

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Локально-неравновесные модели процессов переноса

С.Л. Соболев

Рассмотрены различные типы моделей, описывающих процессы переноса тепла, массы и импульса, протекающие в локально-неравновесных условиях. Показано, что такие модели в форме уравнений в частных производных представляют собой иерархические последовательности уравнений параболического и гиперболического типов, порядок которых возрастает с увеличением степени отклонения системы от локального равновесия. Проанализированы основные свойства локально-неравновесных моделей и их взаимосвязи между собой и расширенной необратимой термодинамикой.

PACS numbers: 05.60.+w, 05.70.Ln

Содержание

1. Введение (1095).
 2. Расширенная необратимая термодинамика (1097).
 - 2.1. Основные положения. 2.2. Потоки высшего порядка.
 - 2.3. Уравнение переноса.
 3. Двухтемпературная модель (1100).
 4. Дискретная модель (1103).
 - 4.1. Диффузионный закон предельного перехода. 4.2. Волновой закон предельного перехода.
 5. Интегральная модель (1104).
 6. Заключение (1105).
- Список литературы (1106).

1. Введение

Процессы переноса энергии и вещества имеют самое широкое распространение в природе и технике. Этим объясняется исключительно важное научное и практическое значение построения теории процессов переноса, установления основных закономерностей их протекания и создания эффективных методов решения задач переноса.

Как и любая другая термодинамическая теория, классическая термодинамика необратимых процессов и основанная на ней теория процессов переноса [1, 2] опираются на ряд основополагающих принципов (аксиом), которые, с одной стороны, способствуют установлению ясности в формулировках основных понятий и принципов теории, а с другой стороны, накладывают серьезные ограничения на область применимости

теории. Наиболее сильно ограничивают область применимости классической теории процессов переноса принцип локального термодинамического равновесия и принцип локальности.

Принцип локального термодинамического равновесия означает, что, хотя система в целом и не находится в состоянии полного равновесия и в ней существуют градиенты температуры и/или концентрации, в каждом малом элементе среды существует состояние локального равновесия, для которого локальная энтропия является той же функцией макроскопических переменных, что и для равновесной системы. Это означает, что состояние неравновесной системы описывается локальными термодинамическими потенциалами, которые зависят от пространственных координат и времени только через термодинамические параметры и подчиняются уравнениям термостатики. Например, если в качестве независимых переменных выбрать локальную плотность внутренней энергии $U(x, t)$, удельный объем $v(x, t)$, локальную концентрацию $C_i(x, t)$ различных химических компонентов, то состояние физически малого объема в окрестности точки x в момент времени t описывается локальной энтропией:

$$S = S(U(x, t), v(x, t), C_1(x, t), \dots, C_i(x, t), \dots), \quad (1.1)$$

для которой справедливо уравнение Гиббса:

$$T ds = dU + P dv - \sum \mu_i dC_i, \quad (1.2)$$

где T, P, μ — локальные температура, давление и химический потенциал соответственно. С физической точки зрения приближение локального равновесия справедливо, если время релаксации τ , в течение которого устанавливается равновесие в макроскопически малых, но содержащих большое число частиц областях, намного меньше характерного времени рассматриваемого процесса t_0 , т.е.

$$\tau \ll t_0. \quad (1.3)$$

С.Л. Соболев. Институт химической физики им. П. Черноголовка РАН, 142432 Черноголовка, Московская обл., Россия
Тел. (095) 962-80-80 (4-81-57)
E-mail: sobolev@icp.ac.ru

Статья поступила 28 января 1997 г.,
после доработки 23 апреля 1997 г.

Иными словами, состояние локального термодинамического равновесия может установиться в системе, если скорость изменения ее макропараметров за счет внешних воздействий, т.е. скорость разрушения равновесия, много меньше скорости релаксации системы к локальному равновесию.

Принцип локальности, используемый при построении как классической термодинамики необратимых процессов, так и многих других термодинамических теорий, предполагает, что основные законы механики справедливы не только для системы в целом, но и для каждой из ее частей, какой бы малой она ни была. Отсюда следует, что в интегральных законах сохранения для таких систем можно совершать предельный переход при стремлении объема интегрирования к нулю и получать эквивалентные законы сохранения в форме дифференциальных уравнений в частных производных. С физической точки зрения такая процедура некорректна, так как среда состоит из микрообъектов (атомов, молекул, кластеров и т.д.), которые обладают качественно новыми свойствами, несовместимыми с классическими представлениями механики сплошной среды. Однако, если характерный макромасштаб рассматриваемого процесса L много больше характерного масштаба микроструктуры среды h , т.е.

$$L \gg h, \quad (1.4)$$

то такой процесс локален, т.е. подчиняется уравнениям переноса в локальной форме. Например, закон сохранения плотности какой-либо величины A в интегральной форме (субстанциональное уравнение баланса) имеет следующий вид [2]:

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho A dv = - \int_{\Omega} J_A d\Omega + \int_v \sigma_A dv, \quad (1.5)$$

где ρ — плотность, J_A — поток величины A , σ_A — производство величины A , v — объем и Ω — поверхность рассматриваемой системы. Из принципа локальности следует, что (1.5) справедливо при $v \rightarrow 0$ и $\Omega \rightarrow 0$. Далее, применяя теорему Гаусса, получим дифференциальную форму уравнения баланса:

$$\rho \frac{dA}{dt} + \nabla J_A = \sigma_A. \quad (1.6)$$

Уравнение (1.6) локально, так как его форма не зависит от характерных масштабов рассматриваемой системы, и может быть использовано для любой части системы, какой бы малой она ни была.

Основываясь на принципе локального термодинамического равновесия и принципе локальности, классическая термодинамика необратимых процессов приводит к уравнению теплопереноса параболического типа (уравнение диффузии имеет аналогичный вид) [1, 2]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T + W, \quad (1.7)$$

где a — коэффициент теплопроводности, W — источник тепла. Как и следовало ожидать, классическое уравнение переноса (1.7) локально, т.е. оно не содержит характерного масштаба, присущего данной системе и, следовательно, справедливо для любой ее части, какой бы малой она ни была. Кроме того, приближение локального термодинамического равновесия (см. нера-

венство (1.3)) приводит к тому, что уравнение переноса (1.7) не содержит также и характерных временных масштабов данной системы (времени релаксации). Это означает, что (1.7) локально во времени. Таким образом, классические уравнения переноса параболического типа (1.7) локальны как во времени, так и в пространстве.

Характерные пространственно-временные масштабы L , h , t_0 и τ определяют две характерные скорости:

$$V = \frac{L}{t_0}, \quad (1.8)$$

$$V^* = \frac{h}{\tau}. \quad (1.9)$$

Скорость (1.8), представляющая собой отношение макромасштабов рассматриваемого процесса, характеризует линейную скорость изменения параметров системы, вызванную внешними причинами. Например, это может быть скорость перемещения изотерм при движении источника тепловыделения в теплопроводящей среде. Отношение микропараметров V^* в формуле (1.9) является внутренней характеристикой самой системы и не зависит от внешних условий. Величина V^* — скорость распространения возмущений потенциала переноса, т.е. скорость распространения тепловой или диффузионной волны. Например, в газах характерными микропараметрами среды как для процессов теплопереноса, так и процессов массопереноса являются средняя длина свободного пробега h и время между двумя последовательными столкновениями молекул τ . Поэтому V^* — средняя скорость молекул газа, причем $V^* = 3D/h = 3a/h$ (где D — коэффициент диффузии), поскольку в газах $a = D$. В более сложных системах коэффициенты диффузии и теплопроводности могут значительно различаться. Так, например, в расплавах металлов коэффициент диффузии примеси $D \sim 10^{-9} - 10^{-8} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$ значительно меньше коэффициента теплопроводности $a \sim 10^{-5} - 10^{-4} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$. Соответственно, скорость распространения концентрационных возмущений (диффузионная скорость) $V_D \sim 1 - 20 \text{ м с}^{-1}$ много меньше скорости распространения тепловых возмущений $V_T \sim 10^{-3} - 10^4 \text{ м с}^{-1}$. При этом характерное время диффузионной релаксации $\tau_D \sim h/V_D$ много больше, чем время тепловой релаксации $\tau_T \sim h/V_T$. Иными словами, в такой системе сначала, через время порядка τ_T , устанавливаются локально-равновесные значения температуры и лишь затем, через время порядка τ_D , — локально-равновесные значения концентрации. Такая же ситуация, т.е. последовательная релаксация к тепловому, а лишь затем и к диффузионному равновесию может возникнуть и в других системах со сложной структурой, например в полимерах и капиллярно-пористых средах.

При распространении бегущих волн условия справедливости принципов локального равновесия и пространственной локальности эквивалентны неравенству $V \ll V^*$ [3].

