

01

Закономерности реакции систем

© Г.Е. Скворцов

С.-Петербургский государственный университет

Поступило в Редакцию 6 апреля 1998 г.

На основе закона и принципа динамического соответствия рассматриваются закономерности реакции систем в виде функциональных соотношений воздействия — реакция для широкого диапазона неравновесности. Динамическое соответствие отражается объект-процессным классификатором, с помощью которого указываются возможные новые эффекты большой неравновесности. С использованием законов реакции дается простое описание структурного перехода для многообразия систем.

Одна из основных проблем — определение характерных особенностей и функционального вида реакции системы на воздействие.

Качественные характеристики реакции широкого круга систем (физики, химии, биологии) определяются основными законами реакции [1–5].

Далее исходный закон структурной обусловленности модифицируется в форме закона меры действия, а также закона и принципа динамического соответствия, которые более удобны для использования.

На их основе рассматриваются закономерности реакции систем в виде функциональных соотношений определяющих величин и мер действия в зависимости от интервала их значений.

Принцип динамического соответствия используется для указания классов закономерностей и эффектов в рамках объект-процессного классификатора.

Для реакции структурного перехода дается достаточно универсальная зависимость, модифицирующая модель [5], которая применяется для описания переходов в физических, химических и биологических системах.

1. Закон меры действия утверждает, что результат воздействия на систему определяется величиной воздействия, отнесенной к соответствующей структурной характеристике системы.

Мера действия (МД) задается отношением фактора действия g и соответствующего структурного фактора $S[g]$

$$G_s = \frac{g}{s[g]} : A_{ns} = \left| \frac{a_n - a_{n0}}{a_{ns} - a_{n0}} \right|, \quad F_s = \left| \frac{f}{f_s} \right|, \quad (1.1)$$

$$T_s = \tau_s \left| \partial t \ln \left| \frac{a_n}{a_{ns}} \right| \right|, \quad L_s = \lambda_s \left| \partial x \ln \left| \frac{a_n}{a_{ns}} \right| \right|, \quad (1.2)$$

$$G_0 = \frac{g}{s[0]}, \quad S = \frac{s[g]}{s_0}. \quad (1.3)$$

Степень неравновесности (СНР) можно определить формулой

$$C = \sum_s \frac{G_s}{1 + \gamma_s (G_s - 1)^2}, \quad (2)$$

γ_s — нормирующий фактор. В этих выражениях используются обозначения работ [2–5].

Действие g включает начальные и граничные условия, внешние и внутренние воздействия.

Мера действия наряду с исходной мерой (1.3) и СНР достаточны для универсального определения ”динамизма” любых систем.

Закон МД полезно сопоставить с его аналогом для биологических систем — законом исходного уровня ([6], с. 121).

2. Принцип динамического соответствия (ДС) указывает, что различные процессы в разных системах можно сравнивать, используя набор мер действия и степеней неравновесности.

Закон динамического соответствия утверждает: процессы имеют сходство — меру соответствия, тем большую, чем ближе значения мер действия и СНР для них.

Принцип ДС указывает на наличие частичных соответствий и стимулирует их поиск на основе ряда факторов: сходства уравнений, режимов, функциональной зависимости ключевых величин, процессных аналогий и т. п.

Сходства уравнений и режимов перехода для средней неравновесности служат основой универсальности синергетики. Подобие на основе уравнений и процессных аналогий составляет содержание теории [7].

Общие динамические уравнения и функциональная форма общих определяющих соотношений [8] дают основу реализации принципа ДС для процессов большой неравновесности.

Принцип ДС включает в себя целый ряд эффективных специализаций: принцип отрицательной обратной связи (Ле Шателье), принцип "кинетического совершенства" для развивающихся систем [9], принцип устойчивого неравновесия живых систем Бауэра и др.

3. Закон и принцип ДС реализуются в виде объект-процессного классификатора (ОПК).

ОПК составляют концентрированные сведения об объектах и возможных в них процессах в форме таблицы (матрицы), сочетающей шкалу классов объектов (ядро, атомы, молекулы, и т.д.) со шкалой интенсивности процесса — возрастающей меры действия.

