование гиперкомплексного исчисления в физике. Начиная со второй половины XX в. оно вновь появляется в физических журналах и книгах (см., напр., [2–8]), что подчеркивает актуальность данной тематики. В связи с этим возникает необходимость исследовать возможность применения кватернионных (псевдокватернионных) функций для описания кинетических процессов. Одинаковый математический вид уравнения неразрывности для жидкости, уравнений диффузии и теплопроводности указывает на универсальный характер математического описания, который был выяснен при изучении вопроса о гипераналитичности псевдокватернионных функций [1], что подчеркивает несомненную научную значимость такого исследования.

2. Кватернионы и псевдокватернионы

Кватернион (гиперкомплексное число) получают из комплексного числа путем использования принципа удвоения комплексных единиц. Если дано комплексное число $z = x + iy$, то, полагая $x = x_0 + jx_2$ и $y = x_1 + jx_3$, получим кватернион [9]:

$$q = x_0 + ix_1 + jx_2 + kx_3\,, \tag{1}$$

где x_0 – числовая (скалярная, действительная), а $ix_1 + jx_2 + kx_3$ – векторная (мнимая, комплексная) части кватерниона. Над кватернионами можно выполнять все арифметические действия. Особый интерес представляет произведение мнимых частей двух разных кватернионов:

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} q_1 \operatorname{Im} q_2 = &-(x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3) + (x_2y_3 - x_3y_2)i + \\ &+(x_3y_1 - x_1y_3)j + (x_1y_2 - x_2y_1)k\,. \end{aligned}\tag{2}$$

Числовая часть этого выражения представляет собой скалярное произведение векторов $\mathbf{X} = (x_1; x_2; x_3)$ и $\mathbf{Y} = (y_1; y_2; y_3)$, т.е. $\mathbf{X}\cdot\mathbf{Y} = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3$, взятое со знаком минус. Мнимая часть кватерниона (2) представляет собой векторное произведение этих векторов $\mathbf{X}\times\mathbf{Y}$, причем ее модуль $|\mathbf{X}\times\mathbf{Y}| =$ $= |\mathbf{X}||\mathbf{Y}|\sin\varphi$, где φ – угол между данными векторами. Отсюда вытекает иная форма записи кватерниона:

$$q = q_0 + \beta\mathbf{q} \tag{3}$$

(β – мнимая единица, $\beta^2 = -1$; такая форма записи кватерниона называется алгебраической), причем перемножение мнимых частей приведенной гиперкомплексной структуры будет осуществляться с учетом (2) по правилу

$$\beta\mathbf{q}_1\beta\mathbf{q}_2 = -\mathbf{q}_1\cdot\mathbf{q}_2 + \beta[\mathbf{q}_1\times\mathbf{q}_2]. \tag{4}$$

Если ввести новую комплексную единицу α ($\alpha^2 = -1$), которая коммутирует с комплексной единицей β ($\alpha\beta = \beta\alpha$), и рассмотреть структуры вида

$$q = \alpha q_0 + \beta\mathbf{q}, \tag{5}$$

то получим многообразие псевдокватернионов. Псевдокватернионы отличаются от гиперкомплексных чисел возможностью комплексного сопряжения по двум комплексным единицам α и β. Как было показано в работе [1], физически значимыми являются псевдокватернионы, причем комплексное сопряжение надо проводить по мнимой единице α. Поскольку псевдокватернионы порождают псевдоевклидово пространство, рассмотрим условия гипераналитичности псевдокватернионных функций.

3. Гипераналитичность псевдокватернионных функций

Комплексная функция $f(z)=u(x,y)+iv(x,y)$ (функции $u(x,y)$, $v(x,y)$ $\in$ $\in$ $R(x,y)$, т.е. вещественны) будет аналитической [10,11] (регулярной, голоморфной [12]) в области D, если она удовлетворяет условиям Коши–Римана:

$$\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{\partial v}{\partial y};\quad \frac{\partial u}{\partial y}=-\frac{\partial v}{\partial x}. \tag{6}$$

Подействуем инфинитезимальным комплексным оператором $\Diamond=\frac{\partial}{\partial x}+i\frac{\partial}{\partial y}$ («тетра») на комплексную функцию $f(z)$, получим

$$\Diamond f(z)=\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{\partial v}{\partial y}+i\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right). \tag{7}$$

В силу условий (6) функция $f(z)$ удовлетворяет уравнению $\Diamond f(z) = 0$, следовательно, она аналитическая.

