Variational version of thermal conduction fluctuations in the context of the most probable route

1987 J. Phys. A: Math. Gen. 20 5379

(http://iopscience.iop.org/0305-4470/20/15/049)

J. Phys. A: Math. Gen. 20 (1987) 5379-5392. Printed in the UK

La version variationnelle de fluctuation de la conduction thermique dans le contexte du parcours le plus probable

O V Minine

Département de Physique, Institut de la Mécanique de Précision et de l'Optique, Sablinskaya 14, 197101 Léningrad, URSS

Reçu le 10 octobre 1986, présentation définitive le 24 mars 1987

Résumé. Dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre local et à l'aide de la fonction de répartition presentée auparavant par Zubarev, il est obtenu l'expression de la fluctuation quadratique dans un système de non-équilibre au stade hydrodynamique. Il est montré que cette fluctuation satisfait aux conditions nécessaires pour l'utiliser comme la fonction de Liapounov. Il est démontré que l'exigence de Liapounov de la stabilité méne, en fin de compte, à une fonctionnelle de fluctuation dont la valeur est minimale au stade hydrodynamique. Des estimations infinitésimales sont présentées pour les parties droites de deux équations de bilan: de l'entropie et de l'énergie interne. Il est prouvé que le potentiel local de Prigogine et Glansdorff au cas de la conduction thermique peut être déduit de la fonctionnelle de fluctuation perturbée. Au moyen de la formule du princip d'Onsager et Machlup, on obtient les intégrales de parcours correspondantes en évolution du système au stade hydrodynamique.

Abstract. An expression for the square-law fluctuation of internal energy is obtained in the framework of the local equilibrium approach with the aid of the non-equilibrium distribution function presented recently by Zubarev. It is shown that this fluctuation satisfies the necessary conditions for its use as Liapounov's function. It is demonstrated that Liapounov's stability requirement leads to a fluctuating functional which has a minimum for the hydrodynamic stage. The infinitesimality estimates of the right parts are found for two balance equations: energy and entropy. It is shown that the local potential of Prigogine and Glansdorff can be derived from perturbed fluctuating functional obtained here. With the aid of the well known formula of the Onsager-Machlup postulate for the density probability transition of a thermodynamic system from some non-equilibrium state, the path integrals are obtained for the evolution of the system in the hydrodynamic stage.

1. Introduction

L'interprétation variationnelle de la conduction thermique non-statonnaire et linéaire comme une synthèse de l'idée du potentiel local et de l'hypothèse de fluctuation, présentée et discutée dans la série des travaux (Rosen 1953, Glansdorff et Prigogine 1971, Schechter 1967, Minine 1974), est bien connue: une valeur extrémale de la fonctionnelle

$$J(T, T^0) = \int_t \int_X [\rho C_v T\, \partial T^0/\partial t + \tfrac{1}{2}\lambda (\nabla T)^2 - WT]\, \mathrm{d}X\, \mathrm{d}t - \int_t \int_S \lambda T \nabla_n T^0\, \mathrm{d}S\, \mathrm{d}t \qquad (1)$$

se réalise pour une fonction $T = T^0(X, t)$ qui est une solution de l'équation de Fourier et satisfait aux conditions limites du premier ou deuxième genre. Selon la représentation de Glansdorff et Prigogine (1971), la fonction T^0 est celle qui correspond à une vraie valeur moyenne de la distribution macroscopique ('dont il faut encore trouver') de sorte qu'elle n'est pas soumise à la variation; la fonction $T(X, t)$ est une distribution subissant envers T^0 une fluctuation. Etant donné que la conduction thermique est caractérisée par le stade hydrodynamique, où les petites fluctuations thermiques sont un processus stochastique Markovien, on pourrait penser qu'il n'y a aucune raison à récourir au problème suffisement clair de la thermodynamique linéaire de non-èquilibre. Néanmoins, dans les divers divisions de cet article on entend aussi par les fluctuation des déviations anomales de fait de l'application d'une approximation *a priori* $T(X, t)$ à la recherche de $T^0(X, t)$ avec méthode variationelle directe.

Il est démontré dans l'article de Minine (1984) qu'à l'intégrale $J(T, T^0)$ on est admis d'utiliser une température dimensionnelle aussi bien que celle sans dimension $\theta(X', F_0')$, où

$$X = (x, y, z) \Rightarrow X' = (\xi, \zeta, \eta) \qquad t \Rightarrow F_0.$$

La fonctionnelle (1) se transforme alors à l'expression suivante

$$\mathscr{J} = \int_{F_0} \int_G [\theta\, \partial\theta^0/\partial F_0 + \tfrac{1}{2}(\nabla\theta)^2 - Ki^0\theta]\, \mathrm{d}X'\, \mathrm{d}F_0' - \int_{F_0} \int_\Gamma \theta \nabla_n \theta^0\, \mathrm{d}\Gamma\, \mathrm{d}F_0' \qquad (2)$$

où $Ki = W(X, t)R_1^2/[\lambda(T^* - T^0)]$ est une densité sans unité des sources intérieures.

Quoique la transformation formelle de (1) à (2) ne contienne pas de difficultés principales, pourtant l'interprétation physique de celle-ci avance des questions. Le retour à la compréhension du sens physique de (1) fut considérablement stimulé par nombre d'ouvrages de Lavenda et Santamato (1981, 1982, Lavenda 1979, 1984). Ainsi, dans l'article Lavenda et Santamato (1982), les auteurs démontrèrent rigoureusement qu'aux processus de non-équilibre en présence de petites fluctuations thermiques accidentelles (avec forte limitation à l'intensité de celles-ci, $K\downarrow 0$) se réalise le principe de la probabilité maximale le long de la vraie trajectoire au cours de l'évolution du système dynamique. Auparavant, ceci fut accompli par Onsager et Machlup (1953) en cas de la thermodynamique linéaire de non-équilibre, et, quelques années plus tard, Ventzel et Freindlin (1972, 1984) formulèrent la théorie conséquente du développement des systèmes dynamiques sous l'influence de perturbations accidentelles.

