

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ  
до практичних занять з навчальної дисципліни  
«Фізика складних, нелінійних, нерівноважних систем довкілля»  
для студентів денної та заочної форми навчання  
спеціальності 183 «Технології захисту навколишнього середовища»

Затверджено  
на засіданні групи  
забезпечення спеціальності  
Протокол №   9    
від «15»   04   2021р.

Методичні вказівки до практичних занять з дисципліни «Фізика складних, нелінійних, нерівноважних систем довкілля» для студентів 4 року навчання денної та заочної форми за спеціальністю 183 «Технології захисту навколишнього середовища», рівень вищої освіти бакалавр. / Герасимов Олег Іванович, Кудашкіна Лариса Сергіївна. Одеса, ОДЕКУ, 2021.

## ЗМІСТ

|                                                                                                            |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Передмова.....                                                                                             | 4  |
| 1. Дослідження модельних систем із нестійкими моделями.<br>Осцилятор Ван-дер-Поля.....                     | 5  |
| 1.1. Приклади розв'язання задач.....                                                                       | 6  |
| 1.2. Задачі для самостійного розв'язання .....                                                             | 9  |
| 2. Розрахунки ентропії неідеальних газів.....                                                              | 9  |
| 2.1. Приклади розв'язання задач.....                                                                       | 10 |
| 2.2. Задачі для самостійного розв'язання .....                                                             | 11 |
| 3. Функції розподілу мультимасштабних систем.....                                                          | 12 |
| 3.1. Приклади розв'язання задач.....                                                                       | 14 |
| 3.2. Задачі для самостійного розв'язання .....                                                             | 16 |
| 4. Моделі середнього поля у застосуванні до складних<br>систем. Неевклідові моделі систем та процесів..... | 16 |
| 4.1. Приклади розв'язання задач .....                                                                      | 18 |
| 4.2. Задачі для самостійного розв'язання .....                                                             | 21 |
| 5. Питання для самоперевірки.....                                                                          | 22 |
| 6. Теми самостійних робіт.....                                                                             | 23 |
| Література.....                                                                                            | 24 |

## Передмова

Методичні вказівки призначені для самостійної підготовки студентів-бакалаврів до практичних занять з курсу «Фізика складних, нелінійних, нерівноважних систем довкілля».

Подані основні уявлення про нерівноважні та нелінійні процеси, що відбуваються у довкіллі, методи їх опису та застосування в задачах моделювання станів та переходів поміж ними; математичний та нелінійний базис моделей широкого класу; явищ та процесів, які полягають параметризації з використанням сценаріїв нелінійних явищ.

Методичні вказівки містять скорочений необхідний матеріал з теоретичної частини курсу, приклади задач, задачі для самостійного розв'язування та питання для самоперевірки.

Формою контролю практичного модулю є усне опитування та розв'язування задач під час проведення практичних занять за темами лекційного курсу. Всього за практичні заняття студент може отримати 20 балів. Максимальна кількість балів за одне практичне заняття – 5, при цьому прохідний бал – 3 (60%).

За виконання самостійної роботи за темами із розділу 6 студент отримує додаткові бали.

## 1. Дослідження модельних систем із нестійкими моделями. Осцилятор Ван-дер-Поля.

Різновидом нерівноважних нелінійних дисипативних систем є автогенератори. Саме за рахунок нерівноважності забезпечується надходження енергії, необхідної для підтримання незгасаючих коливань. Класичною в теорії коливань є схема автогенератора Ван-дер-Поля.

Модель нелінійної автоколивальної системи Ван-Дер-Поля широко використовується при дослідженні динаміки коливальних систем, в яких відбувається поповнення енергії системи з зовнішнього джерела. Рівняння

$$\ddot{x} + \mu(x^2 - 1)\dot{x} + x = 0,$$

де  $\mu > 0$  параметр, розглядається як простий гармонійний осцилятор, але з нелінійним «гальмуючим» членом  $\mu(x^2 - 1)\dot{x}$ . Цей член діє як «позитивне гальмування» при  $x > 1$  і як «негативний» при  $x < 1$ . Іншими словами, для великої початкової амплітуди осциляції загасають, але якщо вона досить мала, то осциляції зростають. Як можна припускати, система, в кінці кінців, стабілізується до стійких осциляцій. Виявляється, рівняння Ван дер Поля має єдиний стійкий граничний цикл для кожного  $\mu > 0$ .

План розв'язання задач методом Ван-дер-Поля:

1. Представляємо рівняння динамічної системи в формі Коші:

$$\{\dot{x} = y, \quad \dot{y} = -x + \mu f(x, y).\}$$

2. Складаємо систему скорочених рівнянь Ван-дер-Поля:

$$\{\dot{K} = \mu\Phi, \quad \dot{\Theta} = \mu\Psi,\}$$

у яких функції  $\Phi$  і  $\Psi$  визначаються по наступних формулах:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi = \Phi(K) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(K \cos u, -K \sin u) \sin u \, du, \\ \Psi = \Psi(K) = -\frac{1}{2\pi K} \int_0^{2\pi} f(K \cos u, -K \sin u) \cos u \, du. \end{array} \right.$$

3. Визначаємо стан рівноваги рівняння  $\dot{K} = \mu\Phi$ . Якщо  $\Phi'(K_i) < 0$ , то стан рівноваги стійкий, а якщо  $\Phi'(K_i) > 0$  – нестійкий. Якщо  $\Phi'(K_i) = 0$  питання про стійкість залишається відкритим. Стан рівноваги – окружність радіусу  $K_i$  на площині  $(a, b)$ .
4. Аналізуємо рівняння  $\dot{\Theta} = \mu\Psi$ . Можливі два випадки:

- а)  $\Psi(K) \equiv 0$ . Отже,  $\Theta = \Theta_0 = \text{const}$ , тобто фазова траєкторія рухається за променем  $\Theta = \text{const}$ . Станам рівноваги на площині змінних Ван-дер-Поля відповідають граничні цикли на площині  $(x, y)$ . Стійким станам рівноваги відповідають орбітно-стійкі граничні цикли, а нестійким – нестійкі граничні цикли.
- б)  $\Psi(K) \neq 0$ . В цьому випадку корінням рівняння  $\Phi(K) = 0$  також відповідають граничні цикли на площині  $(x, y)$ . Фазові траєкторії викривлені, але якісно система не змінилась. З'являється поправка на частоту, яка дорівнює  $\mu\Psi(K_i)$ .