Так как кинетические процессы протекают в реальном евклидовом пространстве-времени, получим условия для псевдокватернионной функции $f(\tau,\mathbf{r}) = \alpha\phi(\tau,\mathbf{r}) + \beta\boldsymbol{\psi}(\tau,\mathbf{r})$ (t – время, $\mathbf{r}$ – радиус-вектор местоположения, величина $\tau = Ct$, C – скорость света) в некоторой области Γ, аналогичные соотношениям Коши–Римана.

Подействуем оператором $\Diamond=\alpha\frac{\partial}{\partial\tau}+\beta\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}$ на данную функцию и воспользуемся уравнением $\Diamond f = 0$. Тогда получим

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau}+\mathrm{div}\boldsymbol{\psi}=0, \tag{8}$$

$$\frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial\tau}+\mathrm{grad}\phi=0, \tag{9}$$

$$\mathrm{rot}\boldsymbol{\psi}=0 \tag{10}$$

(операции дивергенции (div), градиента (grad) и ротора (rot) стандартно определены в векторной алгебре [13]). Отметим, что условия регулярности не изменятся, если провести замены $\phi\to\phi+\frac{\partial q(\tau)}{\partial\tau}$ и $\boldsymbol{\psi}\to\boldsymbol{\psi}+\mathrm{grad}g(\mathbf{r})$, причем функции $q(\tau)$ и $g(\mathbf{r})$ должны удовлетворять уравнениям $\frac{\partial^2 q(\tau)}{\partial\tau^2}=0$ и $\Delta g(\mathbf{r}) = 0$. Эти уравнения определяют калибровочную инвариантность псевдогиперфункций. Из уравнения (10) следует, что функция $\boldsymbol{\psi} = \mathrm{grad}\sigma$. Вводя обозначение $\chi=\frac{\partial\sigma}{\partial\tau}+\phi$ и подставляя функцию $\phi=\chi-\frac{\partial\sigma}{\partial\tau}$ в уравнение (8), получаем $\dfrac{\partial\chi}{\partial\tau} - \quad \sigma = 0$ (здесь $\quad = \dfrac{\partial^2}{\partial\tau^2} - \Delta$ – оператор Даламбера), при этом $\chi(\mathbf{r},\tau)$ удовлетворяет уравнению $\mathrm{grad}\chi = 0$. Если вещественная функция $\sigma(\mathbf{r},\tau)$ удовлетворяет уравнению Даламбера $\quad \sigma = 0$, то регулярная гиперфункция определяется однозначно.

4. Псевдогиперфункции и физические законы

Преобразуем (8) к виду

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \mathrm{div}\left(\phi\frac{\mathbf{V}}{c}\right) = \mathrm{div}\left(\phi\frac{\mathbf{V}}{c} - \boldsymbol{\psi}\right) \tag{11}$$

или

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \mathrm{div}\mathbf{J}_\phi = \sigma_\phi, \tag{12}$$

где введены обозначения: $\mathbf{J}_\phi = \phi\dfrac{\mathbf{V}}{c}$ – поток величины $\phi(\tau,\mathbf{r})$; $\sigma_\phi = \mathrm{div}(J_\phi - \boldsymbol{\psi})$ – производство величины ϕ в области Γ за счет наличия «стоков» и «источников» (см., напр., [14, с. 20]). Если $\sigma_\phi = 0$ и среда несжимаема ($\mathrm{div}\mathbf{V} = 0$), то величина ϕ сохраняется. Таким образом, в общем случае уравнение (12) определяет уравнение баланса величины ϕ, а в частном ($\sigma_\phi = 0$) – дифференциальный закон сохранения скалярной составляющей псевдогиперфункции.