По динамической шкале ОПК располагаются: данные о равновесных структурных характеристиках объектов-систем; термомеханика, $G < 0.1$; классические динамические теории, $G < 0.2$; синергетика, $0.2 < G < 0.4$; супергидродинамика [10], $0.4 < G < 1$; режимы СП, $G \approx 1$; область аномальных процессов, $G \gtrsim 1$; первое "квазиравновесное окно", $1.1 < G < 1.3$ и т.д. вплоть до разрушения и унификации объектов-систем.

Система ОПК обладает целым рядом существенных полезных свойств. Среди них — прогностическое свойство, которое позволяет предсказывать новые эффекты и давать характеристику новых, пока не выявленных, разделов наук.

В качестве примера укажем многообразие аномальных эффектов, эффектов СП и, в частности, структурных переходов полей, эффектов "окон квазиравновесности".

С использованием принципа ДС и ОПК можно охарактеризовать синергетику и супергидродинамику многонуклонного ядра, макромолекулы, поля и т.д.

4. Продемонстрируем реализацию принципа ДС в виде закономерностей функциональной формы реакции и величины МД или СНР.

Наиболее общую форму макроскопической реакции дают определяющие соотношения и операторное решение уравнений супергидродинамики [8]

$$J_n = K_n[G]; \quad R = R[G, \Pi], \quad (3)$$

J_n — потоки, K_n и R — операторы восприимчивости и реакции функционального типа (нелинейные, нелокальные, с запаздыванием).

Для выявления вида (3) целесообразно выделить такие интервалы значений: $G < 0.2$; $G_a < 0.2$, $T, L > 0.3$; $T, L < 0.3$, $0.3 < G_a < 1$ (G_a — мера активного действия).

В первом интервале (малая неравновесность) основные зависимости описываются линейными соотношениями

$$J_n \simeq \sum_m K_{nm} G_m, \quad K_{nm} = \left(\frac{\delta J_n}{\delta G_m} \right)_{G=0}; \quad R \simeq \sum_m R_m G_m, \quad (4)$$

K_{nm} и R_m — коэффициенты восприимчивости и реакции. Эти соотношения пригодны для любых систем, за исключением случаев неустойчивости исходного состояния (СП режим) или резонансного реагирования. Для случая пороговой реакции системы (переключение, фотоэффект) в (4) достаточно добавить постоянную.

Для второго интервала потоки и реакция имеют вид линейных пространственно-временных функционалов

$$J_n = \sum_m \int dt' d\mathbf{x}' K_{nm}(t - t', \mathbf{x} - \mathbf{x}') G_{m0}(t', \mathbf{x}'), \dots \quad (5)$$

Вид подобных зависимостей в полном интервале масштабных мер T_0, L_0 для газов дан в [8].

Основные зависимости в третьем интервале имеют вид нелинейных функций

$$J_n = K_n(G); \quad R = R(G, \Pi). \quad (6)$$

Далее рассмотрим этот случай для реакции СП.

Для широкого интервала изменения G целесообразно использовать принцип ДС относительно определяющих соотношений, представив их в частично раскрытом интерполяционном виде

$$J_n[G] = \sum_{l,s,m} \int_0^t dt' \int d\mathbf{x}' \varphi_{nm}^{ls}(\Delta t, \Delta \mathbf{x}; G, G') \times \exp \left[-T_{nm}^s \left(\frac{|\Delta t|}{\tau_{nm}^s(G')} \right) - L_{nm}^l \left(\frac{|\Delta \mathbf{x}|}{\lambda_{nm}^l(G')} \right) \right] G'_m, \quad (7)$$

$\Delta t = t - t'$, $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$, $G' \neq G(t', \mathbf{x}')$; φ, L, T — функции, характер поведения которых можно указать для малых и больших значений

аргументов. Это выражение кинетических законов согласуется с общей формой и предназначается для построения полуфеноменологических теорий. Оно эффективно использовалось для ряда систем (плазма, полимеры, разреженный газ).

