

Федеральное агентство по образованию
Уральский государственный технический университет – УПИ
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

В.Н. Скоков

В.Д. Селезнев

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ

2-е издание, дополненное

*Рекомендовано учебно-методическим объединением по образованию
в области "Ядерная физика и технологии" в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений*

Екатеринбург

УГТУ – УПИ

2010

УДК 53(075.8)

ББК 22.3 я 73

С44

Рецензенты:

кафедра общей и молекулярной физики Уральского государственного университета (зав. кафедрой д-р физ.-мат. наук, проф. С.Ф. Борисов);
чл.-кор. РАН В.П. Коверда (Институт теплофизики УрО РАН).

Скоков В.Н.

С44 ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ : учебное пособие / В.Н. Скоков, В.Д. Селезнев, 2-е изд., доп. Екатеринбург : УГТУ – УПИ, 2010. 236 с.

ISBN 978-5-321-01697-8

Пособие посвящено физике неравновесных процессов, включая основные положения синергетики и теории стохастических процессов. Рассматриваются вопросы неравновесной термодинамики, теории самоорганизации при кооперативном поведении сильно неравновесных систем различной природы, неравновесных фазовых переходов и флуктуационных явлений. Основное внимание уделено физической сущности явлений и общности описания различных неравновесных процессов.

Книга основана на курсе лекций, читаемом на физико-техническом факультете Уральского государственного технического университета (УГТУ – УПИ) на протяжении ряда лет, и рассчитана на студентов старших курсов и аспирантов физических и физико-технических факультетов.

Библиогр.: 40 назв. Табл. 2. Рис. 51.

УДК 53(075.8)

ББК 22.3 я 73

ISBN 978-5-321-01697-8

© Уральский государственный
технический университет – УПИ, 2008
© Скоков В.Н., Селезнев В.Д., 2008
© УГТУ – УПИ, дополнения, 2010

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
1. ВОЗНИКНОВЕНИЕ ФИЗИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ. ПРИМЕРЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ	9
Контрольные вопросы	16
2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ.....	17
2.1. Локальное равновесие.....	17
2.2. Производство энтропии. Линейные законы Онсагера. Соотношение взаимности.....	20
2.3. Вариационные принципы линейной термодинамики неравновесных процессов. Теоремы Онсагера и Пригожина	22
Контрольные вопросы	26
3. ОСНОВЫ НЕЛИНЕЙНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ И СИНЕРГЕТИКИ	27
3.1. Неравновесная термодинамика и синергетика	27
3.2. Неравновесные фазовые переходы.....	28
3.2.1. Основные результаты теории фазовых переходов Ландау	28
3.2.2. Фазовые переходы в пространственно неоднородной системе. Уравнение Гинзбурга–Ландау	36
3.2.3. Критические показатели. Гипотеза масштабной инвариантности..	38
3.2.4. Особенности неравновесных фазовых переходов. Макроскопическое описание самоорганизации	43
3.2.5. Переход от ламинарного к турбулентному течению как неравновесный фазовый переход	49
3.2.6. Диссипативные динамические системы	54
3.2.7. Аттракторы.....	55
3.2.8. Типы аттракторов. Стационарные точки. Предельные циклы	58

3.3. Динамический хаос	72
3.3.1. Странные аттракторы. Система Лоренца	72
3.3.2. Свойства аттрактора Лоренца	80
3.3.3. Критерии динамического хаоса. Автокорреляционная функция и спектр мощности. Показатели Ляпунова. Энтропия Колмогорова– Синяя.....	89
3.3.4. Фрактальные структуры и фрактальная размерность	97
3.3.5. Определение размерности аттракторов по экспериментальным рядам данных	104
3.3.6. Сценарии перехода к динамическому хаосу	109
3.3.7. Точечные отображения	114
3.4. Автоволны.....	119
3.4.1. Типы автоволн в нелинейных средах.....	119
3.4.2. Волны переключения в бистабильных средах	121
3.4.3. Примеры волн переключения	123
3.4.4. Задача о распространении волн переключения.....	135
3.4.5. Тепловое распространение пламени	142
3.4.6. Примеры базовых моделей автоволн в “многокомпонентных” возбуждаемых средах.....	146
Контрольные вопросы	151
4. СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ	153
4.1. Стохастические уравнения движения	154
4.1.1. Броуновское движение. Уравнение Ланжевена	154
4.1.2. Мультипликативный шум	158
4.2. Уравнение Фоккера–Планка	162
4.2.1. Марковские процессы и основное кинетическое уравнение	162
4.2.2. Вывод уравнения Фоккера–Планка из основного кинетического уравнения	164
4.2.3. Связь уравнения Фоккера–Планка и уравнения Ланжевена	166
4.2.4. Стационарное решение уравнения Фоккера–Планка	169
4.3. Примеры стохастических процессов.....	172
4.3.1. Распределение броуновских частиц по скоростям	172
4.3.2. Стохастический способ определения коэффициента диффузии... ..	174

4.3.3. Образование зародышей при фазовых переходах первого рода..	178
4.3.4. Развитая турбулентность	199
4.3.5. $1/f$ шум	204
4.4. Неравновесные фазовые переходы, индуцированные шумом	223
Контрольные вопросы	231
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	233

ВВЕДЕНИЕ

В равновесной термодинамике рассматриваются системы, находящиеся в состоянии равновесия, и изучаются очень медленные (квазистатистические, обратимые) процессы, протекающие через непрерывную последовательность равновесных состояний. Отклонение системы от положения равновесия сопровождается возникновением процессов переноса массы, импульса и энергии, которые приближают систему к равновесию. Процессы переноса характеризуются соответствующими потоками. Например, градиент температуры может вызвать поток тепла, градиент плотности — поток массы и так далее. При небольших отклонениях от состояния равновесия потоки связаны с соответствующими градиентами линейными соотношениями. Поэтому термодинамика неравновесных процессов при малых отклонениях от равновесия часто называется линейной неравновесной термодинамикой. При больших отклонениях от положения равновесия линейные соотношения нарушаются, в системе становятся возможны процессы самоорганизации, которые рассматриваются как неравновесные фазовые переходы. Соответствующая феноменологическая теория процессов, протекающих вдали от термодинамического равновесия, получила название нелинейной неравновесной термодинамики.

Исследование процессов, протекающих в открытых системах вдали от термодинамического равновесия, показало, что в таких системах, несмотря на детерминированные начальные и граничные условия могут возникать сложные хаотические режимы. Причиной их возникновения являются неустойчивости процессов и флуктуации. В этом случае говорят о динамическом (или детерминированном) хаосе. Развитие теории динамического хаоса позволило существенно прояснить вопрос о причине появления необратимости в макроскопических системах и, в частности, дало толчок в понимании природы перехода от ламинарного течения жидкостей к турбулентному.

Физика неравновесных процессов является по своей сути междисциплинарным научным направлением. Ее цель – развитие идей и методов единого описания широкого класса процессов в сильнонеравновесных системах различной природы. Сложность сильнонеравновесных открытых систем предопределяет широкие возможности для существования в них кооперативных явлений, приводящих к образованию пространственных, временных и пространственно-временных структур. При их образовании диссипация играет конструктивную роль. Для таких структур И. Пригожиным был введен термин *диссипативные структуры*. Это название объединяет все виды структур: временные, например автоколебания в генераторе, пространственные, например ячейки Бенара в слое теплопроводящей жидкости, и, наконец, наиболее общие пространственно-временные структуры.

Для того чтобы подчеркнуть роль коллектива и кооперации при образовании диссипативных структур, Г. Хакен ввел термин *синергетика*, что означает совместное действие. Синергетика – не самостоятельная научная дисциплина, а междисциплинарное научное направление; цель синергетики – выявление общих идей, общих методов и общих закономерностей в различных областях науки.

В настоящее время физика неравновесных процессов и нелинейных неравновесных систем продолжает свое бурное развитие. Несмотря на появившиеся прекрасные монографии и учебные пособия, посвященные вопросам теории динамического хаоса, автоволновых процессов, неравновесной статистической механики, представляется актуальным изложить основные представления физики неравновесных процессов и нелинейной неравновесной термодинамики в одном учебном пособии, адаптированном к изучению этой дисциплины в учебных заведениях физико-технического профиля.

Охватить все вопросы в рамках одного учебного курса практически невозможно. Поэтому цель данного курса – дать представление об основных понятиях и методах физики неравновесных процессов, не претендуя на полноту изложения.

При составлении курса были использованы учебные пособия и монографии, список которых приведен в конце книги.

1. ВОЗНИКНОВЕНИЕ ФИЗИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ. ПРИМЕРЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ

Начнем с краткого изложения истории вопроса. Возникновение физики неравновесных процессов было подготовлено трудами многих выдающихся исследователей девятнадцатого столетия. В их числе физик Л. Больцман, математики А. Пуанкаре и А.М. Ляпунов, биолог Ч. Дарвин.

В XIX веке были заложены основы современной молекулярно-кинетической теории материи. Одним из ее основателей был Людвиг Больцман. Он предложил первое кинетическое уравнение для описания необратимых процессов в газах. Оно описывает, в частности, процесс установления равновесного состояния в газе. Больцман впервые ввел и статистическое определение энтропии. Он доказал Н-теорему, согласно которой в процессе установления равновесного состояния энтропия любой изолированной системы монотонно возрастает и остается постоянной при его достижении.

Теория Больцмана вызвала возражения у многих ученых того времени. Среди оппонентов Больцмана был выдающийся математик и механик А. Пуанкаре, который, опираясь на обратимые уравнения механики, пришел к выводу, что теория необратимых процессов и механика несовместимы. Основанием для возражений, в частности, служило то, что в механике нет функции, играющей роль энтропии. Однако представители следующего поколения ученых по достоинству оценили труды Больцмана.

На пороге XX столетия стало ясно, что развитие теории неравновесных процессов в физических и биологических системах является одной из важнейших задач естествознания. Оказалось, однако, что от понимания важности проблемы до ее даже далеко не полного решения потребовалось почти целое столетие.

Первым принципиальным шагом в этом направлении была развитая А. Эйнштейном, М. Смолуховским и П. Ланжевром теория *броуновского движения* – хаотического движения малых, но все же макроскопических частиц в жидкости. Его причиной являются случайные толчки со стороны молекул жидкости. Заслуга этих ученых состоит в том, что, в противоположность детерминистической механике, случайные силы, действующие на броуновскую частицу, были введены в явной форме. Теория броуновского движения легла в основу теории флуктуаций.

Теория броуновского движения была развита в начале текущего столетия и сразу стала рабочим инструментом при рассмотрении многих физических явлений. Однако лишь по прошествии более полувека в статистической теории неравновесных процессов были сделаны следующие принципиальные шаги. Для этого понадобились новые идеи, новые образы и понятия. Большую роль в теории неравновесных процессов играют работы российских ученых: математика и механика А.М. Ляпунова – одного из создателей теории устойчивости движения, математика А.Н. Колмогорова, физиков Л.И. Мандельштама, А.А. Андропова, Н.С. Крылова, Я.Б. Зельдовича и многих других.

Важным понятием в физике неравновесных процессов являются неравновесные фазовые переходы, то есть переходы от одних режимов протекания процессов к другим, связанные с их неустойчивостью и наличием флуктуаций. Первоначально фазовые переходы рассматривались лишь в равновесных системах, но за последние десятилетия исследование вышло далеко за свои классические пределы. Поведение систем с неравновесными фазовыми переходами стало привлекать все большее внимание и превратилось в развивающееся поле деятельности не только в физике и химии – традиционных областях, но и в биологии, экономике, социологии. Проведенные исследования позволили выработать единое представление о законах, управляющих процессами, протекающими вдали от равновесия в *от-*

крытых системах, т.е. системах, обменивающихся с окружающей средой веществом и энергией. Значительным достижением явилось распространение понятия фазового перехода на неустойчивости, присущие сильно неравновесным (нелинейным) системам.

Рассмотрим некоторые наиболее известные примеры неравновесных фазовых переходов и образования структур вдали от термодинамического равновесия.

Конвекция Бенара. Рассмотрим в качестве примера образование конвективных пространственных структур, возникающих при неравномерном нагреве жидкости, находящейся в поле тяжести. Если горизонтальный слой жидкости подогреть снизу, то между нижней и верхней поверхностями возникает разность температур. Когда она невелика, то все подводимое снизу тепло распространяется вверх путем теплопроводности и жидкость остается однородной в горизонтальной плоскости и неподвижной. При разности температур выше некоторого критического значения в жидкости начинается конвекция: холодная жидкость опускается вниз, а нагретая поднимается вверх. Распределение этих двух противоположно направленных потоков может оказаться самоорганизованным, в результате чего возникает система правильных шестиугольных конвективных ячеек. По краям каждой такой ячейки жидкость может опускаться вниз, при этом в центре ячейки подниматься вверх. Переход к образованию шестиугольных ячеек обусловлен тем, что при большой разности температур в покоящейся жидкости возникает неустойчивость механического равновесия и устанавливается новый режим свободной конвекции со скоростью, не равной нулю. Возможность образования ячеек при конвекции была обнаружена Х. Бенаром в 1900 году. Он проводил свои опыты с тонкими (толщиной до 0,5 мм) горизонтальными слоями спермацета (кашалотового воска), налитого на стальной лист и открытого сверху. Именно после опытов Бенара любые ячейки конвекции часто именуют *ячейками Бенара*. К математическому

описанию данного процесса – знаменитой модели Лоренца – мы еще вернемся.

Когерентные колебания в лазерах. Если атомы, из которых состоит рабочее тело лазера, возбудить или “накачать” извне, то они испускают световые волны. При малой мощности накачки эти волны некоррелированы, как в свете, испускаемом обычной лампой. Но стоит повысить мощность накачки до некоторого критического значения, как атомы начинают испускать чисто синусоидальную световую волну, что означает строго коррелированное действие отдельных атомов, то есть можно сказать, что атомы самоорганизуются. Когда мощность накачки превышает второе критическое значение, лазер может начать испускать очень интенсивные и короткие импульсы. При этом возникает следующая последовательность неустойчивостей: отсутствие колебаний с выделенной частотой $\rightarrow$ когерентные колебания с одной частотой $\omega_1 \rightarrow$ периодические импульсы с частотой ω_2 , модулирующие колебания с частотой ω_1 .

При дальнейшем росте мощности накачки испускание света может становиться хаотичным, то есть совершаться беспорядочно.

По различным причинам лазер сыграл одну из решающих ролей в развитии синергетики. Немаловажное значение имело, в частности, то, что явления, происходящие в области перехода лампа $\leftrightarrow$ лазер, поддаются теоретическому анализу и могут быть подробно исследованы экспериментально. В данных переходах обнаружена удивительная и далеко идущая аналогия с фазовыми переходами в системах, находящихся в тепловом равновесии.

Колебания тока в нелинейных электрических цепях. Если электрические цепи содержат нелинейные элементы (то есть такие элементы, в которых зависимость тока от приложенного напряжения нелинейна, в частности имеет S-образный вид), то при определенных условиях при плавном изменении какого-либо параметра схемы в цепи возможно спонтанное

возникновение автоколебательных режимов. Так, например, автоколебания возникают в цепях, содержащих полупроводниковые или сверхпроводящие элементы, газоразрядные лампы с падающими участками вольтамперных характеристик и т.д. На рис.1.1 схематично показана S-образная вольтамперная характеристика нелинейной цепи. Классическим примером электрической автоколебательной системы является *генератор Ван-дер-Поля*, представляющий собой лампу с S-образной вольт-амперной характеристикой, включенную в цепь с емкостью и индуктивностью. В такой системе возникают релаксационные автоколебания, причем чем больше диссипация в системе, тем больше автоколебания отличаются от синусоидальных.

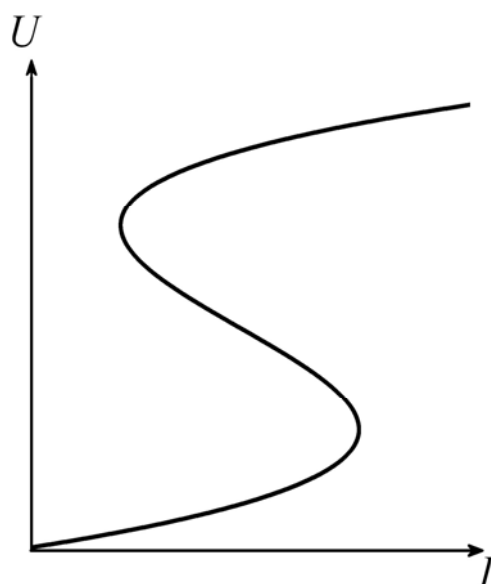


Рис. 1.1. Вольт-амперная характеристика цепи с нелинейным элементом

Другим распространенным примером является диод Ганна. Если к образцу арсенида галлия приложить относительно небольшое напряжение, то возникает постоянный ток, подчиняющийся закону Ома. Когда же напряжение, возрастая, достигает некоторого критического значения, постоянный ток сменяется периодическими импульсами.

Спонтанные переходы в режим регулярных автоколебаний при плавном изменении управляющего параметра относятся к классу неравновесных фазовых переходов.

На первый взгляд приведенные примеры возникновения автоколебаний в электрических цепях не имеют ничего общего с термодинамикой, однако, это не так. Спонтанные переходы из одного режима функционирования цепи к другому (в частности, возникновение автоколебаний) при плавном изменении управляющего параметра происходят в диссипативных системах в условиях, далеких от термодинамического равновесия, и имеют глубокую аналогию с термодинамически равновесными фазовыми переходами.

Автоколебательные химические реакции. Обычно при химических реакциях, если дать возможность реагентам провзаимодействовать, интенсивно перемешивая реакционную смесь, то конечный продукт получается однородным. Но в некоторых реакциях могут возникать временные, пространственные или пространственно - временные структуры. Наиболее известной из таких реакций является реакция Белоусова–Жаботинского.

В 1951г. Б.П. Белоусов открыл периодическую химическую реакцию окисления лимонной кислоты $\text{CH}_2(\text{COOH})_2$ смесью бромата калия KBrO_3 и сульфата церия $\text{Ce}_2(\text{SO}_4)_3$, растворенных в разбавленной серной кислоте. Исходные реагенты в определенных пропорциях сливают в колбу и перемешивают. В реакторе непрерывного перемешивания могут возникать концентрационные колебания, наблюдаемые непосредственно по изменению цвета от красного к синему. В замкнутой системе, то есть без подвода новых веществ, эти колебания затем затухают. Но если непрерывно подводить реагенты и отводить конечные продукты, то колебания продолжаются неограниченно долго. В настоящее время известны десятки систем, в которых наблюдаются химические колебания. Если реакционную смесь не перемешивать, то могут возникнуть пространственные структуры. Например, в реакции Белоусова–Жаботинского наблюдаются концентрические волны или спирали.

Другой класс макроскопических структур, возникающих при непрерывном подводе вещества, составляют пламена. При определенных условиях могут возникнуть автоколебания фронта горения или ячеистая структура пламени.

Приведенные примеры образования структур в открытых системах относятся к существенно нелинейным явлениям. Как правило, при описании подобных явлений используют методы теории нелинейных динамических систем. Поскольку рассматриваемые переходы имеют много общего с термодинамически равновесными фазовыми переходами, для их описания используется современная теория фазовых переходов, основывающаяся на концепции параметра порядка.

Как отмечалось выше, физической основой описания неравновесных процессов в системах являются неравновесная термодинамика и статистическая физика. Причем уравнения, которыми описываются процессы самоорганизации, существенно нелинейны. Иными словами, основой теории самоорганизации в открытых системах является нелинейная неравновесная термодинамика. Однако прежде чем перейти к ее описанию, рассмотрим основные положения линейной неравновесной термодинамики.

Контрольные вопросы

1. Чем различаются равновесные и неравновесные процессы?
2. Что такое неравновесные фазовые переходы?
3. Приведите примеры неравновесных фазовых переходов и образования пространственных, временных и пространственно-временных структур в открытых неравновесных системах.
4. Какие конкурирующие факторы приводят к образованию ячеек Бенара?
5. Назовите основные исторические этапы становления теории неравновесных процессов.

2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ

2.1. Локальное равновесие

Классическая равновесная термодинамика изучает либо свойства равновесных физических систем, когда ни один из параметров системы не изменяется со временем и внутри системы нет никаких макроскопических движений, либо равновесные квазистатические процессы, когда параметры системы изменяются физически бесконечно медленно, так что система все время находится в равновесных состояниях. В классической равновесной термодинамике нет в явном виде времени как физической величины. В этом смысле равновесная термодинамика является “термостатикой”. Возникновение термодинамики равновесных систем и квазистатических процессов связывают со знаменитой работой С. Карно “Размышления о движущей силе огня”, вышедшей в 1824 г. Практически одновременно с работой Карно в 1822 г. появилась работа Ж.Б. Фурье “Аналитическая теория тепла”. В отличие от Карно в работе Фурье фигурировали скорости изменения термодинамических величин. В дальнейшем идеи Фурье развивались в направлении нахождения уравнений динамики различных процессов. Так, в 1827 г. Г. Ом вывел свой знаменитый закон, а в 1855 г. А. Фик – уравнение диффузии. В 1822 г. появилась работа А. Навье, положившая основание гидродинамике вязких жидкостей. Долгое время оба направления развивались независимо друг от друга. Решительный шаг в их объединении был сделан лишь в 1931 г. Л. Онсагером, создавшим феноменологическую теорию слабонеравновесных процессов.

Бурное развитие термодинамики неравновесных процессов началось после Второй мировой войны, в значительной мере благодаря работам голландско-бельгийской школы (И. Пригожин, П. Глендсдорф, С. де Гро-

от, П. Мазур и их сотрудники). В этих работах было показано, что в процессах, далеких от состояния термодинамического равновесия, могут образовываться пространственные и временные структуры. Процессы появления таких структур относятся к *неравновесным фазовым переходам* (иногда используют термин “кинетические фазовые переходы”), которые являются обобщением понятия термодинамически “равновесных” фазовых переходов и соответствуют сменам режимов протекания различных процессов. Примерами неравновесных фазовых переходов являются: ламинарно-турбулентный переход при течении жидкости, переход от пузырькового кипения жидкости к пленочному, переход к режиму когерентных колебаний в лазерах, образование электронно-дырочной плазмы в полупроводниках, возникновение автоколебаний в химических реакциях и электронных генераторах, а также многие другие. Математически такие процессы описываются нелинейными дифференциальными уравнениями. Поэтому описание сильнонеравновесных нелинейных процессов и неравновесных фазовых переходов основывается на использовании математической теории нелинейных динамических систем. Физика сильнонеравновесных нелинейных процессов снимает кажущееся противоречие между вторым законом термодинамики о стремлении замкнутой системы к беспорядку и образованием упорядоченных структур в процессе эволюции различных систем.

При описании систем, не находящихся в состоянии термодинамического равновесия, сразу же возникает вопрос об определении основных физических величин в неравновесной области. Действительно, феноменологическое понятие энтропии строго определяется лишь для равновесных состояний замкнутых систем с помощью основного термодинамического равенства:

$$TdS = dU + \sum_i A_i da_i, \quad (2.1)$$

где S – энтропия; T – температура; U – внутренняя энергия; a_i – внешние параметры; A_i – сопряженные с ними внешние силы. Поскольку при равновесии состояние системы определяется заданием внешних параметров и температуры, энтропия как функция состояния задана как функция этих величин. Точно так же свободная энергия F , выражающаяся через энтропию по формуле $F = U - TS$, строго определена только для состояния равновесия.

В неравновесном состоянии внутренние параметры системы уже не являются функциями только внешних параметров и температуры. Неравновесное состояние должно характеризоваться помимо внешних параметров и температуры еще и заданием одного или нескольких внутренних параметров, характеризующих данное неравновесное состояние.

Одним из постулатов теории необратимых процессов Онсагера является постулат о локальном термодинамическом равновесии системы, когда каждая локальная область может быть охарактеризована определенными значениями равновесных термодинамических параметров. Причем размеры этих локальных областей должны быть достаточно большими, чтобы в них эффективно действовал механизм установления равновесия (например, для молекулярных систем размеры локально-равновесных областей должны быть много больше длины свободного пробега молекул). При этом характерные времена изменения термодинамических параметров в пределах локальной области должны быть много больше времени установления равновесия (времени релаксации) в них (например, среднего времени свободного пробега молекул). В то же время размеры локальных областей должны быть настолько малыми, чтобы изменения термодинамических параметров в пределах этих областей были гораздо меньше, чем перепады этих параметров на всей рассматриваемой системе. А характерное время локальной релаксации значительно меньше времени, за которое устанавливается равновесие во всей системе. В таком приближении каждой ло-

кально равновесной области можно приписать вполне определенные значения термодинамических функций (усредненных по выделенной пространственной области) и считать, что внутри каждой области справедливы уравнения равновесной термодинамики для этих усредненных параметров. Собственно неравновесные свойства системы будут определяться зависимостью термодинамических параметров от времени и пространственных координат. Предположение о локальном термодинамическом равновесии является достаточно сильным, но во многих случаях вполне оправданным.

2.2. Производство энтропии. Линейные законы Онсагера. Соотношение взаимности

Будем считать, что локальная энтропия (например, энтропия единицы объема) s зависит от термодинамических параметров $a_i(\vec{r}, t)$, как и при полном равновесии. Изменение энтропии в покоящейся среде подчиняется уравнению баланса:

$$\frac{ds}{dt} = -\operatorname{div} \vec{J}_s + \sigma, \quad (2.2)$$

где $\vec{J}_s$ – плотность потока энтропии; σ – скорость возникновения энтропии в единице объема, называемая производством энтропии. Плотность потока энтропии в однокомпонентном веществе связана с плотностью теплового потока $\vec{q}$: $\vec{J}_s = \vec{q}/T$.

В термодинамике необратимых процессов показывается, что выражение для производства энтропии можно представить в виде

$$\sigma = \sum_i I_i X_i, \quad (2.3)$$

где I_i – термодинамические потоки; X_i – термодинамические силы. Значения термодинамических потоков определяют скорости изменения тер-

модинамических параметров. В состоянии равновесия все потоки обращаются в нуль вместе с термодинамическими силами.

В теории Онсагера постулируется линейная связь между потоками и силами:

$$I_i = \sum_k L_{ik} X_k . \quad (2.4)$$

Линейная связь между потоками и силами означает малость отклонения от положения термодинамического равновесия. Коэффициенты L_{ik} в линейном законе (2.4) называются феноменологическими или кинетическими коэффициентами. Диагональные элементы матрицы L_{ii} определяют прямые явления переноса. Например, если термодинамическими силами являются градиенты температуры, концентрации или электрического потенциала, которые вызывают соответственно потоки тепла, массы и электрического заряда, то линейный закон (2.4) переходит соответственно в закон Фурье: $\vec{q} = -\lambda \text{ grad } T$, устанавливающий связь между тепловым потоком и градиентом температуры; Фика: $\vec{I} = -D \text{ grad } C$, устанавливающий связь между потоком вещества и градиентом концентрации; и Ома: $\vec{j} = -\rho^{-1} \text{ grad } \varphi$, устанавливающий связь между плотностью электрического тока и градиентом электрического потенциала. Кинетические коэффициенты в данном случае имеют смысл коэффициентов теплопроводности, диффузии и электропроводности. Недиagonальные элементы L_{ik} определяют так называемые перекрестные процессы (термодиффузия, термоэлектричество и т.д.).

Л. Онсагер показал, что кинетические коэффициенты удовлетворяют так называемому соотношению взаимности:

$$L_{ik} = L_{ki} , \quad (2.5)$$

т.е., что коэффициенты не независимы друг от друга, а образуют симметричную матрицу. Другое ограничение на кинетические коэффициенты появляется как следствие второго начала термодинамики. Подставив выра-

жение для потоков (2.4) в формулу для производства энтропии (2.3), получим квадратичное по термодинамическим силам уравнение:

$$\sigma = \sum_{i,k} L_{ik} X_i X_k . \quad (2.6)$$

Так как согласно второму началу термодинамики $\sigma > 0$, то квадратичная форма (2.6) является положительно определенной. Необходимым и достаточным условием положительности симметричной матрицы L_{ik} является положительность детерминанта и главных миноров $L_{ii} \geq 0$, $|L_{ik}| \leq \sqrt{L_{ii} L_{kk}}$ и т.д. Это устанавливает определенные ограничения на кинетические коэффициенты. Следует отметить, что соотношения взаимности Онсагера справедливы только для независимых термодинамических сил X_i и X_k .

2.3. Вариационные принципы линейной термодинамики неравновесных процессов. Теоремы Онсагера и Пригожина

В 1931г. Л.Онсагер показал, что линейный закон, связывающий потоки с термодинамическими силами, а также соотношения взаимности эквивалентны некоторому вариационному принципу, который он назвал принципом наименьшего рассеяния энергии.

В стационарном случае этот принцип выражается минимумом введенных Онсагером диссипативных функций:

$$\Psi = \frac{1}{2} \sum_{i,k} L_{ik} X_i X_k , \quad (2.7)$$

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i,k} R_{ik} I_i I_k . \quad (2.8)$$

Можно показать, что из линейной связи между потоками и термодинамическими силами и соотношений взаимности следует, что функции Ψ и Φ потенциальны.

Действительно, из выражения (2.7) находим:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial X_i} = \sum_k L_{ik} X_k = I_i, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial X_i \partial X_k} = \frac{\partial I_i}{\partial X_k} = L_{ik} = L_{ki} = \frac{\partial I_k}{\partial X_i} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X_k \partial X_i}. \quad (2.10)$$

Аналогично можно показать потенциальность функций, определяемых соотношением (2.8). Принцип наименьшего рассеяния энергии Онсагера утверждает, что для действительно происходящего в системе процесса при заданных потоках реализуется такая связь потоков и сил, что выражение $\sigma(I, X) - \Psi(X, X)$ имеет максимум. Аналогично, выражение $\sigma(I, X) - \Phi(I, I)$ при заданных силах имеет максимум при варьировании по потокам. Математически принцип наименьшего рассеяния энергии записывается как равенство нулю вариаций:

$$\begin{aligned} \delta[\sigma(I_i, X_i) - \Psi(X_i, X_k)]_I &= 0, \\ \delta[\sigma(I_i, X_i) - \Phi(I_i, I_k)]_X &= 0, \end{aligned} \quad (2.11)$$

где σ – производство энтропии, определяемое выражением (2.3). Варьирование в формуле (2.11) производится в первом случае по силам, во втором – по потокам. Можно показать, что в стационарных процессах в открытых системах условия экстремума (2.11) означают, что диссипация энергии в таких системах минимальна.

И. Пригожиным в 1947г. был сформулирован принцип минимума производства энтропии: если в системе действуют n термодинамических сил, причем m из них поддерживаются постоянными, то с течением времени в системе устанавливается стационарное состояние с минимальным производством энтропии $\sigma = \sum_{i=1}^m I_i X_i$. Данное утверждение справедливо в рамках линейной неравновесной термодинамики. Более общая формулировка вариационного принципа минимума производства энтропии содержится в теореме Глендсдорфа и Пригожина (1954г.). Сущность этой тео-

ремы заключается в том, что в приближении линейной связи между силами и потоками имеет место выражение:

$$\frac{d\sigma}{dt} \leq 0, \quad (2.12)$$

то есть производство энтропии уменьшается во времени, если система приближается к стационарному состоянию, определяющемуся независимыми от времени граничными условиями. Равенство выполняется в стационарном случае, когда производство энтропии принимает минимальное значение, совместимое с независимыми от времени граничными условиями.

Запишем дифференциал производства энтропии с учетом соотношения (2.3):

$$d\sigma = \sum_i I_i dX_i + \sum_i X_i dI_i. \quad (2.13)$$

Первый член в выражении (2.13) связан с изменением сил, а второй – с изменением потоков, то есть $d\sigma = d_X\sigma + d_I\sigma$.

Здесь использованы обозначения:

$$\begin{aligned} d_X\sigma &= \sum_i I_i dX_i, \\ d_I\sigma &= \sum_i X_i dI_i. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Если справедливы основные постулаты линейной теории, то можно доказать, что изменение производства энтропии вследствие изменения сил равно изменению производства энтропии вследствие изменения потоков и каждое из этих изменений равно половине полного изменения производства энтропии, т.е. $d\sigma = 2d_X\sigma = 2d_I\sigma$.

Для доказательства запишем последовательность преобразований:

$$\begin{aligned}
d_X \sigma &= \sum_i I_i dX_i = \sum_{i,k} L_{ik} X_k dX_i = \\
&= \sum_{i,k} X_k (L_{ki} dX_i) = \sum_k X_k dI_k = d_I \sigma.
\end{aligned}
\tag{2.15}$$

В приведенных преобразованиях использовались лишь постулаты линейной теории. Как показали Глендсдорф и Пригожин, в нелинейной области стационарное состояние не обязательно соответствует минимуму производства энтропии. Однако скорость изменения производства энтропии, обусловленное изменением термодинамических сил, уменьшается и в нелинейной области, т.е.

$$\frac{d_X \sigma}{dt} \leq 0.
\tag{2.16}$$

Выражение (2.16) получило название универсального критерия эволюции Глендсдорфа – Пригожина.

Из экстремальных принципов отметим также принцип Циглера, позволяющий устанавливать связь между потоками и силами, в том числе в случае их нелинейной связи, когда производство энтропии выражают через потоки многочленом со степенью выше второй. Согласно этому принципу система, подверженная действию заданных термодинамических сил, стремится к своему конечному состоянию кратчайшим из возможных способов с максимальным порождением энтропии при приближении к стационарному состоянию. В частном случае квадратичной функции принцип Циглера сводится к принципу Онсагера наименьшего рассеяния энергии. Упомянутая тенденция вдали от равновесия может приводить к тому, что при реализации неустойчивости устанавливается режим течения с максимальным производством энтропии.

Контрольные вопросы

1. В чем заключается постулат о локальном термодинамическом равновесии?
2. Сформулируйте основные приближения линейной неравновесной термодинамики.
3. Как определяется производство энтропии?
4. Как производство энтропии связано с потоками и термодинамическими силами?
5. Что такое кинетические коэффициенты?
6. Какие ограничения накладываются на значения кинетических коэффициентов, обусловленные вторым законом термодинамики?
7. Что такое соотношение взаимности Онсагера?
8. Приведите физические примеры линейной связи между потоками и термодинамическими силами.
9. Что такое диссипативные функции Онсагера?
10. Сформулируйте принцип наименьшего рассеяния энергии Онсагера и принцип минимального производства энтропии Пригожина.
11. Что утверждает теорема Глендсдорфа–Пригожина?
12. Какой вариационный принцип термодинамики неравновесных процессов не ограничен областью линейной связи термодинамических сил и потоков?

3. ОСНОВЫ НЕЛИНЕЙНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ И СИНЕРГЕТИКИ

3.1. Неравновесная термодинамика и синергетика

В предыдущем параграфе уже отмечались особенности применимости принципа Глендсдорфа – Пригожина к нелинейным процессам, когда отклонения от термодинамического равновесия нельзя считать малыми и постулаты линейной термодинамики неравновесных процессов не применимы. Однако главной отличительной особенностью открытых нелинейных систем, находящихся вдали от термодинамического равновесия в неустойчивом состоянии, является то, что кооперативное взаимодействие различных подсистем в условиях действия принципа максимума производства энтропии может приводить не к выравниванию свойств этих подсистем в результате релаксационных процессов, а наоборот – к образованию различных пространственных, временных и пространственно-временных структур. Со времени открытия второго закона термодинамики возник следующий вопрос: как можно согласовать вывод о возрастании энтропии – возрастании неопределенности, хаоса – с наличием в природе разнообразных процессов самоорганизации, иными словами с возникновением в ходе неравновесных процессов более упорядоченных состояний? Полный ответ на этот вопрос пока еще не найден. В физике существует очень много примеров образования более упорядоченных состояний в ходе неравновесных процессов. Как уже отмечалось во введении, наука, изучающая процессы самоорганизации в неравновесных открытых системах различной природы, носит название синергетика. Она рассматривает процессы самоорганизации в физике, химии, биологии, экономике с использованием методов термодинамики, статистической механики, теории колебаний, теории динамических систем, теории катастроф, теории стохастических уравнений.

С современной точки зрения процессы самоорганизации в открытых системах представляются как последовательность *неравновесных фазовых переходов*. Понятие неравновесного (кинетического) фазового перехода является естественным обобщением термодинамически равновесных фазовых переходов, таких, как переход жидкость – пар, ферромагнитный переход или переход нормальный проводник – сверхпроводник. Феноменологические аспекты неравновесных фазовых переходов попадают под общее определение процессов, представляющих интерес для термодинамики неравновесных процессов.

В целом нелинейная неравновесная термодинамика, как и синергетика, является развивающейся наукой с широким охватом самых различных процессов и явлений, которым посвящены многочисленные монографии, не говоря уже об оригинальных статьях.

3.2. Неравновесные фазовые переходы

3.2.1. Основные результаты теории фазовых переходов Ландау

Фазовые переходы традиционно делятся на переходы первого (с конечной скрытой теплотой перехода) и второго рода (с нулевой скрытой теплотой), последние называются еще непрерывными. Данная классификация отнюдь не является исчерпывающей, но вполне достаточна для большинства практических нужд. Основы теории фазовых переходов были заложены в тридцатые годы двадцатого века Л.Д. Ландау. Эта теория применима к окрестностям критических точек (таких, как критическая точка на диаграмме “газ – жидкость”), фазовым переходам второго рода, а также к фазовым переходам первого рода, протекающих не слишком далеко от критической точки. Центральным понятием в теории Ландау является так называемый *параметр порядка*, который связан с изменением симметрии

системы при фазовых переходах второго рода. При понижении температуры в точке фазового перехода происходит спонтанное (самопроизвольное) нарушение (понижение) симметрии системы, связанное с появлением ненулевого среднего значения параметра порядка. Параметр порядка определяется таким образом, что он пробегает отличные от нуля (положительные или отрицательные) значения в одной фазе, называемой несимметричной, и равняется нулю в другой (симметричной) фазе.

Связь параметра порядка с симметрией фаз можно проиллюстрировать на примере переходов, связанных с изменением упорядоченности кристаллов. В частности, если мы имеем упорядоченный сплав CuZn с кубической решеткой, в которой атомы Zn находятся в вершинах, а атомы Cu в центрах кубических ячеек, то при повышении температуры кристалл разупорядочивается и атомы цинка и меди меняются местами, т.е. во всех узлах решетки появляются отличные от нуля вероятности нахождения атомов обоего сорта. Как только вероятности нахождения атомов в вершинах и центрах ячеек сравниваются, все узлы становятся эквивалентными, и симметрия кристалла повышается. Параметр порядка может быть определен как $\phi = (\omega_{\text{Cu}} - \omega_{\text{Zn}}) / (\omega_{\text{Cu}} + \omega_{\text{Zn}})$, где ϕ – параметр порядка, ω_{Cu} и ω_{Zn} – вероятности нахождения в каком-либо узле атомов Cu или Zn. В упорядоченном состоянии $\omega_{\text{Cu}} = \omega_{\text{Zn}}$ и, следовательно, $\phi = 0$.

Параметр порядка может иметь различную физическую природу. В критической точке “жидкость – газ” параметр порядка определяется как $\phi = (\rho - \rho_c) / \rho_c$, где ρ – плотность вещества (жидкости или газа), ρ_c – плотность в критической точке. То есть при фазовом переходе “жидкость – газ” параметр порядка характеризует относительное отклонение плотности от критического значения. В критической точке различие между жидкостью и газом исчезает, и параметр порядка обращается в нуль. При температурах ниже критической значение параметра порядка не нулевое. Следует отметить, что в этом случае параметр порядка может принимать два отличных

от нуля значения (положительное и отрицательное), соответствующих жидкой или газовой фазам.

В табл. 1 приведены примеры фазовых переходов и соответствующие параметры порядка.

Таблица 1

<i>Фазовый переход</i>	<i>Параметр порядка</i>
Жидкость – газ	Плотность
Ферромагнетик – парамагнетик	Намагниченность
Сверхпроводник – нормальный проводник	Амплитуда волновой функции электронных пар
λ -переход в жидком гелии (переход в сверхтекучее состояние)	Амплитуда волновой функции атомов гелия
Расслаивание бинарных жидкостей	Концентрация
Фазовые переходы в твердых сплавах	Плотность одной компоненты на под решетке

Напомним основные положения феноменологической теории фазовых переходов Ландау, развитой первоначально для описания термодинамически равновесных фазовых переходов второго рода. Теория Ландау является классической теорией среднего поля, в которой кооперативное многочастичное взаимодействие, ответственное за фазовый переход, заменяется некоторым эффективным потенциалом. Данная теория (с последующими модификациями, учитывающими флуктуации параметра порядка) широко используется в настоящее время для качественного, а в ряде случаев и количественного описания фазовых переходов. Теория Ландау показывает глубокую связь между фазовыми переходами второго рода и критическими явлениями.

В теории предполагается, что неравновесный термодинамический потенциал системы в окрестности точки фазового перехода второго рода может быть представлен в виде ряда по степеням ϕ :

$$\Phi(P, T, \phi) = \Phi_0(P, T) + \alpha\phi + A\phi^2 + C\phi^3 + B\phi^4 + \dots, \quad (3.1)$$

где коэффициенты $\alpha, A, B, C, \dots$ являются функциями от P и T . Величина Φ_0 характеризует симметричную фазу ($\phi = 0$). Полагая далее, что в простейшем случае термодинамический потенциал является симметричным по отношению к изменению знака параметра порядка, будем считать, что $\alpha = C = 0$. В этом случае разложение термодинамического потенциала принимает вид

$$\Phi(P, T, \phi) = \Phi_0(P, T) + A(P, T)\phi^2 + B(P, T)\phi^4. \quad (3.2)$$

Предполагается, что параметр $B > 0$ (в противном случае для устойчивости системы необходимо учитывать члены разложения с более высокой степенью параметра порядка). Знак коэффициента A в общем случае может быть любым. Зависимость изменения термодинамического потенциала системы $\Delta\Phi(\phi) = \Phi(P, T, \phi) - \Phi_0(P, T)$ при различных коэффициентах A показана на рис. 3.1.

Характер состояния и тип фазового перехода изменяется при изменении знака коэффициента перед квадратичным членом в разложении (3.2). При $A < 0$ имеем два устойчивых состояния, разделенных энергетическим барьером. Переход между этими состояниями является фазовым переходом первого рода. При $A = 0$ барьер исчезает, и мы имеем зависимость $\Delta\Phi(\phi)$, соответствующую критическому состоянию или точке фазового перехода второго рода. Случай с $A > 0$ соответствует закритическому состоянию. В случае, когда $C \neq 0$, то есть при наличии кубического по ϕ слагаемого в разложении (3.1), зависимость $\Delta\Phi(\phi)$ становится не-симметричной относительно начала координат. Это означает, что одна из

фаз является метастабильной. Мы эту ситуацию (как и влияние внешнего поля на фазовый переход) рассматривать не будем.

В теории Ландау предполагается, что поскольку при $T = T_c$ $A = 0$, то функцию $A(P, T)$ вблизи критической точки можно представить в виде

$$A(P, T) = a(P)(T - T_c), \quad (3.3)$$

где T_c – критическая температура или температура фазового перехода второго рода.

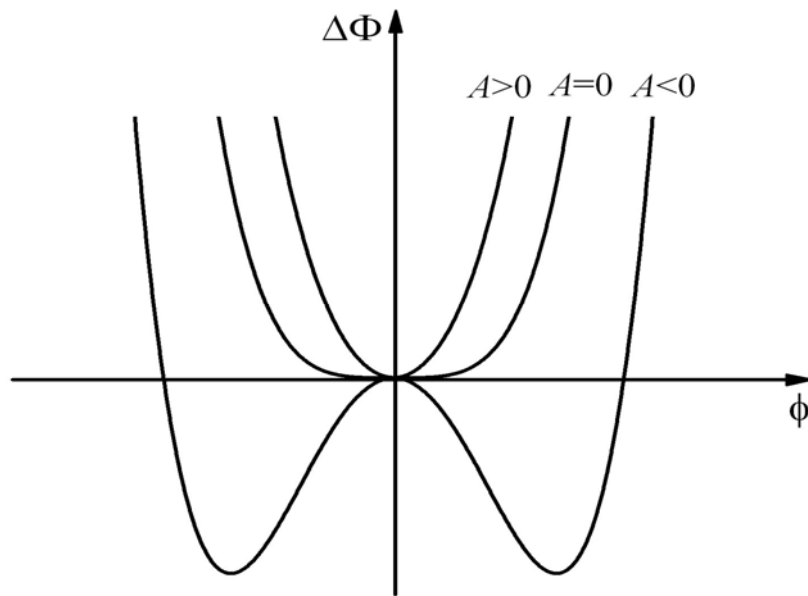


Рис. 3.1. Изменение термодинамического потенциала системы как функции параметра порядка при докритическом ($A < 0$), критическом ($A = 0$) и закритическом ($A > 0$) состояниях

Предполагая, что $B(P, T) = B(P)$, окончательно можно записать следующее выражение для неравновесного термодинамического потенциала:

$$\Delta\Phi(P, T) = a(P)(T - T_c)\phi^2 + B(P)\phi^4. \quad (3.4)$$

В равновесии потенциал $\Phi(P, T, \phi)$ достигает минимума. Приравняв к нулю производную $\partial\Phi/\partial\phi$, можно найти равновесные значения параметра порядка:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = 2\phi a(P)(T - T_c) + 4\phi^3 B(P) = 0. \quad (3.5)$$

При $T > T_c$ имеем только один действительный корень $\phi = 0$, который соответствует закритическому состоянию. Причем это состояние является устойчивым. При $T < T_c$ наряду с корнем $\phi_1 = 0$, который в данном случае соответствует неустойчивому состоянию (локальный максимум на зависимости $\Delta\Phi(\phi)$), появляются два действительных корня

$$\phi_{2,3} = \pm \sqrt{-\frac{a(T - T_c)}{2B}}, \quad (3.6)$$

которые соответствуют двум локальным минимумам термодинамического потенциала. Равновесные значения параметра порядка $\phi_{2,3}$ соответствуют двум фазам (например, приведенным значениям плотностей жидкости и газа при фазовом переходе “жидкость – газ”). Найдём равновесные значения $\Delta\Phi(\phi)$, подставив равновесные значения из выражения (3.6) в формулу (3.4):

$$\Delta\Phi(\phi_{2,3}) = -a(T - T_c) \frac{a(T - T_c)}{2B} + B \frac{a^2(T - T_c)^2}{4B^2} = -\frac{a^2(T - T_c)^2}{4B}. \quad (3.7)$$

По зависимости $\Phi(T, \phi)$ с использованием известных термодинамических равенств: $S = -(\partial\Phi/\partial T)_P$ и $c_P = T(\partial S/\partial T)_P$ можно найти скачок теплоемкости в точке фазового перехода.

Энтропия, соответствующая равновесным значениям параметра порядка $\phi_{2,3}$ будет иметь вид

$$S - S_0 = \Delta S = -\left(\frac{\partial \Delta\Phi}{\partial T}\right)_P = \frac{a^2(T - T_c)}{2B}. \quad (3.8)$$

Соответственно для скачка теплоемкости получим выражение

$$\Delta c_p = c_P - c_{P0} = T \left(\frac{\partial \Delta S}{\partial T}\right)_P = \frac{a^2 T_c}{2B}, \quad (3.9)$$

где c_{p0} – теплоемкость симметричной фазы. Таким образом, теория Ландау предсказывает скачок теплоемкости в точке фазового перехода.

Для количественного описания динамики релаксации при фазовых переходах необходимо перейти к динамическим уравнениям. В классической теории фазовых переходов используется предположение Ландау – Халатникова о том, что скорость изменения параметра порядка при стремлении к равновесию пропорциональна “возвращающей” силе $\partial\Phi/\partial\phi$:

$$\frac{d\phi}{dt} = -\gamma \frac{\partial\Phi}{\partial\phi}, \quad (3.10)$$

где γ – коэффициент пропорциональности. Подставляя выражение для $\Phi(\phi)$ в формулу (3.10), получим динамическое уравнение:

$$\frac{d\phi}{dt} = -2\gamma(T - T_c)a\phi - 4\gamma B\phi^3. \quad (3.11)$$

Рассмотрим поведение параметра порядка вблизи критической точки. Представим параметр порядка в виде $\phi = \bar{\phi} + \delta\phi$, где $\bar{\phi}$ – равновесное значение параметра порядка: $\delta\phi$ – малое отклонение от равновесия. Подставив это выражение для параметра порядка в релаксационное уравнение (3.11), учитывая, что $d\bar{\phi}/dt = 0$, и пренебрегая степенями $\delta\phi$ выше первой, получим линеаризованное релаксационное уравнение:

$$\frac{d(\delta\phi)}{dt} = -2\gamma(T - T_c)a(\bar{\phi} + \delta\phi) - 4\gamma B\bar{\phi}^3 - 12\gamma B\bar{\phi}^2(\delta\phi). \quad (3.12)$$

Поскольку из условия равновесия $4\gamma B\bar{\phi}^3 = 2\gamma(T_c - T)a\bar{\phi}$, то

$$\frac{d(\delta\phi)}{dt} = -2\gamma(T - T_c)a(\delta\phi) - 12\gamma B\bar{\phi}^2(\delta\phi). \quad (3.13)$$

При $T > T_c$ имеется только одно равновесное значение параметра порядка $\bar{\phi}_1 = 0$. В этом случае релаксационное уравнение (3.13) принимает вид

$$\frac{d(\delta\phi)}{dt} = -2\gamma(T - T_c)a\delta\phi. \quad (3.14)$$

Если ввести обозначение

$$\tau_0 = \frac{1}{2\gamma a(T - T_c)}, \quad (3.15)$$

то уравнение (3.14) запишется в виде

$$\frac{d(\delta\phi)}{dt} = -\frac{\delta\phi}{\tau_0}. \quad (3.16)$$

Величина τ_0 представляет собой время релаксации параметра порядка.

Оно стремится к бесконечности при $T \rightarrow T_c$.

Решение уравнения (3.16) имеет вид

$$\delta\phi = \phi_0 e^{-t/\tau_0}, \quad (3.17)$$

где ϕ_0 – значение параметра порядка в начальный момент времени, т.е. релаксация носит экспоненциальный характер.

Рассмотрим теперь область температур $T < T_c$. В этом случае нулевое значение параметра порядка становится неустойчивым, а устойчивыми являются значения, определяемые выражением (3.6). Подставляя эти значения в формулу (3.13), получим

$$\frac{d(\delta\phi)}{dt} = -2\gamma(T - T_c)a(\delta\phi) + 12\gamma B \frac{(T - T_c)}{2B}(\delta\phi) = 4\gamma(T - T_c)a(\delta\phi). \quad (3.18)$$

Релаксационное уравнение (3.18), как и для случая $T > T_c$, можно записать в виде соотношения (3.16) со временем релаксации $\tau_0 = [4\gamma a(T_c - T)]^{-1}$. При температурах $T < T_c$ релаксация параметра порядка, как и при $T > T_c$, экспоненциальная.

Таким образом, при приближении к критической точке минимум $\Phi(\phi)$ становится все более пологим, т. е. “возвращающая сила”, стремящаяся перевести систему в состояние с равновесным значением параметра порядка, становится все более слабой, так что во время релаксации для установления равновесия по параметру порядка неограниченно возрастает. В

самой критической точке ($T = T_c, \bar{\phi} = 0$) релаксационное уравнение (3.11) принимает вид

$$\frac{d(\delta\phi)}{dt} = -4\gamma B(\delta\phi)^3. \quad (3.19)$$

Решение данного уравнения имеет вид $\delta\phi \sim t^{-1/2}$, т.е. релаксация носит степенной характер в отличие от рассмотренной выше экспоненциальной релаксации. Данное явление получило название *критического замедления* релаксации флуктуаций.

3.2.2. Фазовые переходы в пространственно неоднородной системе. Уравнение Гинзбурга – Ландау

Рассмотрим пространственно неоднородную систему, когда параметр порядка ϕ зависит от координаты $\vec{r}$, но давление и температура однородны. Если пространственно распределенную систему можно разбить на подсистемы, которые являются почти однородными и характеризуются плотностью термодинамического потенциала $f(\vec{r})$, то в этом аддитивном приближении термодинамический потенциал системы приближенно определяется в виде суммы потенциалов подсистем

$$\Phi_{ad} = \int f(\vec{r}) d\vec{r} = \int [f_0 + a(T - T_c)\phi^2 + B\phi^4] d\vec{r}. \quad (3.20)$$

В действительности следует ожидать, что неоднородность системы будет давать дополнительный вклад, связанный с неоднородностью параметра порядка. Этот вклад определяется градиентом параметра порядка $\nabla\phi$. Учтем этот вклад, вводя дополнительные члены разложения по $\nabla\phi$, и оставим только квадратичный член $(\nabla\phi)^2$ (от первой степени не должен зависеть потенциал). В этом случае выражение для термодинамического потенциала запишется в виде функционала

$$\Phi = \int [f_0 + a(T - T_c)\phi^2 + B\phi^4 + g(\nabla\phi)^2] d\vec{r} \quad (3.21)$$

Соответствующее условие равновесия получается варьированием интеграла (3.21) по ϕ и приравниванием вариации нулю. Из курса вариационного исчисления известно, что для существования экстремума функционала (стационарного распределения параметра порядка по пространству) необходимо выполнение уравнения Эйлера, которое для функционала (3.21) имеет вид

$$\frac{\delta\Phi[\phi(\vec{r},t)]}{\delta\phi(\vec{r},t)} = \frac{\partial F}{\partial\phi} - \frac{d}{d\vec{r}} \left(\frac{\partial F}{\partial(\nabla\phi)} \right) = 0, \quad (3.22)$$

где через F обозначено подынтегральное выражение в (3.21). Подставив выражение для F в уравнение Эйлера (3.22), получим

$$2a(T - T_c)\phi + 4B\phi^3 - 2g\Delta\phi = 0, \quad (3.23)$$

где через $\Delta \equiv \partial^2 / \partial \vec{r}^2$ обозначен лапласиан. Уравнение (3.23) определяет равновесное распределение параметра порядка.