Следующее условие гипераналитичности (9) путем преобразования

$$\frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial\tau} + \left(\frac{\mathbf{V}}{c}\mathrm{grad}\right)\boldsymbol{\psi} = \left(\frac{\mathbf{V}}{c}\mathrm{grad}\right)\boldsymbol{\psi} - \mathrm{grad}\phi \tag{13}$$

сводится к виду

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\psi}}{\mathrm{d}\tau} = \left(\frac{\mathbf{V}}{c}\mathrm{grad}\right)\boldsymbol{\psi} - \mathrm{grad}\phi\,. \tag{14}$$

Формула (14) определяет закон изменения векторной функции $\boldsymbol{\psi}(\tau,\mathbf{r})$, т.е. закон движения величины, описываемой этой функцией. В частности, уравнение (14) в механике соответствует уравнению Ньютона [1]. Из формулы (10) следует, что векторное поле $\boldsymbol{\psi}$ является потенциальным (безвихревым) [13, с. 172], т.е. $\boldsymbol{\psi}(\tau,\mathbf{r}) = \mathrm{grad}\xi(\tau,\mathbf{r})$, где $\xi(\tau,\mathbf{r})$ – потенциал векторного поля $\boldsymbol{\psi}$.

Полученные условия регулярности псевдогиперфункций (8)–(10) применим для исследования кинетических процессов. Законы Фика для диффузии и Фурье для теплопроводности выполняются, если отсутствуют источники, т.е. согласно уравнению (12) векторная часть псевдокватернионной функции $\boldsymbol{\psi} = \mathbf{J}_\phi$ ($\mathbf{J}_\phi$ – поток величины ϕ), а согласно уравнению (13) термодинамическая сила, вызывающая поток величины ϕ, $\mathbf{X} = \dfrac{\partial\mathbf{J}_\phi}{\partial\tau} = -\nabla\phi$. Тогда согласно линейной теории Онсагера $\mathbf{J}_\phi = k\mathbf{X} = -k\nabla\phi$, где k – коэффициент пропорциональности. Если коэффициент k постоянен, то уравнение (10) выполняется автоматически, а (8) переходит в уравнение типа уравнения теплопроводности или диффузии в зависимости от физического наполнения скалярной части псевдокватерниона. Кроме того, из формул (8) и (9) следует, что скалярная часть псевдокватерниона φ удовлетворяет уравнению Даламбера

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial\tau^2} - \Delta\varphi = 0\,, \tag{15}$$

что указывает на возможность появления волн величины φ в неравновесных условиях. Следовательно, кинетические процессы могут быть описаны в рамках псевдокватернионного подхода.

5. Диссипативные системы Онсагера и Казимира

Преобразуем общее выражение для внутренней энергии многокомпонентной системы к виду

$$-\frac{U}{\theta} = \frac{PV_x}{\theta}\frac{V}{V_x} - \frac{ST_x}{\theta}\frac{T}{T_x} - \sum_{i=1}^{m}\frac{\mu_i}{\theta}N_i \tag{16}$$

(V_x и T_x – соответственно характерные объем и температура системы), который позволяет ввести безразмерные обобщенные скалярные силы ($x_1 = \frac{PV_x}{\theta}$, $x_2 = \frac{T_x}{T}$ и $x_{3i} = -\frac{\mu_i}{\theta}$) и координаты ($q_1 = \frac{V}{V_x}$, $q_2 = -\frac{ST}{T_x}$ и $q_{3i} = N_i$). Обобщенные координаты и силы термодинамической системы являются проекциями вектора состояния и вектора сил. Тогда формула (16), переписанная в виде

$$-\frac{U}{\theta} = x_1q_1 + x_2q_2 + \sum_{i=1}^{m} x_{3i}q_{3i}\,, \tag{17}$$

определяет «работу» термодинамических сил при статическом положении системы в термодинамическом пространстве.