5. Визначаємо біфуркації.

6. В задачах на обчислення поправки частоти використовуємо формулу:

$$\Delta\omega = \mu\Psi(K_i),$$

де  $K_i$  – корень рівняння  $\Phi(K) = 0$ .

7. Для визначення автоколивань системи необхідно знайти корені  $K_i$  і дослідити стійкість режиму автоколивань.

## 1.1. Приклади розв'язання задач.

### Задача 1.

Знайти залежність амплітуди коливань від параметру  $\alpha$ . Побудувати біфуркаційну діаграму по  $\alpha$  і фазовий портрет:

$$x + \ddot{x} = -\mu \frac{d}{dt} [x - 2((x - \alpha) - (x - \alpha)^3)], \quad 0 < \mu \ll 1.$$

Розв'язок.

Перепишемо систему у наступному вигляді:

$$x + \ddot{x} = \mu[\dot{x} - 6\dot{x}(x - \alpha)^2].$$

Позначимо:

$$f(x, \dot{x}) = \dot{x} - 6\dot{x}(x - \alpha)^2.$$

Приводимо систему до форми Коши:

$$\{\dot{x} = y, \quad \dot{y} = -x + \mu f(x, y).\}$$

Складаємо систему скорочених рівнянь, для яких знаходимо функції  $\Phi$  і  $\Psi$ :

$$\{\dot{K} = \mu\Phi, \quad \dot{\Theta} = \mu\Psi.\}$$

$$\begin{aligned}\Phi(K) &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(K \cos u, -K \sin u) \sin u \, du \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (-K \sin u + 6K \sin u (K \cos u - \alpha)^2) \sin u \, du \\ &= \frac{1}{2} K(1 - 6\alpha^2) - \frac{3}{4} K^3.\end{aligned}$$

$$\Psi(K) = -\frac{1}{2\pi K} \int_0^{2\pi} f(K \cos u, -K \sin u) \cos u \, du \equiv 0,$$

тому, що береться інтеграл від непарної функції по періоду.

Визначаємо стани рівноваги:

$$\Phi(K) = 0 \Rightarrow K_1 = 0, K_2 = \sqrt{\frac{2}{3}(1 - 6\alpha^2)}.$$

Стан рівноваги  $K_2$  існує, коли  $|\alpha| < \frac{1}{\sqrt{6}}$

Дослідимо стан рівноваги (СР) на стійкість. Для цього обчислимо  $\Phi'(K)$ :

$$\Phi'(K) = \frac{1}{2}(1 - 6\alpha^2) - \frac{9}{4}K^2.$$

Досліджуємо СР  $K_1$ :

$$\Phi'(0) = \frac{1}{2} - 3\alpha^2 \Rightarrow \begin{cases} \alpha^2 > \frac{1}{6} & \text{— СР стійке} \\ \alpha^2 < \frac{1}{6} & \text{— СР нестійке} \end{cases}$$

Досліджуємо СР  $K_2$ :

$$\Phi'(K_2) = 6\alpha^2 - 1 \Rightarrow \text{якщо } \alpha^2 < \frac{1}{6} \text{ — СР стійке.}$$

Побудуємо біфуркаційну діаграму.

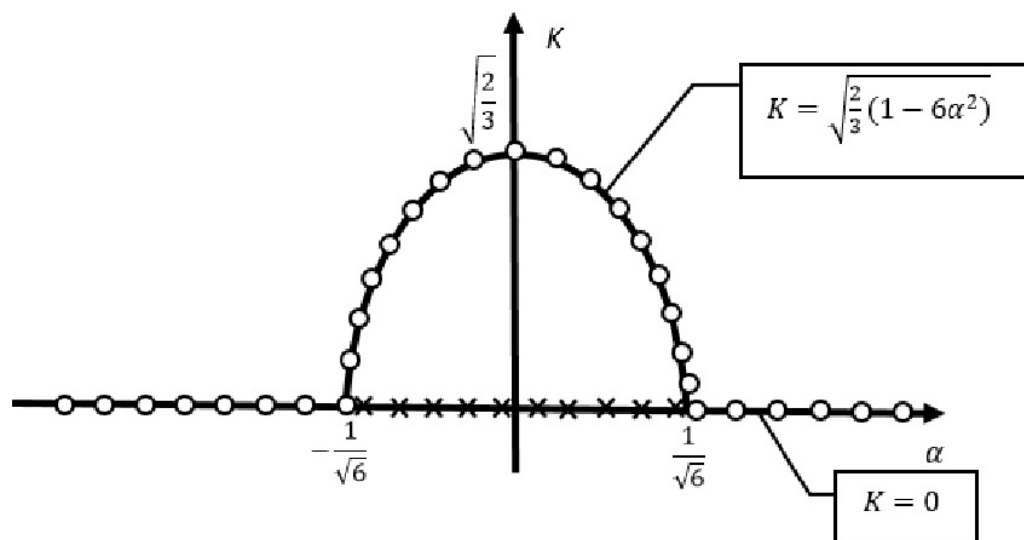


Рис.1.1. Показано кружечком стійкість, хрестиком – нестійкість.

Побудуємо фазові портрети у залежності від параметра  $\alpha$ .

