УДК 530.1 (075.8)

В.М. Сомсиков, А.Б. Андреев
Институт ионосферы, Алматы, Казахстан

ОСОБЕННОСТИ ПЕРЕХОДА К ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ ОТ ДИНАМИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ СТРУКТУРИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

Аннотация. *Изучаются особенности перехода от дискретного описания динамики систем к термодинамическому описанию. В качестве динамического параметра системы используется внутренняя энергия. Рассмотрено ее изменение при прохождении системой потенциально взаимодействующих материальных точек потенциального барьера в зависимости от их числа, ширины и высоты барьера. Установлено два критических числа. Первое число определяет необходимое количество материальных точек для перехода системы к необратимой динамике, а второе число определяет переход к термодинамическому описанию. Обсуждается соответствие результатов численных расчетов теоретическим основам динамики систем и понятиям энтропии.*

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

Введение

Анализ огромного числа попыток найти объяснение второго закона термодинамики в рамках законов классической механики натолкнул на мысль [1-7], что решение этой проблемы в классической механике отсутствует. Это могло означать, либо то, что в классической механике в принципе нет места этому объяснению [2], либо то, что формализмы классической механики, используемые для описания динамики систем, требуют расширения, например, путем снятия ограничений, при которых они строились.

Оказалось, что согласно уравнению движения как целого достаточно большой системы потенциально взаимодействующих ***материальных точек (МТ)***, полученного на основе принципа дуализма симметрии [3], динамика системы может быть необратимой. Необратимость связана с тем, что работа поля внешних сил тратится не только на движение системы, но и на изменение ее внутренней энергии. Такой механизм необратимости назван детерминированным [3,4], поскольку следует только из законов механики без привлечения вероятностных закономерностей. В результате поиска причины необратимости удалось показать, что в механике необратимость была потеряна в результате того, что при выводах уравнения Лагранжа использовалась гипотеза о голономности связей [11]. Эта гипотеза исключила нелинейные члены из уравнений движения, ответственные за нелинейную трансформацию энергии движения системы в ее внутреннюю энергию [7].

Любое тело можно задать в виде неравновесной системы МТ. В термодинамическом приближении локального равновесия такая неравновесная система представима в виде совокупности равновесных подсистем. Будем называть такую равновесную подсистему ***структурированной частицей (СЧ),*** т.е. в качестве СЧ будем использовать равновесную систему из достаточно большого количества потенциально взаимодействующих МТ.

В соответствии с дуализмом симметрии, энергия СЧ представляет собой сумму независимых энергий: внутренней энергии и энергии движения [3]. Поэтому динамика СЧ определяется дуализмом этих энергий, меняющихся вдоль траектории движения СЧ при условии сохранения их суммы. В соответствии с таким дуализмом энергии уравнение движения СЧ задается в независимых микро и макропеременных. Причем, микропеременные задают движения МТ относительно ЦМ СЧ, а макропеременные определяют движение ЦМ СЧ. Такой путь получения уравнения движения СЧ позволил исключить использование гипотезы о голономности связей, на которую опирается вывод канонического уравнения Лагранжа [11]. Благодаря этому, в отличие от канонического уравнения Лагранжа, уравнение движения СЧ учитывает нелинейную трансформацию энергии движения во внутреннюю энергию, отвечающую за нарушение симметрии времени [6]. Как и почему условие голономности связей исключает учет нелинейных членов, отвечающих за нарушение симметрии времени, было показано на примере изучения задачи о прохождении осциллятора через потенциальный барьер [7]. Оказалось, что только благодаря таким нелинейным членам возможно прохождение осциллятора через потенциальный барьер, даже если его высоты больше энергии движения осциллятора. Если же пренебречь неголономностью связей, этот эффект исчезает.

