УДК 536.12

К ПРОБЛЕМЕ СИНТЕЗА КИНЕТИЧЕСКИХ МАТРИЦ ПРОСТЫХ ПОДСИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

И. Е. Старостин

Введение

В настоящее время для описания динамики протекания неравновесных процессов существуют два подхода [1]: макроскопический и микроскопический. Микроскопический подход основан на статистической физике и кинетической теории и базируется на кинетических уравнениях, например, кинетическом уравнении Паули, кинетическом уравнении Больцмана [1, 2]. Использование этого подхода подразумевает знание моделей молекул, на основе которых составляются эти уравнения [1–3]. В рамках макроскопического подхода состояние системы характеризуется макроскопическими переменными, связанными между собой уравнениями баланса, а причиной протекания неравновесных процессов являются термодинамические силы [4–6]. Для составления математической модели динамики протекания неравновесных процессов необходимо знать связь термодинамических сил со скоростями протекания неравновесных процессов (скоростями изменения независимых переменных состояния) [5]. В работе [7] на основе анализа кинетического уравнения Паули [2] было показано, что особенности протекания неравновесных процессов, помимо термодинамических сил, определяются еще и кинетическими свойствами системы, определяемыми вероятностями перехода [2], входящими в уравнение Паули. Макроскопические параметры системы, в том числе и энтропия, а значит, и термодинамические силы [4–6], определяются вероятностями состояния системы, то эти параметры не зависят от вероятностей перехода [2, 3, 7]. Таким образом, связь термодинамических сил со скоростями определяется кинетическими свойствами системы [7].

Для связи термодинамических сил со скоростями в работах [8, 9] была введена матрица восприимчивостей (или кинетическая матрица [7]), характеризуемая кинетическими свойствами системы [7]. На основе этой матрицы был в [8, 9] разработан в общем случае математического моделирования неравновесных процессов потенциально-потоковый метод, уравнения которого имеют вид [8, 9]:

$$\begin{aligned}
&\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = A\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right)\vec{X}\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right)+\frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt},\\
&\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) = -\vec{\nabla}_{\vec{x}}F\left(\vec{x},\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right),\vec{U}\right)\Big|_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})},\\
&\frac{d\vec{y}(t)}{dt} = \begin{pmatrix}\dfrac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_m}\end{pmatrix}_{\substack{\vec{x}=\vec{x}(t)\\ \vec{P}=\vec{P}\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t)\right)}}\left(\frac{d\vec{x}(t)}{dt}-\frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}\right)+\frac{d^{(e)}\vec{y}}{dt},
\end{aligned} \tag{1}$$

где $\vec{x}$, $\vec{y}$ – координаты состояния системы; $\vec{P}$ – параметры баланса системы; $\frac{d^{(e)}\vec{x}(t)}{dt}$, $\frac{d^{(e)}\vec{y}(t)}{dt}$ – внешние составляющие скоростей изменения координат состояния системы $\vec{x}$ и $\vec{y}$ соответственно; $\vec{U}$ – внешние условия, в которых находится рассматриваемая система; $F\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – свободная энергия системы; $\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – термодинамические силы, движущие неравновесные процессы внутри системы; $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – положительно определенная матрица восприимчивостей системы к термодинамическим силам. В работах [10, 11] на основе кинетической матрицы делается качественный анализ динамики протекания неравновесных процессов.

Но в систему уравнений (1) входят только параметры состояния системы, однако на практике удобно пользоваться величинами, не являющимися параметрами состояния системы, например, количеством теплоты. С этой целью в [8, 9] рассматривается замена термодинамических координат $\vec{x}$ величинами приращений $\Delta\vec{x}$, не являющихся параметрами состояния системы. Это дает возможность записать потенциально-потоковые уравнения (1) в более практичном виде [8, 9].

