

УДК 531.3

© Т. А. Хантулева

Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург
khan47@mail.ru

ОБ ОПИСАНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА И ФОРМИРОВАНИИ ДИНАМИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ЖИДКИХ СРЕДАХ

Статья поступила в редакцию 29.01.2020, после доработки 06.02.2020

Обсуждаются проблемы, связанные с описанием сложных движений жидких сред, которые сопровождаются многомасштабным комплексом неравновесных процессов, включая релаксационные и инерционные эффекты. За основу взят подход, основанный на нелокальной теории неравновесных процессов переноса с применением методов кибернетической физики, который позволяет выйти за пределы механики сплошной среды, описать самоорганизацию и эволюцию динамических вихреволновых структур при неравновесном переносе импульса в жидкости. В рамках этого подхода предложен алгоритм определения спектра масштабов динамических структур, формирующихся в неравновесных течениях жидкости за счет условий, наложенных на систему воздействиями со стороны ее окружения. Временная эволюция течения описывается с помощью принципа скоростного градиента, разработанного в теории управления адаптивными системами. Управляющими параметрами служат средние размеры динамической структуры жидкой среды, а целевая функция задается максимальной энтропией, которую может произвести система при наложенных на нее ограничениях. При этом между структурной эволюцией системы и динамикой течения формируются обратные связи, которые стабилизируют режим течения. Без их учета эволюция динамических структур может приводить к неустойчивостям разного типа и изменению режима течения. В качестве примера приведено высокоскоростное течение Рэлея, где показано, что за счет перехода к турбулентному режиму жидкость минимизирует необратимые потери механической энергии.

Ключевые слова: неравновесные течения жидкости, метод неравновесного статистического оператора, самоорганизация динамических структур, временная эволюция, принцип скоростного градиента, принцип максимума энтропии, обратная связь, ламинарно-турбулентный переход.

T. A. Khantuleva

St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

ON THE DESCRIPTION OF NON-EQUILIBRIUM TRANSPORT PROCESSES AND FORMATION OF DYNAMIC STRUCTURES IN LIQUID MEDIA

Received 29.01.2020, in final form 06.02.2020

The paper discusses the problems associated with the description of the complicated motions of liquid media, which are accompanied by a multi-scale complex of non-equilibrium processes, including relaxation and inertial effects. The approach is based on the nonlocal theory of non-equilibrium transport processes using the methods of cybernetical physics, which allows one to go beyond the limits of continuum mechanics, to describe the self-organization and evolution of dynamic vortex-wave structures during non-equilibrium momentum transport in a liquid. In the framework of this approach, an algorithm is proposed for determining the scale spectrum of dynamic structures formed in non-equilibrium fluid flows due to the conditions imposed on the system by actions from the side of its environment. The temporal evolution of the flow is described using the Speed Gradient principle developed in the control theory of adaptive systems. The control parameters are the average sizes of the dynamic structure of the liquid medium, and the goal function is determined by the maximum entropy that the system can produce under the constraints imposed on it. In this case, feedback is formed between the structural evolution of the system and the dynamics of the flow, which stabilizes the flow regime. Without taking them into account, the evolution of dynamic structures can lead to various types of instabilities and a change in the flow regime. An example is the high-speed Rayleigh flow, where it is shown that, due to the transition to a turbulent regime, the liquid minimizes irreversible loss of mechanical energy.

Ссылка для цитирования: Хантулева Т.А. Об описании неравновесных процессов переноса и формировании динамических структур в жидких средах // Фундаментальная и прикладная гидрофизика. 2020. Т. 13, № 1. С. 3–14.

For citation: *Khantuleva T.A.* On the description of non-equilibrium transport processes and formation of dynamic structures in liquid media. *Fundamentalnaya i Prikladnaya Gidrofizika*. 2020, 13, 1, 3–14.

DOI: 10.7868/S2073667320010013

Key words: non-equilibrium fluid flows, the method of non-equilibrium statistical operator, self-organization of dynamic structures, temporal evolution, the Speed Gradient principle, the principle of maximum entropy, feedback, laminar-turbulent transition

1. Трудности описания неравновесных процессов

Современное представление о протекании неравновесных процессов в распределенных системах, основанное на экспериментальных данных, полученных с помощью новых высокоточных приборов, кардинально отличается от бытовавшего долгое время мнения, что неравновесные процессы — это необратимые и/или нестационарные процессы, которые можно описать дифференциальными уравнениями в частных производных. Попытки применять традиционные модели механики сплошной среды вдали от термодинамического равновесия приводили к серьезным ошибкам. Например, в области вычислительной гидромеханики наблюдается активное развитие численных методов и создание на их базе универсальных пакетов программ, предлагающих достаточно широкий выбор встроенных моделей замыкания уравнений переноса. Однако большинство таких моделей как, например, модели турбулентных течений, реологические модели неньютоновских жидкостей справедливы только в достаточно узком диапазоне параметров, а попытки их обобщения на более широкие классы задач приводят к весьма громоздким построениям и не обладают предсказательной способностью. Область применимости таких моделей в пакетах не указывается, потому что точно ее определить просто невозможно. Главная трудность при этом заключается в том, что все понятия физики в той или иной степени привязаны к равновесным состояниям изучаемых систем, и пересмотр одних представлений влечет за собой переосмысление всех основ термодинамики и концепции сплошной среды. Для того, чтобы избежать ошибок при построении математических моделей, надо понимать специфические особенности реакции систем на внешнее воздействие, сильно отклоняющее состояние системы от равновесия.