Динамическое положение системы в термодинамическом гиперпространстве найдем следующим образом. Введем в рассмотрение псевдокватернион обобщенных координат $N_i(\tau,\mathbf{r}) = \alpha q_i(\tau,\mathbf{r}) + \beta\mathbf{J}_i(\tau,\mathbf{r})$ (здесь $q_i(\tau,\mathbf{r})$ – обобщенные термодинамические координаты, $\mathbf{J}_i(\tau,\mathbf{r})$ – поток величины $q_i(\tau,\mathbf{r})$), а силы определим псевдогиперфункцией $Q_i(\tau,\mathbf{r}) = \alpha x_i(\tau,\mathbf{r}) + \beta\mathbf{X}_i(\tau,\mathbf{r})$ (здесь $x_i(\tau,\mathbf{r})$ – скалярные составляющие силы, а $\mathbf{X}_i(\tau,\mathbf{r})$ – обобщенные векторные термодинамические силы). Тогда динамическое состояние системы может быть определено либо функцией $F_1 = \sum_i Q_iN_i^{+\alpha}$, либо $F_2 = \sum_i Q_iN_i$, которые задают положение в термодинамическом гиперпространстве двух различных диссипативных систем:

а) *диссипативная система Онсагера*. В этом случае функция состояния неравновесной системы имеет вид

$$F_1=\sum_i Q_i N_i^{+\alpha}=\sum_i\left(x_i q_i-\mathbf{X}_i\cdot\mathbf{J}_i+\alpha\beta\left(x_i\mathbf{J}_i-q_i\mathbf{X}_i\right)+\beta\left[\mathbf{X}_i\times\mathbf{J}_i\right]\right)=$$

$$=-\frac{U}{\theta}-\Phi+\alpha\beta\mathbf{W}+\beta\mathbf{M}\,, \tag{18}$$

здесь $\dfrac{U}{\theta}=-\sum\limits_i x_i q_i$ – функция состояния; $\Phi=\sum\limits_i \mathbf{X}_i\cdot\mathbf{J}_i$ – диссипативная функция, определяющая производство энтропии [15]; $\mathbf{W}=\sum\limits_i\left(x_i\mathbf{J}_i-q_i\mathbf{X}_i\right)$ – векторная функция движения; $\mathbf{M}=\sum\limits_i\left[\mathbf{X}_i\times\mathbf{J}_i\right]$ – векторная функция перемешивания. В линейном приближении обобщенные силы и потоки обобщенных координат связаны с соответствующими величинами соотношениями

$$q_i=\sum_j L_{ij}x_j\ \text{ и }\ \mathbf{J}_i=\sum_j L_{ij}\mathbf{X}_j\,. \tag{19}$$

Данные равенства определяют линейную теорию Онсагера и приводят к тому, что в случае коллинеарности термодинамических сил векторная функция перемешивания обращается в нуль, а векторная функция движения приводится к виду

$$\mathbf{W}=\sum_{i,j}\left(L_{ij}-L_{ji}\right)x_i\mathbf{X}_j\,. \tag{20}$$

При выполнении условий симметричности кинетических коэффициентов $L_{ij}=L_{ji}$ (соотношения взаимности Онсагера) функция $\mathbf{W}$ обращается в нуль. Таким образом, при указанных ограничениях динамическое состояние термодинамической системы описывается скалярной функцией $F_1=-\dfrac{U}{\theta}-\Phi$ или термодинамической функцией $F=U+\Phi\theta$, которую назовем функцией состояния Онсагера;

б) *диссипативная система Казимира*. Если состояние системы задается функцией

$$F_2=\sum_i Q_i N_i=\sum_i\left(-x_i q_i-\mathbf{X}_i\cdot\mathbf{J}_i+\alpha\beta(x_i\mathbf{J}_i+q_i\mathbf{X}_i)+\beta\left[\mathbf{X}_i\times\mathbf{J}_i\right]\right)=$$

$$=\frac{U}{\theta}-\Phi+\alpha\beta\mathbf{W}+\beta\mathbf{M}\,, \tag{21}$$

то в линейном приближении (19) состояние системы будет описываться скалярной функцией $F_2=\dfrac{U}{\theta}-\Phi$ или термодинамической функцией $F=U-\Phi\theta$ (назовем функцией состояния Казимира) при выполнении условий Казимира $L_{ij}=-L_{ji}$.

