

PACS: 62.20.F-, 62.20.fq, 62.30.+d, 81.40.Jj

С.В. Терехов¹, В.Н. Варюхин¹, Т.Н. Мельник¹,
А.Г. Петренко², В.М. Юрченко¹

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОСТИ. III. РЕАКЦИЯ СИСТЕМЫ. ВОЗНИКНОВЕНИЕ ИЕРАРХИЙ

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

²Донецкий национальный университет

Статья поступила в редакцию 1 июня 2017 года

Показано, что различные отклики неравновесной системы на внешнее воздействие можно смоделировать с помощью потенциалов термодинамических полей. Проведено сравнение экспериментальных и теоретических диаграмм напряжение–деформация для металлов и пластмасс. Предложена схема возникновения бесконечной и конечной иерархий необратимых процессов.

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

1. Введение: отклик неравновесной системы

Реакция неравновесной системы на внешнее воздействие проявляется в виде отклика, который можно отобразить с помощью потенциалов термодинамических полей [1,2]. Использование преобразований системы отсчета в Q -области расширенного пространства (обозначения и определения приведены в [1]), а также суммы указанных потенциалов позволяют смоделировать зависимость среднего (в силу того, что локальные области системы обладают отличающимися друг от друга параметрами, а процессы имеют противоборствующий характер) интенсивного потенциала от сопряженного независимого аргумента и управляющего внешнего параметра. Зависимости потенциала φ от обобщенной координаты q (рис. 1) имеют вид: резонансов (например, резонансное поглощение световой энергии валентными электронами структуры стекловолокна [3, рис. 3.23]); фрактального роста потенциала, характерного для вольт-амперных характеристик структур на сферических металлических кластерах [4; 5, рис. 2]; шумов со степенной зависимостью спектра мощности [6; 7, рис. 10.3], которые возникают в системах с различной физической природой; реакции упругопластического материала на деформацию [8; 9, рис. 1.1].

Разнообразие откликов неравновесной системы на внешнее воздействие демонстрирует универсальный характер потенциалов термодинамических по-

лей. Определенные соотношения между внешними управляющими параметрами модели позволяют, в частности, строить кривые зависимости приложенного напряжения σ от деформаций ξ [9,10] и скоростей их изменения $\dot{\xi}$. Следует отметить, что похожие между собой диаграммы напряженного состояния неравновесной системы возникают при разных способах деформирования материала, например при сдвиге и кручении [11], а также при реализации различных процессов на более низком уровне организации, в частности метастабильной системы. В данной работе термодинамическое состояние системы отображается с помощью феноменологической модели, для которой численные значения параметров взяты из экспериментальных данных.