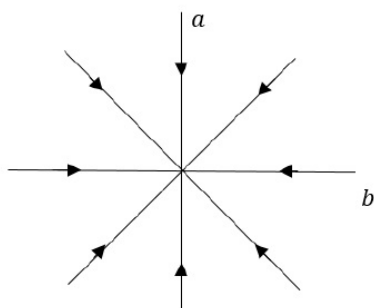


Рис. 4

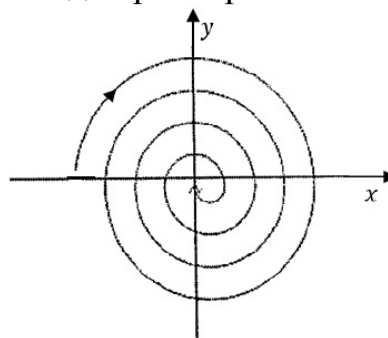


Рис. 5

$$|\alpha| > \frac{1}{\sqrt{6}}$$

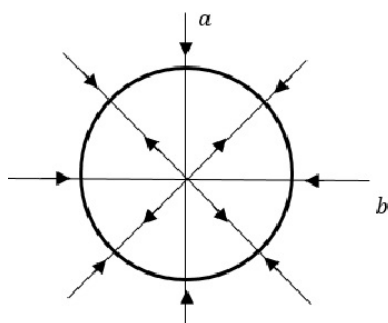


Рис. 6

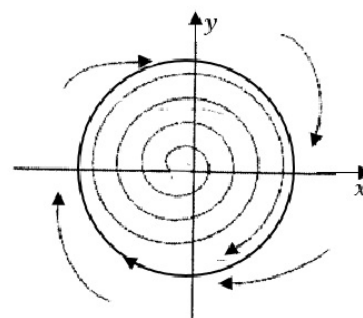


Рис. 7

$$|\alpha| < \frac{1}{\sqrt{6}}$$

Рис. 2. Фазові портрети системи.

## 1.2. Задачі для самостійного розв'язання.

1.2.1. Знайти залежність амплітуди автоколивань від  $\alpha$ . Побудувати біфуркаційну діаграму по  $\alpha$  і вказати біфуркаційні значення  $\alpha$ . Які типи біфуркацій?  $\ddot{x} + x = -\mu[\dot{x} - \alpha(\dot{x} - \dot{x}^3)], \quad 0 < \mu \ll 1.$

1.2.2. Побудувати біфуркаційну діаграму по  $\alpha$  і фазовий портрет системи. Яким буде вигляд фазового портрету при  $\mu=0$ ?

$$\ddot{x} + x = -\mu \frac{d}{dt}[x - \alpha x^3 + x^5], \quad 0 < \mu \ll 1.$$

## 2. Розрахунки ентропії неідеальних газів.

Оборотній термодинамічний процес – це процес, який може бути проведений в зворотному напрямку без того, щоб в системі і оточуючому середовищі залишались будь-які зміни.

Отже, для оборотності процесу необхідно:

1) Щоб існував процес  $2 \rightarrow 1$  при якому система проходить через ті ж проміжні стани, що й при процесі  $1 \rightarrow 2$ .

2) Ні в системі, ні в оточуючих тілах, не відбувається жодних змін, коли система повернеться у вихідний стан.

Якщо ж перехід з 2 в 1 неможливо здійснити без змін в оточуючих тілах, то такий процес є необоротним.

Всі реальні процеси в реальних системах є необоротними. Причина необоротності – це нееквівалентність теплоти і роботи.

Поняття оборотного процесу є абстракцією. Реальні процеси тим більше підходять під це визначення, чим з більшою підставою цей процес можна назвати рівноважним. Надалі будемо вважати поняття рівноважного і оборотного процесів такими, що співпадають.

Оскільки всі природні, самовільні процеси відбуваються із скінченною швидкістю, тобто є нерівноважними, отже під час таких процесів в замкнених системах ентропія завжди зростає. Таким чином, другий початок термодинаміки для нерівноважних процесів вказує напрямок їх протікання: природні процеси в ізольованих (або тільки адіабатично ізольованих) системах проходять у напрямку збільшення ентропії.

Термодинамічні розрахунки зміни ентропії засновані на визначенні:

$$dS = \frac{\delta Q_{\text{обор}}}{T}$$

(тобто, на II закону термодинаміки для рівноважних процесів: у будь-якої термодинамічної системи існує однозначна й адитивна функція стану, яку називають ентропією, що при рівноважних адіабатичних процесах не змінюється) і на властивостях частинних похідних ентропії по термодинамічних параметрах:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = \frac{C_P}{T}; \quad \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \frac{C_V}{T}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P; \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V.$$

Для реальних газів найпростішим термічним рівнянням стану, яке на якісному рівні вірно описує їх поведінку, навіть у випадку переходу до рідкого стану, є рівняння Ван-дер-Ваальса, і для одного моля речовини має вигляд:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) \cdot (V - b) = RT.$$

де  $a$  і  $b$  – сталі для даної речовини, визначають відповідно сили притягання та сили відштовхування, що діють між молекулами газу.

## 2.1. Приклади розв'язання задач.

### Задача 1.

Обчислити ентропію газу Ван-дер-Ваальса.

#### Розв'язок.

На підставі першого і другого законів термодинаміки можна записати

$$S = \int \frac{\delta Q}{T} = \int \frac{dU + p dV}{T} = \int \frac{C_V dT + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T + p\right] dV}{T}.$$

Використовуючи зв'язок між термічним і калоричним рівнянням стану

$$T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T + p,$$

матимемо

$$S = \int \frac{C_V dT + T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V dV}{T}.$$

З рівняння Ван-дер-Ваальса випливає, що

$$p = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2},$$

тому

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \frac{R}{V-b},$$

отже,

$$S = \int C_V \frac{dT}{T} + R \int \frac{dV}{V-b}.$$

Оскільки  $C_V$  слабо залежить від температури, ентропію одного моля газу Ван-дер-Ваальса шукаємо у вигляді

$$S = C_V \ln T + R \ln(V-b) + S_0.$$

### Задача 2.

Визначити залежність ентропії від об'єму для термодинамічної системи, яка описується рівнянням стану (для одного моля):

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) \cdot (V-b) = RT.$$

Розв'язок.

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \frac{R}{V-b}.$$

Інтегруючи цю рівність, знаходимо залежність ентропії від об'єму:

$$S(V) = \int \frac{R}{V-b} dV = R \ln(V-b) + \text{const},$$

де  $\text{const}$  залежить від температури.

## 2.2. Задачі для самостійного розв'язання.

2.2.1. Визначити залежність ентропії від об'єму для термодинамічної системи, яка описується рівнянням стану (для одного моля):

$$\left(P + \frac{a}{TV^2}\right) \cdot (V-b) = RT.$$

2.2.2. Визначити залежність ентропії від об'єму для термодинамічної системи, яка описується рівнянням стану (для одного моля):

$$PV = RT \cdot \left(1 + \frac{b}{V} + \frac{c}{V^2}\right).$$

2.2.3. Один моль газу описується рівнянням стану:

$$(P + f(V))(V - b) = RT,$$

де  $f(V)$  – деяка функція, що не залежить від температури. Потрібно розрахувати зміну ентропії газу при його незворотному ізотермічному розширенні від об'єму  $V_1$  до об'єму  $V_2$ .

