

№ 464

А.Л. Петелин

Нелинейная термодинамика

Устойчивость конечных состояний
неравновесных систем

Курс лекций

№ 464

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИСиС»

Кафедра экстракции и рециклинга черных металлов

А.Л. Петелин

Нелинейная термодинамика

Устойчивость конечных состояний
неравновесных систем

Курс лекций

Допущено учебно-методическим объединением
по образованию в области металлургии в качестве
учебного пособия для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по направлению Металлургия



ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ДОМ

Москва 2011

УДК 544.3
П29

Рецензент
канд. физ.-мат. наук, доц. *И.В. Аныхтина*

Петелин, А.Л.

П29 Нелинейная термодинамика : устойчивость конечных состояний неравновесных систем : курс лекций / А.Л. Петелин. – М. : Изд. Дом МИСиС, 2011. – 101 с.
ISBN 978-5-87623-499-5

Рассмотрены основные закономерности поведения открытых физико-химических систем при значительных отклонениях от равновесия. Большое внимание уделено вопросам неравновесной термодинамики, образованию диссипативных структур. Даны примеры возникновения упорядоченных состояний в металлургических системах. Приведены основы математического описания процессов в неравновесных системах и анализа устойчивости конечных состояний нелинейных систем.

Курс лекций соответствует программе курса «Основы синергетики для металлургов».

Предназначен для подготовки бакалавров по направлению «Физика», а также для подготовки магистров по направлению «Металлургия».

УДК 544.3

ISBN 978-5-87623-499-5

© Петелин А.Л., 2011

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
1. Основные понятия и определения	8
2. Равновесная термодинамика.....	11
3. Отклонения от равновесия. Термодинамический подход	13
4. Термодинамические основы описания неравновесных систем	16
4.1. Принцип локального равновесия	16
4.2. Линейная термодинамика	20
4.2.1. 1-й закон Онзагера.....	20
4.2.2. Определение термодинамических сил. 2-й и 3-й законы Онзагера	23
4.2.3. Диффузионные задачи	28
4.2.4. Принцип Пригожина	31
5. Область нелинейных законов – универсальный критерий эволюции систем	34
6. Самоорганизация и диссипативные структуры	39
6.1. Увеличение степени порядка в неравновесных системах	39
6.2. Самоорганизация	43
6.2.1. Эффект Бенара	43
6.2.2. Эффект Тейлора.....	46
6.2.3. Реакция Белоусова–Жаботинского	48
6.3. Диссипативные структуры – свойства, классификация, условия существования.....	50
7. Нелинейная термодинамика. Динамические модели процессов с одной переменной	53
7.1. Динамические уравнения.....	53
7.2. Эволюция систем. Метод потенциала	55
7.3. Автокатализ, динамика популяций.....	57
7.4. Автокатализ с ветвлением. Бифуркации – неравновесные фазовые переходы.....	60
7.5. Ангармонический осциллятор. Нарушение временной симметрии	63
7.6. Эволюция систем. Анализ динамической функции	65
8. Нелинейная термодинамика. Динамические модели процессов с двумя переменными	68
8.1. Точечные конечные состояния, классификация, фазовые портреты, эволюция систем	68
8.2. Предельные циклы	73
9. Общие вопросы устойчивости нелинейных систем	78
9.1. Устойчивость по траектории	78

9.2. Орбитальная устойчивость	79
9.3. Структурная устойчивость	80
10. Теория катастроф – взгляд со стороны.....	82
10.1. Катастрофы и анализ структурной устойчивости	82
10.2. Катастрофа «складка»	83
10.3. Катастрофа «сборка».....	84
11. Активные среды.....	88
11.1. Бистабильные среды.....	89
11.2. Возбудимые среды	94
Библиографический список.....	96
Приложение 1. Устойчивость систем с n переменными.....	97
Приложение 2. Критерии устойчивости. Функция Ляпунова.....	99

ВВЕДЕНИЕ

Любая наука изучает систему, т.е. некоторый объект или совокупность объектов. При этом исследуется, как устроен объект – его свойства, структура, особенности. Одним из наиболее важных является вопрос эволюции системы – поведение ее во времени. Например, в механике предполагается возможность полного описания произвольного объекта в любой наперед заданный момент времени. Для законов механики характерны строгая причинность, единственность поведения, полная симметрия прошлого и будущего, т.е. обратимость основных законов движения относительно времени. Естественно, что и процессы, описываемые такими законами, обратимы. Сравнение полученной картины с реальным миром явлений показывает, что законы механики не описывают сложные системы, состоящие из множества частиц.

