第13卷 第2期
1983年5月25日

力 学 进 展
ADVANCES IN MECHANICS

Vol. 13 No. 2
May 25, 1983

耗散结构理论与流体稳定性

孙锦山 曾先才 陈创飞

耗散结构理论是一门新的学科，是由比利时学派的I. Prigogine 和P. Glansdorff 创立的。耗散结构理论对热力学和统计物理是一个重大的突破。它的出现对整个自然科学领域乃至社会科学的各个领域都有广泛的影响。Prigogine因此于1976年荣获了诺贝尔奖金。

本文先粗略地介绍耗散结构理论的基本概念及其热力学基础[1]，然后应用所得到的Glansdorff和Prigogine广义判据，着重研究带化学反应的Benard对流的稳定性问题。同时我们也将给出层流稳定性和Rayleigh-Taylor不稳定性的判据，对它们作定性的讨论。

一、平衡结构与耗散结构

在自然界和社会现象中，存在两种宏观体系结构：平衡结构与耗散结构。

所谓平衡结构，是指在热力学平衡状态下的稳定化的有序结构。这种结构无需外界提供物质和能量即可形成和维持。例如晶体和静态下的液体，就是比较典型的平衡结构。平衡结构又有人称之为“死结构”。

所谓耗散结构，则是指在耗散状态下的稳定化的有序结构。换言之，它是指体系在非平衡状态下通过与外界交换物质或能量而形成和维持的一种稳定化的有序结构。与平衡结构不同，它必须依靠外界提量物质或能量。因此，耗散结构又称为“活结构”。

例如，Benard对流就是耗散结构的一个比较典型的例子[4]。如图1，在两个无限大的水平薄板之间充满流体。上板温度为T_1，下板温度为T_0。$T_0>T_1$。当温度梯度小于某一个临界值时，流体静止，热以传导的方式通过流体；但当温度梯度达到某一个临界值时，流体突然出现一些如图2所示的非常规则的对流涡胞（cell)。如果上面不是薄板而是自由面，则从上往下可以看到一种如图2所示的蜂窝结构。这种对流涡胞的出现，需要宏观大的分子数在宏观长的时间内，有条不紊地进行运动。它相当于一个超分子组织。这表明稳定破坏后自发地出现了新的组织。这种新的组织，我们即称之为耗散结构。

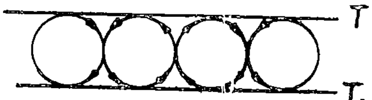

图1

又如生态平衡也可以形成耗散结构。我们知道，描述捕食与被捕食物种之间生态平衡的Lotka-Volterra方程有如下的形式：

$$\frac{du}{dt}=au-cuv,\qquad \frac{dv}{dt}=-bv+cuv$$

其中u，v分别代表所述的两种生物。当无外界干扰时，这两个方程的右端等于零，形成定态平衡，可立即得到$u=b/c$，$v=a/c$两个解；但是，如果初始给一个扰动，则形成周期性的波动解（图3)。

在化学反应中也可出现耗散结构[5]．典型的例子是Belousov-Zhabotinski 反应：

$$3H^{+}+3BrO_3^{-}+5CH_2(COOH)_2\xrightarrow[H_2SO_4]{Ce^{4+}/Ce^{3+}}3BrCH(COOH)+2HCOOH+4CO_2+5H_2O$$

即丙二酸在催化剂铈的作用下被溴酸氧化，当溴酸浓度低于某个临界值时生成物的浓度随时间是单调变化的；而当溴酸浓度达到某个临界值时则出现生成物的浓度随时间周期性改变的化学振荡，周期30秒，持续时间50分钟．这种化学振荡是一种时间性的耗散结构（见图4）．

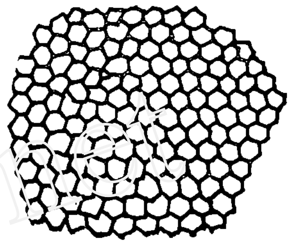

图 2

在经济学领域内，Prigogine举一个城市作为例子[1,2]．他说，一个城市要存在下去，只有它既是输入粮食、燃料及其他货物的中心，同时又是输出产品和废物的中心才行．这就需要一个合理的结构；否则，不管缺了哪一部分人的分工，这个城市都无法存在下去．

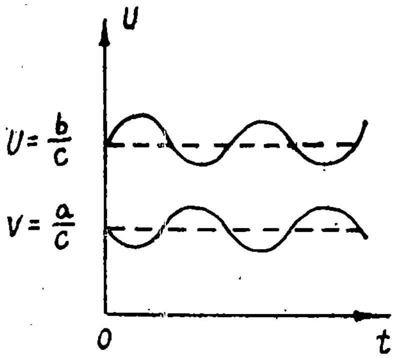

图 3

归纳起来，耗散结构大致有以下几个特点：

（1）必须依靠外界提供物质或能量，才能形成耗散结构．例如Benard 对流要依靠外界提供一个负熵流，也就是能量，才能形成规则的对流涡胞．

（2）Prigogine说：非平衡是有序之源，不可逆过程可导致耗散结构的产生．按照统计力学的观点，平衡是无序的，非平衡才是有序的起源．这是 Prigogine 等人的出发点．耗散结构是在非线性非平衡区不可逆过程中形成的一种稳定化的有序结构，这种有序是通过涨落的有序，与平衡结构中的有序是完全不同的．耗散结构的内部是运动的，而且这种运动是有一定的规律的，随时间或空间作周期性的变化．

