

УДК 530.1 (075.8)

В.М. СОМСИКОВ, А.Б. АНДРЕЕВ

О КРИТЕРИЯХ ПЕРЕХОДА К ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ ДИНАМИКИ СИСТЕМ

Путем численного моделирования изучаются основные характеристики движения равновесной системы потенциально взаимодействующих материальных точек в неоднородном поле сил и критерии, определяющие переход от дискретного описания к термодинамическому описанию систем. Рассматривается изменение внутренней энергии системы при прохождении потенциального барьера в зависимости от ширины барьера, числа элементов системы, начальных условий. Показывается, как меняется амплитуда флуктуаций энергетических параметров системы в зависимости от числа материальных точек. Выполняются оценки Д-энтропии. Установлено два критических числа. Первое число определяет необходимое количество МТ для перехода системы к необратимой динамике, а второе число – переход к термодинамическому описанию. Анализируется соответствие результатов теоретическим основам динамики систем.

Ключевые слова: нелинейность, классическая механика, энергия, термодинамика, формализмы Лагранжа, голономные связи, необратимость.

Введение

Одна из основных проблем физики связана с обоснованием эмпирической термодинамики, статистической физики и кинетики в рамках законов классической механики. Так, в настоящее время нет достаточно ясных критериев применимости термодинамического описания, эргодических теорем, статистических методов для описания неравновесных систем. Нет достаточно строгих критериев перехода к физике сплошных сред через полное механическое описание. Например, нельзя строго ответить на вопрос, для какого количества элементов систем и с какой точностью для них применимо термодинамическое описание. Основная трудность на пути решения этих и многих других подобных задач связана с тем, что до последнего времени не существовало строгого объяснения необратимости в рамках законов классической механики без привлечения вероятностных гипотез [1–10]. Действительно, общепринятое на сегодня объяснение необратимости, которое построено в рамках классической механики, опирается на свойство экспоненциальной неустойчивости гамильтоновых систем и гипотезу о существовании флуктуаций. Суть объяснения заключается в следующем. Согласно теореме Пуанкаре об обратимости гамильтоновых систем, существует хотя и очень большое, но конечное время, в течение которого система вновь пройдет сколь угодно близко около исходной точки фазового пространства [2, 5]. Но если усреднить по достаточно малой окрестности точки фазового пространства, в которой находится система, то из-за экспоненциальной неустойчивости она уже не вернется в исходное состояние. Такому усреднению эквивалентны очень малые флуктуации в системе. Поэтому, приняв гипотезу о флуктуациях, приходим к объяснению необратимости в гамильтоновых системах. Но гипотеза об огрублении фазового пространства за счет флуктуаций фактически означает привлечение чуждых детерминизму классической механики статистических законов. Анализ огромного числа попыток найти объяснение второго закона термодинамики только на основе законов классической механики без использования статистических гипотез наталкивал на мысль [2], что решение этой проблемы в рамках существующих формализмов классической механики отсутствует. Это может означать либо то, что в классической механике, в принципе, нет ему объяснения [2], либо то, что формализмы классической механики требуют расширения, например, путем снятия ограничений, при которых они строились.

Чтобы найти подход к решению проблемы необратимости, часто исследовались простейшие системы типа бильярдов при условии голономности связей [5, 11, 12]. Мы также начали исследовать эту проблему на простейших системах упругосталкивающихся дисков в приближении парных столкновений, но при этом требование о голономности связей было исключено [13]. В результате оказалось установлено, что такие системы необратимы. При этом ключевую роль в механизме ус-

тановления равновесия играет обмен импульсами между дисками систем. На основе результатов исследования динамики систем дисков были получены уравнения Гамильтона и Лиувилля, которые описывают установление равновесия в неравновесных системах. Следует подчеркнуть, что эти уравнения были получены без использования каких-либо дополнительных статистических гипотез [14]. Но модели дисков в силу их ограничений еще не позволяли утверждать о существовании необратимости в классической механике. Например, парные взаимодействия характерны только для достаточно разреженных систем. Более того, в природе взаимодействия между элементами систем являются потенциальными. Поэтому следующим нашим шагом было изучение неравновесных систем потенциально взаимодействующих материальных точек (МТ) [14–18]. Подходы к этим исследованиям подсказали результаты изучения дисков.

В результате исследований систем потенциально взаимодействующих МТ оказалось, что если снять некоторые ограничения формализмов классической механики, то появляется возможность объяснения необратимости в рамках законов Ньютона. Как удалось показать [15], этим ограничением являлась гипотеза о голономности связей, используемая при выводах уравнений Лагранжа [13].

Механизм необратимости был предложен в рамках механики структурированных частиц (СЧ). Он назван детерминированным, поскольку следует только из механики СЧ без привлечения вероятностных закономерностей. Суть механики СЧ заключается в следующем [14–18].

