

О НЕКОТОРЫХ ИНТЕРЕСНЫХ СЛЕДСТВИЯХ ПРИНЦИПА МАКСИМУМА ПРОИЗВОДСТВА ЭНТРОПИИ

Л. М. Мартюшев *

*Институт промышленной экологии
Уральского отделения Российской академии наук
620219, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 8 сентября 2006 г.

Два неравновесных фазовых перехода (морфологический и гидродинамический) рассматриваются с помощью принципа максимума производства энтропии. При этом впервые проводится количественное сравнение результатов анализа и эксперимента. Морфологический переход изучается на примере неравновесной кристаллизации льда, а гидродинамический — в виде классической задачи о переходе от ламинарного течения к турбулентному в круглой трубе. В последнем случае предсказано наименьшее число Рейнольдса, равное 1200, при котором возможен этот переход. Проводится обсуждение этого важного и интересного результата.

PACS: 05.70.Ln, 47.27.Cn, 81.10.Aj

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время принцип максимума производства энтропии (МЕРП) все чаще используется в различных исследованиях, относящихся к физике, химии и биологии (см. обзоры [1, 2]). Большинство работ, однако, имеют ярко выраженную теоретическую направленность и посвящены либо анализу фундамента и истоков этого принципа (см., например, [3–5]), либо его использованию при анализе той или иной математической модели природного явления (см., например, [6–8]). В последнем случае сравнение с опытом происходит чаще всего на качественном уровне. По этим двум направлениям достигнуты значительные успехи. Вместе с тем практически отсутствуют работы, в которых имелось бы количественное сравнение следствий МЕРП с существующими опытами или, что наиболее интересно, делались бы количественные предсказания важных, допускающих экспериментальную проверку фактов. Поиск и анализ подобных примеров является целью работы.

Согласно МЕРП неравновесная система при наличии возмущений достаточной амплитуды выбирает состояние с максимумом производства энтропии.

Как следствие, наиболее просто проверить справедливость расчетов с помощью МЕРП в случае, когда в эволюционирующей системе происходит неравновесный фазовый переход первого рода¹⁾, т. е. переход скачкообразного типа. В этом случае можно сравнить производство энтропии в старой и новой неравновесных фазах. При этом изменение производства энтропии при переходе должно быть положительным: 1) близким к нулю при наличии в развивающейся системе достаточного уровня шума (переход вблизи так называемой бинодали); 2) существенно большим нуля, если шум (возмущение) был не достаточной величины и, как следствие, система оказалась достаточно далеко в метастабильной области, перед тем как осуществить переход. Однако, несмотря на обилие подобных неравновесных переходов, в литературе редко удается найти все необходимые экспериментальные данные достаточной точности для расчета производства энтропии. В данной работе мы рассмотрим два примера, которые лишены указанного недостатка.

¹⁾ Возможность косвенной проверки МЕРП с помощью непосредственного использования экспериментальных данных при отсутствии неравновесного перехода была показана нами ранее [9]. Однако эта работа имела качественный характер.

*E-mail: mlm@ecko.uran.ru

2. МОРФОЛОГИЧЕСКИЙ ПЕРЕХОД ПРИ НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ЛЬДА

