О некоторых топологических свойствах кинетического моделирования неравновесной системы

М. Б. Сайханов

Комплексный научно-исследовательский институт Российской академии наук.
Россия, 364051, Чеченская Республика, г. Грозный, Старопромысловское ш., 21а.
E-mail: saikhanov_musa@mail.ru

Статья поступила 20.05.2011, подписана в печать 31.10.2011

Рассматриваются топологические свойства кинетического моделирования неравновесной системы, обусловленные неоднородностью структуры ее энергетического спектра. В частности, показано, что слоистый характер энергетического спектра неравновесной системы с топологической точки зрения можно трактовать как несвязность энергетических спектров ее квазиравновесных подсистем. Показана возможность использования римановой и скалярной кривизны гиперповерхности полного производства энтропии в качестве локальной и глобальной характеристик неравновесности системы.

Ключевые слова: неравновесная система, кинетическое моделирование, производство энтропии, топология, связность, кривизна.

УДК: 536.75 + 515.12 + 515.16. PACS: 05.70.Ln, 02.40.–k.

Введение

Топологические свойства, возникающие при кинетическом моделировании неравновесной системы, связаны с квантованием необратимых процессов, сопутствующих ей в процессе эволюции. Действительно, кинетическое моделирование как метод теоретического описания сильнонеравновесной системы исходит из того, что ее энергетический спектр имеет дискретно-непрерывную (слоистую) структуру [1–3]. При этом непрерывность имеет место в локальном масштабе квазиравновесных подсистем, частицы которых имеют близкие (неразличимые) энергетические уровни, образующие энергетические слои. Здесь речь идет, конечно, о физической непрерывности, или квазинепрерывности, обеспечивающей, как известно, возможность непрерывного перехода частиц между соседними уровнями энергетического слоя [4, 5]. Напротив, дискретность, т. е. прерывность, имеет место в глобальном масштабе всей неравновесной системы и связана с отдаленностью друг от друга энергетических слоев, между которыми осуществляются кинетические процессы переноса [6]. Теоретическое описание на глобальном уровне осуществляется путем крупнозернистого квантования полного производства энтропии с учетом слоистой структуры энергетического спектра неравновесной системы и формулировки вариационного принципа для временной эволюции нестационарной неравновесной системы. В то же время на локальном уровне квазиравновесных подсистем достаточно использовать аппарат неравновесной термодинамики (статистики).

1. Энергетический спектр неравновесной системы и связность

С топологической точки зрения непрерывность энергетического спектра квазиравновесной подсистемы означает, что он является *односвязным*. Однако этого нельзя сказать об энергетическом спектре всей неравновесной системы, состоящего из нескольких (многих) энергетических слоев. В этом случае энергетический спектр является *несвязным*, поскольку из одного энергетического слоя нельзя попасть в другой непрерывным путем (переходом) [7]. Примерами подобных неравновесных систем являются неравновесный газ, двухтемпературная плазма, неравновесная спин-решеточная система в магнетиках и т. д. [6]. Энергетический спектр всех этих систем состоит из энергетических слоев (ниш), отделенных друг от друга энергетическими интервалами, сравнимыми с шириной самих слоев.

Следует отметить, что с топологической точки зрения последние являются *компонентами* глобально несвязного энергетического спектра неравновесной системы, число m которых в ходе эволюции неравновесной системы изменяется [2, 3, 7]. Особенно это имеет отношение к сильнонеравновесной нестационарной системе, эволюционирующей либо в сторону стационарного (равновесного) состояния, либо, при наличии возмущения, удаляющейся от него. В первом случае число компонент энергетического спектра уменьшается и в стационарном или равновесном состоянии достигает минимального значения. Во втором случае наблюдается рост числа компонент за счет увеличения числа квазиравновесных подсистем с квазинепрерывным спектром энергии.

Например, при термической релаксации сильно нагретого газа к температуре окружающей среды колебательная, вращательная и некоторые другие степени свободы (и соответственно энергетические ниши) в результате молекулярно-кинетических процессов в газе могут прекратить свое существование, так что в равновесном состоянии останется только одна степень свободы — поступательная [2]. Если теперь, наоборот, осуществлять нагревание равновесного газа, имеющего одну поступательную степень свободы, то возможно поэтапное включение вращательной, колебательной, электронной и других степеней свободы. В каждой из вновь возникших энергетических ниш, соответствующей той или иной степени свободы, по истечении характерного времени τ^j (локального времени релаксации) устанавливается равновесное состояние [6].

При интенсивной накачке в открытую систему энергии возможно также образование диссипативных структур, подобных ячейкам Бенара [8]. Как показывают экспериментальные и теоретические исследования, энергетический спектр такого рода локальных динамических структур является квазинепрерывным, т. е. в энергетическом пространстве уровней неравновесной системы происходит образование дополнительных энергетических слоев.