Описанием сложных систем занимается термодинамика, в которой постулируется, что любая система со временем необратимо приближается к своему наиболее вероятному состоянию – состоянию равновесия, характеризующемуся максимально возможной для этого объекта степенью беспорядка. Природа не статична, она эволюционирует, развивается из прошлого в будущее. Будущее, согласно термодинамике, происходит так: от порядка – к беспорядку, от здоровья – к болезни и смерти, к разрушению. И никогда назад, к порядку и здоровью. Обратные процессы запрещены.

Но в природе постоянно происходят обратные процессы. Причем всегда (!) в системах, далеких от равновесия. Самым распространенным и наглядным примером является феномен жизни. Живые организмы со времени своего появления претерпели значительное усложнение формы и степени организации. Примеры усложнения структуры можно повсеместно найти и в неживой природе. Ими являются периодические явления в геологических масштабах – от гейзеров до закономерного повторения ледниковых периодов. Сложные неравновесные структуры с высокой степенью порядка часто образуются в металлургии и в металловедении: дендритная и зональная структуры слитков, отливок, бейнитная, трооститная, сорбитная и другие структуры в сталях. Повторяющиеся циклические (упорядоченные) процессы происходят также в жизни человеческого общества, в экологических системах.

Все это свидетельствует, что в сложных системах при определенных условиях возможны процессы с увеличением степени порядка.

Такое поведение систем, которое можно охарактеризовать, как самоорганизация, казалось бы, противоречит основным принципам как механики, так и термодинамики. Действительно ли это так?

Чтобы разобраться в этом, сформулировать условия и механизмы формирования порядка, необходимо найти правильный подход к изучению таких систем. Просматривается два возможных варианта:

1) предположить, что при переходе к сложным системам определенного вида или находящихся в определенных условиях, т.е. при преодолении некоторого барьера «сложности», реализуется область действия новых законов, более общих, чем законы механики и термодинамики. Этот переход, возможно, аналогичен переходу к миру сверхвысоких скоростей (теория относительности) или к миру сверхмалых масштабов (квантовая механика). В настоящее время не обнаружено никаких специфических законов, свойственных очень сложным объектам;

2) попытаться описать процессы увеличения степени порядка на основе имеющихся законов и принципов и на базе накопленного экспериментального материала.

Вариант 2 предпочтительнее для многих исследователей, работающих в различных сферах научной деятельности. Использование уже известных законов требует обобщения информации, имеющейся в различных областях знаний. Этот подход профессора Штутгартского университета Г. Хакена получил название синергетического, а сама наука – название «**синергетика**», *изучающая совместное действие многих подсистем, в результате которого на макроскопическом уровне возникает структура и соответствующее функционирование.* «Синергетика» в переводе с греческого языка – содействие, сотрудничество.

Идеологической основой синергетики является нелинейная термодинамика неравновесных систем и процессов, поэтому в имеющихся на данный момент учебниках и монографиях при анализе самоорганизации основное внимание уделяется термодинамическому анализу процессов эволюции систем как в направлении уменьшения, так и в сторону увеличения степени порядка. Определяющую роль при этом играет теория диссипативных структур – особой формы упорядоченного поведения или состояния сложных объектов, разработанная лауреатом Нобелевской премии по химии И. Пригожиным на основе термодинамической теории устойчивости. (И. Пригожиным в 40-х годах XX века была создана брюссельская школа по исследованию процессов вдали от равновесия.) Язык определений и

математический аппарат новой науки основан на ранее разработанных теориях сложных систем: теории систем (Берталанфи), кибернетики и теории информации (Винер, Эшби), теории игр и оптимального пути эволюции (фон Нейман), теории нелинейных дифференциальных уравнений (Пуанкаре) и т.д. В связи с этим чаще вместо общего названия «синергетика» при исследовании самоорганизации в сложных системах используют названия: неравновесная термодинамика, термодинамика необратимых процессов, нелинейная динамика, термодинамическая теория устойчивости.

В нашей стране изучением самоорганизации в теории автоколебаний занималась школа академика Андронова (с 30-х годов XX века), хотя в то время термин «самоорганизация» еще не был общеупотребительным и не фигурировал в названиях публикаций и других работах. Позже была развита теория автоволн (Рэм Хохлов), экспериментально обнаружены химические колебательные процессы (Б.П. Белоусов) и концентрационные волны в жидкой фазе (А.М. Жаботинский).