### 3. Функції розподілу мультимасштабних систем.

Для розуміння макроскопічних систем, що складаються з величезного числа частинок, необхідно, перш за все, сформулювати нові поняття, що відповідають такій новій якості, як надзвичайна складність системи. Ці поняття, засновані на фундаментальних законах фізики, дозволять визначити параметри, найбільш зручні для опису макроскопічних систем, встановити закономірності, які діють в макроскопічних системах, і дадуть нам відносно прості методи для визначення та прогнозування їх властивостей. Наявність великого числа частинок в складі системи дає можливість ефективно використовувати статистичні методи.

Обчислення фізичних величин шляхом усереднення їх значень у мікростанах становить основу статистичного методу дослідження макросистем.

Механічний стан системи повністю визначається радіус-векторами  $\vec{r}_i$  і імпульсами  $\vec{p}_i$  частинок системи. Індекс  $i = 1, 2, \dots, N$  нумерує частинки системи;  $N$  – повне їх число. Набори радіус-векторів та імпульсів всіх частинок системи позначимо стисло через  $q$  і  $p$ . Простір можливої зміни величин  $q$  і  $p$  (точніше, наборів величин) називають фазовим простором системи. Він має розмірність, рівну  $6N$ , тобто дорівнює подвоєному числу ступенів свободи системи (число ступенів свободи однієї частинки дорівнює трьом). Кожна точка фазового простору зображує певний механічний стан системи.

Те, що величини  $q$  і  $p$  повністю задають механічний стан системи, проявляється в тому, що в замкненій системі вони повністю визначають і розвиток цього стану в часі  $t$ . Будучи записаними в змінних  $q$  і  $p$ , рівняння руху системи математично виявляються замкнутими. Такі рівняння добре відомі. Вони називаються рівняннями Гамільтона. Якщо ми знаємо величини  $q(0)$  і  $p(0)$  у початковий момент часу  $t = 0$ , можна за допомогою цих рівнянь однозначно знайти величини  $q(t)$  і  $p(t)$  в усі наступні моменти часу  $t$ .

Зі зміною механічного стану системи в часі, точка, що зображує цей стан фазового простору, рухається в ньому по деякій траєкторії, що називається фазовою траєкторією. Фазові траєкторії, що вийшли з різних початкових точок фазового простору, не можуть перетинатися між собою. Внаслідок величезного числа ступенів свободи макроскопічної системи фазові траєкторії мають надзвичайно складний і заплутаний характер. Для консервативних систем енергія зберігається, так що гамільтоніан системи

$$H(q, p) = E \quad (3.1)$$

Отже, фазова траєкторія повинна лежати на поверхні постійної енергії в фазовому просторі, що визначається умовою (1), – так званий ергодичний поверхні. Коли макроскопічна система знаходиться у рівновазі, її макроскопічні характеристики залишаються постійними в часі. Однак, з мікроскопічної точки зору її стан весь час змінюється, і ми не знаємо, в якому мікростані перебуває система в даний момент (тобто, де конкретно в даний момент знаходиться фазова точка на ергодичній поверхні).

У будь-якому реальному експерименті властивості макроскопічного тіла сприймаються як результат колективної поведінки його частинок відразу за досить великий проміжок часу. Тільки як усереднені за такий проміжок часу потрібно розуміти властивості макроскопічного тіла в кожний «поточний» момент часу  $t$ . При надзвичайній складності і заплутаності фазових траєкторій в макроскопічній системі практично неможливо говорити про окремий механічний стан системи в даний момент часу. Практично можна говорити лише про ймовірність знаходження системи в окремих ділянках її фазового простору.

Ймовірність  $dw$  знаходження системи в момент часу  $t$  в нескінченно малому елементі  $dqdp$  її фазового простору поблизу точки  $\rho(q, p)$  (де  $(q, p) \equiv (q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N)$ ) записують у вигляді

$$dw = \rho(q, p, t) dqdp. \quad (3.2)$$

Функцію  $\rho(q, p, t)$ , що визначається рівністю (3.2) і представляє собою щільність ймовірності розподілу механічних станів системи в її фазовому просторі, називають повною функцією розподілу. Вона дає повний статистичний опис системи: дозволяє знайти і ймовірності окремих механічних станів системи, і середні значення будь-яких фізичних величин системи.

Таким чином, множина допустимих станів зображується набором фазових точок, кожна з яких рухається вздовж своєї фазової траєкторії. Фазовий портрет системи дається безліччю точок, розподілених у фазовому просторі. Цю множину можна розглядати як зображення в даний момент часу дуже великого (за кількістю точок) числа копій даної системи, що знаходяться у відповідних допустимих мікростанах.

Сукупність макроскопічно однакових систем, розподілених по допустимих мікростанах, називають статистичним ансамблем. Нехай є певний набір станів системи. За великий період часу  $T$  система проходить багато разів через всі стани, перебуваючи деякий час в кожному з них.

Для розгляду системи частинок, що взаємодіють, користуються ентропією Гіббса.

Розглядатимемо систему, що характеризується довільною функцією Гамільтона  $H(X)$ , а набір змінних  $X$  визначений вище. Рівноважний стан цієї системи описується відомим з курсу статистичної фізики канонічним розподілом Гіббса

$$f_c(X) = \exp \left[ \frac{F - H(X)}{k_B T} \right], \quad (3.3)$$

де  $F$  – вільна енергія рівноважного стану. Цей розподіл задовольняє умові нормування (1.1.22), з якої й можна знайти вільну енергію  $F$  за відомими гамільтоніаном  $H(X)$  та температурою  $T$ .