Динамическое уравнение получается с использованием соотношения Ландау – Халатникова:

$$\frac{\partial\phi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\gamma \frac{\delta\Phi[\phi(\vec{r},t)]}{\delta\phi(\vec{r},t)}, \quad (3.24)$$

где параметр γ характеризует скорость релаксации системы к положению равновесия. С учетом выражения для функциональной производной (первое равенство в соотношении (3.22)) динамическое уравнение для параметра порядка сводится к виду

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = 2g\gamma\Delta\phi - 2a\gamma(T - T_c)\phi - 4B\gamma\phi^3. \quad (3.25)$$

Или, вводя новые обозначения для коэффициентов

$D = 2\gamma g$, $\alpha = -2a\gamma(T - T_c)$, $\beta = 4B\gamma$, получим

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = D\Delta\phi + \alpha\phi - \beta\phi^3. \quad (3.26)$$

Уравнение (3.26) представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа с нелинейным источником. Параболические уравнения хорошо изучены в математической физике (к этому же классу принадлежат уравнения диффузии и теплопроводности). Уравнение (3.26) иногда называют уравнением Гинзбурга – Ландау (хотя исторически первым уравнением Гинзбурга – Ландау является динамическое уравнение для амплитуд комплексного параметра порядка в феноменологической теории сверхпроводимости). Обобщенные уравнения Гинзбурга – Ландау играют важную роль при описании неравновесных фазовых переходов.

3.2.3. Критические показатели. Гипотеза масштабной инвариантности

Теория Ландау основывается на разложении энергии Гиббса системы по параметру порядка вблизи точки фазового перехода. Она отражает многие существенные моменты фазовых переходов. Однако развитые флуктуации вблизи критической точки не учитываются этой теорией, и это приводит к некоторому расхождению результатов теории Ландау с соответствующими экспериментальными данными. Эксперимент привел к концепции скейлинга, которая заключается в степенном характере поведения различных величин вблизи точки фазового перехода второго рода. Были введены так называемые критические индексы, которые характеризуют такую зависимость. В шестидесятые годы XX века была построена феноменологическая теория, позволяющая связывать различные критические индексы между собой. Понимание явления скейлинга было достигнуто в семидесятые годы и было связано с работами К. Вильсона, в которых использован метод ренормгруппы.

Экспериментальные данные дают основание считать, что при $T \rightarrow T_c$ теплоемкость c_P стремится к бесконечности. Вводя обозначение $\tau \equiv (T - T_c)/T_c$, можно записать:

$$c_P \sim |\tau|^{-\alpha}, \quad (3.27)$$

где $\alpha < 1$, т.е. вместо скачка теплоемкости, предсказываемого теорией Ландау (выражение (3.9)), в экспериментах наблюдается степенная расходимость теплоемкости. Степенные зависимости наблюдаются и для других величин. Закон стремления к нулю равновесного значения параметра порядка в несимметричной фазе (при $A < 0$) записывается как

$$\phi \sim (-\tau)^\beta, \quad \beta > 0. \quad (3.28)$$

Из теории Ландау следует, что $\phi \sim \sqrt{T_c - T}$ (см.(3.6)), т.е. $\beta = 1/2$. Из экспериментов следует, что $\beta = 0,33$.

Определим восприимчивость как отклик системы на внешнее малое воздействие: $\chi \simeq (\partial\phi/\partial h)_{h=0}$, где h – внешнее поле, воздействующее на систему. Примером восприимчивости является изотермическая сжимаемость жидкости: $\chi_T = V^{-1}(\partial V/\partial P)_T$. При приближении к критической точке восприимчивость расходится по степенному закону:

$$\chi \sim |\tau|^{-\gamma}. \quad (3.29)$$

Важное значение в теории критических явлений играет понятие радиуса корреляции флуктуаций (или корреляционного радиуса) r_c . Корреляционный радиус определяется таким образом, что на расстояниях, больших r_c , две флуктуации можно считать независимыми. Температурная зависимость корреляционного радиуса r_c определяется показателем ν ($\nu > 0$):

$$r_c \sim |\tau|^{-\nu}. \quad (3.30)$$

Показатель ξ , определяющий закон убывания парной корреляционной функции $G(r)$ с расстоянием при $\tau = 0$:

$$G(r) \sim r^{-(d-2+\xi)}, \quad (3.31)$$

где d – размерность пространства ($d = 3$ для обычных тел).

Показатели степеней в законах (3.25) – (3.31) называют критическими показателями или *критическими индексами*. Кроме перечисленных, вводят ряд индексов для описания критического поведения при наличии внешнего поля. Критические индексы являются универсальными для всех фазовых переходов второго рода, их значения одинаковы для всех переходов с изменением симметрии, описывающихся одним параметром порядка. В рамках теории Ландау значения критических индексов следующие: $\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\xi = 0$, $\gamma = 1$. Область применимости теории Ландау определяется числом Гинзбурга Gi и задается соотношением $Gi/|\tau| \ll 1$, где $Gi = B^2(kT_c)^2 / |a|g^3$.

Задача теоретического описания критического состояния заключается по существу в проверке скейлинговых соотношений типа (3.27) – (3.31) и вычислении конкретных значений критических индексов.

Существенный прогресс в изучении критических явлений связан с гипотезой масштабной инвариантности или гипотезой подобия, сформулированной в 1966г. Л. Кадановым и независимо В.Л. Покровским и А.З. Паташинским. В основе данной гипотезы лежит представление о том, что рост радиуса корреляции вблизи T_c приводит к существенному взаимодействию флуктуаций, что и определяет особенности критического поведения. Гипотеза масштабной инвариантности утверждает, что сингулярная зависимость физических величин вблизи критической точки есть следствие расходимости радиуса корреляции, который является единственным физическим масштабом длины вблизи критической точки. С математической точки зрения гипотеза подобия означает, что термодинамические функции вблизи критической точки являются обобщенными однородными функ-

циями переменных. Функция называется однородной, если выполняется условие (на примере функции двух переменных):

$$f(\lambda x, \lambda y) = \lambda^r f(x, y), \quad (3.32)$$

где число r носит название степени или порядка однородности. Гипотеза подобия позволила установить ряд точных соотношений между критическими индексами. Мы не будем подробно останавливаться на выводе этих соотношений, а приведем в качестве примера наиболее часто встречающиеся соотношения:

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{\gamma}{2-\xi}, \\ \alpha &= 2 - \nu d, \\ \beta &= \frac{1}{2} \nu (d - 2 + \xi). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Заметим, что значения критических индексов, полученных в рамках теории Ландау, не удовлетворяют скейлинговым соотношениям (3.33) и эксперименту в реальных трехмерных системах. Можно убедиться, что индексы теории Ландау удовлетворяют скейлинговым соотношениям, если в них формально положить размерность пространства $d = 4$. Размерность пространства $d = 4$ называется верхней критической размерностью теории. Результатом современной теории является утверждение об универсальности критического поведения – величина критических индексов в самых различных физических системах определяется только размерностью системы, в которой происходит фазовый переход и числом параметров порядка.

Теоретическая проблема расчета конкретных значений критических индексов в течение долгого времени была одной из самых трудных в термодинамике и статистической физике. Физической причиной этих трудностей является сильное взаимодействие флуктуаций в критической области и отсутствие естественного малого параметра, по которому можно было бы попытаться построить какой-либо вариант теории возмущений. Эта задача была успешно решена Вильсоном с использованием заимствованно-

го из квантовой теории поля метода ренормализационной группы, который представляет собой метод масштабных преобразований, заключающийся в последовательном усреднении по флуктуациям, масштабы которых меньше, чем характерные линейные размеры пространственных неоднородностей. Вильсон предложил оригинальный метод расчета критических индексов, основанный на теории возмущения по искусственно определенному малому параметру $\varepsilon = 4 - d$ – отклонению от верхней критической размерности пространства $d = 4$, при которой индексы совпадают с предсказаниями теории среднего поля Ландау.

В табл. 2 приведены значения некоторых критических индексов, рассчитанных в рамках теории Ландау, флуктуационной теории фазовых переходов и экспериментальные данные для критической точки “жидкость – пар” для ксенона.

Таблица 2

Наименование индекса	Критические индексы, полученные из		
	теории Ландау	флуктуационной теории	экспериментальных данных
α	0	0,167	<0,4
β	1/2	0,333	0,33
γ	1	1,167	1,26

В заключение этого параграфа заметим, что наряду с масштабной инвариантностью, сформулированной для термодинамических свойств вблизи критической точки, существует динамическая масштабная инвариантность, которая распространяет гипотезу подобия на кинетические явления.

3.2.4. Особенности неравновесных фазовых переходов. Макроскопическое описание самоорганизации

Первым обратил внимание на общность возникновения диссипативных структур и фазовых переходов в равновесных системах Г. Хакен. Это дало ему основание назвать процессы образования диссипативных структур неравновесными фазовыми переходами. Перечислим необходимые условия для возможности возникновения диссипативных структур и, следовательно, неравновесных фазовых переходов.

1. Стационарные диссипативные структуры могут образовываться только в открытых системах. В таких системах возможен обмен энергией и энтропией со средой, приток энергии, компенсирующий потери и обеспечивающий существование упорядоченных состояний.

2. Диссипативные структуры возникают в макроскопических системах, то есть в системах, состоящих из большого числа структурных единиц. Это позволяет использовать для их описания уравнения для усредненных по физически бесконечно малому объему функций. Упорядоченное движение в таких системах всегда носит кооперативный характер, так как в него вовлекается большое число структурных единиц.

3. Диссипативные структуры при теоретическом рассмотрении возникают лишь в системах, описываемых нелинейными уравнениями для макроскопических функций. Примером может служить система нелинейных гидродинамических уравнений.

4. Для возникновения решений, описывающих образование диссипативных структур, нелинейные уравнения должны допускать появление при определенных значениях параметров решений, обладающих иной симметрией. Например, переход от теплопереноса за счет теплопроводности к конвективному движению по ячейкам Бенара сопровождается появлением трансляционной симметрии с периодом, кратным размеру ячейки.

Многие из наиболее распространенных макроскопических систем могут быть описаны с помощью набора параметров состояния $\vec{X} \equiv \{X_i\}$, удовлетворяющих эволюционным уравнениям вида

$$\frac{\partial \vec{X}}{\partial t} = \vec{f}[\vec{X}(\vec{r}, t), \hat{L} \vec{X}(\vec{r}, t), \lambda], \quad (3.34)$$

где $\vec{f} \equiv \{f_i\}$ – есть некоторая векторная функция вектора $\vec{X}$ и результата воздействия на него пространственного дифференциального оператора $\hat{L}$.

Уравнения типа (3.34), в которых правая часть зависит от времени неявно, носят название автономных. Параметрами состояния $\vec{X}$ могут быть, например, поля температуры, электрического потенциала, скоростей или химического состава. Функции $\vec{f}$, как правило, содержат частные производные по пространственным переменным и нелинейны, например, из-за химических реакций в системе или явлений переноса (таких, как конвекция в гидродинамике). Они могут также зависеть от некоторого набора управляющих параметров λ (констант скоростей, коэффициентов диффузии и т.д.). Примером уравнений типа (3.34) может служить система уравнений переноса массы импульса и энергии в неравновесной термодинамике.

Для того чтобы задача (3.34) имела решения, значения управляющих параметров и граничные условия, поддерживаемые на границе системы, должны быть известны. Граничные условия бывают либо условиями Дирихле, задающими значения параметров на поверхности, либо условиями Неймана, задающими значения потоков на поверхности.

Управляющие параметры λ и граничное условие, наложенное на систему, воспроизводят внешнее воздействие.

При исследовании процессов самоорганизации обычно принимают предположение о том, что внешняя среда постоянна во времени. Такое предположение требует постоянства во времени всех управляющих параметров λ и граничных условий. В этом случае проблема возникновения в

системе упорядоченного режима может быть исследована следующим образом. Поскольку среда постоянна, мы можем предположить, что существует по крайней мере одно не зависящее от времени решение $\vec{X}_0$, для которого

$$\vec{f}[\vec{X}(\vec{r}, t), \hat{L} \vec{X}(\vec{r}, t), \lambda] = 0. \quad (3.35)$$

Примем это решение за опорное, которое соответствует неупорядоченному состоянию. Переход к упорядоченному состоянию является неравновесным фазовым переходом и ассоциируется с неустойчивостью и нарушением симметрии. В этом случае тривиальное решение (3.35) становится неустойчивым и сменяется новым, что на языке теории дифференциальных уравнений называется *бифуркацией*. Простейший способ исследования такой возможности состоит прежде всего в проверке устойчивости опорного состояния относительно малых возмущений. Для этого положим

$$\vec{X}(\vec{r}, t) = \vec{X}_0 + \vec{x}(\vec{r}, t), \quad |x_i / X_i| \ll 1. \quad (3.36)$$

Подставив выражение (3.36) в (3.34), получим уравнение для временной эволюции возмущения. После линеаризации векторного уравнения (пренебрежения степенями x_i выше первой) получим систему уравнений

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = \sum_j A_{ij}(\lambda) x_j, \quad (3.37)$$

где каждый элемент матрицы A_{ij} представляет собой линейный дифференциальный оператор, получаемый из (3.34) путем линеаризации.

Линейная система (3.37) допускает решения в виде

$$x_i^k(\vec{r}, t) = x_{i0}^k(\vec{r}) \exp(\nu_k t). \quad (3.38)$$

Подставляя выражение (3.38) в (3.37), получаем систему однородных дифференциальных уравнений, которая представляет собой задачу на собственные значения параметра $\nu_k(\lambda)$ и собственные функции, которые должны удовлетворять наложенным на систему граничным условиям. Частоты

ν_k в общем случае являются комплексными. Вещественная часть $\text{Re}\{\nu_k\}$ определяет скорость эволюции возмущений, а мнимая – частоту периодических процессов. Если $\text{Re}\{\nu_k\} > 0$, то возмущения нарастают со временем и система является неустойчивой. Если $\text{Re}\{\nu_k\} < 0$, то возмущения рассеиваются и система является асимптотически устойчивой. Следовательно, возникновение перехода можно определить просто изучая поведение $\text{Re}\{\nu_k\}$ как функции значений управляющих параметров λ и наложенных на систему граничных условий. Для простоты предположим, что мы исследуем свойства системы, имея в своем распоряжении только один управляющий параметр λ . В точке $\lambda = \lambda_c$, где по крайней мере одна из величин $\text{Re}\{\nu_k\}$ перестает быть отрицательной и становится положительной, время жизни флуктуаций $\tau \simeq |1/\text{Re}\{\nu_k\}|$ в первом приближении стремится к бесконечности. Иначе говоря, релаксация флуктуаций замедляется. Такое значение λ_c называется точкой бифуркации. Это та точка, в которой одно или несколько новых решений векторного уравнения (3.34) соединяются с рассматриваемым опорным состоянием. С каждым новым стационарным решением уравнения (3.34) принято связывать параметр порядка ϕ , который обращается в нуль в точке λ_c и служит мерой отклонения от опорного состояния. Зависимость ϕ от λ носит название бифуркационной диаграммы.

В качестве параметра порядка для неравновесных (кинетических) фазовых переходов обычно выступает амплитуда нового стационарного состояния, например, амплитуда скорости конвекции в опыте Бенара. Следует отметить, что величина этой амплитуды не может быть определена путем решения линеаризованной задачи (3.37), для определения конечного значения стационарной амплитуды необходимо учесть нелинейные связи в рассматриваемой системе.

На рис.3.2 показан пример бифуркационной диаграммы для фазового перехода второго рода. При $\lambda < \lambda_c$ существует единственное асимптотическое решение. Оно устойчиво и соответствует режиму, обладающему самой высокой симметрией. В точке $\lambda = \lambda_c$ это решение становится неустойчивым, и в закритической области возникают одна, две или более новых ветвей решения с более низкой симметрией.

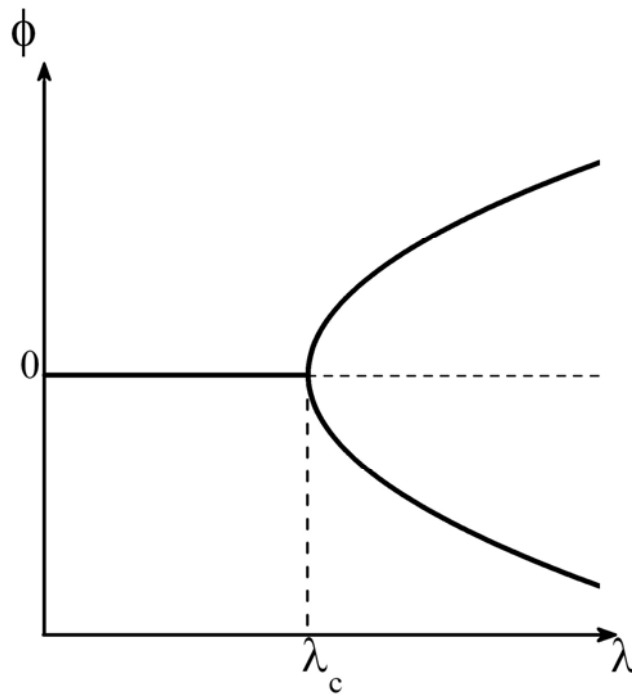


Рис. 3.2. Бифуркационная диаграмма для фазового перехода второго рода

Примером подобной бифуркационной диаграммы является зависимость равновесного значения параметра порядка $\phi = (\rho - \rho_c)/\rho_c$ для критической точки жидкость – пар от управляющего параметра, который для диаграммы, представленной на рис.3.2 может быть определен как обратная температура, т.е. $\lambda = 1/T$. Действительно, при температурах равных или больших критической $T \geq T_c$ ($\lambda \leq \lambda_c$) имеем одно состояние. При температурах $T < T_c$ ($\lambda > \lambda_c$) появляются два возможных состояния: жидкое и газообразное. Точка $T = T_c$ ($\lambda = \lambda_c$) является точкой бифуркации.

Однако подобные диаграммы можно изобразить не только для термодинамических “равновесных” фазовых переходов, но и для неравновесных переходов, как они были определены выше. Представим себе балку прямоугольного сечения, на которую положен груз, как показано на рис. 3.3. Если увеличивать груз, балка сжимается и остается прямолинейной. Но, начиная с некоторого критического веса, она уже не может оставаться в этом положении и прогибается вправо или влево. Если нарисовать зависимость максимального прогиба балки от веса груза, то получится зависимость, подобная изображенной на рис. 3.2.

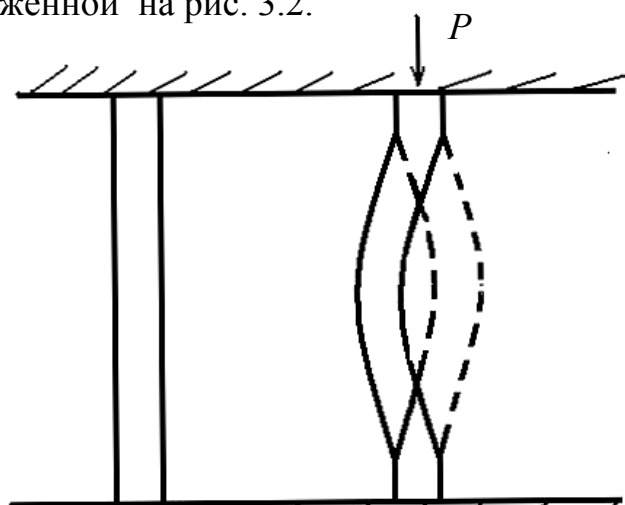


Рис. 3.3. Прогиб балки под нагрузкой

В данном случае параметром порядка можно считать отклонение середины балки от вертикального положения: $\phi = \Delta x$, а управляющим параметром – вес груза: $\lambda = P$.

Бифуркации такого рода встречаются в классических гидродинамических неустойчивостях Бенара и Тейлора. Они соответствуют возникновению пространственной когерентной структуры конвективных ячеек. Аналогичная бифуркация часто встречается при возникновении пространственных, временных или пространственно - временных колебаний в химических системах типа описанной выше реакции Белоусова – Жаботинского.

Помимо простейшего вида бифуркационной диаграммы, изображенной на рис.3.2, существуют более сложные виды диаграмм, состоящие из нескольких точек бифуркации, и соответствующие возможности протекания нескольких фазовых переходов в системе.

3.2.5. Переход от ламинарного к турбулентному течению как неравновесный фазовый переход

Вопрос о том, почему при увеличении числа Рейнольдса происходит переход от ламинарного движения к турбулентности, давно волнует исследователей. В 1944г. Л.Д. Ландау была предложена теория, в которой переход к турбулентному движению рассматривается, по-существу, как фазовый переход.

Запишем систему уравнений Навье – Стокса и непрерывности для несжимаемой жидкости:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \vec{u}, \quad (3.39)$$

$$\operatorname{div} \vec{u} = 0.$$

Представим скорость течения жидкости $\vec{u}(\vec{r}, t)$ и давление p в виде суммы двух слагаемых

$$\vec{u} = \vec{u}_0 + \vec{u}_1, \quad p = p_0 + p_1, \quad (3.40)$$

где функции $\vec{u}_0(\vec{r})$ и $p_0(\vec{r})$ удовлетворяют стационарным уравнениям

$$(\vec{u}_0 \nabla) \vec{u}_0 = -\frac{1}{\rho} \nabla p_0 + \nu \Delta \vec{u}_0, \quad \operatorname{div} \vec{u}_0 = 0. \quad (3.41)$$

Подставляя выражения (3.40) в систему (3.39) и учитывая уравнения (3.41) получим:

$$\frac{\partial \vec{u}_1}{\partial t} + (\vec{u}_0 \nabla) \vec{u}_1 + (\vec{u}_1 \nabla) \vec{u}_0 = -\frac{1}{\rho} \nabla p_1 + \nu \Delta \vec{u}_1, \quad \operatorname{div} \vec{u}_1 = 0. \quad (3.42)$$

В выражении (3.42) опущены члены, содержащие высшие порядки по величине $\vec{u}_1$, то есть рассмотрение проводим в рамках линейной теории возмущений. Граничным условием к (3.42) является исчезновение $\vec{u}_1$ на неподвижных твердых поверхностях.

Функция $\vec{u}_1(\vec{r})$ и $p_1(\vec{r})$ удовлетворяет системе однородных линейных дифференциальных уравнений (3.42) с коэффициентами, являющимися функцией только от координат. Общее решение таких уравнений может быть представлено в виде суммы частных решений, в которых $\vec{u}_1(\vec{r})$ и $p_1(\vec{r})$ зависят от времени посредством множителей типа $\exp(vt)$, где величины $v = \gamma - i\omega$ в общем случае являются комплексными. Если вещественная часть γ - положительна, то $\exp(\gamma t)$ будет неограниченно возрастать со временем, т.е. движение будет неустойчивым относительно малых возмущений. Для устойчивости движения необходимо, чтобы у всех возможных величин v вещественная часть была отрицательна, т.е. $\gamma = \text{Re}\{v\} < 0$. В этом случае возникшие по тем или иным причинам возмущения будут экспоненциально затухать со временем. В общем нелинейном случае без линеаризации анализ устойчивости движения крайне сложен, если вообще возможен. Из эксперимента известно, что при малых числах Рейнольдса движение устойчиво. Начиная с некоторого значения $Re > Re_c$, ламинарное движение теряет свою устойчивость и происходит переход к турбулентности. Рассмотрим случай, когда число Рейнольдса лишь немного отличается от критического значения.

При $Re < Re_c$ $\gamma < 0$. При $Re = Re_c$ появляется одна частота, мнимая часть которой обращается в нуль. При $Re > Re_c$ $\gamma > 0$. Функция u_1 , соответствующая последнему случаю, имеет вид

$$u_1 = A(t)f(\vec{r}), \quad (3.43)$$

где зависящая от времени амплитуда определяется выражением:

$$A(t) = \text{const } e^{\gamma t} e^{-i\omega t}. \quad (3.44)$$

Описанный метод применим лишь при достаточно малых значениях u_1 . Из формулы (3.44) можно найти производную по времени от квадрата амплитуды $|A|^2 = AA^*$ (квадрат амплитуды является вещественной функцией):

$$\frac{d|A|^2}{dt} = 2\gamma |A|^2. \quad (3.45)$$

Рассмотрим теперь случай слабой нелинейности. Выражение (3.45) является первым членом разложения в ряд по степеням AA^* (A^* – комплексно сопряженное значение). Следующий член разложения это $|A|^4$. Таким образом,

$$\frac{d|A|^2}{dt} = 2\gamma |A|^2 - \alpha |A|^4. \quad (3.46)$$

Решение уравнения (3.46) имеет вид

$$|A|^{-2} = \frac{\alpha}{2\gamma} + \text{const } e^{-2\gamma t}. \quad (3.47)$$

Отсюда видно, что квадрат амплитуды асимптотически при $t \rightarrow \infty$ стремится к конечному пределу

$$|A|_{\max}^2 = \frac{2\gamma}{\alpha}. \quad (3.48)$$

Параметр γ является функцией числа Рейнольдса. Вблизи критического значения Re_c функцию $\gamma(Re)$ можно разложить в ряд по степеням $(Re - Re_c)$ и ограничиться первым членом разложения:

$$\gamma \approx \text{const}(Re - Re_c). \quad (3.49)$$

Коэффициент α считается зависящим от числа Рейнольдса. Если $\alpha > 0$ (то есть нелинейный член снижает амплитуду), то стационарное решение уравнения (3.48) при $Re > Re_c$ имеет вид

$$|A|_{\max} = \left(\frac{2\gamma}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \sim (\text{Re} - \text{Re}_c)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.50)$$

Учитывая, что $|A|_{\max}$ выступает в этой задаче в качестве параметра порядка, полезно сравнить выражение (3.50) с (3.28) и убедиться в универсальности общих закономерностей равновесных и неравновесных фазовых переходов.

Рассматриваемая теория возникновения нестационарного гидродинамического течения аналогична теории неравновесных фазовых переходов в автоколебательных системах. Если воспользоваться терминологией теории колебаний, то можно сказать, что решение (3.50), когда $\alpha > 0$ и $\text{Re} > \text{Re}_c$, отвечает мягкому возбуждению колебаний, когда “генерация” начинается со сколь угодно малого значения амплитуды колебаний.

Зависимость амплитуды колебаний скорости от превышения над порогом, определяемая выражением (3.50), и отвечающая условию мягкого возбуждения колебаний скорости (когда генерация начинается с бесконечно малых значений амплитуды колебаний), для некоторых течений, например, течения в области смешения двух жидкостей, соответствует данным экспериментов, в которых исследуется процесс зарождения турбулентности.

Зарождение турбулентности может быть обусловлено и жестким возникновением колебаний, когда генерация начинается с конечного значения амплитуды колебаний. Такого рода процессы наблюдаются в течениях Пуазейля (в трубах или между двумя параллельными стенками).

Режим жесткого возбуждения возможен, если коэффициент при четвертой степени $|A|^4$ положителен ($\alpha < 0$), а коэффициент при члене более высокого порядка (шестого) отрицателен. В этом случае уравнение для амплитуды записывается следующим образом:

$$\frac{d|A|^2}{dt} = 2\gamma|A|^2 - \alpha|A|^4 - \beta|A|^6, \quad \alpha < 0, \beta > 0. \quad (3.51)$$

Стационарное решение (3.51) имеет вид

$$|A|_{\max}^2 = \frac{|\alpha|}{2\beta} \pm \left[\frac{\alpha^2}{4\beta^2} + \frac{2|\alpha|}{\beta} \gamma \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.52)$$

График зависимости интенсивности колебаний при мягком и жестком возбуждении показан на рис.3.4.

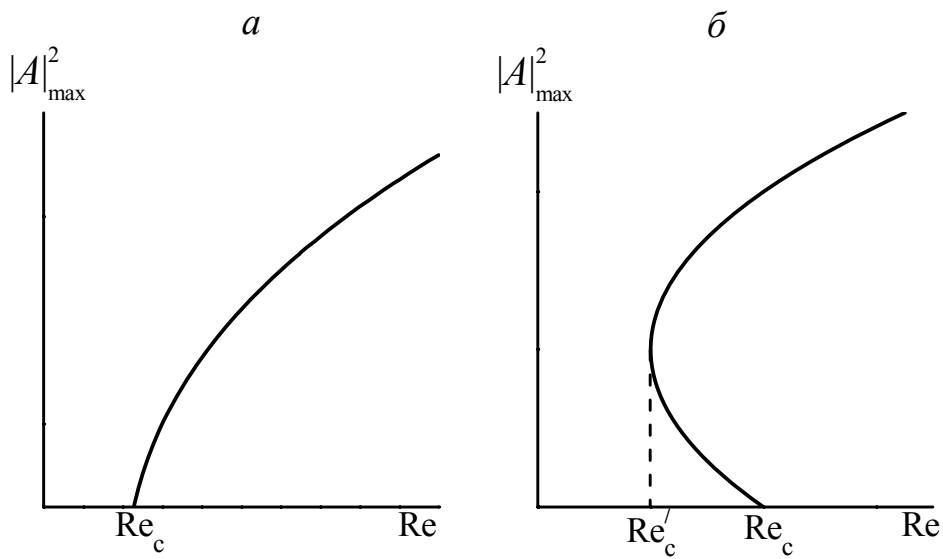


Рис. 3.4. Бифуркационная диаграмма при мягком (а) и жестком (б) переходе к турбулентности

При $Re > Re_c$ стационарное состояние не может существовать. При мягком возбуждении стационарное состояние (ламинарное движение) устойчиво при любых числах Рейнольдса $Re < Re_c$. При превышении числа Рейнольдса над критическим значением при мягкой потере устойчивости амплитуда возмущений нарастает плавно по мере увеличения степени надкритичности.

При жестком возбуждении имеются два критических числа Рейнольдса Re_c и Re'_c (см. рис.3.4). В области чисел $Re'_c < Re < Re_c$ есть два

устойчивых и одно неустойчивое решения для амплитуды возмущений. В этом интервале движение бистабильно, то есть заданному значению управляющего параметра соответствуют два стационарных состояния: $|A|_{\max}^2 = 0$ и $|A|_{\max}^2$ с конечным значением, соответствующим верхней ветви. Переход между двумя состояниями является неравновесным фазовым переходом первого рода.

Приведенная картина может сопоставляться с экспериментальными данными лишь при малых значениях надкритичности $Re - Re_c$. Только в этом случае возможно представление типа (3.51) в виде полиномов по $|A|^2$.

3.2.6. Диссипативные динамические системы

В п.3.2.4 отмечалось, что многие физические процессы, сопровождающиеся неравновесными фазовыми переходами, описываются эволюционными уравнениями типа (3.34). При изменении управляющих параметров возможна качественная перестройка решений уравнений (бифуркация). В физических процессах этому соответствует смена режимов переноса, в частности, в системе могут возникнуть пространственно – временные структуры. В ходе последовательного усложнения регулярных структур может быть достигнута граница, за которой их поведение становится неустойчивым по отношению к малым возмущениям. В результате могут образовываться сложные, нерегулярные структуры, более характерные для случайного, стохастического поведения. Оказалось, что сложная иерархия бифуркаций, приводящая к усложнению движений, может наблюдаться не только в пространственно распределенных активных средах, но и в достаточно простых (но нелинейных) сосредоточенных системах. В случае сосредоточенных систем уравнения типа (3.34) переходят в систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка по времени. Данные вопросы являются предметом теории динамических систем.

3.2.7. Аттракторы

Рассмотрим физическую систему, эволюция во времени которой описывается системой n обыкновенных дифференциальных уравнений 1-го порядка:

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{f}(\vec{X}), \quad \vec{X}(0) = \vec{X}_0, \quad (3.53)$$

где $\vec{X} = \{X_1, \dots, X_n\}$ – n -мерный вектор с компонентами $X_1, \dots, X_n$, а $\vec{f}$ – векторная функция, компонентами которой служат величины $\vec{f} = \{f_1, \dots, f_n\}$. Будем предполагать, что функция $\vec{f}$ не зависит явно от времени, то есть система является автономной. В простейшем случае системой типа (3.53) описывается релаксация к равновесному состоянию в отсутствие внешних сил.

Под фазовым пространством будем понимать n -мерное пространство, образованное компонентами $\{X_1, \dots, X_n\}$ вектора $\vec{X}$. Решение уравнений (3.53) задает некоторую линию или фазовую траекторию в n -мерном фазовом пространстве. Совокупность всех фазовых траекторий при различных начальных условиях называется n -мерным потоком. Если $\vec{f}$ – гладкая функция, то каждой точке фазового пространства ставится в соответствие единственное состояние системы.

Из курса статистической механики известно, что характерной особенностью систем частиц, движение которых подчиняется гамильтоновой механике, является сохранение фазового объема статистического ансамбля систем. В противоположность этому в диссипативных системах фазовый объем ансамбля систем в среднем сжимается. Примером может служить полый шар с пористыми стенками, заполненный вначале газом при давлении P_0 и температуре T_0 и помещенный в среду с тем же газом, находящимся при давлении P_p и температуре T_p . Очевидно, что любой фазовый

объем начальных состояний с течением времени стянется в точку (P_p, T_p) , как это схематично показано на рис.3.5.

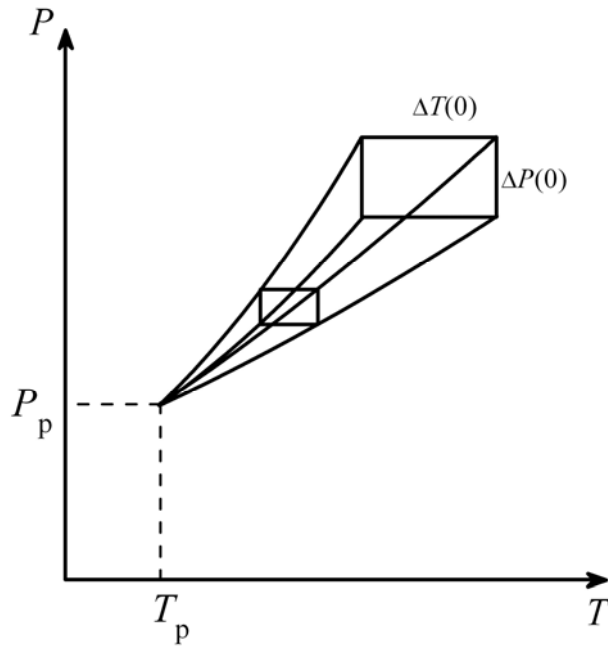


Рис. 3.5. Эволюция фазового объема для задачи установления равновесия

Рассмотрим теперь более общую задачу с n параметрами. Фазовый объем определяется по формуле

$$\Delta\Omega = \prod_{i=1}^n (\Delta X_i)_{X_j \neq X_i}. \quad (3.54)$$

Найдем скорость изменения фазового объема в начальный момент времени ($t = 0$). Здесь нижний индекс указывает на то, что при варьировании i -го параметра около фиксированной точки $\{X_1, \dots, X_n\}$ производится при постоянных значениях других параметров. Беря производную по времени из формулы (3.54), получим

$$\begin{aligned} \frac{d(\Delta\Omega)}{dt} &= \frac{d(\Delta X_1)}{dt} \prod_{i \neq 1} \Delta X_i + \frac{d(\Delta X_2)}{dt} \prod_{i \neq 2} \Delta X_i + \dots = \\ &= \frac{d(\Delta X_1)}{dt} \Delta X_1^{-1} \prod_i \Delta X_i + \frac{d(\Delta X_2)}{dt} \Delta X_2^{-1} \prod_i \Delta X_i + \dots \end{aligned} \quad (3.55)$$

Для упрощения записи здесь не указываются условия варьирования. Отсюда, учитывая выражение (3.54), получим

$$\frac{d(\Delta\Omega)}{dt} = \Delta\Omega \sum_i \Delta X_i^{-1} \frac{d(\Delta X_i)}{dt}. \quad (3.56)$$

Обозначим

$$\Theta \equiv \Delta\Omega^{-1} \frac{d(\Delta\Omega)}{dt} = \sum_i \Delta X_i^{-1} \frac{d(\Delta X_i)}{dt}. \quad (3.57)$$

Для того чтобы найти величину $\frac{d(\Delta X_i)_{X_j \neq X_i}}{dt}$ из формулы (3.57), заметим, что решение системы уравнений (3.53) может быть представлено в виде $X_i = X_i(X_1(0), \dots, X_n(0), t)$, поэтому, варьируя начальные условия только для i -го параметра, получим

$$\Delta X_i(t) = \left(\frac{\partial X_i(t)}{\partial X_i(0)} \right)_{X_j(0) \neq X_i(0)} \Delta X_i(0). \quad (3.58)$$

Беря производную по времени из выражения (3.58), будем иметь

$$\frac{d(\Delta X_i)}{dt} = \Delta X_i(0) \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial X_i}{\partial X_i(0)} \right)_{X_j(0) \neq X_i(0)}. \quad (3.59)$$

Подставляя выражение (3.59) в (3.57) при $t \rightarrow 0$ находим

$$\Theta|_{t \rightarrow 0} = \sum_i \frac{\Delta X_i(0)}{\Delta X_i} \frac{d}{dt} \frac{\partial X_i}{\partial X_i(0)} \bigg|_{t \rightarrow 0} = \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial X_i} = \operatorname{div} \vec{f}. \quad (3.60)$$

Таким образом, если

$$\operatorname{div} \vec{f} = 0, \quad (3.61)$$

то система является консервативной. В этом случае при движении ее фазовый объем сохраняется.

Если же

$$\operatorname{div} \vec{f} < 0, \quad (3.62)$$

то система будет диссипативной, и ее фазовый объем со временем сокращается (например, см. рис.3.5). В конечном счете, при $t \rightarrow \infty$ все решения

такой системы сосредоточатся на некотором подмножестве фазового пространства, называемом *аттрактором*. Областью притяжения аттрактора (бассейном аттрактора) называется множество начальных точек $\vec{X}_0$, таких, что при $t \rightarrow \infty$ фазовые траектории, начавшиеся в этих точках, стремятся к аттрактору. Простейшим примером аттрактора является состояние равновесия. В этом случае аттрактором является точка. При отклонении системы от этого состояния в отсутствие внешних сил происходит релаксация к равновесному состоянию. Любая начальная точка из области притяжения такого аттрактора с течением времени выйдет в равновесное состояние. Однако не все аттракторы являются состоянием равновесия.

Понятие пространственно сосредоточенных (или точечных) систем является приближением. Однако во многих случаях пространственная распределенность системы не является определяющим фактором. Например, маленький хорошо теплопроводный шар в среде с другой температурой можно считать точечной системой из-за малости градиента температуры внутри шара, и скорость изменения его температуры определяется мощностью теплоотдачи. Ниже будут рассмотрены основные типы аттракторов.

3.2.8. Типы аттракторов. Стационарные точки. Предельные циклы

Рассмотрим пространственно сосредоточенную систему, описываемую двумя обыкновенными дифференциальными уравнениями:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= f_1(x, y), \\ \frac{dy}{dt} &= f_2(x, y)\end{aligned}\tag{3.63}$$

с начальными условиями $x|_{t=0} = x_0, y|_{t=0} = y_0$.

Примером сосредоточенной динамической системы, описываемой двумя уравнениями типа (3.63), является электрическая цепь, содержащая реактивные элементы (подробнее такой пример будет рассмотрен ниже).

Решением системы (3.63) является система двух функций:

$$\begin{aligned} x &= F_1(t, x_0, y_0), \\ y &= F_2(t, x_0, y_0), \end{aligned} \quad (3.64)$$

которые обращают выражение (3.63) в тождество. Плоскость (x, y) для дифференциальных уравнений (3.63) называют фазовой плоскостью, а график функции (3.64) как параметрически заданной кривой (параметр – время t) – фазовой траекторией. Уравнение траектории можно получить, разделив первое уравнение системы (3.63) на второе и, исключив тем самым время. Изменяя начальную точку (x_0, y_0) , получаем семейство траекторий на фазовой плоскости, которое образует фазовый портрет системы (3.63).

Будем считать, что система (3.63) имеет стационарные решения $\bar{x}$ и $\bar{y}$, т.е. $dx/dt|_{\bar{x}} = f_1(\bar{x}, \bar{y}) = 0$, $dy/dt|_{\bar{y}} = f_2(\bar{x}, \bar{y}) = 0$. Число стационарных решений определяется видом функций $f_1(x, y)$ и $f_2(x, y)$. С геометрической точки зрения число стационарных решений определяется числом точек пересечения двух линий $f_1(x, y) = 0$ и $f_2(x, y) = 0$. Чтобы число решений было более одного, необходимо, чтобы хотя бы одна из функций была нелинейной.

Для исследования устойчивости стационарных решений воспользуемся стандартной качественной теорией дифференциальных уравнений. Зададим малые возмущения стационарных решений $\delta x = x - \bar{x}$ и $\delta y = y - \bar{y}$. Тогда система (3.63) приобретет вид

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{d(\delta x)}{dt} = \frac{\partial f_1}{\partial x} \delta x + \frac{\partial f_1}{\partial y} \delta y, \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{d(\delta y)}{dt} = \frac{\partial f_2}{\partial x} \delta x + \frac{\partial f_2}{\partial y} \delta y. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Частное решение системы (3.65) ищем в виде

$$\begin{aligned}\delta x &= \delta x_0 e^{\mu t}, \\ \delta y &= \delta y_0 e^{\mu t}.\end{aligned}\tag{3.66}$$

После подстановки выражения (3.66) в (3.65) имеем

$$\begin{aligned}\mu \delta x_0 &= \frac{\partial f_1}{\partial x} \delta x_0 + \frac{\partial f_1}{\partial y} \delta y_0, \\ \mu \delta y_0 &= \frac{\partial f_2}{\partial x} \delta x_0 + \frac{\partial f_2}{\partial y} \delta y_0.\end{aligned}\tag{3.67}$$

Вводя матрицу

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix},\tag{3.68}$$

систему (3.67) можно записать в виде

$$\begin{aligned}(A_{11} - \mu) \delta x_0 + A_{12} \delta y_0 &= 0, \\ A_{21} \delta x_0 + (A_{22} - \mu) \delta y_0 &= 0.\end{aligned}\tag{3.69}$$

Для того чтобы система однородных уравнений (3.69) имела решение, необходимо обращение в ноль определителя:

$$\det(A_{ij} - \mu \delta_{ij}) = 0.\tag{3.70}$$

Раскрывая определитель, имеем

$$\mu^2 - \mu(A_{11} + A_{22}) + A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} = 0.\tag{3.71}$$

Уравнение (3.71) имеет корни

$$\mu_{1,2} = \frac{A_{11} + A_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(A_{11} + A_{22})^2}{4} - A_{11}A_{22} + A_{12}A_{21}}.\tag{3.72}$$

Общее решение системы (3.65) является линейной комбинацией частных решений:

$$\begin{aligned}\delta x &= b_{11} e^{\mu_1 t} + b_{12} e^{\mu_2 t}, \\ \delta y &= b_{21} e^{\mu_1 t} + b_{22} e^{\mu_2 t},\end{aligned}\tag{3.73}$$

где $b_{11} + b_{12} = \delta x_0$, $b_{21} + b_{22} = \delta y_0$.

В зависимости от значения характеристических чисел $\mu_{1,2}$ стационарные точки системы могут иметь различный тип. Рассмотрим эти случаи.

1. Корни μ_1 и μ_2 характеристического уравнения (3.71) вещественны и одного знака. Особая точка системы называется *узлом*. Фазовый портрет системы, т.е. семейство траекторий на фазовой плоскости, соответствующих различным начальным условиям, в данном случае имеет вид, схематично показанный на рис. 3.6. При положительных корнях $\mu_1 > 0$ и $\mu_2 > 0$ фазовые траектории, соответствующие различным начальным условиям, выходят из особой точки $(0,0)$. В этом случае узел является неустойчивым. При отрицательных корнях $\mu_1 < 0$, $\mu_2 < 0$ фазовые траектории, соответствующие различным начальным условиям, стремятся в точку $(0,0)$. В этом случае узел является устойчивым.

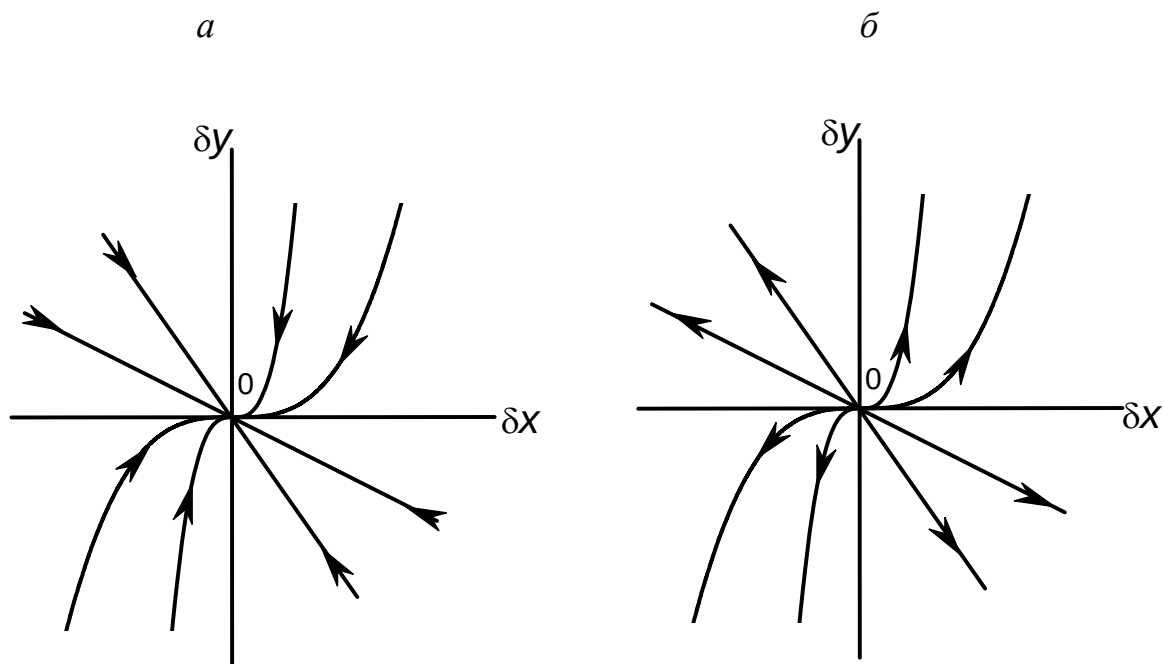


Рис. 3.6. Устойчивый (а) и неустойчивый (б) узлы

В случае неустойчивого узла система стремится уйти из точки, а в случае устойчивого – возвратиться в нее.

2. Корни μ_1 и μ_2 вещественные и разных знаков. Такая неустойчивая стационарная точка системы называется *седлом*. По одним направлениям (в зависимости от начальных условий) система стремится к особой точке, а по другим выходит из нее. Поведение фазовых траекторий в окрестности седловой точки схематично показано на рис.3.7. Траектории I и II (на рис. 3.7), проходящие через седло, разделяют области фазового пространства, в которых фазовые траектории входят в точку и выходят из нее. Такие траектории называются сепаратрисами.

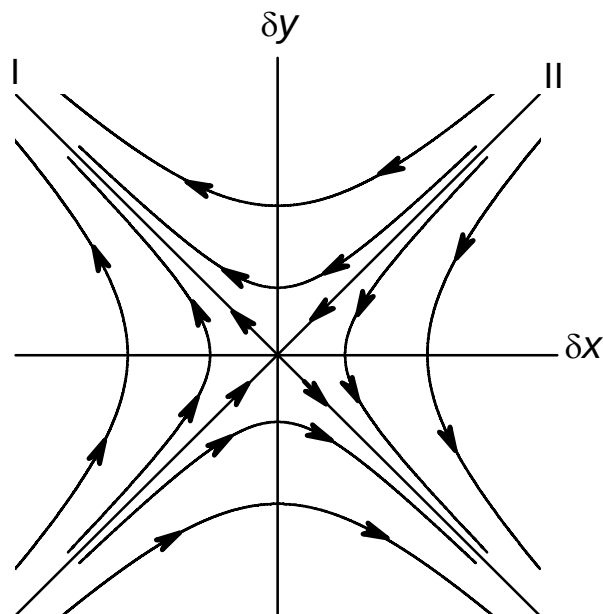


Рис. 3.7. Седловая точка

3. Корни μ_1 и μ_2 характеристического уравнения комплексно-сопряженные, но не чисто мнимые. В этом случае особая точка называется *фокусом* (рис. 3.8). Положительной вещественной части соответствует неустойчивый фокус, отрицательной вещественной части – соответственно устойчивый фокус. При устойчивом фокусе амплитуда колебаний убывает

со временем, при неустойчивом – нарастает. С математической точки зрения фокус характеризуется тем, что существует такая окрестность особой точки, где каждая траектория стремится к критической точке при $t \rightarrow \infty$ или при $t \rightarrow -\infty$ и по мере того, как каждая траектория стремится к особой точке, она "обвивает" ее бесконечное число раз. Схематично поведение фазовых траекторий в окрестности устойчивого фокуса показано на рис.3.8а, неустойчивого фокуса – на рис.3.8б. Такие особые точки, как устойчивый узел и устойчивый фокус являются притягивающими множествами или аттракторами.

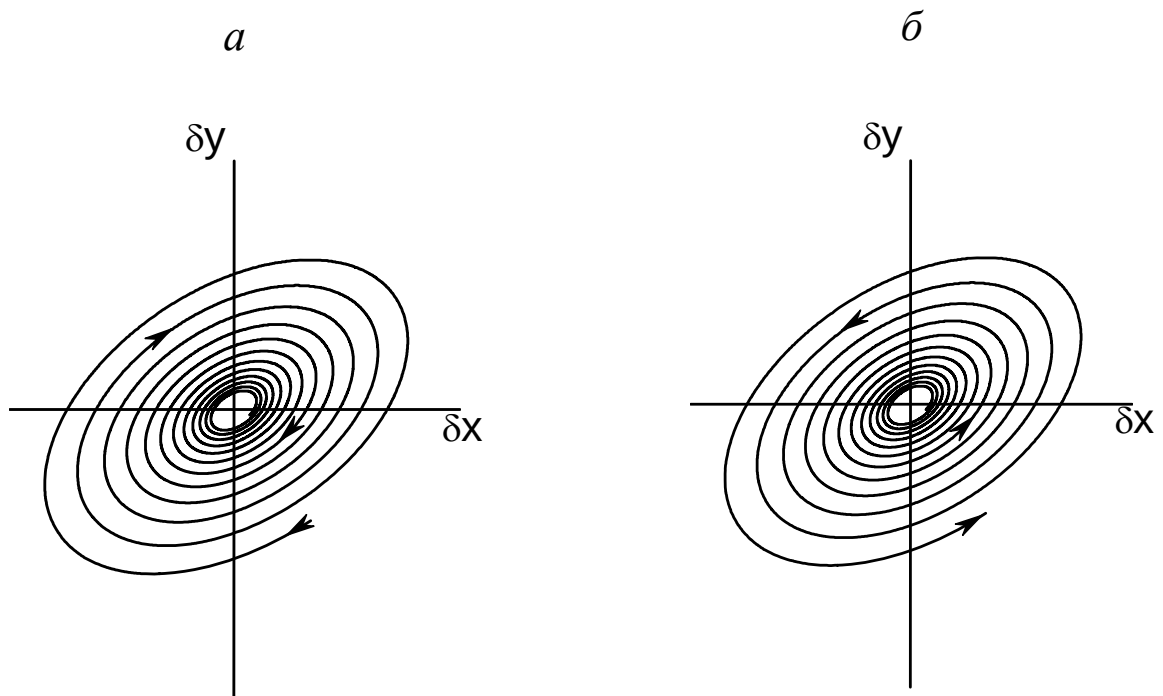


Рис.3.8. Устойчивый (а) и неустойчивый (б) фокусы

Кроме перечисленных случаев в многомерных системах встречаются и более сложные типы стационарных точек. Например, возможны комбинации 1 и 2-го, а также 2 и 3-го типов. Особые точки в этих случаях называются соответственно седло – узел и седло – фокус.

4. Корни характеристического уравнения μ_1 и μ_2 чисто мнимые. Если система является консервативной, то особая точка называется *центром*. Фазовый портрет представляет собой концентрические замкнутые линии (например, окружности), при изменении управляющего параметра система переходит на новую траекторию. В случае диссипативных систем случай равенства нулю вещественной части корней характеристического уравнения может соответствовать, так называемому *предельному циклу*. Предельный цикл есть изолированная замкнутая кривая на фазовой плоскости, к которой в пределе при $t \rightarrow \infty$ стремятся все фазовые траектории. Устойчивые предельные циклы являются аттракторами. Они обладают тем свойством, что в их достаточно малой окрестности нет других замкнутых траекторий, а все остальные фазовые кривые из этой окрестности наматываются на эту единственную замкнутую траекторию. Данная ситуация изображена на рис. 3.9.

