

РОЗДІЛ 7. ТЕРМОДИНАМІЧНІ ТА СИНЕРГЕТИЧНІ ПРИНЦИПИ БІОФІЗИКИ СКЛАДНИХ СИСТЕМ

“Віки іспробувала іти віднайти форми медичного зв’язаного механізму у картині природи, що здавалася хаотичною”.

В.І. Вернадський

Зародження живої матерії в процесі еволюції довколишнього світу, виникнення впорядкованих структур в неживій природі та в складних біологічних системах – явища, які продовжують залишатися одними з найдивовижніших для розуміння в рамках матеріалістичної науки.

Класичні питання сучасного природознавства і науки в цілому можуть бути сформульовані у вигляді: чому, з одного боку, має місце встановлення рівноваги (теплової, механічної тощо), а з другого боку, спостерігається ускладнення об’єктів в процесі біологічної еволюції, тобто працює принцип Дарвіна? Чому знання точних фізичних і хімічних законів, таких як закони Ньютона, закон Кулона та інших, не дозволяє часто описати найпростіші властивості живих систем? Чи існує зв’язок між основними законами, за допомогою яких можна дослідити природні та суспільні явища?

В силу значної диференціації науки аж до самого останнього часу відповіді на ці питання відносилися скоріше до компетенції філософії. Кожний розділ природознавства та суспільних наук використовував і використовує свої методи дослідження і підходи, які, зазвичай, не мають спільних точок зіткнення. Разом з тим існують універсальні принципи природи і відповідні методи дослідження, які можна застосувати для будь-яких систем. Це, перш за все, методи термодинаміки та синергетики, до вивчення основ яких у застосуванні до складних медико-біологічних систем ми переходимо в цьому розділі.

7.1. ВІДКРИТІ БІОЛОГІЧНІ СИСТЕМИ, ЗАКОНИ ТЕРМОДИНАМІКИ І ТЕРМОДИНАМІЧНІ ПОТЕНЦІАЛИ

Найважливішою властивістю живих організмів є здатність перетворювати і запасати енергію в різних формах. Саме цим визначається значення термодинамічного підходу для вивчення спільних закономірностей перетворення енергії, які є універсальними і загальними для явищ як живої, так і неживої природи. Інша специфіка біологічних об'єктів полягає в тому, що вони не є ізольованими від зовнішнього середовища. Через контакти з зовнішнім середовищем живі організми обмінюються з оточенням речовиною, енергією та інформацією, тобто є відкритими системами.

Дослідники, вивчаючи складні процеси в живих системах, створюють певні моделі цих процесів шляхом аналізу медико-біологічних даних. При цьому, зокрема, використовується феноменологічний, або термодинамічний, підхід. Закони термодинаміки відкритих систем представляють саме ту універсальну основу, на якій повинні будуватися і вдосконалюватися подібні моделі. Нагадаємо основні закони термодинаміки.

Перший закон (перше начало) термодинаміки: теплота, що підводиться до системи, йде на зміну її внутрішньої енергії та на роботу, яку здійснює система над зовнішніми тілами.

Математичний запис 1-го начала термодинаміки виглядає так:

$$\delta Q = dU + \delta A, \quad (7.1)$$

де враховано, що внутрішня енергія U є одним з відповідних термодинамічних змінних, тоді як теплота Q і робота A не є.

Математична основа для 1-го начала термодинаміки була створена перш за все дослідженнями англійського фізика Джоуля, який в 1840–1845 р.р. показав, що потрібна одна і та ж механічна робота для нагрівання певної кількості води.

Цікаво відзначити той значний внесок, який привнесли медики у встановлення цього одного з найважливіших законів природи. Так, вважається, що честь відкриття 1-го закону (закон збереження енергії) належить разом з фізиками Джоулем і Гельмгольцем ще й лікарю Майєру.

Другий закон (друге начало) термодинаміки: в ізольованій системі неможливий перехід тепла від менш нагрітого тіла до більш нагрітого.

Це формулювання 2-го закону термодинаміки належить німецькому фізику Клаузіусу, який в 1865 р. ввів в науку фундаментальне поняття ентропії. *Ентропія S – це така функція стану, що характеризує напрямок самодовільного процесу в ізольованій системі.*

Ентропія ізольованої системи зростає з наближенням до рівноважного стану, ентропія досягає свого максимального значення.

Важлива роль, яка відводиться в термодинаміці ентропії, пов'язана принаймні з двома причинами:

1) зміна ентропії δS характеризує теплоту δQ , одержану або віддану системою при взаємодії з оточенням: $\delta S \geq \delta Q/T$ (як знак “>” для незворотних, реальних процесів в природі);

2) ентропія характеризує ступінь впорядкованості (або невідповідності) системи. Згідно з принципом Больцмана, ентропія пов'язана з термодинамічною ймовірністю W системи за допомогою такого фундаментального співвідношення:

$$S = k \ln W, \quad (7.2)$$

де k – стала Больцмана. Не вводячи в теоретичні розрахунки, можна стверджувати, що в термодинаміці ймовірність W дорівнює числу мікростанів, за допомогою яких реалізується даний емпіричний стан системи.

Термодинамічні потенціали. Термодинамічний стан будь-якої системи повністю визначається її **термодинамічними потенціалами**.

Для кожного певного набору незалежних термодинамічних параметрів певний термодинамічний потенціал, за допомогою якого можуть бути обчислені будь-які макроскопічні характеристики системи. Наведемо визначення і основні властивості чотирьох термодинамічних потенціалів – внутрішньої енергії, ентальпії, вільної енергії Гіббса і вільної енергії Гельмгольца.

Внутрішня енергія U . Перші два закони (начала) термодинаміки дають спільно такий вираз для зміни внутрішньої енергії відкритої системи

$$dU = TdS - PdV + \mu dN. \quad (7.3)$$

З цього співвідношення випливає, що внутрішня енергія є природним термодинамічним потенціалом при обранні в якості набору незалежних змінних ентропії S , об'єму V і кількості часток N .

Диференціювання внутрішньої енергії дає такі параметри, як температура T , тиск P і хімічний потенціал μ , що є спряженими в термодинамічному сенсі обраному набору незалежних змінних.

$$T = U'_{S,N}, \quad P = -U'_{V,N}, \quad \mu = U'_{S,V}.$$

Очевидно, що зміна внутрішньої енергії при адиабатичному процесі ($S = const$) визначається роботою діючих на систему зовнішніх сил, тоді як в умовах постійності об'єму V визначається теплом, що передається системі. ця зміна

Ентальпія (тепловміст) H . Ентальпія пов'язана з внутрішньою енергією наступним співвідношенням:

$$H = U + PV,$$

а її повний диференціал рівний

$$dH = TdS + VdP + \mu dN. \quad (7.4)$$

З цього виразу стає зрозуміло, що ентальпія, як термодинамічний потенціал, повинна бути використана для набору незалежних змінних S , P , N . Для ізобаричного процесу зміна ентальпії визначається тим теплом, що поглинає (віддає) система. Диференціювання ентальпії дає параметри:

$$T = H'_{P,N}, \quad V = H'_{S,N}, \quad \mu = H'_{S,P}.$$

Вільна енергія Гіббса G .

зана такими

співвідношеннями з внутрішньою енергією U , ентропією S та тиском P і кількістю речовини N :

$$G = H - TS = U + PV - TS,$$

а її повний диференціал

$$dG = -SdT + VdP + \mu dN. \quad (7.5)$$

Видно, що вільній енергії Гіббса відповідає набір незалежних змінних T, P, N . Спряжені в термодинамічному значенні параметри виходять як такі похідні від вільної енергії Гіббса:

$$S = -G'_{T,N}, \quad V = G'_{P,N}, \quad \mu = G'_{T,P}.$$

Останнє співвідношення показує, що хімічний потенціал μ є вільна енергія Гіббса в розрахунку на один моль при сталих температурі та тиску. Зауважимо у зв'язку з проведеним в попередньому розділі 6 розглядом мембранних електричних потенціалів клітин, що в присутності електричного поля та із врахуванням розчиненої речовини хімічний потенціал (в цьому випадку його називають електрохімічним потенціалом) дорівнює

$$\bar{\mu} = \mu_0 + kT \ln C + ze\phi \quad (\text{в розрахунку на одну молекулу}),$$

$$\bar{\mu} = \mu_0 + RT \ln C + zF\phi \quad (\text{в розрахунку на один моль}),$$

де z – валентність, e – елементарний заряд, F – число Фарадея, μ_0 – хімічний потенціал речовини (наприклад, певного іона), ϕ – потенціал електричного поля.

Вільна енергія Гельмгольца F . Для цього термодинамічного потенціалу маємо

$$F = U - TS = H - PV - TS.$$

Відповідно

$$dF = -SdT + PdV + \mu dN. \quad (7.6)$$

Звідси випливає, що для вільної енергії Гельмгольца природним набором незалежних змінних є T, V, N .

Необхідно відзначити також, що в природних умовах значно легше реалізувати вимогу постійності температури T , ніж ентропії S . Тому два останніх термодинамічних потенціали – вільної енергії Гіббса G та Гельмгольца F –

для опису медико-біологічних систем, особливо тих, що перебувають у ізобарні або ізотермічно-ізохорні умови є найбільш природними. З наближенням до положення рівноваги вільні енергії Гіббса G та Гельмгольца F набувають своїх мінімальних значень.

7.1. ОСНОВИ ТЕРМОДИНАМІКИ НЕЗВОРОТНИХ ПРОЦЕСІВ

Дослідження біофізичних процесів, що відбуваються в реальних системах, методами рівноважної термодинаміки часто є неадекватним наближенням. У загальному випадку фізичні і біофізичні об'єкти не знаходяться в положенні рівноваги. В них з кінцевою швидкістю протікають незворотні процеси, які прагнуть повернути систему в стан рівноваги. Добре відомими прикладами можуть бути процеси теплопровідності з характерним часом встановлення рівноваги або, як його ще зовуть, часом релаксації $\tau \approx L^2/\chi$ (L – розмір системи, $\chi = \lambda/\rho C_p$ – лінійний коефіцієнт температуропровідності, λ – коефіцієнт теплопровідності, ρ – густина, C_p – теплоємність); процеси дифузії з часом релаксації $\tau \approx L^2/D$ (D – коефіцієнт дифузії); процеси внутрішнього тертя з часом релаксації $\tau \approx L^2/\nu$ ($\nu = \eta/\rho$ – кінематична в'язкість, η – динамічна в'язкість) та інші.

Термодинаміка незворотних процесів, що та і феноменологічною основою для вивчення незворотних процесів у різних системах, в тому числі і біофізичних, спирається на наступні положення та поняття: лінійний закон, принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів, закони збереження, виробництво ентропії, спряження потоків, стаціонарний стан, теорема Пригожина та інші.

7.2.1.

Лінійний закон

Лінійний закон

емпіричних фактів, які формуються у вигляді відомих законів:

а) **закон Фіка** $J_n = -D \nabla n$, що пов'язує потік частинок J_n , тобто кількість частинок, що за одиницю часу перетинають одиницю площі в перпендикулярному напрямку, і різницю (градієнт) концентрації ∇n ,

б) **закон Фур'є** $J_Q = -\lambda \nabla T$, що пов'язує потік тепла J_Q і різницю (градієнт) температури ∇T ,

в) **закон Ома** $J_\varphi = -\sigma \nabla \varphi$, що пов'язує потік заряду J_φ і градієнт потенціалу $\nabla \varphi$ (електричного поля).

Нагадаємо (див параграф 1.2.2 в першому томі), що градієнт ∇A модулем дорівнює максимальному значенню похідної dA/dx , а за напрямком співпадає з напрямком зростання величини A .

Процеси переносу, в яких градієнт даної властивості викликає потік цієї ж фізичної властивості, називаються **прямими процесами переносу**.

вище приклади відносяться саме до такого переносу. Очевидно, що перераховані в переносу. Окрім прямих, існують **непрямі (перехресні) процеси переносу**, в яких градієнт однієї фізичної властивості викликає потік іншої фізичної властивості.

Розглянемо приклад так званих термодифузійних явищ. Нехай у деякому середовищі мають місце два градієнти: концентрації n і температури T . Тоді в такому середовищі виникають потоки частинок і тепла, причому

$$J_n = -D \nabla n - \alpha \nabla T,$$

$$J_Q = -\lambda \nabla T - \beta \nabla n.$$

Процес виникнення потоку частинок під дією градієнту температури носить назву *ефекту Соре* (рівнянні для J_n).

Зворотний процес пов'язаний з виникненням потоку тепла під дією градієнту потенціалу, називається *ефектом Дюфура*.

Ще одним прикладом непрямого процесу переносу є термоелектричний ефект – виникнення потоку електричного заряду під дією градієнту температури.

Для узагальнення наведених вище емпіричних законів розглянемо

а) *термодинамічні сили*

$$X_i \Rightarrow \{ \nabla n, \nabla T, \nabla \varphi, \nabla v, \dots \},$$

що зв'язані з градієнтами різних фізичних величин (концентрації, температури, потенціалу електричного поля, швидкості тощо), а також

потоки

б)
$$J_i \Rightarrow \{ J_n, J_q, J_e, J_{mv}, \dots \}$$

кількості частинок, тепла, електричного заряду, імпульсу тощо.

Лінійний закон

стверджує: *кожний термодинамічний безворотний процес і від термодинамічних сил,*

тобто N

$$J_i = \sum_{k=1}^N L_{ik} X_k, \quad (7.7)$$

де L_{ik} – так звані кінетичні коефіцієнти, а N – загальна кількість термодинамічних сил в системі. Зауважимо, що лінійний закон справедливий при порівняно невеликих відхиленнях системи від положення рівноваги, коли градієнти фізичних властивостей (термодинамічні сили) є малими. При великих відхиленнях від положення рівноваги необхідно враховувати старші по X_k

що така теорія складається з кубічної теорії. Природно лінійний варіант термодинамічної теорії незворотних процесів.