（3）“自组织现象”（self-organization）．耗散结构是在给定的外界条件下，体系本身自发地形成的一种新组织，并不是人为地强行安排的．

（4）反映了时间的方向性和历史的偶然性．一个系统由线性近平衡区逐步发展，经过分歧点进入一个远离平衡的不稳定的无序定态，然后通过涨落发生突变，达到一个新的稳定的有序结构，这才可能是耗散结构．由此可见，时间的方向性是非常明显的．图（5）是状态量与控制参数λ的关系曲线．λ_0对应平衡态．当$\lambda \geqslant \lambda_1$时，如果内部与外界没有扰动，状态将沿虚线变化；但此时若有外界或内部的扰动，则状态量将沿上面的分支或下面的分支变化．究竟沿哪一支变化，这就要看历史的偶然性．

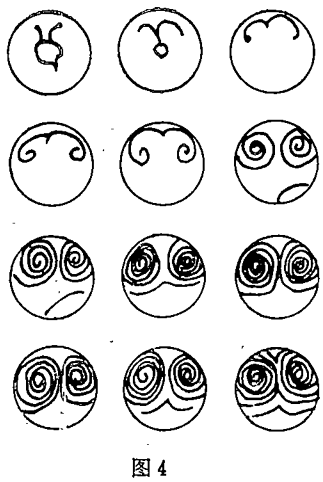

图 4

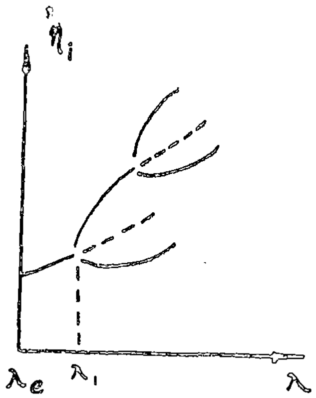

图 5

二、局域平衡与平衡方程

将局域平衡的概念引入非平衡热力学，这是耗散结构理论得以建立的重要手段[7]。我们知道，在平衡态中，各宏观状态量（ρ，p，T，e）均为常数，不随时间变化，也不随空间变化。而非平衡态的各个宏观状态量却是时间和空间的函数；当我们这样说时，实际上已经做了局域平衡的假设，因为体系处在非平衡时，不存在经典热力学的宏观状态量，这些宏观状态量是对平衡态定义的。但是Prigogine认为，可以把一个非平衡系统分成许多宏观小微观大的单元子系。这些单元子系在宏观上虽然很小，但在微观上却包含了足够多的粒子，并且服从Gibbs-Maxwell分布，因而是平衡的。这种单元子系的平衡即称为**局域平衡**。在作了局域平衡的假设之后，对每一个局域，都可以用经典热力学的热力学函数和热力学关系式来描述。因而对整个系统的熵和能量等广延量就可以化为每个局域相应量的求和。Prigogine等人正是由此假设出发，以"非平衡是有序之源"作为根本指导思想，借助经典热力学、连续介质力学的已有知识，以李雅甫诺夫函数为判据，以分支数学和随机理论为工具，建立了线性和非线性的非平衡热力学理论。

gPYigine等在局域平衡假设的基础上，推导了物理量的平衡方程。对于边界为Ω，体积为V的系统，广延量$I(t)$可以表示成强度量f对体积的积分

$$I(t)=\int_V f dV$$

$I(t)$随时间的变化可以分为两部分：

$$\frac{\partial I}{\partial t}=P[I]+\Phi[I]$$

其中 $P[I]=\int_V \sigma dV$称为源项，是每单位时间内体积V产生的I，σ则是单位时间单位体积产生的f；$\Phi[I]=\int_\Omega j_n d\Omega$称为流项，是单位时间通过边界面$\Omega$的流；$j_n$则为沿表面内法线方向的流密度。于是我们可以得到：

$$\frac{\partial I}{\partial t}=\int_V \sigma dV+\int_\Omega j_n d\Omega$$

应用Greeen公式，可以直接得到局域的平衡方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}=\sigma-\mathrm{div}\vec{j} \qquad (1)$$

其中流密度$\vec{j}$包括运流项和传导流项$\vec{j}_{\mathrm{cond}}$：

$$\vec{j}=\vec{j}_{\mathrm{cond}}+f\vec{v}$$

令源项等于零，可以得到相应的守恒方程。令$I=M$，$f=\rho$，$\vec{j}=\rho\vec{v}$，因$\sigma(M)=0$，则

由式（1）得到连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\operatorname{div}(\rho \vec{v})=0 \tag{2}$$

令 $f=\rho \vec{v}$，$\vec{j}=\rho \vec{v}\vec{v}$，$\sigma=\rho \vec{f}$，由式（1）可得

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho \vec{v}\vec{v}+\vec{P})=\rho \vec{f} \tag{3}$$

此为动量方程．其中 $\vec{P}=p\vec{I}+\vec{\tau}$，$p\vec{I}$ 为静压力张量，$\vec{\tau}$ 为粘性或弹塑性应力张量．$\vec{f}$ 为作用在单位质量上的总外力．

同样，令 $f=\rho_r$，$\vec{j}=\rho_r\vec{v}_r$，$\sigma=\sum\limits_{l} m_r\nu_r^{(l)}\omega^{(l)}$，可推得带化学反应的反应扩散方程：

$$\frac{\partial \rho_r}{\partial t}+\operatorname{div}(\rho \vec{v}_r)=\Sigma m_r\nu_r^{(l)}\omega^{(l)} \tag{4}$$