Нехай  $f(X)$  – розподіл, що відповідає деякому довільному рівноважному стану, задовольняє умові нормування (3.6) і для якого середнє значення функції Гамільтона  $H(X)$  таке саме, як для канонічного розподілу (3.3):

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(X) f_c(X) dX = \int_{-\infty}^{\infty} H(X) f(X) dX. \quad (3.4)$$

Позначимо відповідно через  $S_c$  та  $S$  ентропію, що відповідає станам із розподілами  $f_c(X)$  та  $f(X)$ . Тоді відповідно до теореми Гіббса

$$S_c - S = \int_{-\infty}^{\infty} f(X) \ln \frac{f(X)}{f_c(X)} dX \geq 0. \quad (3.5)$$

Слід підкреслити, що інтеграл у співвідношенні (3.5) дорівнює різниці ентропії лише за виконання додаткової умови (3.4). У цьому випадку він виступає в ролі функції Ляпунова для досліджуваної системи частинок.

### 3.1. Приклади розв'язання задач.

#### Задача 1.

Розглянути модель системи, коли ентропія Гіббса збігається з ентропією Больцмана.

Розв'язок.

Розглянемо  $6N$ -вимірний фазовий простір  $X = \{r_1, r_2, \dots, r_N, p_1, p_2, \dots, p_N\}$ . Кожна точка такого простору відповідає певному стану системи з  $N$  частинок. При статистичному описі точки розташовуються в просторі  $X$  випадковим чином, і можна ввести відповідну функцію розподілу  $f_N(X, t)$ , що в загальному випадку залежить від часу та задовольняє звичайній умові нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_N(X, t) dX = 1 \quad (3.6)$$

Тоді ентропія Гіббса задається співвідношенням

$$S_G(t) = -k_B \int_{-\infty}^{\infty} f_N(X, t) \ln[f_N(X, t)] dX + S_0 \quad (3.7)$$

Константу  $S_0$  у (3.7) слід обрати такою самою, як у визначенні ентропії Больцмана. Тоді за відсутності кореляцій, тобто коли рух кожної з частинок системи можна вважати незалежним від руху всіх інших частинок, багаточастинковий розподіл записується просто як добуток  $N$  одночастинкових,

$$f_N(X, t) = \prod_{i=1}^N f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t), \quad (3.8)$$

і ентропія Гіббса збігається з ентропією Больцмана:

$$\begin{aligned} S_G(t) &= -k_B \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N f(\vec{r}_j, \vec{p}_j, t) \ln \left[ \prod_{i=1}^N f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t) \right] dX + S_0 = \\ &= -k_B \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t) \ln[f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t)] d\vec{r}_i d\vec{p}_i \prod_{j \neq i} \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}_j, \vec{p}_j, t) d\vec{r}_j d\vec{p}_j + S_0 = \\ &= -k_B \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t) \ln[f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t)] d\vec{r}_i d\vec{p}_i + S_0 = \\ &= -k_B N \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}, \vec{p}, t) \ln[f(\vec{r}, \vec{p}, t)] d\vec{r} d\vec{p} + S_0 = S_B \end{aligned} \quad (3.9)$$

(враховано, що всі частинки мають однакові одночастинкові функції розподілу).

В загальному випадку, коли рівність (3.8) не справджується, виконується умова

$$S_G \leq S_B. \quad (3.10)$$

Справді, максимум ентропії повинен відповідати максимальній неупорядкованості системи, а взаємодія між частинками спричиняє, очевидно, до появи такої впорядкованості.

### 3.2. Задачі для самостійного розв'язання.

3.2.1. Посудина розділена на два сполучені між собою відділення об'ємами  $V_1$  та  $V_2$ . Ймовірність потрапляння частинки до кожного з відділень пропорційна до його об'єму. Запишіть ймовірність того, що  $N$  частинок розподіляться по відділеннях у кількості  $N_1$  та  $N_2$  відповідно. Запишіть ентропію, що відповідає стану термодинамічної рівноваги.

3.2.2. Розв'яжіть задачу 3.2.1 для випадку, коли посудина розділена

а) на три відділення з об'ємами  $V_1$ ,  $V_2$  та  $V_3$ ;

б) на  $n$  однакових відділень.

## 4. Моделі середнього поля у застосуванні до складних систем. Неевклідові моделі систем та процесів.

Чи може система будь-якого ступеня складності знаходитися в рівновазі, і за яких умов це можливо? Відповідь на це питання має велике теоретичне і практичне значення. Важливим випадком поставленої задачі є фазові рівноваги.

Нехай система складається з  $n$  незалежних компонент та існує у вигляді  $r$  дотичних фаз. Кожна фаза характеризується тиском, температурою і  $n$  хімічними потенціалами. Нехай загальні температура і тиск у всіх фазах будуть  $P$  і  $T$ . Тоді умови рівноваги фаз можна записати у вигляді

$$\mu_1^i = \mu_2^i = \dots = \mu_r^i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.1)$$

Кожен з цих потенціалів є функцією від  $(n+1)$  незалежних змінних –  $P$ ,  $T$  і  $(n-1)$  різних концентрацій компонент у даній фазі. Умови (107) являють собою систему  $n(r-1)$  рівнянь з числом невідомих у цих рівняннях  $r(n-1)+2$ . Для того, щоб ці рівняння мали рішення, треба щоб їх число було не більше числа невідомих: Звідси

$$r \leq n + 2. \quad (4.2)$$

Іншими словами, в системі, що складається з  $n$  незалежних компонент, може перебувати одночасно в рівновазі не більше, ніж  $(n+2)$  фази. Умова (4.2) виражає так зване правило фаз Гіббса. Зокрема, у випадку однієї компоненти максимальне число співіснуючих фаз дорівнює трьом. Таким чином, число параметрів, які можна задавати довільно без порушення умов рівноваги, дорівнює

$$f = n - r + 2. \quad (4.3)$$

Це число називають числом термодинамічних ступенів свободи системи. Якщо число фаз дорівнює свему максимальному значенню ( $n+2$ ), то  $f=0$  тобто, в рівняннях (4.1) всі змінні визначені, і жодної з них не можна змінити без того, щоб не порушилася рівновага і не зникла якась із фаз.

При всіх фазових переходах тіло або виділяє, або поглинає енергію у вигляді прихованої теплоти відповідного переходу (теплота плавлення, випаровування тощо). Фазові переходи, що супроводжуються стрибкоподібною зміною енергії або інших величин, пов'язаних з енергією, наприклад, густини, називаються фазовими переходами першого роду. Для них характерна стрибкоподібна зміна властивостей речовин. При фазовому переході першого роду нова фаза не виникає відразу у всьому об'ємі. Спочатку утворюються зародки нової фази, які ростуть, поширюючись на весь об'єм.