A la discussion des problèmes de la stabilité des systèmes en question, les auteurs des ouvrages cités attirent l'attention au fait que pour tout interval de temps en présence de petites perturbations le processus suit 'le courant' avec probabilité écrasante, c'est-à-dire, le long des solutions déterministes.

Les estimations de probabilité les plus complexes et plus fines se font à l'occurence du mouvement du système 'contre le courant' ou 'à travers' de celui-ci.

Lavenda et Santamato posèrent le problème d'extension du principe d'Onsager et Machlup jusqu'aux processus stochastiques non-Gaussiens (dans les systèmes thermodynamiques) et la recherche d'un critère adéquat de la stabilité de ceux-ci. Pourtant, leur attention à la stricte argumentation de la structure et des propriétés de l'intégrale de parcours (the path integral) ne doit pas exclure un autre point de vu à propos des problèmes touchés.

A notre avis, quelques aspects de l'interprétation probabiliste de OM pour la thermodynamique linéaire de non-équilibre ne sont pas élaborés jusqu'au bout en ce qui concerne de leurs proprietés, de leurs portées et de leurs applications.

Cet article établit le rapport entre le principe de OM pour la thermodynamique linéaire de non-équilibre et la stabilité selon Liapounov du stade hydrodynamique des systèmes. Dans la § 2, il est démontré que la fluctuation quadratique de l'énergie interne pour la conduction thermique a l'ordre infinitésimal ainsi que pour l'état d'équilibre des systèmes thermodynamiques. La § 3 de l'ouvrage est consacrée à l'introduction de la fonction de Liapounov qui possède le sens physique transparent. La condition de la stabilité du stade hydrodynamique y est établie, et de celle-ci on déduit, en fin de compte, une fonctionnelle de fluctuation. On introduit là une fonctionelle perturbée coïncidant avec (1).

A la § 4 les proprietés de deux fonctionelles sont discutées. Dans la § 5, la liaison est donnée entre la fonctionelle de fluctuation perturbéé et le potentiel local de Glansdorff et Prigogine. Le sens physique du principe de Galerkine est mentionné pour les problèmes de conduction thermique.

En la dernière division, on expose le rapport entre le principe de OM et la condition de stabilité du stade hydrodynamique.

2. Sur la fluctuation quadratique de l'énergie dans un système thermodynamique de non-équilibre au stade hydrodynamique

La fluctuation quadratique de l'énergie du système thermodynamique à l'état d'équilibre est égale à

$$D = \langle (H-E)^2 \rangle = \int_{\Omega} (H-E)^2 f(p,q)\,\mathrm{d}\Omega = K_B C_v T^2. \tag{3}$$

Dans un système non stationnaire à l'état de non-équilibre, le Hamiltonien H et l'énergie moyenne E sont des fonctions des coordonnées et du temps. Donc, l'expression (3) se transforme à la suivante:

$$D(t) = \int_{\Omega} \left(\int_X (\mathscr{H}(p,q,X) - \rho e(X,t))\,\mathrm{d}X \right)^2 f_\varepsilon(p,q,t)\,\mathrm{d}\Omega \tag{4}$$

où $\mathscr{H}(p,q,X)$ et $e(X,t)$ sont les densités respectives avec

$$\begin{aligned} &\mathscr{H}(p,q,X) = \left(\sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \tfrac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi |q_i - q_j| \right) \delta(q_i - X) \\ &H(p,q) = \int_X \mathscr{H}(p,q,X)\,\mathrm{d}X \qquad E(t) = \int_X \rho e(X,t)\,\mathrm{d}X \qquad X = \{x,y,z\}. \end{aligned} \tag{4'}$$

La fonction de répartition de non-équilibre au stade hydrodynamique pour la conduction thermique (Zubarev 1974) est

$$\begin{aligned} f_\varepsilon(p,q,t) = Z^{-1} \exp\Bigg[&- \int_X \frac{\mathscr{H}(p,q,X) - \rho e(X,t)}{\theta(X,t)}\,\mathrm{d}X \\ &+ \int_X \int_{-\infty}^{0} \mathrm{e}^{\varepsilon t_1} (\nabla \cdot j_{\mathscr{H}}(X,t_1)\theta(X,t+t_1) + \mathscr{H}(p,q,X,t_1) \\ &\times \frac{\partial \theta(X,t+t_1)}{\partial t_1} \Big)\,\mathrm{d}t_1\,\mathrm{d}X \Bigg] \end{aligned} \tag{5}$$

où $\theta(X,t) = K_B T(X,t)$, Z est l'intégrale des états en cas non stationnaire de non-équilibre.

La fonction de répartition de non-équilibre $f_\varepsilon(p, q, t)$ satisfait à l'equation perturbée de Liouville aux conditions limites thermodynamiques $\varepsilon \to +0$, $V \to \infty$ (Zubarev 1974).