其中 ρ_r，m_r，$\vec{v}_r$ 分别是 r 组分的分密度，质量和速度；$\omega^{(l)}$ 为第 l 反应道的化学反应率；$\nu_r^{(l)}$ 为 r 组分第 l 反应道的化学计量系数（正号表示生成，负号表示减少，0 表示不出现 r 组分的物质）．根据定义，$\sum\limits_r \rho_r\vec{v}_r=\rho\vec{v}$，$\rho=\sum\limits_r \rho_r$，$\triangle\vec{v}_r=\vec{v}_r-\vec{v}$，$\Sigma\rho_r\triangle\vec{v}_r=0$，由式（4）可以得到

$$\frac{\partial \rho_r}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho_r\vec{v})+\nabla\cdot(\rho_r\triangle\vec{v}_r)=\Sigma m_r\nu_r^{(l)}\omega^{(l)} \tag{5}$$

此即为反应扩散方程，其中左边第二项为运流项，第三项为扩散流项．令 $f=\rho e$，$\vec{j}=\rho e\vec{v}+\vec{q}$，$\sigma=-\vec{P}:\nabla\vec{v}+\sum\limits_r\rho_r\vec{f}_r\triangle\vec{v}_r$，则由式（1）得能量守恒方程

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho e\vec{v}+\vec{q})=-\vec{P}:\nabla\vec{v}+\sum_r\rho_r\vec{f}_r\Delta\vec{v}_r \tag{6}$$

其中 e 为内能，$\vec{q}$ 为热流，$\vec{f}_r$，$\triangle\vec{v}_r$ 分别为 r 组分所受的外力和扩散速度．

有了以上的守恒方程，便可以由 Gibbs-Duhem 关系式

$$T\frac{ds}{dt}=\frac{de}{dt}+P\frac{d(1/\rho)}{dt}-\sum_{r}\mu_r\frac{d(\rho_r/\rho)}{dt} \tag{7}$$

推出熵平衡方程．方程（7）中，s为熵，μ_r为化学势．式（7）可以化为

$$T\left(\frac{\partial s}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla s\right)=\frac{\partial e}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla e-\frac{p}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla\rho\right)$$

$$-\sum_r\mu_r\left[\frac{\partial(\rho_r/\rho)}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla(\rho_r/\rho)\right] \tag{8}$$

以ρ乘式（8）两边，利用式（2），（5），（6）即可得

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho s\vec{v}+\frac{1}{T}\vec{q}-\sum_r\rho_r\mu_r\triangle\vec{v_r}/T)$$

$$=\vec{q}\cdot\nabla(\frac{1}{T})-\sum_r\rho_r\nabla\vec{v_r}(\nabla\frac{\mu_r}{T}-\frac{1}{T}\vec{f_r})+\frac{1}{T}\vec{\vec{\tau}}:\nabla\vec{v}+\sum_1\frac{A}{T}\omega^{(l)} \tag{9}$$

此即为熵平衡方程．其中左边第二项为熵流项，包括运流、热流和扩散流三项．等式右边为熵产生，即熵源项，包括热力、扩散力、外力、粘滞力和化学亲和力所产生的熵．$A^1=-\Sigma\mu_r\nu_r^{(1)}$为化学亲和力，表示化学反应的能力．

三、非平衡热力学的稳定性判据

有了非平衡系统局域形式的守恒方程，就可以利用李雅普诺夫直接判据研究非平衡系统的稳定性问题．我们可以将方程（9）改写成

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t}=-\mathrm{div}\vec{J}_\Omega+\sigma(s) \tag{10}$$

其中 $\vec{J}_\Omega=\rho s\vec{v}+\frac{\vec{q}}{T}-\sum_r\rho_r\mu_r\triangle\vec{v_r}/T$

$$\sigma(s)=\vec{q}\cdot\nabla(\frac{1}{T})-\sum_r\rho_r\nabla\vec{v_r}\left(\nabla\frac{\mu r}{T}-\frac{1}{T}\vec{f_r}\right)+\frac{1}{T}\vec{\vec{\tau}}:\nabla\vec{v}+\sum_1\frac{A_1}{T}\omega^{(1)}$$

一般地局域熵产生$\sigma(s)$可以写成"广义流"J_k和"广义力"X_k的乘积：

$$\sigma(s)=\sum_k J_kX_k \tag{11}$$

相应地可将上面的$\vec{q}$，$\rho_r\triangle\vec{v_r}$，$\frac{1}{T}\vec{\vec{\tau}}$，$\omega^{(1)}$分别称为热流、扩散流和反应流，而$\nabla(\frac{1}{T})$，$(\nabla\frac{\mu_r}{T}-\frac{1}{T}f_r)$，$\nabla\vec{v}$和$\frac{A_1}{T}$则可统统称为对应广义流的广义力．

在非平衡系统中，若认为“流” J_k是由于力 $\{X_k\}$ 引起的，则在接近平衡态区域，当“力”足够弱时，可对平衡态将“流” J_k按 $\{X_k\}$ 展开：

$$J_k(\{X_k\})=J_k(0)+\sum_l\left(\frac{\partial J_k}{\partial x_l}\right)_0 x_l+\frac{1}{2}\sum_{lm}\frac{\partial^2 J_k}{\partial x_l\partial x_m}x_l x_m+\cdots$$

在平衡态$J_k(0)=0$，忽略高次项，则有

$$J_k=\sum_l L_{kl}x_l\quad,\quad L_{kl}=\left(\frac{\partial J_k}{\partial x_l}\right)_0 \tag{12}$$