При движении СЧ в неоднородном поле внешних сил энергия движения может переходить во внутреннюю энергию. Величина изменения внутренней энергии СЧ пропорциональна величине градиентов сил внешнего поля. При выполнении условия равновесия СЧ вдоль ее траектории движения, внутренняя энергия СЧ может только увеличиваться, но не может трансформироваться в энергию ее движения. В этом суть природы детерминированной необратимости, т.е. такой необратимости, которая является следствием детерминированных законов классической механики и не нуждается в гипотезе о флуктуациях. Такая гипотеза используется в устоявшемся на сегодня объяснении необратимости на основе Гамильтонова формализмов классической механики [2]. Наличие детерминированной необратимости позволяет ввести понятие детерминированной энтропии, определяемой отношением приращения внутренней энергии системы к величине внутренней энергии [5].

Само уравнение движения СЧ является нелинейным. Аналитические расчеты, которые могли бы позволить проверить вытекающие из него теоретические выводы, практически невозможны. Остается возможность проверить эти выводы численным экспериментом. К основным теоретическим заключениям, которые следуют из анализа уравнения движения СЧ, и которые поддаются чис-ленной проверке, можно отнести сле-дующие результаты изучения механики СЧ:

1. Принцип дуализма симметрии.
2. Изменение внутренней энергии движения СЧ может быть только при движении СЧ в неоднородных полях сил.
3. Скорость изменения внутренней энергии находится в прямой зависимости от величин градиентов этих полей.
4. Необратимость должна появляться только при достаточно больших значениях числа МТ в системе.
5. Должны существовать критерии перехода от описания динамики систем в рамках классической механики к описаниям в рамках термодинамики, статистической физике, кинетике.

Цель работы: путем численного моделирования динамики систем рассмотреть особенности перехода от динамического описания к термодинамическому, статистическому описаниям.

Для этого выполнялись численные расчеты величины флуктуаций внутренней энергии системы при прохождении потенциального барьера в зависимости от начальных данных, параметров барьера. Изучались изменения внутренней энергии в зависимости от ширины барьера. Исследовалась область применимости детерминированной энтропии. Определялись критерии перехода к термодинамическому описанию систем. Это позволило определить, каким образом статистические законы физики следуют из строгих законов классической механики и как осуществляется переход к термодинамическому описанию. Не менее важным является и то, что расчеты позволили определить некоторые характеристики области применимости механизма необратимости, которые вытекают из уравнения движения СЧ.

Постановка задачи.

Для решения поставленных задач возьмем систему потенциально взаимодействующих МТ. В качестве исследуемых параметров будем использовать изменение внутренней энергии и энергии движения ***центра масс (ЦМ)*** системы. Это позволяет проверить принцип дуализма симметрии систем, а также изучить критерии перехода от описания динамики систем в рамках классической механики к термодинамическому описанию в зависимости от числа элементов и их функции распределения в системе.

Будем задавать распределение МТ в соответствии с равновесным распределением, и определять изменения ее параметров при прохождении потенциального барьера (см. рис. 1). Задача решалась в ***дуальной системе координат***. То есть, в системе координат, в которой ***независимыми переменными являются микро и макропеременные*** [5]. Микропеременные определяют движение каждой МТ относительно ЦМ системы, а макропеременные определяют движение ЦМ относительно барьера. Высота барьера выбиралась так, чтобы система проходила через него. Рассчитывались изменения внутренней энергии системы, энергии движения, динамическая энтропия и другие параметры задачи в зависимости от количества МТ, высоты и ширины барьера, начальных условий. Полученные результаты численного моделирования сопоставлялись с термодинамическими и статистическими законами [8], а также с теоретическими выводами, полученными на основе уравнения движения СЧ [3-7].