Таким образом, введенный нами параметр числа слоев энергетического спектра неравновесной системы m непосредственно характеризует ее топологический аспект, т. е. число компонент несвязного множества энергетических уровней неравновесной системы. В то же время не вызывает сомнения целесообразность построения в пространстве энергетических уровней неравновесной системы некоторых других глобальных и локальных метрических характеристик.

2. Квантование функционала полного производства энтропии

В связи с этим необходимо отметить, что основное затруднение термодинамической теории Гленсдорфа–Пригожина заключается в том, что она не позволяет должным образом осуществить описание кинетического аспекта в случае сильнонеравновесной нестационарной системы [9]. В частности, речь идет о невозможности учета в ее рамках кинетики взаимодействия локально равновесных подсистем неравновесной системы. В неоднородном (слоистом) пространстве энергетических уровней неравновесной системы эта задача успешно решается путем крупнозернистого (по энергетическим слоям) квантования функционала полного производства энтропии [3, 6]. С этой целью на локальном уровне квазиравновесных подсистем вводятся параметры отклонений обобщенных термодинамических сил $\Delta X_i^j = X_i^j - X_i^{j\,\mathrm{eq}}$ и скоростей $\dot{X}_i^j$ (здесь i, j — номера необратимого процесса и квазиравновесной подсистемы), характеризующих соответственно неравновесный и нестационарный аспекты неравновесной системы. На глобальном уровне интегральной характеристикой неравновесной системы является полное производство энтропии. При этом построение характеристического функционала полного производства энтропии в этом случае осуществляется в дискретно-непрерывном пространстве энергетических уровней неравновесной системы [1–3].

В результате получаем крупнозернисто проквантованное выражение функционала полного производства энтропии

$$P = P(\Delta X_1^1, \dots, \Delta X_i^j, \dots, \Delta X_n^m, \dot{X}_1^1, \dots, \dot{X}_i^j, \dots, \dot{X}_n^m). \qquad (1)$$

В $(2mn+1)$-мерном пространстве переменных ΔX_i^j, $\dot{X}_i^j$ и P равенство (1) представляет собой уравнение гиперповерхности функционала полного производства энтропии. При этом необратимый процесс в неравновесной системе осуществляется либо в соответствии с минимальными свойствами функционала P (слабо неравновесная система), либо в соответствии с минимальными свойствами избыточного производства энтропии $\delta_{X\dot{X}}P = P - P^{\mathrm{st}}$ (сильнонеравновесная нестационарная система) [9]. Эти функционалы в случае термодинамической устойчивости неравновесной системы являются одновременно функциями Ляпунова ($\Lambda_P = P, \delta_{X\dot{X}}P$).

3. Формулировка вариационного принципа

Обобщение принципа минимального производства энтропии (Пригожин, 1947) на нестационарный случай в глобально кинетической модели легко достигается исходя из геодезического характера избыточного производства энтропии, выражаемого вариационным уравнением [6]

$$\delta(\delta_{X\dot{X}}P) = 0. \qquad (2)$$

Это уравнение для конечного интервала времени $t = t_2 - t_1$ можно переписать в виде

$$\delta(\delta_{X\dot{X}}P) = \delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial_{X\dot{X}}P}{\partial t} dt = 0, \qquad (3)$$

где $(\partial P/\partial t)_{X\dot{X}}$ — скорость временного изменения полного производства энтропии, обусловленная изменением термодинамических сил (X) и скоростей их изменения $(\dot{X})$.

Решение уравнения (3) существенно упрощается, если неравновесная система находится вблизи равновесного или стационарного состояний. В этом случае функционалы P и $\delta_{X\dot{X}}P$ можно разложить в ряд по малым параметрам ΔX_i^j, $\dot{X}_i^j$, причем вблизи равновесного состояния физически значим второй дифференциал полного производства энтропии, являющийся функцией Ляпунова [9]:

$$\Lambda_P = P = \frac{1}{2}\delta^2 P = \\ = \sum_{\alpha\beta}\sum_{\lambda\mu} P_{\lambda\mu}^{\alpha\beta} \Delta X_\alpha^\lambda \Delta X_\beta^\mu + \sum_{\alpha\beta}\sum_{\lambda\mu} P'^{\alpha\beta}_{\lambda\mu} \dot{X}_\alpha^\lambda \dot{X}_\beta^\mu, \qquad (4)$$

где $P_{\lambda\mu}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial X_\alpha^\lambda \partial X_\beta^\mu}\right)_{\mathrm{eq}}$, $P'^{\alpha\beta}_{\lambda\mu} = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \dot{X}_\alpha^\lambda \partial \dot{X}_\beta^\mu}\right)_{\mathrm{st}}$ — коэффициенты разложения функционала P вблизи равновесного и стационарного состояний; $\alpha, \beta = 1, \dots, n$; λ, $\mu = 1, \dots, m$.