Зустрічаються, однак, фазові переходи, при яких перетворення відбувається відразу во всьому об'єму в результаті безперервної зміни кристалічної решітки, тобто взаємного розташування частинок в решітці. Це може призвести до того, що при певній температурі зміниться симетрія решітки. Ця температура і буде точкою фазового переходу, який в цьому випадку називається фазовим переходом другого роду. Температура, при якій відбувається фазовий перехід другого роду, називається точкою Кюрі. Іншими словами, фазові переходи можна охарактеризувати наступним чином:

- при фазових переходах першого роду зазнають розрив перші похідні хімічного потенціалу і має місце рівняння Клапейрона – Клаузіуса, що визначає лінію співіснування фаз;
- при фазових переходах другого роду неперервні перші похідні хімічного потенціалу, але зазнають розрив другі похідні (теплоємність, коефіцієнт об'ємного розширення).

До фазових переходів другого роду належить цілий ряд явищ у кристалах при зміні їх температури: сегнетоелектричні переходи, парамагнітні/феромагнітні переходи, перехід у надпровідний стан, розупорядкування сплавів та інші. Сюди ж належить і перехід рідкого гелію в надплинний стан. У всіх цих явищах можна вказати так званий «параметр порядку», що виникає в низькотемпературній фазі і перетворюється на нуль у точці переходу.

Відповідно до теорії середнього поля, взаємодія частинки з іншими частинками замінюється впливом на неї деякого самоузгодженого усередненого поля оточення (молекулярного поля), що визначається станом системи.

Наприклад, в магнетику на окрему частинку у додаток до зовнішнього магнітного поля діє молекулярне поле, джерелом якого є магнітні моменти

сусідніх частинок, середні значення яких цілком визначаються намагніченістю системи. Тобто,  $B_{\text{мол}} = \lambda \bar{M}$ , де  $\lambda$  – параметр молекулярного поля, в ізотропному випадку це скаляр. Можна оцінити параметр  $\lambda$ , використовуючи гамільтоніан ізотропного феромагнетика у моделі Гейзенберга. Виявляється, що він дорівнює  $\lambda = Jz/N\gamma^2$ , де  $z$  – число найближчих сусідів частинки.

#### 4.1.1. Приклади розв'язання задач.

##### Задача 1.

Розглянемо деяку модельну хімічну реакцію, відому в літературі як брюсселятор:



Вважатимемо, що концентрації початкових речовин А, В та продуктів реакції С, D підтримуються сталими, тоді як концентрації проміжних продуктів X, Y можуть змінюватися з часом. Тоді, позначивши концентрації тими ж літерами, що й хімічні речовини, і вважаючи, що всі константи швидкостей реакцій дорівнюють одиниці, можна записати (з урахуванням дифузії для одновимірної моделі) кінетичні рівняння для концентрацій проміжних продуктів реакції в такому вигляді:

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = A + X^2 Y - BX - X + D_x \frac{\partial^2 X}{\partial z^2}; \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = -X^2 Y + BX + D_y \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2}. \end{cases} \tag{4.1.2}$$

Стаціонарний однорідний стан системи відповідає термодинамічній гілці. Для нього

$$\begin{cases} A + X(XY - B - 1) = 0; \\ X(XY - B) = 0, \end{cases} \tag{4.1.3}$$

Звідки

$$X_0 = A, \quad Y_0 = \frac{B}{A}. \tag{4.1.4}$$

З'ясувати стійкість цього стану.

Розв'язок.

Розглянемо малі відхилення від стійкості:

$$X = X_0 + \Delta X, \quad Y = Y_0 + \Delta Y, \quad |\Delta X| \ll X_0, \quad |\Delta Y| \ll Y_0. \quad (4.1.5)$$

Тоді з (4.1.2) можна отримати:

$$\begin{cases} \frac{\partial \Delta X}{\partial t} = 2B\Delta X + A^2\Delta Y - B\Delta X - \Delta X + D_x \frac{\partial^2 \Delta X}{\partial z^2}; \\ \frac{\partial \Delta Y}{\partial t} = B\Delta X - 2B\Delta X - A^2\Delta Y + D_y \frac{\partial^2 \Delta Y}{\partial z^2}. \end{cases} \quad (4.1.6)$$

Шукатимемо розв'язок системи (4.1.6) в експоненціальній формі:

$$\Delta X, \Delta Y \sim \exp(\lambda t - ikz). \quad (4.1.7)$$

Підставивши (4.1.7) до (4.1.6), можна отримати систему лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь щодо амплітуд відхилень:

$$\begin{cases} (B - 1 - \lambda - k^2 D_x) \Delta X + A^2 \Delta Y = 0; \\ -B \Delta X + (-\lambda - A^2 - k^2 D_y) \Delta Y = 0. \end{cases} \quad (4.1.8)$$

Прирівнявши до нуля визначник системи (4.1.8), отримаємо квадратне рівняння щодо  $\lambda$ . Його корені можна подати у формі

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= -b \pm \sqrt{b^2 - c}, \\ 2b &= A^2 - B + 1 + k^2 (D_x + D_y); \\ c &= A^2 + k^2 [A^2 D_x + (1 - B) D_y] + k^4 D_x D_y. \end{aligned} \quad (4.1.9)$$

Зрозуміло, що стаціонарний однорідний розв'язок (4.1.5) системи (4.1.2) буде стійким лише за виконання умови  $\text{Re} \lambda_{1,2} < 0$ .

Розіб'ємо площину  $\{b, c\}$  на характерні області з різними значеннями  $\text{Re} \lambda_{1,2}$  та  $\text{Im} \lambda_{1,2}$  (рис. 4.1).

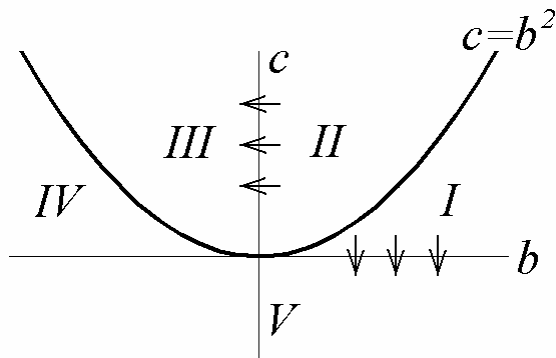


Рис. 4.1. Характерні області стійкості та нестійкості стаціонарного однорідного розв'язку для брюсселятора.