В работе [8, 9] рассматривается декомпозиция системы на простые подсистемы, несопряженные между собой (системы отдельных протекающих процессов, несопряженных между собой). Приращение векторов $\vec{x}$ и $\vec{y}$ в сложной системе связано с независимыми приращениями $\delta\Delta_j\vec{x}$ в j-й совокупности сопряженных процессов (j-й простой подсистемы) и представляется следующим образом [8, 9]:

$$d\vec{x} = \sum_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix} \delta\Delta_j\vec{x} + d^{(e)}\vec{x}, \quad d\vec{y} = \sum_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{y}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{y}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix} \delta\Delta_j\vec{x} + d^{(e)}\vec{y}, \quad (2)$$

где матрицы $\begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{y}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{y}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix}$ получаются из уравнений баланса [8]. Согласно (1), (2) и в силу независимости приращений $\delta\Delta_j\vec{x}$ имеем

$$\begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{y}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{y}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial\vec{y}\left(\vec{x},\vec{P}\right)}{\partial x_m} \end{pmatrix}_{\vec{P}=\vec{P}(\vec{x},\vec{y})} \begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix}, \; j=1,N. \quad (3)$$

Термодинамические силы $\Delta\vec{X}_j\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, $j=1,N$ в простых подсистемах определяются в соответствии с [8, 9] согласно

$$\Delta\vec{X}_j\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) = -\left(\left(\frac{dF\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)}{\delta\Delta_j x_1}\right)_{\vec{P},\vec{U}} \cdots \left(\frac{dF\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)}{\delta\Delta_j x_{m_j}}\right)_{\vec{P},\vec{U}} \right), \; j=1,N, \quad (4)$$

$$\Delta\vec{X}_j\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) = \begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix}^T \vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \; j=1,N. \quad (5)$$

В силу несопряженности простых подсистем запишем потенциально-потоковые уравнения простых подсистем [8, 9]

$$\frac{\delta\Delta_j\vec{x}(t)}{dt} = \tilde{A}_j\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right)\Delta\vec{X}_j\left(\vec{x}(t),\vec{y}(t),\vec{U}(t)\right), \; j=1,N, \quad (6)$$

где $\tilde{A}_j\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – матрица восприимчивостей простой j-й подсистемы. Из (2), (5), (6) видно, что матрица восприимчивостей сложной системы $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ определяется в соответствии с [8, 9] в силу

$$A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) = \sum_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix} \tilde{A}_j\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \begin{pmatrix} \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_1} & \cdots & \frac{d_j\vec{x}}{\delta\Delta_j x_{m_j}} \end{pmatrix}^T. \quad (7)$$

Из уравнений (2)–(7) несложно получить систему уравнений (1). Таким образом, уравнение (7) показывает, каким образом, зная из эксперимента матрицы восприимчивостей простых подсистем (имея известную из эксперимента базу данных матриц восприимчивостей простых подсистем (отдельных процессов), входящие в различные сложные системы), можно определить матрицу восприимчивостей сложной системы, а значит, потенциально-потоковые уравнения (1).

Задачей, рассматриваемой в настоящей работе, является разработка методики построения матриц восприимчивостей простых подсистем $\tilde{A}_j\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ из экспериментальных данных.

Построение матриц восприимчивостей простых подсистем

В работах [4, 6] рассматривается применение формализма Онзагера – частного случая уравнений потенциально-потокового метода [8, 9] к различным видам неравновесных процессов. В этих работах [4, 6] на основе перекрестных коэффициентов матрицы Онзагера (частного случая матрицы восприимчивостей в случае линейной околоравновесной области [8, 9]) вводятся коэффициенты увлечения термодинамических координат, например, в случае термоэлектричества – теплоты Пельтье и коэффициент термоЭДС. Часть из коэффициентов увлечения строится экспериментально, а часть – определяется из матрицы Онзагера, которая строится на основе измеренных из эксперимента коэффициентов увлечения одних координат другими и коэффициентов эквивалентности термодинамических сил [4, 6]. Поэтому для того, чтобы разработать методику построения матрицы восприимчивостей, необходимо установить связь между матрицей восприимчивостей и матрицей коэффициентов увлечения одних термодинамических координат другими и матрицей коэффициентов эквивалентности термодинамических сил в случае простых подсистем.

Исследование и анализ неравновесных процессов у современных авторов сопровождается выделением обратимой и необратимой составляющей неравновесных процессов. Увлечение теплоты диффузионным потоком и выделение или поглощение теплоты Пельтье, рассмотренные в [4, 6], является обратимой составляющей неравновесного процесса, так как при изменении направления увлекающей величины изменяется направление увлекаемой величины [6]. Именно, как было отмечено выше и в [6], из анализа обратимой составляющей явления термоэлектричества были определены теплота Пельтье и коэффициент термоЭДС. Таким образом, зная характеристики обратимых составляющих неравновесных процессов, а также необратимых составляющих (в случае термоэлектричества – электрического сопротивления и коэффициента теплопередачи), можно построить матрицу Онзагера – частный случай матрицы восприимчивостей [4, 6].