L'intégrale des états est

$$Z = \int_\alpha \left\{ \exp\left[-\int_X \frac{\mathcal{H}(p, q, X) - \rho e(X, t)}{\theta(X, t)} \, dX + \int_X \int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t_1} (\nabla \cdot j\mathcal{H}(X, t_1) \right.\right.$$
$$\left.\left. \times \theta(X, t + t_1) + \mathcal{H}(p, q, X) \frac{\partial \theta(X, t + t_1)}{\partial t_1} \right) dt_1 \, dX \right]\right\} d\Omega. \tag{6}$$

On considère un moment fixe du temps auquel correspond un état stationnaire de non-équilibre. On profite des proprietés de la distribution qui décrit l'état d'équilibre local. La multitude de valeurs θ_m et e_m sera une composition des paramètres locales macroscopiques d'équilibre. Il est clair que

$$\frac{\partial Z}{\partial(1/\theta)} = \sum_m \frac{\partial Z}{\partial(1/\theta_m)} \frac{\partial(1/\theta_m)}{\partial(1/\theta)} \tag{7}$$

avec

$$\chi_m = \frac{\partial(1/\theta_m)}{\partial(1/\theta)} = \begin{cases} 1 & X' \in X_m \\ 0 & X' \notin X_m, \; X = U_m X_m. \end{cases} \tag{7'}$$

On peut obtenir une expression pareille pour la deuxième derivée.

Après avoir fait la différentiation de (6), en tenant compte du pouvoir d'additionner suivant les espaces respectifs et la propriété (7), en multipliant ensuite les sommes et les réduisant, on aura

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial(1/\theta)^2} = \int_\Omega \left(\int_X (\mathcal{H}(p, q, X) - \rho e(X, t) \, dX \right)^2 f_\varepsilon(p, q, t) \, d\Omega + R' \tag{8}$$

ou

$$\frac{1}{V} \int_X \frac{\partial^2 Z}{\partial(1/\theta)^2} \, dX = \langle (H - E(t))^2 \rangle + R \tag{8'}$$

avec R et R' des membres inconnus.

D'autre part, d'une manière analogue à la précédante, on a

$$\frac{1}{V} \int_X \frac{\partial^2 Z}{\partial(1/\theta)^2} \, dX = \frac{1}{V} \int_X \left\{ \frac{\partial}{\partial(1/\theta)} \left[-\int_\Omega \left(\int_X \mathcal{H}(p, q, X) \, dX \right) f_\varepsilon(p, q, t) \, d\Omega \right]\right\} dX$$
$$= \frac{1}{V} \int_X \theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \langle H \rangle \, dX = \int_X K_B \rho C_v T^2(X, t) \, dX. \tag{9}$$

En faisant la comparaison (8') de (9), on obtient

$$D(t) = \langle (H - E(t))^2 \rangle + R = \int_X K_B \rho C_v T^2(X, t) \, dX. \tag{10}$$

Pour que la fluctuation $D(t)$ ait l'expression connue au cas particulier $T(X, t) =$ constant en tout moment du temps t, après avoir appliqué le théorème de la moyenne, il est nécessaire d'admettre $R \equiv 0$.

On peut remarque que $D(t)$ a l'évaluation majorante

$$D(t) \leqslant K_B C_v \max_{X,t} T^2(X, t). \tag{11}$$

Par conséquent, dans le cas de non-équilibre, la fluctuation a le même ordre infinitésimal (au stade hydrodynamique).

3. L'indice de la stabilité du stade hydrodynamique selon la méthode directe de Liapounov

Le stade hydrodynamique d'évolution du système de non-équilibre est décrit par l'équation perturbée de Liouville

$$\frac{\mathrm{d}f_\varepsilon}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial f_\varepsilon}{\partial t}+\mathrm{i}\mathscr{L}f_\varepsilon(t)=-\varepsilon(f_\varepsilon(t)-f_q) \qquad \varepsilon\to+0 \tag{12}$$

où $\mathrm{i}\mathscr{L}$ est l'opérateur de Liouville et f_q étant la fonction de répartition de quasiéquilibre. D'après le théorème de Liapounov sur la stabilité d'un mouvement perturbé (Rouche *et al* 1977), de même que suivant le théorème de Pojaritski sur la construction de la fonction positivement définie, le rôle de celle-ci peut jouer (en vertu de l'équation (12)), la fluctuation quadratique de l'énergie

$$D(t)=\frac{1}{2}\int_\Omega\left(\int_X(\mathscr{H}(p,q,X)-\rho e(X,t))\,\mathrm{d}X\right)^2 f_\varepsilon(p,q,t)\,\mathrm{d}\Omega. \tag{13}$$

Elle possède la propriété de régulièrement bornée, ce qui donnera la stabilité aussi régulière pour tous X et t. La procédure de la différentiation méne à l'égalité

$$\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t}=\dot{D}=\frac{1}{2}\int_\Omega\left(\frac{\partial}{\partial t}(H-E)^2 f_\varepsilon(p,q,t)+(H-E)^2\frac{\partial f_\varepsilon}{\partial t}\right)\mathrm{d}\Omega$$

ou

$$\dot{D}=-\int_\Omega H\frac{\partial E}{\partial t}f_\varepsilon(p,q,t)\,\mathrm{d}\Omega+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}E^2(t)+\frac{1}{2}\int_\Omega(H-E)^2[-\mathrm{i}\mathscr{L}f_\varepsilon(p,q,t)$$
$$-\varepsilon(f_\varepsilon(p,q,t)-f_q(p,q))]\,\mathrm{d}\Omega. \tag{14}$$

L'intégrale

$$-\frac{1}{2}\int_\Omega(H-E)^2\mathrm{i}\mathscr{L}f_\varepsilon(p,q,t)\,\mathrm{d}\Omega$$

en vertu des propriétés des crochéts de Poisson, est égale à zéro. La grandeur

$$-\frac{\varepsilon}{2}\int_\Omega(H-E)^2(f_\varepsilon-f_q)\,\mathrm{d}\Omega$$

conformément au résultat établi dans la § 2, a l'ordre infinitésimal. Avec haute précision (ordre ε) on a

$$\dot{D}=-\tfrac{1}{2}\varepsilon D$$

ou

$$\dot{D}=-\int_\Omega H\frac{\partial E}{\partial t}f(p,q,t)\,\mathrm{d}\Omega+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}E^2(t)\leqslant 0 \tag{15}$$

comme la condition importante du stade hydrodynamique. Cette exigence est en pleine concordance avec le théorème sur la stabilité des solutions des équations différentielles stochastiques (Guiham et Skorohod 1968) selon lequel à la stabilité régulière assimptotique des celles-ci les moments de deuxième ordre sont invariables par rapport aux petites influences accidentelles d'éspèce de Wiener.