Этот случай важен также и с методологической точки зрения, поскольку минимальность изменения второго дифференциала полного производства энтропии геометрически означает минимальность изменения соответствующей ему площади участка гиперповерхности. Дело в том, что геометрически второй дифференциал производства энтропии $\frac{1}{2}\delta^2 P$ пропорционален квадрату длины траектории движения точки на гиперповерхности (4) при изменении неравновесных и нестационарных параметров $\Delta X_i^j(t)$ и $\dot{X}_i^j(t)$. При этом минимальность изменения площади гиперповерхности в окрестности заданной точки определяется минимальностью изменения квадратичных форм [10]. Отсюда следует, что геодезической характеристикой при рассмотрении необратимых процессов в неравновесной нестационарной системе является изменение площади гиперповерхности (4) в заданном временном интервале ее эволюции.

4. Исследование топологических свойств гиперповерхности полного производства энтропии

С топологической точки зрения гиперповерхность является наиболее частым объектом расслоения пространства. В нашем случае речь идет о расслоении пространства возможных термодинамических состояний, задаваемых локальными параметрами ΔX_i^j, $\dot{X}_i^j$ неравновесной нестационарной системы, по величине энергии. Очевидно, здесь мы имеем дело с одномерным расслоением пространства, так как гиперповерхности ставится в соответствие действительное число (энергия). Для стационарной неравновесной системы справедливы равенства

$$\dot{X}_i^j = 0$$

и, следовательно, гиперповерхность полного производства энтропии задается лишь в пространстве неравновесных термодинамических параметров ΔX_i^j.

Один из эффективных методов исследования топологии многомерной гиперповерхности связан с использованием ее римановой кривизны [10]. При этом установлено, что конечность римановой кривизны гиперповерхности обусловлена конечностью ее топологии и соответствующего ей индекса устойчивости [11]. С другой стороны, со средней кривизной H связаны минимальные свойства площади гиперповерхности, а именно она минимальна, если $H = 0$. При этом глобальный подход к проблеме изучения топологических свойств с помощью римановой кривизны основывается на исследовании геодезических риманова многообразия на гиперповерхности и их экстремальных свойств с использованием теории Морса и теорем сравнения [12].

С физической точки зрения риманова кривизна гиперповерхности полного производства энтропии (1) характеризует степень отклонения термодинамической системы от равновесного или стационарного состояния. Она выражается через коэффициенты второго дифференциала разложения P по малым параметрам отклонений dX_i^j, $d\dot{X}_i^j$ вблизи заданного неравновесного состояния и, следовательно, является локальной [6]. Рассмотрим ее вычисление на примере квазистационарной неизотермической системы, для которой нестационарный процесс можно не принимать во внимание и, следовательно, второй дифференциал имеет вид

$$\frac{1}{2}\delta^2 P = \sum_{i,j} P_{ij}\, d\beta^i\, d\beta^j, \tag{5}$$

где $P_{ij} = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial\beta^i\partial\beta^j}\right)_{n\,\mathrm{eq}}$ — кинетические коэффициенты неравновесного состояния; β^i, β^j — обратные температуры квазиравновесных подсистем; $i, j = 1, \ldots, m$. Отметим, что геометрически квадратичная форма (5), так же как и (4), выражает площадь элемента гиперповерхности и тем самым является ее метрикой. Как известно, риманова кривизна гиперповерхности, задаваемая метрикой (5), может быть записана в виде следующего тензора 4-го ранга [13]:

$$R^i_{\cdot kld} = \frac{\partial \Gamma^i_{kd}}{\partial \beta^l} - \frac{\partial \Gamma^i_{kl}}{\partial \beta^d} + \Gamma^i_{nl}\Gamma^n_{kd} - \Gamma^i_{nd}\Gamma^n_{kl}, \tag{6}$$

где символы Кристоффеля выражаются через компоненты метрического тензора по формуле

$$\Gamma^i_{kd} = \frac{1}{2}P^{id}\left(\frac{\partial P_{dk}}{\partial\beta^l} + \frac{\partial P_{dl}}{\partial\beta^k} - \frac{\partial P_{kl}}{\partial\beta^d}\right).$$