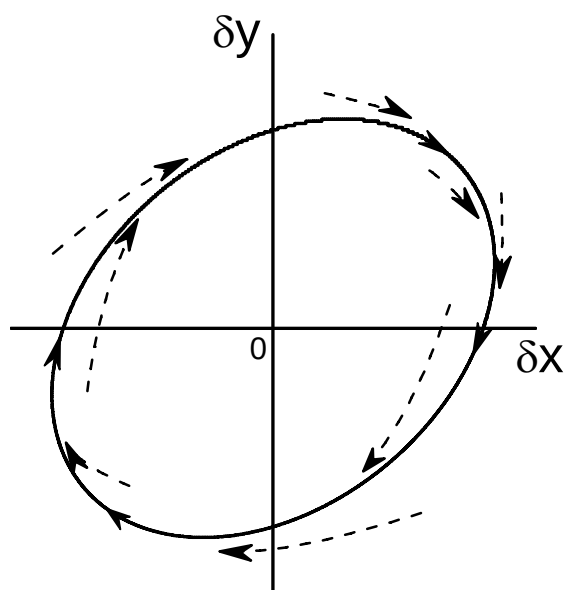


Рис. 3.9. Устойчивый предельный цикл

Бифуркация рождения предельного цикла была впервые исследована А.А. Андроновым для случая системы из двух уравнений, обобщена Е. Хопфом на системы с произвольной размерностью и носит название бифуркации Андронова–Хопфа.

Рассмотрим в качестве примера рождение предельного цикла в нелинейной электрической цепи.

Пусть электрический проводник с нелинейной вольтамперной характеристикой, например такой, какая показана на рис.3.10, включен в простую цепь с емкостью C , включенной параллельно нелинейному проводнику и последовательно включенной индуктивностью L . Также последовательно с нелинейным проводником включено нагрузочное сопротивление R_0 . Обозначим сопротивление нелинейного проводника R , а ЭДС постоянного источника – E .

Пусть стационарная вольт-амперная характеристика проводника будет $I^*(U)$. Если зависимость $I^*(U)$ – кубическая, то мы имеем генератор Ван-дер-Поля. При более сложной (но также нелинейной) зависимости $I^*(U)$ иногда говорят об обобщенном генераторе Ван-дер-Поля.

Из закона Кирхгофа уравнение для падения напряжения будет иметь вид

$$C \frac{dU}{dt} = I - I^*(U). \quad (3.74)$$

Уравнение для тока при наличии индуктивности:

$$L \frac{dI}{dt} = E - U - IR_0. \quad (3.75)$$

Динамика системы определяется уравнениями (3.74) и (3.75). Стационарные состояния задаются точками пересечения нагрузочной прямой $U = E - IR_0$ с вольт-амперной характеристикой нелинейного элемента $I^*(U)$ (рис. 3.11), которые соответствуют уравнениям (3.74) и (3.75) в стационарном случае.

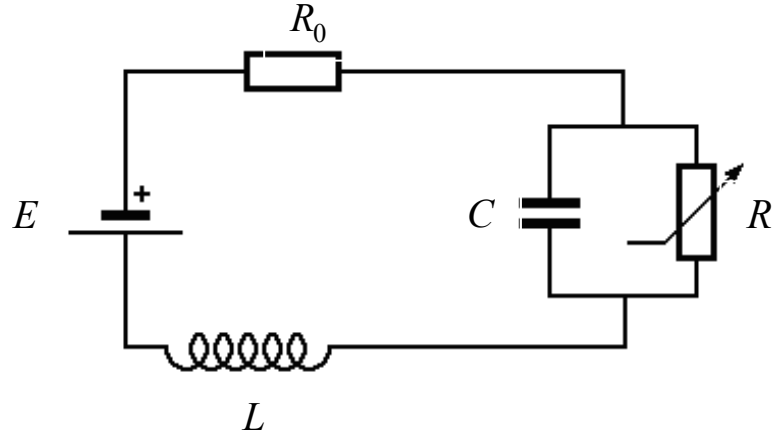


Рис.3.10. Простейшая нелинейная цепь

Приведем краткий анализ динамической системы, задаваемой уравнениями (3.74) и (3.75) на устойчивость. Введем новые переменные: $\tau = t/(LC)^{1/2}$, $Z = (L/C)^{1/2}$. В этом случае система уравнений примет вид

$$\begin{aligned} \frac{dI}{d\tau} &= \frac{1}{Z}(E - U - IR_0), \\ \frac{dU}{d\tau} &= Z(I - I^*(U)). \end{aligned} \quad (3.76)$$

Будем искать решение в виде суммы стационарного решения и малого возмущения δI и δU . В этом случае система динамических уравнений для возмущений имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{d\tau} \delta I \\ \frac{d}{d\tau} \delta U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -R_0/Z & -1/Z \\ Z & -Z dI^*/dU \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta I \\ \delta U \end{pmatrix}, \quad (3.77)$$

где производная dI^*/dU вычисляется на стационарной вольтамперной характеристике.

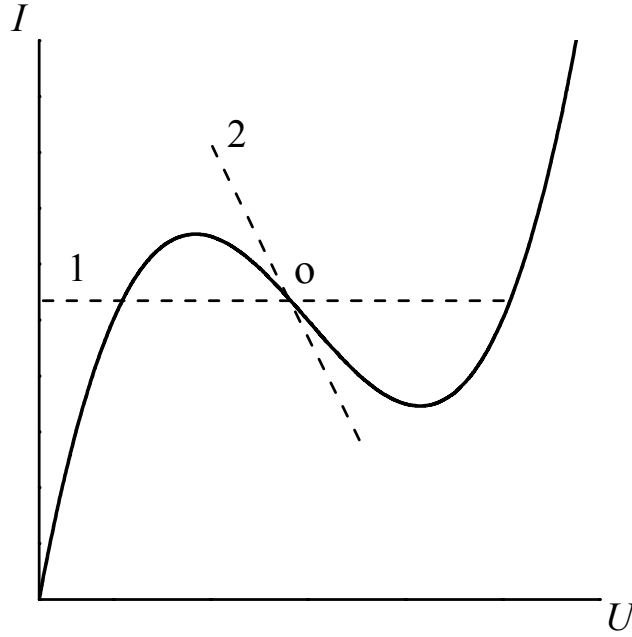


Рис.3.11. Вольт-амперная характеристика нелинейного элемента. Пунктирные линии – нагрузочные прямые электрической схемы. Линия 1 соответствует режиму фиксированного тока ($I = \text{const}$); линия 2 определяется уравнением $U = E - IR_0$ и соответствует режиму фиксированного напряжения источника ($E = \text{const}$)

Детерминант матрицы, стоящей в правой части (3.77), равен

$$D = R_0 \frac{dI^*}{dU} + 1, \quad (3.78)$$

а ее след:

$$T = - \left(\frac{R_0}{Z} + Z \frac{dI^*}{dU} \right). \quad (3.79)$$

Повторяя процедуру решения, описанную в разделе 3.28, определим собственные значения μ матрицы в выражении (3.77) из уравнения:

$$\mu^2 - T\mu + D = 0. \quad (3.80)$$

Корни уравнения (3.80):

$$\mu_{1,2} = \frac{T}{2} \pm \sqrt{\frac{T^2}{4} - D} . \quad (3.81)$$

Если рабочая точка находится на участке вольт-амперной характеристики с положительным дифференциальным сопротивлением, т.е. $dI^*/dU > 0$, то в этом случае из выражений (3.78), (3.79) следует, что $D > 0, T < 0$. Возможны два случая.

1. $0 < D < T^2/4$. В этом случае корни $\mu_{1,2}$, определяемые формулой (3.81), вещественны и отрицательны, т.к. $T/2 < 0$ и $|T/2| > \sqrt{T^2/4 - D}$. Рабочая точка вольт-амперной характеристики является устойчивым узлом, и все возмущения затухают.

2. $D > T^2/4$. Корни $\mu_{1,2}$ комплексно сопряженные с отрицательной вещественной частью ($T/2 < 0$). В этом случае рабочая точка вольт-амперной характеристики представляет собой устойчивый фокус, т.е. все возмущения релаксируют в виде затухающих колебаний.

Рассмотрим теперь рабочую точку вольт-амперной характеристики с отрицательным дифференциальным сопротивлением, то есть $dI^*/dU < 0$. В этом случае величины D и T , определяемые выражениями (3.78) и (3.79), могут принимать положительные, отрицательные и нулевые значения.

Рассмотрим случаи, когда $D \neq 0, T \neq 0$.

1. Если $0 < D < T^2/4$, то корни $\mu_{1,2}$, определяемые формулой (3.81), вещественны и одного знака. Знак корней совпадает со знаком T и определяется соотношением величин $Z|dI^*/dU|$ и R_0/Z . В случае, когда $Z|dI^*/dU| < R_0/Z$, $T < 0$, корни отрицательны, следовательно, рабочая точка устойчива (устойчивый узел). При $Z|dI^*/dU| > R_0/Z$, $T > 0$ корни характеристического уравнения положительны, следовательно, возмущения будут нарастать, и рабочая точка неустойчива (неустойчивый узел).

2. В случае $D > T^2/4$ корни комплексно сопряженные с отрицательной вещественной частью при $Z|dI^*/dU| < R_0/Z$ и положительной при $Z|dI^*/dU| > R_0/Z$. В первом случае рабочая точка является устойчивым фокусом, во-втором – неустойчивым.

3. При отрицательном детерминанте $D < 0$ корни характеристического уравнения согласно (3.81) вещественны и имеют различные знаки. Рабочая точка в этом случае является седлом: по одному направлению переменные затухают, по другому – нарастают.

Случай $T = 0$, $D > 0$ соответствует двум вещественным корням разного знака, то есть седловой точке.

При $T = 0$, $D < 0$ корни характеристического уравнения чисто мнимые. В этом случае неустойчивый фокус сливается с устойчивым и происходит бифуркация рождения предельного цикла.

Случай $D = 0$ соответствует касанию нагрузочной линии и вольт-амперной характеристики. При $T = 0$, $D = 0$ в системе также рождается предельный цикл.

При детерминанте системы $D = 0$ (касание нагрузочной кривой вольт-амперной характеристики) происходит бифуркация седло – узел, что соответствует переходу от неравновесного фазового перехода первого рода к неравновесному фазовому переходу второго рода. При $T = 0$, $D > 0$ (корни μ_1 и μ_2 чисто мнимые) имеем бифуркацию Андронова – Хопфа, при которой рождается предельный цикл.

При численном моделировании системы (3.76) необходимо в явном виде задать вид вольт-амперной характеристики. В частности, в простейшем случае для качественного анализа часто используют кубическую аппроксимацию:

$$I^* = \beta U(U^2 - 1), \quad (3.82)$$

где β - параметр. На рис. 3.12 приведен фазовый портрет системы, полученный численным интегрированием уравнений (3.74), (3.75), соответствующий предельному циклу при следующих параметрах: $\beta = 2,5$; $L = 0,7$; $C = 0,4$; $R_0 = 0,3$; $E = 0,2$.

На рис. 3.13 показаны колебания напряжения и тока в генераторе Ван-дер-Поля, соответствующие предельному циклу с теми же параметрами, что и на рис.3.12. С усилением нелинейности (увеличение параметра β), а также с увеличением индуктивности автоколебания все более отличаются от гармонических.

Таким образом, в двумерных диссипативных динамических системах возможны аттракторы двух типов: устойчивые стационарные точки и устойчивые предельные циклы. Этим исчерпываются все возможные случаи. Однако для систем с размерностью фазового пространства $n \geq 3$ динамика системы уже не исчерпывается этими двумя простыми случаями.

Кроме стационарных точек и предельных циклов, в них могут существовать и более сложные аттракторы, в частности двумерные инвариантные торы, отвечающие квазипериодическому движению с двумя несоизмеримыми частотами. В многомерных системах возможно возникновение еще более сложного квазипериодического движения, когда в фазовом пространстве рождаются торы более высокой размерности. В таких системах возможно явление, известное как синхронизация колебаний, когда колебания с независимыми частотами сложным образом влияют друг на друга, что может приводить к исчезновению квазипериодического и возникновению периодического движения.

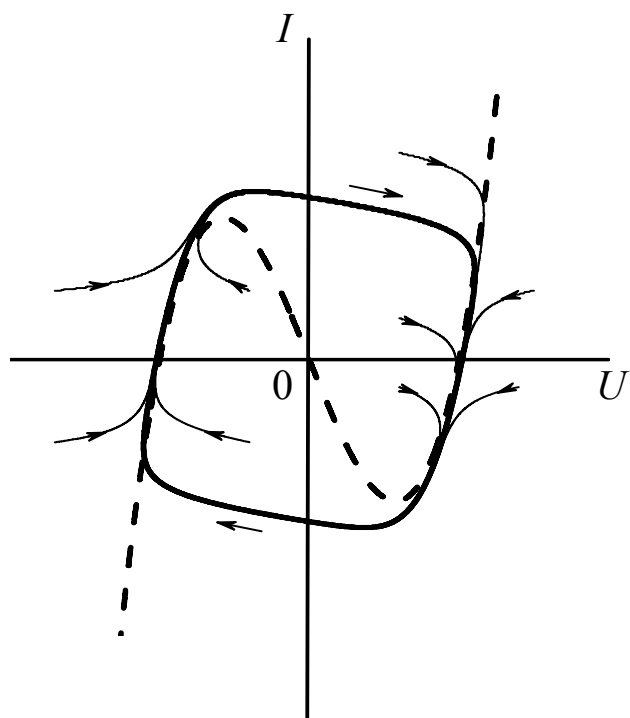


Рис. 3.12. Предельный цикл в системе Ван-дер-Поля. Пунктирной линией показана вольт-амперная характеристика

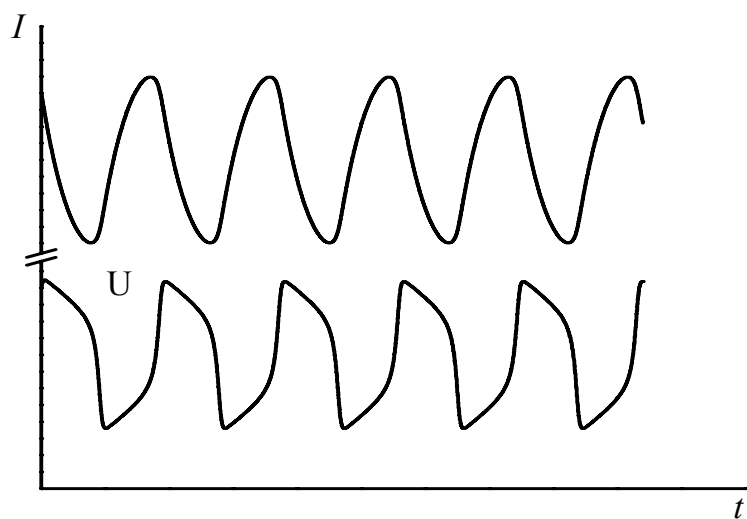


Рис.3.13. Колебания напряжения и тока в генераторе Ван-дер-Поля, соответствующие предельному циклу (численный расчет)

3.3. Динамический хаос

3.3.1. Странные аттракторы. Система Лоренца

Все перечисленные выше аттракторы – устойчивые стационарные точки, устойчивые предельные циклы и инвариантные торы – называются простыми аттракторами. Кроме простых аттракторов существуют притягивающие множества, получившие название *странных аттракторов*. Термин “странный аттрактор” был введен Д. Рюэлем и Ф. Такенсом и означал аттрактор, отличный от стационарной точки или предельного цикла.

Примером математической системы, обладающей странным аттрактором и демонстрирующей хаотическое поведение, является ставшая классической система Лоренца. Эта система представляет собой нелинейную систему трех обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, которая была выведена в 1963 г. Э. Лоренцом из уравнений гидродинамики и предложена для объяснения термоконвекции. Анализ данной системы численными методами показал возможность установления режима, характеризующегося сложным непериодическим изменением динамических переменных. В последствии оказалось, что система уравнений Лоренца применима не только к задаче о конвекции в слое, но и к другим системам. Приведем вывод системы Лоренца*.

Рассмотрим слой жидкости глубины h , находящийся в поле тяжести. Пусть на верхней границе поддерживается постоянная температура T_0 , а на нижней границе $T_0 + \Delta T$ (рис.3.14).

Из-за того, что нагретая жидкость легче холодной, при достаточно большой разности температур возникает конвекционное течение. В исходной постановке задачи мы имеем дело с распределенной системой – ее со-

* Кузнецов С.П. Динамический хаос / С.П. Кузнецов. М.: Физматлит, 2001. 296 с.

стояние характеризуется полями скоростей $\vec{V}(x, y, z, t)$, плотности $\rho(x, y, z, t)$ и температуры $T(x, y, z, t)$.

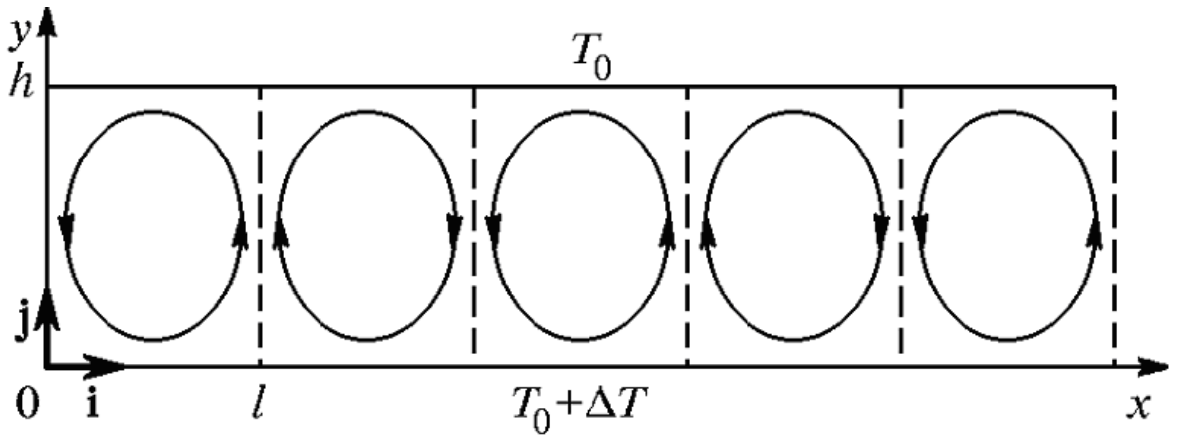


Рис.3.14. Конвективные ячейки, возникающие в подогреваемом снизу слое жидкости

Изменение этих полей во времени описывается системой уравнений с частными производными:

$$\begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} \right] &= -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{V} + \vec{g} \rho, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) &= 0, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\nabla T) \vec{V} &= \kappa \nabla^2 T, \\ \rho &= \rho_0 (1 - \gamma(T - T_0)), \end{aligned} \quad (3.83)$$

где $p(x, y, z)$ – поле давлений; η – коэффициент динамической вязкости; κ – коэффициент теплопроводности; γ – коэффициент теплового расширения, $\vec{g}$ – вектор ускорения силы тяжести. В случае, когда нет конвекции ($\vec{V} = 0$), вместо первого уравнения системы (3.83) будем иметь уравнение механического равновесия:

$$0 = -\nabla p^* + \rho g^*, \quad (3.84)$$

а решение третьего уравнения сведется к линейному распределению температуры:

$$T^*(y) = T_0 + \Delta T \left(1 - \frac{y}{h} \right). \quad (3.85)$$

Вычитая (3.84) из первого уравнения системы (3.83) и вводя обозначения:

$\tilde{\rho} = \rho - \rho^*$ и $\tilde{p} = p - p^*$, получим

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \nabla \vec{V} = - \frac{1}{\rho^* + \tilde{\rho}} \nabla \tilde{p} + \frac{\eta}{\rho^* + \tilde{\rho}} \nabla^2 \vec{V} + g \frac{\tilde{\rho}}{\rho^* + \tilde{\rho}}. \quad (3.86)$$

Учитывая, что $\tilde{\rho} \ll \rho^*$ и пренебрегая величинами второго порядка малости, можно записать

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \nabla \vec{V} = - \frac{\nabla \tilde{p}}{\rho^*} + \nu \nabla^2 \vec{V} + g \frac{\tilde{\rho}}{\rho^*}. \quad (3.87)$$

В третьем уравнении (3.83) второй член перепишем в виде

$$\vec{V} \nabla T = \vec{V} \nabla (T^* + \theta) = \vec{V} \nabla T^* + \vec{V} \nabla \theta = -V_y \frac{\Delta T}{h} + \nabla(\theta \vec{V}). \quad (3.88)$$

Учитывая также, что $\rho = \rho^* (1 - \gamma(T - T^*))$, а $\vec{g} = -\vec{j}g$, где $\vec{j}$ – вертикальный орт оси y , система уравнений (3.83) будет иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} &= \gamma g \vec{j} \theta - \frac{1}{\rho_0} \nabla \tilde{p} + \nu \nabla^2 \vec{V}, \\ \nabla \vec{V} &= 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla(\theta \vec{V}) - \frac{\Delta T}{h} V_y &= \kappa \nabla^2 \theta, \end{aligned} \quad (3.89)$$

где $\theta = T - T^*$.

Граничные условия на верхнем и нижнем крае слоя жидкости, отражающие постоянство температуры и отсутствие потока жидкости через границу, имеют вид

$$\theta|_{y=0} = 0, \quad \theta|_{y=h} = 0, \quad V_y|_{y=0} = 0, \quad V_y|_{y=h} = 0. \quad (3.90)$$

Если также принять, что границы слоя являются свободными, т.е. тангенциальное трение отсутствует, то на границе должно выполняться условие $\partial V_x / \partial y = 0$.

Распишем векторные уравнения в координатах:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial V_x}{\partial t} + V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_x}{\partial y} &= -\rho_0^{-1} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 V_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} \right), \\
\frac{\partial V_y}{\partial t} + V_x \frac{\partial V_y}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_y}{\partial y} &= \gamma g \theta - \rho_0^{-1} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 V_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_y}{\partial y^2} \right), \\
\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} &= 0, \\
\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial(\theta V_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\theta V_y)}{\partial y} - h^{-1} \Delta T V_y &= \kappa \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right).
\end{aligned} \tag{3.91}$$

Исключим из уравнений (3.91) поле давлений.

Для этого продифференцируем первое уравнение по y , а второе по x и вычтем одно из другого. В результате система уравнений принимает вид

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\partial V_x / \partial y - \partial V_y / \partial x)}{\partial t} &= -V_x \frac{\partial^2 V_x}{\partial x \partial y} - V_y \frac{\partial^2 V_x}{\partial y^2} + V_x \frac{\partial^2 V_y}{\partial x^2} + V_y \frac{\partial^2 V_y}{\partial x \partial y} - \\
&\quad - \gamma g \frac{\partial \theta}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^3 V_x}{\partial x^2 \partial y} + \frac{\partial^3 V_x}{\partial y^3} - \frac{\partial^3 V_y}{\partial x \partial y^2} - \frac{\partial^3 V_y}{\partial x^3} \right), \\
\frac{\partial \theta}{\partial t} &= -\frac{\partial(\theta V_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\theta V_y)}{\partial y} + h^{-1} \Delta T V_y + \kappa \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right), \\
\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} &= 0.
\end{aligned} \tag{3.92}$$

В дальнейшем искомые поля скоростей, плотности и температуры представляют в виде разложения в ряды по некоторой полной системе базисных функций. После этого рассматривают зависимость от времени коэффициентов разложения. Такой метод известен как метод Галеркина.

Выберем базис тригонометрических функций вида

$$\begin{aligned} \sin(m\alpha x)\sin(n\beta y), \quad \sin(m\alpha x)\cos(n\beta y), \\ \cos(m\alpha x)\sin(n\beta y), \quad \cos(m\alpha x)\cos(n\beta y), \end{aligned} \quad (3.93)$$

где $\beta = \pi/h$; $\alpha = \pi/l = \pi a/h$; m и n – целые числа.

При выборе базисных функций учтем известный из эксперимента факт, что режим конвекции реализуется в виде валов, периодически расположенных как по координате x , так и по координате y . Взяв одну ячейку, расположенную в области $-l < x < l$, $-h < y < h$, можно считать течение периодически продолженным, как показано на рис. 3.15. Число n показывает число валов на размере h , а число m соответствует числу валов на длине $l = h/a$, где a задает отношение периодов по осям x и y . В таком течении температура должна быть четной функцией x и нечетной функцией y .

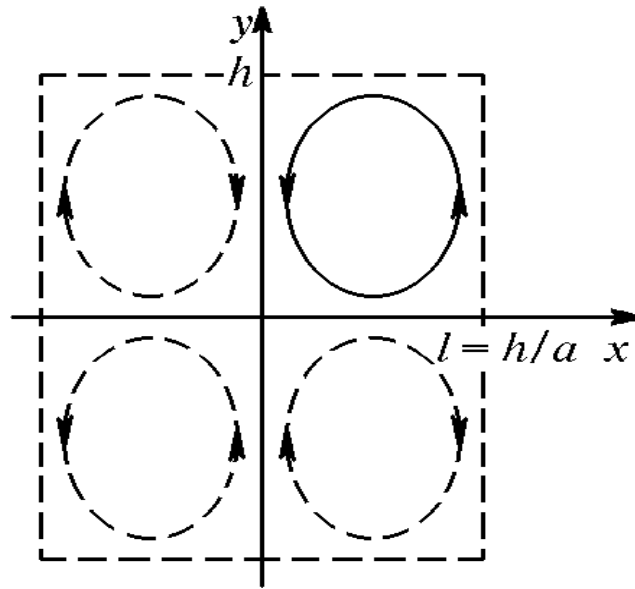


Рис. 3.15. Выбор структуры разложения в ряд по базисным функциям

Представим отклонение температуры $\theta(x, y, t)$ в виде разложения по базисным тригонометрическим функциям уравнений (3.83), выбрав из них функции, четные по x и нечетные по y , удовлетворяющие граничным условиям (3.90):

$$\theta(x, y, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \Theta_{mn}(t) \cos(m\alpha x) \sin(n\beta y). \quad (3.94)$$

Компоненты скорости также разложим в ряд по тригонометрическим функциям. Прежде заметим, что из условия нулевой дивергенции (третье уравнение в системе (3.92)) следует существование функции Ψ , такой, что $V_x = \partial\Psi/\partial y$, $V_y = -\partial\Psi/\partial x$, и обращающей в тождество уравнение непрерывности. Функция Ψ носит название функции тока. Как видно из рис.3.15, компонента скорости V_x должна быть нечетной по x и четной по y , а компонента V_y – наоборот, четной по x и нечетной по y . Эти условия, так же как и граничные, будут выполнены, если функцию тока представить в виде разложения

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} U_{mn}(t) \sin(m\alpha x) \sin(n\beta y). \quad (3.95)$$

В этом случае компоненты скорости выражаются в виде рядов по тригонометрическим функциям:

$$\begin{aligned} V_x(x, y, t) &= - \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} n\beta U_{mn}(t) \sin(m\alpha x) \cos(n\beta y), \\ V_y(x, y, t) &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} m\alpha U_{mn}(t) \cos(m\alpha x) \sin(n\beta y). \end{aligned} \quad (3.96)$$

Если теперь подставить выражения (3.94) и (3.96) в (3.92), то можно получить бесконечную систему уравнений для коэффициентов Θ_{mn} и U_{mn} . Для обрезания рядов используется предположение, что существенными являются лишь несколько членов разложения. Так система Лоренца получается, если считать существенными и отличными от нуля лишь коэффициенты U_{11} , Θ_{11} и Θ_{02} . Обозначим их соответственно через X, Y и Z . В результате для выражений (3.94) и (3.96), получим

$$\begin{aligned} \theta &= Y \cos(\alpha x) \sin(\beta y) - Z \sin(2\beta y), \\ V_x &= -X\beta \sin(\alpha x) \cos(\beta y), \quad V_y = X\alpha \cos(\alpha x) \sin(\beta y). \end{aligned} \quad (3.97)$$

Подставив выражения для V_x и V_y из (3.97) в первое уравнение (3.92), выполнив преобразования с помощью тригонометрических формул и приравняв коэффициенты в левой и правой части уравнения перед сомножителями

вида $\sin(\alpha x)\sin(\beta y)$, получим

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\alpha\gamma g}{\alpha^2 + \beta^2} Y - \nu(\alpha^2 + \beta^2)X. \quad (3.98)$$

Аналогично, подставив выражение для θ из первого уравнения (3.97) во второе уравнение системы (3.92), выполнив тригонометрические преобразования и приравнявая коэффициенты перед комбинациями вида $\cos(\alpha x)\sin(\beta y)$ и $\sin(2\beta y)$ в левой и правой частях уравнения, получим

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dt} &= \frac{\alpha\Delta T}{h} X - \kappa(\alpha^2 + \beta^2)Y - \beta\alpha XZ, \\ \frac{dZ}{dt} &= -4\kappa\beta^2 Z + \frac{1}{2}\alpha\beta XY. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Приведем уравнения (3.98) и (3.99) к безразмерному виду посредством замены: $X = Ax$, $Y = By$, $Z = Cz$, $t = D\tau$, где A, B, C, D – некоторые постоянные коэффициенты. Тогда получаем

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= \frac{\alpha\gamma g}{\alpha^2 + \beta^2} \frac{BD}{A} y - D\nu(\alpha^2 + \beta^2)x, \\ \frac{dy}{d\tau} &= \frac{\alpha\Delta T}{h} \frac{AD}{B} x - D\kappa(\alpha^2 + \beta^2)y - \frac{ACD}{B} xz, \\ \frac{dz}{d\tau} &= \frac{ABD}{2C} \alpha\beta xy - 4\kappa\beta^2 Dz. \end{aligned} \quad (3.100)$$

Следующий шаг заключается в подборе коэффициентов таким образом, чтобы

вид уравнений максимально упростился. Для этого полагают, что

$$\begin{aligned} D &= \kappa^{-1}(\alpha^2 + \beta^2) - 1, \quad \frac{\alpha\gamma g}{\alpha^2 + \beta^2} \frac{BD}{A} = \frac{\nu}{k}, \\ \frac{ACD}{B} \alpha\beta &= 1, \quad \frac{ABD}{2C} \alpha\beta = 1. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Отсюда

$$A = \frac{\sqrt{2}\kappa(\alpha^2 + \beta^2)}{\alpha\beta}, \quad B = \frac{\sqrt{2}\kappa\nu(\alpha^2 + \beta^2)^3}{\alpha^2\beta\gamma g}, \quad C = \frac{\kappa\nu(\alpha^2 + \beta^2)^3}{\alpha^2\beta\gamma g}. \quad (3.102)$$

На заключительном этапе введем безразмерные переменные:

$$\sigma = \frac{\nu}{k}, \quad b = \frac{4\beta^2}{\alpha^2 + \beta^2}, \quad r = \frac{\alpha^2\gamma g\Delta T}{\kappa\nu h(\alpha^2 + \beta^2)^3}. \quad (3.103)$$

Отношение коэффициентов кинематической вязкости и температуропроводности σ представляет собой число Прандтля. Комбинация $R = h^3\gamma g\Delta T/\kappa\nu$ есть число Рэлея. Рэлеем было показано, что условию возникновения конвективного течения в виде валов в горизонтальном слое со свободными границами отвечает определенное критическое значение этого числа $R_c = \pi^4 a^{-2}/(1 + a^2)^3$. Этот результат также можно получить из (3.99), оставляя в системе уравнений только линейные члены и решая задачу на линейную устойчивость. Выражая α и β в выражении для r (3.103) через a и h , и учитывая выражение для критического числа Рэлея, получим, что $r = R/R_c$. Это значение носит название приведенного числа Рэлея. Постоянная b характеризует геометрию ячеек, а именно отношение ее вертикального и горизонтального размеров.

Подставив выражения (3.102) и (3.103) в (3.100), получим систему уравнений, которая называется моделью Лоренца:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \sigma y - \sigma x, \\ \frac{dy}{dt} &= rx - y - xz, \\ \frac{dz}{dt} &= xy - bz. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Данная система представляет собой динамическую систему в трехмерном фазовом пространстве. Коэффициенты в системе уравнений (3.104) являются безразмерными числами. Физический смысл переменных x , y и z

для конвекции Бенара вытекает из (3.94) и (3.96): переменная x характеризует скорость вращения конвекционных валов, величины y и z отвечают за распределение температуры, соответственно, по горизонтали и по вертикали.

Существует еще одна, совершенно иная физическая система, которая описывается уравнениями Лоренца. Это модель одномодового лазера. Предположим, что имеется резонатор, в котором может возбуждаться одна мода – колебания электромагнитного поля на определенной частоте ω_0 с фиксированной пространственной структурой. Амплитуда колебаний может медленно изменяться во времени благодаря присутствию потерь и взаимодействию поля с активной средой, заполняющей резонатор. Активная среда состоит из атомов с двумя энергетическими уровнями, причем разность энергий между уровнями $\Delta E = \hbar\omega_0$, где $\hbar$ – постоянная Планка. Иными словами, частота перехода считается точно совпадающей с собственной частотой моды резонатора. Далее предполагается, что присутствует механизм накачки, благодаря которому атомы переходят с нижнего уровня на верхний. Оказалось, что уравнения, описывающие динамику такой системы, в точности совпадают с системой (3.104), в которой в данном случае x отвечает амплитуде поля, y – поляризации, z – инверсии населенности уровней. Место геометрического параметра b и числа Прандтля σ занимают отношения коэффициентов релаксации инверсии и поля к коэффициенту релаксации поляризации. Интенсивность накачки играет ту роль, какую в гидродинамической системе играло число Рэлея.

3.3.2. Свойства аттрактора Лоренца

Сжатие фазового объема диссипативной динамической системы приводит к тому, что фазовые кривые с течением времени стягиваются к предельному множеству – странному аттрактору и, попав в область, занятую

им, остаются там навсегда. На самом же аттракторе движение является неустойчивым: любые две траектории системы расходятся экспоненциально быстро, оставаясь на странном аттракторе. Иначе говоря, поведение системы со странным аттрактором характеризуется сочетанием глобального сжатия фазового объема с локальной неустойчивостью фазовых траекторий. Динамика системы со странным аттрактором является хаотической, т.е. система ведет себя сложным образом и внешне ее поведение напоминает случайное, несмотря на то, что оно описывается детерминированной системой дифференциальных уравнений с вполне определенными начальными условиями. Следует сделать замечание, что, строго говоря, в современной литературе разделяют понятия странный и хаотический аттракторы. Странные аттракторы состоят из множества точек, которые не могут быть описаны кусочно-дифференцируемыми функциями; хаотические аттракторы определяются высокой чувствительностью к изменению начальных условий. Выяснилось, что все хаотические аттракторы являются странными. Обратное утверждение не верно, то есть существуют странные не хаотические аттракторы. Данное различие носит специальный характер, и мы в дальнейшем этого вопроса касаться не будем.

Исторически уравнения Лоренца явились первой динамической системой уравнений, в которой было показано существование странного аттрактора. Нас эта система в основном будет интересовать как модельный пример, изучая который можно понять, что такое странный аттрактор динамической системы и как он может появиться.

Перечислим сначала ряд общих свойств модели Лоренца.

Дивергенция системы (3.104) (см. выражение 3.60)

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{\partial f_2}{\partial y} + \frac{\partial f_3}{\partial z} = -(b + \sigma + 1) < 0. \quad (3.105)$$

Следовательно, фазовый объем со временем постоянно сжимается, т.е. система Лоренца является диссипативной.

Система Лоренца симметрична относительно замены переменных $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow z$, следовательно, ее фазовый портрет симметричен относительно оси z .

Опишем изменение режимов движения в системе (3.104) в зависимости от значений параметров r, σ, b .

1. Стационарные точки системы Лоренца находятся из уравнений:

$$\begin{aligned}\sigma y - \sigma x &= 0, \\ rx - y - xz &= 0, \\ xy - bz &= 0.\end{aligned}\tag{3.106}$$

Из первого уравнения получаем $y = x$, соответственно второе переписываем как $x(r - 1 - z) = 0$ и видно, что есть две возможности: $x = 0$ и $z = r - 1$. Из третьего уравнения получаем для первого случая $z = 0$, а для второго $x = \pm\sqrt{bz} = \pm\sqrt{b(r-1)}$. Это решение существует лишь для $r \geq 1$. Таким образом, при $r < 1$ существует одно стационарное состояние, расположенное в начале координат ($x = y = z = 0$), а при $r \geq 1$ существуют три стационарных состояния:

$$\begin{aligned}x &= 0, & y &= 0, & z &= 0; \\ x &= \sqrt{b(r-1)}, & y &= \sqrt{b(r-1)}, & z &= r-1; \\ x &= -\sqrt{b(r-1)}, & y &= -\sqrt{b(r-1)}, & z &= r-1,\end{aligned}\tag{3.107}$$

которые в дальнейшем будем обозначать как O, O_1, O_2 . С точки зрения физической интерпретации, в задаче о конвекции первая неподвижная точка отвечает стационарному состоянию при отсутствии конвективных потоков. Второе и третье решения соответствуют наличию конвективного потока — вращению жидкости соответственно против или по часовой стрелке.

Рассмотрим теперь вопрос о том, при каких значениях параметров найденные стационарные точки являются устойчивыми или неустойчивыми. Пусть (x_0, y_0, z_0) — интересующая стационарная точка. Для того чтобы определить тип особых точек, воспользуемся стандартной теорией возму-

щений: представим решения в виде $x = x_0 + \delta x$, $y = y_0 + \delta y$, $z = z_0 + \delta z$ и ограничимся линейными слагаемыми по $\delta x, \delta y$ и δz . В результате получим систему:

$$\begin{aligned}\frac{d(\delta x)}{dt} &= \sigma(\delta y - \delta x), \\ \frac{d(\delta y)}{dt} &= r\delta x - \delta y - x_0\delta z - \delta x z_0, \\ \frac{d(\delta z)}{dt} &= -b\delta z + x_0\delta y + \delta x y_0.\end{aligned}\tag{3.108}$$

В линейном анализе на устойчивость обычно предполагается, что возмущения экспоненциально зависят от времени, т.е. $\delta x, \delta y, \delta z \sim \exp(\mu t)$. Тогда уравнения принимают вид задачи на собственные значения:

$$\begin{aligned}\mu(\delta x) &= \sigma(\delta y - \delta x), \\ \mu(\delta y) &= r\delta x - \delta y - x_0\delta z - \delta x z_0, \\ \mu(\delta z) &= -b\delta z + x_0\delta y + \delta x y_0\end{aligned}\tag{3.109}$$

или

$$\mu \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sigma & \sigma & 0 \\ r - z_0 & -1 & -x_0 \\ y_0 & x_0 & -b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix}.\tag{3.110}$$

Условием существования ненулевого решения является равенство нулю детерминанта:

$$\begin{vmatrix} -\sigma - \mu & \sigma & 0 \\ r - z_0 & -1 - \mu & -x_0 \\ y_0 & x_0 & -b - \mu \end{vmatrix} = 0.\tag{3.111}$$

Раскрывая детерминант, получим

$$(\mu + \sigma)[(\mu + 1)(\mu + b) + x_0^2] + \sigma[(\mu + b)(z_0 - r) + x_0 y_0] = 0.\tag{3.112}$$

Для стационарной точки O , расположенной в начале координат, имеем

$$(\mu + \sigma)(\mu + 1)(\mu + b) - \sigma r(\mu + b) = 0\tag{3.113}$$

или

$$(\mu + b)[\mu^2 + (\sigma + 1)\mu + \sigma(1 - r)] = 0, \quad (3.114)$$

откуда находим три корня:

$$\mu_1 = -b, \quad \mu_{2,3} = -\frac{1}{2}(\sigma + 1) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\sigma + 1)^2 + \sigma(r - 1)}. \quad (3.115)$$

Первое число всегда отрицательно. Второе и третье являются одновременно отрицательными лишь при $r < 1$; если же $r > 1$, одно из них становится положительным. Следовательно, точка O устойчива при $r < 1$ и неустойчива при $r > 1$. С точки зрения классификации особых точек, при $r < 1$ O является устойчивым узлом. Если $r > 1$, то точка O превращается в седло – узел. Как отмечалось выше, параметр r есть приведенное число Рэлея (отношение числа Рэлея к его критическому значению, то есть к значению, при котором образуются конвективные ячейки). Таким образом, стационарное состояние, отвечающее отсутствию конвективных потоков становится неустойчивым при превышении критического значения $r = 1$.

Рассмотрим теперь точки O_1 и O_2 . Подставляя координаты этих точек из выражения (3.107) в (3.112), после алгебраических преобразований получим кубическое уравнение относительно μ :

$$\mu^3 + (\sigma + b + 1)\mu^2 + (r + \sigma)b\mu + 2\sigma b(r - 1) = 0. \quad (3.116)$$

Выписывание корней уравнения (3.116) в явном виде слишком громоздко и мало что дает для анализа. Численные (например, графические) методы решения уравнения (3.116) показывают, что при небольшом превышении значения r над единицей все три значения μ вещественны и отрицательны, т.е. исследуемые стационарные точки представляют собой устойчивые узлы. При увеличении r одно собственное значение остается вещественным и отрицательным, а два других становятся комплексно сопряженными с отрицательной вещественной частью. Это значит, что точки O_1 и O_2 превращаются в устойчивые фокусы. При дальнейшем увеличении r вещественная часть комплексно сопряженных корней меняет знак, что соответствует потери устойчивости данными стационарными точками. Найдем этот

порог устойчивости. Для этого сделаем подстановку: $\mu = i\lambda$. Уравнение (3.116) примет вид:

$$-i\lambda^3 - (\sigma + b + 1)\lambda^2 + ib(\sigma + 1)\lambda + 2\sigma b(r - 1) = 0. \quad (3.117)$$

Приравнивая к нулю отдельно вещественную и мнимую часть (3.117), получим:

$$\begin{aligned} -(\sigma + b + 1)\lambda^2 + 2\sigma b(r - 1) &= 0, \\ [-\lambda^2 + b(\sigma + r)]\lambda &= 0. \end{aligned} \quad (3.118)$$

Из первого уравнения (3.118) имеем $\lambda^2 = 2\sigma b(r - 1)/(\sigma + b + 1)$. Подставляя это выражение во второе уравнение (3.118), получим $(-2\sigma b(r - 1)/(\sigma + b + 1) + b(\sigma + r))\lambda = 0$. Отсюда выражая r , находим порог устойчивости $r = r^*$:

$$r^* = \frac{\sigma(\sigma + b + 3)}{\sigma - b - 1}. \quad (3.119)$$

С точки зрения физической интерпретации, увеличение r соответствует увеличению числа Релея, то есть увеличению подогрева слоя жидкости. При $r < 1$ система Лоренца имеет единственную неподвижную точку в начале координат. Это единственный аттрактор системы. При $r > 1$ стационарное состояние O становится неустойчивым и точка O перестает быть аттрактором, а аттракторами становятся вновь возникшие стационарные точки O_1 и O_2 . В задаче о конвекции эти два аттрактора соответствуют состояниям с вращением жидкости против и по часовой стрелке. При превышении параметром r критического значения, которое дается формулой (3.119), все стационарные точки становятся неустойчивыми, и фазовая траектория системы приобретает сложный, запутанный вид, который был назван странным аттрактором.

Для дальнейшего изучения поведения траекторий требуется численное интегрирование уравнений (3.104), поскольку локальный анализ окрестностей неустойчивых стационарных точек O, O_1 и O_2 не дает полных

сведений о характере движений в системе Лоренца. Эта система обладает большим разнообразием возможных движений. Численно пишем поведение системы с изменением параметра r при постоянных значениях $\sigma = 10$, $b = 8/3$. Указанные значения σ и b взяты из оригинальных работ по исследованию системы Лоренца (можно брать и другие значения). При данных значениях σ и b из формулы (3.119) имеем $r^* \approx 24.7368...$ При превышении этого значения стационарное конвективное движение в виде валов становится неустойчивым. Мы не будем подробно описывать все возможные динамические режимы, которые дает система Лоренца, а приведем результаты численного интегрирования системы при значениях $\sigma = 10$, $b = 8/3$, $r = 28$, взятых из оригинальной работы Э. Лоренца и приводимых практически во всех учебниках и монографиях, посвященных динамическому хаосу. На рис. 3.16 показаны численные решения $x(t)$, $y(t)$ и $z(t)$ системы (3.104), соответствующие хаотическому аттрактору Лоренца.

На рис. 3.17 приведены фазовые портреты динамической системы, соответствующие аттрактору Лоренца, в координатах $x - z$, $y - z$ и $x - y$. Иллюстрация решений на рис. 3.16 и 3.17 показывает, что амплитуда скорости вращения валов x , имея среднее значение вблизи стационарных точек O_1 и O_2 осциллирует с постепенным нарастанием амплитуды. Это приводит к возможному пересечению нулевого значения скорости вращения и перескоку траектории в область другой стационарной точки с противоположным направлением вращения валов. Причем процесс нарастания амплитуды осцилляций очень чувствителен к начальным условиям и поэтому носит хаотический характер.

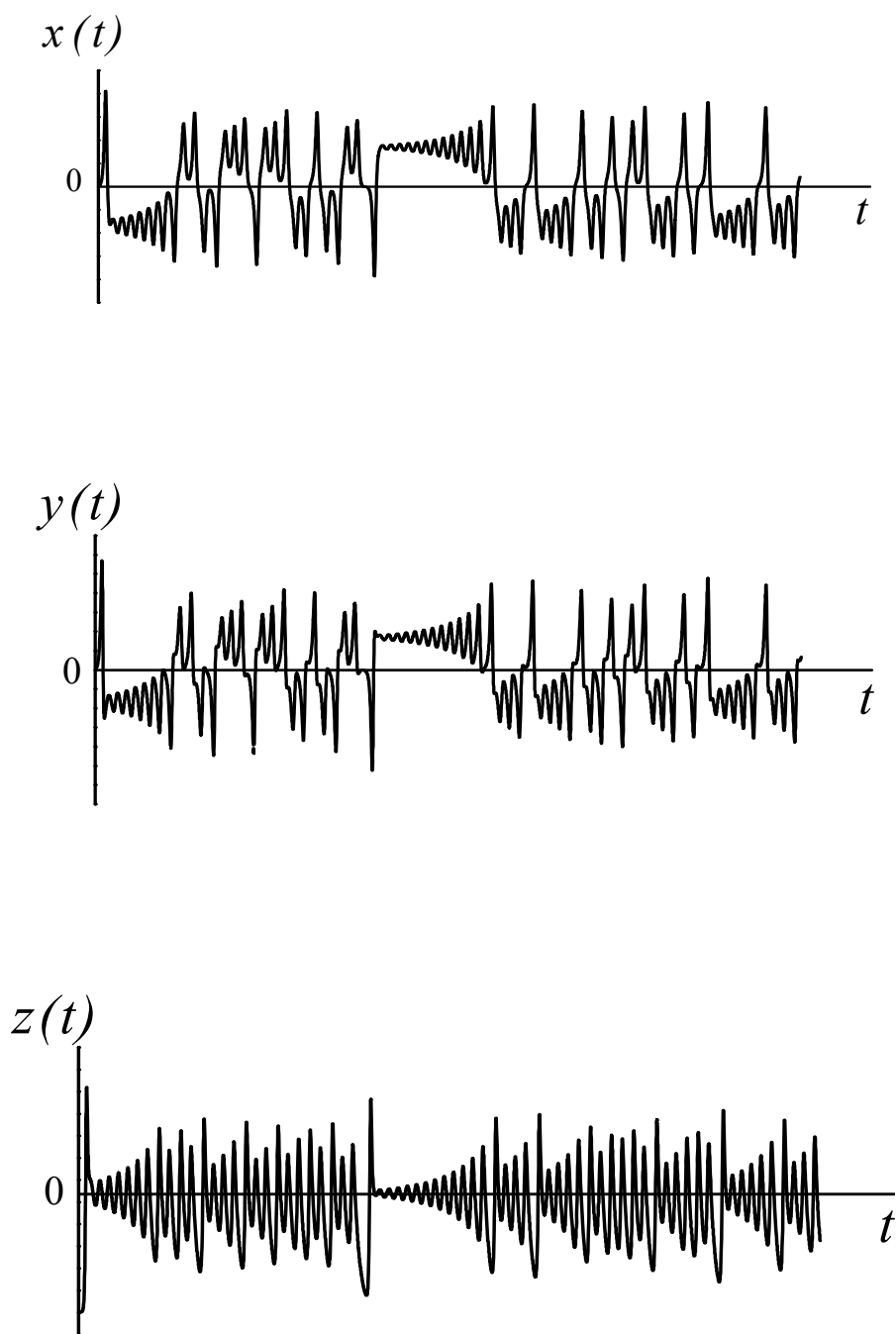


Рис. 3.16. Численные решения системы Лоренца, соответствующие странному аттрактору

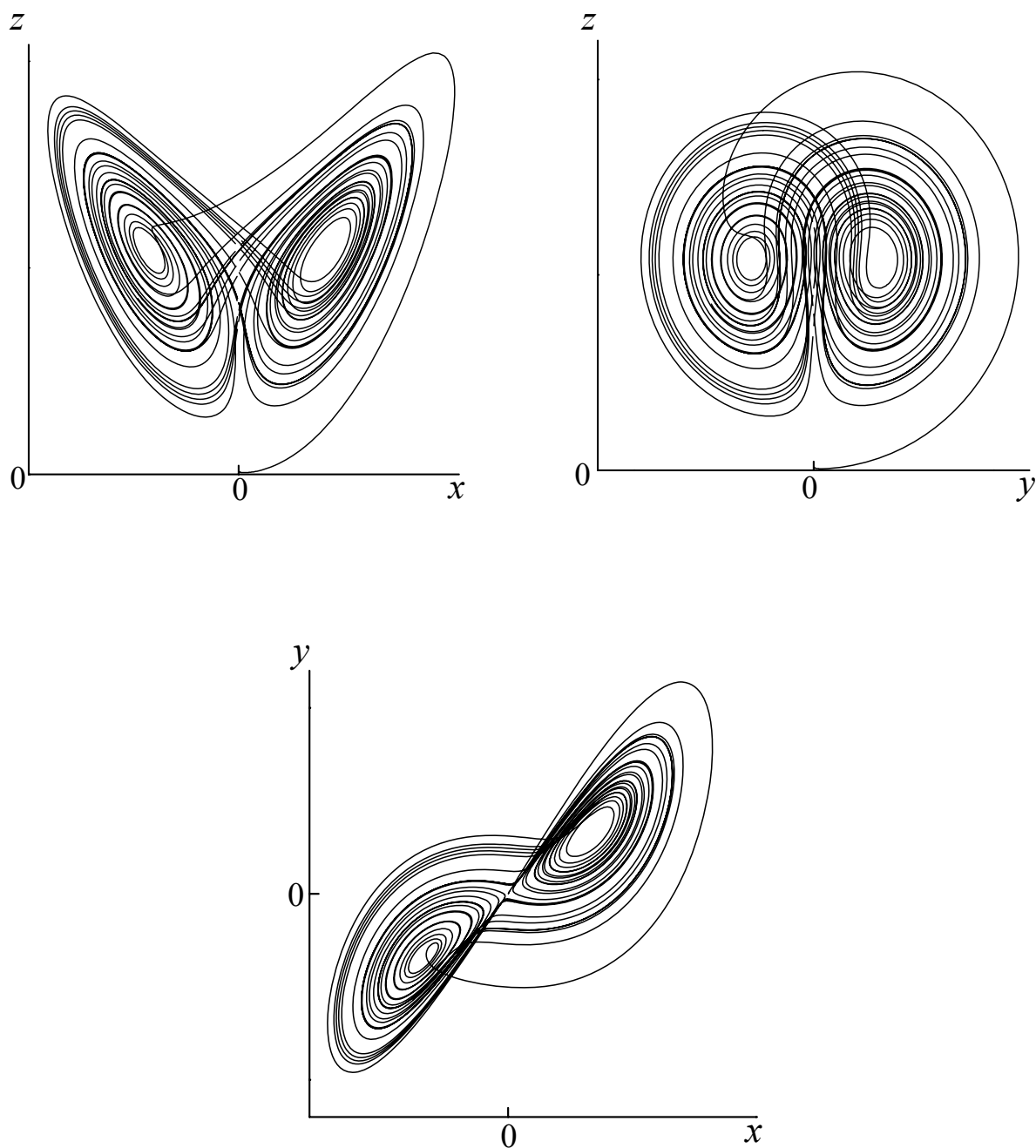


Рис.3.17. Проекции на фазовые плоскости $x - z$, $y - z$ и $x - y$, хаотической траектории на аттракторе Лоренца

Отметим, что описанная картина далеко не исчерпывает всего многообразия феноменов в модели Лоренца. Хаотический режим имеет место в системе Лоренца и при более высоких значениях вплоть до $r \approx 148,4$ (при $\sigma = 10, b = 8/3$), когда система демонстрирует простой регулярный режим

автоколебаний, которому в фазовом пространстве соответствует предельный цикл. В определенных областях по параметру r наблюдаются переходы к хаосу по различным сценариям (возможные сценарии перехода к хаосу будут изложены ниже).

Кроме описанного аттрактора Лоренца известны и другие модельные системы трех обыкновенных дифференциальных уравнений с квадратичными нелинейностями, которые предсказывают сложное хаотическое поведение.