即“流”与“力”之间成线性关系。满足此关系式的非平衡区域称为线性非平衡区域。在线性非平衡区域，L_{kl}满足Onsager倒易关系[8]，即如将 L_{kl}以矩阵形式写出，则该矩阵是对称的：

$$L_{kl}=L_{lk} \tag{13}$$

其物理意义是：广义力 x_l产生的广义流J_k，与广义力 x_k产生的广义流 J_l在数量上是相等的。

将 $\sigma(s)$ 对整个系统积分，考虑到热力学第二定律适用于单元子系，即 $\sigma(s)\geqslant 0$，于是在线性非平衡区域，显然成立

$$P=\int_V \sigma(s)dV\geqslant 0 \tag{14}$$

即整个系统的总熵产生不能小于零。可以证明[1]总熵产生 P 对时间的导数在线性非平衡区满足

$$\frac{\partial P}{\partial t}\leqslant 0 \tag{15}$$

等于零对应于定态；小于零对应于偏离定态的情况，说明线性非平衡区的系统随时间的发展总是朝熵产生减小的方向进行的，直至到达定态才不再随时间变化。在线性非平衡区，定态的熵产生达到极小值，此称之为最小熵产生原理。

最小熵产生原理，保证在线性非平衡区的系统随时间的发展一定趋于定态，即使存在由外界条件无规则的变化或系统内部物理量的涨落所引起的扰动，也同样如此。例如，假设系统已处于定态，以一组状态量 $\{\eta_i^\circ\}$ 来描述；由于扰动，系统偏离定态，状态量变为 $\{\eta_i^\circ+\delta\eta_i(t)\}$，熵产生值大于定态时的值。但由于最小熵产生原理，这一熵产生要随时间而减少，最后达到最小值，重新回到定态。这里所说的定态是指状态量 $\{\eta_i\}$ 不随时间变化的状态，既可以是非平衡的定态，也可以是平衡态。平衡态是无外界影响的一种特殊情况下的定态。

由上可知，线性非平衡区的定态是稳定的。在线性非平衡区，我们选总熵产生P为李雅普诺夫函数，用$\frac{\partial P}{\partial t}\leqslant 0$作为线性非平衡系统的发展判据。线性非平衡区的定态底稳定性说明，耗散结构不可能在线性非平衡区出现。

将方程（10）对整个系统的体积进行积分，得

$$\int_V \frac{\partial(\rho s)}{\partial t} dV = -\oint_\Omega \vec{J}_\Omega \cdot d\vec{\Omega} + \int_V \sigma(s) dV = \frac{d_e s}{dt} + \frac{d_i s}{dt}$$

因为系统内部的熵产生项$\frac{d_i s}{dt} \geqslant 0$，所以系统与外界的熵交换项$\frac{d_e s}{dt}$必须小于等于零，才能保证系统的总熵变化$\int_V \frac{\partial(\rho s)}{\partial t} dV = 0$，使系统处于定常态。这说明，除非 $\sigma(s) = 0$，否则，必须由外界给系统提供一个负熵流，才能使系统形成一个定常态，即耗散结构。耗散结构只可能在非线性非平衡区域形成。

Prigogine 选择熵的二级微商 $\delta^2 s$ 作为非线性非平衡区判别系统稳定性的李雅普诺夫函数，选取比内能e，比容$1/\rho$和r组元的质量分数N_r为独立变量。根据局域热动平衡的假定，利用Gibbs关系式，可以推出[2]

$$\begin{cases} \delta^2(\rho s) = -\frac{\rho}{T}\left\{\frac{C_V}{T}(\delta T)^2 + \frac{\rho}{x}\left[\delta\left(\frac{1}{\rho}\right)\right]^2 + \frac{\rho}{x}\sum_{rr'} \mu_{rr'} \delta N_r \delta N_{r'}\right\} \\ v = \frac{1}{\rho}, \quad \mu_{rr'} = \frac{\partial \mu_r}{\partial N_{r'}} \\ x = -\frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_{T, N_r} \quad \text{（冻结等压系数）} \\ C_V = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_{V, N_r} \quad \text{（冻结定容比热）} \end{cases} \tag{16}$$

$\delta^2(\rho s)$ 称为超熵产生（excess entroy production）．方程（16）称为超熵产生方程．因为此方程是在局域平衡的假设下推出来的，要求式中C_v，x，$\mu_{rr'}$均大于零，因而显然可见

$$\delta^2(\rho s) \leqslant 0 \tag{17}$$

有了$\delta^2(\rho s)$，我们就可以根据李雅普诺夫稳定性直接判据判别系统是否稳定的：

$$\left.\begin{array}{l} \text{若} \frac{d}{dt}\left[\delta^2(\rho s)\right] > 0\text{，则系统是热力学稳定的} \\ \text{若} \frac{d}{dt}\left[\delta^2(\rho s)\right] = 0\text{，则系统处于热力学中性稳定} \\ \text{若} \frac{d}{dt}\left[\delta^2(\rho s)\right] < 0\text{。则系统是热力学不稳定的} \end{array}\right\} \tag{18}$$

考察一个系统是否稳定，不光要看其是否热力学稳定，而且要看是否动力学稳定．只有这两者都稳定，整个系统才是稳定的；否则，只要其中之一是不稳定的，整个系统就是不稳定的。在动力学不稳定性中，可以选动能$\frac{1}{2}\rho\vec{v}^2$的二阶微商作为李雅普诺夫函数．可以证明

$$\delta^2\left(\frac{1}{2}\rho\vec{v}^2\right) = \rho\,(\delta\vec{v})^2 \geqslant 0 \tag{19}$$

可见$\delta^2(\rho s)$是恒负的函数，而$\delta^2\left(\frac{1}{2}\rho\vec{v}^2\right)$则是恒正的函数．由余量满足的流体力学方程组

