

Так как $q < 1$, то

$$\|x^{(n)} - x^*\| \leq \frac{1}{m} \left(\frac{1}{\alpha} - \frac{1}{2} K \right)^{-1} \frac{q^n}{1-q} \varphi(x^{(0)})$$

Таким образом, сходимость $\{x^{(v)}\}$ происходит с той же быстротой, с которой сходится и $\{f(x^{(v)})\}$.

Как было отмечено в [1], процесс (2) обобщает модифицированный метод Ньютона. Но если в общем случае последний сходится только при начальном приближении $x^{(0)}$, довольно близком к x^* [3], то в рассматриваемом случае потенциальных операторов процесс (2) сходится к решению уравнения (1) независимо от начального приближения.

В (1) была рассмотрена также сходимость метода Галеркина, которая дальше использовалась при доказательстве сходимости метода частичной аппроксимации. При доказательстве первого метода были приняты некоторые довольно жесткие предположения, которые оказываются излишними; однако сходимость метода Галеркина в случае уравнений с потенциальными операторами будет следствием сходимости метода Ритца, рассмотренной в работе [6], поэтому этот вопрос здесь не рассматривается.

Поступила 13 VII 1964

ЛИТЕРАТУРА

1. Симеонов С. В. Некоторые методы решения нелинейных задач механики деформируемого тела. ПММ, 1964, т. 28, вып. 3.
2. Вайнберг М. М. Вариационные методы исследования нелинейных операторов. Гостехиздат, 1956.
3. Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ в нормированных пространствах. Физматгиз, 1959.
4. Ворович И. И. Красовский Ю. П. О методе упругих решений. Докл. АН СССР, 1959, т. 126, № 4.
5. Поляк Б. Т. Градиентные методы минимизации функционалов. Ж. вычисл. матем. и матем. физики, 1963, т. 3, № 4.
6. Михлин С. Г. О методе Ритца в нелинейных задачах. Докл. АН СССР, 1962, т. 142, № 4.

ВЫВОД УРАВНЕНИЙ ЛИНЕЙНОЙ ВЯЗКОУПРУГОСТИ

Т. Н. Хазанович (Москва)

В статистической теории необратимых процессов в течение последнего десятилетия появились новые идеи, которые, в частности, позволили вывести уравнения гидродинамики и получить выражения для гидродинамических коэффициентов переноса, дающие принципиальную возможность их вычисления на основании молекулярных моделей (см., например, [1]). В настоящей заметке сходным образом выводятся уравнения, связывающие напряжения с малыми деформациями вязкоупругой среды.

Внешние силы, действуя на вязкоупругое тело, деформируют его и вызывают в нем процессы течения, характеризуемые распределением скоростей $v(x, t)$ (x — радиус-вектор), т. е. приводят тело в термодинамически неравновесное состояние. Задача сводится к тому, чтобы найти статистическое распределение для такого неравновесного состояния. В качестве нулевого приближения обычно берется так называемое локально-равновесное распределение. Это распределение получается, если разбить все тело на «бесконечно малые», но макроскопические элементы объема и предположить, что каждый элемент находится в равновесии, характеризуемом каноническим распределением Гиббса

$$\rho_L = \exp \left\{ \beta \int d^3x [F(x) - H^\circ(x)] \right\} \quad \left(\beta = \frac{1}{kT} \right) \quad (1)$$

Здесь k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, $F(x, t)$ — плотность свободной энергии и $H^\circ(x)$ — плотность функции Гамильтона в системе координат, движущейся со скоростью $v(x, t)$; интегрирование распространяется по объему тела.

Функция $H^\circ(\mathbf{x})$ связана с функцией Гамильтона системы H соотношением

$$\int H^\circ(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = H - \sum_i \mathbf{p}_i \mathbf{v}_i + \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2 \quad (2)$$

где m_i и \mathbf{p}_i — масса и импульс i -й частицы, $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}(\mathbf{r}_i, t)$ — значение скорости в точке нахождения i -й частицы.