Каковы же численные критерии, характеризующие хаотическое поведение? Перейдем к определению некоторых критериев отличия регулярных движений от хаотических.

3.3.3. Критерии динамического хаоса.

Автокорреляционная функция и спектр мощности.

Показатели Ляпунова. Энтропия Колмогорова – Синяя

Существует принципиальная разница в поведении систем со странными и простыми аттракторами. Необходимо иметь критерии, которые отличали бы аттракторы одного типа от аттракторов другого.

Традиционными и достаточно надежными способами определения характера динамического поведения системы являются нахождение автокорреляционной функции и спектральной плотности процесса.

Рассмотрим одномерный процесс $x(t)$ (это может быть одна компонента решения динамической системы или измеряемая в эксперименте величина). *Автокорреляционной функцией* называется среднее по некоторому временному интервалу T при $T \rightarrow \infty$ произведений $x(t)$, взятых в два различных момента времени t и $t + \tau$:

$$R(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} \int_0^T x(t)x(t+\tau)dt. \quad (3.120)$$

По своему смыслу автокорреляционная функция определяет взаимное влияние событий, произошедших в различные моменты времени. Для хаотических режимов $x(t)$ со средним значением $\bar{x} = 0$ автокорреляционная функция $R(\tau)$ имеет максимум в начале координат и затухает со временем до нуля. По характеру затухания автокорреляционной функции в ряде случаев можно судить о динамическом поведении системы. Если мы имеем дело с динамической системой на странном аттракторе, то такое затухание достаточно слабое, в отличие от гауссовских случайных процессов, при которых автокорреляционная функция очень резко спадает и имеет вид δ -функции (δ -коррелированные случайные процессы).

Нетрудно видеть, что автокорреляционная функция для $x(t) = a$, равна постоянной a^2 . Для функций, стремящихся к нулю при $t \rightarrow \infty$, $R(\tau) = 0$. Для периодических функций автокорреляционная функция также периодична с постоянной амплитудой.

Для того чтобы ввести понятие спектральной плотности, разложим $x(t)$ в интеграл Фурье:

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x_{\omega}(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad (3.121)$$

где Фурье-образ

$$x_{\omega}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (3.122)$$

Так как функция $x(t)$ не стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$, то несобственные интегралы (3.121) и (3.122) в общем случае расходятся. Эта проблема решается тем, что в реальном случае интегрирование ведется в конечных пределах.

Спектральной плотностью процесса $x(t)$ (или спектром мощности) называется величина, равная среднему квадрату амплитуды Фурье преобразования:

$$S(\omega) = \langle |x_\omega(\omega)|^2 \rangle. \quad (3.123)$$

По своему смыслу спектральная плотность характеризует энергию процесса $x(t)$, приходящуюся на единичный интервал частот вблизи ω .

Если $x(t)$ стационарный эргодический процесс, то имеет место равенство Парсеваля: $\int_{-\infty}^{\infty} |x(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |x_\omega(\omega)|^2 d\omega / 2\pi$, которое представляет со-

бой одну из форм записи закона сохранения энергии для случайного процесса. В теории случайных процессов показывается, что в этом случае справедлива теорема Винера-Хинчина, согласно которой спектральная плотность связана с автокорреляционной функцией: спектральная плотность есть Фурье-образ автокорреляционной функции:

$$S(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau. \quad (3.124)$$

При регулярном – периодическом или квазипериодическом – движении спектр будет дискретным, состоящим из основной частоты и гармоник (при гармонических колебаниях спектр представляет собой δ -функцию). При хаотическом движении спектр непрерывен. На рис. 3.18 приведены спектры, полученные численным интегрированием системы Лоренца (3.104): a – регулярные колебания, соответствующие предельному циклу, b – странному аттрактору (спектры соответствуют переменной z системы Лоренца).

Из сравнения двух спектров легко отличить периодический и хаотический режимы.

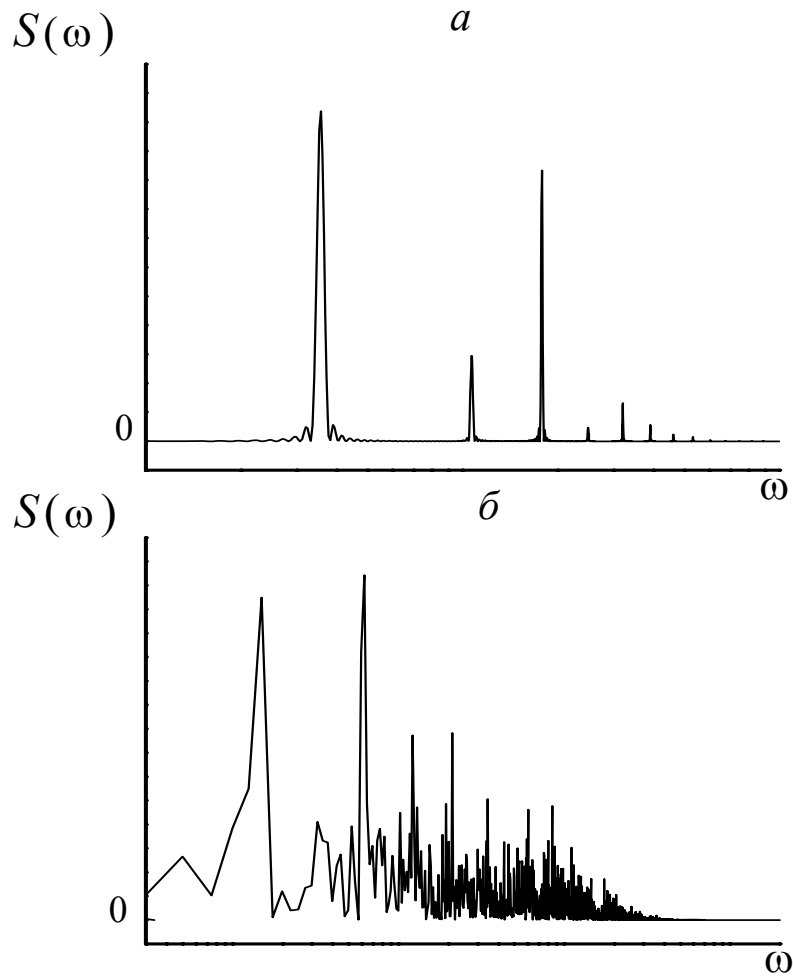


Рис.3.18. Спектральные плотности двух режимов: *a* – предельный цикл, *б* – странный аттрактор. Расчет для z - координаты системы Лоренца

Если для различения регулярных и хаотических режимов, как правило, бывает достаточно сравнения их спектров, то для того чтобы отделить странный аттрактор от полностью случайного процесса, сравнения спектров недостаточно.

Поскольку хаотичность является следствием неустойчивости фазовых траекторий, так что близкие в фазовом пространстве интегральные кривые с течением времени расходятся, то представляется вполне естественным в качестве критерия выбрать меру разбегания фазовых кривых динамической системы.

Пусть, как и прежде, некоторая динамическая система задается обыкновенными дифференциальными уравнениями:

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{f}(\vec{X}) \quad (3.125)$$

с соответствующими начальными условиями. Рассмотрим в фазовом пространстве в начальный момент времени $t = 0$ две близкие фазовые точки $\vec{X}_1(0)$ и $\vec{X}_2(0)$. Обозначим через $d(t) = |\vec{X}_2(t) - \vec{X}_1(t)|$ расстояние между точками в момент времени t . Если режим является хаотическим, то с течением времени $d(t)$ будет экспоненциально возрастать, то есть $d(t) \approx d(0)\exp(kt)$, где величина k характеризует среднюю скорость разбегания траекторий. Средняя скорость разбегания равна:

$$\bar{k} = t^{-1} \ln \frac{d(t)}{d(0)}. \quad (3.126)$$

Определим величину h :

$$h = \lim_{\substack{d(0) \rightarrow 0 \\ t \rightarrow \infty}} t^{-1} \ln \frac{d(t)}{d(0)}. \quad (3.127)$$

Величину h часто называют *энтропией Колмогорова – Синяя*. Энтропия Колмогорова – Синяя характеризует меру разбегания фазовых траекторий, находящихся в начальный момент времени бесконечно близко друг к другу. Используя это понятие, можно определить, каким является исследуемый режим движения – хаотическим или регулярным. Если динамика системы является регулярной, то с течением времени расстояния $d(t)$ не возрастают, так что значение энтропии Колмогорова – Синяя равно нулю. В случае хаотического движения всегда $h > 0$.

Строго говоря, в литературе энтропию Колмогорова – Синяя определяют через показатели Ляпунова. Характеристические показатели Ляпунова играют очень важную роль в теории динамических систем. Рассмотрим, как они вводятся.

Выделим в фазовом пространстве некоторый сферический объем и рассмотрим его деформацию при перемещении вдоль фазовой траектории. При сдвиге вдоль траектории элемент объема в одних направлениях сжимается, а в других растягивается, и сфера превращается в эллипсоид. По мере движения вдоль траектории как направления полуосей эллипсоида, так и их длины изменяются. Обозначим $d_n(t)$ – длины полуосей эллипсоида, где индекс n нумерует направления. Будем считать, что $d_n(t)$ зависит от времени экспоненциальным образом:

$$d_n(t) = d(0)e^{l_n t}, \quad (3.128)$$

где $d(0)$ – радиус исходной сферы. Тогда среднюю скорость изменения длин $d_n(t)$ можно записать в виде

$$\bar{l}_n = t^{-1} \ln \frac{d_n(t)}{d(0)}. \quad (3.129)$$

Характеристическими показателями Ляпунова называют предельные значения

$$L_n = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ d(0) \rightarrow 0}} t^{-1} \ln \frac{d_n(t)}{d(0)}. \quad (3.130)$$

Определенные таким образом величины L_n – вещественные числа, число которых равно размерности пространства. Фазовый объем системы пропорционален произведению длин полуосей. Тогда относительное изменение фазового объема можно представить в виде

$$\Theta = \frac{\prod d_n(t)}{d(0)^n} = \exp \left(t \sum_n L_n \right). \quad (3.131)$$

Из выражения (3.131) видно, что скорость изменения фазового объема определяется суммой показателей Ляпунова. Как было показано ранее, средняя скорость относительного изменения фазового объема равна среднему вдоль траектории значению дивергенции $\vec{f}$ (см. выражение 3.60) и

для диссипативных систем отрицательна. Иначе говоря, для диссипативной системы сумма показателей Ляпунова отрицательна, т.е.

$$\sum_n L_n < 0. \quad (3.132)$$

Для одномерного аттрактора (устойчивой стационарной точки) показатель Ляпунова может принимать только отрицательное значение. Для двумерного аттрактора кроме отрицательного показателя существует нулевой показатель Ляпунова. Нулевой показатель отвечает направлению вдоль самой траектории. Действительно, возьмем начальные условия на самом аттракторе (например, в случае предельного цикла – на замкнутой фазовой траектории). Обе изображающие точки будут следовать по одной траектории и отличаться только временным сдвигом (точка, стартующая позже, будет проходить все те же значения, что и первая, спустя заданный промежуток времени). Этот факт является следствием инвариантности динамических уравнений относительно сдвига времени. Поэтому деформации фазового объема при сдвиге вдоль траектории не происходит, и соответствующий показатель Ляпунова нулевой.

В случае $n \geq 3$ наряду с отрицательными и нулевыми показателями могут существовать положительные показатели Ляпунова. Положительные показатели Ляпунова означают неустойчивость соответствующих направлений. Для трехмерного хаотического аттрактора существует один положительный показатель Ляпунова. Для аттракторов большей размерности число положительных показателей Ляпунова может быть больше единицы, при сохранении равенства (3.132). Энтропию Колмогорова – Синая определяют как сумму положительных показателей Ляпунова. В математической теории устойчивости показывается, что величина, определенная формулой (3.127), совпадает с максимальным характеристическим показателем Ляпунова. В случае трехмерных аттракторов оба определения энтропии Колмогорова – Синая (как сумма положительных показателей Ляпунова и по формуле (3.127) эквивалентны.

Таким образом, положительные значения показателей Ляпунова означают, что в данных направлениях движение является неустойчивым. Отрицательные значения отвечают устойчивым направлениям. Динамическую систему называют гиперболической, если она имеет как положительные, так и отрицательные показатели Ляпунова.

Сформулируем критерии, позволяющие основываясь на характеристических показателях Ляпунова, различать типы аттракторов динамических систем.

Для одномерной системы, аттракторами которой могут быть только устойчивые особые точки, существует только один показатель Ляпунова, который является отрицательным. Запишем условно это как $L_1 = (-)$.

В двумерных системах аттракторы могут быть двух типов: устойчивые стационарные точки и предельные циклы. Если оба показателя Ляпунова отрицательны, то есть $(L_1, L_2) = (-, -)$, то аттрактором является устойчивая стационарная точка. Если $(L_1, L_2) = (0, -)$, то аттрактором является предельный цикл. Нулевой показатель соответствует направлению движения.

В трехмерном случае, помимо устойчивых особых точек и предельных циклов, аттракторами могут являться инвариантные торы (квазипериодические движения с несоизмеримыми частотами) и странные аттракторы. Когда два характеристических показателя Ляпунова равны нулю, а третий отрицателен, т.е. $(L_1, L_2, L_3) = (0, 0, -)$, то в фазовом пространстве имеется устойчивый инвариантный тор. Если один из ляпуновских показателей отрицателен, другой равен нулю, а третий положителен, то мы имеем дело со странным аттрактором. Таким образом, для трехмерных динамических систем встречается четыре типа аттракторов:

$(L_1, L_2, L_3) = (-, -, -)$ – устойчивый фокус или узел;

$(L_1, L_2, L_3) = (0, -, -)$ – устойчивый предельный цикл;

$(L_1, L_2, L_3) = (0, 0, -)$ – устойчивый тор;

$(L_1, L_2, L_3) = (+, 0, -)$ – странный аттрактор.

Аналитическое определение характеристических показателей Ляпунова и, соответственно, энтропии Колмогорова – Синая для большинства физически интересных задач не представляется возможным. Однако существуют алгоритмы, которые позволяют определить эти величины численными методами. В частности, для системы Лоренца при параметрах $\sigma = 16; b = 4; r = 40$ характеристические показатели Ляпунова равны $L_1 = 1,37; L_2 = 0; L_3 = -22,37$. Следовательно, при указанных параметрах имеется странный аттрактор, а движение является хаотическим.

3.3.4. Фрактальные структуры и фрактальная размерность

Принадлежащие странному аттрактору сложные, запутанные траектории расположены в ограниченной области пространства состояний. Диссипативные динамические системы обладают тем свойством, что их решения при $t \rightarrow \infty$ притягиваются к некоторому подмножеству в фазовом пространстве. Это подмножество для случая регулярной динамики в системе произвольной размерности может быть либо устойчивой стационарной точкой, либо устойчивым предельным циклом, либо инвариантным тором. Математическим образом хаотических колебаний диссипативных систем размерности $n \geq 3$ служит странный аттрактор. Странный аттрактор не обладает гладкой структурой и непрерывностью. Его геометрическое строение намного сложнее. Проведем в фазовом пространстве некоторую плоскость, например, перпендикулярную одной из фазовых осей. В процессе движения фазовые траектории будут пересекать эту плоскость. Образующееся в плоскости сечение носит название сечения Пуанкаре. Тщательный анализ странных аттракторов показал, что соответствующие сечения Пуанкаре имеют структуру канторовых множеств.

Канторовским называется множество точек, которое получается из единичного отрезка при удалении из нее средней трети, затем удаления средней трети из каждого оставшегося отрезка и так далее. (рис.3.17). Канторово множество обладает свойством самоподобия. Подобные геометрические объекты были названы Б. Мандельбротом *фракталами*.



Рис.3.19. Пример построения канторова множества

Одним из стандартных примеров фрактала является триадная кривая Коха. Рассмотрим этот пример подробнее. Построение кривой Коха начинается с прямолинейного отрезка единичной длины $L(1) = 1$. Он называется затравкой и может быть заменен каким-нибудь многоугольником, например равносторонним треугольником. Затравка – это 0-е поколение кривой Коха. Затем каждое звено затравки мы заменяем образующим элементом, обозначенным на рис. 3.20 через $n = 1$. В результате такой замены мы получаем 1-е поколение – кривую из четырех прямолинейных звеньев, каждое длиной по $1/3$. Длина всей кривой первого поколения составляет величину $L(1/3) = 4/3$. Следующее поколение получается при замене каждого прямолинейного звена уменьшенным образующим элементом. В результате имеем кривую второго поколения, состоящую из $N = 4^2 = 16$ звеньев, каждое длиной $\delta = 3^{-2} = 1/9$. Длина кривой второго поколения равна $L(1/9) = (4/3)^2 = 16/9$. Заменяя все звенья предыдущего поколения кривой уменьшенным образующим элементом, получаем новое поколение кривой. Определим теперь размерность кривой Коха. Длина кривой n -го

поколения определяется формулой $L(\delta) = (4/3)^n$. Длина каждого звена составляет $\delta = 3^{-n}$. Замечая, что число поколений n представимо в виде $n = -\ln \delta / \ln 3$, запишем длину кривой Коха в виде:

$$L(\delta) = (4/3)^n = \exp\left(-\frac{(\ln 4 - \ln 3) \ln \delta}{\ln 3}\right) = \delta^{1-D}, \quad (3.133)$$

где $D = \ln 4 / \ln 3 \approx 1.2628$ имеет смысл размерности кривой Коха и называется фрактальной размерностью.

Число сегментов равно $N(\delta) = 4^n = 4^{-\ln \delta / \ln 3}$ и может быть записано в виде:

$$N(\delta) = \delta^{-D}. \quad (3.134)$$

Заметим, что на каждой стадии построения кривые Коха могут быть растянуты в прямую линию, поэтому топологическая размерность триадной кривой Коха равна 1.

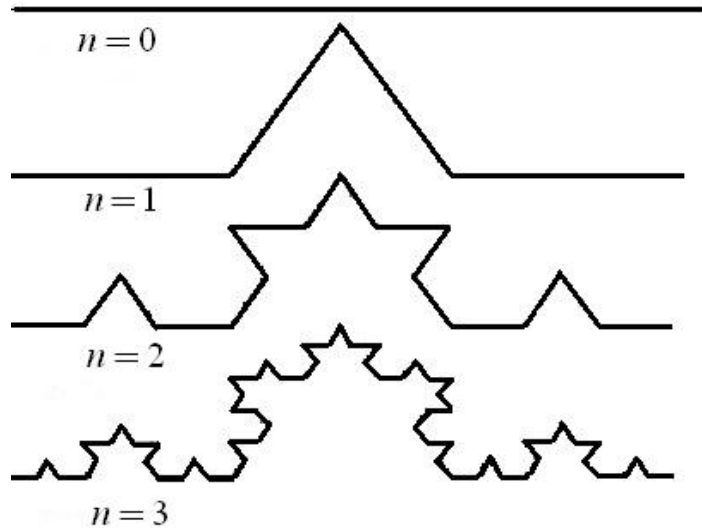


Рис. 3.20. Построение фрактальной кривой Коха

Топологическая размерность принимает лишь целые значения. Мы видим, что фрактальная размерность D больше топологической размерности.

В качестве другого примера фрактала на рис. 3.21 приведен так называемый ковер Серпинского. Он строится исходя из квадрата, который делим вертикальными и горизонтальными линиями на девять равных частей и средний квадрат выбрасываем. С каждым оставшимся квадратом повторяем ту же процедуру, и так до бесконечности. Получившаяся в результате фигура показана на рис. 3.21. Вычисления показывают, что размерность ковра Серпинского $D = \log_3 8 = 1,8927\dots$

Рассмотрим определение фрактальной размерности в более общем виде.

Пусть имеется некоторое множество A в заданном объеме n - мерного пространства. Положим без ограничения общности заданный объем равным единице.

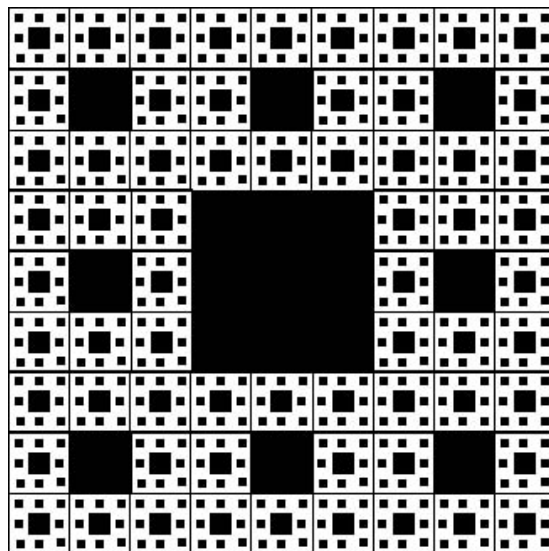


Рис.3.21. Ковер Серпинского – пример фрактальной структуры

Покроем множество A n -мерными кубиками со стороной δ так, чтобы эти кубики содержали все точки множества A . Пусть N – минимальное число кубиков, необходимых для покрытия A , тогда *фрактальная размерность* (по Хаусдорфу) определяется как предел

$$D = \lim_{\delta \rightarrow 0} [\ln N(\delta) / \ln(1/\delta)]. \quad (3.135)$$

Для регулярных множеств (например, “куска” трехмерного евклидова пространства, поверхности или линии) фрактальная размерность равна целому числу (соответственно 3, 2, 1) и совпадает с обычной размерностью. Действительно, при малых δ из формулы (3.135) получаем $N \simeq \delta^{-D}$. Число кубиков со стороной δ , необходимое для покрытия единичного объема в трехмерном пространстве, пропорционально $1/\delta^3$, для покрытия поверхности $\sim 1/\delta^2$, для покрытия линии $\sim 1/\delta$.

Таким образом, если мы имеем простой аттрактор, например, предельный цикл, то вполне очевидно, что его фрактальная размерность совпадает с топологической и равна единице. Фрактальная размерность странного аттрактора равна дробному числу. Так, в частности, фрактальная размерность аттрактора Лоренца равна 2,06.

Ввиду чрезвычайной важности фрактальной размерности возникает вопрос о явном ее вычислении для тех или иных аттракторов.

Существует гипотеза, выдвинутая Дж. Капланом и Дж. Йорке, согласно которой фрактальная размерность связана с характеристическими показателями Ляпунова L_i . Согласно гипотезе Каплана и Йорке нижней границей для фрактальной размерности является ляпуновская размерность, определяемая как

$$D_L = j + \frac{1}{|L_{j+1}|} \sum_{i=1}^j L_i, \quad (3.136)$$

где все показатели Ляпунова L_i упорядочены: $L_1 \geq L_2 \geq \dots \geq L_n$ (n – размерность фазового пространства), а число j определяется из условий:

$$L_1 + L_2 + \dots + L_j \geq 0, \quad L_1 + L_2 + \dots + L_j + L_{j+1} < 0, \quad (3.137)$$

т.е. j определяет номер характеристического показателя Ляпунова, до которого их сумма положительна. Напомним, что сумма положительных показателей Ляпунова определяет энтропию Колмогорова – Синая.

Формула (3.136) носит название формулы Каплана–Йорке. Она доказана строго для некоторых видов простых аттракторов, но в общем случае носит характер гипотезы. Численная оценка размерности по формуле (3.136) хорошо совпадает с расчетами фрактальной размерности другими способами. Формулу (3.136) можно проиллюстрировать графически, если изобразить зависимость сумм ляпуновских показателей $S_n = \sum_{i=1}^n L_i$ от числа

слагаемых и соединить точки ломаной линией (рис.3.22). Точка пересечения графика с осью абсцисс как раз соответствует размерности D_L , рассчитанной по формуле Каплана–Йорке (3.136). График также иллюстрирует взаимное соотношение между несколькими существенными для нелинейной динамики характеристиками аттрактора. В частности, максимальное значение S_m соответствует сумме положительных ляпуновских показателей (энтропии Колмогорова–Синая).

Для трехмерных динамических систем в предположении, что движение происходит на странном аттракторе, формула Каплана–Йорке сводится к виду

$$D_L = 2 + L_1/|L_3|, \quad (3.138)$$

поскольку для таких систем $L_1 > 0, L_2 = 0, L_3 < 0$.

Таким образом, размерность странного аттрактора равна дробному числу. Напомним, что размерность фазового пространства равна числу независимых динамических переменных, которые однозначно определяют состояние системы. Очевидно, что число динамических переменных, описывающих динамику системы, может быть меньше, чем размерность фазового пространства (например, когда фазовая траектория в трехмерном или двумерном пространстве – прямая линия). Наименьшее число независимых

переменных, однозначно определяющих установившееся движение, называют размерностью вложения. Размерность вложения аттрактора – это минимальная размерность фазового подпространства, в которое без самопересечений можно поместить подмножество, содержащее аттрактор.

Поясним смысл понятия пространства вложения на примерах. Рассмотрим аттрактор в виде замкнутой орбиты – предельного цикла. Если мы попытаемся спроецировать его на плоскость, то, вообще говоря, образ аттрактора может оказаться кривой с одним или несколькими самопересечениями. В этом случае говорят, что аттрактор нельзя вложить на плоскость. Однако замкнутую орбиту можно без самопересечений вложить в трехмерное пространство. В случае предельного цикла размерность аттрактора (топологическая размерность) равна 1. Он вкладывается без самопересечения в пространство размерности 3.

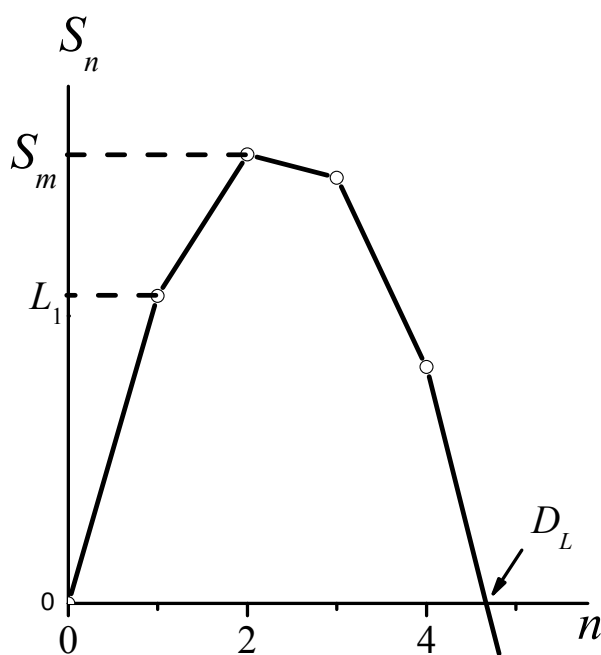


Рис.3.22. Схематичное изображение зависимости суммы показателей Ляпунова от числа слагаемых

В трехмерное пространство можно вложить также тороидальную поверхность. Размерность подпространства, куда вкладывается аттрактор, больше размерности аттрактора. Существует теорема Мане, согласно которой любое гладкое многообразие размерности m всегда может быть вложено без самопересечений в пространство размерности как минимум $2m + 1$. Аттрактор, характеризуемый фрактальной размерностью D , всегда может быть вложен в пространство с целочисленной размерностью k , которая удовлетворяет неравенству $k \geq 2D + 1$. В ряде случаев размерность вложения может быть и меньше, вплоть до значения $d + 1$, где d – целая часть фрактальной размерности D . Если мы из каких-либо данных знаем размерность фазового пространства, то можем сразу сказать, каково максимальное число независимых переменных, которое необходимо взять для теоретического описания процесса.

Возникает вопрос, как по экспериментальным данным установить размерность динамической системы. Ответ на этот вопрос дает гипотеза Таккенса о псевдофазовом пространстве. Согласно этой гипотезе для определения размерности достаточно знать, как меняется со временем только одна динамическая переменная.

3.3.5. Определение размерности аттракторов по экспериментальным рядам данных

Допустим, что мы имеем временную зависимость динамической переменной $x(t)$. Вначале произведем дискретизацию переменной, то есть будем рассматривать значения переменной в дискретные моменты времени $x_i(t_i)$. Введем некоторый параметр, называемый временем задержки τ и будем рассматривать моменты времени $t_i, t_i + \tau, t_i + 2\tau, + \dots$. Сконструируем m -мерные вектора

$X^{(i)} = \{x_i(t_i), x_i(t_i + \tau), x_i(t_i + 2\tau), \dots, x_i(t_i + (m - 1)\tau)\}$. Гипотеза Такенса за-

ключается в том, что пространство, сконструированное из m -мерных векторов X_i , называемое псевдофазовым, передает основные топологические свойства реального фазового пространства.

Введем меру в m -мерном псевдофазовом пространстве, определяемую как расстояние между векторами $X^{(i)}$ и $X^{(j)}$. Это расстояние можно ввести различными способами. Конкретный способ определения меры большого значения не имеет.

В частности, можно ввести эвклидову метрику

$$\|X^{(i)} - X^{(j)}\| = \left[\sum_{k=1}^m (X_k^{(i)} - X_k^{(j)})^2 \right]^{1/2}. \quad (3.139)$$

В качестве расстояния между векторами можно выбрать максимальное значение разностей их компонент. Как показали исследования, результаты практически не зависят от способа введения метрики.

П. Грассбергером и И. Прокачя было введено понятие корреляционного интеграла

$$C_m(r) = \frac{1}{M(M-1)} \sum_{i,j=1, i \neq j}^M \theta(r - \|X^{(i)} - X^{(j)}\|), \quad (3.140)$$

где M – общее число точек в обрабатываемой реализации $x(t)$, $\Theta(r)$ – функция Хевисайда, то есть

$$\theta(r - \|X^{(i)} - X^{(j)}\|) = \begin{cases} 1, & \text{при } \|X^{(i)} - X^{(j)}\| \leq r \\ 0, & \text{при } \|X^{(i)} - X^{(j)}\| > r \end{cases}. \quad (3.141)$$

Корреляционный интеграл $C_m(r)$ имеет смысл доли пар векторов $X^{(i)}$ и $X^{(j)}$, расстояние между которыми меньше r .

Предполагается, что при малых r корреляционный интеграл зависит от r степенным образом:

$$C_m(r) = r^{\nu_m}. \quad (3.142)$$

Начиная с некоторого значения $m \geq n$, показатель ν_m перестает зависеть от m . Эта величина ν носит название корреляционной размерности, а величина n определяет размерность фазового пространства системы. Корреляционная размерность является нижней оценкой фрактальной размерности аттрактора.

Практически при нахождении корреляционной размерности определяют тангенсы углов наклона зависимостей $\lg C_m$ от $\lg r$. При некотором $m = n$ тангенс угла наклона перестает меняться с увеличением m . Максимальный тангенс угла наклона и принимается за оценку фрактальной размерности аттрактора.

Результаты определения размерностей зависят от выбора времени задержки τ и от длины реализации. Математика не дает каких-либо определенных рецептов.

При практическом использовании алгоритма Грассбергера и Прокачя нужно иметь в виду следующее.

1. *Время задержки.* Для слишком малых значений τ координаты вектора $X^{(i)}$ в псевдофазовом пространстве подобны друг другу и аттрактор растягивается вдоль диагонали в координатах $x(t_i + \tau) - x(t_i)$. Малое значение τ приводит к сильно заниженным значениям размерности. Желательно выбирать такое время задержки, которое содержит в себе большую независимость координат от времени. С другой стороны слишком большие значения времени задержки τ приводят к потере информации, содержащейся в данных, и два близких вектора становятся достаточно удаленными во времени, что приводит к кажущемуся увеличению размерности.

К настоящему времени имеются различные рецепты выбора времени задержки τ . Если частотный спектр динамической переменной имеет максимум, то значение времени задержки можно выбрать в интервале $0,1/f_{\max} < \tau < 0,5/f_{\max}$, где $f_{\max}$ — частота, соответствующая максимуму спектральной плотности. Однако спектральная плотность не всегда имеет

максимум. В этом случае наиболее часто употребляется метод выбора τ , соответствующего моменту времени, в который автокорреляционная функция сигнала в первый раз обращается в ноль. В литературе существуют и другие способы выбора времени задержки.

2. *Длина реализации.* Длина реализации связана с измеряемой размерностью. Чем больше измеряемая размерность, тем большую длину реализации необходимо иметь, чтобы обеспечить достаточное заполнение аттрактора точками. Длина реализации зависит также от точности представления данных аттрактора, то есть от амплитудного разрешения сигнала. Строго говоря, степенная зависимость (3.142) выполняется при $r \rightarrow 0$. На практике при вычислении размерности наклон интеграла определяется на конечном интервале $r_{\max} - r_{\min}$. Известна экспериментальная оценка требуемой длины реализации N : $\ln N \approx \nu(r_{\max} - r_{\min})$, где $(r_{\max}, r_{\min})$ - интервал r , на котором корреляционный интеграл $C \sim r^\nu$. В целом, вопрос о приемлемой минимальной длине реализации остается дискуссионным.

Реальная реализация, получаемая в эксперименте, содержит в себе шум. Вопрос о разграничении динамического сигнала и шума остается сложным. Для определения является ли исследуемый сигнал динамическим или шумовым часто применяют метод фазовой рандомизации. Для этого в Фурье-преобразовании исходного сигнала произвольно меняют фазу, а затем с использованием обратного Фурье-преобразования возвращаются к временному ряду. Если корреляционные интегралы, полученные из двух наборов данных – первичного и “суррогатного” значительно различаются, то в исходной реализации присутствует динамический сигнал.

В том случае, когда шум аддитивен и имеет небольшую амплитуду, на корреляционных интегралах имеются изломы в области малых значений r . Это позволяет отделить хаотический сигнал динамического происхождения от аддитивного шума.

На рис.3.23 приведены корреляционные интегралы, полученные из экспериментальных данных по сигналу с термоанемометра на оси струи в рабочей части цилиндрической аэродинамической трубы.* Корреляционная размерность определялась по значениям тангенса наклона корреляционных интегралов от размерности фазового пространства.

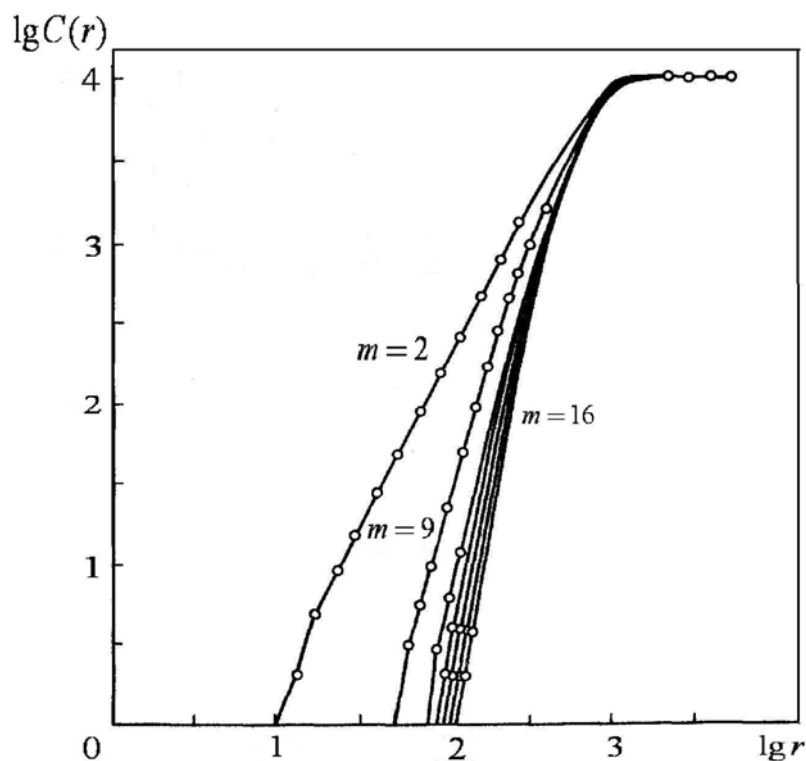


Рис. 3.23. Корреляционные интегралы, рассчитанные по экспериментальным данным пульсации скорости при течении жидкости в цилиндрической трубе (длина открытой рабочей части $L=1200$ мм, начальное сечение струи 300 мм²) при числах Рейнольдса $Re \approx 105$

Было установлено, что размерность фазового пространства (размерность вложения) конечна и равна 8 (точнее: 7 – 9), а корреляционная размерность аттрактора составляет приблизительно 2,5 (дробное значение).

Отсюда можно сделать вывод, что фазовые траектории при турбулентном движении жидкости (в описанном эксперименте) имеют динамическое происхождение (конечномерность размерности вложения) и распо-

* Рабинович М.И. Регулярная и хаотическая динамика структур в течениях жидкости / М.И.Рабинович, М.М. Сущик //Успехи физических наук. 1990. Т. 160. Вып.1. С.1-64.

лагаются на странном аттракторе (дробное значение корреляционной размерности).

Следует отметить, что обработка экспериментальных данных с использованием теории динамического хаоса должна быть проведена очень аккуратно с учетом всех влияющих на результаты факторов. Поэтому окончательные выводы о динамическом происхождении нерегулярного сигнала (динамический хаос) нужно делать осторожно.

3.3.6. Сценарии перехода к динамическому хаосу

Рассмотрим основные пути или, как говорят, основные сценарии, перехода от регулярного движения к хаотическому. Сценарии такого перехода напрямую связаны с проблемой возникновения турбулентности.

Широко распространенным сценарием перехода к динамическому хаосу является переход путем удвоения периода, который был подробно исследован М. Фейгенбаумом и получил название – сценарий Фейгенбаума. Этот сценарий отвечает ситуации, когда в результате потери устойчивости исходного предельного цикла в фазовом пространстве рождается цикл удвоенного периода, при котором системе требуется в два раза больше времени на возврат в исходное состояние. При дальнейшем увеличении управляющего параметра возникает новое удвоение периода, то есть первоначальный период увеличивается в четыре раза. В частности, возможна бесконечная последовательность бифуркаций удвоения периода исходного предельного цикла. Эта последовательность бифуркаций происходит на конечном интервале изменения управляющего параметра и переводит систему от устойчивого периодического движения к хаотической динамике. Исследования бифуркаций удвоения периода выявили их глубокую связь с фазовыми переходами второго рода. В частности сценарию Фейгенбаума, присущи свойства масштабной инвариантности и универсальности. Уни-

версальность проявляется в том, что для множества диссипативных нелинейных систем различной природы, в которых возможен переход к хаотическому поведению путем удвоения периода, характерны одни и те же количественные закономерности масштабной инвариантности.

Проиллюстрируем сценарий Фейгенбаума на примере модельной системы, описываемой уравнениями:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= -(y + z), \\ \frac{dy}{dt} &= (x + ey), \\ \frac{dz}{dt} &= f + z(x - g),\end{aligned}\tag{3.143}$$

где e и f - постоянные коэффициенты. Эта система носит название системы Ресслера. Она, как и система Лоренца, содержит в себе странный аттрактор.

На рис. 3.24 приведены численные решения данной системы при значениях параметров $e = f = 1/5$ и при различных значениях параметра g .

Строго говоря, странный аттрактор формируется при бесконечном числе бифуркаций удвоения. Значения управляющего параметра (в данном случае g) образуют сходящуюся последовательность:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} g_m = g_\infty.\tag{3.144}$$

Скорость сходимости бесконечной последовательности g_m определяется универсальной постоянной – числом Фейгенбаума δ :

$$\lim_{m \rightarrow \infty} [(g_m - g_{m-1}) / (g_{m+1} - g_m)] = \delta = 4.6692...\tag{3.145}$$

Для сценария Фейгенбаума постоянная δ не зависит от конкретного вида динамической системы. Обнаруженный Фейгенбаумом закон сходимости есть частное проявление масштабной инвариантности при бифуркации удвоения периода.

В реальных экспериментах и численных расчетах, где всегда имеются физические шумы или ошибки округления, бесконечную последовательность удвоения наблюдать не удастся. Вместо этого после нескольких бифуркаций удвоения движение становится хаотическим.

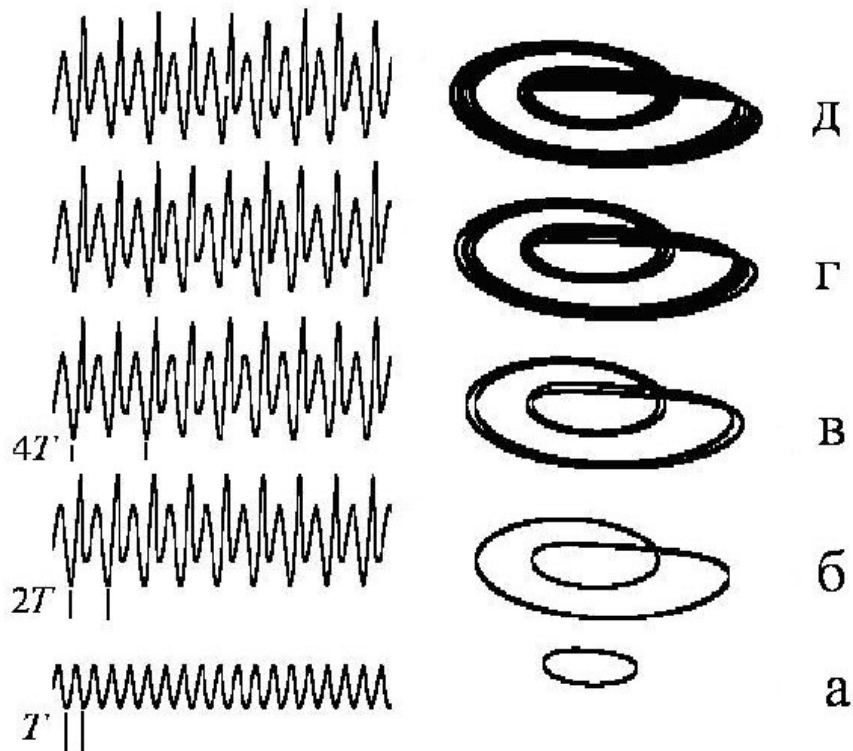


Рис. 3.24. Каскад бифуркаций удвоения периода на примере системы Ресслера при изменении параметра g . Реализации переменной x и фазовые портреты в плоскости $x-y$. а – $g = 2$; б – $g = 6,0$; в – $g = 6,5$; г – $g = 6,8$; д – $g = 6,9$

Другим очень распространенным сценарием перехода к хаосу является сценарий рождения инвариантных торов. Этот сценарий был впервые предложен Л.Д. Ландау (и независимо от него Э. Хопфом) как один из возможных сценариев возникновения турбулентности. В работе Ландау, опубликованной в 1944г. ставится вопрос о том, как возникает турбулентность при увеличении числа Рейнольдса (п. 3.2.5). Согласно теории Ландау первичное течение теряет устойчивость по отношению к колебательному

возмущению на некоторой частоте. В результате потери устойчивости предельного цикла в фазовом пространстве рождается инвариантный тор, т. е. кроме движения с частотой ω_1 рождается движение с частотой ω_2 . Фазовая траектория в этом случае представляет собой спираль, намотанную на поверхность тора. Если отношение частот рационально, т.е. $\omega_1/\omega_2 = m/n$, где m и n – целые числа, то в фазовом пространстве возникает предельный цикл, расположенный на торе. Поведение системы в этом случае станет периодическим. Если отношение частот иррационально, то фазовая траектория всюду плотно покрывает тор.

С последующим изменением управляющего параметра может произойти потеря устойчивости двумерного тора, в результате которой появляется новое движение с частотой ω_3 , т.е. произойдет рождение трехмерного тора. В результате каскада подобных бифуркаций возникают инвариантные торы все возрастающей размерности. В конечном итоге мы приходим к сложному квазипериодическому движению с k несоизмеримыми частотами, которое при больших k будет выглядеть как хаотическое. Однако квазипериодическое движение, даже очень сложное, не является странным аттрактором, так как для него отсутствует разбегание фазовых траекторий. Кроме того, такое движение встречается чрезвычайно редко. Под действием всегда присутствующих возмущений такое движение с течением времени вырождается в периодическое или же разрушается и дает начало хаотическому режиму.

Модификацией сценария Ландау–Хопфа является сценарий Рюэля – Такенса. Согласно этому сценарию после трех бифуркаций рождения несоизмеримых частот возникает трехчастотное квазипериодическое движение, как и в модели Ландау–Хопфа, однако это трехчастотное движение в силу своей неустойчивости превращается не в четырехмерный инвариантный тор, а в странный аттрактор. Теорема Рюэля и Такенса утверждает,

что странный аттрактор может возникнуть в результате бесконечно малого возмущения трехмерного инвариантного тора.

Возможность перехода к хаотическому режиму по сценарию Рюэля–Такенса подтверждается экспериментально. Так, при экспериментальном исследовании конвекции Бенара в подогреваемом слое жидкости с увеличением градиента температуры обнаружен переход к хаосу. Перед таким переходом в спектре скорости жидкости наблюдалась сначала одна, а затем две независимые частоты. Хаотический режим, характеризующийся сплошным спектром, появлялся сразу вслед за двухчастотным или трехчастотным движением. Данный сценарий наблюдается также при переходе к хаотическому поведению динамики вихрей Тейлора, образующихся между двумя вращающимися цилиндрами. Сценарий Рюэля – Такенса, называемый также квазипериодический распад, часто реализуется при переходе к хаотическому режиму колебаний в автогенераторах. Все это дает основания считать, что сценарий Рюэля–Такенса является реалистичным путем перехода динамических систем к хаотическому поведению.

И, наконец, если в какой-то системе имеет место чередование стадий регулярного и хаотического поведений, то говорят о перемежаемости. Переход через перемежаемость – третий очень важный и широко распространенный сценарий перехода к хаосу. Этот сценарий называют еще сценарием Помо–Манневиля. При таком переходе всплески хаотического поведения чередуются (перемежаются) с регулярным. При переходе к хаосу через перемежаемость средняя продолжительность регулярного (ламинарного) движения между двумя последовательными хаотическими всплесками

$$\langle \tau \rangle = \frac{1}{|\lambda - \lambda_c|^{1/2}}, \quad (3.146)$$

где λ - управляющий параметр. На рис.3.25 приведена типичная реализация для режима с перемежаемостью, соответствующая колебаниям тока в генераторе Ван-дер-Поля с периодической вынуждающей силой. Режимы с

перемежаемостью можно получить в системе Лоренца (3.104), например при значении параметров $\sigma = 10$, $b = 8/3$ и значениях r в некотором диапазоне вблизи $r \approx 166$.

Переход к хаосу через перемежаемость наблюдался во многих экспериментах, в конвекции Релея–Бенара, автоколебательной химической реакции Белоусова–Жаботинского. Такой переход является неравновесным фазовым переходом первого рода.

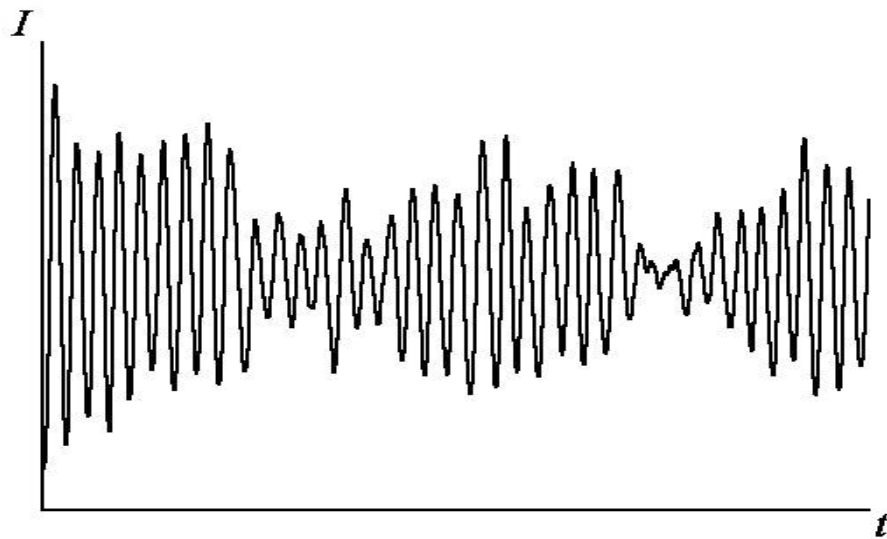


Рис. 3.25. Режим с перемежаемостью в автогенераторе

Кроме перечисленных основных сценариев перехода к хаотическому поведению, встречаются и их комбинации.

3.3.7. Точечные отображения

В заключение раздела, посвященного динамическому хаосу, остановимся на точечных отображениях.

Точечные отображения – это самостоятельный раздел теории динамических систем, где изучаются объекты не с непрерывным, а с дискретным временем. Примером точечного отображения является сечение Пуанкаре, о котором упоминалось в п.3.3.4. В силу ряда причин точечные отображения

сыграли огромную роль в развитии понятий нелинейной динамики, и в частности динамического хаоса. Мы в рамках данного курса не рассматриваем дискретные системы, а ограничимся лишь кратким упоминанием о свойствах, пожалуй, самого известного из точечных отображений – *логистического отображения*.

Логистическое отображение было впервые введено П. Ферхюльстом для описания динамики биологических популяций. Предполагается, что в отсутствие сдерживающих факторов численность популяции в какой-либо год определяется численностью популяции в предыдущий год: $y_{n+1} = f(y_n)$. Это и есть простейшее дискретное отображение. Его вид можно конкретизировать, если сделать несколько простых предположений. Пусть при малой численности популяции ее величина год от года меняется в геометрической прогрессии. Тогда $y_{n+1} = \lambda y_n$, где λ – параметр, определяющий скорость размножения. Ясно, однако, что при большой численности популяции она не сможет расти так быстро. Эффекты конкуренции за источники питания приведут к ограничению численности. Предположим, что закон падения численности связан с квадратичной нелинейностью. Тогда отображение примет вид $y_{n+1} = \lambda y_n - \gamma y_n^2$. Сделав замену переменной: $y = x\lambda/\gamma$, получим

$$x_{n+1} = \lambda x_n (1 - x_n). \quad (3.147)$$

Это уравнение носит название логистического или однопараметрического квадратичного отображения. Оно в действительности неплохо описывает, по крайней мере, с качественной стороны, динамику некоторых биологических популяций.

Несмотря на свой простой вид, логистическое отображение, наряду с системой Лоренца, служит одной из основных, фундаментальных моделей нелинейной динамики и теории динамического хаоса.

Последовательность чисел x_n можно рассматривать как дискретное изменение динамической переменной x . Отличительной особенностью последовательностей x_n , даваемых логистическим отображением, является то, что они допускают сложную динамику в зависимости от управляющего параметра λ . В частности, в логистическом отображении возможно существование циклов различного периода, а также хаотического поведения. Следует заметить, что исторически хаотическая динамика в точечных отображениях была исследована раньше, чем в системах с непрерывным изменением времени. Сам термин хаос для динамических систем был впервые использован применительно к дискретным отображениям. На них были установлены многие закономерности хаотической динамики, в частности, переход к хаосу путем удвоения периода и универсальность Фейгенбуама (3.145) были открыты на логистическом отображении.

Не вдаваясь в математическое исследование точечных отображений, проиллюстрируем основные свойства выражения (3.147).

Эволюцию, описываемую дискретными отображениями, удобно представлять на итерационных диаграммах (их иногда еще называют диаграммами Ламерея). На диаграмме откладывают зависимость переменной x_{n+1} от x_n , то есть функцию $f(x) = \lambda x(1 - x)$, и проводят биссектрису $g(x) = x$, как показано на рис. 3.26. Тогда эволюция переменной представляется на диаграмме некоторой «лесенкой».

Если постепенно увеличивать параметр λ в интервале от 0 до 4, то можно наблюдать следующую картину. В интервале $0 < \lambda \leq 1$ квадратичное отображение имеет единственную устойчивую неподвижную (стационарную) точку $x = 0$, как это показано на рис. 3.26,а. С точки зрения динамики популяций стационарная точка означает, что численность популяции устанавливается постоянной (в данном случае 0). С увеличением λ в интервале $1 < \lambda \leq 3$ появляется еще одна стационарная точка ($x \neq 0$). Динамика системы может иметь и более сложный колебательный характер. Так, при

$\lambda = 3$ в системе рождается автоколебательный режим, как это показано на рис. 3.26,б. При увеличении управляющего параметра в интервале $3 < \lambda \leq 3,5$ наблюдаются бифуркации удвоения периода колебаний. С дальнейшим увеличением λ происходит переход к хаотическому поведению.

Качественное изменение динамики системы в зависимости от управляющего параметра иллюстрирует бифуркационная диаграмма, приведенная на рис.3.27. На бифуркационной диаграмме по вертикальной оси откладываются неподвижные (стационарные) точки отображения, а по горизонтальной – значения управляющего параметра λ .

Кроме логистического отображения известно достаточно большое число дискретных отображений различной размерности, которые демонстрируют хаотическую динамику.

Критерии хаотического поведения для точечных отображений такие же, как и для непрерывных систем. Действительно, последовательность точек x_n мы всегда можем рассматривать как “оцифрованный” временной ряд чисел и представить его как решение некоторой системы дифференциальных уравнений в дискретные моменты времени, в частности как сечение Пуанкаре. В отличие от систем с непрерывным временем, хаотическое поведение может наблюдаться уже в одномерных точечных отображениях, тогда как в системах, описываемых дифференциальными уравнениями, размерность фазового пространства должна быть не менее 3.