Ньютон построил механику для абстрактной бесструктурной МТ. Поэтому при движении МТ работа внешних сил идет только на ее перемещение. Это определяет второй закон Ньютона. Но в реальном мире мы всегда имеем дело с телами, обладающими структурой. В этом случае работа внешних сил тратится не только на их перемещение, но и на изменение внутренней энергии, обусловленной движениями элементов тела относительно их центра масс (ЦМ).

Поскольку все элементы систем обладают структурой, то их динамика определяется принципом дуализма симметрии. Принцип заключается в том, что динамика реальных тел, обладающих формой и структурой, должна определяться двумя симметриями: симметрией пространства и симметрией самой системы. Из этого принципа следует дуализм энергии, согласно которому движение тела, обусловленное внешними силами, можно определить, если полную энергию тела разделить на его внутреннюю энергию и энергию движения. Из дуального выражения энергии следует уравнение движения системы, которое учитывает работу сил, изменяющих внутреннюю энергию [14]. То есть в общем случае энергия движения тела, обладающего структурой, уже не является инвариантом. Инвариантом является сумма внутренней энергии и энергии движения. Следовательно, механику тела нужно строить исходя из инвариантности полной дуальной энергии.

В качестве модели тела, учитывающей возможность изменения внутренней энергии, можно взять систему потенциально взаимодействующих МТ. Такая модель соответствует реальным телам. Действительно, все фундаментальные силы потенциальны. Согласно классической механике, любое тело, включая газ, можно задать совокупностью потенциально взаимодействующих между собой МТ. Именно на основе такой модели в рамках гамильтонова формализма удается получить соответствующие экспериментам статистические законы для газа вблизи равновесия и его функции распределения [5, 19, 20].

Теперь поясним, почему СЧ нужно брать равновесной и почему ее уравнение движения можно использовать для описания динамики неравновесных систем. Известно, что формализм Гамильтона справедлив для равновесных систем. Состояние равновесного газа однозначно определяется внутренней энергией. Если же мы имеем неравновесную систему, то для ее описания можно воспользоваться тем, что в приближении локального термодинамического равновесия она представима совокупностью перемещающихся равновесных подсистем [19, 20]. Тогда описание динамики неравновесной системы сводится к описанию движения равновесных в термодинамическом смысле подсистем. Систему можно считать равновесной в термодинамическом приближении, если она содержит достаточно большое количество МТ. Ее и будем называть СЧ.

Уравнение движения СЧ позволяет объяснить механизм необратимости без вероятностной гипотезы о флуктуациях и построить механику неголономных систем [15–18]. Мы назвали эту необратимость детерминированной, так как она прямо вытекает из механики Ньютона без вероятностных гипотез.

Детерминированная необратимость вовсе не исключает общепринятого механизма необратимости, так как наличие флуктуаций является достаточным условием для необратимости, но не является необходимым.

Существование детерминированной необратимости служит веским аргументом в пользу детерминизма природы. Это очень важно, если вспомнить принципиальные для всей физики споры Бора и Эйнштейна о детерминизме и случайности, возникшие при создании квантовой механики [10].

Согласно принципу дуализма симметрии, энергия СЧ представляет собой сумму независимых энергий: внутренней энергии и энергии движения. Поэтому динамика СЧ определяется дуализмом этих энергий, меняющихся вдоль траектории движения СЧ при условии сохранения их суммы. В связи с дуализмом энергии уравнение движения СЧ задается в независимых микро- и макропеременных. Причем микропеременные задают движения МТ относительно ЦМ СЧ, а макропеременные определяют движение ЦМ СЧ. Такой путь получения уравнения движения СЧ позволяет исключить использование гипотезы о голономности связей, на которую опирается вывод канонического уравнения Лагранжа. В отличие от канонического уравнения Лагранжа [21] уравнение движения СЧ описывает нелинейную трансформацию энергии движения во внутреннюю энергию, отвечающую за нарушение симметрии времени [14–18].

Когда и насколько существенно то, что условие голономности связей исключает учет нелинейных членов, отвечающих за нарушение симметрии времени, было показано на примере изучения прохождения осциллятора через потенциальный барьер [22]. В качестве осциллятора использовалась система двух МТ, соединенных пружиной. Осциллятор имеет энергию движения и внутреннюю энергию. Эти два типа энергии следует задавать в независимых микро- и макропеременных. Микропеременные описывают энергию колебания осциллятора, а макропеременные определяют движение его ЦМ. Наличие неоднородного внешнего поля сил приводит к зацеплению независимых переменных, что эквивалентно неголономности связей. В результате такого зацепления возникает взаимная трансформация энергии движения и внутренней энергии. Благодаря этому, при определенных фазовых соотношениях возникает эффект прохождения осциллятора через барьер даже тогда, когда его энергия движения меньше высоты барьера. Существует также эффект его отражения при энергии движения больше высоты барьера. Причем при плавном изменении фазы происходит чередование полос прохождения и отражения осциллятора [22]. Но если пренебречь неголономностью связей, эти эффекты исчезнут, то есть характер прохождения возбужденного осциллятора через потенциальный барьер определяется фазой его колебания, с которой он подходит к потенциальному барьеру. В зависимости от нее при прохождении барьера возникнет либо увеличение внутренней энергии осциллятора, либо увеличение его энергии движения. В первом случае осциллятор может отразиться, а во втором может пройти. Прохождение или отражение от барьера зависит от его высоты, энергии движения и других параметров осциллятора.