На макроскопических, т. е. достаточно больших пространственно-временных масштабах линейные законы хорошо описывали процессы, протекающие в системах, состояния которых слабо отличались от термодинамического равновесия. Согласно линейному подходу, господствовавшему в науке несколько веков, реакция системы пропорциональна воздействию на нее, а результирующая реакция в ответ на несколько воздействий аддитивна. Линейные математические модели, построенные на основе такого подхода, в силу единственности решений линейных уравнений описывают физические процессы детерминированным, а, значит, предсказуемым образом. Процессы, описываемые линейными моделями, устойчивы и хорошо воспроизводятся в экспериментах. Классическая физика построена на линейных законах. Однако развитие науки и техники ставит на передний план исследование высокоскоростных и быстропротекающих процессов, которые, как показали эксперименты, уже не вписываются в концепцию линейного подхода. Переход к высокоскоростным и быстропротекающим процессам означает уменьшение характерных пространственно-временных масштабов, на которых начинают проявляться эффекты внутренней структуры системы. Процессы, протекающие на уровне внутренней структуры системы, могут быть очень сложными из-за коллективного взаимодействия многих элементов, в результате оказывается невозможным выделить индивидуальное действие одиночного фактора среди множества других. Коллективные эффекты приводят к невозможности локализации описания и к необходимости использования интегральных соотношений при описании реакции системы. Кроме того, реакция системы на быстрое воздействие в силу инерционных эффектов начинает запаздывать по отношению к самому воздействию. При множественных воздействиях запаздывание реакции системы может приводить к неустойчивости процесса, появлению осцилляций и формированию обратных связей в системе. Поведение системы при этом становится неоднозначным, плохо предсказуемым и плохо воспроизводимым в экспериментах. Такие сложные динамические процессы на уровне внутренней структуры среды сопровождают и формируют макроскопическую реакцию системы вдали от термодинамического равновесия, которая с точки зрения линейного подхода является не только нелинейной, но, возможно, даже аномальной.

При экспериментальном исследовании высокоскоростных процессов в конденсированных средах, помимо технических трудностей, связанных с необходимостью проводить измерения на малых пространственно-временных масштабах, возникают еще и принципиальные трудности обработки и интерпретации результатов измерений. Если размер области усреднения при измерении становится

соизмерим с размером структурного элемента среды, то результат измерения уже не относится к макроскопическому масштабному уровню. Для динамических процессов чаще всего это промежуточный уровень между микроскопическим и макроскопическим [1, 2]. Процессы, протекающие на таких масштабных уровнях, корректно не описываются аппаратом механики сплошной среды. В этих условиях средние плотности массы, импульса и энергии определены лишь в вероятностном смысле и не совпадают с их классическим определением. При этом надежность экспериментальных измерений падает, становится невозможным набрать достаточную статистику по результатам измерений.

Экспериментальные результаты, полученные при исследовании неравновесных процессов в различных областях механики (гидродинамики турбулентных течений, многофазных сред, волновых процессах в твердых телах, живых системах), обнаруживают множество общих черт, характеризующих неклассическую реакцию системы на внешнее воздействие. Вдали от термодинамического равновесия процессы переноса в разных средах часто сопровождаются формированием новых многомасштабных структур, таких как пристеночные слои, крупномасштабные пульсации массовой скорости, вихревые структуры, локализованные неоднородности и т. п. Наблюдаемые эффекты самоорганизации определяются не только самим веществом и его фазовым состоянием, но также режимом нагружения, граничными условиями и геометрией системы. Сформированные этими факторами структуры в результате взаимодействия их элементов начинают эволюционировать. Скорость эволюции структуры должна влиять на релаксационные характеристики среды и может приводить к неустойчивостям состояний, к структурным переходам с переключением с одного режима на другой и появлению обратных связей.

Таким образом, адекватное описание неравновесных процессов требует выхода за пределы механики сплошной среды и разработки нового подхода на стыке континуальной механики, неравновесной термодинамики и теории управления. В следующем разделе работы будут кратко охарактеризованы результаты, полученные в неравновесной статистической физике, которые послужили основой подхода, позволяющего единообразно описывать течения жидких сред в широком диапазоне режимов и внешних условий. В разделах 3–5 изложены основные принципы нелокальной теории переноса импульса в жидкости, предложены алгоритмы определения параметров динамических структур и описания их временной эволюции на основе принципа скоростного градиента. Эти принципы и алгоритмы в комплексе с нелокальными гидродинамическими уравнениями позволяют проследить эволюцию течения жидкости вдали от термодинамического равновесия и определить устойчивость неравновесных стационарных состояний при наложенных условиях.

2. Неравновесные процессы в статистической механике

Во второй половине прошлого столетия Д. Н. Зубарев [1, 2] разработал метод неравновесного статистического оператора, который может описывать необратимые процессы переноса массы, импульса и энергии вдали от термодинамического равновесия.

С помощью этого метода Д. Н. Зубарев получил определяющие соотношения между сопряженными термодинамическими потоками $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ и силами $\mathbf{G}(\mathbf{r}, t)$ (градиентами макроскопических величин), которые справедливы без ограничений на масштабы процесса

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{K}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}', t'). \quad (1)$$

Вблизи локального термодинамического равновесия эти связи становятся линейными и локальными $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = k \mathbf{G}(\mathbf{r}, t)$, где k — коэффициенты переноса в гидродинамических уравнениях. Интегральные ядра $\mathbf{K}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$, обобщающие коэффициенты переноса на неравновесные условия, представляют собой (в общем случае тензорные) неравновесные пространственно-временные корреляционные функции термодинамических потоков и сил, которые вводят влияние пространственно-нелокальных эффектов и памяти в гидродинамические уравнения. Они представляют собой нелинейные функционалы макроскопических полей, содержащие зависимость от истории нагружения системы, ее размеров и геометрии. Макроскопические выражения для этих функционалов в общем случае неизвестны, поскольку зависят не только от свойств самой системы, но и от истории ее взаимодействия с окружением.

Нелокальные соотношения с памятью (1) служат замыкающими соотношениями для уравнений переноса в неравновесных условиях, которые при этом не локализируются и перестают быть дифференциальными. Интегро-дифференциальные уравнения нелокальной гидродинамики обобщают уравнения классической гидродинамики на неравновесные процессы за пределами механики сплошной среды.

Зубарев доказал, что вдали от термодинамического равновесия второй закон термодинамики для локального производства энтропии $\sigma(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}, t)$ может не выполняться, тогда как интегральное производство энтропии при учете эффектов нелокальности неотрицательно. В общем случае, когда производство энтропии включает в себя пространственную нелокальность и память, энтропия может колебаться, возрастая лишь в среднем. При этом можно утверждать, что в результате некоторого (например, циклического) процесса в конечном счете полная энтропия возросла:

$$S(+\infty) - S(-\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d\mathbf{r} \sigma(\mathbf{r}, t) \geq 0.$$

Метод неравновесного статистического оператора Зубарева, позволяющий корректно описывать процессы вдали от термодинамического равновесия, приводит к новым макроскопическим моделям переноса в реальных системах, которые не привязаны к концепции сплошной среды. Эти нелокальные модели с памятью, единственные принципиально новые модели переноса за последние почти два века, до сих пор не нашли широкого применения ни в теории, ни в практике, несмотря на то, что современная высокоскоростная техника, тонкие технологии, биомеханика и медицина требуют адекватного описания сильно неравновесных процессов. Причина невостребованности столь важных результатов кроется в первую очередь в невозможности непосредственного моделирования ядер переноса как функционалов гидродинамических градиентов. Однако, главная причина — непонимание роли ограничений, наложенных на открытую термодинамическую систему, в формировании масштабов пространственно-временных корреляций. Эффекты нелокальности и памяти — это плата за неизбежную неполноту описания процесса в открытой неравновесной системе. Физические эффекты, порождаемые неравновесными корреляциями, рассматриваются на основе подхода, описанного в следующем разделе.