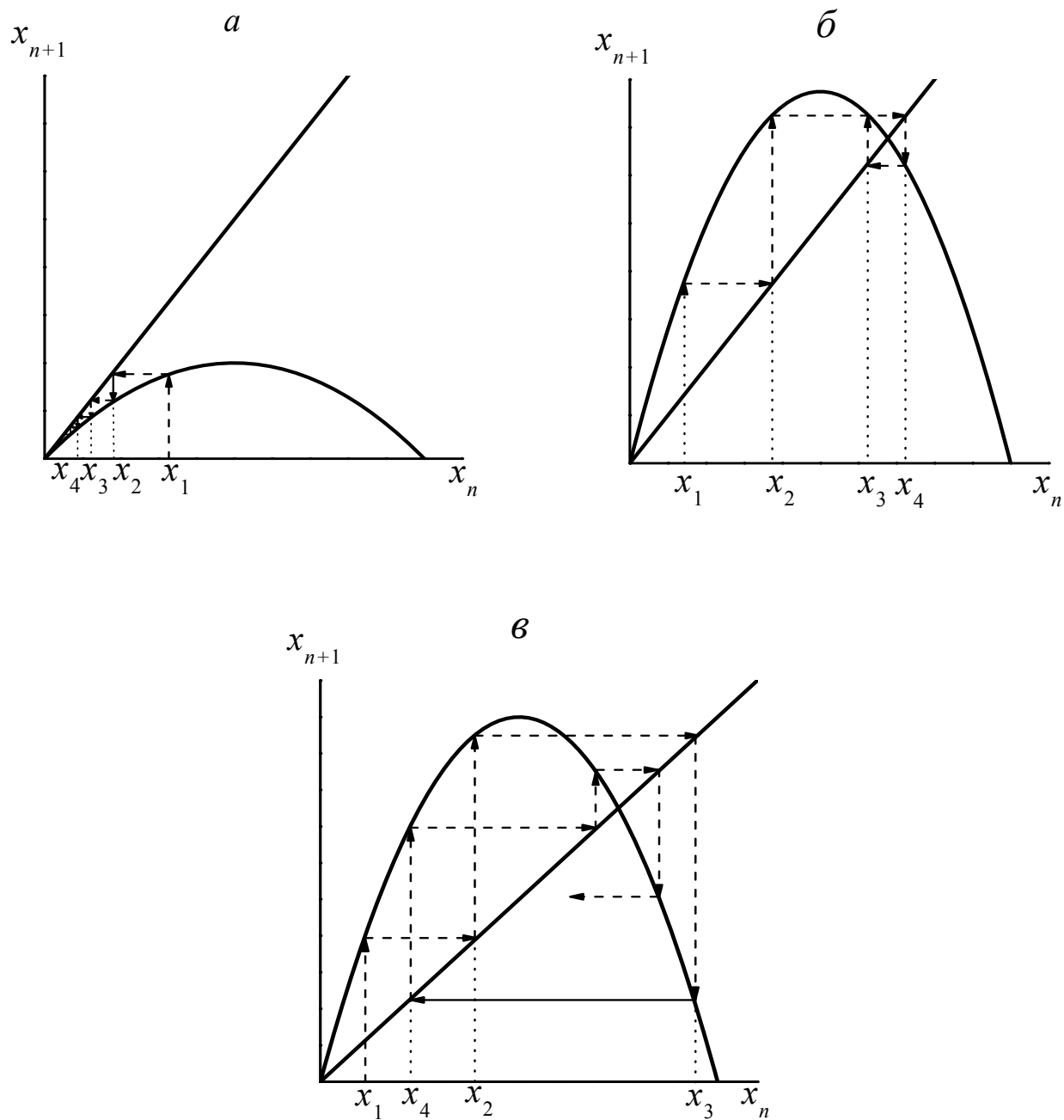


Рис.3.26. Иттерационные диаграммы при значениях управляющего параметра: а – $\lambda = 0,8$; б – $\lambda = 3$; в – $\lambda = 4$

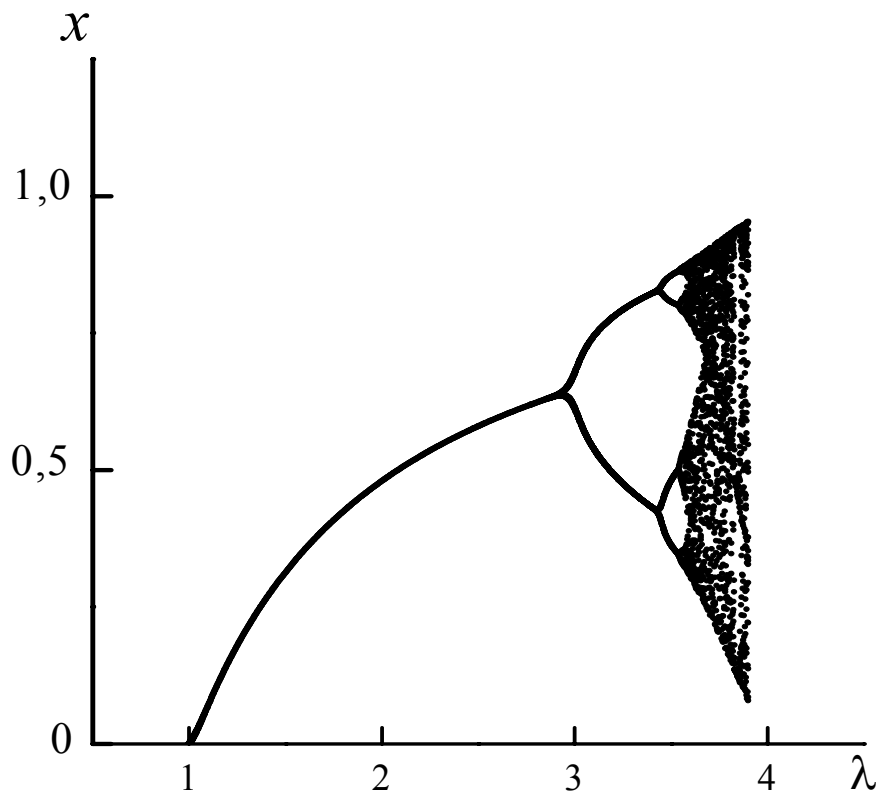


Рис.3.27. Бифуркационная диаграмма логистического отображения

3.4. Автоволны

3.4.1. Типы автоволн в нелинейных средах

В предыдущем разделе рассматривались динамические системы, в которых отсутствует пространственная координата и возможна лишь временная самоорганизация. В тех случаях, когда в среде имеются пространственно-распределенные источники энергии, возможны различного типа автоволновые процессы.

Под *автоволнами* принято понимать самоподдерживающийся в активной нелинейной среде волновой процесс (включая стационарные струк-

туры), сохраняющий свои характеристики постоянными за счет распределенного в среде источника энергии. Эти характеристики – период, длина волны, скорость распространения, амплитуда и форма – в установившемся режиме зависят только от локальных свойств среды и не зависят от начальных, а часто и от граничных условий.

Для неравновесной диссипативной распределенной системы можно указать базисный набор структур. Известны следующие типы структур, наблюдаемых в однородной активной среде: 1. Распространение уединенного фронта возбуждения (движение границы фазового перехода или фронта переключения). 2. Распространение импульса стабильной формы. 3. Автономные локализованные источники волн. 4. Стоячие волны. 5. Ревербератор (эхо). 6. Синхронные автоколебания в пространстве. 7. Стационарные во времени неоднородные распределения в пространстве (диссипативные структуры). Мы в качестве примера рассмотрим лишь первый случай, т.е. волны переключения, которые напрямую связаны с движением фронта фазового превращения.

Следует отметить, что структуры могут существовать не только в диссипативных неравновесных, но и в консервативных системах. Такие структуры обычно называются солитонами. Однако между солитонами и структурами в диссипативных средах существует различие. Так, после столкновения солитоны восстанавливают свою форму и скорость распространения, тогда как, например, бегущие импульсы или бегущие фронты в диссипативных системах взаимно уничтожаются. Скорость и форма солитона определяются начальными возмущениями, а скорость и форма автоволн от начальных условий не зависят.

3.4.2. Волны переключения в бистабильных средах

При рассмотрении феноменологической теории фазовых переходов мы уже сталкивались с *бистабильными* системами. Характерной особенностью таких систем является тот факт, что заданному значению управляющего параметра соответствуют два устойчивых стационарных состояния. Если заданному значению управляющего параметра соответствуют несколько устойчивых стационарных состояний, то говорят о состоянии *мультистабильности*. Понятие бистабильности (мультистабильности) является общим. Бистабильными могут быть среды, когда одному значению управляющего параметра соответствуют два стационарных состояния, включая неравновесные. Понятие бистабильности применимо не только к свойствам, но и к различным режимам протекания процессов. В качестве примера можно привести оптическую бистабильность, когда определенной интенсивности и поляризации падающего излучения соответствуют два возможных устойчивых стационарных состояния поля прошедшей волны, отличающихся амплитудой и параметрами поляризации. Оптическая бистабильность используется в различных оптоэлектронных приборах. В химической кинетике описаны случаи, когда при заданных внешних условиях могут протекать различные химические реакции. В теплофизике известна бистабильность пузырькового и пленочного режимов кипения, когда при заданной температуре греющей поверхности (или при заданном значении теплового потока к жидкости) теплоотдача может осуществляться в режимах пузырькового или пленочного кипения (кризис кипения).

Процесс распространения волны переключения заключается в последовательном переключении бистабильных элементов из одного устойчивого состояния в другое под действием какого-либо внешнего воздействия. Бистабильная среда представляет собой дискретный набор бистабильных элементов с определенными правилами переходов между ними. Про-

стейший бистабильный элемент описывается дифференциальным уравнением

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \quad (3.148)$$

в котором функция $f(x)$ является нелинейной и имеет характерный вид, изображенный на рис. 3.28. Стационарному состоянию элемента соответствуют точки, в которых $f(x) = 0$. На рис.3.28 это точки x_1 , x_2 и x_3 . Определим тип стационарных точек (устойчивые или неустойчивые). Для этого рассмотрим малые отклонения переменной x от стационарных значений $\bar{x}$ (x_1 , x_2 и x_3 на рис.3.28): $x = \bar{x} + \delta x$. Подставив x в (3.148), получим линеаризованное уравнение

$$\frac{d(\delta x)}{dt} \approx \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=\bar{x}} \delta x. \quad (3.149)$$

В (3.149) учтено, что $d\bar{x}/dt = 0$ и отброшены члены, содержащие δx в степени выше первой. Тип стационарной точки определяется знаком производной df/dx , взятой в стационарной точке. Если знак этой производной отрицателен, то при увеличении x (положительное значение δx) возникает сила, стремящаяся вернуть систему обратно ($\delta \dot{x} < 0$), и, наоборот, при положительной производной в стационарной точке эта точка является неустойчивой. На рис. 3.26 устойчивыми стационарными точками являются точки x_1 и x_3 . Точка x_2 неустойчива.

Если размер бистабильных элементов достаточно мал, то среду, состоящую из таких элементов, можно представить как непрерывно распределенную систему. В этом случае описание динамики среды будет основываться на построении дифференциальных уравнений, характеризующих динамику отдельных элементов и их взаимодействие. В приближении сплошной среды взаимодействие отдельных элементов часто можно считать взаимодействием диффузионного типа (диффузия, теплопроводность).

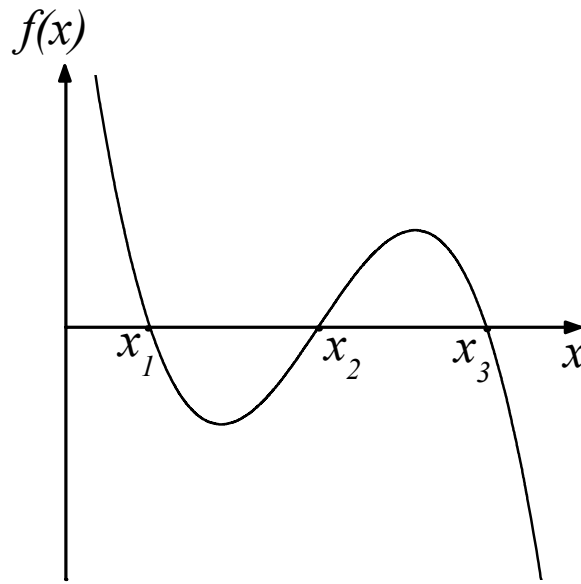


Рис.3.28. Типичный вид функции $f(x)$ в уравнении (3.148)

В этом случае в уравнение (3.148) нужно добавить слагаемое, содержащее $D\partial^2/\partial\vec{r}^2$, где D имеет смысл обобщенного коэффициента диффузии, $\Delta \equiv \partial^2/\partial\vec{r}^2$ – лапласиан:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x) + D\Delta x. \quad (3.150)$$

Уравнение (3.150) относится к дифференциальным уравнениям в частных производных параболического типа. Особенностью таких уравнений с нелинейной функцией источника $f(x)$, показанной на рис.3.28, является то, что они допускают решения в виде волн переключения. При распространении волны переключения элементы среды последовательно переходят из одного устойчивого состояния в другое.

3.4.3. Примеры волн переключения

Приведем некоторые примеры систем, для которых реализуется бистабильное состояние.

Тепловое разрушение сверхпроводимости. Проиллюстрируем случай возникновения бистабильного состояния на примере теплового разрушения сверхпроводящего состояния в присутствии транспортного тока. Если мы имеем сверхпроводник, по которому течет ток, то при температуре ниже критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние джоулево тепловыделение отсутствует (электрическое сопротивление равно нулю). Если по какой-либо причине температура достигла критического значения, то в единице объема сверхпроводника будет выделяться тепло с мощностью $Q = j^2 \rho(T)$, где j – плотность транспортного тока; $\rho(T)$ – удельное электрическое сопротивление. В режиме фиксированного тока температурная зависимость мощности тепловыделения определяется температурной зависимостью сопротивления. При $T < T_c$ (T_c – температура сверхпроводящего перехода) сопротивление $\rho = 0$, следовательно, $Q(T < T_c) = 0$. Теплоотвод от сверхпроводника в охладитель с температурой T_0 в простейшем случае передается линейной температурной зависимостью удельной мощности теплоотдачи $W = \alpha A(T - T_0)/v$, где α – коэффициент теплоотдачи, A – площадь поверхности, с которой осуществляется теплоотдача, v – объем сверхпроводника. На рис. 3.29,а схематично показаны температурные зависимости мощностей тепловыделения Q и теплоотвода W для случая теплового разрушения сверхпроводимости, а на рис. 3.29,б температурная зависимость функции источника $f(T) = Q(T) - W(T)$. Стационарные состояния определяются условием теплового баланса в системе, т.е. равенством мощностей тепловыделения и теплоотвода: $Q(T) = W(T)$. На рис. 3.29 стационарные состояния показаны точками 1, 2 и 3. Из рисунка видно, что точки 1 и 3 являются устойчивыми, а точка 2 неустойчива.

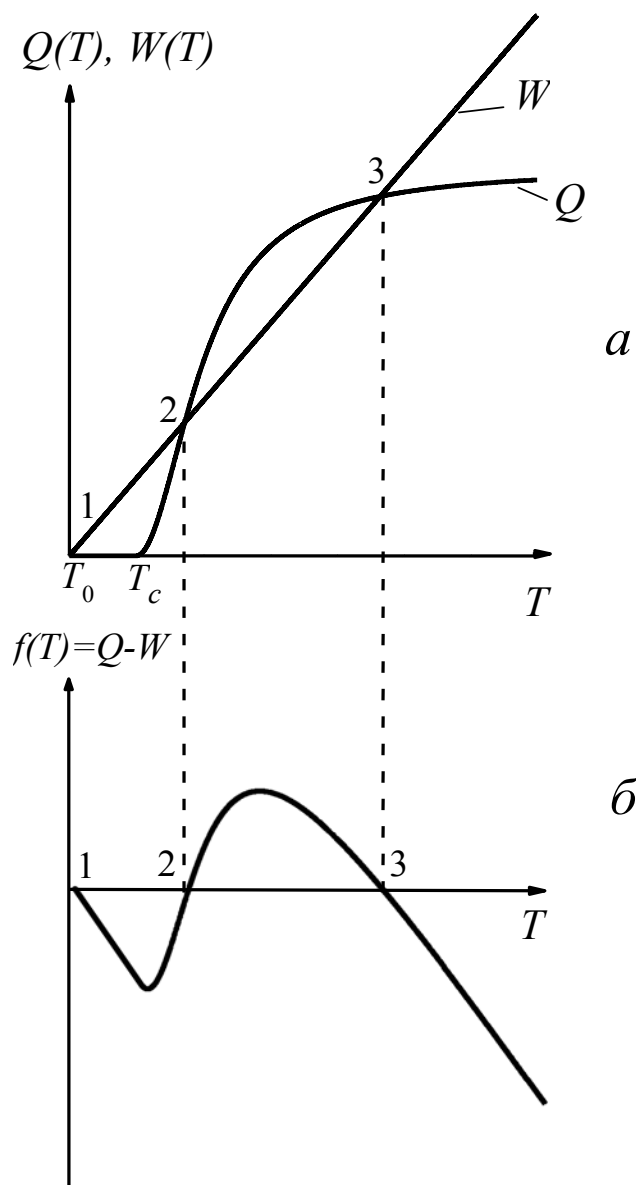


Рис. 3.29. Возникновение бистабильного состояния при тепловом разрушении сверхпроводимости

При малых отклонениях от точек 1 и 3 система стремится вернуться в них и, наоборот, при малом отклонении от точки 2 система стремится перейти в одну из устойчивых точек 1 или 3. Тип стационарной точки определяется соотношением температурных зависимостей тепловыделения и теплоотвода: при $\partial Q/\partial T < \partial W/\partial T$ точка устойчива, при $\partial Q/\partial T > \partial W/\partial T$ точка неустойчива.

Таким образом, при заданном значении транспортного тока (который в данном случае является управляющим параметром) мы имеем два устойчивых состояния – с малым (нулевым) сопротивлением (точка 1 на рис.3.29) и с большим сопротивлением (точка 3 на рис.3.29). Данной ситуации соответствует S-образная вольт-амперная характеристика, похожая на вольт-амперную характеристику, приведенную на рис.1.1.

Сверхпроводник в условиях тепловой неустойчивости является бистабильным элементом. Динамической переменной, которая при одних и тех же управляющих параметрах может принимать различные значения, в данном случае является температура сверхпроводящего элемента. Такая бистабильность носит название тепловой бистабильности.

Динамика элемента при тепловой бистабильности описывается уравнением теплового баланса

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{c_v} f_v(T), \quad (3.151)$$

где c_v – теплоемкость единицы объема сверхпроводника, а функция $f_v(T)$ есть тепловая функция источника, отнесенная к единице объема.

$$f_v(T) = j^2 \rho(T) - \alpha \frac{A}{v} (T - T_0). \quad (3.152)$$

Вышеприведенный анализ демонстрирует работу отдельного бистабильного элемента.

В реальной ситуации в качестве бистабильных элементов можно считать короткие тонкопленочные сверхпроводящие мостики, вдоль которых температура приблизительно однородна.

Если мы имеем протяженный сверхпроводник, то его можно условно разбить на отдельные области, каждая из которых работает как бистабильный элемент. Между элементами происходят перетечки тепла за счет теплопроводности. В этом случае динамика сверхпроводника описывается уравнением теплопроводности с нелинейными источниками тепла:

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial \vec{r}^2} + j^2 \rho(T) - \alpha \frac{A}{v} (T - T_0). \quad (3.153)$$

Уравнение (3.153) допускает решение, при котором движение температурного фронта, связанного с движением межфазной границы сверхпроводник – нормальный проводник, происходит в виде волны переключения.

Горение. Одним из наиболее важных и известных примеров автоволновых процессов являются процессы распространения фронта горения. Под горением понимают быстрые экзотермические процессы с выделением большого количества тепла. Если процесс горения поддерживается накоплением в системе тепла, то говорят о тепловом горении. Если же процесс поддерживается образованием катализирующих продуктов реакции, то имеет место цепное или автокаталитическое горение. Ниже будем рассматривать лишь тепловое горение.

Возьмем некоторую ячейку, внутри которой может протекать процесс горения. Предположим, что в единицу времени в единице объема выделяется количество теплоты $Q(T)$, зависящее от температуры T , при которой происходит горение. Если элемент теплоизолирован от внешней среды, то вся выделяющаяся при горении теплота расходуется на его нагрев. В связи с этим изменение температуры со временем подчиняется уравнению

$$c_v \frac{dT}{dt} = Q(T), \quad (3.154)$$

где c_v – теплоемкость единицы объема. Поскольку функция $Q(T)$ неотрицательна, то в адиабатических условиях, если пренебречь выгоранием топлива, температура будет неограниченно возрастать с течением времени. При наличии теплоотдачи в охладитель уравнение теплового баланса будет иметь вид

$$c_v \frac{dT}{dt} = Q(T) - W(T), \quad (3.155)$$

где $W(T)$ – мощность теплоотвода. Мощность тепловыделения можно записать в виде $Q = wG(T)$, где w – удельная теплота сгорания топлива, $G(T)$ – скорость реакции горения, которая носит термоактивационный характер (закон Аррениуса): $G(T) \sim \exp(-E/RT)$, где E – энергия активации (на один моль), R – универсальная газовая постоянная. Функцию теплоотвода в (3.155) обычно представляют в виде $W = (T - T_0)/Z_T$, где в числителе записана разность температур пламени T и окружающей среды T_0 ; Z_T – тепловое сопротивление, характеризующее интенсивность процесса теплоотвода (величина, обратная коэффициенту теплоотдачи). Стационарные точки определяются решением уравнения теплового баланса

$$we^{-E/RT} = \frac{T - T_0}{Z_T}. \quad (3.156)$$

На рис. 3.30 приведены температурные зависимости мощности тепловыделения при горении $Q(T)$ и мощности теплоотвода в окружающую среду $W(T)$ при трех значениях температуры среды. Этот рисунок носит название диаграммы Семенова. Если линия теплоотвода пересекает линию тепловыделения в двух точках (случай *a* на рис.3.30), то устойчивой стационарной точкой является низкотемпературная точка 1, которая соответствует отсутствию горения (тление), так как при любом спонтанном повышении температуры $T > T_1$ теплоотвод превышает тепловыделение, а при $T < T_1$ выделение тепла больше теплоотдачи, и температура в любом из этих вариантов будет возвращаться к $T = T_1$. Точка 2 является неустойчивой и соответствует зажиганию, так как при температурах $T > T_2$ $Q(T) > W(T)$, т.е. тепловыделение превышает теплоотвод и происходит саморазогрев. Такая ситуация носит название теплового взрыва. При уменьшении теплоотвода (или эквивалентном увеличении мощности тепловыделения, например за счет увеличения теплоты реакции) температур-

ная зависимость мощности теплоотвода касается температурной зависимости мощности тепловыделения, то есть точки 1 и 2 на рис.3.30 сливаются (случай b), и в случае, когда кривая тепловыделения лежит целиком выше кривой теплоотвода (с на рис. 3.30), вне зависимости от начальной температуры образца, происходит его ускоряющийся разогрев.

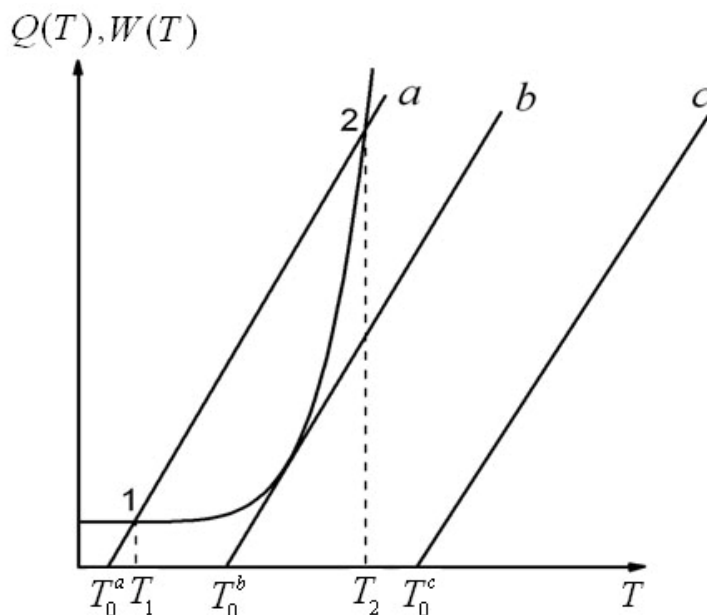


Рис.3.30. Диаграмма Семенова. Температурные зависимости мощности тепловыделения при горении и теплоотвода при трех значениях

температуры окружающей среды $T_0^a < T_0^b < T_0^c$

Неограниченный рост мощности тепловыделения, характерный для теплового взрыва, будет происходить, если в системе имеется избыток горючего или тепловой эффект реакции велик и приводит к значительному разогреву в короткий промежуток времени. Во многих реальных случаях разогрев лимитируется выгоранием горючего. В частности, если мы имеем так называемую проточную систему, когда горючее вещество вносится в зону реакции с постоянной скоростью, функция $Q(T)$ при высоких температурах может выходить на стационарный режим (рис.3.31), определяемый

скоростью подачи горючего. В этом случае ситуация очень похожа на случай теплового разрушения сверхпроводимости. Устойчивыми точками являются точки 1 и 3. Область бистабильности на рис.3.31 заключена между пунктирными линиями, соответствующими вариации коэффициента теплоотдачи. Нижняя пунктирная линия на рис.3.31 (слияние точек 1 и 2) определяет границу самопроизвольного воспламенения при температуре T_1 . При более высоких значениях коэффициента теплоотдачи воспламенение будет происходить только при $T > T_2$. Верхняя пунктирная линия (слияние точек 2 и 3) определяет границу потухания, т.е. при более высоких значениях коэффициента теплоотдачи пламя будет угасать, горение прекращаться.

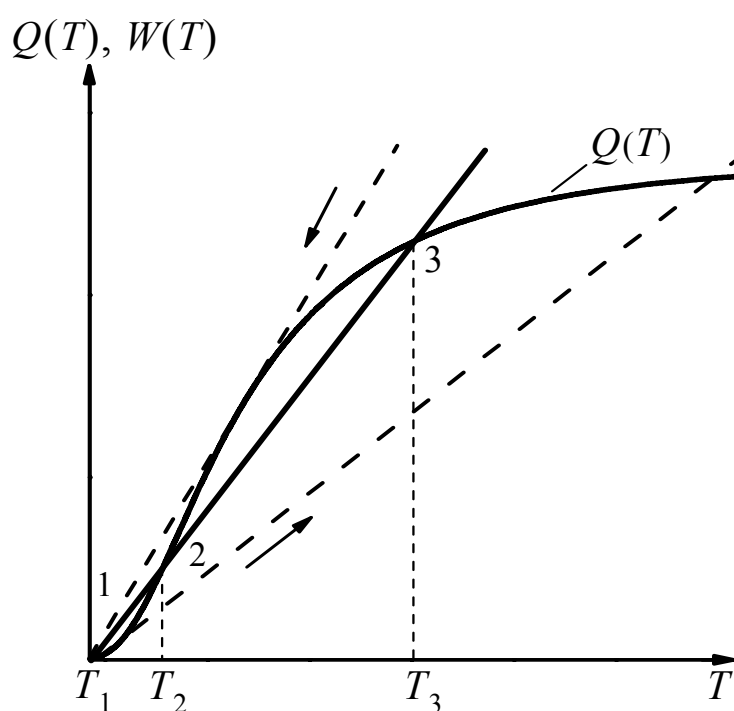


Рис.3.31. Бистабильность режимов горения

Если взять систему из связанных между собой подобных бистабильных ячеек, то в приближении, что теплообмен между ячейками осуществляется

по механизму теплопроводности, система описывается уравнением

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial \vec{r}^2} + Q - W, \quad (3.157)$$

которое представляет собой уравнение теплопроводности с источниками $Q(T)$ и стоками $W(T)$ тепла, приходящимися на единицу объема. Первый член в его правой части описывает распространение тепла от области горения к холодной соседней области за счет теплопроводности.

Строго говоря, для описания процесса горения уравнение теплопроводности (3.157) следует дополнить дифференциальным уравнением, описывающим изменение концентрации горючего вещества в зоне реакции:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial \vec{r}^2} - G(T, n), \quad (3.158)$$

где n – концентрация горючей смеси; D – коэффициент диффузии; G – скорость реакции горения (частота элементарных актов реакции). В уравнении (3.158) предполагается, что подвод горючего в зону реакции осуществляется за счет диффузии. Мощность тепловыделения в уравнении (3.157) также является функцией температуры и глубины превращения: $Q = Q(T, n)$.

Иногда, чтобы учесть выгорание, вводят явную зависимость от времени $Q = Q(T, t)$. Если горючее вещество не подводится в зону реакции, то из-за выгорания топлива будет происходить резкое падение мощности тепловыделения до нуля. В этом случае горение прекратится даже в адиабатическом режиме при теплоизолированных стенках. Однако, если мы имеем цепочку таких элементов, между которыми возможен обмен теплом, то горение может передаваться от одного элемента к другому. Примером такого автоволнового процесса является распространение фронта горения в бикфордовом шнуре, т.е. в цилиндрической оболочке, внутренняя часть которой заполнена порохом. Такой порох находится в устойчивом состоя-

нии, но при его поджигании у одного из концов шнура в нем возникает самораспространяющаяся с постоянной скоростью область горения. Ее возникновение связано с тем, что при горении пороха выделяется тепловая энергия, которая прогревает соседнюю область (следующую порцию пороха), вызывая воспламенение пороха в ней, а затем и в соседних к ней областях. В бикфордовом шнуре энергия запасена в порохе и распространение тепловой волны связано с его выгоранием. Иными словами, бикфордов шнур является одноразовой системой, в то время как рассмотренный выше сверхпроводник легко вернуть в исходное состояние, для чего нужно лишь на некоторое время выключить внешнее напряжение, дать сверхпроводнику остыть, а затем опять включить напряжение. Волна горения в бикфордовом шнуре является волной релаксации. В отличие от волн переключения, которые могут распространяться в обоих направлениях, волны релаксации могут распространяться лишь в одну сторону. Элементы среды находятся в некотором состоянии (часто метастабильном), и внешнее воздействие переводит их в новое состояние, из которого они уже выйти не могут.

Кризис теплоотдачи при кипении. Нелинейной может быть не только функция тепловыделения, но и функция теплоотвода. Эта ситуация имеет место при переходе от пузырькового режима кипения к пленочному (кризис кипения). При кризисе кипения температурная зависимость мощности теплоотдачи при некотором значении температуры теплоотдающей стенки резко уменьшается. Это вызвано тем, что образуются осушенные области и коэффициент теплоотдачи от греющей поверхности в пар значительно меньше коэффициента теплоотдачи в жидкость. Зависимость температурной зависимости мощности теплоотдачи при кризисе кипения имеет вид, схематично показанный на рис. 3.32. Для простоты такую зависимость можно считать линейной.

Из рис. 3.32 видно, что устойчивым состояниям соответствуют режимы пузырькового (точка 1) и пленочного (точка 3) кипения. На протяженном нагревателе пространственно-временное распределение температуры описывается нелинейным уравнением теплопроводности (3.157). Только в данном случае нелинейной является не функция тепловыделения $Q(T)$, а функция теплоотвода $W(T)$. При теоретическом описании динамики температурного поля при кризисе кипения, как правило, вводят нелинейную аппроксимацию коэффициента теплоотдачи α .

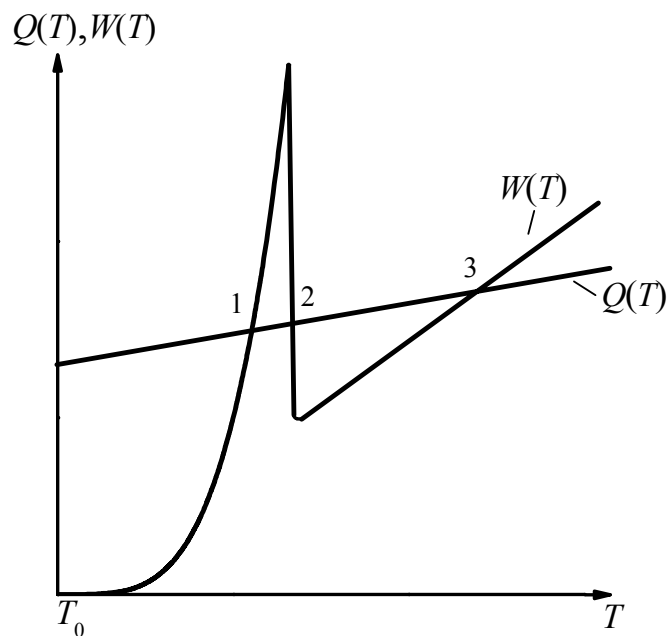


Рис. 3.32. Схематичное изображение мощностей тепловыделения $Q(T)$ и теплоотдачи $W(T)$ при кризисе кипения

Экологическая модель. Рассмотрим теперь экологическую модель. Пусть в среде происходит размножение некоторых животных, численность которых в расчете на единицу объема обозначим через n . Разобьем среду на отдельные элементы с однородным распределением особей. Предполагается, что вероятность рождения пропорциональна вероятности встречи мужской и женской особей, т.е. величине n^2 . Смертность животных про-

порциональна их численности. Динамика такой системы описывается уравнением

$$\frac{dn}{dt} = -\gamma n + \alpha m(n)n^2. \quad (3.159)$$

Скорость размножения пропорциональна массе пищи m , которая зависит от числа поедающих ее животных. Изменение m со временем должно описываться отдельным дифференциальным уравнением, содержащим n .

Рассмотрим ситуацию, когда масса пищи быстро подстраивается к мгновенной численности животных, так что m представляет собой убывающую функцию от численности животных n . Для того чтобы был невозможен неограниченный рост численности животных в популяции, убывание m должно быть достаточно быстрым, например экспоненциальным: $m = m_0 \exp(-n/n_0)$, где m_0 и n_0 – некоторые постоянные коэффициенты. При таких условиях рассматриваемая экологическая система также представляет собой бистабильную среду, аналогичную рассмотренным выше. Она описывается уравнением

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \alpha m_0 n^2 e^{-n/n_0} - \gamma n. \quad (3.160)$$

Эта среда обладает двумя устойчивыми однородными состояниями. В первом из них $n \equiv 0$, что соответствует отсутствию особей. Во втором устойчивом стационарном состоянии ограничение роста достигается благодаря обеднению пищевых ресурсов.

При переходе к пространственно-распределенной системе с учетом диффузионного блуждания животных по среде можно записать уравнение

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial \vec{r}^2} + \alpha m_0 n^2 e^{-n/n_0} - \gamma n. \quad (3.161)$$

3.4.4. Задача о распространении волн переключения

Приведенные выше примеры показывают, что бистабильные активные среды, имеющие самую различную природу, описываются уравнением одного и того же вида, а именно

$$\frac{\partial x}{\partial t} = D \frac{\partial^2 x}{\partial \vec{r}^2} + f(x). \quad (3.162)$$

Уравнение (3.162) есть нелинейное уравнение параболического типа. Для того чтобы уравнение (3.162) допускало решение в виде волны переключения, необходимо, чтобы в некотором диапазоне параметров алгебраическое уравнение $f(x) = 0$ имело три решения, два из которых (x_1 и x_3) соответствуют устойчивым состояниям системы, а одно (x_2) – неустойчивому состоянию (рис.3.28).

Обозначим скорость фронта переключения из одного состояния x_1 в другое x_3 через V . Задача состоит в нахождении постоянной скорости V . Такая задача применительно к уравнению типа (3.162) рассматривалась впервые А.Н. Колмогоровым, И.Г. Петровским, Н.С. Пискуновым и независимо Р. Фишером применительно к биологической проблеме распространения вида.

Будем для простоты рассматривать одномерный случай. Для описания волны перейдем в систему координат, движущуюся вместе с волной со скоростью V вдоль оси r . Для этого введем новую координату:

$$\xi = r - Vt. \quad (3.163)$$

Новая переменная ξ связана с движущимся фронтом. Тогда исходное уравнение (3.162) сводится к виду

$$D \frac{d^2 x}{d\xi^2} + V \frac{dx}{d\xi} + f(x) = 0 \quad (3.164)$$

с граничными условиями: $x \rightarrow x_1$ при $\xi \rightarrow +\infty$ и $x \rightarrow x_3$ при $\xi \rightarrow -\infty$.

Решение данного уравнения существует не при всех значениях V . Нахождение соответствующего распределения $x(\xi)$ и соответствующих значений скорости V неоднократно рассматривалось в литературе и имеет отношение к различным физическим явлениям, например к волнам горения, волнам переключения в газовой или полупроводниковой плазме, оптическому или газовому разряду, тепловому разрушению сверхпроводимости в присутствии транспортного тока и т. д.

Умножим уравнение (3.164) на $dx/d\xi$ и проинтегрируем его по ξ от $-\infty$ до $+\infty$. Учтем, что при $\xi \rightarrow -\infty$ величина $x = x_3$ и $dx/d\xi = 0$ (стационарное состояние), а при $\xi \rightarrow +\infty$ величина $x = x_1$ и $dx/d\xi = 0$. Первое слагаемое в уравнении обратится в ноль, так как

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{dx}{d\xi} \right) \frac{dx}{d\xi} d\xi = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{dx}{d\xi} \right)^2 d\xi = \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\xi} \right)^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad (3.165)$$

В результате получим

$$V \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{dx}{d\xi} \right)^2 d\xi = - \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{dx}{d\xi} d\xi = - \int_{x_3}^{x_1} f(x) dx. \quad (3.166)$$

Введем формально некоторый потенциал

$$U(x) = - \int_0^x f(x) dx. \quad (3.167)$$

Тогда (3.166) можно записать в виде

$$V = [U(x_1) - U(x_3)] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{dx}{d\xi} \right)^2 d\xi \right]^{-1}. \quad (3.168)$$

Вид функции $U(x)$ показан на рис. 3.33. Функция $U(x)$ имеет два минимума в точках x_1 и x_3 . В промежуточной точке x_2 имеется локальный

максимум. Скорость V убывает с уменьшением разности $\Delta U = U(x_1) - U(x_3)$. Если $U(x_1) < U(x_3)$, волна движется в обратном направлении. При $U(x_1) = U(x_3)$, который для обычных фазовых переходов соответствует бинодали или линии равновесия, скорость волны переключения равна нулю. В этом случае говорят, что мы имеем стоячую волну переключения.

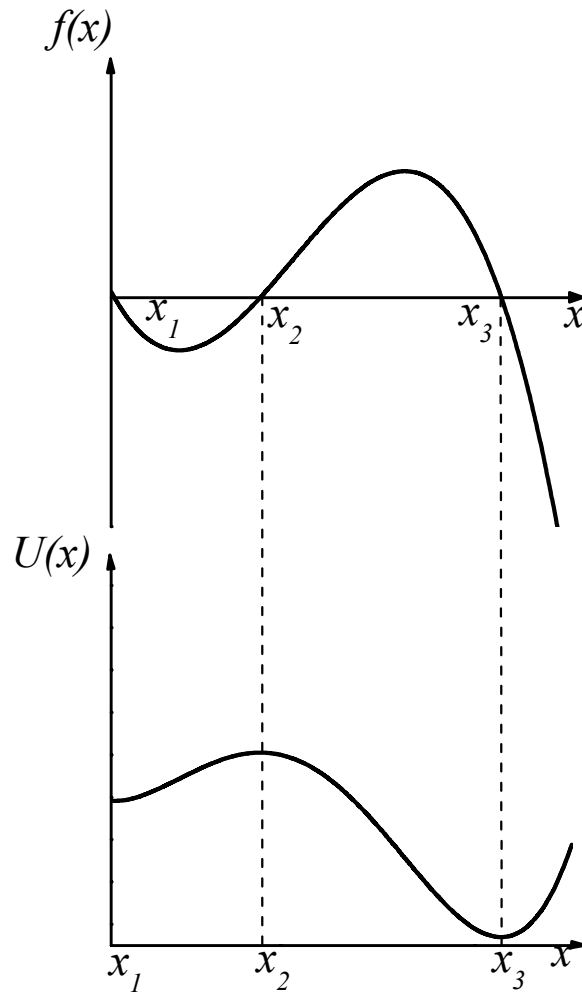


Рис. 3.33. Зависимость $f(x)$ и соответствующая ей зависимость $U(x)$

Для того чтобы определить скорость волны переключения по формуле (3.168), необходимо знать профиль волны $dx/d\xi$. Общих аналитических методов, позволяющих рассчитывать скорость волны переключения при произвольной функции $f(x)$, не существует.

Однако существуют математические методы расчета скорости волн переключения в различных предельных случаях.

В частности, если скорость волны мала, то ее профиль можно считать мало отличающимся от профиля стоячей волны.

Профиль стоячей волны $dx^{(0)}/d\xi$ дается решением уравнения (3.164) при $V = 0$:

$$D \frac{d^2 x}{d\xi^2} + f(x) = 0. \quad (3.169)$$

Для интегрирования уравнения (3.164) введем новую переменную $z \equiv dx/d\xi$. Тогда (3.164) перепишется в виде

$$D z \frac{dz}{dx} + f(x) = 0, \quad (3.170)$$

или

$$\frac{d(z^2)}{dx} = -\frac{2}{D} f(x). \quad (3.171)$$

Интегрируя уравнение (3.171) от x_3 до текущего значения x , учитывая выражение (3.167) и определение z , а также граничные условия $dx/d\xi = 0$ при $x = x_3$, получим

$$\frac{dx}{d\xi} = z = \left\{ -\frac{2}{D} \int_{x_3}^x f(x) dx \right\}^{1/2} = \left\{ \frac{2}{D} [U(x) - U(x_3)] \right\}^{1/2}. \quad (3.172)$$

При заданной функции $f(x)$ дифференциальное уравнение можно решить. Типичное решение приведено на рис.3.34.

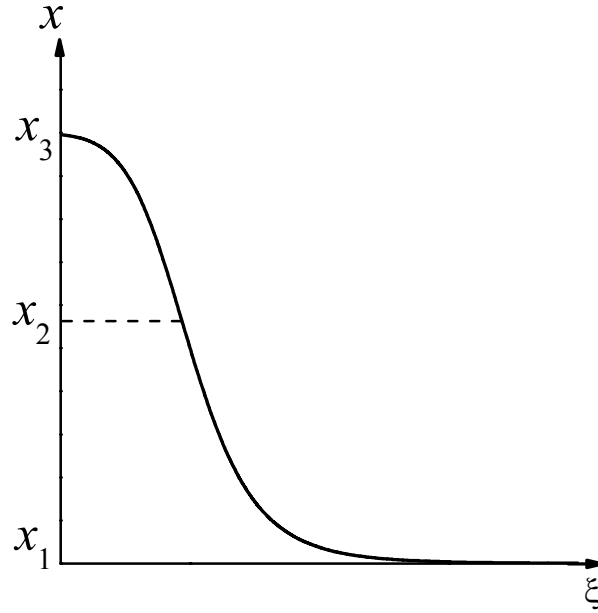


Рис.3.34. Профиль стоячей волны

Из выражения (3.172) следует, что профиль имеет максимум при значении $x = x_3$, а максимальное значение $dx/d\xi$ в соответствии с выражением (3.172) и рис. 3.33 достигается при значении $x = x_2$.

Подставляя вместо профиля стоячей волны выражение $dx/d\xi$ из (3.172) в уравнение (3.168), получим выражение для скорости медленных волн переключения:

$$\begin{aligned}
 V &= [U(x_1) - U(x_3)] \frac{D}{2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} [U(x) - U(x_3)] d\xi \right\}^{-1} = \\
 &= \sqrt{\frac{D}{2}} [U(x_1) - U(x_3)] \left[\int_{x_3}^{x_1} \frac{dx}{\sqrt{U(x) - U(x_3)}} \right]^{-1}.
 \end{aligned} \tag{3.173}$$

Другой приближенный способ расчета был предложен Я.Б. Зельдовичем и Д.А. Франк-Каменецким в теории теплового распространения пламени.

Предположим, что функция $f(x)$ имеет вид, как показано на рис. 3.35.

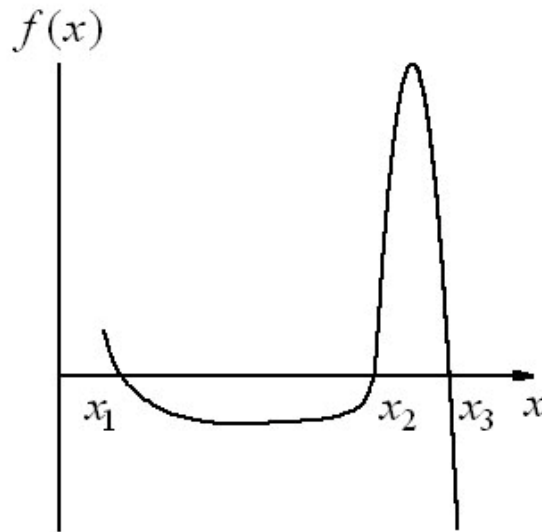


Рис.3.35. Нелинейная функция $f(x)$

Эта функция достигает больших положительных значений в узком интервале от x_2 до x_3 и является отрицательной, но малой по модулю в интервале от x_1 до x_2 . В этом случае величины $U(x_1)$ и $U(x_3)$, определяемые по (3.167), будут сильно отличаться друг от друга и, следовательно, согласно (3.168) это будет соответствовать большим скоростям.

Поведение волны в этом случае делится на две качественно различные стадии. В интервале от x_2 до x_3 слагаемое $f(x)$ в уравнении (3.164) велико и членом, содержащим скорость, можно пренебречь.

В этом случае уравнение (3.164) принимает вид (3.169). При $x = x_2$ из (3.172) имеем

$$\left. \frac{dx}{d\xi} \right|_{x=x_2} = \left\{ \frac{2}{D} [U(x_2) - U(x_3)] \right\}^{1/2}. \quad (3.174)$$

Рассмотрим теперь поведение волны в интервале (x_1, x_2) .

Поскольку значение $f(x)$ мало (по сравнению с участком (x_2, x_3)), то в уравнении (3.164) пренебрежем последним слагаемым. В этом случае уравнение (3.164) примет вид

$$D \frac{d^2 x}{d\xi^2} = -V \frac{dx}{d\xi}. \quad (3.175)$$

Проинтегрируем уравнение (3.175) на участке от x_2 до x_1 и учтем, что $\xi \rightarrow \infty$ и $dx/d\xi = 0$ при $x = x_1$. В результате имеем

$$x_2 - x_1 = \frac{D}{V} \frac{dx}{d\xi} \Big|_{x_2}. \quad (3.176)$$

Сравнивая (3.176) и (3.174) и приняв, что x_2 мало отличается от x_3 ($x_2 \approx x_3$),

получим следующее выражение для скорости:

$$V = \frac{\{2D[U(x_3) - U(x_2)]\}^{1/2}}{x_3 - x_1}. \quad (3.177)$$

Выражение (3.177) определяет скорость распространения быстрых волн переключения.

В важном случае, когда функция $f(x)$ задается полиномом третьего порядка: $F(x) = -\alpha(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$, скорость волны переключения можно получить аналитически. В этом случае скорость равна

$$V = \frac{1}{2}(\alpha D)^{1/2}(x_1 + x_3 - 2x_2). \quad (3.178)$$

3.4.5. Тепловое распространение пламени

В реальных случаях для оценки скорости волн не всегда прибегают к решению дифференциальных уравнений общего вида, а используют приближенные методы. В качестве примера приведем оценку скорости медленной волны переключения для случая теплового распространения пламени. Роль динамической переменной в этом случае играет температура, переменная z определяет температурный профиль волны, функция $f(T)$ определяется разностью удельных мощностей тепловыделения и теплоотвода. Уравнение (3.170) в этом случае будет иметь вид

$$\lambda z \frac{dz}{dT} + Q(T) - W(T) = 0. \quad (3.179)$$

Здесь $\lambda = \kappa c_v$ – коэффициент теплопроводности (κ – температуропроводность); c_v – удельная изохорная теплоемкость); $Q(T)$ и $W(T)$ – соответственно удельные (в единице объема) мощности тепловыделения и теплоотвода.

Обозначим через T_b температуру фронта реакции горения ($T_b = T_3$) Тепловой поток, идущий из зоны реакции горения в зону подогрева можно оценить как $q = \lambda dT/d\xi$ при $T = T_2$ (см. рис. 3.33 и 3.34). Температурный профиль стоячей волны определяется выражением (3.172). В этом случае тепловой поток равен

$$q = \lambda \left. \frac{dT}{d\xi} \right|_{T=T_2} = \sqrt{2\lambda \int_{T_2}^{T_b} (Q - W) dT}. \quad (3.180)$$

Здесь учитывали, что для тепловой задачи роль коэффициента диффузии играет температуропроводность, т.е. $D = \kappa = \lambda/c_v$. В системе координат, движущейся со скоростью фронта превращения V , пламя покоится, а горючая смесь движется со скоростью, равной скорости распространения пламени. Количество тепла, выделяемое в химической реакции в единицу времени и отводящееся теплопроводностью, равно тому запасу химиче-

ской энергии, который несет в себе поток горючей смеси, поэтому можно написать:

$$q = \rho n V w, \quad (3.181)$$

где ρ, n – соответственно плотность и концентрация горючей смеси; w – теплота реакции. Приравнявая правые части (3.180) и (3.181), получим

$$\sqrt{2\lambda \int_{T_2}^{T_b} (Q - W) dT} = \rho n V w. \quad (3.182)$$

Отсюда

$$V = \frac{1}{\rho n w} \sqrt{2\lambda \int_{T_2}^{T_b} (Q - W) dT}. \quad (3.183)$$

Формула (3.183) получена при использовании предположения о малости скорости распространения пламени. В частном случае, когда вкладом $W(T)$ в интеграл, входящий в выражения (3.182), (3.183), можно пренебречь, все выделяющееся тепло будет отводиться за счет теплопроводности. Если мощность тепловыделения записать в виде $Q = wG(T)$, где $G(T)$ – скорость реакции горения (частота элементарных актов реакции в единице объема), то формула (3.183) примет вид

$$V = \frac{1}{\rho n} \sqrt{\frac{2\lambda}{w} \int_{T_2}^{T_b} G(T) dT}. \quad (3.184)$$

Формулу (3.184) иногда преобразуют к другому виду. Если вся теплота, выделившаяся при сгорании топлива, идет на нагрев от начальной температуры T_0 до температуры горения T_b , то условие теплового баланса можно записать как $\rho n w = c_v(T_b - T_0)$. Выразив отсюда n и подставив в выражение (3.184), получим

$$V = \frac{1}{c_v(T_b - T_0)} \sqrt{2\lambda w \int_{T_0}^{T_b} G(T) dT}. \quad (3.185)$$

Температурная зависимость скорости реакции имеет, как правило, аррениусовский вид: $G(T) \approx \exp(-E/RT)$. Для количественного описания явления горения Д.А. Франк-Каменецким был предложен метод разложения экспоненты, в котором разложение в ряд производится в показателе формулы Аррениуса при сохранении ее экспоненциального характера. Для этого величина, стоящая в показателе формулы Аррениуса, представляется в виде

$$\frac{E}{RT} = \frac{E}{R(T_b + \Delta T)} = \frac{E}{RT_b} \cdot \frac{1}{(1 + \Delta T/T_b)} \approx \frac{E}{RT_b} - \frac{E}{RT_b^2} \Delta T, \quad (3.186)$$

где T_b – температура стационарного горения; $\Delta T = (T - T_b)$ – отклонение температуры вблизи фронта горения; E – энергия активации химической реакции горения. После этого зависимость скорости реакции от температуры принимает приближенный вид

$$G(T) \approx e^{-\frac{E}{RT}} \approx e^{-\frac{E}{RT_b}} \cdot e^{\beta}, \quad (3.187)$$

где $\beta = E \Delta T / RT_b^2 = E(T - T_b) / RT_b^2$ – безразмерная разность температур.

Определим температурный интервал горения как такой интервал, на котором скорость реакции изменяется в e раз. Это соответствует параметру $\beta = 1$. Отсюда температурный интервал горения $\Delta T = RT_b^2 / E$.

Вернемся к обсуждению формулы для скорости пламени (3.184). Поскольку функция $G(T)$ резко зависит от температуры, как правило, по закону Аррениуса, величину интеграла в (3.184) можно по порядку величины оценить как произведение максимального значения скорости реакции $G_{\max}$ на эффективную ширину температурного интервала ΔT . Таким образом, получим

$$V \approx \frac{T_b}{c_v(T_b - T_0)} \sqrt{\frac{2R\lambda w G_{\max}}{E}}. \quad (3.188)$$

Определим среднее время реакции τ_r как время, за которое при максимальной скорости тепловыделения выделится все тепло, содержащееся в исходной смеси, — тепло реакции идет на нагрев горючей смеси от T_0 до T_b . Условие теплового баланса в этом случае можно записать в виде: $\tau_r Q = w G_{\max} \tau_r = c_v (T_b - T_0)$. Выражая отсюда $G_{\max}$ и подставляя его в выражение (3.188), получим

$$V \approx T_b \sqrt{\frac{2R\lambda}{c_v E (T_b - T_0) \tau_r}} = B \sqrt{\frac{\kappa}{\tau_r}}, \quad (3.189)$$

где $\kappa = \lambda / c_v$ — температуропроводность; безразмерный постоянный коэффициент $B = T_b \sqrt{2R / E (T_b - T_0)}$.