В області I маємо  $\lambda_{1,2} < 0$  ( $\text{Im}\lambda_{1,2}=0$ ). Тут малі відхилення від розв'язку (4.1.4) будуть експоненціально згасати з часом.

В області II маємо  $\text{Im}\lambda_{1,2} \neq 0$ ,  $\text{Re}\lambda_{1,2} < 0$ . Тут згасання малих відхилень від однорідного стаціонарного розв'язку матиме осциляторний характер.

Отже, I і II – це області стійкості однорідного стаціонарного розв'язку. В усіх інших областях цей розв'язок буде нестійким.

В області III маємо  $\text{Im}\lambda_{1,2} \neq 0$ ,  $\text{Re}\lambda_{1,2} > 0$ . Іншими словами, в цій області відхилення від положення рівноваги матиме характер біжучої хвилі, амплітуда якої з часом зростає, або суперпозиції таких хвиль. Випадок  $k=0$  (або  $D_x=D_y=0$ ) дає синфазні коливання, амплітуда яких зростає з часом. Перехід з області II в область III відповідає (при  $k=0$ ) відомій біфуркації Андронова – Хопфа, або м'якому самозбудженню коливань.

В області IV маємо  $\text{Im}\lambda_{1,2}=0$ ,  $\lambda_{1,2} > 0$ . Відхилення від положення рівноваги являє собою просторово періодичне збурення, що монотонно зростає з часом (так звана аперіодична нестійкість), або набір таких збурень.

Нарешті, в області V буде  $\text{Im}\lambda_{1,2}=0$ ,  $\lambda_1\lambda_2 < 0$ , тобто поведінка відхилень від рівноваги буде приблизно такою ж, як і в області IV. Перехід з області I в область V відповідає так званій біфуркації Тюрінга.

## Задача 2.

Як ми бачили на прикладі брюсселятора, перехід від термодинамічної гілки до формування структури проходить через точку біфуркації (одну або декілька), після чого в системі розвивається нестійкість, а на її нелінійній стадії формується структура (стаціонарна або нестаціонарна). Яка роль флуктуацій у процесах самоорганізації?

## Розв'язок.

Біфуркація звичайно супроводжується вибором одного з кількох можливих варіантів розвитку системи.

Так, у дисипативному осциляторі з потенціалом вигляду

$$\Phi(x) = \alpha x^2 + \beta x^4 \quad (\beta > 0)$$

при від'ємних  $\alpha$  виникають дві стійкі точки рівноваги –  $x_{1,2} = \pm(|\alpha|/2\beta)^{1/2}$  (рис. 4.2). Яку з них обере система при переході керівного параметра  $\alpha$  через біфуркаційне значення  $\alpha=0$ , визначає початкове відхилення від попередньої точки рівноваги  $x=0$ .

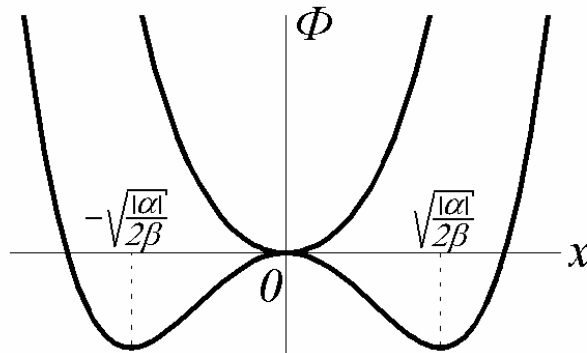


Рис. 4.2. Поява нових положень рівноваги при проходженні системи через біфуркаційну точку.

Фактично відхилення системи від положення рівноваги в момент її проходження через біфуркаційну точку визначається флуктуаціями. Отже, саме флуктуації визначають той шлях, яким розвиватиметься система після біфуркації.

Можна показати, що в біфуркаційних точках, де термодинамічна гілка втрачає стійкість, спостерігається зростання рівня флуктуацій. Саме така ситуація, наприклад, має місце в автогенераторі Ван-дер-Поля при переході через точку, що відповідає порогу самозбудження.

Після того, як керівний параметр перейшов через біфуркаційне значення, роль флуктуацій знову стає незначною, і розвиток системи протікає еволюційним шляхом.

### 4.3. Задачі для самостійного розв'язання.

4.3.1. Розрахувати надлишкове виробництво ентропії в брюсселяторі.

4.3.2. Характеристичне рівняння для параметра  $\lambda$ , який характеризує стійкість положення рівноваги системи щодо малих відхилень, має вигляд  $\lambda^3 + a\lambda^2 + b\lambda + c = 0$ . В тривимірному просторі ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ) виділіть характерні області стійкості та нестійкості й дослідіть можливі переходи між ними.

4.3.3. Для одновимірної моделі брюсселятора, користуючись числовими методами, побудувати розв'язок, що відповідає розподіленню автоколивань системи. Дослідити залежність поведінки розв'язку від значень керівних параметрів та від довжини системи.

4.3.4. Порівняйте нормовану ентропію (при фіксованому значенні енергії) для двох близьких станів ансамблю автогенераторів Ван-дер-Поля, що відрізняються величиною коефіцієнту позитивного зворотного зв'язку (тобто величиною коефіцієнту  $\alpha$ ).

