

К ВОПРОСУ О МЕТОДАХ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ В ТЕРМОДИНАМИКЕ

Б.Х. Драганов, доктор технических наук
Т.В. Морозюк, доктор технических наук
Берлинский технический университет
М. Пекулеа, академик
Академия наук Румынии

На основе статистической физики проанализированы основные положения термодинамики и принципы возрастания энтропии.

Статистическая физика, фазовое пространство, квантовая статистика, вероятность, теория информации, энтропия.

С точки зрения статистической физики равновесное состояние соответствует максимальной хаотичности системы, т.е. состоянию, реализуемому наибольшим числом частиц возможных способов.

Все системы стремятся к переходу в равновесие. Под вероятностью некоторого события понимается предел, к которому стремится относительная частота появления этого события при неизменных внешних условиях.

Для газов, состоящих из многоатомных молекул, закономерности распределения оказывается несостоятельным. Причина заключается в неучете квантованности энергии молекул идеального газа по всем трем видам движения: поступательного, вращательного и колебательного.

Цель исследований – анализ законов распределения для многоатомного газа с позиции статистической физики.

Результаты исследований. Состояние частицы (или системы) принято обозначать точкой в фазовом пространстве с обобщенной координатой q_i и обобщенным импульсом p_i . Система, для которой векторы q и p N -мерны, имеет N степеней свободы. Ее фазовое пространство $2N$ -мерно. Эволюция состояния гамильтоновых систем со временем определяется с помощью функции Гамильтона $H = H(q, p)$.

Связь между q и p определяется соотношением:

$$q = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad p = \bar{\partial} \frac{\partial H}{\partial q}. \quad (1)$$

Напомним, что функция Гамильтона – характеристическая функция механической системы, выраженная через канонические переменные: обобщенные координаты q_i и обобщенный импульс p_i . Для системы со связями, явно не зависящими от времени t движущейся в стационарном

потенциальном поле, функция Гамильтона $H(q_i, p_i) = T = \Pi$, где Π – потенциальная энергия; T – кинетическая энергия системы, в выражении которой все обобщенные скорости q_i заменены на p_i , с помощью равенства

$$p_i = \frac{\partial T_i}{\partial q_i} .$$

Распределение частиц в фазовом пространстве $f(q, p, t)$ выражается функцией, удовлетворяющей условию нормирования [1]:

$$\int_{\Gamma} f(q, p, t) d\Gamma = 1, \quad d\Gamma = (dq dp) . \quad (2)$$

Дифференциальной формой закона сохранения числа частиц является уравнение непрерывности в фазовом пространстве:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div}(Jf) = 0, \quad (3)$$

или, с учетом условия, что фазовая среда несжимаемая

$$\frac{\partial f}{\partial t} + q \frac{\partial f}{\partial q} + p \frac{\partial f}{\partial p} = 0 .$$

Уравнение (3) представляет собой уравнение Лиувилля [1, 2]. В соответствии с этим уравнением компоненты тока $J(\dot{q}, \dot{p})$ выражены как функции q, p (и, может быть, t). Следующее замечание существенно: уравнение (3) не содержит никакой иной информации, кроме той, которая следует из уравнений движения (1). Решение (3) может быть записано в виде

$$f(q, p, t) = f_0(q_0 = q_0(q, p, t), p_0 = p_0(q, p, t)), \quad (4)$$

где связь между (q_0, p_0) и (q, p) определяется из (1), а $f_0 = f_0(q_0, p_0) = f(t = 0)$ — начальное условие.

$$f(q, p, t) = \delta(q - q(t))\delta(p - p(t)), \quad (5)$$

где $q(t)$ и $p(t)$ определяют траекторию частицы.

Отметим, что распределение Максвелла при поступательном движении молекул (частиц) макроскопической физической системы, находящейся в статистической равновесии, вытекает как частный случай из более общего распределения молекул идеального газа по энергии в равновесной системе, известного как закон распределения Максвелла-Больцмана (МБ-распределение) [2]:

$$N_i = g_i e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{\Theta}} ; \quad (6)$$

$$N = \sum_i g_i e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{\Theta}} ; \quad (7)$$

$$U = \sum_i \varepsilon_i g_i e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{\Theta}} , \quad (8)$$

где N_i – число молекул, обладающих энергией ε_i ; N – общее число молекул;

Θ – статистическая температура, выраженная в единицах энергии, $\Theta = kT$; μ – химический потенциал газа, отнесенный к одной молекуле; g_i – кратность вырождения энергетического уровня ε_i .

Формула (6) – это выражение закона распределения (МБ), в соответствии с которым для молекулярной системы, находящейся в равновесии, число молекул, обладающих энергией ε_i пропорционально множителю Больцмана $e^{\frac{-\varepsilon_i}{kT}}$.

МБ-распределение устанавливает важную связь между внутренней энергией идеального газа и температурой как параметра, усредняющего значение энергии по всем микросостояниям системы. Этот вывод остается справедливым и при переходе от МБ-статистики к «более правильным» квантовым статистикам Бозе-Эйнштейна (БЭ- статистики) и Ферми-Дирака (ФД-статистика)

Распределение Бозе-Эйнштейна – формула, описывающая распределение по уравнениям энергии тождественных частиц с нулевым или целочисленным спином при условии, что взаимодействие частиц в системе слабое или им можно пренебречь.

Статистика Ферми-Дирака – квантовая статистика, применяемая к системам тождественных частиц с полуцельным спином.

Распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака могут быть представлены формулами одного вида

$$N_i = \frac{g_i}{e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}} \mp 1}; \quad (9)$$

$$N = \sum_i \frac{g_i}{e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}} \mp 1}; \quad (10)$$

$$U = \sum_i \frac{\varepsilon_i g_i}{e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}} \mp 1}. \quad (11)$$

Знак «минус» относится к БЭ – распределению, знак «плюс» – к ФД-распределению. Условие (11) определяет внутреннюю энергию как функцию μ и T , но так как $\mu = \mu(N, T)$, то $U = U(N, T)$.

Температура, ниже которой газ перестает подчиняться МБ-распределению и переходит к распределениям Бозе-Эйнштейна или Ферми-Дирака, называется температурой вырождения газа T_g , а сам газ называется вырожденным, т.е. подчиняющимся квантовым статистикам.

Есть основания считать, что практически все технически важные молекулярные газы подчиняются статистике Максвелла-Больцмана и рассчитываются по МБ-распределению, согласно которому температура определяется средней кинетической энергией молекул газа [2].

Заслуживает внимания статистический метод анализа энтропии. С именем Больцмана связана знаменитая H -теорема, определяющая направление макроскопической эволюции системы. Больцман ввел также определение энтропии через функцию распределения системы $F(p, q)$:

$$S[F] = - \int F \ln F dpdq . \quad (12)$$

В связи с определением (4) понадобится одно важное замечание. Пусть $f(q, p, t)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля (3). Это означает, что информация, заключенная в f , не содержит тех свойств, которые присущи кинетическому описанию. Действительно, решение уравнения Лиувилля (3) эквивалентно решению гамильтоновых уравнений движения (1). Другой характеристикой этого факта является равенство

$$\frac{dS[f]}{dt} = 0 , \quad (13)$$

где

$$S[F] = - \int f \ln f dpdq . \quad (14)$$

Выражение (13) находится из формулы (14) дифференцированием:

$$\frac{dS[f]}{dt} = - \int (1 - \ln f) \frac{df}{dt} dpdq .$$

Отсюда следует (13), так как в силу уравнения Лиувилля $\frac{df}{dt} = 0$. Таким образом, энтропия, определенная по функции распределения f , не изменяется со временем.

Больцману [3] также принадлежит еще одно утверждение:

$$S = k \ln W , \quad (15)$$

где W – статистический вес состояния, описываемого функцией распределения F ; k – постоянная Больцмана. Подробное обсуждение и доказательство формулы (15) были даны Эренфестом [4]. Дальнейшее развитие различных областей науки (статистической физики, теории информации и др.) подтвердило ту глубину познания природы, которая заложена в формуле Больцмана.

Статистическая физика рассматривает особый класс процессов-флуктуации, для которых система переходит из более вероятного состояния в менее вероятное, ее энтропия уменьшается. Наличие флуктуации показывает, что закон возрастания энтропии выполняется в основном для большого промежутка времени.

Энтропия в статистической физике тесно связана с информацией, которая служит мерой неопределенности сообщений. Для определенного дискретного статистического распределения определяют вероятность P_k информации. Из вероятной трактовки информационной энтропии могут быть выделены распределения статистической физики – каноническое распределение Гиббса, которое соответствует максимальному значению информации.

Термодинамика неравновесных процессов позволяет более детально исследовать процесс возрастания энтропии и определить энтропию, образующуюся в единице объема за единицу времени вследствие отклонения от равновесной термодинамики. Вопросы оценки энтропийных процессов глубоко анализируются в работах И. Пригожина [4].

Выводы

Выполненный анализ позволяет сделать вывод, что практически все закономерности, относящиеся к молекулярным газам, подчиняются статистике Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна, Ферми-Дирака.

Список литературы

1. Заславский Г.М. Стохастичность динамических систем / Заславский Г.М. – М.: Наука, 1984. – 271 с.
2. Никульшин Р.К. Термодинамические основы и методы получения низких температур в холодильной и криогенной технике: учеб. пособ. для вузов / Р.К. Никульшин, Т.В. Морозюк. – Одесса: ХТ и Т, 1999. – 140 с.
3. Новиков И.И. Термодинамика / Новиков И.И. – М.: Машиностроение, 1984. – 592 с.
4. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов / Пригожин И. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1960. – 128 с.
5. Румер Ю.Б. Термодинамика. Статистическая физика и кинетика / Ю.Б. Румер, М.Ш. Рывкин. – М.: Наука, 1972. – 400 с.
6. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии: учебник / Смирнова Н.А. – М.: Высш. шк., 1973. – 480 с.

На основі статистичної фізики проаналізовано основні положення термодинаміки та принципи зростання ентропії.

Статистична фізика, фазовий простір, квантова статистика, ймовірність, теорія інформації, ентропія.

Based on a statistical analysis of the basic physics of the provisions and principles of thermodynamics, entropy increase.

Statistical physics, phase space, quantum statistics, probability, information theory, entropy.

УДК 621.316.11

РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ВИБОРУ ПОТУЖНОСТІ ДЖЕРЕЛ РОЗПОДІЛЕНОЇ ГЕНЕРАЦІЇ В РОЗПОДІЛЬНИХ ЕЛЕКТРИЧНИХ МЕРЕЖАХ СІЛЬСЬКИХ РЕГІОНІВ

В.В. Козирський, доктор технічних наук

О.В. Гай, кандидат технічних наук

В.М. Бодунов, інженер

Розглянуто питання оптимізації потужності джерел розподіленої генерації в розподільних електричних мережах сільських регіонів. Запропоновано використання централізованого керування потужністю джерел розподіленої генерації.

Розподільна електрична мережа, джерела розподіленої генерації, оптимізація потужності, централізоване керування.

© В.В. Козирський, О.В. Гай, В.М. Бодунов 2012