Симметричная составляющая матрицы восприимчивостей является необратимой составляющей матрицы восприимчивостей, а кососимметричная – обратимой [9].

В случае рациональной термодинамики некоторая составляющая обратимой составляющей матрицы восприимчивостей может быть известна из эксперимента, например, инерционная составляющая [9]. Отсюда матрицу восприимчивостей $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ можно представить в виде

$$A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\tilde{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \qquad (8)$$

где $\tilde{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – известная из эксперимента составляющая обратимой составляющей матрицы восприимчивостей $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ (в силу сказанного выше антисимметричная матрица [9]); $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – оставшаяся составляющая матрицы восприимчивостей $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$. В силу положительной определенности матрицы $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ и антисимметричности матрицы $\tilde{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ матрица $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ согласно (8) положительно определена.

Используя разложение (8), нетрудно разложить скорость протекания неравновесных процессов внутри системы на две составляющие

$$\frac{d\vec{x}}{dt}-\frac{d^{(e)}\vec{x}}{dt}=\frac{d\breve{\vec{x}}}{dt}+\frac{d\tilde{\vec{x}}}{dt}; \qquad (9)$$

где

$$\frac{d\breve{\vec{x}}}{dt}=\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right),\ \frac{d\tilde{\vec{x}}}{dt}=\tilde{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right). \qquad (10)$$

Составляющая $\frac{d\tilde{\vec{x}}}{dt}$ обусловлена известной из эксперимента обратимой составляющей неравновесных процессов; составляющая $\frac{d\breve{\vec{x}}}{dt}$ – оставшимися эффектами протекания неравновесных процессов. Из уравнений (8) – (10) непосредственно следует первое уравнение системы (1). Из уравнения (9) всегда можно, используя (10), определить составляющую $\frac{d\breve{\vec{x}}}{dt}$, которая будет использована для построения составляющей $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ матрицы восприимчивостей $A\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$; составляющая $\tilde{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ непосредственно известна из эксперимента.

Рассмотрим увлечение одной части $d\breve{\vec{x}}^{I}$ координат $d\breve{\vec{x}}$ другой частью $d\breve{\vec{x}}^{II}$ этих координат. Для этого используя блочное представление векторов $\frac{d\breve{\vec{x}}}{dt}$, $\vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, и матрицы $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$

$$d\breve{\vec{x}}=\begin{pmatrix} d\breve{\vec{x}}^{I} \\ d\breve{\vec{x}}^{II} \end{pmatrix},\ \vec{X}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\begin{pmatrix} \vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \\ \vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \end{pmatrix}, \tag{11}$$

$$\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\begin{pmatrix} \breve{A}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & \breve{A}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \\ \breve{A}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & \breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \end{pmatrix}, \tag{12}$$

получим согласно (10)–(12)

$$\frac{d\breve{\vec{x}}^{I}}{dt}=\breve{A}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\breve{A}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \tag{13}$$

$$\frac{d\breve{\vec{x}}^{II}}{dt}=\breve{A}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right). \tag{14}$$

Введя матрицу увлечения $\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ координат $d\breve{\vec{x}}^{I}$ координатами $d\breve{\vec{x}}^{II}$, матрицу эквивалентности $\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ термодинамических сил $\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ силам $\vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, а также матрицу восприимчивостей $\breve{\Lambda}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ неувлеченной составляющей величины $d\breve{\vec{x}}^{I}$ в соответствие с

$$\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\breve{A}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\left(\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)^{-1}, \tag{15}$$

$$\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\left(\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)^{-1}\breve{A}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \tag{16}$$

$$\breve{\Lambda}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\breve{A}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)-\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{A}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \tag{17}$$

получим согласно (13) – (17)

$$\frac{d\breve{\vec{x}}^{II}}{dt}=\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\left(\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right), \tag{18}$$

$$\frac{d\breve{\vec{x}}^{I}}{dt}=\breve{\Lambda}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\frac{d\breve{\vec{x}}^{II}}{dt}. \tag{19}$$