Следует заметить, что процесс переноса по своей сути нелокален, так как частица переносит энергию или массу из одной точки пространства в другую, причем этот перенос происходит не мгновенно, а требует конечного промежутка времени τ . Если выполняются приближения локального равновесия (1.3) и принцип пространственной локальности (1.4), то этими эффектами можно

пренебречь и описывать процесс переноса классическими уравнениями параболического типа (1.7). Такие процессы переноса будем называть локальными, так как они локальны как во времени, так и в пространстве. В противном случае, т.е. когда $t_0 \sim \tau$ и/или $L \sim h$, процесс переноса нелокален и не может быть адекватно описан классическими (локальными) уравнениями переноса параболического типа (1.7). В такой ситуации для описания процессов переноса следует пользоваться какой-либо локально-неравновесной моделью, не опирающейся на приближение локального термодинамического равновесия и принцип пространственной локальности. При распространении бегущих волн критерий отсутствия локального равновесия принимает вид [3] $V \sim V^*$.

Как уже отмечалось выше, скорость распространения диффузионных возмущений V_D может быть на несколько порядков меньше скорости тепловых возмущений V_T . Следовательно, возможна ситуация, когда характерная скорость процесса переноса V такова, что $V_D \sim V \ll V_T$. В таком случае процесс теплопереноса протекает в локально-равновесных условиях и может быть описан классическим уравнением теплопроводности параболического типа, в то время как процесс массопереноса локально-неравновесен и уже не подчиняется классическому уравнению диффузии [3–6].

2. Расширенная необратимая термодинамика

2.1. Основные положения

Одной из наиболее последовательных и детально разработанных термодинамических теорий, не опирающихся на принцип локального равновесия и учитывающих также пространственную нелокальность процессов переноса, является так называемая "расширенная необратимая термодинамика" (РНТ) [3, 7–13]. Помимо классических независимых переменных, используемых локально-равновесной термодинамикой необратимых процессов, РНТ для описания состояния системы вдали от локального равновесия использует в качестве новых независимых переменных диссипативные потоки, т.е. поток тепла q , поток массы J и тензор напряжения P . Таким образом, в локально-неравновесной системе энтропия S является функцией не только классических переменных (см. (1.1)), но и диссипативных потоков (для простоты рассматриваем однокомпонентную диффузию):

$$S = S(U(x, t), v(x, t), C(x, t), q(x, t), J(x, t), P(x, t)). \quad (2.1)$$

Следует заметить, что с физической точки зрения новые переменные существенно отличаются от классических. Если классические переменные подчиняются законам сохранения и изменяются относительно медленно в процессе эволюции системы, то потоки в общем случае не подчиняются законам сохранения и являются относительно "быстрыми" переменными, скорость изменения которых при релаксации системы к локальному равновесию может быть высока. Введение потоков как независимых переменных вполне оправданно с физической точки зрения. Действительно, если в системе существует какой-либо поток, то это означает направленное движение носителей тепла или массы, т.е. такая система более

упорядочена по сравнению с системой, в которой потоки отсутствуют. Следовательно, энтропия, которая, как известно, является мерой "разупорядоченности", в системе с потоками должна быть меньше, чем энтропия в системе без потоков. Используя расширенный набор независимых переменных в определении локально-неравновесной энтропии (2.1) и классическую формулировку второго начала термодинамики с учетом новых локально-неравновесных членов в выражениях для производства энтропии и ее потока, РНТ приводит к дифференциальным уравнениям для диссипативных потоков эволюционного (релаксационного) типа [7–13]:

$$q + \tau_T \frac{\partial q}{\partial t} = -\lambda \nabla T, \quad (2.2)$$

$$J + \tau_D \frac{\partial J}{\partial t} = -D \nabla C, \quad (2.3)$$

$$p + \tau_0 \frac{\partial p}{\partial t} = -\zeta \nabla V, \quad (2.4)$$

$$P^v + \tau_{2p} \frac{\partial P^v}{\partial t} = -2\eta \dot{\nabla}, \quad (2.5)$$

где $P = p\delta + P^v$, δ — единичный тензор, p — вязкое давление (1/3 следа тензора P), P^v — часть тензора P со следом равным нулю, λ — коэффициент теплопроводности, D — коэффициент диффузии, ζ — объемная вязкость, η — сдвиговая вязкость, $\dot{\nabla}$ — симметрическая часть градиента скорости, τ_T , τ_D , τ_0 и τ_{2p} — времена релаксации соответствующих диссипативных потоков. Таким образом, включение диссипативных потоков в ряд независимых переменных приводит к тому, что эти потоки уже не определяются градиентом соответствующего потенциала переноса, как в классическом локально-равновесном случае, а являются решениями эволюционных уравнений (2.2)–(2.5). Эти уравнения описывают процесс релаксации диссипативных потоков к своим локально-равновесным значениям. Например, в системе с нулевым градиентом температуры начальное значение теплового потока q_0 релаксирует к равновесному значению $q = 0$ по экспоненциальному закону:

$$q(t) = q_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_T}\right).$$

Следует заметить, что уравнения для диссипативных потоков (2.2)–(2.5) описывают простейший случай одноступенчатой (или одностадийной) релаксации и не учитывают как перекрестных, так и пространственно-нелокальных эффектов. В общем случае система может эволюционировать к локальному равновесию, проходя последовательно несколько стадий с различными временами релаксации, причем такой процесс может быть пространственно-нелокален.

Далее для простоты рассмотрим только процесс теплопроводности, имея в виду, что аналогичные рассуждения и выкладки могут быть проделаны и для других процессов переноса [7]. В этом случае локально-неравновесная энтропия $S(U, v, q)$ принимает вид

$$S = S_{eq} - \frac{\tau_T}{2\lambda\rho T^2} q \cdot q, \quad (2.6)$$

где S_{eq} — локально-равновесная энтропия. Принимая во внимание, что локально-равновесная абсолютная температура T определяется из соотношения $T^{-1} = (\partial S_{eq} / \partial U)_v$, локально-неравновесная температура

Θ может быть найдена из (2.9) дифференцированием по U :

$$\frac{1}{\Theta} = \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_{v,q} = \frac{1}{T} + \alpha q \cdot q, \quad (2.7)$$

где α — положительная константа. Например, для идеального одноатомного газа выражение (2.7) имеет вид [11, 12]

$$\frac{1}{\Theta} = \frac{1}{T} + \frac{2}{5} \frac{m}{n^2 k^3 T^4} q \cdot q, \quad (2.8)$$

где m — масса молекулы, k — константа Больцмана, n — число молекул газа в единице объема. Из (2.7) и (2.8) следует, что $\Theta < T$. Из молекулярно-кинетической теории известно, что

$$\frac{kT}{m} = \langle V_x^2 \rangle = \langle V_y^2 \rangle = \langle V_z^2 \rangle,$$

где V_x , V_y и V_z — компоненты скорости молекулы газа. В локально-неравновесном случае наличие теплового потока q приводит к нарушению принципа равномерного распределения энергии по степеням свободы [12]. Предположим, что тепловой поток направлен по оси y , а $q_x = q_z = 0$. В такой ситуации уже не существует равномерного распределения энергии по степеням свободы, т.е. $\Theta_x = \Theta_z = \Theta < T$ и $\Theta_y = 3T - 2\Theta > T$, где

$$\Theta_x = \frac{m}{k} \langle V_x^2 \rangle, \quad \Theta_y = \frac{m}{k} \langle V_y^2 \rangle, \quad \Theta_z = \frac{m}{k} \langle V_z^2 \rangle$$

[12]. Отсюда следует, что при отклонении системы от локального равновесия, вызванном наличием в ней теплового потока, средний квадрат скорости молекул в направлении теплового потока превышает равновесное значение. При этом средний квадрат скорости в остальных направлениях меньше равновесного значения и определяется локальной температурой Θ (см. (2.7) и (2.8)).

Следует подчеркнуть, что, строго говоря, в уравнениях для потока тепла (2.2) должен стоять градиент локально-неравновесной температуры, т.е. $\nabla \Theta$, а не ∇T . В практических ситуациях разница между Θ и T невелика [11, 12]. Однако с концептуальной точки зрения появление $\nabla \Theta$ в уравнении для теплового потока означает существование локально-неравновесного стационарного состояния $q = -\lambda \nabla \Theta$ [7, 11, 12], которое может существенно отличаться от локально-равновесного стационарного состояния $q = -\lambda \nabla T$.