3. Нелокальная теория неравновесных процессов переноса

На основе нелокальных и запаздывающих уравнений переноса, полученных методами неравновесной статистической механики, автором работы предложена самосогласованная нелокальная теория неравновесных процессов переноса, которая является принципиально новым, универсальным и экономичным способом описания комплекса процессов переноса в открытых системах [3–5]. В рамках этого подхода введены теоретически обоснованные принципы структурирования неопределенности, связанной с видом корреляционных функций. При замыкании модельных уравнений применяются методы, разработанные в теории нелинейных операторных систем специального вида [6], а также кибернетические методы управления адаптивными системами через обратную связь [7–8].

Выявление взаимосвязи между неравновесными корреляционными функциями и понятием внутренней структуры среды позволяет физически обосновать современную тенденцию в математике к дискретизации и построить адекватные вычислительные алгоритмы. Приведем кратко основные формулы, показывающие, как пространственные корреляции, возникающие при неравновесном переносе импульса, связаны с внутренней структурой системы.

Для неравновесного стационарного течения среды, когда эффектами памяти можно пренебречь, нелокальное выражение для тензора напряжений получается из соотношения (1) с интегральным ядром $\mathbf{K}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(t - t')$ при переходе к пределу $t \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \int_{-\infty}^t dt' \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{K}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}'}(\mathbf{r}', t') = \\ &= \int_{-\infty}^t dt' \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(t - t') \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}'}(\mathbf{r}', t') \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}'}(\mathbf{r}', t). \end{aligned} \quad (2)$$

Разложение подынтегральной функции $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{r}'$ в ряд Тейлора в окрестности точки $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ с последующей подстановкой под интеграл (2) приводит к переходу от интегрального оператора к дифференциальному оператору бесконечного порядка

$$\int_V d\mathbf{r}' \mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}'}(\mathbf{r}') = \mathbf{k}_0(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r}) + \mathbf{k}_1(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \mathbf{k}_2(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r}) + \dots \quad (3)$$

В разложении (3) первые моменты неравновесной корреляционной функции $\mathfrak{Z}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ имеют физический смысл, связанный с характеристиками внутренней структуры среды. Момент нулевого порядка $\mathbf{k}_0(\mathbf{r}) = \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ есть тензор 2-го ранга. Его сферическая часть $k_0(\mathbf{r})$ определяет эффективную вязкость среды с внутренней структурой, которая зависит от пространственных координат, размеров и геометрии системы. Исследования высокоскоростных и турбулентных течений в жидкостях и газах показали, что с ростом скорости течения коэффициент вязкости сначала начинает зависеть от градиента скорости, а потом совсем теряет связь с молекулярными свойствами среды [9]. Но и понятие эффективной вязкости, введенное в механике многофазных сред, перестает быть корректным для концентрированных дисперсных смесей, поведение которых определяется сильным коллективным взаимодействием. Момент нормированного ядра $\mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') / k_0(\mathbf{r})$ первого порядка определяет математическое ожидание вектора $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$ $\mathbf{n}_1(\mathbf{r}) = \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \boldsymbol{\gamma}$. Поскольку функция пространственных корреляций отлична от равновесной $\mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \neq \delta(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)$, первый момент $\boldsymbol{\gamma} \neq 0$ отличен от 0. Это значит, что в неравновесной системе возникают новое направление и новая длина, под действием внешнего нагружения среда поляризуется вдоль вектора $\boldsymbol{\gamma}$. В неоднородном поле скоростей и напряжений элемент среды со смещенным на $\boldsymbol{\gamma}$ центром начинает вращаться. Наличие внутренних вращений в среде приводит к асимметрии тензора напряжений при неравновесном переносе. Сферическая часть второго момента неравновесной корреляционной функции, характеризует радиус пространственных корреляций ε : $n_2(\mathbf{r}) = \int_V d\mathbf{r}' \mathbf{N}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2 = \varepsilon^2 - 2\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\gamma}$. Вблизи локального равновесия, когда $\varepsilon \rightarrow 0$, $\boldsymbol{\gamma} \rightarrow 0$, корреляционная функция превращается в δ -функцию. В другом предельном случае $\varepsilon \rightarrow \infty$, корреляционная функция не затухает с ростом расстояния от данной точки, а система проявляет реакцию упругого твердого тела. В обоих предельных случаях среда ведет себя как бесструктурная, когда справедлива концепция механики сплошной среды.

В переходной области при конечных корреляциях и в зависимости от нагружения в среде импульс переносится отдельными элементами, которые можно рассматривать как внутреннюю динамическую структуру системы. В общем случае неравновесная корреляционная функция и ее моменты могут меняться со временем в ходе процесса переноса. Для квазистационарных процессов, где зависят от времени могут только параметры нелокальной модели, в работах [3, 5] использовано модельное выражение для тензора напряжений, включающее три первых корреляционных момента:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = k_0 \frac{1}{\varepsilon} \int_V d\mathbf{r}' \exp \left\{ -\frac{\pi (|\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \boldsymbol{\gamma}(t)|)^2}{\varepsilon^2(t)} \right\} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}'}(\mathbf{r}'). \quad (4)$$

Высшие моменты модельной корреляционной функции (4), характеризующие флуктуации структуры системы, не исчезли из данной модели, но выражаются через три первых момента, явно входящих в модель. В зависимости от размеров и геометрии поля течения пространственная зависимость первых моментов считается либо известной, либо усредненной по объему системы.