Внешние силы не включены в H . Однако без ограничения общности можно считать, что внешние силы имеют потенциал Φ , явно зависящий от времени. Действительно, молекулы, находящиеся на границе тела, можно не включать в систему и считать внешними силами силы взаимодействия между молекулами системы и молекулами на границе, координаты которых являются внешними параметрами. Распределение (1) представляет собой обобщение на конденсированные среды локально-равновесного распределения, введенного Энскогом и Чепменом для идеального газа [2].

Точное распределение запишем в виде

$$\rho = \exp[\beta(l + c)] \quad (\beta l = \ln \rho_L) \quad (3)$$

Здесь c — поправка. Распределение ρ должно удовлетворять уравнению Лиувилля

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{H + \Phi, \rho\} = 0$$

Подстановка (3) в (4) дает

$$dc/dt = -dl/dt \quad (4)$$

Будем предполагать, что процесс деформирования начался в момент $t = 0$, до этого момента тело находилось в равновесном, недеформированном состоянии. При этом ρ_L сводится к обычному распределению Гиббса и $c = 0$. Символическое решение уравнения (4) с начальным условием $c = 0$ имеет вид

$$c(X_t, t) = - \int_0^t \frac{dl(X_\tau, \tau)}{d\tau} d\tau$$

где X_τ — совокупность фазовых координат системы в момент τ .

Ограничимся случаем малых градиентов скорости, т. е. слабой неравновесности. Величина c — мера неравновесности системы, поэтому распределение (3) можно разложить в ряд

$$\rho = \rho_L (1 + \beta c + \dots) \quad (5)$$

Примем, что функция Гамильтона системы имеет вид

$$H = \sum_k \left(\frac{p_k^2}{2m_k} + \varepsilon_k \right) + \sum_{k < l} u_{kl} \quad (6)$$

где ε_k — внутренняя энергия частицы, u_{kl} — энергия взаимодействия k -й и l -й частиц. В громадном большинстве случаев силы межмолекулярного взаимодействия имеют предельный радиус взаимодействия, малый по сравнению с масштабом макроскопических неоднородностей. При этих условиях тензор напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$ получается в результате статистического усреднения тензора — $\Pi_{\alpha\beta}^\circ$, где

$$\Pi_{\alpha\beta}^\circ = \frac{1}{V} \left[\sum_i \frac{p_{i\alpha} p_{i\beta}}{m_i} - \sum_{i < j} (r_{i\alpha} - r_{j\alpha}) \frac{\partial u_{ij}}{\partial r_{i\beta}} \right] \quad (\mathbf{p}_i^\circ = \mathbf{p}_i - m_i \mathbf{v}_i) \quad (7)$$

Здесь \mathbf{p}_i° — импульс относительно системы координат, движущейся со скоростью $\mathbf{v}(\mathbf{r}_i, t)$, V — некоторый макроскопический объем, и суммирование распространено по молекулам в этом объеме (см., например, [3, 4]).

Из определения ρ_L следует, что тензор

$$\sigma_{\alpha\beta}^\circ = - \langle \Pi_{\alpha\beta}^\circ \rangle_L \quad (8)$$

где угловые скобки с индексом L означают усреднение по локально-равновесному распределению, определяется деформациями так же, как если бы процессов течения не было, т. е. определяется обычным законом Гука.

Усредняя (7) при помощи распределения (5), получаем

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{(0)} + \sigma_{\alpha\beta}^{(1)} + \dots \quad \left(\sigma_{\alpha\beta}^{(1)} = \beta \int_0^t dt' \left\langle \Pi_{\alpha\beta}^{\circ}(X_t), \frac{dl(X_{\tau}, \tau)}{d\tau} \right\rangle \right) \quad (9)$$

Величины типа $\langle A(X_t) B(X_{\tau}) \rangle$ называются функциями временных корреляций и играют большую роль в современной теории необратимых процессов.