2.2. Поток высшего порядка

Включение диссипативных потоков в ряд независимых переменных, описывающих локально-неравновесное состояние системы, приводит к эволюционным уравнениям для этих потоков, которые без учета перекрестных эффектов имеют форму так называемых уравнений Максвелла – Каттанео (2.2) – (2.5). Однако эти уравнения не могут быть представлены в виде полных законов сохранения, когда изменение какой-либо величины в данной точке пространства обусловлено двумя причинами: потоком этой величины (дивергентный член) и ее источником. Действительно, уравнение Максвелла – Каттанео (2.2) может быть представлено как

$$\rho \frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\rho}{\tau_T} (q + \lambda \nabla T).$$

Правая часть этого уравнения может рассматриваться с феноменологической точки зрения как источник. Для того чтобы это уравнение имело форму полного закона сохранения, РНТ вводит дополнительный член в дивергентной форме, т.е.

$$\rho \frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\rho}{\tau_T} (q + \lambda \nabla T) - \nabla q_2, \quad (2.9)$$

где q_2 — поток теплового потока или поток второго порядка, представляющий собой тензор второго ранга. Последний член в уравнении (2.9) описывает пространственно нелокальные эффекты. Сравнение с кинетической теорией показывает, что поток q_2 связан с четвертым моментом неравновесной функции распределения по скоростям. В принципе, процедура введения потоков должна быть продолжена, так как локально-неравновесная энтропия в общем случае может зависеть от потоков всех порядков [7].

Возникает естественный вопрос: потоки до какого порядка следует учитывать при описании процесса релаксации какой-либо системы к локальному равновесию. Ответ на этот вопрос зависит от спектра времен релаксации τ_n . Если время релаксации потока q_n много больше, чем времена релаксации q_{n+1} , q_{n+2} , ..., то достаточно ограничиться введением потоков до n -го порядка включительно при условии, что характерное время рассматриваемого процесса $t_0 \gg \tau_{n+1}$. Если же все характерные времена τ_n одного порядка и $t_0 \sim \tau_n$, то следует принимать во внимание потоки всех порядков. Рассмотрим простейший случай, когда $\tau_T \gg \tau_2, \tau_3, \dots$. Тогда эволюционное уравнение для теплового потока имеет вид

$$q + \tau_T \frac{\partial q}{\partial t} = -\lambda \nabla T - l^2 \nabla^2 q. \quad (2.10)$$

Учет потока второго порядка q_2 с нулевым временем релаксации $\tau_2 = 0$ приводит к появлению дополнительного члена $l^2 \nabla^2 q$, который описывает пространственно нелокальный эффект процесса теплопереноса, где l — характерный масштаб нелокальности (корреляционная длина).

Таким образом, последовательное введение потоков высшего порядка приводит к иерархии уравнений для теплового потока, которые учитывают различные степени отклонения системы от локального термодинамического равновесия, а также и пространственно нелокальные эффекты. Например, в твердом теле при низких температурах достаточно учесть поток второго порядка с нулевым временем релаксации, т.е. ограничиться уравнением (2.10), чтобы описать тепловые волны и другие особенности процесса переноса [7]. Для идеальных газов все характерные времена релаксации τ_n одного порядка и, в принципе, все они должны приниматься во внимание при описании системы вдали от локального равновесия [13]. Однако для практических целей обычно достаточно взять лишь несколько дополнительных потоков.

2.3. Уравнение переноса

В предыдущих разделах были рассмотрены уравнения для потоков тепла. Другим соотношением, связывающим q и T , является закон сохранения энергии.

Из закона Максвелла – Каттанео (2.2) и закона сохранения энергии получаем уравнения, описывающие пространственно-временную эволюцию температуры и теп-

лового потока в локально-неравновесных условиях:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_T \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = a \nabla^2 T + \frac{W}{c_p \rho} + \frac{\tau_T}{c_p \rho} \frac{\partial W}{\partial t}, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \tau_T \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = a \nabla(\nabla q) - a \nabla W, \quad (2.12)$$

где $a = \lambda/c_p \rho$ — коэффициент температуропроводности. Таким образом, введение теплового потока q в ряд независимых переменных и появление, как следствие, релаксационного члена в законе Максвелла–Каттано приводят к уравнению теплопроводности (2.11) гиперболического типа. В такой постановке, когда тепловой поток q является независимой переменной, для определения его пространственно-временной эволюции возникает независимое уравнение (2.12), которое также является уравнением в частных производных гиперболического типа. Уравнение теплопроводности гиперболического типа (2.11) и соответствующее уравнение для теплового потока (2.12) имеют два семейства характеристик $x \pm V_T t = \text{const}$. Это означает, что тепловой сигнал (или высокочастотные тепловые возмущения) распространяются в локально-неравновесных условиях с конечной скоростью $V_T = (a/\tau_T)^{1/2}$. Иными словами, уравнения (2.11) и (2.12) предсказывают, что изменения температуры на поверхности полубесконечного тела будут распространяться в его объем с конечной скоростью V_T . Это свойство решений гиперболических уравнений переноса радикально отличается от свойств решений классических уравнений переноса параболического типа (1.9) или (1.10), согласно которым влияние всякого теплового возмущения распространяется мгновенно на все пространство, т.е. тепло из точки x распространяется так, что уже в следующий момент времени после действия источника тепла тепловые возмущения обращаются в нуль лишь асимптотически при $x \rightarrow \infty$ [26]. Этот "парадокс бесконечной скорости распространения возмущений" с физической точки зрения неприемлем, так как нарушает принцип причинности. Таким образом, локально-неравновесные уравнения гиперболического типа устраняют этот парадокс.

Уравнение теплопроводности гиперболического типа (2.11) сочетает в себе свойства как классического уравнения теплопроводности, описывающего чисто диссипативный способ передачи энергии, так и волнового уравнения (вторая производная по времени), описывающего распространение незатухающих волн. Это объясняет экспериментально наблюдаемые волновые свойства процесса теплопереноса при низких температурах — распространение тепловой волны с конечной скоростью [14, 15]; отражение тепловой волны от теплоизолированной границы, а при падении на границу раздела двух сред частичное отражение и частичное прохождение в другую среду [16]; интерференция тепловой волны [17].

Отметим, что постановка краевой задачи для уравнений (2.11) и (2.12) требует задания начального значения не только температуры, как в классическом локально-равновесном случае, но и начальных значений $\partial T/\partial t$, q и $\partial q/\partial t$, поскольку (2.11) и (2.12) являются уравнением второго порядка, а тепловой поток q — независимой переменной.

Рассмотрим теперь влияние пространственно нелокальных эффектов на процесс теплопереноса. В таком случае тепловой поток q и градиент температуры свя-

заны соотношением (2.10). Из закона сохранения и (2.10) найдем уравнение теплопереноса, описывающее пространственно-временную эволюцию температуры системы T :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_T \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = a \nabla^2 T + l^2 \frac{\partial \nabla^2 T}{\partial t} + \frac{\tau}{c_p \rho} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{W}{c_p \rho} - \frac{l^2}{c_p \rho} \nabla^2 W. \quad (2.13)$$

Из (2.13) следует, что учет пространственной нелокальности в уравнении для теплового потока (2.10) приводит к появлению нелокальных членов и в уравнении для температуры. Наличие смешанной производной $\partial \nabla^2 T/\partial t$ в (2.13) изменяет тип уравнения — из гиперболического оно снова превращается в параболическое. Таким образом, если без учета пространственной нелокальности гиперболическое уравнение переноса (2.11) предсказывает, что скачок температуры распространяется как поверхность сильного разрыва с постоянной скоростью V_T , то нелокальный член $\partial \nabla^2 T/\partial t$ сглаживает скачок температуры и приводит к возникновению вместо сильного разрыва переходного фронта с непрерывным изменением температуры. Толщина этого фронта постепенно увеличивается пропорционально $t^{1/2}$. Такое сглаживающее действие нелокальных эффектов аналогично сглаживающему действию вязкости в газовой динамике, поэтому смешанная производная $\partial \nabla^2 T/\partial t$ в уравнении теплопереноса (2.13) может ассоциироваться с "температурной вязкостью".

Заметим, что метод фиктивной вязкости, т.е. введение фиктивного вязкого члена в уравнения газовой динамики, используется для преодоления трудностей, возникающих при численном анализе разрывных решений. При этом отпадает необходимость в задании краевых условий на разрыве в процессе счета, по окончании которого фиктивная вязкость устремляется к нулю и газ вновь становится невязким. Такой прием, т.е. введение фиктивной "температурной" вязкости, может найти применение и при численном моделировании тепловых ударных волн.