On représentéra ensuite l'expression (15) par l'intermédiaire des densités

$$\dot{D}(t) = -\int_{\Omega}\left(\int_X \mathscr{H}(p,q,X)\,\mathrm{d}X\frac{\partial}{\partial t}\int_X \rho e(X,t)\,\mathrm{d}X\right)f(p,q,t)\,\mathrm{d}\Omega + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_X \rho e(X,t)\,\mathrm{d}X\right)^2. \tag{16}$$

On fera récours à l'inégalité de Cauchy-Schwartz. Le deuxième terme peut être reécrit sous forme

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_X \rho e(X,t)\,\mathrm{d}X\right)^2 = \frac{\partial}{\partial t}\int_X V\rho^2 e^2(X,t)\,\mathrm{d}X + \frac{\partial}{\partial t}\int_X U(X,t)\,\mathrm{d}X. \tag{17}$$

L'expression dans la premiére intégrale, d'après l'évoluation bien connue, est

$$\int_X V\mathscr{H}(p,q,X)\min_X\frac{\partial}{\partial t}\rho e(X,t)\,\mathrm{d}X < \int_X \mathscr{H}(p,q,X)\,\mathrm{d}X\int_X\frac{\partial}{\partial t}\rho e(X,t)\,\mathrm{d}X < \int_X V\mathscr{H}(p,q,X)\max_X\frac{\partial}{\partial t}\rho e(X,t)\,\mathrm{d}X.$$

Elle peut être présentée sous la forme

$$\int_X \mathscr{H}(p,q,X)\,\mathrm{d}X\int_X\frac{\partial}{\partial t}\rho e\,\mathrm{d}X = \int_X V\mathscr{H}(p,q,X)\frac{\partial}{\partial t}\rho e(X,t)\,\mathrm{d}X + \int_X Y(p,q,X,t)\,\mathrm{d}X \tag{18}$$

où $Y(p,q,X,t)$ est une fonction indéterminée.

Après la substitution (17) et (18) dans (16), on a

$$\dot{D}(t) = -\int_{\Omega}\left(\int_X V\mathscr{H}(p,q,X)\frac{\partial}{\partial t}\rho e(X,t)\,\mathrm{d}X\right)f(p,q,t)\,\mathrm{d}\Omega \times\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int_X V\rho^2 e^2(X,t)\,\mathrm{d}X + Q'(t)$$

ou

$$\dot{D}(t) = -\int_X V\frac{\partial\rho e}{\partial t}\rho e\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_X V\frac{\partial}{\partial t}\rho^2 e^2\,\mathrm{d}X + Q'(t) \tag{19}$$

avec une fonction $Q'(t)$ pour le moment inconnue. Application de l'équation du bilan

$$\frac{\partial\rho e(X,t)}{\partial t} + \nabla\cdot j(X,t) = 0$$

après avoir fait des transformations nécessaires en (19), entraine l'égalité

$$\dot{D}(t) = \int_X V\left(\rho e\frac{\partial\rho e}{\partial t} - j\nabla(\rho e)\right)\mathrm{d}X + \int_S Vj_n\rho e\,\mathrm{d}s + Q'(t). \tag{19'}$$

Introduisant la loi de Fourier, on obtient

$$\frac{1}{\rho C_v V}\dot{D}(t)=\int_X\left(\rho C_v T\frac{\partial T}{\partial t}+\lambda(\nabla T)^2\right)\mathrm{d}X-\int_s \lambda T\nabla_n T\,\mathrm{d}S+Q(t) \tag{20}$$

où λ est le coéfficient de conductibilité thermique.

Comme la fonction $T(X,t)$ satisfait à l'équation de Fourier (le stade hydrodynamique) et aux conditions limites réspectives, tandis que $\dot{D}(t)$ est égal à zéro, donc $Q=0$. Au cas contraire $\dot{D}(t)\neq 0$.

Après l'intégration, on aura l'expression d'accroissement de fluctuation en un intervalle de temps arbitraire mais suffisement grand:

$$\Delta D^1=\int_t\int_X\left(\rho C_v T\frac{\partial T}{\partial t}+\lambda(\nabla T)^2\right)\mathrm{d}X\,\mathrm{d}t-\int_t\int_S \lambda T\nabla_n T\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t \tag{21}$$

avec

$$D^1(t)=\frac{1}{\rho C_v V}D(t)\qquad t=[t_0,t_1].$$

Maintenant on peut faire la soustraction de l'accroissement ΔD^1 le terme $\int_t\int_X \frac{1}{2}\lambda(\nabla T)^2\,\mathrm{d}X\,\mathrm{d}t$ parce que l'un et l'autre sont des nombres. On obtient alors une expression correspondant à l'intégrale de fluctuation (préperturbée)

$$\begin{aligned}J(T)&=\Delta D^1-\int_t\int_X \tfrac{1}{2}\lambda(\nabla T)^2\,\mathrm{d}X\,\mathrm{d}t\\&=\int_t\int_X\left(\rho C_v T\frac{\partial T}{\partial t}+\tfrac{1}{2}\lambda(\nabla T)^2\right)\mathrm{d}X\,\mathrm{d}t-\int_t\int_S \lambda T\nabla_n T\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t.\end{aligned} \tag{22}$$