5. Рассмотрим аналитическую модель СП реакции (для случая (6)), которая существенно улучшает первоначальное описание [5] и для основной величины $\Phi(G)$ имеет вид

$$\frac{d\Phi}{dG} = \frac{(G - G_1)(G - G_2)}{\alpha^2(G - G_3)^2 + \gamma^2}, \quad (8)$$

$G_{1,2,3} > 0$, $G_{1,2}$ — точки максимума и минимума, G_3 , α , γ — параметры СП, определяемые из опыта либо из кинетической модели.

Решение (8) с учетом условия $\Phi(0) = 0$ принимает вид

$$\begin{aligned} \alpha^2\Phi = G + (G_{31}G_{32} - \epsilon^2) \frac{1}{\epsilon} \left[\operatorname{arctg} \frac{G - G_3}{\epsilon} + \operatorname{arctg} \frac{G_3}{\epsilon} \right] \\ + \frac{1}{2}(G_{31} + G_{32}) \ln \left(\frac{(G - G_3)^2 + \epsilon^2}{G_3^2 + \epsilon^2} \right), \quad (9) \end{aligned}$$

$$G_{ij} = G_i - G_j, \quad \epsilon = \gamma/\alpha.$$

Применим [9] для описания СП, происходящего при движении доменной границы в магнитном поле [11]. Используя условие нормированности величин относительно начала СП, $\Phi(1) = 1$ и учитывая порог G_c , с которого начинается движение, согласно данным [11] получаем ($\alpha^2\Phi = V$):

$$\bar{G} = G - G_c, \quad V(\bar{G}_2 = 1.37) = 0.48, \quad V(\bar{G}_3 = 1.09) = 0.77,$$

$$\epsilon = 0.35, \quad \max V' \simeq V' \left(\frac{\bar{G}_1 + \bar{G}_2}{2} \right) = 0.3. \quad (10)$$

Модель (9) была применена для разнообразных СП: дуговой разряд ([12], с. 277), затухание звука с ростом температуры в аморфном селене ([13], с. 242): резкое уменьшение — аналог сверхтекучести; аномальная фотопроводимость ([14], с. 162); вспышка холодного пламени ([15], с. 212); распространение пламени со вспышкой ([16], с. 250); различные биологические процессы ([6], с. 77, 138, 156, 233, 249, 284).

Многообразие триггерного поведения в живых системах с несомненностью указывает, что, как правило, механизмы жизнедеятельности имеют в своей основе структурные переходы. Этот вывод многое объясняет в биологических процессах с точки зрения физики.

Рассматривая результаты анализа химических реакций посредством потенциометрического и спектрофотометрического титрования, обнаруживаем, что на этапах с активным переходным состоянием наблюдается, как правило, зависимость [9]. Это обстоятельство позволяет указать перспективный подход к брутто описанию широкого круга реакций, который обобщает теорию цепных реакций Семенова.

Список литературы

- [1] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. В. 17. С. 15–18.
- [2] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 6. С. 85–89.
- [3] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 7. С. 23–27.
- [4] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 10. С. 17–21.
- [5] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 21. В. 3. С. 80–85.
- [6] Живые системы под внешним воздействием. Сб. СПб., 1992. 440 с.
- [7] Кутателадзе С.С. Анализ подобия и физические модели. Л.: Наука, 1986. 293 с.
- [8] Скворцов Г.Е. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. В. 4. С. 956–973; Вестник ЛГУ. 1979. В. 13. С. 94–98.
- [9] Шноль С.Э. Физико-химические факторы биологической эволюции. М.: Наука, 1979. 262 с.
- [10] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 22. С. 7–11.
- [11] Четкин М.В., Звездин А.К. и др. // ЖТФ. 1988. Т. 94. В. 1. С. 269–275.
- [12] Артемов В.И., Левитан Ю.С., Синкевич О.А. Неустойчивости турбулентности в низкотемпературной плазме. М.: МЭИ, 1994. 412 с.
- [13] Bushenau U. In Phase Transitions and Relaxation in Systems with Competing Energy Scales. Acad. Publ. 1993. 452 p.
- [14] Корсунский М.И. Аномальная фотопроводимость. М., 1972. 192 с.
- [15] Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Химические процессы в газах. М., 1981. 262 с.
- [16] Семенов Н.Н. Цепные реакции. М., 1986. 534 с.