За основу бралось следующее уравнение движения СЧ [4]:

$$M_N \dot{\bar{V}}_N = -\vec{F}^{env} - (\Phi^{env} + \dot{E}_N^{ins})\vec{V}_N / V_N^2, \qquad (1)$$

Здесь

$\vec{V}_N = \bar{R}_N = (1/N)\sum_{i=1}^{N} \dot{\vec{r}}_i$ -скорость ЦМ

$i = 1,2,3...\mathrm{N}$ – номера МТ, $M_N = Nm$;

$F^{env} = \sum F_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$, $\dot{E}_N^{ins} = \sum_{i=1}^{N} \tilde{v}_i (m\dot{\tilde{v}}_i + F(\tilde{r}_i)_i)$ - изменение внутренней энергии системы, $\Phi^{env} = \sum \tilde{v}_i F_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$,

$\vec{F}_i^{env}(R_N, \tilde{r}_i)$ - сила, действующая на i-ую МТ, со стороны внешнего поля,

$r_i = R_N + \tilde{r}_i$, $\tilde{r}_i$ - координаты МТ относительно ЦМ.

Силы взаимодействия МТ $F_i(\tilde{r}_{ij})$ задавались законом Гука. Внешнее поле сил задавалось в виде одного периода косинусоиды:

$U(x_i) = U_b(\cos(2\pi(x_i - R_b)/a) + 1)$, при условии $(\mathrm{R}_b - a/2) < x_i < (\mathrm{R}_b + a/2)$.

Отсюда силы, действующие на каждую из МТ, определяются выражением:

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

где U_b - высота барьера; R_b - положение экстремума барьера; a - ширина барьера; x_i - расстояние, i - номер соответствующей МТ. Согласно (2), сила пропорциональна высоте барьера и обратно пропорциональна его ширине.

Чтобы определить характер изменений энергии движения и внутренней энергии системы в зависимости от количества МТ и начальных значений, расчеты прохождения барьера выполнялись для различных начальных распределений МТ и параметров задачи.

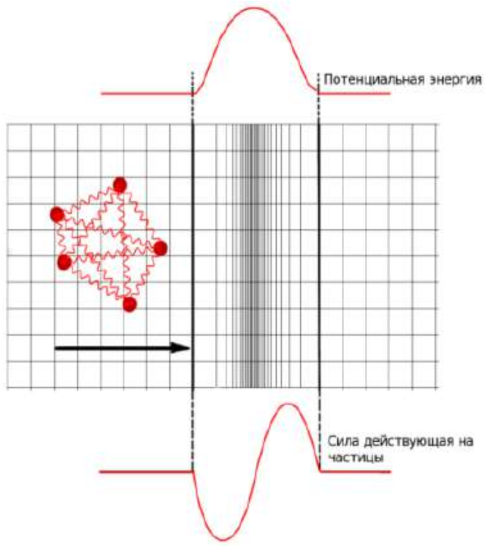

Рисунок 1.– Схема численных расчетов прохождения системы через потенциальный барьер.

Характер изменения внутренней энергии в зависимости от числа МТ

Согласно теории, для консервативных неравновесных систем, представленных совокупностью равновесных подсистем в неоднородном поле внешних сил должна наблюдаться необратимая динамика, обусловленная увеличением внутренней энергии за счет их энергии движения [3-8]. Аналогичный вывод следует и из статистических методов анализа неравновесных систем [9,10]. Рассмотрим вопрос, для какого количества МТ систему можно описывать в рамках эмпирических уравнений термодинамики и статистических законов.

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

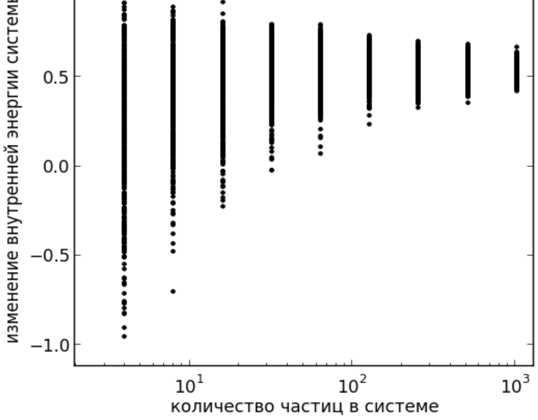

Рисунок 2. – Поведение величины флуктуации внутренней энергии системы в зависимости от числа МТ.