Теперь нужно вычислить

$$\frac{dl}{dt} = \frac{\partial l}{\partial t} + \{H, l\} + \{\Phi, l\} \quad (10)$$

Влияние взаимодействия Φ на движение в фазовом пространстве макроскопического тела, содержащего большое число частиц, незначительно по сравнению с H : Φ влияет только на частицы, близкие к границе. Поэтому при вычислении (10) третьим членом в правой части можно пренебречь. (Это, разумеется, можно делать, если рассматривать движение за интервалы времени, малые по сравнению с циклами Пуанкаре.)

На основании (1), (2) и (6) получаем, раскрывая скобки Пуассона,

$$\frac{dl}{dt} = \int d^3x \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_k p_k^{\circ} \frac{\partial v_k}{\partial t} + \sum_k \frac{p_{k\alpha} p_{k\beta}}{m_k} \frac{\partial v_{k\alpha}}{\partial r_{k\beta}} + \sum_{k+l} \frac{\partial u_{kl}}{\partial r_{k\alpha}} v_{k\alpha} - \sum_k v_{k\alpha} p_{k\beta} \frac{\partial v_{k\alpha}}{\partial r_{k\beta}} \quad (11)$$

Здесь подразумевается суммирование по повторяющимся греческим индексам. Рассмотрим член

$$\sum_{k+l} \frac{\partial u_{kl}}{\partial r_{k\alpha}} v_{k\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{k+l} \frac{\partial u_{kl}}{\partial r_{k\alpha}} (v_{k\alpha} - v_{l\alpha}) \quad (12)$$

Как уже упоминалось, радиус межмолекулярного взаимодействия много меньше масштаба макроскопических неоднородностей, в том числе неоднородности скоростей. Поэтому

$$v_{k\alpha} - v_{l\alpha} \approx - \frac{\partial v_{k\alpha}}{\partial r_{k\beta}} (r_{k\beta} - r_{l\beta}) \quad (13)$$

Плотность свободной энергии зависит от времени через зависимость от времени компонент тензора деформаций, т. е. $\partial F / \partial t = (\partial F / \partial u_{\alpha\beta}) (\partial u_{\alpha\beta} / \partial t)$. Из (8) следует

$$\partial F / \partial u_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{\circ} \quad (14)$$

Кроме того,

$$\frac{\partial u_{\alpha\beta}}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial v_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right) \quad (15)$$

Подстановка (12) — (15) в (11) дает

$$\frac{dl}{dt} = \int \sigma_{\alpha\beta}^{(0)} \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} d^3x + \sum_k p_k^{\circ} \frac{\partial v_k}{\partial t} + \sum_k (\Pi_{k\alpha\beta} - v_{k\alpha} p_{k\beta}) \frac{\partial v_{k\alpha}}{\partial r_{k\beta}} \quad (16)$$

Здесь

$$\Pi_{k\alpha\beta} = \frac{p_{k\alpha} p_{k\beta}}{m_k} - \frac{1}{2} \sum_l \frac{\partial u_{kl}}{\partial r_{k\alpha}} (r_{k\beta} - r_{l\beta})$$

Будем пренебрегать всеми величинами высшего порядка малости по градиентам скорости. При этом

$$\frac{\partial v_{k\alpha}}{\partial t} \approx - v_{k\beta} \frac{\partial v_{k\alpha}}{\partial r_{k\beta}}$$

что позволяет записать (16) в виде

$$\frac{dl}{dt} = \int \sigma_{\alpha\beta}^{\circ} \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} d^3x - \sum_k (\Pi_{k\alpha\beta} - v_{k\alpha} p_{k\beta} - p_{k\alpha}^{(0)} v_{k\beta}) \frac{\partial v_{k\alpha}}{\partial r_{k\beta}} \quad (17)$$