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{\partial\delta\rho}{\partial t}=-\nabla\cdot\left[\delta(\rho\vec{v})\right]\\
&\frac{\partial\delta\rho_r}{\partial t}=-\nabla\cdot\left[\delta(\rho_r\vec{v_r})\right]+\sum v_r^{(l)}m_r\delta\omega^{(l)}\\
&\frac{\partial\delta(\rho\vec{v})}{\partial t}=\vec{f}\delta\rho-\nabla\cdot[\delta\vec{\vec{P}}+\delta(\rho\vec{v}\vec{v})]\\
&\frac{\partial\delta(\rho e)}{\partial t}=-\nabla\cdot[\delta\vec{q}+\delta(\rho e\vec{v})]-\delta[\vec{\vec{p}}:\nabla\vec{v}]+\sum_r\vec{f}_r\delta(\rho_r\triangle\vec{v}_r)
\end{aligned}\right\}\quad(20)$$

可以求出$\delta^2(\rho s)$与$\delta^2(\frac{1}{2}\rho\vec{v}^2)$对时间的导数：

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}\delta_t[\varepsilon^2\delta^2(\rho s)]=&\sum_a\delta J_a\delta X_a'-\varepsilon^2\delta v_i\ \{T_{,i}^{-1}\delta(\rho e)+\sum_r[F_{ri}T^{-1}\\
&-(\mu_rT^{-1})_{,i}]\delta\rho_r\}\ +v_i\ \{\delta(\rho e)[\varepsilon^2\delta T^{-1}]_{,i}-\sum_r\delta\rho_r[\varepsilon^2\delta(\mu_rT^{-1})]_{,i}\}\\
&+\varepsilon^2\ \{f_iT^{-1}\delta\rho\delta v_i+T^{-1}\delta p_{ij}\delta v_{i,j}-v_{i,j}\delta T^{-1}\delta p_{ij}\}\\
&-\ \{\varepsilon^2[\delta q_i\delta T^{-1}-\sum_r\delta(\rho_r\triangle v_{ri})\delta(\mu_rT^{-1})+v_i\delta^2(\rho s)]\}_{,i}
\end{aligned}\quad(21)$$

其中X_a'表示加权广义力，而

$$\begin{aligned}
\sum_a\delta J_a\delta X_a'=&\delta q_i\delta(\varepsilon^2T^{-1})_{,i}+\sum_r\delta(\rho_r\triangle v_{ri})\delta[\varepsilon^2f_{ri}T^{-1}(\varepsilon^2\mu_rT^{-1})_{,i}]\\
&-\delta(p_{ij}T^{-1}\ \delta(\varepsilon^2v_{i,j})+\sum_l\delta\omega^{(l)}\delta(\varepsilon^2A_lT^{-1})
\end{aligned}\quad(22)$$

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2}\partial_t\ [\frac{\tau^2}{2}\delta^2(\rho v^2)]=&\frac{1}{2}\partial_t[\rho\tau^2(\delta v)^2]\\
=&\tau^2f_i\delta\rho\delta v_i+\delta p_{ij}\ (\tau^2\delta v_i)_{,j}-\tau^2v_{i,j}\delta v_i\delta(\rho v_j)\\
&-\frac{1}{2}(\delta v)^2(\tau^2\rho v_i)_{,i}-[\tau^2\delta v_i\delta p_{ij}+\frac{\tau^2}{2}\rho v_j(\delta v)^2]
\end{aligned}\quad(23)$$

式（21），（22）和（23）中，∂_t表示对时间的微商；指标i，j表示对x，y，z坐标的明显求和；逗号后面的j表示对x，y，z坐标的导数求和．ε，τ为与时间无关的任意函数．

对于整个系统，可选$\delta^2(\rho z)$作为李雅普诺夫函数：

$$\delta^2(\rho z)=\tau^2\delta^2(\tfrac{1}{2}\rho v^2)-\varepsilon^2\delta^2(\rho s)>0\quad(24)$$

于是

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\delta^2(\rho z)<0 &&\text{系统稳定}\\
&\frac{\partial}{\partial t}\delta^2(\rho z)>0 &&\text{系统不稳定}\\
&\frac{\partial}{\partial t}\delta^2(\rho z)=0 &&\text{系统中性稳定}
\end{aligned}\right\}\quad(25)$$

四、带化学反应的Benard对流的稳定性

关于Benard对流，经典流体力学已经给出了很好的结果[3]；近几年来，也有人用变分法进行了研究[1]。这里，我们将应用上面叙述的耗散结构理论所得到的广义判据对带化学反应的Benard对流的稳定性进行一些初步的研究。为简单起见，只考虑单一的化学反应，反应率与温度成正比，并忽略反应物的燃耗的情况。

相应的运动方程为

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_j\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j)=0\\
&\rho\frac{\partial v_i}{\partial t}+\sum_j\rho v_j\frac{\partial v_i}{\partial x_j}=\rho f_i+\sum_j\frac{\partial P_{ij}}{\partial x_j}\\
&\qquad P_{ij}=-p\delta_{ij}+p_{ij}\\
&p_{ij}=\eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\eta\sum_k\frac{\partial v_k}{\partial x_k}\delta_{ij}\\
&\rho\frac{\partial e}{\partial t}+\sum_j\rho v_j\frac{\partial e}{\partial x_j}=\sum_j\frac{\partial}{\partial x_j}\left(K\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)-\sum_{ij}P_{ij}\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\Phi\\
&\Phi=\sum_{ij}2\eta d_{ij}^2-\sum_j\frac{2}{3}\eta\,(d_{jj})^2+\rho c_v QT\\
&d_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)
\end{aligned}\right\}\qquad(26)$$