На рисунке 2 представлены результаты 400 экспериментов для каждого числа МТ в системе. Количество МТ соответствует степени двойки (4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024). Макропараметры начальных условий постоянные: масса системы=1кг, масса каждой МТ=1/N, кинетическая энергия ЦМ системы E_s=150 Дж, вектор скорости системы направлен вдоль координатной оси X. Потенциальный барьер расположен в плоскости YZ и имеет ширину вдоль оси X равную a=0.2 м, высота барьера E_b=130 Дж, внутренняя энергия системы E_0^{ins} =100 Дж, коэффициент жёсткости связей U_o=300000 Н/м. Микропараметры начальных условий, координаты и скорости частиц, задавались в каждом эксперименте случайным образом. Каждая точка на рисунке соответствует отношению величины изменения внутренней энергии системы к начальной кинетической энергии системы ($\Delta E^{ins} / E_0^{ins}$).

Из рисунка видно, что при количестве частиц $N = 64$ изменение внутренней энергии могут быть только положительными, т.е. ни один из проведенных численных экспериментов не дал отрицательного значения изменения внутренней энергии. Это означает, что для данных параметров задачи при $N \geq 64$ динамика системы необратима. Такой вывод сделан из того, что *критерием необратимости может служить невозможность трансформации внутренней энергии в ее энергию движения. Число частиц, начиная с которого изменения внутренней энергии могут быть только положительными при движении системы в переменном потенциальном поле сил назовем* ***первым критическим числом***. Очевидно, что это число МТ, при котором систему можно считать необратимой, зависит от параметров задачи, например, от ширины барьера.

Область применимости детерминированной энтропии

В соответствие с законом сохранения импульса, внутренняя энергия СЧ при достаточно слабых ограничениях не способна возвращаться в энергию движения, так как невозможно такое сложение внутренних сил, которое бы изменило импульс ее ЦМ. Это означает необратимость системы. Иными словами необратимость связана с односторонней трансформацией энергии относительного движения системы во внутреннюю энергию.

Необратимость трансформации энергии движения системы в ее внутреннюю энергию в неоднородном поле внешних сил позволила ввести в механику *понятие* ***детерминированной энтропии*** (она названа детерминированной, поскольку следует из законов Ньютона). По аналогии с энтропией Клаузиуса, эта энтропия определяется как ***отношение приращения внутренней энергии СЧ к ее величине.*** Тогда приращение энтропии неравновесной системы, которая в приближении локального термодинамического равновесия может быть представлена совокупностью СЧ, пропорционально энергии относительных движений СЧ, трансформирующейся в их внутреннюю энергию. В этом случае изменение энтропии определяется формулой [5]:

$$\Delta S^d = \sum\nolimits_{L=1}^{R}\left\{N_L \sum\nolimits_{k=1}^{N_L}[\int \sum\nolimits_s F_{ks}^L v_k dt]/E_L\right\} \quad (5)$$

где E_L-внутренняя энергия L-СЧ; N_L- число частиц в L-СЧ; L=1,2,3… R - количество СЧ; s- внешние МТ, взаимодействующие с k-й МТ L-СЧ; F_{ks}^L- сила, действующая на k-ю МТ СЧ со стороны s-ой МТ другой СЧ; v_k-скорость k-й МТ.

В нашем случае $L=1$. Тогда формула (5) для изменения энтропии системы после прохождения барьера, определяется простой формулой: $\Delta S^d = \Delta E^{ins} / E_0^{ins}$. Эту формулу можно проверить путем численных расчетов ΔE^{ins} возникающего после прохождения системы через потенциальный барьер.

На рисунке 3 представлены средние значения величины изменения внутренней энергии системы ΔE^{ins}, поделённые на начальную кинетическую энергию ЦМ системы, равную 100 Дж. Также показаны доверительные интервалы этой величины. Доверительный интервал рассчитан как среднеквадратическое отклонение величины, умноженное на коэффициент Стьюдента равный 2.6 и соответствующий доверительному уровню 0.99, для данного числа экспериментов (400 экспериментов).