При движении СЧ в неоднородном поле внешних сил энергия движения может переходить во внутреннюю энергию. Величина изменения внутренней энергии СЧ пропорциональна величине градиентов сил внешнего поля. Если СЧ вдоль всей траектории остается равновесной, ее внутренняя энергия может только увеличиваться, но не может трансформироваться в энергию ее движения. В этом суть природы детерминированной необратимости, т.е. такой необратимости, которая является следствием детерминированных законов классической механики и не нуждается в гипотезе о флуктуациях, используемой для объяснения необратимости в рамках канонических формализмов классической механики [5, 8].

Наличие детерминированной необратимости привело к понятию «Д-энтропии» [15–18]. Эта энтропия названа так, поскольку она вытекает из детерминированных законов классической механики без использования гипотезы о наличии флуктуаций в системах. Она определяется отношением приращения внутренней энергии СЧ к величине внутренней энергии. Особенность Д-энтропии состоит именно в том, что она определяется той частью работы внешних сил, которая уходит на изменение внутренней энергии. То, что Д-энтропия по своему определению не связана с мерой хаоса, соответствует идее, изложенной в [23], согласно которой энтропия по своей сути не есть мера хаоса. Действительно, согласно определению Д-энтропии, это мера той части работы, которая неизбежно уходит на изменение внутреннего состояния тела, и совсем не обязательно ей будет соответствовать увеличение хаоса. Только для равновесных систем между Д-энтропией и мерой хаоса будет однозначное соответствие.

Само уравнение движения СЧ является нелинейным. Аналитические расчеты, которые могли бы позволить проверить вытекающие из него теоретические выводы, практически невыполнимы. Остается единственная возможность проверить теоретические выводы численным экспериментом. Численное моделирование позволяет определить критерии перехода от классической механики к

термодинамике, статистической физике, кинетике в зависимости от свойств системы, выявить области необратимости систем и т.д.

Цель работы: путем численного моделирования определить основные свойства уравнения движения систем потенциально взаимодействующих МТ в неоднородном поле внешних сил. Для этого выполнялись численные расчеты величины флуктуаций внутренней энергии системы при прохождении потенциального барьера в зависимости от начальных данных и параметров барьера, изучалась зависимость изменения внутренней энергии от ширины барьера, исследовалась область применимости Д-энтропии. Это позволило определить критерии перехода от детерминированного к термодинамическому описанию систем. Кроме того, это позволило определить, каким образом некоторые важные статистические законы физики могут следовать из строгих законов классической механики. Выполненные здесь расчеты позволили также определить некоторые характеристики области применимости механизма необратимости.

Постановка задачи

Для решения поставленной задачи бралась система потенциально взаимодействующих МТ. В качестве начальных значений задавалась ее внутренняя энергия, энергия движения ЦМ. Начальное распределение МТ в системе задавалось случайным образом. Координаты и скорости МТ определялись случайными величинами так, чтобы в системе ЦМ их сумма равнялась нулю, а система занимала шаровой объём с определенным радиусом, при котором потенциальная энергия взаимодействия МТ в системе равнялась суммарной кинетической энергии МТ. При этом до подхода к потенциальному барьеру функция распределения выбиралась максвелловской.

Рассчитывались изменения параметров системы при прохождении потенциального барьера (рис. 1). Задача решалась в дуальной системе координат, т.е. в системе координат, в которой независимыми переменными являются микро- и макропеременные [16]. Микропеременные определяют движение каждой МТ относительно ЦМ системы, а макропеременные определяют движение ЦМ относительно барьера. Высота барьера выбиралась так, чтобы система проходила через него. Рассчитывались изменения внутренней энергии системы, энергии движения, Д-энтропия и другие параметры задачи в зависимости от количества МТ, высоты и ширины барьера, начальных условий. Полученные результаты сопоставлялись со статистическими законами и с теоретическими выводами, полученными на основе уравнения движения СЧ [16–18].

За основу бралось следующее уравнение движения СЧ [16]:

$$M_N \dot{V}_N = -F^{\text{env}} - (\Phi^{\text{env}} + \dot{E}_N^{\text{ins}}) V_N / V_N^2. \quad (1)$$

Здесь $V_N = \dot{R}_N$ – скорость ЦМ; $i = 1, 2, 3, \dots, N$ – номера МТ; $R_N = (1/N) \sum_{i=1}^N r_i$; $M_N = Nm$, m – масса МТ. Все массы МТ выбраны равными единице; $F^{\text{env}} = \sum F_i^{\text{env}}(R_N, \tilde{r}_i)$; $\dot{E}_N^{\text{ins}} = \sum_{i=1}^N \tilde{v}_i (m \dot{\tilde{v}}_i + F(\tilde{r}_i)_i)$ – изменение внутренней энергии системы; $\Phi^{\text{env}} = \sum \tilde{v}_i F_i^{\text{env}}(R_N, \tilde{r}_i)$; $F_i^{\text{env}}(R_N, \tilde{r}_i)$ – сила, действующая на i -ю МТ со стороны внешнего поля; $r_i = R_N + \tilde{r}_i$, \tilde{r}_i – координаты МТ относительно ЦМ.