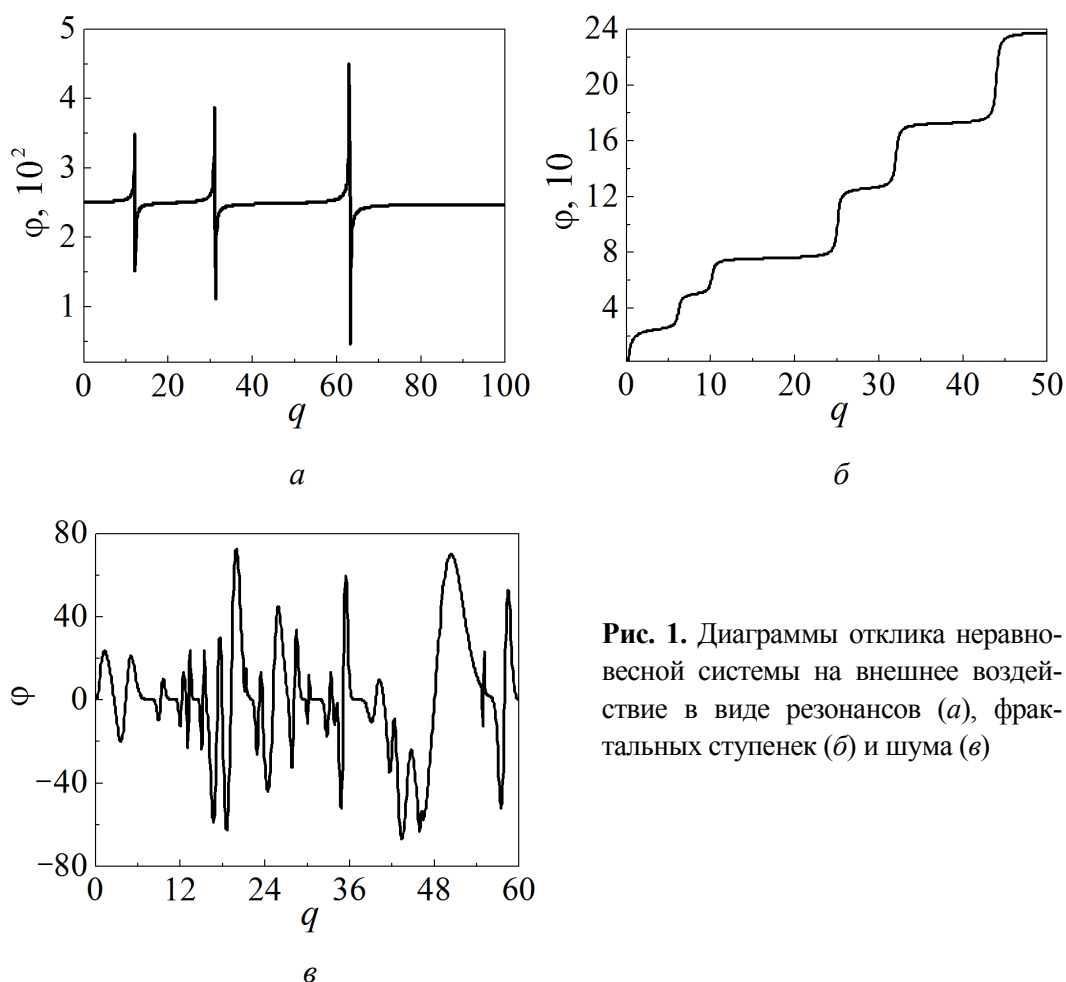


Рис. 1. Диаграммы отклика неравновесной системы на внешнее воздействие в виде резонансов (а), фрактальных ступенек (б) и шума (в)

2. Диаграммы механических состояний реальных материалов

Диаграммы состояния для кристаллов с дефектами различной размерности были получены авторами для термодинамического потенциала с учетом полей деформации (управляющий внешний параметр – поле напряжений). Теоретические аналоги экспериментальных диаграмм напряжение σ –деформация ϵ для алюминия (рис. 2, кривая 1) и стали 18Х2Н4МА (кривая 2) [12, с. 120] рассчитывали соответственно по формулам

$$\sigma(\xi) = 10 \operatorname{arctg}(0.01\xi) + 6 \operatorname{arctg}(0.2\xi),$$

$$\sigma(\xi) = 1.4\xi \exp(-0.02\xi^2) + 89 \operatorname{arctg}(1.9\xi) + \operatorname{arctg}(0.007\xi) + \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{88} \right)^2 \right].$$

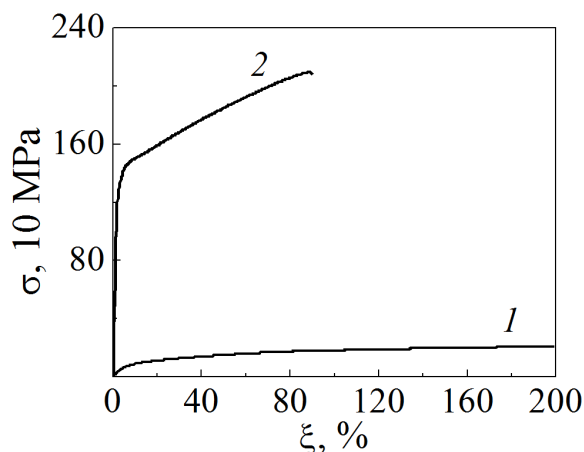
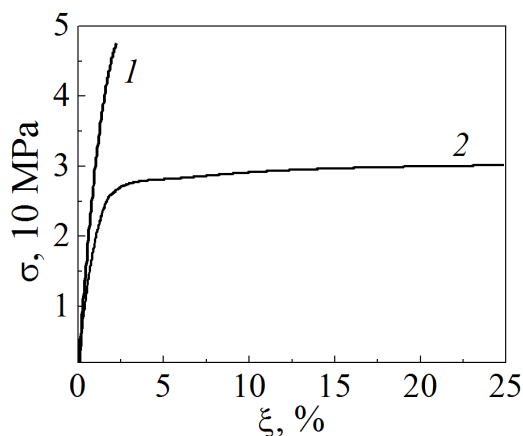