其中Φ的第一、二两项为粘性耗散项，第三项为化学反应放能项。做 Boussenesq 近似，即（1）只考虑动量方程中重力项ρ的压缩性，其余的ρ均认为是常数；（2）采用热涨冷缩状态方程，即$\rho=\rho_0\,[1-\alpha(T-T_0)]$，其中$\alpha$为体积膨胀系数。于是方程（26）可简化为

$$\left.\begin{aligned}
&\sum_j\frac{\partial v_j}{\partial x_j}=0\\
&\rho_0\frac{\partial v_i}{\partial t}+\sum_j\rho_0 v_j\frac{\partial v_i}{\partial x_j}=-\rho g\lambda_i-\frac{\partial p}{\partial x_i}+\eta\nabla^2 v_i\\
&\frac{\partial T}{\partial t}+\sum_j v_j\frac{\partial T}{\partial x_j}=K'\nabla^2 T+\frac{1}{\rho_0 c_v}\Phi\\
&K'=K/\rho_0 c_v,\qquad \lambda_i=(0,\ 0,\ 1)
\end{aligned}\right\}\qquad(27)$$

当系统处于定常态时，流体是静止的，$\vec{v}=0$，由方程（27）可得

$$\frac{\partial p}{\partial x_i}=-g\rho\lambda_i,\quad K'\nabla^2 T+QT=0$$

于是可求得定态解

$$T=\frac{T_1-T_0\cos\sqrt{\frac{\rho_0 c_v\theta}{K}}h}{\sin\sqrt{\frac{\rho_0 c_v\theta}{K}}h}\sin\sqrt{\frac{\rho_0 c_v\theta}{K}}z+T_0\cos\sqrt{\frac{\rho_0 c_v\theta}{K}}z \tag{28}$$

$$p=p_0-g\rho_0\Big[z+\alpha\Big(\frac{T_1-T_0\cos\sqrt{\rho_0 c_v\theta/K}\;h}{\sqrt{\rho_0 c_v\theta/K}\sin\sqrt{\rho_0 c_v\theta/K}\;h}\cos\sqrt{\frac{\rho_0 c_v\theta}{K}}z$$

$$-\frac{T_0}{\sqrt{\rho_0 c_v\theta/K}}\sin\sqrt{\frac{\rho_0 c_v\theta}{K}}z-T_0 z\Big)\Big] \tag{29}$$

其中T_1，T_0分别为上下边界的温度，h为流体层的厚度．可见当 h 固定时，每给定一对（T_1，T_0），就对应一个定态．

对方程（27）作线性化处理，忽略扰动量二阶及二阶以上的小量，得到扰动量满足的方程

$$\left.\begin{aligned}
&\sum_j\frac{\partial u_j}{\partial x_j}=0\\
&\rho_0\frac{\partial u_i}{\partial t}=-g\rho_0\alpha\theta\lambda_i+\sum_j\frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j}\\
&\rho_0 c_v\frac{\partial\theta}{\partial t}=K\sum_j\frac{\partial^2\theta}{\partial x_j^2}-\rho_0 c_v\sum_j u_j\frac{\partial\theta}{\partial x_j}\lambda_j+\rho_0 c_v Q\theta\\
&\text{其中}\lambda_i=(0,\ 0,\ 1);\ u_i=\delta v_i;\ \theta=\delta T
\end{aligned}\right\} \tag{30}$$

再进而逐项求得

$$\delta p_{ij}=\eta\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\Big),\ \delta q_i=-K\frac{\partial\theta}{\partial x_i}$$

$$\delta p_{ij}\delta v_{i,j}=\eta\Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\Big)\frac{\partial u_i}{\partial x_j}=2\eta d_{ij}{}^2$$

$$f_i\delta\rho\delta v_i=-g\alpha\rho_0\theta u_z$$

$$\delta q_i\delta(\varepsilon^2T^{-1})_{,i}=K\frac{\partial\theta}{\partial x_j}\ \frac{\varepsilon^2}{T^2}\ \frac{\partial\theta}{\partial x_j}+\frac{1}{2}K\nabla(\theta^2)\nabla\Big(\frac{\varepsilon^2}{T^2}\Big)$$

取$\varepsilon=T$，则有

$$\delta q_i\delta(\varepsilon^2T^{-1})_{,i}=K\Big(\frac{\partial\theta}{\partial x_j}\Big)^2$$

$$-\delta(p_{ij}T^{-1})\delta(\varepsilon^2 v_{i,j})+\varepsilon^2T^{-1}\delta p_{ij}\delta v_{i,j}=0$$

$$-\varepsilon^2\delta v_i[T_{,i}{}^{-1}\delta(\rho e)-(\mu T^{-1})_{,i}\delta\rho]=\varepsilon^2u_i+\frac{T_{,i}}{T^2}\rho_0 c_v\theta$$

代入式（23）并对整个系统的体积积分，得到流体运动的动力学稳定条件为

$$\int_V[g\alpha\rho_0\theta u_z+\delta\rho u_{i,i}-2\eta d_{ij}{}^2]dV<0$$

将方程（30）的第一式代入，即得：

$$\int_V[g\alpha\rho_0\theta u_z-2\eta d_{ij}^2]dV<0 \tag{31}$$

式（31）与不考虑化学反应的Benard对流的稳定性条件相同．可见，由粘性引起的动能耗散是一个致稳因素，粘性越大，系统越稳定；而浮力所引起的内能增加则是一个不稳定因素，浮力越大，系统越不稳定．