Приближенные формулы для оценки скорости распространения пламени получены Я.Б. Зельдовичем и Д.А. Франк-Каменецким. Несмотря на сделанные допущения, формулы неплохо описывают экспериментальные данные по скоростям распространения пламени. Проведем оценку скорости распространения пламени вдоль спички. Вначале несколько преобразуем формулу (3.189). Ширина пламени d связана с тем, что после возгорания заданного элемента длины спички необходимо некоторое время τ_r для выгорания горючего материала этого элемента, поэтому скорость распространения пламени $V = d / \tau_r$. Подставляя отсюда выражение для τ_r в (3.188) и выражая скорость, получим:

$$V \approx B^2 \frac{\kappa}{d}. \quad (3.190)$$

Примем значение температуры горения $T_b \approx 1500$ К, начальной температуры $T_0 \approx 300$ К, энергия активации горения (окисления) углерода составляет $E \approx 10^5$ Дж/моль. В этом случае коэффициент $B \approx 0,6$. Коэффициент температуропроводности древесины примем равным $\kappa \approx 10^{-5}$ м²/с. Оценка

скорости распространения пламени по (3.189) дает значение $V \approx 0,4 \cdot 10^{-3}$ м.

3.4.6. Примеры базовых моделей автоволн в “многокомпонентных” возбудимых средах

Выше были рассмотрены простые автоволны в бистабильных средах. Данные автоволны могут быть описаны одномерными уравнениями. Распространение волн переключения в двумерном и трехмерном случаях имеют, конечно, свои особенности, связанные, прежде всего, с устойчивостью фронта фазового превращения, но в принципиальном плане не вносят ничего нового в скорость распространения по сравнению с одномерным случаем. Существует, однако, множество нелинейных многокомпонентных систем (под многокомпонентностью в данном случае понимается не множество химических компонент в системе, а многокомпонентность параметра порядка), когда размерность пространства (количество уравнений) вносит качественно новое поведение. В п.3.6.1. были перечислены возможные типы автоволн в активных средах. Рассмотрим кратко некоторые примеры таких автоволн, приводящих к формированию пространственно-временных структур.

Бегущий импульс. Базовой математической моделью бегущего импульса вдоль оси r является система уравнений:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{dx}{dt} &= P(x, y) + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= Q(x, y) + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial r^2}, \end{aligned} \tag{3.191}$$

где кривая $P(x, y) = 0$ (нуль-изоклина) на фазовой плоскости (x, y) является N -образной кривой, а ε – малым параметром. Видно, что модель бегущего фронта является частным случаем бегущего импульса при $y \equiv 0$.

Бегущий импульс описывает распространение возмущений в так называемых возбудимых средах. Переменная x играет роль быстрой переменной. Переменная y – медленная переменная. После прохождения волны переключения среда восстанавливается к исходному состоянию. На фронте и спаде бегущего импульса, где происходит резкое изменение x , переменную y можно считать постоянной. Это означает, что поведение x на фронте и спаде импульса описывается первым из уравнений (3.191), т.е. фронт импульса есть волна переключения. Спад импульса представляет собой обратную волну переключения, которая должна бежать за фронтом с той же скоростью. Уравнения (3.191) допускают как уединенные, так и периодические решения.

Простым и наглядным примером бегущего импульса является горение сухой травы в степи. При каждом прохождении волны пламени трава сгорает, но затем она, хотя очень медленно отрастает вновь, так, что степь можно поджечь еще раз.

Примерами бегущего импульса являются процессы возбуждения в биологических мембранных системах (нервных волокнах, мышцах, миокарде).

При усложнении связи между динамическими переменными и увеличении их числа возможно появление более сложных автоволновых структур. Мы не будем рассматривать сложные автоволны в пространственно распределенных системах, состоящих из возбудимых и автоколебательных элементов, такие как автономные источники волн, различного типа спиральные волны и т.д. Остановимся кратко лишь на стационарных пространственно неоднородных состояниях, так называемых диссипативных структурах.

Диссипативные структуры. Понятие диссипативных структур было введено в середине шестидесятых годов XX века И. Пригожиным.

Простейшие модели диссипативных структур описываются двумя динамическими переменными x и y , зависящими от времени и одной пространственной координаты:

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial t} &= P(x, y) + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= Q(x, y) + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial r^2}.\end{aligned}\tag{3.192}$$

Образование диссипативных структур возможно при следующих условиях:

1. Одна из переменных, например x , является автокаталитической, другая (y) – демпфирующей. Это означает, что в системе, линеаризованной вблизи стационарного состояния $\bar{x}$ и $\bar{y}$, такого, что

$$\begin{aligned}P(\bar{x}, \bar{y}) &= 0, \\ Q(\bar{x}, \bar{y}) &= 0,\end{aligned}\tag{3.193}$$

выполняется условие

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{\bar{x}, \bar{y}} &> 0, \\ \left. \frac{\partial Q}{\partial y} \right|_{\bar{x}, \bar{y}} &< 0.\end{aligned}\tag{3.194}$$

Производные $\left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_{\bar{x}, \bar{y}}$ и $\left. \frac{\partial Q}{\partial x} \right|_{\bar{x}, \bar{y}}$ также должны иметь разные знаки. Такие

условия выполняются лишь в термодинамически неравновесных открытых системах и по терминологии Пригожина относятся к нелинейной термодинамике.

2. Коэффициент диффузии автокатализатора должен быть меньше коэффициента диффузии демпфера:

$$D_x < D_y. \quad (3.195)$$

При выполнении данных условий однородное стационарное состояние с $x = \bar{x}$ и $y = \bar{y}$ может стать неустойчивым по отношению к гармоническим возмущениям с длиной волны, соизмеримой с размерами системы. Значения параметров системы (3.192), при которых она теряет устойчивость (декремент затухания возмущений обращается в ноль), называют бифуркационными, а саму бифуркацию – бифуркацией Тьюринга. Система отбирает от внешних возмущений ограниченное число гармонических мод, которые могут нарастать. Их нарастание стабилизируется нелинейными членами функций $P(x, y)$ и $Q(x, y)$. При значениях параметров, близких к бифуркационным, образуется плавная гармоническая диссипативная структура. Вдали от точки бифуркации возникают контрастные диссипативные структуры, которые состоят из узких участков резкого изменения автокаталитической переменной x , чередующихся с широкими участками плавного изменения переменных.

Как было показано Й. Курамото и Т. Цузуки в 1975г., все типичные системы, описываемые системой (3.192), в окрестности точки бифуркации описываются уравнением, имеющим вид

$$\frac{\partial W}{\partial t} = W + (1 + ic_1) \frac{\partial^2 W}{\partial r^2} - (1 + c_2) |W|^2 W, \quad (3.196)$$

где $W = x(r, t) + iy(r, t)$ - комплексная функция, вещественная и мнимая части которой определяют поведение переменных x и y вблизи точки бифуркации. Уравнение (3.196) является обобщенным уравнением Гинзбурга–Ландау для комплексного параметра порядка W .

В качестве примера стационарной диссипативной структуры приведем модельную систему, предложенную для описания класса химических реакций и получившую название брюсселятор:

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial t} &= A - (B+1)x + x^2y + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= Bx - x^2y + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial r^2}.\end{aligned}\tag{3.197}$$

На рис. 3.36 приведены результаты численного интегрирования системы (3.197) при параметрах: $A = 2$; $B = 4,6$; $D_x = 0,0016$; $D_y = 0,008$.

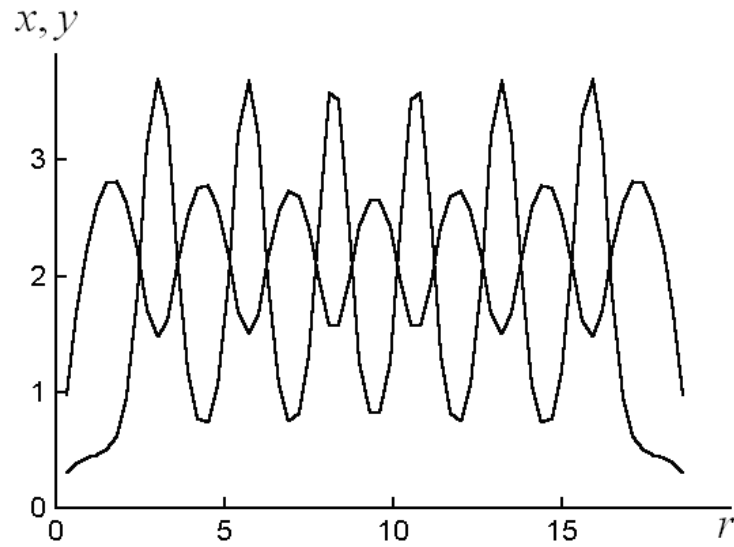


Рис. 3.36. Стационарные диссипативные структуры в модели брюсселятор

Контрольные вопросы

1. В чем смысл понятия параметра порядка в теории фазовых переходов?
2. Приведите примеры параметров порядка при различных фазовых переходах.
3. В чем суть феноменологической теории фазовых переходов Ландау?
4. Как релаксирует параметр порядка в докритической, критической и закритической областях?
5. Как учитывается пространственная распределенность системы в теории фазовых переходов Ландау?
6. В чем смысл гипотезы масштабной инвариантности в теории фазовых переходов?
7. Перечислите основные критические показатели при фазовых переходах II рода.
8. В чем заключаются особенности неравновесных фазовых переходов?
9. Приведите примеры параметров порядка для неравновесных фазовых переходов.
10. Что такое мягкое и жесткое возбуждение колебаний?
11. Что такое консервативные и диссипативные динамические системы? Приведите примеры таких систем.
12. Что называют аттрактором и какие бывают типы аттракторов?
13. Приведите пример предельного цикла.
14. Что означает термин "странный аттрактор"?
15. В чем заключаются основные предположения вывода системы уравнений Лоренца?
16. Назовите основные свойства системы уравнений Лоренца.
17. Что такое динамический хаос? Каковы причины его возникновения?
18. Каковы критерии динамического хаоса?
19. Что такое автокорреляционная функция?

20. Что называют спектром мощности случайного процесса?
21. Что такое энтропия Колмогорова–Синяя и показатели Ляпунова?
22. Может ли возникнуть динамический хаос в двумерной системе?
23. Что такое фрактальная структура и как определяется фрактальная размерность?
24. Приведите примеры модельных фракталов и природных объектов с фрактальными свойствами.
25. В чем заключается суть методики определения фрактальной размерности по опытным данным?
26. Что такое “точечные отображения”?
27. Каковы основные свойства логистического отображения?
28. Что такое автоволны и какие бывают типы автоволн?
29. Приведите примеры автоволн.
30. Сформулируйте задачу о распространении волн переключения в бистабильных средах.
31. Оцените скорость распространения пламени по “бензиновой дорожке”.

4. СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ

В предыдущих главах мы рассматривали феноменологическую теорию неравновесных процессов, которая описывает эволюцию динамических переменных без явного учета флуктуаций в системе. Исследование странных аттракторов показывает, что развитие некоторых макроскопических процессов во времени обладает высокой чувствительностью к изменению начальных условий и управляющих параметров. Очевидно, что в таких случаях даже малые изменения этих величин могут привести к существенным изменениям фазовых траекторий. В таких ситуациях может оказаться, что фазовые траектории развития макроскопического процесса будут определяться характером флуктуаций динамических параметров и для предсказания поведения макросистем необходимо учитывать флуктуации в явной форме и решать так называемые стохастические уравнения движения.

Впервые стохастические уравнения движения были предложены для описания закономерностей хаотического блуждания броуновских частиц, поэтому удобно излагать теорию стохастических уравнений именно на этом примере. Следует отметить, что интерес к флуктуациям, возникший при создании основ статистической физики, начиная с работ Максвелла – Больцмана – Гиббса, не угасает по настоящее время. Теория стохастических (случайных) процессов занимает одно из ведущих мест в теоретической физике. Прежде всего, это обусловлено универсальностью концепции стохастичности, использование которой связано с тем, что поведение как систем с большим числом степеней свободы, подчиняющихся уравнениям движения Ньютона, так и систем с малым числом гидродинамических степеней свободы зачастую не может быть представлено однозначно детерминированным образом из-за неустойчивости таких движений. В частности, во второй половине XX века выяснено, что необратимость поведения

макроскопических систем с большим числом степеней свободы может быть обусловлена динамическим хаосом. Это означает, что точные уравнения движения исходных степеней свободы носят совершенно детерминированный характер, однако в силу неустойчивости движения, любые сколь угодно малые возмущения фазовых траекторий в пространстве координат и импульсов отдельных частиц приводят к тому, что при обращении времени мы никогда не попадем в исходную точку фазового пространства. Этот факт означает, что стохастическое описание и переход к усредненным величинам есть не просто сокращенное описание, но является отражением глубинной природы процессов, происходящих в реальных системах.

При построении теории статистических систем основная идея состоит в переходе от точного уравнения механического движения многих частиц к приближенным стохастическим уравнениям, которые описывают поведение динамических переменных, усредненных по конечному объему фазового пространства (гидродинамических степеней свободы).

4.1. Стохастические уравнения движения

4.1.1. Броуновское движение. Уравнение Ланжевена

Открытое в 1827 г. Р. Броуном быстрое, не прекращающееся ни на миг, сильно нерегулярное движение небольшой частицы, находящейся во взвешенном состоянии в жидкости, получившее название броуновского движения, сыграло заметную роль в теории случайных явлений как в физике, так и в математике. Вследствие теплового движения молекул окружающей жидкости броуновская частица претерпевает за короткий временной интервал огромное число соударений — порядка 10^{21} в секунду. Так как частица гораздо тяжелее молекул жидкости, действие каждого соуда-

рения в отдельности пренебрежимо мало. Однако, поскольку число непрерывно происходящих соударений велико, возникает наблюдаемое в микроскоп эффективное движение. Важно подчеркнуть также, что каждое соударение происходит независимо от остальных.

Рассмотрим простейший случай движения маленькой частицы массы m в жидкой среде. Пусть $r(t)$ - координата частицы. На броуновскую частицу действуют, во-первых, силы со стороны окружающей ее среды и, во-вторых, на нее могут действовать внешние силы F , например сила тяжести. Предполагая, что сила трения, действующая на частицу, пропорциональна скорости (в соответствии с формулой Стокса), т.е. $F_{mp} = -\gamma \frac{dr}{dt}$, где γ – коэффициент трения, можно записать уравнение движения броуновской частицы

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -\gamma \frac{dr}{dt} + F. \quad (4.1)$$

Во многих задачах инерциальное слагаемое $m d^2 r / dt^2$ много меньше диссипативного $\gamma dr / dt$, описывающего затухание. В этом случае уравнение движения броуновской частицы сводится к следующему виду:

$$\gamma \frac{dr}{dt} = F. \quad (4.2)$$

Для того, чтобы учесть случайный характер действия на частицу со стороны молекул, П. Ланжевен в уравнение движения ввел дополнительную случайную силу $\xi'(t)$, которая характеризует суммарное случайное воздействие на частицу со стороны молекул жидкости:

$$\gamma \frac{dr}{dt} = F + \xi'(t). \quad (4.3)$$

Согласно Ланжевену случайная функция $\xi'(t)$ имеет нормальное (гауссовское) распределение с нулевым средним, а автокорреляционная функция от $\xi'(t)$ является δ - функцией:

$$\begin{aligned}
P(\xi') &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \sigma} e^{-\frac{\xi'^2}{2\sigma^2}}, \\
\langle \xi' \rangle &= 0, \\
\langle \xi'(t) \cdot \xi'(t + \tau) \rangle &= \sigma^2 \delta(t - \tau),
\end{aligned} \tag{4.4}$$

где $P(\xi')$ – плотность вероятности распределения переменной $\xi'(t)$; δ – дельта функция Дирака; угловые скобки означают усреднение по времени. Третье равенство в (4.4) означает то, что молекулы, сталкивающиеся с броуновской частицей и вызывающие флуктуирующую силу, ведут себя независимо друг от друга, исключая случай, когда они действуют одновременно. Наличие дельта-функции физически означает, что мы имеем конечные корреляции флуктуирующей силы, сосредоточенной на временном интервале, много меньшим характерного времени торможения частицы вязким трением m/γ .

Случайные процессы $\xi'(t)$, обладающие свойством (4.4), носят название гауссовских δ -коррелированных процессов. Согласно теореме Винера – Хинчина спектр мощности случайного процесса есть Фурье-образ автокорреляционной функции:

$$\langle S(\omega) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma^2 \delta(t - \tau) e^{-i\omega t} dt = \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}} = \text{const}, \tag{4.5}$$

то есть спектр мощности $\xi'(t)$ не зависит от частоты. Это свойство легло в основу названия *белый шум*, закрепившегося за случайными процессами такого типа: в их спектре энергия равномерно распределена по всем частотам, как в спектре белого света. Белый шум – процесс чрезвычайно нерегулярный. Он непрестанно совершает самые непредсказуемые скачки, его траектории нигде не дифференцируемы. Белый шум является математической абстракцией, существуют различные способы строгого математического определения белого шума. Реальные случайные процессы могут обладать лишь теми или иными свойствами белого шума, в частности иметь

равномерный спектр мощности в определенном диапазоне частот и гауссовское распределение.

Если положить внешнюю силу в уравнении (4.3) равной нулю, т.е. $F = 0$, то получим дифференциальное уравнение для координаты броуновской частицы с нулевой массой в отсутствие внешних сил:

$$\frac{dr}{dt} = \gamma^{-1} \xi'(t). \quad (4.6)$$

Решение уравнения (4.6) есть интеграл от белого шума и определяет так называемый *винеровский случайный процесс*.

Уравнения (4.2), (4.3), (4.6) моделируют броуновское движение частицы с нулевой массой. При учете конечной массы частицы удобнее взять не координату, а скорость броуновской частицы $v(t) = dr/dt$. Тогда уравнение (4.1) для случая $F = 0$ запишется в следующем виде:

$$m \frac{dv}{dt} = -\gamma v + \xi'(t). \quad (4.7)$$

Уравнение носит название уравнения Ланжевена. Введя обозначения $v(t) = x(t)$, $\lambda = \gamma/m$, $\xi(t) = \xi'(t)/m$, уравнение (4.6) запишем в виде

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x + \xi(t) \quad (4.8)$$

Решение уравнения (4.8) определяет случайный процесс $x(t)$, носящий название *процесса Орнштейна – Уленбека*. С помощью этого уравнения моделируют не только флуктуации скорости броуновской частицы, но и множество случайных процессов самой различной природы. В этом случае под $x(t)$ понимается переменная, характеризующая конкретный случайный процесс. Уравнение (4.8) часто называют линейным уравнением Ланжевена. Формальное решение (4.8) имеет вид

$$x(t) = x_0 e^{-\lambda(t-t_0)} + e^{-\lambda(t-t_0)} \int_{t_0}^t e^{\lambda(t'-t_0)} \xi(t') dt', \quad (4.9)$$

где $x(t_0) = x_0$ – начальные условия.

Следует отметить, что в литературе под уравнением Ланжевена часто понимают любое дифференциальное уравнение вида

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \xi(t), \quad (4.10)$$

где $x(t)$ определяет некоторую стохастическую переменную (в случае неравновесных фазовых переходов параметр порядка); $f(x)$ – в общем случае нелинейная функция; $\xi(t)$ – гауссовый δ -коррелированный шум. Если характеристики случайной силы $\xi(t)$ в уравнении Ланжевена не зависят от значений самой стохастической переменной $x(t)$, то $\xi(t)$ называется *аддитивным шумом*.

В случае нелинейной функции $f(x)$ решение уравнения (4.10) часто возможно лишь численными методами.

4.1.2. Мультипликативный шум

Будем считать, что динамика системы описывается уравнением: $\dot{x} = f_\alpha(x)$, а функция $f_\alpha(x)$ зависит не только от переменной x , определяющей стохастическую систему, но и от некоторого параметра α , задаваемого средой, в которую помещена система. В случае малого воздействия внешней среды ($\alpha \ll 1$) можно записать функцию f_α в виде разложения по степеням параметра α и ограничиться линейным по α приближением:

$$f_\alpha(x) = f_0(x) + \left. \frac{\partial f(x)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} \alpha, \quad (4.11)$$

где $f_0(x)$ – составляющая силы, независимая от воздействия среды. Обозначим $g(x) = \partial f(x) / \partial \alpha|_{\alpha=0}$. Будем считать, что воздействие среды зависит от времени, т.е. $\alpha = \alpha(t)$, и зависимость от времени имеет случайную

составляющую. Это можно формально учесть, приписывая параметру α зависимость от времени в виде

$$\alpha(t) = \bar{\alpha} + \sigma \xi(t), \quad (4.12)$$

где параметр $\bar{\alpha}$ описывает детерминированное воздействие среды (в общем случае $\bar{\alpha} = \bar{\alpha}(t)$); σ – среднеквадратичное отклонение (в такой записи подразумевается, что среднеквадратичное отклонение функции $\xi(t)$ равно 1). Таким образом, с учетом (4.11) и (4.12) выражение (4.10) можно представить в виде

$$\frac{dx}{dt} = f_{\bar{\alpha}}(x) + \sigma g(x) \xi(t), \quad (4.13)$$

где $f_{\bar{\alpha}}(x) = f_0(x) + \bar{\alpha}g(x)$ – детерминированное значение силы. Второе слагаемое в (4.13) представляет собой шум, который учитывает флуктуации управляющего параметра. Шум, интенсивность которого зависит от свойств самой случайной переменной (множитель $g(x)$), называется *мультипликативным*.

Будем в дальнейшем для простоты детерминированное значение силы обозначать $f(x) = f_{\bar{\alpha}}(x)$.

Стохастическое уравнение движения с мультипликативным шумом часто записывают в виде

$$dx = f(x)dt + \sigma g(x)dw(t), \quad (4.14)$$

где $dw(t) = \xi(t)dt$ – дифференциал винеровского процесса. Формальное решение уравнения (4.14) имеет вид

$$x(t) = \int_0^t f(x(t'))dt' + \sigma \int_{w(0)}^{w(t)} g(x(t'))dw(t'), \quad (4.15)$$

где принято $x(0) = 0$. Поскольку функция $x(t')$ непрерывна, то вычисление первого интеграла в правой части (4.15) не приводит к каким-либо особенностям. Однако при нахождении составляющей

$$I(t) = \int_{w(0)}^{w(t)} g(x(t')) dw(t') \quad (4.16)$$

интегрирование производится не по времени, а по стохастической переменной $w(t')$, которая имеет особенности*.

Представим выражения (4.14) и (4.16) в конечно-разностном виде, разбивая интервал времени $[0, t]$ на $N \rightarrow \infty$ одинаковых отрезков $\Delta t_i \equiv t_{i+1} - t_i \rightarrow 0$, где $i = 0, 1, \dots, N$, $N\Delta t_i = t$:

$$\Delta x(t_i) = f(x(t_i))\Delta t_i + \sigma g(x(\tilde{t}_i))\Delta w_i, \quad (4.17)$$

$$I(t) \equiv \lim_{\Delta t_i \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{N-1} g(x(\tilde{t}_i))\Delta w_i, \quad (4.18)$$

где введено обозначение $\Delta w_i \equiv w(t_{i+1}) - w(t_i)$. Знак $\tilde{t}$ означает неоднозначность в возможности выбора значения $w(t_i)$. Ввиду сингулярного характера функции $w(t_i)$ результаты существенно зависят от выбора точки

$$\tilde{t}_i = t_i + \varepsilon \Delta t_i, \quad \varepsilon \in [0, 1], \quad (4.19)$$

в которой определяется значение мультипликативной функции $g(x(\tilde{t}_i))$. При $\varepsilon = 0$ эта точка находится на левой границе интервала Δt_i . Выбор $\varepsilon = 0$ означает интегрирование стохастического уравнения по Ито (исчисление Ито, стохастический интеграл Ито). При $\varepsilon = 1/2$ время $\tilde{t}_i$ фиксируется посередине отрезка Δt_i и мы приходим к исчислению Стратоновича (стохастический интеграл Стратоновича). Наконец, при $\varepsilon = 1$ величина $\tilde{t}_i = t_{i+1}$ отвечает правой границе интервала Δt_i – такой выбор предложен Климонтовичем.

Интеграл Ито подразумевает, что между случайным процессом x_i и силой ξ_i в тот же момент времени нет никакой зависимости. Выбор левых концов интервалов разбиения в качестве точек, в которых вычисляются

* Олемской А.И. Теория стохастических систем с сингулярным мультипликативным шумом / А.И. Олемской // Успехи физических наук. 1998. Т. 168, N 3. С.287 – 321.

значения подынтегрального выражения, как бы максимально использует тот факт, что винеровский процесс имеет независимые приращения. Предложенное Ито определение стохастического интеграла является разумным, если приходится иметь дело с подлинно белым шумом. Однако истинный белый шум является математической абстракцией. В реальном случае шум всегда имеет отличное от нуля время корреляции. Эта ненулевая память приводит к зависимости между случайным процессом x_i и случайной силой ξ_i в один и тот же момент времени. Интеграл Стратоновича (как и способ, предложенный Климонтовичем) учитывает именно такую корреляцию между системой и внешним шумом. Однако, строго говоря, не существует физических причин для фиксации какого-то определенного значения ε .

Между интегрированием по Ито и интегрированием по Стратоновичу существует определенная связь. Найдем эту связь.

Для определения интеграла $I(t)$ выразим в (4.18) величину $g(x(\tilde{t}_i))$ мультипликативной функции внутри интервала Δt_i через значение $g(x(t_i))$ на его границе. С этой целью запишем разложение

$$x(\tilde{t}_i) \approx x(t_i) + \dot{x}(t_i)\varepsilon\Delta t_i = x(t_i) + \varepsilon\Delta x(t_i), \quad (4.20)$$

следующее из (4.19). Аналогичным образом получаем

$$g(x(\tilde{t}_i)) \approx g(x(t_i)) + \varepsilon\nabla g(x(t_i))\Delta x(t_i), \quad (4.21)$$

где обозначено $\nabla g(x(t_i)) \equiv dg/dx|_{x=x(t_i)}$. Подставляя сюда $\Delta x(t_i)$ из (4.17), приходим к искомому выражению

$$g(x(\tilde{t}_i)) \approx g(x(t_i)) + \varepsilon\sigma g(x(t_i))\nabla g(x(t_i))\Delta w_i + \varepsilon f(x(t_i))\nabla g(x(t_i))\Delta t_i. \quad (4.22)$$

В теории случайных процессов строго показывается, что дифференциал по времени dt имеет второй порядок малости по сравнению с дифференциалом стохастической переменной $dw = \xi(t)dt$. Поэтому последнее слагаемое в (4.22) может быть опущено. Подставляя оставшиеся члены

(4.22) в (4.18) и возвращаясь к континуальному представлению (4.16) и (4.15), получим выражение

$$x(t) = \int_0^t [f(x(t')) + h(x(t'))] dt' + \sigma \int_{w(0)}^{w(t)} g(x(t')) dw(t'), \quad (4.23)$$

которое в отличие от (4.15) содержит силу

$$h(x) = \frac{\varepsilon}{2} \sigma^2 \nabla g^2(x), \quad (4.24)$$

зависимую от выбора исчисления. Характерно, что системы с аддитивным шумом, когда $g(x) = \text{const}$, $h(x) \equiv 0$, не чувствительны к выбору исчисления.

4.2. Уравнение Фоккера–Планка

Наличие случайной силы в стохастических уравнениях движения приводит к тому, что, несмотря на фиксацию начальных условий, уравнения движения имеют множество решений, распределенных случайным образом, поэтому актуальным является определение функции распределения (плотности вероятности) $P(x, t)$ данного значения x в момент времени t .

4.2.1. Марковские процессы и основное кинетическое уравнение

Простейшим процессом, описывающим причинную связь между событиями, является *марковский процесс*. Дискретным марковским процессом называется такой случайный процесс, который характеризуется тем, что переход из состояния в момент времени t_i в состояние в момент времени t_{i+1} не зависит от предыстории системы. Математически это означает, что условная плотность вероятности случайной величины x_{i+1} в момент времени t_{i+1} однозначно определяется заданием случайной величины x_i в

момент t_i и не зависит от каких-либо величин в более ранние моменты времени.

Для непрерывных марковских процессов справедливо уравнение Колмогорова для условной вероятности попасть в интервал от x до $x + dx$ за время dt , если в момент времени t система была в состоянии x :

$$P(x + dx, t + dt) = W(x, x + dx)P(x, t)dxdt, \quad (4.25)$$

где $W(x, x + dx)dxdt$ – вероятность перехода из микросостояния x в интервал от x до $x + dx$ за промежуток времени dt . Здесь использовали предположение о том, что эта вероятность на малых интервалах времени пропорциональна dt . Данное уравнение характеризует эволюцию функции распределения. Уравнение Колмогорова удобно привести к несколько иному виду. Рассмотрим некоторое состояние системы x . Система может перейти в интервал состояний $x' + dx'$. Вероятность прямого перехода из интервала $x' + dx'$ в состояние x за единицу времени будет $W(x', x)dx'$, а вероятность обратного перехода из состояния x в интервал состояний $x' + dx'$ будет $W(x, x')dx'$. Отсюда сразу следует уравнение

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \int [W(x', x)P(x', t) - W(x, x')P(x, t)]dx'. \quad (4.26)$$

Первое слагаемое в (4.26) характеризует прямые переходы $x' \rightarrow x$, а второе – обратные $x \rightarrow x'$.

Уравнение (4.26) называется основным кинетическим уравнением (иногда его называют управляющим уравнением). Основное кинетическое уравнение представляет собой уравнение баланса для вероятности каждого состояния x . Первый член в правой части уравнения (4.26) соответствует возрастанию вероятности из-за переходов из других состояний x' , а второй – уменьшению вероятности из-за переходов в другие состояния.

Для решения основного кинетического уравнения следует определить интенсивность переходов $W(x, y)$, что представляет собой отдельную задачу. Однако очень часто бывает достаточно знать не полную функцию

распределения $W(x, y)$, а два ее первых момента. При их определении важную роль играет принцип детального равновесия

$$P(x)W(x, x') = P(x')W(x', x). \quad (4.27)$$

Принцип детального равновесия означает совпадение интенсивности прямых и обратных переходов между любыми микросостояниями x и x' , происходящими в условиях равновесия, когда $\partial P(x, t)/\partial t = 0$.

4.2.2. Вывод уравнения Фоккера–Планка из основного кинетического уравнения

Переход от основного кинетического уравнения к уравнению Фоккера–Планка возможен только для таких процессов, где зависимость $W(x, x')$ является непрерывной функцией. Будем рассматривать лишь малые скачки $x' = x + \Delta x$. Тогда для непрерывных процессов первое слагаемое в квадратных скобках (4.26) можно представить в виде ряда

$$W(x + \Delta x, x)P(x + \Delta x, t) = W(x, x + \Delta x)P(x, t) + \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial [W(x, x + \Delta x)P(x, t)]}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [W(x, x + \Delta x)P(x, t)]}{\partial x^2} \Delta x^2 + \dots$$

Здесь учли, что при непрерывной функции $W(x, x')$ и малом Δx $W(x + \Delta x, x) \approx W(x, x + \Delta x)$.

Подставив это разложение в основное кинетическое уравнение (4.26), получим, ограничившись квадратичным членом разложения,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \int \left\{ \frac{\partial [W(x, x + \Delta x)P]}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [W(x, x + \Delta x)P]}{\partial x^2} (\Delta x)^2 \right\} d(\Delta x). \quad (4.29)$$

Введя обозначения

$$a_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta x W(x, x + \Delta x) d(\Delta x), \quad (4.30)$$

$$a_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta x^2 W(x, x + \Delta x) d(\Delta x), \quad (4.31)$$

получим окончательно кинетическое уравнение в виде

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [-a_1(x)P(x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [a_2(x)P(x, t)]. \quad (4.32)$$

Функции $a_1(x)$ и $a_2(x)$ являются первым и вторым моментами интенсивности перехода. Следует заметить, что

$$\begin{aligned} \langle \Delta x \rangle &= \frac{a_1(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} W(x, x + \Delta x) d(\Delta x)} = a_1(x) \Delta t, \\ \langle (\Delta x)^2 \rangle &= \frac{a_2(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} W(x, x + \Delta x) d(\Delta x)} = a_2(x) \Delta t. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Так как вероятность попасть в интервал $d(\Delta x)$ за время Δt выражается через $W(x, x + \Delta x)d(\Delta x) \Delta t$, то интеграл от этой величины нормируется на единицу, поэтому

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x, x + \Delta x) d(\Delta x) = 1/\Delta t. \quad (4.34)$$

Вводя оператор $\nabla \equiv \partial/\partial x$, запишем (4.32) в виде

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \left[-a_1 P + \frac{1}{2} \nabla (a_2 P) \right]. \quad (4.35)$$

Уравнение (4.32) (как и (4.35)) носит название *уравнения Фоккера – Планка*. Первый член в правой части уравнения Фоккера – Планка (4.32) носит название дрейфового или конвективного, а второй диффузионного или флуктуационного. Уравнение Фоккера–Планка применимо ко многим физическим процессам (броуновское движение, радиоактивный распад, фазовые переходы первого рода и многие другие процессы). Следует заметить, что при выводе уравнения Фоккера – Планка из основного кинетического уравнения мы ограничились вторым порядком малости при разложении

вероятности перехода. Такое приближение не является слишком сильным. Можно показать, что для гауссовских процессов только моменты a_1 и a_2 отличны от нуля. В этом случае использованное предположение оправдано. Уравнение Фоккера–Планка предполагает непрерывность процесса. Применимость уравнения Фоккера–Планка становится проблематичной, когда рассматриваемый процесс характеризуется большими флуктуациями или скачками, как, например, в процессах рождения – гибели при малом числе особей.

Для того чтобы описать конкретный случайный процесс с помощью уравнения Фоккера–Планка, необходимо вычислить первый и второй моменты интенсивности перехода. В следующем параграфе покажем, как это сделать, если известно, что данный случайный процесс подчиняется уравнению Ланжевена.

4.2.3. Связь уравнения Фоккера–Планка и уравнения Ланжевена

Рассмотрим линейное уравнение Ланжевена

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x + \xi(t). \quad (4.36)$$

Решение уравнения (4.36) имеет вид

$$x(t) = x_0 e^{-\lambda t} + e^{-\lambda t} \int_0^t \xi(t') e^{\lambda t'} dt'. \quad (4.37)$$

Усредняя по ансамблю и используя, что $\langle \xi(t) \rangle = 0$, получим

$$\langle x(t) \rangle|_{x_0} = x_0 e^{-\lambda t}. \quad (4.38)$$

Далее, возводя (4.37) в квадрат с последующим усреднением, получим

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= x_0^2 e^{-2\lambda t} + e^{-2\lambda t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\lambda(t'+t'')} \langle \xi(t') \xi(t'') \rangle = \\
&= x_0^2 e^{-2\lambda t} + \frac{\sigma^2}{2\lambda} (1 - e^{-2\lambda t}).
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Здесь использовалось свойство δ -коррелированности белого шума, т.е. что $\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t - t')$, где σ^2 – дисперсия.

Выберем малое время $\Delta t \ll \lambda^{-1}$. Тогда из соотношения (4.38) получим

$$\langle \Delta x \rangle_{x_0} \equiv \langle x(t) \rangle_{x_0} - x_0 = -\lambda x_0 \Delta t + O(\Delta t)^2. \tag{4.40}$$

Аналогично из (4.39) получим

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_{x_0} = \sigma^2 \Delta t + O(\Delta t)^2. \tag{4.41}$$

Поскольку $\langle \Delta x \rangle_{x_0} = a_1 \Delta t$, $\langle (\Delta x)^2 \rangle_{x_0} = a_2 \Delta t$, можно написать уравнение Фоккера – Планка

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial}{\partial x} x P(x, t) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \tag{4.42}$$

В случае броуновского движения уравнение (4.42) описывает плотность вероятности застать броуновскую частицу со скоростью x .

Рассмотрим теперь обобщенное уравнение Ланжевена:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \xi(t). \tag{4.43}$$

Можно показать, что данное уравнение эквивалентно квазилинейному уравнению Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [f(x) P(x, t)] + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \tag{4.44}$$

где σ^2 – дисперсия белого шума $\xi(t)$.

Действительно, уравнение (4.43) эквивалентно уравнению

$$\Delta x = \int_t^{t+\Delta t} f(x(t'))dt' + \int_t^{t+\Delta t} \xi(t')dt'. \quad (4.45)$$

Напомним, что коэффициенты в правой части уравнения Фоккера–Планка являются моментами a_1 и a_2 , которые можно вычислить из уравнения Ланжевена.

Среднее с фиксированным $x(t)$ имеет вид

$$\langle \Delta x \rangle = f(x(t))\Delta t + O(\Delta t)^2, \quad (4.46)$$

то есть первый момент равен $f(x(t))$, второй момент равен

$$\frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{\Delta t} = \left\langle \left[\int_t^{t+\Delta t} f(x(t'))dt' + \int_t^{t+\Delta t} \xi(t')dt' \right]^2 \right\rangle. \quad (4.47)$$

После достаточно громоздких вычислений, которые мы опускаем, можно показать, что второй момент, как и для линейного уравнения Ланжевена равен σ^2 , откуда следует (4.44).

Рассмотрим теперь стохастическое уравнение с мультипликативным шумом

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + g(x)\xi(t). \quad (4.48)$$

Очевидно, что в этом случае соответствующее уравнение Фоккера–Планка будет зависеть от выбора исчисления (Ито или Стратоновича). После достаточно громоздких вычислений можно показать, что в интерпретации Ито соответствующее уравнение Фоккера – Планка имеет вид

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x)P(x,t)] + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}[g^2(x)P(x,t)]. \quad (4.49)$$

Здесь σ^2 – интенсивность мультипликативного шума (см.(4.12)). Интерпретация стохастического интеграла по Стратоновичу соответствует следующему уравнению Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x)P(x,t)] + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} [g(x)P(x,t)]. \quad (4.50)$$

Выражения (4.49) и (4.50) можно записать единым образом:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \left[-(f+h)P + \frac{\sigma^2}{2} \nabla(g^2 P) \right], \quad (4.51)$$

где $h(x) \equiv \varepsilon \sigma^2 \nabla(g^2(x))$ ($\varepsilon = 0$ для исчисления Ито и $\varepsilon = 1/2$ для исчисления Стратоновича).

Отметим, что выбор описания стохастических процессов с помощью стохастического уравнения движения Ланжевена или с помощью кинетического уравнения Фоккера–Планка зависит от конкретной задачи.

В заключение данного параграфа приведем вид уравнения Фоккера–Планка в наиболее общем виде в случае n переменных ($i = 1, 2, \dots, n$):

$$\frac{\partial P(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [A_i P(\vec{x}, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [B_{ij}(\vec{x}) P(\vec{x}, t)]. \quad (4.52)$$

Суммирование в (4.52) подразумевается по всем повторяющимся индексам. Матрица B_{ij} симметрична и положительно определена, т.е. все ее собственные значения положительны. В качестве переменных могут быть координаты, энергия и скорости частиц.

4.2.4. Стационарное решение уравнения Фоккера–Планка

Уравнение Фоккера–Планка представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных с переменными коэффициентами, и в общем случае его решение в аналитическом виде не представляется возможным. Существуют различные достаточно сложные математические методы, позволяющие в том или ином приближении получить решение уравнения Фоккера – Планка.

В стационарных системах распределение вероятности не зависит от времени, поэтому $\partial P/\partial t = 0$ и обобщенный поток в уравнении Фоккера – Планка принимает постоянное значение. Воспользуемся формой записи уравнения Фоккера–Планка в виде (4.51). Условие стационарности запишется в виде

$$J \equiv (f + h)P - \frac{\sigma^2}{2} \nabla(g^2 P) = \text{const}, \quad (4.53)$$

где $\nabla \equiv \partial/\partial x$. Для систем, находящихся в состоянии равновесия суммарный поток равен нулю, т.е. $J = 0$. Уравнение Фоккера–Планка в этом случае принимает вид

$$[f(x) + h(x)]P - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} [g^2(x)P(x)] = 0. \quad (4.54)$$

Решение (4.54) записывается в виде

$$P = Z^{-1} g^{-2(1-2\varepsilon)} \exp\left(\frac{1}{\Theta} \int \frac{f+h}{g^2} dx\right), \quad (4.55)$$

где введено обозначение $\Theta \equiv \sigma^2/2$, параметр ε определяет выбор способа интегрирования мультипликативного шума (4.19) (входит в выражение для h (4.24)), постоянная Z задается условием нормировки:

$$\int P(x) dx = 1. \quad (4.56)$$

В случае аддитивного шума $g(x) = 1$, $h = 0$ и распределение (4.55) принимает вид

$$P(x) = Z^{-1} \exp\left(\frac{1}{\Theta} \int f(x) dx\right). \quad (4.57)$$

Для потенциальных систем $f(x)$ можно представить в виде $f(x) = -\partial U/\partial x$.

Тогда для окончательного решения получим

$$P(x) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{U(x)}{\Theta}\right) dx. \quad (4.58)$$

Видно, что выражение (4.58) имеет вид распределения Гиббса, если $U(x)$ – эффективный гамильтониан системы, Θ – температура, выраженная в энергетических единицах. Нормировочная постоянная

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{U(x)}{\Theta}\right) dx \quad (4.59)$$

представляет собой статистическую сумму. Величина

$$F = -\Theta \ln Z \quad (4.60)$$

определяет свободную энергию системы. Формулы (4.58 – 4.60) аналогичны известным выражениям равновесной статистической механики. В случае броуновского движения интенсивность случайной силы определяется температурой: $\sigma^2/2 = kT$, но в общем случае шум может иметь другую природу.

В случае мультипликативного шума $g(x) \neq \text{const}$. В теории случайных процессов показывается, что и в этом случае равновесное распределение записывается в квазигиббсовском виде

$$P(x) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{U_{eff}(x)}{\Theta}\right), \quad (4.61)$$

где эффективный потенциал связан с исходным соотношением

$$U_{eff} = 2(1 - 2\varepsilon)\Theta \ln g(x) + U'(x), \quad (4.62)$$

$$U'(x) = -\int \frac{f(x)}{g^2(x)} dx. \quad (4.63)$$

4.3. Примеры стохастических процессов

4.3.1. Распределение броуновских частиц по скоростям

Вернемся к примеру броуновского движения. Взвешенные в жидкой или газообразной среде малые частицы находятся в непрерывном движении. Причиной такого макроскопического движения является микроскопическое движение молекул. Распределение молекул по энергиям подчиняется распределению Максвелла. Возникает вопрос о распределении по энергии макроскопических частиц. Для решения этого вопроса рассмотрим пространственное (трехмерное) броуновское движение. Воспользуемся многомерным уравнением Фоккера–Планка (4.52), так как одномерное уравнение для пространственного случая не пригодно. Будем считать, что броуновские частицы массой m имеют сферическую форму радиуса r и распределены по физическому пространству равномерно. Применительно к нашей задаче уравнение (4.52) можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial P(\vec{v}, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} [A_i(\vec{v}) P(\vec{v}, t)] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\vec{v}) \frac{\partial^2 P(\vec{v}, t)}{\partial v_i \partial v_j}, \quad (4.64)$$

где $P(\vec{v}, t)$ - искомое распределение по компонентам скорости $\vec{v}(v_x, v_y, v_z)$.

Для макроскопических сферических частиц в соответствии с уравнением (4.1)

$$A_i = -\frac{\gamma}{m} v_i = \frac{F_{mpi}}{m} = \frac{6\pi\eta r v_i}{m} \quad (4.65)$$

есть i -тая компонента ускорения частицы, обусловленного трением (η – коэффициент вязкости). В уравнении (4.65) использовали формулу Стокса для силы трения. Уравнение Фоккера–Планка (4.64) перепишем в виде

$$\frac{\partial P(\vec{v}, t)}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial J_i}{\partial v_i}, \quad (4.66)$$

где

$$J_i = -A_i(\vec{v})P(\vec{v}, t) + \frac{1}{2} \sum_j B_{ij}(\vec{v}) \frac{\partial P(\vec{v}, t)}{\partial v_j} \quad (4.67)$$

есть плотность потока в пространстве скоростей. Нас интересует распределение частиц по скоростям в равновесном состоянии, когда $J_i = 0$, поэтому

$$A_i(\vec{v})P(\vec{v}, t) = \frac{1}{2} \sum_j B_{ij}(\vec{v}) \frac{\partial P(\vec{v}, t)}{\partial v_j}. \quad (4.68)$$

Для решения уравнения (4.68) учтем, что в равновесии нет физически выделенного направления, поэтому величину $B_{i,j}$ можно представить в виде

$$B_{i,j} = \beta \delta_{i,j}, \quad (4.69)$$

где $\delta_{i,j}$ – символ Кронекера, а β не зависит от скорости. В этом случае также можно предположить, что в силу независимости распределений по компонентам скорости:

$$P(\vec{v}, t) = P_x(v_x)P_y(v_y)P_z(v_z). \quad (4.70)$$

Здесь $P_i(v_i)dv_i$ есть вероятность того, что броуновская частица обладает скоростью в интервале от v_i до $v_i + dv_i$. Тогда уравнение (4.68) можно записать в виде

$$\frac{\gamma}{m} v_i P_i = -\frac{1}{2} \beta \frac{\partial P_i(\vec{v}, t)}{\partial v_i}. \quad (4.71)$$

Решение этого уравнения есть

$$P_i = \alpha e^{-\frac{\gamma}{m\beta} v_i^2}, \quad (4.72)$$

а искомый результат представляется гауссовской формой:

$$P(\vec{v}) = \alpha^3 e^{-\frac{\gamma}{m\beta} v^2}. \quad (4.73)$$

Из условия нормировки распределения на единицу и требования, что средняя энергия броуновской частицы равна $3kT/2$, (4.73) сводится к известной формуле Максвелла. При этом накладывается условие связи коэффициентов уравнения Фоккера – Планка: $\sigma^2/2 = \beta = 2\gamma kT/m^2$.

Таким образом, распределение броуновских частиц по скоростям, как и распределение молекул, подчиняется распределению Максвелла.

4.3.2. Стохастический способ определения коэффициента диффузии

Полученная связь имеет глубокий физический смысл и, в частности позволяет выйти на нетривиальное соотношение между коэффициентами диффузии и вязкости. Рассмотрим этот вопрос на примере коэффициента диффузии случайных блужданий частиц. Этот коэффициент выражается через средний квадрат смещения по формуле Эйнштейна (для достаточно больших t):

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = 2D\Delta t, \quad (4.74)$$

где Δt – время наблюдения за частицей. С другой стороны, средний квадрат смещения частицы можно выразить через ее скорость. Смещение частицы

$$\Delta x = \int_0^t v_x(t') dt'. \quad (4.75)$$

Следовательно,

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_0^t dt' \int_0^{t'} v_x(t') v_x(t'') dt'' . \quad (4.76)$$

Учитывая, что $\langle v_x(t') \cdot v_x(t'') \rangle = R(t' - t'')$ есть автокорреляционная функция скорости, и разбивая двумерную область интегрирования на подобласти с $t' < t''$ и $t' > t''$, получим

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} R(t' - t'') dt'' . \quad (4.77)$$

Вводя вместо t' и t'' новые переменные интегрирования $t = t''$ и $\Delta t = t' - t''$, находим

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2 \int_0^t (t - \Delta t) R(\Delta t) d(\Delta t) = 2t \int_0^t R(\Delta t) d(\Delta t) . \quad (4.78)$$

Сравнивая (4.78) и (4.74) в пределе больших t , получаем так называемую формулу Грина – Кубо для коэффициента диффузии:

$$D = \int_0^{\infty} R(\Delta t) d(\Delta t) . \quad (4.79)$$

Из выражения (4.79) видно, что коэффициент диффузии определяется через интеграл от корреляционной функции скорости случайных блужданий. Формула дает еще один независимый способ расчета коэффициента D . Подставляя в определение корреляционной функции скорости решение уравнения Ланжевена (4.9), получим

$$\begin{aligned}
R(\Delta t) &= \langle v_x(t) \cdot v_x(t + \Delta t) \rangle = \\
&= \left\langle \left(v_{0x} e^{-\frac{\gamma}{m}(t-t_0)} + e^{-\frac{\gamma}{m}(t-t_0)} \int_{t_0}^t e^{\frac{\gamma}{m}(t'-t_0)} \xi(t') dt' \right) \times \right. \\
&\quad \left. \times \left(v_{0x} e^{-\frac{\gamma}{m}(t+\Delta t-t_0)} + e^{-\frac{\gamma}{m}(t+\Delta t-t_0)} \int_{t_0}^{t+\Delta t} e^{\frac{\gamma}{m}(t'-t_0)} \xi(t') dt' \right) \right\rangle.
\end{aligned} \tag{4.80}$$

При $(t - t_0) \gg m/\gamma$ (m/γ - время релаксации средней скорости из-за трения) будем иметь

$$R(\Delta t) = \frac{\sigma^2 m}{2\gamma} e^{-\frac{\gamma}{m}\Delta t}. \tag{4.81}$$

Подставляя выражение $R(\Delta t)$ из (4.81) в формулу для D (4.79), получим

$$D = \frac{\sigma^2 m}{2\gamma} \int_0^\infty e^{-\frac{\gamma\Delta t}{m}} d(\Delta t) = \frac{\sigma^2 m^2}{2\gamma^2}. \tag{4.82}$$

Если учесть связь коэффициентов уравнения Фоккера – Планка: $\sigma^2/2 = 2\gamma kT/m^2$, то получим искомую связь между коэффициентами трения ($\gamma = 6\pi\eta r$) и диффузии:

$$D = \frac{2\gamma kT m^2}{2m^2 \gamma^2} = \frac{kT}{\gamma}. \tag{4.83}$$

Следует иметь в виду, что для диффузии тяжелых ионов в растворителях со сравнительно малой массой молекул формула (4.83) достаточно хорошо ”работает” и широко используется на практике. Ограничения применимости этой формулы связаны с основным условием справедливости теории броуновского движения – использованием автокорреляционной функции случайной силы в виде δ -функции. Такое приближение соответствует реальности только в том случае, если флуктуирующая сила корре-

лирует на временных интервалах, меньших, чем все остальные характерные времена (прежде всего, чем время релаксации средней скорости). Найдем отношение этих времен. Характерное время флуктуаций силы можно определить как обратную частоту столкновений молекул среды с броуновской частицей:

$$\tau_F = \left(\frac{1}{4} n v_t \cdot 4 \pi r^2 \right)^{-1} = \left(\pi n v_t r^2 \right)^{-1}. \quad (4.84)$$

Тогда отношение времен

$$\frac{\tau_F}{\tau_v} = \frac{\gamma}{\pi r^2 m n v_t} = \frac{6 \pi \eta r}{\pi r^2 m n v_t} = \frac{6 \pi \frac{1}{2} m_c n v_t \lambda_0 \alpha r}{\pi r^2 m n v_t} = 3 \alpha \frac{m_c}{m} \frac{\lambda_0}{r}. \quad (4.85)$$

Здесь m_c – масса молекулы среды; λ_0 – длина свободного пробега молекул; коэффициент α учитывает возможный потенциальный барьер при перескоках молекул жидкости (в газе $\alpha = 1$).

Из (4.85) видно, что для обеспечения малости τ_F/τ_0 необходимо иметь малое отношение массы молекул среды к массе броуновской частицы и малое отношение длины свободного пробега к радиусу броуновской частицы. При постепенном уменьшении радиуса и, соответственно, массы броуновской частицы малость отношения τ_F/τ_0 перестает обеспечиваться и, в частности, нарушается строгость вывода теории о связи между коэффициентами диффузии и вязкости. Однако для жидкостей условие малости отношения времен может выполняться вплоть до того, что в качестве броуновской частицы может выступать отдельный ион, если его масса значительно превосходит массу молекул среды. Если проанализировать поведение тяжелой примеси в газовой фазе, то из-за сравнительно большой длины свободного пробега трение молекулы тяжелой примеси перестает быть вязким. В пределе свободно молекулярного режима с точностью до численного множителя сила, действующая на движущуюся частицу, определяется выражение

$$F = \pi r^2 \cdot \frac{1}{4} n v_t m v_t \cdot \frac{v}{v_t}, \quad (4.86)$$

где $\pi r^2 n v_t m v_t / 4$ - импульс, передаваемый пластинке площадью πr^2 за счет ударов молекул с одной стороны. Если пластинка движется со скоростью v , разность импульсов, передаваемая пластинке, будет пропорциональна отношению v/v_t . Тогда можно записать, что γ величина будет определяться как

$$\gamma = \alpha \pi r^2 n m_c v_t. \quad (4.87)$$

Используя (4.84) и (4.87), можно найти отношение времен для тяжелой примесной молекулы в газе: $\tau_F/\tau_v = m_c/m$, следовательно, теория броуновской частицы должна приближенно “работать”, если $m_c \ll m$. Для того чтобы убедиться в этом, из условия (4.83) и (4.87) получим

$$D = \frac{kT}{\alpha \pi r^2 n m_c v_t} \sim \frac{v_t}{r^2 n}, \quad (4.88)$$

что по порядку величины соответствует кинетической теории газов в пределе, когда радиус броуновской частицы станет равным радиусу молекулы примеси.