Рис. 2. Теоретические диаграммы напряжение σ –истинное удлинение ξ для алюминия (кривая 1) и стали 18X2H4MA (кривая 2)

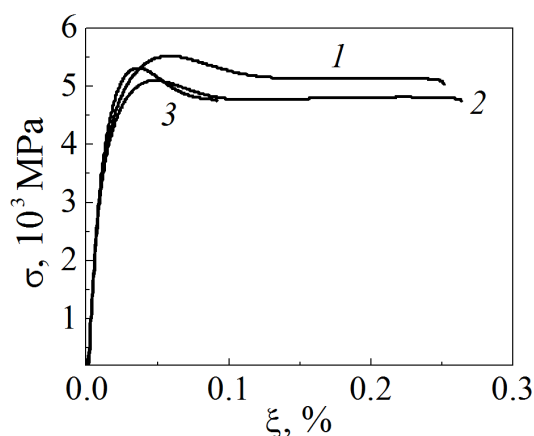
Теоретические формулы позволяют описывать диаграммы напряжение–деформация не только для металлов и сплавов, но и для других материалов, например пластмасс. На рис. 3,а показаны теоретические кривые для полистирола, экспериментальные данные для которых приведены в [13, с. 398]. Вычисления напряжений для полистирола (кривая 1) и ударопрочного полистирола (кривая 2) проводили соответственно по формулам

$$\sigma(\xi) = \xi \exp(-0.09\xi^2) + 3.3 \operatorname{arctg}(0.74\xi) + 0.01 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{2.2} \right)^2 \right],$$

$$\sigma(\xi) = 0.17\xi \exp(-0.09\xi^2) + 1.62 \operatorname{arctg}(0.74\xi) + 0.22 \operatorname{arctg}(24\xi).$$



а



б

Рис. 3. Теоретические диаграммы напряжение σ –деформация ξ : а – для полистирола (кривая 1) и ударопрочного полистирола (кривая 2); б – для пиралина: 1 – 0.007, 2 – 0, 3 – 0.042 [14, с. 86]

На рис. 3,б приведены теоретические зависимости напряжения от деформации для пиралина, которые рассчитывали по формулам (экспериментальные кривые см. в [14, с. 86]):

$$\begin{aligned}\sigma_1(\xi) &= 2560\xi \exp(-250\xi^2) + 332\operatorname{arctg}(145\xi) + 2.6 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{0.25} \right)^2 \right], \\ \sigma_2(\xi) &= 3300\xi \exp(-400\xi^2) + 320\operatorname{arctg}(145\xi) + 2 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{0.26} \right)^2 \right], \\ \sigma_3(\xi) &= 6300\xi \exp(-700\xi^2) + 325\operatorname{arctg}(145\xi) + 1.2 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{0.09} \right)^2 \right].\end{aligned}$$

Теоретические кривые соответствуют экспериментальным данным для конкретных образцов. Однако основным недостатком полученных выражений является отсутствие связи феноменологических коэффициентов с такими параметрами материалов, как, например, модуль Юнга, коэффициент всестороннего сжатия и другие константы. Для нахождения этой связи необходимо развитие микроскопической теории неравновесных процессов пластических течений с малой скоростью и медленным разрушением материала.