Будем опираться на экспериментальный материал, представленный в работах [10, 11]. В этих работах с особой тщательностью исследовалась морфологическая диаграмма и скорость роста кристаллов льда при неравновесном квазидвумерном затвердевании переохлажденной бидистиллированной воды²⁾. Опыты проводились при атмосферном давлении, а диапазон исследованных переохлаждений составил до 30 градусов. На этом интервале было обнаружено несколько различных неравновесных форм роста и соответственно несколько неравновесных (в данном случае морфологических) фазовых переходов. К неравновесному фазовому переходу первого рода относился только один: от «устойчивой иглы (stable needle)» к «пластине (platelet)», происходящий при переохлаждении на 7.5 градусов. Проанализируем этот переход с точки зрения МЕРР³⁾. Согласно приведенным экспериментальным данным зависимость скорости V от переохлаждения ΔT вблизи точки перехода хорошо описывается линейной функцией $V = L(\Delta T - \theta)$, где L , θ — некоторые эмпирически определяемые размерные коэффициенты. Значения этих коэффициентов легко определяются из представленного в работе [11] графика и составляют для устойчивой иглы $L = 0.31 \text{ см}/^\circ\text{C}\cdot\text{с}$, $\theta = 3.5^\circ\text{C}$, для пластины $L = 0.78 \text{ см}/^\circ\text{C}\cdot\text{с}$, $\theta = 5.0^\circ\text{C}$. С точки зрения локальной неравновесной термодинамики приведенное выражение можно считать своего рода связью термодинамического потока (очевидно, пропорционального скорости перехода вещества из расплава в кристалл) и силы (пропорциональной переохлаждению). Так как экспериментальные данные в работах [10, 11] приведены для локальной скорости роста (например, вершины иглы), то и термодинамический поток имеет локальный смысл. Однако переохлаждение расплава ΔT приводится в работе для всего образца, и оно будет отлично от локального переохлаждения вблизи границы, скорость роста которой измеряется. В этой связи коэффициент θ можно рассматривать как поправку к термодинами-

²⁾ Было проведено порядка тысячи измерений, погрешность измерения скорости составила менее 5%.

³⁾ Далее при расчете морфологического перехода при неравновесной кристаллизации будем придерживаться подхода, предложенного в работе [12] и использованного для анализа неравновесной кристаллизации хлористого аммония. К сожалению, эта пионерская работа оказалась по большей части незамеченной.

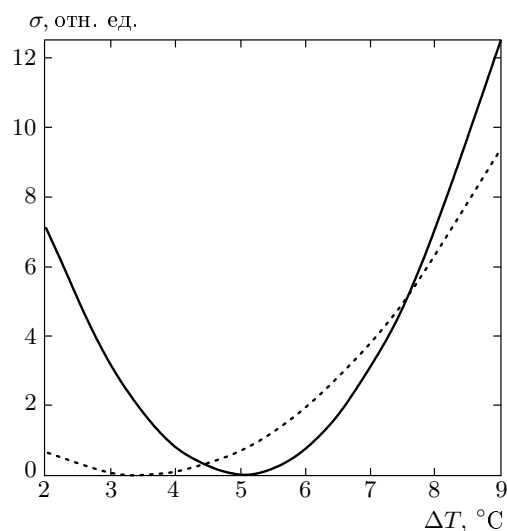


Рис. 1. Зависимости производства энтропии σ при неравновесной кристаллизации льда от переохлаждения ΔT . Пунктирная линия относится к игле, сплошная — к пластине

ческой силе, возникающую при переходе к локальному переохлаждению вблизи границы и зависящую от кривизны и поверхностного натяжения рассматриваемой морфологической фазы.

Производство энтропии σ , равное произведению термодинамической силы на поток, в рассматриваемом случае можно записать как

$$\sigma = kV(\Delta T - \theta) \quad \text{или} \quad \sigma = kL(\Delta T - \theta)^2,$$

где k — некоторая размерная константа, зависящая от теплоты фазового перехода лед–вода, температуры плавления льда и т. д. Зависимости производства энтропии от переохлаждения для иглы и пластины приведены на рис. 1. Как видно из графика, в области существования рассматриваемых кристаллических структур ($\Delta T > 5\text{--}7^\circ\text{C}$) производство энтропии пластины оказывается больше производства энтропии иглы, как раз начиная с $\Delta T \approx 7.5^\circ\text{C}$, т. е. со значения, при котором и наблюдается в эксперименте морфологический переход от иглы к пластине. Заметим, что скорость роста кристалла при переходе в этой точке изменяется скачкообразно в 1.5 раза. Таким образом, можно заключить, что использование подхода, основанного на МЕРР, позволило количественно определить точку неравновесного перехода с точностью в пределах ошибки эксперимента.

В приведенном выше примере мы по существу занимались оценкой метода, основанного на МЕРР, используя имеющиеся экспериментальные данные. По-

попробуем сейчас предсказать точку неравновесного перехода в задаче, представляющей огромный практический и теоретический интерес, однако, несмотря на более чем столетнюю историю, так до конца и не решенную.