Покажем, что матрица $\breve{\Lambda}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, вводимая согласно (17), положительно определена. Согласно (12), (15) – (17) имеем

$$\begin{pmatrix} E & -\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \\ 0 & E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \breve{A}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & \breve{A}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \\ \breve{A}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & \breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E & 0 \\ -\breve{\alpha}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & E \end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix} \breve{\Lambda}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & 0 \\ \breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\left(\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)-\breve{\alpha}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right) & \breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \end{pmatrix}.$$

Из полученного уравнения видно, что в силу положительной определенности матрицы $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ матрица в правой части полученного уравнения положительно определена, а значит, и матрица $\breve{\Lambda}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ также положительно определена.

Представим блочные матрицы $\breve{A}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ и $\breve{A}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ в виде

$$\begin{gathered} \breve{A}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)-\bar{\breve{K}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\bar{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \\ \breve{A}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\bar{\breve{K}}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\bar{\breve{\alpha}}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \end{gathered} \tag{20}$$

где $\bar{\breve{K}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – матрица обратимого сопряжения, а $\bar{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ – матрица увлечения несопряженных обратимо составляющих, аналогичная матрице $\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$. Согласно (15), (16), (20) получим

$$\begin{gathered} \bar{\breve{K}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\left(\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)-\left(\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)^{T}\right)\times \\ \times\breve{A}^{IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\left(\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\breve{A}^{IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)^{-1}\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right); \end{gathered} \tag{21}$$

$$\begin{gathered} \bar{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\left(\breve{\alpha}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\left(\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)^{T}\breve{A}^{IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)\times \\ \times\left(\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\breve{A}^{IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)^{-1}. \end{gathered} \tag{22}$$

Также введем матрицу $\bar{\breve{\Lambda}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, аналогичную матрице $\breve{\Lambda}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$

$$\bar{\breve{\Lambda}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\breve{A}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)-\bar{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\bar{\breve{\alpha}}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right). \tag{23}$$

Согласно (12), (20), (23) получим

$$\begin{gathered} \breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=\begin{pmatrix} E & \bar{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \\ 0 & E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{\breve{\Lambda}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & 0 \\ 0 & \breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E & 0 \\ \bar{\breve{\alpha}}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & E \end{pmatrix}+ \\ +\begin{pmatrix} 0 & \bar{\breve{K}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) \\ -\bar{\breve{K}}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right) & 0 \end{pmatrix}. \end{gathered} \tag{24}$$

Согласно (10)–(12), (24) получим

$$\begin{gathered} \frac{d\breve{\vec{x}}^{I}}{dt}-\bar{\breve{K}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{\vec{X}}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)-\bar{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\left(\frac{d\breve{\vec{x}}^{II}}{dt}+\bar{\breve{K}}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{\vec{X}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)= \\ =\bar{\breve{\Lambda}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{\vec{X}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right), \\ \frac{d\breve{\vec{x}}^{II}}{dt}=\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\left(\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\breve{\vec{X}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\breve{\vec{X}}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right). \end{gathered} \tag{25}$$

Из уравнений (25) виден физический смысл матриц $\breve{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, $\breve{\breve{K}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$.

Из уравнения (24) видно, что матрица $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ положительно определена тогда и только тогда, когда положительно определены матрицы $\breve{\breve{\Lambda}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ и $\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$. В работах [5, 6] было доказано, что матрица восприимчивостей, входящая в потенциально-потоковые уравнения, может быть построена положительно определенной тогда и только тогда, когда произведение термодинамических сил на скорости протекания неравновесных процессов положительно [8, 9, 13]. Положительность этого произведения гарантируется вторым началом термодинамики, отсюда матрица восприимчивостей положительно определена. Отсюда для того, чтобы матрица восприимчивостей $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$ была положительно определенной, необходимо и достаточно выполнения условий

$$\vec{X}^{IT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\left(\frac{d\breve{\vec{x}}^{I}}{dt}-\breve{\breve{K}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)-\breve{\breve{\alpha}}^{I-II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\times\right.$$
$$\left.\times\left(\frac{d\breve{\vec{x}}^{II}}{dt}+\breve{\breve{K}}^{I-IIT}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)\right)\geq 0, \tag{26}$$

$$\left(\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+\vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\right)^{T}\frac{d\breve{\vec{x}}^{II}}{dt}\geq 0\,, \tag{27}$$

причем знак равенства относится к случаям $\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=0$ и $\breve{\beta}^{II-I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)\vec{X}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)+$ $+\vec{X}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)=0$ соответственно. Условия (26) и (27) – условия корректности задания матриц увлечения термодинамических координат и матриц эквивалентности термодинамических сил.