Силы взаимодействия МТ задавались законом Гука. Внешнее поле сил задавалось в виде одного периода косинусоиды: $U(x_i) = U_b (\cos(2\pi(x_i - R_b)/a) + 1)$ – при условии $(R_b - a/2) < x_i < (R_b + a/2)$. Отсюда силы, действующие на каждую из МТ, определяются выражением

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

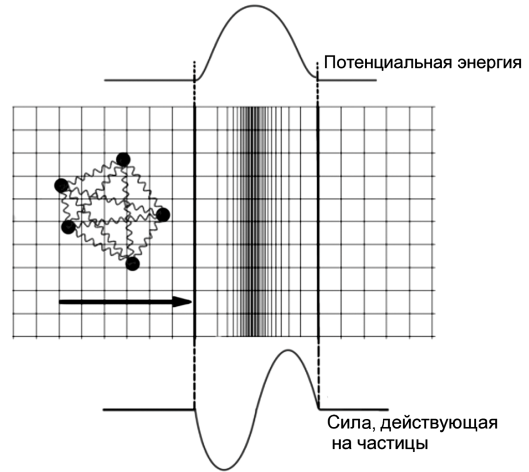


Рис. 1. Схема численных расчетов прохождения системы через потенциальный барьер

где U_b – высота барьера; R_b – положение экстремума барьера; a – ширина барьера; x_i – расстояние i -й МТ от ЦМ; 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, расчеты прохождения барьера выполнялись для различных начальных распределений МТ и параметров задачи.

Характер изменения внутренней энергии в зависимости от начальных данных и числа МТ

Согласно теоретическим результатам, для консервативных неравновесных систем, представленных совокупностью равновесных подсистем в неоднородном поле внешних сил, должна наблюдаться необратимая динамика, обусловленная увеличением внутренней энергии за счет их энергии движения [14–18]. Аналогичный вывод следует и из статистических методов анализа неравновесных систем [19, 20, 24]. Рассмотрим вопрос, для какого количества МТ систему можно описывать в рамках эмпирических уравнений термодинамики и статистических законов.

Если теоретические результаты, которые вытекают из уравнения движения систем, справедливы, то должно существовать такое число МТ, при котором внутренняя энергия системы при ее движении в неоднородном поле сил может только увеличиваться, но не может быть отрицательной. Это число можно взять в качестве нижнего критерия равновесности системы. Очевидно, что это число будет зависеть от относительных величин внутренней энергии, энергии движения системы, высоты потенциального барьера. Чтобы убедиться в его существовании и изучить его поведение в зависимости от параметров задачи, выполнялись расчеты изменения внутренней энергии системы в зависимости от числа МТ.

На рис. 2 представлены результаты 400 экспериментов для различного числа МТ. Количество МТ соответствует степени два (4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024). Макропараметры начальных условий постоянные: масса системы = 1 кг, масса каждой МТ равна $1/N$, кинетическая энергия

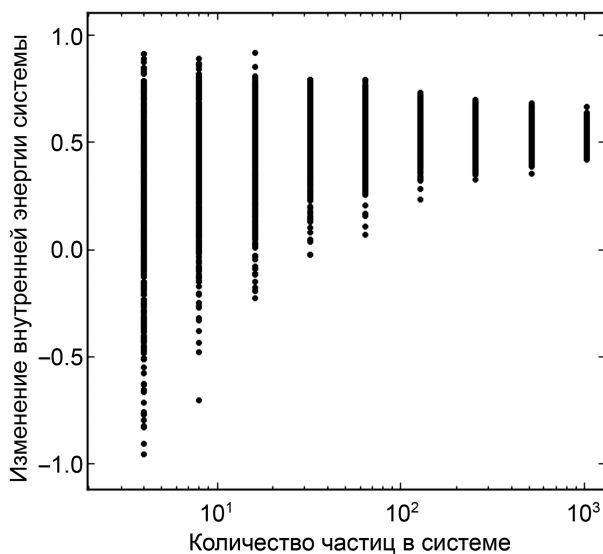


Рис. 2. Величина флуктуации внутренней энергии системы в зависимости от числа МТ

ЦМ системы $E_s = 150$ Дж, вектор скорости системы направлен вдоль координатной оси X . Такой вывод сделан из того, что критерием необратимости может служить невозможность трансформации внутренней энергии в ее энергию движения. Это число назовем **первым** критическим числом N_1 . Очевидно, что N_1 , при котором систему можно считать необратимой, зависит от параметров задачи, например от ширины барьера.