3. ПЕРЕХОД ОТ ЛАМИНАРНОГО ДВИЖЕНИЯ К ТУРБУЛЕНТНОМУ В КРУГЛОЙ ГЛАДКОЙ ТРУБЕ

Этот случай течения жидкости под действием градиента давления наиболее полно исследован экспериментально и теоретически (см., например, обзорные работы [13, 14]). Как известно, этот переход обычно происходит при критических числах Рейнольдса (Re_c), приблизительно равных 2300. Вместе с тем, если предпринимать дополнительные усилия по уменьшению различных возмущений исследуемого потока жидкости (например, на входе трубы), переход к турбулентному движению можно существенно затян timer, сдвинув число Re_c до значений 10^5 и более [13, 14]. Аналитически показано, что рассматриваемое течение является линейно устойчивым при любых значениях Re и как следствие, по-видимому, не существует верхней границы перехода от ламинарного режима к турбулентному: число Re_c будет увеличиваться при все более «аккуратных» экспериментах [14]. Однако существует очень интересный вопрос: а существует ли предельное нижнее значение критического числа Рейнольдса? Очевидно, что для его достижения необходимо подвергать ламинарный поток жидкости различным возмущениям. Экспериментально показано, что наименьшее число Re_c равно примерно 1760 [15]. Это значение в настоящее время обычно приводится как предельное наименьшее [14].

Обсудим теперь данное явление с точки зрения МЕРР. Переход от ламинарного течения к турбулентному можно рассматривать как неравновесный фазовый переход. Точка перехода (Re_c) находится в диапазоне значений от бинодали (1760 по данным работы [15]) до спинодали (10^5 или более, вплоть до бесконечности). В этом диапазоне в зависимости от возмущений возможно существование как ламинарной, так и турбулентной фазы. Производство энтропии при движении жидкости в трубе напрямую связано с диссипацией механической энергии, производимой силами давления (перепадом давлений на концах трубы). При постоянных температуре и плотности жидкости можно считать, что производство

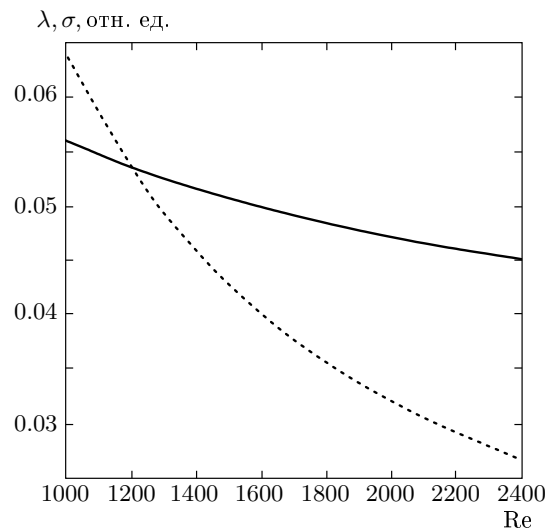


Рис. 2. Зависимости коэффициента трения λ (или производства энтропии σ) от числа Рейнольдса Re . Пунктирная линия — ламинарное течение (кривая Гагена — Пуазейля), сплошная — турбулентное течение (кривая Блазиуса)

энтропии рассматриваемого течения напрямую связано с так называемым коэффициентом трения (сопротивления) $\lambda(Re)$ [16–18]. Поэтому анализ поведения производства энтропии в данном случае можно заменить анализом λ . Для ламинарного течения закон сопротивления (закон Гагена — Пуазейля) имеет вид $\lambda = 64/Re$, а для турбулентного (закон Блазиуса)⁴: $\lambda = 0.316/(Re^{0.25})$ [16, 17]. При переходе от ламинарного течения к турбулентному коэффициент трения (а следовательно, и производство энтропии) испытывает скачок от меньших значений (относящихся к кривой Гагена — Пуазейля) к большим (относящимся к кривой Блазиуса)⁵. Этот скачок является тем большим, чем дальше в метастабильную область (больших Re) удалось «проникнуть» в эксперименте с помощью уменьшения возмущений ламинарного потока. Согласно МЕРР, из равенства производства энтропии можно найти бинодаль неравновесного перехода (т. е. как раз наименьшее значение Re_c , при котором возможен переход от лами-

⁴ Для турбулентной области, в отличие от ламинарной, существует множество других эмпирически найденных зависимостей $\lambda(Re)$ [17, 19]. Однако формула Блазиуса, несмотря на то что была предложена одной из первых, является наилучшим приближением для относительно малых чисел Рейнольдса (а именно этот случай будет исследоваться ниже) [19].