Donc, les intégrales (21) et (22) peuvent être appeleés fonctionnelles de fluctuation, lesquelles sont definies à une multitude $\{T(X,t)\}$ contenant aussi $T^0(X,t)$. Avec cela

$$\Delta D^1(T^0)=0 \tag{23}$$

$$J(T^0)=-\int_t\int_X \tfrac{1}{2}\lambda(\nabla T^0)^2\,\mathrm{d}X\,\mathrm{d}t. \tag{24}$$

4. Sur l'ordre infinitésimal des parties droites dans les deux équations de bilan

L'accroissement de la fluctuation d'énergie en un temps t, en vertu de la formule (19′), est égal à

$$\Delta D=\int_t\int_X V\rho C_v T^2\left(\frac{\partial\rho e}{T\,\partial t}-\frac{j\nabla T}{T^2}\right)\mathrm{d}X\,\mathrm{d}t+\int_t\int_S V\rho C_v T^2\frac{j_n}{T}\,\mathrm{d}S\,\mathrm{d}t. \tag{25}$$

En faisant les transformations exigées, on reécrit (25) sous la forme

$$\Delta D=\int_t\int_X \rho C_v V T^2\left[\rho\frac{\partial s}{\partial t}+\frac{j\nabla T}{T^2}+\nabla\cdot\left(\frac{j}{T}\right)\right]\mathrm{d}X\,\mathrm{d}t. \tag{25'}$$

En désignant

$$\boldsymbol{J}_s=\boldsymbol{j}/T\qquad \boldsymbol{X}=\nabla(1/T)\qquad \sigma=\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{X}$$

on aura

$$\Delta D = \int_t \int_X \rho C_v V T^2 \left(\rho \frac{\partial s}{\partial t} - \sigma + \nabla \cdot \boldsymbol{J}_s \right) \mathrm{d}X \, \mathrm{d}t \leq \int_t V \max_X \left| \rho \tau \frac{\partial s}{\partial t} - \sigma \right.$$

$$\left. + \nabla \cdot \boldsymbol{J}_s \right| \mathrm{d}t \int_X \rho C_v \max_t T^2(X, t) \, \mathrm{d}X = \max_{X,t} D(t). \tag{26}$$

Mais ètant donné

$$D(t) = \int_X K_B \rho C_v T^2(X, t) \, \mathrm{d}X$$

il en résulte donc

$$\int_t V \max_X \left| \rho \frac{\partial s}{\partial t} - \sigma + \nabla \cdot \boldsymbol{J}_s \right| \mathrm{d}t = K_B \tag{27}$$

d'où

$$\int_t \max_X \left| \rho \frac{\partial s}{\partial t} - \sigma + \nabla \cdot \boldsymbol{J}_s \right| \mathrm{d}t = K_B / V. \tag{28}$$

Par conséquent, on a

$$\int_t \int_X \left(\rho \frac{\partial s}{\partial t} - \sigma + \nabla \cdot \boldsymbol{J}_s \right) \mathrm{d}X \, \mathrm{d}t \leq K_B. \tag{29}$$

L'expression à l'intégrale est l'équation du bilan de l'entropie sous forme locale.

De la formule (19′), on peut en obtenir une autre, contenant à l'intégrale l'équation du bilan de l'énergie interne. Pour ce but on n'y a qu'à employer le théorème de Gauss

$$\Delta D = \int_t \int_X \left[\rho C_v V \left(T \frac{\partial \rho e}{\partial t} - j \nabla T + \nabla \cdot (Tj) \right) \right] \mathrm{d}X \, \mathrm{d}t = \int_t \int_X \rho C_v V T \left(\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot j \right)$$

$$\mathrm{d}X \, \mathrm{d}t \leq \int_t V \max_X \left| \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot j \right| \mathrm{d}t \int_X \rho C_v \max_t T(X, t) \, \mathrm{d}t$$

$$= \max_{X,t} D. \tag{30}$$

D'où on observe

$$\int_t V \max_X \left| \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot j \right| \mathrm{d}t = K_B \max_{X,t} T \tag{31}$$

et la norme d'opérateur

$$L = \rho C_v \, \partial / \partial t - \lambda \Delta \tag{32}$$

est égale respectivement

$$\|L\| = \int_t \max_X \left| \rho C_v \frac{\partial}{\partial t} - \lambda \Delta \right| \mathrm{d}t = K_B / V \qquad \|T\| = 1 \tag{33}$$

et enfin, on a à écrire

$$\int_t \int_X \left(\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot j \right) \mathrm{d}X \, \mathrm{d}t \leq K_B \max_{X,t} T. \tag{34}$$

On peut rémarquer de ces évaluations que pour les systèmes de petites volumes le défaut engendré aux équations de bilan (28) et (31) a une tendence à s'agrandir et leur violation sera considérable. Cela est bien accordé avec la condition de l'altération du stade hydrodynamique au sens du limite thermodynamique ($\varepsilon \to +0$, $V \to \infty$).

Il est facil de noter que d'après les estimations (25) et (26) sous l'expression de fluctuation ΔD^1 c'est une température rélative $\vartheta = T - T_0$ qui peut y figurer, ce qui est déterminé par la structure ΔD^1 et, à la fois, par l'ordre de sa valeur.