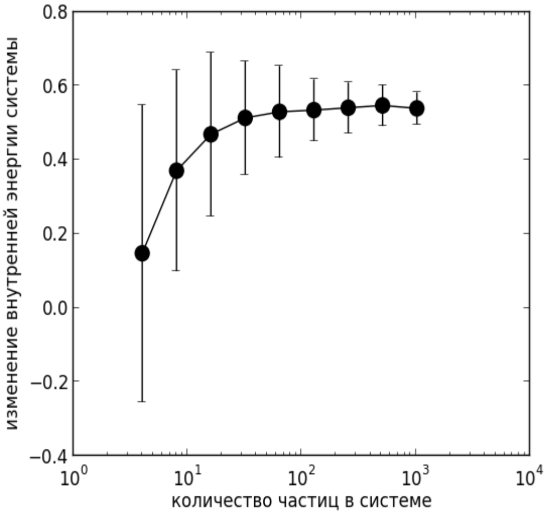

Рисунок 3. – Зависимость изменения относительной величины внутренней энергии от числа МТ.

Здесь величина изменения внутренней энергии системы с точностью до постоянного множителя представляет собой изменение энтропии ΔS^d. Согласно расчетам, она будет положительной с вероятностью 0,99 уже при значениях $N \geq 8$. Для меньших значений N величина ΔE^{ins} может быть отрицательной. С ростом числа МТ флуктуация ΔS^d стремится к нулю, и уже при $N \geq 10^3$ она становится примерно равной 0.1 от абсолютного значения величины ΔS^d.

Дальнейшее увеличение числа МТ после $N \approx 10^3$ не меняет величины приращения внутренней энергии при прохождении барьера, т. е. величина ΔE^{ins} при таком количестве МТ достигает максимума. При $N \geq 10^3$ величина $\Delta S^d = \Delta E^{ins} / E_0^{ins}$ ~0,55. Итак, *если дальнейшее увеличение числа МТ не влияет на изменение термодинами-*

ческих параметров системы, то его (в нашем случае $N = 10^3$) *можно назвать **вторым критическим числом***. Оно определяет необходимость перехода к термодинамическому описанию рассмотренной нами ситуации (задачи).

Изменения энергии системы при прохождении барьера

Нами были выполнены численных расчеты амплитуд флуктуаций внутренней энергии системы при прохождении барьера, в зависимости от числа МТ. Эти расчеты убедительно подтверждают возможность обоснования статистических законов, если только опираться на законы механики. Покажем это для статистических флуктуаций среднеквадратичной величины, характеризующую систему. Напомним, как на основе статистических закономерностей доказывается, что относительная флуктуация какого-либо аддитивного параметра системы обратно пропорциональна $\sqrt{N}$, где N - количество элементов системы [8].

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

$$\left|(\Delta E)^2\right|^{1/2} \sim 1/N^{1/2} \quad .$$

Таким образом, если рассчитываемая величина относительных флуктуаций E^{int}, возникающих при прохождении системы через барьер, с ростом числа МТ изменяется обратно пропорционально $\sqrt{N}$, то это будет служить, как подтверждением закона о флуктуациях, так и подтверждением возможности обоснования этого закона с помощью законов классической механики. Аппроксимирующая пунктирная линия, заданная уравнением $f = p + r/\sqrt{N}$, где p =3.5, r =110.

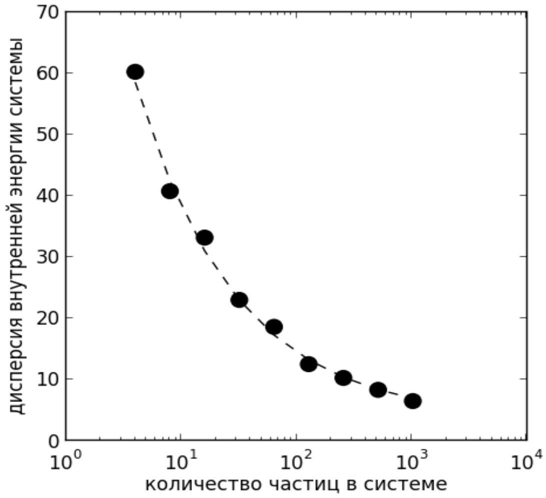

Рисунок 4. – Зависимость максимальной амплитуды флуктуации ΔE^{ins} (точки) от чисел МТ.