Область применимости Д-энтропии

В соответствии с законом сохранения импульса внутренняя энергия СЧ при достаточно слабых ограничениях не способна возвращаться в энергию движения, так как невозможно такое сло-

Потенциальный барьер расположен в плоскости YZ и имеет ширину a вдоль оси X равную 0.2 м, высота барьера $E_b = 130$ Дж, внутренняя энергия системы $E_0^{\text{ins}} = 100$ Дж, коэффициент жёсткости связей $U_0 = 300000$ Н/м. Микропараметры начальных условий, координаты и скорости частиц задавались случайным образом. Каждая точка на рисунке соответствует отношению величины изменения внутренней энергии системы к начальной кинетической энергии системы ($\Delta E^{\text{ins}} / E_0^{\text{ins}}$).

Из рис. 2 видно, что при $N \geq 64$ изменения внутренней энергии могут быть только положительными. То есть 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.

жение внутренних сил, которое бы изменило импульс ее ЦМ. Это означает необратимость системы. То есть необратимость связана с односторонней трансформацией энергии относительного движения системы во внутреннюю энергию.

Необратимость трансформации энергии движения системы в ее внутреннюю энергию в неоднородном поле внешних сил позволила ввести в механику понятие Д-энтропии (она является детерминированной, поскольку следует из законов Ньютона). По аналогии с энтропией Клаузиуса, Д-энтропия определяется как отношение приращения внутренней энергии СЧ к ее величине. Тогда приращение Д-энтропии неравновесной системы, которая в приближении локального термодинамического равновесия может быть представлена совокупностью СЧ, пропорционально энергии относительных движений СЧ, трансформирующейся в их внутреннюю энергию. В этом случае изменение Д-энтропии определяется формулой [17]

$$\Delta S^d = \sum_{L=1}^R \left\{ N_L \sum_{k=1}^{N_L} \left[\int \sum_s F_{ks}^L v_k dt \right] / E_L \right\}, \quad (3)$$

где E_L – внутренняя энергия L -СЧ; N_L – число частиц в L -СЧ; $L = 1, 2, 3, \dots, R$ – 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 -й МТ другой СЧ; v_k – скорость k -й МТ.

Формула (3) получена на основе уравнения движения СЧ и определяет долю увеличения внутренней энергии СЧ относительно ее полной величины. Она справедлива в случае равновесности СЧ вдоль ее траектории.

В нашем случае $L = 1$. Тогда формула (3) для изменения Д-энтропии системы после прохождения барьера определяется простой формулой: $\Delta S^d = \Delta E^{\text{ins}} / E_0^{\text{ins}}$. Эту формулу можно проверить путем численных расчетов ΔE^{ins} при прохождении системой потенциального барьера.

На рис. 3 представлены средние значения величины изменения внутренней энергии системы ΔE^{ins} , поделённые на начальную кинетическую энергию ЦМ системы равную 100 Дж. Также показаны доверительные интервалы этой величины. Доверительный интервал рассчитан как среднеквадратическое отклонение величины, умноженное на коэффициент Стьюдента, равный 2.6 и соответствующий доверительному уровню 0.99, для данного числа экспериментов (400 экспериментов). Эти величины с точностью до постоянного множителя представляют собой изменение Д-энтропии ΔS^d . Согласно расчетам, эта величина будет положительной с вероятностью 0.99 уже при значениях $N \geq 8$.

Для меньших значений N величина ΔE^{ins} может быть отрицательной. 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 .

Дальнейшее увеличение числа МТ не меняет величины приращения внутренней энергии при прохождении барьера, т.е. величина ΔE^{ins} при таком количестве МТ достигает своего предела. При $N \geq 10^3$ величина $\Delta S^d = \Delta E^{\text{ins}} / E_0^{\text{ins}} \sim 0.55$. Так как дальнейшее увеличение числа МТ не влияет на изменение термодинамических параметров системы, то это число МТ можно назвать **вторым критическим** числом N_2 . Оно определяет переход к термодинамическому описанию для данной задачи.

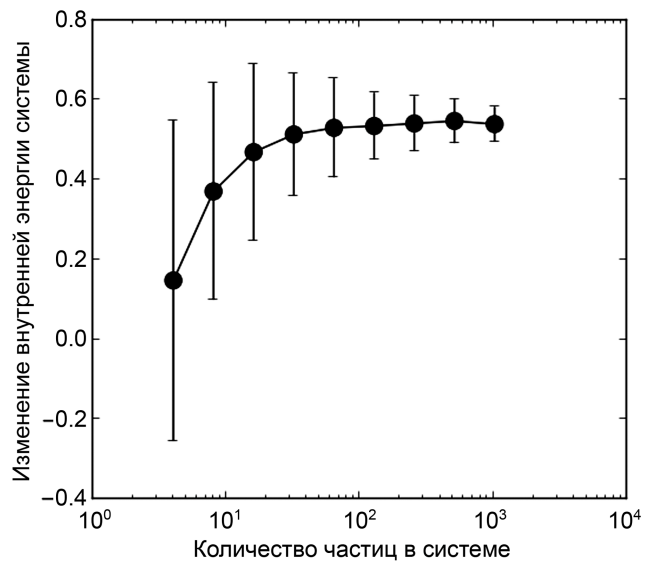


Рис. 3. Зависимость изменения относительной величины внутренней энергии от числа МТ