Если $\tau_2 > 0$, то

$$(\tau_T + \tau_2) \frac{\partial q}{\partial t} + \tau_T \tau_2 \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = -\lambda \nabla T - q + l^2 \nabla q - \tau_2 \lambda \frac{\partial \nabla T}{\partial t}. \quad (2.14)$$

Таким образом, при $\tau_2 > 0$ и $\tau_n = 0$ ($n > 2$) уравнение для теплового потока (2.14) является гиперболическим уравнением второго порядка. Соответствующее ему уравнение для температуры принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + (\tau_T + \tau_2) \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \tau_T \tau_2 \frac{\partial^3 T}{\partial t^3} = a \nabla^2 T + (a \tau_2 + l^2) \frac{\partial \nabla^2 T}{\partial t} + \\ + \frac{1}{c_p \rho} \left[W + (\tau_T + \tau_2) \frac{\partial W}{\partial t} + \tau_T \tau_2 \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} - l^2 \nabla^2 W \right]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Это уравнение также гиперболического типа с конечной скоростью распространения возмущений V_2^* :

$$V_2^* = \left(\frac{a}{\tau_T} + \frac{l^2}{\tau_T \tau_2} \right)^{1/2}. \quad (2.16)$$

Из (2.16) видно, что $V_2^* > V_T = (a/\tau_T)^{1/2}$, т.е. тепловая волна (сильный разрыв), соответствующая уравнению

теплопереноса (2.15), распространяется с большей скоростью, чем тепловая волна, описываемая уравнением (2.11) без учета потоков высшего порядка.

В принципе, процедура введения потоков более высокого порядка может быть продолжена. Она приведет к последовательности уравнений переноса в частных производных, причем в случае нулевого времени релаксации потока высшего порядка это уравнение будет параболического типа, а при ненулевом времени релаксации — гиперболического. Скорость распространения тепловой волны, соответствующая последовательности гиперболических уравнений, будет увеличиваться и стремиться к конечному пределу [13].

Одной из особенностей нелокальных уравнений переноса (2.11), (2.13) и (2.15) является наличие в их правых частях не только функции источника W , но и ее производных как по времени, так и в пространстве. С формальной точки зрения такие члены могут рассматриваться как дополнительные источники тепла, точнее "псевдоисточники". Существование таких псевдоисточников, конечно же, не меняет суммарного теплосодержания системы, определяемого начальным теплосодержанием и функцией реального источника W . Однако они могут заметно исказить пространственно-временные распространения температуры и теплового потока в системе. Заметим, что уравнение Максвелла–Каттанео (2.2) может быть представлено как приближение первого порядка при разложении в ряд Фурье по τ_T более общего соотношения: $q(t + \tau_T) = -\lambda \nabla T$. Это выражение означает, что между тепловыми потоками и градиентом температуры существует временной сдвиг, равный времени релаксации. С позиций молекулярно-кинетической теории такая временная задержка может рассматриваться как время между двумя последовательными соударениями молекул, так как приблизительно такое время необходимо молекуле на то, чтобы долететь до выделенной поверхности, через которую определяется тепловой поток. Дополнительный член $\tau_T \partial q / \partial t$ в законе Максвелла–Каттанео (2.2) может рассматриваться как проявление инерционности процесса теплопереноса. Действительно, записав (2.2) в виде

$$\tau_T \frac{\partial q}{\partial t} + q = \lambda T^2 \nabla \left(\frac{1}{T} \right), \quad (2.17)$$

можно легко обнаружить аналогию между (2.17) и уравнением движения механического тела под действием вынуждающей силы $\lambda T^2 \nabla (1/T)$ и силы вязкости (второй член в левой части (2.17)), причем роль скорости движения этого тела играет тепловой поток q , а его массы — время релаксации τ_T . Напомним, что в термодинамике величина $\nabla (1/T)$ носит название термодинамической силы.

3. Двухтемпературная модель

Одной из простейших и вместе с тем весьма эффективных моделей, описывающих процесс теплопереноса в локально-неравновесных условиях, является так называемая двухтемпературная (2Т) модель [3, 10, 18–30]. Такая модель предполагает, что система состоит из двух взаимодействующих подсистем, причем характерное время обмена (релаксации) энергией между ними много больше времен релаксации к локальному равновесию

каждой отдельно взятой подсистемы. В этом случае каждой из подсистем может быть приписана своя собственная температура, а теплофизическая задача в системе в целом сводится к определению пространственно-временной эволюции этих температур с учетом обмена энергией между подсистемами.

Впервые 2Т-модель была, по-видимому, использована для анализа процесса теплопереноса в металлах, где роль взаимодействующих подсистем играли электроны и решетка [18]. 2Т-модель оказалась весьма эффективной для описания релаксации энергии между различными степенями свободы молекул в газах, а также между легкой и тяжелой фракциями в смеси двух газов [19]. В капиллярно-пористых средах 2Т-приближение использовалось для описания теплообмена между газовой и твердой фазами [20–22]. Кроме того, 2Т-модель хорошо себя зарекомендовала при анализе взаимодействия высокоинтенсивного источника энергии с полимерными материалами, когда энергия от источника сначала передается фоновой подсистеме, а лишь затем от фононов к колебательным степеням свободы молекул полимера. В этом случае каждой из подсистем также может быть приписана своя собственная температура, причем релаксация энергии между ними играет наиболее заметную роль вблизи точки стеклования [23]. Кроме того, 2Т-модель может быть использована для анализа процесса теплопереноса в плазме, где роль взаимодействующих подсистем играют электроны и ионы, в турбулентных потоках, где происходит теплообмен между турбулентными пятнами и инертной прослойкой [25].

В ряде работ [31–33] для изучения процессов теплопроводности в неомогенных средах предлагается использовать уравнение гиперболического типа, которое учитывает релаксацию системы к локальному равновесию. На основе такого подхода получены оценки времен релаксации для неомогенных систем и показано, что их значения на много порядков превышают времена релаксации к локальному равновесию для газов, жидкостей и твердых тел. Следовательно, время релаксации процесса теплопереноса в неомогенных средах имеет иной физический смысл. Это относится также и к другим теплофизическим характеристикам неомогенной системы.

Рассмотрим сначала случай, когда равновесие в системе в целом отсутствует и между подсистемами происходит обмен энергией, т.е. они имеют разные температуры T_1 и T_2 , но внутри каждой из подсистем существует локальное равновесие. Тогда пространственно-временная эволюция температур T_1 и T_2 описывается парой связанных уравнений параболического типа (т.е. классических локально-равновесных уравнений переноса) [24, 34]:

$$c_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \lambda_i \nabla^2 T_i \pm g(T_2 - T_1) + W_i, \quad (3.1)$$

где $i = 1, 2$, g — коэффициент теплообмена между подсистемами; знак плюс соответствует $i = 1$, минус — $i = 2$, W_i — интенсивность источников тепловыделения. Заметим, что все коэффициенты в (3.1) относятся к единице объема неомогенной среды.

В большинстве случаев с практической точки зрения удобнее пользоваться средней температурой, являющейся мерой тепловой энергии единицы объема неомогенной системы. Для двухкомпонентной системы сред-

няя температура имеет следующий вид:

$$\bar{T} = \frac{c_1 T_1 + c_2 T_2}{c_1 + c_2}.$$

Из (3.1) можно получить уравнения, описывающие пространственно-временную эволюцию как температур подсистем T_i ($i = 1, 2$), так и средней температуры \bar{T} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_i}{\partial t} + \tau_1 \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2} - l_a^2 \frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 T_i = a^* \nabla^2 T_i - a_g l_g^2 \nabla^4 T_i + \\ + \frac{W_1 + W_2}{c_1 + c_2} + \tau_1 \frac{\partial}{\partial t} \frac{W_i}{c_i} - \frac{l_g^4}{c_i} \nabla^2 \frac{W_i}{h_i^2}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \tau_1 \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial t^2} - l_a^2 \frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 \bar{T} = a^* \nabla^2 \bar{T} - a_g l_g^2 \nabla^4 \bar{T} + \frac{W_1 + W_2}{c_1 + c_2} + \\ + \tau_1 \frac{\partial}{\partial t} \frac{W_1 + W_2}{c_1 + c_2} - \frac{l_g^4}{c_1 + c_2} \nabla^2 \left(\frac{W_1}{h_1^2} + \frac{W_2}{h_2^2} \right), \end{aligned} \quad (3.3)$$

где $\tau_1 = c_1 c_2 / g(c_1 + c_2)$; $h_i^2 = \tau_1 a_i$; $a_i = \lambda_i / c_i$; $l_a^2 = h_1^2 + h_2^2$; $l_g^2 = h_1 h_2$; $a^* = (\lambda_1 + \lambda_2) / (c_1 + c_2)$; $a_g = l_g^2 / \tau_1$.

Уравнения теплопроводности для неогомогенной среды (3.2), (3.3) существенным образом отличаются и от уравнения теплопроводности параболического типа, и от уравнения теплопроводности гиперболического типа. В них содержатся параметры временной τ_1 и пространственной l нелокальности. Это означает, что если характерные пространственно-временные масштабы процесса переноса в неогомогенной системе t_0 и L таковы, что $t_0 \sim \tau_1$ и $L \sim l$, то локальное уравнение переноса параболического типа становится несправедливым и вместо него следует использовать нелокальные уравнения (3.2), (3.3).