En partant de la fonctionnelle de fluctuation (21) ou (22) il est aisé à passer vers la fonctionnelle déjà connue et perturbée par $T(X, t)$, à savoir:

$$J(T, T^0) = \int_t \int_X \left(\rho^0 C_v^0 T \frac{\partial T^0}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\lambda^0 (\nabla T)^2 - W^0(X, t) T\right) \mathrm{d}X \, \mathrm{d}t - \int_t \int_S \lambda T \nabla_n T^0 \, \mathrm{d}S \, \mathrm{d}t \tag{35}$$

le terme $W^0 T$ étant rélié à l'introduction au Hamiltonien (4') du membre qui dépend du temps et des coordonnées

$$\tilde{\mathcal{H}}(p, q, X, t) = \mathcal{H}(p, q, X) + \mathcal{H}^1(X, t)$$

ce qui donnéra le terme mentionné $W^0 T$ après le calcul de la valeur moyenne statistique. Appélerons désormais (35) fonctionnelle de fluctuation perturbée. La présentation de celle-ci sous cette forme introduit, d'une façon formelle, la méthode directe des variations. La fonction $T^0(X, t)$ est une vraie moyenne dont la fluctuation est (normale) thermique à la grandeur $\langle \Delta T^2 \rangle \sim K_B T^{02}/C_v$. Tandis que la température $T(X, t)$ est celle qui subit des fluctuations auprès de T^0 avec des modes anomales dont l'ordre peut être plus grand

$$\langle \Delta T^2 \rangle \gg K_B T^2 / C_v.$$

Dans un contexte de résolution du problème de la conduction thermique à l'aide de la méthode variationnelle, la fonction fluctuante de température a des anomales à cause d'une approximation *à priori*.

Il est facil à démontrer que la fonctionnelle de fluctuation perturbée $J(T, T^0)$ est partout convexe (en haut) pour les fonctions $T(X, t)$ qui sont construites comme une série de Fourier. La valeur maximale $J(T, T^0)$ est négative:

$$J(T^0, T^0) = -\int_t \int_X \tfrac{1}{2}\lambda (\nabla T^0)^2 \, \mathrm{d}X \, \mathrm{d}t. \tag{36}$$

Comme la fonction $T = T^0$ correspond à la condition d'extrémum, la fonctionnelle $J(T, T^0)$ atteint le maximum global. Ceci prouve l'utilisation de la fonctionnelle perturbée et donc la méthode directe des variations. Au moyen d'une transformation de celle-ci, elle peut être faite partout positive, convexe, avec la valeur minimale pour $T = T^0$:

$$J'(T, T^0) = |J(T, T^0)|. \tag{36'}$$

5. Sur le rapport entre la fonctionnelle de fluctuation perturbée et le potentiel local de Glansdorff et Prigogine

Ce n'est pas difficile de s'assurer qu'à l'aide des transformations identiques c'est la formulation variationnelle appélée par Glansdorff et Prigogine (1971) comme la méthode du potentiel local qui peut être déduite de la fonctionnelle de fluctuation perturbée. On va inscrire la fonctionnelle (35) sous la forme

$$J(T, T^0) = \int_t \int_X \left(\rho^0 C_v^0 T \frac{\partial T^0}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\lambda^0(T)(\nabla T)^2\right) \mathrm{d}X\, \mathrm{d}t - \int_t \int_S \lambda^0(T) T \nabla_n T^0\, \mathrm{d}S\, \mathrm{d}t.$$

On la modifièra puis à la forme suivante:

$$J(T, T^0) = \int_t \int_X T^2 \left(\frac{\rho^0 C_v^0}{T} \frac{\partial T^0}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\lambda^0(T) T^2 (\nabla T)^2}{T^4}\right) \mathrm{d}X\, \mathrm{d}t$$
$$- \int_t \int_S T \left(\frac{\lambda^0(T) T^{02} \nabla_n T^0}{T^{02}}\right) \mathrm{d}s\, \mathrm{d}t.$$

Utilisérons maintenant le développement $\lambda^0(T)T^2$ en série à condition que l'on garde le premier terme (Glansdorff et Prigogine 1971)

$$\lambda^0(T) T^2 = \lambda^0 T^{02} + \delta(\lambda^0 T^2) \qquad \delta(\lambda^0 T^2) \to 0$$

et, ayant appliqué le théorème de la moyenne, on a

$$J'(T, T^0) = \int_t \int_X \left(\frac{\rho^0 C_v^0}{T} \frac{\partial T^0}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\lambda^0 T^{02} (\nabla T^{-1})^2\right) \mathrm{d}X\, \mathrm{d}t$$
$$+ \beta \int_t \int_S T \lambda^0 T^{02} \nabla_n (T^{0-1})\, \mathrm{d}S\, \mathrm{d}t \qquad (37)$$

où

$$J'(T, T^0) = \beta J(T, T^0) \qquad \beta = 1/\bar{T}^2.$$

L'expression à la première intégrale (37) est bien semblable à celle qui est appellée dans l'ouvrage (Glansdorff et Prigogine 1971) comme Lagrangien. Mais le signe auprès du terme $\partial T^0/\partial t$ dans (37) est positif tandis qu'il est négatif dévant la même expression dans le potentiel local (voir 10.23 dans le bouquin cité):

$$\mathscr{L}(T, T^0) = -\rho^0 C_v^0 \frac{1}{T} \frac{\partial T^0}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\lambda^0 T^{02} (\nabla T^{-1})^2.$$

Le potentiel local même y est présenté comme suit

$$\Phi(T, T^0) = \int_V \mathscr{L}(T, T^0)\, \mathrm{d}V.$$

Par ailleur, on peut rémarquer que l'intégrale superficielle est éliminée sans motivations suffisantes. La valeur négative de ce terme dans le potentiel local de Prigogine et Glansdorff n'est pas expliquée au point de vu physique. Pourtant, à condition que l'on construise la variation du potentiel local comme une derivée faible au sens de Gateau, après avoir appliqué le théorème de Green, on peut obtenir l'équation de Fourier.