В то же время в качестве глобального параметра неравновесности системы (в смысле учета всех ее подсистем) целесообразно использовать скалярную кривизну гиперповерхности полного производства энтропии. Она получается из тензора Римана (6) переходом от смешанных компонент к ковариантным компонентам и последующим двойным свертыванием с метрическим тензором. В результате получаем следующее формулу для вычисления скалярной кривизны гиперповерхности:

$$R = P^{il}P^{kd}R_{ikld}, \tag{7}$$

где тензор Римана в ковариантном виде

$$R_{ikld} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 P_{id}}{\partial\beta^k\partial\beta^l} + \frac{\partial^2 P_{kl}}{\partial\beta^i\partial\beta^d} - \frac{\partial^2 P_{il}}{\partial\beta^k\partial\beta^d} - \frac{\partial^2 P_{kd}}{\partial\beta^i\partial\beta^l}\right) + \\ + P_{np}\left(\Gamma^n_{kl}\Gamma^p_{id} - \Gamma^n_{kd}\Gamma^p_{il}\right).$$

С физической точки зрения наше предположение о скалярной кривизне как глобальной кинетической характеристике неравновесной неизотермической системы подтверждается, в частности тем, что для равновесного состояния или состояния, близкого к равновесному, она равна нулю. Это следует из того, что в равновесном состоянии кинетические коэффициенты P_{ij} равны нулю, так как в этом случае обращается в нуль сама величина P полного производства энтропии. Вблизи равновесного состояния P_{ij} коэффициенты весьма слабо изменяются за счет изменения параметров β^k, так что их практически можно считать постоянными величинами. Тогда частные производные компонент метрического тензора P_{ij} по параметрам обратных температур β^k обращаются в нуль, что с учетом формулы (7) приводит также к нулевому значению для скалярной кривизны.

В то же время для состояний, далеких от равновесия, компоненты P_{ij} являются функциями параметров β^k и, следовательно, должна быть отличной от нуля скалярная кривизна.

Заключение

В настоящее время топология весьма эффективно используется во многих разделах физики в качестве инструмента исследования ее объектов как в микроскопическом, так и макроскопическом масштабе [14]. Во многом это связано с тем, что современная физика наряду с продолжением изучения аспекта движения материи, начатого в XVII в., в значительной степени акцентирована на изучении ее структурного аспекта. Например, речь идет об атомной и ядерной физике, физике элементарных частиц, астрофизике и других разделах современной физики. В то же время структурный аспект материи не чужд и неравновесной термодинамике, поскольку Пригожин показал, что неравновесность может приводить к возникновению диссипативных структур [8]. Поэтому исследование топологических свойств неравновесных систем на основе метода кинетического моделирования представляется целесообразным и перспективным.

Автор выражает благодарность академику В. П. Маслову, критические замечания которого способствовали заметному улучшению настоящей работы.

Список литературы

1. *Van Hove L.* // Physica. 1955. **21**. P. 517.
2. *Осипов А.И., Уваров А.В.* // Успехи физ. наук. 1992. **162**, № 11. С. 1.
3. *Сайханов М.Б.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2002. № 4. С. 10.
4. *Пуанкаре А.* О науке. М., 1990.
5. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 5. Ч. 1. М., 1976.
6. *Сайханов М.Б.* // Теплофизика высоких температур. 2006. **44**, № 6. С. 877.
7. *Александров П.С.* Введение в теорию множеств и общую топологию. М., 1977.
8. *Гленсдорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М., 2003.
9. *Сайханов М.Б.* // Журн. физ. химии. 2006. **80**, № 7. С. 1330.
10. *Хильдебрант С.* Краевые задачи для минимальных поверхностей // Минимальные поверхности. М., 2003. С. 208.
11. *Громол Д., Клингенберг В., Мейер В.* Риманова геометрия в целом. М., 1971.
12. *Фоменко А.Т.* // Успехи матем. наук. 1981. **36**, вып. 6. С. 105.
13. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 2. М., 1988.
14. *Монастырский М.И.* Топология калибровочных полей и конденсированных сред. М., 1995.

Some topological properties of the kinetic modelling of non-equilibrium system

M. B. Saikhanov

Complex Institute, Russian Academy of Sciences, Grozny 364051, Russia.
E-mail: saikhanov_musa@mail.ru.

Topological properties of kinetic modeling of the nonequilibrium system, the structures of its power spectrum caused by heterogeneity are considered. In particular, it is shown that layered character of a power spectrum of nonequilibrium system from the topological point of view can be treated as incoherence of power spectra of its quasi-equilibrium subsystems. Use possibility Riman and scalar curvature of a hyper surface of total manufacture of entropy as the local and global characteristic non-equilibrium is shown.

Keywords: nonequilibrium system, kinetic modeling, entropy production, topology, connection, curvature.
PACS: 05.70.Ln, 02.40.–k.
Received 20 May 2011.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 1(2012).

Сведения об авторе

Сайханов Муса Баудинович — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник; тел.: (928) 787-30-86, e-mail: saikhanov_musa@mail.ru