Рассмотрим теперь некоторые частные случаи уравнений (3.2), (3.3) и физический смысл параметров, входящих в них. В диссипативных процессах, когда тепло передается только диффузионным способом, макромасштабы такого процесса L и t_0 связаны между собой следующим образом: $L^2 = a^* t_0$. В этом случае уравнения (3.2), (3.3) в нулевом приближении сводятся к классическим локальным уравнениям параболического типа, т.е. к уравнениям диффузии. В следующем приближении следует учитывать все члены в уравнениях (3.2), (3.3), при этом процесс теплопереноса нелокален. Пространственная нелокальность характеризуется константами l_a и l_g , которые являются соответственно средним арифметическим и средним геометрическим между характерными глубинами прогрева подсистем h_1 и h_2 за время τ_1 . Временная нелокальность процесса теплопереноса характеризуется параметром τ_1 , представляющим собой время релаксации разности температур между подсистемами, т.е. время выравнивания температур или характерное время теплообмена между подсистемами. Оба эти приближения являются уравнениями в частных производных параболического типа с бесконечной скоростью распространения возмущений.

Если характерная скорость рассматриваемого процесса, например скорость движения источника тепловыделения или скорость распространения прогретой зоны, $V \sim L/t_0$, сравнима по порядку величины с характерной скоростью $V_T \sim l/\tau$, определяемой соотношением между масштабами пространственной и временной нелокальностями, то из (3.2), (3.3) следует уравнение гиперболиче-

ского типа (рассматриваем одномерный вариант):

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \tau_1 \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial t^2} = a^* \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} + \frac{W_1 + W_2}{c_1 + c_2} + \tau_1 \frac{\partial}{\partial t} \frac{W_1 + W_2}{c_1 + c_2}. \quad (3.4)$$

В этом случае пространственная нелокальность процесса теплопереноса отсутствует, а параметр τ_1 характеризует инерционные свойства передачи тепла и определяет скорость распространения тепловых возмущений

$$V_T = \left(\frac{a^*}{\tau_1} \right)^{1/2} = \left[\frac{(\lambda_1 + \lambda_2)g}{c_1 c_2} \right]^{1/2}.$$

Инерционностью теплопередачи в неогомогенных средах объясняется наличие производной по времени функции источника в (3.2), (3.3) — внешне тепловое воздействие воспринимается системой с запаздыванием на характерное время τ . Применение уравнения теплопроводности гиперболического типа для анализа процессов переноса в средах с неогомогенной внутренней структурой в ряде случаев дает наилучшее согласие теории и эксперимента [31].

Таким образом, анализ теплопереноса в двухтемпературной среде, подчиняющейся системе связанных локальных уравнений теплопроводности (3.1), показал, что такой процесс нелокален как во времени, так и в пространстве. Характерными масштабами нелокальности являются время релаксации энергии между подсистемами τ_1 и пространственный масштаб l , равный по порядку величины глубине прогрева системы за время τ_1 . Следует подчеркнуть, что эти параметры, т.е. τ_1 и l , являются внутренними характеристиками системы такими же как, например теплоемкость или коэффициент теплопроводности, и могут быть определены экспериментально. Значения этих параметров определяют, когда и на какой стадии процесса теплопереноса следует учитывать пространственную и/или временную нелокальность. Более того, как было показано выше, соотношение между масштабами нелокальности и характерными макромасштабами самого процесса переноса определяет тип (параболический или гиперболический) уравнения переноса в частных производных, соответствующего данному процессу.

Рассмотрим теперь практически важный частный случай, когда теплопроводностью и тепловыделением в одной из подсистем можно пренебречь, например, $\lambda_1 = 0$ и $W_1 = 0$. Тогда уравнение (3.2) принимает вид

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} + \tau_1 \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2} - l^2 \frac{\partial^3 T_i}{\partial t \partial x^2} = a^* \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + \frac{W}{c_1 + c_2} + \chi_i \frac{\tau_1}{c_i} \frac{\partial W}{\partial t}, \quad (3.5)$$

где $\chi_1 = 0$ и $\chi_2 = 1$. В этом случае вследствие предположения $\lambda_1 = 0$ тепловой поток через выделенную в $2T$ -системе поверхность определяется градиентом температуры только во второй подсистеме: $q = -\lambda_2 \partial T_2 / \partial x$. Однако закон Фурье для $2T$ -системы в целом, представляющий собой взаимосвязь между тепловым потоком q и градиентом температуры $\partial T / \partial x$, принимает нелокальную форму:

$$q + \tau_1 \frac{\partial q}{\partial t} = -\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} - l^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}. \quad (3.6)$$

Модифицированный закон Фурье (3.6) и закон сохранения энергии, записанный для средней температуры,

приводят к нелокальному уравнению переноса для средней температуры \bar{T} , вид которого аналогичен (3.5).

Следует заметить, что уравнение для теплового потока (3.6) в 2Т-системе совпадает с уравнением (2.13), полученным в РНТ путем введения в качестве дополнительных переменных диссипативных потоков высших порядков (см. раздел 2). Это означает, что наличие таких потоков в системе эквивалентно многоступенчатому процессу релаксации энергии между взаимодействующими подсистемами с различными температурами $T_1, T_2, \dots, T_n, \dots$.

Двухтемпературная модель (3.1) с соответствующими уравнениями теплопроводности (3.2), (3.3) и уравнением для теплового потока (3.6) получены в предположении локального равновесия внутри каждой из подсистем. Естественным обобщением такой модели является 2Т-система, в которой в одной из подсистем происходит процесс релаксации к локальному равновесию:

$$c_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = g(T_2 - T_1), \quad (3.7)$$

$$c_2 \frac{\partial T_2}{\partial t} + \tau_2 c_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial t^2} = \lambda \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + g(T_1 - T_2), \quad (3.8)$$

где τ_2 — время релаксации подсистемы 2 к локальному равновесию. Предполагается также для простоты $W = 0$. После несложных преобразований из (3.7) и (3.8) получим уравнения теплопроводности для каждой из температур T_1 и T_2 :

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} + \tau_1 \left(1 + \frac{\tau_2 g}{c_2} \right) \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2} + \tau_1 \tau_2 \frac{\partial^3 T_i}{\partial t^3} = a^* \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + l^2 \frac{\partial^3 T_i}{\partial t \partial x^2}. \quad (3.9)$$

Как и следовало ожидать, учет процесса релаксации подсистемы 2 (уравнение (3.8)) приводит к гиперболическому уравнению теплопроводности (3.9) в том смысле, что оно так же, как и (3.8), определяет конечную скорость распространения тепловых возмущений $V_2 = (a_2/\tau_2)^{1/2}$.

Уравнение (3.9) содержит три дополнительных (по сравнению с классическим локально-равновесным уравнением теплопроводности параболического типа) параметра: два временных, τ_1 и τ_2 (причем $\tau_1 > \tau_2$), и один пространственный, l . Соотношение между этими микропараметрами, характеризующими внутренние свойства системы, и характерными параметрами t_0 и L процесса переноса, т.е. макропараметрами, определяет тип процесса переноса и соответствующее уравнение теплопроводности:

1. Локальный предел. Если $t_0 \gg \tau_1$ и $L \gg l$, то уравнение (3.9) сводится к классическому локально-равновесному уравнению теплопроводности параболического типа. В этом случае процесс переноса локализован как во времени, так и в пространстве и не зависит от характерных масштабов нелокальности τ_1, τ_2 и l . Профиль температуры в полубесконечном теле, $x > 0$, при постоянном значении $T = \text{const}$ на поверхности $x = 0$ показан на рис. 1а. Как уже отмечалось выше, изменение температуры на поверхности тела $x = 0$ сказывается через конечный интервал времени даже в бесконечно удаленной точке $x \rightarrow 0$, т.е. локальное уравнение теплопроводности параболического типа предсказывает бесконечную скорость распространения тепловых возмущений.