3. Иерархия необратимых процессов

Наличие в локальной области пространственно-временного континуума источников (стоков) обобщенных координат (или потенциалов в термодинамическом фазовом пространстве) с интенсивностью σ_i и действие на целлу (локальную область системы) внешних термодинамических сил \mathbf{Y}_i порождают возможность построения иерархических структур путем реализации самоцепляющихся процессов. Для построения простейшей модели иерархичности рассмотрим систему неоднородных уравнений вида (1.14) (первая цифра – номер литературного источника, а вторая – номер формулы из работы), записанную в безразмерных величинах

$$\begin{cases} \frac{\partial q_i}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i = \sigma_i, \\ \frac{\partial \mathbf{J}_i}{\partial \tau} + \nabla q_i = -\mathbf{Y}_i, \end{cases} \quad (1)$$

где $\tau = \frac{c_{(i)}t}{\tau_0}$ – безразмерное время, $c_{(i)}$ – характерная скорость процесса изменения независимой переменной типа i , τ_0 – время реакции системы, $\mathbf{J}_i = q_i \frac{\mathbf{c}_{(i)}}{c_{(i)}}$ – безразмерный поток обобщенного аргумента i . Подействуем на

первое уравнение системы (1) оператором локальной производной по времени $\partial/\partial\tau$, а на второе уравнение – оператором расходимости div (с учетом тождеств

ва $\text{div}(\nabla) \equiv \Delta$, где $\Delta = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$ – оператор Лапласа). Из второго установленного уравнения вычтем первое, получим неоднородное волновое уравнение Даламбера (см., напр., [15])

$$\square q_i = -\rho_i, \quad (2)$$

здесь $\square = \Delta - \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}$ – оператор Даламбера, а величину $\rho_i = \text{div} \mathbf{Y}_i + \frac{\partial \sigma_i}{\partial \tau}$ можно интерпретировать как плотность «зарядов» типа i .

Если применить к первому уравнению системы (1) оператор Гамильтона ($\nabla = \sum_{k=1}^3 \mathbf{e}_k \frac{\partial}{\partial x_k}$), а ко второму уравнению – оператор локальной производной по времени $\partial/\partial \tau$, а затем вычесть из первого установленного уравнения второе, то получим уравнение Даламбера для потока типа i :

$$\square \mathbf{J}_i + \text{rot}(\text{rot} \mathbf{J}_i) = -\mathbf{j}_i, \quad (3)$$

здесь величина $-\mathbf{j}_i = \frac{\partial \mathbf{Y}_i}{\partial \tau} + \nabla \sigma_i$ – плотность «тока» типа i .

Из определений плотностей «зарядов» и «токов» типа i в (2) и (3) следует, что плотность источников σ_i и внешняя термодинамическая сила \mathbf{Y}_i удовлетворяют системе уравнений (1), т.е.

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_i}{\partial \tau} + \text{div} \mathbf{Y}_i = \rho_i, \\ \frac{\partial \mathbf{Y}_i}{\partial \tau} + \nabla \sigma_i = -\mathbf{j}_i. \end{cases} \quad (4)$$

Таким образом, появление волн в неравновесной системе указывает на порождение необратимыми процессами (1) новых неравновесных изменений (4). Повторное применение описанной процедуры к системе (4) приведет к появлению волновых уравнений для величин σ_i и \mathbf{Y}_i , что указывает на возникновение нового необратимого процесса. Бесконечное копирование процедуры порождает неограниченную иерархию неравновесных процессов. Ограниченная иерархия изменений возникает в случае пропорциональности величин, описывающих вновь образующиеся источники и внешние силы, величинам предыдущих поколений необратимых процессов, т.е. при выполнении, например, равенств $\sigma_i = \lambda q_i$ и $\mathbf{Y}_i = \lambda \mathbf{J}_i$ (где λ – число), которые являются частным случаем соотношения, полученного в рамках линейной теории Онзагера [16]. Из (4) видно, что выполнение указанных соотношений для величин второго поколения необратимых процессов приводит к равенствам $\rho_i = \lambda \sigma_i = \lambda^2 q_i$ и $\mathbf{j}_i = \lambda \mathbf{Y}_i = \lambda^2 \mathbf{J}_i$. Следовательно, для n -го поколения неравновесных процессов будут выполняться равенства

$$P_{i(n)} = \lambda \sigma_{i(n)} = \lambda^n q_i, \quad \mathbf{J}_{i(n)} = \lambda \mathbf{Y}_{i(n)} = \lambda^n \mathbf{J}_i. \quad (5)$$