La variation du Lagrangien se présente (Glansdorff et Prigogine 1971) sous la forme

$$\left(\frac{\delta \mathscr{L}}{\delta T^{-1}}\right)_{T^0} = \nabla(\lambda^0 \nabla T^0) - \rho^0 C_v^0 \frac{\partial T^0}{\partial t} \qquad T = T^0$$

et il n'y a aucune indication à son origine.

D'autre part il est nécessaire de souligner particulièrement que la procédure de réduction de la fonctionnelle de fluctuation perturbée à la forme du potentiel local, contraint le changement du signe à l'invers auprès du terme $\partial T^0/\partial t$ afin d'obtenir l'équation de Fourier qui résulte de la variation de T^{-1} (mais pas déjà de T).

Par conséquent, on peut constater que le potentiel local de Prigogine et Glansdorff pour les problèmes non-stationnaires de la conduction thermique, est formulé avec des points vagues en ce qui concerne le fondament de deux aspects importants: la structure du Lagrangien et la procédé variationnelle, a toutefois l'origine de fluctuation:

(i) d'une part c'est la valeur minimale (zéro) du produit en temps de la fluctuation de l'énergie le long de vraie solution à chaque instant;

(ii) d'autre part c'est la réalisation sous forme locale et intégrale des équations du bilan de l'énergie interne et de l'entropie au stade hydrodynamique;

(iii) enfin, c'est l'accroissement minimal (zéro) de fluctuation de l'énergie au stade hydrodynamique des systèmes durant tout interval du temps.

L'interprétation physique et les propriétés de la fonctionnelle de fluctuation permettent de considérer à nouveau de certaines méthodes variationnelles qui furent pratiquées pour la solution des problèmes de la conduction thermique.

Ainsi, la méthode de Galerkine, laquelle traitère-t-on (Glansdorff et Prigogine 1971) comme celle qui n'a pas le sens physique, est une procédé d'aborder des problèmes en question développée dans cet article. La grandeur infinitésimale de la fluctuation de l'énergie est garantie au stade hydrodynamique, où les fluctuations anomales, causées par une solution approximative, doivent être réduites aux normales (thermiques) avec la valeur moyenne $\langle(\tilde{T}-T^0)^2\rangle \sim K_B T^{02}/C_v$ tandis qu'une approximation $\tilde{T}$ tend à la distribution la plus probable par rapport au celles-ci. Lorsque l'on exige que des fonctions d'essaie soient orthogonales au défaut de l'équation de Fourier

$$\int_X \tilde{T} L(\tilde{T})\, \mathrm{d}X = 0$$

cela correspond à l'expression

$$\int_X \left(\rho C_v \tilde{T}\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \lambda(\nabla \tilde{T})^2\right) \mathrm{d}X - \int_S \lambda \tilde{T} \nabla_n \tilde{T}\, \mathrm{d}S = 0$$

ce qui coïncide avec la démande du minimum du produit de la fluctuation quadratique moyenne à chaque instant du temps le long de la solution déterministe $\tilde{T} = T^0$.

La condition intégrale d'orthogonalité

$$\int_t \int_X \tilde{T} L(\tilde{T})\, \mathrm{d}X\, \mathrm{d}t = 0$$

n'est que la fonctionnelle déterminée ci-dessus qui représente l'accroissement infinitésimal de la fluctuation de l'énergie au stade hydrodynamique.

6. L'intégrale de parcours au sens d'Onsager et Machlup et l'interprétation variationnelle de fluctuation de la conduction thermique

Comme Onsager et Machlup (1953) démontrèrent, la densité de probabilité de la transition d'un système thermodynamique d'un état de non-équilibre à un autre est égale à

$$f(\Gamma_1, t_1/\Gamma_2, t_2) \sim \exp\left(-\frac{1}{2K_B}\int_{t_1}^{t_2}[\phi(\dot{\alpha}, \dot{\alpha}) + \psi(\xi, \xi) - \dot{S}]\,dt\right) \tag{38}$$

où

$$\dot{S} = \int_X \rho\frac{ds}{dt}dX = \int_X \sigma\,dX - \int_X \nabla\cdot J_s\,dX$$

avec le développement sur la base de l'équation du bilan de l'entropie sur la trajectoire déterministe.

Etant donné

$$\phi = \tfrac{1}{2}\sum_{ij} R_{ij}\dot{\alpha}_i\dot{\alpha}_j \qquad \psi = \tfrac{1}{2}\sum_{i,j} L_{ij}X_iX_j$$

donc à l'approximation des lois linéaires, on peut représenter la somme des potentiels de dispersion sous forme

$$\tilde{\dot{S}} = \phi + \psi = \dot{S} + \delta\dot{S} \tag{39}$$

où $\delta\dot{S}$ est un excès du produit de l'entropie dans le système le long du parcours avec l'influence de petites fluctuations accidentelles comme un processus de Markov.