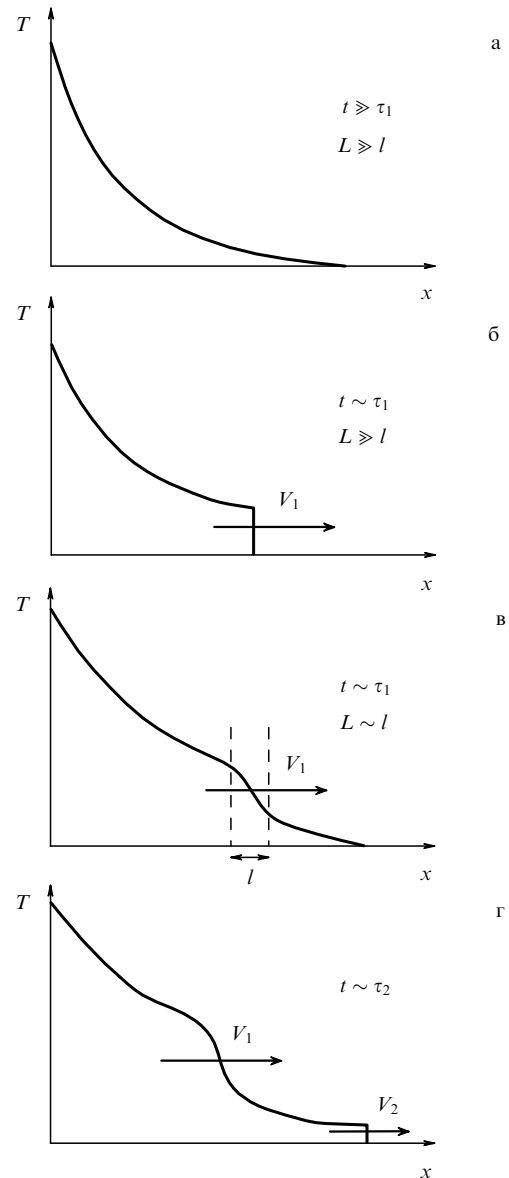


Рис. 1. Профили температуры в полубесконечном теле $x > 0$ после скачка температуры на его границе $x = 0$ в начальный момент времени: (а) в локально-равновесном приближении, соответствующий решению классического уравнения теплопроводности параболического типа; (б) в локально-неравновесном приближении, соответствующий решению гиперболического уравнения теплопроводности (2.11), т.е. "телеграфного уравнения"; (в) в локально-неравновесном приближении, соответствующий решению 2Т-модели; (г) в локально-неравновесном приближении, соответствующий решению 2Т-модели гиперболического типа (3.5).

2. В локальном пределе по пространству $L \gg l$, но с учетом локальной неравновесности (т.е. временной нелокальности) $t_0 \sim \tau_1$ уравнение переноса (3.9) редуцируется к уравнению переноса гиперболического типа. Это уравнение предсказывает, что тепловые возмущения в локально-неравновесной системе распространяются с конечной скоростью $V_1 = (a^*/\tau_1)^{1/2}$. Иными словами, скачок температуры на границе полубесконечного тела распространяется как поверхность сильного разрыва с конечной скоростью V_1 (рис. 1б).

3. В следующем приближении, когда учитывается как пространственная, $L \sim l$, так и временная, $t_0 \sim \tau_1$, нелокальности процесса переноса, уравнение (3.9) принимает

вид (3.5). Пространственная нелокальность снова приводит к бесконечно большой скорости распространения возмущений (рис. 1в). Пространственная нелокальность при этом сглаживает поверхность сильного разрыва, превращая ее в волновую структуру с непрерывным изменением температуры. Скорость распространения этого фронта по порядку величины равна V_1 , а его ширина увеличивается пропорционально $x^{1/2}$. Наличие такого фронта обусловлено процессом релаксации энергии между подсистемами.

4. Принимая во внимание все нелокальные члены в уравнении (3.6), получим, что профиль температуры в полубесконечном теле имеет два характерных фронта (см. рис. 1). Первый, распространяющийся с большей скоростью $V_2 = (a_2/\tau_2)^{1/2}$, соответствует релаксации к локальному равновесию внутри подсистемы 2 и не зависит от теплообмена с подсистемой 1, так как $\tau_1 < \tau_2$. Этот фронт представляет собой поверхность сильного разрыва. Второй фронт, с меньшей скоростью $V_1 < V_2$, связан с процессом релаксации энергии между подсистемами и подробно обсуждался в пункте 3.

Выбор модели теплопереноса зависит от поставленной задачи. Если, например, необходимо определить скорость фронта тепловой волны, соответствующей релаксации энергии между подсистемами, и расстояние, на которое она ушла от поверхности тела, а структура самого фронта при этом значения не имеет, то следует воспользоваться приближением, описанным в пункте 2. В этом случае характерным макромасштабом L является расстояние от поверхности тела до фронта волны, причем $L \gg l$. Если же при этом важна и структура фронта волны, т.е. $L \sim l$, то нужно учитывать и пространственную нелокальность процесса переноса (случай 3).

Наличие большего числа взаимодействующих подсистем приведет к появлению новых волновых фронтов на профиле температуры, скорость и форма которых соответствуют какой-либо стадии релаксации энергии между ними.

Пример. Двухтемпературная модель (3.7), (3.8) и соответствующее уравнение переноса (3.9) могут быть использованы для анализа процесса теплопереноса при облучении поверхности металла сверхкороткими лазерными импульсами. Такие эксперименты обнаружили волновое распространение теплового импульса со скоростью $V \sim V_F$, где V_F — скорость Ферми [35]. Система уравнений (3.7), (3.8) предсказывает распространение тепловой волны через электронный газ со скоростью V_2 (см. рис. 1). Учитывая, что основной вклад в теплоперенос вносят электроны, имеющие скорость порядка V_F , можно оценить $V_2 \sim V_F$, что находится в согласии с результатами эксперимента.

4. Дискретная модель

В последнее время возрастает интерес к моделям дискретного типа, которые, в отличие от классических континуальных подходов, предполагают, что пространство и время являются не непрерывными, а дискретными переменными. Иными словами, считается, что система состоит из взаимодействующих дискретных объектов, состояние которых изменяется через конечные промежутки времени. Подобный подход используется в механике, гидродинамике, магнитогидродинамике, теории роста кристаллов, биологии и т.д. [27–29, 35–41].

Аксиоматика дискретного подхода к моделированию процессов переноса может быть основана на теории случайных блужданий [3, 7, 27, 39–41]. Для простоты рассмотрим одномерный случай, в котором предполагается, что блуждающая частица, переносящая энергию и/или массу, совершает скачки длиной h в положительном или отрицательном направлении оси x с равной вероятностью, причем такой скачок происходит на каждом временном шаге через равные промежутки времени τ . Далее, учитывая, что потенциал переноса Θ (температура или концентрация) пропорционален числу частиц в рассматриваемом элементе среды, можем записать дискретное уравнение переноса в виде [27, 39–41]

$$\Theta(x, t + \tau) = \frac{1}{2} [\Theta(x + h, t) + \Theta(x - h, t)] + F(\Theta(x, t)), \quad (4.1)$$

где $F(\Theta(x, t))$ — дискретный аналог источника тепла или массы. Уравнение (4.1) означает, что число частиц в элементе среды x в момент времени $t + \tau$ равно сумме частиц, прилетевших из ближайших соседних элементов среды в точках $x + h$ и $x - h$, где они находились на предыдущем временном шаге t , плюс число частиц, не связанное с процессом переноса, а определяемое внешним источником. Заметим, что в уравнении (4.1) предполагалось, что вероятность скачка частицы в положительном и отрицательном направлении оси x равны $1/2$. Функция F представляет собой решение полугруппы, соответствующее обычному дифференциальному уравнению [38]

$$\frac{d\Theta}{dt} = W(\Theta(t)). \quad (4.2)$$

Отсюда найдем, что функция источника $F(\Theta)$ в дискретном уравнении переноса (4.1) и функция источника $W(\Theta)$ в дифференциальном уравнении (4.2) связаны следующим образом:

$$F(\Theta) = \int_t^{t+\tau} W(\Theta(t)) dt.$$

Как уже обсуждалось ранее, в локально-неравновесной ситуации как температура, так и тепловой поток являются независимыми переменными. Следовательно, значение теплового потока не может быть получено дифференцированием распределения температуры в системе, как это обычно делается в локально-равновесном случае, а должно быть найдено из решения независимого уравнения, описывающего пространственно-временную эволюцию самого потока. Следовательно, для описания процесса теплопереноса наряду с дискретным уравнением для температуры (4.1) необходимо сформулировать и дискретное уравнение для потока тепла. По определению, тепловой поток q является энергией, переносимой через единичную площадку за единицу времени. В дискретной модели тепловой поток через дискретный элемент среды с координатой x может быть представлен в виде

$$q\left(x, t + \frac{\tau}{2}\right) = -\frac{c_p \rho h}{2\tau} [\Theta(x + h, t) - \Theta(x - h, t)]. \quad (4.3)$$

В выражении (4.3) тепловой поток q рассматривается в средний момент времени $t + \tau/2$ между двумя последовательными состояниями дискретного элемента в моменты времени t и $t + \tau$, так как обмен энергией

между дискретными элементами происходит именно в промежутке между стационарными состояниями системы. Следует заметить, что для описания динамики системы достаточно, вообще говоря, одного дискретного уравнения (4.1), а выражение (4.3) при этом может рассматриваться как определение теплового потока.

Уравнения переноса в дискретной форме (4.1) и (4.3) особенно удобны для компьютерного моделирования нелокальных процессов тепломассопереноса, так как они не требуют перевода на язык дискретной математики. Примеры численного моделирования на основе дискретного уравнения (4.1) приведены в [40].