Изменения энергии системы при прохождении барьера

Убедительным подтверждением возможности обоснования статистических законов, опираясь на законы механики, служат результаты сопоставления численных расчетов амплитуд флуктуаций внутренней энергии, возникающих при прохождении системой барьера, в зависимости от числа МТ и функции их распределения, с законом статистических флуктуаций ее средней квадратичной величины. Напомним, как на основе статистических закономерностей доказывается, что относительная флуктуация какого-либо аддитивного параметра системы обратно пропорциональна \sqrt{N} , где N – количество элементов системы [19].

Внутренняя энергия системы МТ, E^{ins} , является аддитивной величиной. Если систему разбить на N частей, то среднее значение ее внутренней энергии будет равно сумме средних значений внутренних энергий подсистем, т.е. $|E^{\text{ins}}| = \sum_{i=1}^N |E_i|$. Будем исходить из того, что внутренняя энергия растет пропорционально увеличению числа МТ системы. Тогда для средней квадратичной величины флуктуации внутренней энергии будем иметь $|(\Delta E)^2| = \left(\sum_{i=1}^N \Delta E_i \right)^2$. Если флуктуации в подсистемах считать независимыми, то получим $|(\Delta E)^2| = \sum_{i=1}^N |(\Delta E_i)^2|$. Отсюда приходим к известному закону $|(\Delta E)^2|^{1/2} \sim 1/N^{1/2}$.

Таким образом, если рассчитываемая величина относительных флуктуаций E^{int} , возникающих при прохождении системы через барьер, с ростом числа МТ изменяется обратно пропорционально \sqrt{N} , то это будет служить как подтверждением закона о флуктуациях, так и подтверждением возможности обоснования этого закона с помощью законов классической механики.

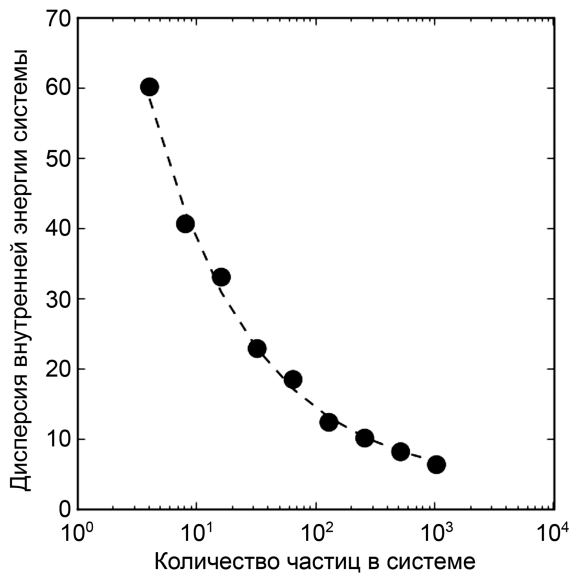


Рис. 4. Зависимость максимальной амплитуды флуктуации ΔE^{ins} (точки) от чисел МТ. Аппроксимирующая пунктирная линия, заданная уравнением $f = p + r/\sqrt{N}$, где $p = 3.5$, $r = 110$

Как видим из рис. 4, точки, соответствующие амплитудам флуктуации изменения внутренней энергии, хорошо ложатся на кривую, соответствующую статистическому закону убывания флуктуаций в системе с ростом числа ее элементов [19]. Это, во-первых, означает, что численные расчеты прохождения системы через барьер верны, во-вторых, что дуализм энергии отображается в статистических законах, в-третьих, законы классической механики применимы не только для обоснования статистических законов, но и для определения области их применения в зависимости от параметров задачи.

Незначительное расхождение результатов расчета флуктуации ΔE^{ins} от статистической формулы зависимости квадратичных флуктуаций можно объяснить тем, что рост числа МТ приводит к изменению других ее параметров, от которых зависит величина ΔE^{ins} , например размер системы. Кроме того, определенное отклонение от статистического закона может быть связано и с тем, что для заданного числа МТ нельзя строго считать систему равновесной. В целом, изучение природы этих отклонений может оказаться полезным для определения областей применимости статистических законов в конкретных задачах динамики.

Зависимость изменения внутренней энергии от ширины барьера

Согласно уравнению движения системы, изменение внутренней энергии ΔE^{ins} , нелинейно зависящее от микро- и макропеременных, отлично от нуля лишь тогда, когда характерный масштаб

неоднородности поля внешних сил соизмерим с масштабом системы. Величина ΔE^{ins} должна увеличиваться с ростом разности сил, действующих на различные области системы [16–18]. Проверку этого вывода осуществим путем расчетов зависимости ΔE^{ins} от ширины барьера. На рис. 5 приведены результаты этих расчетов ΔE^{ins} .