Для любой простой подсистемы сложной системы, как видно из (1) и (6), можно выполнить преобразования, аналогичные (8)–(27). Поэтому для каждого блочного разбиения матрицы (12) можно, используя уравнения (8)–(12), (21)–(25), разработать методику построения матрицы восприимчивостей простой подсистемы сложной системы. Условия (26) и (27) гарантируют положительную определенность матриц $\breve{\breve{\Lambda}}^{I}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, $\breve{A}^{II}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$, а значит, и матрицы восприимчивостей $\breve{A}\left(\vec{x},\vec{y},\vec{U}\right)$.

Заключение

Итак, в настоящей статье мы получили формализм построения кинетической матрицы простых подсистем (8)–(12), (21)–(27). Для построения этой матрицы необходимо знать из экспериментальных данных термодинамические силы, скорости протекания неравновесных процессов, а также матрицы увлечения термодинамических координат и матрицы эквивалентности термодинамических сил в этой простой подсистеме. В работе [12] рассматривается пример определения коэффициентов матрицы восприимчивостей.

Список литературы

1. Старостин, И. Е. Потенциально-потоковый метод – инструмент качественного анализа и моделирования динамики неравновесных процессов / И. Е. Старостин, С. П. Халютин // Научные чтения по авиации, посвященные памяти Н. Е. Жуковского : материалы X Всерос. науч.-техн. конф. – М. : Издательский дом Академии им. Н. Е. Жуковского, 2013. – С. 40–45.
2. Квасников, И. А. Термодинамика и статистическая физика. Т. 3. Теория неравновесных систем / И. А. Квасников. – М. : Едиториал УРСС, 2002. – 432 с.
3. Квасников, И. А. Термодинамика и статистическая физика. Т. 2. Теория равновесных систем: Статистическая физика / И. А. Квасников. – М. : Едиториал УРСС, 2002. – 432 с.
4. Агеев, Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах / Е. П. Агеев. – М. : Эдиториал УРСС, 2001. – 136 с.

5. Эткин, В. А. Энергодинамика (синтез теорий переноса и преобразования энергии) / В. А. Эткин. – СПб. : Наука, 2008. – 409 с.
6. Гроот, С. Р. Термодинамика необратимых процессов / С. Р. Гроот. – М. : Гос. изд. техн.-теор. лит., 1956. – 281 с.
7. Старостин, И. Е. Связь матрицы восприимчивостей потенциально-потоковых уравнений с физическими свойствами неравновесной системы / И. Е. Старостин, С. П. Халютин, В. И. Быков // Инновации на основе информационных и коммуникационных технологий : материалы X Междунар. науч.-практ. конф. «Инфо-2013». – М. : МИЭМ НИУ ВШЭ, 2013. – С. 260–262.
8. Халютин, С. П. Потенциально-потоковый квазиградиентный метод моделирования неравновесных процессов / С. П. Халютин, И. Е. Старостин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2012. – № 2. – С. 25–35.
9. Моделирование сложных электроэнергетических систем летательных аппаратов / С. П. Халютин, М. Л. Тюляев, Б. В. Жмуров, И. Е. Старостин. – М. : Изд-во ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», 2010. – 188 с.
10. Быков, В. И. Качественный анализ динамики процессов в неравновесных системах на основе потенциально-потокового метода / В. И. Быков, С. П. Халютин, И. Е. Старостин // Надежность и качество : тр. Междунар. симп. : в 2 т. / под ред. Н. К. Юркова. – Пенза : Изд-во ПГУ, 2012. – Т. 1. – С. 488–491.
11. Быков, В. И. Качественный анализ динамики процессов в неравновесных системах на основе потенциально-потокового метода методом обратной связи / В. И. Быков, И. Е. Старостин, С. П. Халютин // Информатика и системы управления: кибернетическая физика. – 2013. – № 3 (37). – С. 75–89.
12. Старостин, И. Е. Определение параметров схемы замещения потенциально-потоковой модели никель-кадмиевого аккумулятора методом гидрооксидных пленок / И. Е. Старостин // Надежность и качество : тр. Междунар. симп. : в 2 т. / под ред. Н. К. Юркова. – Пенза : Изд-во ПГУ, 2011. – Т. 1. – С. 318–324.
13. Информационная технология многофакторного обеспечения надежности сложных электронных систем / Н. К. Юрков, А. В. Затылкин, С. Н. Полесский, И. А. Иванов, А. В. Лысенко // Надежность и качество сложных систем. – 2013. – № 4. – С. 75–79.