Следует отметить, что вывод формулы (4.79) не использует конкретную модель броуновской частицы, и она может быть использована для строгого расчета коэффициента самодиффузии, например путем замены операции усреднения решения уравнения Ланжевена по случайной переменной (по времени) на усреднение по статистическому ансамблю решения уравнения Лиувилля.

4.3.3. Образование зародышей при фазовых переходах первого рода

Фазовый переход первого рода происходит путем флуктуационного образования в объеме метастабильной фазы зародышей новой фазы. Метастабильные фазовые состояния являются не вполне устойчивыми состоя-

ниями. При заданных внешних параметрах стабильной фазе соответствует самый глубокий минимум термодинамического потенциала относительно всех молекулярных конфигураций системы. Метастабильным фазам отвечают более мелкие минимумы потенциалов. Наличие такого минимума обеспечивает устойчивость метастабильной системы по отношению к малым возмущениям. Возникновение новой фазы в метастабильной жидкости связано с преодолением энергетического барьера, который определяет работу образования зародыша критического размера. Если в метастабильной системе возникают зародыши, превышающие критический размер, то их дальнейший рост термодинамически обусловлен. Это означает начало фазового превращения в системе. В теории гомогенной нуклеации предполагается, что зародыши новой фазы возникают и растут в результате гетерофазных флуктуаций. Основные положения этой теории сформулированы еще Дж. Гиббсом. Он впервые высказал предположение о том, что термодинамическая устойчивость метастабильного состояния должна быть связана с работой образования критического зародыша.

Рассмотрим в капиллярном приближении процесс образования зародышей новой фазы. Для определенности будем рассматривать систему, находящуюся в изобарно-изотермических условиях. Запишем разность термодинамического потенциала Гиббса $\Delta\Phi = \Phi_2 - \Phi_1$ для двух состояний вещества: состояние 1 – однородная метастабильная фаза; состояние 2 – жидкость при тех же термодинамических параметрах, но с зародышем новой фазы:

$$\Delta\Phi = (\mu_2 - \mu_1)\delta N + \sigma\delta A, \quad (4.89)$$

где σ – удельная свободная энергия межфазной поверхности раздела (поверхностное натяжение); δA – площадь поверхности зародыша; μ_1 и μ_2 соответственно химические потенциалы объемных (с плоской границей раздела) исходной и новой фаз, например при образовании кристаллика в переохлажденной жидкости – это химические потенциалы жидкости и

кристалла; δN – число молекул, перешедших в новую фазу. Так как новая фаза более устойчива, чем исходная, то $\mu_2 < \mu_1$. Второе слагаемое в (4.89) характеризует работу образования поверхности раздела и является положительной величиной. Если принять, что зародыш новой фазы является сферой радиуса r , то выражение (4.89) запишется в виде

$$\Delta\Phi = -\frac{4}{3}\pi r^3 v_2^{-1} \Delta\mu + 4\pi r^2 \sigma, \quad (4.90)$$

где v_2 – удельный объем новой фазы, $\Delta\mu = \mu_1 - \mu_2$

На рис. 4.1 кривой 1 показана зависимость поверхностной энергии от размера новой фазы (в сферической аппроксимации зародыша от его радиуса). Эта зависимость пропорциональна площади поверхности и, следовательно, квадрату радиуса. Кривая 2 на рис. 4.1 показывает изменение объемной части термодинамического потенциала (первое слагаемое в 4.90), пропорциональное $-r^3$. Суммарное изменение термодинамического потенциала в зависимости от радиуса новой фазы имеет куполообразный вид, как показано на рис.4.1.

Максимальное значение зависимости $\Delta\Phi(r)$ определяет работу образования критического зародыша. Радиус критического зародыша определяется условием максимума $\Delta\Phi(r)$: $d(\Delta\Phi)/dr = 0$.

Отсюда

$$r_c = 2\sigma v_2 / \Delta\mu. \quad (4.91)$$

Подставляя это значение радиуса критического зародыша в разность термодинамических потенциалов (4.90), получим выражение для работы образования критического зародыша

$$W_c = \Delta\Phi(r_c) = -\frac{4}{3}\pi \left(\frac{2\sigma v_2}{\Delta\mu} \right)^3 \frac{\Delta\mu}{v_2} + 4\pi \sigma \left(\frac{2\sigma v_2}{\Delta\mu} \right)^2 = \frac{16}{3}\pi \frac{\sigma^3 v_2^2}{(\Delta\mu)^2}. \quad (4.92)$$

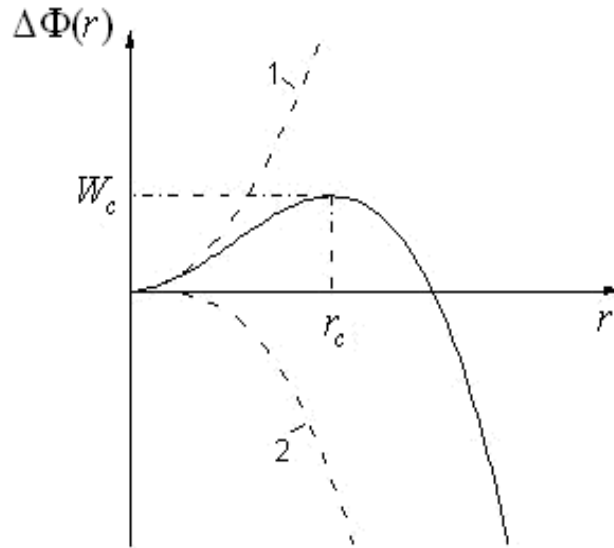


Рис.4.1. Изменение термодинамического потенциала при образовании зародыша новой фазы

Если из (4.91) выразить отношение $\Delta\mu/v_2$ и подставить в (4.90), то получим, что работа образования критического зародыша равна $1/3$ от его поверхностной энергии:

$$W_c = -\frac{4}{3}\pi r_c^3 \frac{2\sigma}{r_c} + 4\pi r_c^2 \sigma = \frac{4}{3}\pi r_c^2 \sigma. \quad (4.93)$$

Разность химических потенциалов определяет пересыщение системы. Вместо разности химических потенциалов удобнее пользоваться глубиной захода в метастабильную область по температуре ΔT (например, при образовании кристаллических зародышей в переохлажденной жидкости) или соответствующей разностью давлений Δp (при образовании пузырьков пара в перегретой жидкости). Так, при кристаллизации переохлажденной жидкости при неизменном давлении химический потенциал можно записать в виде

$$\mu_2 \approx \mu_1 + \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_p \Delta T. \quad (4.94)$$

При температуре термодинамического равновесия протяженных фаз (например, при температуре плавления массивного кристалла) $\mu_1 = \mu_2$. Воспользовавшись термодинамическим равенством

$(\partial\mu/\partial T)_p = \Delta s = \Delta h/T_0$ (где Δs – изменение удельной энтропии при плавлении, $\Delta h, T_0$ – соответственно удельная теплота и температура плавления), получим из (4.91), что работа образования критического зародыша

$$W_c = \frac{16}{3} \pi \frac{\sigma^3 v_2^2 T_0^2}{(\Delta h)^2 (\Delta T)^2}. \quad (4.95)$$

Значение W_c характеризует высоту барьера термодинамического потенциала Гиббса, который нужно преодолеть системе за счет флуктуации. При увеличении глубины захода в область метастабильных состояний этот барьер снижается. Следовательно, возрастает вероятность его преодоления за счет тепловых флуктуации в системе.

В классической теории зародышеобразования, восходящей к работам Гиббса и Фольмера, вероятность образования зародыша критического размера определяется в соответствии с термодинамической теорией флуктуаций:

$$P \sim e^{-W_c/kT}. \quad (4.96)$$

Случайный процесс образования зародышей новой фазы является ярким примером макроскопического проявления флуктуаций. Стохастический характер процесса непосредственно проявляется в экспериментах. Зародышеобразование (нуклеация) характеризуется случайным временем ожидания появления жизнеспособного зародыша новой фазы. Распределение таких времен, или иначе времен жизни метастабильной фазы, достаточно легко находится экспериментально. В частности, эксперименты по измерению времен жизни метастабильных (перегретых и переохлажденных) жидкостей показали, что процесс зарождения новой фазы является случайным и имеет пуассоновское распределение времен ожидания. В экспериментах непосредственно определяется среднее время ожидания появ-

ления зародыша $\bar{\tau}$ в объеме V метастабильной жидкости. В рамках классической теории гомогенного зародышеобразования определяется частота зародышеобразования J , т.е. число жизнеспособных зародышей, образующихся в единицу времени в единице объема метастабильной фазы:

$$J = N_1 B e^{-W_c/kT}, \quad (4.97)$$

где N_1 – число молекул в единице объема метастабильной фазы, B – кинетический коэффициент, определяющий частоту присоединения молекул к зародышу новой фазы.

Частота зародышеобразования связана со средним временем появления зародыша новой фазы и объемом простым соотношением

$$J = (\bar{\tau}V)^{-1}. \quad (4.98)$$

Поскольку термодинамическая теория ограничена лишь стадией до фактического фазового перехода, она не может дать информацию о более детальном ходе этого процесса образования зародышей, в том числе о величине предэкспоненциального множителя в (4.97). Здесь требуется кинетическое рассмотрение эволюции зародышей, приводящей в конце концов к их выпадению в новую фазу. Рассмотрение кинетики образования новой фазы как случайного процесса приводит к кинетическому уравнению Фоккера – Планка.

Обозначим через $f(n, t)$ число зародышей новой фазы, в которых в момент времени t содержится n молекул. Элементарным актом, меняющим размеры зародышей, является присоединение к нему или, наоборот, потеря одной молекулы; это изменение следует считать малым, поскольку сами зародыши являются макроскопическими образованиями. Образование зародышей в теории рассматривается как процесс случайных блужданий вдоль фазовой оси n в поле термодинамической силы с потенциалом $\Delta\Phi(n)$. Будем считать, что вероятность перехода $n \rightarrow n+1$ за время Δt равна $D_+(n)\Delta t + O(\Delta t)$, а вероятность обратного перехода за это же время

$D_-(n)\Delta t + O(\Delta t)$, где $O(\Delta t)$ – бесконечно малая функция, обозначающая вероятность более, чем одного перехода за время Δt . Тогда число зародышей в момент времени $t + \Delta t$ определяется равенством

$$f(n, t + \Delta t) = f(n, t) + D_+(n-1)f(n-1, t)\Delta t + D_-(n+1)f(n+1, t)\Delta t - [D_+(n) + D_-(n)]f(n, t)\Delta t + O(\Delta t). \quad (4.99)$$

Вероятность прямого и обратного переходов можно связать, используя равновесную функцию распределения f^0 :

$$\begin{aligned} D_+(n-1)f^0(n-1) &= D_-(n)f^0(n), \\ D_+(n)f^0(n) &= D_-(n+1)f^0(n+1). \end{aligned} \quad (4.100)$$

Выражая из (4.100) D_- через D_+ и считая, что различие между вероятностями прямого и обратного переходов несущественно: $D_+ = D_- = D$, получим

$$\begin{aligned} \frac{f(n, t + \Delta t) - f(n, t)}{\Delta t} &= D(n)f^0(n) \left[\frac{f(n+1)}{f^0(n+1)} - \frac{f(n)}{f^0(n)} \right] - \\ &- D(n-1)f^0(n-1) \left[\frac{f(n)}{f^0(n)} - \frac{f(n-1)}{f^0(n-1)} \right]. \end{aligned} \quad (4.101)$$

Переходя к пределу $\Delta t \rightarrow 0$ и при $n \gg 1$, когда изменение числа частиц на единицу можно считать бесконечно малым шагом, получим дифференциальное уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(n, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial n} \left[-D(n)f^0(n) \frac{\partial}{\partial n} \frac{f(n, t)}{f^0(n, t)} \right] = \\ &= -\frac{\partial}{\partial n} \left[D(n)f(n) \frac{\partial \ln f^0(n)}{\partial n} - D(n) \frac{\partial f(n)}{\partial n} \right]. \end{aligned} \quad (4.102)$$

Сравнивая (4.102) с (4.35), нетрудно убедиться, что полученное уравнение является уравнением Фоккера – Планка. Выражение в квадратных скобках имеет смысл потока зародышей вдоль фазовой оси n . Первый член в (4.102) описывает средний поток зародышей в пространстве размеров n ,

связанный с ростом зародышей при $r > r_c$ (или их растворением при $r < r_c$), второй – случайное блуждание по числу молекул в зародыше.

Стационарный процесс зародышеобразования определяется условием:

$$\frac{\partial f(n,t)}{\partial t} = 0. \quad (4.103)$$

В этом случае уравнение (4.102) имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial n} \left[-D(n)f^0(n) \frac{\partial}{\partial n} \frac{f(n,t)}{f^0(n,t)} \right] = 0. \quad (4.104)$$

После первого интегрирования получим

$$J = -D(n)f^0(n) \frac{\partial}{\partial n} \frac{f(n,t)}{f^0(n,t)} = \text{const}, \quad (4.105)$$

т.е. поток зародышей есть величина постоянная (не зависящая от n) и равна числу зародышей размером, превосходящим критический, образующихся за единицу времени в единице объема метастабильной фазы. Эта величина носит название стационарной частоты (или скорости) зародышеобразования.

Найдем отношение f/f^0 из уравнения (4.105):

$$\frac{f(n)}{f^0(n)} = -J \int_0^n \frac{dn}{D(n)f^0(n)} + C. \quad (4.106)$$

Постоянные J, C определяются из граничных условий при малых и больших n . С уменьшением размеров вероятность флуктуаций быстро возрастает, поэтому можно считать, что запас зародышей малых размеров пополняется настолько быстро, что их число продолжает оставаться равновесным, несмотря на постоянный отвод потоком J . Эта ситуация выражается граничным условием

$$\frac{f(n)}{f^0(n)} \rightarrow 1, \text{ при } n \rightarrow 0. \quad (4.107)$$

Граничное условие при больших n можно записать, если сделать предположение, что зародыши больших закритических размеров удаляются из системы. В этом случае

$$\frac{f(n)}{f^0(n)} \rightarrow 0, \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (4.108)$$

Из первого граничного условия (4.107) имеем $C=1$. Учитывая это и используя второе граничное условие (4.108), получим

$$J = \left[\int_0^\infty \frac{dn}{D(n)f^0(n)} \right]^{-1} \quad (4.109)$$

Решение, удовлетворяющее обоим граничным условиям, имеет вид

$$\frac{f(n)}{f^0(n)} = J \int_n^\infty \frac{dn}{D(n)f^0(n)}. \quad (4.110)$$

Обычно постулируется, что равновесная функции распределения f^0 имеет вид

$$f^0 \sim e^{-\Delta\Phi/kT}, \quad (4.111)$$

где $\Delta\Phi$ – изменение термодинамического потенциала при флуктуации, которое имеет смысл минимальной работы, которую необходимо затратить для создания зародыша заданного размера. Выражение для термодинамического потенциала удобнее рассматривать как функцию не числа частиц в зародыше, а его линейного радиуса r (в сферической аппроксимации зародыша). Проведем такую замену переменной. В этом случае выражение (4.109) примет вид

$$J = \left[\int_0^\infty \frac{dr}{D(r)f^0(r)} \frac{dn}{dr} \right]^{-1}. \quad (4.112)$$

Преобразуем выражение (4.90) для работы образования зародыша заданного размера r . Для этого разложим $\Delta\Phi(r)$ в ряд по степеням $\Delta r = r - r_c$ и ограничимся квадратичным членом разложения. Учитывая (4.91) и (4.93), получим

$$\begin{aligned}
\Delta\Phi &= \Delta\Phi(r_c) + \left. \frac{\partial\Delta\Phi}{\partial r} \right|_{r=r_c} \Delta r + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2\Delta\Phi}{\partial r^2} \right|_{r=r_c} (\Delta r)^2 = \\
&= W_c - 8\pi\sigma\Delta r + 8\pi\sigma r_c\Delta r - 8\pi r_c \frac{\sigma}{r_c} (\Delta r)^2 + 4\pi\sigma(\Delta r)^2 = \\
&= \frac{4\pi}{3}\sigma r_c^2 - 4\pi\sigma(\Delta r)^2.
\end{aligned} \tag{4.113}$$

Тогда выражение для равновесной функции распределения $f^0(r)$ можно представить в виде

$$\begin{aligned}
f^0(r) &= N_1 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta\Phi}{kT}\right) = \\
&= f^0(r_c) \exp\left[-\frac{(\partial^2\Delta\Phi/\partial r^2)_{r=r_c} (r-r_c)^2}{2kT}\right] = \\
&= f^0(r_c) \exp\left\{\frac{4\pi\sigma}{kT} (r-r_c)^2\right\},
\end{aligned} \tag{4.114}$$

где

$$f^0(r_c) = N_1 \exp\left(-\frac{W_c}{kT}\right) = N_1 \exp\left(-\frac{4\pi\sigma r_c^2}{3kT}\right). \tag{4.115}$$

Здесь использовано соотношение (4.93). Предэкспоненциальный множитель N_1 означает число центров в единице объема метастабильной фазы, в которых может начаться процесс образования зародышей. В теории гомогенного зародышеобразования считается, что N_1 – число молекул в единице объема метастабильной фазы. На рис. 4.2 качественно показан вид зависимости равновесной функции распределения от размера зародыша при заданном пересыщении (заданном размере критического зародыша). При $r > r_c$ график функции $f_0(r)$ показан пунктиром, так как в теории предполагается, что все зародыши, достигшие критического размера удаляются из системы.

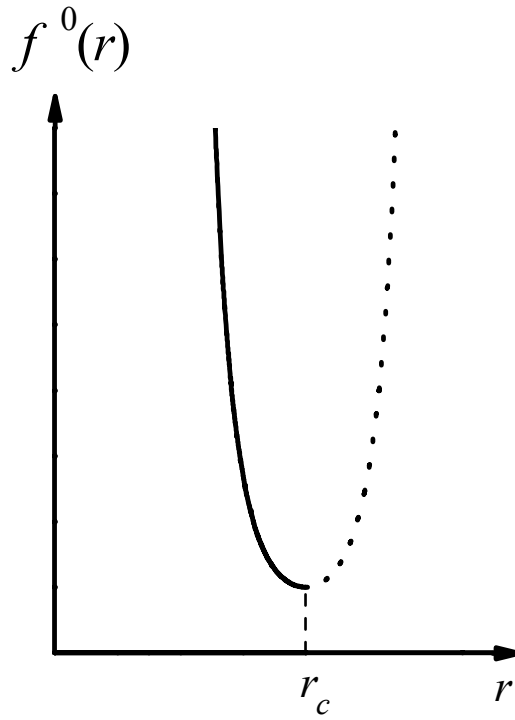


Рис.4.2. Зависимость равновесной функции распределения от размера зародыша при заданном пересыщении

Функция $f^0(r)$ имеет выраженный минимум при $r = r_c$. На рис.4.3 показан вид зависимости подынтегральной функции в (4.113) от радиуса. Из рисунка видно, что подынтегральная функция имеет выраженный максимум при $r = r_c$.

Воспользовавшись вблизи этой точки выражением (4.113), можно распространить интегрирование (4.112) по $r - r_c$ от $-\infty$ до $+\infty$. В результате получится выражение

$$J \approx \left[-\frac{(\partial^2 \Delta \Phi / \partial r^2)_{r=r_c}}{2\pi kT} \right]^{1/2} \left(\frac{dr}{dn} \right)_{r=r_c} D(r_c) f^0(r_c). \quad (4.116)$$

Выражение

$$z = \left(\frac{dr}{dn} \right)_{r=r_c} \left[- \frac{(\partial^2 \Delta \Phi / \partial r^2)_{r=r_c}}{2\pi kT} \right]^{1/2} \quad (4.117)$$

есть неравновесный фактор Зельдовича, который определяет отличие распределения зародышей по размерам от равновесного.

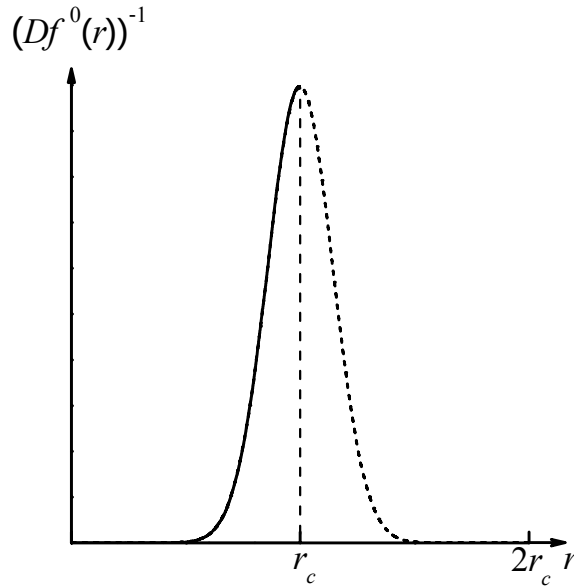


Рис.4.3. Зависимость подынтегральной функции в (4.112) от радиуса

Число частиц в зародыше $n \sim r^3$, значит $dn/dr \sim 3r^2$. Отсюда $dr/dn = r/3n$. Из выражения (4.90) и (4.113) имеем

$$\left(\frac{\partial^2 \Delta \Phi}{\partial r^2} \right)_{r=r_c} = -8\pi\sigma \quad (4.118)$$

Тогда неравновесный фактор равен

$$z = \frac{2r_c}{3n_c} \sqrt{\frac{\sigma}{kT}}. \quad (4.119)$$

Приведем численную оценку z для процесса кристаллизации переохлажденных металлов, в частности олова. Поверхностное натяжение кристалл – жидкость $\sigma = 0.06$ Дж/м², температура кристаллизации переохлажденного расплава $T \simeq 210 - 230$ К. Число молекул в критическом заро-

дыше $n \approx 100$ при радиусе $r_c \approx 10^{-9} \text{ м}$. Отсюда $z \approx 10^{-2}$. Такой порядок величины неравновесного фактора является типичным для большинства экспериментальных условий образования зародышей в метастабильных жидкостях.

Рассмотрим теперь кинетический коэффициент D . Задача его вычисления зависит от конкретной природы фазового перехода и учета различных гидродинамических и кинетических факторов, влияющих на перенос молекул из метастабильной фазы к межфазной границе. Так для процесса кипения, надо рассмотреть с помощью уравнений гидродинамики и теплообмена рост пузыря в жидкости; для процесса выпадения растворенного вещества из пересыщенного раствора надо рассмотреть рост выпавшего зерна путем диффузионного подвода к нему вещества из окружающего раствора. В литературе существуют различные конкретные схемы расчета кинетического коэффициента.

В случае кристаллизации переохлажденных жидкостей простая оценка кинетического коэффициента дана Д. Тарнбаллом и Дж. Фишером:

$$D(r_c) \approx i_c \nu \approx i_c (kT/h) e^{-E/kT}, \quad (4.120)$$

где i_c – число молекул на поверхности критического зародыша, частота перехода молекул из жидкости в кристалл

$$\nu = (kT/h) e^{-E/kT}, \quad (4.121)$$

где h – постоянная Планка, E – энергия активации процесса перехода молекул из жидкой фазы в кристаллическую. В расчетах обычно принимают E равной энергии активации вязкого течения или самодиффузии. Таким образом, по классической теории гомогенного зародышеобразования частота зарождения кристаллов в переохлажденной жидкости определяется выражением

$$J = N_1 z i_c (kT/h) e^{-E/kT} e^{-W_c/kT} = K_v e^{-W_c/kT}, \quad (4.122)$$

где предэкспоненциальный множитель K_v часто называется кинетическим коэффициентом гомогенного зародышеобразования. Для переохлажденных металлических расплавов $K_v \approx 10^{38} - 10^{39} \text{ с}^{-1} \text{ м}^{-3}$.

На рис.4.4 приведена температурная зависимость стационарной частоты зарождения кристаллов в переохлажденном расплаве олова*. Точками на этом рисунке показаны экспериментальные данные по кристаллизации капель микронных размеров ($\sim 10^{-4} \text{ м}$) и наноразмеров ($\sim 10^{-8} \text{ м}$). Меньшим размерам согласно (4.97) соответствуют более высокие значения частот и соответственно более высокие переохлаждения (при заданном характерном времени опыта τ).

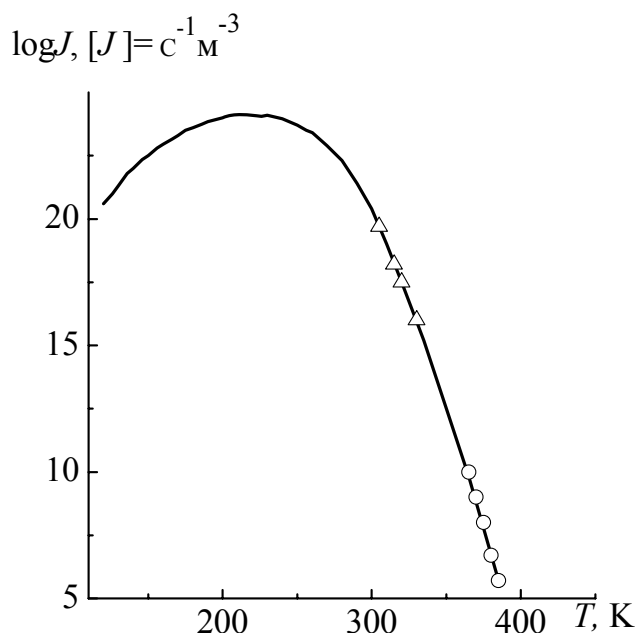


Рис.4.4. Температурная зависимость стационарной частоты зарождения кристаллов в переохлажденном расплаве олова: о – экспериментальные данные кристаллизации капель радиусом 10 – 100 мкм; Δ – кристаллизация капель радиусом 2 – 10 нм

* Скрипов В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей / В.П. Скрипов, В.П. Коверда. М.: Наука. 1984. 232 с.

Ниспадающий участок при понижении температуры на рис.4.4 связан с тем, что при низких температурах замедляются межмолекулярные перестройки, что приводит к уменьшению вероятности образования кристаллов. Формально куполообразная форма обусловлена фактором $-1/(T - T_0)^2 T$ в показателе экспоненты (формулы (4.95) и (4.96)).

Установление стационарной частоты зародышеобразования может быть сильно замедлено при кристаллизации вязких жидкостей. Впервые проблема нестационарного зародышеобразования была рассмотрена Зельдовичем, который принял следующую аппроксимацию:

$$\begin{aligned} f(n, t) &= f(n) \exp(-\tau_0/t), \\ J(t) &= J \exp(-\tau_0/t), \end{aligned} \quad (4.123)$$

где $f(n)$ и J соответственно стационарные значения функции распределения зародышей по размерам и частоты зародышеобразования; τ_0 – характерное время установления стационарного состояния (время запаздывания). Для определения τ_0 нужно решить нестационарное уравнение (4.102), что представляет собой сложную задачу. Различные приближенные методы дают оценку для типичных экспериментов по переохлаждению малых объемов различных металлов $\tau_0 \approx 10^{-7} - 10^{-10}$ с. Однако при кристаллизации сильно вязких расплавов или аморфных твердых тел, значение времени запаздывания может сильно возрасть и достигать десятков и сотен секунд. В этом случае кинетика зародышеобразования определяется вязкостью. Низкотемпературная ветка частоты нестационарного зародышеобразования при кристаллизации вязких расплавов лежит ниже соответствующих значений стационарной частоты зародышеобразования.

При образовании пузырьков пара в перегретой жидкости хорошей оценкой для частоты гомогенного зародышеобразования является выражение

$$\ln J = 88 - W_c / kT, \quad (4.124)$$

где частота зародышеобразования имеет размерность $\text{с}^{-1}\text{м}^{-3}$. Соответствующие значения перегрева входят в работу образования пузырька пара критического размера. На рис. 4.5 приведены экспериментальные данные по достижимым перегревам.* Сплошная линия 1 соответствует линии равновесия протяженных жидкой и паровой фазам (бинодали). Линия 2 – расчет по теории при фиксированном значении частоты зародышеобразования $J = 10^{12} \text{ с}^{-1}\text{м}^{-3}$, соответствующей типичным экспериментальным условиям. Линия 3 – граница термодинамической устойчивости жидкости (спинодаль). Точки соответствуют экспериментальным данным по предельному перегреву жидкости. С – критическая точка жидкость – пар.

Таким образом, при исследовании кинетики зарождения новой фазы во многих жидкостях наблюдается хорошее согласие экспериментальных данных с теорией гомогенной нуклеации.

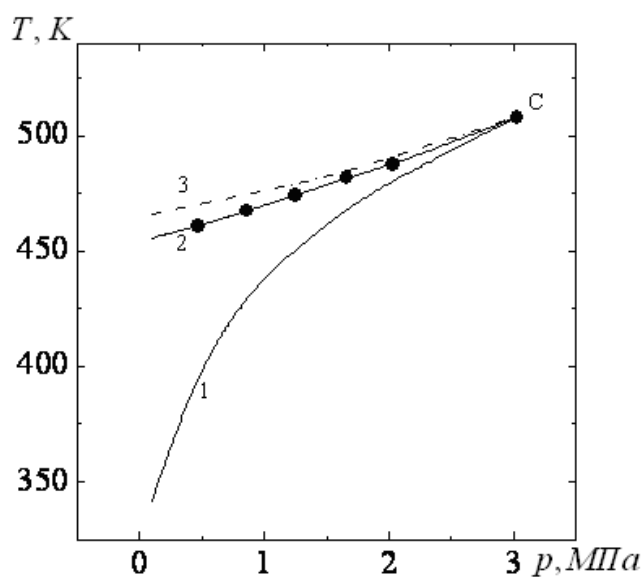


Рис. 4.5. Бинодаль (1), линия достижимых перегревов (2) и спинодаль (3) жидкого гексана

* Теплофизические свойства жидкостей в метастабильном состоянии: справочник / В.П.Скрипов и др. М.: Атомиздат, 1980. 208 с.

Образование зародышей новой фазы является ярким проявлением стохастичности на макроуровне. Стохастическое описание процесса получило экспериментальное подтверждение.

Приведенное выше рассмотрение кинетики фазового перехода относится только к начальной стадии перехода, когда объем всех зародышей новой фазы должен быть настолько мал, чтобы их возникновение и рост не отражались заметно на степени метастабильности основной фазы. На этой стадии происходит флуктуационное образование зародышей новой фазы, и рост каждого из них не зависит от поведения остальных зародышей.

В заключение данного параграфа рассмотрим основные моменты кинетики фазового перехода первого рода в рамках общей теории фазовых переходов Ландау. Пусть фазовый переход в системе описывается параметром порядка x .

Запишем динамическое уравнение Гинзбурга–Ландау (3.11) для параметра порядка x в виде

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x - \beta x^3. \quad (4.125)$$

Здесь $\beta > 0$ берется из соображений устойчивости системы (см. п. 3.2.1), а параметр λ может принимать как положительные, так и отрицательные значения ($\lambda = 0$ – соответствует критической точке).

Уравнение Гинзбурга–Ландау (4.125) является детерминированным и не учитывает хаотичности теплового движения молекул. Вследствие хаотического теплового движения молекул в системах большого числа частиц постоянно рождаются и исчезают флуктуации самых разных размеров. Микроскопическое состояние среды изменяется при этом намного быстрее, чем макроскопическое состояние системы. Быстрые флуктуации среды можно рассматривать как некоторый случайный процесс с очень малым временем корреляции, в пределе как δ -коррелированный процесс. Формально случайный характер теплового движения молекул можно учесть по

аналогии с броуновским движением, введя в уравнение (4.125) некоторую случайную силу $\xi(t)$:

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x - \beta x^3 + \xi(t). \quad (4.126)$$

Относительно флуктуирующей силы будем полагать, что это гауссовский δ - коррелированный шум, т.е. $\langle \xi(t) \rangle = 0$, $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t - t')$.

Уравнение (4.126) представляет собой уравнение Ланжевена, описывающее броуновское движение вдоль фазовой оси x в поле с потенциалом, определяемым разложением Ландау (3.4). Уравнению Ланжевена соответствует уравнение Фоккера–Планка. Согласно (4.44), уравнение Фоккера – Планка для плотности вероятности $P(x, t)$, соответствующее уравнению Ланжевена (4.123), имеет вид

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(\lambda x - \beta x^3) P(x, t) \right] + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \quad (4.127)$$

Данное уравнение допускает стационарное решение (см. (4.58))

$$P_0(x) = N \exp \left[-\frac{2}{\sigma^2} \Delta \Phi \right] = N \exp \left[\frac{2}{\sigma^2} \left(\frac{\lambda x^2}{2} - \frac{\beta x^4}{4} \right) \right], \quad (4.128)$$

где N – нормировочный множитель. При изменении знака параметра λ изменяется форма функции распределения (4.128): при $\lambda < 0$ она имеет один максимум, что соответствует одному устойчивому состоянию (закритическое состояние), при $\lambda > 0$ два пика, что соответствует двум устойчивым состояниям (докритическое состояние). Учитывая, что показатель экспоненты в (4.128) зависит от x в соответствии с рис.3.1, нетрудно понять, что $P_0(x)$ будет иметь два максимума в точках, соответствующих минимуму $\Delta \Phi(x)$. Ширина соответствующих пиков будет определяться величиной дисперсии σ^2 . Это означает, что стационарные вероятности (при $t \rightarrow \infty$) заставить систему в одном или другом фазовом состоянии будут равны друг другу, так как в данной постановке задачи глубины минимумов

$\Delta\Phi(x)$ одинаковы. В реальных условиях при конечных временах наблюдения вероятность застать систему в одном из двух возможных состояний будет определяться начальными условиями. Теоретическое определение такой вероятности связано с решением нестационарного уравнения Фоккера – Планка, для которого будет необходимо задать начальные условия для параметра порядка x . Если величина барьера $\Delta\Phi(x)$ при переходе из одного состояния в другое будет достаточно велика, то вероятность застать систему в минимуме $\Delta\Phi(x)$, соответствующем начальному состоянию, может за конечные времена оказаться близкой к единице, а во втором минимуме близкой к нулю.

Заметим, что в теории Ландау не конкретизируется физический смысл параметра порядка и конкретная природа фазового перехода. Основные положения этой теории можно использовать и для неравновесных фазовых переходов различной природы. Физический смысл параметра порядка x и случайной силы в соответствующем уравнении Ланжевена (4.126) определяется конкретной задачей.

В случае пространственно распределенных систем рост зародыша новой фазы при фазовых переходах первого рода может происходить в виде волны переключения. Действительно, релаксация параметра порядка в пространственно распределенных системах описывается распределенным уравнением Гинзбурга–Ландау (3.26). Легко заметить, что при $f(x) = \lambda x - \beta x^3$, уравнение (3.162), описывающее бистабильные активные среды, имеет вид уравнения Гинзбурга–Ландау (3.26) для параметра порядка x , описывающего динамику релаксации параметра порядка при фазовых переходах.

Перепишем уравнение волны (3.162) в следующей форме:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\delta\Phi(x)}{\delta x(r,t)}, \quad (4.129)$$

где правая часть выражена как вариационная производная от функционала:

$$\Phi = \int \left[U(x(r)) + \frac{1}{2} D(\nabla x)^2 \right] dr, \quad (4.130)$$

где функция

$$U = -\int f(x) dx = -\frac{1}{2} \lambda x^2 + \frac{1}{4} \beta x^4. \quad (4.131)$$

Уравнение (4.129) имеет вид уравнения Ландау–Халатникова (3.24) и описывает динамику фазового перехода с параметром порядка x в потенциале Φ , определяемом функционалом (4.130). Таким образом, движение фронта фазового перехода можно рассматривать в виде волны переключения.

Из уравнений (4.129) и (4.130) следует, что Φ не может возрастать с течением времени независимо от выбора исходного состояния. Действительно,

$$\frac{d\Phi}{dt} = \int \frac{\delta\Phi}{\delta x(r,t)} \frac{\partial x}{\partial t} dr = - \int \left(\frac{\delta\Phi}{\delta x(r,t)} \right)^2 dr \leq 0. \quad (4.132)$$

Устойчивым стационарным состояниям соответствуют минимумы функционала Φ , и эволюция системы заключается в приближении к одному из таких стационарных состояний.

Стационарные состояния $x = x_1$ и $x = x_3$ (см. п. 3.4.3, рис. 3.28) всегда устойчивы по отношению к малым возмущениям, поскольку любое малое возмущение приведет к возрастанию функционала Φ . Если система первоначально находилась в состоянии, которое не отвечает абсолютному минимуму Φ , то, создав достаточно большое возмущение, ее можно перевести в наиболее устойчивое состояние, отвечающее наиболее глубокому минимуму Φ . Абсолютному минимуму функционала соответствует наименьшее значение U . Для ситуации, изображенной на рис. 3.28, это состояние с $x = x_3$.

На рис. 4.6 показано, как эволюционируют со временем малые и большие возмущения стационарного состояния $x = x_1$.

Уравнение (4.129) с потенциалом (4.130) при произвольных $U(x)$ может характеризовать различные неравновесные процессы в распределенных системах. При этом в соответствии с (4.132) неравновесный процесс будет развиваться так, что $\Delta\Phi/dt$ будет строго меньше нуля стационарное распределение $x(r)$ будет минимизировать функционал Φ (4.130). Если минимумов у функционала больше одного, то каждому минимуму будет соответствовать определенное стационарное распределение $x(r)$, которое также принято называть неравновесной фазой системы.

Если данная фаза соответствует относительному, но не абсолютному минимуму Φ , то она является метастабильной. Метастабильная фаза устойчива к бесконечно малым возмущениям, но неустойчива по отношению к возмущениям конечного уровня, т. е. если внутри нее возник достаточно крупный зародыш, он начинает расти. Для неравновесных фазовых переходов функционал (4.130) играет роль потенциала Гиббса для “обычных” фазовых переходов.

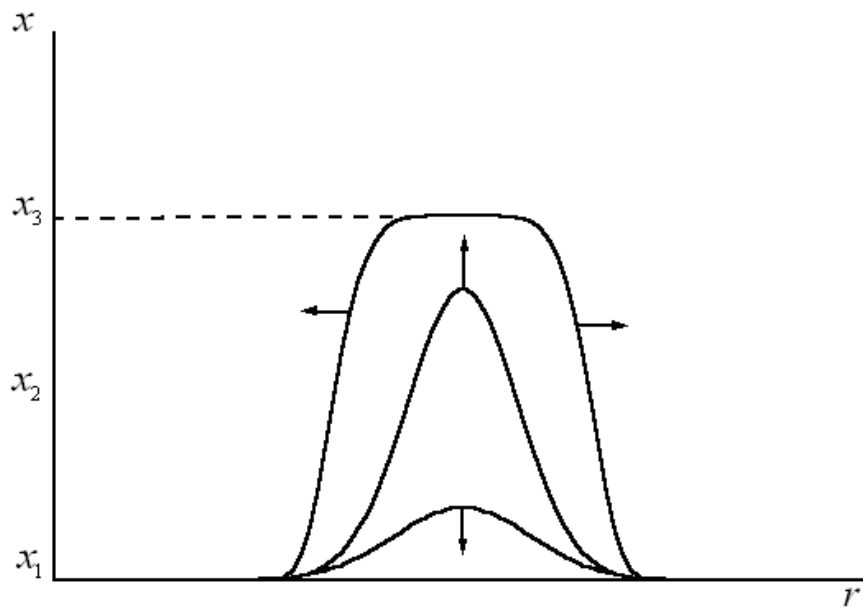


Рис. 4.6. Эволюция со временем различных локальных возмущений

Критический размер зародыша определяется конкуренцией двух факторов. С одной стороны, образование зародыша, внутри которого x близко к x_3 , выгодно для системы, поскольку это уменьшает первое слагаемое в выражении для потенциала (4.130). С другой стороны, возникновение зародыша означает возникновение в среде неоднородности, а поэтому и появление дополнительного положительного вклада в потенциал Φ , пропорционального $(\nabla x)^2$. В капиллярной теории зарождения зародышей новой фазы возникновение неоднородности связывается с поверхностным натяжением.

4.3.4. Развитая турбулентность

Как уже отмечалось в гл. 3, в фазовом пространстве трех переменных x, y, z в некоторой окрестности управляющих параметров существует область, так называемого странного аттрактора, в которой фазовые траектории имеют сложную и очень запутанную структуру. Это дало основания рассматривать систему уравнений Лоренца как простейшую модель турбулентного движения. Этих оснований, однако, едва ли достаточно. Система уравнений Лоренца – простейшая аппроксимация уравнений гидродинамики. Странные аттракторы, возможно, являются важными элементами турбулентного движения, которое, безусловно, является более сложным явлением.

В п. 3.3.5 мы рассмотрели качественную картину возникновения турбулентности при малой степени надкритичности. Турбулентное движение жидкости при достаточно больших значениях числа Рейнольдса характерно чрезвычайно нерегулярным, беспорядочным изменением скорости со временем в каждой точке потока (развитая турбулентность); скорость все время пульсирует около некоторого своего среднего значения. Такое

же нерегулярное изменение скорости имеет место от точки к точке потока, рассматриваемого в заданный момент времени.

Рассмотрим результаты описания развитого турбулентного движения с использованием статистических методов и методов теории подобия.

Введем понятие о средней скорости движения $u(\vec{r})$, получающейся в результате усреднения по большим промежуткам времени истинной скорости в заданной точке пространства. При таком усреднении нерегулярность изменения скорости сглаживается и средняя скорость оказывается плавно меняющейся вдоль потока функцией координат. Разность между истинной и средней скоростями называют пульсационной частью скорости.

Рассмотрим подробнее характер накладывающегося на усредненный поток нерегулярного, пульсационного, движения. Это движение можно в свою очередь качественно рассматривать как результат наложения движений (турбулентных пульсаций, вихрей) различных масштабов (под масштабом движения подразумевается порядок величины тех расстояний, на протяжении которых скоординированно меняется скорость движения). По мере возрастания числа Рейнольдса возникают сначала крупномасштабные пульсации; чем меньше масштаб движения, тем позже такие пульсации появляются. При очень больших числах Рейнольдса в турбулентном потоке присутствуют пульсации с масштабами от самых больших до очень малых. Основную же роль в турбулентном потоке играют крупномасштабные пульсации, масштаб которых порядка величины характеристических длин, определяющих размеры области, в которой происходит турбулентное вихревое движение. Обозначим порядок величины этого основного (или внешнего) масштаба турбулентного движения посредством L . Эти крупномасштабные движения обладают наибольшими амплитудами. Их скорость по порядку величины сравнима с изменениями средней

скорости Δu на протяжении расстояний L . Крупномасштабные пульсации соответствуют низким частотам.

Мелкомасштабные пульсации, соответствующие большим частотам, участвуют в турбулентном потоке со значительно меньшими амплитудами. Их можно рассматривать как мелкую детальную структуру, накладывающуюся на основные крупномасштабные турбулентные движения. В мелкомасштабных пульсациях заключена лишь сравнительно малая часть всей кинетической энергии жидкости.

Свойства течения жидкости в целом определяются числом Рейнольдса $Re = uL/\nu$, где ν – кинематическая вязкость. Наряду с таким числом вводят понятие о числах Рейнольдса турбулентных пульсаций различных масштабов. Если l – масштаб пульсаций, а u_l – порядок величины их скорости, то $Re_l = u_l l/\nu$. Это число тем меньше, чем меньше масштаб движения.

При больших Re велики также и числа Рейнольдса Re_l крупномасштабных пульсаций. Отсюда можно заключить, что для крупномасштабного движения, являющегося как раз основным во всяком турбулентном потоке, вязкость жидкости не играет существенной роли, поэтому в крупномасштабных пульсациях не происходит и заметной диссипации энергии. Вязкость жидкости становится существенной только для самых мелкомасштабных пульсаций. Именно в этих мелкомасштабных пульсациях, не существенных с точки зрения общей картины движения жидкости в турбулентном потоке, и происходит диссипация энергии. Таким образом, диссипация энергии при турбулентном движении происходит следующим образом. От пульсаций с большими масштабами энергия переходит в пульсации с меньшими масштабами, практически не диссипируясь при этом. Можно сказать, что имеется непрерывный поток энергии от крупномасштабных пульсаций к мелкомасштабным пульсациям, то есть от малых частот к большим. Этот поток диссипируется, т. е. кинетическая энергия переходит в тепло в са-

мых мелкомасштабных пульсациях. Разумеется, для поддержания стационарного состояния потока необходимо наличие внешних источников энергии, непрерывно передающих ее основному крупномасштабному движению.

Поскольку вязкость жидкости существенна только для самых мелкомасштабных пульсаций, то можно утверждать, что все величины, относящиеся к турбулентному движению в больших масштабах, не будут могут зависеть от ν . Это обстоятельство сужает круг величин, определяющих свойства турбулентного движения, в результате чего для исследования турбулентности приобретают большое значение соображения подобия, связанные с размерностью имеющихся в нашем распоряжении величин.

Турбулентное движение можно разделить на два интервала: инерционный, в котором движение характеризуется двумя величинами $L, \Delta u$, и вязкий (диссипативный), в котором к ним добавляются еще два параметра — вязкость ν и диссипация энергии ε . Гипотеза о такого рода структуре развитой турбулентности была введена А.Н. Колмогоровым в 1941г. Основываясь на этой гипотезе, А.Н. Колмогоров и А.М. Обухов из соображений подобия получили ряд соотношений.

Применим такие соображения к определению порядка величины диссипации энергии при турбулентном движении. Пусть ε есть среднее количество энергии, диссипируемой в единицу времени в единице массы жидкости. Эта энергия черпается из крупномасштабного движения, откуда постепенно передается во все меньшие масштабы, пока не диссипируется в пульсациях масштаба $\sim l_0$. Поэтому, несмотря на то, что диссипация обязана в конце концов вязкости жидкости, порядок величины ε может быть определен с помощью одних только величин, характерных для крупномасштабных движений. Таковыми являются плотность жидкости ρ , размеры L и скорость Δu . Из этих трех величин можно составить всего одну

комбинацию, обладающую той же размерностью, что и ε , т. е. $[\varepsilon] = \text{Дж} / \text{кг} \cdot \text{с} = \text{м}^2 / \text{с}^3$. Таким способом получаем

$$\varepsilon \sim \frac{(\Delta u)^3}{L}. \quad (4.133)$$

Этой величиной определяется порядок величины диссипации энергии в турбулентном потоке.

Турбулентно движущуюся жидкость можно в некоторых отношениях качественно описывать как жидкость, обладающую некоторой, как говорят, турбулентной вязкостью $\nu_{\text{турб}}$, отличной от истинной кинематической вязкости ν . Величина $\nu_{\text{турб}}$ должно по порядку величины определяться величинами ρ , Δu , L . Единственной составленной из них величиной с размерностью кинематической вязкости является произведение $\Delta u L$, поэтому $\nu_{\text{турб}} \sim \Delta U \cdot L$. Отношение турбулентной вязкости к обычной $\nu_{\text{турб}} / \nu \sim \text{Re}$ растет с числом Рейнольдса. Диссипация энергии выражается через турбулентную вязкость формулой

$$\varepsilon \sim \nu_{\text{турб}} \left(\frac{\Delta u}{L} \right)^2. \quad (4.13)$$

Из (4.131) имеем

$$\Delta u \sim (\varepsilon L)^{\frac{1}{3}}. \quad (4.135)$$

Соотношение (4.135) носит название закона Колмогорова – Обухова. Закон Колмогорова – Обухова можно представить в эквивалентной спектральной форме. Вместо масштабов L введем соответствующие волновые числа $k \sim 1/L$. Обозначим через $E(k)$ кинетическую энергию единицы массы жидкости, такую, что $E(k)dk$ есть кинетическая энергия, заключенная в пульсациях со значениями k в интервале dk . Функция $E(k)$ имеет размерность $\text{м}^3 / \text{с}^2$. Составляя комбинацию этой размерности из ε и k , получим

$$E(k) \sim \varepsilon^{\frac{2}{3}} k^{-\frac{5}{3}}. \quad (4.136)$$

Заменяя $k \sim \omega/\Delta u$, получим выражение для распределения энергии по частотам:

$$E(\omega) \sim (\Delta u \varepsilon)^{\frac{2}{3}} \omega^{-\frac{5}{3}}. \quad (4.137)$$

Нижний конец частотного спектра турбулентного движения лежит при частотах $\omega_{\min} \sim u/L$. Верхний же его конец определяется частотами $\omega_{\max} \sim u/l_0$. Распределение энергии по частотам (4.137) есть спектр мощности турбулентных пульсаций: $E(\omega) = \langle S(\omega) \rangle$.

Степенная зависимость энергии от частоты означает масштабную инвариантность пульсаций, т. е. отсутствие выделенного пространственного (4.136) и временного (4.137) масштабов. Однако не все случайные процессы, обладающие свойством масштабной инвариантности, сводятся к турбулентным пульсациям. Примером таких процессов является так называемый $1/f$ шум.

4.3.5. $1/f$ шум

Спектр мощности (или спектральная плотность) флуктуаций является важной характеристикой случайного процесса. Напомним, что спектр мощности характеризует энергию флуктуационного процесса, приходящуюся на единичный интервал частот вблизи выделенной частоты f . Экспериментально спектр мощности определяется отношением среднего квадрата амплитуды сигнала, прошедшего через фильтр с полосой пропускания достаточно малой ширины Δf вблизи частоты f , к ширине полосы Δf . Другой способ определения спектра мощности – через Фурье преобразование сигнала. Если функцию $x(t)$ можно разложить в интеграл Фурье

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x_f(f) e^{2\pi i f t} df, \quad (4.138)$$

где Фурье-образ

$$x_f(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-2\pi i f t} dt, \quad (4.139)$$

то спектральная плотность процесса определяется как средний квадрат амплитуды Фурье-преобразования:

$$S(f) = \left\langle |x_f(f)|^2 \right\rangle. \quad (4.140)$$

При практическом вычислении коэффициентов Фурье преобразования интегрирование в (4.138), (4.139) ведется в конечных пределах, определяемых длиной реализации $x(t)$.

Как уже отмечалось в п. 3.4.3, если $x(t)$ – стационарный эргодический процесс (стационарность процесса означает постоянство моментов функции распределения, а эргодичность означает равносильность усреднения по времени и по ансамблю реализаций), то спектральная плотность связана с автокорреляционной функцией теоремой Винера–Хинчина (3.103).

Лоренцевский спектр мощности. Найдем спектр мощности случайного процесса, определяемого линейным уравнением Ланжевена:

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x + \xi(t), \quad (4.141)$$

где $\xi(t)$ – гауссовский δ - коррелированный процесс; т.е. случайная функция $\xi(t)$ имеет нормальное (гауссовское) распределение с нулевым средним, а автокорреляционная функция от $\xi(t)$ является δ - функцией (см. (4.4)). Фурье преобразование от левой и правой частей (4.141) имеет вид

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)_{\omega} = -\lambda x_{\omega} + \xi_{\omega}, \quad (4.142)$$

где индекс “ ω ” означает Фурье образ. Учитывая, что Фурье-образ от производной равен

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{\omega} = i\omega x_{\omega} \quad (4.143)$$

(в этом легко убедиться, интегрируя интеграл Фурье по частям), получим

$$x_{\omega} = \frac{\xi_{\omega}}{\lambda + i\omega} = \frac{\xi_{\omega}(\lambda - i\omega)}{\lambda^2 + \omega^2}. \quad (4.144)$$

Возводя (4.144) в квадрат и усредняя, получим

$$|x_{\omega}|^2 = \frac{\text{const}}{\lambda^2 + \omega^2}. \quad (4.145)$$

Здесь const определяется спектром мощности случайной функции $\xi(t)$ и согласно (4.5)

$$\text{const} = |\xi_{\omega}|^2 = \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}}. \quad (4.146)$$

Переходя к частоте $f = \omega/2\pi$ и учитывая (4.146), получим выражение

$$S(f) = \frac{\sigma^2}{(2\pi)^{5/2}(f_0^2 + f^2)}, \quad (4.147)$$

где $f_0 = \lambda/2\pi$. Зависимость $S(f)$, даваемая формулой (4.147), носит название функции Лоренца и соответственно спектр мощности, определяемый (4.147), носит название лоренцевского спектра. Величина f_0 определяет характерную частоту процесса и обратно пропорциональна времени релаксации. Действительно, решение детерминированного уравнения (4.141) в отсутствие внешнего шума ($\xi(t) = 0$) имеет вид: $x(t) \sim \exp(-t/\tau)$, где $\tau = 1/\lambda = 2\pi/f_0$.

Характерной особенностью лоренцевского спектра является наличие горизонтальной полки в области низких частот. При $f_0 \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$) спектр мощности $S = \text{const}$, т.е. равномерно распределен по частоте.

там (спектр белого шума), при больших собственных частотах $f_0 \gg f$ ($\tau \rightarrow 0$) спектр мощности $S \sim 1/f^2$.

Автокорреляционную функцию процесса можно вычислить по спектральной плотности (4.147) с использованием теоремы Винера – Хинчина или непосредственно из решения уравнения Ланжевена, как это было сделано в п. 4.3.2 (формула (4.81)). Получим, что автокорреляционная функция экспоненциально спадает со временем:

$$R(t) = \frac{\tau\sigma^2}{2} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (4.148)$$

Лоренцевские спектры мощности, равно как и экспоненциальное затухание временных корреляций, характерны для многих случайных процессов, встречающихся в природе.