Відзначимо ще один, здавалося б очевидний факт, що носить назву *принципу Кюрі*: *лінійний закон повинен зв'язувати потоки і термодинамічні сили однієї і тієї ж скалярної, векторної (в загальному випадку – тензорної) розмірності.*

Іншими словами, в кожне рівняння лінійного закону повинні входити або скалярні величини, такі як тиск (векторні величини зветь ще тензорами нульового рангу), або векторні величини, такі як градієнти концентрації, температури, потенціалу електричного поля, а також потоки частинок, тепла, електричного заряду (ці величини зветь ще тензорами першого рангу), або так звані тензори другого рангу, якими є потік імпульсу та градієнт швидкості. Принцип Кюрі дозволяє встановити достатньо нетривіальні факти, згідно з якими, наприклад, потік частинок, що є векторною величиною, не може викликатися просторовими похідними від швидкості, тобто тензорними величинами 2-го рангу) та інші.

7.2.2.

Принцип симетрії бінарних коефіцієнтів і

Формулювання *принципу симетрії кінетичних коефіцієнтів (теорема Онсагера)*: при певному виборі термодинамічних сил і потоків матриця кінетичних коефіцієнтів є симетричною, тобто кінетичні коефіцієнти в перехресних явищах є рівними.

Принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів записується за допомогою простої математичної формули:

$$L_{ik} = L_{ki}. \quad (7.8)$$

Не зупиняючись детально на доведенні теореми Онсагера, конкретизуємо слова “при певному виборі сил і потоків”. Для цього розглянемо спочатку ентропію нерівноважного стану, вважаючи, що система знаходиться все ж таки досить близько від своєї рівноваги.

Позначимо через $\langle P_k \rangle_0 = P_{k0}$ клад, густини частинок, енергії $\langle \epsilon_k \rangle_0$ та інші параметри (наприклад, ентропія у положенні рівноваги, а через $\alpha_k = P_k - \langle P_k \rangle_0$ відхилення параметрів від своїх рівноважних значень. Розкладемо ентропію нерівноважного стану в ряд по відхиленням α_k :

$$S(P_k) = S(P_{k0}) + \sum_k \left(\frac{\partial S}{\partial P_k} \right)_0 \alpha_k + \frac{1}{2} \sum_{k,l} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial P_k \partial P_l} \right)_0 \alpha_k \alpha_l + \dots$$

Враховуючи близькість системи до рівноважного стану, подальшими членами ряду будемо нехтувати. Оскільки похідні від ентропії по параметрам P_k у положенні рівноваги, то через екстремальність ентропії в рівновазі маємо

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P_k} \right)_0 = 0.$$

Звідси для відхилення ентропії від свого максимального значення отримуємо вираз, що містить квадрати відхилень α_i положення рівноваги: параметрів від

$$\Delta S = S(P_k) - S(P_{k0}) = -\frac{1}{2} \sum_{k,l} g_{kl} \alpha_k \alpha_l, \quad (7.9)$$

де через $g_{kl} = g_{lk} = -\left(\frac{\partial^2 S}{\partial P_k \partial P_l}\right)_0$ позначені другі похідні від ентропії S по параметрах α_i ,

Потоки J_i і термодинамічні сили X_i в стані рівноваги.

$$J_i = \frac{\partial \alpha_i}{\partial t}, \quad X_i = \frac{\partial \Delta S}{\partial \alpha_i}. \quad (7.10)$$

Тоді, враховуючи вираз для ΔS з формули (7.8) і симетрію коефіцієнтів $g_{ik} = g_{ki}$, мічних сил X_i

$$X_i = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N g_{ij} \alpha_j - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N g_{ki} \alpha_k = -\sum_{j=1}^N g_{ij} \alpha_j. \quad (7.10)$$

Обґрунтуванням для вибору сил і потоків у відповідності з формулами (7.10) є проста симетрична форма для величини

$$\sigma = \frac{\partial \Delta S}{\partial t}, \quad (7.11)$$

яка грає важливу роль у термодинаміці незворотних процесів. Ця величина називається **швидкістю виникнення ентропії**, **виробництвом ентропії**, або

ентропію (виробництво ентропії) для всієї системи та для одиниці об'єму. Очевидно, так можна зробити для просторово однорідних систем. У цьому випадку фізичний зміст величини σ полягає в тому, що вона визначає зміну ентропії всього об'єму системи за одиницю часу. Для просторово неоднорідних систем (наприклад, цитоплазми поблизу мембран або біологічних рідин у зовнішньому полі) слід вводити уявлення про об'ємну густину виробництва ентропії, яка характеризує зміну ентропії за одиницю часу в одиниці об'єму середовища.

Обчислимо виробництво ентропії з врахуванням співвідношень (7.9) та (7.11)

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{1}{2} \sum_{i,k} g_{ik} \alpha_i \alpha_k \right) = -\frac{1}{2} \sum_{i,k} g_{ik} \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} \alpha_k - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i,k} g_{ik} \alpha_i \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = -\frac{1}{2} \sum_{i,k} (g_{ik} + g_{ki}) \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} \alpha_k. \end{aligned}$$

З урахуванням зробленого в (7.10) вибору сил і потоків виробництво ентропії являє собою суму доданків, кожний з яких є добутком i -

$$\sigma = \sum_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} \cdot \left(-\sum_k g_{ik} \alpha_k \right) = \sum_i J_i X_i. \quad (7.12)$$

того потоку на i -ту термодинамічну силу:

Таким чином, наслідком теореми Онсагера є той факт, що з N^2 $N(N+1)/2$ кінетичних коефіцієнтів є незалежними. Лише має місце лише для випадку, коли параметри α_i функціями швидкостей (енергія, концентрація тощо). Якщо існують параметри (позначимо їх через β_i), функціями швидкостей (наприклад, імпульс). Тоді принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів (теорему Онсагера) для систем, що знаходяться в магнітному полі або обертаються, слід узагальнити у вигляді:

$$\begin{aligned} L_{ik}^{\alpha\alpha}(B, \omega) &= L_{ki}^{\alpha\alpha}(-B, -\omega), \\ L_{ik}^{\beta\beta}(B, \omega) &= L_{ki}^{\beta\beta}(-B, -\omega), \\ L_{ik}^{\alpha\beta}(B, \omega) &= -L_{ki}^{\alpha\beta}(-B, -\omega), \end{aligned}$$

де B – індукція магнітного поля, а ω – кутова швидкість.

7.2.3.

Спряження потоків у біологічних системах

Для багатьох життєво важливих процесів, що проходять у відкритих біологічних системах, характерним є явище, яке називається *спряженням потоків*.

основні положення термодинаміки незворотних процесів використовуються в біологічних системах, в яких крім дисипативних процесів дифузії, теплопровідності, в'язкості відбуваються також і хімічні (біохімічні) реакції.

Спочатку зупинимося коротко на описанні хімічних реакцій, що використовується в термодинаміці незворотних процесів. Для відкритих багатокомпонентних систем термодинамічні потенціали містять, як зазначалося в розділі 7.1, доданок $\sum \mu_i N_i$,

по кількості компонентів $i = 1, \dots, n$, де сума береться

системах виявляється корисним введення деякого внутрішнього параметру (узагальненої координати) ξ , *степенем*

повноти, який називається

параметру ξ є інтегральною характеристикою реакції, змінна ξ зв'язана зі зміною кількості молей dN_i

співвідношенням: реагуючих компонентів наступним

$$d\xi = dN_i / \nu_i, \quad (7.13)$$

де ν_i –

перед ν_i – стехіометричні коефіцієнти реакції, тобто числові коефіцієнти 0.

Очевидно, що зміна кількості молей всіх речовин в хімічно реагуючій системі повністю визначається зміною числа молей одного певного

компоненту N_i , ξ .

рівняння, яке зв'язує $d\xi$ з dN_i дозволяє ввести величину A . Зауважимо, що

хімічними (біохімічними) реакціями. Тоді рівнянням стану системи з

$$\sum \mu_i dN_i = (\sum \nu_i \mu_i) d\xi = -A d\xi, \quad (7.14)$$

де величина $A = -\sum \nu_i \mu_i$ *спорідненістю хімічної (біохімічної) реакції*.

Величина A була введена у хімічну термодинаміку де

Донде A характеризує близькість системи до хімічної рівноваги.

Так, для ізобарично-ізотермічної системи маємо

а) у рівновазі $A = 0$ $\Delta G = 0$
 і, відповідно, зміна вільної енергії Гіббса

б) при $\Delta G < 0, A > 0$ –

в) при $\Delta G > 0, A < 0$ – реакція можлива,

Хімічні (біохімічні) реакції, поряд з неможливими раніше незворотними процесами дифузії, теплопровідності, в'язкості, також дають внесок у виробництво ентропії. Як було показано в попередньому параграфі, виробництво ентропії визначається добутком потоків J_i і термодинамічних сил X_i , тобто $\sigma = \sum J_i X_i$. Для хімічно реагуючої системи вибір потоку J_{xim} і X_{xim} що їх викликають визначається наступними співвідношеннями:

$$J_{xim} = d\xi / dt, \quad X_{xim} = A / T.$$

Відповідно виробництво ентропії у такій системі отримує додатковий внесок

$$\sigma_{xim} = A (d\xi / dt) / T = AV_{xim} / T, \quad (7.15)$$

де $V_{xim} = d\xi / dt$ –

тепер перейдемо безпосередньо до поняття спряження потоків. Нехай у досліджуваній системі відбуваються одночасно дві реакції, котрі є єдиними джерелами незворотності. Тоді виробництво ентропії у відповідності з формулою (7.15) має вигляд

$$\sigma = (A_1 V_1 + A_2 V_2) / T > 0$$

і є додатною величиною в силу 2-го закону термодинаміки. Дана нерівність має місце не тільки в тому випадку, коли кожний з доданків є додатним, але й тоді, коли один з них (скажімо, перший) – від'ємний, а другий – додатний і більший першого за модулем, тобто

$$A_1 V_1 < 0, \quad A_2 V_2 > 0, \quad |A_1 V_1| < A_2 V_2.$$

У цьому випадку прийнято називати першу реакцію **спряженою**, а другу – **спрягаючою**.

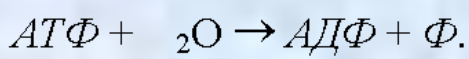
Очевидно, що одна перша реакція була б від'ємна величина і виробництво ентропії в результаті цієї реакції також від'ємне. Однак, ця реакція стає можливою через наявність іншої реакції, для якої виробництво ентропії є величина додатна.

Саме така ситуація і називається **спряженням потоків**, або **спряженням незворотних процесів**.
Потоком (процесів) називається таке спільно виникле між двома потоками (процесами) явище, яке дає зменшення ентропії від одного потоку (процесу), яке було б неможливе в ізольованій системі.

Приклад 1. Фосфорилування глюкози відбувається в результаті такої реакції :



де P – іон фосфорної кислоти. Цей процес сам по собі виявляється неможливим, так як у результаті цієї реакції відбувається збільшення вільної енергії Гіббса на величину $\Delta G = 13.4 \text{ кДж/моль}$ (7.1). Процес фосфорилування стає можливим при кінетичному спряженні з іншим процесом – гідролізом АТФ:



Під час останньої реакції вільна енергія Гіббса зменшується на величину $\Delta G = -30.5 \text{ кДж/моль}$.

Перша реакція (фосфорилування глюкози) є спряженою, друга (гідроліз АТФ) – спряженою. Результуюча реакція (брутто-реакція) записується у вигляді



Для такої результуючої реакції загальна зміна вільної енергії Гіббса є від'ємною величиною, яка дорівнює $\Delta G = -17.1 \text{ кДж/моль}$. Таким чином, спорідненість такої реакції є величиною додатною ($A > 0$),

Приклад 2. В ізольованій системі при наявності одного сорту частинок процес дифузії йде в напрямку від місць, де концентрація речовин більша, в місця, де вона менша. При наявності хоча б двох сортів частинок, а в загальному випадку – системі, потік частинок якого-небудь **багатого** компонента може рухатися в напрямку зростання концентрації.

Приклад 3. Своєрідне поєднання процесів, які розглядуємо в перших двох прикладах, відбувається при **активному транспорті** молекулярні речовини через біологічні мембрани, розділі 6. В результаті активного транспорту речовина (наприклад іони натрію) переноситься в напрямку збільшення концентрації. Такий спряжений процес викликається можливим завдяки спрягаючій реакції – реакції гідролізу **АТФ**.

7.2.4.

Стационарний стан відкритої системи та ентропії

Розглянемо поняття стаціонарного стану, котре грає важливу роль в термодинамічному описанні відкритих систем.

Повна зміна ентропії dS представлена як сума двох доданків у відкритій системі може бути

$$dS = dS_i + dS_e, \quad (7.16)$$

що описують в загальному вигляді такі процеси:

- 1) процеси зміни ентропії всередині системи (dS_i), теми з навколишнім середовищем (dS_e) взаємодію відкритої сис

Коли б всередині досліджуваної системи відбувалися лише зворотні процеси, то зміна ентропії була б відсутня ($dS_i = 0$). Оскільки всередині реальної системи протікають незворотні дисипативні процеси, в результаті яких наростає ентропія, то $dS_i > 0$.

Щодо знака величини dS_e , то він може бути довільним і залежить від того, відбувається поступлення ентропії в систему або відтік ентропії з неї, пов'язаний з потоками частинок, тепла та іншими процесами переносу через поверхню, що обмежує виділений об'єм досліджуваної системи.

Стаціонарним називається такий стан системи, при якому ентропія всієї відкритої системи S зберігається, тобто повна зміна ентропії дорівнює нулю ($dS = 0$).

Із умови постійності ентропії ($dS = 0$) безпосередньо випливає, що $dS_e = -dS_i$, і рівняння (7.16) змінює вигляд. Тоді в силу процесів, що відбуваються всередині системи, зміна ентропії dS_e через взаємодію відкритої системи з довкіллям повинна бути від'ємною ($dS_e < 0$)

всередині системи рівноб за моделлю зміни ентропії стаціонарності відкритої системи стає можливою, якщо ентропія, що наростає всередині системи, повністю переходить в навколишнє середовище. Іншими словами, можна стверджувати, що відкриті системи у стаціонарному стані живляться **негентронією (від'ємною ентропією) $N = -S$.**

Пригожиним було доведено, що у *стаціонарному стані виробництво ентропії мінімальне* ($\sigma = \sigma_{\min}$).