Формулы (5) демонстрируют масштабирование исходных величин при переходе от одного поколения необратимых явлений к другому. При значении параметра $|\lambda| < 1$ иерархия неравновесных процессов с ростом номера поколения вырождается в распространение волны исходных величин при отсутствии «зарядов» и «токов» типа i . При $\lambda = 1$ процесс является самоподдерживающимся для исходных величин, а при $\lambda = -1$ – для зеркальных функций $-q_i$ и $-\mathbf{J}_i$. В случае $|\lambda| > 1$ иерархия необратимых явлений при переходе с одного уровня на другой вызывает в неравновесной системе существенный рост «зарядов» и «токов» типа i , чему должна препятствовать внешняя среда, в которой также протекают транспортные процессы.

Реакцией неравновесной системы на изменения внешних управляющих параметров является формирование иерархии спектра времен релаксации (или спектра частот), которых может быть, в том числе, и счетное число. Бесконечный спектр частот наблюдается при динамических процессах типа турбулентности, эволюции биологических организмов и др., а ограниченный – при рождении солитонов, концентрационных волн и аналогичных образований. Рождение иерархических структур может приводить к необратимости во времени неравновесных процессов. Появление в неравновесной системе иерархических структур указывает на образование бесконечной или ограниченной цепочки событий со звеньями вида «случайные блуждания + изменения потоков во времени = волна». Реализация бесконечной цепочки характеризуется бесконечным спектром частот, регистрируемых в системе, а осуществление ограниченной цепочки, в частности, может приводить к образованию уединенных волн.

4. Заключение

Термодинамическая концепция неравновесности позволяет предположить, что синергетические системы могут образовать объекты определенной структуры, возникающие в областях нелинейного поведения или неравновесности. Их отклик на внешнее воздействие, в частности, можно представить в такой последовательности: неравновесность – производство энтропии – поиск устойчивого состояния – самоорганизация – переструктурирование – снижение уровня неравновесности – уменьшение производства энтропии – объект с новыми количественными и качественными признаками. Такая последовательность с определенной вероятностью может реализоваться в системах с положительной обратной связью при достижении управляющими параметрами пороговых значений (точка бифуркации (ветвления)), что приводит к когерентной реакции компонентов системы на изменившиеся внешние условия. Переход через точку бифуркации может сопровождаться, в частности, появлением автоколебательных движений, которые характеризуются сложным спектром. Из возникших структурных единиц производится от-

бор наиболее стабильных объединений частиц (кластеров), которые затем клонируются по всей системе с использованием скейлинговых (масштабных) преобразований.

Для теоретического описания явлений и процессов в синергетической системе были предложены модели, опирающиеся на построения Онзагера, Пригожина, Олемского, Цаллиса и др. Однако оставался неисследованным вопрос об описании неравновесности на основе отклонений установленных термодинамических соотношений от их классических формулировок (термодинамическая концепция неравновесности). Предложенный подход позволяет сохранить все достижения равновесной термодинамики и расширить феноменологический метод на неравновесные объекты.

В представленном цикле работ применение преобразования Лежандра к неравновесной энтропии дало возможность ввести понятие функции неравновесности. Эта функция зависит от потенциалов термодинамических полей и определяет отклонение выражения для энтропии от ее классического вида. При стремлении системы к равновесию функция неравновесности и ее дифференциал обращаются в нуль, а формула для равновесной энтропии и уравнение Дюгема–Гиббса приобретают ранее установленный вид. Вблизи точки термодинамического равновесия функция неравновесности линейным образом зависит от потенциала теплового поля, что указывает на теплообменный характер неравновесного состояния при подходе системы к термодинамическому равновесию.