Граничные условия, наложенные на систему, приводят к дискретизации спектра масштабов, как это имеет место в квантовой механике. Если, например, выразить скорость через уравнения переноса импульса в виде некоторого функционала поля течения $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \Psi[\mathbf{u}(\mathbf{r}); \boldsymbol{\gamma}(t), \varepsilon(t)]$, то условия прилипания и непротекания на межфазной границе Γ приведут к нелинейным соотношениям относительно параметров $\Psi[\mathbf{u}(\mathbf{r} = \Gamma), \boldsymbol{\gamma}(t), \varepsilon(t)] = 0$, которые в зависимости от степени отклонения от локального рав-

новесия могут привести либо к непрерывному спектру в области справедливости уравнений классической гидродинамики, либо к дискретному вдали от равновесия. Постановка краевых задач для нелокальных в пространстве и времени уравнений за счет структурных параметров становится самосогласованной: процесс переноса зависит от структуры системы, а структура определяется самим процессом переноса. Только такой подход, который включает структурные эффекты на промежуточном между макро- и микро- уровне, приводит к замкнутой самосогласованной формулировке граничных задач теории неравновесных процессов переноса в открытых системах.

4. Эволюция динамической структуры системы

В реальных задачах, как правило, наложенных на систему граничных условий, определяющих иерархию масштабов внутренней структуры среды, оказывается недостаточно для определения всех параметров структуры. Часть этих параметров самопроизвольно релаксирует, стремясь приблизить систему к термодинамическому равновесию и, согласно принципу Джемса [10], достигнуть максимально допустимого при наложенных условиях значения полной энтропии. Для описания эволюции внутренней структуры системы во времени в работах [7–8] был предложен алгоритм скоростного градиента, разработанный в кибернетической физике [8]. В соответствии с методом скоростного градиента, среди всех возможных движений в системе реализуются те, для которых входные переменные изменяются пропорционально градиенту от скорости изменения некоторого целевого функционала. В качестве целевой функции эволюции системы выбирается максимум полной энтропии, произведенной в системе за время неравновесного процесса переноса при заданных граничных условиях воздействия на систему. При этом скорости изменения параметров структуры, входящих в математическую модель системы, играют роль управляющих параметров. Косвенно такой выбор целевой функции и управляющих параметров согласуется с гипотезой Н. Н. Боголюбова о затухании пространственно-временных корреляций в ходе процесса релаксации системы [11]. Для неравновесных процессов, описываемых нелокальными уравнениями без памяти, как следует из метода Зубарева, вместо локального производства энтропии следует рассматривать интегральное производство энтропии в процессе переноса импульса $\Delta S(t) = \int_V d\mathbf{r} \sigma(\mathbf{r}, t)$.

Целевой функционал при граничных условиях $\Psi[\mathbf{u}(\mathbf{r}=\Gamma); \boldsymbol{\gamma}(t), \varepsilon(t)] = 0$ принимает вид

$$\Delta Q(\boldsymbol{\gamma}, \varepsilon) = \int_V d\mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r}; \boldsymbol{\gamma}(t), \varepsilon(t)) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r}) + \sum_m \lambda_m \Psi[\mathbf{u}(\mathbf{r}=\Gamma); \boldsymbol{\gamma}(t), \varepsilon(t)], \quad (5)$$

где λ_m — множители Лагранжа, а m — число граничных условий. Согласно алгоритму скоростного градиента, чтобы получить зависимость от управляющих параметров, целевую функцию следует продифференцировать по времени

$$\frac{d}{dt} \Delta Q(\boldsymbol{\gamma}, \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Delta Q(\boldsymbol{\gamma}, \varepsilon) \frac{\partial \boldsymbol{\gamma}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \Delta Q(\boldsymbol{\gamma}, \varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}. \quad (6)$$

Алгоритм скоростного градиента записывается в двух разных формах: дифференциальной для процессов волнового типа и конечной для медленных процессов диффузионного типа. Поскольку интегральные величины типа генерации энтропии изменяются медленнее, чем сами градиенты макроскопических полей, то и структурная эволюция системы будет медленным процессом, который можно описать уравнениями скоростного градиента в конечной форме. Это обстоятельство обуславливает разделение переменных по масштабам, которое является необходимым условием для описания процессов самоорганизации структуры в системе [12]. Алгоритм скоростного градиента в конечной форме для квазистационарных процессов совпадает с алгоритмом наискорейшего спуска и порождает систему нелинейных дифференциальных уравнений относительно параметров внутренней структуры системы:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\gamma}}{\partial t} = -\mathbf{g} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Delta Q(\boldsymbol{\gamma}, \varepsilon), \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -g_\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \Delta Q(\boldsymbol{\gamma}, \varepsilon). \quad (7)$$

Эмпирические константы $g > 0$ связаны с инерциальными свойствами структуры системы. Алгоритм (7) позволяет обобщить принцип эволюции Глансдорфа — Пригожина в теории диссипативных процессов переноса [13] на эволюцию систем вдали от термодинамического равновесия

$$\frac{d}{dt} \Delta Q(\gamma, \varepsilon) = -\mathbf{g} \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} \Delta Q(\gamma, \varepsilon) \right]^2 - g \left[\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \Delta Q(\gamma, \varepsilon) \right]^2 \leq 0.$$

В силу нелинейности уравнений (7) эволюция может протекать одновременно на нескольких масштабных уровнях, скорость эволюции на них могут сильно варьироваться. Их решения могут ветвиться, в точках ветвления могут возникать метастабильные состояния, где эволюция может изменить свое направление.

Дифференциальная форма уравнения скоростного градиента в этом же случае приводит к уравнению второго порядка, решения которого отвечают уже совершенно другому типу эволюции структуры:

$$\frac{\partial^2 \gamma}{\partial t^2} = -\mathbf{g} \frac{\partial}{\partial \gamma} \Delta Q(\gamma, \varepsilon), \quad \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial t^2} = -g_\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \Delta Q(\gamma, \varepsilon). \quad (8)$$

Модель структурной эволюции второго порядка (8) может давать периодические и квазипериодические решения. Большинство природных процессов, связанных с сезонными изменениями, относятся именно к этому типу. А вот глобальные изменения, усредненные по большим временным масштабам, либо, напротив, процессы на малых по сравнению с периодом временах протекают согласно модели эволюции (7).

Такой подход позволяет рассчитать весь процесс с точностью до начальных условий для параметров структуры и констант в уравнениях скоростного градиента, характеризующих скорость эволюции структуры системы. По отношению к рассматриваемому процессу эволюции системы эти величины, являясь интегральными характеристиками процесса эволюции, эволюционируют достаточно медленно и действительно могут считаться эмпирическими константами в некотором диапазоне условий. Проблема в том, как эти константы определить из эксперимента. Если можно измерить три профиля скорости в нестационарной области, разделенные небольшими временными промежутками, то можно найти константы эволюции и не только полностью восстановить всю эволюцию системы в прошлом, но и прогнозировать будущее поведение системы.