Це твердження має назву *“теорема Пригожина”*. Це твердження має привертати увагу, бо це означає, що встановлення цієї теоремі.

Дійсно, з отриманих в 7.2.2 формул для виробництва ентропії

$$\sigma = dS / dt = \sum J_i X_i \quad J_i = \sum L_{ik} X_k$$

та лінійного закону $\sigma = \sum L_{ik} X_i X_k$. маємо (7.17)

Для спрощення обмежимося випадком двох термодинамічних сил і відповідно двох потоків. Тоді, приймаючи до уваги принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів ($L_{ik} = L_{ki}$),

наступний вираз для виробництва ентропії: можна записати

$$\sigma = \sum L_{11} X_1^2 + 2L_{12} X_1 X_2 + \sum L_{22} X_2^2.$$

Обчислимо часткові похідні від виробництва ентропії σ термодинамічним силам X_1, X_2 : по

$$\partial \sigma / \partial X_1 = 2L_{11} X_1 + 2L_{12} X_2 = 2J_1,$$

$$\partial \sigma / \partial X_2 = 2L_{22} X_2 + 2L_{12} X_1 = 2J_2.$$

Звідси видно, що якщо в стаціонарному стані відкритої системи потоки $J_1 = 0, J_2 = 0$, виробництво ентропії приймає екстремальне значення. Це в силу додатної визначеності квадратичної форми $\sigma = f(X_1, X_2)$ визначеності других похідних і пов'язаної з цим пози

$$\partial^2 \sigma / \partial X_1^2 = 2L_{11} > 0, \quad \partial^2 \sigma / \partial X_2^2 = 2L_{22} > 0$$

цей екстремум є мінімум (див. розділ 1 в першому томі), тобто виробництво ентропії у стаціонарному стані приймає мінімально можливе значення.

Принцип мінімуму виробництва ентропії у стаціонарному стані відкритої системи має надзвичайно важливе значення. Він дає кількісний критерій, що дозволяє визначити *напрямок розвитку (еволюції) відкритої системи* будь-якої складності, а саме: *якщо у відкритій системі відбуваються незворотні процеси поблизу термодинамічної рівноваги, то по зменшенню виробництва ентропії у такій системі можна передбачити її перехід у стаціонарний стан.*

Іншими словами, критерієм наближення системи до стаціонарного стану є від'ємність похідної від виробництва ентропії за часом, тобто виконання нерівності

$$\partial \sigma / \partial t = \partial^2 S / \partial t^2 < 0. \quad (7.18)$$

Теорема Пригожина пояснює також принципову стійкість стаціонарних станів відкритих систем. Дійсно, якщо відкрита система самодовільно виходить з свого стаціонарного стану через флуктуації, то в ній відбувається збільшення швидкості виробництва ентропії ($\partial \sigma / \partial t > 0$).

Тоді через теорему Пригожина необхідним наслідком подібної зміни стану системи повинні бути такі процеси всередині системи, при яких вона знову повернеться до свого початкового стаціонарного стану. Принцип мінімуму виробництва ентропії (теорема Пригожина) відіграє таку ж роль для відкритих систем, як *принцип Ле Шательє-Брауна*, що пояснює стійкість рівноважних систем: ***будь-який зовнішній вплив, який виводить систему з положення рівноваги, викликає в ній такі процеси, які прагнуть послабити результат цих зовнішніх впливів.***

7.1. ВІДКРИТІ МЕДИКО-БІОЛОГІЧНІ СИСТЕМИ, ЩО ЗНАХОДЯТЬСЯ ДАЛЕКО ВІД РІВНОВАГИ

(ЕЛЕМЕНТИ СИНЕРГЕТИКИ)

Визначним досягненням у розвитку науки за останні роки стало розуміння фундаментальних основ і принципів самоорганізації у відкритих системах різної природи (фізичних, хімічних, біологічних та ін.) поодаль від їх положення рівноваги. Зараз вже можна говорити про створення *міждисциплінарної області науки – синергетики, котра вивчає загальні принципи самоорганізації і утворення просторових, часових і просторово-часових структур у відкритих нерівноважних системах.*

Самий факт утворення нових структур (упорядкування) знаходиться в уявному протиріччі з другим началом термодинаміки, з суті якого випливає, що з плином часу обов'язково відбувається зникнення структур (розупорядкування) з одночасним підвищенням сумарної ентропії всієї системи. В дійсності цього протиріччя, що виникло ще при співставленні другого начала термодинаміки і еволюційного принципу Дарвіна, не існує. Дійсно, утворення структур відбувається у відкритій підсистемі, котра завжди являє собою частину якої-небудь більшої системи. Якщо ця остання є замкненою системою, то дисипативні процеси, що у ній відбуваються, призводять до зростання ентропії усієї системи, але це не обов'язково викликає зростання ентропії кожної її частини.

Поява наприкінці 80-х років ХХ століття нового міждисциплінарного наукового напрямку, який отримав назву

“*синергетика*” створила надійні засади для посилення інтеграційних тенденцій в науці та освіті. Як вже зазначалося, синергетика вивчає загальні принципи самоорганізації та утворення впорядкованих структур у відкритих нерівноважних системах різної природи.

Термін “**самоорганізація**” визначає процес (явище) одержання пов’язані із **структури** внаслідок процесів (явища) одержання поведінки системи завдяки наявності внутрішніх зв’язків і контактів з зовнішнім середовищем. Здатністю до самоорганізації і утворення впорядкованих структур володіють системи живої та неживої природи, а також штучні системи.

Якщо до виникнення синергетики природничі та інші науки могли обходитися при використанні системного підходу до своїх об’єктів дослідження без врахування колективних ефектів, які призводять до утворення стійких структур в часі та просторі, то зараз послідовне вивчення цих проблем стало можливим на основі синергетичних методів. Особливо важливим і гострим постає питання щодо впорядкованості і самоорганізації при дослідженні енергетичних, екологічних, соціальних, політичних, медико-біологічних та інших глобальних проблем.

Існує досить велика кількість прикладів виникнення впорядкованих структур у системах різної природи:

у фізиці – надплинність, це фазові переходи, типів надпровідності, розряді, пентагональні структури у плазмі токамаків, когерентне випромінювання лазерів, солітони;

в астрофізиці –

у хімії – це червона пляма Юпітера, полярні сніжки; ця Белоусова-Жеролинська окислювально-відновлювальна реакція;

у біології – синтезі, морфогенетичні процеси у різних колективних і фотокочувальна динаміка чисельності популяцій;

у медицині –

міокарді, спіральні квинні і ректационні структури у зривці Гока при депресії Леао;

в обчислювальній техніці –

надійність роботи ЕОМ, розпізнавання образів, паралельні обчислення і

у соціології і політології –

стійкість політичних систем; формування суспільної думки,

в екології –

забруднення, а також велика кількість інших процесів і

Просте перерахування цих прикладів показує, що синергетика тісно пов'язана з різними областями науки і техніки. Разом з тим це не означає, що вона використовує цілковито різнорідні поняття. Одним з головних аспектів світоглядного значення синергетики, найбільш цінним досягненням синергетичного підходу якраз і є те, що в ній вдається обґрунтувати нові “перші принципи”, що лежать в основі процесів самоорганізації і впорядкування або, більш загально кажучи, функціонування відкритих складних систем.

Одна з основних причин процесів самоорганізації та впорядкування формулюється у вигляді принципу, який можна було б назвати “*принципом узагальненого дарвінізму*”, а саме: *просторові, часові та просторово-часові структури в органічному та неорганічному світі виникають як прояв колективних коливань через флуктуації, їх взаємодію і відбір тих з них, які мають найбільший час затухання*

(*параметри* *керуючими модами*) Такі найбільш крива енергетичні параметри порядку,

(*керуючими модами*) Саме вони визначають еволюцію системи, котра нерівно мала дуже багато степенів свободи. В результаті колективної взаємодії різних мод у такій системі може виділитися лише декілька параметрів порядку. У цьому полягає зміст *принципу підлеглості*,

важливу роль у синергетичних процесах, котрий грає дуже

Впорядковані структури, які утворюються у відкритих системах, далеких від рівноваги, поділяються на просторові, часові і просторово-часові (див. таблицю 1).

До просторових структур відносяться гексагональні комірки Бенара, згадані вище спіральні структури, що в певний момент часу можна спостерігати в реакції Белоусова-Жаботинського (БЖ), в колонії соціальних амеб (плазмодії міксоміцети), в міокарді, на сітківці ока при депресії Леао тощо.

Таблиця 7.1. Типи впорядкованих структур та їх параметри

Система	Тип структури	Просторова розмірність системи d	Характерні параметри
Реакція БЖ	Просторові структури, часові осциляції	$d = 1, 2$ $d = 1, 2, 3$	$\lambda \approx 1 \text{ см}$ $T \approx 4 \text{ хв}$
Баретер (дріт із струмом в середовищі H_2 і He)	Просторові структури, автохвилі	$d = 1, 2$ $d = 3$	$v \approx 1 \text{ см/с}$ $T \approx 5 \text{ хв}$ $V \approx 10\text{--}50 \text{ мкм/с}$
Гліколіз	Часові осциляції, автохвилі	$d = 3$	$T \approx 5 \text{ хв}$
Плазмодій міксоміцети	Часові осциляції	$d = 3$	$\lambda \approx 1\text{--}100 \text{ мкм}$ $v \approx 1 \text{ мм/хв}$
Морфогенез	Просторові структури	$d = 3$	$\lambda \approx 1 \text{ мкм} - 1 \text{ см}$
Сітківка ока	Спіральні хвилі	$d = 3$	$\lambda \approx 1 \text{ мкм}$ $v \approx 1 \text{ мм/хв}$

Часові структури спостерігаються в екологічних суспільствах (типовий прикладом є «періодична», що буде розглянута пізніше), часові осциляції при гліколізі і фотосинтезі тощо.

Просторово-часові структури мають місце при спостереженні реакції Белоусова-Жаботинського протягом досить тривалого часу (десятки хвилин), міокарді, при поширенні нервового імпульсу в аксоні тощо.

Розглянемо деякі приклади впорядкування та самоорганізації систем різної природи, про які згадувалося вище, більш докладно. Особливу увагу при цьому ми будемо звертати на схожість, певну подібність цих явищ. Ця схожість поведінки різноманітних систем (наприклад, дивний перебіг періодичної хімічної реакції Белоусова-Жаботинського, утворення спіральних структур в колонії соціальних амеб, поява ревербераторів у міокарді тощо) дає підстави говорити про так званий “ізоморфізм” впорядкованих структур у певній подібності, явищ утворення відкритих системах.



Мал. 7.1. Спіральні хвилі в реакції Белоусова-Жаботинського (фотографія А.Т. Вінфрі).

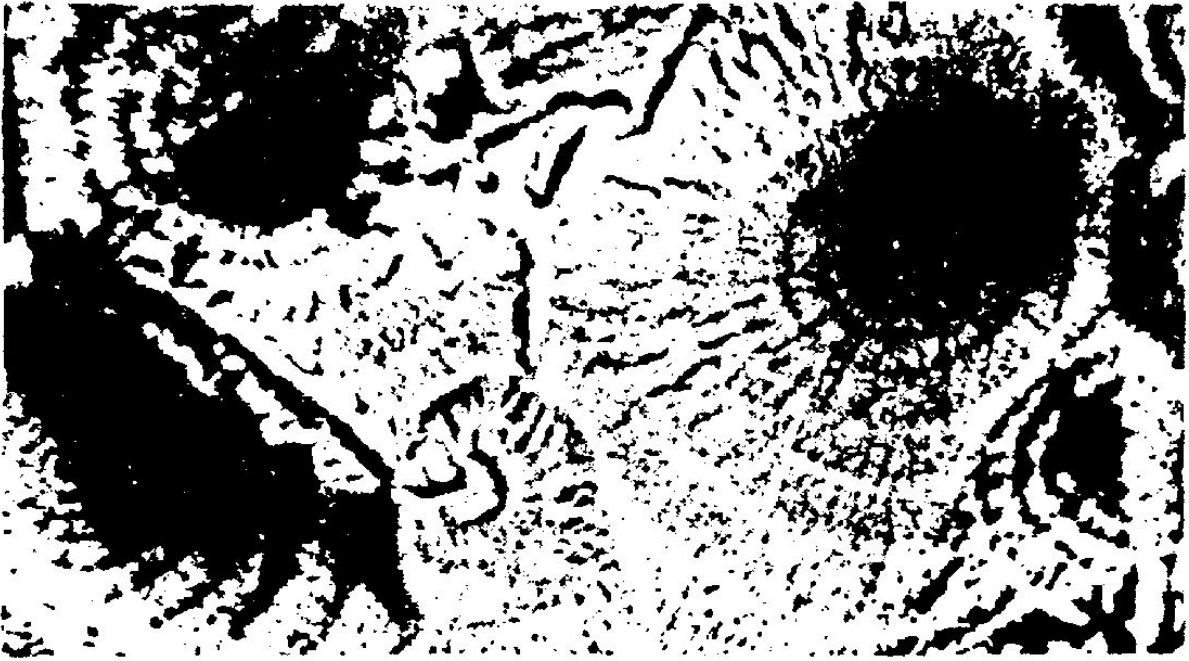
Періодична хімічна реакція Белоусова-Жаботинського.

У 1951 році радянський хімік Б.П. Белоусов відкрив нову реакцію, суть якої зводилася до того, що протягом декількох годин з періодом приблизно 4 хвилини змінювався колір хімічно реагуючих компонентів – від червоного до синього і навпаки, тобто ця реакція була періодичною. Лише через 8 років Б.П. Белоусову вдалося надрукувати повідомлення про своє відкриття у реферативному журналі “Сборник рефератов по радиационной медицине” за 1958 г. Далі теоретичні аспекти цієї реакції розроблялися А.М. Жаботинським, а потім А.М. Заїкіним. Було з’ясовано, що хімічна реакція Белоусова є окисно-відновною, автокаталітичною реакцією, в якій беруть участь іони церія змінної валентності. Саме зміна валентності іонів церія від 3 до 4 (і навпаки) викликає зміну кольору реакції. У 1970 р. А.М. Заїкін і А.М. Жаботинський створили зручні умови для експериментального спостереження періодичної хімічної реакції, відкритої Б.П. Белоусовим, коли вилили розчин, в якому відбувалася ця реакція, тонким шаром в чашку Петрі. В такій системі, яка потім отримала назву хімічного реактора Заїкіна-Жаботинського, ними спостерігалися спіральні автохвилі хімічної активності – дуже ефектні природні структурні утворення (див. мал. 7.1).