Фликкер-шум. В 1925 г. Дж. Джонсоном при исследовании тока эмиссии электронных ламп был открыт флуктуационный процесс, спектр мощности которого изменялся обратно пропорционально частоте, т.е. $S_f \sim 1/f$. Такой процесс был назван *фликкер-шумом*. Обратно пропорциональная зависимость спектральной плотности от частоты означает возможность крупномасштабных (высокоэнергетичных) низкочастотных выбросов в системе.

Первоначально фликкер-шум исследовался применительно к различным электронным приборам. Оказалось, что фликкер-шум проявляется практически у всех материалов и элементов, используемых в электронике. Впоследствии выяснилось, что фликкер-шум является универсальным типом флуктуаций, который помимо физики твердого тела наблюдается в самых различных сферах: в астрофизике – во флуктуациях рентгеновского излучения галактик, микроволнового излучения квазаров и солнечных пятен; в геофизике – при грозах, землетрясениях и разливах рек; в биологии – в ритмах сердечной деятельности и деятельности головного мозга, колебании инсулина в крови и в нейромембранах; в экономике – при колебани-

ях курсов акций на биржах; в дорожном движении; в информатике – при флуктуациях информационных потоков в компьютерных сетях; даже в музыке. Такое многообразие и широкое распространение фликкер шума свидетельствует о его возможных универсальных причинах и источниках.

В современной литературе фликкер-шум чаще называют $1/f$ шумом или $1/f$ флуктуационным процессом, а соответствующие ему спектры мощности называют $1/f$ спектрами. Более часто встречается частотная зависимость спектральной плотности вида $S \sim 1/f^\alpha$, где величина показателя α лежит в диапазоне $0.8 \leq \alpha \leq 2$. В тех случаях, когда важно указать измеренную частотную зависимость спектров и, следовательно, величину α , используют термин $1/f^\alpha$ шум.

Согласно теореме Винера–Хинчина спектральная плотность является Фурье-образом автокорреляционной функции, поэтому в случае $1/f$ шума, для которого $S_f \sim 1/f$, можно записать выражение для автокорреляционной функции

$$R(t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{f} e^{2\pi i f t} df. \quad (4.149)$$

Интеграл (4.149) расходится как на нижнем, так и на верхнем пределе. Однако эта расходимость является логарифмически медленной. В том случае, когда $1/f$ поведение спектров наблюдается в ограниченном диапазоне частот, автокорреляционная функция спадает по логарифмическому закону:

$$R(t) \sim -\ln(t). \quad (4.150)$$

Медленный логарифмический спад функции корреляции флуктуаций во времени означает наличие у системы с $1/f$ шумом долгой “памяти” о прошлых событиях.

К настоящему времени благодаря многочисленным экспериментальным и теоретическим исследованиям установлены основные свойства

$1/f$ шума. Однако до сих пор нет единого взгляда на природу этого явления. Существуют также сомнения в существовании универсального механизма $1/f$ шума, неопределенной остается локализация источника $1/f$ шума.

Важным является вопрос о функции распределения амплитуд флуктуаций в случайных процессах с $1/f$ спектром. Определение функций распределения по экспериментальным данным делались многократно. Чаще всего, флуктуации с фликкерным спектром распределены по закону, близкому к нормальному. Небольшие различия наблюдаются на “хвостах” функций распределения. Однако в реальных экспериментах часто имеют дело с ансамблем независимых источников. А в силу известной из математической статистики центральной предельной теоремы функция распределения от независимых источников стремится к гауссовской, поэтому гауссовский характер функций распределения, наблюдаемый в экспериментах, может быть следствием суперпозиции независимых источников. В этой связи большое значение имеет выделение элементарных источников $1/f$ флуктуаций и нахождение их функций распределения.

Отличительной особенностью флуктуаций с $1/f$ спектром мощности является их масштабная инвариантность. Масштабная инвариантность означает отсутствие выделенного (в данном случае временного) масштаба. Функция распределения масштабно-инвариантных флуктуаций не изменяется при огрублении реализаций, т.е. наблюдается подобие реализаций, измеренных на различных масштабах. Примером масштабно-инвариантного случайного процесса является развитая турбулентность, рассмотренная в п. 4.3.4. При развитом турбулентном движении спектр мощности пульсаций $S(f) \sim f^{-\alpha}$, где показатель степени $\alpha = 5/3$, т.е. $\alpha > 1$. Как было отмечено в п. 4.3.4, низкочастотный предел степенного поведения при развитой турбулентности ограничен макроскопическими характеристиками потока – средней скоростью u и размерами системы L : $f_{\min} \approx u/L$. При $1/f$ шуме

такое ограничение отсутствует и $1/f$ поведение спектров мощности удается проследить экспериментально до очень низких частот. Анализ случайных процессов с $1/f$ спектром мощности указывает на то, что в отличие от турбулентных пульсаций, при которых происходит переток энергии от низкочастотных движений к высокочастотным с последующей диссипацией в области высоких частот, при $1/f$ шуме имеет место обратный процесс перетока энергии от высокочастотных мод к низкочастотным, поэтому развитая турбулентность не может служить универсальной моделью для многих случайных процессов с $1/f$ спектром мощности.

Другим хорошо известным примером флуктуаций, обладающих свойством масштабной инвариантности, являются флуктуации вблизи критической точки (п. 3.2.3). Однако такие флуктуации наблюдаются в очень узкой окрестности критической точки, т.е. для наблюдения критических флуктуаций требуется тонкая подстройка управляющих параметров, что не согласуется с широкой распространенностью процессов с $1/f$ спектром мощности флуктуаций. Тем не менее схожесть свойств $1/f$ флуктуаций с критическими флуктуациями привела к формулировке концепции самоорганизованной критичности.

Перейдем к краткому рассмотрению некоторых теоретических моделей $1/f$ шума.

Суперпозиция релаксационных процессов. Эта модель широко используется в физике твердого тела для объяснения наблюдаемого $1/f$ шума при прохождении электрического тока через проводники.

Запишем линейное уравнение Ланжевена в виде

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x + \sqrt{\lambda} \xi(t). \quad (4.151)$$

Это уравнение отличается от (4.8) тем, что интенсивность внешнего шума пропорциональна $\sqrt{\lambda}$ (или, что то же самое, обратно пропорциональна корню квадратному из времени релаксации системы: $\sim \sqrt{1/\tau}$).

Беря Фурье-преобразование от левой и правой частей (4.151), возводя в квадрат и усредняя, получим выражение для спектральной плотности, аналогичное (4.147) и отличающееся множителем f_0 в числителе:

$$S(f) = \frac{f_0 \sigma^2}{(2\pi)^{3/2} (f_0^2 + f^2)}. \quad (4.152)$$

Перейдем в (4.152) от частоты f_0 к времени релаксации $\tau = 2\pi/f_0$:

$$S(f) = \frac{\tau \sigma^2}{(2\pi)^{1/2} (4\pi^2 + \tau^2 f^2)}. \quad (4.153)$$

Пусть теперь мы имеем ансамбль независимых источников флуктуаций, описываемых уравнениями типа (4.151) и спектральная плотность которых соответственно определяется формулой (4.153). В силу независимости источников спектр мощности суммарного сигнала будет определяться суперпозицией спектров мощности от каждого независимого источника. Предположим теперь, что каждый источник флуктуаций имеет свое время релаксации и эти времена распределены с плотностью вероятности

$$P(\tau) \approx \frac{1}{\tau^\beta}. \quad (4.154)$$

Спектр мощности суммарного сигнала

$$\begin{aligned} S(f) &= \int_0^\infty P(\tau) \frac{\tau \sigma^2}{(2\pi)^{1/2} (4\pi^2 + f^2 \tau^2)} d\tau = \frac{\sigma^2}{(2\pi)^{1/2}} \int_0^\infty \frac{\tau^{1-\beta}}{4\pi^2 + f^2 \tau^2} d\tau = \\ &= \frac{\sigma^2}{(2\pi)^{1/2}} \frac{1}{f^{2-\beta}} \int_0^\infty \frac{(f\tau)^{1-\beta}}{4\pi^2 + f^2 \tau^2} d(f\tau) = \text{const} \cdot \frac{1}{f^{2-\beta}}. \end{aligned} \quad (4.155)$$

Показатель α , характеризующий частотную зависимость спектра мощности и показатель β , характеризующий распределение времен релаксации связаны между собой соотношением

$$\alpha + \beta = 2 \quad (4.156)$$

При $\beta = 1$, имеем $S(f) \sim 1/f$, т.е. спектр мощности изменяется обратно пропорционально частоте.

Происхождение $1/f$ спектров в описанной модели иллюстрирует рис. 4.7. На этом рисунке показаны лоренцевские спектры мощности от трех случайных процессов. Можно подобрать такие частоты f_{01}, f_{02} и f_{03} (три времени релаксации) и соответствующие интенсивности внешнего белого шума, что суммарный процесс будет иметь спектр мощности, близкий к $1/f$ виду.

При выводе частотной зависимости спектра (4.155) сделано два серьезных предположения. Во-первых, времена релаксации должны иметь степенное распределение (4.154). Во-вторых, интенсивность внешнего шума для каждого из источников флуктуаций должна зависеть от времени релаксации.

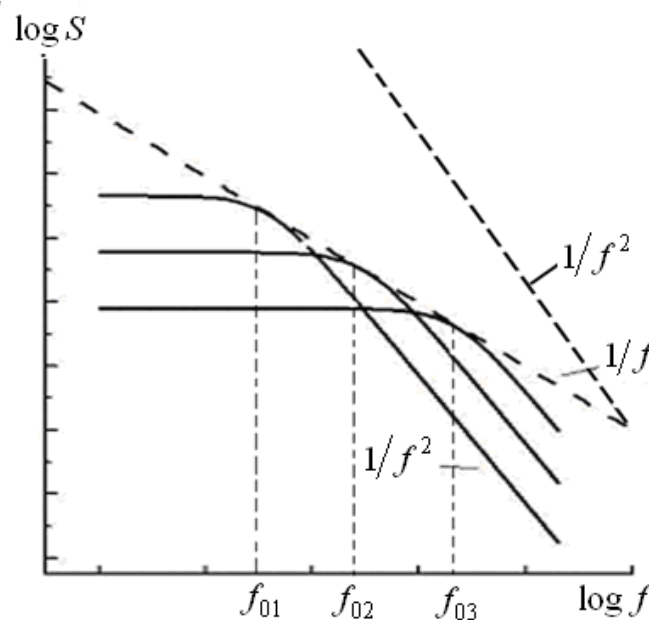


Рис. 4.7. Спектр мощности $1/f$ в модели суперпозиции лоренцевских источников с заданным распределением времен релаксации

Что касается первого предположения, то в частных случаях требуемое распределение получается при прохождении тока через проводники с определенным типом дефектов. Второе предположение означает, что для каждого типа дефектов (для каждого времени релаксации) должна существовать своя интенсивность внешнего белого шума. Если считать, что таким

внешним шумом является тепловой шум, интенсивность которого $\sim kT$, то каждому дефекту необходимо приписать свою температуру, чему трудно дать физическую интерпретацию.

Заметим, что степенное распределение плотности вероятности времен релаксации, которое постулируется в данной модели, означает отсутствие какого-либо выделенного временного масштаба (свойство степенных распределений). Иными словами, масштабная инвариантность интегрального сигнала при суперпозиции релаксационных процессов заложена в предположении (4.154).

Как было отмечено выше, масштабная инвариантность $1/f$ шума имеет сходство с критическими флуктуациями вблизи точки фазового перехода второго рода. Это дало основание П. Баку, К. Тангу и К. Вейсельфельду сформулировать в 1987 г. концепцию *самоорганизованной критичности**.

Самоорганизованная критичность. Первоначально понятие о самоорганизованной критичности было введено для объяснения $1/f$ шума. В настоящее время концепция самоорганизованной критичности широко применяется для описания поведения сложных систем с развитыми флуктуациями в самых различных областях физики, экологии, биологии, в социальных науках.

Присутствие в системе $1/f$ шума означает отсутствие выделенного масштаба времени. Отсутствие выделенных пространственных и временных масштабов (пространственно-временная инвариантность) означает самоподобие флуктуаций. Такое самоподобие характерно для критической точки, поэтому гипотеза Бака, Танга и Визенфельда заключается в том, что $1/f$ поведение спектральной плотности каким-то образом связано с критическим состоянием системы. При этом предполагается, что система является пространственно-распределенной, а ее поведение определяется боль-

* Бак П. Самоорганизованная критичность / П. Бак, К. Чен // В мире науки. 1991. №3. С.16 – 24.

шим числом взаимодействий. Но термодинамическая критическая точка требует тонкую подстройку параметров состояния (например, температура и давление в критической точке жидкость – пар), а самоорганизованная критичность является состоянием, к которому приходит система в результате своей эволюции без тонкой подстройки управляющих параметров.

Базовой моделью теории самоорганизованной критичности является куча песка. Пусть мы имеем поднос, в центр которого по одной добавляются песчинки. Если на каком-либо участке кучи наклон становится слишком велик, то песчинка соскальзывает вниз, увлекая за собой другие песчинки и срывая тем самым лавину, которая либо затухает, попав в область с небольшим наклоном, либо достигает края подноса, где песчинки сваливаются с него, покидая систему. Если средний наклон кучи не очень велик, то очередная песчинка, скорее всего, не вызовет значительных изменений. Если наклон очень большой, то добавление одной единственной песчинки может привести к макроскопическому оползню, в который будет вовлечена большая масса песка. Если наклон имеет некоторое промежуточное значение, то нельзя указать характерный размер лавины, вызываемый добавлением одной песчинки. В этом случае закон распределения лавин по размерам имеет степенной вид (критическое поведение). Масса песка будет флуктуировать со спектральной плотностью $\sim 1/f^\alpha$, где показатель степени α лежит в интервале $1 < \alpha \leq 2$. Независимо от своего начального состояния куча песка эволюционирует к критическому состоянию, в котором она характеризуется вполне определенным значением среднего наклона. Эта задача может быть сформулирована на языке клеточных автоматов. При моделировании самоорганизованной критичности, как правило, рассматривают клеточный автомат, то есть систему, в которой пространственные и временные координаты могут принимать лишь дискретные значения. Правило перехода из одного состояния в другое таково, что в момент $t+1$ состояние системы определяется состоянием в момент t и со-

стоянием некоторого числа ближайших соседей в момент времени t . В двумерном случае простейший клеточный автомат “куча песка” задается следующим алгоритмом. Задается двумерная квадратная решетка. Координаты ячеек обозначим, как (x, y) . Каждой ячейке ставится в соответствие целое число $z(x, y)$. На первом шаге полагается, что все $z(x, y) = 0$. Затем случайным образом выбирается ячейка, и число z для нее увеличивается на единицу, т.е. $z(x, y) \rightarrow z(x, y) + 1$. Снова случайным образом выбирается ячейка (эта может быть та же самая ячейка, что и на первом шаге), и число z для нее увеличивается на единицу. Так продолжается до тех пор, пока число z в одной из ячеек не превысит критическое значение z_c (в двумерной модели обычно полагается $z_c = 4$). В этом случае возникает “лавины” – значение z в ячейке с $z = z_c$ зануляется, а в соседних ячейках увеличивается на единицу. Таким образом, сход лавины представляется следующим алгоритмом:

$$\begin{aligned} z(x \pm 1, y) &\rightarrow z(x \pm 1, y) + 1, \\ z(x, y \pm 1) &\rightarrow z(x, y \pm 1) + 1, \\ z(x, y) &\rightarrow z(x, y) - 4, \quad \text{для } z(x, y) \geq z_c \end{aligned} \tag{4.157}$$

В настоящее время существует большое число модификаций клеточных автоматов различной размерности, моделирующих сход лавин. Оказалось, что в большинстве моделей самоорганизованной критичности показатель степени α в частотной зависимости спектров мощности $S \sim 1/f^\alpha$ близок не к 1, а к 2. Концепция и модели самоорганизованной критичности внесли большой вклад в теорию лавин. Однако первоначальная цель введения самоорганизованной критичности – объяснение $1/f$ шума – во многом осталась открытой.

1/f шум при неравновесных фазовых переходах. Экспериментальные исследования показали, что интенсивные флуктуации со спектром мощности, обратно пропорциональным частоте, могут наблюдаться при неравновесных фазовых переходах. В частности, такие флуктуации были

обнаружены при неравновесных фазовых переходах, связанных с тепловым разрушением сверхпроводимости и с кризисом теплоотдачи при кипении (эти примеры приводились в п. 3.4.3).

На рис. 4.8 приведен спектр мощности флуктуаций падения напряжения на сверхпроводнике при кризисе кипения охладителя (жидкого азота)*. Пунктирной линией показана зависимость $S \sim 1/f$. В этом случае мы имеем наложение двух неравновесных фазовых переходов: образования домена нормальной (несверхпроводящей) фазы при разрушении сверхпроводимости транспортным током и смены режима кипения азота на этом домене (кризис кипения). При этом оба перехода оказывают взаимное влияние друг на друга.

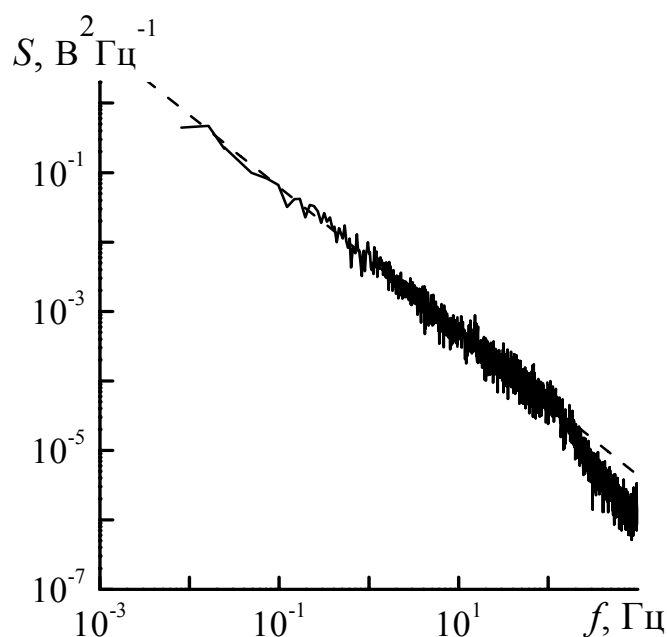


Рис. 4.8. Спектр мощности колебаний напряжения на сверхпроводнике. Рост домена нормальной фазы вызывает рост тепловыделения и, как следствие, способствует росту паровой пленки, контактирующей с тепловыделяющей поверхностью. С другой стороны, ухудшение теплоотдачи при пе-

* Коверда В.П. $1/f$ - шум в критическом неравновесном фазовом переходе / В.П. Коверда, В.Н. Скоков, В.П. Скрипов // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т.63, №9. С.739 – 742.

переходе к пленочному кипению способствует росту температуры поверхности и, как следствие, росту домена нормальной фазы. Оба перехода происходят при шумовом воздействии, вызванном случайными актами образования и отрыва паровых пузырей.

Происхождение флуктуаций с $1/f$ спектром мощности при неравновесных фазовых переходах было объяснено в рамках предложенной феноменологической модели взаимодействующих неравновесных фазовых переходов в присутствии внешнего шума^{*}. В данной теории для описания динамики флуктуаций используются стохастические уравнения, которые в простейшем случае в сосредоточенной (не зависящей от пространственных координат) системе имеют вид

$$\begin{aligned}\frac{d\phi}{dt} &= -\phi\psi^2 + \psi + \Gamma_1(t), \\ \frac{d\psi}{dt} &= -\phi^2\psi + 2\phi + \Gamma_2(t),\end{aligned}\tag{4.158}$$

где ϕ, ψ – динамические переменные (параметры порядка); Γ_1, Γ_2 – гауссовы δ -коррелированные шумы. В отсутствие шума ($\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0$) система имеет стационарное решение $\phi = \psi = 0$. Легко показать, что собственные значения соответствующего характеристического уравнения, определяемые выражением (3.72), равны $\mu_{1,2} = \pm\sqrt{2}$, т.е. вещественны и противоположных знаков. Следовательно, стационарная точка $(0,0)$ является седлом. Кроме седловой точки $(0,0)$, система (4.155) имеет асимптотическое решение: $\phi(t) \rightarrow 1/\sqrt{2t}$, т.е. $\phi(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$; $\psi(t) \rightarrow \sqrt{2t}$, т.е. $\psi(t) \rightarrow \infty$ при $t \rightarrow \infty$. На рис.4.9 показан фазовый портрет бесшумовой системы (4.158), т.е. фазовые траектории, соответствующие различным начальным условиям. Действие белого шума в системе (4.158) снимает расходимость

^{*} Коверда В.П./ $1/f$ -шум при неравновесном фазовом переходе. Эксперимент и математическая модель/ В.П. Коверда, В.Н. Скоков, В.П. Скрипов // ЖЭТФ. 1998. Т.113, №.5. С.1748 - 1757.

$\psi(t)$ при $t \rightarrow \infty$, и реализации случайных процессов $\phi(t)$ и $\psi(t)$ становятся стационарными.

Систему (4.158) можно записать в виде

$$\begin{aligned}\frac{d\phi}{dt} &= -\frac{\partial\Phi}{\partial\phi} + \Gamma_1(t), \\ \frac{d\psi}{dt} &= -\frac{\partial\Phi}{\partial\psi} + \phi + \Gamma_2(t),\end{aligned}\tag{4.159}$$

где потенциальная функция $\Phi(\phi, \psi)$ определяется выражением

$$\Phi = \frac{1}{2}\phi^2\psi^2 - \phi\psi.\tag{4.160}$$

Вид функции $\Phi(\phi, \psi)$ показан на рис.4.10. Рельеф потенциала представляет собой две гиперболические долины, разделенные барьером, самая низшая точка которого (перевал) находится в начале координат. А долины по мере удаления от начала координат сужаются все более круто возрастающими стенками.

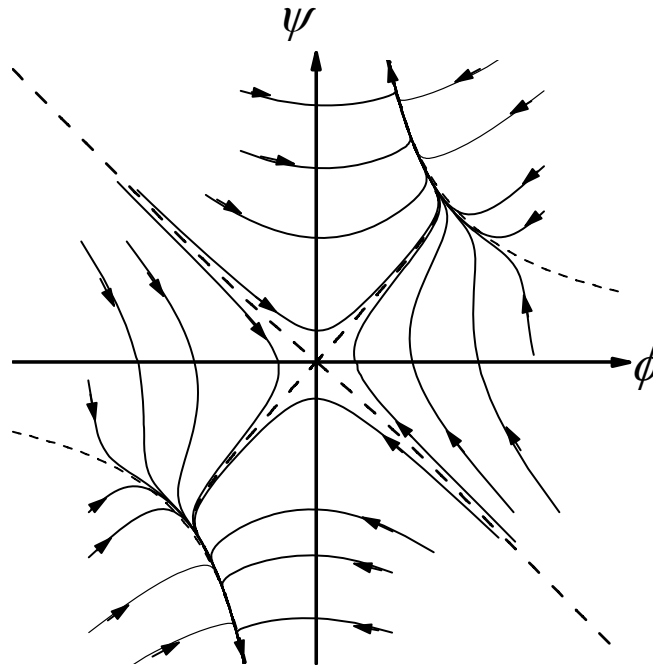


Рис. 4.9. Фазовый портрет системы, полученный численным интегрированием (4.158) в отсутствие внешнего шума ($\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0$)

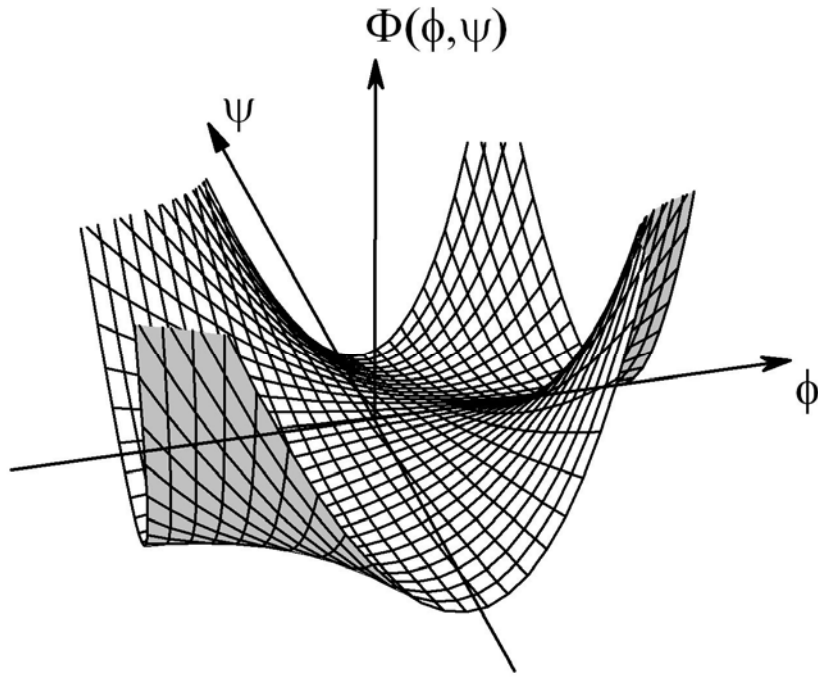


Рис.4.10. Вид потенциальной функции $\Phi(\phi, \psi)$

Наличие слагаемого ϕ в правой части второго уравнения (4.159) (коэффициента 2 при переменной ϕ во втором уравнении (4.158)) делает систему непотенциальной, что можно интерпретировать как наличие некоторого потока. Непотенциальность системы не препятствует тому, чтобы динамические уравнения (4.159) рассматривать как уравнения Ландау–Халатникова, а потенциал Φ в виде разложения Ландау.

Для того чтобы понять физический смысл потенциала Φ , сделаем линейное преобразование динамических переменных: $\phi = (\eta - \theta)/\sqrt{2}$, $\psi = (\eta + \theta)/\sqrt{2}$, которое соответствует повороту фазовой плоскости на угол $\pi/4$. В новых переменных потенциал Φ примет вид

$$\Phi = \frac{1}{4}\eta^4 - \frac{1}{2}\eta^2 + \frac{1}{4}\theta^4 + \frac{1}{2}\theta^2 - \frac{1}{2}\eta^2\theta^2. \quad (4.161)$$

Выражение (4.161) является разложением потенциала системы по степеням параметров порядка η и θ , иначе говоря, (4.161) описывает фазовые переходы с параметрами порядка η и θ . Случай одного параметра порядка

рассматривался нами в п. 3.2.1 при изложении феноменологической теории фазовых переходов Ландау. Разложение (4.161) описывает два фазовых перехода. Из структуры этого выражения видно, что перед квадратичным членом ($\sim \eta^2$) стоит знак минус, а перед квадратичным членом ($\sim \theta^2$) стоит знак плюс. Как отмечалось ранее при рассмотрении теории Ландау, это означает, что переход, характеризующийся параметром порядка η , является докритическим, а переход, характеризующийся параметром порядка θ , — закритическим. Последний член в правой части (4.161) ($\sim \eta^2 \theta^2$) учитывает взаимодействие параметров порядка, следовательно, ответственен за взаимное влияние двух фазовых переходов. Таким образом, физический смысл системы (4.158) означает одновременное протекание и взаимодействие двух фазовых (в общем случае — неравновесных) переходов в присутствии внешнего шумового воздействия (случайные силы $\Gamma_1(t)$ и $\Gamma_2(t)$ в (4.158), (4.159)).

Система стохастических дифференциальных уравнений (4.158) является нелинейной и допускает лишь численное решение. Численный анализ показывает, что система (4.158) в достаточно широком диапазоне интенсивностей внешнего шумового воздействия генерирует стационарные стохастические процессы $\phi(t)$ и $\psi(t)$, спектры мощности которых имеют частотные зависимости $1/f$ и $1/f^2$ соответственно.

На рис. 4.11 приведены спектры мощности флуктуаций $\phi(t)$ и $\psi(t)$, полученные Фурье преобразованием численных решений системы (4.158). Пунктирной линией показана зависимость $\sim 1/f$.

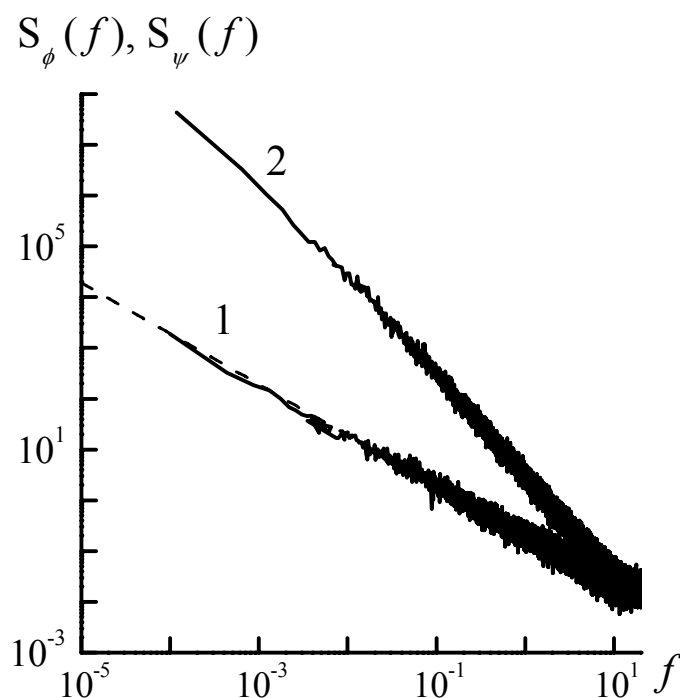


Рис. 4.11. Спектры мощности флуктуаций: 1– $\phi(t)$; 2 – $\psi(t)$

Интересно отметить, что спектр мощности от обратной переменной $1/\psi$ совпадает со спектром мощности переменной ϕ и имеет вид $\sim 1/f$, хотя функции распределения исходных реализаций $\phi(t)$ и $1/\psi(t)$ разные. Эти функции распределения начинают совпадать при проведении процедуры масштабного огрубления с помощью усреднения по некоторому масштабу времени τ (параметр τ называют еще коэффициентом масштабного преобразования). Данная процедура применительно к численным решениям системы (4.158) показала, что, начиная с некоторого значения τ , реализации $\phi(t)$ становятся масштабно-инвариантными. При этом выявляется отличие функций распределения от гауссовских.

Самоподобие при масштабных преобразованиях является важным свойством флуктуаций с $1/f$ спектром мощности. Масштабная инвариантность $1/f$ флуктуаций свидетельствует о критическом поведении системы.

Однако в отличие от “обычной” термодинамической критической точки в данном случае не требуется тонкая подстройка управляющих параметров, как и в случае самоорганизованной критичности.

Модель $1/f$ шума при неравновесных фазовых переходах допускает обобщение на случай пространственно распределенных систем. В одномерном случае простейшая распределенная система стохастических дифференциальных уравнений, решением которой являются случайные процессы с $1/f$ спектром, имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} - \phi \psi^2 + \psi + \Gamma_1(r, t), \\ \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\phi^2 \psi + \phi + \Gamma_2(r, t),\end{aligned}\tag{4.161}$$

Здесь D имеет смысл обобщенного коэффициента диффузии. Шумы Γ_1 и Γ_2 являются δ -коррелированными с нормальным распределением.

Рассмотренные системы стохастических уравнений (4.158) и (4.161) записаны в простейшем виде. Более общий вид (более сложная пространственная распределенность, различные численные коэффициенты перед слагаемыми, наличие слагаемых, пропорциональных другим степеням параметров порядка) усложняют анализ, но не меняют главного результата: взаимодействующие неравновесные фазовые переходы в присутствии внешнего белого шума могут генерировать флуктуации со спектром мощности, обратно пропорциональным частоте. Экспериментальные исследования флуктуационных процессов при различных неравновесных фазовых переходах (переходных и кризисных режимах кипения, кавитации, электрическом разряде, горении) показали, что неравновесные фазовые переходы действительно могут сопровождаться крупномасштабными низкочастотными пульсациями с $1/f$ спектрами мощности.

4.4. Неравновесные фазовые переходы, индуцированные шумом

Рассмотрим влияние внешнего шума на фазовый переход. Имеется наглядная аналогия между фазовыми переходами и механическим движением шарика по желобу. Внешние флуктуации вынуждают совершать шарик колебания в окрестности положения равновесия и тем самым приводят к расплыванию распределения вероятности. Если бы ландшафт, по которому движется шарик, был “безликим”, то шарик под действием внешних флуктуаций совершал бы нечто вроде броуновского движения, но в действительности мы имеем противодействующую систематическую силу, возвращающую шарик на дно долины. Можно ожидать следующего стационарного поведения: плотность вероятности достигает максимума в точке с координатой, соответствующей минимуму потенциала, и несколько размазана в ее окрестности в зависимости от интенсивности внешнего шума. При аддитивном воздействии шума на систему стационарное состояние системы, по крайней мере с одной переменной, не изменяется. Аддитивный шум вынуждает частицу колебаться в долинах потенциала и не влияет на сам потенциал. Таким образом, аддитивный внешний шум оказывает на систему дезорганизующее действие, приводя к расплыванию плотности вероятности $P(x)$ в окрестности детерминированных стационарных состояний, определяемых минимумами потенциала.

В случае мультипликативного шума ситуация изменяется. Действие флуктуаций среды зависит от состояния системы. Это означает, что, следуя механической аналогии, не только частица совершает малые колебания в долинах задаваемого потенциала горного ландшафта, но и отдельные участки “местности” случайным образом поднимаются и опускаются. При мультипликативном шуме наиболее устойчивое состояние не обязательно совпадает с наиболее глубокой потенциальной ямой, даже при очень малой интенсивности шума. Если же интенсивность шума достаточно

велика, то экстремумы плотности вероятности и по числу и по положению могут существенно отличаться от детерминированного стационарного состояния. Иначе говоря, если интенсивность мультипликативного шума превосходит некоторое пороговое значение, функциональная зависимость плотности вероятности $P(x)$ может резко измениться, т.е. происходит переход. В примере с горным ландшафтом мультипликативный шум может привести к образованию новых ям. Это означает, что помимо дезорганизующего действия на систему, которое оказывает на систему аддитивный шум, мультипликативный шум может приводить к возникновению новых состояний. В этом случае говорят о неравновесных фазовых переходах, индуцированных шумом или *индуцированных шумом переходах*^{*}.

Математические аспекты фазовых переходов, индуцированных шумом, достаточно сложны. Мы рассмотрим некоторые простейшие примеры. Понятие переходов, индуцированных шумом, было впервые введено на так называемой модели Ферхюльста, моделирующей рост биологической популяции. Данная модель в детерминированном случае описывается уравнением

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x - x^2. \quad (4.163)$$

Величина $x(t)$ характеризует численность биологической популяции. Параметр λ носит название мальтусовского параметра роста и равен разности между рождаемостью и смертностью в популяции. Второй член в правой части уравнения (4.163) – самоограничительный. Он выражает ограниченность ресурсов популяции, например имеющийся на территории запас пищи сдерживает в остальном неограниченный рост популяции.

^{*} В нелинейных системах неравновесные фазовые переходы могут в ряде случаев быть индуцированы также и аддитивным шумом (см., например, Landa P.S. Influence of additive noise on transitions in nonlinear systems / P.S. Landa, A.A. Zai-kin, V.G. Ushakov, J. Kurths // Phys. Rev. E. 2000. Vol.61. P.4809 – 4820).

Решение уравнения (4.163) имеет вид

$$x(t) = x(0)e^{\lambda t} \left\{ 1 + x(0) \left[(e^{\lambda t} - 1) / \lambda \right] \right\}^{-1}, \quad (4.164)$$

в чем легко убедиться, подставляя (4.164) в (4.161).

При $\lambda < 0$ уравнение допускает только одно стационарное решение $x = 0$, которое устойчиво. При $\lambda = 0$ это решение становится неустойчивым и претерпевает бифуркацию: от него отделяется новая ветвь стационарных состояний $x = \lambda$. В точке $\lambda = 0$ система претерпевает фазовый переход второго рода. Бифуркационная диаграмма системы показана на рис. 4.12.

Нас будет интересовать случай, когда флуктуации среды протекают быстро по сравнению с величиной $\tau_{\text{макро}} = \lambda^{-1}$, определяющей макроскопический временной масштаб эволюции.

Изменения в состоянии среды воздействуют на систему через внешний параметр λ . Если этот внешний параметр можно представить в виде

$$\lambda_t = \lambda + \sigma \xi(t), \quad (4.165)$$

где λ – среднее значение; $\xi(t)$ – гауссовский белый шум. В этом случае динамическое уравнение (4.163) заменяется стохастическим дифференциальным уравнением с мультипликативным шумом:

$$dx = f(x)dt + \sigma g(x)dw(t) = (\lambda x - x^2)dt + \sigma x dw. \quad (4.166)$$

Соответствующее (4.166) уравнение Фоккера – Планка (см.(4.51)) будет иметь вид в интерпретации Ито

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(\lambda x - x^2)P(x,t) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x^2 P(x,t)) \right] \quad (4.167)$$

и в интерпретации Стратоновича

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(\lambda x - x^2 + \frac{\sigma^2}{2} x)P(x,t) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x^2 P(x,t)) \right]. \quad (4.168)$$

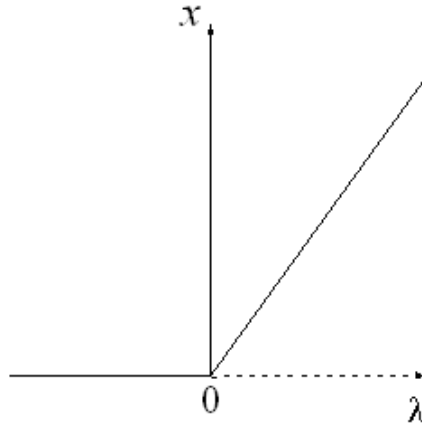


Рис. 4.12. Бифуркационная диаграмма стационарных состояний в модели Ферхюльста: — — устойчивые состояния; ··· — неустойчивые состояния

Экстремумы плотности вероятности являются наиболее подходящим индикатором перехода в стационарном поведении ($\partial P / \partial t = 0$) системы. Их допустимо отождествить с макроскопическими стационарными состояниями систем и можно рассматривать в качестве параметров порядка для неравновесных фазовых переходов.

Стационарное решение уравнений (4.167) и (4.168) определяется выражениями (4.61) – (4.63). В случае исчисления Ито ($\varepsilon = 0$ в (4.62)) можно записать:

$$P_0(x) = Z^{-1} \exp \left\{ -\frac{2}{\sigma^2} \left[\sigma^2 \ln g(x) - \int \frac{f(x)}{g(x)^2} dx \right] \right\}. \quad (4.169)$$

В рассматриваемой модели Ферхюльста $f(x) = \lambda x - x^2$, $g(x) = x$. Подставив эти значения в (4.169) и выполнив преобразования, получим

$$P_0(x) = Z^{-1} x^{(2\lambda/\sigma^2 - 2)} \exp \left(-\frac{2x}{\sigma^2} \right). \quad (4.170)$$

В интерпретации Стратоновича $\varepsilon = 1/2$ и стационарная плотность вероятности в модели Ферхюльста

$$P_0(x) = Z^{-1} x^{(2\lambda/\sigma^2 - 1)} \exp\left(-\frac{2x}{\sigma^2}\right). \quad (4.171)$$

Тип зависимости стационарной плотности вероятности от x определяется диапазоном значений управляющего параметра λ и изображен на рис. 4.13.

В случае $\lambda < 0$ (Стратонович) и $\lambda < \sigma^2/2$ (Ито) плотность вероятности определяется δ -функцией, т.е. равна нулю всюду, кроме точки $x = 0$. На рис. 4.13 стационарная плотность вероятности в этом случае совпадает с осью ординат (1).

При $\lambda > 0$ в интерпретации Стратоновича и $\lambda > \sigma^2/2$ в интерпретации Ито стационарные плотности вероятности показаны кривой 2 на рис. 4.13. В нуле стационарная плотность вероятности обращается в бесконечность, т.е. сохраняет часть свойств δ -функции. Хотя $x_1 = 0$ не является более устойчивой стационарной точкой, она все же остается наиболее вероятным значением. В некотором смысле δ -функция начинает расплываться вправо, когда λ минует эту точку перехода.

При $\lambda > \sigma^2$ (Стратонович) и $\lambda > \sigma^2/2$ (Ито) появляется вторая точка перехода и стационарная плотность вероятности показана кривой 3 на рис. 4.13. В этом случае переход соответствует резкому изменению распределения плотности вероятности, максимум которой приходится на ненулевую численность популяции.

Таким образом, отметим, что изменение характера и сдвиг перехода в данной модели происходит под воздействием мультипликативного шума. Индуцированные шумом переходы типа сдвига являются весьма распространенным явлением. Такого рода переходы свидетельствуют, что знание одного лишь среднего состояния среды недостаточно для предсказания макроскопического поведения систем.

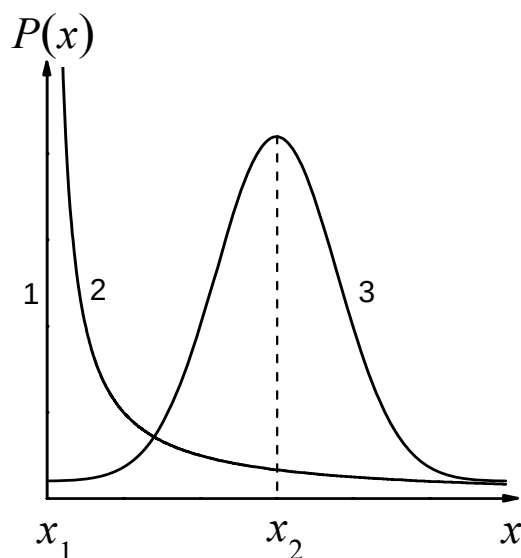


Рис. 4.13. Примерный ход стационарной плотности вероятности в модели Ферхюльста при различных значениях интенсивности внешнего шума

Кроме сдвига неравновесного фазового перехода внешний шум может приводить к более глубоким изменениям в макроскопическом поведении нелинейных систем. В частности, мультипликативный шум может индуцировать переход, который отсутствует в детерминированном случае. Математические аспекты этого явления весьма сложны. Мы рассмотрим лишь постановку задачи на примере модели генного отбора и отметим результаты.

Модель генного отбора соответствует детерминированному феноменологическому уравнению

$$\frac{dx}{dt} = \alpha - x + \lambda x(1 - x), \quad x \in [0, 1]. \quad (4.172)$$

Здесь $x(t)$ – некоторый параметр состояния; λ – параметр, характеризующий среду. Первоначально эта модель была введена искусственно из чисто теоретических соображений, но в дальнейшем получила весьма реалистичные интерпретации, в частности в области популяционной генетики. Эта интерпретация и обоснование (4.172) весьма сложны и требуют опре-

деленных знаний в области генетики. Модель имеет приложения и в других областях, в частности уравнением типа (4.172) описывается эволюция концентрации в некоторых многофазных химических реакциях, где α и λ – некоторые безразмерные параметры, составленные из констант скоростей реакций. Как и в модели Ферхюльста будем считать, что параметр λ флуктуирует согласно (4.165). В результате получается следующее стохастическое дифференциальное уравнение:

$$dx = f(x)dt + \sigma g(x)dw, \quad (4.173)$$

где

$$f(x) = \alpha - x + \lambda x(1 - x), \quad g(x) = x(1 - x). \quad (4.174)$$

Подставляя (4.174) в выражение (4.169), получим, что стационарная плотность вероятности процесса имеет вид (ограничимся исчислением Ито и частным случаем $\alpha = 1/2$)

$$P_0(x) = Z^{-1} \exp \left\{ -\frac{2}{\sigma^2} \left[\sigma^2 \ln g(x) - \int \frac{f(x)}{g(x)^2} dx \right] \right\} = \\ Z^{-1} x^{-1} (1-x)^{-1} \exp \left\{ \frac{2}{\sigma^2} \left[-\frac{1}{2x(1-x)} - \lambda \ln \frac{1-x}{x} \right] \right\}. \quad (4.175)$$

При среднем значении $\lambda = 0$ выражение (4.175) упрощается:

$$P_0(x) = Z^{-1} x^{-2} (1-x)^{-2} \exp \left\{ \frac{2}{\sigma^2} \left[-\frac{1}{2x(1-x)} \right] \right\}. \quad (4.176)$$

Стационарное решение детерминированного феноменологического уравнения (4.172) при среднем значении $\lambda = 0$ и $\alpha = 1/2$ есть величина $x = 1/2$. В случае флуктуирующей среды получаем в общем случае три экстремума плотности вероятности:

$$x_1 = \frac{1}{2}, \quad x_{2,3} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(1 - \frac{2}{\sigma^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (4.177)$$

Таким образом, из (4.177) видно, что при $\sigma^2 > 2$ стационарная плотность вероятности имеет три экстремума, из которых два – максимумы, что от-

вечает наиболее вероятному состоянию. Наиболее вероятное состояние в детерминированном случае $x = 1/2$ при $\sigma^2 < 2$ превращается в минимум. Случай $\sigma^2 = 2$ соответствует критическому состоянию.

Графически поведение стационарной плотности вероятности при различных интенсивностях шума показано на рис. 4.14.

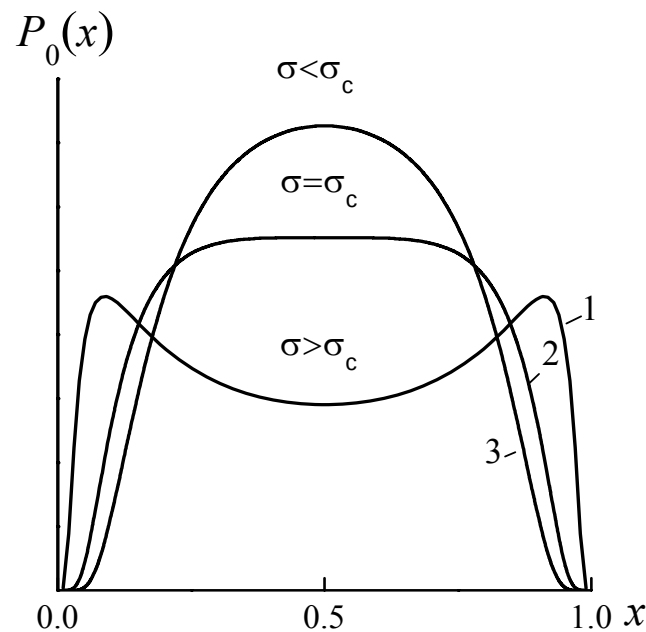


Рис. 4.14. Поведение стационарной плотности вероятности генетической модели при интенсивностях шума выше (1), равной (2) и ниже (3) критической.

Если ввести понятие стохастического потенциала, т. е. некоторого эффективного потенциала системы U_{eff} , то влияние мультипликативного шума приводит к появлению новых минимумов этого потенциала.

Таким образом, при изменении интенсивности мультипликативного шума качественно изменяется поведение системы. Из одного стационарного состояния рождается два. Происходит индуцированный шумом переход. Шум оказывает не только дезорганизующее действие, но и может стабилизировать новые макроскопические состояния в системе.

Контрольные вопросы

1. Что такое стохастические процессы? Приведите примеры стохастических процессов.
2. В чем заключаются причины возникновения макроскопических случайных процессов?
3. Обусловлена ли сила трения броуновской частицы столкновениями с молекулами окружающей среды? Если да, то почему в уравнении Ланжевена выделяется дополнительная случайная сила?
4. Что такое “белый шум”? Приведите примеры природных процессов, описываемых моделью “белого шума”.
5. В чем особенность мультипликативного шума?
6. Как определяются марковские процессы и насколько адекватна модель марковских процессов случайным процессам, наблюдаемым в опытах?
7. В чем заключается идея вывода уравнения Фоккера–Планка?
8. Как связаны уравнения Ланжевена и Фоккера–Планка?
9. Как выглядит стационарное решение уравнения Фоккера–Планка?
10. Оцените средний модуль скорости броуновского движения щепки массой 1 г, плавающей на поверхности воды?
11. Почему коэффициент диффузии тяжелых ионов в воде можно определять по измеренной вязкости?
12. Как получить распределение броуновских частиц по скоростям из уравнения Фоккера–Планка?
13. Как происходит образование новой фазы при фазовых переходах I рода?
14. Что такое частота зародышеобразования при фазовых переходах?
15. Каковы условия возникновения неустойчивости по отношению к образованию новой фазы?

16. Что такое метастабильное состояние и как определяется работа образования критического зародыша в теории и в опытах?
17. В чем заключается закон Колмогорова–Обухова при развитой турбулентности?
18. Что такое $1/f$ шум и каковы основные свойства $1/f$ шума?
19. Что такое самоорганизованная критичность?
20. Что такое неравновесные фазовые переходы, индуцированные шумом?

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

К главе 1

1. Арнольд В.И. Теория катастроф /В.И. Арнольд. М.: Наука, 1990. 128 с.
2. Гленсдорф П. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций / П. Гленсдорф, И. Пригожин. М.: Мир, 1973. 280 с.
3. Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем / Ю.Л. Климонтович. М.: Янус, 1995. 624 с.
4. Малинецкий Г.Г. Современные проблемы нелинейной динамики / Г.Г. Малинецкий, А.Б. Потапов. М.: Эдиториал УРСС, 2000. 336 с.
5. Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах / И. Пригожин, Дж. Николис. М.: Мир, 1979. 512 с.
6. Хакен Г. Синергетика / Г. Хакен. М.: Мир, 1989. 272 с.

К главе 2

1. Базаров И.П. Термодинамика / И.П. Базаров. М.: Высшая школа, 1991. 376 с.
2. Де Гроот С. Неравновесная термодинамика / С. Де Гроот, П. Мазур. М.: Мир, 1964. 456 с.
3. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы / И. Дьярмати. М.: Мир, 1974. 304 с.
4. Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д.Н. Зубарев. М.: Наука, 1971. 415 с.
5. Кайзер Дж. Статистическая термодинамика неравновесных процессов / Дж. Кайзер. М.: Мир, 1990. 608 с.
6. Леонтович М.А. Введение в термодинамику. Статистическая физика / М.А. Леонтович. М.: Наука, 1983. 416 с.
7. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов / И. Пригожин. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1960. 160 с.

8. Стратонович Р.Л. Нелинейная неравновесная термодинамика / Р.Л. Стратонович. М.: Наука, 1985. 480 с.

К главе 3.

1. Анищенко В.С. Сложные колебания в простых системах / В.С. Анищенко. М.: Наука, 1990. 312 с.
2. Васильев В.А. Автоволновые процессы / В.А. Васильев, Ю.М. Романовский, В.Г. Яхно. М.: Наука, 1987. 240 с.
3. Кузнецов С.П. Динамический хаос / С.П. Кузнецов. М.: Физматлит, 2001. 286 с.
4. Ландау Л.Д. Статистическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Физматлит, 2002. Ч.1. 615 с.
5. Ландау Л.Д. Гидродинамика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Физматлит, 2003. 736 с.
6. Е.М. Лифшиц, Е. М. Физическая кинетика / Е. М Лифшиц, Л. П. Питаевский. М.: Физматлит, 2007. 536 с.
7. Лоскутов А. Ю. Введение в синергетику / А. Ю.Лоскутов, А.С. Михайлов. М.: Наука, 1990. 270 с.
8. Ма Ш. Современная теория критических явлений / Ш. Ма. М.: Мир, 1980. 298 с.
9. Мандельброт Б.Б. Фрактальная геометрия природы / Б.Б. Мандельброт. М.: Институт компьютерных исследований, 2002. 656 с.
10. Мун Ф. Хаотические колебания / Ф. Мун. М.: Мир, 1990. 311 с.
11. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов / А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. М.: Наука, 1982. 381с.
12. Рабинович М.И. Введение в теорию колебаний и волн / М.И. Рабинович, Д.И. Трубецков. М.: Наука, 1992. 456 с.
13. Садовский М.В. Лекции по статической физике. Москва – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. 335с.

14. Федер Е. Фракталы / Е. Федер. М.: Мир, 1991. 251 с.
15. Хакен Г. Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах / Г. Хакен. М.: Мир, 1985. 483с.
16. Шелль Э. Самоорганизация в полупроводниках / Э.Шелль. М.: Мир, 1991. 464 с.
17. Шустер Г. Детерминированный хаос : Введение / Г. Шустер. М.: Мир, 1988. 240 с.

К главе 4

1. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей / Б. В. Гнеденко. М.: Наука, 1988. 446 с.
2. Ван Кампен Н.Г. Стохастические процессы в физике и химии / Н.Г. Ван Кампен. М.: Высшая школа, 1990. 376 с.
3. Вентцель А.Д. Курс теории случайных процессов / А.Д. Вентцель. М.: Наука, 1996. 320 с.
4. Кляцкин В.И. Динамика стохастических систем / В.И. Кляцкин. М.: Физматлит, 2002. 239 с.
5. Кляцкин В. И. Стохастические уравнения глазами физика (Основные положения, точные результаты и асимптотические приближения) / В.И. Кляцкин. М.: Физматлит, 2001. 528 с.
6. Олемской А.И. Самоорганизация самоподобных стохастических систем / А.И. Олемской, Д.О. Харченко. Ижевск – Москва: РХД, 2007. 296 с.
7. Репке Г. Неравновесная статистическая механика / Г. Репке. М.: Мир, 1990. 320 с.
8. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость / В.П. Скрипов. М.: Наука, 1972. 312 с.
9. Хорстхемке В. Индуцированные шумом переходы / В. Хорстхемке, Р. Лефевр. М.: Мир, 1987. 397 с.