En substituant $\delta\dot{S}$ sous forme de partie droite perturbée à deux composantes, on a

$$\delta\dot{S} = \int_X (\tilde{\sigma} - \nabla\cdot\tilde{J}_s)\,dX \tag{40}$$

ensuite, après avoir replacé (39) et (40) en la formule (38), on obtiendra

$$f(\Gamma_1, t_1|\Gamma_2, t_2) \sim \exp\left[-\frac{1}{2K_B}\int_{t_1}^{t_2}\int_X\left(\rho\frac{ds}{dt} - \tilde{\sigma} + \nabla\cdot\tilde{J}_s\right)dX\,dt\right] \tag{41}$$

où les termes résponsables à la source de l'entropie et au flux de celle-ci doivent être considerés comme perturbés. C'est dû soit aux fluctuations immanentes soit aux perturbations extérieures (déterministes).

Le principe de OM est maintenant exprimé comme l'intégrale de parcours contenant à l'incrément l'équation du bilan de l'entropie et, à la fois, l'équation cinétique stochastique avec le bruit blanc (ou coloré) à condition de son petit intensité. Si l'équation du bilan est réalisée (le stade hydrodynamique), la probabilité à cette transition $f(\Gamma_1, t_1|\Gamma_2, t_2) \to 1$. Elle sera aussi écrasante au cas de la fontionnelle de OM géneralisée par Lavenda et Santamato (1982). D'ailleurs, à condition que la partie droite de l'équation perturbée

$$\rho\,ds/dt = \tilde{\sigma} - \nabla\cdot\tilde{J}_s$$

satisfasse aux restrictions de Lavenda et Santamato (1982), (par exemple $K\downarrow 0$), il suffit, peut être, de se borner à l'incrément de norme attenuée:

$$f(\Gamma_1, t_1|\Gamma_2, t_2) \sim \exp\left(-\frac{1}{2K_B}\int_t\int_X\left|\rho\frac{ds}{dt} - \tilde{\sigma} + \nabla\cdot\tilde{J}_s\right|dX\,dt\right). \tag{42}$$

Tenant compte des transformations faites plus haut à la fonctionnelle de fluctuation perturbée (voir la § 4), on peut écrire (42) sous la forme

$$f(\Gamma_1, t_1 | \Gamma_2, t_2) \sim \exp\left(-\frac{1}{2K_B \max_{X,t} T^2}\left|\int_t \int_X \left(\rho C_v T \frac{\partial T}{\partial t} + \lambda(\nabla T)^2\right) dX\, dt - \int_t \int_S \lambda T \nabla_n T\, dS\, dt\right|\right). \tag{43}$$

C'est ainsi que la fonctionnelle de fluctuation est, dans ce context, une intégrale de parcours pour un système thermodynamique de non-équilibre en évolution à la conduction thermique.

L'expression à l'intégrale est alors le Lagrangien

$$L = \dot{D}^1 = \int_X \left(\rho C_v T \frac{\partial T}{\partial t} + \lambda(\nabla T)^2\right) dX - \int_S \lambda T \nabla_n T\, dS \tag{44}$$

et le multiplicateur $K_B \max_{X,t} T^2$ va jouer le rôle d'une mesure du produit de fluctuation $\int_t L\, dt$ au cours du processus dissipatif. Le produit de fluctuation est minimal aux petits bruits thermiques (normales) pour le stade hydrodynamique; il diffère essentiellement de zéro quand les déviations, dûes aux diverses causes, ne se soumettent pas aux circonstance du processus accidental d'espèce du bruit blanc.

Lorsque l'on utilise la fonctionnelle de fluctuation perturbée, la formule de OM peut étre présentée comme suit

$$f(\Gamma_1, t_1 | \Gamma_2, t_1) \sim Q \exp\left[-\frac{1}{2K_B \max_{X,t} T^2}\left|\int_t \int_X \times\left(\rho C_v T \frac{\partial T^0}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\lambda(\nabla T)^2\right) dX\, dt - \int_t \int_S \lambda T \nabla_n T^0\, dS\, dt\right|\right] \tag{45}$$

où

$$Q = \exp\left(-\frac{1}{2K_B \max T^2}\int_t \int_X \tfrac{1}{2}\lambda(\nabla T^0)^2\, dX\, dt\right)$$

est le facteur de normalisation.

La densité de probabilité a un maximum aigu pour $T = T^0$. En vertu du fait que la fonctionnelle de fluctuation perturbée est convexe sur l'enveloppe linéaire des fonctions orthogonales, la probabilité perturbée sera aussi une fonction convexe. A la fonction $T = T^0$ la probabilité est constante et maximale, c'est-à-dire $\delta f(T, T^0) = 0$ et la méthode variationelle est valable.

References

Glansdorff P et Prigogine I 1971 *Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations* (New York: Wiley-Interscience)

Guihman I I et Skorohod A V 1968 *Stochastic Differential Equations* (Kiev: Naukova Dumka) p 314

Lavenda B H 1979 *Found. Phys.* **9** 405-20

—— 1984 *J. Phys. A: Math. Gen.* **17** 3353-62

Lavenda B H et Santamato E 1981 *J. Math. Phys.* **22** 2926-33

—— 1982 *J. Stat. Phys.* **29** 345-61

Minine O V 1974 *J. Eng. Phys. USSR* **26** 1105-11

—— 1984 *J. Eng. Phys. USSR* **47** 489-90

Onsager L et Machlup S 1953 *Phys. Rev.* **91** 1505-12

Rosen P 1953 *J. Chem. Phys.* **21** 1220–1
Rouche N, Habets P et Laloy M 1977 *Stability Theory by Liapunov's Direct Method* (New York: Springer)
Schechter R 1967 *The Variationial Method in Engineering* (New York: McGraw-Hill) ch 7
Ventzel A D et Freindlin M I 1972 *Theor. Prob. Appl.* **17** 269
—— 1984 *Random Perturbations of Dynamical Systems* (Berlin: Springer) ch 4
Zubarev D N 1974 *Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics* (New York: Consultants Bureau) ch 4