Якщо спіральні хвилі в чашці Петрі, що вивчалися А.М. Жаботинським та А.М. Заїкіним, були двовимірні, то американський біофізик А. Уінфрі зміг спостерігати згодом тривимірні автохвилі хімічної активності. Детальний хімічний механізм періодичної реакції Белоусова був остаточно описаний (після перших робіт А.М. Жаботинського і А.М. Заїкіна) венгерським вченим Є. Керошем та американцями Р. Філдом і Р. Нойесом. Останні розробили для цього спеціальну **кінетичну модель**, яка отримала назву **“орегонатор”** (назвою американського штату Орегон, де працювали автори цієї моделі). Інша кінетична модель **“брюсселятор”**, яку розробили авторами з метою пояснення перебігу періодичної автокаталітичної хімічної реакції Белоусова-Жаботинського, була створена І.Р. Пригожином та Г. Ніколісом (назва моделі пов’язана, очевидно, зі столицею Бельгії, де у Вільному Університеті Брюсселя працює лауреат Нобелівської премії І.Р. Пригожин).

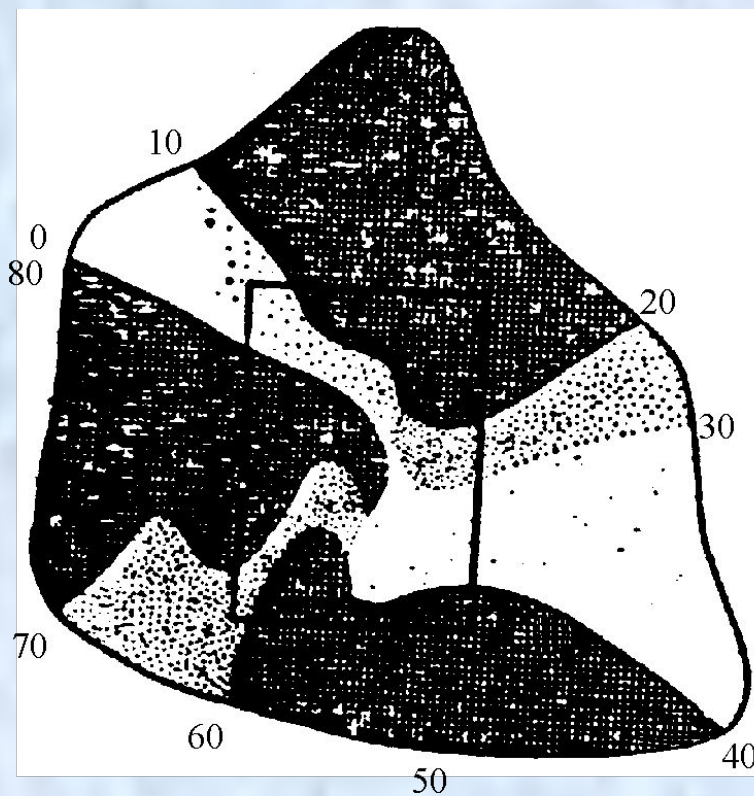
Спіральні структури в колонії соціальних амеб.

Ще у біологічному суспільстві, а саме – в колонії соціальних амеб (амеби-слизевиків *Dictyostelium discoideum*) соціальними до об'єднання (агрегації) у відповідні просторові структури, які мають спіральну форму. Виявляється, що коли амеби мають в достатку їжі, вони існують як окремі і розвиваються індивідуально. Зовсім інша ситуація має місце, коли їжа закінчується. Тоді голодні амеби починають спонтанно та в імпульсному режимі виділяти спеціальну хімічну речовину – цАМФ (циклічний аденозинмонофосфат), який відіграє роль морфогена, тобто сприяє формоутворенню. Просторовий розподіл цього морфогена, точніше кажучи – градієнт концентрації цАМФ, є просторовою міткою, яка дає можливість всім іншим амебам збиратися (агрегувати) у спіральні або концентричні структури. Таким чином, механізм хімічної сигналізації виявився надзвичайно важливим в процесі формоутворення – морфогенезу. Принциповим є той факт, що структури в колонії соціальних амеб (мал. 7.2) виявляються подібними до автохвиль хімічної активності в реакції Белоусова-Жаботинського не лише за зовнішніми ознаками, але й тому, що ці спіральні утворення виникають у відкритих системах, які є активними за своєю природою, (енергій) словами, збудливими через існуючий в них запас



Мал. 7.2. Спіральні структури в колонії соціальних амеб (фотографія Г. Гереша і Б. Хесса).

Спіральні структури (ревербератори) в міокарді. Вперше спіральні структури в міокарді були відкриті у 1946 році мексиканським кардіохірургом А. Розенблютом та математиком Н. Вінером, який по праву вважається “батьком” кібернетики. В той рік А. Розенблют запросив свого друга Н. Вінера відпочити з ним, тоді ж він і розповів Н. Вінеру про небезпечну серцеву хворобу – фібриляцію, яка дуже часто приводить до миттєвої зупинки серця. І вони разом створили модель, яка показала, що при порушенні механічної однорідності серцевого м’язу – міокарду (така неоднорідність має місце біля витoku вени з серця) з’являється спіральна хвиля електричного збудження міокардіальних клітин. Ця спіральна хвиля отримала назву “ревербератор” (мал. 7.3).



Мал. 7.3. Спіральна хвиля в серцевому м'язі кролика (з роботи М. Алессі, Ф. Бонке, Ф. Шопмана; цифрами позначені моменти часу в мілісекундах).

В подальшому вдалося довести, що ревербератори виникають не лише там, де порушується механічна неоднорідність, але і в точках, де з'являється неоднорідність по деякому прихованому параметру активного середовища, яким є міокард, – періоду рефрактерності (див. нижче). Саме ці точки стають джерелами появи спіральних хвиль (ревербераторів) у міокарді. Першим наслідком змін у ритмі роботи серця, а саме – збільшення частоти серцевих скорочень), а потім і фібриляція (хаотична пульсація серця). Розуміючи механізми появи ревербераторів, можна вести свідомий пошук ліків та інших немедикаментозних методів запобігання фібриляції. Треба підкреслити, що хімічний реактор, де відбувається періодична реакція Белоусова-Жаботинського, є тим активним аналоговим середовищем, в якому були зроблені успішні експерименти в цьому напрямку.

Сучасні підходи до основних синергетичних проблем самоорганізації та впорядкування використовують потужні та добре апробовані методи, на які спираються *а) теорія фазових перетворень, б) теорія нелінійних коливань і автохвиль, в) кінетичні моделі типу "брюсселятора" і "орегонатора",* та деякі інші підходи.

Нижче ми зупинимось більш детально на цих питаннях.

Розпочнемо з аналізу сучасного стану і досягнень *теорії фазових переходів*, яка складає (поряд з іншими методами) наукову і методичну основу синергетики. В критичних точках, які визначають процеси самоорганізації і впорядкування, слід приділяти особливу увагу флуктуаційним ефектам. В останні 2–3

десятиліття довідкується про різні утермодинамічних параметрів (температури, тиску тощо) від своїх середніх значень. Це стало можливим завдяки розвитку універсальних методів фізики фазових переходів і критичних явищ, заснованих на ідеях теорій масштабної інваріантності (скейлінгу). З. Ренгінського, В.Л. Покровського, М. Фішера, Л. Каданова, К. Вільсона та інших вчених.

Вихідним при побудові статистичної теорії фазових переходів є поняття параметра порядку та поля, спряженого йому в термодинамічному сенсі (див. таблицю 7.2). Іншою принципово важливою характеристикою систем, в яких відбуваються фазові переходи, є радіус кореляції, який визначає ту відстань, на якій флуктуації параметра порядку, тобто їх відхилення від середніх значень, впливають одна на другу (корелюють між собою). З наближенням до точки фазового переходу величина радіусу кореляції сильно зростає. Таким чином, різним системам поблизу їх фазових переходів стає притаманною колективна взаємодія флуктуацій на великих відстанях та на значних часових інтервалах. Більш того, в поведінці цих систем з'являється універсальність, тобто їх властивості (рівняння стану, різні рівноважні та кінетичні характеристики) описуються однаковими законами, які називають масштабно-інваріантними або скейлінговими.

Цей результат є дуже сильним і принциповим через те, що дослідивши детально критичну поведінку однієї системи (наприклад, рідина поблизу критичної точки), природи (наприклад, магнетик, надпровідник, хімічна частина системи тощо) за допомогою своєрідного словника (частина цього словника міститься у таблиці 7.2), який пов'язує між собою відповідні величини систем різної природи.

Таблиця 7.2. Параметри порядку та спряжені поля для різних систем

Система	Параметр порядку	Спряжене поле
Однокомпонентна рідина	Відхилення питомого об'єму від критичного значення	Відхилення температури і тиску від критичних значень
Двокомпонентна суміш поблизу критичного стану розшарування	Відхилення концентрації від критичного значення	Різниця хімічних потенціалів компонентів
Система з хімічними реакціями	Степінь повноти (число оборотів) хімічної реакції	Спорідненість хімічної реакції

Залежність рівноважних та кінетичних властивостей від температури, зовнішнього поля та інших змінних поблизу точок фазових переходів характеризується степеневими законами, де показники степенів мають назву критичних індексів. Величини критичних індексів залежать від просторової розмірності системи, розмірності (числа компонентів) параметра порядку, а також від радіуса потенціалу взаємодії. Системи, що мають однакові значення цих характеристик (наприклад, є тривимірними, із скалярним параметром порядку і короткосяжним радіусом міжмолекулярної взаємодії), потрапляють в один і той же “клас універсальності”.

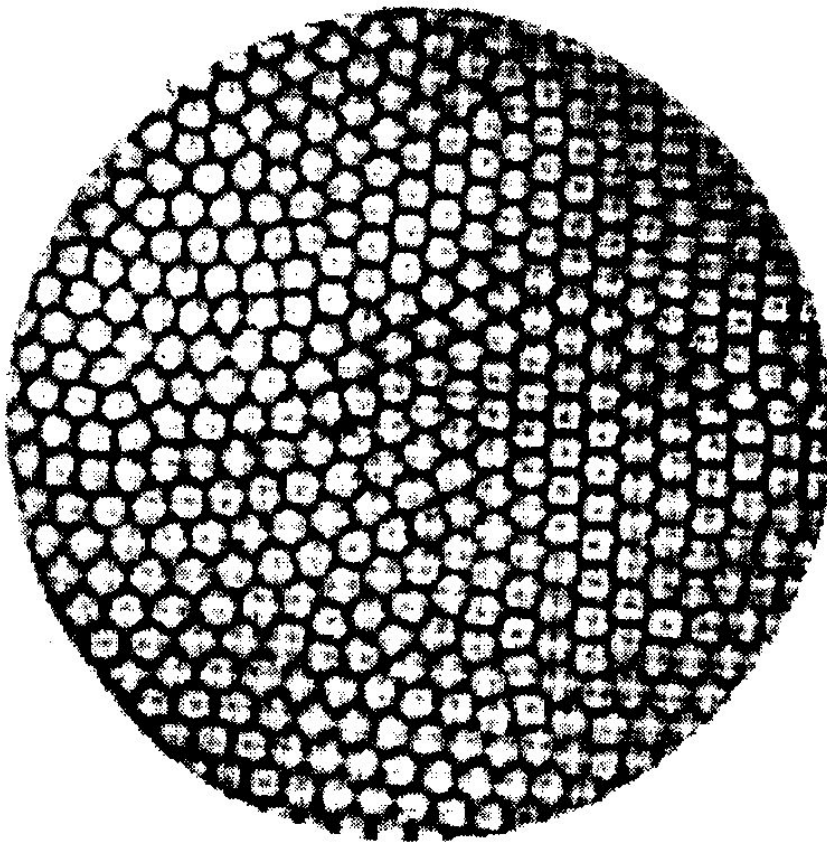
чи бінарна рідка суміш, магнетик в тиск званому наближенні Ізінга, хімічно реагуюча система, система “медіатор-рецептор” у синаптичній щілині тощо, описуються поблизу своїх критичних точок однаковими степеневими скейлінговими законами.

Слід, взагалі кажучи, розрізняти *рівноважні* та *нерівноважні фазові переходи*.

Для рівноважних фазових переходів таких параметрів, як тиск, температура, хімічні потенціали компонентів розчину тощо (ці параметри зовуться ще інколи “*поліболовими*”) трапляється стрибкоподібна зміна таких параметрів (ці параметри зовуться ще інколи “*густинними*”). У випадку нерівноважних фазових переходів відбуваються різкі зміни в поведінці параметрів системи, які приводять до появи впорядкованих структур. Ці процеси впорядкування і самоорганізації певною мірою нагадують рівноважні фазові переходи, де відбувається стрибкоподібна зміна “*густинних*” параметрів. Проте, суттєвою особливістю нерівноважних фазових переходів (на відміну від рівноважних) є те, що вони відбуваються у відкритих системах, в яких через взаємодію з навколишнім середовищем має місце від’ємна зміна (тобто зменшення) ентропії. Звичайно, нерівноважні фазові переходи (які зовуться ще кінетичними фазовими переходами) є набагато різноманітнішими, ніж рівноважні (термодинамічні) фазові переходи.