УДК 536.12

Старостин, И. Е.

К проблеме синтеза кинетических матриц простых подсистем на основе экспериментальных данных / И. Е. Старостин // Надежность и качество сложных систем. – 2014. – № 1(5). – С. 71–78.

Старостин Игорь Евгеньевич
кандидат технических наук, научный сотрудник,
ООО «Экспериментальная мастерская НаукаСофт»
(125167, Россия, г. Москва, 4-я ул. 8 Марта, 6А)
7-915-333-21-65,
E-mail: starostinigo@yandex.ru

Starostin Igor' Evgen'evich
candidate of technical sciences, research associate,
Vacancies «Experimental Workshop NaukaSoft»,
(125167, 6a 4-th 8 Marta street, Moscow, Russia)

Аннотация. В настоящее время для описания динамики протекания неравновесных процессов в сложных системах существуют два подхода: микроскопический и макроскопический. Микроскопический подход основан на статистической физике и кинетической теории, основанных на уравнениях движения частиц, например, кинетических уравнениях Паули, базирующихся на известных моделях молекул. Макроскопический подход основан на современной неравновесной термодинамике, в общем случае характеризующейся отказом от гипотезы локального термодинамического равновесия (рациональная термодинамика). В рамках этой термодинамики причиной и необходимым условием протекания неравновесных процессов являются термодинамические силы. Однако, как было показано автором в опубликованных им ранее работах, термодинамические силы однозначно не определяют характера протекания неравновесных процессов, помимо этих сил, еще эти особенности определяются некоторыми

Abstract. Today to describe the dynamics of non-equilibrium processes there exist two approaches: microscopic and macroscopic. Microscopic approach based on statistical physics and kinetic theory based on the equations of motion of particles, such as kinetic equations Pauli basing on certain models of molecules. Macroscopic approach, based on the modern non-equilibrium thermodynamics is generally characterized by the rejection of the hypothesis of local thermodynamic equilibrium (rational thermodynamics). Under this cause of thermodynamics and a prerequisite course of non-equilibrium processes are thermodynamic forces. However, as was shown by the author in his earlier published works, the thermodynamic forces clearly do not define the character of the non-equilibrium processes, in addition to these forces has these features are determined more and some properties of the system, called the author earlier kinetic, regardless of thermodynamic forces. Therefore, the author of previously introduced matrix susceptibilities (kinetic matrix) defined by these свойствами системы, названными ранее автором кинетическими, независимо от термодинамических сил. Поэтому автором ранее была введена матрица восприимчивостей (кинетическая матрица), определяемая этими кинетическими свойствами, позволяющая связать термодинамические силы со скоростями за счет записи ранее разработанных автором уравнений потенциально-потокового метода. Было показано, что кинетическая матрица сложной системы строится на основе кинетических матриц простых подсистем, а последние матрицы в свою очередь строятся из экспериментальных данных этих простых подсистем. В настоящей работе разрабатывается формализм построения кинетических матриц простых подсистем из экспериментальных данных.

Ключевые слова: неравновесная система, простые подсистемы, кинетическая матрица, формализм построения кинетической матрицы простых подсистем.

kinetic properties, allowing to relate the thermodynamic forces at speeds by writing equations previously developed by the author potentially streaming method. The author has previously shown that the kinetic matrix of complex system is built , knowing the kinetic matrix of simple subsystems, and the last matrix in turn constructed from the experimental data of these simple subsystems. In this paper we develop a formalism for constructing kinetic matrices of simple subsystems of the experimental data.

Key words: non-equilibrium systems, simple subsystems, kinetic matrix, formalism of constructing kinetic matrix of simple subsystems.