## 5. Питання для самоперевірки

1. Що дозволяють отримувати асимптотичні методи?
2. У чому полягає основна ідея методу Ван-дер-Поля?
3. Хто провів математичне обґрунтування методу Ван-дер-Поля?
4. Рівняння якого виду дозволяє досліджувати метод Ван-дер-Поля?
5. Перед якими членами даного рівняння має перебувати малий параметр?
6. Чи можливе в принципі порушення умов стійкості класичної термодинаміки?
7. Який з можливих станів рівноваги системи називають термодинамічною гілкою? Наведіть кілька прикладів.
8. За яких умов термодинамічна гілка може стати нестійкою? Наведіть кілька прикладів.
9. До якого класу належать хімічні реакції, що протікають у брюсселяторі? Які реальні аналоги брюсселятора?
10. Порівняйте між собою характер втрати стійкості системи при біфуркації Андронова – Хопфа та при біфуркації Тюрінга.
11. В яких випадках поняття еволюції та самоорганізації збігаються, а в яких – ні? Наведіть кілька прикладів.
- 12.2. В якому сенсі можна говорити про статистичний ансамбль автогенераторів Ван-дер-Поля?
13. Наведіть кілька прикладів біфуркацій і вкажіть, які варіанти подальшого розвитку системи при цьому виникають.
- 14.6. Яку роль відіграють флуктуації при проходженні системи через біфуркаційну точку?
15. Утворення структур у первісно однорідному середовищі призводить до зменшення ентропії. Як це узгоджується з другим початком термодинаміки?
16. Порівняйте між собою рівняння неперервності в електродинаміці та рівняння балансу ентропії. Що в них спільне і що – відмінне?
17. Запишіть рівняння балансу ентропії в інтегральній формі.
18. Наведіть кілька прикладів систем, де має місце локальна рівновага.
19. Наведіть кілька прикладів систем, де локальна рівновага порушується.
20. Чи застосовна формула для густини виробництва ентропії через узагальнені термодинамічні сили та відповідні потоки для великих відхилень від стану термодинамічної рівноваги?
21. Чому утворення дисипативних структур можливе тільки при значних відхиленнях від термодинамічної рівноваги?
22. На чому ґрунтується доведення Н-теореми Больцмана?
23. Чому виробництво ентропії в замкненій системі частинок, які взаємодіють між собою лише через зіткнення, пов'язане з необоротними процесами?
24. Як співвідносяться між собою другий початок термодинаміки, Н-теорема Больцмана та теорема Гіббса?

25. Як співвідносяться між собою ентропія Больцмана, ентропія Гіббса та ентропія Шеннона?
26. Порівняйте між собою структури, що виникають у системах при низьких температурах, та дисипативні структури.

## 6. Теми самостійних робіт

За напрямом «Фізика нелінійних нерівноважних багаточастинкових систем. Елементи фізики м'якої матерії».

### 1. Структура та динаміка гранульованих матеріалів:

- а) методи мультимасштабного опису локальної структури гранульованих матеріалів; кроссовер; динамічні фазові переходи у гранульованих матеріалах;
- б) дослідження (моделювання) процесів компактизації, сегрегації, кластеризації в гранульованих матеріалах у зовнішньому полі;
- в) дослідження локальної рівноваги та асимптотичних стаціонарних станів в моделях мікро-механічних систем із дисипативними взаємодіями;
- г) вивчення переносу енергії/імпульсу в моделях дискретних механічних систем з нелінійними взаємодіями; електропровідність гранульованих провідників; теплопровідність гранульованих матеріалів;
- д) задача розсіяння в гранульованих матеріалах, як задача Ми у випадку системи сфер у наближенні низької кратності розсіяння;
- е) мультимасштабний аналіз розповсюдження збуджень у низьковимірних силових ланцюжках за допомогою WKB метода;

### 2. Флуктуаційна динаміка хімічно реагуючих систем:

- а) дослідження локальних станів хімічно реагуючих ґраток;
- б) реакційно-дифузійні моделі відкритих систем з хімічними реакціями;
- в) кінетична теорія впорядкованих у мезо-масштабі колоїдних систем: колоїдні розчини, запорошена плазма, гранульовані матеріали.

### 3. Теорія розсіяння у конгломераціях частинок:

- а) квантова задача розсіяння на багатоцентровому потенціалі з урахуванням короткодіючих і далекодіючих внесків та її застосування у теорії ядерної матерії;
- б) статистична теорія форми лінії у спектрах непружного розсіяння випромінювань на багаточастинкових системах.

### 4. Класична теорія рідин:

- а) урахування колективних ефектів у структурних, термодинамічних і поляризаційних властивостях простих рідин (метод прямого моделювання багаточастинкових функцій розподілу);
- б) статистичний KB підхід до інтерпретації надлишкових властивостей розчинів.

За напрямом «Моделювання фізичних процесів у довкіллі».

- Основи глобального екологічного матеріалознавства;
  - Фізична кінетика радіоактивних домішок;
  - Динаміка відкритих мікромеханічних систем з нелінійними зв'язками;
  - Нелінійні, фракційні моделі явищ та процесів в системах довкілля.
- За напрямом «Теоретичні основи технологій захисту навколишнього середовища»
- Фізичне обґрунтування системи наземного радіаційного моніторингу;
  - Використання новітніх матеріалів для виявлення радіаційних забруднень;
  - Розробка аналітичних неевклідовських методів опису та параметризації екологічно шкідливих (у тому числі – радіоактивних) контамінацій;
  - Побудова теоретичних моделей ранньої діагностики процесів радіаційного охрупчування;
  - Розробка теорії фізичних модулів у квантовій криптографії у сегменті забезпечення інформаційних мереж;
  - Нелінійні моделі радіаційного та інших видів гормезису.
  - Розбудова мультимасштабної теорії (WKБ) динаміки хвильових збуджень у анізотропних системах.

## Література

1. Герасимов О.І. Механіка суцільних середовищ. Конспект лекцій / О.І. Герасимов, А.Я. Співак. Одеса: Одеський державний екологічний університет, 2008. 63 с.
2. Герасимов О.І. Додаткові глави статистичної фізики. Конспект лекцій / О.І. Герасимов, Л.С. Кудашкіна. ОДЕКУ, 2017. 62 с.
3. Пригоровский А.Л. Задачи по теории колебаний, устойчивости движения и качественной теории дифференциальных уравнений. Ч. 4. Метод Ван-дер-Поля. Метод Пуанкаре: Учебно-методическое пособие / А.Л. Пригоровский, В.М. Сандалов, Е.С. Москова. Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. 24 с.
4. Биккин Х. М. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика / Х. М. Биккин, И. И. Ляпилин. Екатеринбург : УрО РАН, 2009. 500 с.
5. Анісімов І.О. Синергетика. Навчальний посібник / І.О. Анісімов. Київ: КНУ ім. Т. Шевченка, 2006. 157 с.