⁵ На основании такого поведения производства энтропии можно отнести переход от ламинарного течения к турбулентному к неравновесным фазовым переходам первого рода.

нарного течения к турбулентному). Из рис. 2 видно, что данное число Re_c равно примерно 1200. Таким образом, согласно МЕРР, переход от ламинарного течения к турбулентному может произойти, начиная со значения Re_c , равного 1200, а не с 1760, как принято в настоящее время. Проанализируем полученный результат. Наиболее просто объяснить практически 32-процентное расхождение предсказания и эксперимента тем, что использованная экстраполяция закона Блазиуса на столь малые числа Рейнольдса является некорректной. С этим возражением достаточно сложно спорить. Можно лишь надеяться, что данный закон, выполняющийся для турбулентного течения в очень большом диапазоне чисел Re (не один порядок), окажется справедливым⁶⁾ и в диапазоне его значений от 1200 до 2300. Особенно интересным, как нам кажется, является предположение, что найденное с помощью МЕРР число как раз и является истинной бинодалью перехода. Недостижимость этого числа в широко цитируемых экспериментах связана с некоторыми методическими особенностями, традиционно используемыми при экспериментальном возмущении изначально ламинарного потока. Действительно, в таких экспериментах обычно, изменяя амплитуду возмущений и частоту, локально возмущают поток в начале трубы или в ее другой части [13–15, 20–22]. Однако эти возмущения из-за механизма своего возникновения обладают относительно малыми длинами волн (т. е. имеют значительные волновые числа). Случай малых волновых чисел оказался не исследованным⁷⁾. Конечно, с точки зрения эксперимента генерация подобных возмущений и анализ структуры течения вблизи перехода может оказаться более сложной проблемой. Добиться таких возмущений можно, например, вращая трубу вокруг вертикально проходящей оси. В этом случае на элемент объема движущейся жидкости действует сила Кориолиса. Благодаря этой силе будет наблюдаться искажение потока жидкости относительно оси трубы с крайне малой длиной волны. Амплитуда такого возмущения будет зависеть от силы Кориолиса, а следовательно, от угловой скорости вращения трубы. Нам удалось найти единственную работу [23], в которой экспериментально исследуется подобная система вблизи точки перехода. Авто-

ры работы [23] построили график (см. рис. 8 в [23]), по осям которого отложили обычное и так называемое осцилляционное число Рейнольдса⁸⁾, и обозначили области, где движение жидкости является ламинарным и турбулентным. Поразительным является тот факт, что, согласно представленному графику, при увеличении амплитуды возмущения в случае использованных длинноволновых возмущений число Re_c уменьшается и асимптотически приближается к 1200! По-видимому, этот результат оказался незамеченным исследователями, занимающимися поиском наименьшего критического числа Рейнольдса. Это можно объяснить некоторой «не традиционной» схемой эксперимента, идущей от практических нужд⁹⁾, и существенным отличием ее от классических опытов с локальными возмущениями на неподвижных трубах, у истоков которых стояли Рейнольдс, Никурадзе и др.¹⁰⁾.

Другим косвенным подтверждением сделанной с помощью МЕРР оценки бинодали являются проведенные совсем недавно численные расчеты течения в круглой трубе [14, 24, 25]. В этих работах были обнаружены трехмерные структуры, так называемые «traveling waves», имеющие различную азимутальную симметрию и являющиеся, по мнению авторов, первым проявлением перехода к турбулентности. Наиболее интересно, что наименьшим числом Рейнольдса, при котором появляются эти структуры, является 1250 и оно соответствует структурам с небольшой азимутальной симметрией (равной 3)¹¹⁾.