同样，由式（21）可得到热力学稳定性条件：

$$\int_V[K(\theta_{,i})^2+\frac{\partial T}{\partial z}\rho_0c_v\theta u_z+\varepsilon^2\sum_i\delta\omega^{(1)}\delta(A_iT^{-1})]dV>0 \tag{32}$$

式中第一项为热传导引起的熵的增加，是一个致稳因素．热传导系数越大，系统越稳定；第二项表示由于流体上下对流引起的熵的增加或减少，它可以是致稳因素，也可以是不稳定的因素．对于通常的Benard对流，由于$T_1<T_0$，使$\frac{\partial T}{\partial z}<0$，对流引起熵的减少，是不稳定因素；若$T_1>T_0$，则$\frac{\partial T}{\partial z}>0$，对流引起熵的增加，是致稳因素．在有化学反应的情况下，如果存在$\sqrt{\frac{\rho_0c_v\theta}{K}}\,h\ll1$，则 $\frac{\partial T}{\partial z}\approx\frac{T_1-T_0}{h}$，此项所起的作用与普通的Benard对流相同．第三项表示化学反应引起熵的增加或减少．对静止态为化学平衡的情况，这项的影响使熵增加，是致稳因素；对不可逆的放热反应，使熵减少，是不稳定因素．可见，如考虑流体的化学反应，仍保持$T_0>T_1$，那么临界瑞利数的值将下降；对$T_0\leqslant T_1$的流体层，则可能由于存在放热化学反应而出现类似的Benard对流现象．

倘若不考虑化学反应，则Benard对流的热力学稳定条件变为

$$\int_V[K(\theta_{,i})^2+\beta\theta u_z]dV>0 \tag{33}$$

$$\beta=\frac{T_1-T_0}{h}$$

将式（31）与式（33）合并成如下的式子：

$$\int_V\frac{1}{2}\partial_t\delta^2(\rho z)\,dV=\int_V[g\alpha\rho_0\theta u_z-2\eta d_{ij}^2]dV$$

$$-\int_V[K(\theta_{,i})^2+\beta\theta u_z\rho_0]dV<0 \tag{34}$$

引进无量纲Rayleigh数

$$\mathrm{Ra}=\frac{g\alpha h^4}{k\nu}\beta>0$$

令式（34）等于零，应用复数运算规则求系统的中性稳定条件，对（x，y）平面平均后，可给出Rayleigh数为

$$\mathrm{Ra}=\frac{(g\alpha)^2h^4\int_0^h\langle\theta_{,i}\theta^*_{,i}\rangle dz}{\int_0^h[g\alpha\eta(\langle\theta u_z^*\rangle+\langle\theta^* u_z\rangle)-\eta^2\langle u_{i,j}u^*_{i,j}\rangle]dz}\tag{35}$$

此式的最小值即称为临界Rayleigh数，记作 $(\mathrm{Ra})_c$，式中 $\langle\rangle$ 表示对 xy 平面求平均。

对于上下表面均是自由面或均是固壁的情况，可以分别求得临界Rayleigh数如下表：

	(Ra)c 耗 散	(Ra)c 精 确[3]
自由面-自由面	672.15	657.5
固壁-固壁	1821.8	1707.76

可见，所得结果与精确解还是比较接近的。

五、层流的稳定性

我们由基本方程出发，应用Glansdorf和Prigogine广义判据推出不可压流体层流稳定性的判据，并进行定性的讨论。

对于不可压流体，定常态满足

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_i}=0,\quad \sum_{j=1}^{3}\bar{u}_j\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i}+\nu\nabla^2\bar{u}_i\tag{36}$$

扰动量所满足的方程为

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i}=0\\&\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial t}+\sum_{j=1}^{3}\bar{u}_j\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}+\sum_{j=1}^{3}\tilde{u}_j\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}+\sum_{j=1}^{3}\tilde{u}_j\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial\tilde{p}}{\partial x_i}+\nu\nabla^2\tilde{u}_i\end{aligned}\right\}\tag{37}$$

边界条件为$\tilde{u}_i=0$.式(36)和(37)中,$\bar{u}_i$，$\bar{p}$表示定态量，$\tilde{u}_i$，$\tilde{p}$表示扰动量。假定流体层的厚度为$2b$，将坐标原点取在流体的对称面上，x轴为顺流方向，y轴向上，并成立边界条件：$y=\pm b$，$\bar{u}_i=0$；$y=0$，$\bar{u}_1=u$，于是可得到定常解为

$$\bar{u}_1=u(1-y^2/b^2),\qquad \bar{u}_2=\bar{u}_3=0$$

$$\bar{p}=-\frac{2\rho\nu u}{b^2}x$$

注意到$\vec{f}=0,\delta\vec{v}=\tilde{u}_i$，$\vec{v}=\bar{u}_i$,代入Glansdorff和Prigogine的广义判据中，逐项进行计算得

$$\int_V \left\{-2\nu d^2_{i,j}+2\rho\widetilde{u}_1\widetilde{u}_2 uy/b^2\right\}dV+\int_V \nabla[\nu\vec{R}-\frac{1}{2}\rho\vec{v}(\delta\vec{v})^2]dV\leqslant 0$$

其中$\vec{R}=\sum_{j=1}^{3}\left(\widetilde{u}_{i,j}+\widetilde{u}_{j,i}\right)\cdot\overline{u}_i \qquad (i=1,\ 2,\ 3)$

在固壁上$\vec{R}=\vec{v}=0$，故上式变成

$$\int_V\left(-2\nu d^2_{ij}+2\rho\widetilde{u}_1\widetilde{u}_2\ uy/b^2\right)dV+\int_S\left[\nu\vec{R}-\tfrac{1}{2}\rho\vec{v}\ (\delta\vec{v})^2\right]d\vec{S}\leqslant 0 \qquad (38)$$