По оси ординат отложено соотношение изменения внутренней энергии к начальной энергии движения ЦМ системы. Сплошная вертикальная линия соответствует среднеквадратичному отклонению координат МТ системы (показатель размера системы). Пунктирная линия соответствует максимальному размеру системы (максимальное расстояние между МТ в ходе численного эксперимента).

Согласно рис. 5, наблюдается уменьшение эффективности трансформации энергии движения во внутреннюю энергию с ростом ширины барьера. Т.е. с уменьшением градиента неоднородности внешних сил изменение внутренней энергии при прохождении барьера стремится к нулю. Закон уменьшения близок к степенной зависимости. Зависимость изменения внутренней энергии от величины градиента внешних сил следует из уравнения (1), если разложить внешнюю силу по малому параметру [17].

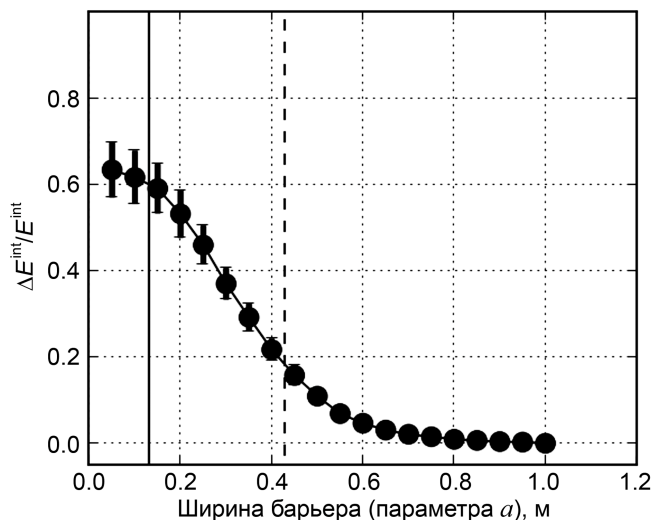


Рис. 5. Изменение внутренней энергии в зависимости от ширины барьера a

Заключение

Численный расчет динамических параметров движения равновесной системы потенциально взаимодействующих МТ в заданном неоднородном поле внешних сил позволил выявить следующие закономерности. Определено минимальное число МТ, выше которого ни для одного начального состояния заданной системы невозможно уменьшение внутренней энергии при прохождении барьера. Для нашего случая это число равно $N_1 \sim 10^2$. То есть при $N \geq 10^2$ динамика системы становится необратимой. Такое число для рассматриваемого случая служит критерием перехода к необратимой динамике систем. Это число определяет минимальное количество элементов системы, начиная с которого можно использовать понятие Д-энтропии S^d . Подчеркнем, что число N_1 получено для частной модели. В общем случае, если взять другую модель системы с другими значениями параметров, это число может быть иным. Однако главное не то, что здесь было определено это число, а то, что его можно достаточно строго определить в рамках законов механики Ньютона. Вывод данного числа на основе только законов механики служит веским аргументом в пользу того, что термодинамика может быть получена и обоснована в рамках классической механики без привлечения статистических гипотез. Более того, это показывает, что статистические законы могут найти свое обоснование в рамках классической механики. Как точно отмечено в [23], неявные знания, которые существенно пересекаются с эмпирическими, требуют строгих доказательств. Поэтому хотя, как правило, априори принимается, что при значениях числа $N \gg 10^2$ можно пользоваться статистическими законами, оно все же нуждается в расчетах для каждого конкретного случая.

Установлено существование второго критического числа N_2 . В нашем случае это $N_2 = 10^3$. При увеличении количества МТ в системе свыше этого числа рост ΔE^{ins} прекращается. Для рассмотренного случая асимптотическое значение $\Delta E^{\text{ins}} \sim 0.55$. Так как дальнейшее увеличение числа МТ перестает влиять на значение термодинамических параметров системы, то это число МТ логично назвать вторым критическим числом или критическим числом перехода к термодинамическому описанию системы.

Показано, что величина относительных флуктуаций E^{ins} , возникающих при прохождении системы через барьер, с ростом числа МТ падает. Скорость такого падения обратно пропорциональна \sqrt{N} . Наличие такой закономерности для систем, установленной на основе уравнений динамики, служит аргументом в пользу утверждения, что статистические законы должны иметь строгое обоснование в рамках законов классической механики. Поскольку закон о флуктуациях лежит в основах статистической физики [19], то этот результат свидетельствует о возможности обоснования статистических законов на основе строгих законов физики.

С уменьшением градиента внешних сил наблюдается уменьшение эффективности трансформации энергии движения во внутреннюю энергию. Такая зависимость свидетельствует о том, что изменение внутренней энергии обусловлено непотенциальными силами, которые пропорциональны градиентам внешних сил [18].

Таким образом, численные расчеты, выполненные на основе уравнения движения СЧ, показали его соответствие теоретическим результатам [18]. Кроме того, они позволили определить критерии перехода от динамического описания к термодинамическому описанию в зависимости от количества МТ. Это открывает пути для обоснования законов термодинамики в рамках законов классической механики.