Уравнения эволюции (7) вводят обратные связи между макроскопической эволюцией течения среды и эволюцией ее динамической структуры. Неравновесные процессы вдали от равновесия в целом неустойчивы, но некоторые стационарные состояния могут просуществовать конечное время. Характерное время, в течение которого структура системы не меняет своего типа, можно считать временем жизни данной структуры. Структурный переход в системе, сопровождаемый не только изменением типа структуры, но и резким изменением макроскопических свойств системы, соответствует потере устойчивости системы. Когда макроскопические свойства системы изменяются пороговым образом, можно говорить о катастрофе. Примерами катастрофических процессов являются разрушение твердых тел, возникновение отрыва в гидродинамике, неравновесные фазовые переходы и т. п.

Алгоритм скоростного градиента позволяет интерпретировать эволюцию системы графически [14]. Интегральное производство энтропии системы задает некоторую эволюционирующую гиперповерхность над пространством параметров структуры, на которой граничные условия вычерчивают траекторию, по которой фазовая точка согласно методу скоростного градиента может только скатываться вниз. Ясно, что пока система не скатится до низшей точки траектории, система будет неустойчива. Область локальной устойчивости соответствует попаданию траектории эволюции системы во впадину или на плоский участок поверхности производства энтропии, но обратные связи могут изменить форму поверхности.

В кибернетике [8] показано, что система с обратной связью гораздо более устойчива по отношению к внешним возмущениям, чем системы с жестким программным управлением. Оптимизация масштабных параметров движения и структуры среды, обеспечивающих устойчивое движение тела, решает задачу управления высокоскоростным движением в конденсированной среде.

Таким образом, саморегуляция и самоорганизация являются неотъемлемыми элементами математического моделирования неравновесных процессов, поскольку замыкание балансных уравнений в неравновесных условиях без них невозможно.

5. Эволюция неравновесных течений жидких сред

В данном разделе на примере задачи Рэлея покажем, что в рамках обобщенных моделей нелокальной гидродинамики с законами внутреннего управления можно описать эволюцию системы к термодинамическому равновесию на более неравновесной стадии, чем классическое решение. Затем будет показано,

что при высокоскоростном движении пластины учет пространственных корреляций, описывающих эффекты внутренней структуры системы (в том числе турбулентные эффекты), приводит к уменьшению интегрального произведения энтропии в системе, по сравнению с моделями сплошной среды (например, при ламинарном режиме течения). Это значит, что в неравновесных процессах система стремится минимизировать свои необратимые потери и для этого формирует свою динамическую структуру.

Задача Рэлея [15, 16] считается одной из тестовых задач для анализа новых гидродинамических моделей. Решение этой задачи для ньютоновской модели жидкой среды получается в явном виде.

Задача Рэлея формулируется следующим образом. Бесконечная плоскость ($L \rightarrow \infty$, $l \rightarrow 0$) в момент времени $t = 0$ мгновенно приводится в движение параллельно самой себе с постоянной скоростью U_0 (рис. 1).

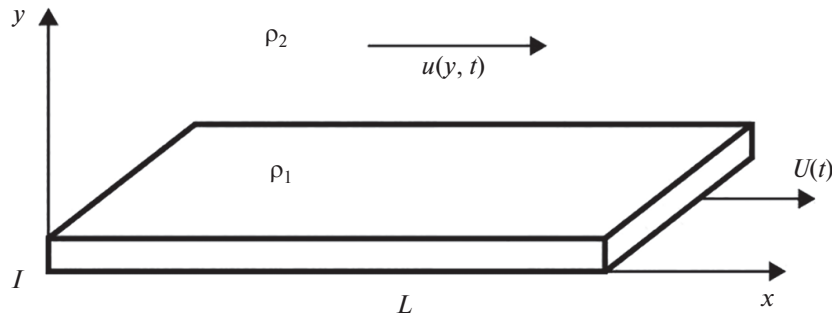


Рис. 1. Схема движения в течении Рэлея.

Fig. 1. Motion scheme in the Rayleigh problem.

Движение вязкой несжимаемой ньютоновской жидкости описывается параболическим уравнением для сдвиговой средней скорости u :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (9)$$

где ν — кинематическая сдвиговая вязкость среды, а ось y направлена по нормали к пластине. При заданном начальном условии и при граничных условиях прилипания

$$u(y, t = 0) = 0, \quad u(y = 0, t) = U_0, \quad u(y \rightarrow \infty, t) \rightarrow 0 \quad (10)$$

уравнение (9) имеет решение

$$u(y, t) = U_0 \left(1 - \operatorname{erf} \frac{y}{2\sqrt{\nu t}} \right). \quad (11)$$

Градиент скорости по нормали к пластине принимает вид

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{U_0}{\sqrt{\pi \nu t}} \exp \left\{ -\frac{y^2}{4\nu t} \right\}. \quad (12)$$

Вязкое сдвиговое напряжение в рамках линейной термодинамики пропорционально градиенту скорости (12)

$$P(y, t) = \nu \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\nu U_0}{\sqrt{\pi \nu t}} \exp \left\{ -\frac{y^2}{4\nu t} \right\}. \quad (13)$$

Выражение имеет δ -образную сингулярность при $y = 0$, $t \rightarrow 0$, которая является следствием параболичности уравнения (9).