Таким образом, в настоящей работе с помощью подхода, основанного на МЕРР, проведен количественный расчет точек перехода при неравновесных фазовых переходах. Полученные результаты и сравнение с имеющимися экспериментальными данными показывают существенную перспективность данного подхода.

⁸⁾ Это число прямо пропорционально угловой скорости вращения или, как указано выше, амплитуде возмущения.

⁹⁾ Такие опыты важны для проблем, связанных с течением жидкости в трубопроводах движущихся механизмов (автомобиль, корабль).

¹⁰⁾ Отметим, что и сами авторы относятся к своему результату просто как исследованию турбулизации в случае особых условий эксплуатации трубы. Это, а также, по-видимому, незнание существующей проблемы поиска наименьшего числа Рейнольдса не позволило им интерпретировать свой результат со стороны, наиболее интересной с точки зрения фундаментальных вопросов гидродинамики.

¹¹⁾ Для большей азимутальной симметрии (4, 5, 6) значения Re_c оказываются большими. Интересно отметить, что малая симметрия как раз соответствует большей длине волны.

⁶⁾ Можно относиться к этому как к некоторой гипотезе.

⁷⁾ Можно предположить, что этот тип возмущения может привести к меньшим значениям Re_c . Действительно, как показано теоретически в случае рассмотренных выше морфологических переходов при кристаллизации, как раз возмущения с большей длиной волны и приводили к более раннему неравновесному переходу [8].

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Ozawa, A. Ohmura, R. D. Lorenz, and T. Pujol, *Rev. Geophys.* **41**, 1018 (2003).
2. L. M. Martyushev and V. D. Seleznev, *Phys. Rep.* **426**, 1 (2006).
3. H. Ziegler, *An Introduction to Thermomechanics*, Amsterdam, North-Holland (1983).
4. J. M. Ziman, *Can. J. Phys.* **34**, 1256 (1956).
5. R. Dewar, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 631 (2003).
6. G. W. Paltridge, *Nature* **279**, 630 (1979).
7. I. J. Ford and T.-L. Lee, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34**, 413 (2001).
8. Л. М. Мартюшев, В. Д. Селезнев, И. Е. Кузнецова, *ЖЭТФ* **118**, 149 (2000).
9. L. M. Martyushev and E. G. Axelrod, *Письма в ЖЭТФ* **78**, 948 (2003).
10. А. А. Шибков, М. А. Желтов, А. А. Королев и др., *ДАН* **389**, 497 (2003).
11. A. A. Shibkov, Yu. I. Golovin, M. A. Zheltov et al., *Physica A* **319**, 65 (2003).
12. A. Hill, *Nature* **348**, 426 (1990).
13. Л. Шиллер, *Движение жидкостей в трубах*, ОНТИ, Москва (1936).
14. R. R. Kerswell, *Nonlinearity* **18**, R17 (2005).
15. A. G. Darbyshire and T. Mullin, *J. Fluid Mech.* **289**, 83 (1995).
16. А. Д. Рейнольдс, *Турбулентные течения в инженерных приложениях*, Энергия, Москва (1979).
17. И. Е. Идельчик, *Справочник по гидравлическим сопротивлениям*, Машиностроение, Москва (1992).
18. S. C. Plasting and R. R. Kerswell, *Phys. Fluids* **17**, 011706 (2005).
19. B. J. McKeon, M. V. Zagarola, and A. J. Smits, *J. Fluid Mech.* **538**, 429 (2005).
20. J. Peixinho and T. Mullin, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 094501 (2006).
21. B. Hof, A. Juel, and T. Mullin, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 244502 (2003).
22. I. Wygnanski, M. Sokolov, and D. Friedman, *J. Fluid Mech.* **69**, 283 (1975).
23. B. Benhamou, A. Laneville, and N. Galanis, *Int. J. Thermal Sci.* **43**, 1141 (2004).
24. H. Faisst and B. Eckhardt, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 224502 (2003).
25. H. Wedin and R. R. Kerswell, *J. Fluid Mech.* **508**, 333 (2004).