Для дальнейшего анализа представим дискретные уравнения (4.1) и (4.4) в операторной форме:

$$[\exp(\tau \partial_t) - \cosh(h \partial_x)] \Theta(x, t) = F(\Theta), \quad (4.4)$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{2} \partial_t\right) [q(t, x)] = -\sinh(h \partial_x) [\Theta(x, t)] \frac{c_p h}{\tau}. \quad (4.5)$$

Теперь можно сделать предельный переход от дискретных уравнений (4.1) и (4.3) к континуальным уравнениям в частных производных. Для этого необходимо перейти к пределу $\tau \rightarrow 0$ и $h \rightarrow 0$ в уравнениях (4.4) и (4.5). Такой предел содержит бесконечное число членов ряда Тейлора с двумя малыми параметрами τ и h .

Чтобы получить уравнения с конечным числом членов, необходимо задать закон предельного перехода, т.е. взаимосвязь между τ и h при τ и $h \rightarrow 0$. Закон предельного перехода определяется характером процессов, протекающих в данной системе. Рассмотрим два основных случая.

4.1. Диффузионный закон предельного перехода

В теории случайных блужданий обычно предполагают, что коэффициент переноса $D = h^2/2\tau$ остается конечной величиной при стремлении h и τ к нулю, т.е.

$$\lim_{h, \tau \rightarrow 0} \frac{h^2}{2\tau} = D = \text{const} > 0. \quad (4.6)$$

В этом случае нулевое приближение по τ дискретного уравнения (4.1) имеет вид классического уравнения переноса параболического типа:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + W. \quad (4.7)$$

В этом приближении из (4.6) получаем классический закон Фурье (или Фика в случае массопереноса):

$$q = -\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial x}, \quad (4.8)$$

где $\lambda = D\rho c_p$ — коэффициент теплопроводности.

Подчеркнем, что все разложения дискретных уравнений любой степени точности являются уравнениями параболического типа в том смысле, что определяют бесконечную скорость распространения возмущений, $V^* \rightarrow \infty$. Это свойство является следствием диффузионного закона предельного перехода (4.6), так как $V = h/\tau = 2D/h \rightarrow \infty$ при $h \rightarrow 0$.

4.2. Волновой закон предельного перехода

В предыдущем разделе был рассмотрен диффузионный закон предельного перехода, который определяет бесконечную скорость распространения возмущений V^* . Рассмотрим теперь такой закон предельного перехода,

который дает конечное значение V^* . Следовательно, будем предполагать, что

$$\lim_{h, \tau \rightarrow 0} \frac{h}{\tau} = V^* < \infty. \quad (4.9)$$

Назовем этот закон предельного перехода "волновым". В первом приближении по τ при волновом законе предельного перехода (4.9) из (4.4) и (4.5) получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Theta}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial t^2} &= \frac{V^{*2} \tau}{2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + W + \frac{\tau}{2} \frac{\partial W}{\partial t}, \\ q + \frac{\tau}{2} \frac{\partial q}{\partial t} &= -\frac{V^{*2} \tau c_p \rho}{2} \frac{\partial \Theta}{\partial x}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Как и следовало ожидать, эти уравнения гиперболического типа с конечной скоростью распространения возмущений V^* , соответствующей волновому закону предельного перехода (4.9). Эти уравнения совпадают соответственно с гиперболическими уравнениями переноса (2.11) и законом Максвелла – Каттанео (2.2), полученными в РНТ путем введения теплового потока в ряд независимых переменных, описывающих локально-неравновесное состояние системы.

Таким образом, при переходе от дискретного уравнения переноса к его приближениям различной точности в виде уравнений в частных производных следует задавать закон предельного перехода, т.е. связь между характерными временными и пространственными микромасштабами. Закон предельного перехода определяет тип уравнений переноса (параболический или гиперболический) и, следовательно, основные качественные свойства их решений. Выбор закона предельного перехода диктуется скоростью протекания процесса переноса. Для относительно медленных процессов "диффузионного" типа с характерной скоростью V , много меньшей скорости распространения возмущений V^* , следует пользоваться диффузионным законом предельного перехода (4.6). Высокоскоростным режимам процессов переноса, т.е. когда $V \sim V^*$, соответствует волновой закон предельного перехода (4.9).

Двухтемпературная дискретная модель, объединяющая основные свойства дискретной модели (раздел 4) и 2T-модели (раздел 3), рассмотрена и проанализирована в [27, 29].

5. Интегральная модель

Как уже отмечалось выше, расширенная необратимая термодинамика, а также и другие термодинамические и статистические теории приводят к пространственно-временной нелокальности уравнений для диссипативных потоков (тепла и массы). Эти уравнения, дополненные соответствующими законами сохранения, приводят к нелокальным уравнениям переноса для температуры и концентрации. Следует заметить, что эта процедура обычно продвигается с законами сохранения в форме локального уравнения в частных производных. Строго говоря, корректный вывод уравнений переноса должен быть основан на нелокальной форме законов сохранения, содержащих столько же нелокальных членов, сколько присутствует в уравнениях для диссипативных потоков. В этом разделе будет показано, что предположение о пространственно-временной нелокальности законов сохранения приводит одновременно к нелокальным

уравнениям переноса и нелокальным уравнениям для диссипативных потоков.

Рассмотрим сначала систему классических (локальных) уравнений, являющихся основой локально-равновесной термодинамики необратимых процессов и, следовательно, локально-равновесной теории процессов переноса. Эта система состоит из закона сохранения энергии, закона Гиббса и уравнения баланса энтропии, которые в случае изотропного твердого тела имеют следующий вид:

$$\rho \frac{dU}{dt} = -\nabla q, \quad (5.1)$$

$$dS = T^{-1} dU, \quad (5.2)$$

$$\rho \frac{dS}{dt} + \nabla J_S = \sigma_S, \quad (5.3)$$

где J_S и σ_S — поток и производство энтропии соответственно. Как уже отмечалось выше, дифференциальная форма уравнений (5.1)–(5.3) является следствием предположения о пространственно-временной локальности, когда объем интегрирования в законах сохранения стремится к нулю. В общем же случае интегральные уравнения, соответствующие (5.1)–(5.3), имеют следующий вид:

$$\rho [U(x, t + \tau) - U(x, t)] = \frac{1}{\Omega} \int_t^{t+\tau} \oint_{\eta} q(x, t) d\eta dt, \quad (5.4)$$

$$S(x, t + \tau) - S(x, t) = T^{-1} [U(x, t + \tau) - U(x, t)], \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \rho [S(x, t + \tau) - S(x, t)] + \frac{1}{\Omega} \int_t^{t+\tau} \oint_{\eta} J_S(x, t) d\eta dt = \\ = \int_t^{t+\tau} \int \sigma_S(x, t) d\Omega dt, \end{aligned} \quad (5.6)$$

где τ — временной масштаб нелокальности, Ω — объем и η — поверхность, соответствующие линейному масштабу нелокальности h , т.е. $\Omega \sim h^3$ и $\eta \sim h^2$.

Подчеркнем, что уравнения (5.4)–(5.6) нелокальны не только в пространстве, но и во времени, так как скорости изменения энергии и энтропии, т.е. их первые производные по времени, представляющие собой локальные члены, заменены на конечные разности с характерным масштабом нелокальности τ . В одномерном случае (5.4) может быть переписано как

$$\begin{aligned} \rho [U(x, t + \tau) - U(x, t)] = \\ = -\frac{\tau}{2h} \left[q\left(x + h, t + \frac{\tau}{2}\right) - q\left(x - h, t + \frac{\tau}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

В (5.7) интегрирование по времени заменено с некоторым приближением значением q в средний момент времени $t + \tau/2$. Подставляя (5.7) в (5.5), получим выражения для потока и производства энтропии, соответствующие интегральной формулировке (5.4)–(5.6). Согласно второму закону термодинамики, производство энтропии должно быть положительным. Из этого требования вытекают следующие соотношения, представленные в виде рядов Фурье с малыми параметрами τ и h :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \dots = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \dots \right), \quad (5.8)$$

$$q + \tau \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} + \dots = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \dots \right). \quad (5.9)$$

Уравнение теплопроводности (5.8) и уравнение теплового потока (5.9) в соответствующих приближениях и при соответствующем законе предельного перехода содержат в себе классическое уравнение переноса параболического типа и закон Фурье, уравнение переноса гиперболического типа (телеграфное уравнение) и закон Максвелла–Каттанео.

Таким образом, интегральная формулировка (5.4)–(5.6) и соответствующий ей второй закон термодинамики приводят к появлению в уравнениях переноса нелокальных членов, совпадающих с (или равных по порядку величины) членами в уравнениях переноса, полученных в РНТ или других термодинамических и статистических методах на основе локальной формулировки законов сохранения. Это означает, что строгий подход к исследованию динамики нелокальных систем должен быть основан на законах сохранения в интегральной или какой-либо иной нелокальной форме.