Решение Рэлея показывает, что со временем устанавливается стационарное состояние, когда вся жидкость приходит в равномерное движение вместе с пластиной. При переходе в систему координат, движущуюся вместе с пластиной, получаем неподвижную жидкость в полном термодинамическом

равновесии с пластиной. В процессе релаксации сдвиговых напряжений и диссипации кинетической энергии в тепло устанавливается равновесное состояние, которое характеризуется нулевым локальным и интегральным производством энтропии

$$\sigma(y, t) = \frac{\partial u}{\partial y} P(y, t) = \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 = \frac{\nu U_0^2}{\pi \nu t} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2\nu t} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0. \quad (14)$$

$$\Omega(t) = \int_0^\infty dy \sigma(y, t) = \int_0^\infty dy \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 = \frac{\nu U_0^2}{\sqrt{2\pi \nu t}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0. \quad (15)$$

При движении пластины с высокой скоростью процесс переноса импульса от пластины к среде идет по стадиям. Начальная стадия процесса сопровождается генерацией сдвиговых волн, которые распространяются от поверхности пластины и не могут быть описаны параболическим уравнением (9). Волновые процессы необходимо описывать с учетом эффектов памяти об истории разгона с конечной скоростью и запаздывания реакции среды по отношению к движению пластины [4]. Между начальной волновой и конечной гидродинамической (описываемой решением (11)) стадиями вдали от термодинамического равновесия существует переходный режим, в котором формируются вихре-волновые структуры. При высокоскоростном процессе энергия с макроскопического масштабного уровня не успевает опуститься до микроскопического масштаба теплового движения молекул среды [17], оставаясь на промежуточных масштабах в форме вихре-волновых пульсаций скорости, которые формируют динамическую структуру системы в ответ на импульсное внешнее воздействие. В результате производство энтропии в турбулентном режиме должно уменьшаться по сравнению с его значением для ламинарного процесса, описываемого моделями механики сплошной среды [18].

Для описания части переходного режима, примыкающего к гидродинамической стадии, используем нелокальную гидродинамическую модель без учета запаздывания, построенную в рамках нелокальной теории неравновесных процессов [3]

$$P(y, t) = \nu \int_0^\infty \frac{dy'}{\varepsilon} \exp \left\{ -\frac{\pi(y' - y - \gamma)^2}{\varepsilon^2} \right\} \frac{\partial u}{\partial y'}. \quad (16)$$

Такая нелокальная модель описывает процесс релаксации сдвигового напряжения за счет параметров модели ε , γ , которые эволюционируют со временем. δ -образное интегральное ядро в (16) благодаря параметру сдвига $\gamma > 0$, имеющему смысл толщины пристеночного подслоя, где решение Рэлея некорректно, обеспечивает равномерный предельный переход к решению Рэлея (4) во всем полупространстве, включая границу $y = 0$. При этом градиент скорости и вязкое напряжение уже не будут линейно и одновременно связаны между собой в одной пространственной точке.

Приближенное значение сдвигового напряжения можно получить из выражения (16) при подстановке под знак интеграла градиента скорости (12)

$$P(y, t) = -\frac{U_0 \nu}{\sqrt{\pi \nu t}} \int_0^\infty \frac{dy'}{\varepsilon} \exp \left\{ -\frac{\pi(y' - y - \gamma)^2}{\varepsilon^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y'^2}{4\nu t} \right\}. \quad (17)$$

На рис. 2 показано, как трение на поверхности пластины $P(y = 0, t)$ меняется со временем при различных значениях параметров нелокальной модели.

Уменьшение сопротивления при высокоскоростном движении тела в жидкости было экспериментально подтверждено в работе [19]. Интегральное производство энтропии принимает вид

$$\Omega(t; \gamma, \varepsilon) = \int_0^\infty dy \sigma(y, t) = \frac{U_0^2}{\pi t} \int_0^\infty dy \exp \left\{ -\frac{y^2}{4\nu t} \right\} \int_0^\infty \frac{dy'}{\varepsilon} \exp \left\{ -\frac{\pi(y' - y - \gamma)^2}{\varepsilon^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{y'^2}{4\nu t} \right\}. \quad (18)$$

Параметры $\varepsilon(t)$, $\gamma(t)$ эволюционируют со временем согласно принципу скоростного градиента с начальными условиями, которые будут определяться условиями разгона пластины. Построим поверхность $\Omega(t; \gamma, \varepsilon)$ над плоскостью параметров γ , ε .

На рис. 3 (см. вклейку) видно, что наибольшие значения интегрального производства энтропии $\Omega(t; \gamma, \varepsilon)$ имеют место вблизи нулевых значений параметров ε , γ (ламинарный режим по модели (11))

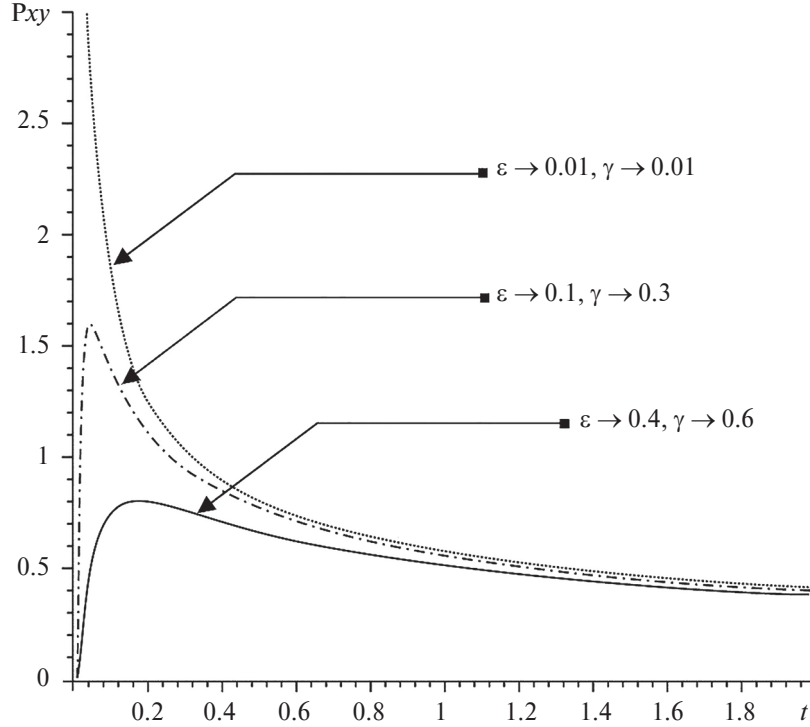


Рис. 2. Устранение начальной сингулярности за счет нелокальных эффектов.

Fig. 2. Elimination of the initial singularity due to nonlocal effects.

и затухают со временем. Траектории спуска по поверхности со временем приводят к уменьшению интегрального производства энтропии и укрупнению динамической структуры системы ε, γ . Это означает, что интегральное производство энтропии для структурированной системы всегда будет отставать от роста энтропии в бесструктурной системе. Тогда уровень интегрального производства энтропии в неравновесном стационарном состоянии за счет формирования динамических структур должен быть ниже, чем для системы бесструктурной при тех же скоростях движения. Поэтому на высоких скоростях выгоден турбулентный режим, а на малых скоростях вблизи равновесия ламинарный. По-видимому, выживание живых систем при изменении условий внешней среды также обеспечивается изменчивостью внутренних процессов.