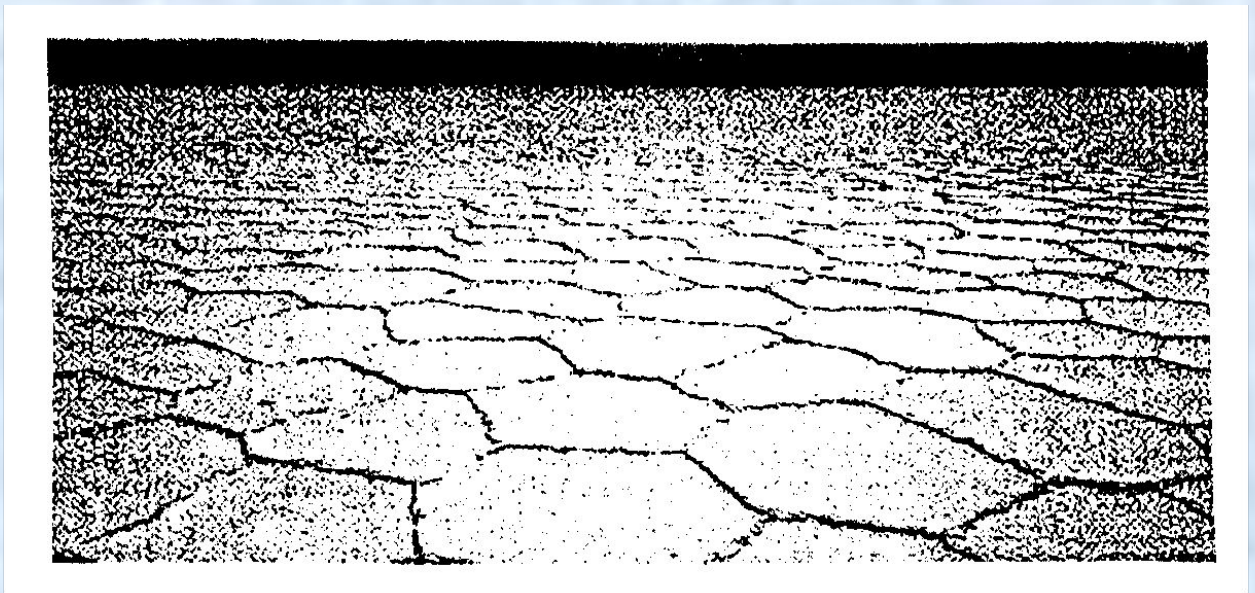
Розглянемо загальні властивості відкритих систем, в яких існують різноманітні процеси впорядкування. На відміну від рівноважних утворень, які можуть бути описані та досліджені відомими методами термодинаміки та статистичної фізики, в нерівноважних системах реалізуються так звані *дисипативні структури* (го- жиним). цей термін вперше був введений І.Р. При

Прикладом звичайних рівноважних структур є рідина чи кристал, які існують в залежності від температури, тиску та інших зовнішніх параметрів. Дисипативні структури утворюються завдяки потокам енергії, імпульсу, маси через границі системи. Типовим прикладом дисипативної структури є так звані комірки Бенара, які виникають в реальній в'язкій рідині при наявності в ній різниці температури. Коли рідина підігривається знизу (існує потік тепла через нижню границю в такій відкритій системі), то раптово при деякому співвідношенні між товщиною шару рідини, різницею (градієнтом) температури, в'язкістю та іншими параметрами в раніше однорідній рідині виникають шестигранні утворення – комірки Бенара (див. мал. 7.4).



Мал. 7.4. Гексагональні комірки Бенара (з книги С. Чандрасекара “Гідродинамічна та гідромагнітна стабільність”).

Такий процес є проявом взаємодії флуктуацій (відхилень параметрів системи від середніх значень). Роль взаємодії флуктуацій зростає і стає вирішальною поблизу критичних (бифуркаційних) точок. Ця взаємодія може стати наслідком одностороннього впливу на систему. Ця взаємодія може стати наслідком неоднорідна рідина) руйнується. В ній з'являються більш впорядковані структури, які й зветься дисипативними.



Мал. 7.5. Гексагональні структури, що виникли на поверхні соленого озера Юмі в Болівії (фото К. Хірояма з “Дейлі Юміурі”).

Дуже схожий до комірок Бенара вигляд мають гексагональні структури, що спостерігаються на висушеній поверхні соленого озера Юмі в Болівії (мал. 7.5). Можливо, це також є проявом синергетичних процесів, що виникають при конвекційній нестійкості нерівноважної відкритої системи. Значна схожість цих гексагональних структур дивує і є безумовним викликом людському розуму, як і поширеність спіральних структур у зовсім різних за своєю природою системах.

Інший тип впорядкування відкритої системи – це **автохвилі** та **автоколювання**, що відбуваються на реакції Белоусова-Жаботинського при реверсаторів ду хімічної. Відомими прикладами автохвиль і автоколювань є також хвиля розповсюдження потенціалу дії (зміни електричного потенціалу) вздовж нервового волокна (аксона), хвиля горіння, автоколювання при гліколізі та фотосинтезі тощо.

Загальні риси всіх цих процесів полягають у наявності наступних спільних особливостей середовищ, де вони відбуваються:

1. **Середовища активні**, розповсюджуються автохвилі, де мають місце пружні, теплові або електричні сили, енергія хвилі передається від джерела у віддалені точки з послабленням. На відміну від пасивних середовищ, в активних йдуть процеси накопичення енергії та її вивільнення при відповідному механізмі збудження.

2. **Активні** середовища мають три різні стани свого функціонування:

- **стан спокою** який реалізується у відсутності зовнішніх впливів;
- **стан збудження** який виникає при наявності зовнішніх впливів;
- **стан рефрактерності** який виникає після зникнення збудження і під час якого система повертається в стан спокою (якщо система перебуває в стані збудження довго, доки вона не перейде у стан спокою).

3. **Ізбірна властивість автохвиль** цих процесів в тому числі й **ефектом синхронізації**. Якщо в середовищі є декілька джерел коливань і хвиль з різними частотами, то найстійкішими є коливання і хвилі з максимальною частотою. Іншими словами, всі коливання з меншими частотами подавляються коливаннями з більшими частотами.

4. **Властивість автохвиль** в активних середовищах (див. таблицю У.3). В цій таблиці, в останньому стовпчику, містяться відомості і про ще один тип впорядкованих структур – **солітони** (хвилі).

поодинокі

Таблиця 7.3. Порівняння властивостей автохвиль в активних середовищах, хвиль у пасивних середовищах і солітонів

Властивість	Автохвилі в активних середовищах	Лінійні хвилі у пасивних середовищах	Солітони в консервативному нелінійному середовищі
1. Дисипація енергії	велика	мала	немає
2. Втрачає енергію	має місце	немає	немає
3. Збереження енергії	має місце	немає	має місце
4. Принцип суперпозиції	Немає	має місце	немає
5. Адаптація при згинненні	має місце	немає (в загальному випадку)	немає
6. Інтерференція	немає	має місце	немає
7. Дифракція	має місце	має місце	має місце
8. Відбивання	немає	має місце	має місце

Вперше солітон був відкритий С. Расселом у 1834 році досить випадково, як часто й робляться великі відкриття. С. Рассел вивчав в той час рух барж різних форм, що мали різні швидкості, з метою надати рекомендації щодо будівництва барж у зв'язку з переходом від кінської тяги до парової. Саме проводячи ці спостереження, він відкрив солітон, про що так написав у своєму звіті “Доповідь про хвилі”: “Я слідкував за рухом баржі, яку швидко тягнула вздовж вузького каналу пара коней, коли баржа раптово зупинилася; але маса води, яку баржа привела в рух, не зупинилася. Замість цього вона зібралася біля носу судна в стані божевільного руху, потім раптово залишила його позаду і покотилася вперед з дуже великою швидкістю, прийнявши форму великого одинокого підвищення, тобто водяного пагорба, який продовжував свій шлях вздовж каналу, не змінюючи своєї форми та не знижуючи швидкості”.

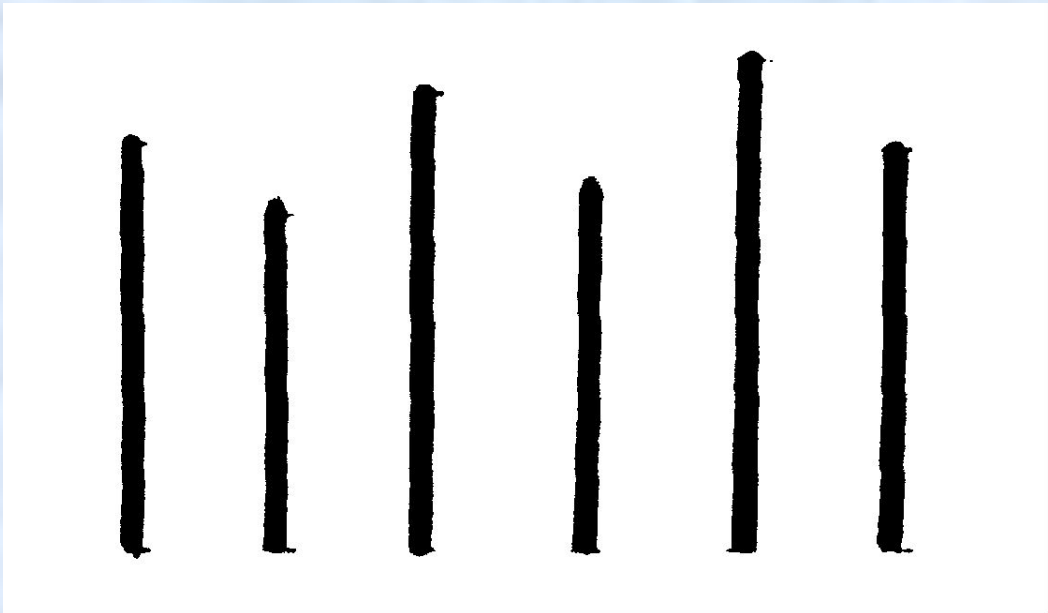
Зараз солітони відкриті у багатьох середовищах – в магнетиках, надпровідниках, живих системах, атмосферах Землі та планет. Досить ймовірно, що солітони мали важливе значення для процесу еволюції Всесвіту. Хромодинаміка, сучасна теорія елементарних частинок, передбачає появу (можуть ще не валирити експериментально) солітонів, які можуть нести магнітний заряд. Таким чином, справедливим є твердження, що наука про солітони інтенсивно розвивається в останні роки.

Зрозуміло, що методи синергетики повинні добре працювати для тих випадків, коли мова йде саме про кооперативну поведінку систем різної природи з утворенням впорядкованих структур. Нижче ми розглянемо приклади застосування синергетичних методів до деяких соціальних і політичних процесів.

Перш за все постає питання: чи можливо взагалі сподіватися на успіх при застосуванні подібних методів до об'єктів, які складаються з великої сукупності індивідумів? Дійсно, поведінка окремого індивідуума в складних ситуаціях, як правило, непередбачена, вона визначається дуже великою кількістю часто випадкових факторів. Тому зрозуміло, що скоріш за все неможливо створити детерміновану математичну модель такої поведінки окремої людини. Разом з тим, очевидно, можна сподіватися на досить точне передбачення середньостатистичної поведінки окремого представника даної соціальної групи. Саме в цьому випадку, тобто на рівні статистичних закономірностей, стають корисними математичні методи, що спираються на досягнення сучасної синергетики.

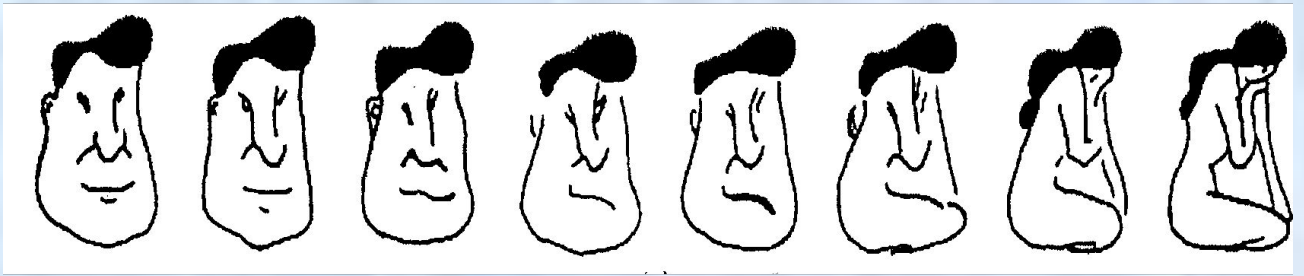
Спочатку зупинимося на застосуванні методів синергетики до *соціології*, *формування громадської думки*. *янемає приклад, який пов'язаний з цим процесом і відомий як експеримент С. Еша.* Розглянемо експеримент С. Еша. Нехай людині показують декілька предметів різної довжини (мал. 7.6).

Питання, на яке треба дати відповідь, таке: “Як співвідносяться між собою довжини першого і останнього відрізків?” Як виявляється і це цілком зрозуміло, відповідь залежить від того, чи відомі людині результати попереднього опитування. Так, наприклад, якщо в результаті попереднього опитування 60% них відповіли, що останній відрізок довший за перший, то людина з більшою ймовірністю підтвердить цей висновок. В дійсності обидва відрізки мають однакові довжини.



*Мал. 7.6. Експеримент С. Еша (з книги Г. Хакена
“Иерархия неустойчивостей в само-
Синергетизующихся системах и устройствах”).*

Іншим цікавим прикладом подібної зміни точки зору є особливості процесу зорового сприйняття, що зветься ефектом гістерезису (мал. 7.7) та ефектом порушеної симетрії (мал. 7.8). Від першого випадку зорове сприйняття об'єкту залежить від напрямку, в якому розглядається цей малюнок, тоді як в другому результат залежить від того, на чому фокусується увага – на центральній білій частині малюнка, де чітко видно вазу, або на бокових чорних частинах, де видно два обличчя.