Данный курс не претендует на полноту охвата материала. Его задача – дать общее введение в метод изучения сложных нелинейных систем, показать возможности качественного анализа динамических моделей и привлечь внимание студентов, специализирующихся в области металлургии, металловедения и физико-химических методов исследований металлургических процессов, к возможностям, которые открывает перед специалистами единый подход к решению самых разнообразных задач.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Во введении уже были использованы некоторые понятия, такие как система, структура и т.д. Для того чтобы в дальнейшем не возникло неясностей при их трактовке, необходимо определить эти и некоторые другие понятия так, как это принято в термодинамике и смежных с ней науках. При этом следует учесть, что поскольку сами понятия носят весьма общий характер и охватывают широкий круг разнородных объектов и процессов, определения также будут общими. Не всегда в дальнейшем оказывается возможным дать также точные математические формулировки и определения.

Система – это объект, состоящий из нескольких (в пределе – бесконечного числа) элементов (подсистем, частей), взаимодействующих друг с другом (в пределе – взаимодействие может отсутствовать, например, идеальный газ), которые составляют единое целое и могут быть выделены из окружающей среды. Это означает, что взаимодействия внутри объекта более значимы (интенсивнее, сильнее), чем его внешние взаимодействия (в пределе – внешние взаимодействия отсутствуют, система замкнута). Системы разделяются на относительно простые, которые могут быть описаны законами механики, и сложные, которым обычно присуще большое количество элементов, многообразие связей между ними, включая и обратные связи. Более четкого определения сложной системе дать не удастся. Примеры простых систем: соударяющиеся точечные частицы; движение частицы (планеты) под действием силы тяжести; движение точечного заряда в электрическом (магнитном) поле. Примеры сложных систем: живой организм; столб газа в атмосфере, содержащий несколько химических компонентов (веществ) и подверженный воздействию солнечного света и тепла, силы тяжести, магнитного поля Земли, потока космических частиц.

Структура – это способ организации элементов и характер связи между ними, при этом не важно, каковы сами элементы, их природа, а важна совокупность их взаимоотношений.

Структуры можно подразделить на пространственные (рельеф местности, структура образца), временные (последовательность сигналов, событий) и пространственно-временные (волны, колебания).

Кроме того, есть структуры двух типов сложности: статическая структурная сложность, характеризующаяся структурами элементов и характером их взаимосвязей, и динамическая сложность, связанная с поведением системы во времени, хотя ясно, что первая влияет на вторую.

Модель – идеальный образ объекта, получаемый путем упрощения реальной сложной системы соответствующим выбором элементов и отказом от несущественных связей. Построение модели в большинстве случаев оказывается необходимым, так как исследование реальной физико-химической или другой системы, содержащей огромное количество элементов, связанных друг с другом очень сложным образом, наталкивается на непреодолимые препятствия. Поведение модели в некотором интервале значений внешних параметров должно быть адекватно поведению реальной системы.

Модель объекта (явления) представляет собой продукт схематизации реальной картины. Степень схематизации зависит от общего замысла и целей анализа, от ожидаемой полноты и точности решения задачи. Второстепенные особенности при этом во внимание не принимаются.

Параметры – все макроскопические признаки, характеризующие систему и ее взаимодействие с окружающей средой. Параметры могут быть внешними (если они определяются не входящими в саму систему объектами) и внутренними (если они определяются внутренним движением и взаимодействием элементов системы). Совокупность независимых параметров (внешних и внутренних) определяет состояние системы.

Стационарное состояние – состояние, когда параметры системы не зависят от времени, т.е. со временем не меняются.

Равновесное состояние = состояние термодинамического равновесия – состояние, когда не только все параметры не зависят от времени, но и нет потоков (вещества, энергии или др.), вызванных внешними источниками, через границы системы. Согласно статистической теории, состояние термодинамического равновесия – наиболее вероятное состояние системы при заданных значениях внешних параметров.

Термодинамические параметры – параметры, которые характеризуют систему в состоянии термодинамического равновесия.

Изолированная система – система, которая не обменивается с внешней средой ни веществом, ни энергией. Изолированная система с течением времени приходит в состояние термодинамического равновесия и никогда самопроизвольно не может из него выйти (так как это наиболее вероятное ее состояние).

Время релаксации – время, за которое система, выведенная из состояния равновесия, возвращается в равновесное состояние.

Термодинамическая система – система, которая находится в состоянии термодинамического равновесия.