Для простоты рассмотрим предельный случай при $\varepsilon \rightarrow 0$, но при $\gamma > 0$. Полученное при этом выражение для напряжения уже не содержит начальной сингулярности на границе

$$P(y, t) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} -\frac{vU_0}{\sqrt{\pi vt}} \exp\left\{-\frac{(y+\gamma)^2}{4vt}\right\}. \quad (19)$$

Интегральное производство энтропии с учетом (19) при $\gamma > 0$ снижается по сравнению с решением Рэлея (15):

$$\Omega(t; \varepsilon, \gamma) = \frac{U_0^2}{\pi t} \int_0^\infty dy \exp\left\{-\frac{(y+\gamma)^2}{4vt}\right\} = \frac{vU_0^2}{\sqrt{2\pi vt}} \left[1 - \operatorname{erf} \frac{\gamma}{\sqrt{2vt}}\right] \begin{matrix} \rightarrow 0, & t \rightarrow \infty \\ \rightarrow 0, & t \rightarrow 0 \end{matrix}. \quad (20)$$

Учет параметра γ приводит к немонотонному поведению интегрального производства энтропии вблизи твердой границы. Согласно (20) интегральное производство энтропии на малых временах существенно уменьшается, но со временем структурные эффекты исчезают и устанавливается то же равновесное состояние. Такие эффекты должны наблюдаться и в общем случае (11), поскольку интегральный оператор является сглаживающим функционалом для сдвигового напряжения, зависящим от поля скорости и параметров нелокальности.

6. Заключение

Макроскопическое поведение неравновесной системы определяется эволюцией ее внутренней структуры, которая может возникать и эволюционировать в результате внешнего воздействия на систему. Сама физика неравновесных процессов требует введения самоорганизации — образования новых структур, сопровождающих протекание высокоскоростных процессов в реальных средах. Эти структуры становятся естественными носителями информации в системе и приводят к установлению внутренней обратной связи и саморегуляции в неравновесной системе. Включение обратных связей между макроскопической и структурной эволюцией системы в модель внутреннего управления привносит многовариантность в описание эволюции системы вдали от равновесия. При описании неравновесных процессов элементы теории управления становятся необходимыми для построения корректных математических моделей, обладающих предсказательной способностью. Оказывается, что эти свойства присущи не только живым системам, но и в той или иной степени всем явлениям материального мира.

Особенно учет синергетических эффектов [4, 13] важен при описании динамических процессов в конденсированных средах, где эффекты коллективного взаимодействия порождаются инерционными свойствами плотной среды, которые в значительной степени обуславливают ее макроскопическую реакцию на импульсные воздействия. Макроскопические свойства среды можно считать заданными только вблизи термодинамического равновесия. Поэтому становится ясно, что все попытки использования традиционных макроскопических моделей с набором эмпирических параметров — «жестких» моделей [20] — не будут обладать предсказательной способностью.

Предложенный подход порождает новые перспективы управления высокоскоростными и быстропротекающими процессами, связанные с созданием новых технологий, информационных систем, исследованием природных многомасштабных процессов, а также с предсказанием и предотвращением катастрофических явлений.

Литература

1. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. С. 377–390.
2. *Kuzemsky A.L.* Theory of transport processes and the method of non-equilibrium statistical operator // Intern. J. Mod. Phys. B. 2007. N21. P. 1–129.
3. *Хантулева Т.А.* Нелокальная теория неравновесных процессов переноса. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2013. 278 с.
4. *Мещеряков Ю.И., Хантулева Т.А.* Неравновесные процессы в конденсированных средах. Часть 1. Экспериментальные исследования в свете нелокальной теории переноса. // Физическая мезомеханика. 2014. Т. 17, № 5. С. 21–37.
5. *Родионов А.А., Хантулева Т.А.* Нелокальная гидродинамика и ее приложения // Фундаментальная и прикладная гидрофизика. 2011. Т. 4, № 3. С. 22–36.
6. *Vavilov S.A.* A method of studying the existence of nontrivial solutions to some classes of operator equations with an application to resonance problems in mechanics // Nonlinear Analysis. 1995. V. 24, N5. P. 747–764.
7. *Fradkov A.L.* Cybernetical physics: from control of chaos to quantum control. Berlin: Springer-Verlag, 2007.
8. *Fradkov A.L.* Speed-gradient entropy principle in nonstationary processes // Entropy. 2008. V. 10, N4. P. 757–764.
9. *Боголюбов Н.Н. (мл.), Садовников Б.И., Шумовский А.С.* Математические методы статистической механики модельных систем. М.: Наука, 1989. 295 с.
10. *Jaynes E.* The Maximum Entropy Formalism. MIT: Cambridge, 1979.
11. *Боголюбов Н.Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. М.: Гостехиздат, 1946. 119 с.
12. *Haken H.* Information and self-organization // A macroscopic approach to complex systems. Berlin, Germany: Springer, 2006.
13. *Glansdorff P., Prigogine I.* Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations. Wiley Interscience, 1972.
14. *Khantuleva T.A., Shalymov D.S.* Modelling non-equilibrium thermodynamic systems from the speed-gradient principle // Phil. Trans. R. Soc. A375: 20160220.
15. *Rayleigh L.* On the motion of solid bodies through viscous liquid // Philos. Mag. 1911. N21. P. 697–711.
16. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Издание 5-е. Т. VI. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2001. 736 с.
17. *Ravichandran G., Rosakis A.J., Hodovany J., Rosakis P.* On the convention of plastic work into heat during high-strain-rate deformation // Shock Compression of Condensed Matter-2001. AIP Conf. Proc. N.Y. 2002. V. 620. P. 557–562.

18. Климонтович Ю.Л. Турбулентное движение и структура хаоса. М.: Наука, 1990.
19. Ищенко А.Н., Кулешов В.И., Монахов Р.Ю., Родионов А.А., Хантулева Т.А. Высокоскоростное движение под водой. Теория и эксперимент // Тр. 12-й Всероссийской конференции. «Прикладные технологии гидрофизики и гидроакустики». СПб.: Наука, 2014.
20. Арнольд В.И. «Жесткие» и «мягкие» математические модели. М.: МЦНМО, 2004. 32 с.