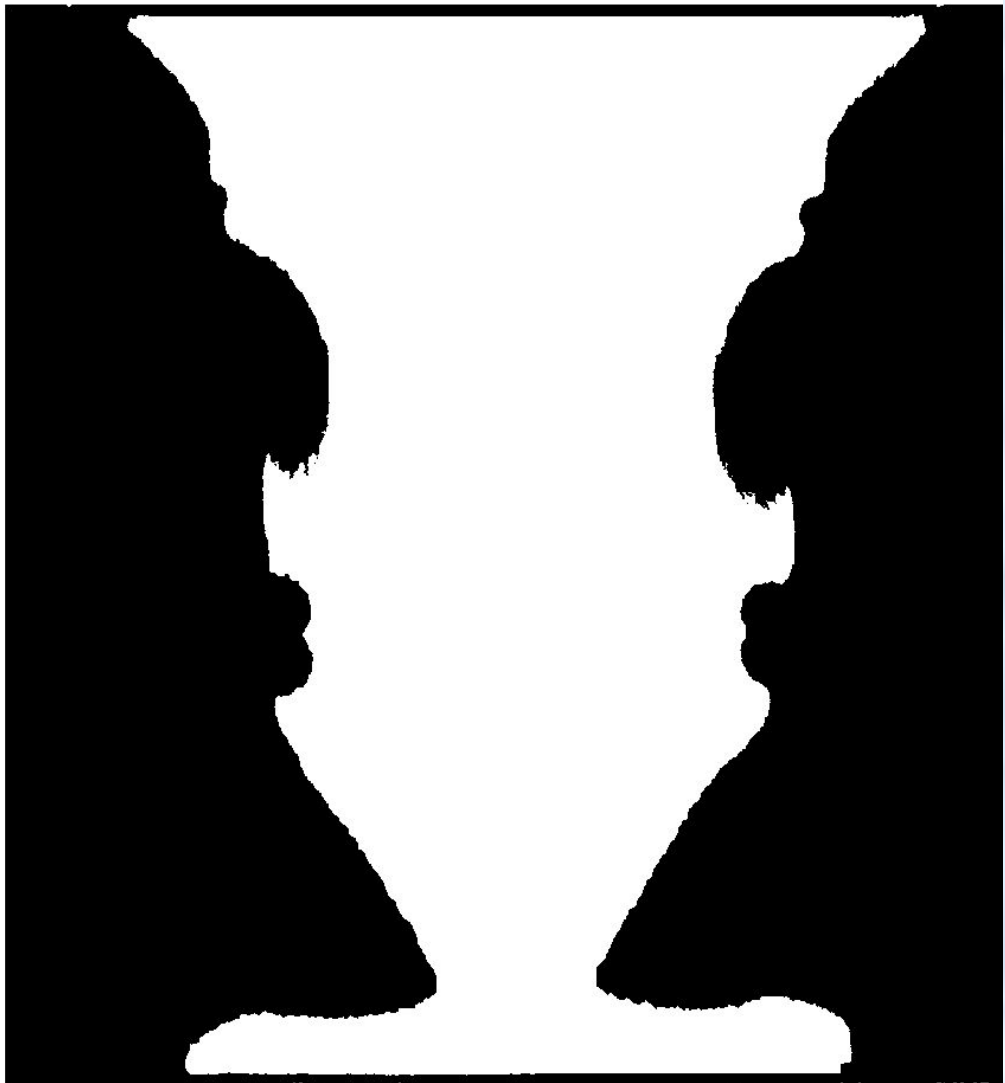


Мал. 7.7. Ефект гістерезису (з книги Г. Хакена

“

~

...



Мал. 7.8. Ефект порушеної симетрії (Г.Хакена “Синергетика”). з книги

Універсальні методи термодинаміки та синергетики можуть бути успішно застосовані і до вивчення *політичних процесів*, зокрема *проблеми стійкості політичних систем*. Цікаві результати в цьому напрямку були отримані визначним українським фізиком і політичним діячем І.Р. Юхновським. Як вже вказувалося раніше, мірою впорядкованості будь-якої системи, в тому числі і політичної, є притаманна їй ентропія S (негентропія N). Величина ентропії S (або значення негентропії N) в абсолютній одиниці з протилежним знаком: оскільки негентропія дорівнює рядковою є система. Таким чином, перехід від більш до досконалої до більш досконалої політичної системи відповідає зменшенню ентропії або збільшенню негентропії.

Стійкість будь-якої політичної системи визначається режимом її функціонування. І.Р. Юхновський пропонує розглянути такі два граничних режими функціонування політичних систем:

1. **відкритою** динамічному режимі. Це означає, в термінах термодинаміки, що система вільно обмінюється з навколишнім середовищем всім, чим можна обмінюватись – перш за все енергією, ентропією (негентропією) та інформацією.

Тут слід зауважити, що а) ентропія і інформація визначаються однаковим чином; б) ентропія та інформація не можуть бути зведені до енергії.

Щоб краще зрозуміти останнє твердження, досить пригадати відомий приклад з киданням двох монет з однакової висоти. Нехай обидві монети однакові за інформацією, що в них міститься: на них з одного боку викарбований один і той же герб, а на другому боці – однакова цифра. Проте, вони мають зовсім різні маси. Тоді, коли ми їх одночасно кидаємо з однакової висоти, виділяється, звичайно, зовсім різна енергія, оскільки маси монет є різними (нагадаємо, що енергія дорівнює добутку маси на прискорення вільного падіння і часу висоту). Це стосується інформації, яка отримується при киданні цих монет, то вона є абсолютно однаковою і дорівнює 1 біту, оскільки реалізується один варіант з двох можливих (герб або цифра), тобто 0 або 1.

зовнішнього середовища. Зовнішній, режим є абсолютно ізолюваним політичних і соціальних систем. Але є приклади, коли реальні системи існували в стані, який можна вважати досить наближеним до ізолюваного стану (наприклад, колишній СРСР). Фізично стан подібної ізоляції відповідає адіабатичній ситуації, коли не відбувається теплообміну системи з навколишнім середовищем. Тоді як випливає з першого закону термодинаміки (див. формулу (7.1)) будь-яка робота виконується за рахунок внутрішньої енергії системи. Це обов'язково призводить до зростання ентропії (чи зменшення негентропії), тобто до зменшення впорядкованого стану системи і врешті-решт, до її деградації. Загальні перші принципи природи суспільства, зокрема другий закон термодинаміки, дозволяють підтвердити цей важливий висновок щодо функціонування політичної системи, яка є ізолюваною, а саме: **абсолютно детермінований шлях до розпаду (тобто такий процес, який відбувається з ймовірністю, що дорівнює одиниці) актерною рисою еволюції всіх ізолюваних систем будь-якої природи.** Розпад СРСР є одним з останніх підтверджень цього висновку.

Ще один дуже цікавий напрямок досліджень, який має принципове значення для різних галузей знань і описує стрибкоподібні зміни поведінки систем різноманітної природи – це сучасна **теорія катастроф.**

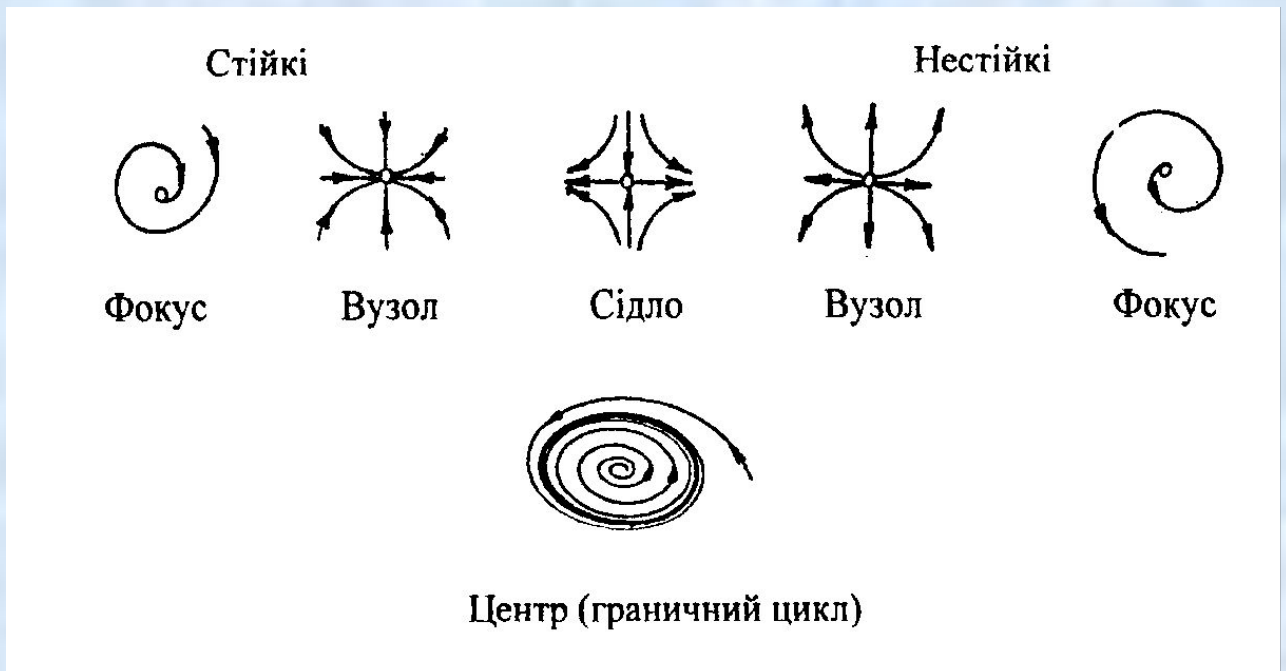
У 1972 році в Нью-Йорку вийшла з друку давньоанглійською мовою до цього книга французького математика-тополога Р. Тома “Структурна стійкість і морфогенез”. Вже сама назва цієї книги вказувала на її достатньо універсальний характер. Дійсно, Р. Том поставив перед собою задачу створення такого варіанту математичної теорії динамічних (еволюціонуючих) систем, який був би придатним для біології та інших галузей науки, досить далеких від математики і який в цьому сенсі не є настільки точним, як фізика, хімія і ряд інших наук. Основна ідея Р. Тома полягала в тому, щоб застосувати теорію динамічних систем з класифікацією особливих точок за А. Пуанкаре для аналізу як структурно-стійких станів, нечутливих до малих збурень (змін параметрів системи), так і різких (розривних) змін станів системи при плавній зміні параметрів, які називаються **катастрофами.**

По своїй суті знаходження особливих точок за методом А. Пуанкаре зводиться до відшукування стаціонарних, тобто тих, що не залежать від часу, розв'язків системи диференціальних рівнянь для параметрів порядку, які визначають поведінку досліджуваного об'єкту. Особливі точки знаходяться згідно з розв'язком відповідної системи диференціальних рівнянь відносно так званих збурень по відношенню до стаціонарних розв'язків. В залежності від знаку дійсної (Re) частини (Im) λ характеристичного рівняння особливі точки поділяються на стійкі та нестійкі вузли і фокуси, сідла та центри, або граничні цикли (див. таблицю 7.4).

Таблиця 7.4. Типи особливих точок (класифікація Пуанкаре)

Тип особливої точки	Значення коренів	
	Дійсна частина	Уявна частина
Стійкий вузол	$Re \lambda_1 < 0$ $Re \lambda_2 < 0$	$Im \lambda_1 = 0$ $Im \lambda_2 = 0$
Нестійкий вузол	$Re \lambda_1 > 0$ $Re \lambda_2 > 0$	$Im \lambda_1 = 0$ $Im \lambda_2 = 0$
Сідло	$Re \lambda_1 < 0$ $Re \lambda_2 > 0$	$Im \lambda_1 = 0$ $Im \lambda_2 = 0$
Стійкий фокус	$Re \lambda_1 < 0$ $Re \lambda_2 < 0$	$Im \lambda_1 \neq 0$ $Im \lambda_2 \neq 0$
Нестійкий фокус	$Re \lambda_1 > 0$ $Re \lambda_2 > 0$	$Im \lambda_1 \neq 0$ $Im \lambda_2 \neq 0$
Центр (граничний цикл)	$Re \lambda_1 = 0$ $Re \lambda_2 = 0$	$Im \lambda_1 \neq 0$ $Im \lambda_2 \neq 0$

Мал. 7.9 ілюструє можливі види особливих точок для динамічних систем з двома параметрами порядку згідно до класифікації А. Пуанкаре. Як бачимо з відповідних фазових портретів системи, для **стійкого вузла** що зображує динамічну еволюцію системи, до стаціонарного стану (особливої точки) як по першому, так і по другому параметру порядку. У випадку **нестійкого вузла** віддаляється від особливої точки по обох параметрах порядку. Якщо корені характеристичного рівняння мають різні знаки, тобто особлива точка – **сідло**, нестійкою, але лише по одному з параметрів порядку.



Мал. 7.9. Фазові портрети можливих видів особливих точок

Якщо для стійкого і нестійкого вузлів та сідла характерна неперіодична поведінка, то для всіх інших особливих точок притаманна періодична (коливальна) поведінка динамічної системи. Для **стійкого фокусу** вигляді спіралі, що накручується на особливу точку, це відтворює затухаючим коливанням в часі для обох параметрів порядку систем. Для **нестійкого фокусу** спіраль розкручується, що відтворює зростаючим коливанням параметрів порядку, амплітуда яких зростає випадку **центра (граничного циклу)** (рис. 1, нарешті, в останньому незатухаючі коливання (автоколивання) параметрів відбуваються).

Зауважимо, що стійкі та нестійкі вузли та фокуси, а також сідла характеризують “**грубі**” системи, тоді як граничний цикл (рис. 1) – **негрубі**. Поняття “грубо” і “негрубо” системи бувають (рис. 1) – введене завдяки дослідженням класичних систем, які були виконані визначним математиком О.О. Андроном та його учнями. Під “грубою” системою мається на увазі така система, яка знаходиться поблизу свого рівноважного стану і яка не може бути виведена зі стану рівноваги при зміні параметрів. Очевидячки, що “негруба” система легко виводиться за рахунок незначної зміни параметрів зі свого стану рівноваги, який є нестійким. Зрозуміло, що чисто математичне (точніше сказати – топологічне) поняття “грубості” і “негрубості” має надзвичайно широке застосування в психології, економіці, політиці та інших областях при вивченні стійкості цих систем.