无量纲化后得到

$$\begin{cases}\int_V\left[d_{i,j}^2-Re\widetilde{u}_1\widetilde{u}_2 y\right]dV-\int_S\frac{1}{2}\vec{R}\,d\vec{S}+\frac{1}{4}\int_S \mathrm{Re}(1-y^2)(\delta\vec{v})^2 dzdy\geqslant 0\\ d_{i,j}=\frac{1}{2}\left(\widetilde{u}_{i,j}+\widetilde{u}_{j,i}\right)\\ \mathrm{Re}=ub\rho/\nu \text{为Reynolds数}\end{cases} \qquad (39)$$

式（39）的第一个积分表示粘性力与惯性力之间的平衡关系，第二个积分表示某一个控制面上粘性力做功，第三个积分表示通过此控制面的扰动动能。当$\nu=0$时，显然$\nabla\vec{v}=0$，式（38）变为

$$-\int\rho\vec{v}\frac{1}{2}(\delta\vec{v})^2 d\vec{S}\leqslant 0$$

因此系统是稳定的（Reigh定理）。

当$\nu\neq 0$时，式（38）第一个积分是主要的；当Re到达一定值后，就破坏了稳定性条件，出现湍流。但当$\mathrm{Re}\to\infty(\nu=0)$时，不稳定区域逐渐缩小到零。Thomes1953年正确地解析了这种现象，称为粘性的两重性：一方面粘性有致稳作用，另一方面当粘性很小时，它又是引起不稳定的一个因素。

因不考虑热传导、温度梯度、外力、浓度扩散和化学反应的影响，因此一定满足热力学稳定性条件。

六、Rayleigh-Taylor不稳定性

假定流体不可压，初始时刻静止，只在z方向受重力作用；流体层的厚度为h，密度沿z方向连续变化，上、下表面的密度分别为ρ_2和ρ_1。于是由流体力学基本方程组出发，可以得到定常态的解

$$\overline{u}_i=0 \qquad T=\mathrm{Const} \qquad \rho=\rho_1+\frac{\rho_2-\rho_1}{h}z$$

$$p=\int-\left(\rho_1+\frac{\rho_2-\rho_1}{h}z\right)gdz=p_0-\left(\rho_1 z+\frac{1}{2}\frac{\rho_2-\rho_1}{h}z^2\right)g$$

然后可写出扰动量满足的方程，逐项求出Glansdorff和Prigogine广义判据中各项的值，代入方程（21）和（23），便可得到动力学稳定条件为

$$\int\left[g\delta\rho\delta v_z+\delta p\widetilde{u_{i,i}}-2\eta d_i{}^2{}_{,i}\right]dV<0 \tag{40}$$

热力学稳定条件为

$$\int\left[K(\delta T_{,j})^2+T_{,jj}\rho c_v\delta TU_z\right]dV>0 \tag{41}$$

由式（41）可知，当$T=\text{const}$时，热力学条件稳定，热传导是一个致稳因素。

由于$\delta\rho=\frac{\rho_2-\rho_1}{h}\delta z$，$\frac{d\delta z}{dt}=\delta v_z$，$\delta\rho\delta v_z>0$，所以由式（40）可见，重力加速度$g$是一个不稳定因素。因

$$u_{i,i}=-\frac{1}{\rho}\frac{d\delta\rho}{dt}$$

$$\delta p\,u_{i,i}=\frac{\rho_2-\rho_1}{h}\left[\left(\rho_1+\frac{\rho_2-\rho_1}{h}z\right)g\right]\delta v_z\delta z$$

而$\delta v_z\delta z>0$，$\rho_2-\rho_1>0$，所以$\delta pu_{i,i}>0$，可知可压缩性是一个不稳定因素，而粘性系数则显然是致稳因素。

耗散结构理论的建立给自然科学的发展带来了生气，开辟了新的前景，但是离实际问题的解决还差得很远。目前，它虽然在流体力学，尤其是在生物学和化学中得到了广泛的应用，但是它还不可能对各种问题给出定量的结果，而只能给出定性的描述，指出过程发展的总趋势。因此，应用这一理论来讨论Benard对流和层流的稳定性以及Rayleigh-Taylor不稳定性时，我们也就不可能对有关的问题给出细致的描述，只好停留在定性的讨论上。这是这个理论的不足之处。我们相信，通过学术界的共同努力，这门学科终究会日臻完善，更加成熟起来。

陈式刚同志对本文进行了审阅，在此谨致谢意。

参考文献

〔1〕Glansdorff, P. and Prigogine, I., Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations(1971).
〔2〕Nicolis, G. and Prigogine, I., Self-Organization in Non-Equilibrium Systems (1977).
〔3〕Chandraskhar, S., Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability (1961).
〔4〕Schechter, R. S., Velarde, M. G. and Platten, J. K., The Two-Component Benard Problem, Advances in Chem. Phys., 26 (1974).
〔5〕全国非平衡统计物理文集（西安，1979）.
〔6〕周光召等，《爆轰流体力学》(待出版).
〔7〕Prigogine, I., Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes (1967).
〔8〕De Groot, S.R., Thermodynamics of Irreversible Processes, North-Holl and Publishing Company (1952).
〔9〕孙锦山，临界爆轰的稳定条件和螺旋爆轰波，爆炸与冲击，1（1981）.

THEORY OF DISSIPATIVE STRUCTURE AND FLUID STABILITY

Sun Jin-shan　Zeng Xian-cai　Chen Chuang-fei