Как видим, точки соответствующие амплитудам флуктуации изменения внутренней энергии достаточно точно ложатся на кривую, соответствующую статистическому закону убывания флуктуаций в системе с ростом числа ее элементов [8].

Это означает, во-первых, что численные расчеты прохождения системы через барьер верны, во-вторых, что дуализм энергии отображается в статистических законах, в-третьих, законы классической механики применимы не только для обоснования статистических законов, но и для определения области их применения.

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

Зависимость изменения внутренней энергии от ширины барьера

Согласно уравнению движения системы, изменение внутренней энергии ΔE^{ins}, нелинейно зависящее от микро и макропеременных, отлично от нуля лишь тогда, когда характерный масштаб неоднородности поля внешних сил соизмерим с масштабом системы. Величина ΔE^{ins} должна увеличиваться с ростом разности сил, действующих на различные области системы [4,5]. Проверку этого вывода осуществим путем расчетов зависимости ΔE^{ins} от ширины барьера. На рисунке 5 приведены результаты таких расчетов ΔE^{ins}.

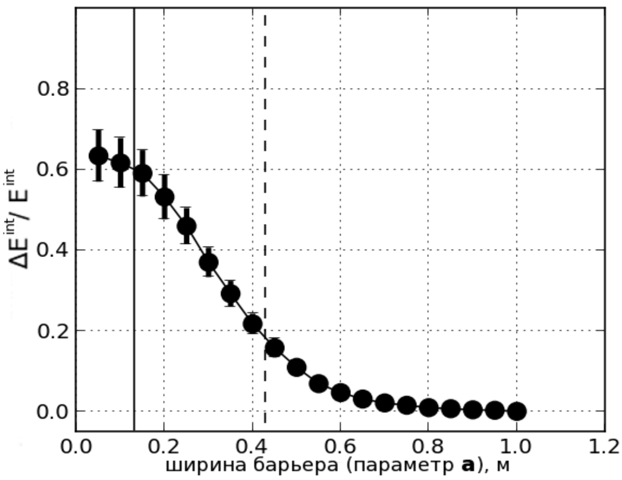

Рисунок 5. – Изменение внутренней энергии в зависимости от ширины барьера.

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

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

На рисунке 6 приведены результаты расчетов зависимости изменения внутренней энергии, как от ширины барьера, так и

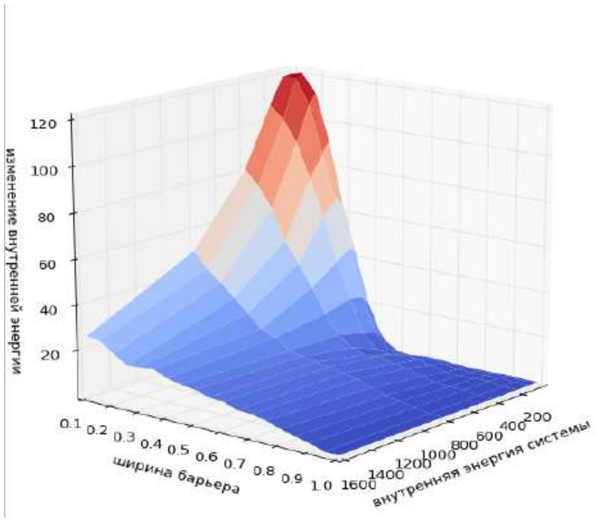

Рисунок 6. – Изменение внутренней энергии в зависимости от ее начального значения и ширины барьера.