Объединяя два случая, можно утверждать, что динамическое состояние диссипативной системы можно описывать неравновесной термодинамической функцией $F = U \pm \Phi\theta$ (знак «+» соответствует системам Онсагера, а знак «–» – системам Казимира). Отметим также, что для изотропной системы потоки определяются только силами их природы согласно теореме Кюри (см., напр., [15, с. 131]), т.е. выполняется равенство $L_{ij} = L_j \delta_{ij}$. Анизотропная система будет описываться той же функцией F, если векторные функции движения **W** и перемешивания **M** равны нулю. Отсюда следует, что изотропная и анизотропная диссипативные системы могут находиться в одном и том же состоянии, если $\mathbf{W} = 0$ и $\mathbf{M} = 0$. Следовательно, необратимые процессы в системе Онсагера повышают энергию системы за счет диссипативной составляющей $\Phi\theta$. В связи с этим протекающие эволюционные процессы стремятся понизить энергию термодинамической системы до внутренней энергии за счет производства энтропии, в результате чего диссипативная функция стремится к нулю. Рассеивание энергии в системе Казимира понижает энергию системы. Таким образом, возможно возникновение таких устойчивых структур, когда функция рассеивания энергии $\Phi\theta$ совпадает с внутренней энергией системы.

6. Выводы

Продемонстрирована возможность применения теории кватернионов к исследованию кинетических процессов. Регулярность псевдогиперфункций с векторной частью вида $\boldsymbol{\psi} = \int \frac{\mathbf{J}_\phi}{k} d\tau$ приводит к кинетическим уравнениям, описывающим диффузию по Фику и теплопроводность по Фурье. В случае линейной связи между обобщенными термодинамическими координатами и силами можно классифицировать два вида диссипативных систем (Онсагера и Казимира), которые отличаются условиями симметрии кинетических коэффициентов и возникновением в случае систем Казимира необратимых структур, обладающих энергией меньшей, чем в исходном состоянии.

1. *С.В. Терехов*, Вісник Донецького університету. Серія А: Природничі науки № 2, 287 (2002).
2. *Е.А. Ермолаев*, ДАН БССР **23**, 804 (1979).
3. *J. Souček*, J. Phys. **A14**, 1629 (1981).
4. *Д.А. Лейтес*, Теоретическая и математическая физика **58**, 229 (1984).
5. *F.H.J. Cornish*, J. Phys. **A18**, 2191 (1984).
6. *I. Abonyi, J.F. Bito, J.K. Tar*, J. Phys. **A24**, 3245 (1991).
7. *J.D. Morgan*, J. Phys. **A35**, 3317 (2002).
8. *С.Н. Кирпичников, В.С. Новоселов*, Математические аспекты кинематики твердого тела, ЛГУ, Ленинград (1986).
9. *И.Л. Кантор, А.С. Солодовников*, Гиперкомплексные числа, Наука, Москва (1973).

10. *И.Г. Араманович, Г.Л. Лунц, Л.Э. Эльсгольц*, Функции комплексного переменного. Операционное исчисление. Теория устойчивости, Наука, Москва (1968).
11. *Е. Титчмарш*, Теория функций, Наука, Москва (1980).
12. *В.И. Смирнов*, Курс высшей математики, Т. 3, ч. 2, Наука, Москва (1974).
13. *А.И. Борисенко, И.Е. Тарапов*, Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Вища школа, Харьков (1986).
14. *К.П. Гуров*, Феноменологическая термодинамика необратимых процессов, Наука, Москва (1978).
15. *И. Дьярмати*, Неравновесная термодинамика, Мир, Москва (1974).

S.V. Terekhov

ON A POSSIBILITY OF APPLICATION OF PSEUDOQUATERNIONS TO THE DESCRIPTION OF KINETIC PROCESSES

Research of the application of pseudofunctions of spatial complex variables (pseudoquaternions) to the problem of description of kinetic processes has been conducted. It is shown that the hyperanalytical quality of pseudoquaternions results in equations similar to the continuity equations or differential conservation for one or another physical quantity. The pseudoquaternion interpretation of the «work» of thermodynamic forces requires the introduction of new kinetic functions. In the linear theory these functions go to zero due to the correlations imposed on kinetic coefficients. The existence of two thermodynamic functions differing in scalar parts, which can be used as the functions of the state of the nonequilibrium system, is shown.