Повертаючись до теорії катастроф Р. Тома, можна сказати, що вона являє собою сучасний розвиток теорії стійкості динамічних систем А.М. Ляпунова (поняття стійкості взагалі є дуже важливою характеристикою динамічної системи) і теорії особливостей Х. Уїтні, які узагальнюють собою відомі в класичному математичному аналізі дослідження на екстремум. Недарма створення теорії катастроф порівнювалося в 70-х роках – роках її виникнення – з переворотом в математиці, пов’язаним зі створенням І. Ньютоном і Г.В. Лейбніцем диференціального і інтегрального числень.

Дослідження з нелінійної динаміки мали дуже великий вплив на формування основних ідей і принципів теорії катастроф. Так, значним результатом цих досліджень став суттєвий розвиток уявлень про **біфуркації** (ція” буквально означає “роздвоєння”), термін “біфуркації” перебудови динамічних систем.

Нові важливі результати в теорії біфуркацій належать визначному російському математику В.І. Арнольду, який незалежно від Р. Тома довів деякі принципові теореми в теорії катастроф. Р. Том, який вважається автором теорії катастроф, віддає пріоритет у винаході терміну “теорія катастроф” англійському математику – топологу К. Зіману. Саме К. Зіману присвятили свою прекрасну монографію “Теорія катастроф та її застосування” Т. Постон і І. Стюарт, написавши в передмові:

Кристоферу Зіману, біля ніякого ми сидимо, на плечах якого ми стоїмо. Дивним є той факт, що математик К. Зіман придумав так звану “машину катастроф” – досить простий пристрій, який легко може бути виготовлений і який дозволяє дуже наочно спостерігати різкі зміни поведінки машини при незначній варіації параметрів. Опис “машини катастроф” можна знайти у чудовій, невеличкій за об’ємом книзі В.І. Арнольда “Теорія катастроф”, в якій подається, з одного боку, науково-популярне, а з іншого, дуже глибоке і витончене викладення основних принципів теорії катастроф.

Представляють інтерес висловлені В.І. Арнольдом загальні міркування з точки зору теорії катастроф щодо тенденцій (“принципів”) переходу до “крайнього стану” системи довільної природи (фізичної, біологічної, соціальної, політичної тощо).

1. **“Принцип тендітності гарного (стійкого)”**: система, що знаходиться на границі стійкості, з більшою ймовірністю переходить в нестійкий стан. Це пов’язане з досить зрозумілим з інтуїтивної точки зору правилом: “гарні” (зокрема, стійкі) системи повинні задовольняти декільком (інколи багатьом) вимогам, тоді як “погані” можуть мати хоча б один недолік, тобто між “гарними” і “поганими”

2. **“Принцип погіршення на шляху до кращого”**: процесі послідовної еволюції системи до кращого стійкого стану з поганого нестійкого відбувається погіршення, до того ж на початковій стадії процесу переходу до кращого стану швидкість погіршення зростає. Максимум протидії на шляху до кращого реалізується до досягнення найгіршого стану. Далі в цьому самому поганому стані протидія зменшується і може повністю зникнути, коли система знаходиться вже достатньо близько до кращого стану.

3. **“Принцип стрибкоподібного покращення”**: система стрибком, а не в процесі поступової еволюції, проскакує найгірший стан і опиняється поблизу гарного, то далі вона самодовільно рухається в бік цього гарного стану.

4. **“Принцип еволюції до катастрофи”**: основними законами природи і суспільства, які характеризуються на ефекти зворотного зв'язку (в суспільному житті та політиці – це, насамперед, особиста відповідальність за прийняті рішення), веде до катастрофи.

Таким чином, підводячи підсумок короткого огляду сучасних синергетичних процесів у природничих та суспільних науках, можна сказати, що *освіти і науки пов'язане з інтеграцією знань у різних дисциплін, посиленням міжпредметних зв'язків, використанням цього нового міждисциплінарного напрямку для глибокого розуміння єдності законів природи і суспільства, а отже розвитку особистості як кінцевої мети всієї освітянської діяльності.*

7.1. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ В СКЛАДНИХ МЕДИКО-БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМАХ

Звернемося спочатку до якісного аналізу динамічної системи, що описується двома нелінійними диференціальними рівняннями довільного вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= P(x, y), \\ \frac{dy}{dt} &= Q(x, y). \end{aligned} \quad (7.19)$$

Дослідимо стійкість стаціонарного стану такої системи, застосовуючи метод малих збурень і лінеаризації диференціальних рівнянь. Для цієї мети представимо розв'язок у вигляді суми стаціонарних значень змінних x_0, y_0 і малих збурень ζ, η :

$$x = x_0 + \zeta, \quad y = y_0 + \eta.$$

Лінеаризуючи систему диференціальних рівнянь, тобто залишаючи лише ті доданки, що містять перші степені малих збурень ζ, η ,

$$\begin{aligned} \frac{d\zeta}{dt} &= P(x_0 + \zeta, y_0 + \eta) = a\zeta + b\eta, \\ \frac{d\eta}{dt} &= Q(x_0 + \zeta, y_0 + \eta) = c\zeta + d\eta, \end{aligned} \quad (7.20)$$

де коефіцієнти a, b, c, d

$$a = P'_x(x_0, y_0); \quad b = P'_y(x_0, y_0); \quad c = Q'_x(x_0, y_0); \quad d = Q'_y(x_0, y_0).$$

Важливе значення в якісному аналізі поведінки динамічних систем відіграє часова еволюція послідовних станів досліджуваної системи у вигляді траєкторії руху зображуючої точки у фазовому просторі x, y , **фазовим портретом**,

або **фазовою кривою**. Траєкторія називається портрету динамічної системи. В залежності від вигляду фазового портрету динамічні системи поділяються на грубі та негрубі. "Грубі" системи – це системи, характер траєкторії яких у фазовому просторі зберігається при малих змінах похідних a, b, c, d . "Негрубі" системи – це системи, траєкторії яких відчуюють достатньо різкі зміни при малих варіаціях параметрів a, b, c, d .

Будемо шукати загальний розв'язок досліджуваної динамічної системи поблизу її стаціонарного стану у вигляді

$$\zeta = A e^{\lambda t}, \eta = B e^{\lambda t}.$$

Тоді

$$\frac{d\zeta}{dt} = \lambda \zeta = aA e^{\lambda t} + bB e^{\lambda t},$$

$$\frac{d\eta}{dt} = \lambda \eta = cA e^{\lambda t} + dB e^{\lambda t},$$

звідки маємо

$$\lambda A = aA + bB, \lambda B = cA + dB.$$

Ненульовий розв'язок даної алгебраїчної системи рівнянь відносно коефіцієнтів A B визначник рівний нулю: і має місце лише при умові, що головний

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

або
$$\lambda^2 - (a + d)\lambda + (ad - bc) = 0.$$

Звідси для коренів цього рівняння, яке зветься характеристичним, маємо

$$\lambda_{1,2} = [(a + d)/2] \pm \{[(a + d)^2/4] - (ad - bc)\}^{1/2}.$$

Якщо корені не є кратними, то розв'язок системи може бути подано у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \zeta &= C_{11} e^{\lambda_1 t} + C_{12} e^{\lambda_2 t}, \\ \eta &= C_{21} e^{\lambda_1 t} + C_{22} e^{\lambda_2 t}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Нехай корені λ_1, λ_2 – дійсні. Тоді особливі точки у відповідності або класифікацією Пуанкаре (див. главу 4) являють собою вузли або сідла, а саме:

- а) $\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$ – **стійкий вузол**;
- б) $\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0$ – **нестійкий вузол**;
- в) $\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$ $\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$ –

називається “**сідлом**”, особлива нестійка точка, яка

г) якщо λ_1, λ_2 – комплексноспряжені величини, тоді у системі відбуваються коливання, особлива точка – **фокус**, якщо $\text{Re} \lambda_{1,2} < 0$ – **стійкий фокус**, $\lambda_{1,2} > 0$ – **нестійкий фокус**.

д) якщо $\text{Re} \lambda = 0$, якщо $\text{Re} \lambda = 0$ коливання, особлива точка системи відбуваються незалежно що стійкий і нестійкий вузли, стійкий і нестійкий фокуси, а також сідла характеризують “труби” системи, тоді як граничний цикл (центр)

Як вже зазначалося, поблизу критичних (біфуркаційних) точок малі зміни зовнішніх параметрів можуть призвести до якісних перебудов (біфуркацій) фазових портретів досліджуваних систем.

Розглянемо найбільш типові біфуркації:

1. **Біфуркація з одного вузла (фокуса) в два вузла (фокуси)** певних умов розв'язки, що відповідають стійкому вузлу (фокусу), можуть стати нестійкими і відбувається перехід у два нових стійких вузла. При відмінній від нуля уявній частині коренів характеристичного рівняння вузли перетворюються, очевидно, в фокуси.

2. **Біфуркація Хопфа з фокуса в граничний цикл** Для цього випадку, вивчаючи вперше Хопфом, корені характеристичного рівняння є комплексно-спряженими числами

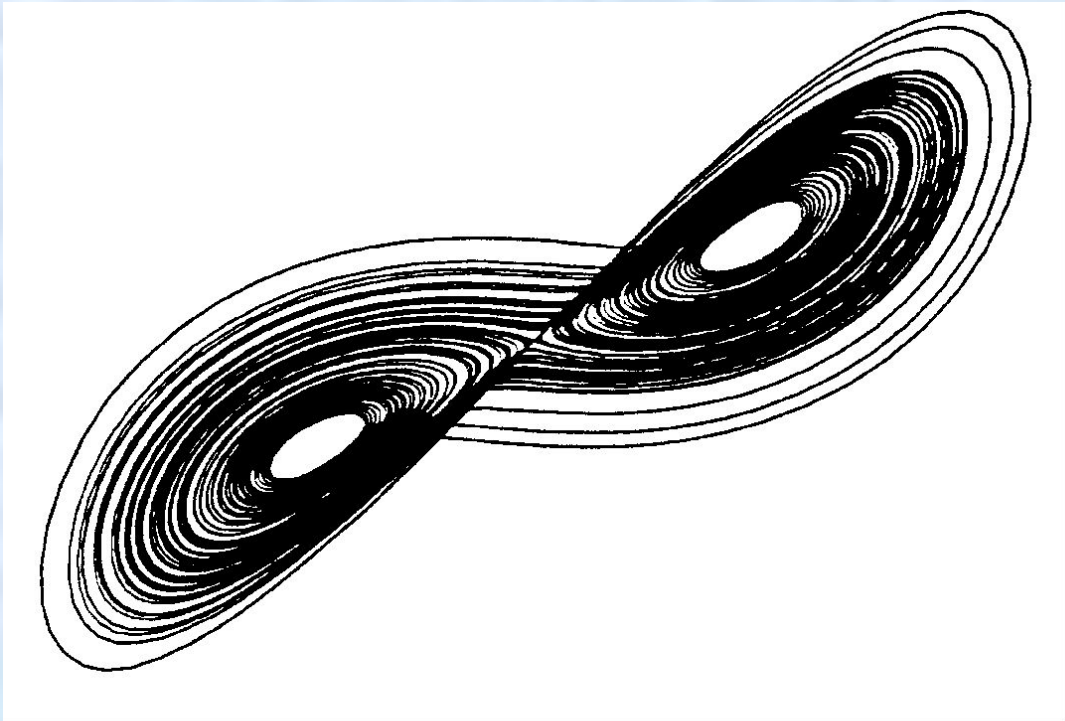
$$\lambda_1 = \text{Re}\lambda_1 + i \text{Im}\lambda_1, \lambda_2 = \text{Re}\lambda_2 - i \text{Im}\lambda_2.$$

При $\text{Re}\lambda \rightarrow 0$ результати першого корені наближаються до уявної осі. У граничний цикл, тобто у системі виникають періодичні в часі коливання.

3. **Біфуркації граничного циклу** При подальшій зміні керуючих параметрів можуть відбуватися певні перебудови фазових траєкторій системи, при яких можливі такі біфуркації: а) старий граничний цикл переходить в новий один або більше граничних циклів у одній і тій самій площині; б) старий двовимірний граничний цикл переходить у тривимірний граничний цикл, до того ж у випадку незамкнутих траєкторій виникає рух зображуючої точки по поверхні тора; в) старий граничний цикл з періодом T_1 рухаючись по якому система повертається у початковий стан за час $T_2 = 2T_1$ (переходить у новий стан оду).

4. Дивні аттрактори.

траєкторія, що являє собою При зміні керуючих параметрів фізична і хаотичною. У цьому випадку, який отримав назву дивного аттрактора, траєкторії руху зображуючої точки у фазовій площині стають недетермінованими (мал. 7.10). Якщо для простих аттракторів (стійких особливих точок і граничних циклів) усі фазові траєкторії стягуються у близьке оточення цих точок або граничного циклу, то для дивного аттрактора усі фазові траєкторії розбігаються і хаотично перемішуються, залишаючись в області тяжіння дивного аттрактора.



Мал. 7.10. Фазовий портрет дивного аттрактора.

Зручним методом аналізу стійкості фазових траєкторій є дослідження так званих **показників Ляпунова**. Не вдаючись у достатньо тонкі і складні математичні деталі, показники Ляпунова можна визначити як узагальнення показника степені у виразі для експоненціального в часі розв'язку $\delta x(t)$, характеризує диференціальне рівняння першого порядку довільного вигляду, а саме:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln \delta x(t)}{t}.$$

Кількість показників Ляпунова не повинна перевищувати розмірність простору, в якому задана шукана величина $\delta x(t)$. Тоді виявляється можливим сформулювати такі критерії для простих і дивних аттракторів у термінах показників Ляпунова (розглянемо для визначення тривимірний випадок):

а) якщо всі три показники Ляпунова від'ємні, то аттрактор – стійкий фокус;

б) якщо два показники від'ємні, а третій рівний нулю, то аттрактор – граничний цикл;

в) якщо один показник від'ємний, а два інші дорівнюють нулю, то аттрактор – стійкий тор;

г) якщо один з показників Ляпунова виявляється додатнім, то стає можливим хаотичний рух зображуючої точки. Так, при $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 < 0$

фази сусідніх траєкторій (хаотичний) аттрактор незначній зміні початкових умов. Одним з перших прикладів дивного аттрактора стала гідродинамічна (метеорологічна) модель Лоренца, розв'язки якої виявили хаотичне розбігання фазових траєкторій в силу ефектів турбулентності і неточності задання початкових умов. Зауважимо, що при $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$ фазові портрети системи є відповідно нестійкий тор або нестійкий граничний цикл, які не є аттракторами.