Качественное отличие результатов, полученных в [14–18], а также в данной статье, от результатов предшествующих работ приведено в таблице.

№ п/п	Результаты других авторов	Результаты [14–18], а также данной статьи
1	Ранее процессы перемешивания, как правило, изучались в рамках формализмов классической механики, в частности Гамильтона, на моделях бильярдов Синая. Это исключало возможность описания необратимой динамики без привлечения чуждых классической механике статистических гипотез	Системы дисков изучались на основе уравнений движения классической механики в приближении парных столкновений, но без использования ее формализмов. Эти исследования показали, что необратимость определяется нелинейными процессами обмена энергией между элементами систем
2	Уравнения Лагранжа, описывающие динамику систем, получены при использовании гипотезы о голономности связей, исключающей учет обмена энергиями между различными степенями свободы, а потому и возможность описания необратимой динамики	Уравнения движения систем в механике СЧ выведены из дуального выражения энергии с учетом возможности преобразования энергии движения во внутреннюю энергию СЧ за счет обмена энергиями между различными степенями свободы. В этом случае ограничения на динамику систем, обусловленные гипотезой о голономности связей, исключаются
3	Объяснение необратимости гамильтоновых систем опирается на гипотезу о существовании случайных флуктуаций. Только при их наличии динамика экспоненциально неустойчивых по Ляпунову неравновесных систем необратима. То есть наличие флуктуаций в гамильтоновых системах является необходимым условием для необратимости	Детерминированная необратимость взаимодействующих систем СЧ возникает в результате трансформации энергии движения СЧ в ее внутреннюю энергию в процессе обмена импульсами элементов систем. Это обуславливает необратимость даже при отсутствии случайных флуктуаций
4	Традиционно применимость термодинамического описания определяется либо экспериментально, либо статистическими методами, например, методом молекулярной динамики (методами Монте-Карло)	Показана возможность определения области применимости термодинамического приближения для описания систем, опираясь на расчеты дуального выражения энергии и путем введения понятия Д-энтропии СЧ

В целом, полученные результаты подтверждают необходимость описания динамики систем в рамках классической механики в соответствии с принципом дуализма симметрии на основе уравнения движения СЧ, а также возможность обоснования законов термодинамики, статистической физики, кинетики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гинзбург В. Л. // УФН. – 2007. – Т. 177. – № 4. – С. 345–346.
2. Пригожин И. От существующего к возникающему. – М.: Наука, 1980. – 342 с.
3. Хайтун С. Д. Механика и необратимость. – М.: Янус, 1996. – 448 с.
4. Lebowitz J. L. // Phys. Today. – 1999. – V. 46. – P. 32–38.
5. Заславский Г. М. Стохастичность динамических систем. – М.: Наука, 1984. – 273 с.
6. Смолуховский М. // УФН. – 1967. – Т. 93. – Вып. 4. – С. 724–737.
7. Cohen E. G. // NATO Sci. Series E: Appl. Sci. – 1998. – P. 371–223.
8. Кадомцев Б. Б. // УФН. – 1995. – Т. 165. – № 8. – С. 895–973.
9. Sidharth V. G. Modelling Time. arXiv:0809.0587v1 [physics.gen-ph] 3 Sep. 2008.
10. Бор Н. // УФН. – 1958. – Т. LXVI. – Вып. 4. – С. 571–598.
11. Синай Я. Г. Современные проблемы эргодической теории. – М.: Физматгиз, 1995. – 208 с.
12. Bird G. A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. – Oxford: Clarendon Press, 1976. – 476 p.
13. Сомсиков В. М., Мерзляков М. А., Малков Е. А. // Проблемы эволюции открытых систем. Вып. 1. – Алма-Ата, 1999. – С. 52–62.
14. Somsikov V. M. // IJBC. – November 2004. – V. 14. – No. 11. – P. 4027–4033.
15. Somsikov V. M. // J. Phys.: Conf. Series. – 2005. – V. 23. – P. 7–16.
16. Somsikov V. M. // New Adv. Phys. – September 2008. – V. 2. – No. 2. – P. 125–140.
17. Somsikov V. M. // Open Access Library J. – 2014. – P. 1–8.
18. Сомсиков В. М. От механики Ньютона к физике эволюции. – Алма-Ата: Наука, 2014. – 272 с.
19. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1976. – 583 с.
20. Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинематика. – М.: Наука, 1977. – 532 с.
21. Голдстейн Г. Классическая механика. – М.: Наука, 1975. – 416 с.
22. Сомсиков В. М., Денисеня М. И. // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 3. – С. 95–103.
23. Хайтун С. Д. // Вопросы философии. – 2013. – № 2. – С. 62–74.
24. Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем. – М.: Янус, 1995. – 292 с.

Институт ионосферы, г. Алматы, Республика Казахстан

Поступила в редакцию 12.05.14,
после доработки – 17.01.15.