от ее начального значения. Видно, что при больших значениях начальной внутренней энергии системы, на порядок превышающих энергию барьера и кинетическую энергию движения центра масс системы, изменение внутренней энергии слабее зависит от ширины барьера, чем при малых значениях внутренней энергии. При этом, чем меньше ширина барьера, тем больше величина изменения внутренней энергии. Такое поведение изменения внутренней энергии можно объяснить следующим образом. Увеличение внутренней энергии системы при условии сохранения ее объема обусловлено увеличением сил взаимодействия МТ, т.е. при этом увеличивается жесткость системы. Поэтому влияние сил внешнего поля на изменение внутренней энергии должно уменьшаться. Именно это мы и наблюдаем в расчетах.

Заключение

Численные расчеты, выполненные на основе принципа дуализма энергии, из которого вытекает уравнение движения СЧ, выявили численные критерии перехода от динамического описания к термодинамическому описанию в зависимости от количества МТ. Это открывает пути для обоснования эмпирических законов термодинамики в рамках детерминированных законов классической механики.

В результате выполненных численных расчетов установлено, что существует минимальное число МТ, выше которого ни для одного начального состояния заданной системы невозможен процесс уменьшения внутренней энергии при прохождении барьера. По нашим расчетам при $N \geq 10^2$ динамика системы становится необратимой. Такое число служит критерием перехода к необратимой динамике систем с ростом количества ее элементов. Существование такого числа для динамической системы является важным подтверждением возмож-ности обоснования законов термодинамики в рамках законов классической механики. Оно определяет минимальное количество элементов системы, начиная с которого можно использовать понятие детерминированной энтропии S^d.

Установлено существование второго критического числа. В нашем случае это $N = 10^3$. При увеличении количества МТ в системе свыше этого числа, рост ΔE^{ins} прекращается. Для рассмотренного случая, асимптотическое значение ΔE^{ins} ~0,55. Так как дальнейшее увеличение числа МТ перестает влиять на значение термодинамических параметров системы, то это число МТ логично назвать вторым критическим числом или критическим числом перехода к термодинамическому описанию системы.

Показано, что величина относительных флуктуаций E^{ins}, возникающих при прохождении системы через барьер, с ростом числа МТ падает. Скорость такого падения обратно пропорциональна $\sqrt{N}$. Существование такой закономерности для динамических систем служит аргументом в пользу утверждения, что статистические законы должны иметь строгое обоснование в рамках законов классической механики [4,5]. Поскольку закон о флуктуациях лежит в основах статистической физики [8], то этот результат свидетельствует о возможности обоснования статистических законов физики на основе классической механики.

С уменьшением градиента внешних сил и увеличением энергии связи МТ в системе наблюдается уменьшение эффективности трансформации ее энергии движения во внутреннюю энергию. Такая зависимость свидетельствует о том, что изменение внутренней энергии систем обусловлено непотенциальными силами, которые пропорциональны градиентам внешних сил [5].

В целом, все полученные результаты подтверждают необходимость и возможность описания динамики систем в соответствии с принципом дуализма энергии на основе уравнения движения СЧ. Именно опираясь на дуализм, удается выявить и изучит связь законов классической механики с эмпирическими законами термодинамики, статистической физики.

Список литературы:

1 *Гинзбург В.Л.* Специальное заседание ред. Коллегии журнала УФН, приуроченное к 90 летию со дня рождения В.Л. Гинзбурга. // УФН. – 2007. – 177 (4). – 345 с.

2 *Пригож ин И.* От существующего к возникающему. // М. – Наука. – 1980.

3 *Somsikov V.M.* The restrictions of classical mechanics in the description of dynamics of nonequilibrium systems and the way to get rid of them // New Adv. in Physics. – 2008. – Vol. 2. No 2. September. – P. 125-140.

4 *Somsikov V. M.* Nonequilibrium systems and mechanics of the structured particles. // Elsever. Chaos and Complex system. –2013. – XV, 581 P. 31-40.

5 *Somsikov V.M.* The equilibration of an harddisks system. // IJBC. – 2004. November. – V 14. N11. – P.4027-4033

6 *Somsikov V.M.* Thermodynamics and classical mechanics. // Journal of physics: Conference series. 23, –2005, – P.7-16.