Для встановлення універсальних закономірностей в самоорганізованих системах, які мають різні геометричні розміри, розуміння ролі їх спонтанного ускладнення, наявності в них просторово корельованих областей широко залучаються методи кінетичних моделей, які були покладені в основу сучасної теорії дисипативних структур (І.Р. Пригожин, Г. Ніколіс, П. Гленсдорф та інші).

В якості конкретного прикладу кінетичної моделі розглянемо відому модель “хижак-жертва”, яку запропонували А. Лотка і В. Вольтера. Система нелінійних диференціальних рівнянь цієї моделі має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \varepsilon_1 X - \gamma_1 XY, \\ \frac{dy}{dt} &= \gamma_2 XY - \varepsilon_2 Y. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Перше рівняння описує динаміку чисельності першого типу тварин – “жертв” (наприклад, зайців), які живляться рослинами. Перший доданок у правій частині цього рівняння описує природне розмноження жертв, тоді як другий – їх зменшення від зустрічей з хижаками (наприклад, рисями). Друге рівняння характеризує динаміку зміни чисельності хижаків: перший доданок у правій частині задає збільшення хижаків, які живляться жертвами, а другий – природне зменшення жертв при відсутності хижаків. Стационарний розв’язок моделі визначається з наступної системи рівнянь:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 x_0 - \gamma_1 x_0 y_0 &= 0, & y_0 &= \frac{\varepsilon_1}{\gamma_1}; \\ -\varepsilon_2 y_0 + \gamma_2 x_0 y_0 &= 0, & x_0 &= \frac{\varepsilon_2}{\gamma_2}. \end{aligned} \quad (7.22)$$

Лінеаризація рівнянь системи (7.21) поблизу стационарного розв’язку дає

$$\begin{aligned} \frac{d\zeta}{dt} &= \varepsilon_1(x_0 + \zeta) - \gamma_1(x_0 + \zeta)(y_0 + \eta) = -\varepsilon_2 \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \eta, \\ \frac{d\eta}{dt} &= -\varepsilon_2(y_0 + \eta) + \gamma_2(x_0 + \zeta)(y_0 + \eta) = \varepsilon_1 \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \zeta. \end{aligned} \quad (7.23)$$

Шукаючи розв’язок цієї системи у вигляді

$$\zeta = A \exp(\lambda t), \quad \eta = B \exp(\lambda t), \quad (7.24)$$

отримуємо характеристичне рівняння:

$$\begin{vmatrix} \lambda & \varepsilon_2 \gamma_1 / \gamma_2 \\ -\varepsilon_1 \gamma_2 / \gamma_1 & \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

або

$$\lambda^2 + \varepsilon_1 \varepsilon_2 = 0,$$

звідки отримуємо шукані корені

$$\lambda_{1,2} = \pm i (\varepsilon_1 \varepsilon_2)^{1/2}. \quad (7.25)$$

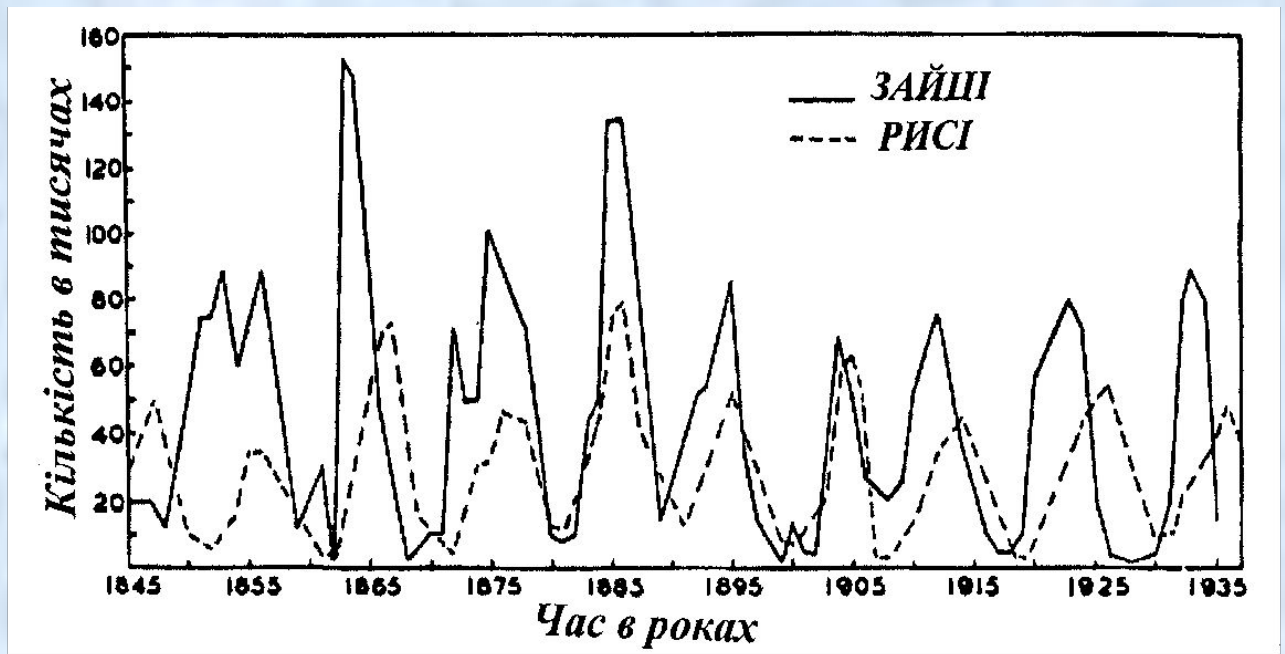
Таким чином, у відповідності до класифікації особливих точок по А. Пуанкаре отримана особлива точка в моделі “хижак-жертва” є менурі (або тріфурі).

Фазові криві мають вигляд замкнутих траєкторій (фазовий цикл).

Оскільки для малих збурень $\zeta(t)$ і $\eta(t)$ співвідношення вигляду мають місце

$$\begin{aligned} \zeta(t) &= C_{11} e^{i\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}t} + C_{12} e^{-i\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}t}, \\ \eta(t) &= C_{21} e^{i\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}t} + C_{22} e^{-i\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}t}, \end{aligned} \quad (7.26)$$

то цей результат відображає те, що ми спостерігаємо в реальних умовах, тобто експериментально, а саме: періодичну зміну чисельності популяції хижаків і жертв (див. мал. 7.11).



Мал. 7.11. Періодична зміна чисельності популяції в екологічній системі “хижак(рисі) - жертва (зайці)” за даними “Хадсон-Бей” (з книги Г. Хакена “Синергетика”).

Недолік розглянутої вище моделі Лотка-Вольтерра – її
 “~~незрубість~~” ~~Іншими словами~~ ~~амплітуди коливань кожного виду.~~
 В реальності такого не спостерігається. Покращання моделі
 Лотка-Вольтерра пов’язане з врахуванням самообмежень в
 зростанні чисельності обох популяцій, що описується вве-
 денням останніх (третіх) доданків в рівняння моделі

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \varepsilon_1 x - \gamma_{12} xy - \gamma_{11} x^2, \\ \frac{dy}{dt} &= \varepsilon_2 y + \gamma_{21} xy - \gamma_{22} y^2. \end{aligned} \tag{7.27}$$

Дослідження особливих точок для такої покращаної
 моделі показує, що якщо при $\gamma_{11} = \gamma_{22} = 0$
 являла собою центр або граничний цикл (незруба система),
 то при $\gamma_{11} \neq 0, \gamma_{22} \neq 0$
 або стійкий вузол, то ця система має грубо стійкий фокус

7.1. ПРАКТИЧНЕ ЗАНЯТТЯ “ТЕРМОДИНАМІКА ВІДКРИТИХ БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ”

Мета заняття:

1. Вивчити основні положення термодинаміки відкритих біологічних систем, що обмінюються речовиною та енергією з оточуючим середовищем.

2. Навчитися застосовувати термодинамічні методи для дослідження відкритих медико-біологічних систем.

Теоретичні питання, що розглядаються на практичному занятті

1. Термодинамічний метод вивчення медико-біологічних систем.
2. Термодинаміка рівноважних ізольованих систем.
3. Перший та другий закони (начала) термодинаміки.
4. Ентропія, зв'язок ентропії з термодинамічною ймовірністю (Термодинамічні потенціали).
5. Термодинамічні потенціали.
6. Термодинаміка відкритих систем поблизу положення рівноваги.
 - 6.1. Другий закон для потоків і термодинамічних сил.
 - 6.2. Перші і другі процеси переносу, принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів.
 - 6.3. Виробництво ентропії.
 - 6.4. Зв'язок потоків.
7. Термодинаміка відкритих систем, теорема Приложения рівноваги. Процеси впорядкування в системах різної природи. Поняття про синергетику.

Додаткова література

1. Биофизика / Под ред. Владимирова Ю.А. – М.: Медицина, 1983.
2. Ремизов А.Н. Медицинская и биологическая физика. – М.: Высшая школа, 1996.
3. Чалый А.В. Неравновесные процессы в физике и биологии. – К.: Наукова думка, 1997.
4. Чалый О.В. Синергетичні принципи освіти та науки. – К.: Віпол, 2000.

Завдання для самої роботи і перевірки кінцевого рівня знань

Після вивчення теоретичного матеріалу слід ознайомитись з еталонами розв'язку задач і виконати завдання для перевірки кінцевого рівня знань.

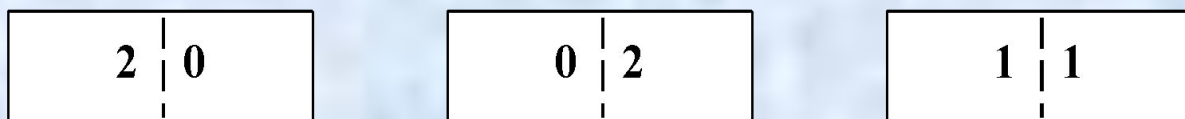
Типові задачі з еталонами розв'язків

Задача 1.

Маємо 2 молекули в об'ємі, який розділений напівпроникною перегородкою. Намалювати можливі конфігурації в цій системі. Знайти а) число мікростанів, тобто термодинамічну ймовірність, б) ентропію та в) ймовірність (частоту появи) кожної з конфігурацій.

Розв'язок.

Можливі конфігурації для системи з 2 молекул в заданому об'ємі представлені на мал. 7.12.



Мал. 7.12. Можливі конфігурації для молекул а і б в об'ємі з напівпроникною перегородкою.

Число мікростанів (термодинамічна ймовірність) дорівнює

- $W_1 = 1,$

для першої конфігурації $W_2 = 1,$

для другої конфігурації $W_3 = 2.$

Для третьої конфігурації дорівнює

$$S_1 = S_2 = k \ln 1 = 0, S_3 = k \ln 2 = 9.57 \cdot 10^{-24} \text{ Дж / К.}$$

Ймовірність (частота появи) кожної з конфігурацій дорівнює

$$P_1 = P_2 = 1/4, P_3 = 1/2.$$

Задача 2.

Узагальнити закон Ома в диференціальній формі на випадок, коли в системі є ще й градієнт концентрації числа частинок.

Розв'язок.

Закон Ома в диференціальній формі має вигляд $\mathbf{j} = \gamma \mathbf{E}$, де \mathbf{j} – вектор густини електричного струму, γ – коефіцієнт електропровідності.

Оскільки напруженість електричного поля зв'язана відомим співвідношенням з градієнтом потенціалу електричного поля $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$, то закон Ома набуває такого вигляду: $\mathbf{j} = -\gamma \nabla \varphi$.

Згідно з лінійним законом термодинаміки необернених процесів, в присутності градієнта концентрації числа частинок ∇c маємо таке узагальнення закону Ома в диференціальній формі:

$$\mathbf{j} = -\gamma \nabla \varphi + L_{12} \nabla c,$$

де L_{12} – кінетичний коефіцієнт, що відповідає за перехресний процес появи додаткового внеску в електричний струм за рахунок градієнту концентрації числа частинок.

Завдання для перевірки кінцевого рівня знань

1. Записати зміну ентальпії через зміну внутрішньої енергії, об'єму і тиску. Розглянути окремий випадок ізобарної системи.
2. Записати зміну вільної енергії Гіббса через зміну ентальпії, температури і ентропії. Розглянути окремий випадок ізотермічної системи.
3. В об'ємі, що розділений напівпроникною перегородкою, знаходиться $N = 3$ молекули. Знайти число мікростанів (термодинамічну ймовірність) і ймовірність (частоту появи) кожної з конфігурацій.
4. Знайти ентропію кожної з конфігурацій для задачі 3.
5. В об'ємі, що розділений напівпроникною перегородкою, знаходиться $N = 4$ молекули. Знайти число мікростанів (термодинамічну ймовірність) і ймовірність (частоту появи) кожної з конфігурацій.
6. Знайти ентропію кожної з конфігурацій для задачі 5.
7. В об'ємі, що розділений напівпроникною перегородкою, знаходиться $N = 5$ молекули. Знайти число мікростанів (термодинамічну ймовірність) і ймовірність (частоту появи) кожної з конфігурацій.
8. Знайти ентропію кожної з конфігурацій для задачі 7.
9. Написати вираз для потоку частинок при наявності різниці концентрації і температури. Розглянути окремий випадок відсутності потоку частинок у такій системі.
10. Написати вираз для потоку частинок при наявності різниці концентрації і тиску. Розглянути окремий випадок відсутності потоку частинок у такій системі.
11. У системі є два градієнта (температури і концентрації) і два потоки (частинок і тепла). Записати відповідні лінійні закони і принцип симетрії кінетичних коефіцієнтів для такої системи.
12. Записати у загальному вигляді лінійний закон для густини електричного струму через мембрану. Взяти до уваги, що з обох сторін мембрани різні концентрації і потенціали електричного поля.