6. Заключение

Математические модели, описывающие локально-неравновесные процессы переноса, представляют собой иерархическую последовательность, соответствующую степени отклонения системы от локального равновесия. Степень отклонения системы от локального равновесия и, следовательно, адекватный выбор той или иной модели переноса зависят от соотношений между характерными пространственно-временными масштабами процесса переноса (макромасштабами) и микромасштабами, характеризующими релаксацию системы к локальному равновесию. Следует заметить, что характерные масштабы процесса переноса зависят как от внешних факторов, таких как граничные и начальные условия, источники тепла и массы, так и от параметров самой системы, например коэффициентов диффузии, теплопроводности и т.д. Характерные времена релаксации и масштабы пространственной нелокальности являются внутренними параметрами самой системы и не зависят от внешних условий.

Иерархическая последовательность математических моделей, описывающих локально-неравновесные процессы переноса, состоит из последовательности уравнений в частных производных параболического и гиперболического типов, порядок которых увеличивается с увеличением степени отклонения системы от локального равновесия. Тип уравнений зависит от закона предельного перехода, который, в свою очередь, определяется характером процесса переноса. Следует заметить, что процедура разложения по малому параметру (или нескольким параметрам) часто встречается в термодинамических и статистических теориях, например в теории Навье–Стокса, методах Грета и Чепмена–Энскога и т.п. Следовательно, в этих случаях также может оказаться полезной идея о введении различных законов предельного перехода, определяющих взаимное поведение параметров разложения при стремлении их к нулю.

Предлагаемые локально-неравновесные модели процессов переноса, с одной стороны, находятся в соответствии с существующими версиями локально-неравновесной термодинамики, а с другой стороны, расширяют круг возможных объектов исследований и имеют относительно простой вид, позволяющий использовать их для анализа конкретных физических ситуаций.

Дискретные модели процессов переноса особенно удобны для компьютерного моделирования, так как они не требуют перевода на язык дискретной математики, поскольку представлены непосредственно в рекуррентной форме.

Проведенные на основе этих моделей исследования показали, что локально-неравновесные эффекты оказывают определяющее влияние на механизм и основные закономерности распространения высокоскоростных бегущих волн в активных средах [3–6, 28, 40, 49–50]. Примерами таких волн могут служить волны горения, волны сверхпроводник–нормальный металл, волны плавления и затвердевания и др. В условиях далеких от локального равновесия распределения потенциалов переноса (т.е. температуры и концентраций компонентов) существенно отличаются от классических, локально-равновесных. Это и приводит к качественно новым свойствам бегущих волн в локально-неравновесных условиях. Подробнее эти вопросы будут рассмотрены в отдельной работе.

Развитые методы носят достаточно общий характер и могут служить основой для построения локально-неравновесных моделей процессов переноса, протекающих в различных физических системах. Например, такой подход может оказаться полезным при анализе процесса перехода горения в детонацию, при изучении аномальной диффузии в полимерных материалах вблизи точки стеклования, при исследовании взаимодействия сверхкоротких лазерных импульсов с плазмой, при изучении условий образования аморфных сплавов при сверхбыстрой закалке и т.д.

Список литературы

1. Де Гроот С, Мазур П *Неравновесная термодинамика* (М.: Мир, 1964)
2. Дьярмати И *Неравновесная термодинамика* (М.: Мир, 1974)
3. Соболев С Л *УФН* **161** 5 (1991)
4. Sobolev S L *Phys. Lett. A* **199** 383 (1995)
5. Sobolev S L *Phys. Status Solidi (a)* **156** 293 (1996)
6. Sobolev S L *Phys. Rev. E* **55** N4 (1997)
7. Jou D, Casas-Vazquez J, Lebon G *Extended Irreversible Thermodynamics* (Berlin: Springer, 1996); *J. Non-Equilib. Thermodyn.* **21** 103 (1996); *Rep. Prog. Phys.* **51** 1105 (1988)
8. Muller I, Ruggeri T *Extended Thermodynamics* (New York: Springer, 1993)
9. Eu B C *Kinetic Theory and Nonequilibrium Thermodynamics* (New York: Wiley, 1992)
10. Nettleton R E, Sobolev S L *J. Non-Equilib. Thermodyn.* **20** 205 (1995); **20** 297 (1995); **21** 1 (1996)
11. Casas-Vazquez J, Jou D *Phys. Rev. E* **49** 1040 (1994)
12. Camacho J, Jou D *Phys. Rev. E* **52** 3490 (1995)
13. Jou D, Pavon D *Phys. Rev. A* **44** 6496 (1991)
14. Пешков В П *Физ. журнал* **8** 381 (1944)
15. Van Gutfeld R J, in *Physical Acoustics: Principles and Methods* Vol. V (Ed. W P Mason) (New York, London: Academic, 1968) p. 233
16. Torczynski J R *Phys. Fluids* **27** 2636 (1984); Torczynski J R, Gerthsen D, Roesgen T *Phys. Fluids* **27** 2418 (1984)
17. Борисенко И Ф, Федотов Ф О, Шварцбург Ф Б *ДАН СССР* **313** 336 (1990)
18. Анисимов С И и др. *Действие излучения большой мощности на металлы* (М.: Наука, 1970)
19. Жданов В М, Алиевский С В *Процессы переноса в молекулярных газах* (М.: Наука, 1989)
20. Потытняков С И и др. *ФГВ* (2) 19 (1985)
21. Алдущин А П, Сеплярский Б С, Шкадинский К Г *ФГВ* (1) 36 (1980)
22. Кисилев О В, Матрос Ю Ш *ФГВ* (2) 25 (1980)
23. Wen X, Tolbert W, Dlott D J. *Chem. Phys.* **99** 4140 (1993)
24. Соболев С Л *ИФЖ* **66** 492 (1994)
25. Баренблатт Г И, в сб. *Нелинейные волны. Самоорганизация* (М.: Наука, 1983) с. 191
26. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Гидродинамика* (М.: Наука, 1986)
27. Sobolev S L *J. de Phys. III* **3** 2261 (1993)
28. Соболев С Л, Манелис Г Б *Хим. Физ.* **13** (5) 88 (1994)
29. Sobolev S L, in *Proc. Int. Col. on Dust Explosions* (Warsaw, 1993) p. 123
30. Tang D W, Araki N J. *Phys. D: Appl. Phys.* **29** 2527 (1996)
31. Kaminski W J. *Heat Trans. ASME* **112** 555 (1990)
32. Luikov A V *Int. J. Heat Mass Trans.* **9** 139 (1966)
33. Антонишин Н В, Геллер М А, Парнас А Л *ИФЖ* **26** (1974)
34. Sobolev S L *Phys. Lett. A* **197** 243 (1995)
35. Brorson S, Fujimoto J, Ippen E *Phys. Rev. Lett.* **59** 1962 (1987)
36. Wolfram S *Theory and Applications of Cellular Automata* (Singapore: World Scientific, 1986)
37. Oppo G L, Kapral R *Phys. Rev. A* **33** 4219 (1986)
38. Oono Y, Puri S *Phys. Rev. A* **38** 434 (1988)
39. Weymann H *Am. J. Phys.* **35** 488 (1967)
40. Sobolev S L *Phys. Lett. A* **163** 101 (1992)
41. Sobolev S L *Int. J. Heat Mass Trans.* **37** 2175 (1994)
42. Sobolev S L *Phys. Rev. E* **50** 3255 (1994)
43. Соболев С Л *ДАН СССР* **303** 1184 (1988)
44. Соболев С Л *ЖТФ* **59** (10) 170 (1989)
45. Соболев С Л *ИФЖ* **58** 661 (1990)
46. Соболев С Л *ЖТФ* **60** (3) 16 (1990)
47. Соболев С Л *ДАН СССР* **310** 603 (1990)
48. Sobolev S L *J. Low Temp. Phys.* **83** (5–6) 307 (1991)
49. Соболев С Л *ЖФХ* **66** 1226 (1992)
50. Sobolev S L *Int. J. Thermophys.* **17** 1089 (1996)

Local non-equilibrium transport models

S.L. Sobolev

*Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences
Chernogolovka, 142432 Moscow Region, Russia
Tel. (7-095) 962-80 80, ext. 4-11-57
E-mail: sobolev@icp.ac.ru*

Local non-equilibrium models of heat and mass transport processes are considered and shown to form a hierarchy of parabolic and hyperbolic equations whose order increases with deviation away from local equilibrium. The basic features of these models, in particular their relationship to the generalised irreversible thermodynamics, are discussed.

PACS numbers: **05.60. + w**, **05.70.Ln**

Bibliography — 50 references

Received 28 January 1997, revised 23 April 1997