References

1. Zubarev D.N. Non-equilibrium statistical thermodynamics. Berlin, Germany, Springer, 1974.
2. Kuzemsky A.L. Theory of transport processes and the method of non-equilibrium statistical operator. *Intern. J. Mod. Phys. B*. 2007, 21, 1–129.
3. Khantuleva T.A. Nonlocal theory of nonequilibrium transport processes. *St. Petersburg, St. Petersburg State University*, 2013. 278 с.
4. Meshcheryakov Yu.I., Khantuleva T.A. Nonequilibrium processes in condensed media: Part 1. Experimental studies in light of nonlocal transport theory. *Phys. Mesomech.* 2015, 18, 3, 228–243.
5. Rodionov A.A., Khantuleva T.A. Nonlocal hydrodynamics and its applications. *Fundamentalnaya i Prikladnaya Gidrofizika*. 2011, 4, 3, 22–36.
6. Vavilov S.A. A method of studying the existence of nontrivial solutions to some classes of operator equations with an application to resonance problems in mechanics. *Nonlinear Analysis*. 1995, 24, 5, 747–764.
7. Fradkov A.L. Cybernetical physics: from control of chaos to quantum control. Berlin, Springer-Verlag, 2007.
8. Fradkov A.L. Speed-gradient entropy principle in nonstationary processes. *Entropy*. 2008, 10, 4, 757–764.
9. Bogoliubov N.N., Sidorov B.I., Schumovsky A.S. Mathematical methods for statistical mechanics of model systems. Moscow, Nauka, 1989 (in Russian).
10. Jaynes E. The Maximum Entropy Formalism. MIT, Cambridge, 1979.
11. Bogoliubov N.N. Problems of dynamic theory in statistical physics. Oak Ridge TN Technical Information Service, 1960.
12. Haken H. Information and self-organization. A macroscopic approach to complex systems. Berlin, Springer, 2006.
13. Glansdorff P., Prigogine I. Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations. Wiley Interscience, 1972.
14. Khantuleva T.A., Shalymov D.S. Modelling non-equilibrium thermodynamic systems from the speed-gradient principle. *Phil. Trans. R. Soc. A375*: 20160220.
15. Rayleigh L. On the motion of solid bodies through viscous liquid. *Philos. Mag.* 1911, 21, 697–711.
16. Landau L.D., Lifshits E.M. Theoretical Physics. Ed. 5th. V. 6. Hydrodynamics. Moscow, Fizmatlit, 2006. 736 p. (in Russian).
17. Ravichandran G., Rosakis A.J., Hodovany J., Rosakis P. On the conversion of plastic work into heat during high-strain-rate deformation. *Shock Compression of Condensed Matter-2001. AIP Conf. Proc. N.Y.*, 2002, 620, 557–562.
18. Klimontovich Yu.L. Turbulent Motion and Structure of Chaos. Moscow, Nauka, 1990 (in Russian).
19. Ishchenko A.N., Kuleshov V.I., Monakhov R. Yu., Rodionov A.A., Khantuleva T.A. High-rate motion under water. Theory and experiment. *Proc. 12th conf. “Applied technologies of hydrophysics and hydroacoustics”*. St. Petersburg, Nauka, 2014 (in Russian).
20. Arnold V.I. “Hard” and “soft” mathematical models. Moscow, 2004. 32 p. (in Russian).

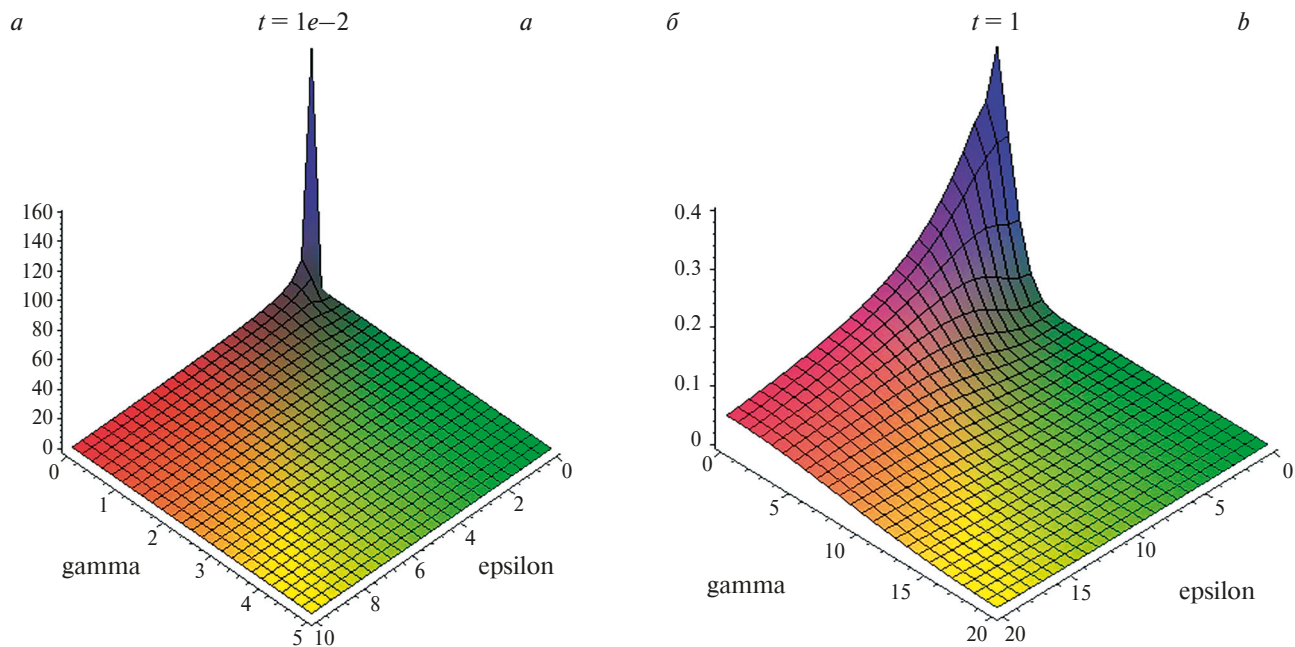


Рис. 3. Вид поверхности (11) над плоскостью параметров ϵ, γ :
 a — в момент времени $t = 0.1$; b — в момент времени $t = 5$.

Fig. 3. Type of surface (11) above the plane of parameters ϵ, γ :
 a — at a time $t = 0.1$; b — at a time $t = 5$.