В качестве системы можем рассматривать любой достаточно большой объем тела. При малых градиентах можно выбрать такой объем V , чтобы градиент скорости в нем был постоянен. При этом (17) принимает вид

$$\frac{dl}{dt} = T_{\alpha\beta} \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} \quad \left(T_{\alpha\beta} = V \Pi_{\alpha\beta}^{\circ} + \int_V \sigma_{\alpha\beta}^{(0)} d^3x \right) \quad (18)$$

Подстановка (18) в (9) дает

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{1}{kT} \int_0^t d\tau \langle \Pi_{\alpha\beta}^{\circ}(X_t) T_{\mu\nu}(X_{\tau}) \rangle_L \frac{\partial v_{\mu}(\tau)}{\partial X_{\nu}} \quad (19)$$

Из (8) следует, что $\langle T_{\mu\nu} \rangle_L = 0$, поэтому соотношению (19) можно придать более симметричный вид:

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{1}{kTV} \int_0^t d\tau \langle T_{\alpha\beta}(X_t) T_{\mu\nu}(X_{\tau}) \rangle_L \frac{\partial v_{\mu}(\tau)}{\partial X_{\nu}} \quad (20)$$

Интегрируя (20) по частям и учитывая (15) и то, что $u_{\mu\nu}(0) = 0$, получаем окончательно

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{1}{kTV} \langle T_{\alpha\beta} T_{\mu\nu} \rangle_L u_{\mu\nu}(t) - \int_0^t K_{\alpha\beta\mu\nu}(t-\tau) u_{\mu\nu}(\tau) d\tau \quad (21)$$

Здесь

$$K_{\alpha\beta\mu\nu} = \frac{1}{kTV} \frac{d}{d\tau} \langle T_{\alpha\beta}(X_t) T_{\mu\nu}(X_{\tau}) \rangle_L \quad (22)$$

По причине короткодействующего характера межмолекулярных сил упругие коэффициенты и функции в (21), как и должно быть, не зависят от объема V .

Складывая $\sigma_{\alpha\beta}^{(0)}$ и $\sigma_{\alpha\beta}^{(1)}$, видим, что первый член в правой части (21) приводит только к изменению коэффициентов в законе Гука, в то время как второй член описывает наследственные свойства среды. В результате имеем

$$\sigma_{\alpha\beta} = \lambda_{\alpha\beta\mu\nu} u_{\mu\nu} - \int_0^t K_{\alpha\beta\mu\nu}(t-\tau) u_{\mu\nu}(\tau) d\tau \quad (23)$$

Уравнение (23) представляет собой известное соотношение линейной вязкоупругости (см., например, [5, 6]), которое выведено здесь на основании общих принципов статистической физики, причем фактически единственное модельное предположение заключается в предположении о радиусе действия межмолекулярных сил. Однако, чтобы вычислить при помощи соотношения (22) релаксационные коэффициенты, потребуются, разумеется, весьма детальные модели. Следует отметить, что анизотропия $K_{\alpha\beta\mu\nu}$ может быть вызвана как анизотропией среды, так и деформацией. Иными словами, анизотропия $\lambda_{\alpha\beta\mu\nu}$ и $K_{\alpha\beta\mu\nu}$ может быть различной по величине.

Поступила 29 VII 1964

ЛИТЕРАТУРА

1. М с Л е п п а н J. A., Jr. The Formal Statistical Theory of Transport Processes. *Advances Chem. Phys.*, 1963, vol. 5, p. 261.
2. Ч е п м е н С., К а у л и н г Т. Математическая теория неоднородных газов. Изд. иностр. лит. М., 1960.
3. А й з е н ш и ц Р. Статистическая теория необратимых процессов. Изд. иностр. лит., М., 1963, стр. 18.
4. М о r i Н., Statistical Mechanical Theory of Transport in Fluids. *Phys. Rev.*, 1958, vol. 112, No. 6.
5. Г о л ь д е н б л а т т И. И. Некоторые вопросы механики деформируемых сред. Гостехиздат, М., 1955.
6. И л ь ю ш и н А. А. Пластичность. Основы общей математической теории. Изд-во АН СССР, 1963, стр. 241.