7 *Somsikov V.M., Denisnya V.I.* Peculiarities of passage of an oscillator through a potential barrier. // Russian Physics Journal, – 2013, September, – Volume 56, 4. – P. 463-472.

8 *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. –М. – 1976. – 583 с.

9 *Lanczos C.* The variation principles of mechanics. //University of Toronto press. – 1962.

9 *Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш.* Термодинамика, Стат.Физ. и Кинематика. – М, Наука. – 1977.

10 Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. 3 тома – М., Янус. – 1995.

11 Голдстейн Г. Классическая механика. – М. – 1975.

Принято в печать 3.02.14

В.М. Сомсиков, А.Б. Андреев
Институт ионосферы, Алматы, 050020, Казахстан
E-mail: vmsoms@rambler.ru

ОСОБЕННОСТИ ПЕРЕХОДА К ТЕРОМДИНАМИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ ОТ ДИНАМИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ СТРУКТУРИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

Аннотация. Изучаются особенности перехода от дискретного описания динамики систем к термодинамическому описанию. В качестве динамического параметра системы используется внутренняя энергия. Рассмотрено ее изменение при прохождении системой потенциально взаимодействующих материальных точек потенциального барьера в зависимости от их числа, ширины и высоты барьера. Установлено два критических числа. Первое число определяет необходимое количество материальных точек для перехода системы к необратимой динамике, а второе число определяет переход к термодинамическому описанию. Обсуждается соответствие результатов численных расчетов теоретическим основам динамики систем и понятиям энтропии.

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

V.M. Somsikov, A.B. Andreyev
National Center for Space Research and Technology
Institute of Ionosphere, Almaty, 050020, Kazakhstan
E-mail: vmsoms@rambler.ru

PECULIARITIES OF THE TRANSITION TO THERMODYNAMIC DESCRIPTION FROM FROM THE DYNAMIC DESCRIPTION OF THE STRUCTURED PARTICLES

Abstract. Are studied features of transition from a discrete description of dynamical systems to the thermodynamic description. As a dynamic parameter of system is used the internal energy of system. Examined its variation during the passage of potentially interacting systems of material points thru the potential barrier in depends on their number, width and height of the barrier. Obtained two critical numbers. The first number determines the required amount of material points for the transition to irreversible dynamics, and the second number defines passage to the thermodynamic description. The agreement between the results of numerical calculations and the theoretical foundations of system dynamics and concept of entropy is discussed.

Keywords:nonlinearity, classical mechanics, energy, thermodynamics, Lagrangian formalism, nonholonomic constraints, irreversibility.

В.М. Сомсиков, А.Б. Андреев
Ионосфера институты, Алматы, 050020, Қазақстан
E-mail: vmsoms@rambler.ru

ҚҰРЫЛЫМДАЛҒАН БӨЛШЕКТЕРДІҢ ДИНАМИКАЛЫҚ СИПАТТАМАДАН ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ СИПАТТАМАҒА ӨТУ ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ

Жүйелер динамикасының дискретті сипаттамасынан термодинамикалық сипаттамасына өтудің ерекшелігі зерттеледі. Жүйенің динамикалық параметрі ретінде ішкі энергиясы пайдаланылады. Оның потенциалды әрекеттесетін материалдық нүктелер жүйесімен потенциалды кедергіні өтуде өзгерісі олардың санымен, кедергінің биіктігімен және енімен байланысты қаралған. Екі сыни сан анықталған. Бірінші сан жүйенің қайтымсыз динамикасына өтуі үшін қажетті материалдық нүктелердің санын анықтайды, ал екінші сан термодинамикалық сипаттамаға өтуін анықтайы. Жүйелер динамикасын зерттеуінің теориялық нәтижелеріне және энтропия ұғымдарына сандық есептеулер нәтижелерінің сәйкестікті талқыланады.

Маңызды сөздер: сызықсыздық, классикалық механика, энергия, термодинамика, Лагранж формализмдері, голономдық емес байланыстар, қайтымсыздық.