Физико-математический подход позволил установить существование ряда моделей компенсации неравновесности. В частности, в модели перекрестной компенсации асимметричного типа показано, что производство энтропии дает возможность снизить уровень неравновесности, которая, в свою очередь, подавляет рост производства энтропии в расширенном пространстве. Следовательно, хаотизация в синергетической системе подавляется возникновением упорядоченных структур.

В рамках предложенной концепции были получены следующие результаты: в конкретных примерах, в частности, установлена нетождественность понятия «неравновесность» с такими понятиями, как «открытость системы» и «необратимость процессов»; проведена классификация состояний неравновесной системы; получены кинетические уравнения эволюции потенциалов термодинамических полей в термодинамическом фазовом пространстве; продемонстрирована возможность появления динамических эффектов и нового инварианта движения, который определяется суммой энтропии и функции неравновесности; найдены функциональные зависимости интенсивных потенциалов термодинамических полей от их экстенсивных аргументов, что позволило смоделировать для конкретных примеров различные отклики синергетической системы на внешнее воздействие. Полученные результаты указывают на перспективность данного направления исследований в области построения теории синергетических систем.

1. С.В. Терехов, В.Н. Варюхин, Т.Н. Мельник, А.Г. Петренко, В.М. Юрченко, ФТВД **27**, № 1, 103 (2017).
2. С.В. Терехов, В.Н. Варюхин, Т.Н. Мельник, А.Г. Петренко, В.М. Юрченко, ФТВД **27**, № 2, 83 (2017).
3. А.Н. Игнатов, Оптоэлектроника и нанофотоника, Лань, Санкт-Петербург (2011).
4. В.В. Погосов, Е.В. Васютин, В.П. Курбацкий, А.В. Бабич, А.В. Коротун, Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии **5**, 39 (2007).
5. С.В. Терехов, ФТВД **22**, № 1, 33 (2012).
6. Ш.М. Коган, УФН **145**, 285 (1985).
7. С.В. Терехов, Фракталы и физика подобия, Цифровая типография, Донецк (2011).
8. Ж.-П. Пуарье, Ползучесть кристаллов. Механизмы деформации металлов, керамики и минералов при высоких температурах, Мир, Москва (1988).
9. В.В. Селиванов, Механика разрушения деформируемого тела, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва (1999).
10. С.В. Терехов, В.Н. Саяпин, ФТВД **24**, № 3–4, 39 (2014).
11. А. Надаи, Пластичность и разрушение твердых тел, Изд-во иностр. лит., Москва (1954).
12. Я.Б. Фридман, Механические свойства металлов. Ч.1. Деформация и разрушение, Машиностроение, Москва (1974).
13. Ю.М. Лахтин, В.П. Леонтьева, Материаловедение, Машиностроение, Москва (1980).
14. А.А. Ильюшин, В.С. Ленский, Соппротивление материалов, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1959).
15. Ф.М. Морс, Г. Феибах, Методы теоретической физики, Т.1, Изд-во иностр. лит., Москва (1958).
16. L. Onsager, Phys. Rev. **37**, 405; **38**, 2265 (1931).

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

THERMODYNAMICAL CONCEPT OF NON-EQUILIBRIUM. III. SYSTEM REACTIONS. EMERGENCE OF HIERARCHIES

It is shown that different responses of a non-equilibrium system on external influence can be modeled by means of potentials of thermodynamic fields. Comparison of experimental and theoretical stress-strain diagrams is carried out for metals and plastics. A scheme of the origin of infinite and finite hierarchy of irreversible processes is offered.

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

Fig. 1. Response diagrams of a non-equilibrium system to external influence in the form of resonances (*a*), fractal steps (*b*) and noise (*e*)

Fig. 2. Theoretical stress σ –effective elongation ξ diagrams in aluminum (curve 1) and steel 18X2H4MA (curve 2)

Fig. 3. Theoretical stress σ –strain ξ diagrams: *a* – in polystyrene (curve 1) and high-impact polystyrene (curve 2); *b* – in pyraline: 1 – 0.007, 2 – 0, 3 – 0.042 [14, p. 86]